

## 关于用MS切面的经验

以ZnO 为例，比如我想切 (100) (110) (111) 三种晶面

- (100)

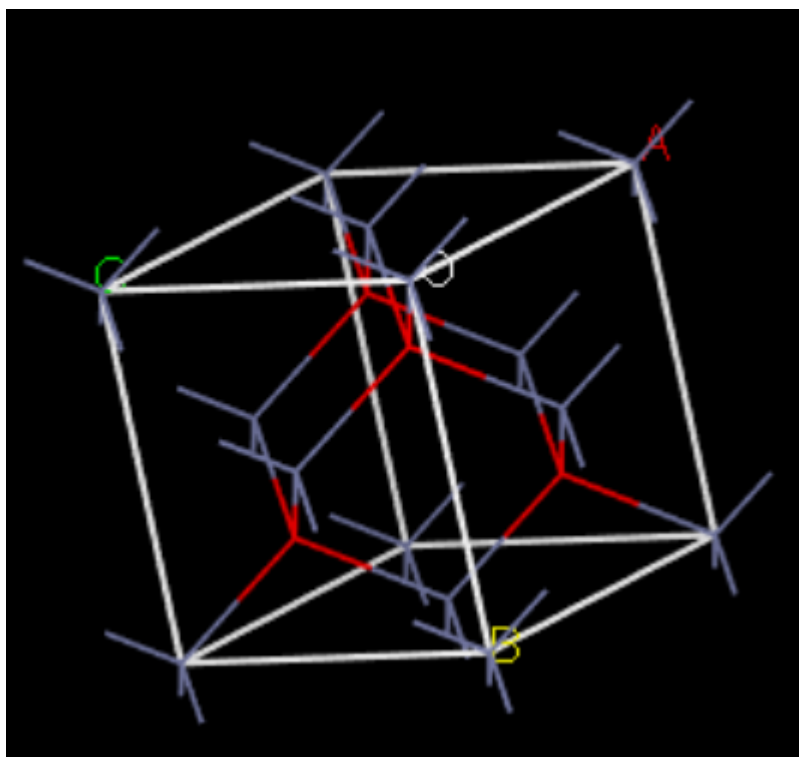


图 1

图1 是新鲜出炉的*Face-Centered Cubic ZnO*, 接下来借助MS 切 (100) 面，把ZnO 结构导入MS 后，按如下步骤操作：

1. Build->Surfaces->cleave surface

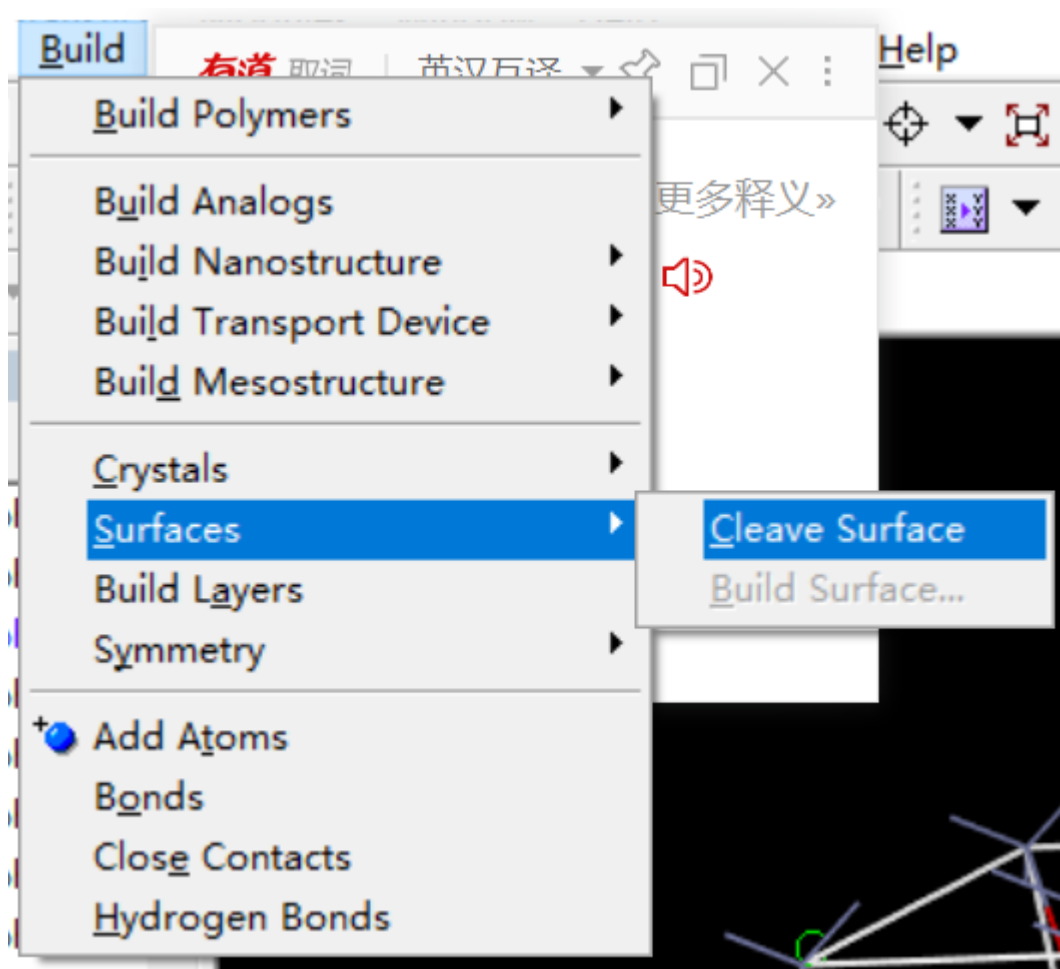


图2

2. 在Cleave plane(hkl) : 输入1 0 0

