

MXDORTO、MXDTRICL

ユーザーマニュアル

Version 1.0

佐久間博、則竹史哉

目次

- 1 このプログラムでできること
- 2 インストール
 - 2.1 MXDORTO, MXDTRICL と解析プログラム
 - 2.1.1 シリアル版
 - 2.1.2 MPI 並列版
- 3 初期ファイルの中身
 - 3.1 計算条件の設定 (file05.dat)
 - 3.1.1 ポテンシャルモデル
 - 3.1.2 オプション
 - 3.2 原子情報・座標・速度 (file07.dat)
- 4 初期ファイルの作り方
 - 4.1 結晶モデル
- 5 出力ファイル
- 6 計算原理
 - 6.1 ポテンシャル関数
 - 6.1.1 BMH-EXP, Full flexible atom, Kawamura model
 - 6.1.2 Morse model
 - 6.1.3 FIPC water model
 - 6.2 運動方程式
 - 6.3 温度・圧力制御

黄色のハイライト：確認中、準備中

I このプログラムでできること

このプログラム (MXDORTO, MXDTRICL) は古典分子動力学計算を実行するために作成されました。オリジナルは河村雄行先生が開発されてきました。MXDORTO, MXDTRICL では主に無機結晶と水分子を計算対象とします。MXDORTO, MXDTRICL を利用するメリットとしては、基本的に分子ごとの番号付けが必要なく、初期構造ファイルの作成が非常に簡便であることです。

MXDORTO: 直交座標系の計算向け

MXDTRICL: 三斜晶系、単斜晶系、せん断変形の計算向け

計算実績例

雲母・粘土鉱物

炭酸塩鉱物

グラファイト

シリケートメルト

塩化物

塩水

水・氷

など

3 初期ファイルの中身

3.1 計算条件の設定 (file05.dat)

file05.dat の例を図 3.1 に示す。

```

1 MD.....I.....I.....I.....I.....I.....I.....I.....I:
2 START      Phlogopite
3 ECONOMY     50000.    50000.    100.      50.      50.
4 NOACCUM    0.40       1.0       0.0
5 T SCALING   373.15    -0.1       1.
6 P SCALING   1.0000    1.0000    1.0000
7 V
8 BMH-EXP     6.        0.0
9 1 O     864.-1.227500  16.00     1.868     0.151    27.400
10 2 Si    216.    2.100     28.09     0.987     0.083    0.000
11 3 Al     72.     1.950     26.98     1.089     0.088    0.000
12 4 Mg    216.    1.520     24.305    1.137     0.101    2.000
13 5 H     144.    0.460      1.01     0.074     0.032    0.000
14 6 K     72.     1.000     39.10     1.546     0.115    14.000
15
16 1 2      49200.0     5.0      -3281.0     2.24
17 2 1 2    0.000061   120.0      1.77      16.8
18 1 3      36200.0     5.0      -1946.0     2.24
19 1 5      13711.0     7.40      -783.0     3.13
20           8.3      12.80      1.283
21
22 VELOCITY   1.0      |
23
24
25 MD.....I.....I.....I.....I.....I.....I.....I:
26 STOP
27

```

図 3.1 file05.dat の記入例（左の数字は行番号）

各数字とキーワードは書式付きフォーマットで記述する必要がある。つまり、各数字とキーワードは決まった位置に書く必要がある。例えば“START”は2行目、左詰め、1～5列目に書く。

(1行目) “MD.....I..” このまま手を加えない。

(2行目、計算開始条件とタイトル)

[1-10列目]

START: file07.dat から座標・速度を元に計算スタート

CONTINUE: file09p.dat から座標を元に計算スタート

RESTART: 初期座標から計算スタート

[11-70 列目]

計算のタイトルを記入（例：Phlogopite）

(3行目、計算ステップ数と結果の出力)

[1-10列目] file06.datへの出力データ量

ECONOMY: 少

NORMAL: 中

DETAIL: 多

- [11-20 列目] 計算ステップ数 IRECRD1
- [21-30 列目] 動形分布関数等で使うステップ数 IRECRD2
- [31-40 列目] file07.dat を更新するステップ間隔 IRECRD3
- [41-50 列目] file09p.dat に出力するステップ間隔 IRECRD4
- [51-60 列目] file09v.dat に出力するステップ間隔 IRECRD5
- [61-70 列目] 空白

