【建模干货】快速灵活搭建"超级大"的结构模型

单胞(Unit cell): 又称晶胞, 能够反映晶格的对称性的周期单元。 超胞(Supercell): 超胞是对单胞的扩展, 扩展成新的重复单元。

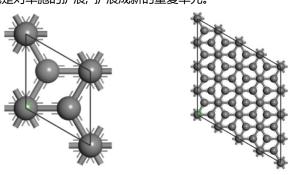


图 1 单胞石墨烯和 4x4x4 超胞石墨烯结构

为什么要创建超胞结构?

——我们研究表面吸附、异质结和缺陷等问题时常常需要构造一定形态的超胞结构。

1) 表面吸附:不同晶向、不同吸附浓度;

2) 异质结模型:解决晶格失配的问题;

3) 缺陷问题:获得合适的空位、掺杂浓度模型;

.....

设计高性能新材料的过程:我们通常会对多个材料进行相同的处理及性能表征,通过一系列指标进行材料筛选。那如何实现地对成百上干的结构做类似的超胞建模处理呢?今天我为大家介绍建模神器—MatCloud+,帮您解决超胞建模的一切问题。

接下来,我们以文献 J. Phys. Chem. C , 2011, 115, 19394–19404.搭建锐钛矿型 TiO_2 超胞结构为例,说明 MatCloud+如何进行扩展原始晶胞: $2 \times 2 \times 2$ 超胞和重新定义晶胞: $\sqrt{2} \times \sqrt{2} \times 1$ 超胞模型的搭建。

请大家注意喔:你不需要下载任何软件,仅需浏览器,且全部是图形化操作,大家跟着我来吧。

一、超晶胞(扩展原始超胞)

- 本部分以锐钛矿型 TiO₂结构为例,直接扩展 2 x 2 x 2 超胞。
- (1) 上传结构

MatCloud+平台会自动转变上传格式,因此支持 cif、POSCAR、mol、pdb 等多种格式文件。



图 2 MatCloud+上传结构

(2) 创建直接超晶胞 (扩展原始晶胞) 工作流

MatCloud+的建模功能可以轻松的实现扩胞、切面、随机取代、建立吸附构型等操作。本例中,所需组件如下:

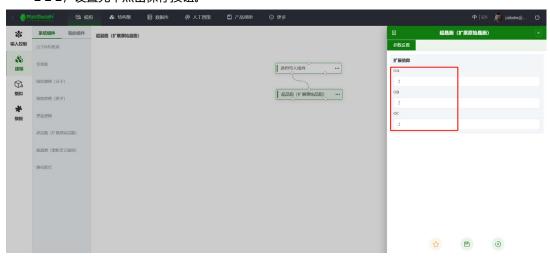
点击输入控制,将【通用导入组件】拖至右边的工作流设计页面;

点击建模,将组件【超晶胞(扩展原始晶胞)】拖至右边的工作流设计页面并连接成计算流程,如下图所示:



图 3 MatCloud+超晶胞 (扩展原始晶胞) 建模工作流

- (3) 设置超晶胞 (扩展原始晶胞) 建模参数并提交计算
- 》 {扩展倍数}: OA OB OC 的默认值均为 1,点击 OA OB OC 下方的 icon (空白条) 按钮调整数值为 2 2 2,设置完毕点击保存按钮。



(4) 查看、下载计算结果

》 可视化的展示超胞结构,并支持下载图片或者结构文件。



图 5 MatCloud+超晶胞 (扩展原始晶胞) 建模结果

单胞与超晶胞(直接扩展晶胞)结果:

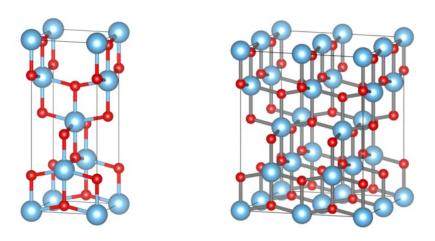


图 6 单包 TiO2 和 2 x 2 x 2 TiO2 超胞结构

- 二、超晶胞 (重新定义晶格)
- 本部分以锐钛矿型 TiO₂ 结构为例, 重新定义晶胞: √2 x √2 x 1 超胞

操作步骤同超晶胞(扩展原始晶胞) 一致,只不过参数设置不同:



图 7 MatCloud+超晶胞 (扩展原始晶胞) 参数设置

什么是重新定义晶格 (Redfine lattice) ? ——改变周期性晶格的形状

如何进行重新定义晶格?

