

课程名称：分子动力学

一、课程编码：0100018

课内学时：32 学分：2

二、适用学科专业：力学、材料科学、分子生物学

三、先修课程：

四、教学目标

通过本课程的学习分子动力学模拟方法，掌握分子动力学（Molecular dynamics）及蒙特卡罗（Monte Carlo）方法的基本原理，掌握分子动力学及蒙特卡罗方法在生物大分子模拟、材料科学及流体模拟方面的应用。

五、教学方式

课堂讲授

六、主要内容及学时分配

- | | |
|-----------------------------------|------|
| 1. 导论 | 2 学时 |
| 1.1 计算机模拟常用方法 | |
| 1.2 分子模拟的历史和发展现状 | |
| 1.3 分子模拟应用实例介绍 | |
| 2. 分子模拟的基本方法 | 2 学时 |
| 2.1 边界条件 | |
| 2.2 控制方程及积分方法 | |
| 2.3 分子坐标的描述，拓扑结构 | |
| 3. 分子模拟力场 | 6 学时 |
| 3.1 各种势函数的表达形式及其应用（生物大分子系统、聚合物） | |
| 3.2 各种势函数的表达形式及其应用（碳原子系统、金属常用势函数） | |
| 4. 分子动力学模拟软件介绍及应用 | 4 学时 |
| 4.1 HyperChem | |
| 4.2 Gromacs | |
| 4.3 LAMMPS | |
| 5. 分子动力学模拟实例 | 4 学时 |
| 5.1 蛋白质分子动力学模拟 | |
| 5.2 蛋白质分子与小分子相互作用模拟 | |
| 5.3 典型材料变形、破坏模拟 | |
| 6. 分子动力学中重要的特殊方法 | 6 学时 |
| 6.1 分子动力学加速算法 | |
| 6.2 加载分子动力学（SMD、TMD） | |
| 6.3 Replica exchange MD | |
| 6.4 伞状采样 | |
| 7. 蒙特卡罗（Monte Carlo）方法 | 6 学时 |
| 7.1 蒙特卡罗方法的基本思想 | |
| 7.2 伪随机数的产生和检验 | |
| 7.3 给定分布的随机数抽样方法 | |
| 7.4 基本 Monte Carlo 算法 | |

7.5 典型的蒙特卡罗方法应用实例：计算圆周率

7.6 典型的蒙特卡罗方法应用实例：随机行走

8. 光滑粒子流体动力学方法 (Smoothed Particle Hydrodynamic) 介绍 2 学时

七、考核与成绩评定

成绩以百分制衡量，期末笔试成绩占 40%，课题报告占 60%。

八、参考书及学生必读参考资料

1. 陈舜麟编著，《计算材料科学》，化学工业出版社，2005 年。
2. 张跃编著，《计算材料科学基础》，北京航空航天大学出版社，2007。
3. (荷) 弗兰克 (Frenkel & Smit) 等著，汪文川 等译，《分子模拟——从算法到应用》，2002。
4. M. P. Allen , D. J. Tildesley, 《Computer Simulation of Liquids》, Oxford University Press, 1987。
5. GROMACS user manual. Version 5.0。
6. 沈惠川著，《统计力学》，中国科学技术大学出版社，2011。

九、大纲撰写人：李德昌