

MD出力ファイルフォーマット

(1) MD出力ファイルとは

Materials Explorer のシミュレーション結果は、「MD出力ファイル（拡張子：.sim）」に出力されています。モニター変数表示（Monitoring）モジュールで表示されるモニター変数や、原子配置表示（3D-Atomic Configuration）モジュールで表示される原子配置などの時系列データが出力されています。出力先は、MD入力ファイル（拡張子：.inp）を作成したフォルダと同じフォルダです。MD出力ファイルは、書式なしFORTRAN記録です。MD出力ファイル中、整数値、および実数値を表すビット列は、ビッグエンディアンに従っています。エンディアン方式については、「(8) エンディアン方式について」を参照してください。

(2) MD出力ファイルをテキスト化する方法について

MD出力ファイルは、書式なし FORTRAN 記録であるため、そのままでは内容を見ることができません。内容を数値として見る場合や、他の可視化ソフトなどで利用する場合には、テキストファイルに変換すると便利です。MD出力ファイルをテキスト化するユーティリティとして、sim2asc.exe があります。sim2asc.exe は、Materials Explorer をインストールしたフォルダ内にあります。

(3) MD出力ファイルの内容と、ファイルフォーマットについて

以下のファイルフォーマットでは、ファイルに出力されている内容について、レコードを単位として説明しています。

「型」にはデータ型が記号で示されています。記号の意味は次の通りです。

Aw : w バイト文字型

I : 4 バイト整数型

R : 4 バイト実数型

「引数値」には引数の値の範囲が示されています。引数の値の範囲が複数示されている場合には、上に書かれている変数が先に繰り返されます。

原子・分子発生機能を使用すると、出力される内容が若干変わります。

原子・分子発生機能を使用した場合と使用しなかった場合の2種類のファイルフォーマットについて説明します。

MD出力ファイルフォーマット (原子・分子発生なし)

1. ファイル名

内容	ファイル名
変数名	FNAME
型	A20

2. ファイル作成日、ファイル作成者

内容	作成日			作成日			作成者名
変数名	CDATE			MDATE			AUTHOR
型	年 A4	月 A2	日 A2	年 A4	月 A2	日 A2	A30

注) CDATE と MDATE の内容は、常に同じです。

3. コメント

内容	コメント
変数名	COMMEN
型	A80

4. シミュレーション条件 (1)

内容	計算モード 0 : 初回 1 : 継続	シミュレーション ステップ数	ファイル出力 開始ステップ	ファイル出力 終了ステップ	ファイル出力 インターバル ステップ
変数名	IRESTA	NSTEP	MINIT	MFINL	MINTV
型					

5. シミュレーション条件(2)

内容	時間刻み幅	未使用	アンサンブル 1:NEV 2:NTV 3:NPH 4:NTP	温度モード 0:温度固定 1:温度変化	圧力モード 0:圧力固定 1:圧力変化	カットオフ 距離
単位	fs					Å
変数名	DT	NSBLOC	IENSEM	ITEMP	IPRES	RCUT
型	R					R

6. 全原子数、分子種数

内容	全原子数	分子種数
変数名	NATOM	KMOL
型		

7. 分子種情報

内容	分子種名	未使用	分子数	分子内原子 数	分子内結合 数	分子内原子 種数
変数名	CHAMOL (K)	IDYNAM (K)	NUMMOL (K)	NUMATM (K)	NUMBON (K)	KINDAT (K)
引数値	K=1, KMOL	K=1, KMOL	K=1, KMOL	K=1, KMOL	K=1, KMOL	K=1, KMOL
型	A16					

8. 原子情報

内容	原子種 ID	原子種名		原子量	電荷
単位					素電荷 e
変数名	KINATM (I, K)	CHATOM (I, K)		CMASS (I, K)	CHARGE (I, K)
引数値	I=1, NUMATM (K) K=1, KMOL	I=1, NUMATM (K) K=1, KMOL		I=1, NUMATM (K) K=1, KMOL	I=1, NUMATM (K) K=1, KMOL
型	I	元素 記号 A2	原子 タイプ A2	R	R

