



قطب علمی
سیستم‌های پیچیده
و ماده چگال



سمینار هفتگی ماده چگال نرم

عنوان سمینار

MDAS: روشی جدید برای تسریع فرایند تعادل در سیستم های چگال ناهمگن

ارائه دهنده
آرمان فتحی زاده

نام دانشگاه و دانشکده
پژوهشکده مهندسی و علوم محاسباتی
دانشگاه تگزاس در آستین

چکیده

شبیه سازی دینامیک مولکولی یکی از ابزارهای قوی برای مطالعه سیستم های چند فازي است. با این حال اگر با سیستم های چگال سر و کار داشته باشیم به دلیل پایین بودن ضریب پخش، نتایج وابسته به شرایط اولیه خواهند بود. روش جایگزین دینامیک مولکولی می تواند مونته کارلو باشد. اما برای سیستم های چگال این روش نیز با مشکل پایین بودن نرخ پذیرش روبه رو است. به همین جهت ما در اینجا یک روش جدید بر پایه ترکیب دینامیک مولکولی و کار غیر تعادلی معرفی خواهیم کرد. ابتدا نحوه بکارگیری این روش بر روی سیستمهای دوتایی لئاردجونز نشان داده شده و با روش های کلاسیک مقایسه خواهد شد. در آخر نشان می دهیم که چگونه این روش می تواند برای شبیه سازی غشای سلول مفید باشد.

زمان: شنبه ۱۷/۰۶/۹۷ ساعت ۱۵:۳۰
مکان: تالار جناب (آمفی تئاتر دانشکده فیزیک)