چکیده

یکی از روش های مفید بررسی عبور حلال‌ها از نانوکانال‌ها شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌باشد. در این پایان‌نامه شبیه-سازی دینامیک مولکولی عبور حلال‌های خالص آب، متانول و اتانول از درون نانولوله بورنیترید در دو شرایط جداگانه بررسی شده است، که این شرایط عبارتند از:

۱- بدون اعمال هیچ نیرویی بر مولکول ها

۲- اعمال نیرو به صورت فشار یا میدان الکتریکی

در نهایت امکان جداسازی مخلوط حلال‌های آب/متانول و آب/اتانول توسط نانولوله بورنیتریدی مورد بررسی قرار گرفته است. تمامی شبیه‌سازی‌های انجام گرفته توسط نرم‌افزار NAMD صورت گرفته است.

کلمات کلیدی:

شبیه سازی دینامیک مولکولی- نانو لوله بور نیترید- عبور حلالها از درون نانو لوله بور نیترید- نانولوله

Abstract

Molcular dynamics simulation is one of the efficient methods for investigate the permeation of fluids through nanochanals. In this thesis molecular dynamics simulation used to stady permeation of pure solvents such as water, methanol and ethanol from boron nitrid nanotubes in the absence of any applying force and presence of the pressure or electrical field. Then we examine the separation of the mixtures of water /methanol and water/ethanol by means of BNNT. All simulations were performed using NAMD.

Keywords:
Molecular dynamics simulation, B-N nanotubes, permeation from B-N nanotubes, permeation, nanotube

تقدیم به:

پدرم، که تکیه‌گاه من در مواجهه با مشکلات و وجودش مایه‌ی دلگرمی من می‌باشد.

مادرم، دریای بی‌کران فداکاری و عشق که وجودم برایش همه رنج و وجودش برایم همه مهر می‌باشد.

و **همسرم**، پناه خستگیم و امید بودنم که سایه مهربانیش سایه‌سار زندگیم می‌باشد.

سپاس‌گذاری

الهی یکتای بی‌همتایی، بر همه چیز بینایی، در همه حال دانایی، از عیب مصفایی، از شرک مبرایی، داروی دل‌هایی، به تو رسد ملک خدایی. الهی هر که تو را شناسد کار او باریک و هر که تو را نشناسد راه او تاریک، تو را شناختن از تو رستن است و به تو پیوستن از خود گذشتن است. الهی اگر طاعت بسی ندارم در هر جهان جز تو کسی ندارم.

الهی روزگاری ترا می‌جستم خود را می‌یافتم، اکنون خود را می‌جویم و ترا می‌یابم. الهی چه غم دارد آن که تو را دارد و که را شاید که تو را نستاید، آزاد آن نفس که به یاد تو بازان و آباد آن دل که به مهر تو نازان و شاد آن کس که با تو در پیمان.

الهی تو ما را جاهل خواندی از جاهل جز خطا چه آید؟ تو ما را ضعیف خواندی از ضعیف جز عجز چه آید؟ الهی تو ما را برگرفتی و کسی نگفت که بردار، اکنون که برگرفتی وامگذار و در سایه‌ی لطف و عنایت خود می‌دار.

الهی چون عزیزان به ناز پرورده ما را فراموش کنند، تو بر ما رحمت کن. الهی اگر در پرسش خود در مانم یا راه پرسیدن را ندانم، صلاح کارم را به من نما و دلم را بدانچه رستگاری من در آن است متوجه فرما که چنین کار از راهنمایی‌های تو ناشناخته نیست.

قدردانی

اکنون که در سایه ایزد منان، این پایان‌نامه به اتمام رسیده است، بر خود وظیفه می‌دانم تا از تمامی عزیزانی که راهگشای این تحقیق بوده‌اند، تشکر و قدردانی نمایم. امید است که سپاس بی دریغ اینجانب را بپذیرند.

از استاد راهنمای محترم، جناب آقای دکتر جابر جهان‌بین سردرودی نهایت تشکر و قدردانی را دارم.

از استاد مشاور، جناب آقای دکتر علیرضا راستکار ابراهیم‌زاده که همواره مرا از نقطه نظرات خود بهرمند ساخته‌اند، تشکر می‌نمایم.

از استاد داور، جناب آقای دکتر حبیب اله ابراهیم نژاد که قبول زحمت فرموده و داوری این پایان‌نامه را به عهده گرفتند، تشکر می‌نمایم.

در نهایت از تمامی اساتید محترمی که از تجربیاتشان در طول تحصیل بهرمند شدم، به خصوص مدیر گروه محترم جناب آقای دکتر محمد قلعه اسدی قدردانی می‌نمایم.

