



دانشگاه شهید چمران اهواز  
دانشکده علوم (شیمی)

پایان نامه کارشناسی ارشد  
(شیمی فیزیک)

موضوع:

شبیه سازی دینامیک مولکولی تابع توزیع شعاعی  
برای سیال های نئون و کریپتون

نگارنده:

فریال فرید

استاد راهنما:

دکتر مهرداد بامداد

استاد مشاور:

دکتر سیامک نوری زاده

خرداد ۱۳۸۸

خورشید برای من طلوع می کند،  
زمین برای من در گردش است،  
ابرها برای من می بارند  
و خدا همیشه منتظر من است و من او را دارم.  
پس چرا سبز نباشم.

سپاس خدای را که بر ما منت زیستن نهاد و از تاریکی های جهل به روشنایی نور  
هدایت نمود.

تقدیم به پدرم.....

هرچند که در ابتدای راه از وجود ارزشمندش بی بهره ماندم ولی یاد و نامش  
همواره موجب افتخار و مباهاتم بوده است. امیدوارم که جایگاه فعلی ام موجب  
شادی روح ایشان گردد.

تقدیم به اسطوره صبر و فداکاری، مادرم

او که وجودم برایش همه رنج و وجودش برایم همه مهر و امید  
او که دعایش بزرگترین سرمایه زندگی است.

تقدیم به خواهرانم، فرناز و فرنوش

برادرم، علی

که لذت زندگی و زیبایی های آن را با وجود آنها لمس می کنم و  
و محبت را در امواج نگاهشان.

تقدیر و تشکر از استاد گرامی ام جناب آقای دکتر مهرداد بامداد  
که در تمام مراحل این پایان‌نامه دلسوزانه مرا همراهی نمودند. امیدوارم با  
ارایه این پایان‌نامه توانسته باشم گوشه کوچکی از زحماتشان را جبران کنم.

و در پایان تقدیم به تمام کسانی که مدتی از روز را صرف خلق کردن می‌کنند.

دانشگاه شهید چمران اهواز

مدیریت تحصیلات تکمیلی

شماره:.....

تاریخ:.....

پیوست:.....

بسمه تعالی

( نتیجه ارزشیابی پایان نامه دوره کارشناسی ارشد)

بدینوسیله گواهی می‌گردد پایان‌نامه خانم فریال فرید دانشجوی رشته شیمی فیزیک از دانشکده علوم به شماره دانشجویی ۸۵۲۳۱۰۲ تحت عنوان:

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تابع توزیع شعاعی برای سیال‌های نئون و کریپتون

جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد در تاریخ ۱۳۸۸/۳/۲۷ توسط هیئت داوران مورد ارزشیابی قرار گرفت و با درجه تصویب گردید.

امضاء	مرتبه عالی	۱- اعضا هیئت داوران:
	استادیار	الف) استاد راهنما: دکتر مهرداد بامداد
	دانشیار	ب) استاد مشاور: دکتر سیامک نوری زاده
	استاد	ج) داور ۱: دکتر هوشنگ پرهام
	استادیار	د) داور ۲: دکتر عبدالهادی فرخ نیا
		ه) نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه (استاد ناظر):
	استاد	دکتر علیرضا کیاست
	استاد	۲- مدیر گروه: دکتر هوشنگ پرهام
		۳- معاون پژوهشی تحصیلات تکمیلی دانشکده:
	استاد	دکتر ناهید پوررضا
		۴- مدیر کل تحصیلات تکمیلی دانشگاه:
	استادیار	دکتر عبدالرحیم هوشمند

