بسم الله الرحمن الرحيم

وزارت علوم،تحقیقات و فناوری
دانشگاه شهید مدنی آذربایجان
دانشکده علوم پایه
گروه فیزیک

پایان نامه مقطع کارشناسی ارشد

رشته فیزیک-گرایش سیستم های پیچیده

عنوان پایان نامه:

شبیه سازی دینامیک مولکولی جداسازی یونهای فلزی آلاینده آب توسط نانو صفحه گرافن

استاد راهنما:

دکتر علیرضا راستکار ابراهیم زاده

استاد مشاور:

دکتر جابر جهان بین سردرودی

پژوهشگر:

لیلا قلی نژاد

بهمن ۱۳۹۲

تبریز-ایران

تقدیم به پدر و مادرم

به پاس تعبیر عظیم و انسانی شان از کلمه ایثار و از خودگذشتگی
به پاس محبت های بی دریغشان که هرگز فروکش نمی کند.

تقدیم به همسرم

به پاس عاطفه سرشار که سایه مهربانیش سایه سار زندگیم می باشد.

سپاس گذاری

حمد و سپاس خدای را آن نخستین بی پیشین و آن آخرین بی پسین را؛ خداوندی که دیده بینایان از دیدارش قاصر آید و اندیشه واصفان از نعت او فرو ماند.

آفریدگان را به قدرت خود ابداع کرد و به مقتضای مشیت خویش جامه ی هستی پوشاند و به همان ره که ارادت او بود روان داشت و رهسپار طریق محبت خویش گردانید.

چون ایشان را به پیش راند کس را یارای واپس گراییدن نبود و چون واپس دارد کس را یارای پیش تاختن نباشد.

هر زنده جانی را از رزق مقسوم خویش توشه ای معلوم نهاد؛ آن سان که کس نتواند از آن که افزونش داده؛ اندکی بکاهد و بر آن که اندکش عنایت کرده چیزی بیفزاید.

منزه و پاک است نام های او و ناگستنی است نعمت های او.

حمد و سپاس خداوندی را که خود را به ما شناسانید و شیوه ی سپاسگزاریش را به ما الهام کرد و ابواب علم ربوبیت خویش را به روی ما بگشاد و ما را به اخلاص در توحید او راه نمود و از الحاد و تردید در امر وی به دور داشت.

او را سپاس گوییم چنان سپاسی که، چون در میان سپاسگزارانش زیستن بگیریم؛ همواره با ما باشد و به یاری آن از همه ی آنان که، خواستار خشنودی و بخشایش او هستند گوی سبقت بربایم.

قدردانی

اکنون که در سایه ایزد منان، این پایان نامه به اتمام رسیده است، بر خود وظیفه می دانم تا از تمامی عزیزانی که راهگشای این تحقیق بوده اند، تشکر و قدردانی نمایم. امید است که سپاس بی دریغ اینجانب را بپذیرند.

از استاد راهنمای محترم، جناب آقای دکتر علیرضا اسکندر ابراهیم زاده که همواره راهنما و راهگشای اتمام و اکمال این تحقیق بوده اند نهایت تشکر و قدردانی را دارم.

از استاد مشاور محترم، جناب آقای دکتر جابر جهان بین سردرودی که همواره مرا از نقطه نظرات خود بهرمند ساخته اند، با تمام وجود تشکر و قدردانی می نمایم.

از استاد داور محترم جناب آقای دکتر جعفر عظمت که قبول زحمت فرموده و داوری این پایان نامه را به عهده گرفتند، تشکر می نمایم.

در نهایت از تمامی اساتید محترمی که از تجربیاتشان در طول تحصیل بهرمند شدم، قدردانی می نمایم.

از دوستان عزیزی که به نحوی در انجام این پایان نامه به بنده لطف داشته اند، به خصوص آقایان دکتر صادق افشاری، رامین فتحعلی پور، دکتر جلالی نیا و خانم ها دکتر مریم آتابای، دکتر مینا یعقوبی و دکتر معصومه ایقانی تشکر می نمایم.

لیلا قلی نژاد

بهمن ۱۳۹۲

تبریز - ایران

فهرست مطالب

عنوان صفحه

چکیده.....یک

فصل اول: مقدمه و تئوری.....۱

۱-۱- مقدمه.....۲

۱-۲- تاریخچه نانو.....۲

۱-۳- فناوری نانو چیست؟.....۳

۱-٤- نانوتکنولوژی محاسباتی.....۵

۱-۵- شبیه سازی رایانه ای.....٦

۱-٦- روش های مکانیک مولکولی.....٦

۱-۷- ویژگی های مشترک میدان نیرو.....۷

۱-۸- پارامتری کردن میدان نیرو ۸

۱-۹- برهمکنش های بین مولکولی.....۹

۱-۹-۱- برهمکنش های الکترواستاتیکی.....۱۰

۱-۹-۲- برهمکنش های واندروالسی.....۱۰

۱-۱۰- برهمکنش های درون مولکولی ۱۲

۱-۱۰-۱- کشش پیوندی.....۱۲

۱-۱۰-۲- خمش زاریه ای.....۱۳

۱-۱۰-۳- زاویه دووجهی.....۱۳

۱-۱۱- مرزهای سستم.....۱٤

۱-۱۲- شرایط مرزی متنارب.....۱۵.

