

# 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 .....	3
晶体结构编辑 .....	12
新增、删除、编辑原子 .....	12
修改晶格常数 .....	13
建立超晶胞和寻找原胞 .....	14
新建晶胞 .....	15
批量切表面 .....	17
晶体结构分析 .....	19
衍射图谱分析 .....	19
径向分布函数分析 .....	22
Hylanemos 计算 .....	26
能量与性质计算 .....	26
电子结构分析 .....	33
声子分析 .....	34
力学分析 .....	35
电荷密度与波函数分析 .....	36
结构优化与分子动力学计算 .....	40
过渡态计算 .....	42
P2D 计算 .....	44
高级计算 .....	51
电压曲线 .....	51
晶体形貌 .....	60
离子电导率 .....	67
CP2K 输入文件 .....	72
能量计算设置 .....	72
结构优化计算设置 .....	76
分子动力学计算设置 .....	77
Lammps 输入文件 .....	79

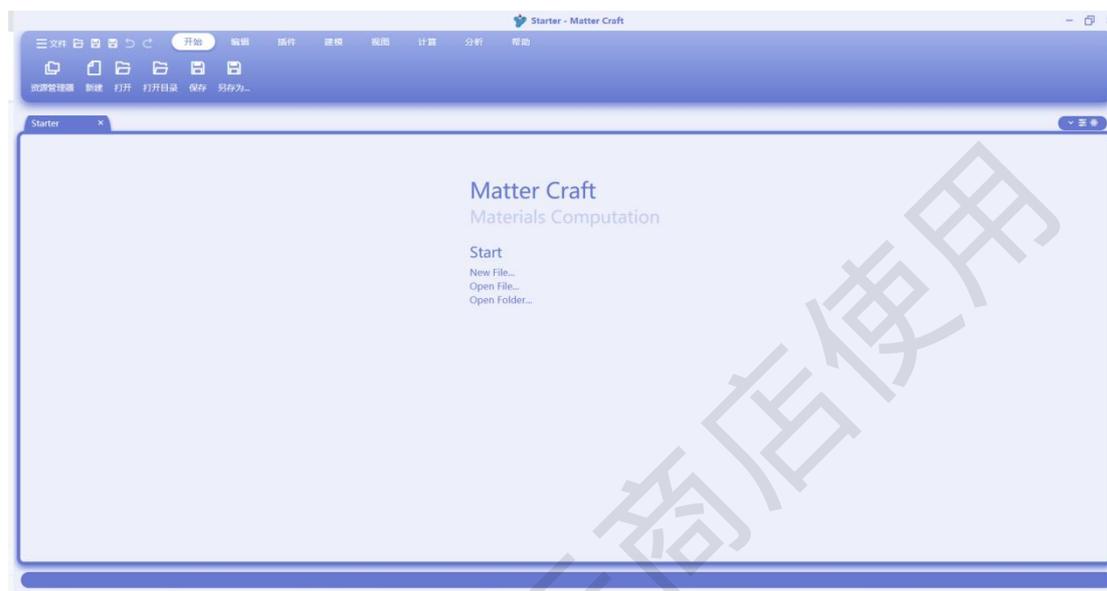
材料工坊中是屹良科技旗下一款跨尺度材料模拟平台, 其中包含开箱即用的中文图形界面和基于第一性原理的 DFT 计算软件 Hylanemos。它帮助用户完成模型建立、任务创建、计算模拟和数据分析这一完整流程, 实现对材料物理化学性质和性能的模拟与预估。

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。

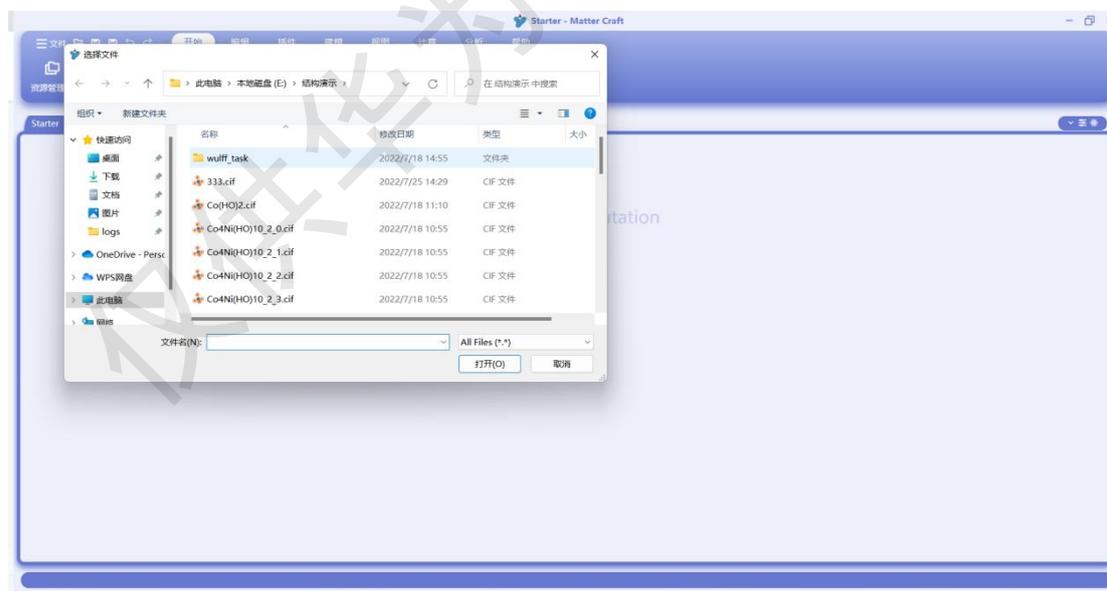
## 晶体结构显示

### 晶体结构导入

打开材料工坊后，软件显示如下界面。

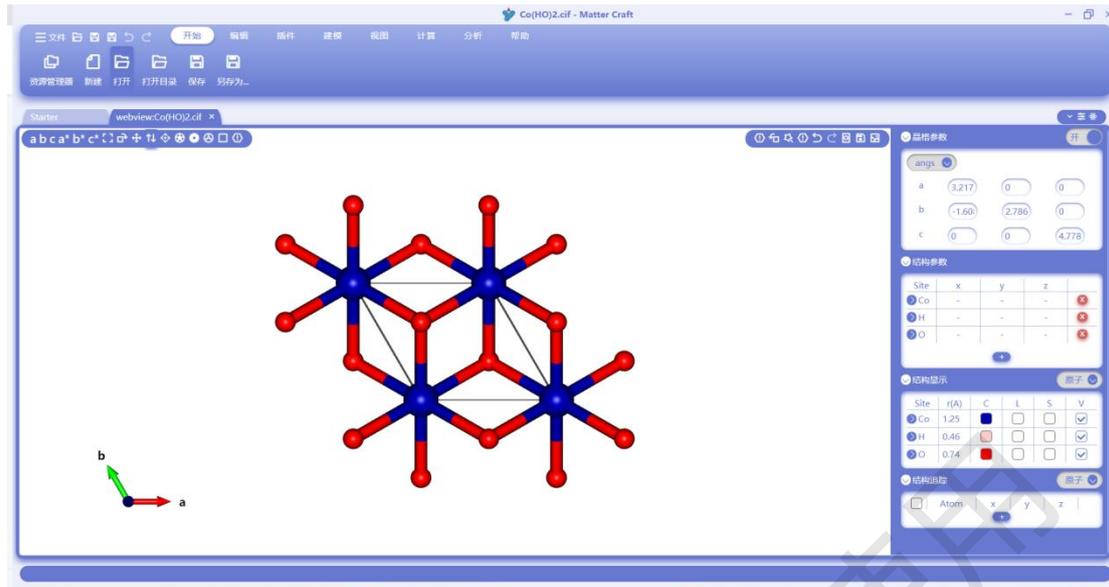


在当前界面中点击“开始”中的“打开”，会弹出如下对话框。



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  $\text{Co}(\text{OH})_2$  为例，打开一个  $\text{Co}(\text{OH})_2$  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。



## 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：

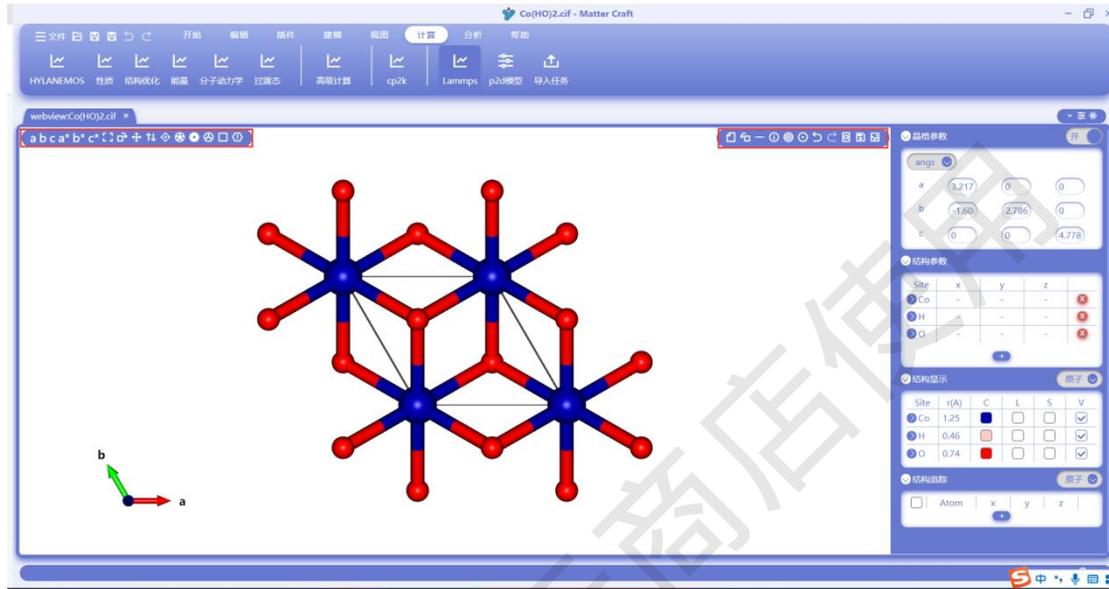
1. 从 a 轴俯视晶体
2. 从 b 轴俯视晶体
3. 从 c 轴俯视晶体
4. 从垂直于 bc 轴所在的平面俯视晶体
5. 从垂直于 ac 轴所在的平面俯视晶体
6. 从垂直于 ab 轴所在的平面俯视晶体
7. 选择原子
8. 旋转视图
9. 移动视图
10. 缩放视图
11. 编辑原子
12. 显示球棒模型
13. 显示空间填充模型
14. 显示多面体模型
15. 显示晶格模型
16. 显示棒模型

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

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

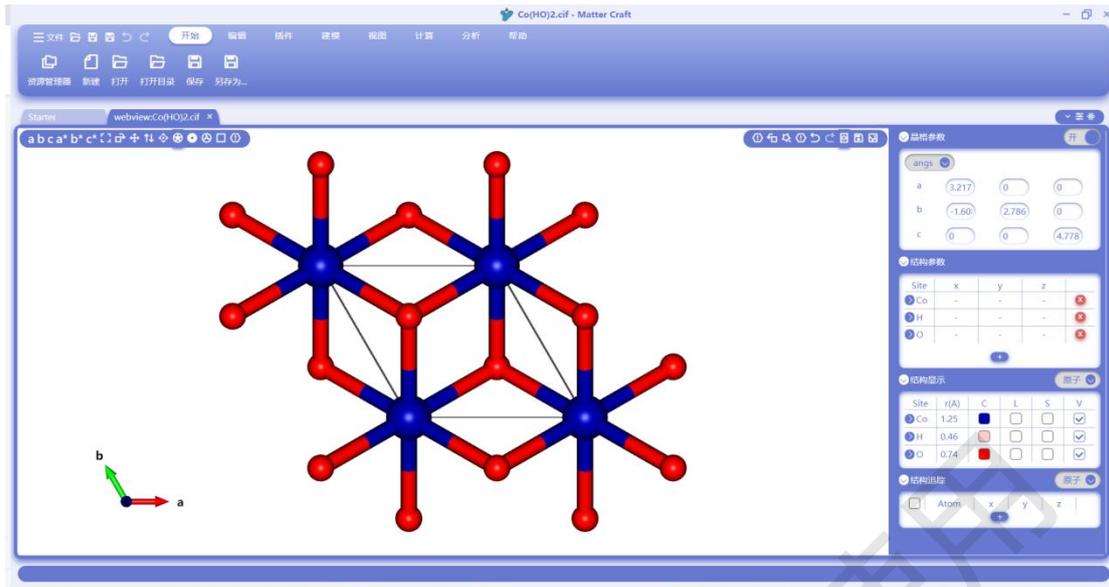
旋转：点击旋转视图图标，然后长按鼠标左键，拖动鼠标可以旋转视图；或者直接滚动鼠标滚轮进行缩放。

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。

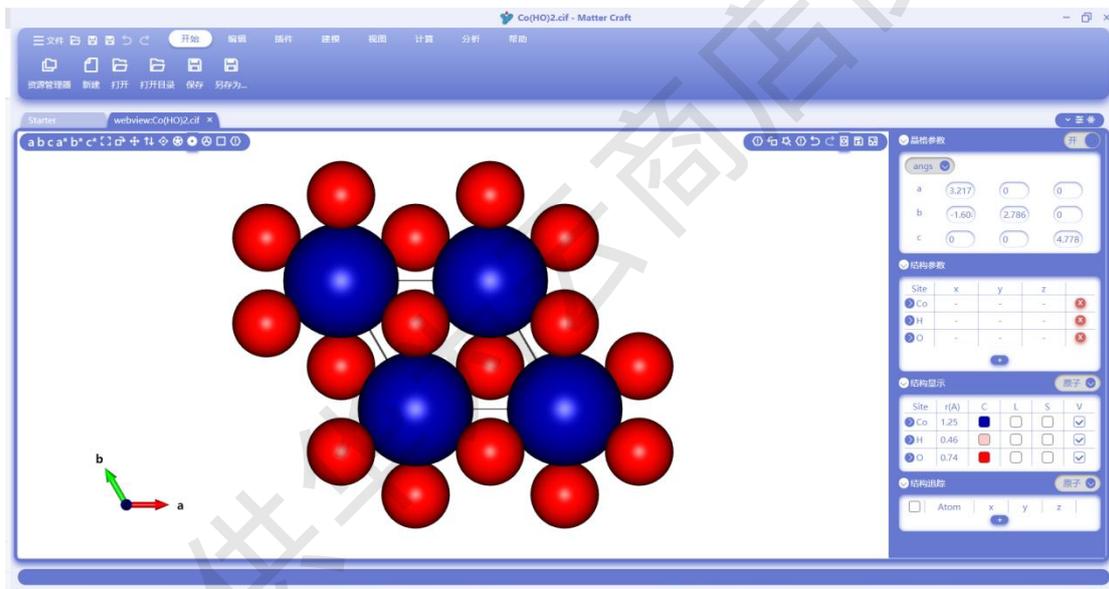
平移：点击移动视图图标，然后长按鼠标左键，上下左右拖动鼠标可以平移视图。

### B. 晶体显示模型

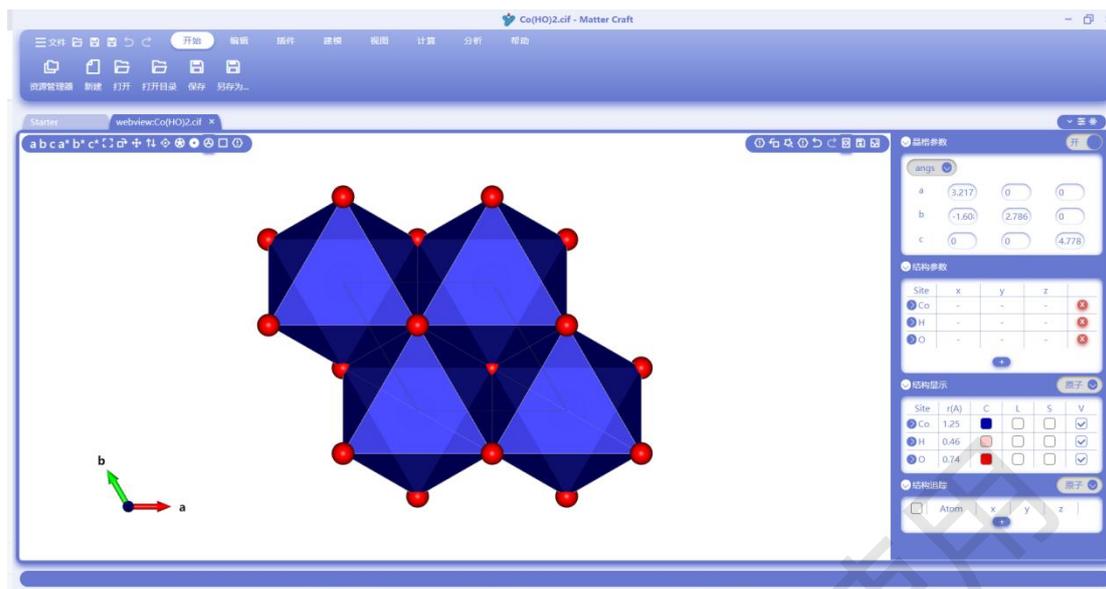
球棒模型：点击球棒模型，此时原子显示为球，键显示为棒。



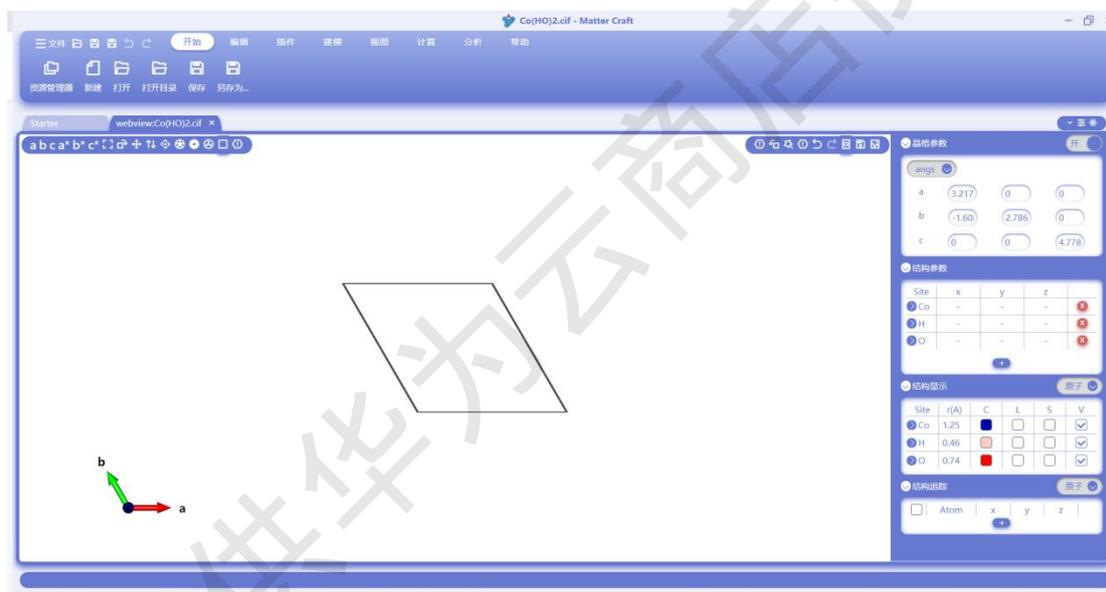
空间填充模型：点击球棒模型，此时原子显示会填充空间。



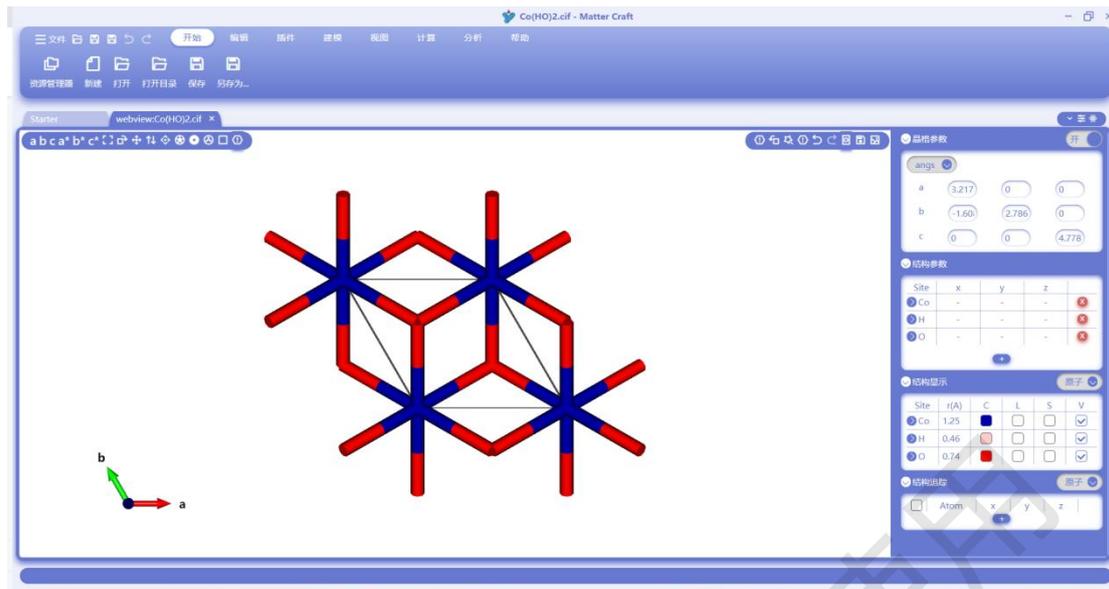
空间填充模型：点击多面体模型，此时原子和键会连成多面体。



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。

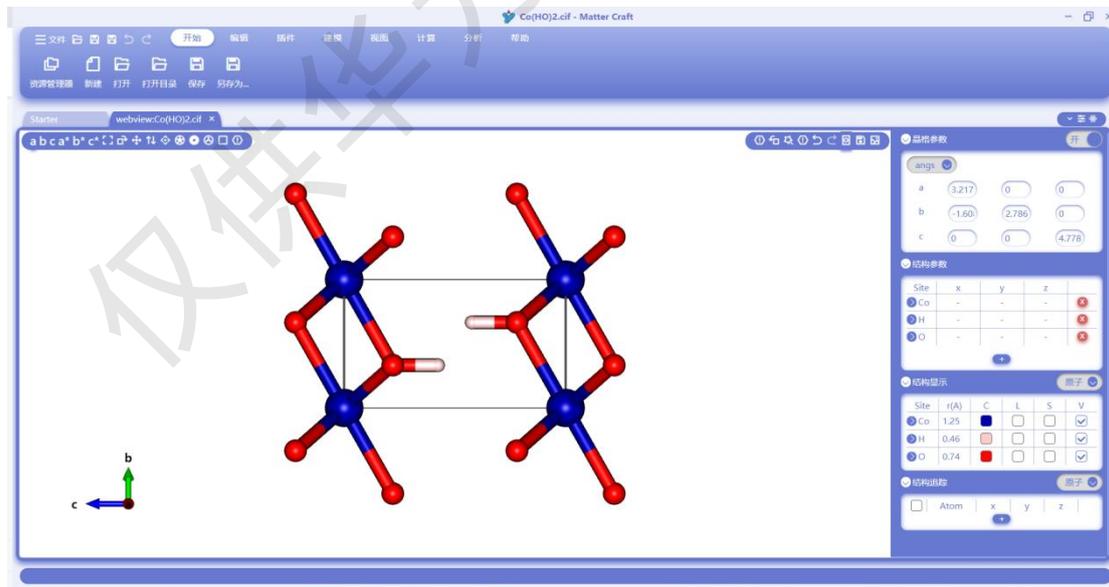


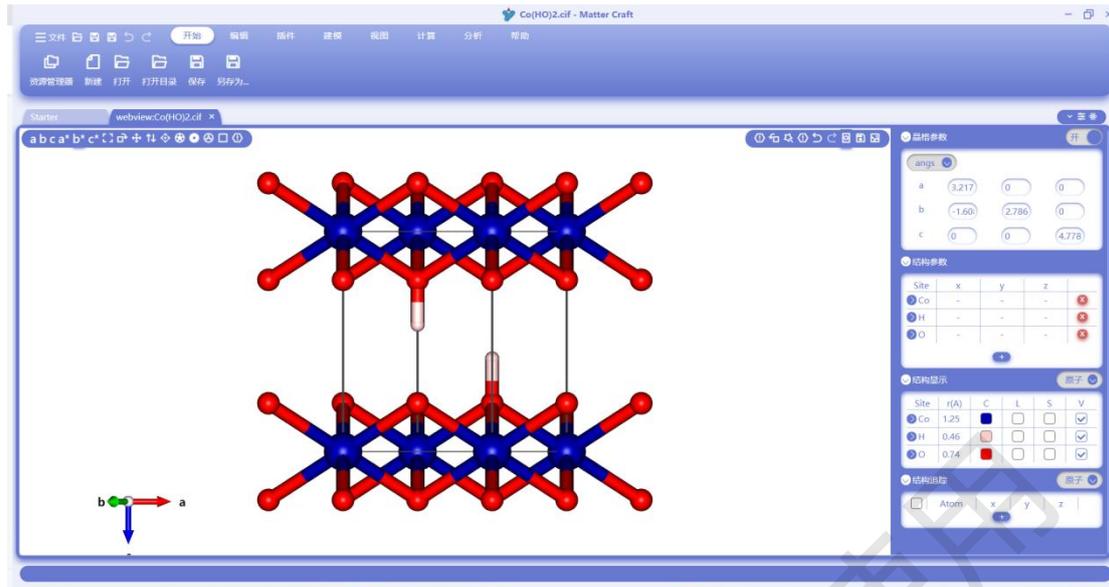
### C. 沿轴、面显示

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

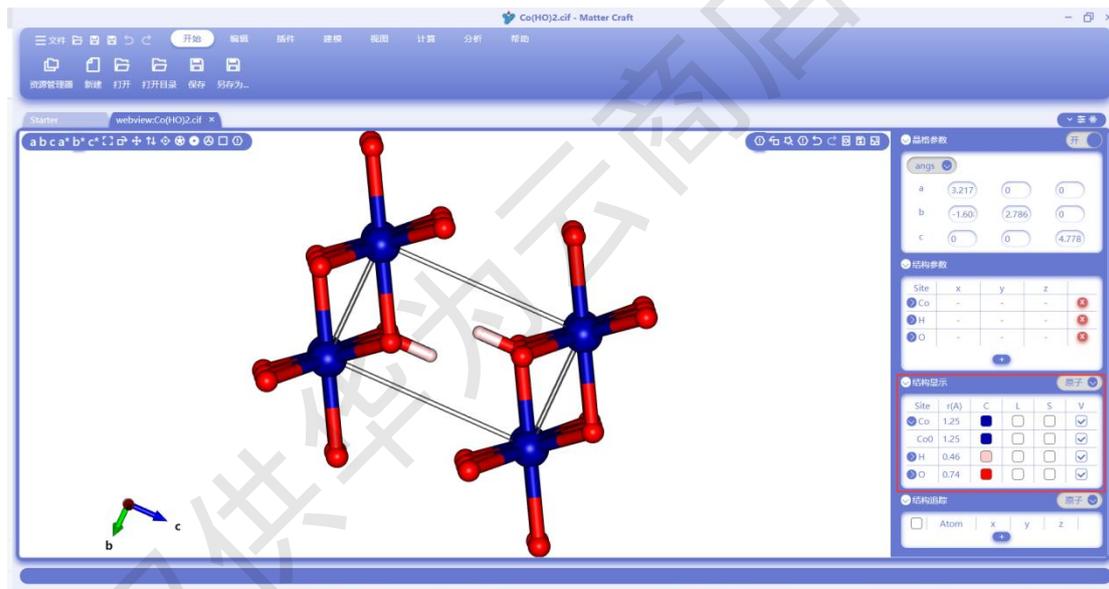
对于  $\text{Co}(\text{OH})_2$  晶体，从 c 轴俯视晶体如上面的图所示，从 a 轴俯视晶体和从垂直于 ac 轴所在的平面俯视晶体的视图分别如下面两图所示



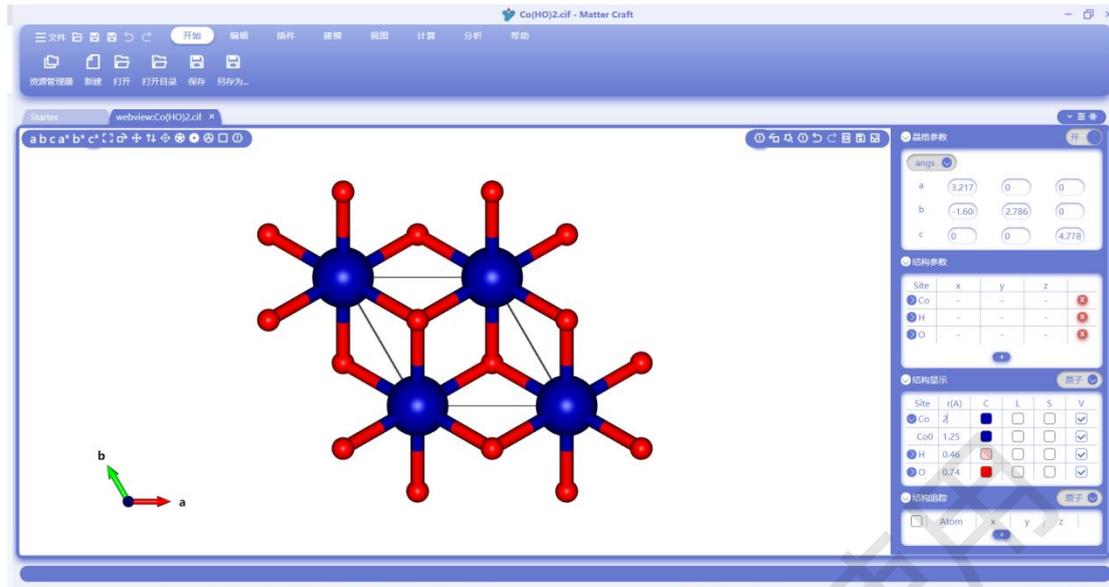


#### D. 结构显示模块修改

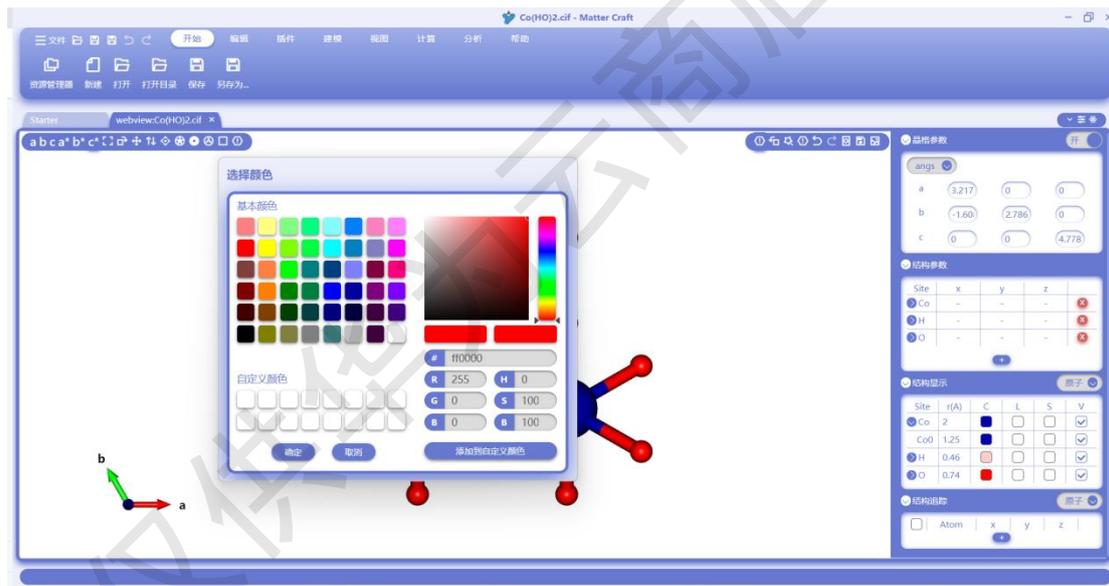
结构显示模块在下图中红框处，在模块中可以选择和修改原子、键和多面体的各种显示状态。

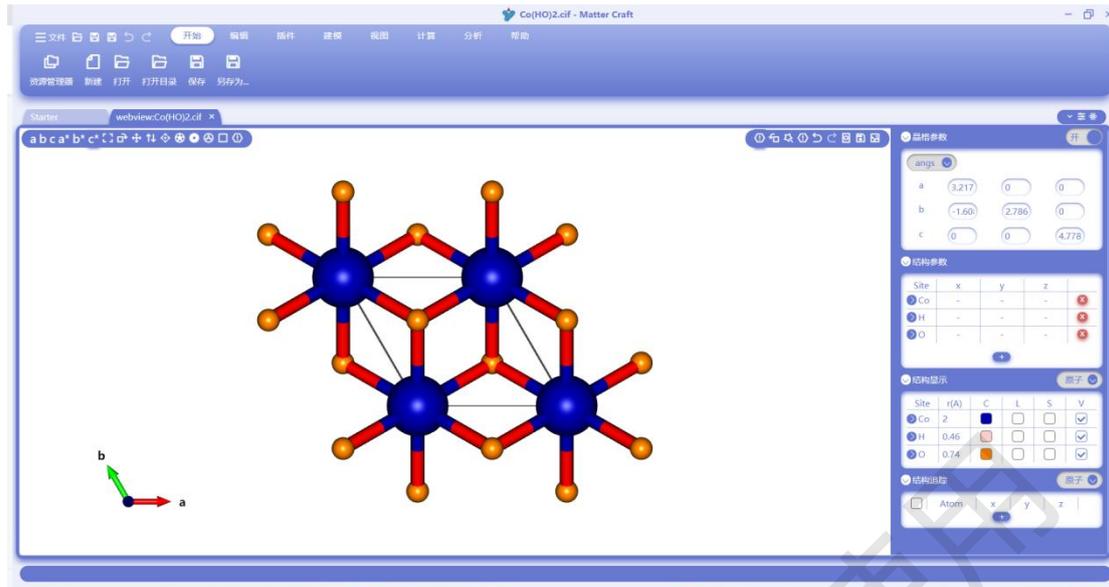


在原子模式下，修改  $r(A)$  的值，可以修改原子显示的半径，如下图所示为将 Co 元素的半径修改为 2 的结果。

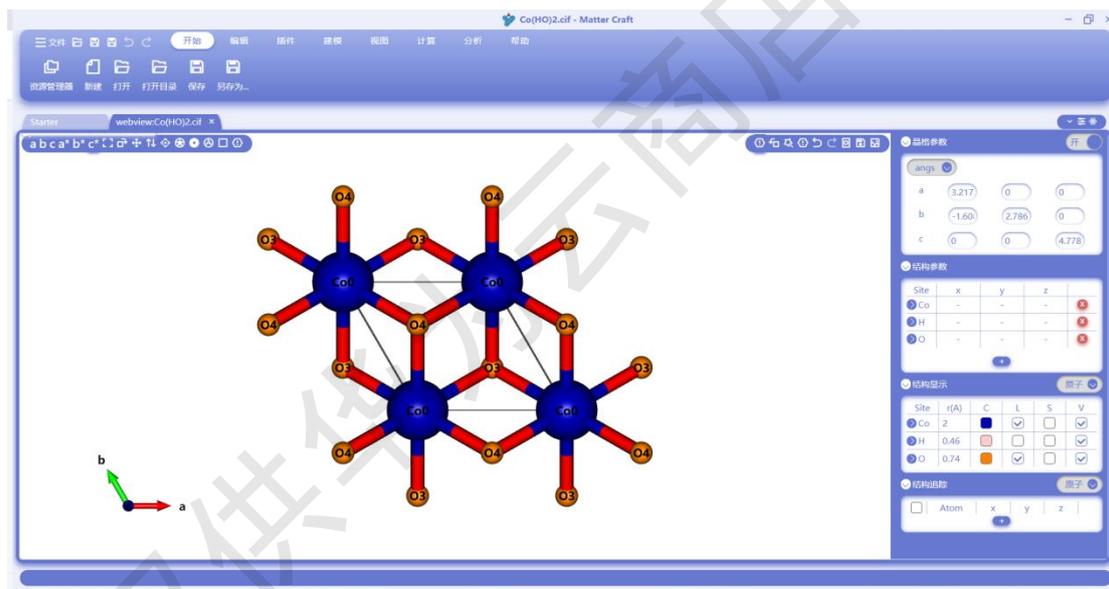


在原子模式下，点击 C 列下的色块，可以修改原子显示的颜色，点击后将显示下面的颜色选择框，选择需要修改的颜色后点击确定，原子会被修改为对应的颜色。下图显示将 O 元素改为橙色的结果。

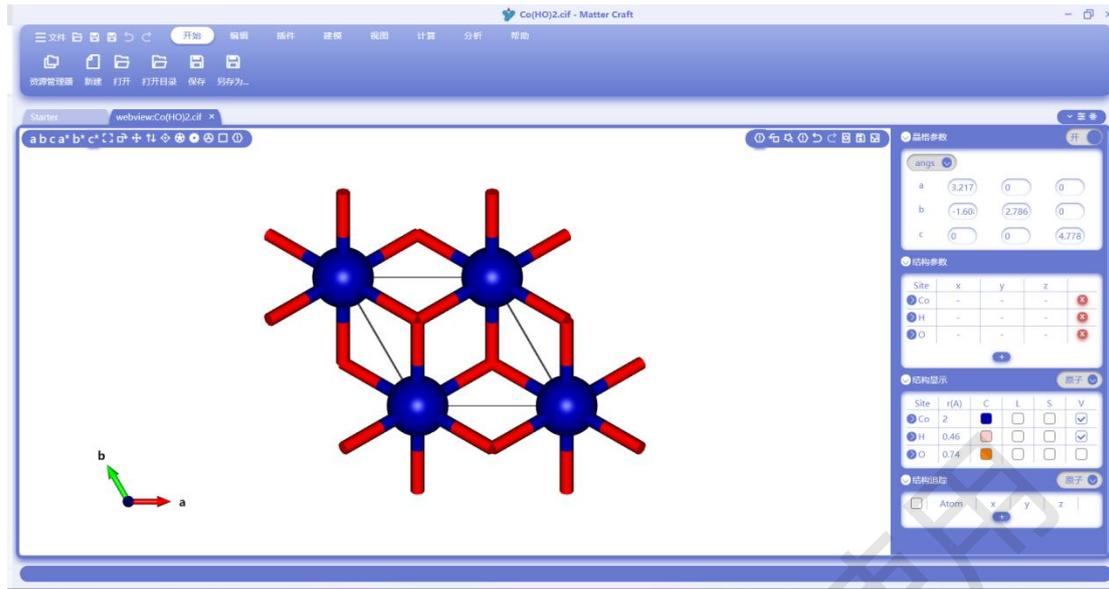




点击 L 列下的框选，可以选择是否显示对应元素/原子的标签，选择 Co 和 O 的 L 后，显示标签如下图所示

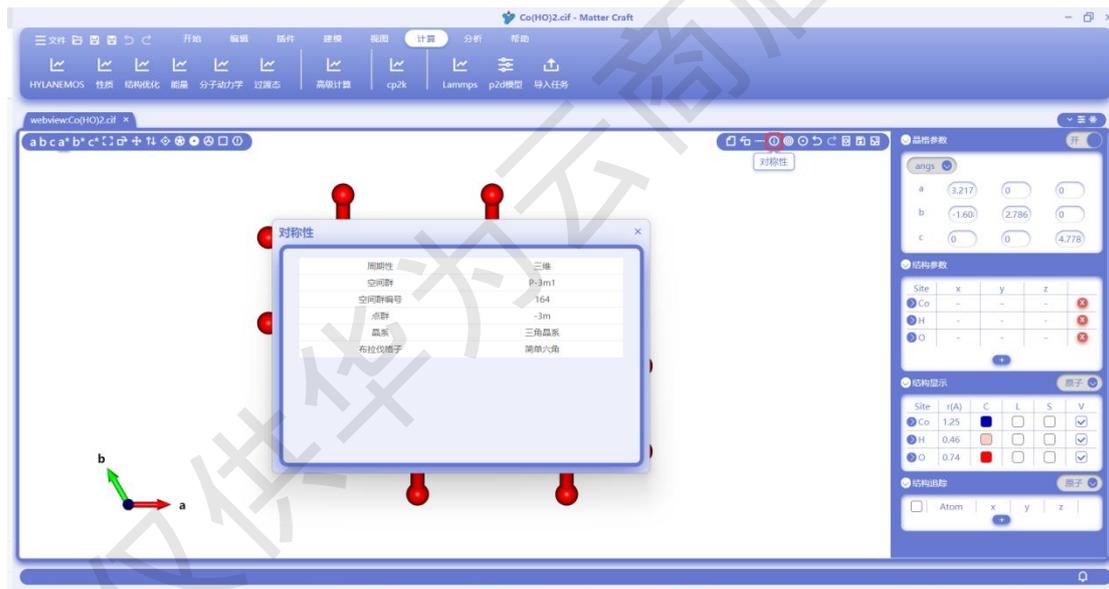


点击 S 列下的框选，可以选择对应的元素/原子。点击 V 列下的框选，可以选择是否显示对应元素/原子，取消 O 的 V 后，显示如下图所示。



### E. 对称性

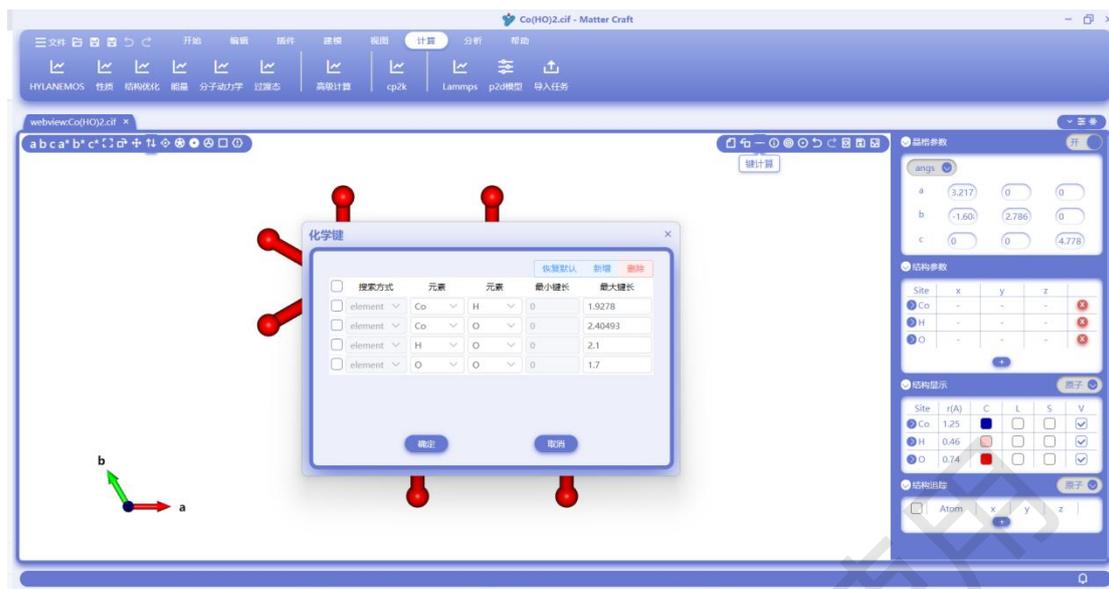
点击红框处的对称性，然后会显示晶体结构的对称性信息。



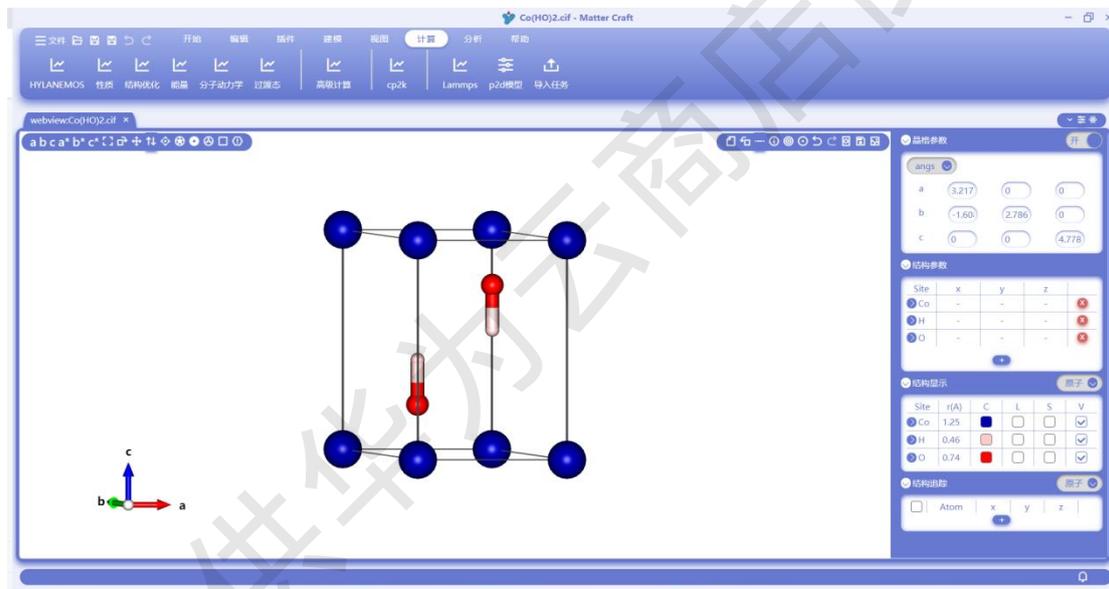
### F. 键修改

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。



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

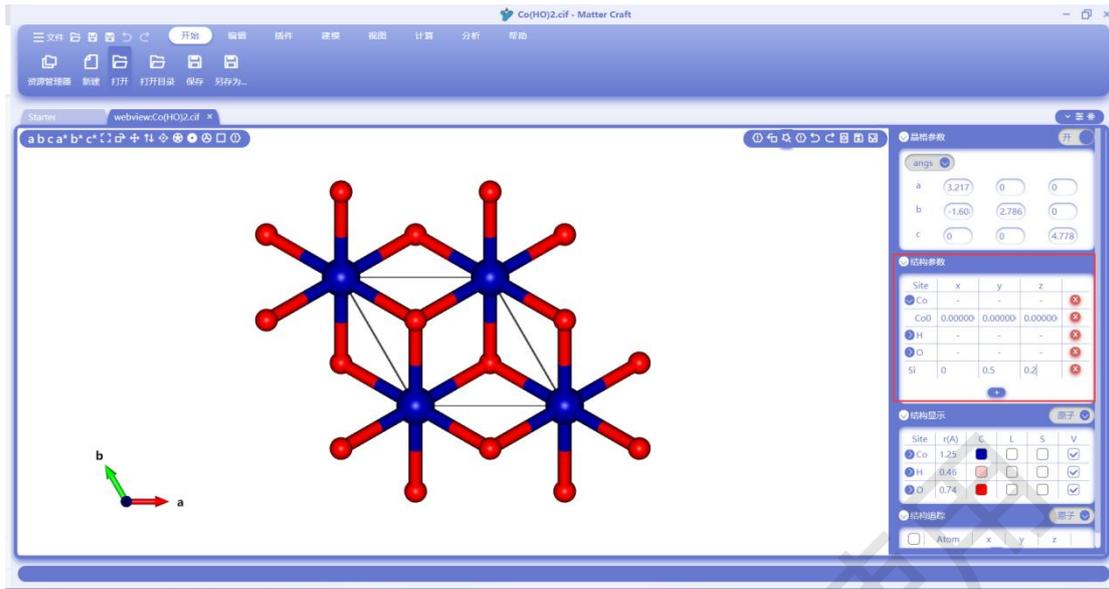
#### A. 编辑原子

##### 1. 拖拽原子

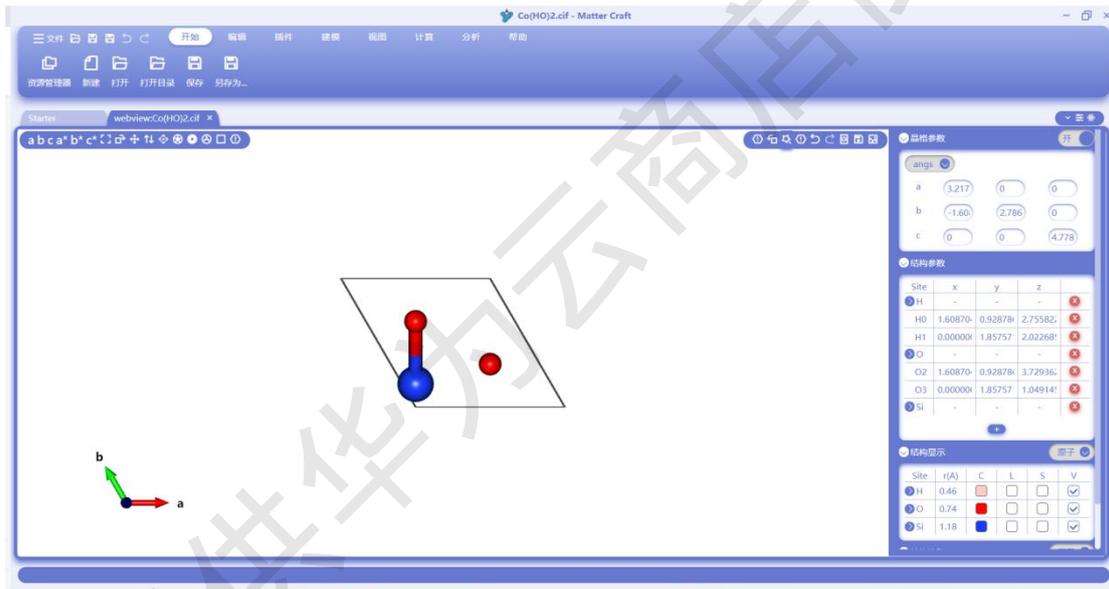
点击晶体结构视图左上角的编辑原子，鼠标长按一个原子并进行拖拽，即可移动原子位置。

