

**暨南大学本科生**

**课程论文**

2021~2022学年第二学期

**课程名称**  走进物理世界

**学生学号**  罗逸谦

**学院学系**  理工学院物理系

**年级专业**  应用物理学

**授课教师** 郑飞鹏

**日 期**  **2022 年 7 月 6 日**

**课程成绩**

**题目： 固体中电声耦合的第一性原理计算**

**在本学期跟着郑老师学习的过程中，主要了解了第一性原理计算的基本计算原理和计算工具。**

**通过使用python编写识别布拉伐晶格的类型的程序，初步了解晶格的构成和定量描述方法，以下是学习过程回顾：**

## 晶体结构

### 晶体结构 = 空间点阵 + 结构基元

#### Crystal structure， the manner in which atoms, ions, or molecules are spatially arranged.

* + 1. 空间点阵

空间点阵是晶体中结构基元排列的几何学抽象，用以描述和分析晶体结构的周期性和对称性由于各点阵的周围环境相同，故只有十四种空间点阵

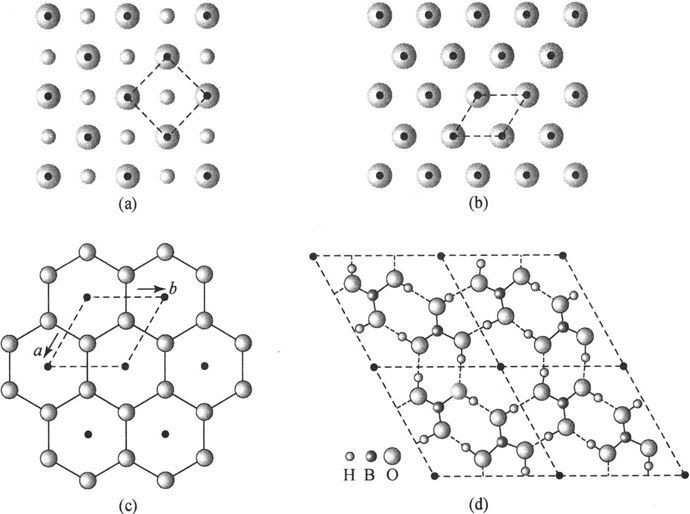
* + 1. 结构基元

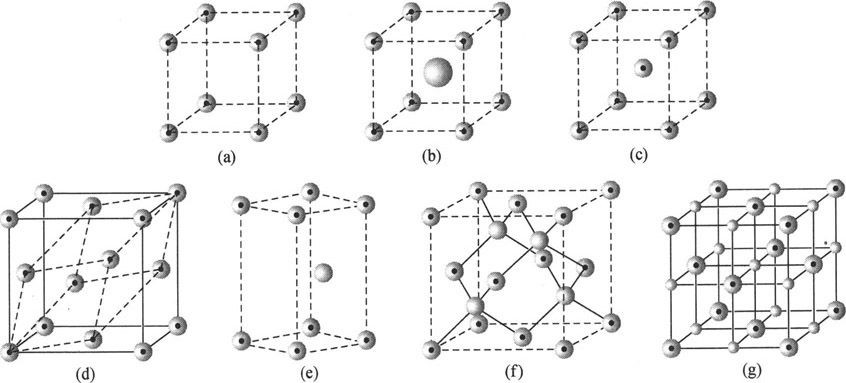
点阵结构中每个点阵所代表的具体内容，即包括原子或分子的种类、数量及其在空间按照一定方式的结构单元，称为晶体的结构基元

* + 1. 晶格

晶格是对晶体结构的几何抽象，晶格可用于表示晶体结构，表示原子位置的三位排序

*由此我们可以看到，选定的结构基元必须能够只通过平移来复原整个晶体结构:*



二维的结构基元

三维的结构基元

* 1. **晶格的周期性**

**晶格的周期性由原胞和基矢来描述**

* + 1. 原胞——晶格中最小重复单元

三维晶格的重复单元是平行六面体

* + 1. 基矢——原胞的边矢量

重复单元的边长矢量*a*, *b*, *c*

## 晶胞

#### 晶胞是晶体结构的基本重复单位，整个晶体就是按晶胞在三维空间周期地重复排列，相互平行取向，按每一顶点为8个晶胞共有的方式堆砌而成。

晶胞包含了描述一个晶体结构，包括组成、对称性和空间排列的特点等所有信息。

我们不仅能够通过晶胞了解结构基元（化学组成），还能够通过晶胞来推出点阵（结构周期重复的方式），进一步地还能了解晶体的宏观对称性。

* 1. **原胞**

在完整晶体中，晶格在空间的三个方向上都具有一定的周期对称性，这样可以取一个以结点为顶 点，边长等于这三个方向上的周期的平行六面体作为最小的重复单元，来概括晶格的特征，这样的重复单元称为初基原胞或简称原胞。

