

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه زنجان

دانشکده‌ی علوم - گروه فیزیک

پایان‌نامه کارشناسی ارشد

گرایش حالت جامد

اثر افت‌وخیزهای گرمایی در کمانش میکرولوله‌ها

خهبات قمری

استاد راهنما:

دکتر علی نجفی

تیر ۱۳۸۹

تقدیم بہ
پدر و مادر عزیزم

سپاس گذاری

صدف وار کوهر شناسان راز دهن جز به لؤلؤ نکر دند باز

استاد گران قدر جناب آقای دکتر نجفی، از راهنمایی‌ها و زحمات شما از صمیم قلب تشکر و قدردانی می‌کنم.
از خانواده‌ی عزیزم به خاطر همه چیز بی‌نهایت ممنونم.
همچنین از دوست خوبم آقای محسن نشتاحسینی که با کمک‌هایش در انجام پروژه مرا همراهی کردند،
سپاس گزارم.

چکیده

میکرولوله‌ها یکی از بیوپلیمرهای اسکلت سلول هستند که در شکل‌دهی و مقاومت سلول در مقابل نیروهای داخلی و خارجی تاثیر به‌سزایی دارند. این رشته‌های توخالی، داخل سیتوپلاسم توسط دیگر رشته‌های اسکلت سلولی احاطه شده و نسبت به آنها بسیار سخت‌تر هستند؛ به همین جهت می‌توان از آنها به عنوان ستون‌های اصلی سلول نام برد.

ساختمان سلول طوری است که در مقابل نیروهای وارد شده، از خود خاصیت کشسانی نشان می‌دهد، در چنین ساختاری خمش و کمانش میکرولوله‌ها نقش مهمی دارند. مسئله‌ی کمانش میکرولوله‌ها بارها مورد بررسی قرار گرفته است، ولی اغلب از تاثیر افت‌وخیزهای گرمایی محیط بر آن چشم‌پوشی شده، یا به طور کامل لحاظ نشده است.

در این پایان‌نامه با مدل‌سازی ساختار میکرولوله و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به وسیله‌ی نرم‌افزار *ESPResSo*، خمش و کمانش میکرولوله‌ها و تاثیر افت‌وخیزهای گرمایی محیط بر گذار کمانش آنها بررسی شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهند که افت‌وخیزهای گرمایی که با افزایش دما زیاد می‌شوند، نیروی بحرانی کمانش را کاهش داده و با کاهش دما و کم شدن نیروی افت‌وخیزهای گرمایی، منحنی نیروی بحرانی بر حسب سختی خمشی به حالت نظری پیوسته و استاتیک نزدیک می‌شود.

کلمات کلیدی: پلیمر، سلول، میکرولوله، خمش، کمانش، افت‌وخیز گرمایی، دینامیک مولکولی، شبیه‌سازی.

فهرست مطالب

۱	مقدمه	۱
۳	۱.۱ اسکلت سلول	۳
۴	۲.۱ میکرولوله‌ها	۴
۸	۳.۱ افت و خیزهای گرمایی	۸
۹	۴.۱ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پلیمرها	۹
۱۰	۱.۴.۱ روش دینامیک مولکولی	۱۰
۱۲	۲ خواص آماری پلیمرها	۱۲
۱۳	۱.۲ زنجیر ایده‌آل	۱۳
۱۳	۱.۱.۲ مدل گشت تصادفی	۱۳
۱۶	۲.۱.۲ تاثیر برهمکنش‌های کوتاه برد	۱۶
۱۸	۲.۲ زنجیر گاوسی	۱۸
۱۹	۳.۲ خمش گرمایی رشته‌ها	۱۹
۲۰	۱.۳.۲ طول ایستایی	۲۰
۲۳	۲.۳.۲ رشته‌های نیمه‌منعطف	۲۳
۲۴	۳ خمش و کمانش	۲۴
۲۵	۱.۳ تنش و کرنش	۲۵

۲۶	تغییر شکل عضو متقارن در خمش خالص
۲۹	۱.۲.۳ شرط برقراری رابطه‌ی خمیدگی
۲۹	۳.۳ انرژی کرنش
۳۱	۴.۳ کاربرد رابطه‌ی خمیدگی در تیرها و ستون‌ها
۳۲	۱.۴.۳ خمش تیرها
۳۴	۲.۴.۳ کمانش ستون‌ها
۳۶	۵.۳ شرط تعادل در کمانش
۳۶	۶.۳ شرایط تکیه‌گاهی مختلف برای ستون و کمانش آن

