

SCIGRESS ME チュートリアル

実践分子動力学・例題

富士通(株)

2013/10/22

【例題 1】セルサイズの設定

1. 積み重ね数 $1 \times 1 \times 1$ の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「新規作成」をクリック
- ② 「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック
- ③ 「種類」欄で「テンプレート」を選択
- ④ 「グループ」欄で「基本単位系」を選択
- ⑤ 「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択
- ⑥ 「次へ」ボタンをクリック
- ⑦ 「原子」タブを選択
- ⑧ 「Ni」を選択
- ⑨ 「完了」ボタンをクリック
- ⑩ 「MD セル」タブを選択
- ⑪ 「基本セル定数」欄で $a=b=c=3.524$ に設定
- ⑫ 「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

- ① 「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック
- ② 「組合せ」欄で「Ni -- Ni」を選択
- ③ 「設定」ボタンをクリック
- ④ 「共通ライブラリ ¥Inorganic¥2Body¥LennardJones_Type¥HaliciogluPound」を選択
- ⑤ 「OK」ボタンをクリック

- ⑥ 「カットオフ距離」タブを選択
- ⑦ 「カットオフ距離」欄に 7 と入力
- ⑧ 「オプション」タブを選択
- ⑨ 「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす
- ⑩ 「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす
- ⑪ 「適用」ボタンをクリック
- ⑫ 「OK」ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	298 K
総ステップ数	5000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

- ③ 「適用」ボタンをクリック
- ④ 「OK」ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

- ② 「ファイル名」欄に ファイル名 (Ni_rc_111) を入力
- ③ 「保存」 ボタンをクリック
- ④ 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ⑤ 「実行」 ボタンをクリック

(5) 結果解析

- ① 「結果」⇒「モニター変数」をクリック
- ② 「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
- ③ 「項目」欄で全てのチェックをはずす
- ④ 「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる
- ⑤ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑥ 「閉じる」 ボタンをクリック
- ⑦ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ⑧ 「保存する場所」を指定する
- ⑨ 「ファイル名」欄に ファイル名 (Ni_rc_111) を入力
- ⑩ 「ファイルの種類」欄で「CSV Files (*.csv)」を選択
- ⑪ 「保存」 ボタンをクリック
- ⑫ 表計算・グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて CSV ファイルから原子あたりのポテンシャルエネルギーを求め、グラフ表示する

2. 積み重ね数 **3×3×3** の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック

- ② 入力データファイル Ni_rc_111.inp を選択
- ③ 「開く」 ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック
- ⑤ 「ファイル名」 欄に ファイル名(Ni_rc_333)を入力
- ⑥ 「保存」 ボタンをクリック
- ⑦ 「モデリング」 ⇒ 「MD セルの積み重ね」 をクリック
- ⑧ 「積み重ね数」 欄で **a 軸=b 軸=c 軸=3** に設定
- ⑨ 「OK」 ボタンをクリック
- ⑩ 「はい」 ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

- ① 「シミュレーション」 ⇒ 「ポテンシャル関数の設定」 をクリック
- ② 「組合せ」 欄で 「Ni -- Ni」 を選択
- ③ 「設定」 ボタンをクリック
- ④ 「共通ライブラリ ¥Inorganic ¥2Body ¥LennardJones_Type ¥HaliciogluPound」 を選択
- ⑤ 「OK」 ボタンをクリック
- ⑥ 「カットオフ距離」 タブを選択
- ⑦ 「カットオフ距離」 欄に 7 と入力
- ⑧ 「オプション」 タブを選択
- ⑨ 「二体力の長距離補正を行う」 のチェックをはずす
- ⑩ 「Shifted Force Potential を利用する」 のチェックをはずす
- ⑪ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑫ 「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック
- ② 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ③ 「実行」ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「結果」⇒「モニター変数」をクリック
- ② 「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
- ③ 「項目」欄で全てのチェックをはずす
- ④ 「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる
- ⑤ 「適用」ボタンをクリック
- ⑥ 「閉じる」ボタンをクリック
- ⑦ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ⑧ 「保存する場所」を指定する
- ⑨ 「ファイル名」欄に ファイル名 (Ni_rc_333) を入力
- ⑩ 「ファイルの種類」欄で「CSV Files (*.csv)」を選択
- ⑪ 「保存」ボタンをクリック
- ⑫ 表計算・グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて CSV ファイルから原子あたりのポテンシャルエネルギーを求め、グラフ表示する

