

Cvičení – zonální tavba NaCl

1/20
pch04



Evropský sociální fond „Praha & EU: Investujeme do vaší budoucnosti“

Inovace předmětu Počítačová chemie je podporována projektem CHEMnote (Inovace bakalářského studijního programu Chemie – moderní vzdělávání podpořené použitím notebooků – CZ.2.17/3.1.00/33248) v rámci Operačního programu PRAHA – ADAPTABILITA.

Bod tání modelu NaCl

2/20
pch04

Úkol:

Stanovte bod tání modelu NaCl metodou zonální tavby (*slab geometry*)

Model:

Lennard Jones + náboje¹

Postup:

- připravte nanokrystalek $2 \times 2 \times 2$ (Na_4Cl_4)
- replikujte tento motiv $3 \times 3 \times 3$ krát a simulujte krystal v periodických okrajových podmínkách
- stanovte hustotu a radiální distribuční funkci krystalu
- roztavte a stanovte hustotu a radiální distribuční funkci taveniny
- replikujte krystal $1 \times 1 \times 3$ krát a roztavte polovinu boxu
- simulujte za dané teploty a sledujte, zda krystal narůstá či se taví

¹In Suk Jung and Thomas E. Cheatham, III; *J. Phys. Chem. B* **112**, 9020–9041 (2008)

Připojení na vzdálený počítač – MobaXTerm

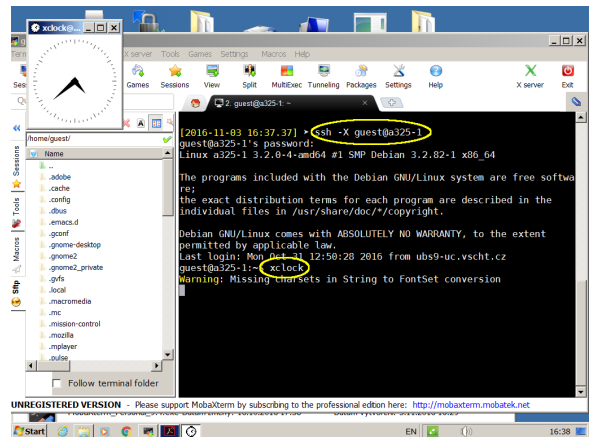
3/20
pch04

Mobaxterm v sobě zahrnuje terminál i X-server. Najděte:

- S:\Kolař\MobaXterm.Personal.12.3.zip
(= //pyr.vscht.cz/scratch/Kolař/MobaXterm.Personal.12.3.zip)
nebo najděte na webu a stáhněte "MobaXterm Home Edition – Portable"
- Rozbalte, spusťte, potvrďte vše a ignorujte různé paranoidní hlášky
- Klikněte na **+ Start local terminal**
- V okně terminálu spusťte vybranou relaci, např.:
[2019-11-11 11:11.11] ssh -X guest@403-as67-03.vscht.cz
Heslo je tajné – řeknu na místě. Během psaní hesla se nic nezobrazuje!
Máte-li vlastní účet na klastru, můžete ho použít (ale vaše výsledky, jako křivky tuhnutí/tavení, nebudou snadno dostupné ostatním).
- Alternativně (resp. v některých verzích MobaXtermu) se jméno počítače (403-as67-03.vscht.cz) a uživatele (guest) napíše do dialogu
- Vzdálený přístup (VPN) z místa mimo školu byl zakázán a je možný pouze na výjimku. Pokud budete počítat úlohu na klastru, nutno požádat o povolení.
- Pokud by MobaXterm nefungoval, viz „Alternativa: PuTTY + Xming“

Připojení na vzdálený počítač – MobaXTerm

4/20
pch04

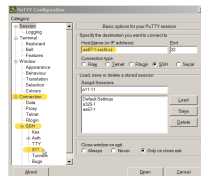


Alternativa: PuTTY + Xming

+ 5/20
pch04

Terminál s příkazovým řádkem (PuTTY)

- Windows Start → hledat → putty a program spusťte.
- Host name → počítač
- Connection → SSH [→ Tunneling] → X11
→ Enable X11 forwarding
- zpět Session → Open
- Login as: guest **máte-li, použijte vlastní účet**
- Password: (sdělím)



X server pro zobrazení grafiky (Xming)

- Windows Start → hledat → xming a spusťte
- Všechny dotazy potvrdit. Ve stavovém řádku se musí objevit ikona

Test připojení

6/20
pch04

Základním způsobem práce pod Unixem/Linuxem je **příkazový řádek**, což je vstup interpretu příkazů (**shellu**): napíšete příkaz a stisknete **Enter**.

