

SCIGRESS ME チュートリアル

実践分子動力学・演習

富士通(株)

2013/10/23

【演習問題 1】融点の求め方（自己拡散係数から求める方法）

1. 緩和計算

(1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MDセルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「Diamond(C)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Si」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄で $a=b=c=5.431$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=8 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Si -- Si」を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic¥3Body¥Tersoff_Type¥Tersoff89¥Tersoff89_T3」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	1800 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

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Si_mp_1800K_D_T3)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

(5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「格子定数(a)」、「格子定数(b)」、「格子定数(c)」にチェックを入れる

「プロット点」ボタンをクリック

「プロット点数」を 1000 に設定

「OK」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

a、b、cの平均値を求め、それらの平均を緩和後のセルサイズとする

2. 本計算

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル Si_mp_1800K_D_T3.inp を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Si_mp_1800K_D_NTV_T3)を入力

「保存」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄の a、b、c に 1.(5) で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	1800 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

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

「結果」 ⇒ 「二次解析」 ⇒ 「平均二乗変位」 をクリック

「解析開始時間」 を 100 に設定

「時系列の長さ」 を 201 に設定

「詳細設定」 ボタンをクリック

「時系列の個数」 を 700 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「解析」 ⇒ 「計算」 をクリック

「OK」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「表示」 ⇒ 「グラフ表示」 をクリック

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「保存する場所」 を指定

「ファイル名」 欄に ファイル名(Si_mp_1800K_D_NTV_T3)を入力

「保存」 ボタンをクリック

表計算・グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて CSV ファイルから近似直線の傾きを求め、アインシュタインの式から自己拡散定数を得る

3. 融点を求める

(1) 1.と同様にして、2100, 2400, 2700,3000K の緩和計算を行う

(2) 2.と同様にして、2100, 2400, 2700,3000K の本計算を行い、自己拡散定数を求める

- (3) グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて、温度と自己拡散定数のグラフを作成する
- (4) 拡散係数が急激に増加する温度を融点とする

【演習問題 1】融点の求め方（固液二相計算から求める方法）

1. 緩和計算

(1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MDセルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「Diamond(C)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Si」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄で $a=b=c=5.431$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=8、c 軸=16 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Si -- Si」を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic ¥3Body ¥Tersoff_Type ¥Tersoff89 ¥Tersoff89_T3」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	2100 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
MD セルの形状	直方体を保つ

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Si_2100K)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(5) 結果解析

「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック

「グラフ」 ⇒ 「表示項目」 をクリック

「項目」 欄で全てのチェックをはずす

「項目」 欄で「格子定数(a)」、「格子定数(b)」、「格子定数(c)」 にチェックを入れる

「プロット点」 ボタンをクリック

「プロット点数」 を 1000 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」 ⇒ 「統計情報」 をクリック

「2点選択」 ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

a、b、の平均値を求め、それらの平均を緩和後のセルサイズ a,b とする

cの平均値を求め、緩和後のセルサイズ c とする

2. 二相モデル作成

(1) モデリング

「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック

入力データファイル **Si_2100K.inp** を選択

「開く」 ボタンをクリック

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(**Si_2100K_melt**)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「MD セル」 タブを選択

「基本セル定数」 欄の **a**、**b**、**c** に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数の設定を適用」 ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグし下半分の原子を選択する

「表示」 ⇒ 「プロパティ」 をクリック

「属性タブ」 を選択

「速度一定」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「表示」 ⇒ 「原子と結合の表示」 ⇒ 「原子の属性による色分け」 をクリックし、属性の設定状況を確認

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」 ⇒ 「ポテンシャル関数の設定」 をクリック

「組合せ」 欄で 「**Si -- Si**」 を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ」 **Inorganic** **Body** **Tersoff_Type** **Tersoff89** **Tersoff89_T3** を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

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

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

3. 本計算

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Si_2100K_melt.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック
「ファイル名」欄にファイル名 (Si_2100K_ble) を入力
「新規ジョブとしてリスタートする」にチェックをいれる
「OK」ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	2100 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
MD セルの形状	直方体を保つ

「適用」ボタンをクリック
「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

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

「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

「結果」 ⇒ 「原子配置」 をクリック

「設定」 ⇒ 「原子配置」 をクリック

「原子/分子」 欄の **Si** をクリックして非選択状態にする

「結線」 ボタンをクリックする

「原子ペア」 で、いずれも **Si (Si)** を選択する

「距離」 の 「(下限)」 を **2.5** に設定する

「閉じる」 ボタンをクリック

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

スライダーを最終ステップ(1000)に移動する

4. 界面移動による融点見積もり

(1) 1.と同様にして、**2400K** および **2700 K** の緩和計算を行う

(2) 2.と同様にして、**2400K** および **2700 K** の二相モデルを作成する

(3) 3.と同様にして、**2400K**, および **2700 K** の本計算を行う

(4) 界面移動の様子から **2100K**, **2400K**, **2700K** の中から融点に近い温度を求める

ここでは、**2400K** が融点に近いものとする

5. 融点を求める

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Si_2400K_ble.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック

「ファイル名」欄にファイル名 (**Si_2400K_ble_NPH**) を入力

「OK」ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NPH
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
MD セルの形状	直方体を保つ

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

(4) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「閉じる」ボタン  をクリック

(5) リスタートデータ作成

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック

「OK」ボタンをクリック

(6) 融点を求める

平衡状態となるまでリスタート計算を繰り返す

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「温度」のみにチェックをいれる

「プロット点」ボタンをクリック

「プロット点数」を最大値に設定

「OK」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタン」をクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

T (温度)のグラフの平衡状態の領域の両端をクリック

「平均値」欄に表示された値を融点とする

【演習問題 2】 固相成長

1. 緩和

(1) モデリング

「ファイル」 ⇒ 「新規作成」 をクリック

「モデリング」 ⇒ 「MDセルの作成」 をクリック

「種類」 欄で 「テンプレート」 を選択

「グループ」 欄で 「基本単位形」 を選択

「テンプレート」 欄で 「Diamond(C)」 を選択

「次へ」 ボタンをクリック

「原子」 タブを選択

「Si」 を選択

「完了」 ボタンをクリック

「MDセル」 タブを選択

「基本セル定数」 欄で $a=b=c=5.431$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」 ボタンをクリック

「モデリング」 ⇒ 「MDセルの積み重ね」 をクリック

「積み重ね数」 欄で a 軸=b 軸=5、c 軸=13 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「はい」 ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」 ⇒ 「ポテンシャル関数の設定」 をクリック

「組合せ」 欄で 「Si -- Si」 を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic¥3Body¥Tersoff_Type¥Tersoff89¥Tersoff89_T3」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	1800 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
MD セルの形状	直方体を保つ

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Si_SPE_rlx)を入力

「保存」ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

2. 熔融

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Si_SPE_rlx.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック

「ファイル名」欄にファイル名 (**Si_SPE_melt**) を入力

「新規ジョブとしてリスタートする」にチェックをいれる

「OK」ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグし、下 10 層の原子を選択する

「表示」⇒「プロパティ」をクリック

「属性タブ」を選択

「速度一定」を選択

「OK」ボタンをクリック

「表示」⇒「原子と結合の表示」⇒「原子の属性による色分け」をクリックし、属性の設定状況を確認

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

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

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「上書き保存」 をクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

3. 冷却

(1) モデリング

「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック

入力データファイル **Si_SPE_melt.inp** を選択

「開く」 ボタンをクリック

「ファイル」 ⇒ 「リスタート」 をクリック

「ファイル名」 欄にファイル名 (**Si_SPE_quench**) を入力

「OK」 ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	可変
総ステップ数	320000 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

「温度」欄の「設定」ボタンをクリック

「追加」ボタンをクリック

「時間」欄に 320000 を設定

「温度」欄の「値」に 1800 を設定

「OK」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」 ボタンをクリック

4. 本計算

(1) モデリング

「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック

入力データファイル **Si_SPE_quench.inp** を選択

「開く」 ボタンをクリック

「ファイル」 ⇒ 「リスタート」 をクリック

「ファイル名」 欄にファイル名 (**Si_SPE_T3**) を入力

「新規ジョブとしてリスタートする」 にチェックをいれる

「OK」 ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	1800 K
圧力	1 atm
総ステップ数	200000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	1000 step
出力間隔ステップ数	1000 steps
MD セルの形状	直方体を保つ

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「上書き保存」 をクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(4) リスタートデータの作成

「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック

入力データファイル **Si_SPE_T3.inp** を選択

「開く」 ボタンをクリック

「ファイル」 ⇒ 「リスタート」 をクリック

「OK」 ボタンをクリック

(5) リスタート計算の実行

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(6) 結果解析

「結果」 ⇒ 「原子配置」 をクリック

「設定」 ⇒ 「原子配置」 をクリック

「原子/分子」欄の **Si** をクリックして非選択状態にする

「結線」ボタンをクリックする

「原子ペア」で、いずれも **Si (Si)** を選択する

「距離」の「(下限)」を **2.5** に設定する

「閉じる」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

スライダーを移動し、構造の時間変化を見る

「閉じる」ボタン  をクリック

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる

「プロット点」ボタンをクリック

「プロット点数」を **4000** に設定

「OK」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

【演習問題 3】線膨張係数の算出

(1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MDセルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Ni」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄で $a=b=c=3.524$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「すべて選択」ボタンをクリック

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic ¥2Body ¥Morse_Type ¥FlahiveGraham」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 7 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	200 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

