بسم الله الرحمن الرحيم

**دانشگاه آزاد اسلامی**

**واحد مرودشت**

**گروه شیمی**

**پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد.*M.Sc***

**گرایش :شیمی فیزیک**

عنوان:

# بررسی انتقالات فازی ترکیب دارویی ضدسرطان کلرید سزیم و اثرات نانولوله‌های کربنی بر این انتقالات فازی توسط روشهای دینامیک مولکولی

**استاد راهنما:**

**دکتر مریم بهادری**

**استاد مشاور:**

**دکتر امین رضا ذوالقدر**

**نگارش:**

**شهلا کشاورزی**

**تابستان ۱۳۹۰**

**تقدیم به:**

روح پاک پدر عزیزم

به او که سراسر زندگیش پاکی و صداقت بود.

به او که شکوه لحظه های بودنش

هنوز

نبودنش را برایم غیر قابل باور ساخته است.

و به مادر عزیزم

استوره بزرگواری مهربانی صبر و امید

که اگر دستان پر مهرش نواز شگر رویاهایم نبود

در اولین قدمهایم باز می ماندم.

سر بر آستان جلال پروردگاربی همتا می سایم که دگربار توفیق اندوختن دانشی هر چند اندک را روزیم فرمود.
اینک که توفیق جمع آوری وتهیه این مجموعه را یافته ام، بر خود واجب می دانم از تمامی عزیزان وسرورانی که در طی انجام این پژوهش به بنده لطف داشته اند تشکر وقدردانی نمایم.
بی گمان تشکراز تمام افرادی که بنده را در این پروژه یاری کرده اند غیرممکن است اما لازم است که برخی افراد یاد شود.
شایسته است از از راهنمایی ها وشفقتهای استادانه ای استاد راهنمای بزرگوارم **سرکار خانم دکتر بهادری** که هم راهنمای من در مراحل مختلف تحقیق وهم راهنمای من در مراحل مختلف زندگی بودند ودر کمال اخلاص یاریم کردند نهایت سپاسگزاری خود را اعلام دارم.
همچنین برخود واجب می دانم که به رسم ادب وحق شناسی کمال امتنان، تشکر وقدردانی نسبت به استاد بزرگوار وارجمندم **جناب آقای دکتر ذوالقدر** که رهنمود های ارزنده وحکیمانه ی ایشان همواره رهگشا ونقطه امیدی بود درلحظات دشوار تلاشم ودر تمام مراحل از ابتدا تا انتها مرا یاری نمودند واز بذل هر گونه مساعدت وراهنمایی در پایان رسانیدن این امر دریغ ننمودند را ابراز نمایم.
جا دارد تا مراتب قدردانی وامتنان خود را از **سرکار خانم دکتر شرفی** و **سرکار خانم دکتر باقری** که داوری این رساله را به عهده داشتند ابراز نمایم.
همچنین از کلیه سرورانی که بنده را در انجام این پایان نامه مورد لطف وعنایت خاص خود قرار داده اند به خصوص دوست عزیزم سر کار خانم ابراهیمی فرد سپاسگزاری وقدردانی می نمایم واز درگاه خداوند بزرگ آرزوی سعادت وسربلندی روز افزون برای همه آنها دارم.

# چکیده


## بررسی انتقالات فازی ترکیب دارویی ضدسرطان کلرید سزیم و اثرات نانولوله‌های کربنی بر این انتقالات فازی توسط روشهای دینامیک مولکولی

مطالعات تجربی نشان می دهند کلرید سزیم دارای یک انتقال فاز BCC به FCC در دمای ۴۷۲ کلوین است. از آنجا که مبحث انتقالات فازی کاربرد گسترده ای در تعیین خواص ترکیبات دارد، در این پایان نامه انتقالات فازی این ترکیب در بازه ی دمایی گسترده ای توسط روش‌های شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین با توجه به اهمیت به دست آوردن نقطه ذوب از روشهای دینامیک مولکولی، ارائه بهبود روش‌های موجود وبررسی تاثیر حضور نانو لوله‌های کربنی بر نقطه ذوب در کاربرد بهینه نمک‌های‌هالیدی موثر بوده است.

بدین منظور از روش‌های شبیه سازی دینامیک مولکولی با استفاده از میدان نیروهای دقیق حاصل از محاسبات کوانتوم مکانیکی برای بررسی ماهیت برهم کنش‌های درون مولکولی و بین مولکولی استفاده شده است.