از دوستان عزیزی که به نحوی در انجام این پایان‌نامه به بنده لطف داشته‌اند، به خصوص آقایان دکتر جعفر عظمت، دکتر صادق افشاری و خانمها دکتر معصومه ایقانی، دکتر مریم آتابای، دکتر مینا یعقوبی، بتول شیرفروش ستاری و مهوش یاراحمدی تشکر می‌نمایم.

فرزانه قاسمی

آذر ۱۳۹۱

تبریز- ایران

فهرست عناوین

عنوان صفحه

چکیده ..... یک

فصل اول: مقدمه و تئوری ۱

۱-۱- مقدمه..... ۲

۱-۲-مقدمه‌ای بر نانوفناوری ۲

۱-۳-دلایل اهمیت مواد نانومقیاس..... ۳

۱-٤-نانوفناوری محاسباتی ۳

۱-۵-مدل‌سازی در برابر شبیه‌سازی..... ٤

۱-٦-شیمی محاسباتی ٦

۱-۷-شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۷

۱-۸-الگوریتم‌های دینامیک مولکولی ۹

۱-۹-الگوریتم ورله..... ۱۰

۱-۱۰-شبیه‌سازی مونت کارلو..... ۱۳

۱-۱۱-میدان نیرو..... ۱٤

۱-۱۱-۱- برهمکنش‌های بین مولکولی..... ۱۵

۱-۱۱-۲- برهمکنش‌های درون مولکولی..... ۱٦

۱-۱۲- ویژگی‌های مشترک میدان نیرو ۱۹

۱-۱۳- پارامتری کردن میدان نیرو ۲۰

۱-۱٤- تکنیک‌های مورد استفاده در شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای..... ۲۰

۱-۱٤-۱- مرزهای سیستم..... ۲۱
۱-۱٤-۲- شرایط مرزی متناوب..... ۲۱
۱-۱۵-دینامیک مولکولی در دما و فشار ثابت ۲۳
۱-۱٦- شروع و اجرای شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی ۳۱
۱-۱۷-خواص وابسته به زمان ۳۱
۱-۱۸- نانولوله‌های کربنی و بورنیتریدی..... ۳۲
۱-۱۹-مورفولوژی نانولوله‌های بورنیتریدی..... ۳۳
۱-۲۰- کاربردهای مؤثر نانولوله‌های بورنیتریدی..... ۳۵
۱-۲۱- پیشینه تجربی و نظری کار ۳٦
۱-۲۲- جداسازی مخلوط حلال‌های آب/متانول و آب/اتانول به صورت تجربی ۳٦
۱-۲۳- هدف پروژه ۳۷
فصل دوم:جزئیات محاسباتی ۳۸
۲-۱- دینامیک مولکولی ۳۹
۲-۲- نرم‌افزارNAMD ۳۹
۲-۲-۱- ویژگی‌های کلیدی نرم‌افزارNAMD ٤۰
۲-۳- نرم‌افزارVMD..... ٤۱
۲-۳-۱- ویژگی‌های کلیدی نرم‌افزارVMD..... ٤۲
۲-٤- فایل‌های ورودی مورد نیاز برای انجام شبیه‌سازی دینامیک مولکولی..... ٤۳
۲-۵- فایل پیکربندیNAMD..... ٤٤
۲-۵-۱- پارامترهای پیکربندیNAMD..... ٤٤

۲-۵-۲- پارامترهای میدان نیرو ٤٦
۲-۵-۲-۱- پارامترهای غیرپیوندی ٤٦
۲-۵-۲-۲- پارامترهای PME ۵۰
۲-۵-۳- پارامترهای نگه‌داری هارمونیک ۵۰
۲-۵-٤- کمینه‌سازی استاندارد و پارامترهای دینامیکی ۵۱
۲-۵-٤-۱- کمینه‌سازی انرژی ۵۱
۲-۵-٤-۲- دینامیک ۵۱
۲-۵-٤-۲-۱-پارامترهای گام زمانی ۵۲
۲-۵-٤-۲-۲-ارزش دهی آغازی ۵۲
۲-۵-٤-۲-۳- پارامترهای گام‌های زمانی متعدد ۵۲
۲-۵-٤-۲-٤- کنترل دما و تعادل ۵۳
۲-۵-٤-۲-۵- پارامتر اختصاص دوباره‌ی دما ۵۳
۲-۵-۵-تست فاصله برهمکنش‌های غیرپیوندی ۵۳
۲-۵-٦-اعمال نیرو ۵٤
۲-۵-۷- اعمال میدان الکتریکی خارجی ۵۵
۲-٦-تهیه ساختارها ۵۵
۲-۷-مراحل مختلف شبیه‌سازی و توضیح روش کار ۵۵
فصل سوم: نتایج و بحث ۵۷
۳-۱- سیستم شبیه‌سازی ۵۸
۳-۲- جزئیات محاسباتی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی(MD) ۵۹

