

目 次

A : neighborhood parameters	1
B : bond angle analysis (BAA)	2
C : centrosymmetry parameter analysis (CPA)	2
D : neighbor distance analysis (NDA)	2
F : angular Fourier series (AFS) like parameter	3
I : tetrahedron order parameter (TOP)	3
Q : Bond order parameter	3
W : Bond order parameter	4
LQ : local Bond order parameter	4
LW : local Bond order parameter	4
Reference	5

title: “論文に使用したパラメータなど”
date: “Feb 2019”

A : neighborhood parameters

common neighborhood parameter A [1]、predominant common neighborhood parameter P [2]、another predominant common neighborhood parameter N [2] は非常に似ている式で計算される。 P と N に関しては、 A の一種として実装されている。

$$A^{(type,m)}(i) = \frac{1}{N+1} \sum_{j \in \tilde{N}_b(i)} A'^{(type,m)}(j)$$

$$A'^{(type=A,m)}(i) = \frac{1}{N} \sum_{j \in N_b(i)} \left| \sum_{k \in N_b(i,j)} \{r(i,k) + r(j,k)\} \right|^2$$

$$A'^{(type=P,m)}(i) = \frac{1}{N} \sum_{j \in N_b(i)} \left| \sum_{k \in N_b(i,j)} \{r(i,j) + r(k,j)\} \right|^2$$

$$A'^{(type=N,m)}(i) = \frac{1}{N} \left| \sum_{j \in N_b(i)} \sum_{k \in N_b(i,j)} \{r(i,j) + r(k,j)\} \right|^2$$

変数 $N_b(i)$ は粒子 i の N 個の隣接粒子のリストである。変数 $\tilde{N}_b(i)$ は粒子 i を含む $N+1$ 個の隣接粒子のリストである。変数 $N_b(i,j)$ は粒子 i , 粒子 j から最も近い m 個の粒子のリストである。変数 $type$ で計算を行うオーダーパラメータの種類を指定する変数である。

本研究では、変数 m として、 $\{1, 2, 3\}$ を使用した。

B : bond angle analysis (BAA)

bond angle analysis B は次の式で計算される。 [3]

$$B^{(m,n,\phi)}(i) = \frac{1}{N+1} \sum_{j \in \tilde{N}_b(i)} B'^{(m,n,\phi)}(i)$$

$$B'^{(m,n,\phi)}(i) = \frac{1}{N(N-1)/2} \sum_{j > k \in N_b(i)} f^{(m,n,\phi)}(\theta(j, i, k))$$

$$f^{(m,n,\phi)}(\theta(j, i, k)) = \cos^n(m\theta(j, i, k) + \phi)$$

変数 $N_b(i)$ は粒子 i の N 個の隣接粒子のリストである。変数 $\tilde{N}_b(i)$ は粒子 i を含む $N+1$ 個の隣接粒子のリストである。変数 $\theta(j, i, k)$ はベクトル $r(i, j)$ とベクトル $r(i, k)$ との角度である。変数 m は、角度の係数である。変数 n は、 \cos 関数に使用する指数である。変数 ϕ は、関数の補正のために角度である。

本研究では、変数 m として、 $\{1, 2, 3\}$ 、変数 n として、 $\{1, 2\}$ 変数 ϕ として、 $\{0, 2/3\pi, \pi/2, \pi/3, \pi/4, \pi/5, \pi/6\}$ を使用した。

C : centrosymmetry parameter analysis (CPA)

centrosymmetry parameter C は次の式で計算される。 [4]

$$C(i) = \frac{1}{N+1} \sum_{j \in \tilde{N}_b(i)} C'(i)$$

$$C'(i) = \sum_{j \in M_b(i)} |r(i, j) + r(i, k)|^2$$

変数 $\tilde{N}_b(i)$ は粒子 i を含む $N+1$ 個の隣接粒子のリストである。変数 $N_b(i)$ は粒子 i の N 個の隣接粒子のリストである。変数 $M_b(i)$ は粒子 i の $N/2$ 個の隣接粒子のリストである。粒子 k は、座標 $r(j)$ の、ベクトル $r(i)$ に関して反対側に移動した座標 $r'(j)$ から一番近い位置にある $N_b(i)$ リストにある粒子である。

D : neighbor distance analysis (NDA)

neighbor distance analysis D は次の式で計算される。 [5]

$$D(i) = \frac{1}{N+1} \sum_{j \in \tilde{N}_b(i)} D'(i)$$

$$D'^{(f_{ij}, f_{ik}, f_{jk})}(i) = \frac{1}{N(N-1)/2} \sum_{j > k \in N_b(i)} f_{ij}(r(i, j)) f_{ik}(r(i, k)) f_{jk}(r(j, k))$$

