دانشگاه فردوسی مشهد

انتشارات، شماره ۵۲۲

مبانی شبیه سازی دینامیک مولکولی

Press.um.ac.ir

تألیف:

دکتر الهه گوهرشادی - مجید موسوی - فاطمه موسوی

سرشناسه : گوهرشادی، الهه، ۱۳۴۳ -
عنوان و نام پدیدآور : مبانی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی / تألیف الهه گوهرشادی، مجید موسوی، فاطمه موسوی.
مشخصات نشر : مشهد: دانشگاه فردوسی مشهد، ۱۳۸۷.
مشخصات ظاهری : ۱۹۸ ص.: مصور.
فروست : انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد؛ شماره ۵۲۲.
شابک : (ISBN: 978-964-386-188-9)
وضعیت‌فهرست‌نویسی : فیپا.
یادداشت : واژه‌نامه.
موضوع : دینامیک مولکولی -- شبیه‌سازی کامپیوتری.
شناسه افزوده : موسوی، مجید، ۱۳۵۹ -
شناسه افزوده : موسوی، فاطمه.
رده‌بندی کنگره: ۱۳۸۷ ۹ گ ۲ ش / ۳ / QD ۳۵۵
رده‌بندی دیویی: ۵۳۱/۰۱۳
شماره کتابخانه ملی: ۱۵۰۸۷۱۴

انتشارات، شمارهٔ ۵۲۲

مبانی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

تألیف

دکتر الهه گوهرشادی ـ مجید موسوی ـ فاطمه موسوی

ویراستار علمی

دکتر بیژن نجفی (استاد دانشگاه صنعتی اصفهان)

وزیری، ۱۹۸ صفحه، ۱۰۰۰ نسخه، چاپ دوم، زمستان ۱۳۹۳

امور فنّی و چاپ: مؤسسهٔ چاپ و انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد

بها : ۵۵۰۰۰ ریال

شابک ۹-۱۸۸-۳۸۶-۹۶۴-۹۷۸ ISBN: 978-964-386-188-9

Press.um.ac.ir

فهرست مطالب

فصل ۱

مقدمه

۱-۱ شرحی مختصر از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۱

۱-۲ تاریخچه ۲

۱-۳ کاربردها ۳

۱-۴ برخی ملاحظات مهم ۵

۱-۴-۱ مدل‌سازی و شبیه‌سازی ۵

۱-۴-۲ شبیه‌سازی، نظریه یا تجربه ۷

۱-۴-۳ کوچک‌سازی و شبیه‌سازی ۷

۱-۵ سیستم‌های مدل و پتانسیل‌های برهم‌کنش ۹

۱-۵-۱ مدل برای برهم‌کنش‌های مولکولی ۹

۱-۵-۱-۱ سیستم‌های اتمی ۹

۱-۵-۱-۲ سیستم‌های مولکولی ۱۳

۱-۵-۱-۳ پتانسیل‌های جفتی ساده برای مولکولها ۲۲

۱-۵-۱-۴ پتانسیل‌های جفتی حاصل از مکانیک مولکولی ۲۲

۱-۵-۱-۵ پتانسیل‌های مکانیک مولکولی (میدانهای نیرو) ۲۳

۱-۵-۲ مدل برای برهم‌کنش‌های بین سیستم و محیط ۲۷

۱-۶ انواع شبیه‌سازیهای رایانه‌ای ۲۷

۱-۶-۱ شبیه‌سازیهای اتفاقی و جبری ۲۸

۱-۶-۱-۱ پیشینهٔ مختصری از روش مونت کارلو ۲۸

۱-۶-۱-۲ روش اتفاقی یا روش مونت کارلو ۲۹

۱-۶-۱-۳ روش مونت کارلو با تحمیل نیرو ۳۱

۱-۶-۱-۴ دینامیک مولکولی ۳۲

۱-۶-۱-۵ مقایسه بین روش مونت کارلو و روش دینامیک مولکولی ۳۳

۱-۶-۱-۶ شبیه‌سازی دینامیک لانگ‌وین ۳۴

۱-۶-۲ شبیه‌سازیهای پیوسته و ناپیوسته ۳۴

Press.um.ac.ir

۱-۶-۳ شبیه‌سازیهای موضعی یا توزیعی ۳۵
مراجع ۳۶

فصل ۲
اصول و مبانی
۲-۱ معادلات حرکت ۳۹
۲-۱-۱ دینامیک نیوتونی ۳۹
۲-۱-۲ فرمول‌بندی هامیلتونی ۴۰
۲-۱-۳ دینامیک لاگرانژی ۴۲
۲-۲ طبقه‌بندی سیستم‌های دینامیکی ۴۳
۲-۳ تعیین خواص ماکروسکوپی ۴۵
۲-۳-۱ مراحل اساسی برای تعیین خواص با استفاده از شبیه‌سازی ۴۷
۲-۳-۲ مسائل و مشکلات ناشی از برابر قرار دادن A_m و $\langle A \rangle$ $\left(A_m = \langle A \rangle\right)$ ۴۷
۲-۴ توزیع اساسی ۴۸
۲-۴-۱ توزیع سرعتها ۴۸
۲-۵ عناصر نظری نمونه‌سازی ۴۹
۲-۵-۱ متوسط مسیر حرکت (آمار مسیر حرکت) ۵۰
۲-۵-۲ آمار نمونه‌گیری ۵۱
۲-۵-۳ مقدار قابل انتظار برای متوسط نمونه یا آمار توزیع نمونه‌برداری ۵۱
۲-۵-۴ رابطهٔ بین متوسط‌های مختلف ۵۲
۲-۶ شرایط مرزی تناوبی ۵۲
۲-۶-۱ اثرات سطحی ۵۲
۲-۶-۲ از بین بردن اثرات سطحی ۵۳
۲-۶-۳ انواع سل ۵۴
۲-۶-۴ تعداد سل‌ها یا جعبه‌های تصویر ۵۵
۲-۶-۵ محدودیتهای کاربرد شرایط مرزی تناوبی ۵۵
۲-۷ پتانسیل قطع‌شده ۵۷
۲-۷-۱ اثرات قطع کردن پتانسیل ۵۸
۲-۷-۲ پتانسیل نیروی انتقال یافته ۵۸

Press.um.ac.ir

۲-۸ قرارداد حداقل تصویر ۵۹
۲-۹ اصول بقا (پایستگی) ۶۰
۲-۹-۱ اثر شرایط مرزی تناوبی بر اصول بقا ۶۰
۲-۹-۱-۱ جرم ۶۰
۲-۹-۱-۲ انرژی کل ۶۱
۲-۹-۱-۳ اندازه حرکت خطی ۶۱
۲-۹-۱-۴ اندازه حرکت زاویه‌ای ۶۱
۲-۱۰ سیستم واحدها ۶۲
مراجع ۶۳

فصل ۳
شبیه سازی دینامیک مولکولی کرات سخت
۳-۱ مقدمه ۶۵
۳-۲ امتیازات شبیه‌سازی رایانه‌ای کرات سخت ۶۶
۳-۳ دینامیک کرات سخت ۶۷
۳-۴ سینماتیک کرهٔ سخت ۶۸
۳-۴-۱ یک بعدی ۶۸
۳-۴-۲ سه بعدی ۶۹
۳-۵ جدول بندی زمان برخورد ۷۱
۳-۶ الگوریتم شبیه سازی ۷۲
۳-۶-۱ الگوریتم آلدر و وین رایت ۷۲
۳-۶-۱-۱ مرحلهٔ آغازین ۷۲
۳-۶-۱-۲ مرحلهٔ تعادل ۷۳
۳-۶-۱-۳ مرحلهٔ تولید ۷۳
۳-۷ مکانها و سرعتهای اوّلیّه ۷۴
۳-۸ نظارت بر مرحلهٔ تعادل ۷۶
۳-۸-۱ نظم مکانی ۷۶
۳-۸-۲ تابع H ۷۸
۳-۹ محاسبهٔ خواص ۷۸

Press.um.ac.ir

۳-۱۰ انتقال فاز ۸۰
مراجع ۸۱

فصل ۴
شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کرات نرم (اجسام نرم)
۴-۱ مقدمه ۸۳
۴-۲ روش اختلاف متناهی (*FDM*) ۸۳
۴-۲-۱ روش اولر ۸۴
۴-۲-۲ خطاها ۸۵
۴-۲-۲-۱ خطای قطع (te) ۸۵
۴-۲-۲-۲ خطای گردکردن ۸۶
۴-۲-۲-۳ خطای موضعی و خطای کلی ۸۶
۴-۲-۳ روش رانگ- کاتا (RK) ۸۸
۴-۳ دینامیک مولکولی پتانسیل‌های پیوسته ۸۹
۴-۳-۱ الگوریتم‌های انتگرالی ۸۹
۴-۳-۱-۱ الگوریتم اساسی ورلت ۹۰
۴-۳-۱-۲ الگوریتم پیش‌بینی کننده- تصحیح کننده ۹۴
۴-۳-۱-۳ الگوریتم پیش‌بینی کننده- تصحیح کنندهٔ گیر ۹۴
۴-۳-۱-۴ الگوریتم بیمان ۹۶
۴-۳-۲ مقایسهٔ الگوریتم‌های انتگرالی ۹۷
۴-۴ مراحل الگوریتم شبیه‌سازی برای اجسام نرم ۹۸
۴-۴-۱ مرحلهٔ آغازین ۹۸
۴-۴-۱-۱ مقدمات ۹۸
۴-۴-۱-۲ شرایط اوّلیّه برای اتمها ۹۹
۴-۴-۲ تعادل ۱۰۰
۴-۴-۲ تولید ۱۰۱
۴-۵ ارزیابی قابل اطمینان بودن نتایج ۱۰۲
۴-۵-۱ تعادل ۱۰۲
۴-۵-۲ بررسی قوانین بقا ۱۰۳

