

第 2 章 Materials Studio 建模

2.1 界面常用操作

2.1.1 Materials Studio 的启动

从 Windows“启动”菜单中选择“程序”Accelrys Materials Studio 4.0| Materials Studio。如果在桌面上有 Materials Studio 图标，也可以通过双击图标来启动 Materials Studio。在启动 Materials Studio 时，首先会出现一个所谓的欢迎界面（Welcome to Materials Studio），必须创建一个新的项目或从对话框中载入一个已经存在的项目。

注意：如果是第一次打开 Materials Studio，会看到一个叫做 Materials Studio 文件关联的对话框，如果出现这种情况，按照提示点击 OK 按钮即可。

2.1.2 创建项目

在欢迎界面对话框上选择创建一个新的项目，然后点击 OK。然后会出现新建项目对话框，选择要存储文件的位置并且键入“tiejifeijinghejin”作为文件名，然后点击 OK。此时的项目管理器如图 2-1 所示：

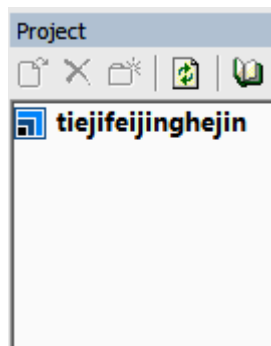


图 2-1 Project 界面

Materials Studio 对中文支持不好，命名时最好用英文字母，可以右击点 Rename，进行重命名。

2.1.3 输出图像

可以将 3D Atomistic 文件显示的图像作为位图输出，输出的图像可以包含到其它文件中。位图图像被存储为.bmp 格式，可以使用简单的位图编辑器比如

Windows 的画图进行编辑。从菜单栏中选择 **File | Export...** 显示 **Export** 对话框。点击 **Export as type** 文本框右侧的选项箭头，从下拉列表中选择 **Structure Bitmap (*.bmp)**。一旦选择了位图格式，**Options...** 按钮就被激活了。点击 **Options...** 按钮以显示 **Bitmap Export Options** 对话框。可以调节对话框中的位图图像的像素尺寸以适合相关需求。

2.1.4 自动保存

Materials Studio 具有自动保存功能，它可以在工作期间，以一定的时间间隔将项目中文档的变化写入硬盘中。如果希望在工作期间执行自动保存功能，则应该确保该功能是被打开的，如果有必要可以调整自动保存的时间间隔。从 **Materials Studio** 菜单栏上选择 **Tools | Options...**，显示出选项对话框。在 **General** 选项卡上，确保 **Enable AutoSave** 检查框被选中，自动保存时间间隔设成 10 分钟。如果在保存工作之前，**Materials Studio** 程序意外地结束了，比如断电或程序错误，在重新启动程序之后，则可恢复当前项目自动保存的最新的版本。

注意：恢复文件选项只出现一次，如果拒绝恢复自动保存的文件，那么在硬盘上的自动保存文件将被删除。还可以通过在选项对话框的 **Folder Locations** 选项卡中指定的位置来手动恢复自动保存文件。选择选项对话框的 **Locations** 选项卡，检查 **AutoSave** 目录的默认位置，点击 **OK**，关闭对话框。

2.1.5 界面介绍

1、菜单栏

- 1) **File**: 文件。关于文件和工程操作，比如打开，保存，输入，输出和打印。
- 2) **Edit**: 编辑。编辑所选的物体和使用剪贴板。
- 3) **View**: 视图。修改 **MS** 模型的外观。
- 4) **Modify**: 修改。修改当前窗口物体性能。
- 5) **Build**: 建立。计算键的相关性质，关闭键之间的链接，氢键以及创建聚合物，晶体，表面和层状结构。
- 6) **Tools**: 工具。控制当前窗口的物体。
- 7) **Statistics**: 使用静态分析程序。
- 8) **Module**: 模块。使用 **MS** 模型模块。
- 9) **Window**: 窗口。在 **MS** 模型中组织和激活打开的文件窗口。
- 10) **Help**: 使用 **MS** 模型帮助系统或者其他关于 **MS** 模型的网络信息。



2、工具栏:


- 1) **Standard**: 标准。文件操作。





2) 3D Viewer: 3D 视图模式和视图控制工具。3D 结构视图可能通过使用 3D Viewer 工具栏上的按钮用不同的方法进行操作。



 选择不同类型的对象：在 3D 视图工具栏上，选择 3D Viewer Selection Mode 按钮 ，然后在所建结构中通过单击选择一个单一的原子。原子变成了黄色表明它已经被选择了。通过鼠标的托拽操作可以选择一定区域内的所有对象，包括原子和键。在结构中的某个原子或键上双击鼠标可以选择整个结构。同时按住 SHIFT 和 ALT 键，右键点击并向左拖动。