۳-۳- نمودارهای افت‌وخیز انرژی..... ٦٠
۳-٤- بخش اول: نتایج حاصل از به تعادل‌رسانی حلال‌ها..... ٦٠
۳-٤-۱- حلال آب..... ٦٠
۳-٤-۲- حلال متانول..... ٦٢
۳-٤-۳- حلال اتانول..... ٦٤
۳-٤-٤- حلال آب/متانول..... ٦٥
۳-٤-٥- حلال آب/اتانول..... ٦٧
۳-٥-بخش دوم: مقایسه عبور حلال‌های مختلف از درون نانولوله‌هایی با قطرهای متفاوت..... ٦٨
۳-٥-۱- آرایش و جهت‌گیری مولکول‌های حلال درون نانولوله‌ها..... ٦٨
۳-٥-۱-۱- حلال آب..... ٦٨
۳-٥-۱-۲- حلال متانول..... ٧٠
۳-٥-۱-۳- حلال اتانول..... ٧١
۳-٥-۲- مقایسه تعداد متوسط پیوندهای هیدروژنی حلال‌هادرون نانولوله‌ها..... ٧٢
۳-٦- بخش سوم: بررسی جداسازی مخلوط حلال‌های آب/متانول و آب/اتانول..... ٧٩
۳-٦-۱- حلال آب درون نانولوله (۱۰,۱۰)..... ٨٠
۳-٦-۲- حلال متانول درون نانولوله(۱۰,۱۰)..... ٨٣
۳-٦-۳- حلال آب/متانول درون نانولوله (۱۰,۱۰)..... ٨٦
۳-٦-٤- حلال آب درون نانولوله(۱۳و۱۳)..... ٩٢
۳-٦-٥- حلال اتانول درون نانولوله (۱۳و۱۳)..... ٩٥
۳-٦-۷- حلال آب/اتانول درون نانولوله (۱۳و۱۳)..... ٩٨

۳-۷-بخش چهارم: بررسی تأثیرات فشارومیدان الکتریکی بر عبور حلال‌هاازدرونانولوله‌های بورنیتریدی ۱۰۳

۳-۷-۱- بررسی تأثیر فشار بر عبور حلال‌های خالص آب و متانول از درون نانولوله(۱۰,۱۰) ۱۰٤

۳-۷-۲- بررسی تأثیر فشار بر عبور حلال‌های خالص آب و اتانول از درون نانولوله(۱۳,۱۳) ۱۰٤

۳-۷-۳-بررسی‌تأثیرمیدان الکتریکی برعبور حلال‌های خالص آب و متانول از درون نانولوله(۱۰,۱۰).....۱۰۵

۳-۷-٤-بررسی‌تأثیرمیدان الکتریکی برعبور حلال‌های خالص آب و اتانول از درون نانولوله(۱۳,۱۳) ۱۰۵

۳-۸- نتیجه‌گیری.....۱۰۷

۳-۹- پیشنهادات برای کارهای بعدی.....۱۰۷

منابع و مآخذ.....۱۰۸

فهرست اشکال

عنوان صفحه

شکل(۱-۱) برهمکنش‌ها در مولکول‌ها ۱۵

شکل(۱-۲) نمودار برهمکنش‌های واندروالسی ۱۶

شکل(۱-۳) پیوند بین دو اتم ۱۷

شکل(۱-٤) زاویه بین دو اتمi و اتم k ۱۷

شکل(۱-۵) تصاویر نیومن مولکول اتان ۱۸

شکل(۱-٦) زاویه دووجهی میان چهار اتم و مولکول اتان ۱۸

شکل(۱-۷) شرایط مرزی متناوب در دو بعد ۲۲

شکل(۱-۸)مدل‌های‌اتمی (a)نانولوله‌های‌بورنیتریدی‌آرمچیر(۷,۷)(b)نانولوله‌های‌بورنیتریدی‌زیگزاگ(۱۰,۰)-(c)نانولوله‌های بورنیتریدی کایرال (۱۰,۵) ۳٤

