

材料工坊使用教程

目录

材料工坊使用教程	1
晶体结构显示	2
晶体结构导入	2
晶体结构显示	
晶体结构编辑	
新增、删除、编辑原子	
修改晶格常数	13
建立超晶胞和寻找原胞	14
新建晶胞	
批量切表面	
晶体结构分析	
衍射图谱分析	
径向分布函数分析	
Hylanemos 计算	
能量与性质计算	
电子结构分析	
声子分析	
力学分析	
电荷密度与波函数分析	
结构优化与分子动力学计算	
过渡态计算	
P2D 计算	
高级计算	
电压曲线	
晶体形貌	
离子电导率	
CP2K 输入文件	
能量计算设置	
结构优化计算设置	
分子动力学计算设置	
Lammps 输入文件	79

材料工坊中是屹艮科技旗下一款跨尺度材料模拟平台,其中包含开箱即用的中文图形界面和 基于第一性原理的 DFT 计算软件 Hylanemos。它帮助用户完成模型建立、任务创建、计算模拟 和数据分析这一完整流程,实现对材料物理化学性质和性能的模拟与预估。

本教程分为八部分,分别是晶体结构显示、晶体结构编辑、晶体结构分析、Hylanemos 计算、 P2D 计算、高级计算、CP2K 输入文件和 Lammps 输入文件。



材料工坊使用教程

晶体结构显示

晶体结构导入

打开材料工坊后,软件显示如下界面。



在当前界面中点击"开始"中的"打开", 会弹出如下对话框。

		iam itu			
← → × 个 → ↓ 组织・新建文件共	(由時) 大地道会(い)) (5枚演会)		046 20th	×	
← → 、 ↑ ¹ → 1 组织 ・ 新建文件夫	(由時)本地磁盘(F·)、伝物違元。				
组织 新建文件夹	number - incommunication -	v C	.○. 在结构演示中	搜索	
			≣ •		
> 🊖 快速访问 🛛	名称	修改日期	类型	大小	1
🔤 🐙 🛅 🛷 🗧	wulff_task	2022/7/18 14:55	文件夹		
🛓 下载 🛷 📑	# 333.cif	2022/7/25 14:29	CIF文件		•
	Co(HO)2.cif	2022/7/18 11:10	CIF文件		A Maria
logs *	Co4Ni(HO)10_2_0.cif	2022/7/18 10:55	CIF文件		itation
> 🔷 OneDrive - Persc 🦂	Co4Ni(HO)10_2_1.cif	2022/7/18 10:55	CIF 文件		
> 🏊 WPS网盘	Co4Ni(HO)10_2_2.cif	2022/7/18 10:55	CIF 文件		
> 💭 此电脉	Co4Ni(HO)10_2_3.cif	2022/7/18 10:55	CIF文件		
> 🖕 🖬 1771/5				-	
文件省(N)	ş	~	All Files (*.*)	~	
			打开(0)	取消	

用户找到结构文件所在的文件目录,然后选择相应的结构文件,再点击打开即可打开该晶体结构 文件。当前支持的结构文件类型包括有 cif 文件、vasp 文件 (POSCAR)、xyz 文件。这里以 Co(HO)2.cif 为例,打开一个 Co(OH)2 的晶体结构。

文件打开后显示如下的晶体结构视图,表明晶体结构文件已经成功导入。

材料工坊使用教程



晶体结构显示

晶体结构视图左上角为晶体视图和晶格编辑的功能,红框中从左到右的功能分别为:

- 1. 从 a 轴俯视晶体
- 2. 从 b 轴俯视晶体
- 3. 从 c 轴俯视晶体
- 4. 从垂直于 bc 轴所在的平面俯视晶体
- 5. 从垂直于 ac 轴所在的平面俯视晶体
- 6. 从垂直于 ab 轴所在的平面俯视晶体
- 7. 选择原子
- 8. 旋转视图
- 9. 移动视图
- 10. 缩放视图
- 11. 编辑原子
- 12. 显示球棒模型
- 13. 显示空间填充模型
- 14. 显示多面体模型
- 15. 显示晶格模型
- 16. 显示棒模型

右上角也为晶体视图和晶格编辑的功能、红框中从左到右的功能分别为

- 1. 打开文本
- 2. 原子移动
- 3. 键计算
- 4. 对称性
- 5. Isosurface
- 6. 建立超胞
- 7. 寻找原胞

材料工坊使用教程

- 8. 撤销操作
- 9. 恢复操作
- 10. 恢复初始结构
- 11. 另存为
- 12. 导出图片

下面将逐个介绍晶体结构显示的功能



A. 旋转、缩放、平移

旋转: 点击旋转视图图标, 然后长按鼠标左键, 拖动鼠标可以旋转视图; 或者直接滚动鼠标滚轮 进行缩放。

缩放:点击缩放视图图标,然后长按鼠标左键,拖动鼠标可以缩放视图,鼠标向下为缩小,向上 为放大。

平移: 点击移动视图图标, 然后长按鼠标左键, 上下左右拖动鼠标可以平移视图。

B. 晶体显示模型

球棒模型:点击球棒模型,此时原子显示为球,键显示为棒。

材料工坊使用教程



空间填充模型:点击球棒模型,此时原子显示会填充空间。



空间填充模型:点击多面体模型,此时原子和键会连成多面体。

材料工坊使用教程



晶格模型:点击晶格模型,此时只显示晶格,不显示原子和键。



棒模型:点击棒模型,此时只显示键,不显示原子。

材料工坊使用教程



C. 沿轴、面显示

点击如下按钮,将从对应的轴或面方向看向晶体。

- 1. 从 a 轴俯视晶体
- 2. 从 b 轴俯视晶体
- 3. 从 c 轴俯视晶体
- 4. 从垂直于 bc 轴所在的平面俯视晶体
- 5. 从垂直于 ac 轴所在的平面俯视晶体
- 6. 从垂直于 ab 轴所在的平面俯视晶体

对于 Co(OH)2 晶体,从 c 轴俯视晶体如上面的图所示,从 a 轴俯视晶体和从垂直于 ac 轴所在的 平面俯视晶体的视图分别如下面两图所示

Ξ Δ Δ Δ Δ Δ Δ Δ HE HE<	So(HO)2.cif - Matter Craft	- 0
State webweck000000000000000000000000000000000000	Expression Contraction and and and and and and and and and an	
a b c a' b' c' () a' + 12 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	Starter webview:Co(HO)2.cif ×	
b	abca*b*c*() 中 中 や � � ❷ □ ②	○品情参数 (用)
# 127 0 0 b 100 278 c 0 4.78 B 100 278 C 0 4.78 B 100 100 C 0 4.78 B 100 100 C 0 0 B 100 100 C 0 0 B 100 100 C 0 0 C 0 0 C 0 0 0 C 0 0 0 C 0 0 0 C 0 0 0 C 0 0 0 C 0 0 0 C 0 0 0 C 0 0 0 C 0 0 0 C 0 0 0 C 0 0 0 C 0 0		angs 🔘
b f60 2280 f0 c 0 4.778 C 0 4.778 C 0 4.778 C 0 0 C 0<		a (3.217) (0 (0)
С С С С С С С С С С		b (-1.60) (2.786) (0
b C </th <th></th> <th>c 0 0 4.778</th>		c 0 0 4.778
B C <th></th> <th>◎枯特参数</th>		◎枯特参数
		Site x y z
		●H → → → ④
		⊘ ○ ○
		0
b c		Site I(A) C L S V
		OH 0.46 □ □ ☑
		Atom x y z

材料工坊使用教程



D. 结构显示模块修改

结构显示模块在下图中红框处,在模块中可以选择和修改原子、键和多面体的各种显示状态。



在原子模式下,修改 r(A)的值,可以修改原子显示的半径,如下图为将 Co 元素的半径修改为 2 的结果。

材料工坊使用教程



在原子模式下,点击 C 列下的色块,可以修改原子显示的颜色,点击后将显示下面的颜色选择 框,选择需要修改的颜色后点击确定,原子会被修改为对应的颜色。下图显示将 O 元素改为橙 色的结果。

		So(HO)2.cif - Matter Craft		- 6 ×
三文件 日 日 日 日 C 开始 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日) 編輯 話件 建极 視問 日 另存为	11 A 21 A A A A A A A A A A A A A A A A		
Starter webview:Co(HO)2.cif ×				★ ¥
a b c a* b* c* 🖸 🗗 🕂 14 🗇 🏵 🗿 🕹	000		0	○品幣参数 (开)
b a				Imple Imple <th< th=""></th<>

材料工坊使用教程



点击 L 列下的框选,可以选择是否显示对应元素/原子的标签,选择 Co 和 O 的 L 后,显示标签 如下图



点击 S 列下的框选,可以选择对应的元素/原子。点击 V 列下的框选,可以选择是否显示对应元素/原子,取消 O 的 V 后,显示如下图。

材料工坊使用教程



E. 对称性

点击红框处的对称性,然后会显示晶体结构的对称性信息。

🎷 Co(H0)2.cif - Matter Craft	- 6 >
(1) 국가 제품 제품 제품 제품 제품 가(2) C C C C C C C C C C C C C C C C C C C	
HYLANEMOS 世紀 新期以北 IE品 分子設力学 IJIII本 美限計算 cp2k Lammps p2d機型 号入任务	
webview.Co(H0)2.cli ×	(> ≅ *)
(abca*b*c*:)☆+14 今後 ● 8 □ 0) 図 5 - ●●● 5 ⊂ 8 □ 同時日	A ● 副标参数 开 ● A A A A A A A A A A A A A A A A A A
	a (3.217) (0 (0) b (1.60) (2.786) (0)
对称性 ×	c (0 (0 (4.778)
用期性	◇詰构参数
空间群 P-3m1 空间群编号 164	Site x y z
点群	он <u>о</u>
編成 三月編成 布拉の指子 第第小小角	Ø0 Q
	 ● 結构显示 ● 結构显示
	Site r(A) C L S V
	♥H 0.46 □ □ □ ♥
	O 0.74
	◇ 岳构追踪
a	Atom x y z
	Q

F. 键修改

点击红框处的键修改,然后会显示键修改的设置页面。

在这里可以设置每种元素之间的键的最大键长,新增一种键或删除已有的键。

材料工坊使用教程

	9 Co	o(HO)2.cif - Matter Craft	- 0 >
	建築 規則 計算 分析 裕助		
HYLANEMOS 性质 结构优化 能量 分子动力学 过度态	こ こ → 高级计算 cp2k Lammps p2d機型		
webview:Co(HO)2.cif ×			(*±*)
a b c a* b* c* 🖸 🗗 🕂 🌣 🏵 👁 🖓 🗖 🛈		(□☆−○◎○⊃⊂⊠≣⊠)	→品格参数 (开)
		線计算	angs 💿
	•		a (3.217) (0 (0)
	Y Y		b (-1.60) (2.786) (0)
	化学键	×	
			4.//8
		你复致Li人 新增 新峰	●結构参数
	搜索方式 元素 元素	最小罐长 最大罐长	Site x y z
	element v Co v H v	0 1.9278	Ф Со
• • •		0 2.40493	00 0
		0 17	0
			● 后梅最示 (原子)●
			Site r(A) C L S V
	(iiii)	BOH	●H 0.46 □ □ ●
b	_		
a a	-	•	Atom x y z
L			
0			Q.

删除 C-O 键之后,结构中不再显示 C-O 键了。



晶体结构编辑

新增、删除、编辑原子

A. 编辑原子

1. 拖拽原子

点击晶体结构视图左上角的编辑原子, 鼠标长按一个原子并进行拖拽, 即可移动原子位置。

2. 使用结构参数面板编辑原子

在右侧的结构参数,可以修改原子的 x、y、z 坐标;点击 x 可以删除原子;点击+可以新增原子, 点击+后填入元素种类和坐标即可新增原子。

材料工坊使用教程



新增 Si 原子、删除 Co 原子后结构如下图

🌮 Co(H0)2.cif - Matter Craft	- 6 ×
王xrt B B B C (<u>現象)</u> 編集 編件 建成 総裁 計算 分析 考約	
U. C. G. G. G. G. S.	
Startier webviewC0(H0)2.dl ×	
(abca*b*c*()☆+14 ◇●●□◎) (◎ 5 ⊄ 0 5 C 8 8 8	
	angs 🔘
	a (3.217) (0 (0)
	b (-1.60) (2.786) (0
	A 118
	Site x y z
	ØH ◎
	H1 0.00000 1.85757 2.02268
	00 8
	O3 0.000001 1.85757 1.04914!
	osi 0
	Site r(A) C L S V
	⊘H 0.46 □ □ ☑ 00 0.74 □ □ ☑
	©Si 1.18 ■ □ □ ☑

修改晶格常数

下图红框处为晶格参数的显示, 右上角的开关控制显示方式, 开时显示三个晶轴的长度和三个角的角度, 关时显示矩阵。单位可以在下方修改, 可显示为 angstram、bohr 或 nm。直接修改下面的数值, 就可以修改对应的晶格常数。

材料工坊使用教程



建立超晶胞和寻找原胞

点击超胞按钮, 在超胞设置的弹框中输入 a、b、c 三个方向的超胞倍数, 点击确定, 即可建立超 胞。

	🎔 Co(HO)2.cif - Matter Craft		- 0
三文件 日 日 日 つ (一) 用約 編集 編集 (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1)	an Ka 11 94 Ma		
Starter webview:Co(HO)2.cif ×			
a b c a* b* c* [3 d* ⊕ 14 � ❸ ● ❷ 🗆 ① ①		① 缶 & ① 5 C 図 目 図	◎品幣参数 ①美
		超態	angs 💿
			α (3.217) α (90)
			b (3.217) β (90
	Supercell		с (4.778) ү (119.9)
			◇结构参数
	supercen (3,1,1,4)		Site x y z
			●Co 0
			Cool 0.00000 0.00000 0.00000 0 NH - - - - 8
			H1 1.60870 0.92878 2.75582 🔇
			H2 0.00000 1.85757 2.02268 (0)
	(ato: 10%)		
 .	• •		⊗H 0.46 □ □ ☑
			●信构追踪 原子 ●

建立的超胞如下图。

材料工坊使用教程



点击原胞按钮,软件会自动寻找当前结构的原胞,对上图的晶胞点击原胞后,找到如下图所示的 原胞。

	🍄 Co(HO)2.cif - Matter Craft	- @ ×
三文件 日間 目 り ご 开始 編編 脳件 建板 税間		
0 1 6 6 8 8		
资源管理器 新建 打开 打开目录 保存 另存为		
Starter webview:Co(HO)2.cif ×		(VE*)
(a b c a* b* c* [] 0* ⊕ 1↓ ♦ ⊕ ● Ѳ □ ᠐)	0 fa 4	
		(angs 💿
		a (3.217) α (90)
		b (3.217) β (90)
		C (4.778) Y (119.9)
		© Co ◎
		Co0 0.00000 0.00000 0.00000 0
		⊘H 0 H1 -16087(0.92878 -2.0226) 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
		H2 -1.6087(-0.9287) -2.7558; 8
n x		© · · · Q
		◎ 结构显示 [原子 ◎]
ь		Site r(A) C L S V
a 룾		
	•	● 信梅追踪 原子 ◎

新建晶胞

如下图红框处,点击建模-新建结构

材料工坊使用教程

	Starter - 2019 - Matter Craft	- D ×
- 文件 日 日 日 つ ご 一 开始 編編 新件 建模 税間		→ 抽機上後
		and the second sec
新建结构 超图 原图 随机取代 直空层		
资源管理器 v Starter ×		
(0 HHH)		
C SOLA		
C_mp-48_conv		
🚦 diffusion.json	Mathau Cuaft	
🖬 disp1-POSCAR	Watter Craft	
🖬 disp2-POSCAR	Materials Computation	
🚦 graphite (3).cif		
🖬 graphite-1.cif	Chard	
graphite-2.cif	Stdit	
🛙 graphite-551.cif	New File	
graphite-Li-H.cif	Open File	
🔲 graphite-Li-H.v	Open roider	
🗧 graphite-Li1.cif		
II graphite-Li2.cif		
🖬 graphite-Li3.cif		
🖪 graphite.cif		
E H3-0.cif		
H3-1.cif		
Ifpo_entries.json		
🖬 Licif		
LiFe2(PO4)2_1		
LiFe2(PO4)2_1		
LiFe2(PO4)2_1		
E LiFePO4-1.cif		
LiFePO4-2.cif		
LiFePO4.cif		
ELPS-d1.cif		
ELPS-d5.cif		

选择新建文件的路径并输入文件名,点击保存



会生成一个新的结构,这时使用之前的修改晶格常数和新增编辑原子的方法就可以建立新的晶体结构。



材料工坊使用教程

	🎷 unnamed.cif - 脑狗 - Matter Craft 🛛 🚽	đΧ
三文4 台 曽 曽 う ご 开始 編編 新件 建模 税間 计算	分析 帮助 🔗 能推上修	
le ⊨ ⊂ Q Q		
新建结构 超限 原肥 随机取代 真空层		
资源管理器 - Starter webview:unnamed.cit ×	a	
②结构 (a b c a* b* c* (3 d* + 14 ◆ ● ● ● □ ①)	(0 ft な 0 5 C 8 ft 12) ◎##### (#	
C_mp-48_conv	(angs ())	
E diffusion.json		5
disp1+OSCAR		5 📗
I graphite (3).cif		ς Π
graphite-1.cif		
graphite-551.cif	◎ 品約参数	
graphite-Li-H.v	Site x y z	0
graphite-Li1.cif	0	
graphite-Li2.cif	● 結构显示 (展示	70
graphite.cif	Site r(A) C L S	v
H3-0.cif	●H 0.46 □ □ □	
Ifpo_entries.json	●島物組織	70
LLCIT LLFe2(PO4)2 1		
E LiFe2(PO4)2_1		_
LiFe2(PO4)2_1		
ILIFePO4-2.cif a		
E LiFePO4.cif		
ELPS-d5.cif		

批量切表面

如下图红框处,点击建模-真空层。

💅 TiO2.cif - 1849 - Matter Craft	- ð ×
Experies and the sense and the sense of the	⊗ 28128
资源管理器 > webview:TiO2.cif ×	×=+
Import (a) C (a) C (c) (a) C (① 4 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ● Entitient ● Entitient

这里支持两种切表面的方式,一种是指定一个最大的米勒指数面,一种是指定一个特定的米勒指数。当使用前者时,会遍历所有小于等于最大米勒指数的晶面进行切表面;使用后者时,只会切指定的米勒指数面 hkl。

根据切面的需要切出 slab 的厚度、真空层的厚度、最多可切断多少键,并选择是否是生成对称 的 slab、非极化的 slab、是否将 slab 放在晶格中心。设置完成后点击生成表面结构。



材料工坊使用教程

		\$	TiO2.cif - 结构 - Matter Craft	- 5 ×
三文件 日 日 日 日 つ ご 一开始 編編 編件				参 接触上後
	比量切表面		×	
	teren Bredish ward.			
INTERIOR BURE ARE REPART. IN SEC.				
		指定米勒指数	指定最大米勒指 2 指定一个米勒指 数	
statester webview.hoz.of *				
a b c a* b* c* C □* + 1			h 0 0	
H3-0.01			k 0	angs 🕥
Ifpo entries.ison			1 1 0	3 295 0 0
Li.cif				
E LiFe2(PO4)2_1		最大米勒指数	2	Þ (0) (4.59) (0)
LiFe2(PO4)2_1		and a labor strategy		¢ (0) (4,59)
LiFe2(PO4)2_1		REC 1 YOLDLUGH (SK)	5	C 17 (1) 40 M
LiFePO4-1.cit		真空层厚度	10 A	C LUMPERA
LiFePO4-zit				Site x y z
LPS-d1.cif		最多可切断的键数量	10	
🖬 LPS-d5.cif		83040HPM	La	
LPS-d6.cif		7E1034CE186A3404D30	Clark Clark	•
LPS.cif		星态口生成非极少的	0clah	● 结构显示 原子 ●
SI CH (1 0 0) eff		ALL ALL ALL AND THE	2100	Site r(A) C L S V
Si 1.0 cif		是否將生成的slabf	5为原则.	STi 1.47
Si 2 0.cif				🔊 O 0.74 📒 🗌 🖓 🖌
Si_2_1.cif		slab是否放在扁槽中	-0	Art Malg Pr
Si_3_0.cif				
Si_3_1.cif				Atom x y z
Si-1.cf				
E Sicif	(生成表面结构	1036	
TiO2.cif				
🗉 unnamed.cif				

选择输出文件要放的文件夹,点击选择文件夹。

请设置保存文件目录								9 - Matter Cr	raft				
	> DELL			~	C P	在 DELL 中!	受索				,		
目织 • 新建文件夹													
🔶 快速访问									加定一个米勒加			-	
▲ 桌面 ≯ 业 下载 ≯	.anaconda	.burai	.conda	.config	.continuu m	.ipynb_che ckpoints	.ipython						○品信参数
□ 文档 ★ ■ 図片 ★								3					angs
ConeDrive - Perso	.julia	.jupyter	.local	.matplotli b	.matter_cr aft	.ms-ad	.spyder-py 3						b 0 4
▲ WPS网盘									À				• • •
💭 此电脑	.ssh	.texlive20 21	.vscode	3D 对象	anaconda 31	AppData	electron-q uick-start		Å				◎結构参数
0 12 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	-	-	-	-	1997	-	-						Site x y
×1	+*				选	译文件夹	IC/M						00
Li o'uoch	11												0
prim-POSCAR.cif						是否只生成	IEt版化出的slab						●結构量示
Si (2) (-1 0 0).cif						是否这生现	Oslabse to RIM						Site r(A) C ● Ti 1.47
Si 2 0.cif													OO 0.74 📕 🛛
Si_2_1.cif						slab是否放行	E晶楷中心						
Si_3_0.cif		D											
Si_3_1.cif													Atom x
SI-1.01		and the second											
E Si con cif	c				9	成表面结构				取消			
Si-con.cif					_	and the second sec							
Si-con.cif													

在设定的文件夹可以找到切出的表面结构。

材料工坊使用教程

		🎷 TiO2.cif - 结构 - Matter Cra	ft	- 🗗 ×
三文件 日日日 日 し て 开始 🧯	明 時件 建模 规图 计算			る
			- 0 >	
THESONS REED BOID				
		- ■ 重看		(121)
●结构 目 H3-0.cif ← → × ↑	此电脑 > 桌面 > 001 > 0	✓ C ○ 左0中接索		
目 H3-1.cif	名称 作品	は日期 美型 コ	tuk	angs 🕥
Licif # #	TIO2.cif 202	2/8/5 14:36 CIF 文件	2 KB	a (2.96) (0) (0)
■ LiFe2(PO4)2_1 ↓ 下転 #				b 0 (4.59 0
□ LiFe2(PO4)2_1 □ 文档 ★				c 0 0 (4.59)
□ LiFe2(PO4)2_1 ■ M				
LiFePO4-1.cif				●后相参数
LIFEPO4-2.Cli				Site x y z
LPS-d1.cif				
LPS-d5.cif				
IPS-d6.cif > III 此电脑				•
ELPS.cif > 2 网络				● 結构显示 原子 ●
Si (2) (10 0) cit > A Linux				Site r(A) C L S V
Si 1 0.cif				●Ti 1.47
■ Si_2_0.cif 1 个项目			=	■ 00 0.74 ■ 0 9
Si_2_1.cif			1	
Si_3_0.cif				
Si_3_1.cit				Atom x y z
Si-ron cif	1	1	0	
Si.cif	•			BHHHMMER CAUsers DELLADeckton
TiO2.cif				course anoth
unnamed.cif				source. graph

切出的其中一个表面结构如图所示。

	\$	TiO2.cif - 结构 - Matter Craft		- 0
三文件日日日日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日	重件 建皮 税用 计算 分析 1			8 1838.149
资源管理器 ~ webview:TiO2.cif web	oviewcTiO2.cit ×			· = # 1
Image: Big S Websige: Big S Image: Big S Image: Big S Image: Big S			04405C888	Image Image <td< td=""></td<>
unnamed.cif				

