



دانشگاه سوادکوه

دانشکده علوم - گروه فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

عنوان:

محاسبه خواص گرمایی آلیاژ $Sn - Au$ در مقیاس نانو

نفیسه خسروی

استاد راهنما:

دکتر جمال داودی

شهریور ۱۳۸۹



چکیده

هدف از اجرای این مجموعه‌ی پژوهشی، بررسی ویژگی‌های حرارتی، رفتارهای تعادلی و فازی آلیاژی متشکل از عناصر طلا و قلع به شیوه‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولیست. پتانسیل برگزیده شده برای این شبیه‌سازی، پتانسیل دو و سه جسمی *Murrell – Mottram* است. این بررسی‌ها در غالب هنگرد *NVT* برای آلیاژ $Sn - 6\%Au$ (درصد وزنی) و عناصر خالص تشکیل‌دهنده‌ی آن صورت پذیرفت. انرژی‌های جنبشی، پتانسیل، چگالی و ثابت شبکه‌ای که در آن سیستم به تعادل می‌رسد و محیای مطالعات فیزیکی می‌شود را سنجیدیم. پس از کسب اطمینان از انطباق این ویژگی‌های تعادلی با شرایط آزمایشگاهی این عناصر، به بررسی رفتارهای گرمایی آنها پرداختیم. دمای ذوب، ضریب انبساط طولی و حجمی و نیز ظرفیت گرمایی هر یک از آنها در حجم و فشار ثابت محاسبه گردید. این پردازش با استفاده از تغییرات رفتاری انرژی و ثابت شبکه بر حسب دما انجام گرفت. در پایان، با اعمال تغییراتی در کد کامپیوتری، این آلیاژ را در مقیاس نانو مطالعه کرده و خواص گرمایی آلیاژ $Sn - 6\%Au$ را در مقیاس نانو محاسبه نمودیم.

تقدیم با احترام و عشق

به پروردگار حسین (ع)

و حسین (ع)

جدش

پدر و مادرش

خواهر و برادران و فرزندان

محبانش، پدرم و مادرم

و شیعیانش، حبیبه علوی و پدرش،

محبوبترین ندیده زندگی زهیر ابراهیم زاده، حسین مقدم و صلابت مادرانشان

با سپاس از یک انسان، علمش، خلوصش، و لحظه لحظه‌ی زحماتش
استاد بزرگوارم، جناب آقای دکتر داودی

سپاس بی‌کران از دوستان و حامیان اندیشه‌ام در دانشگاه

و

همنوردانم در گروه کوهنوردی اورست زنجان

فهرست مندرجات

۱	مقدمه
۲	۱ دینامیک مولکولی
۲	۱.۱ مقدمه‌ای بر شبیه‌سازی کامپیوتری
۵	۲.۱ تاریخچه
۱۰	۳.۱ آغازی بر دینامیک مولکولی
۱۴	۴.۱ ایده کلی دینامیک مولکولی
۱۵	۵.۱ طراحی یک سیستم ساده
۱۶	۱.۵.۱ دما در MD
۱۹	۶.۱ برهم‌کنش بین ذرات
۱۹	۱.۶.۱ خاستگاه توابع پتانسیل
۲۱	۲.۶.۱ توابع پتانسیل و طرح یک مثال
۲۳	۳.۶.۱ محاسبه جفت‌های اتمی
۴۰	۷.۱ انتگرال معادله حرکت

۴۲	۸.۱	معیارهای یک انتگرال گیری خوب
۴۵	۹.۱	واحدهای بی بعد
۴۸	۱۰.۱	شرط مرزی دوره‌ای
۵۷	۱۱.۱	محاسبه نیرو
۵۹	۲	یک پتانسیل سه جسمی
۵۹	۱.۲	پتانسیل‌های سه جسمی
۶۱	۲.۲	پتانسیل <i>Murrell – Mottram</i>
۶۳	۱.۲.۲	بخش دو جسمی
۶۷	۲.۲.۲	جملات سه جسمی
۷۰	۳.۲.۲	یک مثال عددی
۷۲	۳.۲	تبیین عنصر قلع
۷۵	۴.۲	نگاهی بر عنصر طلا
۷۷	۵.۲	روشی برای سهولت اجرا
۷۸	۳	دیدگاه ترمودینامیکی
۷۸	۱.۳	دینامیک مولکولی و مکانیک آماری
۷۹	۱.۱.۳	دما در مکانیک آماری
۸۲	۲.۱.۳	فشار
۸۸	۳.۱.۳	پارامتر نظم
۹۰	۲.۳	خواص فیزیکی
۹۳	۱.۲.۳	خواص استاتیک