3. 積み重ね数 **5×5×5** の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック
- ② 入力データファイル **Ni_rc_111.inp** を選択
- ③ 「開く」 ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ⑤ 「ファイル名」欄に ファイル名(**Ni_rc_555**)を入力
- ⑥ 「保存」 ボタンをクリック
- ⑦ 「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック
- ⑧ 「積み重ね数」欄で **a 軸=b 軸=c 軸=5** に設定
- ⑨ 「OK」 ボタンをクリック
- ⑩ 「はい」 ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

- ① 「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック
- ② 「組合せ」欄で「Ni -- Ni」を選択
- ③ 「設定」 ボタンをクリック
- ④ 「共通ライブラリ¥Inorganic¥2Body¥LennardJones_Type¥HaliciogluPound」を選択
- ⑤ 「OK」 ボタンをクリック
- ⑥ 「カットオフ距離」 タブを選択
- ⑦ 「カットオフ距離」欄に **7** と入力
- ⑧ 「オプション」 タブを選択
- ⑨ 「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす
- ⑩ 「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす
- ⑪ 「適用」 ボタンをクリック

- ⑫ 「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック
- ② 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ③ 「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「結果」⇒「モニター変数」をクリック
- ② 「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
- ③ 「項目」欄で全てのチェックをはずす
- ④ 「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる
- ⑤ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑥ 「閉じる」 ボタンをクリック
- ⑦ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ⑧ 「保存する場所」を指定する
- ⑨ 「ファイル名」欄に ファイル名 (Ni_rc_555) を入力
- ⑩ 「ファイルの種類」欄で「CSV Files (*.csv)」を選択
- ⑪ 「保存」 ボタンをクリック
- ⑫ 表計算・グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて CSV ファイルから原子あたりのポテンシャルエネルギーを求め、グラフ表示する

【例題 2】適正な初期状態の設定

1. 原子間距離 $d=2.49184\text{\AA}$ の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「新規作成」をクリック
- ② 「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック
- ③ 「種類」欄で「テンプレート」を選択
- ④ 「グループ」欄で「基本単位系」を選択
- ⑤ 「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択
- ⑥ 「次へ」ボタンをクリック
- ⑦ 「原子」タブを選択
- ⑧ 「Ni」を選択
- ⑨ 「完了」ボタンをクリック
- ⑩ 「MD セル」タブを選択
- ⑪ 「基本セル定数」欄で $a=b=c=3.524$ に設定
- ⑫ 「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック
- ⑬ 「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック
- ⑭ 「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定
- ⑮ 「OK」ボタンをクリック
- ⑯ 「はい」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

- ① 「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック
- ② 「組合せ」欄で「Ni -- Ni」を選択
- ③ 「設定」ボタンをクリック
- ④ 「共通ライブラリ¥Inorganic¥2Body¥Morse_Type¥FlahiveGraham」を選択
- ⑤ 「OK」ボタンをクリック
- ⑥ 「カットオフ距離」タブを選択
- ⑦ 「カットオフ距離」欄に 7 と入力
- ⑧ 「オプション」タブを選択
- ⑨ 「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす
- ⑩ 「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす
- ⑪ 「適用」ボタンをクリック
- ⑫ 「OK」ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 以下の設定を行う


アンサンブル	NTP
温度	0.01 K
総ステップ数	5000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps
MD セルの形状	立方体を保つ

- ③ 「適用」 ボタンをクリック
- ④ 「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ② 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_ad_1)を入力
- ③ 「保存」 ボタンをクリック
- ④ 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ⑤ 「実行」 ボタンをクリック

(5) 結果解析

- ① 「結果」⇒「原子配置」をクリック
- ② 「再生」ボタン  をクリック

2. 原子間距離 $d=1.52594\text{\AA}$ の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック
- ② 入力データファイル Ni_ad_1.inp を選択
- ③ 「開く」 ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ⑤ 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_ad_2)を入力
- ⑥ 「保存」 ボタンをクリック