(4行目、時間刻みと kJ/mol エネルギーの定義)

- [1-10 列目] 二体相関関数等のデータ蓄積設定
 - NOACCUM: IRECRD2 ステップごとにデータを初期化
 - ACCUM: 全計算ステップでデータ蓄積
- [11-20 列目] 運動方程式の時間刻み (fs)
- [21-30 列目] kJ/mol 単位にするための換算係数の指定 FORML
 - FORML=1.0: 原子 1 のアボガドロ数を 1 mol とする。
 - 原子 4 のアボガドロ数を 1 mol したい場合
 - FORML = NION(1)/NION(4)
 - ここで NION(1) は計算セル内の原子 1 の個数、NION (4) は原子 4 の個数

- [31-40 列目] クーロンエネルギーの実空間のカットオフ距離
 - RCUT(1)
 - RCUT(1) < 0.01 の場合、RCUT(1)=15.0 Å と設定される。
- [41-50 列目] 空白 RCUT (2): 短距離力のカットオフ距離
- [51-60 列目] 空白
- [61-70 列目] 空白

(5行目、温度制御の設定)

- [1-10 列目] 温度制御方法
 - T SCALING: 速度スケーリング法
 - T SCALE-A: 原子種ごとの速度スケーリング法
 - T NOSE: Nosé-Hoover chain 法(圧力制御との併用不可)
 - T NO-CNTL: 温度制御無し
- [11-20 列目] 設定温度 (K) TMPGET
- [21-30 列目] -0.1: 設定温度に到達するまでの NTSTEP (31-40 列目に記載) ステップ辺りの温度変化 DELTMP
 - T NOSE の場合には 1.e-7 とする。
- [31-40 列目]
 - T SCALING と T SCALE-A の場合 NTSTEP : 温度変化制御を行うステップ間隔

T NOSE の場合、周波数 ω_1 (cm⁻¹, 热浴 1)

[41-50 列目] T NOSE の場合、周波数 ω_2 (cm⁻¹, 热浴 2)

[51-60 列目] T NOSE の場合、周波数 ω_3 (cm⁻¹, 热浴 3)

[61-70 列目] T NOSE の場合、周波数 ω_4 (cm⁻¹, 热浴 4)

(6 行目、圧力制御の設定)

[1-10 列目] 圧力制御方法

P SCALING: 圧力スケーリング法

P ANDERSEN: Andersen の方法

P NO-CNTL: 圧力制御無し

[11-20 列目] 設定応力 Pxx (GPa) (直方体セルで x 方向)

[21-30 列目] 設定応力 Pyy (GPa) (直方体セルで y 方向)

[31-40 列目] 設定応力 Pzz (GPa) (直方体セルで z 方向)

[41-50 列目] P ANDERSEN の場合、x 方向の仮想質量

[51-60 列目] P ANDERSEN の場合、y 方向の仮想質量

[61-70 列目] P ANDERSEN の場合、z 方向の仮想質量

(7 行目、体積制御の設定)

[1-10 列目] 体積制御方法

V : 圧力制御による自動変形

V CONST. : 体積固定

[11-20 列目] 空白

[21-30 列目] 空白

[31-40 列目] 空白

[41-50 列目] 空白

[51-60 列目] 空白

[61-70 列目] 空白

(8 行目、ポテンシャルモデルの設定)

[1-10 列目] ポテンシャルモデルの選択

BMH-EXP

MORSE

BUSING

BELONO

TOSHIFUMI

WOODCOCK

PAULING

METAL
PAIR-P
STSUNE

L-J: Lennard-Jones model

[11-20列目] Ewald法の自動最適化モード(MODE=1.-6.)、数字が大きいほど高精度。

[21-30列目] Ewald法の加速収束因子 α

ALPHA

ALPHA < 0.001 の場合、自動設定

[31-40 列目] 空白

[41-50 列目] 空白

[51-60列目] 空白

[61-70 列目] 空白

(9行目-14行目、原子種の設定、行数は原子種の数による)

[2列目] 原子座標の固定の有無 FIX

空白：座標の固定無し

—：その原子種の座標を固定

[3-4列目] 原子種の記号 ATOM

[5-10列目] 原子数 n_{a}

〔11-20列目〕 価数 g_{10}

[21-30列目] 原子量 $m_{\text{r.o.}}$ (g/mol)