۴ شبیه‌سازی

۴۱	۱.۴ برهم‌کنش مونومرها
۴۱	۱.۱.۴ برهم‌کنش پیوندی
۴۳	۲.۱.۴ برهم‌کنش غیرپیوندی
۴۴	۲.۴ نیروهای اتلافی
۴۵	۱.۲.۴ حرکت کاتوره‌ای
۴۵	۲.۲.۴ معادله‌ی اسملوکوسکی
۴۹	۳.۲.۴ معادله‌ی لانژوین
۵۰	۳.۴ معادله‌ی حرکت
۵۳	۴.۴ بی‌بعد سازی معادله‌ی حرکت
۵۵	۵.۴ اعداد به کار رفته در شبیه‌سازی

۵ نتایج

۵۹	۱.۵ محاسبه‌ی طول ایستایی DNA
۶۱	۲.۵ خمش یک میکرولوله
۶۲	۳.۵ کمانش میکرولوله دوسر گیردار

۶۴	کمانش میکرولوله در $T \neq 0$	۴.۵
۶۶	تأثیر سختی خمشی بر نیروی بحرانی	۱.۴.۵
۶۷	تأثیر تغییر دمای محیط بر گذار کمانش	۲.۴.۵
۶۷	تأثیر تغییر ضریب سختی فنرهای کششی	۳.۴.۵
۶۸	نمودارهای انرژی	۴.۴.۵

۶ بحث و نتیجه گیری ۷۱

الف برنامه‌ی شبیه سازی ۷۳

۷۴	الف. الگوریتم	
۷۵	الف. برنامه	

فصل ۱

مقدمه

اسکلت سلول^۱ یکی از موضوع‌های جالب‌توجه پژوهشگران در چند سال اخیر بوده است. یکی از اعضای اصلی اسکلت سلولی میکرولوله‌ها^۲ هستند. میکرولوله‌ها ساختار پلیمری دارند.

هدف این پایان‌نامه بررسی کمانش^۳ میکرولوله‌ها در حضور افت‌وخیزهای گرمایی محیط است. کمانش یک مفهوم مکانیکی برای میله‌ها و ستون‌ها است، کمانش میکرولوله‌ها بارها مورد بررسی قرار گرفته است، ولی اغلب از تاثیر افت‌وخیزهای گرمایی محیط بر آن چشم‌پوشی شده، یا به طور کامل لحاظ نشده است.

در این پایان‌نامه با مدل‌سازی ساختار زنجیر پلیمری میکرولوله و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی توسط نرم افزار *ESPResso*، خمش و کمانش میکرولوله‌ها و تاثیر افت‌وخیزهای گرمایی محیط بر گذار کمانش آن‌ها بررسی شده است.

پس از آوردن مقدمه‌ای در فصل اول پایان‌نامه به معرفی خواص آماری پلیمرها می‌پردازیم. در فصل سوم خمش و کمانش پلیمرها را در حالت تعادلی مطالعه می‌کنیم، در فصل چهارم با ارائه مدل‌های ریزمقیاس، افت‌وخیزهای گرمایی را بررسی می‌کنیم و نتایج محاسبات در فصل پنجم گزارش می‌شود.

در این فصل سعی بر این است که اطلاعات اولیه‌ای در مورد موضوع پایان‌نامه و علت انتخاب آن، در اختیار خواننده قرار گیرد. بدین منظور معرفی کوتاهی از ساختمان اسکلت سلولی را ارائه می‌دهیم. همچنین در مورد

