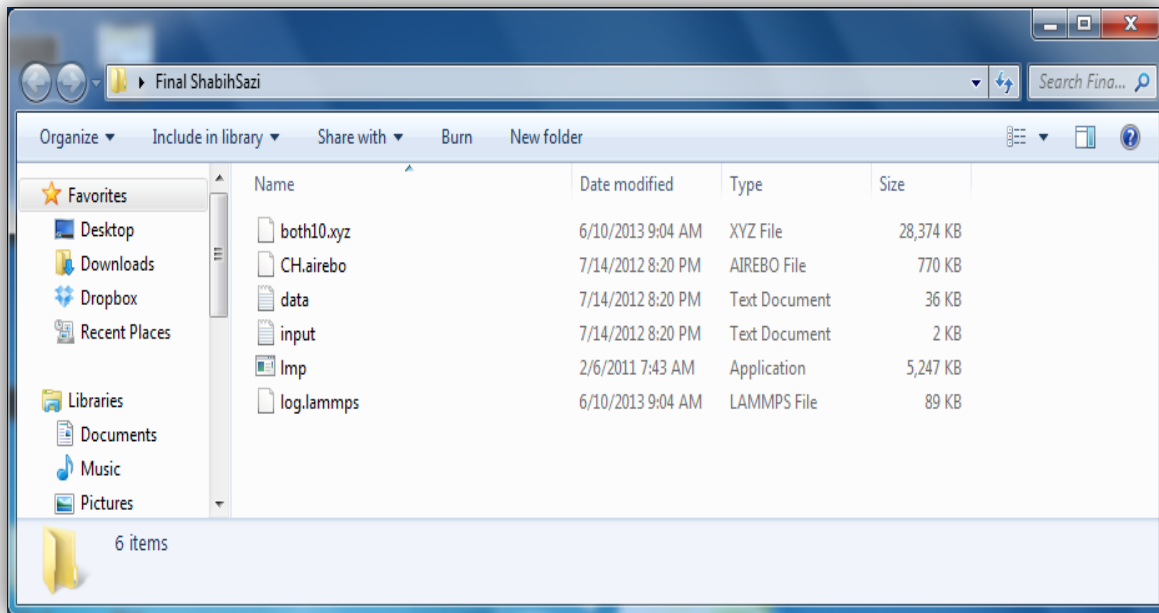


به نام خدا

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 .



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



✚ **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 کاملاً 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.

```

C:\Windows\system32\cmd.exe - imp
Microsoft Windows [Version 6.1.7600]
Copyright (c) 2009 Microsoft Corporation. All rights reserved.

C:\Users\Party.Man>cd Desktop
C:\Users\Party.Man\Desktop>cd "Shabihsazi - Copy"
C:\Users\Party.Man\Desktop\Shabihsazi - Copy>imp < input.txt
LAMMPS (12 Apr 2013)
Reading data file ...
  orthogonal box = <-600.7 -330.25 -100> to <600.7 330.25 100>
  1 by 1 by 1 MPI processor grid
  1020 atoms
  96 atoms in group right
  1 atoms in group left
  923 atoms in group mid
  97 atoms in group boundary
Setting up run ...
Memory usage per processor = 2.33987 Mbytes
Step temp totEng Press Lx Ly Lz
  0          271.44259      -7266.6379      -14.014521      1201.4      660.5
  200        463.4513      -7265.7613      7.2818022      1201.4      660.5
  200        511.9647      -7259.4373      -1.357567      1201.4      660.5
  
```

عکس (۱) - شروع محاسبات

```

C:\Windows\system32\cmd.exe - imp
  49200      477.23918      -7258.3705      0.20881159      1201.4      660.5
  200
  49300      488.89378      -7257.9505      0.29198496      1201.4      660.5
  200
  49400      514.51203      -7256.5075      0.33744349      1201.4      660.5
  200
  49500      516.48962      -7256.05      -0.76942432      1201.4      660.5
  200
  49600      505.38402      -7254.9794      -0.44943675      1201.4      660.5
  200
  49700      490.04034      -7256.8665      0.31659083      1201.4      660.5
  200
  49800      516.83868      -7255.2602      0.48487104      1201.4      660.5
  200
  49900      502.6115      -7255.8834      0.095963014      1201.4      660.5
  200
  50000      499.43237      -7254.9184      -0.57120907      1201.4      660.5
  200
  50100      510.51498      -7253.9983      0.069035411      1201.4      660.5
  200
  50200      504.10506      -7255.0133      0.46283537      1201.4      660.5
  200
  50300      506.76488      -7254.9422      0.34651757      1201.4      660.5
  200
  
