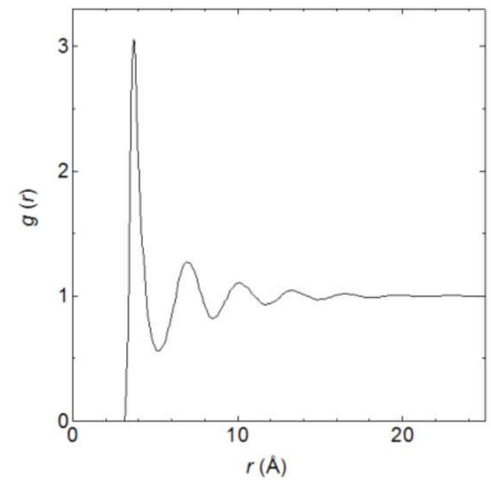
動径分布関数／二体分布関数

- ある原子種 i から距離 r 離れた場所にどれだけの原子種 j が存在するかの指標
- $i = j$ のとき動径分布関数，$i \neq j$ のとき二体分布関数と呼ぶ



Arの動径分布関数の実験値

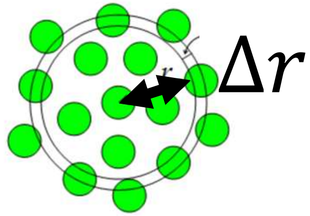
動径分布関数の計算：https://polymer.apphy.u-fukui.ac.jp/~koishi/lecture/md_program7/index.php

定義式：

$$g(r) = \langle g_i(r) \rangle$$

ここで,

$$g_i(r) = \frac{\dfrac{n(r)}{4\pi r^2 \Delta r}}{\dfrac{N}{V}}$$



$$= \frac{\text{球殻内の粒子の密度}}{\text{系の平均密度}}$$

ただし,

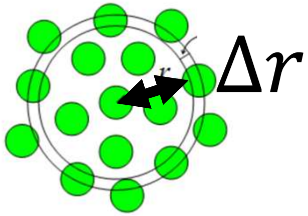
V：系の体積
N：系の粒子数
r：ある原子からの距離
$n_i(r)$：ある粒子 i からの距離 r と $r + \Delta r$ の球殻の間にある粒子の数
$g_i(r)$：ある粒子 i の動径分布関数

