

آشنایی با روش‌های شیه‌سازی مولکولی:

شاره‌ها، مواد دانه‌ای و سیستم‌های نانومتری

تألیف:
فاطمه انبیا علی

www.ketab.ir

سرشناسه: ابراهیمی، فاطمه، ۱۳۴۵-
عنوان و نام پدیدآور: آشنایی با روش‌های شبیه‌سازی مولکولی: شماره‌ها، مواد دانه‌ای و سیستم‌های نانومتری / تألیف: فاطمه ابراهیمی.
مشخصات نشر: مشهد: سخن گستر، ۱۳۹۴.
مشخصات ظاهری: ۲۶۸ ص.: مصور، نمودار.
شابک: 978-600-247-485-8

وضعیت فهرست‌نویسی: فیا

یادداشت: کتابنامه.

یادداشت: نمایه.

موضوع: دینامیک مولکولی - - شبیه‌سازی کامپیوتری

موضوع: نانوتکنولوژی

رده‌بندی کنگ: ۱۳۹۲ الف ۲ ش / ۳ / QD۴۵۵

رده‌بندی یوبی: ۵۴۱/۰۱

شماره کتابشناسی ملی: ۴۱۲۳۲۸۷



انتشارات سخن گستر

مشهد - خیابان ابن‌سینا - مقابل ابن‌سینا ۱۲ - ۱۱۵

تلفن: ۳۸۴۳۹۹۵۵

Sokhangostar.com

نام کتاب: آشنایی با روش‌های شبیه‌سازی مولکولی: شماره‌ها، مواد دانه‌ای و سیستم‌های نانومتری

تألیف: فاطمه ابراهیمی

صفحه‌آرایی: نفیسه اسماعیلی

شمارگان: ۱۰۰۰ جلد

نوبت چاپ: اول / ۱۳۹۵

چاپ: میثاق

قیمت: ۱۷۰۰۰ تومان

شابک: ۸-۴۸۵-۲۴۷-۶۰۰-۹۷۸

مقدمه

شبیه‌سازی ملکولی ابزار توانمندی است که در کنار آزمایش‌های واقعی به درک ما از ماهیت رفتار ماده و ارتباط آن با مدل‌های فرض شده برای ساختار میکروسکوپی آن کمک فراوانی می‌کند. کتاب‌های متعدد و ارزشمندی در زمینه شبیه‌سازی ملکولی نوشته شده‌اند که در آن‌ها روش‌ها، مختلف شبیه‌سازی تشریح شده و به موازات آن الگوریتم‌ها، روش‌ها و تکنیک‌های محاسباتی، مندرج برای اجرای این روش‌ها معرفی شده‌اند. هدف اصلی این کتاب اما، آشنا کردن خواننده با مفاهیم اصلی مطرح شده در روش‌های شبیه‌سازی ملکولی و همچنین دامنه کاربرد آنها در پیش‌بینی و تخمین ویژگی‌های بزرگ مقیاس ماده بر اساس خواص اجزاء سازنده آن است و کمتر به الگوریتم‌ها و تکنیک‌های برنامه نویسی پرداخته شده است.

کتاب همچنین شامل مثال‌هایی است که به مطالعه موردی مطرح شده و برای هر کدام نسخه‌ها و کدهای لازم در انتهای هر فصل ارائه شده است. نسخه‌ها با نرم افزار لمپس (LAMMPS) نوشته شده‌اند که به سادگی قابل نصب و اجرا بر روی کامپیوترهای شخصی است و اطلاعات لازم برای نصب این نرم افزار در وبگاه آن موجود است. سعی بر این بوده است که کتاب تا حد امکان خودآموز باشد و خواننده علاقمند با آشنا شدن مفهومی از مفاهیم بنیادی فیزیک مکانیک و ترمودینامیک بتواند مفاهیم مندرج در آن را با مراجعه به سایر منابع فراگیرد. مطالب این کتاب را می‌توان در یک نیم‌سال تحصیلی برای دانشجویان مقاطع تحصیلات تکمیلی در رشته‌های فیزیک، شیمی، مهندسی مواد و مکانیک و همچنین زیست محاسباتی تدریس کرد.