- ⑦ MDセルの中心付近の原子[格子座標 (0.4, 0.5, 0.5)]を選択
- ⑧ 「表示」⇒「プロパティ」をクリック
- ⑨ 「座標値」欄で **a=0.4, b=0.45, c=0.45** と設定
- ⑩ 「OK」ボタンをクリック
- ⑪ 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

(2) 相互作用設定


- ① 「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック
- ② 「組合せ」欄で「Ni -- Ni」を選択
- ③ 「設定」ボタンをクリック
- ④ 「共通ライブラリ¥Inorganic¥2Body¥Morse_Type¥FlahiveGraham」を選択
- ⑤ 「OK」ボタンをクリック
- ⑥ 「カットオフ距離」タブを選択
- ⑦ 「カットオフ距離」欄に 7 と入力
- ⑧ 「オプション」タブを選択
- ⑨ 「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす
- ⑩ 「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす
- ⑪ 「適用」ボタンをクリック
- ⑫ 「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック
- ② 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

- ③ 「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「結果」 ⇒ 「原子配置」 をクリック
- ② 「再生」 ボタン  をクリック

3. 原子間距離 $d=0.498369\text{\AA}$ の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック
- ② 入力データファイル **Ni_ad_1.inp** を選択
- ③ 「開く」 ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック
- ⑤ 「ファイル名」 欄に ファイル名(**Ni_ad_3**)を入力
- ⑥ 「保存」 ボタンをクリック
- ⑦ MDセルの中心付近の原子[格子座標 **(0.4, 0.5, 0.5)**]を選択
- ⑧ 「表示」 ⇒ 「プロパティ」 をクリック
- ⑨ 「座標値」 欄で **a=0.4, b=0.42, c=0.42** と設定
- ⑩ 「OK」 ボタンをクリック
- ⑪ 「ファイル」 ⇒ 「上書き保存」 をクリック

(2) 相互作用設定


- ① 「シミュレーション」 ⇒ 「ポテンシャル関数の設定」 をクリック
- ② 「組合せ」 欄で 「Ni -- Ni」 を選択

- ③ 「設定」 ボタンをクリック
- ④ 「共通ライブラリ ¥Inorganic¥2Body¥Morse_Type¥FlahiveGraham」 を選択
- ⑤ 「OK」 ボタンをクリック
- ⑥ 「カットオフ距離」 タブを選択
- ⑦ 「カットオフ距離」 欄に 7 と入力
- ⑧ 「オプション」 タブを選択
- ⑨ 「二体力の長距離補正を行う」 のチェックをはずす
- ⑩ 「Shifted Force Potential を利用する」 のチェックをはずす
- ⑪ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑫ 「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」 ⇒ 「上書き保存」 をクリック
- ② 「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック
- ③ 「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「結果」 ⇒ 「原子配置」 をクリック
- ② 「再生」 ボタン  をクリック

【例題 3】初期緩和計算

1. NEV アンサンブルの場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「新規作成」をクリック
- ② 「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック
- ③ 「種類」欄で「テンプレート」を選択
- ④ 「グループ」欄で「基本単位系」を選択
- ⑤ 「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択
- ⑥ 「次へ」ボタンをクリック
- ⑦ 「原子」タブを選択
- ⑧ 「Ni」を選択
- ⑨ 「完了」ボタンをクリック
- ⑩ 「MD セル」タブを選択
- ⑪ 「基本セル定数」欄で $a=b=c=3.524$ に設定
- ⑫ 「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック
- ⑬ 「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック
- ⑭ 「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定
- ⑮ 「OK」ボタンをクリック
- ⑯ 「はい」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

- ① 「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

- ② 「組合せ」欄で「Ni -- Ni」を選択
- ③ 「設定」ボタンをクリック
- ④ 「共通ライブラリ¥Inorganic¥2Body¥Morse_Type¥FlahiveGraham」を選択
- ⑤ 「OK」ボタンをクリック
- ⑥ 「カットオフ距離」タブを選択
- ⑦ 「カットオフ距離」欄に 7 と入力
- ⑧ 「オプション」タブを選択
- ⑨ 「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす
- ⑩ 「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす
- ⑪ 「適用」ボタンをクリック
- ⑫ 「OK」ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 以下の設定を行う