 Rotate: 旋转结构视图。等同于按 Shift+鼠标右键+鼠标中键，再松开中键，即可随着鼠标移动而旋转结构视图。

 Zoom: 向上或者右侧拖动可以增大所选结构的视图：向下或者向左侧拖动会缩小所选结构的视图。

 Translation: 将结构沿着不同的方向平移。等同于按 Shift+鼠标右键+鼠标中键，再松开右键，即可随着鼠标移动而平移结构视图。



Fit to View: 根据窗口的尺寸，为 3D 结构选择合适的大小。

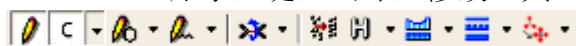


Recenter: 将结构放置到窗口的中心，结构大小不变。



Reset View: 将结构放置到窗口中原来的位置，并恢复原有大小。

3) Sketch: 原子，键，画环，修改工具。



替换原子。

4) Symmetry: 创建，修改，找到对称系统。



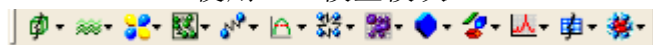
5) Atom & Bonds: 创建原子和键，操作工具。



6) Animation: 在 3D 视图控制动画。



7) Modules: 使用 MS 模型模块。



3、三个 Explorer: 从 View (见图 2-2) 的 Explorer 可调出此三个 Explorer，并都可以通过点击标题栏并拖动将三个 Explorer 放到屏幕上的任何位置。

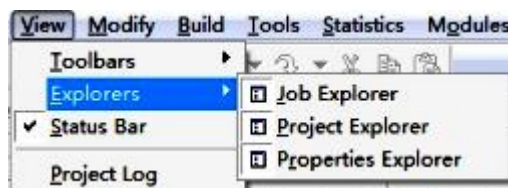


图2-2 调出Explorer

几个重要的窗口，可分为这三类：

1) Job Explorer: 见图 2-3, 显示已完成的、正在运行的程序。所属模块 (Server);

显示动态模拟的状态 (status): 准备 (setup)、开始 (starting)、运行 (running), 当成功运行会出现 successfully, 若失败则会出现 failure, 此时应当选择 View==>Project Log 查看错误信息, 如图 2-4; 此外还有进度 (Progress :任务以百分比显示的进度) 等等。



图2-3 Job Project

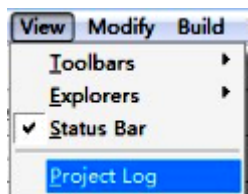


图2-4 查看工程日志

2) Project Explorer: 见图 2-5, 显示运行的 job, 各种输入与输出文件, 近端远程的状态都可以显示, 可以查看结果、修改输出输入的相关设定。

3) Properties Explorer: 见图 2-6, 材料的原子及电子结构 3D 模型等物性数据, 例如晶体晶胞边长、原子元素种类等等。均可通过双击加以修改。