در روش‌های دینامیک مولکولی با توجه به تغییرات توابع ترمودینامیکی همچون انرژی و توابع ساختاری مثل متوسط مربعات جابجایی، می توان اطلاعاتی در مورد تغییرات فازی سیستم به دست آورد. تغییرات انرژی برای ترکیب دارویی $CsCl$ داخل نانولوله کربنی انتقالات فازی این ترکیب را نشان می دهد.

با این روش انتقالات فازی کلرید سزیم به عنوان یک داروی ضد سرطان توسط روش‌های دینامیک مولکولی و درحضور نانو لوله‌های کربنی که تاثیر به سزایی بر خواص دارویی این ترکیب دارد مقایسه گردیده است.

# فهرست مطالب

**عنوان** صفحه


**فصل اول: شبیه سازی کامپیوتری ..... ۱**

۱-۱ مقدمه ..... ۲

۱-۲ روش مونت کارلو ..... ۴

۱-۳ شبیه سازی دینامیک مولکولی ..... ۴

۱-۴ مقایسه روش دینامیک مولکولی و مونت کارلو ..... ۵

۱-۵ اهمیت پژوهش در زمینه فناوری نانو ..... ۵

۱-۶ نانو لوله های کربنی ..... ۶

۱-۷ لزوم توجه به مقیاس نانو ساختار ..... ۸

۱-۸ مروری بر تحقیقات انجام شده ..... ۹

۱-۹ تاریخچه شبیه سازی دینامیک مولکولی ..... ۱۰

۱-۱۰مدلها در شبیه سازی دینامیک مولکولی ..... ۱۱

۱-۱۰-۱-مدل کره سخت ..... ۱۱

۱-۱۰-۲- مدل کره نرم ..... ۱۲

۱-۱۱- پتانسیل ترسف ..... ۱۴

۱-۱۲- مجموعه ها در شبیه سازی دینامیک مولکولی ..... ۱۴

۱-۱۳- روش اوالد ..... ۱۵

۱-۱۴-روش شبیه سازی دینامیک مولکولی ..... ۱۶

۱-۱۴-۱- مرحله آغازی ..... ۱۶

۱-۱۴-۱-۱-تعیین مکان اولیه ذرات (ایجاد پیکربندی اولیه ..... ۱۶

۱-۱۴-۱-۲- انتساب سرعتهای اولیه ی معین به ذرات ..... ۱۷

۱-۱۴-۱-۳-پتانسیل های برهم کنش ..... ۱۷

۱-۱۴-۱-۳-۱- برهم کنش های غیرپیوندی ..... ۱۸

۱-۱۴-۱-۳-۲- برهمکنش های پیوندی ..... ۲۰

۱-۱۴-۱-۴- شرایط مرزی تناوبی ..... ۲۱

۱-۱۴-۱-۵- شعاع قطع و فهرست همسایه ها ..... ۲۴

۱-۱۴-۲- مرحله تعادل ..... ۲۷

۱-۱۴-۳- مرحله پایانی ..... ۲۷

۱-۱۵- هدف از تحقیق ..... ۳۰

**فصل دوم:روش تحقیق شبیه سازی دینامیک مولکولی ..... ۳۰**

۲-۱- شبیه سازی با استفاده از نرم افزار DL-POLY2 ..... ۳۰
۲-۲- میدان نیرو یا FORCE FIELD ..... ۳۰
۲-۳- الگوریتم های دینامیک مولکولی ..... ۳۲
۲-۳-۱-Verlet Leapforg (LF) ..... ۳۲
۲-۳-۲Velocity Verlet (VV) ..... ۳۲
۲-۴-ترموستات ..... ۳۳
۲-۵-باروستات ..... ۳۳
۲-۶-حد واسط گرافیکی جاوا ..... ۳۴
۲-۷- فایل های ورودی ..... ۳۴
۲-۷-۱- فایل CONTROL ..... ۳۵
۲-۷-۲- فایل CONFIG ..... ۳۵
۲-۷-۳- فایل FIELD ..... ۳۵
۲-۷-۴-فایل REVOLD ..... ۳۶
۲-۸- فایل های خروجی ..... ۳۶
۲-۸-۱- فایل OUTPUT ..... ۳۶
۲-۸-۲- فایل REVIVE ..... ۳۶
۲-۸-۳- فایل STATIS ..... ۳۷
۲-۸-۴- فایل REVCON ..... ۳۷
۲-۸-۵- فایل HISTORY ..... ۳۹
**فصل سوم:روش کار ونتایج ..... ۳۹**
۳-۱-روش کار ..... ۳۹
۳-۲- نتیجه گیری ..... ۴۳

