به نام خدا

مؤسسه فرهنگی هنری
دیباگران تهران

شبیه سازی دینامیک مولکولی
با
Lammps

(بسته نرم افزاری متن باز)

مؤلفان :

دکتر نیر رزم آرا

استادیار گروه مهندسی مکانیک ، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان

مهندس ایمان تصدیقی

عضو هیات علمی دانشکده مهندسی مکانیک موسسه غیر انتفاعی صنعتی فولاد

مهندس صادق سلیمانی آذر

کارشناس ارشد مهندسی مکانیک،دانشگاه شهید مدنی آذربایجان

هرگونه چاپ و تکثیر از محتویات این کتاب بدون اجازه کتبی
ناشر ممنوع است. متخلفان به موجب قانون حمایت حقوق
مؤلفان، مصنفان و هنرمندان تحت پیگرد قانونی قرار می‌گیرند.

شبیه سازی دینامیک مولکولی با Lammps

(بسته نرم افزاری متن باز)

مؤلفان : دکتر نیر رزم آرا
مهندس ایمان تصدیقی
مهندس صادق سلیمانی آذر

ناشر: مؤسسه فرهنگی هنری دیباگران تهران
حروفچینی و صفحه‌آرایی: نازنین نصیری
طرح روی جلد: سحر نژاد محمدی
چاپ: درج عقیق
نوبت چاپ: پنجم
تاریخ نشر: ۱۳۹۸
تیراژ: ۵۰ جلد

قیمت: ۸۰۰۰۰۰ ریال

شابک: ۱-۵۲۵-۱۲۴-۶۰۰-۹۷۸
ISBN: ۹۷۸-۶۰۰-۱۲۴-۵۲۵-۱

نشانی واحد فروش: تهران، میدان انقلاب، خ کارگر جنوبی، روبروی پاساژ مهستان، پلاک ۱۲۵۱
تلفن: ۶۶۴۱۰۰۴۶-۲۲۰۸۵۱۱۱
کد پستی: ۱۳۱۴۹۸۳۱۸۵
فروشگاههای اینترنتی دیباگران تهران
WWW.MFTBOOK.IR
www.dibagarantehran.com
www.mftdibagaran.ir
نشانی تلگرام:@mftbook نشانی اینستاگرام : Dibagaran_publishing

سرشناسه : رزم آرا ، نیر،۱۳۶۴-

عنوان و نام پدید آور : شبیه سازی دینامیک مولکولی با Lammps(بسته نرم افزاری متن باز) / مولفان : نیر رزم آرا ،ایمان تصدیقی ،صادق سلیمانی آذر

مشخصات نشر: تهران- دیباگران تهران -۱۳۹۵

مشخصات ظاهری:۲۸۲ ص. مصور.

شابک :۱-۵۲۵-۱۲۴-۶۰۰-۹۷۸

وضعیت فهرستنویسی : فیپا

موضوع: نرم افزار لمپس

موضوع : LAMMPS(computer software)

موضوع : دینامیک مولکولی – شبیه سازی کامپیوتری

موضوع:Molecular dynamics- computer simulation

شناسه افزوده : تصدیقی ، ایمان ، ۱۳۶۶-

شناسه افزوده : سلیمانی آذر ، صادق ،۱۳۷۲-

رده بندی کنگره: ۱۳۹۵ ۴ ر ۲ ش /۳ /QD۴۵۵

رده بندی دیویی :۵۴۱/۰۱۱۳

شماره کتابشناسی ملی : ۴۵۲۵۱۶۴

اپلیکیشن دیباگران را از سایت های فروشگاهی ما دریافت و نصب نمایید.

