

# GaN的声子计算

本节将介绍JAMIP在声子相关计算与后处理方面的方法，主要包含以下内容：

- 声子相关计算内容：
  - 声子相关计算内容
  - 声子谱和声子态密度
  - 软模相变
  - Gruneisen常数
- 声子相关计算后处理：
  - 绘图程序使用 (声子谱和声子态密度、Gruneisen常数)
  - 数据提取与计算结果分析
    - 生成力常数文件
    - 软模相变结构分析

## JAMIP计算准备工作

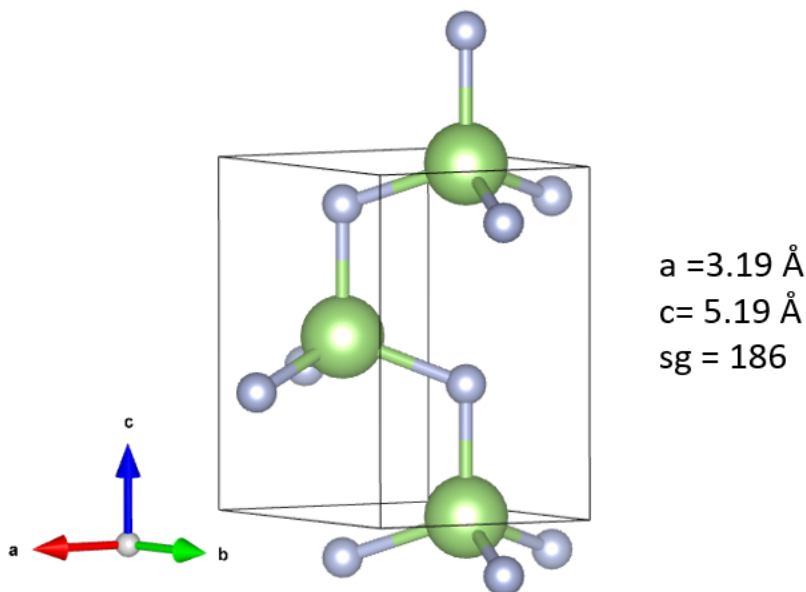
### 1. 程序准备

JAMIP进行声子相关计算,用户需要准备以下程序：

- VASP可执行程序与赝势库
- 安装JAMIP和Phonopy程序包

### 2. 材料结构文件

本示例选择常见的纤锌矿GaN结构计算，结构示意图如下：



### 3. 计算参数设置

计算使用VASP程序完成，下面列出了配置文件。需要注意的是，计算声子结构需要使用远高于常规计算的收敛精度。

`input.py` (任务提交文件, 可通过执行 `jp -i vasp` 生成)

```
vasp.program = $VASP_PATH           # VASP可执行文件路径, 需要用户添加
vasp.potential = $VASP_PSUEDOPATH    # VASP赝势库路径, 需要用户添加
vasp.tasks = 'relax scf force softmode gruneisen'
vasp.xc_func = 'pbe'

vasp.force = 1e-4                    # force convergence
vasp.energy = 1e-8                   # energy convergence
vasp.cutoff = 450                    # encut setting
vasp.kpoints = 0.189                 # kspacing
```

`.incarc` (计算参数文件, 需要使用 `ls -a` 查看)

```
base:
  system: jamip
  npar: 4
  ismear: 0
  sigma: 0.05
  lreal: false
  prec: true
  algo: normal
```

`.cluster` (集群参数文件, 需要使用 `ls -a` 查看)

```
manager: PBS           # 任务管理系统
project: VASP          # 任务名
queue: batch           # 队列名
cores: 16              # 计算使用的核数
nodes: 1               # 计算使用的节点数
cmd: qsub              # 任务提交命令
mpi: mpirun            # 并行程序命令
maximum: 4             # 最大提交任务数
env:
- moudle load intel    # 运行程序所需环境变量, 若python3为虚拟环境则需另外添加虚拟环境路径
- conda activate python3 # 用户可根据实际情况修改
```

