

Лабораторная работа №1

Использование метода молекулярной динамики. Визуализация результатов

Цель работы:

Изучить LAMMPS как инструмент молекулярно-динамического моделирования. Рассмотреть различные варианты визуализации атомной системы.

Используемые программы:

1. Программа молекулярно-динамического моделирования LAMMPS.
2. Программы для визуализации VMD и Ovit.
3. Набор табулированных потенциалов для ГЦК металлов.

Варианты заданий: ваш порядковый номер в журнале.

Предназначение и роль визуализации атомных систем

Большую роль в познании человеком природы играет визуальное восприятие им окружающего мира. Какими бы большими ни были возможности компьютеров, человек способен лучше, чем они, распознавать изображения и делать из этого выводы. Например, человек практически мгновенно может сделать заключение о наличии того или иного дефекта в кристаллическом материале по его изображению, тогда как компьютеру необходимо для этого провести сложные расчеты по определенному алгоритму, специально созданному для распознавания именно этого типа дефекта. Поэтому в атомном компьютерном моделировании структур и процессов в твердых телах широко используются методы и программы визуализации.

Основной принцип визуализации очень прост. Если имеется некоторая система (кристалл или сложная молекула), состоящая из одного или нескольких типов атомов, координаты которых известны, то эту систему можно отобразить на экране, изображая атомы в виде определенных геометрических тел (как правило, в виде сфер) в соответствии с их от-

носительным расположением. При этом каждому типу атомов можно присвоить определенный цвет, можно изобразить связи между ними и т.д. Следует сказать, что современная техника визуализации позволяет получать не только двумерное изображение на экране компьютера, но также трехмерные изображения в специальных камерах.

Первоначально программы визуализации были созданы для изображения сложных молекул. Одной из программ, предназначенных для этой цели, является программа VMD, которая является эффективным инструментом молекулярного моделирования и визуализации. Официальный сайт (<https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>) содержит информацию о правилах работы с программой, дистрибутивы последних версий. В настоящее время имеется множество подобных программ, большинство из которых свободно распространяется. Оказалось, что многие из них пригодны также для визуализации кристаллов, поскольку последние являются ничем иным, как большими молекулами. По набору выполняемых функций различные программы близки друг к другу, поэтому, зная принципы визуализации на примере одной из них, легко научиться пользоваться остальными.

1. Построение исходной структуры для моделирования.

Для первичного освоения методов моделирования в данной работе рассматривается модель идеальной г.ц.к. решетки металлов. Для построения исходной структуры используется программа `in.fcc`, которая позволяет построить расчетную ячейку г.ц.к. решетки с заданным значением параметра. Файлы типа `.in` открываем программой Notepad++. Принцип построения исходной структуры решетки, как и любой другой системы, достаточно прост, - он заключается в заполнении расчетной ячейки атомами. При наличии дефектов это построение может представлять технически сложную задачу, которая для каждого случая решается по-своему. В случае идеальной решетки построение наиболее просто. В случае работы с пакетом МД LAMMPS в программе задается параметр решетки нужного металла, масса атомов, определяется объем, который нужно заполнить атомами металла и также задается тип решетки.

2. Выбор граничных условий для моделирования

Следующим подготовительным этапом моделирования является выбор граничных условий, которые определяют, будет ли моделирование проводиться при постоянном давлении или при постоянном объеме. Для того чтобы моделировать систему с постоянным объемом, границы расчетной ячейки фиксируют, то есть держат неподвижными в течение всего времени моделирования. Для моделирования системы при постоянном

давлении необходимо позволять границам двигаться.

При моделировании во всех или отдельных направлениях могут быть использованы непериодические граничные условия, то есть система может быть конечной и иметь открытые поверхности. В частности, может стоять задача моделирования тонкой пластинки материала, имеющего две параллельные плоские поверхности. В этом случае в направлении нормали к этим плоскостям должны быть «отключены» периодические граничные условия.