فهرست مطالب

فصل اول: شبیه سازی دینامیک مولکولی ۱۷

۱-۱ مقدمه..... ۱۷

۱-۲ روش‌های شبیه‌سازی سیستم‌های مولکولی ۱۸

۱-۳ برهمکنش‌های بین مولکولی..... ۲۳

۱-۳-۱ تابع پتانسیل لنارد- جونز..... ۲۵

۱-۳-۲ پتانسیل قطع شده..... ۳۰

۱-۳-۳ برهمکنش بین سیال و سطح جامد ۳۱

۱- ۴ مکان و سرعت اولیه ذرات ۳۲

۱-۴-۱ انتخاب پیکربندی اولیه ۳۲

۱-۴-۲ سرعت‌های اولیه..... ۳۴

۱- ۵ شرایط مرزی ۳۶

۱-۶ انتگرال‌گیری زمانی..... ۴۰

۱-۶-۱ الگوریتم ورله..... ۴۱

۱-۶-۲ الگوریتم سرعت ورله ۴۲

۱- ۷ مجموع‌های آماری و دماپاهای سیستم..... ۴۳

۱-۷-۱ دماپاها یا مجموع‌های آماری دما ثابت ۴۴

۱-۷-۱-۱ مقیاس‌بندی سرعت ۴۴

۱-۸ تعادل سیستم..... ۴۷

۱-۸-۱ نمونه برداری..... ۴۷

۱-۸-۲ محاسبه متوسط آماری کمیت‌های ترمودینامیکی ۴۸
۱-۸-۲-۱ دما ۴۹
۱-۸-۲-۲ انرژی کل و آنتالپی ۴۹
۱-۸-۲-۳ تانسور تنش ۵۱
فصل دوم: آشنایی با لمپس ۵۳
۲-۱ معرفی لمپس ۵۳
۲-۲ ساختار کد ورودی لمپس ۵۸
۲-۳ نصب لمپس بر روی اوبونتو و ویندوز ۶۲
۲-۳-۱ نصب لمپس بر روی اوبونتو ۱۴.۰۴ ..... ۶۳
۲-۳-۲ نصب لمپس بر روی ویندوز ۶۴
فصل سوم: دستورهای کاربردی لمپس ۷۱
۳-۱ دستورهای مربوط به مرحله آغازین و قالب‌بندی ۷۲
۳-۱-۱ دستور units ۷۲
۳-۱-۲ دستور dimension ۷۷
۳-۱-۳ دستور boundary ۷۸
۳-۱-۴ دستور atom_style ۸۰
۳-۲ دستورهای مربوط به تعریف اتم‌ها و دامنه شبیه‌سازی ۸۶
۳-۲-۱ دستور lattice ۸۶
۳-۲-۲ دستور region ۹۱
۳-۲-۳ دستور create_box ۱۰۱
۳-۲-۴ دستور create_atoms ۱۰۵

۳-۳ دستورهای مربوط به تنظیمات و پیکربندی ۱۱۰
۳-۳-۱ دستور mass..... ۱۱۰
۳-۳-۲ دستور neighbor..... ۱۱۲
۳-۳-۳ دستور pair_style ۱۱۵
۳-۳-۴ دستور group ۱۲۷
دستور group ۱۲۷
۳-۳-۵ دستور fix ۱۳۵
۳-۳-۶ دستور fix nve ۱۴۲
۳-۳-۷ دستور fix nvt /npt/nph..... ۱۴۶
۳-۳-۸ دستور variable ۱۵۲
۳-۳-۹ دستور compute..... ۱۵۶
۳-۳-۱۰ دستور timestep..... ۱۶۴
۳-۴ دستورهای مربوط به اجرای شبیه‌سازی..... ۱۶۵
۳-۴-۱ دستور thermo..... ۱۶۵
۳-۴-۲ دستور thermo_style..... ۱۶۶
۳-۴-۳ دستور dump ۱۷۲
۳-۴-۴ دستور run ۱۸۱
فصل چهارم: نمونه‌هایی از کدهای شبیه‌سازی با لمپس ۱۸۴
۴-۱ نمونه‌ای از کد لمپس درزمینه مکانیک سیالات: جریان کوئت و پوآزوی..... ۱۸۷
۴-۱-۱ شبیه‌سازی جریان کوئت ۱۸۷
۴-۱-۲ شبیه‌سازی جریان پوآزوی ۱۹۶

۴-۲ نمونه‌ای از کد لمپس درزمینه فیزیک: شبیه‌سازی سیستم حاوی ذرات دوقطبی۱۹۸
۴-۳ نمونه‌ای از کد لمپس درزمینه محاسبه خواص ماکروسکوپی: ویسکوزیته.....۲۰۸
۴-۳-۱ محاسبه ویسکوزیته سیال لناردجونز ۲۰۸
۴-۳-۲ محاسبه ویسکوزیته آب با استفاده از پتانسیل های مختلف.....۲۱۵
۴-۴ نمونه‌ای از کد لمپس درزمینه مکانیک جامدات و مواد: پدیده پخش در آلیاژ زیرکونیوم-هیدروژن ۲۲۹
فهرست منابع ۲۳۹
ضمایم.....۲۴۳
ضمیمه الف: نصب سیستم‌عامل اوبونتو ۱۴.۰۴ .....۲۴۳
ضمیمه ب: روش الحاق کردن پکیج خارجی در لمپس.....۲۵۶
ضمیمه ج: مستندات پتانسیل‌ها ۲۵۸
ضمیمه د: نصب نرم‌افزار VMD در لینوکس ۲۶۸
ضمیمه ه: فولدر Tools.....۲۷۱