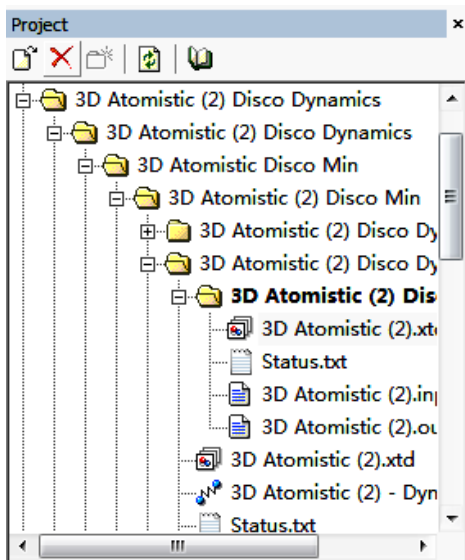


图 2-5 工程文件

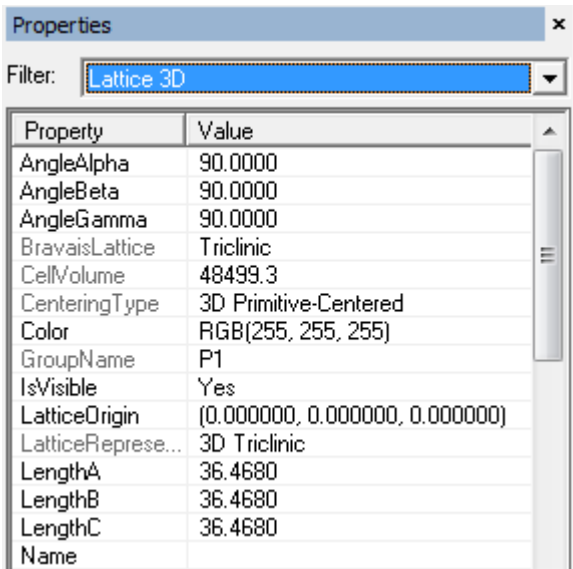


图 2-6 特性参数

2.2 晶胞的建立

2.2.1 单个晶胞的建立

1、首先要有晶胞，里面建立原子结构；可以通过 file==>import 打开进入 structure 内建的分类型，选已经建好的结构。晶格参数都会自动显示。

2、也可手工输入 Fe 的晶体结构。先打开 New Document，选 3D atomistic document，见图 2-7，确定之后会给出一个空的 3D 对象的工作稿。再点击 Build==>Build Crystal，见图 2-8，弹出对话框，见图 2-9，据文献[15]，得到 Fe 晶体的参数，手工输入晶体结构，输入空间群（Enter group）：space group-点群：1 P1（原胞，对称性最低）。

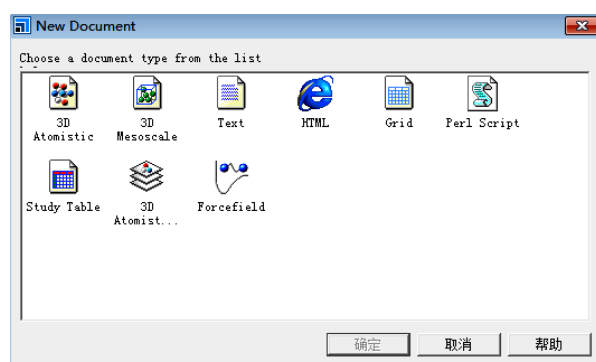


图 2-7 新建类型

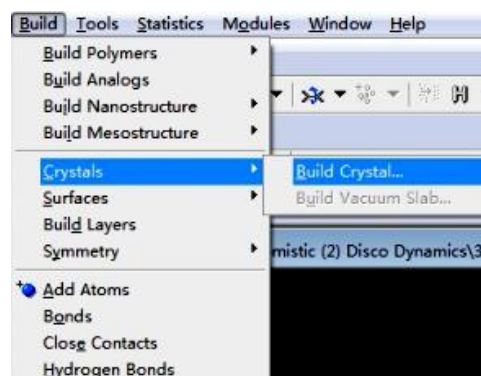


图 2-8 建立晶胞

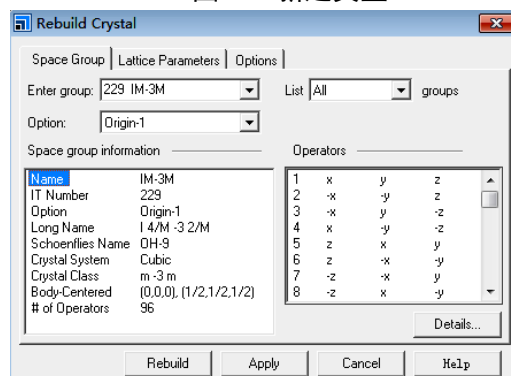


图2-9 选择空间群

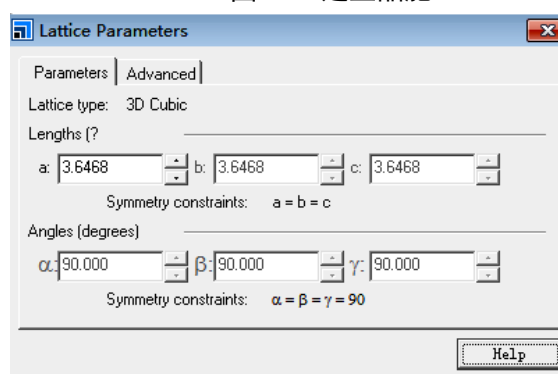


图2-10 晶格参数的设定

注意：一旦在 Space Group 选项卡上输入了 space group 的信息，a、b、c、 α 、 β 和 γ 点阵参数就根据所设置的空间群的对称性被自动地设置了。

这一操作将 space group 设置为 229 IM-3M，Space group information 框中的信息改变，显示空间群的细节。Operators 框也用与空间群相联系的对称性操作进行了更新。

