دانشگاه کاشان

دانشکده شیمی

گروه شیمی فیزیک

پایان‌نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته شیمی فیزیک

عنوان:

مطالعه‌ی برهم‌کنش اسیدهای آمینه با نانولوله بور نیتریدی (۱۶،۰) به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

استاد راهنما:

خانم دکتر زهرا توانگر

توسط:

مریم محمدی

آبان ۹۲

بسمه تعالی

تاریخ:
شماره:
پیوست:

دانشگاه کاشان
دانشکده شیمی

مدیریت تحصیلات تکمیلی دانشگاه

صورتجلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

نام و نام خانوادگی دانشجو : **مریم محمدی**

شماره دانشجویی : ۹۰۱۵۵۶۰۲۰۸

رشته : **شیمی گرایش شیمی فیزیک** دانشکده : شیمی

عنوان پایان‌نامه : " مطالعه‌ی برهم‌کنش اسیدهای آمینه با نانولوله بور نیتریدی (۱۶،۰) به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی "

این پایان‌نامه به مدیریت تحصیلات تکمیلی به منظور بخشی از فعالیتهای تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد ارائه می‌گردد.دفاع از پایان نامه در تاریخ ۹۲/۰۸/۲۸ مورد تأیید و ارزیابی هیأت داوران قرار گرفت و

با نمره به عدد: ۱۹٫۹۹ و درجه عالی به تصویب رسید.

به حروف: نوزده و نود و نه صدم

اعضاء هیأت داوران

عنوان	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱. استاد راهنما :	دکتر زهرا توانگر	استادیار	
۲. متخصص و صاحب نظر داخل دانشگاه :	دکتر مسعود همدانیان	دانشیار	
۳. متخصص و صاحب نظر داخل دانشگاه :	دکتر محسن محسن نیا	استاد	
٤. نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه	دکتر مسعود همدانیان	دانشیار	

مدیر تحصیلات تکمیلی: دکتر منصورنیا

آدرس: کاشان - بلوار قطب راوندی
کدپستی ۸۷۳۱۷ - ۵۱۱۶۷
تلفن ۵۹۱۲۳۹۷ - دورنگار ۵۹۱۲۳۹۷

تقدیم به:

پدر و مادر صبور و فداکارم

که امروزم حاصل مهربانی آن‌هاست

چیدم گلی ز باغ ادب تا بروز عید

در بارگاه میر ادب پرور آورم

حیف است با خسان گل دانش کنی نثار

من گل نثار مردم دانش‌ور آورم

استاد شهریار

تشکر و قدردانی

حمد و سپاس خدای را که توفیق کسب دانش و معرفت را به ما عطا فرمود. در اینجا بر خود لازم می‌دانم از تمامی اساتید بزرگوار بویژه اساتید دوره کارشناسی ارشد که در طول سالیان گذشته مرا در فراگیری علم و معرفت و فضائل اخلاقی یاری نموده اند تقدیر و تشکر نمایم.

از استاد گرامی و بزرگوار سرکار **خانم دکتر زهرا قوانکر** که راهنمایی اینجانب را در انجام تحقیق، پژوهش و نگارش این پایان نامه تقبل نموده اند نهایت تشکر و سپاسگزاری را دارم.

از آقایان **دکتر حسن بهرنی نیا و دکتر محمود هدانیان** بعنوان استاد داور داخل دانشگاه که این پایان نامه را مورد مطالعه قرار داده و در جلسه دفاعیه شرکت نموده اند تشکر و قدردانی می نمایم.

در پایان از جناب آقای **دکتر محمود هدانیان** که بعنوان نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه قبول زحمت نموده اند سپاسگزاری می نمایم.

چکیده

به دلیل اهمیت مطالعه و تحقیق در سامانه‌های زیستی و نیز یافتن جایگزین مناسب با میزان سمیّت کمتر نسبت به نانولوله‌های کربنی که کاربرد بالقوه‌ای برای انتقال دارو در بدن دارند، برهم‌کنش اسیدهای آمینه به عنوان واحدهای سازنده‌ی پروتئین‌ها و داروهای پپتیدی با نانولوله‌ی بورنیتریدی که کم‌ضررتر از نانولوله‌های کربنی شناخته شده‌اند، مورد مطالعه قرار گرفت. بدین منظور برهم‌کنش اسیدهای آمینه در فاز گازی و سپس در فاز آبی مورد بررسی قرار گرفت. ضرایب نفوذ اسیدهای آمینه و آب در هر دو فاز و نیز اثر چگالی و دما بر جذب اسیدهای آمینه و آب روی سطح نانولوله بور نیتریدی بررسی شد.

