



سمینار هفتگی ماده چگال نرم

ملاقات با وقایع نادر در دینامیک مولکولی

چکیده

انرژی آزاد یکی از کمیت‌هایی است که جهت روند فرآیندهای فیزیکی و شیمیایی را مشخص می‌کند و یکی از سؤال‌هایی که همیشه مطرح است؛ محاسبه انرژی آزاد سیستم‌ها در محاسبات نظری و شبیه‌سازی‌هاست. در حالت کلی این خیلی مشکل نیست. مشکل آنجا است که ما نیاز به محاسبه انرژی آزاد در نقاطی از فضای فاز را داریم که به‌طور معمول احتمال سر زدن سیستم به آن نقاط بسیار کم است. در این صحبت به بعضی از روش‌هایی که برای محاسبه انرژی آزاد در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به این منظور به کار گرفته می‌شوند؛ اشاره خواهیم کرد و نقاط قوت و ضعف آن‌ها را باهم مقایسه می‌کنیم.

Reza Ejtehadi

Sharif University of Technology

زمان: شنبه ۱۴۰۰/۱۲/۲۱ ساعت ۱۵:۳۰

مکان: کلاس مجازی دکتر اجتهادی

<https://vc.sharif.edu/ch/ejtehadi>