

SCIGRESS ME 特別版

入門チュートリアル

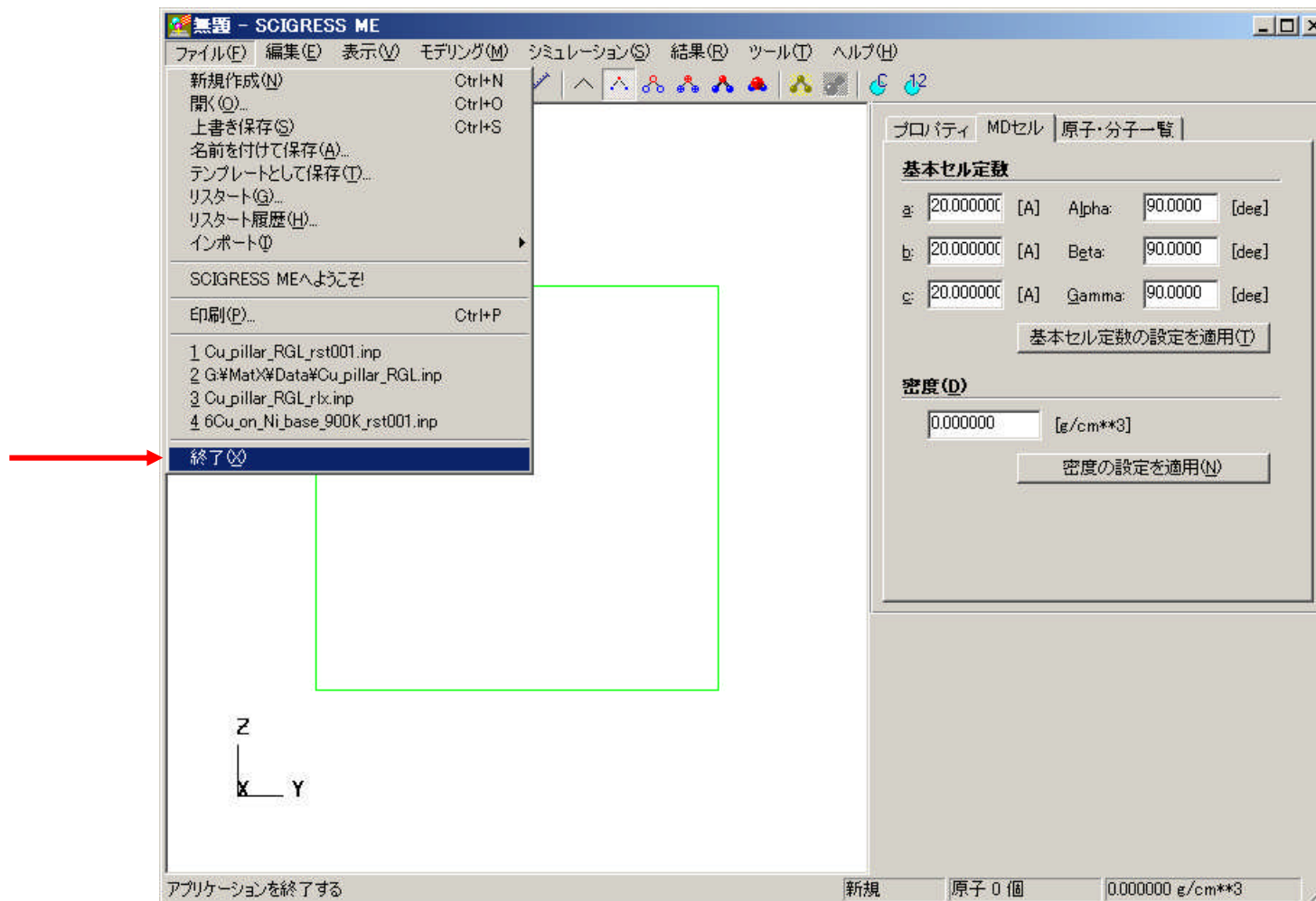
010001011000
 00010110001111101010
 110101
 1011000111110101000
 010110000101

