

mdspass2 チュートリアル

2015 年 10 月
生産技術研究所 梅野

※バイナリは 201506xx 版を使用

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 をクリックします. すると, その部分がロールアウトし, "Config", "Write Config", "Create Config" の 3 つのボタンが現れます. Create Config をクリックします. 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 とタイプしてリターンキーを押してください.
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 Mishin を選択してください.
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. 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.
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.

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

的な値を入力します。

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。
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 パネルの情報にある 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 パネル上の方に 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。
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。
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 パネルの情報にある 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。

(注 : Draw bond にチェックを入れてもすぐにはボンドが表示されないことがあります。ポテンシャル関数を切り替えた時など、カットオフ距離が適切に設定されていないことが原因でそうなることがあります。その場合には、コントロールパネルで”Calc”を押すとポテンシャルの計算が行われ、カットオフが再設定されてきちんとボンドが表示されると思います。)

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。

4. 表面構造の解析

シリコン(001)表面の構造を求めてみます。

1. Control パネル下部の File control and config creation エリアにある Create Config をクリックし、Create Config パネルを開きます。
2. Atom は Si, Potential は Tersoff とします。その下のラジオボタンは Diamond をチェックします。# of rep in x/y/z はそれぞれ、4, 4, 3 とします。Lattice const. は 5.43 と入力します。これで、Create ボタンをクリックしてセルを作成します。Create config パネルは Close で閉じてください。
3. Control パネルで、PBC x/y にチェックを入れ、PBC z のチェックを外します。dt (fs) は 2.0 程度でよいでしょう。
4. Algorithm を Relaxation (atom) とします。Set param をクリックして Set parameter パネルを開き、Relax algo を GLOC にします。Deformation settings で、ex/ey/ez がすべて 0 となっていることを確認します。
5. 後で構造を観察しやすいように設定をしておきます。Draw bond にチェックを入れ、Bond length を 3.0 としておきます。Atom color は Energy にし、Autorange にチェックを入れておきます。Close で Set parameter パネルを閉じます。
6. MD on/off ボタンを押し、MD 計算を実行します。原子構造の緩和計算が行われます。数百ステップ計算すれば OK ですので、再度 MD on/off ボタンを押して MD 計算を一旦停止します。
7. Temp set に 100 を入力し、Algorithm を NVT とします。MD on/off で MD 計算を再開します。しばらくすると、表面の原子が結合をし、ダイマー構造を形成することがわかります。Control パネルの Rotation 等のコントローラを操作して、色々な角度からセルを観察して確認してみて下さい。
8. どのような構造ができるかは、乱数で与えた初期原子速度などに依存します。おか

しな構造になってしまったら, Control パネル一番下の Reset ボタンを押すと, MD を開始する前の原子構造に戻りますので, 上記の手続きやり直すことができます. 温度を少し変えてみたり, セルの大きさを変えてみたりして試してみるのも良いでしよう.

9. ダイマーを形成した表面原子, ダイマーを形成しない原子が現れたら, いったん MD on/off で MD を停止してみます. 両者はエネルギーが大きく異なるので, 異なる色で着色されているはずです. MD viewer のウインドウにマウスカーソルを持っていき, それぞれの原子を左クリックしてみて下さい. コンソールウインドウ (Windows では黒い背景のテキスト画面) に, クリックした原子の情報が現れます. 原子がもっているポテンシャルエネルギーも表示されます. ダイマーを形成しない原子は, ダングリングボンドを持っているためエネルギーが非常に高いことが分かります.

5. ナノワイヤのモデル作成と引張り解析

銅のナノワイヤのモデルを作成し, 引張り MD 計算をしてみます.

1. Create config パネルを開き, Atom は Cu, Potential は EAM Mishin, その下の構造は FCC を選択します.

(注: GEAM の方が、後のすべり挙動は見やすいかもしれません。これは、GEAM の方が fcc に近い構造をより強く好み、少し崩れたような”曖昧な”構造が消えやすいからだと思われます。)

2. # of rep in x/y/z はそれぞれ, 3,3,8 とします. Lattice const. は 3.61 とします. Create し, Close でパネルを閉じます.
3. Set parameters パネルを開き, 各種セッティングをします. Draw bond にチェック, Bond length は 2.8 とします. Relax algo は GLOC にチェックしておきます. Deformation settings で, ex/ey/ez はすべて 0 としておきます. Close でパネルを閉じます.
4. Control パネルで, PBC x/y のチェックを外し, PBC z のチェックを入れます. こうすることで z 方向のみに周期境界条件が課され, ナノワイヤの計算となります.
5. dt は 2.0 程度とし, Algorithm を Relaxation (atom) にして, MD 計算を数百ステップ行います (MD on/off ボタンを使用します). x,y 方向に原子構造が少しだけ収縮することに気が付くかもしれません.
6. Temp set を 300 程度とし, Algorithm を NVT として, MD 計算を開始します. 原子が振動し始めるのが分かります.
7. 数百ステップ MD を行った後, MD を一旦停止します. Algorithm を Relaxation (atom) に切り替え, 再び MD 計算を実行すると, 構造緩和計算が行われます. 数百ステップ行うと, 原子構造の変化が見た目ではほぼ無くなります. ただし, 上記の手続き (有限温度 MD+構造緩和) によって, ごくわずかな「初期不整」が与え

られたことに注意してください。

8. この構造を用いて、引張りシミュレーションをします。Set parameter パネルを開き、Relax algo を FIRE に切替えます。Atom color をロールアウトし、ラジオボタンの CSP を選択します。Autorange を外し、min を 0, max を 0.03 とします。これは、結晶すべりによる積層欠陥の形成を視覚化するのに適した着色法です。Deformation settings エリアで、ez に 0.002 程度の値を入れ、Repeat Lz のチェックを外します。Close でパネルを閉じます。
9. Control パネルで、Algorithm が Relaxation (atom) となっていることを確認し、MD 計算をスタートします。すると z 方向への引張り MD 計算が開始します。しばらくすると急激に構造変化が起こります。初期不整があるので、きわめてゆっくり引張っていけば (ez の値がもっと小さければ)、エッジ部からの転位発生などがみられるはずです。ですがここでは引張り速度が速すぎて (かつ初期不整がそれほど大きくないために)、構造全体が一気に相変態したような挙動が見られてしまします。
10. そこで、もう少し大きな初期不整を与えてみます。Create config パネルを開き、下の方にある Edit config をロールアウトします。この状態で、MD viewer 上で適当なエッジ原子を左クリックすると、その原子が着色され、Edit config エリアにその原子の情報が表示されます。そこで、Remove atom ボタンを押すとこの原子が消去されます (原子数が一つ減ります)。Close で Create config パネルを閉じてください。
11. ついでに、単純な引張り解析でなく、z 軸方向への引張／圧縮繰返し解析に切替えます。Set parameters パネルを開き、Deformation settings エリアで Repeat Lz にチェックを入れ、Lz(min)に 30.0, Lz(max)に 34.0 と入力します。Close でパネルを閉じます。
12. このセッティングで、MD 計算を開始してみてください。セルの z 方向サイズが 33Å に至る少し前に、先ほど取り除いた原子のあたりを起点として結晶すべり変形が起こります。まだ変形速度が速いため、相変態のような挙動も部分的に見られますが、繰返し変形をじっと観察しているとすべり様の挙動がみられるはずです。Rotation コントローラで視点角度を変えてみると見やすくなるかもしれません。Lz(min), Lz(max)の値を若干変更すると違った様子が見られますので、色々と試してみて下さい。