

1. 修改 atom\_swap.py 程序，令其可读取 POSCAR 文件中的 Y/N，以决定原子是否可交换
2. 学习数据结构与算法
3. 学习 VASP、MS、Linux 终端命令
4. 学习机器学习

Upload

```
scp -r /Users/wangzongjian/desktop/ML/Deep_learning/s1_w2.py  
zxchen@114.212.165.153:/home/zxchen/work_dir/zjwang
```

Download

```
scp -r zxchen@114.212.165.153:/home/zxchen/work_dir/zjwang/test_vacancy/  
OUTCAR /Users/wangzongjian/desktop
```

114.212.175.227

sezhang

07075024

zjwang

wzj3687379

宗健，  
我想你的这篇文章主要突出如下几点：

(1) PdM(M=,Cu,Ag,Au) 在 HHH 同，C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>，C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> 下的吸附诱导偏析

(2) 为描述 (1)，需要与真空干净表面情况对比，这就牵出钯铜真空情况与不少实验不符的现象，经比较泛函，考虑色散校正，和晶格参数（比较表面能）。我们得出的解释是表面能随晶格参数而变化，在钯铜合金的理论晶参下，钯的表面能小于铜的，于是出现钯偏析的现象。

(3) 实际情况下，钯铜合金是什么偏析呢？目前我不能完全认为是钯偏析，也可能是铜偏析。为此，我们要弄清下面叁点：

(A) 钯铜合金在实验条件下的实际晶参是多少？注意热胀冷缩现象的存在，而理论优化只相应于零 K 情况下的，即使理论方法没有任何误差，其优化的结果也要考虑温度效应，才能代表实验的晶参。

(B) 合金的晶型是什么，这是我考虑做 B 2 的原因。

(C) 晶参显然与合金的组成有关，不同钯浓度下的合金，晶参应当不一样。

对这三点，这个文章中只要研究表面能随晶参的变化，建议做 5 个点，即 5 个不同的晶参，间隔均匀一些，有 5 个点，可以拟合出一条曲线出来，这样就可以预测了。

(4) 基于 (3) 是表面能与晶参的关系曲线，根据钯铜表面能大小，来预测 MC 模拟后哪个元素偏析，与你的 MC 结果比较。两种可能会略有偏差，这是预料之中的。

为此，我们须采用一致计算方案。考虑到 pw91 对银金的钯合金已有结果，且黄一直用这个泛函，再有，即使用上 ps 泛函并没有解决铜的问题，因此，我们这个文章的泛函仍用 pw91，ps 的结果不要删除，文章中我们可以提到这个检查（若不提及也要保留，以防审稿人提问）。

MC的参数，主要指步数和VASP计算的设置。关于步数，建议你做一个测试，我以前测试的结果是，平均每个原子有5次改变位置的机会的话，结果基本上可以接受为平衡结果。但我们必须做扎实这件事，因为，这个MC中的最基本也是最容易补质问的一点，如果我们说，我们报道的是只做300次的结果，审稿人极可能要求提供证明，甚至说，这个结果不可信，而否定整个MC的结果。干净表面次数可能要远小于表面吸附了物质的。

关于VASP计算参数，K点331，完全可以了。因为你的 $a=11$ 左右。动能400，NSW=3-5，这个次数可以与前面的测度一道做。

小王，

现在MC已能按照我们的希望正常进行下去，因此，我们下面就有计划地根据我们前面的文章设计开展计算就好。按我们前面的设想，这个文章反映如下几个方面的问题：

(1) PdM (Cu, Agt, Au) 合金在真空条件下（无吸附质之洁净表面）情况下的表面偏

(2) PdM中Cu的合金异常现象的解释（基于元素的表面能随晶格常数的变化不等性）。为此，你做不同晶格大小下的钯，铜，金，银表面能（之所以要做金银，是为了从另一方面说明表面能与偏析成份的关系，同时也增加你大论文的内容）。看了你给的计算表面能的模型，7层，上下各两层优化。400电子伏，331基本是可以（为保险起见，如果计算量增加不大的话，表面能的K点可以取551，以防审稿人质疑）。做表面能的计算采用的泛函与钯铜的体相优化的泛函相同。

