

UserStress 使用教程

一、简介

UserStress 是用 Perl 语言编写的 Materials Studio 插件，其主要功能为自动沿着晶体的 a 轴、b 轴或者 ab 双轴拉伸二维材料，并计算其应变-能量变化关系。

二、主页

<https://github.com/liujiacode/UserStress>

三、版本

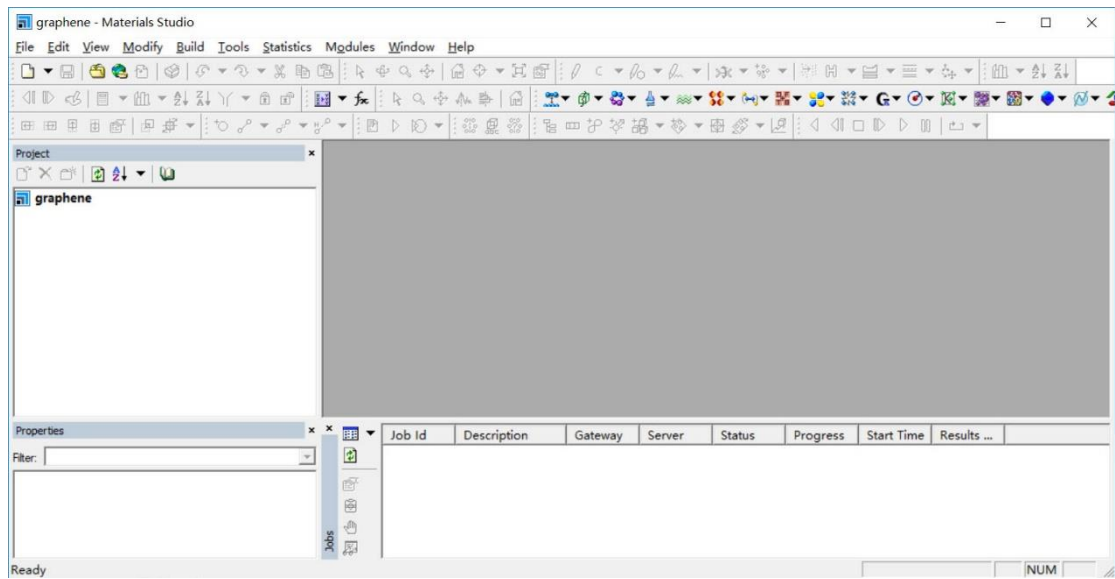
1.1

四、环境

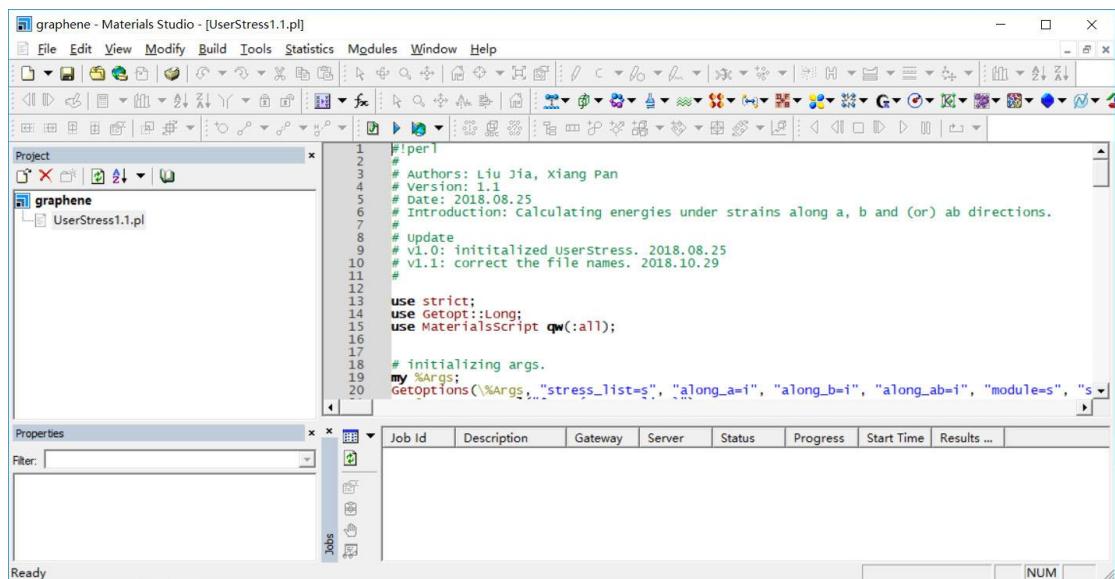
Materials Studio 8.0

五、安装

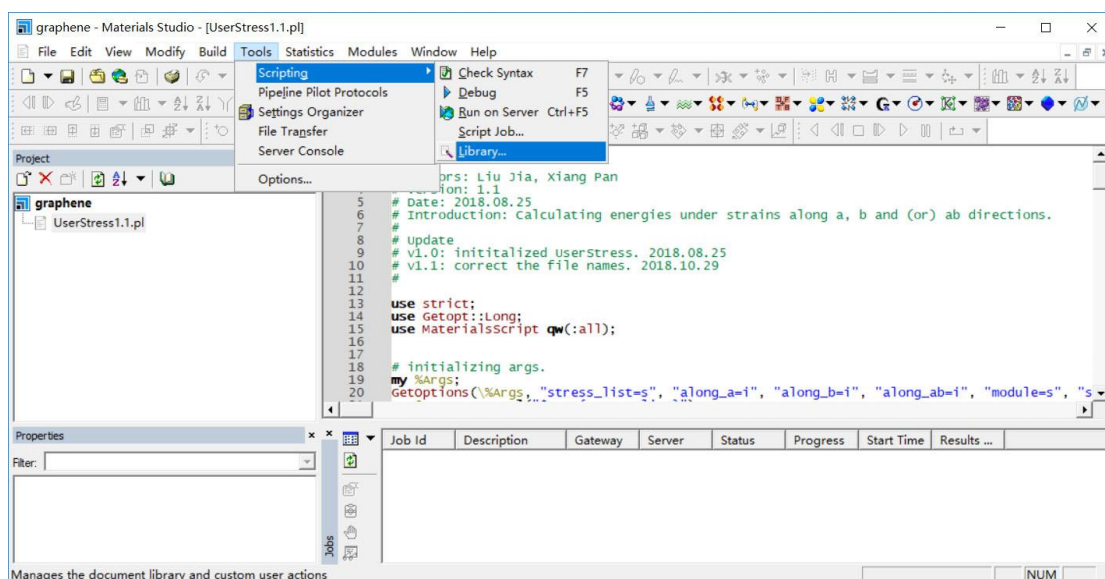
1) 打开 Materials Studio。



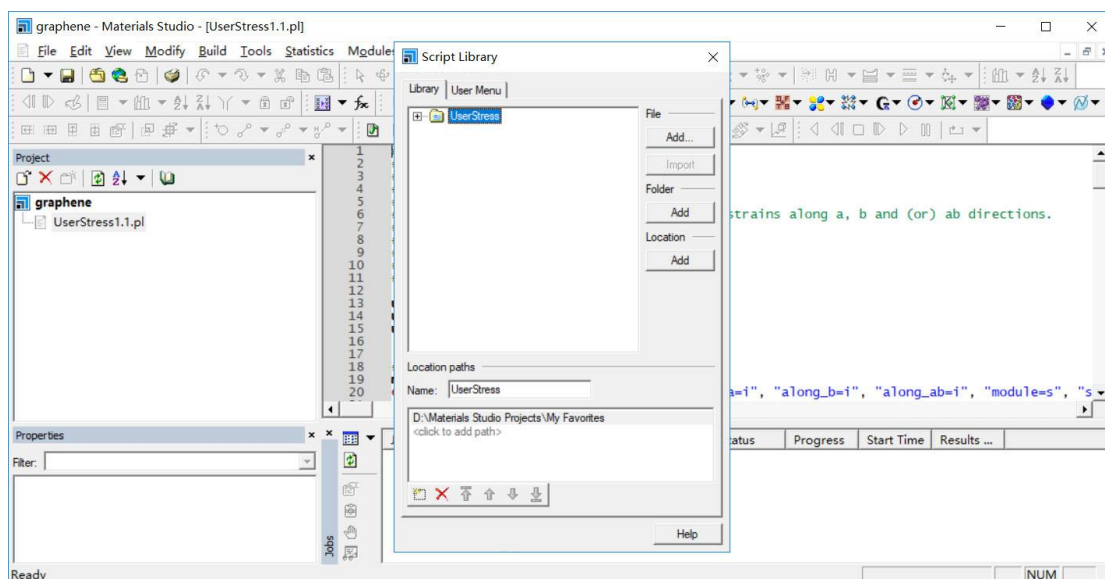
2) 下载 [UserStress](#)。将 UserStress 文件夹里的 UserStress1.1.pl 文件复制到项目文件目录下。