- Začátek řádku (např. `guest@403-as67-03:~$`) se nazývá **prompt**.
- Celé okno s promptem a výstupem se nazývá **terminál**.
- Pokud chcete předchozí příkaz opravit a spustit znovu, použijte kurzorovou šipku nahoru a opravte.

Jako test, že připojení je v pořádku, zkuste:

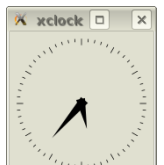
```
guest@403-as67-03:~$ xclock
```

Zobrazí se hodiny. Hodiny zrušte buď myší , nebo stiskem **Ctrl-C** v okně terminálu.

nebo
xeyes

Nevidíte hodiny???

- Nejsou ikonizované? Hledejte dole na liště.
- Restartujte mobaxterm
- Restartujte Windows...
- Zkuste PuTTY + Xming



(Start: pro ty, kdo mají vlastní účet na klastru)

7/20
pch04

- Založte si složku a rozbalte data:

```
mkdir vase_slozka
cd vase_slozka
unzip /home/guest/A.zip
```

- Pak musíte nastavit prostředí:
Pokud používáte bash: `source env.sh`
Pokud používáte tcsh: `source env.csh`
Pokud nevíte, jaký shell máte: `ps x`

Midnight Commander

8/20
pch04

Je nadstavba shellu podobná aplikaci Total Commander (Windows Commander) vhodná pro uživatele zvyklé na Windows.

- nastartujte Midnight Commander příkazem
`guest@403-as67-03:~$ mc`
- Z důvodu ostatních uživatelů může být obrazovka v nestandardní pozici. Pak pomocí **Tab** přejděte na panel, který má nahoře vlnovku (~)². Základní ovládání:

zobrazit výpisy na obrazovku/commander (přepínač)	Ctrl-o
spravit rozbitou obrazovku (po výstupu)	Ctrl-l
prohlížení souboru (může být předefinováno)	F3
editace textového souboru	F4
nový textový soubor + editace	Shift-F4
menu	F9
start asociované aplikace, změna složky	Enter, doubleclick
ukončit Midnight Commander	F10

- Simulační soubory jsou asociovány s aplikacemi (viz přílohy na konci)

²Vlnovka značí domovskou složku uživatele, zde ~ = /home/guest.

Start: guest

9/20
pch04

Skript je sada příkazů v interpretovaném programovacím jazyce.

Simulační cvičení je připraveno ve formě skriptů v jazyce **bash** (stejný, jaký interpretuje příkazy vašeho shellu). Konvenční koncovka bash-skriptu je **.sh**, často je označen hvězdičkou *****, což značí spustitelnost. Skripty budete postupně spouštět, např. z prostředí Midnight Commanderu.

● **Nastavení prostředí uživatele:** Spust'te skript **A.sh**.

Protože jste všichni jeden uživatel guest, musíte pracovat každý ve **vlastní složce**. Skript se vás proto zeptá na jméno složky, kterou založí a do které zkopíruje potřebné soubory. V této složce budete dále pracovat.

● Po skončení skriptu **A.sh** najdete svou složku a přejděte do ní. Objeví se sada skriptů:

A01-Na4Cl4.sh

A02-repl.sh

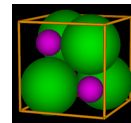
:

A01-Na4Cl4.sh (nanokrystalek)

10/20
pch04

● **Úkol:** Hustota modelu NaCl je 2.1 g cm^{-3} , $M(\text{NaCl}) = 58.4 \text{ g mol}^{-1}$. Vypočtete velikost hrany L krychličky obsahující Na_4Cl_4 , převed'te na Å.

● Spust'te skript **A01-Na4Cl4.sh** a vložte vypočtené číslo do programu. Prohlédněte si vytvořený krystalek.



Návod pro show:

● Kontextový návod: stiskni **tláčítko** pravým tlačítkem myši

● kliknutí označuje molekuly (nebudete potřebovat)

● tažení rotuje a pohybuje konfigurací:

– levé tlačítko: rotace okolo x, y

– prostřední tlačítko: přesun

– pravé tlačítko: rotace okolo z

● kolečko myši = zoom

Start trajektorie (až budete nějakou mít): **||>**

Pokud se budete nudit: **NFF** nebo **ZBUF** + **one frame + render**

A02-repl.sh (příprava krystalku $\text{Na}_{108}\text{Cl}_{108}$)

11/20
pch04

V dalším kroku pomnožíme krystalek $3 \times$ v každém směru a necháme chvíli simulovat za teploty 300 K a tlaku 1 atm.