چکیده پایان نامه

نام خانوادگی دانشجو: فرید	نام: فریال
عنوان پایان نامه: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تابع توزیع شعاعی برای سیال‌های نئون و کریپتون	
استاد راهنما: دکتر مهرداد بامداد	
درجه تحصیلی: کارشناسی ارشد	رشته: شیمی
محل تحصیل: دانشگاه شهید چمران اهواز	گرایش: شیمی فیزیک
تاریخ فارغ التحصیلی: خرداد ۸۸	دانشکده: علوم
تعداد صفحه: ۱۰۰	
واژه‌های کلیدی: تابع توزیع شعاعی - شبیه‌سازی دینامیک مولکولی - سیال نئون - سیال کریپتون - پتانسیل عزیز	
<p>چکیده:</p> <p>تابع توزیع شعاعی مهم‌ترین ویژگی ساختاری مواد است. این تابع بیانگر احتمال یافتن یک مولکول در فاصله‌ی خاص از یک مولکول مرکزی اختیاری است که با <math>g(r)</math> نمایش داده می‌شود که <math>r</math> فاصله‌ی بین مولکولی است. در عمل می‌توان چنین اندیشید که <math>\rho g(r)</math> نمایانگر چگالی محلی مولکول‌ها در تعادل و در فاصله‌ی <math>r</math> از مولکول مرکزی است.</p> <p>با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، تابع توزیع شعاعی در محدوده‌ی وسیعی از دما و چگالی براساس پتانسیل دقیق بین اتمی کریپتون و نئون، شبیه‌سازی شده است. برای این منظور پتانسیل‌های جدید XC برای کریپتون و نئون استفاده شده و تابع توزیع شعاعی شبیه‌سازی شده است. شبیه‌سازی‌ها براساس روش دینامیک مولکولی کلاسیکی با مجموعه‌های <math>NVE</math> و شرایط مرزی دوره‌ای برای ۸۶۴ ذره انجام شده است. الگوریتم سرعت ولت برای انتگرال‌گیری از معادلات حرکت به کاررفته و شبیه‌سازی در <math>100000</math> مرحله با <math>\Delta t^* = 0.001</math> و شعاع قطع <math>2.5\sigma</math> برای نئون و <math>3.5\sigma</math> برای کریپتون انجام شده است.</p> <p>تابع توزیع شعاعی شبیه‌سازی شده روابط حدی زیر را تامین می‌کند</p> <p>الف- در چگالی صفر به حد گاز ایده‌ال، یک میل می‌کند.</p> <p>ب- در فواصل بین مولکولی زیاد به یک کاهش می‌یابد.</p> <p>علاوه بر این تابع توزیع شعاعی شبیه‌سازی شده باید قله‌ی اول را در فاصله‌ی برخوردی نمایش دهد. در دومین مرحله، برازش داده‌های شبیه‌سازی شده با عبارت ساده‌ی تحلیلی که شامل ده پارامتر تنظیم‌پذیر می‌باشد انجام شده است. مناسب بودن برازش با محاسبه‌ی درصد خطای میانگین، بین داده‌های شبیه‌سازی شده و عبارت تحلیلی در تمامی محدوده‌ی دما و چگالی سنجیده شده است. نتایج بیانگر توافق عالی بین داده‌های شبیه‌سازی شده و عبارت تحلیلی است.</p>	



## فصل اول

### شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

- ۱-۱- آزمایش‌های کامپیوتری..... ۱
- ۲-۱- اهداف شبیه‌سازی دینامیک مولکولی..... ۲
- ۳-۱- دینامیک مولکولی..... ۴
- ۱-۳-۱- دینامیک نیوتنی..... ۴
- ۲-۳-۱- دینامیک هامیلتونی..... ۵
- ۴-۱- معادلات حرکت..... ۶
- ۵-۱- مسیرهای فضای فاز..... ۸
- ۶-۱- برهم‌کنش‌های مولکولی..... ۱۲
- ۷-۱- شرایط مرزی..... ۱۴
- ۸-۱- شرایط مرزی تناوبی..... ۱۵
- ۹-۱- پتانسیل قطع شده..... ۱۷
- ۱۰-۱- انتگرال‌گیری از معادلات حرکت..... ۱۸

۲۲	..... ۱-۱۰-۱- الگوریتم ورت
۲۴	..... ۱-۱۱-۱- الگوریتم‌هایی با درجات بالاتر
۲۵	..... ۱-۱۲-۱- اندازه‌گیری کمیت‌های آماری ساده
۲۶	..... ۱-۱۲-۱- انرژی پتانسیل
۲۶	..... ۱-۱۲-۲- انرژی جنبشی
۲۶	..... ۱-۱۲-۳- انرژی کل
۲۷	..... ۱-۱۲-۴- دما
۲۷	..... ۱-۱۲-۵- فشار