アンサンブル	NEV
温度	298 K
総ステップ数	100000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

- ③ 「適用」ボタンをクリック

- ④ 「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ② 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_rlx_NEV_298K)を入力
- ③ 「保存」 ボタンをクリック
- ④ 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ⑤ 「実行」 ボタンをクリック

(5) 結果解析

- ① 「結果」⇒「モニター変数」をクリック
- ② 「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
- ③ 「項目」欄で全てのチェックをはずす
- ④ 「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる
- ⑤ 「プロット点」 ボタンをクリック
- ⑥ スライダーを移動し、プロット点数を 1000 にする。
- ⑦ 「OK」 ボタンをクリック
- ⑧ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑨ 「閉じる」 ボタンをクリック

2. NTP アンサンブルの場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック

- ② 入力データファイル Ni_rlx_NEV_298K.inp を選択
- ③ 「開く」 ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ⑤ 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_rlx_298K)を入力
- ⑥ 「保存」 ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	298 K
圧力	1 atm
総ステップ数	100000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

- ③ 「適用」 ボタンをクリック
- ④ 「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック
- ② 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

- ③ 「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック
- ② 「グラフ」 ⇒ 「表示項目」 をクリック
- ③ 「項目」 欄で全てのチェックをはずす
- ④ 「項目」 欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる
- ⑤ 「プロット点」 ボタンをクリック
- ⑥ スライダーを移動し、プロット点数を 1000 にする。
- ⑦ 「OK」 ボタンをクリック
- ⑧ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑨ 「閉じる」 ボタンをクリック

【例題 4】ブックキーピング法の設定

1. 固体系(球殻の厚さ $dr=0.2\text{\AA}$)の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「新規作成」をクリック
- ② 「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック
- ③ 「種類」欄で「テンプレート」を選択
- ④ 「グループ」欄で「基本単位系」を選択
- ⑤ 「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択
- ⑥ 「次へ」ボタンをクリック
- ⑦ 「原子」タブを選択
- ⑧ 「Ni」を選択
- ⑨ 「完了」ボタンをクリック
- ⑩ 「MD セル」タブを選択
- ⑪ 「基本セル定数」欄で $a=b=c=3.524$ に設定
- ⑫ 「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック
- ⑬ 「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック
- ⑭ 「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定
- ⑮ 「OK」ボタンをクリック
- ⑯ 「はい」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

- ① 「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック
- ② 「組合せ」欄で「Ni -- Ni」を選択
- ③ 「設定」ボタンをクリック
- ④ 「共通ライブラリ ¥Inorganic¥2Body¥Morse_Type¥FlahiveGraham」を選択
- ⑤ 「OK」ボタンをクリック
- ⑥ 「カットオフ距離」タブを選択
- ⑦ 「カットオフ距離」欄に 7 と入力
- ⑧ 「オプション」タブを選択
- ⑨ 「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす
- ⑩ 「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす
- ⑪ 「適用」ボタンをクリック
- ⑫ 「OK」ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	298 K
総ステップ数	10000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

- ③ 「オプション」 タブをクリック
- ④ 「粒子登録法の球殻の厚さ」 欄に **0.2** と入力
- ⑤ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑥ 「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック
- ② 「ファイル名」 欄に ファイル名 (Ni_bk_cry_02) を入力
- ③ 「保存」 ボタンをクリック
- ④ 「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック
- ⑤ 「実行」 ボタンをクリック

(5) 結果解析

- ① 「シミュレーション」 ⇒ 「結果状況」 をクリック
- ② 「ELAPSED CPU TIME」 の値を記録する
- ③ 「OK」 ボタンをクリック

2. 固体系(球殻の厚さ $dr=0.5\text{\AA}$)の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック
- ② 入力データファイル Ni_bk_cry_02.inp を選択
- ③ 「開く」 ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

