MDソフトのインストール(for Windows)および使用法説明

2013年1月

生産技術研究所　梅野

1. Windowsマシンへのインストール

* Windows7, Windows XP でテスト済みです．
* 作業用ディレクトリ（以下WDとします）を作成してください．
* <http://www.cmsm.iis.u-tokyo.ac.jp/code/mdspass2/forWin/> にあるすべてのファイルをダウンロードし，WDに置いてください．
* pot.zipを展開します．WDにpotというディレクトリができるはず．
* ３つのdllファイルを，c:\Windows\system に置いてください．（System32ではありません）
* mdspass2.exeをダブルクリックして，正常に起動するかテストしてください．

【2月6日追記】「Windowsで動かない」というエラーレポートが相次ぎました．どうやらmdspass2.exe.manifestというファイルが同じディレクトリにないとダメなようなので，置いておきました．また，エラーが出た際，ディレクトリ名を変更すると正常に動くようになる，など謎の挙動を示すことも判明しましたが，この辺りはよくわかっていません．

1. ソフトの使用法

* mdspass2.exeの実行には，同じディレクトリに  
  ①CONFIGファイル（原子配置とポテンシャル関数の情報が記述されている）  
  ②SETDATファイル（計算条件などを記述したファイル）  
  ③pot ディレクトリ（ポテンシャル関数のデータが格納されている）  
  が存在していなければいけません．
* ①，②についてはサンプルファイルをいくつか用意しています．それらをCONFIGおよびSETDATという名前にコピーしてから実行してください．
* Controlパネル中央部の，Rotation, Objects XY, Objects Zをドラッグするとモデルを回転・移動・拡大縮小できます．
* Controlパネル上部のMD on/offでMD計算を開始・停止します．

1. サンプル１：ナノワイヤの結晶すべり

* CONFIG.WIREとSETDAT.WIREを使用してください．これは，Cu原子でナノワイヤを作り，軸方向に引張りひずみをかけた状態のものです．
* Set paramからポップアップウインドウを開き，Atom colorのmax欄に0.03を入力してください．  
  ※各原子に対してCentral Symmetric Parameterと呼ばれるパラメータ（周囲の原子配置が点対称からどれだけずれているかを現す指標）を計算し，それに応じて色分けしています．
* ControlパネルのMD on/offを押してください．MDが始まります．
* Ensemble TypeをNVTに切替え，少ししたらRelaxationに戻す，という作業を繰り返してください．うまくいけば結晶のすべりが見えるはずです．  
  ※NVTに切り替えるのは，設定温度(100K)の温度揺らぎを与えるためです．温度揺らぎがない完全結晶状態だと，結晶構造は不安定ですが各原子はつり合い状態にあるので，何も起こりません
* うまくいかなかったら，Controlパネル下のResetボタンを押すと原子配置が初期状態に戻りますのでやり直してください．

1. サンプル２：CNTの圧縮

* CONFIT.CNT.6.0.x15とSETDAT.CNTを使用してください．アームチェア型カーボンナノチューブのモデルです．圧縮と引張りを繰り返しなさいという条件がSETDAT.CNTに与えられています．（Set param🡪Deformation settingsで確認できます）
* 起動したら，Ensemble TypeをNVTにセットしてください．  
  ※100Kに相当する運動エネルギーが各原子に乱数を用いて与えられ，その後のMD計算は温度一定条件で行われます．
* MD on/offを押してください．CNTがS字形に変形していくはずです．  
  ※S字形に変形するのは，言ってみれば「たまたま」です．他にも座屈モードがあり，条件によっては（たとえば0K）現れるモードが変わることがあります．

1. その他

不具合が生じた場合や使用法がわからないときには [umeno@iis.u-tokyo.ac.jp](mailto:umeno@iis.u-tokyo.ac.jp) に連絡ください．