## فصل دوم

### تابع توزیع شعاعی

۳۱	..... ۲-۱- معرفی
۳۱	..... ۲-۲- به دست آوردن تابع توزیع شعاعی
۳۴	..... ۲-۳- ویژگیهای تابع توزیع شعاعی
۳۸	..... ۲-۴- ارتباط برخی توابع ترمودینامیکی با تابع توزیع شعاعی
۳۸	..... ۲-۴-۱- انرژی
۴۰	..... ۲-۴-۲- فشار
۴۱	..... ۲-۵- تاثیر چگالی بر تابع توزیع شعاعی



## فصل سوم

### بحث و نتیجه گیری

۴۶	۱-۳- مقدمه.....
۴۶	۲-۳- معرفی پتانسیل‌های ازین.....
۴۶	۱-۲-۳- پتانسیل XC.....
۴۹	۲-۲-۳- پتانسیل HFD.....
۴۹	۳-۳- انتخاب پتانسیل.....
۵۰	۴-۳- منحنی‌های پتانسیل.....
۵۲	۵-۳- تعیین محدوده تولید تابع توزیع شعاعی.....
۵۲	۱-۵-۳- کمیت‌های کاهش یافته.....
۵۸	۶-۳- روش شبیه‌سازی.....
۵۹	۷-۳- بهینه‌سازی شرایط.....
۶۱	۸-۳- همگرایی در شبیه‌سازی.....
۶۳	جدول.....
۶۷	نمودار.....
۸۰	۹-۳- ارزیابی یک تابع ریاضی برای RDF شبیه‌سازی شده.....
۸۴	جدول برازش.....
۹۰	نمودار برازش.....
۹۶	۱۰-۳- بحث و نتیجه‌گیری.....





## ۱-۱- آزمایش‌های کامپیوتری

اولین بار ورلت<sup>۱</sup> در سال ۱۹۶۷ عبارت آزمایش‌های کامپیوتری را به‌کار برد [۱و۲]. در واقع آزمایش کامپیوتری به محاسباتی گفته می‌شود که در آنها داده با استفاده از محاسبات کامپیوتری به‌دست می‌آید.

امروزه آزمایش‌های کامپیوتری نقش مهمی در علم بازی می‌کنند [۲]. در گذشته علوم فیزیکی به‌وسیله اثر متقابل بین آزمایش و نظریه مشخص می‌شدند. در آزمایش، سیستم موضوع مورد اندازه‌گیری است و نتایج به شکل عددی به‌دست می‌آیند. در نظریه، یک مدل از سیستم ساخته می‌شود و معمولاً به شکل معادلات ریاضی بیان می‌شود [۳]. مدل، به‌وسیله توانایی آن برای توصیف رفتار سیستم در یک مورد انتخاب شده تایید می‌شود و در موارد زیادی به میزان قابل توجهی ساده‌سازی صورت می‌گیرد. این ساده‌سازی به منظور حذف همه پیچیدگی‌های مربوط به مسائل جهان واقعی است. در مدل‌های پیچیده شیمیایی مثل مولکول‌های آلی، مولکول‌های چند اتمی، خوشه‌ها و ... که درجه آزادی بیشتری نسبت به یک مدل ساده دارند برای نشان دادن رفتار واقعی سیستم تقریب‌هایی مورد نیاز است. با پیدایش کامپیوترهای با سرعت بالا، مدل بر اساس نظریه ارایه می‌شود ولی محاسبات به وسیله کامپیوتر انجام می‌گردد و الگوریتم نیز به وسیله یک زبان برنامه‌نویسی مناسب نوشته می‌شود. در این صورت می‌توان پیچیدگی‌های سیستم واقعی را وارد محاسبات کرد و همچنین بیشتر سیستم‌های واقعی را می‌توان بررسی کرد. در اثر گسترش وسیع آزمایش‌های کامپیوتری، اصلاح اساسی در ارتباط نظریه و آزمایش به‌وجود می‌آید. از طرف دیگر گسترش شبیه‌سازی‌های کامپیوتری امکان به‌وجود آوردن مدل‌های دقیق‌تر را فراهم می‌نماید.

