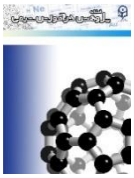
مقاله مروری

پژوهش در آموزش شیمی، سال سوم، شماره سوم، صفحات ۱-۱۴

پژوهش در آموزش شیمی

http: //chemedu.cfu.ac.ir



مروری بر روش‌های شبیه‌سازی در مقیاس مولکولی: روش مونت کارلو و روش دینامیک مولکولی

آرش وجود [۱]*، نیرمحمدیان طریقی [۲]

[۱] *باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان، واحد اردبیل، دانشگاه آزاد اسلامی، اردبیل، ایران*

[۲] *گروه شیمی، واحد اردبیل، دانشگاه آزاد اسلامی، اردبیل، ایران*

چکیده

اهمّیت محاسبات به عنوان ابزاری فراگیر و توانمند در علوم پایه بویژه در علوم فیزیک و شیمی، زمینه‌ای را برای هدایت جهت‌گیری علایق و نگرش‌های پژوهشی به این شاخه از علم (موسوم به شیمی محاسباتی) ایجاد کرده است. از طرفی، تعامل انسان با طبیعت همواره از طریق مطالعهٔ نظری یا تجربی بوده است. اما، با ورود و رشد چشمگیر رایانه‌ها در چهار دههٔ گذشته، امروزه دانشمندان از طریق شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای امکان آن را یافته‌اند که فرآیندهای مختلف را با دقت بسیار بالا مورد مطالعه قرار دهند تا در نهایت پاسخ پرسش‌های خویش را آسان‌تر به‌دست آورند. مقاله حاضر درصدد است با مروری مختصر بر شیمی محاسباتی که درست در نقطهٔ مقابل شیمی نظری و غیر محاسباتی قرار دارد و بررسی روش‌های شبیه‌سازی در مقیاس مولکولی (روش مونت کارلو و روش دینامیک مولکولی)، تصویر نسبتا جامعی از این مفاهیم را به خوانندگان ارائه دهد. برای گردآوری اطلاعات در این پژوهش از روش کتابخانه‌ای و جستجو در منابع و پایگاههای داده معتبر استفاده شده است.

کلیدواژه‌ها: آموزش شیمی، شبیه‌سازی، شیمی محاسباتی، مونت کارلو، دینامیک مولکولی.

---

* نویسنده مسئول: (✉ voojod.a2012@gmail.com)

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۷/۱۴ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۹/۲۱

مقدّمه

امروزه اهمّیت شایان محاسبات عددی در علوم فیزیک و شیمی نظری بر کسی پوشیده نیست (گوهرشادی و همکاران، ۱۳۸۵). از سویی، در کنار روش‌های تجربی و نظری، محاسبه به عنوان شاخهٔ سوم علم شناخته می‌شود. بر این اساس، شاخه‌ای از علم شیمی که سعی در حل مسائل با استفاده از رایانه‌ها دارد، شیمی محاسباتی[۱] نامیده می‌شود و درست در نقطهٔ مقابل شیمی نظری و غیر محاسباتی قرار دارد. هم‌چنین، شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای نیز به عنوان بخشی از علوم محاسباتی کاربردهای زیادی در مطالعهٔ فرآیندهای شیمیایی، فیزیکی، زیست شناختی و غیره دارد.

استفاده از شبیه‌سازی رایانه‌ای در زمینه‌های مختلف در سال‌های اخیر رو به افزایش بوده است و یکی از مهمترین کاربرد آن در زمینه‌ی آموزش و یادگیری بوده است. به طورکلی، شبیه‌سازی پیوند میان نظریه و تجربه بوده و با کمک گرفتن از آن می‌توان یک تئوری را با به کارگیری مدل مشابه امتحان کرد و درستی مدل را در مقایسه با نتایج تجربی تأیید نمود و نیز امکان شبیه‌سازی مواردی را داریم که آزمایش کردن آن‌ها در محیط آزمایشگاه، مشکل یا ناممکن است. فراتر از این، عملاً شبیه‌سازی نوعی تجربهٔ ذهنی است که بدون وسایل و امکانات آزمایشگاهی انجام می‌شود. در کارهای تجربی، همیشه آمار و احتمال، خطا، تجهیزات و موجودیت سامانه در نظر گرفته می‌شود، در حالی که در شبیه‌سازی خطای مشخص، تجهیزات محدود به رایانه و متعلقات آن و موجودیت سامانه یک مدل ریاضی که بیانگر سامانه است. از این رو، شبیه‌سازی را می‌توان نوعی کار تجربی ارزیابی کرد.

