

基于卤化物钙钛矿(CsPbBr₃)进行结构建模

本节将介绍JAMIP-StructureFactory类中多种结构操作方法，可以辅助高通量计算所需的晶体结构构建，主要包括以下内容：

- 结构的输入/输出
- 批量构建高通量搜索的候选结构集
- 低维化结构构建
- 缺陷结构构建

结构建模准备工作

- 结构建模模块依赖于JAMIP数据库，用户需要安装并配置好数据库。数据库的安装及配置，请参阅JAMIP手册。
- 拷贝Input和Scripts在同一目录下，并在该目录下创建Output目录，用于结构建模的输出文件夹。

构建Output目录层次，用于以下结构建模的输出。其目录层次为：

```
| -Input
| -Scripts
| -Output
    | -forHTCalculations
        | -single
        | -double
    | -2D
        | -non-passivation
        | -passivation
    | -defect
        | -moire_supercell
```

创建Output目录，有以下两种方法：

- 使用Shell语言，在终端中：

```
>>> mkdir -p Output/forHTCalculations/single
>>> mkdir -p Output/forHTCalculations/double
>>> mkdir -p Output/2D/non-passivation
>>> mkdir -p Output/2D/passivation
>>> mkdir -p Output/defect/moire_supercell
```

- 执行Python代码：

```
>>> import os
>>> output=['Output/forHTCalculations/single',
```

```
'Output/forHTCalculations/double',
'Output/2D/non-passivation',
'Output/2D/passivation',
'Output/defect/moire_supercell']
>>> for path in output: os.system('mkdir -p {}'.format(path))
```

1. 结构的输入/输出

以下内容均以卤化物钙钛矿(CsPbBr₃)为例。

注意：为确保可以正确执行以下代码，请保证Input和Scripts处于同一目录层次，并且不要删减Input目录中的文件。所有输出的结构均位于Output目录中。Output_for_comparsion目录保存了正确的输出结果，可以用于对比。

```
# 基本模块导入
>>> from jamip.db.connect import Structure,Read,Write
>>> from jamip.db.materials.molStructure import MolStructure
>>> from jamip.db.materials.molComposition import MolComposition
>>> from jamip.db.modeling.structureFactory import StructureFactory
>>> import numpy as np
```

结构读取

Read(path, dtype)用于从文件中读取结构。其中，path为文件的路径。dtype为文件类型，目前支持的类型有：1) 晶体结构：CIF、POSCAR、XDATCAR，以及CALYPSO输出结构；2) 分子结构：xyz和mol。

```
# 读取晶体结构
>>> raw=Read('../Input/CsPbBr3.vasp', dtype='poscar').run()
>>> s0=Structure().create(raw_structure=raw)

# 读取分子结构
>>> raw = Read('../Input/molecule/CH3NH3.xyz', dtype='xyz').run()
>>> MA=MolStructure().create(raw_structure=raw)
```

同时，也可以读取JAMIP数据库中保存的结构（详细的数据库查询语法规则，请查阅JAMIP手册的数据库部分）：

```
>>> FA=MolComposition.objects.get(formula='CN2H5').structure_set.all()[0]
```

输出结构

类似地，Write(structure, path, dtype)用于输出JAMIP中的结构。其中，structure为结构对象，path为输出路径，dtype为文件类型，目前支持的类型有：1) 晶体结构：CIF、POSCAR；2) 分子结构：xyz和mol。

```
>>> Write(structure=sf.structure,
          path='../Output/defect/CsPbBr3_twist.vasp',
          dtype='poscar').run()
```

2. 批量构建高通量搜索的候选结构集

注意:

- 除少数方法外，StructureFactory类中的方法都支持链式操作，即在同一行命令中可以连续进行多次结构操作；
- 获取结构操作后的结构，调用StructureFactory类对象的属性structure；
- 建议在结构操作过程中，保持isUpdatedInfo和isPersist为False，可以显著提高程序的响应速度；
- 建议在所有结构操作完成后，先调用Structure类的update()方法来同步内建数据结构，可以避免数据的不一致。

2.1.单钙钛矿结构(ABX₃)