شکل(۲-۱) نمودار پتانسیل واندروالسی در حضور و عدم حضور تابع switching ٤۷

شکل(۲-۲) نمودار پتانسیل الکترواستاتیکی در حضور و عدم حضور تابع shifting ٤۸

شکل(۲-۳) نمودار پتانسیل الکترواستاتیک هنگام استفاده از الکترواستاتیک کامل توسط NAMD ٤۹

شکل(۳-۱)نانولوله بورنیترید (۷,۷)درون غشای سیلیکون نیترید ۵۸

شکل(۳-۲)نمودار افت‌وخیز انرژی کل۱ حلال آب ٦۱

شکل(۳-۳)نمودار افت‌وخیز انرژی کل۲ حلال آب ٦۱

شکل(۳-٤)نمودار دمای متوسط حلال آب ٦۱

شکل(۳-۵)نمودار تعداد پیوندهای هیدروژنی حلال آب ٦۱

شکل(۳-٦)نمودار افت‌وخیز انرژی کل۱ حلال متانول ٦۳

شکل(۳-۷)نمودار افت‌وخیز انرژی کل۲ حلال متانول ٦۳

شکل(۳–۸)نمودار دمای متوسط حلال متانول..... ٦٣
شکل(۳–۹)نمودار تعداد پیوندهای هیدروژنی حلال متانول..... ٦٣
شکل(۳–۱۰) نمودار افت‌وخیز انرژی کل۱حلال اتانول..... ٦٤
شکل(۳–۱۱) نمودار افت‌وخیز انرژی کل۲ حلال اتانول..... ٦٤
شکل(۳–۱۲) نمودار دمای متوسط حلال اتانول..... ٦٥
شکل(۳–۱۳)نمودار تعداد پیوندهای هیدروژنی حلال اتانول..... ٦٥
شکل(۳-۱٤)نمودار افت‌وخیز انرژی کل۱ حلال آب/متانول..... ٦٦
شکل(۳-۱٥)نمودار افت‌وخیز انرژی کل۲ حلال آب/متانول..... ٦٦
شکل(۳-۱٦)نمودار دمای متوسط حلال آب/متانول..... ٦٦
شکل(۳-۱۷)نمودار تعداد پیوندهای هیدروژنی حلال آب/متانول..... ٦٦
شکل(۳-۱۸)نمودار افت‌وخیز انرژی کل۱ حلال آب/اتانول..... ٦٧
شکل(۳-۱۹)نمودار افت‌وخیز انرژی کل۲ حلال آب/اتانول..... ٦٧
شکل(۳-۲۰)نمودار دمای متوسط حلال آب/اتانول..... ٦٧
شکل(۳-۲۱)نمودار تعداد پیوندهای هیدروژنی حلال آب/اتانول..... ٦٧
شکل(۳-۲۲)جهت‌گیری و آرایش مولکول‌های آب درون نانولوله(۷,۷)..... ٦٩
شکل(۳-۲۳)جهت‌گیری و آرایش مولکول‌های آب درون نانولوله(۱۰,۱۰)..... ٦٩
شکل(۳-۲٤)جهت‌گیری و آرایش مولکول‌های آب درون نانولوله(۱۲,۱۲)..... ٦٩
شکل(۳-۲٥)جهت‌گیری و آرایش مولکول‌های آب درون نانولوله(۱۳,۱۳)..... ٦٩
شکل(۳-۲٦)جهت‌گیری و آرایش مولکول‌های متانول درون نانولوله(۷,۷)..... ۷۰
شکل(۳-۲۷)جهت‌گیری و آرایش مولکول‌های متانول درون نانولوله(۱۰,۱۰)..... ۷۰