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_cte_200K)を入力

「保存」ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

(5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「格子定数(a)」、「格子定数(b)」、「格子定数(c)」にチェックを入れる

「プロット点」ボタンをクリック

「プロット点数」を 1000 に設定

「OK」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

各グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

各グラフで「平均値」欄に表示された値を平均し、この温度での MD セル辺長とする

(6) 線熱膨張係数を求める

250, 300, 350, 400K での MD セル辺長を(1)~(5)と同様にして求める

グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて、温度と MD セル辺長のグラフを作成する

グラフの直線近似式から線熱膨張係数を求める

【演習問題 4】 比熱の算出と材料依存性

1. 緩和計算

(1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MDセルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Ni」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄で $a=b=c=3.524$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=4 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Ni -- Ni」を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic ¥EAM ¥GeneralizedEAM_Type ¥GEAM」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「カットオフ距離」 タブを選択

「カットオフ距離」 欄に 7 と入力

「オプション」 タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」 のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」 のチェックをはずす

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	293 K
圧力	1 atm
総ステップ数	10000 steps
時間刻み幅	0.5 fs
出力開始ステップ	10 step
出力間隔ステップ数	10 steps
MD セルの形状	立方体を保つ

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Ni_SHC_293K)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(5) 結果解析

「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック

「グラフ」 ⇒ 「表示項目」 をクリック

「項目」 欄で全てのチェックをはずす

「項目」 欄で「格子定数(a,b,c)」にチェックを入れる

「プロット点」 ボタンをクリック

「プロット点数」 を 1000 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」 ⇒ 「統計情報」 をクリック

「2点選択」 ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

グラフで「平均値」欄に表示された値をこの温度での MD セル辺長とする

2. 本計算

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル Ni_SHC_293K.inp を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Ni_SHC_293K_DP)を入力

「保存」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄の a、b、c に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	293 K
総ステップ数	10000 steps
時間刻み幅	0.5 fs
出力開始ステップ	10 step
出力間隔ステップ数	10 steps

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「上書き保存」 をクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック

「グラフ」 ⇒ 「表示項目」 をクリック

「項目」 欄で全てのチェックをはずす

「項目」 欄で「内部エネルギー」 にチェックを入れる

「プロット点」 ボタンをクリック

「プロット点数」 を 1000 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」 ⇒ 「統計情報」 をクリック

「2点選択」 ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

グラフで「平均値」 欄に表示された値をこの温度での内部エネルギーとする

3. モル比熱を求める

- (1) 1.と同様にして 298、303K での緩和計算を行う
- (2) 2.と同様にして 298、303K での内部エネルギーを求める
- (3) グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて、温度と 1mol 当たりの内部エネルギーのグラフを作成する
- (4) グラフの直線近似式の傾きからモル比熱を求める

※ Ag, Au, Cu, Pd, Pt についても同様に算出する

【演習問題 5】アモルファス構造の動径分布関数

1. 緩和計算(結晶)

(1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MDセルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「Diamond(C)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Si」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄で $a=b=c=5.431$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Si -- Si」を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic¥3Body¥Tersoff_Type¥Tersoff89¥Tersoff89_T3」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	300 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
MD セルの形状	立方体を保つ

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Si_PCF_rlx_T3)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(5) 結果解析

「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック

「グラフ」 ⇒ 「表示項目」 をクリック

「項目」 欄で全てのチェックをはずす

「項目」 欄で「格子定数(a,b,c)」 にチェックを入れる

「プロット点」 ボタンをクリック

「プロット点数」 を 1000 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」 ⇒ 「統計情報」 をクリック

「2点選択」 ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

グラフで「平均値」 欄に表示された値を緩和後の MD セル辺長とする

2. 溶融

(1) モデリング

「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック

入力データファイル Si_PCF_rlx_T3.inp を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Si_PCF_melt_T3)を入力

「保存」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄の a、b、c に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

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

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

3. 冷却

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Si_PCF_melt_T3.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック

「ファイル名」欄にファイル名 (**Si_PCF_quench_T3**) を入力

「OK」ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	可変
総ステップ数	470000 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

「温度」欄の「設定」ボタンをクリック

「追加」 ボタンをクリック
「時間」 欄に 470000 を設定
「温度」 欄の「値」に 300 を設定
「OK」 ボタンをクリック
「OK」 ボタンをクリック
「適用」 ボタンをクリック
「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

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

4. 緩和計算(アモルファス)

(1) モデリング

「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック
入力データファイル **Si_PCF_quench_T3.inp** を選択
「開く」 ボタンをクリック
「ファイル」 ⇒ 「リスタート」 をクリック
「ファイル名」 欄にファイル名 (**Si_PCF_amorphous_T3**) を入力
「OK」 ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	300 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

