【建模干货】高通量生成不同浓度的取代掺杂结构



由图可知,理论模拟主要分为3个阶段——建模、计算、数据处理。科研时间宝贵,如何在有限的时间内提高科研效率?今天我们将利用 MatCloud+帮助大家快速得到批量取代掺杂模型。

物理、化学、材料领域设计高性能新材料的常见手段之一为——取代掺杂。人为搭建掺杂结构通常既耗 费时间又无法保证结果的严谨性,今天我们就来为大家介绍自动化随机掺杂模型的搭建。

取代掺杂模型如何创建?

?

1、 假设原始模型为 32 个 C 原子的石墨烯结构,用两个 N 原子取代其中两个 C 原子,有 496 种可能性, 如何搭建所有的掺杂模型?

2、496 个取代掺杂模型中如何筛选并去除这些等价结构?

3、如何在不等价的结构中筛选出最稳定或者是性能最优的结构?

4、如何创建一定浓度范围内的高通量掺杂模型?

.....

取代建模真是让人头晕目眩、无从下手……

你还在为取代掺杂建模而发愁吗?现在教你一个"注册即用"的建模平台——MatCloud+,只需要你点点 鼠标,简单参数设置即可为您解决取代建模的全部难题,得到可视化的所有浓度百分比饼图及对应结构模 型。

| | 结构 | 个数 | 百分比 |
|--|----------------------------------|----|-------|
| | C31N | 1个 | 1.64% |
| 3.28% [1.64%] 1.64% | C30N2 | 2个 | 3.28% |
| 3.28% 3.28% 3.28% C30N2 | C29N3 | 2个 | 3.28% |
| 3.28% C29N3 3.28% C28N4 3.28% C28N4 | C28N4 | 2个 | 3.28% |
| 3.28% C26N6 3.28% C25N7 | C27N5 | 2个 | 3.28% |
| 3.28% C24NB 3.28% C24NB 2.28% C23N9 | C26N6 | 2个 | 3.28% |
| 3.28% C22N10 3.28% C21N11 3.28% C21N11 | C22N10 C21N11 C25N7 C20N12 | 2个 | 3.28% |
| 3.28% 3.28% 3.28% 3.28% | C24N8 | 2个 | 3.28% |
| | C23N9 | 2个 | 3.28% |
| | C22N10 | 2个 | 3.28% |

噔噔蹬,接下来,我们以 N 原子取代石墨烯结构的 C 原子为例,说明 MatCloud+平台如何得到高通量的 取代掺杂模型。

MatCloud+高通量取代掺杂实例

- ▶ 原模型: 32 个 C 原子的超晶胞石墨烯
- > 取代掺杂的参数: N 原子取代 C 原子
- 掺杂浓度范围: 0~1
- ▶ 掺杂浓度间隔: 1/32=3.13%
- (1) 上传结构

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

| MatCloud+ | 命模拟 | & 结构集 | 目 数据库 | 1 @ 人工智能 | 凹 产品帮助 | ⊙ 更多 | | 中 EN 🥻 zhangxiao 🕚 |
|-----------|---------------------------------------|-------|-------------------------|------------|--------|------|---------------------|------------------------|
| 私有结构库 | 教理を入 | 私友结构房 | | | | | | |
| 机器学习数据库 | 90.06/平 / | | | | | | | |
| 物性数据库 | ▲上传 2 Q. 请输入关键词, 搜索结构 | | | | | | | 搜索 结构 搜索 |
| | | 总数:22 | 结构名 🗢 | 化学式 😄 | 原子总数 | 空间群 | 创建时间 🗘 | 操作 |
| | | 1 | graphite (0 0 1)-Li-1-3 | Li1 C32 | 33 | 1 P1 | 2021-09-14 15:16:44 | 國直看 《编辑 ④下载 自删除 |
| | | 2 | graphite (0 0 1)-Li-1-2 | Li1 C32 | 33 | 1 P1 | 2021-09-14 15:16:44 | 國查看 之编辑 ④下载 前删除 |
| | | 3 | graphite (0 0 1)-Li-1-1 | Li1 C32 | 33 | 1 P1 | 2021-09-14 15:16:44 | 民 查看 之 编辑 ④ 下载 前 删除 |
| | | 4 | graphite (0 0 1)-Li-1-0 | Li1 C32 | 33 | 1 P1 | 2021-09-14 15:16:43 | 民 查看 之 编辑 ④ 下载 首 删除 |
| | | 5 | graphite (0 0 1) | C32 | 32 | 1 P1 | 2021-09-14 15:12:44 | 民 查看 《编辑 ④下载 首 删除 |
| | | 6 | Cu | Cu32 | 32 | 1 P1 | 2021-09-08 16:39:46 | 昆 查看 之 编辑 ④ 下载 首 删除 |
| | | 7 | TiO2-1Mn | O16Ti7Mn1 | 24 | 1 P1 | 2021-09-08 09:39:52 | 民 查看 《编辑 ④下载 自删除 |
| | 0 | 8 | TiO2-Mo | O72Ti32Mo4 | 108 | 1 P1 | 2021-09-08 09:39:52 | 昆 查看 《编辑 ④下载 圖删除 |

(2) 创建高通量取代掺杂建模工作流

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并导入石墨烯结构;