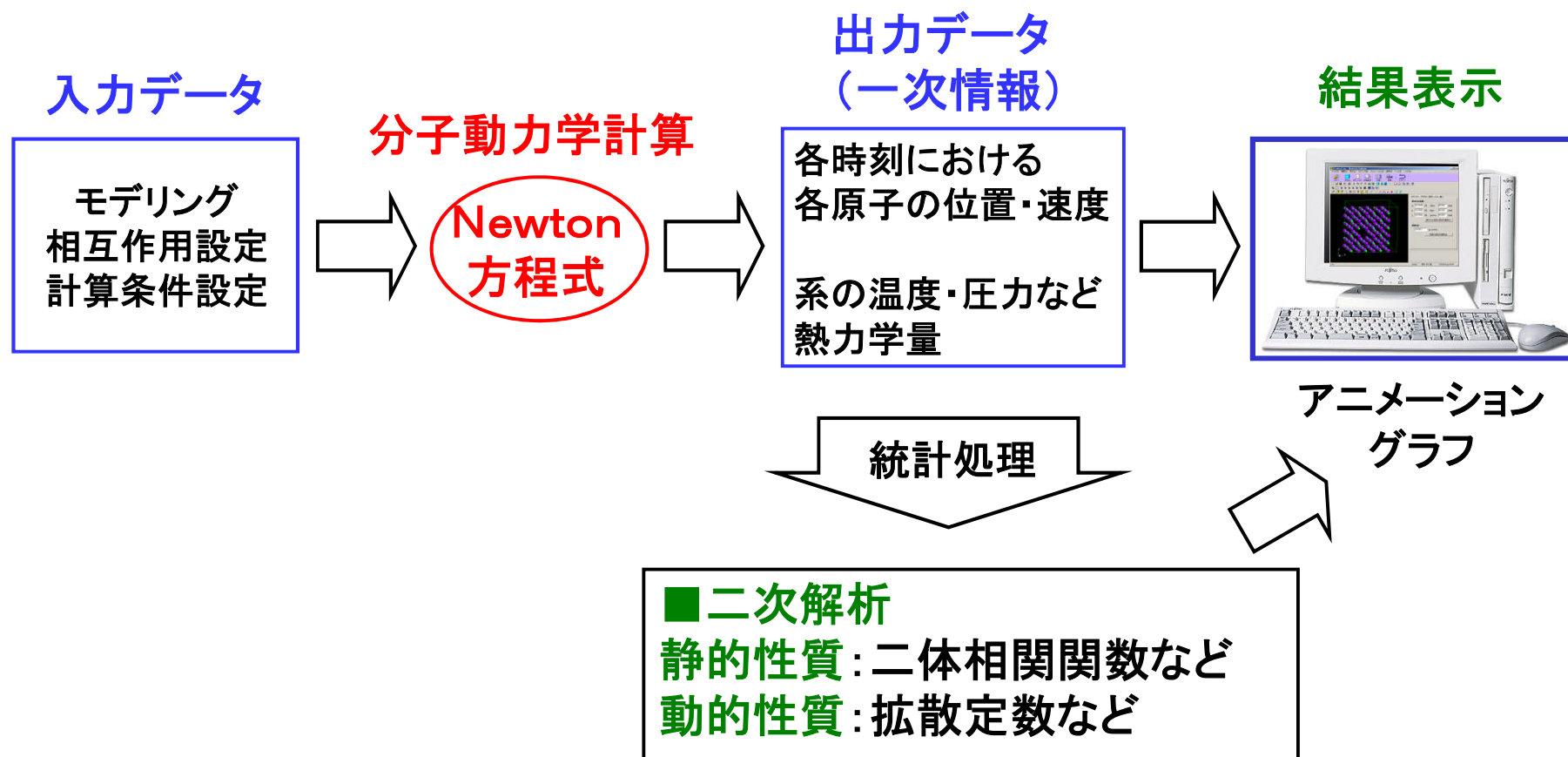
SCIGRESS MEの基本操作

「スタート」メニュー から
「プログラム」または「すべてのプログラム」
→「SCIGRESS ME 2.1 特別版」
→「SCIGRESS ME」
を選択します

SCIGRESS ME の終了方法

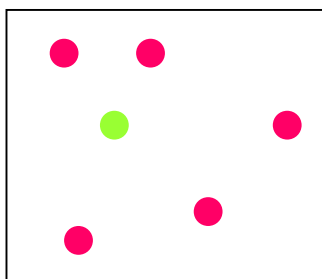
「ファイル」→「終了」をクリック





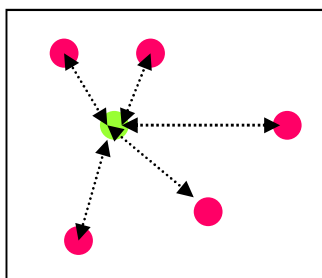
α 鉄のシミュレーションを行う

入力データの作成



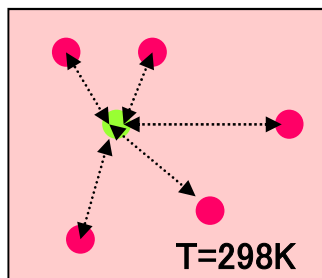
a. モデリング

計算対象(分子・系)の作成



b. ポテンシャル設定

結合・非結合相互作用のポテンシャルを設定する



c. 計算条件設定

c- i . 実験的条件

温度・圧力など現実の実験でも設定するもの

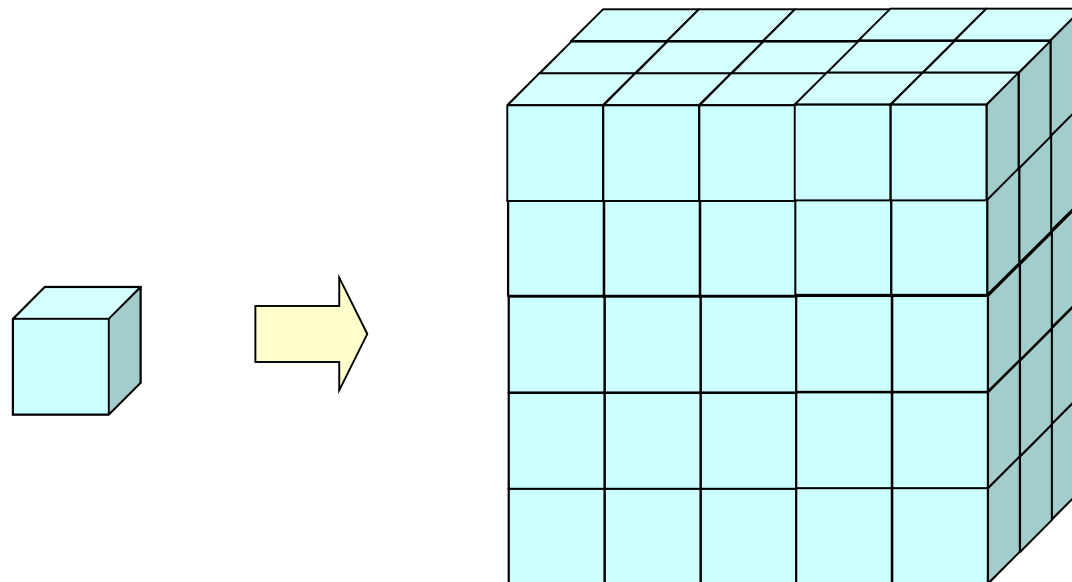
c- ii . 計算的条件

ステップ数などシミュレーション特有のもの

Total step=1000step

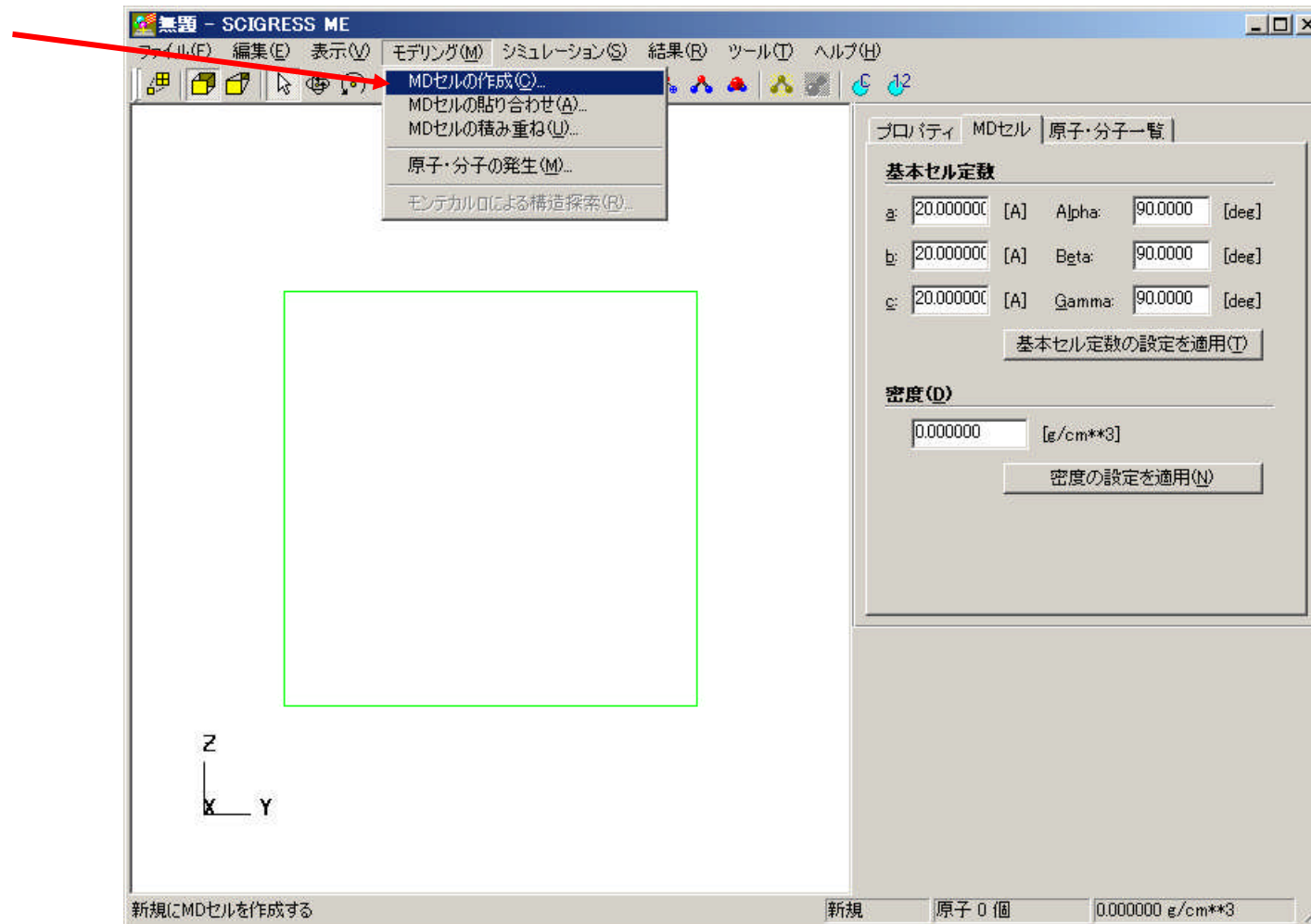
系のモデリングは以下のように行う

- (1) Feの基本セル(体心立方格子, 格子定数 2.8665 \AA)を作成する
- (2) 基本セルを $5 \times 5 \times 5$ で積み重ねる



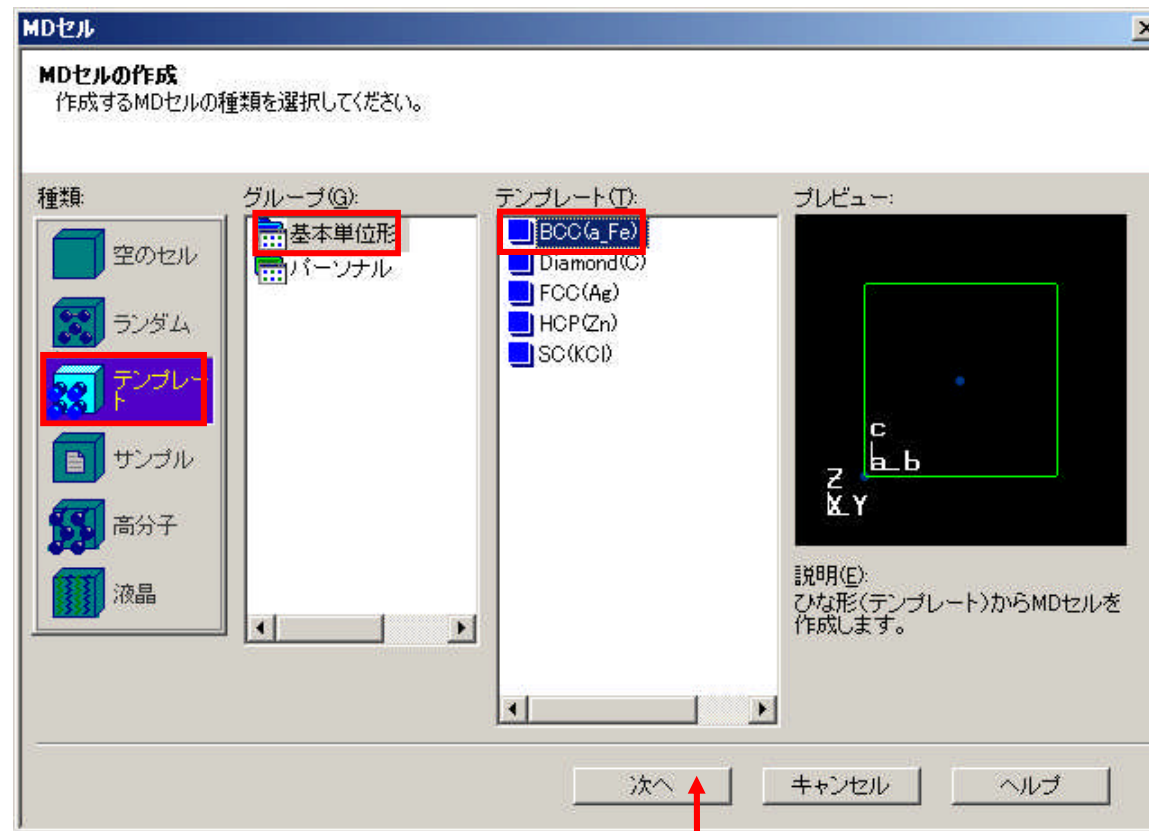
モデリング

「モデリング」→「MDセルの作成」をクリック



モデリング

種類は「テンプレート」、グループは「基本単位形」、
テンプレートは「BCC(a_Fe)」を選択し、「次へ」をクリック



(置き換ええない) を選択し、「次へ」をクリック

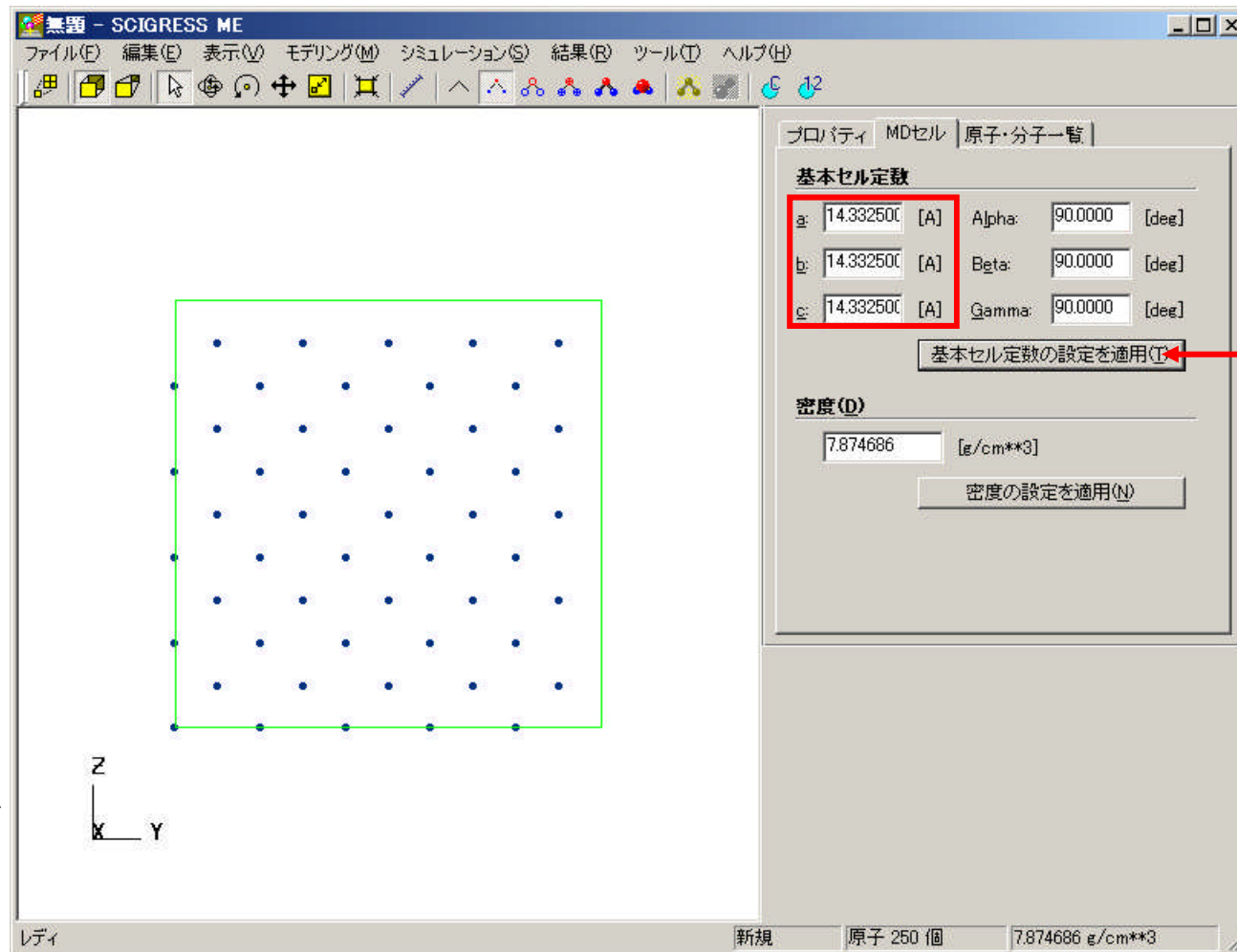


「積み重ね数」の「a軸」、「b軸」、「c軸」を全て5に設定し、「完了」をクリック



モデリング

「基本セル定数」を設定 ($2.8665 \times 5 = 14.3325 \text{ \AA}$) し、
「基本セル定数の設定を適用」をクリック



(*) αFe の格子定数は、
FSポテンシャルの
論文記載の値
 2.8665 \AA
を使用する

ポテンシャル設定

Finnis Sinclairポテンシャル

二体力項	$\phi_{ij}(r) = \begin{cases} (r-c)^2(c_0 + c_1 \cdot r + c_2 \cdot r^2) & (r < c) \\ 0 & (c < r) \end{cases}$
多体力項	$\rho_i = \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij})$ $\rho_j(r) = \begin{cases} (r-d)^2 + \beta(r-d)^3/d & (r < d) \\ 0 & (d < r) \end{cases}$ $E_i(\rho_i) = -A\sqrt{\rho_i}$

