

وثيقة توصيف مقرّر درسي

نمذجة ومحاكاة المواد (Materials Simulation and Modelling)

عنوان المقرّر

2.5 ECTS

عدد وحدات التعلّم

تزويد الطالب بالمعارف والمهارات المتقدّمة في الطرائق الحاسوبية المستخدمة في نمذجة ومحاكاة المادّة بأبعادها المختلفة وخلال أزمنة مختلفة، من المستوى الذري وحتى مستوى المادّة المستمرة، بما يمكنه من تنفيذ تجارب *in silico* وابتكار مواد جديدة أو تطوير خواص محدّدة لمادّة ما.

غاية المقرّر

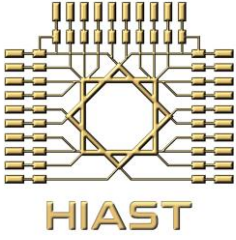
مخرجات التعلّم المستهدفة

سيكون الطالب الذي يكمل هذا المقرّر بنجاح قادراً على:

- استيعاب المفاهيم والأدوات الأساسية لنمذجة المواد.
- إدراك فائدة النمذجة والمحاكاة وحدود استخدامها.
- التطبيق العملي للنمذجة في مجال علوم المواد ويشمل ذلك مهارة استخدام برمجيات نمذجة حديثة مثل Materials Studio, Scrodinger أو حزم برمجية مفتوحة المصدر مثل LAMMPS, GROMACS
- عرض نتائج المحاكاة باستخدام برمجيات إظهار مناسبة VMD, OVITO .

محتوى المقرّر

- مدخل في نمذجة المواد: أهميّة النمذجة في علم المواد، المفاهيم الأساسية في نمذجة المواد، تطبيقات النمذجة وتجارب المحاكاة.
- الديناميك الجزيئي: ديناميك الجزيئات، مراحل المحاكاة وتحليل نتائجها وموثوقيتها، النمذجة والترموديناميك (قوانين المصنويّة، الديناميك الجزيئي في جمل NVE - NVT- NPT - الديناميك الجزيئي المسرّع)، تحديات الديناميك الجزيئي وحدود تطبيقه.
- الديناميك الجزيئي - دراسة حالات: التعريف ببيئة نمذجة الديناميك الجزيئي LAMMPS، دراسة بعض التطبيقات والحالات الخاصة باستخدام LAMMPS.
- التعريف ببرنامج Materials Studio وبرنامج Schrodinger: رسم الجزيئات البسيطة ودراسة البنية الفراغية، البنى النانوية والميزوية، البلورات - السطوح - التناظر.
- نمذجة امتصاص المواد العضوية: رسم بنى الجزيئات العضوية واستيراد البنية الماصّة، تحديد شروط الامتصاص ورسم منحنى الامتصاص، رسم سطح الطاقة الكامنة وتحديد مواقع التأثير في الجزيئة.
- نمذجة التوافقية في الخلائط: بناء البوليمرات (PAA -PP -POE)، الدراسة التوافقية بين البوليمرات استنتاج معامل التوافقية.



الجمهورية العربية السورية
المعهد العالي للعلوم التطبيقية والتكنولوجيا

- نمذجة النفوذية في المواد: تحضير بنية المصفوفة البوليميرية المضيفة، بناء خلية المحاكاة وتحقيق وضع توازن للخلية، حساب الديناميك الجزيئي ومعامل الانتشار.
- التنبؤ بخواص البوليميرات التشاركية العشوائية: رسم الوحدات التكرارية وبناء البوليمير التشاركي العشوائي، حساب معامل الانكسار.
- التأثير المتبادل بين البوليمير والسطوح المعدنية: إنشاء السطح المعدني وبناء البوليمير، تنفيذ الدينامك الجزيئي وحساب طاقة التأثير المتبادل.