⑤ 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_bk_cry_05)を入力

⑥ 「保存」ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

② 「オプション」タブをクリック

③ 「粒子登録法の球殻の厚さ」欄に **0.5** と入力

④ 「適用」ボタンをクリック

⑤ 「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

① 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

② 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

③ 「実行」ボタンをクリック

(4) 結果解析

① 「シミュレーション」⇒「結果状況」をクリック

② 「ELAPSED CPU TIME」の値を記録する

③ 「OK」ボタンをクリック

3. 固体系(球殻の厚さ $dr=1.5\text{\AA}$)の場合

(1) モデリング

① 「ファイル」⇒「開く」をクリック

- ② 入力データファイル Ni_bk_cry_02.inp を選択
- ③ 「開く」 ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック
- ⑤ 「ファイル名」 欄に ファイル名(Ni_bk_cry_15)を入力
- ⑥ 「保存」 ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック
- ② 「オプション」 タブをクリック
- ③ 「粒子登録法の球殻の厚さ」 欄に **1.5** と入力
- ④ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑤ 「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」 ⇒ 「上書き保存」 をクリック
- ② 「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック
- ③ 「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「シミュレーション」 ⇒ 「結果状況」 をクリック
- ② 「ELAPSED CPU TIME」 の値を記録する
- ③ 「OK」 ボタンをクリック

4. 固体系(球殻の厚さ $dr=2.5\text{\AA}$)の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック
- ② 入力データファイル Ni_bk_cry_02.inp を選択
- ③ 「開く」ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ⑤ 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_bk_cry_25)を入力
- ⑥ 「保存」ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 「オプション」タブをクリック
- ③ 「粒子登録法の球殻の厚さ」欄に **2.5** と入力
- ④ 「適用」ボタンをクリック
- ⑤ 「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック
- ② 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ③ 「実行」ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「シミュレーション」⇒「結果状況」をクリック

- ② 「ELAPSED CPU TIME」の値を記録する
- ③ 「OK」 ボタンをクリック

5. 液体系の作成

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック
- ② 入力データファイル Ni_bk_cry_02.inp を選択
- ③ 「開く」 ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ⑤ 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_5000K)を入力
- ⑥ 「保存」 ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	5000 K
総ステップ数	10000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

- ③ 「適用」 ボタンをクリック

- ④ 「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック
- ② 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ③ 「実行」 ボタンをクリック

6. 液体系(球殻の厚さ $dr=0.2\text{\AA}$)の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック
- ② 入力データファイル Ni_5000K.inp を選択
- ③ 「開く」 ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」⇒「リスタート」をクリック
- ⑤ 「ファイル名」 欄に ファイル名(Ni_bk_melt_02)を入力
- ⑥ 「新規ジョブとしてリスタートする」にチェックを入れる
- ⑦ 「OK」 ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	2000 K
総ステップ数	10000 steps

時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

- ③ 「オプション」 タブをクリック
- ④ 「粒子登録法の球殻の厚さ」 欄に **0.2** と入力
- ⑤ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑥ 「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」 ⇒ 「上書き保存」 をクリック
- ② 「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック
- ③ 「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「シミュレーション」 ⇒ 「結果状況」 をクリック
- ② 「ELAPSED CPU TIME」 の値を記録する
- ③ 「OK」 ボタンをクリック

7. 液体系(球殻の厚さ $dr=0.5\text{\AA}$)の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック
- ② 入力データファイル Ni_bk_melt_02.inp を選択

- ③ 「開く」 ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック
- ⑤ 「ファイル名」 欄に ファイル名(Ni_bk_melt_05)を入力
- ⑥ 「保存」 ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック
- ② 「オプション」 タブをクリック
- ③ 「粒子登録法の球殻の厚さ」 欄に **0.5** と入力
- ④ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑤ 「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」 ⇒ 「上書き保存」 をクリック
- ② 「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック
- ③ 「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「シミュレーション」 ⇒ 「結果状況」 をクリック
- ② 「ELAPSED CPU TIME」 の値を記録する
- ③ 「OK」 ボタンをクリック

8. 液体系(球殻の厚さ $dr=1.5\text{\AA}$)の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック
- ② 入力データファイル Ni_bk_melt_02.inp を選択
- ③ 「開く」ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ⑤ 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_bk_melt_15)を入力
- ⑥ 「保存」ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 「オプション」タブをクリック
- ③ 「粒子登録法の球殻の厚さ」欄に **1.5** と入力
- ④ 「適用」ボタンをクリック
- ⑤ 「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック
- ② 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ③ 「実行」ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「シミュレーション」⇒「結果状況」をクリック
- ② 「ELAPSED CPU TIME」の値を記録する