```

عکس (۲) - اواسط محاسبات



```

C:\Windows\system32\cmd.exe
100000      507.09532      -7256.159 -0.0036898682      1201.4      660.5
200
Loop time of 1412.69 on 1 procs for 100000 steps with 1020 atoms
Pair time (<%) = 1388.56 (<98.2922)
Neigh time (<%) = 8.18648 (<0.579497)
Comm time (<%) = 0.82809 (<0.058618)
Outpt time (<%) = 8.62549 (<0.610573)
Other time (<%) = 6.4863 (<0.459146)

Nlocal:      1020 ave 1020 max 1020 min
Histogram:  1 0 0 0 0 0 0 0 0
Nghost:      0 ave 0 max 0 min
Histogram:  1 0 0 0 0 0 0 0 0
Neighs:      0 ave 0 max 0 min
Histogram:  1 0 0 0 0 0 0 0 0
FullNghs:    73790 ave 73790 max 73790 min
Histogram:  1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 73790
Ave neighs/atom = 72.3431
Neighbor list builds = 982
Dangerous builds = 0

C:\Users\Party.Man\Desktop\Shahisazi>

```

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

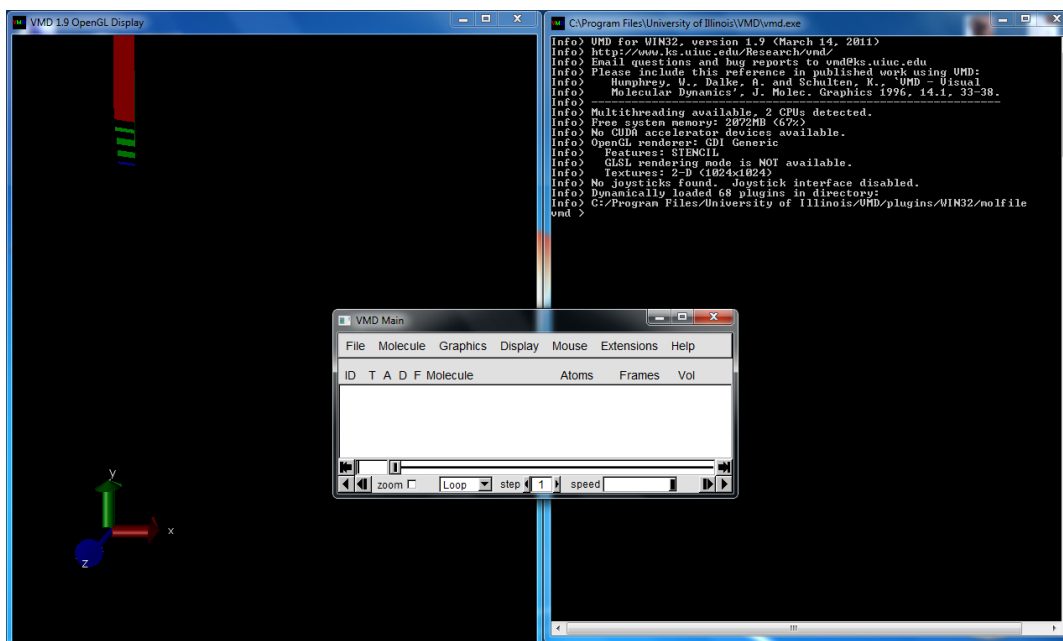
VMD اجرا می کنیم و تصاویر گرافیکی متحرک شبیه سازی دینامیک مولکولی رو می بینیم .

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

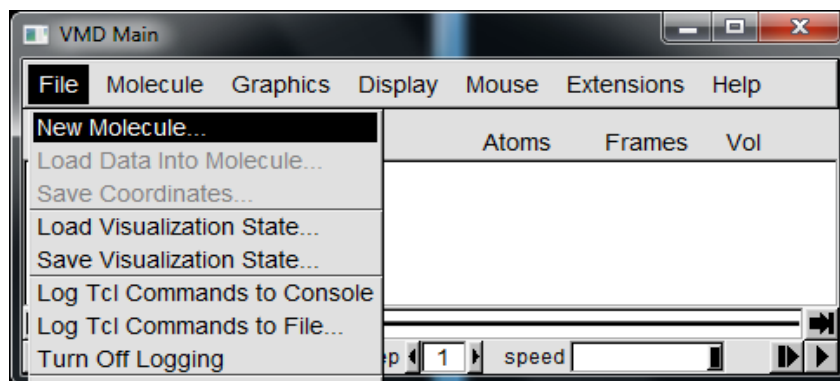
بعد از نصب فایل نرم افزار VMD (که البته خیلی سخت نیست فقط کافی چند بار روی Next کلیک کنید و

منتظر باشید که نصب شه) از منوی Start ویندوز نرم افزار رو پیدا کنید و بازش کنید . بعد باز کردن باید سه

