



鸿之微科技(上海)股份有限公司
HONGZHIWEI TECHNOLOGY(SHANGHAI)CO.,LTD.



Device Studio 使用教程

版本： 2025B



鸿之微科技（上海）股份有限公司

陆菲菲 陈江晖

2025 年 12 月 19 日

目录

1 Device Studio 简介	3
1.1 材料原子级建模	4
1.1.1 支持多种材料结构文件的导入和导出	4
1.1.2 分子、晶体、器件以及特殊结构的可视化	4
1.1.3 支持对原子结构进行精修操作	5
1.1.4 丰富的材料数据库	7
1.1.5 创建分子、晶体、器件和特殊结构	7
1.1.6 分子、晶体、器件结构的相互转换	11
1.2 高性能科学仿真计算	11
1.3 计算任务的监控和管理	11
1.4 数据可视化	12
2 安装和运行	15
2.1 运行环境说明	15
2.2 下载安装	15
2.3 登录使用	16
3 快速入门指南	19
3.1 登录并启动 Device Studio	19
3.2 创建 Device Studio 项目	20
3.3 导入 Si 晶体结构	22
3.4 生成自洽和能带计算输入文件	24
3.5 提交自洽和能带计算任务	28
3.6 Si 晶体结构能带的数据可视化	32

3.7 能带数据可视化结果导出	33
4 图形界面介绍	35
4.1 菜单栏 (Menu)	36
4.1.1 File	36
4.1.2 Edit	37
4.1.3 View	38
4.1.4 Build	39
4.1.5 Simulator	42
4.1.6 Window	43
4.1.7 Help	44
4.2 工具栏 (Toolbars)	45
4.3 项目管理区域 (Project Explorer)	48
4.4 结构 3D 显示区域 (3D Viewer)	49
4.5 结构属性区域 (Properties Explorer)	50
4.6 计算任务监控管理区域 (Job Manager)	51
4.7 个人中心 (Personal Center)	52
5 结构建模	59
5.1 支持的文件类型	59
5.2 导入结构	60
5.2.1 本地数据库导入结构	60
5.2.2 在线数据库导入结构	63
5.3 2D 分子建模	67
5.4 3D 分子建模	70
5.5 晶体建模	73
5.6 晶体结构的切面/切片	77
5.7 晶体结构的晶胞重定义	79
5.8 器件建模	83
5.8.1 导入 Au 晶体结构	83
5.8.2 将 Au 原胞转换为 Au 晶胞	84
5.8.3 将 Au 晶胞转换为 Au 超胞	87
5.8.4 删 除 Au 超胞中多余原子及操作	88
5.8.5 设置 X 和 Y 轴方向为真空	90
5.8.6 将结构做镜像处理并重置晶格常数	92
5.8.7 搭建两端口器件结构	93
5.8.8 给器件结构添加缓冲层	96
5.9 导出结构	97

6 结构编辑及信息测量	99
6.1 结构的 3D 显示基础操作	99
6.2 结构的修改操作	101
6.2.1 添加原子	101
6.2.2 删除原子	102
6.2.3 替换原子	102
6.2.4 修改原子坐标	103
6.2.5 移动选中的原子	104
6.3 结构的信息测量	107
6.3.1 测量 2 个原子之间的距离	107
6.3.2 测量 2 个原子之间的向量	108
6.3.3 测量 3 个原子之间的夹角	108
6.3.4 测量 4 个原子之间的二面角	108
7 原子结构精修模块	111
7.1 原子结构精修模块图形界面介绍	113
7.1.1 SRM-菜单栏	113
7.1.1.1 SRM-菜单栏-File	114
7.1.1.2 SRM-菜单栏-Edit	116
7.1.2 SRM-工具栏	117
7.1.3 SRM-结构显示区域	119
7.1.4 SRM-参数调节区域	120
7.1.4.1 SRM-参数调节区域-Atoms 区域	120
7.1.4.2 SRM-参数调节区域-Model 区域	124
7.1.4.3 SRM-参数调节区域-Rendering 区域	126
7.1.4.4 SRM-参数调节区域-Selection 区域	129
7.1.5 SRM-Setting 界面	130
7.2 在原子结构精修模块导入结构	133
7.3 修改原子结构精修模块背景颜色	137
7.4 修改结构中原子的颜色	138
7.4.1 修改结构中同一元素的颜色	139
7.4.2 修改结构中某一原子的颜色	140
7.4.3 修改结构中所有元素的颜色	141
7.5 修改结构中原子的半径	143
7.5.1 修改结构中同一元素的半径	143
7.5.2 修改结构中某一原子的半径	144
7.5.3 修改结构中所有元素的半径	146

7.6	结构的球棍模式/多面体模式	148
7.7	调节结构的光照参数	149
8	亮点功能	151
8.1	超胞识别原胞	151
8.2	Nanodcal 一键计算	153
8.3	柔性器件结构建模	155
8.4	LAMMPS 运动轨迹的显示	157
8.5	晶体结构的空间群信息识别	159
8.6	拆分分子结构	160
8.7	VASP 差分电荷密度的可视化分析	163
8.8	任务监控与管理	167
9	常用功能	171
9.1	修改 Device Studio 主界面背景颜色	171
9.2	Device Studio 引用说明	174
10	科学计算软件应用实例	177
10.1	Nanodcal 实例	177
10.1.1	Nanodcal 计算流程	178
10.1.1.1	Nanodcal 自治计算流程	178
10.1.1.2	Nanodcal 本征态计算流程	179
10.1.2	Nanodcal 创建项目	180
10.1.3	Nanodcal 搭建或导入结构	180
10.1.4	Nanodcal 输入文件的生成	181
10.1.4.1	Nanodcal 生成自治计算输入文件	181
10.1.4.2	Nanodcal 生成本征态计算输入文件	184
10.1.5	Nanodcal 连接服务器	185
10.1.6	Nanodcal 计算	187
10.1.6.1	Nanodcal 自治计算	187
10.1.6.2	Nanodcal 本征态计算	191
10.1.7	Nanodcal 本征态的可视化分析	191
10.1.7.1	本征态的 3D 可视化分析	191
10.1.7.2	本征态的 2D 可视化分析	193
10.1.7.3	本征态的 1D 可视化分析	194
10.2	LAMMPS 实例	195
10.2.1	LAMMPS 计算流程	196
10.2.2	LAMMPS 创建项目	197

10.2.3 LAMMPS 导入结构	197
10.2.4 LAMMPS 输入文件的生成	198
10.2.5 LAMMPS 计算	203
10.2.6 LAMMPS 计算结果的可视化分析	205
10.3 QUANTUM ESPRESSO 实例	206
10.3.1 QUANTUM ESPRESSO 计算流程	206
10.3.2 QUANTUM ESPRESSO 创建项目	207
10.3.3 QUANTUM ESPRESSO 导入结构	208
10.3.4 QUANTUM ESPRESSO 参数设置	208
10.3.5 QUANTUM ESPRESSO 输入文件的生成	209
10.3.6 QUANTUM ESPRESSO 计算	211
10.3.7 QUANTUM ESPRESSO 计算结果的可视化分析	213
10.4 RESCU 实例	215
10.4.1 RESCU 计算流程	215
10.4.2 RESCU 创建项目	216
10.4.3 RESCU 导入结构	217
10.4.4 RESCU 输入文件的生成	217
10.4.4.1 RESCU 生成自洽计算输入文件	217
10.4.4.2 RESCU 生成能带计算输入文件	219
10.4.4.3 RESCU 生成态密度计算输入文件	220
10.4.5 RESCU 计算	221
10.4.5.1 RESCU 自洽计算	221
10.4.5.2 RESCU 能带计算	223
10.4.5.3 RESCU 态密度计算	224
10.4.6 RESCU 计算结果的可视化分析	225
10.5 Nanoskim 实例	228
10.5.1 Nanoskim 计算流程	229
10.5.2 Nanoskim 创建项目	229
10.5.3 Nanoskim 导入结构	230
10.5.4 Nanoskim 输入文件的生成	230
10.5.4.1 Nanoskim 生成准备文件	230
10.5.4.2 Nanoskim 生成自洽输入文件	231
10.5.4.3 Nanoskim 生成电流、电子透射谱输入文件	234
10.5.5 Nanoskim 计算	235
10.5.5.1 Hamiltonian 计算	235
10.5.5.2 BandStructure 计算	236
10.5.6 Nanoskim 计算结果的可视化分析	237

10.6 STEMS 实例	238
10.6.1 STEMS 计算流程	239
10.6.2 STEMS 创建项目	240
10.6.3 STEMS 导入文件	240
10.6.4 PFC 计算输入文件的生成	241
10.6.5 PFC 计算	245
10.6.6 PFC 计算结果的可视化分析	249
10.7 MOMAP 实例	251
10.7.1 MOMAP 软件功能结构	252
10.7.2 BDF 计算部分	253
10.7.3 MOMAP 计算部分	254
10.7.3.1 EVC 计算	254
10.7.3.2 荧光光谱及荧光辐射速率的计算	259
10.7.3.3 内转换速率	265
10.8 VASP 实例	268
10.8.1 VASP 计算流程	269
10.8.2 VASP 创建项目	269
10.8.3 VASP 导入结构	269
10.8.4 VASP 输入文件的生成	271
10.8.5 VASP 计算	275
10.8.6 VASP 计算结果的可视化分析	277
10.9 TOPS 实例	277
10.9.1 TOPS 计算流程	278
10.9.2 TOPS 创建项目	278
10.9.3 TOPS 建模（分子结构）	279
10.9.4 TOPS 输入文件的生成	280
10.9.5 TOPS 计算	285
10.9.6 TOPS 计算结果的可视化分析	287
10.10 DS-PAW 实例	288
10.10.1 DS-PAW 计算流程	289
10.10.2 DS-PAW 创建项目	290
10.10.3 DS-PAW 导入结构	290
10.10.4 DS-PAW 输入文件的生成	291
10.10.5 DS-PAW 计算	297
10.10.6 DS-PAW 计算结果的可视化分析	299
10.11 BDF 实例	299
10.11.1 BDF 的发展史	301

10.11.2 BDF 计算流程	302
10.11.3 BDF 创建项目	302
10.11.4 BDF 导入结构	303
10.11.5 BDF 输入文件的生成	303
10.11.6 BDF 计算	306
10.11.7 BDF 计算结果的可视化分析	309
11 常见问题及解决方案	311
11.1 如何下载 Device Studio 安装包?	311
11.2 如何找到 Device Studio 的快捷方式?	311
11.3 如何引用 Device Studio?	311
11.4 如何修改 Device Studio 的背景颜色为白色?	312
12 使用教程下载	313



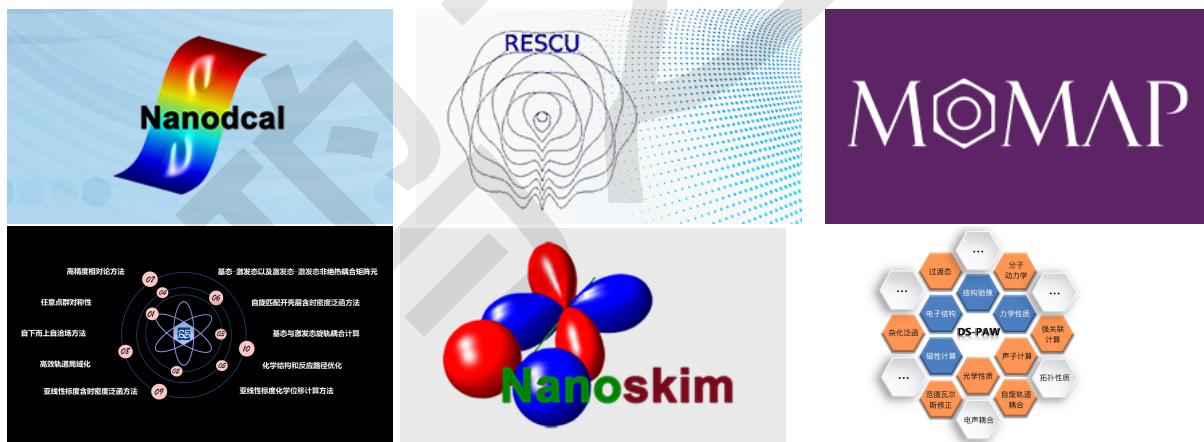
欢迎使用 **Device Studio**, Device Studio 学术使用免费, 本教程主要针对 **Windows** 版 Device Studio 的功能进行详细说明。

Device Studio (简称: DS) 作为鸿之微科技 (上海) 股份有限公司 (简称: 鸿之微) 研发的多尺度材料设计与仿真平台, 可实现 **材料原子级建模** (百万量级)、**高性能科学仿真计算**、**计算任务的监控和管理**、**数据可视化分析**的全过程, 从而实现材料设计与科学仿真模拟一体化, 极大地促进和提升科研效率, 帮助科研工作者解决当今多尺度材料设计与仿真模拟的一系列重要问题。

Device Studio 集成了多种科学计算软件, 可满足用户在各个领域的科学仿真计算需求。集成了第一性原理平面波计算软件 **DS-PAW**, 第一性原理量子输运计算软件 **Nanodcal**, 紧束缚模型量子输运计算软件 **Nanoskim**, 第一性原理大体系 KS-DFT 计算软件 **RESCU**, 量子化学计算软件 **BDF**, 分子发光与输运性质计算软件 **MOMAP**, 嵌段共聚物自组装相行为设计软件 **TOPS**, 聚合物耗散粒子动力学模拟软件 **PODS**; 并给其他科学计算软件, 如: **VASP**、**LAMMPS**、**QE**、**OVITO**、**Gaussian**、**NWChem** 等添加了接口。

Device Studio 基于强大的材料设计建模和高性能科学仿真计算能力, 可广泛应用于量子器件、人工生物、先进电池、智能照明、存储器等产业中, 辅助其在电子材料、合金、生物科技等领域开展材料研发与设计, 为光电和集成电路等产业提供专业的技术支撑。

若想更多了解关于 **Nanodcal**、**RESCU**、**MOMAP**、**BDF**、**Nanoskim**、**DS-PAW** 等软件信息, 请点击相应图标或名称。





CHAPTER 1

Device Studio 简介

Device Studio 作为多尺度材料设计与仿真平台，其功能主要分为四大模块，分别为 材料原子级建模（百万量级）、高性能科学仿真计算、计算任务的监控和管理、数据可视化。



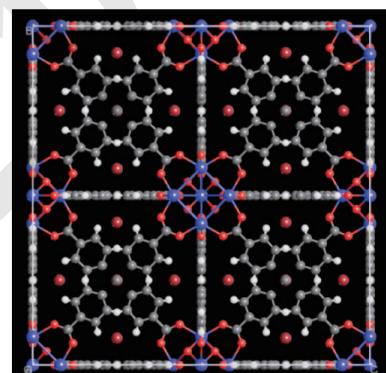
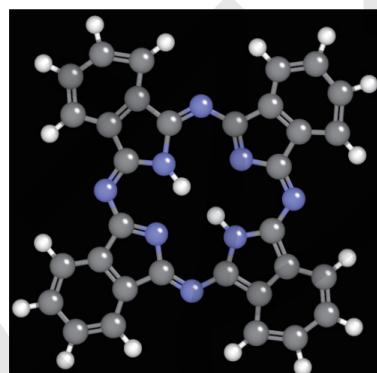
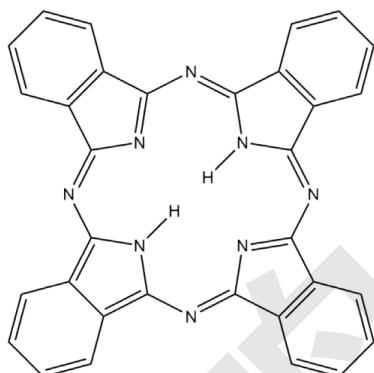
1.1 材料原子级建模

1.1.1 支持多种材料结构文件的导入和导出

Device Studio 平台支持 .hzw、.xyz、.cif、.xsd、scf.input、.py、POSCAR、CONTCAR、.mol、.pdb 等格式结构文件的导入；支持 .hzw、.xyz、.cif、.png 等格式结构文件的导出。

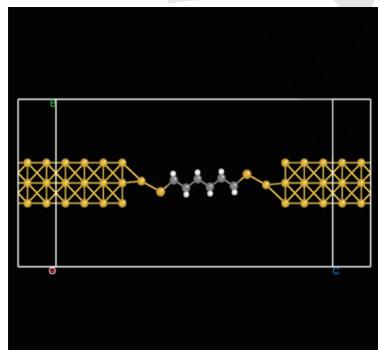
1.1.2 分子、晶体、器件以及特殊结构的可视化

将材料的结构文件导入到 Device Studio，即可在 Device Studio 的主窗口中实时查看到结构的 3D 视图。用户可将 3D 视图放大、缩小、旋转或平移；可选择从 ZY、XY、XZ、YZ、YX、ZX 任意平面查看结构的 3D 视图；可选择结构 3D 视图的显示方式，正视图或透视图。

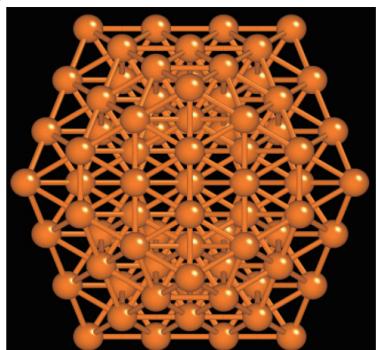


2D分子结构: Phthalocyanine (酞青) 3D分子结构: Phthalocyanine (酞青)

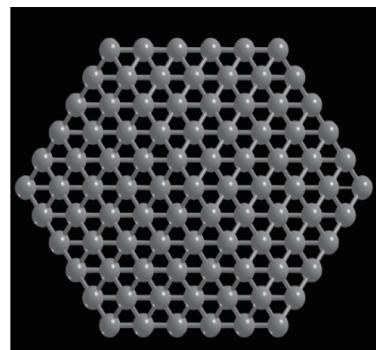
晶体结构: UiO-67



器件结构: Au-Alkanethiol-Au



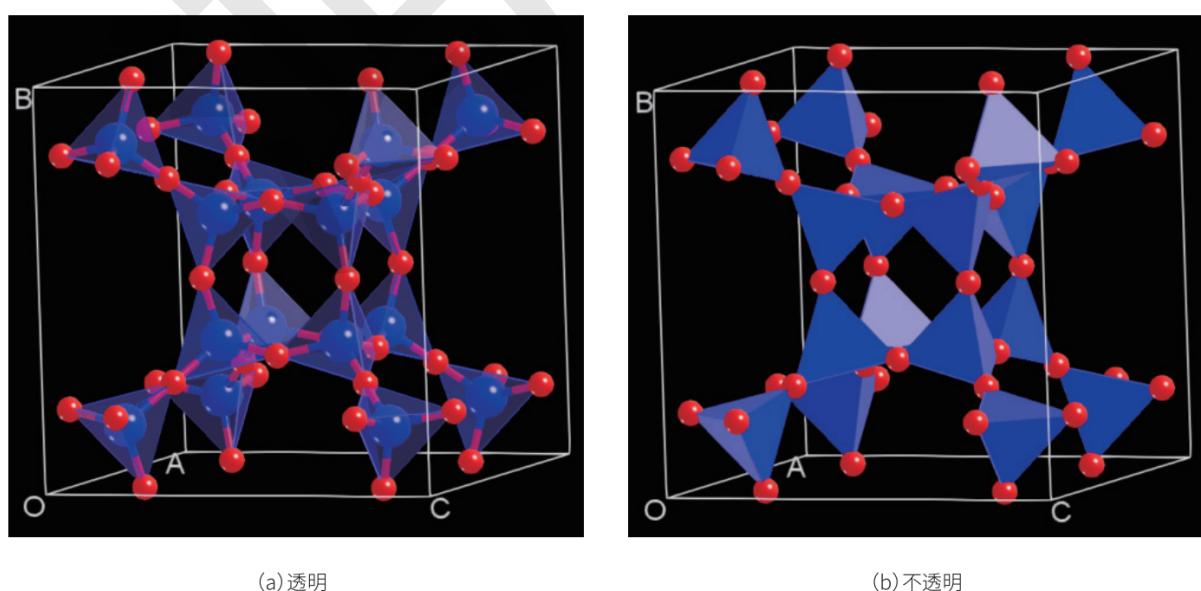
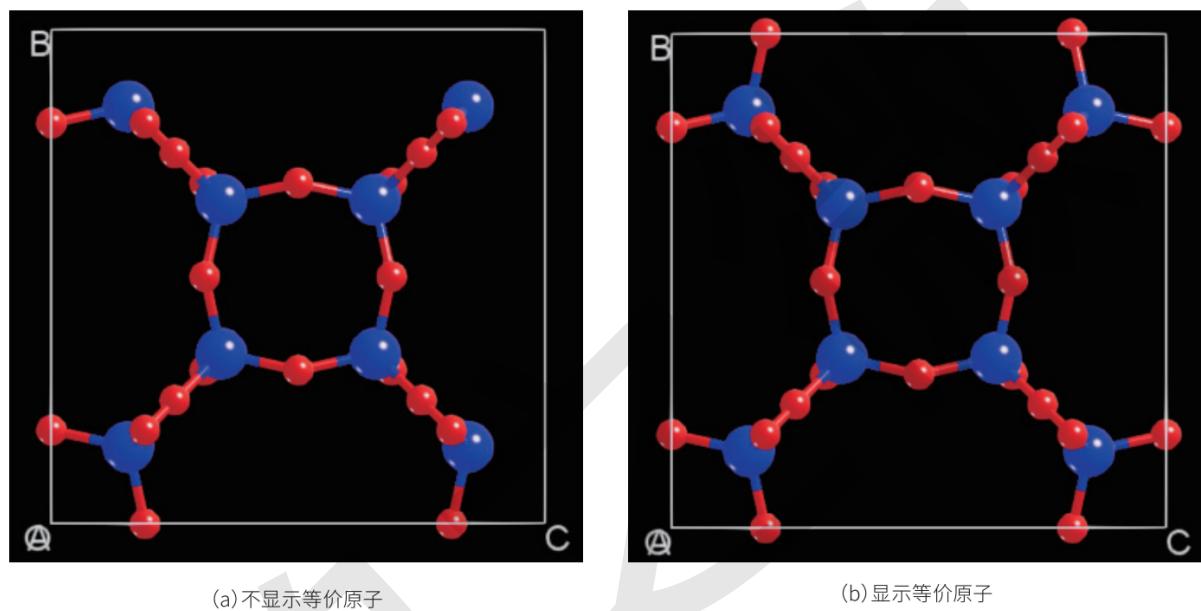
特殊结构: Icosahedron



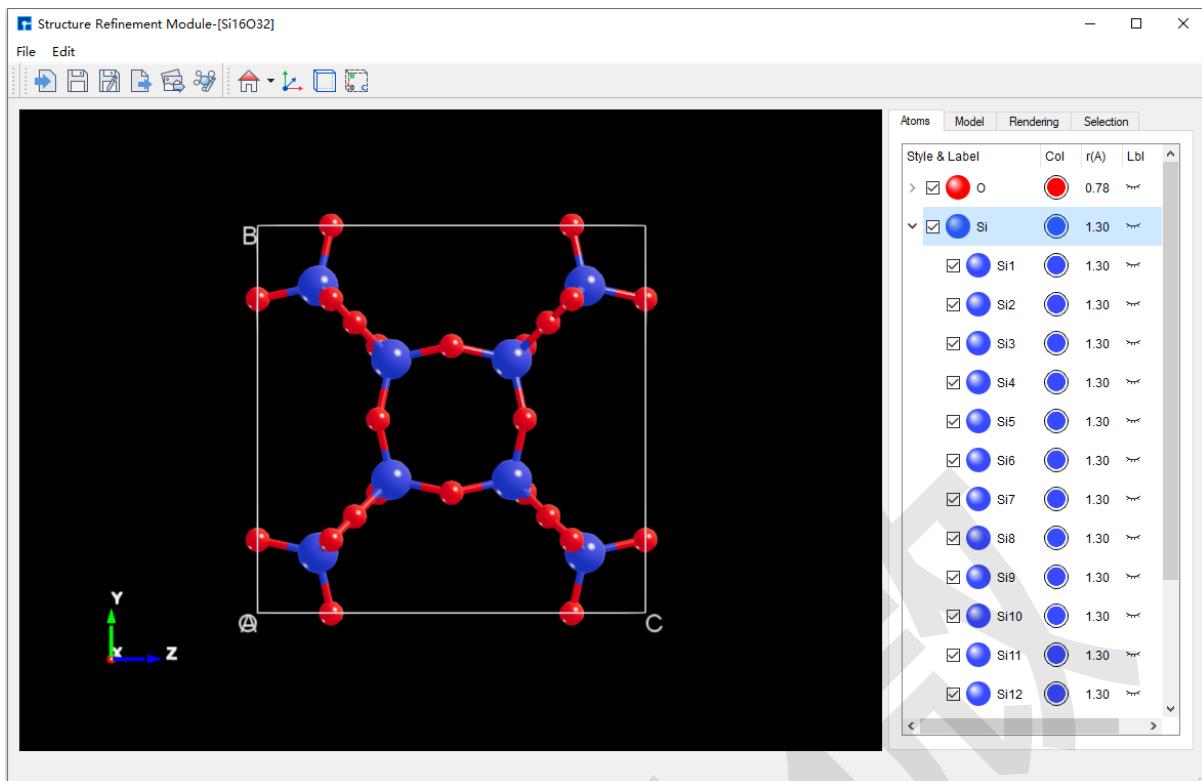
特殊结构: Cubooctahedron

1.1.3 支持对原子结构进行精修操作

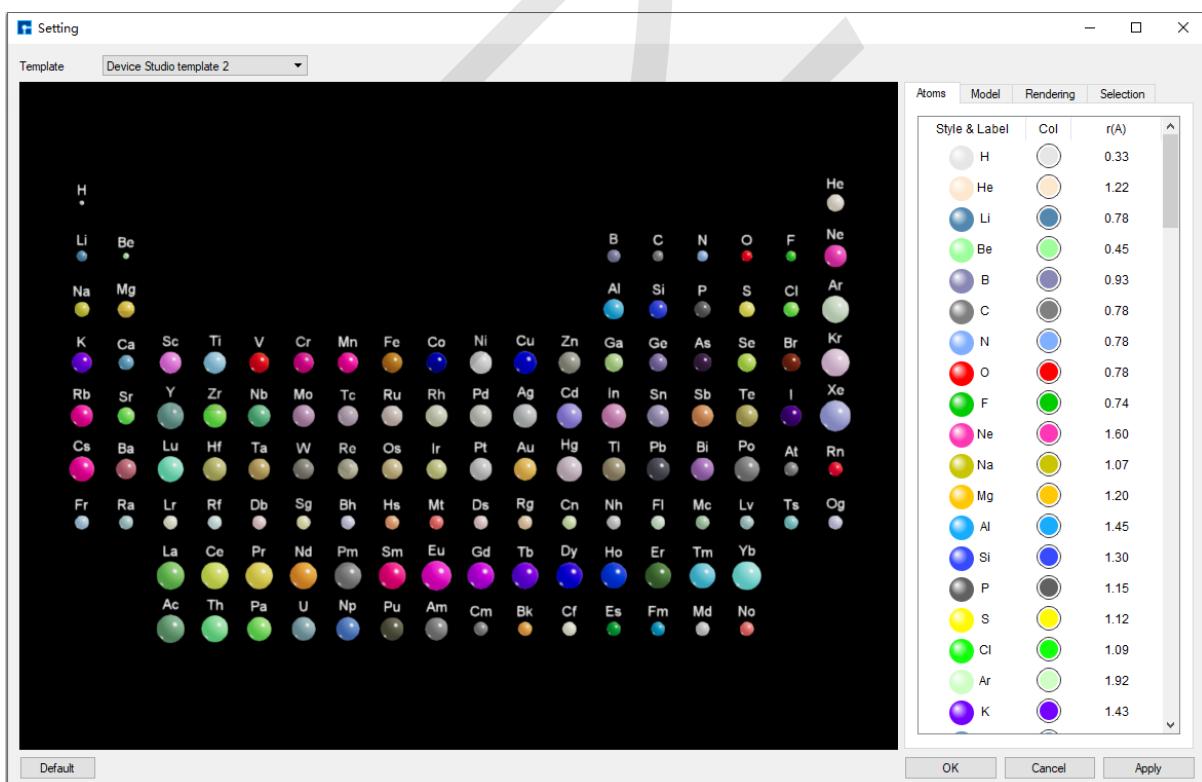
- Device Studio 平台支持对原子结构进行增、删、改等操作。
- 支持用户选择原子结构的显示模式，球棍模式或多面体模式；支持用户调节多面体的透明度。
- 支持用户修改原子结构中同一元素、多个原子或某一原子的颜色、半径和光照。
- 支持用户选择 Device Studio 初始模板并应用，支持用户根据科研需求或个人审美设置颜色、半径、光照以及背景等参数，生成用户专属模板并应用。



Device Studio 使用教程



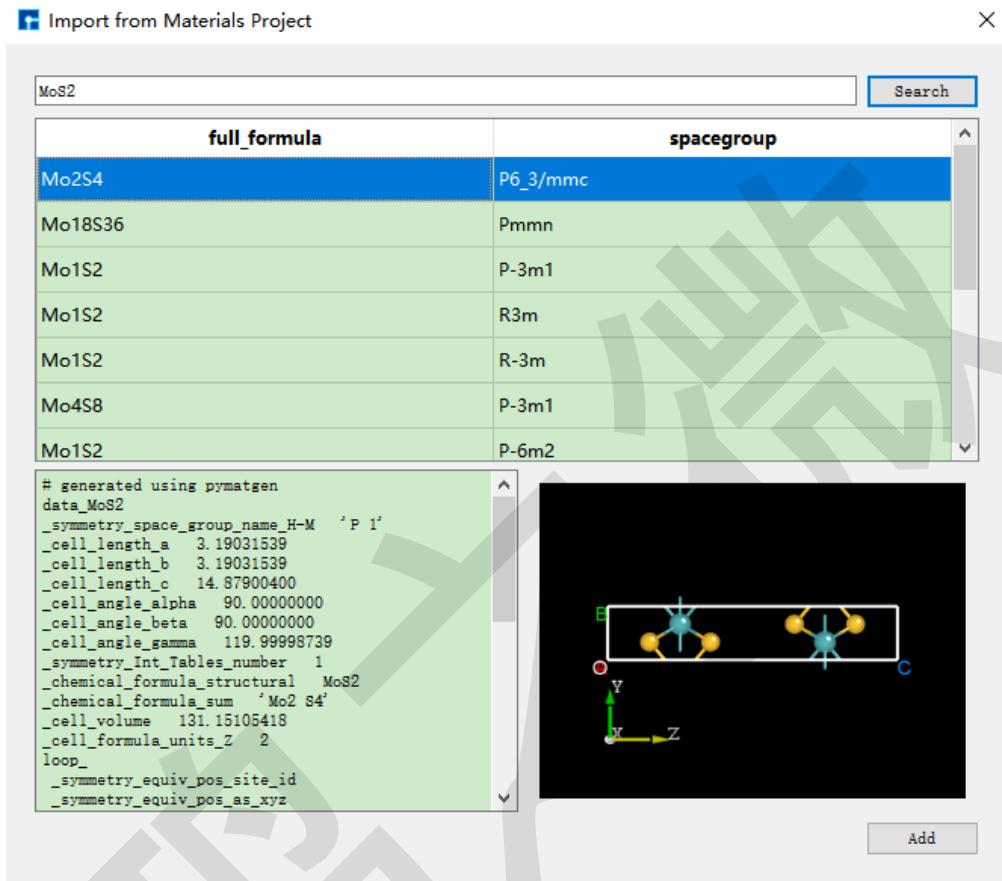
Device Studio 原子结构精修界面



Device Studio 初始模板

1.1.4 丰富的材料数据库

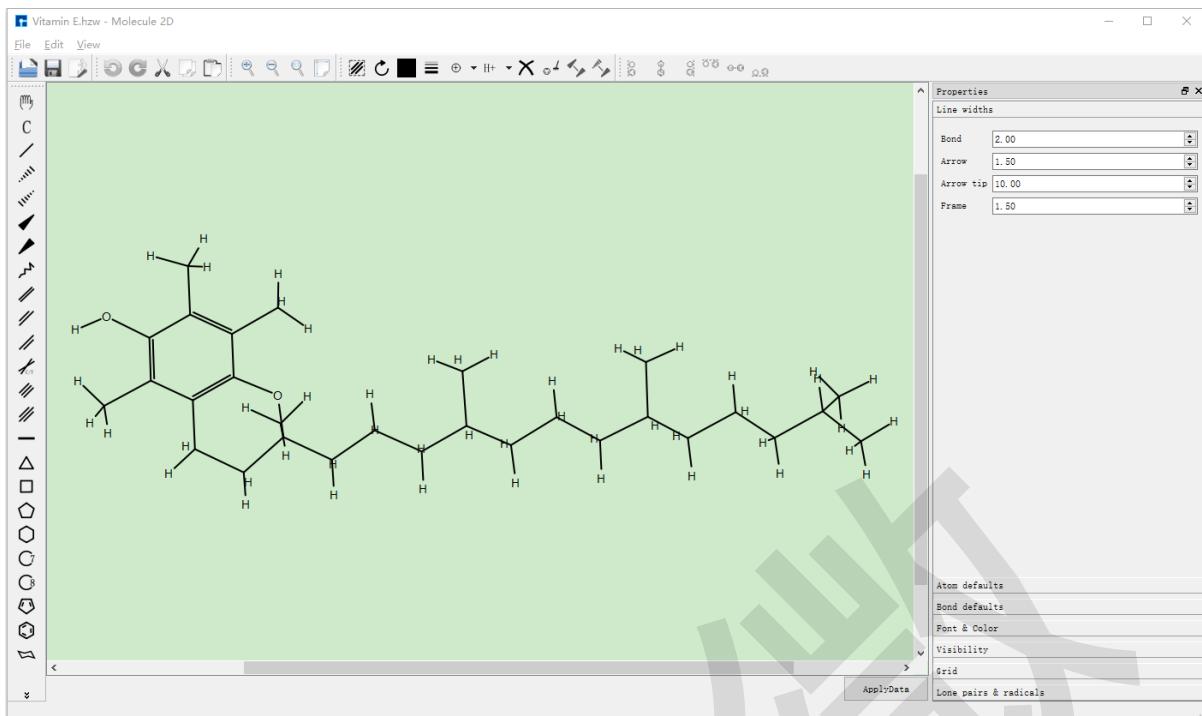
- 本地数据库：该数据库目前包含 500 多种常用或热门材料，后期将不断更新扩大。
- Device Studio 平台支持在线数据库 Materials Project，用户可通过 Device Studio 平台连接该数据库搜索并导入结构，并可查看结构的空间群对称和原子坐标等信息。



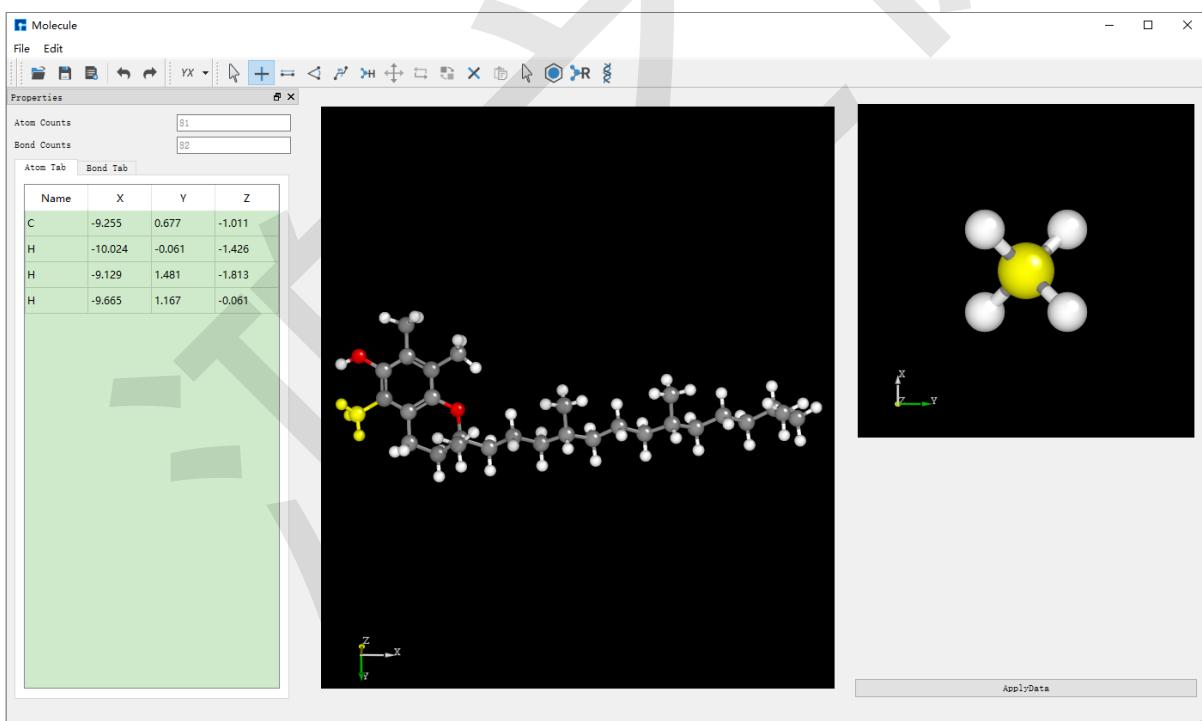
1.1.5 创建分子、晶体、器件和特殊结构

- Device Studio 平台具有强大的建模功能，支持创建各种分子、晶体、器件和特殊结构。
- 可根据匹配精度，自动劈裂晶面，匹配搭建器件结构；可匹配搭建晶体和多层膜结构。
- 能够生成 Nanoribbon、Nanotube、团簇、晶界、随机掺杂等特殊结构。

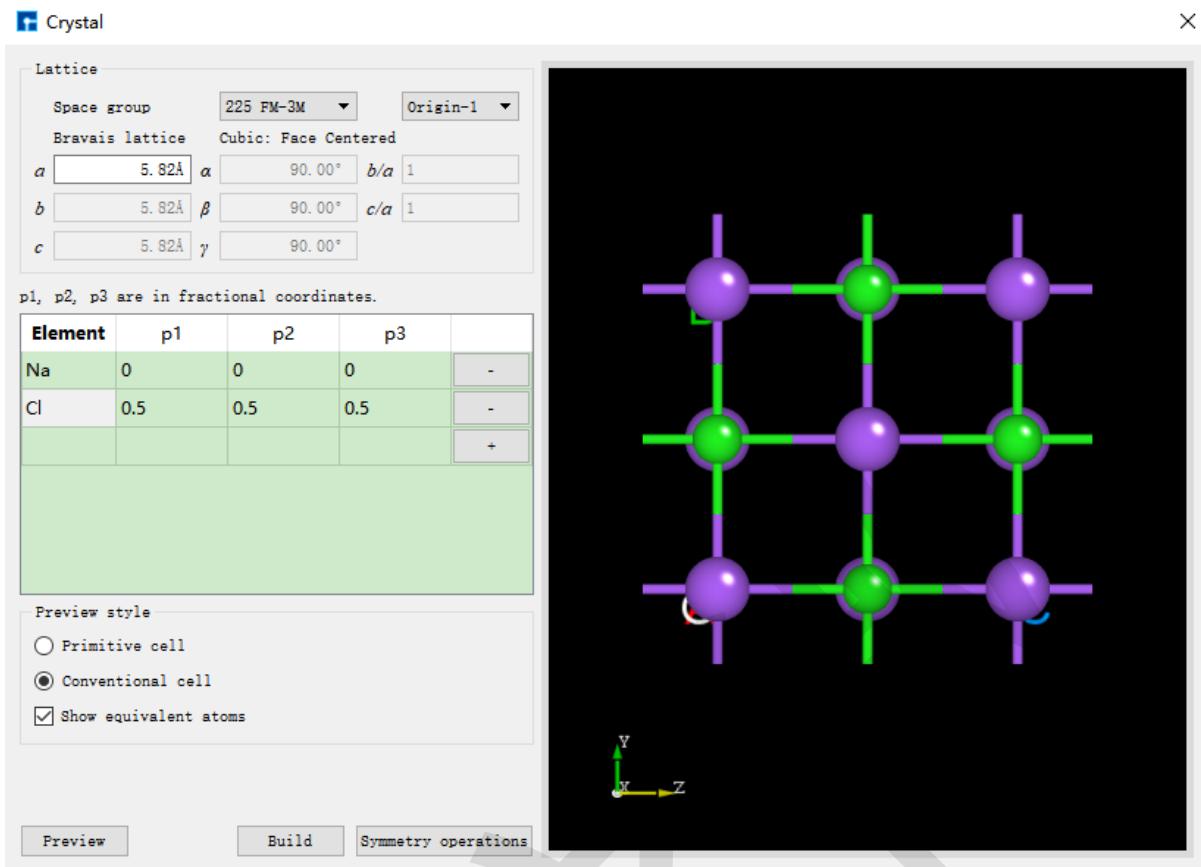
Device Studio 使用教程



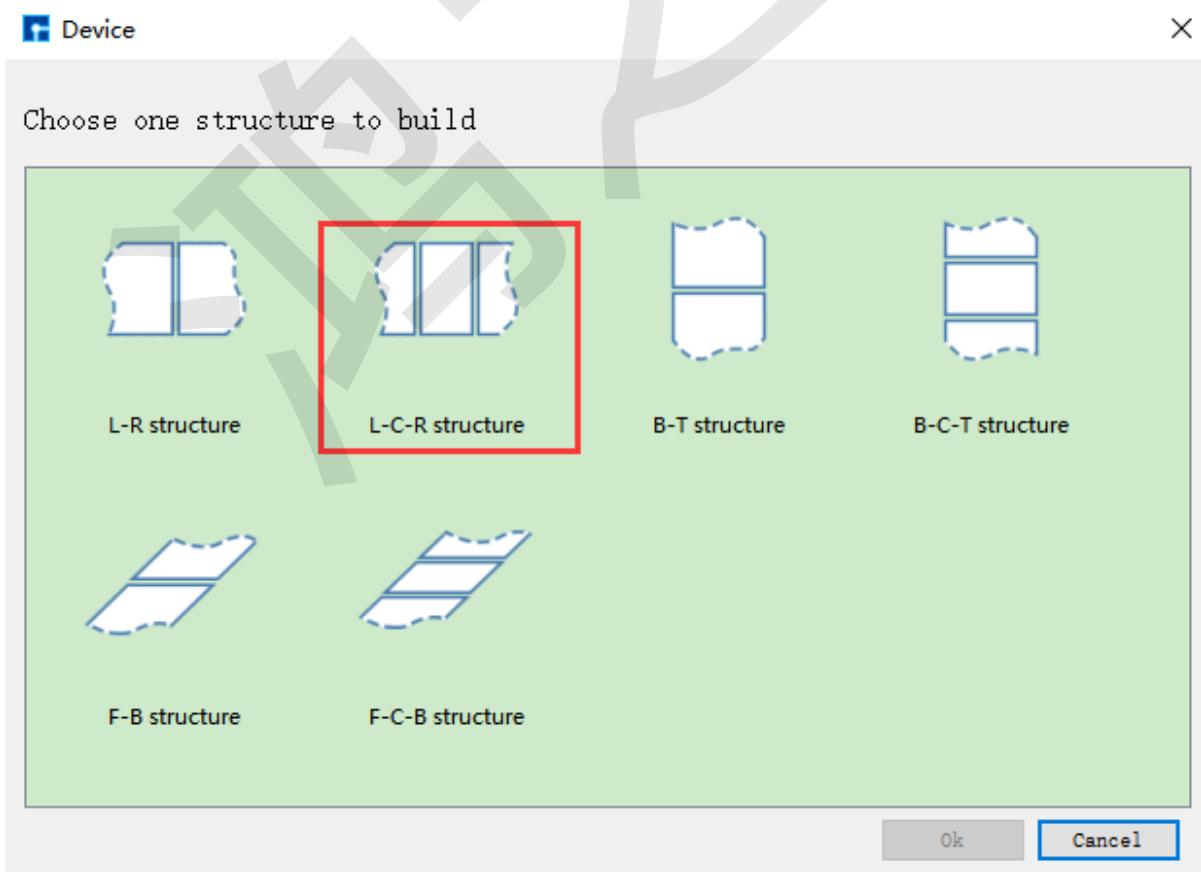
Device Studio 平台搭建 2D 分子结构



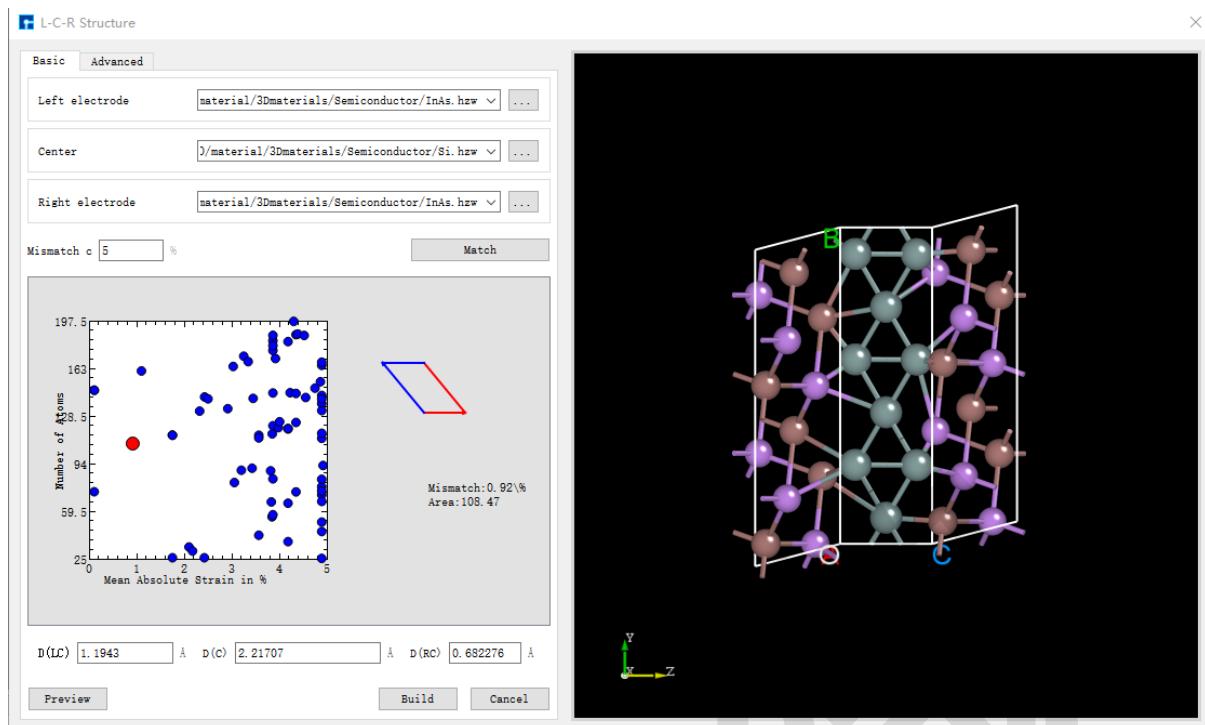
Device Studio 平台搭建 3D 分子结构



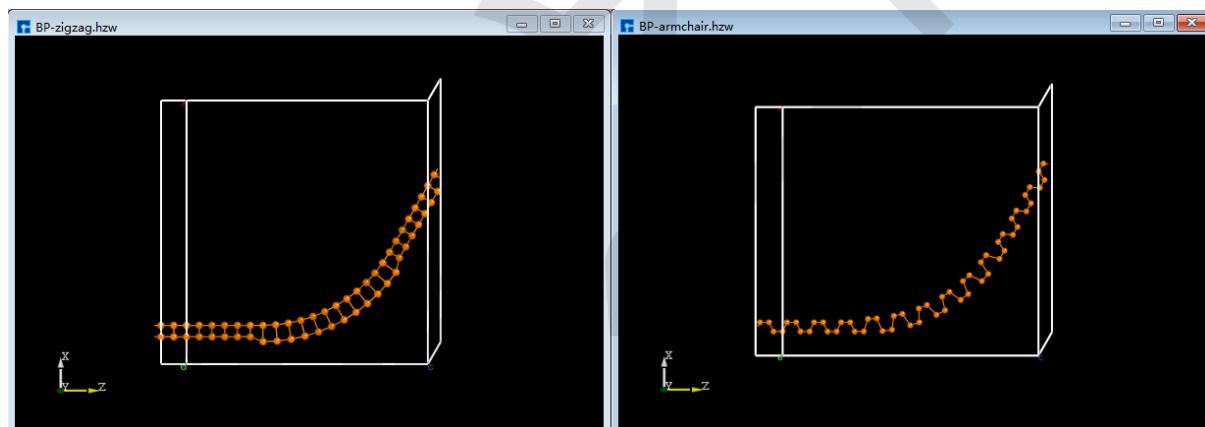
Device Studio 平台搭建晶体结构



Device Studio 使用教程



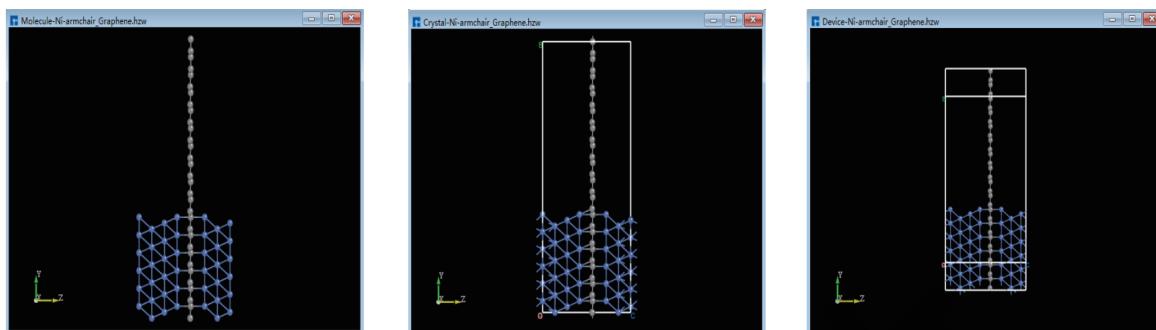
Device Studio 平台搭建 L-C-R 器件结构



Device Studio 平台搭建柔性器件结构

1.1.6 分子、晶体、器件结构的相互转换

Device Studio 平台支持分子、晶体和器件结构的相互转换。



分子结构：Ni-armchair_Graphene 晶体结构：Ni-armchair_Graphene 器件结构：Ni-armchair_Graphene

1.2 高性能科学仿真计算

- 多种计算软件开箱即用。

Device Studio 集成了多种科学计算软件，开箱即用，可满足用户在各个领域的科学仿真计算需求。集成了第一性原理平面波计算软件 DS - PAW，第一性原理量子输运计算软件 Nanodcal，紧束缚模型量子输运计算软件 Nanoskim，第一性原理大体系 KS-DFT 计算软件 RESCU，量子化学计算软件 BDF，分子发光与输运性质计算软件 MOMAP，嵌段共聚物自组装相行为设计软件 TOPS；并给其他科学计算软件，如：VASP、LAMMPS、QE、OVITO、Gaussian、NWChem 等添加了接口。

1.3 计算任务的监控和管理

- 超算服务器和本地计算机的连接。

使用 Device Studio 平台，可自动连接超算服务器和本地计算机，用户可根据计算需要一键切换使用服务器或本地计算机。

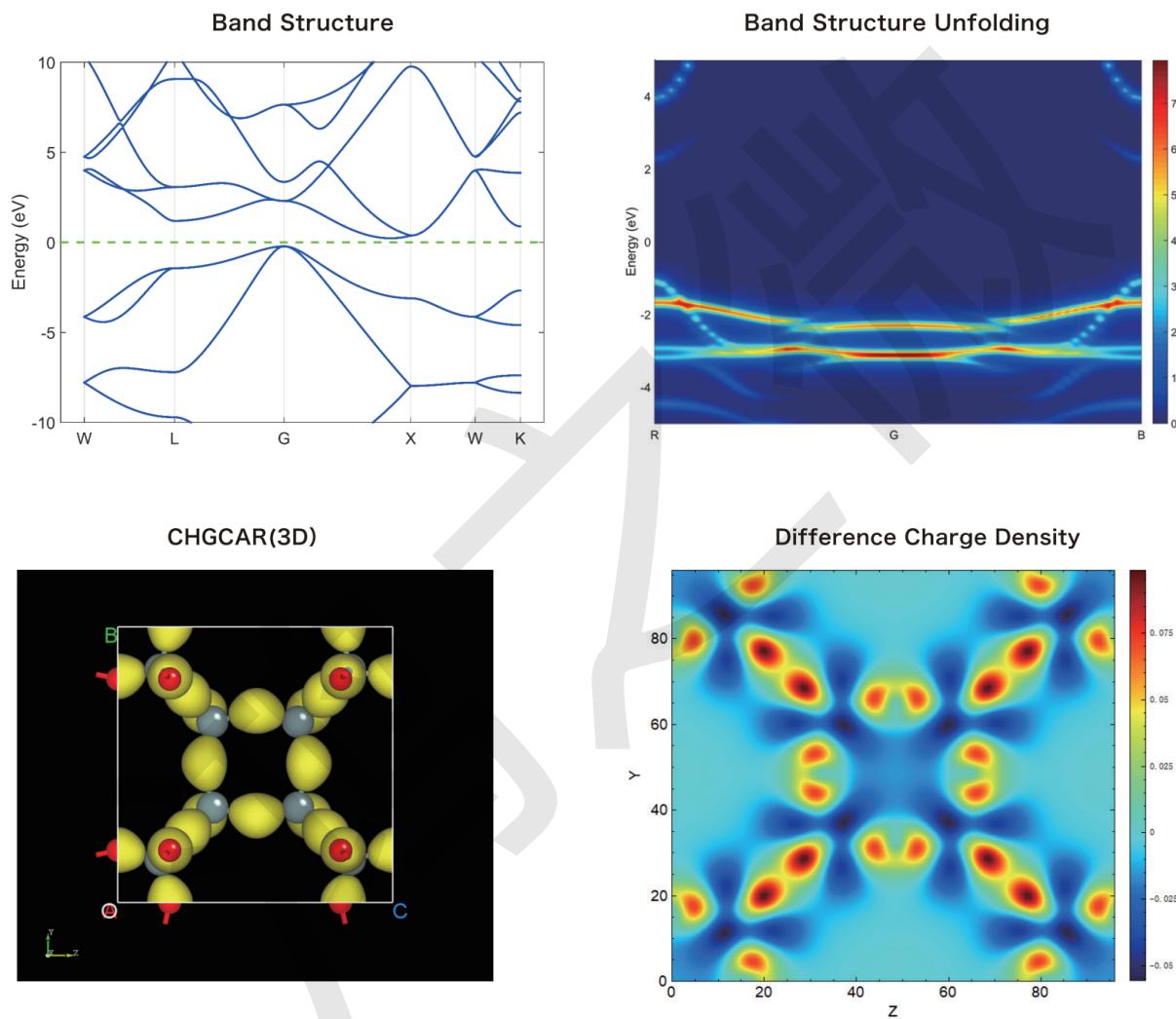
- 计算任务的监控和管理。

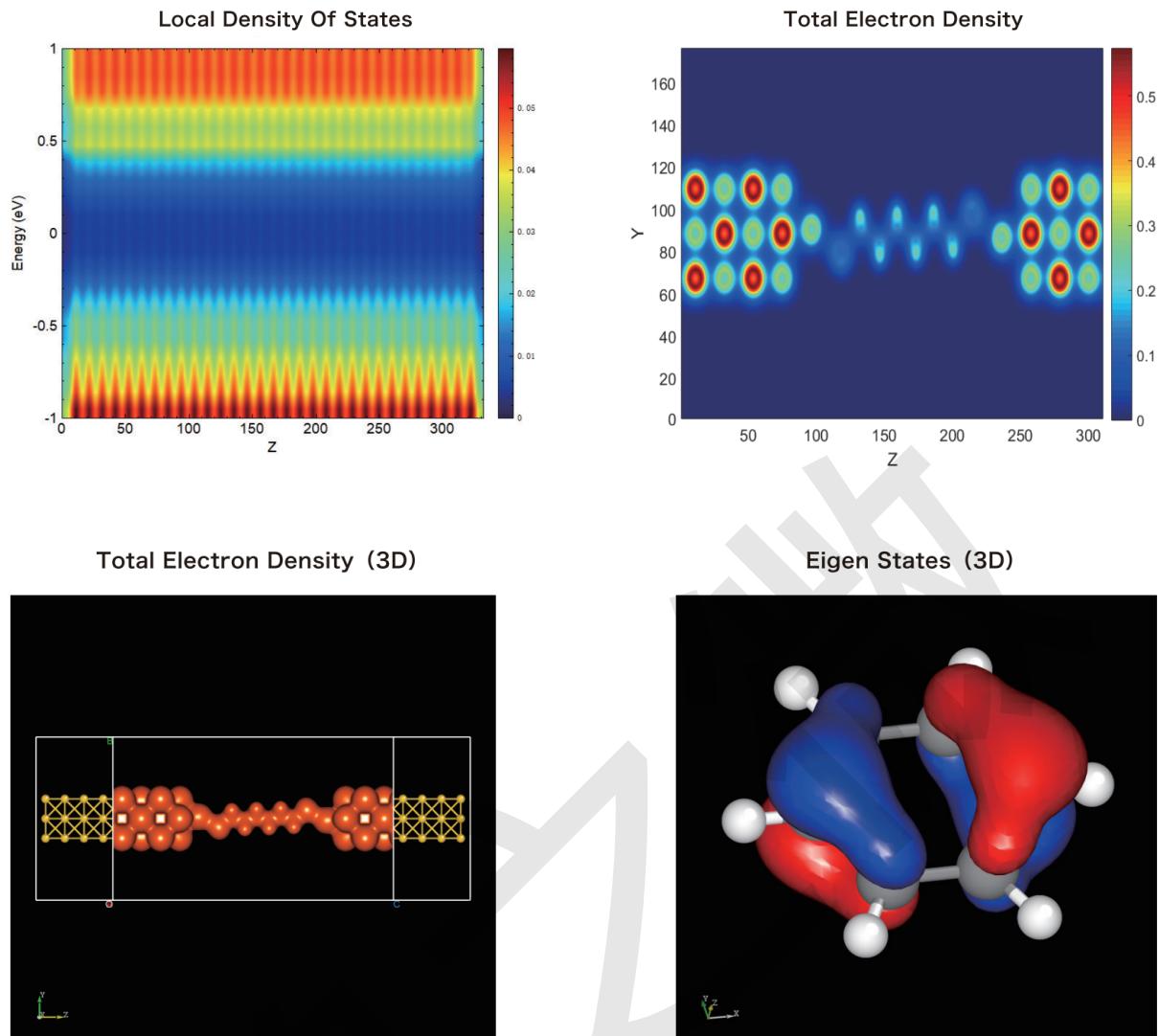
通过 Device Studio 平台界面式鼠标点击操作，即可完成多种科学仿真软件计算任务的提交，无需掌握 Linux 系统的使用，同时可实时查看计算任务的状态，排队中、计算中、计算完成等，计算完成后，自动将计算结果拉回本地，大大降低了初学者的使用门槛和操作难度。

1.4 数据可视化

- 计算结果的数据可视化。

Device Studio 平台可将科学仿真计算结果进行自动分析，绘制出数据可视化图形，用户可一键切换计算结果的 3D、2D 或 1D 的数据可视化图形，支持将可视化图形以 .png、.jpg、.bmp、.pdf、.tif、.eps 格式导出。对于动态的可视化图形，如运动轨迹，支持以 .gif 动画的形式将可视化图形导出。





- 可视化图形的编辑。

对于可视化图形，Device Studio 平台提供放大、缩小、旋转，是否显示 Colorbar，选择 Colormap，修改坐标轴的取值范围，修改标题和坐标轴的字体类型、字体大小以及字体是否加粗等编辑功能。



CHAPTER 2

安装和运行

2.1 运行环境说明

Device Studio 的运行环境为 Windows 64 位系统，显卡支持 OpenGL 3.3，并安装最新驱动程序。

备注

Device Studio 不支持在虚拟机上运行，请不要在虚拟机上安装运行。

2.2 下载安装

1. Device Studio 安装包下载网址：<https://cloud.hzwtech.com/web/product-service?id=6>；
2. 在浏览器中打开链接如 图 2.1 所示，点击 Windows 版 *** 即可下载 Windows 版的 Device Studio 的安装包 DeviceStudio***.zip；
3. 将安装包 DeviceStudio***.zip 放置在本地电脑的英文目录下 → 解压 → 找到 **bin** 目录下的 *DeviceStudio.exe* 文件 → 右击 → 发送到 (N) → 桌面快捷方式，则电脑桌面具有 Device Studio 快捷方式。



图 2.1: Device Studio 在鸿之微云上产品介绍页面

备注

Device Studio 因模块较多，故安装包较大，建议用户使用 **WinRAR** 解压，解压速度较快，解压后无需安装。点击 图 2.1 中 Windows 版 *** 即可下载 Windows 版的 Device Studio 安装包，点击 使用手册 即可查看 Device Studio 的使用教程。

2.3 登录使用

使用 Device Studio 的方式有 2 种，使用鸿之微云账号登录使用或离线使用，建议用户使用 鸿之微云账号登录使用，下面将详细描述使用使用鸿之微云账号登录使用 Device Studio 的操作步骤：

1. 注册鸿之微云账号：
 - a) 鸿之微云账号注册网址： <https://cloud.hzwtech.com/web/register>；
 - b) 在浏览器中打开链接后如 图 2.2 所示，用户按照提示注册好账号即可。



图 2.2: 鸿之微云账号注册页面

备注

若有鸿之微云账号，可省略该步骤。

2. 双击解压后的安装包中 **bin** 目录下的 *DeviceStudio.exe* 文件或电脑桌面 **Device Studio** 快捷方式启动 Device Studio，使之进入 Device Studio 登录界面如下图所示，按照提示登录即可，登录后即可使用 Device Studio；



3. 查看 Device Studio 帮助文档。

a) 通过 Device Studio 查看 帮助文档:

- 登录并启动 *Device Studio* → 图 3.2 创建项目，点击 图 3.2 中 *Getting Started Guide* 即可查看到 *Device Studio* 的快速入门指南。
- 登录并启动 *Device Studio* → 图 3.4 创建好项目的 *Device Studio* 界面，点击 界面中 *Help* → *Getting Started With Device Studio* 即可查看到 *Device Studio* 的快速入门指南。

b) 通过网址查看 帮助文档: <http://hwztech.com/Help/index.html>

备注

Device Studio 的 [帮助文档](#) 中含有很多关于 *Device Studio* 的功能介绍，不仅仅只有快速入门指南，用户可根据具体需要进行查看。

CHAPTER 3

快速入门指南

快速入门指南以第一性原理量子输运计算软件 Nanodcal 中 Si 晶体结构的自洽和能带计算为例进行详细说明，主要分为以下几个步骤，包含登录并启动 Device Studio、创建 Device Studio 项目、导入 Si 晶体结构、生成自洽和能带计算输入文件、提交自洽和能带计算任务、Si 晶体结构能带的数据可视化、能带数据可视化结果导出。

3.1 登录并启动 Device Studio

双击解压后的 Device Studio 安装包中 **bin** 目录下的 *DeviceStudio.exe* 文件或电脑桌面 **Device Studio** 快捷方式，登录并启动 Device Studio 操作如 图 3.1 所示。



图 3.1: 登录并启动 Device Studio

3.2 创建 Device Studio 项目

登录并启动 Device Studio 后，则可创建 Device Studio 项目，创建项目操作如 图 3.2、图 3.3、图 3.4 所示。

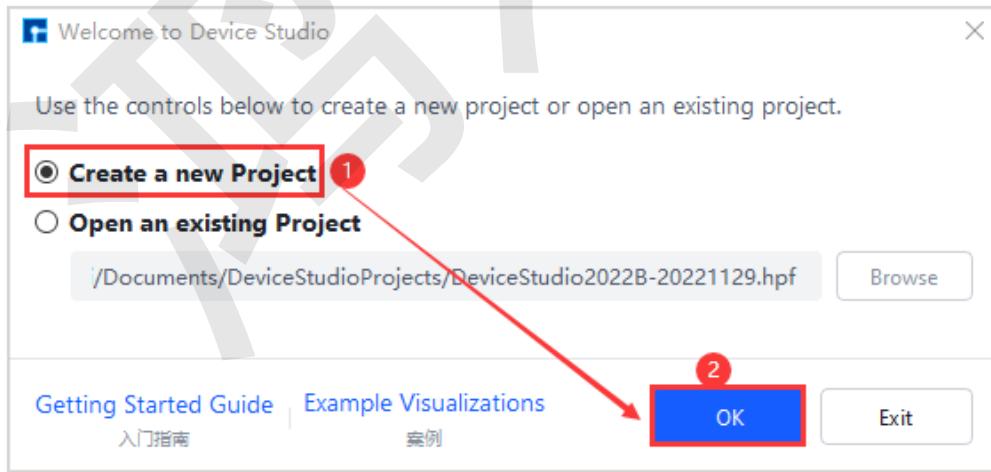


图 3.2: 创建项目

备注

- 点击图 3.2 中 *Getting Started Guide* 则链接到 Device Studio 使用教程的快速入门指南。
- 点击图 3.2 中 *Example Visualizations*, 则弹出 Device Studio Example Visualizations 界面如图 3.5 所示, 用户可根据需要选择案例了解情况。

