



وزارت علوم، تحقیقات و فناوری  
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه  
گاوزنگ، زنجان



## گردهمایی و کارگاه آموزشی شبیه سازی دینامیک مولکولی سامانه های متنوع زیستی و شیمیایی

### Meeting and Workshop on Molecular Dynamics Simulation of Various Biological and Chemical Systems

May 14-15, 2025. Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS)

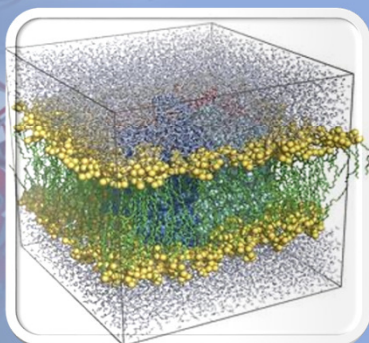
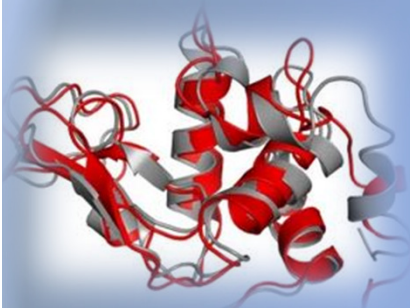
برگزار کننده:

گروه شیمی فیزیک دانشکده شیمی IASBS



استاد مدعو خارج از کشور:

پروفسور سامان علوی از دانشگاه اتاوا، کانادا



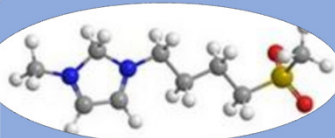
دبیر علمی:

دکتر محمد حسین کوثری

محل برگزاری: دانشکده شیمی

دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

۲۴-۲۵ اردیبهشت ۱۴۰۴



همراه با امکان ارسال خلاصه مقاله و آرایه پوستر  
با موضوع شبیه سازی برای شرکت کنندگان

#### بخش نظری:

- مبانی شبیه سازی دینامیک مولکولی
- تحلیل داده های مسیر شبیه سازی و محاسبه کمیت های مختلف ساختاری، دینامیکی ...
- آشنایی با فضای لینوکس و نصب نرم افزارها

#### بخش عملی:

- آموزش مراحل شبیه سازی دینامیک مولکولی برخی از سامانه های متنوع نظیر:
- کلاتریت ها و ترکیبات متخلخل، سیال محدود شده
  - دارو / پروتئین در محیط آبی و مایعات یونی
  - بارگذاری دارو بر روی نانولوله کربنی
  - محلول آبی مجاور غشای دولایه فسفولیپیدی
  - ✓ آموزش با بسته های شبیه سازی گرومکس و دی-ال-پلی
  - ✓ کار با برنامه های گرافیک مولکولی و تحلیل فایل مسیر



شروع ثبت نام: اواسط بهمن ۱۴۰۳

پست الکترونیکی: [iasbstcc2025@gmail.com](mailto:iasbstcc2025@gmail.com)

تارنما: <https://iasbs.ac.ir/~mhkowsari/index.html>