変数 $\tilde{N}_b(i)$ は粒子 i を含む $N+1$ 個の隣接粒子のリストである。関数 $f_{ij}(r(i, j)), f_{ik}(r(i, k)), f_{jk}(r(j, k))$ は、距離を引数とし、返り値として何らかの値を持つ関数である。変数 $r(i, j), r(i, k), r(j, k)$ は、各々、粒子 i, j , 粒子 i, k , 粒子 j, k 間の距離である。

本研究では、関数 f として、 $\{\sqrt{r}, r, r^2, [1 - \exp\{-(r - 3.0)^2/(2 * 1.5^2)\}], [0.5 + 0.5 * \exp\{-(r - 3.0)^2/(2 * (1.5)^2)\}]\}$ を使用した。

F : angular Fourier series (AFS) like parameter

angular Fourier series parameter F は次の式で計算される。[6][7]

$$F(i) = \frac{1}{N+1} \sum_{j \in \tilde{N}_b(i)} F'(i)$$

$$F'_i(f_a, f_b, m) = \frac{1}{N(N-1)/2} \sum_{j > k \in N_b(i)} f_a(\min(r(i, j), r(i, k))) f_b(\max(r(i, j), r(i, k))) \cos(l\theta(j, i, k))$$

変数 a は、隣接粒子で平均化を行う回数。変数 $N_b(i)$ は粒子 i の N 個の隣接粒子のリストである。関数 f_a, f_b は、距離を引数とする何かの関数である。変数 l は、角度の係数である。変数 $\theta(j, i, k)$ はベクトル $r(i, j)$ とベクトル $r(i, k)$ との角度である。

本研究では、関数 f_a, f_b として、 $\{\sqrt{r}, r, r^2, [1 - \exp\{-(r-3.0)^2/(2*1.5^2)\}], [0.5 + 0.5 * \exp\{-(r-3.0)^2/(2*(1.5)^2)\}]\}$ を使用した。変数 l として、 $\{1, 2, 3, 4, 6, 8, (180/109.5), 2(180/109.5), 3(180/109.5), 4(180/109.5), 6(180/109.5)\}$ を使用した。

I : tetrahedron order parameter (TOP)

Tetrahedron order parameter I は以下の式で計算される。[8][9]

$$I(i) = \frac{1}{N+1} \sum_{j \in \tilde{N}_b(i)} I'(i)$$

$$I'(i) = 1 - \frac{3}{8} \sum_{j > k \in N_b(i)} \{\cos(\theta(j, i, k)) + 1/3\}^2$$

変数 $N_b(i)$ は粒子 i の N 個の隣接粒子のリストである。変数 $\tilde{N}_b(i)$ は粒子 i を含む $N+1$ 個の隣接粒子のリストである。変数 $\theta(j, i, k)$ はベクトル $r(i, j)$ とベクトル $r(i, k)$ との角度である。

Q : Bond order parameter

Bond order parameter Q は以下の式で計算される。[10]

$$Q_l(i) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l |q'_{lm}(i)|^2}$$

$$q'_{lm}(i) = \frac{1}{N+1} \sum_{j \in \tilde{N}_b(i)} q_{lm}(j)$$

$$q_{lm}(i) = \frac{1}{N} \sum_{j \in N_b(i)} Y_{lm}(\theta(i, j), \phi(i, j))$$

変数 $N_b(i)$ は粒子 i の N 個の隣接粒子のリストである。変数 $\tilde{N}_b(i)$ は $N_b(i)$ に粒子 i 自身を追加した $N+1$ 個の粒子のリストである。関数 Y は、パラメータ l の球面調和関数である。変数 $\theta(i, j), \phi(i, j)$ はベクトル $r(i, j)$ の球面座標系での表現における角度で、 θ は z 軸からの角度、 ϕ は x 軸からの角度である。

本研究では、球面調和関数のパラメータ l として、 $\{2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16\}$ を使用した。

W : Bond order parameter

Bond order parameter W は以下の式で計算される。[10]

$$W_l(i) = \frac{\sum_{m_1+m_2+m_3=0} \begin{pmatrix} l & l & l \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} q_{lm_1}(i) q_{lm_2}(i) q_{lm_3}(i)}{\left(\sum_{m=-l}^l |q_{lm}(i)|^2\right)^{3/2}}$$

$$q_{lm}(i) = \frac{1}{N+1} \sum_{j \in \tilde{N}_b(i)} q'_{lm}(j)$$

$$q'_{lm}(i) = \frac{1}{N} \sum_{j \in N_b(i)} Y_{lm}(\theta(i, j), \phi(i, j))$$

変数 $N_b(i)$ は粒子 i の N 個の隣接粒子のリストである。変数 $\tilde{N}_b(i)$ は $N_b(i)$ に粒子 i 自身を追加した $N+1$ 個の粒子のリストである。関数 Y は、パラメータ l の球面調和関数である。変数 $\theta(i, j), \phi(i, j)$ はベクトル $r(i, j)$ の球面座標系での表現における角度で、 θ は z 軸からの角度、 ϕ は x 軸からの角度である。変数 m_1, m_2, m_3 は $-l$ から l までの値をとるが、 $m_1 + m_2 + m_3 = 0$ の時だけ計算される。行列 $\begin{pmatrix} l & l & l \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ は Wigner 3- j symbol である。