تحلیل دقیق‌تر تمایل نانولوله برای جذب اسیدهای آمینه مختلف با رسم نمودارهای توزیع شعاعی امکانپذیر شد. نتایج این تحقیق حاکی از تأثیر برهم‌کنش‌های دوقطبی-دوقطبی در افزایش میزان انرژی برهم‌کنش در فاز گازی و اثر تشکیل پیوند هیدروژنی در افزایش میزان انرژی برهم‌کنش در فاز آبی می‌باشد.

ضرایب نفوذ اسیدهای آمینه در فاز گازی متأثر از برهم‌کنش‌های واندروالس و جرم مولکولی افزایش می‌یابد و در فاز آبی به علت حضور مولکول‌های آب و نیروی تشکیل پیوند هیدروژنی کاهش می‌یابند. مقادیر منفی انرژی جذب متوسط اسیدهای آمینه در هر دو فاز حاکی از مناسب بودن نانولوله‌های بور نیتریدی برای جذب اسیدهای آمینه است و البته مقادیر انرژی برهم‌کنش در فاز آبی بیشتر است.

کلمات کلیدی: نانولوله‌ی بور نیتریدی، اسید آمینه، برهم‌کنش، انرژی جذب، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول: مباحث نظری

۱-۱- مقدمه ۲

۱-۲- تاریخچه‌ی مختصری از شبیه‌سازی رایانه‌ای ۲

۱-۲-۱- شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای ۳

۱-۲-۱-۱- میدان‌های نیرو ۴

۱-۳- شیوه‌ها و فنون ۹

۱-۳-۱- دینامیک نیوتنی ۹

۱-۳-۱-۱- انتگرال‌گیری از معادلات حرکت ۱۱

۱-۳-۱-۲- شرایط مرزی متناوب ۱۵

۱-۳-۲- قطع پتانسیل و قرارداد نزدیک‌ترین تصویر ۱۵

۱-۳-۳- نیروهای بردبلند ۱۶

۱-۴- چگونگی تحلیل نتایج ۱۷

۱-۵- معرفی نانولوله‌های بور نیتریدی ۲۰

۱-۵-۱- روش‌های سنتز ۲۲

۱-۶- ویژگی‌ها و کاربردها ۲۳

۱-۷- سمیّت در ابعاد نانو ۲۵

۱-۸- مروری بر مطالعات پیشین ۲۵

فصل دوم: روش‌های انجام محاسبات و نتایج

۲-۱- مقدمه ۴۰

۲-۲- نانولوله‌ی بور نیتریدی ۴۰

۲-۲-۱- معادله‌ی ترساف و پارامترهای مربوط به آن ۴۱

۲-۳- اسیدهای آمینه ۴۳

۲-۴- معرفی نرم‌افزار ۴۷

۲-۴-۱- میدان‌های نیرو در دی‌ال-پالی-۲ ۴۷

۲-۴-۲- معرفی پوشه‌های ورودی و خروجی برنامه‌ی دی‌ال-پالی ۴۸

۲-۵- متوسط مربعات جابجایی (MSD) ۵۳

۲-۶- شبیه‌سازی سامانه‌ها ۵۴

۲-۶-۱- شبیه‌سازی به منظور حصول دماپا و زمان آسایش ۵۵

۲-۷- شبیه‌سازی سامانه اسید آمینه و نانولوله در فاز گازی ۵۸

۲-۸- شبیه‌سازی سامانه اسید آمینه و نانولوله در فاز آبی ۶۳

۲-۸-۱- بررسی قابلیت ترشوندگی نانولوله‌ی بور نیتریدی ۶۶

۲-۸-۲- شبیه‌سازی سامانه آب و نانولوله در چگالی‌های مختلف ۶۷

فصل سوم: بحث و نتیجه‌گیری

۳-۱- مقدمه ۷۰

۳-۱-۱- برهم‌کنش اسیدهای آمینه با دیواره نانولوله ۷۰

۳-۲- بررسی اثر دما به روی انرژی برهم‌کنش ۷۴

۳-۳- بررسی اثر چگالی به روی انرژی برهم‌کنش ۷۵