۱-۱۳- شرایط مرزی در برهم کنش های کوتاه برد و بلند برد.....۱٦

۱-۱٤- شبیه سازی دینامیک مولکولی ۱۷

۱-۱۵- الگوریتم های دینامیک مولکولی ۲۲

۱-۱٦- الگوریتم ورله ۲۳

۱-۱۷- دینامیک مولکولی در دما و فشار ثابت ۲٦

۱-۱۷-۱- دمای ثابت ۲٦

۱-۱۷-۲- فشار ثابت ۲۷

۱-۱۸- شروع و اجرای شبیه سازی دینامیک مولکولی ۲۸

۱-۱۹- شبیه سازی مونت کارلو ۲۹

۱-۲۰- پتانسیل نیروی میانگین ۳۰

۱-۲۱- نمونه برداری چتری ۳۱

۱-۲۲- جهان وکمبود آب شیرین ۳۲

۱-۲۳- نقش غشا ۳۳

۱-۲٤- غشاهایی باجنس نانو لوله های کربنی ۳٤

۱-۲۵- خواص وکارایی نانو فیلترها ۳۵

۱-۲٦- گرافن ۳٦

۱-۲۷- کاربردهای گرافن ۳۷

۱-۲۸- نانو حفره درصفحات گرافن ۳۸

۱-۲۹- پیشینه های نظری وتجربی موضوع ۳۸

۱-۳۰- هدف پروژه ۳۸

فصل دوم:جزئیات محاسباتی ٤۰

۲-۱- الگوریتم پایه‌ای یک برنامه ی دینامیک مولکولی ٤۱

۲-۲- نرم افزار NAMD ٤۱

۲-۲-۱- مزایای استفاده از NAMD ٤۲

۲-۳- شرایط مختلف شبیه سازی دینامیکی..... ٤٢
۲-٤- نرم افزار VMD..... ٤٣
۲-٤-۱- ویژگیهای کلیدی نرم افزار VMD..... ٤٣
۲-٥- نرم افزار WHAM..... ٤٤
۱-٥-۲- دستور اجرایی WHAM..... ٤٤
۲-٦- فایل های ورودی مورد نیاز برای انجام شبیه سازی دینامیک مولکولی..... ٤٥
۲-۷- فایل پیکربندی NAMD..... ٤٦
۲-۷-۱- پارامتر پیکربندی NAMD ٤٦
۲-۸- سیستم شبیه سازی..... ٥٣
۲-۹- محاسبات شبیه سازی..... ٥٦
۲-۱۰- مراحل مختلف شبیه سازی و توضیح روش کار..... ٥٨
فصل سوم: نتایج و بحث..... ٦٠
۳-۱- نگاه کلی به شبیه سازی دینامیک مولکولی..... ٦١
۳-۲- نمودار pmf یون ها..... ٦٢
۳-۲-۱- نمودار pmf برای حفره هیدروژنی..... ٦٣
۳-۲-۲- نمودار pmf برای حفره فلوئور-نیتروژنی..... ٦٣
۳-۳- نمودارهای افت وخیز انرژی..... ٦٤
۳-٤- نتایج حاصل از به تعادل رسانی سیستم..... ٦٥
۳-٤-۱- سیستم با حفره هیدروژنی..... ٦٥
۳-٤-۲- سیستم با حفره فلوئور-نیتروژنی..... ٦٥
۳-٥- جریان و تعداد یون های عبوری از نانو صفحه..... ٦٦
۳-٦- زمان بازداری یون ها..... ٦٨
۳-۷- جهت گیری مولکول های آب در اطراف یون عبوری از نانوصفحه..... ٦٩

۳-۸- تعداد پیوند های هیدروژنی ۷۰
۳-۸-۱- سیستم با حفره هیدروژنی ۷۱
۳-۸-۲- سیستم با حفره فلوئور-نیتروژنی ۷۲
۳-۹- تابع توزیع شعاعی یون-آب ۷٤
۳-۱۰- انتگرال زیر نمودار RDF ۷۵
۳-۱۱- انرژی کل سیستم در طول شبیه سازی ۷٦
۳-۱۱-۱- سیستم با حفره هیدروژنی ۷۷
۳-۱۱-۲- سیستم با حفره فلوئور-نیتروژنی ۷۸
۳-۱۲- نتیجه گیری ۷۹
۳-۱۳- پیشنهادات برای کارهای بعدی ۷۹
مراجع ۸۱