# فهرست جداول

**عنوان** صفحه

جدول ۳-۱ مختصه اتم های موجود در سلول واحد ..... ۶۱

جدول ۳-۲ پارامترهایی از پتانسیل ترسف برای اتم کربن وسیلیسیم ..... ۶۶

# فهرست نمودارها

**عنوان** صفحه

نمودار۳-۳ نمایش تغییرات چگالی با دما ..... ۴۵

نمودار۳-۴ نمایش تغییرات چگالی با دما در حضورکربن نانو لوله ..... ۴۶

نمودار۳-۵ نمایش تغییرات انرژی را با زمان ..... ۴۷

نمودار۳-۵ نمایش تغییرات زمان با متوسط مربعات جا به جایی ..... ۴۸

# فهرست شکل‌ها و تصاویر

**عنوان** صفحه


شکل۱-۱- ارتباط بین شبیه سازی کامپیوتری، تئوری و تجربی ..... ۳

شکل۱-۲- نمایش پتانسیل کره سخت ..... ۱۲

شکل۱-۳- پتانسیل لنارد-جونز برای متان ..... ۱۳

شکل۱-۴- مسیر کلی شبیه سازی دینامیک مولکولی در مجموعه یNPT ..... ۱۶

شکل۱ -۵- نمایش طول پیوند r، زاویه پیوندی θ، زاویه پیچشیφ در نرمال نونان ..... ۲۰

شکل۱-۶- نمایش سیستم تناوبی دوبعدی ..... ۲۳

شکل ۱-۷- آ- دوازده وجهی لوزی مانند، ب- اکتاهدرال قطع شده ..... ۲۴

شکل۱-۸- سیستم تناوبی دوبعدی ..... ۲۵

شکل ۲-۱- فایل های ورودی (چپ) و فایل های خروجی (راست) DL-POLY2 ..... ۳۴

شکل۳-۱نمایش یک سوپر سل با ابعاد۲۰/۵۵ ..... ۴۱

شکل ۳-۲ نمایش سل شبیه سازی شده در حال ذوب ..... ۴۲

# فصل ۱

## شبیه سازی کامپیوتری

# شبیه سازی کامپیوتری[1]

## ۱-۱- مقدمه

شبیه‌سازی کامپیوتری به علت دارا بودن امتیازهای خاص برای بررسی و مطالعه‌ی اغلب سیستم‌ها بکار می‌رود. در این روش معمولاً برای توصیف سیستم‌های فیزیکی از پارامترهای مدل شبیه سازی استفاده می‌شود. کامل‌ترین وجامع‌ترین تعریف را شانون[2] ارائه داده است."شبیه‌سازی عبارت است از طراحی مدلی از سیستم واقعی و انجام آزمایش‌هایی با این مدل به منظور پی بردن به رفتار سیستم، یا ارزیابی استراتژیهای گوناگون است ( این مدل سازی در محدوده‌ای که به وسیله معیار و یا مجموعه‌ای از معیارها اعمال شده است) برای عملیات سیستم صورت می‌گیرد". بنابراین در می یابیم که این فرایند، هم شامل ساخت مدل و هم شامل استفاده تحلیلی از آن برای مطالعه یک مسئله است. در تعریف فوق، سیستم واقعی به معنای سیستمی است که وجود دارد، یا قابلیت ایجاد شدن را دارد.

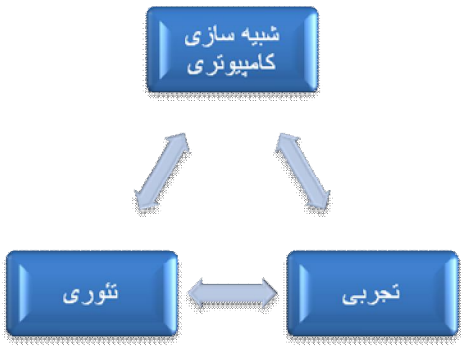
شاید تصور شود که آزمایش شبیه‌سازی تنها شامل شناخت سیستم و ساختن مدل کامپیوتری آن می‌باشد و به همین علت در بعضی دوره‌های آموزشی تنها به جنبه‌های نرم افزاری این روش توجه می‌شود. در صورتیکه ساختن مدل سیستم به وسیله یک زبان کامپیوتری تنها یکی از قدم‌های لازم است. اهمیت این مطلب وقتی زیادتر می‌گردد که آزمایش جنبه آموزشی نداشته و نتایج آن باید در مورد یک سیستم واقعی به کار گرفته شود. در آنجاست که باید تا حد ممکن مطمئن بود که مدل معتبر بوده و رفتار سیستم را به خوب

