



## Tárgytematika

|                                 |                                 |
|---------------------------------|---------------------------------|
| <b>Félév:</b>                   | 2010/11/1                       |
| <b>Tárgynév:</b>                | Molekuláris szimulációk         |
| <b>Tárgykód:</b>                | VEMKFKV112S                     |
| <b>Felelős szervezet neve:</b>  | Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék |
| <b>Felelős szervezet kódja:</b> | MKFK                            |
| <b>Tárgyfelelős neve:</b>       | dr. Kristóf Tamás               |

---

### Oktatás célja:

A molekuláris szimulációk alapjainak és alkalmazási lehetőségeinek megismertetése, és a számítógépes szimulációs eljárások készítésének bemutatása mintaprogramok segítségével.

### Tantárgy tartalma:

Bevezetés. A molekuláris szimulációk célja, alkalmazási területei és alapfogalmai. A számítógépes szimulációk rövid története. Fizikai tulajdonságok a molekuláris szimulációkban. Konfigurációs tulajdonságok. Mikroszkopikus anyagi tulajdonságok és a makroszkopikus rendszer sajátságai. A részecskék kölcsönhatásainak modellezése: Born-Oppenheimer-közelítés, intermolekuláris kölcsönhatási potenciálok. Holonom kényszerek. A rendszerméret kezelése a molekuláris szimulációkban (periodikus határfeltétel, „minimum image” konvenció). Néhány statisztikus mechanikai alapfogalom. Állapotösszeg, sokaság. Ergodikus rendszer. Sokaság- és időátlagok. Fluktuációk. Monte Carlo szimulációk. Monte Carlo-integrálás. Kvázi-véletlen számok. „Fontosság szerinti” mintavételezés. A Metropolis-módszer kanonikus sokaságon. Markov-lánc. A mikroszkopikus reverzibilitás kritériuma. A Monte Carlo szimulációk elemi lépései, és azok programozási kulcskérdései. Monte Carlo szimulációk (MC) egyéb természetes sokaságokon (izoterm-izobár, nagykanonikus, mikrokanonikus, stb.). A molekuladinamikai módszerek alapjai. Mozgásegyenletek. Termodinamikai peremfeltételek. A Newton-, a Lagrange- és a Hamilton-„megoldás”. A mozgásegyenletek fontosabb numerikus integráló módszerei. A Verlet- és más módszerek, illetve ezek algoritmusai. Molekuladinamikai (MD) szimulációk kanonikus és izoterm-izobár sokaságokon. Eljárások transzport-tulajdonságok számítására. Nemegyensúlyi és ab-initio MD. A molekuláris szimulációk indítása: kezdeti konfiguráció (kezdeti sebességeloszlás), egyensúlyba hozás. Konvergencia. A molekuláris szimulációk legfontosabb hatékonyságnövelő eljárásai. Az erő, a potenciális energia és a nyomás hatékony számítási módszerei. Számítási időt megtakarító technikák: szomszédlista alkalmazása; az intermolekuláris kölcsönhatási potenciálok levágása. A molekuláris szimulációs programok struktúrája. Input-output: fájlkezelés. Fontosabb rutin eljárások, általánosan használt algoritmusok, objektumorientált megoldások. Hosszú távú korrekciók. A reakciótér-módszer és az Ewald-módszer. Hibabecslés a molekuláris szimulációkban. Korrelációs függvények számítása. Szerkezeti tulajdonságok meghatározása. A szabadenergia kitüntetett szerepe a molekuláris szimulációkban. Fázisegyensúlyok számítása. Különleges mintavételezési technikák a molekuláris szimulációkban. Adaptív módszerek. Merev és flexibilis molekulamodellek használata. Összetett molekulamodellek. Speciális geometriájú rendszerek szimulációi. Molekuláris szimulációk pórusokban és határfelületeken. A molekuláris szimulációk ipari alkalmazása. MD és MC algoritmusok többprocesszoros számítógépekre. Összefoglalás.



## Tárgytematika

|                                 |                                 |
|---------------------------------|---------------------------------|
| <b>Félév:</b>                   | 2010/11/1                       |
| <b>Tárgynév:</b>                | Molekuláris szimulációk         |
| <b>Tárgykód:</b>                | VEMKFKV112S                     |
| <b>Felelős szervezet neve:</b>  | Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék |
| <b>Felelős szervezet kódja:</b> | MKFK                            |
| <b>Tárgyfelelős neve:</b>       | dr. Kristóf Tamás               |

---

### Számonkérési és értékelési rendszere:

Nincs.

### Kötelező és ajánlott irodalom:

Baranyai András - Pusztai László: Rendezetlenség kondenzált fázisokban. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1995.  
D. Frenkel - B. Smit: Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. Academic Press, San Diego, 1996. M. P. Allen - D. J. Tildesley: Computer Simulation of Liquids. Clarendon Press, Oxford, 1987.