

## 分子動力学 (MD) 計算 MXDORTOプログラム マニュアル

東京工業大学 (現在岡山大学) 河村雄行先生開発のソフトを使います。

[http://www.geo.titech.ac.jp/lab/kawamura/md\\_program.html](http://www.geo.titech.ac.jp/lab/kawamura/md_program.html)

MXDORTOは東工大 河村雄行先生、NIMS佐久間博先生からのご厚意により提供いただいたソフトです。

<準備>

### 1. 配付した電子ファイル類をコピーする。

配付したフォルダを置く場所：

C:の真下に並列に置く。

C:¥MXD

C:¥MD-DATA

「UEditSet...」実行ファイルを解凍し、インストールする。

### 2. 環境変数でパスを指定する

環境変数の設定方法

- 1 コンピュータのプロパティから、詳細設定タブの下にある環境変数をクリックする。
- 2 ユーザー環境変数の新規をクリック。
- 3 変数名に PATH  
変数値に C:¥mxd  
と書いてOKとする。
- 4 環境変数のWindowでOKとする。
- 5 Windowsを再起動

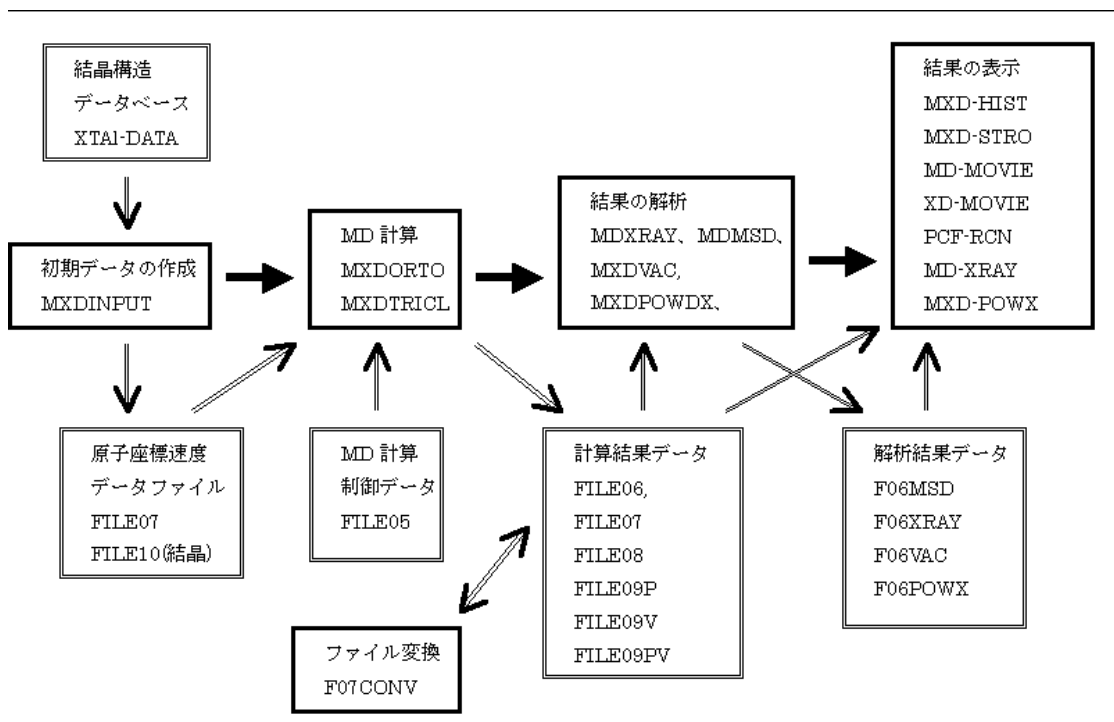


図1 MXDORTOによるMD計算システム図

配付したファイルの種類と役割

<http://www.geo.titech.ac.jp/lab/kawamura/MXDmanual/1-3.htm>

にアクセス

### 3. 初期データの作成

初期ファイルとして必要なのは、file05.datとfile07.datです。

- 1、ファイルを保存するフォルダを作る。

(C:¥md-data¥Jikken1)