فهرست اشکال

شکل ۱- ۱. فلوچارت کلی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی..... ۲۰

شکل ۱- ۲. روش‌های مدل‌سازی سیستم‌های نانو و درجه معین بودن آن‌ها..... ۲۲

شکل ۱- ۳. روش‌های مدل‌سازی در مقیاس‌های طولی مختلف ۲۳

شکل ۱- ۴. پتانسیل لنارد- جونز برحسب فاصله بین مولکولی ($\varepsilon = \sigma = 1$) [3]..... ۲۷

شکل۱- ۵. تقسیم پتانسیل لنارد- جونز به قسمت‌های جاذبه و دافعه [3]..... ۲۹

شکل ۱- ۶. نمایی از انواع ساختارهای شبکه‌ای استاندارد ۳۳

شکل۱- ۷. انواع ساختارهای مختلف شبکه FCC..... ۳۴

شکل ۱- ۸. طرحواره‌ای از شرط مرزی تناوبی در یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی [3]..... ۳۷

شکل ۱- ۹. طرحواره‌ای از جزئیات روش فهرست همسایه ورله [3]..... ۳۹

شکل ۱- ۱۰. قفسه‌های نمونه‌گیری خواص در یک نانوکانال به صورت دو و سه‌بعدی ۴۸۰

شکل ۳-۱. نمایشی ساده از قانون کولن..... ۱۲۷

شکل ۴-۱. ساختار کلی کد ورودی لمپس به همراه نمونه کد ۱۸۶

شکل ۴-۲. جریان کوئت درون کانال..... ۱۸۸

شکل ۴-۳. جریان پوآزوی درون کانال..... ۱۹۶

شکل ۴-۴. سیستم حاوی ذرات دوقطبی ۱۹۸

شکل ۴-۵. پیکر بندی مولکولی برای مدل $\mathbf{SPC/E}$ برای ۱۰۰۰ مولکول آب ۲۲۸

شکل ۴-۶. موقعیت اتمی ذرات هیدروژن که به صورت تصادفی در ساختار زیرکونیوم پخش شده اند ... ۲۲۹

شکل ج-۱. منحنی پتانسیل لنارد جونز ۲۵۹

شکل ج-۲. پتانسیل مورس ۲۶۱

شکل ج-۳. اعمال پتانسیل نامناسب لنارد جونز به نانولوله کربنی ۲۶۷

فهرست جداول

جدول ۳-۱ مقادیر بی بعد کمیت‌ها در سیستم واحد lj ۷۳

جدول ۳-۲ ابعاد کمیت‌ها در سیستم واحدهای مختلف..... ۷۴

ادامه جدول ۳-۲ ابعاد کمیت‌ها در سیستم واحدهای مختلف..... ۷۶

جدول ۳-۳ مشخصه‌های اضافی مربوط به هر سبک اتمی و انواع سیستم‌های فیزیکی مدل شده با آن‌ها ۸۲