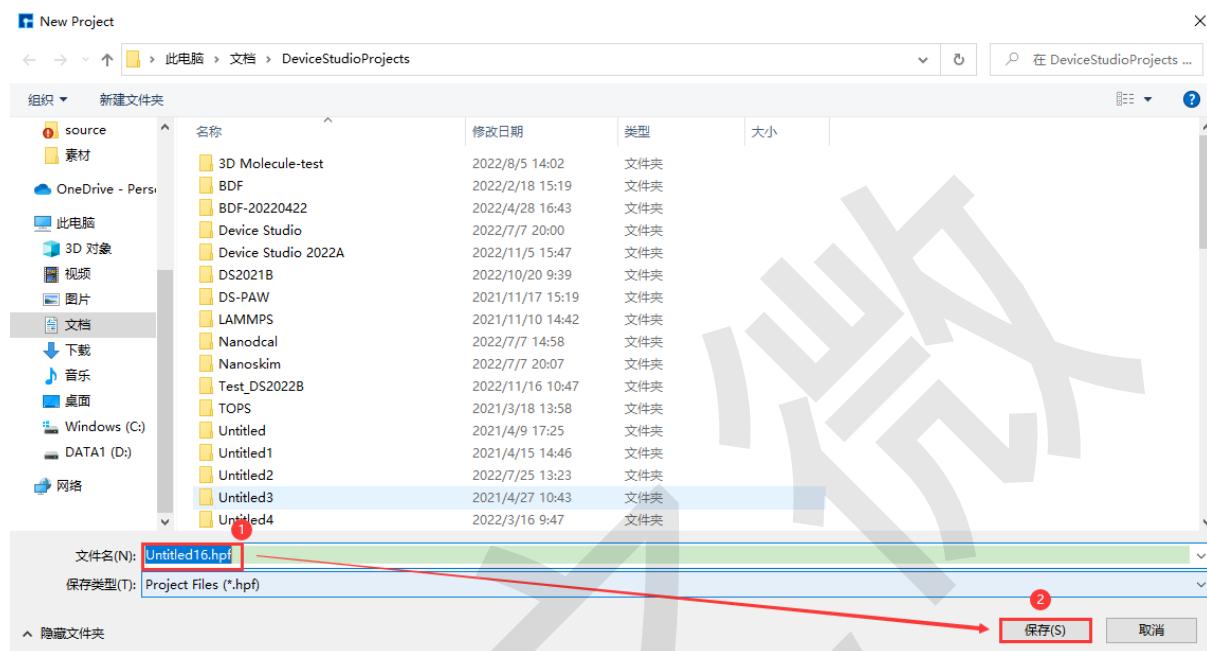


图 3.3: 给项目命名

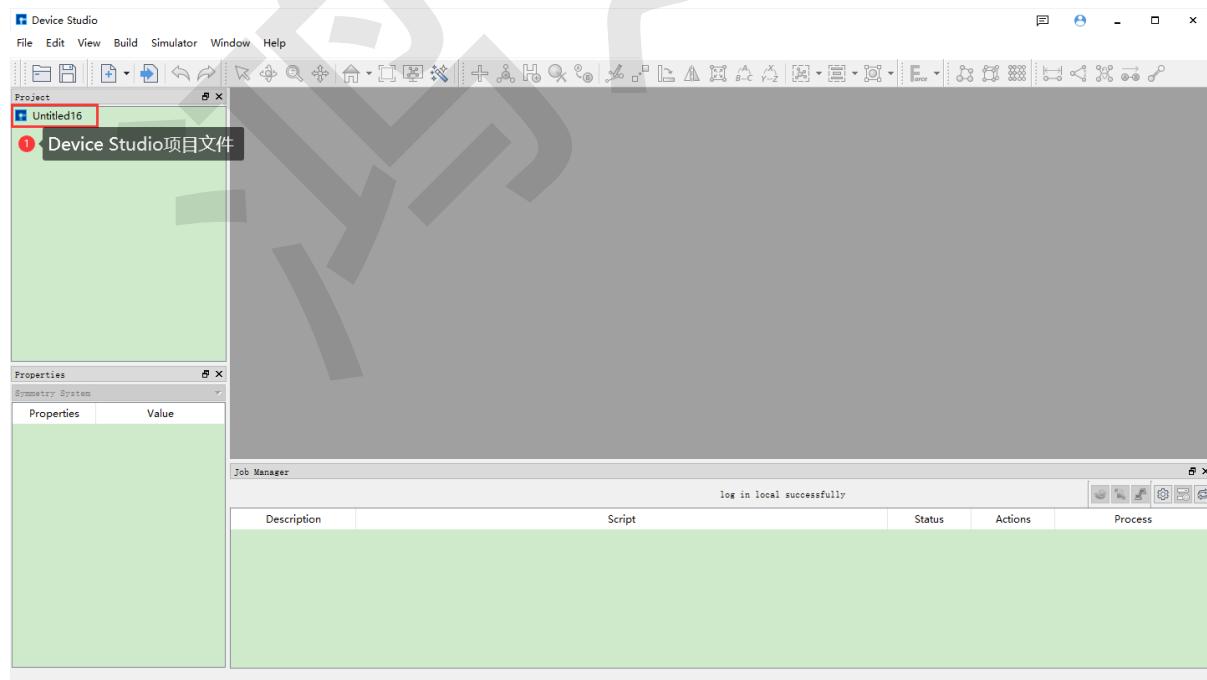


图 3.4: 创建好项目的 Device Studio 界面

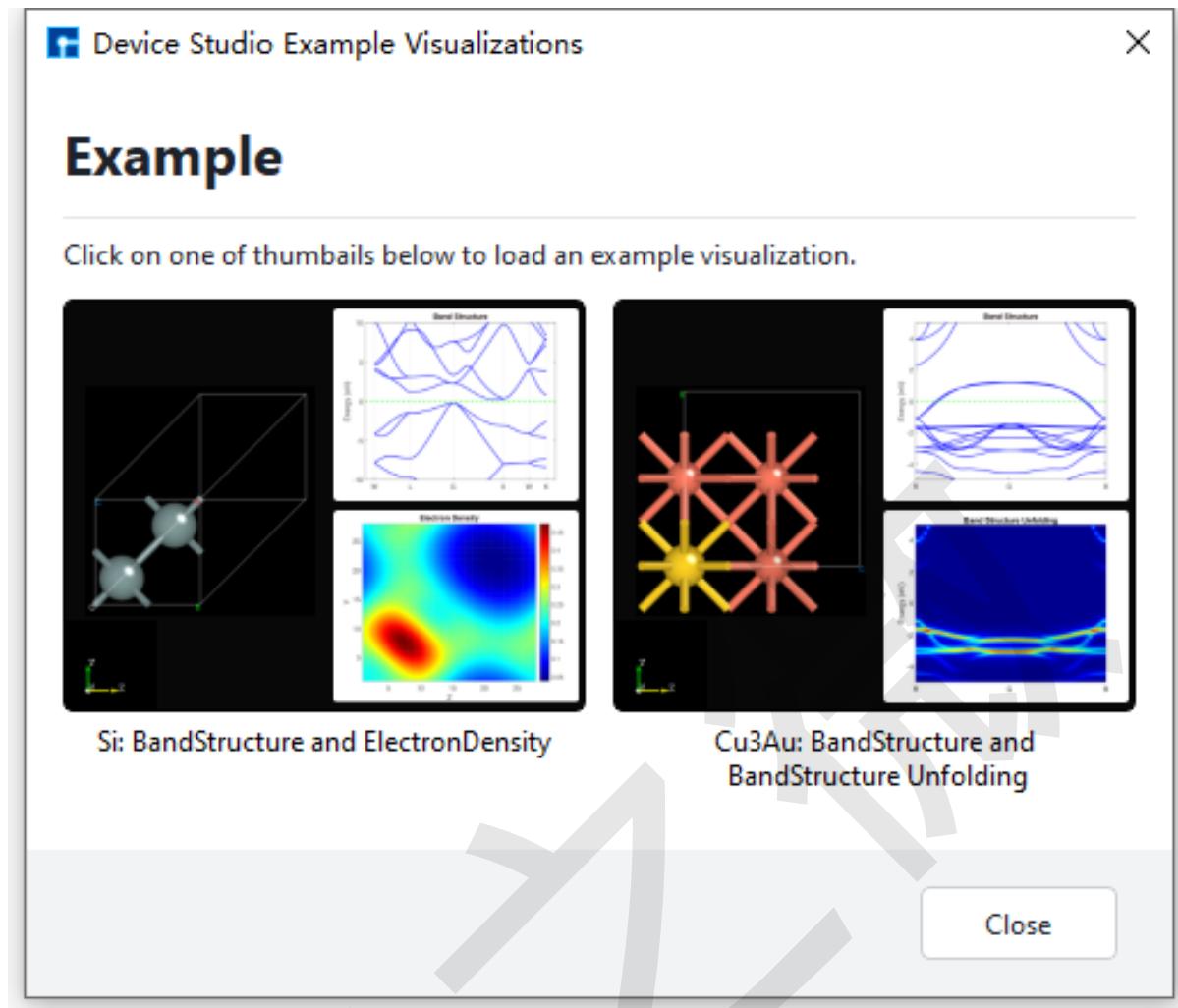


图 3.5: Device Studio Example Visualizations 界面

3.3 导入 Si 晶体结构

导入 Si 晶体结构的操作如 图 3.6、图 3.7、图 3.8 所示。

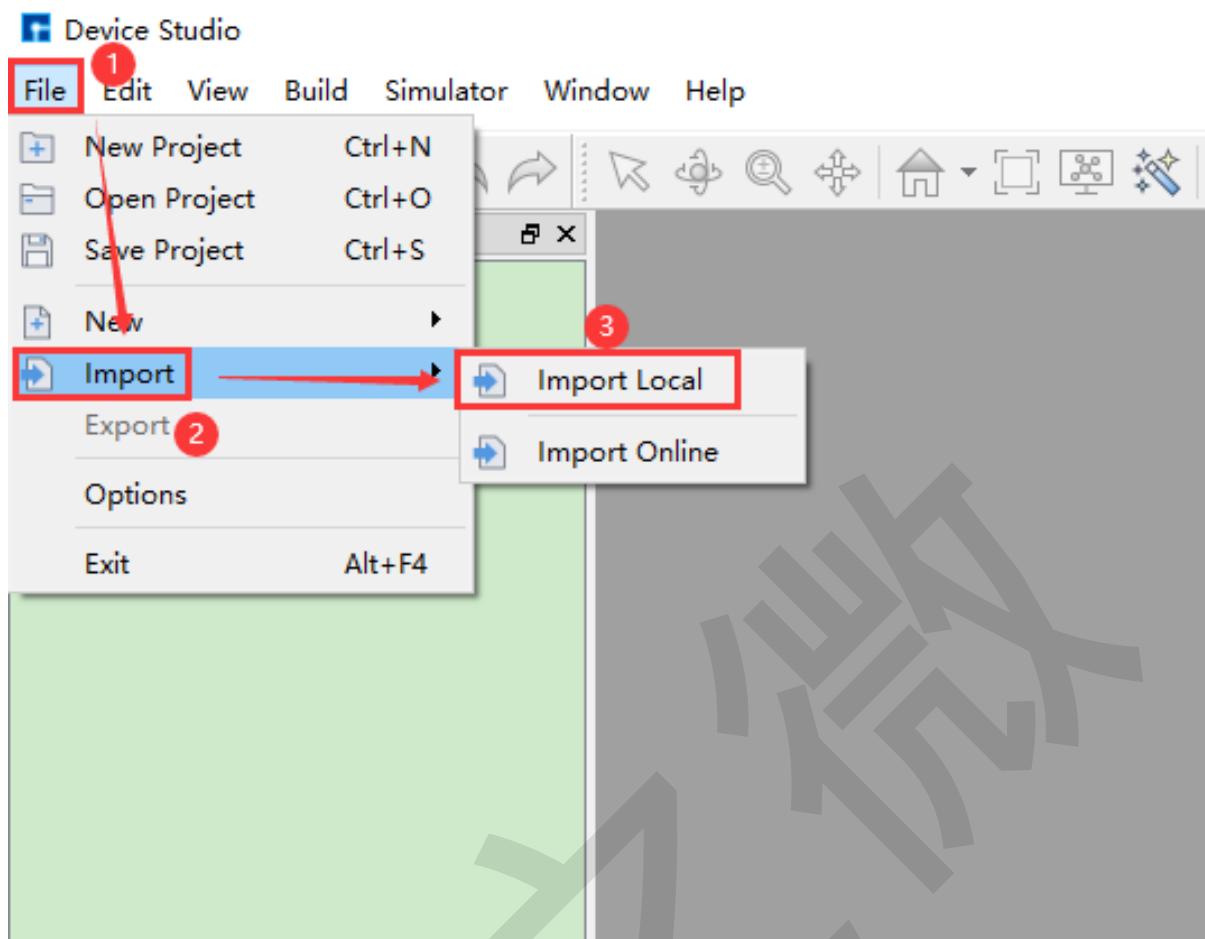


图 3.6: 弹出导入结构界面

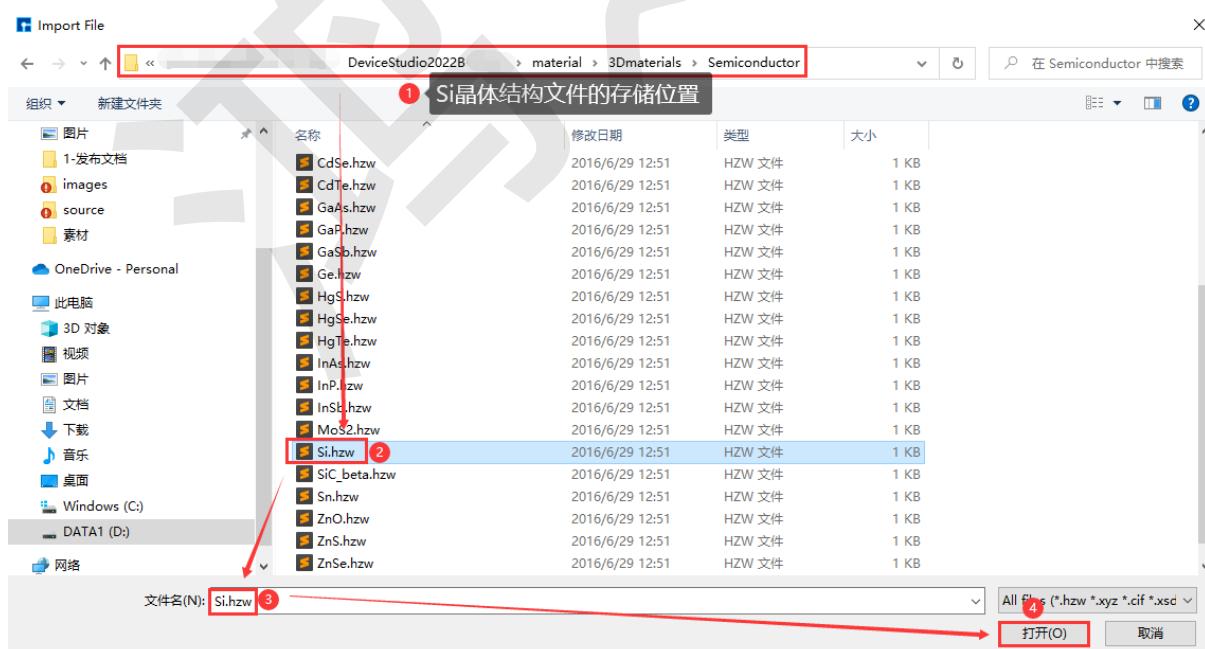


图 3.7: 导入 Si 晶体结构

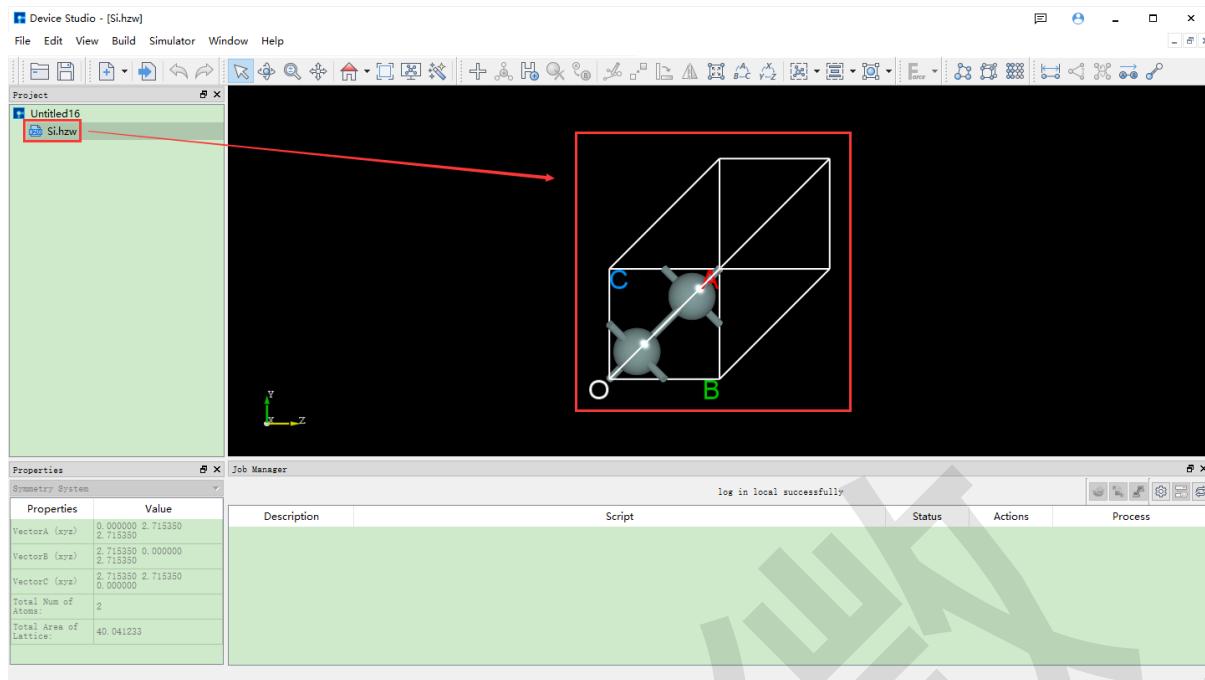


图 3.8: 导入 Si 晶体结构后的 Device Studio 界面

3.4 生成自洽和能带计算输入文件

生成 Si 晶体结构自洽计算输入文件的操作如图 3.9、图 3.10、图 3.11 所示。

生成 Si 晶体结构能带计算输入文件的操作如图 3.12、图 3.13、图 3.14 所示。

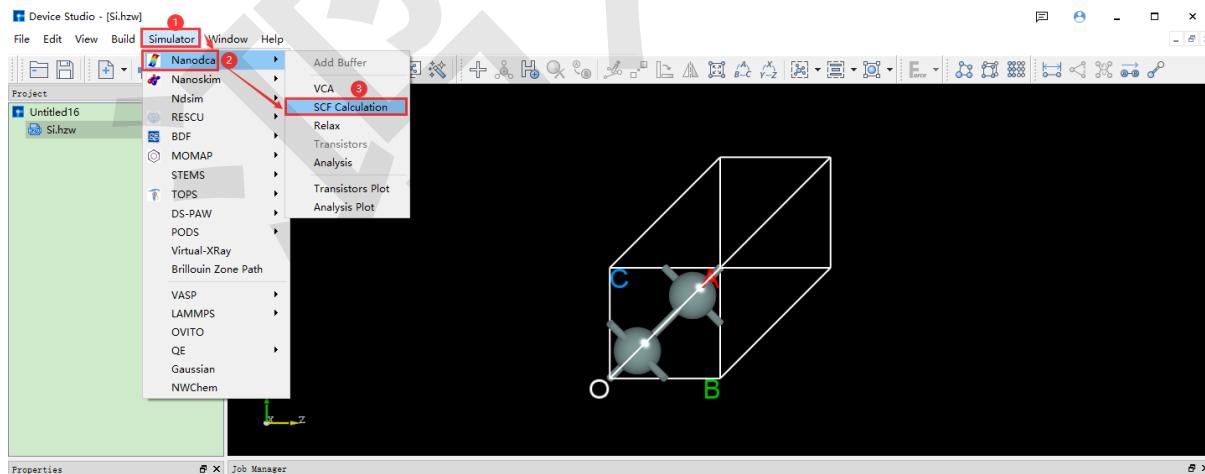


图 3.9: 弹出生成自洽计算输入文件界面操作

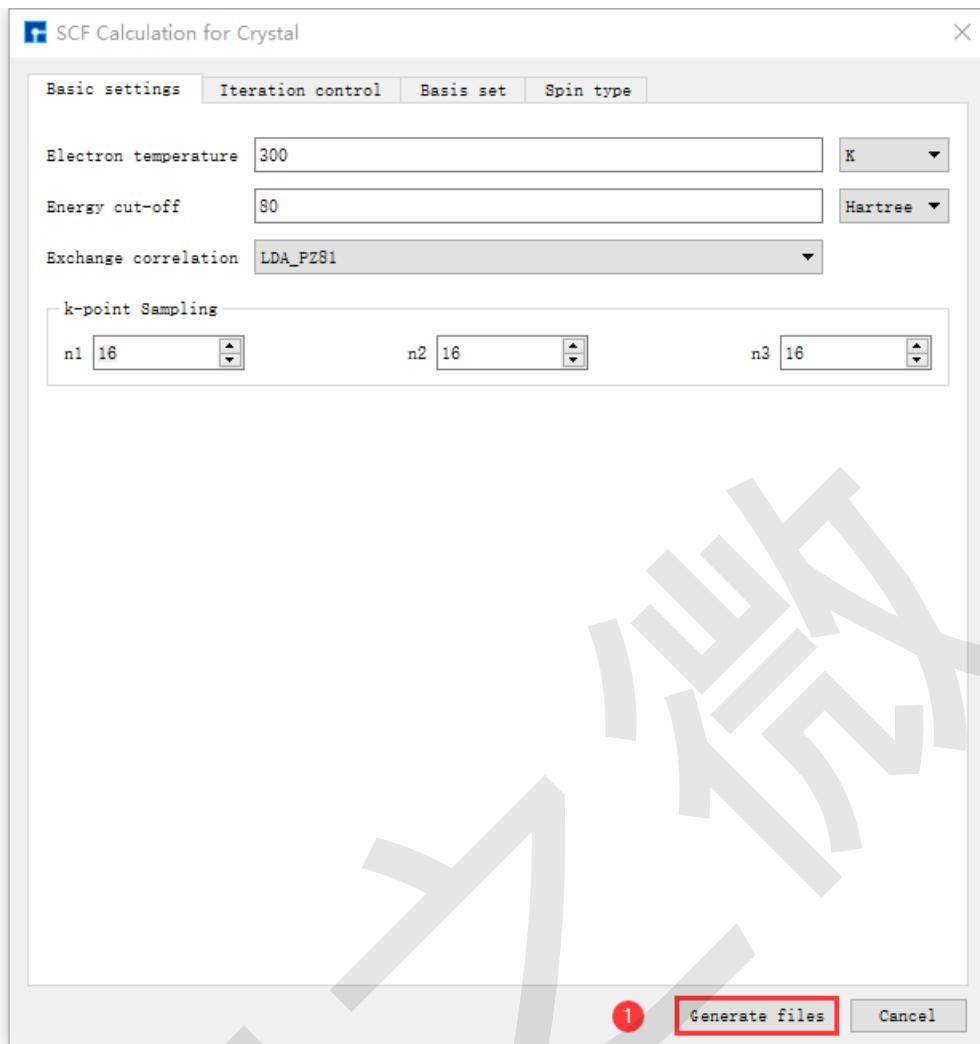


图 3.10: 设置参数并生成自洽计算输入文件

Device Studio 使用教程

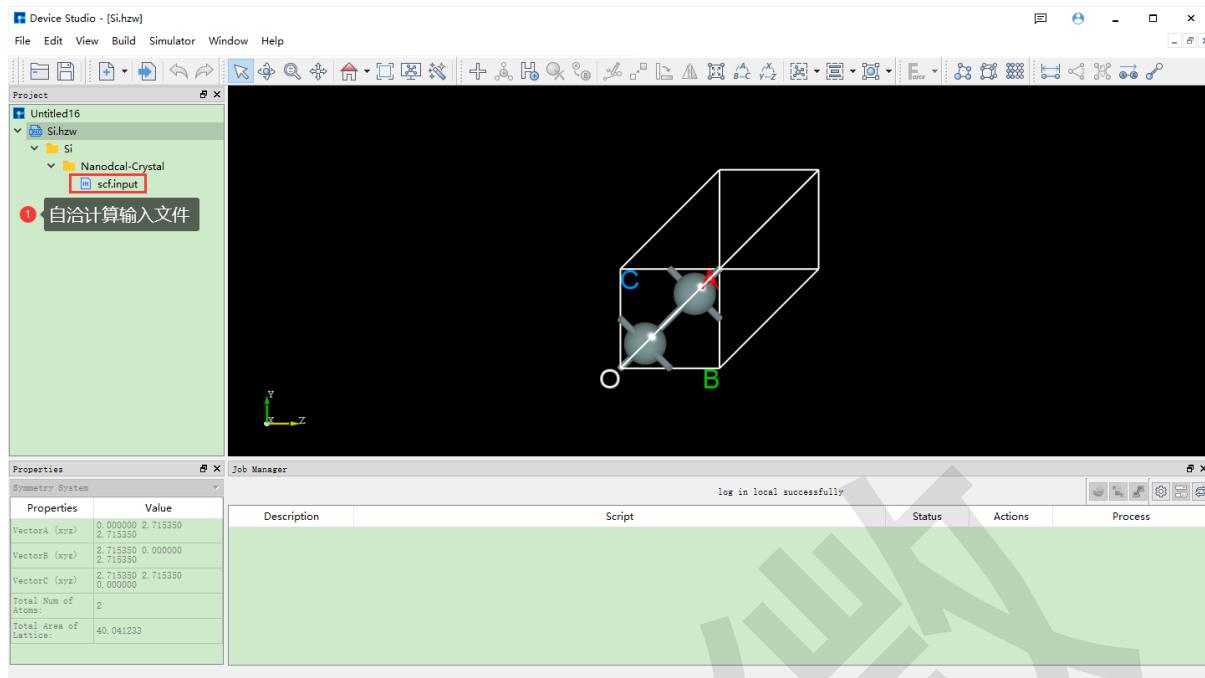


图 3.11: 生成自治计算输入文件后的 Device Studio 界面

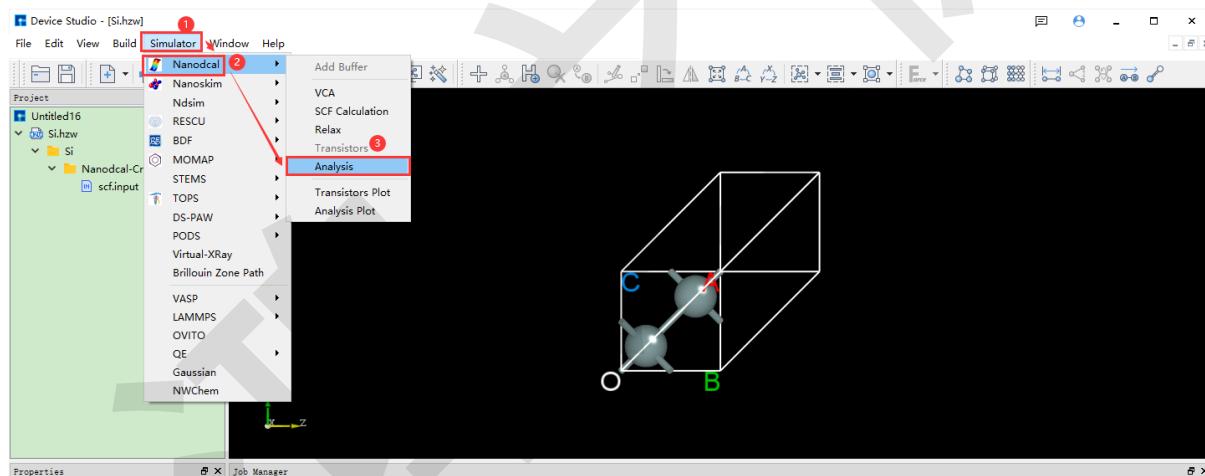


图 3.12: 弹出生成能带计算输入文件界面操作

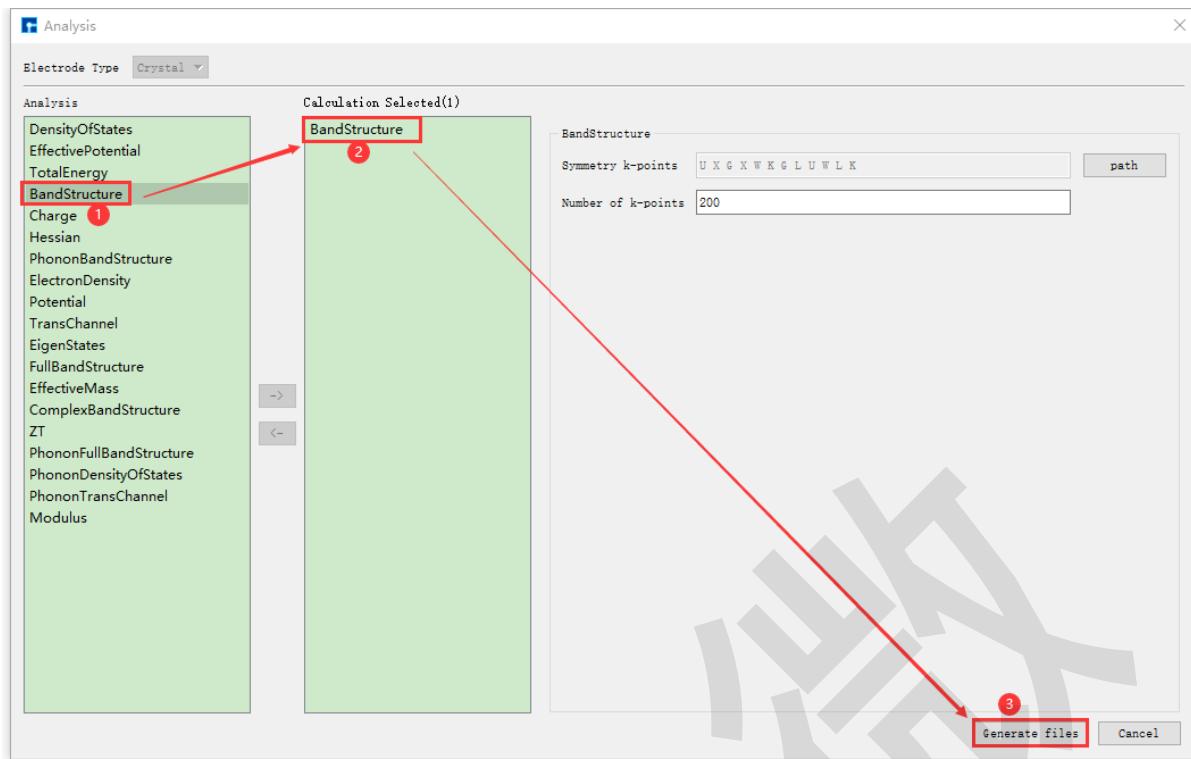


图 3.13: 设置参数并生成能带计算输入文件

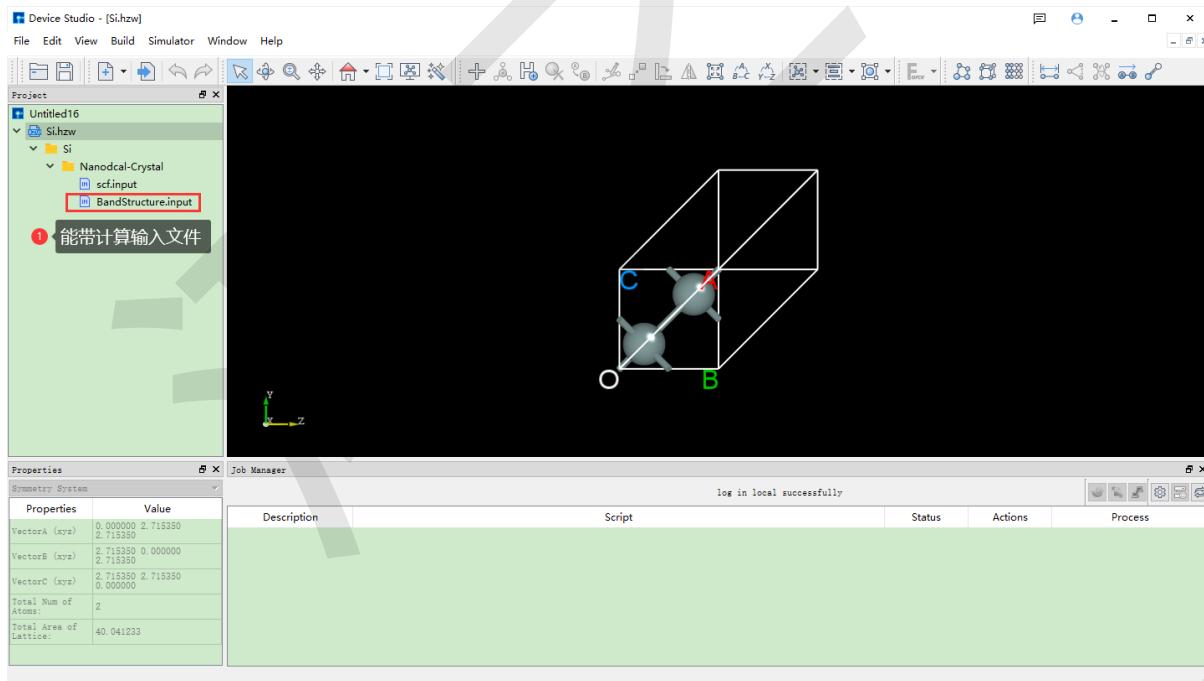


图 3.14: 生成能带计算输入文件后的 Device Studio 界面

3.5 提交自洽和能带计算任务

首先做 Si 晶体结构的自洽计算，提交 Si 晶体结构自洽计算任务的操作如 图 3.15、图 3.16 所示。

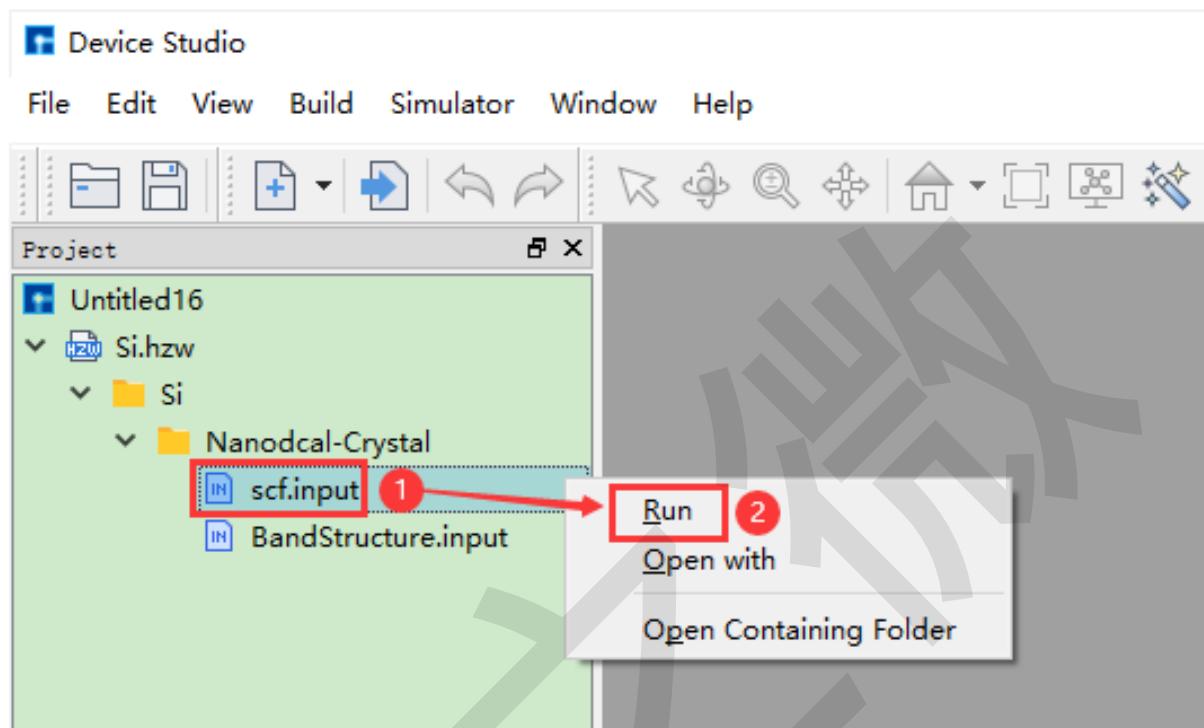


图 3.15: 提交自洽计算任务操作一



图 3.16: 提交自洽计算任务操作二

Device Studio 使用教程

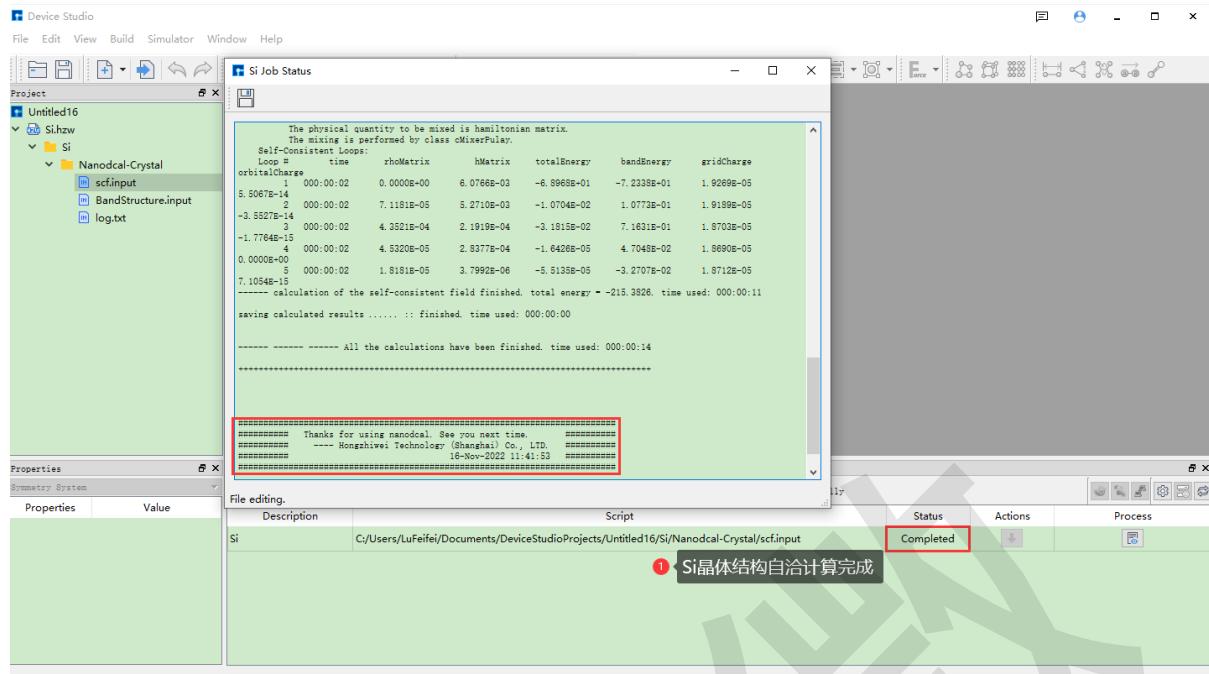


图 3.17: Si 晶体结构自治计算完成后的 Device Studio 界面

自治计算完成后，才可以进行 Si 晶体结构的能带计算，可通过计算任务监控管理区域判断自治计算任务是否计算完成，当计算任务处于排队中、计算中和计算完成时，*Status*分别为 Queued、Running、Completed。Si 晶体结构自治计算完成后的 Device Studio 界面如图 3.17 所示。提交 Si 晶体结构能带计算任务的操作如图 3.18、图 3.19 所示，Si 晶体结构能带计算完成后的 Device Studio 界面如图 3.20 所示。

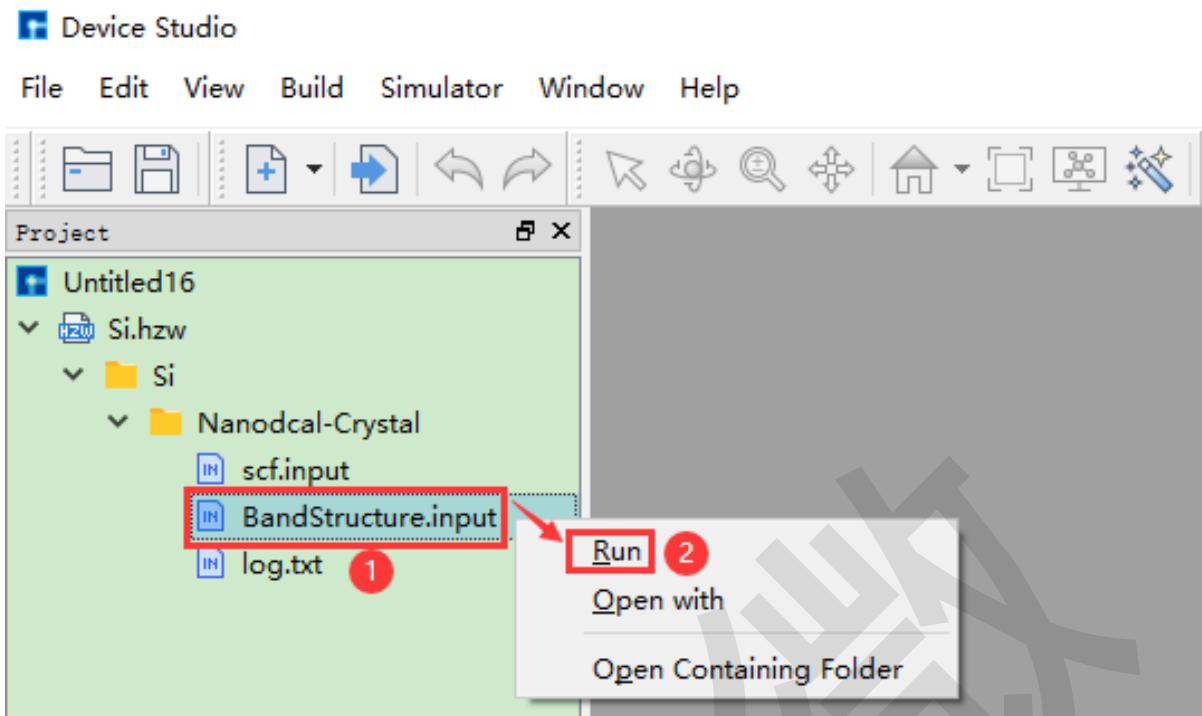


图 3.18: 提交能带计算任务操作一

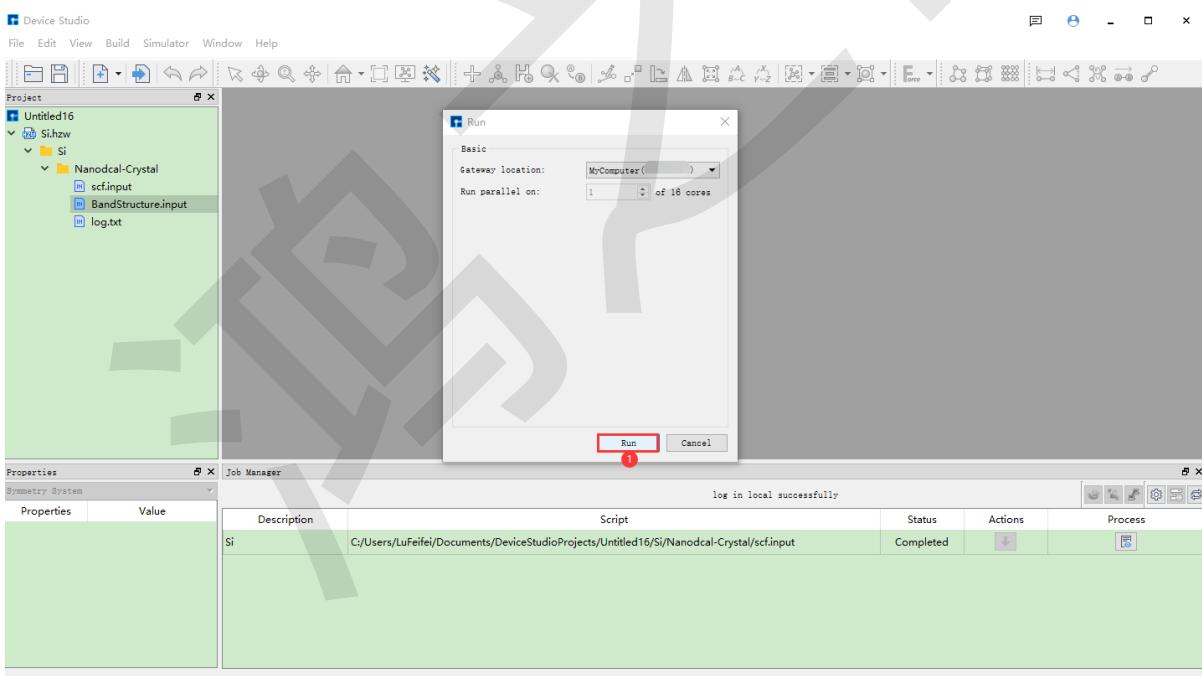


图 3.19: 提交能带计算任务操作二

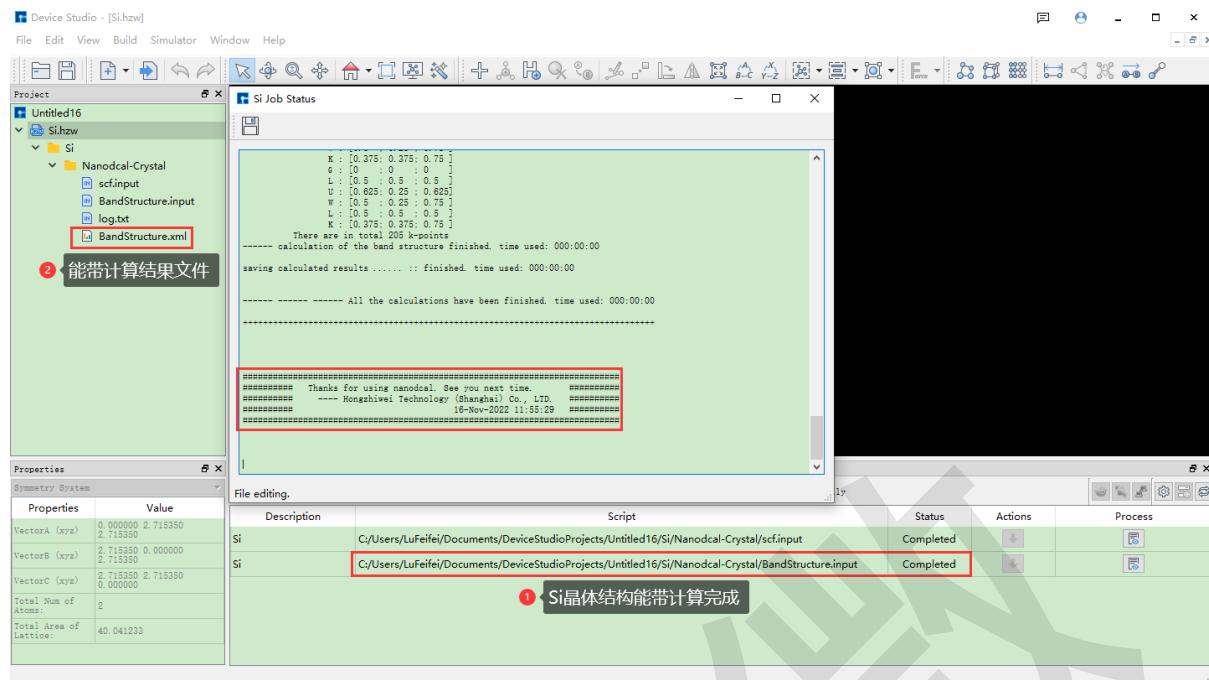


图 3.20: Si 晶体结构能带计算完成后的 Device Studio 界面

3.6 Si 晶体结构能带的数据可视化

Si 晶体结构能带计算完成后，可对能带计算结果进行可视化分析，其操作如图 3.21 所示。

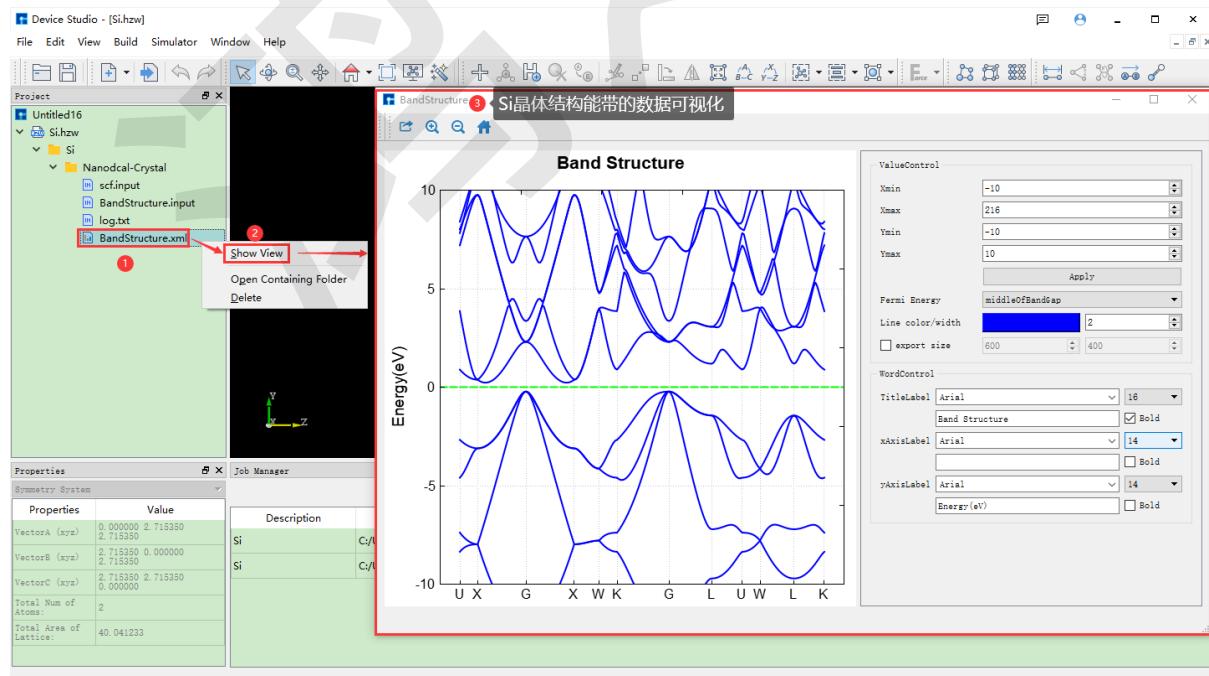


图 3.21: Device Studio 对 Si 晶体结构能带计算结果数据可视化的操作步骤

3.7 能带数据可视化结果导出

对 Si 晶体结构能带计算结果数据可视化之后，用户可根据需要将数据可视化结果导出，导出操作如图 3.22 所示。

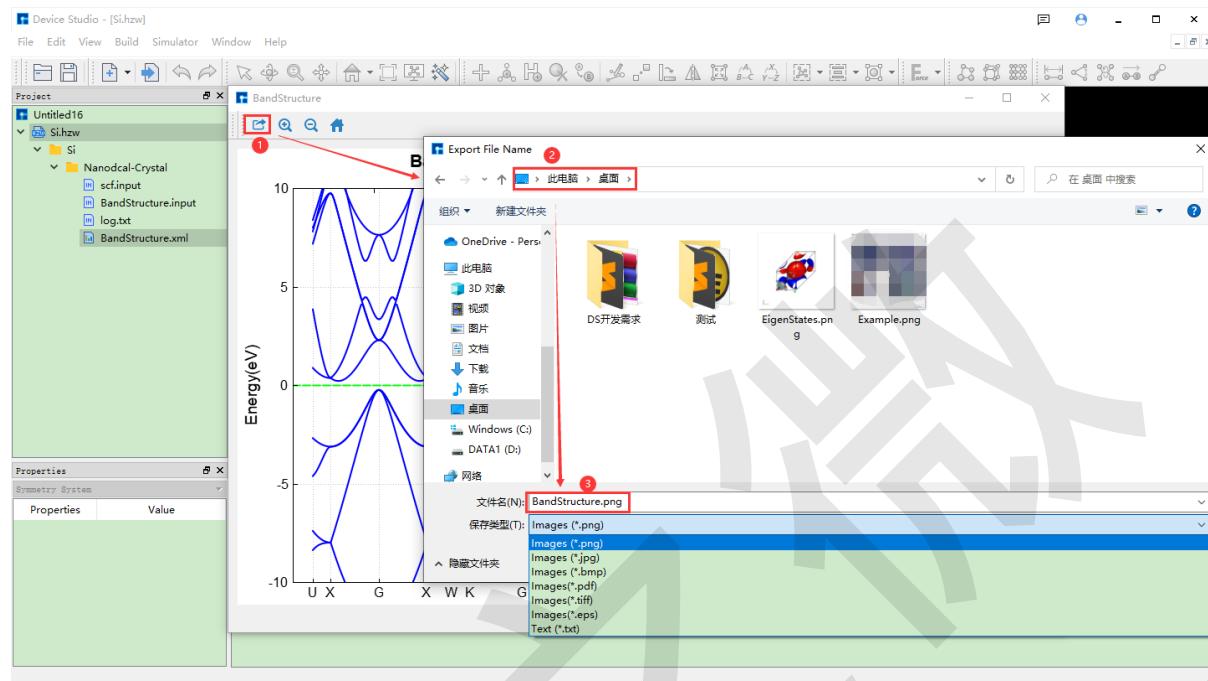


图 3.22: Device Studio 导出 Si 晶体结构能带数据可视化结果的操作步骤



CHAPTER 4

图形界面介绍

Device Studio 图形界面如 图 4.1 所示。

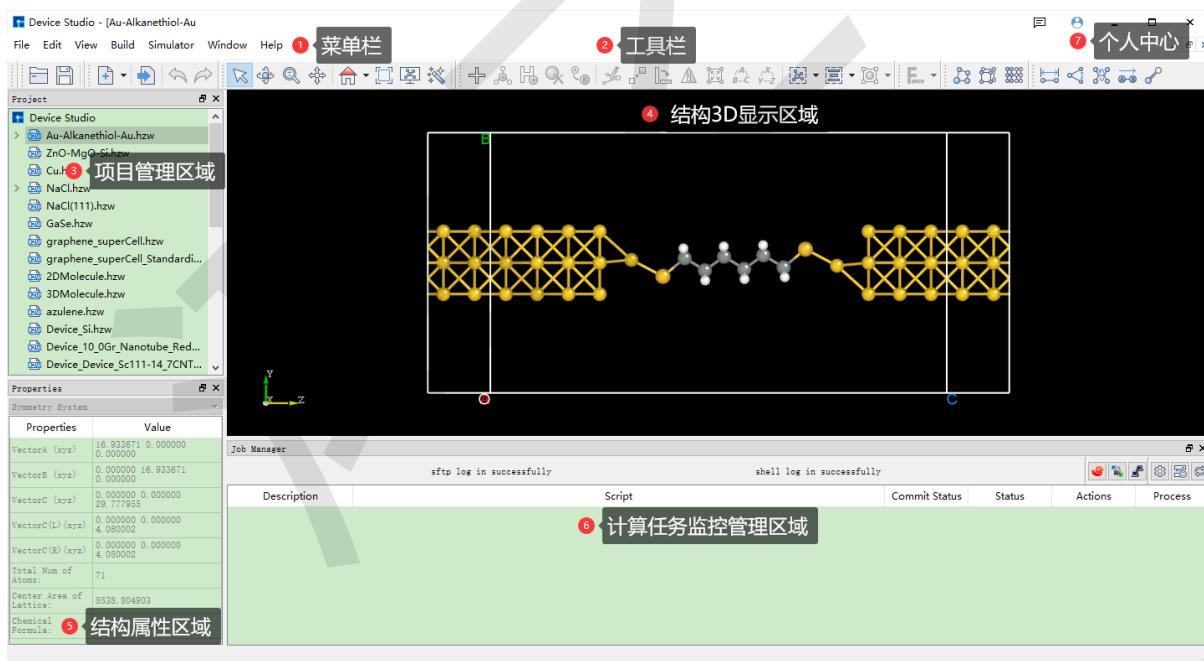


图 4.1: Device Studio 图形界面

4.1 菜单栏 (Menu)

Device Studio 的菜单栏图形界面如 图 4.2 所示。



图 4.2: 菜单栏

4.1.1 File

单击 *File*，界面如 图 4.3 所示。

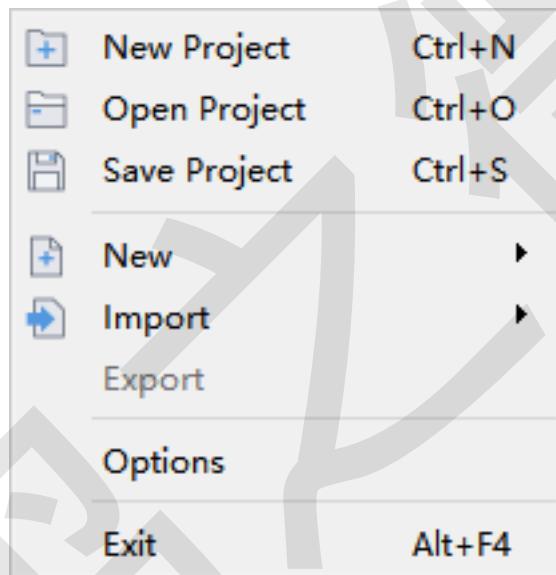


图 4.3: File

- *New Project*：弹出新建项目界面，用户可使用该界面创建新的项目，项目文件的后缀名为 .hpf。用户可根据需要对该项目命名，如 DeviceStudio.hpf；或采用默认命名，如 Untitled.hpf。命名之后单击“保存”按钮即可新建，反之，若不想新建项目，单击“取消”按钮即可。
- *Open Project*：弹出打开项目界面，用户可使用该界面打开已建的项目，如 DeviceStudio.hpf 项目，找到该项目文件并选中，单击“打开”按钮即可打开，反之，若不想打开项目，单击“取消”按钮即可。
- *Save Project*：保存当前项目。
- *New*：用户可根据需要选择搭建器件、晶体或分子结构。

- *Import*：弹出导入结构文件界面，用户可选择从本地或在线数据库导入器件、晶体或分子结构。
- *Export*：弹出导出当前结构文件界面，用户可根据需要对该结构文件命名，或采用默认命名，并选择存储位置。
- *Options*：弹出选项界面，用户可根据需要选择赝势基组文件，设置 Device Studio 背景颜色和刷新时间。
- *Exit*：关闭软件 Device Studio。

4.1.2 Edit

单击 *Edit*，界面如 图 4.4 所示。

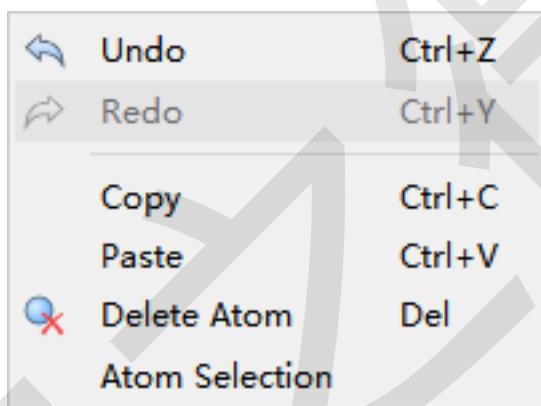


图 4.4: Edit

- *Undo*：撤销。
- *Redo*：重做。
- *Copy*：复制。
- *Paste*：粘贴。
- *Delete Atom*：删除选中的原子。
- *Atom Selection*：选择部分原子中的特定元素的原子，特定元素的原子用户可根据需要进行选择。如：先框选一部分原子，再选择该部分原子中的所有的 C 原子。

4.1.3 View

单击 *View*，界面如 图 4.5 所示。

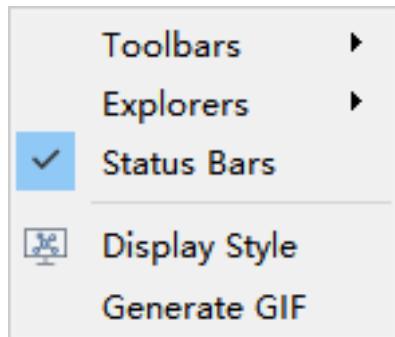


图 4.5: View

- *Toolbars*：用户可根据需要选择是否在工具栏显示 Project、Standard、3D View 三个模块。若显示，则勾选对应的模块即可；反之，不勾选即可。
- *Explorers*：用户可根据需要选择是否在软件上显示 Project Explorer、Properties Explorer 和 Job Manager 三个模块。若显示，则勾选对应的模块即可；反之，不勾选即可。
- *Status Bars*：勾选则选择在软件上显示该模块，不勾选则不显示。
- *Display Style*：弹出 *DisplayStyle* 设置界面。对于原子，用户可根据需要选择不显示，以线状显示，或以球棒状显示。对于晶格基矢，用户可选择不显示，以实线显示，或以虚线显示。若实线显示，可根据需要设置线条的粗细。
- *generate GIF*：弹出 *generategif* 界面，用户可根据需要将已有的一系列图片选中并导入，生成后缀名为 .gif 的动态图，生成后将该动态图导出即可。

4.1.4 Build

单击 *Build*，界面如 图 4.6 所示。



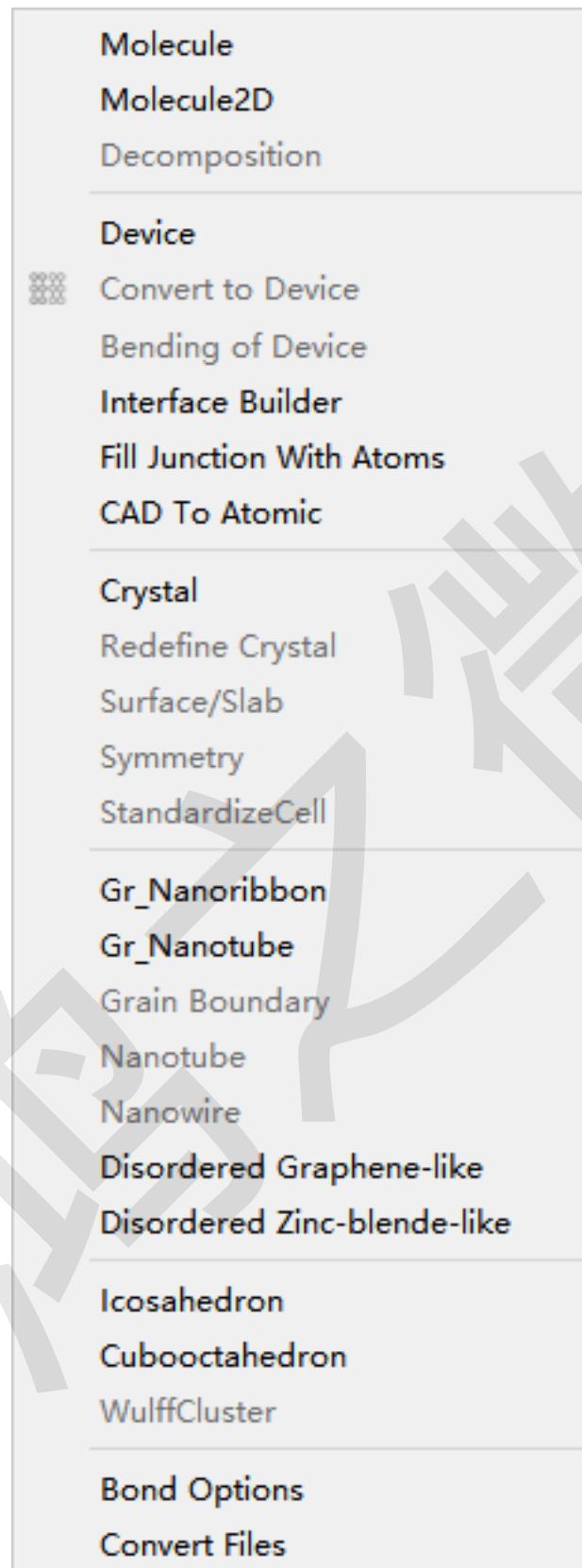


图 4.6: Build

- *Molecule* : 搭建 3D 分子结构。

- *Molecule2D*：搭建 2D 分子结构。
- *Decomposition*：拆分分子结构。
- *Device*：搭建器件结构。器件类型有 L-R structure、L-C-R structure、B-T structure 等，用户可根据需要选择构建。
- *Convert to Device*：在分子或晶体结构的基础上搭建器件结构。
- *Bending of Device*：将两端口器件结构进行弯曲操作。
- *Interface Builder*：搭建异质结结构。
- *Fill Junction With Atoms*：搭建多层膜结构。
- *CAD to Atomic*：通过 2D CAD 的方式搭建多层膜结构。
- *Crystal*：搭建晶体结构。
- *Redefine Crystal*：晶体结构的晶胞重定义扩胞。
- *Surface/Slab*：晶体结构的切面/切片。
- *Symmetry*：对晶体结构进行空间群识别。
- *StandardizeCell*：超胞识别原胞。
- *Gr_Nanoribbon*：搭建纳米带结构。
- *Gr_Nanotube*：搭建纳米管结构。
- *Grain Boundary*：在方胞基础上搭建晶界结构。
- *Nanotube*：在晶体结构基础上搭建纳米管。
- *Nanowire*：在晶体结构基础上搭建纳米线。
- *Disordered Graphene-like*：搭建类石墨烯无序结构。
- *Disordered Zinc-blende-like*：搭建类闪锌矿无序结构。
- *Icosahedron*：搭建正二十面体结构。
- *Cubooctahedron*：搭建正立方八面体结构。
- *WulffCluster*：在方胞基础上搭建 WulffCluster 结构。
- *Bond Options*：成键设置。
- *Convert Files*：结构文件的互转。

4.1.5 Simulator

单击 *Simulator*，界面如 图 4.7 所示。用户可根据需要选择对应的模块进行对应软件的输入文件的生成、计算及数据可视化的操作。

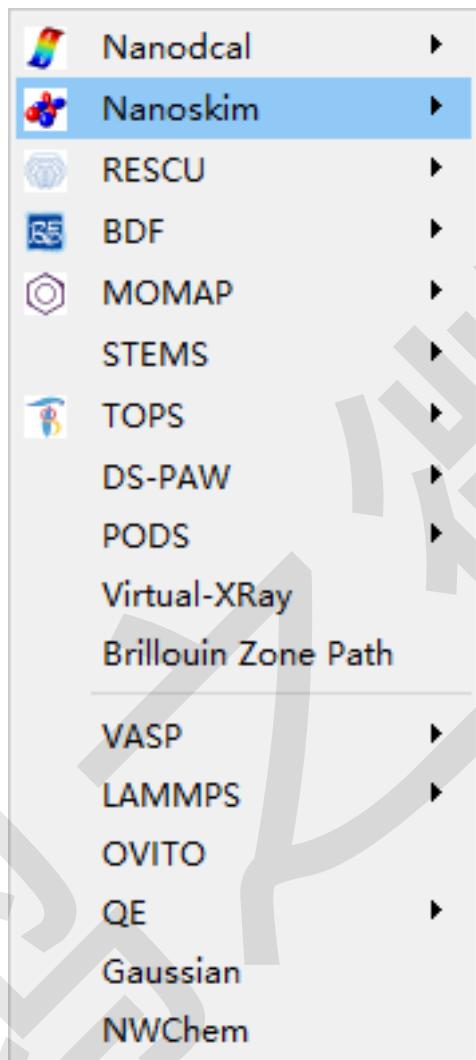


图 4.7: Simulator

- *Nanodcal*：第一性原理量子输运计算软件 Nanodcal。
- *Nanoskim*：紧束缚模型量子输运计算软件 Nanoskim。
- *RESCU*：第一性原理大体系 KS-DFT 计算软件 RESCU。
- *BDF*：量子化学计算软件 BDF。
- *MOMAP*：分子发光与输运性质计算软件 MOMAP。
- *STEMS*：材料微观组织演化模拟软件 STEMS。
- *TOPS*：嵌段共聚物自组装相行为设计软件 TOPS。

- *DS-PAW*：第一性原理平面波计算软件 DS-PAW。
- *PODS*：聚合物耗散粒子动力学模拟软件 PODS。
- *Virtual-XRay*：晶体衍射性质计算模块 Virtual-XRay。
- *Brillouin Zone Path*：显示晶体结构的布里渊区。
- *VASP*：电子结构计算和量子力学一分子动力学模拟软件包 VASP。
- *LAMMPS*：大规模原子分子并行模拟器 LAMMPS。
- *OVITO*：原子和粒子模拟数据的科学可视化和分析软件 OVITO。
- *QE*：采用赝势和平面波方法的第一性原理计算软件 QUANTUM ESPRESSO。
- *Gaussian*：量子化学计算软件 Gaussian。
- *NWChem*：量子化学模拟软件 NWChem。

4.1.6 Window

单击 *Window*，界面如 图 4.8 所示。

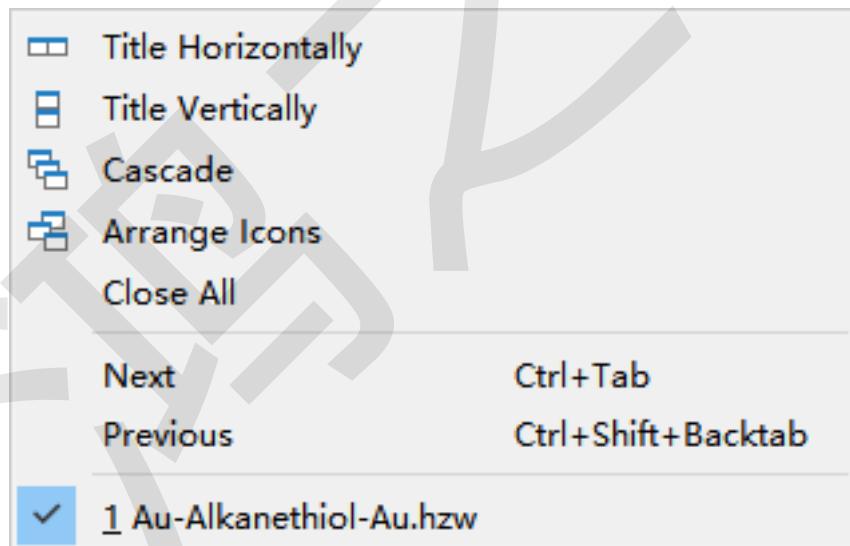


图 4.8: Window

- *Title Horizontally*：将结构文件的 3D Viewer 窗口水平排列。
- *Title Vertically*：将结构文件的 3D Viewer 窗口竖直排列。
- *Cascade*：将结构文件的 3D Viewer 窗口层叠排列。
- *Arrange Icons*：将结构文件的 3D Viewer 窗口最小化。

- *Close All*：关闭结构文件的 3D Viewer 窗口。
- *Next*：选中下一个结构文件的 3D Viewer 窗口。
- *Previous*：选中上一个结构文件的 3D Viewer 窗口。

4.1.7 Help

单击 *Help*，界面如 图 4.9 所示。

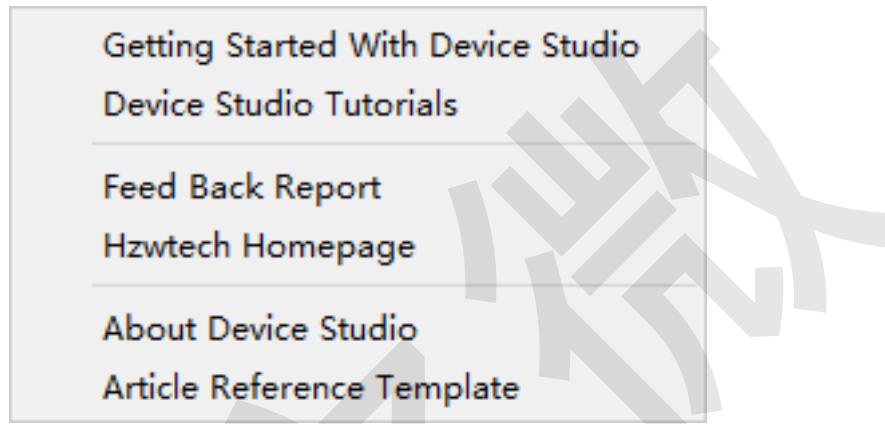


图 4.9: Help

- *Getting Started With Device Studio*：连接 Device Studio 快速入门指南。
- *Device Studio Tutorials*：连接 Device Studio 使用教程。
- *Feed Back Report*：弹出鸿之微客户信息反馈收集界面，用户可通过该界面将产品建议反馈给鸿之微。
- *Hzwtech Homepage*：连接鸿之微科技（上海）股份有限公司主页。
- *About Device Studio*：弹出 About Device Studio 窗口，了解 Device Studio 版本号、发行公司、License 的使用期限等。
- *Article Reference Template*：弹出 Device Studio 文章引用模板，方便用户在文章中正确的引用 Device Studio。

4.2 工具栏 (Toolbars)

Device Studio 的工具栏如 图 4.10 所示。将 Toolbars 上的所有图标按从左到右顺序，从 1 开始标号一直到结束共有 38 个标号。将鼠标箭头放在图标上可查看与之对应的图标英文名称。



图 4.10: 工具栏

标号	图标	图标英文名称	功能描述
1		Open Project	打开 Device Studio 项目文件
2		Save Project	保存当前项目和结构
3		New	新建结构，通过点击下拉按钮可选择新建器件、晶体管或分子结构
4		Import Local	从本地导入结构文件
5		Undo	撤销
6		Redo	重做
7		3D Viewer Selection Mode	选择，点击进入选择模式，可通过鼠标单击或拖动框选原子
8		3D Viewer Rotation Mode	旋转，点击进入旋转模式，可通过拖动鼠标将原子结构的 3D 视图进行旋转
9		3D Viewer Zoom Mode	放大或缩小，点击进入缩放模式，可通过滚动鼠标中键将原子结构的 3D 视图进行放大或缩小
10		3D Viewer Translation Mode	平移，点击进入平移模式，可通过拖动鼠标将原子结构的 3D 视图进行平移
11		3D Viewer zy View	点击重置结构的 3D 视图 (z-y 面)，点击下拉可选择从不同视角查看结构的 3D 视图

续下页

表 4.1 - 接上页

标号	图标	图标英文名称	功能描述
12		3D Viewer Fit to View	点击将结构的 3D 视图根据屏幕移动到合适位置
13		Display Style	点击可设置原子结构的显示模式
14		Structure Refinement Module	点击进入原子结构精修模块，该模块全面升级了原子结构 3D 显示效果，以等价原子的形式显示原子结构，并支持球棍/多面体显示模式，用户可自定义颜色、半径和光照等参数，创建专属个人模板
15		Add Atom	添加原子，点击进入 Device Studio 元素周期表，选择元素，在结构的 3D 视图中鼠标点击即可添加原子
16		Add New Atom	在选中的多个原子中间位置添加原子。该图标需选择多个原子才可激活使用
17		Hydrogen passivation	用氢原子钝化晶体结构。目前，只对 Si 和 C 元素有效
18		Delete Atom	删除选中的原子
19		Replace Atom	替换选中的原子
20		Edit Atom With Selected	设置 2 个原子之间的距离或 3 个原子之间的夹角。该图标需选择 2 个及以上原子才可激活使用
21		Move Atom	移动选中的原子。该图标需选中原子才可激活使用
22		Rotate Atom	旋转选中的原子。该图标需选择 2 个及以上原子才可激活使用
23		Mirror Atom	将选中的原子做镜像处理。该图标需选中原子才可激活使用
24		Stretch Cell	保持分数坐标不变的情况下，伸展或压缩原胞
25		alternate axes	轮换结构的晶格基矢 A、B、C

续下页

表 4.1 - 接上页

标号	图标	图标英文名称	功能描述
26		alternate coordinate	轮换结构的 X、Y、Z
27		Wrap	根据周期性将晶格外的原子沿着单元轴平移到晶格内，点击下拉可选择 Wrap Along a/b/c
28		Center	将结构中所有原子或选中的原子作为整体在晶格单元中居中对齐，点击下拉可选择 Center Along a/b/c
29		Fit Cell	自动匹配最小单元晶格基矢，点击下拉可选择 Fit Cell Along a/b/c
30		Minimize Structure	通过分子力场计算对分子结构进行结构优化，点击下拉可选择合适的力场。该图标仅对显示的结构为分子结构时才可激活使用
31		Convert to Molecule	将当前结构转换为分子
32		Convert to Crystal	将当前结构转换为晶体
33		Convert to Device	将当前结构转换为器件
34		Distance	测量 2 个原子之间的距离
35		Angle	测量 3 个原子之间的夹角
36		Dihedral angle	测量 4 个原子之间的二面角
37		Vector between two atoms	测量 2 个原子之间的向量
38		Recalculate LinkerBond	重新成键

备注

Device Studio 的工具栏及其重要，建议用户在使用 Device Studio 前，可仔细阅读[工具栏 \(Toolbars\)](#) 中各图标的功能。另为方便用户的使用，Device Studio 对工具栏中的各图标进行了功能分类，当图标为灰色，不可用时，并非 Bug，而是该图标需要在特定条件下方可激活使用。在需要帮助时，可咨询鸿之微专业的解决方案中心团队。

4.3 项目管理区域 (Project Explorer)

项目管理区域如 图 4.11 所示，如该项目名称为 DeviceStudio，该项目下含有 3 个结构文件，分别为 Au-Alkanethiol-Au.hzw、NaCl.hzw、azulene.hzw。对于结构文件，如 Au-Alkanethiol-Au.hzw，由图 3.3-1 红色框选部分可知该区域可管理对应结构计算的输入文件，如自洽计算输入文件 scf.input，用户可通过选中该输入文件 → 右击 → *Open with* 打开查看，或通过选中该输入文件 → 右击 → *Open Containing Folder* 找到该文件在电脑中存储的位置。对于结构文件，若已经生成相关计算的输入文件，则不可重新命名；反之，若未生成相关计算的输入文件，用户可根据需要重新命名，操作为选中该结构文件 → 右击 → *Rename*，然后重新命名即可。

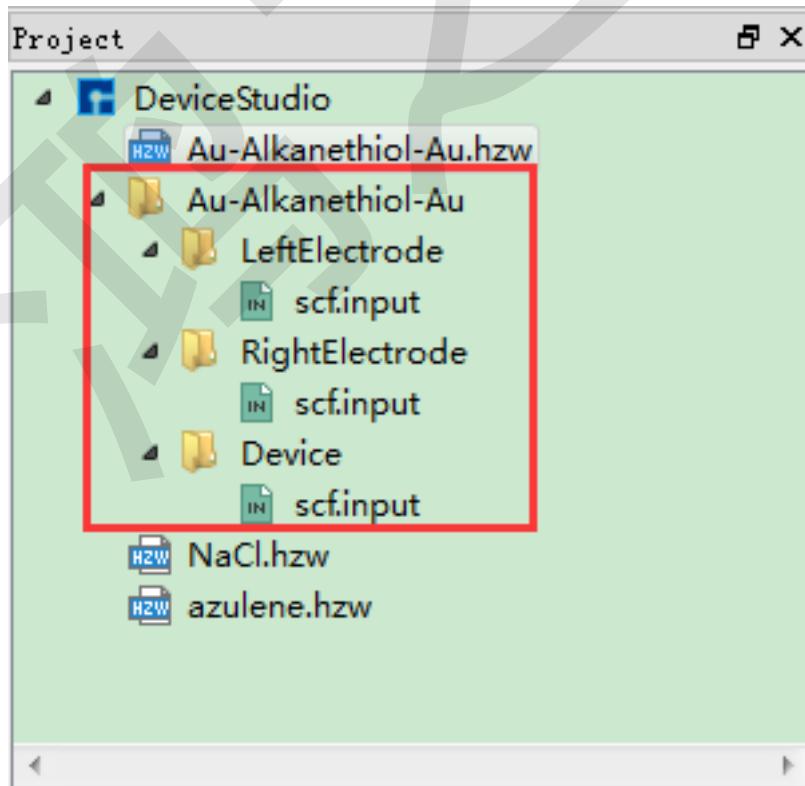


图 4.11: 项目管理区域

想要在 **项目管理区域** 新建或打开已建的项目，导入或导出结构文件可参考 [File](#) 的详细说明。

备注

Device Studio 已对 **项目管理区域** (*Project Explorer*) 进行优化，建议用户在使用过程中，给项目文件、结构文件等命名时采用纯英文，不要使用空格、中文、星号等特殊字符，提交作业进行计算过程中，含 **提交作业后**，均不要更改文件名，若想更改，建议在提交作业进行计算前更改。

4.4 结构 3D 显示区域 (3D Viewer)

结构 3D 显示区域 如 [图 4.12](#) 所示，如在该区域显示结构 Au-Alkanethiol-Au.hzw 的 3D 视图，则通过在 **项目管理区域** 选中并双击结构文件即可。在该区域，用户可通过滚动鼠标中键将结构的 3D 视图放大或缩小；可先选中工具栏中的 *3D Viewer Translation Mode* 快捷图标或按住鼠标中键，通过拖动鼠标将结构的 3D 视图在该区域平移；可先选中工具栏中的 *3D Viewer Rotation Mode* 快捷图标或按住鼠标右键，通过拖动鼠标将结构的 3D 视图在该区域旋转。

用户可根据计算需要对结构进行增、删、改等一系列操作，操作后的结构的 3D 视图均可在该区域实时显示。对于结构的操作用户可根据 **工具栏** (*Toolbars*) 中各快捷图标的功能描述进行。

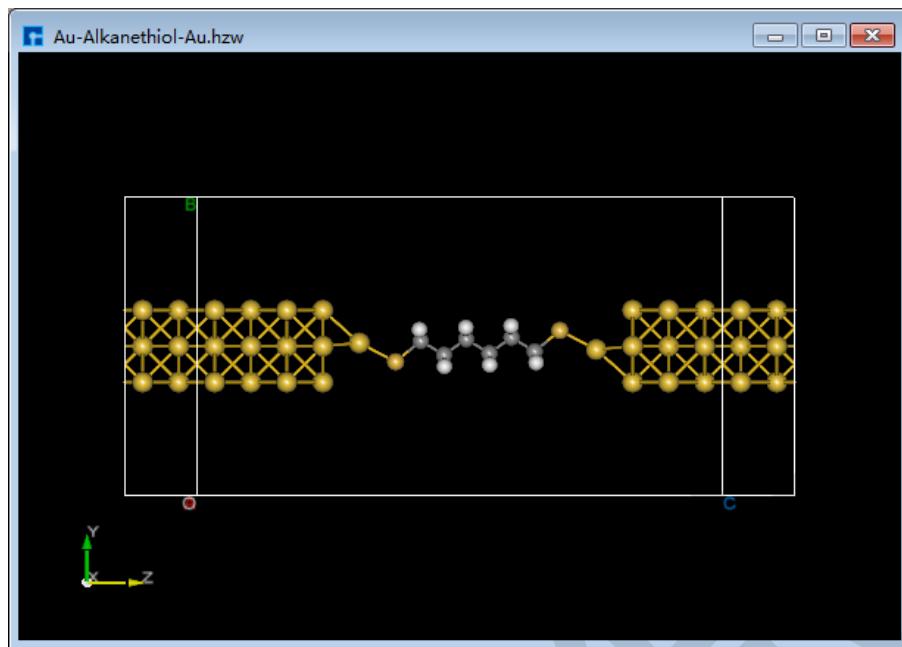


图 4.12: Au-Alkanethiol-Au 的 3D 显示

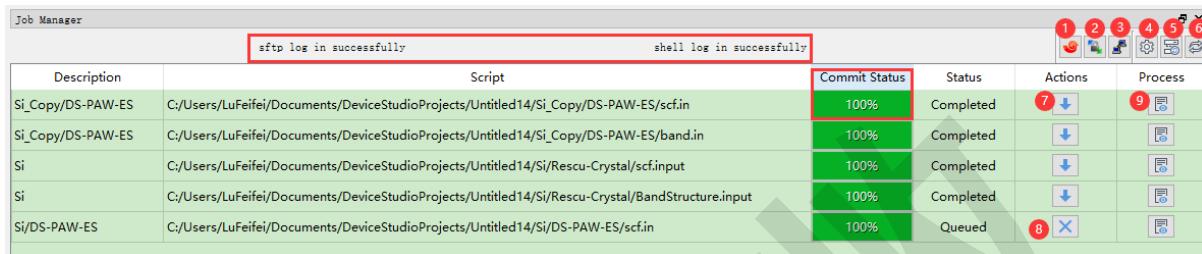
4.5 结构属性区域 (Properties Explorer)

如 3D 显示区域显示结构 Au-Alkanethiol-Au.hzw，则结构属性区域显示结构的系统信息如 图 4.13 所示；若选中 Au-Alkanethiol-Au.hzw 结构的某一个原子，则结构属性区域显示结构的原子信息如 图 4.14 所示，用户可通过鼠标双击修改选中的原子的坐标位置或替换原子。

Properties Symmetry System <table border="1"> <thead> <tr> <th>Properties</th> <th>Value</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>VectorA (xyz)</td> <td>16.933671 0.000000 0.000000</td> </tr> <tr> <td>VectorB (xyz)</td> <td>0.000000 16.933671 0.000000</td> </tr> <tr> <td>VectorC (xyz)</td> <td>0.000000 0.000000 29.777955</td> </tr> <tr> <td>VectorC(L)(xyz)</td> <td>0.000000 0.000000 4.080002</td> </tr> <tr> <td>VectorC(R)(xyz)</td> <td>0.000000 0.000000 4.080002</td> </tr> <tr> <td>Total Num of Atoms:</td> <td>71</td> </tr> <tr> <td>Center Area of Lattice:</td> <td>8538.804903</td> </tr> </tbody> </table>	Properties	Value	VectorA (xyz)	16.933671 0.000000 0.000000	VectorB (xyz)	0.000000 16.933671 0.000000	VectorC (xyz)	0.000000 0.000000 29.777955	VectorC(L)(xyz)	0.000000 0.000000 4.080002	VectorC(R)(xyz)	0.000000 0.000000 4.080002	Total Num of Atoms:	71	Center Area of Lattice:	8538.804903	Properties Atom <table border="1"> <thead> <tr> <th>Properties</th> <th>Value</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>ElementSymbol</td> <td>Au</td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>8.46683530</td> </tr> <tr> <td>Y</td> <td>6.42683470</td> </tr> <tr> <td>Z</td> <td>7.14000350</td> </tr> </tbody> </table>	Properties	Value	ElementSymbol	Au	X	8.46683530	Y	6.42683470	Z	7.14000350
Properties	Value																										
VectorA (xyz)	16.933671 0.000000 0.000000																										
VectorB (xyz)	0.000000 16.933671 0.000000																										
VectorC (xyz)	0.000000 0.000000 29.777955																										
VectorC(L)(xyz)	0.000000 0.000000 4.080002																										
VectorC(R)(xyz)	0.000000 0.000000 4.080002																										
Total Num of Atoms:	71																										
Center Area of Lattice:	8538.804903																										
Properties	Value																										
ElementSymbol	Au																										
X	8.46683530																										
Y	6.42683470																										
Z	7.14000350																										
图 4.13: 结构的系统信息	图 4.14: 结构的原子信息																										

4.6 计算任务监控管理区域 (Job Manager)

由图 4.15 可知计算任务监控管理区域含有 5 个模块，其功能描述如下所示。当任务处于排队中、计算中和计算完成时，*Status* 分别为 Queued、Running、Completed。计算完成后，部分计算结果会自动拉回本地，若需要更多计算结果可点击下载按钮进行下载回传。



The screenshot shows the Device Studio Job Manager interface. At the top, there are two status indicators: "sftp log in successfully" and "shell log in successfully". Below is a table with columns: Description, Script, Commit Status, Status, Actions, and Process. The table contains five rows of task information. The "Actions" column includes icons for download (7), refresh (8), and delete (9). The "Process" column includes icons for download (1), refresh (2), and delete (3). The "Status" column indicates the task status: Completed (green) for most, and Queued (yellow) for one.

