

# SCIGRESS ME チュートリアル

---

## 実践分子動力学・演習

富士通(株)

2013/10/23



## 【演習問題 1】融点の求め方（自己拡散係数から求める方法）

### 1. 緩和計算

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「Diamond(C)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Si」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄で  $a=b=c=5.431$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で  $a$  軸= $b$  軸= $c$  軸=8 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

#### (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Si -- Si」を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥3Body¥Tersoff\_Type¥Tersoff89¥Tersoff89\_T3」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	1800 K
圧力	1 atm
総ステップ数	100000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Si\_mp\_1800K\_D\_T3)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

#### (5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「格子定数(a)」、「格子定数(b)」、「格子定数(c)」にチェックを入れる

「プロット点」ボタンをクリック

「プロット点数」を 1000 に設定

「OK」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

a、b、c の平均値を求め、それらの平均を緩和後のセルサイズとする

## 2. 本計算

### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル Si\_mp\_1800K\_D\_T3.inp を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Si\_mp\_1800K\_D\_NTV\_T3)を入力

「保存」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄の a、b、c に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

## (2) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	1800 K
圧力	1 atm
総ステップ数	100000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

## (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」 ボタンをクリック

#### (4) 結果解析

「結果」⇒「二次解析」⇒「平均二乗変位」をクリック

「解析開始時間」を 100 に設定

「時系列の長さ」を 201 に設定

「詳細設定」 ボタンをクリック

「時系列の個数」を 700 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「解析」⇒「計算」をクリック

「OK」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「表示」⇒「グラフ表示」をクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「保存する場所」を指定

「ファイル名」欄に ファイル名(Si\_mp\_1800K\_D\_NTV\_T3)を入力

「保存」 ボタンをクリック

表計算・グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて CSV ファイルから近似直線の傾きを求め、アインシュタインの式から自己拡散定数を得る

### 3. 融点を求める

(1) 1.と同様にして、2100, 2400, 2700,3000K の緩和計算を行う

(2) 2.と同様にして、2100, 2400, 2700,3000K の本計算を行い、自己拡散定数を求める

- (3) グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて、温度と自己拡散定数のグラフを作成する
- (4) 拡散係数が急激に増加する温度を融点とする



## 【演習問題 1】融点の求め方（固液二相計算から求める方法）

### 1. 緩和計算

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「Diamond(C)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Si」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄で  $a=b=c=5.431$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=8、c 軸=16 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

#### (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Si -- Si」を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥3Body¥Tersoff\_Type¥Tersoff89¥Tersoff89\_T3」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	2100 K
圧力	1 atm
総ステップ数	100000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps
MD セルの形状	直方体を保つ

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Si\_2100K)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

#### (5) 結果解析

「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック

「グラフ」 ⇒ 「表示項目」 をクリック

「項目」 欄で全てのチェックをはずす

「項目」 欄で「格子定数(a)」、「格子定数(b)」、「格子定数(c)」 にチェックを入れる

「プロット点」 ボタンをクリック

「プロット点数」 を 1000 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」 ⇒ 「統計情報」 をクリック

「2点選択」 ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

a、b、の平均値を求め、それらの平均を緩和後のセルサイズ a,b とする

c の平均値を求め、緩和後のセルサイズ c とする

## 2. 二相モデル作成

### (1) モデリング

「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック

入力データファイル **Si\_2100K.inp** を選択

「開く」 ボタンをクリック

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(**Si\_2100K\_melt**)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「**MD セル**」 タブを選択

「基本セル定数」 欄の **a**、**b**、**c** に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数の設定を適用」 ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグし下半分の原子を選択する

「表示」 ⇒ 「プロパティ」 をクリック

「属性タブ」 を選択

「速度一定」 を選択

「**OK**」 ボタンをクリック

「表示」 ⇒ 「原子と結合の表示」 ⇒ 「原子の属性による色分け」 をクリックし、属性の設定状況を確認

## (2) 相互作用設定

「シミュレーション」 ⇒ 「ポテンシャル関数の設定」 をクリック

「組合せ」 欄で 「**Si -- Si**」 を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ」¥Inorganic¥3Body¥Tersoff\_Type¥Tersoff89¥Tersoff89\_T3」 を選択

「**OK**」 ボタンをクリック

「**OK**」 ボタンをクリック

### (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	<b>NTV</b>
温度	<b>5000 K</b>
総ステップ数	<b>10000 steps</b>
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

## 3. 本計算

### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Si\_2100K\_melt.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック  
「ファイル名」欄にファイル名（Si\_2100K\_ble）を入力  
「新規ジョブとしてリスタートする」にチェックをいれる  
「OK」ボタンをクリック

## (2) 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  
以下の設定を行う

アンサンブル	<b>NTP</b>
温度	<b>2100 K</b>
圧力	<b>1 atm</b>
総ステップ数	<b>100000 steps</b>
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps
MD セルの形状	<b>直方体を保つ</b>

「適用」ボタンをクリック  
「OK」ボタンをクリック

## (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック  
「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」 ボタンをクリック