注) 原子の持つ電荷の単位は、素電荷 $e=1.60217733e-19C$ を 1 とした値です。

9. 結合情報 (このレコードは、 $\sum \text{NUMBON}(K) \neq 0$ の場合にのみ存在します)

内容	原子ID	原子ID	結合種
変数名	ICB(J, K)	JCB(J, K)	BK(J, K)
引数值	J=1, NUMBON(K) K=1, KMOL	J=1, NUMBON(K) K=1, KMOL	J=1, NUMBON(K) K=1, KMOL
型	I	I	A4

注) ICB, JCB は、分子内で互いに結合している原子のペアです。「原子ID」は、分子内で振られた原子の通し番号です。「結合種」は、単結合、二重結合などの、結合の種類に対応した、2文字で表される記号です。

10. 初期原子座標

内容	X座標	Y座標	Z座標
単位	無次元	無次元	無次元
変数名	X(I)	Y(I)	Z(I)
引数值	I=1, NATOM	I=1, NATOM	I=1, NATOM
型	R	R	R

注) 原子座標は、11レコードのH行列 (基本セルの形状を表す行列) により規格化されています。

11. 初期H行列

内容	H行列
単位	Å
変数名	H(I, J)
引数值	I=1, 3 J=1, 3
型	R

注) H行列は、基本セルの形状を表す行列です。

以下、12~16レコードは、シミュレーションの結果として得られる時系列データです。

12~16レコード

12~16レコード

:

12~16レコード

のようにして、(MFINL-MINIT)/MINTV+1 回繰り返し出力されています。

12. モニター変数

内容	温度	圧力	体積	内部エネルギー	ハミルトニアン	時間スケール変数
単位	K	GPa	\AA^3	10^7J	10^7J	無次元
変数名	CTEMP	CPRESS	VOL	UENER	HAMILT	F
型	R	R	R	R	R	R

13. H行列

内容	H行列
単位	\AA
変数名	H(I, J)
引数値	I=1, 3 J=1, 3
型	R

注) H行列は、基本セルの形状を表す行列です。

14. 原子座標

内容	X座標	Y座標	Z座標
単位	無次元	無次元	無次元
変数名	X(I)	Y(I)	Z(I)
引数値	I=1, NATOM	I=1, NATOM	I=1, NATOM
型	R	R	R

注) 原子座標は、13レコードのH行列（基本セルの形状を表す行列）により規格化されています。

15. 原子速度

内容	速度のX成分	速度のY成分	速度のZ成分
単位	無次元	無次元	無次元
変数名	VX(I)	VY(I)	VZ(I)
引数値	I=1, NATOM	I=1, NATOM	I=1, NATOM
型	R	R	R

注) 原子速度は、13レコードのH行列（基本セルの形状を表す行列）と、5レコードの時間刻み幅により、規格化されています。

16. 原子ポテンシャル

内容	原子 ポテンシャル
単位	10^7J
変数名	APOT(I)
引数値	I=1, NATOM
型	R

MD出力ファイルフォーマット（原子・分子発生あり）

1. ファイル識別番号

内容	ファイル 識別番号
変数名	MAGIC
型	I

2. ファイル名

内容	ファイル名
変数名	FNAME
型	A20

3. ファイル作成日、ファイル作成者

内容	作成日			作成日			作成者名
変数名	CDATE			MDATE			AUTHOR
型	年 A4	月 A2	日 A2	年 A4	月 A2	日 A2	A30

注) CDATE と MDATE の内容は、常に同じです。

4. コメント

内容	コメント
変数名	COMMEN
型	A80

5. シミュレーション条件(1)

内容	計算モード 0 : 初回 1 : 継続	シミュレー ション ステップ数	ファイル出力 開始ステップ	ファイル出力 終了ステップ	ファイル出力 インターバル ステップ
変数名	IRESTA	NSTEP	MINIT	MFINL	MINTV
型	I	I	I	I	I

6. シミュレーション条件(2)

