

ソフトウェアSOVAを用いた 構造秩序解析

志賀元紀^{1,2}、森田秀利¹、小野寺陽平³ NMS/

¹東北大学,²理研AIP,³NIMS

2024年4月28日9:00~12:00 超秩序構造科学・第4回若手の学校

若手の学校での担当コンテンツ

 ・<u>材料構造モデルを用いた構造秩序解析</u> (志賀)

基本的な内容の講義(基礎知識などの習得)

- ・<u>ソフトウェアSOVAを用いた構造秩序解析</u> (志賀、森田、小野寺)
 - ソフトウェアを用いた演習・データ解析



<u>チュートリアルHP</u> https://www.shiga-lab.org/sova_tutorial202404



- •昨日の講義内容を振り返る。
- •構造モデルの解析する。
- 一見類似する構造秩序の違いを理解する。

分からないことがあれば、都度、挙手してください。

構造解析ソフトウェア Structural Order Visualization and Analysis (SOVA)



<u>可視化</u> 原子,化学結合,四面体 リング,空隙

構造秩序解析
 化学結合,構造因子,PDF
 リング,四面体,空隙,
 多面体の共有形態
 (頂点・稜・面の共有)

https://www.shiga-lab.org/sova



- 開発中のため、計算バグなどを含む可能性がありますので、 使用者の責任でご使用してください。
 (多くのフリーAppも同様の可能性あり)
- シミュレーションボックス形状が、立方体のみをサポートしています。(それ以外では計算に誤りを含む場合があります。)
- 計算・表示を繰り返すと、最新の結果に表示が反映されない場合があります。結果を注意深く観察しながら、取り組んでください。



| | SOVA | ③メニュー (解析・設定) |
|----------------|------|--|
| | | |
| | Ø | file view statistics pdf angle ring cavity file |
| (1)メインビュー | | Open Delete Show |
| | | Select all frames Select every nth frame |
| | | |
| | | |
| | | ④設定の入力 |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | Θ | image/video |
| | | Save screenshot for the current frame |
| | | Save screenshot for all selected frames |
| t ^r | | Save video for all selected frames |
| z_x | o | logging |
| ②ビューの選択メニュー | | ⑤ログ コンソール |
| 3D View | | |
| Welcome SOVA | | |



| | file view | statistics | pdf | angle | ring | cavity |
|---|------------------|------------|--------|-------|----------|-----------|
| Ø | | | file | | | |
| | Open | | Delete | | | Show |
| | Select all frame | s | | Sele | ect ever | nth frame |

- file :構造ファイルの読み込み
- view :表示のオン・オフ
- statistics : 統計量(原子、空隙)
- pdf :二体分布関数(pdf)、構造因子
- angle :結合角
- ring : リング計算
- cavity : 空隙解析

構造ファイルのフォーマット

基本的には、周期境界を含む構造データを対象にしている。

CIF (Crystallographic Information File) (*.cif)
 結晶構造記述の標準フォーマット
 (フォーマットは複雑なので説明省略)

以下は、次ページ以降にて説明

- RMC (Reverse Monte Calro) format (*.cfg)
- XYZ format (*.xyz)
- Extend XYZ format (*.exyz)

RMC出力のcfgファイル

(Version 3 format configuration file) !file created by SimpleCfg::save ! Amorphous Si 108368 95147 82 0 moves generated, tried, accepted configurations saved 0 6256 molecules of all types 1 types of molecules 原子数等の情報 1 is the largest number of atoms in a molecule (元素の種類の記載なし) 0 Euler angles are provided F (box is cubic) Defining vectors are: シミュレーションボックスの形状 25.014837 0.000000 0.000000 (左の値を2倍した値が実際のサイズ) 0.000000 25.014837 0.000000 0.000000 0.000000 25.014837 6256 molecules of type 1 各元素の数 1 atomic sites 0.000000 0.000000 0.000000 相対座標 -0.916030926008991 -0.990802750512793 -0.904329661680858 範囲[-1,+1]の値になる -0.852850474338590 -0.959047534271694 -0.963629176127805

xyz (exyz) ファイル

1行目: 原子数

2行目: セル形状 サイズ

3行目以降: 元素シンボル、3次元座標(オングストローム)