Description	Script	Commit Status	Status	Actions	Process
Si_Copy/DS-PAW-ES	C:/Users/LuFeifei/Documents/DeviceStudioProjects/Untitled14/Si_Copy/DS-PAW-ES/scf.in	100%	Completed	7	1
Si_Copy/DS-PAW-ES	C:/Users/LuFeifei/Documents/DeviceStudioProjects/Untitled14/Si_Copy/DS-PAW-ES/band.in	100%	Completed	8	2
Si	C:/Users/LuFeifei/Documents/DeviceStudioProjects/Untitled14/Si/Rescu-Crystal/scf.input	100%	Completed	9	3
Si	C:/Users/LuFeifei/Documents/DeviceStudioProjects/Untitled14/Si/Rescu-Crystal/BandStructure.input	100%	Completed		
Si/DS-PAW-ES	C:/Users/LuFeifei/Documents/DeviceStudioProjects/Untitled14/Si/DS-PAW-ES/scf.in	100%	Queued	8	

图 4.15: 计算任务监控管理区域

- *Description* : 结构名称。
- *Script* : 任务输入文件的位置。
- *Commit Status* : 任务文件传输进度。
- *Status* : 任务的计算状态。
- *Actions* : 任务的计算操作。
- *Process* : 查看任务计算日志文件，通过日志文件可判断任务是否计算完成。

计算任务监控管理区域 (*Job Manager*) 各图标功能如下表格所示：

标号	图标	图标英文名称	功能描述
1		/	点击则进入设置 Xshell 的 exe 文件目录
2		Open Win-SCP	点击则通过 WinSCP 连接当前超算服务器, 如 图 8.31
3		Open PuTTY	点击则通过 PuTTY 连接当前超算服务器, 如 图 8.30
4		Reset IP	点击则进去 MachineOptions 界面, 在该界面中可选择本地或超算服务器, 亦可自定义连接服务器。连接服务器操作可参考 <i>Nanodcal 连接服务器</i> 节内容
5		Reload to server	重新连接服务器
6		refresh	刷新, 点击则刷新计算任务监控管理区域状态
7		Download	下载, 点击则进入计算结果下载界面如 图 8.29 所示
8		Cancel	取消, 点击则取消计算任务
9		Inspect simulation data in real time	点击则可实时查看计算结果的日志文件

4.7 个人中心 (Personal Center)

点击 图 4.16 中标号 ① 则进入 Device Studio 的个人中心 (*Personal Center*) , 个人中心分为 资源概览、软件授权和 登录记录三部分, 分别如 图 4.16、图 4.17、图 4.18 所示。

1. 个人中心的 资源概览如 图 4.16 所示, 在该界面中可查看到 当前超算分区、可用算力和 云储存可用空间, 对图中各标号功能进行详细说明如下;
 - a) 点击 图 4.16 中 ①, 则进入 Device Studio 的个人中心;
 - b) 点击 图 4.16 中 ②, 则进入 鸿之微云社区如 图 4.19 所示;
 - c) 点击 图 4.16 中 ③ 下拉按钮可选择超算服务器如 图 4.20 所示;

- d) 点击图 4.16 中 ④ 超算负载查询，则可进入鸿之微云 超算资源概览如 图 4.21 所示；
- e) 点击图 4.16 中 ⑤，则可查看对应产品或活动详情；
- f) 点击图 4.16 中 ⑥ 退出登录，即可退出登录，回到 Device Studio 初始登录界面如 图 3.1 所示。



图 4.16: 资源概览

2. 个人中心的 软件授权 如 图 4.17 所示，在该界面中可查看到 已到期 和 未到期 的软件情况，对图中各标号功能进行详细说明如下；

- a) 点击 图 4.17 中 ① (即图中各软件, 如 Device Studio), 则可查看 Device Studio 的使用教程;
- b) 点击 图 4.17 中 ②, 则进入鸿之微云 软件产品和授权如 图 4.22 所示。

备注

如点击 图 4.17 中 ① (即图中各软件), 没有链接到对应软件的使用教程, 无任何响应, 则表示该软件在鸿之微云上无使用教程或链接失效, 具体情况可咨询鸿之微的解决方案中心团队。若想查询各软件的使用教程, 可在 鸿之微云 网站上查询。



图 4.17: 软件授权

3. 个人中心的 登录记录如 图 4.18 所示，在该界面中可查看到 登录情况，点击 图 4.18 中 ① 记录详情，则可进入鸿之微云 登录记录如 图 4.23 所示。



图 4.18: 登录记录

Device Studio 使用教程



图 4.19: 鸿之微云社区



图 4.20: 在个人中心 选择超算服务器



图 4.21: 鸿之微云 超算资源概览

The screenshot shows a software catalog titled "软件产品和授权" (Software Products and Licensing). It lists various software packages along with their types, latest versions, license types, and license expiration dates. The software includes Device Studio, Nanodal, DS-PAW, Phase Lab, BDF, RESCU, Nanoskim, BFD, Symucal, MOMAP, TOPS, OVITO, NanoDesigner, and MeQLab. The interface includes a search bar, filter options, and a sidebar for navigation.

软件	软件类型	最新版本	license	license有效期	操作
Device Studio	多尺度材料设计与仿真平台	2022B	超算版	2023-12-14	
Nanodal	第一性原理量子输运计算软件	2022A	超算版	2023-08-30	
DS-PAW	第一性原理平面波计算软件	2023A	超算版	2024-04-13	
Phase Lab	相图相场计算软件	2023A	超算版	2023-02-09	
BDF	量子化学计算软件	2023A	超算版	2024-02-22	
RESCU	第一性原理大体系 KS-DFT 计算软件	2022A	超算版	2023-08-30	
Nanoskim	蒙特卡洛模型量子输运计算软件	2022A	超算版	2023-08-30	
BFD	电芯正向设计软件	2022A	超算版	2023-08-30	
Symucal	高通合金多尺度集成计算系统	2022A	单机版	2023-08-30	
MOMAP	分子发光与磁共振性质计算软件	2022A	超算版	2023-08-30	
TOPS	聚合物理论计算软件	2022A	超算版	2023-08-30	
OVITO	可视化分析软件	2022A	单机版	2023-08-30	
NanoDesigner	概化电子-全定制电路设计平台	2023	超算版	2023-05-01	
MeQLab	概化电子-封装连接模平台	2023	超算版	2023-05-01	

图 4.22: 鸿之微云 软件产品和授权

The screenshot shows a log-in history section titled "登录记录" (Login History). It displays a list of log-in events with details such as location, device, and timestamp. The interface includes a search bar and a pagination control at the bottom.

登录地点	登录端	时间
上海 上海	DeviceStudio	2023-04-18 17:13:26
上海 上海	DeviceStudio	2023-04-18 17:07:21
上海 上海	网页端登录	2023-04-18 17:04:29
上海 上海	DeviceStudio	2023-04-18 16:54:39
上海 上海	网页端登录	2023-04-18 16:53:03
上海 上海	网页端登录	2023-04-18 16:34:59
上海 上海	网页端登录	2023-04-18 16:34:47
上海 上海	DeviceStudio	2023-04-18 16:29:14
上海 上海	DeviceStudio	2023-04-18 16:27:20
上海 上海	DeviceStudio	2023-04-17 18:01:11

图 4.23: 鸿之微云 登录记录



CHAPTER 5

结构建模

Device Studio 支持从本地或在线数据库导入结构，或在导入结构的基础上搭建新的结构，支持创建各种分子、晶体和 LCR/LR/FCB/FB/BCT/BT 等典型的器件结构。Device Studio 可根据用户提出的匹配精度要求，自动劈裂晶面，并进行匹配搭建器件结构，可以自动匹配搭建多层膜器件或晶体结构。能够生成 Nanoribbon、Nanotube、团簇、晶界、随机掺杂等特殊结构。

5.1 支持的文件类型

Device Studio 支持的文件类型有 .hzw、.xyz、.cif、.dsxml、.pdb、.mol、.xsd、scf.input、.py、POSCAR、CONTCAR 等，其中 .hzw 为 Device Studio 特有文件格式。Device Studio 可根据用户需要导出 .hzw、.xyz 格式的结构文件，并可将结构文件的 3D 可视化结果以 .png 图片格式导出；对于晶体结构，可识别其空间群结构信息，并导出 .cif 格式的结构文件。

5.2 导入结构

导入结构前需要创建新项目或打开已建项目，在存在项目的基础上导入结构。创建项目操作为：双击 Device Studio 图标快捷方式登录并启动软件，其图形界面如 图 5.1 所示，根据界面提示选择创建一个新的项目（*Create a new Project*）或打开一个已经存在的项目（*Open an existing Project*）的按钮，选中之后点击界面中的 *OK* 按钮即可。若选择创建一个新的项目，用户可根据需要给该项目命名，如本项目命名为 Device Studio。

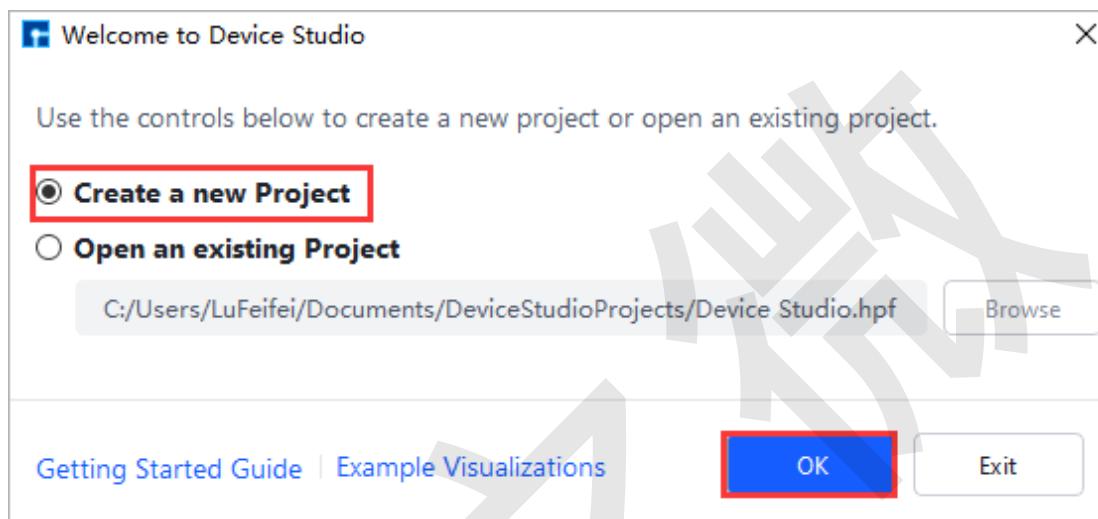


图 5.1: 启动软件后选择创建或打开项目的图形界面

5.2.1 本地数据库导入结构

Device Studio 自带本地数据库，该数据库包含 500 多种常用或热门材料，后期将会不断更新壮大数据库，若用户需大量级数据库，可关注鸿之微软件 FIRST，该软件内置了三大数据库 QuickMol、QuickCrystal 和 ACED，材料条目超过 **1000** 万。用户可通过本地数据库导入结构，如导入 ZnO-MgO-Si 器件结构，其导入结构的操作如 图 5.2 红色部分所示：*File → Import → Import Local*，之后弹出图形界面如 图 5.3 所示，根据界面提示在本地数据库中找到 ZnO-MgO-Si 所在的文件夹，选中 ZnO-MgO-Si 结构文件，点击 图 5.3 中的打开按钮即可导入 ZnO-MgO-Si 结构，导入 ZnO-MgO-Si 结构后的图形界面如 图 5.4 所示，其中 ZnO-MgO-Si.hzw 结构文件在 Project Explorer（项目管理）区域，结构的 3D 视图显示在 3D Viewer（3D 显示）区域。

备注

若不想通过数据库导入结构，知道结构文件的位置，如 ZnO-MgO-Si 结构，直接鼠标左击选中该结构文件，拖动到 Device Studio 的 Project Explorer（项目管理）区域即可导入

该结构，同时其结构的 3D 视图显示在 3D Viewer（3D 显示）区域。

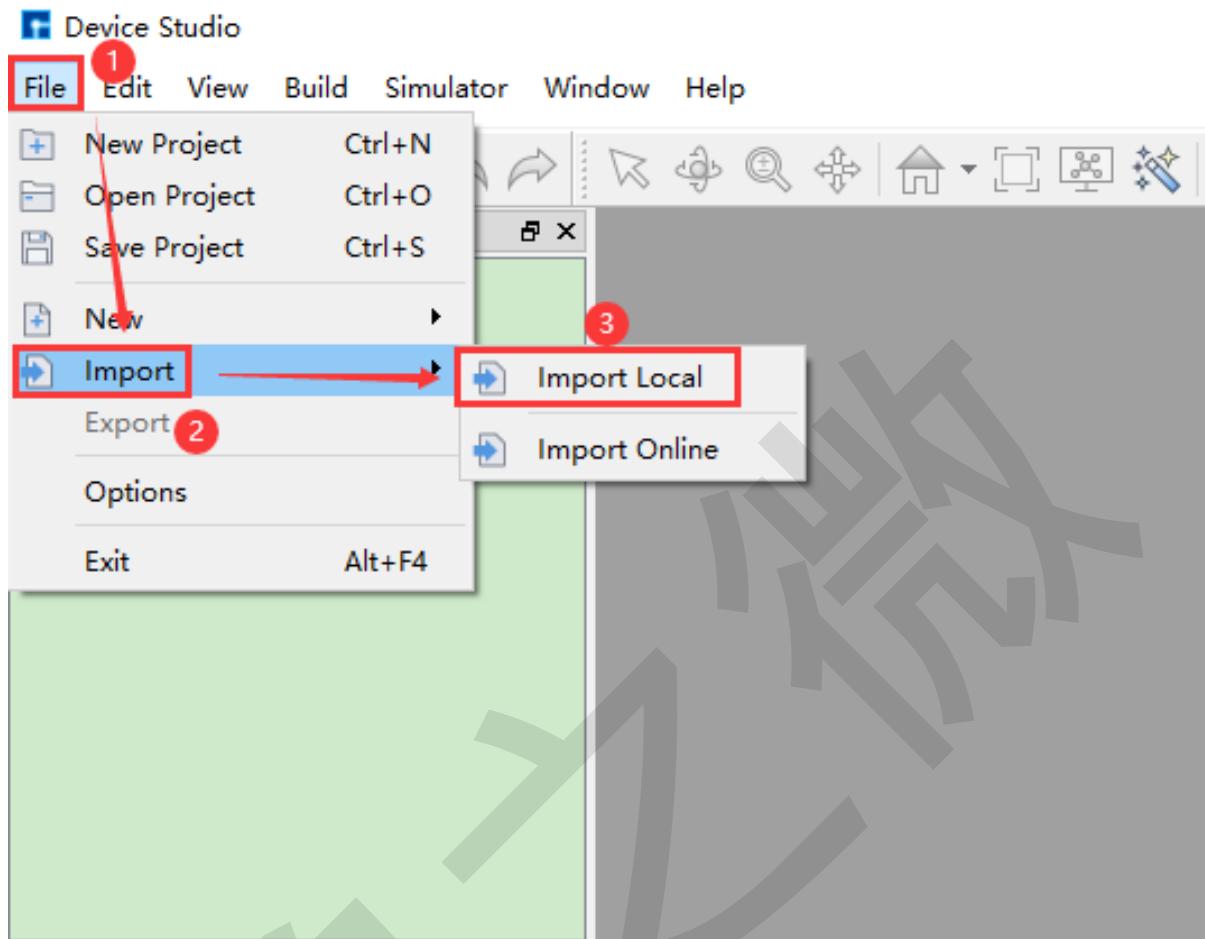


图 5.2: 弹出本地数据库导入结构操作界面

Device Studio 使用教程

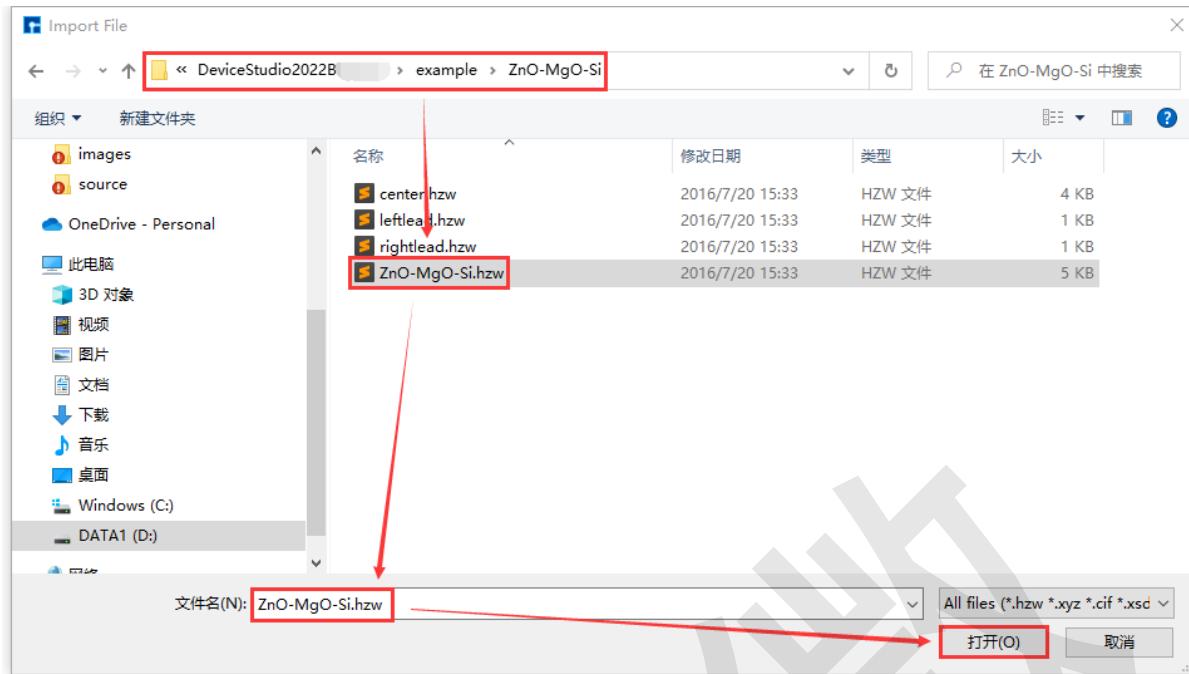


图 5.3: 选中 ZnO-MgO-Si 结构文件界面

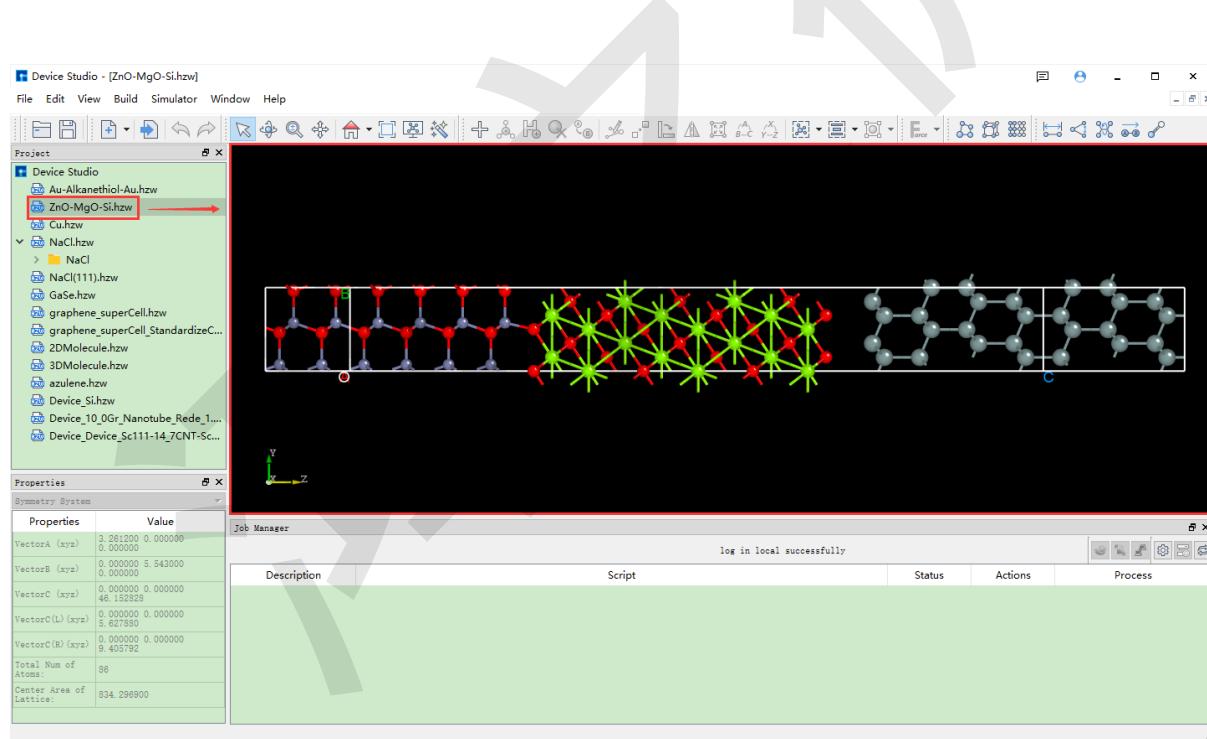


图 5.4: 导入 ZnO-MgO-Si 结构后的 Device Studio 界面

5.2.2 在线数据库导入结构

Device Studio 支持连接在线数据库 Materials Project, 如 图 5.5 红色部分所示: 点击 *File* → *Import* → *Import Online* 则弹出从 Materials Project 数据库导入结构的界面, 在该界面中用户可通过输入元素、化学式或 mp 序号的方式来搜索原子结构。

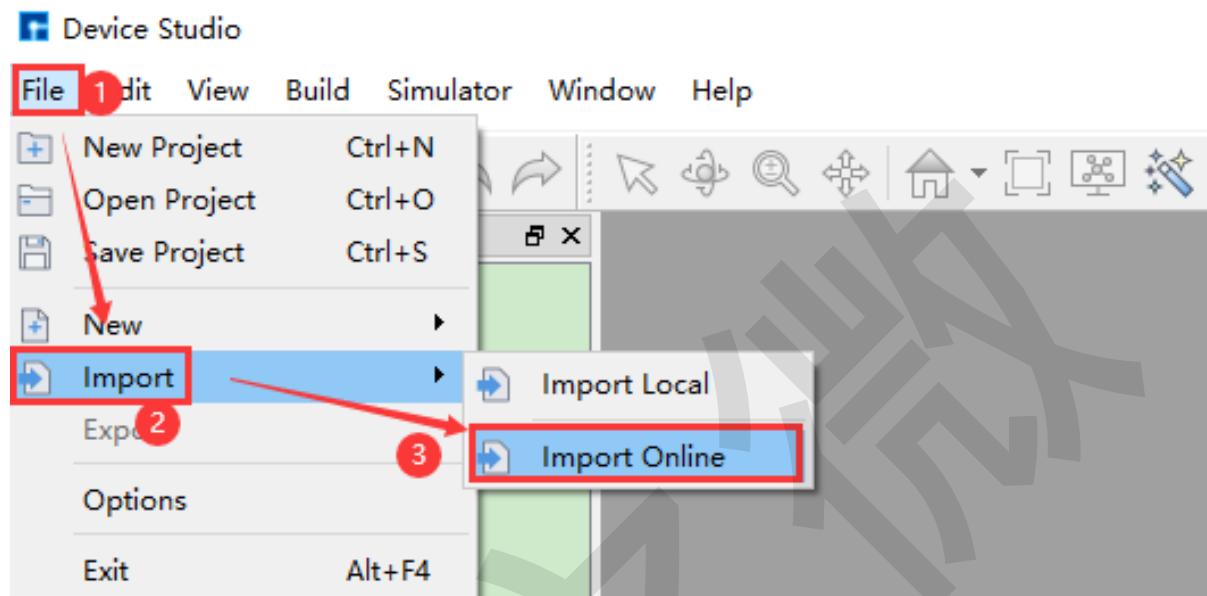


图 5.5: 弹出在线数据库导入结构操作界面

如 图 5.6 所示, 通过输入元素来搜索结构, 输入 Si 元素, 点击 *Search* 按钮或点击键盘 *Enter* 键, 则出现很多只含有 Si 元素的原子结构, 如 Si40 结构, 左边为其详细的化学式, 右边为其对应的空间群结构, 选中之后可在界面左下角红色框区域查看该结构的化学式、空间群对称信息以及原子坐标等详细信息; 可在界面右下角红色框区域查看到该结构的 3D 显示。对于结构的 3D 显示, 可通过滚动鼠标中键将 3D 显示结果放大或缩小; 可鼠标右键选中该结构, 通过拖动鼠标来将 3D 视图显示结果进行旋转, 确定好搜索的原子结构后点击界面中的 *Add* 按钮则可将该原子结构导入, 其结构文件保存在软件的项目管理区域 (Project Explorer), 同时可在 3D 显示区域查看到该原子结构的 3D 视图, 通过在线数据库 Materials Project 导入 Si40 结构后的 Device Studio 界面如 图 5.7 所示。

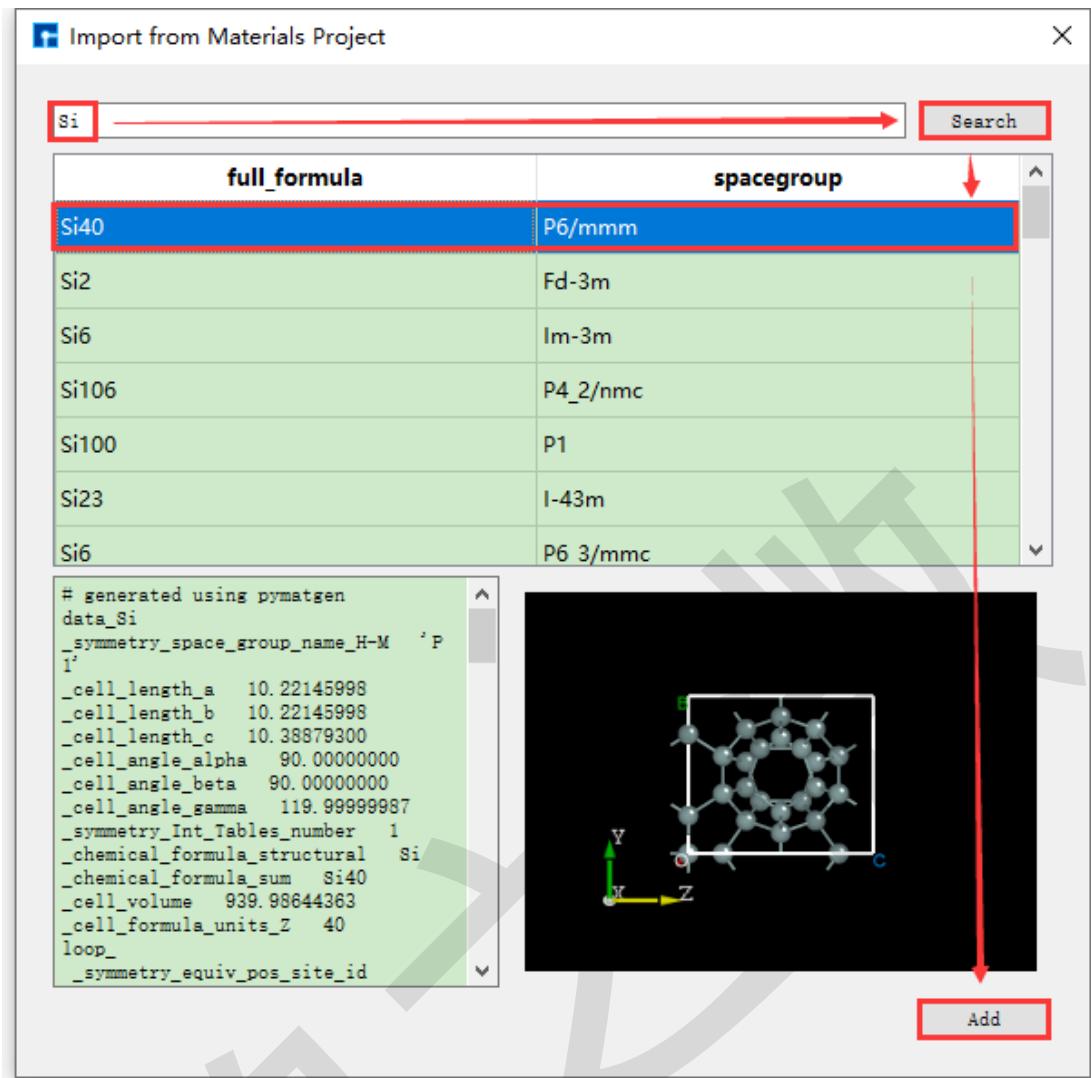


图 5.6: Materials Project 元素搜索并导入结构的操作界面

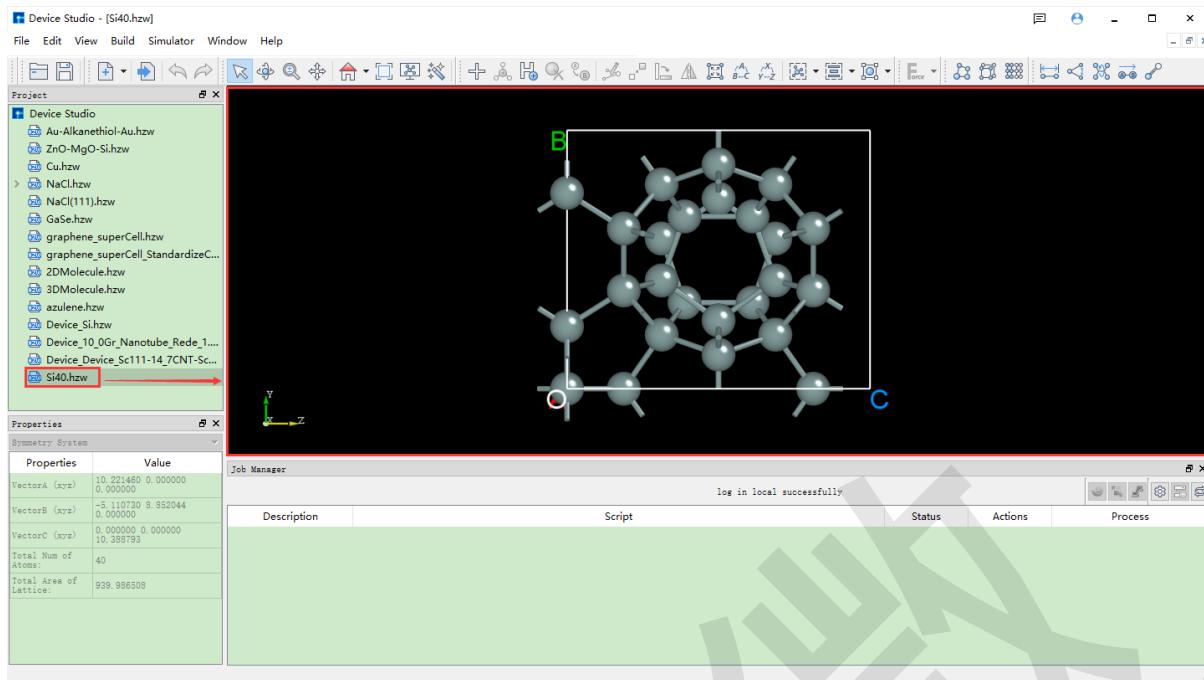


图 5.7: 导入 Si40 结构后的 Device Studio 界面

通过化学式、mp 序号来搜索并导入结构的操作与通过元素搜索并导入结构的操作一致，其操作界面分别如 图 5.8 、图 5.9 所示。

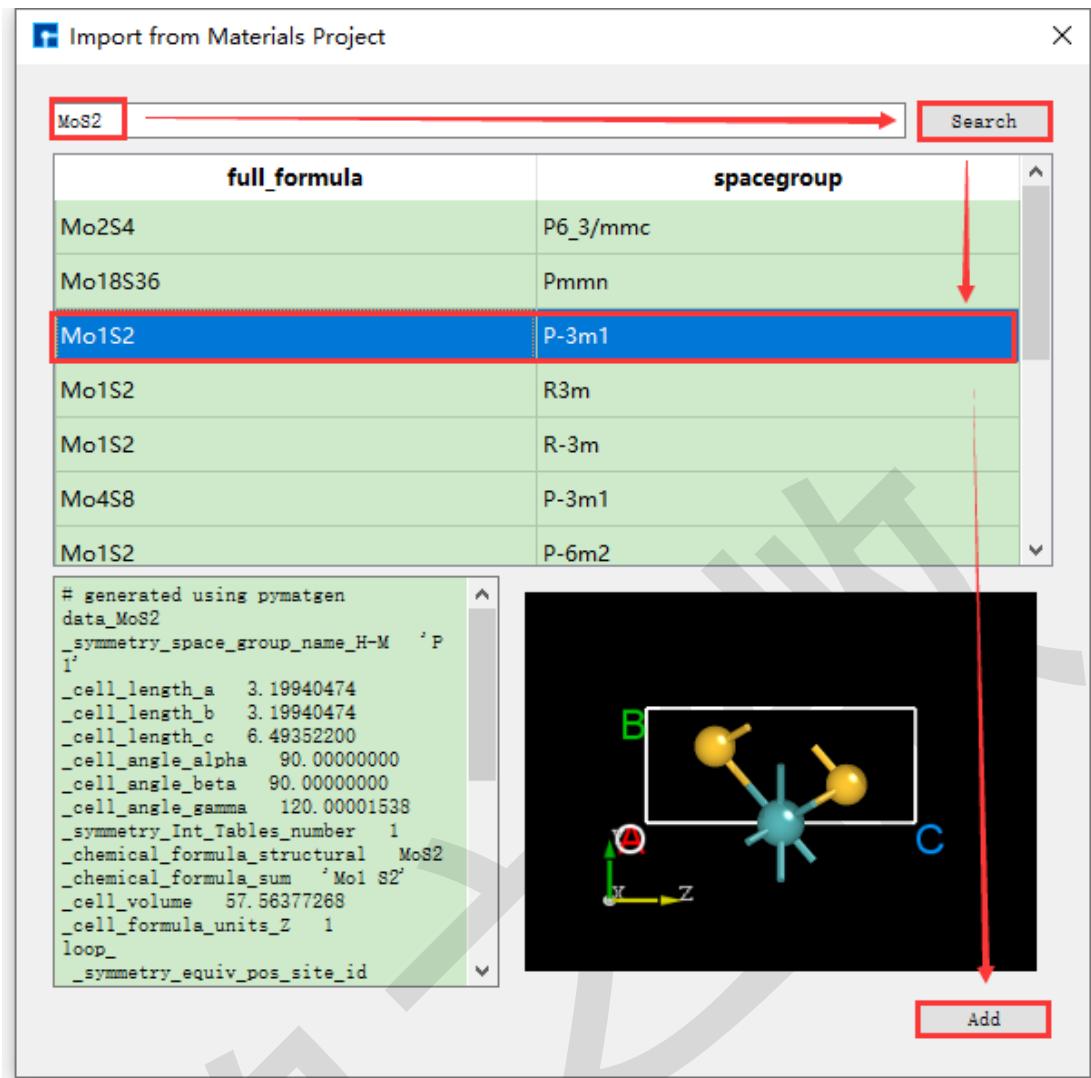


图 5.8: Materials Project 化学式搜索并导入结构的操作界面

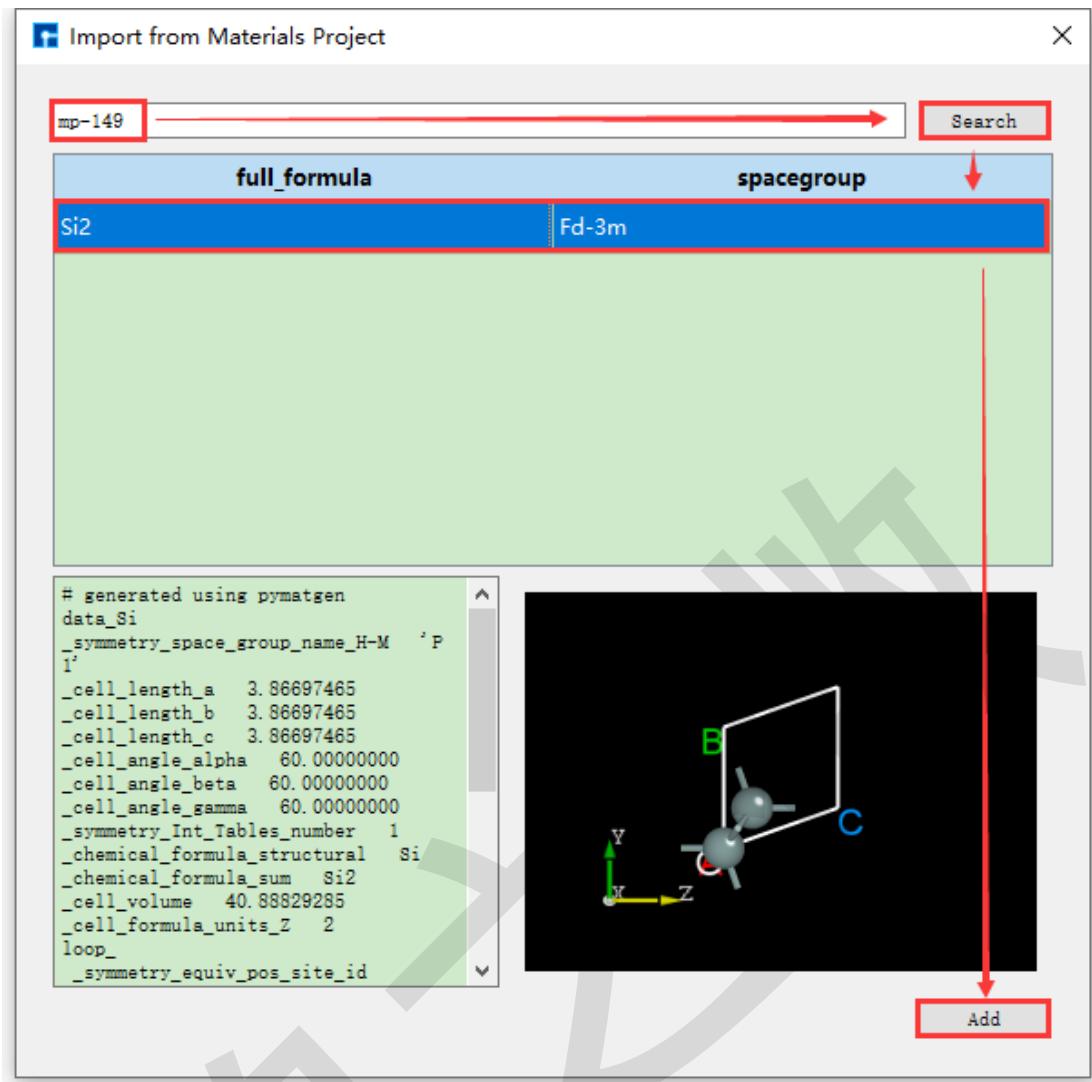


图 5.9: Materials Project mp 序号搜索并导入结构的操作界面

5.3 2D 分子建模

Device Studio 2022A 版新增 2D 分子建模功能，在 2D 分子建模的界面中，其工具栏包含绘制分子结构式的多种键和工具，包括化学键、环形模板、折叠链、船式结构、椅式结构、箭头、边框以及文本编辑工具等，用户可通过该功能快捷方便的绘制各种 2D 平面分子结构式和编写方程式，并支持将 2D 分子结构转化为 3D 分子结构。

Device Studio 具有对 2D 分子结构进行编辑的功能，用户可对分子结构进行旋转、修改键宽、键长、键位颜色、键位类型、键位属性转换、加氢、减氢、加电荷、减电荷等操作。

以搭建 3 个相连苯环的 2D 分子结构并将其转换为对应的 3D 分子结构为例，其搭建步骤如 图 5.10、图 5.11、图 5.12、图 5.13、图 5.14 所示。

5.3. 2D 分子建模

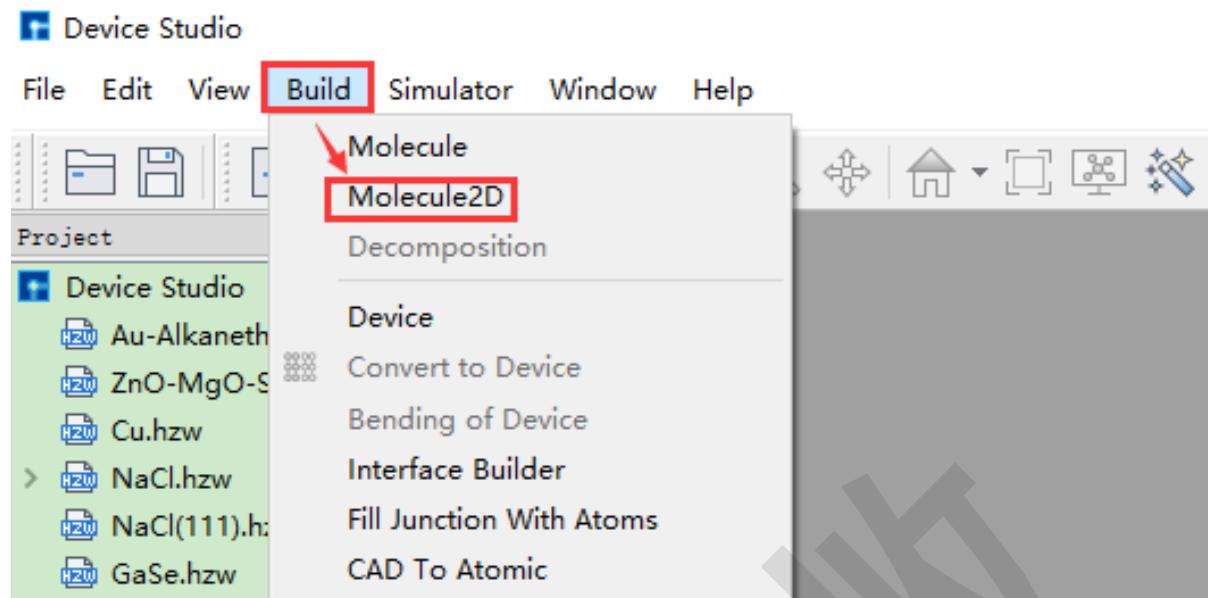


图 5.10: 弹出 2D 分子建模界面操作

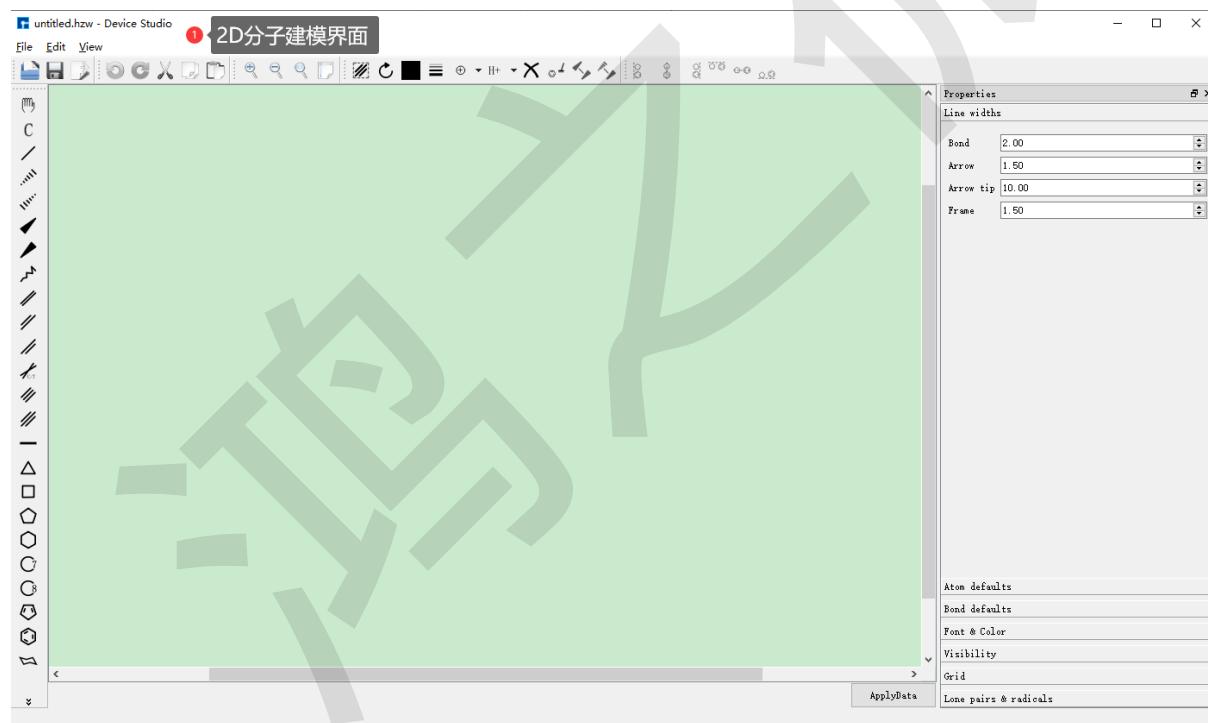


图 5.11: 2D 分子建模界面

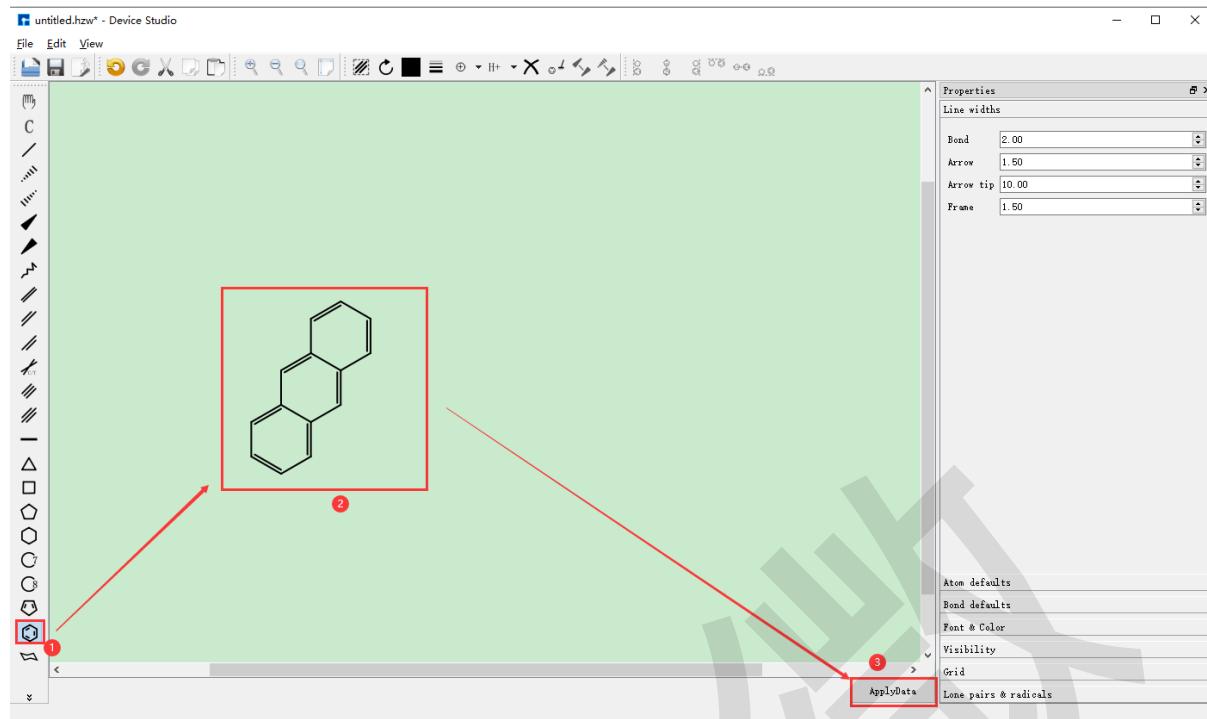


图 5.12: 搭建 2D 分子结构并转换为 3D 分子结构操作

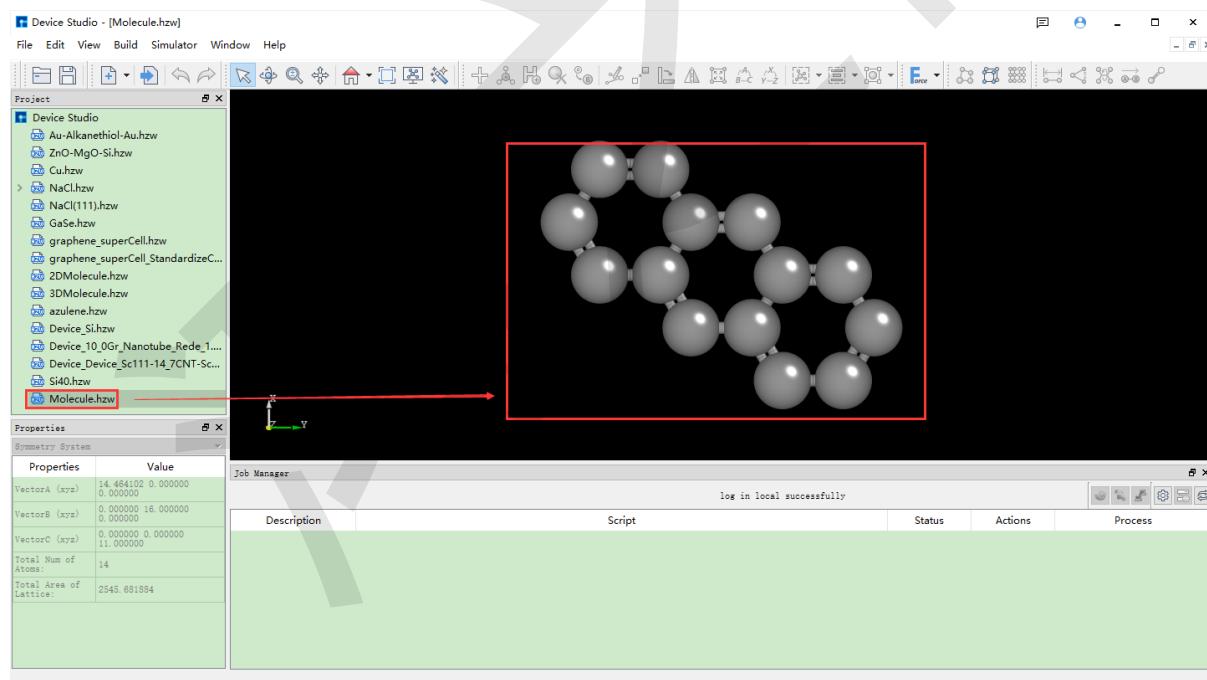


图 5.13: 2D 分子结构转换为 3D 分子结构后的 Device Studio 界面

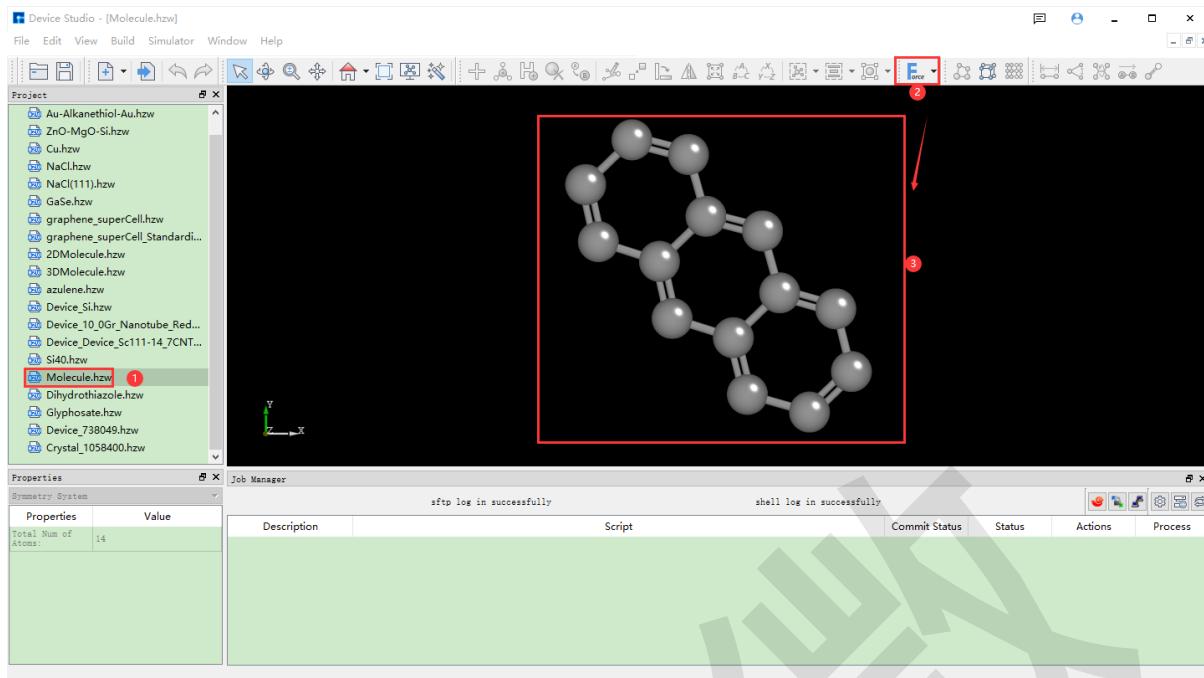


图 5.14: 优化转换后的 3D 分子结构操作

备注

图 5.14 中标号为 ② 的 *Minimize Structure* 为通过分子力场计算对分子结构进行结构优化，默认为 MMFF94，可通过点击下拉按钮选择合适的力场进行结构优化。

5.4 3D 分子建模

Device Studio 2022A 版新增 3D 分子建模功能，用户可通过该功能方便快捷的搭建 3D 分子结构，Device Studio 支持对 3D 分子结构进行编辑，并可查看分子结构的原子坐标和原子之间成键的详细信息，可对分子结构进行共键调整、原子夹角调整、二面角调整、加氢、平移、旋转、重命名、复制片段、增、删、改等一系列操作。Device Studio 搭建 3D 分子结构的操作界面如图 5.15、图 5.16、图 5.17、图 5.18、图 5.19 所示。

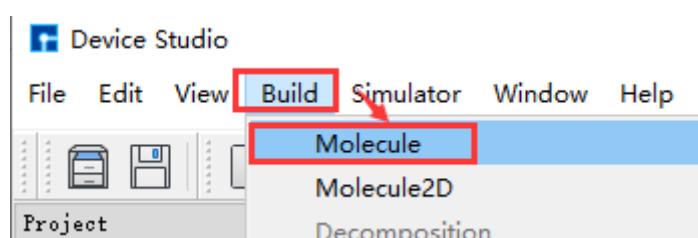


图 5.15: 弹出 3D 分子建模界面操作

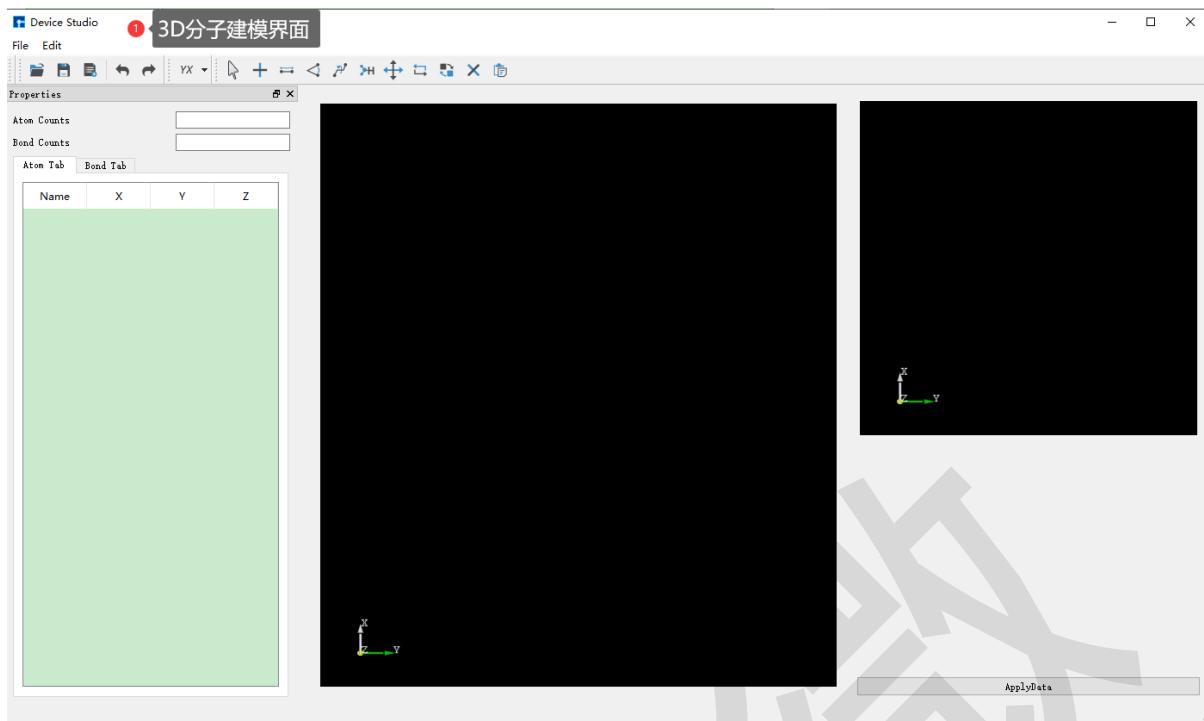


图 5.16: 3D 分子建模界面

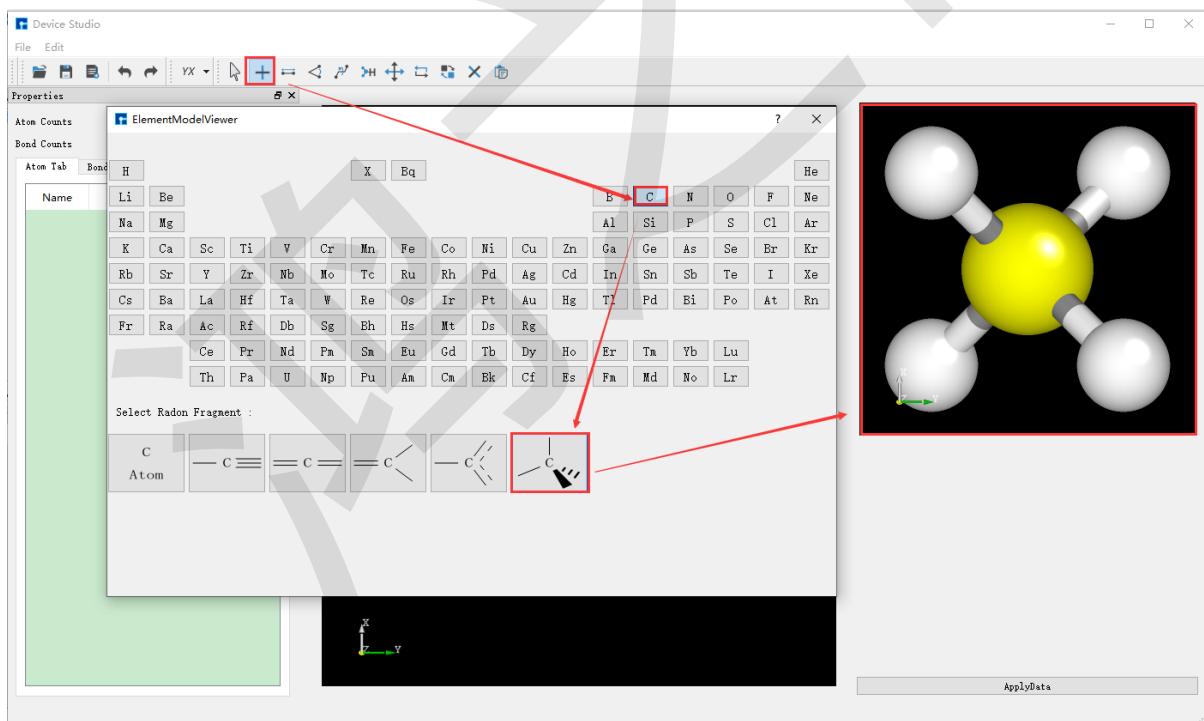


图 5.17: 搭建 3D 分子结构操作一

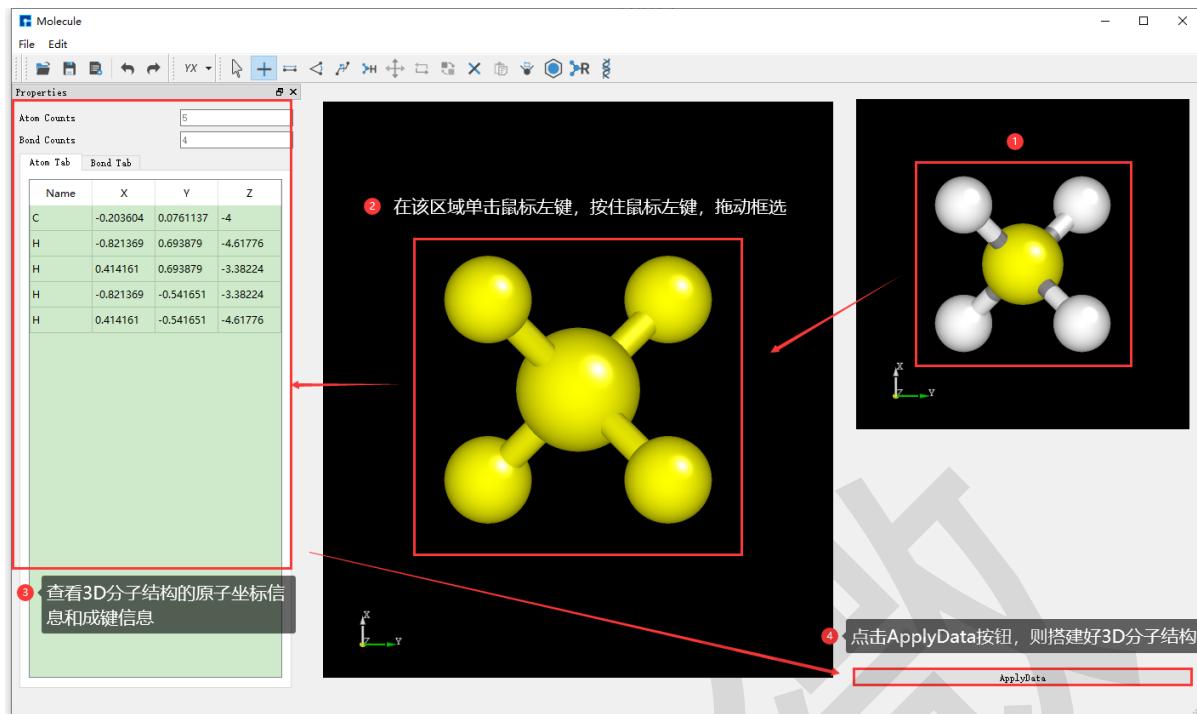


图 5.18: 搭建 3D 分子结构操作二

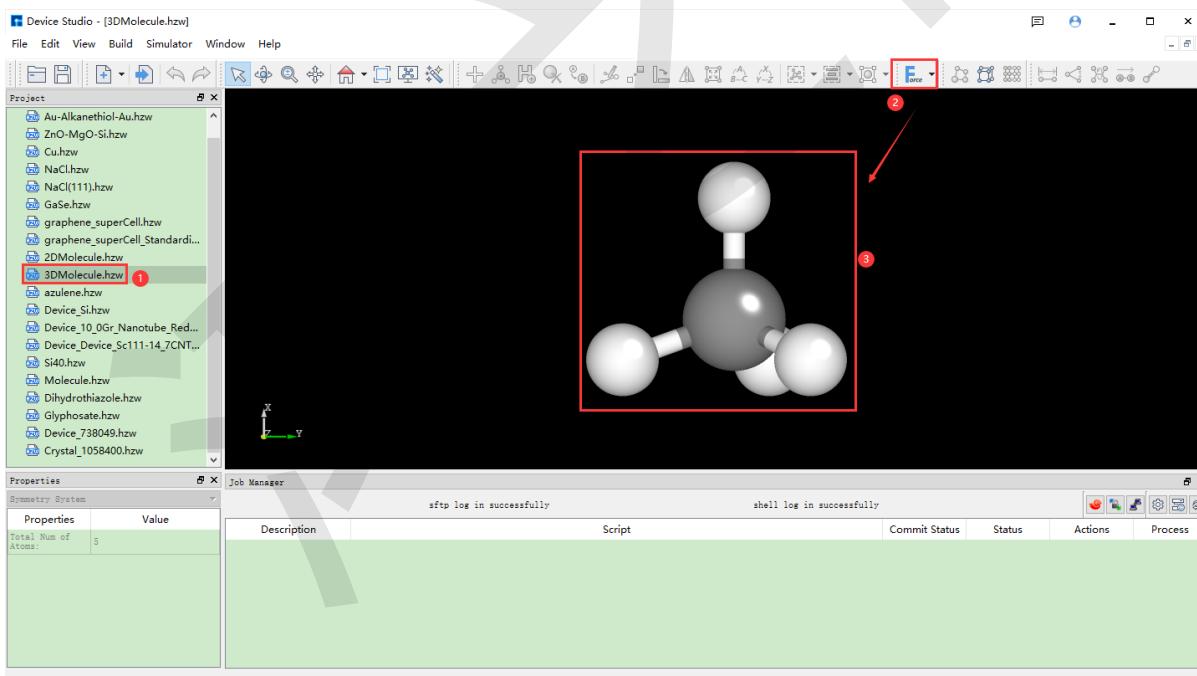


图 5.19: 优化搭建好的 3D 分子结构

5.5 晶体建模

对于晶体建模，用户可先在本地数据库或在线数据库搜索该结构是否存在，若存在，直接导入；若不存在，可自行搭建，或导入一个结构，在其基础上进行搭建，具体如何搭建晶体结构，用户可根据需要自行选择。

以搭建 NaCl 晶体结构为例，在 Device Studio 的图形界面中点击 *Build → Crystal*，弹出搭建晶体结构的界面如 图 5.20 所示。

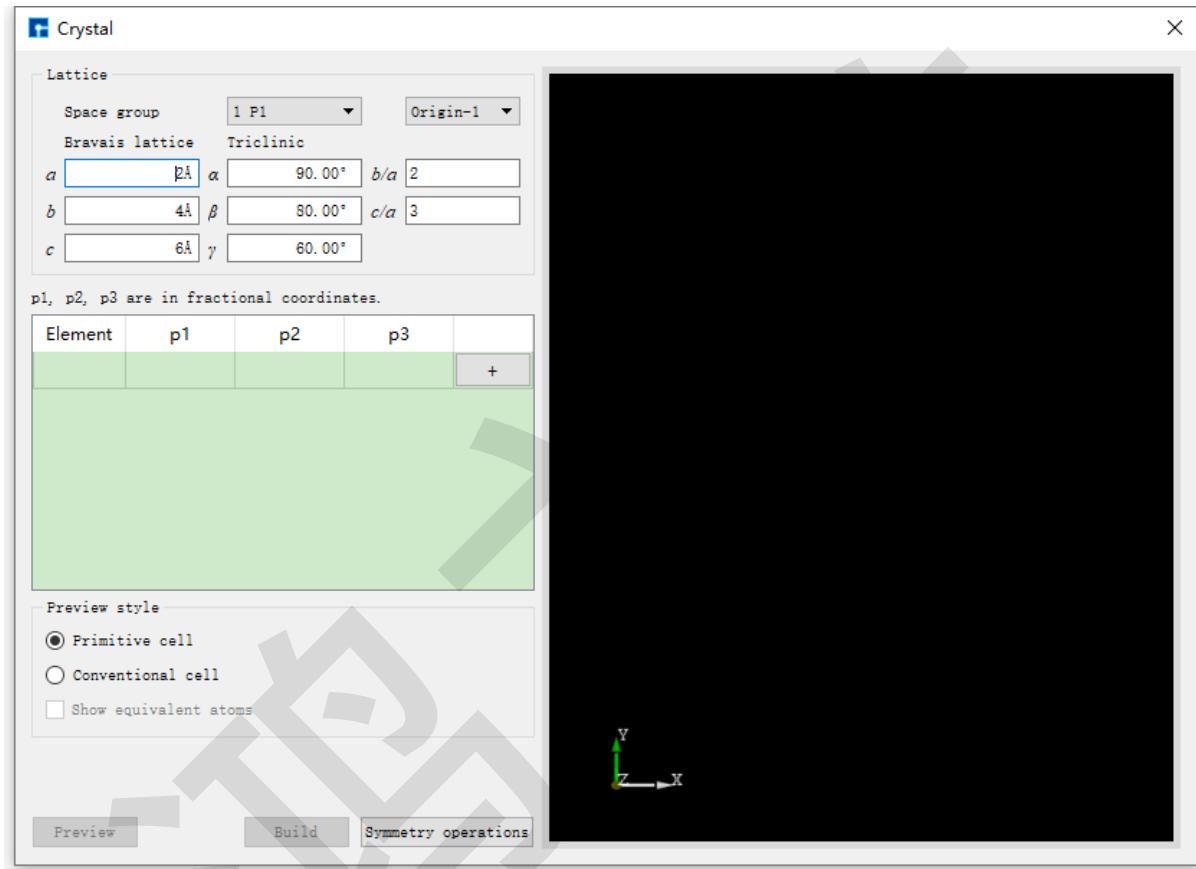


图 5.20: 搭建晶体结构界面

若不知道 NaCl 晶体的空间群信息，在如 图 5.20 所示的界面中搭建 NaCl 晶体结构，则可按照 图 5.21 红色框选部分及箭头指向所示，一步步填写或选中对应信息，点击 *Preview* 按钮在界面右侧区域预览所搭建的结构，该步骤主要用于检查搭建的结构是否正确，是否是所需结构，之后点击 *Build* 则搭建好 NaCl 晶体结构，其结构文件保存在软件的项目管理区域（Project Explorer），同时可在 3D 显示区域查看到该结构的 3D 视图；反之，若在预览过程中发现所搭建的结构不正确，则可在 图 5.20 所示界面中重新搭建。搭建结构过程中，用户可根据需要选择界面中的 *Preview style*，即选中 *Primitive cell* 或 *Conventional cell*；选择是否显示等价位置原子，即是否勾选 *Show equivalent atoms*。

