

mdspass2 チュートリアルと演習

last update: Dec 2021

はじめに

- mdspass2 は立ち上げ時に CONFIG (構造ファイル) および SETDAT (各種条件設定ファイル) を読み込みます.
- Control パネルの下の方 Write Config ボタンを押すと、現在の構造が CONFIG.OUT ファイルに書き出されます。また、Set param ボタンで開くポップアップウインドウの下の方 Write Setdat ボタンを押すと、現在の各種条件設定が SETDAT.OUT ファイルに書き出されます。これらのファイルをリネーム（拡張子を削除）して立ち上げ時に読ませるようにすると便利です。
- ダウンロードされたものの中に含まれているデフォルトの SETDAT ファイルが、もしかしたら色々とややこしいセッティングを指定したものになっているかもしれません。
http://www.cmsm.iis.u-tokyo.ac.jp/code/mdspass2/sample_files/ にある
SETDAT.SIMPLE をダウンロードし、SETDAT にリネームしてから下記の作業に入つていただくと安全かと思います。
- 各ウインドウ右上の角にある”×”ボタンを押すと、そのウインドウだけが閉じるのではなく mdspass2 全体が終了してしまいます。これは利用している glui ライブラリの仕様らしく、どうしようもありません。ポップアップウインドウを閉じようとして”×”ボタンを押してしまわないように注意してください。

パート I: 理想結晶構造

1. 結晶構造モデル作成

1. Control パネルの下の方にある、File control and config creation の枠内に、”Read Config”, ”Write Config”, ”Create Config” の 3 つのボタンがあります（もしボタンが隠れている場合は、File control and config creation をクリックすると、その部分がロールアウトし、ボタンが見えるようになります）。Create Config をクリックすると、Create config パネルがポップアップして現れます。
2. まず、アルミニウムの結晶構造を作成してみます。パネルの上のほうに Atom と書いてあり、その右側にラベル入力欄があります。そこに Al と記入されていることを確認してください。記入されていなければ、Al とタイプして Enter キーを押してください。
一つ下に Atom(2)という欄がある場合は、そちらにも Al とセットしておきます。
3. その下の Potential を変更します。入力欄を左クリックするとセレクションバーが

現れます。EAM を選択してください。

※EAM にはバリエーションがあり、GEAM と Mishin が選択可能です。後ほど Control パネルから選択します。

4. その下にラジオボタンがあります。アルミニウムは fcc 構造なので、FCC を選択してください。
5. 上方の右側を見てください。# of rep in x/y/z という入力欄は、ユニットセル (fcc の場合は原子 4 個を含む立方体セルがユニットセルとなります) を x/y/z 方向に何個積むかを示しています。それぞれ、3 と入力してください。キー入力でも、上下ボタンをクリックすることでも数値の変更ができます。これで、原子数 $4 \times 3 \times 3 \times 3 = 108$ 個のセルが作成されることになります。
6. 少し下に行くと、Lattice const. a という入力欄があります。格子定数を Å 単位で入力します。アルミニウムなので、4.04 とします。
なお、その下にある Lattice const. c は FCC 格子作成の際には無視されます。
7. パネルの一番下に 3 つボタンが並んでいます。Create をクリックしてください。MD viewer ウィンドウに構造が現れたら、Create config パネルの下の Close をクリックしてください。
8. Control パネルの上方、Potential: のところに EAM が表示されているのを確認してください。その右側 ARG/FILE ボタンを押すと ARG を選択するポップアップが開くので、Mishin を選択して閉じてください。

2. 有限温度 MD

上記で作成したアルミニウム 108 原子のセルを用いて、簡単な MD 計算を実行してみます。

1. Control パネルの一番上に、PBC x/y/z のチェックボタンがあります。x/y/z 方向それぞれに周期境界条件を課すか否かを設定します。ここでは結晶の計算をしますので、すべてにチェックが入れられていることを確認してください。
2. Temp set 入力欄に、設定温度を入力します。単位は K です。100~500 程度の適当な値を入力します。
3. Algorithm をクリックするとセレクションバーが現れ、アンサンブルを選択することができます。ここでは速度スケーリング法を用いた温度一定条件での計算 (NVT アンサンブル) を行いますので、NVT を選択してください。（ここでは NVT (Scaling) を選択してください）
4. 下の方に、Status というエリアがあり、その中に dt (fs) 入力欄があります。MD の時間ステップを単位 fs で与えます。1.0~2.0 程度の適当な値を入力してください。あまり大きすぎると計算が発散し、小さすぎると原子の動きが遅くなりすぎます。