فهرست جداول

عنوان صفحه

جدول (۲-۱)جدول پارامترهای واندروالسی.....٤٦

جدول (۲-۲)جدول طول پیوند اتم ها.....٥٦

جدول(۲-۳)جدول مربوط به بار اتم ها در صفحه هیدروژنی.....٥٦

جدول(۲-٤)جدول مربوط به بار اتم ها در صفحه فلوئور-نیتروژنی.....٥٧

جدول (۳-۱)جدول مربوط به زمان بازداری یون ها برای حفره هیدروژنی.....٦٨

جدول (۳-۲)جدول مربوط به زمان بازداری یون ها برای حفره فلوئور-نیتروژنی.....٦٩

فهرست اشکال

عنوان صفحه

شکل(۱-۱) برهمکنشهای پیوندی و غیر پیوندی.....۹

شکل(۱-۲) نمودار برهمکنشهای واندروالسی ۱۱

شکل(۱-۳) پیوند بین دو اتم.....۱۳

شکل(۱-٤) زاویه بین دو اتم i و اتم k ۱۳

شکل(۱-٥) تصاویر نیومن مولکول اتان.....۱٤

شکل(۱-٦) شرایط مرزی متناوب در دو بعد.....۱٦

شکل (۱-۷) صفحه اتمی گرافن.....۳٦

شکل(۲-۱)نمودار انرژی پتانسیل واندروالسی.....٤٦

شکل(۲-۲)نمودار پتانسیل واندروالسی در حضور و عدم حضور تابع switching.....٤٨

شکل(۲-۳)نمودار پتانسیل الکترواستاتیکی در حضور و عدم حضور تابع shifting.....٤٩

شکل(۲-٤)نمودار پتانسیل الکترواستاتیکی هنگام استفاده از الکترواستاتیک کامل توسط NAMD.....٤٩

شکل (۲-٥) صفحه ی گرافنی ۳۰×۳۰.....٥٤

شکل(۲-٦)صفحه گرافنی حفره دار دارای عامل H..... ٥٤
شکل(۲-۷)صفحه گرافنی حفره دار دارای عامل F-N..... ٥٥
شکل(۲-۸)صفحه گرافنی در حضور آب و یون..... ٥٥
شکل(۳-۱) عکس لحظه‌ای عبور یون کلر از حفره هیدروژنی..... ٦٢
شکل(۳-۲)عکس لحظه‌ای عبور یون سدیم ار حفره فلوئور-نیتروژنی..... ٦٢
شکل(۳-۳) نمودار pmf برای نانو حفره ها..... ٦٤
شکل(۳-٤) نمودار افت وخیز انرژی کل برای حفره هیدروژنی..... ٦٦
شکل(۳-٥) نمودار افت وخیز انرژی کل برای حفره فلوئور نیتروژنی..... ٦٦
شکل(۳-٦) نمودارجریان در مقابل میدان الکتریکی..... ٦٧
شکل(۳-۷) نمودار تعداد یون های عبوری از نانو حفره ٦٧
شکل(۳-۸)نمودار زمان بازداری یون ها ٦٩
شکل(۳-۹)جهت گیری مولکول های آب در اطراف یون عبوری از حفره هیدروژنی..... ۷۰
شکل(۳-۱۰)جهت گیری مولکول های آب در اطراف یون عبوری از حفره فلوئور-نیتروژنی..... ۷۰
شکل (۳-۱۱)نمودار تعداد پیوندهای هیدروژنی در طی زمان شبیه سازی برای حفره هیدروژنی..... ۷۱
شکل(۳-۱۲)نمودار تعداد پیوندهای هیدروژنی در طی زمان شبیه سازی برای حفره فلوئور-نیتروژنی..... ۷۳
شکل (۳-۱۳) نمودار تغییرات تعداد پیوند های هیدروژنی با تغییر میدان..... ۷۳
شکل(۳-۱٤)نمودارتابع توزیع شعاعی در میدان های الکتریکی مختلف برای حفره هیدروژنی..... ۷٤
شکل(۳-۱٥) نمودارتابع توزیع شعاعی در میدان های الکتریکی مختلف برای حفره فلوئور- نیتروژنی..... ۷٥
شکل(۳-۱٦)نمودار انتگرال زیر نمودار RDF در سیستم با حفره هیدروژنی..... ۷٥
شکل(۳-۱۷)نمودار انتگرال زیر نمودار RDF در سیستم با حفره فلوئور-نیتروژنی..... ۷٦
شکل(۳-۱۸)نمودار انرژی کل سیستم در طول شبیه سازی برای سیستم با حفره هیدروژنی..... ۷۷
شکل(۳-۱۹) نمودار انرژی کل سیستم در طول شبیه سازی برای سیستم با حفره فلوئور-نیتروژنی..... ۷۹