#### (4) 結果解析

「結果」⇒「原子配置」をクリック

「設定」⇒「原子配置」をクリック

「原子/分子」欄の **Si** をクリックして非選択状態にする

「結線」 ボタンをクリックする

「原子ペア」で、いずれも **Si (Si)** を選択する

「距離」の「(下限)」を **2.5** に設定する

「閉じる」 ボタンをクリック

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

スライダーを最終ステップ(1000)に移動する

#### 4. 界面移動による融点見積もり

(1) 1.と同様にして、2400K および 2700 K の緩和計算を行う

(2) 2.と同様にして、2400K および 2700 K の二相モデルを作成する

(3) 3.と同様にして、2400K,および 2700 K の本計算を行う

(4) 界面移動の様子から 2100K, 2400K, 2700K の中から融点に近い温度を求める

ここでは、2400K が融点に近いものとする

#### 5. 融点を求める

(1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Si\_2400K\_ble.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック

「ファイル名」欄にファイル名 (**Si\_2400K\_ble\_NPH**) を入力

「OK」ボタンをクリック

## (2) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	<b>NPH</b>
圧力	1 atm
総ステップ数	100000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps
MD セルの形状	直方体を保つ

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

## (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック




「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

#### (4) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「閉じる」 ボタン  をクリック

#### (5) リスタートデータ作成

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック

「OK」ボタンをクリック

#### (6) 融点を求める

平衡状態となるまでリスタート計算を繰り返す

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「温度」のみにチェックをいれる

「プロット点」ボタンをクリック

「プロット点数」を最大値に設定

「OK」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタン」をクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

T (温度)のグラフの平衡状態の領域の両端をクリック

「平均値」欄に表示された値を融点とする

## 【演習問題 2】 固相成長

### 1. 緩和

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「Diamond(C)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Si」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄で  $a=b=c=5.431$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=5、c 軸=13 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

#### (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Si -- Si」を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic ¥3Body ¥Tersoff\_Type ¥Tersoff89 ¥Tersoff89\_T3」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	1800 K
圧力	1 atm
総ステップ数	100000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps
MD セルの形状	直方体を保つ

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Si\_SPE\_rlx)を入力

「保存」ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

## 2. 溶融

### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Si\_SPE\_rlx.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック

「ファイル名」欄にファイル名 (**Si\_SPE\_melt**) を入力

「新規ジョブとしてリスタートする」にチェックをいれる

「OK」ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグし、下 10 層の原子を選択する

「表示」⇒「プロパティ」をクリック

「属性タブ」を選択

「速度一定」を選択

「OK」ボタンをクリック

「表示」⇒「原子と結合の表示」⇒「原子の属性による色分け」をクリックし、属性の設定状況を確認

### (2) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	<b>NTV</b>
温度	<b>5000 K</b>
総ステップ数	<b>10000 steps</b>
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

### (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

## 3. 冷却

### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Si\_SPE\_melt.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック

「ファイル名」欄にファイル名 (**Si\_SPE\_quench**) を入力

「OK」ボタンをクリック

## (2) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	可変
総ステップ数	320000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「温度」欄の「設定」ボタンをクリック

「追加」ボタンをクリック

「時間」欄に 320000 を設定

「温度」欄の「値」に 1800 を設定

「OK」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

## (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」 ボタンをクリック

#### 4. 本計算

##### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Si\_SPE\_quench.inp** を選択

「開く」 ボタンをクリック

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック

「ファイル名」欄にファイル名 (**Si\_SPE\_T3**) を入力

「新規ジョブとしてリスタートする」にチェックをいれる

「OK」 ボタンをクリック

##### (2) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	<b>1800 K</b>
圧力	<b>1 atm</b>
総ステップ数	<b>200000 steps</b>
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	<b>1000 step</b>
出力間隔ステップ数	<b>1000 steps</b>
MD セルの形状	直方体を保つ



「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「上書き保存」 をクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

### (4) リスタートデータの作成

「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック

入力データファイル **Si\_SPE\_T3.inp** を選択

「開く」 ボタンをクリック

「ファイル」 ⇒ 「リスタート」 をクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (5) リスタート計算の実行

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

### (6) 結果解析

「結果」 ⇒ 「原子配置」 をクリック

「設定」 ⇒ 「原子配置」 をクリック

「原子/分子」欄の **Si** をクリックして非選択状態にする

「結線」ボタンをクリックする

「原子ペア」で、いずれも **Si (Si)** を選択する

「距離」の「(下限)」を **2.5** に設定する

「閉じる」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

スライダーを移動し、構造の時間変化を見る

「閉じる」 ボタン  をクリック

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる

「プロット点」ボタンをクリック

「プロット点数」を **4000** に設定

「OK」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

### 【演習問題 3】線膨張係数の算出

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Ni」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄で  $a=b=c=3.524$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で  $a$  軸= $b$  軸= $c$  軸= $5$  に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

#### (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「すべて選択」ボタンをクリック

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥2Body¥Morse\_Type¥FlahiveGraham」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 7 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

### (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	200 K
圧力	1 atm
総ステップ数	100000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

#### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Ni\_cte\_200K)を入力

「保存」ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

#### (5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「格子定数(a)」、「格子定数(b)」、「格子定数(c)」にチェックを入れる

「プロット点」ボタンをクリック

「プロット点数」を 1000 に設定

「OK」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

各グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

各グラフで「平均値」欄に表示された値を平均し、この温度での MD セル辺長とする

(6) 線熱膨張係数を求める

250, 300, 350, 400K での MD セル辺長を(1)～(5)と同様にして求める

グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて、温度と MD セル辺長のグラフを作成する

グラフの直線近似式から線熱膨張係数を求める

## 【演習問題 4】 比熱の算出と材料依存性

### 1. 緩和計算

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Ni」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄で  $a=b=c=3.524$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で  $a$  軸= $b$  軸= $c$  軸=4 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

#### (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Ni -- Ni」を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic¥EAM¥GeneralizedEAM\_Type¥GEAM」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「カットオフ距離」 タブを選択

「カットオフ距離」 欄に 7 と入力

「オプション」 タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」 のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」 のチェックをはずす

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	293 K
圧力	1 atm
総ステップ数	10000 steps
時間刻み幅	0.5 fs
出力開始ステップ	10 step
出力間隔ステップ数	10 steps
MD セルの形状	立方体を保つ



「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

#### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Ni\_SHC\_293K)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」 ボタンをクリック

#### (5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「格子定数(a,b,c)」にチェックを入れる

「プロット点」 ボタンをクリック

「プロット点数」を 1000 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」 ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

グラフで「平均値」欄に表示された値をこの温度での **MD** セル辺長とする

## 2. 本計算

### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Ni\_SHC\_293K.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(**Ni\_SHC\_293K\_DP**)を入力

「保存」ボタンをクリック

「**MD** セル」タブを選択

「基本セル定数」欄の **a**、**b**、**c** に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

### (2) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	<b>NTV</b>
温度	293 K
総ステップ数	10000 steps
時間刻み幅	0.5 fs
出力開始ステップ	10 step
出力間隔ステップ数	10 steps

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」 ボタンをクリック

### (4) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「内部エネルギー」にチェックを入れる

「プロット点」 ボタンをクリック

「プロット点数」を 1000 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」 ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

グラフで「平均値」欄に表示された値をこの温度での内部エネルギーとする

3. モル比熱を求める

- (1) 1.と同様にして 298、303K での緩和計算を行う
- (2) 2.と同様にして 298、303K での内部エネルギーを求める
- (3) グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて、温度と 1mol 当たりの内部エネルギーのグラフを作成する
- (4) グラフの直線近似式の傾きからモル比熱を求める

※ Ag, Au, Cu, Pd, Pt についても同様に算出する

## 【演習問題 5】アモルファス構造の動径分布関数

### 1. 緩和計算(結晶)

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「Diamond(C)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Si」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄で  $a=b=c=5.431$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

#### (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Si -- Si」を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic ¥3Body ¥Tersoff\_Type ¥Tersoff89 ¥Tersoff89\_T3」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	300 K
圧力	1 atm
総ステップ数	100000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps
MD セルの形状	立方体を保つ

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Si\_PCF\_rlx\_T3)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

#### (5) 結果解析

「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック

「グラフ」 ⇒ 「表示項目」 をクリック

「項目」 欄で全てのチェックをはずす

「項目」 欄で「格子定数(a,b,c)」にチェックを入れる

「プロット点」 ボタンをクリック

「プロット点数」 を 1000 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」 ⇒ 「統計情報」 をクリック

「2 点選択」 ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

グラフで「平均値」 欄に表示された値を緩和後の MD セル辺長とする

## 2. 溶融

### (1) モデリング

「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック

入力データファイル Si\_PCF\_rlx\_T3.inp を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Si\_PCF\_melt\_T3)を入力

「保存」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄の a、b、c に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

## (2) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	<b>NTV</b>
温度	<b>5000 K</b>
総ステップ数	<b>10000 steps</b>
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

## (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック



「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

### 3. 冷却

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Si\_PCF\_melt\_T3.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック

「ファイル名」欄にファイル名 (**Si\_PCF\_quench\_T3**) を入力

「OK」ボタンをクリック

#### (2) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	<b>可変</b>
総ステップ数	<b>470000 steps</b>
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「温度」欄の「設定」ボタンをクリック

「追加」ボタンをクリック  
「時間」欄に 470000 を設定  
「温度」欄の「値」に 300 を設定  
「OK」ボタンをクリック  
「OK」ボタンをクリック  
「適用」ボタンをクリック  
「OK」ボタンをクリック

### (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック  
「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック  
「実行」ボタンをクリック

## 4. 緩和計算(アモルファス)

### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック  
入力データファイル Si\_PCF\_quench\_T3.inp を選択  
「開く」ボタンをクリック  
「ファイル」⇒「リスタート」をクリック  
「ファイル名」欄にファイル名 (Si\_PCF\_amorphous\_T3) を入力  
「OK」ボタンをクリック

### (2) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	<b>300 K</b>
総ステップ数	<b>100000 steps</b>
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

