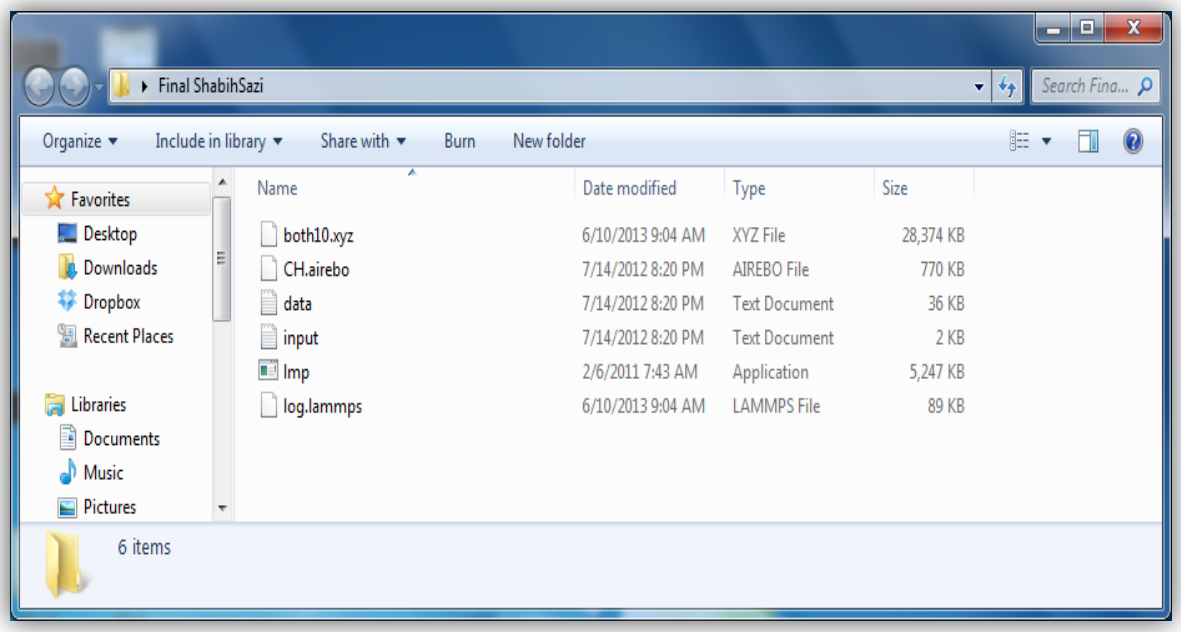
به نام خدا

در این مقاله قصد داریم با شما به صورت قدم به قدم اولین شبیه سازی رو در دنیای فناوری نانو اجرا کنیم و سعی کنیم که اولین تجربه رو در این زمینه بدست بیاریم و شیوه کار با نرم افزارهای LAMMPS و VMD رو یاد بگیریم . پس بسم الله ...

✓ **اولین گام : در این قدم شما باید فایل های مورد نیاز رو برای اجرای این شبیه سازی را دانلود نمایید (لینک دانلود این فایل ها کنار لینک دانلود همین مقاله است) و با این فایل ها آشنا بشین .تصویر زیر ارائه دهنده ی لیست فایل های مورد نیاز شبیه سازی است . و جدول زیر ارائه دهنده ی توضیحات فایل هاست .**



نام فایل	توضیح فایل
Both10.xyz	فایل نهایی خروجی لمپس و مورد نیاز برای ویژوالیشن نهایی (تولید تصاویر گرافیکی متحرک)
CH.airebo	فایل تعریف نیری بین اتمی اتم های CH
Data.txt	فایل ورودی نرم افزار لمپس که در آن اتم های مورد استفاده در شبیه سازی تعریف شده است
Input.txt	فایل کدهای ورودی نرم افزار لمپس که تنه ی اصلی کار شبیه سازی را انجام می دهد
Lmp.exe	فایل اجرایی نرم افزار لمپس
Log.lammps	فایل خروجی log که اطلاعات خروجی نرم افزار لمپس در آن ثبت می شود