شکل(۳-۲۸)جهت‌گیری و آرایش مولکول‌های متانول درون نانولوله(۱۲,۱۲) ۷۰
شکل(۳-۲۹)جهت‌گیری و آرایش مولکول‌های متانول درون نانولوله(۱۳,۱۳) ۷۰
شکل(۳-۳۰)جهت‌گیری و آرایش مولکول‌های اتانول درون نانولوله(۷,۷) ۷۱
شکل(۳-۳۱)جهت‌گیری و آرایش مولکول‌های اتانول درون نانولوله(۱۰,۱۰) ۷۱
شکل(۳-۳۲)جهت‌گیری و آرایش مولکول‌های اتانول درون نانولوله(۱۲,۱۲) ۷۱
شکل(۳-۳۳)جهت‌گیری و آرایش مولکول‌های اتانول درون نانولوله(۱۳,۱۳) ۷۱
شکل(۳-۳٤)پیوندهای‌هیدروژنی آب درون نانولوله(۷,۷) ۷۳
شکل(۳-۳۵)پیوندهای‌هیدروژنی آب درون نانولوله(۱۰,۱۰) ۷۳
شکل(۳-۳٦)پیوندهای هیدروژنی آب درون نانولوله(۱۲,۱۲) ۷۳
شکل(۳-۳۷)پیوند های هیدروژنی آب درون نانولوله(۱۳,۱۳) ۷۳
شکل(۳-۳۸)پیوندهای هیدروژنی متانول‌درون نانولوله(۷,۷) ۷٤
شکل(۳-۳۹)پیوندهای هیدروژنی متانول‌درون نانولوله(۱۰,۱۰) ۷٤
شکل(۳-٤۰)پیوندهای‌هیدروژنی‌متانول‌درون نانولوله(۱۲,۱۲) ۷٤
شکل(۳-٤۱)پیوندهای‌هیدروژنی‌متانول‌درون نانولوله(۱۳,۱۳) ۷٤
شکل(۳-٤۲)پیوندهای‌هیدروژنی اتانول درون نانولوله (۷,۷) ۷۵
شکل(۳-٤۳)پیوندهای‌هیدروژنی اتانول درون نانولوله(۱۰,۱۰) ۷۵
شکل(۳-٤٤)پیوندهای‌هیدروژنی اتانول درون نانولوله(۱۲,۱۲) ۷۵
شکل(۳-٤۵)پیوندهای‌هیدروژنی اتانول درون نانولوله(۱۳,۱۳) ۷۵
شکل(۳-٤٦)تعدادمتوسط‌پیوندهای‌هیدروژنی‌به‌ازای هرمولکول آب به صورت تابعی از قطر نانولوله ۷٦
شکل(۳-٤۷)روندتغییرات‌تعدادمتوسط‌پیوندهای‌هیدروژنی‌به‌ازای هرمولکول متانول با قطر نانولوله ۷٦

شکل(۳-٤٨)روندتغییراتتعدادمتوسطپیوندهایهیدروژنیبهازای هرمولکول اتانول با قطر نانولوله.....۷۷
شکل(۳-٤۹)روندتغییراتتعدادمتوسطپیوندهایهیدروژنیبهازای هرمولکول حلال با قطر نانولوله ۷۷
شکل(۳-۵۰)عکس لحظهای عبورحلال آب از درون نانولوله(۱۰,۱۰).....۸۰
شکل(۳-۵۱)نمودارافتوخیزانرژیکل۱عبورحلال آب از نانولوله(۱۰,۱۰) ۸۱
شکل(۳-۵۲)نمودارافتوخیزانرژی کل۲عبورحلال آب از نانولوله(۱۰,۱۰).....۸۱
شکل(۳-۵۳)نموداردمایمتوسطعبورحلالآبازنانولوله(۱۰,۱۰).....۸۱
شکل(۳-۵٤)نمودارفشارمتوسطعبورحلالآبازنانولوله(۱۰,۱۰) ۸۱
شکل(۳-۵۵)نمودارتعداد پیوندهای هیدروژنی آب درون نانولوله(۱۰,۱۰) ۸۲
شکل(۳-۵٦)پروفایل دانسیته آب درون نانولوله(۱۰,۱۰).....۸۳
شکل(۳-۵۷)عکس لحظهای عبورحلال متانول از درون نانولوله(۱۰,۱۰) ۸۳
شکل(۳-۵۸)نمودار افتوخیز انرژی کل۱عبورحلالمتانول ۸٤
شکل(۳-۵۹) نمودار افتوخیز انرژی کل۲عبورحلالمتانول.....۸٤
شکل(۳-٦۰) نموداردمای متوسط عبور حلال متانول.....۸۵
شکل(۳-٦۱)نمودار فشار متوسط عبور حلال متانول ۸۵
شکل(۳-٦۲)نمودار تعداد پیوندهای هیدروژنی متانول درون نانولوله(۱۰,۱۰).....۸۵
شکل(۳-٦۳)پروفایل دانسیته متانول درون نانولوله(۱۰و۱۰) ۸٦
شکل(۳-٦٤) عکس لحظهای عبورحلال آب/متانول از درون نانولوله(۱۰,۱۰) ۸۷
شکل(۳-٦۵)نمودارافتوخیزانرژی کل۱عبورحلالآب/متانول ۸۷
شکل(۳-٦٦)نمودارافتوخیزانرژی کل۲عبورحلالآب/متانول ۸۷
شکل(۳-٦۷)نمودار دمای متوسط عبور حلالآب/متانول ۸۸