۹۴	کمیت‌های گرمایی	۳.۳
۹۶	توابع پاسخ ترمودینامیکی	۱.۳.۳
۱۰۱	محاسبات خطا	۴.۳
۱۰۱	خطاهای آماری	۱.۴.۳
۱۰۲	روش <i>Bootstrap</i>	۲.۴.۳
۱۰۳	روش <i>Jackknife</i>	۳.۴.۳
۱۰۴		نانو مواد	۴
۱۰۴	مقدمه‌ای بر مواد نانو ساختار	۱.۴
۱۰۸	برخی خواص فیزیکی و مکانیکی	۲.۴
۱۰۸	منشاء خواص	۱.۲.۴
۱۱۱	ضریب پخش	۲.۲.۴
۱۱۲	ضریب انبساط حرارتی	۳.۲.۴
۱۱۳	خواص مغناطیسی	۴.۲.۴
۱۱۴	حد حلالیت عناصر آلیاژی	۵.۲.۴
۱۱۵	مقاومت الکتریکی	۶.۲.۴
۱۱۶	مقاومت به خوردگی	۷.۲.۴
۱۱۶	خاصیت نگهداری هیدروژن	۸.۲.۴
۱۱۷	خواص الاستیکی	۹.۲.۴
۱۱۹	خواص پلاستیکی	۱۰.۲.۴
۱۲۱	سوپر پلاستیسیته	۱۱.۲.۴
۱۲۲	در حیطه آزمایشگاه و صنعت نانوتکنولوژی	۳.۴
۱۲۲	تعیین خواص مکانیکی	۱.۳.۴
۱۲۳	مطالعه پایداری حرارتی	۲.۳.۴
۱۲۴	مطالعات توپوگرافی	۳.۳.۴

۱۲۵	۵	آلیاژهای بدون سرب و نتیجه گیری
۱۲۶	۱.۵	کاربرد لحیم در صنعت
۱۲۷	۱.۱.۵	نصب مدارهای چاپی
۱۲۸	۲.۱.۵	سرب در لحیم $Sn - Pb$
۱۳۱	۲.۵	عنصر سرب، سلامت و محیط زیست
۱۳۳	۳.۵	ترکیبات بدون سرب
۱۳۳	۱.۳.۵	قلع
۱۳۵	۴.۵	آلیاژهای پیشنهادی
۱۳۵	۱.۴.۵	آلیاژ $Sn - Zn$
۱۳۶	۲.۴.۵	آلیاژ $Sn - Cu$
۱۳۶	۳.۴.۵	آلیاژ $Sn - Bi$
۱۳۷	۴.۴.۵	آلیاژ $Sn - Ag$
۱۳۷	۵.۴.۵	آلیاژ $Sn - Au$ و کاربری آن در صنعت
۱۴۳	۵.۵	جمع بندی و نتیجه گیری
۱۴۳	۱.۵.۵	عنصر خالص Sn
۱۵۴	۲.۵.۵	عنصر خالص Au
۱۶۱	۳.۵.۵	آلیاژ $Sn - Au$
۱۶۹	۶.۵	محاسبات فوق در ابعاد نانو
۱۷۷	پیوست ۱	
۱۸۱	پیوست ۲	
۱۸۴	منابع	

مقدمه

پرکاربردترین آلیاژ متداول در صنعت، صنایع الکترونیک و مهندسی لحیم نام دارد. این آلیاژ با ترکیب $Sn - 3\%Pb$ (درصد وزنی) حاوی مقادیر زیادی سرب بوده که منجر به سمی شدن این ماده می‌گردد. خطر آفرینی این آلیاژ برای صنعتکاران، محیط زیست و فیزیولوژی بدن انسان موجب تصویب قوانینی دولتی در راستای حذف این آلیاژ از صنعت گردید. لذا یافتن یک آلیاژ جایگزین و بررسی خواص آن، به عنوان یکی از شاخه‌های مهم در مهندسی متالورژی و الکترونیک مورد توجه بسیاری از جوامع علمی قرار گرفت. این پایان‌نامه در راستای نیل به همین هدف، آلیاژ $Sn - Au$ را برای بررسی خواص گرمایی کاربردی در صنعت برگزید. به منظور انجام این طرح پژوهشی، روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی را انتخاب کردیم. لذا مطالعه‌ی تکنیک‌های این شیوه بررسی، و پیاده‌سازی آن برای این آلیاژ از دغدغه‌های اصلی این اثر گردید. تحقیق و مطالعه‌ی پتانسیلی که بتواند عناصر قلع و طلا را شبیه‌سازی نماید، قدم بعدی را در فصل دوم به خود اختصاص داد. نحوه‌ی بررسی خواص گرمایی در این تکنیک را مطالعه کردیم و روش‌هایی برای این منظور یافتیم. کسب ذهنیتی روشن از زوایای صنعتی و آزمایشگاهی نانومواد، این اثر را به عرصه‌ی مقالات و کتب این شاخه از علم کشاند که در فصل ۴ نگاهی کوتاه بر آن‌ها خواهیم داشت. و در فصل آخر، دانشمان از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، بررسی‌های ترمودینامیکی و نانومواد را گردهم خواهیم آورد و می‌پردازیم به نانوآلیاژهای بدون سرب که این اثر را با هدف بررسی این آلیاژها آغاز کردیم. آموخته‌هایمان از دانش شبیه‌سازی را بر یکی از این آلیاژها پیاده کرده و نتایج آن را برایتان جمع‌بندی می‌کنیم، و برخی خواص فیزیکی‌اش را از نظر می‌گذرانیم.

