**0. 准备需要计算的材料的结构等。**

A.建一个新目录，取名0-initial，在里面准备好做结构弛豫所需要的INCAR，KPOINTS，POSCAR，POTCAR等VASP所需的输入文件

B.在0-initial目录下建立1-CHG和2-band两个目录

C.在1-CHG中准备好做总能计算的INCAR (注意加上ICORELEVEL = 1，LVTOT = T，LVHAR = T，方便获得芯能级、真空能级)，并且链接上一层目录的CONTCAR为POSCAR （ln –s ../CONTCAR POSCAR），以及链接上一层目录的POTCAR，KPOINTS，kernel等

D.在2-band中准备好做能带计算的INCAR以及KPOINTS，同样链接上一层目录的CONTCAR为POSCAR，以及上一层目录的POTCAR，kernel等

**1. 形变势和弹性模量相关计算**

A. 使用clone脚本获得单轴拉伸或压缩的结构。

clone 0-initial direction step N

其中direction为形变的方向（a/b/c），step为形变的步长，N为生成的结构的数量，要求N为奇数

例如：clone 0-initial a 0.025 5

会生成5个文件夹1-0.950 2-0.975 3-1.000 4-1.025 5-1.050，里面的结构分别就是形变后的结构。

B.提交计算顺序完成每个目录下的以下计算：结构弛豫，在1-CHG下完成CHGCAR计算，2-band的能带计算。确保每一步计算收敛。

**2. 有效质量相关计算**

A. 在X-1.000目录建立3-Me目录，在其中准备好做有效质量计算的INCAR以及KPOINTS，同样链接上一层目录的CONTCAR为POSCAR，以及POTCAR和kernel等。

B. 提交并完成有效质量计算。

**3.修改MCAR，指定需要计算迁移率的K点位置及能带数等。使用脚本fitmobility**

NL = 1 #Layer number

TEM = 300 #Temperature, 300 default

#FitYoungs and Weff

DIR = c #指定真空层方向

#FitMe

KVBM = 0 #指定拟用于合有效质量的K点数，例如1-10为使用前十个K点，0使用全部K点

VM = 28 # VBM的band数（或者想拟合有效质量的任意band数）

KCBM = 0

CM = 29 #CBM

#FitEl

KEV = 10 #指定计算第几个K点的形变势

VE = 28 #VBM的band数

KEC = 10

CE = 29 #CBM

**迁移率计算使用公式及相关推导过程参考文献如下**

**[1] S. Takagi, A. Toriumi, M. Iwase and H. Tango, IEEE Trans. Electron Devices 41, 2363-2368 (1994).**

**[2] G. Fiori and G. Iannaccone, Proc. IEEE 101, 1653-1669 (2013).**

**[3] P. Kang, V. Michaud-Rioux, X.H. Kong, G.H. Yu and H. Guo, 2D Materials 4, 045014 (2017).**

**[4] P. Kang, W.-T. Zhang, V. Michaud-Rioux, X.-H. Kong, C. Hu, G.-H. Yu and H. Guo, Phys. Rev. B 96, 195406 (2017).**

**[5] C. Wang, X. Zhou, Y. Pan, J. Qiao, X. Kong, C.-C. Kaun, and W. Ji, Phys. Rev. B 97, 245409 (2018).**