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

(4) 結果解析

「結果」⇒「二次解析」⇒「二体相関関数・積算配位数」をクリック

「解析開始時間」を 5300 に設定

「時系列の長さ」を 5800 に設定

「解析」⇒「計算」をクリック

「OK」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「表示」⇒「グラフ表示」をクリック

【演習問題 6】拡散係数の求め方

1. 完全結晶の場合

(1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MDセルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「BCC(a_Fe)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「完了」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=8 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Fe -- Fe」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥EAM¥GeneralizedEAM_Type¥GEAM」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 7 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	1000 K
総ステップ数	1000000 steps
時間刻み幅	0.5 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Fe_1000K_L)を入力

「保存」ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

(5) 結果解析

「結果」⇒「原子配置」をクリック

「設定」⇒「軌跡」をクリック

「サンプリング点数」を 10000 に設定

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

軌跡を確認後、「ファイル」⇒「終了」をクリック

「結果」⇒「二次解析」⇒「平均二乗変位」をクリック

「解析開始時間」を 20 に設定

「時系列の長さ」を 301 に設定

「詳細設定」ボタンをクリック

「時系列の個数」を 900 に設定

「OK」ボタンをクリック

「解析」⇒「計算」をクリック

「OK」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「表示」⇒「グラフ表示」をクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「保存する場所」を指定

「ファイル名」欄に ファイル名(Fe_1000K_L)を入力

「保存」ボタンをクリック

表計算・グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて CSV ファイルから近似直線の傾きを求め、アインシュタインの式から自己拡散定数を得る

2. 自己格子間原子を配置した場合

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Fe_1000K_L.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(**Fe_SIA_1000K_L**)を入力

「保存」ボタンをクリック

「編集」⇒「原子・分子の挿入」をクリック

「原子」タブを選択

「Fe」を選択

「座標値」欄で **a=0.5, b=0.5, c=0.5625** と設定

「挿入」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「**Fe -- Fe**」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic ¥EAM ¥GeneralizedEAM_Type ¥GEAM」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 7 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

(4) 結果解析

「結果」⇒「原子配置」をクリック

「設定」⇒「軌跡」をクリック

「サンプリング点数」を 10000 に設定

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

軌跡を確認後、「ファイル」⇒「終了」をクリック

「結果」⇒「二次解析」⇒「平均二乗変位」をクリック

「解析開始時間」を 20 に設定

「時系列の長さ」を 301 に設定

「詳細設定」ボタンをクリック

「時系列の個数」を 900 に設定

「OK」ボタンをクリック

「解析」⇒「計算」をクリック

「OK」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「表示」⇒「グラフ表示」をクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「保存する場所」を指定

「ファイル名」欄に ファイル名(Fe_SIA_1000K_L)を入力

「保存」ボタンをクリック

表計算・グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて CSV ファイルから近似直線の傾きを求め、アインシュタインの式から自己拡散定数を得る

3. 自己格子間原子近傍の 1 原子を Cu と置換した場合

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル Fe_SIA_1000K_L.inp を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Cu_diff_in_Fe_1000K_L)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「原子・分子一覧」 タブを選択

座標(0.500000, 0.500000, 0.500000)の原子を選択

「置換」 ボタンをクリック

「原子」 タブを選択

「Cu」 を選択

「置換」 ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」 ⇒ 「ポテンシャル関数の設定」 をクリック

「すべて選択」 ボタンをクリック

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥EAM¥GeneralizedEAM_Type¥GEAM」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「カットオフ距離」 タブを選択

「カットオフ距離」 欄に 7 と入力

「オプション」 タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」 のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」 のチェックをはずす

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

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

(4) 結果解析

「結果」⇒「原子配置」をクリック
「設定」⇒「軌跡」をクリック
「サンプリング点数」を 10000 に設定
「Cu」のチェックをはずす
「適用」ボタンをクリック

Fe の軌跡を確認後、「Cu」にチェックを入れ、「Fe」のチェックをはずす
「適用ボタンをクリック」
「閉じる」ボタンをクリック

Cu の軌跡を確認後、「ファイル」⇒「終了」をクリック
「結果」⇒「二次解析」⇒「平均二乗変位」をクリック
「解析開始時間」を 20 に設定
「時系列の長さ」を 301 に設定
「詳細設定」ボタンをクリック
「時系列の個数」を 900 に設定
「OK」ボタンをクリック
「解析」⇒「計算」をクリック
「OK」ボタンをクリック
「閉じる」ボタンをクリック

「表示」⇒「グラフ表示」をクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「保存する場所」を指定

「ファイル名」欄に ファイル名(Cu_diff_in_Fe_1000K_L)を入力

「保存」ボタンをクリック

表計算・グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて CSV ファイルから近似直線の傾きを求め、アインシュタインの式から自己拡散定数を得る