Zařídí to skript **A02-repl.sh**.

K tomu je potřeba jednak definice silového pole (připraví se sama), jednak definiční soubor simulace. Pro zvýšení uměleckého dojmu si ho můžete prohlédnout na následující stránce.

cryst300.def – definiční soubor první simulace

12/20
pch04

```
n=108 ! pomocna promenna
N[0]=n N[1]=n ! pocet Na+ a Cl-
rho=2050 ! referencni hustota [kg/m3]
cutoff=8.607 ! elst cutoff (pro Ewaldovu sumaci) [AA]
LJcutoff=cutoff ! Lennard-Jones cutoff [AA]
rdf.grid=20 ! mereni struktury (rad. distr. f.) [1/AA]
el.epsk=2 el.epsr=0.4 ! presnost vypoctu elst. sil [K/AA]
el.diff=0.3 ! omezi urcita varovani o presnosti
noint=30 h=0.1/noint ! pocet kroku/cyklu a delka kroku [ps]
no=100 ! pocet cyklu
dt.plb=1 ! jak casto se bude zapisovat "playback" [ps]
thermostat="Andersen" ! nahodne stouchance (Maxwell-Boltzmann)
T=300 ! teplota [K] (bude zmeneno)
tau.T=1 ! casova konstanta termostatu [ps]
P=101325 ! tlak [Pa]
bulkm modulus=2e13/(T+300) ! odhad modulu pruznosti (pro barostat)
tau.P=2 ! konstanta barostatu [ps]
init="start" ! start z predch. konfig.; nove mereni a zaznam
! TOHLE BUDE SMAZANO PO PRVNIM KROKU:
load.n[0]=3 ! pomnoziti 3x ve smeru x
load.n[1]=3 ! pomnoziti 3x ve smeru y
load.n[2]=3 ! pomnoziti 3x ve smeru z
;
```

A03-cr-ini.sh (počáteční relaxace)

13/20
pch04

Skript se vás zeptá na teplotu, kterou dostanete od vyučujícího. Vhodný interval teplot je 1200–1400 K. Stejná teplota pak bude použita i v kroku A09.

Na grafech veličin v závislosti na čase vidíme, zda máme systém zrelaxovaný do rovnováhy.

Zobrazeny jsou závislosti teploty, potenciální energie a hustoty na čase.

Všechny grafy zrušíte nejrychleji pomocí **kill all**

Pokud grafy stále vykazují trend, nutno tento krok opakovat.

Na dotaz

„Opakovat michani s **init**="append"(A/n)?" odpovídáme buď **a** **Enter** nebo **A** **Enter** nebo **n** **Enter** nebo **N** **Enter**.

Jak je zvykem ve světě unixu, velké A znamená default, tedy jen **Enter** znamená také ano.

Nejpomaleji konverguje hustota; pokud se mění jen o $\pm 10 \text{ kg m}^{-3}$, je to OK.

A04-cr-sim.sh simulace v rovnováze

14/20
pch04

Spustíme simulaci s vytvořeným krystalem ještě jednou a budeme měřit.

Protože simulace bude delší, bude spuštěna nikoliv na serveru, ale dávkově na některém z klientů klastru (neplatí pro a325-1).

A05-cr-view.sh prohlížení výsledků

● 1=show (video trajektorie)

● 2=konvergenční profily (veličiny v závislosti na čase)

● 3=radiální distribuční funkce (kliknutím do grafu pravou myší si zobrazíte význam barev)

● 4=kumulativní distribuční funkce (running coordination number) = počet sousedů daného iontu do dané vzdálenosti (kliknutím do grafu pravou myší si zobrazíte význam barev)

A06-melt-ini.sh tavení krystalu

15/20
pch04

Teplota je nastavena na 1900 K.

Opět sledujte, zda je systém v rovnováze.

A07-melt-sim.sh simulace taveniny

Simulace zrelaxované taveniny bude provedena dávkově na klastru.

A08-melt-view.sh prohlížení výsledků

Podobné jako v případě krystalu.

(Body A06–A08 můžete přeskočit a pokračovat bodem A09.)

A09-zone-ini.sh Příprava zonální tavby

16/20
pch04

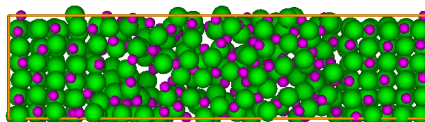
● Krystal připravený v bodech A03 až A05 bude zreplikován třikrát ve směru osy z . Výsledný krystal bude ještě trochu protažen ve směru z .