例:a_Si_speed1e11K.xyz

| 3 |
|----|
| 61 |
| 65 |
| 16 |
| 70 |
| 37 |
| |



| file | view | statistics | pdf | angle | ring | cavity |
|------|------|------------|--------|-------|------|--------|
| | | | file | | | |
| Open | | | Delete | | | Show |

| ▲ Applications Name Date Modified Size M □ Desktop Image: size size size size size size size size | | Q Search | tal 📀 | <>> | Recents |
|---|-----------|----------|--------------------|-----------------------------|--------------|
| □ Desktop | Kind | Size | Date Modified | Name | Applications |
| Documents Downloads Downloads Sio2_beta_cristobalite222.cif 2024年4月19日 6:37 11 KB (0) Sio2_beta_cristobalite333.cif 2024年4月19日 6:37 11 KB (0) Sio2_beta_cristobalite333.cif 2024年4月19日 6:37 11 KB (0) Sio2_beta_cristobalite333.cif 2024年4月19日 6:37 12 KB (0) Cloud I Cloud Drive Shared Socations Wex Folder Hide Out YZ Files (*.cif) XYZ Files (*.xyz) | Crystalti | 4 KB | 2024年4月19日 6:37 | 😺 si222.cif | Desktop |
| Downloads Sio2_beta_cristobalite222.cif 2024年4月19日 6:37 11 KB C Sio2_beta_cristobalite333.cif 2024年4月19日 6:37 36 KB C Cloud Cloud Drive Shared Coactions Dropbox ags tedia Music New Folder Hide Opt YYZ Files (*.xyz) Cancel | Crystalti | 12 KB | 2024年4月19日 6:37 | 🔹 si333.cif | Documents |
| Downloads sio2_beta_cristobalite333.cif 2024年4月19日 6:37 36 KB C cloud iCloud Drive Shared poster Dropbox ags edia Music New Folder Hide Opt XYZ Files (*.cif) XYZ Files (*.xyz) Cancel | Crystalti | 11 KB | 2024年4月19日 6:37 | 😺 sio2_beta_cristobalite22: | |
| cloud i Cloud Drive S Shared Cancel Music New Folder Hide Opt XYZ Files (*.cfg) CIF Files (*.cfg) CIF Files (*.cff) XYZ Files (*.xyz) Cancel | Crystalti | 36 KB | 2024年4月19日 6:37 | 🕴 sio2_beta_cristobalite33 | Downloads |
| i Cloud Drive Shared Cancel Music New Folder Hide Opt XYZ Files (*.xyz) Cancel | | | | | loud |
| Shared bocations Dropbox ags ledia Music New Folder Hide Opt XYZ Files (*.cfg) CIF Files (*.cff) XYZ Files (*.xyz) Cancel | | | | | Cloud Drive |
| edia Music New Folder Hide Opt XYZ Files (*.cfg) CIF Files (*.cif) XYZ Files (*.xyz) Cancel | | | | | 🖞 Shared |
| Bropbox edia Music New Folder Hide Opt XYZ Files (*.crg) ClF Files (*.crf) XYZ Files (*.xyz) Cancel | | | | | ocations |
| edia Music New Folder Hide Opt XYZ Files (*.crfg) CIF Files (*.crff) XYZ Files (*.xyz) Cancel | | | | | Dropbox |
| ledia ✓ RMC Files (*.cfg) Music New Folder Hide Opt XYZ Files (*.xyz) Cancel C | | | | | ags |
| Music CIF Files (*.cif) XYZ Files (*.xyz) Cancel | | | (*.cfg) | | ledia |
| New Folder Hide Opt XYZ Files (*.xyz) Cancel | | | .cif) | | 1 Music |
| | Open | Cancel | *.xyz) | New Folder Hide Opt | |
| Photos extended XYZ Files (*.exyz) | open | Cancer | (YZ Files (*.exyz) | | Photos |
| All Files (**) | | |) | | |

右上の「file」タブの「open」ボタンを 押す。

- フォルダやファイルを選択する。
 (拡張子の選択が必要)
- 3. ここでは、配布したフォルダ「data」 の中の「crystal」→「si.cif」を開こう。

