بسم الله الرحمن الرحيم

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه تربیت معلّم آذربایجان
دانشکده علوم پایه
گروه شیمی

پایان نامه
برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک

عنوان:

مطالعه نظری خواص شیمی فیزیکی نانو لوله های کربنی دوپه شده در شرایط گوناگون با استفاده از روش های شیمی محاسباتی و شبیه سازی مولکولی

استاد راهنما:
دکتر جابر جهان بین سردرودی

استاد مشاور:
دکتر علیرضا راستکار

پژوهشگر:
محمد قاسم نژاد اسفهلان

شهریور/۱۳۸۸
تبریز/ایران

بسم الله الرحمن الرحیم

معبودم! ای بود و نبودم! خدای من! عشق من! ای برتر از اندیشهٔ ناتوانم! ای همهٔ هستی من! ای زیباترین، ای کاملترین و ای بهترین آفرینندگان! نمی‌دانم کدامین واژه را به کار برم تا از بابت این آرامشی که به من عطا کردی تشکر کرده باشم. یا الهی و ربی من لی غیرک.

درود و سپاس یگانهٔ جاوید را که آرام گیرد دلها با یاد او و آرامش پذیرد پریشان عالمی با نام او. سپاس و صدها سپاس به پاس بهترین نعمتی که به ما عطا فرمودی: نعمت خداوندیت.

می دانم که نخواهم توانست سپاس خود را در قالب کلمات در آورده و شکرگزار تو باشم. لذا از کلام مولای متقیان علی (ع) کمک می گیرم و

«گواهی می‌دهم که خدا یکتاست، انبازی ندارد و بی‌همتاست. گواهیی از روی اعتقاد و ایمان، بی‌آمیغ برآمده از امتحان؛ و گواهی می‌دهم که محمّد(ص) بندهٔ او و پیامبر اوست. او را بفرستاد با دینی آشکار، و با نشانه‌هایی پدیدار، و قرآنی نبشته در علم پروردگار. که نوری است رخشان، و چراغی است فروزان، و دستورهایش روشن و عیان. تا گَردِ دودلی از دلها بزداید، و با حجّت و دلیل مُلزم فرماید.

پاک خدایا! چه بزرگ است آنچه می‌بینم از خلقت تو؛ و چه خُرد است، بزرگی آن در کنار قدرت تو؛ و چه با عظمت است آنچه می‌بینم از ملکوت تو، و چه ناچیز است برابر آنچه بر ما نهان است از سلطنت تو، و چه فراگیر است نعمت تو در این جهان؛ و چه اندک است در کنار نعمتهای آن جهان.

خدایا! اگر در پرسش خود درمانم یا راهِ پرسیدن را ندانم، صلاحِ کارم را به من نما و دلم را بدانچه رستگاری من در آن است متوجه فرما! که چنین کار از راهنماییهای تو ناشناخته نیست و از کفایتهای تو نه.»

تقدیم به پدر و مادرم

چکیده

در این پایان نامه خواص شیمی فیزیکی نانو لوله های کربنی دوپه شده در شرایط گوناگون با استفاده از روش های شیمی محاسباتی و شبیه سازی مولکولی مورد بررسی قرار گرفته است.
نانو لوله های کربنی خواص ترمودینامیکی منحصر به فردی دارند که با اضافه کردن اتم های دیگری به آن مانند بور این خواص دچار تغیرات می شوند. روش های شیمی محاسباتی و شبیه سازی مولکولی یکی از ابزارهای مفیدی هستند که خواص ترمودینامیکی سیستم هائی در ابعاد نانو را می توان با آنها مورد بررسی قرار داد.
خواص ترمودینامیکی تعادلی نانو لوله های کربنی دوپه شده در حلال آب از جمله خواص منحصر به فرد هستند.
آب از جمله حلال های مهم و پر کاربرد می باشد که تحقیقات زیادی در مورد خواص آن انجام شده است. قابلیت ایجاد پیوند هیدروژنی میان مولکولهای آب خواص ویژه ای به آن داده است .
با استفاده از نرم افزار شبیه ساز مولکولی به روش مونته کارلو و تابع توزیع شعاعی(rdf) برای اتمهای کربن و بور نانو لوله و اتم های اکسیژن و هیدروژن مولکول آب خاصیت آب گریز یا آب دوستی این نانو لوله ها بررسی شد .