- ③ 「OK」 ボタンをクリック

9. 液体系(球殻の厚さ $dr=2.5\text{\AA}$)の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック
- ② 入力データファイル Ni_bk_melt_02.inp を選択
- ③ 「開く」 ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ⑤ 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_bk_melt_25)を入力
- ⑥ 「保存」 ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 「オプション」 タブをクリック
- ③ 「粒子登録法の球殻の厚さ」欄に **2.5** と入力
- ④ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑤ 「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック
- ② 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ③ 「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「シミュレーション」⇒「結果状況」をクリック
- ② 「ELAPSED CPU TIME」の値を記録する
- ③ 「OK」ボタンをクリック

【例題 5】時間刻みの設定

1. 時間刻み幅 $dt=0.1$ fs の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「新規作成」をクリック
- ② 「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック
- ③ 「種類」欄で「テンプレート」を選択
- ④ 「グループ」欄で「基本単位系」を選択
- ⑤ 「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択
- ⑥ 「次へ」ボタンをクリック
- ⑦ 「原子」タブを選択
- ⑧ 「Ni」を選択
- ⑨ 「完了」ボタンをクリック
- ⑩ 「MD セル」タブを選択
- ⑪ 「基本セル定数」欄で $a=b=c=3.524$ に設定
- ⑫ 「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック
- ⑬ 「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック
- ⑭ 「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定
- ⑮ 「OK」ボタンをクリック
- ⑯ 「はい」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

- ① 「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

- ② 「組合せ」欄で「Ni -- Ni」を選択
- ③ 「設定」ボタンをクリック
- ④ 「共通ライブラリ¥Inorganic¥2Body¥Morse_Type¥FlahiveGraham」を選択
- ⑤ 「OK」ボタンをクリック
- ⑥ 「カットオフ距離」タブを選択
- ⑦ 「カットオフ距離」欄に 7 と入力
- ⑧ 「オプション」タブを選択
- ⑨ 「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす
- ⑩ 「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす
- ⑪ 「適用」ボタンをクリック
- ⑫ 「OK」ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	298 K
総ステップ数	50000 steps
時間刻み幅	0.1 fs
出力開始ステップ	500 step
出力間隔ステップ数	500 steps

- ③ 「適用」ボタンをクリック

- ④ 「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ② 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_ts_01)を入力
- ③ 「保存」 ボタンをクリック
- ④ 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ⑤ 「実行」 ボタンをクリック

(5) 結果解析

- ① 「結果」⇒「モニター変数」をクリック
- ② 「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
- ③ 「項目」欄で全てのチェックをはずす
- ④ 「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる
- ⑤ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑥ 「閉じる」 ボタンをクリック

2. 時間刻み幅 $dt=1$ fs の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック
- ② 入力データファイル Ni_ts_01.inp を選択
- ③ 「開く」 ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

⑤ 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_ts_1)を入力

⑥ 「保存」 ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

② 以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	298 K
総ステップ数	5000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	50 step
出力間隔ステップ数	50 steps

③ 「適用」 ボタンをクリック

④ 「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

① 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

② 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

③ 実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

① 「結果」⇒「モニター変数」をクリック

- ② 「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
- ③ 「項目」欄で全てのチェックをはずす
- ④ 「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる
- ⑤ 「適用」ボタンをクリック
- ⑥ 「閉じる」ボタンをクリック

3. 時間刻み幅 $dt=10$ fs の場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック
- ② 入力データファイル **Ni_ts_01.inp** を選択
- ③ 「開く」ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ⑤ 「ファイル名」欄に ファイル名(**Ni_ts_10**)を入力
- ⑥ 「保存」ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	298 K
総ステップ数	500 steps
時間刻み幅	10 fs
出力開始ステップ	5 step

出力間隔ステップ数	5 steps
-----------	---------

- ③ 「適用」 ボタンをクリック
- ④ 「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック
- ② 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ③ 実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「結果」⇒「モニター変数」をクリック
- ② 「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
- ③ 「項目」欄で全てのチェックをはずす
- ④ 「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる
- ⑤ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑥ 「閉じる」 ボタンをクリック