5. Control パネルの上方にある Set param というボタンをクリックすると、Set parameters パネルがポップアップします。これは、描画のためのセッティングやその他いろいろな計算条件を設定するためのパネルです。下の方に Deformation settings というバーがあるのでクリックしてロールアウトしてください。ex, ey, ez は、セルサイズを x,y,z 方向に収縮させる場合に使用します。これらの値が 0 となっていることを確認してください。確認できたら、Set parameters パネル一番下の Close をクリックし、このパネルを閉じてください。
6. Control パネルの方に MD on/off というボタンがあります。一度クリックすると MD が始まります。MD viewer ウィンドウを見て、原子が振動していることを確認してください。もう一度 MD on/off ボタンをクリックすると、MD が一時停止します。
なお、MD 計算では「一定の条件を満たした時点で一旦 MD を止めたい」ということがよくあります。これについての指定（MD 停止条件の設定）は Set parameters パネルの中央右側で可能になっています。Stop MD by Fmax にチェックを入れると、原子に働く最大値がある値（その下のボックスに入力します）になった際に MD が off になります。Stop MD by step にチェックすると、設定したステップ数だけ進むと MD が停止します。また、応力が設定値の±○○ MPa 以内に収まつたら止まる、という設定も可能になっています。
7. ~~MD を停止した状態で、Algorithm を一旦 NVE に切り替え、すぐに NVT を選択しなおします。すると、設定温度に応じた原子の初期速度が乱数で与えられます。~~
(Dec.2020 追記：この機能、現在は取り除かれています)
8. Control パネルの Status エリアには、MD の経過ステップ数、原子当たりの平均ポテンシャルエネルギー、現在の温度、原子に働いている力の最大値、セルサイズなどが表示されています。

3. 表示設定の変更

1. Control パネルの上方にある Set param ボタンをクリックし、Set parameters パネルを開いてください。
2. Setup for drawing をクリックし、ロールアウトします。ここでは、描画のためのセッティングができます。例えば Ortho チェックボタンは遠近法有／無を切替えます。Sphere radius, Sphere segment で、原子の球の大きさや球面の滑らかさを変更できます。色々と試してみて下さい。
3. Draw bond にチェックが入っていると、その少し下にある Bond length(単位はÅ) 以内にある原子を線で結び付けて表示します。上記のアルミの場合だと、3.2 などと入力すると最近接原子同士が結合されるはずです。Bond-PBC のチェックが入っていると、セルの境界近くにある原子については隣のセル（イメージセル）内の原

子との結合も計算され、表示されます。

その下に Line と Cylinder が選択できるラジオボタンがあります。 Cylinder を選択するとボンドが立体的に描かれるので、ここではこちらを選択します (Line は原子数が極めて多くなった際に描画コストを下げるために用意しています)。さらにボンドの色も選択できるようになってますので、お好みで選んでください。

4. Draw force は、原子に働いている力のベクトルを矢印で表示します。矢印の長さは F·arw length の値でスケーリングされて表示されます。F·arw length は適当な係数としての意味しかなく、物理的な意味はないので単位はありません。
5. Redraw interval は、何ステップごとに原子の再描画を行うかを指定します。この値が小さいと MD 計算自体は遅くなりますが、原子の動きが滑らかになります。2 や 10 などの値を入力して、その違いを確かめてください。
6. MD 計算中のエネルギー変化、温度変化はそれぞれ energy.d、temp.d というファイルに出力されます。energy.d の各コラムは、ステップ数／ポテンシャルエネルギー（1 原子当たり、単位 eV）／運動エネルギー／全エネルギー、temp.d はステップ数／温度（単位 K）となっています。適当なグラフソフトで描画して確認してみてください。
7. Control パネル中ほどの Capture ボタンを押すと、その時点での viewer の描画がキャプチャされ、png 画像ファイルに出力されます。ボタンを押すごとにその下の Cap-file# の数字が 1 ずつ増えていきます。例えばこの数字が 10 だと SNAPSHOT0010.png というファイルが出力されます。Cap-file# の値は任意に書き換えられます。また、Set parameters パネル中央の Auto capture にチェックを入れておくと、MD を実行している間じゅう、その上の CONF Wr itvl の値ごとのステップ数でキャプチャが行われます。例えば 100 ステップごとに画像を吐き出しだければ、CONF Wr itvl を 100 としておけば良いことになります。
なお Auto capture では、png ファイルと同時に config****.cfg, config****.cfge というファイル (atomeye で読める形式) が吐き出されます。Atomeye では Del キーを押すごとに読み込みファイル名の数字を 1 ずつ上げていくという機能があるので、これをうまく利用すれば原子配置が変化する様子を可視化することができます。

[演習]

1. アンサンブルの比較
 - 1) Cu 原子の立方格子結晶を 3x3x3 並べたモデルを作成し、適当な温度を設定して NVT アンサンブルを実行して原子が動く（熱揺動）する様子を確認せよ。なお、Cu の格子定数は約 3.61Å。
 - 2) NVE アンサンブルに切替えて MD をしばらく実行し、各エネルギーの変化および温度変化をプロットして確認する。全エネルギーが保存されていることを確認せよ。

- 3) NVT (thermostat) アンサンブルに切替える (Nose-Hoover 法の温度制御法)。適当な目標温度を設定し、温度が制御される様子を確認せよ。このとき、サーモスタットの仮想質量を変えて、温度調整の挙動の変化を確認せよ。