金属 Mg 的晶体结构大家比较熟悉吧,是一个六方晶胞,怎么变成正交相呢?如下图所示,将 Mg 的晶体结构进行旋转,使得 \overrightarrow{OA} 方向变成 \overrightarrow{OB} 方向, \overrightarrow{OB} 方向变成 \overrightarrow{OB} 方向,即可得到正交相的 Mg 晶胞(蓝色长方形标记)。因此,我们只需要进行向量相加减即可实现。

 $\overrightarrow{OB'} = \overrightarrow{OB}$

 $\overrightarrow{OA'} = \overrightarrow{OB} + 2\overrightarrow{OA} = (0\ 1\ 0) + 2 (1\ 0\ 0) = (2\ 1\ 0)$

所以Y轴不变,新的晶格矢量 (210) 为新的正交晶胞的X轴矢量。

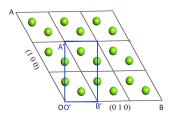


图 8 Mg 的六方晶胞转换成正交相的示意图

对于 $√2 \times √2 \times 1$ 的 TiO₂ 超胞结构,是在 OA,OB 方向进行根号超胞建模,根据刚刚 Mg 的计算过程,我们可知此时晶格矢量变化为:

$$\overrightarrow{OA'} = \overrightarrow{OA} + \overrightarrow{OB} = (1\ 0\ 0) + (0\ 1\ 0) = (1\ 1\ 0)$$

$$\overrightarrow{OB'} = -\overrightarrow{OA} + \overrightarrow{OB} = -(0\ 1\ 0) + (1\ 0\ 0) = (1\ -1\ 0)$$

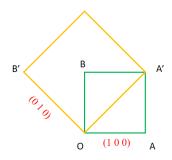


图 9 锐钛矿型 TiO₂ 带根号建模示意图

➤ 平台操作:与超晶胞 (扩展原始晶胞)的操作步骤一致,上传锐钛矿型 TiO₂结构后搭建超晶胞 (重新定义晶格) 计算工作流,设置晶格矢量变化参数,点击计算,直接得到可视化的建模结果。

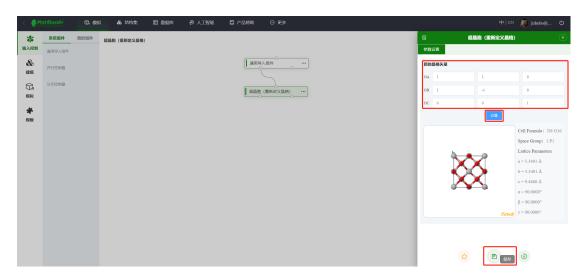


图 10 锐钛矿型 TiO₂ 带根号建模参数设置

▶ 超晶胞(扩展原始晶胞)结果无误的话,点击保存按钮,提交任务,可视化的展示超胞结构,并支持下载图片或者结构文件。

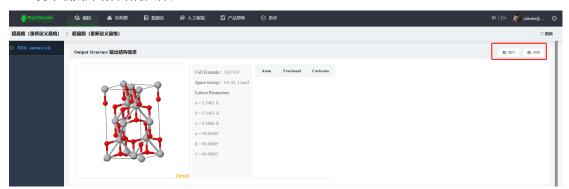


图 11 MatCloud+超晶胞 (重新定义晶格) 建模结果

▶ 单胞与超晶胞 (重新定义晶格) 结果:

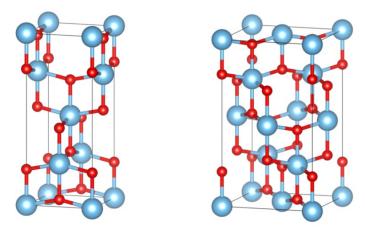


图 12 单包 TiO2和√2 x √2 x 1 TiO2超胞结构

便捷的超胞建模,您学会了吗?MatCloud+的此功能组件为大家免费开放,如此实用的功能,欢迎大家试用!

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**