دو گروه اصلی از روش‌های شبیه‌سازی در مقیاس مولکولی (10^{-10}-10^{-6}) روش مونت کارلو[۲] و روش دینامیک مولکولی[۳] است که از مهم‌ترین روش‌های شبیه‌سازی این مقیاس محسوب می‌شوند. نهایتاً، شیمی محاسباتی با کمک به شیمی آزمایشگاهی می‌تواند در یافتن موضوعات جدید شیمیایی با شیمی تجربی رقابت نماید.

از روش‌های بسیار کارآمد در شیمی محاسباتی، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است که روشی مناسب برای مدل‌سازی میکروسکوپی در مقیاس اتمی و مولکولی را فراهم می‌کند. (اسکولیدآس[۴]، ۲۰۰۴؛ جلیلی، ۱۳۹۵؛ موسوی هفتادر، ۱۳۹۶؛ موسوی و ترک زاده، ۱۳۹۸؛ وجود، ۱۴۰۰). از طرفی،

---

۱ Computational Chemistry
۲ Monte Carlo
۳ Molecular Dynamics
۴ Skoulidas

جوان نیکخواه و مقبلی هدف از پژوهش خود را بر کاربرد شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در سامانه‌های پلیمری متمرکز کردند و به مرور برخی از کاربردهای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در زمینه‌های مختلف علوم و مهندسی پلیمر پرداختند (جوان نیکخواه و مقبلی، ۱۳۹۶). غیاب در پژوهشی با عنوان مقدمه‌ای بر روش شبیه‌سازی مونت کارلو، به معرفی مختصر و ارائه اطلاعات مقدماتی در مورد این روش و نیز زمینه‌های گوناگون کاربردی آن پرداخت (غیاث، ۱۳۹۳).

مقاله حاضر درصدد است با مروری مختصر بر شیمی محاسباتی که درست در نقطهٔ مقابل شیمی نظری و غیر محاسباتی قرار دارد و بررسی روش‌های شبیه‌سازی در مقیاس مولکولی (روش مونت کارلو و روش دینامیک مولکولی)، تصویر نسبتا جامعی از این مفاهیم را به خوانندگان ارائه دهد.

روش پژوهش

پژوهش حاضر از نوع مروری بوده و روش گردآوری اطلاعات آن، جستجوی اینترنتی در داده پایگاه‌های معتبر (شامل مگیران، پایگاه اطلاعات علمی جهاد دانشگاهی (SID)، گوگل اسکولار، ساینس دایرکت و...) است. هم‌چنین برای گردآوری اطلاعات در آن از مطالعات کتابخانه‌ای و کتاب-های مربوط به موضوع، پایان نامه‌ها و مقالات علمی استفاده شده است.

شیمی محاسباتی

رایانه‌ها نه‌تنها در توسعهٔ علم و گسترش مرزهای دانش در جهان امروزی نقش بسیار پر اهمیّت و کلیدی دارد، در دانش شیمی محاسباتی که یکی از شاخه‌های علم شیمی را تشکیل می‌دهد، نیز دوباره از آنها برای پیش‌بینی ساختار مولکول، خواص مولکولی و واکنش‌های شیمیایی استفاده می‌شود. از این رو، پژوهشگر در این روش این امکان را می‌یابد که به جای بررسی عملی پدیده‌های شیمیایی از راه واکنش و ترکیبات شیمیایی در آزمایشگاه، آن‌ها را از طریق محاسبات رایانه‌ای مطالعه نمایند.

شیمی محاسباتی از نتایج شیمی محض که در قالب برنامه‌های مؤثر رایانه‌ای در آمده‌اند، برای محاسبهٔ ساختار و خواص مولکول‌ها استفاده می‌کند. نتایج حاصل از محاسبات معمولاً کامل‌کنندهٔ اطلاعات به‌دست آمده از آزمایش‌های شیمیایی هستند، اما در برخی موارد حتی می‌توانند منجر به پیش‌بینی پدیده‌های مشاهده نشدهٔ شیمیایی نیز شوند. علاوه بر این، شیمی محاسباتی یکی از جذاب‌ترین شاخه‌های شیمی است و برای رفع بسیاری از مشکلات در شیمی قابل استفاده و سودمند

است و از شبیه‌سازی رایانه‌ای برای کمک به حل مشکلات پیچیده شیمیایی استفاده می‌کند و نیز می‌توان بعنوان یک آزمایشگاه مجازی عمل کرده و با شیمی آزمایشگاهی دریافتن موضوعات جدید رقابت نماید. به طورکلی، روش‌های محاسباتی ابداعی برای حل مسائل شیمی، از قوانین مکانیک کوانتوم و مکانیک کلاسیک یا ترکیبی از آن‌ها برای حل مسائل استفاده می‌کنند.