[31-40列目] ポテンシャルモデルによる数字（ポテンシャルモデルを参照）

〔41-50列目〕 ポテンシャルモデルによる数字

〔51-60列目〕 ポテンシャルモデルによる数字

(15行目、ポテンシャルモデルによる) [1-70列目] 空白

(16-20行目、ポテンシャルモデルによる) [1-70列目] パラメータ

(21 行目) [1-70 列目] 空白

(22行目、オプションの設定。複数オプションの場合には行を追加)

「1-10列目」 VELOCITY(オプションの記入欄)

[11=20列目] オプションによる数値 OPI

[21-30列目] オプションによる数値 OP2

[31=40列目] オプションによる数値 OP3

[41-50列目] オプションによる数値 OP4

[51-60列目] オプションによる数値 OP5

[61-70列目] オプションによる数値 OP6

(23-24 行目) [1-70 列目] 空白

(25 行目) [1-70 列目] “MD.....I..” このまま手を加えない。

(26 行目) [1-70 列目] “STOP” このまま手を加えない。

3.1.1 ポテンシャルモデル

3.1.1.1 BMH-EXP

	1-7 列	11-20	21-30
8 行	BMH-EXP	MODE	ALPHA

	1 列	2	3-4	5-10	11-20
9 行- (8+NCOMPO)行	IO	FIX	ATOM	n_{IO}	q_{IO}
	21-30 列	31-40	41-50	51-60	
9 行- (8+NCOMPO)行	m_{IO}	a_{IO}	b_{IO}	c_{IO}	

a_{IO} (Å): 反発直徑

b_{IO} (Å): ソフトネスパラメータ

c_{IO} ((kcal/mol) $^{1/2}$ (Å) 3): ファンデルワールス係数

NCOMPO: 原子種の数

共有結合 2 体項 解離エネルギー無しの場合

	1-2 列	3-4	5-10	11-20	21-30
(10+NCOMPO)行-	IO	JO	空白	D_1	β_1
	31-40 列	41-50			
(10+NCOMPO)行-	D_2	β_2			

IO, JO: 共有結合する原子種の番号

D_1 (kcal/mol): 共有結合エネルギーを決めるパラメータ

D_2 (kcal/mol): 共有結合エネルギーを決めるパラメータ

β_1 (Å $^{-1}$): 共有結合エネルギーを決めるパラメータ

β_2 (Å $^{-1}$): 共有結合エネルギーを決めるパラメータ

共有結合 2 体項 解離エネルギー有りの場合

	1-2 列	3-4	5-10	11-20	21-30
(10+NCOMPO)行-	IO	JO	空白	D_1	β_1
	31-40 列	41-50	51-60	61-70	
(10+NCOMPO)行-	D_2	β_2	空白	I.	

	1-10列	11-20	21-30	31-40	
(11+NCOMPO)行-	空白	D_2	β_3	r_3	

IO, JO: 共有結合する原子種の番号

D_1 (kcal/mol): 共有結合エネルギーを決めるパラメータ

D_2 (kcal/mol): 共有結合エネルギーを決めるパラメータ

β_1 (\AA^{-1}): 共有結合エネルギーを決めるパラメータ

β_2 (\AA^{-1}): 共有結合エネルギーを決めるパラメータ

D_3 (kcal/mol): 解離エネルギーを決めるパラメータ

β_3 (\AA^{-2}): 解離エネルギーを決めるパラメータ

r_3 (\AA): 解離エネルギーを決めるパラメータ

共有結合3体項

	1-2列	3-4	5-6	7-10
(10+NCOMPO)行-	IO	JO	KO	空白
	11-20列	21-30	31-40	41-50
(10+NCOMPO)行-	f	θ	r_m	g_r

