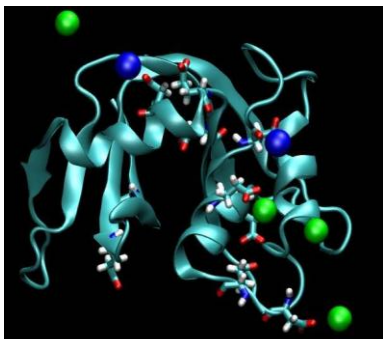


Pokročilé metody molekulové dynamiky (2/0)



Kód: NBCM131 (MFF UK), MC260P91 (PřF UK)

Prof. Pavel Jungwirth, DSc.

pavel.jungwirth@uochb.cas.cz

<http://marge.uochb.cas.cz/~jungwirth>

Úvodní
přednáška
2.10.

Středa 9⁰⁰ – 10³⁰ učebna KCHFOP

MFF UK, Ke Karlovu 3, suterén

- Předmět je vhodný zejména pro **magisterské studenty** a **doktorandy** na MFF UK a PřF UK.
- Navazuje na předmět NBCM051(MFFUK)/MC260P79(PřFUK) „Metody molekulové dynamiky a Monte Carlo“, předchozí absolvování tohoto základního kurzu však není podmínkou. Nutná je nicméně znalost základů molekulových simulací, kvantové mechaniky a statistické termodynamiky.
- Kurz zahrnuje kromě **teoretického výkladu** také **četbu a diskusi odborných publikací**.

Sylabus:

1. Pokročilé metody Monte Carlo. Kanonické a grandkanonické MC. Kinetické MC.
2. Výpočty volné energie. Termodynamická integrace. Poruchová metoda. „Deštníkové“ vzorkování. Potenciál střední síly. Metadynamika. Metoda Jarzynského.
3. Ab initio molekulová dynamika. Car-Parrinellova vs. Born-Oppenheimerova dynamika. DFT metody. Funkce báze.
4. Kvantové molekulové dynamiky. Vlnový balík pro popis pohybu jader. Adiabatická separace pohybu jader a elektronů. Počáteční kvantový stav systému. Numericky přesná integrace časové Schrödingerovy. Aproximativní metody pro mnohačasticové systémy.
5. Metody analýzy trajektorií.

