

导师：孙弘 导师邮箱：[hsun@sjtu.edu.cn](mailto:hsun@sjtu.edu.cn)

# 科研实践报告

## 摘 要

碳作为我们最熟悉的元素之一，我们对它的了解却很大程度上仅限于有序的结构（金刚石、石墨），所以我们小组要研究碳的无序结构，具体的有玻璃状态的碳，这种碳在一定的压力下具有很大的强度，所以有广泛的应用的前景。我们采用 Python 中的 ASE 库来操控原子、分子的结构，并用各种模型来逼近玻璃状态的碳的结构，并用 VESTA 来观察它的结构。

**关键字：**Python(x,y), ASE(Atomic Simulation Environment), 碳的无序结构, 玻璃状态碳, Miller index, Face centered cubic, Crystal (Bravais) lattices, VESTA.

## 背景:

碳作为宇宙中第 4 丰富的元素，具有非常多的同素异形体，他们具有各种各样的不同的物理和化学上的性质[1-4]。但是一直以来人们对于碳的研究大部分都是集中在对于碳的有序结构的研究上，比如碳的金刚石结构和碳的石墨结构，而对碳的无序结构的研究相对较少。在过去的研究当中，高压一般都是用来研究有序的碳的同素异形体结构的，比如石墨[5-9]，C60 及其衍生物[10-12]，碳纳米管[13-15]等，但是基本上没有对无序碳的结构的高压研究。所以我们小组就开展了对碳的无序结构的研究。我们研究的无序结构的碳的其中一个就是玻璃状态的碳。

在研究有序结构的物体时，一般采用 STM(扫描隧道显微镜)来进行观察，但是 STM 也有其显而易见的劣势，就是一般情况下只能观察到被测物体的表面的结构，而不能观察其内部结构。但是对于无序的碳原子结构来说，仅仅看到其表面的结构是不够的，我们还要通过观察其内部的结构来研究它的具体性质，所以我们就需要用 TEM(透射电子显微镜)来观察。一般运用到 TEM 时，需要将被测物体制作成一个薄层才能观察。通常情况下我们还可以采用拉曼光谱分析法来对其进行键的分析。

对于无序结构的碳来说，一般是由其无序结构的密度，成键的类型和强度，以及其中的孔的形状、密度等来进行分类的。

玻璃状态的碳是一种无序结构的碳，具有很多与一般有序结构碳的不同性质。比较特别的是，玻璃碳具有抗腐蚀的性质，而且它的密度小，在一定的压力下强度大。玻璃碳在超过 40GPa 的压力下，玻璃状态的碳的微观结构会发生改变，原来是  $sp^2$  形式结合的结构会转换成全部是  $sp^3$  形式结合的结构，而且具有和金刚石相似的强度，这种强度在除了金刚石以外的材料中从来没有被发现过，并且这种转换是可逆的[16]。对于金刚石来说，它的强度是各向异性的，而对于无序结构的碳来说，强度很有可能就是各向同性的，如果真的是这样的话，这种玻璃状态的碳就有广泛的应用的前景。

在过去的很长的一段时间内，我们都把一些奇形怪状的碳的结构看成金刚石和石墨结构的衍生物，实际上这种认识并不准确。富勒烯的发现让我们对碳有了重新的认识，我们现在知道了碳的结构中存在五环的结构以及其他非六环的结构，这种结构也能非常稳定地存在[17]。

**工作内容:**

调查阅读有关无序碳结构，玻璃状态的碳的文献，了解玻璃状态的碳的强度如此强的原因。

安装针对于科学计算的 Python(x,y),并安装 Python 中的 ASE 运行库。

学习使用 Python 中的 ASE 库来对原子、分子、原子层等微观的结构进行处理。

将用 ASE 库处理完的数据采用如下方法将数据输出到一个 vasp 文件中

```
import ase.io.vasp as vasp
vasp.write('output_atoms.vasp', atoms, direct=True, vasp5=True)
```

学习使用 VESTA 这个软件来查看 vasp 文件中的原子的结构的图像。

运用已知的模型的各种各样的组合来对观察到的玻璃状态的碳的模型进行逼近，然后利用已知模型的性质来计算玻璃状态的碳的性质，再和实验上已知的性质进行比较从而修正模型，最终达到模型的精确化并且通过最终模型来获得玻璃状态碳的其他有价值的但是实验上难以测量的性质。