IO, JO, KO: 共有結合する原子種の番号

$f(10^{-18} \text{ kJ})$: 共有結合エネルギーを決めるパラメータ

$\theta(^{\circ})$: 共有結合の角度を決めるパラメータ

r_m (\AA): 共有結合距離を決めるパラメータ

g_r (\AA^{-1}): 共有結合距離を決めるパラメータ

3.1.1.2 MORSE

	1-5列	11-20	21-30	
8行	MORSE	MODE	ALPHA	

	1列	2	3-4	5-10	11-20
9行- (8+NCOMPO)行	IO	FIX	ATOM	n_{IO}	q_{IO}
	21-30列	31-40	41-50	51-60	
9行- (8+NCOMPO)行	m_{IO}	a_{IO}	b_{IO}	c_{IO}	

a_{IO} (\AA): 反発直徑

b_{IO} (\AA): ソフトネスパラメータ

c_{IO} ((kcal/mol) $^{1/2}$ (\AA) 3): ファンデルワールス係数

NCOMPO: 原子種の数

Morse 2 体項

	1-2 列	3-4	5-10	11-20	21-30
(10+NCOMPO)行-	IO	JO	空白	D_e	β
	31-40 列	41-50			
(10+NCOMPO)行-	r_e				

IO, JO: 共有結合する原子種の番号

D_e (kcal/mol): ポテンシャルの井戸の深さを調整するパラメータ

β (\AA^{-1}): ポテンシャルの幅を調整するパラメータ

r_e (\AA): 結合距離を調整するパラメータ

共有結合 3 体項

	1-2 列	3-4	5-6	7-10
(10+NCOMPO)行-	IO	JO	KO	空白
	11-20 列	21-30	31-40	41-50
(10+NCOMPO)行-	f	θ	r_m	g_r

IO, JO, KO: 共有結合する原子種の番号

$f(10^{-18} \text{ kJ})$: 共有結合エネルギーを決めるパラメータ

θ ($^\circ$): 共有結合の角度を決めるパラメータ

r_m (\AA): 共有結合距離を決めるパラメータ

g_r (\AA^{-1}): 共有結合距離を決めるパラメータ

3.1.1.3 L-J

手持ちのプログラムでは 12 乗の項のみがあって、12 と 6 乗の項がコメントアウトされているどっちが正しい？

3.1.2 オプション

CENTER: 液体・ガスなどの計算で原子・分子をセルの中心に集める。

CONSTSHEAR: [MXDTRICL のみ] セルにせん断変形を与える。

OP1: a 軸の c 軸方向へのシアレート (/ps)

OP2: b 軸の c 軸方向へのシアレート (/ps)

OP3: a 軸の先端が c 軸方向に進んだ距離 (\AA)、計算を CONTINUE する場合に、それ以前にどれだけ変形していたかを積算するための値。

OP4: b 軸の先端が c 軸方向に進んだ距離 (\AA)、計算を CONTINUE す

る場合に、それ以前にどれだけ変形していたかを積算するための値。

CUBE: セルの形を徐々に立方体に近づける。

ELEC.FIELD: 外部電場を印加。

OP1: x 方向の電場 (V/m)

OP2: y 方向の電場 (V/m)

OP3: z 方向の電場 (V/m)

EWALD-C : [MXDORTO のみ] 表面や界面の二次元の計算で周期境界条件のために生じる双極子を消す。

OP1: 表面と垂直方向の軸を指定 OP1=1: x 軸; OP1=2: y 軸;
OP1=3: z 軸

VELOCITY: 原子の速度を file09pv.dat に出力。

OP1: 出力ステップ間隔 (例 OP1 = 1. 每ステップ出力)

WATER-POL: [MXDORTO のみ] FIPC water モデルを使うときのパラメータ指定。

OP1: FIPC モデルの酸素の原子種番号

OP2: FIPC モデルの水素の原子種番号

OP3: 初期配置から FIPC モデルの分子を認識するための最大 OH 間距離 (Å)

OP4: 誘起双極子モーメントの最大値 μ_m (D)。初期状態で分子間距離が近すぎる場合に、分極が大きくなりすぎて計算がストップするのを防ぐための最大値。(0.93 D: Sakuma *et al.*, 2013)

OP5: 空白

OP6: 酸素電荷の位置 r_{OLP} (Å) (0.2 Å: Sakuma *et al.*, 2013)

3.2 原子情報・座標・速度 (file07.dat) 記載中

file07.dat は原子情報・座標・速度を記載したファイルであり、mxdininput 等のコマンドで作成することができる。記入例を図 3.2 に示す。

各数字とキーワードは書式付きフォーマットで記述する必要がある。つまり、各数字とキーワードは決まった位置に書く必要がある。例えば “Phlogopite” は 1 行目、 1 ~ 60 列目に書く。