##### 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。

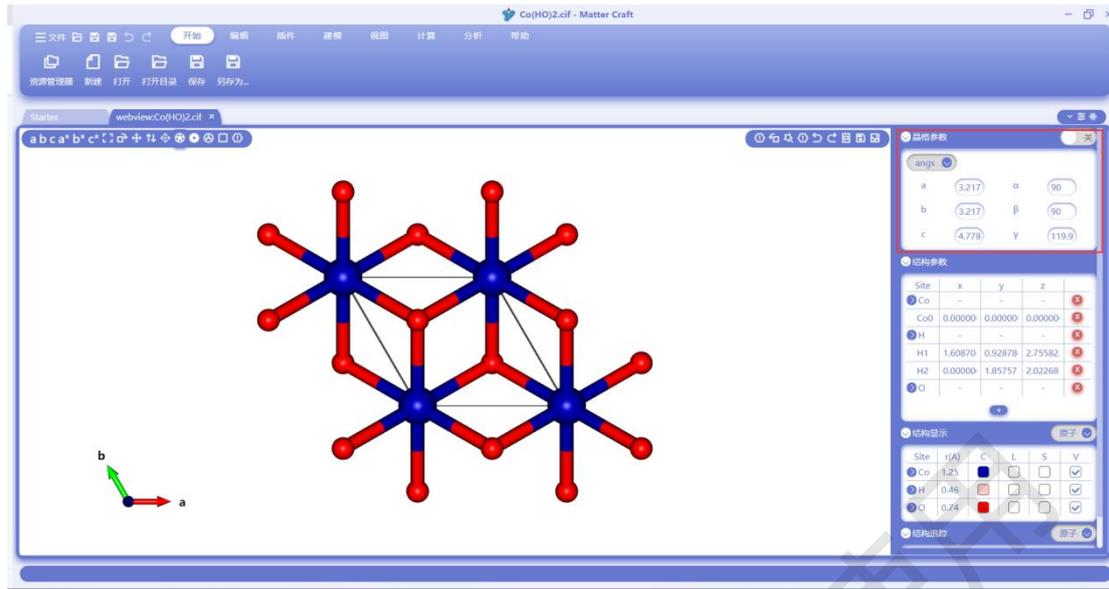


新增 Si 原子、删除 Co 原子后结构如下图



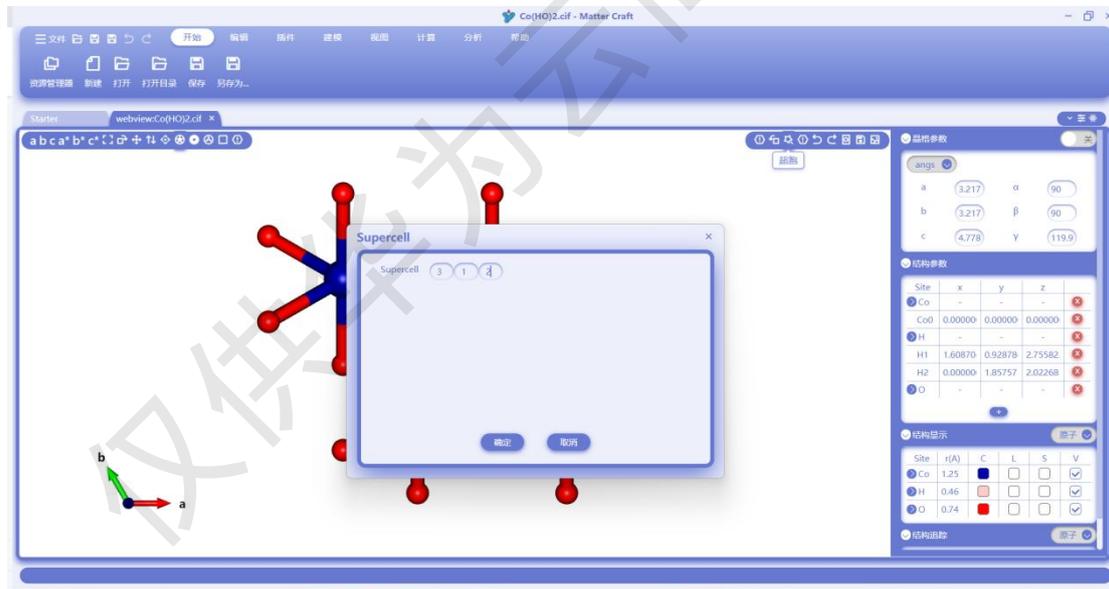
## 修改晶格常数

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 angstrom、bohr 或 nm。直接修改下面的数值，就可以修改对应的晶格常数。

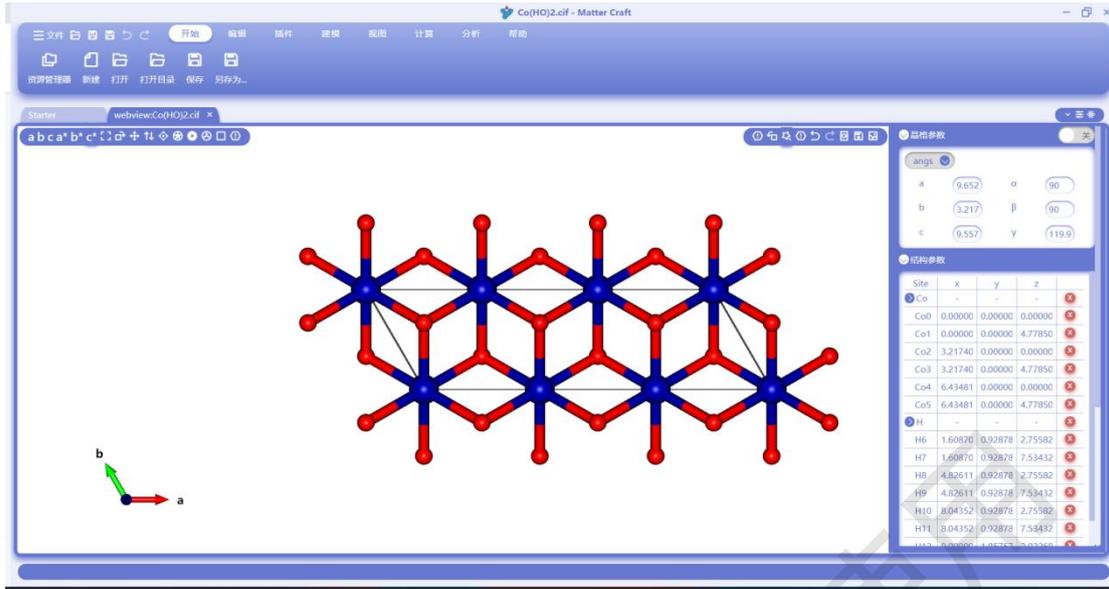


## 建立超晶胞和寻找原胞

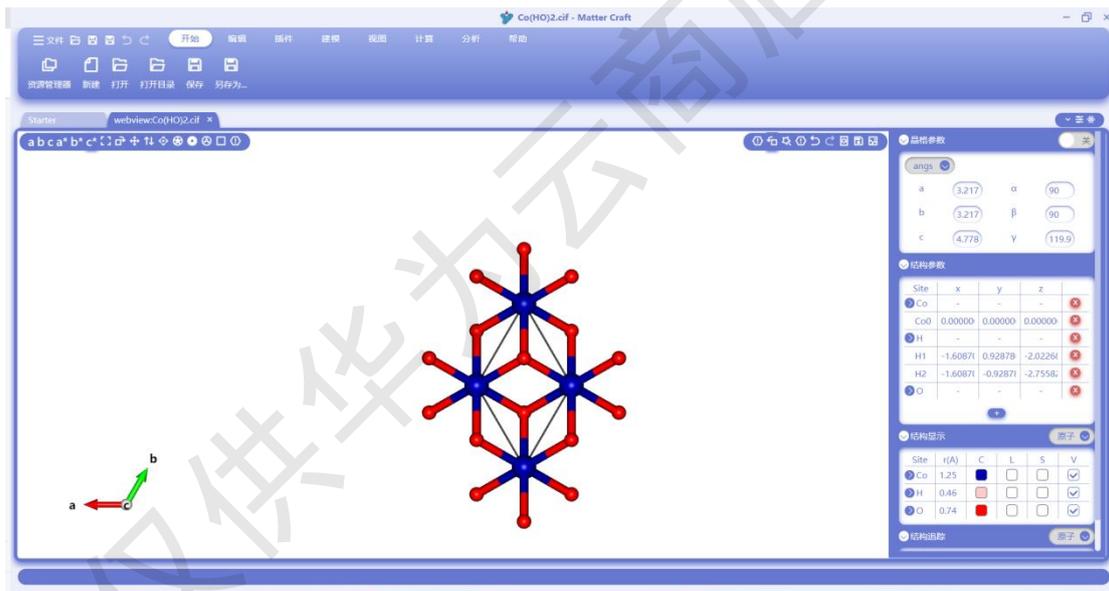
点击超胞按钮，在超胞设置的弹框中输入 a、b、c 三个方向的超胞倍数，点击确定，即可建立超胞。



建立的超胞如下图。

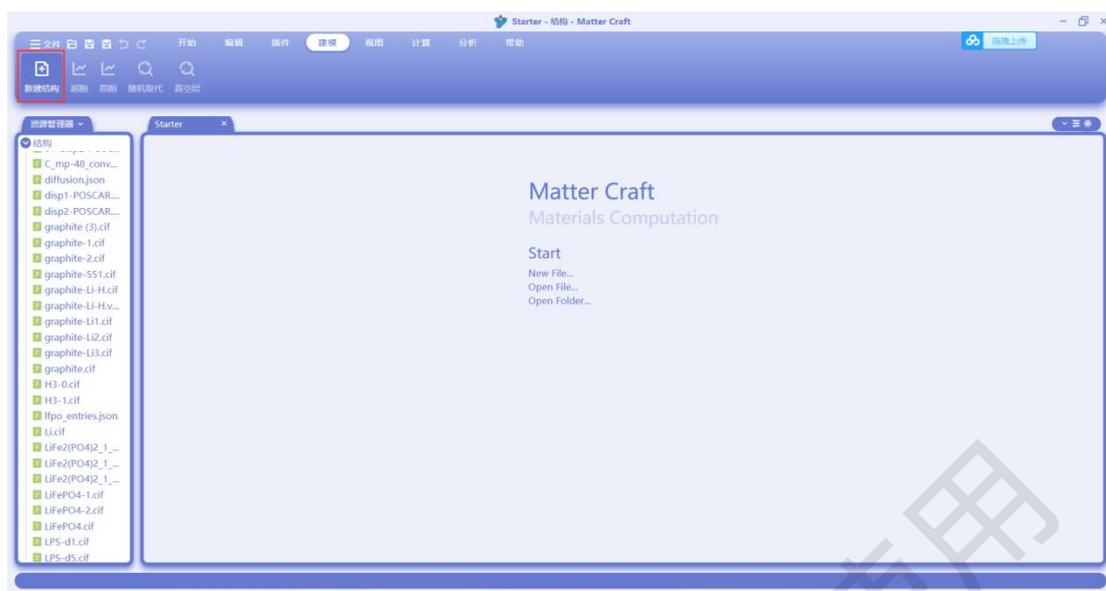


点击原胞按钮，软件会自动寻找当前结构的原胞，对上图的晶胞点击原胞后，找到如下图所示的原胞。

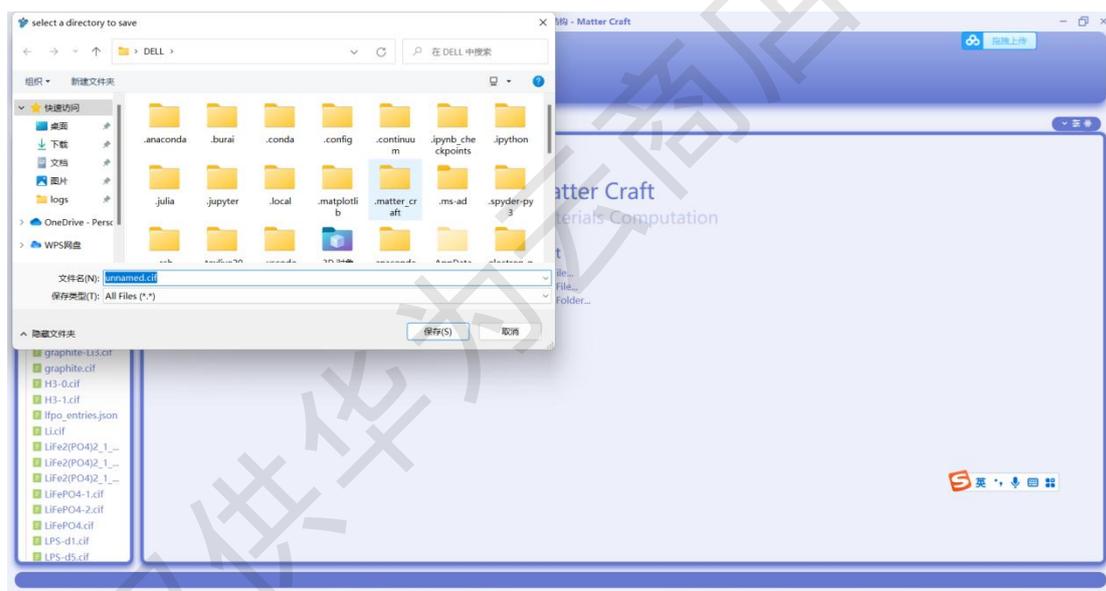


## 新建晶胞

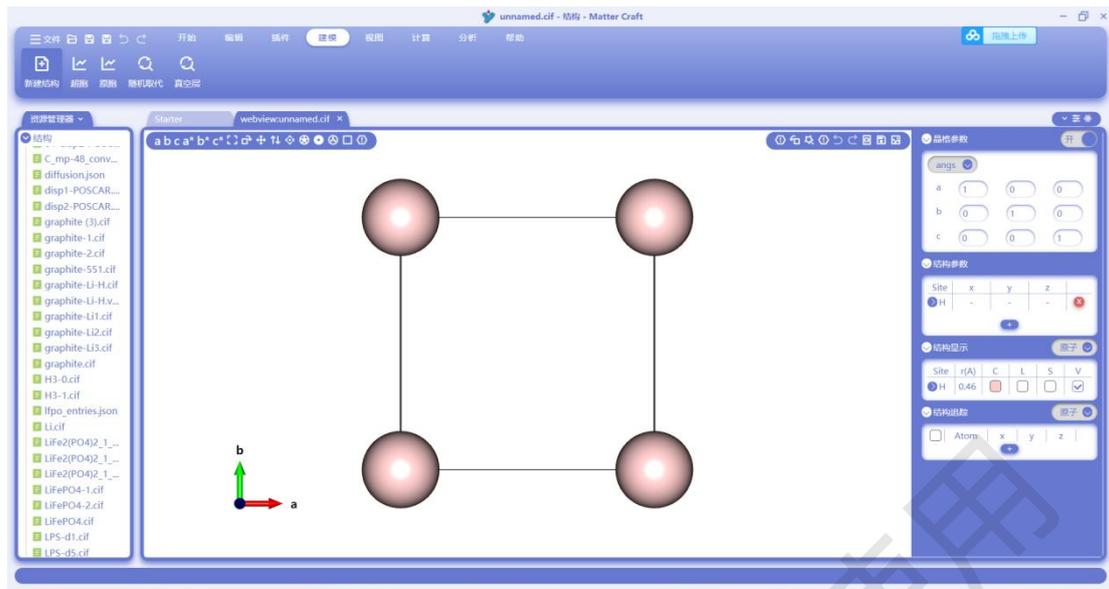
如下图红框处，点击建模-新建结构



选择新建文件的路径并输入文件名，点击保存

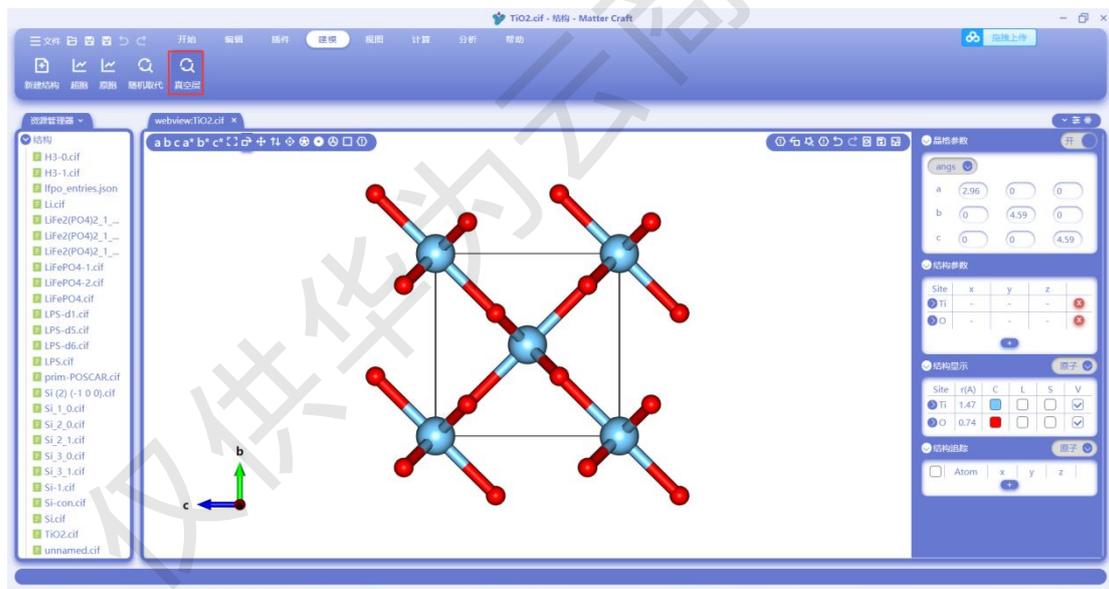


会生成一个新的结构, 这时使用之前的修改晶格常数和新增编辑原子的方法就可以建立新的晶体结构。



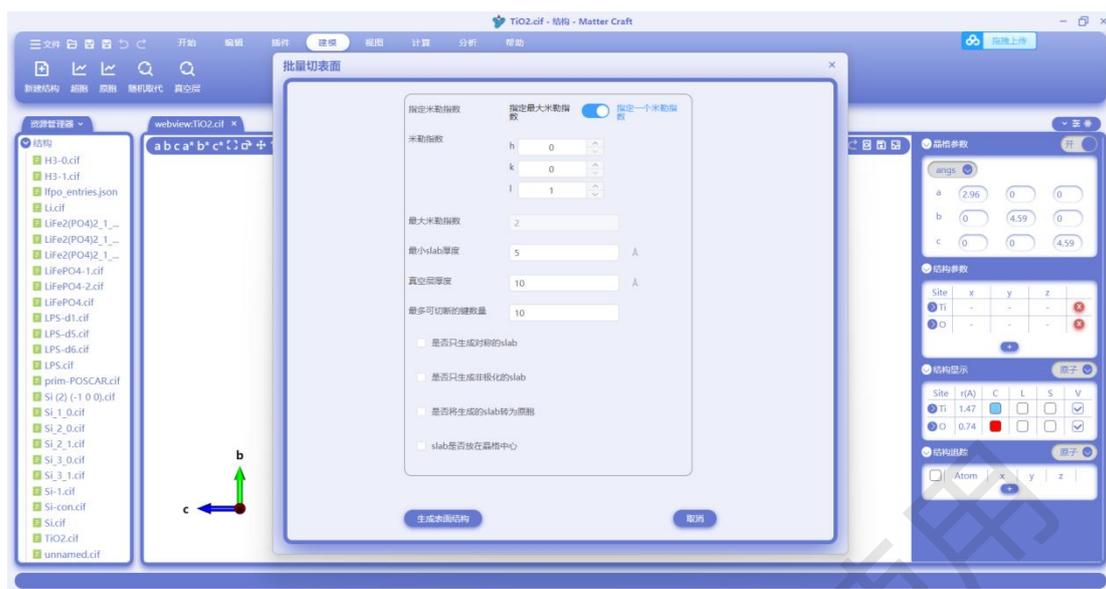
## 批量切表面

如下图红框处，点击建模-真空层。

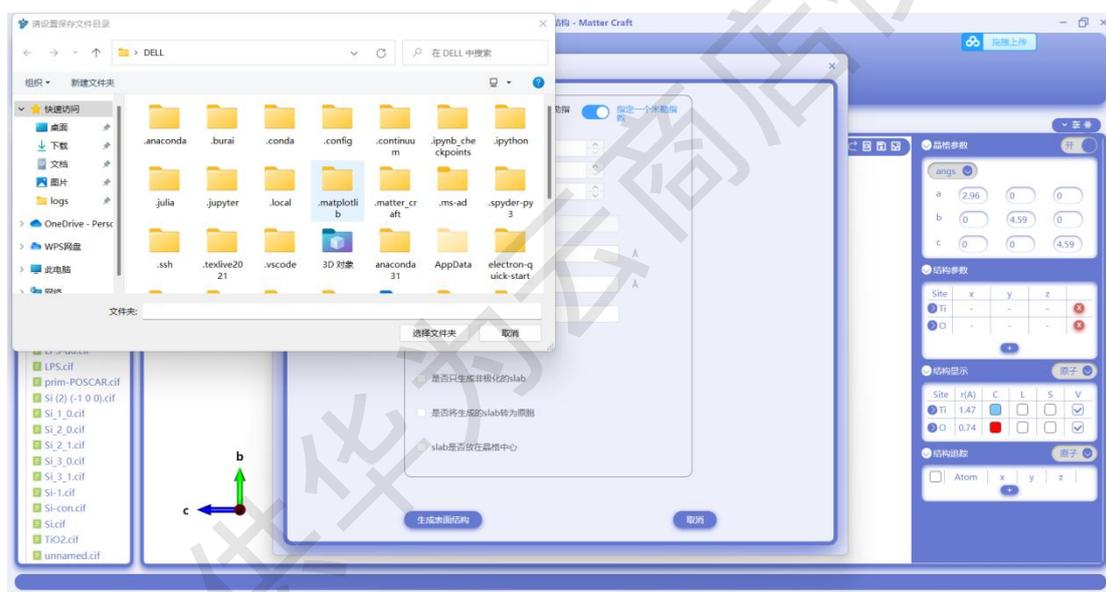


这里支持两种切表面的方式，一种是指定一个最大的米勒指数面，一种是指定一个特定的米勒指数。当使用前者时，会遍历所有小于等于最大米勒指数的晶面进行切表面；使用后两者时，只会切指定的米勒指数面  $hkl$ 。

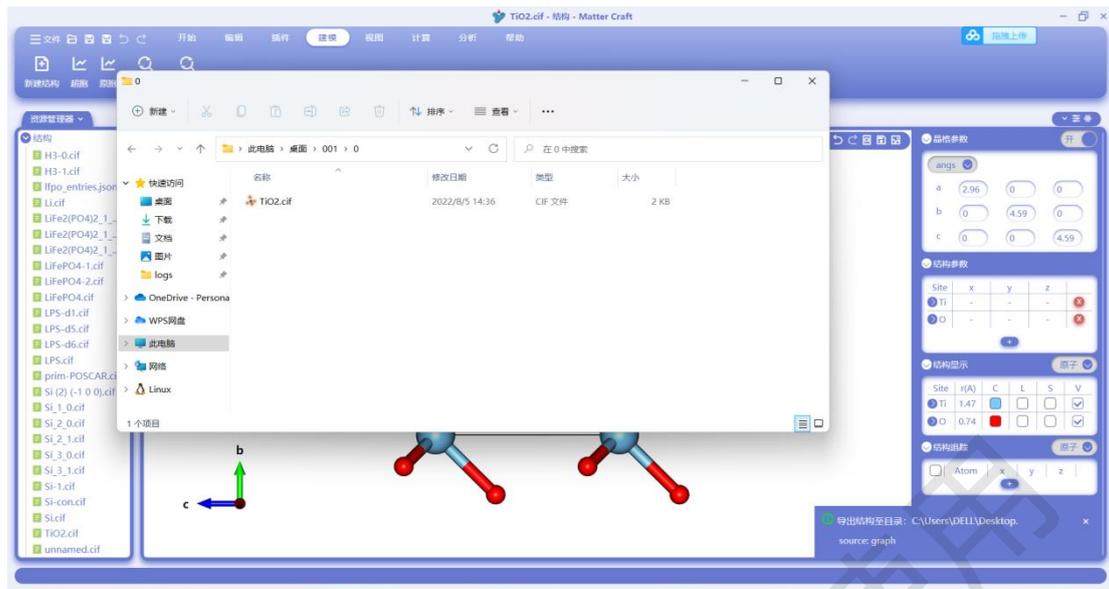
根据切面的需要切出 slab 的厚度、真空层的厚度、最多可切断多少键，并选择是否是生成对称的 slab、非极化的 slab、是否将 slab 放在晶格中心。设置完成后点击生成表面结构。



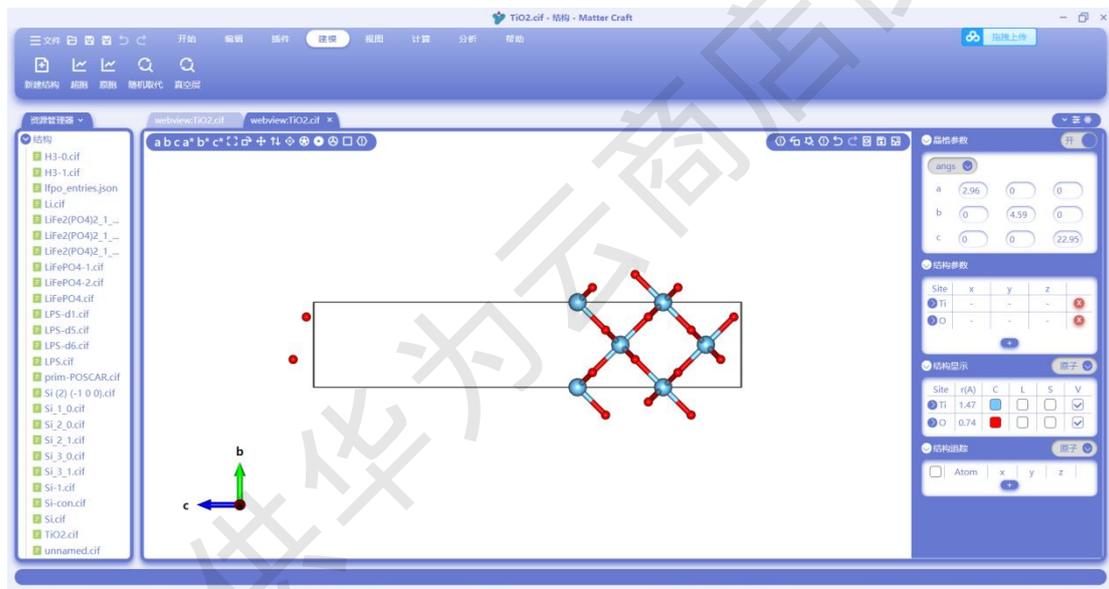
选择输出文件要放的文件夹，点击选择文件夹。



在设定的文件夹可以找到切出的表面结构。



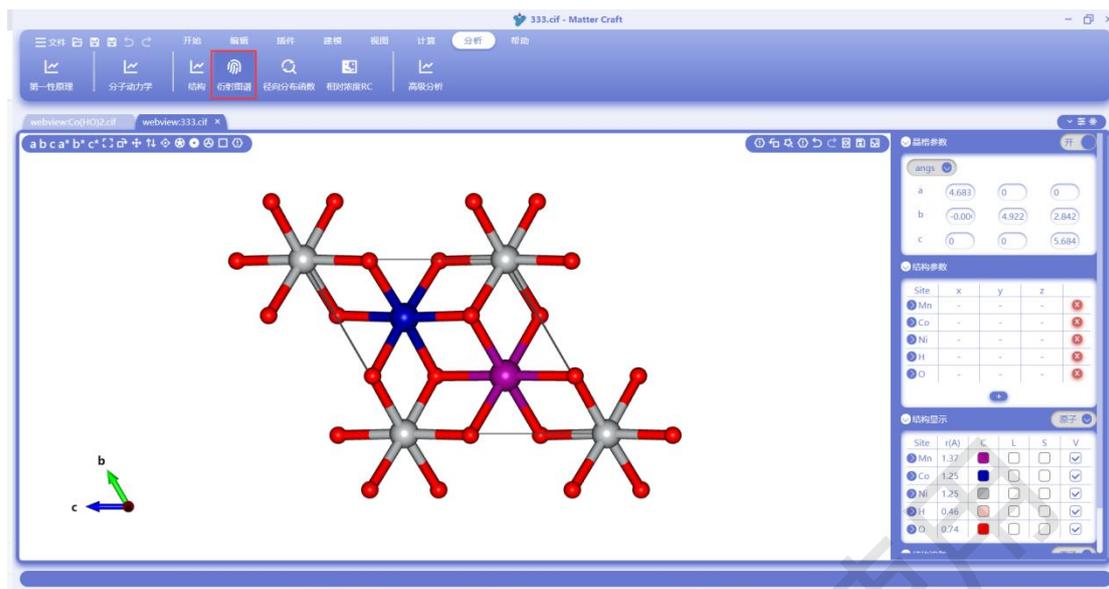
切出的其中一个表面结构如图所示。



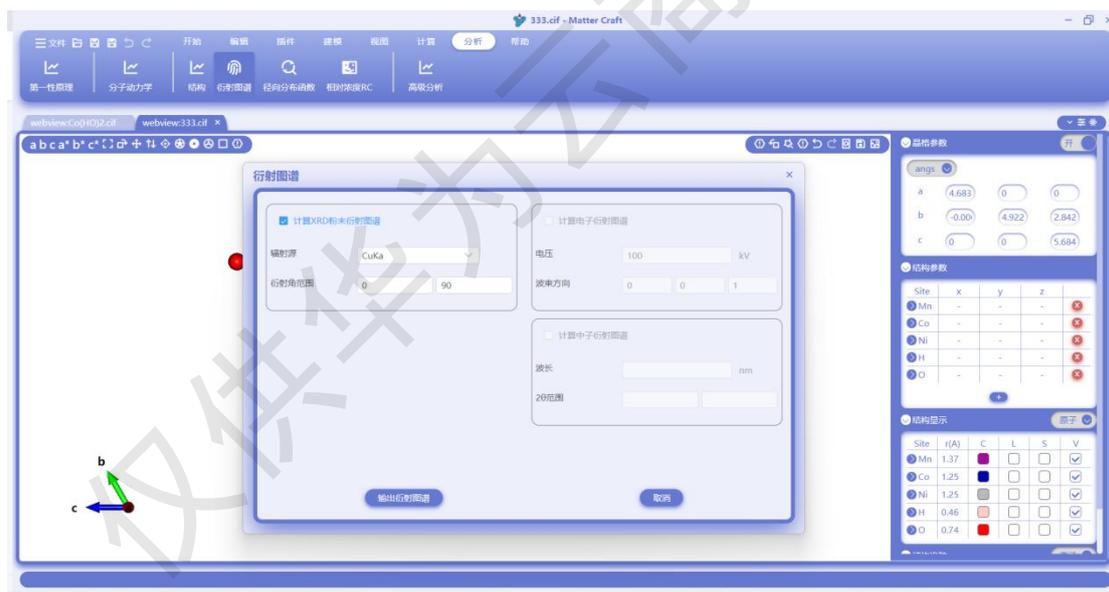
## 晶体结构分析

## 衍射图谱分析

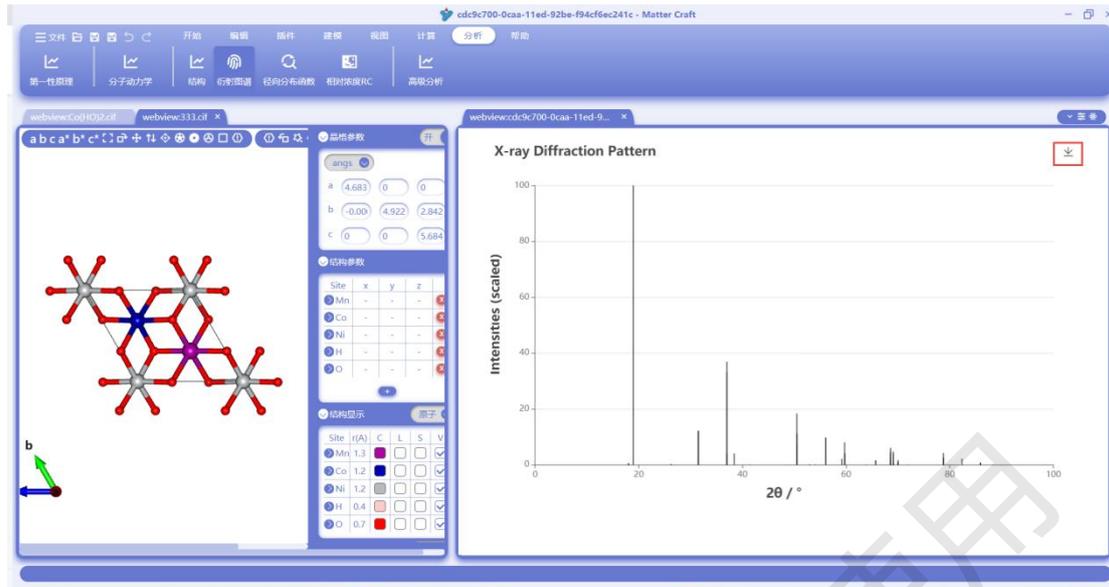
如下图红框处所示，点击“分析”-“结构”-“衍射图谱”进行衍射图谱的分析。



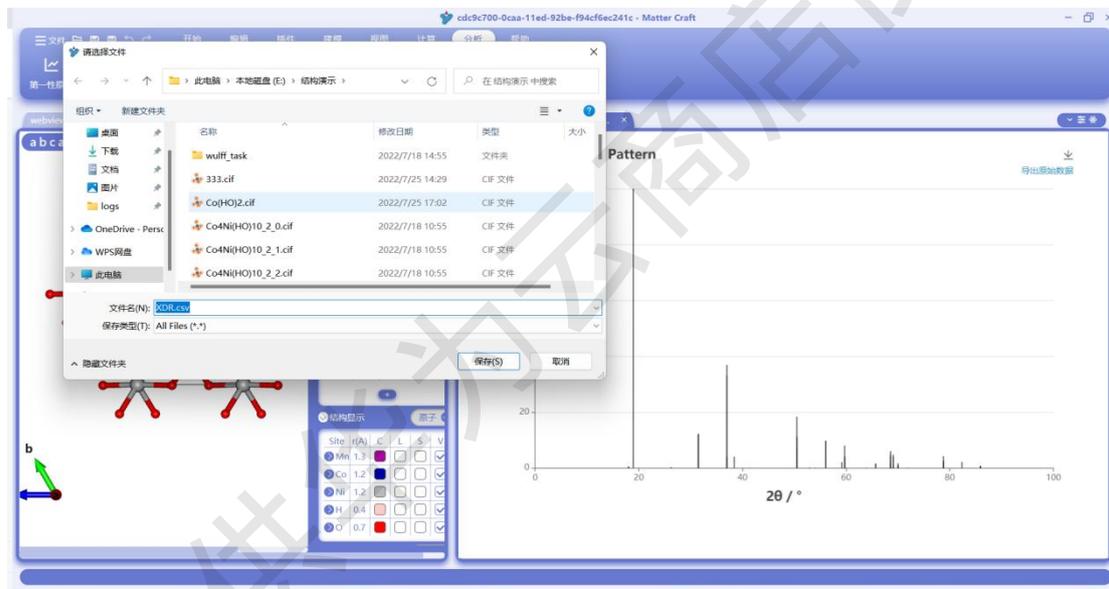
设置中勾选“计算 XRD 粉末衍射图谱”，下方的辐射源可以选择 'CuKa', 'CuKa2', 'CuKa1', 'CuKb1', 'MoKa', 'MoKa2', 'MoKa1', 'MoKb1', 'CrKa', 'CrKa2', 'CrKa1', 'CrKb1', 'FeKa', 'FeKa2', 'FeKa1', 'FeKb1', 'CoKa', 'CoKa2', 'CoKa1', 'CoKb1', 'AgKa', 'AgKa2', 'AgKa1', 'AgKb1' 中的其中一个，不同的辐射源会得到不同的衍射图谱，这里选择 CuKa。然后填写衍射角的范围，这里使用默认值 0 和 90。点击输出衍射图谱，即可得到衍射图谱。



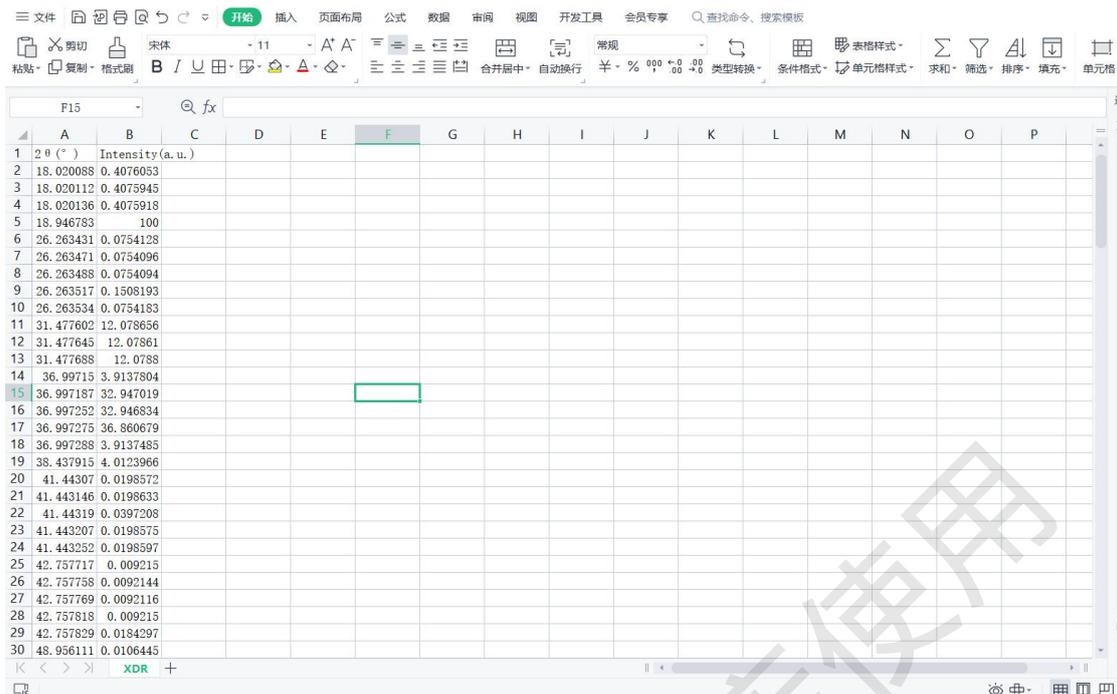
得到的 XRD 粉末衍射的图谱如下图所示，其中横坐标为衍射角度，纵坐标为衍射强度。点击右上角红框处的  图标，可以将数据导出到 csv 文件当中。