Открытая поверхность может быть создана и другим, более общим способом. Для этого в направлении, нормальном к поверхности, устанавливается значительно больший размер ячейки моделирования, чем размер моделируемой системы. Тогда между атомной системой в расчетной ячейке и ее периодическим образом образуется «щель» с шириной, превосходящей радиус действия потенциала, поэтому через нее взаимодействие отсутствует.

3. Выбор шага и времени моделирования

Для получения достоверных результатов моделирования важно правильно выбрать условия моделирования – шаг по времени и длительность моделирования. Первый параметр влияет на точность решения уравнений движения, второй важен для установления термодинамического равновесия в системе.

Точное решение уравнений движения важно, когда важно исследовать динамику колебаний решетки или кинетические явления. Когда нас интересует равновесное состояние системы (минимум энергии при нулевой температуре или соответствующего термодинамического потенциала при конечной), подбор временного шага не критичен. Важно, чтобы он составлял небольшую долю периода колебаний атомов. Обычно шаг по времени берется в интервале $\Delta t=1-5$ фс. В лабораторных работах данного практикума рекомендуется использовать $\Delta t=2$ фс. Время моделирования, или количество необходимых шагов, подбирается эмпирическим способом так, чтобы в течение этого времени достигалась требуемая точность определения минимума энергии или устанавливалось термодинамическое равновесие.

Вид программы с пояснениями:

```
----- Инициализация системы -----  
units metal # выбираем единицы измерения  
dimension 3 # выбираем размерность системы  
boundary p p p # выбираем граничные условия (ГУ), p (periodic) -  
периодические ГУ
```

```

atom_style atomic # выбираем тип атомов
----- Параметры материала -----
lattice fcc 3.52 # выбираем параметр решетки
region sample block 0 10 0 30 0 30 units box # выбираем размер кри-
сталла по x от 0 до 10, по y от 0 до 30, по z от 0 до 30
create_box 1 sample # создаем область для заполнения атомами
create_atoms 1 region sample # заполняем область атомами
mass 1 58.6934 # тип атомов 1, масса атомов типа 1 составляет 58.6934
- в данном примере это масса атомов никеля
----- Потенциал -----
pair_style eam # выбираем тип потенциала - метод погруженного
атома eam (embedded atom method)
pair_coeff * * Ni_u3.eam # прикрепляем файл с параметрами по-
тенциала. Файл для того, чтобы задать потенциал выбираем в папке
C:\Program Files - LAMMPS 64-bit 12Dec2018 - Potentials
----- Выбор термодинамического ансамбля -----
velocity all create 300.0 383123 loop all # задаем температуру 300 К
fix 1 all nvt temp 300.0 300.0 0.05 # задаем изменение температуры, в
данном примере температура не изменяется, а остается равно 300 К
thermo 1000 # задаем вывод на экран каждую 1000 шагов
thermo_style custom step temp etotal pe press vol # задаем параметры,
которые будут выводиться на экран
dump GA10K all custom 100 FCC.lammpstrj id type x y z # записываем
файл FCC.lammpstrj в котором содержатся номера атомов id, тип атомов
type, и три координаты x y z для дальнейшей визуализации
timestep 0.0002 # задаем шаг по времени
run 10 # задаем количество шагов в течение которых проводится
расчет
write_restart FCC.restart # задаем название файла, в который будут
сохраняться координаты атомов
write_data FCC.in # задаем название файла, в который будут сохра-
няться координаты атомов

```

Подробное описание каждой использованной команды представлено на сайте lammps.sandia.gov

----- Конец программы -----

Работа состоит из двух заданий, посвященных моделированию идеальной кристаллической решетки при $T=0$ К и при заданной конечной температуре.

Таблица 1: Варианты к упражнению 1 и 2.