^۱ Cytoskeleton

^۲ Microtubules

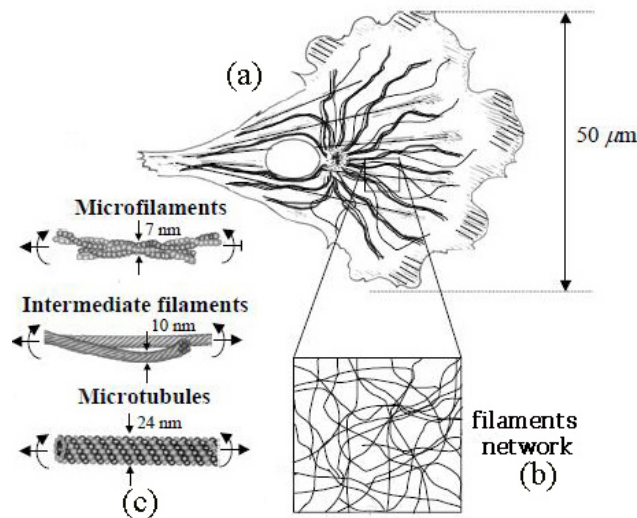
^۳ Buckling

افتوخیزهای گرمایی بحث مختصری صورت می‌گیرد. با توجه به این که از روش دینامیک مولکولی استفاده خواهد شد، در نهایت به صورت اجمالی به دینامیک مولکولی نیز اشاره می‌شود.

۱.۱ اسکلت سلول

همان‌گونه که برای بنا نهادن یک سازه به اسکلت اولیه نیاز داریم، سلول‌های موجودات زنده نیز به اسکلت نیاز دارند. اسکلت سلولی یک شبکه‌ی پیچیده از پلیمرهای پروتئینی است که در سرتاسر سیتوپلاسم^۴ گسترده شده‌اند. این شبکه وظیفه‌ی شکل دهی و مقاومت در مقابل نیروهای داخلی و خارجی در سلول را بر عهده دارد. ایجاد حرکت‌های بزرگ مقیاس، تقسیم سلولی و انقباض سلول‌های ماهیچه‌ای از دیگر نقش‌های اسکلت سلولی است [۱].

ساختار اسکلت سلول از سه نوع رشته‌ی پروتئینی تشکیل شده است: رشته‌های بینابینی^۵، رشته‌های اکتینی^۶ و



شکل ۱.۱: اسکلت سلولی. (a) چگونگی قرارگیری رشته‌ها را در اسکلت سلول نشان می‌دهد (مقیاس سلول). (b) شبکه‌ی رشته‌ها (مقیاس شبکه). (c) رشته‌های زیستی داخل سیتوپلاسم سلول شامل اکتین‌ها، رشته‌های بینابینی و میکرولوله‌ها (مقیاس رشته‌ها) [۳].

میکرولوله‌ها. این رشته‌ها در شکل (۱.۱) نشان داده شده‌اند [۲].

رشته‌های بینابینی از پروتئین‌های پلیمری بلند (میله‌ای) در هم پیچ‌خورده تشکیل شده‌اند. این رشته‌ها ۱ نانومتر قطر و قدرت کششی بالایی داشته و وظیفه اصلی آنها حفظ سلول در برابر تنش‌های مکانیکی است. همچنین

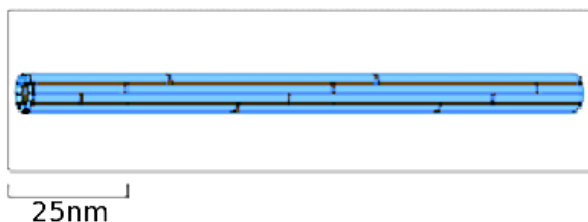
^۴ cytoplasm

^۵ intermediate filaments

^۶ Actin filaments

پوشش هسته را رشته‌های بینابینی محافظت می‌کنند [۱].

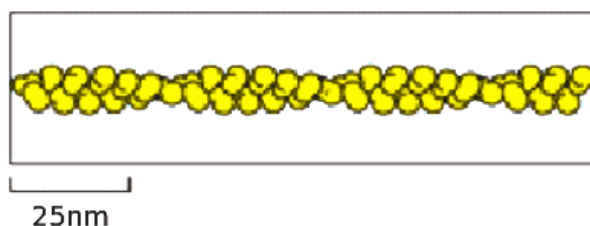
اکتین‌ها یا میکرورشته‌ها از رشته‌های بینابینی نازک‌تر و انعطاف‌پذیرتر هستند. این رشته‌ها با قطر ۷ نانومتر



شکل ۲.۱: نمایی از یک رشته‌ی بینابینی [۱].

زنجیری پیچ‌خورده از جی‌اکتین‌های γ هستند که طول آنها با پلیمره شدن افزایش و با دی‌پلیمره شدن کاهش می‌یابد. رشته‌های اکتینی برای حرکت‌های مختلف سلول ضروری هستند، به خصوص مواردی که حرکت با دخالت سطح سلول همراه است.

