CONCEPT

الكيمياء الحاسوبية والنمذجة الجزيئية: نظرية دالية الكثافة DFT ومجالات القوى وفرز المحفزات

21 – 25 يونيو 2027

برشلونة - فندق أربع نجوم في حي إيكسامبلا



الكيمياء الحاسوبية والنمذجة الجزيئية: نظرية دالية الكثافة DFT ومجالات القوى وفرز المحفزات

المرجع: 19223_725 **التاريخ:** 21 – 25 يونيو 2027 **المكان:** برشلونة - فندق أربع نجوم في حي إيكسامبلا **الرسوم:** SAR 23500

مقدمة:

تقضي فرق البحث والتطوير في البتروكيماويات والحفز والبوليمرات شهورا في تخليق محفزات وإضافات مرشحة كان بالإمكان استبعادها بحسابات قليلة مختارة بعناية، بينما تعتمد فرق أخرى على أرقام محسوبة لم تتحقق منها أي تجربة. تمكن هذه الدورة من كور كونسبت الكيميائيين من توظيف الكيمياء الحاسوبية والنمذجة الجزيئية بحكم مهني سليم: مجالات القوى والميكانيك الجزيئي، ونظرية دالية الكثافة DFT، وتحسين البنية الهندسية، والحالات الانتقالية، والديناميكا الجزيئية، والتنبؤ بالخصائص الطيفية والحرارية، والنماذج البديلة QSPR، والتحقق مقابل القياسات المخبرية. ويعد المشاركون خطة دراسة فرز حاسوبي لمحفز أو إضافة في حالة تطبيقية.

أهداف الدورة:

- مطابقة سؤال بحثي حول محفز أو إضافة أو بوليمر مع أقل الأساليب الحسابية كلفة القادرة على الإجابة بالدقة التي يحتاجها القرار
- بناء نماذج الميكانيك الجزيئي وفحصها باختيار عائلة مجال قوى مناسبة واختبارها للأنظمة العضوية أو البوليمرية أو التفاعلية
- إجراء حسابات تحسين البنية الهندسية بنظرية دالية الكثافة وفحوص الترددات وتصحيحات الطاقة الحرة مع تعليل اختيار الدالية ومجموعة الأساس ومعالجة التشتت
- تحديد الحالات الانتقالية ومقارنة مسارات التفاعل وطاقات الامتزاز لترتيب المحفزات المرشحة بالاستناد إلى الواصفات ومنحنيات البركان
- التنبؤ بالخصائص الطيفية والحرارية وتدريب نماذج QSPR أو نماذج تعلم الآلة البديلة ضمن مجال تطبيق محدد
- تصميم قمع فرز حاسوبي يتضمن ميزانية الحوسبة ونصوص مسارات العمل وخطة تحقق تجريبي لمحفز أو إضافة في حالة تطبيقية

الفئة المستهدفة:

- كيميائيو الأبحاث الذين يصممون المحفزات والمونومرات والإضافات المرشحة ويقيمونها في المختبرات الصناعية
- علماء المواد المسؤولون عن برامج تركيب البوليمرات والمثبتات وتطوير الخصائص
- مختصو الحفز الذين يفسرون بيانات النشاط والانتقائية ويفرزون المواقع الفعالة الجديدة
- فرق البحث والتطوير في العمليات التي تحتاج بيانات حرارية وحركية وفيزيائية للكيمياء الجديدة
- الكيميائيون التحليليون الذين يفسرون أطياف IR Ramang وNMRg ويحتاجون أطيافا مرجعية محسوبة
- فرق النمذجة والمحاكاة التي تدعم المختبرات بالحسابات الجزيئية

محاور الدورة:

اليوم 1: نطاق الكيمياء الحاسوبية وحدودها واختيار الأسلوب المناسب

- هرمية الأساليب: الميكانيك الجزيئي وشبه التجريبي Hartree-Fockg وDFTg والأساليب الأولية المترابطة
- موازنة الدقة مقابل كلفة التوسع الحسابي ومعيار الدقة الكيميائية
- مفاهيم سطح الطاقة الكامنة: النقاط الدنيا ونقاط السرج والبحث عن المطابقات
- لوحة صياغة الأسئلة لطلبات النمذجة في البتروكيماويات والحفز والبوليمرات
- تدقيق محفظة البحث والتطوير: الأسئلة المرشحة للنمذجة مقابل التجارب المخبرية

