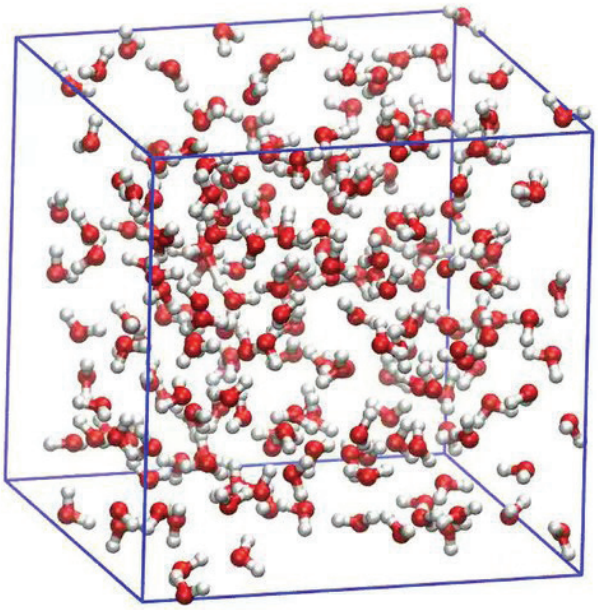
معرفی نرم افزار

آنچه خواهید خواند:

آشنایی با دینامیک مولکولی
معرفی نرم افزار Origin
دوره های آموزشی انجمن علمی



آشنایی با دینامیک مولکولی

ثامن شرفی
دانشجوی کارشناسی رشته مهندسی پلیمر،
دانشگاه تهران

دینامیک مولکولی روشی برای شبیه سازی کامپیوتری و مطالعه ی کنش های فیزیکی اتم ها و مولکول هاست.

دینامیک مولکولی اولین بار در اواخر دهه ۱۹۵۰ میلادی در زمینه فیزیک نظری ارائه و توسعه یافت. اما امروزه عمدتا در زمینه شیمی فیزیک، علوم مواد و مدل سازی مولکول های زیستی نیز کاربرد دارد.

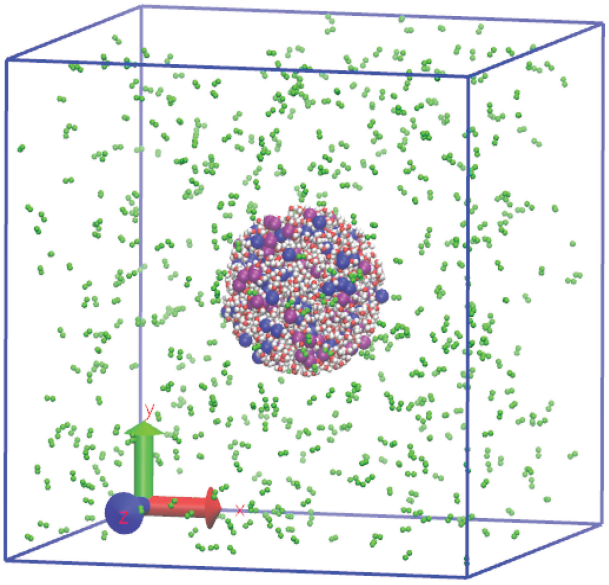
در این روش برهمکنش ذرات در بازه های زمانی معینی و با استفاده از معادلات تعریف شده مورد بررسی قرار می‌گیرد که میتوان اطلاعاتی در مورد خواص مختلف سیستم از جمله انرژی، خواص ساختاری، دینامیکی، مکانیکی و غیره به دست آورد.

یک شبیه سازی دینامیک مولکولی نیازمند تعیین یک تابع، یا تعریف روابطی است که از طریق آن ذرات موجود درشبیه سازی با هم میانکنش خواهند داشت. در شیمی و زیست شناسی این امر معمولا به عنوان یک میدان نیرو و در فیزیک مواد به عنوان پتانسیل میان اتمی شناخته می‌شود که یکی از رایج ترین نسخه ها، حل عددی معادلات حرکت نیوتون برای اتم ها مولکول هاییست که برهمکنش دارند. در این

سیستم نیروهای بین ذرات با میدان های نیروی مکانیک مولکولی محاسبه می‌گردد. جدول زیر نیز شامل چند معادله حرکت برای برسی سیستم های مختلف است.

نوع سیستم	معادله حرکت
سیستم مکانیک کوانتوم	معادله ی شرودرینگر (وابسته به زمان)
سیستم مکانیک کلاسیک	معادله حرکت نیوتون
سیستم کاتوره ای	معادله لاژوین

کاهش وتبدیل از یک تعریف کوانتومی کامل به یک پتانسیل کلاسیک شامل دو تقریب (تخمین) اصلی می باشد. اولی تقریب بورن-اوپنهایمر (Born-Oppenheimer)می باشد، که بیان می‌کند: پویایی (دینامیک) الکترون ها به قدری سریع است که میتواند به عنوان واکنش دهنده سریع به حرکت هسته های خود در نظر گرفته شوند. در نتیجه، آنها ممکن است به طور جداگانه در نظر گرفته شوند. مورد دوم، هسته ها را که بسیار سنگین تر از الکترون ها هستند، به عنوان ذرات نقطه ای که از دینامیک مولکولی کلاسیک پیروی می کنند، تلقی میکند. در دینامیک مولکولی کلاسیک، اثر الکترون ها به صورت یک سطح انرژی بالقوه تخمین زده می شود، که معمولا نشانگر حالت پایه می باشد.

برگرفته ازکتاب

Computational Molecular Dynamics: Chalenges,Methods,Ideas