本研究では、球面調和関数のパラメータ l として、 $\{2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16\}$ を使用した。

LQ : local Bond order parameter

local Bond order parameter LQ は以下の式で計算される。[11][12]

$$LQ_l(i) = \frac{1}{N} \sum_{j \in N_b(i)} \frac{\text{Re}(\sum_{m=-l}^l q_{lm}(i) q_{lm}^*(j))}{|q_{lm}(i)| |q_{lm}(j)|}$$

$$q_{lm}(i) = \frac{1}{N} \sum_{j \in N_b(i)} Y_{lm}(\theta(i, j), \phi(i, j))$$

変数 $N_b(i)$ は粒子 i の N 個の隣接粒子のリストである。関数 Y は、パラメータ l の球面調和関数である。変数 $\theta(i, j), \phi(i, j)$ はベクトル $r(i, j)$ の球面座標系での表現における角度で、 θ は z 軸からの角度、 ϕ は x 軸からの角度である。

本研究では、球面調和関数のパラメータ l として、 $\{2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16\}$ を使用した。

LW : local Bond order parameter

$$LW_l(i) = \frac{\sum_{m_1+m_2+m_3=0} \begin{pmatrix} l & l & l \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} l q_{lm_1}(i) l q_{lm_2}(i) l q_{lm_3}(i)}{\left(\sum_{m=-l}^l |l q_{lm}(i)|^2\right)^{3/2}}$$

$$lq_{lm}(i) = \frac{1}{N} \sum_{j \in N_b(i)} \frac{q_{lm}(i)q_{lm}^*(j)}{|q_{lm}(i)||q_{lm}(j)|}$$

変数 $N_b(i)$ は粒子 i の N 個の隣接粒子のリストである。関数 Y は、パラメータ l の球面調和関数である。変数 $\theta(i, j), \phi(i, j)$ はベクトル $r(i, j)$ の球面座標系での表現における角度で、 θ は z 軸からの角度、 ϕ は x 軸からの角度である。

本研究では、球面調和関数のパラメータ l として、 $\{2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16\}$ を使用した。

Reference

- [1] J.D. Honeycutt, H.C. Andersen, Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters, *The Journal of Physical Chemistry*. 91 (1987) 4950-4963. doi:10.1021/j100303a014.
- [2] A. Radhi, K. Behdian, Identification of crystal structures in atomistic simulation by predominant common neighborhood analysis, *Computational Materials Science*. 126 (2017) 182-190. doi:10.1016/j.commatsci.2016.09.035.
- [3] G.J. Ackland, A.P. Jones, Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. 73 (2006) 1-7. doi:10.1103/PhysRevB.73.054104.
- [4] C.L. Kelchner, S.J. Plimpton, J.C. Hamilton, Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation, *Physical Review B*. 58 (1998) 11085-11088. doi:10.1103/PhysRevB.58.11085.
- [5] A. Stukowski, Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 20 (2012) 045021. doi:10.1088/0965-0393/20/4/045021.
- [6] A.P. Bartók, R. Kondor, G. Csányi, On representing chemical environments, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. 87 (2013) 1-16. doi:10.1103/PhysRevB.87.184115.
- [7] A. Seko, A. Togo, I. Tanaka, Descriptors for Machine Learning of Materials Data, in: *Nanoinformatics*, Springer Singapore, Singapore, 2018: pp. 3-23. doi:10.1007/978-981-10-7617-6_1.
- [8] P.-L. CHAU, A.J. HARDWICK, A new order parameter for tetrahedral configurations, *Molecular Physics*. 93 (1998) 511-518. doi:10.1080/002689798169195.
- [9] E. Duboué-Dijon, D. Laage, Characterization of the Local Structure in Liquid Water by Various Order Parameters, *The Journal of Physical Chemistry B*. 119 (2015) 8406-8418. doi:10.1021/acs.jpcb.5b02936.
- [10] W. Lechner, C. Dellago, Accurate determination of crystal structures based on averaged local bond order parameters, *Journal of Chemical Physics*. 129 (2008) 114707. doi:10.1063/1.2977970.
- [11] E.B. Moore, E. De La Llave, K. Welke, D.A. Scherlis, V. Molinero, Freezing, melting and structure of ice in a hydrophilic nanopore, *Physical Chemistry Chemical Physics*. 12 (2010) 4124-4134. doi:10.1039/b919724a.
- [12] M. Fitzner, P. Pedevilla, A. Michaelides, Predicting heterogeneous ice nucleation with a data-driven approach, *Nature Communications*. 11 (2020) 1-9. doi:10.1038/s41467-020-18605-3.