کلمات کلیدی : نانو لوله های کربنی دوپه شده، شیمی محاسباتی و شبیه سازی، روش مونته کارلو، حلال آب ، اتم بور، خاصیت آب گریزی و آب دوستی

فهرست مطالب

فهرست جداول.....ت
فهرست اشکال.....ج
چکیده .....یک
پیشگفتار.....دو

۱) فصل اول: مقدمه

۱-۱) مقدمه ۱
۱-۲) شیمی محاسباتی و شبیه سازی مولکولی.....۲
۱-۳) تفاوت شیمی محاسباتی با شیمی نظری ۳
۱-٤) شبیه سازی مولکولی.....٤
۱-۵) میدان نیرو.....٤
۱-۵-۱) برهمکنش های بین مولکولی.....۵
۱-۵-۱-۱) برهمکنش الکترواستاتیکی.....۵
۱-۵-۱-۲) برهمکنش واندر والسی.....۵
۱-۵-۲) برهمکنش های درون مولکولی.....٦
۱-۵-۲-۱) کشش پیوندی ٦
۱-۵-۲-۲)خمش زاویه ای.....۷
۱-۵-۲-۳)زاویه دو وجهی.....۸
۱-٦) پارامتربندی میدان نیرو ۱۰
۱-۷) شبیه سازی دینامیک مولکولی ۱۰
۱-۸) شبیه سازی مونته کارلو.....۱۲
۱-۸-۱) مونته کارلو گراند کانونیک.....۱٤
۱-۹) محاسبات DFT ۱٤
۱-۱۰) آشنایی اجمالی با فناوری نانو ۱۵
۱-۱۰-۱) تعریف فناوری نانو.....۱۵

۱-۱۰-۲) نیرو های موثر در ابعاد نانومتری: ۱۵
۱-۱۰-۳) دلایل برای اهمیت نانو ۱۶
۱-۱۱) نانو لوله‌های دوپه شده : سنتز ، ویژگی‌ها و کاربردها ۱۶
۱-۱۱-۱) دوپینـــــگ خـــــارجی ۱۷
۱-۱۱-۲) دوپینگ داخلی یا کپسوله کردن ۱۸
۱ -۱۱-۳) روی سطح یا دوپینگ جانشینی ۱۹
۱-۱۱-۳-۱) دوپینگ جانشینی در گرافیت ۱۹
۱-۱۱-۳-۲) دوپینگ جانشینی در نانولوله‌ها ۱۹

۲) فصل دوم : جزئیات محاسبات و شبیه سازی

۲-۱) مقدمه..... ۲۱
۲-۲) شکل تابعی میدان نیرو..... ۲۱
۲-۳) مدل آب انتخاب شده..... ۲۲
۲-۳-۱)میدان نیروی به کار رفته در آب مدل SPC..... ۲۳
۲-٤) پارامتربندی میدان نیروی UFF ۲۳
۲-٤-۱) ثابت نیروی پیوندی K_r..... ۲٤
۲-٤-۲) ثابت نیروی زاویه‌ای K_θ..... ۲٦
۲-٤-۳) ثابت نیروی پیچشی K_φ..... ۲۷
۲-٤-۵) پارامترهای میدان نیرو ی نانولوله‌ی دوپه شده با دو اتم بور..... ۲۸
۲-٤-۵-۱) ثابت نیروی پیوندی K_r..... ۲۹
۲-٤-۵-۲) ثابت نیروی زاویه‌ای K_θ..... ۳۱
۲-٤-۵-۳) ثابت نیروی پیچشی K_φ..... ۳۲
۲-۵) دلیل انتخاب روش مونته کارلو ۳٤
۲-۵-۱) روش کار..... ۳۵
۲-۵-۲) الگوریتم پیشنهادی برای روش مونته کارلو..... ۳۷
۲-۵-۳) معایب و محاسن با دید کلی ۳۸
۲-۵-۳-۱) امتیازات این روش..... ۳۸

۲-۵-۳-۲) محدودیت ها..... ۳۸
۲-۵-٤) کاربردهای عمومی روش ۳۸

۳) بحث و نتیجه گیری

۳-۱) مقدمه ٤۰
۳-۲) ساختار پیوند هیدروژنی.....٤۲
۳-۳) شرایط سیستم ٤۲
۳-٤) تابع توزیع شعاعی (RDF).....٤٤
۳-٤-۱) بحث روی نمودارهای RDF.....٤۷
۳-۵) توزیع بار در نانو لوله ٤۸
۳-٦)پارامترهای میدان نیرو.....٤۸
۳-۷) آزمایش ثابت پیچشی نانولوله‌ی کربنی ۵۱