## 收获:

了解了在立方晶系中，有原始立方、体心立方、和面心立方这三种结构，我们可以通过 ASE 库来构造这三种不同的结构的原子层并将其与各种分子结合来进行相关的计算。

在 Crystal (Bravais) lattices 中，通常采用 Miller index (hkl)的指示方法来表示晶格的结构，及用一个垂直平面的向量来表示这个平面，比如( $\bar{1}$ 02),其中 $\bar{1}$ 表示-1。

了解了碳的无序结构中的玻璃状态的碳的结构。

初步掌握了一些 ASE 的使用方法，包括如何初始化原子，初始化原子层，计算原子和原子层的潜在能量，进行结构松弛演算，进行文件的输入输

出，让原子进行运动等。

初步熟悉了 VESTA 软件，可以用其来观察特定的微观上的结构。

### 困难:

在阅读文献的过程中，由于对专业术语的不了解，对计算物理领域的研究方法的不熟悉，以及对英语的掌握不够，在理解的过程中遇到了较大的困难。

在安装 ASE 的过程中需要配置环境变量，教程中给出了在 windows 平台中，可以利用 pip 来安装 ASE，但是安装之后进行之后的测试却会出错，在添加了环境变量之后测试并不会出错了，但是在之后的具体的程序的运行过程中还是出错了。

在运行可视化的示例的代码中时：

```
from ase.visualize import view
view(slab)
```

会产生如下的错误

```
Traceback (most recent call last):
  File "C:\Users\93137\Documents\Class
Material\Class_2_2\PhysicsResearchPractice\N2Cu.py", line 27, in <module>
    view(slab)
  File "C:\Python27\Lib\site-packages\ase\visualize\__init__.py", line 56, in view
    subprocess.Popen([command, filename])
  File "C:\Python27\Lib\subprocess.py", line 710, in __init__
    errread, errwrite)
  File "C:\Python27\Lib\subprocess.py", line 958, in _execute_child
    startupinfo)
WindowsError: [Error 2]
```

并且按要求需要添加 PYTHONPATH，由于 windows 平台的影响，在添加 PYTHONPATH 的过程中发现系统并没有创建这一个变量，所以需要自己添加，而在自己添加了这个变量之后还是没有解决这个问题。目前还是没有找到有效

的解决方案。

最终的暂时的解决方案就是不用 ASE 库自带的 view 函数，而采用其中的 io 包里的 vasp 函数来生成 vasp 文件并将图像储存在其中，最后利用 VESTA 软件来查看生成的图像。

### 后续工作计划:

进一步探究玻璃状态的碳的结构为什么能够有如此大的强度。深入了解 Python 中 ASE 的使用方法，并尝试用它来进行无序碳的结构模拟和计算。熟悉 VESTA 的使用的方法，观察无序碳的结构。

### 参考文献：

- [1] C. Frondel and U. B. Marvin, Nature (London) 214, 587 (1967).
- [2] K. S. Novoselov et al., Science 306, 666 (2004).
- [3] H. W. Kroto et al., Nature (London) 318, 162 (1985).
- [4] E. D. Miller, D. C. Nesting, and J. V. Badding, Chem. Mater. 9, 18 (1997).
- [5] W. L. Mao et al., Science 302, 425 (2003).
- [6] Q. Li et al., Phys. Rev. Lett. 102, 175506 (2009).
- [7] Y. Liang, W. Zhang, and L. Chen, Europhys. Lett. 87, 56003 (2009).
- [8] K. Umemoto et al., Phys. Rev. Lett. 104, 125504 (2010).
- [9] X.-F. Zhou et al., Phys. Rev. B 82, 134126 (2010).
- [10] Y. Iwasa et al., Science 264, 1570 (1994).
- [11] V. Blank et al., Diam. Relat. Mater. 7, 427 (1998).
- [12] R. S. Kumar et al., Diam. Relat. Mater. 16, 1250 (2007).
- [13] M. Popov, M. Kyotani, and Y. Koga, Diam. Relat. Mater. 12, 833 (2003).
- [14] W. L. Guo et al., Phys. Rev. Lett. 93, 245502 (2004).
- [15] Z. W. Wang et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 101, 13 699 (2004).
- [16] Lin Y, Zhang L, Mao H, et al. Amorphous diamond: a high-pressure superhard carbon allotrope[J]. Physical Review Letters, 2011, 107(17): 175504.
- [17] Harris P J F. New perspectives on the structure of graphitic carbons[J]. Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences, 2005, 30(4): 235-253.