



# Институт по Информационни и Комуникационни Технологии – БАН

Семинар  
„Паралелни Алогоритми и Научни Пресмятания”

На 21 Април 2015 г. (вторник) от 14:00 в зала 218 на ИИКТ-БАН, ул. Акад. Г. Бончев, блок 25А, Елена Лилкова, асистент, ИИКТ-БАН, ще изнесе доклад на тема:

## Молекулно-динамични симулации – основни понятия и методи

### Абстракт

Молекулната динамика (МД) е мощен инструмент в съвременното молекулно моделиране, който позволява изключително детайлното изследването на структура и динамика – на ниво проследяване на движението на отделните атоми, чрез пресмятане на еволюцията във времето на молекулни системи. Методът на МД е ценно междинно звено, свързващо експеримент и теория и се използва рутинно за изследване на структурните, термодинамичните и транспортните свойства на кондензираната материя, включително молекулни и йонни течности, течни метали, фазите на водата, разтварянето и свързването на малки молекули, както и биологични макромолекули и техните комплекси.

Ще бъде представено въведение в основните понятия, теорията и методите в МД, включително полу-емпирични потенциали, интегратори, поддържане на различни термодинамични ансамбли и др.