设置点阵参数。选择 Lattice Parameters 选项卡，如图 2-10。显示 Lattice Parameters，填写晶格常数，比如 a, b, c 的值，以及三个角度，Fe 的 $a=b=c=3.6468$ ，由于所选择空间群的对称性，只有某些参数能被设置。在 Lengths 区，给出了对称性所规定的约束的暗示，这样可以知道参数 a 必须等于 b 和 c。

option 里面基本上是预设就可以，如图 2-11。Lattice option 里的 orientation standard 指晶胞在绝对坐标中的方向。

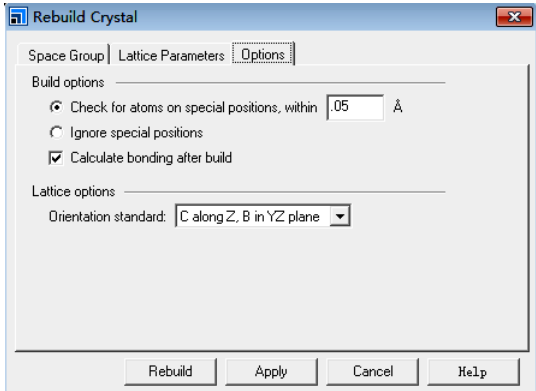



图2-11 Options选项卡

最后按 Build 或者 Apply 就可以生成该结构的晶格模型了。

3、添加原子

在刚才的 model 中加入原子。从工具栏上蓝色球按下去，得到对话框，如图 2-12 所示，就可以加原子，从元素周期表中选原子 Fe，如图 2-13，名字自己会补，abc 用分数坐标，Options 选项卡（见图 2-14）包括额外的键设置和笛卡儿坐标与分数坐标的选择等。这里要注意的是，在开始添加原子之前，要确保 Test for bonds as atoms are created 选项是激活的。即在 Add Atoms 对话框上选择 Options 选项卡，Test for bonds as atoms are created 应该是被选中的。由于所建为晶胞，所以在 Options 中，坐标系统要选择 Fractional。（Fractional 坐标系统用于描述周期单胞，而 Cartesian 坐标系统用于描述非周期结构。）再次选择 Atoms 选项卡。重复操作，直到添加完晶胞中的所有原子。关闭 Add Atoms 框。

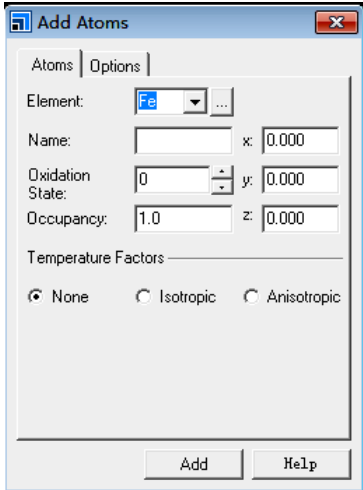


图 2-12 Atoms 选项卡

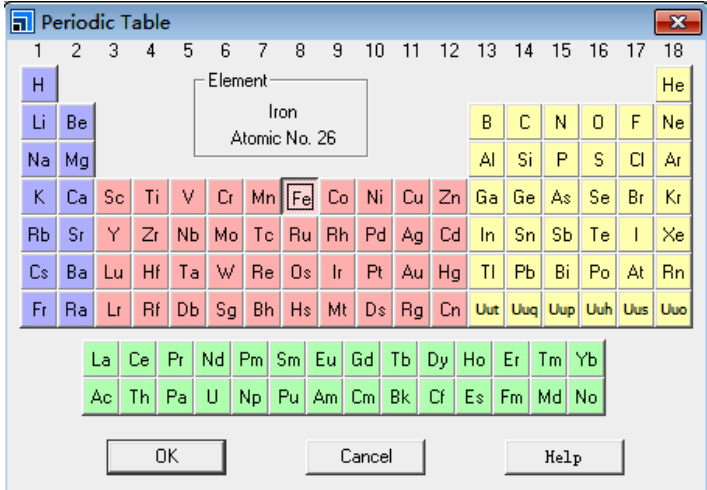


图 2-13 元素周期表窗口

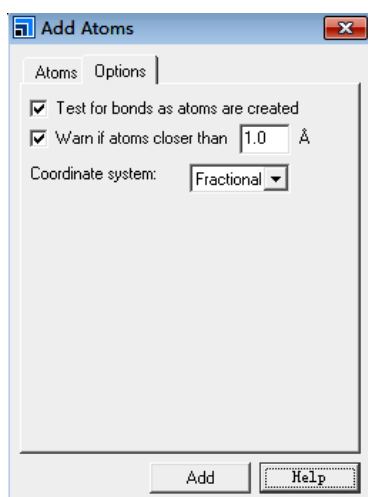


图2-14 Options选项卡

在 3D model 里可以看到这个 Fe 晶体。properties explore 的 filter(见图 2-15) 选单选有 3D lattice, atom 和 symmetry system 等。选 symmetry system, 从 cell formula 可以看到 Fe₂, 表示目前晶胞是一个 2 颗原子的单晶铁晶胞; 还可以看见密度体积等。

