

طرح درس جهت ارائه در نیمسال تحصیلی اول

پلیمریزاسیون	گروه	مهندسی شیمی	دانشکده
کارشناسی ارشد	مقطع	طراحی مولکولی	گرایش
پایه نظری تخصصی عملی اختیاری نظری-عملی	نوع درس	مدل سازی مولکولی	نام درس
دکتر مارال قهرمانی	نام استاد	۳	تعداد واحد
۸۲۸۸۳۳۳۹	تلفن دفتر کار	-	دروس پیش نیاز
Maral.ghahramani@modares.ac.ir	پست الکترونیک	-	دروس هم نیاز

✓ اهداف درس:

۱. آشنائی با مفاهیم اصلی مدل سازی مولکولی
۲. آشنائی با کاربرد روش محاسبات دینامیک مولکولی در علم پلیمر
۳. محاسبه خواص پلیمرها به کمک نرم افزارهای مدل سازی مولکولی

✓ رئوس مطالب و برنامه ارائه در کلاس:

شماره جلسه	موضوع جلسه درس	توضیحات
جلسه اول	فصل اول: مقدمه ای بر شیمی محاسباتی (مقدمه، سطوح انرژی پتانسیل، تقریب برن اپنهایمر، بهینه سازی هندسه)	تئوری
جلسه دوم	فصل اول: مقدمه ای بر شیمی محاسباتی (مکانیک مولکولی، توسعه میدان نیرو، محاسبات به کمک میدان نیرو)	تئوری
جلسه سوم	فصل دوم: مقدمه ای بر شبیه سازی مولکولی پلیمرها (اصول پایه فیزیک زنجیره پلیمر، مدل های زنجیره پلیمر، برهمکنش در سیستم پلیمر، دینامیک زنجیره پلیمر)	تئوری
جلسه چهارم	فصل دوم: مقدمه ای بر شبیه سازی مولکولی پلیمرها (مکانیک آماری، تراژکتوری ها، مکانیک کلاسیک و کوانتوم، معادله حرکت کلاسیک)	تئوری
جلسه پنجم	فصل دوم: مقدمه ای بر شبیه سازی مولکولی پلیمرها (مکانیک آماری، تراژکتوری ها، مکانیک کلاسیک و کوانتوم، معادله حرکت کلاسیک)	تئوری
جلسه ششم	فصل دوم: مقدمه ای بر شبیه سازی مولکولی پلیمرها (معادله لیویل (Liouville) و حل آن در انسامبل های (Ensembles) مختلف)	تئوری
جلسه هفتم	فصل دوم: مقدمه ای بر شبیه سازی مولکولی پلیمرها (معادله لیویل (Liouville) و حل آن در انسامبل های (Ensembles) مختلف)	تئوری
جلسه هشتم	فصل دوم: مقدمه ای بر شبیه سازی مولکولی پلیمرها (خواص قابل محاسبه پلیمرها از طریق شبیه سازی مولکولی و معادلات مربوطه، شبیه سازی مونت کارلو، دینامیک مولکولی، دینامیک براونی)	تئوری
جلسه نهم	فصل دوم: مقدمه ای بر شبیه سازی مولکولی پلیمرها (تکنیک های آنالیز شبیه سازی، شرایط مرزی دوره ای، انواع خطاها در شبیه سازی)	تئوری
جلسه دهم	فصل سوم: کار با نرم افزار (آشنائی با محیط نرم افزار و قابلیت های آن / ساخت انواع پلیمرها و نانوذرات)	اجرا در کلاس با نرم افزار

اجرا در کلاس با نرم افزار	فصل سوم: کار با نرم افزار (آشنائی با محیط نرم افزار و قابلیت های آن / شبیه سازی نفوذ گاز در پلیمرها (ساخت و به تعادل رساندن سامانه، محاسبه ضریب نفوذ گاز))	جلسه یازدهم
اجرا در کلاس با نرم افزار	فصل سوم: کار با نرم افزار (شبیه سازی جذب مولکول های مختلف در غشاهای متخلخل (ساخت و به تعادل رساندن سامانه، پروفایل غلظت) / شبیه سازی جذب گاز بر سطح کاتالیست (ساخت و به تعادل رساندن سامانه، پروفایل جذب))	جلسه دوازدهم
اجرا در کلاس با نرم افزار	فصل سوم: کار با نرم افزار (محاسبه انرژی آزاد انحلال به کمک نرم افزار مدل سازی مولکولی/پیش بینی امتزاج پذیری پلیمرها به کمک نرم افزار مدل سازی مولکولی)	جلسه سیزدهم
اجرا در کلاس با نرم افزار	فصل سوم: کار با نرم افزار (شبیه سازی ساختار کاتد باتری لیتیومی به کمک نرم افزار مدل سازی مولکولی (ساخت، بهینه سازی، انرژی) / شبیه سازی پوشش پلیمری بر لایه فلز (ساخت و به تعادل رساندن سامانه، محاسبه انرژی هر لایه، محاسبه انرژی بین سطحی))	جلسه چهاردهم
اجرا در کلاس با نرم افزار	فصل سوم: کار با نرم افزار (محاسبه انرژی آزاد انحلال برای مخلوط دو حلال به کمک نرم افزار مدل سازی مولکولی/بهینه سازی ساختار ماده کریستالین)	جلسه پانزدهم
اجرا در کلاس با نرم افزار	فصل سوم: کار با نرم افزار (محاسبه دمای انتقال شیشه ای پلیمرها به کمک نرم افزار مدل سازی مولکولی)	جلسه شانزدهم

✓ روش ارزشیابی:

میان ترم = ۳۰٪

پرسش و پاسخ کلاسی (کتبی و شفاهی) و حل تمرین = ۲۰٪

پایان ترم = ۵۰٪

✓ منابع :

1. Lewars E., Computational Chemistry_ Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics-Kluwer, (2004) .
2. Kotelyanskii M., Simulation Methods for Polymers, MARECEL DEKKER INC, New York, (2004).
3. Khalatur PG, Molecular Dynamics Simulations in Polymer Science: Methods and Main Results, Polymer Science: A Comprehensive Reference, Volume1, (2012).
4. Jensen F, Introduction to computational chemistry, Wiley, (1999).