بسم الله الرحمن الرحيم

بسمه تعالی

تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان نامه

آقای سید محمد جواد نیکزاد الحسینی پایان نامه ۸ واحدی خود را با عنوان مدلسازی نانو کامپوزیت های پلیمری تقویت شده با ساختار های کربنی در تاریخ ۱۳۸۸/۱۲/۱۸ ارائه کردند.

اعضای هیات داوران نسخه نهایی این پایان نامه را از نظر فرم و محتوا تایید کرده و پذیرش آنرا برای تکمیل درجه کارشناسی ارشد مهندسی مواد - نانو فناوری پیشنهاد می کنند.

عضو هیات داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضا
استاد راهنما	دکتر حمید رضا شاهوردی	استادیار	
استاد راهنمای دوم	دکتر هاشم رفیعی تبار	استاد	
استاد ناظر	دکتر حمید اسدی	استاد	
استاد ناظر	دکتر سهراب سنجابی	استادیار	
استاد ناظر	دکتر کراسوس غفوری	دانشیار	
مدیر گروه (یا نماینده گروه تخصصی)	دکتر سهراب سنجابی	استادیار	

آیین نامه چاپ پایان‌نامه (رساله)های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان نامه (رساله)های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه،دانش آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می‌شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله)ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده ۲: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان نامه کارشناسی ارشد/ رساله دکتری نگارنده در رشته است که در سال در دانشکده دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی سرکار خانم/جناب آقای دکتر ، مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر و مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر از آن دفاع شده است.»

ماده ۳: به منظور جبران بخشی از هزینه‌های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت‌چاپ) را به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می‌تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر درمعرض فروش قرار دهد.

ماده ۴: در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ شده رابه عنوان خسارت به دانشگاه تربیت‌مدرس، تأدیه کند.

ماده ۵: دانشجو تعهد و قبول می کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می‌تواندخسارت 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 ماده ۴ را از محل توقیف کتابهای عرضه شده‌نگارنده برای فروش، تامین نماید.

ماده ۶: اینجانب دانشجوی رشته

مقطع

تعهد فوق وضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی:

تاریخ و امضا:

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

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی 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 هیات علمی، دانشجویان، دانش آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهشهای علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرحهای تحقیقاتی که با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد ذیل را رعایت نمایند:

ماده ۱- حقوق مادی و معنوی پایان نامه‌ها / رساله‌های مصوب دانشگاه متعلق به دانشگاه است و هرگونه بهره‌برداری از آن باید با ذکر نام دانشگاه و رعایت آیین‌نامه‌ها و دستورالعمل‌های مصوب دانشگاه باشد.

ماده ۲- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجامع علمی باید به نام دانشگاه بوده و استاد راهنما مسئول مکاتبات مقاله باشد.

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

ماده ۳- انتشار کتاب حاصل از نتایج پایان نامه / رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی دانشگاه باید با مجوز کتبی صادره از طریق حوزه پژوهشی دانشگاه و بر اساس آئین نامه های مصوب انجام می‌شود.

ماده ۴- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق حوزه پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده ۵- این دستورالعمل در ۵ ماده و یک تبصره در تاریخ ۱۳۸٤/٤/۲۵ در شورای پژوهشی دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب لازم الاجرا است و هرگونه تخلف از مفاد این دستورالعمل، از طریق مراجع قانونی قابل پیگیری می شود.

نام و نام خانوادگی

امضاء

بسمه تعالی

دانشگاه تربیت مدرس
گروه نانو مواد

پایان نامه کارشناسی ارشد

مدلسازی نانو کامپوزیت هیدروکسی اپتایت تقویت شده با ساختارهای کربنی

تهیه کننده:

سید محمد جواد نیکزاد الحسینی

اساتید راهنما:

دکتر هاشم رفیعی تبار دکتر حمید رضا شاهوردی

زمستان ۸۸

تقدیم به:

مادر و پدر فداکار و مهربانم

و

همسر دلسوز و صبورم

با تشکر از اساتید راهنما آقای دکتر رفیعی تبار و آقای دکتر شاهوردی

و همچنین تشکر از آقای مهندس محمد علی غرآبادیان که در به سرانجام رسیدن این پایان نامه تلاش کردند