رشته‌ی دیگر اسکلت سلولی، میکرولوله‌ها هستند. در قسمت بعدی ساختمان میکرولوله‌ها را با جزئیات بیشتری



شکل ۳.۱: نمایی از یک رشته‌ی اکتین [۱].

مطالعه می‌کنیم.

۲.۱ میکرولوله‌ها

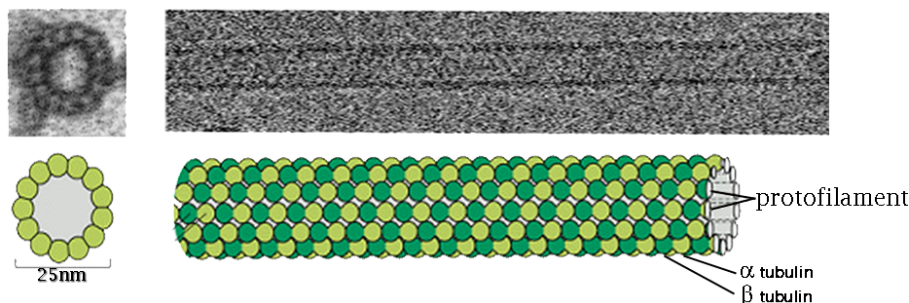
یکی از بیوپلیمرهای مهم داخل سلول میکرولوله‌ها هستند، این رشته‌های توخالی با قطر ۲۵ نانومتر داخل سیتوپلاسم توسط اکتین‌ها و رشته‌های بینابینی احاطه شده‌اند و نسبت به آنها بسیار سخت هستند. به همین جهت می‌توان از آنها به عنوان ستون‌های اصلی سلول نام برد [۴].

^γG Actin

سلول‌های یوکاریوتی^۸ از میکرولوله‌ها جهت تقسیم سلولی، تحرک، شکل‌دهی و ترشح آنزیم‌ها به مقصدی خاص استفاده می‌کنند. مرکز رشد میکرولوله‌ها در سلول یوکاریوتی محل مشخصی در سلول، کنار هسته است که سنتروزوم^۹ نام دارد. داخل سلول میکرولوله‌ها طول‌های مختلفی دارند، ولی در جاهای دیگر مثل تاژک‌ها و اندام‌های حرکتی تک‌سلولی‌ها طول ثابتی دارند. سنتروزوم تعداد، موقعیت و جهت میکرولوله‌ها را در سلول کنترل می‌کند [۱].

در طول ۵۰ سال اخیر تحقیقات بسیار زیادی در مورد میکرولوله‌ها صورت گرفته است، اولین بار منتون و کلارک در سال ۱۹۵۲ [۵] و فاوسیت و پورتر ۱۹۵۴ [۶] توسط میکروسکوپ الکترونی، ساختار داخلی میکرولوله‌ها را کشف کردند. زیرواحدهای سازنده میکرولوله‌ها پروتئین‌های کروی توپولین آلفا^{۱۰} و توپولین بتا^{۱۱} هستند که با اتصال به یکدیگر جفت‌های توپولینی^{۱۲} را می‌سازند ([۷]، [۸]، [۹]) (شکل ۴.۱). هر رشته میکرولوله از سیزده رشته‌ی پروتوفیل‌منت^{۱۳} ساخته شده [۱۰] که به صورت دایره‌ای کنار هم قرار گرفته‌اند (شکل ۴.۱)، البته میکرولوله‌هایی با ۱۱ و ۱۵ پروتوفیل‌منت هم دیده شده‌اند.

میکرولوله‌ها از سنتروزوم رشد خود را آغاز کرده و با امتداد یافتن به سمت غشای سلولی، مسیرهایی را درون



شکل ۴.۱: تصویر حقیقی و نمایشی از یک میکرولوله. توپولین‌های آلفا، بتا و همچنین رشته‌ی پروتوفیل‌منت در شکل مشخص شده‌اند [۱].