Вариант	Материал	Потенциал	T_1, T_2 К
1	Ni	Ni_u3.eam	0, 300
2	Ni	Ni_smf7.eam	0, 300
3	Ni	Ni_smf7.eam	0, 350
4	Ni	Ni_u3.eam	0, 350
5	Ag	Ag_u3.eam	0, 300
6	Cu	Cu_smf7.eam	0, 300
7	Au	Au_u3.eam	0, 300
8	Pt	Pt_u3.eam	0, 300
9	Cu	Cu_u3.eam	0, 300
10	Cu	Cu_u6.eam	0, 300
11	Cu	Cu_smf7.eam	0, 350
12	Cu	Cu_u6.eam	0, 350
13	Al	Al_jnp.eam	0, 350
14	Pt	Pt_u3.eam	0, 350
15	Ag	Ag_u3.eam	0, 350
16	Au	Au_u3.eam	0, 350

Потенциал, описывающий взаимодействие в структуре будет выбран среди доступных в среде LAMMPS EAM-потенциалов, основанных на методе погруженного атома. Начиная с 80-х гг. XX в. развиваются подходы к моделированию структуры и свойств металлов и сплавов с использованием потенциалов, основанных на так называемом методе погруженного атома (EAM), в котором в отличие от парного потенциала учитываются не только взаимодействия между атомами, а еще и взаимодействия электронных облаков с атомами и, наоборот, атомов с облаками. Следует отметить, что такой подход к описанию энергии атомной системы оказался чрезвычайно удачным при моделировании внутренней структуры и физико-механических свойств металлов и полупроводников (в широком смысле – всех кристаллических твердых тел, а в некоторых случаях – и жидких и/или аморфных сред), что подтверждается огромным количеством исследований и публикаций по этому направлению.

Несмотря на то, что первые EAM-потенциалы удовлетворительно описывали целый ряд свойств различных материалов (что не удавалось сделать с помощью парных потенциалов межатомного взаимодействия), было обнаружено, что они достаточно хорошо описывают лишь свойства материалов с ГЦК-структурой. Упругие константы, полученные в ходе

расчетов с использованием потенциалов EAM для материалов с направленными связями (например, для кремния Si), плохо согласовывались с экспериментальными значениями, что связано с тем, что формулировка модели EAM предполагает сферическое усреднение плотности электронных облаков, вследствие чего теряется учет направленности связей.

Упражнение 1. Заходим в папку, содержащую файл `in.fcc`, находим нужные файлы - `imp_serial` (выбираем в папке C:Program Files - LAMMPS 64-bit 12Dec2018 - bin) и файл потенциала для вашего металла. Далее вызываем командную строку, прописываем путь к нужной папке и запускаем LAMMPS: `imp_serial -in in.fcc`.

Получившуюся в результате структуру строим с помощью программы VMD. Фон изменяем на белый. Проекцию меняем на `Orphographic`. Атомы рисуем командой `Graphics-Representation` и тип выбираем `CPK`. Изображение в трех проекциях на плоскости xy , yz , xz и текст программы представляем в отчете.

Упражнение 2. Проведем релаксацию полученной структуры при $T=0$ K с помощью следующих команд в файле `in.relax`:

```
units metal
dimension 3
atom_style atomic
boundary p p p
read_data FCC.in # программа позволяет считывать файл с данными,
# который вы получили ранее
mass 1 58.6934
pair_style eam
pair_coeff * * Ni_u3.eam
velocity all create 0.001 383123 loop all # задаем температуру, близкую
к 0 K
fix 1 all nvt temp 0.001 0.001 1.0 #задаем изменение температуры (в
данном случае температура остается постоянной 0.001 K)
thermo 100
thermo_style custom step temp etotal pe ke press
timestep 0.0002
fix 3 all box/relax aniso 0.0 # команда задает изменение размера ячеек
в процессе релаксации
minimize 1e-24 1e-26 20000 200000 # команда минимизации энергии
dump GA10K all custom 1 FCC_relax_0K.lammpstrj id type x y z
write_data FCC_relax_0K.in
----- Конец программы -----
```

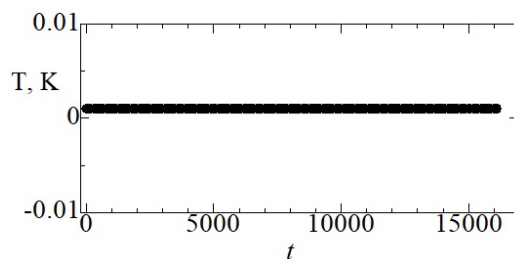


Рис. 1: Зависимость температуры от времени.