چکیده

یکی از روش های مفید برای بررسی جداسازی یون های آلاینده ی آب روش شبیه سازی دینامیک مولکولی می باشد. در این پایان نامه شبیه سازی دینامیک مولکولی جداسازی یون های کلر و سدیم از آب با استفاده از نانو صفحات گرافنی انجام گرفته ونتایج نشان می دهند که حفره های نانومتری در صفحات گرافن را می توان به نحو مؤثری در جداسازی یون ها ازآب به کار برد. با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی عملکرد جداسازی چنین نانو حفره هایی را به صورت تابعی از عوامل شیمیایی و میدان الکتریکی اعمالی بیان می کنیم.تمامی شبیه سازی های انجام گرفته توسط نرم افزار NAMD صورت گرفته است.

کلمات کلیدی:

دینامیک مولکولی؛ آلودگی آب؛ یون؛ نانوصفحه ی گرافنی

فصل اول

مقدمه و تئوری

۱-۱- مقدمه

شبیه سازی رایانه ای نقش بسزایی در حل بسیاری از مسائل ایفا می کند. مسائلی که بدون وجود شبیه‌سازی فقط با استفاده از تقریب قابل حل هستند یا اساساً حلی برای آنها وجود ندارد.یکی از روش های موجود برای بررسی ساختار و رفتار مواد شبیه‌سازی رایانه ای است. شبیه‌سازی رایانه ای به صورت پلی میان مقیاس های میکروسکوپی و ماکروسکوپی عمل می کند و در واقع راه مستقیمی برای رسیدن از ویژگی های میکروسکوپی به خواص ماکروسکوپی و تجربی مورد نظر در اختیارقرارمی دهد .امروزه با پیشرفت فناوری شبیه‌سازی رایانه ای برای محاسبه ی خواص مولکول‌ها با توجه به ساختار و برهمکنش های میکروسکوپی بین آن ها مورد توجه قرار گرفته است که در این خصوص می توان به نقش آن در فرایند نانو اشاره کرد که در آزمودن صحت فرضها ونظریه های فیزیکی در مورد نانو سیستم ها اهمیت دارد[۳-۱].

۱-۲- تاریخچه ی نانو

در طول تاریخ از زمان یونان باستان تاکنون مردم و بخصوص دانشمندان بر این باور بودند که مواد را می توان آن قدر به اجزای کوچک تقسیم کرد تا به ذراتی رسید که خرد ناشدنی هستند و این ذرات بنیان مواد را تشکیل می دهند. شاید بتوان دموکریتوس فیلسوف یونانی را پدر علوم و فناوری‌نانو دانست چرا که در حدود ٤٠٠ سال قبل از میلاد مسیح اولین کسی بود که واژه ی اتم را که به معنای تقسیم ناشدنی در زبان یونانی است برای توصیف ذرات سازنده مواد بکار برد.

با تحقیقات و آزمایش‌های بسیار، دانشمندان تاکنون ۱۰۸ نوع اتم و تعداد زیادی ایزوتوپ کشف کرده‌اند. آنها همچنین پی برده اند که اتم‌ها از ذرات کوچکتری مانند کوارک‌ها و لپتون‌ها تشکیل شده‌اند. با این حال این کشف‌ها در تاریخ پیدایش این فناوری پیچیده زیاد مهم نیست. نقطه شروع و توسعه اولیه فناوری نانو به طور دقیق مشخص نیست. شاید بتوان گفت که اولین نانو تکنولوژیست ها شیشه‌گران قرون وسطایی بوده‌اند که ازقالب‌های قدیمی برای شکل‌دادن شیشه‌هایشان استفاده می‌کرده‌اند. البته این

شیشه‌گران نمی‌دانستند که چرا با اضافه‌کردن طلا به شیشه رنگ آن تغییر می‌کند. در آن زمان برای ساخت شیشه‌های کلیساهای قرون وسطایی از ذرات نانومتری طلا استفاده می‌شده است و با این کار شیشه‌های رنگی بسیار جذابی بدست می‌آمده است. این قبیل شیشه‌ها هم‌اکنون در بین شیشه‌های بسیار قدیمی یافت می‌شوند. رنگ به‌وجودآمده در این شیشه‌ها برپایه این حقیقت استوار است که مواد با ابعاد نانو دارای همان خواص مواد با ابعاد میکرو نمی‌باشند.