### (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

### (4) 結果解析

「結果」⇒「二次解析」⇒「二体相関関数・積算配位数」をクリック

「解析開始時間」を 5300 に設定

「時系列の長さ」を 5800 に設定

「解析」⇒「計算」をクリック

「OK」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「表示」⇒「グラフ表示」をクリック

## 【演習問題 6】拡散係数の求め方

### 1. 完全結晶の場合

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「BCC(a\_Fe)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「完了」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=8 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

#### (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Fe -- Fe」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥EAM¥GeneralizedEAM\_Type¥GEAM」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 7 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

### (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	1000 K
総ステップ数	1000000 steps
時間刻み幅	0.5 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Fe\_1000K\_L)を入力

「保存」ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

#### (5) 結果解析

「結果」⇒「原子配置」をクリック

「設定」⇒「軌跡」をクリック

「サンプリング点数」を 10000 に設定

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

軌跡を確認後、「ファイル」⇒「終了」をクリック

「結果」⇒「二次解析」⇒「平均二乗変位」をクリック

「解析開始時間」を 20 に設定

「時系列の長さ」を 301 に設定

「詳細設定」ボタンをクリック

「時系列の個数」を 900 に設定

「OK」ボタンをクリック

「解析」⇒「計算」をクリック

「OK」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「表示」⇒「グラフ表示」をクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「保存する場所」を指定

「ファイル名」欄に ファイル名(Fe\_1000K\_L)を入力

「保存」ボタンをクリック

表計算・グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて CSV ファイルから近似直線の傾きを求め、アインシュタインの式から自己拡散定数を得る

## 2. 自己格子間原子を配置した場合

### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Fe\_1000K\_L.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(**Fe\_SIA\_1000K\_L**)を入力

「保存」ボタンをクリック

「編集」⇒「原子・分子の挿入」をクリック

「原子」タブを選択

「**Fe**」を選択

「座標値」欄で **a=0.5, b=0.5, c=0.5625** と設定

「挿入」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

### (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「**Fe -- Fe**」を選択

「設定」ボタンをクリック



「共通ライブラリ ¥Inorganic ¥EAM ¥GeneralizedEAM\_Type ¥GEAM」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 7 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

### (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

### (4) 結果解析

「結果」⇒「原子配置」をクリック

「設定」⇒「軌跡」をクリック

「サンプリング点数」を 10000 に設定

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

軌跡を確認後、「ファイル」⇒「終了」をクリック

「結果」⇒「二次解析」⇒「平均二乗変位」をクリック

「解析開始時間」を 20 に設定

「時系列の長さ」を 301 に設定

「詳細設定」 ボタンをクリック

「時系列の個数」を 900 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「解析」⇒「計算」をクリック

「OK」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「表示」⇒「グラフ表示」をクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「保存する場所」を指定

「ファイル名」欄に ファイル名(Fe\_SIA\_1000K\_L)を入力

「保存」 ボタンをクリック

表計算・グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて CSV ファイルから近似直線の傾きを求め、アインシュタインの式から自己拡散定数を得る

### 3. 自己格子間原子近傍の 1 原子を Cu と置換した場合

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル Fe\_SIA\_1000K\_L.inp を選択

「開く」 ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Cu\_diff\_in\_Fe\_1000K\_L)を入力

「保存」ボタンをクリック

「原子・分子一覧」タブを選択

座標(0.500000, 0.500000, 0.500000)の原子を選択

「置換」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Cu」を選択

「置換」ボタンをクリック

## (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「すべて選択」ボタンをクリック

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥EAM¥GeneralizedEAM\_Type¥GEAM」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 7 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

## (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

#### (4) 結果解析

「結果」⇒「原子配置」をクリック

「設定」⇒「軌跡」をクリック

「サンプリング点数」を 10000 に設定

「Cu」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

Fe の軌跡を確認後、「Cu」にチェックを入れ、「Fe」のチェックをはずす

「適用ボタンをクリック」

「閉じる」ボタンをクリック

Cu の軌跡を確認後、「ファイル」⇒「終了」をクリック

「結果」⇒「二次解析」⇒「平均二乗変位」をクリック

「解析開始時間」を 20 に設定

「時系列の長さ」を 301 に設定

「詳細設定」ボタンをクリック

「時系列の個数」を 900 に設定

「OK」ボタンをクリック

「解析」⇒「計算」をクリック

「OK」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「表示」⇒「グラフ表示」をクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「保存する場所」を指定

「ファイル名」欄に ファイル名(Cu\_diff\_in\_Fe\_1000K\_L)を入力

「保存」ボタンをクリック

表計算・グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて CSV ファイルから近似直線の傾きを求め、アインシュタインの式から自己拡散定数を得る

## 【演習問題 7】弾性定数の求め方（ひずみ制御）

### 1. 応力がゼロになるセルサイズの算出

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「BCC(a\_Fe)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「完了」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄で  $a=b=c=2.8665$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

#### (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Fe -- Fe」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic¥EAM¥FinnisSinclair\_Type¥FS」を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	0.1 K
圧力	1 atm
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
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Fe\_1)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」 ボタンをクリック