点击建模,将组件【随机取代】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:

| < 🍈 Ma | | 岛模拟 | 💩 结构集 | 目 数据库 | @ 人工智能 | 凹 产品帮助 | ⊕ 更多 | | 4 | 🕨 en 🧃 | 🔰 zhang | exiao | ப |
|--------|-----------|------|-------|-------|--------|------------|------|-----------|---|--------|---------|-------|---|
| * | 系统组件 | 我的组件 | 随机取代 | | | | | 超算64G(sc) | ~ | 昂提交 | Ð | Q | × |
| 输入控制 | 分子结构枚举 | | | | | | | | | | | | |
| 設備 | 切表面 | | | | | 通用导入组件 | 0 | | | | | | |
| | 吸附建模 (分子) | | | | | 随机取代 |) |] | | | | | |
| 模拟 | 吸附建樹 (原子) | | | | | • <u> </u> | 0 | | | | | | |
| ◆ 模板 | 界面建模 | | | | | | | | | | | | |
| | 超晶胞(扩展原始 | 品胞) | | | | | | | | | | | |
| | 超晶胞 (重新定) | (晶格) | | | | | | | | | | | |
| | 随机取代 | | | | | | | | | | | | |

- (3) 设置高通量取代掺杂建模参数并提交计算
- > 指定结构中的某类原子被元素周期表中的某类原子取代;
- > 浓度控制:通过指定最小取代个数、最大取代个数、步长,控制取代浓度;
- > 自动计算取代结构的相关信息:取代个数、随机输出数、结构总数、摩尔浓度

| < () | atCloud+ | 63.模拟 | ふ 结构集 | 目 数据库 | @ 人工智能 | 🖺 产品帮助 | ⊙更多 | | | 中 | EN 🧵 zł | angxiao |
|----------------|----------|-------|--------------|-------|--------|----------|-----|----------------|----------|----------|---------|---------|
| * | 系统组件 | 我的组件 | 随机取代 | | | | | | | 随机取代 | | |
| 输入控制 | 通用导入组件 | | | | | | | 随机取作 | e | | | |
| 会 建模 | 并行控制器 | | | | | ┃ 通用导入组件 | · | SubDop 取代元3 | ing 哲 | 被 | 取代元素 | 0 |
| | 分支控制器 | | | | | 随机取代 | · | Ν | | | С | |
| 模拟 | | | | | | · | | 化学式 | | | | |
| * | | | | | | | | C32 | | | | |
| 模板 | | | | | | | | 最小取f | 七个数 | 最大取代个数 | 步长 | |
| | | | | | | | | 1 | | 32 | 1 | |
| | | | | | | | | | | 计算法放 | | |
| | | | | | | | | • | 取代个数 | 随机输出数 | 结构总数 | 摩尔浓度(%) |
| | | | | | | | | | 1 | 2 | 32 | 3.13 |
| | | | | | | | | | 2 | 2 | 496 | 6.25 |
| | | | | | | | | | 3 | 2 | 4960 | 9.38 |
| | | | | | | | | | 2 | 2 | ٩ | |

(4) 查看计算结果

> 摩尔浓度:展示不同浓度的随机取代输出个数,并支持展示不同浓度下的结构。

| Output S | tructures 输出结 | 构信息 | | | | |
|----------|------------------|--------------|---------|---------|----|---------|
| 0 导出) | 选中结构 摩尔 洋 | 农度: all | ~ | | | |
| | 总数::61 | all | 招 | 摩尔浓度(%) | 备注 | 操作 |
| 0 | 1 | 3.12 | .N | 3.12 | | 查看 修改备注 |
| O | 2 | 6.25 9.38 | N2 | 6.25 | | 查看 修改备注 |
| O | 3 | 12.50 | 12_1 | 6.25 | | 直看 修改备注 |
| 0 | 4 | 15.62 | N3 | 9.38 | | 查看 修改备注 |
| 0 | 5 | 18.75 | 13_1 | 9.38 | | 查看 修改备注 |
| 0 | 6 | | C28N4 | 12.50 | | 查看 修改备注 |
| 0 | 7 | | C28N4_1 | 12.50 | | 查看 修改备注 |
| 0 | 8 | | C27N5 | 15.62 | | 查看 修改备注 |
| D | 9 | | C27N5_1 | 15.62 | | 查看 修改备注 |
| Ó | 10 | | C26N6 | 18.75 | | 查看 修改备注 |



查看结构:多结构同页面展示。



(5) 取代结构的复用

MatCloud+搭建的高通量取代模型支持 3 种导出方式——"到数据库""到结构集""到本地"。导出的模型可支持后续的一系列高通量性质计算。

| utput Struct | ures 输出结构信息 | L: | | | |
|--------------|-------------|----------|----------|----|---------|
| ▲ 导出选中结 | 摩尔浓度: 2 | all 🗸 | | | |
| 到数据库 | > i1 | 结构名 | 摩尔浓度 (%) | 备注 | 操作 |
| 到结构集 | > | C18N14 | 43.75 | | 查看 修改备注 |
| 到本地 | > | C18N14_1 | 43.75 | | 查看 修改备注 |
| | 28 | C17N15 | 46.88 | | 查看 修改备注 |
| | 29 | C17N15_1 | 46.88 | | 查看 修改备注 |
| | 30 | C16N16 | 50.00 | | 查看 修改备注 |
| | 31 | C16N16_1 | 50.00 | | 查看 修改备注 |
| | 32 | C15N17 | 53.12 | | 查看 修改备注 |
| | 33 | C15N17_1 | 53.12 | | 查看 修改备注 |

> 结构统计:统计所有浓度的结构数和百分比饼图。

MatCloud+高通量取代掺杂

> 建模功能组件化 拖拽式工作流> 图形化高通量建模 自动筛选生成可能结构

> 支持手动筛选输出结构及导出方式

▶ "0"机时完成取代掺杂建模

简便的自动化高通量取代掺杂建模操作, 您学会了吗?

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