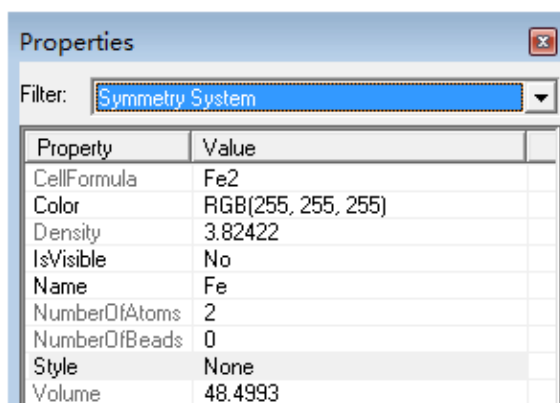


图 2-15 Symmetry System 窗口

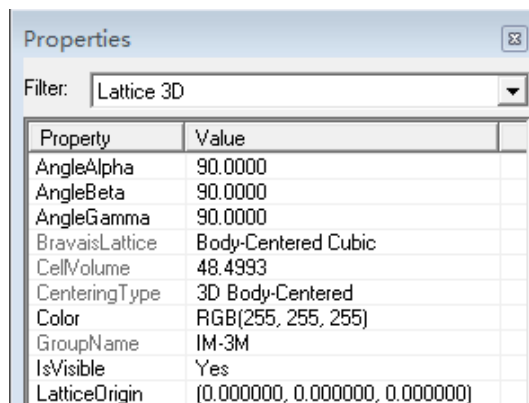


图 2-16 Lattice 3D 窗口

filter 里的 3d lattice 显示晶格信息: 角度 $\alpha\beta\gamma$ 、对称性、晶胞边长、空间群等, 见图 2-16。以晶胞边长为例, 双击可以修改。并不是所有的属性都可以编辑, 不能编辑的属性以灰色显示, 见图 2-17。

Properties Explorer 中的每个原子的 charge 有两种: 一种是 Partial Charge, 一种是 Formal Charge。前者比较精确, 是分子上各原子的实际分布电荷, 是分数; 后者可以认为是各原子的得失电子个数, 是整数。讨论时一般都用实际分布电荷。

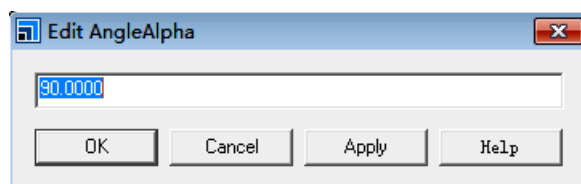


图2-17 编辑角度

2.2.2 更改 3D 显示形式

主要是 Display Style、Display Options、Lighting 以及 Label 的设置。

1) Display Style: 在 3d 工作稿, 见图 2-18, 按右键打开一个弹出菜单, 里头 Display Style 设置 3D 对象显示方式, 见图 2-19、图 2-20。比方说 atom 选项里面的 Display Style 可以选 stick、ball & stick; lattice 也有多种选项。