3Dビュー画面

各タブから色などを選択できる



| | at | oms bonds | polyhe | dra cell ri | ing cavity |) |
|-----------|---------|-----------|---------|---------------|------------|---------|
| select at | oms and | bonds | | | | |
| elem. 1: | Si | | | elem. 2: Si | | |
| Min: | 0.0 | | | Max: 2.220 | 0 | |
| ele | m 1 | elem 2 | min. | 2 max. | 3 bond | |
| 1 5 | Si | Si | 0.0 | 2.220 | | |
| | | | | | | |
| | | D . | | | | |
| | | apply | | | default | |
| styling | (2 | apply | | | default | |

- 1. 「bonds」タブの選択
- 2. 結合距離の最大値を2.220から 2.8に変更
- 3. 「bond」にチェック
- 4. 「apply」ボタンを押す





| ato | oms bonds | polyhedra | cell ring | cavity |
|---------------------|--------------|-----------|-----------|----------|
| select center and a | around atoms | | | |
| center: Si | | ᅌ aro | und: Si | 0 |
| 1 | 2 | | | |
| | | | | |
| | | | | ` |
| (3) | | | (4 |) |
| add | | delete | | apply |
| styling | | | | |
| Opacity : | | | | 0.50 |
| Color : | | | | Select |
| Tetrahedral order | | | | |
| No : | O | | | Show |
| | | | | |

<u>注意:事前に化学結合の設定が必要</u>

- 1. 「polyhedra」タブの選択
- 2. 「center」と「around」の設定
- 3. 「add」ボタンを押す
- 4. 「apply」ボタンを押す



| | atoms | bonds | ро | lyhedra | cell | ring | g ca | vity |
|---------------|-------------|-------------|------|---------|----------|------|-------|---------|
| | | uni | t | atom | operatio | n | | |
| Symmetry in | nformation | | | | | | | |
| Crystal sys | tem : | C | ubic | | | | | |
| Space grou | ıp number | : 2 | 27 | | | | | |
| Hall symbo | 1: | F | 4d 2 | 23-1d | | | | |
| Hermann-N | /lauguin sy | ymbol : 🛛 | d-3n | n | | | | |
| Lattice para | meters (an | gstrom, deg | rees |) | | | | |
| a: 5. | 43070 | b : | | 5.43070 | | c : | | 5.43070 |
| alpha : 90 | 0.00 | be | ta : | 90.00 | | gai | mma : | 90.00 |
| Bravais latti | ce vectors | | | | | | | |
| A: 1.000 | 0 | | 0.0 | 000 | | | 0.000 | D |
| B: 0.000 | 0 | | 1.0 | 000 | | | 0.000 | 0 |
| C · 0.000 | 0 | | 0.0 | 000 | 1,000 | | |) |



単位胞の拡張表示(スーパーセル) 1.「cell」タブの選択 <u>
bonds polyhedra celling cavity</u> <u>
unit atom operation</u> <u>
cubic</u> bor: <u>
27</u> 4. 「apply」ボタンを押す

注意:

一部の多面体しか可視化されない(要再設定) スーパーセルの設定は計算に反映されない。



cifファイルからSupercellデータの生成

pythonのaseパッケージを使用してできる。 https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/

関連パッケージのインポート

[1]: from ase.io import read, write

cifファイルの読み込み

[2]: struct = read('../data_struct/cif/si.cif')

2x2x2のスーパーセルの作成と保存

[3]: write('../data_struct/cif_supercell/si222.cif',struct*(2,2,2))

3x3x3のスーパーセルの作成と保存

[4]: write('../data_struct/cif_supercell/si333.cif',struct*(3,3,3))

スーパーセルのデータ

si222.cif



化学結合、多面体の表示





「sio2_beta_cristobalite222.cif」を開いて、 自由に可視化をしてみてください。



構造秩序の解析

注意:

構造解析を実行すると、ファイル「構造ファイル名.hdf5」に保存される。

| F | | - | U | 77 | J | 1 | | |
|---|-------|------|------|------------|-------|-------|------|--------|
| 3 | | | | | | | | |
| _ | file | edit | view | statistics | pdf | angle | ring | cavity |
| Ð | angle | | | | | | | |
| | | | | | | | | |
| | | | | Show C | Graph | | | |