## (5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「格子定数(a)」、「格子定数(b)」、「格子定数(c)」にチェックを入れる

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

a、b、c の平均値を求め、それらの平均を緩和後のセルサイズとする

## 2. $C_{11}$ , $C_{12}$ を求める

### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Fe\_1.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(**Fe\_2**)を入力

「保存」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄の **b**、**c** に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定



「基本セル定数」欄の **a** に 1.(5) で求めた 緩和後のセルサイズの 1% 短くした値 を設定  
「基本セル定数の設定を適用」 ボタンをクリック

## (2) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	0.1 K
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
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

## (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」 ボタンをクリック

## (4) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「圧力 X」、「圧力 Y」にチェックを入れる

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

PX, PY の平均値を求め、応力 $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ とする

応力ひずみの関係式から弾性定数  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  を求める

### 3. $C_{44}$ を求める

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Fe\_1.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(**Fe\_3**)を入力

「保存」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄の a、b、c に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数」欄の Alpha、Beta、Gamma に 88.849 を設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

## (2) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	0.1 K
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
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

## (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

## (4) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「圧力 **XY**」にチェックを入れる

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

**PXY** の平均値を求め、応力 $\tau$ とする

応力ひずみの関係式から弾性定数  $C_{44}$  を求める

## 【演習問題 8】弾性定数の求め方（応力制御）

### 1. 応力がゼロになるセルサイズの算出

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「BCC(a\_Fe)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「完了」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄で  $a=b=c=2.8665$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

#### (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Fe -- Fe」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic ¥EAM ¥FinnisSinclair\_Type ¥FS」を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	0.1 K
圧力	1 atm
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
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Fe\_2\_1)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」 ボタンをクリック

## (5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「格子定数(a)」、「格子定数(b)」、「格子定数(c)」にチェックを入れる

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

a、b、cの平均値を求め、それらの平均を緩和後のセルサイズとする

## 2. $C_{11}$ , $C_{12}$ を求める

### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Fe\_2\_1.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(**Fe\_2\_2**)を入力

「保存」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄の a、b、c に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数の設定を適用」 ボタンをクリック

## (2) 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

「外場」タブを選択

印加応力因子  $GAM(1,1) = 1e-27$  を設定

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

## (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」 ボタンをクリック

## (4) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「格子定数(a)」、「格子定数(b)」、「格子定数(c)」にチェックを入れる

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」 ボタンをクリック



グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

a、b、c の平均値を求め、応力印加後のセルサイズとする

応力ひずみの関係式から弾性定数  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  を求める

### 3. $C_{44}$ を求める

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Fe\_2\_1.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(**Fe\_2\_3**)を入力

「保存」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄の a、b、c に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

#### (2) 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

「外場」タブを選択

印加応力因子  $GAM(1,2)=GAM(2,1) = 1e-27$  を設定

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

### (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

### (4) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「格子定数(Gamma)」にチェックを入れる

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

平均値を求め、応力印加後の角 **Gamma** とする

応力ひずみの関係式から弾性定数  $C_{44}$  を求める

## 【演習問題 9】 空孔形成エネルギーの算出

### 1. 凝集エネルギーの算出

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「BCC(a\_Fe)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「完了」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄で  $a=b=c=2.8665$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

#### (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Fe -- Fe」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥2Body¥Johnson\_Type¥Johnson」を選択

「OK」 ボタンをクリック

「カットオフ距離」 タブを選択

「カットオフ距離」 欄に 7 と入力

「オプション」 タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」 のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」 のチェックをはずす

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	0.01 K
総ステップ数	2 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	1 step
出力間隔ステップ数	1 steps

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Fe\_Johnson\_Ec)を入力

「保存」ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

## (5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「プロット点情報」をクリック

「プロット点の選択」ボタンをクリック

グラフの点をクリック

「座標値」欄の「Y」の値をこの系のポテンシャルエネルギーとする。

定義式から凝集エネルギーを求める

## 2. 空孔形成エネルギーの算出

### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル Fe\_Johnson\_Ec.inp を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Fe\_Johnson\_Ed)を入力

「保存」ボタンをクリック

「原子・分子一覧」タブを選択

座標(0.5, 0.5, 0.5)の Fe を選択

「削除」ボタンをクリック

## (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Fe -- Fe」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥2Body¥Johnson\_Type¥Johnson」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 7 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

## (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	0.01 K
総ステップ数	<b>10000 steps</b>
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	1 step
出力間隔ステップ数	1 steps

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

#### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

#### (5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「プロット点情報」をクリック

「プロット点の選択」ボタンをクリック

グラフの最初の点をクリック

「座標値」欄の「Y」の値を非緩和構造でのポテンシャルエネルギーとする。

定義式から空孔形成エネルギーを求める

「プロット点の選択」ボタンをクリック

グラフの最後の点をクリック

「座標値」欄の「Y」の値を緩和構造でのポテンシャルエネルギーとする。

定義式から空孔形成エネルギーを求める

### 3. ジョンソンポテンシャルと FS ポテンシャルの比較

- (1) 1.と同様にして、FS ポテンシャルを用いた場合の凝集エネルギーを求める
- (2) 2.と同様にして、FS ポテンシャルを用いた場合の空孔形成エネルギーを求める
- (3) ジョンソンポテンシャルと FS ポテンシャルで凝集エネルギーを比較する
- (4) ジョンソンポテンシャルと FS ポテンシャルで空孔形成エネルギーを比較する