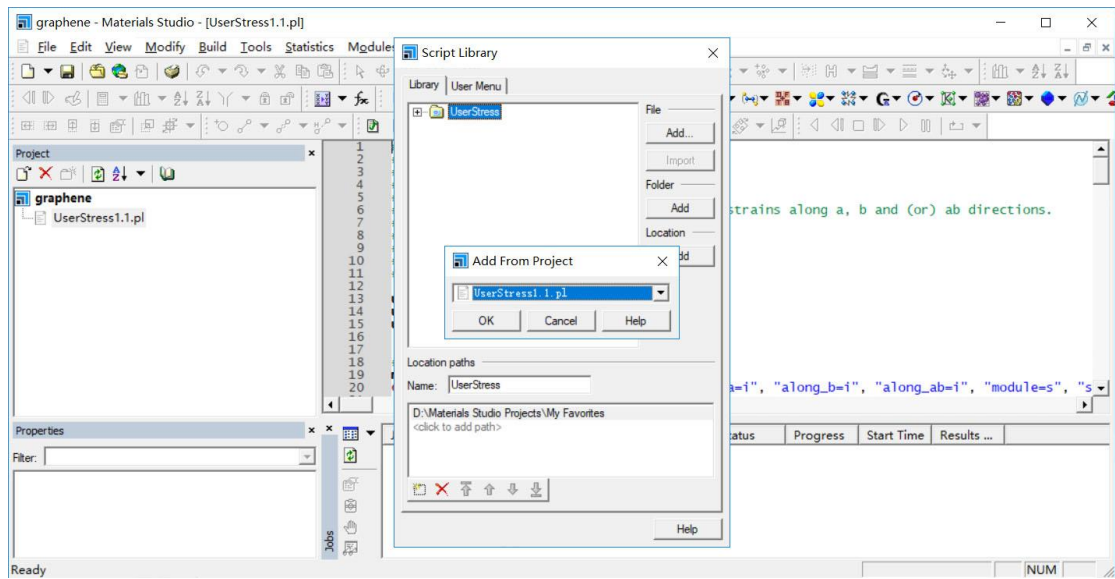
3) 点击 Tools → Scripting → Library..., 打开 Script Library 对话框。



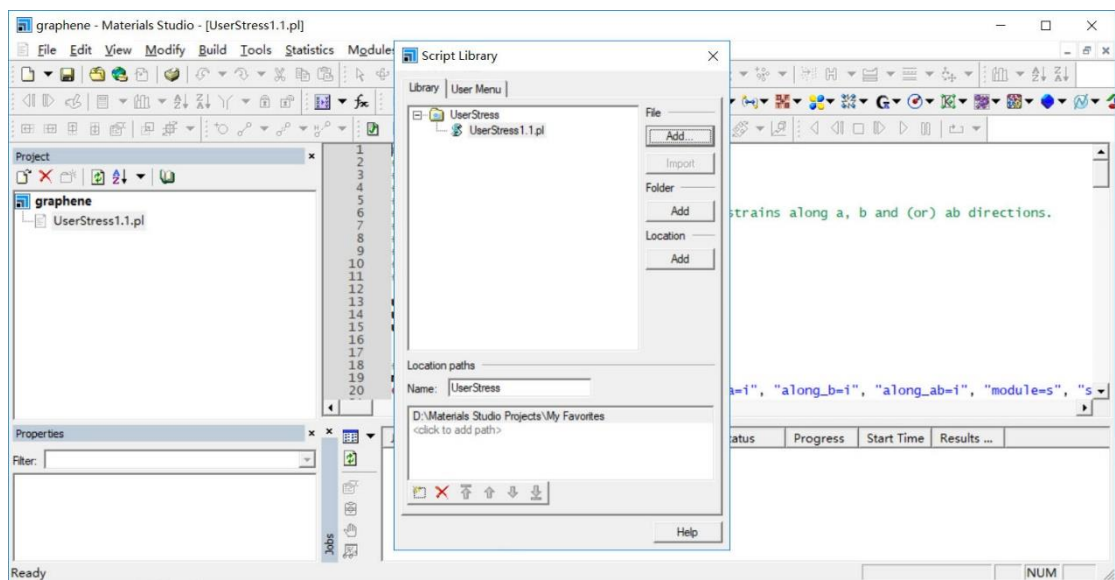
4) 在 Script Library 对话框中，选择 Library 选项卡。点击右侧 Folder 按钮框里的 Add 按钮，新建一个文件夹并命名为“UserStress”。



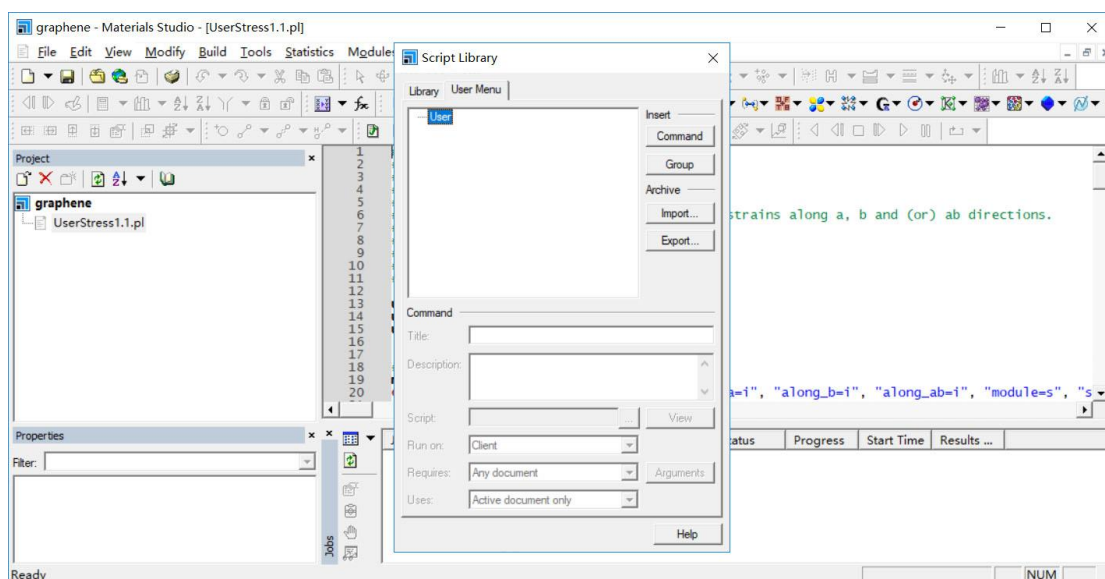
5) 点击 File 按钮框里的 Add 按钮。在弹出的 Add From Project 对话框中选择项目文件目录下的 UserStress1.1.pl 文件。点击 OK 按钮返回 Script Library 对话框。



