

File 05のかきかえ

```
UnEditor
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 整形(P) 表示(V) ツール(T) フォルダ(L) HTMLタグ(M) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)
file05.dat
C:\MD-DATA\Jikken2-1\file05.dat
0|10|20|30|40|50|60|70|80|90
1 MD.....I.:↓
2 START      Jikken2-1           :↓
3 ECONOMY    10000. 10000. 50. 50. 5. :↓
4 NOACCUM    2.00 1.0 0.0 :↓
5 SCALING    298.00 -0.1 1 :↓
6 SCALING    0.0001 0.0001 0.0001 圧力[GPa] :↓
7 :↓
8 L-J        4. 0.0 :↓
9 Ne 256. 0.000 20.18 172.5 3.410 :↓
10 Lennard-Jones      Ne分子量 「L-J」のε 「L-J」のσ 「L-J」の場合空欄 :↓
11 ポテンシャル      Ar:39.95 :↓
12 MD.....I.:↓
13 STOP      :↓
14 ↓ :↓
15 [EOF] :↓
```

計算ステップ数

圧力[GPa]

Ne分子量
Ar:39.95

「L-J」の ϵ 「L-J」の σ 「L-J」の場合空欄

↑
「:」の縦の位置そろえられずれていると計算できないことがある。