۳-۴- اندازه‌گیری ضرایب نفوذ اسیدهای آمینه و آب ۷۵

۳-۴-۱- بررسی تأثیر چگالی بر ضریب نفوذ ۸۰

۳-۴-۲- بررسی تأثیر دما بر ضریب نفوذ مولکول‌های آب ۸۳
۳-۵- توزیع شعاعی متوسط اسیدهای آمینه در فاز گازی ۸۵
۳-۵-۱- توزیع شعاعی متوسط اسیدهای آمینه در فاز آبی ۸۷
۳-۵-۱-۱- توزیع شعاعی متوسط مولکول‌های آب در سامانه آبی ۸۹
۳-۵-۲- اثر چگالی در توزیع شعاعی متوسط مولکول‌های آلانین ۹۰
۳-۵-۲-۱- اثر چگالی در توزیع شعاعی متوسط مولکول‌های آب ۹۱
۳-۵-۲-۲- اثر دما در توزیع شعاعی مولکول‌های آب ۹۲
۳-۵-۳- تأثیر گروه‌های عاملی در جذب اسیدهای آمینه در فاز گازی ۹۳
۳-۵-۴- تأثیر گروه‌های عاملی در جذب اسیدهای آمینه در فاز آبی ۹۸
۳-۶-نتیجه‌گیری نهایی ۱۰۴
منابع و مآخذ ۱۰۹

فهرست جدول‌ها

عنوان **صفحه**

جدول ۲-۱ : پارامترهای پتانسیل ترساف برای توصیف برهم‌کنش بین اتم‌های بور و نیتروژن ۴۳

جدول ۲- ۲: برخی خواص فیزیکی اسیدهای آمینه ۴۵

جدول ۲- ۳ : پارامترهای والانس هندسی برای پتانسیل DREIDING ۴۵

جدول ۲-۴ : پارامترهای پیچش پتانسیل DREIDING برای اتم‌های مرکزی معادل ۴۶

جدول ۲- ۵ : پارامترهای واندروالس پتانسیل DREIDING ۴۶

جدول ۳-۱ : انرژی متوسط سامانه‌های سه‌جزئی، اعداد داخل پرانتز انحراف استاندارد را نشان می‌دهد ۷۲

جدول ۳- ۲ : نتایج انرژی برهم‌کنش متوسط بین دو جزء در سامانه‌های دوجزئی ۷۲

جدول ۳- ۳ : انرژی برهم‌کنش متوسط سامانه آب-BNNT در دماهای مختلف ۷۴

جدول ۳-۴ : انرژی برهم‌کنش متوسط سامانه‌ی آلانین-آب-BNNT در چگالی‌های مختلف ۷۵

جدول ۳- ۵ : ضرایب نفوذ اسیدهای آمینه در فاز گازی و آبی ۷۹

جدول ۳- ۶ : ضرایب نفوذ مولکول‌های آب در سامانه‌های آبی ۷۹

جدول ۳- ۷ : ضرایب نفوذ متوسط آلانین در سامانه‌ی آبی در چگالی‌های مختلف ۸۱

جدول ۳-۸ : ضرایب نفوذ متوسط مولکول‌های آب در سامانه‌ی آبی آلانین در چگالی‌های مختلف ۸۳

جدول ۳- ۹ : ضرایب نفوذ آب در سامانه‌ی آب-BNNT در دماهای مختلف ۸۵

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل ۱-۱ : انواع نانولوله‌های بور نیتریدی ۲۲

شکل ۲-۱ : ساختار نانولوله‌ی بور نیتریدی (۱۶،۰): (الف) تصویر از مقطع نانولوله (ب) تصویر در راستای محور نانولوله ۴۱

شکل ۲- ۲ : شکل فضایی اسیدهای آمینه: (الف) آلانین (ب) گلایسین (ج) سرین ۴۴

شکل ۲-۳ : فایل‌های ورودی وخروجی برنامه‌ی دی‌ال- پالی ۴۹

شکل ۲-۴ : تابعیت زمانی دمای سامانه در زمان آسایش ۰/۴ برای سامانه BNNT (۱۶،۰) ۵۶

شکل ۲- ۵ : تابعیت زمانی انرژی کل سامانه در زمان آسایش الف) ۰/۲ ب) ۰/۴ ج) ۰/۶ برای سامانه BNNT (۱۶،۰) ۵۷