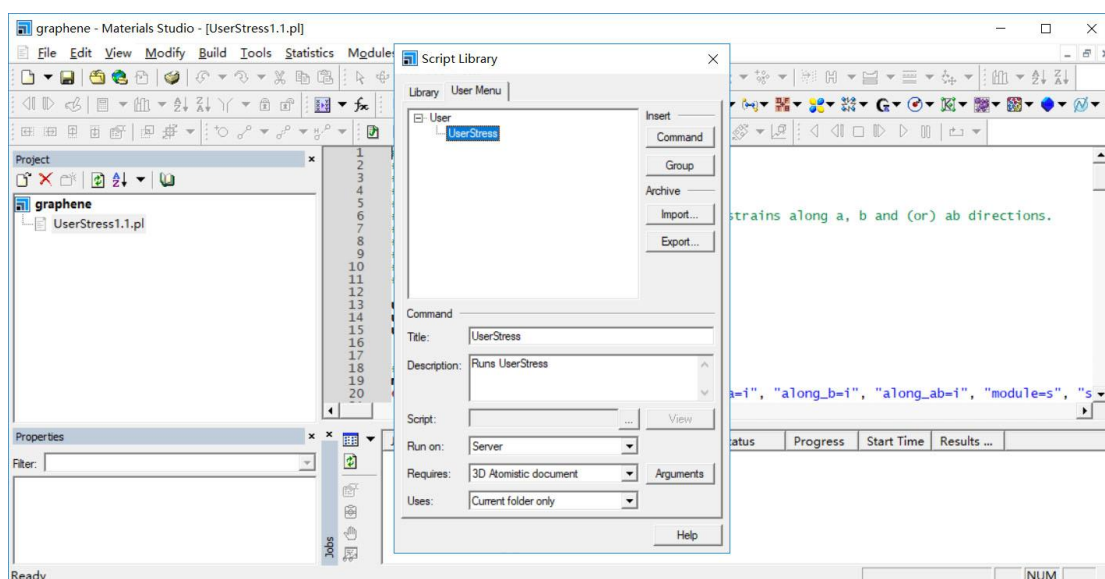
6) 导入 UserStress1.1.pl 文件后 Script Library 对话框如下图所示。



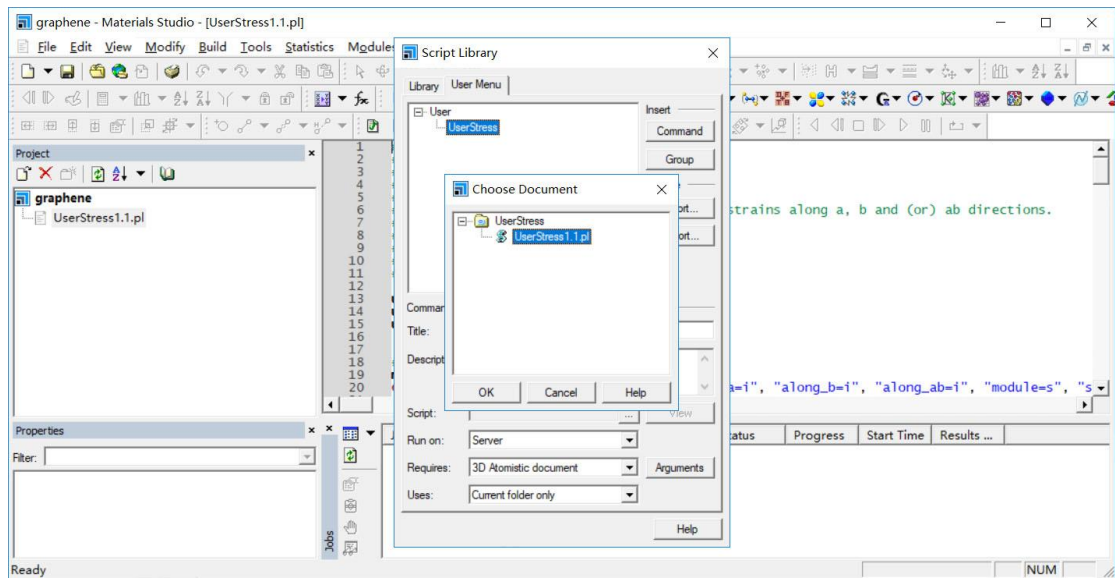
7) 在 Script Library 对话框中，选择 User Menu 选项卡。



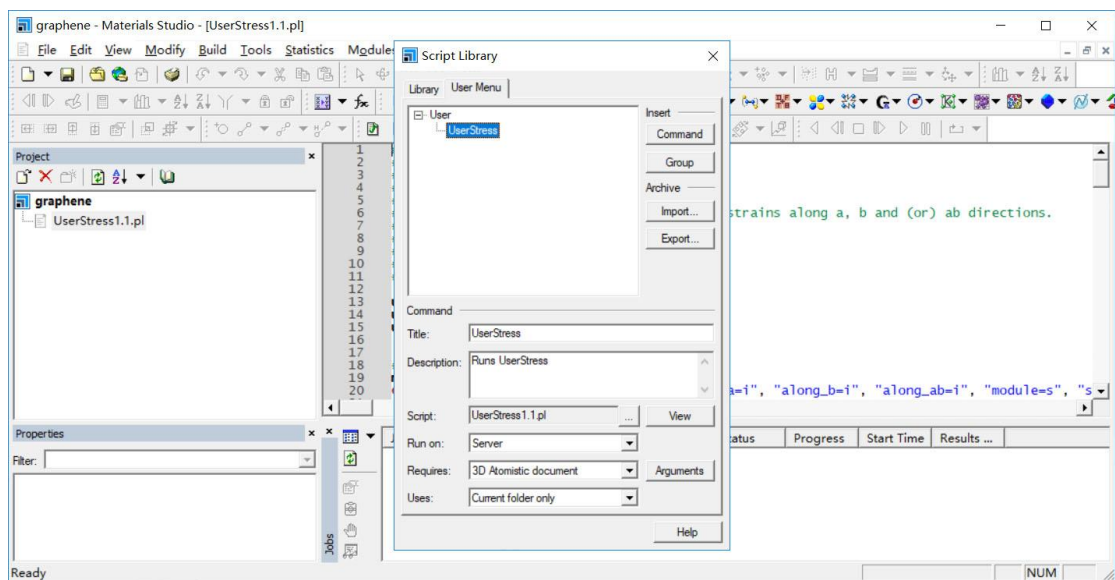
8) 点击 Insert 按钮框里的 Command 按钮，新建一个命令并命名为“UserStress”。在 Title 文本框里输入“UserStress”，在 Description 文本框里输入“Run UserStress”，点击 Run On 选项框旁的▼并选择“Server”，点击 Requires 选项框旁的▼并选择“3D Atomistic document”，点击 Uses 选项框旁的▼并选择“Current folder only”。



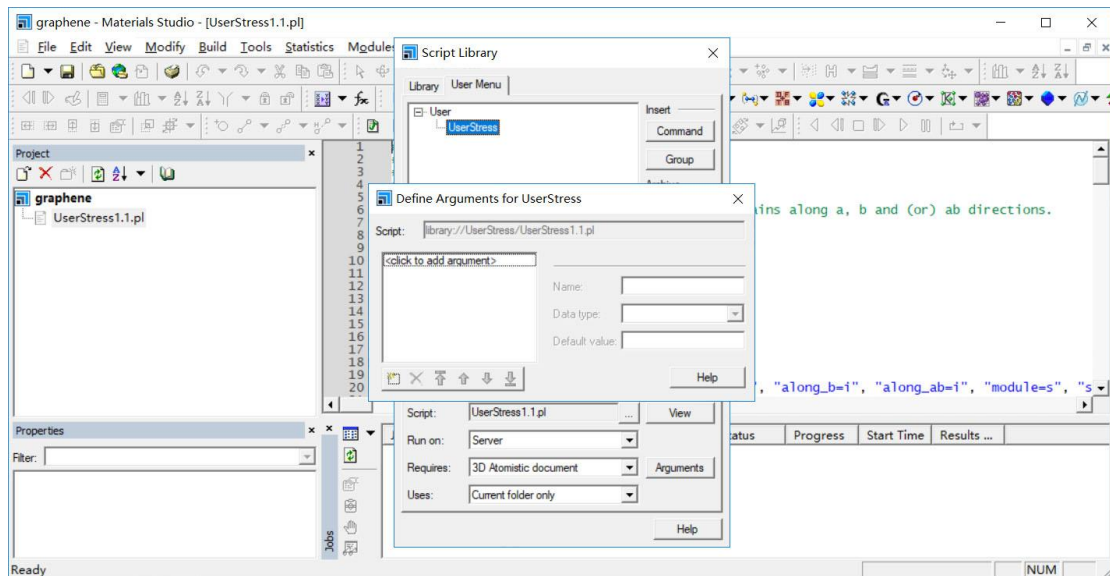
9) 点击 Script 选项框旁的...，并在弹出的 Choose Document 对话框中选择“UserStress”文件夹下的“UserStress1.1.pl”文件。点击 OK 按钮返回 Script Library 对话框。