و تشکر نهایی از خانواده ام که با صبر و امید خود پیشرفت کار را میسر کردند

خلاصه

کاشتنی‌های پزشکی برای درمان آسیب دیدگی‌های بافت‌های استخوانی و دندانی در بدن انسان نقش مهمی دارند. کاشتنی‌های سرامیکی که اصولا از ماده سرامیکی هیدروکسی اپتایت ساخته می‌شوند دارای انطباق زیستی خوبی با بدن انسان هستند. هیدروکسی اپتایت ($Ca_5(PO_4)_3OH$) که ۷۰ درصد استخوان و بخش اعظم مینای دندان را تشکیل می‌دهد، دارای خواص جذبی مناسب و فراهم کننده محیط مستعد برای فعالیت سلول‌های استخوان ساز در محل آسیب دیده می‌باشد. مشکل اصلی هیدروکسی اپتایت خالص، تردی سرامیکی و کم بودن شکل پذیری آن است. با توجه به خواص الاستیکی بسیار خوب نانولوله‌های کربنی، برای رفع این مشکل می‌توان از اضافه کردن نانولوله‌های کربنی و ایجاد نانوکامپوزیت "هیدروکسی اپتایت + نانولوله کربنی" استفاده نمود. در این تحقیق با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی خواص مکانیکی این نانوکامپوزیت از جمله ضرایب الاستیک و نمودار تنش-کرنش محاسبه شده است. میدان نیروی استفاده شده COMPASS و روش تهیه نمودار تنش-کرنش "روش تنش ثابت با کرنش تک محوره" می باشد. همچنین از روش استاتیکی برای تعیین ضرایب الاستیک و از روش نوز-هوور برای کنترل دما استفاده شده است. نتایج تحقیق نشان می دهد که انعطاف پذیری نانوکامپوزیت نزدیک به دوبرابر و انرژی شکست آن دارای افزایش ۵۴ درصدی در جهت محور نانولوله نسبت به هیدروکسی اپتایت خالص است.

کلمات کلیدی : دینامیک مولکولی ، هیدروکسی اپتایت ، hydroxyapatite ، نمودار تنش-کرنش ، ضرایب الاستیک ، نانوکامپوزیت ، نانولوله کربنی ، میدان نیروی COMPASS ، شبیه سازی و مدلسازی سرامیک‌ها ،

فهرست مطالب

فهرست مطالب ..... أ

فهرست شکل ها و نمودارها ..... د

فهرست جدول ها ..... و

۱- مقدمه ۱

۲- مروری بر مطالب انجام شده ۴

۲-۱ مقدمه ای بر شبیه سازی و مدلسازی ۴

۲-۲ معرفی دینامیک مولکولی MD ۶

۲-۲-۱ معادلات حرکت ۶

۲-۲-۲ انتگرال گیری ۷

۲-۲-۳ هنگردهای آماری ۸

۲-۲-۴ خواص ترمودینامیکی تعادلی ۱۰

۲-۲-۵ روش های بهینه سازی ۱۱

۲-۳ مفهوم دما و روش های کنترل آن ۱۲

۲-۳-۱ محاسبه دما ۱۳

۲-۳-۲ کنترل دما ۱۳

۲-۴ فشار و تنش در دینامیک مولکولی ۱۶

۲-۴-۱ محاسبه فشار و تنش ۱۷

۲-۴-۲ کنترل فشار و تنش ۱۹

۲-۵ شیوه محاسبه خواص مکانیکی ۲۱

۲-۶ انرژی پتانسیل بین اتمی ۲۷

۲-۶-۱ پتانسیل های تجربی ۲۹

۲-۶-۲ میدان های نیرو ۳۰
۲-۶-۲-۱ میدان نیروی AMBER ۳۱
۲-۶-۲-۲ میدان نیروی CHARMM ۳۲
۲-۶-۲-۳ میدان نیروی CVFF ۳۲
۲-۶-۲-۴ میدان نیروی Dreiding ۳۳
۲-۶-۲-۵ میدان نیرو Universal ۳۳
۲-۶-۲-۶ میدان نیروی PCFF ۳۳
۲-۶-۲-۷ میدن نیروی COMPASS ۳۳
۲-۷ هیدروکسی اپتایت HAP : خواص و کاربردها ۳۶
۲-۷-۱ کاربرد ها ۳۷
۲-۷-۲ محدودیت ها ۴۰
۲-۷-۳ خواص و ویژگی ها ۴۰
۲-۸ نانولوله های کربنی ۴۲
۲-۸-۱ کاربردها ۴۳
۲-۸-۲ خواص مکانیکی CNT ۴۵
۲-۸-۳ ساختار ۴۵
۲-۹ نانو کامپوزیت های سرامیکی ۴۸
۲-۱۰ معرفی نرم افزار Material Studio ۵۰
۲-۱۱ جمع بندی و راهبرد تحقیق ۵۰
۳- روش انجام آزمایش ۵۳
۳-۱ ایجاد ساختار اولیه ۵۳
۳-۲ بررسی صحت مدل ۵۷
۳-۳ تهیه نمونه های آزمایش ۵۸
۳-۴ روش محاسبه ضرایب الاستیک ۶۱
۳-۵ روش تهیه نمودار تنش-کرنش ۶۳
۳-۵-۱ روش "کرنش ثابت" برای تهیه نمودار تنش-کرنش ۶۴
۳-۵-۲ روش "تنش ثابت" برای تهیه نمودار تنش-کرنش ۶۸