[1]-Computer Simulation
[2] -Shanone

شبیه‌سازی می‌کند. علاوه بر آن، نتایج خام به دست آمده از اجرای مدل، مورد تجزیه وتحلیل قرار گیرند تا باعث قضاوت‌های دقیق تری در مورد سیستم گردد. مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی با داده‌های تجربی به عنوان آزمایشی برای تعیین میزان صحت این مدل‌ها می‌باشد.

در واقع مدل سازی و شبیه‌سازی از روش‌هایی هستند که از یک سو میزان درک ما را از برهم کنش‌های بین قسمت‌های مختلف سیستم و از سوی دیگر کل سیستم را افزایش می‌دهد. مدل سازی سیستم‌ها توسط مدل‌های ریاضی انجام می‌شود، مدل‌هایی که هدف آنها یافتن راه حل تحلیلی برای مسائلی است که پیش گویی رفتار سیستم به کمک مجموعه‌ای از پارامترها و شرایط اولیه امکان پذیر نیست.

انگیزه اصلی شروع و گسترش شبیه‌سازی مولکولی دسترسی به نتایجی دقیق برای مسائل مکانیک آماری به جای استفاده از راه حلهای تقریبی بود. برخی مسائل در مکانیک آماری به طور دقیق قابل حل‌اند، یعنی با مشخص نمودن کامل خواص میکروسکوپی سیستم، به سادگی می‌توان خواص ماکروسکوپی را به دست آورد (مثلاً سیستم گاز ایده‌ال یا شبکه‌های بلورین). ولی برخی مسائل در مکانیک آماری به طور دقیق قابل حل نیستند (مثلاً بررسی خواص فیزیکی مایعات) و ممکن است براساس تجزیه و تحلیل، بر پایه تقریب‌هایی قابل حل باشند. در این موارد کامپیوترها نقش مهمی را در محاسبات دارند [۱].




**شکل۱-۱- ارتباط بین شبیه‌سازی کامپیوتری، تئوری و تجربی**

دو روش عمده در شبیه‌سازی کامپیوتری عبارتنداز: دینامیک مولکولی [1](MD)ومونت کارلو [2](MC).

## ۱-۲- روش مونت کارلو

در روش مونت کارلو که روش تصادفی هم نامیده می‌شود، شبیه‌سازی از یک حالت اولیه که در آن ذرات دارای سرعت اولیه مشخص بوده و انرژی پتانسیل بین آنها نیز معلوم است شروع و یک مکان تصادفی (نقطه جدید در جعبه)، برای حرکت ذرات در نظر گرفته می‌شود. اگر در نتیجه انتقال یک ذره از مکان قبلی به نقطه جدید، با کاهش انرژی پتانسیل مواجه شویم، این حرکت مورد قبول بوده و انجام می‌شود. به عبارتی ذره از مکان اولیه به مکان جدید منتقل می‌شود. حال آنکه اگر چنین حرکتی با افزایش پتانسیل مواجه باشد، این حرکت رد می‌شود. به عبارتی ذره در نقطه اولیه باقی مانده و به دنبال مکان دیگری برای انتقال ذره می‌گردیم. در این روش، تمایل داریم به مینیمم مقدار انرژی برسیم به همین دلیل حرکت‌هایی که منجر به پتانسیل کمتر است را قبول و حرکت‌هایی که با افزایش پتانسیل همراه باشد را نادیده می‌گیریم. با متوسط گیری از تعداد زیادی پیکربندی و محاسبه انرژی پتانسیل هر یک از این پیکربندی‌ها و استفاده از داده‌های آن، خواص سیستم محاسبه می‌شود [۱].