٤) منابع ۵۲

فهـــرست جـــــداول

جدول (۱-۲): پارامترهای نانولوله‌ی کربنی خالص..... ۲۱
جدول (۲-۲): پارامترهای آب مدل SPC ۲۲
جدول (۲-۳): پارامترهای آب مدل SPC و نانو لوله کربنی خالص و دوپه شده ۳۲
جدول (٤-۲) : پارامترهای لنارد – جونز ۳۳

فهرست نمودارها و اشکال

شکل (۱-۱): برهم کنش ها در مولکولها..... ٤

شکل (۱-۲):برهم کنش های واندروالسی..... ٦

شکل(۱-۳) پیوند بین دو اتم..... ۷

شکل(۱-٤) زاویه بین دو اتم iو اتم k..... ۸

شکل(۱-٦): زاویه دو وجهی میان چهار اتم و مولکول اتان..... ۹

شکل (۱-۷) : انواع دوپینگ در نانو لوله ها..... ۱۷

شکل (۲-۱) :تتراسن دوپه شده با یک اتم بور..... ۲٤

شکل (۲-۲):نمودار تغیرات انرژی با طول پیوند..... ۲۵

شکل (۲-۳): به گزینی و تعیین پارامتر..... ۲۵

شکل (۲-٤): تغیرات انرژی همراه با تغیرات زاویه..... ۲٦

شکل ۲-۵) :به گزینی و تعیین پارامتر..... ۲۷

شکل (۲-٦) : تتراسن خمیده دوپه شده با یک اتم بور..... ۲۷

شکل(۲-۷) تتراسن مسطح دوپه شده با یک اتم بور..... ۲۸

شکل (۲-۸) : تتراسن مسطح دوپه شده با دو اتم بور..... ۲۹

شکل (۲-۹) :تغیرات انرژی با تغییرات طول پیوند..... ۳۰

شکل (۲-۱۰) : به گزیینی تغیرات انرژی با تغییرات طول پیوند..... ۳۰

شکل ۲ ـ ۱۱: تغیرات انرژی با تغییرات زاویه..... ۳۱

شکل (۲-۱۲): به گزیینی تغیرات انرژی با تغییرات زاویه..... ۳۲

شکل (۲-۱۱) : الگوریتم پیشنهادی برای روش مونته کارلو..... ۳۷

شکل (۳-۱) :نانو لوله (۰-۱۲) با قطر ۹,٤۱ آنگستروم..... ٤۰

شکل (۳-۲) :نانو لوله (۰-۱۲) دوپه شده با یک اتم بور با قطر ۹,۹۸ آنگستروم..... ٤۱

شکل (۳-۳) : نانو لوله (۰-۱۲) دوکی شکل دوپه شده با تعداد بیشتری از اتمهای بور..... ٤۱

شکل (۳-٤) : جهت‌گیری مولکول‌های آب در نانولوله‌های کربنی..... ٤۲

شکل (۳-۵) : جهت‌گیری مولکول‌های آب در نانولوله‌های کربنی دوپه شده با دو اتم بور..... ٤۳

شکل (۳-۵) : جهت‌گیری مولکول‌های آب در نانولوله‌های کربنی دوپه شده با یک اتم بور..... ٤٤

شکل(۳-٦): تابع توزیع شعاعی برای اتم های کربن نانولوله و اکسیژن آب.....٤٥
شکل(۳-۷): تابع توزیع شعاعی برای اتم های بور نانولوله و اکسیژن آب.....٤٦
شکل ۳-۸ : توزیع بار در نانو لوله دوپه شده.....٤٨
شکل‌های(۳-۹) و (۳-۱۰): نانولوله‌های دوپه شده با اتم‌های بور استوانه‌ی کامل نیستند بلکه در محل‌های اضافه شده‌ی بور ، نانولوله شکل دوکی و تخم مرغی به خود گرفته است.....۵۰
شکل (۳-۱۱): تتراسن مسطح که در آن فاصله میان کربن های انتهائی ۹,۷۹ آنگستروم است.....۵۲
شکل (۳-۱۲): تتراسن خمیده که در آن فاصله میان کربن های انتهائی ۸,۸٤ آنگستروم است.....۵۲

پیشگفتار

نانو فناوری ، فناوری و علم بررسی و بکارگیری تمام مواد ، فرآیندها و اتفاقاتی است که در ابعاد نانو متر رخ می دهد. این علم برای اولین بار در دهه ۱۹۵۰ میلادی توسط ریچارد فاینمین ، فیزیکدان مشهور و برنده جایزه نوبل مطرح گردید اما تا سه دهه مورد توجه چندانی قرار نگرفت تا اینکه در دهه ۱۹۸۰ دوباره توسط فیزیکدان دیگری به نام اریک درکسلر در دو کتاب موتورهای آفرینش و انقلاب نانو فناوری مطرح گردید . از آن زمان تاکنون ، این علم مورد توجه بسیاری قرار گرفت. شبیه سازی مولکولی پایه ای است برای ارتباطات، درک و توسعهٔ فناوریهای نو نظیرفناوری نانو یعنی ابعاد مولکولها و اتم ها.