۳-۵-۳ روش "کرنش ثابت با تنش تک محوره" برای تهیه نمودار تنش-کرنش ۷۰

۴- نتایج ، بحث و پیشنهادات ۷۳

۴-۱ ضرایب الاستیک ۷۳

۴-۲ نمودار تنش-کرنش ۷۸

۴-۲-۱ روش "کرنش ثابت" ۷۸

۴-۲-۲ روش "تنش ثابت" ۸۳

۴-۲-۳ روش "کرنش ثابت با تنش تک محوره" ۸۴

۵- نتیجه گیری و پیشنهادات ۸۸

۶- فهرست مراجع ۹۱

فهرست شکل ها و نمودارها

شکل ۱-۱: روندنمای کلی تحقیق حاضر در مورد بررسی خواص نانوکامپوزیت HAP+CNT ۳

شکل ۲-۱: توزیع سرعت ماکسول-بولتزمن برای مولکول های آب در دماهای مختلف [۸] ۱۲

شکل ۲-۲: ساختار اتمی هیدروکسی اپتایت ۳۶

شکل ۲-۳: تصویر سه بعدی ساختار هیدروکسی اپتایت [۱۸] ۳۷

شکل ۲-۴: سنگ معدنی هیدروکسی اپتایت [۲۱] ۳۷

شکل ۲-۵: کریستال های هیدروکسی اپتایت در ساختار استخوان [۲] ۳۸

شکل ۲-۶: برش طولی استخوان ران [۲] ۳۸

شکل ۲-۷: ساختار دندان. (a) نمایش شماتیکی اجزاء دندان، (b) تصویر SEM از مینای دندان ، (c) تصویر SEMاز عاج دندان [۲] ۳۹

شکل ۲-۸: نانولوله های کربنی به صورت چرخدنده ۴۴

شکل ۲-۹: انواع مختلف نانولوله های کربنی ۴۶

شکل ۲-۱۰: پایه نانولوله کربنی . (a) ورقه گرافیتی با بردارهای شبکه a1,a2 . تعدادی نقطه روی شبکه مشخص شده که زاویه کایرال با آنها مشخص میشود. خطوط خط چین در راستای محیط نانولوله زیگزاگ و خطوط نقطه چین در راستای نانو لوله armchair رسم شده است. (b) یک نانولوله armchair(5,5) (c) یک نانولوله زیگزاگ (9,0). [۲۳] ۴۷

شکل ۳-۱: مراحل سه گانه انجام یک شبیه سازی اتمی ۵۳

شکل ۳-۲: سلول شبکه هیدروکسی اپتایت که ۴۴ اتم در داخل آن جای گرفته اند ۵۶

شکل ۳-۳: نانو لوله کربنی زیگزاگ (10,0) ۵۸

شکل ۳-۴: نماهای مختلفی از نمونه HAP خالص ۶۰

شکل ۳-۵: نانوکامپوزیت HAP+CNT در نماهای مختلف ۶۱

شکل ۳-۶: زوج های مرتب $(\varepsilon_i, \sigma_i)$ و ترسیم آنها در یک نمودار تنش-کرنش ۶۴

شکل ۳-۷: روند نمای تهیه نمودار تنش-کرنش به روش "کرنش ثابت". در این روند نما کرنش در راستای محور z اعمال شده است ۶۷

شکل ۳-۸: روند نمای تهیه نمودار تنش-کرنش به روش "تنش ثابت". در این روند نما تنش در راستای محور z اعمال شده است ۶۷

شکل ۳-۹: نمایش شماتیکی یک نمودار تنش-کرنش (خط توپر) و مشخص نبودن نقطه تنش حداکثر در روش تنش ثابت (خط نقطه چین) ۷۰