晶体结构分析

衍射图谱分析

如下图红框处所示,点击"分析"-"结构"-"衍射图谱"进行衍射图谱的分析。

材料工坊使用教程



设置中勾选"计算 XRD 粉末衍射图谱", 下方的辐射源可以选择 'CuKa', 'CuKa2', 'CuKa1', 'CuKb1', 'MoKa', 'MoKa2', 'MoKa1', 'MoKb1', 'CrKa', 'CrKa2', 'CrKa1', 'CrK b1', 'FeKa', 'FeKa2', 'FeKa1', 'FeKb1', 'CoKa', 'CoKa2', 'CoKa1', 'CoKb1', 'AgKa', 'AgKa2', 'AgKa1', 'A gKb1'中的其中一个, 不同的辐射源会得到不同的衍射图谱, 这里选择CuKa。然后填写衍射角的 范围, 这里使用默认值0和90。点击输出衍射图谱,即可得到衍射图谱。



得到的 XRD 粉末衍射的图谱如下图右侧所示,其中横坐标为衍射角度,纵坐标为衍射强度。点 击右上角红框处的 ^业 图标,可以将数据导出到 csv 文件当中。

材料工坊使用教程



选择输出文件的目录并设定好文件名,即可输出数据为 csv 格式。



XRD 的衍射图谱的数据的 csv 文件打开如下图所示。

材料工坊使用教程

F15		€ fx														
A	В	C	D	E	F	G	Н	1	J	K	L	М	N	0	Р	-
1 2θ(°)	Intensity(a.	1.)														
2 18.020088	0. 4076053															
3 18.020112	0. 4075945															
4 18.020136	0.4075918															
5 18.946783	100															
6 26. 263431	0.0754128															
7 26. 263471	0.0754096															
8 26. 263488	0.0754094															
9 26. 263517	0. 1508193															
0 26.263534	0.0754183															
1 31.477602	12.078656															
2 31.477645	12.07861															
3 31.477688	12.0788															
4 36.99715	3.9137804															
5 36.997187	32.947019															
6 36.997252	32.946834															
7 36.997275	36. 860679															
8 36.997288	3.9137485															
9 38. 437915	4.0123966															
0 41. 44307	0.0198572															
1 41. 443146	0.0198633															
2 41. 44319	0. 0397208															
3 41. 443207	0.0198575															
4 41. 443252	0.0198597															
42.757717	0.009215															
6 42.757758	0.0092144															
7 42.757769	0.0092116															
8 42, 757818	0.009215										- 1					
9 42, 757829	0.0184297															
0 40 050111	0.0106445															

在图谱中将鼠标放在衍射峰的位置处,可以看到该衍射峰对应的角度、强度和晶面指数。



径向分布函数分析

如下图红框处所示,点击"分析"-"结构"-"径向分布函数"进行结构的径向分布函数的分析

材料工坊使用教程



分析的设置面板如下图所示,"用于计算的原子1"和"用于计算的原子2"两个参数用于设置要分析 的原子,可以选择的有当前结构中的全部原子和某一种元素(如下方图所示)。"截断半径"用于 设置计算多少半径范围内的径向分布函数,"间隔"用于设置横坐标的取点密度,"平滑系数"用于 设定如何平滑径向分布函数的曲线。

设置完成后,点击分析按钮即可得到径向分布函数。

第一性原理	行動間譜 径向分布函数 相知 ×	探旗RC 高级分析				(*=*)
abca*b*c*Ω ਰਾ + 14 ⊗ & ● ⊗	□ ① 径向分布函数RDF	->	\bigcirc	○ 行 枝 ① 5 ご 図 面 録 ×	● 品格参数 angs ● a 4.683 0 b -0.000 4.922	0 (2.842)
	k	用于计算的原子1 用于计算的原子2 截断半经 间隔 平滑系数	10 Å 0.02		с б о Сланарах Site x y ОМП Ссбо ОNI ОН ОН ОП	5.684
c	K1	अम	501 6 D		試給局示 Site r(A) C L Mn 1.37	S V V V V V V V V

51 ~



用于计算的原子1	^	
用于计算的原子2	Mn	
截断半径	Со	
间隔	Ni	
亚滑系数	Н	
THEJOX	0	
5	全部原子	
分析		取消

当选择元素和元素进行计算时(这里以 Mn 和 Co 为例),得到如下的径向分布函数图片。横坐标为径向的半径值,纵坐标为关联函数的值。同样的,将鼠标放在峰上,可以显示当前位置的半径和高度值。



当选择元素和全部原子进行计算时(这里以 Mn 和全部原子为例),得到如下的径向分布函数图 片

材料工坊使用教程



当选择全部原子和全部原子进行计算时,得到如下的径向分布函数图片。

点击右上角红框处的 ^坐 图标,可以将径向分布函数数据导出到 csv 文件当中。导出过程和衍 射图谱的相同。



径向分布函数的数据的 csv 文件打开如下图所示。

材料工坊使用教程

₹ ≡	9# D 1	e e c	5 C =	开始	插入	页面布局	公式	数据 审	阅视图	开发]	(具会	员专家	Q、查找命令、	搜索模板							G	2 物作 。	<u>合分享</u>	\sim
P1	×煎切	八 宋	体	-	11	- Δ ⁺ Δ ⁻	Ŧ	+= +=	<u></u>	r=1	常规		- 5	R A	110 表格样式。	2	∇	AL ET	1 +++	Π	m	HT.	HT22	1.1
REEL -	n man-	Martin F	1 / U F	H - III	A	- 0-				나무나 	¥ - %	000 +.0	.00 METHIELE	× & P+28=P	- 12 前示的样式	- 1950	U		j ∔;	(3540781 v	TAR	山米	山口の	(r 2 ²
10,20	Elle alcito	143-048	, <u> </u>			· • ,			D/MAT	Line 1 1	1. 2	UU 1 .00	4.0 20223020	J	+2/ ++-/0181+10	- dour	900.425	14/3* 4400	#701A	134425	TIPPE		-041H 1 94	8 I
	KG		⊜ fv	0																				
	RO	1000	~).		-	1952 11	015										1820		n	7. 188				52
	A	В	C		0	E	F	G	н	1		J	K	L	MN	1	0	Р	Q	R		S	T	
1 r	1	Mn-Mn g(r)Mn-Cog(r)Mn-N:	i g(r)Mn	-Hg(r) M	n-0 g(r)	Co-Mn g(r)Co-Co g(r)Co-Ni	g(r)Co-	Hg(r)	Co-O g(r) Ni	i-Mn g(r)Ni	-Cog(r)Ni-Ni	g(r)Ni	-H g(r)	Ni-0 g(r)	H-Mn g(r) H-Co g	g(r) H-Ni	g(r) H-H	g(r)	2
2	0	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	-
3	0.02	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	-0
4	0.04	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	12
0	0.00	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	147
7	0.08	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		D	0	0	0	0	0
8	0.12	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		n	0	0	0	0	0
9	0.14	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	62
10	0.14	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	
11	0.18	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	\odot
12	0.2	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		D	0	0	0	0	
13	0.22	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		D	0	0	0	0	
14	0.24	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		D	0	0	0	0	
15	0.26	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		D	0	0	0	0	
16	0.28	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0)	D	0	0	0	0	
17	0.3	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0	0	D	0	0	0	0	
18	0.32	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0)	D	0	0	0	0	
19	0.34	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	
20	0.36	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	
21	0.38	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	
22	0.4	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0)	D	0	0	0	0	
23	0.42	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		D	0	0	0	0	
24	0.44	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		D	0	0	0	0	
25	0.46	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		D	0	0	0	0	
26	0.48	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0	,	0	0	0	0	0	
21	0.5	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	
28	0. 52	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	
29	0.54	0		0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	
30	0.56	0	1	0	0	0	0	0		0	U	0	0	0	0	0	0		U	0	U	0	0 -	000
		RDF	T											1.00			<u>ب</u>							5.2
ڌر-ا	0																Ö	· · · ·		100%		0	+	

Hylanemos 计算

能量与性质计算

如下图红框处所示,点击"计算"-"HYLANEMOS"-"能量"进行能量的计算设置。



设置面板如下图所示,分为基础设置、高级设置和性质。进入后面板中已经给出了部分参数的默 认设置,空白的参数可以不需要进行填写。一般来说,使用默认参数就可以完成一个中等精度的 计算任务。

材料工坊使用教程

		🐓 Si.cif - Matter Craft	- @ ×
三文件 日 日 日 う ご 开始 編編 新件	建模 视图 计算 分析		
<u>שששש</u>	L		
构建任务 HYLANEMOS 性质 结构化学 照照 ヘアントロ			
HylAnemos		×	
webview:Si.cif ×		44-05	(Y##)
a b c a* b* c* C c ³ ⊕ 1↓ ◊ ⊕ • 6	1900月6 万丁初以子 两级设置	11/2	
15.75	泛語	轨道占据数方法	angs 💿
1610	GGA-PBE	gauss V	a (3.348) (0 (1.933)
	願助	展宽宽度 0.005 Ha	b (1.116) (3.157) (1.933)
證势类型	NCPP-SG15		C (O (O (3.866)
电荷密度截断能	20 Ha	电子自治收敛标准 日本	
电子波函数数新指	На	最大运代步数	Site x y z
电荷密度快速傅里	† n1 n2 n3		O
姓 亚		对角化方法 🗸	
波函数快速傅里叶	^g n1 n2 n3	蒙大读代步数	
			Si 1.18 ■ □ □ ♥
Leonert	—— K点 —————————————————————————————————	电子自治收敛标准	
KARACIEL J 722	set spacing between kpc 🗸	由高密度型合	
例空间的kr版网相同 ac	0.5 1/Å	混合算法 ~	
B sec	INT	¥Ø.	
		-	
a a			
L			
C			

鼠标悬停在参数名称上,可以看到该参数的描述。

			- 轨道上提数方注	
乏函	GGA-PBE	轨道占据数方法	gauss	~
應热迷刑	赝势	展宽宽度	0.005	На
电荷密度截断能	20 Ha	电子自洽收敛标准	一 电子自洽收敛标准 —	На
电子波函数截断能	Ha	最大迭代步数		
设置 电荷密度快速傅 亚 变换	置电子波函数动能截断能 n1 n2 n3	对角化方法	对角化	~
波函数快速傅里叶变 唤	n1 n2 n3	最大迭代步数		
k点设置方法	K点 set spacing between kpc >>	电子自洽收敛标准		
到空间的k点网格间	05	混合算法	电荷密度混合	~

高级设置面板中,每个模块都有一个开关选项,选择后可以对该模块进行设置。例如 DFT+U 模块,勾选后下方的 DFT+U 类型、DFT+U 投影类型和具体的 U 值可以进行设置。下图为示例。

材料工坊使用教程

		🎔 Si.cif - Matter	Craft		- 🗗 ×
三文件 日 日 日 つ ご 开始 編編 順件	建模 视图 计算 分析				
<u> </u>					
构建任务 HYLANEMOS 性质 结构化化 #1 07-5+3	WOULLAND.				
webview-Si.cit ×					
abca*b*c*[3 c+ + 14 ◇ ● ● ◎ 基础设置 结构	优化 分子动力学 高级设置	性质		○ 晶倍参数	H OI
	DFT+U			angs 💿	
☑ 采用DFT+U		自旋极化	collinear spin 🔍	a (3.348) (0	(1.933)
DFT+U类型	atomic ~	投影类型	element	b (1.116) (3.157)	(1.933)
DET_110R/MPI			element mag	c () ()	(3.866)
CTT GALLOGA	element		Si 0	◎訪物参数	
	element orbital U (eV) J (eV)		Slab	Site x y	z
		使用slab修正	Jaco	🔊 Si 👘 👘	- 0
	色歌	ARE TO shorts		0	
		TRUCTING		◇結构显示	服子 🛇
修正方法	D2 V	修正方法	dipole correction 🗸 🗸	Site r(A) C L	s v
	- 体系海由菜	电势最大位置	0.8		
体系净电荷		电势下降区城长度			Cast C
	运行		关闭		

在性质的页面中设置可以通过勾选能带结构、态密度、声子和力学来确定要计算的材料的性质。 勾选后,右侧会出现该性质的计算设置信息。在能带结构的设置中,软件自动给出了结构的高对 称点和路径,用户也可以手动新增高对称点和删除高对称点,同时设置空带数目和取点数。

		🎔 Si.cif -	Matter Craft		- 0 >
	编辑 插件 建模 視問 计算 分析				
× w w w					
	HylAnemos			×	
webview:Si.cif ×					(*±*)
a b c a* b* c* [] d• + 14 ♦ ⊕ • 6	基础设置 结构优化 分子动力学 高级设置	性质			●最倍参数 (用)
		F	能带结构		(anos 🔘
		空带数目	5		
					a (3.348) (0 (1.933)
		用风雨的发	20		b (1.116) (3.157) (1.933)
		高对称路径	name x y z + O		c (0 (0 (3.866)
			\G ∨ 0 0 0 + -		
	B 107		X V 0.5 0 0.5 + -		
			W ~ 0.5 0.25 0.75 + -		Site x y z
			K ~ 0.37 0.37 0.75 + -		
					Site r(A) C L S V
					SI 1.18
					● 島构追踪 (原子)
					Atom x y z
ь					•
	155		关闭		
				J	
- a					
		_			

态密度的设置中,软件自动给出了默认参数,用户可以进行修改,这里将K点修改为555。

材料工坊使用教程

		🚏 Si.cif - Matter Craft	- @ ×
	編紙 話件 建模 视图 计算 分析		
<u>ששש</u> ≆			
构建任务 HYLANEMOS 性质 结构化	HylAnemos	×	
webviewSicit ×			
a b c a* b* c* [] c+ + 14 ⊗ ⊕ ● @	基础设置结构优化分子动力学高级设置	性质	○品档参数 ①
	性质		angs
	■ 船市结构	空带数目 5	a (3,348) (0 (1,933)
		総量下限 -10 eV	b (1,116) (3,157) (1,933)
		総要上限 10 のど	C 0 0 (3.866)
	2 本子	IU EV	
	■ 力学	取点问题 0.1 eV	Site y y 7
		轨道占据数方法 tetra 💛	Si ◎
		展览宽度 0.005 Ha	•
		Kei all all all	● 結构显示 (展子 ●
			Site r(A) C L S V
			Si 1.18
			Atom x y z
Ь	15T	(¥B)	
a a			

声子的设置中,软件自动给出了默认参数,用户可以进行修改,这里使用默认参数。

		🎔 Si.cif - Matter Craft		- 6 ×
	编辑 插件 建模 视图 计算 分析			
<u>ששש</u> ≰	~ ~ ~			
构建任务 HYLANEMOS 性质 结构化	ny animi vy vy datami wyddiatawi			
	HylAnemos	×		
webview:Si.cit × a b c a* b* c* [] □ + 14 � ⊕ • Ø	基础设置结构优化 分子动力学 高级设置	懴		 ◆ 至 ◆ ◆ 品格参数 (第一)
	世质	1280 #7		angs 💿
	C REMISCRY			a (3.348 (0 (1.933)
	查查查			b (1.116) (3.157) (1.933)
	2 #7			c 0 0 3.866
				○ 結构参数
	□ カ≠			Site x y z
				● 结构显示 原子 ●
				Site r(A) C L S V
				🛛 Si 1.18 🔳 🗌 🗌 🗹
				Atom x y z
ь				
1	超行	关闭		
🖚 a).	
C				

力学的设置中,软件自动给出了默认参数,用户可以进行修改,这里使用默认参数。设置完成后, 点击运行。

材料工坊使用教程

🌮 Si.cif - Matter Craft	- 6 ×
三文井 白 田 香 う ご 一形地 編編 編件 建築 戦闘 (世界) 分析 和助	
* * * * * * * * * * * * * * * * * * * *	
RUMES INLANEMOS 12/8 ISBN/2/1 - RE OCCUPIER - RUME	
HyAnemos A	-
	· · · ·
apca, p, c, c) t, 4, 17 0, 80, 0, 84 million 71 - 472-5 million 71 - 4	<u># 0</u>
■ #5世际地 ■ #5世际地 ■ #5世际地	
a (3.346)	0 (1.933)
■ 2000年 1116 日本 1116 116 116 116 116 116 116 116 116 1	(3.157) (1.933)
· • •	0 (3.866)
● 近 州 参数	
国 カテ Site x	y z
● Si ~	0
	0
● 604057	原子 💿
Site r(A)	C L S V
●Si 1.18	
	周子 🛇
□ Atom	x y z

在任务计算设置中,用户可以修改任务的名称、描述等信息,并设置集群相关的参数,也可以设置并行参数。这里设置为 local,即为本机运行。完成后点击运行。

🕎 Si.cif - Matter Craft	- 0 >
三文件 日日 目 り ご 开始 編編 新件 建模 税間 (計算) 分析 帮助	
* * * * * * * *	
构建任5等 HYLANEMOS 性质 低的 ALL SUB CYTELLER 常用以出现	
(LS)	
webviewSicit ×	
a b c a* b* c* [3 □* + 14 ◇ ④ ● ⑥ 任务名称 Si2 Energy k点开行参数 1	
任务描述 伯丹石参收 1	angs 💿
AD1	a (3.348) (0 (1.933)
	b (1.116) (3.157) (1.933)
服务器 Local V	c 0 0 (3.866)
计算节点 local V	◎結构参数
***	Stel x y z
7713 Weldt mpirum	Office R y R Ø Si O
队列调度 PBS >>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>>	0
	● 結构显示 原子 ●
	Site r(A) C L S V
	Si 1.18
	● 結构追踪 (調子 ()
	Atom x y z
b	0
a l	

在"插件"-"任务"-"本地"设置中, 用户可以看到所有生成的任务文件, 当前生成的任务文件在最下方, 名称为 Si2 Energy。

材料工坊使用教程

■ 2xt 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Provide Mag
Image: Second secon
th # 1 # 2 # 5 # 4 # 4 #
Hit A thewaid A thewaid 10 100-bb ##20 10 cat b************************************
(15) webwex/sit 2 Girelax ##22 3 E Girelax ##22
3 Grinten state
3 B Hotzk + ##X 3 B Hotzk - ##
1 □ Letastic #EX 2 3.464 0 1.533 1 □ Da ha #EX 3.464 0 1.533 1 □ Da ha #EX 3 0 1.533 1 □ Da ha #EX 0 0 3.660 1 □ Da ha #EX 0 0 0 1 □ Da ha #EX 0
1 = 10 ± 3000 2 = 10 ± 3000 2 = 10 ± 3000 2 = 10 ± 3000 2 = 10 ± 400
1 = lip 1 + max c 0 0 0.866 2 = lip 1 + max c 0 0 0.866 2 = lip 1 + max 2 0 0 0.866 2 = lip 1 + max 2 0 0 0.866 2 = lip 1 + max 2 0 0 0.866 2 = lip 1 + max 0 0 0 0.866 2 = lip 1 + max 0 0 0 0 2 = lip 1 + max 0 0 0 0 2 = lip 1 + max 0 0 0 0 2 = lip 1 + max 0 0 0 0 2 = lip 1 + max 0 0 0 0 2 = lip 1 + max 0 0 0 0 2 = lip 1 + max 0 0 0 0 2 = lip 1 + max 0 0 0 0 3 = lip 1 + max 0 0 0 0 3 = lip 1 + max 0 0 0 0 3 = lip 1 + max 0 0 0 0 3 = lip 1 + max 0 0 0 0 3 = lip 1 + max 0 0 0 0 3 = lip 1 + max <td< th=""></td<>
□ Band ##Q □ Control ##Q □ Band ##Q □ Control ##Q □ Galage ##Q □ Control ##Q □ Band #=Q □ Control ##Q <
+ 8 graphene 東照文 > 8 graphene 東照文 3 Graph 1 集成文 3 Graph 1 集成 3 Graph
→ B dhp1 #現交 → B dhp1 # 現交 → B dhp1 # 見 → B dhp1 # L → B dhp1
→ G dip2 米 規文 → B nkas 米規文 → B nkas 米規文 → G nkas × Kas × Kas × G nkas × G nkas × Kas × G nkas × Kas × G nkas × Kas × G nkas × G nkas × Kas × G nkas
→ □ relat 未現文 → □ ck-1 未見文 → □ ck-1 未見文 → □ ck-1 未見文 → □ ck-1 未見文 → □ ck-1 x - □
→ B d+1 ##2 → B d+2 ##2 → B d+2 ##2 → B d+2 ##2 → B d+1 ##2 → B d+1 ##2 → B d+1 Ca
→ G 4-2 非認文 - 5 - 5 - 4 - 1 - 2 - 2 - 2
→ □ Si Ari / 北京 → □ Ari / 北京 → □ Ari / Ari / C L S V ● Si 1.18 □ □ ビ → □ Min1 Ca. 未建会 ● □ Min2 Ca. 未建会
→ G (+ 1 #22) G urbanom #22) B Mati Ca_ #22
→ Bunknown 未該文 → B Mn1 Ca. 未批文 ● Edwigata 第7 ●
→ 目 Mn1 Co 非裁交 ● 結構語篇 (周子 ④)
Atom x y z
→ B Mat Co., 共成の
→ E Mint Co 未規交 a
→ 図 Si2 Energy 未提交
) 武将 (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1)
◆ 本地运行任务

鼠标右键点击任务名,然后选择本地执行程序设置,然后设置 Hylanemos 的计算程序路径。



点击红框处的按钮,选择 Hylanemos 的执行程序(Hylanemos 文件夹中的 bin\Hylanemos.exe)的路径。然后点击确认,完成 Hylanemos 计算程序的设置。



材料工坊使用教程

	💅 Si.cif - Matter Craft	- @ ×
	偏缓 腻件 建模 视图 计算 分析 帮助	
0 00 m A		
MA DE SE LY		
任务 ~	webview:Si.cif × wulft.yaml cp2k.in	(×辛参)
~ 本地	a b c a* b* c* [] c+ + 1↓ ♦ ♥ ● ⊗ □ ①	
>回 Si Wulff 朱提交		(angs 🔘
・回LiCoO2 Voltage 未提交 >同LitoGa/PS6\2 longic 主導立		
→ 図 NaCl Energy 未提交		5323 0 (1320)
> □ C MD 未提交	中地订算程序设置	b (1.108) (3.135) (1.920)
>回 NaC18 NEB 未提交	Anemos E:\EasyDFT\win_0829\parallel\bin\HylAnemo	os.exe
>回 NaC18 NEB 未提交		
> 回 Si Wulff 未提交	P2D E:\理承\bin-2022-09-29-2\bin\bin\p2d.exe	
) 団 C Ionic 未提交		Site x y z
· E FeO Voltage 未接交		🛛 Si 👘 👘 🤐
と目 Li(CoO2)3 Lammos 主接交		0
>回 LiCoO2 Voltage 末提交		
>回 LiCoO2 Wulff 未提交		
→ I C Lammps 未提交	2011	Site r(A) C L S V
> □ C Wulff 未提交	NIX	
> □ C Wulff 未提交		
>□ p2d 未提交		
→ 回 C Energy 未提交		
2 Distenergy 未提交 2 日 Ci Forman 本語本		
2回 Si Relax 未提交		
→ III Si MD 未提交		
> 远程		
> 本地运行任务		
No.		