NaCl 晶体结构的 p1、p2、p3 值如下表所示：

Element	p1	p2	p3
Na	0	0	0
Na	0.5	0.5	0
Na	0.5	0	0.5
Na	0	0.5	0.5
Cl	0.5	0	0
Cl	0	0.5	0
Cl	0	0	0.5
Cl	0.5	0.5	0.5

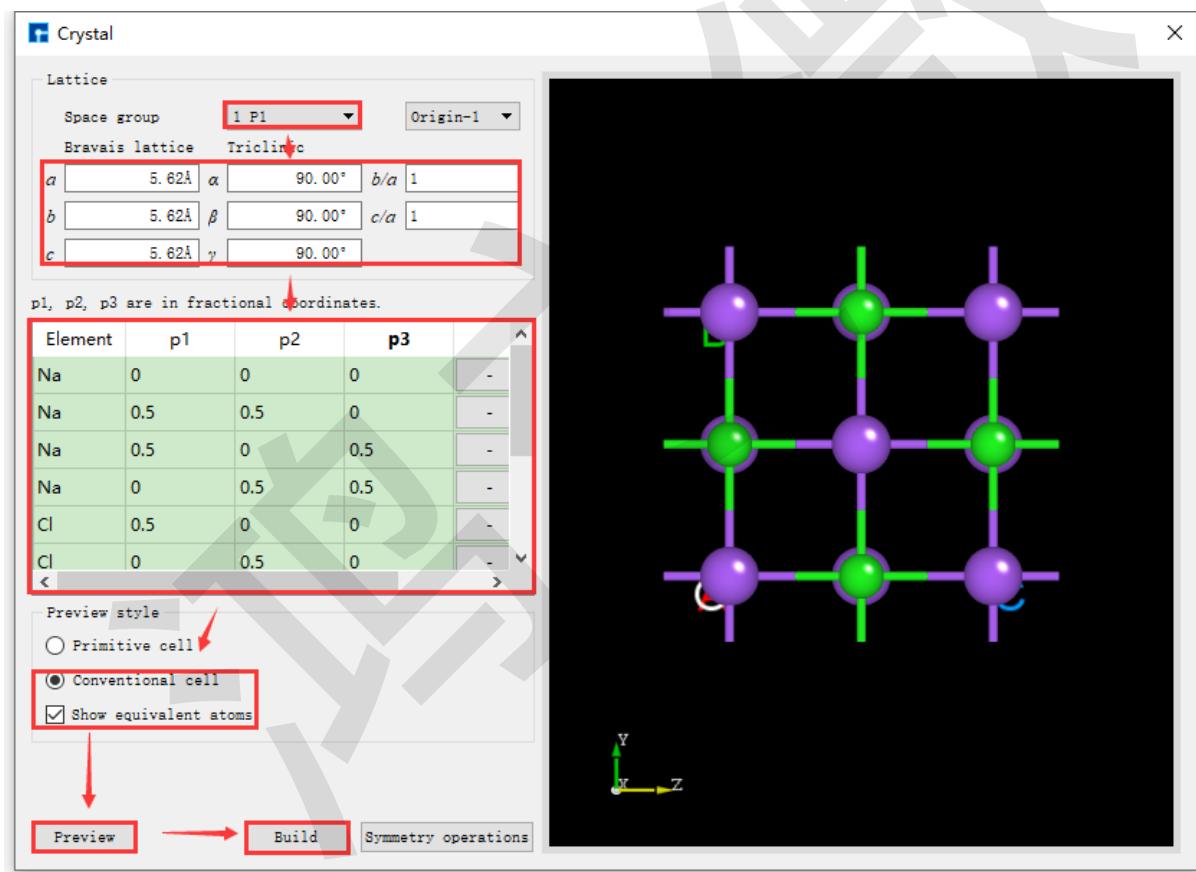


图 5.21: 无空间群信息直接搭建 NaCl 晶体操作界面

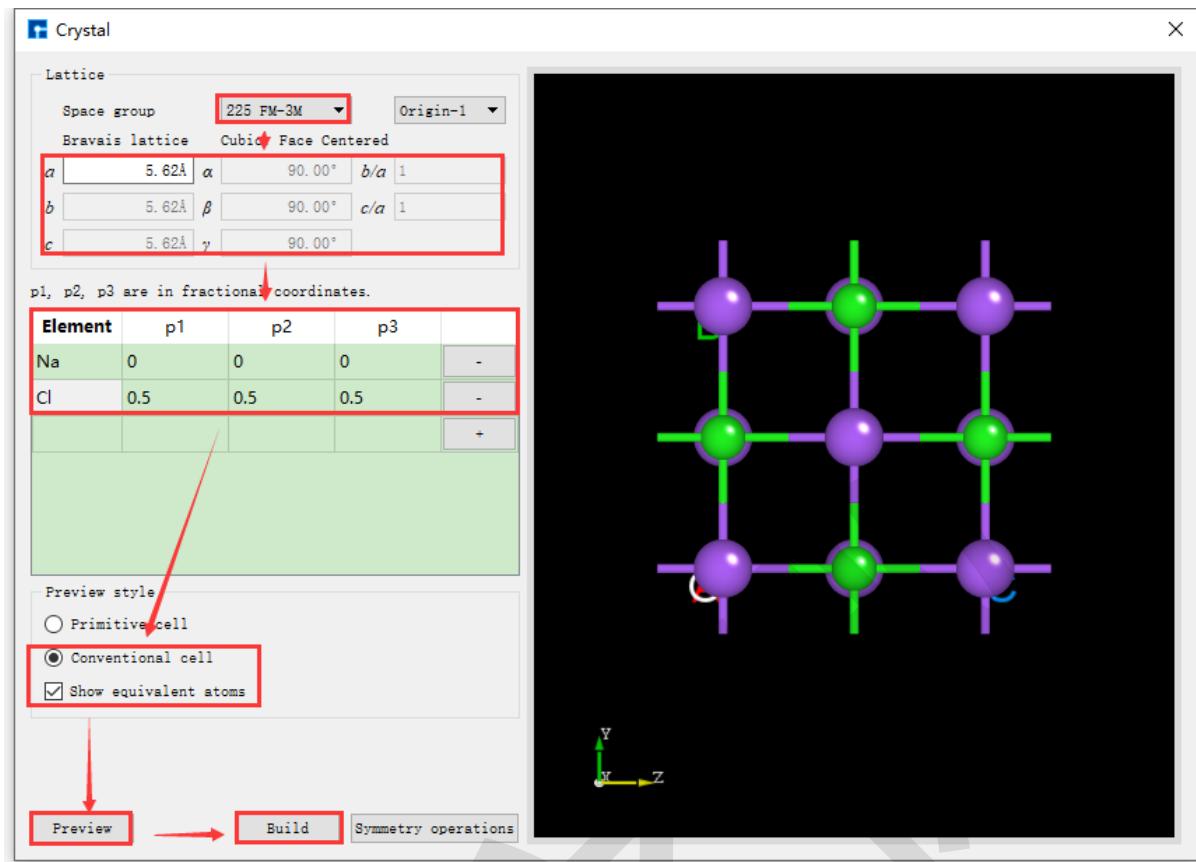


图 5.22: 根据空间群信息搭建 NaCl 晶体操作界面

若知道所搭结构的空间群信息，可更方便快捷的搭建结构，Device Studio 支持 261 种空间群（包含 230 种空间群和 31 种扩展子群）的选择。如 NaCl 晶体的空间群为 225 FM-3M，知道该信息，在如 图 5.20 所示的界面中搭建 NaCl 晶体，则可按照 图 5.22 红色框选部分及箭头指向所示填写对应信息进行搭建，其余操作与上述不知空间群信息一致，这里不做详细说明。对比 图 5.21 与 图 5.22 可知，知道空间群信息可以更简便的搭建晶体结构。

图 5.21 与 图 5.22 均为搭建 NaCl 晶体结构时，选择显示等价位置原子的结果，即勾选 *Show equivalent atoms*，若不勾选，其操作界面如 图 5.23 所示，点击界面中的 *Build* 按钮则搭建好 NaCl 晶体结构，其结构文件保存在软件的项目管理区域，同时其结构的 3D 视图显示在 3D 显示区域，搭建好 NaCl 晶体结构的界面如 图 5.24 所示。

Device Studio 使用教程

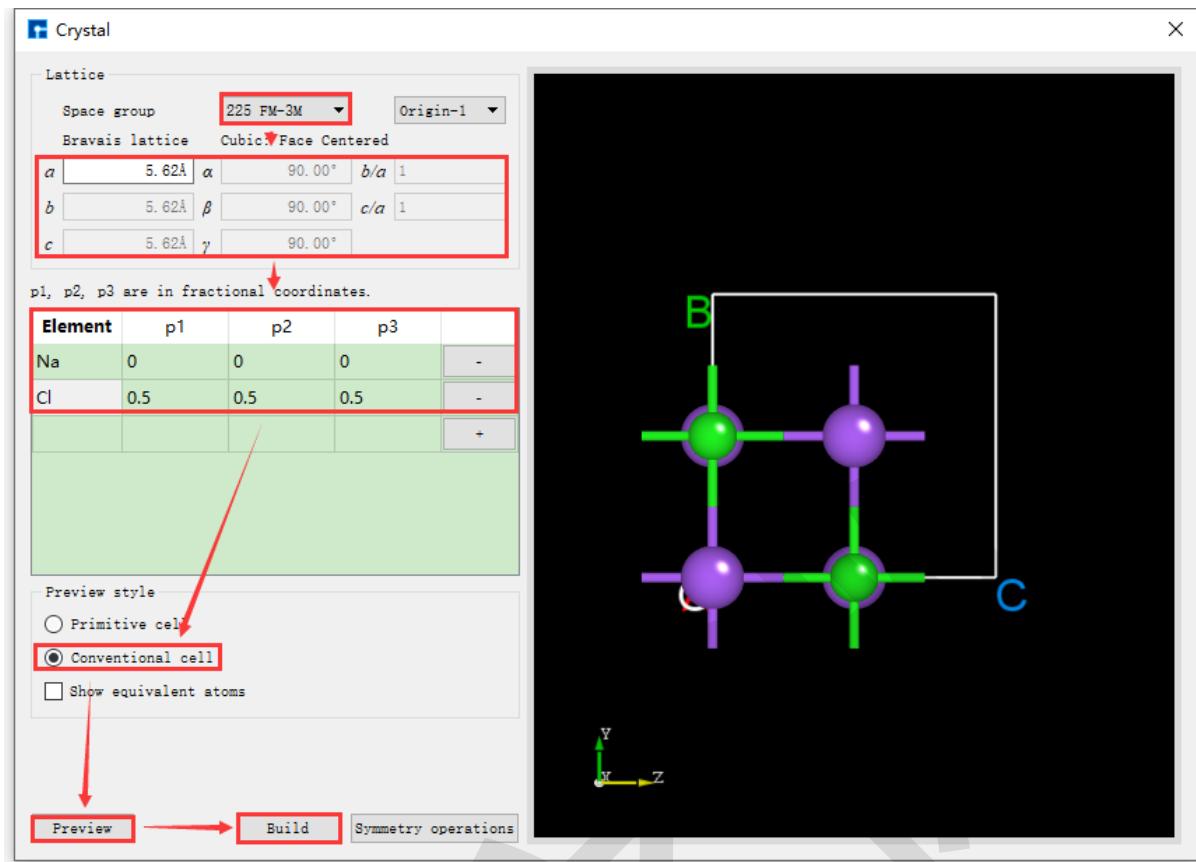


图 5.23: 不显示等价位置原子搭建 NaCl 晶体操作界面

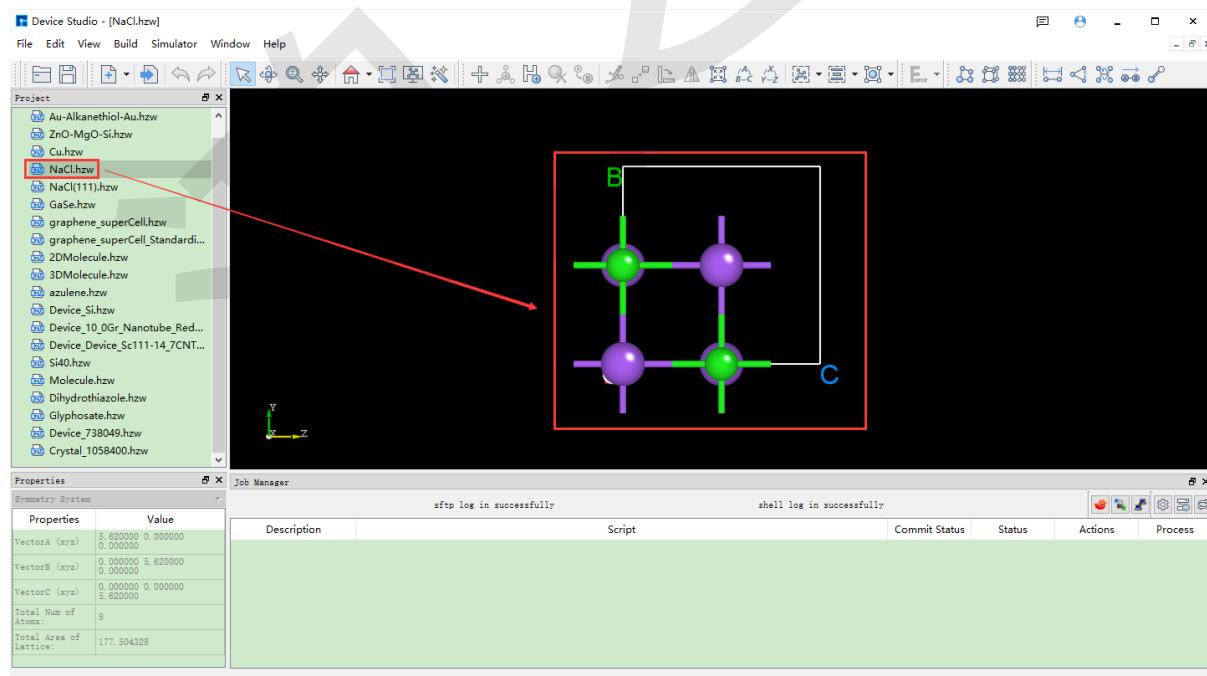


图 5.24: 搭建好 NaCl 晶体结构的 Device Studio 界面

5.6 晶体结构的切面/切片

晶体结构的切面/切片，该功能仅在存在晶体结构的基础上进行。以在[晶体建模](#)章节中搭建的 NaCl 晶体结构的基础上进行切面/切片搭建 Thickness 为 9.73 埃的 NaCl (1 1 1) 晶体结构为例，在如图 5.24 所示界面中点击 *Build → Surface/Slab*，弹出将 NaCl 晶体结构进行切面/切片的界面如图 5.25 所示。

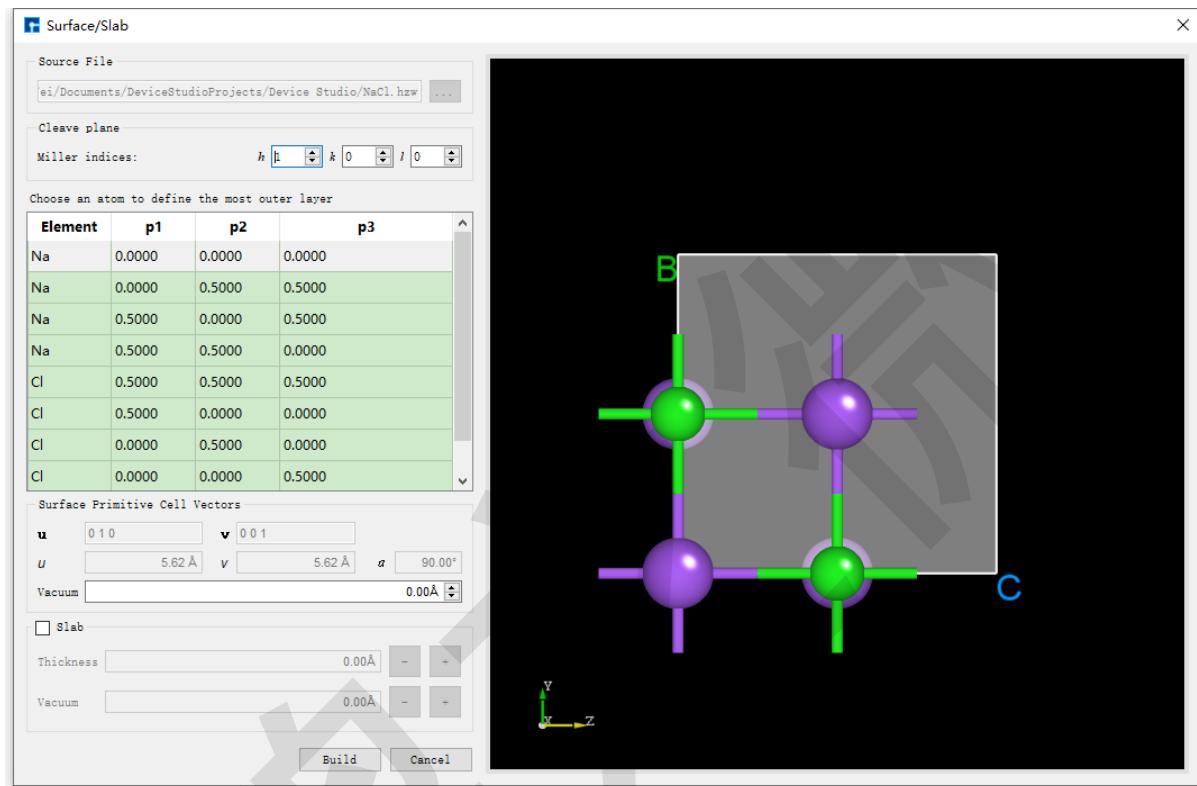


图 5.25: 将 NaCl 晶体结构进行切面/切片的界面

根据需要按照图 5.26 中红色框选部分及箭头指向所示，在图 5.25 所示界面中设置 Miller 指数 (1 1 1)，并在下拉表格中选定 Na (0.5000 0.5000 0.0000) 原子为切面的起始原子，勾选 *Slab*，点击 Thickness 后的 + 号 5 次，将 Thickness 设置为 9.73 埃，同时可在界面右侧区域预览进行切面/切片的结构，之后点击 *Build* 则搭建好 Thickness 为 9.73 埃的 NaCl (1 1 1) 晶体结构，其结构文件挂载在 Device Studio 的项目管理区域，3D 视图显示在 Device Studio 的 3D 显示区域，搭建好 Thickness 为 9.73 埃的 NaCl (1 1 1) 晶体结构的 Device Studio 界面如图 5.27 所示。

Device Studio 使用教程

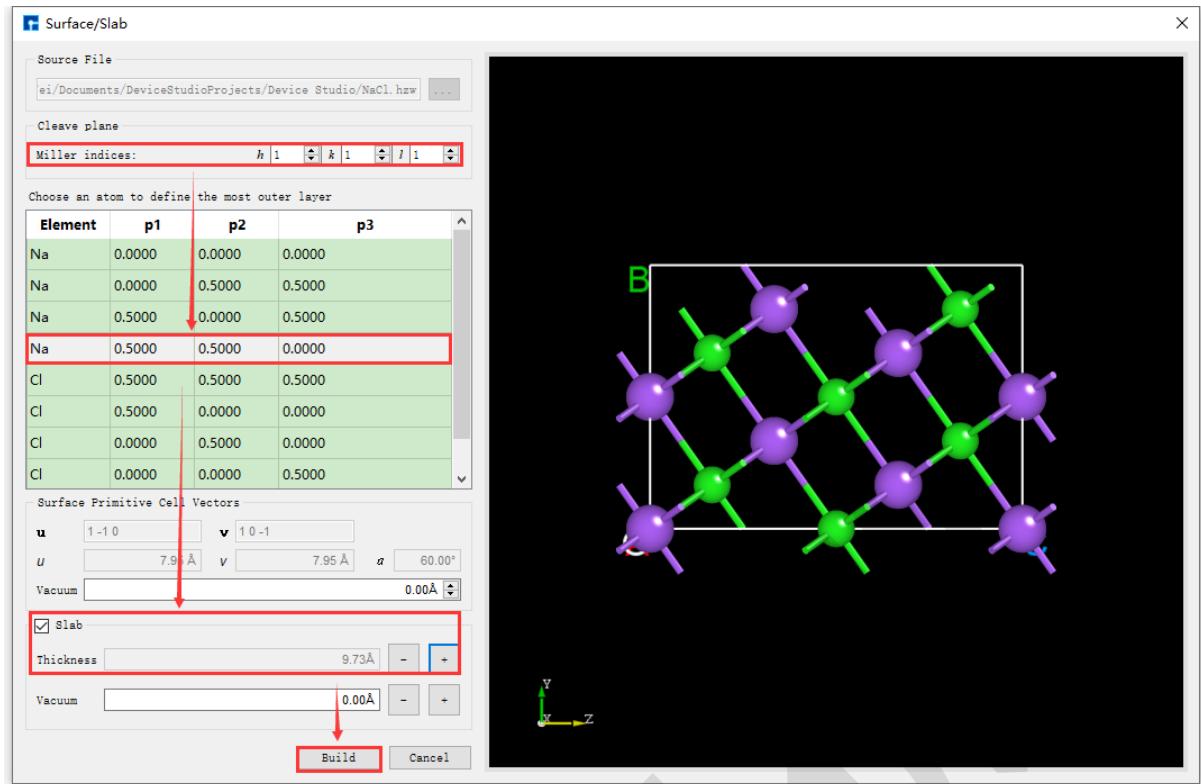


图 5.26: 搭建 Thickness 为 9.73 埃的 NaCl (111) 晶体结构的操作界面

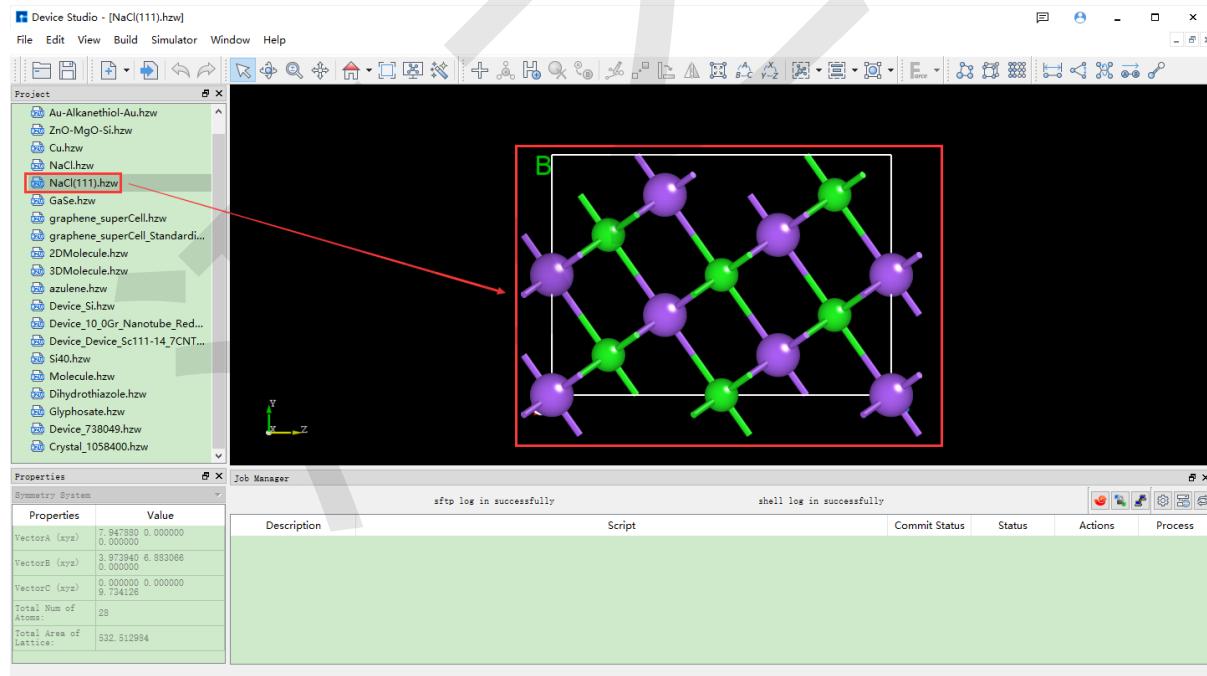


图 5.27: 搭建好 Thickness 为 9.73 埃的 NaCl (111) 晶体结构的 Device Studio 界面

5.7 晶体结构的晶胞重定义

在 Device Studio 中导入 Cu 原胞结构后的界面如 图 5.28 所示，点击界面中的 *Build* → *Redefine Crystal*，弹出将 Cu 原胞结构晶体重定义界面如 图 5.29 所示，按照 图 5.30 中的红色框选部分填写参数，填写好参数后，点击 *Preview* 按钮则可在界面右侧预览扩胞后的结构，之后点击 *Build* 按钮则将 Cu 原胞扩为单胞，同时其结构文件 Cu_Rede.hzw 挂载在 Device Studio 的项目管理区域，结构的 3D 视图在 Device Studio 的 3D 显示区域如 图 5.31 所示。

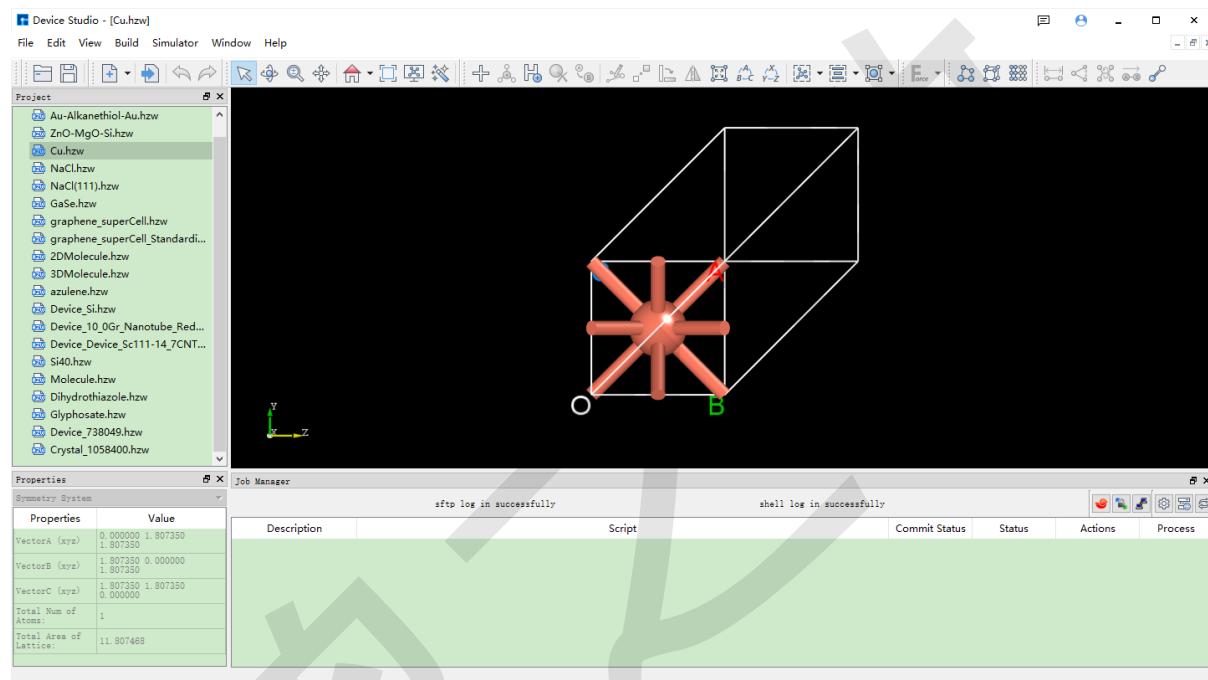


图 5.28: 导入 Cu 原胞结构 (Cu.hzw) 后的 Device Studio 界面

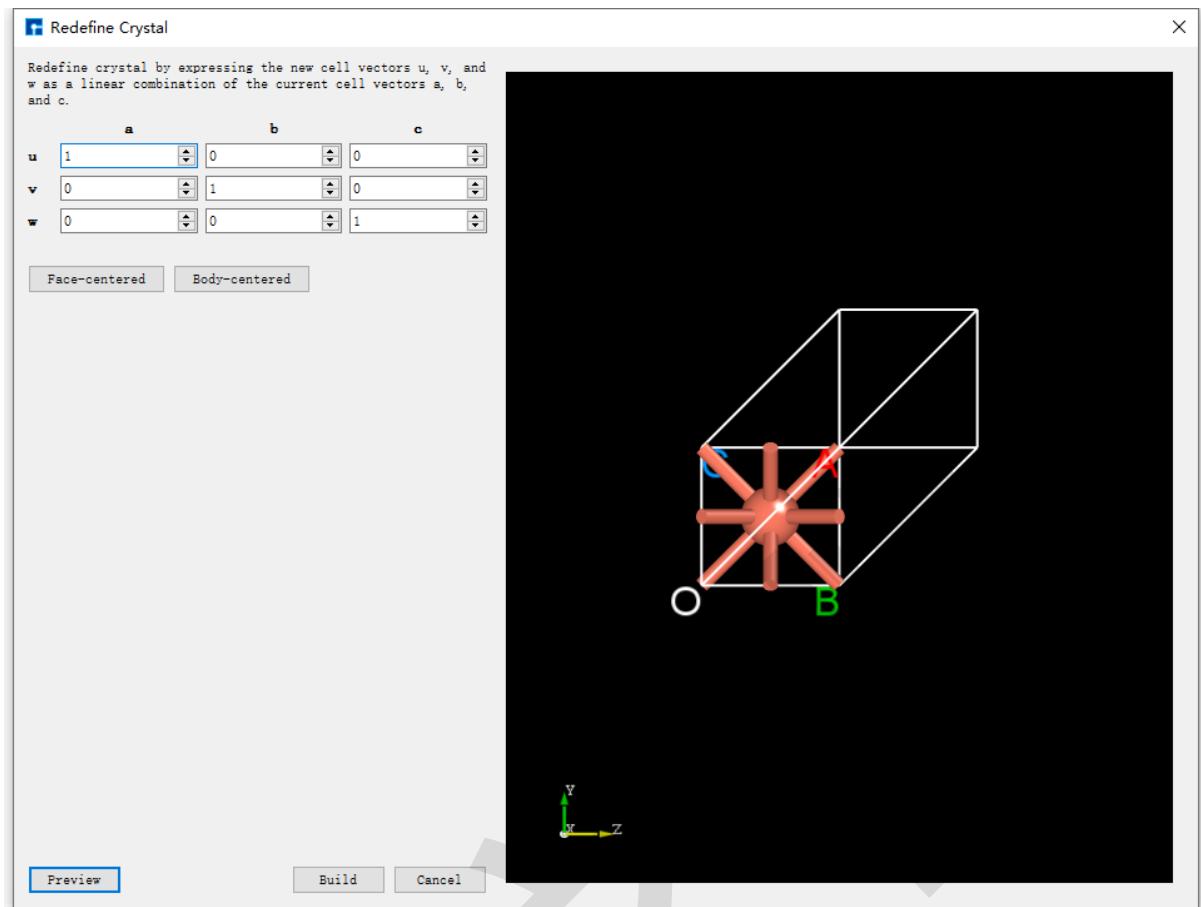


图 5.29: 将 Cu 原胞结构晶胞重定义界面

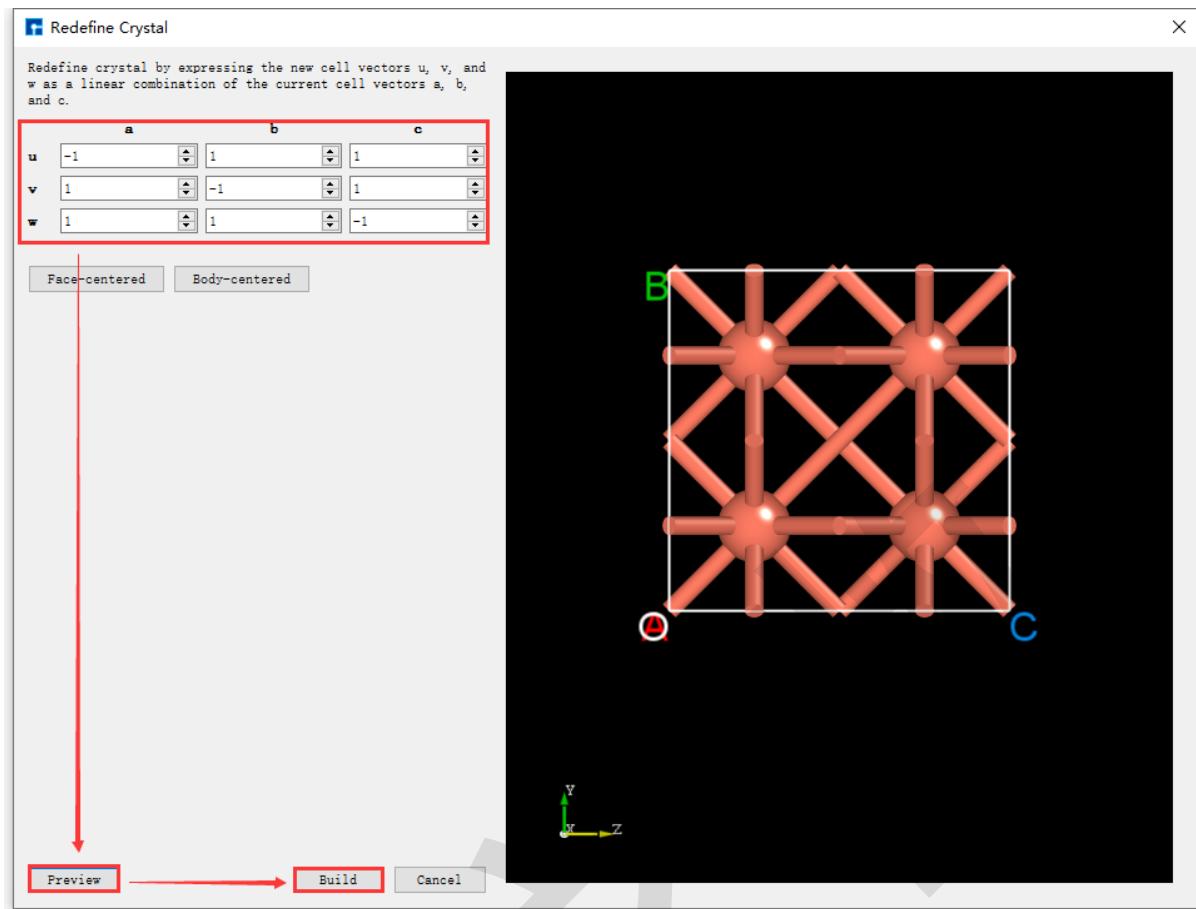


图 5.30: 将 Cu 原胞结构扩为单胞的操作界面

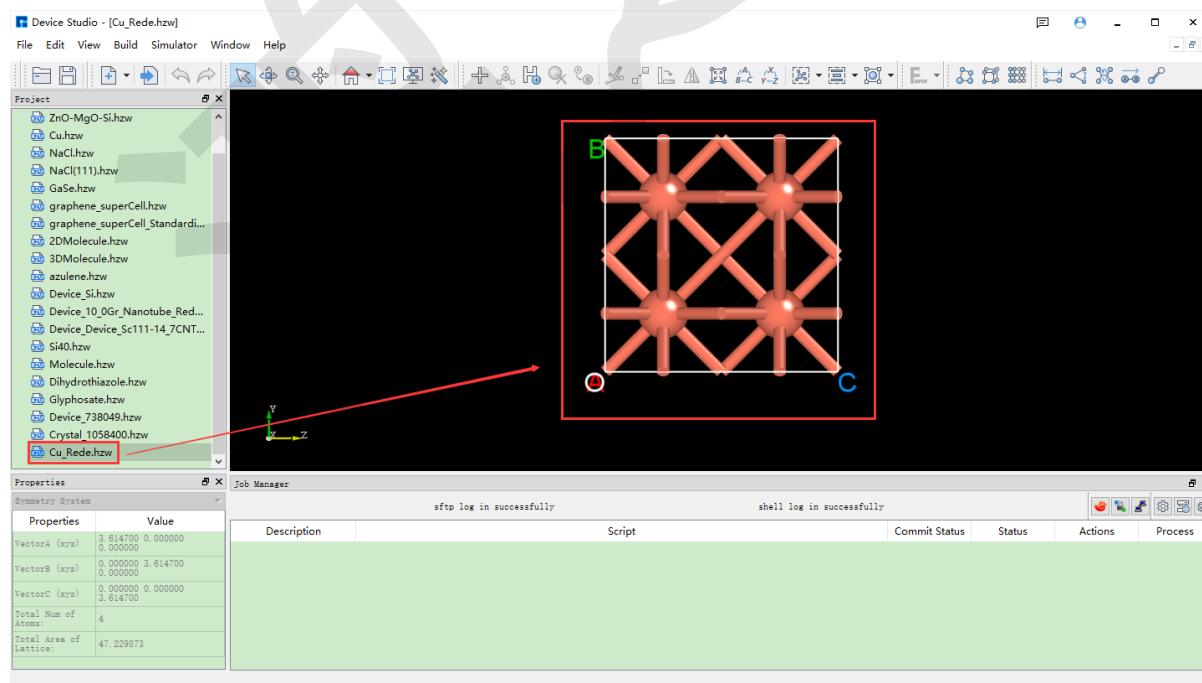


图 5.31: Cu 的单胞 (Cu_Rede.hzw) 结构在 Device Studio 中的 3D 视图

运用 Device Studio 晶体结构的晶胞重定义功能可以将单胞扩为超胞，其操作与将 Cu 原胞扩为单胞的操作一致，以将 Cu 单胞扩为 $4 \times 4 \times 4$ 的超胞为例，点击图 5.31 中的 *Build* → *Redefine Crystal*，弹出将 Cu 单胞结构晶胞重定义界面，其操作界面如图 5.32 所示，按照图 5.32 中的红色框选部分及箭头指向所示一步步操作，之后点击 *Build* 按钮则将 Cu 单胞扩为 $4 \times 4 \times 4$ 的超胞，同时其结构文件 Cu_Rede_Rede.hzw 挂载在 Device Studio 的项目管理区域，结构的 3D 视图在 Device Studio 的 3D 显示区域如图 5.33 所示。

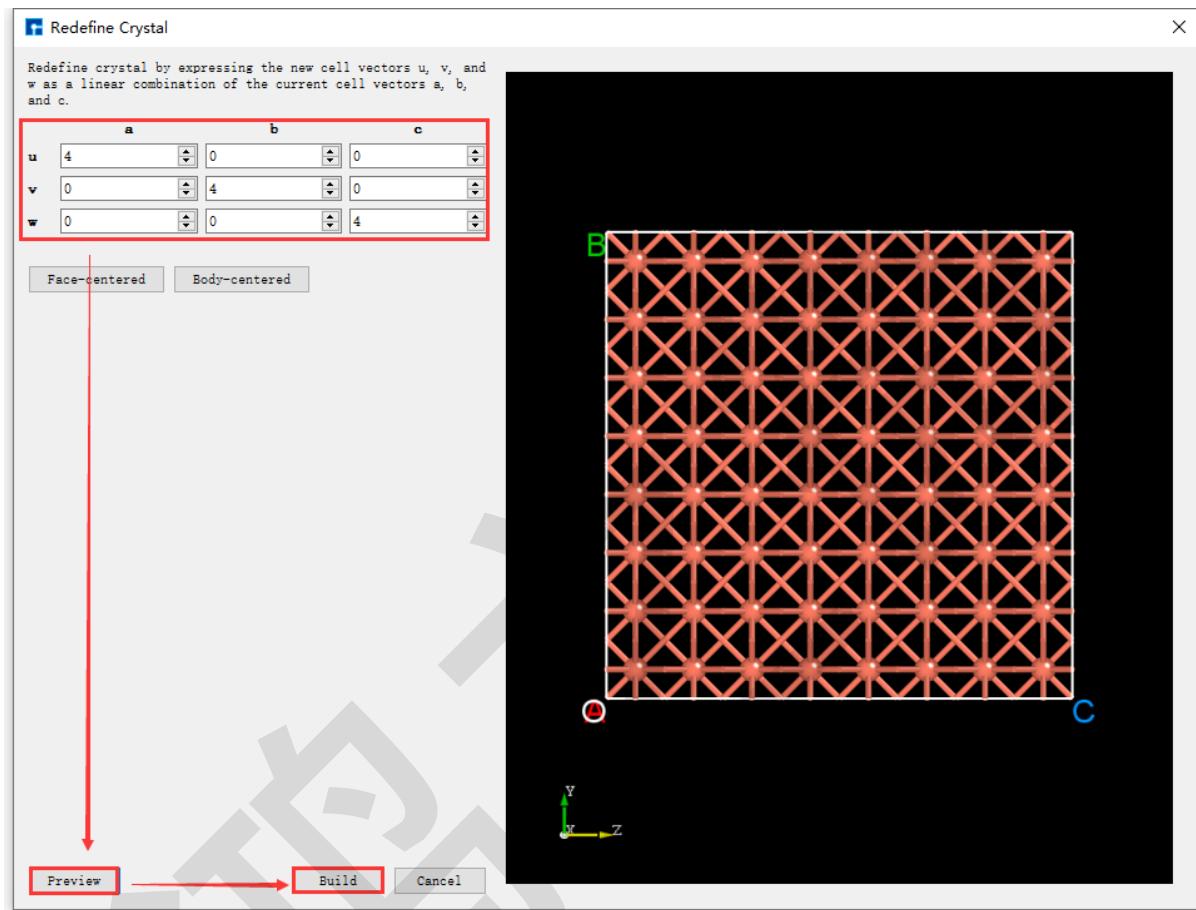


图 5.32: 将 Cu 单胞扩为 $4 \times 4 \times 4$ 超胞的操作界面

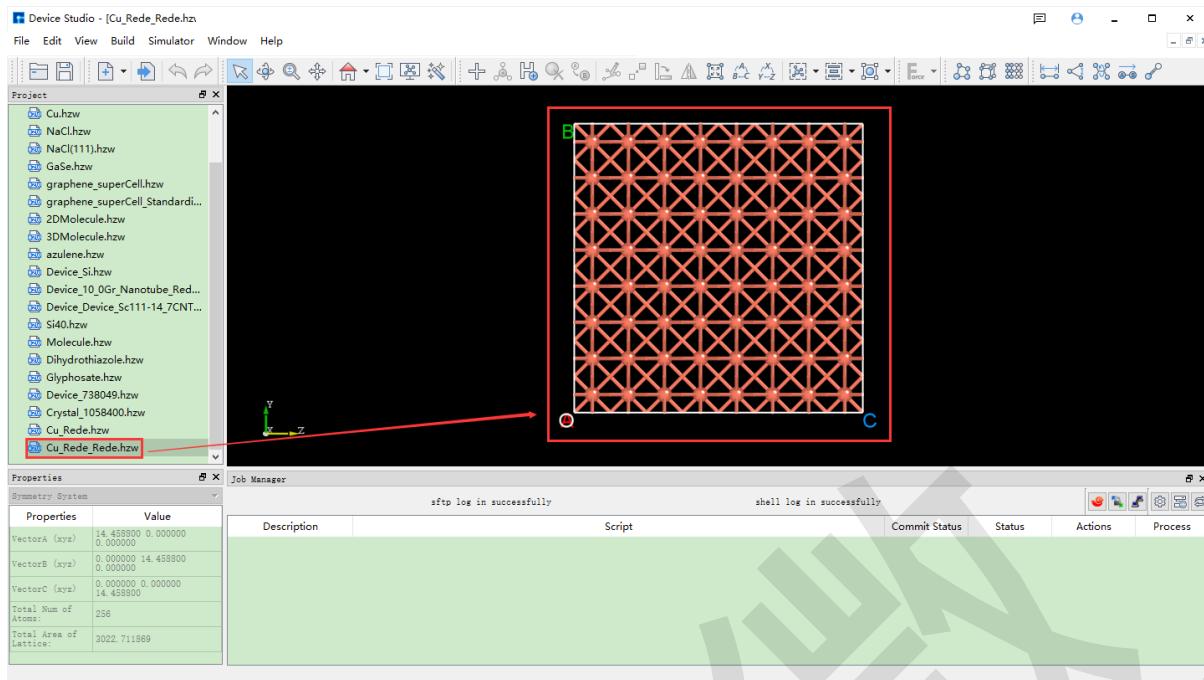


图 5.33: Cu 的超胞 (Cu_Rede_Rede.hzw) 结构在 Device Studio 中的 3D 视图

5.8 器件建模

以搭建金-烷硫醇-金 (Au-Alkanethiol-Au) 分子器件结构为例, 以下将分为几个步骤逐步搭建并详细说明。

5.8.1 导入 Au 晶体结构

从 Device Studio 本地数据库中导入 Au 晶体结构, 即导入 Au 原胞, 导入过程这里不做详细描述, 用户可参考[本地数据库导入结构](#), 导入 Au 晶体结构后的界面如图 5.34 所示。

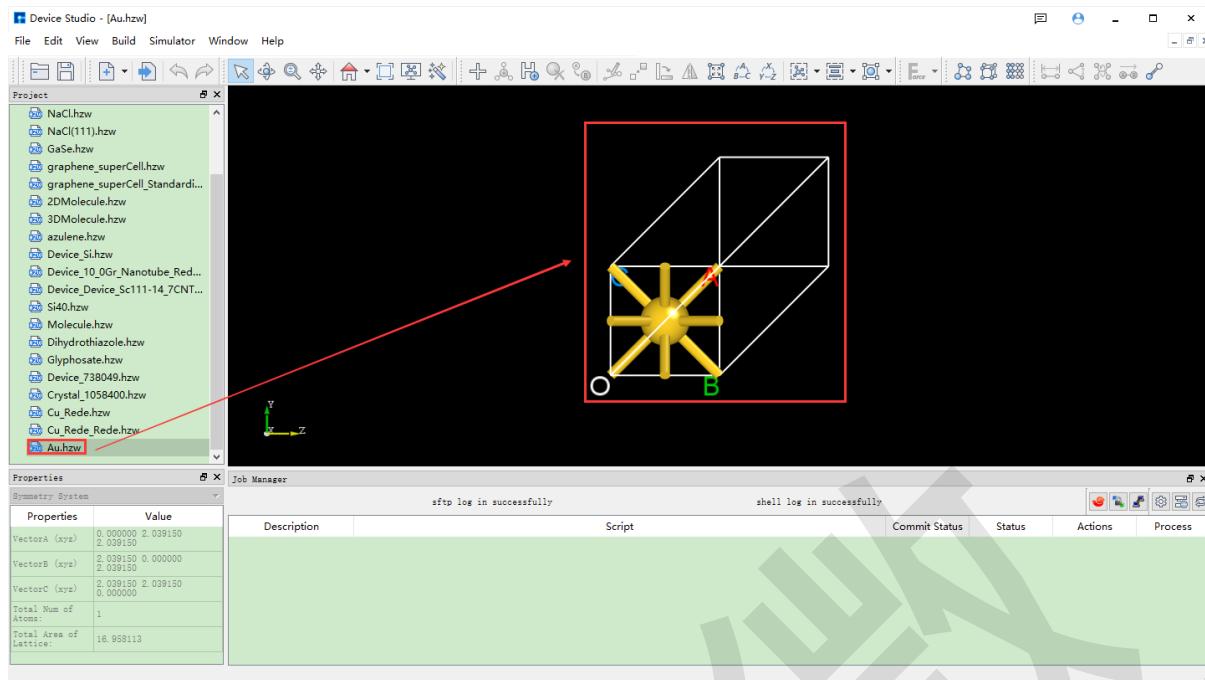


图 5.34: 导入 Au 晶体结构后的界面

5.8.2 将 Au 原胞转换为 Au 晶胞

点击 图 5.34 中的 *Build → Redefine Crystal*，弹出 Redefine Crystal 界面如 图 5.35 所示。点击 图 5.35 中的 *Face-centered → Preview* 则界面变化为如 图 5.36 所示，用户可在 图 5.36 的右侧区域预览转换后的结构，之后点击 *Build* 则 Au 原胞转换为 Au 晶胞结构，其结构文件保存在软件的项目管理区域（Project Explorer），同时可在 3D 显示区域查看到该结构的 3D 视图显示如 图 5.37 所示。图 5.37 中的 Au.hzw 对应 Au 原胞，Au_Rede.hzw 对应 Au 晶胞，用户可根据计算需要选中结构文件，右击选择 *Rename* 对结构文件重新命名。

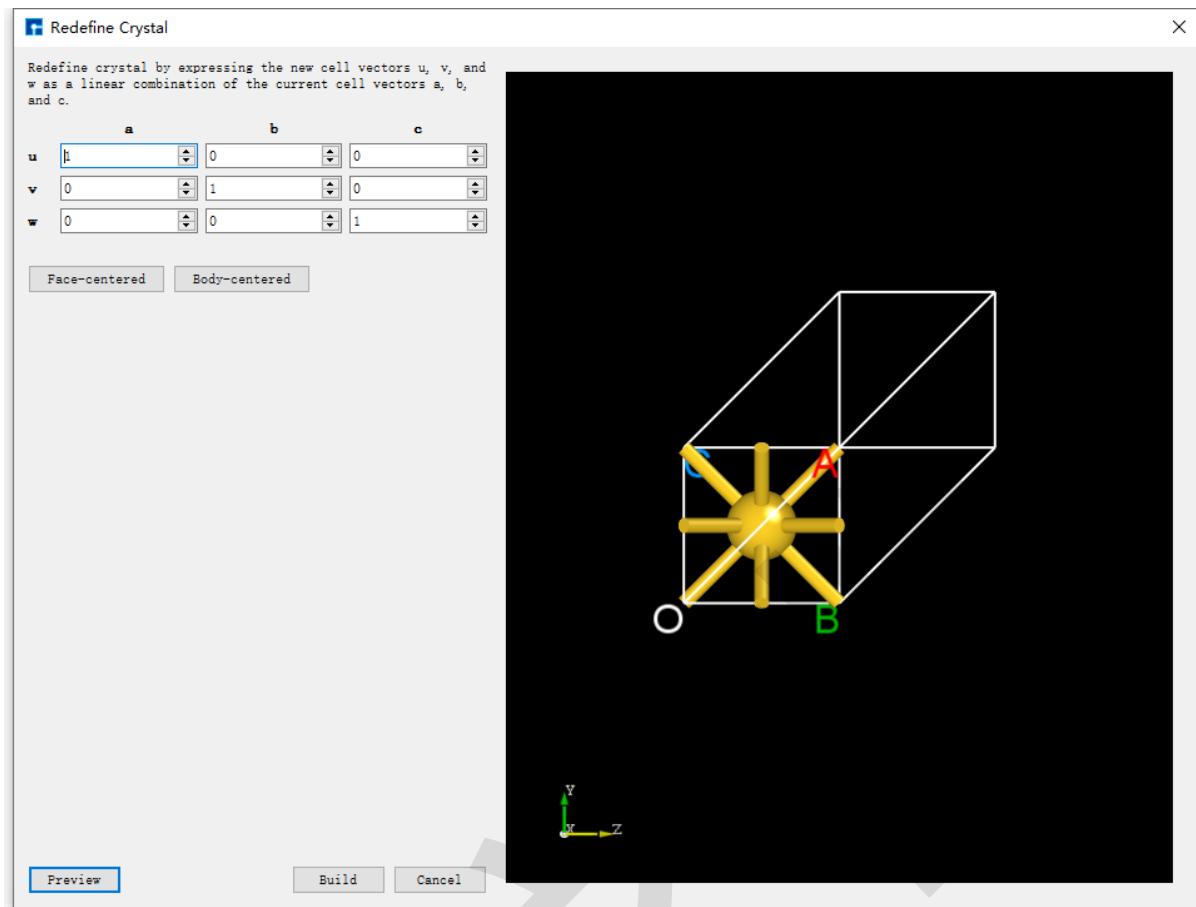


图 5.35: 将 Au 原胞 Redefine Crystal 的界面

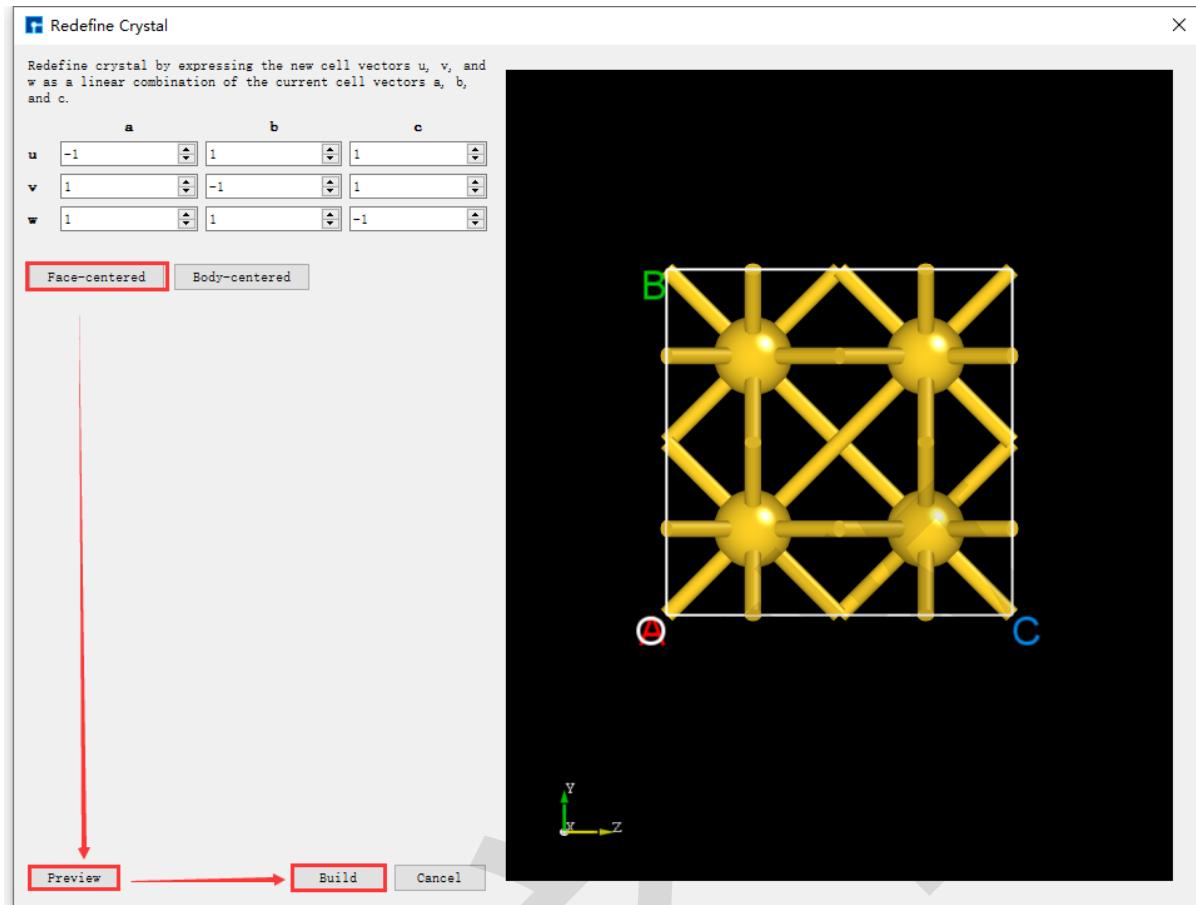


图 5.36: 将 Au 原胞转换为 Au 晶胞的操作界面

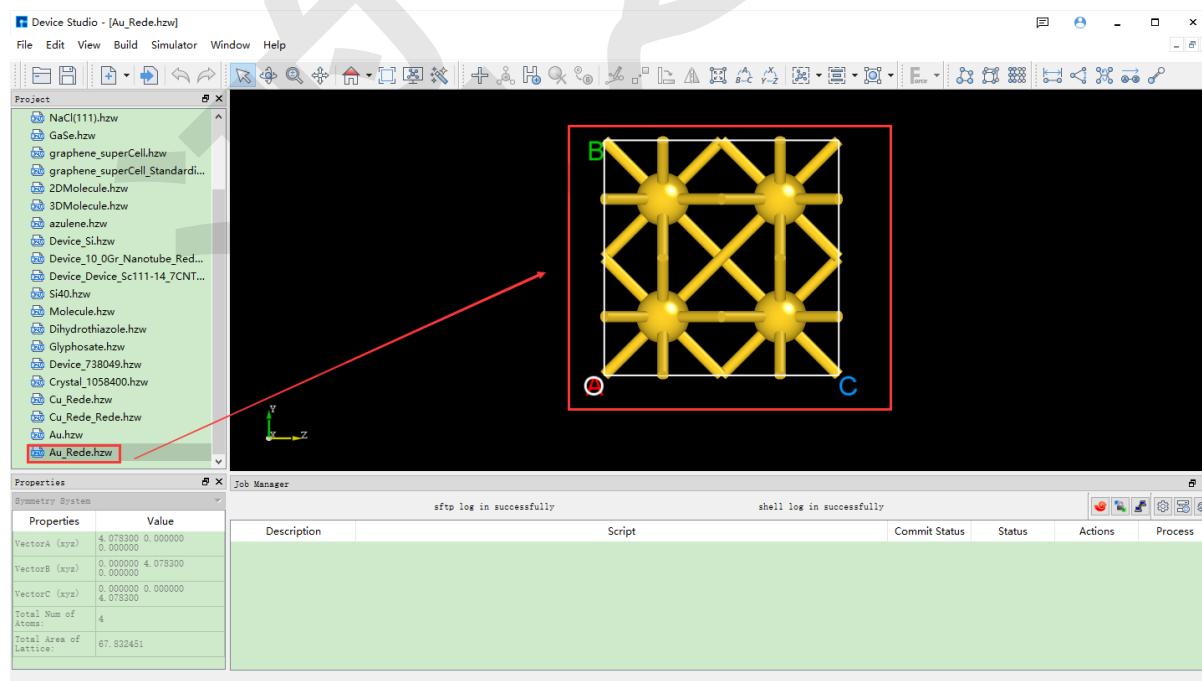


图 5.37: 将 Au 原胞转换为 Au 晶胞后的界面

5.8.3 将 Au 晶胞转换为 Au 超胞

将 Au 晶胞转换为 $2*2*4$ 的超胞（简称：Au 超胞），点击 图 5.37 中的 *Build* → *Redefine Crystal* 弹出 Redefine Crystal 界面，按照如 图 5.38 所示界面红色框选部分修改参数，点击 *Preview* 预览转换后的超胞结构，点击 *Build* 则 Au 晶胞转换为 Au 超胞结构，其结构文件保存在软件的项目管理区域（Project Explorer），同时可在 3D 显示区域查看到该结构的 3D 视图显示如 图 5.39 所示。图 5.39 中的 Au_Rede_Rede.hzw 对应 Au 超胞，用户可根据计算需要给该结构文件重新命名。

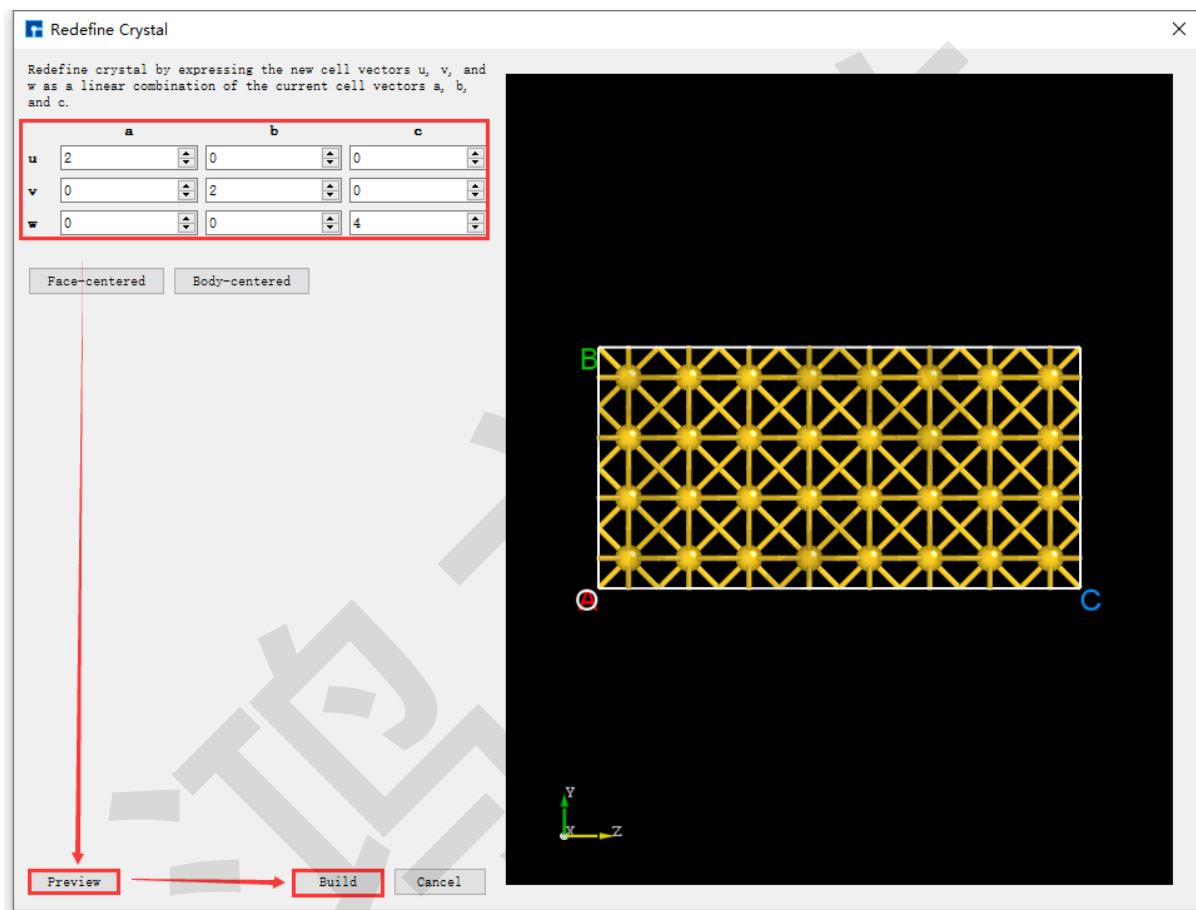


图 5.38: 将 Au 晶胞转换为 Au 超胞的操作界面

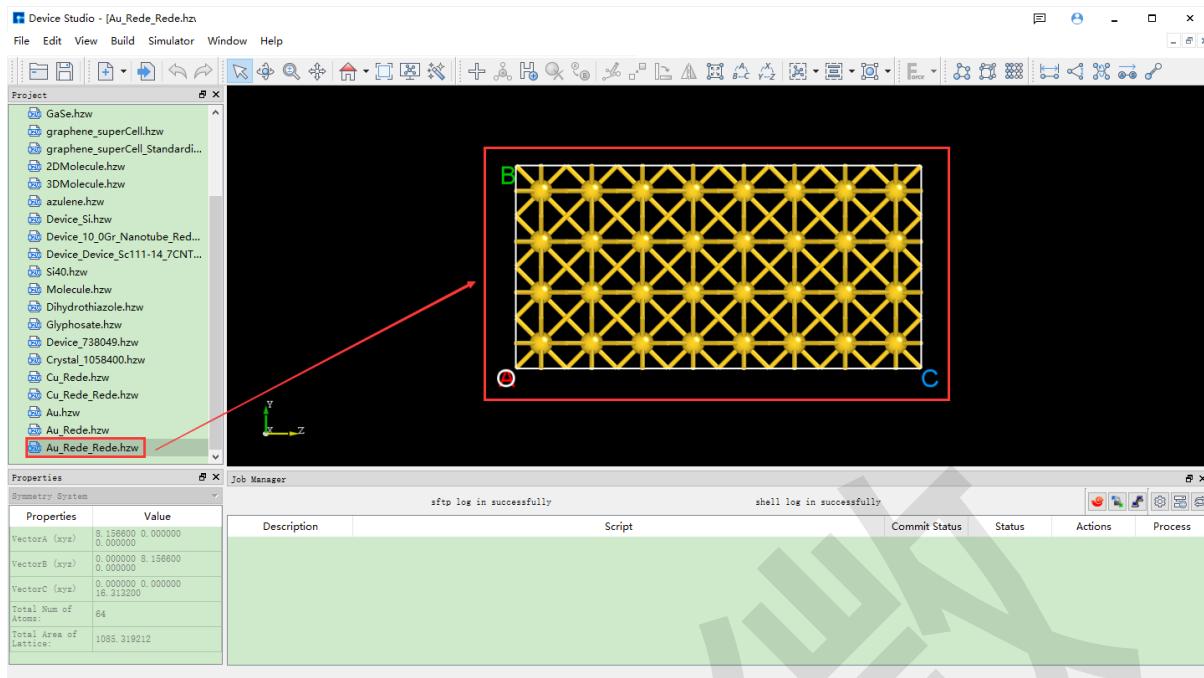


图 5.39: 将 Au 晶胞转换为 Au 超胞后的界面

5.8.4 删减 Au 超胞中多余原子及操作

删除 Au 超胞中多余原子，并将结构在晶格单元中居中对齐。为避免删错原子无法还原，建议将 Au 超胞复制一份，选中 Au_Rede_Rede.hzw 结构文件 → 右击 → Copy，弹出 CopyFile 界面如 图 5.40 所示，用户可根据计算需要重新命名，如 Au_SuperCell，或直接采用默认命名，之后点击 CopyFile 界面中的 OK 按钮，则 Au_SuperCell.hzw 结构文件存储在项目管理区域，双击该结构文件，其结构 3D 视图显示如 图 5.41 (a) 所示。

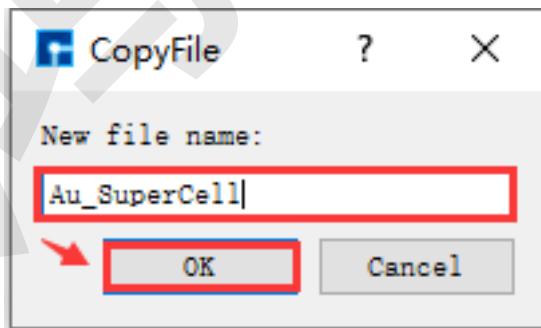


图 5.40: CopyFile 界面

(1) 在 3D 显示区域, zy 面情况下, 用鼠标框选 图 5.41 (a) 中红色框部分, 点击 Toolbars 上的 Delete Atom 快捷图标或按键盘中 Delete 键删除选中的原子, 删除后如 图 5.42 (b) 所示。

(2) 点击 Toolbars 上的 *3D Viewer zy View* 快捷图标右侧的下拉按钮，选中 *xy View* 则由 *zy* 面切换为 *xy* 面如 图 5.43 (c) 所示，用鼠标框选 图 5.43 (c) 中红色框部分，点击 Toolbars 上的 *Delete Atom* 快捷图标或点击键盘 *Delete* 键删除选中的原子。删除后，点击 Toolbars 上的 *3D Viewer zy View* 快捷图标切换回 *zy* 面如 图 5.44 (d) 所示。首先，鼠标框选 图 5.44 (d) 中的红色框部分；其次，按住键盘 *Ctrl* 键，同时鼠标点击 图 5.44 (d) 中的绿色框部分；最后，点击 Toolbars 上的 *Delete Atom* 快捷图标或点击键盘中 *Delete* 键删除选中的原子，删除后如 图 5.45 (e) 所示。

(3) 在 图 5.45 (e) 的情况下，点击 Toolbars 上的 *Center* 快捷图标则可将结构中所有原子作为整体在晶格单元中居中对齐，居中对齐后如 图 5.46 (f) 所示。做完上述一些列操作，此时结构文件 *Au_SuperCell.hzw* 即 *Au_SuperCell* 超胞，其结构的 3D 视图如 图 5.46 (f) 所示。

备注

被选中的原子为高亮黄色，用户可根据这点判断原子是否被选中。

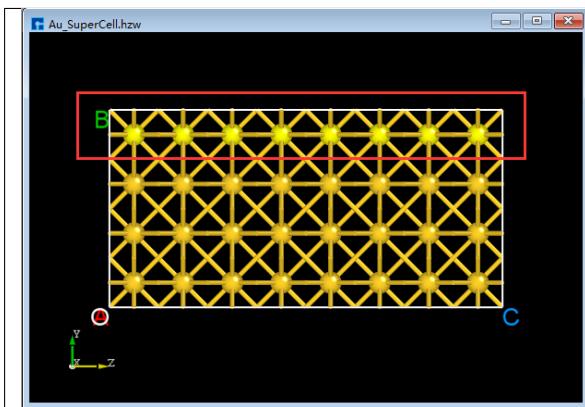


图 5.41: (a)

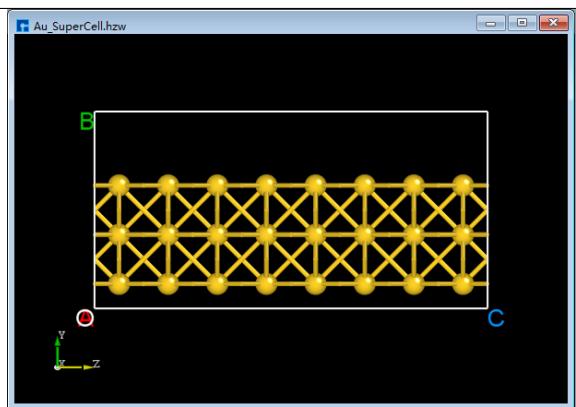


图 5.42: (b)

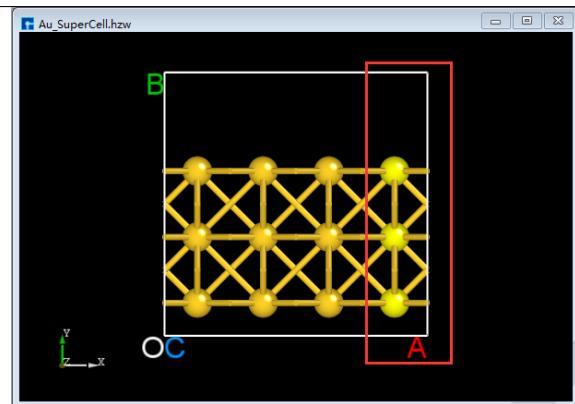


图 5.43: (c)

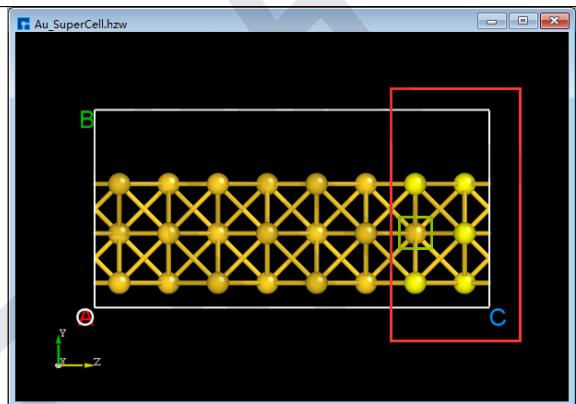


图 5.44: (d)

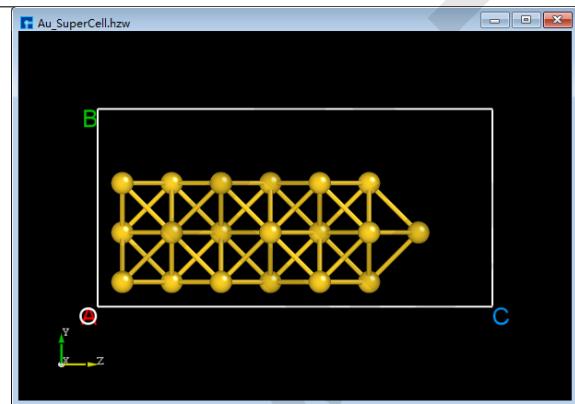


图 5.45: (e)

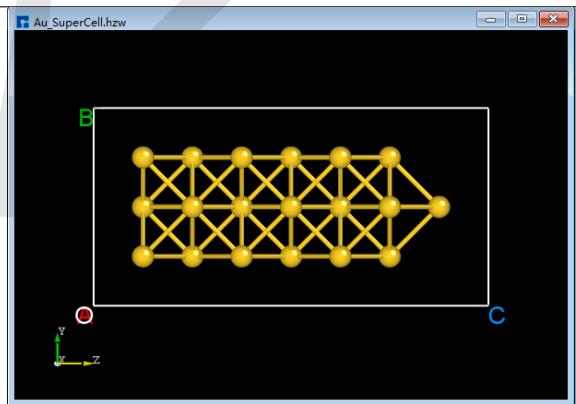


图 5.46: (f)