【例題 6】 アンサンブルによる物性値のゆらぎの違い

1. NEV アンサンブルの場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「新規作成」をクリック
- ② 「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック
- ③ 「種類」欄で「テンプレート」を選択
- ④ 「グループ」欄で「基本単位系」を選択
- ⑤ 「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択
- ⑥ 「次へ」 ボタンをクリック
- ⑦ 「原子」 タブを選択
- ⑧ 「Ni」を選択
- ⑨ 「完了」 ボタンをクリック
- ⑩ 「MD セル」 タブを選択
- ⑪ 「基本セル定数」欄で $a=b=c=3.524$ に設定
- ⑫ 「基本セル定数の設定を適用」 ボタンをクリック
- ⑬ 「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック
- ⑭ 「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定
- ⑮ 「OK」 ボタンをクリック
- ⑯ 「はい」 ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

- ① 「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

- ② 「組合せ」欄で「Ni -- Ni」を選択
- ③ 「設定」ボタンをクリック
- ④ 「共通ライブラリ ¥Inorganic¥2Body¥Morse_Type¥FlahiveGraham」を選択
- ⑤ 「OK」ボタンをクリック
- ⑥ 「カットオフ距離」タブを選択
- ⑦ 「カットオフ距離」欄に 7 と入力
- ⑧ 「オプション」タブを選択
- ⑨ 「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす
- ⑩ 「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす
- ⑪ 「適用」ボタンをクリック
- ⑫ 「OK」ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 以下の設定を行う

アンサンブル	NEV
温度	298 K
総ステップ数	5000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	10 step
出力間隔ステップ数	10 steps

- ③ 「適用」ボタンをクリック

- ④ 「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ② 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_ens_nev)を入力
- ③ 「保存」 ボタンをクリック
- ④ 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ⑤ 「実行」 ボタンをクリック

(5) 結果解析

- ① 「結果」⇒「モニター変数」をクリック
- ② 「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
- ③ 「項目」欄で「圧力」、「体積」、「温度」、「内部エネルギー」、「ポテンシャルエネルギー」のいずれかにチェックを入れる
- ④ 「プロット点」 ボタンをクリック
- ⑤ スライダーを移動し、プロット点数を 500 にする。
- ⑥ 「OK」 ボタンをクリック
- ⑦ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑧ 「閉じる」 ボタンをクリック

2. NTV アンサンブルの場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック
- ② 入力データファイル Ni_ens_nev.inp を選択

- ③ 「開く」 ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック
- ⑤ 「ファイル名」 欄に ファイル名(Ni_ens_ntv)を入力
- ⑥ 「保存」 ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック
- ② 以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	298 K
総ステップ数	5000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	10 step
出力間隔ステップ数	10 steps

- ③ 「適用」 ボタンをクリック
- ④ 「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」 ⇒ 「上書き保存」 をクリック
- ② 「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック
- ③ 「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「結果」⇒「モニター変数」をクリック
- ② 「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
- ③ 「項目」欄で「圧力」、「体積」、「温度」、「内部エネルギー」、「ポテンシャルエネルギー」のいずれかにチェックを入れる
- ④ 「プロット点」ボタンをクリック
- ⑤ スライダーを移動し、プロット点数を 500 にする。
- ⑥ 「OK」ボタンをクリック
- ⑦ 「適用」ボタンをクリック
- ⑧ 「閉じる」ボタンをクリック

3. NTP アンサンブルの場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック
- ② 入力データファイル Ni_ens_nev.inp を選択
- ③ 「開く」ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ⑤ 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_ens_ntp)を入力
- ⑥ 「保存」ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
--------	-----

温度	298 K
圧力	1 atm
総ステップ数	5000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	10 step
出力間隔ステップ数	10 steps

- ③ 「適用」 ボタンをクリック
- ④ 「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック
- ② 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ③ 「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「結果」⇒「モニター変数」をクリック
- ② 「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
- ③ 「項目」欄で「圧力」、「体積」、「温度」、「内部エネルギー」、「ポテンシャルエネルギー」のいずれかにチェックを入れる
- ④ 「プロット点」 ボタンをクリック
- ⑤ スライダーを移動し、プロット点数を 500 にする。
- ⑥ 「OK」 ボタンをクリック
- ⑦ 「適用」 ボタンをクリック