سلول ایجاد می‌کنند. اجزاء اصلی سلول مانند اندامک‌ها می‌توانند توسط موتورهای پروتئینی روی میکرولوله‌ها

^۸eukaryote

^۹Centrosome

^{۱۰} α tubulin

^{۱۱} β tubulin

^{۱۲}dymer tubulin

^{۱۳}protofilament

عبور کنند تا به مقصد مورد نظر برسند ([۱۱]، [۱۳]، [۱۲]). میکرولوله‌ها نیز مانند اکتین‌ها رشته‌های پلیمری هستند که از یک انتها در فاز کاهش و از انتهای دیگر در فاز رشد قرار دارند. فاز رشد را سنتروزوم بر عهده دارد و میکرولوله در آن ثابت شده است [۱۴].

میکرولوله‌ها در شکل‌دهی و مقاومت در مقابل تنش‌های داخلی و خارجی در اسکلت سلول نقش به‌سزایی دارند. یکی از نیروهای داخلی که به میکرولوله وارد می‌شود، ناشی از پلیمر شدن خود میکرولوله است [۱۵]. سازوکار رشد و کاهش میکرولوله‌ها در سنتروزوم به شرح زیر است.

جفت‌های حاصل از اتصال توبولین آلفا و گاما، از انتهای آلفای خود به گاما توبولین سنتروزوم متصل می‌شوند و به این ترتیب رشد میکرولوله‌ها آغاز می‌شود. رشته‌های پروتوفیلامنت با اتصال از انتهای آلفای خود به سنتروزوم و رشد از سر بتا، به میکرولوله جهت خاصی می‌دهند. میکرولوله‌هایی که در فاز رشد هستند، به صورت تصادفی در فاز کاهش قرار می‌گیرند، فرآیند کاهش به سرعت ادامه می‌یابد و حتی ممکن است منجر به نابودی کامل میکرولوله شود. البته میکرولوله‌هایی که در فاز کاهش هستند هم ممکن است به صورت تصادفی به فاز رشد بازگردند. به این تغییر فاز از رشد به کاهش و بالعکس، ناپایداری پویا^{۱۴} می‌گویند که ناشی از توانایی ذاتی میکرولوله‌ها در هیدرولیز ATP است. هر جفت آزاد توبولینی حاوی یک مولکول GTP است که اتصال محکمی با آن دارد. پس از اضافه شدن جفت به پلیمر در حال رشد GTP به GDP هیدرولیز می‌شود. وقتی میکرولوله در فاز رشد قرار دارد، سرعت اضافه شدن مولکول‌های توبولینی از هیدرولیز GTP ای که با خود حمل می‌کنند بیشتر است، در نتیجه در انتهای مثبت میکرولوله‌ها فقط جفت‌هایی قرار دارند که حاوی GTP هستند. از آنجا که توبولین‌ها پیوند محکمی با یکدیگر دارند در انتهای مثبت میکرولوله کلاهیکی تشکیل می‌شود که مانع از دی‌پلیمر شدن می‌شود و کلاهیک GTP^{۱۵} نام دارد [۱].

اما به دلیل تصادفی بودن فرآیندهای شیمیایی، گاهی توبولین موجود در انتهای آزاد میکرولوله، GTP متصل به خود را قبل از اضافه شدن جفت بعدی هیدرولیز می‌کند. در نتیجه انتهای آزاد پروتوفیلامنت از زیر واحد GDP توبولین تشکیل می‌شود. این وضعیت سبب انحراف تعادل به سمت از هم پاشیده شدن میکرولوله می‌شود. چون توبولین‌های باقی مانده در میکرولوله، GTP خود را هیدرولیز کرده‌اند، دی‌پلیمریزاسیون به محض شروع

^{۱۴}dynamic instability

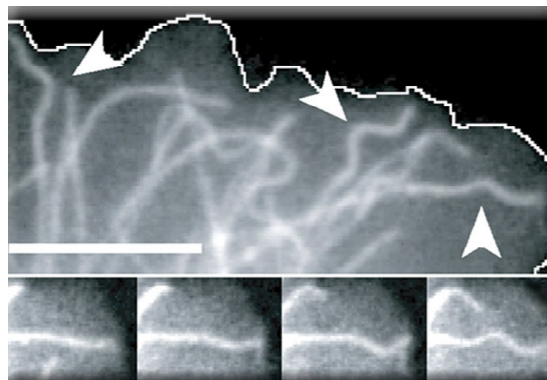
^{۱۵}GTP cap

با سرعت زیادی ادامه می‌یابد.

