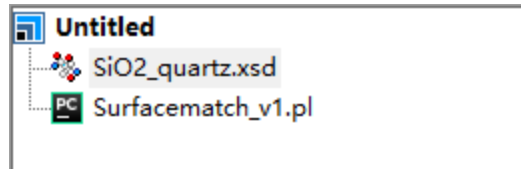


构建层晶面筛选脚本使用方法

西南交通大学 鲁阳阳

使用方法

1: 打开 MS 软件，将需要构建的晶体结构文件和该脚本拖入 MS 工作区



2: 将脚本中\$filename 的值改为晶体结构文件名

```
12
13 use strict;
14 use Getopt::Long;
15 use MaterialsScript qw(:all);
16
17 my $filename = "SiO2_quartz";
18 my $doc = $Documents{"$filename.xsd"};
19 my $pos = Documents->New("SurfacemathReault.txt");
20 my $lattice = $doc->SymmetryDefinition;
21 my $FT;
22 my @num_atom;
```

3: 输入下列参数的值

\$Mismatchdegree = __; 输入最大失配率，默认 0.05

my \$Mismatchangle = __; 输入最大失配角，默认 0

晶向指数的范围:

若 A, B, C 为 10, 10, 10 则搜索范围为 ([-10,-10],[-10,10],[-10,10])

\$SearchAreaA = __;

\$SearchAreaB = __;

\$SearchAreaC = __;

已知晶面的晶格参数 a,b 及夹角

\$a = __;

\$b = __;

\$angle = __;

需要的超胞范围,以已知晶面为准, 比如 A=4,B=5,最大超胞为 4a x 5b

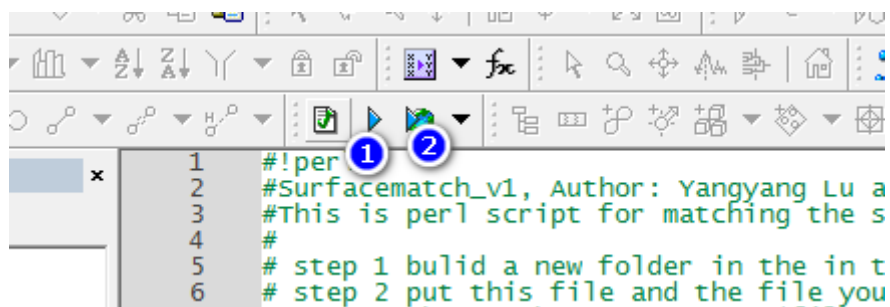
\$supercellA = __;

\$supercellB = __;

```
28
29 my $Mismatchdegree = 0.05;
30 my $Mismatchangle = 0;
31
32 my $SearchAreaA = 2;|
33 my $SearchAreaB = 2;
34 my $SearchAreaC = 2;
35
36 my $a = 3.791348;
37 my $b = 4.791348;
38 my $angle = 90;
39
40 my $supercellA = 5;
41 my $supercellB = 5;
42
43
44 my $a1:
```

4:点击运行，1 为本机运行，2 上传服务器运行

计算结束，符合条件的结果保存在 SurfacemathReault.txt 文件内



5: 查看结果

Surface() 为可以与已知结构匹配的晶面

a-U,b-V 为已知结构的第一个边与 Surface()第一个边匹配

a-V,b-U 为已知结构的第一个边与 Surface()第二个边匹配

3U,5V 为，新切出来的晶面需要扩大的超胞

U,V,Angle 为新切出来的晶面的晶格参数

4a,5b 为已知晶面需要扩大的超胞

```
Surface(-2 2 0)
a-U,b-V
3 U, 5 V
Lattice parameters
U = 5.35 V = 4.82
Angle = 90.00
4 a, 5 b
```

```
Surface(-1 -2 0)
a-V,b-U
2 V, 2 U
Lattice parameters
U = 12.74 V = 5.35
Angle = 90.00
3 a, 5 b
```

自行选择适合的组合，构建层即可。

有任何建议和问题欢迎联系我： 2366488430@qq.com