و صلى الله على سيدنا محمد و آله الطاهرين

بسمه تعالی

دانشکده علوم پایه

تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان‌نامه کارشناسی‌ارشد

اعضای هیئت داوران نسخهٔ نهایی پایان‌نامه خانم فرشته عابدین‌درکوش رشته **فیزیک (اتمی)** تحت عنوان: «**بررسی هدایت گرمایی در نانوتیوپ کربن تک جداره با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی**»**از نظر فرم و محتوا بررسی نموده و آنرا برای اخذ درجهٔ کارشناسی‌ارشد مورد تائید قرار دادند.**

اعضای هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنما	دکتر محمدرضا ابوالحسنی	استادیار	
۲- استاد ناظر داخلی	دکتر احمد مشاعی	استادیار	
۳- استاد ناظرداخلی	دکتر اسماعیل ساعی‌ور	دانشیار	
۴- استاد ناظر خارجی	دکتر امیرعباس صبوری	استادیار	
۵- نماینده شورای تحصیلات تکمیلی	دکتر احمد مشاعی	استادیار	

بسمه تعالی

آیین‌نامهٔ چاپ پایان‌نامه (رساله)های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرّس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان‌نامه (رساله)های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرّس، مبیّن بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه، دانش‌آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می‌شوند:

مادّهٔ ۱ در صورت اقدام به چاپ پایان‌نامه (رساله)ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اطلاع دهد.

مادّهٔ ۲ در صفحهٔ سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه)، عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان‌نامهٔ کارشناسی ارشد/رسالهٔ دکتری نگارنده در رشتهٔ فیزیک *است که در سال* ۱۳۸۹ *در دانشکدهٔ* علوم پایه *دانشگاه تربیت مدرّس به راهنمایی سرکار خانم/جناب آقای دکتر* ابوالحسنی *، مشاورهٔ سرکار خانم/جناب آقای دکتر* ——— *و مشاورهٔ سرکار خانم/جناب آقای دکتر* ——— *از آن دفاع شده است.»*

مادّهٔ ۳ به منظور جبران بخشی از هزینه‌های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت چاپ) را به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می‌تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر در معرض فروش قرار دهد.

مادّهٔ ۴ در صورت عدم رعایت مادّهٔ ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ‌شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت مدرّس، تأدیه کند.

مادّهٔ ۵ دانشجو تعهد و قبول می‌کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می‌تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می‌دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در مادّهٔ ۴ را از محلّ توقیف کتابهای عرضه‌شدهٔ نگارنده برای فروش، تأمین نماید.

مادّهٔ ۶ اینجانب فرشته عابدین دردلیس دانشجوی رشته فیزیک مقطع کارشناسی ارشد تعهد فوق و ضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می‌شوم.

نام و نام‌خانوادگی: فرشته عابدین دردلیس

تاریخ و امضا: ۱۳۹۱/۲/۲۰

بسمه تعالی
جمهوری اسلامی ایران

شماره .....
تاریخ ۸۹/۷/۲۴
پیوست .....

دانشگاه تربیت مدرس
معاونت پژوهشی

آیین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهشهای علمی دانشگاه تربیت مدرس

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی و فناوری دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسانها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیأت علمی، دانشجویان، دانش‌آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهشهای علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرحهای تحقیقاتی با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد زیر را رعایت نمایند:

ماده ۱- حق نشر و تکثیر پایان نامه/ رساله و درآمدهای حاصل از آنها متعلق به دانشگاه می باشد ولی حقوق معنوی پدید آورندگان محفوظ خواهد بود.

ماده ۲- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان‌نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجامع علمی باید به نام دانشگاه بوده و با تایید استاد راهنمای اصلی، یکی از اساتید راهنما، مشاور و یا دانشجو مسئول مکاتبات مقاله باشد. ولی مسئولیت علمی مقاله مستخرج از پایان نامه و رساله به عهده اساتید راهنما و دانشجو می باشد.

تبصره: در مقالاتی که پس از دانش‌آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه/ رساله نیز منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

ماده ۳- انتشار کتاب، نرم افزار و یا آثار ویژه (اثری هنری مانند فیلم، عکس، نقاشی و نمایشنامه) حاصل از نتایج پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی کلیه واحدهای دانشگاه اعم از دانشکده ها، مراکز تحقیقاتی، پژوهشکده ها، پارک علم و فناوری و دیگر واحدها باید با مجوز کتبی صادره از معاونت پژوهشی دانشگاه و براساس آئین نامه های مصوب انجام شود.

