

Научно-образовательный центр Института высокомолекулярных соединений РАН
при участии Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова и
Санкт-Петербургского государственного университета
«Компьютерное моделирование наносистем в науке о материалах и биологии»

Однодневный семинар для студентов и аспирантов

GROMACS: Введение в атомистическое компьютерное моделирование наносистем в науке о материалах

Место проведения: г. Санкт-Петербург, Биржевой проезд 6, ИВС РАН, комн. 152.

Время проведения: 30 ноября 2011г. (среда)

10:00 – 13:00 (теоретические занятия)

15:00 – 18:00 (практические занятия)

Организаторы: д.ф.-м.н. А.А.Гуртовенко, д.ф.-м.н. С.В.Люлин, к.ф.-м.н. С.В.Ларин.

Практические занятия будут проводиться на базе 56-ядерного кластера на основе серверов IBM System x3550 M3.

Свободно распространяемый пакет GROMACS разработан для моделирования биологических систем. В настоящее время GROMACS также применяется для исследования полимерных систем в растворах и расплавах, полимерных нанокомпозитов и др. В данных областях GROMACS является одним из наиболее эффективных инструментов для молекулярно-динамического атомистического моделирования. Однодневный семинар по GROMACS даст возможность молодым исследователям получить общее представление о пакете и навыки его практического использования.

Краткая программа семинара:

- 1. Открытие семинара.** Вступительное слово заведующего лабораторией теории и компьютерного моделирования полимерных систем ИВС РАН, д.ф.-м.н. А.А. Даринского.
- 2. Теоретические занятия**
 - Введение в методы компьютерного моделирования. Метод молекулярной динамики.
 - Использование пакета GROMACS для моделирования методом молекулярной динамики.
 - Атомистическое моделирование полимерных нанокомпозитов методом молекулярной динамики.
- 3. Практические занятия.**
 - Применение пакета GROMACS для моделирования полимерных нанокомпозитов. Создание начальной конфигурации термостойкого полимера, полимерного нанокомпозита. Способы обработки траектории моделирования.

Внимание! Количество участников ограничено: всего 15 мест. Необходима предварительная регистрация, заявки направляйте *Люлину Сергею Владимировичу*, e-mail: s.v.lyulin@gmail.com

Участие в семинаре – бесплатное, необходимо иметь с собой ноутбук.