

1.1. Opis predmeta

NAZIV PREDMETA		Dinamika atoma u plinovima i tekućinama				
Kod	PMP270	Godina studija	DS-1			
Nositelj/i predmeta	Izv. prof.dr. sc. Bernarda Lovrinčević	Bodovna vrijednost (ECTS)	5.0			
Suradnici		Način izvođenja nastave (broj sati u semestru)	P	S	V	T
			30	15	15	
Status predmeta	Izborni, obvezni	Postotak primjene e-učenja	15 %			
OPIS PREDMETA						
Ciljevi predmeta	Osnovno razumijevanje mikroskopske strukture i dinamike plinovitih i tekućih sustava te njihovo modeliranje pomoću simulacija Monte Carlo i molekularne dinamike.					
Uvjeti za upis predmeta i ulazne kompetencije potrebne za predmet	Osnova znanja statističke mehanike, termodinamike, klasične mehanike, kvantne fizike i programiranja.					
Očekivani ishodi učenja na razini predmeta (4-10 ishoda učenja)	1. Osnovno razumijevanje mikroskopske strukture i dinamike tekućina prema idejama statističke fizike tekućina 2. Znanje osnovnih i nekih od naprednih algoritama za računanje strukturnih i termodinamičkih veličina 3. Sposobnost modeliranja molekularnih sustava u plinovitom i tekućem stanju 4. Sposobnost razvoja jednostavnih računalnih programa za simulaciju i analizu rezultata simulacija 5. Razumijevanje računalnih eksperimenata 6. Sposobnost korištenja programskih paketa za simulaciju molekularne dinamike i programa za vizualizaciju podataka					
Sadržaj predmeta detaljno razrađen prema satnici nastave	1. Uvod u kolegij: osnove računalnih simulacija, veza teorija-eksperiment. Osnove rada u linuxu. 2. Statistički opis sustava: ansambl, gustoća vjerojatnosti u faznom prostoru, vremensko usrednjenje i usrednjenje preko ansambla, ergotska hipoteza. 3. N-čestične gustoće i N-čestične distribucijske funkcije, 2-čestična distribucijska funkcija, radijalna distribucijska funkcija (RDF), virijalna jednačica. 4. Uvod u simulacije molekularne dinamike: tri koraka simulacije (inicijacija, ekvilibracija, produkcija). Primjer: molekularna dinamika krutih sfera. 5. Maxwell-Boltzmannova raspodjela brzina u sustavu krutih sfera. Izrada koda i analiza rezultata. 6. Dinamičke veličine u molekularnoj dinamici: brzina-brzina korelacije, difuzijski koeficijent: Green-Kubo i Einsteinov izvod. 7. Autokorelacijska funkcija brzine: izrada koda i analiza rezultata. 8. Uvod u Monte Carlo simulacije: primjer Lennard-Jones sustava. Korištenje programskog koda i analiza rezultata. 9. Monte Carlo simulacija fluida s modificiranim potencijalom: analiza rezultata i usporedba s Lennard-Jones fluidom. 10. Molekularna dinamika Lennard-Jones fluida i analiza rezultata programskog koda. 11. Osnovni integracijski algoritmi u molekularnoj dinamici: izračun položaja i brzina čestica. 12. Polja sile u molekularnoj dinamici: unutarmolekularni i međumolekularni potencijali. 13. Osnove korištenja programskog paketa za simulacije molekularne dinamike. 14. Simulacije jednostavnih sustava - voda u tekućem stanju. Analiza rezultata i					

	vizualizacija. 15. Simulacije složenih sustava - protein u vodi. Analiza rezultata i vizualizacija.					
Vrste izvođenja nastave:	☒ predavanja ☒ seminari i radionice ☒ vježbe ☐ on line u cijelosti ☐ mješovito e-učenje ☐ terenska nastava ☒ samostalni zadaci			☒ multimedija ☐ laboratorij ☐ mentorski rad ☐ domaće zadaće ☐ ☐ ☐		
Obveze studenata	1. Prisustvo i zalaganje studenata na satu izrada zadataka na satu, 2. Izrada zadataka kod kuće, 3. Izrada seminarskog rada koji uključuje samostalno modeliranje i simulaciju metodom molekularne dinamike odabranog fizikalnog problema te analiza rezultata, 4. Pisanje izvještaja i prezentacija seminara.					
Praćenje rada studenata (<i>upisati udio u ECTS bodovima za svaku aktivnost tako da ukupni broj ECTS bodova odgovara bodovnoj vrijednosti predmeta</i>):	Naziv	Ects	Naziv	Ects	Naziv	Ects
	Pohađanje nastave	1.5	Istraživanje	0.5	Eksperimentalni rad	
	Usmeni ispit		Referat		Domaće zadaće	
	Seminarski rad	1	Esej			
	Kolokvij	1	Praktični rad	1		
	Pismeni ispit		Projekt			
Ocjenjivanje i vrjednovanje rada studenata tijekom nastave i na završnom ispitu	Pismeni dio: 2 kolokvija ili pismeni ispit. Prezentacija seminara, članaka, prema potrebi usmeni ispit.					
Obvezna literatura (dostupna u knjižnici i putem ostalih medija)	Naslov			Broj primjeraka u knjižnici	Dostupnost putem ostalih medija	
	[1] B. Lovrinčević, Dinamika atoma u plinovima i tekućinama, skripta, 2021.				E-learning	
Dopunska literatura	[1] J.-P. Hansen and I. R. McDonald, Theory of simple liquids, Academic Press, 2006. [2] P. Allen & D. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon, Press, Oxford, 1987.					
Načini praćenja kvalitete koji osiguravaju stjecanje utvrđenih ishoda učenja	Statistika ispitnih rezultata i studentska evaluacija putem ankete koju provodi Sveučilište u Splitu.					
Ostalo (prema mišljenju predlagatelja)						