同时对A、B和X位进行元素替换，构建高通量候选结构集。

```
# 自定义待选元素
>>> A=['Na', 'K', 'Rb', 'Cs']
>>> B=['Ge', 'Sn', 'Pb']
>>> X=['Cl', 'Br', 'Br']

>>> for a0 in A:
>>>     for b0 in B:
>>>         for x0 in X:
>>>             sf=StructureFactory(structure=s0)
>>>             sf.substitute_atoms(atoms=s0.get_atoms_of_element('Cs'),
>>>                                 symbol_of_elements=a0)
>>>             sf.substitute_atoms(atoms=s0.get_atoms_of_element('Pb'),
>>>                                 symbol_of_elements=b0)
>>>             sf.substitute_atoms(atoms=s0.get_atoms_of_element('Br'),
>>>                                 symbol_of_elements=x0)
>>>             Write(structure=sf.structure,
>>>                   path='../Output/forHTCalculations/single/{}{}{}3.vasp'.format(a0,
>>>                                                                                   b0,
>>>                                                                                   x0),
>>>                   dtype='poscar').run()
```

当A为替换扩展到有机小分子时:

替换A位为有机分子时，需要先删除原位置的原子，再插入有机小分子。否则，程序会抛出原子重叠异常。

```
>>> raw=Read('../Input/molecule/CH3NH3.xyz', dtype='xyz').run()
>>> MA=MolStructure().create(raw_structure=raw)
>>> MA.label='MA' # 用户自定义小分子标签
```

```

>>> raw=Read('../Input/molecule/CH3CH2NH3.mol', dtype='mol').run()
>>> EA=MolStructure().create(raw_structure=raw)
>>> EA.label='EA'

>>> raw=Read('../Input/molecule/CH3NH2CH3.mol', dtype='mol').run()
>>> DEA=MolStructure().create(raw_structure=raw)
>>> DEA.label='DEA'

>>> raw=Read('../Input/molecule/CH3ONH2.mol', dtype='mol').run()
>>> FM=MolStructure().create(raw_structure=raw)
>>> FM.label='FM'

>>> mol_A=[MA, EA, DEA, FM]
>>> for ma0 in mol_A:
>>>     sf=StructureFactory(structure=s0)
>>>     sf.del_atoms(atoms=s0.get_atoms_of_element('Cs'))
>>>     sf.insertMolecule(structure_of_molecule=ma0,
                           position_in_molecule=ma0.mass_center,
                           position=s0.get_atoms_of_element('Cs')[0].position)
>>>     Write(structure=sf.structure,
               path='../Output/forHTCalculations/single/{}PbBr3.vasp'.format(ma0.label),
               dtype='poscar').run()

```

此外，可以从JAMIP数据库中的读取分子结构：

```

>>> mol_A_in_DB=[MolComposition.objects.get(formula='CN2H5').structure_set.all()[0],
                 MolComposition.objects.get(formula='CH6N3').structure_set.all()[0],
                 MolComposition.objects.get(formula='N2H5').structure_set.all()[0],
                 MolComposition.objects.get(formula='NOH4').structure_set.all()[0],
                 MolComposition.objects.get(formula='H4N').structure_set.all()[0]]
>>> for ma0 in mol_A:
>>>     sf=StructureFactory(structure=s0)
>>>     sf.del_atoms(atoms=s0.get_atoms_of_element('Cs'))
>>>     sf.insertMolecule(structure_of_molecule=ma0,
                           position_in_molecule=ma0.mass_center,
                           position=s0.get_atoms_of_element('Cs')[0].position)
>>>     Write(structure=sf.structure,
               path='../Output/forHTCalculations/single/{}PbBr3.vasp'.format(ma0.label),
               dtype='poscar').run()

```

2.2.双钙钛矿结构(A₂B₁B₂X₆)

批量产生双钙钛矿结构，需完成以下流程：

- 构建2x2x2的超胞；
- 分别用+1和+3价元素替换对角线上的Pb；
- 获取替换后结构的原胞结构。

```

>>> B1=['Na', 'Ag'] # B1位元素
>>> B2=['In', 'Bi'] # B2位元素
>>> for b1 in B1:

```

```

>>> for b2 in B2:
>>>     sf=StructureFactory(structure=s0)
>>>     sf.supercell(dim=[2,2,2])
>>>     sf.substitute_atoms(atoms=[['Pb', 0.25, 0.25, 0.25],
                                   ['Pb', 0.75, 0.25, 0.75],
                                   ['Pb', 0.75, 0.75, 0.25],
                                   ['Pb', 0.25, 0.75, 0.75]],
                            symbol_of_elements='Ag')
>>>     sf.substitute_atoms(atoms=[['Pb', 0.75, 0.25, 0.25],
                                   ['Pb', 0.25, 0.25, 0.75],
                                   ['Pb', 0.25, 0.75, 0.25],
                                   ['Pb', 0.75, 0.75, 0.75]],
                            symbol_of_elements='Bi').primitive()
>>>     Write(structure=sf.structure,
               path='../Output/forHTCalculations/double/Cs{}{}Br3.vasp'.format(b1,
                                       b2),
               dtype='poscar').run()

