

sq_particle.py

概要

各ステップにおける粒子オーダーパラメータの構造因子を計算する。このオーダーパラメータでは粒子の形状も表現されるので、粒子内の干渉効果(粒子散乱関数)も同時に得られる。

入力

particleparam_*.h5 (粒子オーダーパラメータ)

出力

sq_particle/sq_particle_*.txt (各ステップにおける静的構造因子、散乱ベクトル 静的構造因子)

設定項目

- l. 53-55 シミュレーションボックスサイズ
- l. 58 最大タイムステップ数(例えば、400 ステップまで調べたい場合は 400 を設定する)
- l. 61 出力のインターバルタイムステップ数
- l. 64 粒子数(規格化に利用)
- l. 67 粒子半径(規格化に利用)