



# FKF3410 Molekylär modellering för materialdesign 7,5 hp

Molecular Modeling for Materials Design

När kurs inte längre ges har student möjlighet att examineras under ytterligare två läsår.

## Fastställande

Kursplan för FKF3410 gäller från och med VT19

## Betygsskala

## Utbildningsnivå

Forskarnivå

## Särskild behörighet

Grundkurs i termodynamik, statistisk mekanik eller motsvarande samt datorvana.

## Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

## Lärandemål

Kursmål:

Allt eftersom de relevanta längdskalorna i framställda material blir mindre och mindre, blir processer på den molekylära och atomära nivån allt viktigare för dess slutliga egenskaper. Dessa processer kan i många fall förstås m.h.a. klassisk termodynamik och statistisk

mekanik, men är p.g.a. systemens komplexitet närmast omöjliga att överblicka utan hjälp av effektiva datorsimuleringar.

En metod för att simulera skeenden på denna skala är klassisk molekylodynamik (MD), vilken i takt med den snabba utvecklingen av både hård- och mjukvara har fått allt större spridning inom materialvetenskapen, med tillämpningar inom exempelvis fasta material, polymerer, lösningar och suspensioner, och kompositer.

Målet är att studenterna efter avslutad kurs skall:

- Ha grundläggande kännedom om de teoretiska grunderna till atomistiska simuleringar av klassiska system
- Själv kunna sätta upp, köra och analysera molekylodynamiksimuleringar av enkla system
- Kunna anpassa simuleringarna till aktuell problemställning genom att välja relevant angreppssätt (m.a.p. kraftfält, simuleringsparametrar, analysmetod, etc.)
- Kunna relatera simuleringarna till experimentella metoder
- Kunna visualisera och presentera resultaten i form av grafer och molekylgrafik
- Förstå begränsningarna för MD som metod

Målgrupp:

Forskarstuderande inom kemi med ett intresse av molekylära mekanismer

## Kursinnehåll

Föreläsningarna i kursen behandlar bl.a.:

- MD-metoden
- Kraftfält
- Ensembler
- Massfördelningsfunktioner, korrelationsfunktioner, fluktuationer
- Kolhydratmodeller (cellulosa, hemicellulosa, vattenmodeller, etc)
- Fri-energimetoder (löslighet, ligand-substrat-bindning, kemisk modifiering)
- Metoder för förbättrad sampling (Replica exchange, steered MD)
- Simulering av mekaniska egenskaper
- Avancerad analys (normalmodsanalys, kvantkorrektioner, simulerad vibrationspektroskopi)
- Introduktion till HPC-miljöer (High Performance Computing)

## Kursupplägg

Huvuddelen av kursinnehållet presenteras under 10 stycken 2-timmars föreläsningar, vilka också innehåller praktiska moment. De centrala delarna exemplifieras under kursens gång i två stycken datorlaborationer. Kursen avslutas med en projektuppgift där studenten skall genomföra och analysera en större simulering samt presentera resultatet i en skriven rapport. Denna uppgift planeras i samråd med läraren och bör anknyta till studentens eget doktorandprojekt.

## Kurslitteratur

Utdelat material

## Examination

Examinator beslutar, baserat på rekommendation från KTH:s handläggare av stöd till studenter med funktionsnedsättning, om eventuell anpassad examination för studenter med dokumenterad, varaktig funktionsnedsättning.

Examinator får medge annan examinationsform vid omexamination av enstaka studenter.

## Övriga krav för slutbetyg

Minst 80% närvaro på föreläsningarna, godkända labbrapporter till datorlaborationerna samt godkänd projektuppgift.

## Etiskt förhållningssätt

- Vid grupparbete har alla i gruppen ansvar för gruppens arbete.
- Vid examination ska varje student ärligt redovisa hjälp som erhållits och källor som använts.
- Vid muntlig examination ska varje student kunna redogöra för hela uppgiften och hela lösningen.