

دورة تأسيسية في أدوات الكيمياء الحاسوبية ومسارات العمل

24 – 28 مايو 2027

برشلونة

AGILE LEADERS
Training Center

AGILE LEADERS
Training Center

دورة تأسيسية في أدوات الكيمياء الحاسوبية ومسارات العمل

المرجع: 239258_1864 **التاريخ:** 24 – 28 مايو 2027 **المكان:** برشلونة **الرسوم:** Euro 6500

نظرة عامة

دورة تأسيسية في أدوات الكيمياء الحاسوبية ومسارات العمل برنامج من أسبوع للكيميائيين ومتخصصي المواد والأدوية والبحث والتطوير، ويغادر المشاركون منها بدفتر للنمذجة الجزيئية القابلة لإعادة الإنتاج. تركز الدورة على إعداد البنى الجزيئية واختيار الميكانيكا الجزيئية أو الطرق الكمية وتحسين البنية وتحليل الأشكال وحساب الخواص والإذابة والديناميكا الجزيئية والتحقق والتفسير. تعتمد الدورة أمثلة محايدة برمجيا. تطور أجايل للتدريب فهما تطبيقيا للكيمياء الحاسوبية.

الفئة المستهدفة

- الكيميائيون المبتدئون في أعمال النمذجة الحاسوبية
- متخصصو المواد الباحثون في البنى والخواص الجزيئية
- باحثو الأدوية الداعمون للدراسات الجزيئية
- علماء المختبر الذين يوسعون التجارب بالحسابات
- المهندسون الكيميائيون وفرق البحث والتطوير المراجعون لنتائج المحاكاة

تفترض الدورة معرفة أساسية بالبنية الجزيئية والكيمياء. تفيد خبرة البرمجة لكنها ليست شرطا، ولا تشمل تطوير الطرق المتقدمة أو إدارة الحوسبة عالية الأداء.

الإدارات والقطاعات المستهدفة

تدعم الدورة البحث على المستوى الجزيئي في بيئات التطوير والتحليل.

- بحوث الكيمياء والمواد
- تطوير الأدوية والتقنية الحيوية
- بحوث الطاقة والحفز والعمليات
- المختبرات الأكاديمية والتعاقدية
- تطوير المنتجات والخدمات الفنية

AGILE LEADERS
Training Center

أهداف التعلم

بنهاية هذه الدورة، سيكون المشاركون قادرين على:

- إعداد البنى الجزيئية وتوثيق افتراضات النمذجة
- تمييز الميكانيكا الجزيئية وكيمياء الكم والطرق الهجينة
- إعداد تحسين البنية ودراسة الأشكال الفراغية
- حساب خواص جزيئية مختارة وتفسيرها
- بناء مسار تأسيسي للديناميكا الجزيئية
- التحقق من النتائج الحاسوبية وتوثيقها وإعادة إنتاجها

جدول الدورة

اليوم 1: البنى والنماذج والإعداد القابل لإعادة الإنتاج

- قائمة التمثيل الجزيئي والبروتنة والشحنة
- مراجعة الإحداثيات والترابط وجودة البنية
- ورقة السؤال الحاسوبي والافتراضات والحدود
- سجل المدخلات والمخرجات والإصدار والبيانات الوصفية
- هيكل دفتر النمذجة الجزيئية القابلة لإعادة الإنتاج

اليوم 2: الميكانيكا الجزيئية وتحليل الأشكال الفراغية

- خريطة مكونات مجال القوة ومعاملاته وصلاحيته
- مراجعة تقليل الطاقة ومعايير التقارب
- تفسير التآثرات الترابطية وغير الترابطية
- جدول توليد الأشكال والطاقات النسبية
- فحص القيود والتقييدات والحساسية

اليوم 3: كيمياء الكم والخواص الجزيئية

- دليل اختيار طريقة البنية الإلكترونية ومجموعة الأساس
- مسار تحسين البنية وفحص الترددات
- مراجعة الشحنة والعزم والخواص المدارية
- سجل نموذج الإذابة وافتراضات البيئة
- مصفوفة مقارنة الطريقة والتكلفة والدقة

اليوم 4: الديناميكا الجزيئية والتحقق والتفسير

- إعداد النظام ومجال القوة والتكوين الابتدائي
- تسلسل تقليل الطاقة والموازنة والإنتاج
- قائمة الخطوة الزمنية والمجموعة وضبط المسار
- تحليل البنية والطاقة وكفاية أخذ العينات
- سجل المقارنة المرجعية والتجريبية وعدم اليقين

اليوم 5: مسار متكامل للكيمياء الحاسوبية

- تمرين: إعداد بنية جزيئية وفحص جودتها
- تمرين: مقارنة الأشكال وأدلة تحسين البنية
- تمرين: اختيار طريقة لحساب خاصية جزيئية
- تمرين: مراجعة مسار للديناميكا الجزيئية
- المهمة الختامية: إكمال دفتر النمذجة الجزيئية القابلة لإعادة الإنتاج

التمارين التطبيقية

تستخدم الدورة أنشطة مقترحة تربط إعدادات الحساب بتفسير كيميائي يمكن الدفاع عنه.

- نشاط مقترح: توثيق إعداد البنية وافتراضات النمذجة
- نشاط مقترح: مقارنة أغراض مجال القوة والطريقة الكمية
- نشاط مقترح: فحص التقارب والأشكال والخواص المحسوبة
- نشاط مقترح: إعادة إنتاج مسار من مدخلاته وسجل بياناته

AGILE LEADERS
Training Center

الأسئلة الشائعة

هل تشترط الدورة خبرة سابقة في البرمجة؟

لا. تشرح الدورة منطق المسار والسجلات أولا، ويمكن استخدام أمثلة رسومية أو نصية بحسب البيئة المتاحة.

ما البرمجيات التي تعلمها الدورة؟

الدورة محايدة برمجيا، وتستخدم الأمثلة لتوضيح ممارسات الإعداد والتحقق والتصور والتفسير القابلة للنقل بين الأدوات.

كيف تختلف الميكانيكا الجزيئية عن كيمياء الكم؟

تستخدم الميكانيكا الجزيئية مجالات قوة ذات معاملات لوصف البنى والتآثرات، بينما تعالج كيمياء الكم البنية الإلكترونية للخواص التي تتطلب ذلك.

ما الذي يجعل النتيجة الحاسوبية قابلة لإعادة الإنتاج؟

تتطلب إعادة الإنتاج حفظ البنى والطرق والمعاملات وإصدارات البرمجيات والمدخلات والبذور العشوائية عند الحاجة والمخرجات وإجراء التحليل.

ما المخرج التطبيقي الذي يكمله المشاركون؟

يكمل المشاركون دفتر النمذجة الجزيئية القابلة لإعادة الإنتاج، ويربط السؤال العلمي وإعداد النموذج والحسابات والفحوص والنتائج والتفسير.

الخاتمة

يكتسب المشاركون طريقة منضبطة للانتقال من سؤال كيميائي إلى نتيجة حاسوبية موثقة. يجعل الدفتر الخيارات والقيود وأدلة التحقق والتفسير ظاهرة. ويدعم التعاون بين الفرق التجريبية والحاسوبية مع توفير أساس لدراسة نمذجة أكثر تخصصا.