روش‌های مدل‌سازی مولکولی در شیمی محاسباتی را می‌توان از یک سو به روش‌های مکانیک کوانتومی و مکانیک کلاسیکی و از سوی دیگر و به صورت کلی‌تر به روش‌های ایستا (استاتیک) و دینامیک تقسیم‌بندی نمود.

به طور کلی، روش‌های محاسباتی در شیمی فیزیک به روش‌های دینامیک، استاتیک و تحلیلی-مقایسه‌ای تقسیم‌بندی می‌شوند:

- روش‌های دینامیک: در این روش‌ها رفتار وابسته به زمان سامانه با ساختار مولکولی که دارد، مورد بررسی قرار می‌گیرد.

- روش‌های استاتیک: در این روش‌ها سامانه به شکل مستقل از زمان و ایستا در نظر گرفته می‌شود.

- روش‌های تحلیلی و مقایسه‌ای: در این روش‌ها معمولاً از روش‌های آماری برای بررسی سامانه و به‌دست آوردن خواص‌اش، استفاده می‌شود (میر محمدی و بحری لاله، ۱۳۹۹؛ وجود، ۱۴۰۰؛ شیرانی‌ایل‌بیگی و غلام‌پور، ۱۳۹۷، غریبی و سادات مطلبی‌پور، ۱۳۹۲).

روش‌های دینامیک و روش مونت کارلو

از آنجایی در روش‌های دینامیک، رفتار وابسته به زمان سامانه مورد بررسی قرار گرفته و بدین منظور از قوانین فیزیک کلاسیک مانند قوانین حرکت نیوتن استفاده می‌شود، این روش‌ها خود به روش‌های دینامیک مولکولی کلاسیک، روش‌های دینامیک مولکولی درشت‌دانه[1] و روش‌های آغازین-دینامیک مولکولی دسته‌بندی می‌شوند (موسوی و ترک زاده، ۱۳۹۸). از طرفی، با توجه به این نوشتار حاضر مبتنی بر روش‌های ایستا نیست، لذا ضرورتی بر توضیحات در مورد روش‌های ایستا که به دو گروه روش‌های مکانیک مولکولی و روش‌های ساختار الکترونی تقسیم می‌شوند، دیده نمی‌شود.

[1] Coarse-Grained Molecular Dynamics

از حیث روش، علاوه بر روش دینامیک مولکولی از روش مونت کارلو نیز برای شبیه‌سازی سامانه‌های مولکولی استفاده می‌شود که در ادامه به مرور مختصر تاریخچه و معرفی کامل این دو روش شبیه‌سازی کاربردی و مهم پرداخته خواهد شد.

۱- تاریخچهٔ مختصری از روش مونت کارلو و روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

مونت کارلو نام منطقه‌ای از کشور موناکو که در اروپای غربی واقع شده است، می‌باشد. تاریخچهٔ روش مونت کارلو و روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به نوعی با تاریخ یارانه‌ها در آمیختگی داشته و بدون وجود ابزاری نظیر یارانه عملاً برای این دو روش نمی‌توانستیم جایگاهی در علم محاسباتی متصور باشیم. اولین مدل روش مونت کارلو را می‌توان آزمایش بوفن[۱]دانست که با انداختن سوزن‌هایی روی سطحی که با نوارهای موازی چوبی پوشیده شده است، عدد تخمین زده می‌شود. متروپولیس[۲] و همکارانش (نیومن[۳]و اولام[۴]) در خلال جنگ جهانی دوم برای تشریح پتانسیل برهم کنش مولکول‌های ترکیبات گازی اورانیم به کار رفته در تولید بمب اتمی، از روش مونت کارلو استفاده کردند و پس پایان جنگ در مجموعه مقالات ارائه شده از سوی این پژوهشگران ضمن معرفی روش، نکات مختلف آن تشریح گردید و پشتوانهٔ ریاضی آن ارائه شد و دلیل انتخاب نام مونت کارلو، استفاده بسیار زیاده از اعداد تصادفی در محاسبات از سوی متروپولیس است؛ به طوری که در عنوان مقاله‌ای که مطالعات اولیه مربوط به این روش را توضیح داد نیز به کار رفت (شمس‌آبادی، ذوالجلالی‌مقدم و ریاضی، ۱۳۹۹؛ متروپولیس و همکاران، ۱۹۵۳؛ متروپولیس و اولام، ۱۹۴۹؛ غیاث، ۱۳۹۳؛ غلامی، ۱۳۹۶؛ وثوقی و همکاران، ۱۳۹۸؛ وجود، ۱۴۰۰؛ هریسون پل، ۱۳۹۶). بالاخره، نخستین شبیه‌سازی رایانه‌ای سیالات در سال ۱۹۵۲ میلادی، توسط متروپولیس و همکارانش صورت گرفت که سرانجام این مطالعهٔ علمی مهم منجر به روش مونت کارلو شد.