WWW.1PAPER.BLOG.IR

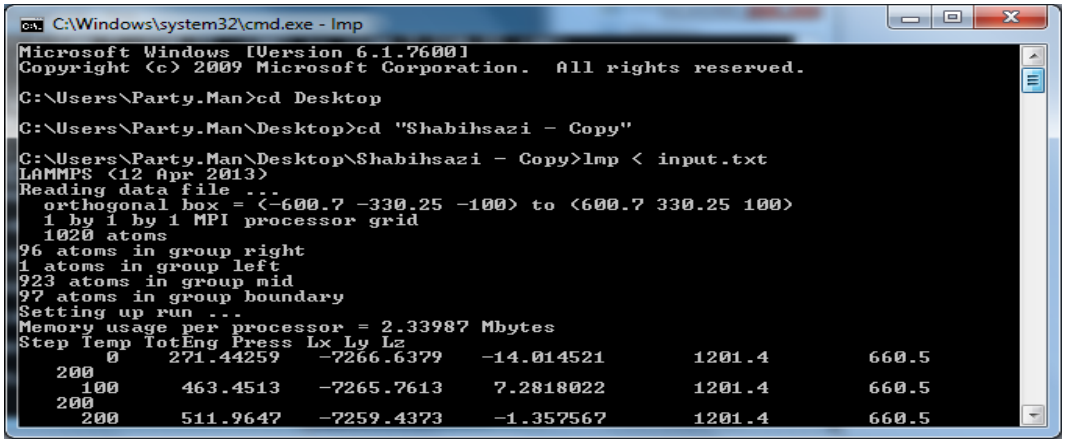
نکته مهم : لینک فایل هایی که برای شبیه سازی مورد نیاز است به صورت فایل زیپ (.zip) ذخیره شده است که برای استفاده راحت تر در مراحل بعد باید آن ها را از حالت زیپ خارج نمود . اگر در این مورد دچار مشکل شدید در وبلاگ یا فروم مطرح کنید تا پاسخ بدم .

✓ **دومین گام :** پس از آماده شدن فایل ها و قرار دادن آن ها در یک پوشه به مرحله اصلی کار یعنی اجرای نرم افزار لمپس و انجام محاسبات شبیه سازی می رسیم . به دلیل این که در دوره عملی بچه در این مرحله خیلی گیر داشتن ترجیح دادم برای این مرحله یک ویدئو ضبط کنم که کاملا واضح مراحل در اون انجام بشه .

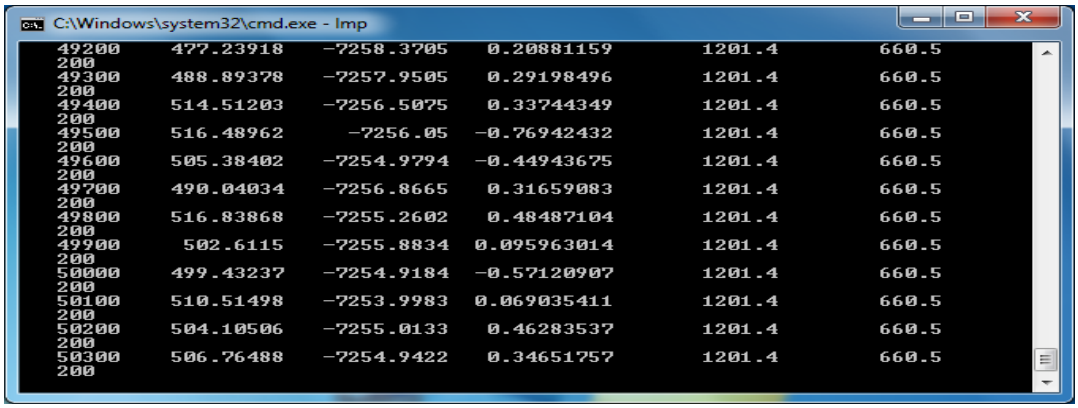
لینک ویدئو آموزشی اولین تجربه شبیه سازی با لمپس

لینک فایل متنی توضیحات ویدئو (داخل ویدئو هم مرورش می کنید)

در این قسمت هم سه تا عکس میزارم که عکس اول آغاز شبیه سازی ، عکس دوم اواسط شبیه سازی و عکس سوم هم پایان کار محاسباته .