ماده ٤- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه یافته ها در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق معاونت پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده ٥- این آیین‌نامه در ٥ ماده و یک تبصره در تاریخ ۸۷/٤/۱ در شورای پژوهشی و در تاریخ ۸۷/٤/۲۳ در هیأت رئیسه دانشگاه به تایید رسید و در جلسه مورخ ۸۷/۷/۱۵ شورای دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب در شورای دانشگاه لازم‌الاجرا است.

«اینجانب ..... دانشجوی رشته ..... ورودی سال تحصیلی ..... مقطع ..... دانشکده ..... متعهد می شوم کلیه نکات مندرج در آئین نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش های علمی دانشگاه تربیت مدرس را در انتشار یافته های علمی مستخرج از پایان نامه / رساله تحصیلی خود رعایت نمایم. در صورت تخلف از مفاد آئین نامه فوق الاشعار به دانشگاه وکالت و نمایندگی می دهم که از طرف اینجانب نسبت به لغو امتیاز اختراع بنام بنده و یا هر گونه امتیاز دیگر و تغییر آن به نام دانشگاه اقدام نماید. ضمناً نسبت به جبران فوری ضرر و زیان حاصله بر اساس برآورد دانشگاه اقدام خواهم نمود و بدینوسیله حق هر گونه اعتراض را از خود سلب نمودم»

امضا: .....
تاریخ: ۸۹/۷/۲۴

تهران، بلوار آل احمد، پل نصر
صندوق پستی: ۱۴۱۱۵-۲۱۸
تلفن: ۸۸۰۱۱۰۰۱
نمابر: ۸۸۰۰۵۰۳۵
res @modares.ac.ir

دانشکده علوم پایه

پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

فیزیک(اتمی- ملکولی)

عنوان:

بررسی هدایت گرمایی در نانوتیوپ کربن تک جداره با استفاده از شبیه سازی دینامیک ملکولی

نام دانشجو:

فرشته عابدین درکوش

استاد راهنما:

دکتر محمدرضا ابوالحسنی

شهریور 1387

تقدیم به

صاحب لوای علم

هو الشکور

برخود لازم میدانم تا پس از شکر به درگاه خدای مهربان از پدر و مادر عزیزم که در تمامی لحظات عمرم گرمای وجودشان راهگشایم بوده است تقدیر و تشکر نمایم. همچنین از زحمات و راهنمای های خردمندانه استادار جمند دکتر ابوالحسنی قدردانی نمایم.

و

از همسر مهربانم که پیمودن این راه را برایم زیبا نمود و از محمد و مهدی که با تحمل مشکلات همراهم بودند متشکرم.

چکیده:

هدف از انجام این رساله ، بررسی رسانندگی حرارتی نانوتیوپ کربن از دیدگاه نظری و تجربی و شبیه سازیهای دینامیک ملکولی تعادلی و غیر تعادلی و عوامل مؤثر بر مقدار آن می باشد .همچنین محاسبه ی ضریب رسانندگی حرارتی بلور نانومتری آرگون جامد خالص با ساختار مکعبی مرکز پر (FCC) و همراه با نقص و ناخالصی کریپتون با استفاده از دینامیک مولکولی تعادلی و روش گرین- کابو انجام شده است .چگونگی تغییرات ضریب رسانندگی حرارتی بلور آرگون خالص با بلوری که در آن حفره و یا ناخالصی وجود دارد بررسی شده است. شبیه سازیها در هنگرد بندادی (NVT)و هنگرد همدما- همفشار (NPT) با استفاده از روش نوزه- هور برای ثابت نگهداشتن دما و روش برندسن برای ثابت ماندن فشار انجام گردیده است .پتانسیل بین ذرات ،پتانسیل دو ذره ای لنارد-جونز است . برای کاهش خطا در هر گام از الگوریتم ورلت استفاده شده است . مقدار ضریب رسانندگی حرارتی برای بلور آرگون خالص در هنگرد بندادی و دمای 70 کلوین برابر با 0.48544 (W/MK) بدست آمده است .