در یک سلول عادی، مراکز سازمان‌دهی میکرولوله‌ها در نتیجه یک ناپایداری پویا، به طور مداوم رشته‌های میکرولوله‌ی جدید را در جهت‌های مختلف به بیرون می‌فرستد. این میکرولوله‌ها حالت جستجوگر دارند و در صورتی که از انتهای مثبت خود به سایر ساختارهای سلولی متصل شوند، پایدار شده و از فروپاشی ساختار توبولینی جلوگیری می‌کنند.

پلیمره شدن میکرولوله‌ها ادامه می‌یابد تا رشته به غشاء سلول برسد، بعد از آن پلیمره شدن باعث تولید نیرو و تحت فشار قرار گرفتن میکرولوله میان سنتروزوم و غشاء می‌شود [۱۵]. در اثر این نیرو، رشته خم می‌شود یا به شکل کمان در می‌آید (شکل ۵.۱). این حالت وقتی که از خارج به غشاء سلول نیرو وارد شود نیز رخ می‌دهد و میکرولوله‌ها تغییر شکل می‌دهند و سلول از خود انعطاف نشان می‌دهد [۱۶].

در این پایان نامه تغییر شکل‌های مکانیکی میکرولوله‌ها مانند خمش و کمانش را به روش شبیه‌سازی دینامیک



شکل ۵.۱: ساختار دینامیکی میکرولوله‌ها داخل سیتوپلاسم. کمانش میکرولوله در شکل دیده می‌شود، خط نشان داده شده برابر $5\mu m$ است [۱۶].

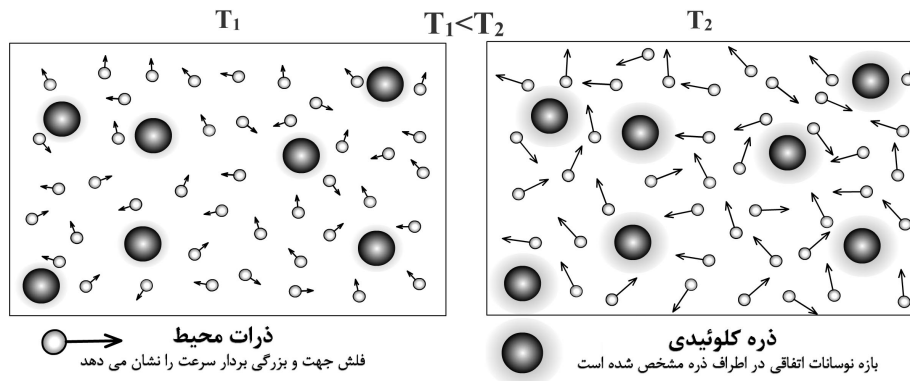
مولکولی^{۱۶} بررسی می‌کنیم.

^{۱۶} molecular dynamic simulation

۳.۱ افت و خیزهای گرمایی

توضیحات خود را با مثالی بسیار ساده از حرکت براونی^{۱۷} ذرات کلوئیدی در محیط آبی یا یک آئینه‌ی آویزان شده در گازی رقیق شروع می‌کنیم. می‌توان با یک میکروسکوپ حرکات نامنظم ذرات کلوئیدی را در محیط آبی نظاره کرد و یا به وسیله‌ی بازتاب یک پرتو نور نوسانات بی‌قاعده‌ی آئینه را به طور واضح دید. این حرکات‌های اتفاقی ذره‌ی کلوئیدی و آئینه‌ی معلق دلیل محکمی برای حرکت گرمایی مولکولی است. این پدیده‌ها حتی در حالت تعادل گرمایی نیز وجود دارند. اگر دمای محیط زیاد شود، سرعت ذرات محیط بیشتر و در نتیجه تعداد نوسانات زیاد خواهد شد (شکل ۶.۱). حرکت گرمایی مولکولی پایه‌ی نظری ریزمقیاس ساختار مواد است [۱۷].

اگر یک نیروی پیشران به ذرات کلوئید اعمال کنیم، باید ذرات شتاب بگیرند، ولی ضربه‌های تصادفی که به



شکل ۶.۱: ذرات کلوئیدی در یک محیط آبی. نوسانات کلوئیدها به صورت هاله‌ای در اطراف آنها نشان داده شده است.