در اینجا لازم است که از استاد گرامی پروفیسور محمد سهیمی که این کتاب را مطالعه کرده و توصیه‌های ارزشمندی برای بهبود آن ارائه دادند و همچنین از تمام کسانی که در

نوشتن این کتاب مستقیماً به من کمک کرده‌اند یا حاصل کار آنها در کتاب نقل شده است
تشکر کنم: همکاران گرامی آقایان دکتر حامد مالکی، دکتر غلامرضا مکتب‌داران و دکتر
احسان ندایی اسکویی که در نصب و راه‌اندازی نرم‌افزار لمپس نقش کلیدی داشته‌اند و
همچنین دانشجویان عزیزی که حاصل کار پژوهشی آن‌ها دستمایه بسیاری از مطالعات موردی
این کتاب بوده است: فرزانه رضائی، ملیکا غلامیان مقدم، عارف پیشه‌ور، سوسن مؤمن زاده
جهرمی، صدیقه ملک قاسمی، طاهره عزیزپور، ملیحه مرتضی پور، حمیده ابطحی‌نیا و اعظم
صفادل.

همچنین تشکر ویژه‌ای دارم از خانم حکیمه کوچی که زحمت زیادی در تهیه نسخه تایپی
و رسم شکل‌ها کشیده‌اند و بدون کمک‌های بی‌دریغ ایشان این کتاب بزودی به سرانجام نمی-
رسید. از آقای سیدرضا فرزادفر نیز که زحمت تایپ بخشی از متن کتاب را متحمل شده‌اند
سپاسگزارم.

فهرست مطالب

۵	 مقدمه
۱۳	 فصل ۱: دینامیک کلاسیک سامانه‌های N ذره‌ای
۱۴	 ۱. حدود اعتبار دینامیک کلاسیک
۱۷	 ۲. دینامیک نیوتن
۱۹	 ۳. رویکرد لاگرانژی
۲۱	 ۴. معادلات هامیلتونی حرکت
۲۲	 ۵. هامیلتونی یک ملکول تنها
۲۴	 ۶. فضای فاز
۲۷	 ۷. الگوریتم اوپلر
۲۹	 ۸. مسیرهای فضای فاز
۳۰	 ۹. حد ترمودینامیکی
۳۲	 مراجع
۳۳	 فصل ۲: مروری بر مکانیک آماری
۳۵	 ۱. مفهوم مجموعه آماری
۳۶	 ۲. فرض ارگودیک
۳۸	 ۳. مجموعه آماری میکروکانونی
۴۰	 ۴. بدست آوردن ترمودینامیک
۴۱	 ۵. قضیه ویريال و قضیه همپاری
۴۴	 ۶. مجموعه آماری کانونی

۴۷	۷. مجموعه کانونی گیس NPT
۴۹	۸. مجموعه آماری ماکروکانونی
۵۰	۹. اهمیت افت و خیزها
۵۴	مراجع

۵۵	فصل ۳: خواص ماکروسکوپی ماده
۵۷	۱. توابع هم‌بستگی
۵۹	۲. توابع ۵-ستگر، تک ذره‌ای و توابع هم‌بستگی دسته جمعی
۶۱	۳. ضریب ترمودینامیک
۶۵	۴. کمیت‌های ساختاری
۷۲	۵. فازهای ماده
۷۶	۶. تشخیص حالت ترمودینامیکی
۷۸	مراجع

۷۹	فصل ۴: دینامیک مولکولی سامانه‌های ساده (۱ سی)
۸۱	۱. دینامیک مولکولی به عنوان یک مسئله N ذره‌ای
۸۲	۲. حالت اولیه سامانه
۸۴	۳. شرایط مرزی دوره‌ای
۸۶	۴. تکنیک‌های محاسبه برهم‌کنش‌های زوج
۹۰	۵. توزیع تعادلی سرعت‌ها
۹۲	۶. مدل‌های ساده برای میدان‌های نیرو
۹۶	۸. انتگرال‌گیری از معادله حرکت (IEM)
۱۰۰	۹. نمونه‌برداری از متغیرهای ترمودینامیکی
۱۰۱	مطالعه موردی ۱: به تعادل رساندن شاره لنارد-جونز
۱۰۴	مراجع