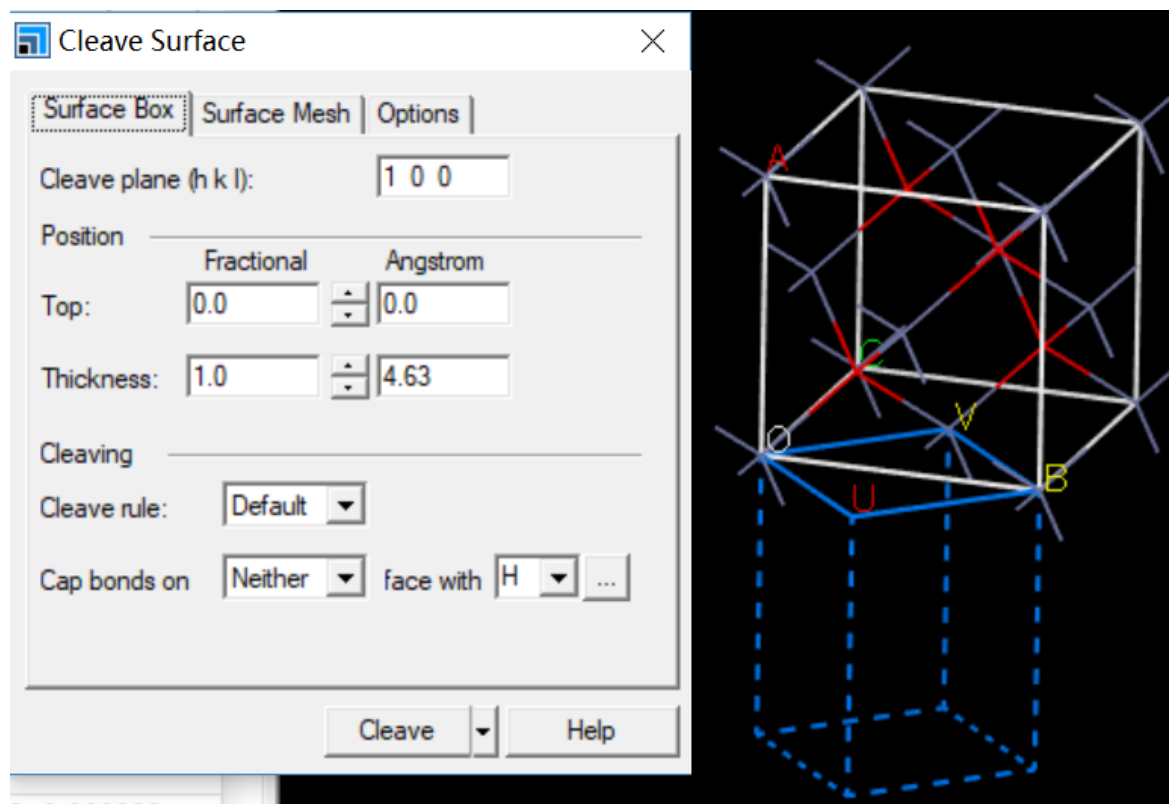


图3

注意：如果你对  $(hkl)$  密勒指数表示方式不太熟悉，请翻看固体物理书籍。可以简单的理解  $(100)$  为：1对应 $x$  or  $(oA)$ , 中间0 对应 $y$  or  $(oB)$ , 第三个0 对应 $z$  or  $(oC)$  方向，比如  $(100)$  表示切出来的平面将在 $oA$  方向有截点，而平行于 $oC$  和 $oB$  所在的平面。

3. 对于  $(110)$  和  $(111)$  切法完全一样，只需要改变 *Cleave plane(hkl)* 中的值分别为  $(110)$  和  $(111)$  即可，如下图：