در واقع یافتن مثال هایی برای استفاده از نانو ذرات فلزی چندان سخت نیست. رنگدانه‌های تزیینی جام مشهور لیکرگوس در روم باستان (قرن چهارم بعد از میلاد) نمونه‌ای از آنهاست. این جام هنوز در موزه بریتانیا قرار دارد و بسته به جهت نور تابیده به آن رنگ های متفاوتی دارد. نور انعکاس یافته از آن سبز است ولی اگر نوری از درون آن بتابد، به رنگ قرمز دیده می‌شود. آنالیز این شیشه حکایت از وجود مقادیر بسیار اندکی از بلورهای فلزی ریز ۷۰۰ (nm) دارد ، که حاوی نقره و طلا با نسبت مولی تقریبا ١٤ به ١ است حضور این نانوبلورها باعث رنگ ویژه جام لیکرگوس گشته است.

در سال ۱۹۵۹ ریچارد فاینمن مقاله‌ای را دربارهٔ قابلیت‌های فناوری نانو در آینده منتشر ساخت. باوجود موقعیت‌هایی که توسط بسیاری تا آن زمان کسب‌شده بود، ریچارد فاینمن را به عنوان پایه گذار این علم می‌شناسند. فاینمن که بعدها جایزه نوبل را در فیزیک دریافت کرد درآن سال در یک مهمانی شام که توسط انجمن فیزیک آمریکا برگزار شده بود؛ سخنرانی کرد و ایده فناوری نانو را برای عموم مردم آشکار ساخت. عنوان سخنرانی وی «فضای زیادی در سطوح پایین وجود دارد» بود. سخنرانی او شامل این مطلب بود که می‌توان تمام دایره‌المعارف بریتانیکا را بر روی یک سنجاق نگارش کرد. او همچنین از دوتایی‌کردن اتم‌ها برای کاهش ابعاد کامپیوترها سخن گفت در آن زمان ابعاد کامپیوترها بسیار بزرگ تر از ابعاد کنونی بودند اما او احتمال می‌داد که ابعاد آنها را بتوان حتی از ابعاد کامپیوترهای کنونی نیز کوچک تر کرد. او همچنین در آن سخنرانی توسعه بیشتر فناوری نانو را پیش‌بینی نمود[٥-٤].

۱-۳-فناوری نانو چیست؟

فناوری‌نانو واژه‌ای است کلی که به تمام فناوری‌های پیشرفته در عرصه کار با مقیاس نانو اطلاق می‌شود. معمولاً منظور از مقیاس نانو، ابعادی در حدود ۱nm تا ۱۰۰nm می‌باشد. (۱ نانومتر یک میلیاردیم متر است). واژه فناوری نانو اولین بار توسط استاد دانشگاه علوم توکیو در سال ١٩٧٤ بر زبانها جاری شد. که این واژه را برای توصیف ساخت مواد (وسایل) دقیقی که تلورانس ابعادی آنها در حد نانومتر می‌باشد، به

کار برد. در سال ۱۹۸٦ این واژه در کتابی تحت عنوان : «موتور آفرینش: آغاز دوران فناوری‌نانو»بازآفرینی و تعریف مجدد شد.

تفاوت اصلی فناوری نانو با فناوری‌های دیگر در مقیاس مواد و ساختارهایی است که در این فناوری مورد استفاده قرار می‌گیرند. البته تنها کوچک بودن اندازه مد نظر نیست؛ بلکه زمانی که اندازه مواد دراین مقیاس قرار می‌گیردخصوصیات ذاتی آنها از جمله رنگ، استحکام، مقاومت و ... تغییر می‌یابد. در حقیقت اگر بخواهیم تفاوت این فناوری را با فناوری های دیگر به صورت قابل ارزیابی و بیان نماییم، می‌توانیم وجود عناصر پایه را به عنوان یک معیار ذکر کنیم. عناصر پایه در حقیقت همان عناصر نانومقیاسی هستند که خواص آنها در حالت نانومقیاس با خواصشان در مقیاس بزرگتر فرق می‌کند.

اولین و مهم ترین عنصر پایه، نانوذره است. منظور از نانوذره، همان گونه که از نام آن مشخص است، ذراتی با ابعاد نانومتری در هر سه بعد می‌باشد. نانوذرات می‌توانند از مواد مختلفی تشکیل شوند، مانند نانوذرات فلزی،سرامیکی و... . دومین عنصر پایه، نانوکپسول است. همان طوری که از اسم آن مشخص است؛ کپسول‌هایی هستند که قطر نانومتری دارند و می‌توان مواد مورد نظر را درون آنها قرار داد و کپسوله کرد. سال‌هاست که نانوکپسول‌ها در طبیعت تولید می‌شوند؛ مولکول‌های موسوم به فسفولیپیدها که یک سر آنها آب گریز و سر دیگر آنها آب دوست است، وقتی در محیط آبی قرار می‌گیرند، خود به خود کپسول‌هایی را تشکیل می‌دهند که قسمت‌های آب گریز مولکول در درون آنها واقع می‌شود و از تماس با آب محافظت می‌شود. حالت برعکس نیز قابل تصور است.