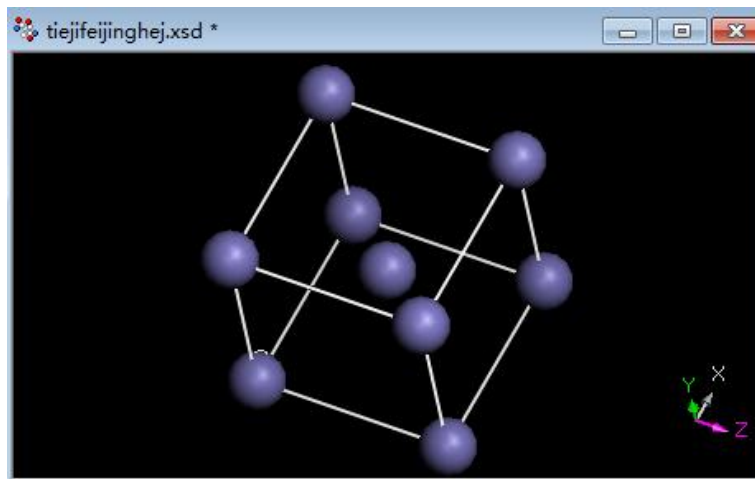


图2-18 3D视图

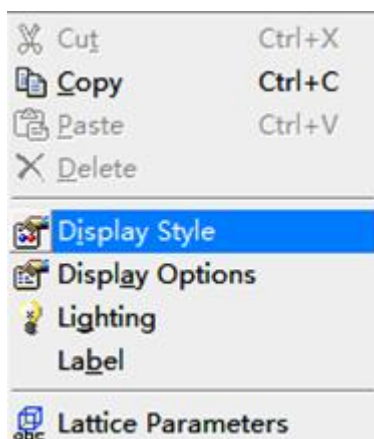


图2-19 Display Style

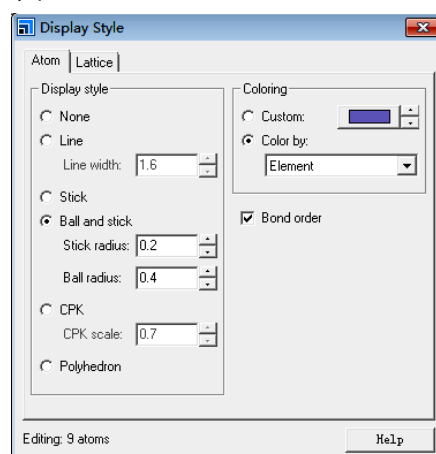


图2-20 Atom选项卡

①选择 Atom 选单, 显示原子或键的方式, 这选项和所用机器显示性能有关, 要是使用机器性能不好, 可选择不要太多贴图的显示方式, 这里选了 Ball and stick 显示方式: 球棍模型, Stick radius 则是控制键的粗细, Ball radius 可以控制显示原子的半径大小。(其中: Line: 线状模型, Line width 键的粗细; Stick: 棍状模型; CPK: 球堆砌模型, CPK scale 控制原子大小; Polyhedron: 多面体堆积模型 (晶体))。

②Lattice: 如图 2-21 所示:

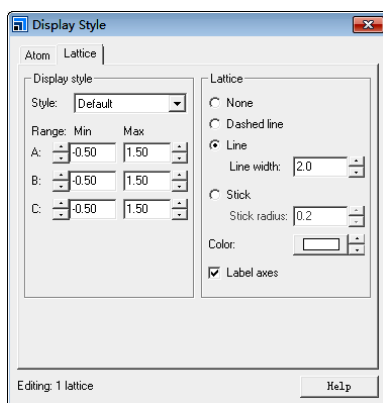


图 2-21 Lattice 选项卡

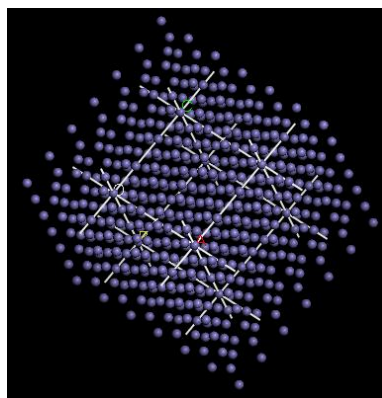


图 2-22 效果图

左边 Display Style 中的 style 下拉列表包括 4 个选项：

Default: 分子被转化为几何中心位于晶胞内。

In-Cell: 所有原子都被转化到单晶胞内。

Original: 原子由对称性定义的位置来显示，不进行额外的变换。

None: 原子和点阵都不显示。

Range: 显示在 X、Y、Z 方向上晶胞的数量，这是可以将我们的结构显示范围变大的功能，这里要注意的是，他只是将显示范围变大，和 super cell 并不相同。这功能在观看范围窄小的 primitive cell 更是有极大的帮助。将 Min 调成 -0.5（可以使负数），Max 调成 1.5（可以非整数），并将复杂的 Lattice 关掉（选择 None），画面会变成如 2-22 图所示。