اکنون می‌توان مدل‌ها را براساس برهمکنش‌های بین ذرات بنا کرد. این روش برای مدل نظری در گذشته وجود نداشته بنابراین شبیه‌سازی، مدل‌ها را به سمت واقعیت می‌آورد [۳]. شبیه‌سازی برای فهمیدن و تفسیر آزمایش‌ها در مقیاس میکروسکوپی و آزمایش‌های پرهزینه و آزمایش‌هایی که شرایط انجام آنها مشکل است، کاربرد دارد.

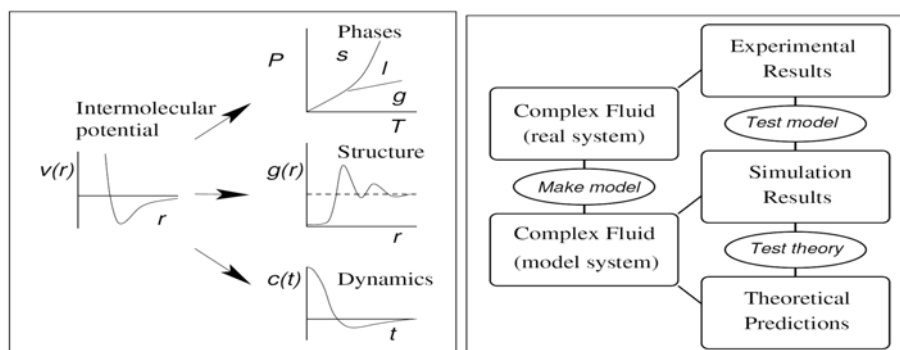
### ۲-۱- اهداف شبیه‌سازی دینامیک مولکولی<sup>۱</sup>

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی روشی برای محاسبه‌ی خواص تعادلی و مطالعه ویژگی‌های یک سیستم کلاسیکی چند ذره‌ای است [۴]. شبیه‌سازی کامپیوتری با امید درک خواص مجموعه‌ای از مولکول‌ها یا به عبارتی ساختار آنها و برهمکنش‌های میکروسکوپی میان آنها انجام می‌شود. شبیه‌سازی مکمل آزمایش‌های کامپیوتری به‌شمار می‌رود که در یادگیری مسائل جدید و مسائلی که از راه‌های دیگر امکان کشف آنها وجود ندارد به ما کمک می‌کند [۵]. در واقع شبیه‌سازی دینامیک مولکولی شباهت بسیار زیادی با آزمایش‌های واقعی دارد. برای انجام یک آزمایش تجربی ابتدا باید نمونه‌ای از ماده‌ای که باید مورد مطالعه قرار بگیرد آماده شود. سپس این نمونه به دستگاه‌های اندازه‌گیری (دماسنج و فشارسنج و یا ویسکومتر) متصل و ویژگی‌های مورد نظر این ماده در مدت زمان مشخصی اندازه‌گیری گردد. اگر اندازه‌گیری‌ها از نظر آماری با هم اختلاف داشته باشند می‌توان از داده‌ها میانگین گرفت که از نظر آماری دقت بیشتری خواهد داشت.

در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نیز دقیقاً همین مراحل طی می‌شود. ابتدا باید نمونه آماده شود. به این صورت که یک سیستم  $N$  ذره‌ای به عنوان مدل

انتخاب می‌شود و معادلات حرکت نیوتن برای این سیستم حل می‌شود تا جایی که ویژگی‌های سیستم با گذشت زمان تغییر نکند (سیستم به تعادل رسیده باشد). بعد از تعادل، اندازه‌گیری اصلی شروع می‌شود. در واقع رایج‌ترین خطاهایی که ممکن است در یک آزمایش کامپیوتری رخ دهد کاملاً مشابه خطاهایی است که در یک آزمایش واقعی رخ می‌دهد. برای مثال نمونه به طور صحیح آماده نشده باشد، مدت زمان اندازه‌گیری خیلی کوتاه باشد، در مدت زمان اندازه‌گیری، سیستم دستخوش تغییرات برگشت‌ناپذیر شده باشد و یا کمیت اندازه‌گیری شده تغییر کرده باشد.