【演習問題 7】 弾性定数の求め方（ひずみ制御）

1. 応力がゼロになるセルサイズの算出

(1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MDセルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「BCC(a_Fe)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「完了」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄で $a=b=c=2.8665$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Fe -- Fe」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥EAM¥FinnisSinclair_Type¥FS」を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	0.1 K
圧力	1 atm
総ステップ数	5000 steps
時間刻み幅	0.5 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Fe_1)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「格子定数(a)」、「格子定数(b)」、「格子定数(c)」にチェックを入れる

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

a、b、cの平均値を求め、それらの平均を緩和後のセルサイズとする

2. C_{11} , C_{12} を求める

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Fe_1.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(**Fe_2**)を入力

「保存」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄の b、c に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数」欄の **a** に 1.(5) で求めた 緩和後のセルサイズの 1% 短くした値 を設定
「基本セル定数の設定を適用」 ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	0.1 K
総ステップ数	5000 steps
時間刻み幅	0.5 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「上書き保存」 をクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
「項目」欄で全てのチェックをはずす
「項目」欄で「圧力 X」、「圧力 Y」にチェックを入れる
「適用」ボタンをクリック
「閉じる」ボタンをクリック
「ツール」⇒「統計情報」をクリック
「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

PX, PY の平均値を求め、応力 σ_x , σ_y とする

応力ひずみの関係式から弾性定数 C_{11} , C_{12} を求める

3. C_{44} を求める

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Fe_1.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(**Fe_3**)を入力

「保存」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄の a、b、c に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数」欄の Alpha、Beta、Gamma に 88.849 を設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	0.1 K
総ステップ数	5000 steps
時間刻み幅	0.5 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

(4) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「圧力 XY」にチェックを入れる

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

PXY の平均値を求め、応力 τ とする

応力ひずみの関係式から弾性定数 C_{44} を求める

【演習問題 8】弾性定数の求め方（応力制御）

1. 応力がゼロになるセルサイズの算出

(1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MDセルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「BCC(a_Fe)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「完了」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄で $a=b=c=2.8665$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Fe -- Fe」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥EAM¥FinnisSinclair_Type¥FS」を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	0.1 K
圧力	1 atm
総ステップ数	5000 steps
時間刻み幅	0.5 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Fe_2_1)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「格子定数(a)」、「格子定数(b)」、「格子定数(c)」にチェックを入れる

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

a、b、cの平均値を求め、それらの平均を緩和後のセルサイズとする

2. C_{11} , C_{12} を求める

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Fe_2_1.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(**Fe_2_2**)を入力

「保存」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄の a、b、c に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数の設定を適用」 ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック

「外場」 タブを選択

印加応力因子 $GAM(1,1) = 1e-27$ を設定

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「上書き保存」 をクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック

「グラフ」 ⇒ 「表示項目」 をクリック

「項目」 欄で全てのチェックをはずす

「項目」 欄で「格子定数(a)」、「格子定数(b)」、「格子定数(c)」にチェックを入れる

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」 ⇒ 「統計情報」 をクリック

「2点選択」 ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

a、b、cの平均値を求め、応力印加後のセルサイズとする
応力ひずみの関係式から弾性定数 C_{11} , C_{12} を求める

3. C_{44} を求める

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Fe_2_1.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(**Fe_2_3**)を入力

「保存」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄の a、b、c に 1.(5) で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

「外場」タブを選択

印加応力因子 $GAM(1,2)=GAM(2,1) = 1e-27$ を設定

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

(4) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「格子定数(Gamma)」にチェックを入れる

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

平均値を求め、応力印加後の角 Γ とする

応力ひずみの関係式から弾性定数 C_{44} を求める

【演習問題 9】 空孔形成エネルギーの算出

1. 凝集エネルギーの算出

(1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MDセルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「BCC(a_Fe)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「完了」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄で $a=b=c=2.8665$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Fe -- Fe」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥2Body¥Johnson_Type¥Johnson」を選択

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

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	0.01 K
総ステップ数	2 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	1 step
出力間隔ステップ数	1 steps

「適用」 ボタンをクリック
「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

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

(5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック
「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
「項目」欄で全てのチェックをはずす
「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる
「適用」ボタンをクリック
「閉じる」ボタンをクリック
「ツール」⇒「プロット点情報」をクリック
「プロット点の選択」ボタンをクリック
グラフの点をクリック
「座標値」欄の「Y」の値をこの系のポテンシャルエネルギーとする。
定義式から凝集エネルギーを求める

2. 空孔形成エネルギーの算出

(1) モデリング

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

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Fe_Johnson_Ed)を入力

「保存」ボタンをクリック

「原子・分子一覧」タブを選択

座標(0.5, 0.5, 0.5)の Fe を選択

「削除」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Fe -- Fe」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥2Body¥Johnson_Type¥Johnson」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 7 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	0.01 K
総ステップ数	10000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	1 step
出力間隔ステップ数	1 steps

