



دانشکده مهندسی مکانیک

فصل اول: مقدمه ای بر نانو فناوری محاسباتی

دینامیک مولکولی

ارائه: حسین نجات

نیمسال دوم ۱۳۹۷

رئوس مطالب

- نانو تکنولوژی
- اثر روشهای مدلسازی در پیشرفت نانو تکنولوژی
- مختصری از روشهای مدلسازی و شبیه سازی در مقیاس نانو
- سیلابس این درس
- چندین مساله مدلسازی سیستم های در مقیاس نانو



نانوتکنولوژی

- فناوری نانو عبارت است از **هنر دستکاری مواد در مقیاس اتمی یا مولکولی**
- فناوری نانو فناوری است که بر پایه **دستکاری تک تک اتمها و مولکولها** استوار است بدین منظور که بتوان ساختاری پیچیده را با خصوصیات اتمی تولید کرد.
- به طور کلی فناوری نانو با مواد، وسایل و ساختارهایی کار می کند که **حداقل یکی از ابعاد آنها بین ۱ تا ۱۰۰ نانومتر** می باشد.
- بر اساس فناوری نانو می توان ابزارهایی ساخت که از مونتاژ اتمها و مولکولهای مختلف به صورت ساخت از پایین به بالا (**Bottom-Up**) بوجود می آیند. البته روش مرسوم ساخت از بالا به پایین (**Top-Bottom**) نیز در نانوتکنولوژی کاربرد دارد که در آن اشیای نانومتری از قطعات بزرگتر بدون اعمال کنترل اتمی ساخته می شوند.



وقایع برجسته در تاریخ فناوری نانو

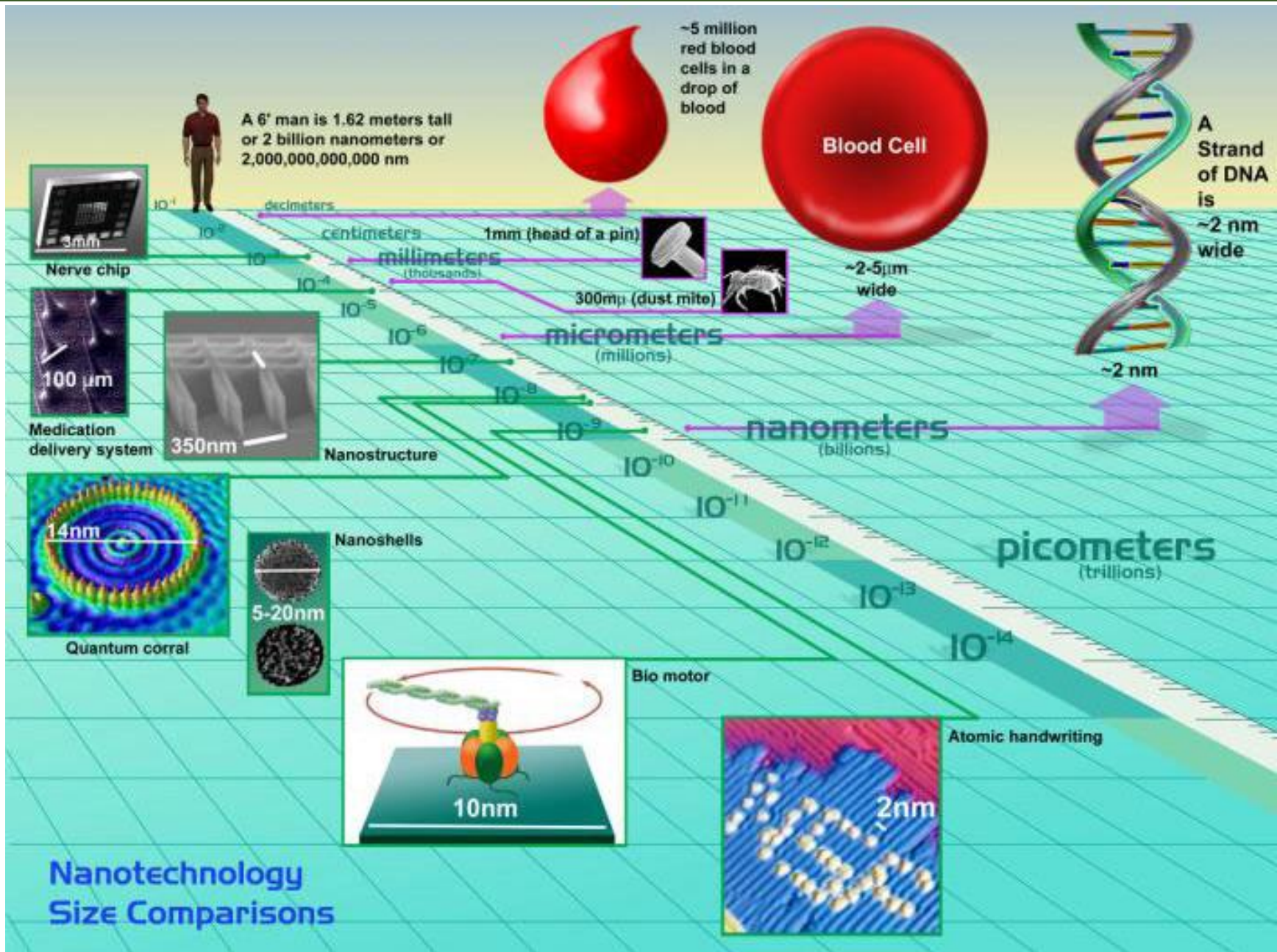
رخداد	سال
سخنرانی مشهور ریچارد فایمن با عنوان «در آن پایین‌ها فضای بسیاری وجود دارد»	۱۹۵۹
مقاله درکسلر در مهندسی مولکولی: روش‌های فراهم نمودن امکانات همگانی برای دستکاری‌های در ابعاد مولکولی، که در مجله آکادمی ملی علوم آمریکا منتشر شده‌است. اولین بار در مقاله‌ای در مجله فناوری نانو مولکولی به بحث گذاشته شد.	۱۹۸۱
پیدایش میکروسکوپ تونلی پیمایشی (روبشی)	۱۹۸۲
کشف «فولرین‌ها»، ساختارهای کربنی صفر بعدی	۱۹۸۵
اختراع میکروسکوپ نیروی اتمی	۱۹۸۶
کشف نانولوله‌های کربنی	۱۹۹۱
کشف صفحه تقریباً دو بعدی از اتم‌های کربن به نام گرافین در دانشگاه منچستر	۲۰۰۴



مفهوم نانومتر

- **یک نانومتر** معادل با **یک میلیارد متر** یا 10^{-9} متر می باشد. برای مقایسه
 - طول پیوند کربن-کربن یا فاصله ی بین این اتمها در یک مولکول در محدوده $0.12-0.15$ nm می باشد.
 - یک رشته DNA دارای قطر حدودی ۲ نانومتر می باشد.
 - اکثر سلولها میکروسکوپی بوده و با چشم غیر مسلح دیده نمی شوند. سلولهای شاخص حیوانی و گیاهی ، دارای قطری حدود ۵ - ۱۰۰ میکرومتر بوده و بسیاری از باکتریهای تنها ۱ - ۲ میکرومتر طول دارند.
 - کوچکترین سلول زنده مربوط به یک باکتری خاص **Mycoplasma** دارای طول ۲۰۰ نانومتر است.
 - طول گلبول قرمز انسان در حدود ۵ میکرون است.
- **حد پایین نانوتکنولوژی** توسط **اندازه اتمها** مشخص می شود زیرا نانوتکنولوژی ابزارهای خود را از اتمها و مولکولها می سازد.
- **حد بالای نانوتکنولوژی** تا جایی است که پدیده هایی که در مقیاسهای بزرگ مشاهده نمی شوند از این محدوده به پایین شروع به ظهور می نمایند. این خاصیت نانوتکنولوژی را از میکروتکنولوژی متمایز می سازد.

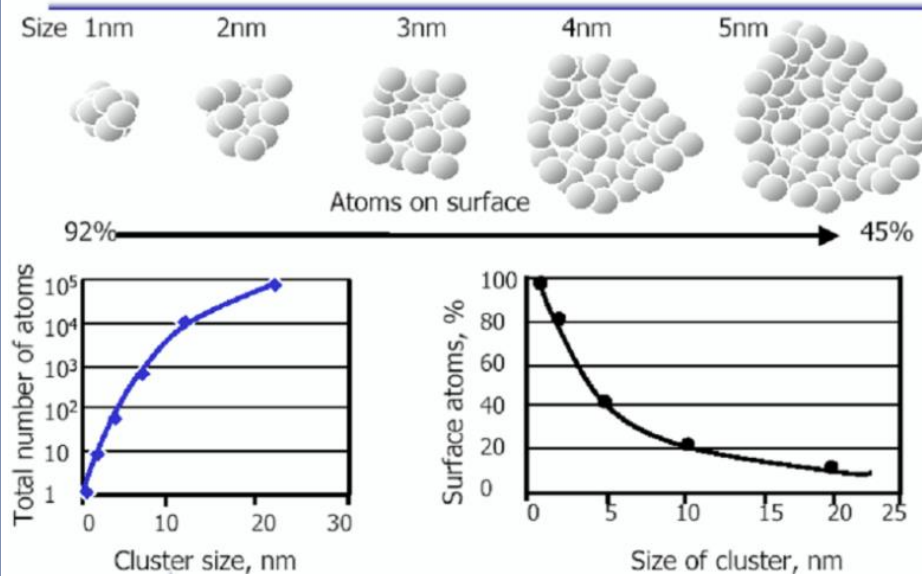




**Nanotechnology
Size Comparisons**

خواص متفاوت در مقیاس نانو

- نسبت سطح به حجم بسیار افزایش می یابد. این تغییر باعث تغییر شدید خواص مکانیکی، گرمایی، واکنش پذیری و ... می شود.



- فرض ایزوتروپیک بودن و پیوسته بودن کاملاً به هم می ریزد.

- مشاهده برخی خواص کاملاً متفاوت نسبت به مقیاس ماکرو.

- مواد غیرشفاف تبدیل به شفاف می شوند.
- مواد پایدار قابل اشتعال می شوند.
- مواد غیرقابل حل، حل پذیر می شوند
- مواد عایق رسانا می شوند.

— ماده ای نظیر طلا که در مقیاس معمولی واکنش پذیری ندارد به عنوان یک کاتالیزور قوی در مقیاسهای نانو عمل می کند.

- بیشتر پدیده های جالب مشاهده شده در مقیاس نانو ناشی از اهمیت اثرات مکانیک کوانتومی (خاصیت موجی بودن در برابر خاصیت ذره ای بودن) و اثرات سطحی هستند.

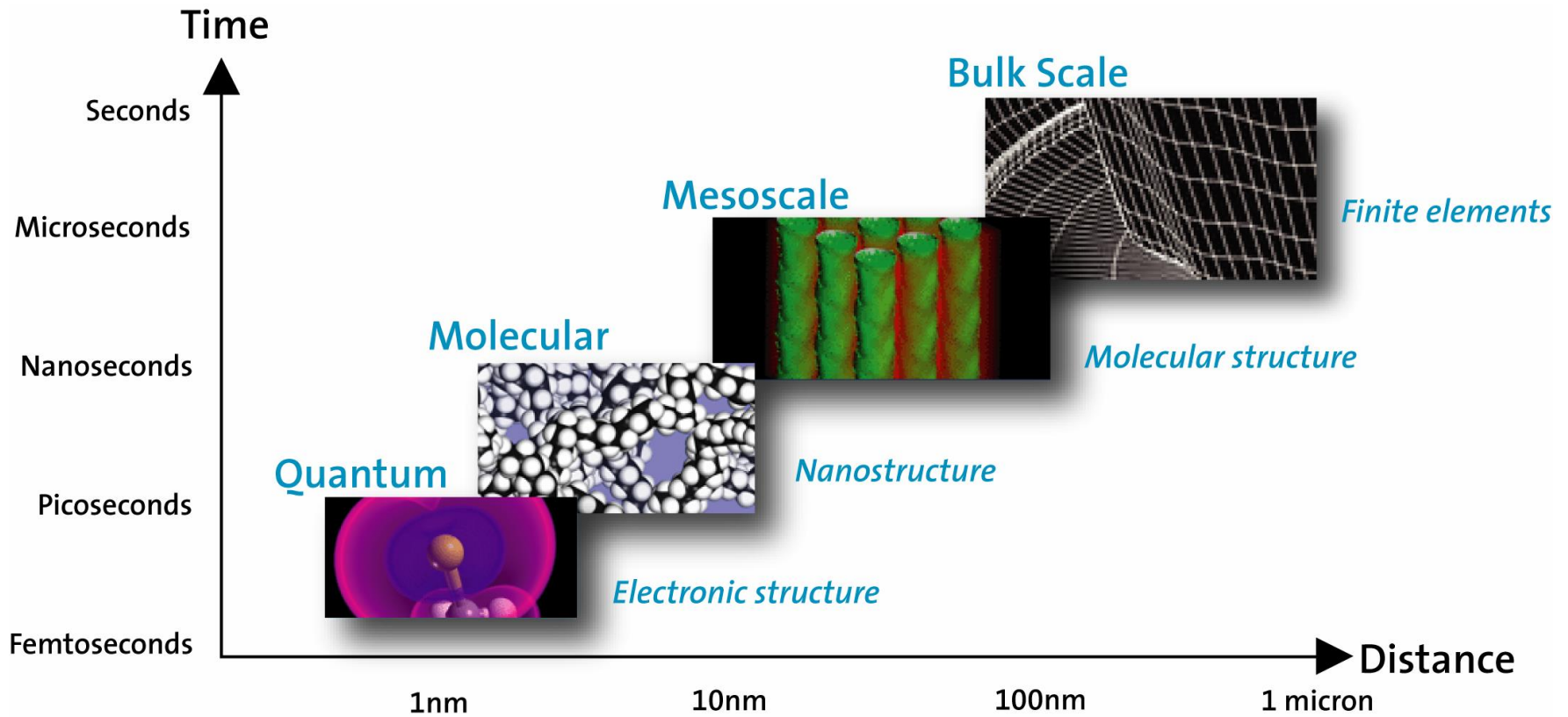


نقش تئوری، مدلسازی و شبیه سازی در پیشرفت فناوری نانو

- تعداد اتمهای شبیه سازی شده بوسیله دینامیک مولکولی برای یک بازه زمانی ۱۰ نانوثانیه از ۱۰ میلیون در سال ۲۰۰۰ به یک میلیارد در سال ۲۰۱۰ رسیده است. توان محاسباتی که ما را قادر به شبیه سازیهای با تعداد اتم بالا و سیستمهای چند مقیاسی می سازد در طول این ۱۰ سال گذشته ۳ مرتبه افزایش یافته است.
- در ده سال آینده انتظار می رود که مدلسازی در مقیاس نانو، روشهای محاسباتی و توان عملیاتی به قدری توسعه یابند که **سرعت شبیه سازی ها تا ۱۰۰۰۰ برابر زیاد شود** و این افزایش قابلیت نیز منجر به **افزایش استفاده از شبیه سازیها در تحقیقات و طراحی خواهند شد. تئوری، مدلسازی و شبیه سازی** به عنوان **یک ابزار طراحی پیشگویانه** به طور وسیعی استفاده خواهد شد.
- روشهای عمومی که قادر به انجام شبیه سازیهای چند مقیاسی/چند پدیده ای هستند برای طراحی سیستمها و ابزارهای جدید در مقیاس نانو توسعه خواهند یافت. شبیه سازیهای پیشگویانه به R&D در زمینه های مختلفی نظیر مهندسی زیستی، دارورسانی، طراحی فیلترها، شناسایی دینامیک سیستمهای پیچیده کمک خواهند نمود. **فناوری محاسباتی بسیار سریعتر و وسیعتر از آزمایشات منجر به توسعه نانو تکنولوژی خواهد شد.**



روشهای شبیه سازی استفاده شده در مقیاسهای مختلف



روشهای شبیه سازی

- شبیه سازی دینامیک مولکولی (تعیینی یا **Deterministic**): روشی است برای محاسبه مسیر حرکت اتمها یا مولکولها در سیستمهای چند اتمی (بیش از ده اتم تا چندین میلیارد اتم) استفاده می شود.
- شبیه سازی مونت کارلو (**Stochastic**): یک روش عددی است که با **نمونه برداری با اهمیت از فضای حالت** سعی در رسیدن به حالت نهایی تعادلی سیستم دارد. این روش بر اساس احتمالات، پیکربندی سیستم مورد بررسی را به شرایط انرژی مینیمم نزدیک می سازد.
- **دینامیک مولکولی Ab Initio**: دینامیک مولکولی **Ab Initio** یا دینامیک مولکولی کوانتومی مسیر حرکت سیستم اتمی را بوسیله حل کردن معادلات شرودینگر و کسب اطلاعات در مقیاس زیر اتمی انجام می دهد.



محتوای درس در بخش دینامیک مولکولی

- مقدمه ای بر کاربرد دینامیک مولکولی جهت مدلسازی سیستم های در مقیاس نانو
- انواع پتانسیل های بین اتمی (مکانیک مولکولی) (شناخت انواع ورودیهای لازم جهت شبیه سازی سیستم های مولکولی نظیر فایل های PDB ، PSF ، آشنایی با میدانهای نیرویی Charmm ، MM2:4)، نیروهای الکترو استاتیکی، نیروهای واندروالس، پتانسیلهای استفاده شده برای فلزات، پتانسیلهای جفتی و چندین جسمی (Many Pair Interaction)، انواع پتانسیلهای استفاده شده برای سیلیکون (Body)، انواع پتانسیلهای استفاده شده برای کربن (ترسف- ای آی ریبو)، انواع پتانسیلهای استفاده شده برای استیلینگر و بر، (EDIP، MEAM)، پتانسیل ReaxFF (ترسف- استیلینگر و بر، (EDIP، MEAM)، پتانسیل ReaxFF
- روشهای مینیمم کردن تابع پتانسیل (روشهایی که از مشتقات انرژی استفاده نمی کنند روش Simplex و روش Sequential) و روشهای کمینه سازی انرژی با استفاده از مشتق تابع (روشهای Steepest Descent، Conjugate Gradient، Newton)، انتخاب روش بهینه سازی مناسب، معیار همگرایی)
- تکنیکهای استفاده شده در شبیه سازی رایانه ای (شرایط مرزی: متناوب و غیرمتناوب)، انواع انسامل، شعاع قطع پتانسیل، لیست همسایگی، نیروهای برد بلند و نحوه محاسبه آنها (از جمله نیروی الکترواستاتیک)



محتوای درس در بخش دینامیک مولکولی

- **شبیه سازیهای دینامیک مولکولی** (روشهای انتگرال گیری از معادلات حرکت (روش ورله سرعتی، روش پیشبینی-تصحیح)، انتخاب مناسب گام زمانی، توزیع سرعتها، شروع و اجرای برنامه شبیه سازی دینامیک مولکولی، دینامیک مقید، مدلسازی مولکولهای صلب، دینامیک مولکولی در دما و فشار ثابت (انواع ترموستاتها)، نمونه ای از شبیه سازی های دینامیک مولکولی)، مثال های مختلفی از مدلسازی و شبیه سازی سیستم های مختلف با استفاده از روش دینامیک مولکولی، معرفی چندین پروژه برای دانشجویان جهت تمرین کد نویسی دینامیک مولکولی)
- **مقدمه ای بر روشهای درشت دانه کردن** (روشهای استفاده شده در بیومولکولها (Residue, Shape based Based))، روشهای مختلف درشت دانه کردن آب (محلول بصورت ضمنی، روش محلول ضمنی بورن عمومی، محلول بصورت دانه درشت))، روشهای دانه درشت کردن برای فلزات
- **شبیه سازی مونت کارلو** (مقدمه، انتگرال گیری مونت کارلو، زمینه های نظری، اجرای شبیه سازی مونت کارلو در یک رایانه، شبیه سازی مونت کارلو در انسامل های مختلف، شبیه سازی مونت کارلو برای سیستم های مولکولی، مقایسه شبیه سازی مونت کارلو با دینامیک مولکولی، معرفی چندین پروژه برای دانشجویان جهت تمرین کد نویسی مونت کارلو)
- **مقدمه ای بر مکانیک آماری** (مقدمه، مفهوم هنگرد، انواع هنگردها)



دینامیک مولکولی

- دینامیک مولکولی یکی از شاخه‌های فیزیک محاسباتی است. در این روش برهمکنش میان اتم‌ها و ملکول‌ها در بازه‌هایی از زمان بر اساس قوانین فیزیک، به وسیله کامپیوتر شبیه‌سازی می‌شود. این روش برای اولین بار در سال ۱۹۵۷ توسط آلدِر (Alder) و واینرایت (Wainwright) بر مبنای مدل کره سخت به کار گرفته شد. در سال ۱۹۶۴ رحمان (Anees Rahman) مدل کره نرم را در شبیه‌سازی خود به کار برد. از وی به عنوان پدر دینامیک مولکولی یاد می‌شود.

- دینامیک مولکولی شکلی از شبیه‌سازی کامپیوتری است که در آن اتم‌ها و مولکول‌ها اجازه دارند برای یک دوره از زمان تحت قوانین شناخته شده فیزیک باهم برهم کنش کنند و چشم‌اندازی از حرکت اتم‌ها بدهند. از آنجائیکه سیستم‌های مولکولی عموماً شامل تعداد زیادی از ذرات هستند امکان‌پذیر نیست که ویژگی‌های سیستم‌های پیچیده را بطور تحلیلی بدست آوریم. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی این مسئله را با بکار بردن روش محاسباتی حل می‌کند.



مراحل شبیه سازی دینامیک مولکولی

• شبیه سازی دستگاههای گسسته (اتمی) چند مرحله زیر را در بر می گیرد:

۱- ایجاد یک مدل از ماده مورد نظر (جامد، مایع، گاز، ساختار مولکولی و یا ترکیبی از این موارد)

۲- در نظر گرفتن پتانسیل بین اتمی مناسب

۳- کمینه کردن انرژی جهت از بین بردن نقاط پر انرژی سیستم و آماده سازی برای اجرا

۴- اعمال شرایط اولیه سرعتی بر اساس دما

۵- محاسبه مسیرهای اتمی سیستم بر اساس معادلات نیوتن و الگوریتم انتگرال گیری

۶- تجزیه و تحلیل این مسیرها و استخراج اطلاعات مختلف



نمونه هایی از مدلسازی ها و شبیه سازی های انجام شده از سیستمهای در مقیاس نانو



بررسی خواص ارتعاشی فولرین

The screenshot displays the 'G2:M1:V1 - Display Vibrations' window. The window contains a table of vibrational modes and their properties. Below the table are controls for animating the vibrations, including a 'Stop Animation' button, a 'Save Movie...' dropdown, and sliders for 'Animation Frequency' and 'Displacement Amplitude'. There are also checkboxes for 'Show Displacement Vectors', 'Show Dipole Derivative Unit Vector', and 'Manual Displacement', along with their respective scales and a 'Save Structure...' button. At the bottom of the window are 'Close', 'Cancel', 'Spectrum', and 'Help' buttons.

Mode #	Freq	Infrared
1	265.45	0.0000
2	265.95	0.0000
3	266.19	0.0000
4	266.37	0.0000
5	266.68	0.0000
6	342.95	0.0012
7	343.54	0.0005
8	344.73	0.0014
9	356.71	0.0003
10	358.14	0.0002

0 atoms, 0 electrons, neutral, singlet

60 atoms, 360 electrons, neutral, singlet

Inquire | Select Atom 1



مدلسازی میکروسکوپ نیروی اتمی

• اصول عملکرد میکروسکوپ

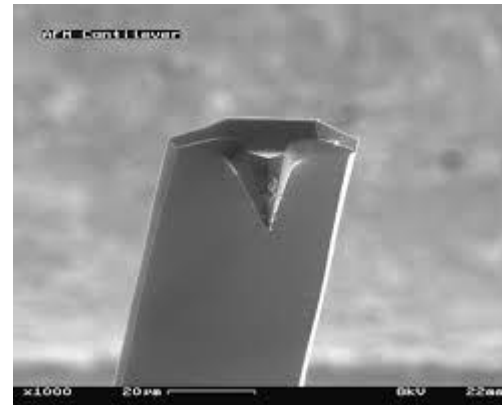
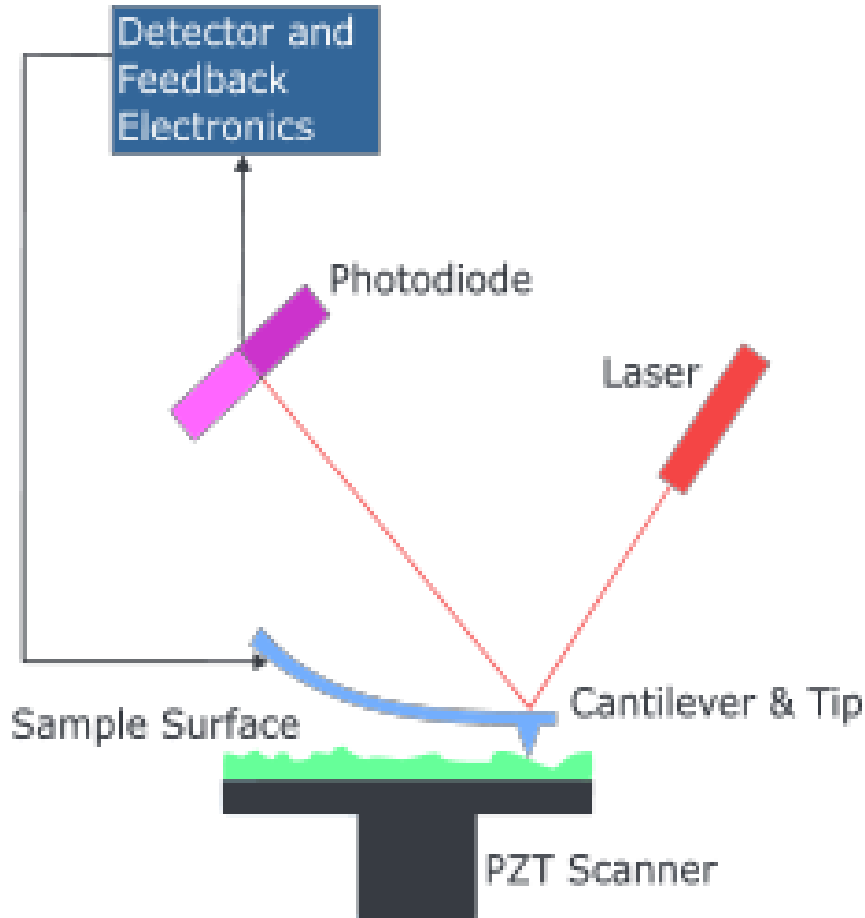
۱- یک سوزن تیز نصب شده در انتهای یک تیر نمونه مورد نظر را اسکن می کند.

۲- این سوزن نیروهای جاذبه و دافعه ای را به علت تبادلات نیرویی با سطح تحمل می کند.

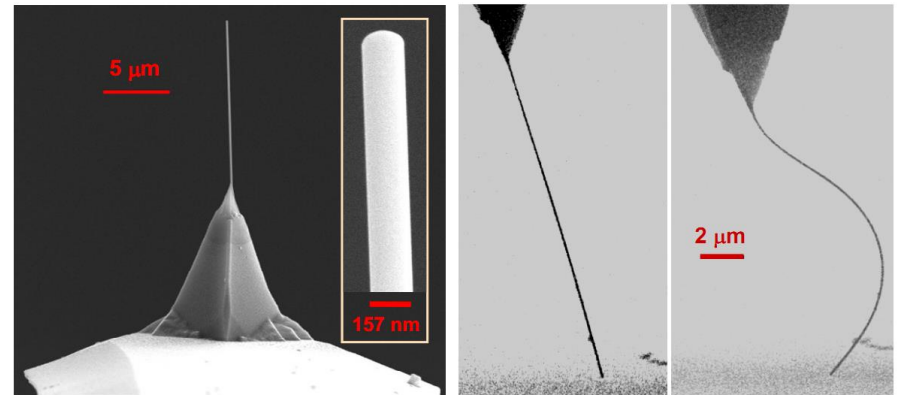
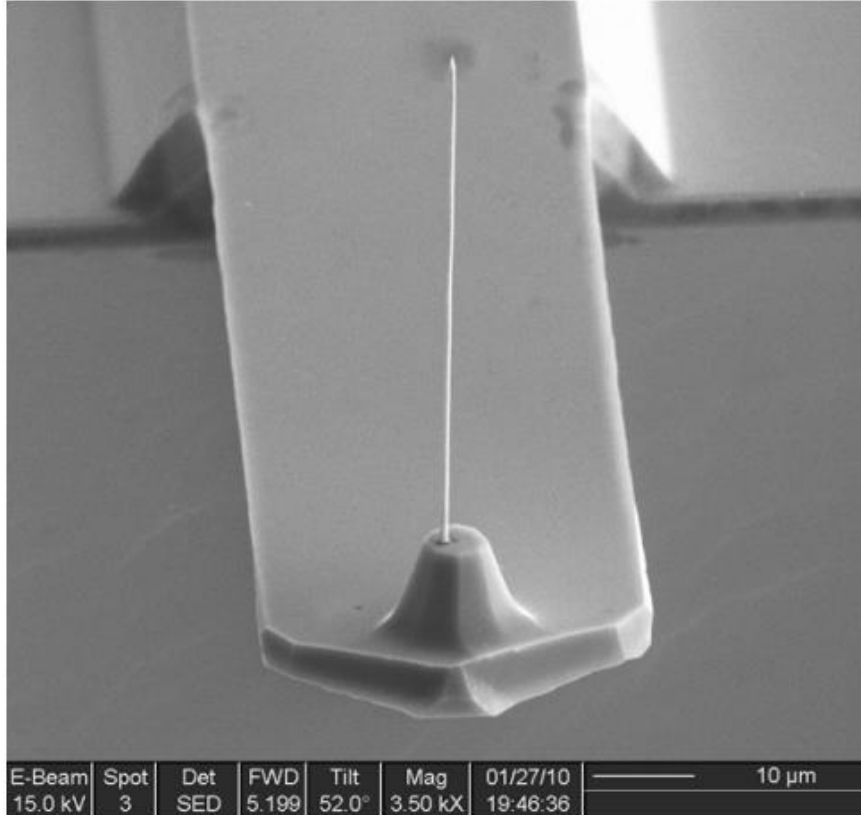
۳- این میکروسکوپ قابلیت کارکردن در سیال، هوا و خلا را دارد.

۴- مودهای تصویربرداری

عبارتند از: ۱- مد تماس
ضربه آهسته

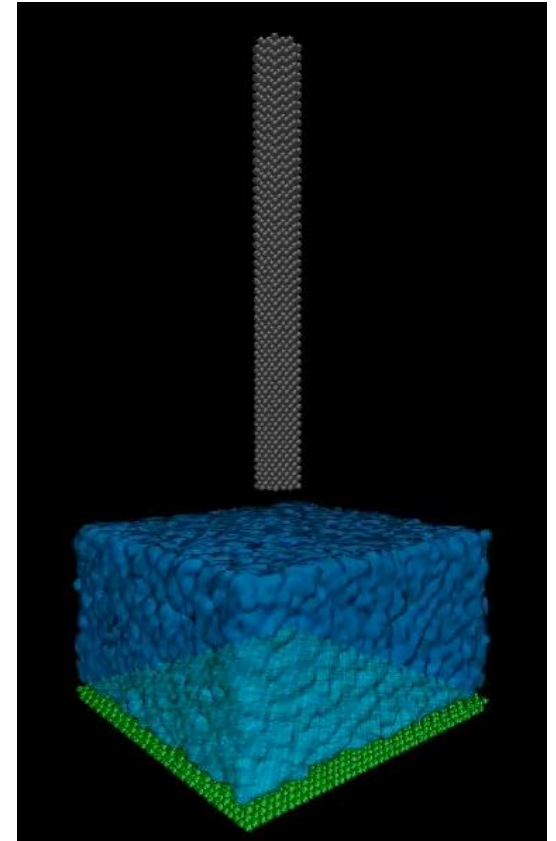
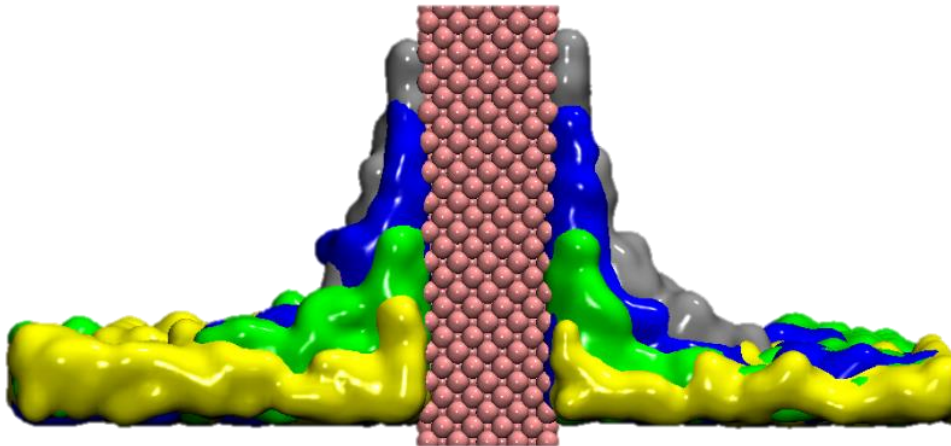


مدلسازی میکروسکوپ در مود ترولینگ



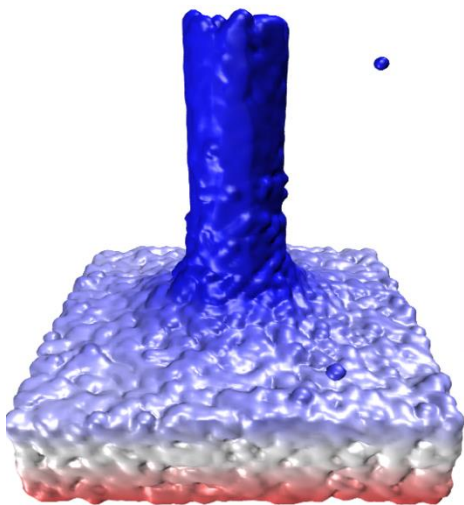
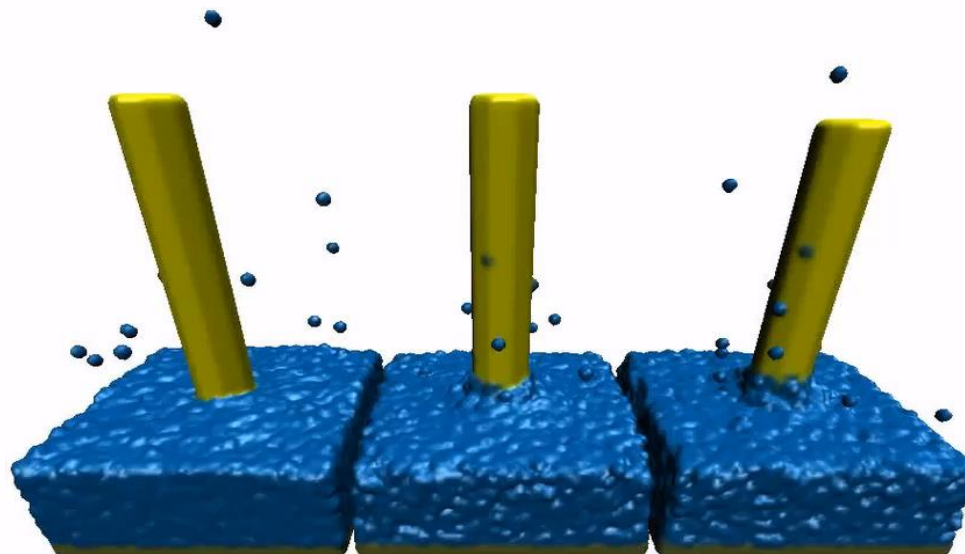
بررسی تشکیل موئینگی در اطراف نانوسوزن با استفاده از دینامیک مولکولی

- هدف از این پروژه بررسی تشکیل موئینگی در اطراف نانوسوزن در آب با استفاده از دینامیک مولکولی بوده است. ابتدا پارامترهای هندسی موئینگی شامل ارتفاع بالاروی آب و زاویه تماس مورد بررسی قرار گرفتند. نشان داده شده که زاویه تماس در تعادل مستقل از قطر است و ارتفاع بالاروی آب با افزایش قطر افزایش می یابد.

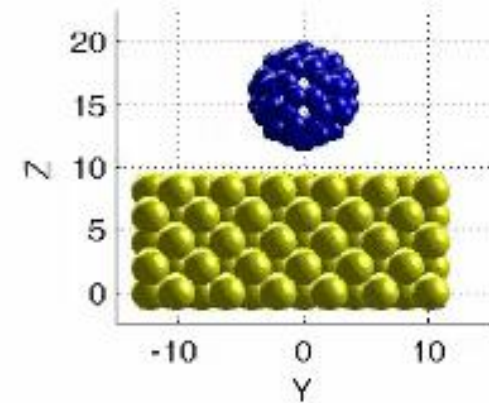
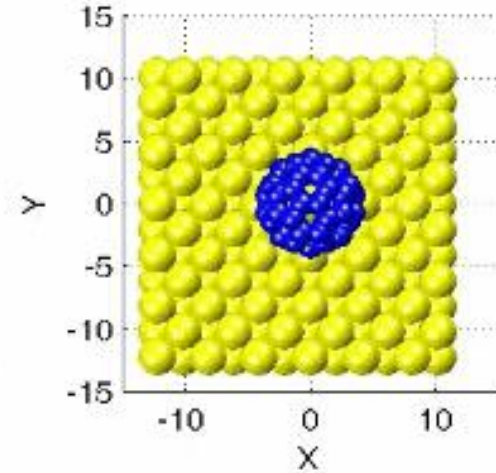
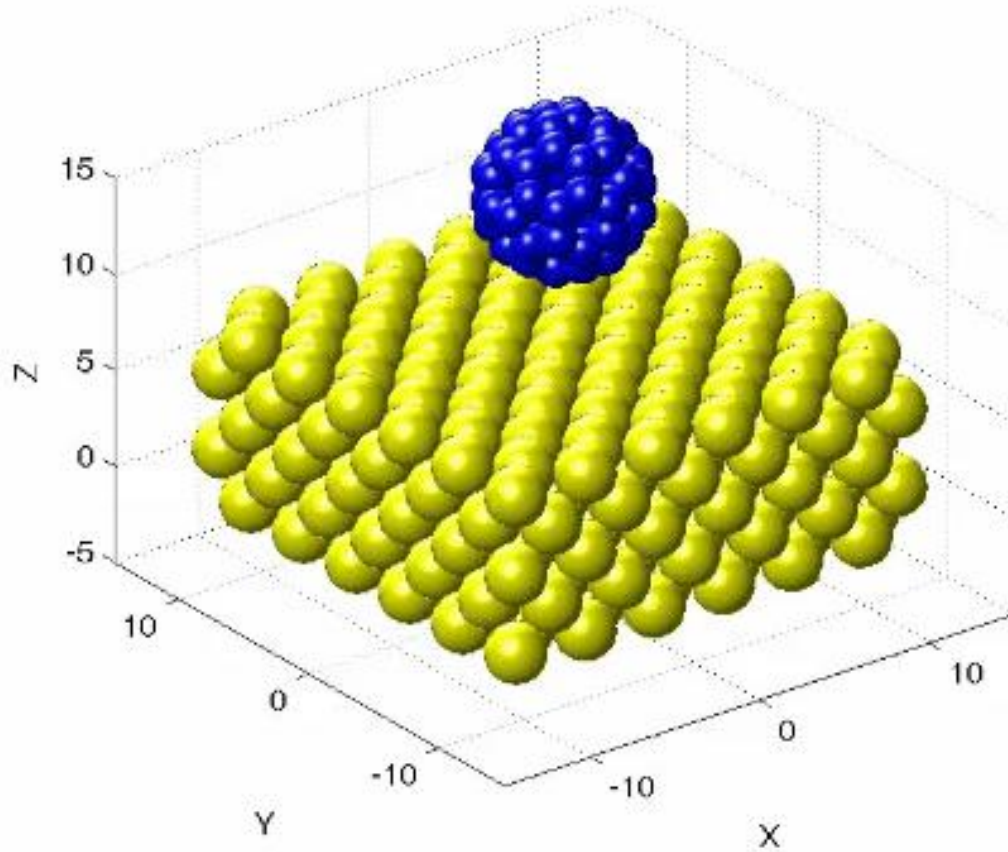


مدلسازی فرآیند شکل گیری منیسکاس برای مواد مختلف

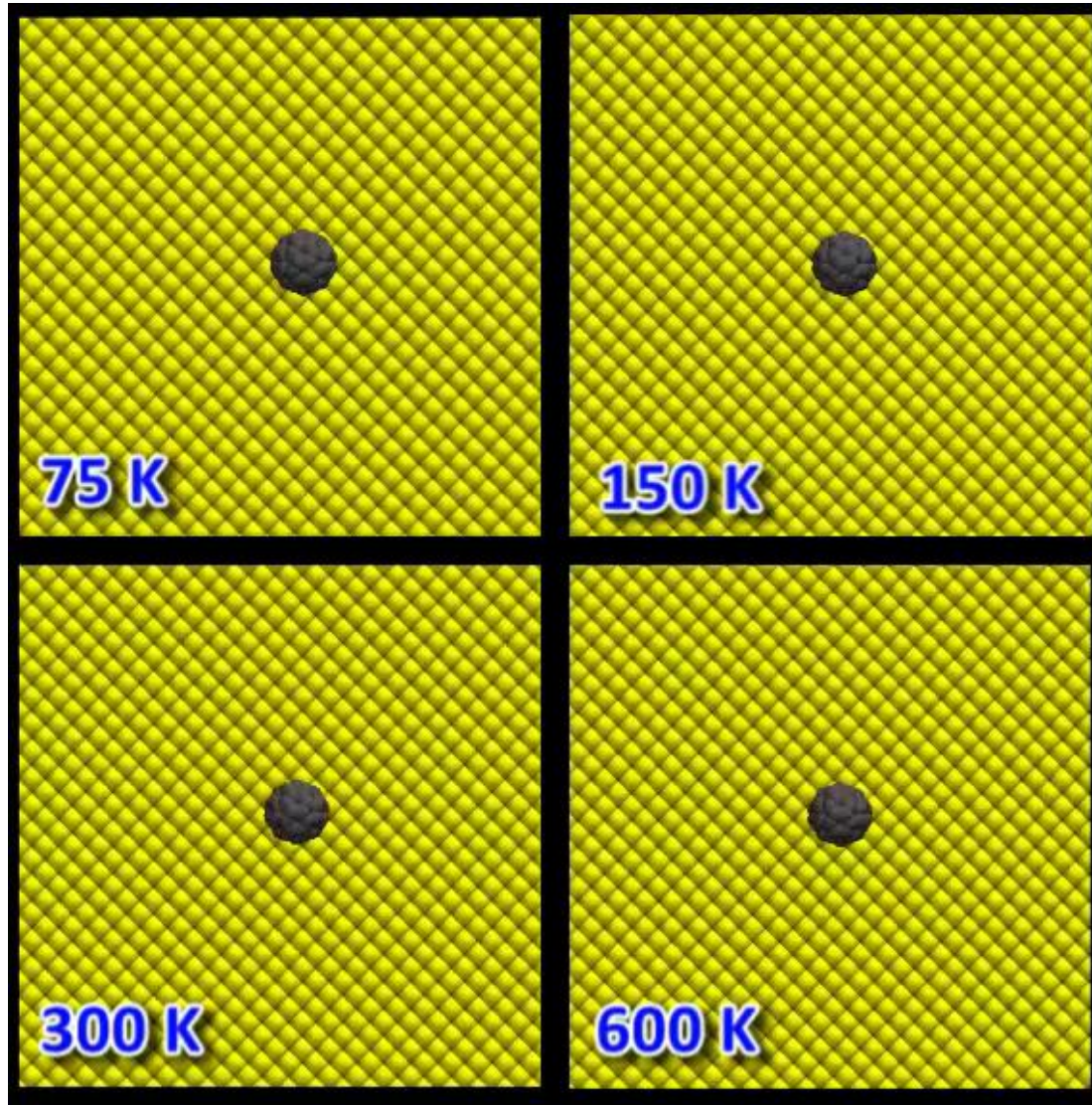
VideoMach unregistered



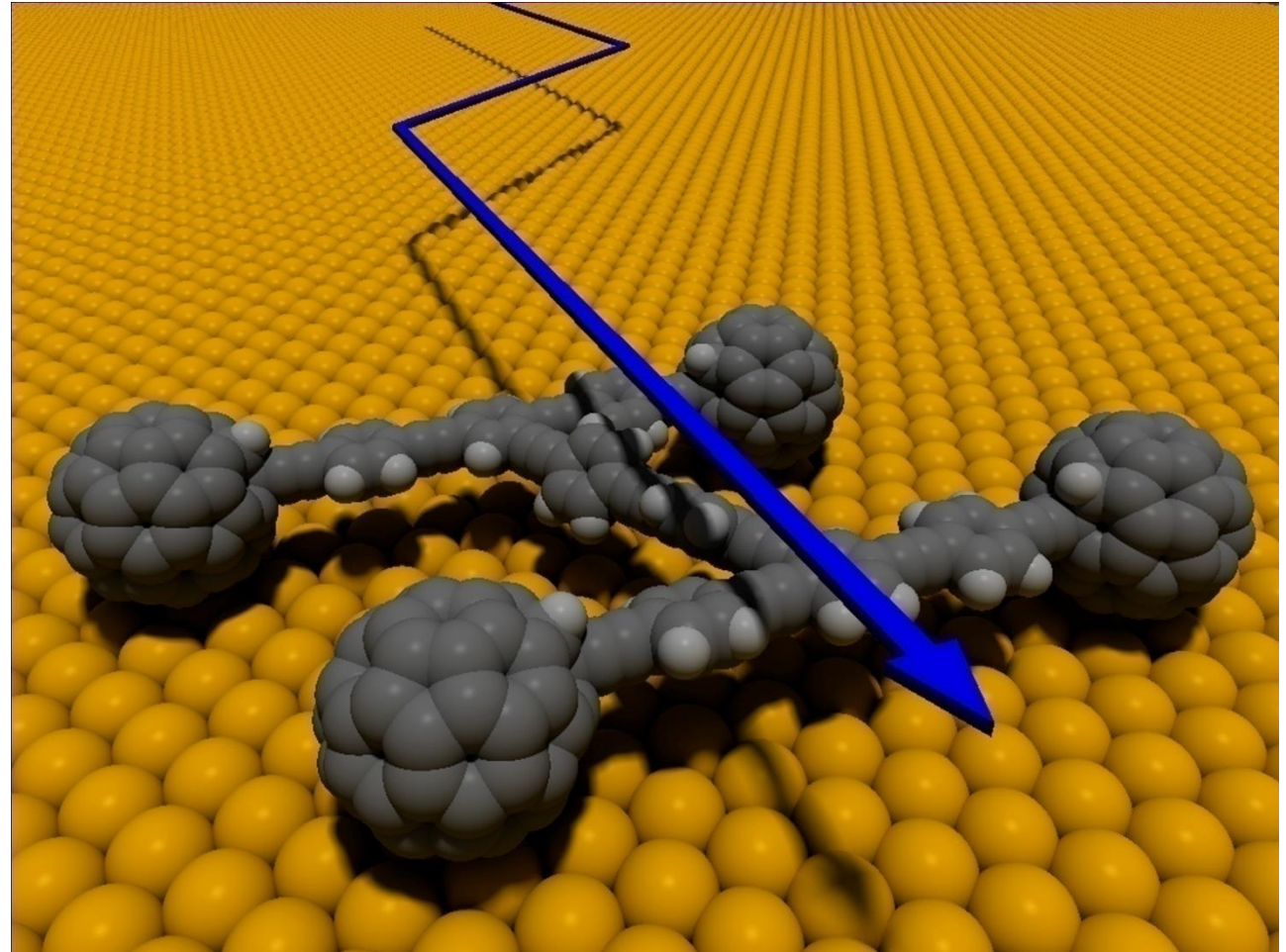
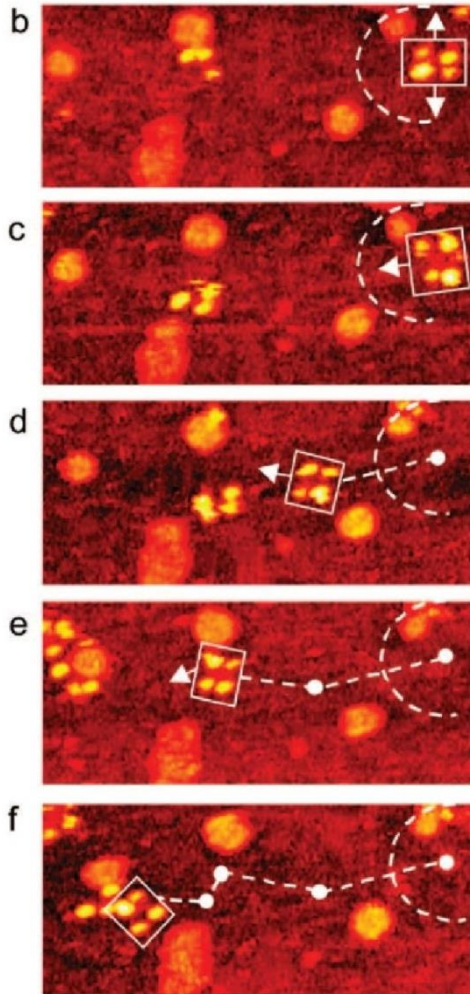
مدلسازی حرکت فولرین روی سطح طلا



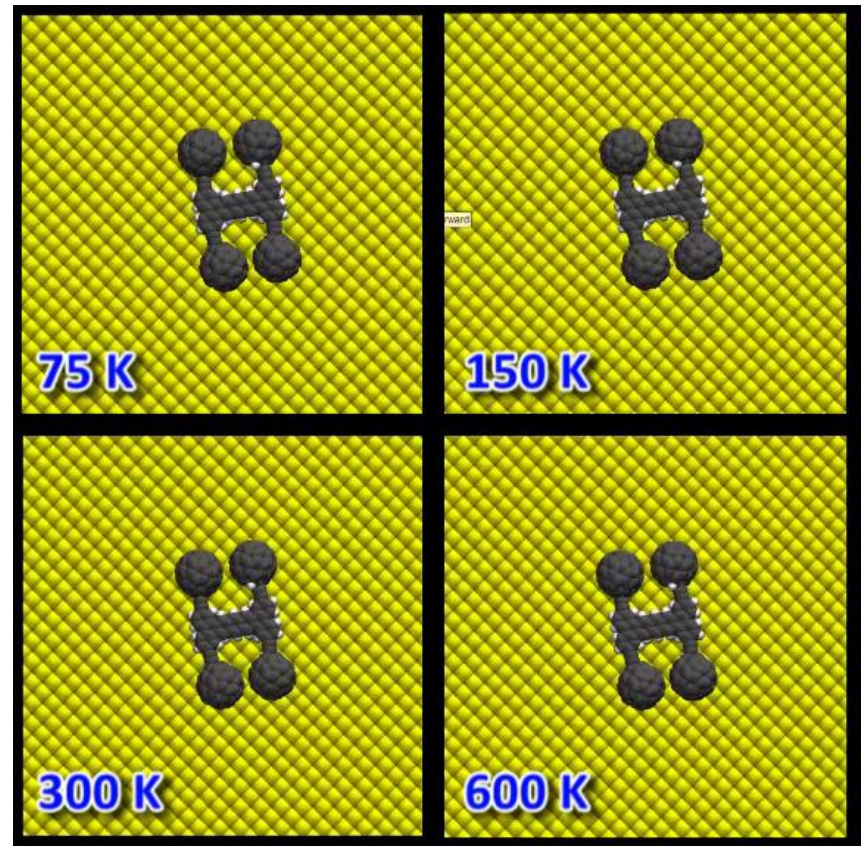
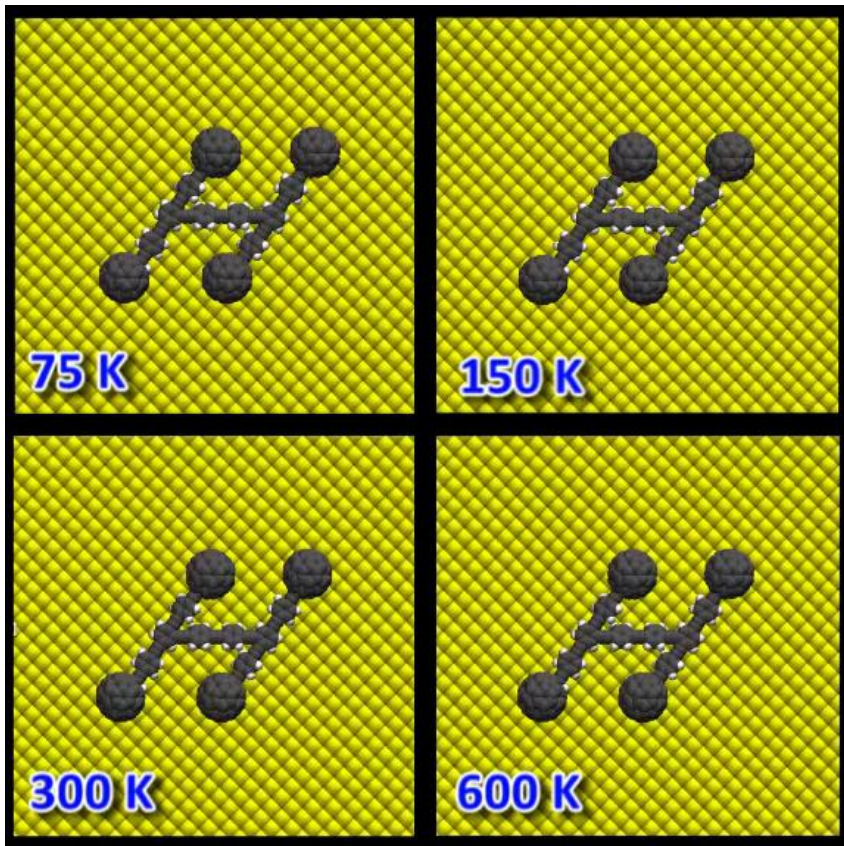
حرکت فولرین در دماهای مختلف



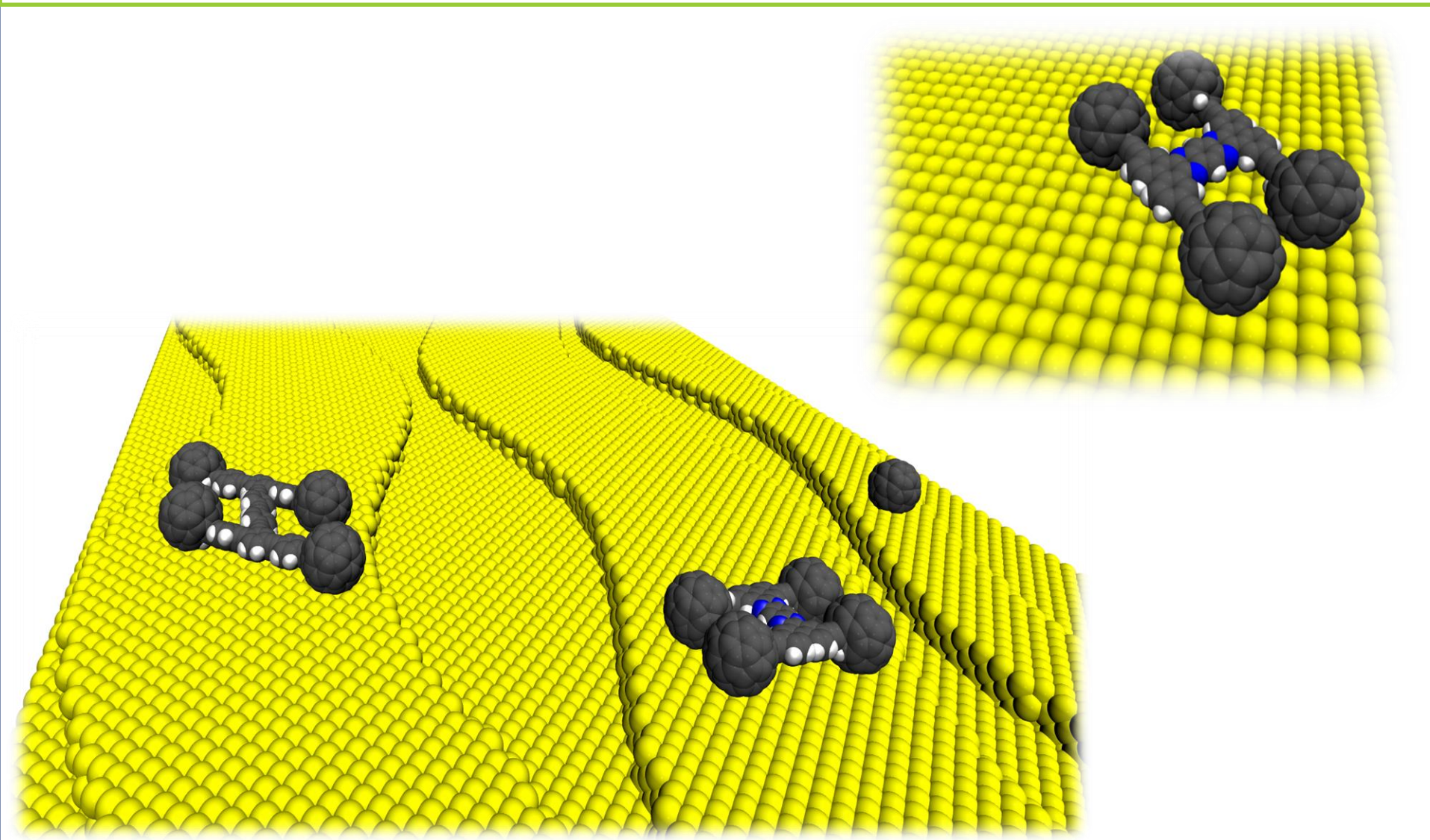
مدلسازی حرکت یک نانوربات بوسیله ایجاد گرادیان دمایی



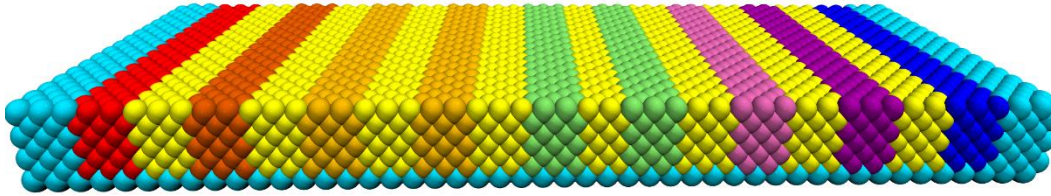
حرکت نانوربات در دماهای مختلف



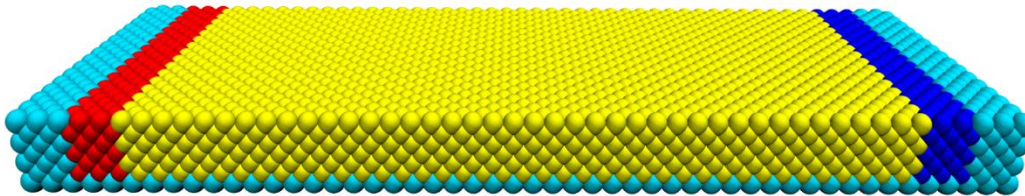
حرکت نانوربات روی پله



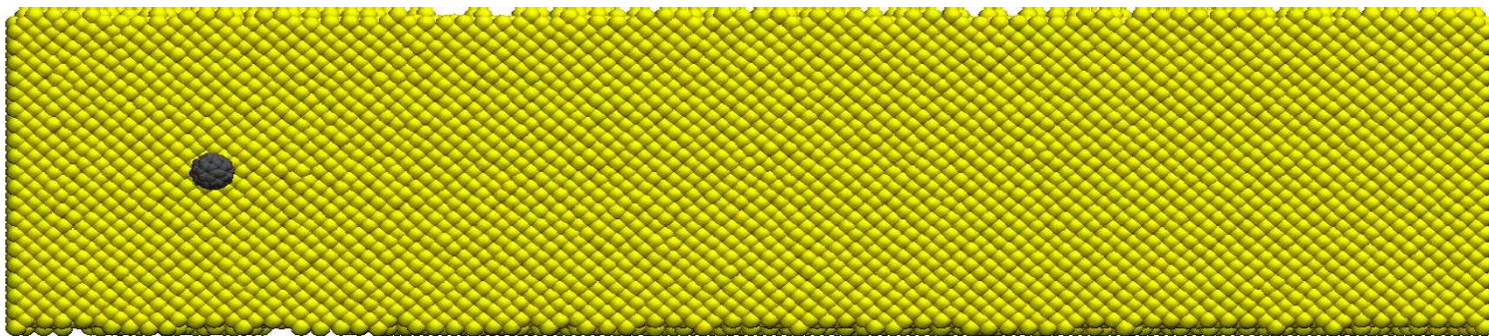
ایجاد گرادیان دمایی



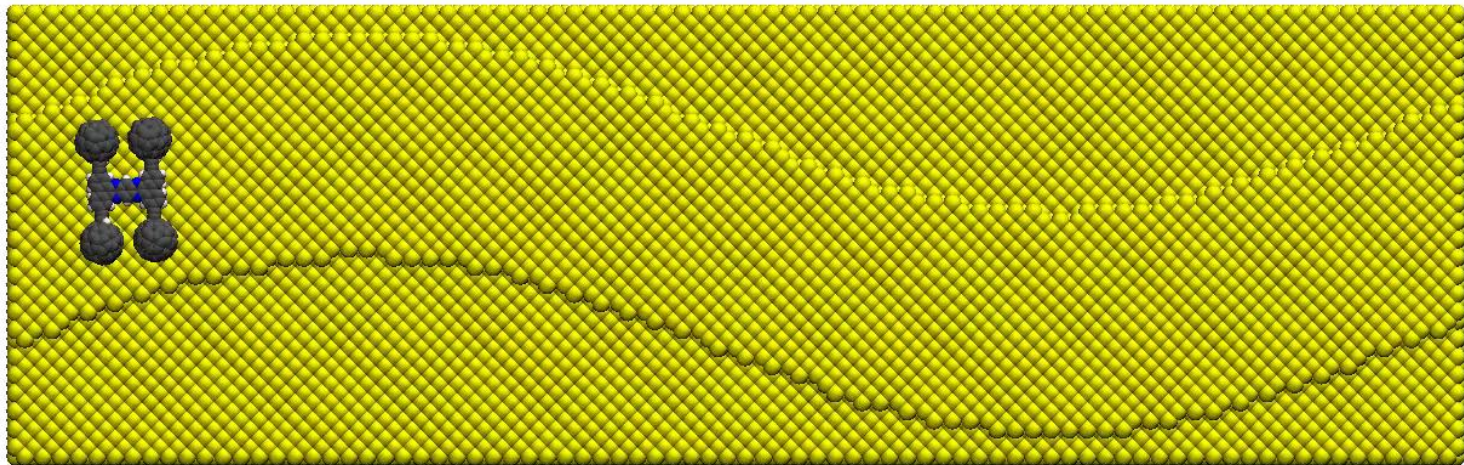
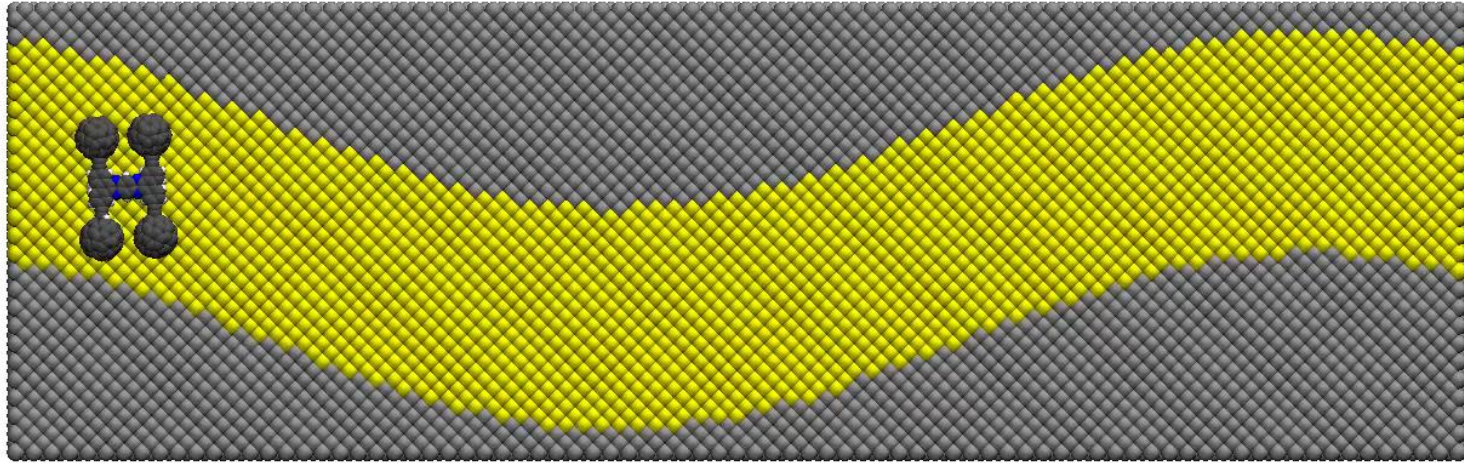
منابع گرمایی توزیع شده



منبع گرمایی متمرکز

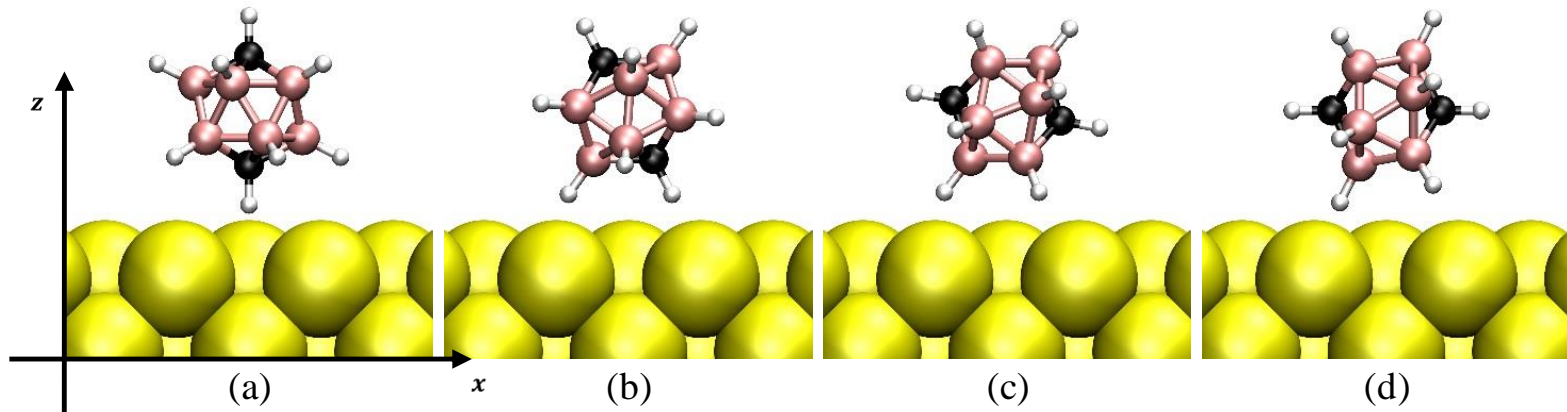


ایجاد حرکت جهت دار با استفاده از گرادیان دمایی و پله یا ناخالصی



مدلسازی حرکت پیکربین روی سطح طلا

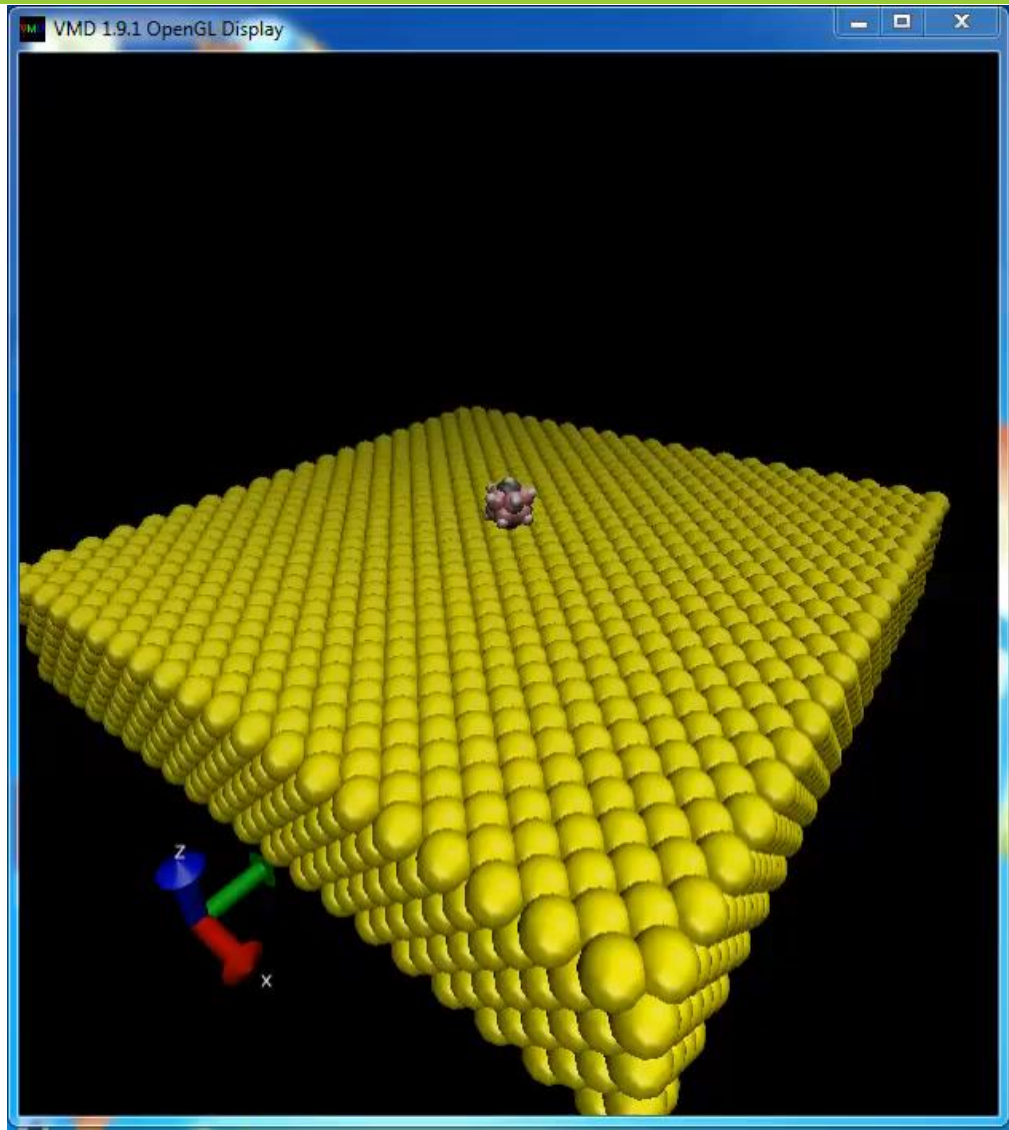
- اتم کربن در پایین ترین وضعیت باشد که به اختصار C-Down نامیده می شود.
- یک اتم کربن و دو اتم بور در پایین ترین وضعیت باشند که به اختصار C-B-B-Down نامیده می شود.
- سه اتم بور در پایین ترین وضعیت باشند که به اختصار B-B-B-Down نامیده می شود.
- محور C-C موازی سطح زیر لایه طلا باشد که به اختصار C-Axle نامیده می شود.



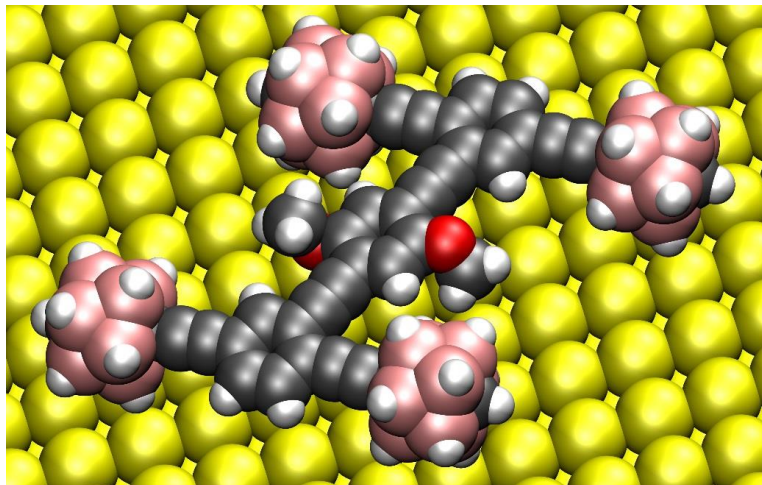
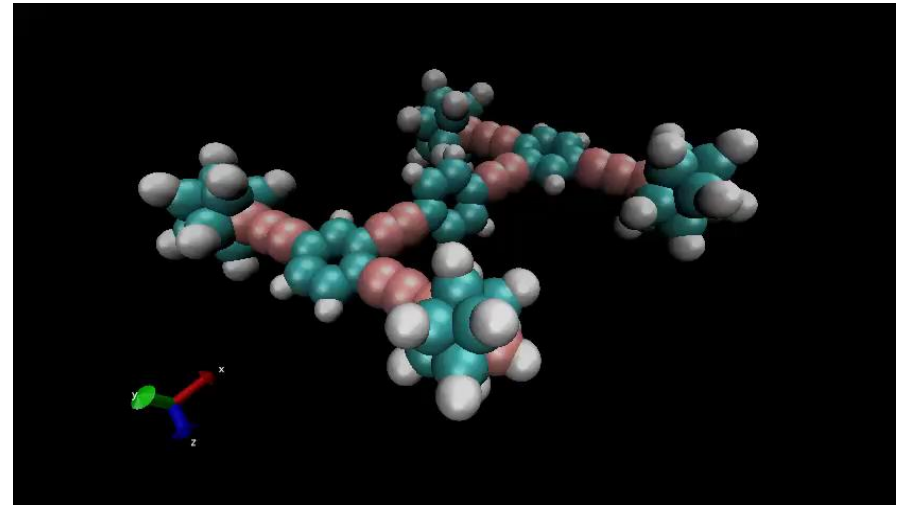
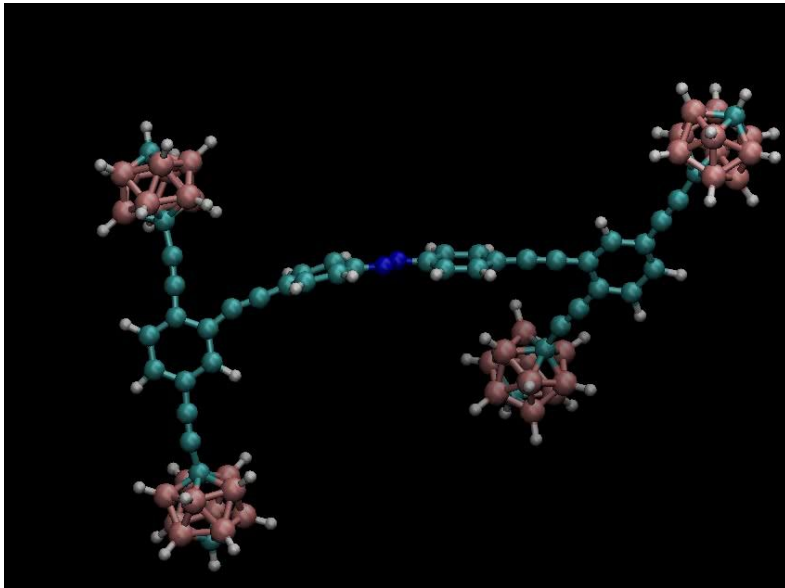
نمای وضعیت p-کربورین بر روی زیر لایه طلا در صفحه x-z. (a) C-Down (b) C-B-B-Down (c) B-B-B-Down (d) C-Axle.

- از آنجا که چاه پتانسیل C نسبت به B عمیق تر است، مشخص است که باید سطوح پایدارتر انرژی دارای جهت گیری باشند که اتم C به سطح طلا نزدیک تر باشد و مشخص است که هرچه تعداد اتم های نزدیک شده به سطح زیر لایه بیشتر باشد، احتمال رسیدن به سطوح انرژی پایدارتر، بیشتر است.

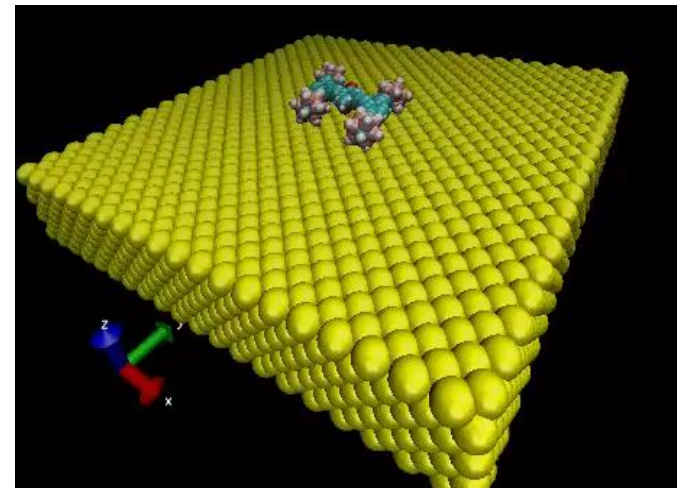
فیلم های حرکت پی کربورین



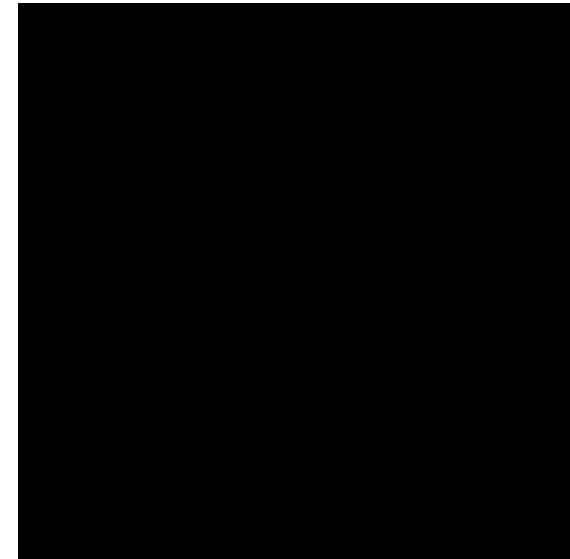
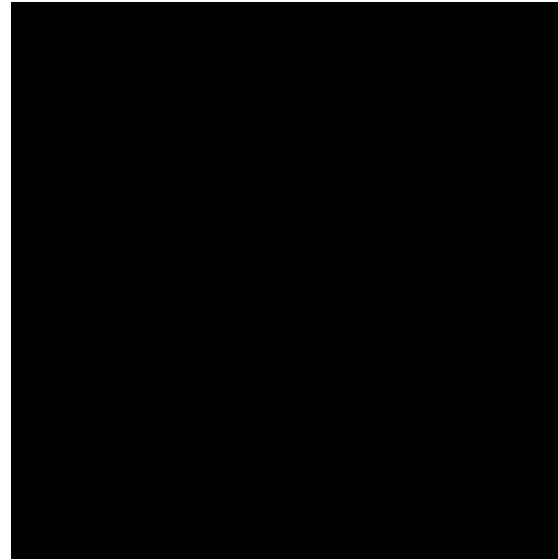
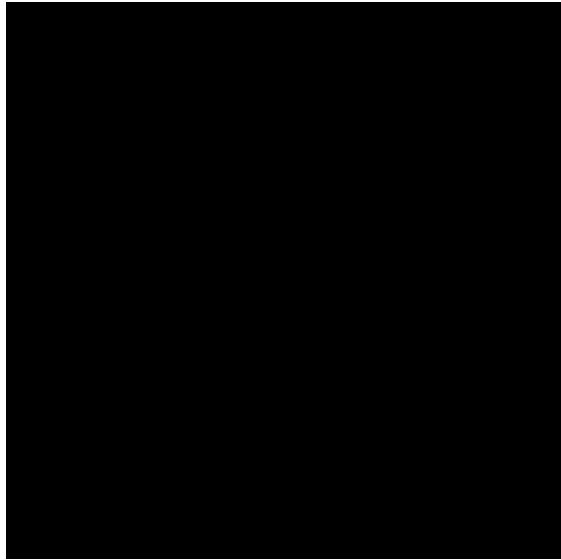
فیلم ارتعاشات خودرو موتوردار



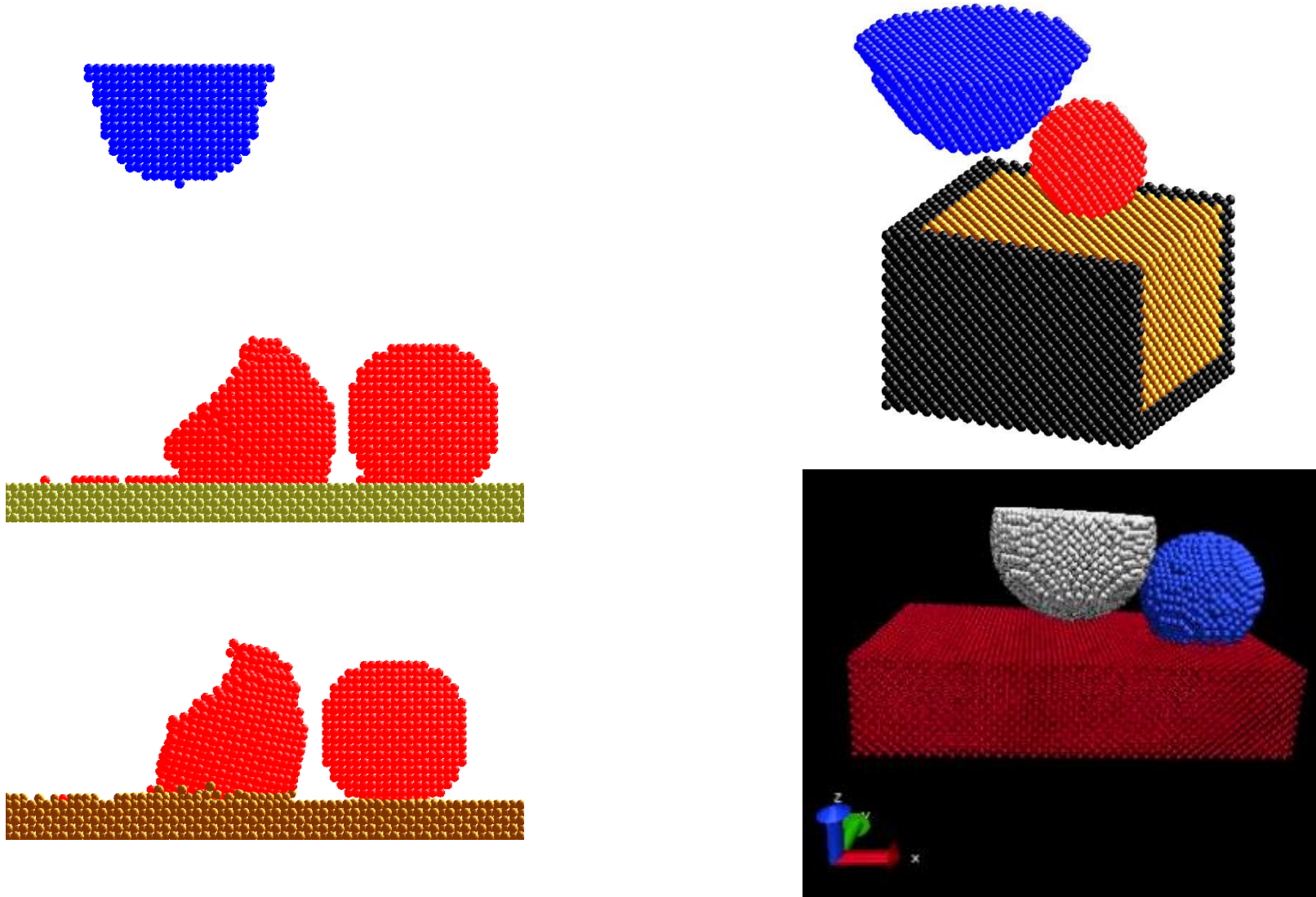
نانو خودروی بر پایه کربورین بر روی زیر لایه طلا.



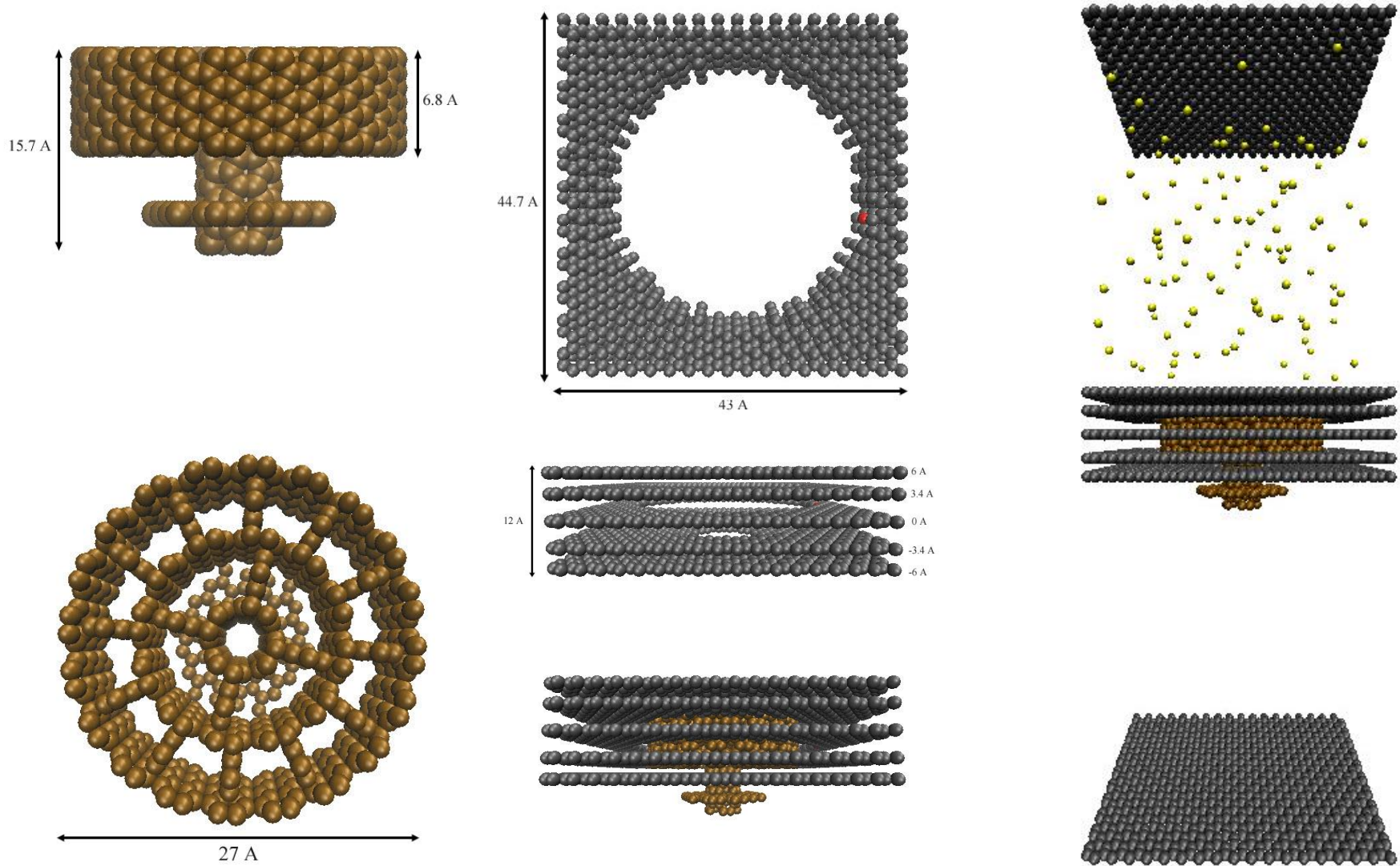
شبیه سازی نانو خودروهای مختلف روی سطح طلا



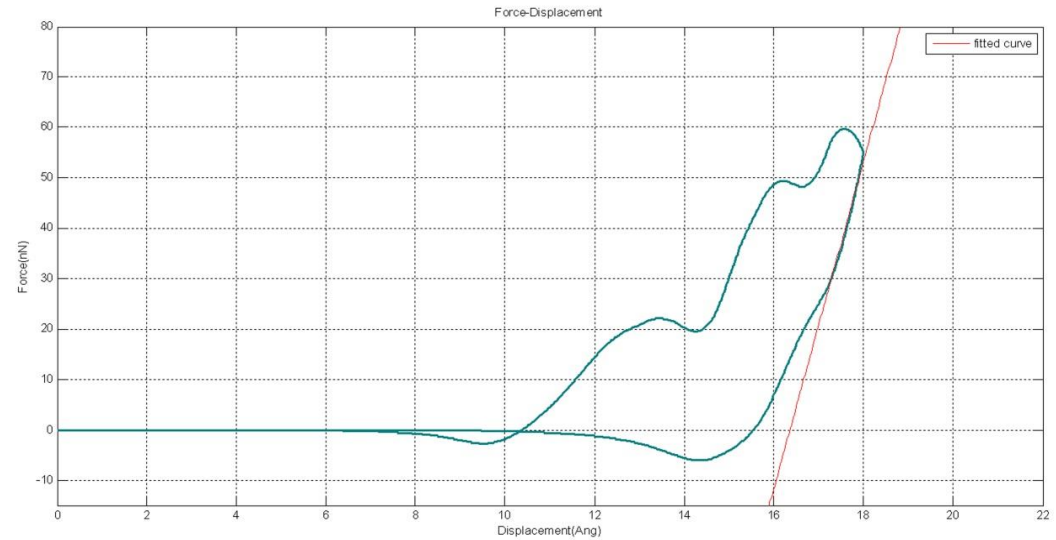
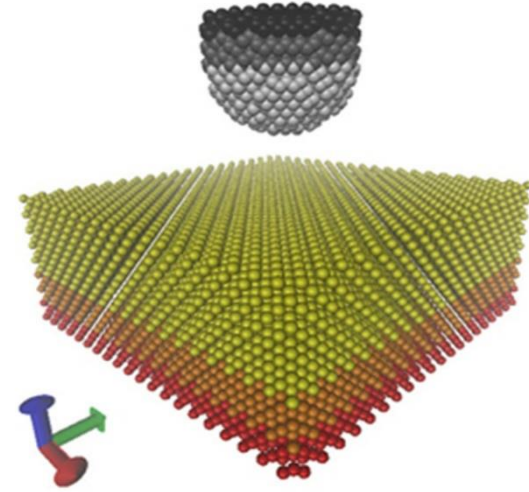
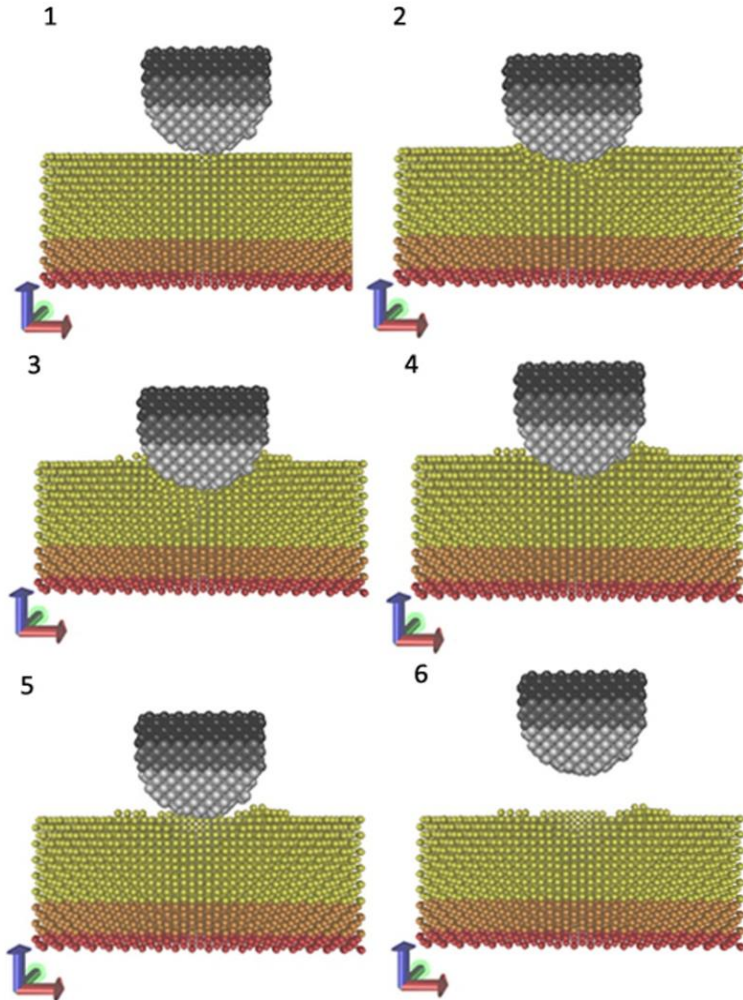
جابجایی نانو ذرات فلزی



طراحی و شبیه سازی یک موتور در مقیاس مولکولی



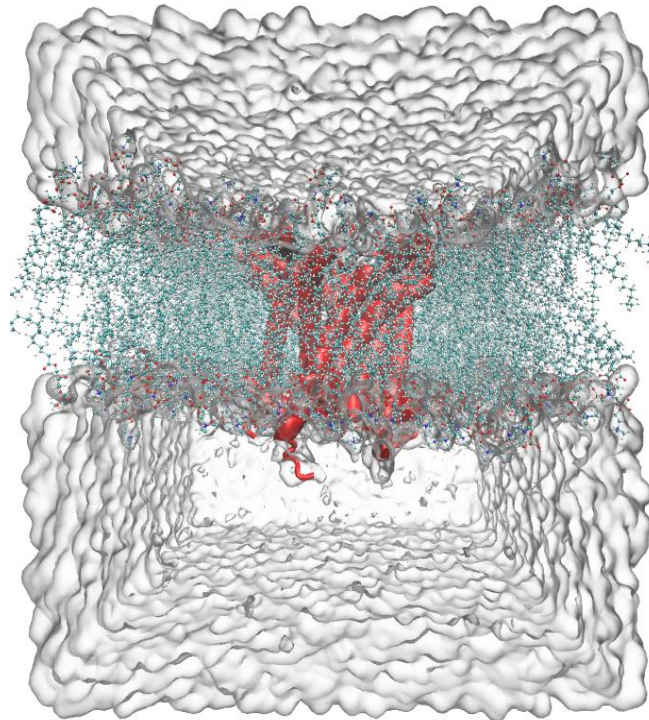
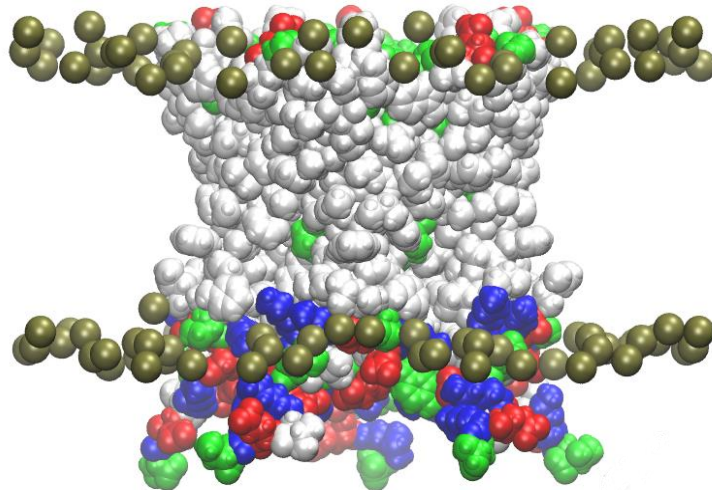
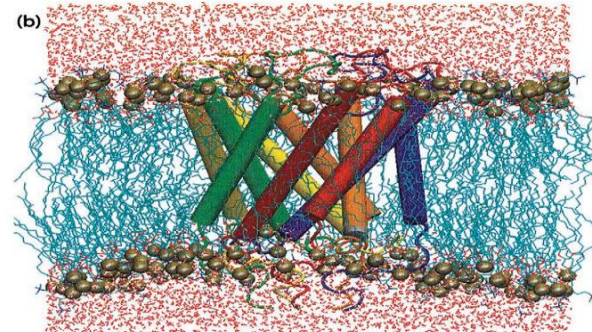
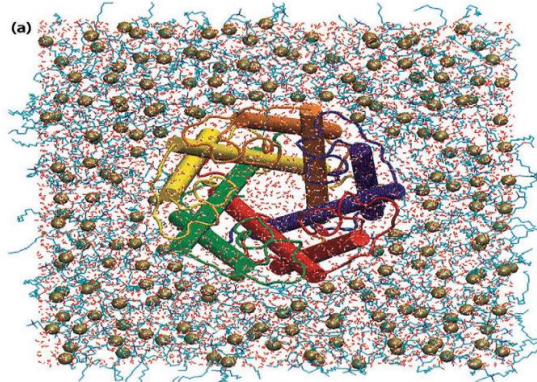
شبیه سازی فرآیند نانوفوذ Nanoindentation



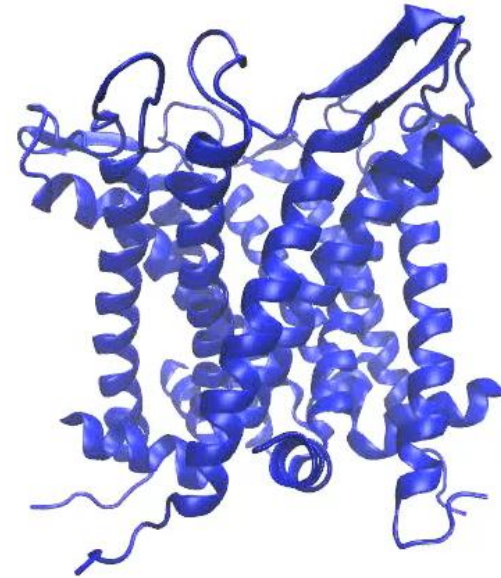
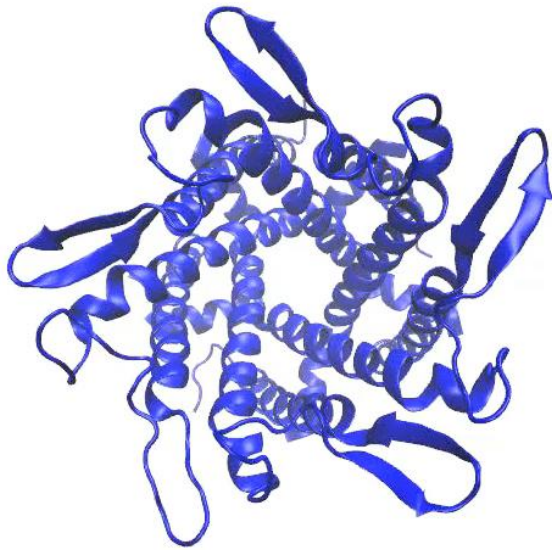
نمونه هایی از شبیه سازی سیستم های زیستی



مطالعه‌ی مکانیزم باز و بسته شدن کانال‌های غشایی حساس به بار مکانیکی

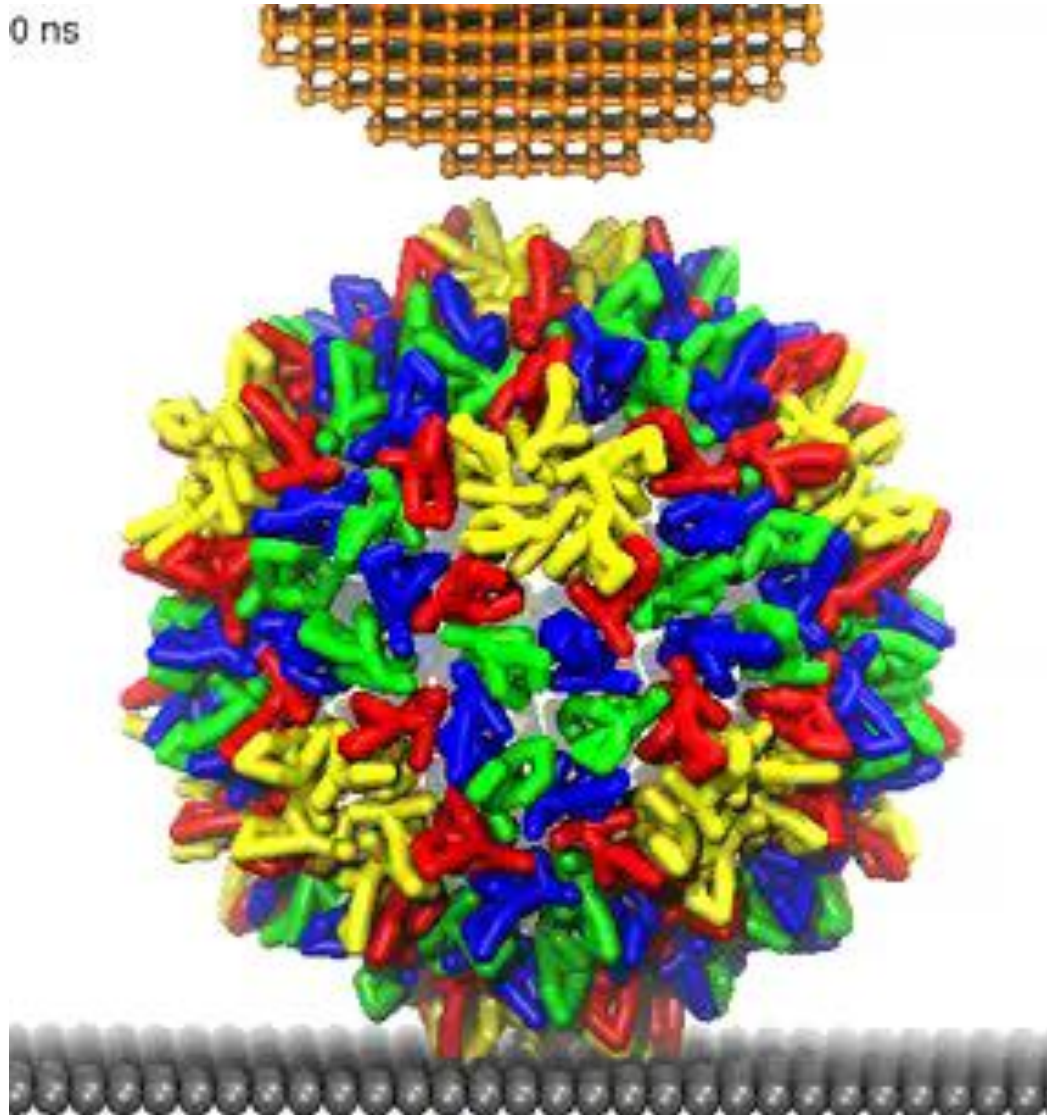


کانال‌های غشایی داخل غشا



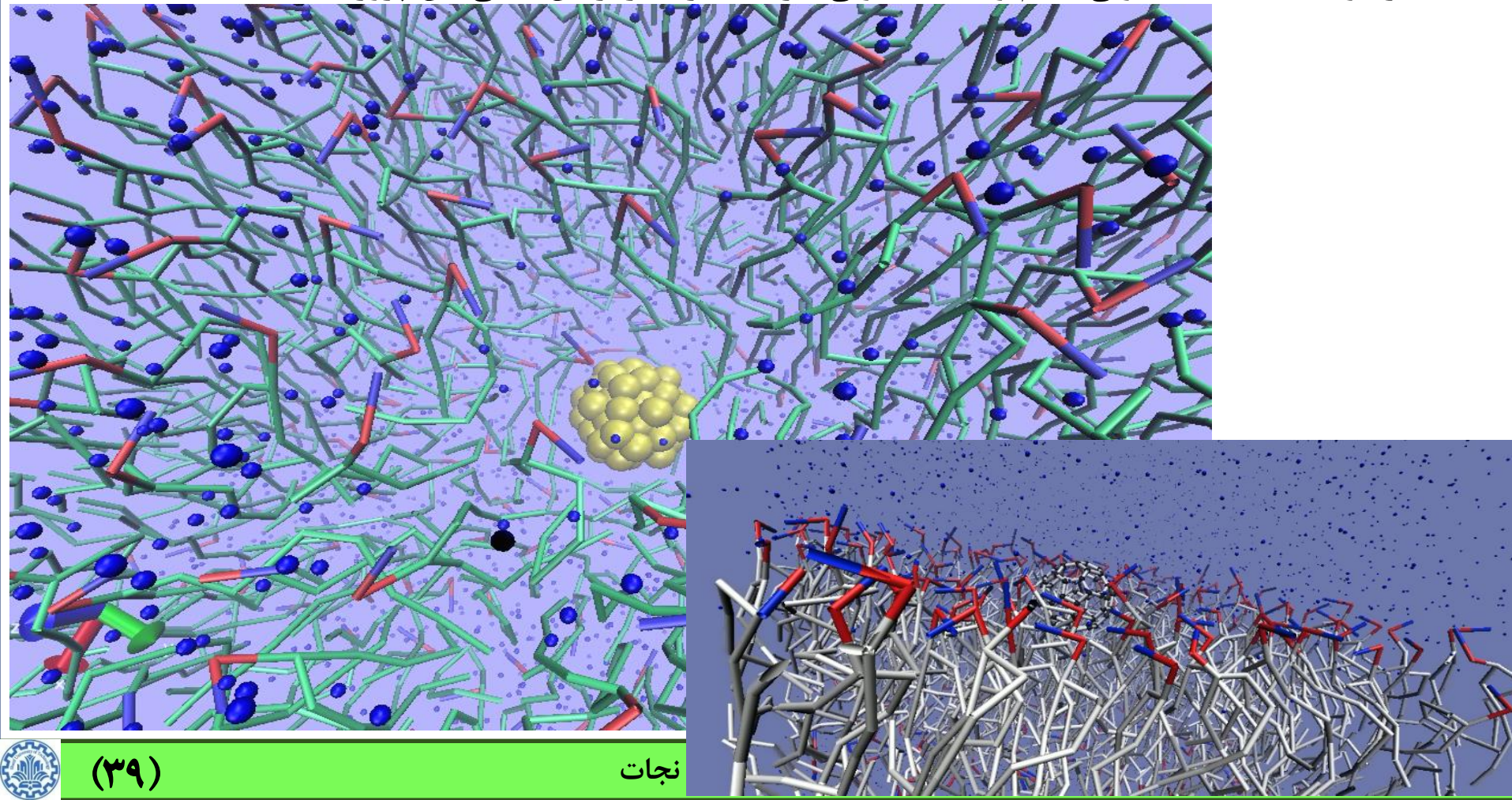
بارگذاری روی نمونه زیستی جهت تعیین خواص مکانیکی

0 ns

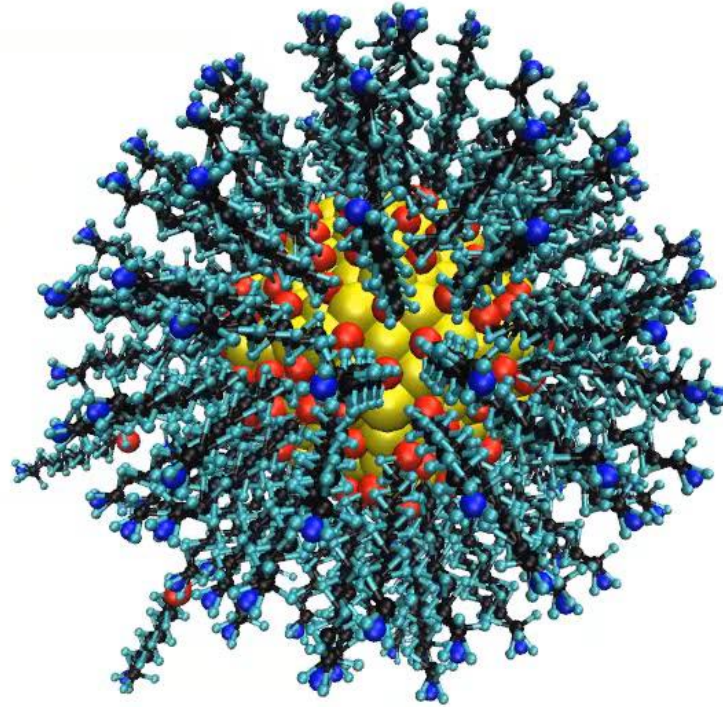


عبور نانوذرات دارو از غشای سلولی

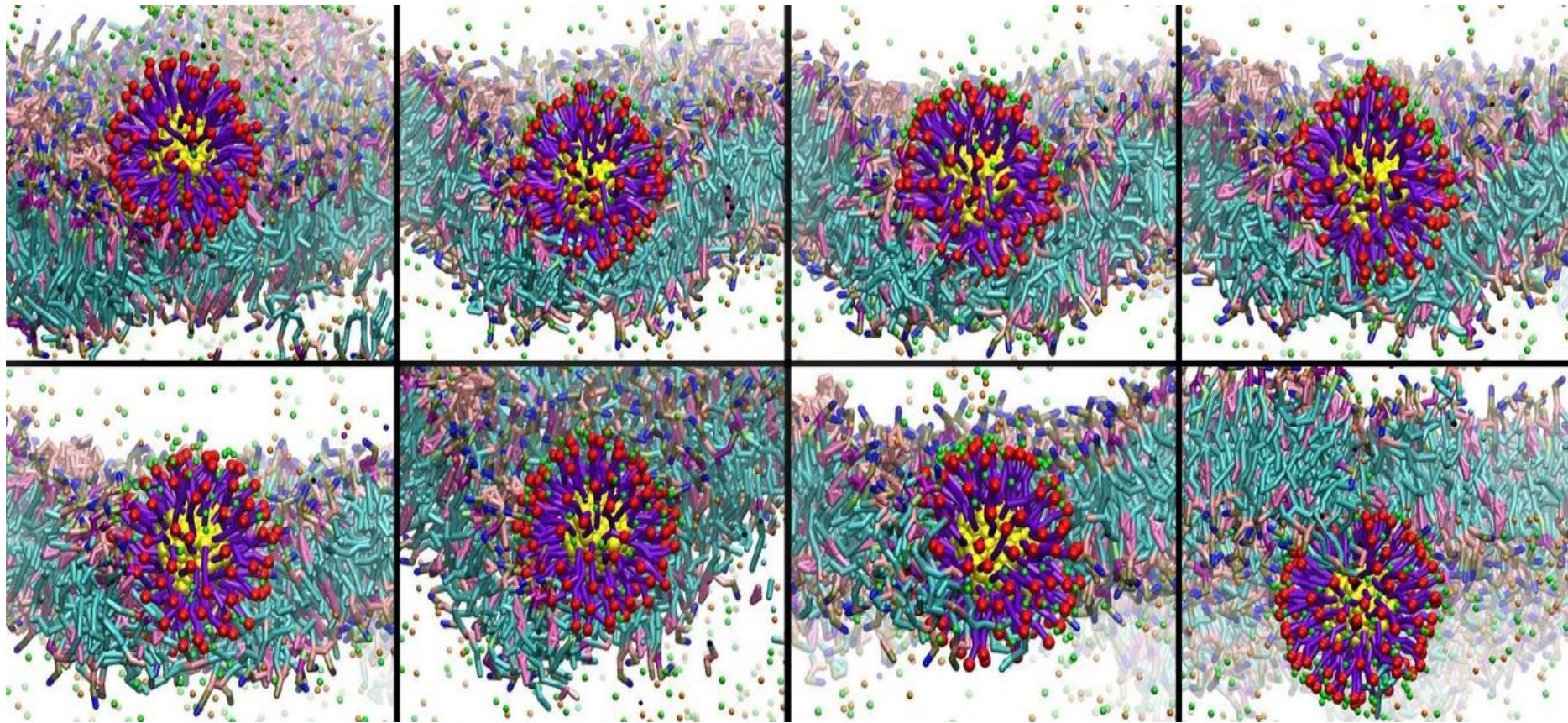
- هدف از این پروژه بررسی و شبیه سازی عبور نانو ذرات مختلف از غشای سلولی است. مقایسه عبور نانو ذرات در دو حالت غشای سلولی سالم و غشای سلولی دارای حفره جز ارکان اصلی این پروژه است.



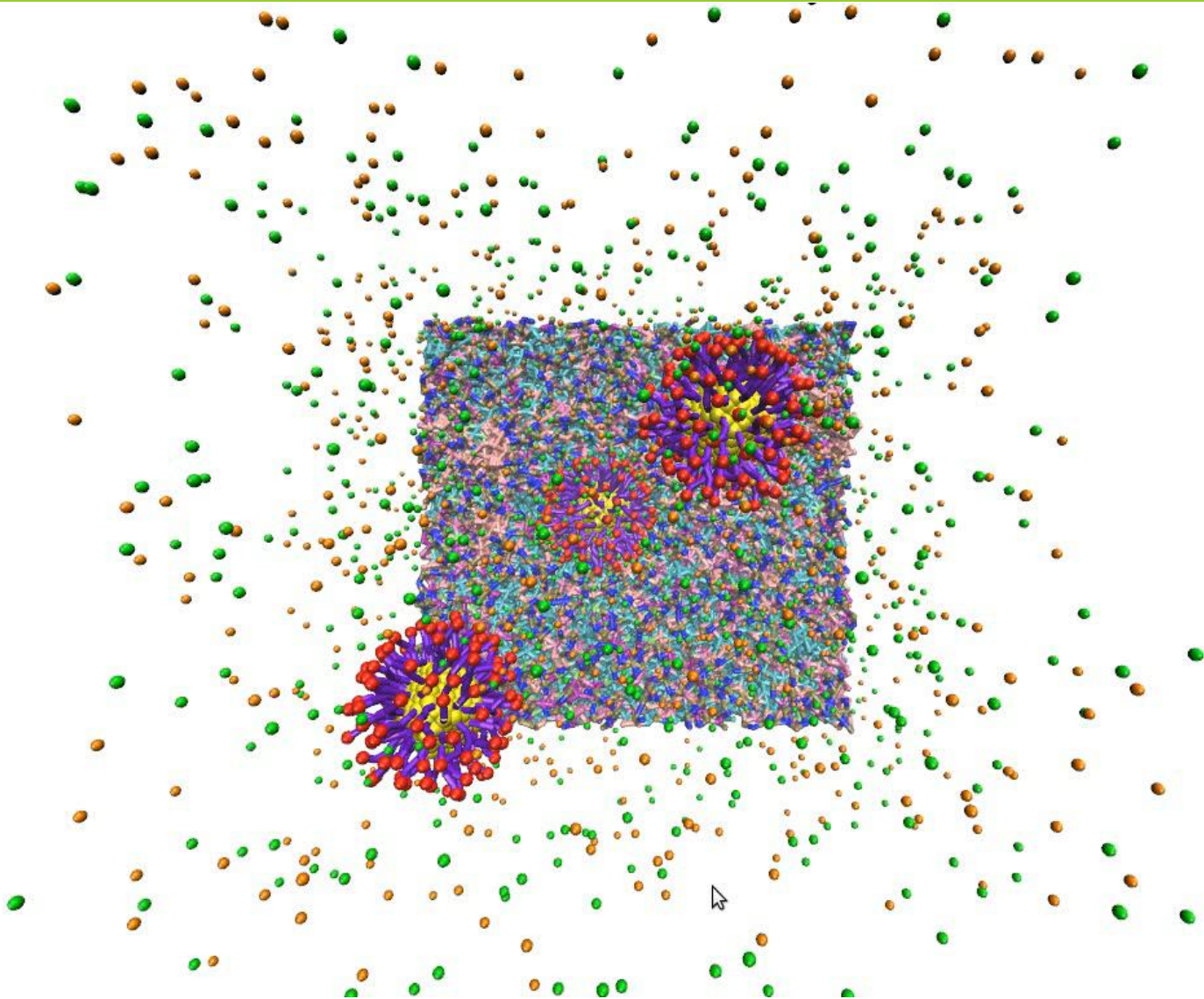
شبیه سازی اتصال لیگاندهای دارو به نانو ذره طلا



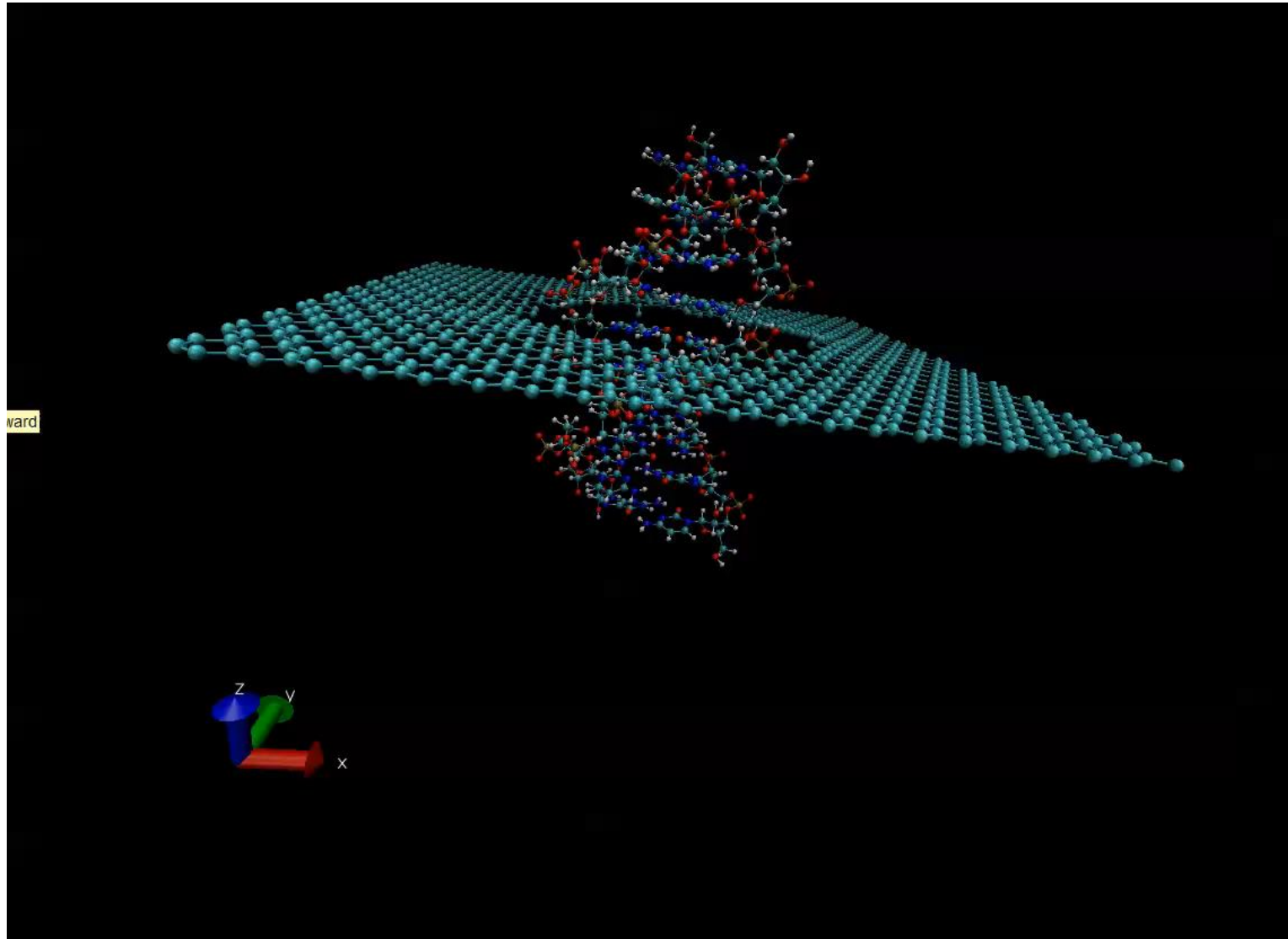
شبیه سازی عبور نانو ذره دارو از غضای سلولی با اعمال اختلاف پتانسیل



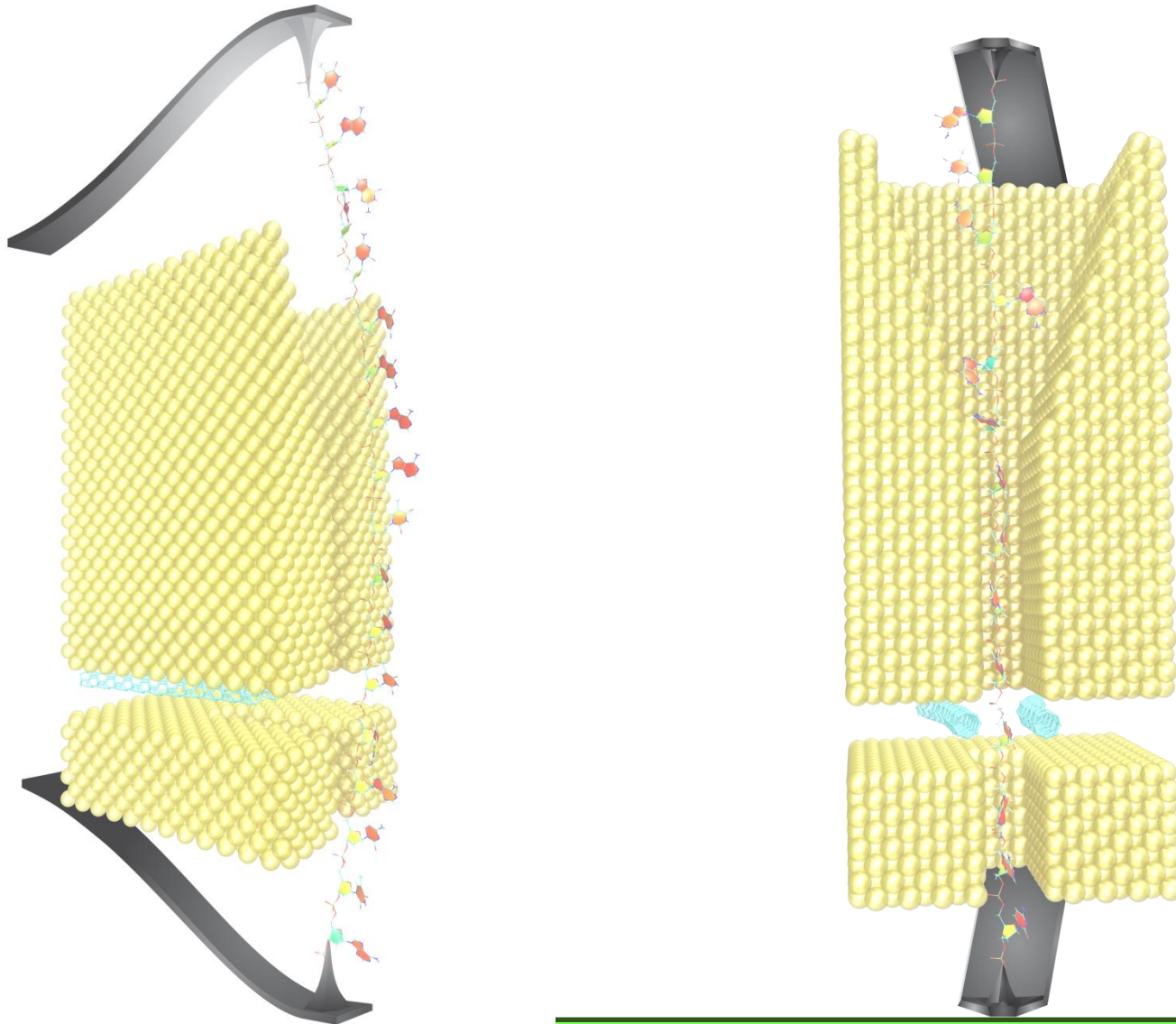
شبیه سازی عبور نانو ذره دارو از غضای سلولی با اعمال اختلاف پتانسیل

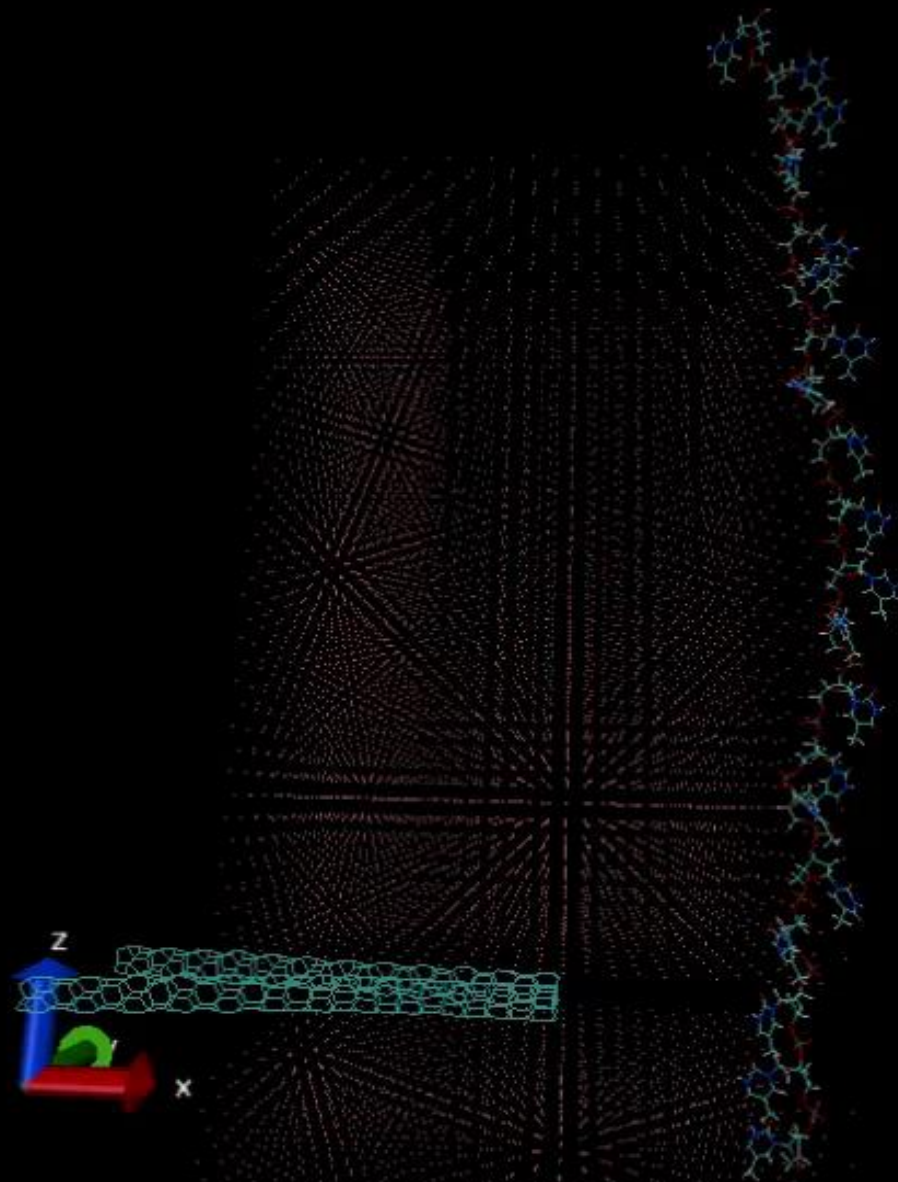


توالی سنجی DNA با استفاده از اندازه گیری جریان عبوری در یک محلول الکترولیت

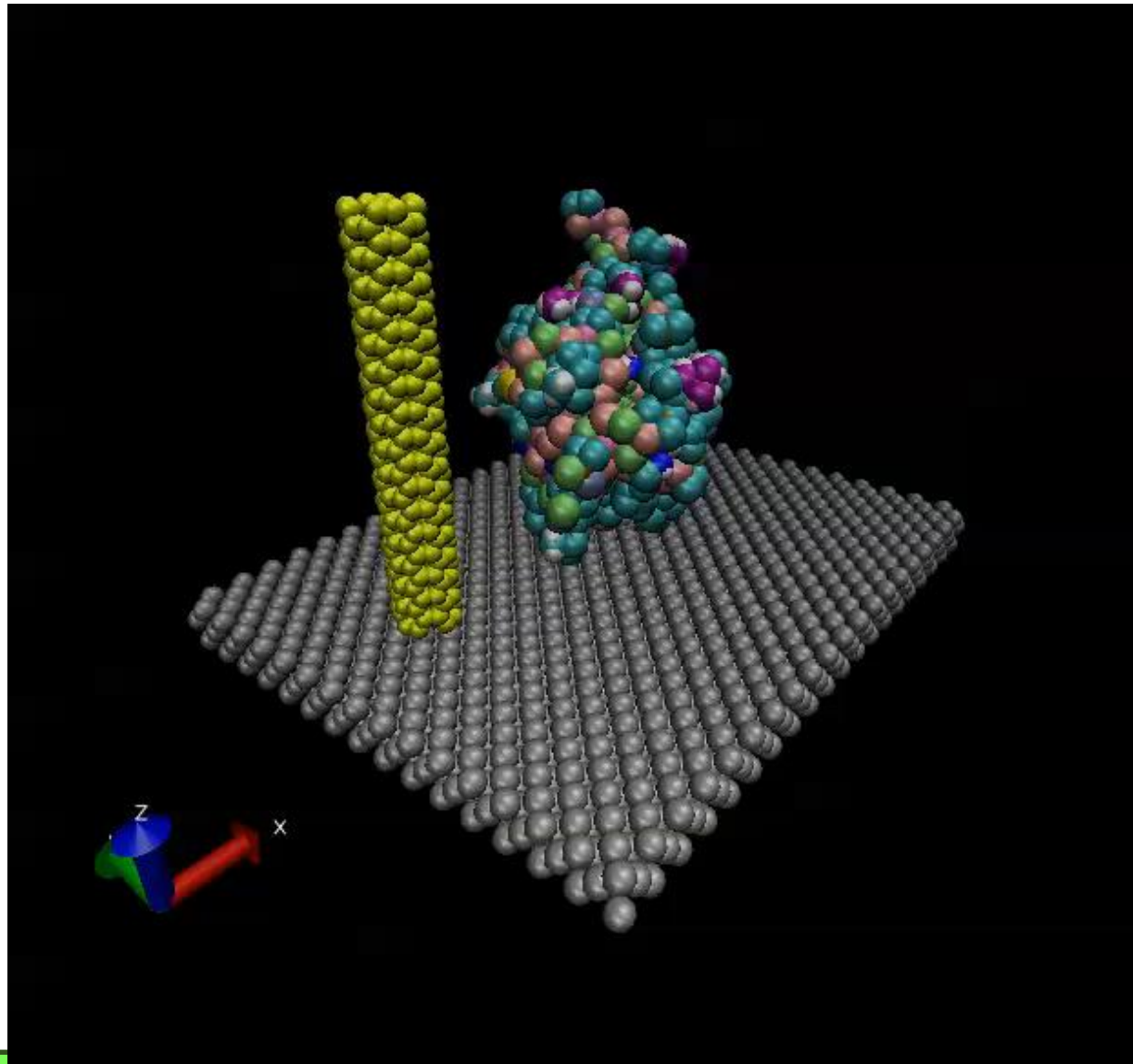


توسعه روشی جهت توالی سنجی DNA

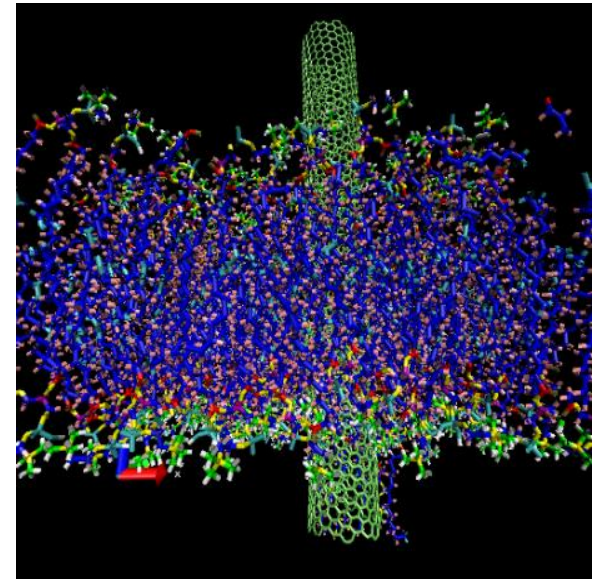
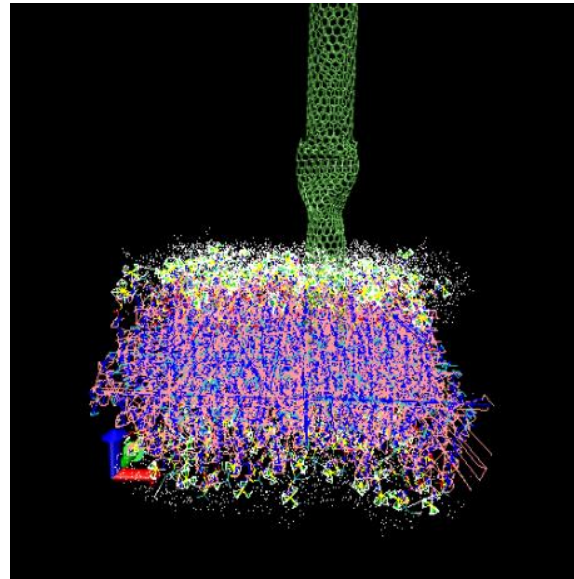
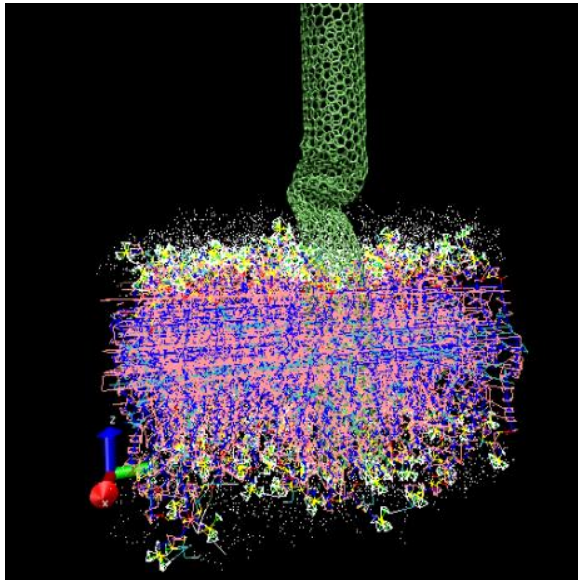




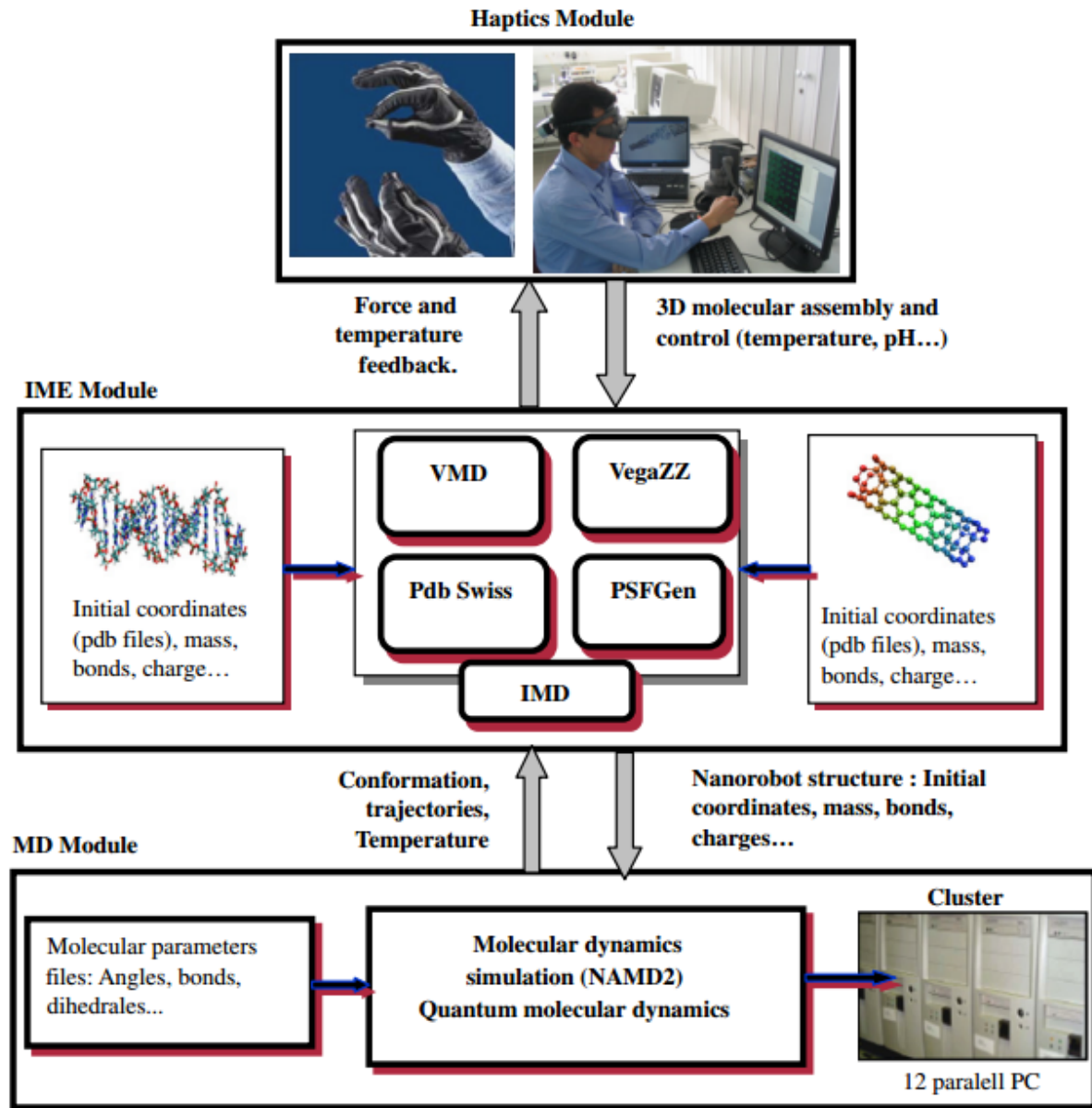
فیلم بیومنیپولیشن یک ذره زیستی روی سطح طلا



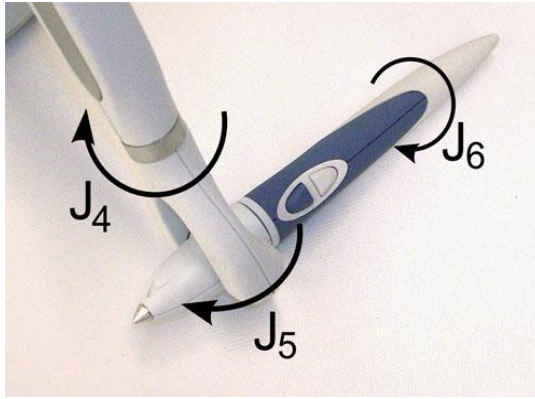
شبیه سازی فرو رفتن نانو تیوب داخل غشاء سلولی



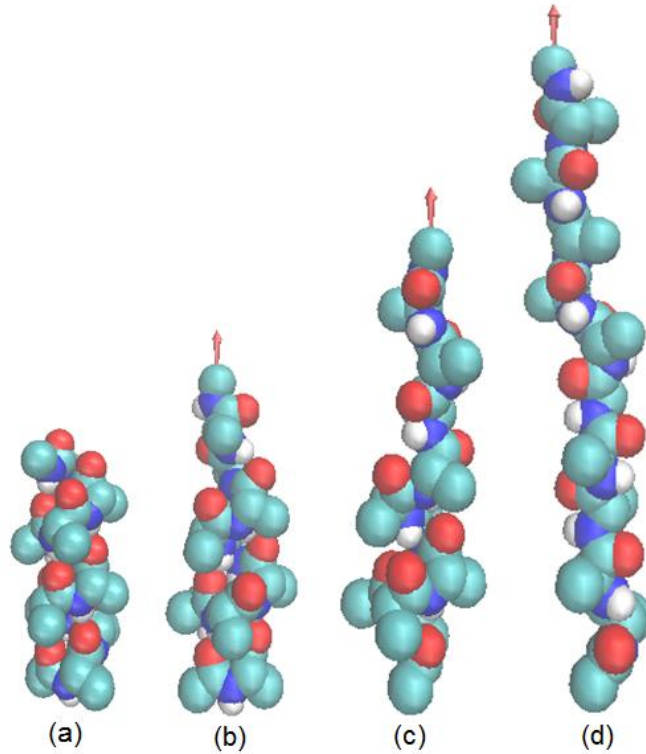
نمونه سازی بیو نانو ربات ها با استفاده از دینامیک مولکولی و ابزار هپتیک



- این پروژه به مطالعه ی مکانیک مولکولی با استفاده از نرم افزار دینامیک مولکولی (NAMD) همراه با تکنیک های واقعیت مجازی (VR) برای نمونه سازی بصری بیو نانو ربات ها می پردازد. با استفاده از محیط های بیو نانو در واقعیت مجازی اپراتور می تواند رفتار قطعات و سازه های زیستی را از طریق شبیه سازی فیزیکی و تجسم سه بعدی، طراحی و توصیف کند.



روبات فانتوم



باز کردن پروتئین آلانین