● Bude zapnut speciální typ termostatu, který bude prostředek krystalu zahřívát a „konce“ (jsou periodicky spojeny) chladit. Tím dostaneme vrstvu ve směru osy z krystalu a vrstvu taveniny (tzv. „slab geometry“).

● Velikost boxu ve směrech x a y je konstantní a dána průměrnou hodnotou ze simulace krychlového krystalu.

Tento krok je opět spuštěn dávkově.

Trik: strukturu lépe uvidíte, pokud použijete rovnoběžné promítání (tlačítko **proj**) a menší koule (view: **-**)



A10-zone-sim.sh Zonální tavba

17/20
pch04

Konfigurace z předchozího kroku bude simulována za konstantní teploty a konstantního tlaku ve směru osy z. Ve směrech x,y se velikost simulační buňky nemění.

Simulace bude spuštěna na některém z klientů klastru.

A11-zone-show.sh prohlížení trajektorie

Trajektorii zapisovanou běžící simulací je možné prohlížet.

Sledujte, zda krystal taje nebo narůstá.

Po zavření programu show budete dotázáni, zda přerušit simulaci.

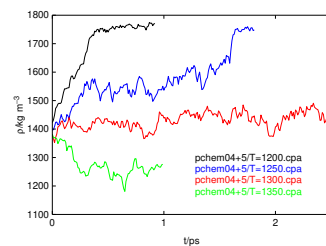
A12-prubeh.sh Průběh tavby

18/20
pch04

● Zobrazí se graf závislosti hustoty na čase pro všechny studenty na stejném počítači (po skončení simulací – musí existovat soubory T=*.cpa).

● Popis křivek dostanete kliknutím pravým tlačítkem myši.

● Výsledky pro čtyři teploty vidíte vpravo ⇒ bod tání JC modelu NaCl = 1300(25) K.³



Přesnější výsledek z větších simulací a s extrapolací $N \rightarrow \infty$ 1287(3) K.³

Po provedení všech cvičení: úklid

● Smažte svou složku pomocí [F8]

● Pečlivě zkontrolujte, zda nemažete složku někoho jiného!

● Vyskočte z Midnight Commanderu ([F10]) a shellu (exit [Enter])

³v závorce je odhad standardní chyby.

Dodatek: Linux command prompt survival kit

19/20
pch04

odhlášení	exit
přehled nedávno zadaných příkazů	history
změna složky (adresáře)	cd SLOŽKA
— zpět	cd ..
výpis souborů ve složce	ls
— některých podrobně	ls -l a*.g
výpis obsahu (krátkého ASCII) souboru	cat SOUBOR
smazání souboru	rm SOUBOR
kopírování souboru (KAM=soubor n. složka)	cp SOUBOR KAM
přesun či přejmenování souboru	mv SOUBOR KAM
editace (nového nebo starého) souboru	mcedit SOUBOR
přerušení běžícího programu	[Ctrl-c]

● Nevidíte-li prompt, protože ho překryl text, stiskněte [Enter].

● [Ctrl-c] v terminálu není „Copy“, ale přerušuje běžící program!

● Text v terminálu se po označení kopíruje prostředním tlačítkem myši.

Dodatek: typy souborů

20/20
pch04

Některé typy MACSIMUS souborů a asociované aplikace.

● Asociovaná aplikace se spustí z mc dvojklikem nebo Enter.
Další asociovaná aplikace (jiná funkce) pak [F3]

● Z příkazového řádku příkazem start, další pak starts

typ	obsah	aplikace	akce
.che	chem. vzorec	blend	editace, minimalizace od zač. F3 = viz výše + normální vibrační módy
.mol	mol. topologie	blend	editace, minimalizace
.plb	trajektorie	show	prohlížeč trajektorie
.cp	konvergenční profil	showcp,plot	zobrazí konvergenční profily
.cfg	konfigurace	showcfg,plot	zobrazí konfiguraci
.sta	naměřená data	staprt	statistická analýza výsledků (F3=podrobně)
.rdf	párový histogram	rdfig,plot	zobrazí radiální distribuční funkce F3 = kumulativní f. (koordináční číslo)
.g	RDF	plot	zobrazí radiální distribuční funkci
.cn	kumulativní RDF	plot	zobrazí kumulativní distribuční funkci
.def	parametry simulace	go	provede příkaz v 1. řádku
.get	řízení simulace	go	provede příkaz v 1. řádku
.nff	data scény	ray	renderuje a zobrazí scénu