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

(5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「プロット点情報」をクリック

「プロット点の選択」ボタンをクリック

グラフの最初の点をクリック

「座標値」欄の「Y」の値を非緩和構造でのポテンシャルエネルギーとする。

定義式から空孔形成エネルギーを求める

「プロット点の選択」ボタンをクリック

グラフの最後の点をクリック

「座標値」欄の「Y」の値を緩和構造でのポテンシャルエネルギーとする。

定義式から空孔形成エネルギーを求める

3. ジョンソンポテンシャルと FS ポテンシャルの比較

- (1) 1.と同様にして、FS ポテンシャルを用いた場合の凝集エネルギーを求める
- (2) 2.と同様にして、FS ポテンシャルを用いた場合の空孔形成エネルギーを求める
- (3) ジョンソンポテンシャルと FS ポテンシャルで凝集エネルギーを比較する
- (4) ジョンソンポテンシャルと FS ポテンシャルで空孔形成エネルギーを比較する

【演習問題 10】 表面エネルギー

1. バルクモデル

(1) モデリング

「ファイル」 ⇒ 「新規作成」 をクリック

「モデリング」 ⇒ 「MDセルの作成」 をクリック

「種類」 欄で 「テンプレート」 を選択

「グループ」 欄で 「基本単位形」 を選択

「テンプレート」 欄で 「FCC(Ag)」 を選択

「次へ」 ボタンをクリック

「原子」 タブを選択

「Cu」 を選択

「完了」 ボタンをクリック

「MDセル」 タブを選択

「基本セル定数」 欄に $a=b=c=3.614812$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」 ボタンをクリック

「モデリング」 ⇒ 「MDセルの積み重ね」 をクリック

「積み重ね数」 欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「はい」 ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」 ⇒ 「ポテンシャル関数の設定」 をクリック

「組合せ」 欄で 「Cu -- Cu」 を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic¥EAM¥GeneralizedEAM_Type¥GEAM」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「カットオフ距離」 タブを選択

「カットオフ距離」 欄に 7 と入力

「オプション」 タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」 のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」 のチェックをはずす

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	0.01 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

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Cu_Bulk_NTV)を入力

「保存」ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

(5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

平均値を求め、バルクモデルのポテンシャルエネルギーとする

2. 薄膜モデル

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル Cu_Bulk_NTV.inp を選択

「開く」 ボタンをクリック

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Cu_Surf_NTV)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「モデリング」 ⇒ 「MDセルの積み重ね」 をクリック

「積み重ね数」 欄で c 軸=3 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「はい」 ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグして、上 10 層の原子を選択

「編集」 ⇒ 「削除」 をクリック

画面内でクリック、ドラッグして、下 10 層の原子を選択

「編集」 ⇒ 「削除」 をクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」 ⇒ 「ポテンシャル関数の設定」 をクリック

「組合せ」 欄で 「Cu -- Cu」 を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic ¥EAM ¥GeneralizedEAM_Type ¥GEAM」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「カットオフ距離」 タブを選択

「カットオフ距離」 欄に 7 と入力

「オプション」 タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす
「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす
「適用」ボタンをクリック
「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

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

(4) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック
「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
「項目」欄で全てのチェックをはずす
「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる
「適用」ボタンをクリック
「閉じる」ボタンをクリック
「ツール」⇒「統計情報」をクリック
「2点選択」ボタンをクリック
グラフの平衡状態の領域の両端をクリック
平均値を求め、薄膜モデルのポテンシャルエネルギーとする

3. 表面エネルギーを求める

1.(5)で求めたバルクのエネルギーと 2.(4)で求めた薄膜のエネルギーから表面エネルギーを求める

※ Ni についても同様に表面エネルギーを求める

【演習問題 11】 界面エネルギー

1. Cu の歪んだバルクモデル

(1) モデリング

「ファイル」 ⇒ 「新規作成」 をクリック

「モデリング」 ⇒ 「MD セルの作成」 をクリック

「種類」 欄で 「テンプレート」 を選択

「グループ」 欄で 「基本単位形」 を選択

「テンプレート」 欄で 「FCC(Ag)」 を選択

「次へ」 ボタンをクリック

「原子」 タブを選択

「Cu」 を選択

「完了」 ボタンをクリック

「MD セル」 タブを選択

「基本セル定数」 欄に $a=b=c=3.614812$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」 ボタンをクリック

「モデリング」 ⇒ 「MD セルの積み重ね」 をクリック

「積み重ね数」 欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「はい」 ボタンをクリック

「MD セル」 タブを選択

「基本セル定数」 欄で $a=b=17.8329$ に設定

「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

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Cu -- Cu」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥EAM¥GeneralizedEAM_Type¥GEAM」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 7 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	0.01 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