فصل ۵: کنترل دما و فشار.....	۱۰۷
۱. ثابت نگه داشتن دما.....	۱۰۸
۲. تنظیم فشار.....	۱۱۵
۳. روش کنترل فشار همراه با تغییر شکل.....	۱۱۸
۴. روش قیود برای تنظیم همزمان فشار و دما.....	۱۲۰
۵. تحلیل خطا.....	۱۲۲
مطالعه موردی ۲: معادله حالت و ویژگی‌های ساختاری شاره لنارد-جوزف.....	۱۲۵
فصل ۶: اتم‌ها، مول‌ها و میدان‌های نیرو.....	۱۳۱
۱. تقسیم‌بندی عمومی نیرو.....	۱۳۲
۲. برهم‌کنش‌های دوربر.....	۱۳۳
۳. برهم‌کنش‌های غیر پیوندی.....	۱۳۷
۴. برهم‌کنش‌های پیوندی.....	۱۴۰
پتانسیل فن.....	۱۴۳
۵. مدل‌های متداول برای ملکول آب.....	۱۴۸
مطالعه موردی ۳: تخمین ضریب گرانروی آب.....	۱۵۱
مراجع.....	۱۵۲
فصل ۷: مواد (محیط‌های) دانه‌ای.....	۱۵۹
۱. روش عنصر گسسته برای شبیه‌سازی مواد دانه‌ای.....	۱۶۱
۲. برهم‌کنش بین دانه‌ها.....	۱۶۳
۳. ویژگی‌های استاتیکی ماده دانه‌ای.....	۱۶۷
۴. رفتار دینامیکی در ماده دانه‌ای.....	۱۷۱
مطالعه موردی ۴: تشکیل تپه دانه‌ای در سیلوی شبه دویعدی.....	۱۷۴
مطالعه موردی ۵: انتقال تنش برشی در یک لایه فشرده شده دانه‌ای.....	۱۷۵
مراجع.....	۱۸۰

فصل ۸: سیستم‌های ناهمگن و شاردهای محبوس شده ۱۸۵

۱. فصل مشترک شارده-خار در مقیاس میکروسکوپی ۱۸۶
۲. کشش سطحی ۱۸۸
۳. ترکندگی و زاویه تماس ۱۹۰
۴. مویینگی ۱۹۱
۵. شاردهای محبوس شده در نانو کانال‌ها ۱۹۲
- مطالعه موردی ۶: تشکیل نانو قطره آب روی سطح گرافن ۱۹۴
- مطالعه موردی ۷: جذب آب در نانو لوله‌های کربنی تک-دیواره ۱۹۶
- مراجع ۱۹۹

فصل ۹: شبیه‌سازی به روش مونت کارلو ۲۰۹

۱. روش مونت کارلو برای تعیین ددی انتگرال ۲۱۰
۲. روش مونت کارلو و مجموعه‌های آماری ۲۱۴
۳. روش متروبولیس ۲۱۵
۴. روش مونت کارلو در مجموعه‌های آماری دیگر ۲۲۱
- مطالعه موردی ۸: شارده لئارد-جونز در یک نانو حفره ۲۲۶
- مراجع ۲۲۹

۱. نرم افزار لمپس (LAMMPS) ۲۳۳
۲. دینامیک اتلاف ذرات (DPD) ۲۳۷
۳. برنامه perl و نسخه LAMMPS برای شبیه‌سازی جذب آب در نانو لوله کربنی ۲۳۹
۴. کد فرتون برای شبیه‌سازی مونت کارلو شارده لئارد-جونز در مجموعه آماری NVI ۲۴۹