فصل ۱

دینامیک مولکولی

۱.۱ مقدمه‌ای بر شبیه‌سازی کامپیوتری

برای یک کشف علمی اغلب سال‌ها به طول می‌انجامد تا بتواند جایگاه خود را در عرصه‌ی کاربری‌های روز دنیا بیابد. اما برای شبیه‌سازی کامپیوتری، داستان به گونه‌ای متفاوت رقم خورد. شبیه‌سازی کامپیوتری کار خود را به عنوان ابزاری برای بهره‌برداری از ماشین‌های محاسباتی الکترونیکی که طی جنگ جهانی دوم و بعد از آن توسعه یافته بودند، آغاز کرد. این ماشین‌ها برای انجام محاسبات سنگین مربوط به پیشبرد سلاح‌های هسته‌ای و کد شکنی نظامی طراحی شده بودند. تا زمانی که در ۱۹۵۰، کامپیوترهای الکترونیکی تا اندازه‌ای در اختیار کاربران غیر نظامی قرار گرفت و این همان نقطه‌ای بود که شبیه‌سازی کامپیوتری قدم به عرصه‌ی علم نهاد [۱].

w. w. wood در دست‌نوشته‌های خود از آن تاریخ چنین یاد می‌کند [۲]:

زمانی که کامپیوتر *MANIAC* در *Los Alamos* در مارس ۱۹۵۲ راه‌اندازی شد،

Metropolis به طیف وسیعی از مسائل می‌اندیشید که بتوان روی این ماشین پیاده کرد، تا هم

ساختار منطقی آنرا ارزیابی نماید و هم آنکه ظرفیت‌های بالای این وسیله را به نمایش بگذارد.

علم، هم نیازمند مشاهده است و هم تفسیر. بدون مشاهده، واقعیتی برای تفسیر نداریم و بدون تفسیر، علم تنها یک پرونده طبقه‌بندی مشاهدات خواهد بود! مبنای تفسیر، تئوریست و زبان علم تئوری، ریاضیات است. نظریه‌ها بر مبنای پایه‌ای از فرضیات بنا می‌شوند. لازمی شکل‌گیری این فرضیات، تفسیر مشاهدات موجود و پیشگویی مشاهدات جدید است و بدین ترتیب است که تئوری‌های برانزده‌تر از گذشته، شکل می‌گیرند.

سوال اینجاست که شبیه‌سازی کامپیوتری چگونه در ادبیات تئوری‌های فیزیکی جای می‌گیرد؟ دنیای آکادمیک در نظریاتی خوش‌تراش که پاسخگوی مسائل کاملاً ایده‌آل باشد، پیچیده شده است. این نظریات در نهایت به جواب‌های مرتب و دقیق دست می‌یابند. و جالب اینجاست که با وجود کاربرد برخی بخش‌های نامعقول ریاضیات در عرصه‌ی علم، هنوز شکاف بزرگی بین بیان یک تئوری، و استخراج اطلاعات کمی در تفسیر آزمایشات وجود دارد. در دنیای واقعی وجود حل‌های دقیق، استثناهای مقدس (!) و جالب توجهی هستند. در نتیجه، تئوری به شدت بر بستری از تقریب‌های تحلیلی و محاسباتی قرار می‌گیرد. اما اغلب آنها در جزئیات غیر قابل کنترل‌اند و به سختی می‌توان اساس اطمینان را بر آنها نهاد.

با این حساب می‌توان جایگاه دانش شبیه‌سازی را به این صورت تبیین کرد: این دانش با تکیه بر مجموعه‌ای از اصول تئوری‌های اولیه، سعی می‌کند از تقریب‌هایی که معمولاً علم تئوری درگیر آنهاست اجتناب کرده و آنها را با یک سری محاسبات استادانه جایگزین نماید.

