

原子操控虛擬平台之研究

劉國祥、陳俊達

E-mail: 9405660@mail.dyu.edu.tw

摘要

中文摘要 本論文主要目的是以分子動力學理論為基礎，探討利用掃描穿隧顯微鏡移動原子之技術，據以建構原子操控虛擬平台，其目的是希望可在不受真實環境限制之下，提供相關教學及研究之參考。文中所建構之原子操控虛擬平台是以分子動力學為基礎，並根據相關文獻之理論與實驗數據，建立操控原子移動的相關數學模式。再利用Borland C++ Builder將所建立之數學模式，撰寫成原子之運動動態方程式，以模擬原子移動特性。而原子模型則是用TrueSpace及Pro/E等CAD軟體來製作。最後透過虛擬實境模擬軟體Vimtek EON Studio將其整合為一完整之原子操控虛擬平台系統。所建構之原子操控虛擬平台，讓使用者可以利用鍵盤上的操控鍵，操控虛擬原子之移動，達到操控訓練與可視化之目的。關鍵字：虛擬實境，分子動力學，掃描穿隧顯微鏡

關鍵詞：虛擬實境；分子動力學；掃描穿隧顯微鏡

目錄

目錄 封面內頁 簽名頁 授權書.....	iii
中文摘要.....	iii
英文摘要.....	vi
誌謝.....	vi
目錄.....	vii
圖目錄.....	viii
表目錄.....	x
符號說明.....	xiii
第一章 緒論.....	xiv
1.1 研究內容.....	1
1.2 文獻回顧.....	1
1.2.1 分子動力學理論文獻回顧.....	2
1.2.2 虛擬實境文獻回顧.....	3
1.2.3 掃描探針顯微鏡文獻回顧.....	4
1.3 論文架構.....	5
第二章 基本理論分析.....	6
2.1 分子動力學基本原理.....	6
2.1.1 分子間作用力與勢能函數.....	7
2.1.2 截斷勢能.....	12
2.1.3 無因次化.....	13
2.2 掃描穿隧顯微鏡原理.....	15
2.2.1 儀器操作理論.....	16
2.2.2 儀器的架構.....	19
第三章 原子操控虛擬平台之模擬結果.....	23
3.1 單原子之操控模擬.....	23
3.2 利用推的方式操控原子之模擬結果.....	28
3.3 利用拉的方式操控原子之模擬結果.....	44
第四章 原子操控虛擬平台之架構.....	58
4.1 虛擬實境系統簡介.....	58
4.1.1 虛擬實境基本分類.....	60
4.2 原子虛擬操控平台系統軟體架構.....	61
4.2.1 Vimtek-EON Studio.....	61
4.2.2 虛擬操控平台之設計.....	67
4.3 實際場景模型.....	69
4.4 操控模擬結果.....	71
第五章 結論與定義.....	74
5.1 結論.....	74
5.2 建議.....	74
參考文獻.....	75

參考文獻

- 參考文獻 [1]J. H. Irving, and J. G. Kirkwood, " The statistical mechanical theory of transport properties. IV. The equations of hydrodynamics ", J. Chem. Phys., Vol. 18, pp. 817-823, (1950).
- [2]N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. h. Teller, and E. Teller, " Equation of State Calculations by Fast Computing Machines, " J. Chem. Phys., Vol. 21, pp. 1087-92, (1953).
- [3]M. P. Allen and D. J. Tildesley, " Computer Simulation of Liquids, " Oxford University Press, New York, (1987).
- [4]B. J. Alder and T. E. Wainwright, " Phase Transition of A Hard Sphere System, " J. Chem. Phys., Vol. 27, pp.1208-9, (1957).
- [5]B. J. Alder and T. E. Wainwright, " Studies in Molecular Dynamics. I. General Method, " J. Chem. Phys., Vol. 31, pp.459-466, (1959).
- [6]L. A. Girifalco and V. G. Weizer, " Application of the Morse Potential Function to Cubic Metals, " Phys. Rev., Vol. 114, No. 3, (1959).
- [7]A. Rahman, " Correlation in the Motions of Atoms in Liquid Atom, " Phys. Rev., 136A, pp.405-11, (1964).
- [8]L. Verlet, " Computer ' Experiments ' on Classical Fluids II, Equilibrium Correlation Function, " Phys. Rev., Vol. 165, pp. 201-14, (1968).
- [9]G. S. Grest, B. DunWeg and K. Kremer, " Vectorized Link Cell Fortran Code for Molecular Dynamics Simulations for a Large Number of

Particles, " Comput. Phys. Comm. Vol. 55(3), pp.269-285, (1989).