شکل ۳-۱۰: روند نمای تهیه نمودار تنش-کرنش به روش "کرنش ثابت با تنش تک محوره". در این روند نما کرنش در راستای محور z اعمال شده است..... ۷۲

شکل ۴-۱: نمودار مقایسه مدول یانگ در سه جهت اصلی در HAP خالص و نانوکامپوزیت HAP+CNT (نانولوله در جهت z)..... ۷۷

شکل ۴-۲: نمودار مقایسه مدول برشی (G)،مدول حجمی (K)، ضریب پواسون (v)، ثابت λ و ثابت μ در HAP خالص و نانوکامپوزیت HAP+CNT..... ۷۷

شکل ۴-۳: منحنی تنش-کرنش برای HAP به روش "کرنش ثابت" در راستای x..... ۷۹

شکل ۴-۴: منحنی تنش-کرنش برای HAP به روش "کرنش ثابت" در راستای y..... ۷۹

شکل ۴-۵: منحنی تنش-کرنش برای HAP به روش "کرنش ثابت" در راستای z..... ۸۰

شکل ۴-۶: منحنی تنش-کرنش برای نانو کامپوزیت HAP+CNT به روش "کرنش ثابت" در راستای x..... ۸۰

شکل ۴-۷: منحنی تنش-کرنش برای نانو کامپوزیت HAP+CNT به روش "کرنش ثابت" در راستای y..... ۸۱

شکل ۴-۸: منحنی تنش-کرنش برای نانو کامپوزیت HAP+CNT به روش "کرنش ثابت" در راستای z..... ۸۱

شکل ۴-۹: نمودار تنش-کرنش HAP خالص که توسط Ching [۴۱] ، با روش "کرنش ثابت" و از طریق محاسبات مکانیک کوانتومی تهیه شده است..... ۸۲

شکل ۴-۱۰: نمودار تنش-کرنش برای نمونه HAP خالص به روش "تنش ثابت" و در جهت z..... ۸۳

شکل ۴-۱۱: نمودارهای تنش-کرنش به روش "کرنش ثابت با تنش تک محوره" در جهت x برای HAP خالص و نانوکامپوزیت HAP+CNT..... ۸۴

شکل ۴-۱۲: نمودارهای تنش-کرنش به روش "کرنش ثابت با تنش تک محوره" در جهت y برای HAP خالص و نانوکامپوزیت HAP+CNT..... ۸۵

شکل ۴-۱۳: نمودارهای تنش-کرنش به روش "کرنش ثابت با تنش تک محوره" در جهت z برای HAP خالص و نانوکامپوزیت HAP+CNT..... ۸۵

شکل ۴-۱۴: مقایسه نمودار تنش-کرنش در کار محاسباتی حاضر با کار تجربی [۵۴] برای hap خالص..... ۸۶

شکل ۴-۱۵: مقایسه سطح زیر نمودار تنش-کرنش در نمونه hap خالص و نانوکامپوزیت hap+cnt..... ۸۶

شکل ۵-۱: چند نمونه از چینش های مختلف نانولوله کربنی در هیدروکسی اپتایت. a) نانولوله کوتاه، b) دو نانولوله به صورت عمود برهم، c) دو نانولوله با زاویه ۴۵ درجه، d) دو نانولوله موازی باهم..... ۹۰

فهرست جدول ها

جدول ۲-۱: درصد وزنی اجزا تشکیل دهنده هیدروکسی اپتایت [۲۰] ۴۱

جدول ۲-۲: خواص فیزیکی و مکانیکی هیدروکسی اپتایت [۲۰] و [۲] ۴۱

جدول ۲-۳: هم خانواده های هیدروکسی اپتایت [۲۰] ۴۲

جدول ۳-۱: اطلاعات مربوط به سلول شبکه هیدروکسی اپتایت [۴۸] ۵۴

جدول ۳-۲: مختصات نسبی اتم های اصلی تشکیل دهنده سلول شبکه هیدروکسی اپتایت [۴۸] ۵۵

جدول ۳-۳: اپراتورهای گروه فضایی $P6_3/m$ که موقعیت اتم های تقارنی را در هیدروکسی اپتایت مشخص میکنند ۵۶