شکل(۳-٦٨)نمودار فشار متوسط عبور حلال‌آب/متانول.....۸۸

شکل(۳-٦٩)نمودار تعداد پیوندهای هیدروژنی حلال‌آب/متانول درون نانولوله(۱۰,۱۰).....۸۸

شکل(۳-۷۰)نمودار توابع توزیع شعاعی نانولوله-آب و نانولوله-متانول درون نانولوله(۱۰,۱۰).....۸۹

شکل(۳-۷۱)نمودارانتگرال‌توابع‌توزیع شعاعی نانولوله-آب‌و نانولوله-متانول درون نانولوله(۱۰,۱۰).....۸۹

شکل(۳-۷۲)تعدادمولکول‌های عبوری آب‌و متانول در واحد زمان از درون نانولوله(۱۰,۱۰) درحلال‌های-خالص آب، متانول و مخلوط آب/متانول.....۹۰

شکل(۳-۷۳)پروفایل دانسیته آب و متانول درون نانولوله(۱۰,۱۰).....۹۱

شکل(۳-۷٤)عکس لحظه‌ای عبورحلال آب از درون نانولوله(۱۳,۱۳).....۹۲

شکل(۳-۷۵) نمودارافت‌وخیز انرژی کل۱عبورحلال آب از نانولوله(۱۳,۱۳).....۹۳

شکل(۳-۷٦)نمودارافت‌وخیز انرژی کل۲عبورحلال آب از نانولوله(۱۳,۱۳).....۹۳

شکل(۳-۷۷)نمودار‌دمای‌متوسط‌عبورحلال‌آب‌از نانولوله(۱۳,۱۳).....۹۳

شکل(۳-۷۸)نمودار‌دمای‌متوسط‌عبورحلال‌آب‌از نانولوله(۱۳,۱۳).....۹۳

شکل(۳-۷۹)نمودار تعداد پیوندهای هیدروژنی حلال آب درون نانولوله(۱۳,۱۳).....۹٤

شکل(۳-۸۰)پروفایل دانسیته آب درون نانولوله(۱۳و۱۳).....۹٤

شکل(۳-۸۱)عکس لحظه‌ای عبورحلال اتانول از درون نانولوله(۱۳,۱۳).....۹۵

شکل(۳-۸۲)نمودار افت‌وخیز انرژی کل۱عبور حلال اتانول.....۹٦

شکل(۳-۸۳)نمودار افت‌وخیز انرژی کل۲عبور حلال اتانول.....۹٦

شکل(۳-۸٤)نمودار دمای متوسط عبور حلال اتانول.....۹٦

شکل(۳-۸۵)نمودار فشار متوسط عبور حلال اتانول.....۹٦

شکل(۳-۸٦)نمودار تعداد پیوندهای هیدروژنی حلال اتانول درون نانولوله(۱۳,۱۳).....۹۷

شکل(۳-۸۷)پروفایل دانسیته اتانول درون نانولوله(۱۳,۱۳).....۹۸

شکل(۳-۸۸)عکس لحظه‌ای عبورحلال آب/اتانول از درون نانولوله(۱۳,۱۳) ۹۸

شکل(۳-۸۹)نمودارافت‌وخیزانرژی‌کل ۱عبورحلال‌آب/اتانول ۹۹

شکل(۳-۹۰)نمودارافت‌وخیزانرژی‌کل ۲عبورحلال‌آب/اتانول ۹۹

شکل(۳-۹۱)نموداردمای متوسط عبور حلال آب/اتانول ۱۰۰

شکل(۳-۹۲) نمودار فشار متوسط عبور حلال آب/اتانول ۱۰۰

شکل(۳-۹۳)نمودار تعداد پیوندهای هیدروژنی حلال آب/اتانول درون نانولوله(۱۳و۱۳) ۱۰۰

شکل(۳-۹٤)نمودارتوابع توزیع شعاعی نانولوله-آب و نانولوله-اتانول درون نانولوله(۱۳,۱۳) ۱۰۱

شکل(۳-۹۵)نمودارانتگرال‌توابع‌توزیع‌شعاعی نانولوله-آب و نانولوله-اتانول درون نانولوله(۱۳,۱۳) ۱۰۱

شکل(۳-۹٦) تعداد مولکول‌های عبوری آب واتانول درواحد زمان از درون نانولوله(۱۳,۱۳) درحلال‌های-خالص آب، اتانول و مخلوط آب/اتانول ۱۰۲

شکل(۳-۹۷)پروفایل دانسیته آب و اتانول درون نانولوله(۱۳,۱۳) ۱۰۳

شکل(۳-۹۸)تعدادمولکول‌های‌عبوری‌آب‌ومتانول درواحد زمان تحت فشاراز درون نانولوله(۱۰,۱۰) ۱۰٤