## ۱-۳- شبیه سازی دینامیک مولکولی

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی عبارت است از حل معادلات حرکت نیوتن، برای یک سیستم اتمی یا مولکولی. به عبارتی چنانچه مختصات و سرعت‌های اولیه ذرات تشکیل دهنده‌ی سیستم به علاوه نیروهای وارده بر هر ذره را بدانیم موقعیت‌ها و سرعت‌های بعدی (مسیرحرکت ذرات روی فضای فاز[3]) باحل معادلات نیوتن قابل محاسبه می‌باشد. هر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی شامل سه مرحله‌ی آغاز، تعادل و پایان است. درمرحله‌ی آغاز، مکانها و سرعت‌های اولیه، به طور دلخواه به ذرات نسبت داده می‌شوند. به علاوه فرم

[1]- Molecular Dynamic
[2]- Monte carlo
[3]- Trajectory

پتانسیل بین ذرات نیز مشخص می‌گردد. سپس شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با حل معادلات نیوتن شروع می‌شود و حالت اولیه سیستم تغیر یافته و شبیه‌سازی را تا آنجا ادامه می‌دهیم که به اصطلاح تعادل حاکم شود. درتعادل، سیستم گذشته خود را فراموش می‌کند و تمامی پارامترهای ترمودینامیکی حول مقدار متوسط نوسان می‌کند. پس از این مرحله، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی روی سیستم تعادلی برای ایجاد آرایش‌های ممکنه روی فضای فاز به منظور متوسط گیری پارامترهای ترمودینامیکی انجام می‌شود. در اینجا فضای فاز یک فضای $6N$ بعدی بوده که متشکل از یک فضای پیکربندی $3N$بعدی (که در آن محورهای مختصات، مولفه‌های بردارهای موقعیت $\vec{r_i}(t)$ هستند) و یک فضای اندازه حرکت خطی $3N$ بعدی (که در آن محورهای مختصات، مولفه‌های بردارهای اندازه حرکت خطی $\overrightarrow{p_i}(t)$ هستند) [۲].

## ۱-۴- مقایسه روش دینامیک مولکولی و مونت کارلو

در هر دو روش، سیستم اولیه غیر تعادلی می‌باشد و برای اینکه سیستم به تعادل برسد لازم است مولکولها با هم برخورد داشته باشند. با برخورد ذرات به هم، جهت حرکت آنها عوض می‌شود و تبادل اندازه حرکت خطی و انرژی صورت می‌گیرد. در این حالت سیستم از حالت اولیه فاصله گرفته و با گذشت زمان توزیع ماکسول- بولتزمن برقرار می‌شود.

برای به دست آوردن خواص دینامیکی وابسته به زمان (هدایت گرمایی، ضریب نفوذ، ویسکوزیته و. .. ) روش دینامیک مولکولی کارآمد است. در حالی که روش مونت کارلو در مواردی که سیستمها دارای دینامیک ذاتی نیستند (برای مطالعه خواص استاتیکی مانند چگالی، انرژی آزاد گیپس و.. . ) به کار می رود [۲].

## ۱-۵- اهمیت پژوهش در زمینه فناوری نانو

در دهه اخیر، پیشرفت‌های تحقیقاتی دانشمندان در مقیاس بسیار کوچک، که عموما تکنولوژی و علم نانو مقیاس نامیده می‌شود، پدیدار شده است. این رویدادهای جدید شامل توانایی ساختن و دستکاری ساختارهای مصنوعی است که خصوصیات آنها در سطح نانومتر قابل کنترل بوده و در زمینه‌های گوناگونی از

جمله گرایشهای مختلف مهندسی، فیزیک، شیمی، علم مواد و زیست مولکولی کاربرد دارد. علم نانو و تکنولوژی قطعا اثر مهمی‌در بهبود زندگی ما خواهد داشت، که به طور عمده می‌توان به گرایش تکنولوژی اطلاعات، صنعت ارتباطات راه دور، شاخه‌های مختلف مهندسی، علم مواد و پزشکی اشاره کرد. فناوری نانو واژه‌ای است کلی، که به کلیه فناوری‌های پیشرفته در عرصه کار با مقیاس نانو اطلاق می‌شود. در سال ۱۹۵۹ ریچارد فاینمن[۱] یکی از دانشمندان متفکر فیزیک، اولین جرقه فناوری نانو (البته در آن زمان هنوز به این نام شناخته نشده بود) طی این سخنرانی با عنوان " فضای زیادی در سطوح پایین وجود دارد" ایده فناوری نانو را مطرح ساخت. وی این نظریه را که در آینده‌ای نزدیک می‌توانیم مولکولها و اتمها را به صورت مستقیم دستکاری کنیم، ارائه داد [۳].

