

二维异质结构建模教程

网络上关于异质结构建模的教程有很多，相信做过异质结的朋友都已经通过百度或其它途径找到过类似的教程，但大多数教程都是基于MS 手动创建，且在创建两种晶格常数不同的异质结时，关于如何求出你所需要的扩胞后的晶格常数显得很繁琐，因此本教程所用的方法旨在简化异质结建模流程，教程需要本人编写的脚本如下：

1. *m_n_supercell.py*
2. *heterojunction.py*
3. *multiplayer.py*
4. *supper_cell.sh*
5. *vaspkit* (非本人编写)

下面通过创建二维异质结ZnO/BN 为例，讲解建模流程：

1. 准备 ZnO/BN 原胞POSCAR如下：

```
ZnO\ (1\1\1)\ (2)
1.0
      3.2739000320      0.0000000000      0.0000000000
      -1.6369500160      2.8352805972      0.0000000000
      0.0000000000      0.0000000000      10.6682996750
O      Zn
1      1
Direct
      0.666666674      0.333333347      0.937359982
      0.000000000      0.000000000      0.000000000

BN\ (1\1\1)
1.0
      2.5562000275      0.0000000000      0.0000000000
      -1.2781000137      2.2137341609      0.0000000000
      0.0000000000      0.0000000000      10.5218000412
N      B
1      1
Direct
      0.666670038      0.333330002      0.000000000
      -0.000000000      -0.000000000      0.049590002
```

2. 记下 两种结构 (以下简称a,b)的晶格常数: a:3.273 b:2.556
3. 运行python *m_n_supercell.py*,并输入 3.273 2.556,脚本输出如下:

```
*****By XueFei Liu*****

The lattice constant for structure a:3.273

The lattice constant for structure b:2.556
***The possible new constants***
-----
Sqrt(lat_a): [6.9999, 4.0, 9.0]
Sqrt(lat_b): [11.9999, 6.9999, 16.0]
-----
*****
Produce m n groups for structure a...
```

```

m_n:1 [[-2, -3], [-1, 2], [3, 1]]
twist_angle:1 [100.9, 139.1, 19.09]
m_n:2 [[2, 0], [-2, -2], [0, 2]]
twist_angle:2 [0.0, 120.0, 120.0, 0.0]
m_n:3 [[3, 0], [-3, -3], [0, 3]]
twist_angle:3 [0.0, 120.0, 120.0, 0.0]
*****
Produce m n groups for structure b...
m_n:1 [] No m n group found!
twist_angle:1 [] No angle group found!
m_n:2 [[-2, -3], [-1, 2], [3, 1]]
twist_angle:2 [100.9, 139.1, 19.09]
m_n:3 [[4, 0], [-4, -4], [0, 4]]
twist_angle:3 [0.0, 120.0, 120.0, 0.0]

```

注：脚本默认 *mismatch* 为5%，如有必要可修改程序92行的 *mismatch* ,脚本98行 *evaule* 的值意义为预计扩胞后可能的晶格常数，默认值为5，表示以上输出 *Sqrt(lat_b)* 中的最大值不会超过25，如有必要可以将 *evaule* 设置大点，程序会输出更多的 *m n* 组合，*twist_angle*，但代价是计算时间更长。

4. *mkdir BN ZnO* 文件夹，并把相应的原胞和 *supper_cell.sh* 拷贝进去，运行 *sh supper_cell.sh*

```

*****By XueFei Liu*****
Input the m n group produced by m_n_superCell.py:
-2 -3 3 1

```

并按以上输入两组 *m n* 的值，注意：由上一步结果来看，对a 产生了3组 *m n* 的组合，对b 产生了两组组合，因此第四步在输入 *m n* 组合时，必须对应选择a b均正常产生的 *m n* 组合，即a 的 *m_n:2* 与b 的 *m_n:2* 对应，a 的 *m_n:3* 与b 的 *m_n:3* 对应，表示分别对a b 以不同的晶格常数扩胞，由于b 的 *m_n:1* 为空，所以a 的 *m_n:1* 无效，以上 *m_n* 的物理意义参考学术之友我写的上一篇相关的教程：关于用MS切面的经验。*twist_gangle* 中的值表示在构建新的超胞时，必须把超胞相对于原胞旋转一定角度，e.g a *m_n:2* [-2,-2] 对应 *twist_angle:2* [120]度，b *m_n:2* [3,1] 对应 *twist_angle* [19.09]度。第四步中输入参数 -3 3 1 表示对b 结构 选择了 *m_n: 2* 组合中的第一和第三组，运行后，结果如下：

```

The POSCAR_REV has been produced by vaspkit !
Run multiplayer.py to obtain multiple-layer POSCAR if necessary !