与晶胞的区别

晶胞：就是可以复制出整个晶体的一小部分晶体原胞：可以通过重复形成晶格的最小晶胞

**二、 布拉伐晶格(Bravais lattice)**

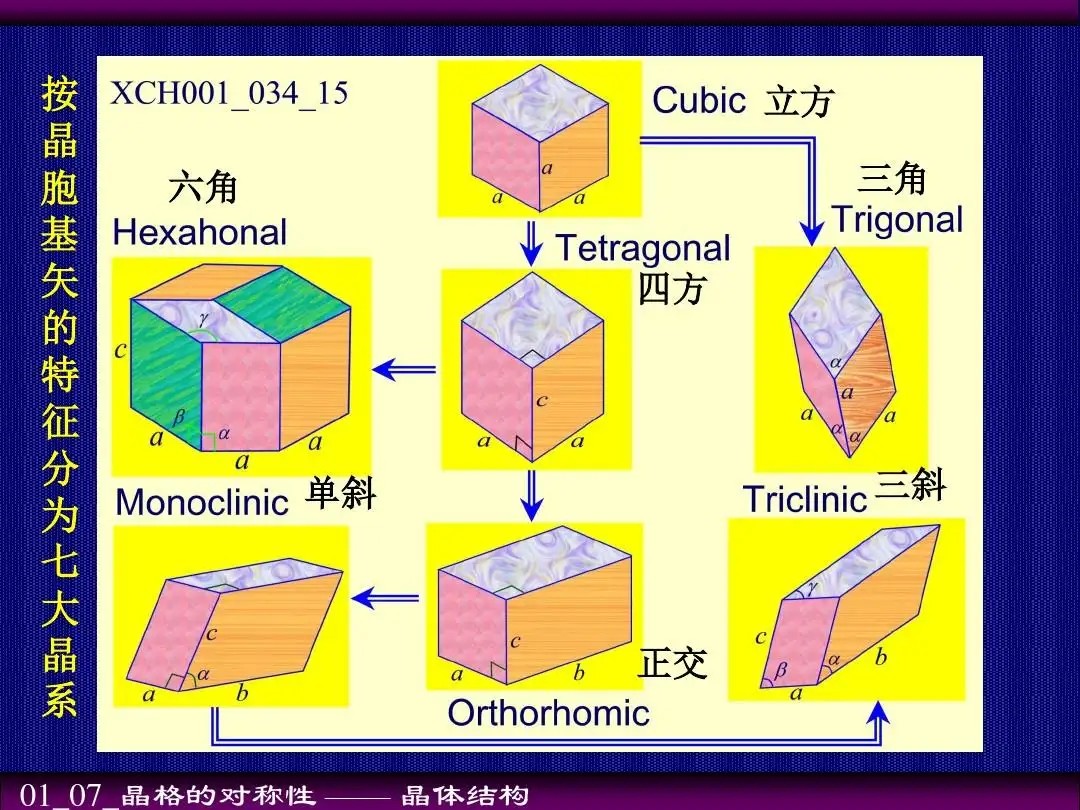
布拉伐晶格是三维空间中由一个或多个原子所组成的基底所形成的无限点阵，每个晶格点上都能找到这样同样的基底，或者说定向移动整数倍到另一个点时也能找到同样的基底，因此晶格在任何一个晶格点上看起来都完全一样。三维布拉维晶格只有14种可能。 ——维基百科