واژه فناوری نانو اولین بار توسط نوریوتانیگوچی[۲] استاد دانشگاه علوم توکیو در سال ۱۹۷۴ بر زبانها جاری شد. او این واژه را برای توصیف ساختار مواد (وسایل) دقیقی که تلورانس ابعادی آنها در حد نانومتر می‌باشد، به کار برد. در سال ۱۹۸۶ این واژه توسط کی اریک درکسلر[۳] در کتابی تحت عنوان "موتور آفرینش: آغاز دوران فناوری نانو" باز آفرینی و تعریف مجدد شد [۴]. فناوری نانو عبارت است از توسعه و استفاده از ادوات و قطعاتی که‌اندازه آنها تنها چند نانومتر است.

پس با رویکرد بسیار وسیع دانشمندان به پژوهش در این زمینه، باید گفت که فناوری نانو می‌تواند راه گشای جهان امروز در دستیابی به فناوری‌های پیشرفته شود و به همین دلیل، اکثر کشورهای جهان با سرمایه‌گذاری وسیع در زمینه فناوری نانو و حمایت از پژوهشگران در این زمینه، عرصه رقابت در ثبت اختراع و ارائه مقالات و استفاده از فناوری نانو در صنعت را، از هم اکنون آغاز کرده‌اند.

[1]-Fineman
[2] -Tanighochi
[3]- Dercksler

## ۱-۶- نانو لوله‌های کربنی

نانو لوله‌های کربنی در سال ۱۹۹۱ توسط ایجیما[1] در هنگام مطالعه سطوح الکترودهای کربن در هنگام تخلیه قوس الکتریکی کشف شد. از آن به بعد محققین بسیاری به رشد آنها پرداخته و مطالعات و بررسی‌هایی در زمینه تعیین مشخصات آنها انجام دادند. ابعاد کوچک این ساختارها، قدرت فوق العاده فیزیکی و منحصر به فردشان، امکان استفاده از آنها را در زمینه‌های زیادی فراهم می آورد. نانو لوله‌ها صفحاتی از اتمهای کربن هستند که درون قسمتی غلطک مانند حرکت می کنند و در ظاهر شبیه توریهای سیمی هستند که بر روی یک سمت آنها پوششی قرار گرفته باشد. این نانولوله‌ها فوق العاده محکم هستند.

کربن نانولوله‌ها[2] ورقه‌های گرافیتی هستند که به صورت استوانه در آمده‌اند. واحد ساختاری اصلی یک نانو لوله یک حلقه هگزا گونال است. حلقه‌ها شامل پیوندهای $\sigma$ و $\pi$ هستند و هر اتم کربن با هر اتم دیگر پیوند دارد و زاویه بین آنها ۱۲۰درجه است. هیبرید اتم‌های کربن در نانولوله $SP^2$ است. مهمترین ساختارهای نانولوله‌های تک دیواره [3] و نانو لوله‌های چند دیواره[4] هستند. نانولوله‌های تک دیواره شامل یک ورقه گرافیتی است که ساختار استوانه ای دارد. بیشتر نانولوله‌های تک دیواره‌ها قطری نزدیک به ۱نانومتر، با طولی هزاران بار بلند تردارند. این لوله‌ها با یکدیگر پیوند ندارند و با فاصله تقریبی $۳/۴A^o$ از هم جدا می‌شوند(همان فاصله بین ورقه‌های گرافیت) آنها تنها ازطریق برهمکنش‌های واندروالسی با هم ارتباط دارند. نانو لوله‌های چند دیواره شامل چندین نانولوله‌های تک دیواره متحدالمرکزاست. طول وقطراین ساختارها وهمچنین بسیاری از خواص آنها با نانولوله‌های تک دیواره‌ها متفاوت است.