```

如果你想产生多层的结构，脚本提示再运行 *multiplayer.py*

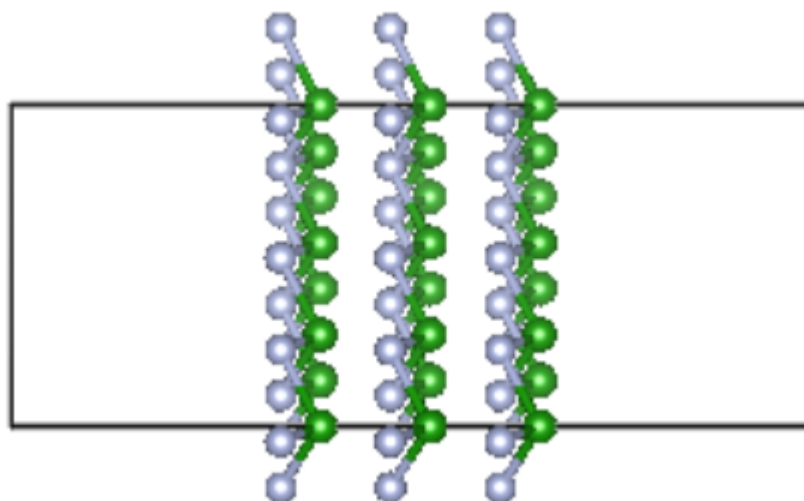
```

*****
*****
Given the number of layers ,distance between two layers and type of atoms coordination you
want to build:

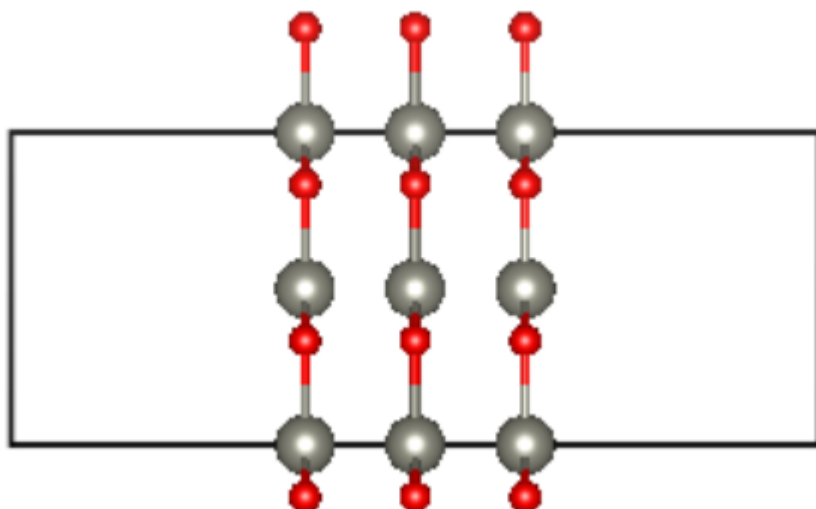
*****
*****
Input the number of layers:
3
Input the distance of two layers:
2
Input the type of atoms coordination(C or D):
D
Input the angle you want to rotate:
0
Now reading vasp structures.
Now produce new multi layers vasp structures.

```

注意：该脚本可以得到D C 两种坐标POSCAR，但强烈建议输入D，一方面C坐标用VESTA 显示有问题，另一方面后续步骤只支持D 坐标。此时已经将b(BN) 扩胞，建立了三层结构，层间距为2A，如下图：



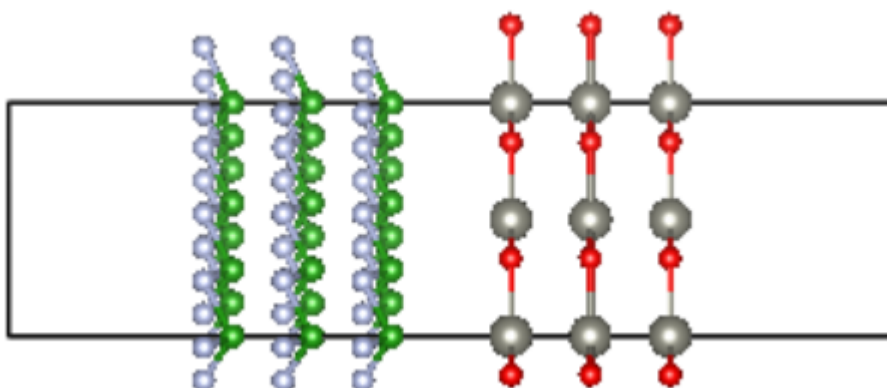
5.重复第四步，选择a m_n组合为： 2 0 0 2，对a(ZnO)结构扩胞后如下：

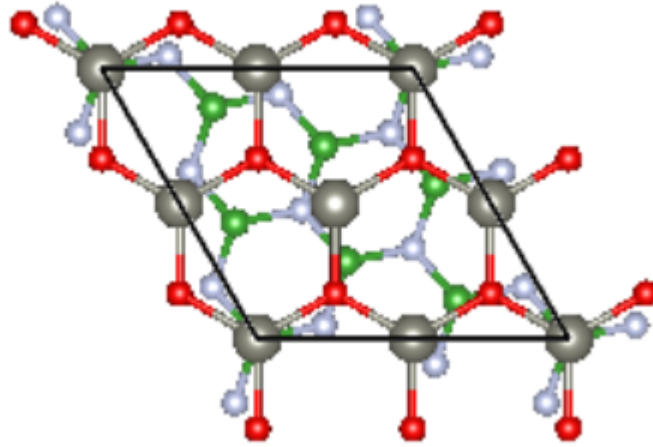


6.在BN ZnO 文件夹外运行：

```
python heterojunction.py ./BN/POSCAR_mullayer3 ./ZnO/POSCAR_mullayer3
*****By XueFei Liu*****
Input the layer distance for heterojunction: 3
```

异质结创建效果如下：





以上便是堆叠型异质结建模过程，如有问题，请联系XueFei Liu :316187631@QQ.COM ,后续考虑追加横向异质结建模过程。脚本下载：https://github.com/lxf-gzu/vasp_small_script