5.8.5 设置 X 和 Y 轴方向为真空

将 Au_SuperCell 超胞的 X 和 Y 轴方向设置为真空。将 Au_SuperCell 超胞复制一份并重命名为 Au_SuperCell_1，双击其结构文件 Au_SuperCell_1.hzw 使之在 3D 显示区域显示。点击 Toolbars 上的 *Convert to Crystal* 快捷图标弹出 Convert to Crystal 界面，按照 图 5.47 所示界面红色框选部分设置参数 → 界面右侧预览 → *Build*，则将 Au_SuperCell_1 超胞的 X 和 Y 轴方向设置为真空如 图 5.48 (a) 所示，点击 Toolbars 上的 *Center* 快捷图标

则可将结构中所有原子作为整体在晶格单元中居中对齐，居中对齐后如图 5.49（b）所示。做完上述一些列操作，结构文件 Au_SuperCell_1.hzw 即 Au_SuperCell_1 超胞，其结构的 3D 视图如图 5.49（b）所示。

备注

将结构文件复制并重命名，是为了在教程中方便说明，同时避免一系列操作后失误后无法还原，用户可根据建模需要决定是否复制、重命名。一般误删或误操作，可点击 Toolbars 上的 *Undo* 快捷图标撤销，或按快捷键 *Ctrl+Z* 撤销。

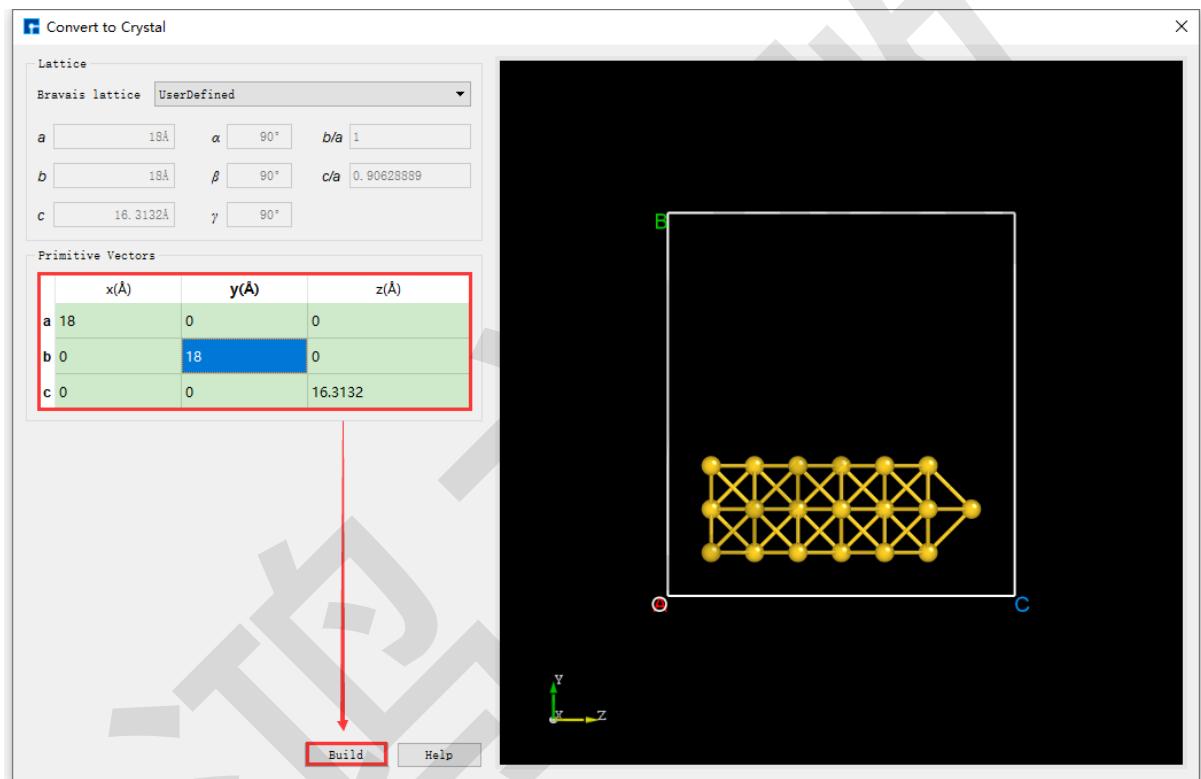
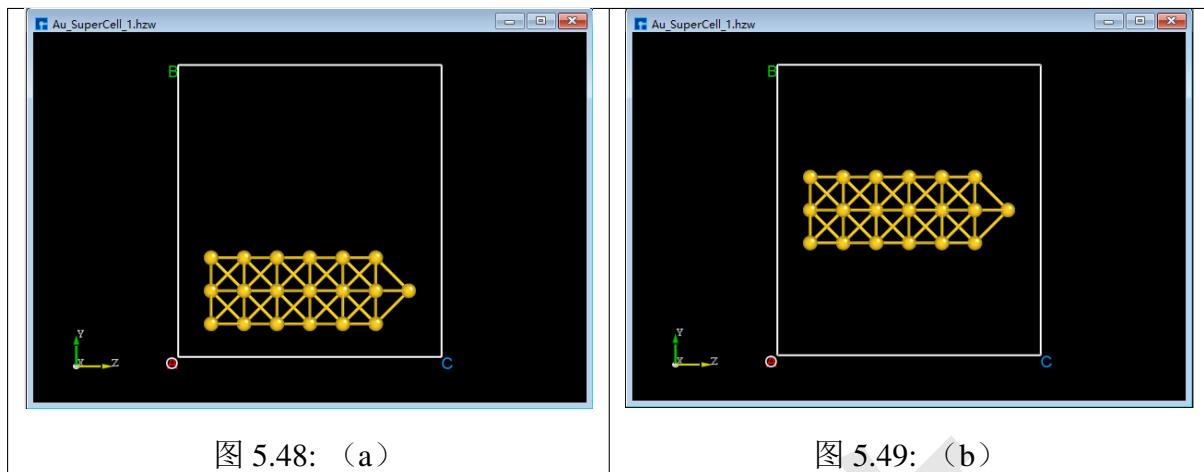


图 5.47: Convert to Crystal 界面

备注

在图 5.47 界面中点击 *Build* 按钮后，若 Au_SuperCell_1.hzw 结构的 3D 视图不显示在 3D 显示区域的合适位置，用户可通过点击 Toolbars 上 *3D Viewer zy View* 快捷图标或按快捷键 *Ctrl+R* 重置该结构的 3D 视图到合适位置，重置后的结构 3D 视图如图 5.49（b）所示。用户在建模过程中遇到结构的 3D 视图不在 3D 显示区域的合适位置，均可通过上述方式重置。



5.8.6 将结构做镜像处理并重置晶格常数

将选中的原子做镜像处理，重新设置晶格常数，并将结构居中对齐。如图 5.50 所示，选中所有原子 → 点击 *Mirror Atom* 快捷图标 → 弹出 Mirror 界面 → 设置参数 → 勾选 Copy → 点击 *Apply*, 则结构如图 5.52 (a) 所示。在图 5.52 (a) 的基础上，点击 *Convert to Crystal* 快捷图标弹出 Convert to Crystal 界面如图 5.51 所示，按图中红色框选部分设置参数后，在界面右侧预览重置晶格常数后的结构，点击 *Build*，点击 *Center* 快捷图标将重置晶格常数后的结构中所有原子作为整体在晶格单元中居中对齐，对齐后如图 5.53 (b) 所示。

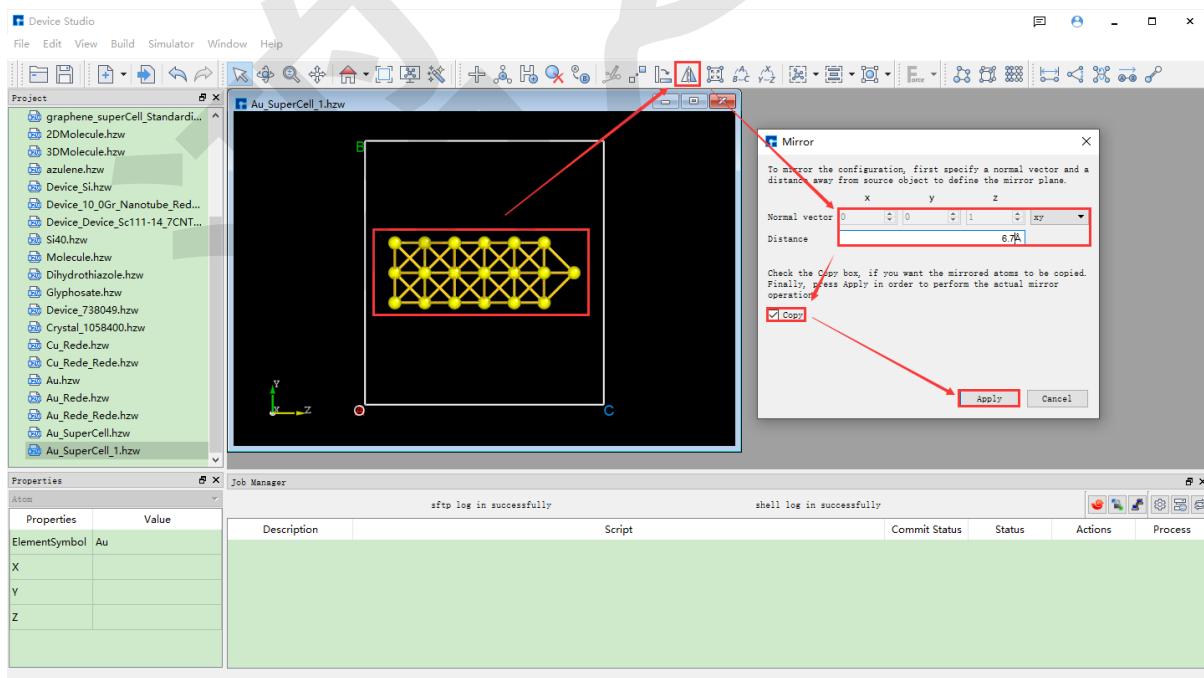


图 5.50: 对 Au_SuperCell_1 超胞做镜像处理操作界面

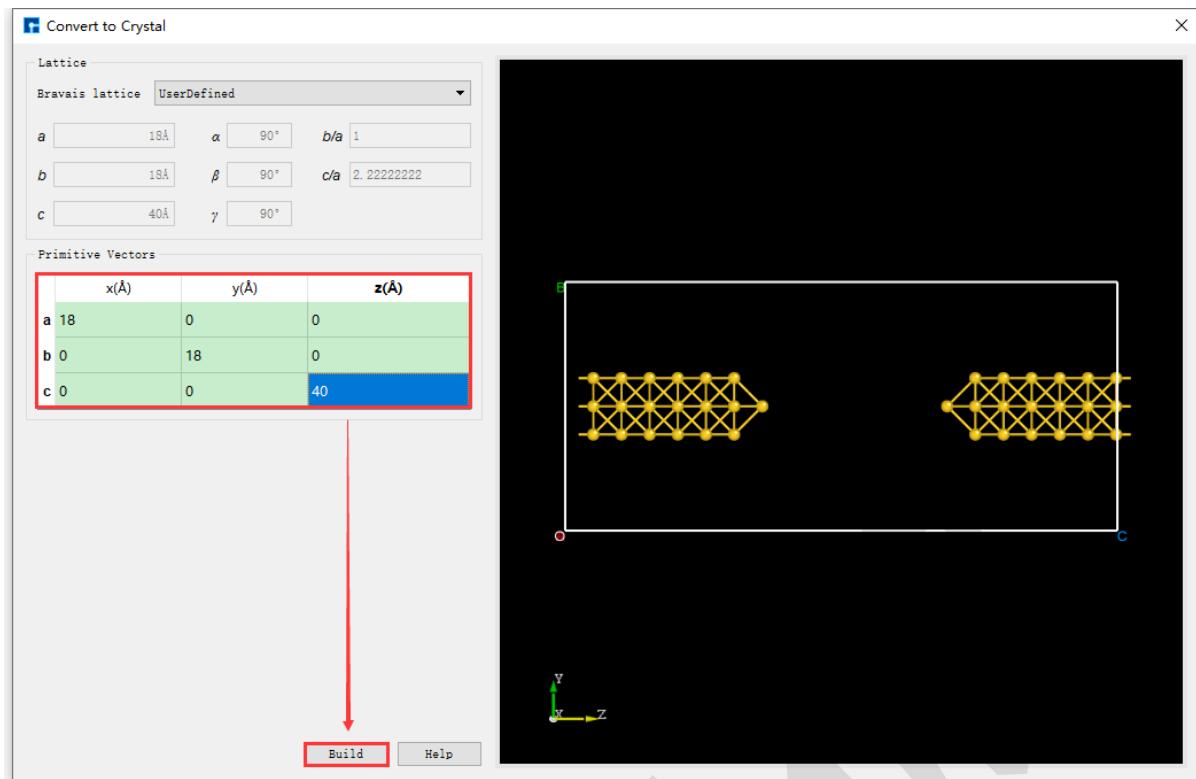
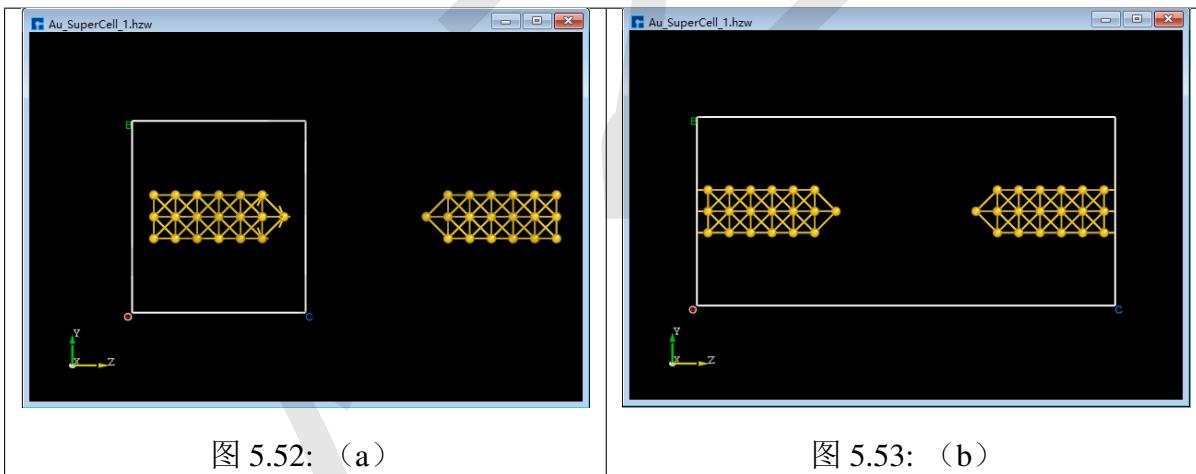


图 5.51: 对 Au_SuperCell_1 超胞重新设置晶格常数操作界面



5.8.7 搭建两端口器件结构

导入烷硫醇分子结构，并将结构复制到 Au_SuperCell_1 超胞结构中居中位置，之后搭建两端口器件结构。

(1) 导入烷硫醇 (Alkanethiol) 分子结构如 图 5.54 所示。

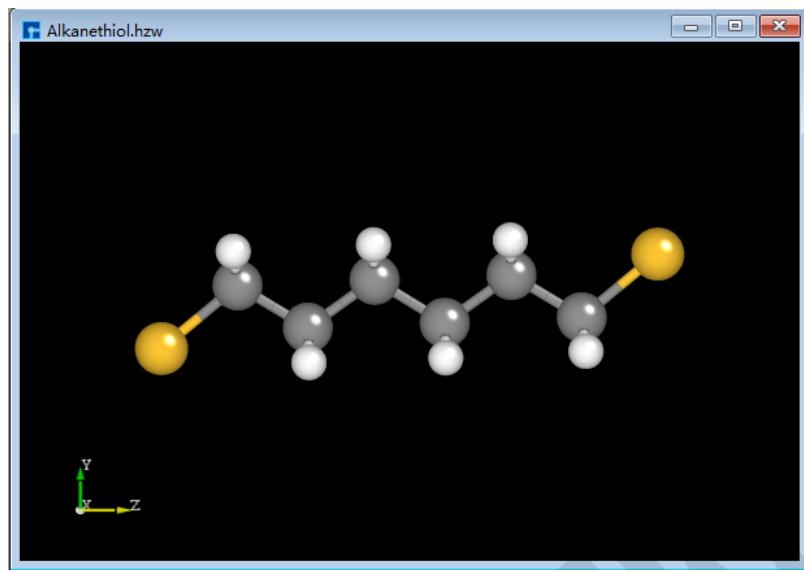


图 5.54: 烷硫醇 (Alkanethiol) 分子结构

(2) 双击 *Au_SuperCell_1.hzw* 打开 *Au_SuperCell_1* 超胞结构, 鼠标框选并按快捷键 *Ctrl+C* 复制烷硫醇 (Alkanethiol) 分子结构; 鼠标点击 图 5.53 (b) 界面左侧位置, 并按快捷键 *Ctrl+V* 将烷硫醇 (Alkanethiol) 分子结构粘贴到 *Au_SuperCell_1* 超胞结构中如 图 5.55 (a) 所示。为方便将粘贴的烷硫醇 (Alkanethiol) 分子结构移动到 *Au_SuperCell_1* 超胞结构的居中位置, 点击 *3D Viewer zy View* 快捷图标右侧的下拉按钮, 选中 *ZX zx View*, 则由 *zy* 面切换为 *zx* 面如 图 5.56 (b) 所示。选中烷硫醇 (Alkanethiol) 分子结构, 点击快捷图标 *Center*, 则将烷硫醇 (Alkanethiol) 分子结构移动到 *Au_SuperCell_1* 超胞结构的居中位置如 图 5.57 (c) 所示, 点击 *3D Viewer zy View* 快捷图标, 则切换为 *zy* 面如 图 5.58 (d) 所示。

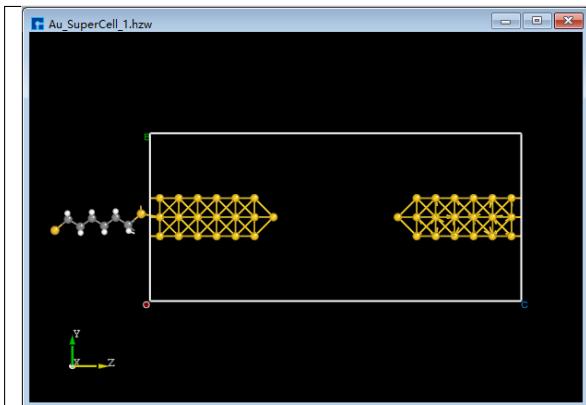


图 5.55: (a)

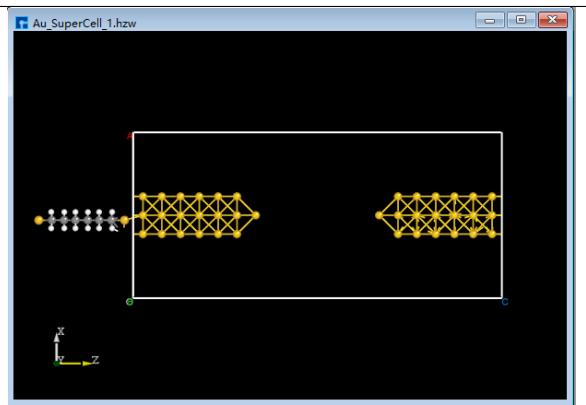


图 5.56: (b)

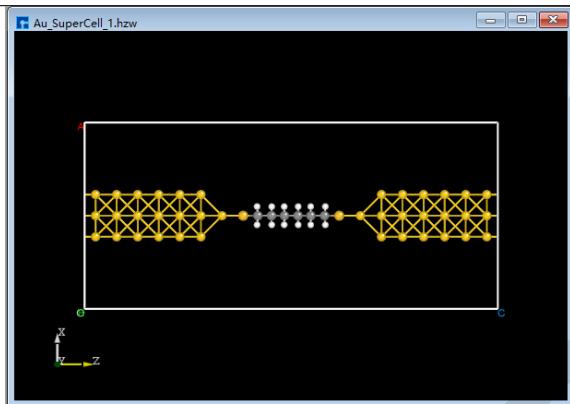


图 5.57: (c)

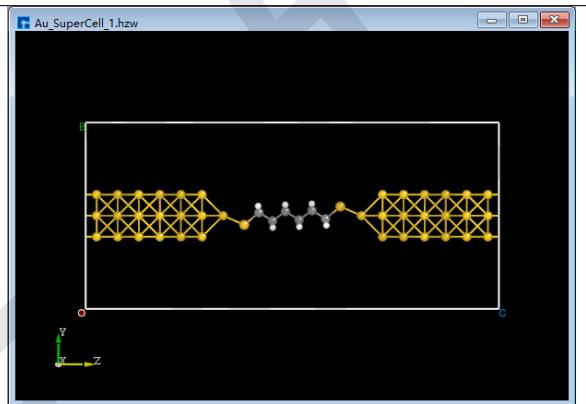


图 5.58: (d)

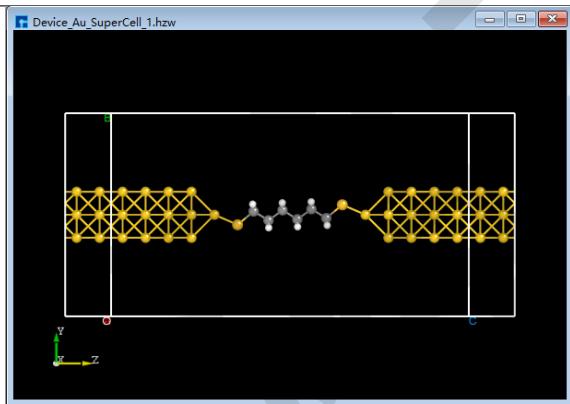


图 5.59: (e)

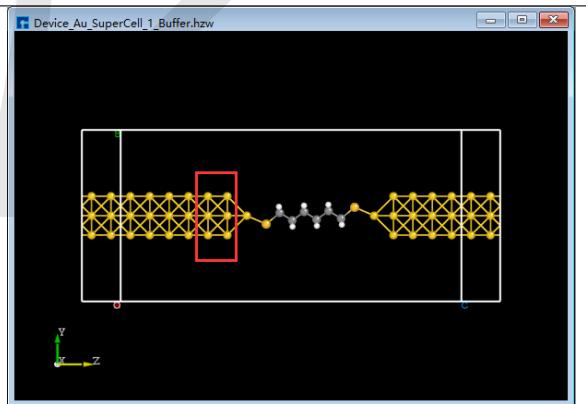


图 5.60: (f)

(3) 点击 *Convert to Device* 快捷图标，弹出 *Convert to Device* 界面如 图 5.61 所示，分别勾选界面中的红色框部分，点击 *Preview* 在界面右侧预览搭建的两端口器件结构，点击 *Build* 则搭建好的两端口器件结构 *Device_Au_SuperCell_1.hzw* 如 图 5.59 (e) 所示。

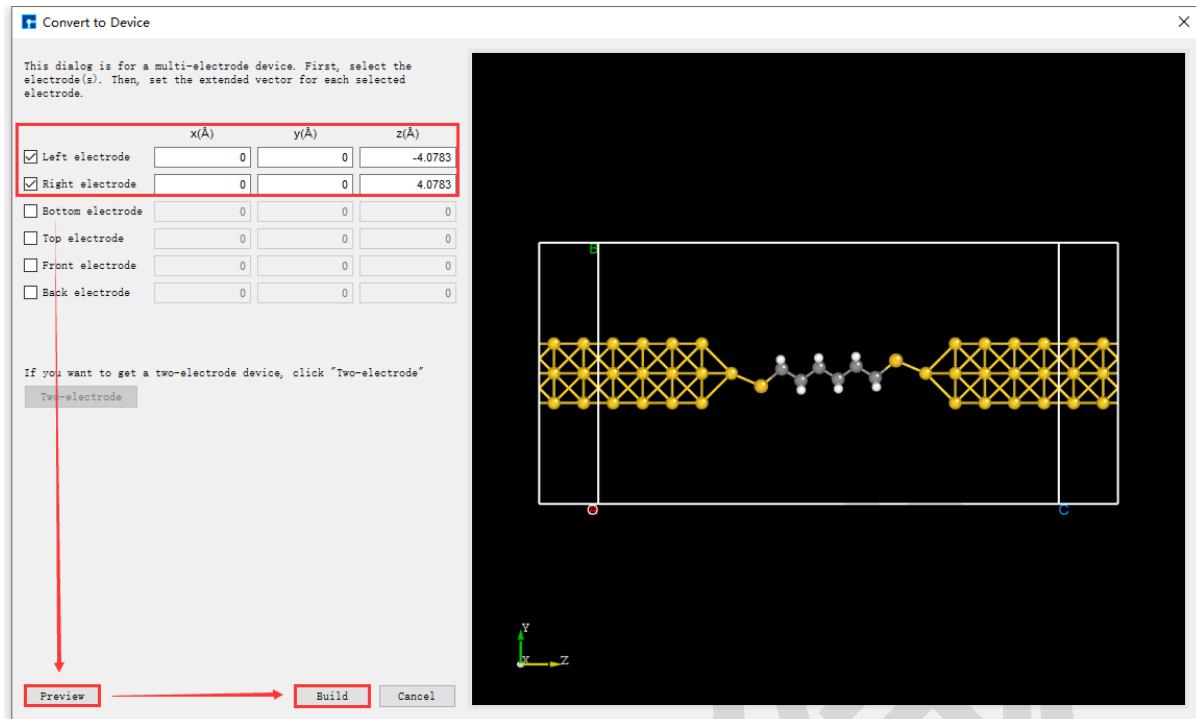


图 5.61: Convert to Device 界面

5.8.8 给器件结构添加缓冲层

用户可根据计算需要决定是否给搭建好的两端口器件结构增加缓冲层，无强制要求。以沿着输运方向(Z轴方向)，给器件结构 Device_Au_SuperCell_1.hzw 靠近电极添加缓冲层为例，添加方式为按原子层递增方式，双击打开该器件结构→点击软件 Menu 菜单栏的 Simulator → Nanodcal → Add Buffer，弹出 Add Buffer 界面如 图 5.62 所示，点击界面中 Left 后的 + 号按钮 2 次，可在界面右侧预览到沿着输运方向器件的左侧添加了缓冲层，点击 Build 则添加了缓冲层的两端口器件结构 Device_Au_SuperCell_1_Buffer.hzw 如 图 5.60 (f) 所示。

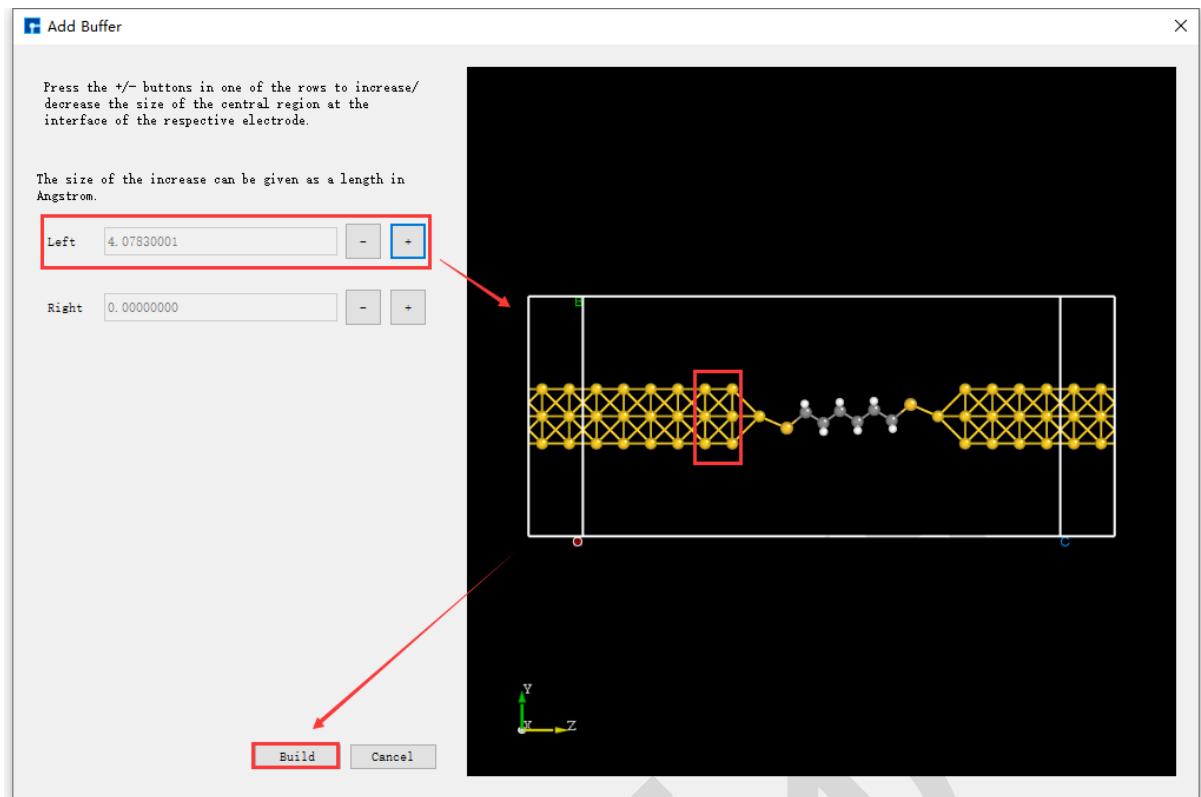


图 5.62: Add Buffer 界面

备注

上述给器件结构添加缓冲层只是案例，用户可根据计算需要决定是否在靠近电极两端添加缓冲层，决定添加几层。

5.9 导出结构

对于搭建好的结构，如两端口器件结构 `Device_Au_SuperCell_1_Buffer.hzw`，若想导出此结构文件，双击打开该结构文件 → 点击软件的 *File* → *Export* 弹出导出当前结构文件界面，用户可根据需要选择存储位置，对该结构文件命名，或采用默认命名，并选择存储格式。



CHAPTER 6

结构编辑及信息测量

对于结构的操作，用户可先仔细阅读工具栏（*Toolbars*）中各快捷图标的功能描述，再根据需要对结构进行相应操作，操作后的结构视图均可在 3D 显示区域查看。

6.1 结构的 3D 显示基础操作

Device Studio 支持从 ZY、XY、XZ、YZ、YX 和 ZX 面观察结构的 3D 视图，如在 3D 显示区域的 NaCl (111) 晶体结构 (NaCl (111).hzw)，用户通过鼠标点击工具栏中的 *3D Viewer zy View* 快捷图标将结构重置到 ZY 面，通过点击该快捷图标的下拉按钮可选择从 XY、XZ、YZ、YX 或 ZX 面来观察 NaCl (111) 晶体结构的 3D 视图，NaCl (111) 晶体结构在 3D 显示区域的 ZY、XY、XZ、YZ、YX 和 ZX 面的 3D 视图分别为 图 6.1、图 6.2、图 6.3、图 6.4、图 6.5 和 图 6.6 所示。

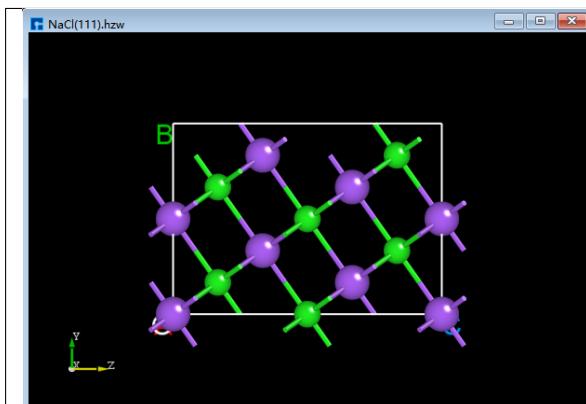


图 6.1: NaCl (111) ZY 面 3D 视图

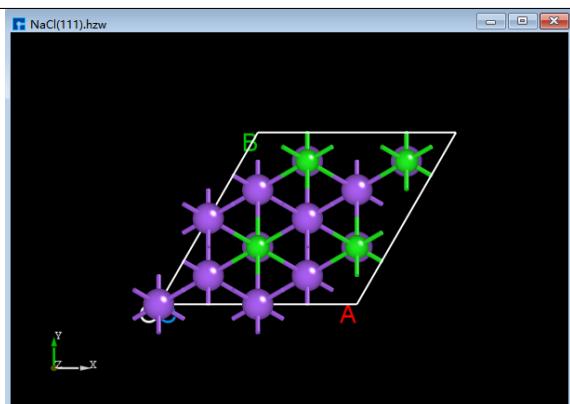


图 6.2: NaCl (111) XY 面 3D 视图

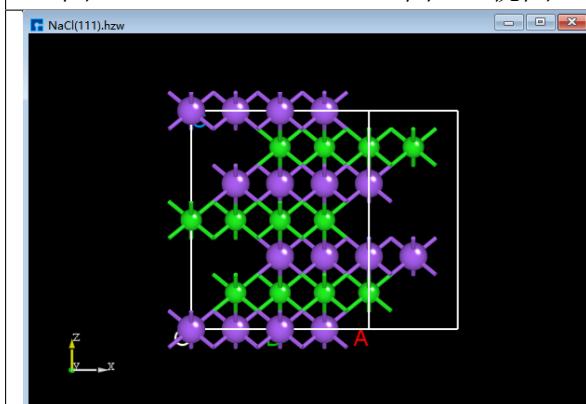


图 6.3: NaCl (111) XZ 面 3D 视图

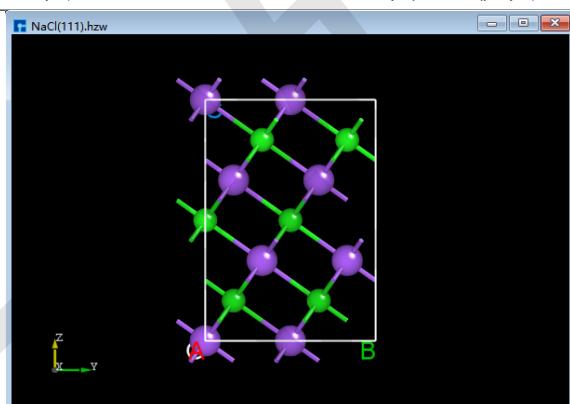


图 6.4: NaCl (111) YZ 面 3D 视图

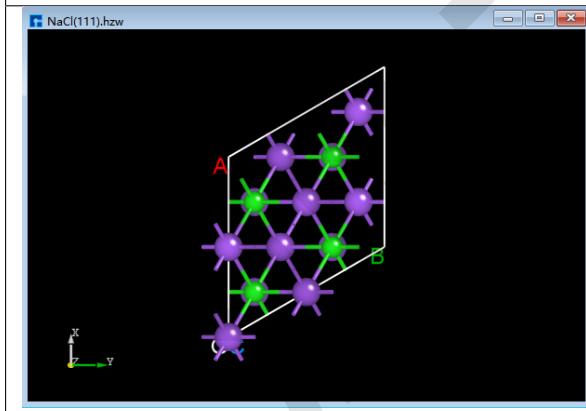


图 6.5: NaCl (111) YX 面 3D 视图

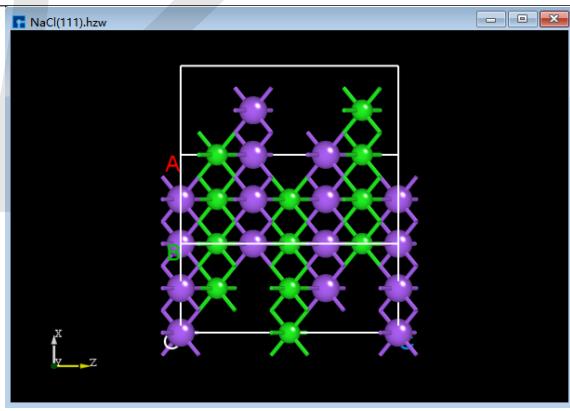


图 6.6: NaCl (111) ZX 面 3D 视图

在结构 3D 显示区域，用户可通过滚动鼠标中键将结构的 3D 视图放大或缩小；可先选中工具栏中的 *3D Viewer Translation Mode* 快捷图标或按住鼠标中键，通过拖动鼠标将结构的 3D 视图在该区域平移；可先选中工具栏中的 *3D Viewer Rotation Mode* 快捷图标或按住鼠标右键，通过拖动鼠标将结构的 3D 视图在该区域旋转。

6.2 结构的修改操作

以晶体 MoS_2 为例来说明结构的一系列修改操作，准备结构文件 ($\text{MoS}_2.hzw$)，鼠标拖动该文件到软件的 Project Explorer (项目管理) 区域即可导入结构，结构的 zy 面 3D 视图如 图 6.12 (a) 所示。

6.2.1 添加原子

如在晶体 MoS_2 中添加一个 Cr 原子，具体操作如 图 6.7 中红色部分所示，点击 Toolbars 上的 *Add Atom* 快捷图标，则弹出元素周期表，在元素周期表中选中 Cr，点击 *OK*，在 图 6.7 所示界面中标号为 ④ 位置处点击鼠标左键，再点击重新计算键长 *Recalculate LinkerBond* 快捷图标，则完成在 MoS_2 中添加一个 Cr 原子的操作，完成后的 3D 视图如 图 6.13 (b) 所示。

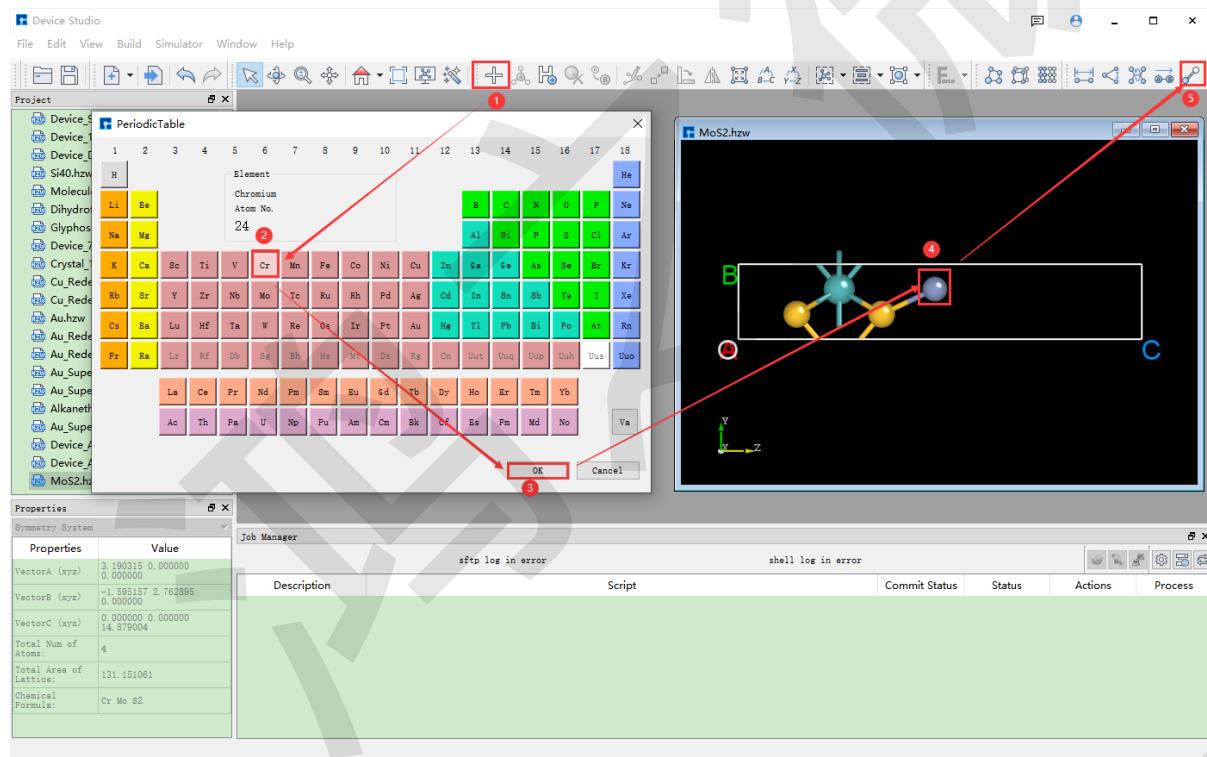


图 6.7: 添加原子操作界面

6.2.2 删 除 原 子

如删除如图 6.13 (b) 所示的结构中左边的 S 原子, 具体操作如图 6.8 中红色部分所示, 选中想删除的 S 原子, 点击 Toolbars 上的 *Delete Atom* 快捷图标或直接按键盘中 *Delete* 键, 则可删除 S 原子, 之后点击重新计算键长 *Recalculate LinkerBond* 快捷图标, 删除 S 原子后的 3D 视图如图 6.14 (c) 所示。

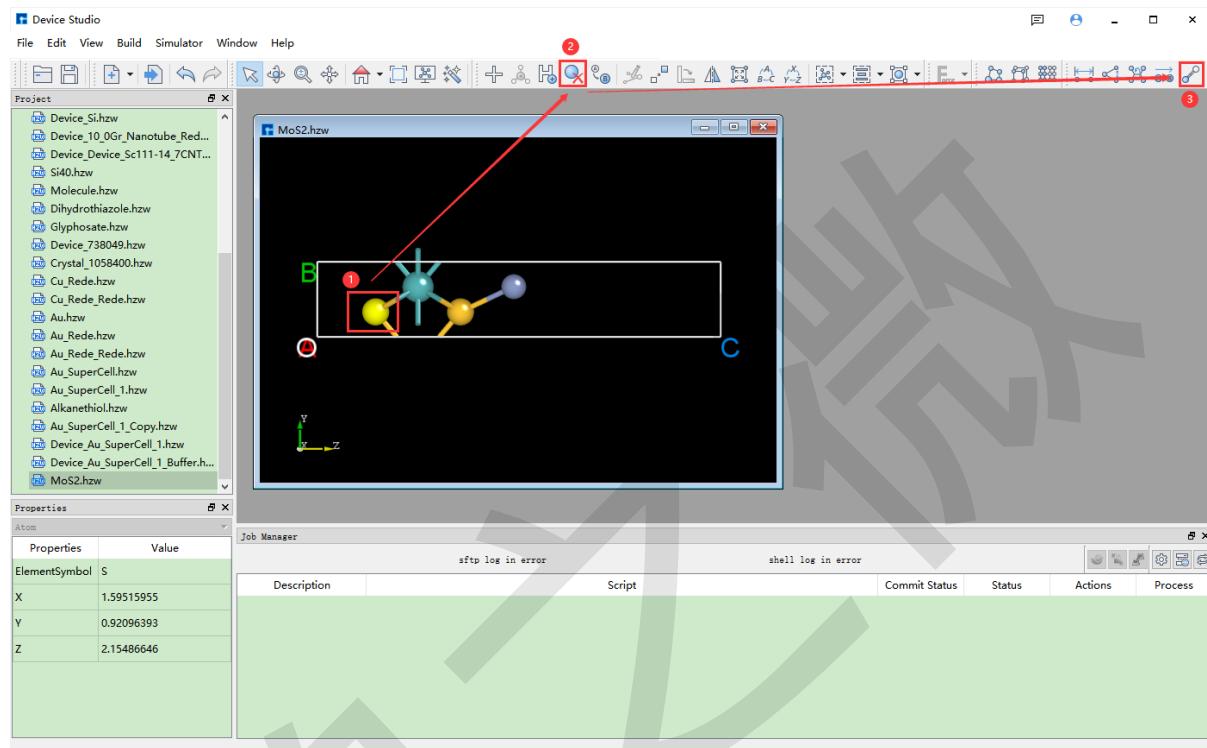


图 6.8: 删 除 原 子 操 作 界 面

6.2.3 替 换 原 子

如将如图 6.14 (c) 所示的结构中的 Cr 原子替换成 W 原子, 具体操作如图 6.9 中红色部分所示, 选中想替换的 Cr 原子, 点击 Toolbars 上的替换原子 *Replace Atom* 快捷图标, 则弹出元素周期表, 在元素周期表中选中 W, 点击 *OK*, 再点击重新计算键长 *Recalculate LinkerBond* 快捷图标, 则完成将如图 6.14 (c) 所示的结构中的 Cr 原子替换成 W 原子的操作, 完成后的结构的 3D 视图如图 6.15 (d) 所示。

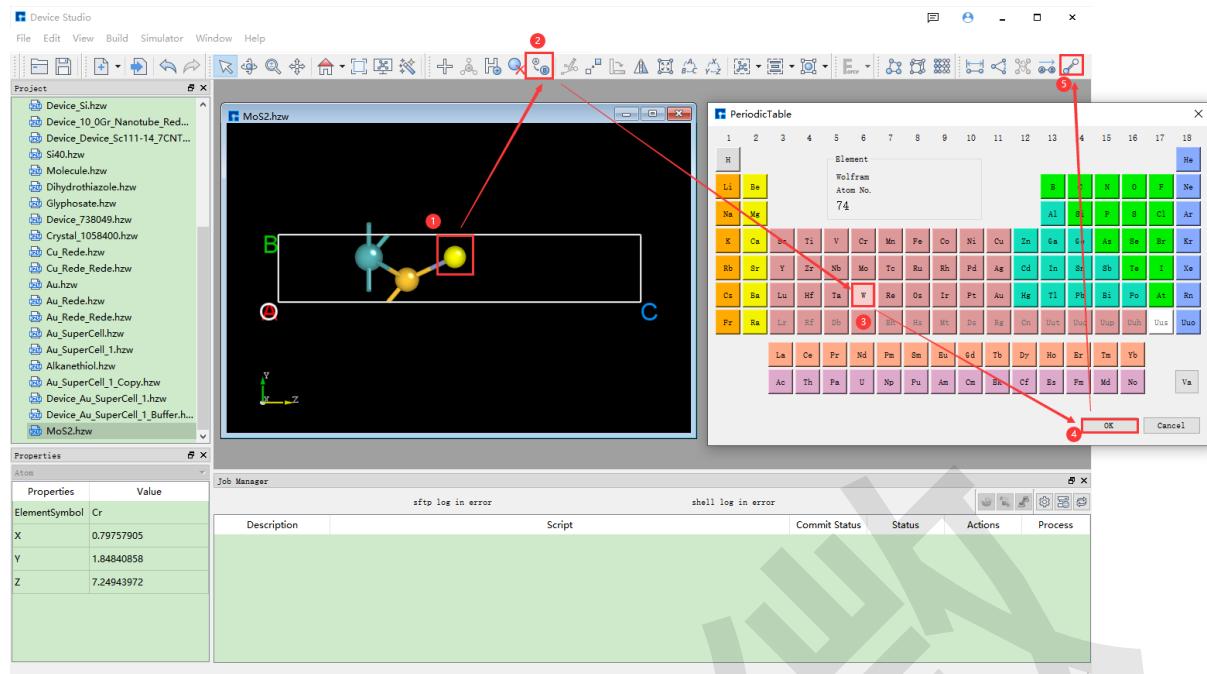


图 6.9: 替换原子操作界面

6.2.4 修改原子坐标

如将 图 6.15 (d) 中 W 原子的坐标位置由 (0.79757905, 1.84840857, 7.24943971) 修 改为 (1.0, 1.5, 12.0), 具体操作如 图 6.10 中红色部分所示, 先鼠标选中 W 原子, 则 在 Properties Explorer (结构属性区域) 查看到选中的 W 原子的坐标信息为 (0.5951619, 1.47565329, 7.18570423), 再鼠标分别双击合适位置填写 1.0、1.5 和 12.0, 则修改好 W 原子的坐标, 最后点击重新计算键长 Recalculate LinkerBond 快捷图标, 修改原子坐标后 结构的 3D 视图如 图 6.16 (e) 所示。

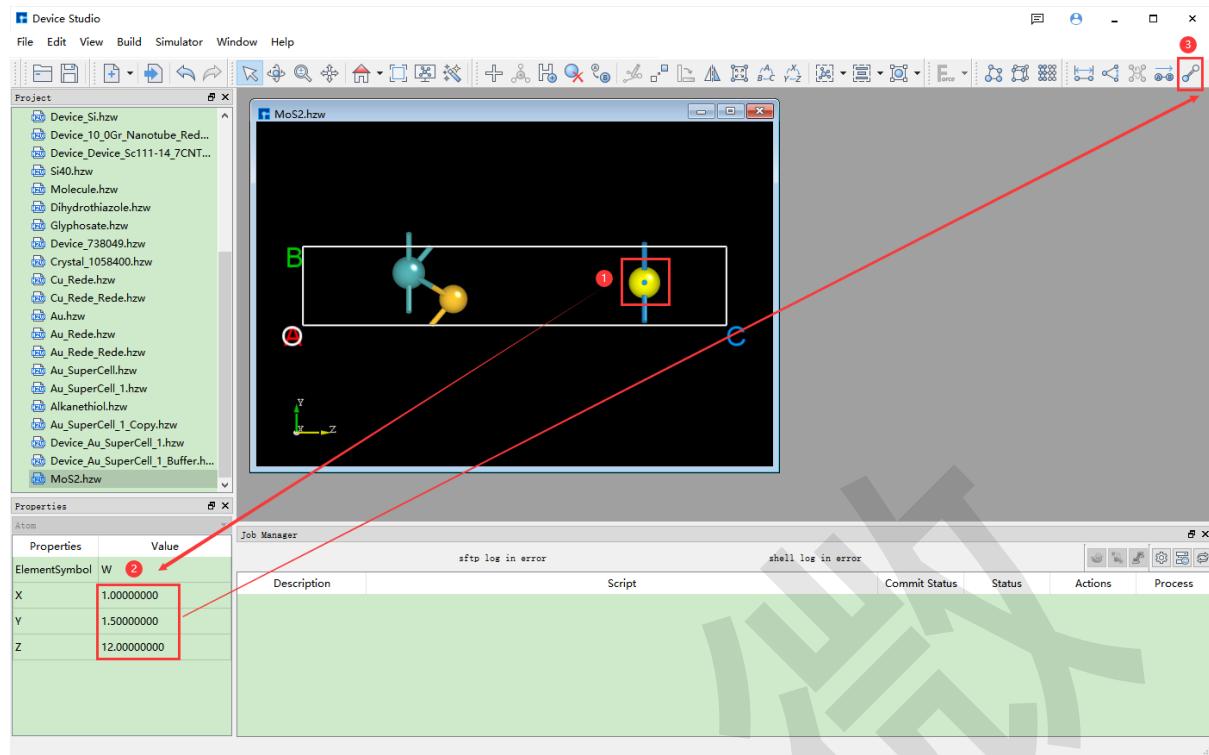


图 6.10: 修改原子坐标操作界面

6.2.5 移动选中的原子

对于 图 6.16 (e) 所示的结构，移动左边的两个原子，具体操作如 图 6.11 红色部分所示，先鼠标框选左边两个原子，点击 *Move Atom* 快捷图标，则弹出 *Move Atom* 界面，在界面中填写移动距离，点击沿着 Z 的正方向 (+z) 移动，移动之后，点击重新计算键长 *Recalculate LinkerBond* 快捷图标，移动后结构的 3D 视图如 图 6.17 (f) 所示。

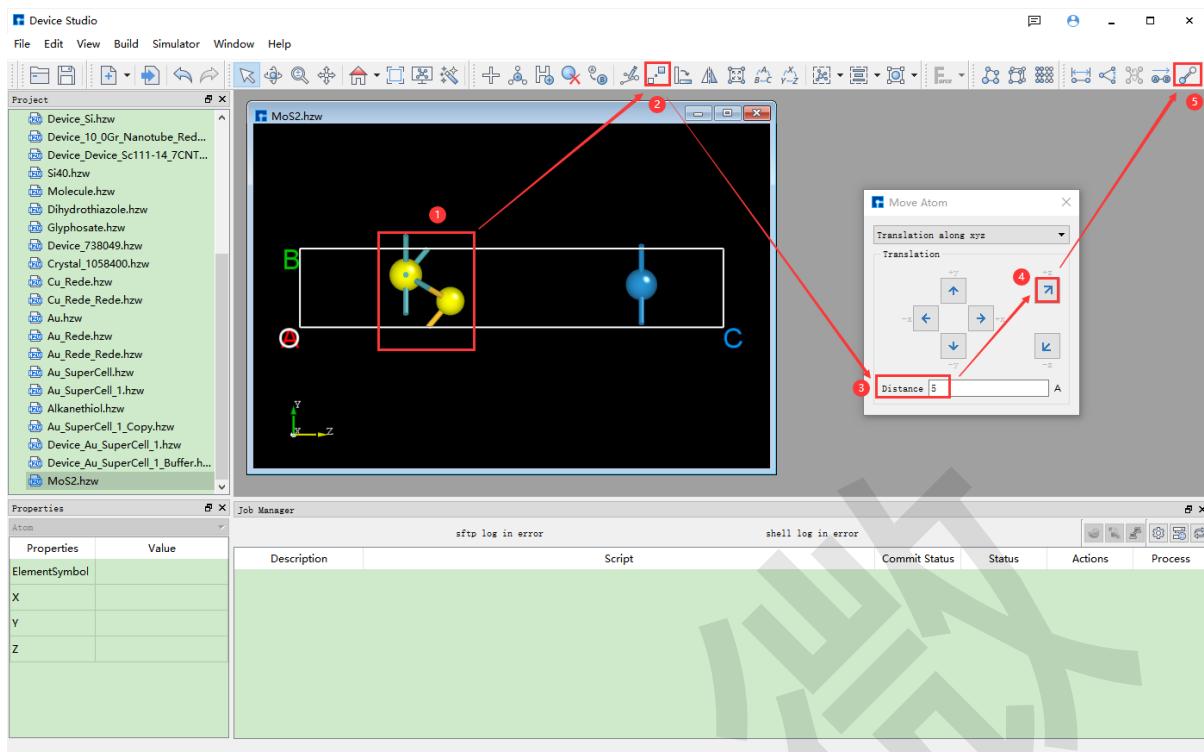


图 6.11: 移动选中的原子操作界面

备注

这里对于结构的修改操作只描述了一部分，用户可根据需要仔细阅读工具栏（*Toolbars*）中各快捷图标的功能描述，再进行相应的结构操作。

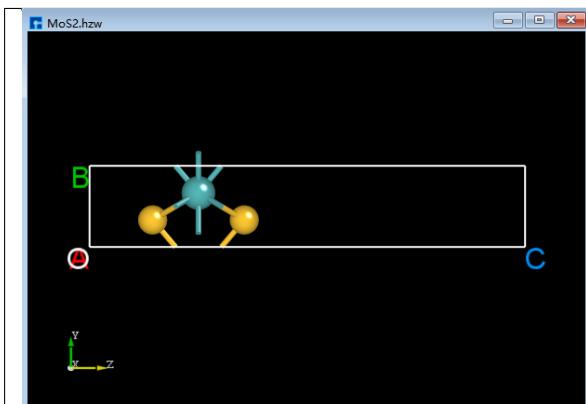


图 6.12: (a)

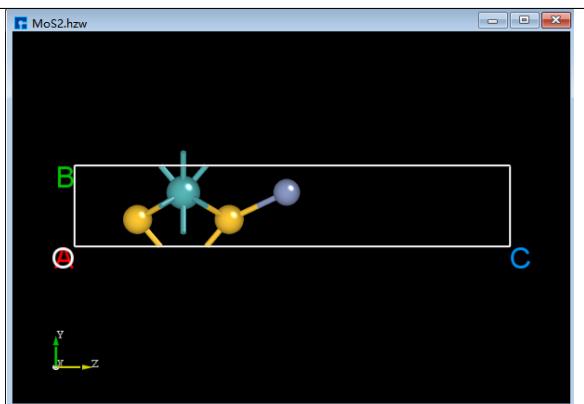


图 6.13: (b)

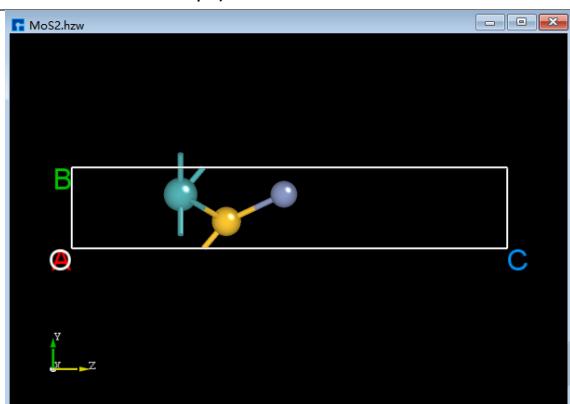


图 6.14: (c)

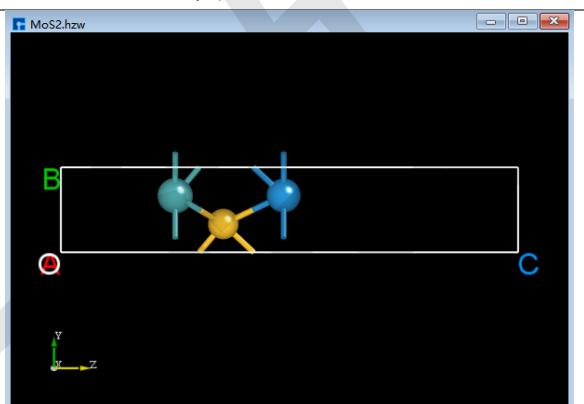


图 6.15: (d)

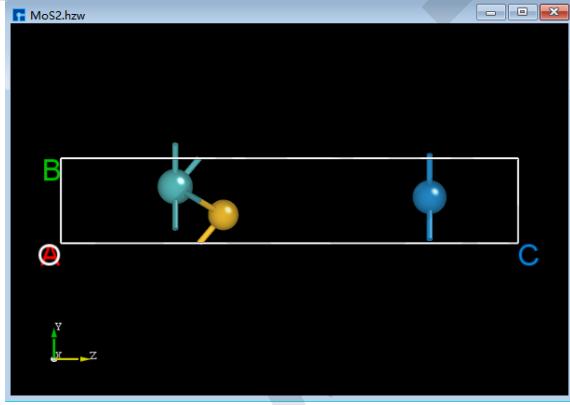


图 6.16: (e)

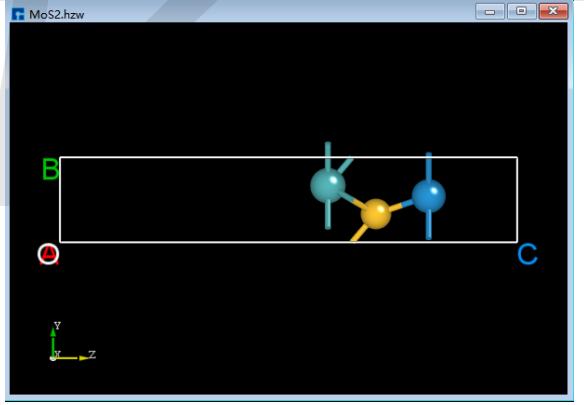


图 6.17: (f)

6.3 结构的信息测量

以 Si8 晶体结构为例描述结构的信息测量一系列操作。准备结构文件（Si8.hzw），鼠标拖动该文件到软件的 Project Explorer（项目管理区域）即可导入结构，结构的 zy 面 3D 视图如 图 6.18 所示。

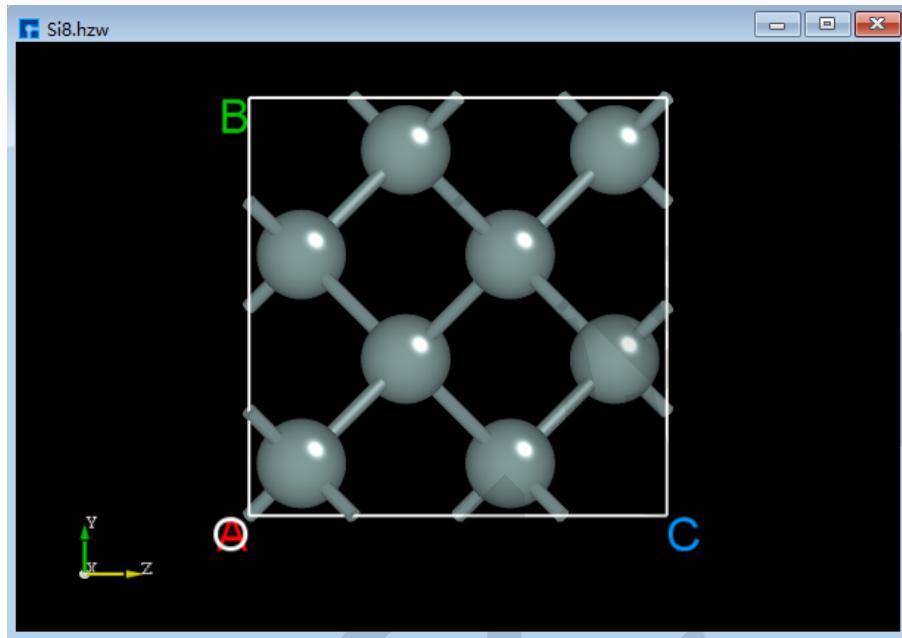


图 6.18: Si8 晶体结构

注意事项

对于结构的信息测量往往需要选中多个原子，在单击选中多个原子的过程中，建议用户先选择工具栏（Toolbars）上对应功能的快捷图标，按住 *Ctrl* 键，再逐个选中结构中的原子。若不按住 *Ctrl* 键，则无法通过鼠标单击的方式选中多个原子，亦无法进行结构的信息测量。

6.3.1 测量 2 个原子之间的距离

对于如 图 6.18 所示的晶体结构，先点击 Toolbars 上的 *Distance* 快捷图标，按住键盘上 *Ctrl* 键，再通过鼠标分别选中结构中的 2 个原子则可测量选中的 2 个原子之间的距离如图 6.19 (a) 所示，若不想保留测量数字，则鼠标右击 →Clear Annotation 即可。

6.3.2 测量 2 个原子之间的向量

对于如 图 6.18 所示的晶体结构，先点击 Toolbars 上的 *Vector between two atoms* 快捷图标，按住键盘上 *Ctrl* 键，再通过鼠标分别选中结构中的 2 个原子则可测量选中的 2 个原子之间的向量如 图 6.20 (b) 所示。

6.3.3 测量 3 个原子之间的夹角

对于如 图 6.18 所示的晶体结构，先点击 Toolbars 上的 *Angle* 快捷图标，按住键盘上 *Ctrl* 键，再通过鼠标分别选中结构中的 3 个原子则可测量选中的 3 个原子之间的夹角如 图 6.21 (c) 所示。

6.3.4 测量 4 个原子之间的二面角

对于如 图 6.18 所示的晶体结构，先点击 Toolbars 上的 *Dihedral angle* 快捷图标，按住键盘上 *Ctrl* 键，再通过鼠标分别选中结构中的 4 个原子则可测量选中的 4 个原子之间的二面角如 图 6.22 (d) 所示。

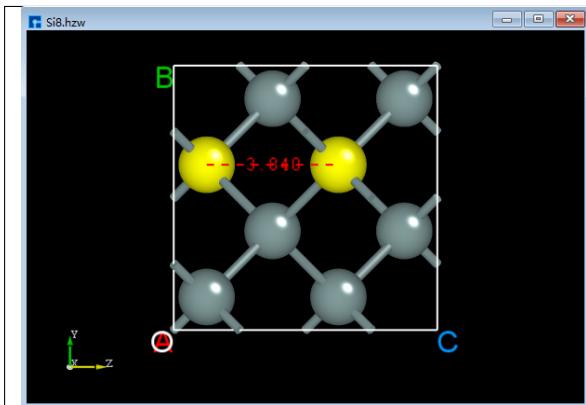


图 6.19: (a)

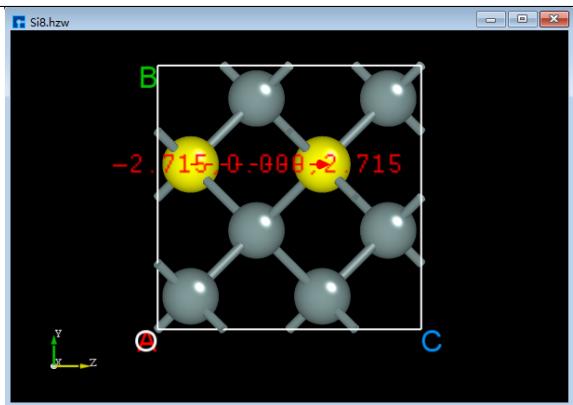


图 6.20: (b)

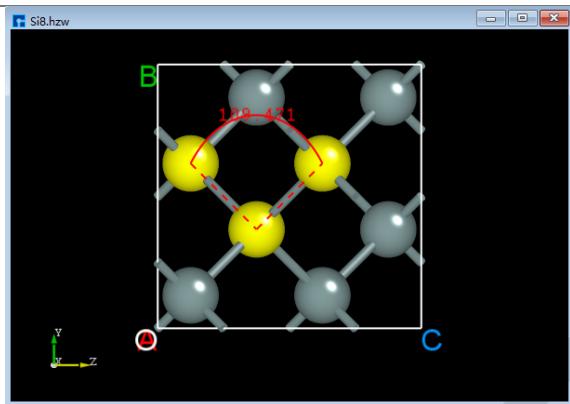


图 6.21: (c)

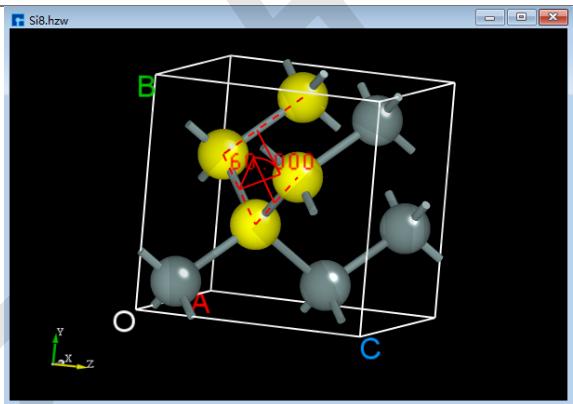


图 6.22: (d)



CHAPTER 7

原子结构精修模块

Device Studio 新增原子结构精修模块（Structure Refinement Module，简称：**SRM**），该模块全面升级了原子结构 3D 显示的渲染和抗锯齿效果，以等价原子的形式显示原子结构，支持球棍或多面体模式，若以多面体模式显示，可调节多面体的透明度；可修改原子结构中同一元素、多个原子或某一原子的颜色、半径和光照；具有 Device Studio 初始模板，用户可自定义颜色、半径或光照参数创建专属模板，并应用于导入原子结构精修模块的原子结构。

本章节中将全部以 **Si16O32** 晶体结构 (`Si16O32.hzw`) 为例来详细描述原子结构精修模块的功能。

原子结构精修模块主要功能如下：

- 新增原子结构精修模块功能，全面升级了原子结构 3D 显示的渲染和抗锯齿效果；
 - 原子结构显示更光滑立体，显示效果更好。
- 新增以 等价原子形式显示原子结构，支持球棍模式或多面体模式；
 - 支持用户选择原子结构的显示模式，球棍模式或多面体模式；
 - 多面体模式时，支持调节多面体的颜色和透明度。
- 新增支持结构 3D 视图编辑功能；
 - 支持修改原子结构中同一元素、多个原子或某一原子的颜色、半径和光照。

- 新增 Device Studio 初始模板功能;
 - 目前含有 2 套 Device Studio 初始模板, 支持用户选择模板并应用到原子结构中;
 - 模板根据元素周期表设置, 包含颜色、半径、光照以及背景颜色等参数。
- 新增支持创建用户专属模板功能;
 - 支持用户设置模板颜色、半径、光照以及背景颜色等参数, 生成专属模板并应用。
- 新增支持控制 Axes、Cell 和 OABC 在 *SRM-结构显示区域* 显示或隐藏功能;
- 新增支持设置结构 3D 视图 (*SRM-结构显示区域*) 背景颜色功能;
 - 支持设置 *SRM-结构显示区域* 背景颜色, 设置背景颜色为渐变效果。
- 新增结构导入、保存和导出功能。
 - 支持导入并显示 .dsxml、.hzw、.xyz、.cif、.pdb、.mol 结构文件;
 - 支持导出 .hzw、.xyz、.cif 结构文件;
 - 支持将原子结构的 3D 视图以 .png、.jpg、.bmp、.pdf、.tif、.eps 图片格式导出保存。

备注

- .dsxml 格式为 Device Studio 原子结构精修模块专属格式, 若想编辑后的结构文件下次导入继续编辑, 建议在 原子结构精修模块界面如 图 7.1 中点击 *File → Save As* 存储为 .dsxml 格式。
- 因原子结构精修模块显示结构文件的 **3D** 视图, .mol 结构文件分为 2D 和 3D, 若用户需要导入该格式结构文件到原子结构精修模块, 建议用户导入 3D 的 .mol 结构文件。

7.1 原子结构精修模块图形界面介绍

原子结构精修模块（Structure Refinement Module，简称：**SRM**）的图形界面如图 7.1 所示。

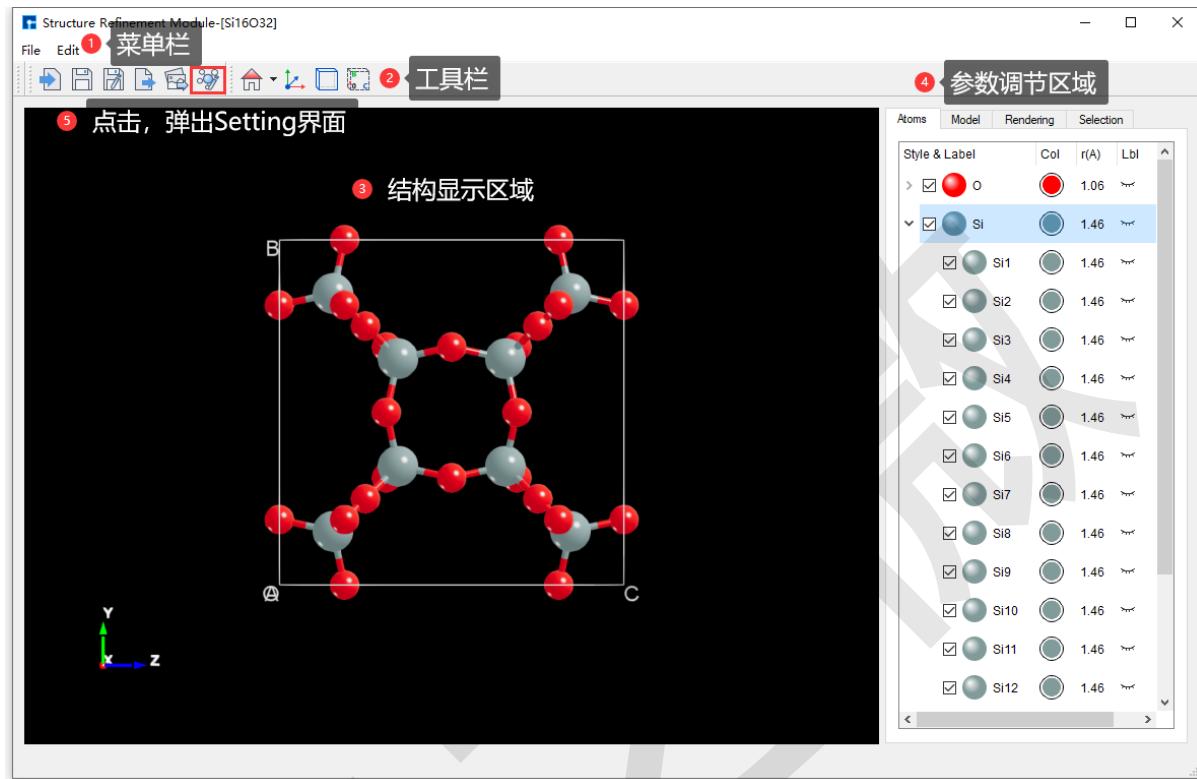


图 7.1: 原子结构精修模块图形界面

7.1.1 SRM-菜单栏

原子结构精修模块（Structure Refinement Module，简称：**SRM**）菜单栏如图 7.2 所示。

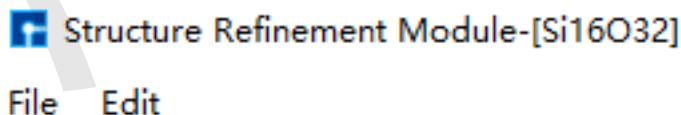


图 7.2: 原子结构精修模块菜单栏

7.1.1.1 SRM-菜单栏-File

点击原子结构精修模块（Structure Refinement Module，简称：SRM）菜单栏上 *File*，界面如 图 7.3 所示。

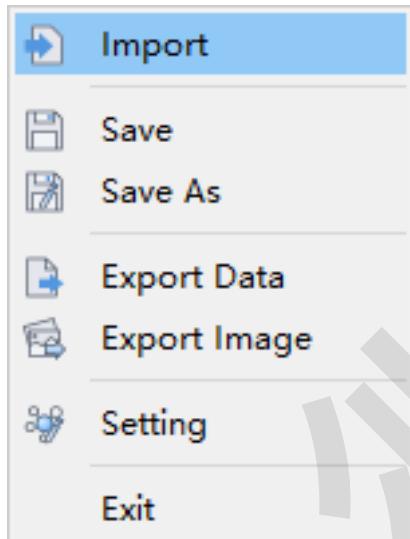


图 7.3: SRM-菜单栏-File

- *Import*：点击后，弹出导入结构文件（.dsxml、.hzw、.xyz、.cif、.pdb、.mol）界面如 图 7.27 所示，用户可根据需要导入原子结构。
- *Save*：默认置灰，不允许进行操作，当用户对原子结构进行编辑后，自动高亮，允许操作，点击后，保存用户对原子结构编辑后的参数，点击后，调用 *Save As* 的弹出保存结构文件 (.dsxml) 界面如 图 7.4。
- *Save As*：点击后，弹出保存结构文件 (.dsxml) 界面，用户可根据需要给结构文件命名，并选择存储位置，如 图 7.4 所示。
- *Export Data*：点击后，弹出导出结构文件 (.hzw、.xyz、.cif) 界面，用户可选择导出文件的格式，可根据需要给结构文件命名，并选择存储位置，如 图 7.5 所示。
- *Export Image*：点击后，弹出导出图片文件 (.png、.jpg、.bmp、.pdf、.tif、.eps) 界面，用户可根据需要给结构文件命名，并选择存储位置，如 图 7.6 所示。
- *Setting*：点击后，弹出 *Setting* 界面，该界面上包含 Device Studio 模板，可设置模板中元素半径、颜色和光照等参数。
- *Exit*：点击后，关闭原子结构精修模块界面。