وابستگی ضریب رسانندگی حرارتی به تعداد ذرات و دما در محدوده دمایی 70-10 درجه کلوین بررسی شده و نتیجه ی حاصل با نتایج تئوری و شبیه سازیهای انجام شده توسط دیگران مقایسه شده است که نشاندهنده توافق بسیار خوب با نتایج آزمایشگاهی است.

کلمات کلیدی:

ضریب رسانندگی حرارتی، دینامیک ملکولی تعادلی، روش گرین -کابو، بلور آرگون جامد، روش نوزه – هور، روش برندسن ، هنگرد همدما- همفشار، هنگرد بندادی ، الگوریتم ورلت

فهرست

عنوان صفحه

چکیده

مقدمه..... ۱

فصل اول-شبیه سازی دینامیک ملکولی

۱-۱تاریخچه..... ۳

۱-۲ انواع شبیه سازی های رایانه ای.....۶

۱-۲-۱روش‌دینامیک‌ملکولی کلاسیک..... ۷

۱-۳ حالت ترمودینامیکی.....۱۰

۱-۴شرایط مرزی دوره ای.....۱۱

۱-۵ الگوریتم دینامیک ملکولی

۱-۵-۱آغازسازی..... ۱۳

۱-۵-۲ تعادل.....۱۷

۱-۵-۲-۱-پارامترنظم..... ۱۸

۱-۵-۲-۲تابع‌توزیع‌سرعت..... ۱۹

۱-۵-۳-تولید.....۲۵

۱-۶ محاسبه نیرو و پتانسیل.....۲۶

۱-۶-۱پتانسیل ۲۶

۱-۷ تقریب قطع کروی..... ۳۵

۱-۸ لیست همسایه ورلت..... ۳۶

۱-۹ تنظیم حجم ، دما و فشار..... ۳۷

۱-۹-۱- مقیاس سرعت ۳۸

۱-۹-۲- الگوریتم نوزه- هور..... ۳۸

۱-۱۰ خطاهای موجود در شبیه سازی..... ۴۱

فصل دوم- استخراج کمیات استاتیک و دینامیک با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک ملکولی