	1-60 列	61-65	66-70	72-75
--	--------	-------	-------	-------

1 行	タイトル	NJOB1	NJOB2	BIN
-----	------	-------	-------	-----

NJOB1: このファイルを使って START や RESTART した回数

NJOB2: CONTINUE した回数

BIN="BIN "の場合、file09p.dat と file09pv.dat に出力するデータがバイナリ形式で記述される。

	77-80 列	82-90	92-100
1 行	ICD	ndmole	r_{OLP}

ICD=1: [FIPC モデル] 計算開始時に charge.dat を読みに行く。

ICD=0: FIPC 以外のモデル(default)

ndmole: [FIPC モデル] 酸素の不対電子対の数が記載される。入力する必要はない。

r_{OLP} : [FIPC モデル] パラメータ。入力する必要はない。

1	Phlogopite						10	1			
2	1584	6	50000	50000	50000	1001	1000	1	0	0	0
3	0	Si	Al	Mg	H	K					
4	864	216	72	216	144	72					
5	1	865	1081	1153	1369	1513					
6	864	1080	1152	1368	1512	1584					
7	373.15	-0.1000	373.15	1.00000	1.00000	1.00000					
8	0.400E-15		31.862230	27.590250	20.252090	0.000000	-0.169778	0.000000			
9	2.848264		0.200000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000			
10	0.133638430	0.072563080	0.08408588	4.98853274	9.6493554	9.772969	0.135906	0.070959	0.087891	1	
11	0.139563770	0.068658390	0.58756473	5.01969605	0.00122095	0.0082655	0.138981	0.068419	0.583812	1	
12	0.143111180	0.409716670	0.08321860	5.00182775	0.00494374	9.569372	0.144897	0.406461	0.087096	1	
13	0.143016930	0.410221190	0.58836351	4.97944845	0.00397294	9.999913	0.145508	0.411427	0.588059	1	
14	0.138347280	0.735637860	0.08517375	5.03375965	0.01913295	0.0369910	0.138357	0.745903	0.094505	1	
15	0.136230240	0.751274760	0.58098709	5.000012344	0.98698785	0.0158147	0.138568	0.746972	0.591220	1	
16	0.299611860	0.076751860	0.08514193	5.00413435	0.01939885	0.0055022	0.305949	0.080329	0.083182	1	
17	0.304606260	0.075570400	0.58805772	4.98243514	9.5154145	0.129246	0.301699	0.076042	0.587669	1	
18	0.308373040	0.405065640	0.08543390	4.98977724	0.97267975	0.185686	0.307593	0.408003	0.092670	1	
19	0.311501830	0.402932870	0.59823068	5.02323095	0.00938614	9.890165	0.306527	0.407236	0.586690	1	
20	0.301068620	0.741651070	0.08060838	4.99250185	0.00059024	9.9999434	0.301252	0.741902	0.086864	1	
21	0.307830770	0.738365610	0.58718435	5.02596394	0.97982305	0.0103205	0.310120	0.736847	0.581366	1	
22	0.464378370	0.069573040	0.08072916	5.00022744	0.99589844	0.9953825	0.467720	0.071949	0.081341	1	
23	0.467561200	0.067211660	0.57611060	4.98022034	0.96891535	0.0092417	0.463444	0.071414	0.580326	1	
24	0.474025500	0.401208420	0.08886815	4.97719525	0.01386754	9.929120	0.470393	0.407714	0.084968	1	
25	0.476090590	0.402888630	0.58543612	4.98139115	0.00858614	9.9977235	0.467623	0.408385	0.579565	1	
26	0.476525900	0.737703640	0.08398802	4.98299975	0.00541334	9.9945654	0.473536	0.741943	0.083373	1	
27	0.471707220	0.749961930	0.58308100	5.01201954	0.96811294	0.9937753	0.481841	0.741358	0.579146	1	
28	0.639968900	0.065957790	0.08775918	5.01003525	0.01256605	0.0341971	0.642517	0.070447	0.088759	1	
29	0.640078440	0.080178030	0.57949621	5.01934865	0.02849794	9.738349	0.637787	0.078666	0.582131	1	
30	0.641431550	0.409291500	0.08724401	5.000037815	0.01293664	9.824921	0.642021	0.407452	0.082284	1	
31	0.639013330	0.413387790	0.58152385	4.98142905	0.01762374	9.788468	0.640997	0.418503	0.582610	1	
32	0.634278860	0.748289820	0.08225073	4.99240275	0.00637294	9.844212	0.636600	0.743739	0.085459	1	
33	0.641707650	0.748903920	0.57902262	5.04746715	0.01225995	0.0236891	0.646537	0.741062	0.585012	1	
34	0.803934790	0.076547470	0.08587008	5.03263465	0.00994634	9.9998558	0.812108	0.067136	0.087675	1	
35	0.806470550	0.066534120	0.58101016	5.02039114	0.98814364	0.9993914	0.801056	0.080318	0.579150	1	
36	0.801916750	0.407921140	0.08620512	4.99000964	0.99392335	0.0178324	0.804859	0.406443	0.076083	1	