نخستین بار در دههٔ ۱۹۴۰ میلادی، جامع‌ترین روش شبیه‌سازی مولکولی یعنی روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در یارانه توسط فرمی[۵]پیشنهاد شد. بعد از فرمی و همانطور که گفته شد، بعد از

---

[۱] Buffon
[۲] Metropolis
[۳] Neumann
[۴] Ulam
[۵] Fermi

نخستین شبیه‌سازی متروپولیس و همکارانش در سال ۱۹۵۲، آلدر[۱]و وین رایت[۲]متوجه این موضوع شدند که می‌توان از معادلات حرکت برای تعداد نسبتاً کمی از ذرات انتگرال‌گیری کرده و رفتار یک سامانه واقعی را با استفاده از شرایط مرزی متناوب بازسازی نمود. این امر منجر به اولین شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی برای سامانه‌های مولکولی شد. پیشرفت اصلی و برجستهٔ بعدی در سال ۱۹۶۴ زمانی محقق شد که رحمان[۳]که از ایشان با نام پدر دینامیک مولکولی یاد می‌شود، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی آرگون مایع را انجام داد. همینطور، در سال ۱۹۷۶، رحمان با کمک استیلین‌گر[۴]شبیه‌سازی دیگری در مورد آب در حالت مایع انجام دادند (آلدر و وین رایت، ۱۹۵۷؛ رحمان ۱۹۶۴؛ جلیلی، ۱۳۹۵؛ حسنی، ۱۳۹۵؛ پیریایی، ۱۳۹۰؛ جهانگیری، ۱۳۹۷).

۲-روش مونت کارلو

روش مونت کارلو در حوزه‌های علوم پایه و مهندسی، پنجرهٔ محاسباتی جدیدی در کنار روش‌های قطعی، گشوده است (وثوقی و همکاران، ۱۳۹۸). روش‌های مونت کارلو در حقیقت جنبهٔ کاربردی شبیه‌سازی تصادفی با توجه به گسترش و پیشرفت رایانه‌هاست. این روش‌ها مجموعه‌ای از الگوریتم‌های محاسباتی هستند که بر اساس نمونه‌گیری‌های تکرار شوندهٔ تصادفی محاسبه‌های‌شان را انجام می‌دهند. در ضمن، الگوریتم‌های رایانه‌ای بسیاری تحت عنوان نمونه‌برداری تصادفی در شبیه‌سازی‌های مونت کارلو توسعه داده شده و مورد استفاده قرار گرفته‌اند. اما عموماً عنوان مونت کارلو در شبیه‌سازی مولکولی به الگوریتم‌هایی اطلاق می‌شود که در آن‌ها از نمونه‌برداری با اهمیّت استفاده می‌شود.

از حیث روش، مونت کارلو یک روش اتفاقی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌باشد و براساس بررسی سطح انرژی توسط بررسی تصادفی هندسهٔ سامانه مولکولی استوار است (جلیلی، ۱۳۹۵؛ موسوی و ترک زاده، ۱۳۹۸؛ حسنی، ۱۳۹۵؛ غیاث، ۱۳۹۳؛ غلامی، ۱۳۹۶؛ وثوقی و همکاران، ۱۳۹۸؛ سلامی، ۱۳۸۲).

---

[۱] Alder
[۲] Wainwright
[۳] Rahman
[۴] Stillinger

امروزه استفاده از روش‌های شبیه‌سازی مونت کارلو کاربرد و تنوع گسترده‌ای یافته و تحقیقات زیادی توسط پژوهشگران سراسر دنیا در زمینه‌های مختلف مونت کارلو انجام شده است. ازهمین‌رو، این روش در فیزیک و شیمی محاسباتی، بیولوژی، اقتصاد، کامپیوتر و مهندسی هسته‌ای و... کاربرد فراوانی دارد. از طرفی، در یک تقسیم‌بندی عمومی و نه چندان دقیق عمده‌ترین زمینه‌های کاربرد این روش را می‌توان در موارد زیر نام برد:

تشریح رفتار زنجیرهای منفرد و مجموعه در حلال‌های مختلف، تشریح فرآیندهای هم‌زمان پلیمرشدن و انتقال فازی و تشکیل سیستم‌های خود ساختار، تشریح سیستم‌های پلیمرشدن امولسیونی و پیش توزیع اندازه ذرات و نیز از این روش کارآمد در مواردی مانند محاسبه ارزش سرمایه شرکت‌ها، پیش‌بینی وضعیت سهام و تدوین موسیقی استفاده می‌شود (داو تن هان[۱] و هال،[۲] ۱۹۹۴؛ دارچ[۳] و اشمیت ناآکه،[۴] ۲۰۰۵؛ بدیعیان باغسیاهی، ۱۳۹۱؛ غیاث، ۱۳۹۳؛ هریسون پل، ۱۳۹۶).