کربن نانو لوله ها رساناهای الکتریکی و گرمایی بسیار عالی هستند خواص بی نظیر آنها باعث استفاده موثر آنها در نانو تکنولوژی شده است. مجموع ویژگیهای الکتریکی، گرمایی و الکتریکی نانو لوله‌های کربنی، آنها را به مواد خاصی تبدیل کرده است، به طوری که می‌توان از نانو لوله‌های کربنی، در زمینه‌های مختلف الکترونیک و الکتروشیمی، افزایش خلوص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های چند منظوره با کارایی بالا، تابشگرهای

[1]- Iijima
[2]-Carbon Nanotubes
[3] -Single Wall Nanotube
[4]- Multi Wall Nanotube

میدانی بر پایه نانو لوله‌های کربنی و استفاده از آنها در پروژهـایی بـا انـدازه نـانویی در انجـام عملیـاتی مثـل اندازه‌گیری، تحقیقات بیولوژیکی و شیمیایی اشاره کرد [۵]. ساختار تو خالی نانو لوله، سـبک بـودن آن را بـه دنبال دارد. چگالی نوع چند دیواره‌ای ۸/۱ و نوع تک دیواره‌ای ۸/۰ است. استحکام ویژه آنها حداقل ۱۰۰ برابر فولاد است. نانو لوله‌ها مقاومت خوبی در برابر مواد شیمیایی داشته و از پایـداری گرمـایی بـالای برخوردارنـد. اکسایش نانولوله از دو سر لوله آغاز می‌شود. این عمل باعث باز شدن لوله خواهد شد. انتقال الکتـرون در نـانو لوله‌ها منحصر به فرد است و در جهت محور شدیدا رسانا هستند. رسانایی گرمایی آنها در جهت محـوری نیـز بالا است.

نانو لوله‌ها از لحاظ کاتالیزوری فعال می‌باشند. آنها خاصیت موییـنگی بالایی دارند و می‌تواننـد گازهـا و مایعـات را در خـود جـای دهنـد. از نـانو لولـه‌هـای چنـد دیـواره ای بـه عنـوان الکتـرود در واکنـشهای بیوالکتروشیمیایی استفاده شده است. نانولوله‌ها می‌توانند واکنشهای احیای اکسیژن را کاتالیز کننـد. سـرعت انتقال الکترون در نانو لوله بیـشتر از الکترودهـای کربنـی اسـت. ذخیـره هیـدروژن در داخـل حفـره‌هـای نانولوله‌های تک دیواره ای امکان پذیر خواهد بود.

## ۱-۷- لزوم توجه به مقیاس نانو ساختار

خواص کوانتومی الکترون‌های داخل ماده و اثر متقابل اتم‌ها بایکدیگر، در مقیاس نانو اهمیت ویـژه‌ای دارد. با تولید ساختارهایی در مقیاس نانومتر، امکان کنترل خواص ذاتی مـواد از جملـه دمـای ذوب، خـواص مغناطیسی، ظرفیت بار و حتی رنگ مواد بدون تغییر در ترکیب شـیمیایی وجـود دارد. از ایـن رو در سـالهای اخیر توجه زیادی به بررسی نحوه تولید انبوه و خصوصیات نانوسیم‌ها[1] و نانو لوله‌ها[2] که از مهمترین مواد نـانو ساختار می‌باشند، صورت گرفته است که می‌توان گفـت توسـعه الکترونیـک و قـدرت یـافتن در ایـن زمینـه، بستگی به پیشرفت مداوم در تولید این نانو مواد دارد. نانو سیم‌ها، نانو ساختارهایی می‌باشند که عمـدتا بـرای ساختن مدارات الکتریکی در اندازه‌های کوچک، به کار می روند و با توجه به خواص ذاتی آنها، زمینه اسـتفاده

[1]- Nanowire
[2]- Nanotube

از آنها را، در مواردی نظیر آشکارسازهای نوری جدید، تصویر برداری، ذخیره داده‌ها و کاربردهای دیگر، فراهم کرده است. [۵و۶]. در مورد نانو ساختار دیگر یعنی نانو لوله‌های کربنی هم کنترل قطر و اندازه و نظم نانو لوله‌ها می‌تواند ما را به ساخت انواع حس گرهای گازی سوق دهد [۷]. پس می‌توان نتیجه گرفت که همواره باید در تولید نانو ساختارها، به قطر و طول آنها دقت کنیم [۸]. نانو لوله‌های کربنی به عنوان موادی که رساناتر از مس، مقاوم تر از فولاد و سبک تر از آلومینیوم است، همواره مورد نظر دانشمندان بوده است.