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Cu_Bulk_NTV_d)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(5) 結果解析

「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック

「グラフ」 ⇒ 「表示項目」 をクリック

「項目」 欄で全てのチェックをはずす

「項目」 欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」 ⇒ 「統計情報」 をクリック

「2点選択」 ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

平均値を求め、この系のポテンシャルエネルギーとする

2. Niの歪んだバルクモデル

(1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MDセルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Ni」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄に $a=b=c=3.519618$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸= b 軸= c 軸=5 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄で $a=b=17.8329$ に設定

「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

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

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	0.01 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

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Ni_Bulk_NTV_d)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(5) 結果解析

「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック

「グラフ」 ⇒ 「表示項目」 をクリック

「項目」 欄で全てのチェックをはずす

「項目」 欄で「ポテンシャルエネルギー」 にチェックを入れる

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」 ⇒ 「統計情報」 をクリック

「2点選択」 ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

平均値を求め、この系のポテンシャルエネルギーとする

3. CuNi バルクモデル

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル Ni_Bulk_NTV_d.inp を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(CuNi_Bulk_NTV)を入力

「保存」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で c 軸=2 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄で c=35.67215 に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグしセルの上半分の原子を選択

「編集」⇒「原子・分子の挿入」をクリック

「原子」タブを選択

「Cu」を選択

「置換」ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「すべて選択」ボタンをクリック

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic¥EAM¥GeneralizedEAM_Type¥GEAM」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「カットオフ距離」 タブを選択

「カットオフ距離」 欄に 7 と入力

「オプション」 タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」 のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」 のチェックをはずす

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「上書き保存」 をクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(4) 結果解析

「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック

「グラフ」 ⇒ 「表示項目」 をクリック

「項目」 欄で全てのチェックをはずす

「項目」 欄で「ポテンシャルエネルギー」 にチェックを入れる

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

平均値を求め、この系のポテンシャルエネルギーとする

4. 界面エネルギーを求める

1.(5)、2.(5)、3.(5)で得たポテンシャルエネルギーと界面の表面積から界面エネルギーを求める

【演習問題 12】カーボンナノチューブの座屈変形

1. 荷重 1.0×10^{-10} N

(1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄で $a=b=c=68.336511$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「編集」⇒「原子・分子の挿入」をクリック

「分子」タブを選択

「CNT_10_10_20」を選択

「詳細」ボタンをクリック

「分子の配向」欄で $\theta=90$ に設定

「挿入」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグして、カーボンナノチューブの左端三層を選択

「表示」⇒「プロパティ」をクリック

「属性」タブを選択

「速度一定」を選択

「OK」ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグして、カーボンナノチューブの右端三層を選択

「表示」⇒「プロパティ」をクリック

「属性」タブを選択

「外力」を選択

FX=FY= 0、FZ= -1e-27 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「表示」 ⇒ 「原子と結合の表示」 ⇒ 「原子の属性による色分け」 をクリック
属性の設定を確認する

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」 ⇒ 「ポテンシャル関数の設定」 をクリック

「組合せ」 欄で 「C -- C」 を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic¥3Body¥Tersoff_Type¥Tersoff89¥Tersoff89_01」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック

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	0.5 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(CNT-Buckling)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

2. 荷重 8.0×10^{-11} N

(1) モデリング

「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック

入力データファイル CNT-Buckling.inp を選択

「開く」 ボタンをクリック

「ファイル」 ⇒ 「リスタート」 をクリック

「OK」 ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグして、カーボンナノチューブの右端三層を選択

「表示」 ⇒ 「プロパティ」 をクリック

「属性」 タブを選択

FZ= $-8e-28$ に設定

「OK」 ボタンをクリック

(2) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

3. 荷重重 8.0×10^{-11} N (リスタート)

2と同様にしてリスタート計算を行う

4. 荷重 0.0 N

(1) モデリング

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック

「OK」ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグして、カーボンナノチューブの右端三層を選択

「表示」⇒「プロパティ」をクリック

「属性」タブを選択

FZ= 0 に設定

「OK」ボタンをクリック

(2) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

(3) 結果解析

「結果」⇒「原子配置」をクリック

「設定」⇒「原子配置」をクリック

「原子/分子」欄の C をクリックして非選択状態にする

「結線」ボタンをクリックする

「原子ペア」で、いずれも C (C) を選択する

「距離」の「(上限)」を 2 に設定する

「閉じる」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

スライダーを移動し、構造の時間変化を見る

【演習問題 13】 結晶成長の初期過程

(1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MDセルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Ni」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄に $a=b=c=3.568818$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=10 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグして、上 9 層を選択