به‌طور کلی شبیه‌سازی به دو دسته تقسیم می‌شود که عبارتند از: دینامیک مولکولی (MD) و مونت کارلو (MC)<sup>۱</sup>. البته روش‌های ترکیبی که از ترکیب ویژگی‌های هر دو روش به وجود آمده‌اند نیز وجود دارند. شبیه‌سازی کامپیوتری به عنوان پلی میان اندازه‌های میکروسکوپی و مقیاس زمانی و جهان ماکروسکوپی آزمایشگاه عمل می‌کند؛ شکل (۱-۱). به این صورت که بر اساس حدسی که از برهمکنش‌های میان مولکول‌ها زده می‌شود می‌توان خاصیت‌های توده‌ای را به صورت دقیق پیش‌بینی کرد. پیش‌بینی‌ها به این علت دقیق هستند که تا جایی که کامپیوتر توانایی داشته باشد می‌توان میزان دقت را انتخاب کرد. شبیه‌سازی به عنوان پلی میان نظریه و تجربه عمل می‌کند. می‌توان یک نظریه را با استفاده از شبیه‌سازی مدل آن، آزمایش کرد. ممکن است مدل در مقایسه با نتایج تجربی سنجیده شود و همچنین می‌توان از شبیه‌سازی در مواردی که امکان انجام آزمایش در آزمایشگاه وجود ندارد برای مثال در فشار یا دماهای خیلی بالا استفاده کرد [۵].



شکل (۱-۱): شبیه‌سازی کامپیوتری به عنوان پلی میان اندازه‌های میکروسکوپی و مقیاس زمانی و جهان ماکروسکوپی آزمایشگاه عمل می‌کند [۵].

### ۳-۱- دینامیک مولکولی

در دینامیک مولکولی در مورد رفتار گروهی ذرات صحبت می‌شود. برای دیدن رفتار سیستم با گذشت زمان، ابتدا باید دینامیک حاکم بر سیستم را مورد مطالعه قرار داد که برای این منظور دو دینامیک نیوتنی<sup>۱</sup> و هامیلتونی<sup>۲</sup> مورد بررسی قرار داده می‌شود.

#### ۱-۳-۱- دینامیک نیوتنی

معادله (۱-۱) توصیف نیوتنی از دینامیک حرکت انتقالی یک مولکول کروی  $i$  ناشی از نیروی اعمال شده  $F_i$  از سوی عامل خارجی است [۶].

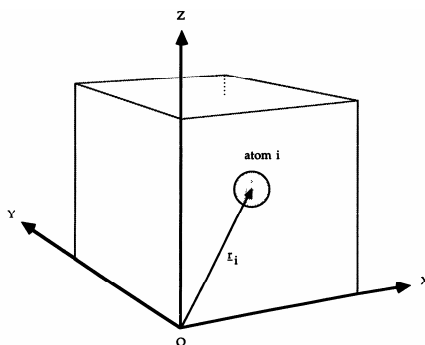
$$F_i = m\vec{r}_i \quad (1-1)$$

که  $m$  جرم مولکول است که به موقعیت، سرعت و شتاب وابسته نیست و نقطه بیانگر مشتق زمانی است و شتاب با معادله (۲-۱) نشان داده می‌شود.

1- Newtonian  
2- Hamiltonian

$$\vec{r}_i = \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2} \quad (2-1)$$

$r_i$  بردار مکان مولکول  $i$  است که در شکل (۲-۱) ملاحظه می‌کنید.



شکل (۲-۱): موقعیت ذره در مختصات کارتزین و بردار مکان [۶]

### ۲-۳-۱- دینامیک هامیلتونی

به جز معادله حرکت نیوتنی، معادلات دیگری برای تابعیت موقعیت و سرعت برحسب زمان وجود دارد. یکی از این معادلات تابع هامیلتونی  $H$  است که در معادله (۳-۱) به صورت تابعی از موقعیت و اندازه حرکت خطی  $N$  ذره نشان داده شده است.

$$H(r^N, p^N) = \text{cte} \quad (3-1)$$

$p_i$  اندازه حرکت خطی مولکول  $i$  است که به صورت معادله (۴-۱) تعریف می‌شود.

$$p_i = m\dot{r}_i \quad (4-1)$$

برای یک سیستم منزوی انرژی کل  $E$  ثابت است که برابر با جمع انرژی‌های جنبشی و پتانسیل است و بنابراین برای سیستم منزوی انرژی کل همان هامیلتونی است و برای  $N$  مولکول کروی تابع هامیلتونی به شکل معادله (۵-۱) نشان داده می‌شود.



$$H(r^N, p^N) = \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2 + U(r^N) = E \quad (5-1)$$

که انرژی پتانسیل  $U$  ناشی از برهمکنش‌های بین مولکولی است که تابعی از موقعیت‌های بین مولکولی است و انرژی جنبشی تابعی از اندازه حرکت خطی است [۶].

