

שם ומספר הקורס:

מודלים מתמטיים בכימיה 84-330-01 – פרופ' דן מאיור תומס

ופרופ' חנוך סנדרוביץ'

סוג הקורס: (שיעור, תרגיל, סמינר, סדנה וכד')

היקף שעות: 26

סמסטר: א

שנת לימודים: תשפ"ב

אתר הקורס באינטרנט:

שעות הקורס:

א. מטרות הקורס (מטרות על / מטרות ספציפיות):

להעניק ידע בסיס בשיטות למידול תאורטי של בעיות שונות בכימיה, ביולוגיה ומדע החומרים. ההרצאות דנות בשיטות התאורטיות והתרגיל ביישום של אותן שיטות בעזרת תוכנות למודלים מולקולריים.

ב. תוכן הקורס: (רציונל, נושאים) שילוב של הרצאות ותרגול בנושאים שונים של כימיה חישובית ומידול מולקולרי

מהלך השיעורים: (שיטות ההוראה, שימוש בטכנולוגיה, מרצים אורחים) הוראה פרונטאלית, כל ההרצאות הוכנו ב-POWERPOINT. יש שימוש בהדמיות. בחלק של התרגיל הסטודנטים עובדים מול מחשב בתוכנות מודלינג מתקדמות.

תכנית הוראה מפורטת לכל השיעורים: (רשימה או טבלה כדוגמת המצ"ב)

מס' השיעור	נושא השיעור	קריאה נדרשת	הערות
1	הקדמה למידול מולקולרי		
2	משטח פוטנציאל: על בסיס מכניקת הקוונטים		
3	משטח פוטנציאל: על בסיס מכניקת הקוונטים		
4	משטח פוטנציאל: על בסיס מכניקה מולקולרית		
5	מינימיזציות וחיפוש קונפורמציות		
6	סימולציות ומודלי סולבציה		
7	שיטות מתקדמות במדעי הנתונים		
8	מידול חלבונים		
9	שיטות מבוססות חלבון: עיגון וסריקה וירטואלית		
10	שיטות מבוססות ליגנד: עקרון הדמיון ופרמקופורים		

		מודלים סטטיסטיים	11
		Materials Informatics	12
		דיון על פרויקט	13

ג. חובות הקורס:

דרישות קדם:

תואר ראשון בכימיה, ביופיסיקה או ביולוגיה.

חובות / דרישות / מטלות:

נוכחות בשיעורים ובתרגולים, ובצוע פרויקט מחקר.

מרכיבי הציון הסופי (ציון מספרי / ציון עובר):

פרויקט מחקר: 100%

ד. ביבליוגרפיה: (חובה/רשות)

ספרי הלימוד (textbooks) וספרי עזר נוספים:

- “Molecular Modelling. Principles and Applications” – *Leach*
- “Essentials of Computational Chemistry” - *Cramer*
- “Molecular Modeling Techniques in Material Science” – *Hill, Subramanian, Maiti*
- “Introduction to Computational Chemistry” – *Jensen*
- Currents in the Literature (scientific journal articles)

חומר מחייב למבחנים: