

بنام خدا :

شبیه سازی دینامیک مولکولی با نرم افزار گرومکس

مؤلفین:

دکتر محسنی شریعتی نیاسر

سمیرا بیجیایی

دکتر امیر شیخی

مریم امیرآفابی

دانشکده مهندسی شیمی دانشگاه تهران

عنوان و نام پدیدآور	شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با نرم‌افزار گرومکس / مولفین مجتبی شریعتی‌نیاسر... او دیگران.
مشخصات نشر	تهران : اتحاد، ۱۳۹۴.
مشخصات ظاهری	۲۷۶ ص.: مصور، جدول، نمودار.
شابک	978-600-197-077-1
وضعیت فهرست نویسی	فیفا
یادداشت	مولفین مجتبی شریعتی‌نیاسر، سمیرا میریحیایی، امیر شیخی، مریم امیر آفتابی.
یادداشت	واژه‌نامه.
موضوع	نرم‌افزار گرومکس
موضوع	دینامیک مولکولی -- شبیه‌سازی کامپیوتری
شناسه افزوده	شریعتی‌نیاسر، مجتبی، ۱۳۳۴ -
رده بندی کنگره	۱۳۹۴ ۵۱۷ ۵۱۲ ش ۵۹ / QP
رده بندی یوبی	۵۳۹/۶
شماره کتابخانه ملی	۴۰۸۴۳۲۴

نام کتاب	شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با نرم‌افزار گرومکس
مؤلفین	دکت مجتبی شریعتی نیاسر - سمیرا میریحیایی - دکتر امیر شیخی - مریم امیر آفتابی
ویراستار علمی	دکت مجتبی شریعتی نیاسر
ویراستار فنی	سمیرا میریحیایی
طراح جلد	احسان غیاثی نسب
ناشر	اتحاد
لیتوگرافی	طیف نگار
چاپ	دیبا - طنین
نوبت چاپ	اول - ۱۳۹۵
تیراژ	۵۰۰ نسخه
قیمت	۲۰۰۰ تومان

دفتر مرکزی کتاب آیلار

انقلاب - خیابان شهید منیری جاوید (اردیبهشت) - خیابان شهدای راندای شرقی - شماره ۱۴۶ (ساختمان آیلار) تلفن: ۶۶۴۰۱۲۵۵ - دورنگار: ۱۴۴۳۱

فروشگاه شماره ۱ (کتاب آیلار)

انقلاب - روبروی دبیرخانه دانشگاه تهران - بازارچه کتاب تلفن: ۴۱۱۸۶۵ - ۶۶۹۵۶۴۳۳

فروشگاه شاه ۲ (کتاب آیلار)

کریمخان زند - مابین ایرانشهر و خردمند جنوبی - شماره ۱۳۲ تلفن: ۸۸۳۱۹۷۴۰-۱

شابک: ۹۷۸-۶۰۰-۱۹۷-۰۷۷-۱ ISBN: 978-600-197-077-1

این اثر مشمول قانون حمایت از حقوق مؤلفان، مصنفان و هنرمندان مصوب ۱۳۴۸ است، هر کس تمام یا قسمتی از این اثر را بدون اجازه ناشر، نشر یا پخش یا عرضه کند تحت پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت.

پیشگفتار:

یکی از بهترین روش‌های موجود برای بررسی ساختار و رفتار مواد شبیه‌سازی رایانه‌ای است. امروزه با پیشرفت فن‌آوری رایانه، به شبیه‌سازهای محاسبه خواص مواد با استفاده از ساختار ذره‌های تشکیل‌دهنده آن‌ها توجه ویژه‌ای می‌شود. شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی اطلاعاتی در سطح میکروسکوپی (موقعیت و سرعت اتم‌ها) تولید می‌کنند و این داده‌ها به کمک مکانیک آماری به مقادیر ماکروسکوپی (فشار، انرژی و ...) تبدیل می‌شوند. در این کتاب شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار گرومکس معرفی شده است. این نرم‌افزار در زمینه سیستم‌های زیستی کاربرد بسیار دارد. با استفاده از آن می‌توان به اطلاعات و جزئیاتی در سطح مولکولی دست یافت که با روش‌های تجربی میسر نمی‌باشد.

در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی از قانون دوم نیوتن برای بررسی تحول زمانی سیستم‌ها استفاده می‌شود. در حقیقت، با انتگرال‌گیری از معادلات حرکت نیوتن یک مسیر به دست می‌آید، که چگونگی تغییر موقعیت، سرعت و شتاب ذره‌ها را با زمان نشان می‌دهد. بنابراین، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌توان هر کمیتی را که مبتنی بر موقعیت و سرعت اتم‌ها باشد به دست آورد.

بر این اساس، برای انجام شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سیستم‌های ذره‌ای بسته نرم‌افزاری GROMACS (Groningen Machine for Chemical Simulations) ارائه شده است. پس از ایجاد ساختار اولیه سیستم در دیتابیس و انتخاب شرایط شبیه‌سازی و میدان نیرو که قلب هر شبیه‌سازی محسوب می‌شود، سیستم به سطح حداقلی از انرژی رسانده می‌شود و بعد از مرحله تعادل‌رسانی، از سیم‌پلش مورد نظر نمونه‌برداری می‌شود. در نهایت فایل مسیر (trajectory) حاصل می‌شود که داده پارامترها از تجزیه و تحلیل آن به دست می‌آیند.

امید است با اظهار نظر فرهیختگانی که کتاب را مطالعه می‌نمایند بتوان در فرصتهای بعدی نقطه ضعف‌های احتمالی را برطرف نمود.

دکتر مجتبی شریعتی نیاسر

سمیرا میریحیایی

دکتر امیر شیخی

مریم امیرآفتابی

فهرست مطالب

فصل اول: مقدمه‌ای بر دینامیک مولکولی و شبیه‌سازی رایانه‌ای	۱۳
۱.۱. مقدمه	۱۴
۲.۱. برتری روش‌های رایانه‌ای	۱۵
۳.۱. شبیه‌سازی تعینی و کاتوره‌های	۱۹
۴.۱. مقایسه روش‌های مونت کارلو و دینامیک مولکولی	۲۰
فصل دوم: اصول شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در نرم‌افزار گرومکس	۲۱
۱.۲. شیم محاسباتی و مدل‌سازی مولکولی	۲۲
۲.۲. مفهوم مدل	۲۴
۱.۲.۲. سطح انرژی و پیل	۲۴
۳.۲. نمونه‌برداری از رست ها	۲۵
۱.۳.۲. معادلات حرکت و میر غای فازی	۲۶
۴.۲. تعیین خواص سیستم	۲۸
۵.۲. کمینه‌سازی انرژی و روش های	۳۳
۶.۲. بررسی خطاها در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی	۳۵
۷.۲. علائم و نمادهای به کار رفته در گرومکس	۳۵
۱.۷.۲. واحدهای دینامیک مولکولی	۳۶
۲.۷.۲. ساده‌سازی واحدها	۳۸
۸.۲. مفاهیم به کار رفته در گرومکس	۳۹
۱.۸.۲. شرایط مرزی متناوب	۳۹
۲.۸.۲. محدودیت‌های قطع	۴۶
۳.۸.۲. مفهوم گروه	۴۷
۱.۳.۸.۲. گروه کوپل دما	۴۸
۲.۳.۸.۲. گروه غیر قابل تغییر	۴۸
۳.۳.۸.۲. گروه شتاب گیرنده	۴۸
۴.۳.۸.۲. گروه نشانگر انرژی	۴۹
۵.۳.۸.۲. گروه مرکز جرم	۴۹
۶.۳.۸.۲. گروه خروجی XTC	۴۹
۹.۲. الگوریتم کلی محاسبات	۴۹

۵۰	۱.۹.۲. شرایط اولیه
۵۲	۲.۹.۲. جستجوی همسایگی (NS)
۵۵	۱.۱۰.۲. محاسبه خواص ترمودینامیکی ساده
۵۷	۱.۱۰.۲. انرژی پتانسیل
۵۷	۲.۱۰.۲. انرژی جنبشی
۵۸	۳.۱۰.۲. انرژی داخلی
۵۹	۴.۱۰.۲. ظرفیت گرمایی
۶۰	۵.۱۰.۲. تابع توزیع شعاعی
۶۱	۶.۱۰.۲. شار و ویرال
۶۱	۱۱.۲. حال عددی معادلات حرکت
۶۱	۱.۱۱.۲. انزال سری از معادلات حرکت نیوتن
۶۳	۲.۱۱.۲. الگوریتم ویرال
۶۴	۳.۱۱.۲. انتخاب گام زمانی
۶۴	۴.۱۱.۲. کوپل‌های به کار رفته
۶۴	۱.۴.۱۱.۲. کوپل دمایی
۶۸	۲.۴.۱۱.۲. کوپل فشار
۷۰	۳.۴.۱۱.۲. کوپل کشش سطحی
۷۱	۵.۱۱.۲. گروه ثابت کننده
۷۱	۱۲.۲. گام خروجی
۷۲	۱۳.۲. دینامیک مولکولی پوست‌های
۷۲	۱۴.۲. بهینه‌سازی موقعیت‌های پوسته
۷۴	۱۵.۲. الگوریتم محدودیت
۷۵	۱۶.۲. الگوریتم لینک
۷۵	۱.۱۶.۲. فرمول لینک
۷۷	۲.۱۶.۲. پارامترهای لینک
۷۷	۱۷.۲. شبیه‌سازی گرم کردن و سرد کردن ناگهانی (SA)
۷۸	۱۸.۲. دینامیک کاتوره‌ای (SD)
۸۱	فصل سوم: توابع برهمکنش و میدان‌های نیرو
۸۲	۱.۳. مقدمه
۸۵	۲.۳. رابطه خواص فیزیکی با دنیای مولکولی

۸۶	۳.۳.۳. برهمکنش های غیر پیوندی
۸۷	۱.۳.۳. مفهوم برد کوتاه و برد بلند
۸۸	۲.۳.۳. برهمکنش لنارد جونز
۹۰	۳.۳.۳. پتانسیل باکینگهام
۹۱	۴.۳.۳. برهمکنش کولمب
۹۲	۵.۳.۳. پتانسیل مدل کره سخت
۹۳	۶.۳.۳. پتانسیل های لنارد-جونز اصلاح شده
۹۳	۱۲.۶.۴. پتانسیل
۹۳	۳.۶.۳. پتانسیل
۹۴	۱.۳.۳. پتانسیل کی هارا
۹۴	۸.۳.۳. پتانسیل لورنتس-سور
۹۴	۹.۳.۳. پتانسیل ساتن-چرن
۹۴	۱۰.۳.۳. پتانسیل نان-کس
۹۵	۱۱.۳.۳. پتانسیل چاه مربع
۹۵	۱۲.۳.۳. برهمکنش کولمب با روش میدان واکنش
۹۷	۱۳.۳.۳. برهمکنش غیر پیوندی اصلاح شده
۹۹	۱۴.۳.۳. برهمکنش برد کوتاه اصلاح شده با والد
۹۹	۴.۳. برهمکنش های پیوندی
۱۰۰	۱.۴.۳. کشش پیوندی
۱۰۱	۱.۱.۴.۳. پتانسیل مرتبه چهارم
۱۰۱	۲.۱.۴.۳. پتانسیل مورس
۱۰۳	۳.۱.۴.۳. پتانسیل کشش پیوندی مکعبی
۱۰۴	۴.۱.۴.۳. پتانسیل کشش پیوندی فی ن (کشش الاستیک غیر خطی محاسبه شده)
۱۰۴	۲.۴.۳. خمش زاویه‌ای
۱۰۵	۱.۲.۴.۳. پتانسیل زاویه‌ای بر پایه کسینوس
۱۰۶	۲.۲.۴.۳. پتانسیل یوری بردلی
۱۰۶	۳.۲.۴.۳. جمله تقابل پیوند- پیوند
۱۰۷	۴.۲.۴.۳. جمله تقابل پیوند- زاویه
۱۰۷	۵.۲.۴.۳. پتانسیل زاویه‌ای درجه چهارم
۱۰۷	۳.۴.۳. جمله‌های خمشی

۱۰۷		۱.۳.۴.۳	خمش نامتعارف
۱۰۸		۲.۳.۴.۳	خمش متعارف
۱۱۱		۵.۳	محدودیت‌ها
۱۱۱		۱.۵.۳	محدودیت‌های مکانی
۱۱۳		۲.۵.۳	محدودیت‌های زاویه‌ای
۱۱۳		۳.۵.۳	محدودیت‌های خمش
۱۱۳		۴.۵.۳	محدودیت‌های فاصله
۱۱۵		۱.۴.۵.۳	میانگین زمانی
۱۱۶		۲.۴.۵.۳	میانگین بر روی چندتایی
۱۱۷		۳.۴.۵.۳	ربرد محدودیت‌های فاصله
۱۱۸		۶.۳	قطبش‌پذیری
۱۱۸		۱.۶.۳	قطبش - پیری
۱۱۸		۲.۶.۳	قطبش‌پذیری آب
۱۱۸		۳.۶.۳	قطبش‌پذیری تو
۱۲۱			فصل چهارم: نیروهای بین مولکولی
۱۲۲		۱.۴	مقدمه
۱۲۳		۲.۴	نیروی بین مولکولی
۱۲۴		۳.۴	انواع نیروهای بین مولکولی
۱۲۴		۱.۳.۴	نیروهای الکتروستاتیکی
۱۳۲		۲.۳.۴	نیروی القایی
۱۳۴		۳.۳.۴	نیروی پراکندگی
۱۴۰		۴.۳.۴	نیروی شیمیایی
۱۴۵			فصل پنجم: محاسبه انرژی آزاد
۱۴۶		۱.۵	مقدمه
۱۴۸		۲.۵	انرژی آزاد حلالیت
۱۴۸		۳.۵	محاسبه انرژی آزاد انحلال
۱۴۹		۴.۵	برهمکنش‌های مربوط به انرژی آزاد
۱۴۹		۱.۴.۵	پتانسیل‌های هارمونیک
۱۵۰		۲.۴.۵	زوايا و پیوندهای گرومکس ۹۶
۱۵۰		۳.۴.۵	دوسطحی‌های سالم

۴.۴.۵	برهمکنش‌های کولمب	۱۵۰
۵.۴.۵	برهمکنش کولمب با میدان واکنش	۱۵۰
۶.۴.۵	برهمکنش لنارد-جونز	۱۵۱
۷.۴.۵	انرژی جنبشی	۱۵۱
۸.۴.۵	قیدها	۱۵۲
۵.۵	تحلیل دستور g -energy	۱۵۴
فصل ششم:	بررسی تفصیلی دستورات برنامه	۱۵۷
۱.۶	اجرای شبیه‌سازی	۱۵۸
۲.۶	پارامترهای اجرا	۱۵۹
۱.۲.۶	پس از پردازش	۱۵۹
۲.۲.۶	کنترل‌های اجرای	۱۵۹
۳.۶.۲	دینامیک لانگس (لانگس)	۱۶۱
۴.۲.۶	کمینه انرژی	۱۶۱
۵.۲.۶	دینامیک مولکولی برست‌های	۱۶۱
۶-۲-۶	کنترل خروجی برنامه	۱۶۲
۷-۲-۶	جستجوی همسایگی	۱۶۲
۸.۲.۶	الکترواستاتیک	۱۶۳
۹.۲.۶	VdW	۱۶۵
۱۰.۲.۶	جدول‌ها	۱۶۶
۱۱.۲.۶	اوالد	۱۶۶
۱۲.۲.۶	کوپل (کنترل) دما	۱۶۷
۱۳.۲.۶	کوپل (کنترل) فشار	۱۶۷
۱۴.۲.۶	گرم و سرد کردن مداوم	۱۶۸
۱۵.۲.۶	اختلال در انرژی آزاد	۱۷۰
۱۶.۲.۶	دینامیک مولکولی غیرتعادلی	۱۷۰
۱۷.۲.۶	میدان‌های الکتریکی	۱۷۰
۳.۶	برنامه‌های در دسترس	۱۷۱
۱.۳.۶	تولید توپولوژی و مشخصه‌های ساختاری	۱۷۱
۲.۳.۶	اجرای شبیه‌سازی	۱۷۲
۳.۳.۶	نمایش گرافیکی سیستم	۱۷۲