اليوم 2: مجالات القوى وكيمياء الكم ونظرية دالية الكثافة

- تشريح مجال القوى: حدود الروابط وحدود كولوم Lennard-Jonesg غير الرابطة
- عائلات مجالات القوى: AMBER وCHARMMg وOPLSg وGAFFg وTraPPEg ومجال ReaxFF التفاعلي
- نظرية Kohn-Sham وسلم دالية التبادل والترابط: LDA وGGAg وMeta-GGAg والداليات الهجينة
- مجموعات الأساس من نوع Gaussian مقابل الموجات المستوية والجهود الكاذبة للأسطح والمواد الصلبة
- تصحيحات التشتت وحالات اللف المغزلي وأنماط إخفاق DFT المعروفة

اليوم 3: مختبر تحسين البنية الهندسية ومسارات التفاعل والديناميكا الجزيئية

- معايير تقارب تحسين البنية الهندسية وفحوص الترددات الاهتزازية
- طاقات التفاعل وتصحيح طاقة نقطة الصفر وطاقة Gibbs الحرة من دوال التجزئة
- البحث عن الحالات الانتقالية: طريقة الشريط المرن المدفوع NEB وإحداثي التفاعل الذاتي IRC
- طاقات الامتزاز وفرز المحفزات بالواصفات ومنحنيات البركان
- إعداد الديناميكا الجزيئية: المجموعات الإحصائية ومنظمات الحرارة والاتزان وتحليل المسارات

اليوم 4: التنبؤ بالخصائص ونماذج QSPR البديلة ومسارات العمل الحاسوبية والتحقق

- التنبؤ الطيفي: أطياف Ramang IR وإزاحات NMR المحسوبة مع معاملات التدريج
- التقديرات الحرارية الكيميائية: حرارة التكوين ونماذج الإذابة الضمنية وانتقال البوليمر الزجاجي من الديناميكا الجزيئية
- واصفات QSPR ونماذج تعلم الآلة البديلة: الغابة العشوائية والشبكات العصبية واختبار Y-Scrambling
- برمجة المهام الدفعية ومديرو مسارات العمل وتتبع مصدر بيانات الحسابات على موارد الحوسبة المشتركة
- التحقق مقابل التجربة: نطاقات الخطأ ومجال التطبيق ومجموعات البيانات المرجعية

اليوم 5: المشروع الختامي في المختبر: خطة دراسة فرز حاسوبي لمحفز أو إضافة

- موجز الحالة: مكتبة مرشحات لمحفز نزع الهيدروجين أو إضافة مضادة للأكسدة في البوليمرات
- مصفوفة اختيار الأسلوب وتقدير ميزانية الحوسبة لقمع الفرز
- تصميم قمع الفرز: تصفية أولية بمجال القوى وترتيب بحسابات DFT ونموذج بديل
- خطة التحقق التجريبي ومعايير المضي أو التوقف التي تربط الحسابات بالاختبارات المخبرية
- عرض خطة دراسة الفرز الحاسوبي وجلسة مساءلة فنية من الزملاء

المهارات التي ستكتسبها:

- اختيار أساليب البنية الإلكترونية
- تقييم معاملات مجالات القوى
- تحديد الحالات الانتقالية
- فرز المحفزات بالواصفات
- تحليل مسارات الديناميكا الجزيئية
- تفسير الأطياف المحسوبة
- التحقق من النماذج البديلة
- تتبع مصدر مسارات المحاكاة

لماذا تحضر هذه الدورة:

- العودة بخطة دراسة فرز حاسوبي لمحفز أو إضافة في حالة تطبيقية بعد مساءلتها من زملاء في فرق بحث أخرى
- خفض عدد المرشحات المرسلة إلى التخليق بترتيبها أولا بحسابات يمكن بيان هامش خطئها
- مساءلة ادعاءات النمذجة لدى الموردين والمراجع العلمية بتمييز الداليات ومجالات القوى غير الملائمة والنماذج البديلة غير المتحقق منها
- تبادل ممارسات النمذجة مع كيميائيين من مختبرات البتروكيماويات والمحفزات والبوليمرات والكيماويات المتخصصة

الخاتمة:

تكسب الحسابات مكانها في البحث والتطوير الصناعي حين يطابق الأسلوب السؤال، وتحمل الأرقام هامش خطأ معلنا، وتختبر النتائج على منضدة المختبر. ينتقل الأسبوع من هرمية الأساليب وسطوح الطاقة الكامنة إلى مجالات القوى ونظرية دالية الكثافة، ثم تحسين البنية الهندسية والحالات الانتقالية والديناميكا الجزيئية والتنبؤ بالخصائص ونماذج QSPR البديلة ومسارات العمل الحاسوبية. ويحول اليوم الأخير ذلك إلى خطة دراسة فرز حاسوبي تربط مكتبة المرشحات ببرنامج تحقق تجريبي.