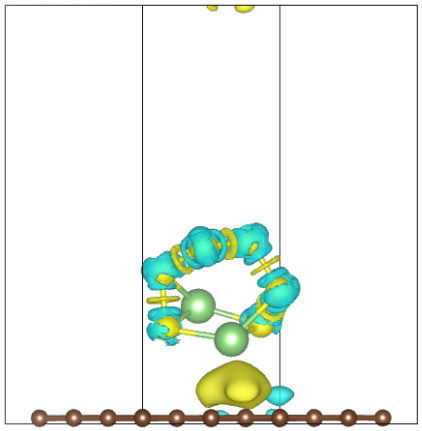
# 如何利用 MatCloud+计算电子密度差

电子密度差又称差分电荷、电荷密度差，是一种密度泛函理论独有的用于分析电子转移的方法，由于其分析效果直观简洁，在众多理论计算文章中频频出现。

电子密度差原理简单来说就是将变化前后同一格点的电子密度作差，差值的正、负用不同的颜色来区分（VESTA 中正/负通常使用黄/青色代替，也可以自定义颜色，但是具体颜色代表的含义需要指明），这样就可以**直接观察到电子发生转移的位置和转移方向**



本文以石墨烯吸附 $Li_2S_6$ 后的电子密度差图为例，电子密度差的绘制分为以下 5 步：

①搭建并优化吸附结构；

②从结果中找出格点精度；

③拆分优化后的吸附结构；

④片段静态计算；

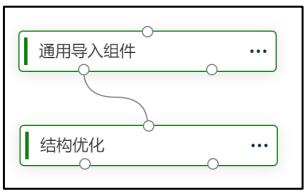
⑤电子密度差后处理。

以下我们通过 MatCloud+，给大家介绍， 如何计算电子密度差。 选用 MatCloud+的原因， 在于仅通过浏览器就可使用，无需下载任何软件。在进行练习之前，需要提前在 MatCloud+(www.matcloudplus.com)注册账号。

**计算过程：**

①搭建并优化吸附结构：

不会搭建吸附结构的童鞋请参考往期文章——【建模干货】自动高通量生成原子吸附模型 https://mp.weixin.qq.com/s/-LOAuxMYkdsbVHFaPGeEsw，搭建如下工作流，提交计算后得到吸附模型优化后的构型（不想建模的可以直接下载结构 https://matcloud.oss-cn-zhangjiakou.aliyuncs.com/document/62908033e4b0f556b5439425.POSCAR）。




②从结果中找出格点精度：

在组件【结构优化】后处理的计算结果中找到 CONTCAR 和 OUTCAR，并将其下载到本地，CONTCAR 文件记录了计算最后一步的结构，格式与 POSCAR 一致，为下一步的文件拆分做准备，OUTCAR 则记录了计算时的格点精度。

| File | Size | Description |
|---|---|---|
| INCAR | 1.58KB | Input parameters |
| KPOINTS | 55B | The KPOINTS file is used to specify the Bloch vectors (k-poi… |
| POTCAR | 0.42MB | The POTCAR file contains the pseudopotential for each atomi… |
| POSCAR | 0.33KB | Input structure. |
| log.out | 6.94KB | VASP out log file. |
| OSZICAR | 4.27KB | Information on each electronic and ionic SCF step. |
| OUTCAR | 0.18MB | Main output file. |
| CONTCAR | 1.03KB | Is the updated POSCAR file after each calculation, whether io… |

用任意编辑器打开 OUTCAR，**搜索 dimension x,y,z NGXF，把 NGXF、NGYF、NGZF 后的整数提取出来**（注意：提取整数，而非小数），此例中需要将 96 96 160 记录下来。

```
Dimension of arrays:
  k-points            NKPTS =       8   k-points in BZ
  number of dos       NEDOS =     301   number of ions
  non local maximal   LDIM  =       5   non local SUM 2l+1
  total plane-waves   NPLWV =    1728
  max r-space proj    IRMAX =       1   max aug-charges
  dimension x,y,z NGX =     48 NGY =    48 NGZ =    80
  dimension x,y,z NGXF=     96 NGYF=    96 NGZF=   160
  support grid    NGXF=     96 NGYF=    96 NGZF=   160
```

③拆分优化后的吸附结构：

CONTCAR 用编辑器打开后，其内容及详细含义如下（POSCAR 类似）：

```
Custom name                                          自定义名称，结构名
   1.00000000000000                                  缩放比例，实际坐标=坐标*缩放比例
     9.840000    0.000000    0.000000               晶格基矢，每行都是一个向量，向量模长即为晶胞轴长，
    -4.920000    8.521690    0.000000               两向量的夹角即为晶胞轴角
     0.000000    0.000000   15.000000
   C    Li    S                                     元素种类及对应元素的原子个数
   32    2     6
Direct                                               坐标类型，分为分数坐标Direct和笛卡尔坐标Cartesian
   0.997210  0.994771  0.013644
   0.080414  0.161396  0.013790
   0.247011  0.994686  0.014488
   0.330258  0.161276  0.014637
   0.497125  0.994696  0.015028
             ......
   0.497160  0.744908  0.012713                     每个原子的坐标，从左到右依次为x、y、z坐标，从上
   0.580493  0.911442  0.014047                     往下其排序与上述元素类型和原子个数一致，即32个C，
   0.747324  0.744919  0.012059                     2个Li，6个S
   0.830572  0.911516  0.013177
   0.552521  0.699560  0.281137
   0.552047  0.457666  0.201775
   0.780135  0.693401  0.236730
   0.756957  0.513384  0.318572
   0.649678  0.514419  0.436696
   0.407509  0.370430  0.422865
   0.318941  0.499779  0.364827
   0.325610  0.483955  0.227228
```

