作者：刘雪飞

邮箱：[316187631@qq.com](mailto:316187631@qq.com)

语言：Python

|  |
| --- |
| 代码已实现功能：  **1. 2D/2D异质结简单版本,** 两个2D材料基矢夹角相同，晶格常数误差范围内相同。利用提供的01\_MoS2\_POSCAR 和01\_WSe2\_POSCAR 文件构建最小原子数、且mismatch在5%之内的异质结，初始层间距为3Å，异质结真空层为15Å，保持异质结晶格基矢夹角与单层材料一致（即120o），晶格常数为两个slab材料的平均数。  测试：说明1原始输入POSCAR 文件的mismatch 应该是超过了5%，所以无法生成a=b的新异质结POSCAR，下面分别以mismatch =9%和5%为例测试code.   1. 9% 测试：将heterojunction.py 和m\_n\_supercell.py 拷贝到输入文件所在目录     2）输入命令：python m\_n\_supercell.py 01\_MoS2\_POSCAR 01\_WSe2\_POSCAR ,代码交互内容包括输入欲产生的异质结的晶格常数为输入POSCAR的倍数，由于例子1中两种POSCAR mismatch >5% ，所以这里输入1倍也能产生异质结，只是在交互内容的mismatch数入时需要输入一个比真实mismatch 稍大的值，比如9%，表示当输入1倍时，程序会自动判断，在该倍率下，如果输入文件的mismatch 比输入的9%小，则该倍率有效，且能找到相应的异质结。      接下来程序经过计算，找到一些列的m\_n 组合，m\_n\_a1 m\_n\_b1 表示对于输入POSCAR1 的晶格常数a b 做线性组合时所得到的m n 系数 m\_n\_a2 m\_n\_b2 是POSCAR2的线性组合系数，注该系数已经经过筛选，是能满足异质结建模条件的组合值，New\_a\* New\_b\* 表示新的晶格常数（显示时精确到1位小数，但实际结构精确位数与原始POSCAR一致），最后一行列出了该倍率(1X)，该mismatch(9%)下新的异质结的夹角，该夹角的大小由输入的倍率和mismatch 控制，倍率和mismatch 越大，该夹角不同的个数越多，请注意，一般来说，我们是找到越小的异质结越好，因此正如程序运行时提示的那样，建议从较小的倍率及合适的Mismatch(一般5%可以接受)开始重复运行程序，直到找到为止。    角度列表中列出了两种角度，120 和60，因此在接下要求输入角度时，用户可以选择60 或120 或60 120 （空格分隔），比如我上图输入60 120 ，该值是存在一个列表中的[60,120],接下来代码要求定义真空厚度和异质结层间距，分别输入30 和3， 程序运行后产生了hetero-POSCAR\_NEW\_0-3 和hetero-POSCAR\_NEW\_1-4,命名中的“0”和“1”是[60,120]中的60 和120 的下标索引号，“3”和“4”表示角度列表中的第3（列表索引号）个60度和第4（列表索引号）个120度所对应的POSCAR，也就是说上述的角度列表中的并不是每一个都能输出来，但一旦有一个能产生新结构，程序就会退出，且保证了该结构基本是最小的异质结，如果用户发现最终一个都不能产生，只需要把倍率增1（2x）后重新运行直到找到即可。异质结如下图所示：      重新运行，此时输入scale times :1 ,mismatch:5%    程序提示增大倍率，表示此次搜索失败，重新运行，输入scale times:2 ,mismatch:5%    找到了四种角度，60 120 139 41    上图表示，我输入了四种角度，但只产生了0-2 和1-6 ，也就是60 度和120度的异质结产生了，其结果如下：      测试2:02\_MoS2\_POSCAR 02\_Graphene\_POSCAR  Scale times :3 mismatch 5% 产生60 和120 的POSCAR      测试3：scale times :3 mismatch:5% 产生114度    Scale times:4 mismatch:5% 产生 90度    测试4：04\_MoS2\_POSCAR 04\_Ni(111)\_POSCAR  Scale times :4 mismatch:5% 产生 60 120 度结构      测试5:05\_GaN001\_POSCAR 05\_HfO2001  Scale times:4 mismatch: 5% 产生90度，结构失败    测试6：02\_Graphene\_POSCAR 02\_MoS2\_POSCAR  Scale times:15 mismatch:5% 产生 60 90 120 41 79 101 角度的POSCAR，如下图    总结：如果用户想得到尽可能多的夹角，只需要尽可能增大scale times ，但计算时间很慢！ |
| 操作说明（请附上操作截图）： |
| 程序实现原理简述（建议以算法流程图的形式呈现）：  简单原理是新的POSCAR的晶格常数由老POSCAR的晶格常数的线性组合：  A0=m\*a+n\*b  B0=m’\*a+n’\*b  A1=m\*a1+n\*b1  B1=m’\*a1+n\*b1  A0\_B0夹角=A1\_B1夹角，实现过成经过一些列的逻辑约束。 |