## JAMIP声子相关任务计算

### 1. 任务提交

用户需要将下载的结构文件存入**结构文件目录(structure)**, 生成任务池并提交任务 `input.py` 中的设置要与实际目录名一致

```
pool=Prepare.pool(vasp)
pool.set_structure('structure','Results') # 结构目录和计算输出目录
pool.save('GaN.dat') # 任务池文件名
Prepare.cluster('pbs') # 计算使用的管理系统
```

任务提交命令(终端内输入)

```
>>> jp -r prepare # 生成任务池文件
>>> jp -r qsub -f GaN.dat # 提交任务池文件
```

任务提交后, 当前目录的文件结构:

```
.
|- .incar
|- .cluster
|- input.py
|- GaN.dat
|- __pycache__ # python3缓存
|- structure # 输入结构目录
  |- GaN.vasp
|- Results # 输出计算目录
  |- GaN.vasp
    |- pbsscript
    |- relax
    |- scf
    |- phonon
      |- force
      |- softmode
      |- gruneisen
        |- minus
        |- plus
```

## 2. 计算细节

### 结构优化(relax)

```
relax:
  nsw: 100 # 离子优化步长。结构优化最多进行3次正常精度的优化计算
  addgrid: true # 提高网格精度, 有助于部分结构计算收敛
```

1. 在结构优化计算时, JAMIP默认开启粗优化计算, 即先使用低精度的收敛参数进行分步计算, 使结构快速弛豫至收敛位置附近, 再进行高精度的计算。用户可以通过任务提交文件中的 **vasp.accelerate** 设置是否开启该功能。
2. 默认优化参数为全优化, 即 `isif=3, ibrion=2`
3. 结构优化未收敛时, 程序不会进行后续计算。

## 自洽场计算(scf)

```
scf:
  ismear: -5 # 使用四面体方法计算轨道电子占据
  lcharg: true # 输出电荷密度文件
```

自洽场计算用于获得基态的波函数(WAVECAR)与电荷(CHGCAR)文件, 供后续性质计算参数使用, 同时在数据提取时, JAMIP默认从自洽场计算结果中提取通用用户所需性质(例如: 电子数、自由能、真空能级)。

## 声子谱和声子态密度(force)

```
force:
  dim: 2 2 2 # 计算力常数使用的超胞大小
  symprec: 0.001 # phonopy搜索结构对称性的精度
  parallel: 4 # 并行任务数, 即最多同时使用4个节点计算该任务
```

声子谱(声子态密度)计算的计算流程:

1. 根据晶体结构对称性, 使用VASP计算超胞结构在不同声子振动模式下的受力;
2. 使用Phonopy进行数据后处理, 生成力常数文件并计算声子谱(声子态密度)。

在VASP计算阶段中, 对于对称性较低的结构可能需要计算上百个振动模式, 为了充分利用计算资源, JAMIP为计算添加了并行功能, 允许计算任务使用额外的节点进行计算, .incar中的parallel设置了最大使用节点数。

为确保声子谱计算结果正确, 用户需要为结构设置合适的超胞大小, 建议扩胞后的晶格常数在10Å以上。本示例计算使用2x2x2的超胞。

## Gruneisen常数(Gruneisen)

```
gruneisen:
  nsw: 50
  isif: 4
  ibrion: 2
  scale: 0.02 # 晶胞缩放系数
  parallel: 4 # 并行任务数
```

gruneisen常数的计算流程:

1. 基于优化后的结构, 分别计算初始结构、晶格缩小、晶格扩大三个结构的力常数, 其中初始结构的力常数直接使用上一步声子谱计算(force)的结果;
2. 使用Phonopy进行数据后处理, 根据三个结构的力常数文件计算gruneisen常数。

在VASP计算阶段, 缩放后结构在计算力常数前需要进行固定晶格体积的计算(isif=4)。在.incar文件中, gruneisen字典内的计算参数实际上用于该优化计算, 力常数计算时仍使用force字典。

gruneisen常数计算结果的准确性与晶胞缩放系数相关，在.incar中对应scale，例如本次计算使用的缩放系数为0.02，代表分别计算0.98和1.02倍晶胞的结构。用户需要在实际计算时对该值进行测试。