如果想要研究 Li2S6 与石墨烯间的电荷转移，那么就需要将吸附构型拆分为 Li2S6、石墨烯两个片段，根据上述 CONTCAR 的解释，仅需将 Li2S6 从晶胞中剥离出来即可，需要剪切其坐标、元素类型和原子个数，其它均保持一致，拆分后的输入文件结果如下：

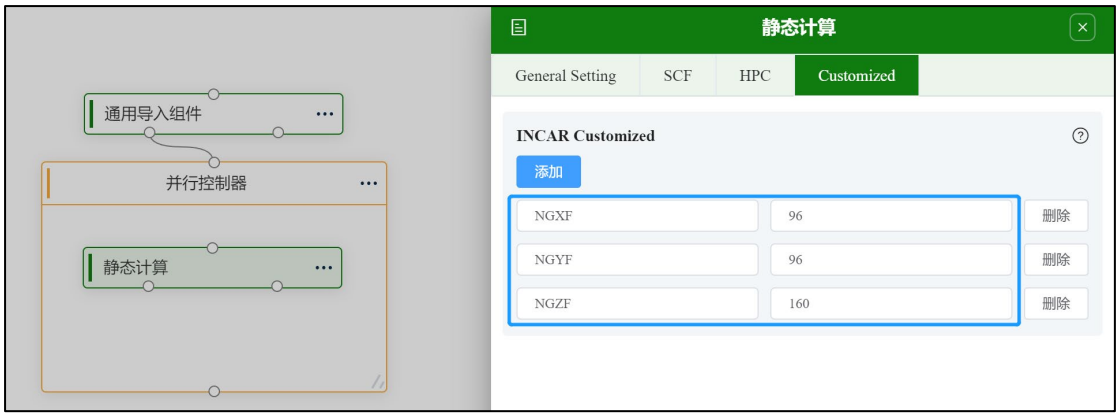
C32
1.00000000000000
9.840000 0.000000 0.000000
-4.920000 8.521690 0.000000
0.000000 0.000000 15.000000
C
32
Direct
0.997210 0.994771 0.013644
0.080414 0.161396 0.013790
0.247011 0.994686 0.014488
0.330258 0.161276 0.014637
0.497125 0.994696 0.015028
0.580513 0.161302 0.015473
0.747173 0.994780 0.014194
0.830563 0.161480 0.014677
0.997200 0.244822 0.013891
.....
0.497160 0.744908 0.012713
0.580493 0.911442 0.014047
0.747324 0.744919 0.012059
0.830572 0.911516 0.013177

Li2S6
1.00000000000000
9.840000 0.000000 0.000000
-4.920000 8.521690 0.000000
0.000000 0.000000 15.000000
Li S
2 6
Direct
0.552521 0.699560 0.281137
0.552047 0.457666 0.201775
0.780135 0.693401 0.236730
0.756957 0.513384 0.318572
0.649678 0.514419 0.436696
0.407509 0.370430 0.422865
0.318941 0.499779 0.364827
0.325610 0.483955 0.227228

拆分后的两个结构，只有蓝框内的数据不同，其它均保持一致。分别命名结构为 C.vasp 和 Li2S6.vasp，上传至 MatCloud+数据库。

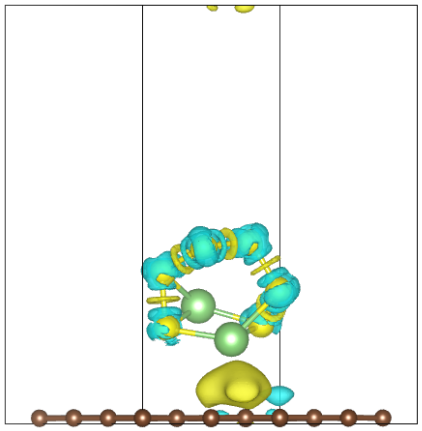
④片段静态计算：

分别计算吸附构型和拆分片段的静态计算，得到电子信息文件 CHGCAR。由于此步骤同时计算三个结构，此处搭建高通量并行计算工作流实现这一过程，并在静态计算添加格点精度参数 NGXF=96、NGYF=96、NGZF=160，结果如下：




⑤电子密度差后处理：

到这里所有需要的输入文件已经获取完毕了，MatCloud+可自动对文件进行后处理，最终可得到如下电子密度差图。



想要获取更详细的教程请点击 MatCloud+首页【申请试用】联系我们。

更多 Matcloud+教程可关注 **b 站迈高科技**
更多动态请关注**迈高科技微信公众号**