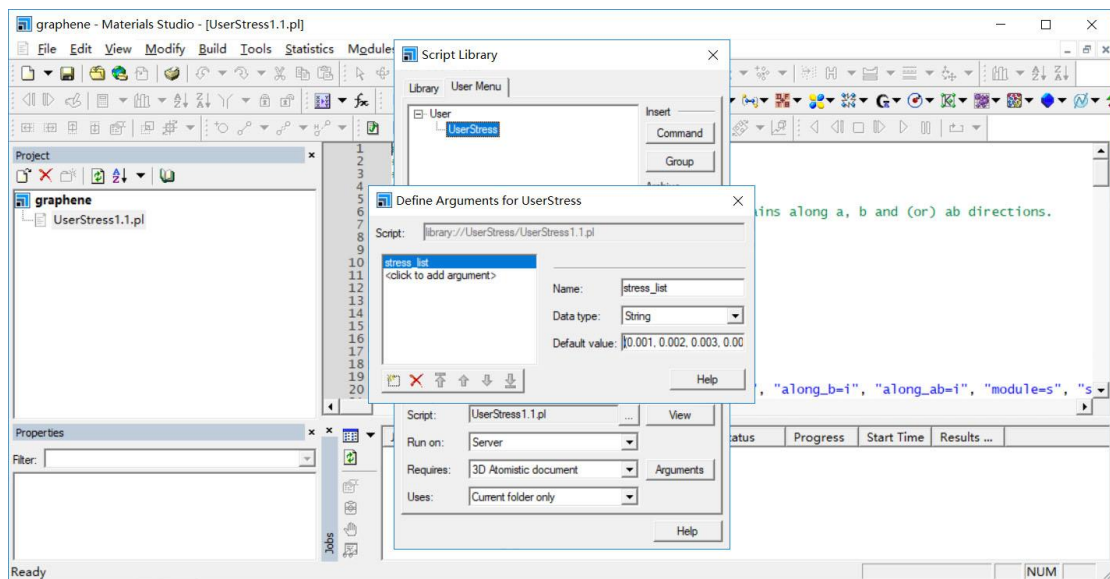
10) 导入 UserStress1.1.pl 文件后 Script Library 对话框如下图所示。



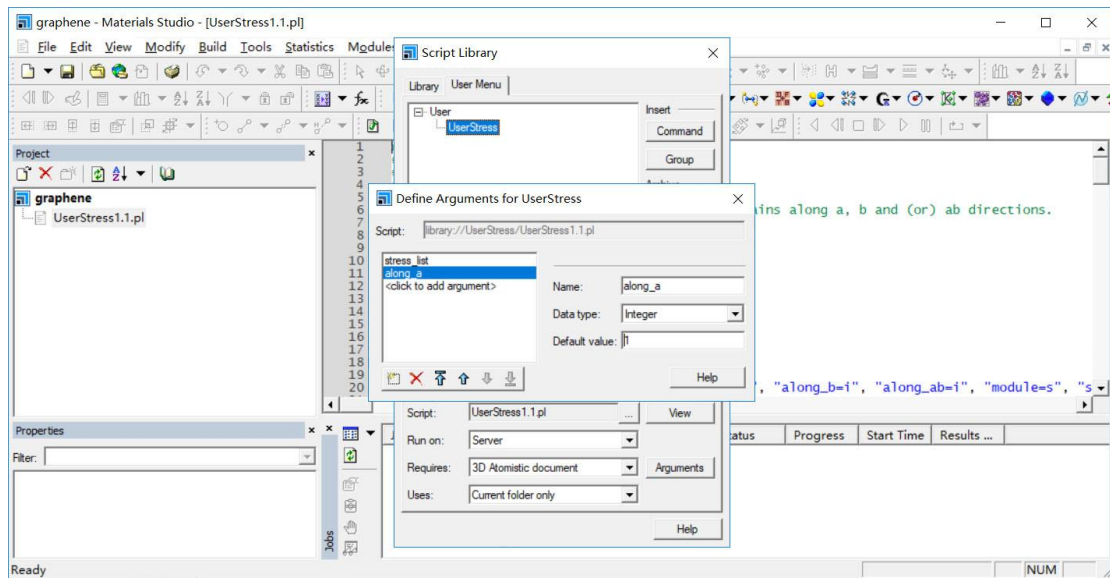
11) 点击 Arguments 按钮，弹出 Define Arguments for UserStress 对话框。



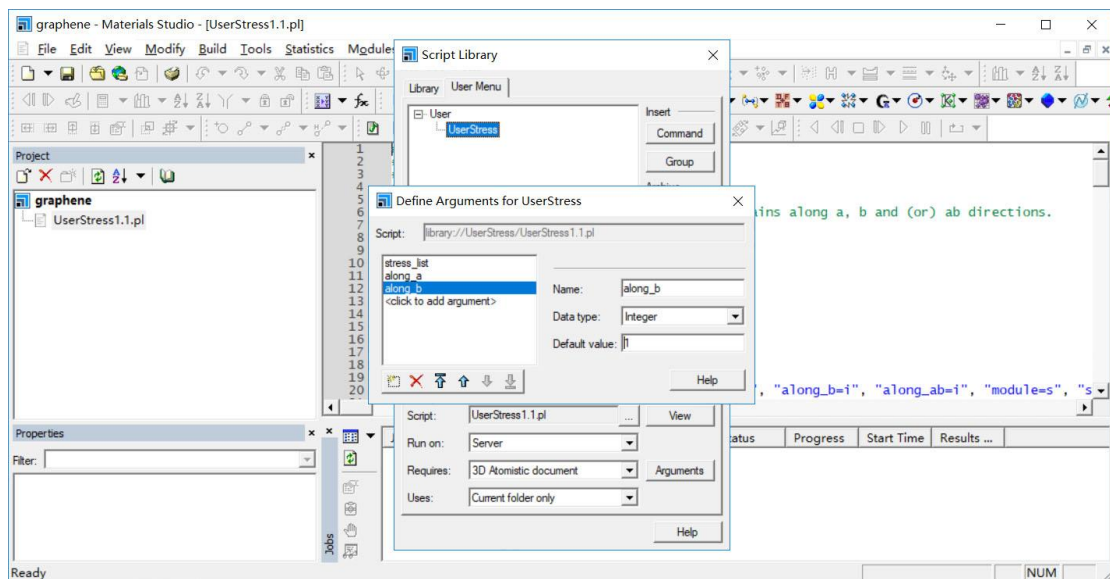
12) 点击 click to add argument 新建参数，并将 Name、Data type 和 Default value 分别设置为“stress_list”、“String”和“(0.001, 0.002, 0.003, 0.004, 0.005, 0.006, 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.06)”。



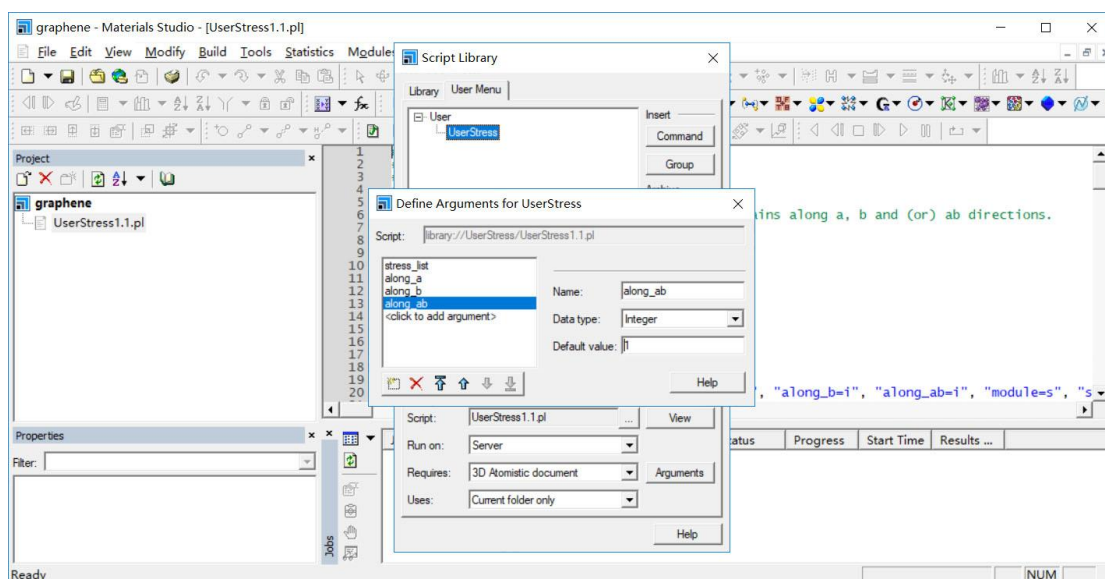
13) 点击 click to add argument 新建参数，并将 Name、Data type 和 Default value 分别设置为 “along_a”、“Integer” 和 “1”。