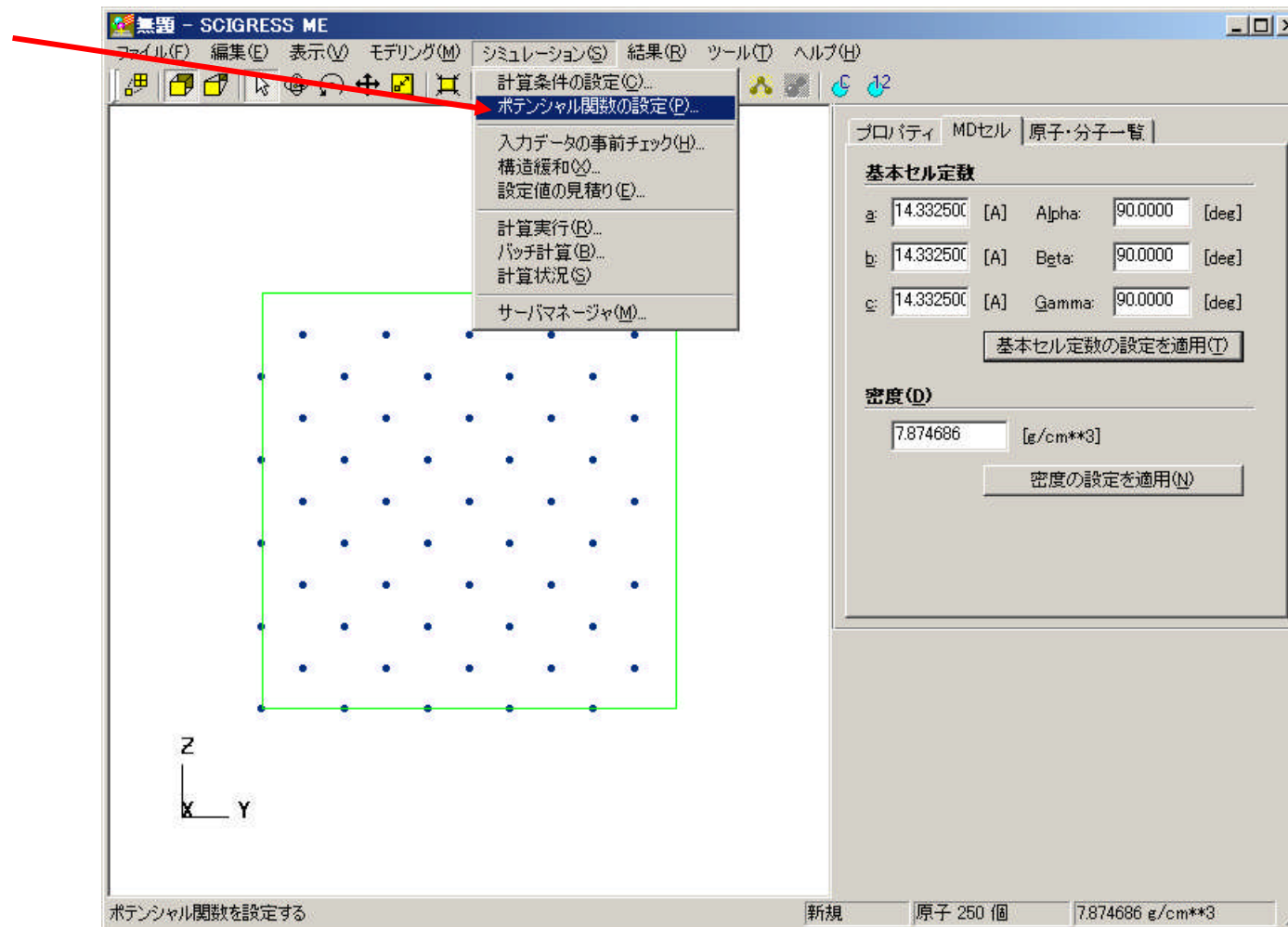
c (Å)	C0(eV)	C1(eV/Å)	C2(eV/Å**2)
3.4	1.2371147	-0.3592185	-0.0385607
A(eV)	d(Å)	β	格子定数(Å)
1.828905	3.569745	1.8	2.8665

[参考文献] Phil. Mag., A 50, 45, (1984)

Erratum: Phil.Mag., A 53, 161, (1986)

