

عنوان مقاله:

طراحی مولکولی با یک مجموعه از خواص مشخص شده به کمک کامپیوتر

محل انتشار:

دوازدهمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران (سال: 1387)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:

حمزه مهرابی نیا - دانشگاه علم و صنعت ایران ، دانشکده مهندسی شیمی

نوراله کثیری - دانشگاه علم و صنعت ایران ، دانشکده مهندسی شیمی

خلاصه مقاله:

در این مقاله از طریق یک برنامه کامپیوتری و مشخص کردن مجموعه ای از خواص مورد نظر ، ماده ای معین می شود که دارای این خواص باشد . این مسئله موسوم به طراحی مولکولی به کمک کامپیوتر (CAMD) است و بصورت یک مسئله بهینه سازی حل میشود بصورتی که خواص ماده مشخص شده بیشترین تطابق (کمترین اختلاف) را با خواص مورد نظر داشته باشند . همچنین مجموعه ای از قوانین شیمیایی باید در نظر گرفته شود به طوری که موادی که در طول الگوریتم ساخته و استفاده می شوند از نظر شیمیایی امکانپذیر باشند . روش بهینه سازی بکار رفته الگوریتم ژنتیک است و برای پیش بینی خواص ماده از روش سهم گروه استفاده شده است .

کلمات کلیدی:

طراحی مولکولی ، بهینه سازی ، الگوریتم ژنتیک ، سهم گروه

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/57945>