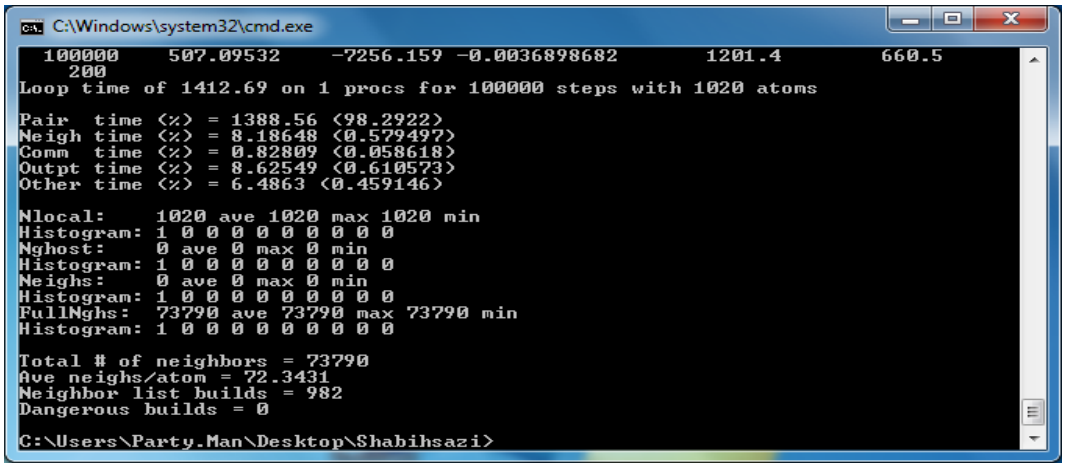


عکس (۱) – شروع محاسبات



عکس (۲) – اواسط محاسبات

WWW.1PAPER.BLOG.IR



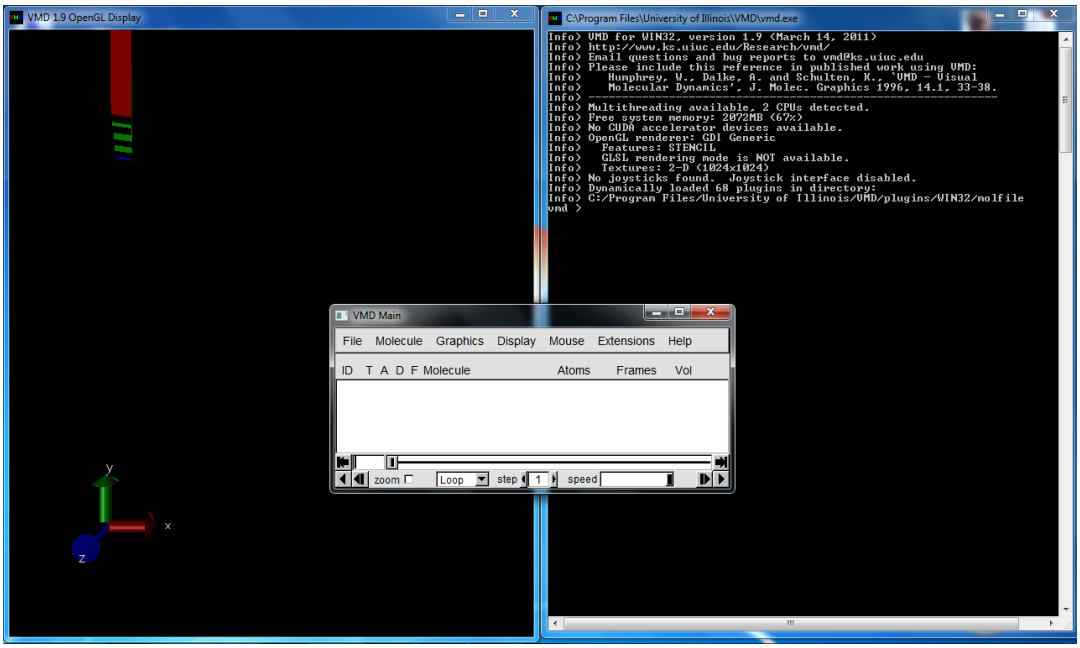
عکس (۳) – پایان محاسبات و خلاصه اطلاعات شبیه سازی

پس از دیدن فیلم و آماده شدن فایل های خروجی نرم افزار لمپس حالا وقتش شده که به گام بعد بریم .

