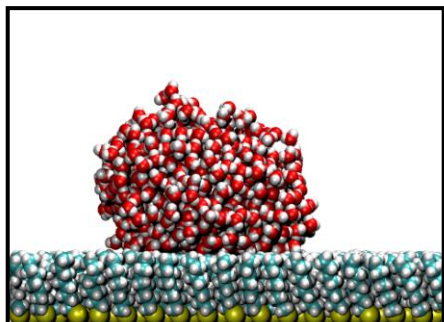


Metody molekulové dynamiky a Monte Carlo (2/1)



Kód: **NBCM051** (MFF UK), **MC260P79** (PřF UK)

RNDr. Martina Roeselová, Ph.D.

martina.roeselova@uochb.cas.cz

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

Úvodní
přednáška
2.10.

Čtvrtek 9⁰⁰ – 11²⁰ učebna KCHFOP

MFF UK, Ke Karlovu 3 (suterén)

- Kurz základů molekulové dynamiky a Monte Carlo. Je zaměřen spíše **prakticky**, s důrazem na pochopení fyzikální podstaty intra- a intermolekulových interakcí a základní metodiky molekulových simulací.
- Kurz zahrnuje kromě **teoretického výkladu** také četbu a **diskusi odborných publikací**, ukázky molekulových simulací, **praktické cvičení** v počítačové laboratoři a závěrečný **samostatný projekt**.
- Předmět je vhodný pro **3. roč. bakalářského studia, magisterské studenty a doktorandy** na MFF UK a PřF UK.

Sylabus:

1. Meziatomové a mezimolekulové síly, interakční potenciály.
2. Základy molekulové dynamiky. Integrace klasických pohybových rovnic, propagátory.
3. Simulační protokol: počáteční podmínky, vstupní parametry, periodické okrajové podmínky, interakční cutoff, Ewaldova sumace, simulace za konstantní teploty a tlaku.
4. „Dynamická“ a „termodynamická“ simulace, statistické soubory, výpočet termodynamických veličin, korelační a distribuční funkce, problém ergodicity.
5. Metody vizualizace a analýzy výsledků.
6. Základy Monte Carlo. Metropolisova metoda generace kanonického souboru.