鼠标右键点击任务名,然后选择本地执行任务,即可开始进行任务的计算



计算完成后,点击该计算任务中的输出文件。然后再点击"分析"-"第一性原理",找到对应的需要 分析的性质。

材料工坊使用教程



电子结构分析

点击"电子结构",然后勾选能带和态密度,可以得到 Si 的能带和态密度。下图左侧为能带图,右 侧为态密度图。由于计算态密度时设置的能量范围是-10 到 10eV,因此态密度图在纵坐标 10 以 上的部分为空白。

点击下图中右上角红框处的按钮, 会弹出图像的设置页面



在图像设置页面中,可以调整图像的 X 轴和 Y 轴的范围和轴名称,可以打开网格线,也可以调 整图中线条的粗细和光滑度。下图为将 Y 轴范围调整到-10 到 10 之间,态密度图显示网格线的 效果。

鼠标放在图中,可以显示该点的横坐标和纵坐标。 右上角红框处的按钮,分别是导出图片和导出原始数据

材料工坊使用教程

王文件 白 日 白 う ぐ 一形約 山田 胡井 建根 税用 计算 金折 市物	
K K K K K	
第一性原理 能源 态思度 电子机构 声子 力学 日 分子动力学 日 结构 日 高级分析	
15 - webviewsCo(H0)2.cif webviewsCigit webviewsCigit vebviewsCigit vebvi	(* ± *)
² - MR ² - M	
	_

选择导出路径并输出导出名称之后,点击保存,即可导出数据或图片。



声子分析

在分析处点击声子,会弹出声子的分析设置面板如下图所示。

可以分析的性质包括声子色散谱、声子态密度和热力学性质,需要勾选想分析的性质并设置相应的分析参数。其中声子色散谱的设置中,软件自动给出了结构的高对称点和路径,用户也可以手动新增高对称点和删除高对称点。

设置完成后点击分析,软件会显示分析后的结果图片

材料工坊使用教程

				V banu_c	io rigito											- U
			计图 分析													
ען ען ען	14 14															
	<u> </u>															
第一性原理 船带 态密度	电子结构 声子		高級分析													
	_				-	-	-						-	-	-	
任务 >	webview:Co()	10)2.cit webviewSi.cit band_O	Tison X												- 6	*≣#
本地	2895	"ion conv win": 2.	声子										×		A 1 =	
) E ab shifts	2896	"md init temp": 0.0.											_	4 1012	1Ψ=	- ^
) El des attents	2897	"neb_opt_step_length": 1.0,														
Closed states	2898	"neb_coord_can_move": [],	2 显示声子色剧	6 8					2 显示声	子志密度						
Dand *##	2899	"ibrav_param_type": "",														
· w graphene #32.9	2900	"use_sym": false,	每条路径K点数	20					Quffi	n1 3	n2 3	n3 3				
/ En disp1 来提交	2901	"ion_t_conv": 0.000972345191														
,凹 disp2 未提交	2902	"dis_scheme": "D4",	K点高对称諸径	name	x	y	z	+ 0	最小能量	0		THz				
・回 relax 未提交	2903	erement_nums : [\G V	0	0	0	+ -								
>回 64-1 未提交	2905	1.						-	最大能量	20						
> 🖸 64-2 未提交	2906	"calc stress": false,						-								
> 回 Si-scf 未提交	2907	"spin_polarization_type": 1,		1 ~				+ -	能量间隔	0.1						
・回 64-1 未提交	2908	"dis_sr_ts": 0.0,		U V	0.62			+ -								
>回 unknown 未提交	2909	"output_ns": false,		$W \simeq$	0.5	0.25	0.75	+ -	🛃 计算热	力学性质						
> 回 Mn1 Co 未提交	2910	"e_fermi": null,		x ~	0.5	0	0.5	+ -								
DI Si8 Wulff 未提交	2911	"dis_s6_D2": 0.0,							温度范围		14	500	1			
P III SiZ Energy 未提交	2912	"dos dt": pull										300				
~ 回 Si2 pho 未提交	2915	"davidson dim mult": 2														
commands.txt	2915	"neb opt terminals": false,														
info.yaml	2916	"cons_cell": [
package.json	2917	"none"		-	-						-					
scf.json	2918],			分析						1039					
DI Si2 Energy 米提交	2919	"neb_path_conv": 0.05,				_	_				_					
> I Mn1 Co 未提交	2920	"u": [],														
P 团 Mn1 Co., 未提交	2921	"U_I"; [];														
> I Si2 Energy 未提交	2922	"neh alg": "neh"														
元段	2924	"nosition type": "relative".														
本地运行任务	2925	"neb opt scheme": "quick-mir	·.													
- Concerts takens						_							_	<u> </u>	~	_

生成的声子色散谱和态密度在左图, 热力学性质在右图。图片的导出数据、图片、调整 X、Y 轴 的功能与能带态密度图的操作一样。



力学分析

选择 elastic 开头的输出文件,然后在分析处点击力学,软件将输出计算出的力学性质。 力学性质包括计算出的弹性劲度张量、弹性柔度张量和体积模量、剪切模量、杨氏模量、泊松比 等性质。此外还有纵波速度、剪切波速、平均波速和德拜温度的数值。

材料工坊使用教程

	Pelastic.txt - Matter Craft	- 0,
	F始 编辑 插件 建模 视图 计算 分析 帮助	
אן אן אן אן		
第一性肌埋 副市 态然起 电子结构		
住坊、	webwews.com elasticity.params.yami elastici.txt ×	v ≠ *
本地	1 弹性切皮术量Elastic Stiffness Tensor C_1] (In GPa):	
> 回 relax 未提交	3 205.620 26.692 43.402 -0.034 -0.051 -23.706	
> □ 64-1 未提交	4 26.842 222.562 26.846 0.005 -0.004 0.007	
2回64-2 未提交	5 43.446 26.815 205.640 -0.010 0.002 23.608	
> 凹 Si-sct 未提交	6 -30.832 -29.508 -33.676 64.156 23.619 -1.676	
2064-1 未提交	7 -30.628 -29.924 -30.814 25.726 809.924 -11.180	
→ 凹 unknown 未提交	9	
D CID MALINE AND T	10	
> ED SIG WUITT REGESE	11 弹性柔度形量Elastic Compliance Tensor S_ij (in GPa^{-1}):	
> 図 Siz Energy 米佐交		
Siz phonon 大臣文		
>回 Mo1 Co1 Ni1 H6 O6 末得交	15 -0.00139 -0.00049 0.00551 4.72235 -0.00000 -0.00254	
>回 Mn1 Co1 Ni1 H6 O6 未得交	16 0.00143 0.00128 0.00143 0.01747 -0.00509 0.00036	
> 回 Si2 Energy 未提交	17 0.00088 0.00091 0.00133 -0.00512 0.01385 -0.00004	
> II Si2 phonon 未提交	18 0.00253 0.00000 -0.00253 0.00000 0.00000 0.01745	
> 図 Si2 Phonon01 未提交	19	
*回 Si2 Elastic 未提交	21	
elastic.txt	22 力学性质Mechanical Properties Voigt Reuss Hill	
elasticity.json	23	
elasticity.params.yaml		
package.json	2.5 将形成量Bulk Hould's B (GFa) 51.985 91.975 91.988 26 杨氏模量Young's Modulus E (GPa) 181.783 164.976 173.487	
scf_OUT.json	27 剪切模量Shear Modulus G (GPa) 91.985 91.975 91.980	
scf.json	28 泊松比Poisson's Ratio v 0.170 0.201 0.185	
struct.yaml	29 P波模量P-wave Modulus (GPa) 195.510 183.548 189.529	● 力学任务分析完成 ×
远程	30 晋氏比率Pugh's Ratio (B/G) 0.844 0.746 0.795	source: graph
•本地运行任务	31 @LAQUQVICKETS Hardness (GPa) 17.922 13.872 15.850	
		行1.列1 plaintext 〇

电荷密度与波函数分析

选择一个输出文件(例如 scf_OUT.json),然后在分析处点击第一性原理-电荷密度,会弹出电荷密度的分析设置面板。

	🐦 scf_OUT.json - 02测试用的 - Matter Craft	- @ ×
三文件 日日日 日 う ご 开地 編編	病件 建模 视图 计算 分析 滑翔	
	E E E E 20 1998 0.220177 1210 200.046 0.0487	
So LENGE 463 SUNT (**) ADDES 7/7 4/19 4/19	anna 1 23 4237 1 stua 1 marchi 1 branca	
任务 ~	webview/FeO.cit sct_OU/Tjson ×	(*±*)
~ 本地	1 {	0
→ I C Ionic 未提交	2 "output": {	
→ 回 FeO Voltage 未提交	$\begin{array}{c} 3 \\ 4 \\ \end{array} $	
> 回 Li(CoO2)3 Lammps 未提交	5 "scf steps": 8,	
> 回 Li(CoO2)3 Lammps 未提交	6 "converged": true,	
→ 回 LiCoO2 Voltage 未提交	7 "scf_diff": 8.429795621360397e-8	
→ 回 LiCoO2 Wulff 未提交	8	
→ I C Lammps 未提交	9 Binterest (
> I C Wulff 未提交	10 Siless ; { 11 "stress": [
→ I C Wulff 未提交	12 11	
→ 回 p2d 未提交	13 0.0,	
・□ C Energy 未提交	14 0.0,	
> 団 Si Energy 未提交	15 0.0	
> ☑ Si Energy 未提交	16 D	
> □ Si Energy 未提交	18 0.0	
→ 🛛 Si Relax 未提交	19 0.0.	
> II Si MD 未提交	20 0.0	
→ I C Lammps 未提交	21],	
> □ MnCoNi(HO)6 Wulff 未提交	22 [
* □ FeO Energy 未提交	23 0.0,	
✓ I FeO Energy 未提交	24 0.0,	
package.json	26	
sd_OUT	27],	
scf_OUT.json	28 "need": false	
scf.json	29 },	
> 远程	30 "energy": {	
> 本地运行任务	31 Hill + 37,0444/3030/4104;	
-		171
<u></u>		₩ ₩ 7, 9 🗉 🖬

当前可以分析的电荷密度包括总电荷密度和磁化电荷密度。选择想要分析的电荷密度, 然后点击分析。
材料工坊使用教程

务 ×	webviewdfeO.dt sct_OUT.json ×	(* #
Rec Lonic 未得交	IK g	
☑ FeO Voltage 未提交		
I Li(CoO2)3 Lammps 未提交	■ 总电荷密度	
回 Li(CoO2)3 Lammps 未提交	Contraction of the second s	
回 LiCoO2 Voltage 未提交	总价值子电商收度	
回 LiCoO2 Wulff 未提交		
回 C Lammps 未提交	· 唐山河峦度	
回 C Wulff 未提交		
☑ C Wulff 未提交	25/PR29919 Apro 6	
回 p2d 未提交	Reforements cap-pop-home	
□ C Energy 未提交		
回 Si Energy 未提交	 2 総分电荷密度 Δρ=ρ_A-ρ_B-ρ_C 	
回 Si Energy 未提交		
님 Si Energy 未提交	A	
回 Si Relax 未提交		
U SI MD 未提交	B	
E Marcantinuos marcante eterror		
E Leo Eparov #100	C	
回 FeO Energy 未提交		
nackage.ison		
sef OUT	分析	
scf_OUT		

软件会弹出一个新的晶体结构,在右侧工具栏处点击红框处的 isosurface。



在 isosurface 中点击新增,然后会出现一个 isosurface 的设置行。

Level: 设置电荷等值面的值 Mode: 设置显示的方式,包括 Positive、Negative、Positive and negative,即只显示正值、只显 示负值、正负值都显示。 Opacity: 设置透明度 颜色:选择颜色 可见:设置这个等值面是否可见

材料工坊使用教程



设置完成后按下回车键, 就可以看到当前设置下的电荷密度在晶体中的分布情况。设置完成后关闭 isosurface 设置面板即可。



波函数分析需要在计算时增加额外的计算设置参数,在生成任务后提交任务计算前,需要用户 在.json 的输入文件中的"job_io"的模块中增加一行"wfc_output": "all",如下图所示。然后再提交 任务。

材料工坊使用教程



计算完成后选择一个输出文件(例如 scf_OUT.json),然后在分析处点击第一性原理-波函数, 会弹出波函数的分析设置面板

	❤ scf_OUT.json - 02测试用例 - Matter Craft	- 6 >
	新祥 建築 税団 計算 <mark>9時</mark> 荷命	
近 近 近 近 近 A 近 第一性原理电子结构 声子 过渡态 力学 电荷密度	ビー ビー ビー ビー 124 # 波通数 分子初力学 局約 高級分析 p24機型	
任务~	webniewsfeQuid scf QUT json ×	
~ 本地		1
> 回 C Ionic 未提交		
> 団 FeO Voltage 未提交	S convergence : {	
> 回 Li(CoO2)3 Lammps 未提交	5 "scf stors": 8.	
> □ Li(CoO2)3 Lammps 未提交	6 "converged": true,	
> 回 LiCoO2 Voltage 未提交	7 "scf_diff": 8.429795621360397e-8	
> 回 LiCoO2 Wulff 未提交	8 }	
> 図 C Lammps 未提交	9	
> □ C Wulff 未提交	10 "stress": {	
→ I C Wulff 未提交	11 STPESS : [
→ E p2d 未提交	13 1,0,0,	
→ I C Energy 未提交	14 0.0,	
> 回 Si Energy 未提交	15 8.0	
> III Si Energy 未提交	16],	
> III Si Energy 未提交	17	
→ III Si Relax 未提交	18 0.0,	
→ 回 Si MD 未提交	19 0.0,	
→ I C Lammps 未提交	21	
> ☑ MnCoNi(HO)6 Wulff 未提交	22	
~回 FeO Energy 未得交	23 0.0,	
✓ I FeO Energy 未提交	24 0.0,	
package.ison	25 0.0	
sef OUT	26	
sef OUT.ison	AU Do "meed": falce	
setison	29	
> 贡程	30 "energy": {	
> 本地运行任务	31 "hart": 37.84447363874104,	
		5英 5 4 日 #

在波函数分析设置面板中填写想要分析的 k 点、能带, 然后选择自旋方向和波函数的实部、虚部 或者模方, 然后点击分析。

材料工坊使用教程

	scr_UUI.json - 02/80/U89 - Matter Crart	- 0
第一性原理 电子结构 声子 过激态 力学 电荷密度 波函数		
£\$ ~	ebviewsHeO.ckl sct_OUT json ×	(~ Ξ 4
本地	2 "output": {	
D C Ionic stoppe	3 "convergence": {	
・ 回 reo voltage 米金シ と 図 Li(CoO2)3 Lamons 半環点	4	
→ 回 Li(CoO2)3 Lammos 由提交		
→ ILiCoO2 Voltage 未提交	7	
>回 LiCoO2 Wulff 未提交	8 K癌 1 范围: [1,112]	
> 団 C Lammps 未提交	9	
→回CWulff 未提交		
→ 回 C Wulff 未提交	12 Marie (50)	
→ 回 p2d 未提交	13	
> □ C Energy 未提交		
> 回 Si Energy 未提交	15	
→ I Si Energy 未提交	10 weaks (eg.) · · ·	
> 네 Si Energy 未提交	18	
・回 Si Relax 米提交	19	
/ D SI MD 未進交) 図 C Lammars +提示	20	
· G C cannings magac 2 同 MacoNinHOI6 Wolff 曲塔な	22	
*回 FeO Energy 実現交	23 分析 取消	
×回 FeO Energy 実得交	24	
package ison	25 0.0	
scf OUT		
scf_OUT.json	28 "need": false	
scf.json	29 },	
远程	30 "energy": {	
本地运行任务	31 "hart": 37.84447363874104.	
		₩ ·, ₺

软件会弹出一个新的晶体结构,这时和电荷密度分析一样添加 isosurface 即可。



结构优化与分子动力学计算

如下图红框处所示,点击"计算"-"HYLANEMOS"-"结构优化"和"分子动力学"分别进行结构优化和 分子动力学的计算设置。

材料工坊使用教程



弹出的设置面板与能量计算时的类似,相同的部分这里不再重复说明。 对于结构优化任务,面板中的结构优化页签可以进行结构优化相关的参数设置。 通过勾选优化晶胞,可以选择是做固定晶格优化还是变晶格优化。在变晶格优化时,可以设置晶 格优化的约束条件并设置目标应力和应力的收敛标准。



对于分子动力学任务, 面板中的分子动力学页签可以进行分子动力学相关的参数设置。 选择不同的系综和热池, 下方可以设置的参数不同。例如 NVT 系综和 Nose-Hoover 热池, 下方 可设置的参数为 Nose-Hoover 热池质量。



材料工坊使用教程

					🎔 Si.cif - Mat	er Craft			- 61 ×
三文件 🛱 🛢				1 (HE SH					
*		la la la							
			200311-00						
Construction 1 mil	CARLINOS LEDI SE	190603 HOMA 233 WD37	- I montrian						
(18 ×	HylAnemos					×			
× 2510	ſ					1	DE		
>⊡ hand ≠#	基础设置 结	制优化 分子动力学	高级设置	性质					
> 🗹 graphene					步数			angs 🕥	
→ 🗹 disp1 未該	系统	NVT	×	模拟步数	5000	1		a (3.348) (0	(1.933)
→ 🗹 disp2 未去								h (116) (216	
→ 🗹 relax 未透	熱油	Nose-Hoover		时间步长	1	fs		0 (1.116) (3.15	9 (1.933)
> 2 64-1 未證	Nose-Hoover#3th							c (0) (0	3.866
→回64-2 未設	质量参数			stream little sta	温度			◎ 防和器数	
2 2 64-1 末根				909Eum/R	1	ĸ			
> 🖾 unknown	Nose-Hoover	4		终止温度	1	TK I		Site x y	2
> ☑ Mn1 Co1 I	CIRCING AND LODE								1 C 1 🗮
> 🖻 si8 Wulff	Nose-Hoover				结构优化算法	\equiv	-	0	
> Si2 Energy	chain热泡质量参数			积分算法	leapfrog	× 1		😔 結构显示	原子 🔘
✓ I Si2 phono	LangevintA3810387							Site r(A) C L	S V
info yaml	系数			电间密度外推力法		× .		💿 Si 1.18 🔳 🗌	
package.iso				波函数外推方法		V		Antonio	
scf.json	Anderson热池碰撞	1					and the second se		08.7
> 🖾 Si2 Energy	Sec.							Atom x	y z
> 🛛 Mn1 Co1 I									
> Mn1 Co1		ante			MAR				
→ I Si2 Energy		Mart			36340				
> El si2 phono									
> 远程									
> 本地运行任务									

点击运行后的面板和任务运行方式与能量计算相同,这里不再重复。

过渡态计算

如下图红框处所示,点击"计算"-"HYLANEMOS"-"过渡态"进行过渡态的计算设置。



弹出的设置面板与能量计算时的类似,相同的部分这里不再重复说明。

对于过渡态,面板中的过渡态设置页签可以进行过渡态相关的参数设置。

右侧的设置分别是过渡态的收敛标准和优化算法的设置。一般采用默认设置即可。采用 CI-NEB 的算法可以得到更精确的过渡态,一般建议在 NEB 计算之后再进行 CI-NEB 计算。

初态的结构为当前激活的结构,用户需要在末态处选择末态的结构,如果还需要插入中间态,则 点击"插入中间态"即可。选择好末态和中间态的结构后,点击结构匹配。

材料工坊使用教程

	🎔 graphite-Li1.	cif - 结构 - Matter Craft	- @ ×
三文件 日日日 日 つ ご 开始 編編 部	件 建模 视图 计算 分析 帮助		る 指題上後
און או או או או	- Im		
HYLANEMUS TEE KANADUK MER ST+WDJ-F LLBK	HylAnemos	×	
2018年期第 v webviewcoranhite-Li1.cif X			
	1日本10日 計算大の市 高級10日		
graphite-551.cif			
🖪 graphite-Li-H.cif	- 结构	电子自洽校效标准	angs 🔘
graphite-Li-H.v	初选 LiC32	载大步数 100	a (9.84) (0) (0)
graphite-Li1.cif	末态 graphite_li2 cif × 结构历史	收敛标准 0.05 eV/Å	h (10) (150)
graphite-Li2.cif	graphic calcin - minutane	0.07	· (4,92) (3.321) (0
graphite.cif	态的总数 5	结构演变步长 1	· • • • • • •
H3-0.cif	and another		◎ 結构参数
H3-1.cif	庙入中町の	- 结构优化算法	
Ifpo_entries.json	graphite-I > 匹配 删除	使用CI-NEB	
LLCIT E LiEn2(RO.4)2 1			OC O
LiFe2(PO4)2 1		Droyden	0
LiFe2(PO4)2_1		Broyden历史步数 5	
E LiFePO4-1.cif			
LiFePO4-2.cif			Site r(A) C L S V
LIFePO4.cit			
E 1PS-d5 cif			
LPS-d6.cif			◇島梅道院 原子 ◎
LPS.cif			Atom x v z
prim-POSCAR.cif	2677	2×M	
Si (2) (-1 0 0).cif			
Si_1_0.cff			
Si 2 1.cif			

进入结构匹配的设置面板,软件会自动进行初末态的原子匹配,每一行为初态和末态对应的原子, 它们分别的坐标,它们之间的距离和是否在过渡态计算中需要固定这个原子。 用户也可以通过下方的修改部分,自行调整初末态的对应原子。在下方选择初态和末态需要对应 的原子,点击应用,即可完成调整。调整完成后可以查看距离是否符合要求。 设置完成后,点击确定,即可完成结构匹配的设置。

					Ý	graphit	e-Li1.cif	结构 - N	latter Cri	aft							2	- @ ×
三文件 日日日 日 つ ご 开始 編編 新件			8 🕒	12														
~ ~ ~ ~ ~ ~ ~	L~																	
HYLANEMOS 性质 结构优化 館墨 分子动力学 过渡态	2507010					1									-			
Ma	tch								1						×			_
资源管理器 > webview:graphite-Li1.cif ×						_	一 结构团	582									6	
○ 结构 graphite-551.cif			初态					末态				12	腚			● 品信参数		π Ο
graphite-Li-H.cif						~			-		固定	100.00	Till da	Til etc.		angs 🕥		
graphite-Li-H.v	1842	121-3-	^		4	126-3-	× .	Ŷ	2	16.14	全部	HD2:X	lefary	10122		a (9.84)	0 0	
graphite-Li1.cif	1	LiO	0.75	0.75	0.36	LiO	0.75	0.49	0.36	0.25				8		b (-4.92)	(8.521) (0	
graphite-Li3.cif	2	C1	0.58	0.66	0.25	C1	0.58	0.66	0.25	0						· ()	0 (1	5
E H3-0.cif		~	0.22	.0.91	0.25	0	0.32	0.91	0.25	0						●结构参数		
H3-1.cif	-		Giardia	Q. J. Lin	difference	66	0.23	0.91m	0.6.0							Site	v 7	
Ifpo_entries.json Iticif	4	G	0.08	0.41	0.25	C3	0.08	0.41	0.25	0						OLi -		0
E LiFe2(PO4)2_1	-5	C4	0.41	0.33	0.25	C4	0.41	0.33	0.25	0						OC -		•
LiFe2(PO4)2_1																	0	
E LiFePO4-1.cif	修改															◎結构显示		银子 💿
LiFePO4-2.cif	连接	初志原子	C1													Site r(A) (LS	V
LiFePO4.cit	和市	志原子	C3				应用									OLi 1.57		
LPS-d5.cif																0 0.77		
LPS-d6.cif b																✓结构追踪		鼠子 ♥
Drim-POSCAR cit			(朝庭							关闭					Atom	x y z	:
■ Si (2) (-1 0 0).cif				_							_	·			J			
Si_1_0.cif																		
Si 2 0.cit																		
	_	_	_	_	_	_	_	_	_	_	_	_	_	_				