۳-روش دینامیک مولکولی

دینامیک مولکولی، روشی در انجام مدل‌سازی میکروسکوپی در مقیاس اتمی و مولکولی و شبیه‌سازی رایانه‌ای است که مبتنی بر پایهٔ مکانیک آماری می‌باشد (عزیزی و دیگران، ۱۳۹۱؛ روحی زاده و دایر، ۱۳۹۲). هم‌چنین، این روش برای شبیه‌سازی رفتار ترمودینامیکی مواد در سه فاز جامد، مایع و گاز با استفاده از نیرو، سرعت و مکان ذرات به حساب می‌آید که در بین این عوامل، مهم‌ترین عامل نیرو است (اخلاصی، ۱۳۹۵).

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی دانشی است که از ترکیب علوم زیستی، شیمی، روش‌ها و الگوریتم‌های متنوع رایانه ای-ریاضیاتی استفاده می‌کند و در حقیقت روشی مناسب برای مطالعهٔ خواص ماکروسکوپی و ترمودینامیکی سامانه‌ها بر اساس خواص مولکولی و میکروسکوپی فراهم می‌کند و نیز برای کمیّت‌هایی که دستیابی به مقادیر تجربی آن‌ها در شرایط غیر متعارف سخت است، می‌توان از تکنیک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده کرد. این تکنیک بسیار قوی برای صورت مسألهٔ فیزیکی سامانه‌های چند پیکره (سامانه‌های میکروسکوپی، بر پایه مکانیک کوانتوم، که اجزاء زیادی دارند و بین اجزاء میان‌کنش وجود دارد) راه حل ارائه می‌دهد. تاکنون راه حل جایگزیی

---

[۱] Dautenhahn
[۲] Hall
[۳] Drache
[۴] Schmidt-Naake

برای پاسخ به این حجم از مسائل وجود نداشته است. به طور کلی، روش دینامیک مولکولی هم در مسائل پایه و هم کاربردی جایگاه خود را تثبیت کرده است. علاوه بر این، در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی، رفتار دینامیکی واقعی سامانه محاسبه می‌شود که با استفاده از آن می‌توان میانگین زمانی خواص سامانه را محاسبه کرد. با اعمال معادلات حرکت نیوتن، مجموعه‌ای از موقعیت‌های اتمی به صورت پی در پی به دست می‌آید (وجود، ۱۴۰۰؛ راپاپورت[۱] ۲۰۰۴؛ هیل[۲] ۱۹۹۲؛ فروتن، خیامیان و فدائی‌نائینی، ۱۴۰۰؛ جلیلی، ۱۳۹۵؛ عزیزی و دیگران، ۱۳۹۱؛ انصاری خلخالی و آجری، ۱۳۹۴). سامانه‌ای با N ذره را در نظر بگیرید به گونه‌ای که موقعیت همهٔ ذرات، سرعت آن‌ها، اندازه و جهت نیروهای بین آن‌ها را در لحظه t_0بدانیم. با حل معادلات حرکت نیوتن می‌توانیم موقعیت و سرعت همهٔ ذرات را در زمان t_1 که کمی بعد از t_0 هست، به دست آوریم. حال، اگر این روند را برای زمان قابل توجهی تکرار کنیم و ادامه دهیم، در واقع رفتار سامانه را مورد بررسی قرار داده‌ایم. این فرآیند، یک روش شبیه‌سازی موسوم به دینامیک مولکولی است. در شبیه‌سازی‌های دنیامیک مولکولی پیکربندی‌های پی در پی سامانه با انتگرال‌گیری از قوانین حرکت نیوتن به دست می‌آید (موسوی و ترک زاده، ۱۳۹۸).

به طور کلی هدف از انجام محاسبات دینامیک مولکولی حل معادلات حرکت برای مولکول‌های شیمیایی و به دست آوردن موقعیت و سرعت اتم‌های آن در هر مقطع زمانی نسبت به مرحلهٔ قبل است. در این میان وجود رایانه‌های پیشرفته و سریع کمک مؤثر و تحسین برانگیزی در انجام این محاسبات حجیم ایفا نموده است. مزیت عمدهٔ روش‌های دینامیک مولکولی این است که در آن‌ها از محاسبات ساده‌تر و با حجم کمتر استفاده می‌شود، لذا به کمک این روش می‌توان سامانه‌های بزرگ‌تر و واقعی‌تر را که با روش‌های دیگر هزینهٔ محاسباتی بسیار بالاتری دارند مطالعه نمود (روحی زاده و دایر، ۱۳۹۲؛ محمدی‌خشوئی، ۱۳۹۸). از طرفی، روش دینامیک مولکولی بسیار شبیه به یک آزمایش تجربی است. در یک آزمایش نخست نمونه‌ای از مادهٔ مورد نظر آماده می‌شود، سپس با استفاده از یک دستگاه اندازه‌گیری خواص مورد نظر آن در طول دوره‌های زمانی معین اندازه‌گیری می‌شود. در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نیز مسیر مشابهی دنبال می‌شود. ابتدا نمونهٔ اولیه تهیه شده یا به زبان شبیه‌سازی مکان‌ها و سرعت‌های اولیهٔ ذرات سامانه دنبال می‌شود. سپس مدل پتانسیلی برای محاسبهٔ نیروی وارد بر ذرات موجود در سامانهٔ N ذره‌ای انتخاب می‌شود. پس از حل معادلات حرکت (که در