```

2.3.低维化结构

构建不同层数的钙钛矿二维结构，需完成以下流程：

- 构建1x1x3超胞结构;
- 删除两端多余结构，保留单个八面体层结构单元;
- 沿着c方向,复制结构单元。

```

>>> sf=StructureFactory(structure=s0)
>>> sf.supercell(dim=[1, 1, 3]).
>>> sf.removeUnit(unit=[0, 0.3, 2],
                  isMoveAtoms=False).removeUnit(unit=[0.7, 1, 2],
                                                  isMoveAtoms=False)
>>> dz=2 # z-direction
>>> for i in range(0, 5): # 钙钛矿的层数
>>>     sf2=StructureFactory(structure=sf.structure)
>>>     sf2.addUnit(unit=[0.33333, 0.66667, dz],
                   nrepeat=i)
>>>     Write(structure=sf2.structure,
              path='../Output/2D/non-passivation/CsPbBr3-2d-{}.vasp'.format(i+1),
              dtype='poscar').run()

```

有机小分子钝化二维材料表面：

```

>>> dz=2 # z-direction
>>> for i in range(0, 5):
>>>     sf2=StructureFactory(structure=sf.structure)
>>>     sf2.addUnit(unit=[0.33333, 0.66667, dz], nrepeat=i)
>>>
>>>     # 按照Cs原子坐标在z方向的分量，排序
>>>     atoms=sf2.structure.get_atoms_of_element('Cs')
>>>     Cs=sorted(atoms, key=lambda atom: atom.position[dz])
>>>
>>>     mol_A=[MA, EA, DEA, FM]

```

```

>>> for ma0 in mol_A:
>>>     sf3=StructureFactory(structure=sf2.structure)
>>>     # left
>>>     sf3.del_atoms(atoms=[Cs[0]])
>>>     sf3.insertMolecule(structure_of_molecule=ma0,
>>>                          position_in_molecule=ma0.mass_center,
>>>                          position=Cs[0].position)
>>>     # right
>>>     sf3.del_atoms(atoms=[Cs[-1]])
>>>     sf3.insertMolecule(structure_of_molecule=ma0,
>>>                          position_in_molecule=ma0.mass_center,
>>>                          position=Cs[-1].position)
>>>     label = ma0.label
>>>     Write(structure=sf3.structure,
>>>            path='../Output/2D/passivation/CsPbBr3-2d-{}-{}.vasp'.format(i+1,
>>>                                                                           label),
>>>            dtype='poscar').run()

```

2.4.缺陷

2.4.1 点缺陷:

形成随机空位缺陷: 调用python内置randiint()方法, 获取指定范围内的随机整数。

```

>>> from random import randint

>>> sf=StructureFactory(structure=s0)
>>> sf.supercell(dim=[3, 3, 3])

>>> Br=sf.structure.get_atoms_of_element('Br')

>>> indexs=[randint(0, len(Br)) for i in range(0, 3)] # 获得随机选中3个Br原子的索引值
>>> del_Br=[Br[i] for i in indexs]

>>> sf.del_atoms(atoms=del_Br)

>>> Write(structure=sf.structure,
>>>        path='../Output/defect/CsPbBr3_vacancy.vasp',
>>>        dtype='poscar').run()

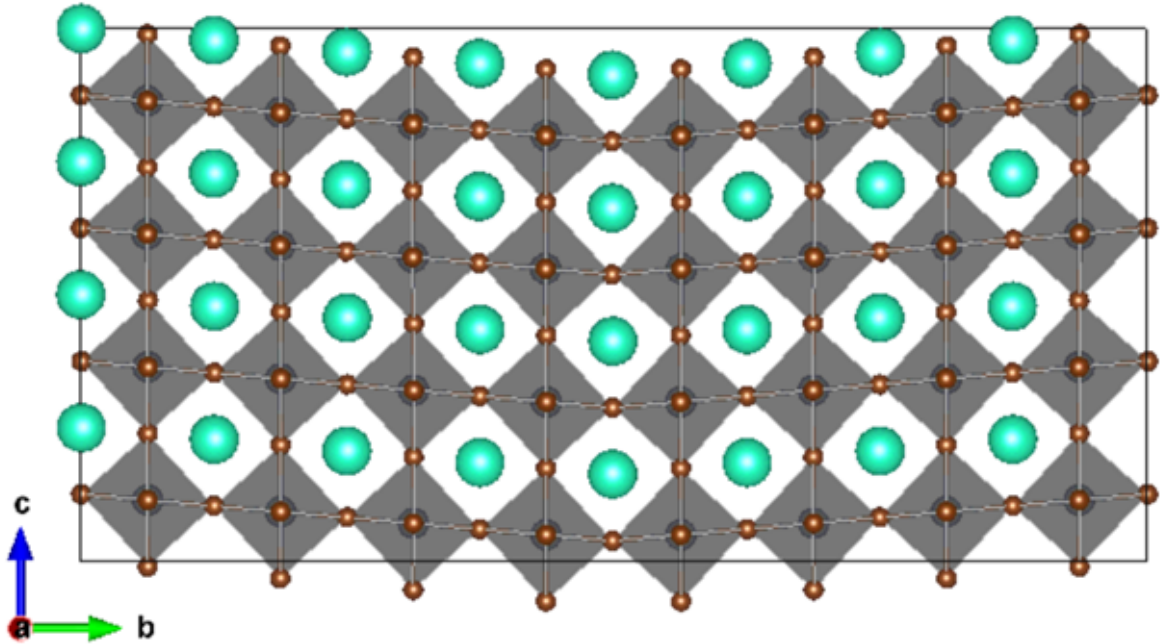
```