⑧ 「閉じる」 ボタンをクリック

【例題 7】ポテンシャルの設定

1. レナードジョーンズポテンシャルの場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「新規作成」をクリック
- ② 「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック
- ③ 「種類」欄で「テンプレート」を選択
- ④ 「グループ」欄で「基本単位系」を選択
- ⑤ 「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択
- ⑥ 「次へ」ボタンをクリック
- ⑦ 「原子」タブを選択
- ⑧ 「Ni」を選択
- ⑨ 「完了」ボタンをクリック
- ⑩ 「MD セル」タブを選択
- ⑪ 「基本セル定数」欄で $a=b=c=3.524$ に設定
- ⑫ 「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック
- ⑬ 「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック
- ⑭ 「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定
- ⑮ 「OK」ボタンをクリック
- ⑯ 「はい」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

- ① 「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

- ② 「組合せ」欄で「Ni -- Ni」を選択
- ③ 「設定」ボタンをクリック
- ④ 「共通ライブラリ¥Inorganic¥2Body¥LennardJones_Type¥HaliciogluPound」を選択
- ⑤ 「OK」ボタンをクリック
- ⑥ 「カットオフ距離」タブを選択
- ⑦ 「カットオフ距離」欄に 7 と入力
- ⑧ 「オプション」タブを選択
- ⑨ 「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす
- ⑩ 「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす
- ⑪ 「適用」ボタンをクリック
- ⑫ 「OK」ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

- ① 「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
- ② 以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	298 K
総ステップ数	5000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	50 step
出力間隔ステップ数	50 steps

- ③ 「適用」ボタンをクリック

- ④ 「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ② 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_pot_LJ)を入力
- ③ 「保存」 ボタンをクリック
- ④ 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ⑤ 「実行」 ボタンをクリック

(5) 結果解析

- ① 「結果」⇒「モニター変数」をクリック
- ② 「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
- ③ 「項目」欄で全てのチェックをはずす
- ④ 「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる
- ⑤ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑥ 「閉じる」 ボタンをクリック

2. モースポテンシャルの場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック
- ② 入力データファイル Ni_pot_LJ.inp を選択
- ③ 「開く」 ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

- ⑤ 「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_pot_Morse)を入力
- ⑥ 「保存」 ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

- ① 「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック
- ② 「組合せ」欄で「Ni -- Ni」を選択
- ③ 「設定」ボタンをクリック
- ④ 「共通ライブラリ ¥Inorganic¥2Body¥Morse_Type¥FlahiveGraham」を選択
- ⑤ 「OK」ボタンをクリック
- ⑥ 「適用」ボタンをクリック
- ⑦ 「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック
- ② 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック
- ③ 「実行」ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「結果」⇒「モニター変数」をクリック
- ② 「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
- ③ 「項目」欄で全てのチェックをはずす
- ④ 「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる
- ⑤ 「適用」ボタンをクリック

- ⑥ 「閉じる」ボタンをクリック

3. GEAM ポテンシャルの場合

(1) モデリング

- ① 「ファイル」⇒「開く」をクリック
- ② 入力データファイル **Ni_pot_LJ.inp** を選択
- ③ 「開く」ボタンをクリック
- ④ 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
- ⑤ 「ファイル名」欄に ファイル名(**Ni_pot_GEAM**)を入力
- ⑥ 「保存」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

- ① 「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック
- ② 「組合せ」欄で「**Ni -- Ni**」を選択
- ③ 「設定」ボタンをクリック
- ④ 「共通ライブラリ¥Inorganic¥EAM¥GeneralizedEAM_Type¥GEAM」を選択
- ⑤ 「OK」ボタンをクリック
- ⑥ 「適用」ボタンをクリック
- ⑦ 「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

- ① 「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック
- ② 「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

③ 「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

- ① 「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック
- ② 「グラフ」 ⇒ 「表示項目」 をクリック
- ③ 「項目」 欄で全てのチェックをはずす
- ④ 「項目」 欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる
- ⑤ 「適用」 ボタンをクリック
- ⑥ 「閉じる」 ボタンをクリック