点击运行后的面板和任务运行方式与能量计算相同,这里不再重复。

计算完成后, 在任务中进入 NEB 的计算文件夹中, 打开一个文件。然后点击分析-第一性原理-过渡态。

材料工坊使用教程

W neb_OUT.json - 7019 - Matte	- D X
三文件 日 日 日 う ご 开始 編編 脳件 建築 税間 计算 分析 松助	→ 指摘上修
第一性原理 电子结构 声子 过渡态 力学 一分子动力学 一结构 高级分析	
任务 <	(*±*)
- 本地 1 {	
> 団 C Energy 実提交 2 "status": "not implemented"	
> 団 TiO2 Ene 未提交 4	
> 回 H2 NEB 未提交	
> 団 Li Energy 未提交	
> 回 TiO2 Ene 未提交	
>□ Si Energy 未提交	
> 回 TiO2 Ene 未提交	
)日 TiO2 Ene 未提交	
7回 HO2 Ene 未提交 入口 clouble 本語文	
· G Si Relax 未選次	
>回 Si Fnerov 丰壤农	
×回 H2 NEB 未提交	
neb OUT.ison	
neb.json	
package.json	
> 団 H2 Energy 非提交	
> 回 LiC32 En 未提交	
→ 団 H2 NEB 未提交	
→ 団 TiO2 Ene 未提交	
> □ LiC32 En 來提交	
> □ Li3PS4 E 來提文	
→ 世 Li3PS4 E 未提交	
) " U C Energy 未定义) 运动	
 Apple 1 大地市行任果 	
- 49060 / LD0	
	存4,则1 json 🗘

整个反应过程的能垒图会显示。其中横坐标为反应坐标,纵坐标为迁移能垒。能垒大小也显示在 此处。右上角可以导出图片和数据,与其他类似,不再重复介绍。

王文件 日間 目 り ご 开始 輪朝 新杵 建模 親間 计算 分析	1.jon-neb - tijg - Matter Clait - Ly A
第一位1888年 电子动响 声子 以黑心 刀子 55子47刀子 14种 美联53年	
th: * verbowcy:aphret-likit neb_OUI_gon * * * * * * * * * * * * * * * * * * *	ree CUI pon(Na8) * NEB STRUCTURE 口口をとく
 ○ 目102 Ene. 未提文 ▲ ▲ → 目 10 Energy 未提交 ▲ 	17 14 45 44 44 22 62 7 7 meV
> □ 1102 Ene 未提文 > □ 510 Energy 未提交 > □ 1102 Ene 未提文	
) □ 1702 Ene. 未現文) □ 1702 Ene. 未現文) □ 51 Felax 未現文 	(june')
 > □ 51 Relax 年度交 > □ 51 Energy 未現交 □ 51 Energy 未現交 □ 54 Energy 未現交 	
neb.30/T.Bon neb.36n package.jon	dratic
> G H2 Energy 未選交 > G H2 Energy 未選交 > 日 H2 FR 未提交	ĬĨ -00 -
> 日 TiO2 Ene 米理交 > 日 LiC22 En 米理交 > 日 LiSC2 E = 単位	-100
□ 13954 E . 未取文 □ C Energy 未提交	-120 0 0.2 0.4 0.6 0.8 1
/ 30% > 本地运行任务	Reaction Coordinate

P2D 计算

如下图红框处所示,点击"计算"-"p2d"进行 p2d 模型的计算设置

材料工坊使用教程



弹出的计算设置面板如下图所示,分为结构、电流和浓度、材料3个页签。进入后面板中已经给 出了部分参数的默认设置。用户需要根据自己的需求进行参数的修改。

Ext B B B D C Fib NA NA NA HE NA NA HE NA NA P20102 X P20102 X P20102 Y		Starter - Matter Craft	- 6 ×
L L <thl< th=""> <thl< th=""> <thl< th=""> <thl< th=""></thl<></thl<></thl<></thl<>		开始 编辑 邮件 建尿 税因 计算 分析 和助	
Definition of the second se	ビ ビ HYLANEMOS 高級计算		
C2THE125 ->		p2d模型 ×	
		新常に花 担応取活法 核利 二 二 二 二 二 二 二 5 二 二 二 5 二 二 二 5 二 二 二 5 二 二 二 5 二 二 二 1 日 日 二 1 日 日 1 1 日 日 1 1 日 日 1 1 日 日 1 1 日 日 1 1 日 1 1 1 日 1 1 1 日 1 1 1 日 1 1 1 日 1 1 1 日 1 1 1 日 1 1 1 日 1 1 1 日 1 1 1 日 1 1 1 日 1 1 1 日 1 1 1 日 1 1 1 日	

电流和浓度设置页面,其中电流信息可以通过面板的参数进行设定,也可以通过"Import data"按钮导入数据。

p2d模型					×
结构优化 电流和济	侬度 材料				
	— 电流 ———		<u></u>	- 反应速率	
放电持续时间	2000	s	输入速率常数	输入参数	
电荷持续时间	2000	s	正极速率常数	9.6422e-10	m/s
开路持续时间	300	s	负极速率常数	8.7106e-10	m/s
1C 放电电流	17.5	A/m^2	正极电流密度	0.8	A/m^2
速率常数	1		负极电流密度	1.1	A/m^2
Import data		Plot curve	正极活性材料参考浓度	3900	mol/m^3
电解质盐浓度	一 浓度 2000	mol/m^3	负极活性材料参考浓度	14870	mol/m^3
正极最大固相浓度	22860	mol/m^3	参考电解质盐浓度	2000	mol/m^3
负极最大固相浓度	26390	mol/m^3	24		
	确认			取消	

可以导入的数据文件类型有 txt 和 csv, 导入页面如下图所示, 选择需要导入的数据文件即可。

1 1 1 1 1	p2d模型	AND THE ADDRESS OF ADDRE	×	v)
211.R -	结构优化 电流和浓度	Haladiani Aakkab X1+ ← → ・ ↑ ↓ , 此电脑 > 下戦	 C の在下戦中搜索 	
	(放电环绕时间) 200	·····································	≣ •	
	200	▲下戰 〃 名称	修改日期	22
	电荷持续时间 200	□ □ 文档 参 ~ 今天 (1)		
		▲ 图片 / 一 方放电曲线坐标2(1).txt	2022/10/27 17:48	文本文档
	开路持续时间 300	□ logs * ~ 上周 (5)		
		OneDrive - Persc C36d2a60-505f-11ed-9015-e97f9d49116d	2022/10/20 18:21	文件夹
	1C 放电电流 17.5	G 学師/H-9814 Elastic Constants-2.txt Si Elastic Constants-2.txt	2022/10/19 10:32	文本文档
	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	→ N Si Elastic Constants.txt	2022/10/19 10:17	文本文档
	1	> 🏠 WPS网盘 📄 Si Elastic Constants(1).txt	2022/10/19 10:18	文本文档
	Import data	> I 此电路	2022/10/19 11:37	XLSX If
	*	度 文件名(N): 充放电曲线坐标2(1).txt	import data (*.csv;*.>	ds;*.xisx; ~
	电解质盐浓度	200	打开(0)	取消 ジャッチョン
	正极最大面相浓度	22860 mol/m^3	- mountes	4
	负极最大固相浓度	26390 mol/m^3		

导入完成后,点击"Plot curve",可以画出电流曲线图



材料工坊使用教程

结构优化 电流	師沈度 材料		webview:c6c1f740-55dc-11ed	-96 ×	
	中版			Current curve	110
放电持续时间	2000 \$	输入速率常数 🧰 输入参数	20-		
电荷持续时间	2000 s	正极速车常数 9.6422e-10	n/s	i	
开路持续时间	300 s	负极速率常数 8.7105e-10	n/s		
1C 放电电流	17.5 A/m^2	正极电流密度 0.8 A/m	10-		
連率常数	1	负极电流密度 1.1 A/m	1^2		
Import data	充放电曲线坐标 Plot curve	正极活性材料参考浓度 3900 mol/m	A3 (V)a6		
-	次度 2000 mol/m^3	负极活性材料参考浓度 14870 mol/m	-0 to		
正极最大简相浓度	22860 mol/m^3	参考电解创盐浓度 2000 mol/m	ee ee		
负极最大面相浓度	26390 mol/m^3				

材料设置页面, 其中正极平衡电位、负极平衡电位、电解质电导率可以通过面板的参数进行设定, 也可以通过"Import data"按钮导入数据, 导入方式和电流类似。

p2d模型				×
结构优化 电流和浓度	度 材料			
电导率	- 正极 3.8	电导率	电解质	S/m
平衡电位	v	Import data	Plot curve	
Import data	Plot curve	扩散系数	7.5e-11	m^2/S
平衡电位温度导数	300	传递数	0.363	
参考浓度	22860 mol/m^3	活性相关性	0	
电极最大荷电状态	0.995			
电极最小荷电状态	0.175			
电导率	- 负极 100 S/m			
平衡电位	v			
Import data	Plot curve 确认		取消	

全部参数设置完成后点击"确认", 会在任务处生成 p2d 的计算任务

材料工坊使用教程

1 State 4 - жа - В Балайс жа А - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс жа - В Балайс ка - В Балайс жа - В Балайс	Current curve

这里和 Hylanemos 计算类似,需要设置 p2d 计算程序的位置。

EXPLOYED D Ha NA		🍄 c6c1f740-55dc-11ed-9680-953d36c46884 - Matter Craft	- 0
L L		开始 蝙蝠 抓件 建模 视阈 计算 分析 帮助	
L L <thl< th=""> L <thl< th=""> L <thl< th=""> L L</thl<></thl<></thl<>	14 14	א לא או או או או	
HYDRENS BARTE Open Lummps pooled BARTE * 58 * * * * * * * * 10 Line/Oo Line - #82 * <			
CBC Note Note Note VAL Velococce/10/40 Stort 14:40.8. Note 10 Stillawick #820 10 Stilawick #820 10 Stillawick #82	HYLANEMOS 高级计算	cp2k Lammps p2d模型 导入任务	
1-30 Control Matter Craft 1-30 Current curve 1-30 Current cur			
 Site Site of the state <l< td=""><td>11.9 *</td><td>starter *</td><td>1-90 X</td></l<>	11.9 *	starter *	1-90 X
Notified terr. #IRC I is italia #IRC	~ 本地		Current curve
A Let Statute ##20 B Si Statute, ##20 B Si Statute, ##20 B Licz Reker-L, ##20)回 LiFePO4 Ener 未提交		
Violation HERC	・回 Si Elastic 未提交	Matter Craft	
P is (1) P is (1) <td< td=""><td>・ 回 Si Elastic 未提交</td><td>Watter Clait</td><td></td></td<>	・ 回 Si Elastic 未提交	Watter Clait	
В ЦС2 Раби-1. #82	・回 Si Danu+Gos 未通交)同 LiC22 Palay.H 一共開始	本地计算程序设置 ×	
Armos (EXayOFTVin 100Pparalehbil/MArenos.cee) B LiC2 Relak-H. # #82 B LiC2 Relak-H. # #82 B LiC2 Relak-H. # #82 B Libergy	> Fill (17.22 Datas-R differe		
I Licz Zeku-H, ##ZZ I Liczy Mak-H, ##ZZ I Liczy Mak-Y, #ZZ	→ 回 LiC32 Relax-T。 未提交	Anemos E:\EasyDFT\win_1008\parallet\bin\HylAnemos.exe	
 B C Relax-991 #820 B Libereyy #820 B Libereyy #820 B Libereyy #820 B N phonon #820 <li< td=""><td>>回LiC32 Relax-H 本提立</td><td></td><td></td></li<>	>回LiC32 Relax-H 本提立		
 Builbergy #IEQ Builbergy 3 #EQ Builbergy 4 #EQ Bui	→ I C Relax-991 未提交	P2D (E\程序\bin-2022-09-29-2\bin\bin\p2d.exe 自)	
 Bibergy-1 相互 Bibergy-1 相互 Bibergy-1 相互 Bibergy-1 相互 Biblenergy-3 相互 Biblenergy-3	> 回 Li Energy 未提交		
 Bilinergy-3 未現交 Bisphonon 未成交 Bisphonon 上成交 Bisp	→ 回 Li Energy-1 未提交		
Bighnion ##2 B	>回Li Energy-3 未提交		
 Bity phonon 地友 Bity phonon レーレーレーレーレーレーレーレーレーレーレーレーレーレーレーレーレーレーレー	> ☑ Si phonon 未提交		
B · B · B · B · B · B · B · B · B ·	> 回 BN phonon 未提交		
Sel Sundary s程度 Sel Sundary set	> 🖸 BN Phonon 未提交		
G Jacob 建築 G Jacob Jac	> 🖸 Si band-gy 未提交	(14)	° · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
・ 目 MinCaN(PO) # 総交 ・ 目 graphene-ba. ・ 化 ・ 日 graphene-b	→ I Si pdos 未提交		
● Graphene-ph. 米区 ● </td <td>・日 MnCoNi(HO)… 未提交</td> <td>ů – – – – – – – – – – – – – – – – – – –</td> <td>1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 -</td>	・日 MnCoNi(HO)… 未提交	ů – – – – – – – – – – – – – – – – – – –	1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 - 1994 -
 > □ graphene-ba ##X > □ Grave ##X <l< td=""><td>>□ graphene-ph_ 未提交</td><td></td><td>1004</td></l<>	>□ graphene-ph_ 未提交		1004
· Billicoz Wulfi #코호 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	> 🖸 graphene-ba 未提交		a.24624845-050876
P2dinjcon pzdinjcon	> 回 LiCoO2 Wulff 未提交		htdrag Thereau
package.joon package.joon 意理 如本的是一个主义的。	*回p2d 非提交	-10-	source: task-generator
peckepepon 語識 記録	pzd.in.json		VAX 11 CONTRACTOR
source: task-generator	package.json		正在生成p2d任务 ×
1. 本地行行过来	· #345		source: task-generator
	-+		

计算设置完成后,右键点击后,选择本地执行任务

材料工坊使用教程



任务正常计算完成后,会在右下角弹出提示框。



计算完成后,点开 p2d.out.json 文件,然后点击"分析"-"p2d 模型"

材料工坊使用教程

	Pzd.out.json - Matter Craft	- 0 ×
	开始 编辑 插件 建模 视图 计算 分析 帮助	
第一性原理 分子动力学	结构 高级分析 p2d模型	
任务、	webview.c6c1f740-55dc-11ed-96 p2d.out.json ×	(~ ± *)
Cur Harden		
The second se	2 "mesh": {	
>回 Si Elastic 未提交	3 "neg": 16.	
> ☑ Si band+dos 未提交	4 "pos": 23.	
> 🖸 LiC32 Relax-H 未提交	5 "nodes": [
→回 LiC32 Relax-B 未提交	6 0.0,	
> □ LiC32 Relax-T 未提交	7 8.210075883774285e-6,	
→回LiC32 Relax-H., 未提交	8 1.642235534407205e-5,	
> I C Relay-001 中提六	9 2.4656118724410825e-5,	
	10 3.29267867069452e-5,	
A D Li Energy segas	11 4.1210743460022394e-5,	
「凹 LI Energy-I 未成改	12 4.939906298010867e-5,	
> 凹 Li Energy-3 未提交	13 5.7287067611339496e-5,	
> 🖸 Si phonon 未提交	14 6.465296554312789e-5,	
> 🖸 BN phonon 未提交	15 7.137231755719904e-5,	
> 図 BN Phonon 未提交	16 7.7440481251603e-5,	
> 回 Si band-gy 未提交	17 8.291181156233137e-5,	
> 🖸 Sipdos 未提交	18 8.784981913168116e-5,	
E MacoNi(HO) =18/5	19 9.2311/1169284/0/2-5,	
	20 9.634/26096550556-5,	
· G graphene-ph. 来题文	21 0.0001,	
・凹 grapnene-ba 未提交	22 0.0001057524323173567,	
> 凹 LiCoO2 Wulff 未提交	23 0.00010/05057/0102425,	
~ ☑ p2d 未提交	25 0.000112333300+3320124,	
OUT	26 0.00012389026761568955	
p2d.in.json	27 0.00012933861704891424.	
p2d.out.json	28 0.00013459699057001757.	
package ison	29 0.00013955221057227948	
> 洗程	30 0.00014412090967050675,	
> 太地运行任务	31 0.00014826685523670115,	
C THORETS LOS		
C		行1,列1 json 🗘

分析设置面板如下图所示,选择需要分析的性质即可。右侧可以设定想得到的时间和数据的插值 方法。全部设定完成后,点击确认即可。

Ξ 20 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10		💅 p2d.out.json - Matter Craft	- 🗗 >
L L <thl< th=""> <thl< th=""> <thl< th=""></thl<></thl<></thl<>		开始 輪蝦 插件 建模 视图 计算 分析 帮助	
LL RL 0.74007 Vir 2.41081 9.74007 Vir 2.51041 9.74007 Vir 2			
Signality 954007 957 95 Signality 954007 95 1 Signality 954007 95 1 Signality 955 1 1 1 Signality 1 1 1 1 1 Signality 1 1 1 1 1 1 Signality 1 <th></th> <th></th> <th></th>			
1 House 1 House 2 House 1 House 3 House 1 House 4 House 1 House	第一性原理 分子动力学	rais p2d-Analysis ×	
CB / Color Vector F / S I / S / S / S / S / S / S / S / S / S /			
- 36 1 - 93 1 - 93 1 - 93 1 - 93 1 - 93 1 - 93 1 - 93 1 - 93 1 - 93 1 - 93 1 - 93 1 - 93 1 - 93 1 - 94 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1 - 91 1	任务 ~	webview 國 电压电源曲线 描儀方法 Linear	
- B St Bank or #820	~ 本地	1	
3 B S Hand-dos, HESC 4 0	> □ Si Elastic 來提交	2 夏小时间 0 5	
1 - Bit (22 Reiser) + states 5 0 - Mit (30 Mit) 0 - Mit (30 Mit) 1 - Bit (22 Reiser) + states 0 0 - Mit (30 Mit) 0 - Mit (30 Mit) 2 - Bit (22 Reiser) + states 0 0 - Mit (30 Mit) 0 - Mit (30 Mit) 2 - Bit (22 Reiser) + states 0 0 - Mit (30 Mit) 0 - Mit (30 Mit) 2 - Bit (10 regy) + states 0 0 - Mit (30 Mit) 0 0 - Mit (30 Mit) 2 - Bit (10 regy) + states 0 0 0 - Mit (30 Mit) 0 0 2 - Bit (10 regy) + states 0 0 0 0 0 0 2 - Bit (10 regy) + states 0 0 0 0 0 0 2 - Bit (10 regy) + states 0 0 0 0 0 0 2 - Bit (10 reg) + states 0 0 0 0 0 0 2 - Bit (10 reg) + states 0 0 0 0 0 0 2 - Bit (10 reg) + states 0 0 0 0 0 0 2 - Bit (10 r	>回 Si band+dos 未提交	4	
1 = Dic22 Relace 3, relation 4 0 0 1 = Dic22 Relace 3, relation 4 0 0 1 = Dic22 Relace 1, relation 4 0 0 1 = Dic22 Relace 1, relation 4 0 0 1 = Dic22 Relace 1, relation 4 0 0 1 = Dic22 Relace 1, relation 4 0 0 1 = Dic22 Relace 1, relation 4 0 0 1 = Dication 4 0 0 1 = Dication 4 0 0 1 = Dication 4 0 0 2 = Dication 4 0 0	> 回 LiC32 Relax-H 未提交	5 日 由能源的价值	
1 = 01 (122) etc.sk-1, #182 1 0 = 01 (122) etc.sk-1, #182 1 0 = 01 (122) etc.sk-1, #182 1 0 = 01 (10-etc), #182 <td>> □ LiC32 Relax-B 未提交</td> <td>6</td> <td></td>	> □ LiC32 Relax-B 未提交	6	
2 - 30 U.S.2 Model*1, max 2 2 - 10 Contemp + max 2 2 - 01 Contemp + max 2	・回LIC32 Relax-T 未提交		
	→ 回 UC32 Relax-PL 未設会	9	
B U Linergy-1 ##20 11 B U Linergy-3 ##20 13 B G Linergy-3 ##20 13 B Si blandgy ##20 14	→ □ C Relax-991 Add C	10	
1 目は feergy 3 未開交 11 2 目は feergy 3 未開交 11 2 目 Ny honon 非反交 11 3 目 Ny honon 非反交 11 3 目 Ny honon 非反交 11 3 日 Ny honon 非反交 12 3 日 Ny honon 非反交 12 3 日 Ny honon 非反交 12 3 日 Synchot 非反交 12 4 日 Synchot 非反交 12 9 Honot 非反交 12 9 Honot 非反应 12 9 Honot 非反交 12 9 Honot 非反交 12 9 Honot 非反应 13 9 Honot 非反应 14 <	→回Li Energy 小版文	11 时间/s 设置	
- В Кринопо надо;	>回Li Energy-3 未提交	12 13 回版推荐法庭	
1 Θ Kh phonon ##\$2 15 1 Θ Kh phonon ##\$2 17 1 Θ Kh phonon ##\$2 17 1 Θ Si Shandy ##\$2 17 1 Θ Si Shandy ##\$2 19 1 Θ Si Shandy ##\$2 19 1 Θ Si Shandy ##\$2 12 2 Θ Jack ##\$2 12 0 J Θ ##\$2 12 0 J Φ ##\$2 12 0 J Φ ##\$2 14 0 J Φ Φ Φ Φ Φ Φ Φ Φ Φ Φ Φ Φ Φ Φ Φ Φ Φ Φ	→ I Si phonon 未提交	14	
1 - B K Phonon #gg 16 1 - B Sh Dad y#gg 17 1 - B Sh Dad y#gg 18 2 - B gathene ba. #gg 12 1 - B gat y#ge 14 2 - B p2d #gg 14 0 - D P2d #gg 14 <tr< td=""><td>>回 BN phonon 未提交</td><td>15</td><td></td></tr<>	>回 BN phonon 未提交	15	
 ● Bi Shand-oy 建取 ● Bi Shand-oy and Shand-oy	>回 BN Phonon 未提交	16	
 ● B (polo, #世交) ● B (polo, #top) ● B (polo, #t	→ 🖾 Si band-gy 未提交	17	
* 18 M CoN(10)00 - 地理2 20 = 8 gaphene ba - 地理2 21 = 8 gaphene ba - 地理2 21 = 8 gaphene ba - 地理2 22 = 8 gaphene ba - 地理2 22 = 9 gab - 地世2 22 = 9 gab - 地t2 22 = 9 gab - ut2 22 = 9 gab - ut2 22 = 9 gab -	> □ Si pdos 未提交	19	
3 G gaphene ph. 未規型 21 1 G gaphene ph. 未規型 22 1 B G gaphene ph. 未規型 22 1 B UCO2 Wulff 未成文 23 1 G ph 相型文 25 C UT 26 ph Kage(on 27 ph Kage(on 27 ph Kage(on 27 ph Kage(on 27) 1 G gaphene ph	>回 MnCoNi(HO) 未提交	20	
* 16 graphene ba. 非版2 22 * 16 pod #規2 23 * 16 pod #規2 24 our 26 pod #規2 24 pod #L0 20 # 10 00 00 # 10 00	→ 回 graphene-ph_ 未提交	21	
* B I GLOGO WWII 消除: ● 日本 研究 のU のU のD 定義 の目から の の の の の の の の の の の の の	> 回 graphene-ba 未提交	23	
- W por Hask 25 OUT 26 potdoution 27 potdoution 29 packagelon 29 558 30 30 0.0000168(50005)250/0110,	・ 世 UCOO2 Wulff 未提交	24	
Polinjon 26 polinjon 27 polinjon 28 sw 30 otworksteeporzen awarder	OUT	25	
Potdoutjon 28 paktagejon 29 28 29 28 29 28 29 28 29 29 29 29 29 29 29 29 29 29 29 29 29 29 29 29 29 29 29 29 29 20 29 20 29 20 29 20 29 20 29 20 29 20 29 20 29 20 29 20 29 20 29 20 29 20 29 20 29 21 29 21 29 21 29 21 29	n2d in ison	26	
packagejion 22 電視 200 新規 200	p2d.out.ison	27	
2日 - 市地語行任務 30 0 0 00001484000032290/0115, 在1月1日 0 0001484000032290/0115,	package.json	29 稿认 取消	
→ 本地运行任务 31 0 0.000148400655249/0115, 石 1.201 km 0	> 远程	30	
E 1201 kon O	> 本地运行任务	31 0,00014820083523070115,	
			51.M1 icon 0