جدول ۳-۴ : ماتریس ضرایب سختی نانولوله کربنی با استفاده از میدان نیروی COMPASS ۵۷

جدول ۳-۵: مشخصات سلول شبیه سازی نمونه اول ۵۹

جدول ۳-۶: مراحل شش گانه اعمال کرنش به سلول شبکه و محاسبه ۳۶ مولفه ماتریس ضرایب سختی ۶۲

جدول ۴-۱: ۲۱ ضریب سختی مستقل در HAP خالص به همراه خطا ۷۳

جدول ۴-۲: مقایسه ضرایب سختی و خواص الاستیکی HAP با کارهای محاسباتی و تجربی دیگر ۷۴

جدول ۴-۳: ۲۱ ضرایب سختی مستقل در نانوکامپوزیت HAP+CNT به همراه خطا ۷۵

۱- مقدمه

از مهمترین بخش‌های ساختمانی بدن انسان ، بافت‌های استخوانی می‌باشد. هنگامی که بر اثر یک حادثه ، استخوان انسان آسیب دیده و شکسته یا خرد شود ، بسته به نوع آسیب از مواد پرکننده یا کاشتنی در محل آسیب دیده استفاده می‌کنند.

در مواد کاشتنی[1] که به عنوان جایگزین در قسمت آسیب دیده استخوان یا دندان انسان به کار می‌رود از فولاد زنگ نزن آستینیتی ، آلیاژ Co-Cr-Mo ، و آلیاژهای پایه تیتانیوم به صورت وسیعی استفاده گشته است. این مواد به علت داشتن استحکام و شکل پذیری خوب توانایی تحمل بار وارد شده را به خوبی دارند. اما مدول الاستیک (ضریب کشسانی) کاشتنی‌های فلزی به خوبی با استخوان انسان مطابقت نداشته که این امر می‌تواند منجر به ایجاد تنش و تغییر فرم و کاهش چسبندگی و رشد استخوان در محل کاشت گردد. علاوه بر این آلیاژهای فلزی اغلب از خوردگی حفره ای و ترک‌های ناشی از خوردگی تحت فشار که در محیط بدن انسان فراهم است آسیب می‌بینند. از این منظر ، مواد سرامیکی دارای برتری‌های مشخصی نسبت به کاشتنی‌های فلزی هستند. انطباق پذیری سرامیک‌ها با سلول‌ها و بافت استخوانی بسیار بهتر است[۱].

با توجه به اینکه ۷۰درصد استخوان و بخش اعظم مینای دندان از سرامیک هیدروکسی اپتایت[2] (HAP) تشکیل شده است و ویژگی‌های منحصر به فرد این سرامیک از لحاظ تشابه فیزیکی و شیمیایی با بخش‌های ساختمانی بدن ، بهترین گزینه برای کاشتنی‌های سرامیکی ، هیدروکسی اپتایت (HAP) می-باشد[۲].

از مزایای کاشتنی‌های هیدروکسی اپتایت، سازگاری خوب با بدن انسان، تسریع در ترمیم استخوان، امکان فعالیت سلول‌های استخوان ساز روی سطح آن، نزدیک بودن خواص الاستیکی آن به استخوان و دندان می‌باشد[۱]. مشکل عمده این ماده که ناشی از ساختار سرامیکی آن است ، تردی زیاد و شکل پذیری پایین آن می‌باشد که در اثر آن ، رشد ترک در هیدروکسی اپتایت خالص سریع بوده و به راحتی شکسته می‌شود .

هیدروکسی اپتایت خالص که با روش‌های زینترینگ عادی تهیه شده استحکام تسلیم و شکل پذیری پایینی دارد. دمای زینتر بالا و زمان طولانی زینتر اغلب باعث درشت شدن دانه‌ها و تجزیه HAP می‌گردد. استحکام شکست آن از $1\ Mpa/\sqrt{m}$ بیشتر نمی‌شود که از استخوان ($2\text{-}12\ Mpa/\sqrt{m}$) خیلی کمتر

[1] Implant
[2] Hydroxyapatite

است[۳]. در برخی تلاش‌ها برای افزایش خواص HAP ، دانه‌های آن نانومقیاس شده که این کار اگرچه استحکام را بالا می‌برد ولی شکل پذیری را به میزان قابل توجهی کاهش می‌دهد.