نتایج مدلسازی مولکولی یا محاسبات، در بخش شیمی تحلیلی کاملاً جا افتاده است .مدلسازیهای چند مقیاسی نیز با دقت بالاتر ومحاسبات سنگین تر پیگیری می شود. فیزیک محیطهای پیوسته و تفکر عمیق در طبیعت رفتاری الکترونها در اتم در سالهای ۱۸۰۰ میلادی خبر از توسعهٔ مکانیک آماری و مکانیک محیطهای پیوسته می‌داد. ظهور دانش شیمی -فیزیک و اساس ساختارهای مولکولی دراواخر ۱۸۰۰ میلادی حاکی از درک پیوندهای شیمیایی می‌داد که در نهایت در سالهای ۱۹۳۰ توسعه یافت و روشهای شیمی کوانتوم که در سالهای ۱۹۵۰ توسعه یافتند. پیشرفتهائی در قدرت محاسباتی، درک و قابلیتهای ما را در کاربردی کردن فیزیک و شیمی محاسباتی توسعه خواهد داد. همانگونه که پیشرفتهائی بزرگ در تکنولوژی اغلب منشعب از نتایج و مشاهدات آزمایشگاهی است، مدلسازی مولکولی با افزایش دقت در حل پیچیدگیهای مدل به گونه‌ای که منجر به نتایج سودمند کاربردی شود، در رشد تکنولوژی مفید است.مدلسازی مؤثر و مدیریت نتایج آن، به برداشت کارشناسی و موفقیت آمیز از کدهای مدلسازی مولکولی وابسته است. یکی از اکتشافات بزرگ مربوط به نانوتکنولوژی ، کشف نانو لوله ها است. نانو لوله ها صفحاتی از اتمهای کربن هستند که درون قسمتی غلطک مانند حرکت می کنند ودر ظاهر شبیه توریهای سیمی هستند که بر روی یک سمت آنها پوششی قرار گرفته باشد. ساختار تو خالی نانو تیوب سبک بودن آن را به دنبال دارد . چگالی نوع چند دیواره ای ۱/۸ و نوع تک دیواره ای ۰/۸ است . استحکام ویژه آنها حداقل ۱۰۰ برابر فولاد است . نانو تیوبها مقاومت خوبی در برابر مواد شیمیایی داشته و از پایداری گرمایی بالای برخوردارند .انتقال الکترون در نانو لوله ها منحصر به فرد است و در جهت محور شدیدا رسانا هستند.نانو لوله ها از لحاظ کاتالیزوری فعال می باشند .نانو لوله ها خاصیت مویینگی بالایی دارند و می توانند گازها و مایعات را در خود جای دهند.

۱-۱) مقدمه:

افزایش سریع قدرت رایانه‌ها راهی را برای شبیه‌سازی سیستم‌های گوناگون و فرآیندهای فیزیکی در مقیاس اتمی گشوده است. امروزه ما این زمینه از علم را مدل‌سازی مولکولی گوئیم[۱]. شبیه‌سازی رایانه‌ای در مقیاس اتمی می‌تواند در کاربردهای مختلفی مورد استفاده قرار گیرد . تعدادی از آنها عبارتند از طراحی دارو ، مهندسی پروتئین ، فرآیندهای زیست محیطی و علم مواد . شبیه سازی رایانه‌ای زمانی مفید است که کار آزمایشگاهی هزینه‌بر ، وقت‌گیر یا عملاً در آزمایشگاه غیرممکن باشد. در کنار آن بسیاری از خواص ترموفیزیکی می‌تواند از شبیه‌سازی حاصل شود. چگالی ، انرژی آزاد ، گرمای ویژه ، گرانروی و ساختار مولکولها مقداری از خواص‌ها هستند که می‌توانند توسط شبیه‌سازی به دست آیند. به طور خلاصه بهتر است بگوئیم که مدلسازی مولکولی شاخه‌ای از علم است که تئوری و تجربه را به میز کاری رایانه می‌آورد و به ما دیدگاهی می‌دهد تا آزمایش رایانه‌ای انجام دهیم . شبیه‌سازی مولکولی یک ابزار قوی برای اکتشاف در سیستم‌هائی در ابعاد نانو می‌باشد[۱].