図 3.2 file07.dat の記入例（左の数字は行番号）

	1-7 列	8-10	11-20	21-30	31-40
2 行	NTION	NCOMPO	NRECRD1	NRECRD2	NRECRD3
	41-50 列	51-60	61-70	91-100	
2 行	NRECRD4	NRECRD5	NRECRD6	NRECRD9	

NTION: 全原子数

NCOMPO: 原子種数

NRECRD1: START からの計算ステップ数

NRECRD2: PCF データ等の積算数

NRECRD3: 現ジョブの計算ステップ数

NRECRD4: file09p.dat に出力された計算ステップ数

NRECRD5: file09v.dat に出力された計算ステップ数

NRECRD6: file06.dat に出力された計算経過データ数

NRECRD9: file09pv.dat に出力された計算ステップ数

	1-2 行	3-6	7-8	9-12	...
3 行	空白	ATOM1	空白	ATOM2	...
4 行		NION1		NION2	...
5 行		IONS1(1)		IONS2(1)	
6 行		IONS1(2)		IONS2(2)	

ATOM1-ATOM20: 原子の種類 (H, O, Si など、最大 20 種)

NION1-NION20: 原子種の数

IONS1(1)-IONS20(1): 原子の通し番号のうち、その原子種の最も小さい番号

IONS1(2)-IONS20(2): 原子の通し番号のうち、その原子種の最も大きい番号

	1-10 列	11-20	21-30
7 行	TEMP	DELTMP	TMPGET

TEMP: 現在の温度(K)

DELTMP: file05.dat の説明を参照。

TMPGET: 設定温度(K)

	31-40 列	41-50	51-60
7 行	P_{xx}	P_{yy}	P_{zz}

P_{xx} : x 軸方向の設定圧力 (GPa)

P_{yy} : y 軸方向の設定圧力 (GPa)

P_{zz} : z 軸方向の設定圧力 (GPa)

	1-10 列	11-20	21-30	31-40	41-50
8 行	DTIME	RUNO18	σ	b	c
	51-60 列	61-70	71-80		
8 行	$\cos(\alpha)$	$\cos(\beta)$	$\cos(\gamma)$		

DTIME: 時間刻み(s)

RUNO18:

a, b, c : シミュレーションセルの各軸の長さ(Å)

α, β, γ : シミュレーションセルの各軸間の角度

	1-10列	11-20	21-30	31-40	41-50
9行	DENSTY	RUNO52	VBOX1	VBOX2	VBOX3
	51-60列	61-70	71-80		
9行	VBOX4	VBOX5	VBOX6		

DENSTY: 密度(g/cm³)

RUNO52:

VBOX1-VBOX6: シミュレーションセルの圧力制御に用いる変数

	1-10列	11-20	21-30	32-40	41-48
10行-	px	py	pz	vx	vy
	49-57列	59-68	69-78	79-88	90-91
10行-	vz	px0	py0	pz0	IO

px: a 軸の部分座標

py: b 軸の部分座標

pz: c 軸の部分座標

vx: a 軸方向の1ステップあたりの変位(Å)を10倍して5を足した値

vy: b 軸方向の1ステップあたりの変位(Å)を10倍して5を足した値

vz: c 軸方向の1ステップあたりの変位(Å)を10倍して5を足した値

px0: “START”時の a 軸の部分座標

py0: “START”時の b 軸の部分座標

pz0: “START”時の c 軸の部分座標

IO: 原子種の番号

RUNO52:

VBOX1-VBOX6: シミュレーションセルの圧力制御に用いる変数

4 初期ファイルの作り方

4.1 結晶モデル

結晶構造のデータは `xtaldata.dat` に記載されている。

`mxdininput` を実行し、質問に答える形式で結晶構造を作製する。

`Structure type (A12)?`で `LIST` と答えると、収録されている結晶構造の名称が表

示される。

(例) Brucite の場合

```
hiroshi@toki1529:/mnt/d/Data/test$ mxdininput
Structure type (A12)? (see XTALDATA.DAT, or type "LIST")
.....
"CHAOS" for liquid or glass
LIST
    CHAOS      BCC      BCC2      BIOTITE      Chlorite      Clinochlore
    DIAMOND     FCC      GRAPHITE   Goethite     Hydrotalcite Illite-1M
    KN03       KN03     LDH CI-a2/A LDH CI-Mg/Al Lepidocrosit Li2CO3
    LIN03      N2 HEXAGONAL N2 CUBIC NA2CO3      NAN03      O2 CUBIC
    O2 CUBIC    PYRITE    SILICON    SPHALERITE SPHALE-(110) A-NAOH
    B-NAOH     BRUCITE    HYDROTALCITE GIBBSITE I-ICE      ICE
    ICE-II      ICE-VI X ICE-VII     ICE-VIII    ICE-VIII_D20 ICE-IX
    ICE-XI     ICE-XI-test ICE-XI-OQ CLATHRATE IC CLATH-2A CLATHRATE-2
    CLATHRATE2 CLATHRATE2 CLATHRATE2 MH3 NONTRONITE AMMONIA
    ALPHA-SI3N4 BETA-SI3N4 B2O3 NaBO2      DIOPSIDE    ENSTATITE
    PROTOENSTATI CLINOENSTATI PP-MGSIO3 PP-MGSIO3-90 PP-MGSIO3-10 PP-MGSIO3-11
    PP-MGSIO3-12 PP-MGSIO3-13 PP-MGGE03 PP-MGGE03-R PP-MGGE03-RP KCuZrS3
    PEROVSKITE  BATI03   BATI03   SRTI03-TET MGSIO3-PEROV P-MGSIO3-090
    P-MGSIO3-100 P-MGSIO3-110 P-MGSIO3-120 P-MGSIO3-130 I'-PEROVSKITE I'-PEROVSKIT
    CAGEO3-PEROV PA/NBM-PEROV KCUF3-PEROV NH4GCL3 NH4GCL3 MGSIO3-ILMEN
    ARAGONITE    CALCITE   CALCITE-rhom DOLOMITE MgSO4      MgCl2
    SRC03       BAC03    ALPHA-C2S10 MONTICELITE FORSTERITE P212121-FORS
    *FORSTERITE I-FORSTERITE B-MG2S104 SPINEL LT-MAGNETITE MT-MODEL 2
    C-MG2S104 D-MG2S104 E-MG2S104 ZIRCON LI2WO4 LISBO3
    BANI03      LINB03   L12S103 NA2S103 A-NA2S1205 QUARTZ
    QUARTZ-D    HP-QUARTZ HT-QUARTZ HT-CRISTOBAL I-CRISTOBALI LT-CRISTOBAL
    LT-CRISTOBAL KEATITE BEF2 I'-CRISTOBAL SILICALITE ZSM-11
    ZSM-5       ZSM-5-AR ZSM-5-TI COESITE STISHOVITE I-TI02-II
    a-PbO2-SiO2 RUTIL    ANATASE GE-QUARTZ GE-RUTILE BADDELEYITE
    tetragonal Z CORUNDUM  CRO3 CRO3-2 NA2CRO4 MGF2-RUTILE
    CACL2       BASO4    SRSO4 CS2SO4 NAALCL4 CACL2-RUTILE
    PBCL2       FLUORITE FLUORITE UO2 AG2O CU2O
    BEO         PERICLASE MGO-(011) MGO-(110) CAO SRO
    BAO         FEO      NaCl  KCl  CSCL CAO-CSCL
    ANDALUSITE SILLIMANITE KYANITE C-ORTHOCLASE ORTHOCLASE ALBITE
    LT-ALBITE' HT-ALBITE' LT-ALBITE MEGAW-AB MONALBITHEXANORTHITE