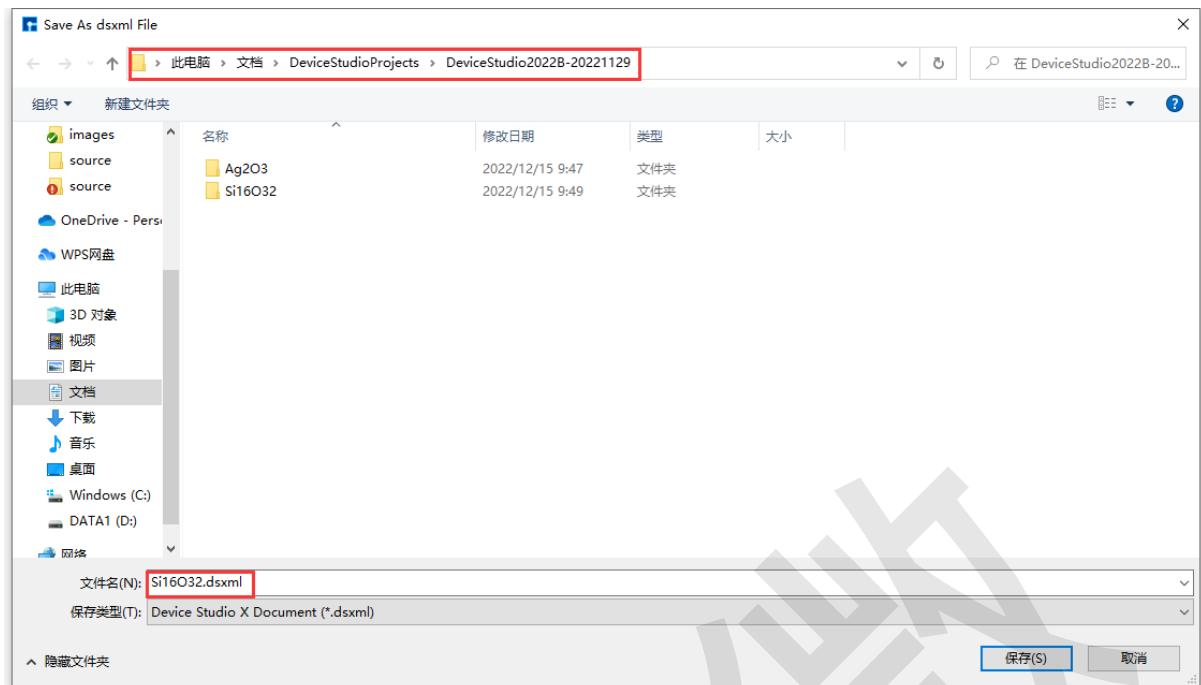


图 7.4: 保存结构文件 (.dsxml) 界面

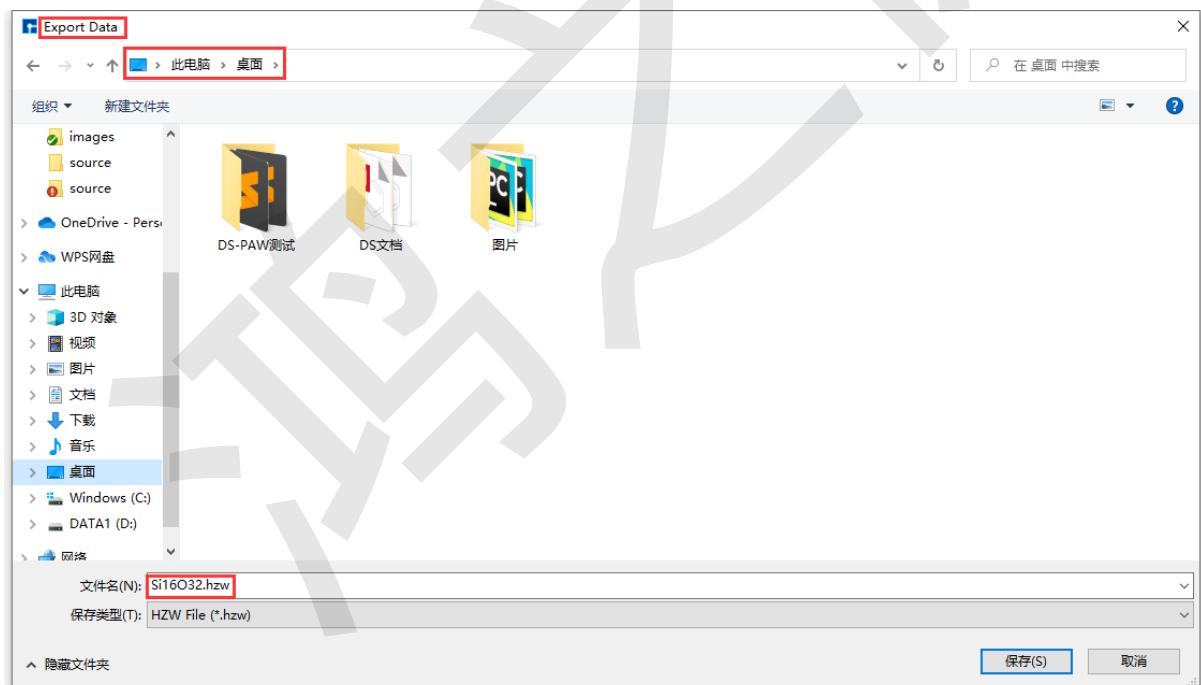


图 7.5: 导出结构文件 (.hzw、.xyz、.cif) 界面

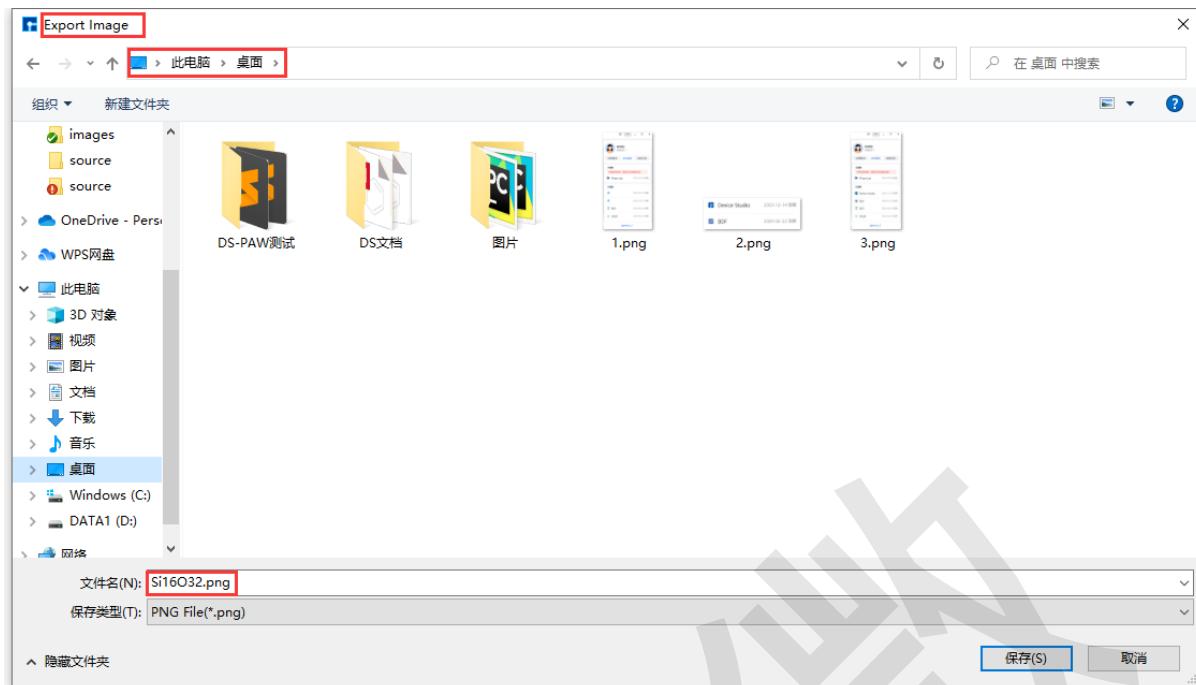


图 7.6: 导出图片文件 (.png、.jpg、.bmp、.pdf、.tif、.eps) 界面

7.1.1.2 SRM-菜单栏-Edit

点击原子结构精修模块（Structure Refinement Module，简称：SRM）菜单栏上 *Edit*，界面如 图 7.7 所示。



图 7.7: SRM-菜单栏-Edit

- *Home ZY View*：点击后，恢复原子结构在结构显示区域的初始状态，点击下拉可选择从不同视角查看结构的 3D 视图。

备注

Home ZY View 主要针对被旋转、平移、放大或缩小后的原子结构，用户可根据需要一键恢复其初始状态。

7.1.2 SRM-工具栏

原子结构精修模块（Structure Refinement Module，简称：SRM）菜单栏如 图 7.8 所示。



图 7.8: 原子结构精修模块工具栏

SRM-工具栏 各图标功能如下表格所示：

标号	图标	图标英文名称	功能描述
1		Import	点击后，弹出导入结构文件界面，用户可根据需要导入原子结构
2		Save	点击后，保存用户对原子结构编辑后的参数
3		Save As	点击后，弹出保存结构文件 (.dsxml) 界面，保存结构文件
4		Export Data	点击后，弹出导出结构文件 (.hzw、.xyz、.cif) 界面，用户可选择导出文件的格式
5		Export Image	点击后，弹出导出图片文件 (.png、.jpg、.bmp、.pdf、.tif、.eps) 界面，用户可根据需要给结构文件命名，并选择存储位置
6		Setting	点击后，弹出 Setting 界面，该界面对应于 Device Studio 模板，可设置模板中元素半径、颜色和光照等参数
7		Home View	ZY 点击后，恢复原子结构在结构显示区域的初始状态，点击下拉可选择从不同视角查看结构的 3D 视图
8		Show Axes	显示坐标轴
9		Hide Axes	隐藏坐标轴
10		Show Cell	当结构为晶体或器件时，显示其 Cell
11		Hide Cell	当结构为晶体或器件时，隐藏其 Cell
12		Show OABC	当结构为晶体或器件时，显示其 OABC
13		Hide OABC	当结构为晶体或器件时，隐藏其 OABC

备注

SRM-工具栏 中前 7 个图标与SRM-菜单栏 对应，详细功能可参考SRM-菜单栏。Show Cell 、 Hide Cell 、 Show OABC 、 Hide OABC 功能仅当导入的结构为晶体或器件时方可激活使

用。

7.1.3 SRM-结构显示区域

原子结构精修模块（Structure Refinement Module，简称：**SRM**）结构显示区域如图 7.9 所示，该区域的功能如下：

- 支持原子结构的 3D 视图的显示；
- 支持用户通过滚动 **鼠标中键** 将原子结构的 3D 视图放大或缩小；
- 支持用户按住 **鼠标右键**，拖动鼠标将原子结构的 3D 视图进行旋转；
- 支持用户按住 **鼠标中键**，拖动鼠标将原子结构的 3D 视图进行平移；
- 支持用户对原子结构进行编辑操作后的实时显示。

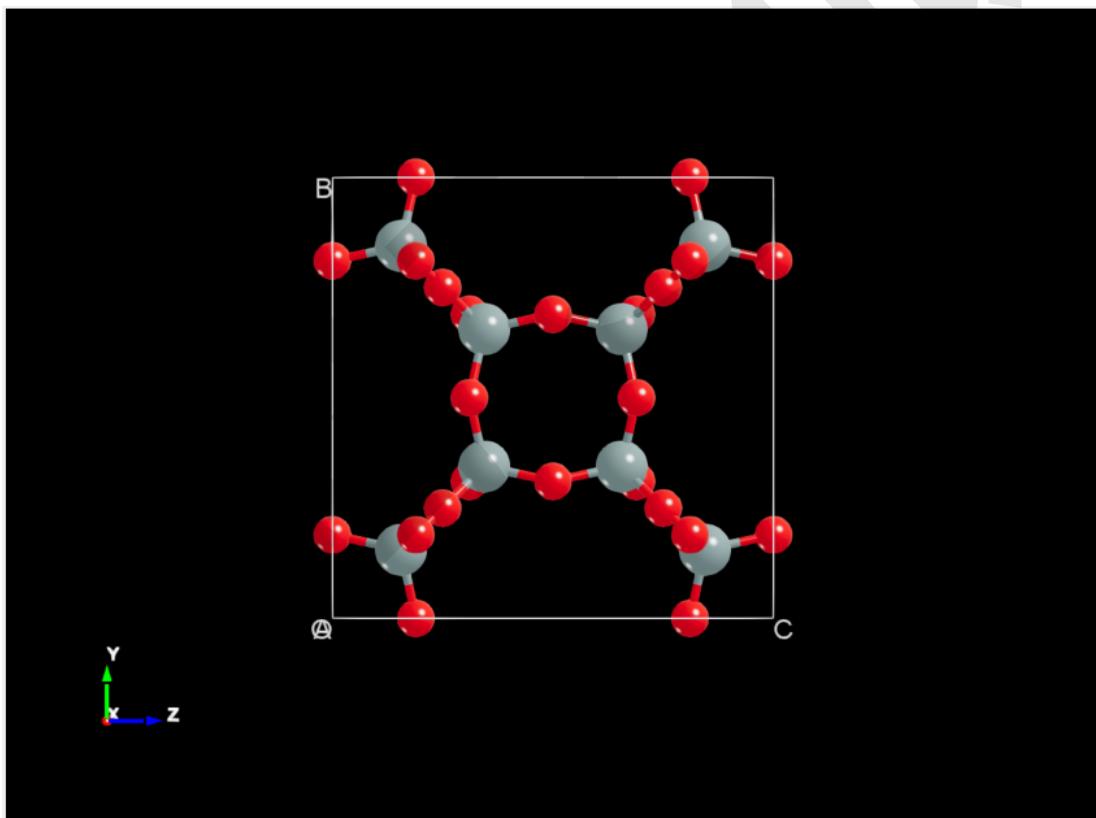


图 7.9: 原子结构精修模块结构显示区域

7.1.4 SRM-参数调节区域

原子结构精修模块（Structure Refinement Module，简称：SRM）参数区域如图 7.10 所示，该区域分为 Atoms、Model、Rendering 和 Selection 四个部分，下面将逐个说明。

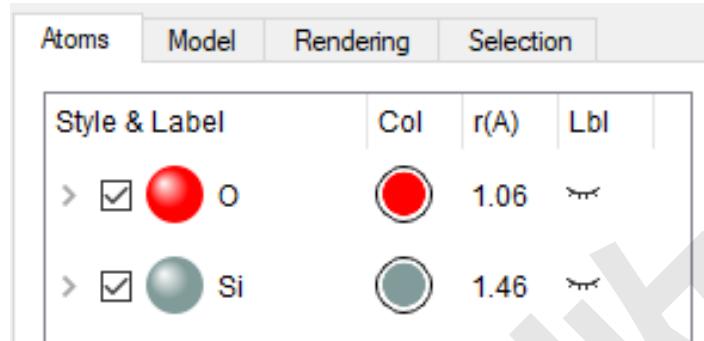


图 7.10: 原子结构精修模块参数调节区域

备注

原子结构精修模块参数调节区域必须在已经导入结构的情况下才可激活使用，否则为置灰状态，无法进行操作，对于该区域的功能描述均在已经激活可使用的情况下进行说明。

7.1.4.1 SRM-参数调节区域-Atoms 区域

原子结构精修模块（Structure Refinement Module，简称：SRM）参数调节区域的 Atoms 区域如图 7.11 所示，该模块功能如下：

- 支持将原子结构中的原子按照元素模式收缩或按照标签模式铺开，默认按照元素模式收缩；
- 支持修改原子结构中同一元素的颜色和半径；
- 支持修改原子结构中某一原子的颜色和半径；
- 支持显示或隐藏原子结构中同一元素的所有原子；
- 支持显示或隐藏原子结构中某一原子；
- 支持显示或隐藏原子结构中同一元素的所有原子的标签；
- 支持显示或隐藏原子结构中的某一原子的标签。

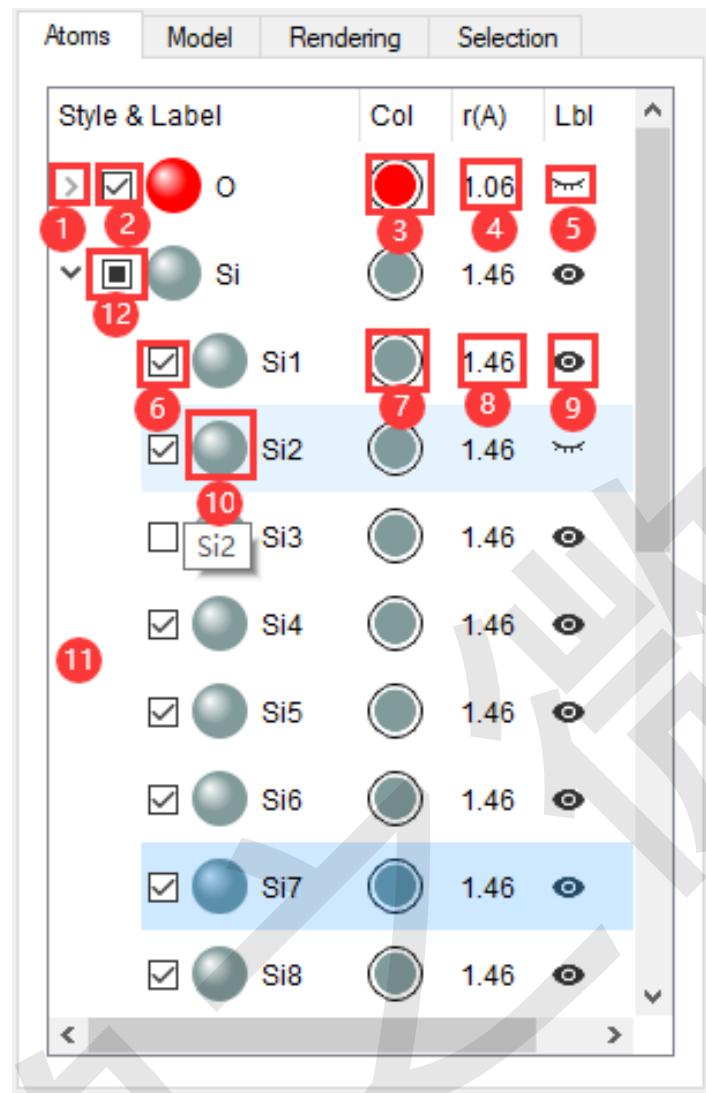


图 7.11: 原子结构精修模块参数调节区域-Atoms 区域

对原子结构精修模块 (Structure Refinement Module, 简称: **SRM**) 参数调节区域的 Atoms 区域, 即 图 7.11 中各标号功能进行说明如下:

- 图 7.11 中标号 ①: 将结构中的原子按照元素模式收缩或按照标签模式铺开;
 - 当按钮箭头向下时, 点击可将所有铺开的 O 原子按照 O 元素模式收缩;
 - 当按钮箭头像右时, 点击可将所有的 O 原子按照标签模式铺开。
- 图 7.11 中标号 ②: 在**SRM-结构显示区域** 显示或隐藏结构中同一元素的所有原子;
 - 勾选, 则在**SRM-结构显示区域** 显示所有的 O 原子;
 - 不勾选, 则在**SRM-结构显示区域** 隐藏所有的 O 原子。
- 图 7.11 中标号 ③: 修改结构中同一元素的颜色;

- 点击 图 7.11 中标号 ③ → 弹出 Select Color 界面如 图 7.12 所示 → 选择颜色或填写 RGB 值 → 点击 *OK* 按钮，即可修改○元素颜色（即：所有○原子颜色）。

备注

当原子结构为多面体模式显示时，修改结构中原子或元素的颜色，均会导致多面体颜色发生变化，用户可通过该方法修改多面体的颜色。

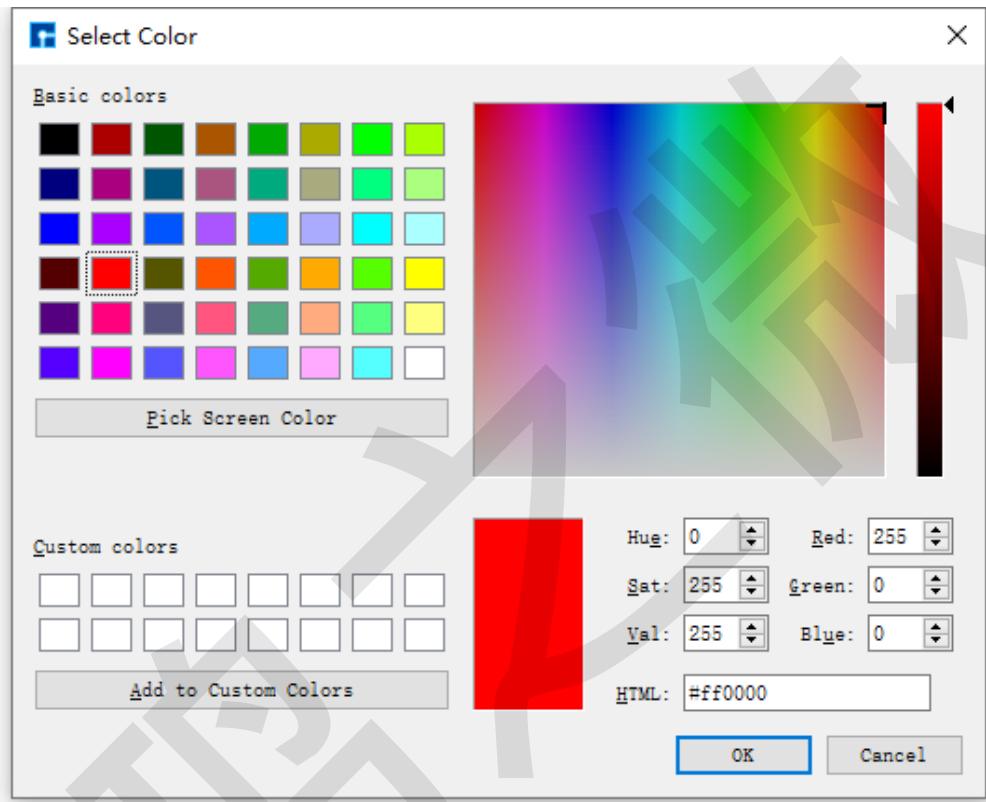


图 7.12: Select Color 界面

- 图 7.11 中标号 ④：修改结构中同一元素的半径；
 - 双击 图 7.11 中标号 ④ → 修改半径数值，即可修改○元素半径（即：所有○原子半径）。

备注

该半径数值为 Double 类型，只保留到小数点后 2 位有效数值。

- 图 7.11 中标号 ⑤：在 *SRM-结构显示区域* 显示或隐藏结构中同一元素所有原子的标签；

- 当眼睛按钮为闭眼时，则`SRM`-结构显示区域 隐藏所有 O 原子的标签；
- 当眼睛按钮为睁眼时，则`SRM`-结构显示区域 显示所有 O 原子的标签。
- 图 7.11 中标号 ⑥：在`SRM`-结构显示区域 显示或隐藏结构中某一原子；
 - 勾选，则在`SRM`-结构显示区域 显示 Si1 原子；
 - 不勾选，则在`SRM`-结构显示区域 隐藏 Si1 原子。
- 图 7.11 中标号 ⑦：修改结构中某一原子的颜色；
 - 点击 图 7.11 中标号 ⑦ → 弹出 Select Color 界面如 图 7.12 所示 → 选择颜色或 填写 RGB 值 → 点击 OK 按钮，即可修改 Si1 原子颜色。
- 图 7.11 中标号 ⑧：修改结构中某一原子的半径；
 - 双击 图 7.11 中标号 ⑧ → 修改半径数值，即可修改 Si1 原子半径。
- 图 7.11 中标号 ⑨：在`SRM`-结构显示区域 显示或隐藏结构中某一原子的标签；
 - 当眼睛按钮为闭眼时，则`SRM`-结构显示区域 隐藏 Si1 原子的标签；
 - 当眼睛按钮为睁眼时，则`SRM`-结构显示区域 显示 Si1 原子的标签。
- 图 7.11 中标号 ⑩：鼠标放置在该位置可悬浮显示原子的标签；
 - 当原子标签过长显示不齐全时，可将鼠标放置在该位置，则会显示该原子完整的标签。如鼠标放置在 图 7.11 中标号 ⑩ 位置处，则显示 Si2 原子完整的标签。
- 图 7.11 中标号 ⑪：可以是 Atoms 区域的任一位置，可通过鼠标右击的方式修改结构中所有元素的颜色或半径；
 - 修改结构中所有元素颜色：右击 → Color → Device Studio template 1 或 Device Studio template 2；
 - 修改结构中所有元素半径：右击 → Radius → Device Studio template 1 或 Device Studio template 2。

备注

Device Studio template 1 和 Device Studio template 2 为 Device Studio 的初始模板，模板根据元素周期表设置，包含颜色、半径、光照以及背景颜色等参数，选择模板，则将模板中的一系列参数都应用到结构上。

7.1.4.2 SRM-参数调节区域-Model 区域

原子结构精修模块（Structure Refinement Module，简称：**SRM**）参数调节区域的 Model 区域如 图 7.13 所示，该模块功能如下：

- 支持选择原子结构的显示模式，球棍模式或多面体模式；
- 多面体模式时，支持调节多面体透明度；
- 支持控制 Axes、Cell 和 OABC 在**SRM**-结构显示区域 显示或隐藏功能；
- 支持设置**SRM**-结构显示区域 背景颜色，设置背景颜色为渐变效果；

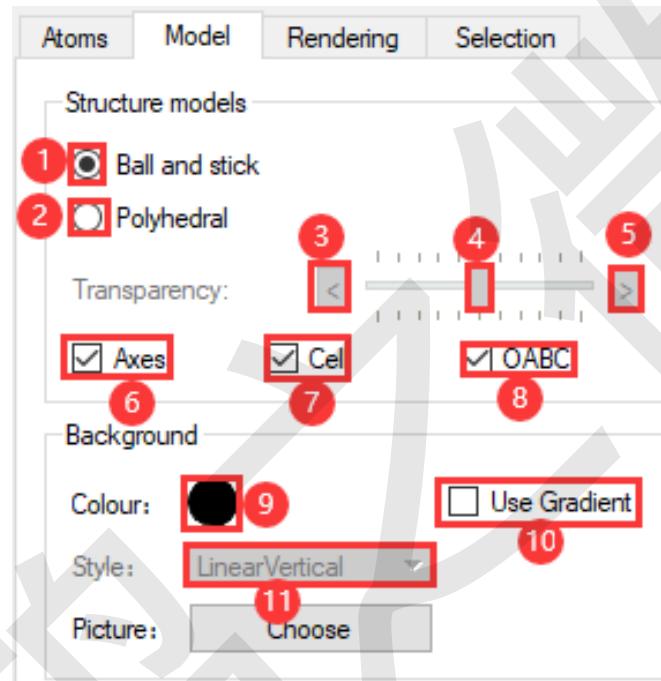


图 7.13: 原子结构精修模块参数调节区域-Model 区域

对原子结构精修模块（Structure Refinement Module，简称：**SRM**）参数调节区域的 Model 区域，即 图 7.13 中各标号功能进行说明如下：

- 图 7.13 中标号 ①：点击 ①，则选择原子结构的显示模式为球棍模式；
- 图 7.13 中标号 ②：点击 ②，则选择原子结构的显示模式为多面体模式；
- 图 7.13 中标号 ③：多面体模式时，点击 ③ 区域按钮，则使多面体的透明度增加，越来越透明；
- 图 7.13 中标号 ④：多面体模式时，鼠标拖动 ④ 区域按钮，可调节原子结构多面体的透明度；

- 鼠标左键点击 ④ 区域按钮，按住往左拖动，使多面体的透明度增加，越来越透明；
- 鼠标左键点击 ④ 区域按钮，按住往右拖动，使多面体的透明度降低，越来越不透明。
- 图 7.13 中标号 ⑤：多面体模式时，点击 ⑤ 区域按钮，则使多面体的透明度降低，越来越不透明；

备注

图 7.13 中标号 ③、④、⑤（即：多面体透明度调节），仅当图中 ②（Polyhedral）为选中状态时，即原子结构的显示模式为多面体模式时，方可激活使用；否则为置灰状态，无法使用。球棍模式和多面体模式只能二选一。

- 图 7.13 中标号 ⑥：在 **SRM-结构显示区域** 显示或隐藏坐标轴；
 - 勾选，则在 **SRM-结构显示区域** 显示原子结构的坐标轴；
 - 不勾选，则在 **SRM-结构显示区域** 隐藏原子结构的坐标轴。
- 图 7.13 中标号 ⑦：当结构为晶体或器件时，在 **SRM-结构显示区域** 显示或隐藏其 Cell；
 - 勾选，则在 **SRM-结构显示区域** 显示原子结构的 Cell；
 - 不勾选，则在 **SRM-结构显示区域** 隐藏原子结构的 Cell。
- 图 7.13 中标号 ⑧：当结构为晶体或器件时，在 **SRM-结构显示区域** 显示或隐藏其 OABC；
 - 勾选，则在 **SRM-结构显示区域** 显示原子结构的 OABC；
 - 不勾选，则在 **SRM-结构显示区域** 隐藏原子结构的 OABC。

备注

图 7.13 中标号 ⑦ 和 ⑧，仅当导入的结构为晶体或器件时，方可激活使用；若导入的结构为分子，该 2 个功能均为置灰状态，无法使用。

- 图 7.13 中标号 ⑨：修改 **SRM-结构显示区域** 背景颜色；

- 点击 图 7.13 中标号 ⑨ → 弹出 Select Color 界面如 图 7.12 所示 → 选择颜色或填写 RGB 值 → 点击 *OK* 按钮，即可修改 **SRM-结构显示区域** 背景颜色。
- 图 7.13 中标号 ⑩：设置 **SRM-结构显示区域** 背景颜色为渐变效果；
 - 勾选，则设置背景颜色为渐变效果；
 - 不勾选，则取消背景颜色的渐变效果。
- 图 7.13 中标号 ⑪：当 图 7.13 中标号 ⑩（即：Use Gradient）为勾选状态时，点击下拉按钮选择背景颜色的渐变类型。

备注

图 7.13 中标号 ⑪，当图中 ⑩（即：Use Gradient）为勾选状态时，方可激活使用；否则为置灰状态，无法使用。

7.1.4.3 SRM-参数调节区域-Rendering 区域

原子结构精修模块 (Structure Refinement Module, 简称：**SRM**) 参数调节区域的 Rendering 区域如 图 7.14 所示，该区域分 3 部分，分别为 **Atom**、**Bonds** 和 **Lighting**，分别支持对原子、键和原子结构进行光照调节，其中原子和键的光照通过 Multiplier (高光系数)、Diffuse (漫反射系数) 和 Shininess (光泽度) 3 个参数调节；**Lighting** 部分对整个原子结构进行光照调节。该模块功能如下：

- 支持对原子结构中的原子和键单独进行光照调节；
- 支持对整个原子结构进行光照调节。
 - 支持设置几束光照射到原子结构中，最多 4 束；
 - 支持调节光束照射在原子上的位置；
 - 支持调节光束的亮度；
 - 支持调节 Ambient (环境光) 参数。

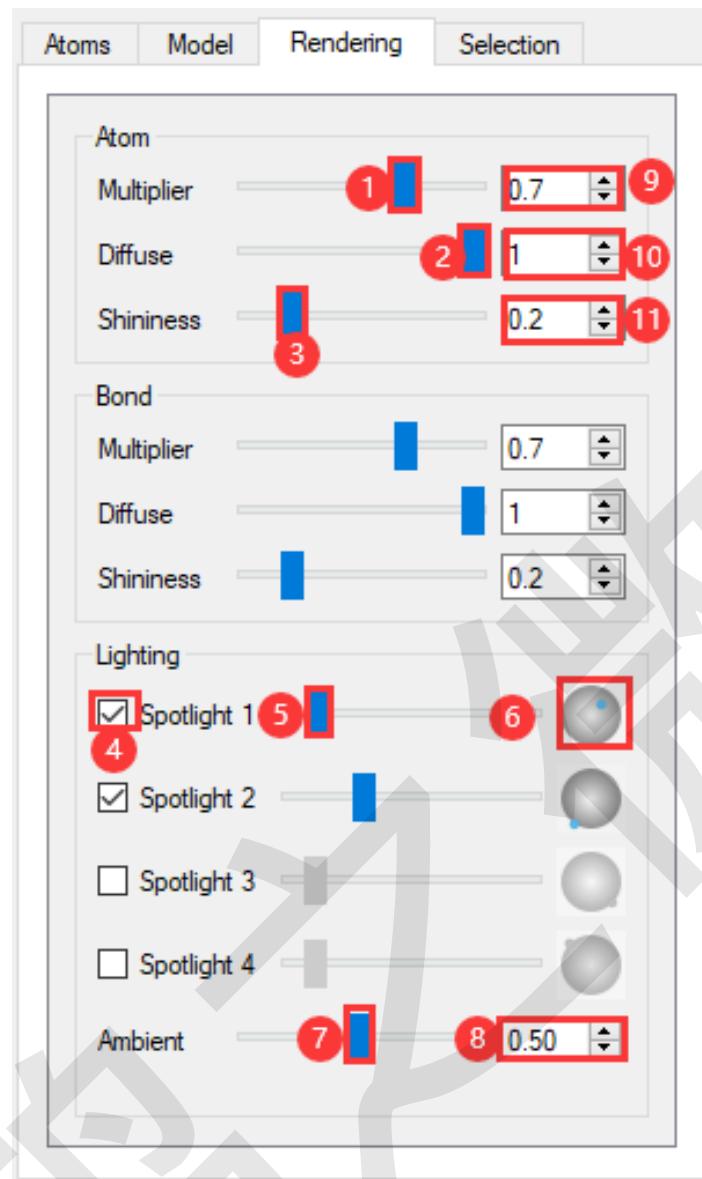


图 7.14: 原子结构精修模块参数调节区域-Rendering 区域

对原子结构精修模块（Structure Refinement Module，简称：**SRM**）参数调节区域的 Rendering 区域，即 图 7.14 中各标号功能进行说明如下：

- **Atom** 部分：调节原子结构中原子的光照；
 - 图 7.14 中标号 ①、②、③ 和 ⑨、⑩、⑪：鼠标拖动 ①、②、③ 位置 滑动按钮或在 ⑨、⑩、⑪ 位置 设置数值，即通过 Multiplier（高光系数）、Diffuse（漫反射系数）和 Shininess（光泽度）3 个参数调节结构中原子的光照，并可实时在 **SRM**-结构显示区域 看到调节效果。
- **Bond** 部分：调节原子结构中键的光照；
 - 该部分光照参数调节方式与 **Atom** 部分一致，这里不做说明。

- **Lighting** 部分：调节整个原子结构中光照，Spotlight 1 到 Spotlight 4 分别代表 4 束光，4 束光的位置初始是不同且固定的，正面 2 束，背面 2 束，最多可设置 4 束光照射到原子结构上。
 - 图 7.14 中标号 ④：控制光束（如：Spotlight 1）是否照射到原子上，并可实时在 **SRM-结构显示区域** 看到调节效果；
 - * 勾选，则光束（如：Spotlight 1）照射到原子上；
 - * 不勾选，则光束（如：Spotlight 1）不照射到原子上。
 - 图 7.14 中标号 ⑤：调节光束（如：Spotlight 1）的亮度，并可实时在 **SRM-结构显示区域** 看到调节效果；
 - * 鼠标左键点击 ⑤ 区域按钮，按住往左拖动，则光束亮度降低，越来越暗；
 - * 鼠标左键点击 ⑤ 区域按钮，按住往右拖动，则光束亮度增加，越来越亮。
 - 图 7.14 中标号 ⑥：调节光束照射在原子上的位置，并可实时在 **SRM-结构显示区域** 看到调节效果；
 - * 点击 图 7.14 中标号 ⑥，调节光束照射在原子上位置的操作如 图 7.15 所示。
 - 图 7.14 中标号 ⑦ 和 ⑧，鼠标拖动 ⑦ 位置 滑动按钮或在 ⑧ 位置 设置数值，即通过 Ambient（环境光）参数调节原子结构的光照，并可实时在 **SRM-结构显示区域** 看到调节效果。



图 7.15: 调节光束照射在原子上位置的操作界面

备注

- Multiplier（高光系数）取值范围 [0 1], Atom 和 Bond 部分默认值为 0.7;
- Diffuse（漫反射系数）取值范围 [0 1], Atom 和 Bond 部分默认值为 1;
- Shininess（光泽度）取值范围 [0.001 1], Atom 和 Bond 部分默认值为 1;
- Ambient（环境光）取值范围 [0 1], 默认值 0.5。

7.1.4.4 SRM-参数调节区域-Selection 区域

原子结构精修模块 (Structure Refinement Module, 简称: SRM) 参数调节区域的 Selection 区域默认置灰, 不允许进行操作, 在SRM-结构显示区域 选中原子, 则可激活使用。如在SRM-结构显示区域 选中 Si16O32 晶体结构中的 O43 原子, 此时 Selection 区域显示 O43 原子属性如 图 7.16 所示。该模块功能如下:

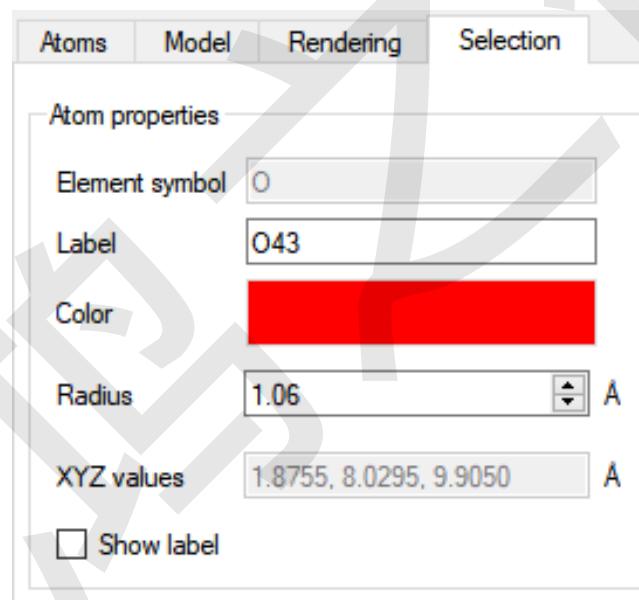


图 7.16: 原子结构精修模块参数调节区域-Selection 区域

- *Element symbol* : 显示选中原子 (如: O43 原子) 的元素名, 不支持修改;
- *Label* : 显示选中原子 (如: O43 原子) 的标签, 支持编辑修改;
- *Color* : 显示选中原子 (如: O43 原子) 的颜色。点击 *Color* 后的颜色按钮 → 弹出 Select Color 界面如 图 7.12 所示 → 选择颜色或填写 RGB 值 → 点击 *OK* 按钮, 即可修改 O43 原子颜色;

- *Radius*：显示选中原子（如：O43 原子）的半径，支持编辑修改；
- *XYZ values*：显示选中原子（如：O43 原子）的坐标信息，不支持修改；
- *Show label*：勾选，则在SRM-结构显示区域 显示选中原子（如：O43 原子）的标签；不勾选，则隐藏。

7.1.5 SRM-Setting 界面

点击原子结构精修模块（Structure Refinement Module，简称：**SRM**）图形界面**SRM**-工具栏上的 *Setting* 图标如 [图 7.17](#)，则弹出原子结构精修模块 Setting 界面如 [图 7.18](#) 所示。该模块功能如下：

- 支持用户选择 Device Studio 初始模板并应用到结构中；
 - 初始模板 Device Studio template 1 和 Device Studio template 2 分别如 [图 7.18](#) 和 [图 7.19](#) 所示。
- 支持用户设置颜色、半径、光照以及背景颜色等参数，生成专属模板并应用。

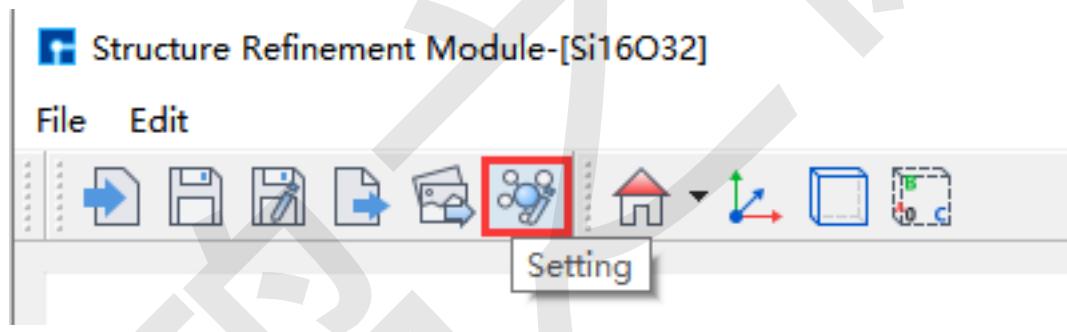


图 7.17: 弹出 Setting 界面的操作步骤

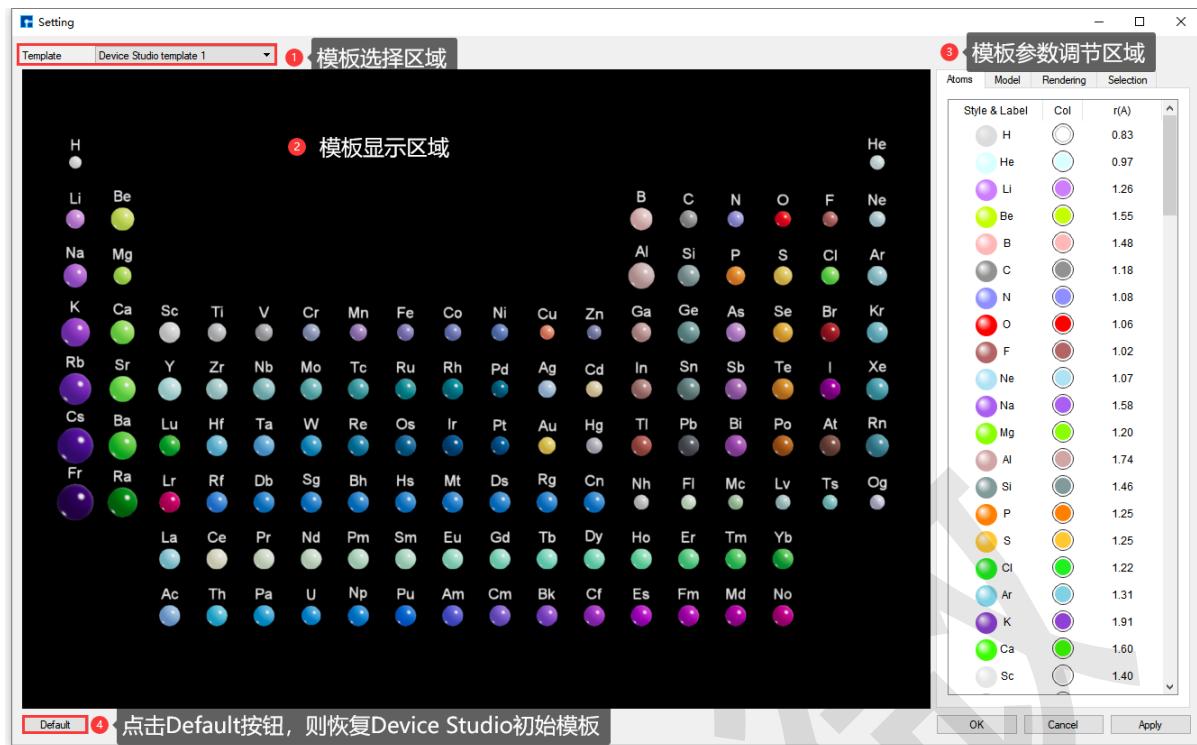


图 7.18: Setting 界面 (Device Studio template 1)

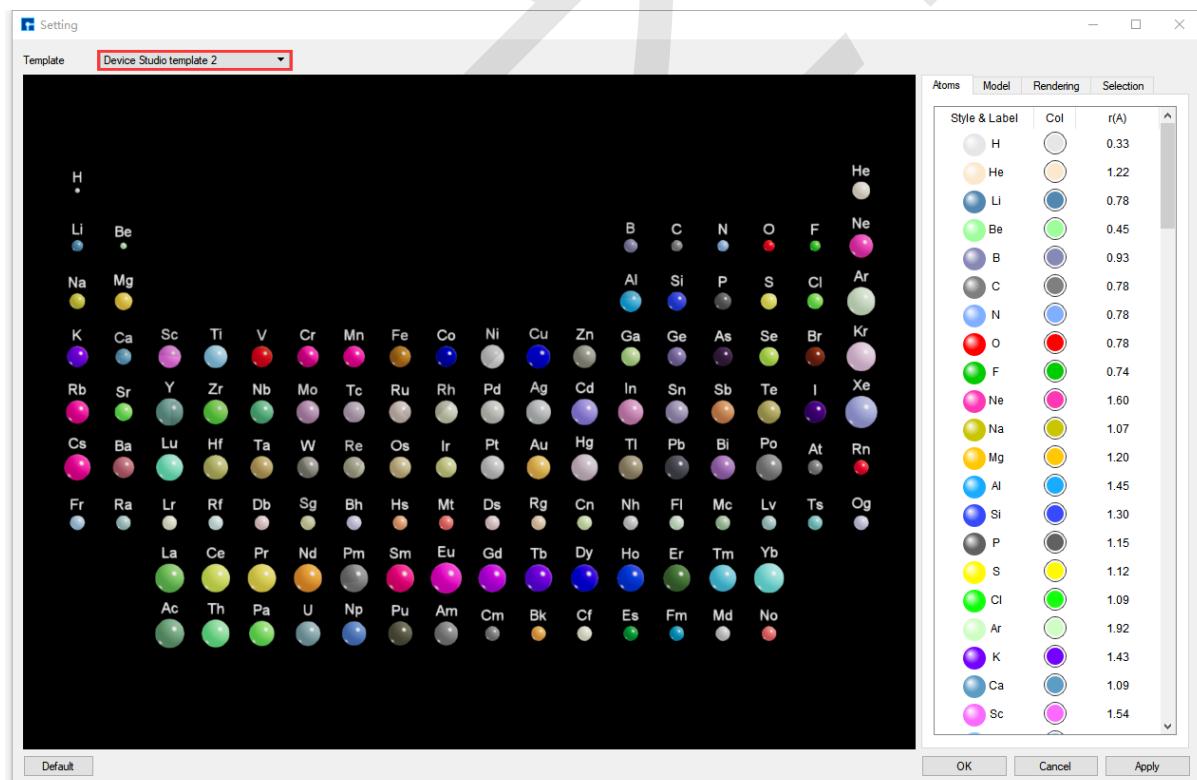


图 7.19: Setting 界面 (Device Studio template 2)

对原子结构精修模块 Setting 界面 图 7.18 中参数进行功能说明如下：

7.1. 原子结构精修模块图形界面介绍

- 模板选择区域:
 - 原子结构精修模块目前含有 2 套 Device Studio 初始模板 Device Studio template 1 和 Device Studio template 2 分别如 [图 7.18](#) 和 [图 7.19](#) 所示, 点击下拉按钮可进行选择, 默认使用模板 Device Studio template 1。模板中包含:
 - * 模板按照元素周期表设置, 默认显示元素周期表结构所有的原子;
 - * 默认显示元素周期表结构所有原子的标签;
 - * 默认的元素颜色参数;
 - * 默认的元素半径参数;
 - * 默认的光照参数;
 - * 默认显示元素周期表结构的背景颜色为黑色。
- 模板显示区域:
 - 显示模板元素周期表结构文件, 对模板的参数调节亦会实时在该区域显示;
- 模板参数调节区域:
 - 该区域除了不能选择模板元素周期表结构的 多面体模式, 其余功能与原子结构精修模块的[SRM-参数调节区域](#)一致, 这里不做详细说明。
- *Default* : 点击该按钮, 则恢复 Device Studio 初始模板;
- *OK* : 点击该按钮, 关闭 Setting 界面, 保存模板参数, 并参数应用到原子结构精修模板界面中的结构;
- *Cancel* : 点击该按钮, 关闭 Setting 界面, 不保存模板参数;
- *Apply* : 点击该按钮, 不关闭 Setting 界面, 保存模板参数, 并参数应用到原子结构精修模板界面中的结构。

备注

若想生成用户专属模板, 可在 Device Studio 初始模板 Device Studio template 1 和 Device Studio template 2 分别如 [图 7.18](#) 和 [图 7.19](#) 的基础上, 设置颜色、半径、光照以及背景颜色等参数, 点击 Setting 界面上的 *OK* 或 *Apply* 即可。具体参数设置操作可参考[SRM-参数调节区域](#)。

7.2 在原子结构精修模块导入结构

在使用原子结构精修模块（Structure Refinement Module，简称：**SRM**）之前需登录并启动 *Device Studio* 并创建 *Device Studio* 项目，导入 Si16O32 晶体结构（鼠标拖动 Si16O32 结构文件到 *Device Studio* 的项目管理区域（*Project Explorer*）即可导入结构），通过 *Device Studio* 主界面进入原子结构精修模块，并在原子结构精修模块中导入结构有 2 种方式。

1. 方式一：*Device Studio* 主界面中已经显示结构（如：Si16O32 晶体结构），如图 7.20 所示操作，即可在原子结构精修模块导入 Si16O32 晶体结构如图 7.21；

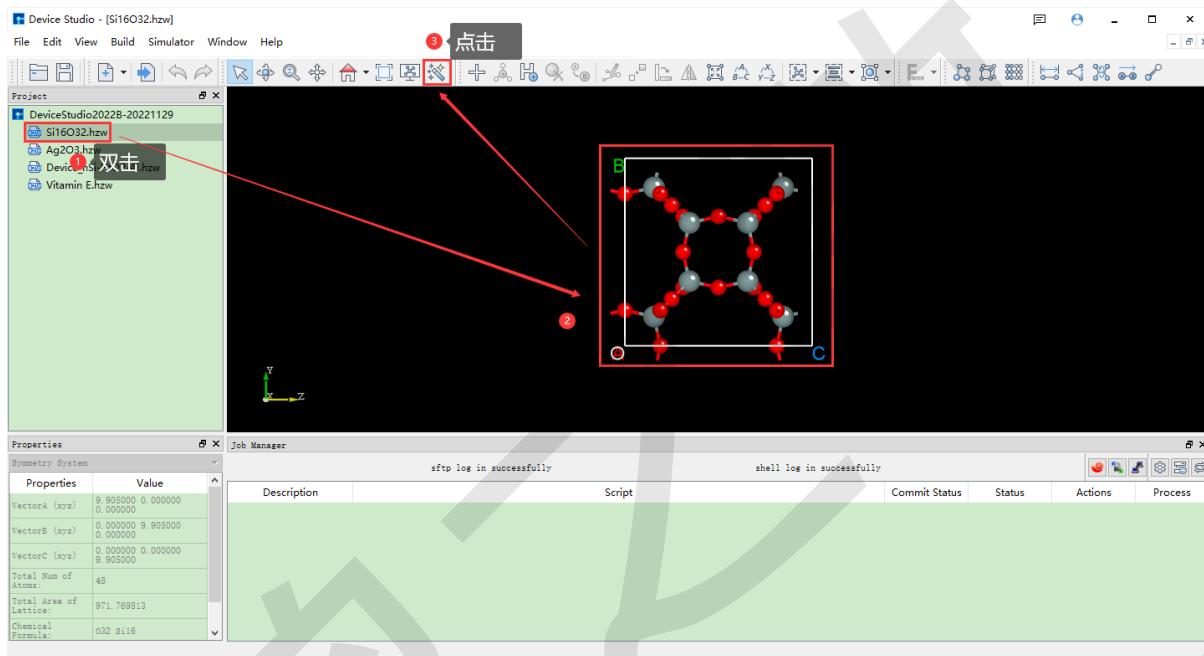


图 7.20: 显示 Si16O32 晶体结构的 *Device Studio* 主界面（不显示等价原子）

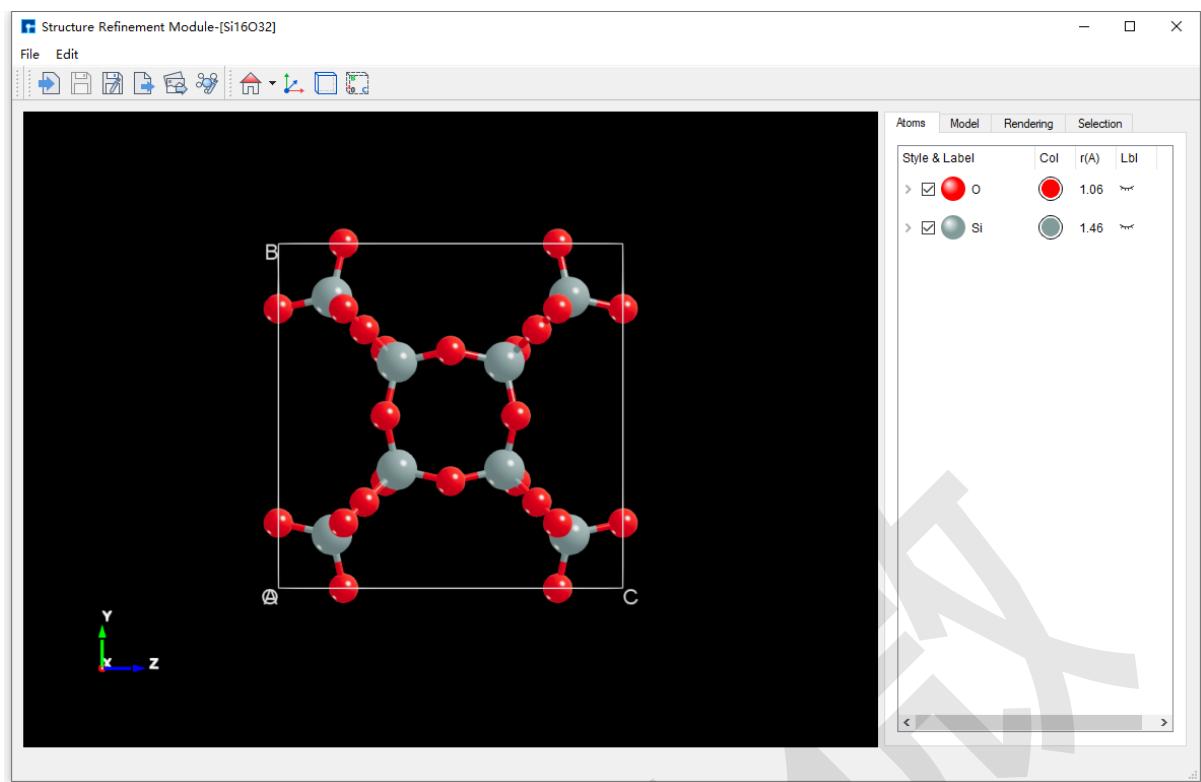


图 7.21: 导入 Si16O32 晶体结构的原子结构精修模块界面（显示等价原子）

Si16O32 晶体结构在 Device Studio 主界面和原子结构精修模块界面中分别以 不显示等价原子 和 显示等价原子 的方式显示，分别如 图 7.22 和 图 7.23 所示。

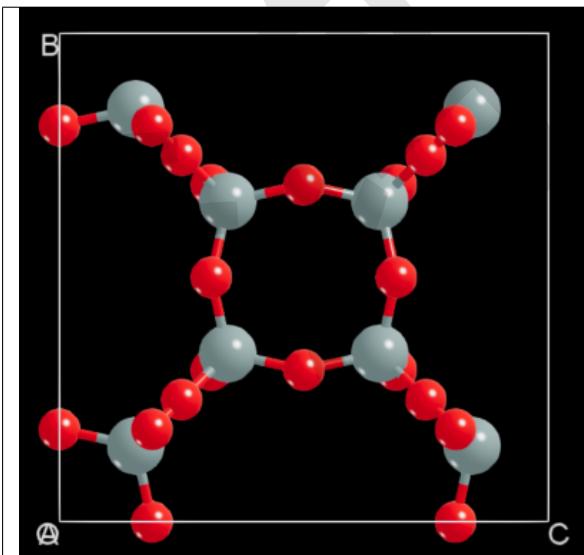


图 7.22: Si16O32 晶体结构不显示等价原子

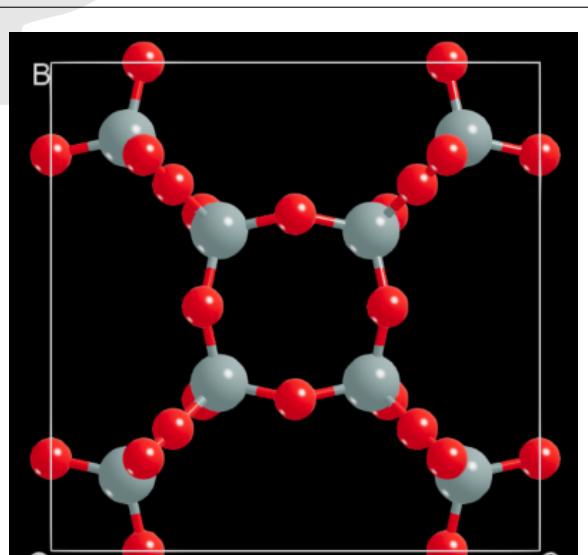


图 7.23: Si16O32 晶体结构显示等价原子

2. 方式二：Device Studio 主界面中没有显示结构，如 图 7.24 所示操作，即可进入原

子结构精修模块如图 7.25。如图 7.26 和图 7.27 所示操作，即可将 Si16O32 晶体结构导入原子结构精修模块，导入 Si16O32 晶体结构后的原子结构精修模块界面如图 7.21 所示。

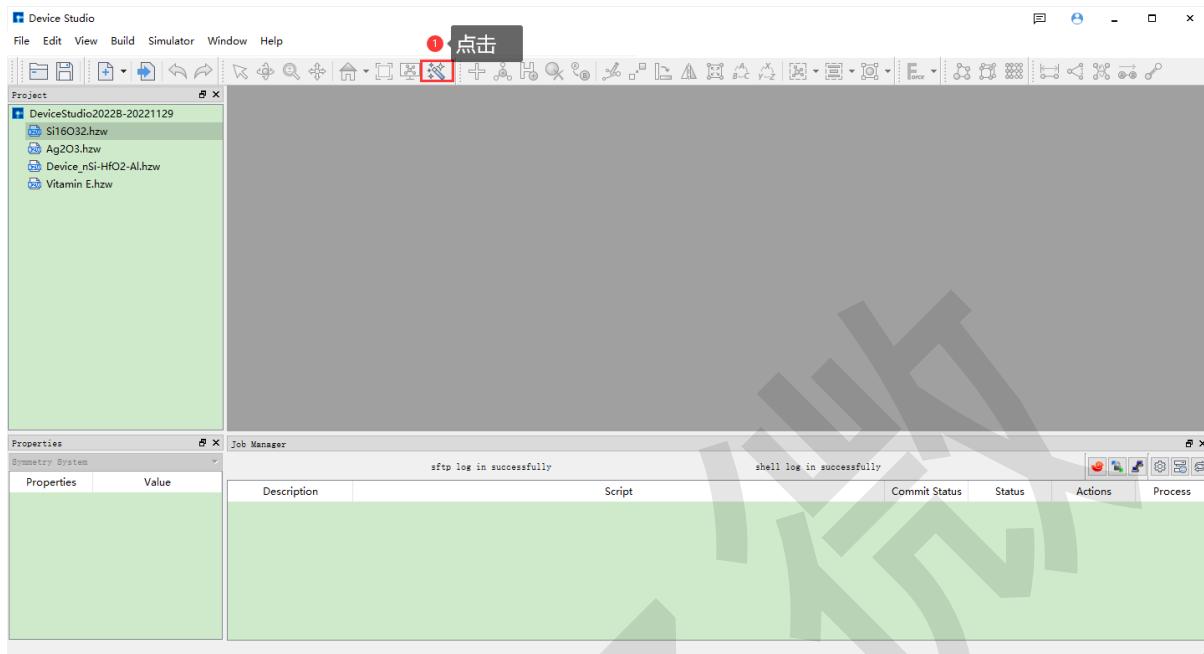


图 7.24: 没有显示结构的 Device Studio 主界面

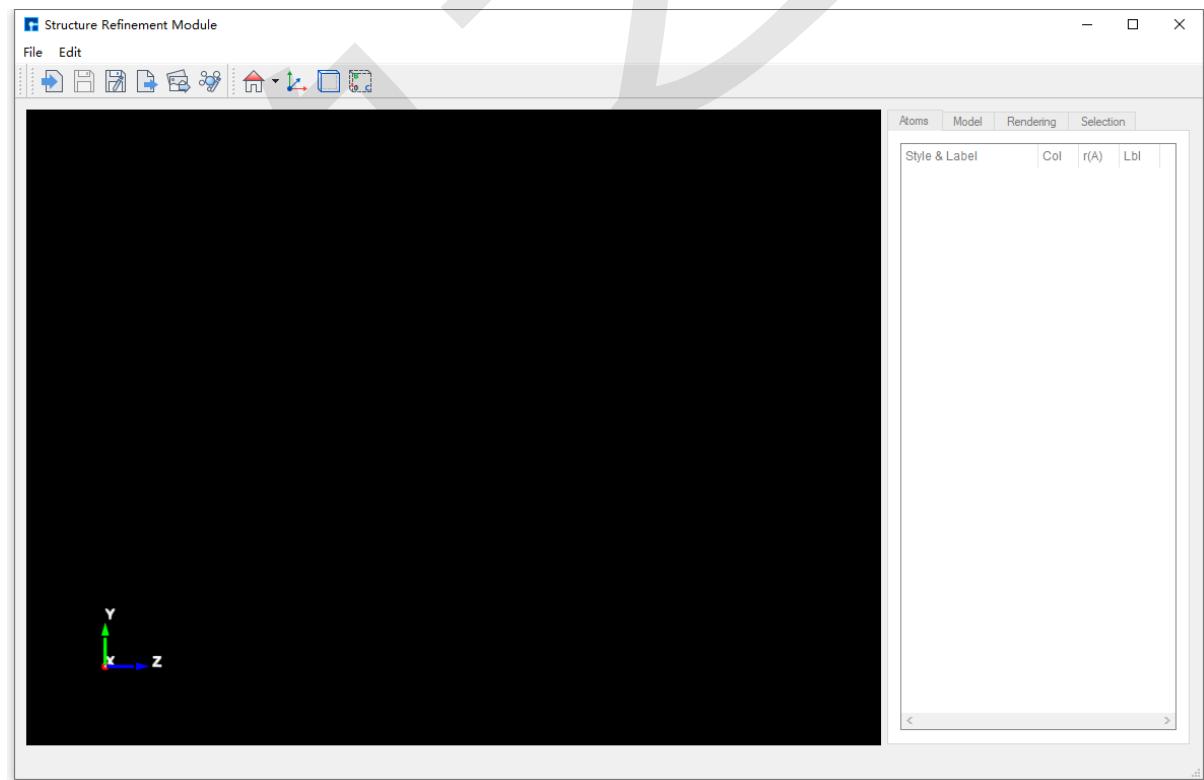


图 7.25: 没有显示结构的原子结构精修模块界面

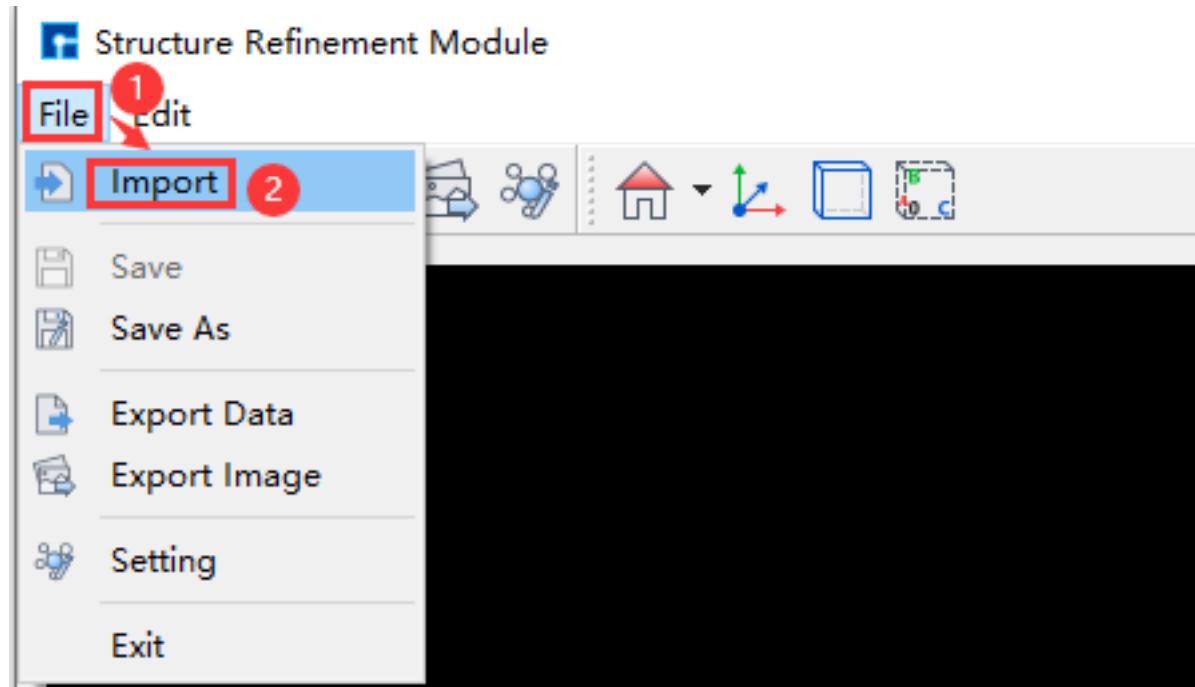


图 7.26: 弹出原子结构精修模块导入结构操作界面

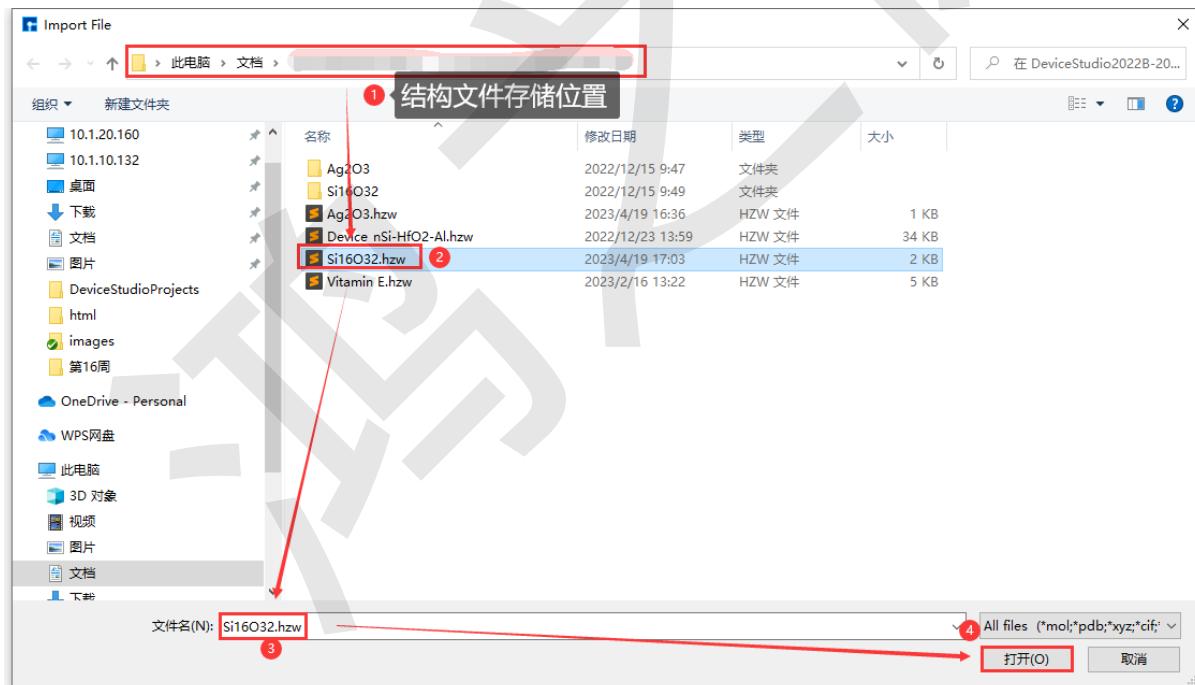
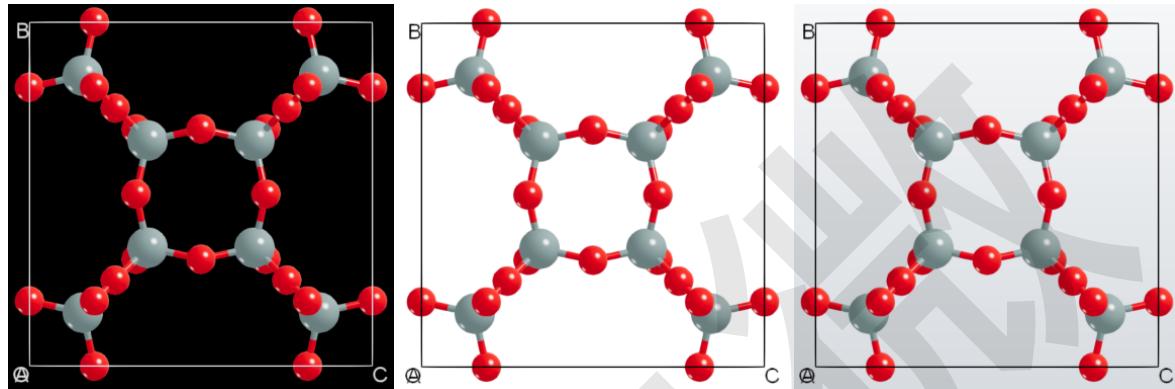


图 7.27: 选中 Si16O32 晶体结构文件导入原子结构精修模块操作界面

7.3 修改原子结构精修模块背景颜色

修改原子结构精修模块背景颜色，需在导入结构的情况下修改，如已经在该模块导入 Si₁₆O₃₂ 晶体结构如图 7.21 所示，导入结构的操作可参考在原子结构精修模块导入结构节内容，具体操作这里不做详细说明。