رفتار مایعات و مواد نانو متخلخل یکی از زمینه‌های فعال است. بر اساس ابعاد کوچک مواد نانو دسترسی به روشهای آزمایشگاهی به راحتی امکان‌پذیر نیست [۱].

بنابر این شبیه‌سازی مولکولی میتواند اطلاعات مفیدی از قبیل چگالی ، ممان دوقطبی ، مزایب نفوذ شارش مولکولها از میان مواد نانو متخلخل ، ایزوترم‌های جذبی و سایتهای جذبی را بدهد. در این پایاننامه شبیه‌سازی مولکولی وشیمی محاسباتی به عنوان ابزاری برای پی بردن به خواص شیمی فیزیکی و تعادلی فاز آبی با نانو لوله‌های کربن خالص و دو په شده با اتم بور به کار رفته است.

۱-۲) شیمی محاسباتی و شبیه سازی مولکولی

برای شروع ابتدا باید شیمی محاسباتی و شبیه سازی مولکولی را تعریف کرد ، با مراجعه به مراجع اصلی در این زمینه شیمی محاسباتی را کتاب شیمی محاسباتی و مدلسازی مولکولی[۱] [۲]

چنین تعریف می کند :

((شیمی محاسباتی یکی از مهیج ترین و روبه رشد ترین رشته های علمی است که به مدل سازی سیستم هائی مانند مولکولهای زیستی، پلیمرها، داروها، مولکولهای آلی و معدنی و دیگر زمینه های علم شیمی می پردازد)).

با نگاهی به این گفتار می فهمیم که شیمی محاسباتی علمی است که در تمامی زمینه های علم شیمی کاربرد دارد و روز به روز در حال پیشرفت است پیشرفتی که دید ما را نسبت به محیط پیرامون متفاوت ساخته است.

این پیشرفت در چند دهه اخیر همراه با رشد سخت افزارها و نرم افزارهای کامپیوتری بوده است.با استفاده از کامپیوتر هائی با قدرت پردازش بالا شیمی محاسباتی به راحتی می تواند در حل مسائل سیستم های شیمیائی پیچیده و زیستی باشد.

مسائلی که می توان با استفاده از شیمی محاسباتی برای آنها جواب پیدا کرد به این صورت است [۲]

۱- شکل فضائی مولکولها:
شکل مولکولها ، طول پیوندها ،زاویه ها و زاویه های دو وجهی

[۱] Computational Chemistry and Molecular Modeling

۲- انرژی مولکولها ،حالت های گذار،کدام ایزومر در حالت تعادل پایدار است و مسیر واکنش در چه جهتی پیش خواهد رفت.

۳- واکنش پذیری شیمیائی :

به عنوان مثال شناسائی محلهای هسته دوست و الکترون دوست که ما را قادر می سازد پیش بینی کنیم کدام نوع از واکنشگرها می تواند با مولکولی واکنش دهد یا این که سنتز نانو لوله های کربنی در محیط آبی به علت آبگریز بودن این نانو لوله ها امکان پذیر نیست[۳].

٤- طیف IR , UV , NMR :

این طیف ها می توانند به دست آیند و اگر مولکولی نا شناخته باشد ، کسی که سعی در ساختن این مولکول می کند به راحتی می داند دنبال چه چیزی باشد.

۵- برهمکنش یک سوبسترا با آنزیم :

بررسی چگونگی عملگری ویژه یک آنزیم بر روی یک سوبسترا برای طراحی داروهای بهتر ومفید تر.

٦- بررسی خواص فیزیکی مواد :

خواص فیزیکی مواد وابسته به خواص تک تک مولکولها و برهمکنش آنها است. به عنوان مثال نقطه ذوب و سختی یک پلیمر مثلاً پلاستیک وابسته به این است که مولکولهای یک پلیمر چگونه در کنار هم آرایش یافته اند و نیروی بین آنها چه اندازه محکم می باشد[۳].

۱-۳) تفاوت شیمی محاسباتی با شیمی نظری :

یانگ[۲] در کتاب شیمی محاسباتی [٤] تفاوت این دو واژه را چنین گفته است :واژه شیمی نظری می تواند به صورت توصیف ریاضی از مسائل شیمی باشد اما شیمی محاسباتی در زمانی مورد استفاده است که یک روش ریاضاتی به آن اندازه پیشرفت کرده باشد که بتواند به طور خودکار در یک برنامه کامپیوتری مربوط به شیمی وارد شده و مورد استفاده قرار گیرد.