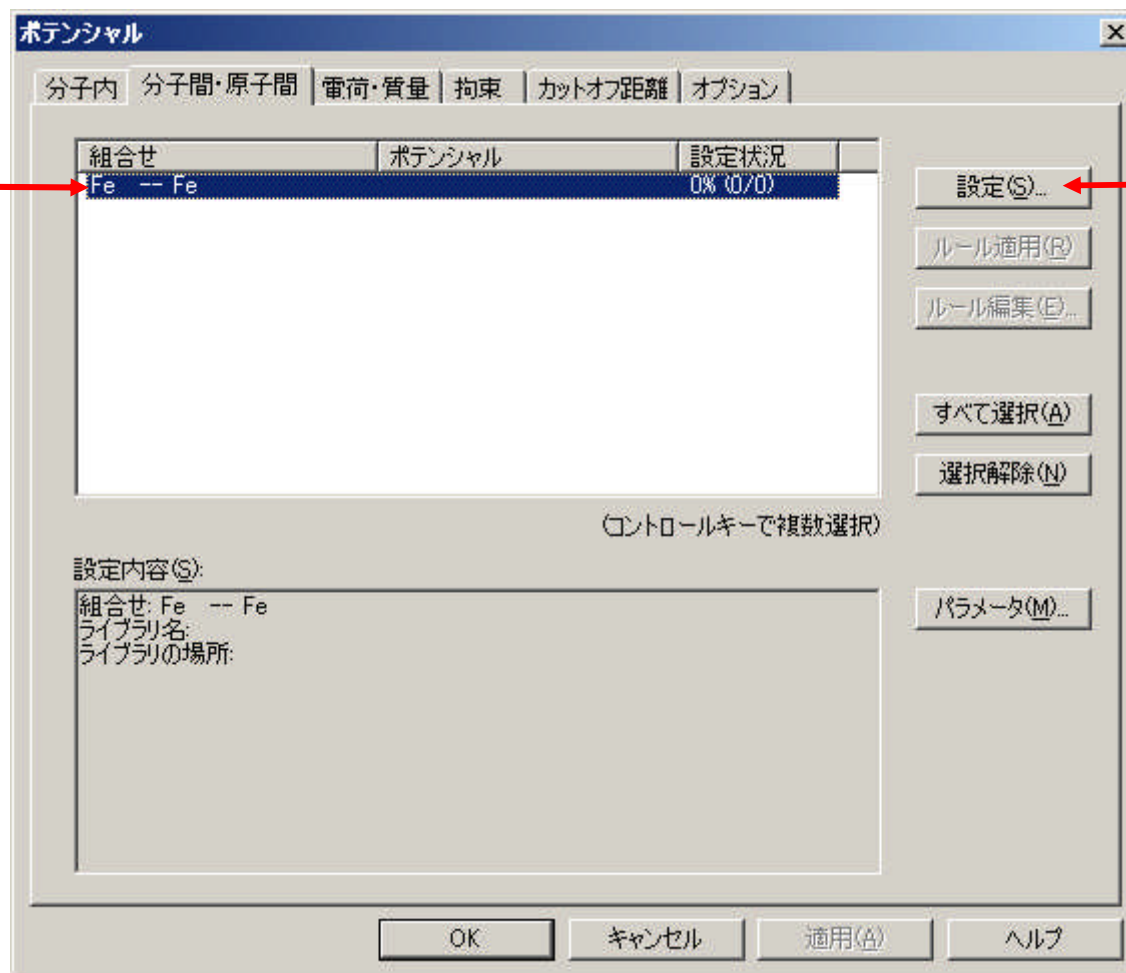
ポテンシャル設定

「シミュレーション」→「ポテンシャル関数の設定」を選択



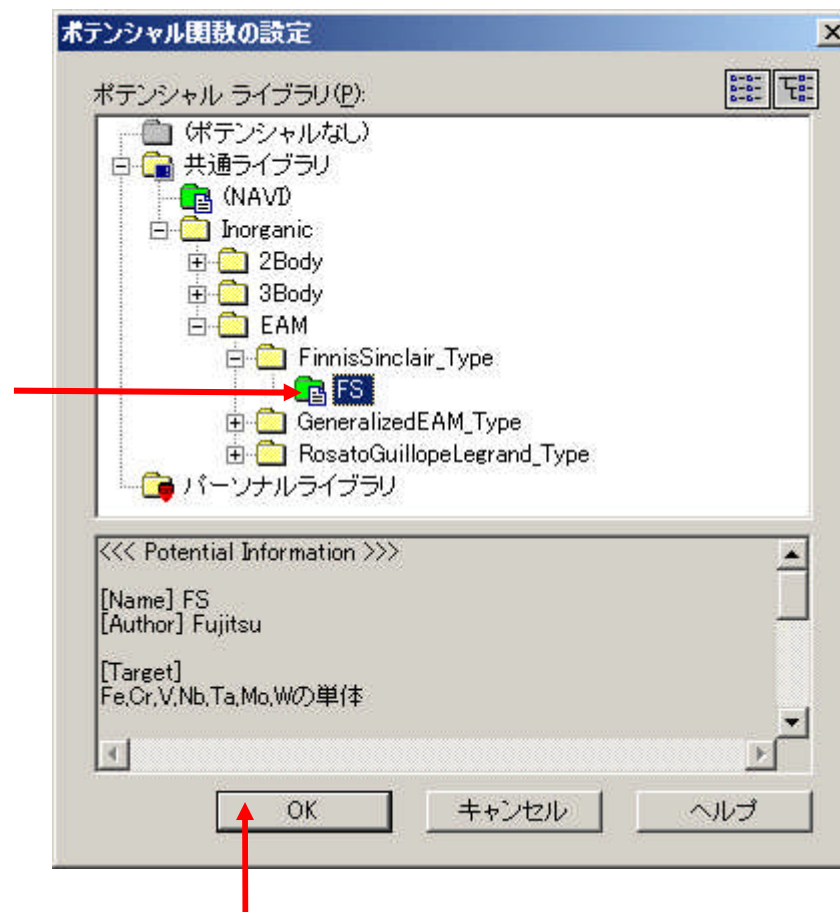
ポテンシャル設定

「Fe -- Fe」を選択し、「設定」をクリック



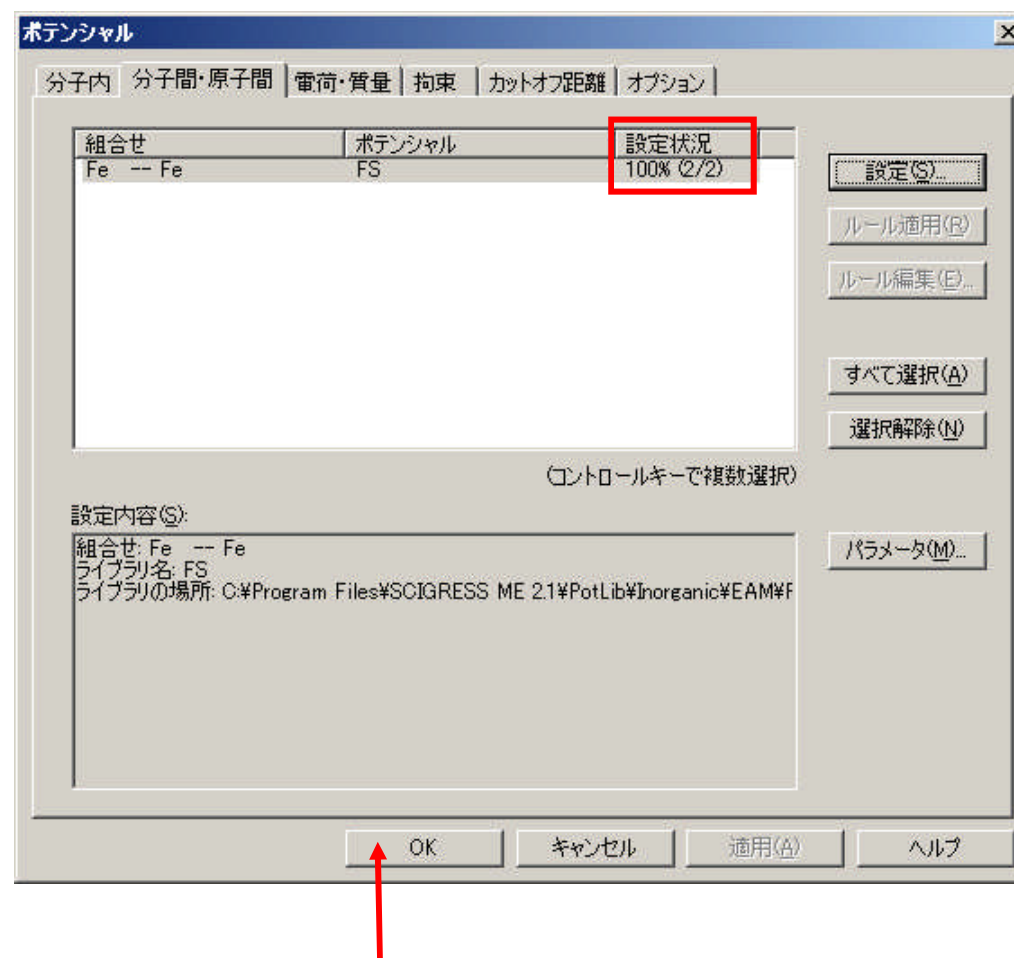
ポテンシャル設定

「共通ライブラリ¥Inorganic¥EAM¥FinnisSinclair_Type¥FS」を選択し、
「OK」をクリック



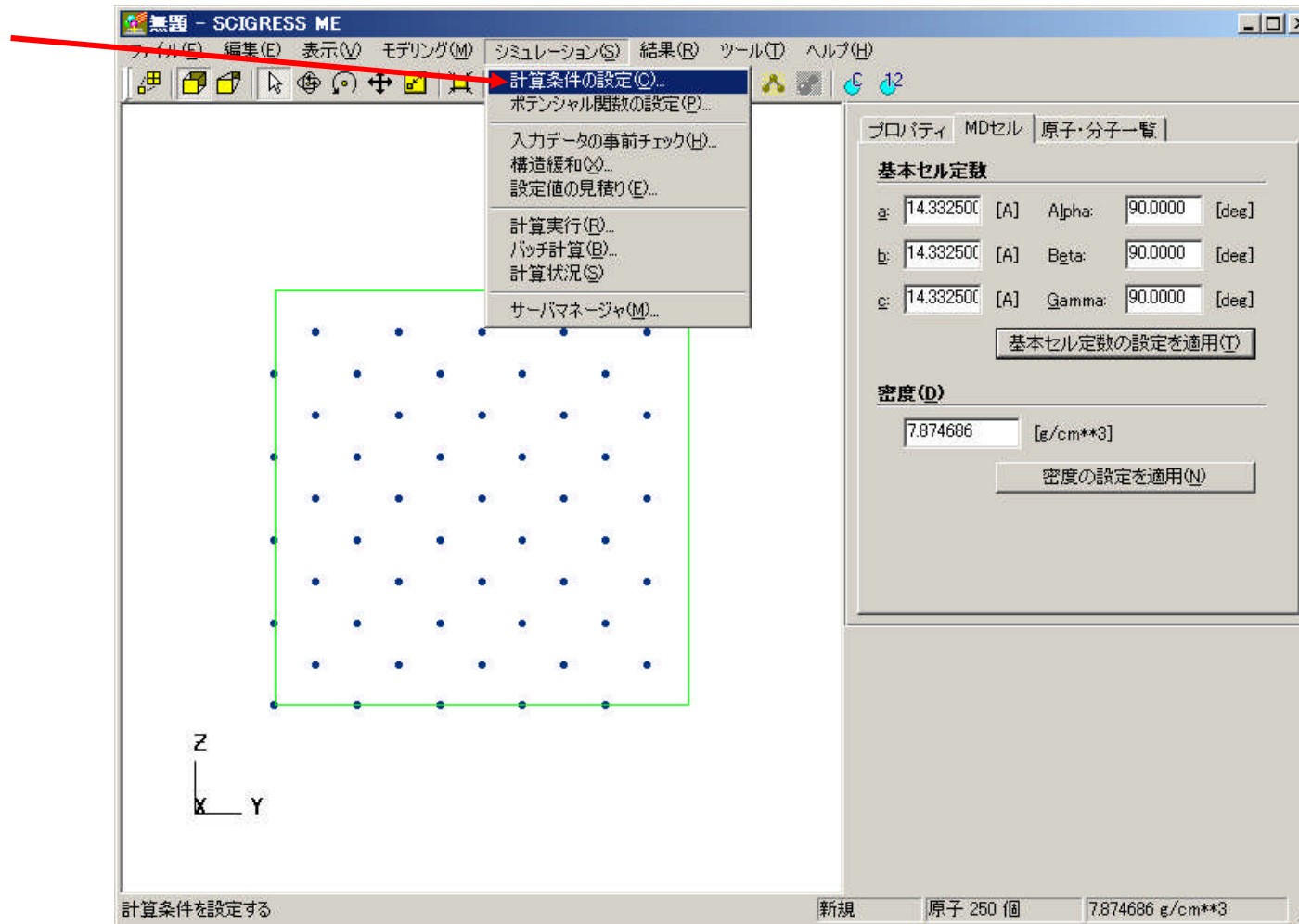
ポテンシャル設定

設定状況が100%になっていることを確認し、「OK」をクリック



計算条件設定

「シミュレーション」→「計算条件の設定」をクリック



計算条件設定

計算条件を設定し、「適用」、「OK」をクリック

計算条件

基本設定 | 外場 | 輸送係数 | ファイル出力 | オプション

アンサンブル

- ☐ NEV
- ☐ NTV
- ☐ NPH
- ☒ NTP

シミュレーション時間

総ステップ数(L): 5000 [steps]

時間刻み幅(P): 0.5 [fs]

出力開始ステップ(S): 100 [step]

出力間隔ステップ数(Q): 100 [steps]

出力ステップ数(Q): 50 [steps]

温度

☒ 一定(C) 0.1 [K]

☐ 可変(A) 設定(E)...

圧力

☒ 一定(C) 1 [atm]

☐ 可変(B) 設定(E)...

周期境界条件

☒ 周期境界条件を適用する(Y)
(原子・分子を発生させる場合は2次元)

MDセル

☒ 一定(N)

☐ a軸方向に可変(A)

☐ b軸方向に可変(B)

☐ c軸方向に可変(C)

設定(E)...

MDセルの形状

☒ 可変(V)

☐ 立方体を保つ(U)

☐ 直方体を保つ(R)

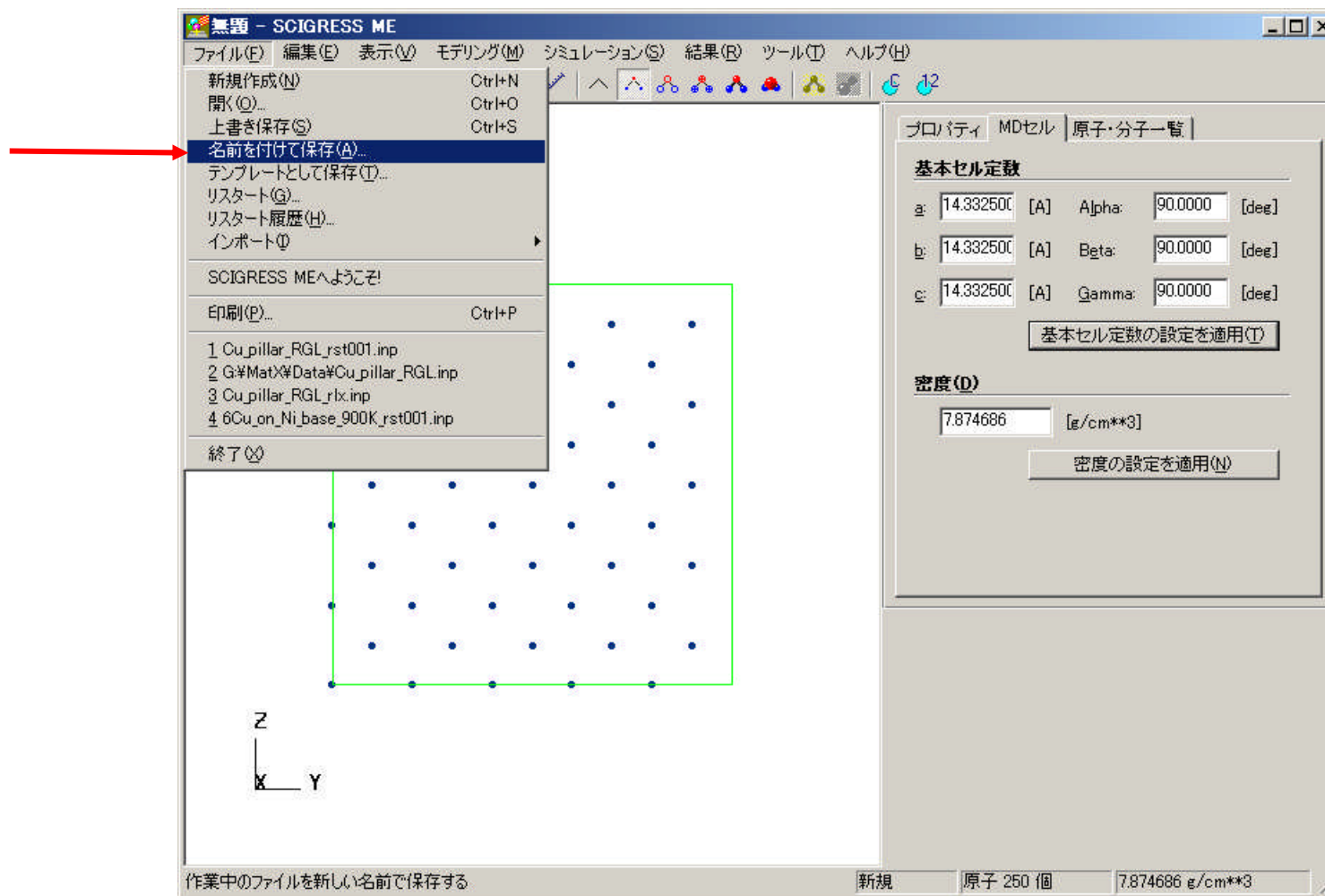
テンプレート... OK キャンセル 適用(A) ヘルプ

計算条件

アンサンブル	NTP
総ステップ数	5000 steps
時間刻み幅	0.5 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ	100 steps
温度	0.1K (一定)
圧力	1 atm (一定)
周期境界条件	適用する