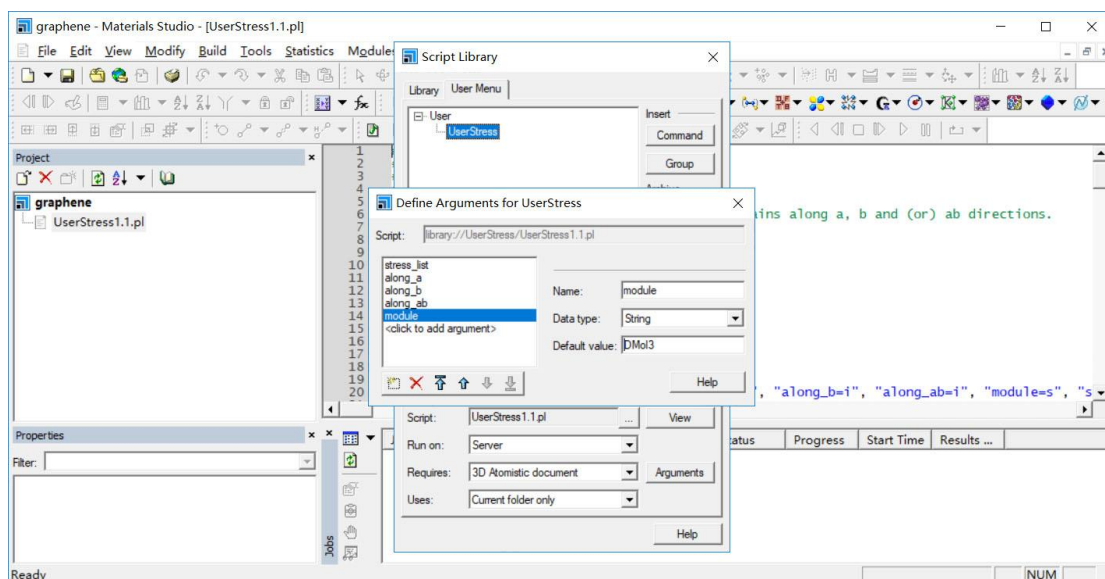
14) 点击 click to add argument 新建参数，并将 Name、Data type 和 Default value 分别设置为 “along_b”、“Integer” 和 “1”。



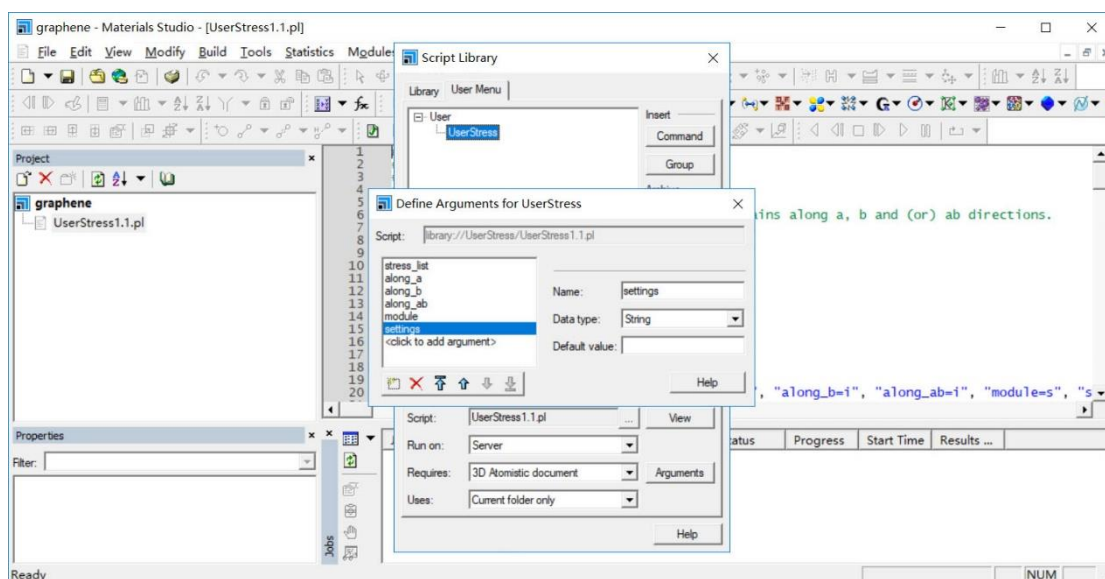
15) 点击 click to add argument 新建参数，并将 Name、Data type 和 Default value 分别设置为 “along_ab”、“Integer” 和 “1”。



16) 点击 click to add argument 新建参数，并将 Name、Data type 和 Default value 分别设置为 “module”、“String” 和 “DMol3”。



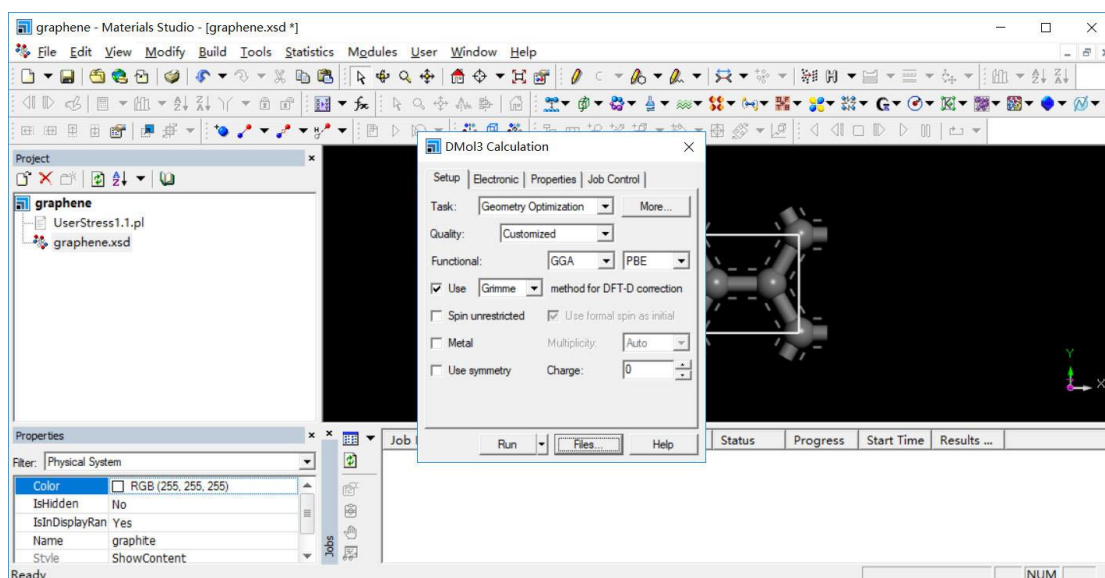
17) 点击 click to add argument 新建参数，并将 Name 和 Data type 分别设置为 “settings” 和 “String”。