**布拉伐晶格指的是晶体的空间点阵形式**

* 1. **晶系**

晶体按其几何形态的对称程度可分为不同晶系

一共可分为七类，即等轴晶系、六方晶系、四方晶系、三方晶系、斜方晶系、单斜晶系和三斜晶系。



#### 这七个晶系又可分为三个晶族。

等轴晶系因对称程度最高。属于高级晶族

六方、四方、三方晶系对称程度中等．属中级晶族 斜方、单斜、三斜晶系对称程度最低，属于低级晶族

* 1. **布拉伐晶格**

14种布拉维晶格可分成7种晶系，每种晶系又可依中心原子在晶胞中的位置不同再分成6种晶格：

简单（P）：晶格点只在晶格的八个顶点处

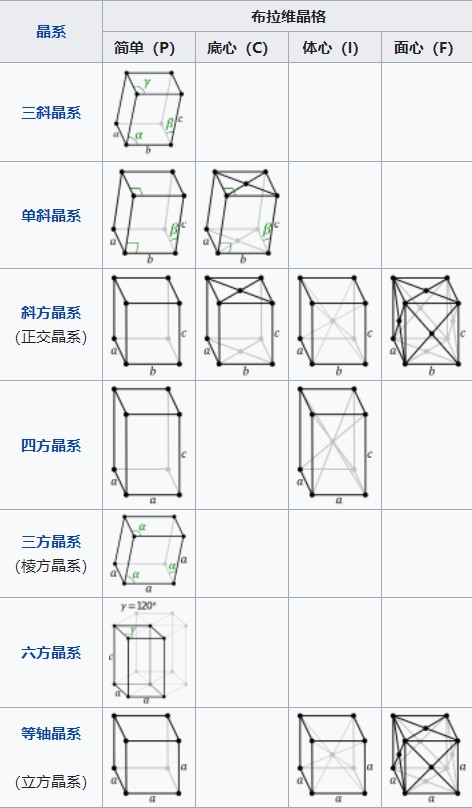
体心（I）：除八个顶点处有晶格点外，晶胞中心还有一个晶格点

面心（F）：除八个顶点处有晶格点外，在六个面的中央还有一个晶格点