شکل ۲-۶ : سامانه‌ی آلانین-BNNT (الف) تصویر مقطع نانولوله قبل از شبیه‌سازی (ب) تصویر در راستای محور نانولوله قبل از شبیه‌سازی (ج) تصویر مقطع نانولوله پس از شبیه‌سازی (د) تصویر در راستای محور نانولوله پس از شبیه‌سازی ۵۹

شکل ۲-۷ : سامانه‌ی گلایسین-BNNT (الف) تصویر مقطع نانولوله قبل از شبیه‌سازی (ب) تصویر در راستای محور نانولوله قبل از شبیه‌سازی (ج) تصویر مقطع نانولوله پس از شبیه‌سازی (د) تصویر در راستای محور نانولوله پس از شبیه‌سازی ۶۰

شکل ۲-۸ : سامانه‌ی سرین-BNNT (الف) تصویر مقطع نانولوله قبل از شبیه‌سازی ۶۱

(ب) تصویر در راستای محور نانولوله قبل از شبیه‌سازی (ج) تصویر مقطع نانولوله پس از شبیه‌سازی (د) تصویر در راستای محور نانولوله پس از شبیه‌سازی

شکل ۲-۹ : تابعیت زمانی انرژی کل سامانه برای سامانه‌ی اسید آمینه-BNNT الف) آلانین ب) گلایسین ج) سرین ۶۲

شکل ۲-۱۰ : سامانه آب-اسیدآمینه-BNNT برای (الف) آلانین (ب) گلایسین (ج) سرین پس از شبیه‌سازی ۶۴

شکل ۲-۱۱ : تابعیت زمانی انرژی کل سامانه برای سامانه‌ی اسید آمینه-آب-BNNT الف) آلانین ب) گلایسین ج) سرین ۶۵

شکل ۲-۱۲ : سامانه آب-BNNT در دمای: (الف) ۱۰۰K (ب) ۲۰۰K (ج) ۳۰۰ K (د) ۴۰۰ K ۶۷

شکل ۲-۱۳ : تصویر مقطع نانولوله پس از شبیه‌سازی برای سامانه آلانین-آب-BNNT با چگالی (الف) ۰/۲۶۷ (ب) ۰/۳۴۶(ج) ۰/۴۵۰(د) ۰/۴۷۸ گرم بر سانتی‌متر مکعب ۶۸

شکل ۳-۱ : متوسط مربعات جابجایی بر حسب زمان برای سامانه‌ی گازی اسید آمینه-BNNT (الف) آلانین (ب) گلایسین (ج) سرین ۷۶

شکل ۳-۲ : متوسط مربعات جابجایی بر حسب زمان برای سامانه‌ی اسید آمینه- آب-BNNT (الف) آلانین (ب) گلایسین (ج) سرین ۷۷

شکل ۳-۳ : متوسط مربعات جابجایی برحسب زمان مولکول‌های آب در سامانه‌های سه‌جزئی (الف) آلانین (ب) گلایسین (ج) سرین ۷۸

شکل ۳-۴ : متوسط مربعات جابجایی بر حسب زمان آلانین در سامانه‌ی آبی با چگالی‌های متفاوت ۸۰

شکل ۳-۵ : متوسط مربعات جابجایی بر حسب زمان مولکول‌های آب در سامانه‌ی ۸۲

آبی آلانین با چگالی‌های متفاوت

شکل ۳-۶ : متوسط مربعات جابجایی بر حسب زمان مولکول‌های آب در سامانه آب-BNNT در دماهای متفاوت ۸۴

شکل ۳-۷ : توزیع شعاعی متوسط اسیدهای آمینه (الف) آلانین (ب) گلایسین (ج) سرین در سامانه گازی اسید آمینه-BNNT (نقطه‌چین برای نشان دادن محل دیواره نانولوله در فاصله Å ۶/۲۶ می‌باشد) ۸۶

شکل ۳-۸ : توزیع شعاعی متوسط اسیدهای آمینه (الف) آلانین (ب) گلایسین (ج) سرین در سامانه آبی اسید آمینه-BNNT (نقطه‌چین برای نشان دادن محل دیواره نانولوله در فاصله Å ۶/۲۶ می‌باشد) ۸۸

شکل ۳-۹ : متوسط توزیع شعاعی مولکول‌های آب حول BNNT در سامانه آبی (الف) آلانین (ب) گلایسین (ج) سرین (نقطه‌چین برای نشان دادن دیواره نانولوله در فاصله Å ۶/۲۶ می‌باشد) ۸۹