وجه تمایزی که بین شبیه‌سازی کامپیوتری در حالت کلی، با دیگر روش‌های محاسباتی می‌توان قائل شد —البته اگر بتوان نامش را تمایز گذاشت— در تفاوت شیوه‌ی به کارگیری کامپیوتر است. در این شاخه تنها یک محاسبه انجام نمی‌دهیم، بلکه کامپیوتر را به یک آزمایشگاه مجازی تبدیل می‌کنیم که سیستم در آن مورد مطالعه قرار می‌گیرد. این همانندسازی می‌تواند توسعه یابد و حتی به نتایج غیر منتظره‌ای برسد. طی سال‌های متمادی، پهنه‌ی وسیعی از تکنیک‌های مدل‌سازی گسترش یافته، و زمینه کاری ما را برای کار در حیطه‌ی مولکولی مهیا نموده‌اند. MD ، مونت کارلو کلاسیک و نیز تکنیک‌هایی با مبانی کوانتومی که انتگرال مسیر را شامل می‌شوند، همچنین روش‌های ترکیبی از MD و مونت کارلو با نظریه‌ی تابع چگالی الکترونی را می‌توان از جمله‌ی این تکنیک‌ها دانست [۳].

در دنیای علم، به دنبال دانستن هستیم. اما خیلی از مواقع چندان هم روشن نیست که دقیقاً چه چیزهایی، این پدیده‌ی دانستن را می‌سازند! در زمینه‌ی شبیه‌سازی، کلمه دانستن، به یک مدل محتمل اطلاق می‌شود که قادر باشد یک سری مشاهدات آزمایشگاهی را بازتولید و پیشگویی نماید. پس از یافتن این مدل، شروع می‌کنیم به ارتقای کارایی‌های آن. ممکن است آنرا توسعه دهیم یا به مدل دیگری تبدیل نماییم که بتواند آزمایش‌های بیشتری را تفسیر کند. البته تفاوت چندان هم بین این روش و طریقی که علم در دیگر زمینه‌ها اختیار کرده است، وجود ندارد. واضح است که تا زمانی که این مدل نتوانسته همه‌ی جنبه‌های ضروری را برای نتایج مورد انتظارمان کسب کند (هرچند هم که مدل پیچیده‌ای باشد)، هیچ مزیت ذاتی دیگری برای پذیرش نخواهد داشت. این موضوع، کنترل کیفیت ما در عرصه‌ی برنامه‌نویسی کامپیوتری خواهد بود.

شبیه‌سازی نقش مهمی در پدیده‌ی آموختن ایفا می‌کند. در این جا برهم‌کنش‌های کامپیوتری از یک پدیده‌ی طبیعی را به نمایش می‌گذاریم. پس از مشاهده‌ی آن می‌توانیم با اندکی انتزاع ذهنی، موضوع مورد نظر را کاملاً درک کنیم و همچنین هر گونه‌ی ارائه‌ی علمی را نیز غنی نماییم. شبیه‌سازی به عنوان بخشی الحاقی از آزمایش، یا به چالش‌کشنده‌ی بحث‌های تئوریکست یا زمینه‌ساز فرضیه‌های جدید. این ابزار بی‌رقیب، در رشته‌ای مانند فیزیک که پر از مفاهیم دشوار است، قادر خواهد بود با غلبه بر عمق این مفاهیم، آنها را با یک دید ساده و ابتدایی نگاه کند. یک مثال خوب دقیقاً نقشی است که MD در دنیای مولکول‌ها ایفا می‌کند، یعنی آوردن بخش زیادی از دنیای نامرئی‌اتم‌ها به صفحه‌ی نمایش زندگی. اما به عنوان نکته‌ای آموزشی، نباید فراموش کرد که در شبیه‌سازی باید حقیقتاً صادق بود. چرا که دیدن، ایمان آوردن است. و نمایش‌هایی که به روی پرده می‌روند، صرفنظر از صداقتشان، می‌توانند کاملاً متقاعد کننده باشند [۳].

۲.۱ تاریخچه

طبیعت قوانین زیبایی دارد، با یک جنبه منفی بزرگ. اینکه بیانشان به زبان معادلاتیست که حل دقیق ندارند، مگر در شرایط خاص. اگر بخواهیم معادله حرکت نیوتون را برای برهم‌کنش بیش از دو ذره بنویسیم، در مقابل یکی از قدیمی‌ترین مسائلی قرار گرفته‌ایم که روی دست فیزیک مانده است! و این یعنی یک حل تحلیلی با مداد و کاغذ نخواهیم داشت. البته با کامپیوتر قادر خواهیم بود پاسخ دلخواه‌مان را تا هرچند درجه دقت که بخواهیم، بدست آوریم. در اکثر علوم مرتبط با خواص مواد، با سیستم‌های بس‌ذره‌ای سر و کار داریم و این یعنی همچنان حل با مداد و کاغذ را فراموش کنید، حتی برای یک ماده خیلی ساده.