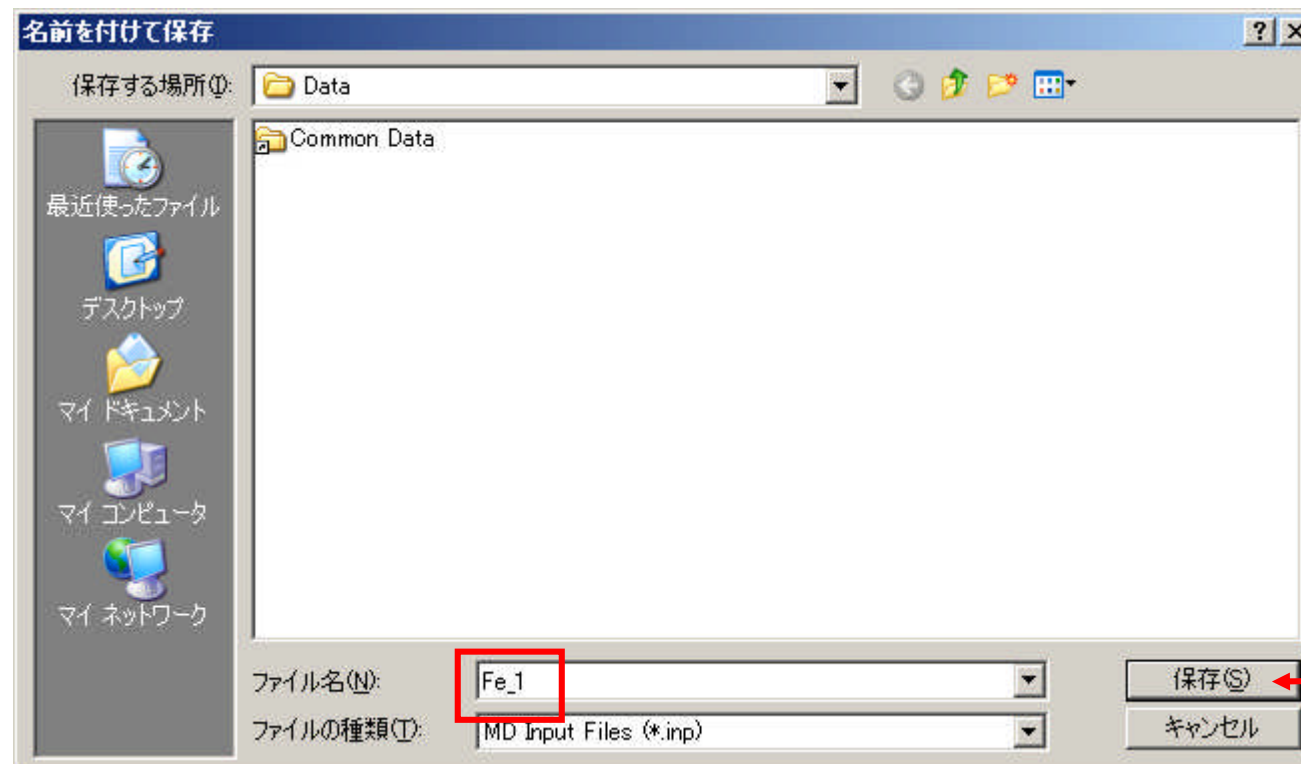
入力データの保存

「ファイル」→「名前をつけて保存」をクリック



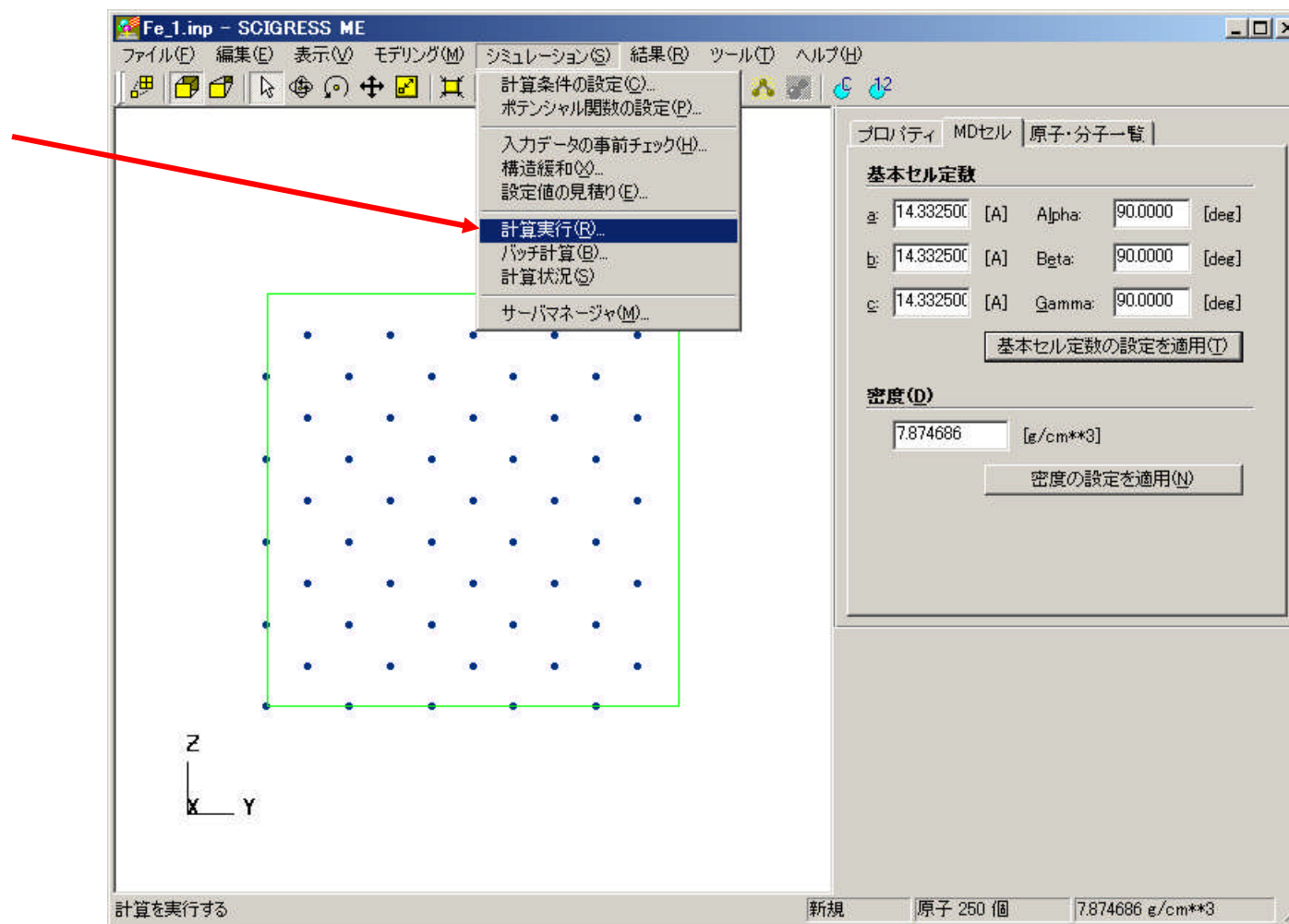
入力データの保存

ファイル名 (**Fe_1**) を入力し、「保存」をクリック

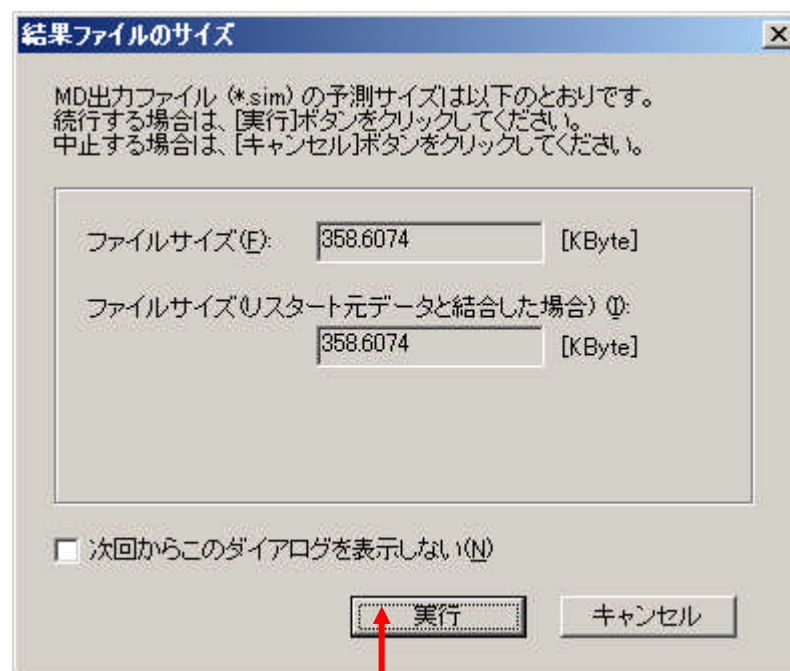


計算実行

「シミュレーション」→「計算実行」をクリック



「実行」をクリック

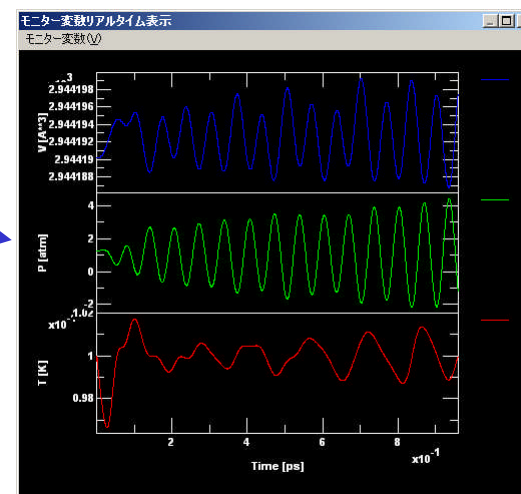
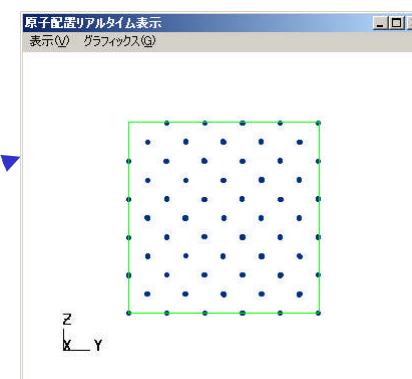
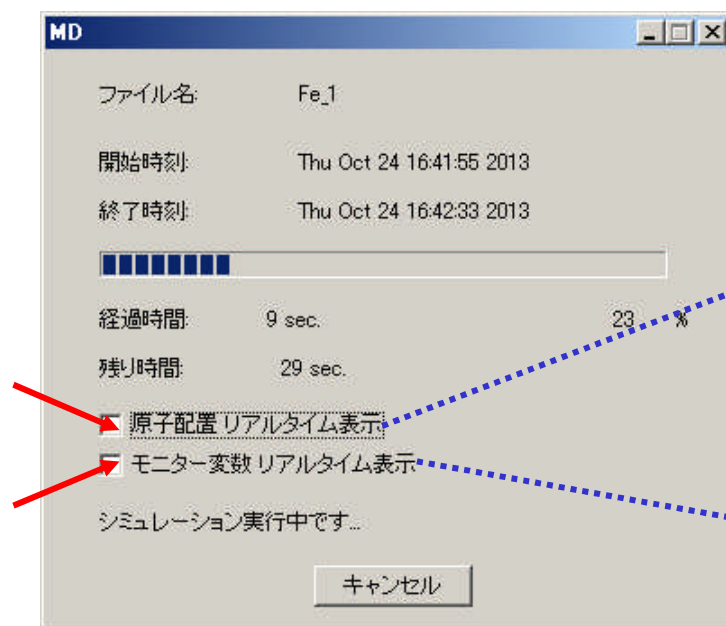


