



سمینار هفتگی ماده چگال نرم

از A به B در فضای انرژی آزاد*

امیر کارگران

دانشکده فیزیک

دانشگاه صنعتی شریف

نویسندگان این مقاله یک روش جدید برای جستجوی مسیر کمینه انرژی آزاد در دستگاه‌های پیچیده مولکولی در دمای محدود ارائه می‌دهند. آنها دو متغیر که توانائی توصیف مکان یک نقطه در فضای پیکر بندی نسبت به مسیر از قبل تعیین شده را دارند معرفی می‌کنند. با کمک این دو متغیر نویسندگان ویژگی‌های روش‌های مانند متادینامیک (Metadynamics) یا نمونه گیری چتری (Umbrella sampling) را با روش‌های پایه مسیر ترکیب می‌کنند. برای انجام این روش باید یک اصل وردشی جدید برای تعیین مسیرهای کمینه انرژی آزاد ارائه داد. برخلاف متادینامیک یا نمونه گیری چتری مسیر می‌تواند با تعداد زیاد دلخواهی متغیر توصیف شود، با وجود این می‌توان انرژی را در طی مسیر به دست آورد. نویسندگان این روش را برای یک مولکول مشخص به صورت عددی مطالعه می‌کنند.

* I am going to talk about paper “From A to B in free energy space”, D. Branduardi *etal*, *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS* 126, 054103 (2007)

زمان: شنبه ۱۳۸۹/۳/۱ ، ساعت: ۱۶:۴۵

مکان: آمفی تئاتر دانشکده فیزیک