



SIMOLANT 2002

Program pro ukázkou skupenských přeměn a výuku molekulárních simulací

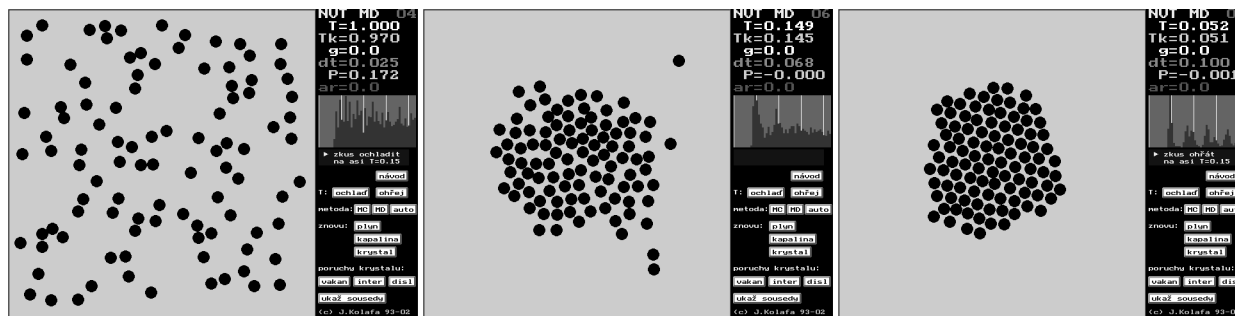
Počítačové simulace, pseudoexperimenty, molekulární simulace metodami Monte Carlo a molekulární dynamiky – to vše jsou synonyma pro moderní „experimentální“ nástroj ke studiu problémů fyziky, chemie i biochemie na mikroskopické úrovni. K jejich použití musíme znát vlastnosti jednotlivých molekul, tj. jejich strukturu a interakční energii dvojice molekul. Metodami počítačových simulací pak určíme vlastnosti systému mnoha molekul.

SIMOLANT 2002 simuluje dvojrozměrný model látky. Molekuly jsou kuličky (či spíše kolečka), které mají kvalitativně vlastnosti reálných molekul, tedy přitahují se, jsou-li blízko u sebe, ale nemohou se překrývat. I tento jednoduchý model popisuje tři skupenství a mnoho dalších jevů.

Účel programu SIMOLANT 2002 je dvojitý.

Pro výuku fyziky a chemie na základní a střední škole: Je možné pozorovat, jak při ochlazení plynu dojde ke kondenzaci a při dalším ochlazení ke krystalizaci a naopak při ohřátí k tání a varu. Lze studovat i některé poruchy krystalové mřížky.

Pro univerzitní kurs počítačových simulací: Lze simulovat metodou Monte Carlo a molekulární dynamiky, při konstantní energii i teplotě, při různých okrajových podmínkách, měnit délku kroku či zkušebního posunutí, ukazovat radiální distribuční funkci a koordinační číslo.



SW/HW požadavky: DOS (např. DOS box pod Windows), VGA 640 × 480 × 16, myš

Kopírování: Freeware (GNU General Public License)

Dostupnost: <http://staffold.vscht.cz/fch/cz/pomucky/simolant.html>,
<http://www.icpf.cas.cz/jiri/skripta>

Autor: RNDr. Jiří Kolafa, CSc., Ústav fyzikální chemie VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6, e-mail: jiri.kolafa@vscht.cz, <http://www.icpf.cas.cz/jiri/>.