    HEXCELSIAN DANBURITE HP-NAALSI04 HY-MG2S104 HOLLANDITE HP-KALS1308
    CaA        GROSSULARITE LT-LEUCITE HT-LEUCITE KALSLITE
    HEX-KALS104 HT-CARNegieI K2SiSi1309 ANALCITE SI-ANALCITE NAA-o
    NAA        NAX      WOLLASTONITE TREMOLITE BERYLLONITE TRIMERITE
    SODALITE   ALOCL   L-BORACITE PBBI02I KMGF3 K2SiF6
    NAALF4     KALF4    K2NaALF6 ALF3 LIALO2 DRY ICE
    MASSICOT   HEMATITE NB2O5 PFN LITHARGE BT
    PBTI03     RUTILE   ANATASE BROOKITE TiO2-2 LA2O3
    ANORTHITE PHLOGOPITE PHLOGOPITE-F KAOLINITE LIZARDITE LIZARDITE GG
    P1-MICA    VERMICULITE MUSCOVITE MUSCOVITE-F MUSCOVITE-S MUSCOVITE-P
    cv1-mica   cv2-mica Tv-mont-1M cv1-mica-2M1 cv1-mica-tmp SERICITE-HT
    PYROPHYLLITE TALC-P-1 TALC-C-1 LASRCR03 LACR03 GD-BIX
    NDPO4      F-APATITE F-APATITE-W TUBE GAN GAN-2
    ALN-2      LIMNO2   CA3N2 MGBN2 KANEMITE BI
    IMOGO-12   IMOGO-13 IMOGO-14 IMOGO-15 IMOGO-16 IMOGO-18
    IMOGO-20   IMOGO-F-12 IMOGO-F-14 IMOGO-F-15 IMOGO-F-16 IMOGO-F-18
    BENZEN     ANTHRACENE ANTHRACENE-2 ANTIGOLITE ANTIGO-OH

Structure type (A12)? (see XTALDATA.DAT, or type "LIST")
.....
"CHAOS" for liquid or glass
BRUCITE
Mg(OH)2 Neutron data N.Jahr.-Minerall.Monatshefte p137(1987)
A= 3.1420 B= 3.1420 C= 4.7660 ( 90.0000 90.0000 120.0000)
Space group :P3-1m
No. of symmetry operations is 12
No. of lattice points is 1
THE NUMBER OF ATOMS IN A ASYMMETRIC UNIT IS 3
THE NUMBER OF ATOMS IN A CELL IS 5
The crystal system is hexagonal or trigonal.
Transform to orthogonal system ?
n
Mg H O : Atoms in the structure
O Si Al Mg Ca Na Cs X Y Z :(Exampl) Type in please
O Mg H
A= 3.142 B= 3.142 C= 4.766( 0.000 0.000 -0.500)
How many cells?
A B C
5 5 4
A= 15.71000 B= 15.71000 C= 19.06400 Ok?
y
The total number of atoms in a basic cell is 500
1 Mg 2.10(0 ) 2.10(0 ) 2.10(0 ) 2.10(0 ) 2.10(0 ) 2.10(0 )
2 H 0.99(0 ) 1.93(H ) 1.93(H ) 1.93(H ) 2.46(0 ) 2.46(0 )
3 O 0.99(H ) 2.10(Mg ) 2.10(Mg ) 2.10(Mg ) 2.46(H ) 2.46(H )
Structure check completed !
I-----I Temperature(K) ?
298.15
*** NO. of ions : 0 : 200 Mg: 100 H : 200 : 0 : 0
*** CELL IS 5 5 4 NPT(NPTP) : 10( 17)
*** A= 15.7100 B= 15.7100 C= 19.0640 CA= 0.0000 CB= 0.0000 CC=-0.5000
*** Density is 2.0585 g/cm3
Do you want a new file05.dat (y/n/r) ?
n
hiroshi@toki1529:/mnt/d/Data/test$
```

5 出力ファイル 準備中

6 計算原理 準備中

6.1 ポテンシャル関数

6.1.1 BMH-EXP, Full flexible atom, Kawamura model

クーロン項、近接反発・分散力項を表現した Born-Mayer-Huggins 型モデル、指
数関数型の共有結合項を加えたモデル。Full flexible atom モデルや Kawamura モ
デルとも呼ばれる。FIPC モデルでも使われる。