

Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	Symulacje komputerowe
Kierunek:	Chemia, II stopień [4 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2014
Specjalność:	nieorganiczna
Rok/Semestr:	II/3
Liczba godzin:	15,0
Nauczyciel:	Bryk Paweł, dr hab.
Forma zajęć:	laboratorium
Rodzaj zaliczenia:	zaliczenie na ocenę
Poziom trudności:	średnio zaawansowany
Wstępne wymagania:	Kurs chemii teoretycznej
Metody dydaktyczne:	<ul style="list-style-type: none"> • ćwiczenia laboratoryjne
Zakres tematów:	<ol style="list-style-type: none"> 1. Symulacje Monte Carlo w zespole kanonicznym i wielkim kanonicznym. 2. Symulacje dynamiki molekularnej w zespole NVE, NVT oraz NPT. Twierdzenie H. 3. Wyznaczanie równania stanu z symulacji MD. 4. Wyznaczanie translacyjnego parametru porządku i radialnej funkcji dystrybucji dla różnych stanów skupienia. 5. Wyznaczanie współczynnika dyfuzji z MD. 6. Wyznaczanie funkcji autokorelacji prędkości z MD. 7. Symulacje cząsteczek. Wyznaczanie niektórych właściwości fizykochemicznych alkanów. 8. Techniki symulacji komputerowych dla potencjałów długozasięgowych. Symulacje komputerowe wody. 9. Nierównowagowa dynamika molekularna. Wyznaczanie współczynnika lepkości.
Forma oceniania:	<ul style="list-style-type: none"> • ćwiczenia praktyczne/laboratoryjne
Literatura:	<ol style="list-style-type: none"> 1. D. Frenkel, B. Smit, <i>Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications</i>. Academic Press, 2002. 2. M.P. Allen, D.J. Tildesley, <i>Computer Simulation of Liquids</i>, Oxford University Press, 1987. 3. D.C. Rapaport, <i>The Art of Molecular Dynamics Simulation</i>, Cambridge University Press, 2004. 4. D.P. Landau, K. Binder, <i>A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics</i>, Cambridge University Press, 2000. 5. M.E.J. Newman, G.T. Barkema, <i>Monte Carlo Methods in Statistical Physics</i>, Oxford University Press, 1999. 6. A. Leach, <i>Molecular Modeling. Principles and Applications</i>, Prentice Hall, 2001.
Dodatkowe informacje:	http://zmpfch.umcs.lublin.pl/
Modułowe efekty kształcenia:	<ol style="list-style-type: none"> 01 Opisać podstawowe metody termodynamiki statystycznej stosowane w fizykochemii 03 Opisać metody wybrane symulacji komputerowych (dynamika molekularna, metoda Monte Carlo) 04 Opisać zjawiska zachodzące na różnych granicach faz 06 Wykonać obliczenia stosując gotowe programy symulacyjne 07 Interpretować wyniki otrzymane przy użyciu programów symulacyjnych 08 Uświadamia sobie konieczność dalszego pogłębiania wiedzy 09 Rozumie znaczenie umiejętności efektywnego szukania informacji w naukowych bazach danych