Press.um.ac.ir

۴-۵-۳ بررسی مقادیر خواص مختلف ۱۰۳
مراجع ۱۰۴

فصل ۵
انواع انسامبل در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی
۵-۱ مقدمه ۱۰۵
۵-۲ انسامبل میکروکانونیکال (NVE) ۱۰۵
۵-۳ انسامبل کانونیکال (NVT) یا انسامبل دمای ثابت ۱۰۷
۵-۳-۱ مقیاس‌بندی سرعت ۱۰۸
۵-۳-۲ اتصال به حمام حرارتی ۱۰۸
۵-۳-۳ ترموستات اندرسن ۱۱۰
۵-۳-۴ ترموستات نوز ۱۱۰
۵-۳-۵ ترموستات گوسین ۱۱۲
۵-۳-۶ معادلات نوز- هوور ۱۱۳
۵-۴ انسامبل هم فشار- هم آنتالپی (NPH) ۱۱۴
۵-۵ انسامبل هم دما- هم فشار (NPT) ۱۱۶
۵-۱-۵ باروستات برندسن ۱۱۶
۵-۲-۵ باروستات اندرسن ۱۱۷
۵-۵-۳ ترکیب مونت‌کارلو- دینامیک مولکولی ۱۱۸
۵-۵-۴ بسط معادلات نوز- هوور ۱۱۸
مراجع ۱۲۰

فصل ۶
محاسبهٔ خواص ترمودینامیکی با استفاده ازشبیه‌سازی دینامیک مولکولی
۶-۱ توابع ترمودینامیکی ساده ۱۲۲
۶-۱-۱ تعیین میانگینهای ترمودینامیکی با استفاده از دینامیک مولکولی ۱۲۲
۶-۱-۱-۱ انرژی داخلی ۱۲۲
۶-۱-۱-۲ فشار ۱۲۳
۶-۱-۱-۳ میانگین مجذور نیرو ۱۲۳

Press.um.ac.ir

۶-۱-۲ تصحیحات بلند برد ۱۲۳
۶-۲ توابع ترمودینامیکی پاسخ ۱۲۴
۶-۲-۱ مقایسهٔ بین دو روش ۱۲۵
۶-۳ خواص وابسته به آنتروپی ۱۲۵
۶-۳-۱ انتگرال گیری ترمودینامیکی ۱۲۶
۶-۳-۲ روش ذرّهٔ آزمایشی ۱۲۷
۶-۴ خواص ساختاری استاتیکی ۱۲۸
۶-۴-۱ اثر چگالی روی *RDF* ۱۳۰
۶-۴-۱-۱ جامدهای کریستالی ۱۳۰
۶-۴-۱-۲ گازها در چگالی کم ۱۳۰
۶-۴-۱-۳ مایعات ۱۳۰
مراجع ۱۳۲

فصل ۷
شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سیستم‌های نانو
۷-۱ مقدمه ۱۳۳
۷-۲ ابزارهای شبیه‌سازی عددی در مقیاس نانو ۱۳۵
۷-۳ مسیرهای حرکت مکان- زمان ۱۳۵
۷-۴ انسامبل مناسب برای شبیه‌سازی سیستم‌های نانو ۱۳۷
۷-۵ پتانسیل‌های بین اتمی ۱۳۷
۷-۵-۱ پتانسیل‌های بین اتمی مناسب ۱۳۷
۷-۵-۲ برخی از پتانسیل‌های بین اتمی ۱۳۸
۷-۵-۲-۱ پتانسیل اتمهای فلزی ۱۳۸
۷-۵-۲-۲ پتانسیل‌های بین اتمی متصل با پیوند- کووالانسی ۱۴۰
۷-۵-۲-۳ پتانسیل‌های غیرپیوندی کربن- کربن ۱۴۱
۷-۵-۲-۴ پتانسیل کربن- فلز ۱۴۲
۷-۶ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ذوب نانو ذرّات آلومینیم ۱۴۲
۷-۷ نتیجه‌گیری ۱۴۹
مراجع ۱۵۱

