

# LV-Nr. 21307a/b

## Moleküldynamik

### Dozenten:

Prof. Dr. Bettina Keller  
Raum: 35.19  
Email: [bettina.keller@fu-berlin.de](mailto:bettina.keller@fu-berlin.de)

### Übungsleiter:

Jan Joswig  
Raum: 35.19  
Email: [janjoswig@zedat.fu-berlin.de](mailto:janjoswig@zedat.fu-berlin.de)

Dr. Burkhard Schmidt  
Raum: Arnimallee 6, R 216  
Email: [burkhard.schmidt@fu-berlin.de](mailto:burkhard.schmidt@fu-berlin.de)

### Webseite

[www.chemie.fu-berlin.de/keller](http://www.chemie.fu-berlin.de/keller) → Teaching

Passwort: MD-sose18

## Vorlesungs- und Übungstermine

**Vorlesung:** Mi, 10-12 Uhr SR 23.02 (Takustr. 3)  
**Übung:** Do, 10-12 Uhr PC Pool, Fabeckstr. 36a, Raum 304(a)

## Inhalt der Vorlesung

- Numerische Integriatoren für klassische MD
- Kraftfelder, Topologien, Wassermodelle
- Periodic boundary conditions, Pairlists, Constraints
- Elektrostatische Wechselwirkungen
- Thermostaten und Barostaten
- Freie-Energie-Berechnung
- Markov state models
- Markov chain Monte Carlo sampling

## Literature

- D. Frenkel, B. Smith "Understanding Molecular Simulation", Academic Press (2001)
- M.P. Allen, D.J. Tildesley "Computer Simulation of Liquids" Oxford University Press (1989)
- A. Leach "Molecular modelling - principles and applications" Prentice Hall (2001)
- F. Jensen "Introduction to Computational Chemistry" JW (2011)
- Cramer "The Essentials of Computational Chemistry" John Wiley & Sons (2004)
- Tuckerman "Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation" Oxford University Press (2011)

## Organisatorisches

- **Bitte tragen Sie sich im Campus-Management ein!**
- Der Zeitaufwand für diesen Kurs beträgt etwa 10 h pro Woche, einschließlich Vorlesung und Übung.
- Der Kurs baut auf den Vorlesungen Physik und Mathematik I & II auf.
- Parallel zu den Vorlesungen wird ein Skript erstellt. Die jeweils aktuelle Version finden Sie auf der Webseite.

## Bewertung des Kurses

- Es wird etwa zehn Übungen zum Vorlesungsstoff geben, die Sie einzeln oder in Zweier-Gruppen bearbeiten können. Bewertet werden die *termingerecht* abgegebenen Protokolle zu diesen Übungen.
- Die Bewertung setzt sich folgendermaßen zusammen
  - regelmäßige Teilnahme: 70% der Übungen abgegeben
  - aktive Teilnahme: 50% der Punkte aus den Übungen erreicht
  - Note: mündliche Prüfung am Ende der Vorlesung