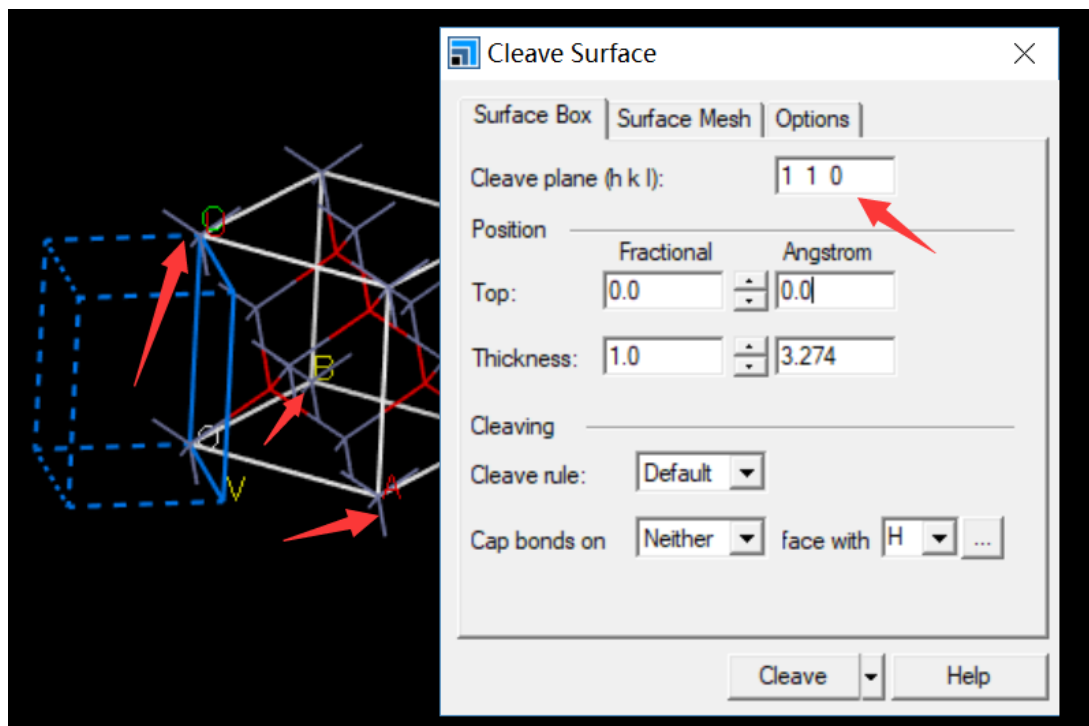


图4

注：由图4 可以发现  $(110)$  面将会在 $oA$  和 $oB$  方向会有截点，而平行于 $oC$ 。

图5为  $(111)$  面切面设置和预览图

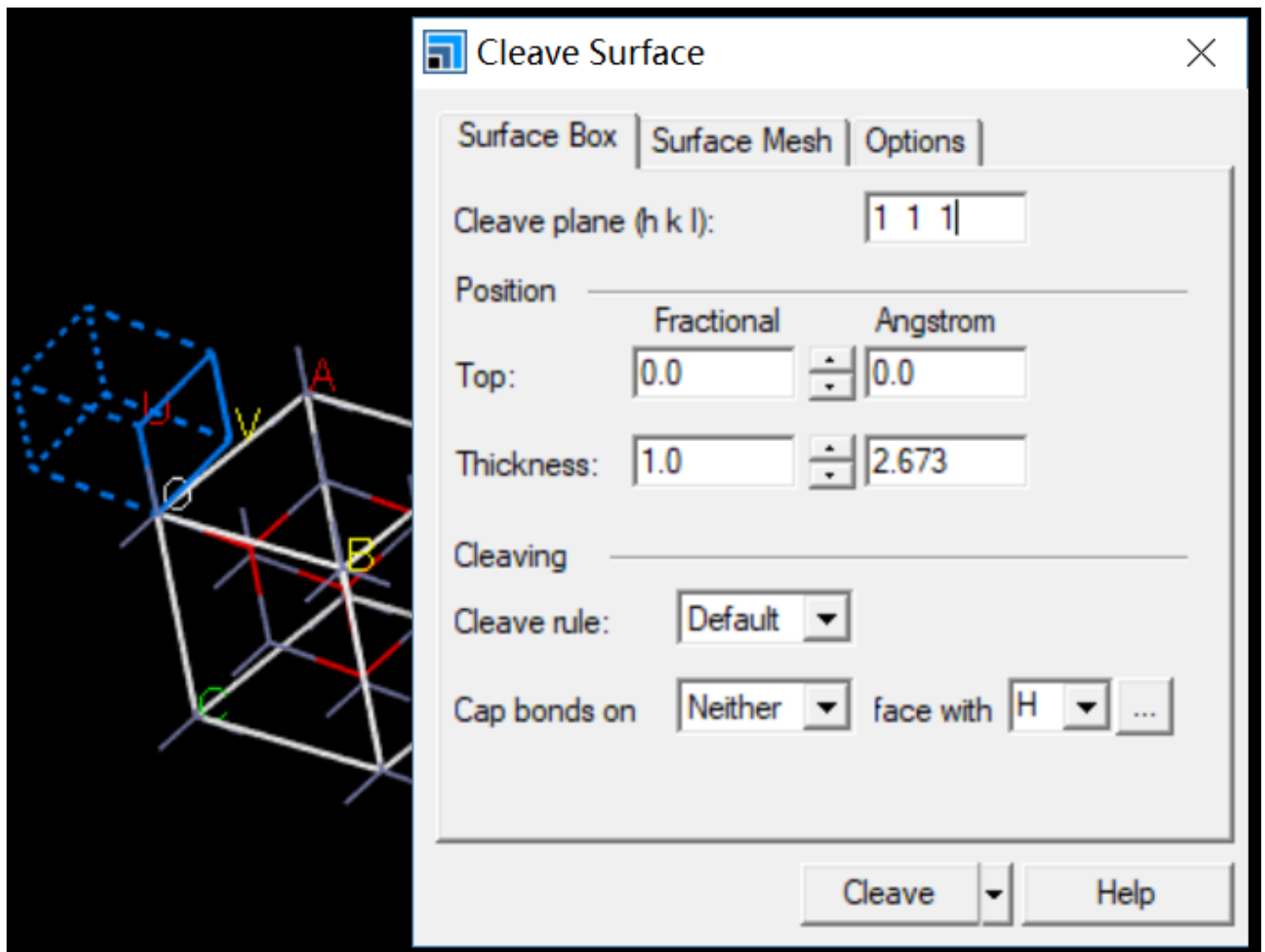


图5

## 以ZnO (111) 为例谈谈如何构建 $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ 晶面常数

1. 对图5 中点击最下面Cleave 按钮后，得到图6

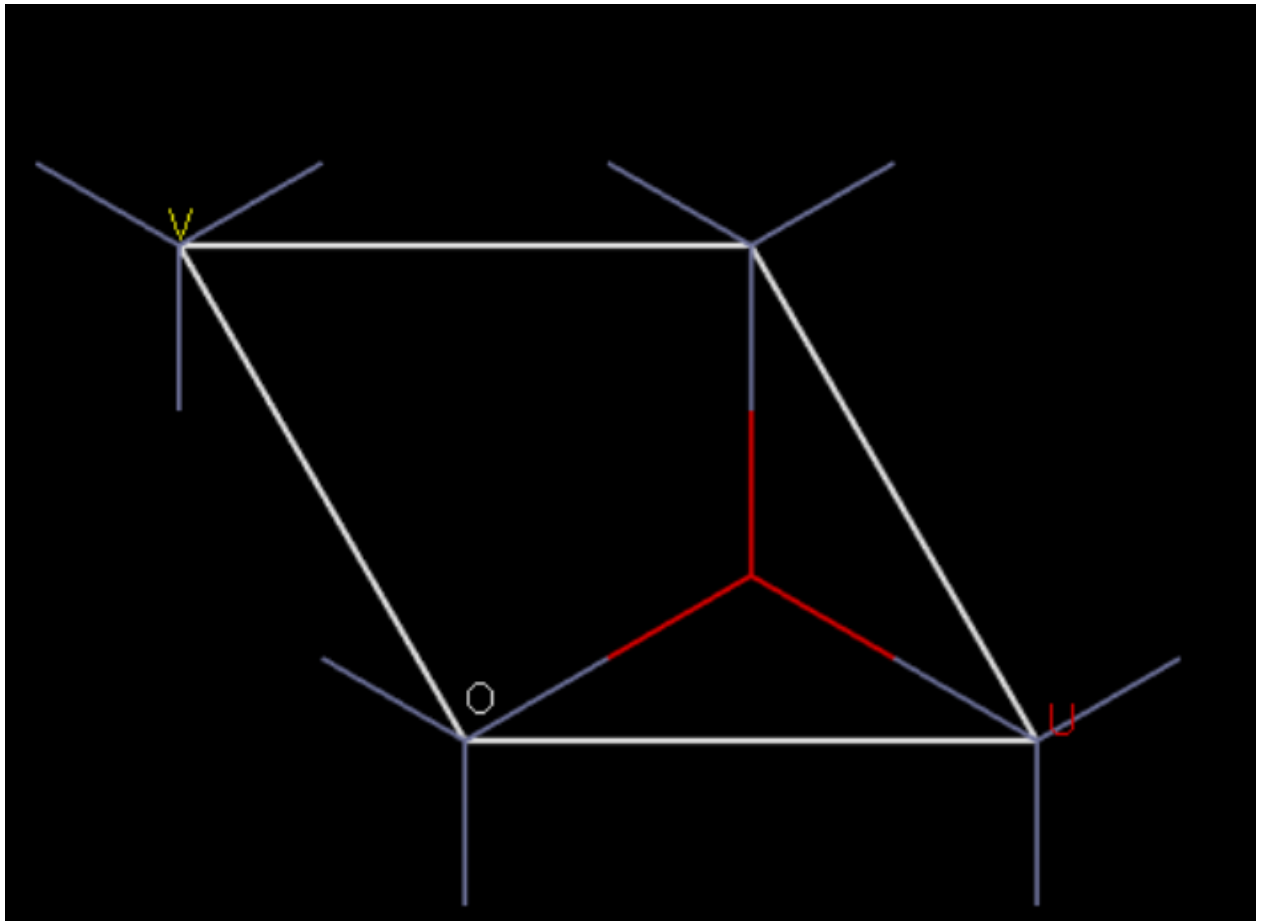


图6

注：DFT 计算软件一般是三维周期性进行计算，因此，如果上图我只保留一层，则需要用 *Build->Crystal->build vaccum slab* 构建真空层 如图7

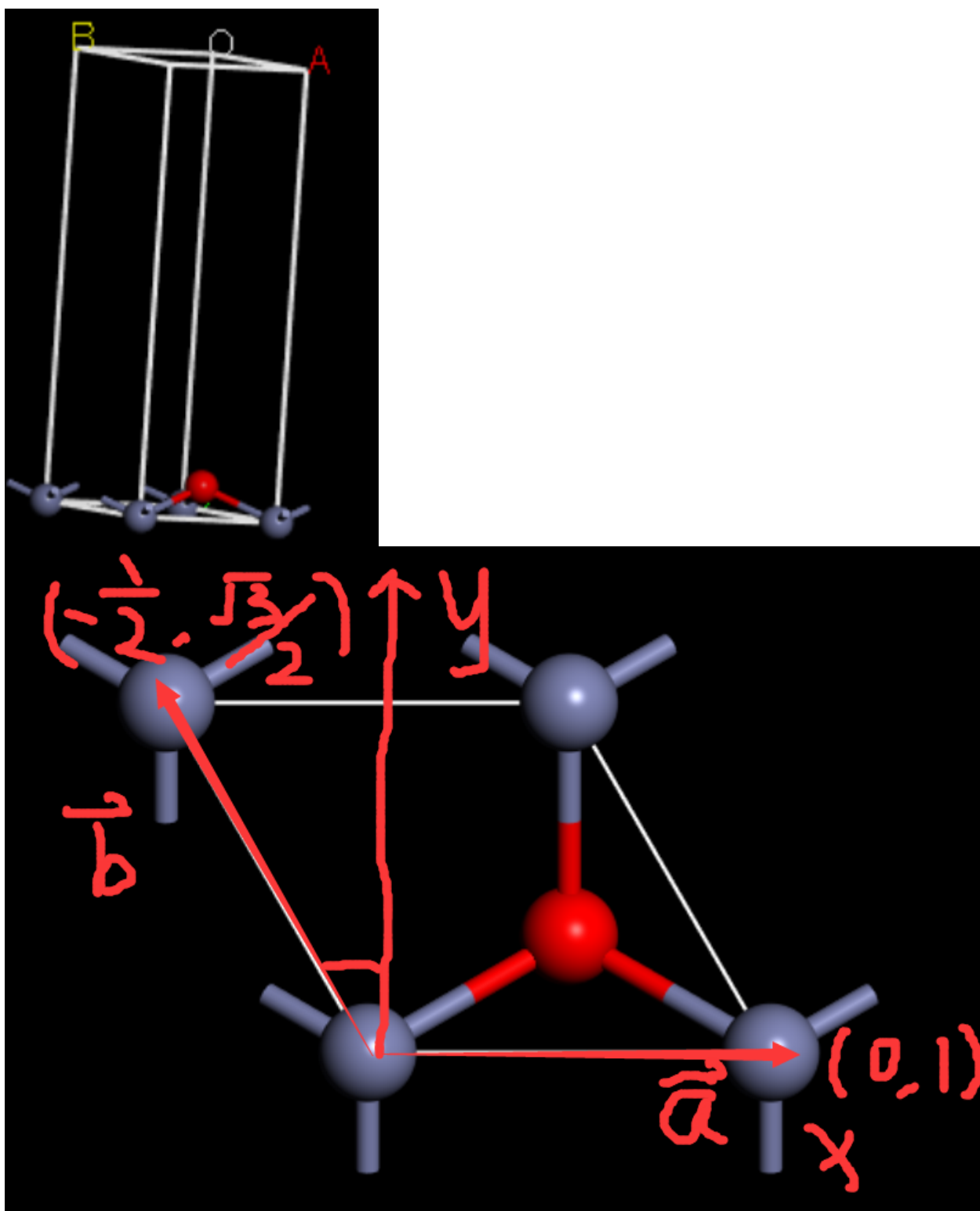


图 7

2. 下面简单推导想得到  $k_1 \times k_2$  时, 该如何设置 MS 中 Redine latttice 的值:

$$\begin{aligned}
\mathbf{a} &= (1, 0), \\
\mathbf{b} &= (-1/2, \sqrt{3}/2) \\
\mathbf{a}' &= \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} * \begin{vmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{vmatrix} * k_1 \\
&= (k_1 * \cos\alpha, k_1 * \sin\alpha) \\
\mathbf{b}' &= \begin{vmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \end{vmatrix} * \begin{vmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{vmatrix} * k_2 \\
&= (-1/2k_2 * \cos\alpha - \sqrt{3}k_2/2 * \sin\alpha, -1/2k_2 * \sin\alpha + \sqrt{3}k_2/2 * \cos\alpha)
\end{aligned}$$

