سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:

بررسی شبیه سازی دینامیک مولکولی در علوم پایه

محل انتشار:

فصلنامه پژوهش های کاربردی در مدیریت و علوم انسانی, دوره 4, شماره 10 (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسنده:

اشرف السادات میرکمالی - استادیار گروه فیزیک، واحد بهشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، بهشهر، ایران

خلاصه مقاله:

دینامیک مولکولی، شکلی از شبیه سازی کامپیوتری است که در آن اتم ها و مولکول ها اجازه دارند برای یک دوره از زمان تحت قوانین شناخته شده فیزیک با هم برهم کنش کنند و چشم اندازی از حرکت اتم ها بدهند. از آنجایی که سیستم های مولکولی عموما شامل تعداد زیادی از ذرات هستند امکان پذیر نیست که ویژگی-های سیتسم های پیچیده را بطور تحلیلی بدست آوریم. شبیه سازی دینامیک مولکولی، این مساله را با بکاربردن روشی محاسباتی حل می کند. این روش یک واسطه بین تجربیات آزمایشگاهی و نظریه ایجاد می کند و به عنوان یک آزمایش مجازی در نظر گرفته می شود. در این مقاله به معرفی روشهای دینامیک مولکولی و کاربردهای آن در فیزیک ،شیمی و زیست شناسی پرداخته شده است.

کلمات کلیدی:

دینامیک مولکولی ،شبیه سازی، مدل سازی، هندسه بعد

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/1840863