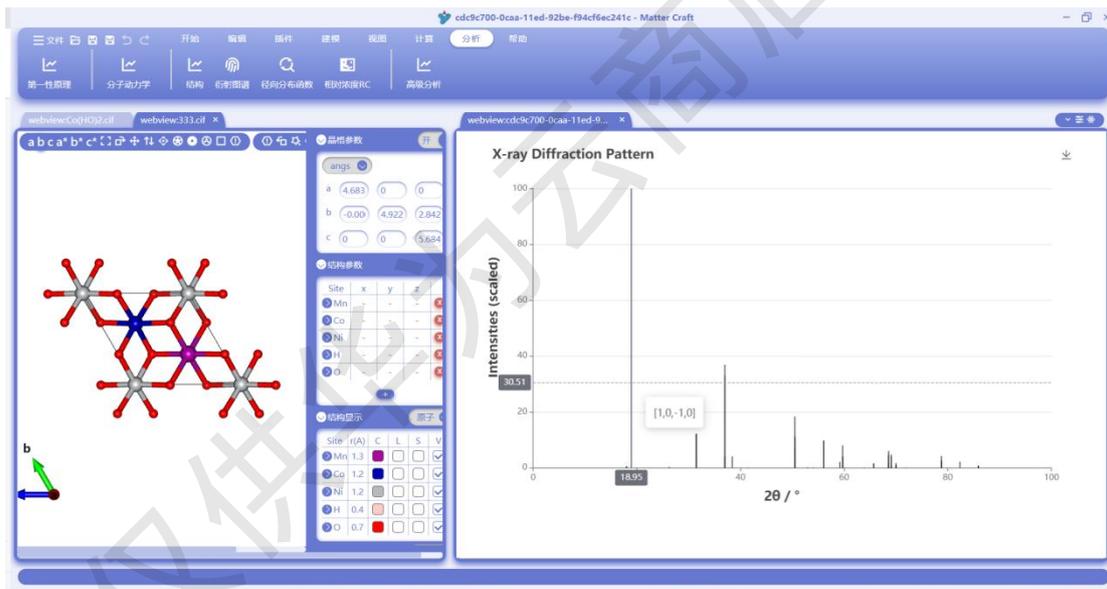
选择输出文件的目录并设定好文件名，即可输出数据为 csv 格式。



XRD 的衍射图谱的数据的 csv 文件打开如下图所示。

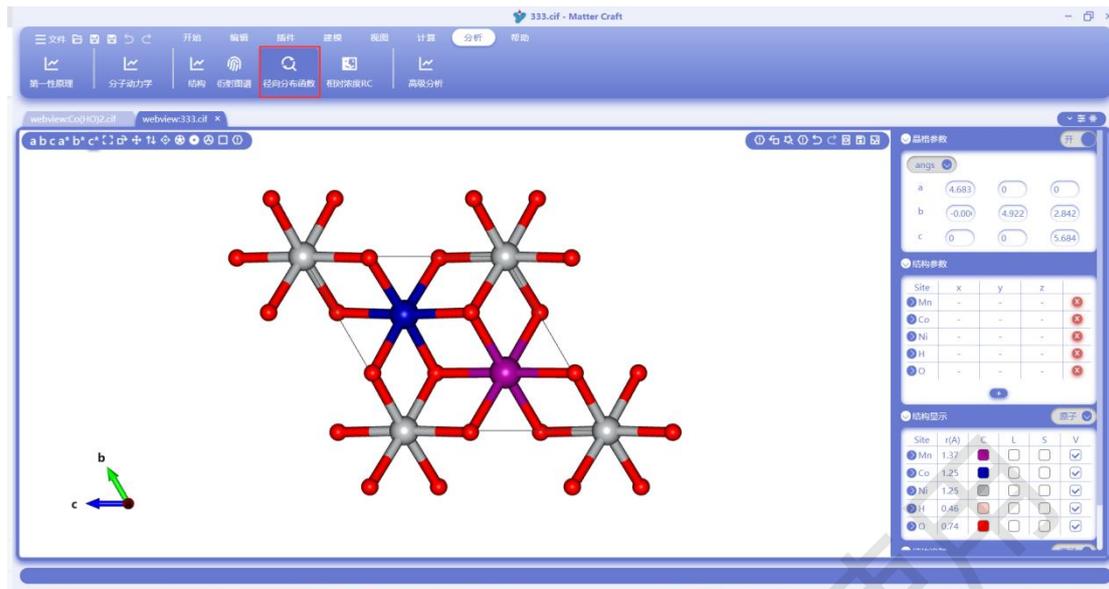


在图谱中将鼠标放在衍射峰的位置处，可以看到该行射峰对应的角度、强度和晶面指数。



## 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



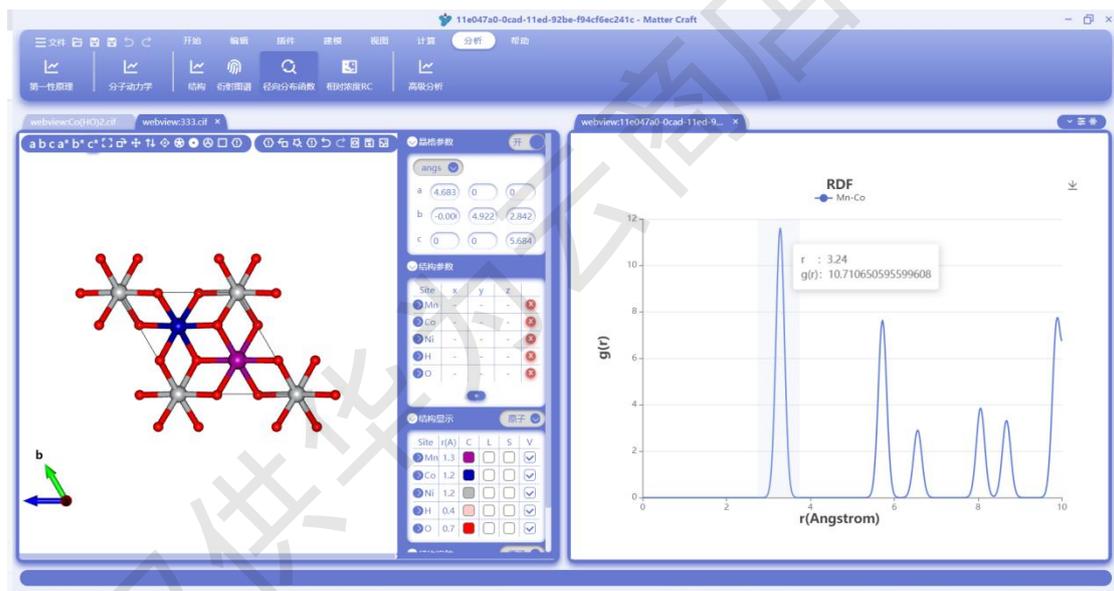
分析的设置面板如下图所示，“用于计算的原子 1”和“用于计算的原子 2”两个参数用于设置要分析的原子，可以选择的有当前结构中的全部原子和某一种元素（如下方图所示）。“截断半径”用于设置计算多少半径范围内的径向分布函数，“间隔”用于设置横坐标的取点密度，“平滑系数”用于设定如何平滑径向分布函数的曲线。

设置完成后，点击分析按钮即可得到径向分布函数。

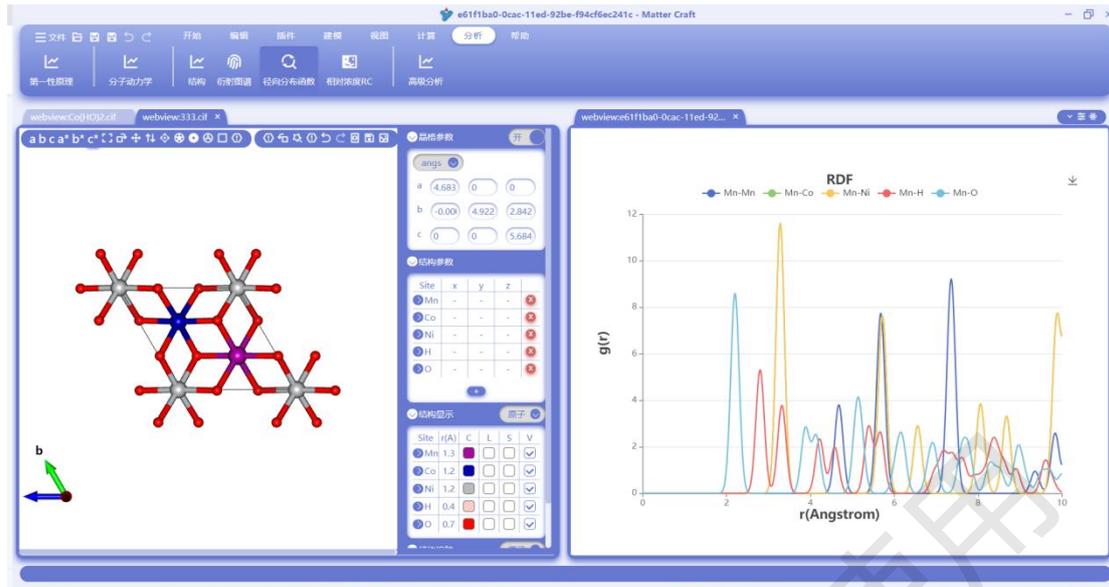




当选择元素和元素进行计算时（这里以 Mn 和 Co 为例），得到如下的径向分布函数图片。横坐标为径向的半径值，纵坐标为关联函数的值。同样的，将鼠标放在峰上，可以显示当前位置的半径和高度值。

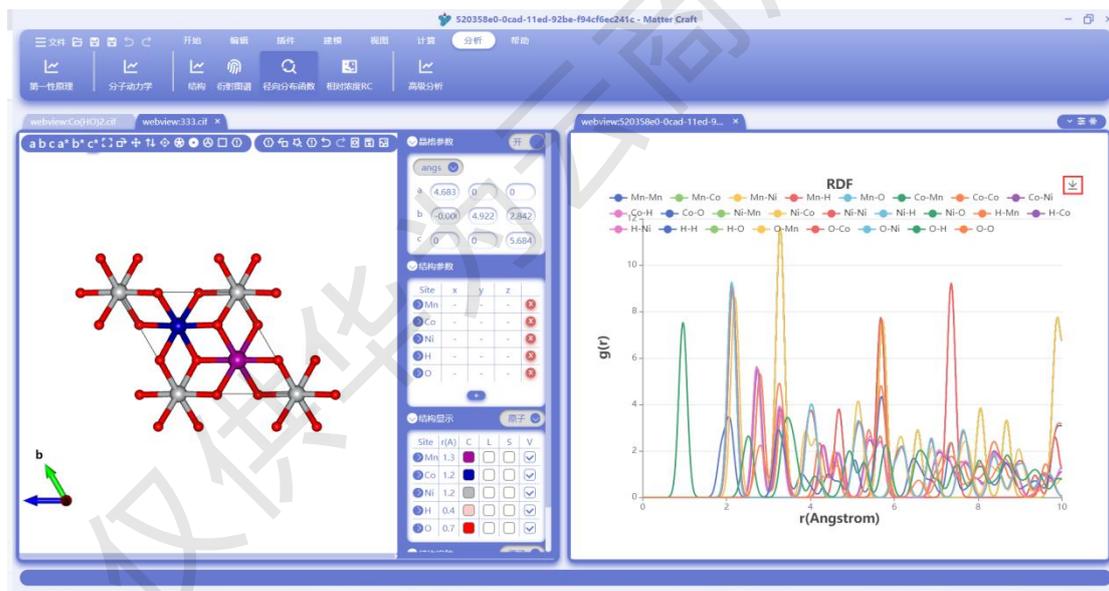


当选择元素和全部原子进行计算时（这里以 Mn 和全部原子为例），得到如下的径向分布函数图片



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  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。



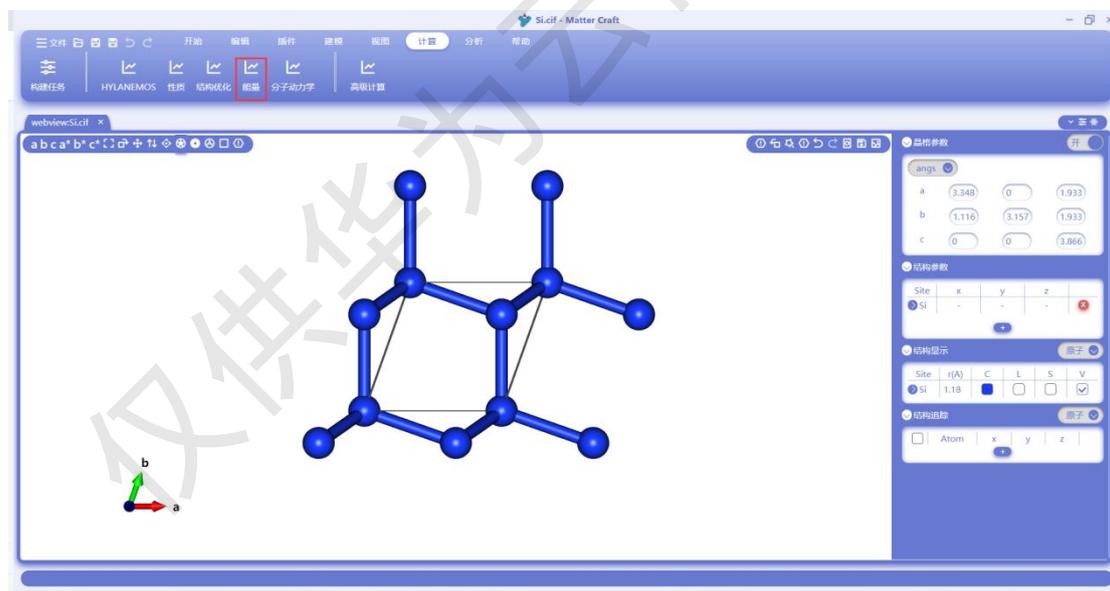
径向分布函数的数据的 csv 文件打开如下图所示。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T
1	r	Mn-Mn g(r)	Mn-Co g(r)	Mn-Ni g(r)	Mn-H g(r)	Mn-O g(r)	Co-Mn g(r)	Co-Co g(r)	Co-Ni g(r)	Co-H g(r)	Co-O g(r)	Ni-Mn g(r)	Ni-Co g(r)	Ni-Ni g(r)	Ni-H g(r)	Ni-O g(r)	H-Mn g(r)	H-Co g(r)	H-Ni g(r)	H-H g(r)
2		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
4		0.04	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5		0.06	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6		0.08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7		0.1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8		0.12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	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
10		0.16	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
12		0.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13		0.22	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
14		0.24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15		0.26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16		0.28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17		0.3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18		0.32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	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
20		0.36	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
22		0.4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
23		0.42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24		0.44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
25		0.46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	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
27		0.5	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
29		0.54	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
30		0.56	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

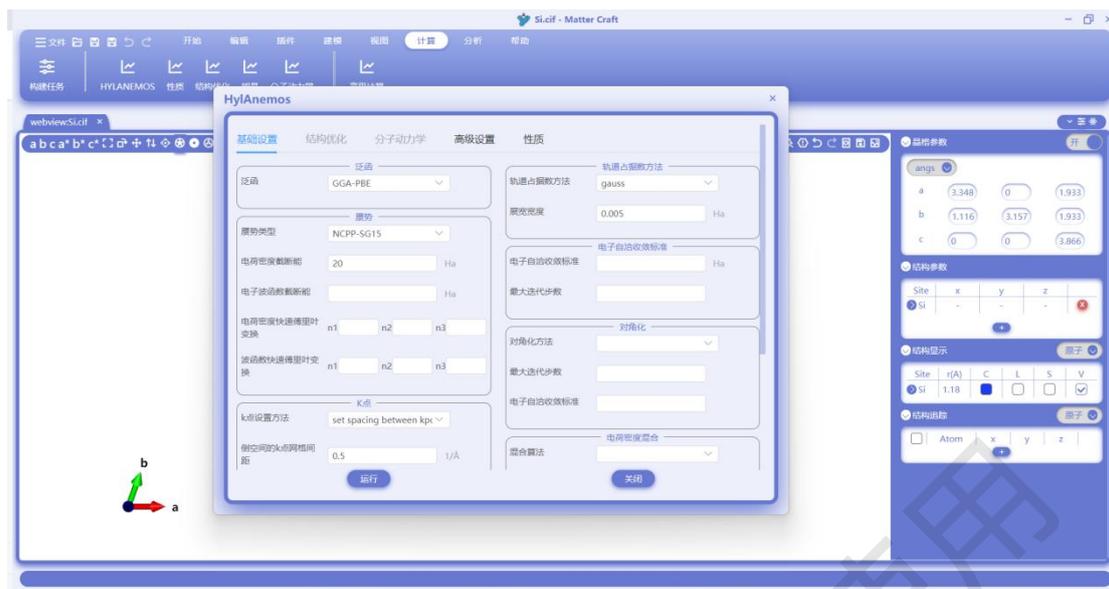
## Hylanemos 计算

## 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。



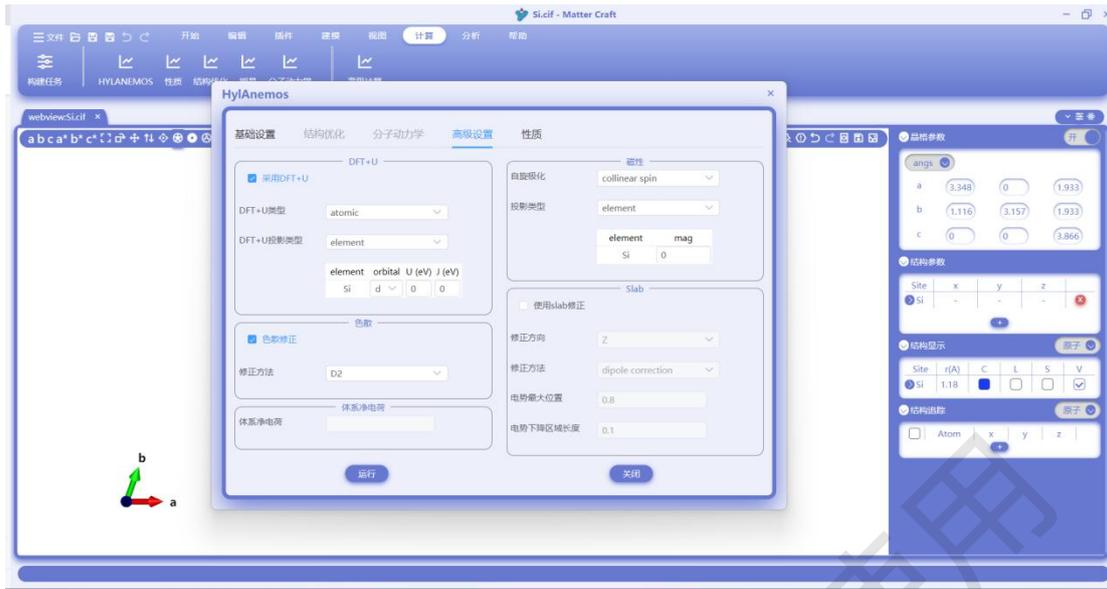
设置面板如下图所示，分为基础设置、高级设置和性质。进入后面板中已经给出了部分参数的默认设置，空白的参数可以不需要进行填写。一般来说，使用默认参数就可以完成一个中等精度的计算任务。



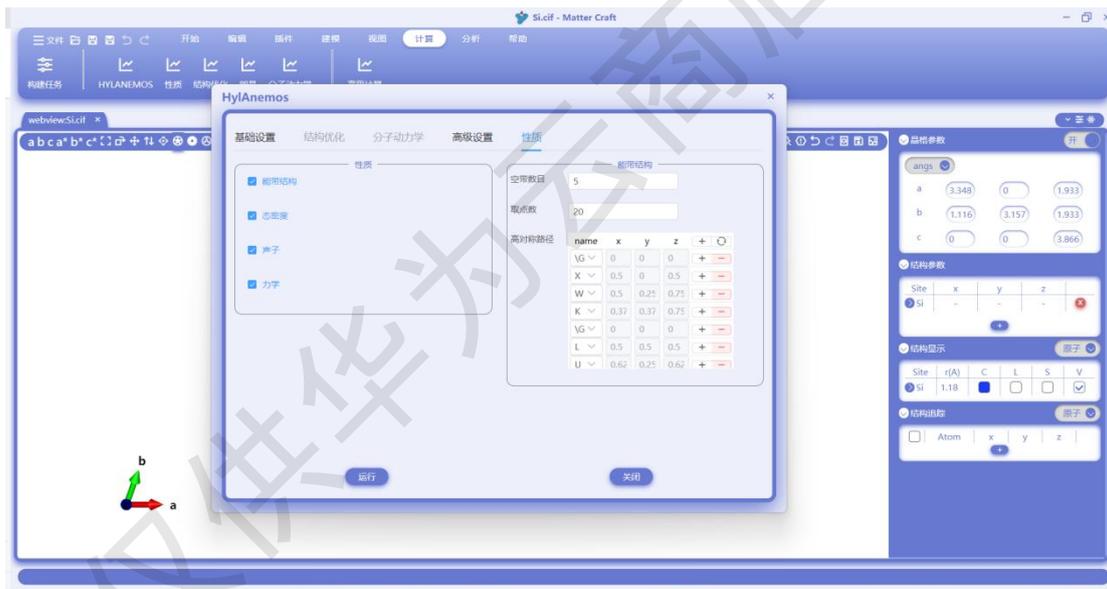
鼠标悬停在参数名称上，可以看到该参数的描述。



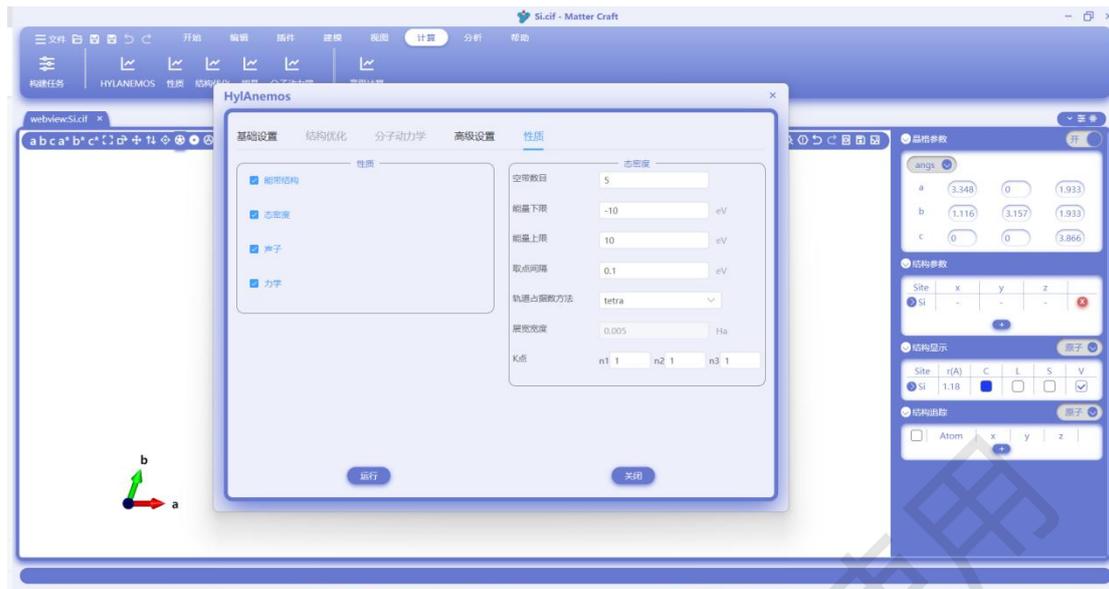
高级设置面板中，每个模块都有一个开关选项，选择后可以对该模块进行设置。例如 DFT+U 模块，勾选后下方的 DFT+U 类型、DFT+U 投影类型和具体的 U 值可以进行设置。下图为示例。



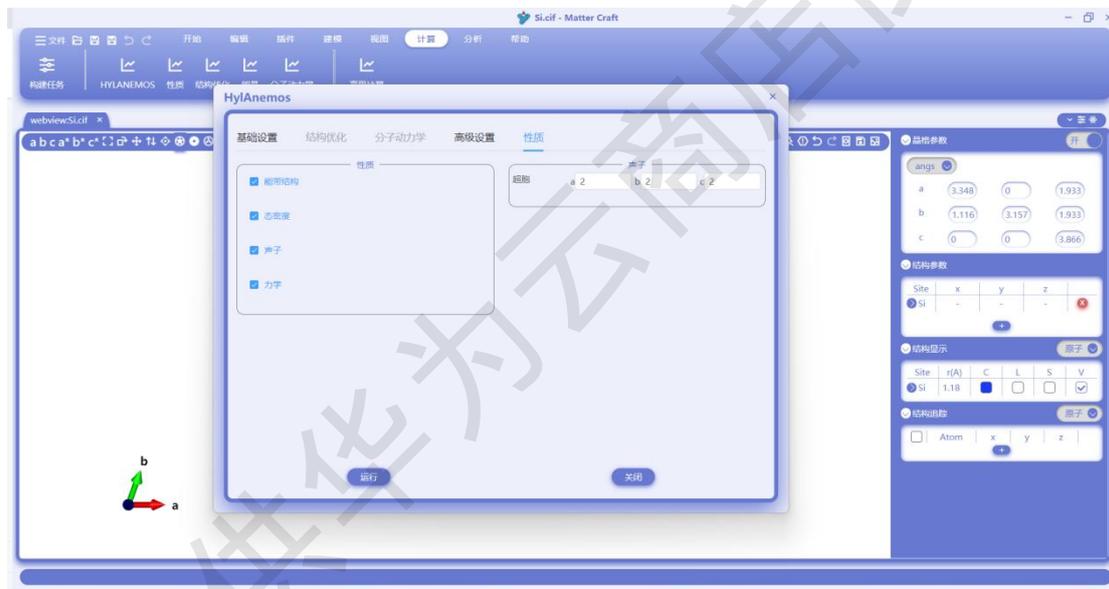
在性质的页面中设置可以通过勾选能带结构、态密度、声子和力学来确定要计算的材料的性质。勾选后，右侧会出现该性质的计算设置信息。在能带结构的设置中，软件自动给出了结构的高对称点和路径，用户也可以手动新增高对称点和删除高对称点，同时设置空带数目和取点数。



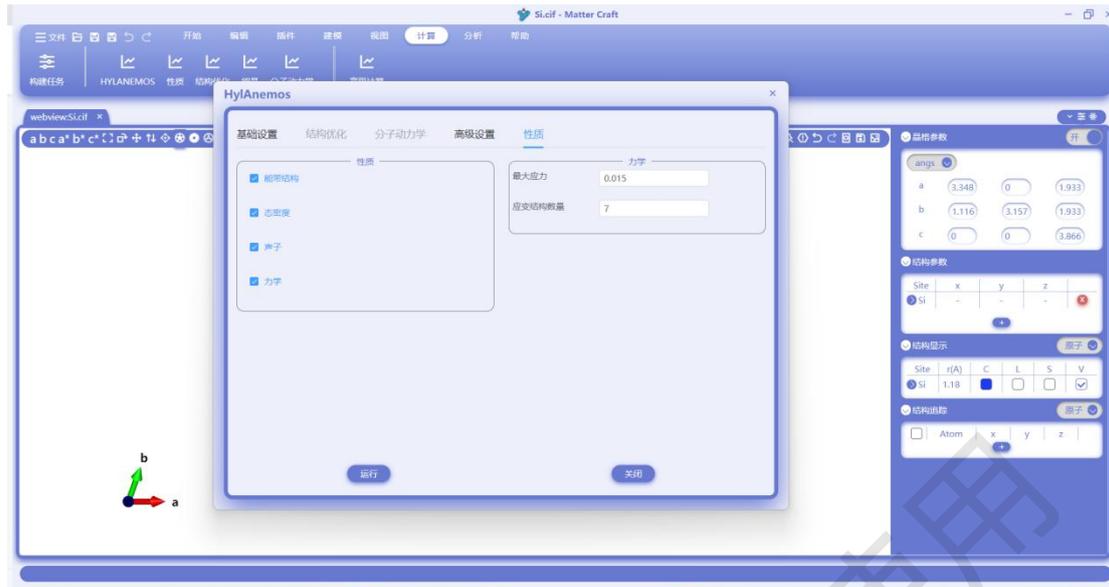
态密度的设置中，软件自动给出了默认参数，用户可以进行修改，这里将 K 点修改为 5 5 5。



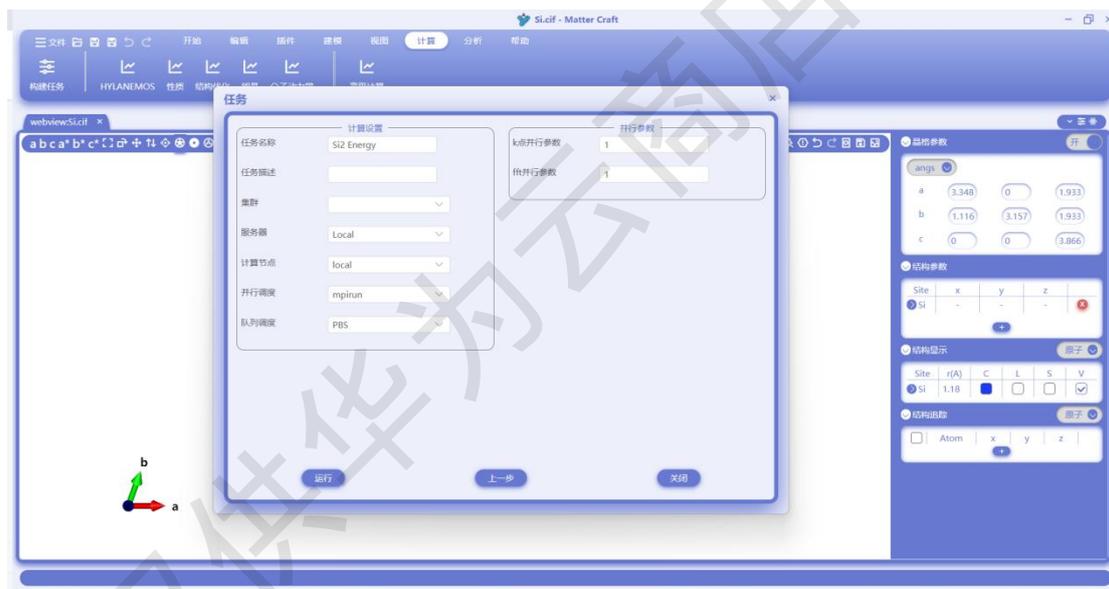
声子的设置中，软件自动给出了默认参数，用户可以进行修改，这里使用默认参数。



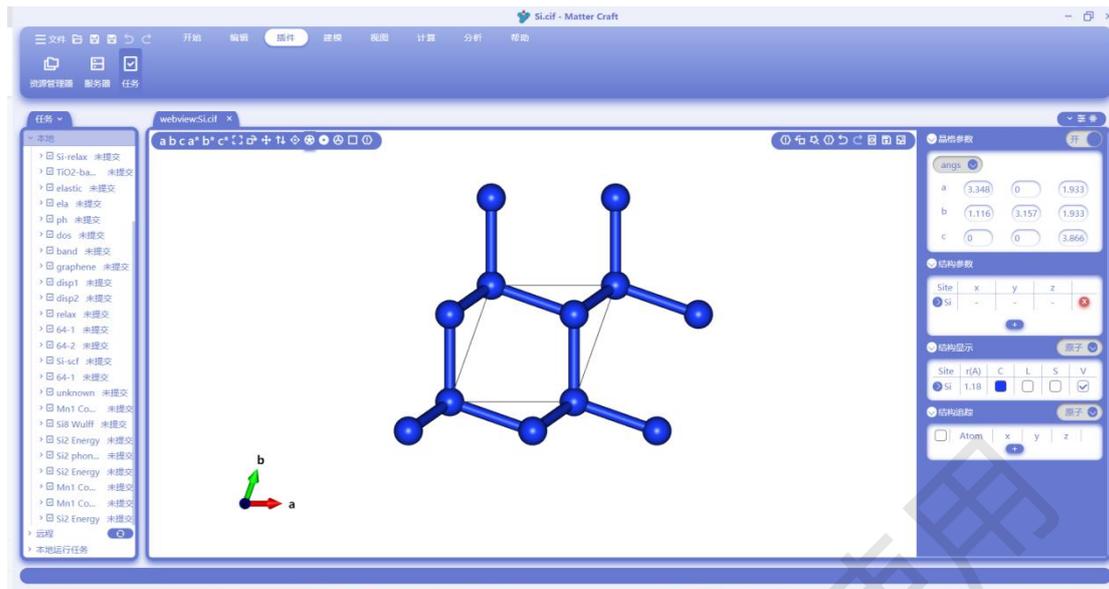
力学的设置中，软件自动给出了默认参数，用户可以进行修改，这里使用默认参数。设置完成后，点击运行。



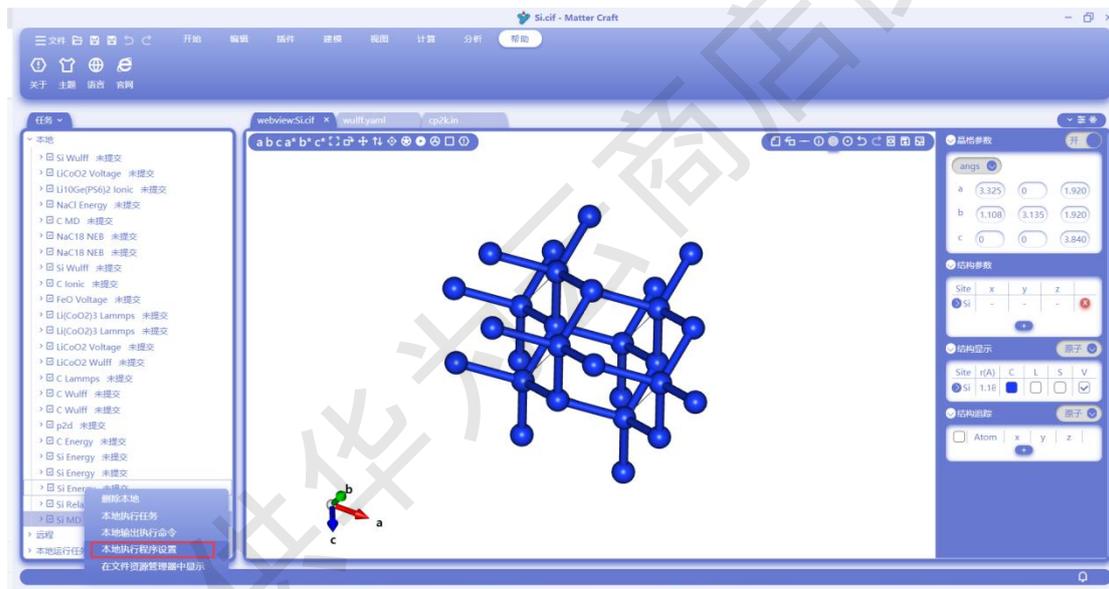
在任务计算设置中，用户可以修改任务的名称、描述等信息，并设置集群相关的参数，也可以设置并行参数。这里设置为 local，即为本机运行。完成后点击运行。



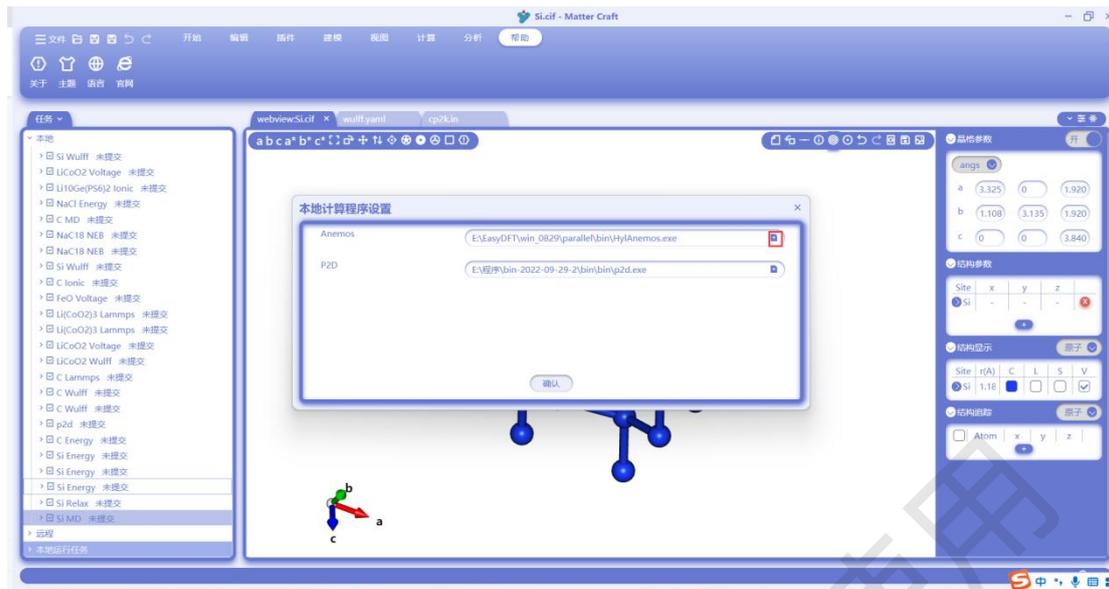
在“插件”-“任务”-“本地”设置中，用户可以看到所有生成的任务文件，当前生成的任务文件在最下方，名称为 Si2 Energy。



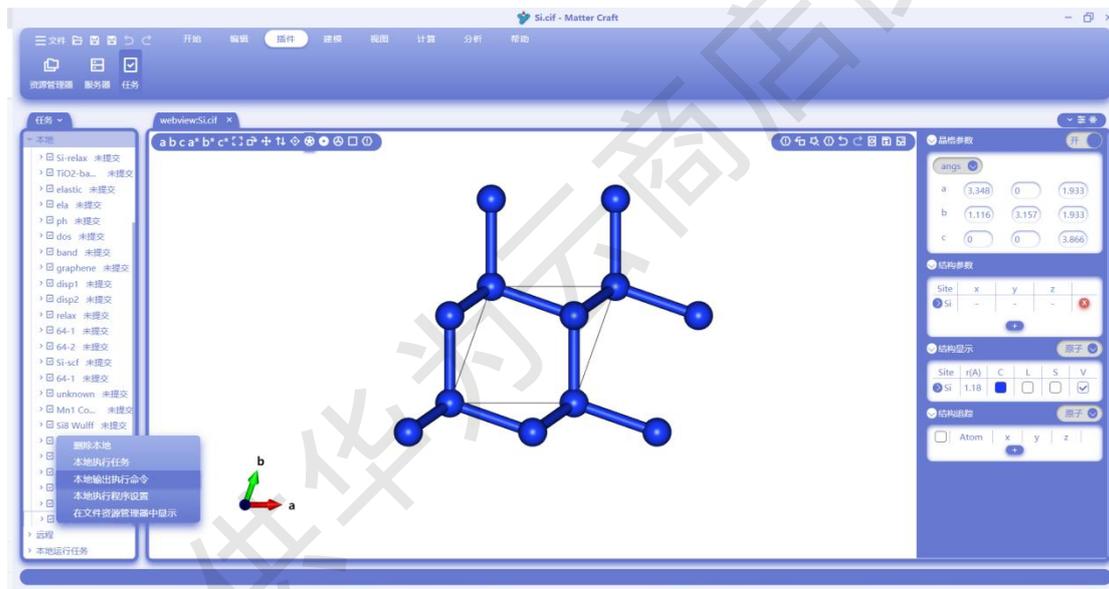
鼠标右键点击任务名，然后选择本地执行程序设置，然后设置 Hylanemos 的计算程序路径。



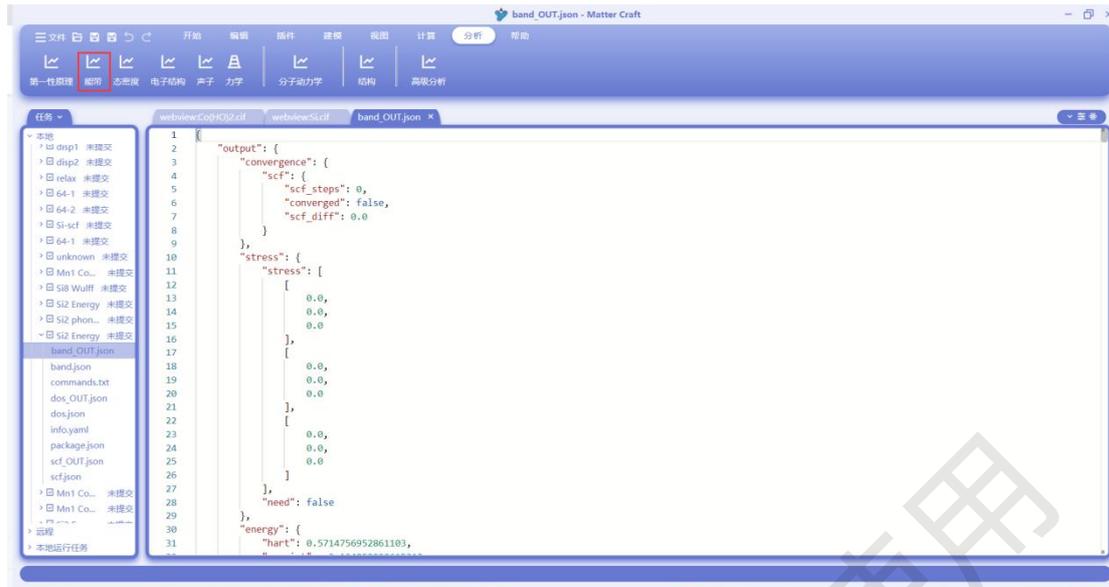
点击红框处的按钮，选择 Hylanemos 的执行程序（Hylanemos 文件夹中的 bin\Hylanemos.exe）的路径。然后点击确认，完成 Hylanemos 计算程序的设置。



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



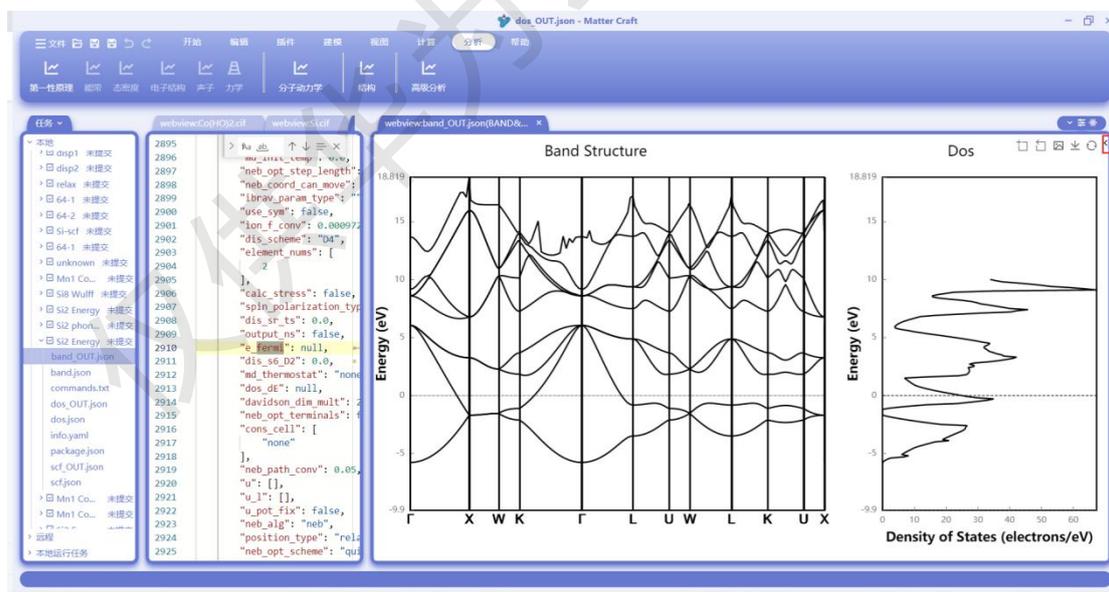
计算完成后，点击该计算任务中的输出文件。然后再点击“分析”-“第一性原理”，找到对应的需要分析的性质。



