

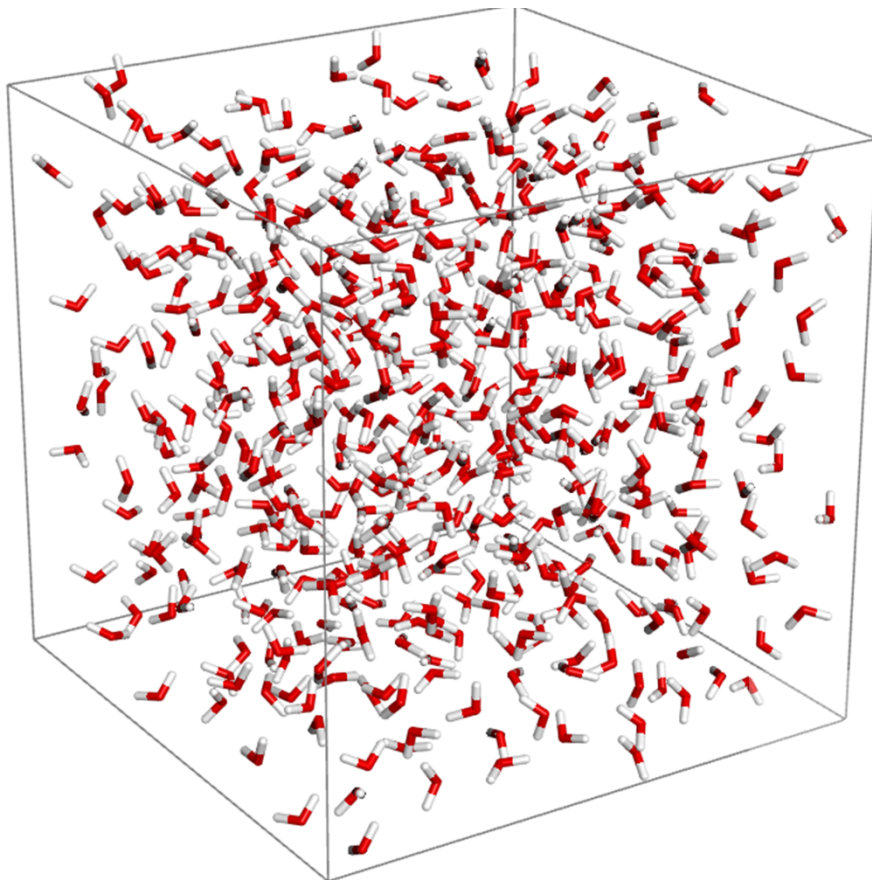
# 分子動力学法 (MD, PIMD)

## 1. 計算設定

以下のように設定した。

- Method: PIMD
- Ensemble: NVT (canonical ensemble)
- Potential: MM (classical potential)
- System: H<sub>2</sub>O (64 molecules)
- Number of beads: 1, 16
- Boundary: periodic boundary condition

系のスナップショットを以下に示す。



## 2. 結果

以下のように、各ステップにおける全エネルギー、ポテンシャルエネルギー、瞬間温度、計算時刻が“standard.out”に出力される。

step	energy [au]	potential [au]	temp [K]	wall clock time
0	26.72593499	2.46109108	300.00	2016-03-04 金 10:56:18.58
10	26.72154291	1.54702217	324.08	2016-03-04 金 10:56:26.55
20	26.72283571	1.36784139	275.43	2016-03-04 金 10:56:34.20
30	26.72304579	1.25660900	266.65	2016-03-04 金 10:56:42.04
40	26.72294052	1.06831460	272.57	2016-03-04 金 10:56:49.69
50	26.72336575	1.06198721	282.97	2016-03-04 金 10:56:57.34
60	26.72311093	0.90714165	315.20	2016-03-04 金 10:57:05.05
70	26.72327800	0.83548383	329.52	2016-03-04 金 10:57:17.62
80	26.72332197	0.77974987	324.63	2016-03-04 金 10:57:25.24
90	26.72314060	0.68389906	314.84	2016-03-04 金 10:57:38.35
100	26.72323059	0.65248203	298.57	2016-03-04 金 10:57:45.97

・・・以下、略・・・

動径分布関数は“rdf.out”に出力される。

1	2	r [au]	rdf: n(r)	rdf: g(r)
0	0	1.00000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.01000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.02000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.03000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.04000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.05000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.06000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.07000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.08000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.09000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.10000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.11000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.12000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.13000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.14000000	0.00000000	0.00000000
0	0	1.15000000	0.00000000	0.00000000

・・・以下、略・・・

酸素-酸素間及び水素-水素間の動径分布を以下に示す。比較のため、古典分子力学（ビーズ数=1とした場合）の結果も記す。原子核量子効果の重要性がわかる。