## 【演習問題 10】 表面エネルギー

### 1. バルクモデル

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Cu」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄に  $a=b=c=3.614812$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

#### (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Cu -- Cu」を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic¥EAM¥GeneralizedEAM\_Type¥GEAM」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「カットオフ距離」 タブを選択

「カットオフ距離」 欄に 7 と入力

「オプション」 タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」 のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」 のチェックをはずす

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	0.01 K
総ステップ数	10000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

#### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Cu\_Bulk\_NTV)を入力

「保存」ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

#### (5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

平均値を求め、バルクモデルのポテンシャルエネルギーとする

## 2. 薄膜モデル

### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル Cu\_Bulk\_NTV.inp を選択

「開く」 ボタンをクリック

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Cu\_Surf\_NTV)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「モデリング」 ⇒ 「MD セルの積み重ね」 をクリック

「積み重ね数」 欄で c 軸=3 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「はい」 ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグして、上 10 層の原子を選択

「編集」 ⇒ 「削除」 をクリック

画面内でクリック、ドラッグして、下 10 層の原子を選択

「編集」 ⇒ 「削除」 をクリック

## (2) 相互作用設定

「シミュレーション」 ⇒ 「ポテンシャル関数の設定」 をクリック

「組合せ」 欄で 「Cu -- Cu」 を選択

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic ¥EAM ¥GeneralizedEAM\_Type ¥GEAM」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「カットオフ距離」 タブを選択

「カットオフ距離」 欄に 7 と入力

「オプション」 タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす  
「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす  
「適用」ボタンをクリック  
「OK」ボタンをクリック

### (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック  
「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック  
「実行」ボタンをクリック

### (4) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック  
「グラフ」⇒「表示項目」をクリック  
「項目」欄で全てのチェックをはずす  
「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる  
「適用」ボタンをクリック  
「閉じる」ボタンをクリック  
「ツール」⇒「統計情報」をクリック  
「2点選択」ボタンをクリック  
グラフの平衡状態の領域の両端をクリック  
平均値を求め、薄膜モデルのポテンシャルエネルギーとする

## 3. 表面エネルギーを求める

1.(5)で求めたバルクのエネルギーと 2.(4)で求めた薄膜のエネルギーから表面エネルギーを求める

※ Ni についても同様に表面エネルギーを求める

## 【演習問題 11】 界面エネルギー

### 1. Cu の歪んだバルクモデル

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Cu」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄に  $a=b=c=3.614812$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=c 軸=5 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄で  $a=b=17.8329$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

## (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Cu -- Cu」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥EAM¥GeneralizedEAM\_Type¥GEAM」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 7 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

## (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	0.01 K
総ステップ数	10000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps



「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

#### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Cu\_Bulk\_NTV\_d)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」 ボタンをクリック

#### (5) 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「ポテンシャルエネルギー」にチェックを入れる

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」 ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

平均値を求め、この系のポテンシャルエネルギーとする

## 2. Ni の歪んだバルクモデル

### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Ni」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄に  $a=b=c=3.519618$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で  $a$  軸= $b$  軸= $c$  軸= $5$  に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄で  $a=b=17.8329$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

### (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Ni -- Ni」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥EAM¥GeneralizedEAM\_Type¥GEAM」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 7 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

### (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	0.01 K
総ステップ数	10000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

#### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(Ni\_Bulk\_NTV\_d)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

#### (5) 結果解析

「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック

「グラフ」 ⇒ 「表示項目」 をクリック

「項目」 欄で全てのチェックをはずす

「項目」 欄で「ポテンシャルエネルギー」 にチェックを入れる

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」 ⇒ 「統計情報」 をクリック

「2点選択」 ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

平均値を求め、この系のポテンシャルエネルギーとする

### 3. CuNi バルクモデル

### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル Ni\_Bulk\_NTV\_d.inp を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(CuNi\_Bulk\_NTV)を入力

「保存」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で c 軸=2 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄で c=35.67215 に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグしセルの上半分の原子を選択

「編集」⇒「原子・分子の挿入」をクリック

「原子」タブを選択

「Cu」を選択

「置換」ボタンをクリック

### (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「すべて選択」ボタンをクリック

「設定」 ボタンをクリック

「共通ライブラリ ¥Inorganic ¥EAM ¥GeneralizedEAM\_Type ¥GEAM」 を選択

「OK」 ボタンをクリック

「カットオフ距離」 タブを選択

「カットオフ距離」 欄に 7 と入力

「オプション」 タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」 のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」 のチェックをはずす

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

### (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「上書き保存」 をクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