## 软模相变(softmode)

```
softmode:  
  dimension: 1 1 1  
  q: 0 0 0  
  band_index: 0  
  amplitude: 0.0 3.0 0.5  
  argument: 0  
  parallel: 4
```

在声子相关计算时，往往会遇到声子谱出现虚频导致计算失败的情况，而软模相变是基于声子振动进一步优化结构方式，通过计算不同振幅结构的能量寻找更加稳定结构。

软模相变在.incar中的核心参数为dimension和amplitude。dimension表示扩胞系数(与力常数计算使用的扩胞系数独立)，amplitude表示调制振幅的范围,本次计算使用的参数为(0.0,3.0,0.5)，代表振幅取0-3的范围，每隔0.5取值，实际计算使用的调制参数为 [0.0, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0]

# JAMIP数据后处理

## 1. 绘图程序

执行 `jp -i plot` 命令，生成绘图程序副本

```
# Plot params  
>>> BAND_EMIN = -1          # 能带类绘图参数, 适用于声子谱  
>>> BAND_EMAX = 21         # emin/emax: 声子谱区间的上下限  
>>> DOS_EMIN = -1          # 态密度类绘图参数, 适用于声子态密度  
>>> DOS_EMAX = 21  
>>> mesh = [10,10,10]     # Phonopy计算态密度时的网格  
  
>>> if __name__ == '__main__':  
>>>     from jamip.utils.plot import Plot  
>>>     pl = Plot(path='Results/GaN.vasp') # 根据生成脚本的位置, 指定计算目录  
>>>     pl.plots('phband')             # 绘制声子谱  
>>>     pl.plots('phdos')              # 绘制声子态密度  
>>>     pl.plots('gruneisen')         # 绘制gruneisen常数  
>>>     pl.plots('softmode')         # 绘制软模相变能量变化
```

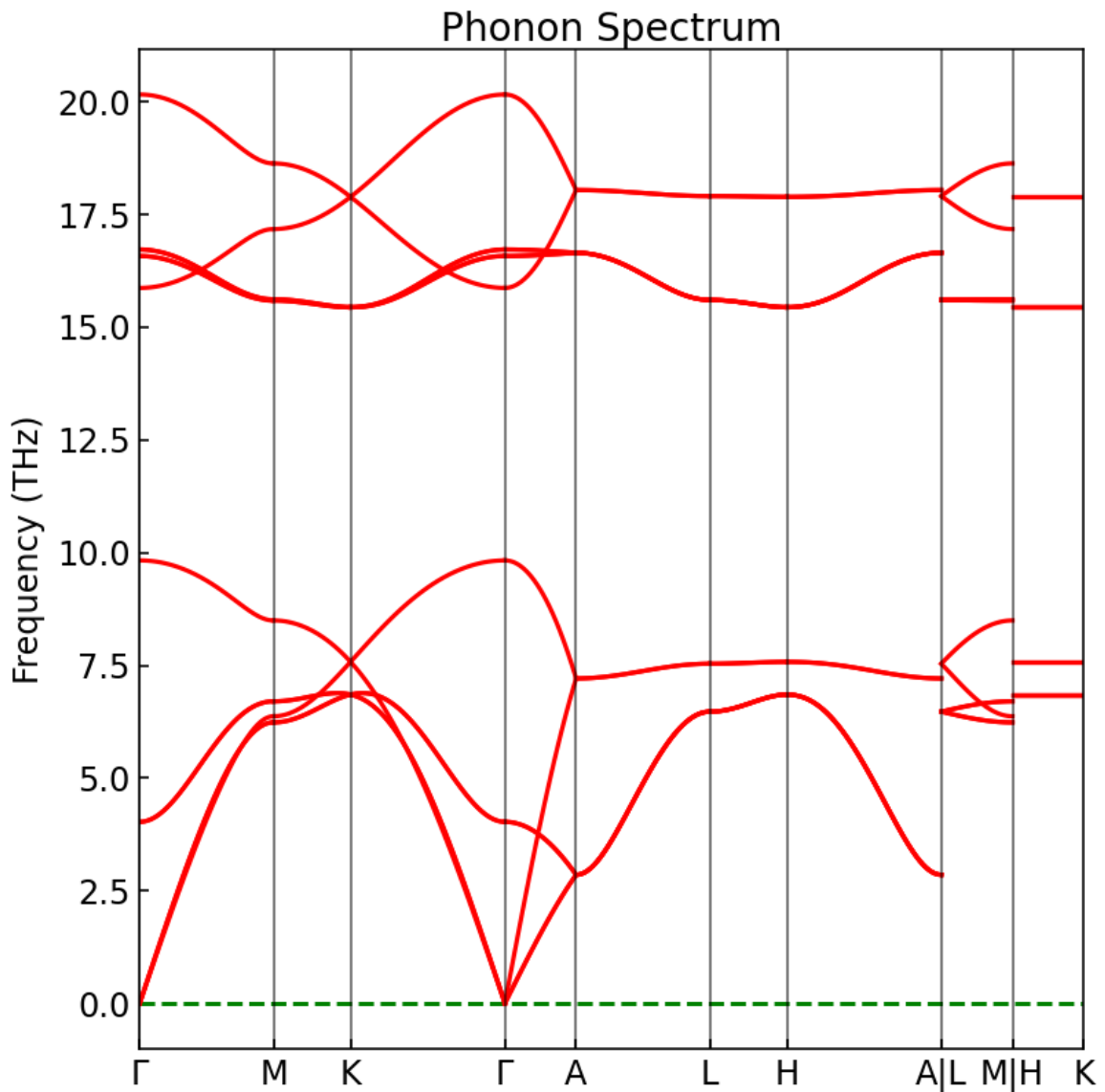
图像的大小、字体大小、线宽等通过 `$HOME/.jamip/viewer` 目录下的matplotlib样式文件设置，例如band.mplstyle(适用于声子谱绘图):

```
figure.figsize: 15,15      # 图像大小  
axes.titlesize : 20       # 标题文字大小  
axes.labelsize  : 25      # 坐标轴标签文字大小  
lines.linewidth : 1.6     # 线宽
```