✓ **سومین گام : در این گام با استفاده از نرم افزار VMD کار Visualation رو پیگیری می کنیم . یعنی فایل خروجی شبیه سازی که پسوندش XYZ هستش (در این شبیه سازی اسمش Both10.xyz) رو با نرم افزار VMD اجرا می کنیم و تصاویر گرافیکی متحرک شبیه سازی دینامیک مولکولی رو می بینیم .**

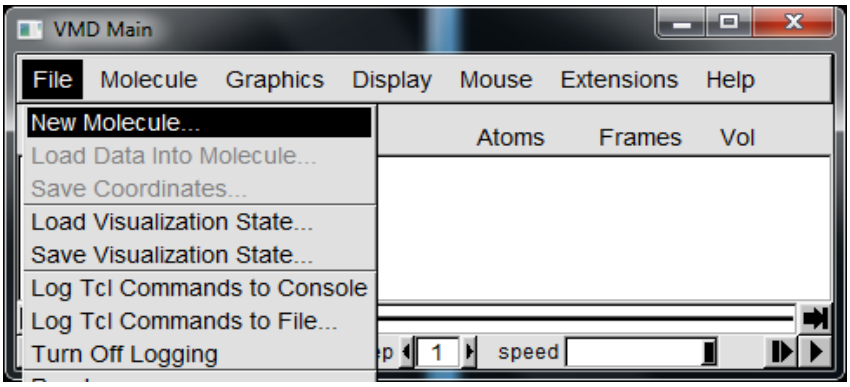
در ابتدا باید نرم افزار VMD رو دانلود کنید که لینکش کنار لینک دانلود همین فایله .

بعد از نصب فایل نرم افزار VMD (که البته خیلی سخت نیست فقط کافی چند بار روی Next کلیک کنید و منتظر باشید که نصب شه) از منوی Start ویندوز نرم افزار رو پیدا کنید و بازش کنید . بعد باز کردن باید سه تا پنجره شبیه تصویر زیر ببنید .

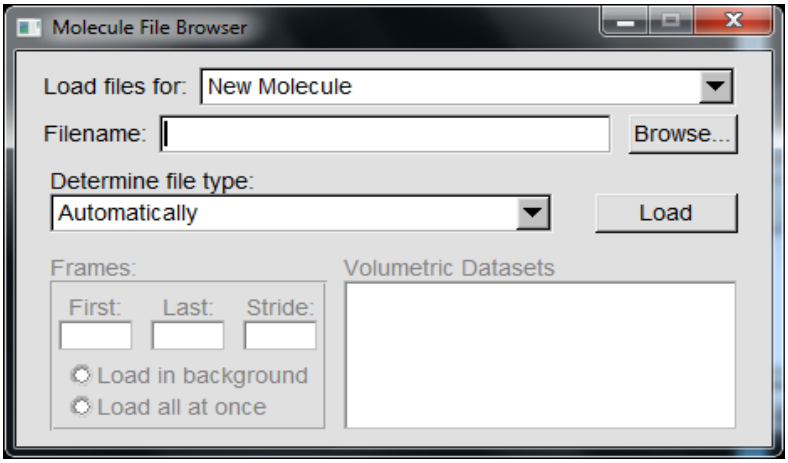


WWW.1PAPER.BLOG.IR

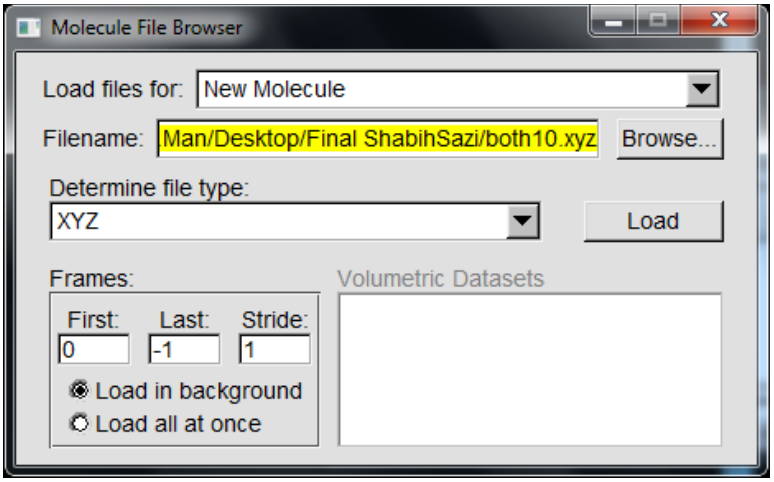
بعد از باز شدن نرم افزار با باز کردن منوی File و انتخاب گزینه ...New Molecule ، مانند تصویر زیر :



پنجره ای مانند تصویر زیر باز خواهد شد .