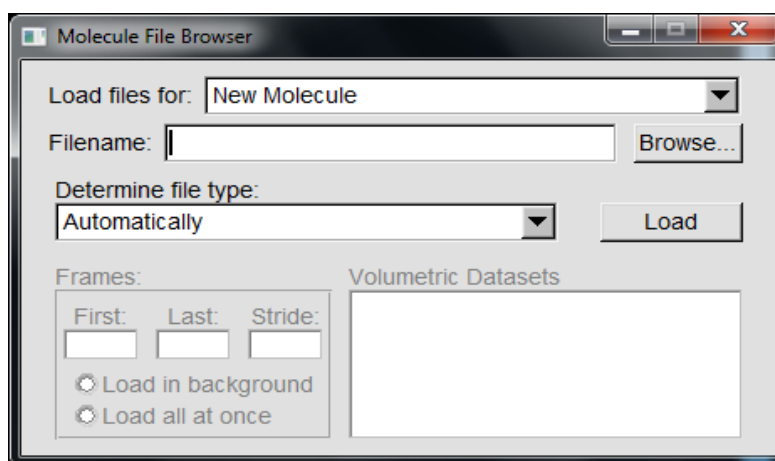
تا پنجره شبیه تصویر زیر ببینید .



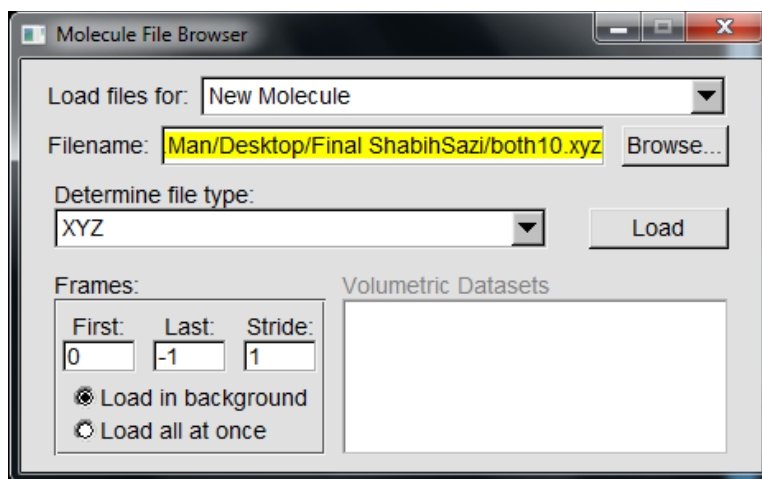
بعد از باز شدن نرم افزار با باز کردن منوی **File** و انتخاب گزینه **New Molecule...** ، مانند تصویر زیر :



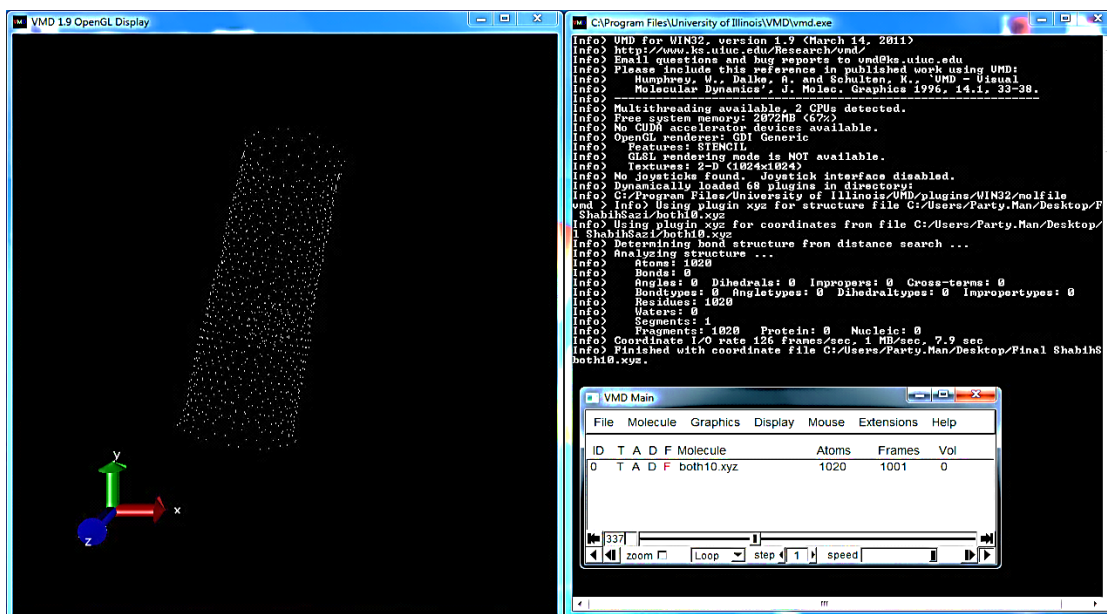
پنجره ای مانند تصویر زیر باز خواهد شد .



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 :



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 داکيومنت های نرم افزار های LAMMPS و VMD اطلاعات بیشتری در مورد فرایندهای اجرا شده در این آموزش بدست بیارین .

لینک داکيومنت 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 اینکه که این پروژه نهایی سومین دوره المپیاد نانو بوده که فقط پنج نفر تونستن تمومش کنن .

منتظ.....ر پست های آینده باشید به تشریح کدها خواهیم پرداخت ...

موفق باشید

صادق قربان زاده (S_G555@YAHOO.COM)

