

شماره درس: ۲۸۱۸۲
نام درس: دینامیک مولکولی

نوع و بیشینه واحد: ثابت ۳	نوع درس: نظری
همیناز: ندارد	پیشنیاز: ندارد
اولین نیمسال ارائه:	مقطع: تحصیلات تکمیلی
آخرین ویرایش: ۱۳۹۷۱	گروه: دینامیک، ارتعاشات

اهداف: در این درس دانشجویان با مبانی و ابزارهای محاسباتی دینامیک مولکولی آشنا می‌شوند و قابلیت کد نویسی و بکارگیری از نرم افزارهای اصلی موجود را فرا خواهند گرفت.

سرفصل‌ها:

- ۱- مقدمه ای بر کاربرد دینامیک مولکولی جهت مدل‌سازی سیستم های در مقیاس نانو
- ۲- انواع پتانسیلهای بین اتمی (مکانیک مولکولی (شناخت انواع ورودیهای لازم جهت شبیه سازی سیستم های مولکولی نظیر فایل های PDB، PSF، آشنایی با میدانهای نیروی MM2:4, Charmm)، نیروهای الکترو استاتیکی، نیروهای واندروالس، پتانسیلهای استفاده شده برای فلزات، پتانسیلهای جفتی و چندین جسمی (Many Body، Pair Interaction)، انواع پتانسیلهای استفاده شده برای کربن (ترسف-ای آی ریو)، انواع پتانسیلهای استفاده شده برای سیلیکون (ترسف-استیلینگر وبر)
- ۳- روشهای مینیم کردن تابع پتانسیل (روشهایی که از مشتقات انرژی استفاده نمی کنند روش Simplex و روش Sequential) و روشهای کمینه سازی انرژی با استفاده از مشتق تابع (روشهای Steepest Descent، Conjugate Gradient، Newton، Gradient)، انتخاب روش بهینه سازی مناسب، معیار همگرایی)
- ۴- تکنیکهای استفاده شده در شبیه سازی رایانه ای (شرایط مرزی: متناوب و غیرمتناوب)، انواع انسامل، شعاع قطع پتانسیل، لیست همسایگی، نیروهای برد بلند و نحوه محاسبه آنها (از جمله نیروی الکترواستاتیک)
- ۵- شبیه سازیهای دینامیک مولکولی (روشهای انتگرال گیری از معادلات حرکت (روش ورله سرعتی، روش پیشینی-تصحیح)، انتخاب مناسب گام زمانی، توزیع سرعتها، شروع و اجرای برنامه شبیه سازی دینامیک مولکولی، دینامیک مقید، مدل‌سازی مولکولهای صلب، دینامیک مولکولی در دما و فشار ثابت (انواع ترموستات ها)، نمونه ای از شبیه سازی های دینامیک مولکولی)، مثال های مختلفی از مدل‌سازی و شبیه سازی سیستم های مختلف با استفاده از روش دینامیک مولکولی، معرفی چندین پروژه برای دانشجویان جهت تمرین کد نویسی دینامیک مولکولی)
- ۶- مقدمه ای بر روشهای درشت دانه کردن (روشهای استفاده شده در بیومولکولها (Residue Based، Shape based)، روشهای مختلف درشت دانه کردن آب، روشهای دانه درشت کردن برای فلزات

مراجع:

1. A. R. Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications, Prentice Hall, 2001.
2. J. M. Haile, Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods, Wiley-Interscience
3. D. C. Rapaport , "The Art of Molecular Dynamics Simulation", Cambridge University Press, 2004.

4. W. Humphrey, A. Dalke, and K. Schulten, "VMD - Visual Molecular Dynamics", Journal of Molecular Graphics, vol. 14, p. 33-38, 1996.
5. J. C. Phillips et al., "Scalable molecular dynamics with NAMD," Journal of computational chemistry, vol. 26, no. 16, p. 1781, 2005. "NAMD A Parallel Object-Oriented Molecular Dynamics Program"
6. "LAMMPS Molecular Dynamics Simulator". Sandia National Laboratories. Retrieved 2010-10-03.