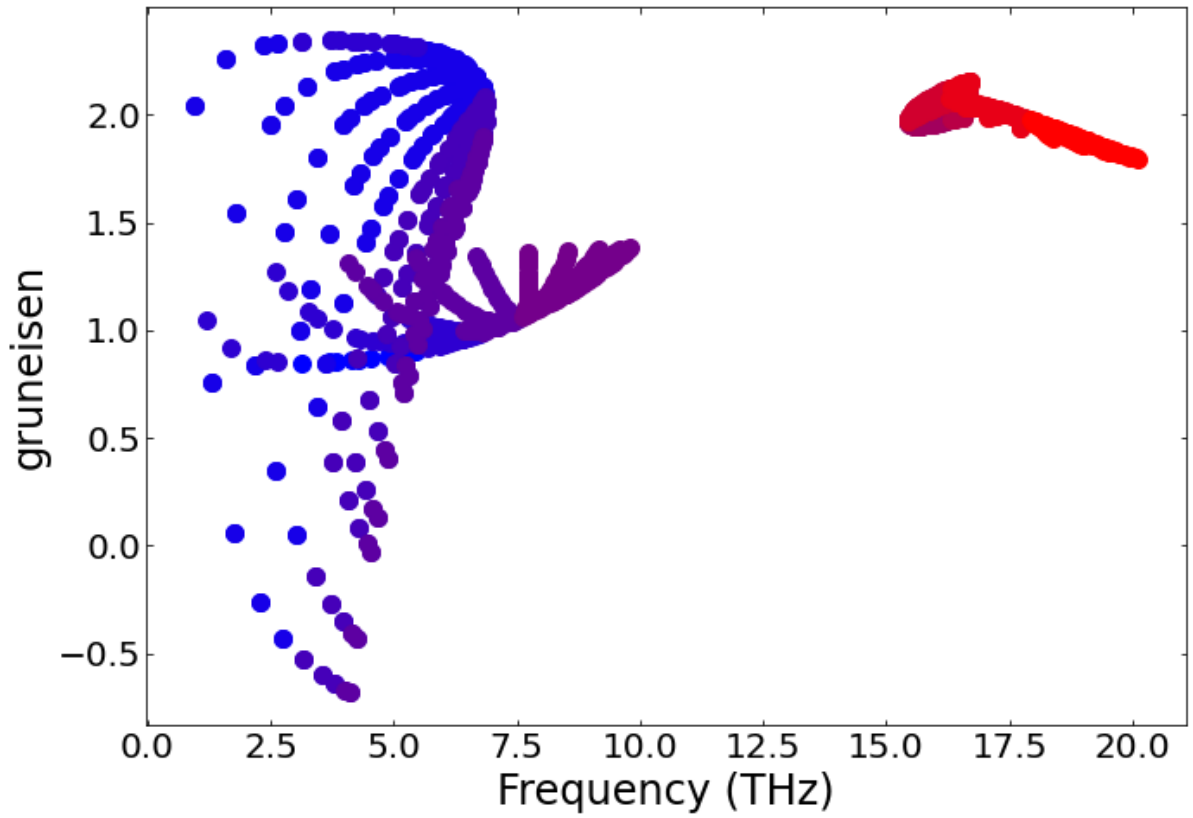
```
xtick.labelsize : 12      # x轴坐标大小
ytick.labelsize : 12      # y轴坐标大小
lines.markersize : 10     # 绘线符号大小
legend.fontsize : 30      # 图例字体大小
```