## 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。

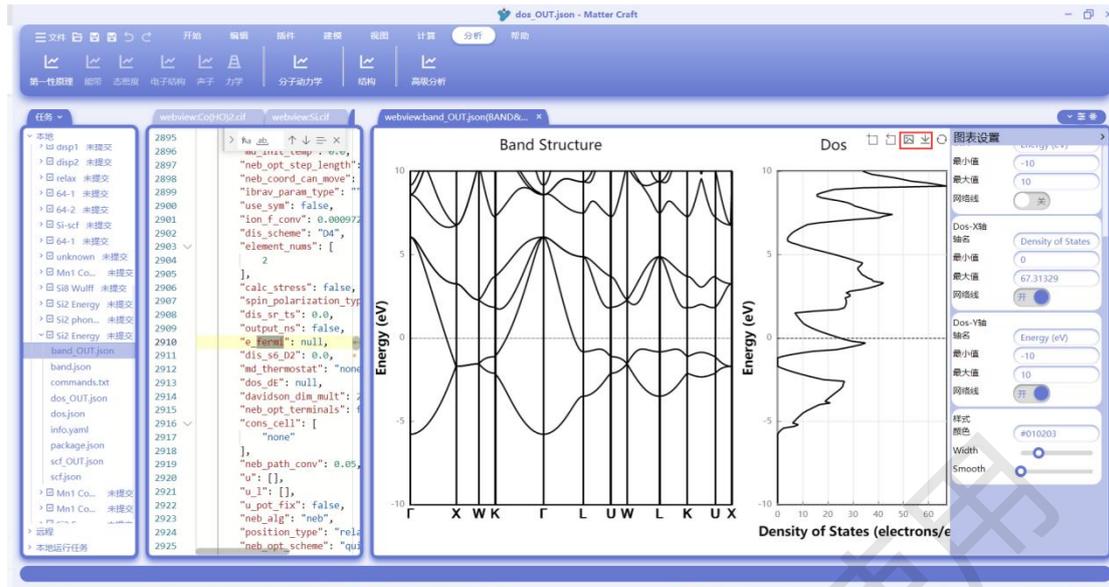
点击下图中右上角红框处的按钮，会弹出图像的设置页面



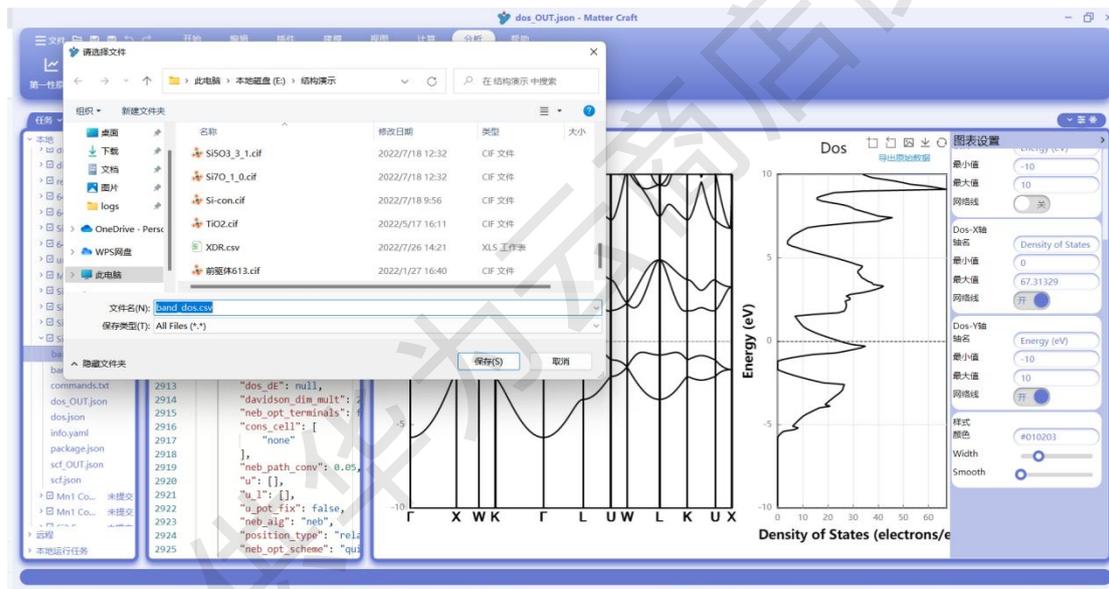
在图像设置页面中，可以调整图像的 X 轴和 Y 轴的范围和轴名称，可以打开网格线，也可以调整图中线条的粗细和光滑度。下图为将 Y 轴范围调整到 -10 到 10 之间，态密度图显示网格线的效果。

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



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。

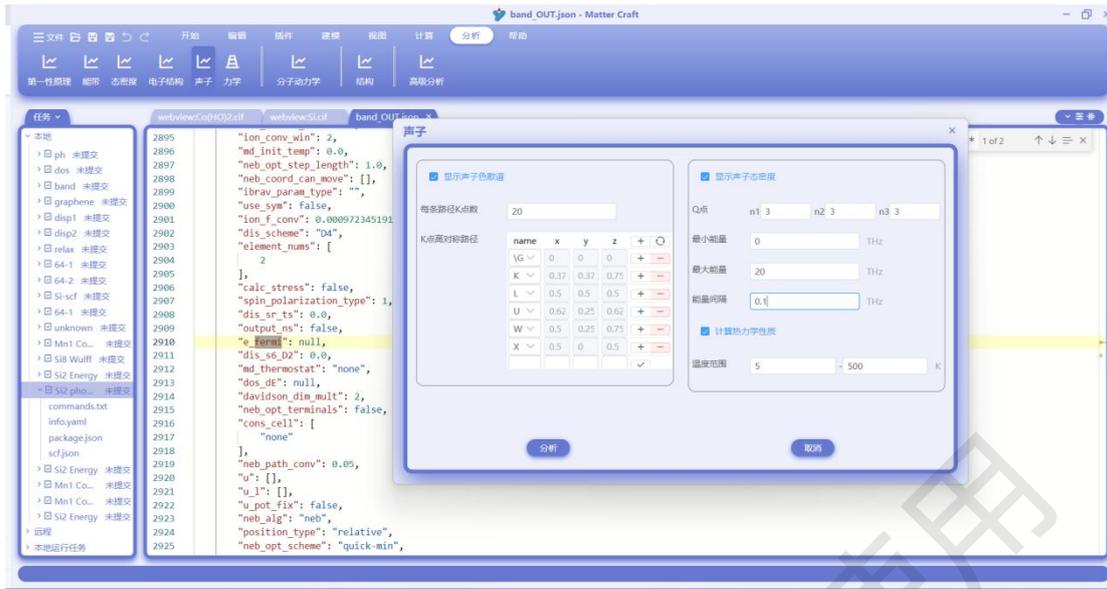


## 声子分析

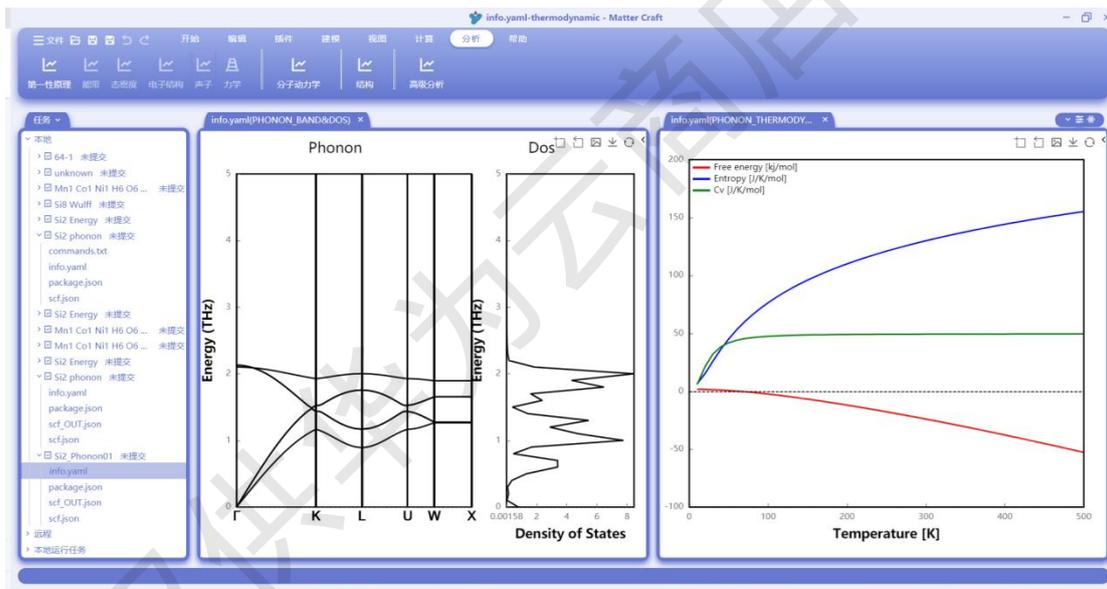
在分析处点击声子，会弹出声子的分析设置面板如下图所示。

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

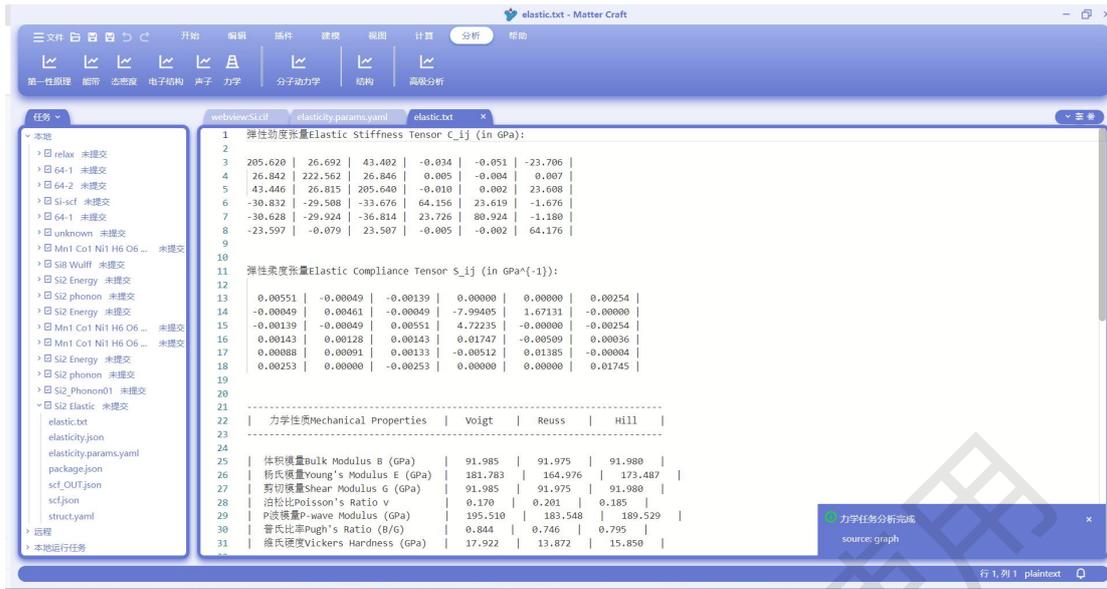


生成的声子色散谱和态密度在左图，热力学性质在右图。图片的导出数据、图片、调整 X、Y 轴的功能与能带态密度图的操作一样。



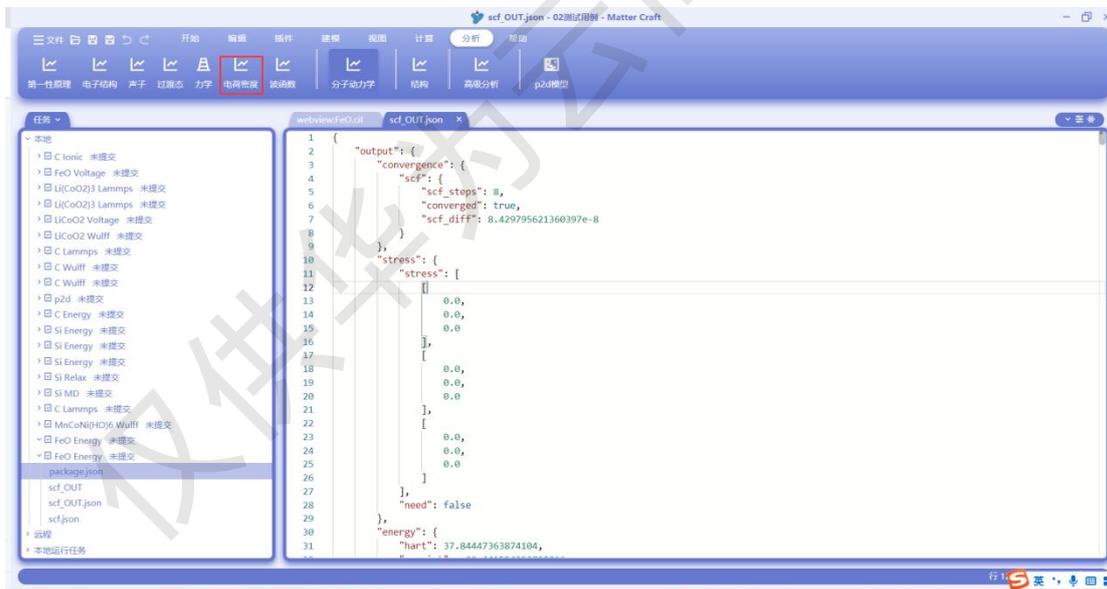
## 力学分析

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。

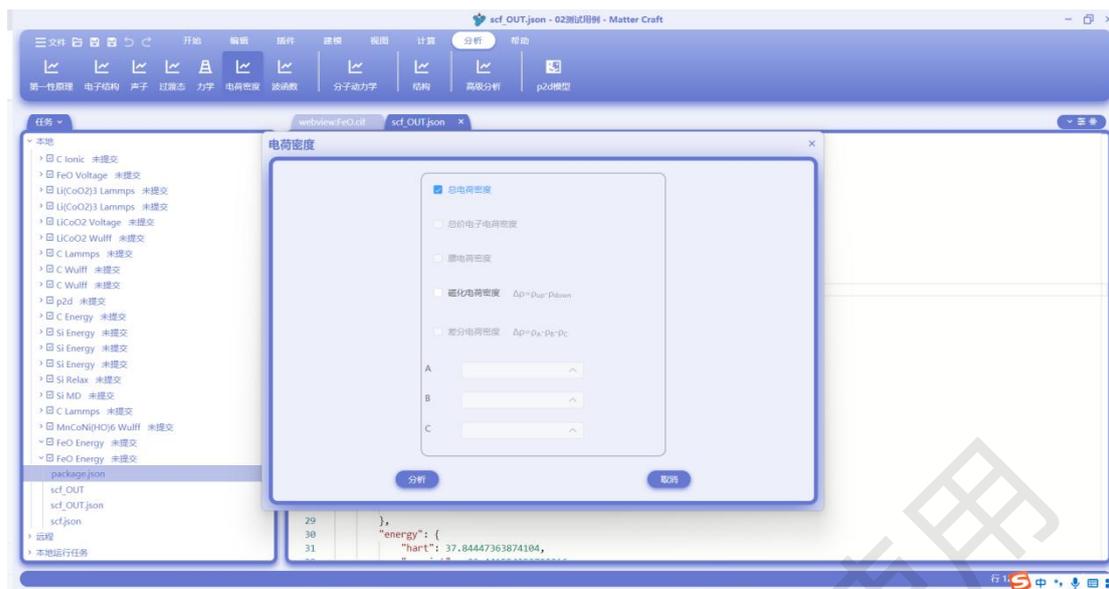


## 电荷密度与波函数分析

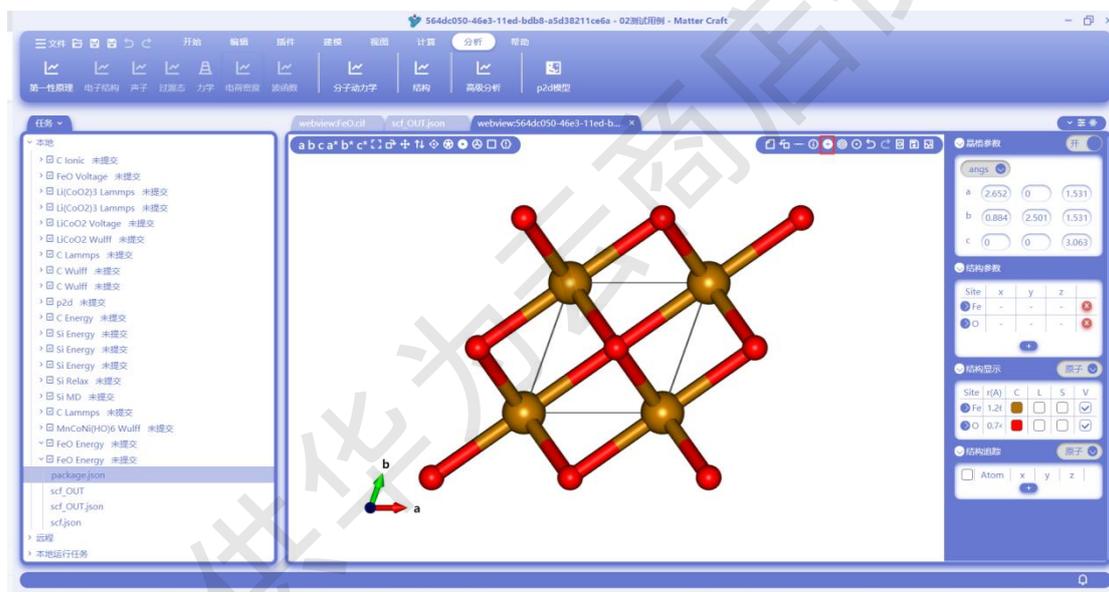
选择一个输出文件（例如 scf\_OUT.json），然后在分析处点击第一性原理-电荷密度，会弹出电荷密度的分析设置面板。



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。



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。

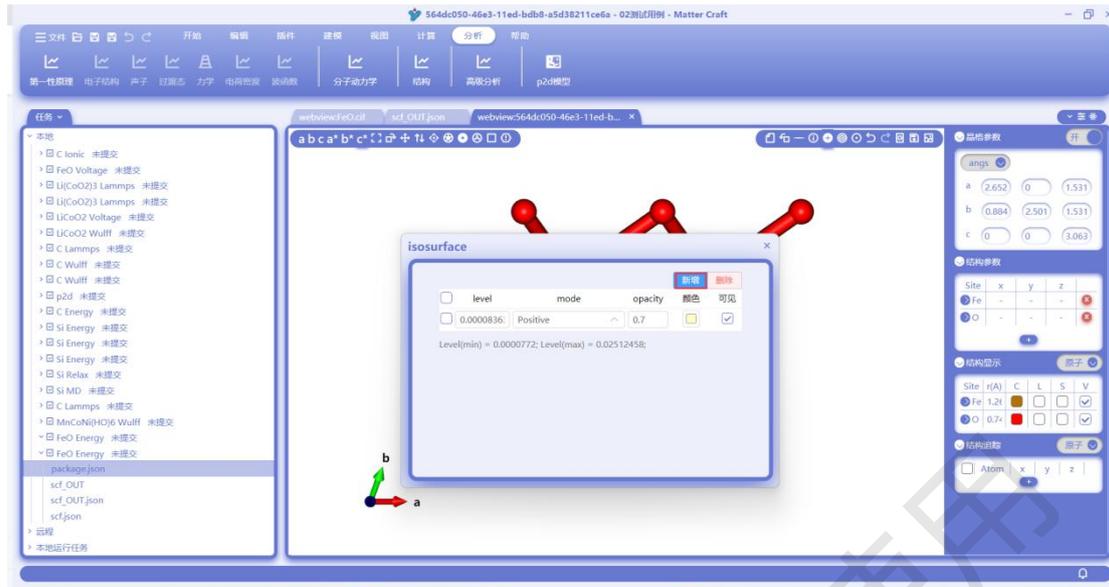
Level: 设置电荷等值面的值

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。

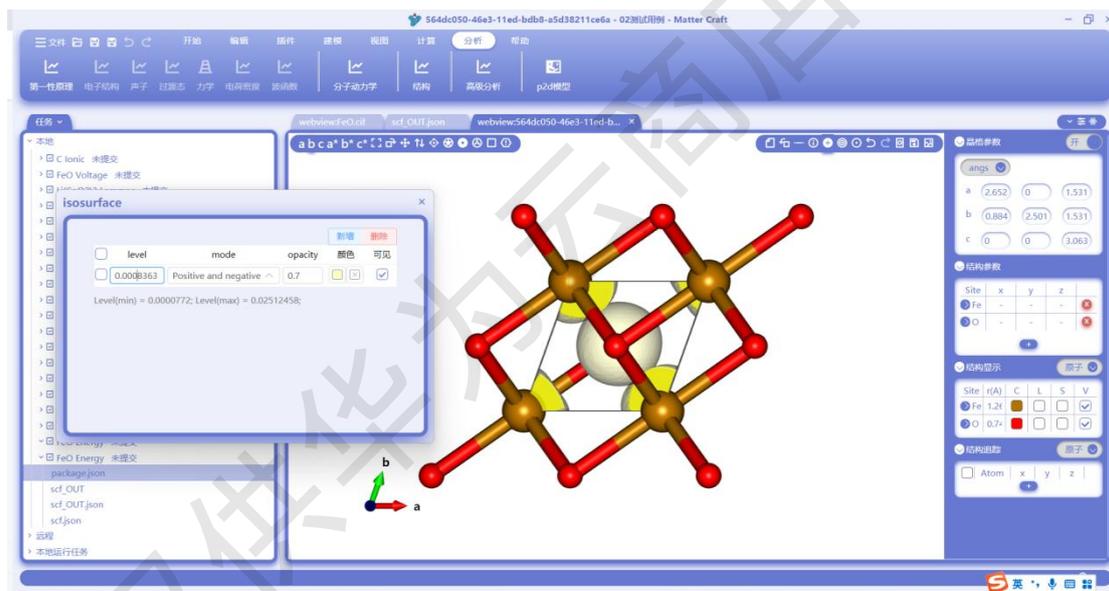
Opacity: 设置透明度

颜色: 选择颜色

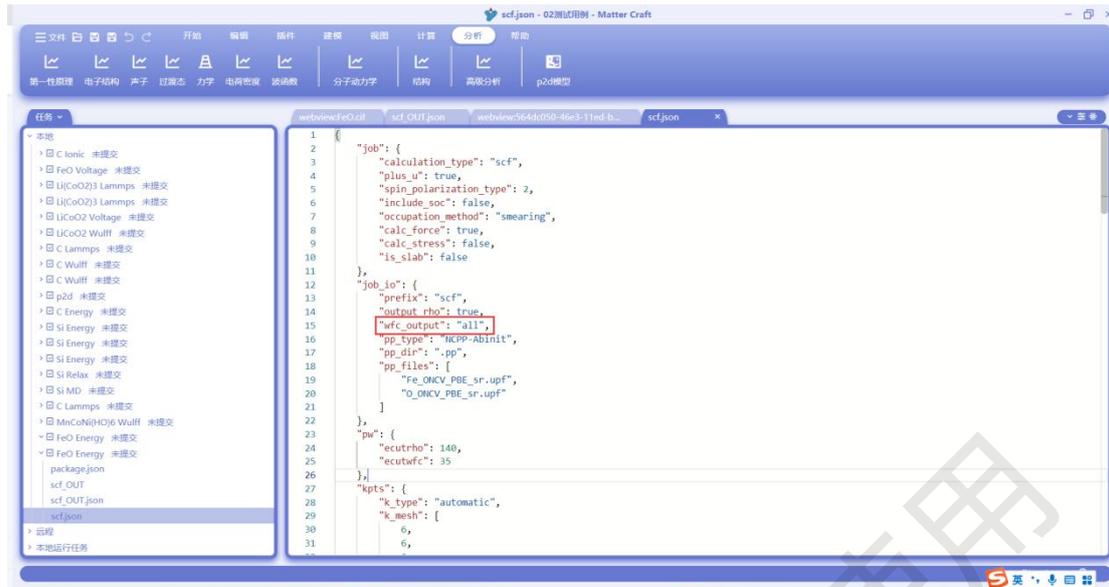
可见: 设置这个等值面是否可见



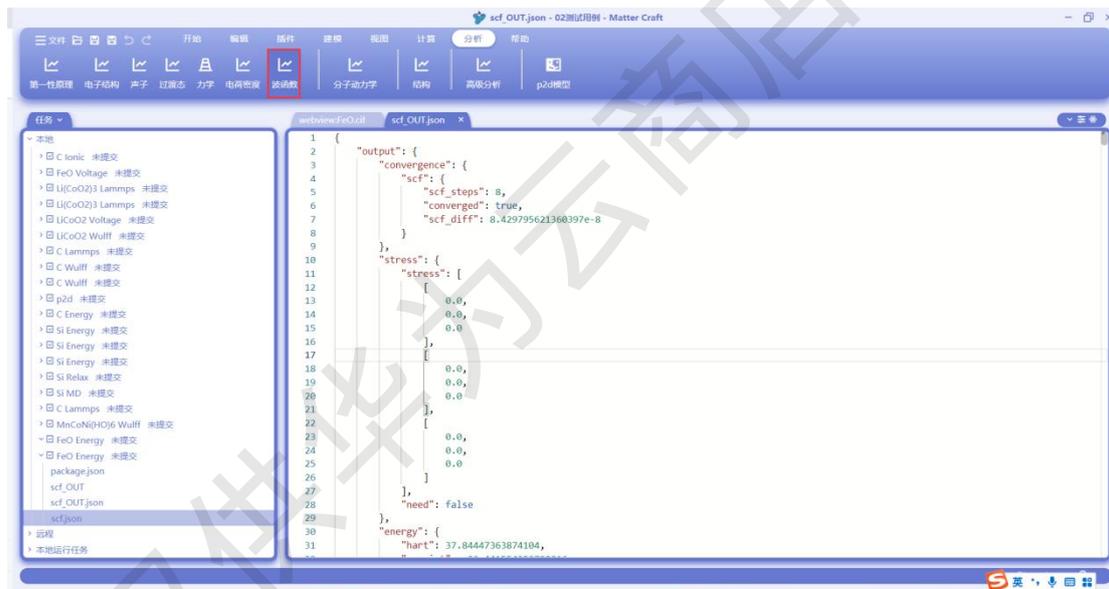
设置完成后按下回车键，就可以看到当前设置下的电荷密度在晶体中的分布情况。设置完成后关闭 isosurface 设置面板即可。



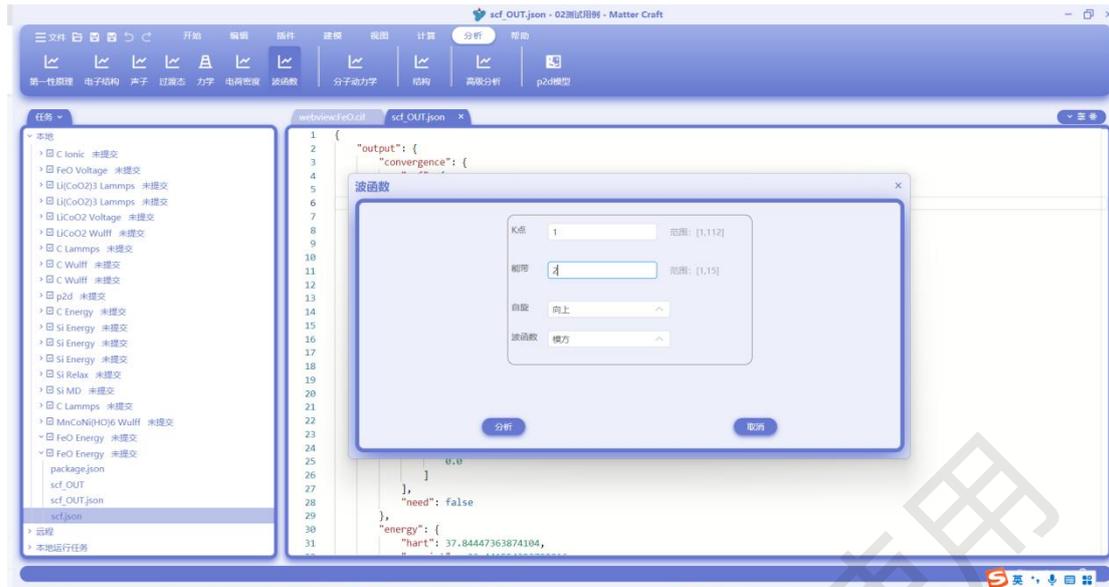
波函数分析需要在计算时增加额外的计算设置参数，在生成任务后提交任务计算前，需要用户在.json 的输入文件中的"job\_io"的模块中增加一行"wfc\_output" : "all"，如下图所示。然后再提交任务。



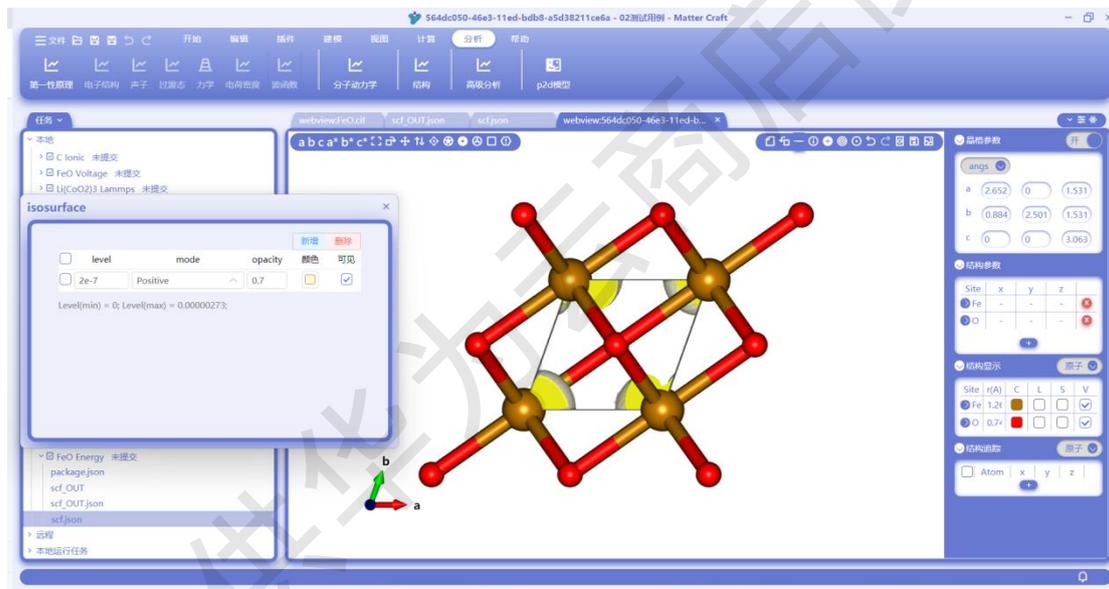
计算完成后选择一个输出文件（例如 scf\_OUT.json），然后在分析处点击第一性原理-波函数，会弹出波函数的分析设置面板



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。

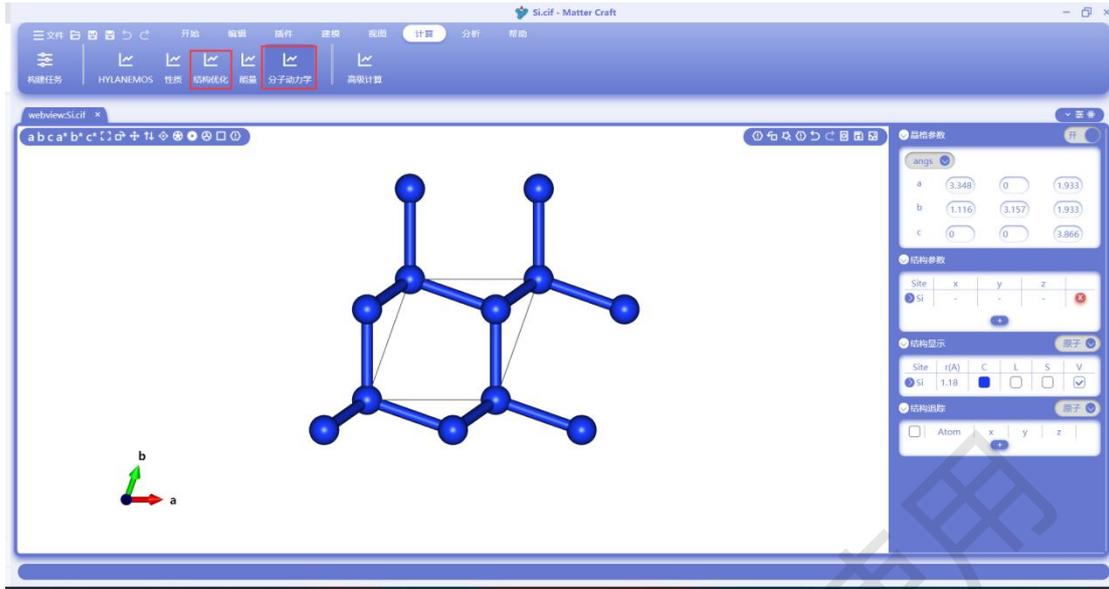


软件会弹出一个新的晶体结构，这时和电荷密度分析一样添加 isosurface 即可。

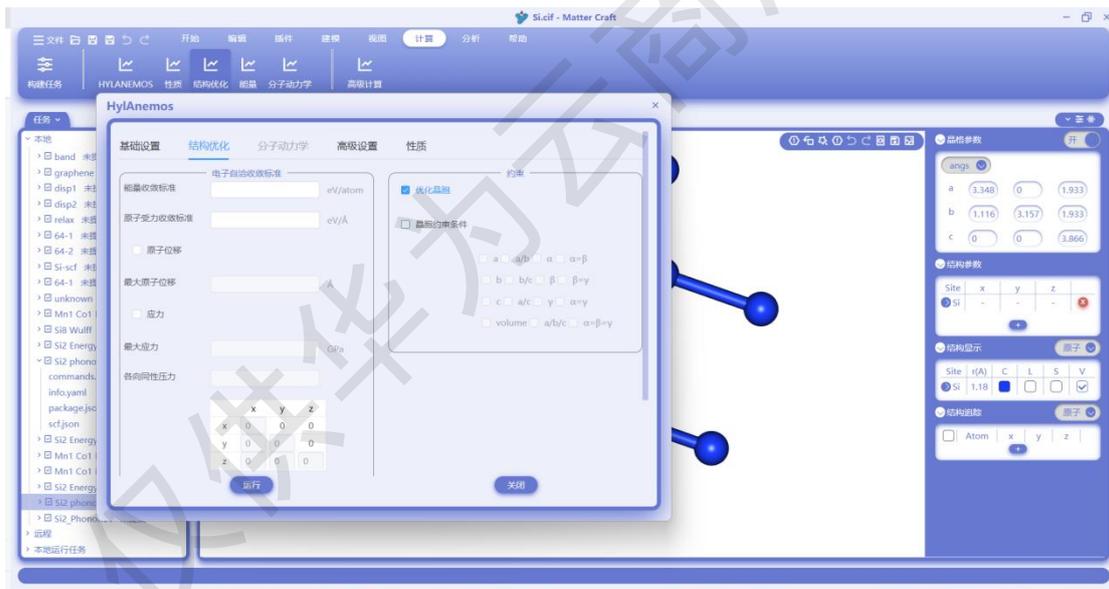


## 结构优化与分子动力学计算

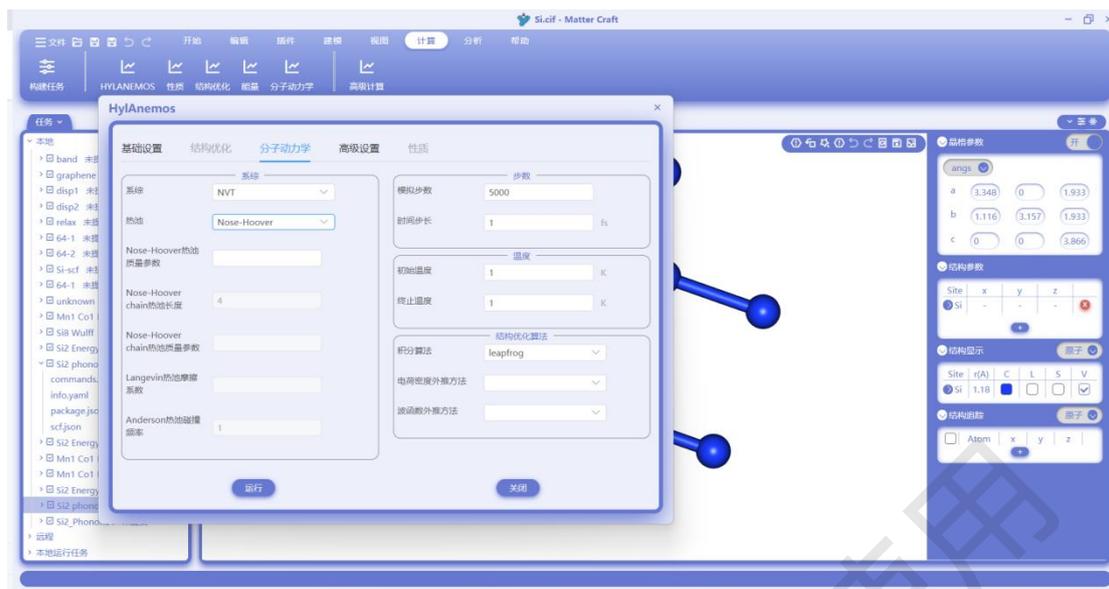
如下图红框处所示，点击“计算”-“HYLANEMOS”-“结构优化”和“分子动力学”分别进行结构优化和分子动力学的计算设置。



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。



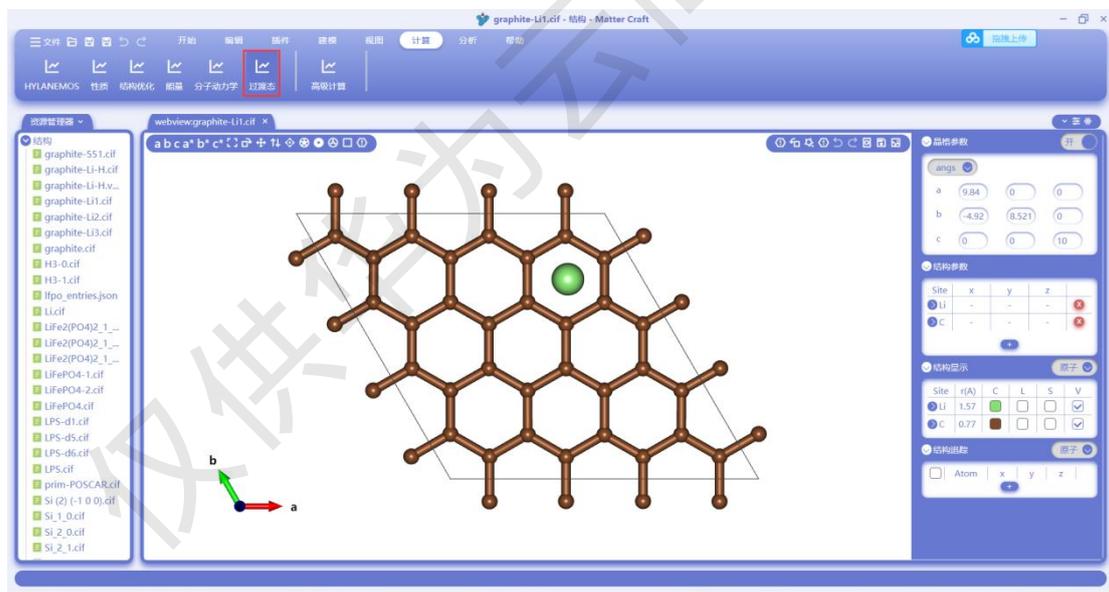
对于分子动力学任务，面板中的分子动力学页签可以进行分子动力学相关的参数设置。  
 选择不同的系综和热池，下方可以设置的参数不同。例如 NVT 系综和 Nose-Hoover 热池，下方可设置的参数为 Nose-Hoover 热池质量。



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。

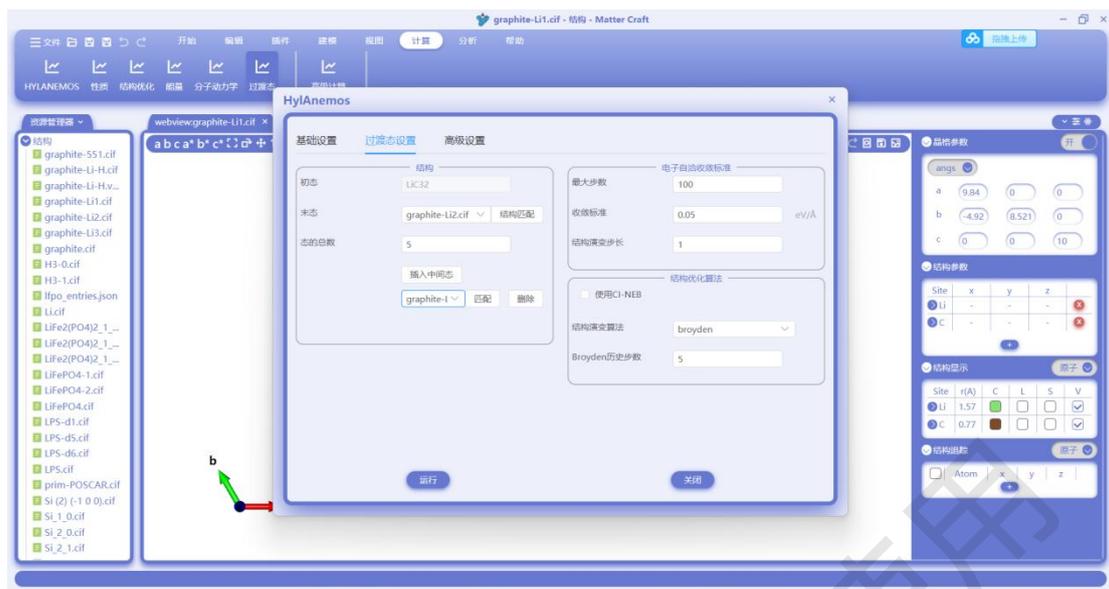


弹出的设置面板与能量计算时的类似，相同的部分这里不再重复说明。

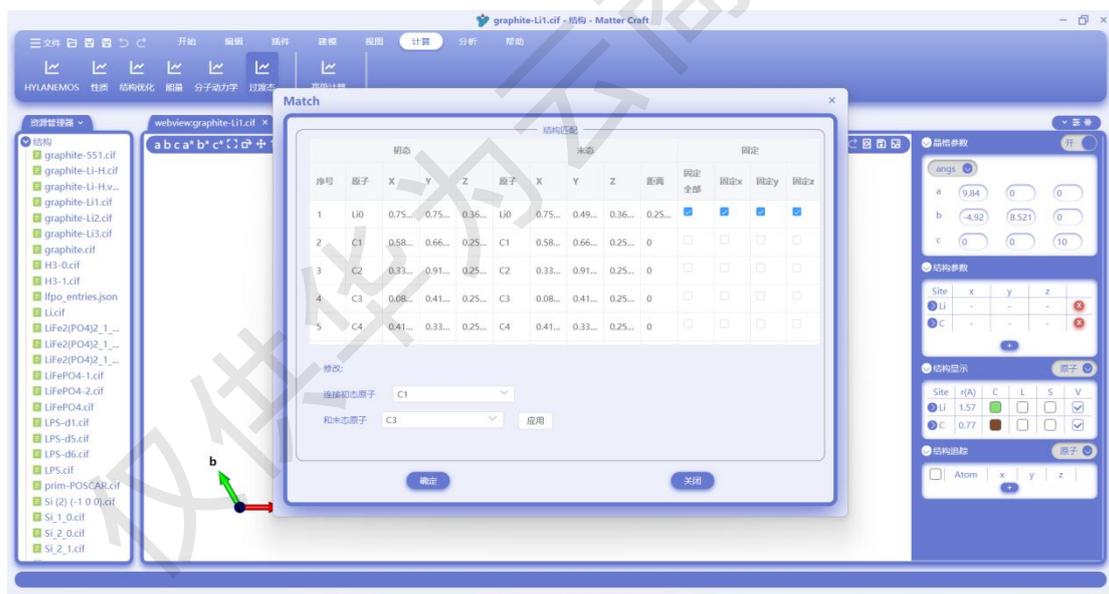
对于过渡态，面板中的过渡态设置页签可以进行过渡态相关的参数设置。

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。

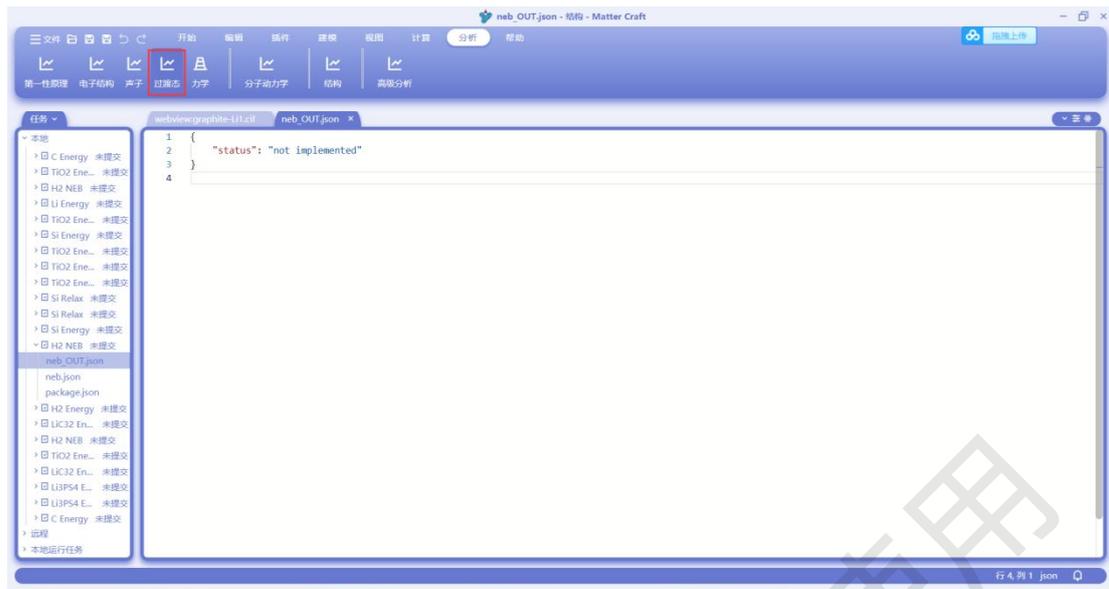
初态的结构为当前激活的结构，用户需要在末态处选择末态的结构，如果还需要插入中间态，则点击“插入中间态”即可。选择好末态和中间态的结构后，点击结构匹配。