以 Si₁₆O₃₂ 晶体结构为例，来详细描述在原子结构精修模块 如何修改显示 Si₁₆O₃₂ 晶体结构的背景颜色，即修改 SRM- 结构显示区域 的背景颜色。



1. 如图 7.28 所示为将显示 Si₁₆O₃₂ 晶体结构的 背景颜色由 纯黑色修改为 纯白色的 操作界面。

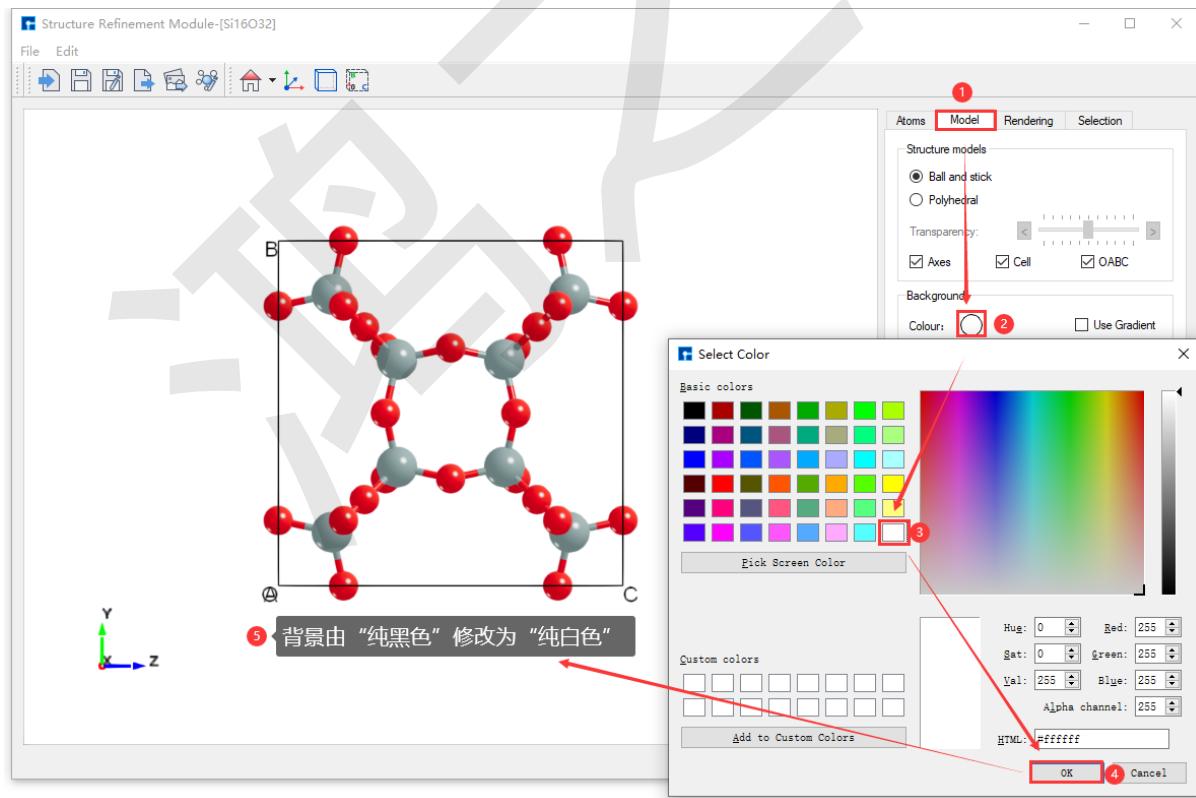


图 7.28: 将显示 Si₁₆O₃₂ 晶体结构的 背景颜色由 纯黑色修改为 纯白色的的操作界面

2. 如 图 7.29 所示为将显示 Si16O32 晶体结构的 背景颜色由 纯白色修改为 渐变色效果的操作界面。

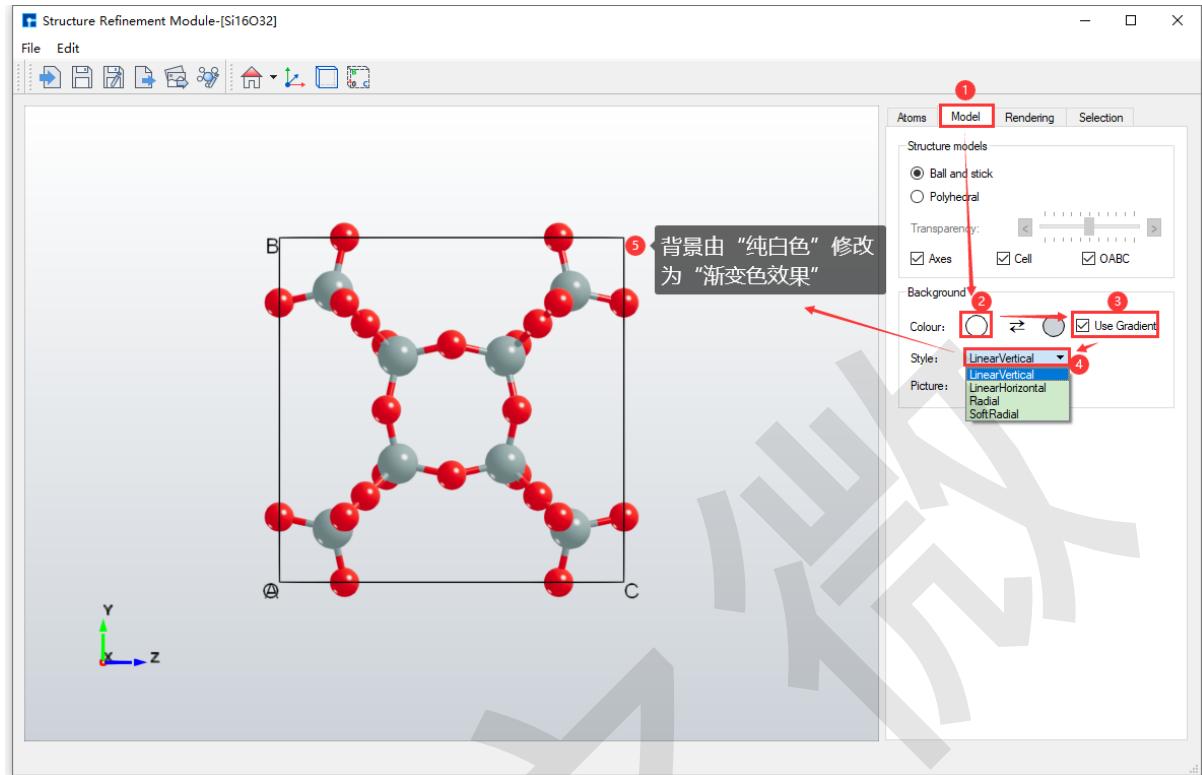


图 7.29: 将显示 Si16O32 晶体结构的 背景颜色由 纯白色修改为 渐变色效果的操作界面

3. 在 图 7.29 基础上, 点击 图 7.29 标号 ④ 区域下拉按钮可选择背景颜色的渐变类型。

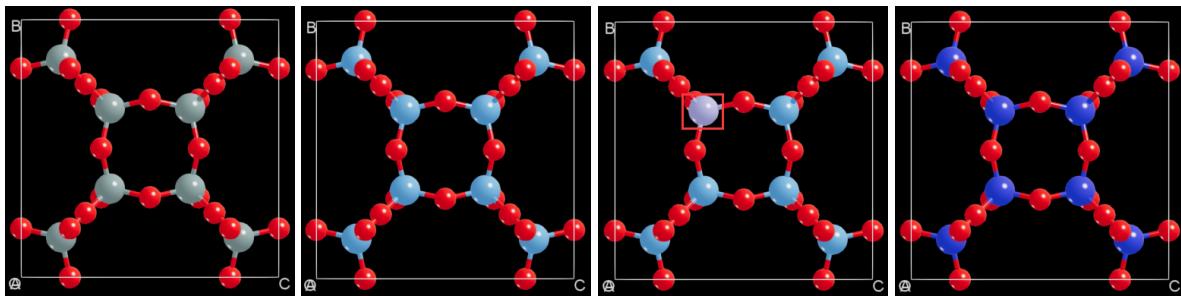
备注

原子结构精修模块的背景颜色主要通过 *SRM-参数调节区域-Model* 区域 修改, 用户可详细阅读该节内容了解详情。

7.4 修改结构中原子的颜色

修改结构中原子的颜色, 需在 导入结构的情况下修改, 如已经在原子结构精修模块中导入 **Si16O32** 晶体结构如 图 7.21 所示, 导入结构的操作可参考在原子结构精修模块导入结构 节内容, 具体操作这里不做详细说明。

以 **Si16O32** 晶体结构为例, 来详细描述在原子结构精修模块 如何修改 **Si16O32** 晶体结构中原子的颜色。



7.4.1 修改结构中同一元素的颜色

如图 7.30 所示为将 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中 Si 元素（即：所有的 Si 原子）的颜色修改为蓝色（RGB 值为 [85 170 255]）的操作界面。

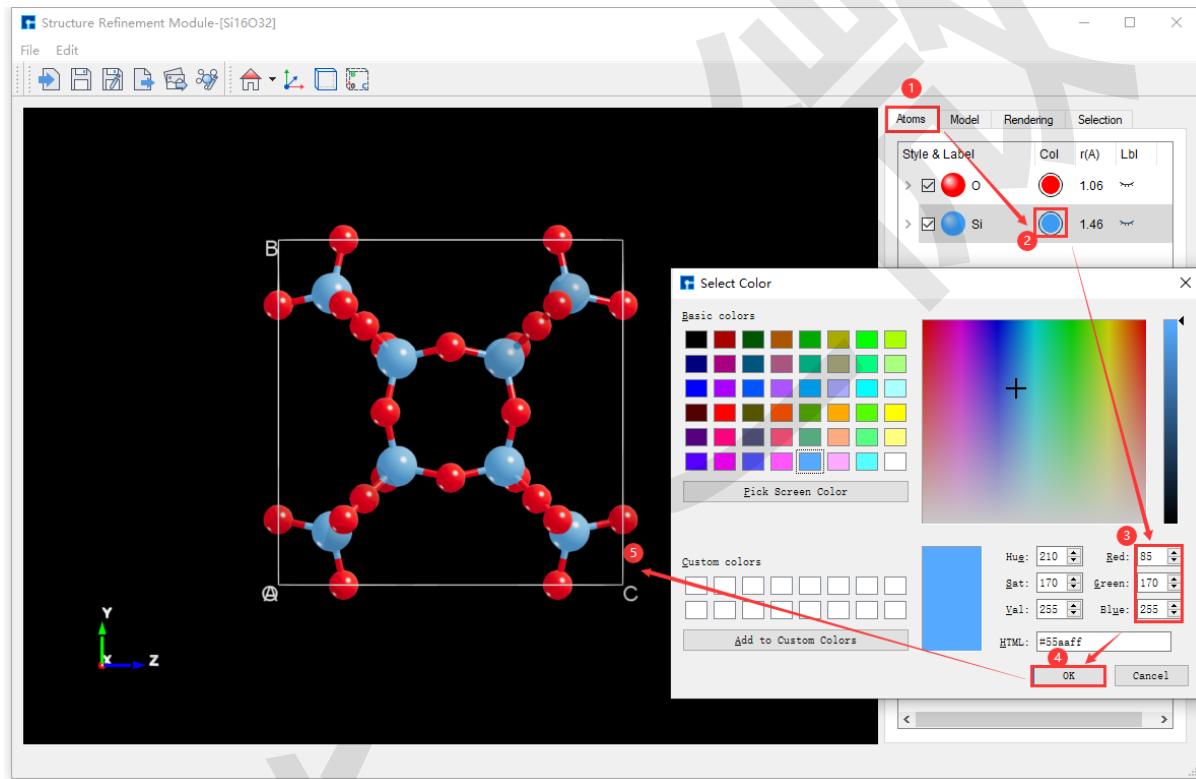


图 7.30: 将 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中 Si 元素的颜色修改为蓝色（RGB 值为 [85 170 255]）的操作界面

7.4.2 修改结构中某一原子的颜色

在图 7.30 基础上, 将 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中 Si₁₁ 原子的颜色修改为 RGB 值为 [170 170 255] 的方式有 2 种。

1. 方式一: 不选中原子, 如图 7.31 所示为将 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中 Si₁₁ 原子的颜色修改为 RGB 值为 [170 170 255] 操作界面;

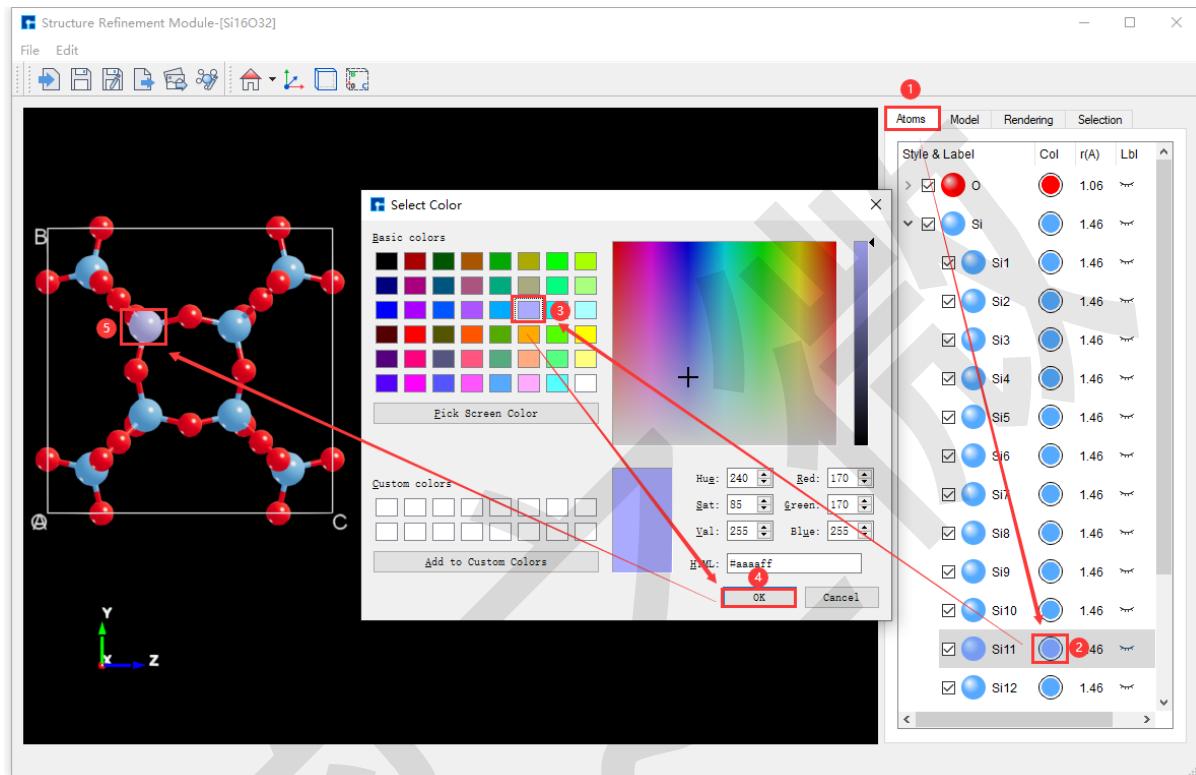


图 7.31: 不选中原子: 将 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中 Si₁₁ 原子的颜色修改为 RGB 值为 [170 170 255] 操作界面

2. 方式二: 鼠标点击选中 Si₁₁ 原子, 如图 7.32 所示为将 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中 Si₁₁ 原子的颜色修改为 RGB 值为 [170 170 255] 操作界面。

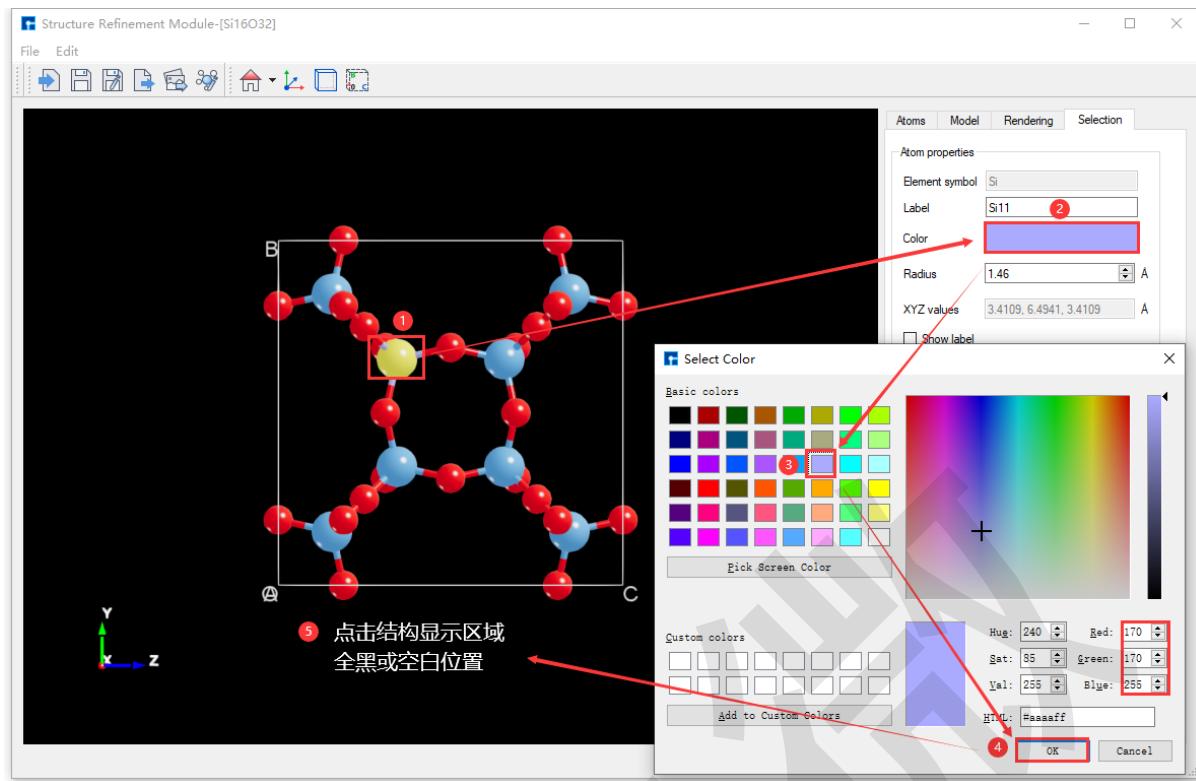


图 7.32: 选中原子: 将 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中 Si11 原子的颜色修改为 RGB 值为 [170 170 255] 操作界面

7.4.3 修改结构中所有元素的颜色

Device Studio 初始模板 Device Studio template 1 和 Device Studio template 2 分别如 图 7.18 和 图 7.19 所示

Si₁₆O₃₂ 晶体结构中含 Si 和 O 2 种元素, 在 图 7.32 基础上修改 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中所有元素的颜色(可认为切换为 Device Studio template 2 模板的颜色)的操作界面如 图 7.33 所示, 修改完成后的界面如 图 7.34 所示。

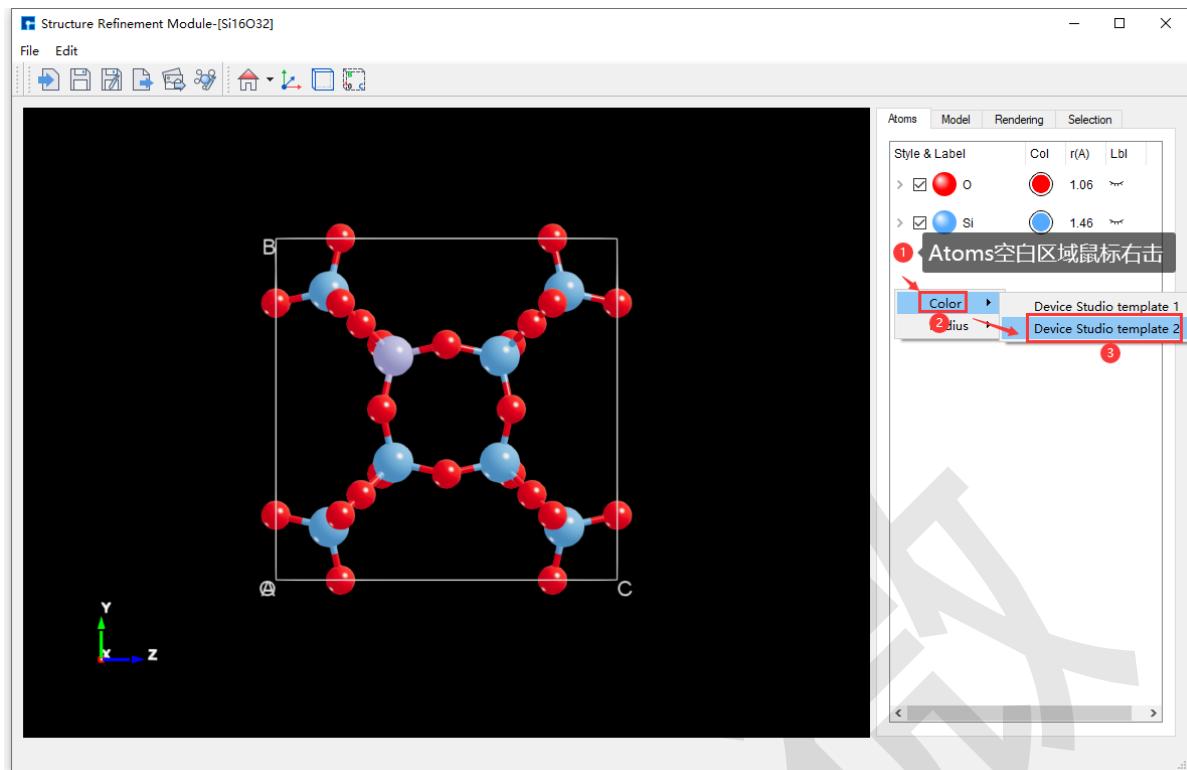


图 7.33: 修改 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中所有元素的颜色的操作界面

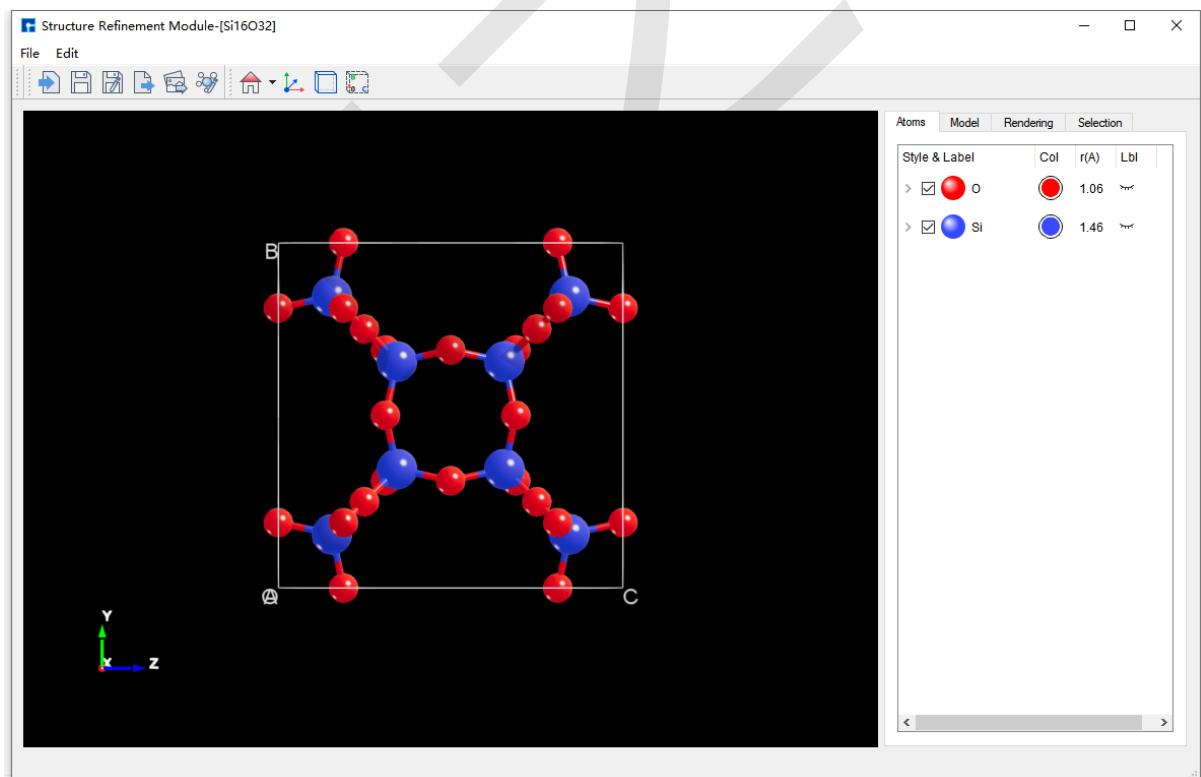


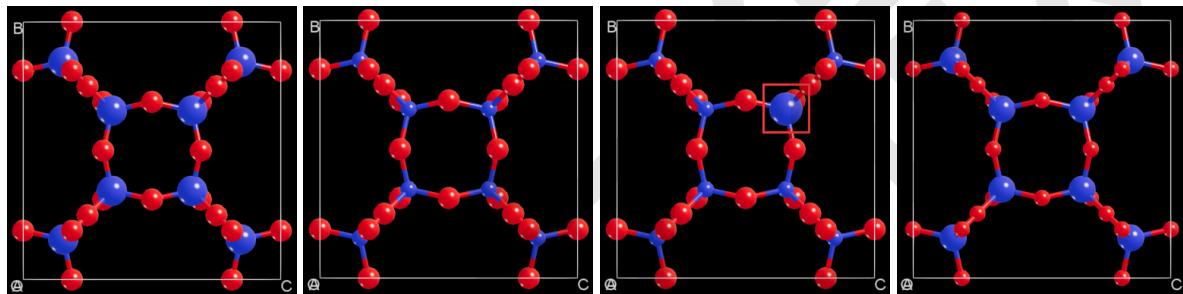
图 7.34: 修改 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中所有元素颜色完成后的界面

备注

通过在 **SRM-参数调节区域-Atoms 区域** 空白区域鼠标右击 → Color → Device Studio template 1 或 Device Studio template 2 的方式修改结构中所有元素的颜色，只是将模板中的颜色参数应用到结构中，半径参数不应用。

7.5 修改结构中原子的半径

修改结构中原子的半径，需在 **导入结构**的情况下修改，在图 7.34 基础上，以 **Si16O32** 晶体结构为例，来详细描述在原子结构精修模块 **如何修改 Si16O32 晶体结构中原子的半径**。



7.5.1 修改结构中同一元素的半径

如图 7.35 所示为将 Si16O32 晶体结构中 Si 元素（即：所有的 Si 原子）的半径由 1.46 修改为 0.80 的操作界面。

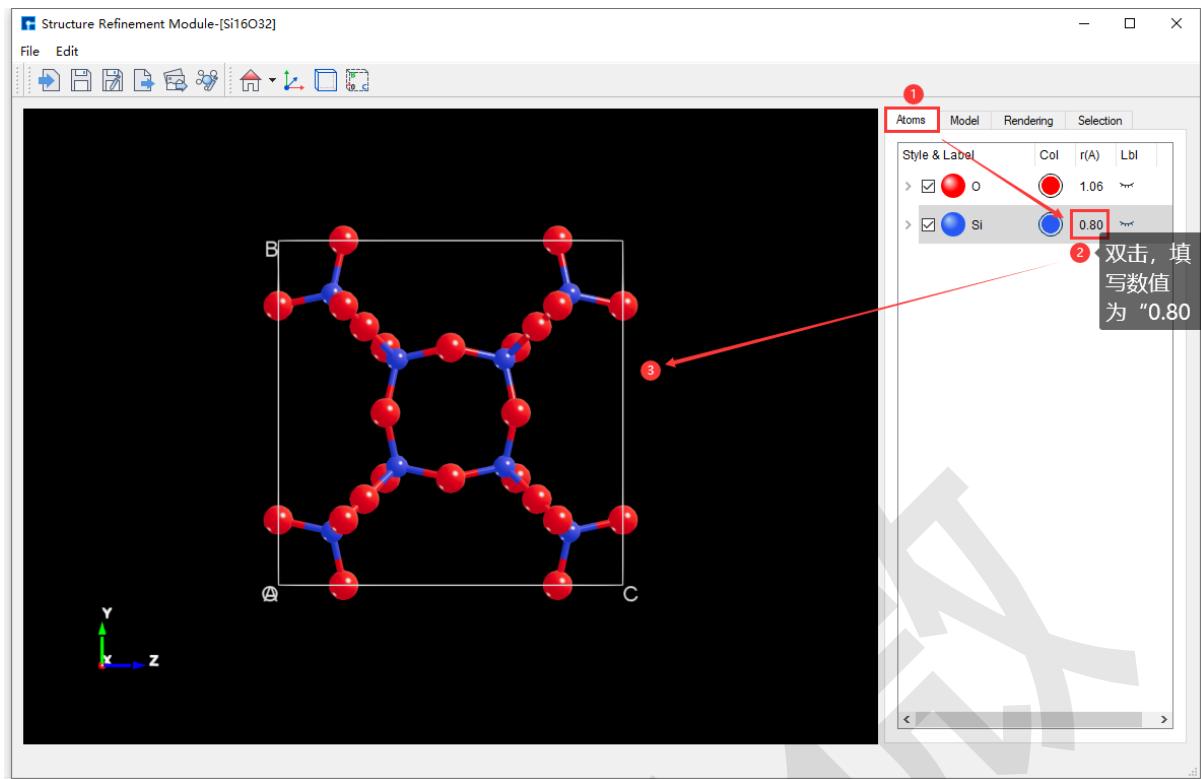


图 7.35: 将 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中 Si 元素的半径由 1.46 修改为 0.80 的操作界面

7.5.2 修改结构中某一原子的半径

在图 7.35 基础上, 将 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中 Si₁₆ 原子的半径由 0.80 修改为 1.60 的方式有 2 种。

1. 方式一: 不选中 Si₁₆ 原子, 如图 7.36 所示为将 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中 Si₁₆ 原子的半径由 0.80 修改为 1.60 的操作界面;

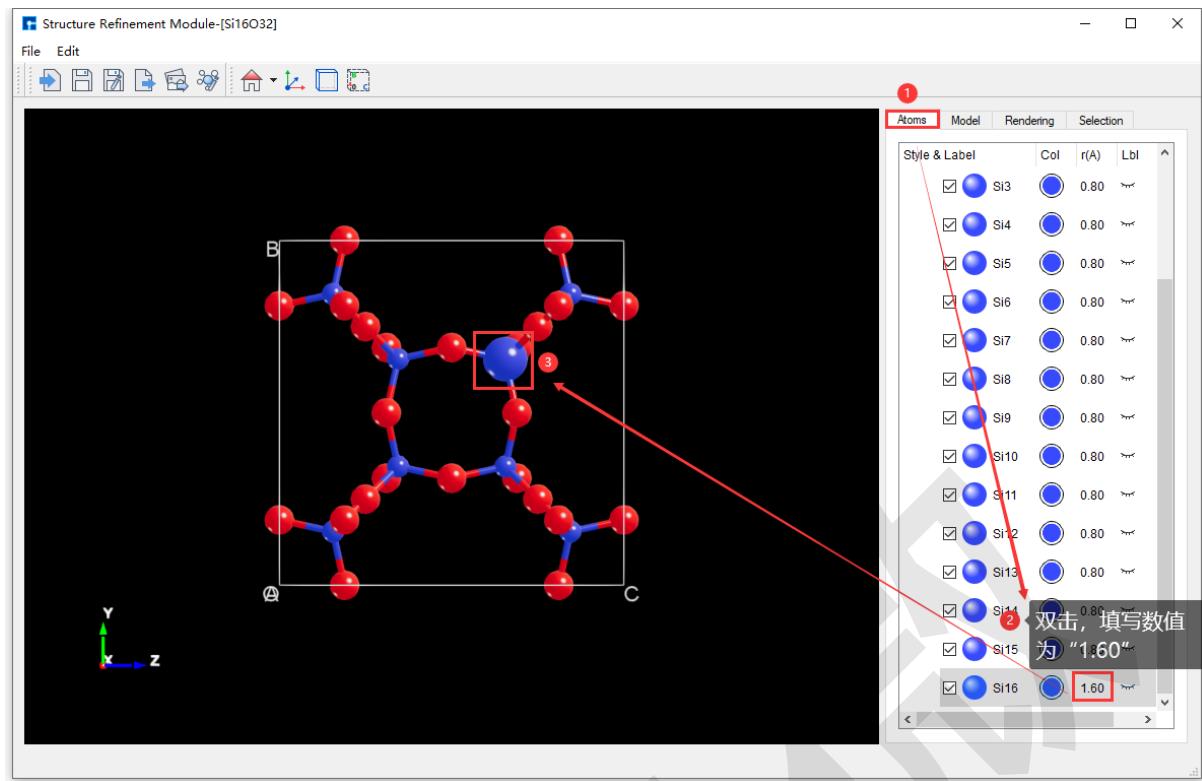


图 7.36: 不选中原子: 将 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中 Si₁₆ 原子的半径由 0.80 修改为 1.60 的操作界面

2. 方式二: 鼠标点击选中 Si₁₆ 原子, 如图 7.37 所示为将 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中 Si₁₆ 原子的半径由 0.80 修改为 1.60 的操作界面。

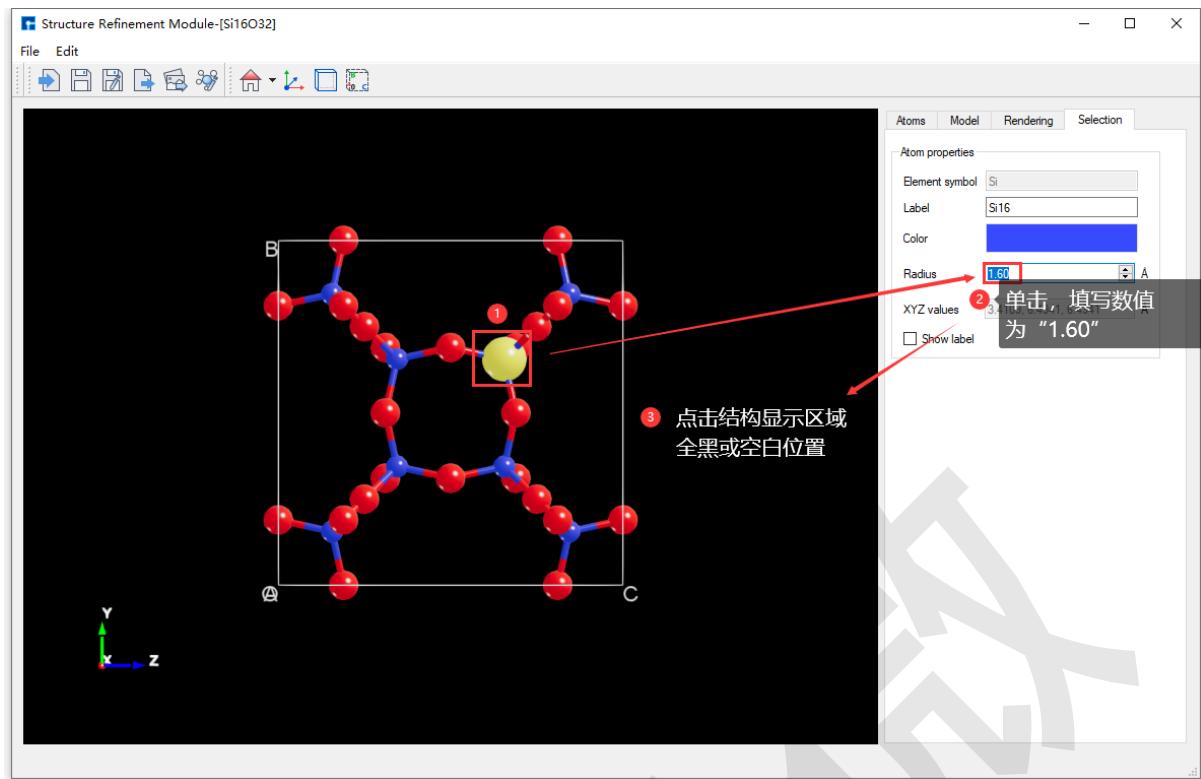


图 7.37: 选中原子: 将 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中 Si₁₆ 原子的半径由 0.80 修改为 1.60 的操作界面

7.5.3 修改结构中所有元素的半径

Device Studio 初始模板 Device Studio template 1 和 Device Studio template 2 分别如 图 7.18 和 图 7.19 所示

Si₁₆O₃₂ 晶体结构中含 Si 和 O 2 种元素，在 图 7.37 基础上修改 Si₁₆O₃₂ 晶体结构中所有元素的半径（可认为切换为 Device Studio template 2 模板的半径）的操作界面如 图 7.38 所示，修改完成后的界面如 图 7.39 所示。

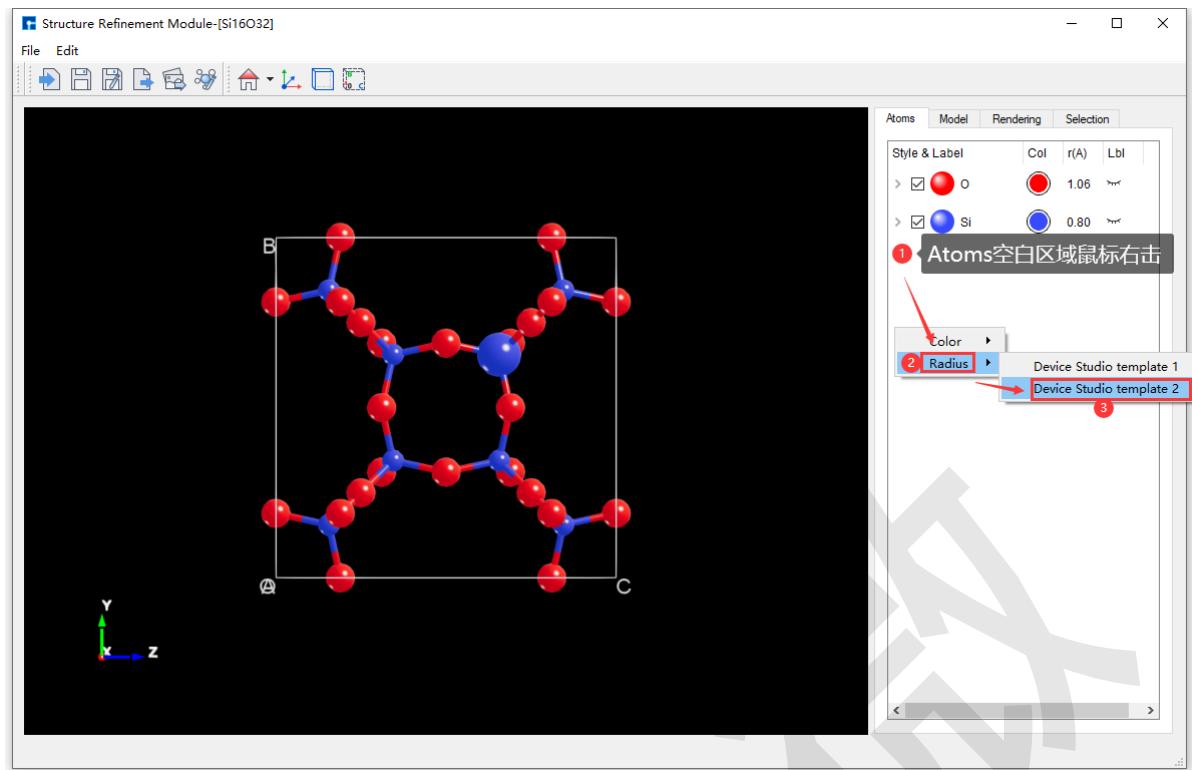


图 7.38: 修改 Si16O32 晶体结构中所有元素的半径的操作界面

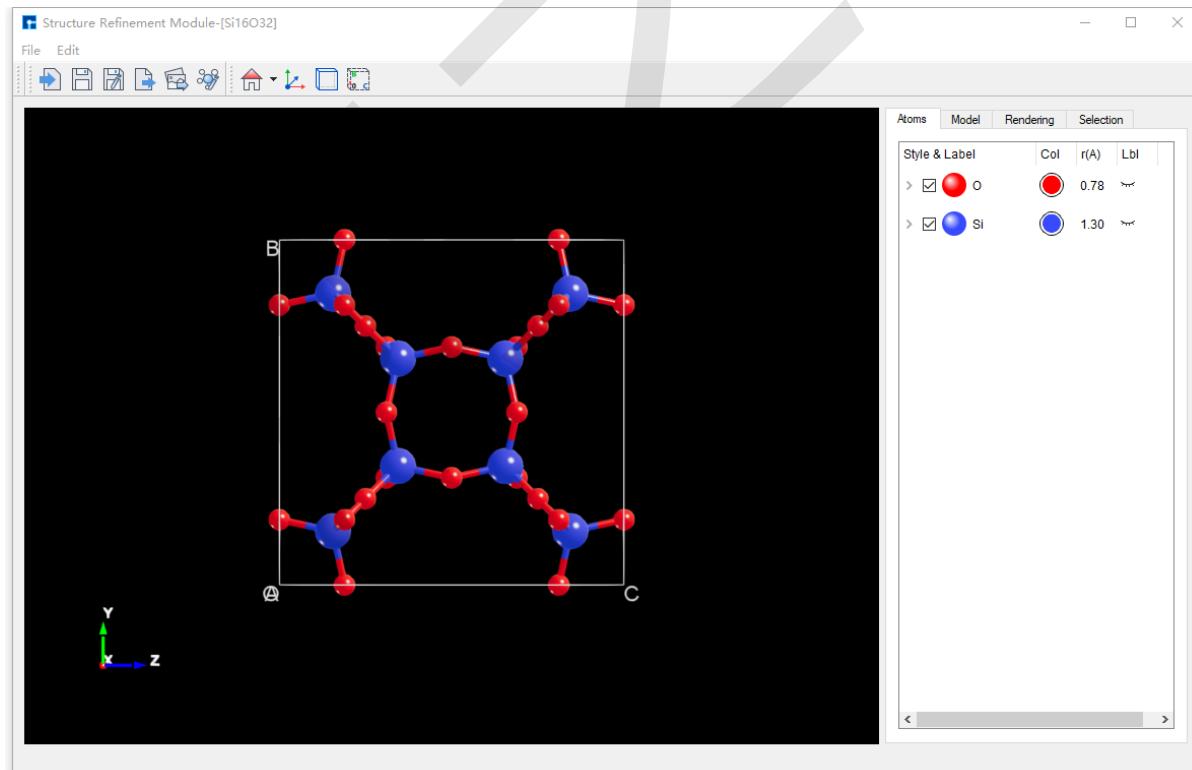


图 7.39: 修改 Si16O32 晶体结构中所有元素半径完成后的界面

备注

通过在 **SRM-参数调节区域-Atoms 区域** 空白区域鼠标右击 → Radius → Device Studio template 1 或 Device Studio template 2 的方式修改结构中所有元素的半径，只是将模板中的半径参数应用到结构中，颜色参数不应用。

7.6 结构的球棍模式/多面体模式

默认导入原子结构精修模块的结构以 球棍模式显示，如 图 7.40 所示为以 球棍模式显示的 Si16O32 晶体结构。

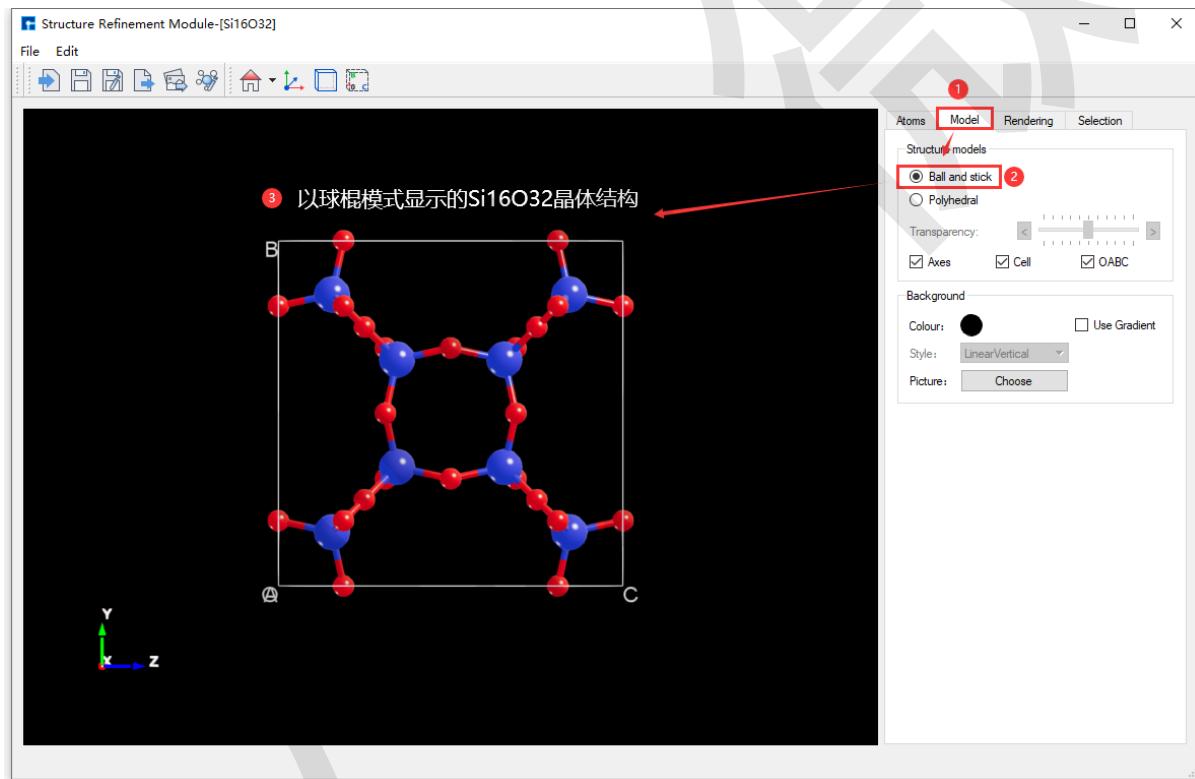


图 7.40: 以 球棍模式显示的 Si16O32 晶体结构

备注

若想原子结构中 不显示键，以 Si16O32 晶体结构为例，鼠标框选 Si16O32 晶体结构 → 按 *Delete* 键即可。

如图 7.41 所示为将 Si16O32 晶体结构由 球棍模式切换为 多面体模式的操作界面。

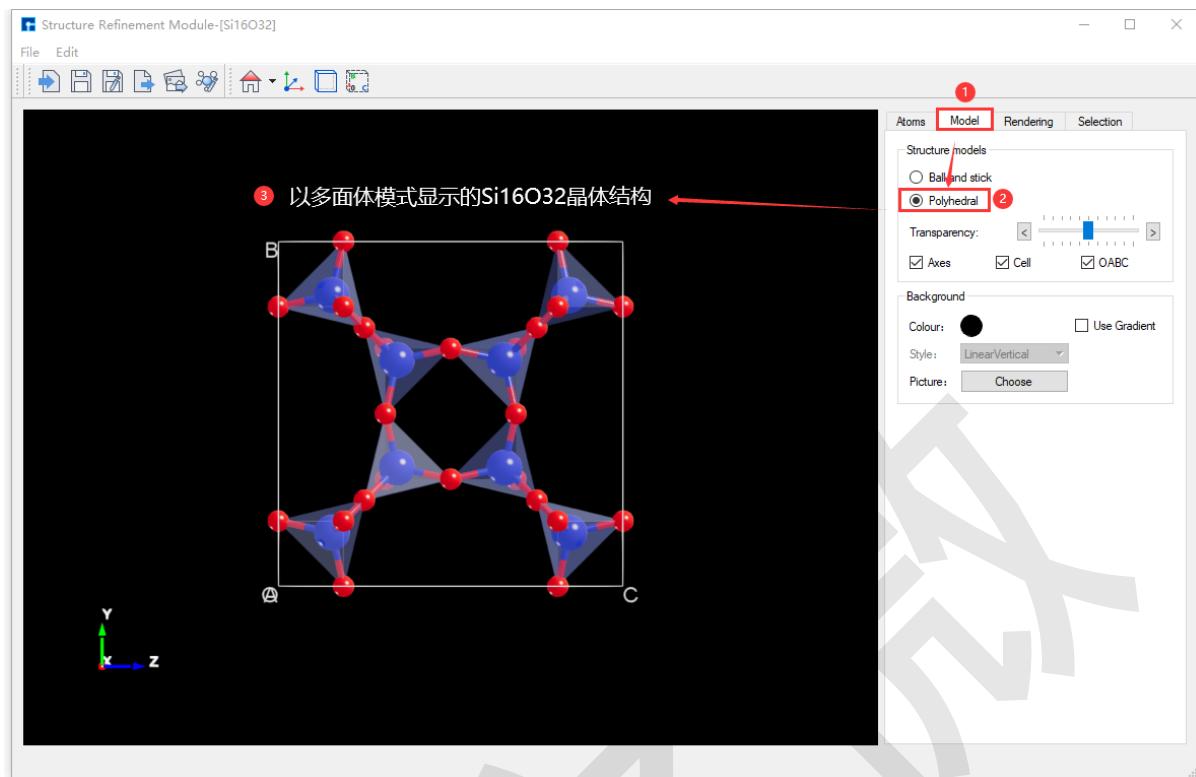


图 7.41: 以 多面体模式显示的 Si16O32 晶体结构

若用户想调节多面体的透明度，可参考 *SRM-参数调节区域-Model 区域* 节内容，该节详细的介绍了如何调节多面体的透明度。

7.7 调节结构的光照参数

原子结构精修模块支持调节结构的光照参数，具体操作这里不做详细说明，用户可参考 *SRM-参数调节区域-Rendering 区域* 节内容。

- 支持对原子结构中的原子和键单独进行光照调节；
- 支持对整个原子结构进行光照调节。
 - 支持设置几束光照射到原子结构中，最多 4 束；
 - 支持调节光束照射在原子上的位置；
 - 支持调节光束的亮度；
 - 支持调节 Ambient（环境光）参数。



CHAPTER 8

亮点功能

8.1 超胞识别原胞

Device Studio 具有超胞识别原胞功能，其操作非常简单。如在 Device Studio 中导入石墨烯超胞结构的界面如 图 8.1 所示（石墨烯超胞结构在 XY 面的 3D 视图），在该界面中点击 *Build → StandardizeCell* 则实现将石墨烯超胞结构识别为原胞结构如 图 8.2 所示。

Device Studio 使用教程

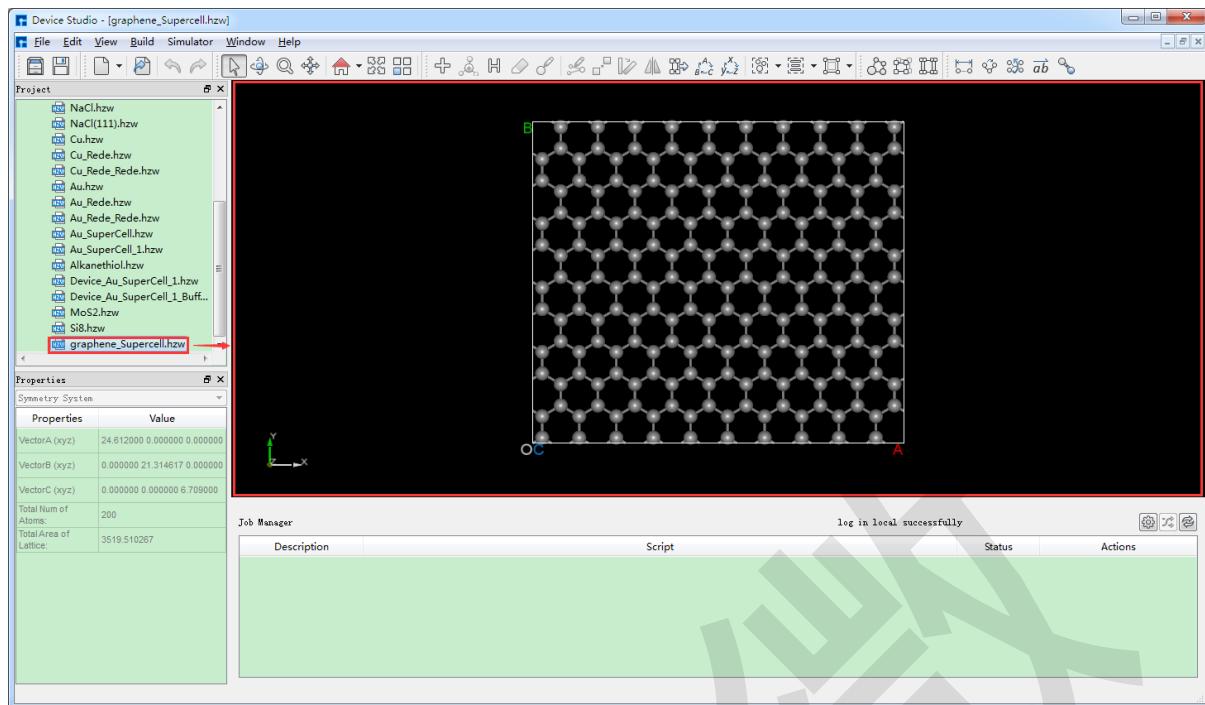


图 8.1: 导入石墨烯超胞结构的 Device Studio 界面

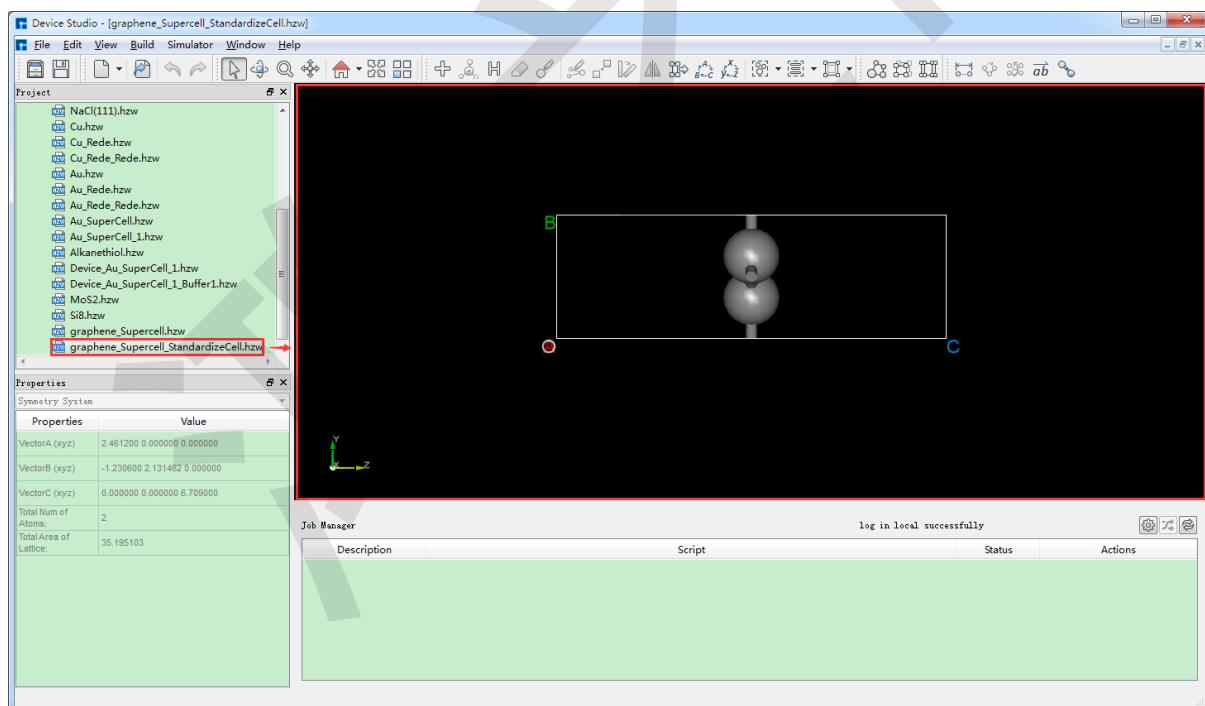


图 8.2: 石墨烯原胞结构

8.2 Nanodcal 一键计算

Device Studio 在 Windows 系统下，针对 Nanodcal、RESCU 新增一键计算功能。对于 Nanodcal 软件，以 MoS₂ 的能带计算为例，在已经做过自洽计算，并且生成 MoS₂ 能带计算的输入文件 BandStructure.input 的基础上，在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中能带计算的输入文件 BandStructure.input → 右击 → Run 弹出 Run 界面如图 8.3 所示，点击该 Run 界面中的 Run 按钮则进行 MoS₂ 的能带计算，计算完成后的 Device Studio 界面如图 8.4 所示。

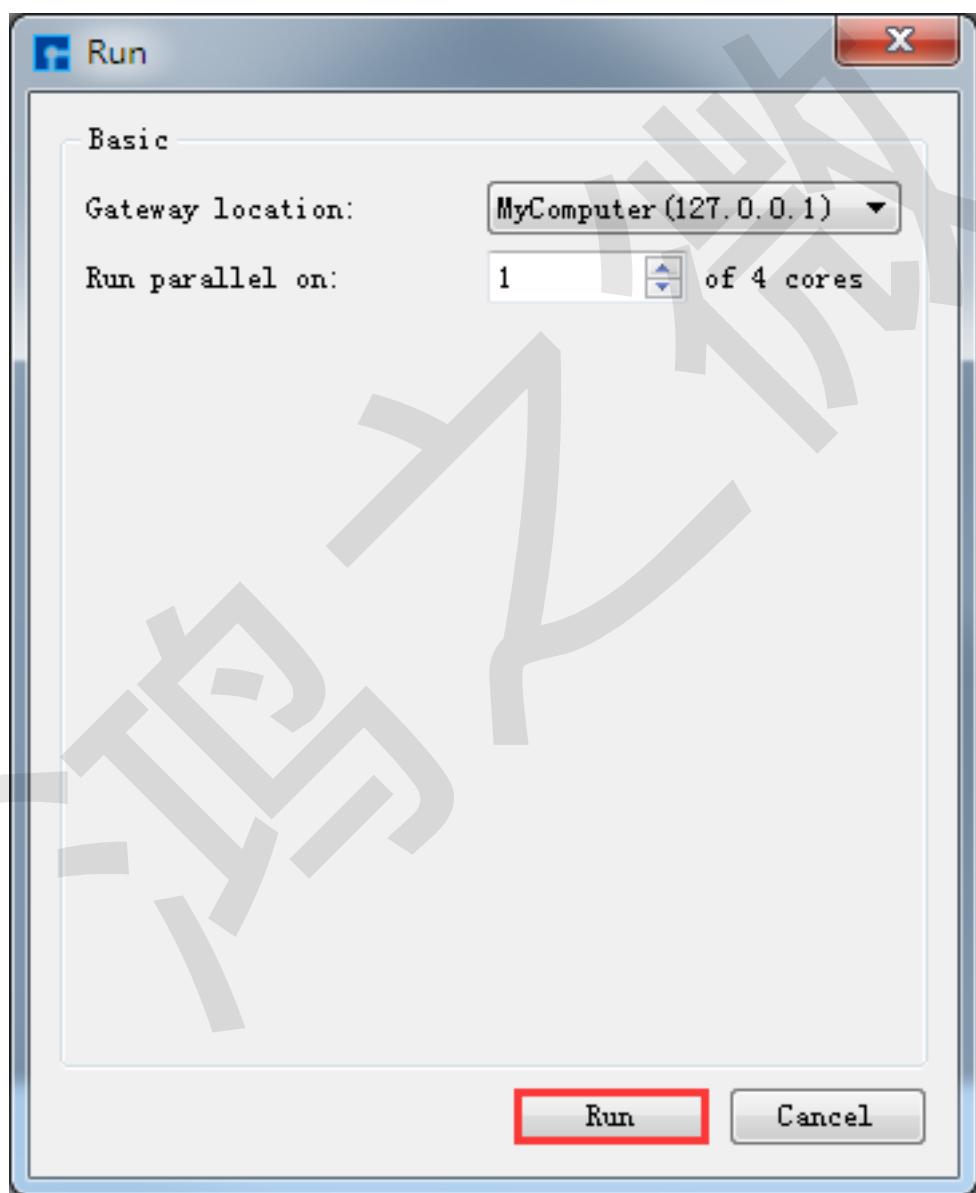


图 8.3: Run 界面

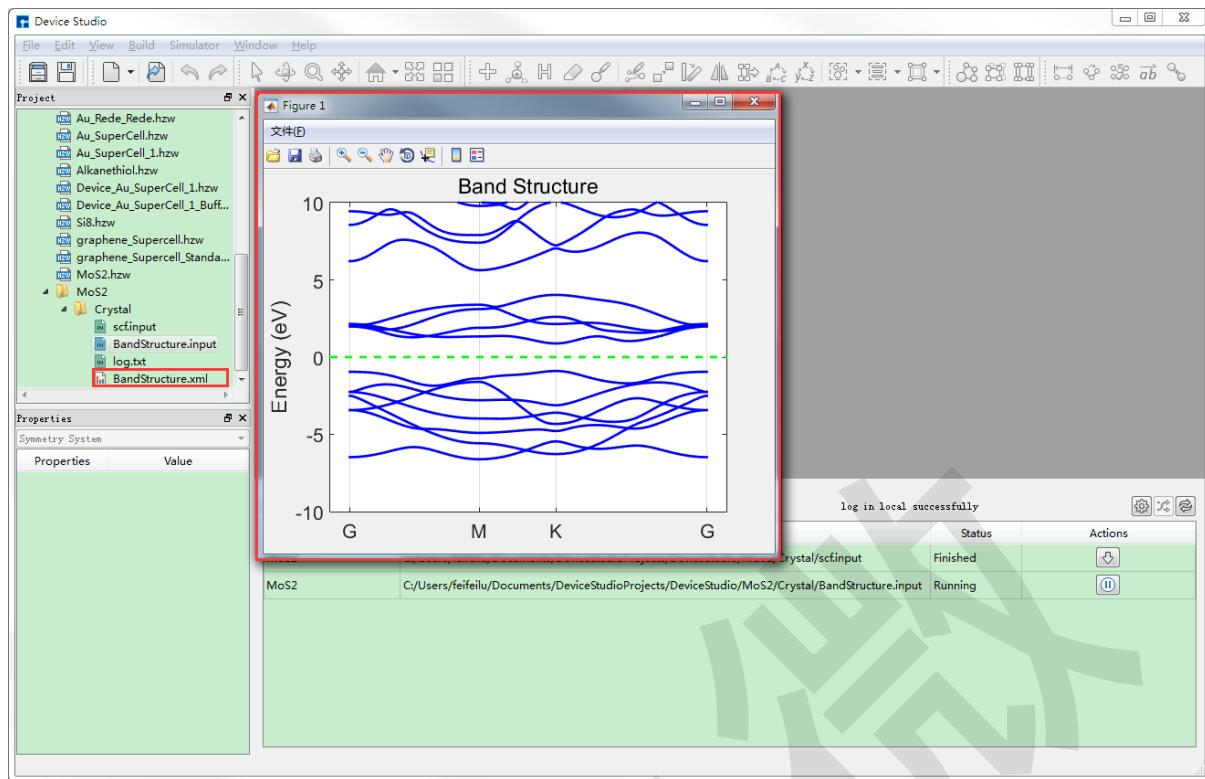
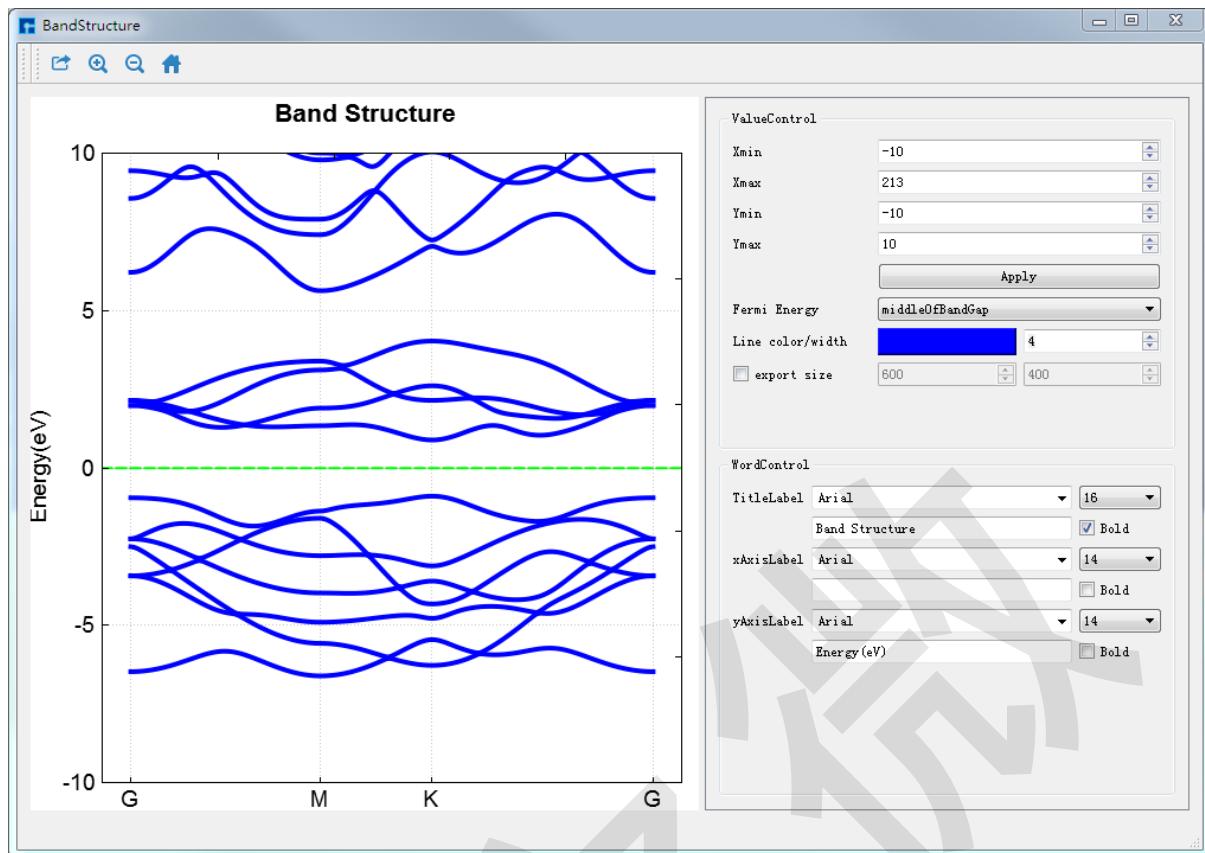


图 8.4: MoS₂ 能带计算完成后的 Device Studio 界面

图 8.4 中的能带图即 MoS₂ 的能带图，在 Device Studio 的 Project Explorer 区域的 BandStructure.xml 文件即 MoS₂ 的能带计算的结果文件。对于该结果文件，选中 BandStructure.xml → 右击 → Show View 则弹出能带的可视化分析界面如 图 8.5 所示。在该界面中，用户可根据需要编辑图片，如修改图像中线条粗细、线条的颜色、坐标轴取值范围；可自行设置标题和坐标轴的标注，同时可修改标题、坐标轴和标注的字体类型和字体大小，以及是否给字体加粗；勾选 图 8.5 界面中的 *export size* 之后，可根据需要设定导出 MoS₂ 的能带可视化分析结果的图片的大小。

图 8.5: MoS₂ 能带的可视化分析界面

备注

Device Studio 在 Windows 系统下, 不仅 Nanodcal 具有一键计算功能, RESCU 也具有, 对于 RESCU 的一键计算这里不做详细说明, 用户可参考 [Nanodcal 一键计算](#)。

8.3 柔性器件结构建模

Device Studio 具有搭建 柔性器件结构的功能, 以搭建金-烷硫醇-金 (Au-Alkanethiol-Au) 柔性器件结构为例, 首先在 Device Studio 中导入金-烷硫醇-金 (Au-Alkanethiol-Au) 分子器件结构如 图 8.6 所示, 在 图 8.6 界面中点击 *Build → Bending of Device*, 弹出搭建柔性器件结构的 Bent 界面, 在 Bent 界面中选择 *Both Side*, 并设置相关参数如 图 8.7 所示, 点击 *Preview* 即可预览搭建的 柔性器件结构, 点击 *Build* 即搭建好金-烷硫醇-金 (Au-Alkanethiol-Au) 柔性器件结构, 其结构文件 Au-Alkanethiol-Au_bent.hzw 挂载在在 Device Studio 的 Project Explorer 区域的, 搭建好金-烷硫醇-金 (Au-Alkanethiol-Au) 柔性器件结构的 Device Studio 界面如 图 8.8 所示。

Device Studio 使用教程

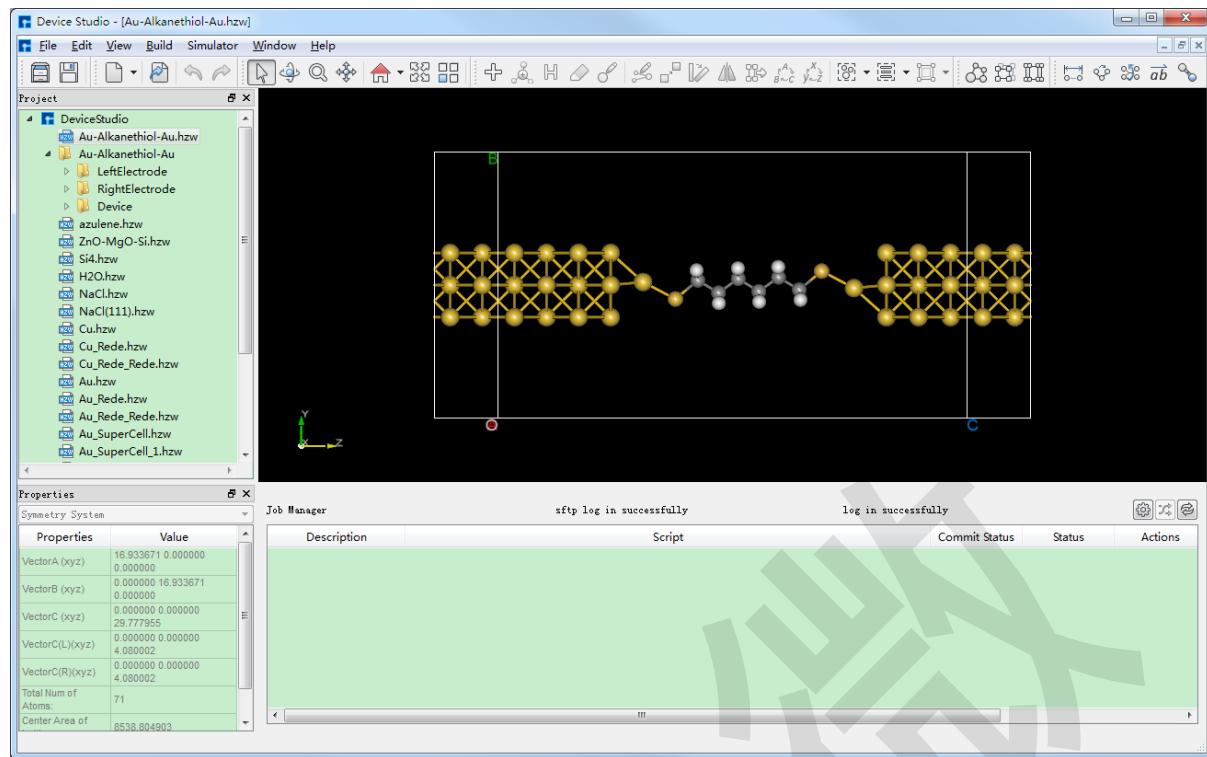


图 8.6: 导入金-烷硫醇-金 (Au-Alkanethiol-Au) 分子器件结构后的 Device Studio 界面

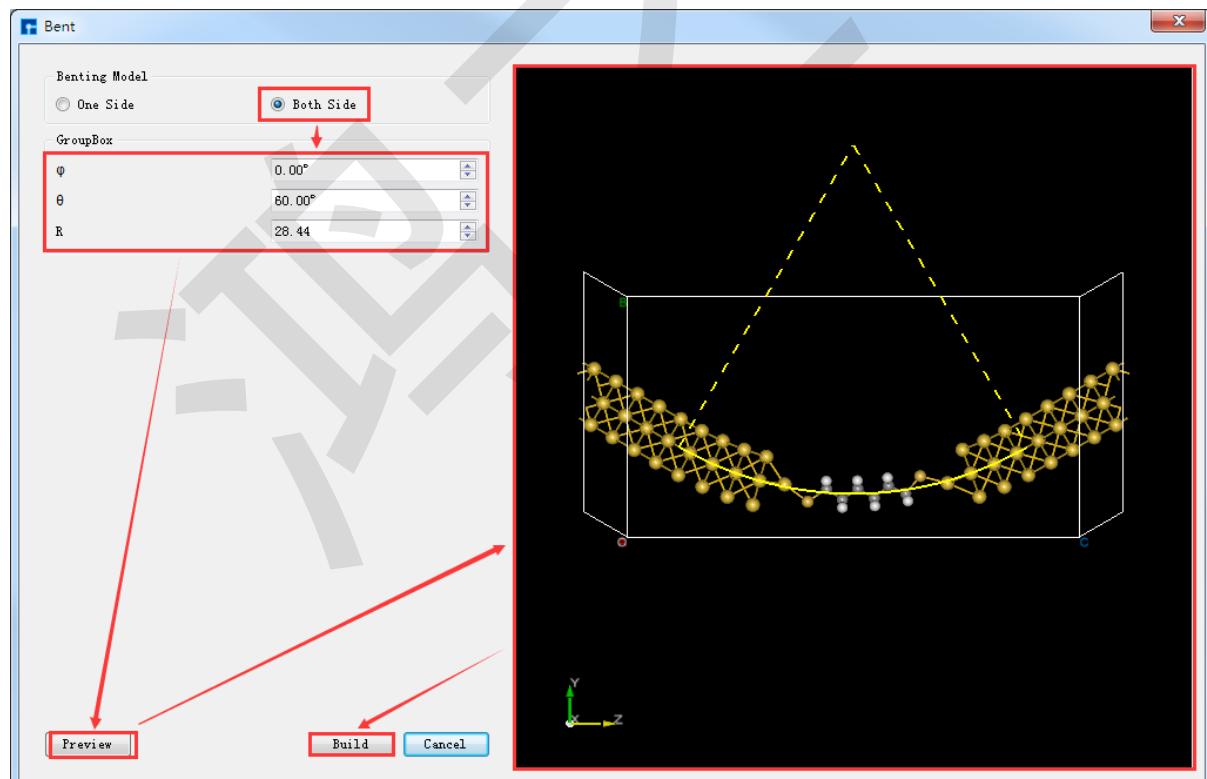


图 8.7: 搭建柔性器件结构的 Bent 界面

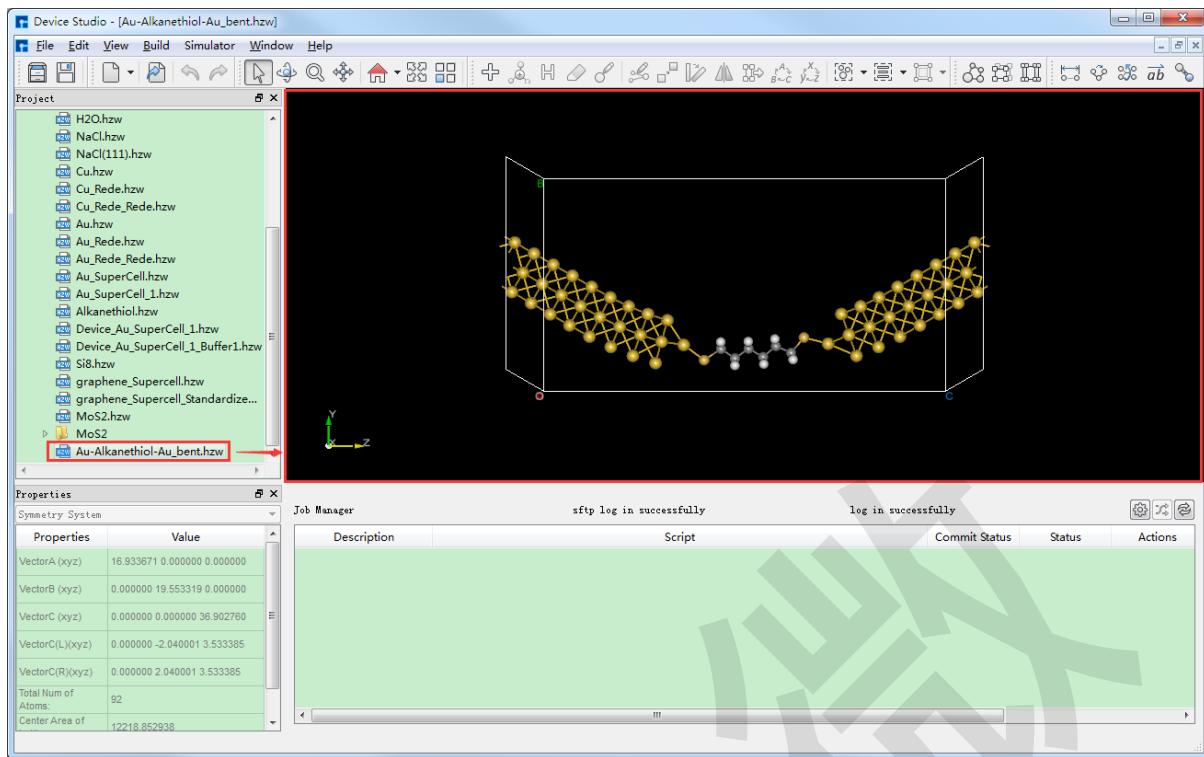


图 8.8: 搭建好金-烷硫醇-金 (Au-Alkanethiol-Au) 柔性器件结构的 Device Studio 界面

8.4 LAMMPS 运动轨迹的显示

Device Studio 具有显示 LAMMPS 运动轨迹的功能, LAMMPS 运动轨迹文件的后缀名为 .dump。以显示 LAMMPS 的运动轨迹文件 evolution.dump 为例, 在 Device Studio 的图形界面中, 点击 Simulator → Lammps → Analysis Plot, 弹出导入 LAMMPS 运动轨迹文件的界面如 图 8.9 所示, 按照 图 8.9 中的红色框选部分指示一步步操作, 点击 打开 按钮则弹出 LAMMPS 运动轨迹在 Device Studio 中的显示界面如 图 8.10 所示, 用户可根据需要修改原子的颜色、原子的半径、播放的起始帧数和播放的结束帧数, 点击 播放 按钮则开始显示 LAMMPS 的运动轨迹文件 evolution.dump。

