

MXDORTO

Getting Started

Windowsの場合

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を出る。
- ▶ 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 ($Mg(OH)_2$) 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/xdort
- 計算結果の熱力学量の表示/xd-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: I:
START Mg(OH)2 Neutron data N.Jahr. Minerall. 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
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) ③file07.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)

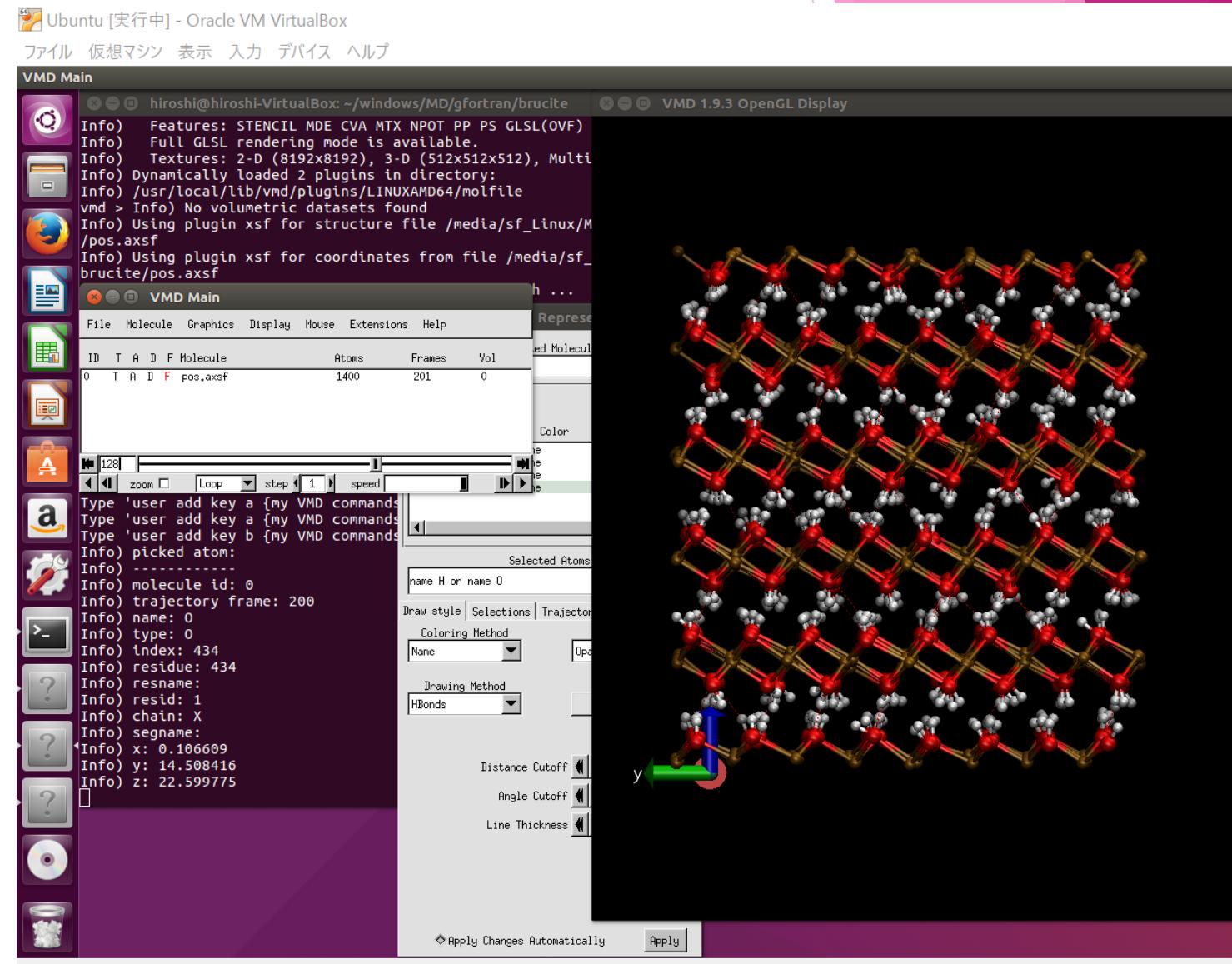
MORSE以降 ポテンシャルパラメータ

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

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

`mxsd-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。