2.4.2 孪晶界

构建孪晶界面, 需要执行以下步骤:

- 构建1x8x8超胞;
- 以X-Z为镜面, 旋转每一个X-Y原子层, 以5°为例;
- 删除边缘错乱和多余的原子, 即删除沿Z方向上下部分和沿Y方向右侧的原子;
- 去掉Z方向的真空层;

- 以晶胞b轴方向中心为镜面，对所有原子做镜像复制。



```

>>> sf=StructureFactory(structure=s0)
>>> sf.supercell(dim=[1, 8, 8])

>>> degree=5
>>> dzs=np.linspace(0, 1, 50)
>>> for i in range(0, len(dzs)-1):
>>>     sf.rotation(atoms=sf.getUnit(unit=[dzs[i], dzs[i+1], 2]),
>>>                 axis=[1, 0, 0],
>>>                 theta=[degree, 'd'],
>>>                 origin=[0, 0, dzs[i]])
>>> sf.removeUnit(unit=[0, 0.25, 2],
>>>                isMoveAtoms=False).removeUnit(unit=[0.75, 1, 2],
>>>                                                  isMoveAtoms=False)

>>> sf.removeUnit(unit=[0.51, 1, 1],
>>>                isMoveAtoms=False)
>>> sf.vacuum(direction=[0, 0, -0.5, 'Direct'], isCenter=False)

# 根据孪晶界，获取右边的镜像原子
>>> add_atoms=[]
>>> for atom0 in sf.structure.atoms:
>>>     if 0.05 < atom0.position[1] < 0.45: # 不需要复制孪晶界和晶胞边界上的原子
>>>         fa0=atom0.to_formated_atom()
>>>         fa0[2] = 1-fa0[2]
>>>         add_atoms.append(fa0)
>>> sf.add_atoms(atoms=add_atoms)

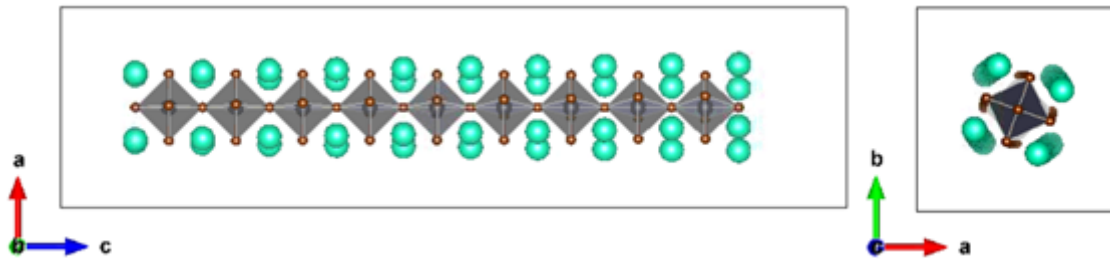
>>> Write(structure=sf.structure,
>>>        path='../Output/defect/CsPbBr3_twist.vasp',
>>>        dtype='poscar').run()