### (4) 結果解析

「結果」 ⇒ 「モニター変数」 をクリック

「グラフ」 ⇒ 「表示項目」 をクリック

「項目」 欄で全てのチェックをはずす

「項目」 欄で「ポテンシャルエネルギー」 にチェックを入れる

「適用」 ボタンをクリック

「閉じる」 ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

平均値を求め、この系のポテンシャルエネルギーとする

#### 4. 界面エネルギーを求める

1.(5)、2.(5)、3.(5)で得たポテンシャルエネルギーと界面の表面積から界面エネルギーを求める

## 【演習問題 12】カーボンナノチューブの座屈変形

1. 荷重  $1.0 \times 10^{-10}$  N

(1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄で  $a=b=c=68.336511$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「編集」⇒「原子・分子の挿入」をクリック

「分子」タブを選択

「CNT\_10\_10\_20」を選択

「詳細」ボタンをクリック

「分子の配向」欄で  $\theta=90$  に設定

「挿入」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグして、カーボンナノチューブの左端三層を選択

「表示」⇒「プロパティ」をクリック

「属性」タブを選択

「速度一定」を選択

「OK」ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグして、カーボンナノチューブの右端三層を選択

「表示」⇒「プロパティ」をクリック

「属性」タブを選択

「外力」を選択



FX=FY= 0、FZ= -1e-27 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「表示」⇒「原子と結合の表示」⇒「原子の属性による色分け」をクリック  
属性の設定を確認する

## (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「C -- C」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥3Body¥Tersoff\_Type¥Tersoff89¥Tersoff89\_01」を選択

「OK」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

## (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	298 K
総ステップ数	10000 steps
時間刻み幅	0.5 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

#### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(CNT-Buckling)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

## 2. 荷重 $8.0 \times 10^{-11}$ N

### (1) モデリング

「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック

入力データファイル CNT-Buckling.inp を選択

「開く」 ボタンをクリック

「ファイル」 ⇒ 「リスタート」 をクリック

「OK」 ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグして、カーボンナノチューブの右端三層を選択

「表示」 ⇒ 「プロパティ」 をクリック

「属性」 タブを選択

FZ=  $-8e-28$  に設定

「OK」 ボタンをクリック

(2) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

3. 荷重重  $8.0 \times 10^{-11}$  N (リスタート)

2.と同様にしてリスタート計算を行う

4. 荷重 0.0 N

(1) モデリング

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック

「OK」ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグして、カーボンナノチューブの右端三層を選択

「表示」⇒「プロパティ」をクリック

「属性」タブを選択

**FZ= 0** に設定

「OK」ボタンをクリック

(2) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

### (3) 結果解析

「結果」⇒「原子配置」をクリック

「設定」⇒「原子配置」をクリック

「原子/分子」欄の C をクリックして非選択状態にする

「結線」ボタンをクリックする

「原子ペア」で、いずれも C (C) を選択する

「距離」の「(上限)」を 2 に設定する

「閉じる」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

スライダーを移動し、構造の時間変化を見る

### 【演習問題 13】 結晶成長の初期過程

#### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Ni」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄に  $a=b=c=3.568818$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で  $a$  軸= $b$  軸= $c$  軸=10 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグして、上 9 層を選択

「編集」⇒「削除」をクリック

画面内でクリック、ドラッグして、最上層を選択

「編集」⇒「原子・分子の挿入」をクリック

「原子」タブを選択

「H」を選択

「置換」ボタンをクリック

「編集」⇒「ランダム選択」をクリック

「選択対象の原子種/分子種」欄で「H」を選択

「選択したい原子/分子の個数」に6を設定

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「編集」⇒「原子・分子の挿入」をクリック

「原子」タブを選択

「Cu」を選択

「置換」ボタンをクリック

「原子・分子一覧」タブを選択

「種類」ボタンをクリック

「原子種・分子種」欄で「H」を選択

「OK」ボタンをクリック

「削除」ボタンをクリック

画面内でクリック、ドラッグして、下2層を選択

「表示」⇒「プロパティ」をクリック

「属性」タブを選択

「速度一定」を選択

「OK」ボタンをクリック

「表示」⇒「原子と結合の表示」⇒「原子の属性による色分け」をクリック

属性の設定を確認する

## (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「すべて選択」ボタンをクリック

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥EAM¥GeneralizedEAM\_Type¥GEAM」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 7 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

## (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTV
温度	900 K
総ステップ数	100000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step