- 1. 「crystal」→「si22.cif」を開く
 2. 化学結合長を2.8Åに設定
- 3. 「angle」タブの「Show Graph」 ボタンを押す。
- 4. 結合角を測る原子を選択
- 5. 左下の「Calculate」ボタンを押し た後に、「Plot」ボタンを押す。
 (再設定後も、この手順が必要)
- 設定の変更、データ出力などを 試してください。





|) • sova) 📸 [🐟 🐟 💽 [💯 - | |
|-------------------------------|--|
| | file edit view statistics pdf angle ring cavity edit |
| | select center and around atoms |
| | center: Si 💿 around: Si 😳 |
| | 1 2 |
| | 1 Si Si |
| | add delete apply |
| | styling |
| | Color: |
| | Tetrahedral order No : 1 C Show |
| | C image/video |
| | Save screenshot for the current frame |
| | Save screenshot for all selected frames |
| | Save video for all selected frames |
| | Contraction of the second seco |
| X V | INFO (04/23/24, 08:28): Number of tetrahedral : 64 |
| | INFO (04/23/24, 08:28): Si - Si number of polyhedra : 27 |
| | INFO (04/23/24, 08:28): Number of tetrahedral : 64 |
| iew | |
| if, frame 1, resolution 64 | |

<u>注意:事前に化学結合の設定が必要</u>

- 1. 「polyhedra」タブの選択
- 2. 「center」と「around」の設定
- 3. 「add」ボタンを押す
- 4. 「apply」ボタンを押す
- 5. 「Tetrahedral order」で 「Show」ボタンを押す

| Tetrahed | Iral order | | |
|----------|------------|----------|------|
| No : | 1 | O | Show |

6. 多面体の歪み指標の分布が表示される。

<u>現在、実行バグの問題で、この機能を表示できない</u>



file

ring calculation O Guttman

0

| view statistics | pdf angle ring | cavity | file edit | view statistics pdf angle ring cavity |
|----------------------|-------------------|--------|---|--|
| ri | ng | , | Ð | ring |
| | | | Rings Ring 1 Ring 2 Ring 3 Ring 4 Ring 5 Ring 6 Ring 7 Ring 8 Ring 9 Ring 10 Ring 11 Ring 12 Ring 13 | Summary of all rings number of rings: 432 |
| | | | Ring 14 Ping 15 | |
| g Primitive Calcu | cut off : late | 24 | Ring 16 Ring 16 Ring 17 Ring 18 Ring 19 | |
| | | | | |
| | | | ring calculation types | |
| | | | ring calculation types Guttman King | Primitive cut off : 24 |



si333.cif, frame 1, resolution 64

リングサイズの分布

| Pair Distribution Functions |
|-----------------------------|
| Cavity Histograms |
| Ring Histograms |
| Angle Histograms |

左下のメニューで
 「Ring Histogram」を選択
 「Plot」ボタンを押す





リング形状(丸さ、厚み)の分布



- 「Ring number」以外に、 1. 「Roundness」(丸さ)や 「Roughness」を選択できる。
- 2. 数の表示をオフにできる。





| | | file | edit | view | statistics | рс | lf | angle | ring | g | cavity | | |
|----------------|---|--------|---------|-----------|------------|------------|--------|------------|------|------|-----------|---|--|
| 8 | a | | | | | | cavity | | | | | | |
| resolution: 64 | | | | | | 0 | Fixe | ed Radius | : 2. | 8 | | | |
| | dataset | surfac | ce cent | ter frame | S | \bigcirc | Cu | stom: | | | | | |
| | si333.cif | х | х | 1 | | | Сс | valent Rad | lius | Cuto | ff Radius | 6 | |
| | | | | | | Si | 1.1 | 1 | | | | | |
| | calculate surface based cavities calculate center based cavities calculate gyration tensor parameters evenwrite evicting results | | | | | | Sav | ve as Pres | et | | | | |
| | | | | | Calc | ulate | | | | | | | |
| | | | | | Culo | anato | | | | | | | |

