

2017—2018 学年度第 1 学期

北京理工大学《分子动力学》课程教学日历

专业年级 硕士一年级 教材 《计算材料科学》 课内总学时 32

开课院系 宇航学院力学系 任课教师 李德昌 课内实验学时 0

周次	时数	教学形式	授课章节和教学内容	作业
第4周	2	课堂授课	<ul style="list-style-type: none"> ● 绪论 	
第5周	2	课堂授课	<ul style="list-style-type: none"> ● 计算机模拟常用方法 ● 分子模拟的历史和发展现状 ● 分子模拟应用实例介绍 	文献阅读 课程论文
第6周	2	课堂授课	<ul style="list-style-type: none"> ● 国庆放假 	
第7周	2	课堂授课	<ul style="list-style-type: none"> ● 分子模拟的基本方法 ● 边界条件 ● 控制方程及积分方法 	
第8周	2	课堂授课	<ul style="list-style-type: none"> ● 分子坐标的描述, 拓扑结构 ● 力场的一般特征——各种势函数的表达形式及其应用(生物大分子系统、聚合物) I 	
第9周	2	课堂授课	<ul style="list-style-type: none"> ● 力场的一般特征——各种势函数的表达形式及其应用(生物大分子系统、聚合物) I 	
第10周	2	课堂授课	<ul style="list-style-type: none"> ● 力场的一般特征——各种势函数的表达形式及其应用(生物大分子系统、聚合物、碳原子系统、金属常用势函数) II, III 	
第11周	2	课堂授课	<ol style="list-style-type: none"> 1. 分子动力学模拟软件介绍及应用 <ul style="list-style-type: none"> ● HyperChem ● Gromacs ● Lammmps 2. 学生课题开题 	课程论文选题
第12周	2	课堂授课	生物大分子系统的分子动力学模拟实例 <ul style="list-style-type: none"> ● 蛋白质分子动力学模拟 ● 蛋白质分子与小分子相互作用模拟 	
第13周	2	课堂授课	分子动力学中重要的特殊方法 <ul style="list-style-type: none"> ● 分子动力学加速算法 ● 加载分子动力学(SMD、TMD) 	
第14周	2	课堂授课	分子动力学中重要的特殊方法 <ul style="list-style-type: none"> ● Replica exchange MD ● 伞状采样 	
第15周	2	课堂授课	蒙特卡罗(Monte Carlo)方法 <ul style="list-style-type: none"> ● 蒙特卡洛方法的基本思想 	
第16周	2	课堂授课	蒙特卡罗(Monte Carlo)方法 <ul style="list-style-type: none"> ● 伪随机数的产生和检验 ● 给定分布的随机数抽样方法 ● 基本 Monte Carlo 算法 	

第17周	2	课堂授课	<ul style="list-style-type: none"> ● 典型的蒙特卡罗方法应用实例：计算圆周率 ● 典型的蒙特卡罗方法应用实例：随机行走 	
第18周	2	课堂授课	<ul style="list-style-type: none"> ● SPH 方法 	
第19周	2	课堂授课	<ul style="list-style-type: none"> ● 学生课题答辩 	
合计	32			