

课程名称: 分子建模与模拟导论

主讲: 王延颀, 中国科学院理论物理研究所

预修课程: 1) 四大力学; 2) Linux/Unix 操作系统环境及命令; 3) C/C++ 编程语言; 4) 数值计算基本知识。

课本:

- 1) Frank Jensen “*Introduction to Computational Chemistry*” (1st Ed.) John Wiley & Sons Ltd. 1999.
- 2) Daan Frenkel and Berend Smit “*Understanding Molecular Simulation — From Algorithms to Applications*” (2nd Ed.) Academic Press, 2002.

参考书目:

- 1) M. P. Allen and D. J. Tildesley “*Computer Simulation of Liquids*” Oxford Science Publications, 1987.
- 2) David Chandler “*Introduction to Modern Statistical Mechanics*” Oxford University Press, 1987.
- 3) Syed Mansoor Sarwar, Robert Koretsky, Syed Aqeel Sarwar “*Unix — The Text Book*” (2nd Ed.) Pearson Education, 2005.

简介: 本课程重点教授第一性计算 (First Principles Calculations) 方法的理论, 分子模拟 (Molecular Simulations) 方法的理论, 及相应的算法和应用软件。通过对本课程的学习, 学生将在对分子建模与模拟方法有理论理解的同时, 初步具备选择适合于应用需要的算法或软件解决理论问题的能力。本课程的目的在于通过理论与实践相结合的训练方法, 使学生在完成学习后即能以分子建模与模拟为手段, 开展对物理, 化学, 材料等不同体系的理论研究工作。

课程大纲:

- I. 第一性计算
 1. 电子结构方法
 2. 密度泛函理论
 3. 应用举例
- II. 分子建模
 1. 通用分子建模方法
 2. Lennard-Jones 势
 3. 金属体系力场
 4. 化学体系力场
 5. 粗粒化方法
- III. 分子模拟方法
 1. 系综与边界条件

2. 蒙特卡罗方法
3. 分子动力学方法
4. 高级技术
5. 数据分析方法

IV. 优化技术

1. 寻找局部最小值
2. 寻找全局最小值
3. 寻找反应路径