شکل ۳-۱۰ : توزیع شعاعی متوسط آلانین حول BNNT در سامانه آبی با چگالی‌های مختلف (نقطه‌چین برای نشان دادن دیواره نانولوله در فاصله Å ۶/۲۶ می‌باشد) ۹۰

شکل ۳-۱۱ : توزیع شعاعی متوسط مولکول‌های آب در سامانه آبی آلانین در چگالی (الف) ۰/۲۶۷ (ب) ۰/۳۴۶ (ج) ۰/۴۵۰ (د) ۰/۴۷۸ (نقطه‌چین برای نشان دادن دیواره نانولوله در فاصله Å ۶/۲۶ می‌باشد) ۹۱

شکل ۳-۱۲ : توزیع شعاعی متوسط مولکول‌های آب بر حسب فاصله از محور نانولوله در دمای (الف) ۱۰۰ (ب) ۲۰۰ (ج) ۳۰۰ (د) ۴۰۰ کلوین ۹۲

شکل ۳-۱۳ : توزیع شعاعی متوسط اکسیژن‌ها برای (الف) آلانین (ب) گلایسین (ج) سرین در فاز گازی (نقطه‌چین برای نشان دادن دیواره نانولوله در فاصله‌ی Å ۶/۲۶ آنگستروم می‌باشد) ۹۳

شکل ۳-۱۴ : نمودارهای مقایسه میزان تمایل به جذب بر حسب فاصله از محور ۹۵

نانولوله گروه‌های عاملی در (الف) آلانین (ب) گلایسین (ج) سرین در فاز گازی (نقطه‌چین برای نشان دادن دیواره نانولوله در فاصله Å ۶/۲۶ می‌باشد)

شکل ۳-۱۵ : توزیع شعاعی متوسط برحسب فاصله از محور نانولوله گروه‌های عاملی (الف) آلانین (ب) گلایسین (ج) سرین در فاز گازی (نقطه‌چین برای نشان دادن دیواره نانولوله در Å ۶/۲۶ می‌باشد) ۹۶

شکل ۳-۱۶ : توزیع شعاعی متوسط اکسیژن‌ها برای (الف) آلانین (ب) گلایسین (ج) سرین در فاز آبی (نقطه‌چین برای نشان دادن دیواره نانولوله در فاصله‌ی Å ۶/۲۶ آنگستروم می‌باشد) ۹۹

شکل ۳-۱۷ : نمودارهای مقایسه میزان تمایل به جذب بر حسب فاصله از محور نانولوله برای گروه‌های عاملی در (الف) آلانین (ب) گلایسین (ج) سرین در فاز گازی (نقطه‌چین برای نشان دادن دیواره نانولوله در فاصله Å ۶/۲۶ می‌باشد) ۱۰۱

شکل ۳-۱۸ : توزیع شعاعی متوسط برحسب فاصله از محور نانولوله گروه‌های عاملی مختلف برای (الف) آلانین (ب) گلایسین (ج) سرین در فاز آبی (نقطه‌چین برای نشان دادن دیواره نانولوله در Å ۶/۲۶ می‌باشد) ۱۰۳

فهرست پیوست‌ها

عنوان **صفحه**

پیوست ۱ : نمونه پوشه‌های ورودی برنامه شبیه‌سازی نانولوله بور نیتریدی (۰،۱۶) ۱۰۶

فصل اول

مباحث نظری

فصل اول

۱– ۱– مقدمه

در این پژوهش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به منظور بررسی سامانه‌ی نانولوله‌ی بور نیتریدی با برخی اسیدهای آمینه در فاز گازی صورت گرفته است و به دلیل اهمیت مطالعه‌ی سامانه‌های زیستی در فاز آبی، این مطالعه در فاز آبی نیز انجام شده است. بر این اساس ابتدا به معرفی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و میدان‌های نیروی مربوط به آن جهت به کار بردن این روش برای مطالعه‌ی برهم‌کنش اسیدهای آمینه با نانولوله‌ی بور نیتریدی خواهیم پرداخت.

