طرح درس شیمی محاسباتی (بخش دوم)

نام درس: شیمی محاسباتی **میزان واحد نظری:** ۳ واحد **میزان واحد عملی:** **شماره درس:** ۰۱-۰۱۷-۱۶-۳۲

مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد **مکان ارئه درس:** کلاس۲۰۴ **روز و ساعت:** شنبه و دوشنبه ۸-۱۰

نام استاد: مجید موسوی **ساعت و نحوه ارتباط با استاد:** یکشنبه ۱۶-۱۸ و چهارشنبه ۱۶-۱۸

تکالیف دانشجو: نمره نهایی (نمره فعالیت های کلاسی: ۲ نمره **نمره پایان نیمسال:** ۸ نمره)

جلسه	روز	تاریخ	رئوس مطالب
۱	دوشنبه	۹۳/۸/۱۹	**بخش اول: شبیه سازی دینامیک مولکولی** شبیه سازی های رایانه ای، مدل سازی و شبیه سازی، شبیه سازی و تجربه، کوچک سازی و شبیه سازی،
۲	شنبه	۹۳/۸/۲۴	انواع شبیه سازی های رایانه ای، شبیه سازی های اتفاقی و جبری (روش مونت-کارلو و روش دینامیک مولکولی)، شبیه سازی های پیوسته و ناپیوسته، شبیه سازی های توزیعی
۳	دوشنبه	۹۳/۸/۲۶	مکانیک آماری، دینامیک نیوتنی، فرمول بندی هامیلتونی و دینامیک لاگرانژی، تعیین خواص ترمودینامیکی، تابع توزیع شعاعی
۴	شنبه	۹۳/۹/۱	پتانسیل برهمکنش و میدان های نیرو
۵	دوشنبه	۹۳/۹/۳	تکنیک های مورد استفاده در شبیه سازی، شرایط مرزی تناوبی، پتانسیل قطع و قرارداد حداقل تصویر، اصول بقا (پایستگی)، سیستم واحدها
۶	شنبه	۹۳/۹/۸	شبیه سازی دینامیک مولکولی کرات سخت، دینامیک و سینماتیک کرات سخت، الگوریتم شبیه سازی، مکان ها و سرعت های اولیه، محاسبه خواص
۷	دوشنبه	۹۳/۹/۱۰	شبیه سازی دینامیک مولکولی اجسام نرم، روش اختلاف متناهی، روش اولر، ارزیابی خطاها در شبیه سازی های رایانه ای و انتخاب گام زمانی
۸	شنبه	۹۳/۹/۱۵	الگوریتم های انتگرالی، الگوریتم ورله، الگوریتم پیش بینی- تصحیح، الگوریتم بیمان، مقایسه الگوریتم های انتگرالی، مراحل اجرای یک شبیه سازی
۹	دوشنبه	۹۳/۹/۱۷	انسامبل های متداول، ترموستات و باروستات
۱۰	شنبه	۹۳/۹/۲۲	**تعطیل**
۱۱	دوشنبه	۹۳/۹/۲۴	محاسبه خواص مختلف در شبیه سازی های رایانه ای، توابع ترمودینامیکی ساده،
۱۲	شنبه	۹۳/۹/۲۹	شبیه سازی دینامیک مولکولی در سیستم های نانو
۱۳	دوشنبه	۹۳/۱۰/۱	برخی از کاربردهای شبیه سازی و آشنایی با برخی از نرم افزارهای متداول در شبیه سازی دینامیک مولکولی
۱۴	شنبه	۹۳/۱۰/۶	برنامه نویسی فرترن ۱ –کلیات، متغیرها، توابع آماده فرترن، کنترل اجرای برنامه،
۱۵	دوشنبه	۹۳/۱۰/۸	برنامه نویسی فرترن ۲- اجرای چند برنامه ساده در Compaq Visual Fortran

مراجع مربوط به بخش دوم:

1. J.M. Haile, Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods, John Wiley (1996).
2. M.P. Allen, D.J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Oxford, Science Publications (2001).

3. D.C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, 2nd ed., Cambridge University Press (2004).

۴. الهه گوهرشادی، مجید موسوی، فاطمه موسوی، مبانی شبیه سازی دینامیک مولکولی، انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد، ۱۳۸۷.

۵. سیف اله جلیلی، شبیه سازی رایانه ای (دینامیک مولکولی و مونت کارلو)،انتشارات دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، ۱۳۸۶.