

吸附建模的最大障碍是什么？MatCloud+帮您一键解决！

上一篇文章，我们为大家介绍了自动化、高通量随机掺杂模型的搭建。除了取代掺杂这种方式以外，还可以通过搭建表面、界面结构来设计高性能新材料。构建表面后会导致表面原子的不饱和配位，通常通过吸附一些基团来饱和表面原子，也就是需要搭建相应的吸附模型；在催化、电池材料等领域，经常会设计各式各样的吸附剂，也会搭建各种吸附模型。今天给大家介绍高通量吸附建模神器—MatCloud+，帮你解决吸附建模的一切问题。

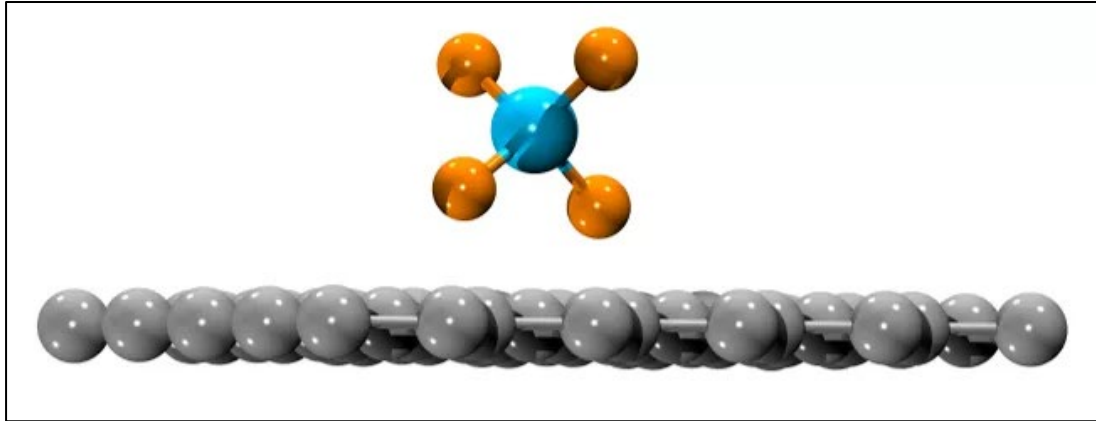


图 1 吸附模型示意图

吸附位点

常见的有三种吸附位点:顶位、桥位和穴位。每一种吸附位点又可能包括多个不同的位置。

- 1) 顶位 (Ontop) : 表面原子正上方的位置;
- 2) 桥位 (Bridge) : 某一个表面原子与它第一近邻原子的中间位置;
- 3) 穴位 (Hollow) : 三个、四个或者更多表面原子的中心位置。

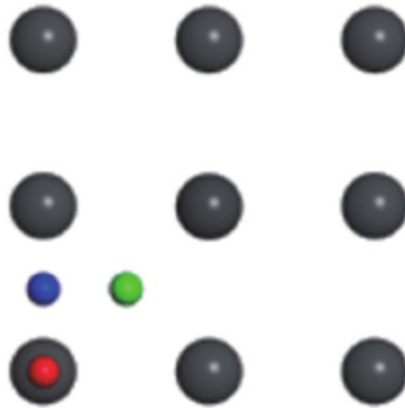


图 2 灰色的为表面原子；红色的为顶位位点；蓝色的为桥位位点；绿色的为穴位位点

吸附模型如何搭建

- 1、依据结构表面原子的周期性，存在着多个吸附位点，如何快速搭建包含所有吸附位点的模型？
- 2、所有吸附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、如何创建一定吸附浓度范围内的高通量吸附模型？

.....

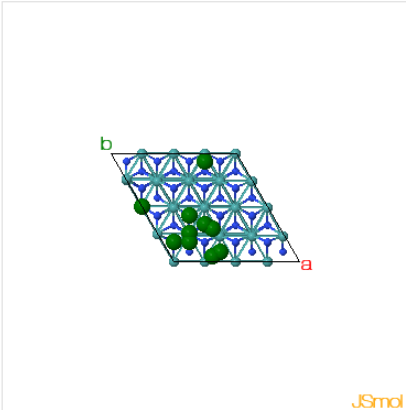
吸附建模同取代建模一样让人无从下手.....

MatCloud+, 不需要下载及安装任何软件, 通过云端操作, 简单参数设置, 即可完成高通量吸附模型的构建。

MatCloud+能够智能识别结构中的表面原子, 依据表面原子的周期性自动寻找所有可能的吸附位点, 高通量生成所有可能的吸附模型, 且支持根据对称性去除等价结构。

位点信息

MoN (2)



全部 添加位点

<input checked="" type="checkbox"/>	名称	类型	坐标		
<input checked="" type="checkbox"/>	位点1	顶位	X: 0.0004	Y: 1.7469	Z: 18.2273
<input checked="" type="checkbox"/>	位点2	顶位	X: 1.4372	Y: 4.1923	Z: 18.0934
<input checked="" type="checkbox"/>	位点3	穴位	X: 2.8750	Y: 3.3772	Z: 18.1387
<input checked="" type="checkbox"/>	位点4	穴位	X: 1.4376	Y: 2.5621	Z: 18.1834
<input checked="" type="checkbox"/>	位点5	穴位	X: 4.3126	Y: 0.9022	Z: 18.1834
<input checked="" type="checkbox"/>	位点6	穴位	X: -2.8750	Y: 5.0370	Z: 18.1380