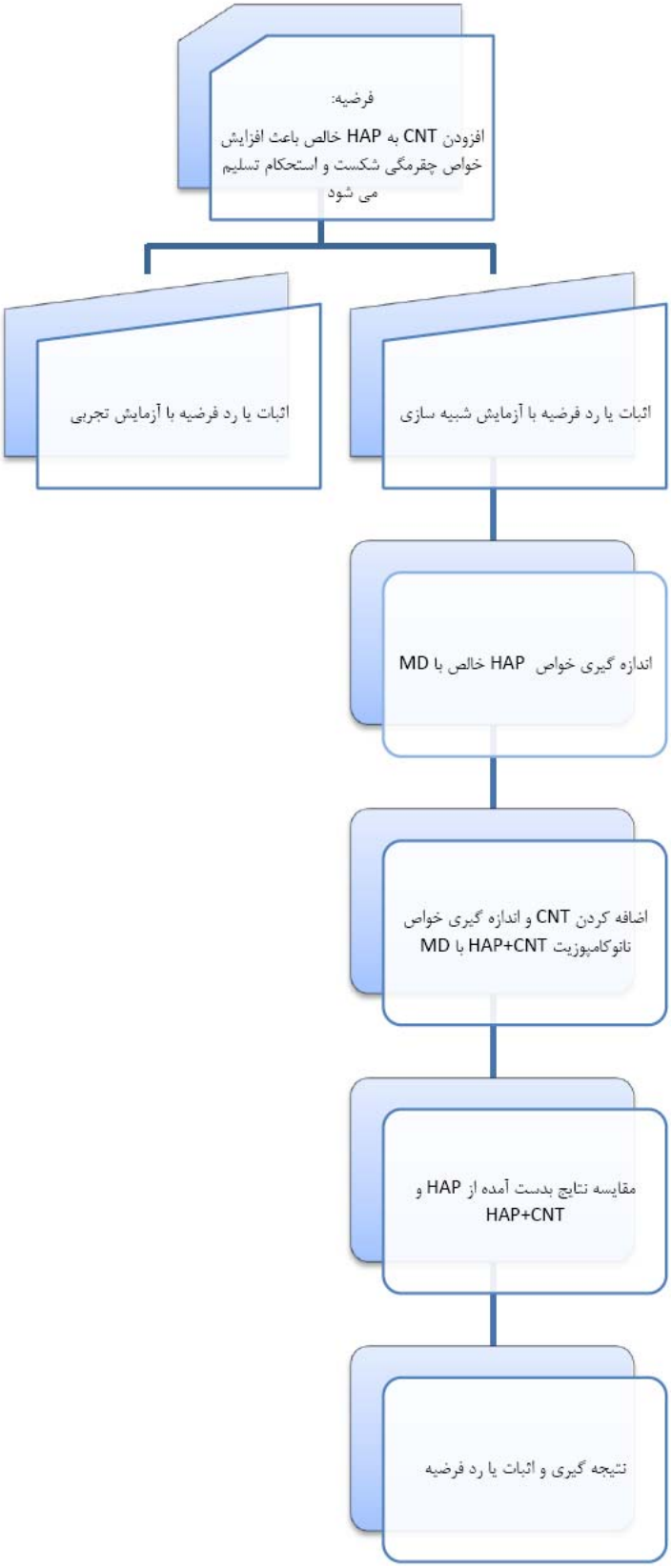
قبلاً از هیدروکسی اپتایت به عنوان پوشش پلاسما روی کاشتنی‌های فلزی استفاده می‌شده که این روش دارای معایبی مانند بی ثباتی HAP و تمایل آن به جدا شدن و تبدیل شدن به تری کلسیم فسفات[۱]، تتراکلسیم فسفات[۲] و همچنین ایجاد اکسید کلسیم ناسازگار با بدن در حین فرایند پلاسما می‌باشد[۴]. عدم تشابه الاستیکی کاشتنی فلزی و خوردگی شیمیایی آن بعد از جدا شدن پوشش HAP ، از دیگر معایب این کاشتنی‌ها می‌باشد.

با توجه به خواص الاستیکی فوق العاده نانولوله کربنی[۳] (CNT) و نتایج خوب مربوط به نانوکامپوزیتی کردن مواد دیگر با افزودن CNT، می‌توان برای رفع معایب HAP خالص ، از نانوکامپوزیت HAP+CNT استفاده گردد. بنابراین با توجه به این فرضیه، با افزودن CNT ، می‌توان به تردی ذاتی HAP و شکست ترد آن فائق آمد. علاوه بر این افزودن CNT باعث تقویت مقاومت به سایش در سرامیک‌ها می‌گردد. عیوب سایشی در کاشتنی‌های رایج منجر به شل شدن اتصالات و عمل جراحی مجدد برای بیمار می‌گردد. هیدروکسی اپتایت می‌تواند با افزایش شکل پذیری از طریق نانوکامپوزیت شدن آن با CNT به عنوان یک ماده عالی با استحکام ، شکل پذیری ، مقاومت به سایش و انطباق زیستی مناسب معرفی شود. برای بازیابی شکل پذیری از نانولوله‌های کربنی می‌توان استفاده نمود. طبق تحقیقات انجام شده CNTها رفتار تطابق زیستی عالی از خود نشان می‌دهند و با سلول‌های استخوان سازگاری دارند[۵].