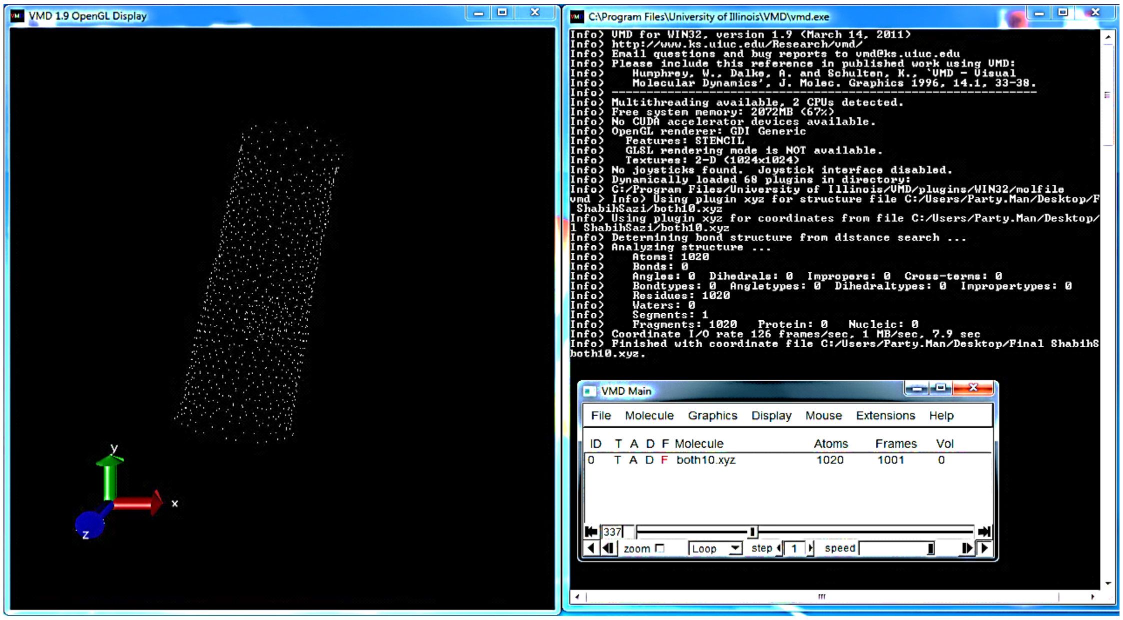


حالا باید در پنجره باز شده که اسمش Molecule File Browser ، با کلیک روی دکمه ...Browse و رفتن به آدرس فایل های پروژه شبیه سازی ، فایل Both10.xyz رو انتخاب کنیم . مثل شکل زیر :



WWW.1PAPER.BLOG.IR

بعد از انتخاب کردن مولکول حالا روی دکمه Load کلیک می کنیم و فایل گرافیکی شبیه سازی یک بار اجرا خواهد شد. که نتیجه کار مثل تصویر زیر خواهد بود :



بهتون تبریک می گم شما اولین شبیه سازی دینامیک مولکولی تون رو به پایان رسوندین . حالا می تونید با دستکاری کردن منوها و مطالعه داکیومنت های نرم افزار های LAMMPS و VMD اطلاعات بیشتری در مورد فرایند های اجرا شده در این آموزش بدست بیارین .

لینک داکیومنت های نرم افزار لمپس کنار لینک دانلود همین فایل گذاشته شده .

نکته مهم : اینو می خواستم اول آموزش بگم ولی دوست داشتم سورپریزتون کنم . این پروژه ای که اجرا کردیم یه آزمایش جالب از ویژگی های منحصر به فرد نانولوله کربنیه بدین صورت که اگر یه نانو لوله رو بین دو منبع گرمایی به اختلاف دمای بالا (مثلا یه طرف ۲۰ درجه و یه طرف ۵۰۰ درجه) قرار بدیم و یه باکی بال رو توش جا بدیم بدون هیچ نیروی مکانیکی خارجی باکی بال در نانو لوله حرکت می کنه و منتقل میشه که در فایل تصویری اینو مشاهده کردین . و نکته جالب تر اینه که این پروژه نهایی سومین دوره المپیاد نانو بوده که فقط پنج نفر تونستن تمومش کنن .

منتظـــــ..........................ـــــــــر پست های آینده باشید به تشریح کدها خواهم پرداخت ...

موفق باشید

صادق قربان زاده (S_G555@YAHOO.COM)

WWW.1PAPER.BLOG.IR