۲-۱ استخراج کمیات با استفاده از توابع همبستگی زمانی..... ۴۳

۲-۱-۱- توابع همبسته ی زمانی..... ۴۴

۲-۳ کمیات ترمودینامیک..... ۴۷

۲-۳-۱ انرژی..... ۴۸

۲-۳-۲ دما..... ۴۸

۲-۳-۳ فشار..... ۴۹

۲-۴ برآورد خطاهای کمیات محاسبه شده در شبیه‌سازی

۲-۴-۱ خطاهای سیستماتیک..... ۵۰

۲-۴-۲ خطاهای آماری..... ۵۱

فصل سوم- رسانندگی حرارتی و مروری بر تحقیقات انجام شده

۳-۱روشهای انتقال حرارت.....۵۴

۳-۱-۱ ەدایت..... ۵۵

۳-۲ روشهای تئوری اندازه‌گیری رسانندگی حرارتی

۳-۲-۱قانون‌هدایت‌حرارتی فوریه..... ۵۷

۳-۲-۲- نظریه جنبشی.....۶۱

۳-۲-۳-معادله‌انتقال‌بولتزمان..... ۶۲

۳-۲-۴-روش تعادلی گرین – کابو.....۶۴

۳-۲-۵-روش تقریب هماهنگ و شبه هماهنگ.....۶۴

۳-۲-۶- با استفاده از تبدیل فوریه و روش طیفی..... ۶۵

۳-۳مقایسه‌ضرایب‌رسانندگی‌درمواد مختلف..... ۶۵

۳-۴هدایت‌حرارتی‌دروسایل‌نانومتری.....۶۹

۳-۵ مروری بر نتایج شبیه‌سازی‌های انجام شده درنانولوله کربن.....۷۴

۳-۵-۱ اثرشرایط‌مرزی‌دوره‌ای‌بررسانندگی حرارتی..... ۷۵

۳-۵-۲اثر شرایط مرزی باز بر رسانندگی حرارتی.....۷۶

۳-۵-۳اثر ایزوتوپ ،تهی جای و نقص بر رسانندگی حرارتی

۳-۵-۳-۱بررسی اثروجود تهی جای.....۷۷

۳-۵-۳-۲بررسی‌اثر وجود ایزوتوپ..... ۷۷

۳-۵-۳-۳اثروجودنقص..... ۷۸

۳-۵-۴اثرافزایش دما بر رسانندگی حرارتی.....۷۹

۳-۵-۵اثرتکدستی بر رسانندگی حرارتی.....۸۱

۳-۵-۶ رسانندگی حرارتی نانولوله داخلی در یک دسته..... ۸۳

۳-۵-۷ اثر طول بر رسانندگی حرارتی.....۸۴

۳-۶ اندازه‌گیری تجربی رسانندگی حرارتی نانولوله کربن تک جداره.....۸۵

۳-۷ اندازه‌گیری تجربی رسانندگی حرارتی نانولوله چند جداره.....۸۷

فصل چهارم-نتایج شبیه سازی بلور آرگون در هنگرد بنادی و هنگرد همدما-همفشار

۴-۱ برنامه شبیه سازی..... ۹۰

۴-۲ بررسی اثر ناخالصی.....۹۴

۴-۳ انجام محاسبات در هنگرد همدما-همفشار..... ۹۵

۴-۴ نمودارهای بدست آمده از شبیه سازی..... ۹۷

۴-۵ اندازه‌گیری تجربی رسانندگی حرارتی آرگون جامد..... ۱۰۱

۴-۶ محاسبه‌رسانندگی‌حرارتی‌آرگون‌جامد بادینامیک‌شبکه‌ناهماهنگ.....۱۰۴

۴-۷ نتایج و پیشنهادات.....۱۰۵

منابع.....۱۰۷

پیوست الف.....۱۰۹

مقدمه

مکانیک آماری یک ابزار اساسی برای مطالعه و درک خواص مواد در سطح میکروسکوپی است . براساس این تئوری، اگر بر همکنش های درون ملکولی و بین ملکولی در دسترس باشد، خواص فیزیکی (ماکروسکوپی) مواد بدست می آید . بنابراین شبیه سازی ملکولی نقش ارزشمندی در ارائه جواب دقیق به مسائل مکانیک آماری دارد . همچنین می توان نتایج یک شبیه سازی ملکولی را با نتایج تجربی مقایسه کرد تا کیفیت یک مدل پتانسیل بین ملکولی را بررسی نمود. اگر مدل مورد نظر مناسب باشد، شبیه سازی دینامیک ملکولی می تواند اطلاعات مفیدی را در اختیار نظریه پردازان و محققین تجربی بگذارد. چرا که اجرا و تجربه کردن نظریات در آزمایشگاه همیشه امکان پذیر نیست و یا ممکن است دقت مورد نظر بخاطر شرایط آزمایشگاهی بسیار پایین تر از آن باشد که نتایج صحیحی برآورده شود . در ضمن در شبیه سازی امکان ایجاد هر نوع تغییر دلخواهی وجود دا رد. بنابراین باداشتن جزئیات میکروسکوپی یک سیستم می توان خواص ماکروسکپی آن را بدست آورد.

اما محدودیتهایی نیز در این روش وجود د ارد مثل محدودیت در زمان شبیه سازی که نهایتا در حدود چند نانو ثانیه است و همچنین محدودیت در تعداد ذره های درون جعبه شبیه سازی ، بطور مثال در شبیه سازیها، ما نهایتا در حدود چند هزار اتم را می توانیم در نظر بگیریم همچنین اندازه سیستم کوچک در نظر گرفته می شود که از محدودیتهای این روش می باشد . اما با این همه نتایج کاملا قابل مقایسه ای با نتایج آزمایشگاهی با کمک دینامیک ملکولی بدست آمده است.

با پیشرفت تکنولوژی و کاهش سایز وسایل الکترونیکی اهمیت توجه به مسائل مربوط به انتقال حرارت آشکار می گردد، زیرا که طول عمر و عملکرد ابزار بشدت به این کمیات وابسته است.