جدول ۳-۴ کلیدواژه و آرگومان‌های دستور lattice ۸۸

جدول ۳-۵ سبک‌های مورداستفاده در دستور region..... ۹۲

جدول ۳-۶ کلیدواژه و آرگومان‌های دستور region ۹۴

جدول ۳-۷ فواصل شبکه برای دستور lattice..... ۱۰۰

جدول ۳-۸ کلیدواژه‌های دستور create_box..... ۱۰۳

جدول ۳-۹ سبک و آرگومان‌های دستور create_atoms ۱۰۶

جدول ۳-۱۰ کلیدواژه‌های دستور create_atoms ۱۰۷

جدول ۳-۱۱ پتانسیل‌های دستور pair_style و کاربرد آن‌ها..... ۱۱۹

جدول ۳-۱۲ سبک‌های دستور group و آرگومان‌های مربوط به هر یک از سبک‌ها. ۱۲۸

جدول ۳-۱۳ سبک‌های مختلف fix در لمپس به همراه عملیات مربوطه ۱۳۶

جدول ۳-۱۴ لیست کلیدواژه‌ها و آرگومان‌های دستور fix nvt /npt/nph..... ۱۴۸

جدول ۳-۱۵ سبک‌ها و آرگومان‌های دستور variable..... ۱۵۳

جدول ۳-۱۶ آرگومان‌های سبک‌های equal و atom در دستور variable ۱۵۴

جدول ۳-۱۷ سبک‌های دستور compute و محاسبات مربوطه ۱۵۷

جدول ۳-۱۸ ارجاع به دستور compute..... ۱۶۲

جدول ۳-۱۹ مقدار پیش‌فرض برای گام زمانی در سیستم واحدهای مختلف ۱۶۵

جدول ۳-۲۰ آرگومان‌های سبک custom در دستور thermo_style..... ۱۶۷

جدول ۳-۲۱ مشخصات اتمی در دستور custom..... ۱۷۸

جدول ۳-۲۲ کلیدواژه‌ها و آرگومان‌های دستور run..... ۱۸۲

جدول ۴-۱ جرم ، بار و فاصله پیوند مولکولهای آب..... ۲۱۸

جدول۴-۲ پارامتر های لنارد-جونز..... ۲۱۸

فهرست نمادها

نمادهای لاتین	
a	شتاب
d	درجه آزادی یا بعد سیستم
E_{total}	انرژی داخلی کل
F	نیروی بین مولکولی
I	ممان اینرسی
K_B	ثابت استفان بولتزمن $\left(3.18\times10^{-23}J/K\right)$
KE	انرژی جنبشی
m	جرم ذره
N	تعداد ذرات
P	فشار سیستم
PE	انرژی پتانسیل
r	بردار مکان
r_{ij}	فاصله بین اتم iام و j ام
r_c	شعاع قطع
S_{ab}	مؤلفه های تنش
T	دما

دمای واقعی	T_A
دمای مورد نظر	T_D
زمان	t
حجم	V
سرعت	v
نمادهای یونانی	
گشتاور مغناطیسی	$\vec{\tau}_{ij}$
پتانسیل برهمکنش	Φ
فاصله بین مولکولی (nm)	σ
شدت برهمکنش (J)	ε
عدد تصادفی	ξ
چگالی عددی	ρ
ضریب مقیاس بندی سرعت	λ
مسافت آزاد بین مولکولی	λ
زمان مشخصه	τ
سرعت زاویه‌ای	ω
ممان مغناطیسی	μ
نفوذ پذیری مغناطیسی خلاء $(4\pi\times10^{-7}H/m)$	μ_0
کمیت ماکروسکوپی	κ

زیرنویس‌ها	
اتم i ام	i
اتم j ام	j
کل	$total$
بالانویس‌ها	
لنارد- جونز	LJ
کمیت بی‌بعد	*

مقدمه ناشر

خط مشی کیفیت انتشارات مؤسسه فرهنگی هنری دیباگران تهران در عرصه کتاب هایی است که بتواند خواسته های به روز جامعه فرهنگی و علمی کشور را تا حد امکان پوشش دهد.

حمد و سپاس ایزد منان را که با الطاف بیکران خود این توفیق را به ما ارزانی داشت تا بتوانیم در راه ارتقای دانش عمومی و فرهنگی این مرز و بوم در زمینه چاپ و نشر کتب علمی دانشگاهی، علوم پایه و به ویژه علوم کامپیوتر و انفورماتیک گام‌هایی هرچند کوچک برداشته و در انجام رسالتی که بر عهده داریم، مؤثر واقع شویم.

گستردگی علوم و توسعه روزافزون آن، شرایطی را به وجود آورده که هر روز شاهد تحولات اساسی چشمگیری در سطح جهان هستیم. این گسترش و توسعه نیاز به منابع مختلف از جمله کتاب را به عنوان قدیمی‌ترین و راحت‌ترین راه دستیابی به اطلاعات و اطلاع‌رسانی، بیش از پیش روشن می‌نماید.

در این راستا، واحد انتشارات مؤسسه فرهنگی هنری دیباگران تهران با همکاری جمعی از اساتید، مؤلفان، مترجمان، متخصصان، پژوهشگران، محققان و نیز پرسنل ورزیده و ماهر در زمینه امور نشر درصدد هستند تا با تلاش‌های مستمر خود برای رفع کمبودها و نیازهای موجود، منابعی پُربار، معتبر و با کیفیت مناسب در اختیار علاقمندان قرار دهند.

کتابی که در دست دارید با همت "**دکتر نیر رزم آرا – مهندس ایمان تصدیقی- مهندس صادق سلیمانی آذر** " و تلاش جمعی از همکاران انتشارات میسر گشته که شایسته است از یکایک این گرامیان تشکر و قدردانی کنیم.