[۱] Rapaport
[۲] Haile

مورد سامانه‌های کلاسیکی می‌تواند معادلهٔ نیوتن باشد) مکان‌ها و سرعت‌های جدید سامانه محاسبه می‌شود و این کار تا زمانی ادامه دارد که سامانه به تعادل برسد. پس از رسیدن به تعادل، اندازه‌گیری بر روی سامانه انجام می‌شود (هیل، ۱۹۹۲؛ وجود، ۱۴۰۰؛ بصیری، ۱۳۹۴).

بدهی است که روش دینامیک مولکولی به مانند هر روش دیگری دارای مزایا و معایبی است که در جدول زیر به تعدادی از آن‌ها اشاره شده است.

جدول ۱- مزایا و معایب روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

مزایا	معایب
امکان دسترسی به سامانه در هر لحظه و نیز، امکان استخراج داده‌ها و نتایج در هر لحظهٔ دلخواه. علاوه بر این، امکان تغییر دادن متغیرهای ترمودینامیکی نظیر دما، فشار، حجم در هر لحظه.	استفاده از مکانیک کلاسیک در شبیه سازی
پیش‌بینی چگونگی انجام پدیده‌های غیر قابل دسترس در آزمایشگاه در مقیاس مولکولی	کمتر بودن تعداد اتم‌ها یا مولکول‌های موجود در جعبه شبیه‌سازی نسبت به نمونه‌های واقعی
امکان انجام شبیه‌سازی در شرایطی که در آزمایشگاه به سختی به دست می‌آید مثل فشار، چگالی و دماهای بسیار بالا یا بسیار کم و نیز دسترسی به محدوده دما و فشاری که در آزمایشگاه فراهم کردن آن‌ها مشکل است.	محدودیت در زمان شبیه‌سازی (کل زمان شبیه‌سازی در چند نانوثانیه از کل زمان تعادل خواهد بود)
امکان ایجاد شرایطی با فشار و دماهای خیلی بالا یا بسیار پایین که در حالت تجربی و آزمایشگاهی دستیابی به آن‌ها ناممکن یا خطرناک است.	پایین بودن سرعت یارانه‌ها
داشتن هزینه پایین، نسبت پژوهش‌هایی که در آزمایشگاه صورت می‌گیرد (در نتیجه مقرون به صرفه است).	محدود بودن حافظهٔ یارانه‌ها

نهایتاً، روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یکی از ابزارهای کارآمد برای مطالعهٔ نظری مولکول‌های حیاتی در نظر گرفته می‌شود و نیز امروزه برای تحقیق و پژوهش در مورد دینامیک، ساختار، ترمودینامیک مولکول‌های حیاتی و ترکیبات آن‌ها از این روش استفاده می‌شود (وجود، ۱۴۰۰؛ وجود و همکاران، ۱۳۹۹). فراتر از این، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ابزاری بسیار سودمند

در علوم مختلف، نظیر شیمی، داروسازی، فیزیک، بیوشیمی، علم مواد، علوم مهندسی به شمار می‌آید (حسنی، ۱۳۹۸؛ وثوقی، شهابی نژاد و ساحلی، ۱۳۹۸؛ بدیعیان باغسیاهی، ۱۳۹۱؛ گوهرشادی و همکاران، ۱۳۸۷).

نتیجه‌گیری

به طور کلی، نتیجه و ره‌آورد مقاله مروری حاضر حکایت از آن دارد که استفاده از روش شبیه‌سازی تصادفی یا مونت کارلو و روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به عنوان دو روش محاسباتی سودمند و کارا در کنار روش تجربی (آزمایشگاهی)، برای انجام مطالعات و تحقیقات در زمینهٔ دانش شیمی بسیار حائز اهمیت و مهم ارزیابی می‌شوند. همچنین امروزه افزایش چشمگیر تعداد مقالات علمی منتشر شده در داخل و خارج کشور با محوریت آن دو روش، پیشرفت‌های چشمگیری را در زمینه شیمی محاسباتی حاصل کرده است.