計算実行

「原子配置リアルタイム表示」をクリック

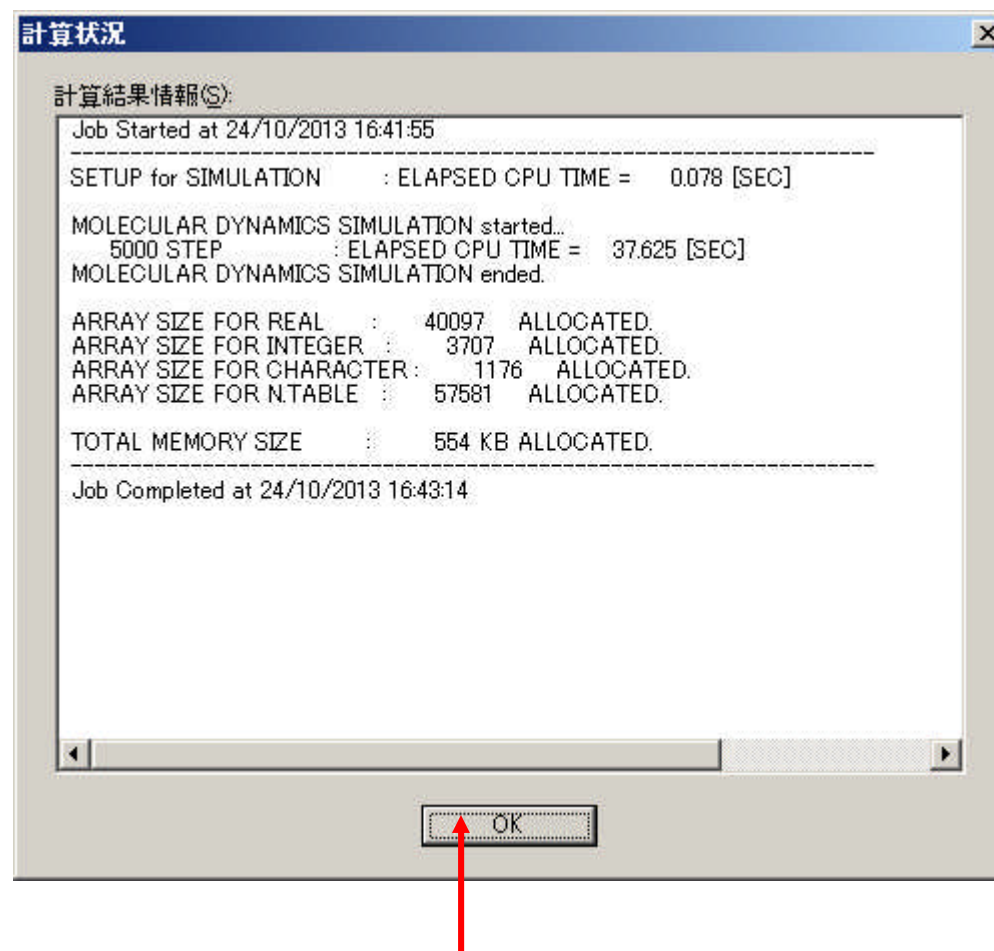
「モニター変数リアルタイム表示」をクリック

(*) 再度クリックしてチェックを外せば、各ウインドウが閉じます



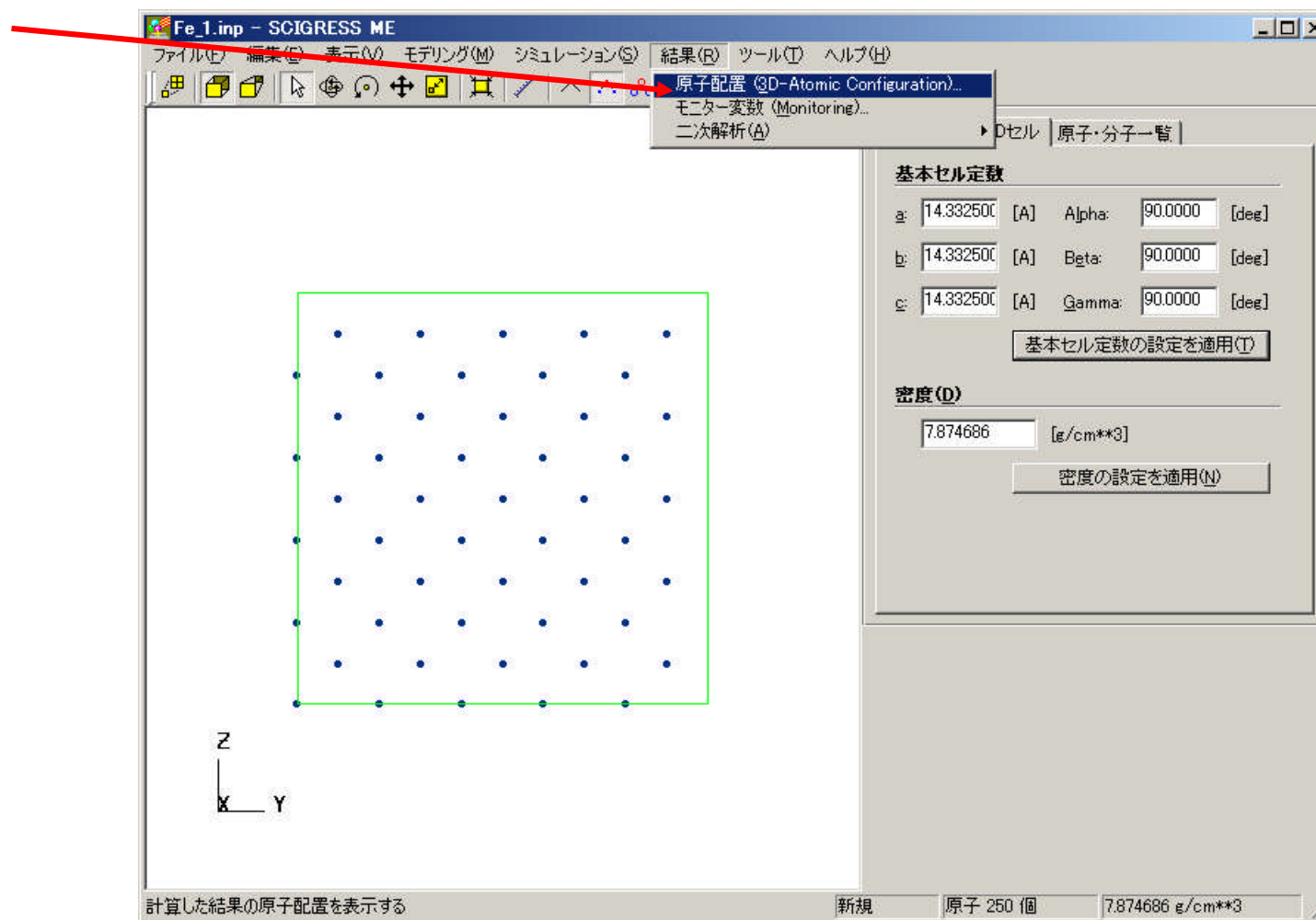
計算終了

計算結果情報を確認後、「OK」をクリック



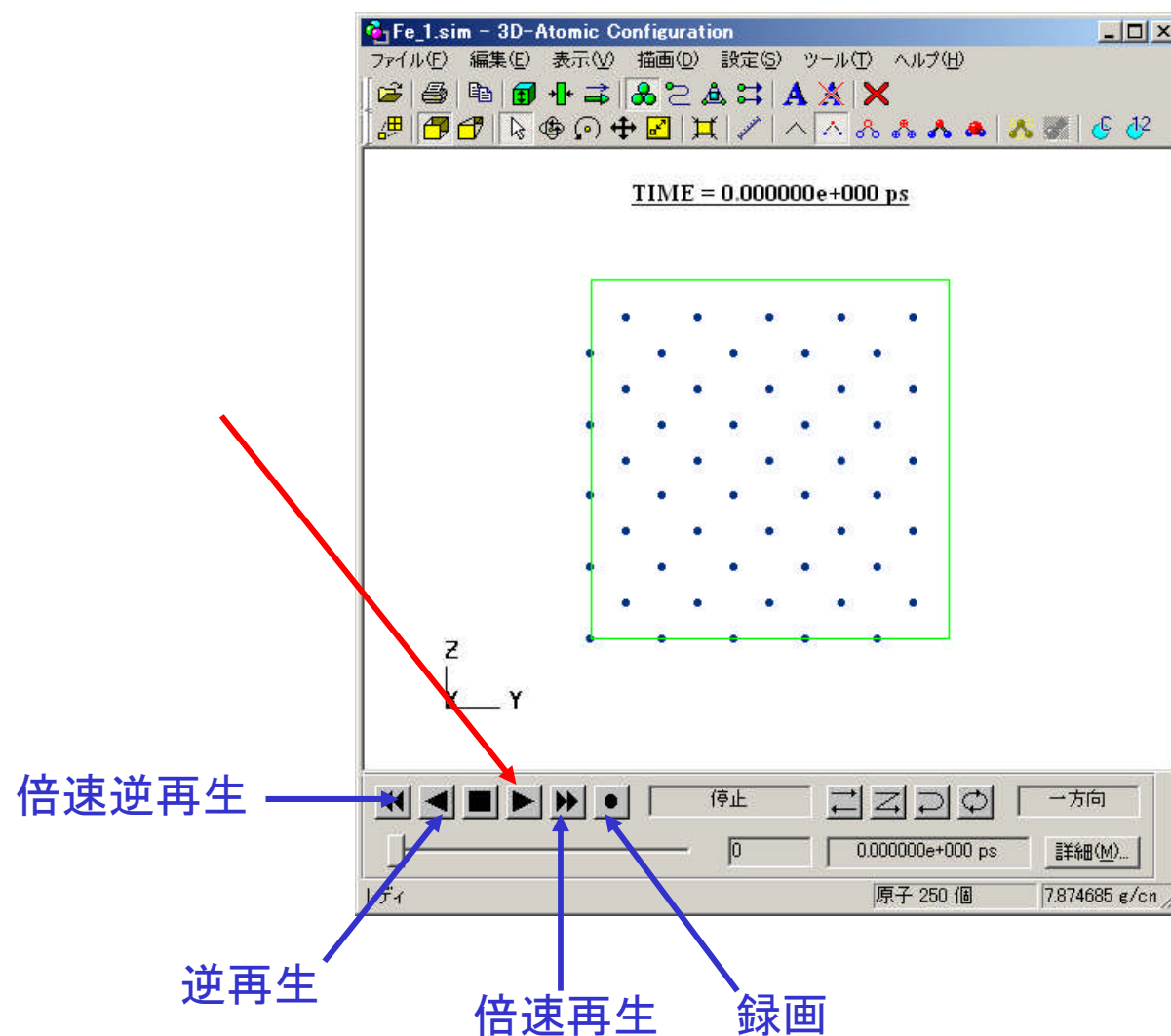
原子配置のアニメーション表示

「結果」→「原子配置」をクリック



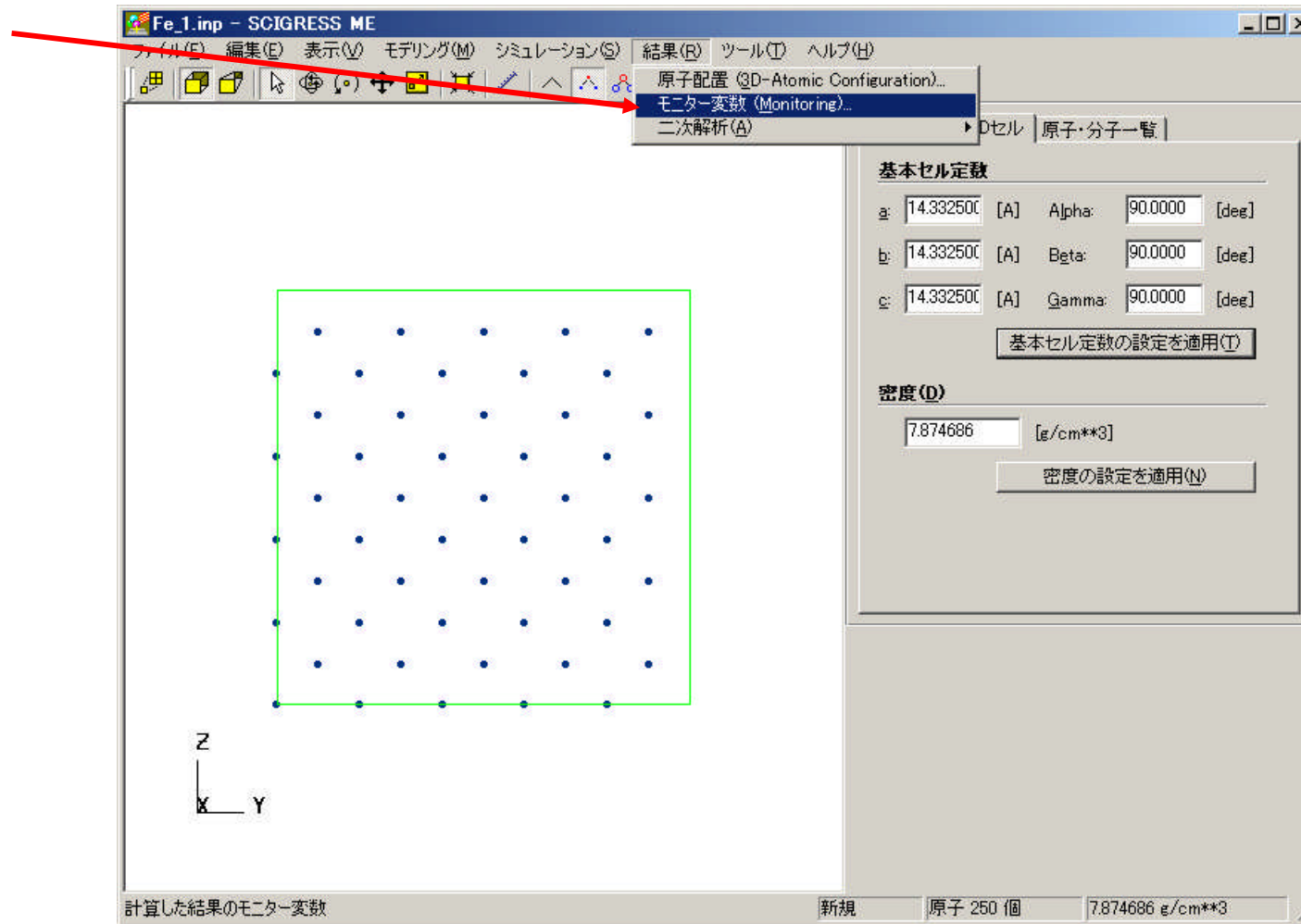
原子配置のアニメーション表示

「再生」ボタンをクリック