分析结果如下图所示,所有分析结果都显示在右侧的界面中,可以通过选择不同的页签来查看不同的分析结果。

材料工坊使用教程



高级计算

电压曲线

如下图红框处所示,点击"计算"-"高级计算"-"电压曲线"进行晶体形貌的计算设置

材料工坊使用教程



电压曲线的设置页面如下图所示。这个页面主要用于设置电压曲线计算的工作元素和 SOC。 电池元素:用于设置切电池的工作元素。LiCoO2 正极中的工作元素是 Li。

最大超胞倍数:用于设置在多大的超胞范围内进行搜索,最大超胞倍数决定了可选的脱 Li 比例。 要计算的脱 Li 比例:用于设置要计算多少脱 Li 比例(即 SOC)的结构。在最大超胞倍数为1时, 结构中有3个 Li 原子,因此脱 Li 比例可选的是100%(不脱),66.7%(脱2个),33.3%(脱1 个)和0%(全脱)。

每个脱 Li 比例结构数:用于设置每个脱 Li 比例需要计算最多多少个结构。设置完成后,点击"计算结构总数",下方会显示本次计算共需要计算多少个结构。



本次计算共需要计算8个结构。

材料工坊使用教程

W LiCoO2.cif - Matter Craft	- D ×
王文和 B B B D C 形地 編編 麻井 建商 範囲 計算 SFF 存留 ビ ビ ビ 芝 ビ レ 芝 ビ ビ 芝 HTLANEMOS 高級計算 电活動能 単子电导本 晶体影響 cp2k Lammps p2d間型	
webviewsLiCoO2.cf × 电压曲线 ×	<u>(*</u> ±*)
● b c a* b* c* (3 c) + 14 ◆ ● ● ● </th <th>fa - 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0</th>	fa - 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
b а а а а а а а а а а а а а	CANALIZATION SILE T(A) C L S V U I 157 0 V U 157 0 V O 074 0 V O 0 0 0 0 V O 0 0 0 0 V O 0 0 0 0 V O 0 0 0 V O 0 0 0 V O 0 0 0 V O 0 0 0 V O 0 0 V O 0 0 V O 0 0 V O 0 0 V O 0 0 V O 0 0 V O 0 0 V O 0 0 V O 0 0 V O 0 0 V O 0 0 V O 0 0 V O 0 0 V O 0 0 V O 0 V O 0 0 V O 0 V

设置完成后点击"计算设置",进入第一性原理计算的参数设置页面。

设置面板如下图所示, 分为基础设置、高级设置和结构优化。进入后面板中已经给出了部分参数 的默认设置, 空白的参数可以不需要进行填写。一般来说, 使用默认参数就可以完成一个中等精 度的计算任务。

基础设置页面,使用默认参数即可。

	💅 Si.cif - 02	测试用例 - Matter Craft	- ð ×
三文件 日 四 四 つ ご 开始 編編 画 ビ ビ ビ 空 HYLANEMOS 高税計算 电圧曲线 高子电导率 高税	編件 EEQ 初期 <u>計算</u> 分析 和助 <u>ゲ</u> レビーン K形現 cp2k Lammps p20機型		_
任务 ~ webview:Sicit ×	HylAnemos		x (***)
 ◆ 北池 ● 山 Relax 非提定 ● 山 Relax 非提定 ● 山 Relax 非提定 ● 山 Relax 非提定 ● D Relax #提定 ● D Relax #提定 ● D Relax #提定 ● D Relax #提定 			• Mickstar • Mickstar • Mickstar • • • • • • • • • • • • • • • • • • •
100 110 311 300k packagejon watfyani 3日(100): 未見交 3回(100): 未見 3回(100): 未 3回(100): 未 3回(100): 未 3回(100): 未 3回(100): 未 3回(100): + 3(100): + 3(10): + 3(100): + 3(100): + 3(100): + 3(100): + 3(100):	Метелийский Бетерийской 1/А Ветелийской 0.5 1/А Бабор 5677 1/А	電台開送 Uniden ン ズは	Atom x y z

结构优化设置页面,使用默认参数即可。由于脱 Li 之后晶格的变化可能会比较大,建议勾选优 化晶胞,在计算时优化晶格常数。

材料工坊使用教程

			🎷 LiCoO2.cif - Matter Craft	- 8 >
三文件 智 智 智 う さ 一开始		建模 親間 计算 分析		
~ ~ ~				
HYLANEMOS 高级计算 电压曲线				
webview:LiCoO2.cif ×	ets FT dts.68			
a b c a* b* c* [] c+ t↓ ◊ ⊛ •	HylAnemos		*	
	其新设置 (5枚)	北化 高级设置	1	angs 💿
		interior in the second s	Pair .	a (2.842) (0 (0)
	創墨收敛际准	0.00001 eV/atom	STAR	b (1.42) (2.462) (0
	原子受力收敛标准	0.05 eV/Å		c (0 (14.14)
			+PREMETERIAN	◎品梅参数
	加于位移		α α α/ο Ο α Ο α=β	Site x y z
	载大原子位移	0.1 Å	Ο Β Ο Β/ς Ο β Ο β«γ	
	应力		c a/c γ α=γ	00 0
	四十章力		C volume C avort C u-p=y	0
	ACCIE/J	0.001 GPA		●結构显示 原子 ●
	各向同性压力	0		Site r(A) C L S V
		x y z		
b		x 0 0 0		⊘ ○ 0.74 □ □ ∀
		z 0 0 0		● 島梅追院 勝子 ●
a 🔪	1 ·	运行	× RI	Atom x y z
				9 ÷ · • • = #
C				

高级设置页面,对于具体的体系应该选择需要的修正。例如对含过渡金属的体系,使用 DFT+U; 对有范德华作用力的体系,选择色散修正;对有自旋的体系,选择自旋极化计算。 对于LiCoO2 体系, 会有过渡全属 Co. 需要为其没罢 DFT+U 和自旋极化,这里的没罢如下图纸

对于 LiCoO2 体系,含有过渡金属 Co,需要为其设置 DFT+U 和自旋极化。这里的设置如下图所示。

		🐓 LiCoO2.cif - M	atter Craft		- 0 ×
三文件 台 図 目 り ぐ 形地 ビ ビ ビ HYLANEMOS 高限計算 电压曲线	編編 画件 建模 税間 (計算 分析 変 ビ ビ ビ 変 高子由导本 晶体形段 cp2k Lammps p2d税型	10			
webviewctiCoO2.cif × a b c a* b* c* [] □• + 14 � ⊛ •	HylAnemos		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	● 品格券数	
		自戰機化 投影类型	副注 collinear spin > 元歳 >	angs a 2.842 0 b (-1.42) (2.462) c 0 0 ● 高裕物業数	0 0 0 (14,14)
	DF1-U股形気型 元素 し し し の し の の の の の		Town 0024 Li 0 Co 0.2 O 0	Site x y 0 Li - - 0 Co - - 0 O - -	- 0 - 0
Б		他已HstatoreLE 修正方法 电势最大位置	Z V dipole correction V	● 括約20万 Site r(A) C L ● Li 1.57 ● Co 1.25 ● O 0.74 ● Co 0.74	s v S V
	(filling)	由称下加仅城长来	(SER	Atom x y	z

设置好 Hylanemos 的计算参数后,点击"运行",进入如下界面。这里可以设置计算的任务名称、 描述,使用的计算资源,并行参数等等。设置完成后点击"运行"。

材料工坊使用教程

			LiCoO2.cif - M	atter Craft			- 0 >
ビビビビ HYLANEMOS 高級計算 电圧曲线	二 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一	cp2k Lammps p2d機型					
webview:LiCoO2.cif X				U)	_		
abca*b*c*[] c+ 14 ♦ ⊕ •	任务			×		○ 品格参数	
-	88		k点并行参数	并行参数1		angs 💿	
	任务描述		fft开行参数	1		a (2.842) (0 b (-1.42) (2.462)	
	\$6.D+					· • •	(14.14)
	服务器	Local 🗸				○結构参数	
	计算节点	local ~				Site x y Site	7 - 0
	并行调度	mpirun				0 Co	- 0
	队列调度	PBS ~				0	
						●結构显示	
						Site r(A) C L	
ь						● Co 1.25 □ ● O 0.74 □	
							康子 😒
▶ a		6)	1-#	×ia		Atom x y	Z
	_						
C							

这时任务栏会出现 LiCoO2 Voltage 的任务, 里面包含了生成的不同脱 Li 比例的结构和计算任务。



在 LiCoO2 Voltage 处点击鼠标右键,点击本地执行程序。然后 Hylanemos 会开始进行计算。

材料工坊使用教程

	FICOD2.cfr - Matter Craft		L
= 文祥 日 日 日 5 C 上 上 HYLANEMOS #90311日 年月	开始 編編 編件 建築 載調 <mark>计型</mark> 分析 存為 ゲ 李 ピ ピ ピ 李 総約 高子伯母本 品林売録 cp2k Lammps p23開型		
低翁 ~	webview:LiCoO2.cif ×	•	39
~ 本地	a b c a* b* c* () d* + t↓ ◇ ⊕ ● ⊘ □ 0	(16-0005⊂回日日) ◎品作参数 (用	O
→ 🖸 Na Relax 未提交			
> 🖸 Na Relax 未提交		angs	
→ 回 K Relax 未提交		a (2.842) (0 (0	2
・ 凹 K Kelax 未提交) 同 K Palax 未提立		b (-1.42) (2.462) (0	
> □ Mg Relax 未提交			
> □ Mg Relax 未提交			2
> 🖸 Mg Relax 未提交		 ● 結构参数 	
> 回 Al Relax 未提交		Site x y z	
> II Al Relax 未提交		Di	8
・□ Al Relax 未僅交)□ Ci Multin +博立	and the second sec	OCo	8
> 図 NaCl Voltage 李焜卒		0 0	8
>回CMD 未提交		0	
> □ C Energy 未提交		● 法約局策 (日本)	
→ IB C band 未提交			-
→ 🖸 Si Wulff 未提交		Site r(A) C L S	× I
~ El LicoO2 Volta 開除杰达			
→ Li(CoO2)3-0 本地执行任约			5
→ Li2(CoO2)3- 本地给出执行	命 令		2
→ LiCoO2-0-or 本地执行程序	設置 1	●結构組織 開分	0
package.json 在文件资源计	uggar a a	Atom x y z	
voltage.yaml			
> 近程			
中市运行性势			
(

开始计算后,右下角会弹出通知提示框,表明任务已经开始计算了。

<pre>Exp B B B C Fish BEE BEF BEE BEE BEE BEE BEE BEE BEE BEE</pre>				💅 LiCoO2.cif - Matter C	iraft		-
L L <thl< th=""> <thl< th=""> <thl< th=""></thl<></thl<></thl<>			214 2011 HI				
INUMANDO Ruiti distati #74194 Ruiti dist		ا ا 🕿 اما		-			
HUDDENOS wordtik dit ziele karden dit generalizete kard				-			
fith Network/CO2 of * * 500	HYLANEMOS MORTEL		i cpzk i tammps pzoł	241			
- 本地 - 小田 和 Relax 相理 - 本地 - 小田 和 Relax 相理 - 本田 - 小田 か Relax 相理 小田 か Relax 相理	任务 ~	webview:LiCoO2.cif ×					
 ○ Bis Below 相照 ○ Bis Below 相E ○ Bis Below 相E ○ Bis Below HE ○ Bis Below HE	~ 本地	abca*b*c*Cor	± 1↓ � ֎ ● ❷ □ 0)			888000-ce	○最格参数 ④
 ○ 日本 Brake 未規交 ○ 日本 Brake 未見交 ○ 日本 Brake + Arge Brake + 未見交 ○ 日本 Brake + Arge Brake + Arg	> 回 Na Relax 未提交						
 ○ 目 Kelau #提交 ○ 日 Kelau #EZC ○ B Kelau #EZC ○ C Mo #EZC<td>> 🛛 Na Relax 未提交</td><td></td><td></td><td>×</td><td></td><td></td><td>angs 🕑</td>	> 🛛 Na Relax 未提交			×			angs 🕑
 ○ R Relax #理交 ○ R Relax #理交 ○ R Relax #理交 ○ B Relax #理交 ○ B Relax #理交 ○ B Relax #理交 ○ A Relax #理交 ○ B Relax #理交 ○ C Energy #型の ○ C Energy #型の ○ C Conce y #Z0 ○ Conce y #Z0 ○ C Conce y #Z0 ○ Conce y #Z0<td>→ 🛛 K Relax 未提交</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td>a (2.842) (0 (0</td>	→ 🛛 K Relax 未提交						a (2.842) (0 (0
 ● Explore #理定 ● Explore #理定 ● Explore #理定 ● Explore #up ● Expl	→ 図 K Relax 未提交						
 I dig Relax 相較。 I dig Relax Hota I dig Relax	> □ K Relax 未提交						- (-1.42) (2.462) (0
 ○ 目板 Relax 相反、 ○ 日本 Relax 相反、 ○ Chor Hag ○ Cool - Opt (relax jon, - kgroup), - force 1 LasyOFT082 (rough), 4 and - force 1 LasyOFT082 (rough), 4 and - force 1 LasyOFT082 (rough), 2 and + force 1 LasyOFT082 (rough), 1 and + force 1 LasyOFT082 (rough), 1 and + force 1 LasyOFT082 (rough), 1 and + force 1 LasyOFT082 (rough), 2 and + force 1 LasyOFT082 (rough), 1 and + force 1 LasyOFT082 (rough	> □ Mg Relax 未提交						c 0 0 14.1
 ○目の目前は、相反 ○目の目前は ○目の目前は ○目の目前は ○目の目前は ○目の目前は ○目の目前は ○目の目前は ○目の目前は ○目の日前は ○目の日前は ○目の日前は ○目の日前は ○目の日前は ○目の日前は ○日の日前は ○日	> ☑ Mg Relax 未提交						
 ○日本局は総計構成 ○	→ 回 Mg Relax 未提交						0 10 19 19 10
 ○ La Mileia: 建定 ○ Bi Mileia: 建定 ○ Catol: #E2 ○ Catol: #E2	> 回 Al Relax 未提交						Site x y z
 A MARKAL 学校 A MARKAL 学校 B SI Wull, 半校交 B Churd, Voltage 非歴史 B Churd, HEQ C Extrange / Extrange) 凹 Al Relax 未提交						Oli a a a l
 Shull 端弦 Bhull Matter Bhull Matter Bhull Matter Bhull Matter Chony 建設 Chony 生 Chony to the set of the s) 回 AI Relax 未健交) 回 CI Modifi 土埋立			And the		1240	-
BC MD 構設 ACM # 程設 BC MD 構設 Control # 20 Control# 20 Control# 20 Control# 20 Control# 20 Control# 20 Co	> El NaCi Voltana #18/5					10041	•
 BC Energy 建設交 BC band 非提交 BC Stand 非 建交 BC Stand 非 型交 BC Stand 非 型交 BC Stand 非 型交 BC Stand 非 型交 BC Stand 非 型 Stand Stand					A	TO TRADUCTURE 1	CoO2 Voltage/f49d3400-24e4-11ed
 B C band 未建築 B K Wulf 未建築 B K Kong Vertage 批算を B K Kong Vertage 批算を C SO20-Opt K Kong Vertage K Kong Verta	>回 C Energy 未根卒					-8379-11154bfd	e11)
Classes Constraints Classes Clast Classes Classes Classes Classes	→ ID C band 未提交				N	source tasks	
 日iGCG2 Voltage 地理の CGD2-0 opt LigCG2D2-0-opt LigCG2D2-0-opt LigCG2D2-0-opt	→ II Si Wulff 未提交						
Cod2-d-opt Category Toolson Portunations and Cod2 - optivata join - Kirouph,Iorce 1/LasyOFT 0/20 Cod2-d-opt LipicsO23-0-opt LipicsO23-0-opt LipicsO23-0-opt LipicsO23-0-opt LipicsO23-0-optivata join - Kirouph,Iorce 1/LasyOFT 0/20 Jac2	~回LiCoO2 Voltage 由提交					EAFaraDET\0807	\oarallel\bin\blutAnamoravaLiCoO
> Li(coQ2)-0-opt > Li(coQ2)-0-opt > Li(coQ2)-0-opt > Li(coQ2)-0-opt peckage.json votage.yami > 元報道行任務 > 자원运行任务 > 자원运行任务 > Source tasks	> CoO2-0-opt					2.0-onthrelay iso	-karoun 0 -force EAFasyDET\08
 LUZ(CO2):0-Opt LUZ(CO2):0-Opt<	Li(CoO2)3-0-opt	b				02\parallel\bin\t	tvlAnemos exe Li2(CoO2)3-0-opt/rel
) UC:002-0-opt package.jion votage.yaml) 遼國) 本地臣行任务	Li2(CoO2)3-0-opt					ax.json,kgroup	.0force E:\EasyDFT\0802\parallel
peckagejon voltgeyand 意耀) 赤地道行任务	LiCoO2-0-opt					\bin\HylAnemos	.exe,Li(CoO2)3-0-opt\relax.json,kg
」 volagesand mos ear.CoO2-0-optyrelac.jon,kgroup.0,force volagesand volages Volagesand volagesand volagesand volagesand volagesand volagesand volagesand volagesand volagesand volagesand v	package.json		⇒ a			roup,0,force E:	EasyDFT\0802\parallel\bin\HylAne
) 定理 シ 本地総合任务 ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・	voltage.yaml					mos.exe,CoO2-0	
5. 安远运行3条	> 四程					source: tasks	
	> 本地运行任务						

计算完成后,点击 voltage.yaml。然后点击"分析"-"高级分析"-"电压曲线"

材料工坊使用教程



弹出的电压曲线分析设置如下。

用户可根据需要勾选是否计算平均电压,是否使用不收敛的数据进行分析。

负极的化学势需要用户填写,下方给出了常用的金属电极在不同赝势下计算得到的化学势,包括 Li、Na、K。用户可以直接使用这些参考化学势,也可以根据自己的需要自行计算负极的化学势。 这里使用 Li 金属负极的

设置完成后,点击"分析"

		🎔 voltage.yaml - Matter Craft		- 8
三文件 日 四 四 日 ○ C レベ レベ 第一位原理 分子动力学	开始 編輯 邮件 建築 規則 ビ ビ ビ ビ 奈 市内 高級Sym 中国 电圧曲站 第子电导利 webviewd/CO02cit voltage.yaml ×	ня 915 тав 5 5 5 5 амянее 1977юв росеба		CES
 本認 ○ Na Relax 未提交 ○ Na Relax 未提交 ○ Kelax 未提交 ○ K Relax 未提交 ○ K Relax 未提交 ○ K Relax 未提交 ○ G M Relax 未提交 ○ G M Relax 未提交 ○ G M Relax 未提交 ○ G A Relax 未提交 ○ G M Relax 未提交 ○ G Loco 2 voltage #提交 ○ G Loco 2 voltage ○ LU(CoO2) -0 opt > LU(CoO2) -0 o	1 •voltage key: LiCoo2-0.opt 2 voltage cnt: 'o' 3 structure: 4 'mandule': eacop.ms/core/s 5 'gclass': structure 6 lattic: 7 matrix: Kref_0 8 - 2.462898 9 - 0 10 - 1.740772968012066: 11 - 2.46202191376938 12 - 2.46202191376938 13 - 1.4136015 14 - 0 15 - 0 16 - 14.145615 17 - 2.842298 18 br 2.842298 19 ci 14.145615 20 alpha: 90 22 gama: 119.9999089999999999999999999999999992 23 volume: 90.0006016651222 24 sites: - name: Li secies: - element: Li abc''	 ● 日田曲銘分析 ● 計算学時期度 ● 使用不吸放刺風田行分析 1 1 	× 魚田化学時 -1-5 eV 知道金田和化学時 (単年) 一日 -1-5 -1 -2 K -1-5 -1 -2 K -1-5 -1 -2 K -1-5 -1 -2 K -1-5 -1 -2	
> 远程 > 本地运行任务	30 - 0 31 - 0			(5)英·•, ♥ ■ #

输出的钴酸锂的电压曲线如下图所示。

纵坐标是电压,横坐标是容量。其中蓝色的线表示放电整个过程中的每一步的电压,绿线表示整 个放电过程的平均电压。这里两者正好相等。

材料工坊使用教程

	4c4a5130-2835-11ed-9308-97a5d484dd52 - N	Aatter Craft – Dr
王文4F B B B D C 开始 明朝 単符 ビ レ レ レ レ レ レ 第一世版現 分子初力子 初時 高税分析 相談	2017 和助 111 111 2017 和助 111 2018 111 111 1111 111 2018 111 1111 1111 1111 1111 1111 11	
任务 予約 3 3 3 3 3 3 3 3 4 3 4 5 <th>Voltage.key X 1 - voltage.key: LiCo2-0-opt 2 voltage.key: LiCo2-0-opt 3 structure: 4 '@module': eacomp-ms/core/structure 5 '@class': structure 6 lattice: 7 matrix: & Ref_0 8 - 0 9 - 1.42448957020801206e-16 11 1.421448957029012 12 - 2.46220913176938 13 - 1.740772968001206e-16 14 - 0 15 - 0 16 - 1.42145015 17 a: 2.8422098 19 c: 1.4.145615 17 a: 2.8422098 19 c: 1.4.145615 17 a: 2.8422098 19 c: 1.4.145615 20 agamma: 119.999989999997 21 beta: 90 22 gamma: 119.9999899999997 23 volume: 90.0908016051222 24 sites: 25 - name: Li 26</th> <th>voltage cultivelectation LICoO2 -> Intercalation LICoO2 Mean</th>	Voltage.key X 1 - voltage.key: LiCo2-0-opt 2 voltage.key: LiCo2-0-opt 3 structure: 4 '@module': eacomp-ms/core/structure 5 '@class': structure 6 lattice: 7 matrix: & Ref_0 8 - 0 9 - 1.42448957020801206e-16 11 1.421448957029012 12 - 2.46220913176938 13 - 1.740772968001206e-16 14 - 0 15 - 0 16 - 1.42145015 17 a: 2.8422098 19 c: 1.4.145615 17 a: 2.8422098 19 c: 1.4.145615 17 a: 2.8422098 19 c: 1.4.145615 20 agamma: 119.999989999997 21 beta: 90 22 gamma: 119.9999899999997 23 volume: 90.0908016051222 24 sites: 25 - name: Li 26	voltage cultivelectation LICoO2 -> Intercalation LICoO2 Mean

点击上方的图例,可以显示或不显示某条线。不显示放电电压曲线的图如下

1244 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日	風神 副板 成田 计第 2011 前向 一 一 一 奈 昭 話 が 相目 内正明は 第子句明本 品体形成 p24時型		
5 ~	Starter voltage.yaml ×	webview4c4a5130-2835-11ed-9 ×	
地 回 Si Wulff 未提交 回 NaCl Voltage 未提交 回 C MD 未提交	1 - voltage_key: LiCoO2-0-opt 2 voltage_cnt: '0' 3 structure: 4 '@module': eacomp-ms/core/structure 5 '@rlase': structure	voltage cuive inclution LiCo02 -O- Intercalation LiCo02 Mean	坐
 □ C Energy 未提交 □ C band 未提交 □ Si Wulff 未提交 □ LiCo22 Voltana 未提交 	6 lattice: 7 matrix: &ref.0 8 - 2.842898 9 - 0		
COO2+0-opt COO2+0-opt Ui(CoO2)3-0-opt Ui(CoO2)3-0-opt Ui(CoO2)3-0-opt	10 - 1.740772968001206e-16 11 1.4214489570296112 12 - 2.463021913176938 13 - 1.740772968001206e-16	4	
3 LCoO2-0-opt package.json voltage.yaml □ L110Ge(PS6)2 Ionic 未提交	14 0 15 -0 16 14,145615 17 a: 2,842998 18 b: 2,842998	3-	
∃ p2d 未遵交 ∃ NaCl Energy 未提交 ∃ C MD 未提交 ⊒ NaC18 NEB 未提交	19 c: 14.145615 20 alpha: 90 21 beta: 90 22 gamma: 119.99999899999997	2-	
B NaC18 NEB 未提交 G Si Wulff 未提交 G C fonic 未提交 B FeO Voltage 未提交 G Si Energy +提序文	23 volume: 09.00000016651222 24 sites: 25 - name: Li 26 species: 27 - element: Li	1.	
a a chergy Assex 2 LiCoO2 Voltage 未提交 2 2 2015任务	28 occu: 1 29 abc: 30 - 0 31 - 0		210