- 2、そのフォルダでコマンドプロンプトを立ち上げる。

フォルダを選択して、Shiftを押しながら右クリックすると「コマンドプロンプトで開く」というメニューがあります。

- 3、そのコマンドプロンプトでmxdinput.exeを実行する。

C:¥md-data¥Jikken1>mxdinputと入力、Enter

- 4、液体やガラスの場合にはCHAOSと打つ。そしてEnter

- 5、適当なランダムな数字を入れる。(例: 5432) そしてEnter

- 6、ファイルにつくタイトルを書く。(例: Jikken1) そしてEnter

7、原子種を書く。(例: Ar) そしてEnter

ここで、書き方は、

ION1 ION2

Ar

原子種が二個以上の場合には、必ず最初の文字をION2、ION3、・・・のIと同じ位置になるようにしてください。

8、ユニットセル中の原子数を記入する。そしてEnter

例 (原子数 1 0 0 の場合) 数字の真下に一桁目の整数を置くようにする。

. . . . 1 . . . . 2

1 0 0

9、ユニットセルの長さabcを指定する (単位はオングストローム)。そしてEnter

I-----I-----I-----I

30. 30. 30.

左によせ (真ん中あたりでも良いが)、ドットをうつのをわすれずに

1 0、密度が表示される。それで良ければ、Yを打つ。そしてEnter

1 1、単原子、2 原子、3 原子分子かを選択する。Arの場合は1 番。そしてEnter

1 2、初期構造の設定 Arならば1 番でよい。そしてEnter

1 3、初期温度の設定 (例 2 9 8. 1 5) を入れてEnter。

1 4、File 0 5 が欲しいので、yを入れてEnter。

これで「Jikken1」のフォルダ内に、file05.dat と file07.dat が生成する。

つづけてコマンドプロンプトで、mxdorto で計算を走らせると、多くのファイルが指定フォルダに生成する。

C:¥MD-DATA¥Jikken1>mxdorto

順調に計算が終わると、「Jikken1」フォルダ内に新たに、file06.dat (計算結果が含まれる)、file08.dat、file09p.dat、file09v.dat、file09pv.dat が生成する。

ここまでできたら、動作確認完了。

#### 4. 分子の動きを動画でみる

結果の描画「描画マニュアル」フォルダ

index.html からスタート、そのマニュアルを参照

MD 可視化マニュアルの中の「データ変換プログラム操作マニュアル」

準備：「MD 可視化アイテム」のフォルダの中にある、`glut32.dll` を、Windows のシステムディレクトリ (`c:\windows\system`) にコピーする (一度やれば OK)

- 1) `Mdconv2.1` をダブルクリック
- 2) 生成したファイルを選択、ただし `file5a.txt` は「描画マニュアル」フォルダの中にあるものを選択することに注意
- 3) `output` は、描画したいフォルダ (例えば「`Jikken1`」フォルダ) を指定し、`Viewfile.bin` を指定する。
- 4) ボンド条件は規定距離の「`120.00`」倍の距離にする。
- 5) `mdview.exe` の場所：「描画マニュアル」フォルダ内の `mdview.exe` を選択する。
- 6) 「変換開始」をクリック
- 7) `color` ファイルはどこですか? と聞かれたら、「`color`」ファイルを選択
- 8) 描画される
  - ・ `Ar` の運動の様子は、`Property->Time` でみることができる。(再生 or スナップショット)
  - ・ ユニットセルが大きい場合、`SHIFT` を押しながらマウスを下方方向に動かすと、縮小され、全体がわかる。そのため、周期境界条件を観察するには、全体を縮小して、眺めるとよくわかる。
  - ・ 参照：MD 可視化マニュアル>表示プログラム操作マニュアルを見て、いろいろ操作してみる。
- 9) ウィンド上を右クリックして、`Open GraphWindow` を開くと、横軸は時刻、縦軸全エネルギーが描画される。