※ Set parameters パネルの左中ほどに NH mass があり、これで温度制御のための仮想質量を調節できる。10 の何乗、という設定ができるようになっているので、窓の数値をプラス 1 すると仮想質量は 10 倍になる。この仮想質量に適当な値を入れ、MD を実行し、温度変化の様子がどのようになるか temp.d で確認するとよい。(仮想質量が大きくなれば温度のレスポンスは遅くなる、ということを確認してほしい。)

- 4) NσH アンサンブルを用いて、応力制御の解析を実行せよ。適当な目標応力成分を設定して、適切に応力が制御されていることを確認せよ。

※本ソフトでの表示は NσH でなく NPH となっている。Algorithm で NPH あるいは NPH+PR damper を選択すると応力制御が行われる。NPH はオリジナルの Parrinello-Rahman 法であり、NPH+PR damper はこれにセルの振動を抑えるための減衰項を導入したもの。

※ Stress ボタンを押すとポップアップが現れ、一番上にセルに働く応力が表示される。ポップアップの真ん中あたりにある PR Setting というところで設定応力が入力できるようになっている（ここではすべてゼロにしておく）。

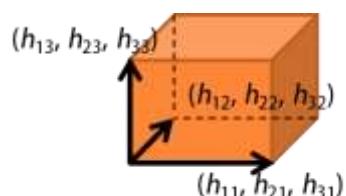
※ 仮想質量の設定については 3) と同様。応力成分の時系列変化は stress.d に出力されるようになっている。応力成分の振れ幅はかなり大きいが、これが正常である（ある程度の時間幅に対して平均値をとる必要がある）。

2. 格子定数の決定および加熱解析

- 1) 適当なサイズの結晶モデルを作成し、応力ゼロ条件、温度一定条件の MD 解析を行う。温度を適当に設定し（低温にしておく）、一定ステップの MD を行って、その温度（および圧力）での格子定数を求めよ。

※ 結晶構造は fcc でよい。どの原子種が選べるかは選択したポテンシャル関数による。Tersoff や SW ポテンシャルを選択して Si などのダイヤモンド構造で試してみてもよい。なお、cell.d にセルサイズの変化が書き出される（各コラムの意味については 1 行目に説明がある。Cell matrix の成分は右下図を参照のこと）ので、セルサイズを（その軸方向に並べた）ユニットセルの数で割れば格子定数が求められる。なお、ダンパを用いない応力制御法ではセルサイズが振動し続けるため、一定時間内の平均値をとるなどの工夫が必要である。

- 2) 1) から温度を少し上げて、同じことを行う。これを繰り返すことで、格子定数と温度の関係を求めよ（この傾きから線膨張係数が得られる）。
- 3) さらに温度を上げていくと、ある時点では熔解するが、熔解後も同じ手続きで格子定数を求めることがで



きる。融点近傍で格子定数・温度線図が折れ曲がることを確認せよ（融点の極めて粗い見積もり）。

3. 構造緩和解析および弾性定数の計算

- 1) 適当なサイズの結晶モデルを作成する。Stress ボタンを押すとポップアップが現れ、一番上にセルに働く応力が表示される。適当に格子定数を入力した場合おそらくゼロになつてないと思われる所以、この値を確認しておく。

- 2) 応力ゼロ条件で緩和計算を行い、応力がゼロに収束していくことを確認する。

※ Stress ポップアップの真ん中あたりにある PR Setting というところで設定応力が入力できるようになっているが、値がすべてゼロとなっていることを確認したのち、Algorithm を Full relaxation (static) とし MD を実行する（原子構造緩和とセル緩和を同時に行うモード）。

- 3) 適当な微小ひずみを与える、セルサイズ固定条件のもと構造緩和計算を行って応力成分を求める。これより、この結晶の弾性定数を求めよ。

※ x, y, あるいは z 方向に引張／圧縮を与えるだけならば、Control ウィンドウの Status 欄にある Cell の窓に値（セルサイズ）を入力すればよい。せん断ひずみなどを与える場合には、Create Config ボタンを押すことで現れるウィンドウの Cell dimension の欄（1、2、3 はそれぞれ下図の 3 つのベクトルの成分）に数値を入力する。

※ この場合は原子構造緩和のみを行うので、Algorithm を Relaxation (atom) とする（このモードでは、NVE と同じ方法で運動方程式を解き、Relax algo で指定した方法で原子構造緩和が行われる）。

Set param をクリックして Set parameter パネルを開き、Relax algo を GLOC に設定する（ $\sum_i \vec{v}_i \cdot \vec{F}_i$ の値が負になった時にブレーキをかける」緩和法）。

なお Relax algo=FIRE も選択できるが、時間刻み幅を増減させて緩和計算の効率化を図る方法であり、安定性が損なわれる（発散して構造が崩壊してしまうことがある）。