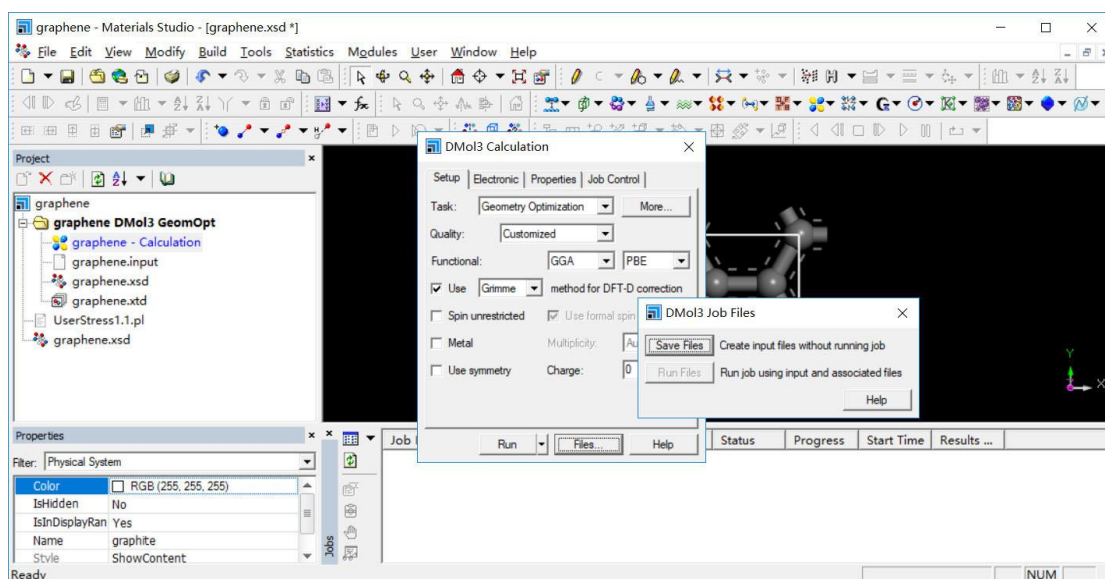
18) 关闭 Define Arguments for UserStress 对话框以及 Script Library 对话框。安装完成。

六、示例

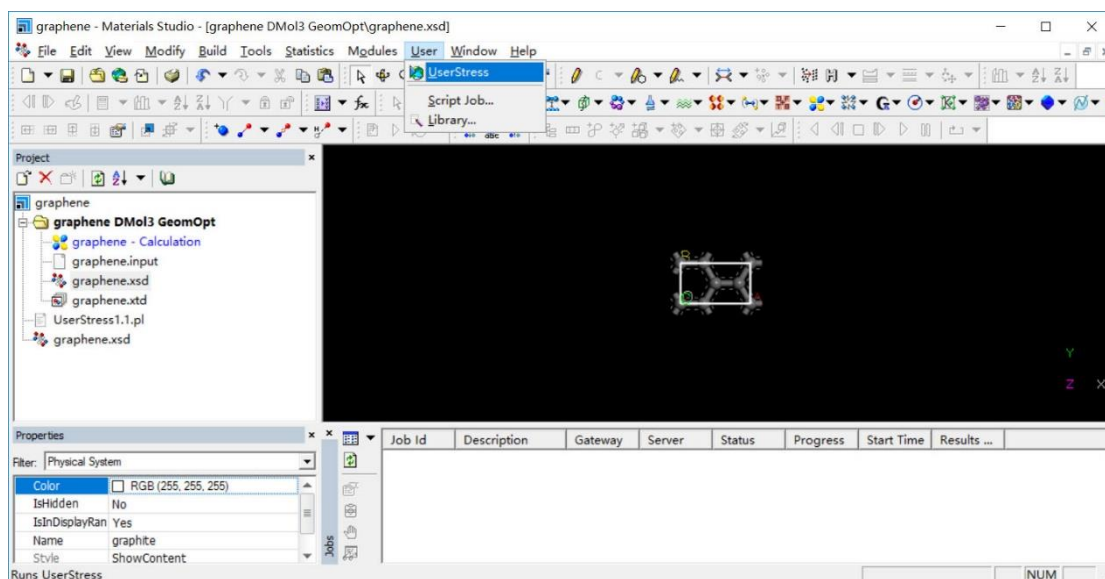
1) 在项目文件目录下新建一个石墨烯结构，命名为“graphene.xsd”。点击 DMol3 图标弹出 DMol3 Calculation 对话框，在对话框里设置结构优化的计算参数。



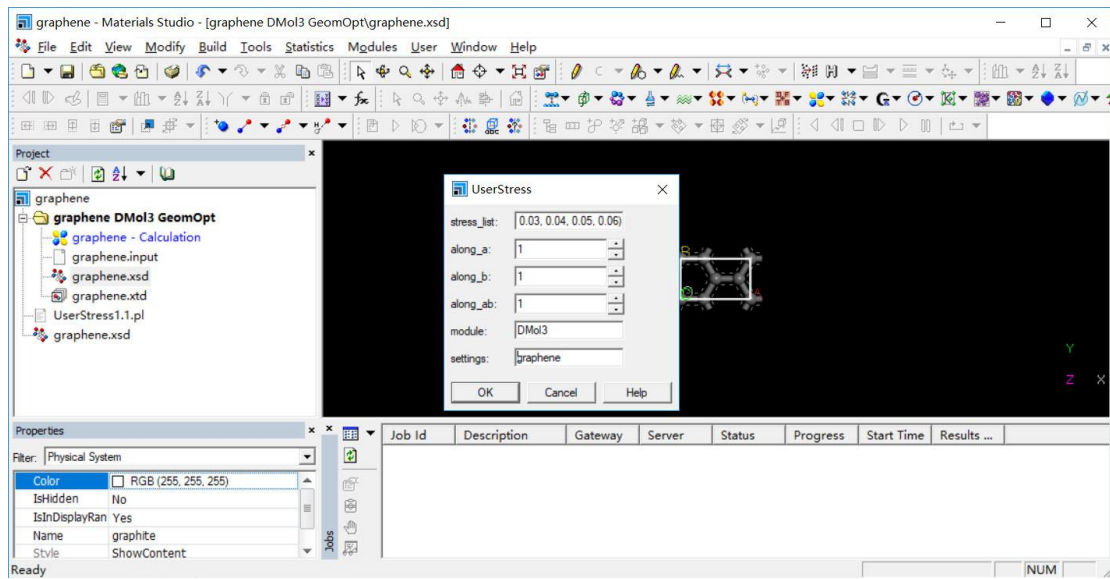
2) 参数设置好后，点击 Files...按钮，弹出 DMol3 Job Files 对话框。在弹出的对话框中点击 Save Files 按钮，保存计算文件。



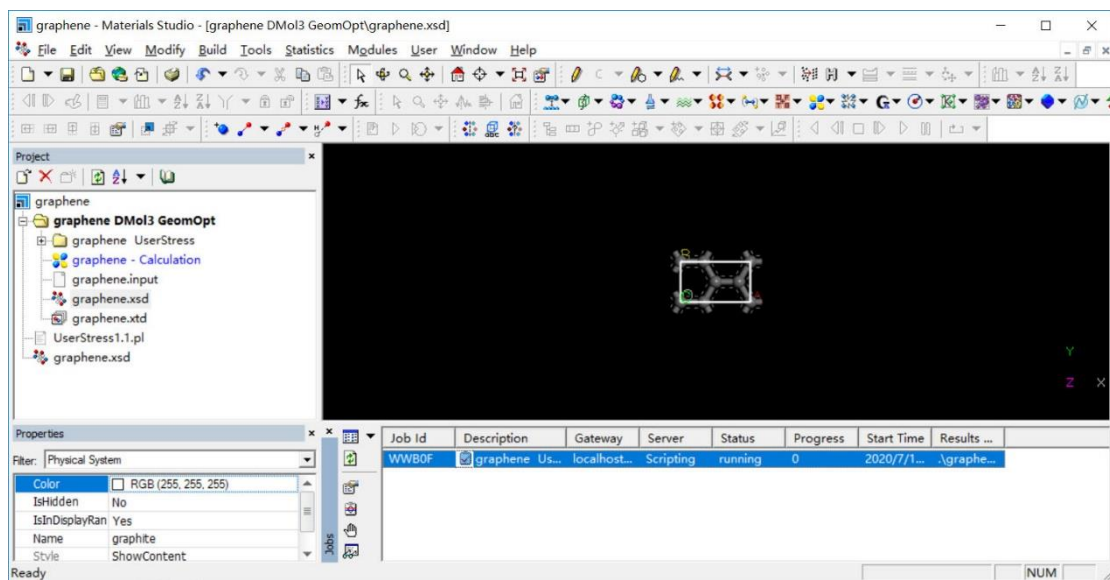
3) 双击打开“graphene DMol3 GeomOpt”文件夹里的“graphene.xsd”文件。点击菜单栏里的 User 下拉菜单，选择 UserStress 选项。