将鼠标放在曲线上,会显示当前点的容量和电压值。

材料工坊使用教程

	4c4a5130-2835-11ed-9308-97a5d484dd	152 - Matter Craft – Ö
三文件 目 目 目 う ご 一开始 編編	馬件 建模 视图 计算 分析 帮助	
M M M		
一性原理 分子动力学 结构 高级分析	所相關电压曲线 离子电导率 晶体形貌 p2d模型	
1务 ~	Starter voltage.yaml ×	webview:4c4a5130-2835-11ed-9 ×
地	1 - voltage_key: LiCoO2-0-opt	
□ Si Wufff 未提交	<pre>2 voltage_cnt: '0'</pre>	voltage curvetercalation LiCoO2 -O- Intercalation LiCoO2 Mean
回 NaCl Voltage 建理效	3 structure:	
PCMD 未提応	4 '@module': eacomp-ms/core/structure	5
	5 gclass : Structure	
Protection of the second	b lattice:	
· U Coand 采提交	/ matrix: &ret_0	
・ ビ Si Wulff 未提交	0 2,042898	P
* 回 LiCoO2 Voltage 未提交	10 - 1 7407730680013060 16	
> CoO2-0-opt	11	186.98
> Li(CoO2)3-0-opt	12 - 2.462021013176038	 Intercalation LiCoO2 4.293339207220924
> Li2(CoO2)3-0-opt	13 - 1,740772968001206e-16	Intercalation LiCoO2 O
> LiCoO2-0-opt	14 0	Intercalation LiCoO2 Mean 4 293339207220924
package ison	15 - 0	
promption	16 - 14,145615	Intercalation LICOU2 Mean 4.293339207220924
vonage.yanu	17 a: 2.842898	
ロ Li10Ge(PS6)2 Ionic 未提交	18 b: 2.842898	
PE p2d 未提交	19 c: 14.145615	
D NaCl Energy 未提交	20 alpha: 90	
DICMD 未提交	21 beta: 90	2-
> 回 NaC18 NEB 未提交	22 gamma: 119.9999989999997	
> □ NaC18 NEB 未提交	23 volume: 99.00908016651222	
DISi Wulff 美標交	24 sites:	
	25 - name: Li	
D E to Weltons +187	26 species:	1-
Delle state	27 - element: Li	
「 U Si Energy 未能文	28 OCCU: 1	
* 団 LiCoO2 Voltage 未提交	29 aDC:	
远程	30 - 0	
本地运行任务	- 0	

点击图片右上角的按钮(下图红框处), 可以导出当前的图片。

三文件 🗟 🗟 🗇 ご 🛛 开始 嶋編 新件	建模 親間 计算 分析 帮助		
M M M M	v Iv 🗢 🖬 🖬		
dt −110000# 27±70020≠ 60400 909003461 610	BE DUTHER MITTER AND		
## ·	Starter voltage vaml ×	webviews4c4a5130-2835-11ed-9. X	
2 W M	1 - voltage key: LiCg02-0-ont		
	2 voltage cnt: '0'	voltage completercalation LiCoO2 -O- Intercalation LiCoO2 Mean	
7回 Si Wulff 朱继交	3 structure:	voltage curve	\simeq
> 回 NaCl Voltage 未提交	4 '@module': eacomp-ms/core/structure		
→ E C MD 未提交	5 '@class': Structure	57	
> 回 C Energy 未提交	6 lattice:		
> 🖸 C band 未提交	7 matrix: &ref_0		
> □ Si Wulff 未提交	8 2.842898		
~ 団 LiCoO2 Voltage 未提交	9 - 0		
> CoO2-0-opt	10 - 1.740772968001206e-16	4-	
> 1i(CoO2)3-0-opt	111.4214489570296112		
> 1/2(CoO2)3-0-opt			
> Unicode jo or opt	13 - 1./40//29080012000-10		
* DC002-0-0pt	14 770		
package.json	16 - 14 145615	3-	
voltage.yami	17 a: 2.842808		
> 目 Li10Ge(PS6)2 Ionic 未提交	18 b: 2.842898		
→ 回 p2d 未提交	19 c: 14.145615		
> 図 NaCl Energy 未提交	20 alpha: 90		
→ 団 C MD 未提交	21 beta: 90	2.	
→ 図 NaC1B NEB 未提交	22 gamma: 119.99999899999997		
> E NaC18 NER 東部立	23 volume: 99.00908016651222		
	24 sites:		
	25 - name: Li		
The source states	26 species:	14	
· @ reo vonage 未提交	27 - element: Li		
・ U Si Energy 未提交	28 occu: 1		
~ 団 LiCoO2 Voltage 未提交	29 abc:		
) 远程	- 0		
> 本地运行任务	- 0		210

选择保存的路径并输入文件名,即可导出图片。



材料工坊使用教程

			🐓 4c4a5130-2835-11ed-9	08-97a5d484dd52 - Matter Craft	-
文件 🗃 🗃 🗃 与 😋			1 <u>分析</u> 12助		
		≈	3		
性原理 分子动力学	结构 高级分析 相图	电压曲线 离子电导率 晶体	明胞 p2d模型		
8				×	
¥ ~				webview:4c4a5130-a	-2835-11ed-9 ×
地 🗧 🗧	↑ 🔼 、 此理語 、 图片 、		✓ C 2 在图片	PRE	
⊡ si Wulff ≭ #8#0 - ###	文件生			voltage cuin	Vetercalation LiCoO2 -O- Intercalation LiCoO2 Mean
I NaCl Voltac	ATA				Save as Image
🖸 C MD 未提	· ·	_		5	
🗟 C Energy 🚁 👱 下戦	21 T	and the second second			
C band 末 🧧 文档	*	12000			
3 Si Wulff 🔺 📃 图片	*	No.	E	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	8
LiCoO2 Vol	保存的图片	本机照片 QC	截图		
CoO2-0-05		20210	9281114		
Li(CoO2)3- Y OneDrive	Persc	21	png		
> Li2(CoO2): > 🚞 电子邮件	5件 「				
› LiCoO2-0- → 늘 图片					
package.json , 🐂 🗴 🛤				3-	
voltage.yaml					
Li10Ge(PS6) 文件名(N): voltage curve.png			~	
p2d 未提交 保存类型	T): All Files (*.*)			~	
NaCl Energy					
C MD 未提 ^ 隐藏文件夹			保存(S)	取消 2-	
NaC18 NEB					
NaC18 NER 4477-00		23 volume:	99.00908016651222		
		24 Sites: 25 - name:	11		
Si Wulff 未提交		26 specie	25:	1-	
Si Wulff 未提交 C Ionic 未提交					
Si Wulff 未提交 C Ionic 未提交 I FeO Voltage 未提交		27 - e.	lement: Li		
I Si Wulff 未提交 I C Ionic 未提交 I FeO Voltage 未提交 I Si Energy 未提交		27 - e. 28 0	lement: Li :cu: 1		
Si Wulff 未提交 I C Ionic 未提交 I FeO Voltage 未提交 I Si Energy 未提交 I LiCoO2 Voltage 未提交		27 - e. 28 oi 29 abc:	lement: Li :cu: 1		
B si Wulff 未提交 I C Ionic 未提交 I FeO Voltage 未提交 I si Energy 未提交 I LiCoO2 Voltage 未提交		27 - e. 28 or 29 abc: 30 - 0	lement: Li :cu: 1		

晶体形貌

如下图红框处所示,点击"计算"-"高级计算"-"晶体形貌"进行晶体形貌的计算设置



晶体形貌的设置页面如下图所示。这个页面主要用于设置切表面的方式。

最大米勒指数:用于设置切表面时最大的米勒指数面,这里设为1,表明切面时将遍历所有最大 米勒指数不大于1的面,即从(000)面到(111)面。

不可切断的键,最大键长:这两个参数用于设置在切面时结构中的哪些键不能被切断。在单质中 不能进行设置。

最大搜索:用于设置搜索正交晶胞的范围,设置得比较大,更有可能找到正交的晶胞,但原子数 也可能更多。这里设置为 5。

真空层厚度:用于设置切出的表面结构的真空层的厚度。这里设置为10。

最小表面厚度:用于设置切出的表面的厚度。这里设置为10。

表面可移动原子厚度:用于设置在第一性原理计算中距离表面多远的原子可以移动。

是否寻找表面结构的原胞:用于设置在切出表面结构后,是否转换为原胞。 只生成对称表面:用于设置是否只生成对称的表面。

只生成非极化表面:用于设置是否只生成非极化表面。在单质中是否勾选对生成的结构不会有影响。



TiO2 结构中,不可切断的键可以选择 Ti-O 键,并设置最大键长。

	💅 TiO2.cif - 02測	武阳时 - Matter Craft		- 0	>
三文件 日 日 日 う ご 一开始 編編 新件 夏	1级 视图 计算 分析 帮助				
14 14 14 🛨 🖬	14 14 +				
	≂				
HYLANEMOS 高吸计算 电压曲线 高子电导率 晶体形积	cp2k Lammps p2dH2f2				
H-8 v waterieurSi of waterieurTi()2 of X					
			(16-00054800)		5
→□ a D C a D C C C D 中 I ◆ ◆ ◆ ◆					
>回 Li Relax 未提交	晶体形貌		×	angs 💿	
→ 回 Li Relax 未提交				a (2.96) (0) (0)	
・回 Li Relax 未提交	EL LUMBER			h () (15) ()	
・ 🛛 Na Relax 未提交	RUCH ROTHER	PERSONAL 10			
> 回 Na Relax 朱提交		最小表面厚度 10		¢ (0) (0) (4.59)	
· G Na Nelax 本提交	不可切断的键 最大键长			●结构参数	
→ 図 K Relax 未提交	Ti4+-O2- 2 Å	表面可移动原子厚度 2.5			1
> □ K Relax 未提交		■ 基本型技术器は100/EBB		one ∧ y 2 ⊙Ti 0	
> □ Mg Relax 未提交	星大技家	End 414 bolle of Hellings		00 0	
→ 団 Mg Relax 未提交		日牛成対称表面		0	
) 凹 Mg Relax 朱耀交					
· C Al Relax 実現交		只生成非极化表面			2
> 図 Al Relax 未提交				Site r(A) C L S V	
×目 Si Wulff 未提交				I 1.47	
> 100				●○ 0.74 ■ □ □ ☑	
> 110 b					5
> hulk					1
package.ison	运行	计算设置	Rolfi		
wulff.yaml					
→ I Li Ionic 未提交					
> 远程					
() 本地运行任务		-			

设置完成后点击"计算设置",进入第一性原理计算的参数设置页面。

设置面板如下图所示,分为基础设置、高级设置和结构优化。进入后面板中已经给出了部分参数 的默认设置,空白的参数可以不需要进行填写。一般来说,使用默认参数就可以完成一个中等精 度的计算任务。

基础设置页面,使用默认参数即可。

材料工坊使用教程

	💅 Si.cif - 0	2测试用例 - Matter Craft	- @ ×
三文件 日 日 日 つ ご 开始 編編	腦件 建模 视图 计算 分析 帮助		
1.0 1.0 1.0 +	14 14 14 **		
HYLANEMOS 高吸计算 电压曲线 离子电导率	晶体形貌 cp2k Lammps p2d機型		
	HylAnemos		×
webviewstell *			
abca*b*c*ljo*	1		
) D Li Relax 未提交			angs 🕥
) 回 li Relay 本理次	送酒	轨道占据数方法	a (2340) (D) (1033)
>回 li Relax 非提交	泛函 GGA-PBE ③	轨道占据数方法 gauss ~	· (3.348) (0 (1.353)
→ 🖸 Na Relax 未現交			b (1.116) (3.157) (1.933)
> 回 Na Relax 未提交	薦势 ———	MERCHESHE 0.005 Ha	C (D) (3866)
> 🖸 Na Relax 未提交	履势类型 NCPP-SG15 ✓		
→ 図 K Relax 未提交	由 7 由 7 和 7 和 7 和 7 和 7 和 7 和 7 和 7 和 7	电子自治权或标准	◎ 结构参数
→ 🖸 K Relax 未提交	Ha	Ha Ha	Site x v z
>□K Relax 未提交	电荷密度截断能 Ha	最大迭代步数 100	🛛 Si 🚽 🚽 🚳
>回 Mg Relax 未提交		100	
> 回 Mg Relax 未提交	电荷密度快速傅里叶变 p1 p2 p3	2160	
³ 回 Mg Relax 米提交	换 111 112 113	刘角化方法 david Y	◎結构显示
「日 Al Relax 未提文)日 Al Relay 本理文	波函数快速傅里叶变换 01 02 03	(and a second s	Site r(A) C L S V
D Al Palax #187		最大迭代步数 100	🛛 Si 1.18 🔲 🗌 🖓 🖌
×回 si Wolff 李樱女	K5		
> 100	k点设置方法 set spacing between kmr ン	对角化收敛标准 0.005	
> 110	veroppeng semeenter		Atom x y z
> 111	倒空间的k点网相间距 0.5 1/人	电荷密度混合	
> bulk		総合算法 broyden ~	
package.json	L-ASIA	¥#	
wulff.yaml	-		
>回 Li Ionic 未提交			
> 远程			
C) 本地运行任务			

结构优化设置页面,使用默认参数即可。注意不能勾选优化晶胞,优化晶胞的话会导致表面积发生变化,使得计算的结果不准确。

	🎷 Si.cif - 02测试用例 - Matter Craft		- 🗗 🤉
	新件 建模 视图 计算 分析 格勒		
ビビビシ HYLANEMOS 高级计算 电压曲线 离子电导本 扉	ビービービー 幸 #形録 cp2k Lammps p2d機型		
TR	HylAnemos	×	
webviewston *			
a b c a* b* c* c * c * c * c	基础设置 结构优化 高级设置		
)回 Li Relay 李瓒卒			angs 🔘
→ 回 Li Relax 未提交	括构优化收敛标准	— 約束 —	a (3.348) (0 (1.933)
> 団 Li Relax 未提交	電量収取数率		
> 🖸 Na Relax 未提交	南子受力的领标准 0.05 all/4		b (1.116) (3.157) (1.933)
> 🖸 Na Relax 未提交	UND CVA Allevation		¢ (0) (0 (3.866)
> 回 Na Relax 未提交	原子位移		
> 回 K Relax 未提交		a a/b α α α=β	●日内部数
> 回 K Relax 未提交	最大原子位移 0.1 Å	$\Box \ b \ \Box \ b/c \ \Box \ \beta \ \Box \ \beta = \gamma$	Site x y z
→ □ K Relax 未提交 → □ Ma Palax 非提立		□ c □ a/c □ y □ α=y	🛛 Si 🚽 🚽 🖉
)回 Mg Relay 李理立	直应力	whime a shir a gabay	•
→ I Mg Relax 未提交		souther sparse a p.y.	
> 図 Al Relax 未現交	最大应力 0.001 GPa		Chinese Chines
> 日 Al Relax 東提交	7 collection		Site r(A) C L S V
→ 団 Al Relax 未提交	EININITETTI 0		ØSi 1.18 □ U V
 日 Si Wulff 床提交 	X X Z		◇结构追踪 原子 ◎
> 100			
> 110			Atom x y z
b b			
Polik A		_	
wilffyaml	「「新行」	R¥	
→回 Li tonic 未想交			
> 远程			
> 本地运行任务			

高级设置页面,对于具体的体系应该选择需要的修正。例如对含过渡金属的体系,使用 DFT+U; 对有范德华作用力的体系,选择色散修正;对有自旋的体系,选择自旋极化计算。

一般来说,在 slab 也就是表面结构中如果有极性则需要设置 slab 的偶极修正。但是在晶体形貌的计算流程中,材料工坊会自动判断切出的表面有没有极性,并对有极性的体系自动设置 slab 的偶极修正。因此在此处不需要进行 slab 修正相关的设置。

材料工坊使用教程

		🎐 Si.cif - 02	测试用例 - Matter Craft				- 🗗 ×
三文件 日 日 日 つ ご 开始 編編		18 计算 分析 帮助					
HYLANEMOS 高級計算 即开曲线 東子田早本	L(本形的 cp2k	Lammos p2d模型					
Contraction of the second second second							
任务 ~ webview:Si.cif ×	HylAnemos				×		(~≡*)
~本地 a b c a* b* c* [] d +				1		○品信参数	(FO)
> 回 Li Relax 未提交	基础设置结构	优化 高级设置				anos 🔘	
> 回 Li Relax 未提交		- DFT+U					
)回 Li Relax 未提交)同 Li Relax 未提交	采用DFT+U		自旋极化	non polarized 🗸 🗸		a (<u>3,348</u>) (<u>0</u>)	(1.933)
→ □ Na Relax 未提交			An and the set			b (1.116) (3.157)	(1.933)
>回 Na Relax 未提交	DFT+U类型	atomic 🗸	投影突望	元素		000	3.866
> 回 Na Relax 未提交	DET (1908) MET			元素 截垣			
>回 K Relax 未提交	Di 1+01000005	7.38				●結构参数	
) 回 K Relax 未提交		元豪 轨道 U (eV) J (eV)		没有数据		Site x y	z
・ 回 K Kelax 未提交 > 回 Mn Belax 未提立						ØSi	- 🛛
> ☑ Mg Relax 未提交		没有数据		Slah		0	
> 団 Mg Relax 朱提交			使用slab修正	500		◇结构显示	原子 🕥
> 回 Al Relax 未提交		色散				Site I r(A) C I	L e L V
→ 日 Al Relax 未提交	色散修正		修正方向	z 🗸		Si 1.18	<u>n</u>
→ □ Al Relax 未建交 → 同 Si WullH + 地址							
> 100	修正方法		修止方法	dipole correction ~		◇結构追踪	原子●
> 110			电势最大位置	0.8		🔲 Ator 🔁 Φ 🦏	ê 📰 📰
> 111 b	(manm	一 体系净电荷					
> bulk	14-351/PHE145		电势下降区域长度	0.1			
package.json		17. A		Fit			
→回 Li Jonic 支援交)		
> 远程							
> 本地运行任务							
N							

设置好 Hylanemos 的计算参数后,点击"运行",进入如下界面。这里可以设置计算的任务名称、 描述,使用的计算资源,并行参数等等。设置完成后点击"运行"。

		\$	Si.cif - 02测试用例 - Matter Craft				- 6 >
三文件 日日日 ち ご 开始 編編	新件 建级 税限	計算 分析					
ビビビン HYLANEMOS 高級計算 电圧曲线 海子电导率 品	ビ ビ 体形貌 cp2k	ビ 幸 Lammps p2d機型					
任务 ~ webview:Sicif ×	任务			×			(120)
* 初池 * 回江 Relax 米提交 * 日江 Relax 米提交 * 日江 Relax 米提交 * 日江 Relax 米提交 * 日江 Relax 米提交 * 日云 Relax 米提交 * 日本 Relax * #E交 * 日本 Relax * #Equitar Relax * #Equitar Relax * 日本 Relax * #Equitar Relax * #Equitar Relax * 日本 Relax * #Equitar Relax * 日本 Relax * #E	 高秋 任务描述 第 1 <	H 1990 H	L設井行参数 10件行参数	10090 1	• ⊂ ₩ ₩ ₩	Alifetz Alifetz	
package.json wulff.yaml >□ Li lonic 未遵交 > 示规运行任务	- atr	•	£-#	¥Ø			

这时任务栏会出现 Si Wulff 的任务, 里面包含了体材料和不同表面的结构和计算任务。

材料工坊使用教程

🎔 Si.cif - 02测证用例 - Matter Craft	- 6 >
HYLANEMOS 高段计算电压曲线高子电导率晶体形积 cp2k Lammps p2d模型	
任务 > webview-Sicit ×	(~ ≆ *)
* 本地 (abca*b*c*:3r*+*4◇●●●□○)	◎品浩参政 (开〇)
→ □ C Relax 未提交	
>□LiRelax 未提交	angs
2 ELI Rehax 未提交	a (3.348) (0 (1.933)
	b (1116) (3157) (1933)
7 DULKERAX REEQ	
	· (0) (3.866)
→ G Na Relax ###	○ 结构参数
→ □ K Relax 未提交	
→ E K Relax 未提交	Site x y z
→ B K Relax 未提交	V SI W
→回 Mg Relax 未提文	O
→ 回 Mg Relax 未提交	◇ 结构显示 原子 ◎
> El Mg Relax: 東提交	
	◇結构追踪 (原子 ♥)
> 100	Atom x y z
>110	
2 m	
> bulk	
packagejison a	
wulffyaml	
> 元程	
◆本地运行任务	

在 Si Wulff 处点击鼠标右键,点击本地执行程序。然后 Hylanemos 会开始进行计算。



开始计算后,右下角会弹出通知提示框,表明任务已经开始计算了。

材料工坊使用教程

		🎔 Si.cif - 02测i	式用例 - Matter Craft			- @ ×
	开始 編編 插件 建模 视距	计算 分析 帮助				
HYLANEMOS 高级计算	电压曲线 离子电导率 晶体形貌 cp2k	Lammps p2d模型				
						_
任务 >	webview:Si.cif ×					(~≣*)
~ 本地	a b c a* b* c* 🖸 🗗 🕂 14 ◊ 🛛 🖸 🖓 🗖 🛈			(16-00050日間日)	◇品信参数	H O
→ I K Relax 未提交						
→ IIK Relax 未提交					angs 🔘	
> 回 K Relax 未提交					a (3,348) (0	(1.933)
→ 図 Mg Relax 未提交		•	<u> </u>			-
→ 🖸 Mg Relax 未提交					0 (1.116) (3.157)	(1.933)
→ 🖾 Mg Relax 未提交					c (0) (0)	(3.866)
> 回 Al Relax 未提交						
> 団 Al Relax 未提交		_	_		──结构参数	
> 団 Al Relax 未提交					Site x v	7
>□ Si Wulff 未提交				通知		
> 100						
> 110		T/		日 开始运行任务: Si		
> 111				bfed24233b1).		
2 Duix		/		source: tasks		
package.json						
2 Filli Ionic stateste				E\EasyDFT\0802	\parallel\bin\HylAnemos.exe,	bulk ×
→ 回 NaCi Vol 東根交				\scf.json,kgrou		oarali
>回1iCoO2 未提交				el\bin\HylAnem	os.exe,111\0\relax.json,kgro	up,0,
> □ C MD 未提交	b	•	-	force E:\EasyD	T\0802\parallel\bin\HylAnem	ios.e
→ I C Energy 未提交	4			xe,111\1\relax.js	on,kgroup,0,force E:\EasyL	OFT\0
→ I C band 未提交	7			802\parallel\bin	HylAnemos.exe,110\0\relax.js	ion,
→ 🖸 Si Energy 未提交	a			kgroup,0,torce	E:\LasyOFT\0002\parallel\bin	Viyi
→ II Si Wulff 未提交				EAEaovDED.0902	have a second	11.1
> 远程				source: tasks	gran aner (om v ryp mennos.exe,	
> 本地运行任务						

计算完成后,点击 wulff.yaml。然后点击"分析"-"高级分析"-"晶体形貌"