横軸時間で、縦軸を全エネルギー以外のパラメータは表示できないので、[6.](#)で示す方法で視覚化する

## 5. 「解き方の指示」の設定方法

file05.dat を UnEditor で開いて編集する。<演示>

a)ポテンシャル関数、b)アンサンブル、c)計算時間など解き方を確定 (file05.dat の上書き保存) してから再度計算を行う。

注意) 原子数、ユニットセルの大きさ (つまり密度)、元素の種類をかえる場合、もう一度 3. に戻り、file05.dat をつくりなおす。

このとき、フォルダを新たにコピーした方が良い。

例) 「Jikken1」フォルダをコピーして、「Jikken2」と名前をかえる

初期データが変わらない場合、file07 の作成はしなくてよいので、file05 のみ UnEditor を使って書き換える。

### a)ポテンシャル関数の選択

デフォルトは「Busing」という関数になっている。

例えば Lennard-Jones 関数 (以下 L-J と略) にかえる場合、次のように UnEditor で file05 を書き換える

- ・ 「Busing」を「L-J」に書き換える (file5 の 8 行目)
- ・ 左から 0.000, 39.95, 172.5, 3.410 とかきかえる (file5 の 9 行目)  
 (それぞれ、有効電荷、Ar 原子量、L-J の  $\epsilon[10^{-23}\text{J}]$ , L-J の  $\sigma[\text{\AA}]$  を意味する)

### b) 解き方 (アンサンブル) の選択

NVE (定エネルギー)、または NTV (定温・定容)、または NPT (定温・定圧)

アンサンブル (保存量) : file5 の 5 から 7 行目

系 (保存量)	5 (T)	6 (P)	7 (V)
定エネルギー (NVE)	T NO-CNTL	P NO-CNTL	V CONST.
定温・定容 (NTV)	T SCALING T NOSE	P NO-CNTL	V [BLANK]
定温・定圧 (NPT)	T SCALING T NOSE	P SCALING P ANDERSEN	V [BLANK]

c)計算時間 = (総ステップ数) × (時間刻み幅)

・総ステップ数：file05.dat の 3 行目 左から順番に 5 つのうち青字部分

```
IRECRD(1): 計算ステップ数 |
| (2): P C F、イオンのポテンシャル分布等の出力ステップ間隔 |
| (3): FILE07 と FILE08 への出力ステップ間隔 (default:50) |
| (4): 原子位置データ (FILE09P) の出力ステップ間隔 (default:50 (MD), 5 (XD)) |
| (5): FILE09V への出力ステップ間隔 (default:5) |
```

・時間刻み幅[fs] file5 の 4 行目 左から順番に 3 つ

```
(1)DTIME : 運動方程式の積分時間間隔、 $\Delta t=DTM \times 10^{-15}sec$  |
(2)FORMULA : モル当りのエネルギーを求めるときの、化学式に現われる 1 番目の元素
(通常、酸化物の場合には酸素)の個数である。 |Ar は 1
(3) RCUTL : 中距離力 (EWALD 実空間)、動径分布関数の計算の打ち切り距離内接球
半径か 1.5 Å の小さい方に自動的にセットされる |default 0
```

!!!!入力上の注意事項!!!!

file05.datは基本的には 10 文字単位で入力する数字の枠が決まっています。  
 一番上の行で”P”で囲まれた中に一つの数字を書き込むようになっています。  
 下に例を示します。

```
MD. . . . . I. . . . . : . . . . . I. . . . . : . . . . . I
ECONOMY          30000.          40.
```

のように、枠からはみでないようにする。書き換えが終わったら、

```
C:¥MD-DATA¥Jikken2>mxddorto
```

で計算を走らせる。

終わったら『4. 分子の動きを動画でみる』でもう一度、分子の動きをみてみよう。  
 結果の詳細（初期構造、解き方の設定等）は、file06.dat を UnEditor で開くとわかる。

## 6. 熱力学諸量を図示してみる

コマンドプロンプトで、

```
C:¥MD-DATA¥Jikken2>mxd-hist
```

Type-in\_?で、必要なパラメータを選択する。（数字入力、Enter で On/OFF）最高で 7 つまで

よければ r をおし、Enter

画面が変わって、Interval of data plotted ?とあり、1 と入力し、Enter

結果概要がでる、画面を閉じる（右上の「×」をクリック）横軸時刻の縦軸諸量の図が出てくる。

図の見方については、講義で説明します。