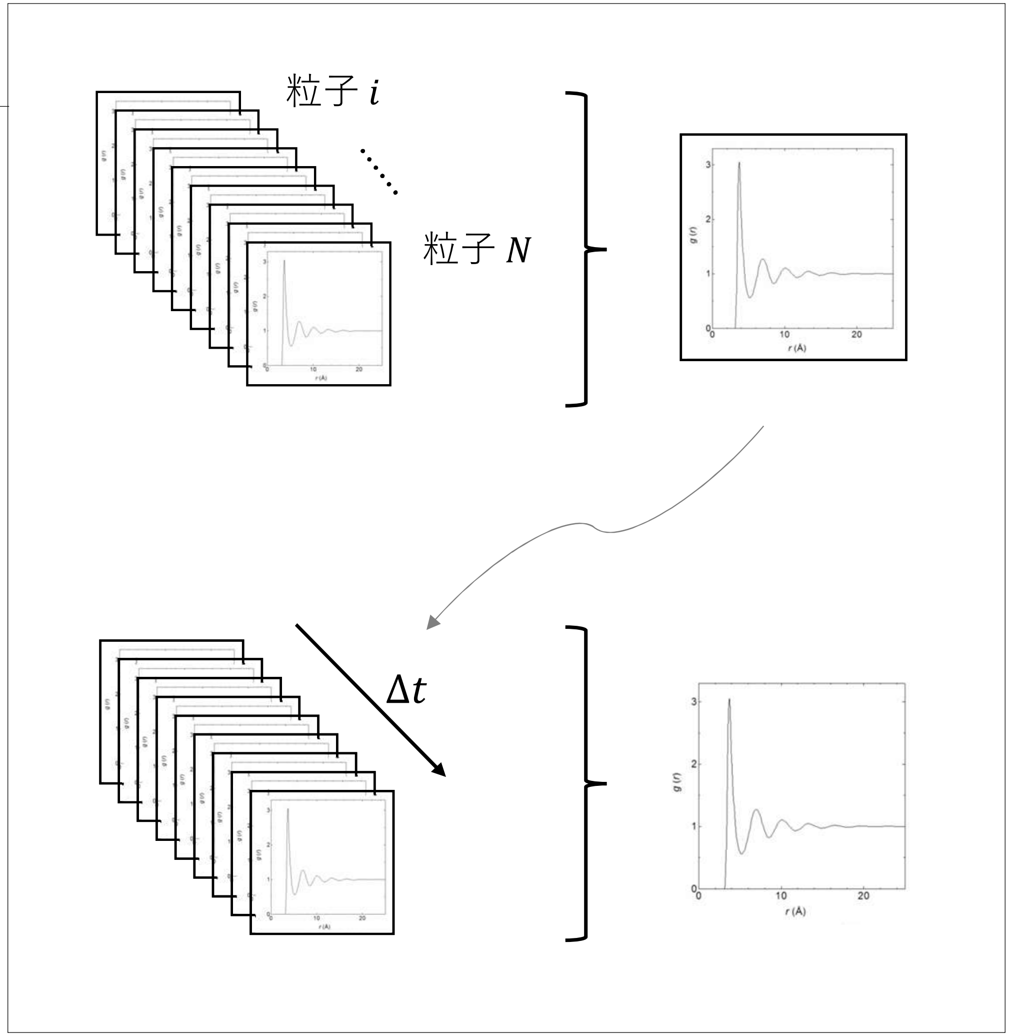
定義式：

$$g(r) = \langle g_i(r) \rangle$$

ここで,

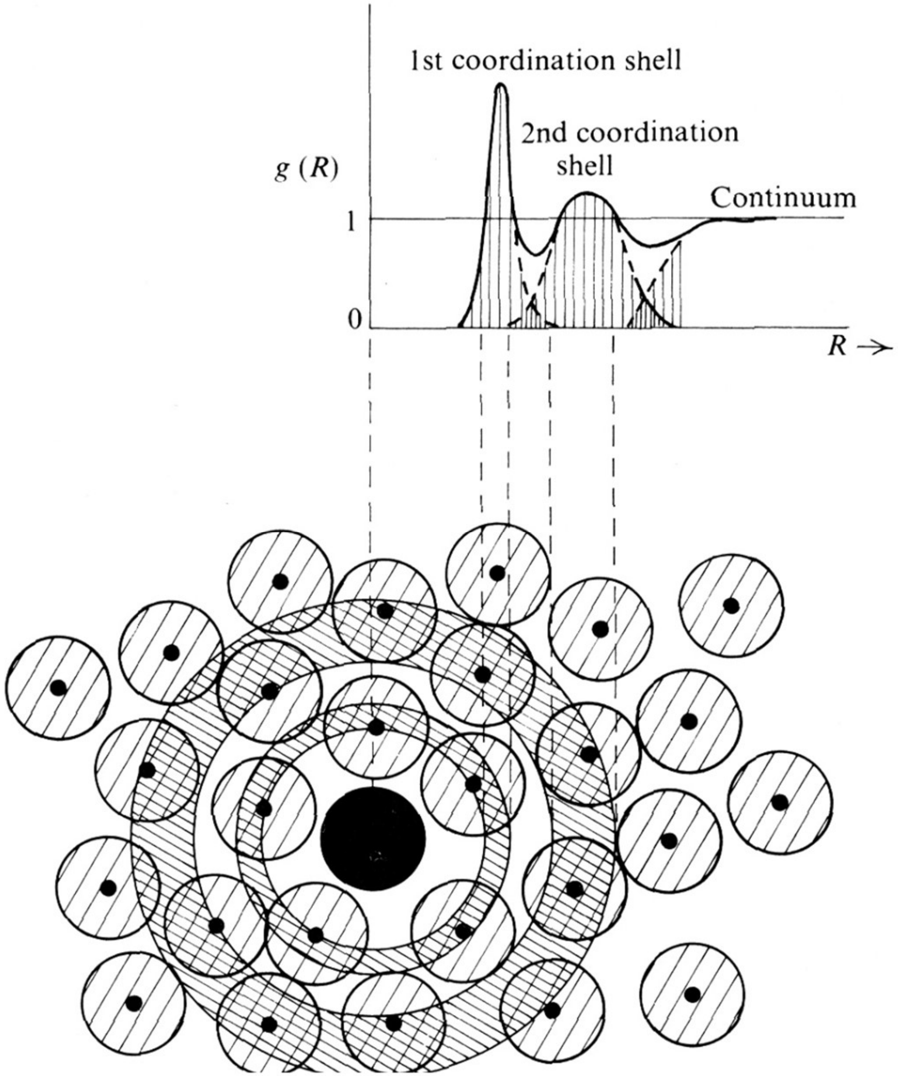
$$g_i(r) = \frac{\dfrac{n(r)}{4\pi r^2 \Delta r}}{\dfrac{N}{V}} = \frac{\text{球殻内の粒子の密度}}{\text{系の平均密度}}$$





ただし,

V：系の体積
N：系の粒子数
r：ある原子からの距離
$n_i(r)$：ある粒子 i からの距離 r と $r + \Delta r$ の球殻の間にある粒子の数
$g_i(r)$：ある粒子 i の動径分布関数