منابع

اخلاصی، مهسا (۱۳۹۵). شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مایع یونی رفتار جذب هلیم در نانولوله‌های کربنی و سلولزی. پایان‌نامه کارشناسی ارشد. گروه فیزیک. دانشکده علوم. دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی.

انصاری خلخالی، رضا و آجری، شهرام (۱۳۹۴). *شبیه‌سازی دینامیک مولکولی*. رشت: انتشارات دانشگاه گیلان.

بدیعیان باغسیاهی، فاطمه (۱۳۹۱). شبیه‌سازی ترابرد الکترون در نیمرسانای اکسید روی به روش مونت کارلو. پایان‌نامه دکترا. گروه فیزیک. دانشکده علوم. دانشگاه فردوسی مشهد.

بصیری، زهره (۱۳۹۴). داکینگ و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فیستین و کامپفرول با آلبومین سر انسانی. پایان‌نامه کارشناسی ارشد. گروه شیمی. دانشکده علوم. دانشگاه اصفهان.

پیریایی، دانیال (۱۳۹۰). شبیه‌سازی دینامیک مولکولی خواص گرمایی آلیاژ PtNi. پایان‌نامه کارشناسی ارشد. گروه فیزیک. دانشکده علوم. دانشگاه گیلان.

جلیلی، سیف‌اله (۱۳۹۵). *شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای. تهران*: انتشارات دانشگاه خواجه نصیر الدین طوسی.

جوان نیکخواه، سوسن و مقبلی، محمد رضا (۱۳۹۶). کاربرد شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در سامانه‌های پلیمری. فصلنامه پژوهش و توسعه فناوری پلیمر ایران، ۲(۵)، ۵-۱۵.

جهانگیری، رامین (۱۳۹۷). *شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ضخامت لایه نانویی ایجادشده در برخورد قطره آب با سطح جامد*. تهران: انتشارات آریا دانش.

حسنی، عطیه (۱۳۹۵). شبیه‌سازی مولکولی فرآیند جذب متان در نانوساختارهای گرافن و پیلاردگرافن. پایان نامه دکترا. گروه مهندسی شیمی. دانشکده مهندسی. دانشگاه فردوسی مشهد.

روحی زاده، راضیه و دایر، محمد رضا (۱۳۹۲). *دینامیک مولکولی پیشرفته*. تهران: انتشارات اندیشه‌سرا.

سلامی، امیر بهداد (۱۳۸۲). مروری بر روش شبیه‌سازی مونت کارلو. پژوهشنامه اقتصادی، ۳(۸)، ۱۳۸-۱۱۷.

شمس‌آبادی، رضا، ذوالجلالی‌مقدم، سیدحمید و ریاضی، رضا (۱۳۹۹). *اصول و مبانی مونت کارلو و کاربرد آن در ترابرد ذرات*. تهران: انتشارات دانشگاه علوم پزشکی ایران.

شیرانی ایل‌بیگی، حسین و غلام‌پور، فرهاد (۱۳۹۷). *شیمی محاسباتی: اصول کلی، روش‌ها و نرم‌افزارها*. تهران: انتشارات کاروان ایرانگردان.

عزیزی، زهرا، ملا امین، فاطمه و منجمی، مجید (۱۳۹۱). *شبیه‌سازی دینامیک مولکولی: کاربرد روش‌های عددی در مدل‌سازی*. تهران: انتشارات اندیشه سرا.

غیاث، مجید (۱۳۹۳). مقدمه‌ای بر روش شبیه‌سازی مونت کارنو. فصلنامه علمی- ترویجی بسپارش، ۴(۱)، ۷۷-۶۷.

غلامی، محمد (۱۳۹۶). مطالعهٔ نظری جذب و جداسازی هیدرو کربن‌های دو و سه کربنی بر روی چار چوب‌های فلز- آلی هم ساختار و هم شبکه‌ای با mof-74 با استفاده از روش‌های از اساس و شبیه‌سازی مولکولی. پایان‌نامه دکترا. گروه شیمی. دانشکده شیمی. دانشگاه مازندران.

غریبی، مهتاب و سادات مطلبی‌پور، مریم (۱۳۹۲). *مبانی و کاربردهای شیمی محاسباتی همراه با آموزش نرم‌افزارهای: Gaussian .gauss view, hyperChem & AIM*. تهران: انتشارات اندیشه‌سرا.

فروتن، معصومه، خیامیان، محمدعلی و فدائی‌نائینی، وحید (۱۴۰۰). *شبیه‌سازی دینامیک مولکولی: از مبانی تا اجرا*. تهران: انتشارات دانشگاه صنعتی شریف.

گوهرشادی، الهه، موسوی، مجید و موسوی، فاطمه (۱۳۸۷). *مبانی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی*. مشهد: انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد.