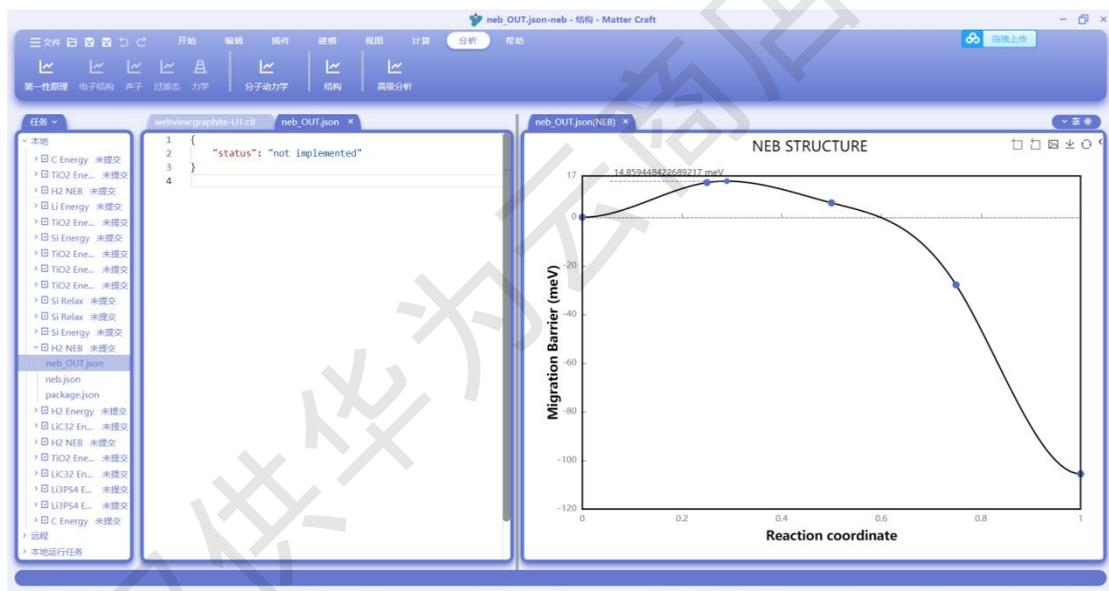
进入结构匹配的设置面板, 软件会自动进行初末态的原子匹配, 每一行为初态和末态对应的原子, 它们分别的坐标, 它们之间的距离和是否在过渡态计算中需要固定这个原子。用户也可以通过下方的修改部分, 自行调整初末态的对应原子。在下方选择初态和末态需要对应的原子, 点击应用, 即可完成调整。调整完成后可以查看距离是否符合要求。设置完成后, 点击确定, 即可完成结构匹配的设置。



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。

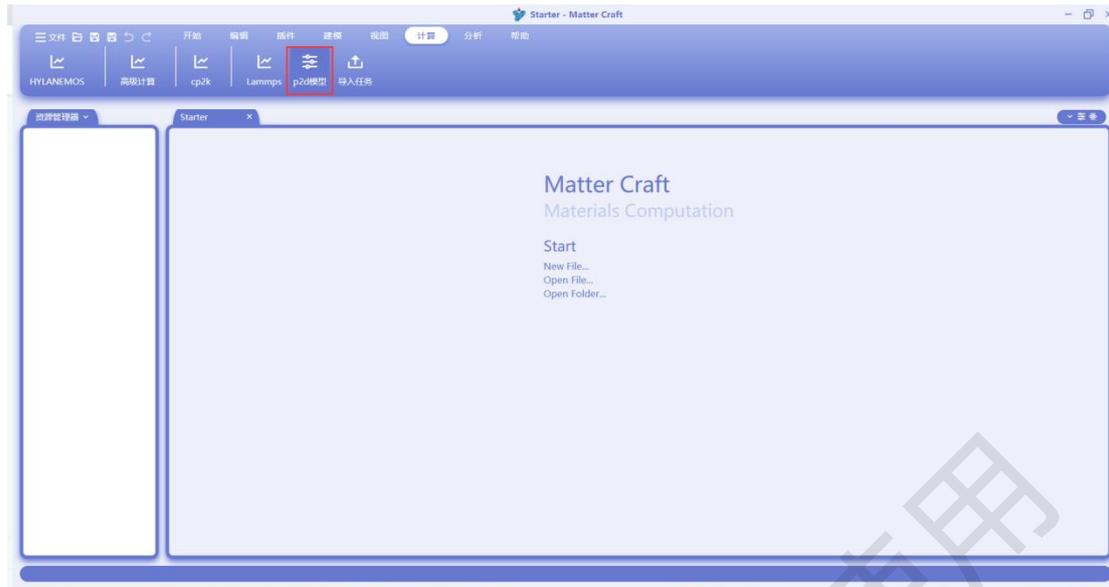


整个反应过程的能垒图会显示。其中横坐标为反应坐标，纵坐标为迁移能垒。能垒大小也显示在此处。右上角可以导出图片和数据，与其他类似，不再重复介绍。

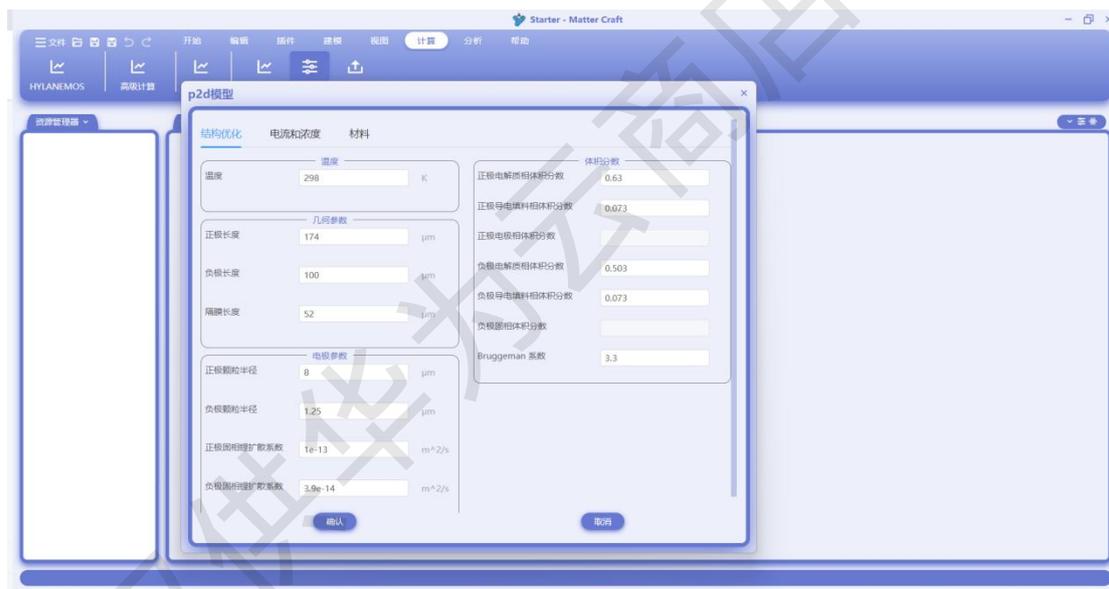


## P2D 计算

如下图红框处所示，点击“计算”-“p2d”进行 p2d 模型的计算设置



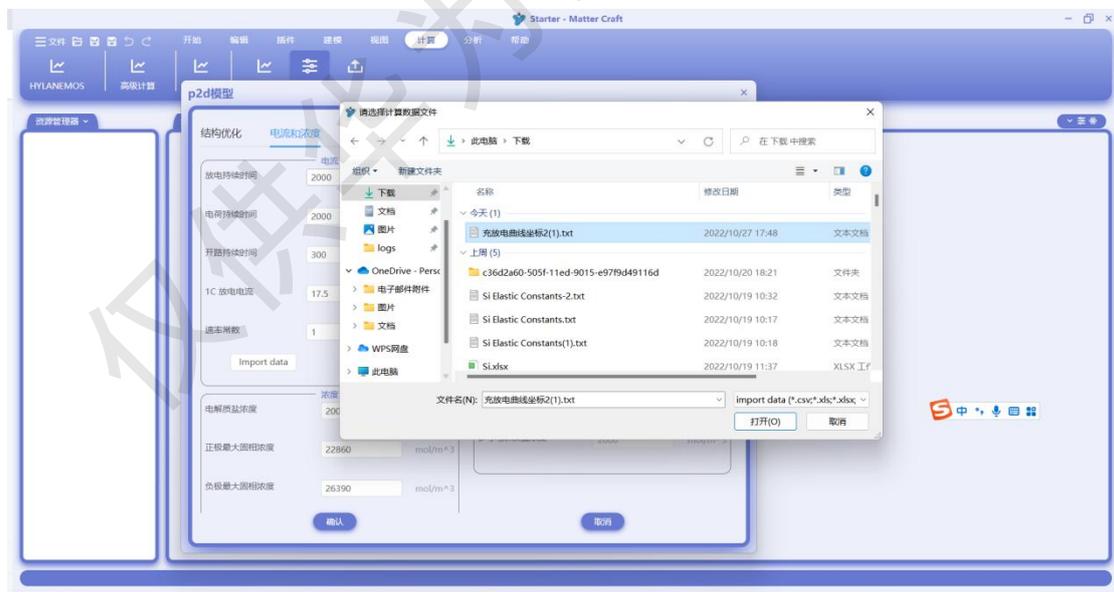
弹出的计算设置面板如下图所示，分为结构、电流和浓度、材料 3 个页签。进入后面板中已经给出了部分参数的默认设置。用户需要根据自己的需求进行参数的修改。



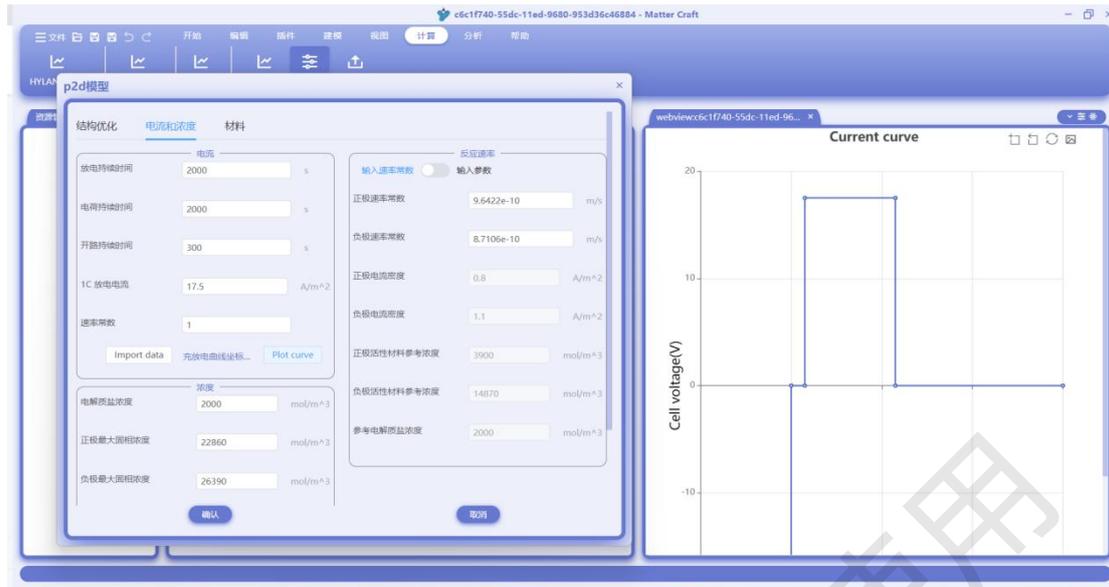
电流和浓度设置页面，其中电流信息可以通过面板的参数进行设定，也可以通过“Import data”按钮导入数据。



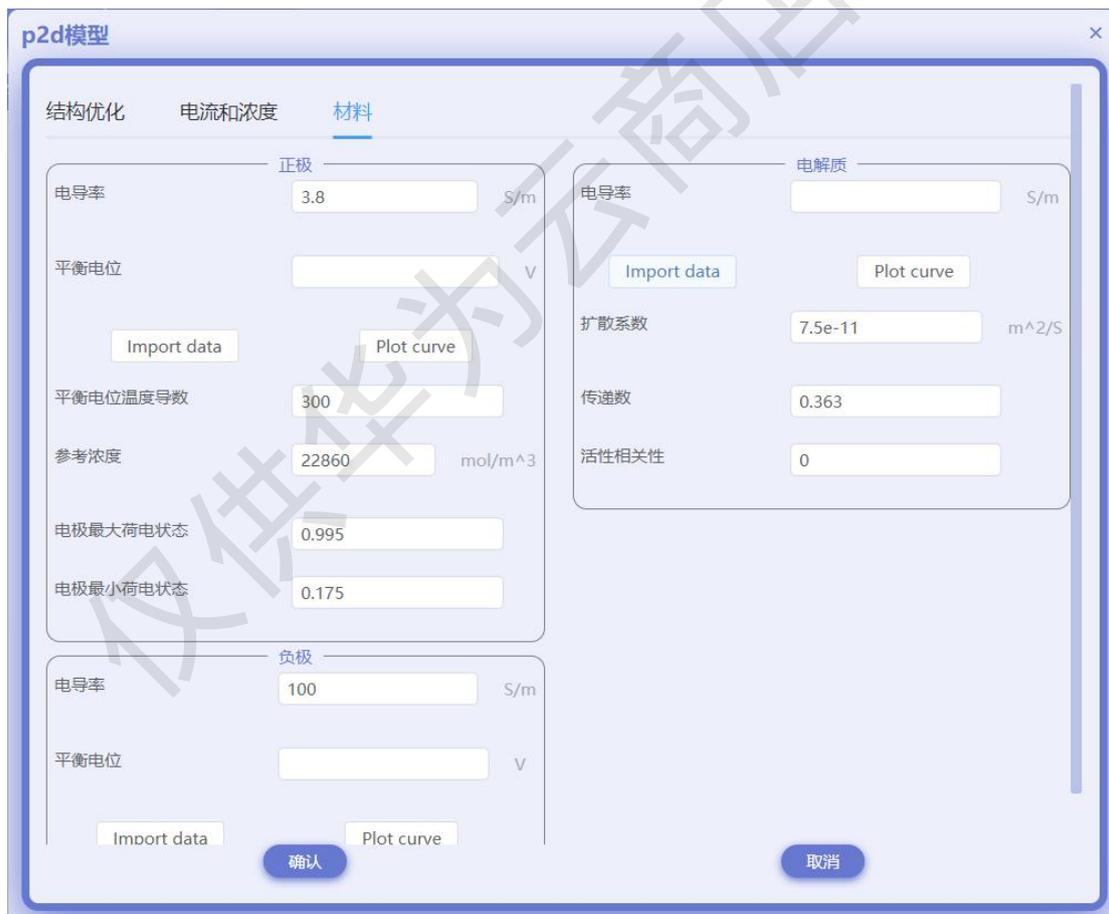
可以导入的数据文件类型有 txt 和 csv，导入页面如下图所示，选择需要导入的数据文件即可。



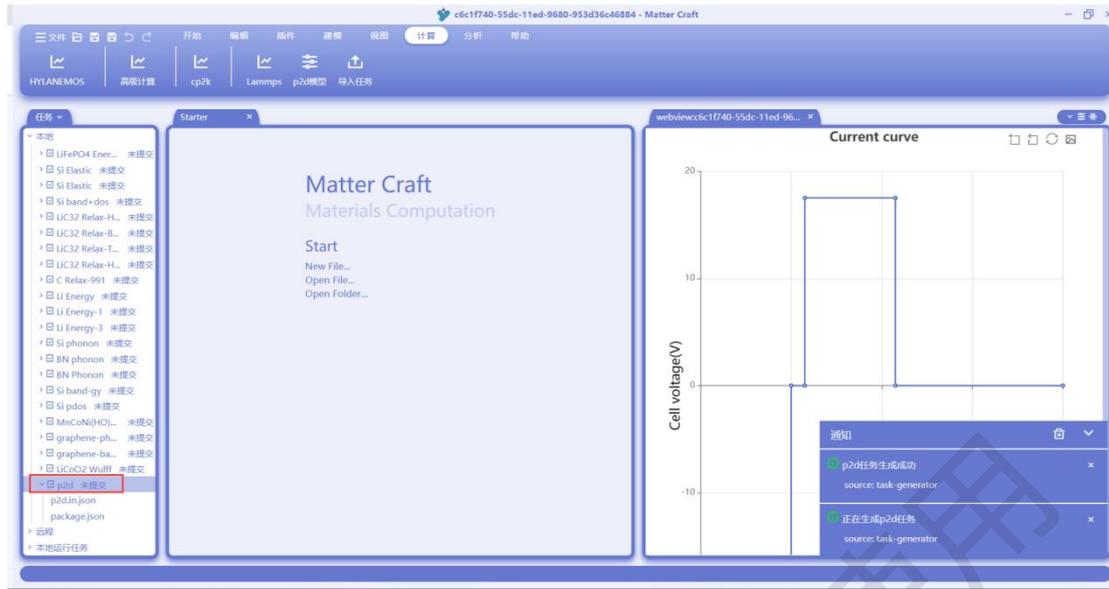
导入完成后，点击“Plot curve”，可以画出电流曲线图



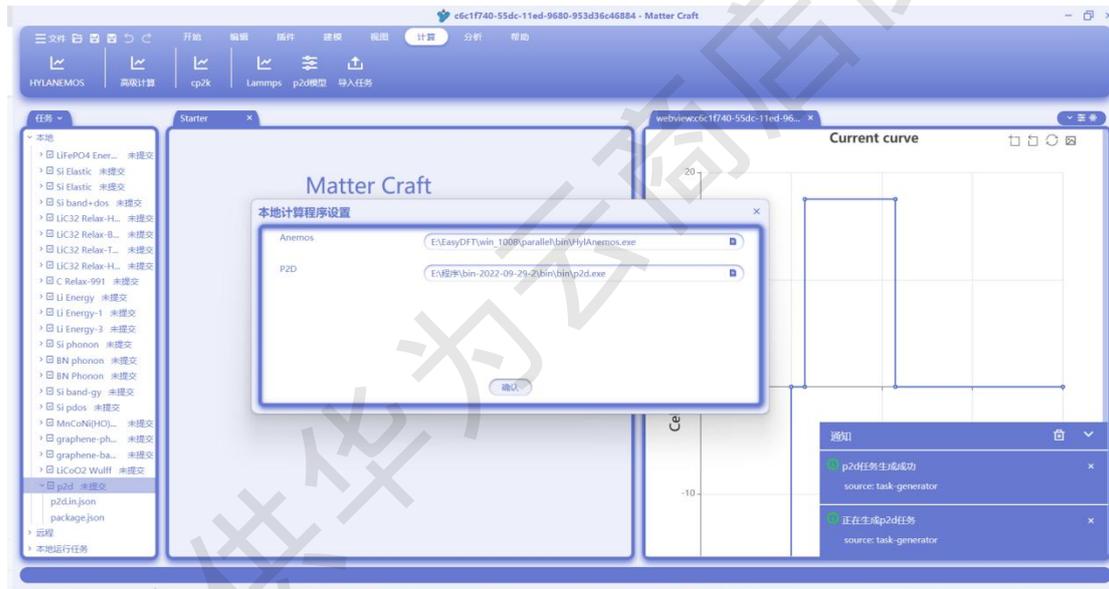
材料设置页面，其中正极平衡电位、负极平衡电位、电解质电导率可以通过面板的参数进行设定，也可以通过“Import data”按钮导入数据，导入方式和电流类似。



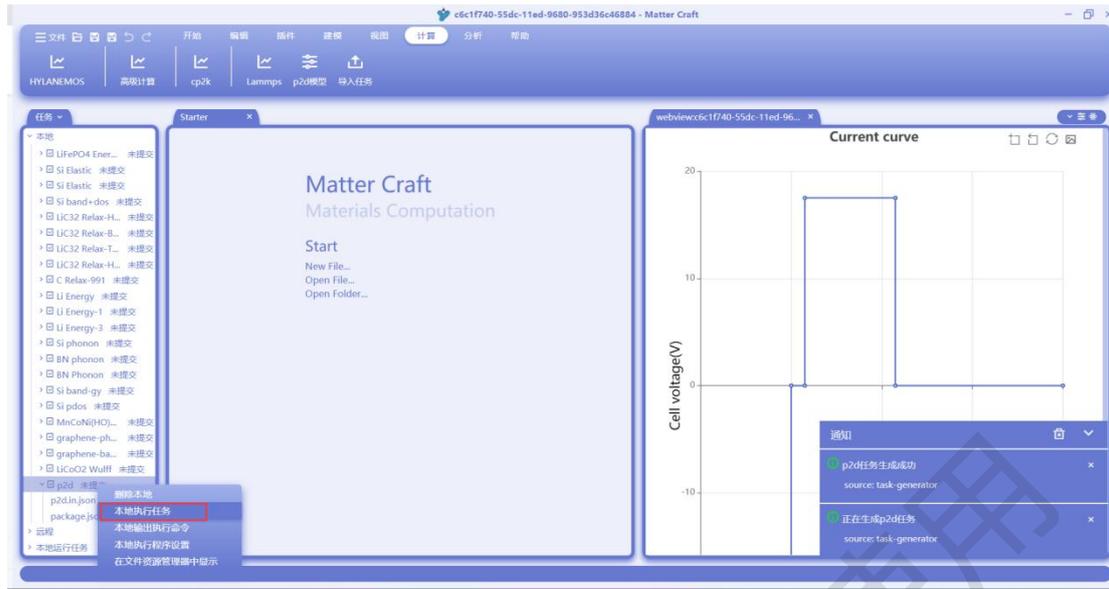
全部参数设置完成后点击“确认”，会在任务处生成 p2d 的计算任务



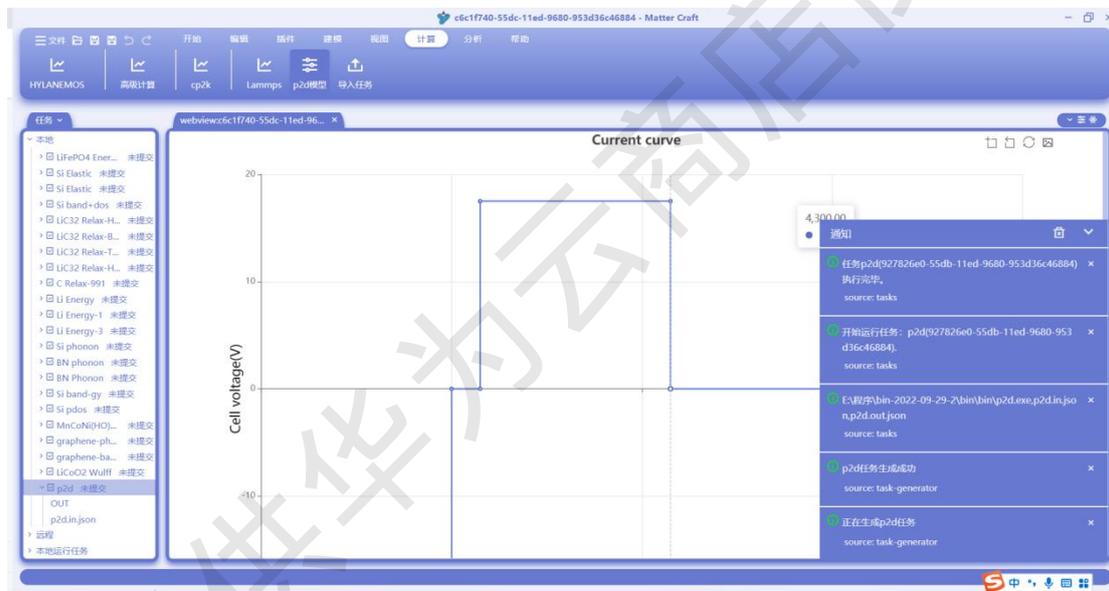
这里和 Hylanemos 计算类似，需要设置 p2d 计算程序的位置。



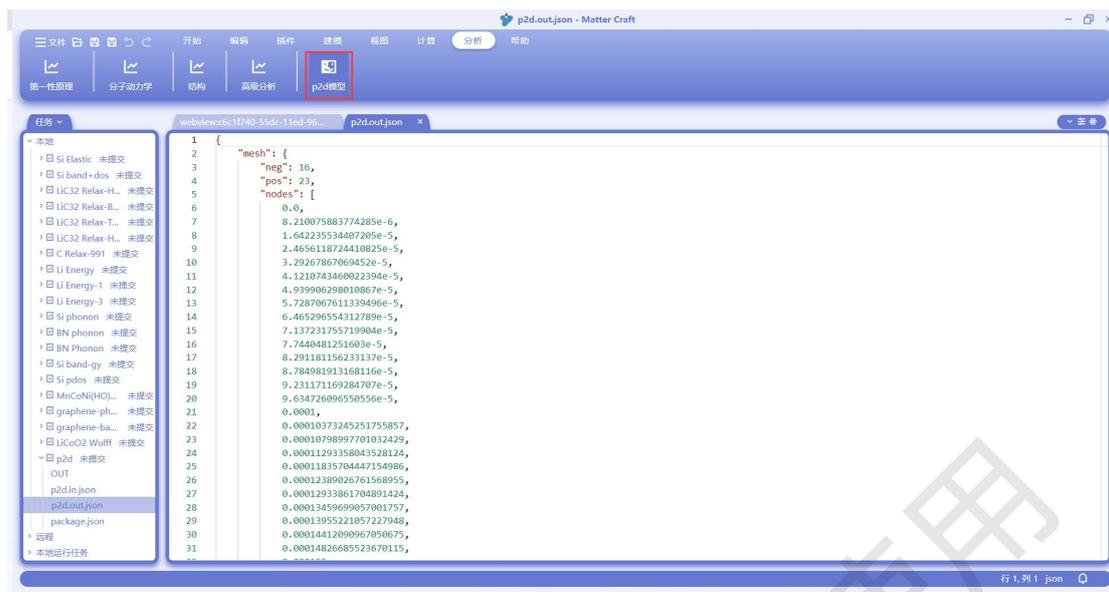
计算设置完成后，右键点击后，选择本地执行任务



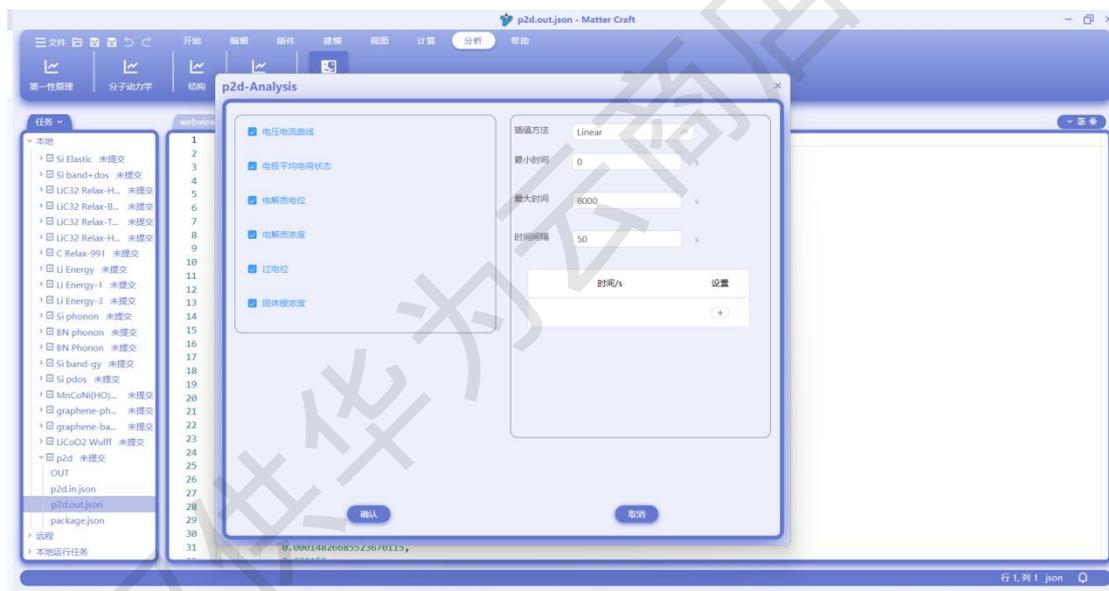
任务正常计算完成后，会在右下角弹出提示框。



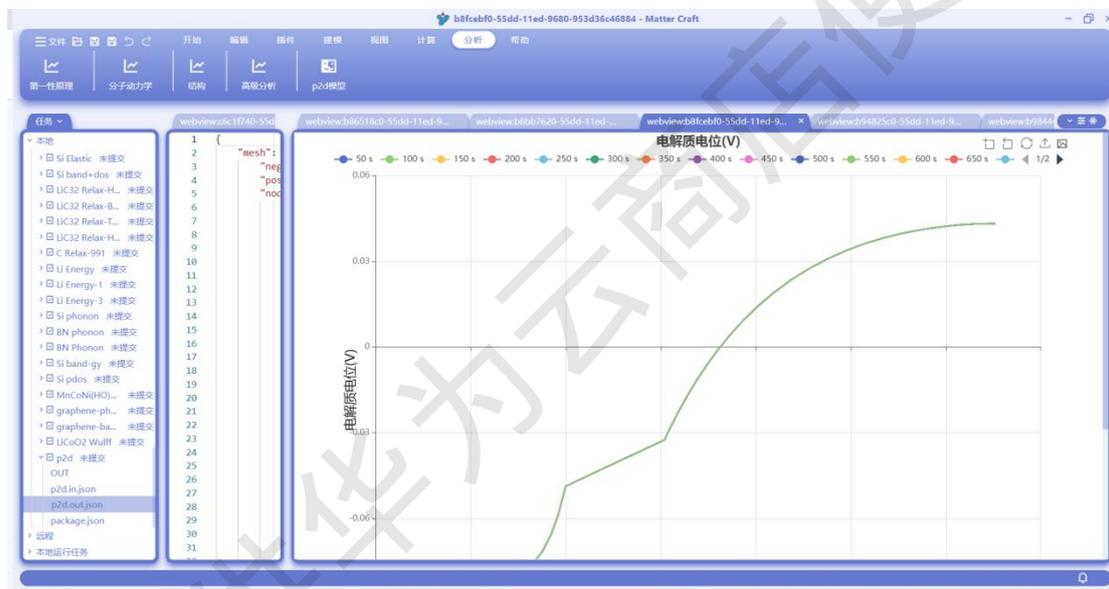
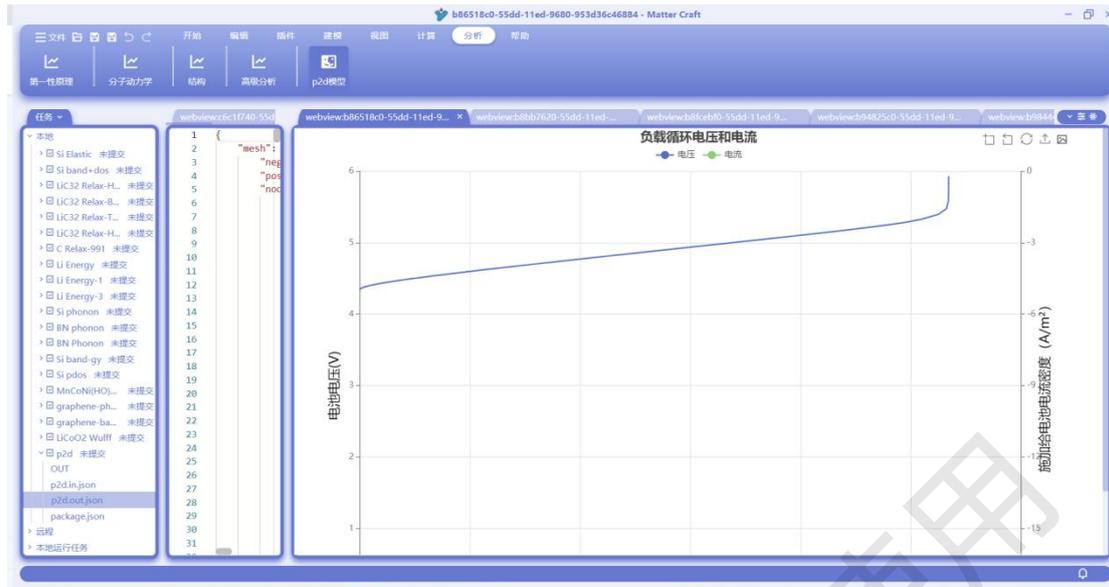
计算完成后，点开 p2d.out.json 文件，然后点击“分析”-“p2d 模型”



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。



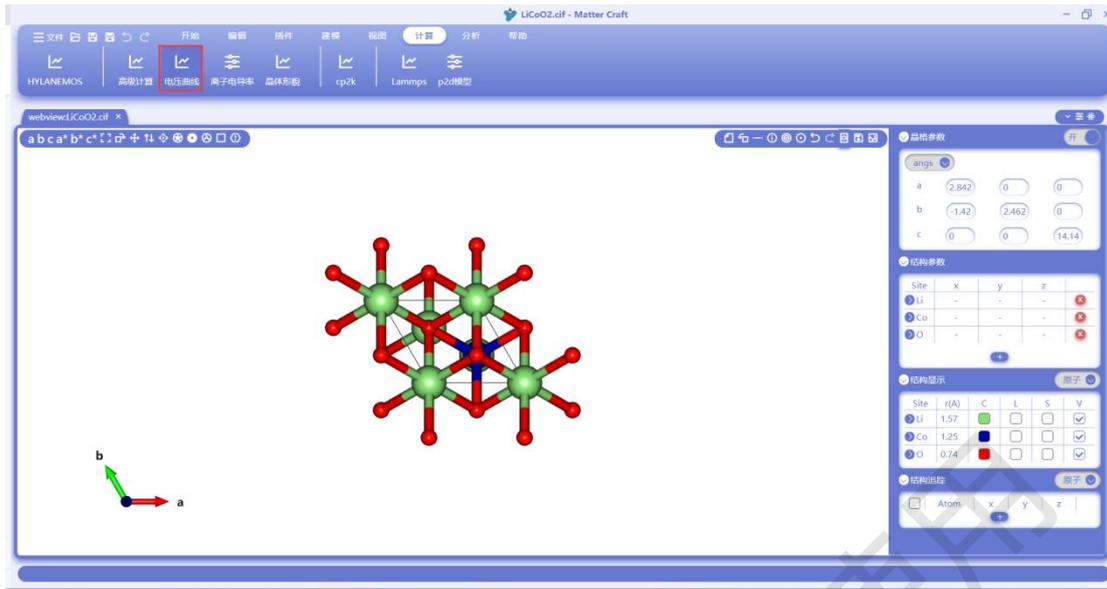
分析结果如下图所示，所有分析结果都显示在右侧的界面中，可以通过选择不同的页签来查看不同的分析结果。



## 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

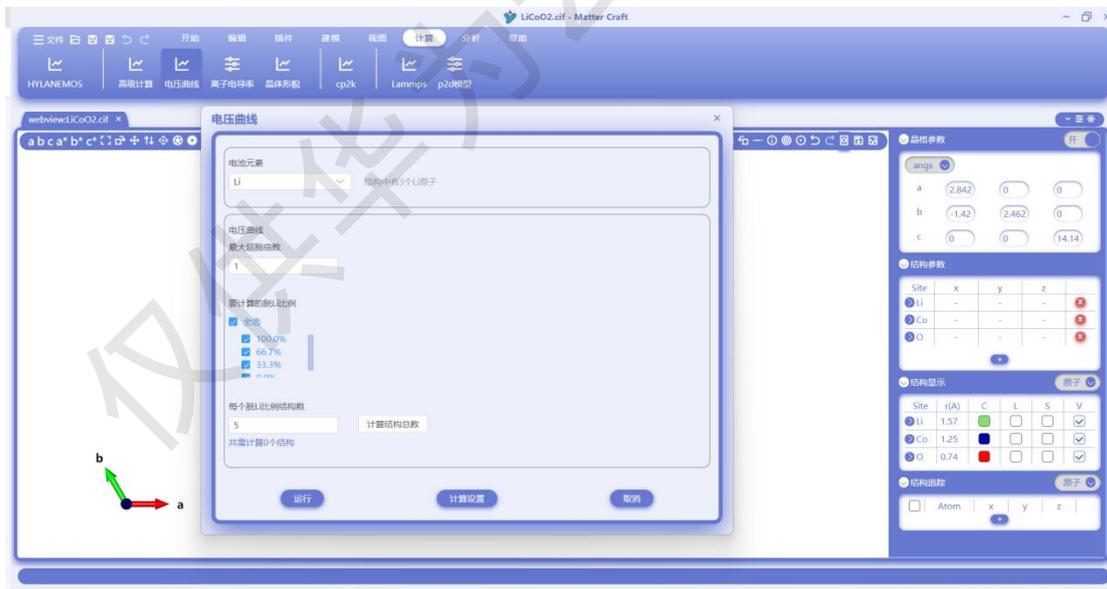


电压曲线的设置页面如下图所示。这个页面主要用于设置电压曲线计算的工作元素和 SOC。

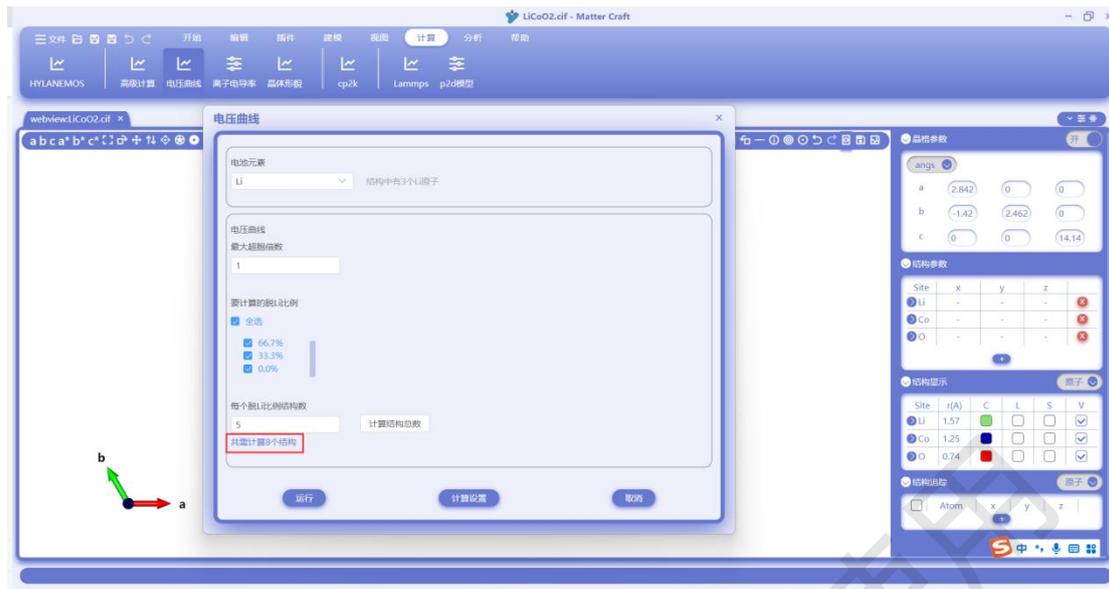
电池元素：用于设置切电池的工作元素。LiCoO2 正极中的工作元素是 Li。

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。



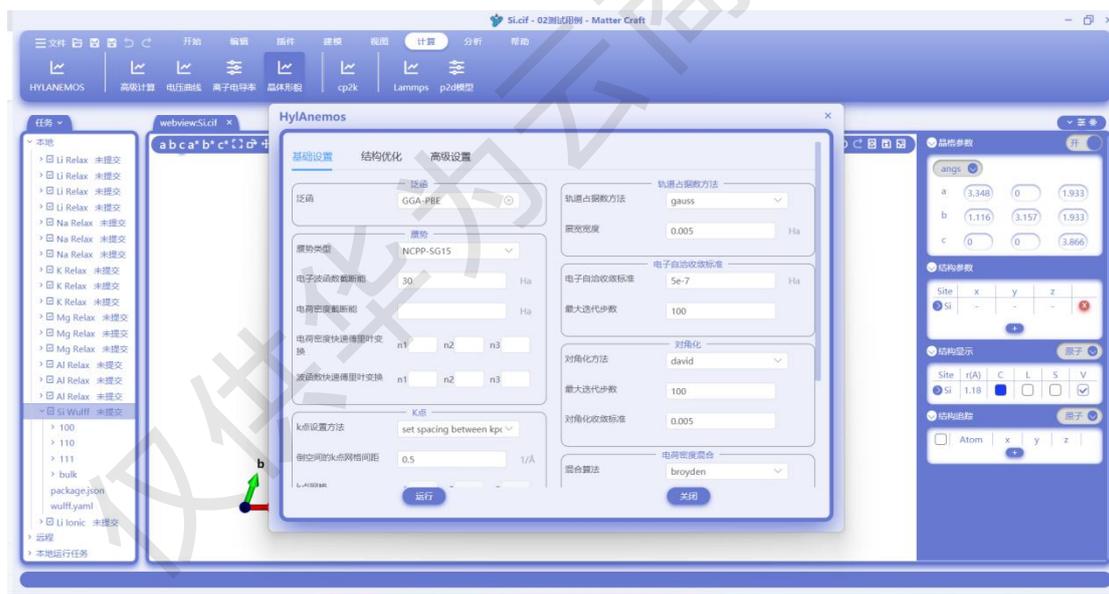
本次计算共需要计算 8 个结构。



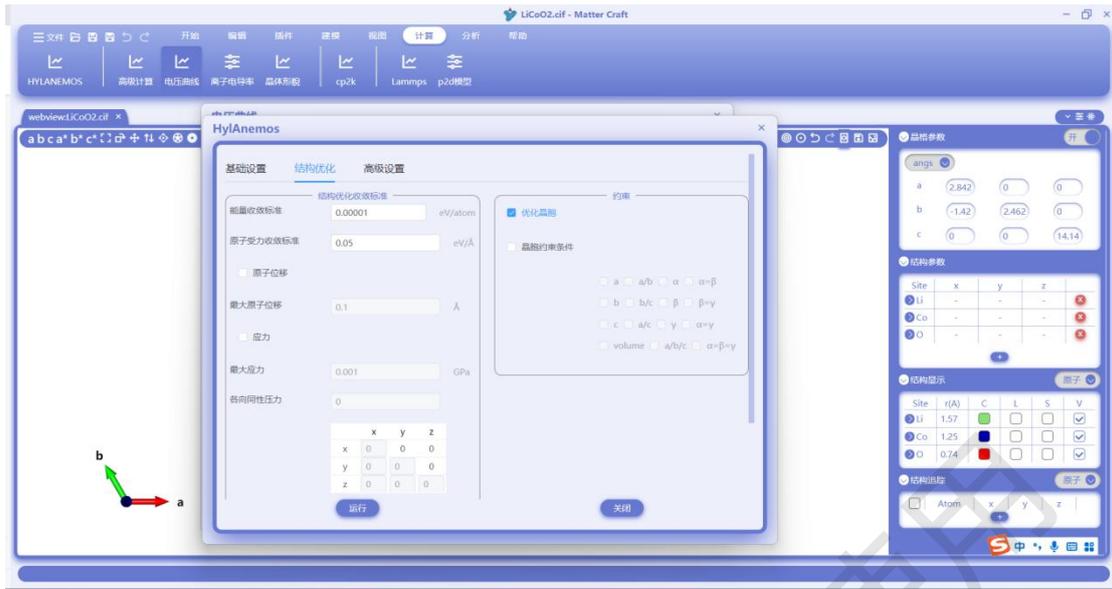
设置完成后点击“计算设置”，进入第一性原理计算的参数设置页面。

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。

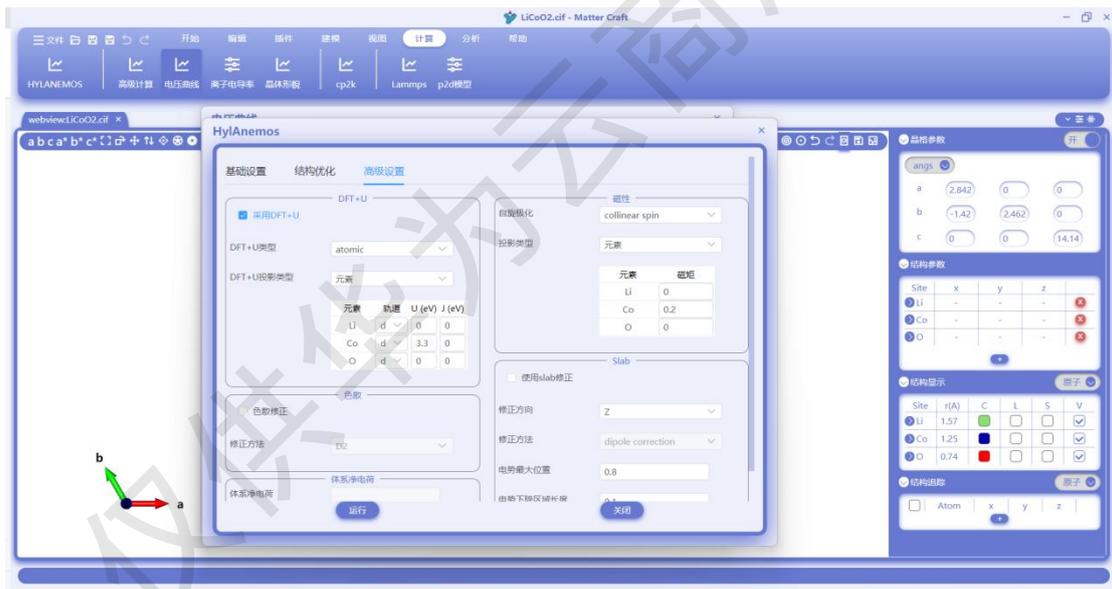
基础设置页面，使用默认参数即可。



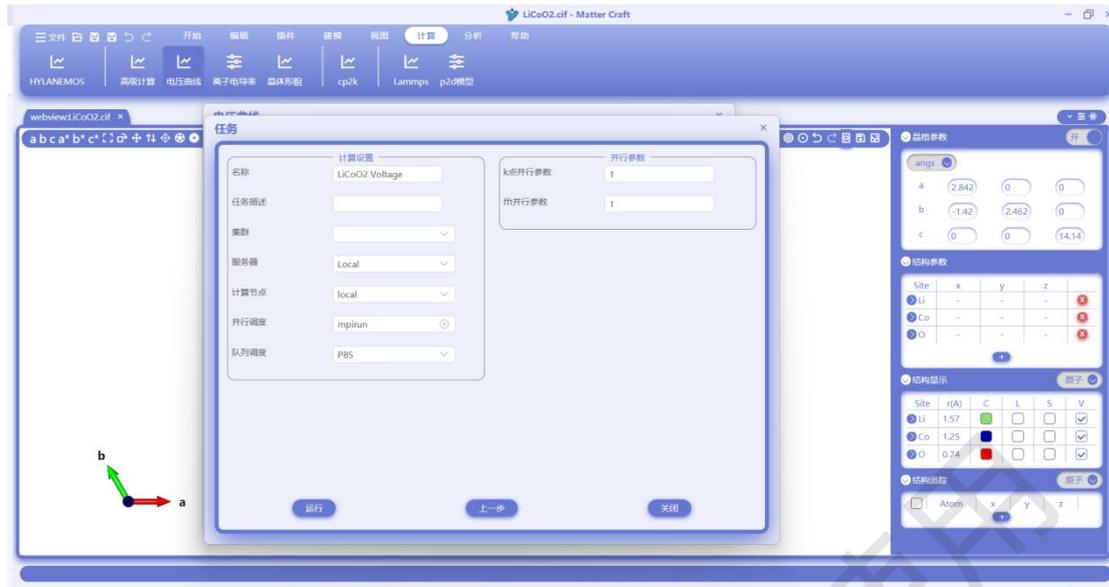
结构优化设置页面，使用默认参数即可。由于脱 Li 之后晶格的变化可能会比较大，建议勾选优化晶胞，在计算时优化晶格常数。