ذره وارد می‌شود، مانع شتاب گرفتن کلوئیدها می‌شوند. پس به طور کلی ضربه‌های تصادفی در اطراف مولکول‌ها دو نوع اثر دارند: نوع اول اثری که باعث حرکت‌های اتفاقی و تصادفی در ذرات می‌شود و نوع دوم اثرهایی که با شتاب گرفتن ذرات در اثر اعمال نیرو مخالفت می‌کنند و مثل نیروی اصطکاک رفتار می‌کنند [۱۷].

نظریه‌ی پخش این دو نوع اثر را به هم مربوط می‌کند. این نظریه رابطه‌ی کلی میان اختلال‌های خارجی و افت‌وخیزهای داخلی سیستم را توضیح می‌دهد. افت‌وخیزهای داخلی سیستم را می‌توان توسط تابع همبستگی

^{۱۷}Brownian motion

کمیت‌های فیزیکی در حالت تعادل افت‌وخیزهای گرمایی توصیف کرد [۱۷]. توضیح کامل‌تر نظریه‌ی پخش در فصل شبیه‌سازی ارائه می‌شود.

۴.۱ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پلیمرها

دینامیک مولکولی یکی از شاخه‌های فیزیک محاسباتی است. در این روش برهمکنش میان اتم‌ها و مولکول‌ها در بازه‌ای از زمان بر اساس قوانین دینامیک ذرات، به وسیله‌ی رایانه شبیه‌سازی می‌شود. این روش برای اولین بار در سال ۱۹۶۴ توسط رحمان (Rahman) [۱۸] و واینرایت (Wainwright) در سال ۱۹۷۱ [۱۹] به کار گرفته شد.

دینامیک مولکولی شکلی از شبیه‌سازی کامپیوتری است که در آن ذرات اجازه دارند برای یک بازه‌ی زمانی تحت قوانین شناخته شده فیزیک با هم برهمکنش کنند در این بازه‌ی زمانی می‌توانیم نحوه‌ی حرکت ذره‌ها را ببینیم. از آنجایی که اکثر سیستم‌های مولکولی از تعداد زیادی ذره تشکیل شده‌اند، امکان ندارد که همه‌ی ویژگی‌های این سیستم‌های پیچیده را به‌طور تحلیلی به دست آوریم، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یک راه قوی برای حل این مسئله با به کارگیری روش‌های محاسباتی است [۲۲].

روش شبیه‌سازی واسطه‌ای میان تجربیات آزمایشگاهی و محاسبات نظری ایجاد می‌کند و به عنوان یک آزمایش مجازی در نظر گرفته می‌شود. دینامیک مولکولی یک روش منظم است که قوانین و نظریه‌های آن از فیزیک، شیمی و ریاضیات به دست می‌آیند و روند آن به کمک علم رایانه مشخص می‌شود. از دینامیک مولکولی ابتدا در فیزیک نظری استفاده شد، ولی امروزه در اکثر شاخه‌های علوم از جمله علم مواد و زیست مولکولی استفاده دارد.

پلیمرهای زیستی از تعداد بسیار زیادی ذره تشکیل شده‌اند، یکی از راه‌های بررسی خواص مکانیکی پلیمرها روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است. شبیه‌سازی پلیمرها اولین بار با مدل زنجیره‌ی یک بعدی، در سال ۱۹۵۰ توسط وال [۲۰] و دستیارانش آغاز شد. در سال ۱۹۷۹ وبر و هلفند [۲۱] با این روش خواص زنجیر پلی‌اتیلن را با یک مدل واقعی به صورت دقیقی محاسبه کردند.

۱.۴.۱ روش دینامیک مولکولی

در دینامیک مولکولی، ابتدا سیستمی شامل n ذره در داخل جعبه‌ای مکعبی به نام جعبه شبیه‌سازی در نظر گرفته می‌شود، بنا به ضرورت می‌توان جعبه را به شکل‌های دیگری نیز انتخاب کرد. مکان اولیه ذرات، با توجه به چگالی ماده و چینش اولیه‌ی ذرات مشخص می‌شود، در حال جایگذاری ذرات می‌توان به ذرات سرعت اولیه نیز داد. چگونگی انتساب سرعت‌های اولیه را میانگین انرژی جنبشی ذرات که مبین دمای محیط است، مشخص می‌کند.