内容	時間刻み幅	未使用	アンサンブル 1:NEV 2:NTV 3:NPH 4:NTP	温度モード 0:温度固定 1:温度変化	圧力モード 0:圧力固定 1:圧力変化	カットオフ 距離
単位	fs					Å
変数名	DT	NSBLOC	IENSEM	ITEMP	IPRES	RCUT
型	R					R

7. 全原子数、分子種数

内容	全原子数	分子種数
変数名	NATOM	KMOL
型		

8. 分子種情報

内容	分子種名	未使用	分子数	分子内原子 数	分子内結合 数	分子内原子 種数
変数名	CHAMOL (K)	IDYNAM (K)	NUMMOL (K)	NUMATM (K)	NUMBON (K)	KINDAT (K)
引数値	K=1, KMOL	K=1, KMOL	K=1, KMOL	K=1, KMOL	K=1, KMOL	K=1, KMOL
型	A16					

9. 原子情報

内容	原子種 ID	原子種名		原子量	電荷
単位					素電荷 e
変数名	KINATM (I, K)	CHATOM (I, K)		CMASS (I, K)	CHARGE (I, K)
引数値	I=1, NUMATM (K) K=1, KMOL	I=1, NUMATM (K) K=1, KMOL		I=1, NUMATM (K) K=1, KMOL	I=1, NUMATM (K) K=1, KMOL
型		元素 記号 A2	原子 タイプ A2	R	R

注) 原子の持つ電荷の単位は、素電荷 $e=1.60217733e-19C$ を 1 とした値です。

10. 結合情報 (このレコードは、 $\sum \text{NUMBON}(K) \neq 0$ の場合にのみ存在します)

内容	原子ID	原子ID	結合種
変数名	ICB(J, K)	JCB(J, K)	BK(J, K)
引数值	J=1, NUMBON(K) K=1, KMOL	J=1, NUMBON(K) K=1, KMOL	J=1, NUMBON(K) K=1, KMOL
型	I	I	A4

注) ICB, JCB は、分子内で互いに結合している原子のペアです。「原子ID」は、分子内で振られた原子の通し番号です。「結合種」は、単結合、二重結合などの、結合の種類に対応した、2文字で表される記号です。

11. 初期原子座標

内容	X座標	Y座標	Z座標
単位	無次元	無次元	無次元
変数名	X(I)	Y(I)	Z(I)
引数值	I=1, NATOM	I=1, NATOM	I=1, NATOM
型	R	R	R

注) 原子座標は、12レコードのH行列 (基本セルの形状を表す行列) により規格化されています。

12. 初期H行列

内容	H行列
単位	Å
変数名	H(I, J)
引数值	I=1, 3 J=1, 3
型	R

注) H行列は、基本セルの形状を表す行列です。

以下、13～19レコードは、シミュレーションの結果として得られる時系列データです。

13～19レコード

13～19レコード

:

13～19レコード

のようにして、(MFINL-MINIT)/MINTV+1 回繰り返し出力されています。

13. モニター変数

内容	温度	圧力	体積	内部エネルギー	ハミルトニアン	時間スケール変数	予約領域	予約領域
単位	K	GPa	Å ³	10 ⁷ J	10 ⁷ J	無次元	-	-
変数名	CTEMP	CPRESS	VOL	UENER	HAMILT	F	-	-
型	R	R	R	R	R	R	R	R

14. H行列

内容	H行列
単位	Å
変数名	H(I, J)
引数値	I=1, 3 J=1, 3
型	R

注) H行列は、基本セルの形状を表す行列です。

15. 基本セル内原子数

内容	基本セル内 原子数
変数名	NSATOM
型	I

16. 基本セル内分子数

内容	基本セル内 分子数
変数名	NSMOL (K)
引数値	K=1, KMOL
型	I

17. 原子座標

内容	X座標	Y座標	Z座標
単位	無次元	無次元	無次元
変数名	X(I)	Y(I)	Z(I)
引数値	I=1, NSATOM	I=1, NSATOM	I=1, NSATOM
型	R	R	R

