



# סילבוס מפורט

<b>שם הקורס</b>	
סימולציות מולקולריות	
<b>מרצה</b>	
ד"ר ברק הירשברג	
<b>מסטר</b>	
ב' תשפ"ב	
<b>דרישות הקורס</b>	
קורסי מתמטיקה ופיזיקה שנה א', תכנות (0351-1100-01), מבוא להסתברות וסטטיסטיקה (0351-1115), תרמודינמיקה סטטיסטית (0351-3209-01), קוונטים וקשר כימי (0351-2206).	
<b>הרכב הציון הסופי</b>	
50% תרגילים במהלך הסמסטר כחלק מפרויקטים 1 ו-2, 50% עבודה על פרויקט מסכם והצגתה בכתה.	
<b>מבנה הקורס</b>	
<b>תאריך / מס' שיעור</b>	נושא השיעור ותכני השיעור (מטלות, רשימת קריאה, משימות וכיו"ב)
	חזרה על מכניקה קלאסית - משוואות ניוטון, חוקי שימור, משוואות המילטון
	חזרה מכניקה סטטיסטית - צברים, משוואת Liouville
	פרויקט I - דינמיקה מולקולרית
	• מבוא ל-Git, פיתוח קוד מודרני בצוותים.
	• דגימת תנאי התחלה: התפלגות מקסוול-בולצמן.
	• כוחות בין מולקולריים - פוטנציאל לנארד-ג'ונס.
	• תנאי שפה מחזוריים ו- minimum image convention.
	• אלגוריתמים לקידום בזמן.
	• שימור אנרגיה בסימולציות והפיכות הזמן.
	פרויקט II - מונטה קרלו
	• אינטגרציה נומרית.
	• דגימה של התפלגות הסתברות, importance sampling.
	• צעדי טרנסלציה, acceptance ratio ו- detailed balance.
	• חישוב ערכי תצפית של גדלים תרמודינמיים והערכת שגיאות.
	פרויקט מסכם בקריאה מודרכת בנושאים מתקדמים (שיטות אנרגיה חופשית, אפקטים קוונטיים ע"י דגימה של אינטגרלי מסלול, תרמוסטטים לדינמיקה מולקולרית)
<b>קריאת רשות</b>	
M.E. Tuckerman, Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation, Oxford M.P. Allen and D.J. Tildesley, Computer Simulations of Liquids, Oxford R.C. Tolman, The Principles of Statistical Mechanics, Dover	