### ۴-۱- معادلات حرکت<sup>۱</sup>

هدف از طرح دینامیک سیستم و توصیف دینامیک سیستم، به دست آوردن معادلات حرکت برای آن سیستم است. به عبارتی دیگر به دست آوردن موقعیت و سرعت ذره نسبت به زمان است. برای به دست آوردن معادله حرکت  $N$  مولکول کروی با استفاده از دینامیک نیوتنی، باید معادلات (۶-۱) که  $3N$  معادله دیفرانسیلی معمولی مرتبه دوم می‌باشند حل شود [۶].

$$\mathbf{F}_{ix} = \frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} \quad \mathbf{F}_{iy} = \frac{d^2 \mathbf{y}_i}{dt^2} \quad \mathbf{F}_{iz} = \frac{d^2 \mathbf{z}_i}{dt^2} \quad (6-1)$$

اما برای به دست آوردن معادله حرکت از هامیلتونی، مشتق زمانی هامیلتونی معادله (۷-۱) بررسی می‌شود.

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial r_i} \dot{r}_i + \frac{\partial H}{\partial t} \quad (7-1)$$

اگر طبق معادله (۵-۱) هامیلتونی مستقل از زمان در نظر گرفته شود. در نتیجه معادله (۷-۱) به شکل معادله (۸-۱) در می‌آید.

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial r_i} \dot{r}_i + \frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad (8-1)$$

معادله (۸-۱) نتیجه کلی است. اگر مشتق زمانی هامیلتونی سیستم منزوی یعنی معادله (۵-۱) در نظر گرفته شود، معادله (۹-۱) به دست می‌آید.

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{m} \sum_i p_i \dot{p}_i + \sum_i \frac{\partial u}{\partial r_i} \dot{r}_i = 0 \quad (9-1)$$

و با مقایسه معادله (۸-۱) و (۹-۱) برای هر مولکول  $i$  معادله (۱۰-۱) و (۱۱-۱) به دست می‌آید.

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m} = \dot{r}_i \quad (10-1)$$

$$\frac{\partial H}{\partial r_i} = \frac{\partial U}{\partial r_i} \quad (11-1)$$

با جایگزین کردن معادله (۱۰-۱) در معادله (۸-۱) معادله (۱۲-۱) و نهایتاً (۱۳-۱) به دست می‌آید.

$$\sum_i r_i p_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial r_i} \dot{r}_i = 0 \quad (12-1)$$

$$\sum_i \left( \dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial r_i} \right) \dot{r}_i = 0 \quad (13-1)$$

از آنجایی که سرعت‌ها غیر وابسته به یکدیگر هستند، پس ضریب معادله (۱۳-۱) باید صفر باشد و در نتیجه معادله (۱۴-۱) به دست خواهد آمد.

$$\frac{\partial H}{\partial r_i} = \dot{p}_i \quad (14-1)$$

در معادله (۱۰-۱) از هامیلتونی نسبت به ممتهم مشتق گرفته شده و سرعت به دست می‌آید. معادله (۱۰-۱) یکی از معادلات حرکت است. در معادله (۱۴-۱) از هامیلتونی نسبت به موقعیت مشتق گرفته شده است و شتاب به دست می‌آید که دومین معادله حرکت است.

برای یک سیستم با  $N$  مولکول کروی معادلات (۱۰-۱) و (۱۴-۱) نماینده  $6N$  معادله دیفرانسیلی مرتبه اول هستند که معادل با  $3N$  معادله مرتبه دوم نیوتنی است. به عبارت دیگر، در دینامیک نیوتنی برای به دست آوردن معادله حرکت،  $3N$  معادله دیفرانسیلی مرتبه دوم و در دینامیک هامیلتونی  $6N$  معادله دیفرانسیلی مرتبه اول باید حل شود.