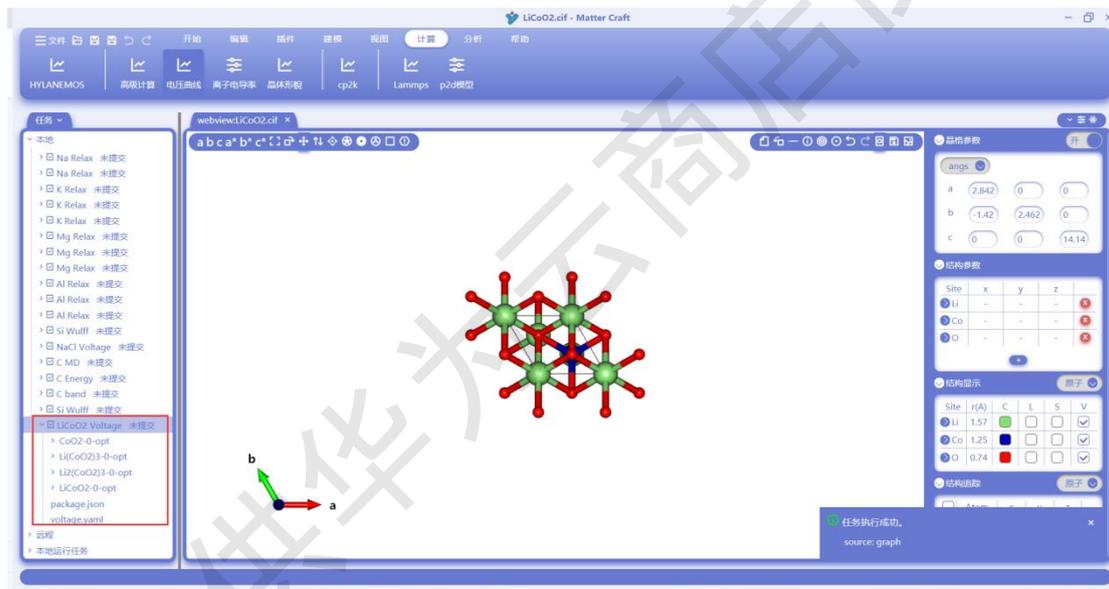
高级设置页面，对于具体的体系应该选择需要的修正。例如对含过渡金属的体系，使用 DFT+U；对有范德华作用力的体系，选择色散修正；对有自旋的体系，选择自旋极化计算。对于 LiCoO<sub>2</sub> 体系，含有过渡金属 Co，需要为其设置 DFT+U 和自旋极化。这里的设置如下图所示。



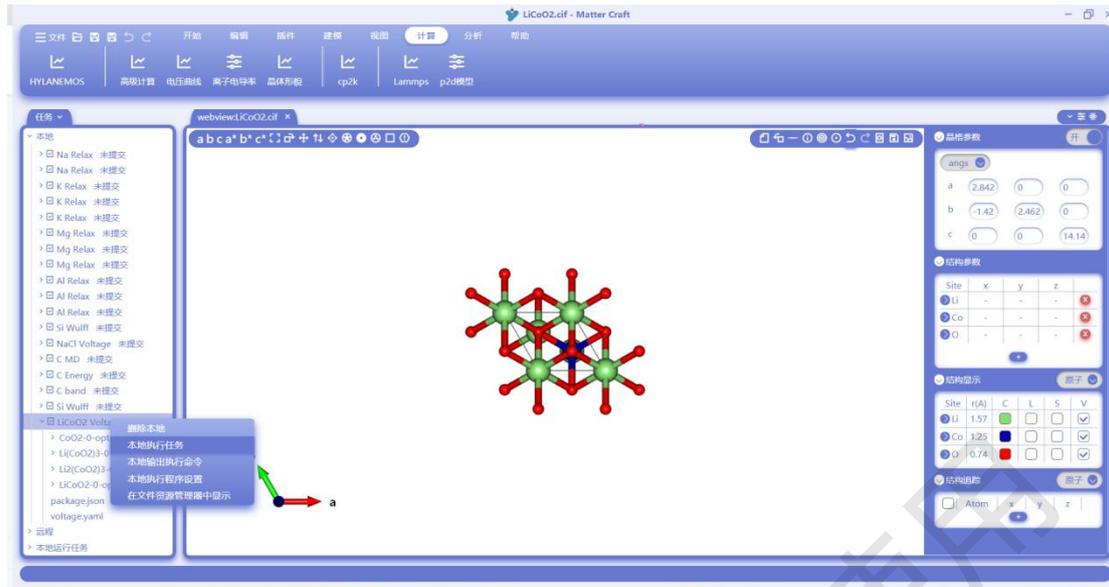
设置好 Hylanemos 的计算参数后，点击“运行”，进入如下界面。这里可以设置计算的任务名称、描述，使用的计算资源，并行参数等等。设置完成后点击“运行”。



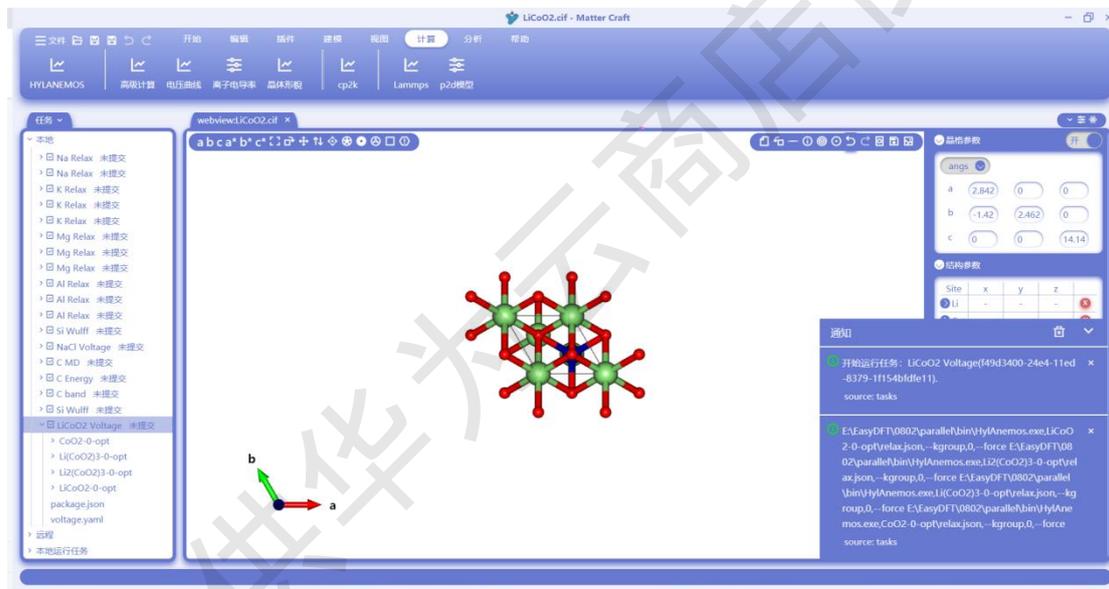
这时任务栏会出现 LiCoO2 Voltage 的任务，里面包含了生成的不同脱 Li 比例的结构和计算任务。



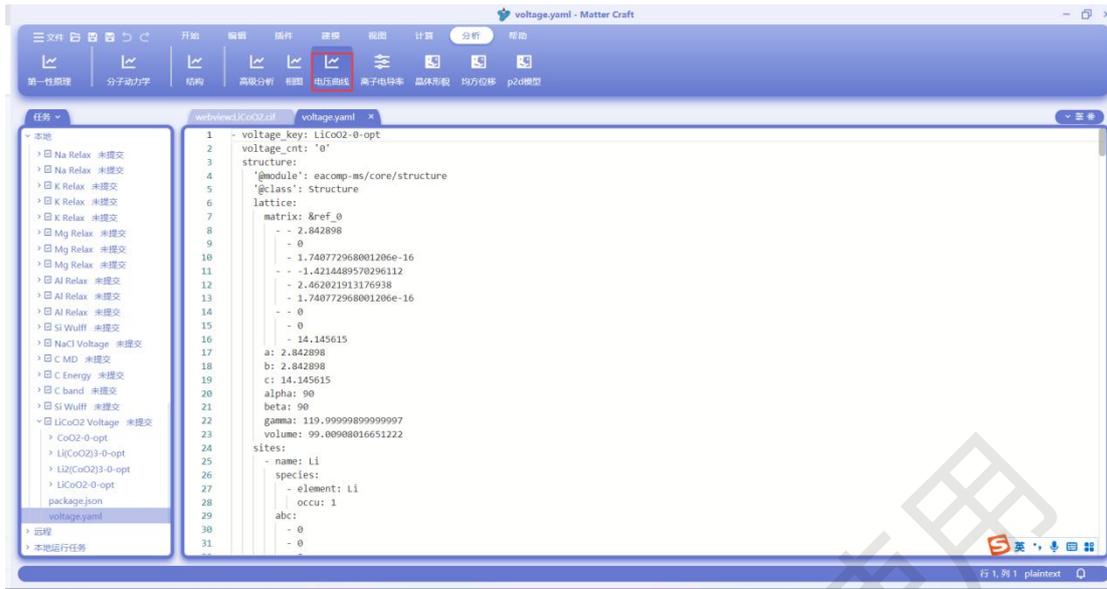
在 LiCoO2 Voltage 处点击鼠标右键，点击本地执行程序。然后 Hylanemos 会开始进行计算。



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。



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



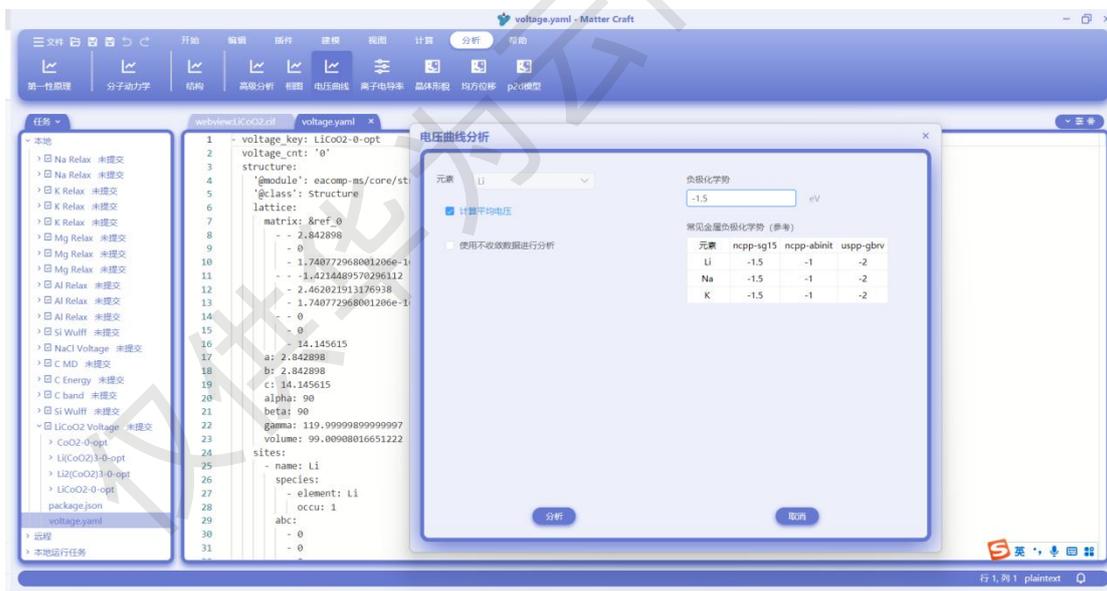
弹出的电压曲线分析设置如下。

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。

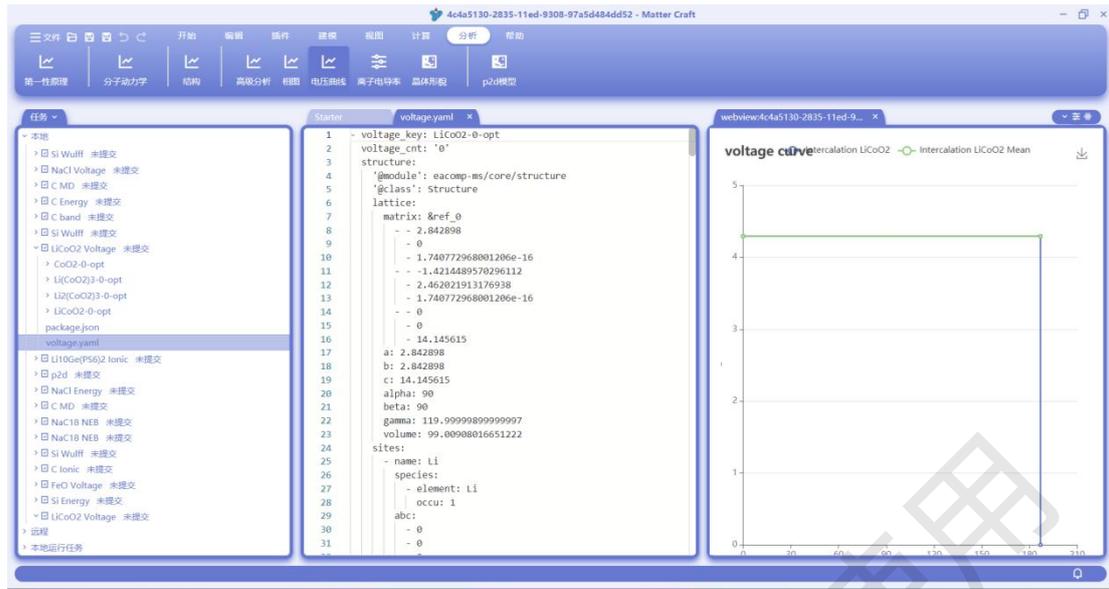
这里使用 Li 金属负极的

设置完成后，点击“分析”

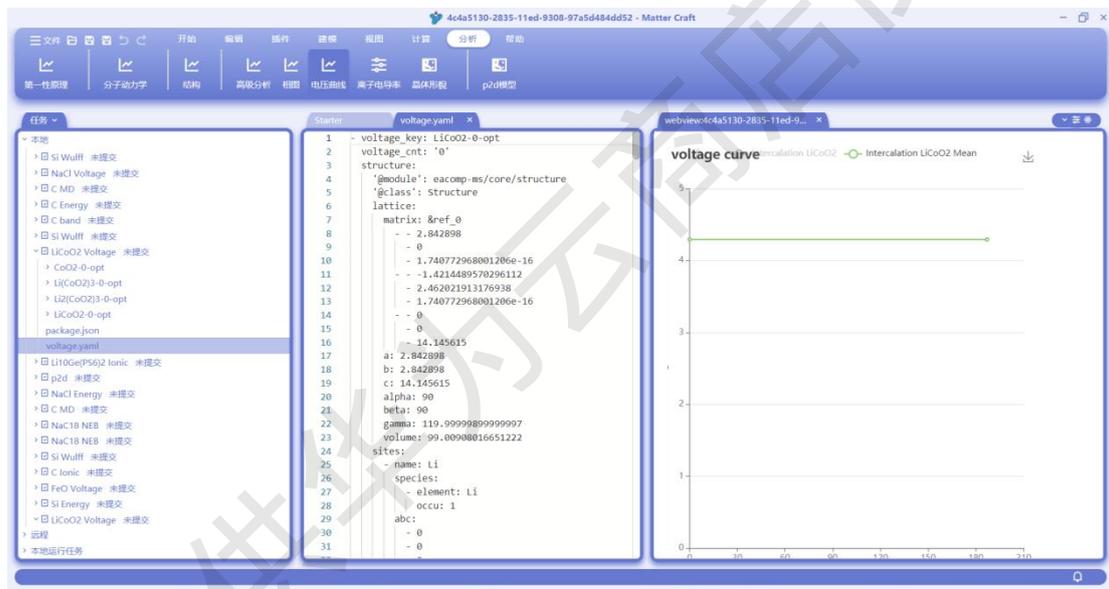


输出的钴酸锂的电压曲线如下图所示。

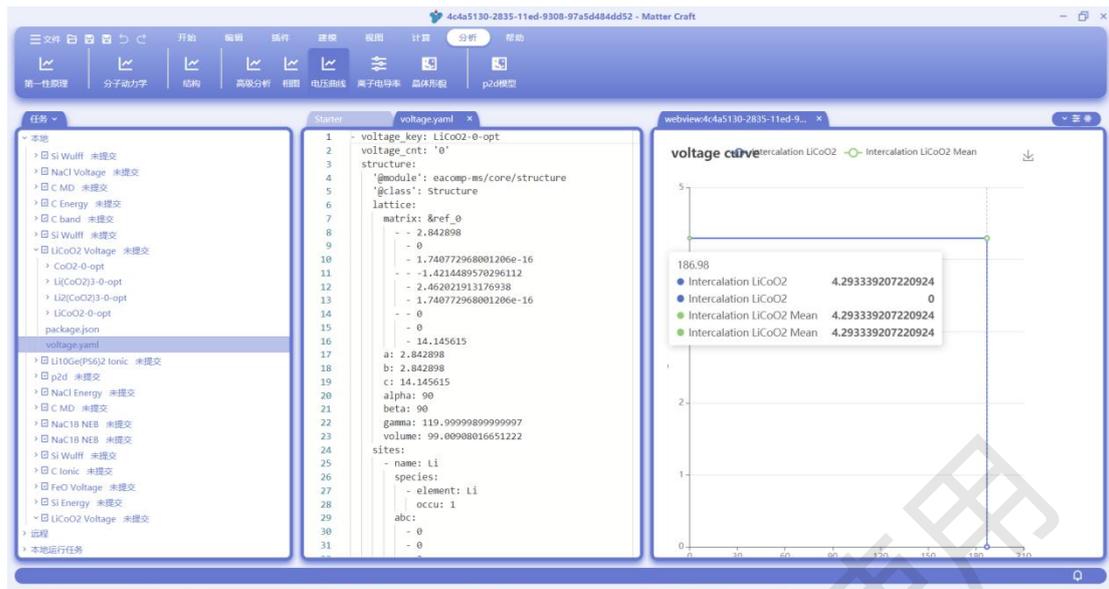
纵坐标是电压，横坐标是容量。其中蓝色的线表示放电整个过程中的每一步的电压，绿线表示整个放电过程的平均电压。这里两者正好相等。



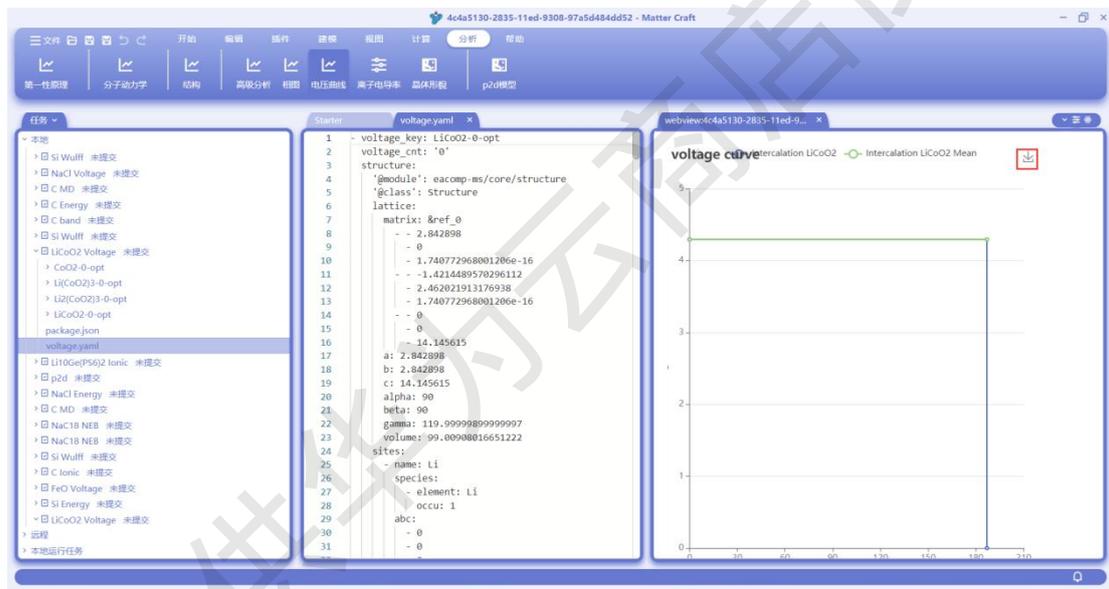
点击上方的图例，可以显示或不显示某条线。不显示放电电压曲线的图如下



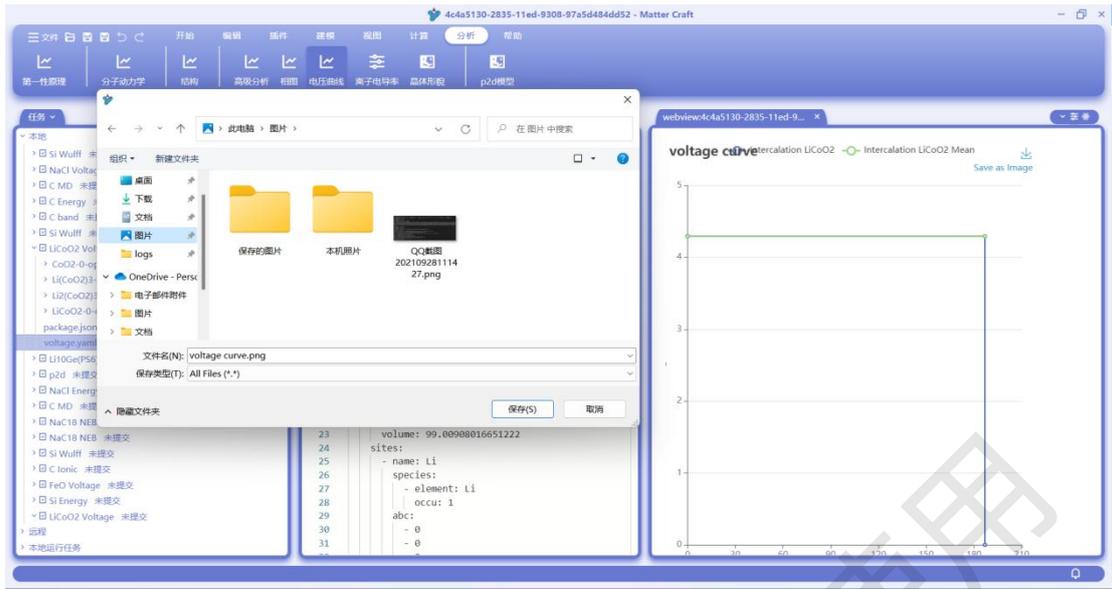
将鼠标放在曲线上，会显示当前点的容量和电压值。



点击图片右上角的按钮（下图红框处），可以导出当前的图片。

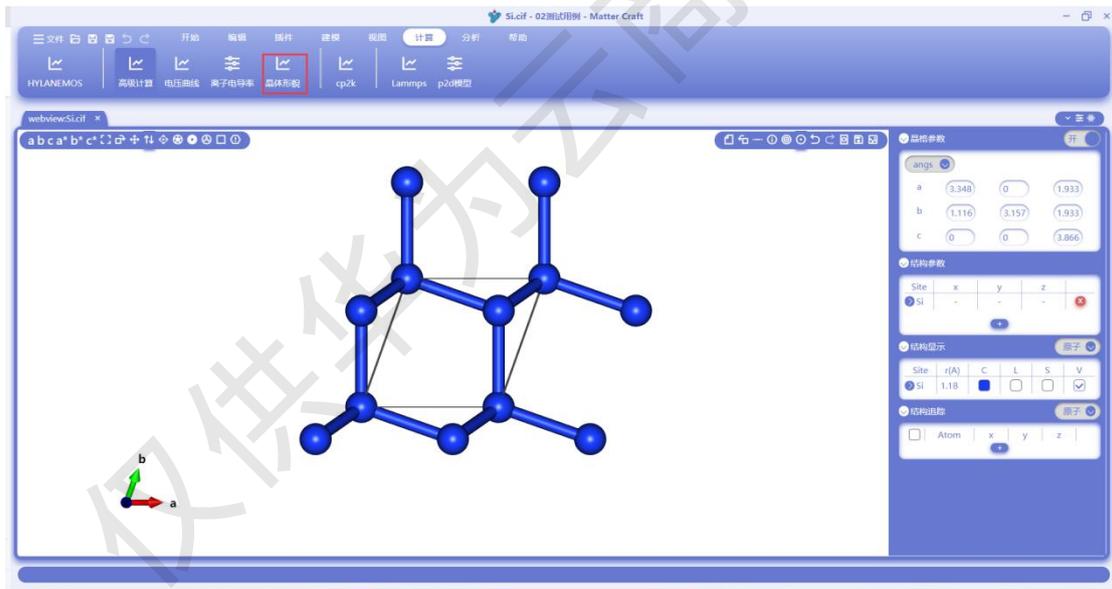


选择保存的路径并输入文件名，即可导出图片。



## 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。

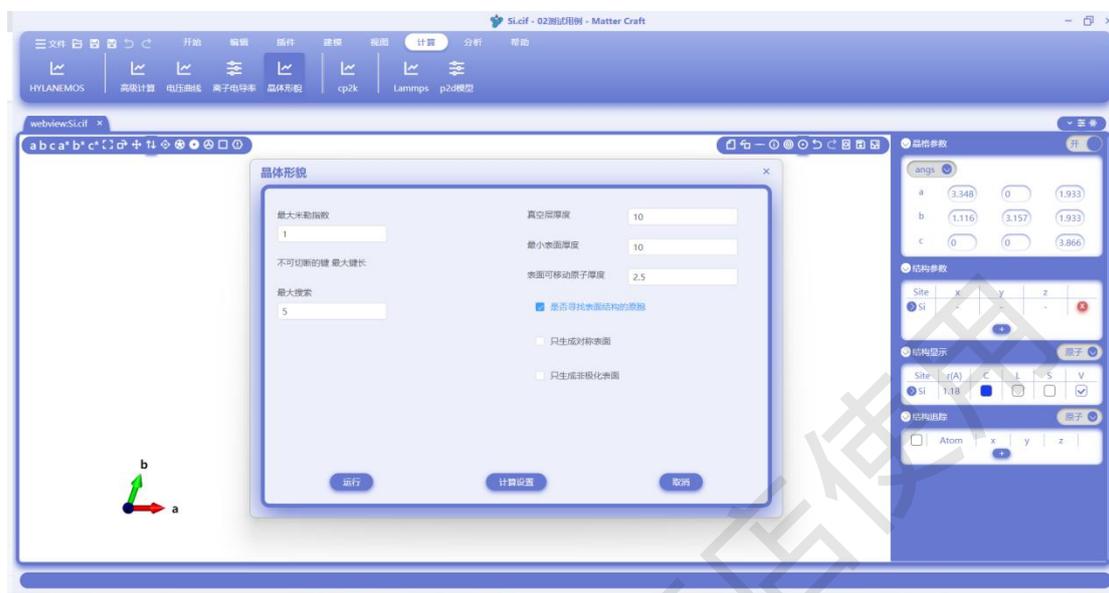
**最小表面厚度：**用于设置切出的表面的厚度。这里设置为 10。

**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。



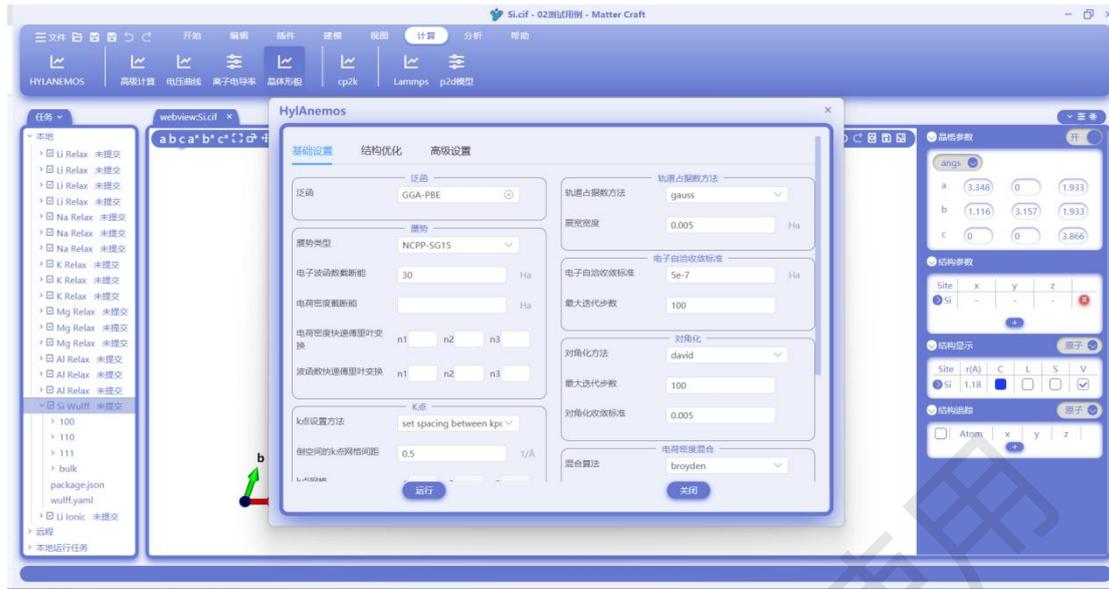
TiO<sub>2</sub> 结构中，不可切断的键可以选择 Ti-O 键，并设置最大键长。



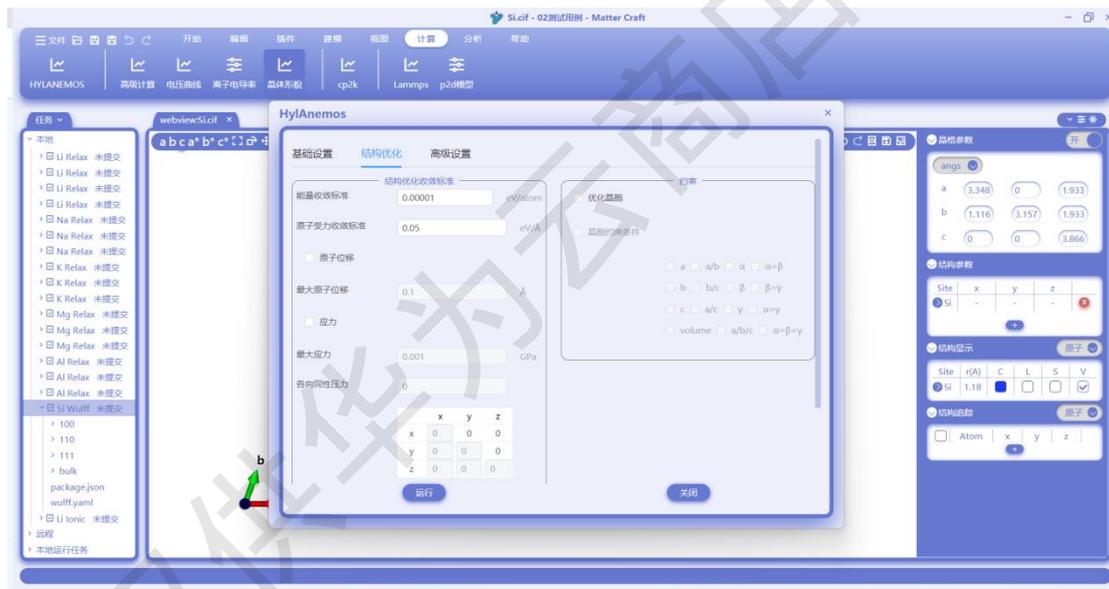
设置完成后点击“计算设置”，进入第一性原理计算的参数设置页面。

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。

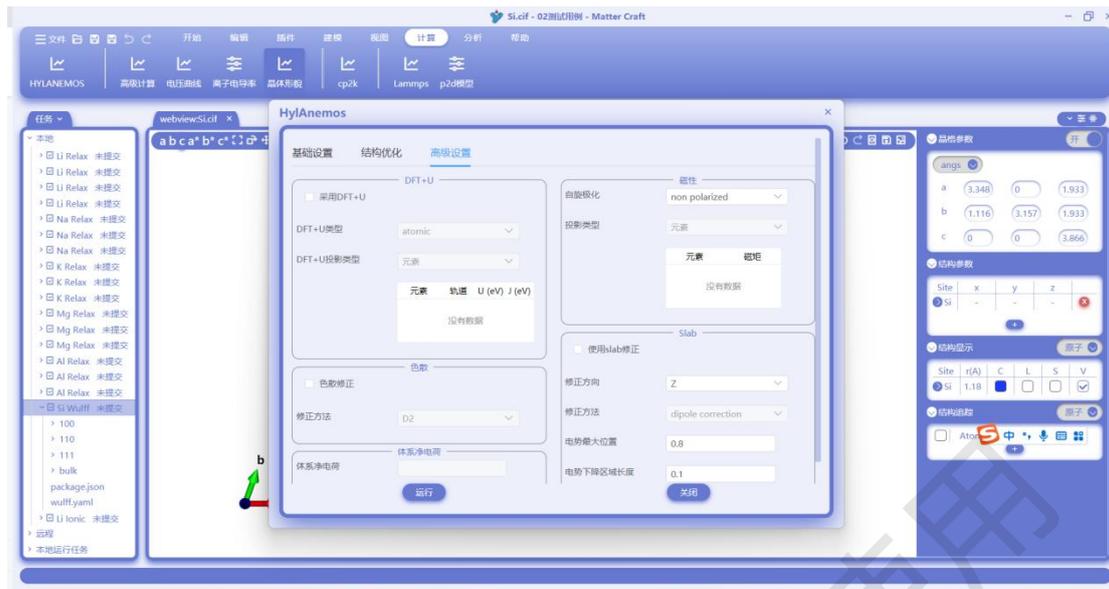
基础设置页面，使用默认参数即可。



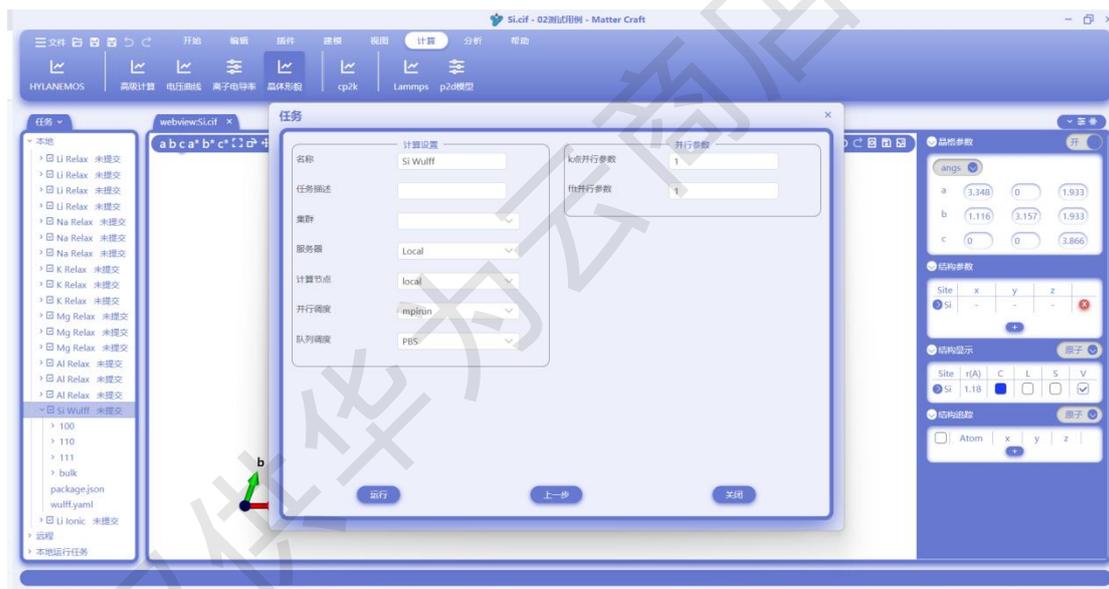
结构优化设置页面，使用默认参数即可。注意不能勾选优化晶胞，优化晶胞的话会导致表面积发生变化，使得计算的结果不准确。



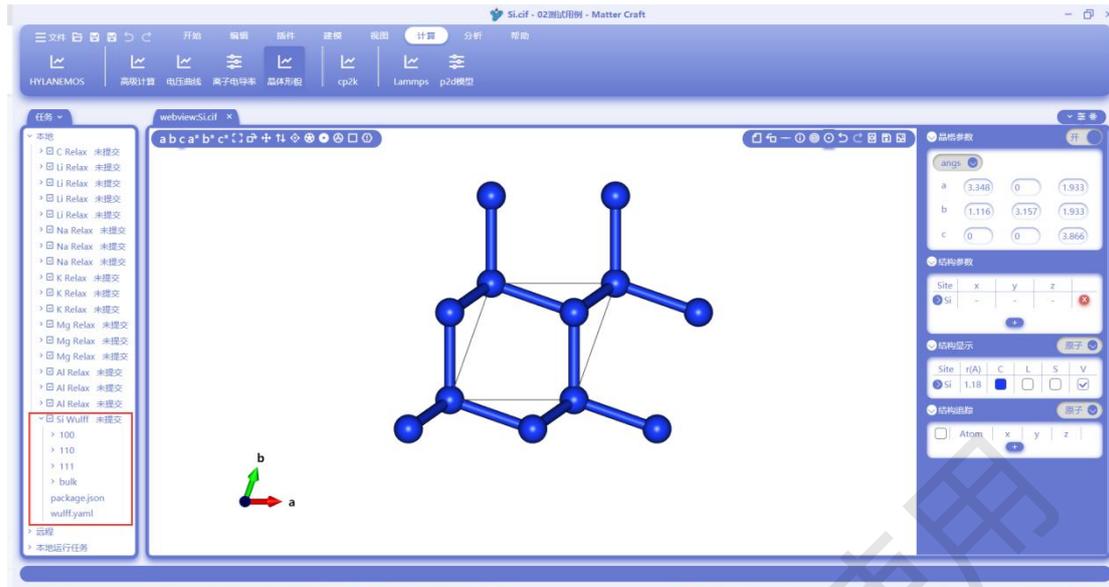
高级设置页面，对于具体的体系应该选择需要的修正。例如对含过渡金属的体系，使用 DFT+U；对有范德华作用力的体系，选择色散修正；对有自旋的体系，选择自旋极化计算。一般来说，在 slab 也就是表面结构中如果有极性则需要设置 slab 的偶极修正。但是在晶体形貌的计算流程中，材料工坊会自动判断切出的表面有没有极性，并对有极性的体系自动设置 slab 的偶极修正。因此在此处不需要进行 slab 修正相关的设置。