注意：上面a' b' 是由a b 用矩阵旋转并缩放后得到，其原理示意图如图8 所示：

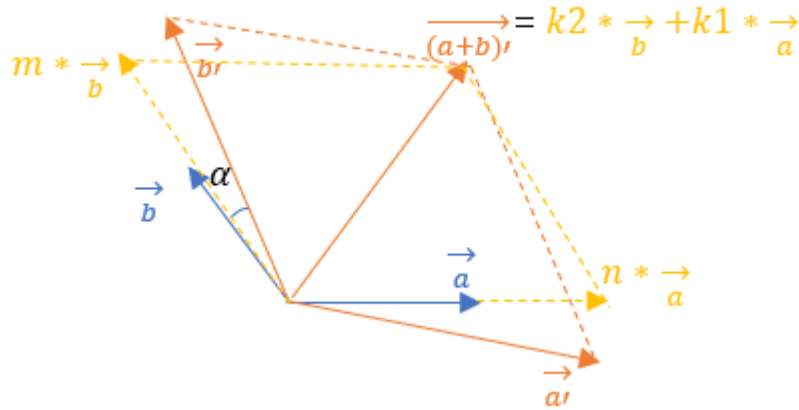


图 8

原胞为蓝色的a b 围成的菱形，浅橙色超胞的对角线由 $ma + nb$  线性组合得到，深橙色为当 $k_1 k_2$  不为整数时，为了得到 $k_1 \times k_2$  的超胞时，必须旋转一个 $\alpha$  角度（新超胞的格点必须落在原胞扩展后的格点上，看看固体物理的周期性），且此时新的晶格为原胞的 $k_1 k_2$  倍，而上面的公式正好用矩阵中的旋转和缩放来实现。由于新的超胞的对角线可以用以上两个向量来表示，即以下等式是成立的：

$$\overrightarrow{(a+b)'} = k_2 * \overrightarrow{b'} + k_1 * \overrightarrow{a'}$$

令对角线为c',则：

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}' &= (\mathbf{a}' + \mathbf{b}') = (k_1 * \cos\alpha - 1/2k_2 * \cos\alpha - \sqrt{3}k_2/2 * \sin\alpha, k_1 * \sin\alpha - 1/2k_2 * \sin\alpha + \sqrt{3}/2k_2 * \cos\alpha) \\
\mathbf{c}' &= m * \mathbf{a} + n * \mathbf{b} = (m - n/2, \sqrt{3}n/2) \\
\text{则:} \\
k_1 * \cos\alpha - 1/2k_2 * \cos\alpha - \sqrt{3}k_2/2 * \sin\alpha &= m - n/2 \\
k_1 * \sin\alpha - 1/2k_2 * \sin\alpha + \sqrt{3}/2k_2 * \cos\alpha &= \sqrt{3}n/2 \\
\text{且有 } \mathbf{c}' \text{ 的模相等:} \\
(m - n/2)^2 + (\sqrt{3}n/2)^2 &= (k_1 * \cos\alpha - 1/2k_2 * \cos\alpha - \sqrt{3}k_2/2 * \sin\alpha)^2 + (k_1 * \sin\alpha - 1/2k_2 * \sin\alpha + \sqrt{3}/2k_2 * \cos\alpha)^2 \\
\text{展开整理后得:} \\
m^2 + n^2 - mn &= k_1^2 + k_2^2 - k_1 k_2
\end{aligned}$$

以 $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ 为例：即 $k_1 = \sqrt{7}$ ,  $k_2 = \sqrt{7}$ , 则上式为：

$$m^2 + n^2 + mn = 7, \quad (m, n \text{ 为整数})$$

由代入法可得， $m=3, n=1$ , 或 $m=-1, n=2$ 为两组解

然后在MS中点Build->Symmetry->Redfine Lattice, 按如图 9 输入

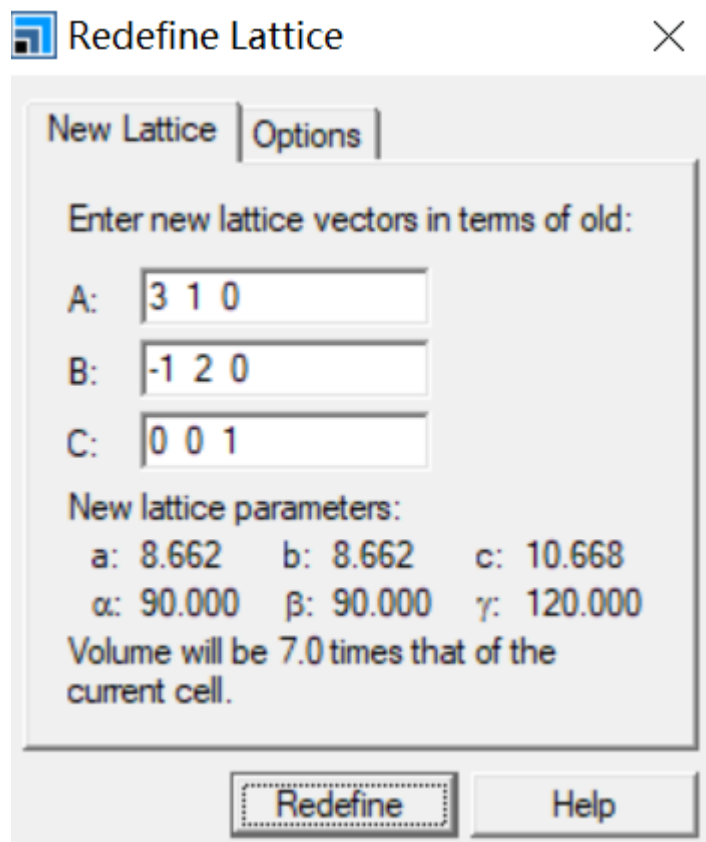


图 9

即可得到 $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$  的超胞，可验证此时新的超胞晶格长度为原胞的 $\sqrt{7}$  倍，如下图：