از مقایسه دو معادله (۴-۱) و (۱۴-۱) معادله (۱۵-۱) به دست می‌آید.

$$\frac{\partial H}{\partial r_i} = -m\ddot{r}_i \quad (15-1)$$

و با در نظر داشتن دو معادله (۱۱-۱) و (۱۵-۱) و سپس مقایسه با معادله (۱-۱) معادله (۱۶-۱) به دست می‌آید.

$$F_i = -\frac{\partial H}{\partial r_i} = -\frac{\partial U}{\partial r_i} \quad (16-1)$$

در دیدگاه نیوتن حرکت نتیجه نیروی اعمال شده است. در دیدگاه هامیلتونی نیرو صریحاً وارد نمی‌شود به جای آن حرکت به گونه‌ای انجام می‌شود که تابع هامیلتونی ثابت باقی می‌ماند [۶].

### ۵-۱- مسیرهای فضای فاز

اولین مورد در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ایجاد مسیر فضای فاز<sup>۱</sup> در یک زمان محدود است. مسیر شامل موقعیت و اندازه حرکت خطی مولکول‌هاست [۶-۸]. در نظر بگیرید تعدادی اتم که مطابق با یک پتانسیل با هم برهمکنش دارند. مرکز هر اتم با یک بردار موقعیت  $r_i$  معین شده است شکل (۱-۲). در یک سیستم منزوی اتم‌ها مطابق با قانون دوم نیوتن حرکت می‌کنند. ترسیم مسیرها را می‌توان با بردار موقعیت وابسته به زمان  $r_i(t)$  نشان داد. همانطور که یک اتم آن مسیر را دنبال می‌کند اندازه حرکت خطی آن نیز به دلیل برهمکنش با دیگر اتم‌ها تغییر می‌کند که می‌توان با بردار اندازه حرکت خطی وابسته به زمان  $p_i(t)$  نشان داد.

تصور کنید که اندازه حرکت خطی و موقعیت  $n$  اتم در یک فضا  $6N$  بعدی ترسیم شود. چنین فضایی را فضای فاز می‌گویند که از دو محور تشکیل شده است.  $3N$  بعد برای فضای ساختار<sup>۳</sup>

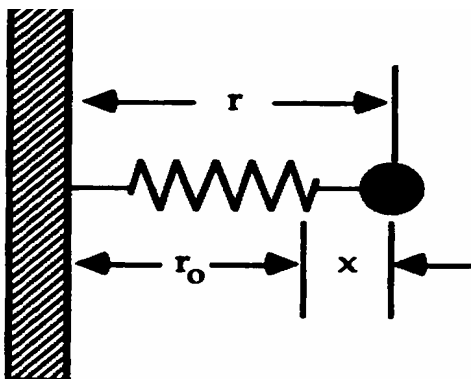
---

1- Trajectory  
2- Phase Space  
3- Configuration space

که در واقع به موقعیت ذرات ارتباط دارد  $(r_i(t))$  و  $3N$  بعد دیگر مربوط به فضای اندازه حرکت خطی می‌شود که به آن فضای اندازه حرکت گویند  $(p_i(t))$ .

در این فضا اندازه حرکت خطی و موقعیت ذره با نقطه مشخص می‌شود. اگر اندازه حرکت خطی و موقعیت ذره با زمان تغییر کند این نقطه در فضا حرکت خواهد کرد. مسیر حرکت این نقطه در فضای فاز تراژکتوری یا مسیر نامیده می‌شود. به این ترتیب اولین قدم در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی محاسبه مسیر فضای فاز است.

یک مثال ساده از مسیر فضای فاز نوسانگر هماهنگ ساده یک بعدی<sup>۱</sup> (ODHO) است. نوسانگر هماهنگ یک جرم متصل شده به یک فنر هماهنگ است؛ شکل (۱-۳). سیستم جرم-فنر منزوی است.



شکل (۱-۳): سیستم جرم-فنر [۶]

وقتی فنر به موقعیت  $r$  جابجا می‌شود جرم در فاصله  $x = r - r_0$  از حالت تعادل قرار می‌گیرد و سیستم دارای انرژی پتانسیل  $u(x)$  است.