执行 >>> python plot.py , 绘制图像

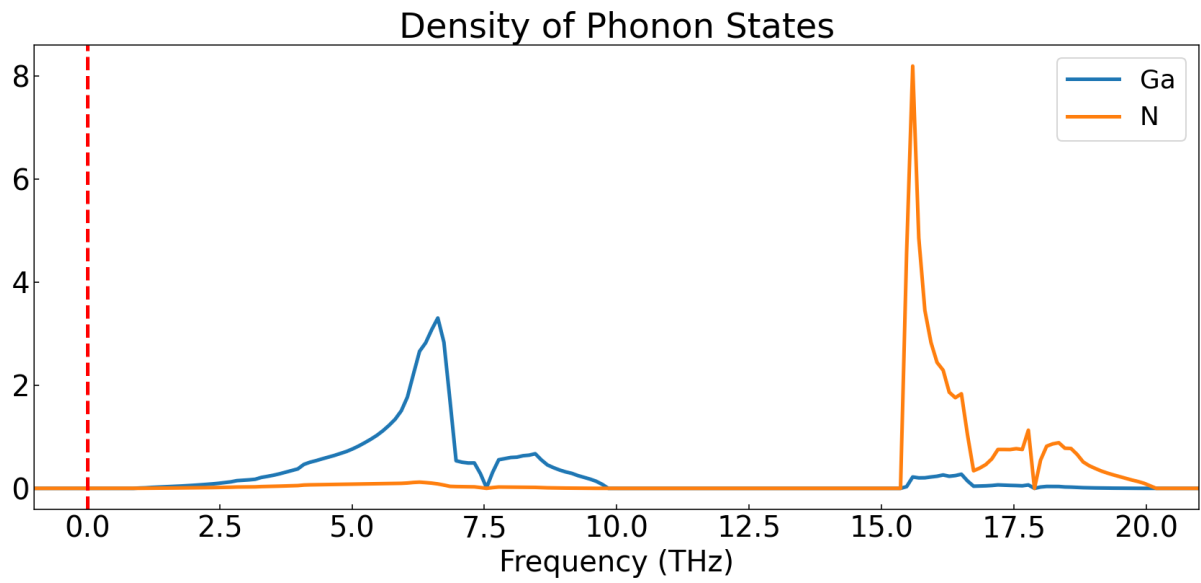
## 声子谱



## Gruneisen常数



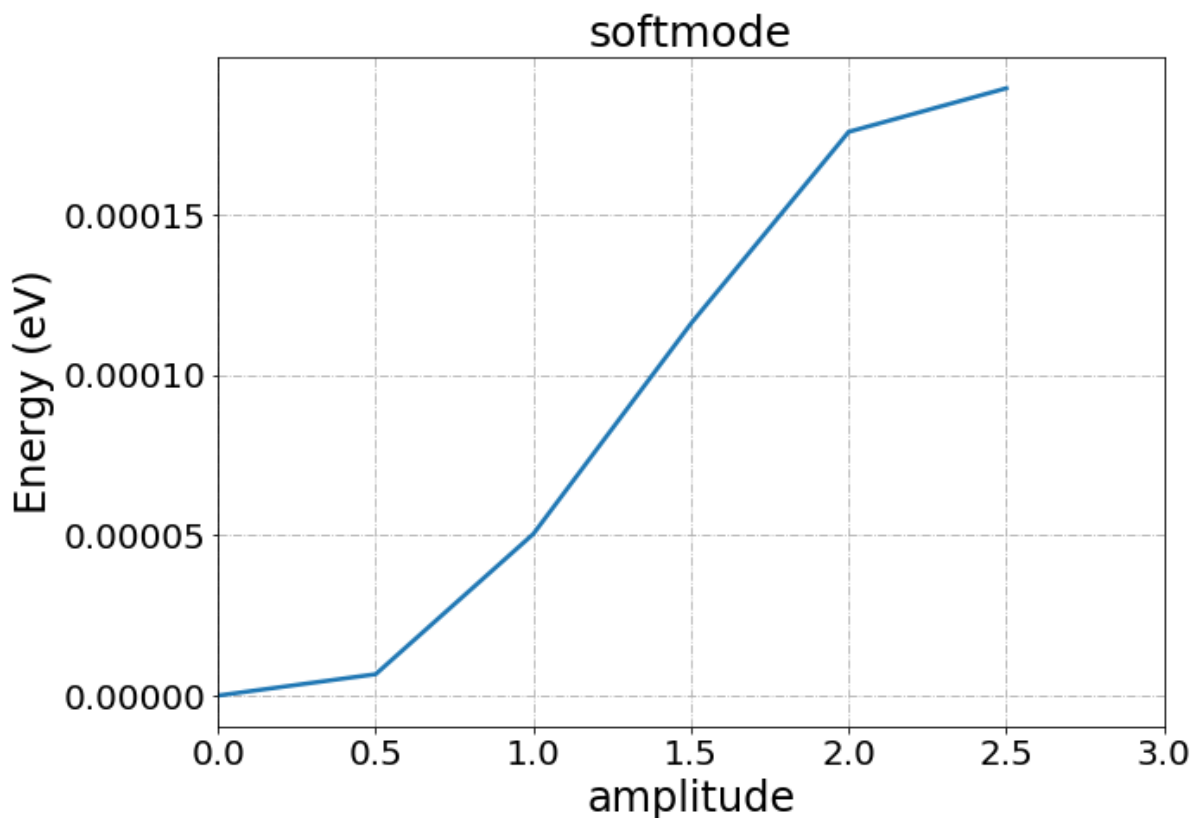
### 声子态密度



## 2. 数据提取与计算结果分析

### 软模相变

如图可知，随着声子振动方向移动，能量不断上升，当前计算的GaN结构是动力学稳定的。



## 力常数文件生成

JAMIP程序会在读取力常数时自动出力常数文件(包括绘图), 如果用户希望手动生成, 可以使用JAMIP的数据提取模块, 基于python脚本实现。

用户也可将Scripts文件夹下force\_sets.py文件放于Input文件夹中执行。

```
>>> from jamip.analysis.vasp import PhononFinder
>>> pf = PhononFinder('Results/GaN.vasp')
>>> phonon = pf.get_phonon() # 初始化Phonopy类
>>> forces = pf.get_forces() # 从VASP计算结果中读取受力矩阵
>>> pf.write_forces(phonon, forces, 'FORCE_SETS') # 将力常数文件输出至当前目录的FORCE_SETS文件
```