

Программа дисциплины

Методы моделирования в молекулярной физике

Программу составил: В.В. Писарев, к. ф.-м. н.

Аннотация

Дисциплина посвящена рассмотрению теоретических основ и практического применения атомистического моделирования в задачах физики конденсированного состояния и науки о материалах. Рассматривается обоснование методов классической молекулярной динамики и Монте-Карло. Для этих методов анализируются способы вычисления базовых термодинамических свойств, свободной энергии и коэффициентов переноса. В практической части курса студентам предлагается анализ вычислительной сложности, точности и ограничений различных подходов для вычисления свойств вещества.

Цель дисциплины

Целью дисциплины является ознакомление с вычислительными методами статистической механики плотных систем с реалистичными моделями взаимодействия.

Задачи дисциплины

- ознакомление студентов с подходом атомистического моделирования в вычислительной статистической физике;
- анализ методов атомистического моделирования как численных методов;
- обоснование методов компьютерной физики с точки зрения статистической механики конденсированной фазы;
- оказание консультаций и помощи студентам в проведении собственных исследований в области молекулярного моделирования;
- освоение студентами знаний для дальнейшего изучения методов и подходов квантового атомистического моделирования.

Содержание

1. Атомистическое моделирование. Методы классической молекулярной динамики и термодинамического Монте-Карло как численные методы.
Обзор методов атомистического моделирования: области применения, история появления. Метод Монте-Карло для задач статистической физики. Метод молекулярной динамики с точки зрения аналитической механики. Потенциалы взаимодействия.
2. Реализация статистических ансамблей в методах Монте-Карло и молекулярной динамики. Статистические суммы. Монте-Карло в каноническом, изобарно-изотермическом ансамблях. Термостатирование в методе молекулярной динамики.
3. Алгоритмы расчета свободной энергии и параметров фазового равновесия в молекулярном моделировании.
Методы Монте-Карло с переменным числом частиц - большой канонический ансамбль, ансамбль Гиббса. Термодинамическое интегрирование.
4. Поверхностные и транспортные свойства.
Алгоритмы выделения поверхности в атомистическом моделировании. Расчет избыточной свободной энергии поверхности. Расчет коэффициентов переноса в равновесной и неравновесной молекулярной динамике.
5. Оптимизационные задачи и методы в молекулярной механике.
Понятие о поверхности потенциальной энергии и поверхности свободной энергии. Алгоритмы минимизации энергии и поиска седловых точек. Алгоритмы расчета дальнедействующих сил: метод Эвальда, метод частица-сетка, метод экранирующего потенциала.
6. Квантовые методы молекулярного моделирования.
Основные понятия теории функционала электронной плотности. Теоремы Хоэнберга-Кона.