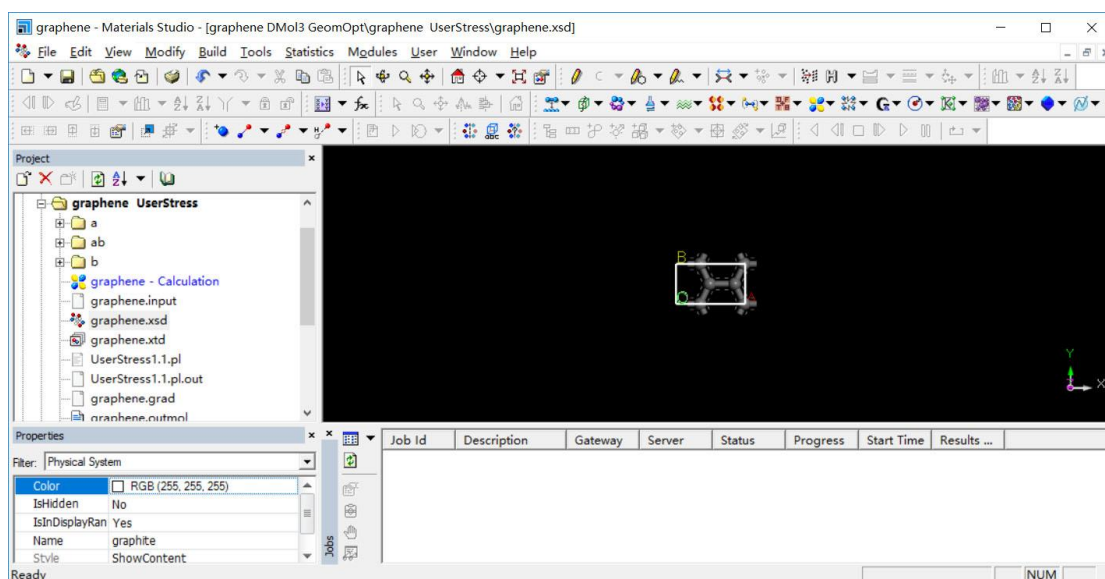
4) 在弹出的 UserStress 对话框中将 settings 设置为“graphene”。点击 OK 开始运行。



5) 正在运行。



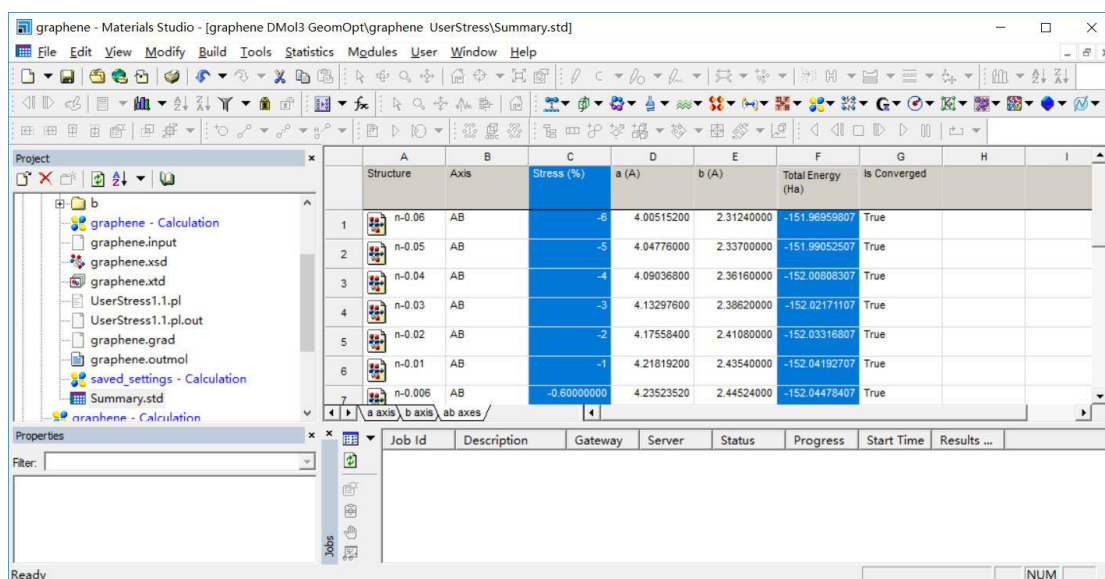
6) 运行完成。



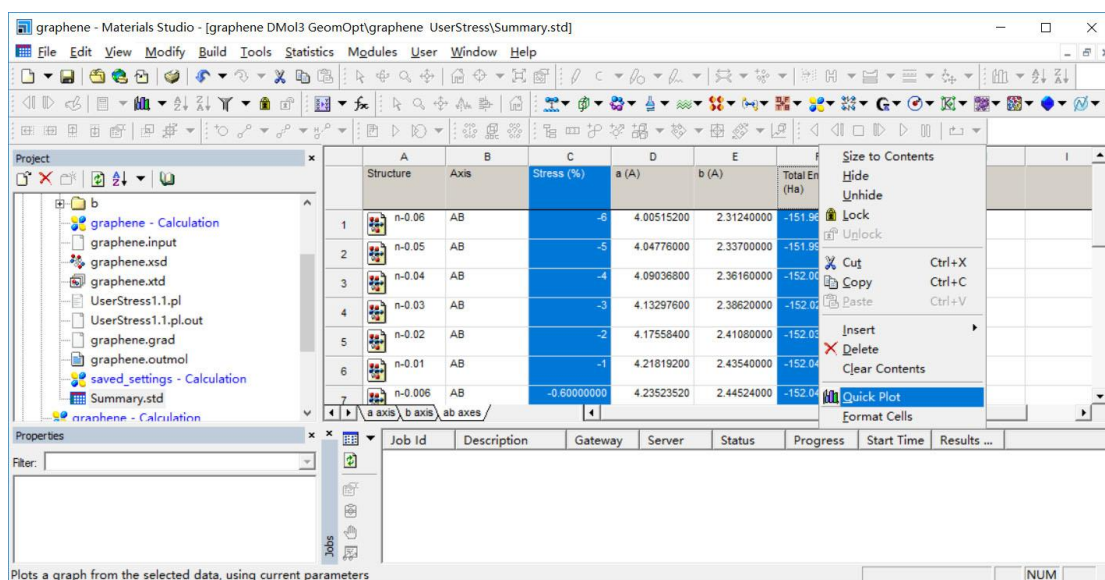
7) 双击打开“graphene UserStress”文件夹里的“Summary.std”文件。表格里“a axis”、“b axis”和“ab axes”选项卡分别储存仅沿 a 轴拉伸、仅沿 b 轴拉伸以及沿 ab 轴同时拉伸的计算结果。表格里第一列储存的是拉伸后的晶体结构，双击可以查看结构。第二列储存的是拉伸轴。第三列储存的是应变数据。第四列和第五列储存的是 a 和 b 轴的晶格常数。第六列储存的是拉伸后晶体结构的能量。第七列储存的是每次计算的收敛情况。

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I |
|---|-----------|------|-------------|------------|------------|-------------------|--------------|---|---|
| | Structure | Axis | Stress (%) | a (Å) | b (Å) | Total Energy (Ha) | Is Converged | | |
| 1 | n-0.06 | AB | -6 | 4.00515200 | 2.31240000 | -151.96959807 | True | | |
| 2 | n-0.05 | AB | -5 | 4.04776000 | 2.33700000 | -151.99052507 | True | | |
| 3 | n-0.04 | AB | -4 | 4.09036800 | 2.36160000 | -152.00808307 | True | | |
| 4 | n-0.03 | AB | -3 | 4.13297600 | 2.38620000 | -152.02171107 | True | | |
| 5 | n-0.02 | AB | -2 | 4.17558400 | 2.41080000 | -152.03316807 | True | | |
| 6 | n-0.01 | AB | -1 | 4.21819200 | 2.43540000 | -152.04192707 | True | | |
| 7 | n-0.006 | AB | -0.60000000 | 4.23523520 | 2.44524000 | -152.04478407 | True | | |