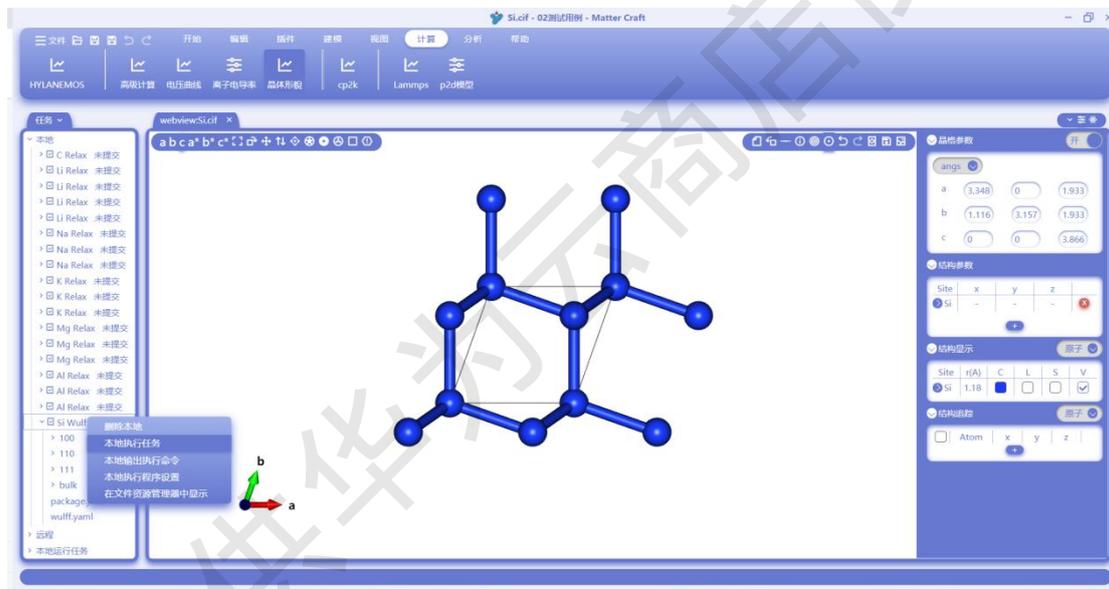
设置好 Hylanemos 的计算参数后，点击“运行”，进入如下界面。这里可以设置计算的任务名称、描述，使用的计算资源，并行参数等等。设置完成后点击“运行”。



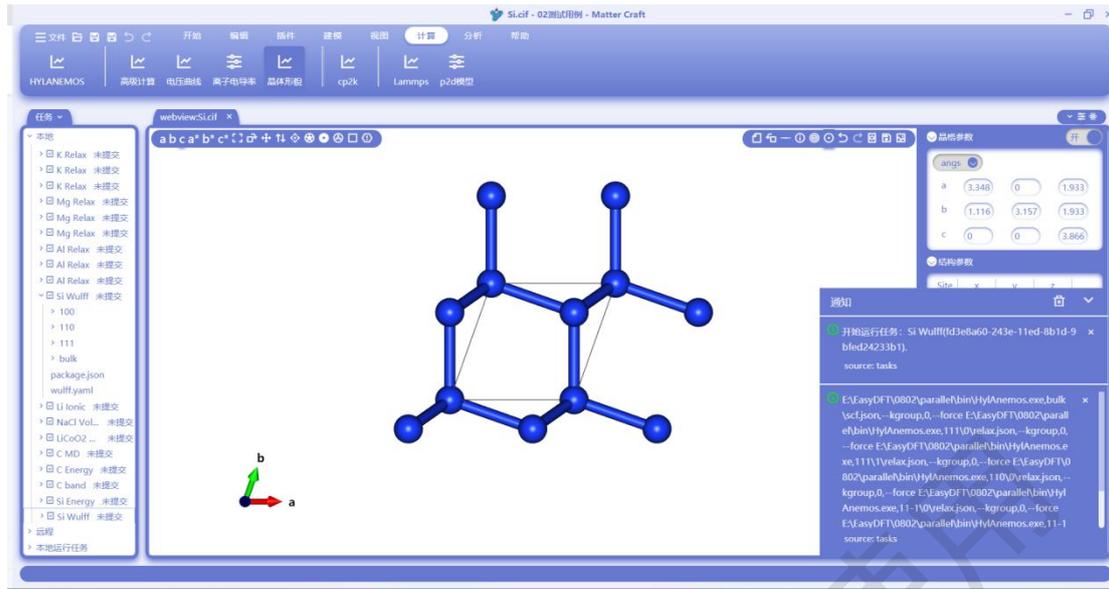
这时任务栏会出现 Si Wulff 的任务，里面包含了体材料和不同表面的结构和计算任务。



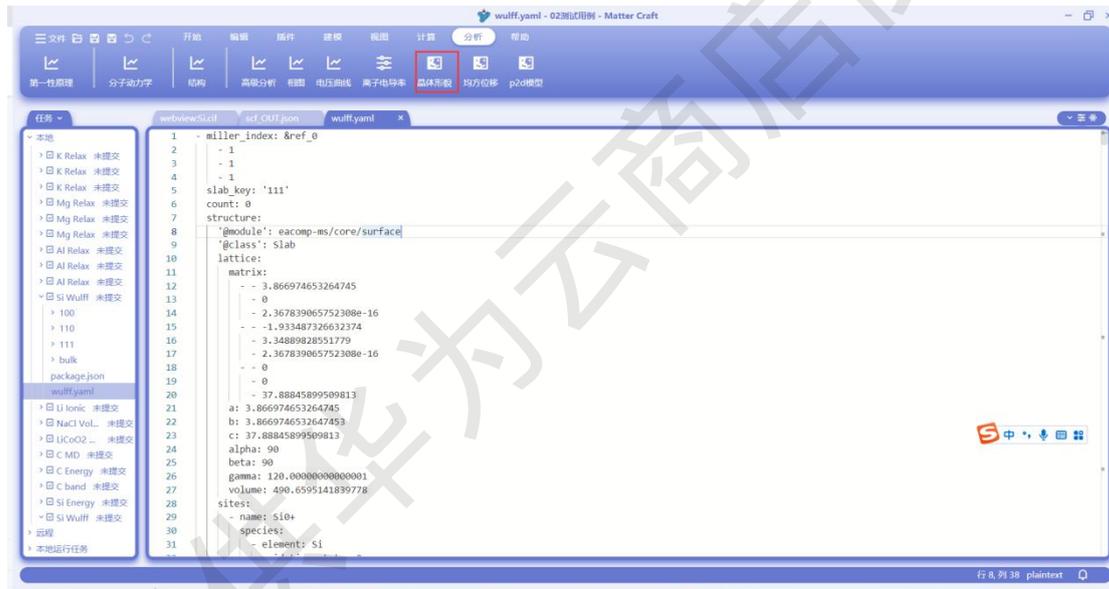
在 Si Wulff 处点击鼠标右键，点击本地执行程序。然后 Hylanemos 会开始进行计算。



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。



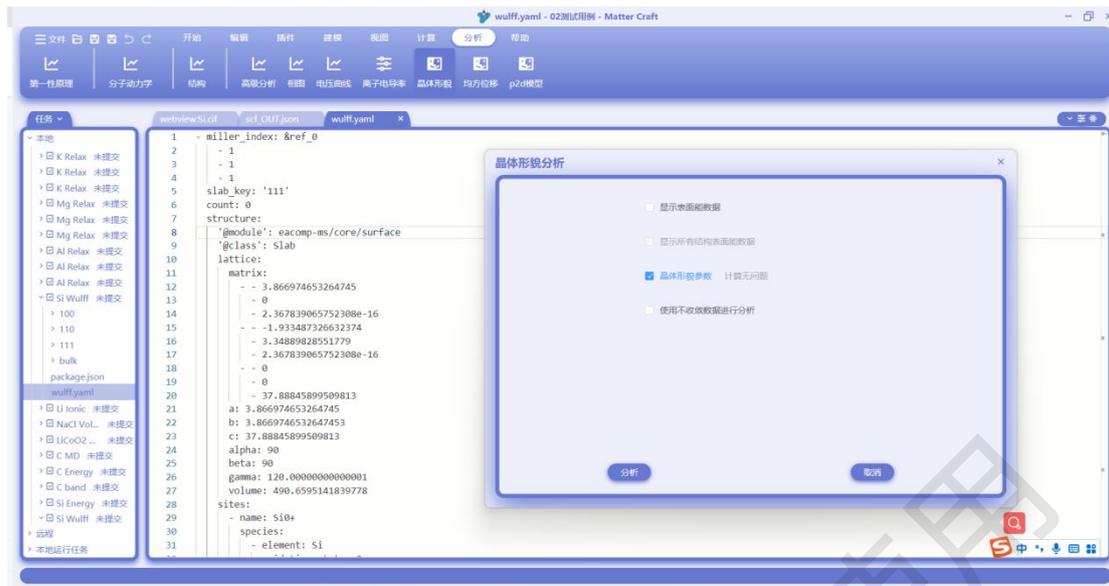
计算完成后，点击 wulff.yaml。然后点击“分析”-“高级分析”-“晶体形貌”



弹出的晶体形貌分析设置如下。

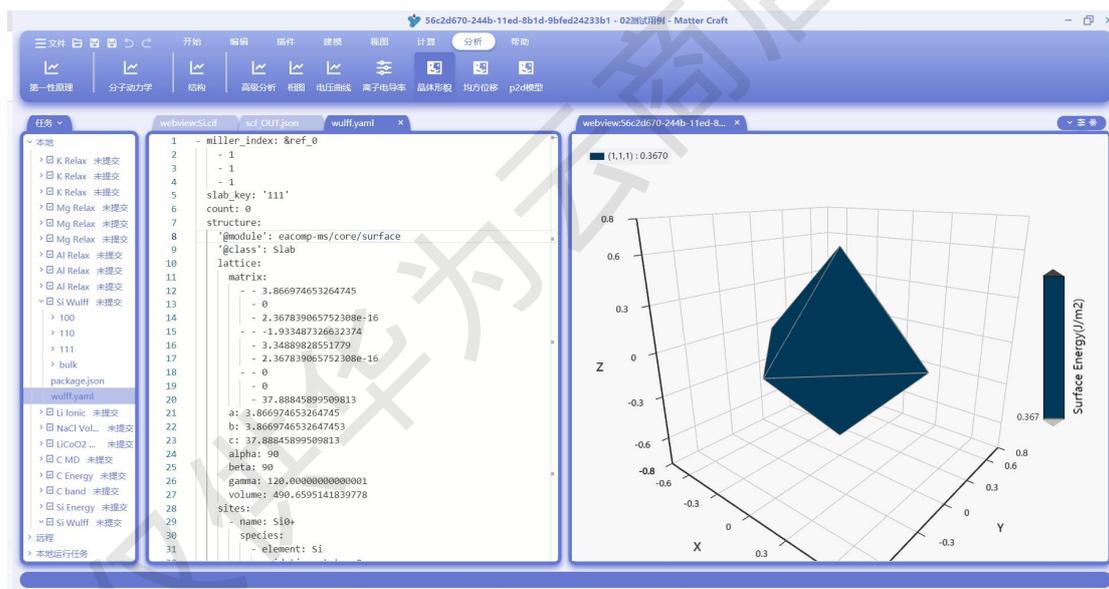
用户可根据需要勾选是否显示表面能数据，是否使用不收敛的数据进行分析。

设置完成后，点击“分析”

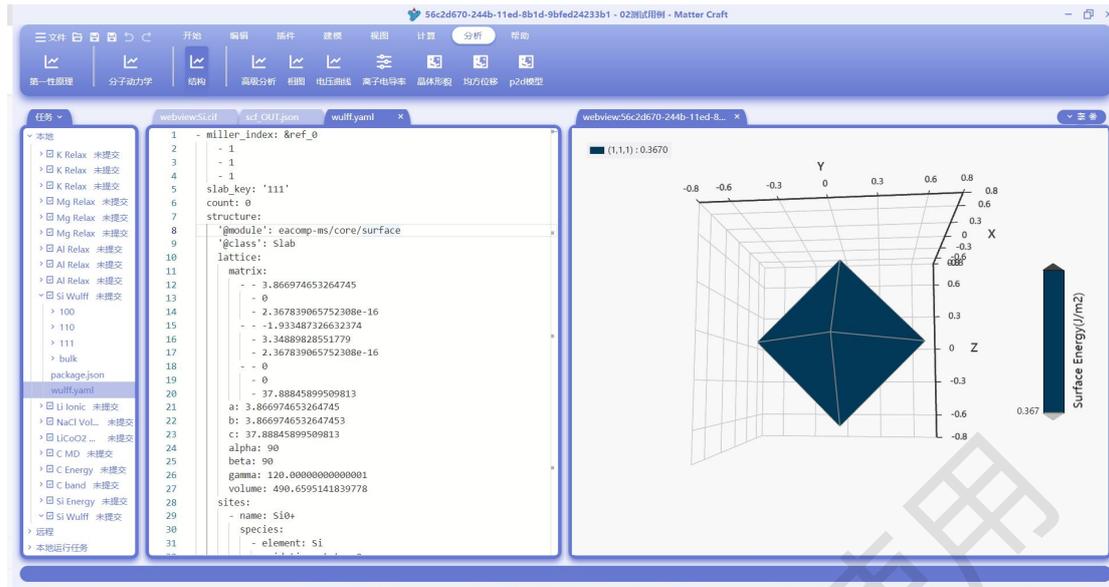


晶体的形貌 wulff shape 的图显示如下所示。左上角标出了暴露的晶面及其表面能，这里是 (111) 面暴露，表面能是  $0.3670\text{J/m}^2$ 。

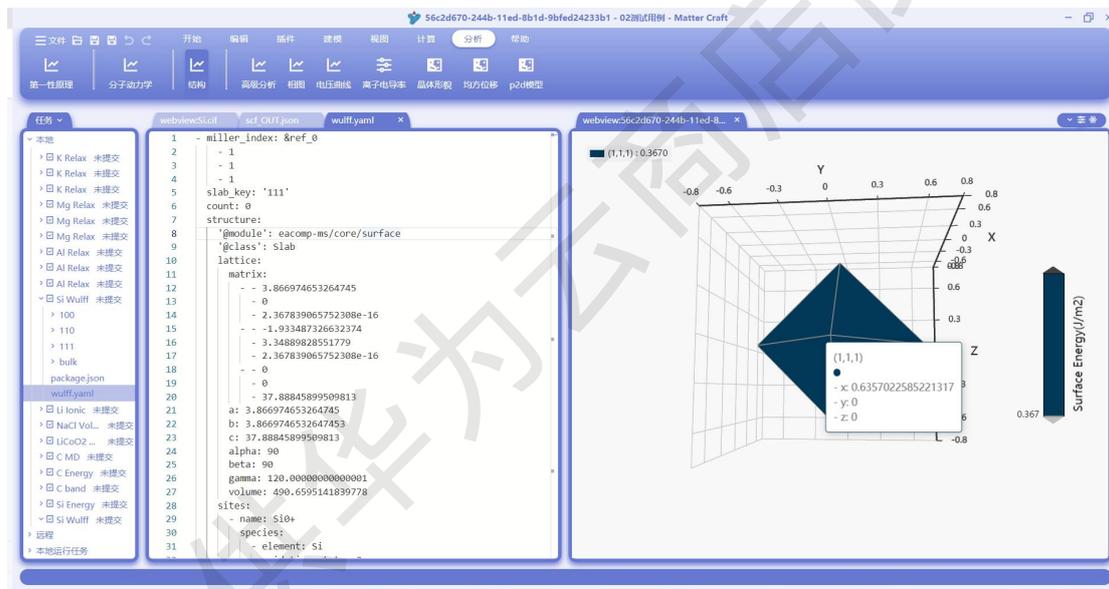
使用鼠标滚轮可以对图像进行放大和缩小。按住鼠标左键可以旋转图像。



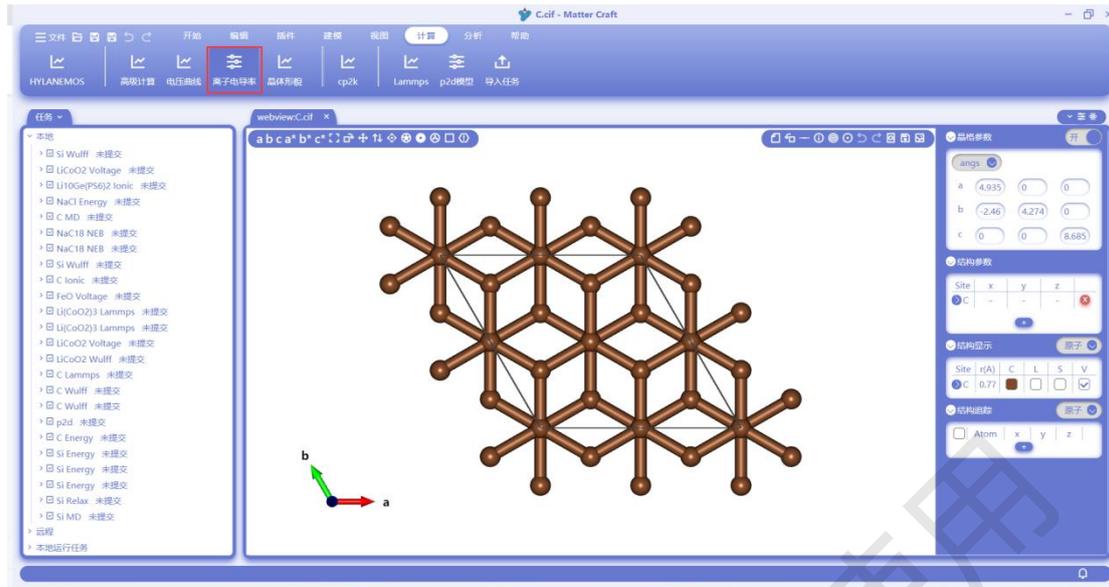
旋转和缩放后的图像示例如下。



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。



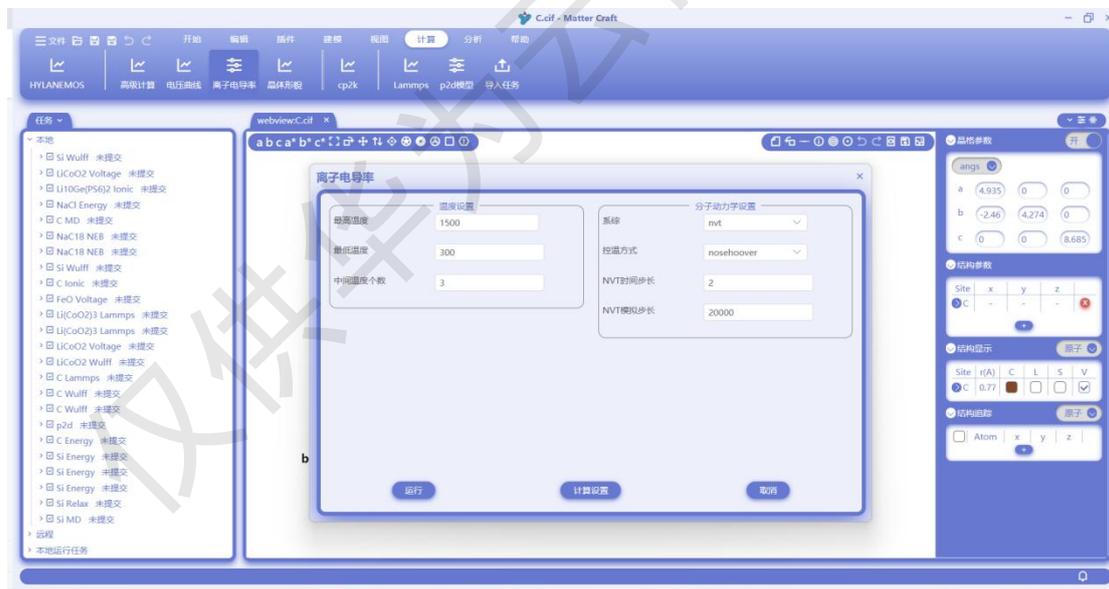
离子电导率



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。

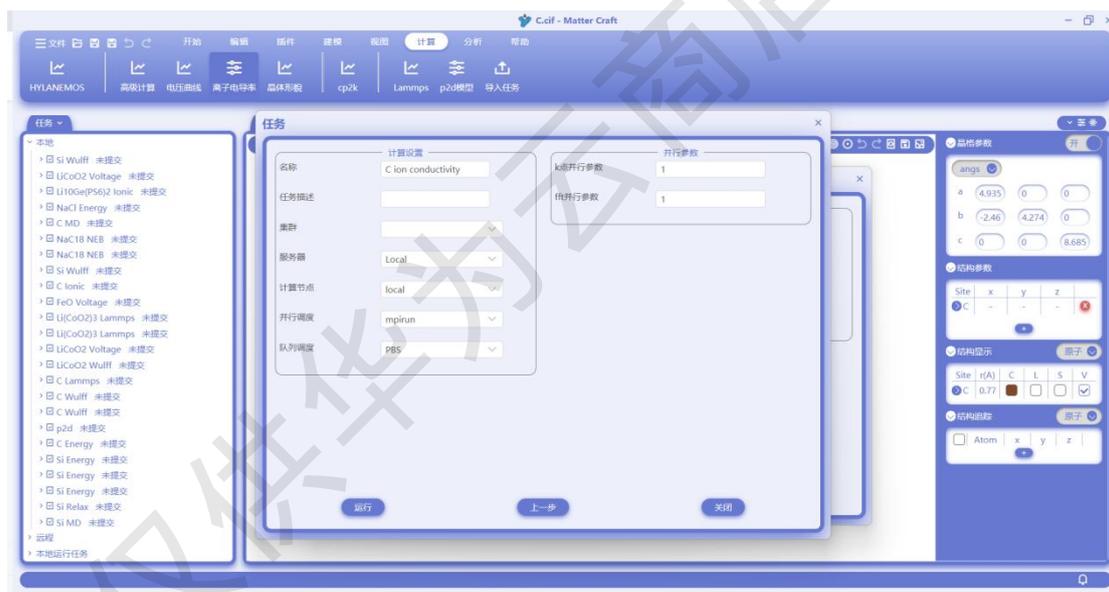
分子动力学设置：用来设置分子动力学相关的参数。



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。

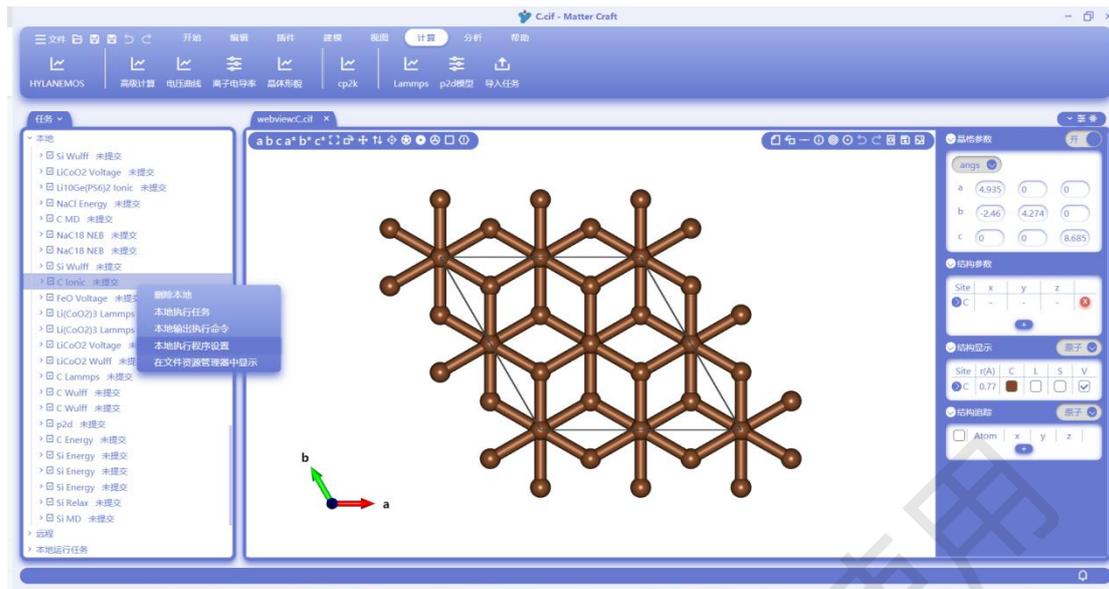


设置好 Hylanemos 的计算参数后，点击“运行”，进入如下界面。这里可以设置计算的任务名称、描述，使用的计算资源，并行参数等等。设置完成后点击“运行”

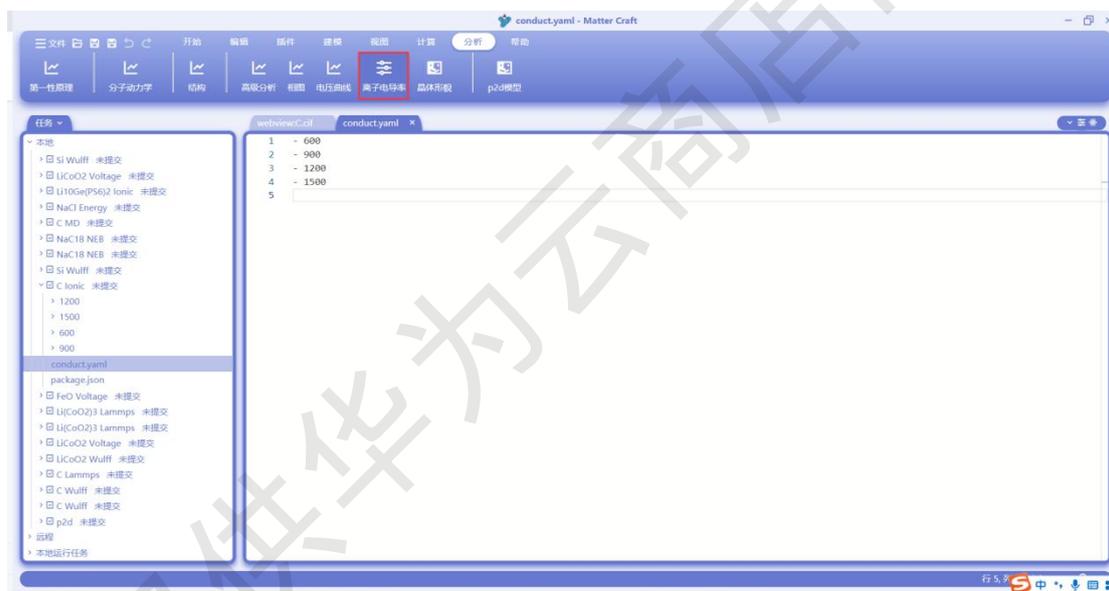


这时任务栏会出现 C ionic 的任务，里面包含了设置的各个温度的分子动力学计算任务。

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。



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

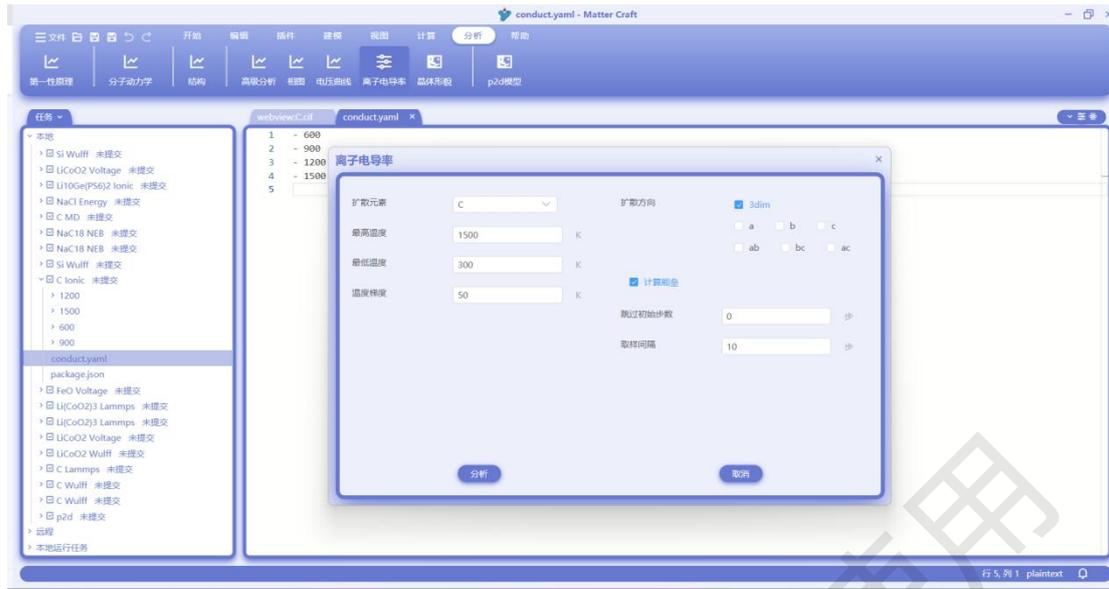
最高温度、最低温度、温度梯度：计算扩散系数和离子电导率的范围和间隔。

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。

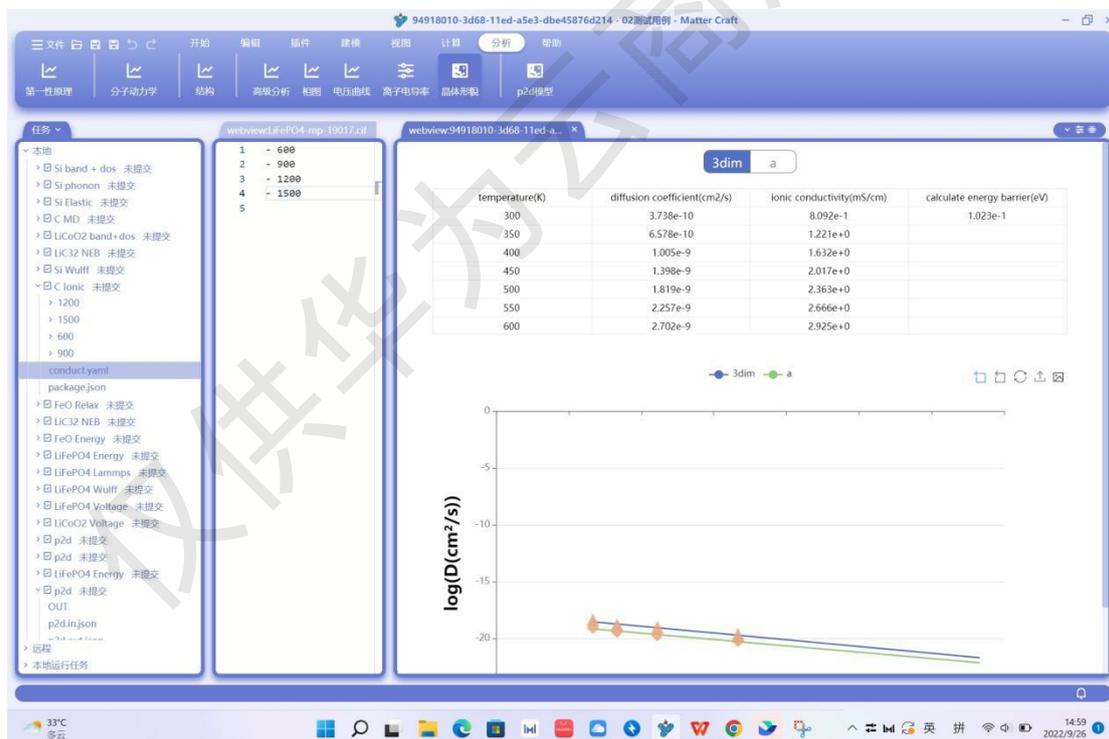
设置完成后，点击“分析”



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。

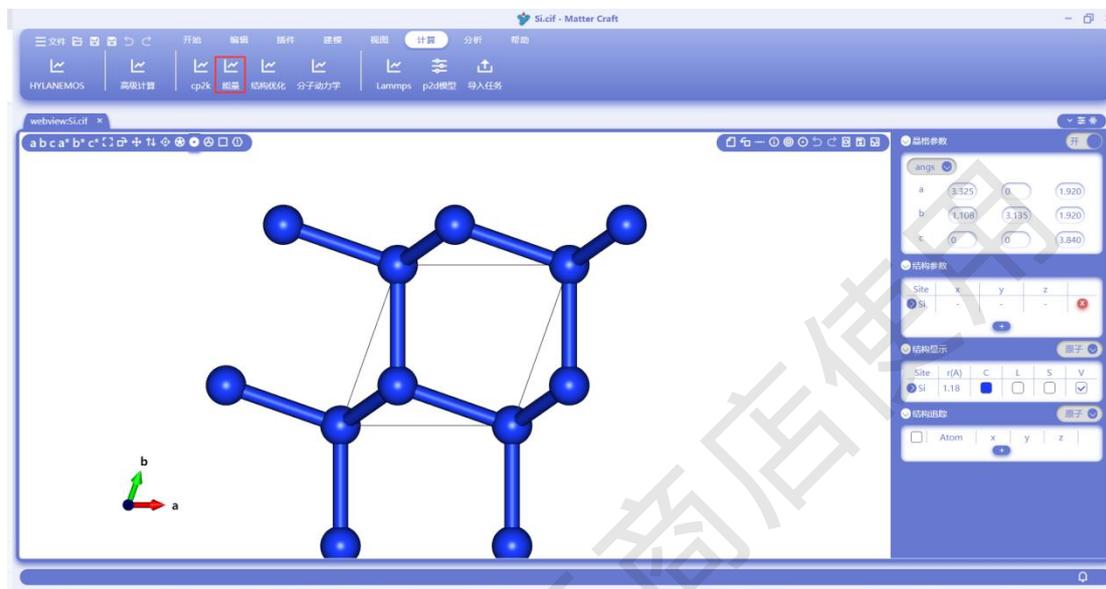
下方的图为计算的拟合的图，可以导出图片和数据，进行缩放。



## CP2K 输入文件

## 能量计算设置

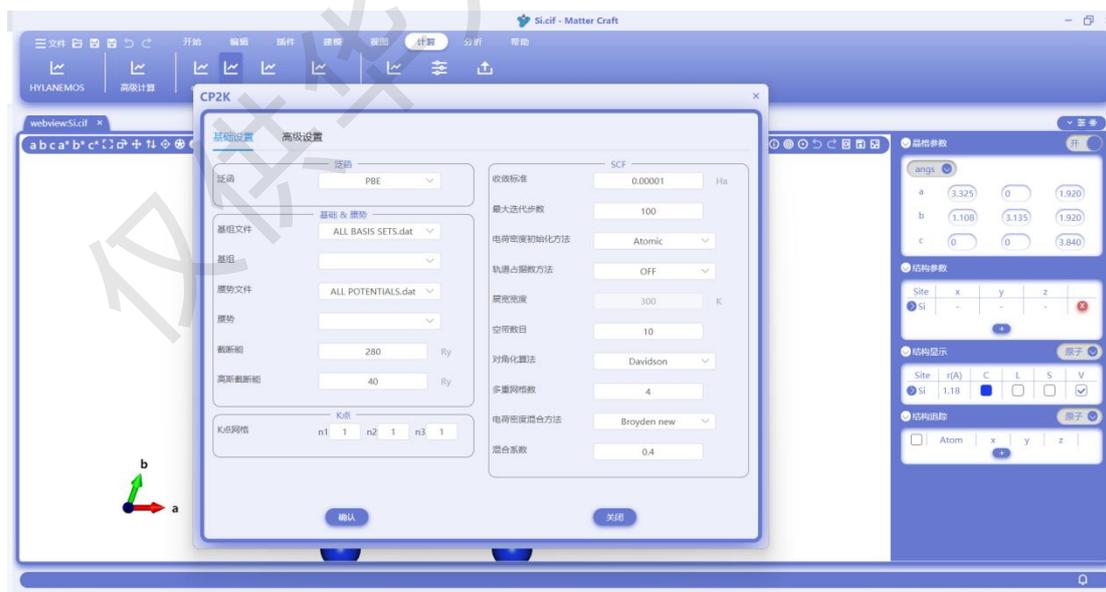
如下图红框处所击“计算”-“CP2K”-“能量”进行能量的计算设置。



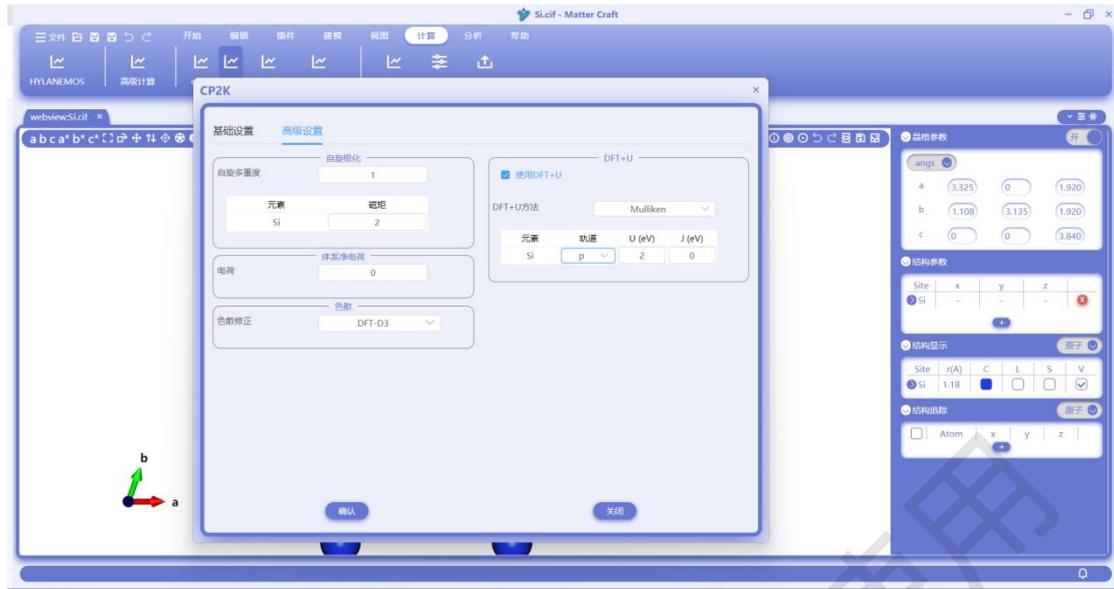
设置面板如下图所示，分为基础设置和高级设置。进入后面板中已经给出了参数的默认设置，。一般来说，使用默认参数就可以完成一个中等精度的计算任务。

用户仍然需要根据基组文件和赈势文件去选择计算所需要的基组和赈势。

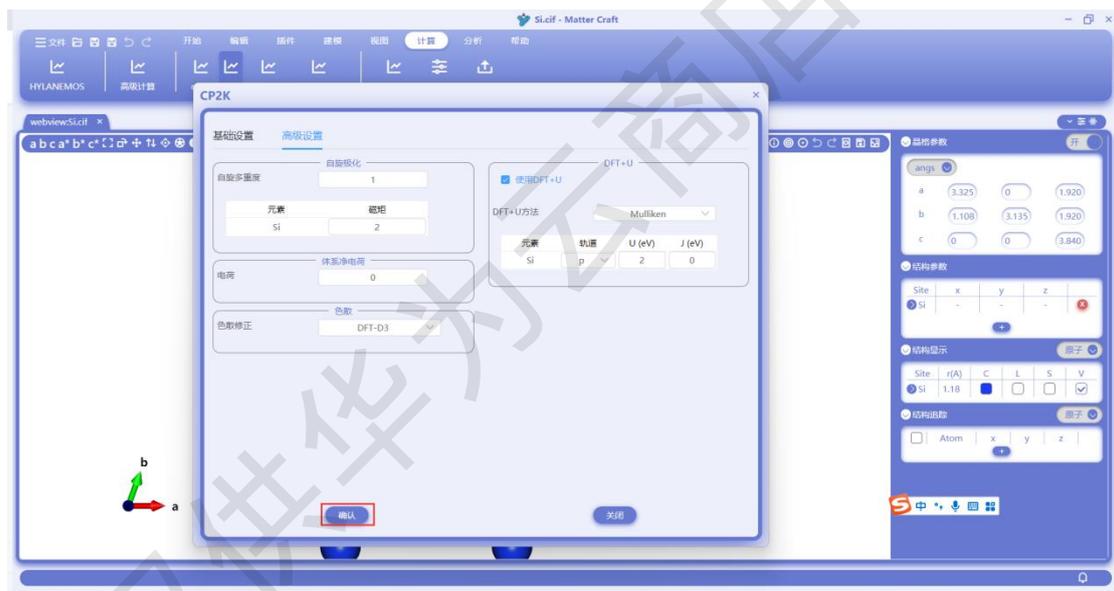
注意当对角化算法为 OT 时，K 点网络必须设置为 1,1,1。



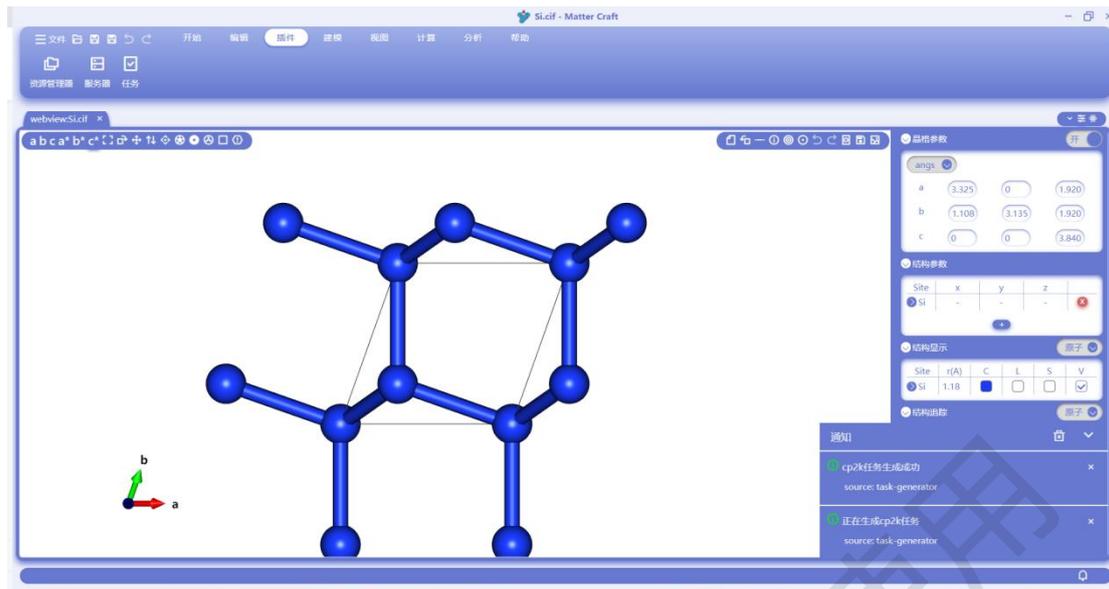
高级设置面板中，包括自旋极化、体系净电荷、色散和 DFT+U 的计算设置。自旋极化模块用于设置体系的自旋多重度和元素的磁矩，体系净电荷模块用于设置体系的带电性质，色散模块用于设置计算时是否使用色散修正和使用何种色散修正方法，DFT+U 模块用于设置计算时是否使用 DFT+U 的方法，使用何种+U 的方法和具体哪个元素+U 的轨道和数值。下图为示例。



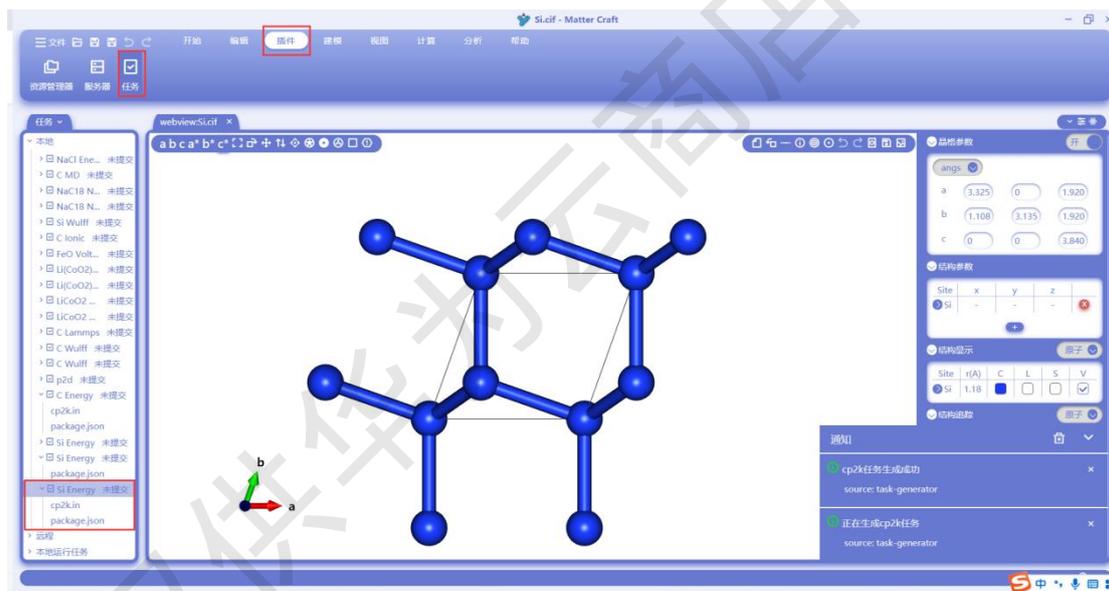
设置完成后点击确认



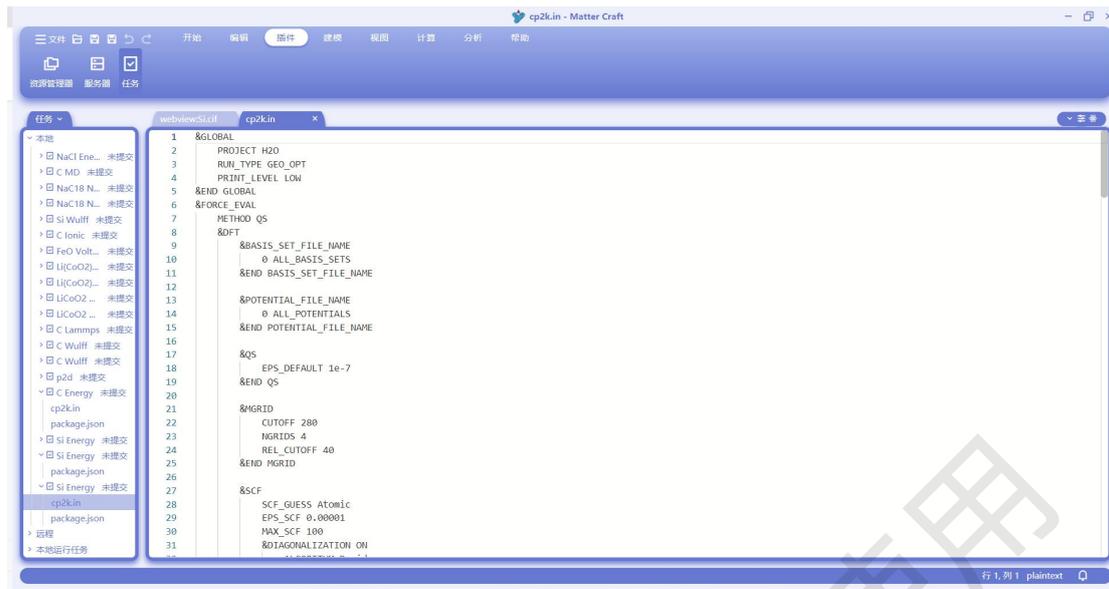
右下角会显示任务生成的情况，显示 cp2k 任务生成成功，表示已经生成了 cp2k 的输入文件。