Выполнение: 1. Запустить программу на счет, используя созданную вами структуру

2. Посмотрите с помощью VMD процесс релаксации. Представьте в отчете изображение структуры в начальный и конечный моменты. Рисование осуществляйте с помощью [Graphics-Representation](#) и тип выбираем [Points](#).

3. С помощью [Graphics-Representation](#) на вкладке [Periodic](#) постройте периодическое изображение ячейки во всех трех направлениях. Продемонстрируйте результат в отчете. С помощью VMD определите начальный и конечный равновесный параметр решетки.

4. Откройте файл [log.lammps](#) и скопируйте оттуда данные

```
Step Temp TotEng PotEng KinEng Press
0 0.001 -856.97102 -856.97115 0.0001255116 1267283.6
100 0.001 -1025.9731 -1025.9732 0.0001255116 1158843.4
200 0.001 -1182.6736 -1182.6738 0.0001255116 1058005.3
...
```

Создайте текстовый файл и сохраните данные в него. Первый столбец это шаг по времени, второй - температура, третий - полная энергия системы, четвертый - потенциальная энергия, пятый - кинетическая энергия. Постройте графики зависимости температуры и трех энергий от времени, как показано в примере на рис. 1 и рис. 2. Проследите по графикам сохраняется ли в системе температура и как меняется энергия.

Из графика зависимости потенциальной энергии от времени можно увидеть, что она через некоторое число шагов, которое и дает время релаксации, начинает флуктуировать около некоторого среднего значения. Установив таким образом требуемое число шагов, им можно пользоваться в дальнейшем для систем данного типа с близким числом атомов.

Чтобы узнать в каких единицах измеряется энергия, найдите помощь по команде [units metal](#) на сайте LAMMPS. Представьте в отчете данные по различным переменным и их единицам измерения по ключевому слову `metal`.

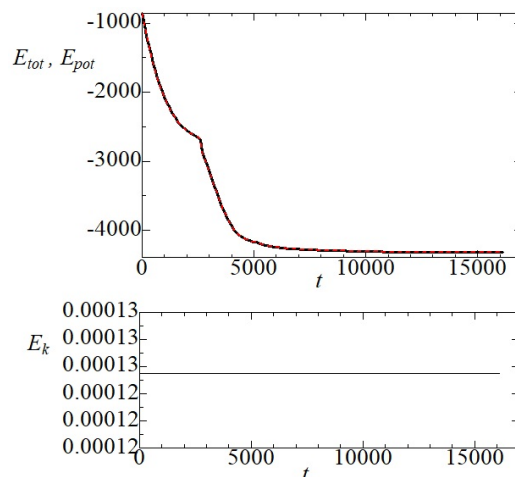


Рис. 2: Зависимость полной и потенциальной энергии от времени. Зависимость кинетической энергии от времени.

Запишите краткий вывод по полученных графикам.

Упражнение 3. Проведем релаксацию полученной структуры при $T=300$ К.

Повторите все действия из Упражнения 2, изменив температуру на 300 К. Постройте начальную и итоговую структуру в VMD и сравните с результатом, полученным при 0 К. Постройте графики зависимости температуры от времени и потенциальной энергии от времени. Графики и их описание предоставить в отчете.

Контрольные вопросы

1. В чем заключаются периодические граничные условия?
2. Что такое релаксация структуры и для чего она проводится?
3. Что показывает график зависимости потенциальной энергии от времени в процессе релаксаций?
4. Описать основные команды программы LAMMPS.
5. Для чего нужны программы визуализации?
6. Что определяет выбор величины шага по времени?
7. Почему нельзя выбрать температуру равную точно 0 К?
8. Как происходит построение исходной структуры?
9. Что такое EAM потенциал?