

The background features abstract, overlapping geometric shapes in various shades of pink and purple, creating a modern, layered effect. The shapes are primarily triangles and polygons, some with thin white outlines, set against a light pink background.

MXDORTO

Getting Started

Windowsの場合

2

WSLをインストールしていない場合

- ▶ Powershellまたはコマンドプロンプトを管理者モードで開く
- ▶ wsl --install
- ▶ パソコンを再起動し、BIOSを立ち上げる。
- ▶ Intel CPUの場合、Intel Virtualization Technology (VT-X)、Intel Vt-dをEnableにする。
- ▶ AMD CPUの場合、SVM ModeをEnableにする。
- ▶ 設定を保存してBIOSを出す。
- ▶ Microsoft StoreからUbuntuを選択し、インストールする。
- ▶ うまく行かないときはこちら:<https://utphys-comp.github.io/wsl2.html>

gfortran

- ▶ Ubuntuのターミナルを開く。
- ▶ sudo apt update
- ▶ sudo apt install build-essential
- ▶ sudo apt install gfortran

VcXsrv (<https://sourceforge.net/projects/vcxsrv/>)

- ▶ Filesタブの中からvcxsrv.?.?.?.?.installer.exeをダウンロードし、インストール。
- ▶ Ubuntuで\$HOME/.bashrcに以下の一行を追加。

export DISPLAY=\$(grep nameserver /etc/resolv.conf | cut -d " " -f 2):0

または、DISPLAY=:00

gnuplot

- ▶ Ubuntuのターミナルを開く。
- ▶ sudo apt update
- ▶ sudo apt install gnuplot

VMD

(<https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>)

- ▶ 自身のコンピュータに該当するVMDをダウンロード。(メールアドレスの登録が必要かも)
- ▶ インストール。

VESTA (<https://jp-minerals.org/vesta/en/>)

- ▶ 該当するOSのVESTA???.zipをダウンロード
- ▶ zipファイルを解凍し、実行ファイルを実行。

Macの場合

XQuartz (<https://www.xquartz.org>)

- ▶ XQuartz-?.?.?.pkgをダウンロード
- ▶ ダウンロードしたパッケージを開き通常のアプリケーションと同様にインストール。

VMD

(<https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>)

- ▶ 自身のコンピュータに該当するVMDをダウンロード。(メールアドレスの登録が必要かも)
- ▶ ????.dmgをダブルクリック
- ▶ フォルダ内の水分子をアプリケーションフォルダにドラッグアンドドロップ。

VESTA (<https://jp-minerals.org/vesta/en/>)

- ▶ VESTA.dmgをダウンロード
- ▶ VESTA.dmgをダブルクリック
- ▶ フォルダ内のVESTAをアプリケーションフォルダにドラッグアンドドロップ。

Xcode (App Store)

- ▶ App StoreからXcodeをインストール
- ▶ ターミナルで `xcode-select --install`

Homebrew (<https://brew.sh>)

- ▶ ホームページのInstall Homebrewに書いてあるコマンドをターミナルで実行。

gfortran

- ▶ ターミナルで `brew install gcc`

gnuplot (<http://www.gnuplot.info>)

- ▶ gnuplotのgnuplot-?.?.?.tar.gzをダウンロード
- ▶ ターミナルで解凍: `tar zxvf gnuplot-?.?.?.tar.gz`
- ▶ 解凍したフォルダに移動: `cd gnuplot-?.?.?`
- ▶ `./configure --with-deadline=builtin`
- ▶ `make`
- ▶ `sudo make install`

MD計算プログラムのコンパイル

- `mkdir ~/MD/src`
- `mkdir ~/MD/bin`
- `~/MD/src`に配布プログラムをコピーする (例: `cp mxdorto.f90 ~/MD/src`)
- `cd ~/MD/src`
- `gfortran mxdorto.f90 -o ../bin/mxdorto`
- `gfortran pos_conv.f90 -o ../bin/pos_conv`
- `gfortran vac.for -o ../bin/vac`

ブルーサイト ($\text{Mg}(\text{OH})_2$) のMD計算

- bruciteのフォルダに移動 (例: `cd ~/MD/examples/brucite`)
- 座標ファイルのコピー (`cp file07.dat_i file07.dat`)
- 設定ファイルの確認 (`file05.dat`) `vi file05.dat`
- MD計算の実行 `../bin/mxdorto`
- 計算結果の熱力学量の表示 `../mxd-hist.sh`
- 原子のダイナミクスの動画作成 `../bin/pos_conv`
- VMDまたはXCrysDenで再生
- 振動スペクトルの計算 `../bin/vac`
- `vac.dat`の中身をフーリエ変換すると振動スペクトルが得られる。

```

MD.....I.....I.....I.....I.....I.....I.....I.....I:
START      Mg(OH)2 Neutron data  N.Jahr.Mineral.Monatshefte p137(1967):
ECONOMY      01000.      1000.      50.      5.      5.      :
NOACCUM      0.40      1.0      0.0      :
T SCALING    298.00      -0.1      1.      :
P SCALING    0.0001      0.0001      0.0001      :
V            :
MORSE        5.      0.0      :
1 O  560.    -1.180    16.00    1.8700    0.1670    23.000    :
2 Mg 280.     1.500    24.31    0.9740    0.0530    3.000    :
3 H  560.     0.430     1.01    0.0440    0.0440    0.000    :
:
1 3      23.1      2.98      1.070      1.      :
      7.6      11.80      1.328      :
3 1 3    0.000116    99.50      1.480      9.2      :
:
VELOCITY      1.      :
:
MD.....I.....I.....I.....I.....I.....I.....I.....I:
STOP
~
~
~