قبل از شبیه‌سازی کامپیوتری تنها یک راه برای پیش‌بینی خواص مواد داشتیم. این راه، استفاده از نظریاتی بود که تقریب‌هایی را وارد می‌کنند و ناگزیر، خیلی دقیق خواهند بود. چرا که سیستم‌های محدودی را شامل می‌شوند که خواص تعادلی در آنها به دقت قابل اجراست (مثل گاز ایده‌آل، کریستال هارمونیک، مدل آیزینگ دوبعدی). در نتیجه اکثر ویژگی‌های مواد واقعی توسط این پایه‌های تقریبی پیش‌بینی می‌شوند، مانند معادله واندروالس برای گاز چگال، تئوری *Debye - huckel* برای الکترولیت‌ها، یا معادله بولتزمن برای گذار فازهای گاز رقیق. با در دست داشتن اطلاعاتی از برهم‌کنش‌های بین مولکولی اغلب می‌توان با یک تقریب مناسب، خواص خوبی بدست آورد. اشکال اینجاست که اطلاعاتمان از این برهم‌کنش‌ها معمولاً محدود است و حتی برای سبکترین مولکول‌ها هم به مشکل بر می‌خوریم. خیلی عالی می‌شد اگر بدون استفاده از این تقریب‌ها می‌توانستیم نتایج خوبی بگیریم، و همانطور که گفتیم شبیه‌سازی این امکان را برایمان فراهم می‌کند.

نتایج شبیه‌سازی را هم می‌توان با آزمایش و هم با نتایج تئوری مقایسه کرد و اینجاست که شبیه‌سازی نقش تایید کننده‌ی تئوری را ایفا می‌کند. و این کاربری بسیار مهمی است، چرا که برخی نظریات معتبر که سابقه‌ی آنها به زمان بولتزمن برمی‌گردد، در جریان تحولات دنیای فیزیک، به شدت نیازمند چنین تاییدهای دوباره‌ای هستند.

در نتیجه شبیه‌سازی یک هدف دوجانبه ارائه می‌دهد: از طرفی برای تئوری‌پردازان دیدگاهی برای درک

احساسی فیزیک مساله می‌سازد و از طرف دیگر کمیات دقیقی تولید می‌کند که می‌تواند با داده‌های آزمایشگاهی مقایسه گردد و به این ترتیب، درستی آن تئوری را تایید کند. این نتایج تنها اعداد هستند و می‌توانند تحت تاثیر خطاهای آماری باشند، لذا نتیجه نهایی شبیه حالات واقعی خواهد بود.

در اوایل این کار، نقش شبیه‌سازی‌های کامپیوتری بسیار پررنگ به نظر می‌رسید. با یک مثال، بهتر می‌توان آن دوره را درک کرد. زمانی که هنوز شبیه‌سازی کامپیوتری مرسوم نشده بود، یکی از حیطه‌هایی که در آن فقدان یک نظریه تئوری را داشتیم، بررسی یک مایع چگال بود. تنها طریق موجود، شبیه‌سازی مکانیکی آن با استفاده از کره‌های ماکروسکوپی بود. مشکل اساسی، چیدن این حباب‌ها به ترتیبی بود که در مدل واقعی داریم. این آزمایش مکانیکی به همت *J. D. Bernal* ساخته و تحلیل شد، که البته تحلیل سه‌بعدی آن به تلاش دانشجویانش به اتمام رسید [۱].

چرا مایع را نام بردیم؟ آن هم دلایل تاریخی دارد. هم جامدات و هم گازها اصول تئوری‌های خوش تعریف بسیاری دارند. در جامدات ذرات را روی نقاط ثابتی از شبکه تنها با ارتعاشاتی اندک در نظر می‌گیریم و گازها، اتم‌های مستقلی دارند که برهم‌کنش‌هایشان به صورت اختلالات ضعیف وارد می‌شود. ولی در یک مایع، در حالی که برهم‌کنش‌ها به اندازه جامدات حائز اهمیت‌اند، هیچ ساختاری وجود ندارد که بر مبنای آن کار کنیم [۳].

اگر شما هم مراحل شبیه‌سازی مکانیکی مایعات را پشت سر می‌گذاشتید و با همان مشکلات روبرو می‌شدید، تولد شبیه‌سازی کامپیوتری و انجام اولین آزمایش‌ها با این وسیله برای مایع چگال، باعث شگفتیتان می‌شد!