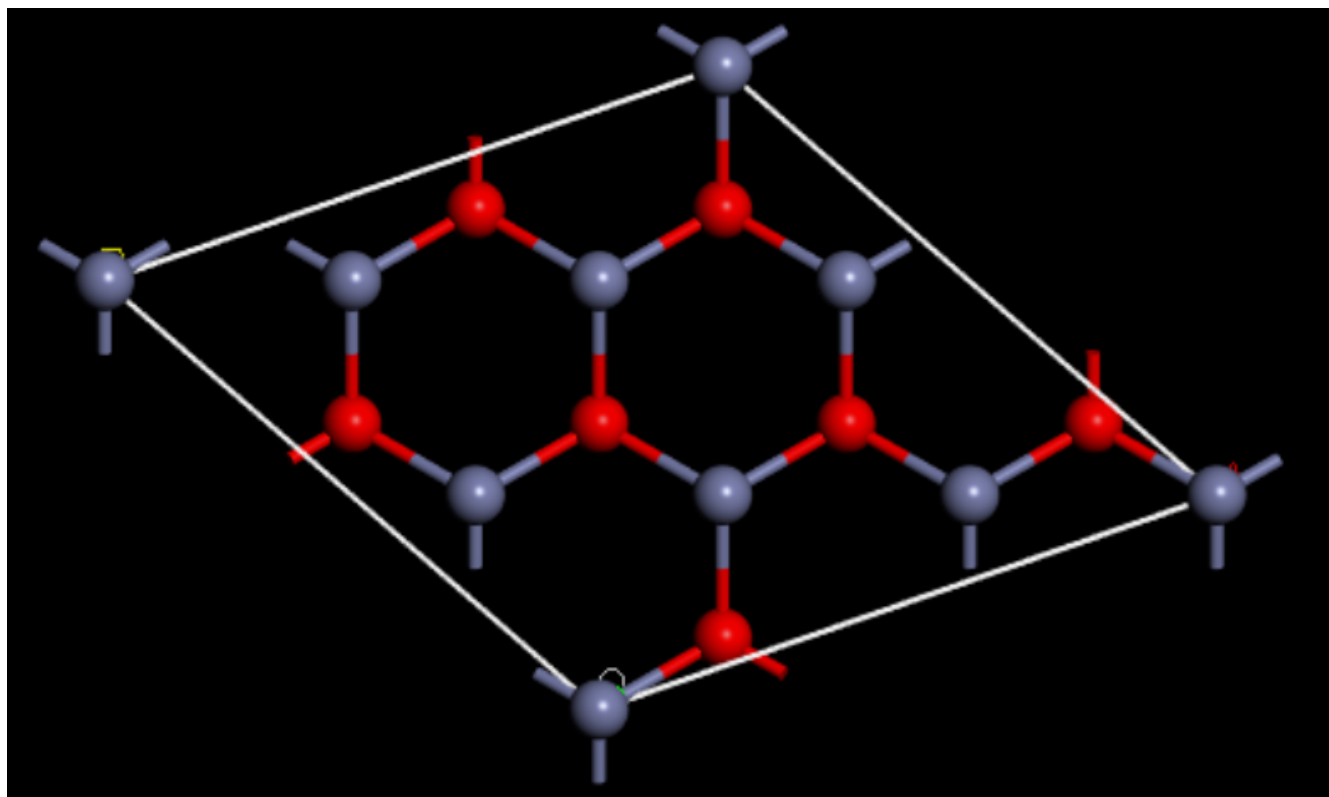


图 10

现在问题来了，“由代入法”印象中是由某个网友的教程中的语句，找不到该教程了，你会发现，代入法还可得到其它  $m\ n$  组合，比如：  $[-3, -2]$ ,  $[-2, -3]$ ,  $[-3, -1]$ ,  $[-1, -3]$ ,  $[-2, 1]$ ,  $[1, -2]$ ,  $[-1, 2]$ ,  $[2, -1]$ ,  $[1, 3]$ ,  $[3, 1]$ ,  $[2, 3]$ ,  $[3, 2]$ ，那这些组合都能切出使原本  $a\ b$  夹角不变的  $\sqrt{7}*\sqrt{7}$  的晶面吗？我们随便择一组试试：  $[-3,-2]$ ,  $[1,-2]$