Press.um.ac.ir

فصل ۸

برخی از کاربردها

۸ـ۱ تابع توزیع شعاعی ۱۵۳
۸–۱–۱ سیال لنارد ـ جونز ۱۵۳
۸–۱–۱–۱ عبارت گلدمن ۱۵۴
۸–۱–۱–۲ عبارت متولی و منصوری (MM) ۱۵۵
۸–۱–۱–۳ عبارت لی و همکاران ۱۵۶
۸–۱–۱–۴ عبارت مرسلی و همکاران ($MGMA$) ۱۵۶
۸–۱–۲ سیال شبه HFD ۱۵۷
۸ـ۲ کشش سطحی سیال شبه HFD ۱۵۹
۸ـ۳ بررسی نقش نیروهای سه ذرّه‌ای در خواص و ساختار مواد متراکم ۱۶۰
۸–۳–۱ برهم‌کنش‌های سه ذرّه‌ای اتمها ۱۶۱
۸–۳–۲ ارتباط بین انرژیهای برهم‌کنش دو ذرّه‌ای و سه ذرّه‌ای سیالات با استفاده از ۱۶۴
۸–۳–۲–۱ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی گازهای نجیب با استفاده از پتانسیل‌های ۱۶۴
۸–۳–۲–۲ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مخلوط گازهای نجیب با استفاده از ۱۶۵
مراجع ۱۶۸

واژه نامه فارسی– انگلیسی ۱۷۱
واژه نامه انگلیسی– فارسی ۱۷۸

Press.um.ac.ir

پیشگفتار

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی روشی مناسب برای مدل‌سازی میکروسکوپی در مقیاس اتمی و مولکولی فراهم می‌کند. از حدود ۶۰ سال پیش تا کنون شبیه سازیهای رایانه‌ای از نظر تعداد و اهمیت، رشد زیادی داشته‌اند. این روشها با گسترش سریع امکانات رایانه‌ای و قدرت محاسباتی توسعهٔ بسیاری یافته‌اند و در حقیقت کاربرد رایانه‌ها در حل مسائل علمی یک نیروی رانشی قوی برای دستیابی به این پیشرفت‌ها است. از آنجا که شبیه‌سازیهای رایانه‌ای شامل حلّ دقیق مسائل مکانیک آماری هستند، خواص سیستم‌های مورد مطالعه با ارزیابی نیروها و انرژیهای بین مولکولی، که معمولاً توسط مدلهای نظری تعریف می‌شوند، تعیین می‌گردند.

مقایسهٔ نتایج حاصل از شبیه‌سازی با داده‌های تجربی به عنوان آزمایشی برای تعیین میزان صحت این مدلها می‌باشد. از طرف دیگر، اطلاعات فراهم شده توسط مدلهای معتبر برای پیش‌گویی خواص سیستم‌های مورد مطالعه استفاده می‌شوند. این ویژگی، کاربرد این روشها را در طراحی رایانه‌ای فرآیندها ممکن می‌سازد. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ابزاری بسیار مفید و کارا در علوم مختلف، نظیر شیمی، داروسازی، فیزیک، بیوشیمی، علم مواد، و علوم مهندسی می‌باشد.

با توجه به گسترش روز افزون مطالعات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در همهٔ شاخه‌های علوم و مهندسی، هدف مؤلفان کتاب حاضر، این است که تا حد ممکن اصول و مفاهیم این روشها را روشن سازند. فصول اول تا ششم این کتاب به بیان اصول، مبانی و مفاهیم اساسی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌پردازد. فصل هفتم ابزارهای شبیه‌سازی در سیستم‌های نانو را بررسی کرده و به مرور برخی از مطالعات شبیه‌سازی در این سیستم‌ها می‌پردازد و فصل هشتم به ارائهٔ برخی از مطالعات سالهای اخیر در زمینهٔ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اختصاص دارد.

از خوانندگان محترم این کتاب تقاضا داریم ما را از نظرات سازنده و اصلاحی خویش بهره‌مند سازند. در پایان بر خود لازم می‌دانیم که از کارمندان و کارکنان انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد که در امر چاپ این کتاب نهایت تلاش خود را مبذول داشته‌اند کمال تشکر و قدردانی را داشته باشیم.

تابستان ۱۳۸۷

دکتر الهه گوهرشادی- مجید موسوی- فاطمه موسوی- دکتر علی مرسلی

Press.um.ac.ir