همانطور که در ابتدا اشاره داشتیم، اولین شبیه‌سازی یک مایع، روی کامپیوتر *MANIAC* در *Los Alamos* توسط *Teller, Rosenbluth, Metropolis* و *Teller* با روش متروپلیس مونت کارلو انجام شد. البته عنوان شبیه‌سازی مونت کارلو پیشتر توسط *Metropolis* و *Ulam* ابداع شده بود و این انتخاب نام به کاربرد بسیار زیاد اعداد تصادفی در این روش برمی‌گشت. تقریباً در همین زمان *Pasta, Fermi* و *Ulam* کار محاسباتی معروف خود را روی دینامک غیرهارمونیک یک کریستال یک‌بعدی ارائه دادند. و سرانجام اولین شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مناسب، توسط *Alder* و *Wainwright* در ۱۹۵۶ در *Livermore* پا به عرصه علم گذاشت. این تولد به مطالعه‌ی دینامیکی مجموعه‌ای از کره‌های سخت پرداخته بود [۱]، که ذرات با سرعت ثابت و برخوردهای

الاستیک حرکت می‌کردند [۶].

تبیین رابطه میان این دو روش مختلف محاسباتی می‌تواند دیدگاه جالبی از خط مشی شبیه‌سازی ارائه دهد. می‌شود گفت یکی جبریست و دیگری تصادفی.

روش مونت کارلو همان روش تصادفیست که با تولید تصادفی هندسه مولکولی سیستم می‌تواند سطوح انرژی آن را ارزیابی کند. آنرا در چند قدم جمع‌بندی می‌کنیم:

۱- تعیین مختصات اولیه (X_0) اتم‌ها به صورت تصادفی

۲- تولید مختصات جدید (X_a) با تغییر مختصات اولیه به طور تصادفی

۳- محاسبه احتمال گذار $W(0, a)$

۴- تولید یک عدد تصادفی R بین صفر و یک

۵- اگر $W(0, a) < R$ بود، انتخاب مختصات قدیمی به عنوان مختصات جدید و ادامه از مرحله ۲

۶- در غیر این صورت پذیرش مختصات جدید و گذر به مرحله ۲.

یکی از معروفترین روش‌ها برای سیستم‌های مولکولی، روش متروپلیس مونت کارلوست [۳۹]. روش‌های متداول، با ایده آل سازی مولکول‌ها به صورت کره‌های سخت یا دیسک‌ها انجام می‌شود.

ظرف چند سال، شبیه‌سازی MC روی پتانسیل برهم‌کنشی لنارد-جونزی اجرا شد و امکان مقایسه‌ی داده‌های آزمایشگاهی با داده‌های ترمودینامیکی بدست آمده از مدل، فراهم گردید [۶].

روش جبری دینامیک مولکولی همانطور که گفتیم، پس از مونت کارلو متولد شد. اساس این روش، بر تابع انرژی پتانسیل قرار داشت. حالا با یک مشتق‌گیری، می‌توان به مولفه‌های نیروی عمل کننده بین اتم‌ها رسید که این نیرو تنها نشئه‌ی دیگرست از معادله حرکت نیوتن.

و چون در هر گام زمانی با مختصات گام قبلی کار خواهد کرد، لذا نتایج نهایی جبراً تحت تاثیر مختصات اولیه خواهند بود [۳۹].

اولین شبیه‌سازی MD روی یک عنصر جدول تناوبی در ۱۹۵۹ توسط گروهی به سرپرستی *Vineyard* در *Brookhaven* گزارش شد. این گزارش به آسیب‌های تابشی کریستال مس اختصاص داشت.

کسانی که با روش‌های مختلف شبیه‌سازی آشنایی مختصری داشته‌اند، حتماً با نام مدل گاز آرگون برخورد کرده‌اند، چرا که به لحاظ آموزشی جنبه‌های کاملی از شبیه‌سازی را شامل می‌شود. اجرای این مدل به عنوان یک مایع واقعی برای اولین بار در ۱۹۶۴ توسط *Rahman* در *Argonne* صورت پذیرفت، که البته با آن مدل معروف آموزشی تفاوت‌های زیادی داشت. در این زمان بود که کامپیوترها از حیطة آزمایشگاه‌های دولتی ایالات متحده فراتر آمدند و کم‌کم در اختیار عموم دانشمندان و کاربران غیرنظامی قرار گرفتند. به این ترتیب، سرعت پیشرفت این تکنیک چندین برابر شد. با این حال، از ۱۹۵۰ به بعد، الگوریتم کلی *MD* و *MC* فقط اندکی تغییر کرد.

متداول‌ترین کاربرد شبیه‌سازی کامپیوتری، ارائه‌ی خواص مواد است. شاید به نظر بیاید که راحت‌تر است آب را در فریزر منزلمان به دمای انجماد برسانیم تا اینکه بیاییم آنرا شبیه‌سازی کنیم و در فضای مجازی منجمد نماییم. نکته اینجاست که شاید این اندازه‌گیری در فشار ۱ اتمسفر چنین راحت به نظر بیاید، اما قطعاً در فشارهای بالاتر بسیار پرهزینه و دشوار خواهد بود و مطمئن باشید که از کامپیوتر شما دود بلند نخواهد شد اگر سیستمتان را به ۱۰۰۰۰ درجه کلون برسانید. علاوه بر آن خواصی را نیز خواهیم داشت که تاکنون قادر به اندازه‌گیری آن نبوده‌ایم. و نهایتاً، کاربری روزافزون آن در تحلیل داده‌ها انکارناپذیر است. برای مثال، یک تکنیک موثر برای بدست آوردن اطلاعات ساختار ماکرومولکول‌ها از $2D - NMR$ ، تزریق داده‌های تجربی آن به شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و ایجاد این فرصت برای کامپیوتر است که ساختار کامل را بسازد. این روش به لحاظ ارزیابی انرژی بسیار مطلوب بوده و با داده‌های در دسترس *NMR* قابل مقایسه است [۱].