عنصر پایه بعدی نانولوله کربنی است. این عنصر پایه در سال ۱۹۹۱ در شرکت NEC کشف شد و در حقیقت لوله‌هایی از گرافیت می‌باشند. اگر صفحات گرافیت را پیچیده و به شکل لوله در بیاوریم، به نانولوله‌های کربنی می‌رسیم. این نانولوله‌ها دارای اشکال و اندازه‌های مختلفی هستند و می‌توانند تک دیواره یا چند دیواره باشند. این لوله‌ها خواص بسیار جالبی دارند که منجر به ایجاد کاربردهای جالب توجهی از آنها می‌شود.

درحقیقت کاربرد فناوری نانو از کاربرد عناصر پایه نشأت می‌گیرد. هر کدام از این عناصر پایه، ویژگی‌های خاصی دارند که استفاده از آنها در زمینه‌های مختلف، موجب ایجاد خواص جالبی می‌گردد. مثلاً از جمله کاربردهای نانوذرات می‌توان به دارورسانی هدفمند و ساده، شناسایی زود هنگام و بی‌ضرر سلول‌های سرطانی و تجزیه آلاینده‌های محیط زیست اشاره کرد. همچنین نانولوله‌های کربنی دارای کاربردهای متنوعی می‌باشند که موارد زیر را می‌توان ذکر کرد:

- تصویربرداری زیستی دقیق
- حسگرهای شیمیایی و زیستی قابل اطمینان و دارای عمر طولانی

- شناسایی و جداسازی کاملاً اختصاصی DNA
- ژن درمانی که از طریق انتقال ژن به درون سلول توسط نانولوله‌ها صورت می‌پذیرد.
- از بین بردن باکتری‌ها

اینها تنها مواردی از کاربردهای بسیار زیادی هستند که برای عناصر پایه قابل تصور می‌باشند[۵-٤].

۱-٤- نانو تکنولوژی محاسباتی

افزایش سریع قدرت رایانه ها راهی را برای شبیه سازی سیستم های گوناگون و فرایندهای فیزیکی در مقیاس اتمی گشوده است. امروزه ما این زمینه از علم را مدل سازی مولکولی[1] می گوییم. شبیه سازی رایانه ای در مقیاس اتمی می تواند کاربردهای مختلفی مانند فرایندهای زیست محیطی، دارو و علم مواد داشته باشد. شبیه سازی رایانه ای زمانی مفید است که کار آزمایشگاهی هزینه بر، وقت گیر یا عملاً انجام آن در آزمایشگاه غیر ممکن باشد. در کنار آن بسیاری از خواص ترموفیزیکی می تواند از شبیه سازی حاصل شود. چگالی، انرژی آزاد، گرانروی و ساختار مولکول ها از خواصی هستند که می توانند توسط شبیه سازی به دست آیند. به طور خلاصه بهتر است بگوییم که مدل سازی مولکولی شاخه ای از علم است که تئوری و تجربه را به میز کاری رایانه می آورد و به ما دیدگاهی می دهد تا آزمایش رایانه ای انجام دهیم. نانوفناوری محاسباتی به شبیه سازی و مدل سازی سیستم های نانو می پردازد و امکان ساخت و تولید آنها را بررسی می کند، یعنی با ابزار محاسبه، مدل های گوناگون ساختارهای نانو را می سازد و ویژگی های گوناگون آن را بررسی می کند.

با توجه به هزینه های تولید یک ساختار در مقیاس نانو لازم است که برای داشتن بالاترین بهره، ابتدا پیش‌بینی هایی در مورد برآورد و هزینه های تولید ماده جدید، ویژگی ها و کاربردهای آن داشته باشیم. لذا تولید نرم افزارهای رایانه ای و نوشتن برنامه هایی که این امکان را برای ما فراهم می کنند، نیز جزو این شاخه از علم نانو به حساب می آید.

به دست آوردن ویژگی ها و خصوصیات یک ماده با روش های تئوری و محاسباتی، علاوه بر چشم انداز بسیار خوبی که از آینده پیش روی ما قرار می دهد، به ما کمک می کند روش های 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 می گذرد، 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 استفاده ی بهتر از هستی رهنمون گردد[٦و ۷].

1 Molecular modeling

رفتار مایعات و مواد نانومتخلخل یکی از زمینه هایی است که می تواند با شبیه سازی های رایانه ای مورد بررسی قرار گیرد، زیرا بر اساس ابعاد کوچک نانومواد دسترسی به روش های آزمایشگاهی به راحتی امکان پذیر نیست[۲].