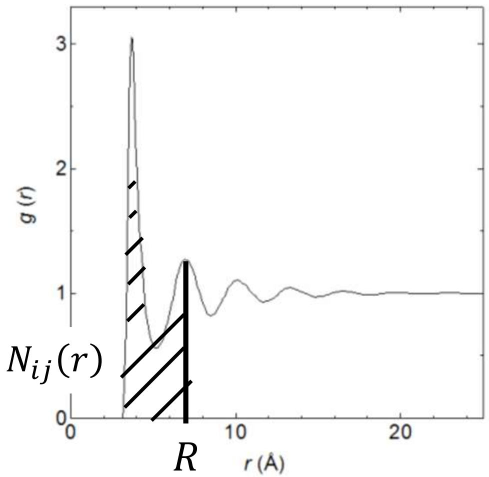


https://user.spring8.or.jp/sp8info/?p=1432

積算配位数

- 積算配位数$N_{ij}(r)$は，粒子 i を中心とした半径 R の球殻内 に存在する粒子 j の総数
- 定義式：

$$N_{ij}(r) = 4\pi\rho_i \int_0^R r^2\, g_{Ij}(r)dr$$



Arの動径分布関数の実験値

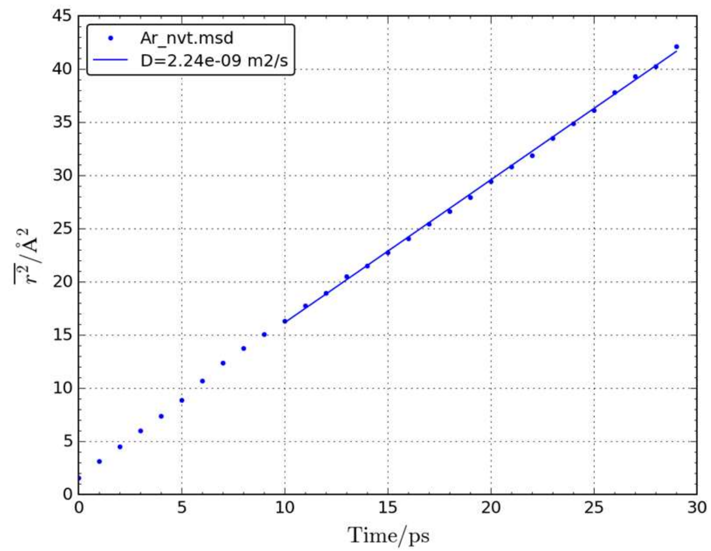
平均二乗変位／自己拡散係数

平均二乗変位

- 原子がある一定時間 t の間に平均してどれだけ変位したかを表す指標
- 定義式： $MSD = \langle |\boldsymbol{x}(t) - \boldsymbol{x}(0)|^2 \rangle$

自己拡散係数

- 平均二乗変位から求めた拡散係数のこと
- 定義式：$D = \lim_{t \to \infty} \frac{1}{6} \cdot \frac{MSD}{t}$



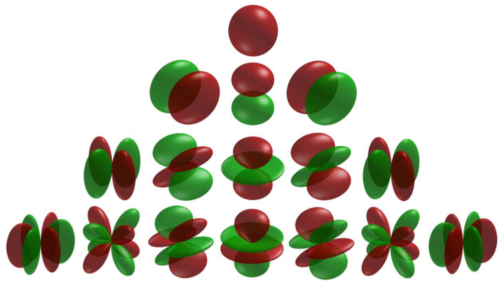
Steinhaldt秩序変数

- 物質中の局所的な原子配列の対称性を定量化するための指標

$$Q_i(i) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l}|Q_{lm}(i)|^2}$$

ここで,

$$Q_{lm}(i) = \frac{1}{N_b(i)}\sum_{j=1}^{N_b(i)} Y_{lm}(\theta_{ij}, \phi_{ij})$$



l : 球面調和関数の次数，m : 球面調和関数の位数
i : 中心粒子（注目している粒子）のインデックス，j : 中心粒子 i の近接粒子のインデックス
r_{ij} : 中心粒子 i と近接粒子 j を結ぶベクトル，θ_{ij} : ベクトル r ijの極角（z軸からの角度）
ϕ_{ij} : ベクトル r_{ij} の方位角（x軸からの角度），$Y_{lm}\left(\theta_{ij}, \phi_{ij}\right)$: ベクトル r_{ij} の方向における球面調和関数
$N_b(i)$: 中心粒子 I の近接粒子の数，$Q_{lm}(i)$: 中心粒子 i の局所的なボンド秩序パラメータ