در ابتدای شکل‌گیری، شبیه‌سازی بسیار ناکارآمد و غیر قابل فهم به نظر می‌رسید. چرا که تئوری کاران با تئوری و آزمایشگاهیان با داده‌های تجربی‌شان راحت‌تر بودند. اما این توصیف، با صحبت‌های *Vineyard* (اولین کسی که روی آسیب تابشی فلزات کار کرده بود)، غیر قابل دفاع شد:

تابستان ۱۹۵۷ در کنفرانس فیزیک و شیمی فلزات در *Gordon*، من روی آسیب تابشی صحبت کردم. سپس بحثی درگرفت که برخی معتقد بودند کامپیوترها در جزئیات که دقیقاً چه اتفاقی می‌افتد، می‌توانند کارساز باشند و برخی می‌گفتند امکانپذیر نیست و عقاید دیگری که چندان مهم نبود. *John Fisher* معتقد بود که این کار توسط دست او به خوبی امکانپذیر است و به محض

رسیدن به منزل، نتایج را برایم ارسال خواهد کرد. ۲ هفته بعد که خبری از ایشان نشد با وی تماس گرفتم، اذعان داشتند که تسلیم شده‌اند، بنابراین، این موضوع مرا به طور جدیتری به فکر واداشت که چگونه می‌توان کامپیوتری با سرعت بالاتر داشت، تا بتوانم به جای *Fisher* وارد این بازی شوم...

و در نهایت، شبیه‌سازی به صورت ابزاری خالص برای استخراج نتایج به ثبت رسید. گرچه هنوز هم برخی معتقدند این پدیده هیچوقت یک کشف محسوب نمی‌شود چرا که آدمی نمی‌تواند آنچه که را وسط نگذاشته است، برداشت کند!

بهترین و آخرین شیوه در توضیح کارایی این ابزار، یک مثال مبسوط است. در میانه‌ی ۱۹۵۰، یکی از سوالات داغ در زمینه‌ی مکانیک آماری این بود که آیا فرم‌های بلوری می‌توانند در سیستمی از ذرات کروی که دافعه‌ی کوتاه‌برد سختی دارند ولی هیچ جاذبه‌ی متقابلی ندارند، شکل بگیرند؟

در یک شبیه‌سازی معروف کامپیوتری، *Alder* و *Wain Wright* و نیز *Wood* و *Jacobson* نشان دادند که چنین سیستمی یک گذار فاز انجمادی مرتبه اول دارد. که اکنون شواهد تجربی، این نتیجه را تایید می‌کنند. البته پس از مدت زمان زیادی که توسط اهل شک، صرف شد! برای مثال ۷ سال بعد از انجام این شبیه‌سازی در جلسه‌ای در *New Jersey*، میان گروهی متشکل از ۱۵ دانشمند سرشناس (که از بینشان ۲ جایزه نوبل بیرون آمد) روی این نظریه بحث و بررسی شد. یکی از نتایج این بود که: کره‌های سخت می‌توانند یک کریستال پایدار را شکل دهند. که به نظر می‌رسید نیمی از حضار به سادگی نمی‌توانستند این نتیجه را بپذیرند.

به هر حال پس از ۳۰ سال نشان داده شد که نیروهای دافعه‌ای سخت واقعاً از ویژگی‌های ساختاری یک مایع است و نیروهای جاذبه‌ای، تا حدی در مرحله بعد قرار می‌گیرند [۱].

۳.۱ آغازی بر دینامیک مولکولی

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، حرکت مولکول‌های انفرادی را در مدلی از جامد، مایع و گاز محاسبه می‌نماید. کلمه کلیدی این تعریف حرکت است، که تغییر موقعیت‌ها، سرعت‌ها و راستاها با زمان را توصیف می‌کند. به بیان دیگر، دینامیک مولکولی شامل یک تصویر از حرکت است که توسط مولکول‌هایی که به جلو و عقب می‌روند و دور خود یا یکدیگر می‌چرخند و باهم یا با دیواره‌ی محیطشان برخورد می‌کنند، دنبال می‌شود.