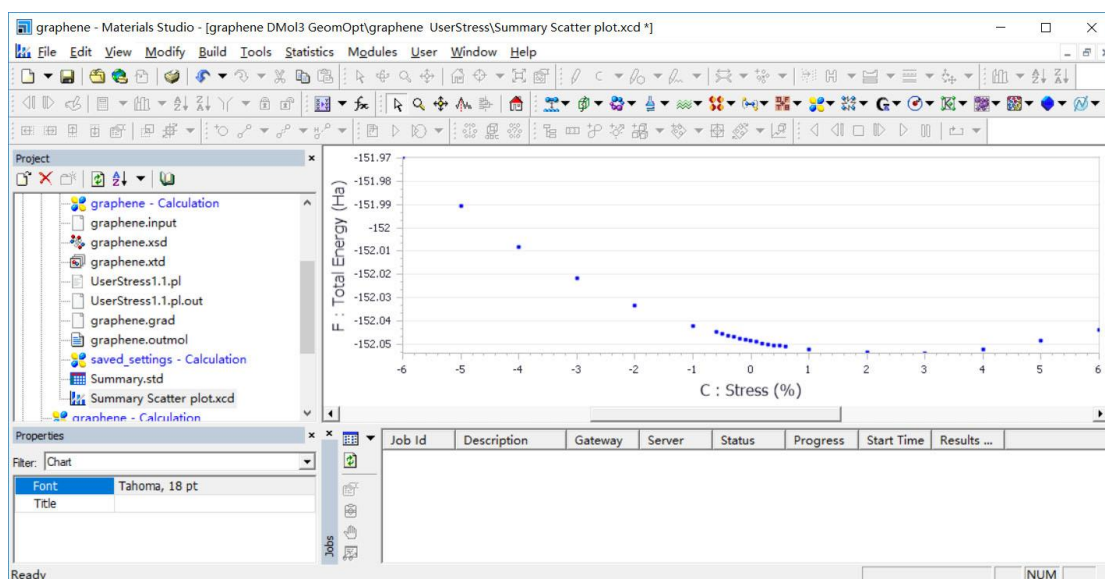
8) 选择“ab axes”选项卡，同时选中选中 C 列（应变）和 F 列（能量）。



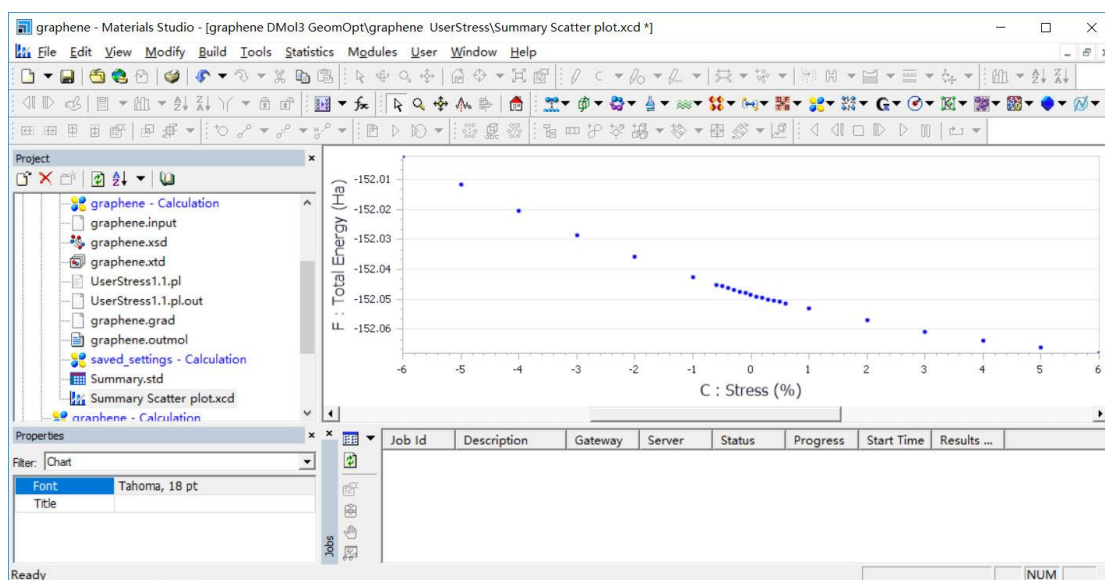
9) 右键单击，在下拉菜单中选择 Quick Plot，做应变-能量关系图。



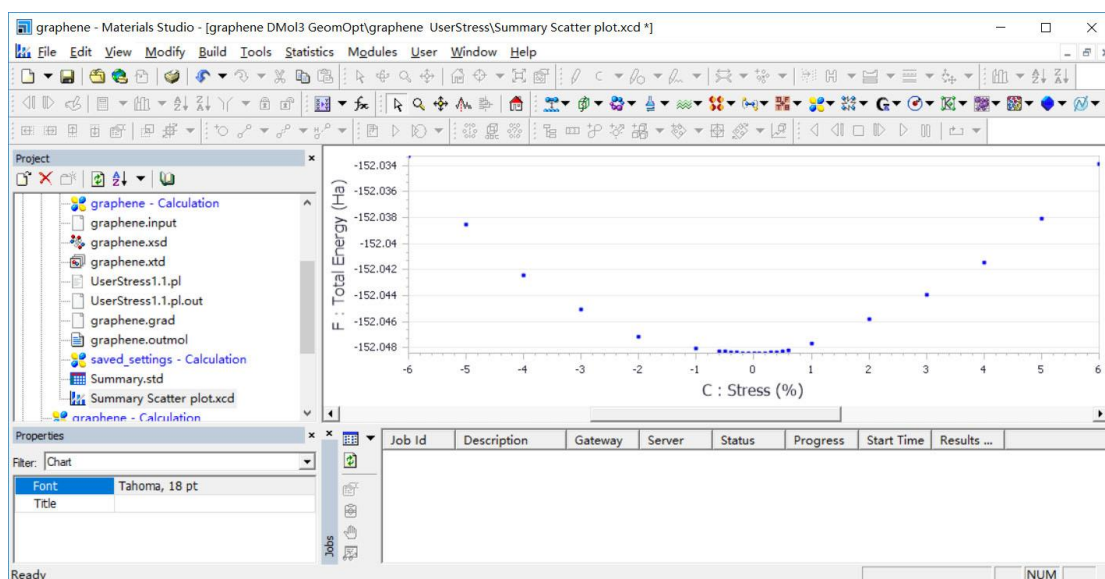
10) 沿 ab 轴同时拉伸时的应变-能量关系如下图所示。可以看到在 3%应力下能量最低。



11) 同理可以做仅沿 a 轴拉伸时的应变-能量关系，如下图所示。



12) 同理可以做仅沿 b 轴拉伸时的应变-能量关系，如下图所示。



七、参数

1) 应力列表 (stress_list)

说明：施加应力值组成的列表。注意，只需给出正应力即可，脚本会自动计算负应力和无应力情况下的结构能量。

取值：(float, float, ...)

默认值：(0.001, 0.002, 0.003, 0.004, 0.005, 0.006, 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.06)

2) 是否仅沿 a 轴拉伸 (along_a)

说明：是否计算仅沿 a 轴施加应力的情况。取 1 时沿此方向拉伸，取 0 时则不拉伸。

取值：0 或者 1

默认值：1

3) 是否仅沿 b 轴拉伸 (along_b)

说明：是否计算仅沿 **b** 轴施加应力的情况。取 1 时沿此方向拉伸，取 0 时则不拉伸。

取值：0 或者 1

默认值：1

4) 是否沿 **ab** 轴同时拉伸 (**along_ab**)

说明：是否计算沿 **ab** 轴同时施加应力的情况。取 1 时沿此方向拉伸，取 0 时则不拉伸。

取值：0 或者 1

默认值：1

5) 计算模块 (**module**)

说明：使用什么模块进行结构优化。模块名称应与前面所设置参数时用的模块一致。目前仅支持 CASTEP 和 DMol3 模块。

取值：DMol3 或者 CASTEP

默认值：DMol3

6) 设置文件 (**settings**)

说明：之前所保存的参数文件名称。给出“-Calculation”之前的名称即可。如计算参数文件为“graphene - Calculation”，则此处应填写“graphene”。

取值：string

默认值：无

八、许可协议

UserStress 遵守由自由软件基金会发布的 GNU 通用公共许可协议发布，不作任何担保。更多细节请参看 GNU 通用公共许可协议 3.0 (GPL 3.0)。