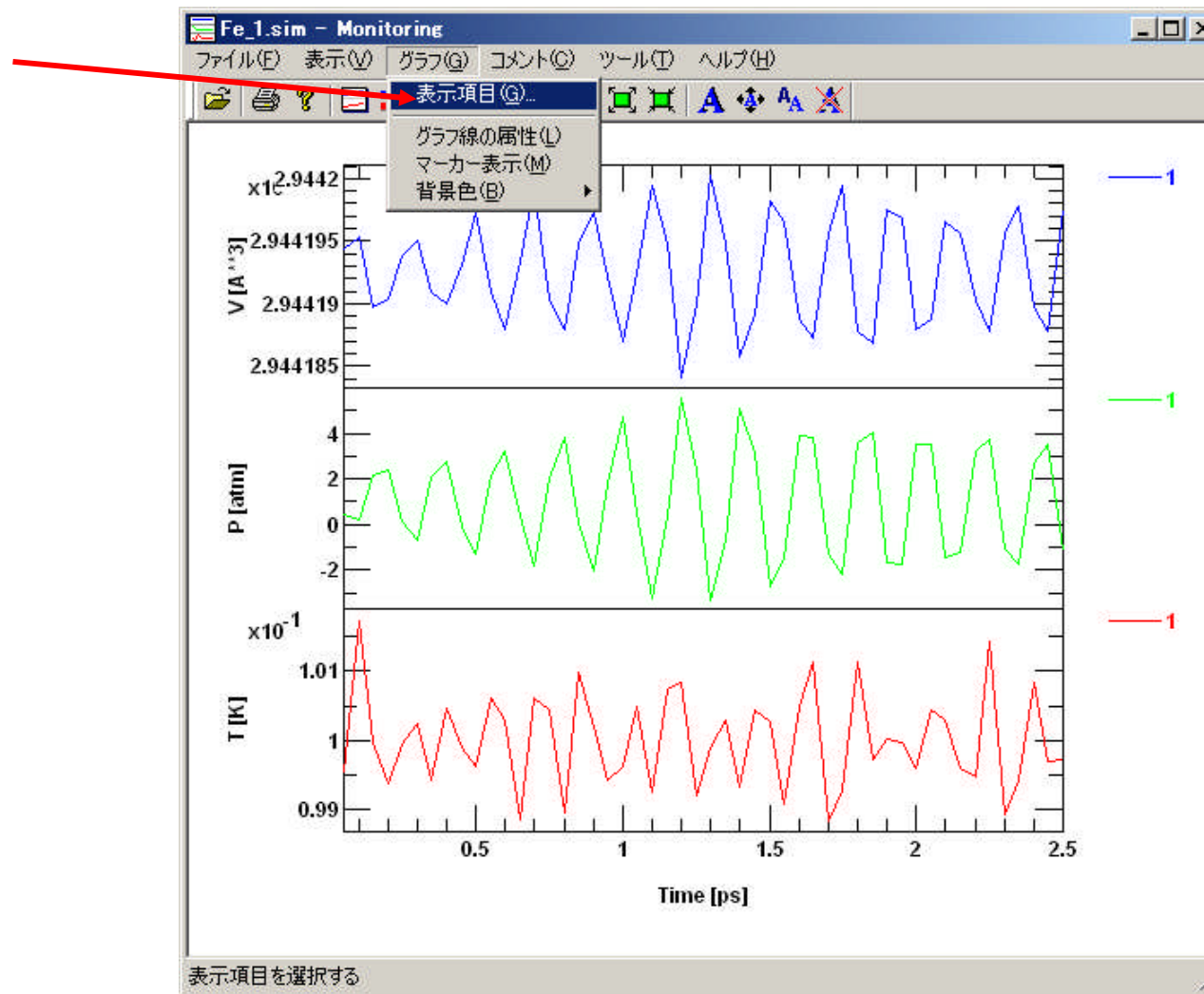
モニター変数の表示

「結果」→「モニター変数」をクリック



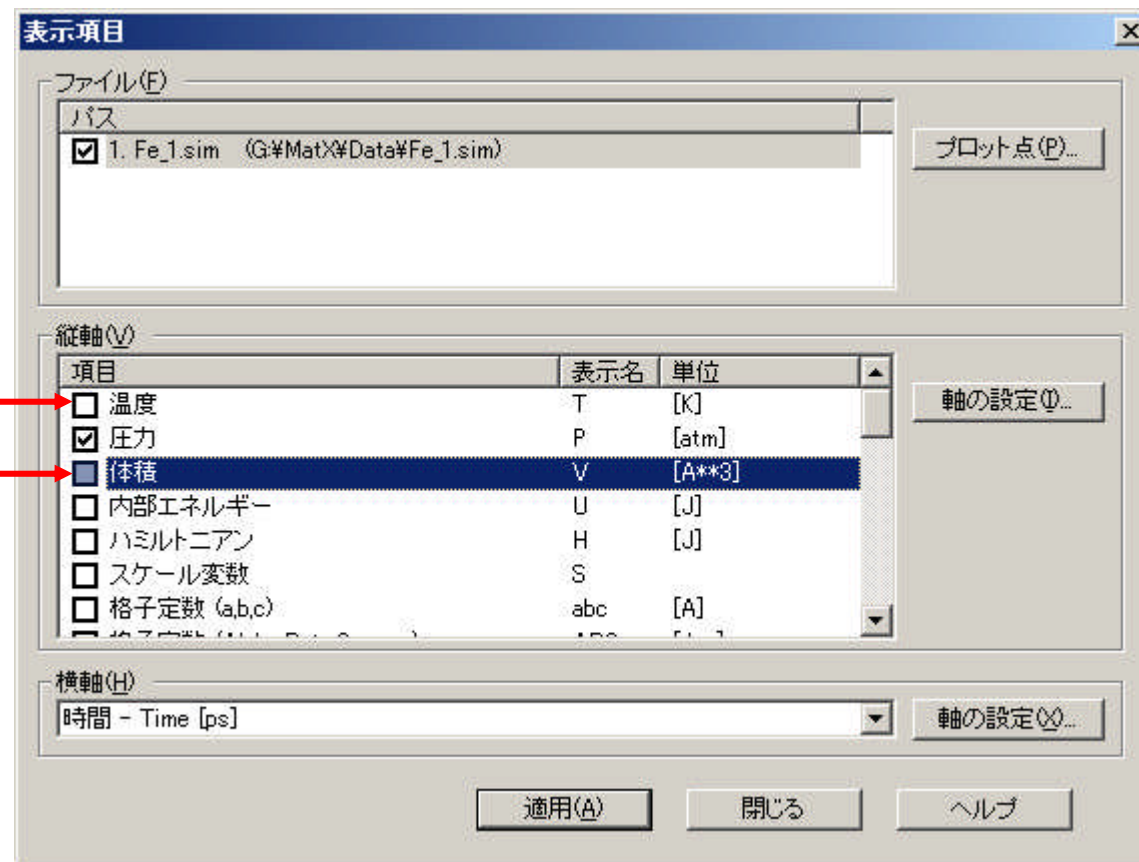
モニター変数の表示

「グラフ」→「表示項目」をクリック



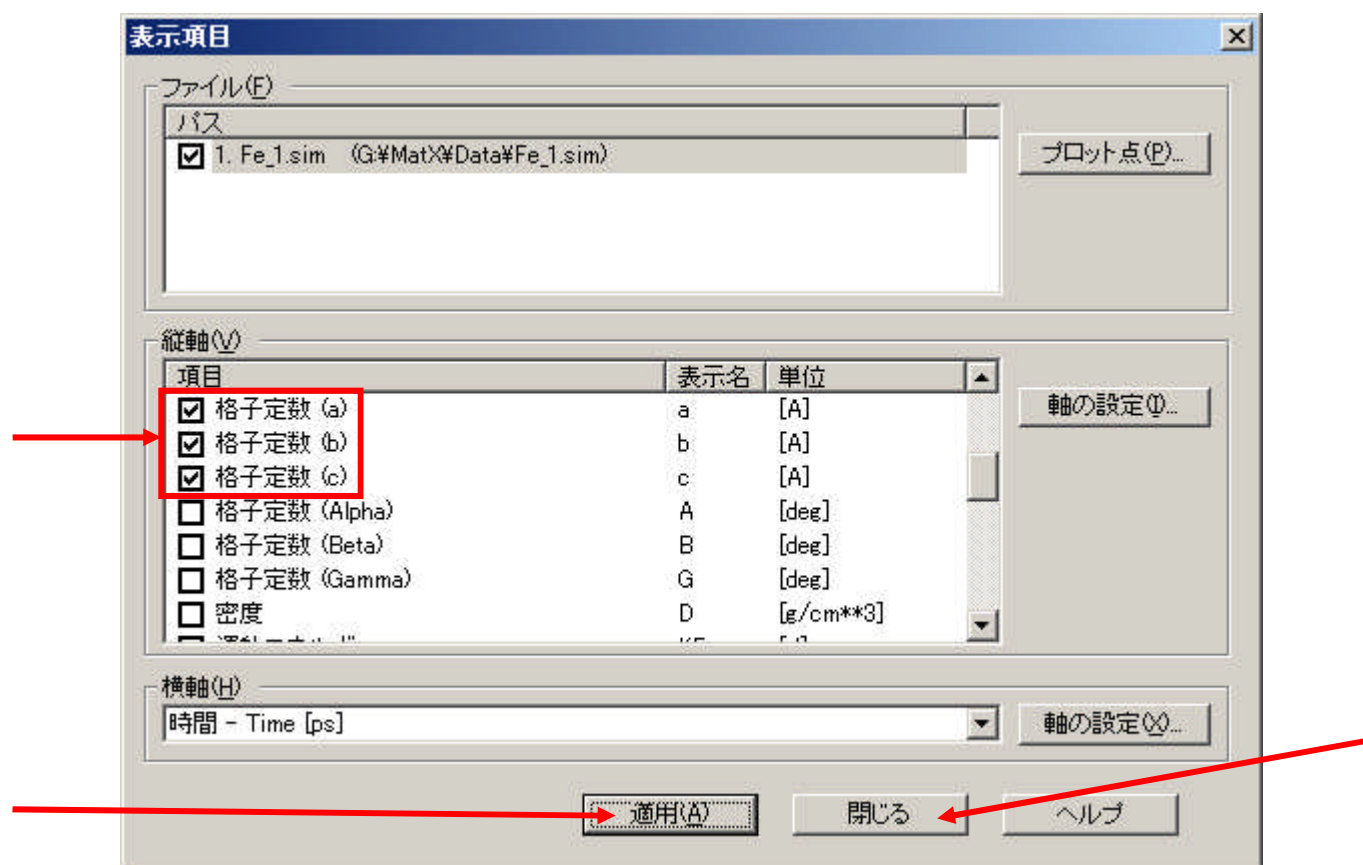
表示項目の選択

「温度」と「体積」をクリックしチェックをはずす



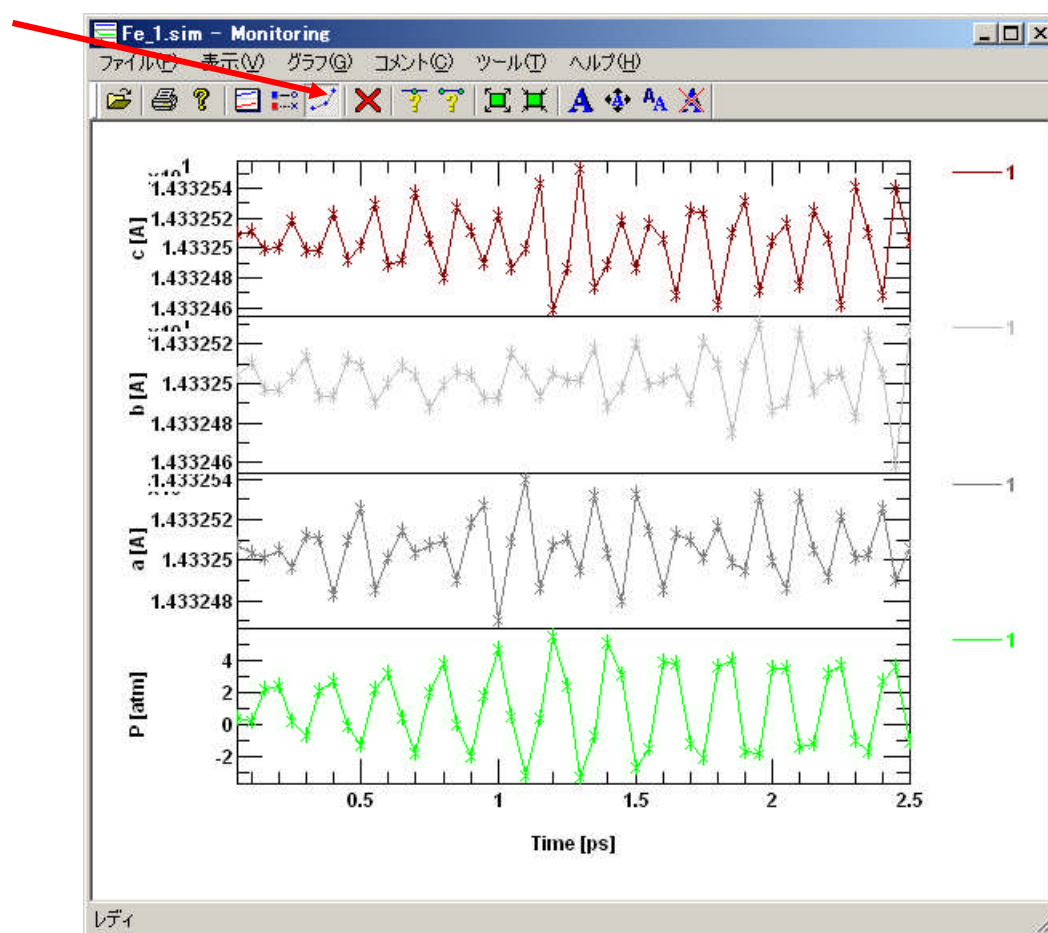
表示項目の選択

「格子定数(a)」、「格子定数(b)」、「格子定数(c)」をクリックしチェックを入れる
「適用」をクリック
「閉じる」をクリック