```

2.4.3 扭转应力下的一维纳米线结构

一维纳米线施加扭转应力，需要执行以下步骤：

- 构建3x3x10超胞;
- 在c轴方向添加真空层, 并删除XY面上四周的原子, 形成一维链;
- 沿着c轴方向, 递增旋转原子。



```
>>> sf=StructureFactory(structure=s0)
>>> sf.supercell(dim=[3, 3, 10]).vacuum(direction=[0, 0, 10, 'Cartesian'],
                                         isCenter=True).removeUnit(unit=[0.88, 1, 2],
                                                                     isCenter=True)

>>> for i in range(0, 2):
>>>     sf.removeUnit(unit=[0, 0.3, i],
                      isMoveAtoms=False).removeUnit(unit=[0.7, 1, i],
                                                      isMoveAtoms=False)

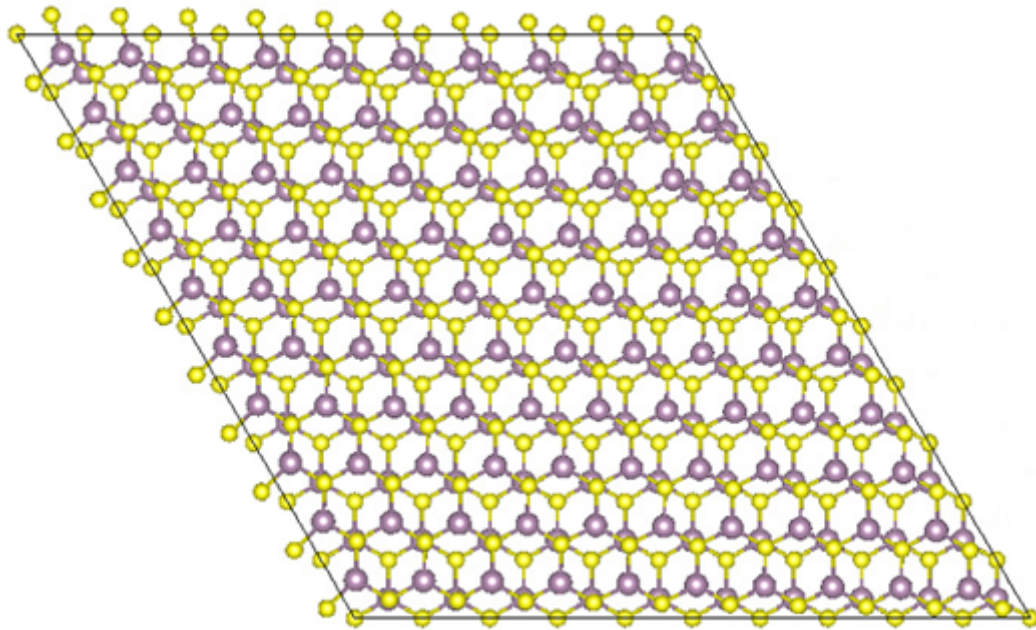
>>> degree=0.5
>>> dzs=np.linspace(0, 1, 50)
>>> for i in range(0, len(dzs)-1):
>>>     sf.rotation(atoms=sf.getUnit(unit=[dzs[i], dzs[i+1], 2],
                                     symbol_of_atoms=['Br', 'Cs']),
                    axis=[0, 0, 1],
                    theta=[degree*i, 'd'],
                    origin=[0.5, 0.5, 0])

>>> Write(structure=sf.structure,
           path='../Output/defect/CsPbBr3_spiral_strain.vasp',
           dtype='poscar').run()
```

2.4.4 摩尔超晶格结构

以MoS₂为例, 构建摩尔超晶格, 需要执行以下步骤:

- 删除多余原子, 得到两个原子层结构;
- 构建超胞结构;
- 选中上层原子, 施加旋转操作。



```

# MoS2
>>> raw=Read('./Input/MoS2.vasp', dtype='poscar').run()
>>> s0=Structure().create(raw_structure=raw)

>>> sf=StructureFactory(structure=s0)

>>> sf.removeUnit(unit=[0, 0.1, 2],
                  isMoveAtoms=False).removeUnit(unit=[0.9, 1, 2],
                                                    isMoveAtoms=False)

>>> sf.supercell(dim=[10, 10, 1])

>>> degree=1
>>> sf.rotation(atoms=sf.getUnit(unit=[0.5, 1, 2]),
               axis=[0, 0, 1, ],
               theta=[degree, 'd'],
               origin=[0, 0, 0])

>>> Write(structure=sf.structure,
          path='./Output/defect/moire_supercell/MoS2_moire.vasp',
          dtype='poscar').run()

```