۱۷۲	۴.۳.۶. تحلیل مشخصه‌های سیستم مانند انرژی‌ها.
۱۷۲	۵.۳.۶. تبدیل‌کننده فرمت‌های گوناگون فایل.
۱۷۲	۶.۳.۶. ابزارها.
۱۷۳	۷.۳.۶. فاصله بین ساختارها.
۱۷۳	۸.۳.۶. فاصله در ساختارها برحسب زمان.
۱۷۳	۹.۳.۶. خواص مربوط به توزیع جرمی برحسب زمان.
۱۷۴	۱۰.۳.۶. آنالیز برهم‌کنش‌های پیوندی.
۱۷۴	۱۱.۳.۶. خواص ساختاری.
۱۷۴	۱۲.۳.۶. خواص سینتیکی.
۱۷۵	۱۱.۳.۶. خواص الکترواستاتیکی.
۱۷۵	۱۴.۳.۶. آنالیز و پرتیب‌ها.
۱۷۵	۱۵.۳.۶. فصل مشترک.
۱۷۵	۱۶.۳.۶. آنالیز هم‌پراکنش.
۱۷۵	۱۷.۳.۶. حالت‌های نرمال.
۱۷۶	۱۸.۳.۶. چند نمونه از دستورالعمل‌ها.

فصل هفتم قسمت اول: تعیین خواص ترمودینامیکی و انتقالی سیالات لنارد-جونز

۱۸۱	(آرگون) با استفاده از نرم‌افزار گرومکس ...
۱۸۲	۱.۱.۷. مقدمه.
۱۸۴	۲.۱.۷. پایه‌های شبیه‌سازی.
۱۸۴	۱.۲.۱.۷. اصول اولیه و داده‌های مورد نیاز.
۲۰۰	۲.۲.۱.۷. الگوریتم‌های مورد استفاده در همگرایی دما و فشار.
۲۰۲	۳.۲.۱.۷. تعیین تعداد اتم‌های مورد نیاز در شبیه‌سازی.
۲۰۹	۳.۱.۷. تعیین خواص فیزیکی و ترمودینامیکی مواد.
۲۰۹	۱.۳.۱.۷. دانسیته.
۲۱۳	۲.۳.۱.۷. تحلیل ظرفیت حرارتی در حجم ثابت (C_v).
۲۱۳	۳.۳.۱.۷. تحلیل ضریب خودنفوذی.
۲۱۶	۴.۱.۷. نحوه همگرایی از شرایط اولیه به شرایط نهایی.
۲۲۰	۵.۱.۷. نتیجه‌گیری.

قسمت دوم: تحلیل دینامیک تغییر فاز (حرارتی) یک سیال لنارد-جونز (آرگون)

۲۲۱	همراه با بیان گرافیکی آن
-----	--------------------------

۲۲۲	۱.۲.۷. مقدمه
۲۲۲	۲.۲.۷. ایجاد خوشه‌ها در تغییر فاز
۲۲۲	۳.۲.۷. روش‌های ایجاد تغییر فاز
۲۲۲	۱.۳.۲.۷. سردسازی تدریجی
۲۲۳	۲.۳.۲.۷. انجماد
۲۲۳	۴.۲.۷. آغاز شبیه‌سازی و تحلیل GC1 و GC5
۲۲۳	۱.۴.۲.۷. GC1
۲۴۸	۴.۲.۷. GC5
۲۵۱	۵.۲.۷. شبیه‌سازی انجماد
	فصل هفتم قسمت سوم: تحلیل دینامیک تغییر فاز (کوانتومکانیکی) یک سیال
۲۵۷	لنارد-جرز (آ. جون. همراه با بیان گرافیکی آن
۲۵۸	۱.۳.۷. مقدمه
۲۵۸	۲.۳.۷. پارامترهای سیستم
۲۶۵	چند سؤال
۲۶۷	مراجع
۲۷۵	واژگان