کارشناسی و نظارت بر محتوا: زهره قزلباش

در خاتمه ضمن سپاسگزاری از شما دانش‌پژوه گرامی درخواست می‌نماید با مراجعه به آدرس dibagaran.mft.info (ارتباط با مشتری) فرم نظرسنجی را برای کتابی که در دست دارید تکمیل و ارسال نموده، انتشارات دیباگران تهران را که جلب رضایت و وفاداری مشتریان را هدف خود می‌داند، یاری فرمایید.

امیدواریم همواره بهتر از گذشته خدمات و محصولات خود را تقدیم حضورتان نماییم.

مدیر انتشارات

مؤسسه فرهنگی هنری دیباگران تهران
Publishing@mftmail.com

پیشگفتار

امروزه شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای به‌عنوان ابزاری مناسب در کنار فعالیت‌های آزمایشگاهی، کمک شایانی به فهم پدیده‌های فیزیکی می‌کند. به دلیل محدودیت‌های آزمایشگاهی در مقیاس میکرو و نانو، علم محاسباتی نانو به‌عنوان مکمل علوم آزمایشگاهی، محققان را در فهم پدیده‌ها در مقیاس میکرو و نانو یاری می‌نماید. در این میان روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، به‌عنوان یک روش معین، در میان روش‌های شبیه‌سازی مولکولی، در سال‌های اخیر موردتوجه محققان قرارگرفته است.

با توجه به گسترش روزافزون استفاده از نرم‌افزارهای منبع باز و رویکرد مثبت محققان نسبت به این‌گونه بسته‌های نرم‌افزاری، شبیه‌سازی‌های مولکولی نیز پیشرفت قابل‌توجهی در این زمینه داشته است. یکی از بسته‌های نرم‌افزاری مهم و پرکاربرد، بسته نرم‌افزاری لمپس است که در دانشگاه سندیای ایالات متحده پایه ریزی شده است. پیشرفت این بسته به‌گونه‌ای بوده که در سال‌های اخیر بالغبر صدها کد توسط محققان دانشگاه‌های مختلف بدان اضافه شده است. در مجموعه حاضر، استفاده از این بسته نرم افزاری به همراه کدهای نمونه با استفاده زبان برنامه‌نویسی C++ و همسو با کدهای پردازش موازی (MPI و GPU)، به منظور کاهش زمان شبیه‌سازی‌ها، در پیشبرد اهداف این کتاب ارائه می‌گردد.

با عنایت به تألیف، ترجمه و گرداوری چند کتاب طی سال‌های اخیر در خصوص اصول روش شبیه سازی دینامیک مولکولی و گستردگی استفاده از این روش در تحقیقات اخیر در دانشگاه‌های سراسر کشور و عدم وجود منبع فارسی در استفاده از نرم افزار لمپس در این حوزه نانو، بر آن شدیم که با توجه به تخصص گروه تألیف کتاب طی شش سال گذشته و انتشار مقالات متعدد در این موضوع، کتاب حاضر تهیه و تدوین گردد.

تمرکز اصلی کتاب بر معرفی و آموزش نرم افزار لمپس در حوزه شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی است. به همین دلیل صرفاً اصول و مبانی روش مزبور در حد نیاز توضیح داده می‌شود لذا در صورت نیاز به مفاهیم و اصول تخصصی به مراجع اصلی مندرج در انتهای کتاب مراجعه نمایید. در فصل اول، مقدماتی در باره روش دینامیک مولکولی بیان می‌شود و سپس در فصل دوم با نرم افزار لمپس آشنا شده و در فصل سوم ساختار کد نویسی برای شبیه سازی دینامیک موکلولی بیان شده و دستورات اساسی لمپس معرفی می‌گردند. در نهایت در فصل چهارم نمونه‌هایی از کدهای شبیه سازی سیستم های مختلف را بیان خواهیم نمود.

با امید به اینکه این اثر بتواند راهگشای محققان و دانش پژوهانِ فارسی زبان، در تحقیقات در سطح مولکولی باشد، از آنجا که هیچ اثری در گام اول به نوبه خود کامل و عاری از هرگونه نقصی نمی‌باشد لذا بی‌صبرانه منتظر شنیدن نظرات و پیشنهادهای شما جهت ارائه هر چه‌بهتر ویرایش و جلد بعدی کتاب هستیم.

نیر رزم آرا، ایمان تصدیقی، صادق سلیمانی آذر

IMAN.TASDIGHI@GMAIL.COM