۱-۵- شبیه سازی رایانه ای

علم به مشاهده و درک نیاز دارد و بدون مشاهده واقعیتی برای درک وجود ندارد. بدون درک، علم فقط ساخت اسناد و مدارک است. پایه ی درک نظریه، و زبان علوم نظری، ریاضی است. نظریه بر اساس یک فرضیه شکل می گیرد و فرضیه یک حدس هوشمندانه برای توصیف و بیان علت مشاهدات موجود به کار می رود. برخورد انسان با طبیعت همواره از طریق مطالعه ی نظری و تجربه بوده است. اما با رشد چشم گیر رایانه ها، امروزه دانشمندان از طریق شبیه سازی رایانه ای امکان آن را یافته اند که فرایندهای مختلف را از جنبه های گوناگون با دقت بیشتری مطالعه کنند و پاسخ پرسش های خودرا آسان تر بیابند. نظریه های علمی بر اساس تقریب های عددی یا تحلیلی بنا می شوند، در حالیکه تقریب ها اغلب غیر قابل کنترل هستند و می توانند اعتبار مسأله را زیر سوال ببرند. بنابراین می توان گفت شبیه سازی های رایانه ای دارای پایه های نظری هستند اما سعی می شود در این روش های محاسباتی از به کارگیری تقریب های رایج برای نظریه های علمی خودداری و با جایگزین کردن محاسبه های بهتر، راه یافتن پاسخ هموار شود[۷].

شبیه سازی رایانه ای را برای پی بردن به خواص مولکول ها بر حسب ساختار و برهم کنش های میکروسکوپی بین آنها به کار گرفته می شود. شبیه سازی رایانه ای به صورت پلی میان مقیاس های میکروسکوپی و ماکروسکوپی عمل می کند. در واقع با در نظر گرفتن حدسی از بر هم کنش بین مولکول ها پیش بینی تقریباً دقیقی برای خواص توده ای سیستم بدست می آوریم. به گونه ای دیگر شبیه سازی به صورت پلی میان تئوری و تجربه عمل می کند. شبیه سازی را می توان برای مواردی مثل دما وفشار بی نهایت به کار گرفت که امتحان آن در آزمایشگاه سخت یا حتی غیر ممکن باشد[۳].

بنابراین شبیه سازی رایانه ای آزمون خوبی برای تجربه و برای توضیح مدل های پیچیده ای است که امکان دست یابی به آن ها با تجزیه و تحلیل وجود ندارد. دو تکنیک مهم شبیه سازی که بیشتر مورد بررسی قرارمی گیرند روش دینامیک مولکولی و روش مونت کارلو می باشد.

چنین شبیه سازی هایی درفیزیک، شیمی، بیوشیمی، بیوشیمی فیزیک و...کاربردهای بسیار وسیعی دارند [۷].

۱-٦-روش های مکانیک مولکولی

متأسفانه بسیاری از مسائل مدل سازی مولکولی بسیار بزرگ تر از این هستند که با روش هـای مکانیـک مولکولی قابل حل باشند. مکانیک کوانتومی با الکترون های سیستم سروکار دارد، بطوریکه حـتی اگـر از بعضی از الکترون ها صرف نظر شود (مانند روش نیمه تجربی) هنوز هم تعدادزیادی ذره را باید در نظـر گرفت و محاسبات وقت گیر هستند. روش های مبتنی بر میدان های نیرو[۲] (که به مکانیک مولکـولی[۳] نیـز مشهورند) از حرکت های الکترونی صرف نظر می کنند و انرژی پتانسیل یـک سیسـتم را فقـط تـابعی از موقعیت هسته ها در نظر می گیرند. بنابراین، مکانیک مولکولی همیشه برای انجام در سیسـتم هـایی کـه تعداد قابل توجهی اتم دارند، به کار می رود. در بعضی موارد با استفاده از میدان نیرو می توان در مـدت زمانی کوتاه، پاسخی برای مسائلی یافت که دقت آن در حد محاسبات مکانیک کوانتومی بسیار سطح بـالا باشد. البته مکانیک مولکولی قادر به محاسبه ی خواص وابسته به توزیع الکترونی نیست.

در مکانیک مولکولی از یک مدل ریاضی برای مولکول استفاده می شود تا ساختارهندسی یا حداقل انرژی آن را پیدا کنیم. شکل عبارت ریاضی پتانسیل و پارامترهای موجود در آن یک میدان نیـرو را تشـکیل مـی دهند. در مکانیک مولکولی الکترون ها در نظر گرفته نمی شوند، بنابراین نمی تـوان اطلاعـاتی دربـاره ی خواص الکترونی مانند توزیع بار الکتریکی یا رفتار الکترون دوستی و هسته دوستی گونه ها بدست آورد.