موادی که رسانندگی حرارتی بالایی دارند و در نتیجه می توانند انتقال دهنده ی خوب حرارت باشند، بسیار مورد توجه هستند. از آن جمله می توانیم از نانولوله های کربنی که رسانندگی حرارتی بسیار بالایی دارند را نام برد .بیشتر اندازه گیریها روی این مواد نشان می دهد که با افزایش دما ، تا

دمای اتاق رسانندگی حرارتی این مواد افزایش می یابد . از نظر تجربی برای نانولوله چند جداره ای با قطر ۱۴ نانومتر در دمای اتاق این مقدار برابر با ۳۰۰۰W/mk اندازه گیری شده است. با استفاده از شبیه سازیهای دینامیک ملکولی انجام شده ، این مقدار برای نانو لوله ی تک جداره تا حدود ۵۸۰۰W/mk نیز برآورد شده است. با این ملاحظات به تحقیق روی کمیت فیزیکی مهم رسانندگی حرارتی با استفاده از روش دینامیک ملکولی تعادلی پرداخته ایم

فصل اول

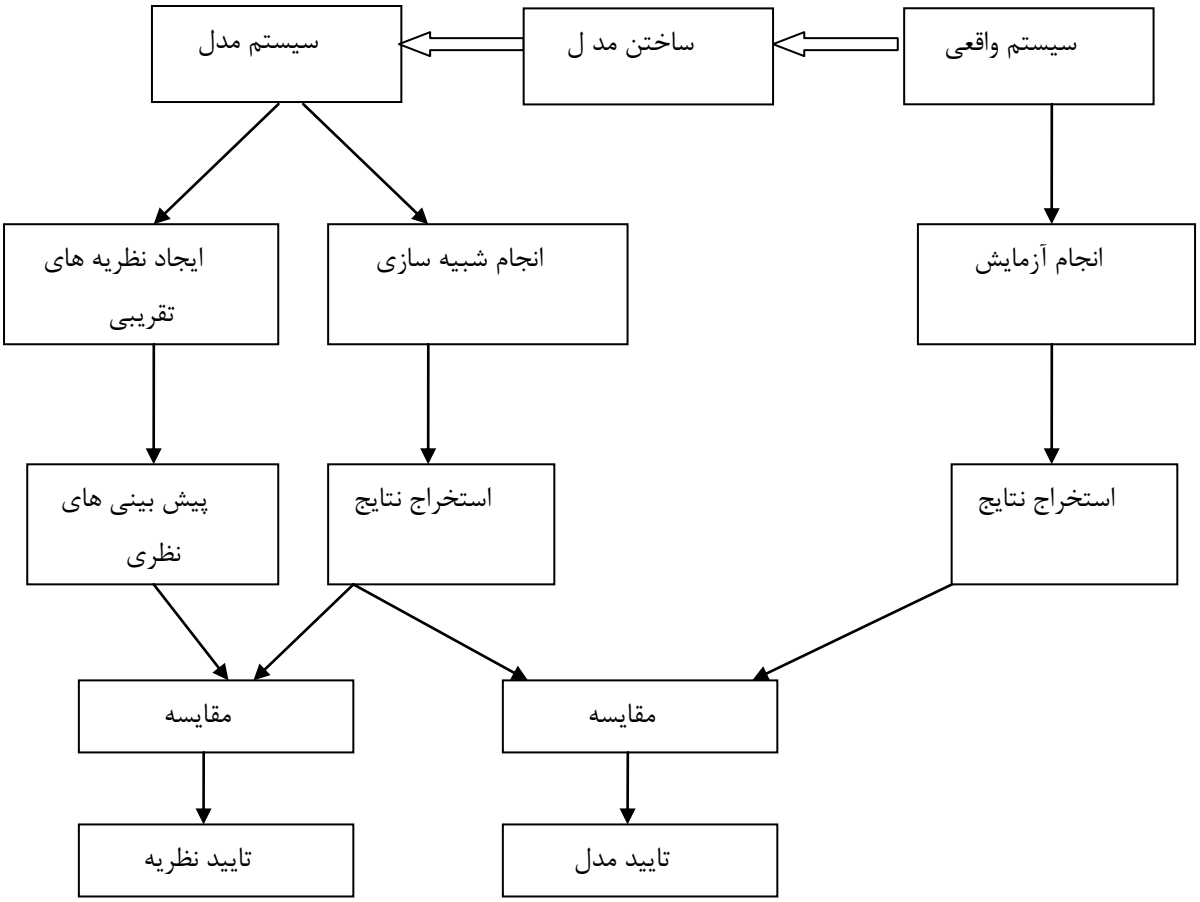
شبیه سازی دینامیک مولکولی

۱-۱ تاریخچه

مکانیک آماری یک ابزار لازم الاجرا برای مطالعه خواص مواد در سطح میکروسکوپی است. براساس این تئوری، اگر بر همکنش ها ی درون ملکولی و بین ملکولی در دسترس باشد، خواص فیزیکی (ماکروسکوپی) مواد بدست می آید. بجز در بعضی موارد ساده و ایده آل، مسایل تحلیلی در مکانیک آماری یا از طریق تقریبها حل می شوند و یا حل نشده باقی می مانند . در چنین مسائلی از شبیه سازی ملکولی استفاده می شود که جوابهای دقیقی را نیز می توان از آن استخراج کرد. بنابراین شبیه سازی ملکولی نقش ارزشمندی در ارائه جواب دقیق به مسائل مکانیک آماری دارد. همچنین می توان نتایج یک شبیه سازی ملکولی را با نتایج تجربی مقایسه کرد تا کیفیت یک مدل پتانسیل بین ملکولی را بررسی نمود. اگر مدل مورد نظر مناسب باشد، شبیه سازی ملکولی می تواند اطلاعات مفیدی را در اختیار نظریه پردازان و محققین تجربی بگذارد. چراکه اجرا و تجربه کردن نظریات و آزمایشات تجربی همیشه امکان پذیر نیست و یا ممکن است دقت مورد نظر بخاطر شرایط آزمایشگاهی بسیار پایین تر از آن باشد که نتایج صحیحی برآورده شود . در ضمن در شبیه سازی امکان ایجاد هر نوع تغییر دلخواهی وجود دارد . بنابراین باداشتن جزئیات میکروسکوپی یک سیستم را بدست آورد . اما محدودیتهایی نیز در این روش وجود د ارد مثل محدودیت در زمان شبیه سازی که نهایتا در حدود چند نانو ثانیه است. و همچنین محدودیت در تعداد ذره های درون جعبه شبیه سازی بطور مثال در شبیه سازیها، ما نهایتا در حدود چند هزار اتم را می توانیم در نظر بگیریم همچنین اندازه سیستم