图 2-21 的 Lattice 可以选 Lattice 的呈现方式及颜色，即显示晶胞边界的形状和颜色。

None: 晶胞边界被删除，即点阵格子从屏幕上被删除了。

Dashed line: 晶胞边界呈现虚线。

Line: 晶胞边界呈现实线，并可通过 Line width 来改变线的宽度。

Stick: 晶胞边界呈现棍棒形状，并可通过 Stick radius 改变棍棒的半径。

在 Lattice 区选择 Line 选项，关闭 Display Style 对话框。

2) Display Options, 如图 2-23 所示。

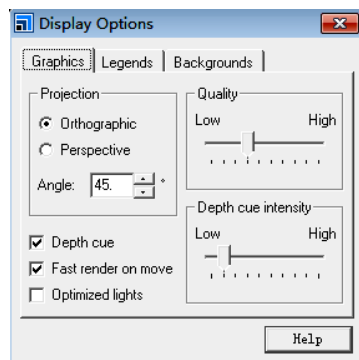


图 2-23 Graphics 选项卡

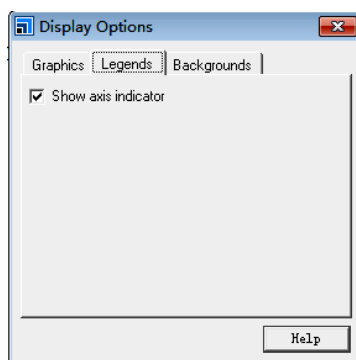


图 2-24 Legends 选项卡

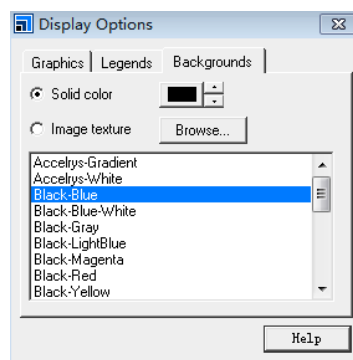


图 2-25 改变背景选项卡

①在 Graphics 选项卡上的投影 (Projection) 命令允许你选择正投影 (Orthographic) 或立体投影 (Perspective)。对于大的结构比如正在构建的结构, 立体投影是很有用的。这里选择 Orthographic 单选按钮。现在增加图像质量以适合输出。向 High 方向拖动 Quality 滑块, 停止在右侧第 4 个小格上。图像质量随着滑块向右移而增加。

②Legends, 如图 2-24 所示, 若不选中则不出现坐标, 具体视需要而定。

③选择 Backgrounds 选项卡, 见图 2-25。在调色板上选择你需要的颜色作为背景色, 点击 OK。

3) Lighting: 如图 2-26、图 2-27 所示。

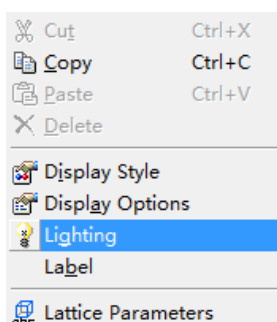


图2-26 Lighting

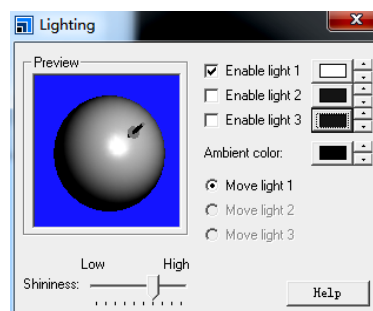


图2-27 Lighting窗口

在 3D 结构上单击右键并选择 Lighting 选项, 该选项将指定加光情况: 在此选项卡内可以设定三个光源, 并改变光源的照射位置(照射位置用箭头显示)。球上的箭头指示光的照射方向。将鼠标移到球上, 鼠标变成手形, 按左键, 拖动球, 改变光的照射方向。Shininess: 调节亮度高低。

4) Label: 见图 2-28、图 2-29。3d 工作稿里按右键选择 Label, 可以选择显示多种标签 (Properties), 比如说显示某个或全部原子的化学符号 (element symbol), 见图 2-29, 2-30。还可以选择字形的大小 (Font); 对已做操作也可以使用 remove 从而删除标签, 见图 2-31。还可以输入一些文字。

