

عنوان دوره تخصصی:

## کارگاه شبیه سازی به روش دینامیک مولکولی با استفاده از نرم افزار GROMACS

مدرسین دوره:

**دکتر امیر حسین جلیلی**

(دکترای شیمی فیزیک و عضو هیأت علمی پژوهشگاه نفت)

**دکتر مژده اخوان**

(دکترای شیمی فیزیک و پژوهشگر علوم نانو پژوهشگاه دانش های بنیادی)

هدف ویژه دوره: این دوره به منظور آشنائی متخصصان شیمی و مهندسان شیمی با مبانی مقدماتی و روشهای مدل سازی مولکولی و شبیه سازی مولکولی، دامنه کاربرد هر یک از آنها در طراحی مولکولهای خاص در صنایع نفت، گاز و پتروشیمی برگزار می گردد. مخاطبین دوره: پژوهشگران شیمی و مهندسی شیمی شاغل در حوزه های شیمیایی، نفت و گاز و دانشجویان علاقه مند و شاغل به تحصیل در رشته های مرتبط.

محتوای دوره:

➤ مقدمه: مدل سازی مولکولی یا شبیه سازی مولکولی؟ مفاهیم و کاربردها

➤ مکانیک کوانتومی و شیمی کوانتومی

➤ مکانیک مولکولی

➤ میدان های نیرو و یا پتانسیل های بین مولکولی

➤ شبیه سازی مولکولی

زمان برگزاری: از ۱۳۹۶/۰۴/۱۰ به مدت ۵ روز ساعت برگزاری: از ساعت ۸:۳۰ الی ۱۶

مکان برگزاری: بلوار غربی ورزشگاه آزادی، پژوهشگاه صنعت نفت، واحد آموزش و تجهیز نیروی انسانی

نحوه ثبت نام: تماس با کارشناس دوره به شماره تلفن ۴۸۲۵۳۱۱۳-۰۲۱

مهلت ثبت نام: حداکثر تا تاریخ ۱۳۹۶/۰۳/۳۱ (با توجه به محدودیت ظرفیت ثبت نام اولویت با افرادی است که سریع تر نسبت به ثبت نام اقدام می نمایند)

هزینه دوره: ۳۰۰،۰۰۰،۷ ریال به ازای هر نفر - واریز وجه به شماره حساب ۲۱۷۴۵۶۹۰۰۱۰۰۱ بانک ملی ایران به نام خزانه داری کل (درآمدهای

اختصاصی پژوهشگاه نفت) یا شماره شبا ۱۰۰۱ ۱۷۴۵ ۶۹۰۰ ۱۷۴۵ ۶۹۰۰ ۰۰۰۲ ۷۰۰۰ ۵۶۰۱ IR و ارائه فیش در شروع دوره یا ارسال تصویر آن به شماره فاکس

۰۲۱۴۴۷۳۹۷۰۷

\* جهت کسب اطلاعات بیشتر با شماره ۰۲۱۴۴۷۳۹۷۸۷ و ۰۲۱۴۸۲۵۳۰۸۴ تماس حاصل فرمایید.

\* به اعضای هیئت علمی دانشگاه ها و دانشجویان تا ۵۰٪ تخفیف اعطا می شود.

**آموزش پژوهشگاه صنعت نفت**