نانو لوله‌های کربنی یکی از مستحکم‌ترین مواد به شمار می روند. خواص مکانیکی نانو لوله‌های کربنی بستگی به قطر نانو لوله‌ها دارد، به طوری که با افزایش قطر نانو لوله‌ها خواص مکانیکی آنها به سمت خواص مکانیکی صفحات گرافیت میل می‌کند. خواص الکتریکی نانو لوله‌های کربنیتک دیواره نسبت به محیط شیمیایی اطراف بسیار حساس می‌باشد، به طوری که تماس با هوا یا اکسیژن به میزان زیادی بر روی مقاومت این نانو لوله‌ها و دیگر خواص الکتریکی آنها تاثیر می‌گذارد. هدایت حرارتی نانو لوله‌های کربنی در جهت محور طولی ممکن است بیشترین مقدار را بین مواد داشته باشد. به علت تشابه ساختار نانو لوله‌های کربنی با گرافیت، این ساختارها از لحاظ خواص حرارتی بسیار شبیه به هم می‌باشند به طوری که تفاوت آنها در این است که نانولوله‌ها فقط در امتداد محورشان رسانای گرما هستند و در جهت عمود بر محورشان هدایت ضعیف تری دارند و حتی در برخی موارد در جهت عمود بر محورشان عایق می‌باشند.

## ۱-۸- مروری بر تحقیقات انجام شده

لی[1]، ژی[2] و همکارانش [۱۰] ذوب و انجماد نانو ذرات طلا در نانو تیوپ‌های کربن تک دیواره را با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی کردند و نشان دادند که نانو ذرات طلا محدود شده در درون نانو لوله‌های‌های کربن تک دیواره به صورت ساختار چند لایه هستند که با مشاهدات پلی کاکوس[3] و همکارانش[۲۵] مطابقت داشت . همچنین دگرگونی اتم‌ها در هر لایه از ویژگی مهم انتقالات فازی نانو

[1]- Xiahua lu
[2]- Xiaolei zhu
[3]- Poulikakos

ذرات طلا محدود شده در نانو تیوپ‌های کربن تک دیواره است. قبل از نقطه ذوب گروه طلا ساختار چند لایه منظم دارد بعد از نقطه ذوب ساختار گروه طلا به صورت نامنظم است. ذوب، از لایه‌های داخلی نانو ذرات و انجماد از لایه‌های بیرونی شروع می‌شود. در طی تحقیق آنها پی بردند که حضور نانو تیوپ‌های تک دیواره باعث نظم گروه طلا و افزایش ثبات آنها می‌شود. آنها از روی نمودار انرژی کل، شاخص لیندمن[۱] و نمودار توزیع تراکم شعاعی انتقال فاز را تشخیص دادند و همچنین مشخص شد که با افزایش سایز نانو ذرات ، دمای ذوب نانو ذرات طلا افزایش می یابد و سرعت هسته کاهش می یابد.

چپلوت[۲] و همکارانش انتقال فاز وذوب $MgSiO$ را با روش شبیه سازی دینامیک مولکولی در فشار بالا بررسی کردند.این ترکیب در ساختار کریستالی قائم اللوزی[۳]تشکیل دهنده اصلی گوشته پایینی زمین است بنابراین ثبات ساختار و انتقال فاز این ترکیب مهم است. انتقال فاز از قائم اللوزی به مکعبی با افزایش تیزی منحنی با حرکت اتم‌های اکسیژن آشکار می‌شود. در فشار معین انتقال در گوشته پایینی زمین در دمایی بالاتراز دمای گوشته سطحی رخ می‌دهد. شبیه سازی تحت شرایط فشار و دمای محیط فاز قائم اللوزی را باز تولید می کند [۱۱].

اکسی[۴] وهمکارانش نانو تیوپ‌های کربن قطبی را با روش شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی کردند. هدف آنها توسعه میدان نیرو نانو تیوپ‌های کربن قطبی با روش شبیه سازی مولکولی بود [۱۲].

## ۱-۹- تاریخچه شبیه سازی دینامیک مولکولی

روش دینامیک مولکولی برای اولین بار در سال ۱۹۵۷ توسط آلدر[۵] و وینرایت[۶] برمبنای مدل کره سخت به کار گرفته شد و درسال ۱۹۶۴، رحمان[۷] مدل کره نرم را در شبیه‌سازی خود به کار برد. از وی به عنوان پدر دینامیک ملکولی یاد می‌شود[۱۳].

---

[1]- Lindemman
[2] -Chaplot
[3]-Orthorhombic
[4]- Xie
[5] -Alder
[6]- Wainwright
[7]- Rahman