		In the second s	- 0
		1. 编辑 括件 建模 视图 计算 分析 帮助	
		x C C Z X 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10	
第一性原理 分子动力		构 高级分析 租題 电压曲线 离子电导率 晶体形象 均方位移 p2d慢型	
	-	— — — — — — — — — — — — — — — — — — — —	
任务、	webview	Sicit sci_OUTjson wulffyaml ×	(×=*)
~ 本地	1 .	- miller_index: &ref 0	1
) IF K Relay 油根衣	2	- 1	
) E K Palay states	3	-1	
NEK Balan +tex	4		
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	5	slab_key: '111'	
· u wy Kelax 未進交	6	count: 0	
/ II Mg Relax 未提交	· ·	Structure:	
・ 凹 Mg Relax 未提交	8	enouse : eacomp-ms/core/surrace	
・ 🖸 Al Relax 未提交	10	lattire:	
> II Al Relax 未提交	11	matrix:	
> 回 Al Relax 未提交	12	3.866974653264745	
> □ Si Wulff 未提交	13	- 0	
> 100	14	- 2.367839065752308e-16	
> 110	15	1.933487326632374	
> 111	16	- 3.34889828551779	
> bulk	17	- 2.367839065752308e-16	
parkage iron	18	- 0	
package.goon	19	- 0	
Wuntyann	20	- 37.88845899509813	
· □ Li ionic 来题交	21	a: 3.809/4053204/45	
, 回 Naci Vol., 未提交	22	01 31600374033204/493	G
* □ LiCoO2 未提交	24	alaha: 90	- · · · ·
> 回 C MD 未提交	25	beta: 90	
→ I C Energy 未提交	26	gamma: 120.000000000000000	
> □ C band 未提交	27	volume: 490.6595141839778	
→ 🖸 Si Energy 未提交	28	sites:	
✓ I Si Wulff 未提交	29	- name: Si0+	
> 远程	30	species:	
> 本地运行任务	31	- element: Si	
C			行 8, 列 38 plaintext 🗘

弹出的晶体形貌分析设置如下。 用户可根据需要勾选是否显示表面能数据,是否使用不收敛的数据进行分析。 设置完成后,点击"分析"

材料工坊使用教程



晶体的形貌 wulff shape 的图显示如下所示。左上角标出了暴露的晶面及其表面能,这里是(111) 面暴露,表面能是 0.3670J/m2。

使用鼠标滚轮可以对图像进行放大和缩小。按住鼠标左键可以旋转图像。



旋转和缩放后的图像示例如下。

材料工坊使用教程

	🌮 56c2d670-244b-11ed-8b1d-9bfe	#24233b1 - 02测试用例 - Matter Craft - 이
	之 开始 编辑 插件 建模 视图 计算 分析 帮助	
	- E E ¥ Y Y Y Y Y	
第一性原理 分子动力	学 结构 高级分析 相图 电压曲线 离子电导率 晶体形貌 均方位移 p2d模型	
任务 ~	webview:Si.cif scf_OUT.json wulff.yaml ×	webview:56c2d670-244b-11ed-8 ×
~本地	1 - miller_index: &ref_0	
> V K Polay att	2 - 1	(1,1,1): 0.3670
	3 - 1	Y
✓ E K Relax ★ ##50	4 - 1	0.3 0.6 0.8
・ Li K Kelax 未提交	5 slab_key: '111'	-0.8 -0.6 -0.3 0.8
² 凶 Mg Relax 未提交	6 count: 0	0.6
→ I Mg Relax 未提交	7 structure:	- 0.3
> 回 Mg Relax 未提交	8 gmodule : eacomp-ms/core/surface .	F o X
> 🛛 Al Relax 未提交	10 lattice	-0.3
> ☑ Al Relax 未提交	11 matrix:	
> II Al Relax 未提交	12 - 3.866974653264745	0.6
✓ 図 Si Wulff 未提交	13 - 0	Ñ
> 100	14 - 2.367839065752308e-16	- 03 E
> 110	151.933487326632374	
> 111	16 - 3.34889828551779	
> bulk	17 - 2.367839065752308e-16	
packaga iron	18 0	
package.json	19 - 0	-0.3
Nonityanii	20 - 37.88845899509813	la l
/ 凹 Li ionic 未提交	21 8: 3.8009/4003204/40	-0.6 0.367
/ 凹 Naci Vol_ 未提交	22 0. 5.0007/4035204/435 23 c: 37 9894590500913	
> □ LiCoO2 未提交	24 alpha: 90	0.8
> □ C MD 未提交	25 beta: 90	
→ I C Energy 未提交	26 gamma: 120.00000000000000	
> □ C band 未提交	27 volume: 490.6595141839778	
> ☑ Si Energy 未提交	28 sites:	
✓ I Si Wulff 未提交	29 - name: Si0+	
> 远程	30 species:	
> 本地运行任务	31 - element: Si	

将鼠标放在表面上,会显示这个表面属于哪个晶面,它的颜色和坐标。

三文件 白 目 白 つ ご 开始 編載 播件 建模 視图 计算 分析 帮助	
第一性節理 分子动力学 结构 高聚分析 相関 电压曲线 离子电导本 晶体形象 均方位移 p2d模型	
任务 v webview:Sicii sci OUTjson wulffyaml × webview:Sic2d6/70-244b-11ed-8 ×	(×≅*)
×本地 1 - miller_index: &ref_0	
→ 団 K Relax 未提交 2 - 1 (1,1,1):0.3670	
> E K Relax 未提交 3 1 1	
→ E K Relax 未提交 5 5 5 1 1 1 1 0.08 -0.6 -0.3 0 0.3 0.6 0.8	
→ 団 Mg Relax 未提交 6 Count: 0	
→ E Mg Relax 未提定 7 structure:	
>⊡ Mo Relax ±#±∞ 8 '@module': eacomp-ms/core/surface	
9 '@class': slab	
2 Ed AlRelay #85	
11 matrix:	
U6	
	n2
> 100 14 - 2.30(6590)/22000-10 - 0.3	10
16 - 3,3489828551779	gy and
17 - 2.367839065752308e-16 (1.1.1) Z	le
2 DUIX 18 0	LL a
package, son 19 - 0 - x 0.6357022585221317	ac
wulttyami 20 - 37.88845895509813 - v.0	E E
→ E Li Ionic 未建交 21 a: 3.866974653264745 - Z 0 6	0.367
> ☑ NaCl VoL 朱提交 22 b: 3.8669746532647453	-
> □ LiCoO2 未提交 23 C: 37.888438939989813 L -0.8	
→ B C MD 未提交 24 d1p1(a): 90 hats: 90	
→ □ C Energy 未进交 26 gamma: 120.000000000001	
> 団 C band 未提交 27 volume: 490.6595141839778	
>回SiEnergy 未提交 28 sites:	
 ✓ 図 Si Wulff 未提交 29 - name: Si0+ 	
> 远程 30 species:	
>本地运行任务 31 - element: Si	

离子电导率

材料工坊使用教程



离子电导率的设置页面如下图所示。这个页面主要用于设置要计算的温度和分子动力学的相关参数。

最高温度、最低温度、中间温度个数:用来设置要计算的最高温、最低温和中间插入的要计算的 温度有多少个。

分子动力学设置:用来设置分子动力学相关的参数。

	C.cif - Matter Craft	- 61 ×
三文中 日日日 日 つ C 利和 編編 編件 ビ ビ 空 ビ HYLANEMOS 満取計算 电圧曲線 高子电母半 品体系統	#19 和田 11日 541 和助 ビ ビ 李 ① cp2k Lammys p2882 ⇒AE(5)	
任务 ~ webview:C.ci	x	(* # *)
 ◆ 本地 ◆ 白 ビ (CO2 Voltage: 米田交) ◆ 目 U (CO2 Voltage: 米田交) ◆ 日 U (CO2 Voltage: 米田交) ◆ 日 U (COE CPU) ◆ 日 KAC IB NEB: 米田交) ◆ 日 KAC IB NEB: 米田 KAC IB NEB: ************************************	C 1 2 2 4 1 4 3 8 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	Statusen FF a 4535 0 0 a 4535 0 0 0 c 0 0 0 0 c 0 0 0 0 c 0 0 0 0 Statusen Statusen 0 0 0 Statusen 0 0 0 0 0 Statusen 0 0 0 0 0 0
→ a Config (7) → G S (Freeny 未建文 → G S (ND 未建文 → 元曜 → 元曜 → 不規志行任务	E5 IIIIRE 803	
		Q

设置完成后点击"计算设置",进入第一性原理计算的参数设置页面。参数设置方式见 Hylanemos 计算章节。

材料工坊使用教程

	🎷 C.cif - Matter Craft	- 8 :
	銀 肠件 建板 视图 计算 分析 帮助	
ビービーを HYLANEMOS 高現計算 电圧曲线 高子电	: ビ ビ ビ 幸 土 94 EMARIAR (sp2k Lammps p2d時間 9A.任务	
任务 ~	HylAnemos ×	
~ 本地		
>回 Si Wulff 未得交		
> 回 LiCoO2 Voltage 未提交	*************************************	(angs 🔘
> 回 Li10Ge(PS6)2 Ionic 未提交	泛语	a (4.935) (0) (0)
> 回 NaCl Energy 未提交	返函 GGA-PBE V 執道古鋼版方法 gauss V	
→ 回 C MD 未提交		0 (-2.46) (4.274) (0
>回 NaC18 NEB 未提交	展防 展防 用a	¢ (0 (0 (8.685)
> 回 NaC18 NEB 未提交	/ ///////////////////////////////////	
> 回 Si Wulff 未提交	电子自治收敛标准	SHIP B M
)回 Clonic 来提交	18-F326886464685 30 Ha 18-F1678903868/16 5e-7 Ha	Site x y z
> 回 FeO Voltage 未提交	由2550年度18550 時十支(P458)	⊘ ⊂ ⊘
・回し(CoO2)3 Lammps 米語志	Han Herzeniter 100	0
2回 LiCoO2 Voltage 非限态	电荷密度快速傅里时变	Arren 77
>回 LiCoO2 Wolff 実現交	10 n1 n2 n3 NIBIO	
→ □ C Lammps 未提交	derivative and the horizon	Site r(A) C L S V
→ 回 C Wulff 未提交	accessoria.exel access n1 n2 n3 最大法代步数 100	OC 0.77 ■ □ □ □
→ I C Wulff 未提交		
→回 p2d 未提交	<u> </u>	
>□CEnergy 未提交	set spacing between kpi	Atom x y z
> ☑ Si Energy 未提交	御空间的点照附指问题 0.5 1// 电荷密闭器合	
> 回 Si Energy 未提交	混合算法 broyden V	
>□ Si Energy 未提交	k启网络 n1 n2 n3	
> 回 Si Relax 未提交	「「「「」「「」」「「」」「「」」」	
→ E Si MD 未提交		
> 10.42		
, 中地运行性务		
		Q

设置好 Hylanemos 的计算参数后,点击"运行",进入如下界面。这里可以设置计算的任务名称、 描述,使用的计算资源,并行参数等等。设置完成后点击"运行"

	🎓 c	Ccif - Matter Craft	-	ð×
三文件 日日日 日 つ ご 开始 編編	插件 建模 视图 计算 分析 帮助			
HYLANEMOS 高级计算 电压曲线 离子电导率	晶体形貌 cp2k Lammps p2d模型 导入任务			
				_
ff.% ~	任务	×		≡*)
~ 本地			 0 5 C E E E O 島橋参数 🦉	
→ 🖸 Si Wulff 未提交				
・回 LiCoO2 Voltage 未提交	C ION CONDUCTIVITY		×	
> 回 Li10Ge(PS6)2 Ionic 未提交	任务描述	ftt并行参数 1	a (4,935) (0) (0	\supset
・回 Naci Energy 未提交 と同 C MD 本語な			b (-2.46) (4.274) (0	5
>□ NaC18 NFB 未提交	集計			20
○ NaC18 NEB 未提交	服务器 Local X			•
→ 団 Si Wulff 未提交	Local		◎ 结构参数	
⇒ 図 C Ionic 未提交	计算节点 local v		Site x y z	
> 回 FeO Voltage 未提交			⊘ C	8
・回 Li(CoO2)3 Lammps 未提交)同 Li(CoO2)3 Lammps 未提交	开行调度 mpirun V		0	
2回 LiCoO2 Voltage 李樱交	队列调度 PRS V			
>回 LiCoO2 Wulff 未提交				
>□CLammps 未提交			Site r(A) C L S	<u>v</u>
→ 回 C Wulff 未提交				
>回CWulff 未提交				F 💿
・ □ p2d 未提交 >□ C France ★問文	K / Y		Atom x y z	
→ 団 C Energy 未提交 → 団 Si Energy 未提交			0	<u> </u>
→ I Si Energy 未提交				
> 団 Si Energy 未提交				
→ 回 Si Relax 未提交	167	—步 关闭		
> III Si MD 未提交				
) 近程				
, 482471129	·			<u> </u>
				Q)

这时任务栏会出现 C ionic 的任务, 里面包含了设置的各个温度的分子动力学计算任务。

在 Si Wulff 处点击鼠标右键,点击本地执行程序。然后 Hylanemos 会开始进行计算。

材料工坊使用教程



计算完成后,点击 conduct.yaml。然后点击"分析"-"高级分析"-"离子电导率"



弹出的离子电导率分析设置如下。 扩散元素:选择在结构中想研究扩散的元素 最高温度、最低温度、温度梯度:计算扩散系数和离子电导率的范围和间隔。 扩散方向:勾选需要分析的扩散方向 计算能垒:勾选是否计算扩散能垒 跳过初始步数、取样间隔:分析分子动力学结果时的要求。 设置完成后,点击"分析"

材料工坊使用教程

			- conductly	inin - mate	er Cratt		- 0
三文件 日日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日 日	插件 建极	规图 计算	(分析) #助				
	~ ~ ~	* 3					
第一性原理 分子动力学 结构 高均	成分析 相關 电压曲线 3	离子电导率 晶体形线	見 p2d機型				
任务 ~	webview.C.cif cond	uct.yaml ×					
· 本地	1 - 600						
> 回 Si Wulff 未提交	2 - 900	白色変					
>回 LiCoO2 Voltage 未提交	4 - 1500	Relation					
>回Li10Ge(PS6)2 Ionic 未提交	5						
→ 団 NaCl Energy 未提交	5°R	故元素	c ~		扩散方向	🛃 3dim	
> EN NO THE AND THE	(B) (新闻 (4)	4500			🗆 a 📄 b 🔂 c	
→ 回 NaC18 NEB 未提交	49.3*		1300			ab bc ac	
> 回 Si Wulff 未提交	最多	氏温度	300	К			
✓ I C Ionic 未提交					☑ 计复能垒		
> 1200	温度	皇梯度	50	K			
> 1500					就过初始步数	0 😕	
> 600					D1199(2)05		
conduct.vaml					9864±163160	10 🤧	
package.json							
> 回 FeO Voltage 未提交							
> 回 Li(CoO2)3 Lammps 未提交							
> 回 Li(CoO2)3 Lammps 未提交							
○回LICoO2 Voltage 未提交 >回LICoO2 Wolf4 キャロウ							
→ 回 C Lammps 未提交			(m)				
> □ C Wulff 未提交			19125			AVCH	
→ 回 C Wulff 未提交				_			
>□ p2d 未提交							
) 近程 、 ★400=C-75.00							
· • 49,646(T)[39]				_			
C =							行 5, 列 1 plaintext Q

离子电导率的图显示如下所示。

上方的表格为拟合出的每个温度下的扩散系数和离子电导率,以及扩散的能垒。通过上方的 3dim、 a 可以切换显示 3 维和 a 方向的扩散系数和离子电导率。

下方的图为计算的拟合的图,可以导出图片和数据,进行缩放。



材料工坊使用教程

CP2K 输入文件

能量计算设置

如下图红框处所击"计算"-"CP2K"-"能量"进行能量的计算设置。



设置面板如下图所示,分为基础设置和高级设置。进入后面板中已经给出了参数的默认设置,。 一般来说,使用默认参数就可以完成一个中等精度的计算任务。 用户仍然需要根据基组文件和赝势文件去选择计算所需要的基组和赝势。 注意当对角化算法为 OT 时,K 点网络必须设置为1.1.1。

			🎷 Si.cif - Matte	r Craft			- 6 >
- 三文件 日 日 日 つ ご 开始		ER RE HE S					
	~ ~ ~	<u> </u>	ئ				
HYLANEMOS 高级计算	CD3K						
	CPZR						
webview:Si.cif ×	Henew as	516 m				-	(*=*)
a b c a* b* c* 🖸 🗗 🕂 14 ♦ 🛞 🥤						✓ 晶倍参数	<u>#O</u>
	距离	DBE V	成效标准	SCF		angs 💿	
		, oc		0.00001	1.00	a (3.325) (0	1.920
		— 基础 & 服势	最大迭代步数	100		b (1.108) (3.135)	(1.920)
	基坦文件	ALL BASIS SETS.dat	电荷密度初始化方法	Atomic		· • •	(3.840)
	题组		轨道占据数方法	OFF	~	◎后持参数	
	腊势文件	ALL POTENTIALS.dat	展態密度	300	к	Site x y	z
	厭势		空带数日	10			- •
	截断部	280 Ry	9+6/2/1011年			◇ 結构显示	(限子))
	ALAS BEAM	40 Ev	ATHINGARIDA	Davidson		Site r(A) C L	s v
			多重网格数	4		🔊 Si 🛛 1.18 📄 🗌	
	Keilion	K.#	电荷密度混合方法	Broyden new		◎島构追踪	順子 💿
			混合系数	0.4		Atom x y	z
L.							
a a		118K		Ri关			
		-	-	_	_		
	_			_	_		

高级设置面板中,包括自旋极化、体系净电荷、色散和 DFT+U 的计算设置。自旋极化模块用于 设置体系的自旋多重度和元素的磁矩,体系净电荷模块用于设置体系的带电性质,色散模块用于 设置计算时是否使用色散修正和使用何种色散修正方法,DFT+U 模块用于设置计算时是否使用 DFT+U 的方法,使用何种+U 的方法和具体哪个元素+U 的轨道和数值。下图为示例。

深圳屹艮科技


材料工坊使用教程

			🎔 Si.cif - Matter Craft	-	ð×
三文件 🗃 🗃 🗃 つ ご 🛛 开始	编辑 新件 建	10 - 10 MB - 11 - 1			
<u> </u>		≝ ⊻			
HYLANEMOS 高级计算	CP2K		>		
webview:Si.cit ×					-
a b c a* b* c* [] c + 14 ♦ ⊕ (基础设置高级设置				0
		1旋极化	DFT+U	(angs 🔘	
	自旋多重度	1	Marchine Contraction (1997)	a (3.325) (0 (1.926	6
	元衰	磁炬	DFT+U方法 Mulliken >>	b (1,108) (3,135) (1,92)	5
	Si	2		C (D) (384	5
	/#	紧净电荷	Si p 2 0		
	电荷	0			
		色散		Si	0
	色散修正	DFT-D3 V		0	
				● 結构显示 (原語	0
				Site r(A) C L S	v
				Si 1.18	2
				● 島格道院 (勝)	
				Atom x y z	
Ь					
a a	(ABLA	(Ri¥		
					•



右下角会显示任务生成的情况,显示 cp2k 任务生成成功,表示已经已经生成了 cp2k 的输入文件。

材料工坊使用教程



点击"插件"-"任务", 会显示所有生成的任务。最下方的任务即为刚刚生成的任务, 任务名称为 Si Energy, 点击后, 下方会出现 cp2k.in 和 package.json 文件。



单击 cp2k.in, 页面中会显示 cp2k.in 的文件。这就是 CP2K 的输入文件。

材料工坊使用教程

	Contain - matter cruit	- 6 ^
	(* 开始 編編 「插件」 建模 視图 计算 分析 帮助	
~		
资源管理器 服务器 任务		
任务・	webview:Si.cif cp2k.in ×	(* * *)
~ 本地	1 &GLOBAL	
>回 NaCl Ene 未提交	2 PROJECT H20	
> □ C MD 未提交	3 RUN_TYPE GEO_OPT	
→ EI NaC18 N 未得容	4 PRINT_LEVEL LOW	
→ Mac18 N 小規定	S &ENU GLUBAL	
) 図 Ci Wolff +切立	7 METHOD OS	
→ G Si widii 米速交	8 80FT	
	9 &BASIS SET FILE NAME	
/ 回 FeU Volt 未偿交	10 0 ALL_BASIS_SETS	
,回Li(CoO2) 未提交	11 &END BASIS_SET_FILE_NAME	
> 凹 Li(CoO2) 未提交	12	
> 回 LiCoO2 未提交	13 &POTENTIAL_FILE_NAME	
> 回 LiCoO2 未提交	14 0 ALL_POTENTIALS	
> □ C Lammps 未提交	15 & BEND POTENTIAL_FILE_NAME	
> □ C Wulff 未提交	10	
> □ C Wulff 未提交	17 aug 5 DEFAILT 10-7	
> 図 p2d 未提交	19 & FND OS	
> 図 C Energy 未提交	20	
cp2k.in	21 8/4GRID	
package.json	22 CUTOFF 280	
> 🖸 Si Energy 未提交	23 NGRIDS 4	
✓ I Si Energy 未提交	24 REL_CUTOFF 40	
package.json	25 &END MGRID	
✓ ☑ Si Energy 未提交	25	
cp2kin	2/ ADUR	
nackage ison	29 EPS SCE 0.08001	
> imp	30 MAX SCF 100	
> 太地运行任务	31 & BDIAGONALIZATION ON	
- 44904E111295	Las Distances a 11	
6		4-1 701 4 minimum O

右键点击 cp2k.in, 然后选择"在文件资源管理器中显示"。

		💅 cp2k.in - Matter Craft	- 0
		始 編輯 155件 建模 视图 计算 分析 花韵	
资源管理器 服务器 任务			
任务 ~	webview	ršlicit cp2kin ×	× ± *
~ 本地	1	&GLOBAL	
→ 図 NaCl Ene. 本提交	2	PROJECT H2O	
	3.	RUN_TYPE GE0_OPT	
	4	PRINT_LEVEL LOW	
NoC19 N. #####	5	AERO GLOBAL	
D CLIMATE AND A	7	METUDO OS	
NE Charle differ	8	&DFT	
/ ⊡ C Ionic #8£3€	9	8BASIS SET FILE NAME	
・回 FeO Volt 未提交	10	Ø ALL BASIS SETS	
・回U(CoO2) 未提交	11	&END BASIS SET FILE_NAME	
→ E Li(CoO2) 未提交	12		
> 回 LiCoO2 未提交	13	&POTENTIAL_FILE_NAME	
→ II LiCoO2 未提交	14	0 ALL_POTENTIALS	
> 回 C Lammps 未提交	15	&END POTENTIAL_FILE_NAME	
→ I C Wulff 未提交	16		
→ I C Wulff 未提交	1/	SQS	
> □ p2d 未提交	10	EPS_DEFAULT IE-7	
~□C Energy 未提交	20	aria fa	
cp2kin	21	8MGRID	
package.ison	22	CUTOFF 280	
→ El Si Energy 未提交	23	NGRIDS 4	
×⊡ Si Energy ≠#z	24	REL_CUTOFF 40	
warenergy #sesc	25	&END MGRID	
Package.json	26		
* 四 Si Energy 未建交	27	&SCF	
CD2XIN REPORT	10	SCF_GUESS Atomic	
раск.		MAY SEE 100	
· 2022	160 - 27 - 100 - 100 - 100		
▶ 本地运行 ▲ 工業件設設官	可論中量示	ALL STREET, ALL ST. LOW ON	
			行 14,列 20 plaintext 🛛