۱– ۲– تاریخچه‌ی مختصری از شبیه‌سازی رایانه‌ای

بیش از ۳۰ سال از زمانیکه نخستین شبیه‌سازی روی مایع، در آزمایشگاه ملی لس آلاموس[1] در ایالات متحده آمریکا صورت گرفته است می‌گذرد. رایانه‌ی لس آلاموس در زمان خود یکی از قویترین رایانه‌های در دسترس بود. اساس شبیه‌سازی مدرن مونت کارلو[2] (به دلیل نقشی که اعداد تصادفی در این روش ایفا می‌کنند به این نام، نام‌گذاری شده است) بسیار ساده است. شیوه متفاوت دیگری که وجود دارد و شامل ویژگی‌های دینامیکی سامانه‌های

[1] Los Alamos
[2] Monte-Carlo

چندعضوی می‌باشد، دینامیک مولکولی [۱] است که برای توصیف آن از حل معادله‌های کلاسیکی حرکت مانند معادله‌های حرکت نیوتنی برای یک مجموعه از مولکول‌ها استفاده می‌شود. این شیوه در آغاز برای سامانه‌ی کره‌ی سخت بوسیله‌ی آلدر[1] و وین رایت[2] (۱۹۵۷و۱۹۵۹) صورت گرفت [۳،۲].

۱-۲-۱- شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای

نظریه‌های علمی براساس تقریب‌های عددی یا تحلیلی بنا می‌شوند، این تقریب‌ها می‌توانند اعتبار مسئله را زیرسؤال ببرند. می‌توان گفت شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای دارای پایه‌های نظری هستند، اما سعی می‌شود در این روش‌های محاسباتی از به‌کارگیری تقریب‌های رایج برای نظریه‌های علمی خودداری و با جایگزین کردن محاسبه‌های بهتر راه یافتن پاسخ را هموار نمود [۴].

شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای نقش با ارزشی در فراهم آوردن نتایج دقیق برای مسائلی در مکانیک آماری که ممکن است با روش‌های دیگر قابل‌حل نباشد یا فقط بتوان آن‌ها را با روش‌های تقریبی حل کرد ایفا می‌کنند. در این صورت شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای به نوعی آزمودن نظریه‌هاست و از نظر تاریخی شبیه‌سازی‌ها، بین روش‌های معین (از قبیل نظریه قدیمی سلولی مایع‌ها) تمایز قائل می‌شوند. نتایج شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای را می‌توان با نتایج آزمایش‌های واقعی نیز مقایسه کرد. در قدم اول، این خود آزمونی از مدل مورد استفاده در یک شبیه‌سازی رایانه‌ای است. سرانجام اگر مدل خوب باشد، کسی که شبیه‌سازی می‌کند امیدوار است که به سایرین دیدگاه تازه‌ای پیشنهاد دهد و به توصیف نتایج جدید کمک کند. این نقش

[1] Alder
[2] Wainwright

دوگانه‌ی شبیه‌سازی‌ها از یک سو به عنوان پلی بین مدل‌ها و پیش‌بینی‌های نظری و از سوی دیگر میان نتایج مدل‌ها و آزمایش‌ها قرار می‌گیرد [۴].

شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای به دو دسته تقسیم می‌شوند:

- دینامیک مولکولی
- مونت کارلو

شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای ویژگی‌های میکروسکوپی یک سامانه نظیر جرم اتم‌ها، برهم‌کنش‌های آن‌ها، ساختار هندسی مولکولی و... را به خواص ماکروسکوپی آن مانند معادله حالت، ضرایب انتقال، پارامترهای ترتیب ساختاری و... پیوند می‌دهند، خواصی که از دیدگاه تجربی از اهمیت خاصی برخوردار است. در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی باید به زمان توجه ویژه‌ای داشت اما در شبیه‌سازی‌های مونت کارلو زمان وارد نمی‌شود [۵].

۱-۲-۱-۱- میدان‌های نیرو

در شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای نیروهای بین‌ذره‌ای و درون‌ذره‌ای به صورت مجموعه‌ای از معادله‌های ریاضی بیان می‌شود و اهمیت بسیاری در دقت و صحت نتایج شبیه‌سازی‌ها دارد. امروزه شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای در زمینه‌های مختلف، در حال تبدیل شدن به بخش جدانشدنی بسیاری از پژوهش‌ها شده است و به درک مسائل مختلف در سطح اتمی کمک می‌کند. بسیاری از این روش‌های شبیه‌سازی که شبیه‌سازی‌های در سطح اتمی خوانده می‌شوند بر مبنای پتانسیل‌های مدل تجربی برای توصیف برهم‌کنش میان اتم‌های سامانه قرار دارد. شبیه‌سازی‌های اتمی به عنوان ابزار ارزشمندی برای مطالعه و درک فرآیندهای میکروسکوپی در مواد چگال شناخته شده است. مزیت شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای این است که کمیت مورد