得到其晶格常数和夹角图11

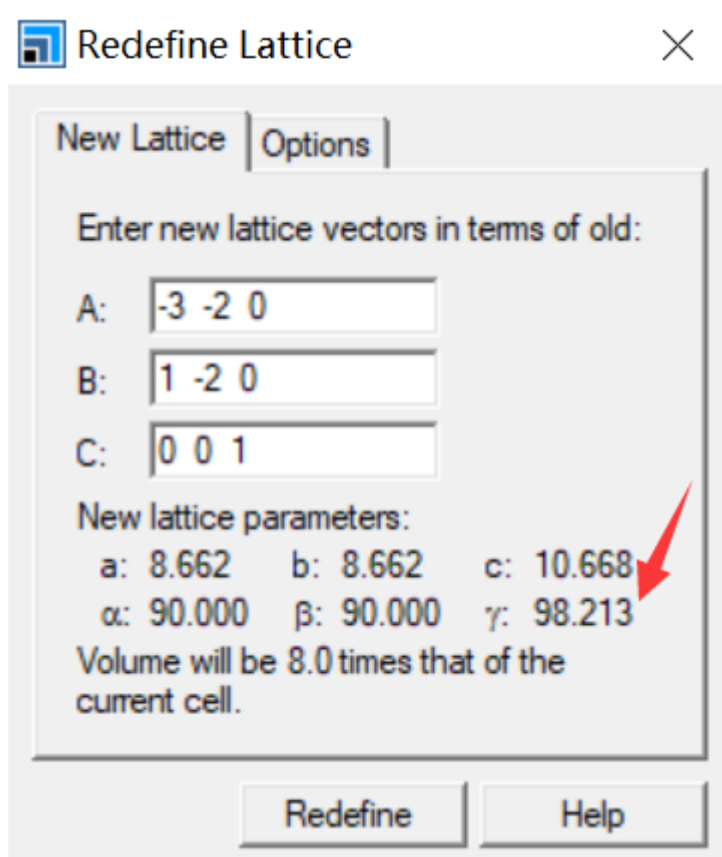


图11

可以看到 a b 长度确实为  $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$  倍，但gamma 角由原来的120 变为了98.213，显然不是你想要的结果。为了解决这个问题，鄙人闲来无事，硬是憋出个Python脚本，暂且命名为：m\_n\_supercell.py 可以筛选出符合要求的m n 组合，本测试是以六方的二维结构为例，ab 夹角为 120，如果你的结构不是六方，你也可以按照本教程思路，对脚本进行相应修改，如果你修改成功，欢迎分享交流。(316187631@.com)下面对脚本进行演示：

在python 环境下 运行脚本 `python m_n_supercell.py` 后提示如下：

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

```
Input sqrt(k1):  7
```

```
Input sqrt(k1):  7
```

```
m n groups as below:
```

```
[[-2, -3], [-1, 2], [3, 1]]
```

图示输入 7 7，表示将要生成 $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ 的超胞，脚本输出三种 m n 组合，此时 在MS 图11 中的A B 栏输入以上3种 m n 组合的任意两种都是OK 的，如果你的体系  $\sqrt{k1} \times \sqrt{k2}$  无法落在格点上，脚本将提示你无法得到相应的m n 组合：

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

```
Input sqrt(k1):  5
```

```
Input sqrt(k1):  5
```

```
m n groups as below:
```

```
No m n group found,please check it
```

为验证是否可找到其它组合的m n 值，输入如下：

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

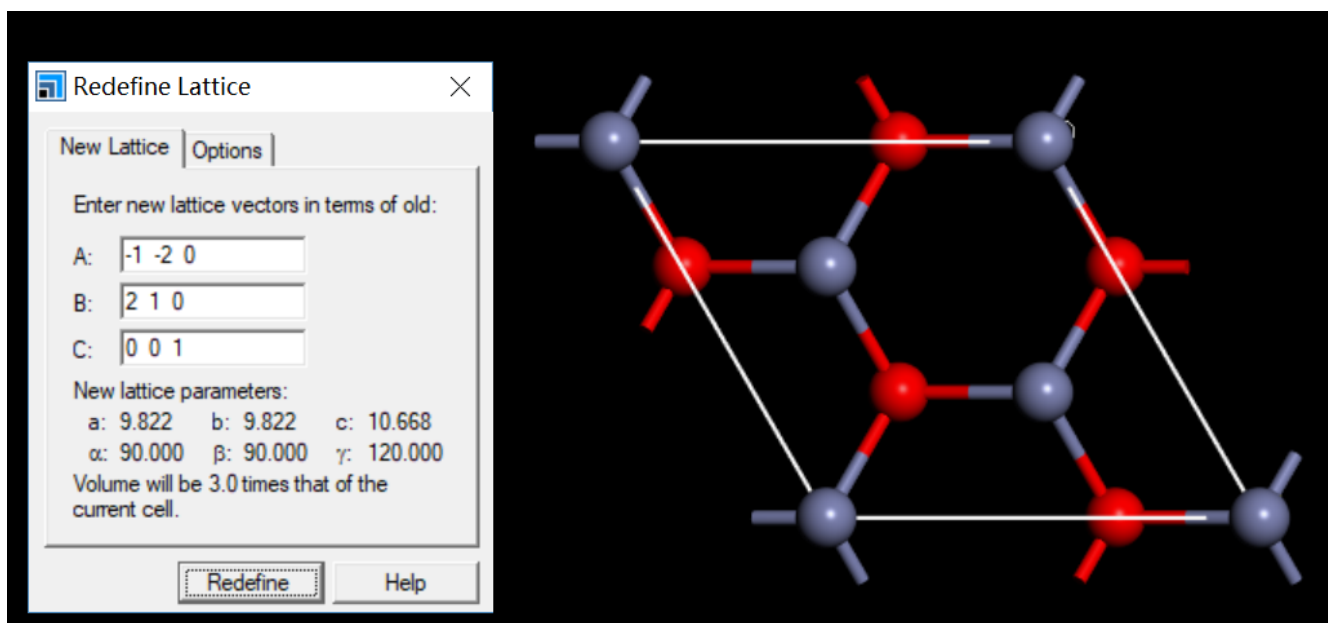
```
Input sqrt(k1):  3
```

```
Input sqrt(k1):  5
```

```
m n groups as below:
```

