|  |  |
| --- | --- |
| 姓名： | 崔梦男 |
| 电子邮箱： | mncui88@126.com |
| 代码所用编程语言： | Python |
| 代码已实现功能：  代码实现了：  1. 2D/2D异质结中级版本，两个2D材料基矢夹角相同，晶格常数不同。例子：MoS2/graphene  2. 自定义初始层间距  3. 自定义异质结真空厚度  4. 自定义指定mismatch的异质结  5. 自定义异质结晶格选取标准：使用上层材料晶格、下层材料晶格、上下层材料晶格平均值  6. 可以自定义上下层材料水平偏移量，从而输出不同堆垛方式的异质结  7. 程序可以输出符合要求 mismatch 前提下，异质结晶胞晶格最小的多种 slab 晶胞搭配方案，并给出这三种搭配方案基本信息，比如异质结晶胞原子数和晶格常数 | |
| 操作说明（请附上操作截图）：  本程序适应于两个2D材料基矢夹角相同，晶格常数不同的异质结：   1. 读入上层个下层材料的POSCAR文件，并在屏幕上打印基本信息：   本步骤以02\_MoS2\_POSCAR和02\_Graphene\_POSCAR文件为例，输出如下     1. 输入mis-match 的数值范围，和以上层还是下层晶格常数为标准(或平均晶格常数)，并输出所有满足该范围的异质结，原子数，晶格常数，mis-match等信息:     其中第一列为序号，第2~3列为上层和下层超胞数，第4列为组成异质结原子数，第5列为异质结晶格常数，第6列为mis-match   1. 选择并输入上述第一列序号，以及上层材料需要平移的平移向量，上下层中间距离，真空层厚度，得到满足条件的异质结POSCAR文件：      1. 查看文件 | |
| 程序实现原理简述（建议以算法流程图的形式呈现）：  流程图 | |