[۲] P.D.Yung

١-٤)شبیه سازی مولکولی

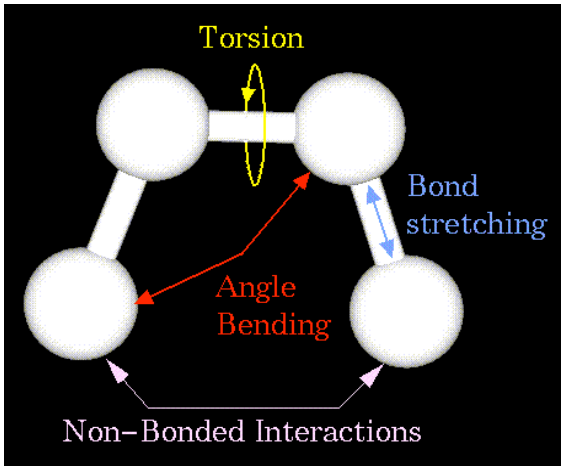
دائره المعارف علوم و مهندسی نانو[٥] شبیه سازی مولکولی را چنین تعریف کرده است :

((یک وسیله برای پیش بینی کلا محاسباتی بسیاری از خواص اساسی یک سیستم در علم شیمی ، پزشکی ،مواد و سایر علوم وابسته می باشد که این خواص شامل خواص ترمودینامیکی ،ترمو مکانیکی ،اسپکتروسکوپی ، مکانیکی ، خواص انتقالی و اطلاعات ریخت شناسی است)).

دو تکنیک عمده شبیه سازی مولکولی ، دینامیک مولکولی[٣] و شبیه سازی مونته کارلو [٤] می باشد که هر کدام ریشه در مکانیک کلاسیک دارند.

١-٥) میدان نیرو[٥]

یک میدان نیرو مجموعه از معادلاتی است که برهمکنش بین اتم ها را فرمول بندی کرده است[٦].این برهمکنش ها به طور معمول در دو گروه طبقه بندی می شوند : برهمکنش های درون مولکولی و برهمکنش های بین مولکولی شکل (١-١).



شکل (١-١): برهم کنش ها در مولکولها

[٣] Molecular Dynamic
[٤] Monte Carlo simulation
[٥] Force Field

۱-۵-۱) برهمکنش های بین مولکولی

برهمکنش های بین مولکولی به دو دسته الکترواستاتیکی و واندر والسی تقسیم می شود.

برهمکنش الکترواستاتیکی ناشی از توزیع بار روی اتم ها در مولکولها است.

۱-۵-۱-۱) برهمکنش الکترواستاتیکی

برهمکنش الکترواستاتیکی بین دو اتم با استفاده از قانون کولومب محاسبه می شود:

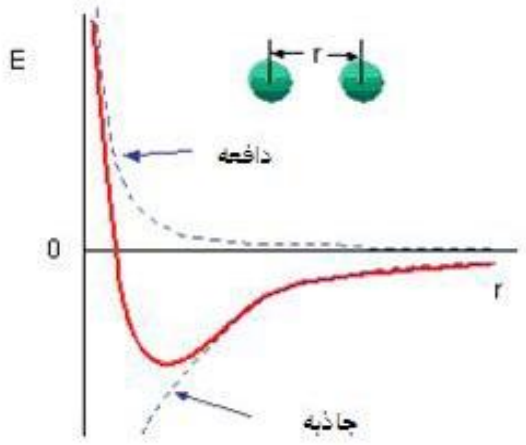
$$U = \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \qquad (۱-۱)$$

۱-۵-۱-۲) برهمکنش واندر والسی

برهمکنش واندر والسی یک برهمکنش کوتاه برد است که دو جمله دافعه و جاذبه دارد شکل (۱-۲).

تابع مشهوری که برای این برهمکنش به کار گرفته می شود تابع لنارد جونز است:

$$U_{vw}(r) = 4\varepsilon\left[(\frac{\sigma}{r})^{12} - (\frac{\sigma}{r})^{6}\right] \qquad (۱-۲)$$



شکل (۱-۲):برهم کنش های واندروالسی

که σ پارامتر برخورد است. هم دینامیک مولکولی و هم شبیه سازی مونته کارلو به میدان نیرو نیاز دارند تا برهمکنش بین اتمها را مشخص کنند[٦].

۱-۵-۲) برهمکنش های درون مولکولی:

اتم هایی که مستقیما و یا حد اکثر با سه پیوند با هم دیگر پیوند دارند ، بر همکنش های درون مولکولی دارند. این بر همکنش ها به سه بخش اصلی تقسیم می شوند.

