

TD RMC

Exemple 1 : modélisation de SiO₂

1. Le modèle est basé sur les données de diffraction des neutrons de Desa et al. Ces données sont dans le fichier **sio2_neutron.fq**.

2. Configuration initiale pour le modèle RMC. On fait une structure aléatoire d'atomes Si, avec la densité qu'ils auront dans le modèle final, en utilisant le programme **random**

Number of Euler angles > **0**

Number of particle types > **1**

Density > **0.0219**

Number of particles of type 1 > **100**

Output file (no extension, will be .cfg) **si_ran**

3. Les atomes de Si doivent être séparés pour avoir une distance entre eux physiquement réaliste. Avec une connaissance de la structure de la silice, i.e. que le réseau est formé de tétraèdres SiO₄ connectés par sommets, on peut estimer que la distance minimale Si-Si est proche de 2.9 Å (plus facilement visible sur les données de diffraction de Rayons X). Pour séparer les atomes, on utilise le programme **moveout**. Un exemple est donné en dessous (la réponse exacte peut différer un peu car cela dépend de la configuration aléatoire initiale).

```

Starting configuration (no extension) ?
si_ran
(Version 3 format configuration file)

Output file           : si_mov
Closest approaches   : 1.0

    10 atoms of type 1 have too close neighbours

Move atoms of type 1 ? (T/F) : t
Maximum move         : 1.0
Max. no. of iterations : 50000

    9 atoms of type 1 have too close neighbours after    0 iterations
    8 atoms of type 1 have too close neighbours after    0 iterations
    7 atoms of type 1 have too close neighbours after    1 iterations
    6 atoms of type 1 have too close neighbours after    3 iterations
    5 atoms of type 1 have too close neighbours after    3 iterations
    4 atoms of type 1 have too close neighbours after    3 iterations
    3 atoms of type 1 have too close neighbours after    5 iterations
    2 atoms of type 1 have too close neighbours after    7 iterations
    1 atoms of type 1 have too close neighbours after    7 iterations
    0 atoms of type 1 have too close neighbours after    7 iterations

Re-calculate neighbours? (T/F) : f
Change cut-offs ? (T/F)       : t
Closest approaches           : 1.5

    26 atoms of type 1 have too close neighbours

Move atoms of type 1 ? (T/F) : t
Maximum move                 : 1.0
Max. no. of iterations       : 50000
.
.
.

```

On continue en augmentant la distance minimale jusqu'à atteindre la valeur limite (cut-off) de 2.9 Å.

4. On fait le réseau initial de Si pour le modèle RMC. Pour cela on utilise le programme **rmca**, en n'ajustant aucune donnée expérimental, mais avec une contrainte de coordinence. On utilise la configuration produite à l'étape 3. Copier **si_mov.cfg** dans **si_net.cfg**. Le fichier input de **rmca** data est **si_net.dat**. La distance maximale de 3.5 Å pour les liaisons Si-Si est estimée à partir de la $G(r)$.

Note importante : Quand on lance **rmca**, il crée un fichier **si_net.his** qui est histogram représentant $g(r)$ et une représentation binaire des coordonnées atomiques. A la fin de la simulation, le programme écrit 3 fichiers : **si_net.cfg** (nouvelle configuration), **si_net.his** (représentation binaire du fichier .cfg) et **si_net.out** (contient les $g_{\alpha\beta}(r)$, $S_{\alpha\beta}(Q)$, $g(r)$ ou $S(Q)$).

Attention ! Quand on relance **rmca**, il lit un fichier **.his** s'il y en a un. Si on veut refaire la simulation à partir du départ, il faut donc bien penser à effacer le fichier **.his** !!

Making Si network for SiO2

```

0.0219          ! number density
2.9            ! cut offs
0.3           ! maximum moves
0.1           ! r spacing
.false.       ! moveout option
0             ! number of configurations to collect
2000          ! step for printing
15 15        ! Time limit, step for saving
0 0 0 0      ! sets of experiments
1            ! Nb of constraints
1 1 2.9 3.5 4 1.0 0.00001 ! Constraints
0           ! Nb of average constraints
.false.     ! Use a potential

```

On fait tourner **rmca** en donnant **si_net** comme fichier input. La contrainte sur la coordinence doit être vérifiée à ~ 99%.