در این تحقیق ، مقایسه بین خواص الاستیکی، استحکام و شکل پذیری HAP خالص و نانوکامپوزیت HAP+CNT بوسیله شبیه سازی دینامیک مولکولی[۴] (MD) انجام می‌شود که در شکل ۱-۱ روند کلی آن نشان داده شده است.

---

[1] TCP
[2] TTCP
[3] Carbon NanoTube
[4] Molecular Dynamics



شکل ۱-۱: روندنمای کلی تحقیق حاضر در مورد بررسی خواص نانوکامپوزیت HAP+CNT

۲- مروری بر مطالب انجام شده

در این بخش توضیحاتی در مورد شبیه سازی دینامیک مولکولی و روش اندازه گیری خواص مکانیکی بوسیله آن داده می‌شود. پس از آن به خواص و کاربردهای هیدورکسی اپتایت و نانولوله کربنی اشاره و نگاهی به نانوکامپوزیت‌های سرامیکی می‌گردد. در پایان جمع بندی مطالب گفته شده و راهبرد کلی تحقیق حاضر بیان می‌شود.

۲-۱ مقدمه ای بر شبیه سازی و مدلسازی

شبیه سازی تقلید یک پدیده واقعی یا وضعیت اجتماعی یا یک فرایند است و معمولاً متضمن نمایش شماری ویژگی‌ها یا رفتارهای کلیدی در یک سامانهٔ فیزیکی یا انتزاعی است. شبیه سازی رایانه ای به علم محاسبه خواص سامانه[1] فیزیکی بر اساس مدل ریاضی ایجاد شده در نرم افزار رایانه ای گفته می‌شود. این روش‌ها معمولا شامل حل معادلات دیفرانسیل حاکم بر سامانه به صورت عددی می‌باشند.

در یک شبیه سازی رایانه ای به حالت‌های سامانه مقدار عددی نسبت داده می‌شود. بنابراین این حالت‌ها (حداقل برای مولکول‌های سامانه) تبدیل به مشاهده پذیر می‌شوند. پس از آن می‌توان با استفاده از رابطه‌های نظری مقدار مشاهده پذیرهایی را که در تجربه قابل دسترس هستند محاسبه کرد. شبیه سازی-های رایانه ای نقش ارزشمندی در حل بعضی از مسایل مکانیک آماری ایفا می‌کنند. مسایلی که بدون وجود شبیه سازی فقط با استفاده از روش‌های تقریبی قابل حل هستند و گاهی نیز اساسا روش دیگری برای حل آن‌ها وجود ندارد. شبیه سازی از یک سو ابزاری برای آزمودن نظریه‌ها فراهم می‌کند و از سویی دیگر می‌توان نتایج حاصل از شبیه سازی‌ها را به طور مستقیم با نتایج تجربی مقایسه کرد. شبیه سازی‌های رایانه ای ویژگی‌های میکروسکوپی یک سامانه (جرم اتم ها، برهم کنش‌های آن ها، ساختار هندسی مولکولی و ...) را به خواص ماکروسکوپی آن (معادله حالت، ضرایب انتقال، پارامترهای ترتیب ساختاری و ...) پیوند می‌دهند، خواصی که از دیدگاه تجربی از اهمیت چشم گیری برخوردار است.

در یک مدل تلاش می‌شود تا بر هم کنش‌هایی که اثر کمی بر مشاهده پذیرهای مورد مطالعه دارند یا بر آن‌ها بی تاثیرند، تفکیک یا حذف شود. در نتیجه یک مدل، ساده تر از سامانه ای است که از آن الگو می-گیرد. به این معنا که به حالت‌های کم تری دسترسی دارد. تفکیک برهم کنش‌ها به معنای برداشتن محدودیت هاست ، در نتیجه یک مدل به حالت‌هایی دسترسی دارد که برای سامانه اصلی قابل دسترسی

[1] system

نیست و برعکس. به عبارتی یک مدل یک زیر مجموعه یا زیر سامانه از یک سامانه اصلی است. بنابراین خروجی‌هایی که مدل برای ورودی‌ها معدود لحاظ می‌کند مشابه حالت‌هایی است که به وسیله سامانه اصلی بازدید می‌شوند.

