

Табела 5.2. Спецификација предмета

Студијски програм: Мастер академске студије Физичка хемија			
Назив предмета: Молекулске симулације у физичкој хемији			
Наставник/наставници: Етински Михајло			
Статус предмета: Изборни			
Број ЕСПБ: 7			
Услов: Нема			
Циљ предмета Разматрање најчешће коришћених алгоритама за рачунање особина молекулских система			
Исход предмета Студент треба да оспособи за коришћење програмског пакета Октаве и да стекне увид у основне алгоритме за симулацију молекулских система. Тиме ће бити оспособљен да развија нове алгоритме или да прилагоди већ постојеће алгоритме за проблеме из квантне хемије и статистичке термодинамике.			
Садржај предмета <i>Теоријска настава</i> Напредно програмирање у програмском пакету Октаве, решавање једнодимензионалне Шредингерове једначине, решавање Хартри-Фокових једначина, рачунање вибронских спектра, рачунање термодинамичких величина, молекулска динамика, Монте Карло симулације у различитим ансамблима. Наставне области: Значај молекулских симулација у физичкој хемији; Окружење Октаве програмског пакета, синтакса, променљиве, изрази, вектори, матрице, случајни бројеви, готове функције, цртање графика; Програмирање у Октаве програмском пакету, петље, функције, скрипте, нумеричка интеграција, решавање диференцијалних једначина; Једноставни примери програма у Октаве програмском пакету; Решавање једнодимензионалне Шредингерове једначине; Решавање Хартри-Фокових једначина; Рачунање вибронских спектра помоћу модела померених хармонијских осцилатора; Рачунање термодинамичких функција у апроксимацији хармонијског осцилатора и крутог ротора; Модели многочестичних система, потенцијали интеракције, гранични услови, иницијализација система, редуковане јединице; Молекулска динамика у микрочанонском ансамблу, интеграција једначина кретања, рачунање корелационих функција; Молекулска динамика на константној температури, Андресенов термостат; Увод у Монте Карло методу, узорковање по важности, Метрополисов алгоритам; Монте Карло метода у канонском ансамблу; Монте Карло метода у изотермско-изобарском ансамблу, Гибсов ансамбл. <i>Практична настава</i> Рачунарске вежбе			
Литература 1. Understanding molecular simulations, from algorithms to applications, D. Frenkel and B. Smith, Academic Press, San Diego, USA, 2002 2. Essentials of computational chemistry, theories and models, C. J. Cramer, John Wiley and Sons, Chichester, England, 2002 3. A first course in scientific computing, symbolic, graphic, and numerical modeling, R. H. Landau, Princeton University Press, Princeton, USA, 2005			
Број часова активне наставе	Теоријска настава: 2	Практична настава: 4	
Методе извођења наставе Предавања, консултације, рачунарске вежбе, семинарски радови			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	10	писмени испит	
практична настава		усмени испит	60
колоквијум-и			
семинар-и	30		