注) 原子座標は、14レコードのH行列（基本セルの形状を表す行列）により規格化されています。

18. 原子速度

内容	速度の X 成分	速度の Y 成分	速度の Z 成分
単位	無次元	無次元	無次元
変数名	VX(I)	VY(I)	VZ(I)
引数値	I=1, NSATOM	I=1, NSATOM	I=1, NSATOM
型	R	R	R

注) 原子速度は、14レコードのH行列（基本セルの形状を表す行列）と、6レコードの時間刻み幅により、規格化されています。

19. 原子ポテンシャル

内容	原子 ポテンシャル
単位	10^7J
変数名	APOT(I)
引数値	I=1, NSATOM
型	R

(4) H 行列について

基本セルは、次の 3 つのベクトルによって張られる任意の平行六面体として定められます。

$$\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$$

$$\mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z)$$

$$\mathbf{c} = (c_x, c_y, c_z)$$

11, 13 レコード（原子・分子発生ありでは 12, 14 レコード）で出力されている H 行列は、これらのベクトルから、

$$\mathbf{H} = (\mathbf{a} \ \mathbf{b} \ \mathbf{c})$$

と表されます。

圧力一定条件の MD では、圧力制御に伴い基本セルの各辺の長さや方向が変化します。

10, 14 レコード（原子・分子発生ありでは 11, 17 レコード）で出力されている原子座標は、H 行列で規格化されています。規格化された座標を格子座標と呼びます。

(5) 格子定数 (Lattice Constants) について

Materials Explorer のモニター変数表示モジュール (Monitoring) で表示される格子定数 (Lattice Constants) は、基本セルの形状を表すパラメータです。基本セルの形状を定める 3 つのベクトル \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} より、

$$a = |\mathbf{a}|$$

$$b = |\mathbf{b}|$$

$$c = |\mathbf{c}|$$

$$\alpha = \arccos(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c} / bc)$$

$$\beta = \arccos(\mathbf{c} \cdot \mathbf{a} / ca)$$

$$\gamma = \arccos(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} / ab)$$

として与えられます。

(6) 原子の実座標の求め方について

10, 14 レコード（原子・分子発生ありでは 11, 17 レコード）で出力されている原子座標は、H 行列で規格化されています。規格化された座標を格子座標と呼びます。格子座標 $S=(X, Y, Z)$ から、実座標 $R=(RX, RY, RZ)$ への変換は、

$$R = H S$$

より、

$$RX = a_x \times X + b_x \times Y + c_x \times Z$$

$$RY = a_y \times X + b_y \times Y + c_y \times Z$$

$$RZ = a_z \times X + b_z \times Y + c_z \times Z$$

となります。実座標の単位は Å です。

(7) 原子速度の求め方について

実座標系の原子速度 $VR=(VX, VY, VZ)$ は、5 レコード（原子・分子発生ありでは 6 レコード）に出力されている時間刻み幅 (Δt) と、15 レコード（原子・分子発生ありでは 18 レコード）に出力されている規格化された原子速度 $VS=(X1, Y1, Z1)$ から、

$$VR = H VS / \Delta t$$

より、

$$VX = (a_x \times X1 + b_x \times Y1 + c_x \times Z1) / \Delta t$$

$$VY = (a_y \times X1 + b_y \times Y1 + c_y \times Z1) / \Delta t$$

$$VZ = (a_z \times X1 + b_z \times Y1 + c_z \times Z1) / \Delta t$$

として求められます。速度の単位は Å/fs です。

(8) エンディアン方式について

最下位のビットが、最下位のアドレス指定をしたバイトに置かれるか、最上位のアドレス指定をしたバイトに置かれるかによって、コンピュータを各々、ビッグ・エンディアンとリトル・エンディアンとに分けます。

例えば、4 バイト整数の 1 のビット列は、それぞれ以下のように表現されます。

- ビッグ・エンディアン

byte 0 byte 1 byte 2 byte 3
00000000 00000000 00000000 00000001

- リトル・エンディアン

byte 3 byte 2 byte 1 byte 0
00000001 00000000 00000000 00000000

MD 出力ファイル中、整数値、および実数値を表すビット列は、ビッグエンディアンに従っています。