底心（A，B或C）：除八个顶点处有晶格点外，在晶胞的一组平行面（A，B或C）的每个面中央还有一个晶格点

*7种不同晶系与每种晶系的6种不同晶格共有7 × 6 = 42种组合，但是有些组合其实是相同的，都能组成*

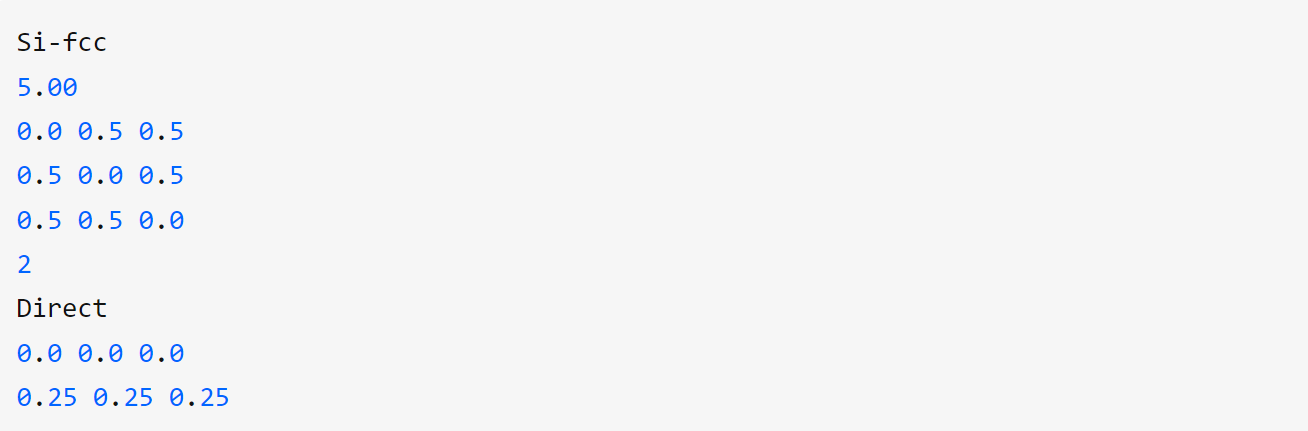
*14种布拉维晶格*



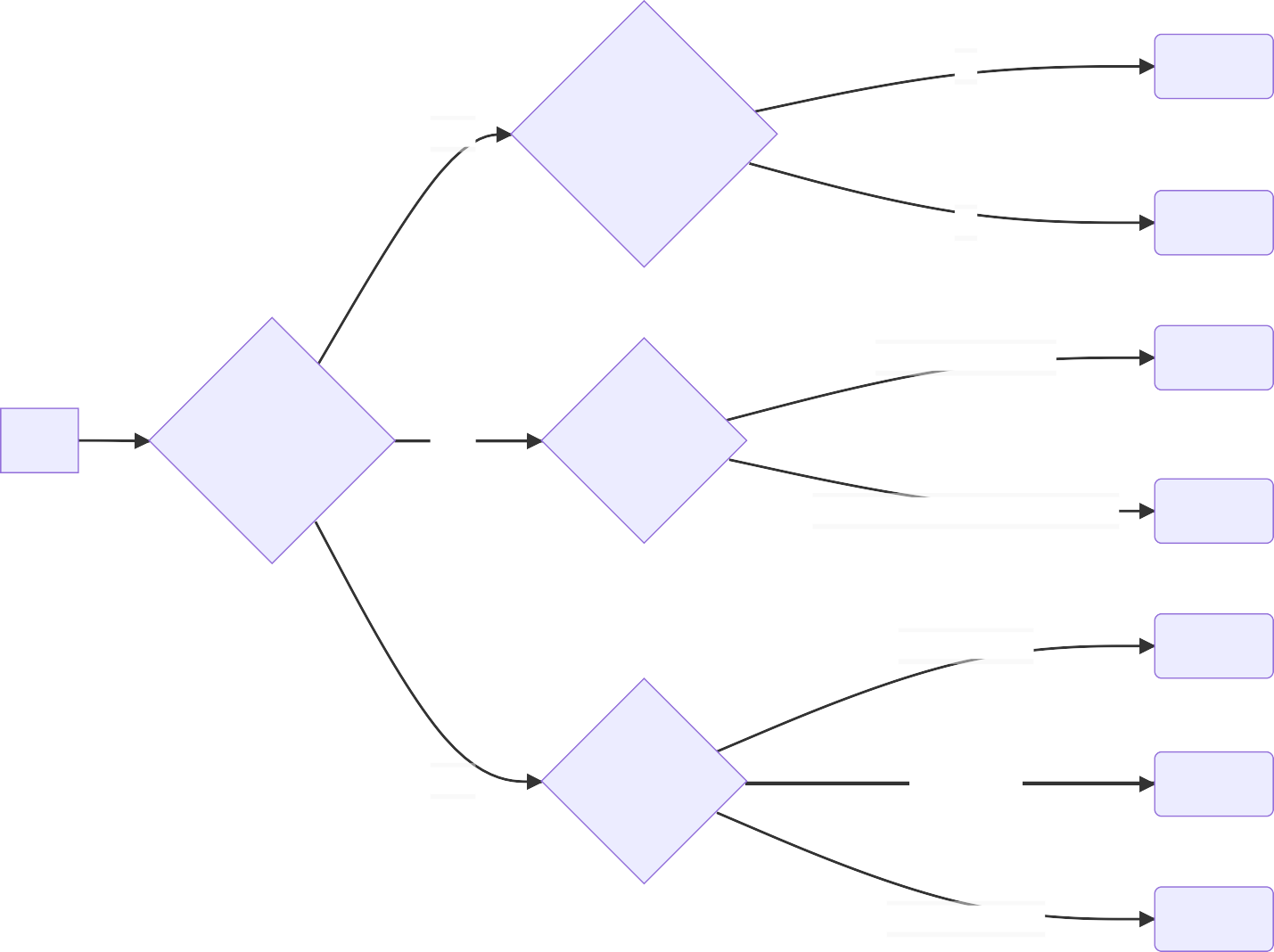
**三、模型建立**

* 1. **POSCAR格式**

POSCAR文件描述了所计算体系的晶胞参数，原子个数以及晶胞中原子位置



* + 1. 第一行：体系的名称
    2. 第二行：基矢的缩放系数，可认为晶格常数
    3. 第三行至第五行：基矢，对应实空间直角坐标系
    4. 第六行：原胞中原子的个数
    5. 第七行：说明原子的坐标是相对基矢给出的
    6. 第八行至第九行：各原子的位置
  1. **判断晶系类型**