البته اصطلاح دینامیک مولکولی تنها در اینجا به کار نمی‌آید. برای مثال، زمانی که مولکول‌های واقعی تحت تاثیر یک پرتو مولکولی مورد مطالعه واقع می‌شوند یا موقعی که با تکنیک‌های طیف‌سنجی مشغول مطالعه مولکول‌ها هستیم، همچنان این لغت به کار می‌آید. این مجموعه اصطلاحات متعلق به حیطه‌ی علم دینامیک شبکه است، که به مطالعه‌ی حرکت‌های ارتعاشی اتم‌ها در جامد با استفاده از مکانیک مولکولی می‌پردازد. البته اگر با مکانیک کوانتومی محاسبه گردد به آن، محاسبه میدان نیرو نیز گفته می‌شود، که اختصاص دارد به مطالعه‌ی ساختار مولکول‌های انفرادی. در این جا، با دانش دینامیک مولکولی تنها در زمینه شبیه‌سازی سروکار خواهیم داشت.

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، درکی است نوین از یک طرح قدیمی علمی. وقتی برای اجزای یک سیستم، مجموعه‌ای از موقعیت‌های اولیه به همراه برهمکنش‌های نیرو را داشته باشیم رفتار آن سیستم را می‌توانیم در اختیار بگیریم. این تفسیر مکانیکی قطعی از طبیعت، از زمان نیوتن تا امروز حرف اول را در این حیطه از علم زده است [۴]. در سال ۱۸۱۴ دقیقاً یک قرن پس از نیوتن، لاپلاس چنین نوشت [۳]:

هوشی که بتواند همه‌ی نیروها را منطبق با طبیعتشان بنماید، آن را به همراه موقعیت‌های نسبی اجزای تشکیل دهنده تفسیر نماید و اینقدر وسیع باشد که تحلیل همه این اطلاعات را تضمین کند، می‌توان آنرا به صورت یک فرمولبندی مشابه برای حرکت سنگین‌ترین اجرام کائنات و سبکترین

اتم‌ها، پذیرفت. برای چنین هوشی، هیچ چیز نامعلومی وجود نخواهد داشت و در یک لحظه، تمام گذشته و آینده در جلو چشمانش خواهد بود.

و اگر چنین رویه‌ای، توسط پیچیدگی‌های ناشی از واقعیت، عقیم گذاشته شود؟ آنوقت می‌توانیم این واقعیت را با یک مدل جانشین نماییم. تامسون، دقیقاً یک قرن بعد از لاپلاس در یکی از سخنرانی‌های خود در بالتیمور *lecture XI* گفت [۴]:

به نظر می‌رسد، منظور از اینکه «آیا ما می‌توانیم یک ذره مشخص در فیزیک را بفهمیم؟» این باشد که «آیا می‌شود یک مدل مکانیکی از آن ساخت؟».

امروزه نیز یک قرن پس از تامسون، ما رویای لاپلاس را پشت سر گذاشته‌ایم: شرط لازم هوش توسط کامپیوترهای دیجیتالی تامین شده است، موقعیت‌های نسبی *اجزا* مجموعه‌ای از سرعت و مکان‌های اولیه‌اند و فرمولبندی‌های مشابه گرچه شاید به صورت تحت اللفظی درست نباشد، می‌تواند با الگوریتم‌ها جانشین شود و کائنات لاپلاس، راهی به سوی مدل‌های همین کائنات یافته است. اکنون، مدل‌های قطعی ریاضیاتی نه تنها در علم فیزیک و مهندسی، شایع شده‌اند بلکه علوم اجتماعی و امور زندگی را نیز تحت سیطره‌ی خود درآورده‌اند.

این نگرشی قدیمی است، اما از آنجا که اغلب صحیح است، به هیچ‌وجه ساده‌انگارانه نخواهد بود. به‌رغم ادعای لاپلاس، هنوز سیستم‌هایی را داریم که غیرقابل پیشگویی‌اند مانند تغییرات بورس یا پیش‌بینی آب‌وهوا. چرا باید اینگونه باشد؟

اگر مدل‌های قطعی ریاضیاتی می‌توانند ما را یاری کنند که مثلاً بتوانیم ماهواره‌ای را به دقت روی ماه بنشانیم، چرا نمی‌توانند کم‌کم آن کنند که آب‌وهوای یک ماه دیگر را روی همین زمین بدانیم؟

پاسخ در نوع نیروهای عمل‌کننده بین مولفه‌های سیستم نهفته است: زمانی که سیستمی شامل اجسامی است که به طور غیر خطی برهم‌کنش می‌کنند، در اینصورت رفتار این سیستم ممکن است غیر قابل پیشگویی باشد. مطالعات چند سال اخیر در دینامیک‌های غیرخطی، قطعیت را از پیش‌بینی‌پذیری، جدا کرده است.