میر محمدی، سید امین و بحری لاله، نعیمه (۱۳۹۹). کاربرد شبیه‌سازی رایانه‌ای در کاتالیزگرهای پلی اولفینی از نوع زیگلر- ناتا. فصلنامه علمی بسپارش، ۱۰(۱)، ۵۹-۶۹.

موسوی هفتادر، سیدعلی (۱۳۹۶). مطالعه نفوذ و جذب بنزن در نانو حفره‌های HKUST-1 به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی. پایان نامه کارشناسی ارشد. گروه شیمی. دانشکده علوم. دانشگاه یزد.

موسوی، مجید و ترک زاده، مهرانگیز (۱۳۹۸). شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با نرم افزار متریالز استودید. تهران: انتشارات مؤسسه دیباگران.

محمدی‌خشوئی، مریم (۱۳۹۸). شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانوکامپوزیت‌های پلیمری. تهران: انتشارات ترخون.

وجود، آرش (۱۴۰۰). بررسی قابلیت افزایش گزینش‌پذیری واکنش فورموس برای تولید کربوهیدارت‌ها با روشهای تجربی و محاسبات دینامیک مولکولی. پایان‌نامه دکترا. گروه شیمی. دانشکده علوم. دانشگاه آزاد اسلامی واحد اردبیل.

وثوقی، ناصر، شهابی نژاد، هادی و ساحلی، فرشته (۱۳۹۸). *کاربرد روش مونت کارلو در محاسبات هسته‌ای*. تهران: انتشارات صانعی شهمیرزادی.

وجود و همکاران (۱۳۹۹). شیمی پیش‌حیاتی: از بررسی واکنش فورموس برای تولید قندها تا کاتالیزورهای مورد استفاده. اردبیل: انتشارات جهاد دانشگاهی اردبیل.

هریسون، پل (۱۳۹۶). مقدمه‌ای بر روش‌های محاسباتی در فیزیک، شیمی و زیست‌شناسی. مترجم: رضا رجائی‌خراسانی. انتشارات: پژوهشی نوآوران شریف.

Alder B., Wainwright T. (1957). Phase transition for a hard sphere system. *Journal of Chemical Physics*, 27(5), 1208-0.

Drache M., Schmidt-Naake G. (2005). Modeling RAFT polymerization kinetics via monte carlo methods. *Polymer*, 46(19), 8483-8493.

Dautenhahn J., Hall C. K. (1994). Monte carlo simulation of off-lattice polymer chains: effective pair potentials in dilute solution. *Macromolecules*, 27(19), 5399-5412

Haile, J.M. (1992). *Molecular dynamics simulation: elementary metho*ds. 1st ed. New York: Wiley.

Metropolis N., Ulam S. (1949). The monte carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, 44(247), 335-341.

Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H. (1953). Equation of state calculations by fast computing machines. *Journal of Chemical Physics*, 21(6), 1087-1092.

Rahman, A. (1964). Correlations in the motion of atoms in liquid argon. *Journal of Chemical Physics*, 136(2A), 405-411.

Rapaport, D. C. (2004). *The art of molecular dynamics simulation*. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press.

Skoulidas, A. (2004). Molecular dynamics simulations of gas diffusion in metal−organic frameworks: argon in CuBTC. *Journal of the American Chemical Society*, 126(5), 1356-1357.

Review article

Research in Chemistry Education, Vol 3, No 3, 1-14

Research in Chemistry Education

http: //chemedu.cfu.ac.ir

A Review of Simulation Methods in Molecular Scale: Monte Carlo Method and Molecular Dynamics Method

Arash Vojood [1*], Nayer Mohammadian Tarighi [2]

[1] *Young Researchers and Elite Club, Ardabil Branch, Islamic Azad University, Ardabil, Iran*

[2] *Department of Chemistry, Ardabil Branch, Islamic Azad University, Ardabil, Iran.*

Abstract

The significance of computation as a comprehensive and powerful tool in the basic sciences, especially physics and chemistry, has provided a platform for research interests and insights in this branch of science (computational chemistry). On the other hand, human has always encountered nature through theoretical or experimental studies. With the introduction and development of computers in the last four decades, however, scientists can precisely explore various processes through computer-aided simulations and find the answer to their questions in a far simpler way. In this regard, the present article is aimed to provide a summary review of computational chemistry which is opposite the theoretical and non-computational chemistry. By reviewing the molecular simulation methods (Monte Carlo and molecular dynamics) this paper tries to offer a comprehensive picture of these concepts. The library method was also employed to collect the data.

Keywords: Chemistry education, Simulation, Computational Chemistry, Monte Carlo, Molecular Dynamics.

[*]Corresponding Author: (✉ voojod.a2012@gmail.com)