

**СПЕЦИАЛИЗИРАН ДОКТОРАНТСКИ КУРС**  
**Компютърно моделиране на комплексни системи**  
**Computer modeling of complex systems**

**Лектор:** проф. дфн Хассан Шамати, ИФТТ-БАН  
Тел.: 979 5778, e-mail: chamati@issp.bas.bg

40 часа

**Анотация**

Целта на курса е въвеждането на докторантите и младите изследователи в съвременните методи на компютърното моделиране. Обсъждат се различните подходи и възможни алгоритми при моделиране на комплексни системи, както и решенията на проблемите, които възникват при работата с модели. Курсът може да послужи като основа за теоретични изследвания на актуални научни проблеми в редица области като физиката, химията и биологията. Акцентът пада върху методите Монте Карло и Молекулната динамика в различни статистически ансамбли и приложението им, както и особеностите в наноразмерната област.

Обучаващите се имат възможност за практическо занятие върху конкретни задачи, свързани с изброените по-горе дисциплини.

**Литература**

- Fahlman, B.D., 2011. Materials chemistry. Springer.
- Ferrario, M., Ciccotti, G., Binder, K., 2006. Computer Simulations in Condensed Matter: From Materials to Chemical Biology, 1st ed, Lecture Notes in Physics. Springer.
- Frenkel, D., Smit, B., 2002. Understanding molecular simulation: from algorithms to applications, 2nd ed., Computational Science Series. Academic Press.
- Kittel, C., 2005. Introduction to solid state physics, 8th ed. ed. Wiley, Hoboken NJ.
- Marder, M., 2010. Condensed matter physics, 2nd ed., Wiley.
- Mitin, V.V., Sementsov, D.I., Vagidov, N.Z., 2010. Quantum Mechanics for Nanostructures. Cambridge University Press.
- Schlick, T., 2010. Molecular modeling and simulation an interdisciplinary guide, Interdisciplinary Applied Mathematics. Springer.
- Tuckerman, M., 2010. Statistical mechanics : theory and molecular simulation. Oxford University Press.