确定 取消

图 3 MatCloud+所有吸附位点的生成

噔噔噔, 接下来, 我们以 Mo₂C 吸附锂离子为例, 说明 MatCloud+平台如何高通量得到吸附模型

MatCloud+高通量吸附建模实例

- 原模型: Mo₂C 表面结构
- 吸附原子: Li
- 吸附个数: 1
- 吸附表面: 上表面
- 吸附高度: 2 Å

(1) 上传结构

MatCloud+平台支持 cif、POSCAR、mol、pdb 等多种格式文件。

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	查看 编辑 下载 删除
2	graphite (0 0 1)-Li-1-2	Li1 C32	33	1 P1	2021-09-14 15:16:44	查看 编辑 下载 删除
3	graphite (0 0 1)-Li-1-1	Li1 C32	33	1 P1	2021-09-14 15:16:44	查看 编辑 下载 删除
4	graphite (0 0 1)-Li-1-0	Li1 C32	33	1 P1	2021-09-14 15:16:43	查看 编辑 下载 删除
5	graphite (0 0 1)	C32	32	1 P1	2021-09-14 15:12:44	查看 编辑 下载 删除
6	Cu	Cu32	32	1 P1	2021-09-08 16:39:46	查看 编辑 下载 删除
7	TiO2-Mn	O16Ti7Mn1	24	1 P1	2021-09-08 09:39:52	查看 编辑 下载 删除
8	TiO2-Mo	O72Ti32Mo4	108	1 P1	2021-09-08 09:39:52	查看 编辑 下载 删除

图 4 MatCloud+ 上传结构

(2) 创建高通量吸附建模 workflow

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 workflow 设计页面，并导入表面结构；

点击建模，将组件【吸附建模(原子)】拖至右边的 workflow 设计页面并连接成计算流程，如下图所示：



图 5 MatCloud+ 吸附建模 workflow

(3) 设置高通量吸附建模参数并提交计算

- 确定吸附原子类型：点选元素周期表中的原子类型；
- 点选确定吸附表面：上 / 下 / 双面；
- 手动设置基底到吸附物质的距离（吸附高度）；
- 吸附浓度：通过指定吸附物质的个数控制吸附浓度。

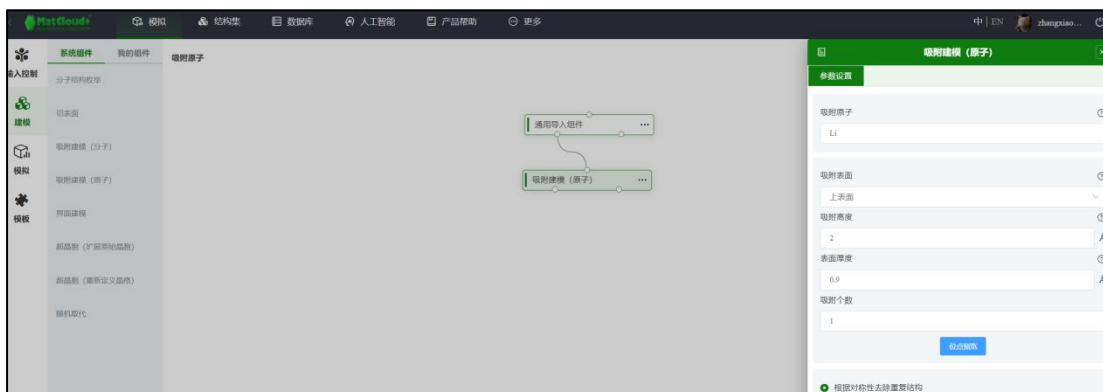


图 6 MatCloud+吸附原子参数设置

高通量生成多个吸附位点

名称	类型	坐标		
位点1	顶位	X: 1.4985	Y: 0.8652	Z: 5.5453
位点2	穴位	X: 2.9970	Y: 1.7303	Z: 5.5453
位点3	穴位	X: 2.9970	Y: 0.0000	Z: 5.5453
位点4	桥位	X: 2.9970	Y: 0.8652	Z: 5.5453

图 7 MatCloud+高通量吸附位点的生成

(4) 查看计算结果

➢ 展示所有吸附位点的吸附模型，并支持多行展示结构。

总数	结构名称	吸附质	吸附个数	吸附位点	备注	操作
1	Mo2C-Li-1-0.vasp	Li	1	位点0-顶位		查看 修改备注
2	Mo2C-Li-1-1.vasp	Li	1	位点1-桥位		查看 修改备注
3	Mo2C-Li-1-2.vasp	Li	1	位点2-穴位		查看 修改备注
4	Mo2C-Li-1-3.vasp	Li	1	位点3-穴位		查看 修改备注

图 8 MatCloud+高通量吸附建模结果

(5) 吸附结构的复用

MatCloud+搭建的高通量吸附模型支持 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。

导出方式	结构名称	吸附质	吸附个数	吸附位点	备注	操作
到数据库	Mo2C-Li-1-0 (3)-Li-1-0.vasp	Li	1	位点0-顶位		查看 修改备注
到结构集	Mo2C-Li-1-0 (3)-Li-1-1.vasp	Li	1	位点1-桥位		查看 修改备注
到本地	Mo2C-Li-1-0 (3)-Li-1-2.vasp	Li	1	位点2-穴位		查看 修改备注
	Mo2C-Li-1-0 (3)-Li-1-3.vasp	Li	1	位点3-穴位		查看 修改备注

图 9 MatCloud+高通量吸附模型导出方式

MatCloud+高通量吸附建模特点

- 云操作
- 建模功能组件化
- 拖拽式 workflow
- 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”机时完成建模
 - 注册即用

便捷的自动化高通量吸附建模操作，你学会了吗？偷偷说一下，此功能组件目前可以免费使用，如此实用的功能，大家还不赶紧用起来！

MatCloud+平台试用通道



扫码申请试用