شبیه‌سازی دینامیک مولکولی رفتار گاز میهمان در حفرات چارچوب فلز-آلی

چکیده

در دهه‌های اخیر، مواد متخلخل، به ویژه چارچوب‌های فلز-آلی (MOFs) به عنوان یکی از سامانه‌های مهم در بسیاری از زمینه‌های علمی از جمله فیزیک، شیمی و علم مواد، علاقه‌مندی قابل توجهی به خود جلب کرده‌اند. با داشتن کاربردهای گسترده در زمینه‌هایی نظیر جذب، جداسازی، پزشکی، بیوپزشکی و کاتالیست، مواد متخلخل نقش مهمی در فعالیت‌های روزمره‌ی ما دارند. در این بخش از دوره‌ی آموزشی، به بررسی خواص دینامیکی و ساختاری مولکول‌های میهمان در داخل حفرات چارچوب فلز-آلی با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پرداخته خواهد شد. در بخش نظری به معرفی چارچوب‌های فلز- آلی و خواص و کاربردهای آن‌ها در جذب و انتقال مولکولهای میهمان اشاره خواهد شد. در بخش عملی ابتدا به بررسی کلی ساختار فایل‌های ورودی بسته‌ی شبیه سازی دینامیک مولکولی پرداخته خواهد شد. در ادامه تهیه‌ی ساختارهای اولیه‌ی اجزای سامانه مورد مطالعه، میدان نیروی مورد استفاده و پارامترهای مورد نظر، بهینه‌سازی سامانه، به تعادل‌رسانی و تولید خواص و در نهایت تجزیه و تحلیل خروجی شبیه سازی دنبال خواهد شد. انتظار می‌رود علاقه‌مندان به شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در پایان بخش عملی بتوانند سامانه‌ی مواد متخلخل را شبیه‌سازی کرده و خواص دینامیکی و ساختاری مولکول‌های میهمان را در داخل حفرات چارچوب فلز-آلی تجزیه و تحلیل کنند.