[10]吳駿翔, " 戰車操控訓練模擬器之虛擬實境系統研究, " 大葉大學自動化研究所碩士論文, (2002).

[11]蔡馥聲, " 虛擬實境遠端監控抽水站, " 南台科技大學電機工程系碩士班碩士論文, (2001).

[12]Canon Communications LLC , <http://www.cancom.com>.

[13]黃毅偉, " 車輛動態特性分析及虛擬實境技術應用於汽車駕駛模擬器之研製, " 國立彰化師範大學工業教育學系碩士班碩士論文, (2000).

[14]潘采穎, " 電子商務平台之互動虛擬化介面研究, " 國立成功大學工業設計學系碩博士班碩士論文, (2002).

[15]陳世峰, " 虛擬實境在測量實習教學之應用, " 中華大學土木工程學系碩士班碩士論文, (2003).

[16]黃亮璋, " 射控系統之虛擬實境模擬, " 國立中央大學/機械工程研究所碩士班碩士論文, (1997).

[17]Young, R., Ward, J. and Scire, F., Review of Scientific Instruments, 43, pp. 999-1011, (1972).

[18]D. W. Abraham, H. J. Mamin, E. Ganz, and J. Clarke, IBM J. Res. Dev. 30, pp. 492, (1986).

[19]R. J. Arsenault and J. R. Beeler, " Computer Simulation in Material Science, " Asm. International, USA, (1988).

[20]R. Smith and M. Jakas, " Atomic and Ion Collisions in Solids and At Surfaces: Theory, Simulation and Applications, " Cambridge University Press, USA, (1977).

[21]方俊民, 何東英, 徐希白, 曾國輝, " 有機化學, " PP. 1-10, (2003).

[22]J. E. Lennard-Jones, " The Determination of Molecular Fields. I, " Proc. Roy. Soc. (Lond.), 106A, pp. 441, (1924).

[23]L. A. Girifalco and V. G. Weizer, " Application of the Morse Potential Function to Cubic Metals, " Phys. Rev., Vol. 114, No. 3, (1959).

[24]C. J. Chen, " Introduction to Scanning Tunneling Microscopy , Oxford : University Press, " (1993).

[25]J. M. Haile, " Molecular Dynamics Simulation: elementary method, " Wiley, New York, (1992).

[26]J. M. Haile, " Molecular Dynamics Simulation: elementary method, " Wiley, New York, (1992).

[27]黃英碩,張嘉升, " 掃描穿遂顯微術, " 科儀新知, 21卷第5期, (2000).

[28]J. Chen, Introduction to Scanning Tunneling Microscopy, New York: Oxford Univ. Press, (1993).

[29] <http://www.local.frs.riken.go.jp/txt/member/t-arai.html> [30]取自美國國家科技委員會, " 奈米科技報導 " .

[31]牟中原, " 科學發展, " 373期, pp.45, (2004).

[32] <http://www.qsl.net/vr2xbp/nano/nanotech-04.html> [33]羅榮立, " 掃描探針為影術之機制介紹, " 科儀新知, 21卷第5期, (2000).

[34]Xavier Bouju, Christian Joachim, and Christian Girard, " Single-atom motion during a lateral STM manipulation, " Phy. Rev. B, Vol. 59, Num. 12, (1999).

[35]瓊特擬真科技, " EON Studio 3D虛擬實境整合互動網頁設計 " , pp. 3-6~3-7, (2002).

[36]EON Studio User Guide.

[37]瓊特擬真科技, " EON Studio 3D虛擬實境整合互動網頁設計 " , pp. 4-2~4-14, (2002).