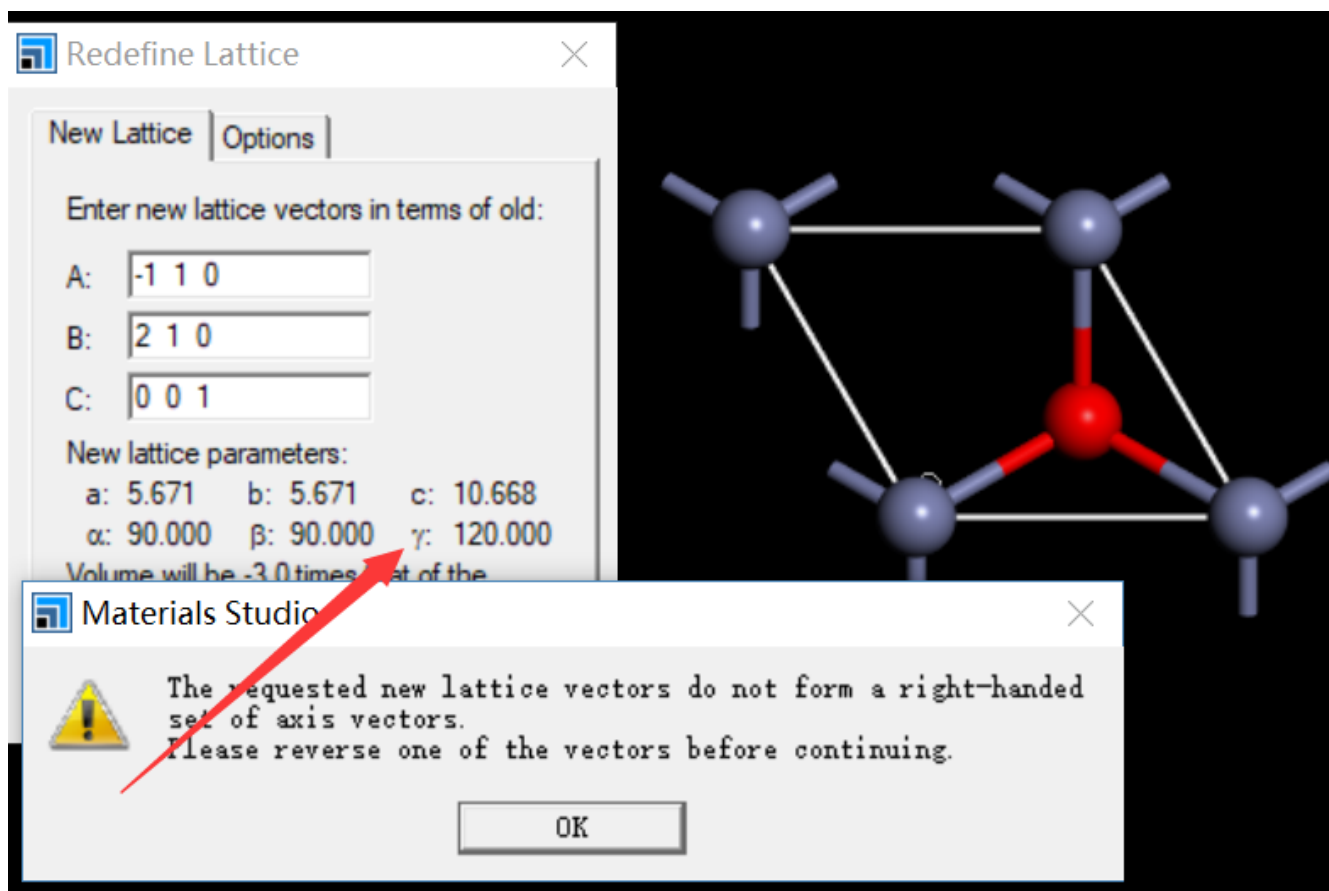
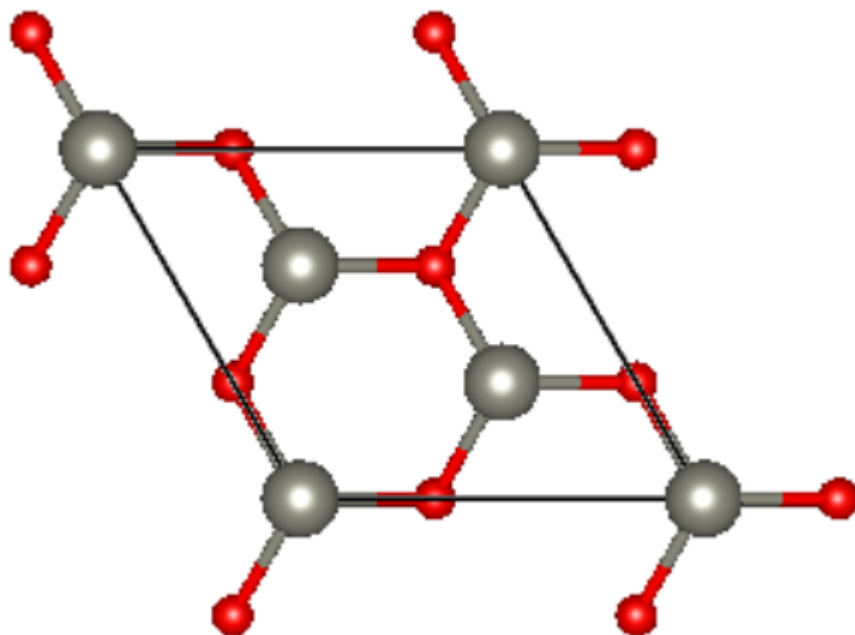
```
[[-1, -2], [-1, 1], [2, 1]]
```

把以上m n 组合输入到ms （图11中）得到如下：



结果与vaspkit 400 一致:

```
-->> (01) Reading Structural Parameters from POSCAR File...
Enter the new lattice vector a in terms of old:
(MUST be three integers, e.g., 1 2 3)
-1 -2 0
Enter the new lattice vector b in terms of old:
2 1 0
Enter the new lattice vector c in terms of old:
0 0 1
+----- Summary -----+
The Transformation Matrix P is:
-1 -2 0
 2  1 0
 0  0 1
Lattice Constants in New Cell:  5.671  5.671 10.668
Lattice Angles in New Cell:  90.00  90.00 120.00
Total Atoms in New Cell:  6
Volume of New Cell is 3 times of the old cell
```



可以发现该组合得到的新的晶格常数和夹角与上一组  $m$   $n$  值一致，但由于MS 只能适用于 *right-handed* 规则，所以无法得到新的晶胞。把这个组合输入vaspkit 也是提示无法生成超胞，

经测试发现 A B 可以生成的  $m$   $n$  组合如下表所示：

<b>A:</b>	<b>-1 -2</b>	<b>-1 -2</b>	<b>-1 1</b>	<b>-1 1</b>	<b>2 1 2 1</b>
<b>B:</b>	<b>-1 1</b>	<b>2 1</b>	<b>-1 -2</b>	<b>2 1</b>	<b>-1 -2 -1 1</b>
	X	V	V	X	X V

上面统计中X 表示无法生成新的超胞，V 表示可以生成新的超胞。仔细分析上表，其实也容易找到究竟哪些组合是可以的，也就是用右手法则，伸出右手，大拇指朝上，四指从OA 出发旋转ab 角到达OB 时，如果转过的角度小于180（对于六方为120）则可以生成新胞(对应V)，如果大于180（240）则不行（对应X）。

以上是关于切面的一些经验，欢迎大家指正，脚本下载地址：