(3) 有表面吸附质时的表面偏析。虽然铜的问题仍然存在，但对我们考虑的问题（吸附诱导的偏析）影响不大，我们关注偏析量的变化

(4) 计算表面能时，原子在体相的能量，我们取优化的晶格下的原子能量，不宜用不同晶格下的原子能量。你已经做了不同晶格下的钯铜体相，我认为这基本上够了（如果金，银没有优化的结果，则要做一下，因为表面能需要），可以提供我们需要的数据来看不同原子能量对表面能的影响了。体相计算设定的K点13, 13, 13是可以的。

(5) 现在看来你的工作进入比较顺利的道路上。在接下来的时间里，一方面完成这个小论文的计算，另一方面，要结合大论文，在研究内容上作一些思考。如果每个阶段的工作都有计划地进行，并且有了结果后即整理，总结，分析，大论文是水到渠成的事，后面会给你很大的自由空间。

宗健，

结果收到。

关于做哪些晶格常数下的表面能，我是这么考虑的：

我们做不同晶格下的表面能的目的主要是要说明为什么钯铜的MC结果为何不符合我们的预期，对吧？我们的观点是，在钯铜合金的晶格常数下，钯的表面能比铜的小。为此，我们做一系列不同晶格常数下纯金属的表面能。接下来的问题是，这一系列不同的晶格常数取什么值。我的看法是，在各个纯金属优化的晶格常两边各取两个点。比如，假如钯的优化晶常是3.90，则你可取3.86，3.88，3.90，3.92，3.94。根据你今天提供的钯的表面能（我取优化的。建议你对优化和没优化的表面能都做拟合）由此五个点，采用二次函数拟合，相关系数平方达1，比线性拟合好。类似地，铜也在铜优化的常数两侧各取两个点，也能得一关系式，由这两个关系式，你能得到铜表面能小于钯的表面能时的晶格常数（按你以前，如果合金的晶格常数取4.00或4.XX，我忘记了，则偏析与预期相符），然后，我们做一个合金晶格常数位于铜小于钯的区域的MC，如果我们的认识是正确的，其结果一定是铜偏析（这个

晶格常数可能与我们根据二次函数关系预测的有点差别，因为体系不太一样）。

对于钯金或钯银，因为他们符合我们的预期（金和银偏析），是否存在钯偏析，则要看何时钯表面能小于金或银的，只要有了金银表面能与晶格常数的二次函数关系，我们就能判断这个问题，也许没有，或者出现钯偏析的条件不现实等等。为得到金银的表面能与晶格的关系，它们也与钯或铜的计算相似处理即可。如果我们预测有可能出现钯偏析，我们就采用预测的晶格常数做一下MC，若真的出现反偏析，这就从另一方面印证的我们的观点。能出现反偏析的可能性金比银大。

以上计算采用你现在做钯表面能的计算方案。

钯的表面的已做了计算，虽然没有取其优化的晶格两侧取点，但影响不大。先不要重做，先做铜的，看看得到的关系式，能不能预测出表面偏析反过来的晶格常数。

采用优化晶格常数两边取点，虽有其合理性，易为审稿人接受。但也有不确定性或风险，即在平衡晶格附近的势能面这种二次函数数据形式的有效性能保持多远。作为研究，我们先采用平衡点两边取点的方案吧。

宗健，

(1) 3.81是在表面能变化点附近，你在不同晶格常数（3.7，3.95）下做MC，希望能看到偏析元素的变化。

(2) 现在表面能的变化与合金体系还是有差别的，因为原子的环境不同。还有其它的可能原因。你现在做的MC的NSW=1还是3？

小王，

比较了一下钯银和钯金的MC结果，银的表面银原子前4层每层的个数

(10/10/4/8),第四层没有变化，金的的是12/7/6/7/,记得最初你给黄的结果中，银和金表面偏析是相同。一种可能是以前是没有优化的，现在是优化的。无论什么原因，建议把银体系在现在的MC最后的结构基础上，再做一下，看是否接近平衡。

期望晶参为3.7和3.95下PdCu的MC模拟结果能符合我们的预期。

宗健，

钯铜合金的MC结果出乎意料，从根据表面能的曲线看，在小晶格条件下，铜表面能小，应偏析，大晶格下钯偏析，现在都是钯偏析，但大晶格下偏析量低于小晶格下的。从总能变化看，似乎都没有达平衡，但即使达平衡，可能对定性趋势也没有改变的可能。建议做下面两个MC，

(1) 在更小的晶格下（如3.5）做钯铜的MC模拟，

(2) 把INCAR中的NSW增加到10或15。