۱-۵-۲-۱) کشش پیوندی

کشش پیوندی ، پیوند بین دو اتم را بیان می کند که تابعی از فاصله بین دو اتم می باشد.شکل (۱-۳)

شکل(۱-۳) پیوند بین دو اتم

روش مفید برای مدلسازی پیوند به این طریق است که فرض کنیم دو اتم توسط فنر به همدیگر وصل شده اند. این کار این اجازه را به ما می دهد تا با استفاده از قانون هوک[٦] ، تغیرات انرژی پیوند را به جابجائی طول پیوند از طول تعادلی r_0 نسبت دهیم:

$$U_{bond}(r) = K(r_{ij} - r_0) \qquad (۱-۳)$$

که r_{ij} فاصله بین دو اتم و K ثابت نیرو می باشد.

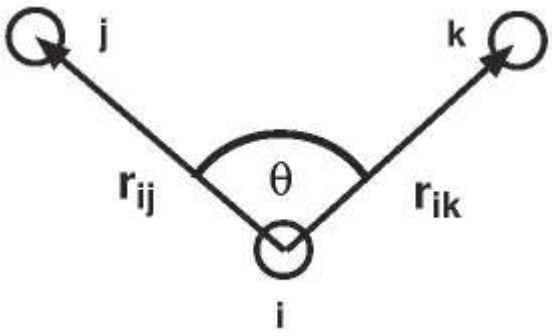
[٦] Hook,s Low

۱-۵-۲-۲)خمش زاویه ای:

خمش زاویه ای برهمکنش میان دو اتمی هست که توسط یک اتم مشترک به هم دیگر وصل شده اند. در اینجا نیز برهمکنش فنر مانندی بین دو اتم موجود می باشد. تغیرات انرژی را در اینجا به جابجائی زاویه از زاویه تعادلی θ_0 نسبت می دهیم شکل(۱-٤) :

$$U_{angle}(\theta) = K\left(\theta_{ijk} - \theta_0\right)^2 \qquad (٤-١)$$

که θ_{ijk} زاویه بین دو اتم **i**و اتم **k** می باشد.



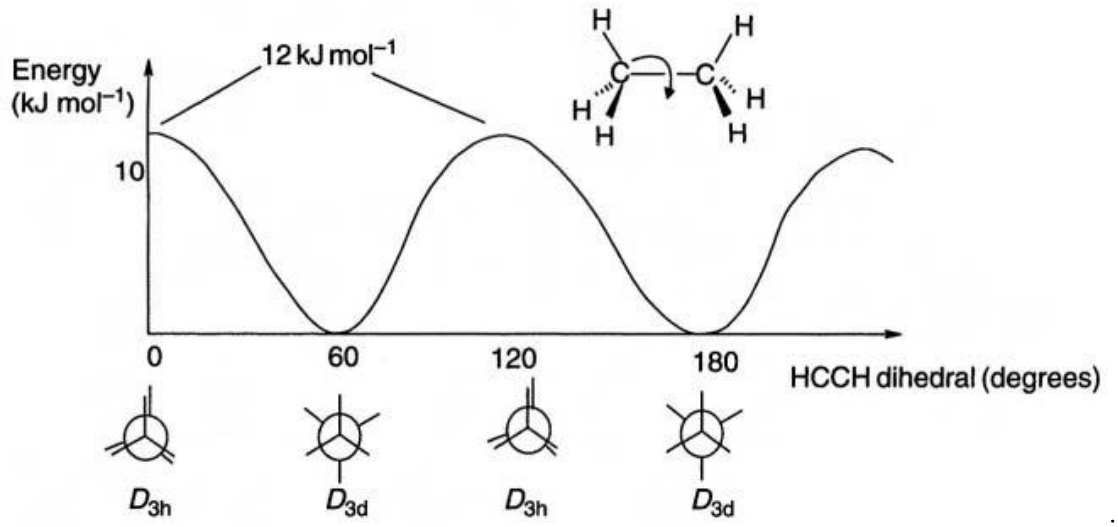
شکل(۱-٤) زاویه بین دو اتم **i**و اتم **k**