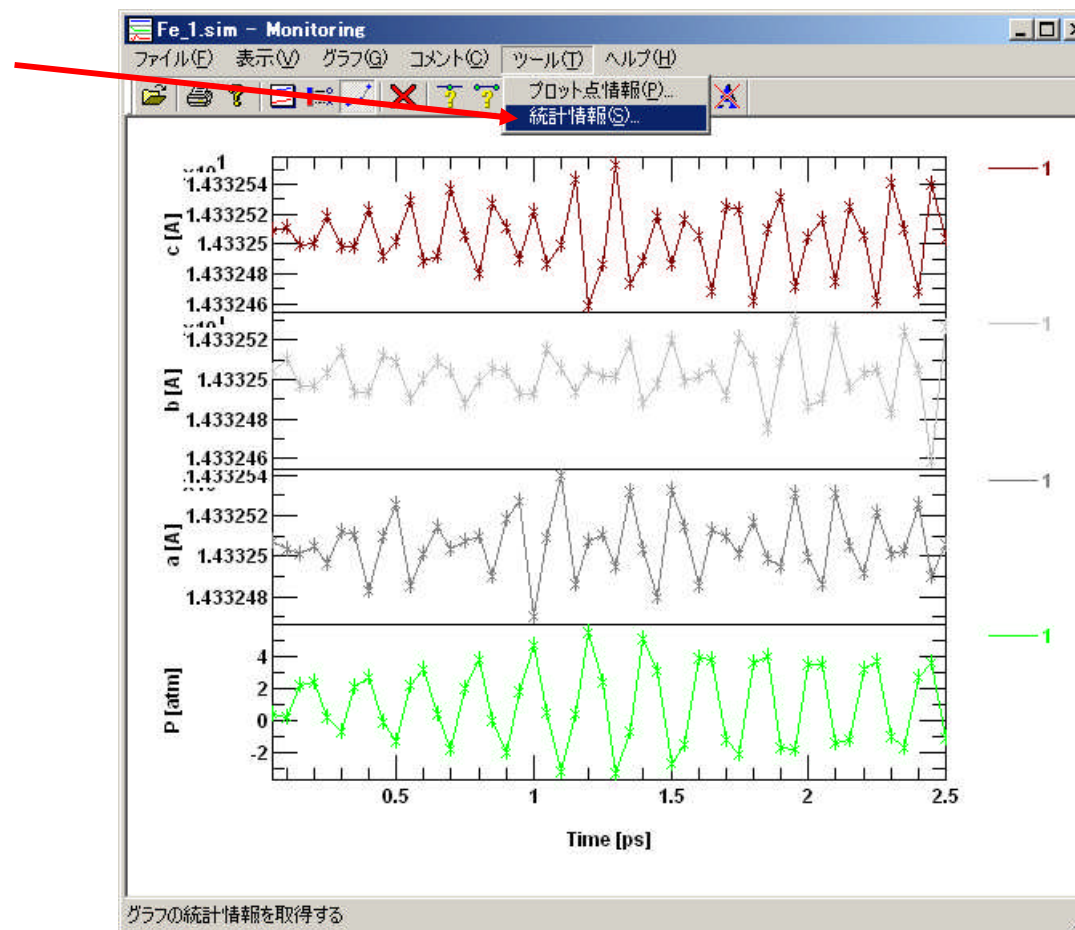
マーカーの表示

「マーカーの表示切り替え」をクリック



グラフの統計情報を見る

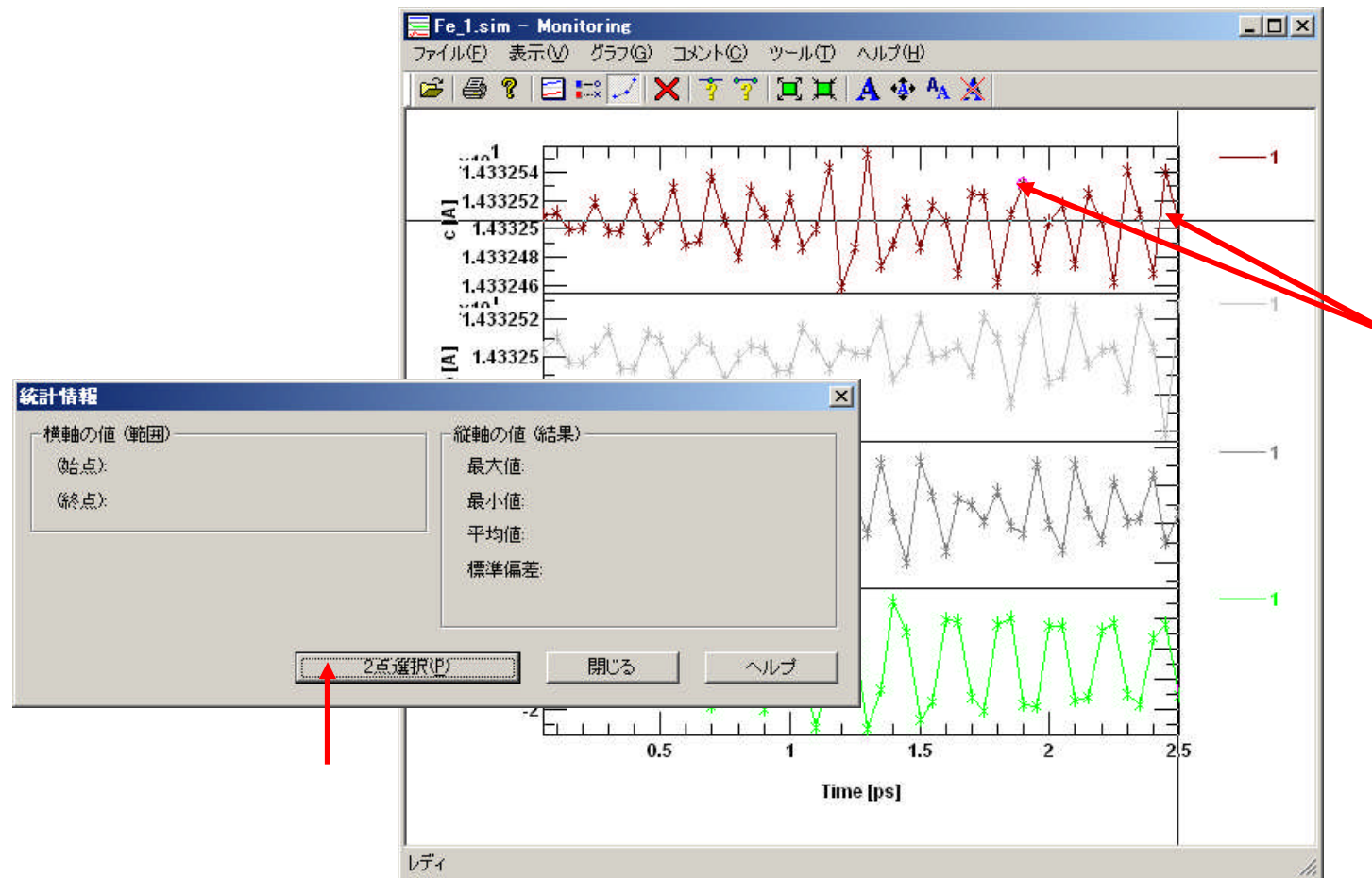
「ツール」→「統計情報」をクリック



グラフの統計情報を見る

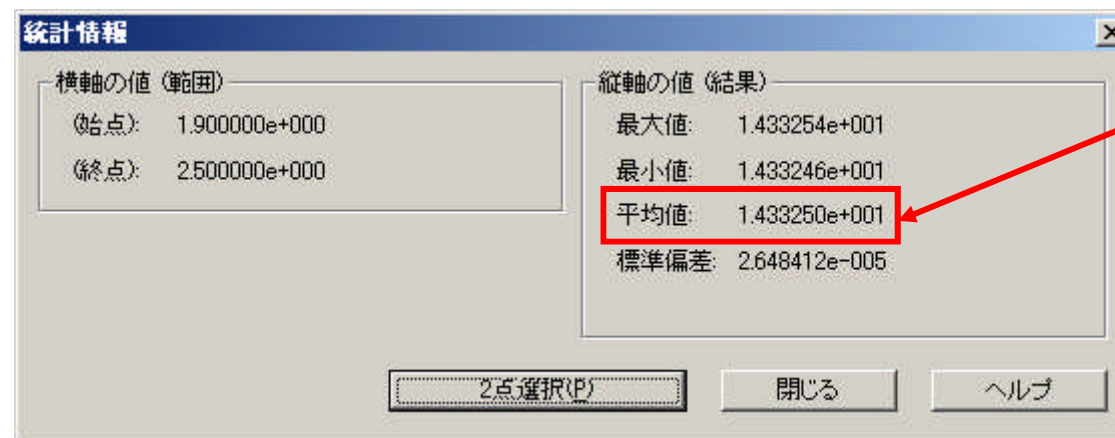
「2点選択」をクリック

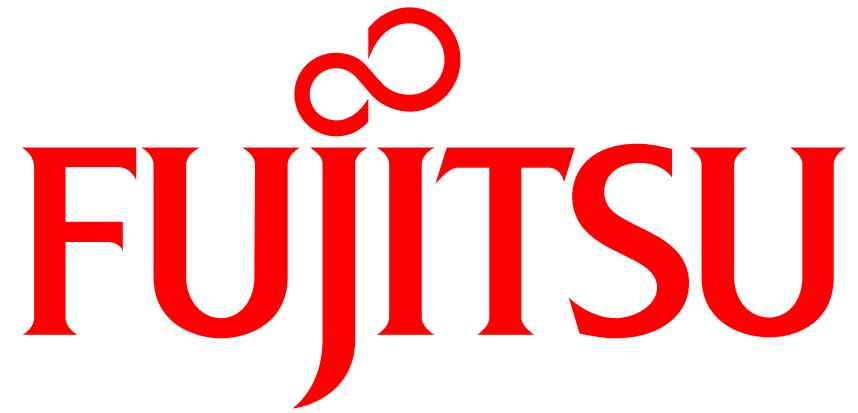
グラフ上のマーカを2点選択(十字の交差点をマーカに合わせ、クリック)



グラフの統計情報を見る

「平均値」を確認する





shaping tomorrow with you