在弹出的文件夹中, 即为 cp2k.in 的文件所在的位置。用户可以将这个文件传输到计算所需的位置, 然后进行 cp2k 计算即可。

材料工坊使用教程

		🎷 cp2k.in - M	atter Craft		- 6 ×
	开始 编辑 插件 建模 视图				
DURCHTER ROOM 1257					
任务~	webview-Si.cit cp2k.in ×				
~ 本地	d1e7e320.388e.11ed-a3f8.23228eac9dbb			- n x)	
→ 回 NaCl Ene 未提交					
> □ C MD 未提交] ⊕ mme - 👗 🚺 🛅 ED				
> 回 NaC18 N 未提交 > 回 NaC18 N 未提交	State of the second sec				
→ El Si Wulff 未提交	$\leftarrow \rightarrow \neg \uparrow $ is k > d1e7e320-	388e-11ed-a3f8-23228eac9d V	C 户在d1e7e320-388e-11ed	-a3f8-23228eac9dbb 中搜索	
>□Clonic 未提交	8 日本 日本市体内 名称	^ 修改日期	类型 大小		
> □ FeO Volt 未提交		2022/9/20 10:49	IN THE 3 KR		
/ 回 U(CoO2) 未提交 > 回 U(CoO2) ⇒提交			111 X 11 S 110		
→ 回 LiCoO2 未提交	12 package.json	2022/9/20 10:49	JSON IR又件 6 KB		
→ II LiCoO2 未提交	14 💌 图片 📌				
→ 回 C Lammps 未提交	16 💴 logs 🖈				
→ 回 C Wulff 未提交	17 - OneDrive - Persona				
→ 🛛 p2d 未提交	18) 19 电子邮件附件				
~ 🛛 C Energy 未提交	26 > 늘 图片				
cp2k.in nackane ison	23 > 1 文档				
> ☑ Si Energy 未提交	23 > 🏊 WPS网盘				
✓ 図 Si Energy 未提交	22 25 > L电脑				
package.json	26 > 9 00 05				
・ Li Si Energy 未建交 cp2kin	27 25 A Linux				
package.json	29 Linux				
> 远程	34 2 个项目 选中 1 个项目 2.46 KB				
> 本地运行任务	SI GOTAGONALIZATION ON				
C					行14,列 🗂 由 🔩 🚛 😐

结构优化计算设置

如下图红框处所示,点击"计算"-"CP2K"-"结构优化"进行结构优化的计算设置。



弹出的设置面板与能量计算时的类似,相同的部分这里不再重复说明。

对于结构优化任务, 面板中的结构优化页签可以进行结构优化相关的参数设置, 所有参数均有默 认设置。

在 CP2K 的结构优化中,收敛标准为位移和原子受力。

通过勾选优化晶胞,可以选择是做固定晶格优化还是变晶格优化。

在变晶格优化时,可以在约束处通过勾选晶格约束然后设置晶格优化的约束条件,例如固定晶轴、 固定晶角、固定空间群、固定对称性等等。还可以设置变晶格优化的目标压力和最大应力的收敛 条件。

勾选离子约束,可以控制在结构优化中哪些原子可以需要固定。



材料工坊使用教程

			🎔 Si.cif - Matter Craft	- 6 ×
		建模 脱配 计算 分析		
1	~ ~ ~ ^		↑ ,	
HYLANEMOS #801118			-	
	CP2K		×	
任务 ~ webviev				· ±*
·本地 abca	基础设置高级设置	结构优化		
→ III NaCl Ene 未提交		Felenovakia		
> □ C MD 未提交	最大位移收该标准	0.003 bohr	○ 代化型器	angs 🛛
> □ NaC18 N 未提交				a (3.325 (0) (1.920)
→ 回 NaC18 N 未提交	最大均方位移收敛标准	0.0015 bohr	结构优化算法 BFGS V	b (1.108) (3.135) (1.920)
) E Si Wuin 米提交	南子歩力力改善板准	0.00045 Hastree Boles		
> 回 FeO Volt 未提交		0.00043 Hartree/boint	约束	C 0 0 (3.840)
> 団 Li(CoO2) 未提交	原子均方受力收敛标准	0.0003 Hartree/bohr	局格約束	◇结构参数
→ 団 Li(CoO2) 未提交	Philippe and the second s		1	Site x y z
> 回 LiCoO2 未提交	服大法代学教	200	a b c film	💿 Si 🚽 🚽 😜
・□ LCoO2 未提交)□ Clammor 主導立	最大应力	100 bar	对称性 ab ac bc	0
→ □ C Wulff 未提交			空间群	
> □ C Wulff 未提交	各向同性压力	100 bar		
→ 🖸 p2d 未提交			國 离子约束	Site r(A) C L S V
~ 回 C Energy 未提交	× 100	y 2		
cp2k.in	x 0	100 0	原子 固定x 固定y 固定z 固定	◇ 結构追旋 (原子 ◎)
> □ Si Energy 李瓒交	7 0	0 100	sio 0 0 0 0	Atom x y z
✓回 Si Energy 未提交				
package.json			Sin Li Li Li	
> I Si Energy 未提交				
cp2k.in		御以	BX	
) package.jsun) 研設				
> 本地运行任务				
				YA I
				ų į

点击确认后,和能量计算类似,生成的任务名称为 Si Relax。其他操作和能量计算相同。



点击运行后的面板和任务运行方式与能量计算相同,这里不再重复。

分子动力学计算设置

如下图红框处所示,点击"计算"-"CP2K"-"分子动力学"进行分子动力学的计算设置。

材料工坊使用教程



弹出的设置面板与能量计算时的类似,相同的部分这里不再重复说明。

对于分子动力学任务, 面板中的分子动力学页签可以进行分子动力学相关的参数设置, 所有参数 均有默认设置。

根据不同的系综和热池设置,下方的不同的参数需要用户对应的进行设置。



点击确认后,和能量计算类似,生成的任务名称为 Si MD。其他操作和能量计算相同。

材料工坊使用教程

🌮 Si.cif - Matter Craft		- @ ×
三文井 石 田 田 り ご 开始 編編 麻井 建模 税間 計算 分析 和助		
ビービービービービービー ビー 李 亡 HTTANEMOS 高級1111 (p21) KEE 1030456: 975027 Lammps p24852 号入任务		
ff.# ~ webviewSicit ×		(*=*)
(→本地) (abca*b*c*() (→ + 14 令 ⊛ ● ⊗ □ ①)	◎ ⊙ ጏ ⊂ 図 面 屈) 😔 晶倍参数	<i>₩</i>
> El LittoGerp. 非规文	angs 🕥	
→ D NUL ERE. 米国区 → D C MD 米提及	a (3.325) (1	1.920
>回 NaC18 N	h (100)	
> D Nac18 N. 共成化		1.135
- □ 51 Wulli 米県交 - □ 51 Wulli 米県交	° (0) (0	3.840
→ E FeO Volt 先提交	○ 结构参数	
○回しばCoO2) 未提交	Site x y	(Z
	🕑 Si 🛛 - 🔹 -	- 0
→回 LiCeO2 未提交		<u> </u>
→ E C Lamps 非認文 → R C Lamps に 計画文	◎结构显示	原子 🖸
	Site r(A) C	L S V
→ B p2d 未提交	Si 1.18	
> C C Energy # ## x	◇結构追踪	原子 💿
→ G Storegy #Rex	通知	ti ~
>豆 Si Energy 未提交 b		
	CD2K(11)(11)(11)	
cp2kin a	source, task-generator	
package.json	0) 正在生成cp2k任务	
) 近照) 本地に行作業	source: task-generator	
- +0.817123		
		ų,

Lammps 输入文件

如下图红框处所击"计算"-"Lammps"进行 Lammps 的计算设置



设置面板如下图所示,分为力场、初始化和计算流程。进入后面板中已经给出了初始化参数的默 认设置。

初始化设置: 边界条件:用于设置计算的边界条件。 近邻距离:用于设置近邻列表的距离范围。 近邻修改方法:用于设置在计算中需要更新近邻还是由第一次确定。 近邻修改延迟步数:用于设置近邻延迟多少步进行修改。 近邻修改步数:用于设置近邻多少步进行修改。 是否修改近邻列表:用于设置计算中是否允许修改近邻列表。

材料工坊使用教程



点击力场后,进入如下的力场设置界面。 点击红框处按钮,选择要使用的力场文件。 在下方填写力场类型和力场系数,然后点击确认即可。

	🍄 C.cif - Matter Craft		- @ ×
	开始。 编辑 副件 建煤 视图 计算 分析 帮助		
HYLANEMOS 性质 后构优化 I	編纂 分子动力学 过道态 高级计算 cp2k Lammps p2d模型 导入任务		
11.0			
11.87 *	webviews.ctr x conduct.yami	× DO	
→ III Si Wulff 未得交	1300		
→ 団 LiCoO2 Voltage 未提交			(angs 🔘
→ 🖸 Li10Ge(PS6)2 Ionic 未提交	mi/\03c Select force field manua ∨		a (4.935) (0) (0)
> 回 NaCl Energy 未提交			b (-2.46) (4.274) (0
)回CMD 未提交)回NaC18NER 由提応			
→ 図 NaC18 NEB 未提交			0 0 8.685
> 回 Si Wulff 未提交	力场类型		○信构参数
~ □ C tonic 未提交	力场系数		Site x y z
> 1200			©C a a a 🙆
> 600	時手动写入力场残量和系统		0
> 900			●結构显示 展子 ◎
conduct.yaml			
package.json			
> 回 FeU Voitage 未進交 > 回 Li(CoO2)3 Lammos 主提交			
> □ Li(CoO2)3 Lammps 未提交			
> 回 LiCoO2 Voltage 未提交			Atom x y z
>回 LiCoO2 Wulff 未提交			
→ B C Lammps 未提交 → B C Weith 未提攻			
→回 C Wulff 未提交	anu Ros		
→ 🖸 p2d 未提交		J	
> 远程		-	
> 本地运行任务			
			S + · · ·

在计算流程处,可以设置分子动力学计算的流程,新增或删除结构优化(Minimize)和分子动力 学系综。这里可以选择 NVE、NVT 和 NPT 三种系综。

点击设置,可以进入结构优化或系综的具体计算参数设置页面。

材料工坊使用教程

			🎷 C.cif - Matter Craft		- 0
「 三文件 🛱 🗑 🗑 🖯 C 🛛 开		親國 计算 分析			
HVIANEMOS 1915 ISKARA ISS	☆子动力型 対照本 高級计算	co2k Lammos	- L1 n2d標型 島入任名		
TTUNINUMOS LESS SUMMAND HOM	ALL MALT COROLS INVECTION	1 cher 1 commiss 1	Provincial 477(113)		
任务 ~	webview:C.cit × con	duct.yaml			(*Ξ*)
~ 本地	lammps			× ┛╘−०⊚०๖୯छ∎छ	○品格参数 (元)
→ 🛛 Si Wulff 未提交					
>回 LiCoO2 Voltage 未提交			计数据程		angs
>回Li10Ge(PS6)2 Ionic 未提交	力场		步骤 +		a (4.935) (0) (0)
>回 NaCl Energy 未提交			Minimize ~ 设置 + -		b (-246) (4274) (0
→ 回 C MD 未提交	初始化		NVT enserr ~ 设置 + -		
→ EI NaC18 NEB 未提交	x277564∓ x p ∨	y p \checkmark z p \checkmark	NPT ensem ~ 设置 + -		C (0) (0) (8.685)
Nacio NED 未知去	07455538		NVE enserr >> 设置 + -		◎ 后构参数
YII Clopic 実現交	2				
> 1200	近邻修改方法 upda	ite 🗸			Site x y z
> 1500					
> 600	近邻修改延迟步数 10				0
> 900					● 结构显示 原子 ◎
conduct.yaml	近邻修改步数 1				
package.json					
> □ FeO Voltage 未提交	Contraction of the				
> 回 Li(CoO2)3 Lammps 未提交					◇结构追踪 原子 ♥
・回日(CoO2)3 Lammps 未提交					Atom x y z
・ 回 LiCoO2 Voltage 米提交 > 回 LiCoO2 Wolff 手操攻			1015		
→ I C Lammps 未提交	1667		4009	V	
→ 団 C Wulff 未提交					
> □ C Wulff 未提交		► a	-	-	
>回 p2d 未提交					
> 远程					
> 本地运行任务					
					0

结构优化 Minimize 的设置页面如下图所示。 设置页面可进行算法、收敛标准和迭代步数等参数的设置。 设置完成后点击确认即可。

		💅 C.cif - Matter Craft		- 6 ×
	ا الله الله الله الله الله الله الله ا	■ 34F 税助		
	ビービービー	ビーマン 山 Lammps p2d機型 导入任务		
任务 >	webview:C.cif × conduct.yaml			(*±*)
~ 本地	lammps		х┛╘━҇҇҄҇҇ѲѺѺҀ҄҄҄Ѐ҄Ҍ҄Ѳ	Samstan (#
→ 図 Si Wulff 未提交 → 図 LiCoO2 Voltage 未提交		141010300		angs 🔘
>回Li10Ge(PS6)2 Ionic 未提交	最小化		×	a (4.935) (0 (0)
> 回 NaCl Energy 未提交				b (-2.46) (4.274) (0
>回 NaC18 NEB 未提交	算法	cg 🗸		
>回 NaC18 NEB 未提交	能最收敛标准	0.0001		
→ 回 Si Wulff 未提交 → 回 C Ionic 未提交				
> 1200	力收敛标准	0.000001 eV/A		Site x y z
> 1500	最大这代步数	1000		0
≥ 900	力/能量最大评估次数	10000		◇結构显示 原子 ◎
conduct.yaml				Site r(A) C L S V
→ I FeO Voltage 未提交		197544		oc 0.77 ■ □ □ 🖂
>回Li(CoO2)3 Lammps 未提交		ACH		
・目LiCoO2)3 Lammps 来提交 ・目LiCoO2 Voltage 未提交				Atom x y z
> □ LiCoO2 Wulff 未提交	流行	Ran		0
→ 回 C Lammps 未提交 → 回 C Wulff 本限交				
→ E C Wulff 未提交	→ a		•	
→ 回 p2d 未提交 → 伝授				
> 本地运行任务				
				φ

NVE 系综的设置页面如下图所示。

左侧可进行 NVE 系综的参数设置,右侧为热力学性质和原子性质的输出的设置,需要输出哪些 参数,间隔多少步进行输出。设置完成后点击确认即可。

材料工坊使用教程

					生感输出		
· ·	模拟步数	5000	🛃 溫度	压力	2 总能量	-	
3	时间步长	2	(体积	□ 压力张量	🛃 Shing		
d Si Wulth 未提交 T UCeO3 Veltage		£	□ 盒子长度	ta l	🛃 勞能		angs 🔘
Li10Ge(PS6)2 Ionic 3	初始速度	random	密度	成双封用目	健角弯曲網		a (4935) (D) (G
3 NaCl Energy 未提交	20040-000 000		見修御殿	at cell	一面色印曲創		
C MD 未提交	\$VINDER DE	298		14 10 60			b (-2.46) (4.274) (0
回 NaC18 NEB 未提交	<u>(</u>		副借用度	12(中国新闻2)	范德瓦尔斯能		C O O (8.6
INAC18 NEB 未提交			improper#8	分子船	长程k空间能		Contraction of Contraction
d Si Wultt 未提交			Add at 10 million to the				C LOISE M
> 1200			相比问问的分数	N	1000		Site x y z
> 1500				100.727.64			OC
600			I INTEL	B 18 2 8 8			
> 900			Ca merio	an an a second			◇结构显示 ())
conduct.yaml			分子id	□ 原子织量	■ 分戦原子坐隊		Site (A) C LL S
package.json			原子速度	原子受力	绝对原子坐标		
FeO Voltage 未提交			电荷				
Li(CoO2)3 Lammps 3							>后构追踪 (目
LiCoO2 Voltage 主播			输出间隔步数	N	1000		Atom x y z
LiCoO2 Wulff 未提交							
C Lammps 未提交							
C Wulff 末提交		Alde			ACC N		
C 144.322 -1-181.00							

NVT 系综的设置页面如下图所示。

左侧可进行 NVT 系综的参数设置,右侧为热力学性质和原子性质的输出的设置,需要输出哪些 参数,间隔多少步进行输出。设置完成后点击确认即可。

			🎐 C.cif - Ma	tter Craft		- @ ×
		: 25 RR HI				
I 1/1 1/1 1/1			In 🗢 .t.			
	- L L	2001+190 cm2k l				
TTDATEMOS EDA SERVICE	0.08 73 3 W173 - X3.06.44	I mosterine I check I ci	animps protecta 437(123			
任务、	NVT系综				×	
× 2519				热力学性质输出		
→ II Si Wulff 未提交	初始温度	298 К	■ 温度	🔄 压力 🔤 总能量		
> ☐ LiCoO2 Voltage 未提交			■ 体积	压力张显 🖬 訪問		angs 🔘
> 回 Li10Ge(PS6)2 Ionic 未提交	結束温度	298 K	會学长度	15 10 10 10		a (4.935) (0 (0)
> 回 NaCl Energy 未提交	1530B	Nose-Hoover				b (-2.46) (4.274) (0
→ 回 C MD 未提交						
→ 図 NaC18 NEB 未提交	温度阻尼	100 time sta	ep 晶檔常数	库仑帽 二面角扭曲帽		c 0 0 (8,685)
> 団 Si Wulff 未提交	很和无约		- 晶格角度	■ 键伸缩能 ■ 范德瓦尔斯能		▽信約参数
✓ I C tonic 未提交			improper#8	分子編 长程k空间編		Site x y z
> 1200	缩放温度窗口	30				00 0
> 1500	and a second second second second		输出问题步数	N 1000		0
> 900	MARCESCI PUMICP NO.	50		III 7 H WITH U		
conduct.yaml	模拟步数	5000	B B-Rid	「「「日の時山」		
package.json			0.771			Site r(A) C L S V
> ☑ FeO Voltage 未提交	时间步长	2 fs.	20-3-10	IE于政策 到数层子塗标		
> 回 Li(CoO2)3 Lammps 未提交	初始連度	random	原子速度	原子受力 绝对原子坐标		
→ 回 LiCoO2)3 Lammps 来提交		Tandom	电荷			Atom x y z
> ☑ LiCoO2 Wulff 未提交						0
→ I C Lammps 未提交			3812131409482930X	N 1000		
> □ C Wulff 末提交						
→ 凹 C Wulff 未提交		and a		Itani		
) 伝程						
> 本地运行任务	П					
						Ų

NPT 系综的设置页面如下图所示。

左侧可进行 NVT 系综的参数设置,右侧为热力学性质和原子性质的输出的设置,需要输出哪些 参数,间隔多少步进行输出。设置完成后点击确认即可。

材料工坊使用教程

				🎷 C.cif	- Matter Craft			- 8
			RE HE					
~ ~ ~	~ ~	~ ~	- E	⊻ ≩ ±				
HYLANEMOS 性质 结构化	NPT系综						×	
任务。	STIANIH RF	12置			热力学	性质输出		***
~ 本地	\$0.0x1000.0x4	298	K		E2 1±73	10月11日日本	< 2 8	
→ El Si Wulff 未提交	结束温度	298	ĸ	体积	压力张量	2 SD82		angs 🔘
・回 LiCoO2 Voltage 未提る				盒子长度	焓	2 39A8		
→ 回 NaCl Energy 東提交	Mode.	Nose-Hoover		密度	后载对我的	鐵角弯曲船		a (4.935) (0 (0
→回CMD 未提交	法度组织	100		晶格常数	库合能	二面角扭曲能		b (-2.46) (4.274) (0
>回 NaC18 NEB 未提交		100		黑地乐座	194004299	恭適至な影響		 0 0 (8.685)
> 図 NaC18 NEB 未提交	拖拽系数	0		The second second	a Tak			
> 回 Si Wulff 未提交	-			improper#8	分子部	TCHEK空间用的		○ 15/19 BX
♥ El Clonic 未提交	初期出生力	1.01325	bar	\$0H10084949		1000		Site x y z
> 1500	结束压力	1.01325	har		14	1000		©⊂ ©
> 600		10,000			原子!	生质输出		0
× 900	晶橋约束	isotropic		🛃 原子id	🖸 原子类型	🖾 元素		●結构显示 原子 ◎
conduct.yaml	(T-100			9-7id	四 唐子市县	■ 分数用子型标		
package.json	SVENCES	1000		10 7 mm	107 Mar	(A24) (E 7) (4) (-		
→ 回 FeO Voltage 未提交 → 回 U/CoO232 Lammars また	模拟步数	5000		In Table	新开爱力	BAUM了至10		
≥ ⊡ Li(CoO2)3 Lammps st				电荷				
・回 LiCoO2 Voltage 未提致	时间步长	2	fs	101110782-0-80		1000		Atom x y z
> II LiCoO2 Wulff 未提交	27104-100 FBF	Contractory (ALTERNIS AN	19	1000		•
→ I C Lammps 未提交	17.3×63.651.04	random	~					
→ 団 C Wulff 東提交	<u> </u>							
> 回 C Wultt 未提交		福认				取消		
) 近程								
> 本地运行任务	J							
								¥.,

全部设置完成后,点击运行。

王文作 日 日 日 日 し C 形物 編新 馬井 レビーレーレーレーレーレー HYLANEMOS 世界 50HKKE 版画 分子初カ子 13回之	ぐ Culf - Matter Craft 課題 配置 計算 公所 前面 ビ ビ ビ ご 素 ① 再総計算 cp2k Lammps p2dBEIE 号入任务	- 0
使う WebviewC.dll • 名助 ····································	1 conduct yrall 2 dammps 万当 万当 原始年 原始年 夏季 近時第2012 夏季 近時第2012 夏季 近時第2012 夏季 近時第25日	Image Image Image Image
		Q

点击"插件"-"任务", 会显示所有生成的任务。最下方的任务即为刚刚生成的任务, 任务名称为 C Lammps, 点击后, 下方会出现 lammps.in、package.json 和 combine.data 文件。

材料工坊使用教程



单击 lammps.in, 页面中会显示 lammps.in 的文件。这就是 Lammps 的输入文件。

	💅 cp2k.in - Matter Craft	- 0
	♂ 开始 编辑 腦件 建模 视图 计算 分析 帮助	
资源管理器 服务器 任务		
任务 ~	webview/Sicit cp2kin ×	(~ ≠ *)
~ 本地	1 &GLOBAL	
> 図 NaCl Eng 中提校	2 PROJECT H20	
	3 RUN_TYPE GEO_OPT	
	4 PRINT_LEVEL LOW	
· 回 NaC18 N 未提交	5 &END GLOBAL	
/凹 NaC18 N 未提交	6 &FORCE EVAL	
> 図 Si Wulff 未提交	7 METHOD QS	
> 凹 C Ionic 未提交		
> ☑ FeO Volt 未提交		
> ☑ Li(CoO2) 未提交	11 & END BASTS SET FILE NAME	
→ 🖸 Li(CoO2) 未提交		
> ☑ LiCoO2 未提交	13 &POTENTIAL FILE NAME	
> ☑ LiCoO2 未提交	14 0 ALL_POTENTIALS	
> □ C Lammps 未提交	15 &END POTENTIAL_FILE_NAME	
> I ⊂ Wulff 未得交	16	
> 回 C Wulff 実現交	17 &QS	
total and the local of the	18 EPS_DEFAULT 1e-7	
X R C Canada +184	19 &END QS	
a Chiergy masse	20	
сракан	21 00/00/10/ 22 FUTALE 200	
package.json		
> 凶 Si Energy 未提交	24 REL CITOFE 49	
* □ Si Energy 未提交	25 &END MGRID	
package.json	26	
~☑ Si Energy 未提交	27 &SCF	
cp2k.in	28 SCF_GUESS Atomic	
package.json	29 EPS_SCF 0.00001	
> 远程	30 NAX_SCF 100	
> 本地运行任务	31 &DIAGONALIZATION ON	
		行1.列1 plaintext 〇

右键点击 lammps.in, 然后选择"在文件资源管理器中显示"。

材料工坊使用教程



在弹出的文件夹中,即为 lammps.in 的文件所在的位置。用户可以将这个文件传输到计算所需的 位置,然后进行 Lammps 计算即可。