「編集」⇒「削除」をクリック

画面内でクリック、ドラッグして、最上層を選択

「編集」⇒「原子・分子の挿入」をクリック

「原子」タブを選択

「H」を選択

「置換」ボタンをクリック

「編集」⇒「ランダム選択」をクリック

「選択対象の原子種/分子種」欄で「H」を選択

「選択したい原子/分子の個数」に6を設定

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「編集」⇒「原子・分子の挿入」をクリック

「原子」タブを選択

「Cu」を選択

「置換」ボタンをクリック

「原子・分子一覧」タブを選択

「種類」ボタンをクリック

「原子種・分子種」欄で「H」を選択

「OK」ボタンをクリック

「削除」ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグして、下2層を選択

「表示」⇒「プロパティ」をクリック

「属性」タブを選択

「速度一定」を選択

「OK」ボタンをクリック

「表示」⇒「原子と結合の表示」⇒「原子の属性による色分け」をクリック

属性の設定を確認する

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「すべて選択」ボタンをクリック

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥EAM¥GeneralizedEAM_Type¥GEAM」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 7 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	900 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
-----------	-----------

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(6Cu_on_Ni_base_900K)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(5) リスタートデータの作成

「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック

入力データファイル 6Cu_on_Ni_base_900K.inp を選択

「開く」 ボタンをクリック

「ファイル」 ⇒ 「リスタート」 をクリック

「OK」 ボタンをクリック

(6) リスタート計算の実行

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

(7) 結果解析

「結果」⇒「原子配置」をクリック

「設定」⇒「軌跡」をクリック

「サンプリング点数」を 2000 に設定

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

軌跡を確認後、「描画」⇒「軌跡」をクリック

「設定」⇒「原子配置」をクリック

「Ni」をクリックし、非選択状態にする

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

スライダーを移動し、構造の時間変化を見る

【演習問題 14】 ナノピラーの塑性変形

1. 応力がゼロになるセルサイズの算出

(1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MDセルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Cu」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄に $a=b=c=3.615$ に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=30、c 軸=1 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

画面内でクリックして削除する原子を選択

「編集」⇒「削除」をクリック

円盤状のモデルを作成する

「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で c 軸=30 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「はい」 ボタンをクリック

(2) 相互作用設定

「シミュレーション」 ⇒ 「ポテンシャル関数の設定」 をクリック

「組合せ」欄で「Cu -- Cu」を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic ¥EAM ¥RosatoGuillopeLegrand_Type ¥RGL」を選択

「OK」 ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 3.1 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

(3) 計算条件設定

「シミュレーション」 ⇒ 「計算条件の設定」 をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	700 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
MD セルの形状	立方体を保つ

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Cu_pillar_RGL_rlx)を入力

「保存」ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で「温度」、「圧力」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

平均値を求め、緩和後の体積とする

緩和後の体積からセルサイズを求める

2. 圧縮変形

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Cu_pillar_RGL_rlx.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(**Cu_pillar_RGL**)を入力

「保存」ボタンをクリック

「MDセル」タブを選択

「基本セル定数」欄の a、b、c に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

(2) 計算条件設定

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	700 K
総ステップ数	100000 steps

出力開始ステップ	1000 step
出力間隔ステップ数	1000 steps
MD セル	c 軸方向に可変

「MDセル」欄の「設定」ボタンをクリック

「追加」ボタンをクリック

「時間」に 100000 を設定

「セルの長さ」欄の「値」に 108.638739 を設定

「OK」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

(3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

(4) リスタートデータの作成

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル Cu_pillar_RGL.inp を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック

「OK」ボタンをクリック
「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック
「MDセル」欄の「c軸方向に可変」を選択
「MDセル」欄の「設定」ボタンをクリック
「追加」ボタンをクリック
「時間」に 100000 を設定
「セルの長さ」欄の「値」に 107.5414 を設定
「OK」ボタンをクリック
「OK」ボタンをクリック
「適用」ボタンをクリック
「OK」ボタンをクリック

(5) リスタート計算の実行

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

(6) 結果解析

(4)、(5)と同様の操作を繰り返し、c軸方向の辺長を 103.151934 Å まで圧縮する
「結果」⇒「原子配置」をクリック
スライダーを移動し、構造の時間変化を見る
構造を確認後、「ファイル」⇒「終了」をクリック
「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック
「項目」欄で全てのチェックをはずす
「項目」欄で「格子定数(c)」、「圧力 Z」にチェックを入れる
「プロット点」ボタンをクリック
「プロット点数」を最大値に設定
「OK」ボタンをクリック
「適用」ボタンをクリック
「閉じる」ボタンをクリック
「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック
「保存する場所」を指定
「ファイル名」欄に ファイル名(Cu_pillar_RGL)を入力
「保存」ボタンをクリック

表計算・グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて CSV ファイルから応力ひずみ曲線を作成する