اشیاء کوچک در نظر گرفته می شود که از محدودیتهای این روش می باشد اما با این همه نتایج کاملا قابل قیاسی با نتایج آزمایشگاهی با کمک دینامیک ملکولی بدست آمده است . ایده شبیه سازی رفتار میکروسکوپی مجموعه ای از اتم ها با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک ملکولی در رایانه، نخستین بار در دهه ۱۹۴۰ توسط فرمی[۱] مطرح شد، ولی نخستین شبیه سازی عملی در سال ۱۹۵۷ توسط الدر[۲] و ویزایت[۳] انجام گرفت که این شبیه سازی رفتاری یک سیستم شامل تنها چند درصد کره سخت را مدل می کرد. رحمان[۴] در سال ۱۹۶۴ اولین کسی بود که با استفاده از پتانسیل لنارد- جونز در شبیه سازی دینامیک ملکولی کمیاتی را برای آرگون مایع استخراج کرد و نشان داد که این نتایج با اطلاعات آزمایشگاهی در توافق خوبی هستند. با پیشرفت تکنولوژی و بالا رفتن توان کامپیوترها و قدرت محاسبات مسائل پیچیده تری را می توانیم با روش دینامیک ملکولی حل و کمیا ت مفیدی را استخراج کنیم. تعدادبسیار زیادی از پدیده های فیزیکی و شیمیایی،از م قیاس ملکولی تا کهکشانی را می توان با استفاده از شبیه سازی های رایانه ای مطالعه کرد.

1 .fermi
2 .Alder
3 .wainwright
4 .Rahman



شکل(۱-۱)- رابطه آزمایش،شبیه سازی و تئوری

۱-۲ انواع شبیه سازی های رایانه ای

چند روش کلی برای شبیه سازی سیستم ها مورد استفاده قرار می گیرد:

۱- روش دینامیک مولکولی:

الف- دینامیک ملکولی کلاسیک[۱]

ب- دینامیک ملکولی آغازین[۲]

۲- روش مونت- کارلو

الف- مونت کارلو متروپولیس[۱]

---

1 .Classsical Molecular Dynamics

2 .Ab initio Molecular Dynamics

3.Metropolis Mont Carlo

4.Path integral,Variational,Diffusion Quantom Monte Carlo

ب- مونت کارلو کوانتومی: انتگرال مسیر، وردشی و پخشی[۲]

در هر دو این روشها (۱و۲) سیستمی شامل چندین ملکول در نظر گرفته می شود و سپس با استفاده از موقعیتهای ملکولی، کمیات ماکروسکوپی سیستم استخراج می شود.