- 空隙パラメータを設定する
 「Calculate」を押す
- 例:Fixed Radius = 2.2 resolution = 128





1. 左下のメニューで「Cavity Histograms」を選択 2. 表示したい変数を選択して、「Plot」ボタンを押す

| | si333.cif, frame 1, resolution 64, 56.7% cavities (surface-based), 48.0% cavities (center-based), 0.2% cavities (domains) | | | | | | | | | | |
|------|---|---|---------------------------------------|--|--|----------------------------------|------------|----------------|--------|-----|--|
| | ✓ Surface-based Cavities | ᅌ ㅇ Cavity Volume 🤇 | 🔵 Surface Area 🗸 Wei | ghted Histogram | Numbe | r of Bins: 20 | | | | | |
| | Center-based Cavities Cavity Domains | | Save I | mage | | Export Data | | | | | |
| | Cavity Histograms | | | | | | \bigcirc | | | | |
| 2500 | - | Su | rface-based Cavities 200 | 0 | | Center-based Cavities | 2.5 - | Cavity Domains | | | |
| 2000 | - | | 175 | 0 - | | | 2.0 - | | | | |
| 1500 | | | 125 25 | 0 - | | | - 1.5 - | | | | |
| 1000 | | | <u>별</u> 100 75 | 0 - | | | <u>1.0</u> | | | | |
| 500 | - | | 50 | 0 - | | | 0.5 - | | | | |
| 0 | 2450.8 2450.9 2451.0 2451.1 2451.1 | 24 ⁵⁷⁻³ 24 ⁵⁷⁻⁸ 24 ⁵⁷⁻⁵ 24 ⁵⁷⁻⁵ | 2451. ¹ 2452. ⁸ | 20 ^{13.1} 20 ^{13.9} 20 ^{13.9} 1 | o ^{th,0} 20 ^{th,2} 20 ^{th,2} 75 Volume | 14.3 2014.4 2014.5 2014.6 2014.1 | 0.0 | 00 | Volume | 0,7 | |

計算した変数に関しては、ソフトウェア<u>pyMolDynのHP</u>を参照してください。



「sio2_beta_cristobalite333.cif」を開いて、 様々な特徴量を解析してみてください。



アモルファスの構造解析

残りの時間で、以下のアモルファス構造を解析・比較してください。

冷却速度の異なるアモルファスの構造モデル

- 1. アモルファスSi
- 2. $\mathcal{P} \in \mathcal{P} \subset \mathcal{P}$

冷却速度は、10¹¹ K/s、 10¹² K/s、 10¹³ K/s、 10¹⁴ K/s 参考のため、液体の構造モデル(接頭辞Iも提供)

RMCでフィッティングした構造モデル

- 1. アモルファスSi
- 2. 液体Hg (水銀)

構造因子の比較(a-Si)



構造因子の比較(a-SiO₂)











| | file edit | view | statistics | pdf | angle | ring | cavity |
|------------|-------------|------|------------|---------|----------|------|--------|
| Ð | | | ţ | odf | | | |
| calcula | te settings | | | | | | |
| 🗸 pa | artial g(r) | | | 🗸 parti | al S(Q) | | |
| V N | eutron S(Q) | | | 🗸 Neut | ron g(r) | | |
| V 🔽 | -ray S(Q) | | | | | | |
| 🗹 G | (r) | | | 🗸 T(r) | | | |
| V N | (r) | | | | | | |
| dr: | 0.05 | | | dq: | 0.05 | | |
| Q min: | 0.3 | | | Q max: | 25.0 | | |
| | | | Show | Graph | | | |

1. 構造データを読み込む 2. 「pdf」タブをクリック

3. 「Show Graph」ボタンを押す

構造因子などの計算(つづき)



左上のメニューから 表示する関数を選択できる

関数に関しては、 <u>次のHP文書</u>などが役に立つ

| √ Partial g(r) | 0 |
|----------------|---|
| Partial S(Q) | |
| Neutron S(Q) | |
| Neutron g(r) | |
| X-ray S(Q) | |
| G(r) | |
| T(r) | |
| N(r) | |

計算結果の比較



1. 複数の構造モデルを解析する。

- メニューの「Tools」→「Diff. graph」
 を選択する。
- 比較したい構造、解析結果を選択して 「Apply」ボタンを押す



残りの時間の演習

冷却速度の異なるデータを比較してみる

- ・構造因子、2体分布関数など
- ・結合角の分布
- •リングの特徴の分布
- 空隙の分布

解析結果の一部を出力し、エクセルデータにまとめる。

もちろん、持参した構造データを解析いただいてもOKです!