出力間隔ステップ数	100 steps
-----------	-----------

「適用」 ボタンをクリック

「OK」 ボタンをクリック

#### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」 ⇒ 「名前を付けて保存」 をクリック

「ファイル名」 欄に ファイル名(6Cu\_on\_Ni\_base\_900K)を入力

「保存」 ボタンをクリック

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

#### (5) リスタートデータの作成

「ファイル」 ⇒ 「開く」 をクリック

入力データファイル 6Cu\_on\_Ni\_base\_900K.inp を選択

「開く」 ボタンをクリック

「ファイル」 ⇒ 「リスタート」 をクリック

「OK」 ボタンをクリック

#### (6) リスタート計算の実行

「シミュレーション」 ⇒ 「計算実行」 をクリック

「実行」 ボタンをクリック

#### (7) 結果解析



「結果」⇒「原子配置」をクリック

「設定」⇒「軌跡」をクリック

「サンプリング点数」を 2000 に設定

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

軌跡を確認後、「描画」⇒「軌跡」をクリック

「設定」⇒「原子配置」をクリック

「Ni」をクリックし、非選択状態にする

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

スライダーを移動し、構造の時間変化を見る

### 【演習問題 14】 ナノピラーの塑性変形

#### 1. 応力がゼロになるセルサイズの算出

##### (1) モデリング

「ファイル」⇒「新規作成」をクリック

「モデリング」⇒「MD セルの作成」をクリック

「種類」欄で「テンプレート」を選択

「グループ」欄で「基本単位形」を選択

「テンプレート」欄で「FCC(Ag)」を選択

「次へ」ボタンをクリック

「原子」タブを選択

「Cu」を選択

「完了」ボタンをクリック

「MD セル」タブを選択

「基本セル定数」欄に  $a=b=c=3.615$  に設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で a 軸=b 軸=30、c 軸=1 に設定

「OK」ボタンをクリック

「はい」ボタンをクリック

画面内でクリックして削除する原子を選択

「編集」⇒「削除」をクリック

円盤状のモデルを作成する

「モデリング」⇒「MD セルの積み重ね」をクリック

「積み重ね数」欄で c 軸=30 に設定

「OK」 ボタンをクリック

「はい」 ボタンをクリック

## (2) 相互作用設定

「シミュレーション」⇒「ポテンシャル関数の設定」をクリック

「組合せ」欄で「Cu -- Cu」を選択

「設定」ボタンをクリック

「共通ライブラリ¥Inorganic¥EAM¥RosatoGuillopeLegrand\_Type¥RGL」を選択

「OK」ボタンをクリック

「カットオフ距離」タブを選択

「カットオフ距離」欄に 3.1 と入力

「オプション」タブを選択

「二体力の長距離補正を行う」のチェックをはずす

「Shifted Force Potential を利用する」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

## (3) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	NTP
温度	700 K

総ステップ数	10000 steps
時間刻み幅	1 fs
出力開始ステップ	100 step
出力間隔ステップ数	100 steps
MD セルの形状	立方体を保つ

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

#### (4) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(Cu\_pillar\_RGL\_rlx)を入力

「保存」ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

#### 結果解析

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で「温度」、「圧力」のチェックをはずす

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ツール」⇒「統計情報」をクリック

「2点選択」ボタンをクリック

グラフの平衡状態の領域の両端をクリック

平均値を求め、緩和後の体積とする

緩和後の体積からセルサイズを求める

## 2. 圧縮変形

### (1) モデリング

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル **Cu\_pillar\_RGL\_rlx.inp** を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「ファイル名」欄に ファイル名(**Cu\_pillar\_RGL**)を入力

「保存」ボタンをクリック

「**MD** セル」タブを選択

「基本セル定数」欄の **a**、**b**、**c** に 1.(5)で求めた 緩和後のセルサイズ を設定

「基本セル定数の設定を適用」ボタンをクリック

### (2) 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

以下の設定を行う

アンサンブル	<b>NTV</b>
温度	700 K
総ステップ数	<b>100000 steps</b>

出力開始ステップ	<b>1000 step</b>
出力間隔ステップ数	<b>1000 steps</b>
MD セル	<b>c 軸方向に可変</b>

「MD セル」欄の「設定」ボタンをクリック

「追加」ボタンをクリック

「時間」に 100000 を設定

「セルの長さ」欄の「値」に 108.638739 を設定

「OK」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

### (3) 分子動力学計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

### (4) リスタートデータの作成

「ファイル」⇒「開く」をクリック

入力データファイル Cu\_pillar\_RGL.inp を選択

「開く」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「リスタート」をクリック

「OK」ボタンをクリック

「シミュレーション」⇒「計算条件の設定」をクリック

「MDセル」欄の「c 軸方向に可変」を選択

「MDセル」欄の「設定」ボタンをクリック

「追加」ボタンをクリック

「時間」に 100000 を設定

「セルの長さ」欄の「値」に 107.5414 を設定

「OK」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「OK」ボタンをクリック

#### (5) リスタート計算の実行

「ファイル」⇒「上書き保存」をクリック

「シミュレーション」⇒「計算実行」をクリック

「実行」ボタンをクリック

#### (6) 結果解析

(4)、(5)と同様の操作を繰り返し、c 軸方向の辺長を 103.151934 Å まで圧縮する

「結果」⇒「原子配置」をクリック

スライダーを移動し、構造の時間変化を見る

構造を確認後、「ファイル」⇒「終了」をクリック

「結果」⇒「モニター変数」をクリック

「グラフ」⇒「表示項目」をクリック

「項目」欄で全てのチェックをはずす

「項目」欄で「格子定数(c)」、「圧力 Z」にチェックを入れる

「プロット点」ボタンをクリック

「プロット点数」を最大値に設定

「OK」ボタンをクリック

「適用」ボタンをクリック

「閉じる」ボタンをクリック

「ファイル」⇒「名前を付けて保存」をクリック

「保存する場所」を指定

「ファイル名」欄に ファイル名(Cu\_pillar\_RGL)を入力

「保存」ボタンをクリック

表計算・グラフ作成ソフト(Microsoft Excel など)を用いて CSV ファイルから応力ひずみ曲線を作成する