MDソフトのインストール(for Windows)および使用法説明

2015年6月

生産技術研究所　梅野

1. Windowsマシンへのインストールと実行テスト

* Windows7、Windows XP でテスト済みです。
* <http://www.cmsm.iis.u-tokyo.ac.jp/code/mdspass2/forWin/> にあるzipファイルをダウンロードします。
* zipファイルを展開し、そのフォルダに移動します。
* フォルダ内にあるmdspass2.exeをダブルクリックすれば実行されます。

1. ソフトの基本使用法

* 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\_KINKED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ったのち，何度か引張り・圧縮解析を行ってキンク状に変形したものです．（表面やエッジ部から転位が出やすくするため）
* Set paramからポップアップウインドウを開き，Atom colorのモードをCSPとし（ラジオボタンをクリック），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．

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．