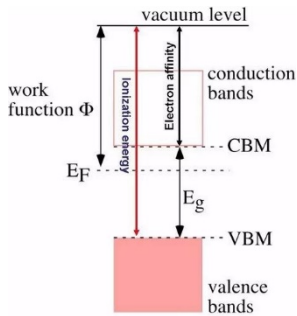


# 【功函数计算】内附 MatCloud+详细操作教程

## 功函数简介：

功函数（又称功函、逸出功）是指要使一粒电子立即从固体表面中逸出，所必须提供的最小能量（通常以 eV 为单位）。这里“立即”一词表示最终电子位置从原子尺度上远离表面但从宏观尺度上依然靠近固体。功函数不是材料体相的本征性质，更准确的说法应为材料表面的性质（比如表面暴露晶面情况和受污染程度）功函数是金属的重要属性。功函数的大小通常大概是金属自由原子电离能的二分之一。通常**功函数越低，体系中的电子越容易逸出参与表面的化学反应**。



## 公式：

从金属 M 的费米能级跨过不带净电荷的表面提取电子所需的最小功。它等于势能和费米动能之和，费米动能取反号：

$$\phi^M = -(V_e + \varepsilon_e^F)$$

其中， $V_e$ 是电子所处的静电势能，而 $\varepsilon_e^F$ 是费米能级。

## 应用案例：

光电阴极在被照射时会发射电子，由于卤化物钙钛矿具有廉价的生长技术、改进的载流子迁移率、低电子阱密度和可调直接带隙，使其成为下一代光电阴极材料的候选材料。功函数可表征体系电子逸出至表面所做的功，用来预测纯无机钙钛矿（ $\text{CsPbBr}_3$  和  $\text{CsPbI}_3$ ）作为光电阴极的可能性，本文以 *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2021, 12(27): 6269-6276 为例，详细说明如何在 MatCloud+实现表面结构功函数的计算。

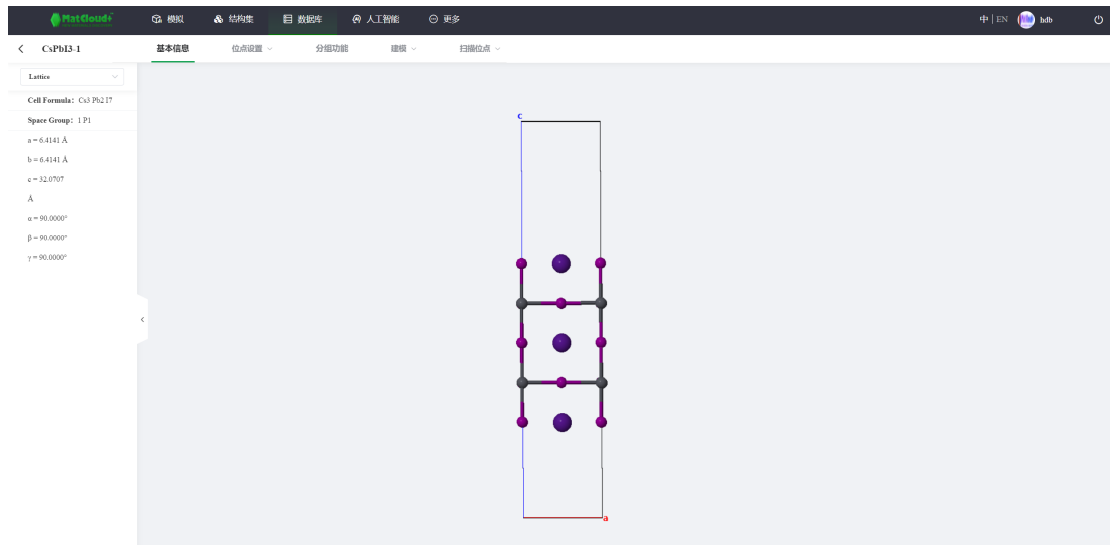
## 计算步骤：

- (1) 上传结构模型
- (2) 搭建功函数计算 workflow
- (3) 设置参数并提交计算
- (4) 计算结果下载及后处理

---

### (1) 上传结构模型

[点击 CsPbI<sub>3</sub> \(1 0 0\) 下载对应表面结构](#)，或导入自定义的表面结构，将结构从本地上传至平台数据库。



## (2) 搭建功函数计算 workflow

点击【输入控制】，将【通用导入组件】拖拽至右边的 workflow 设计页面；  
 点击【模板】—【VASP】，将组件【结构优化】、【静态计算】拖拽至 workflow 设计页面，如下图所示：



## (3) 设置计算参数并提交

### 1) 【通用导入组件】参数设置

单击【通用导入组件】组件设置按钮[...], 单击[参数设置], 选择[从数据库导入], 将 CsPbI<sub>3</sub> 结构导入【通用导入组件】后, 单击[保存]按钮。

### 2) 【结构优化】参数设置

单击【结构优化】组件设置按钮[...], 单击[参数设置]。

#### ① Geometry Optimization 参数设置：

{Convergence Tolerance}: 采用力收敛标准 (Force), 手动更改值为 0.01。

#### ② General Setting 参数设置：

{Energy Cutoff}: 手动输入数字, 参数设置为 450。

### 3) 【静态计算】参数设置

【静态计算】同【结构优化】参数更改一致，将{Energy Cutoff}设置为 450 eV。计算功函数需要加入特殊参数，详细内容如下。

#### ① {Customized}参数设置：

分别在左右两个输入框添加参数 LVHAR 和.TRUE. (注意有英文状态下的点，此参数用于输出计算功函数所需的 LOCPOT 文件)，确认无误后单击[保存]按钮，提交计算。

### (4) 计算结果下载及后处理

MatCloud+平台的【静态计算】结果，可视化的呈现计算体系能量、Bader 电荷、功函数和收敛详情情况，本例中静态计算功函数直接输出对应数值，步骤如下：

1) 计算结束后，点击【静态计算】计算结果，页面直接输出功函数数值 4.609 eV，与文献的数值（下图高亮数值）基本一致。

	Work Function	(100)	
		2x2x3	2x2x5
CsPbI <sub>3</sub>	Before Optimization	3.60	3.54
	After Optimization	4.86	4.69
	Before Optimization	3.46	3.27

功函数的计算教程到此就结束了，想要获得详细的操作内容请私信我们。

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