با معلوم بودن پتانسیل میان ذرات، مدل برهمکنش‌ها از نظر ریاضی قابل حل است. برای هر ذره، جمع نیروهای وارد شده از طرف سایر ذرات را محاسبه کرده و شکل دیفرانسیلی قانون دوم نیوتن را می‌نویسیم. برای n ذره تعداد $6n$ معادله دیفرانسیل معمولی خواهیم داشت، سه معادله برای مکان و سه معادله برای سرعت ذره. حل تحلیلی این دستگاه معادلات برای n های بزرگتر از دو، بسیار سخت می‌شود. اما حل عددی دستگاه کاری به مراتب آسان‌تر است.

اگر برای تحول زمانی سیستم یک گام زمانی δt تعریف کنیم و پتانسیل کل به صورت U باشد، برای نیروهای وارد شده بر ذره‌ی i ام معادله‌ی حرکت نیوتنی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$m_i \vec{r}_i = \vec{f}_i, \quad \vec{f}_i = -\frac{\partial U}{\partial \vec{r}_i},$$

و یا به‌طور معادل:

$$\vec{r}_i = \vec{p}_i / m_i, \quad \vec{p}_i = -\frac{\partial U}{\partial \vec{r}_i}.$$

روندی که برای به دست آوردن مکان لحظه‌ای ذرات در دینامیک مولکولی استفاده می‌شود، به الگوریتم ورله (Verlet) معروف است، تحول زمانی سیستم در الگوریتم ورله از معادلات زیر به دست می‌آید.

$$\begin{aligned} \vec{p}_i(t + \frac{\delta t}{2}) &= \vec{p}_i(t) + \frac{1}{2} \delta t \times \vec{f}_i(t), \\ \vec{r}_i(t + \delta t) &= \vec{r}_i(t) + \frac{1}{m_i} \delta t \times \vec{p}_i(t + \frac{\delta t}{2}), \\ \vec{p}_i(t + \delta t) &= \vec{p}_i(t + \frac{\delta t}{2}) + \frac{\delta t}{2} \vec{f}_i(t + \frac{\delta t}{2}). \end{aligned}$$

با این روابط می‌توانیم مختصات ذرات را بعد از یک گام زمانی برحسب اطلاعات لحظه‌ی قبلی محاسبه کنیم. حال با استفاده از مختصات جدید ذرات می‌توان پتانسیل و نیروی جدید وارد شده به ذره‌ی i ام، در زمان $t + \delta t$ را حساب کرد.

سخت‌ترین و مهمترین قسمت روش دینامیک مولکولی مدل‌سازی برهمکنش میان ذرات است. پتانسیل کل توسط مدل تعریف می‌شود و از روی این پتانسیل نیروی وارد شده بر هر ذره محاسبه می‌شود. در این پایان‌نامه برای بررسی خواص مکانیکی میکرولوله‌ها، از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شده است.

فصل ۲

خواص آماری پلیمرها

پلیمر یک واژه یونانی است که از دو جزء «پلی» به معنای زیاد و «مر» به معنای قسمت، تشکیل شده است. پلیمر یک مولکول درشت است که از واحدهای شیمیایی کوچک زیادی تشکیل شده، که در یک فرآیند شیمیایی به هم وصل شده‌اند. برای مثال پلی اتیلن^۱ $CH_3 - (CH_2)_N - CH_3$ یک زنجیر بلند از مولکول‌های اتیلن^۲ ($CH_2 = CH_2$) و DNA یک مولکول فوق‌العاده بلند ساخته شده از 10^7 مولکول است. چنین مولکول‌های بزرگی یا به طور طبیعی در ترکیبات زیستی یا به صورت مصنوعی در اطراف ما وجود دارند، مانند پلاستیک، لاستیک و

برای مطالعه ویژگی‌های مواد پلیمری، باید رفتار جمعی مولکول‌های تشکیل دهنده را بررسی کنیم. برای این موضوع، ما به مکانیک آماری نیاز داریم تا خصوصیات هر مولکول پلیمر را به صورت مجزا بررسی کنیم. یکی از راه‌های این بررسی، قرار دادن زنجیر پلیمر در یک محلول بسیار رقیق است که برهمکنش با ذرات محلول نادیده گرفته می‌شود.

در این فصل برخی خواص یک زنجیر پلیمری در یک محلول به صورت نظری مطالعه می‌شود.

^۱ Polyethylene

^۲ Ethylene