

# 如何计算吸附能？超全实操解析

摘要：吸附能计算详细流程

社群：如何使用理论计算获得吸附能？快点击原文 get 新技能吧！

在我们阅读文献和做计算时，常常会用到吸附能的计算。那我们如何获得吸附能呢？这里小编跟大家讲解一下，看完就知道如何计算啦！

## 1. 什么是吸附能？

首先，我们要明白什么是吸附能，它的定义是什么？顾名思义，吸附能是指吸附物 A 吸附在基底 B 过程中产生的能量。吸附能  $E_{ads}$  的计算公式为：

$$E_{ads} = E_{AB} - E_A - E_B$$

其中， $E_{AB}$  是指物质 A 吸附在基底 B 后体系 AB 的能量， $E_A$  是指物质 A 的能量， $E_B$  是指基底 B 的能量。

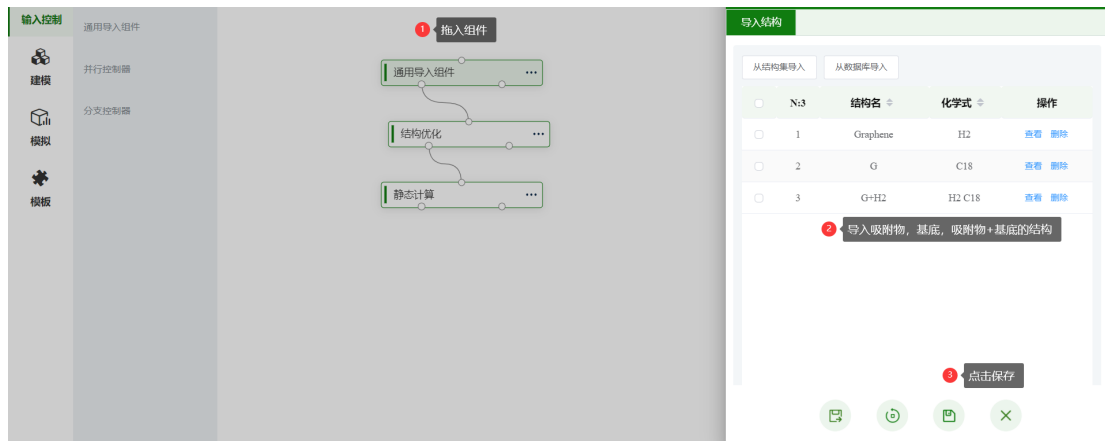
## 2. 如何获得吸附能？

我们用 MatCloud+ 材料云，讲解如何用第一原理能量计算。这里选 MatCloud+ 的原因，是因为它仅需浏览器就可开展材料计算，无需下载安装任何软件，非常便捷。首先，在百度上搜索“Matcloud+”平台，进入官网，获得吸附物 A、基底 B、物质 AB 的能量我们只需要做一步几何优化。详细操作方法如下：

### 2.1 通用导入组件

先【新建工作流】，接着如图所示拖入【通用导入组件】和【结构优化】

接着，点击通用输入组件—参数设置，此处我们选择从【数据库】导入  $H_2$ （吸附物 A）、石墨炔（基底 B）、 $H_2$  吸附于石墨烯（物质 AB）的结构；



## 2.2 结构优化参数设置

(注：本部分参数设置仅供参考，可根据自己的实验需求进行修改)

结构优化中的参数的详情我们可参照“结构优化与高通量结构优化”操作教程详情页，点击结构优化—参数设置：① Geometry Optimization 一系列参数设置：

【Algorithm】参数：结构优化算法选用“RMM-DIIS”

【Convergence Tolerance】参数：结构优化采用力收敛标准（Force），设置为 0.02 eV/Ang

其他选项均按默认参数设置；

☰结构优化✕

<Geometry OptimizationGeneral SettingSCFHPCCustom >

**Algorithm** ?

RMM-DIIS▾

**Convergence Tolerance** ?

Force

0.02eV/Ang

Energy

**Max.iterations** ?

100

**Optimization Control** ?

relax ions

change cell volume

change cell shape

**External Pressure** ?

0GPa



② General Setting 一系列参数设置:

【Energy Cutoff】:平面波截断能设置为 750 eV(可根据自己的要求修改)

其他选项均按默认参数设置;

结构优化

Geometry Optimization | **General Setting** | SCF | HPC | Custom

**Quality** ⓘ

Normal

Energy Cutoff ⓘ

750 eV

**Functional** ⓘ

GGA GGA-PBE

Dispersion Correction ⓘ

**Pseudopotentials** ⓘ

PAW-PBE

More

**Spin & Magnetism**

Spin Polarized ⓘ

**Strong correction** ⓘ

LDA+U

**Charge State**

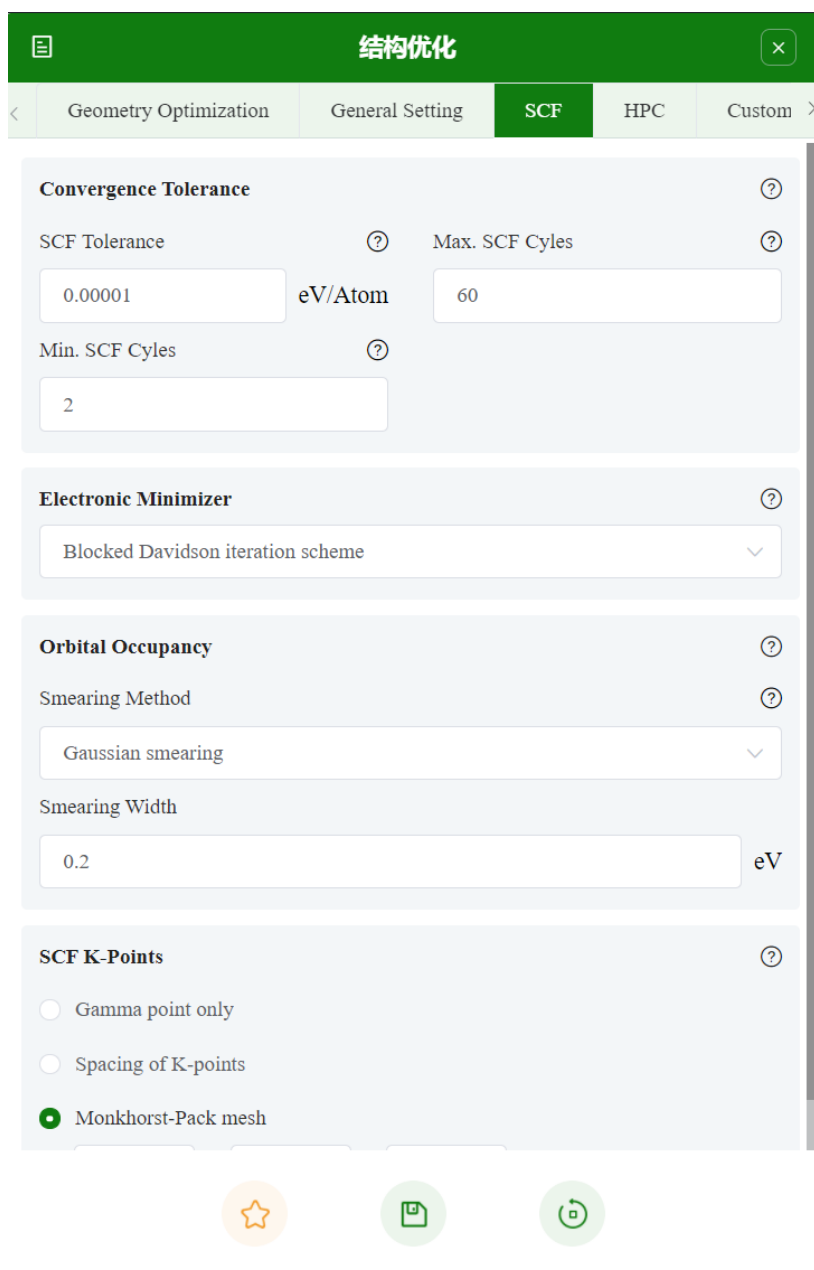
☆ 📄 ↻

③ SCF 一系列参数设置:

【SCF Tolerance】: 电子自洽迭代收敛标准设置为  $10^{-5}$  eV/Atom

【SCF K-Points】: k 点设置为 6x6x4

其他选项均按默认参数设置;



#### ④ HPC 一系列参数设置:

此列主要设置计算时选用的节点数以及每个节点的核心数, 此例按默认参数设置;

所有的参数设置完毕后点击【Save】按钮。

### 2.3 提交任务

参数设置完毕后, 点击右上角的提交按钮, 提交任务。



## 2.4 任务状态查看

转圈表示此组件正在顺利运行

对勾表示此组件运行结束

暂停表示此组件手动暂停

叹号表示此组件计算出错

✔ 计算结束    ⏸ 人为停止

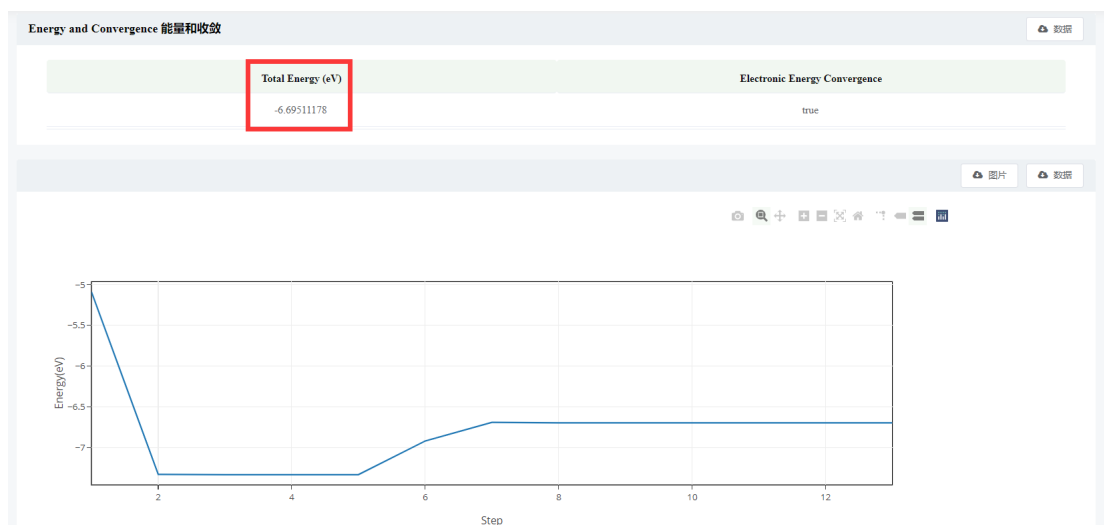
🔄 运行中    ❗ 任务报错

## 2.5 计算结果查看

点击任意组件—查看结果，即可得到结果详情：



点击结构优化—查看结果—后处理—查看，我们就可以分别得到 3 个物质的能量 E。



接下来，按公式  $E_{\text{ads}} = E_{\text{AB}} - E_{\text{A}} - E_{\text{B}}$  计算，我们就可以得到吸附能了。

注：关于结构优化、DOS、能带、吸附模型的详细操作视频可前往哔哩哔哩观看：

[https://www.bilibili.com/video/BV1jL4y1t7Bw?spm\\_id\\_from=333.999.0.0](https://www.bilibili.com/video/BV1jL4y1t7Bw?spm_id_from=333.999.0.0)

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