یک شبیه سازی عموماً می‌تواند به تعداد حالت‌های بسیار بیشتری نسبت به سامانه اصلی دست یابد. بنابراین، در شبیه سازی‌ها محدودیت‌هایی اعمال می‌شود تا خروجی شبیه سازی شده ، دست کم برای مجموعه معدودی از ورودی‌ها با خروجی سامانه اصلی سازگار باشد. یک شبیه سازی اصولا هیچ رابطه ساختاری با سامانه اصلی ندارد به عنوان مثال شیوه اعمال محدودیت‌ها در شبیه سازی ممکن است با مکانیسمی که سامانه اصلی را به حالت‌ها معینی محدود می‌کند تفاوت داشته باشد. [۶]

برخی شبیه سازی‌های رایانه ای مورد استفاده عبارتند از [۷]

۱) مقیاس ماکرو[۱]
   a) روش المان محدود : در محاسبه خواص حرارتی ، نفوذ جرم، مکانیک جامدات و سیالات و ...
   b) روش تفاضل محدود: مشابه روش المان محدود با تفاوت در محاسبه معادلات دیفرانسیل و با محدودیت در مستطیلی بودن مش‌ها
   c) روش شبکه عصبی : به دست آوردن مدل ریاضی حاکم بر داده‌های تجربی موجود
   d) روش‌های پیوسته بدون مش
۲) مقیاس مزو[۲]
   a) نابجایی‌های ساکن و متحرک در مواد
   b) مدل‌های الاستیک و پلاستیک پلی کریستال ها
   c) مدل میدان فازی گینزبرگ-لاندا[۳]
   d) اتوماتای سلولی[۴] CA
   e) نظریه میدان میانگین دینامیکی[۵]
   f) دینامیک ذرات پراکنده[۶]
۳) مقیاس نانو[۱]

---

[1] macro scale
[2] meso scale
[3] Ginzburg-Landau
[4] Cellular Automata
[5] Dynamic Mean Field Theory- Mesodyn
[6] DPD

a) شبیه سازی اتمی
   i) دینامیک مولکولی[۲]
   ii) مونت کارلو[۳]
   iii) روش‌های کوانتومی با محاسبه تابع چگالی الکترونی [۴]

۲-۲ معرفی دینامیک مولکولی MD

شبیه سازی دینامیک مولکولی را می‌توان روی یک سامانه دارای ساختار اولیه و انرژی مشخص شده بین اجزاء آن انجام داد. پایه این شبیه سازی معادلات حرکت کلاسیک هستند که با تغییراتی برای ارتباط اثرات دما و فشار مناسب سازی شده اند. خروجی اصلی دینامیک مولکولی فایل مسیرهای اتمی[۵] می‌باشد که موقعیت‌های اتمی ، سرعت‌ها و اطلاعات دیگری را در طول زمان شبیه سازی ذخیره می‌کند.

۲-۲-۱ معادلات حرکت

در ساده ترین بیان ، دینامیک مولکولی معادله معروف نیوتن را حل می‌کند.

معادله ۲-۱

$$\mathbf{F}_i(t) = m_i \mathbf{a}_i(t)$$

که $\mathbf{F_i}$ نیرو ، m_i جرم و $\mathbf{a_i}$ شتاب اتم i ام هستند. نیروی روی اتم i را می‌توان از مشتق اول انرژی پتانسیل V نسبت به مختصات $\mathbf{r_i}$ به دست آورد.

معادله ۲-۲

$$-\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i} = m_i \frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2}$$

معادلات حرکت کلاسیک تعیّنی[۶] هستند. یعنی اگر موقعیت‌ها و سرعت‌های اولیه معین باشند، موقعیت‌ها و سرعت‌ها در گام زمانی بعدی نیز قابل تعیین می‌باشند. مجموعه موقعیت و سرعت‌های اتم‌ها در طول گام‌های زمانی را مسیرهای اتمی می‌گویند که وابسته به شرایط اولیه و انرژی سامانه می‌باشد.

---

[1] nano scale
[2] Molecular Dynamics
[3] Mont Carlo
[4] DFT
[5] trajectory file
[6] deterministic