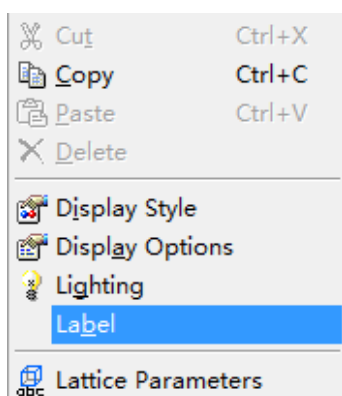


图 2-28 Label

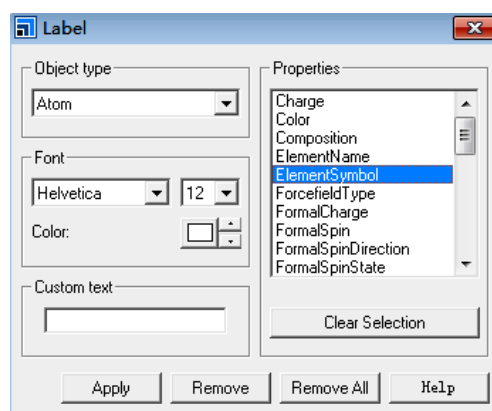


图 2-29 Label 窗口

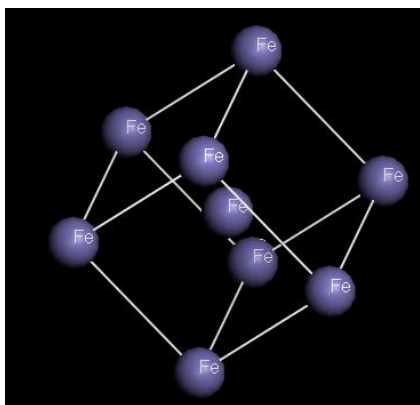


图 2-30 3D 效果图

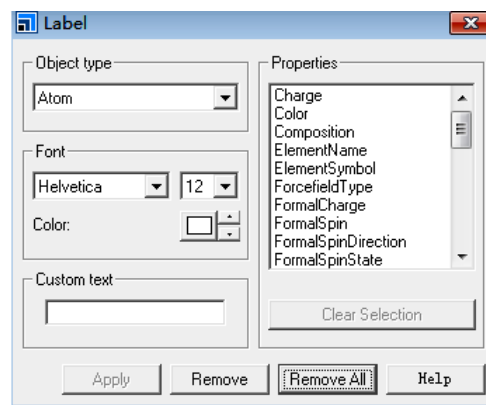


图 2-31 移除

点击 Remove All 可以移除标记。

2.2.3 对称性的相关操作

在建模过程中,可随时查看对称性。点击 Build→Symmetry→Find Symmetry, 见图 2-32, 弹出查找对称性窗口, 见图 2-33。

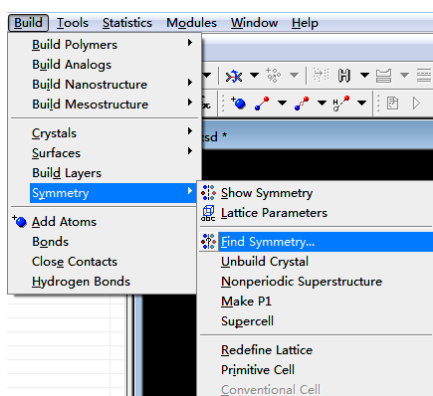


图 2-32 查找对称性

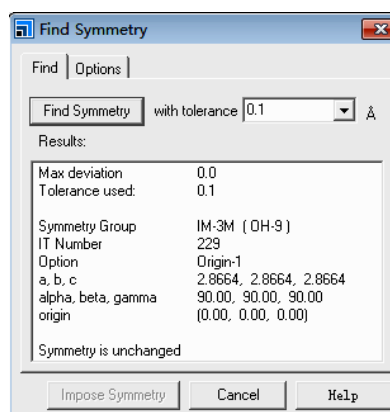


图 2-33 查找对称性窗口

找到单晶 Fe 的对称性为 IM-3M (体心)。若找到的对称性与建立时不符, 则可以使用 with tolerance (公差), 可以通过缩小公差来提高查找对称性的准确度。原子加入后检查晶体对称性, 序号没变, 正确。若原子的分数坐标有误, 对称性改变。

2.2.4 原子的替换

由于所建晶胞为合金, 原子呈中性, 因而要将 Fe 原子的价态改成零价, 在 Properties 里双击 FormalCharge, 弹出对话框, 见图 2-34。取消 Automatic, 然后将价态改为 0。

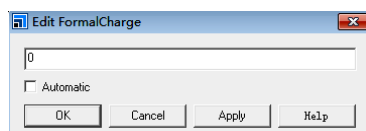



图2-34

选中其中一个铁原子，由于是随机替换，所以在铁晶胞里随机选中一个铁原子即可，再点击工具栏上的  按钮，在弹出来的元素周期表中选择 Cr，再点击 OK，即完成了一次原子替换。用此方法再完成 Si 原子的替换。

2.2.5 超晶胞的建立

在上面的窗口中 Build→Symmetry→Super Cell，见图 2-35，弹出对话框 2-36 所示。

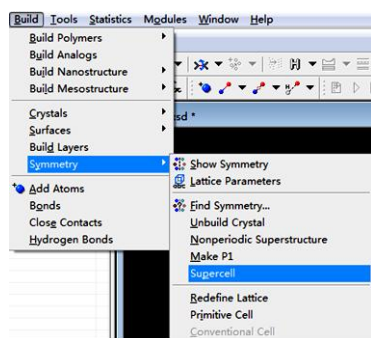


图 2-35 调出超晶胞窗口

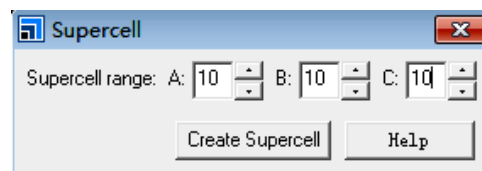


图 2-36 建立超晶胞

这里选择 10×10×10 的晶胞，得到含有 2000 个原子的 $\text{Fe}_{80}\text{Cr}_{10}\text{Si}_{10}$ 的铁基合金。见图 2-37。

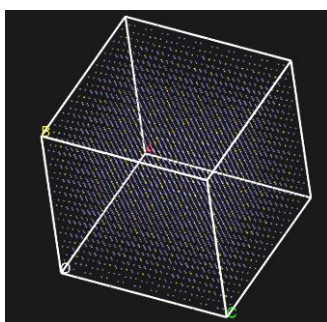


图2-37 超晶胞效果图

