

Institutionen Ingenjörshögskolan

Introduktion till molekylär modellering

Introduction to molecular modelling

10 högskolepoäng/Credits

Ladokkod: FRRSM05

Gäller från: VT 2012

Fastställd av: Forskarutbildningsutskottet, 2012-03-28

Utbildningsnivå: Forskarnivå

Krav på särskilda förkunskaper

Studenten ska vara antagen till forskarutbildning. Examinatorn kan göra undantag från detta. Studenten ska ha tillräckliga kunskaper inom matematik samt kemi, fysik eller kemiteknik. Detta avgörs av examinatorn.

Mål

Studenten ska efter genomgången kurs kunna

- beskriva principer för och användningar av molekylmekaniska kraftfält
- beskriva principer för och användningar av molekylodynamik- (MD) och Monte Carlo- (MC) metoderna
- beskriva principer för och användningar av direkt dynamik (DD) och kvantmekanik-/molekylmekanik(QM/MM)-metoderna
- förklara styrkorna och svagheter hos MD, MC, DD och QM/MM metoderna
- beskriva principerna för kvantmekaniska metoder
- använda ett programmeringsverktyg som fortran eller Matlab
- skriva och använda ett datorprogram för att implementera en eller flera av följande metoder för att studera ett förenklat kemiskt system: MD, MC, DD och QM/MM
- analysera och presentera simuleringsresultaten

Innehåll

- Molekylmekanik
- Simulering av kemiska system på molekylär nivå
- Principerna för molekylorbitalteori
- Termodynamiska egenskaper
- Hybridmodeller (kvantmekaniska/klassiska)

Undervisningsformer

Kursen består av föreläsningar som ges av deltagarna och ett projekt (laboration samt seminarium): simulering av ett förenklat kemiskt system med en datorprogram som studenten har skrivit.

Examinationsformer och betygsskala

Kursen examineras genom följande examinationsmoment:

- Studentföreläsningar, 5 hp
- Simuleringsprojekt och seminarium, 5 hp

Betyg som ges för kursen är Underkänt (U) eller Godkänd (G).

Kurslitteratur och övriga läromedel

C. J. Cramer, 'Essentials of Computational Chemistry: Theory and Models' (John Wiley and Sons, West Sussex, 2004), 2nd edition.

Rekommenderad litteratur:

D. Frenkel and B. Smit, 'Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications' (Academic Press, San Diego, 1996) 2nd ed.

M. P. Allen and D. J. Tildesley, 'Computer Simulation of Liquids' (Clarendon Press, Oxford, 1989).

Studentinflytande och utvärdering

Prefekt och kursansvarig lärare ansvarar för att studenternas synpunkter på kursen systematiskt och regelbundet inhämtas. Resultaten av utvärderingarna som utförs muntligt eller skriftligt, ligger till grund för kursens utformning.

Övrigt

Exempel på förenklade kemiska system är:

- 1) Rörelse hos atomer i en tvåatomig molekyl där studenten analyserar vibrationsfrekvens samt ändringar i total energi, potentiell energi och rörelseenergi. Integrationsalgoritmen kan vara Verlet- eller Euler-algoritmen.
- 2) Simulering av elastisk spridning av atomer från en vägg där studenten analyserar spridningsvinkeln samt ändringar i den totala energi och rörelseenergi. Integrationsalgoritmen kan vara Verlet- eller Euler-algoritmen.