

第三次作业

12307110227 文轩

Part1 利用 ASE 搭建碳纳米管

1. 基本思路

首先声明一下，本来我来搭这个碳纳米管的基本思路是：先在一个平面内铺开 N 个晶胞，然后绕着 Z 轴将这 N 个晶胞卷起来，但是在实现的过程中遇到了很多的困难，比如要取出每个原子的 x 坐标值，以及如何对所有原子进行的分别的作用，最后还需要进行坐标的压缩。感到很麻烦之后，与李雪阳同学进行了交流，发现了他天才的思路，鉴于自己的思路难以进行，以及时间紧迫，于是借鉴了李雪阳同学的思路，自己写了代码，得到了所需的结果。

基本思路如下：

- 1) 先求出所要搭建的碳纳米管的半径 R ， C 原子间距设为 a ，一圈上的晶胞数为 N ， Z 方向延展数为 Nz 。
- 2) 在 Z 轴下方 R 处的直线($x=-R, y=0$)上按顺序建立 4 个 C 原子， Z 坐标分别为 $0, 0.5a, 1.5a, 2a$ 。
- 3) 将中间两个 C 原子绕着 Z 轴旋转 π/N ，即旋转到最后在碳纳米管上的位置，这样得到了一个斜着的晶胞。
- 4) 将这个斜着的晶胞作为一个整体，分别绕着 Z 轴旋转 $i*2\pi/N (1 \leq i < N)$ ，然后将这些旋转得到的晶胞连成一个整体，即得到一个圈。
- 5) 将得到的圈沿着 Z 方向延展 Nz 次，即能得到碳纳米管。

2. 代码

```
import math
a=1                #C 原子间距
N=20               #构成一圈的晶胞数目
Nz=20              #z 方向延展的数目
pi=math.pi
R=a*math.sqrt(3.0)/4.0/math.sin(pi/2.0/N)    管的半径

from ase import Atoms
c1=Atoms('C',positions=[(-R,0,0)],cell=(3.0*R,3.0*R,3.0*a*Nz),pbc=(0,0,1))
c2=Atoms('C',positions=[(-R,0,0.5*a)],cell=(3.0*R,3.0*R,3.0*a*Nz),pbc=(0,0,1))
c3=Atoms('C',positions=[(-R,0,1.5*a)],cell=(3.0*R,3.0*R,3.0*a*Nz),pbc=(0,0,1))
c4=Atoms('C',positions=[(-R,0,2.0*a)],cell=(3.0*R,3.0*R,3.0*a*Nz),pbc=(0,0,1))    #定义一个晶胞内各原子坐标
c2.rotate('z',pi/N,rotate_cell=True)
c3.rotate('z',pi/N,rotate_cell=True)        #中间两个原子绕圆心旋转
c1.extend(c2)
c1.extend(c3)
c1.extend(c4)
c=c1.copy()    #形成一个晶胞
```

```

all=c.copy()

i=1      #利用循环得到一圈
for i in range(1,N,1):
    app=c.copy()
    app.rotate('z',2.0*i*pi/N,rotate_cell=True)
    all.extend(app)

circle=all.copy()

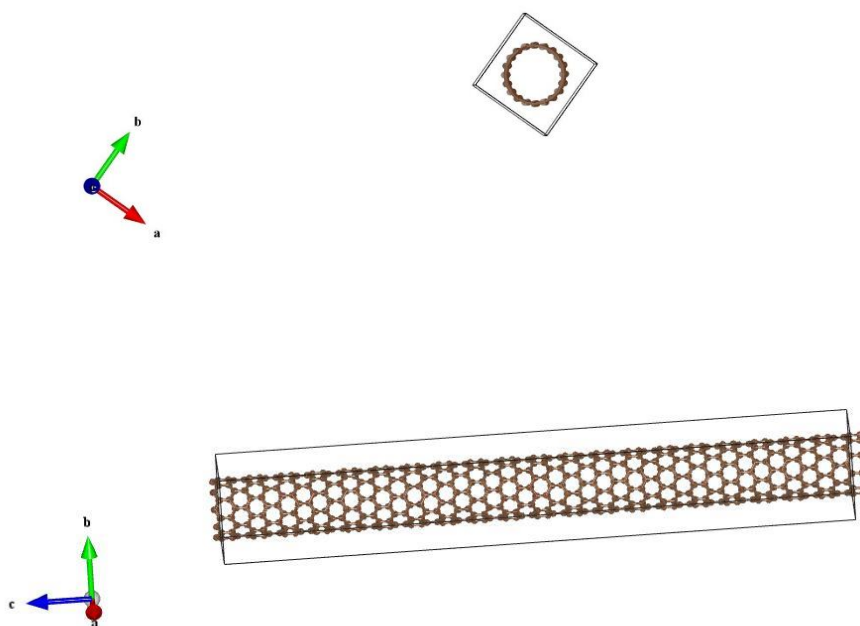
i=1      #利用循环在 z 方向延展，得到纳米管
for i in range(1,Nz,1):
    app=circle.copy()
    app.translate([(0,0,3*a*i)])
    all.extend(app)

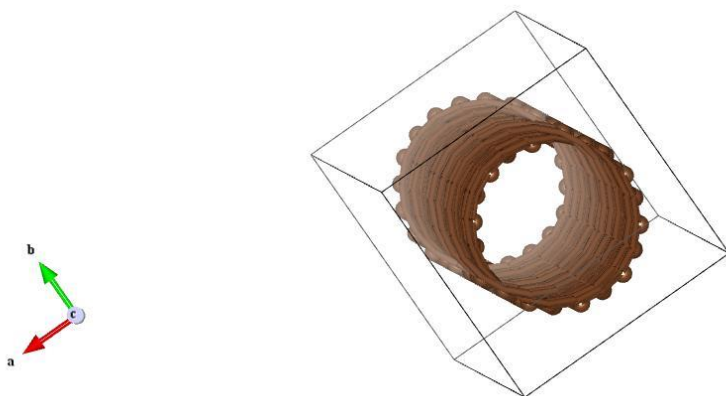
all.translate([1.5*R,1.5*R,0])    #将整个体系平移到第一卦限

print all.positions
from ase.io.vasp import write_vasp
write_vasp("POSCAR",all ,sort=True,direct=True,vasp5=True)

```

3. 图像





Part2 利用 Python 来提高前一次的作业

很遗憾，这一次的工作主要花在完成上次的作业上了，如上一个报告里所说，这一次的
计算模拟得到了很多的经验与教训，同时也发现了很多需要改进的地方，也深刻体会到利用
Python 来提高工作效率的重要性，因此在后面的工作中一定会利用 Python 来进行改进。