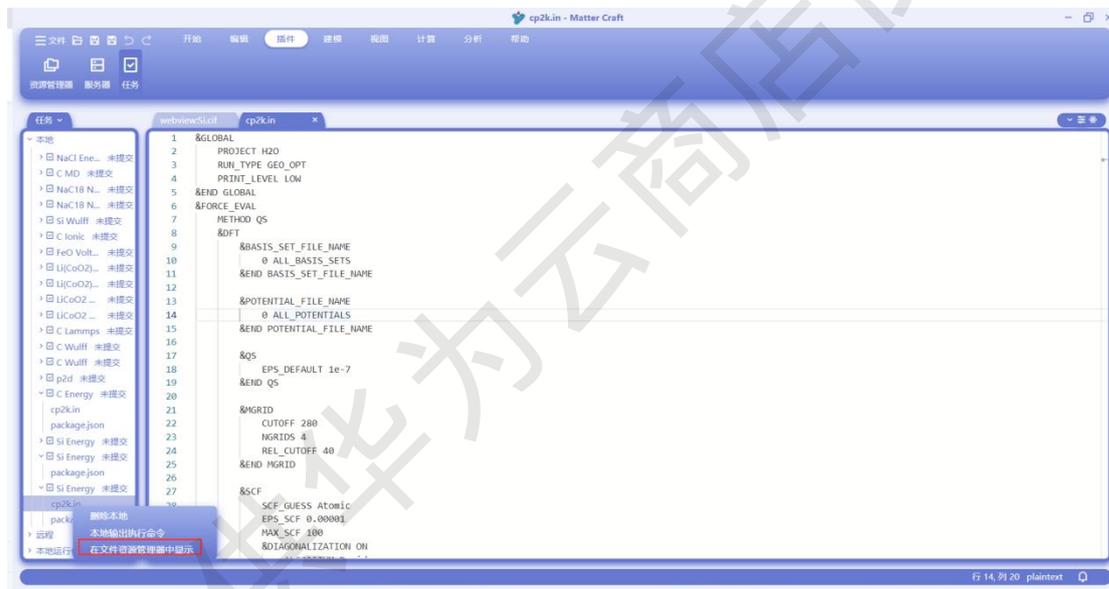
点击“插件”-“任务”，会显示所有生成的任务。最下方的任务即为刚刚生成的任务，任务名称为 Si Energy，点击后，下方会出现 cp2k.in 和 package.json 文件。



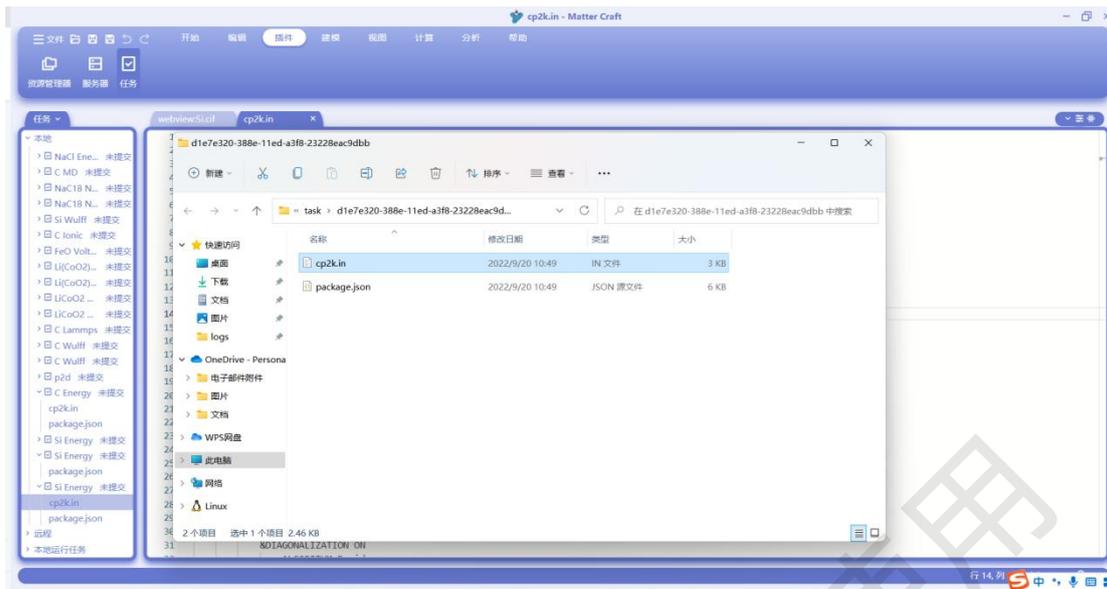
单击 cp2k.in，页面中会显示 cp2k.in 的文件。这就是 CP2K 的输入文件。



右键点击 cp2k.in，然后选择“在文件资源管理器中显示”。

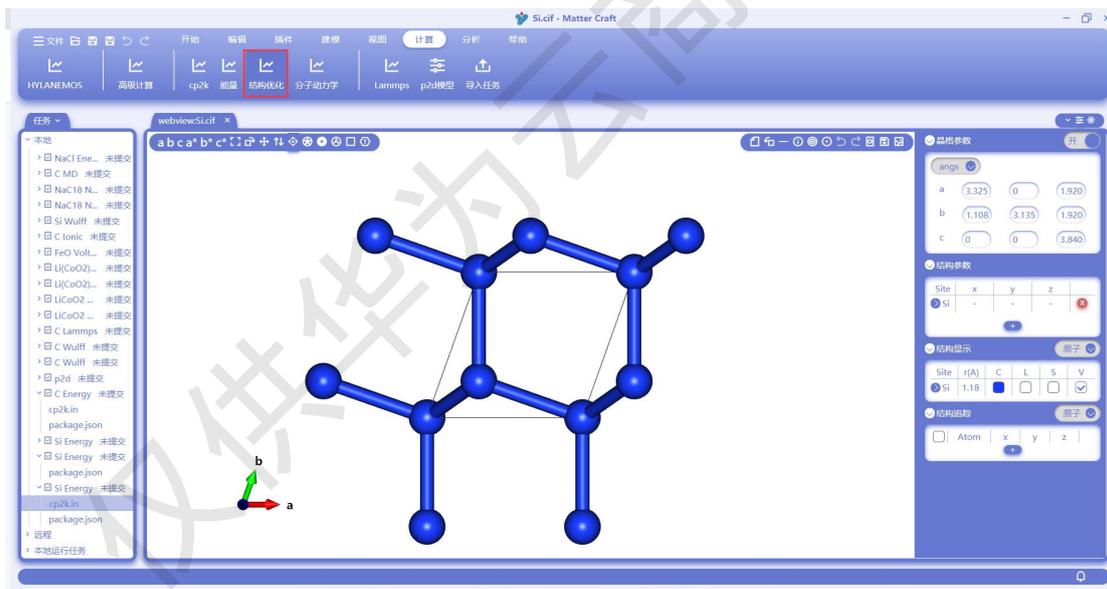


在弹出的文件夹中，即为 cp2k.in 的文件所在的位置。用户可以将这个文件传输到计算所需的位置，然后进行 cp2k 计算即可。



## 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。

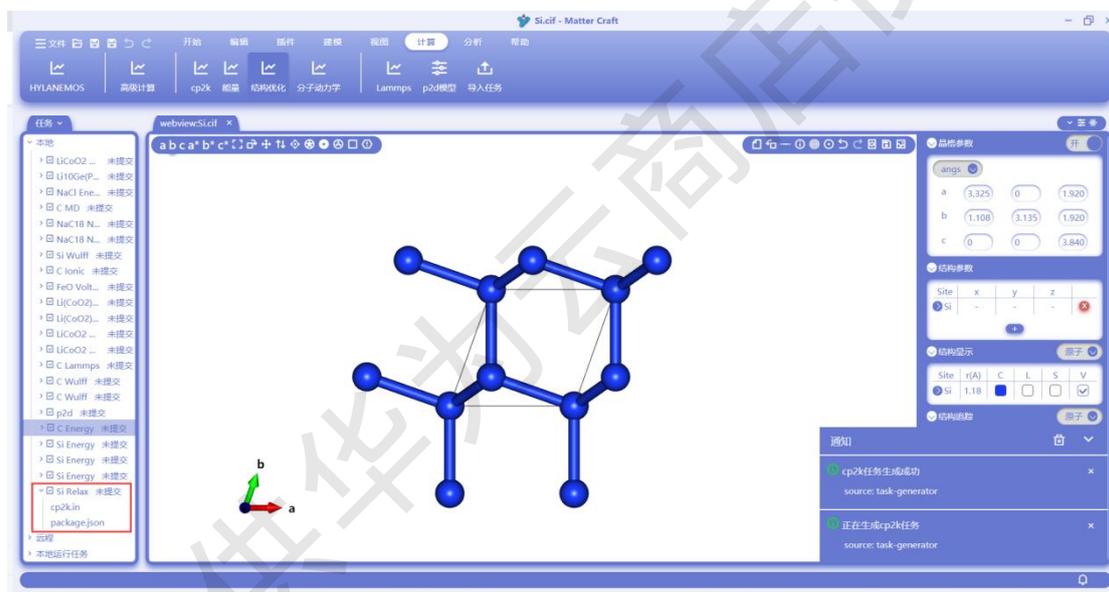
通过勾选优化晶胞，可以选择是做固定晶格优化还是变晶格优化。

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。



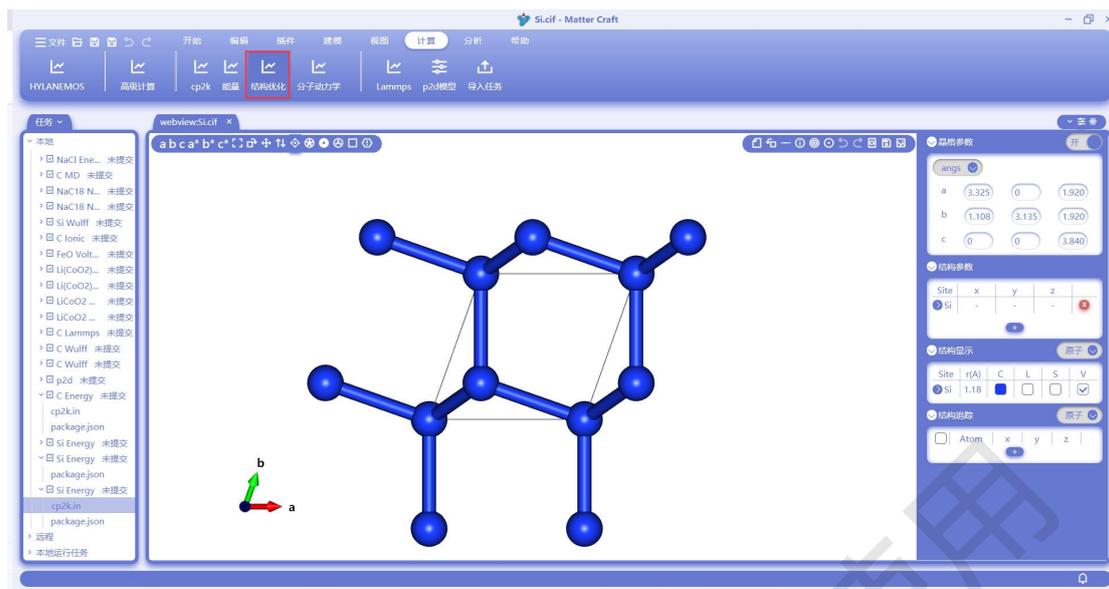
点击确认后，和能量计算类似，生成的任务名称为 Si Relax。其他操作和能量计算相同。



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

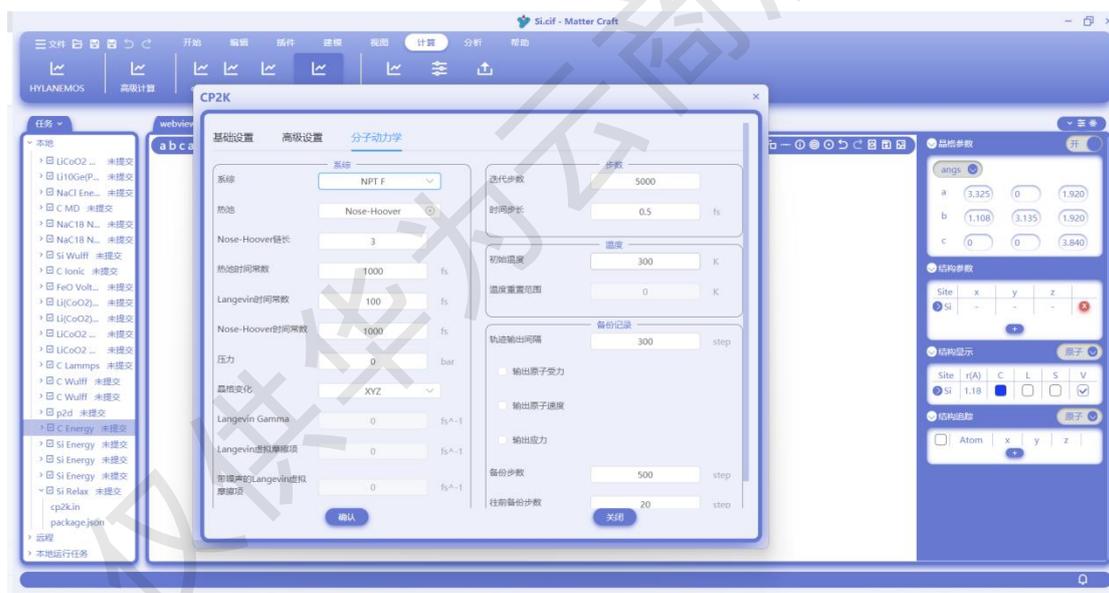
如下图红框处所示，点击“计算”-“CP2K”-“分子动力学”进行分子动力学的计算设置。



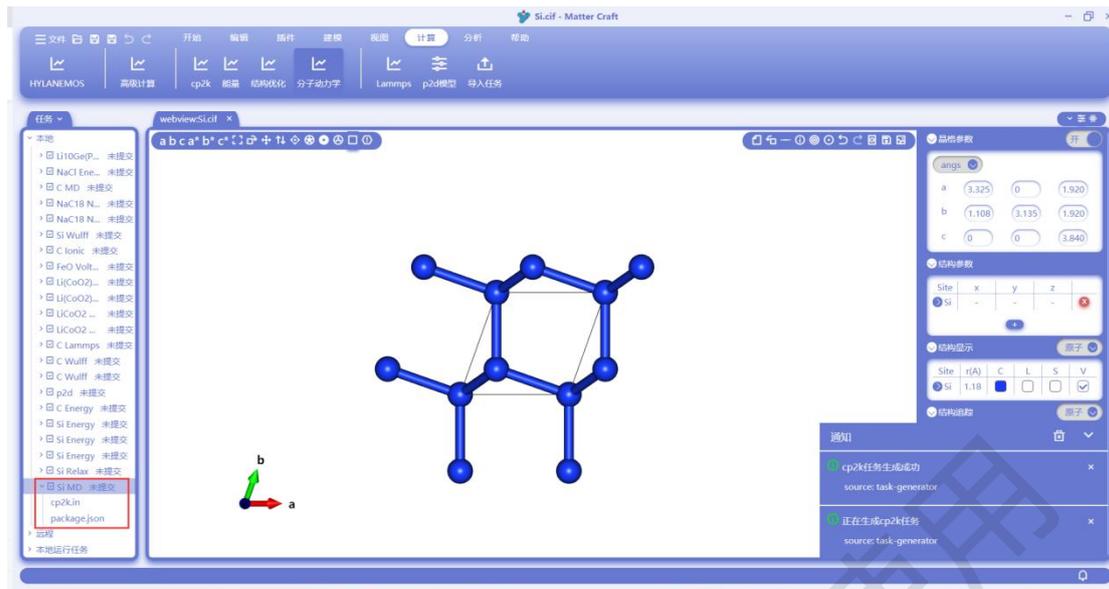
弹出的设置面板与能量计算时的类似，相同的部分这里不再重复说明。

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。

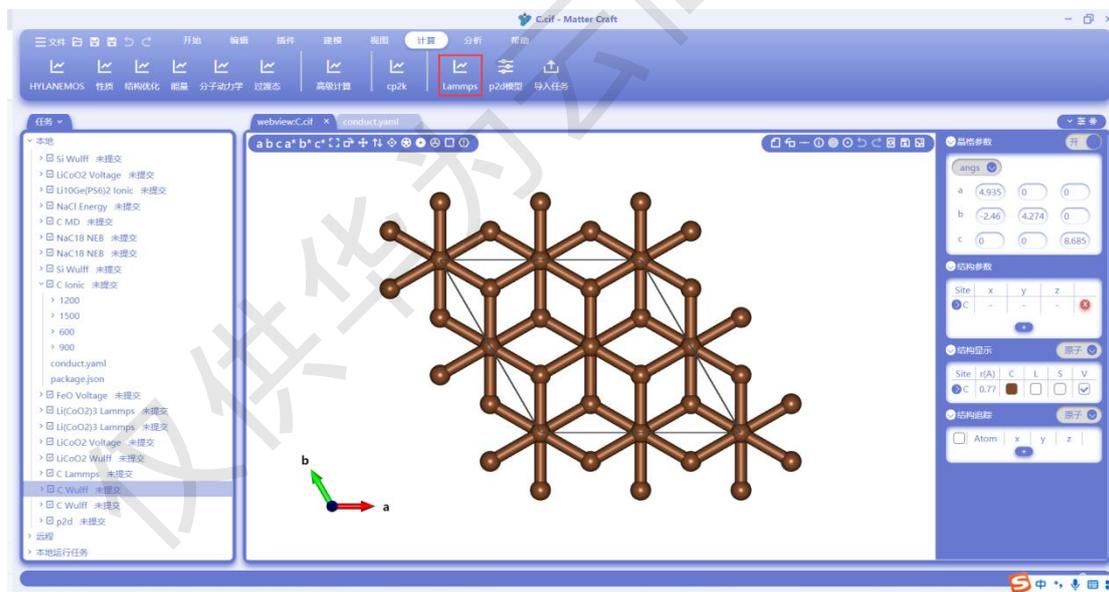


点击确认后，和能量计算类似，生成的任务名称为 Si MD。其他操作和能量计算相同。



## 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。

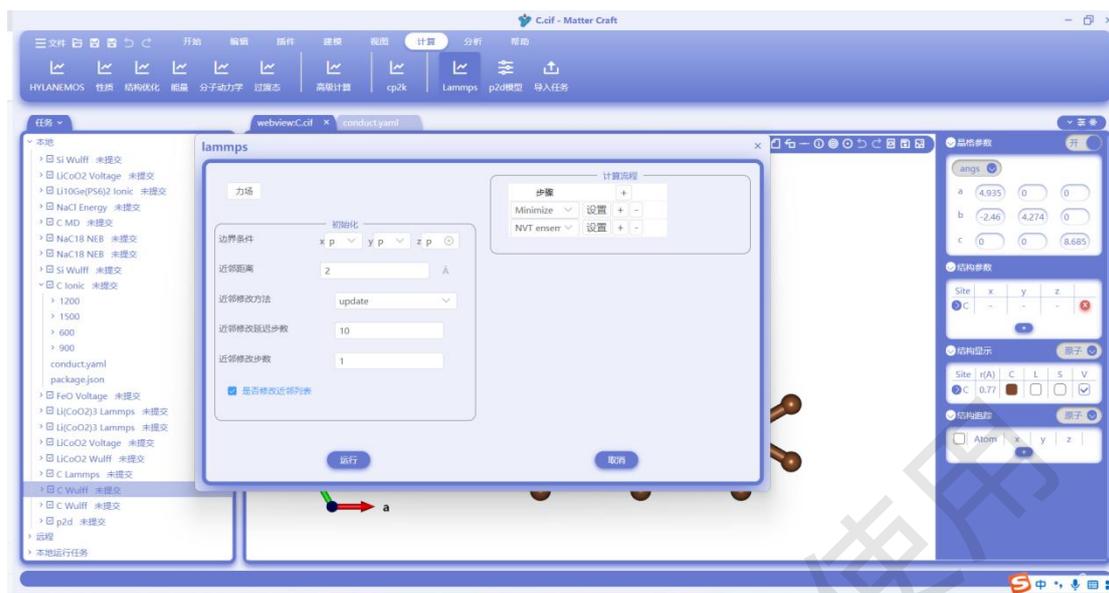
近邻距离：用于设置近邻列表的距离范围。

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。

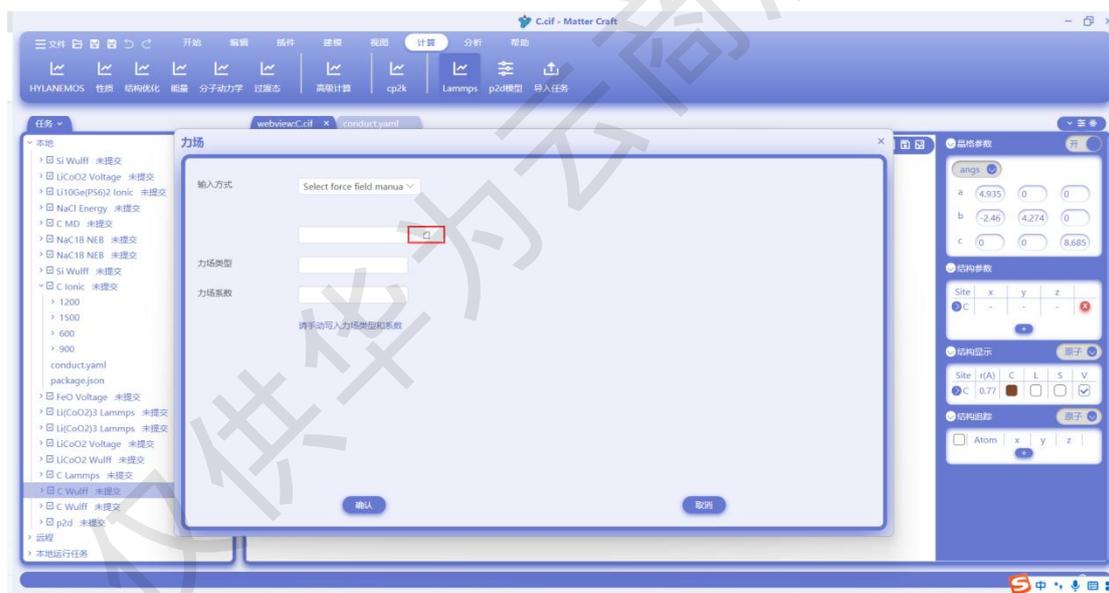
是否修改近邻列表：用于设置计算中是否允许修改近邻列表。



点击力场后，进入如下的力场设置界面。

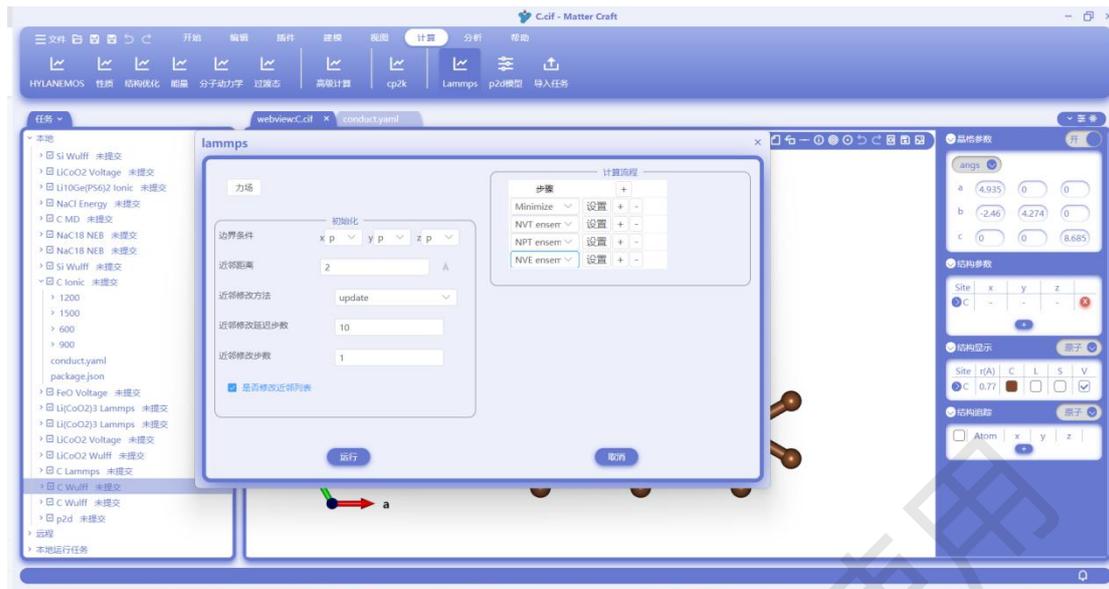
点击红框处按钮，选择要使用的力场文件。

在下方填写力场类型和力场系数，然后点击确认即可。



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。

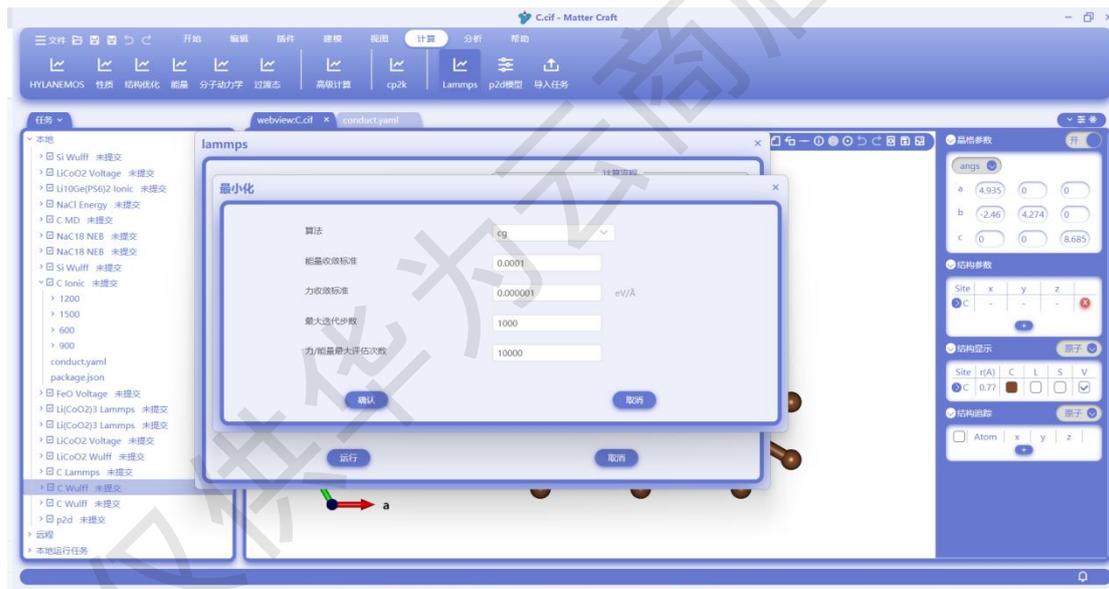
点击设置，可以进入结构优化或系综的具体计算参数设置页面。



结构优化 Minimize 的设置页面如下图所示。

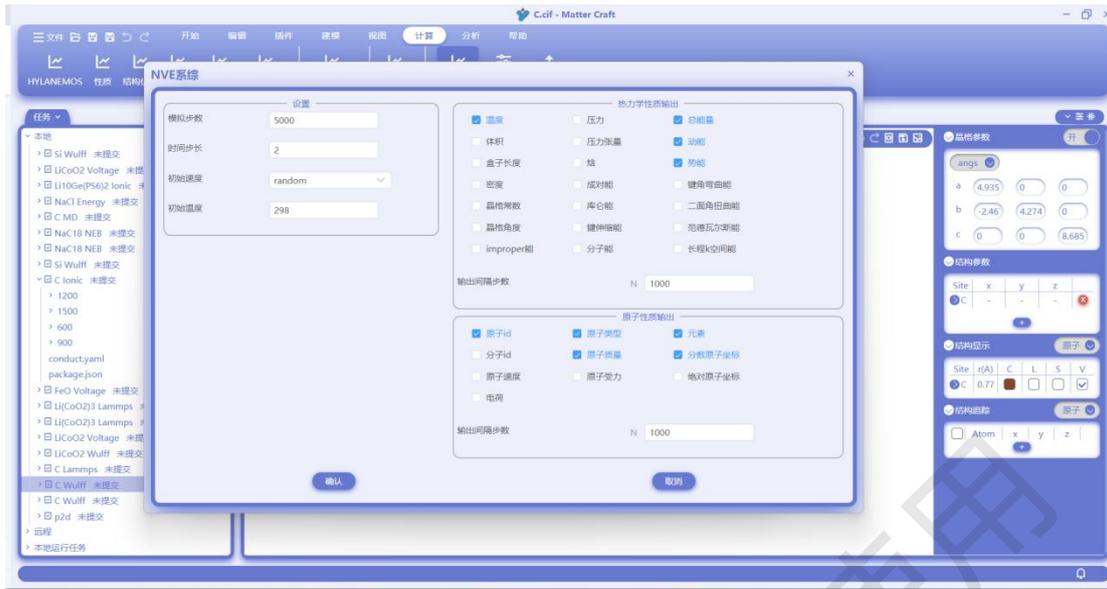
设置页面可进行算法、收敛标准和迭代步数等参数的设置。

设置完成后点击确认即可。



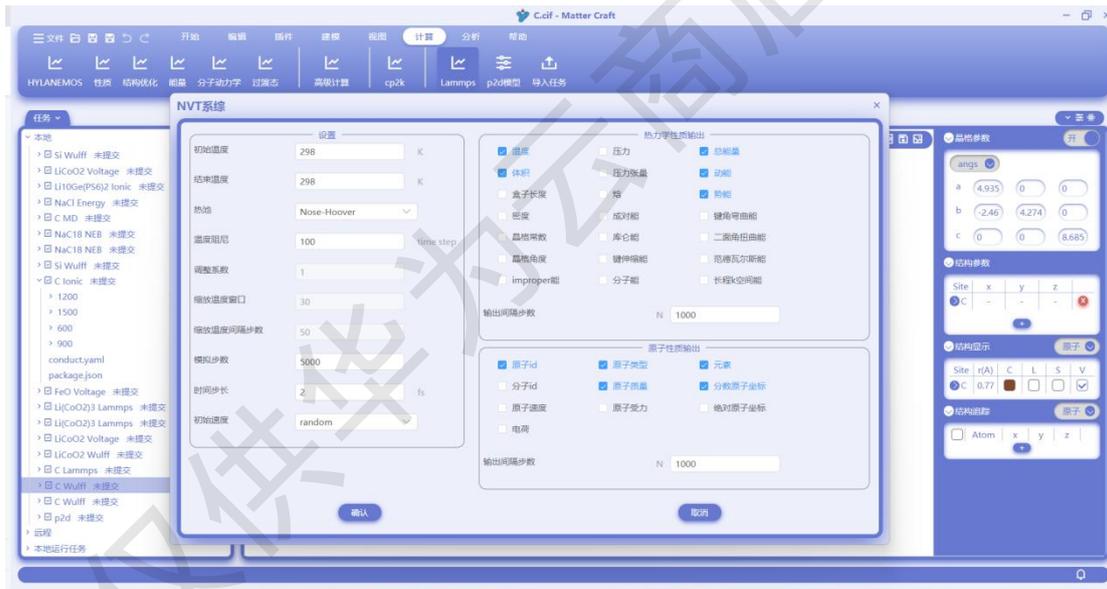
NVE 系综的设置页面如下图所示。

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。



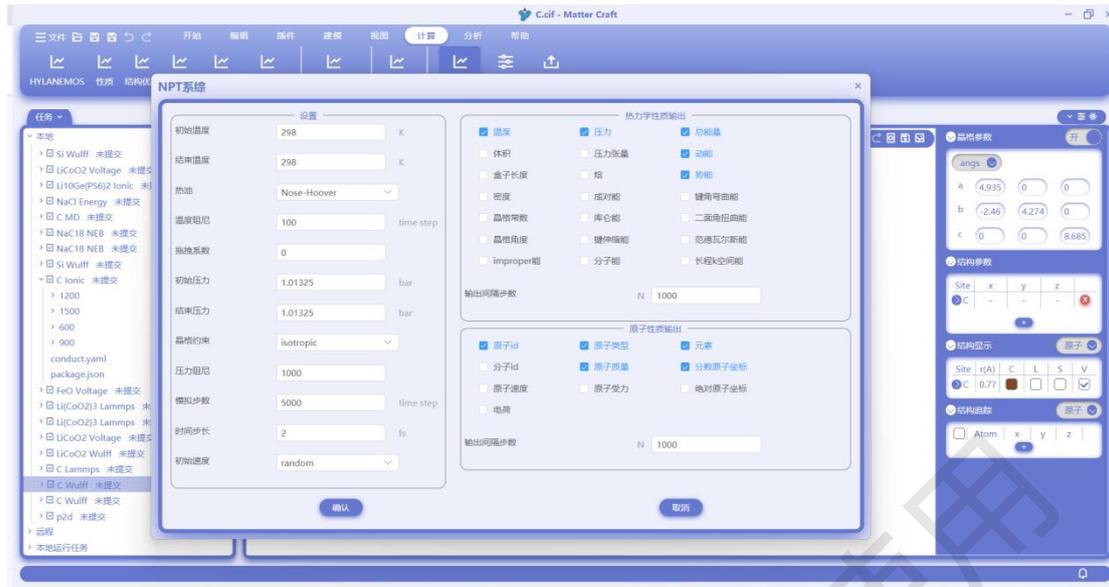
NVT 系综的设置页面如下图所示。

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。

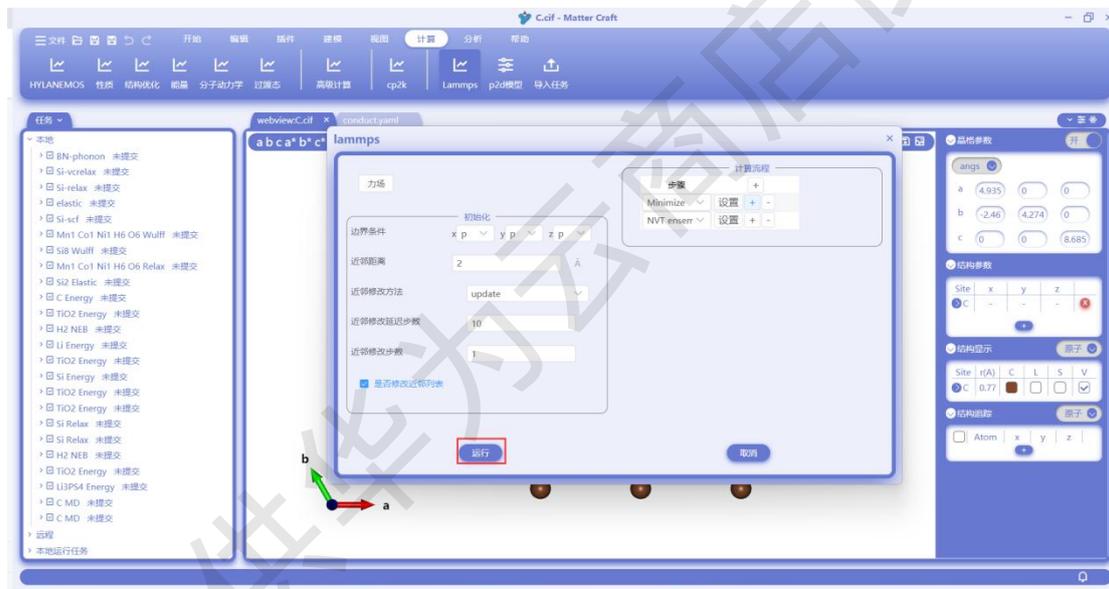


NPT 系综的设置页面如下图所示。

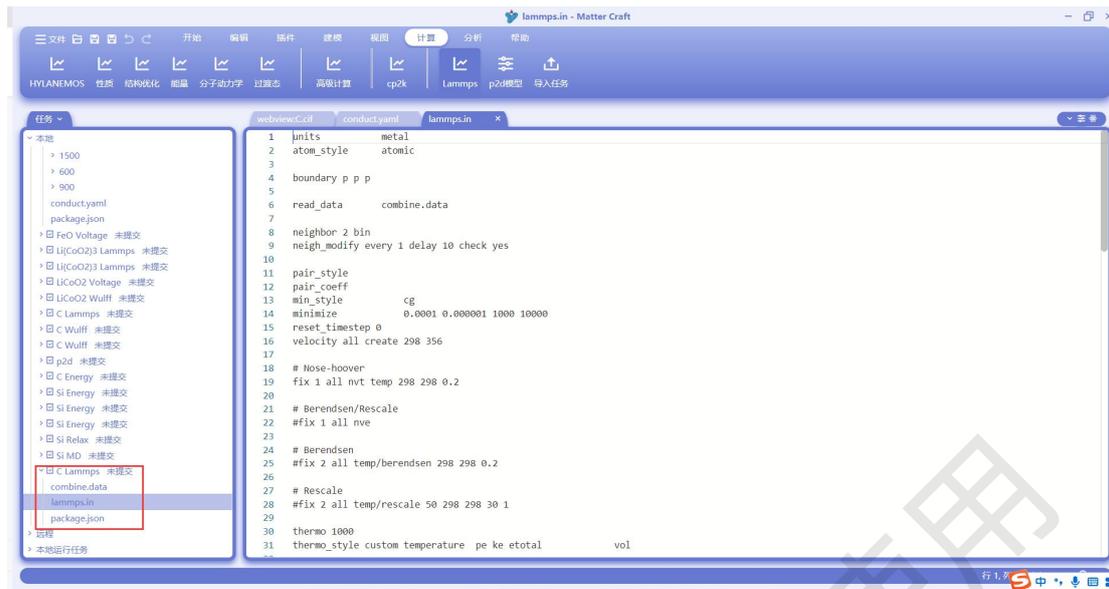
左侧可进行 NVT 系综的参数设置，右侧为热力学性质和原子性质的输出的设置，需要输出哪些参数，间隔多少步进行输出。设置完成后点击确认即可。



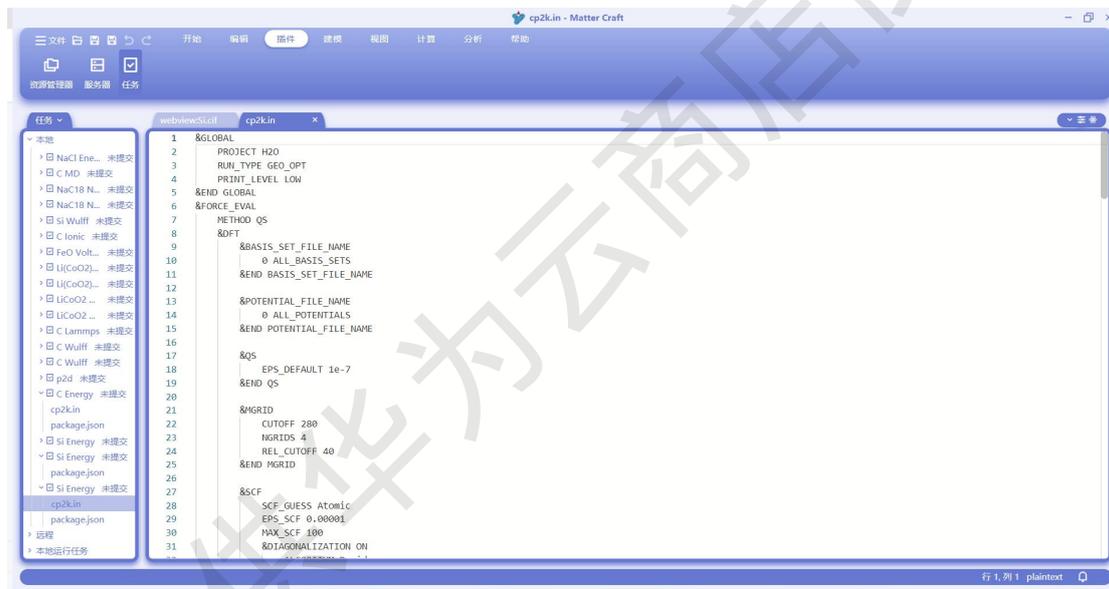
全部设置完成后，点击运行。



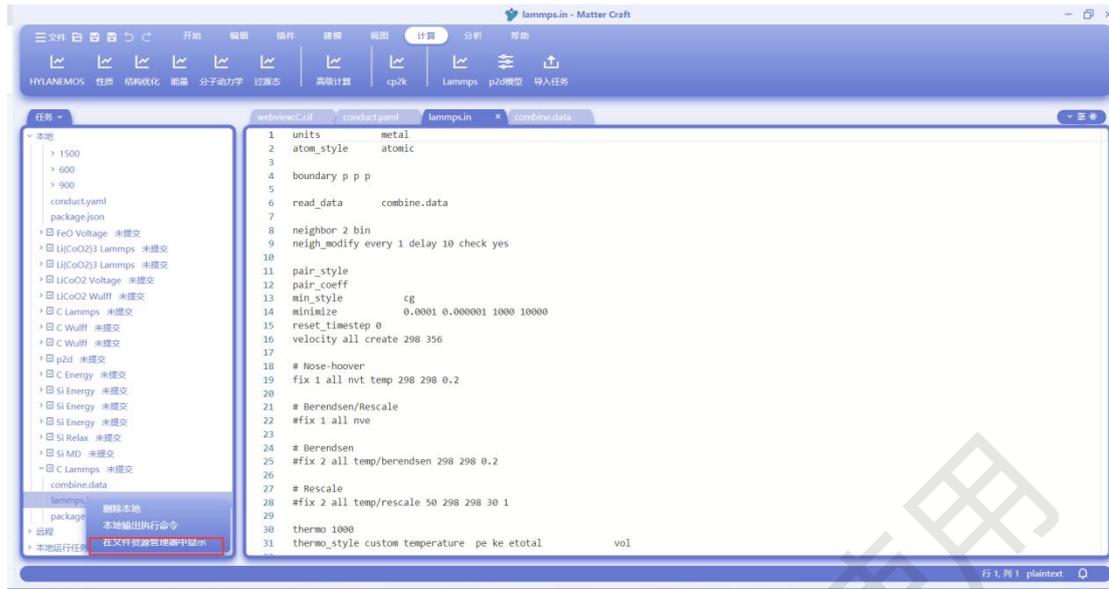
点击“插件”-“任务”，会显示所有生成的任务。最下方的任务即为刚刚生成的任务，任务名称为 C Lammmps，点击后，下方会出现 lammmps.in、package.json 和 combine.data 文件。



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



右键单击 lammmps.in，然后选择“在文件资源管理器中显示”。



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。