شکل(۳-۹۹)تعدادمولکول‌های‌عبوری‌آب‌واتانول درواحد زمان تحت فشاراز درون نانولوله(۱۳,۱۳) ۱۰۵

شکل(۳-۱۰۰)تعداد مولکول‌های عبوری آب و متانول در واحد زمان تحت میدان الکتریکی از درون - نانولوله(۱۰,۱۰) ۱۰٦

شکل(۳-۱۰۱)تعداد مولکول‌های عبوری آب و اتانول در واحد زمان تحت میدان الکتریکی از درون - نانولوله(۱۳,۱۳) ۱۰٦

❋ فصل اول

مقدمه و تئوری

۱-۱- مقدمه

یکی از بهترین روش‌های موجود برای بررسی ساختار و رفتار مواد، شبیه‌سازی[۱] رایانه‌ای است. روش‌های شبیه‌سازی از لحاظ کم هزینه بودن، کنترل پذیر بودن و برخی مزایای دیگر نسبت به روش‌های آزمایشگاهی برترند. امروزه با پیشرفت فناوری رایانه‌ها، به شبیه‌سازی‌هایی که برای محاسبه‌ی خواص مواد با استفاده از ساختار ذرات تشکیل دهنده‌ی آن‌ها انجام می‌گیرد، توجه ویژه‌ای می‌شود. این شبیه‌سازی‌ها خصوصاً در نانوفناوری از اهمیت بسزایی برخوردارند. نانوفناوری از جمله مهم‌ترین و اصلی‌ترین انقلاب‌های علمی صنعتی آینده است که در سال‌های اخیر تلاش‌های بسیار زیادی برای ساختن زیرپایه‌های آن انجام می‌شود. یکی از مهم‌ترین شاخه‌های نانوفناوری، نانوفناوری محاسباتی است که در پیشبرد و اثبات نظریه و فرضیه‌های مربوط به علوم مقیاس نانو نقشی بی‌بدیل دارد [۱].

۱-۲- مقدمه‌ای بر نانوفناوری

گفته می‌شود که یک نانومتر یک نقطه‌ی سحرآمیز در واحد طول می‌باشد، زیرا نقطه‌ای است که کوچکترین ابزارهای ساخت دست بشر از اتم‌ها و مولکول‌های موجود در طبیعت ایجاد می‌شوند. حقیقتاً دنیای بسیار جالب نانوفناوری مابین تمامی رشته‌های علوم و مهندسی جای خود را باز خواهد کرد. ما قادر خواهیم بود چیزهایی بسازیم که در کوچکترین مقیاس ممکن طولی اتم به اتم کار کنند. نانو ابزارهای کوچک انقلابی در صنعت و زندگی ما برپا خواهند کرد. در گزارشات اخیر یافته‌های جهان علوم، به نماینده‌های سازمان سیاست‌گزاری علوم و فناوری بیان شده که علم نانو و فناوری

[۱] simulation

مربوط به آن طبیعت اتم‌ها را در قرن اخیر در هر چیز ساخته‌ی دست بشر تغییر خواهد داد. نانوذرات امروزه در زمینه‌های داروسازی، رساندن دارو به اندام‌های مختلف بدن، تغییر در رشته‌ی DNA و زنجیرهای آن، ذخیره‌سازی اطلاعات، رایانه‌های با خواص نوری، سلول‌های خورشیدی، بهبود بخشیدن سرامیک‌ها و عایق‌ها، کاتالیزگرها، تصفیه‌ی آب و... به کار برده می‌شوند.

۱-۳- دلایل اهمیت مواد نانومقیاس

دلایل زیادی برای اهمیت مواد نانومقیاس[۱] وجود دارد که بعضی از آن‌ها به شرح زیر است:

- خصوصیات مواد در اندازه‌های نانومتری دچار تغییراتی می‌شود و با طراحی مواد نانومتری تغییر در خصوصیات ماکروسکوپیک و میکروسکوپیک ماده مانند رنگ، خواص مغناطیسی، دمای ذوب و ... بدون تغییر ترکیبات شیمیایی آن ممکن می‌شود.
- از جمله خصوصیات مواد بیولوژیکی و زنده، سازمان‌دهی منظم آن‌ها در ابعاد نانومتری است و توسعه در زمینه نانوفناوری به ما اجازه خواهد داد که مواد نانوابعاد ساخت بشر را در داخل سلول‌های زنده قرار دهیم. همچنین این کار باعث خواهد شد که با استفاده از خودچینی طبیعت بتوانیم مواد جدیدی بسازیم. مطمئناً این مورد باعث ایجاد ترکیبات بیولوژیکی با علم مواد خواهد شد.
- ترکیبات نانومتری دارای نسبت سطح به حجم بسیار زیادی هستند، یعنی حجم کمی دارند اما سطح زیادی را پوشش می‌دهند و لذا استفاده از آن‌ها در مواد کامپوزیتی، دارورسانی در بدن و ذخیره‌ی انرژی به شکل شیمیایی (مانند گاز طبیعی و هیدروژن) بسیار ایده‌آل خواهند بود.
- سیستم‌های ماکروسکوپیک ساخته شده از نانوساختارها می‌توانند چگالی بسیار بیشتری نسبت به مواد ساخته شده از میکروساختارها داشته باشند و همچنین هدایت الکتریکی بهتری دارند. با استفاده از برهمکنش نانوساختارها مفاهیم جدیدی در ابزارهای الکترونیکی مانند مدارهای کوچکتر و سریع‌تر، کارایی بسیار بیشتر و مصرف برق بسیار کمتر پدید می‌آید [۲].

۱-٤- نانوفناوری محاسباتی

[۱] nanoscale

افزایش سریع قدرت رایانه‌ها راهی را برای شبیه‌سازی سیستم‌های گوناگون و فرایندهای فیزیکی در مقیاس اتمی گشوده است. امروزه ما این زمینه از علم را مدل‌سازی مولکولی[1] می‌گوییم. شبیه‌سازی رایانه‌ای در مقیاس اتمی می‌تواند کاربردهای مختلفی مانند فرایندهای زیست محیطی، دارو و علم مواد داشته باشد. شبیه‌سازی رایانه‌ای زمانی مفید است که کار آزمایشگاهی هزینه‌بر، وقت‌گیر یا عملاً انجام آن در آزمایشگاه غیر ممکن باشد. در کنار آن بسیاری از خواص ترموفیزیکی می‌تواند از شبیه‌سازی حاصل شود. چگالی، انرژی آزاد، گرانروی و ساختار مولکول‌ها از خواصی هستند که می‌توانند توسط شبیه‌سازی به دست آیند. به طور خلاصه بهتر است بگوییم که مدل‌سازی مولکولی شاخه‌ای از علم است که تئوری و تجربه را به میز کاری رایانه می‌آورد و به ما دیدگاهی می‌دهد تا آزمایش رایانه‌ای انجام دهیم. نانوفناوری محاسباتی به شبیه‌سازی و مدل‌سازی سیستم‌های نانو می‌پردازد و امکان ساخت و تولید آن‌ها را بررسی می‌کند، یعنی با ابزار محاسبه، مدل‌های گوناگون ساختارهای نانو را می‌سازد و ویژگی‌های گوناگون آن را بررسی می‌کند.

با توجه به هزینه‌های تولید یک ساختار در مقیاس نانو لازم است که برای داشتن بالاترین بهره، ابتدا پیش‌بینی‌هایی در مورد برآورد و هزینه‌های تولید ماده جدید، ویژگی‌ها و کاربردهای آن داشته باشیم. لذا تولید نرم‌افزارهای رایانه‌ای و نوشتن برنامه‌هایی که این امکان را برای ما فراهم می‌کنند، نیز جزو این شاخه از علم نانو به حساب می‌آید.

به دست آوردن ویژگی‌ها و خصوصیات یک ماده با روش‌های تئوری و محاسباتی، علاوه بر چشم انداز بسیار خوبی که از آینده پیش روی ما قرار می‌دهد، به ما کمک می‌کند روش‌های بهتری برای تولید مواد جدید در آزمایشگاه در ابعاد کوچک و در مقیاس وسیع داشته باشیم. این حوزه از علم نانو در مدت زمان کمی که از آغاز این علم می‌گذرد، به پیشرفت بسیار زیادی در این حیطه منجر شده است. در حقیقت نانوفناوری راهی است به سوی همگرایی علوم و در واقع راهی است برای این که ما را به استفاده‌ی بهتر از هستی رهنمون گردد[۳و٤].

رفتار مایعات و مواد نانومتخلخل یکی از زمینه‌هایی است که می‌تواند با شبیه‌سازی‌های رایانه-ای مورد بررسی قرار گیرد، زیرا بر اساس ابعاد کوچک نانومواد دسترسی به روش‌های آزمایشگاهی به راحتی امکان‌پذیر نیست [۵].

۱-۵- مدل‌سازی در برابر شبیه‌سازی

[1] Molecular modeling