```

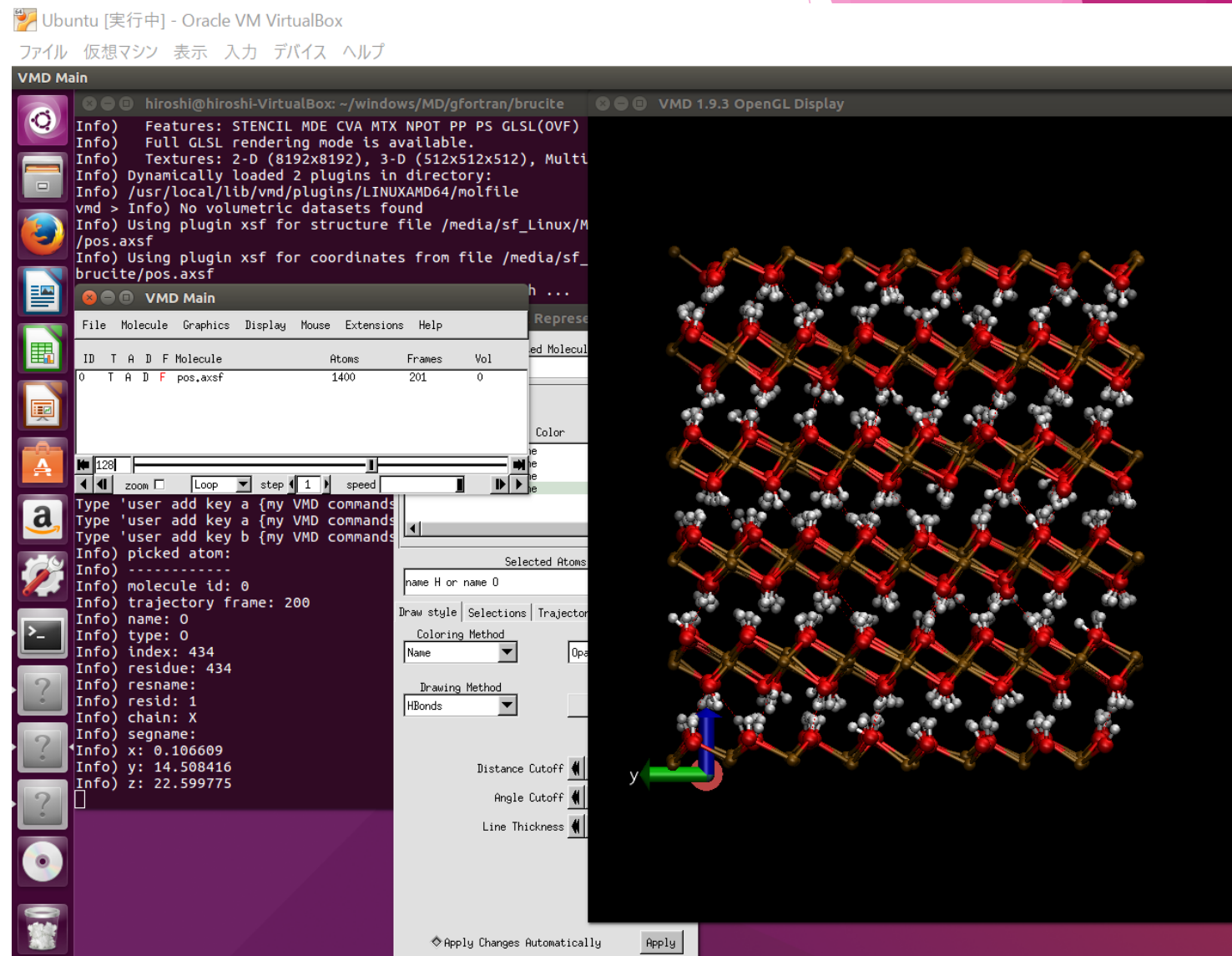
設定ファイル `file05.dat`の中身

ECONOMY ①計算ステップ数(1000) ②動径分布関数等の平均間隔(1000) ③`file07.dat`の上書き間隔(50) ④座標データの出力間隔(5) ⑤熱力学量の出力間隔(5)
 NOACCUM: ①差分方程式の時間間隔 フェムト秒 (0.4)
 T SCALING: 温度制御 ①温度 (298.00 K)
 P SCALING: 圧力制御 ①Px (0.0001 GPa) ②Py (0.0001 GPa)③Pz (0.0001 GPa)
 MORSE以降 ポテンシャルパラメータ
 VELOCITY: 速度データの出力指示 ①データ間隔

計算結果の動画

VMDで*.axsfファイルを読み込む。

- ▶ File – New Molecule – Browse
でpos.axsfファイルを選択し、OK
Load
- ▶ VMD MainでDisplay-Orthographic
- ▶ VMD MainでGraphics- Representations
Drawing Method –CPK
Bond Radius 0.0
Create Rep
Drawing Method- DynamicBonds
Bond Radius 0.1
Distance Cutoff 2.4
Selections
Selected Atomsのallを消す
Selected Atomsにname Mg or name O
Apply
- ▶ VMD Mainで右下の右向き矢印をクリック



熱力学量の出力

`mxd-hist.sh` | で表示すると、温度が揺らいていることがわかる。

`mxd-hist.sh`の後ろにつける数字を変えると別の熱力学量が表示される。