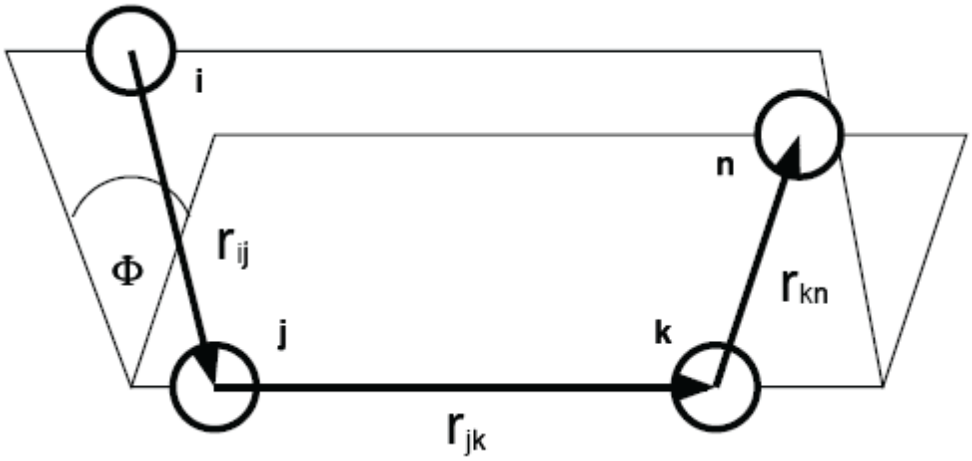
۱-۵-۲-۳)زاویه دو وجهی:

پتانسیل زاویه دو وجهی ناشی از برهمکنش های پیچشی در مولکول است. شکل زاویه دو وجهی بین دو صفحه که در آن چهار اتم به یکدیگر متصل هستند را نشان می دهد. پتانسیل زاویه دو وجهی پیچش اتمها حول پیوند شیمیائی می باشد بنا بر این نقش مهمی در آرایش فضائی مولکولها دارد. پتانسیل زاویه دو وجهی به صورت تابع کوسینوسی بیان می شود:

$$U_{dihedral} = K_1\left(1+\cos\left(\phi\right)\right) + K_2\left(1-\cos\left(2\phi\right)\right) + K_3\left(1+\cos\left(3\phi\right)\right) \qquad (٥-١)$$

مثالی که در این زمینه می توان زد تصاویر نیومن مولکول اتان می باشد[۷] شکل(۱-٦).





شکل(۱-٦): زاویه دو وجهی میان چهار اتم و مولکول اتان

در اینجا می توان شکل کاملی از میدان نیرو راکه از چندین جمله مختلف تشکیل شده را به این صورت بیان کرد :

$$U_{total} = U_{el} + U_{VW} + U_{bond} + U_{angle} + U_{dihedral} \qquad (۱-٦)$$

۱-٦)پارامتربندی میدان نیرو[۷]

یک میدان نیرو می تواند تعداد زیادی پارامتر داشته باشد ، مانند σ و ε در پتانسیل لنارد – جونز و K ثابت نیرو در پتانسیلهای درون مولکولی. پارامتربندی میدان نیرو کار کم ارزشی نیست[٦] تلاشهای زیادی لازم است تا یک میدان نیرو ایجاد شود.

مرحله اول انتخاب داده هائی است که باید استفاده شوند. میدان نیرو ممکن است برای تعین ساختار یا برای تعین خواص ترمودینامیکی استفاده شود. متاسفانه داده های تجربی ممکن است وجود نداشته باشند یا برای دسته خاصی از مولکولها امکان به دست آوردن آنها سخت باشد. محاسبات مکانیک کوانتومی به طور فزاینده ای برای فراهم کردن داده ها ی میدان نیرو به کار می روند.

هنگامی که شکل تابعی برای میدان نیرو انتخاب شد و داده های مورد استفاده در آن پارامتربندی شدند این داده ها باید با روش آزمایش و خطا و یا با بهینه کردن با استفاده از حداقل مربعات بهبود یابند[۸].

۱-۷) شبیه سازی دینامیک مولکولی

یک تکنیک شبیه سازی کامپیوتری است که به صورت پی در پی حالات میکروسکوپی یک سیستم را با حل معادلات کلاسیکی((**نیوتن**)) برای حرکت فراهم می کند[۹].

طبق قانون دوم نیوتن نیرو متناسب با تغیرات تکانه می باشد:

$$F = m\frac{d^2r}{dt^2} \qquad (۷-۱)$$

از این معادله فهمیده می شود که حرکت یک ذره با جرم m در یک فضای مشخص یک نیروی F به آن وارد خواهد شد.با استفاده از این معادله می توان تغیرات مسیر حرکت یک سیستم را نسبت به زمان اندازه گرفت.در شبیه سازی دینامیک مولکولی مجموعه ای از محاسبات در هر مرحله تکرار می شود تا تغیرات سیستم با زمان اندازه گیری شود:

[۷] Force Field Parametrization