این تقسیم بندی براساس شیوه محاسبه موقعیتهای مولکولی r انجام می گیرد.

در روش دینامیک ملکولی، پیکربندیهای جدید از طریق حل عددی معادلات حرکت ملکولها بدست می آید، سیستم به طور دینامیکی در زمان پیش می رود و متوسط زمانی متغیرها را می توان از آن استخراج کرد.

اما در روش مونت کارلو، تعیین پیکربندی سیستم با استفاده از احتمالات است .در شبیه سازی های مونت کارلو هیچ زمان واقعی در کار نیست و سهم تکانه هم وجود ندارد . بحث بیشتر را در می توانید در [2,7,8] ببینید . برای تعیین خواص سا ده ی متعادلی مثل فشار در شاره های اتمی ، دینامیک ملکولی و مونت کارلو هر دو نیاز به یک مقدار زمان کامپیوتری دارند و منجر به مقادیری با دقت یکسان می شوند اما در مواردی مثل محاسبه ی ظرفیت گرمایی، تراکم پذیری و خواص Interfacial و خواص دینامیکی انتقالی سیستم و توابع همبستگی زمانی، روش دینامیک ملکولی موثرتر خواهد بود.

۱-۲-۱ روش دینامیک ملکولی کلاسیک

شبیه سازی دینامیک ملکولی کلاسیک دارای دو شکل کلی است .یک روش برای سیستمهای درحال تعادل و دیگری برای سیستمهای غیر تعادلی.

الف- دینامیک ملکولی تعادلی[۱]

دینامیک ملکولی تعادلی برای سیستمهای در حال تعادل به کار می رود و آنگونه که آلدر[۲] و وینرایت[۳] (۱۹۵۷) بیان کردند، برای سیستم ایزوله ای که شامل تعداد ثابتی ملکول (N) در حجم ثابت (V) است. در نظر گرفته می شود و از آن جا که درسیستم ایزوله انرژی پتانسیل کل (E) نیز ثابت است -که منظور از E مجموع انرژی یتانسیل و جنبشی ذرات است - بنابراین مقادیر (N,V,E)حالت ترمودینامیکی را مشخص می کنند. در این حالت خواص سیستم در تعادل نسبی هستند. به این معنی که حول مقدار تعادلی خود دارای افت وخیز هستند.از همین افت وخیزهای موجود با به کارگیری توابع همبستگی زمانی مناسب، ضرایب انتقالی را می توان محاسبه نمود. موضوع بحث ما در این تحقیق نیز با استفاده از دینامیک مولکولی تعادلی و روشی موسوم به گرین- کابو است. برای

(۱-۱) ر دینامیک ملکولی نیاز به تعیین موقعیتها و سرعتهای ذرات داریم، که این دمیات بحل معادله ی حرکت نیوتن بدست می آیند:

$$F_i(t) = m\ddot{r}_i(t)$$
$$F_i(t) = -\frac{\partial u(r)}{\partial r_i} \qquad (۲-۱)$$

که در این رابطه F_i نیروی وارد بر i از طرف (N-1) ذره دیگر است. با چندین هزار بار انتگرال گیری از رابطه (۱-۱) مسیرهای اتمی ایجاد می شود و پس از آن با استفاده از میانگین گیری زمانی، خواص ماکروسکوپیک، $A(t)$ ، به شکل زیر قابل محاسبه می شوند:

$$\langle A \rangle = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \int_{t_0}^{\infty} A(t)dt \qquad (۳-۱)$$

در حالت تعادل، این میانگین گیری نمی تواند به زمان اولیه ی t بستگی داشته باشد.نمونه برداریها در دینامیک مولکولی نیز پس از رسیدن به حالت تعادل ا نجام می گیرد. با داشتن مکانها و اندازه

1.Classical Molecular Dynamics
2. Alder
3. Wainwright