5. O ajoute maintenant des atomes O entre les liaisons Si-Si pour faire le réseau SiO₂. On utilise le programme **midpt**.

```

ADD ATOMS AT BOND CENTRES

Configuration          : si_net
Maximum bond lengths  : 3.5
Bond                   [From,To] : 1 1
Type of atom to add   : 2

No. of atoms added =   197
Config. size        =   297

Output file           : sio_net.cfg

```

6. On est prêt pour lancer la modélisation RMC. Copier la configuration SiO₂ (**sio_net.cfg**) dans un fichier avec le nom pour la simulation (**sio2_fq.cfg**). Le fichier d'entrée pour **rmca** est **sio2_fq.dat**
Faire tourner **rmca** et attendre très longtemps ... SiO₂ est un réseau avec des tétraèdres contenant que des O pontants et peu de degrés de liberté donc la convergence est très lente.

Exemple 1 : modélisation de $\text{Na}_2\text{O}-2\text{SiO}_2$

1. Le modèle est basé sur les données de diffraction des neutrons de Cormier et al. Ces données sont dans le fichier **NS2_neutron.fq**.

2. On va simuler le verre $\text{Na}_2\text{Si}_2\text{O}_5$ (NS2) avec 80 atomes de Na, 80 atomes de Si et 200 atomes de O soit 360 atomes. La densité expérimentale de NS2 est 2.49 g cm^{-3} soit $0.07411 \text{ at \AA}^{-3}$.

La densité pour les atomes de Si va être $0.07411 * 80 / 360 = 0.016469 \text{ at \AA}^{-3}$.

3. Configuration initiale pour le modèle RMC de NS2. On fait une structure aléatoire d'atomes Si, comme pour le modèle SiO_2 , en utilisant le programme **random**

4. On sépare les atomes Si avec le programme **moveout**.

5. On fait le réseau initial de Si pour le modèle RMC. Pour cela il faut tenir compte des futurs OP (O pontant) et ONP (O non-pontant) !

Pour un verre de composition $x\text{R}_2\text{O}(1-x)\text{SiO}_2$, on peut calculer la fraction d'OP et d'ONP :

$$\text{Nbr de O} = x + 2(1-x) = 2-x$$

$$\text{Nbr de ONP} = 2x$$

$$f_{\text{ONP}} = (2x)/(2-x) \quad f_{\text{OP}} = 1 - f_{\text{ONP}} = (2-3x)/(2-x)$$

Pour NS2, on a $f_{\text{ONP}} = 0.4$ et $f_{\text{OP}} = 0.6$. On va donc imposer que 60% des Si est une coordinance de 4 (cela donnera les OP) et 40% des Si est une coordinance de 3 (cela donnera les ONP).

Voir le fichier **si_net.dat** pour vérifier ces contraintes.

Copier **si_mov.cfg** dans **si_net.cfg**. Le fichier input de RMCA data est

si_net.dat.

On fait tourner **rmca** en donnant **si_net** comme fichier input. La contrainte sur la coordinance doit être vérifiée à ~ 99%.

6. On ajoute ensuite les atomes O avec le programme **midpt**. Si des atomes d'O supplémentaires doivent être ajouté manuellement on utilise le programme **addrand**.

7. On continue à préparer le réseau initial de SiO_2 . Copier le fichier issu de **midpt** et **addrand** dans **siO2_net.cfg**. Le fichier input de **rmca** data est **siO2_net.dat**.

On fait tourner **rmca** en donnant **siO2_net** comme fichier input.

8. On ajoute ensuite les atomes Na avec le programme **addrand**.

Copier le fichier dans **NS2_net.cfg**. On fait tourner **rmca** en donnant **NS2_net** comme fichier input.

9. On est prêt pour lancer la modélisation RMC. Copier la configuration dans un fichier avec le nom pour la simulation (**NS2_fq.cfg**).

Le fichier d'entrée pour **rmca** est **NS2_fq.dat**

Faire tourner **rmca** ...