是

立方晶系

三个

三轴角是否皆为直角

否

三方晶系

三轴角皆为九十度

四方晶系

Start

三边两两相等个数

两个

三轴角间关系

两轴角为直角且一轴角为120度

六方晶系

三角皆为直角

斜方晶系

零个

三轴角间关系

两角为直角

单斜晶系

三角皆不为直角

三斜晶系

实现代码：

import linecache import numpy as np import math

# 求向量模长，即晶胞轴长

def vec\_len(vec):

return np.linalg.norm(vec)

# 求两向量间夹角，即晶胞轴角

def vec\_angle(v1, v2):

l1 = np.linalg.norm(v1) l2 = np.linalg.norm(v2)

cos\_angle = np.dot(v1, v2) / (l1 \* l2) angle = np.arccos(cos\_angle)

return angle / math.pi

file\_name = "./POSCAR" # 打开POSCAR文件

file = open("./POSCAR") # 读取POSCAR文件

# constant\_list为A,B,C晶格参数

constant\_list = []

# 创建3\*3的二维数组用于存储基矢信息

constant\_array = np.zeros([3, 3]) for i in [3, 4, 5]:

constant\_number = linecache.getline(file\_name, i).split() constant = 0

for j in range(3):

constant = constant + float(constant\_number[j]) \*\* 2 constant\_array[i - 3, j] = float(constant\_number[j])

constant\_list.append(round(constant \*\* 0.5, 5))

# 先判断constant\_list中有几个元素相等

len\_counter = 0

if round(vec\_len(constant\_array[0]), 5) == round(vec\_len(constant\_array[1]), 5):

len\_counter += 1

if round(vec\_len(constant\_array[1]), 5) == round(vec\_len(constant\_array[2]), 5):

len\_counter += 1

if round(vec\_len(constant\_array[0]), 5) == round(vec\_len(constant\_array[2]), 5):

len\_counter += 1

# 再判断三轴角中有几个等于90°

angle\_counter = 0

if vec\_angle(constant\_array[0], constant\_array[1]) == 0.5: angle\_counter += 1

if vec\_angle(constant\_array[0], constant\_array[2]) == 0.5: angle\_counter += 1

if vec\_angle(constant\_array[1], constant\_array[2]) == 0.5: angle\_counter += 1

# 统计完毕，开始分类

# 三边相等

if len\_counter == 3:

if angle\_counter == 3: print("立方晶系")

else:

print("三方晶系") # 两边相等

elif len\_counter == 2:

if angle\_counter == 3: print("四方晶系")

else:

print("六方晶系") # 无相等边

else:

if angle\_counter == 3: print("斜方晶体")

elif angle\_counter == 0: print("三斜晶系")

else:

print("单斜晶系")

# 四、阅读一平师兄的代码

#### map函数

传入一个函数和一个可迭代变量，map函数会对可迭代变量一一进行函数操作getline函数

import linecache

# 读取POSCAR函数中的一行，以字符串列表的形式返回

constant\_number = linecache.getline(FileName, i).split()

#### 五、总结

* + 1. 代码基本实现了判断晶格的晶系种类
    2. 在老师和一平师兄的讲解下逐渐明白了对晶体结构的描述

**同时，还有一些其他知识的学习，为今后的科研学习打基础。**

**工具方面主要有：**

1. **Linux的编程能力。能够较为熟练地在Linux服务器上进行文件地处理，能够编写相应的shell脚本对一些文件以及文件中的内容进行预处理和计算后处理。**
2. **利用VESTA对晶体结构进行可视化和一些简单处理。**
3. **初步学习了Material Studio，并尝试对一些晶体结构的赝势进行计算（这是在一位师姐的指导下学习的，但我并不理解其原理）**
4. **进一步熟悉了python编程，并利用python代码基本实现了识别布拉伐晶格类型的程序。**

**理论方面：**

1. **在阅读《固体物理》一书和老师的教导下，对晶体的基本结构和一些特性有了初步的了解，但是对其能量与热学性质还是一头雾水。**
2. **粗略地学习了部分理论力学和量子力学的知识，对理解计算中的一些原理有些许帮助。**

**总结：**

**计算物理仍是我感兴趣的一个方向，但是回望这个学期，我在科研方面的学习进度实在是有点慢。原因主要是五、六月报名参加了较多的学术与体育比赛，分散了过多精力。学期前半程还较为积极，但到了后半程，由于时间分配不佳，在这方面懈怠了，在此向老师表示歉意。往后我会更加合理的分配好时间，努力推进我在科研学习上的进度。同时也感谢老师一个学期以来的悉心教导！**