نکته ای که باید به آن توجه داشت این است که مفهوم یک پیوند در مکانیک مولکولی نقش کلیـدی دارد، اما در محاسبات ساختار الکترونی گرچه مفید است؛ ضروری نیست، زیرا در محاسبات مکانیک مولکولی یک مولکول با اتم ها و پیوندها تعریف می شود و قدرت پیوندها با ساده، دوگانه بودن و... آنها مشـخص می شود. اما در محاسبات ساختار الکترونی، یک مولکول با موقعیت‌های نسبی اتمـی، بـار و چنـدگانگی اسپینی آن تعریف می شود[۷].

۱-۷- ویژگی‌های مشترک میدان نیرو

برای تعریف یک میدان نیرو باید شکل تابعی و پارامترهای آن را مشـخص کـرد، دو میـدان نیـرو ممکـن است شکل تابعی یکسانی را با پارامترهای مختلف به کار ببرند. میدان های نیرو به طور عمده بـه منظـور پیش بینی خواص معینی طراحی و بر همین اساس نیز پارامتری می شوند. اگرچه تلاش بـرای اسـتفاده از

2 force fields
3 molecular mechanics

یک میدان نیرو برای پیش بینی کمیت هایی که از پیش در فرایند پارامتری کردن آن در نظر گرفته نشده اند سودمند است، عدم توانایی در این کار نیز لزوماً برای یک میدان نیرو نقطه ضعف محسوب نمی شود.
قابلیت انتقال شکل تابعی و پارامترها یک ویژگی با اهمیت برای میدان های نیرو است. قابلیت انتقال به ما اجازه می دهد که برای مدل سازی مولکول های مرتبط، از مجموعه پارامترهای یکسانی استفاده کنیم و برای هر سیستم ناچار به پارامتری کردن مجدد میدان نیرو نباشیم. قابلیت انتقال بویژه در استفاده از میدان های نیرو برای انجام پیش‌بینی ها اهمیت دارد. فقط برای سیستم های کوچکی که دقت مضاعفی در محاسبات آن ها مدنظر می باشد، یک مدل اختصاصی طراحی می شود.
یک نکته مهم که باید برای درک بهتر مکانیک مولکولی به خاطر داشته باشیم آن است که میدان های نیرو تجربی هستند، هیچ شکل واقعی ای برای یک میدان نیرو وجود ندارد. البته اگر کارکرد یک شکل تابعی بهتر از شکلی دیگر تشخیص داده شود، احتمالاً آن شکل بر شکل های دیگر ترجیح داده می شود. بیشتر میدان های نیروی متداول شکل بسیار مشابهی دارند و ممکن است تصور شود که این باید یک شکل تابعی بهینه باشد. به طور یقین این مدل ها تصویر مناسبی از برهمکنش های موجود در سیستم ارائه می دهند، اما باید همیشه به خاطر داشت ممکن است شکل های بهتری نیز وجود داشته باشد، به ویژه وقتی یک میدان نیرو را برای دسته ی جدیدی از مولکول ها طراحی می کنیم. شکل های تابعی که معمولاً در میدان های نیروی مکانیک مولکولی مورد استفاده قرار می گیرد، اغلب توافقی میان دقت و کارایی محاسباتی برقرار می کند. هرچه شکل یک تابع دقیق تر باشد، محاسبه با آن طولانی تر است. با پیشرفت رایانه ها استفاده از مدل های دقیق تری امکان پذیر می شود.
یکی از مفاهیم مشترک در بیشتر میدان های نیرو مفهوم گونه اتمی[4] است. در تهیه ورودی برای یک محاسبه مکانیک کوانتومی معمولاً باید عدد اتمی هسته های موجود و ساختار هندسی سیستم و بار کلی و چندگانگی اسپینی آن را مشخص کنیم. برای یک میدان نیرو نیاز به تعیین صریح بار کل و چندگانگی اسپینی نیست، بلکه معمولاً به هر اتم سیستم یک گونه اتمی نسبت داده می شود. گونه اتمی چیزی بیش از عدد اتمی است و معمولاً شامل اطلاعاتی درباره هیبریداسیون و گاهی محیط اتم نیز هست. به عنوان مثال یک میدان نیرو باید میان اتم های کربن با هیبریداسیون sp^3 (باساختار چهاروجهی)، sp^2 (مثلثی) و sp (خطی) تمایز قایل شود. پارامترهای میدان نیرو بر حسب این‌گونه های اتمی مشخص می شوند، بنابراین زاویه مرجع θ_0 برای یک اتم کربن چهاروجهی نزدیک به ۱۰۹/۵ درجه و برای یک کربن مثلثی در حدود ۱۲۰ درجه است. در بعضی از میدان های نیرو گونه اتمی علاوه بر هیبریداسیون نشان دهنده ی محیط اتم نیز هست و در چنین مواردی بعضی از اتم ها ممکن است چندین گونه مختلف داشته باشند[۷].

4 Atom type