به نام خدا

مؤسسه فرهنگی هنری
دیباگران تهران

شبیه سازی دینامیک مولکولی
با نرم افزار متریالز استودیو

مؤلفان:

دکتر مجید موسوی

دکتر مهرانگیز ترک زاده

هرگونه چاپ و تکثیر از محتویات این کتاب بدون اجازه کتبی ناشر ممنوع است. متخلفان به موجب قانون حمایت حقوق مؤلفان، مصنفان و هنرمندان تحت پیگرد قانونی قرار می‌گیرند.

مؤسسه فرهنگی هنری دیباگران تهران

◂ عنوان کتاب: **شبیه سازی دینامیک مولکولی با نرم افزار متریالز استودیو**

◂ مولفان : دکتر مجید موسوی
دکتر مهرانگیز ترک زاده

◂ ناشر: موسسه فرهنگی هنری دیباگران تهران
◂صفحه آرایی: فرنوش عبدالهی
◂طراح جلد:داریوش فرسایی
◂ نوبت چاپ: سوم
◂ تاریخ نشر: ۱۳۹۸
◂ چاپ و صحافی :صدف
◂ تیراژ:۵۰ جلد
◂ قیمت:۷۲۰۰۰۰ ریال
◂ شابک: ۹۷۸-۶۲۲-۲۱۸-۰۳۵-۵

نشانی واحد فروش: تهران، میدان انقلاب، خ کارگر جنوبی، روبروی پاساژ مهستان، پلاک ۱۲۵۱
تلفن: ۲۲۰۸۵۱۱۱-۶۶۴۱۰۰۴۶

فروشگاههای اینترنتی دیباگران تهران :
WWW.MFTBOOK.IR
www.dibagarantehran.com
www.mftdibagaran.ir
نشانی تلگرام:@mftbook

سرشناسه:موسوی ،مجید،۱۳۵۹-
عنوان و نام پدیدآور:شبیه سازی دینامیک مولکولی با نرم افزار متریالز استودیو / مولفان:مجید موسوی ،مهرانگیز ترک زاده.
مشخصات نشر: تهران : دیباگران تهران :۱۳۹۷
مشخصات ظاهری:۲۱۵ ص:مصور،
شابک: ۹۷۸-۶۲۲-۲۱۸-۰۳۵-۵
وضعیت فهرست نویسی: فیپا یادداشت :واژه نامه.کتابنامه
موضوع:دینامیک مولکولی-شبیه سازی کامپیوتری
موضوع:molecular dynamics-computer simulation
موضوع:نرم افزار متریالز استودیو
موضوع:materials studio (computer software)
شناسه افزوده:ترک زاده،مهرانگیز،۱۳۶۶-
رده بندی کنگره:۱۳۹۷ ۸ م۲ ش/۴۵۵/۳ QD
رده بندی دیویی:۵۴۱/۰۱۱۳
شماره کتابشناسی ملی:۵۴۳۸۹۷۴

اپلیکیشن دیباگران تهران را از سایت های اینترنتی دیباگران دریافت نمایید.

فهرست مطالب

فصل ۱

مبانی شبیه‌سازی مورد نیاز در نرم‌افزار متریالز استودیو ۹

۱-۱ روش‌های شیمی محاسباتی ۱۰

۱-۱-۱ روش‌های ایستا ۱۱

۱-۱-۲ روش‌های دینامیک ۱۲

۱-۲ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۱۳

۱-۲-۱ الگوریتم‌های انتگرالی به روش تفاضل معین ۱۴

۱-۲-۲ فنون مورد استفاده در شبیه‌سازی ۱۶

۱-۲-۲-۱ شرایط مرزی دوره‌ای ۱۶

۱-۲-۲-۲ شعاع قطع پتانسیل و قرارداد حداقل تصویر ۱۷

۱-۲-۳ موقعیت‌ها و سرعت‌های اولیه ۲۴

۱-۲-۴ میدان‌های نیرو و انتخاب پتانسیل بین ذره‌ای ۲۵

۱-۲-۵ کنترل شرایط شبیه‌سازی ۳۴

۱-۲-۵-۱ انواع انسامبل‌ها در شبیه‌سازی ۳۵

۱-۲-۵-۲ باروستات ۳۶

۱-۲-۵-۳ ترموستات ۳۷

۱-۲-۶ مراحل اصلی در یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۳۸

۱-۲-۶-۱ کمینه‌سازی انرژی ۳۹

۱-۲-۶-۲ به تعادل‌رسانی سامانه ۴۱

۱-۲-۶-۳ محاسبه‌ی خواص ۴۲

۱-۲-۶-۳-۱ خواص ترمودینامیکی ۴۳

۱-۲-۶-۳-۲ خواص انتقالی ۴۴

۱-۲-۶-۳-۳ تابع توزیع شعاعی ۴۸

۱-۲-۶-۴ تحلیل نتایج و ارزیابی خطاها در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۵۰

فصل ۲

اصول کار با نرم‌افزار متریالز استودیو ۵۳

۲-۱ نمای ظاهری نرم‌افزار ۵۴

۲-۲ ایجاد یک پروژه در متریالز استودیو ۵۶

۲-۳ مدیریت پروژه در متریالز استودیو ۵۹

۲-۴ ترسیم در متریالز استودیو ۶۲

فصل ۳

مدل‌سازی در نرم‌افزار متریالز استودیو ۷۳

۳-۱ مدل‌سازی پلیمرها ۷۴

۳-۱-۱ ساخت هموپلیمر ۷۵

۳-۱-۲ ساخت کوپلیمر دسته‌ای ۸۰

۳-۱-۳ ساخت کوپلیمر تصادفی ۸۲

۳-۱-۴ ساخت دندریمرها یا درختپارها ۸۵

۳-۲ مدل‌سازی نانوساختارها ۸۷

۳-۲-۱ ساخت نانولوله‌ی تک دیواره ۸۷

۳-۲-۲ ساخت نانولوله‌ی چند دیواره ۸۹

۳-۲-۳ ساخت نانو ریسمان ۹۲

۳-۲-۴ ساخت نانو کلاستر ۹۳

فصل ۴

انجام محاسبات در نرم‌افزار متریالز استودیو ۹۹

۴-۱ ماژول AMORPHOUS CELL ۱۰۲

۴-۲ ماژول FORCITE ۱۰۸

فصل ۵

مثالهای کاربردی ۱۲۱

۵-۱ بهینه‌سازی هندسی ساختار اوره همراه و بدون اعمال محدودیتهای تقارن ۱۲۲

۵-۲ محاسبه‌ی ضریب نفوذ یک گاز در یک پلیمر ۱۲۵

۵-۳ ایجاد مدل مولکولی جذب فیزیکی هیدروژن روی سطح تنگستن ۱۳۵

۵-۴ برهمکنش پلیمر با یک سطح اکسید فلزی ۱۴۱

۵-۵ شبیه‌سازی برش محدود ۱۵۰

۵-۶ شبیه‌سازی جذب آب و الکل توسط یک غشای جامد زئولیتی ۱۵۷

۵-۷ شبیه‌سازی ساختار کاتدی لیتیوم کبالت اکسید در باتریهای لیتیوم-یون ۱۶۳
۵-۸ امتزاج‌پذیری دو نوع پلیمر ۱۶۸
۵-۹ محاسبه‌ی انرژی آزاد حلال‌پوشی پروپیونیک اسید در اکتانول نرمال ۱۷۴

پیوست ۱
روش نصب نرم‌افزار ۱۸۳

پیوست ۲
شکل‌های تابعی انواع میدان‌های نیرو ۱۹۱

پیوست ۳
پاسخ به چند سوال متداول ۱۹۷

واژه‌نامه‌ی فارسی - انگلیسی ۲۰۳
واژه‌نامه‌ی انگلیسی - فارسی ۲۰۸

مراجع ۲۱۳

مقدمه ناشر

خط مشی کیفیت انتشارات مؤسسه فرهنگی هنری دیباگران تهران در عرصه کتاب هایی است که بتواند خواسته های به روز جامعه فرهنگی و علمی کشور را تا حد امکان پوشش دهد.

حمد و سپاس ایزد منان را که با الطاف بیکران خود این توفیق را به ما ارزانی داشت تا بتوانیم در راه ارتقای دانش عمومی و فرهنگی این مرز و بوم در زمینه چاپ و نشر کتب علمی دانشگاهی، علوم پایه و به ویژه علوم کامپیوتر و انفورماتیک گام‌هایی هرچند کوچک برداشته و در انجام رسالتی که بر عهده داریم، مؤثر واقع شویم.

گستردگی علوم و توسعه روزافزون آن، شرایطی را به وجود آورده که هر روز شاهد تحولات اساسی چشمگیری در سطح جهان هستیم. این گسترش و توسعه نیاز به منابع مختلف از جمله کتاب را به عنوان قدیمی‌ترین و راحت‌ترین راه دستیابی به اطلاعات و اطلاع‌رسانی، بیش از پیش روشن می‌نماید.

در این راستا، واحد انتشارات مؤسسه فرهنگی هنری دیباگران تهران با همکاری جمعی از اساتید، مؤلفان، مترجمان، متخصصان، پژوهشگران، محققان و نیز پرسنل ورزیده و ماهر در زمینه امور نشر درصدد هستند تا با تلاش‌های مستمر خود برای رفع کمبودها و نیازهای موجود، منابعی پُربار، معتبر و با کیفیت مناسب در اختیار علاقمندان قرار دهند.

کتابی که در دست دارید با همت "**دکتر مجید موسوی و دکتر مهرانگیز ترک زاده** " و تلاش جمعی از همکاران انتشارات میسر گشته که شایسته است از یکایک این گرامیان تشکر و قدردانی کنیم.

کارشناسی و نظارت بر محتوا: زهره قزلباش

در خاتمه ضمن سپاسگزاری از شما دانش‌پژوه گرامی درخواست می‌نماید با مراجعه به آدرس dibagaran.mft.info (ارتباط با مشتری) فرم نظرسنجی را برای کتابی که در دست دارید تکمیل و ارسال نموده، انتشارات دیباگران تهران را که جلب رضایت و وفاداری مشتریان را هدف خود می‌داند، یاری فرمایید.

امیدواریم همواره بهتر از گذشته خدمات و محصولات خود را تقدیم حضورتان نماییم.

مدیر انتشارات

مؤسسه فرهنگی هنری دیباگران تهران
bookmarket@mft.info

پیش‌گفتار

شیمی محاسباتی، شاخه‌ای از دانش شیمی است که سعی در حل مسائل شیمی بـه کمـک رایانـه‌هـا دارد. یکی از روش‌های بسیار کارا در شیمی محاسباتی، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است کـه روشـی مناسب برای مدل‌سازی میکروسکوپی در مقیاس اتمی و مولکولی را فراهم می‌کند. در سـال‌هـای اخیـر چندین کتاب درباره‌ی مبانی و فنون مـورد اسـتفاده در روش‌هـای شـبیه‌سـازی دینامیـک مولکـولی و همچنین برخی از نرم‌افزارهای پرکاربرد در این زمینه به رشته تحریر درآمـده اسـت. بـا توجـه بـه نیـاز گسترده و روزافزون محققین عزیز به نرم‌افزارهای جدیدتر و توانمندتر، در این کتاب به بررسی و توضیح برخی از توانمندی‌های نرم‌افزار متریالز استودیو در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سـامانه‌هـای مختلـف خـواهیم پرداخـت. نـرم‌افـزار متریـالز اسـتودیو جهـت انجـام طیـف وسـیعی از محاسـبات کوانتـومی، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و مونت کارلو در مقیاس‌های مختلف طراحی شـده اسـت. ایـن نـرم افزار بسیار توانمند بوده و برای مطالعات محاسباتی در شاخه‌های مختلف علوم و مهندسی کـاربرد دارد. نرم‌افزار متریال استودیو، علاوه بر توانمندی‌های محاسباتی، دارای یک رابط گرافیکی بسیار قدرتمند در سیستم عامل ویندوز است که سبب می‌شود نسبت به بسیاری از نرم‌افزارهای متداول شبیه‌سازی نظیـر DL-Poly، LAMMPS و ... که بیشتر از محیط متنی در سیسـتم عامـل لینـوکس اسـتفاده مـی‌کننـد، سهولت کاربرد بیشتری داشته باشد. این نرم‌افزار توانایی انجام محاسبات به صورت موازی و با هر تعـداد هسته‌ی دلخواه را دارد.

ویرایش نخست این کتاب، در پنج فصل خدمت علاقمندان تقدیم می‌گردد. در فصل اول این کتاب، ابتدا به انواع روش‌های محاسباتی به اختصار اشاره کرده و سپس به توضیح برخی از مبانی، اصول و فنون پرکاربرد در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی خواهیم پرداخت تا مفاهیم و تنظیمات خاصی که در فصول بعد به کار خواهند رفت، قابل‌درک باشند. در فصل دوم، اصول کار با نرم‌افزار متریالز استودیو بیان خواهد شد. در فصول سوم و چهارم نیز به ترتیب چگونگی مدل‌سازی و انجام محاسبات در این نرم‌افزار توضیح داده می‌شود. در فصل پایانی این کتاب، با ذکر مثال‌هایی هدفمند، به تشریح جنبه‌های مختلف کار با این نرم‌افزار در قالب مثال‌های عملی خواهیم پرداخت. لازم به ذکر است که نرم‌افزار متریالز استودیو دارای توانمندی‌های بسیار زیادی از جمله در محاسبات کوانتومی و شبیه‌سازی‌های مونت‌کارلو و ... است که به لطف خدا سعی خواهیم کرد در ویرایش‌های بعدی همین کتاب یا در کتابی مجزا به این موارد نیز بپردازیم.

پاییز ۱۳۹۷

دکتر مجید موسوی- مهرانگیز ترک‌زاده