Device Studio 使用教程

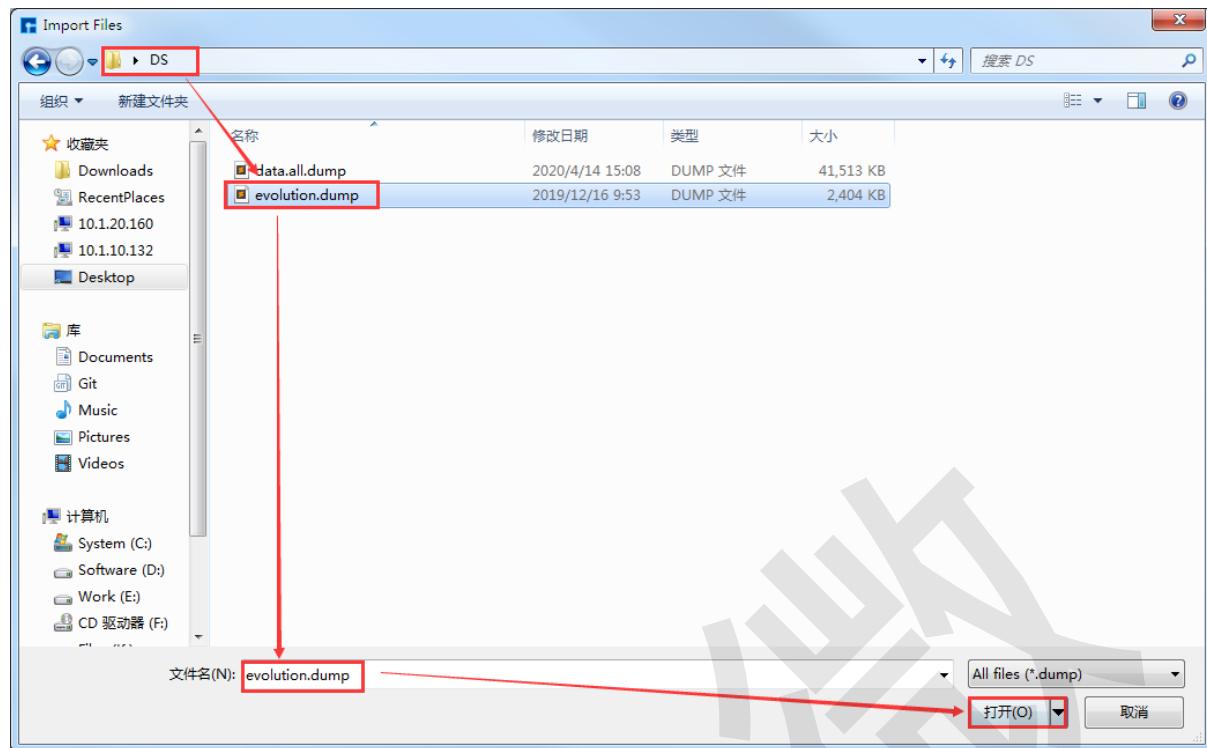


图 8.9: 导入 LAMMPS 运动轨迹文件的 Device Studio 界面

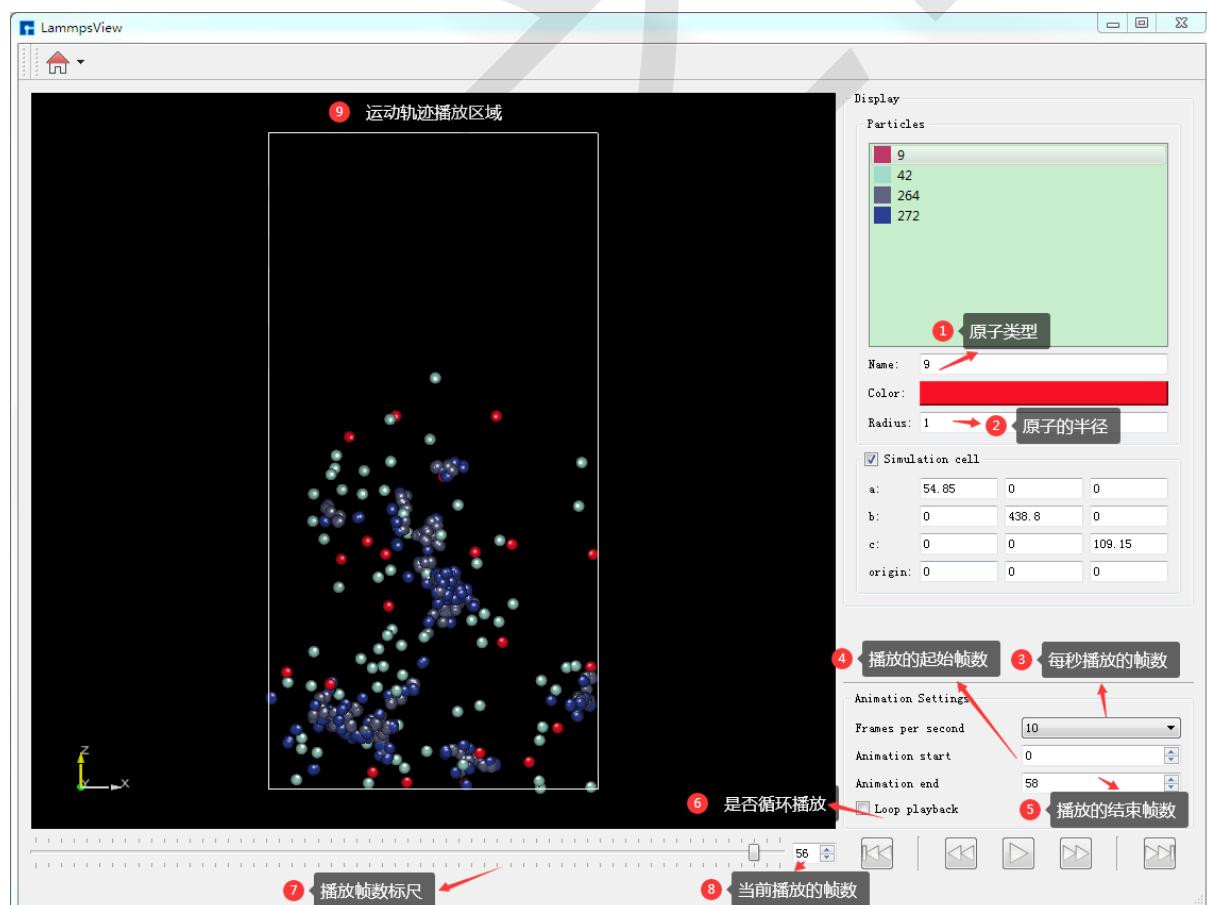


图 8.10: LAMMPS 运动轨迹在 Device Studio 中的显示界面

8.5 晶体结构的空间群信息识别

Device Studio 具有识别晶体结构空间群信息和对称性信息的功能。例如在如图 8.11 所示的 Device Studio 的图形界面中，对于 GaSe 晶体结构，点击界面中的 *Build → Symmetry* 则弹出 Symmetry 界面如图 8.12 所示，在图 8.12 (a) 中可查看到 GaSe 晶体结构的空间群信息，点击 Symmetry 界面中的 *Operators* 按钮，则如图 8.13 所示可查看到 GaSe 晶体结构的对称性信息。

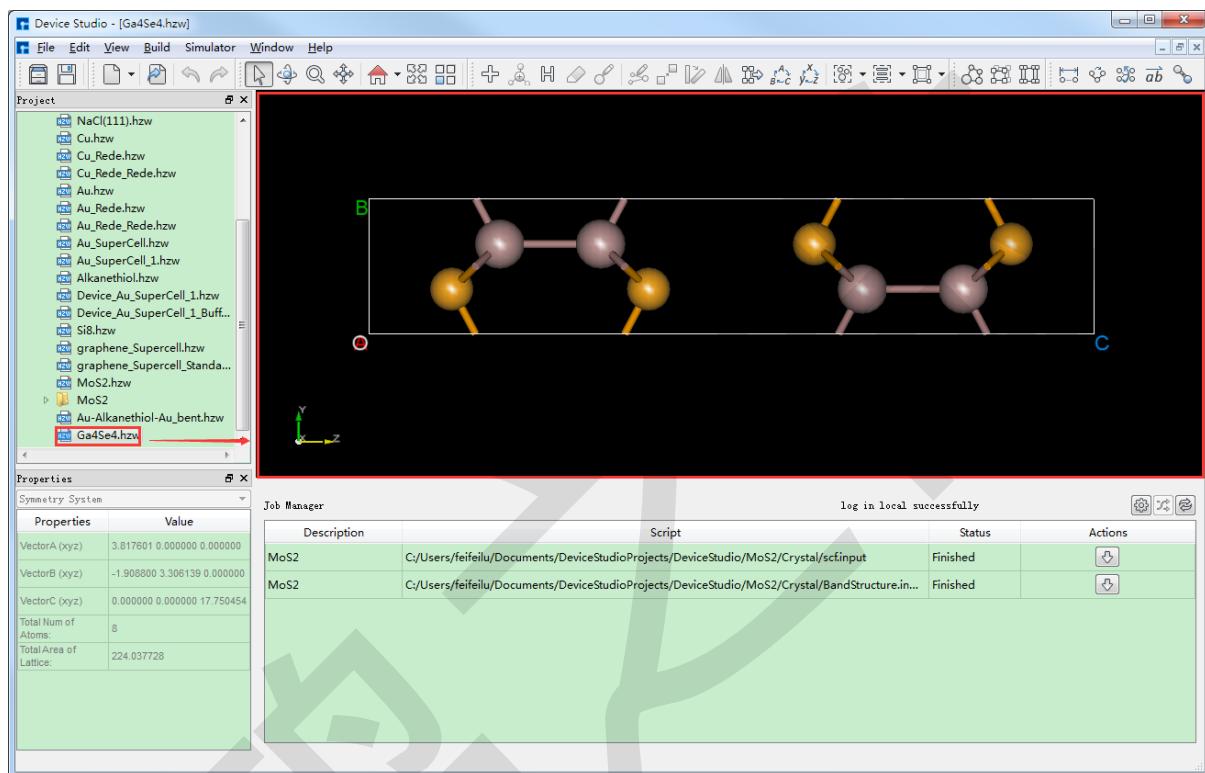


图 8.11: 显示 GaSe 晶体结构的 Device Studio 界面

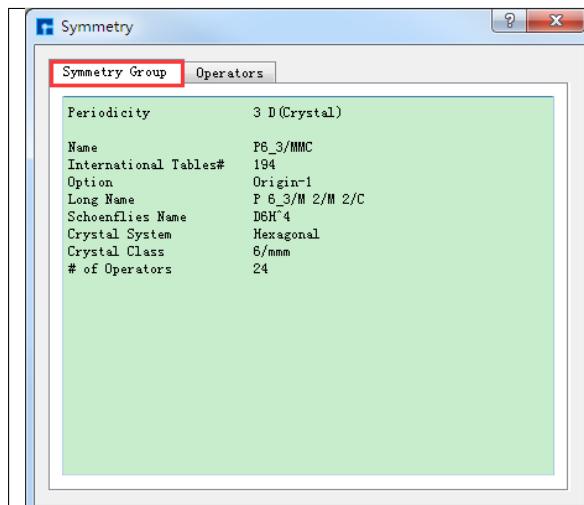


图 8.12: GaSe 晶体结构的空间群信息

This screenshot shows the 'Symmetry' dialog box with the 'Operators' tab selected. It lists 9 symmetry operations (labeled 1 to 9) defined by their effect on the x, y, and z axes:

Index	x->	y->	z->
1	x	y	z
2	-x	-y	-z
3	x-y	x	z+1/2
4	-x+y	-x	-z+1/2
5	-y	x-y	z
6	y	-x+y	-z
7	-x	-y	z+1/2
8	x	y	-z+1/2
9	-x+y	-x	z

图 8.13: GaSe 晶体结构的对称性信息

8.6 拆分分子结构

Device Studio 具有拆分分子结构功能，即将晶体结构拆分成一个个的分子结构。例如在如图 8.14 所示的 Device Studio 的图形界面中，对于 C5H17AlN2O8P2 晶体结构，点击界面中的 *Build → Decomposition* 则将 C5H17AlN2O8P2 晶体结构拆分成 6 个分子结构，分别如图 8.15、图 8.16、图 8.17、图 8.18、图 8.19、图 8.20 所示。

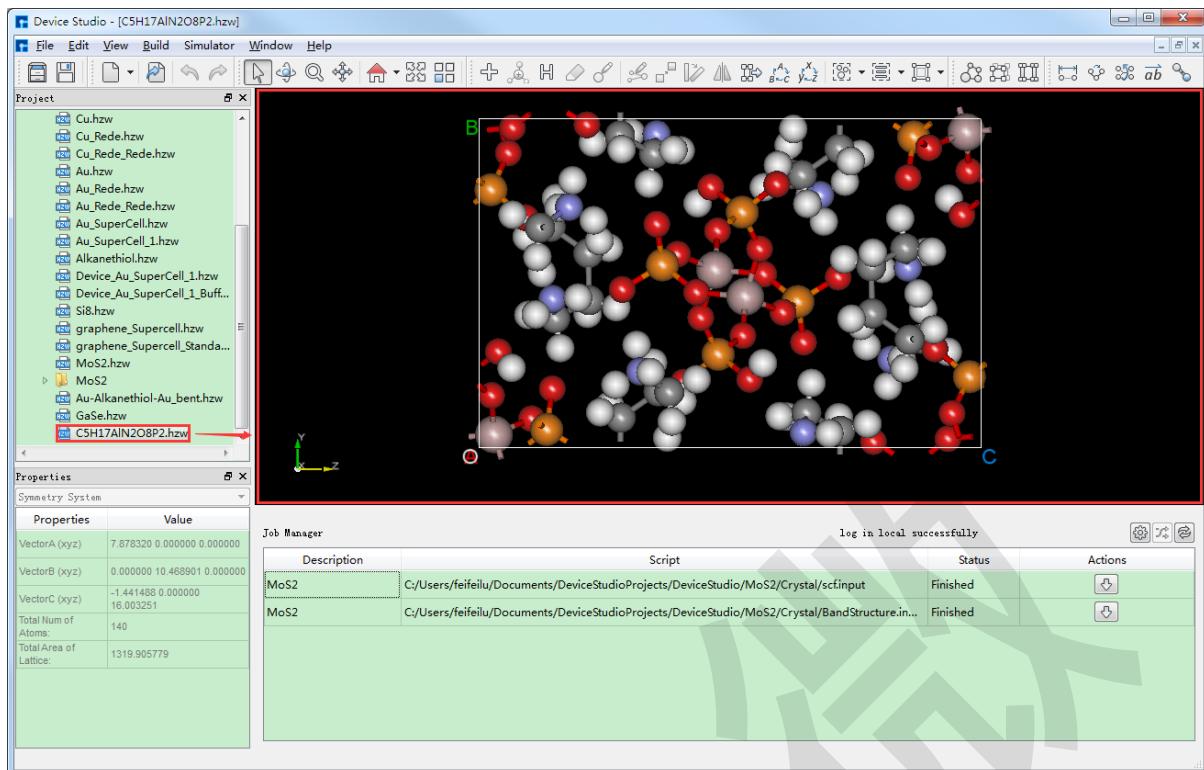


图 8.14: 显示 C5H17AlN2O8P2 晶体结构的 Device Studio 界面

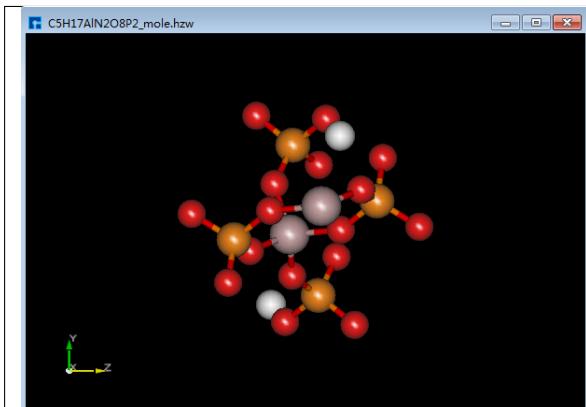


图 8.15: C5H17AlN2O8P2_mole

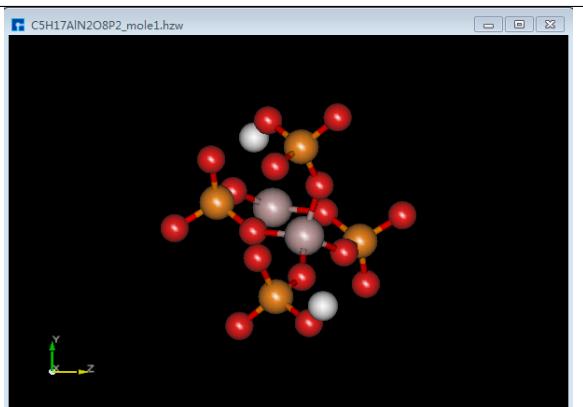


图 8.16: C5H17AlN2O8P2_mole1

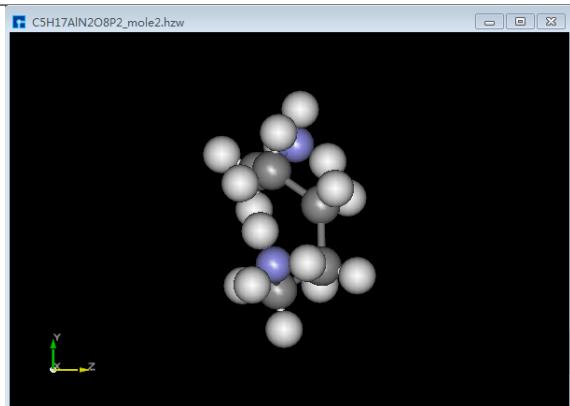


图 8.17: C5H17AlN2O8P2_mole2

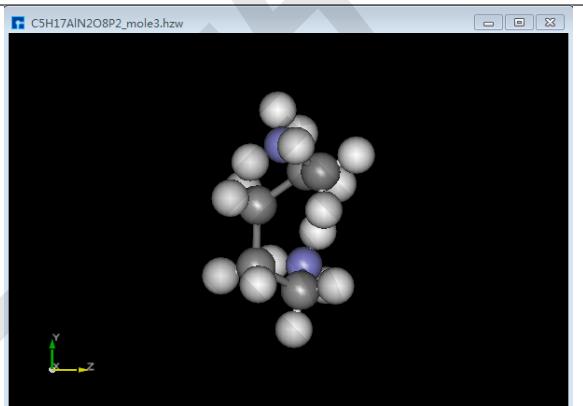


图 8.18: C5H17AlN2O8P2_mole3

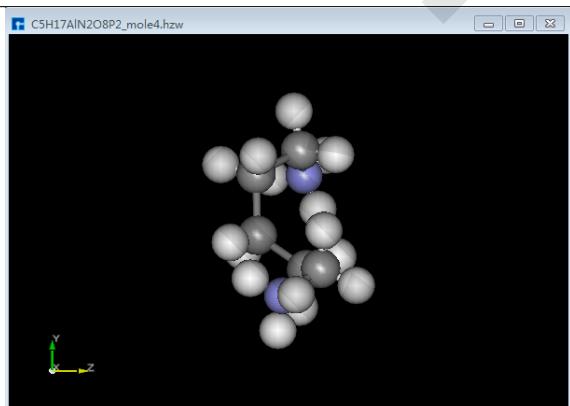


图 8.19: C5H17AlN2O8P2_mole4

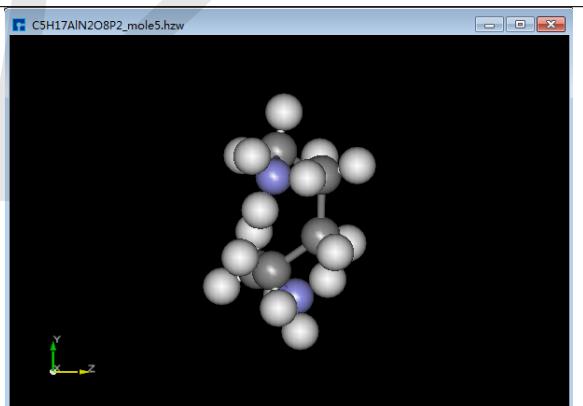


图 8.20: C5H17AlN2O8P2_mole5

8.7 VASP 差分电荷密度的可视化分析

Device Studio 具有 VASP 差分电荷密度可视化分析功能。以 Si16O32 晶体结构的差分电荷密度可视化分析为例，在 Device Studio 的图形界面中，点击 *Simulator* → *VASP* → *Analysis Plot*，弹出导入 Si16O32 晶体结构 CHGCAR 文件的界面 图 8.21 所示，点击图 8.21 中的 打开按钮，则弹出 Si16O32 电荷密度 CHGCAR 的 3D 可视化分析界面 图 8.22 所示。

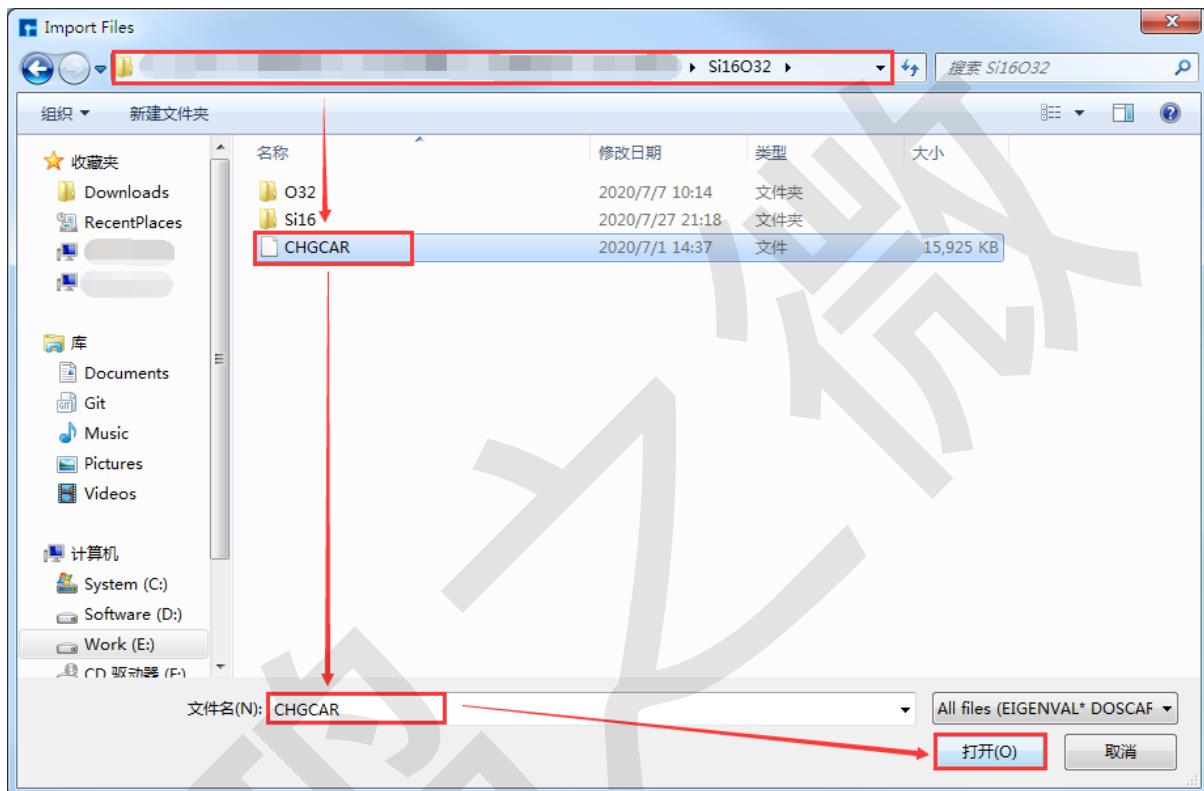


图 8.21: 导入 Si16O32 晶体结构 CHGCAR 文件的界面

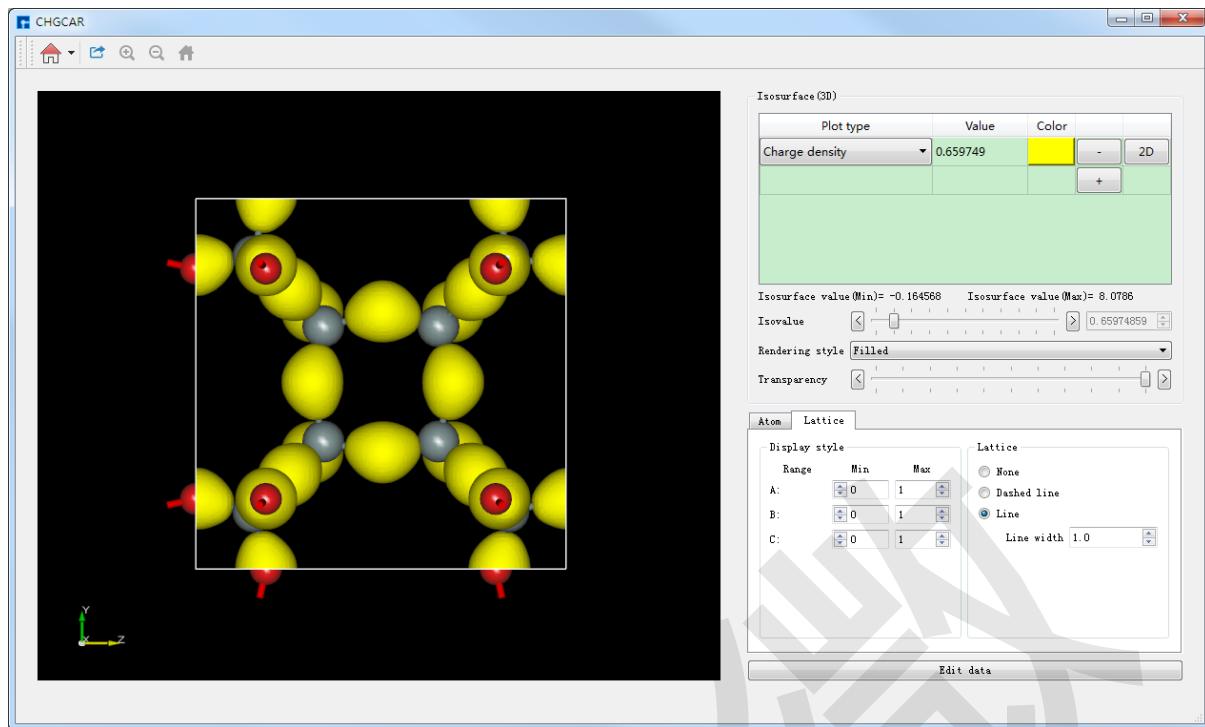


图 8.22: Si16O32 电荷密度 CHGCAR 的 3D 可视化分析界面

在图 8.22 所示的界面中，点击 *Edit data* 按钮弹出 *Editdata* 界面，点击界面中 *Import data* 按钮，分别导入 O32 和 Si16 的 CHGCAR 文件，Operation 栏可通过下拉按钮选择 – 号 图 8.23 所示，点击 *Editdata* 界面中的 *Ok* 按钮，则 Si16O32 差分电荷密度的 3D 可视化分析界面 图 8.24 所示。

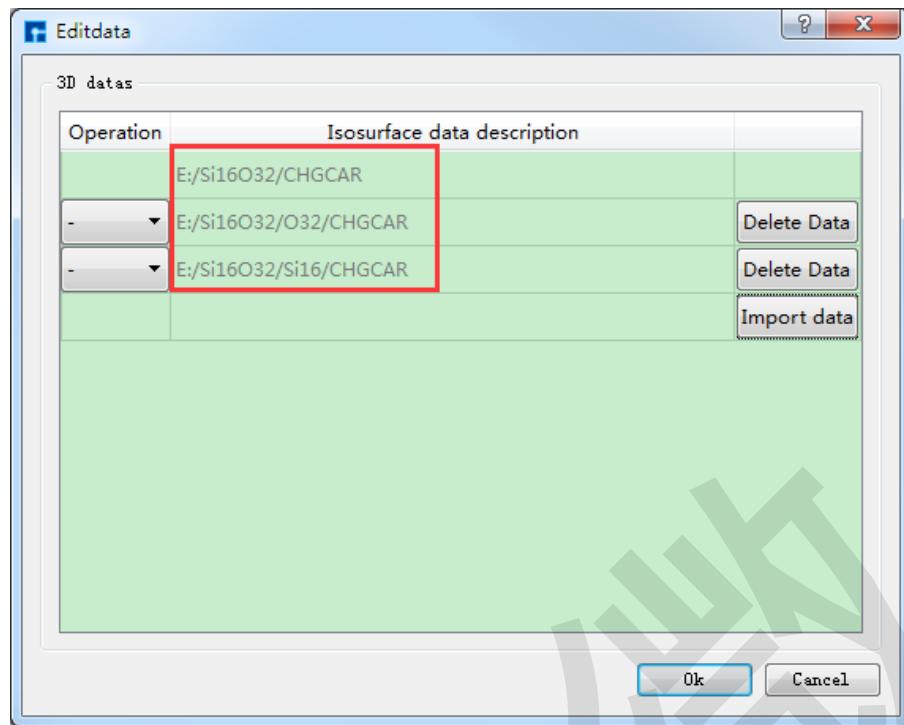


图 8.23: Editdata 界面

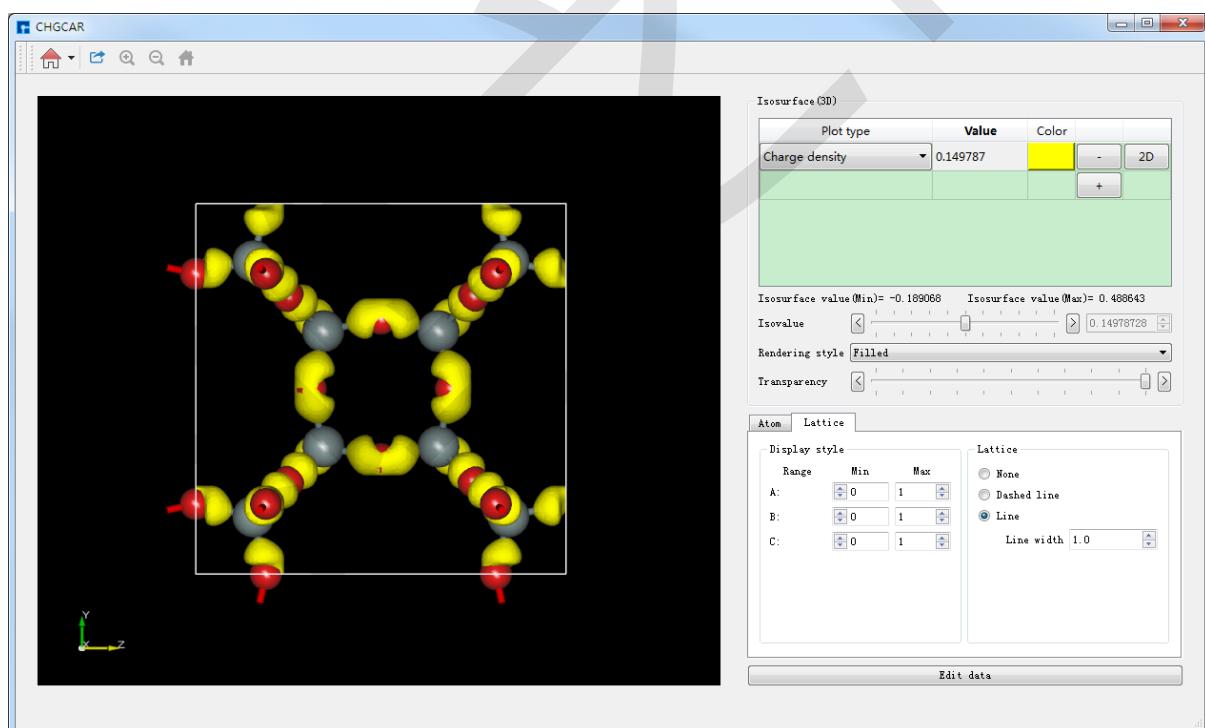


图 8.24: Si16O32 差分电荷密度的 3D 可视化分析界面

在图 8.24 所示界面中点击 2D 按钮则切换为 Si16O32 差分电荷密度的 2D 可视化分析界面 图 8.25 所示。点击图 8.25 所示界面中的 1D 按钮则切换为 Si16O32 差分电荷密度的 1D 可视化分析界面 图 8.26 所示。

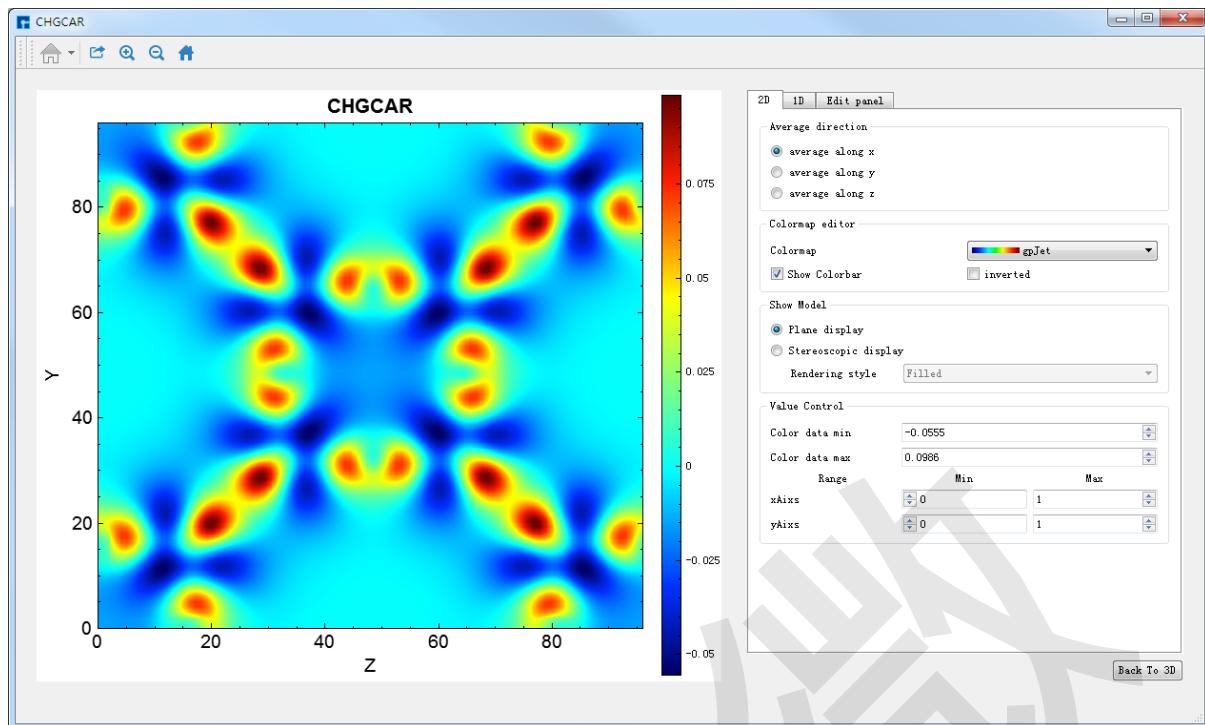


图 8.25: Si16O32 差分电荷密度的 2D 可视化分析界面

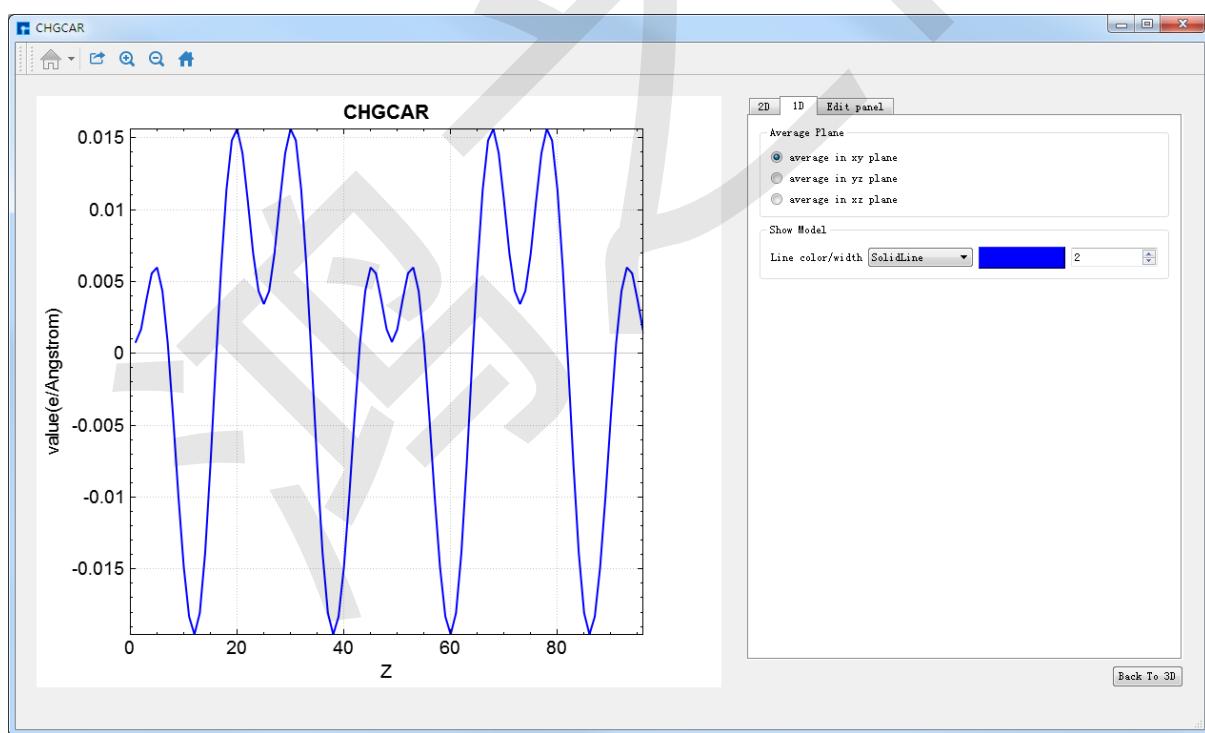


图 8.26: Si16O32 差分电荷密度的 1D 可视化分析界面

对于 Si16O32 差分电荷密度的 2D 可视化分析界面，用户可通过调节 Value Control 模块的 xAixs 和 yAixs 参数对 2D 视图进行扩胞，如把 xAixs 和 yAixs 参数的 Max 值均调节为 2，则扩胞后的 Si16O32 差分电荷密度的 2D 可视化分析界面 图 8.27 所示。

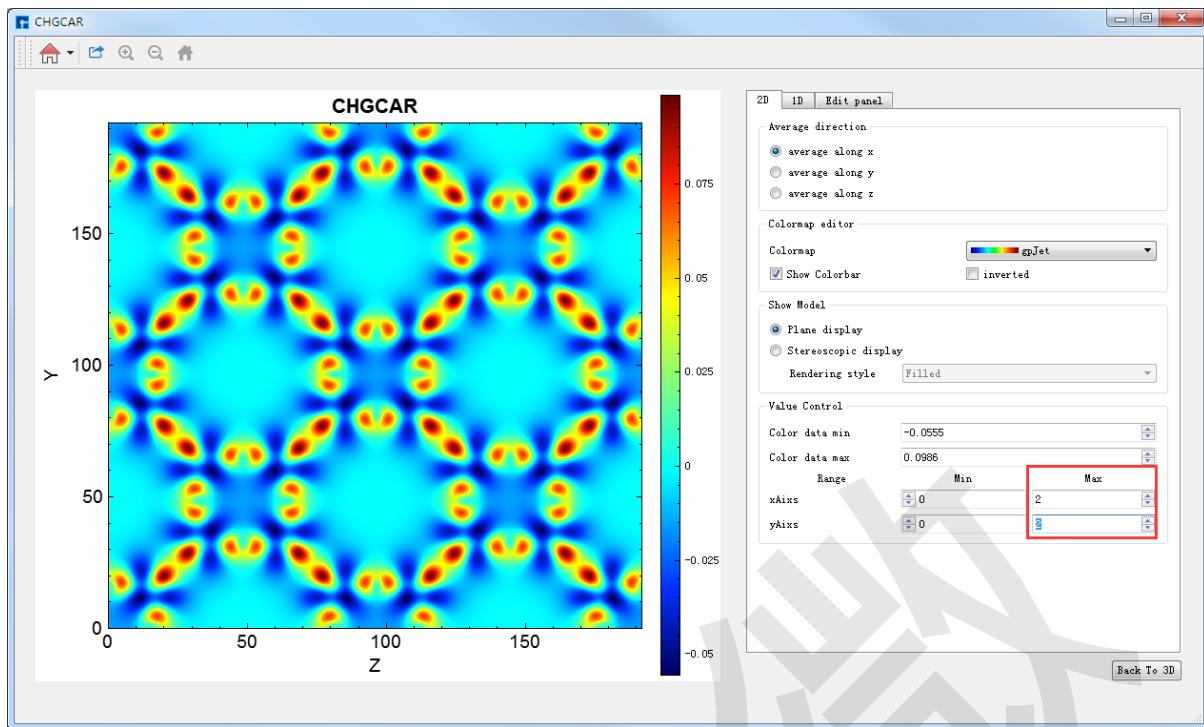


图 8.27: 扩胞后的 Si16O32 差分电荷密度的 2D 可视化分析界面

8.8 任务监控与管理

Device Studio 的计算任务监控管理区域 (*Job Manager*) 集成了 PuTTY、WinSCP 模块如图 8.28 所示, 支持自由配置服务器参数、目录、脚本、命令, 支持任务状态自动刷新, 断网提醒等。对于任务监控与管理区域 Job Manager 如何配置连接服务器可参考 [Nanodcal 连接服务器](#) 节内容。

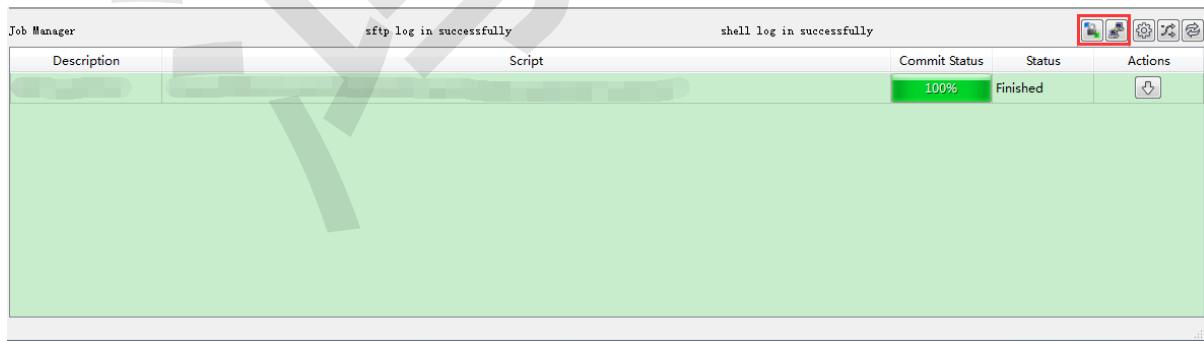


图 8.28: Device Studio 的计算任务监控管理区域 (*Job Manager*)

若任务计算完成, 点击 Job Manager 中 Action 下的 下载按钮弹出下载计算结果的界面如图 8.29 所示, 点击界面中的 Download 则可下载, 下载后可在软件的 Project Explorer 区

域查看到该结果文件。另用户可通过点击 图 8.28 中的 **Open PuTTY**、**Open WinSCP** 的图标连接 Device Studio 已连接的服务器分别如 图 8.30 和 图 8.31 所示。

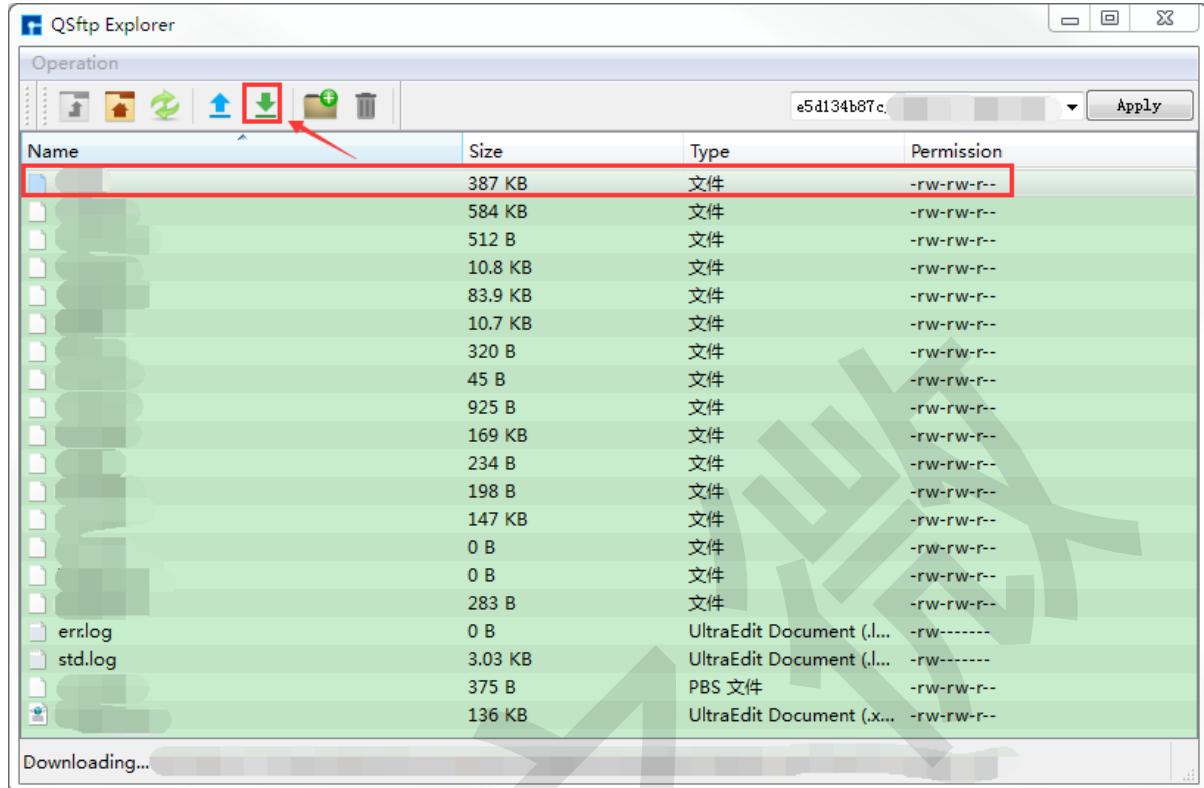


图 8.29: Device Studio 的计算任务监控管理区域 (Job Manager) 下载计算结果的界面

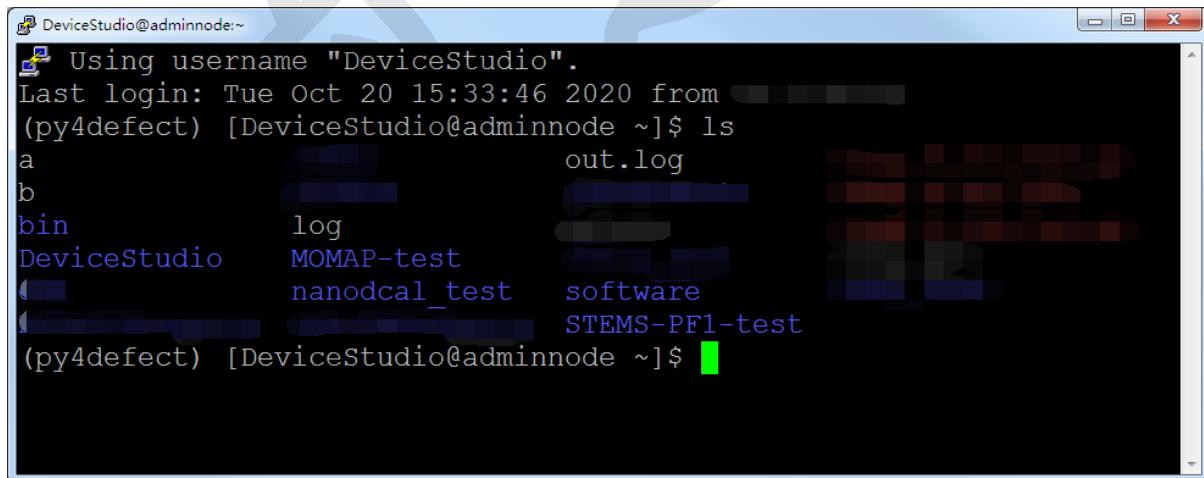


图 8.30: PuTTY 连接服务器界面

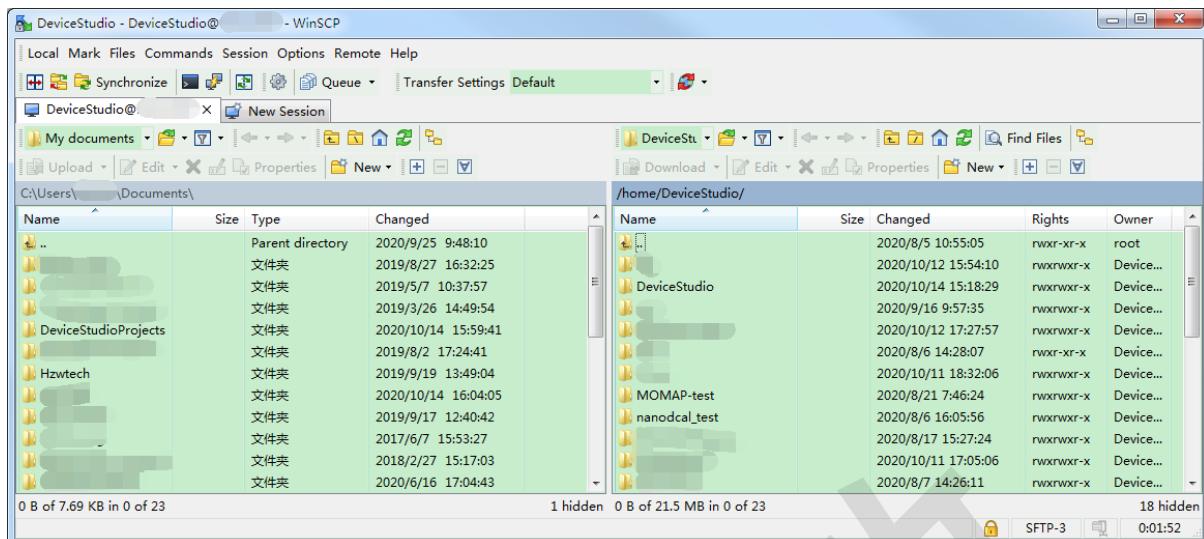


图 8.31: WinSCP 连接服务器界面



CHAPTER 9

常用功能

9.1 修改 Device Studio 主界面背景颜色

修改 Device Studio 主界面中显示原子结构的背景颜色，即修改 Device Studio 中 **结构 3D 显示区域（3D Viewer）** 背景颜色，其修改方式有 2 种，以 **Si16O32** 晶体结构为例来进行详细说明如下。

1. 方式一：Device Studio 主界面中已经显示结构（如：**Si16O32** 晶体结构），如 图 9.1 所示为将显示 **Si16O32** 晶体结构的 背景颜色由 纯黑色修改为 纯白色的操作界面。

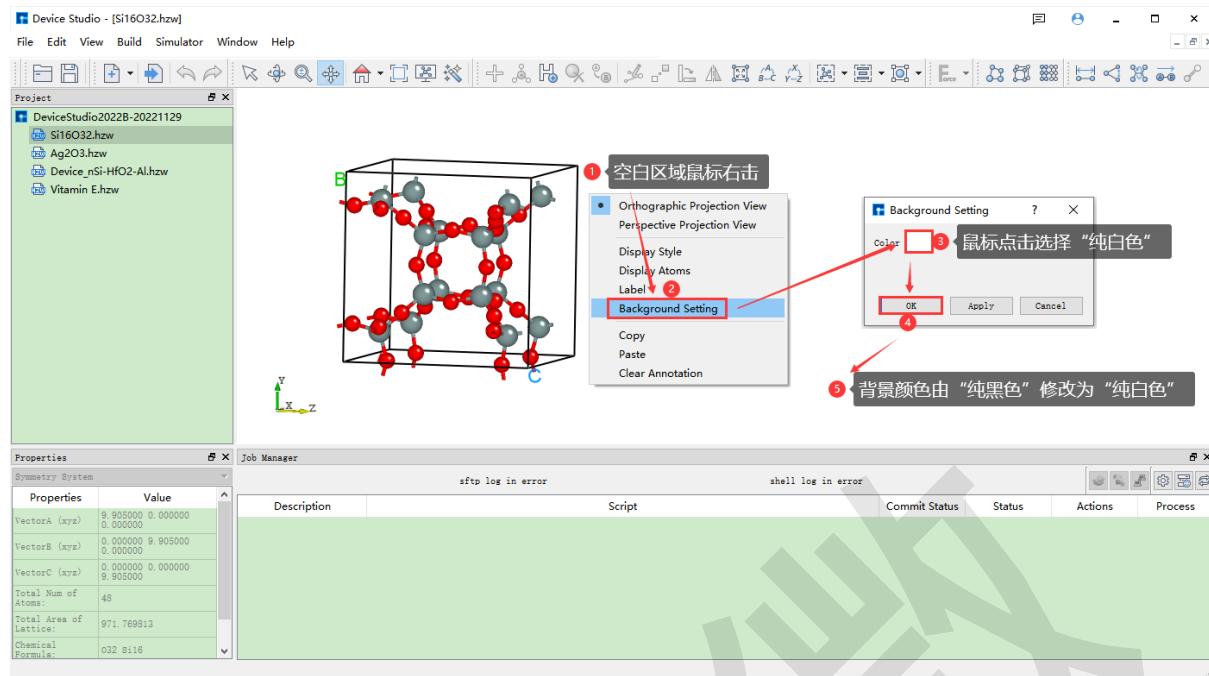


图 9.1: 将显示 Si16O32 晶体结构的 背景颜色由 纯黑色修改为 纯白色的的操作界面

备注

方式一修改背景颜色只能在 Device Studio 主界面中已经显示结构的情况下操作。

2. 方式二: Device Studio 主界面中没有显示结构, 如 图 9.2 、图 9.3 、图 9.4 所示为将显示 Si16O32 晶体结构的 背景颜色由 纯黑色修改为 纯白色的操作步骤。

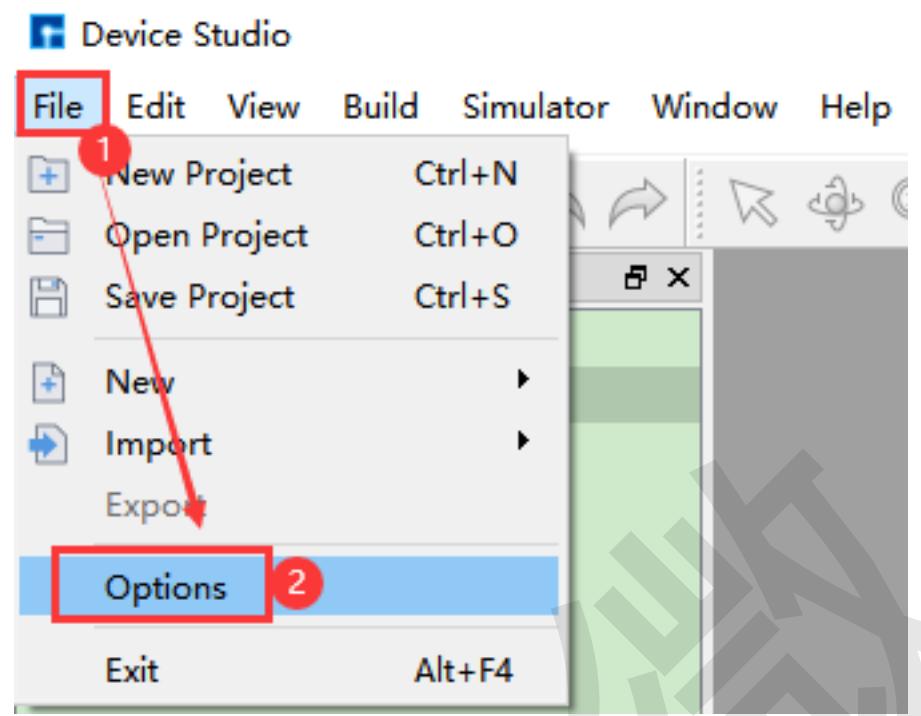


图 9.2: 将 Device Studio 主界面显示结构的 背景颜色由 纯黑色修改为 纯白色操作步骤一

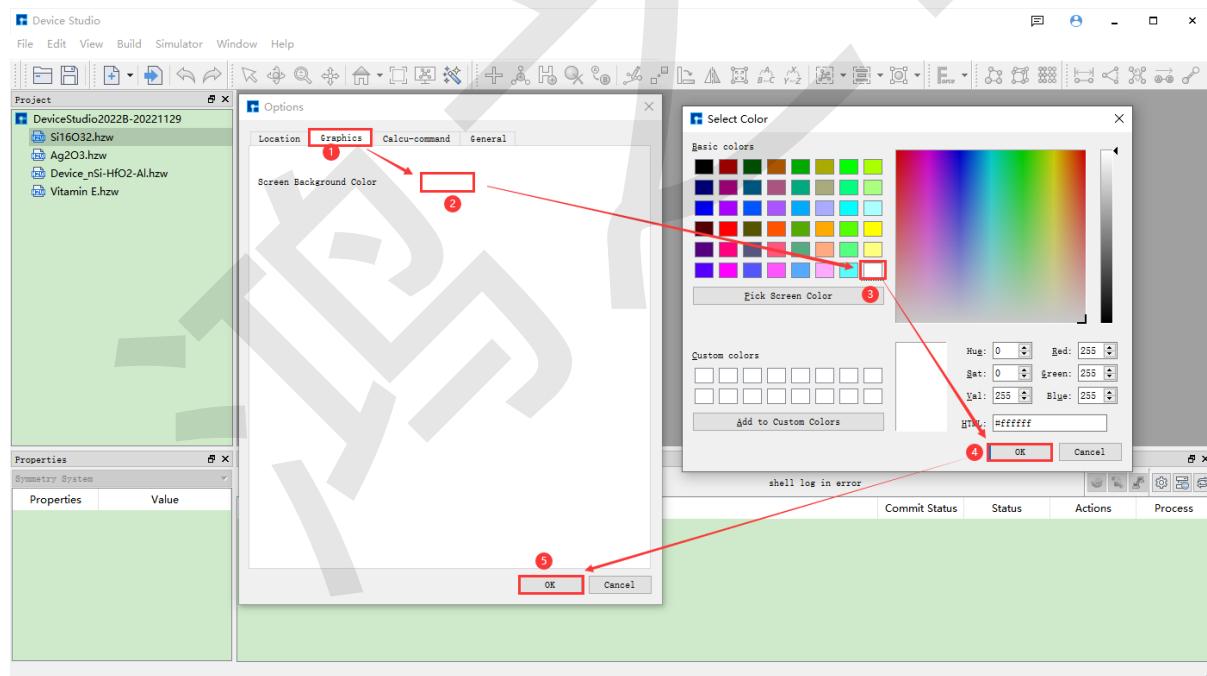


图 9.3: 将 Device Studio 主界面显示结构的 背景颜色由 纯黑色修改为 纯白色操作步骤二

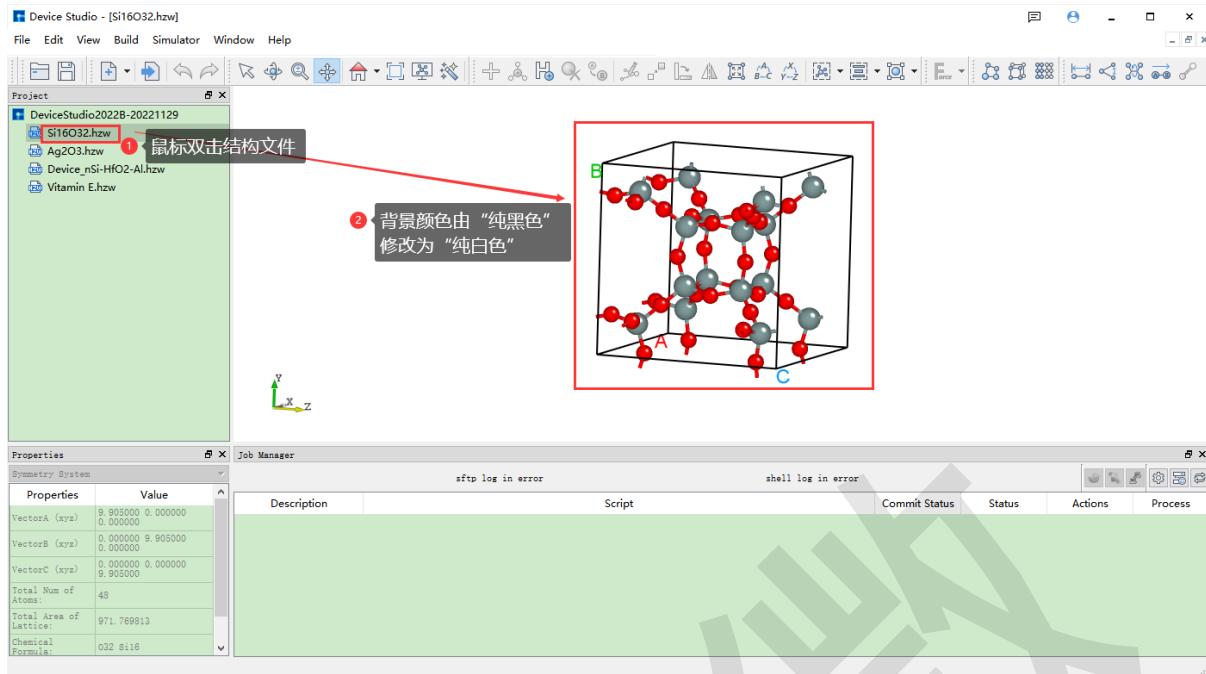


图 9.4: 将 Device Studio 主界面显示结构的背景颜色由 纯黑色修改为 纯白色操作步骤三

注意事项

本章节中主要描述 如何修改 Device Studio 主界面中显示原子结构的背景颜色，即修改 Device Studio 中 [结构 3D 显示区域（3D Viewer）](#) 背景颜色，其对[原子结构精修模块](#)背景颜色不起作用，若想修改原子结构精修模块背景颜色可参考[修改原子结构精修模块背景颜色](#)节内容。

9.2 Device Studio 引用说明

使用 Device Studio 进行 材料原子级建模（百万量级）、高性能科学仿真计算、计算任务的监控和管理、数据可视化中的任何模块，请在文章中引用 Device Studio，其引用模板如下：

Device Studio[1] program provides a number of functions for performing visualization, modeling and simulation. And XXX simulation using XXX software integrated in Device Studio program.
Reference:

[1] Hongzhiwei Technology, Device Studio, Version 2023A, China, 2023. Available online:<https://cloud.hzwtech.com/web/product-service?id=6> (accessed on XXX, XXX).





CHAPTER 10

科学计算软件应用实例

10.1 Nanodcal 实例

Nanodcal 是一款基于非平衡格林函数-密度泛函理论（NEGF-DFT）的第一性原理计算软件，主要用于模拟器件材料中的非线性、非平衡的量子输运过程，是目前国内唯一一款拥有自主知识产权的基于第一性原理的输运软件。可预测材料的电流-电压特性、电子透射几率等众多输运性质。

迄今为止，Nanodcal 已成功应用于 1 维、2 维、3 维材料物性、分子电子器件、自旋电子器件、光电流器件、半导体电子器件设计等重要研究课题中，并将逐步推广到更广阔的电子输运性质研究的领域。

以 Benzene 分子的自洽、本征态计算为例详细描述 Nanodcal 在 Device Studio 中的应用。包含创建项目，从建模到计算，到数据的可视化分析整个流程。Device Studio 可以生成 Nanodcal 很多功能计算的输入文件，用户可根据计算需要选择生成。

备注

Nanodcal 的功能不仅于此，若想了解详情可参照 Nanodcal 使用教程或发送邮件到邮箱 support@hzwtech.com 咨询。

10.1.1 Nanodcal 计算流程

10.1.1.1 Nanodcal 自治计算流程

Nanodcal 自治计算在 Device Studio 中的流程如 图 10.1 所示。

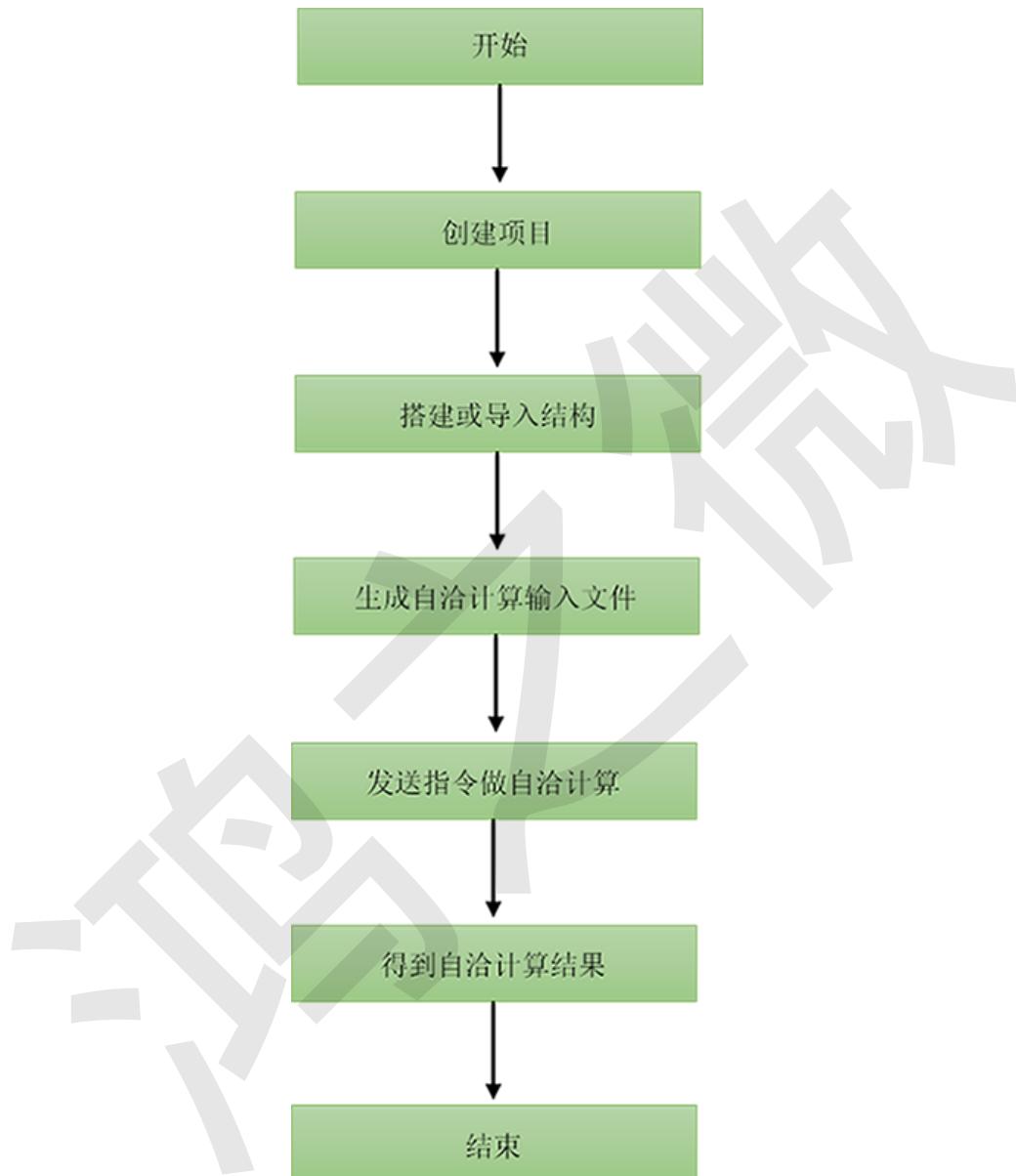


图 10.1: Nanodcal 自治计算流程

10.1.1.2 Nanodcal 本征态计算流程

Nanodcal 本征态计算在 Device Studio 中的流程如 图 10.2 所示。

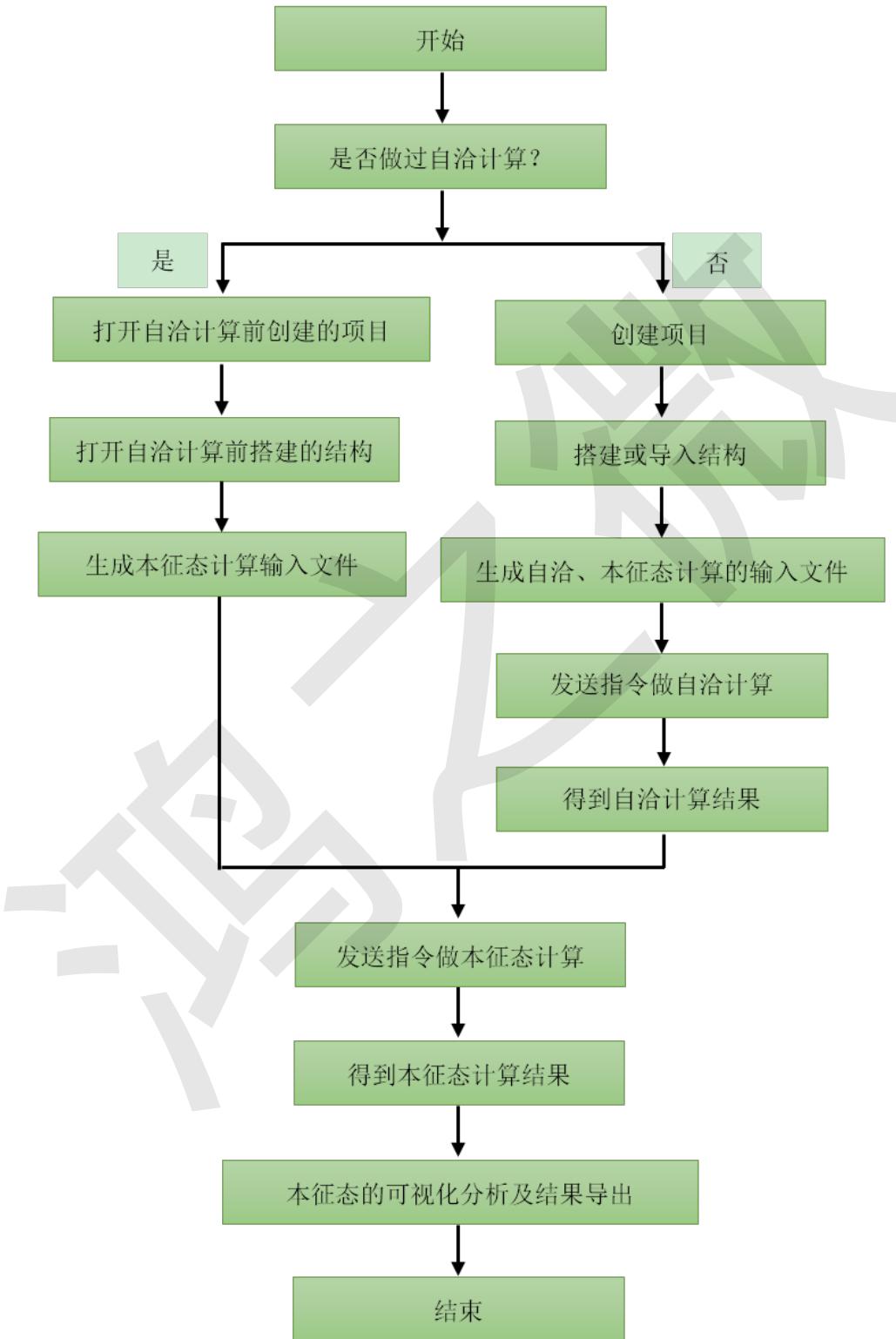


图 10.2: Nanodcal 本征态计算流程

10.1.2 Nanodcal 创建项目

双击 Device Studio 图标快捷方式，登录并启动 Device Studio，在创建或打开项目界面中（启动软件后选择创建或打开项目的图形界面），根据界面提示选择创建一个新的项目（*Create a new Project*）或打开一个已经存在的项目（*Open an existing Project*）的按钮，选中之后点击界面中的 *OK* 按钮即可。若选择创建一个新的项目，用户可根据需要给该项目命名，如本项目命名为 Nanodcal，或采用软件默认项目名。

10.1.3 Nanodcal 搭建或导入结构

对于想要搭建的结构，用户可先在 Device Studio 本地数据库或在线数据库搜索结构是否存在。若存在，找到结构直接导入；若不存在，可将库中的相关结构先导入，在此基础上方便快捷的搭建，也可直接自行搭建。如 Benzene 分子，该结构在 Device Studio 本地库中存在，则可在本地库中找到该结构直接导入即可，导入 Benzene 分子结构后的图形界面如 图 10.3 所示。在 Device Studio 中导入 Benzene 分子结构操作这里不做详细说明，用户可参照导入结构 节内容。

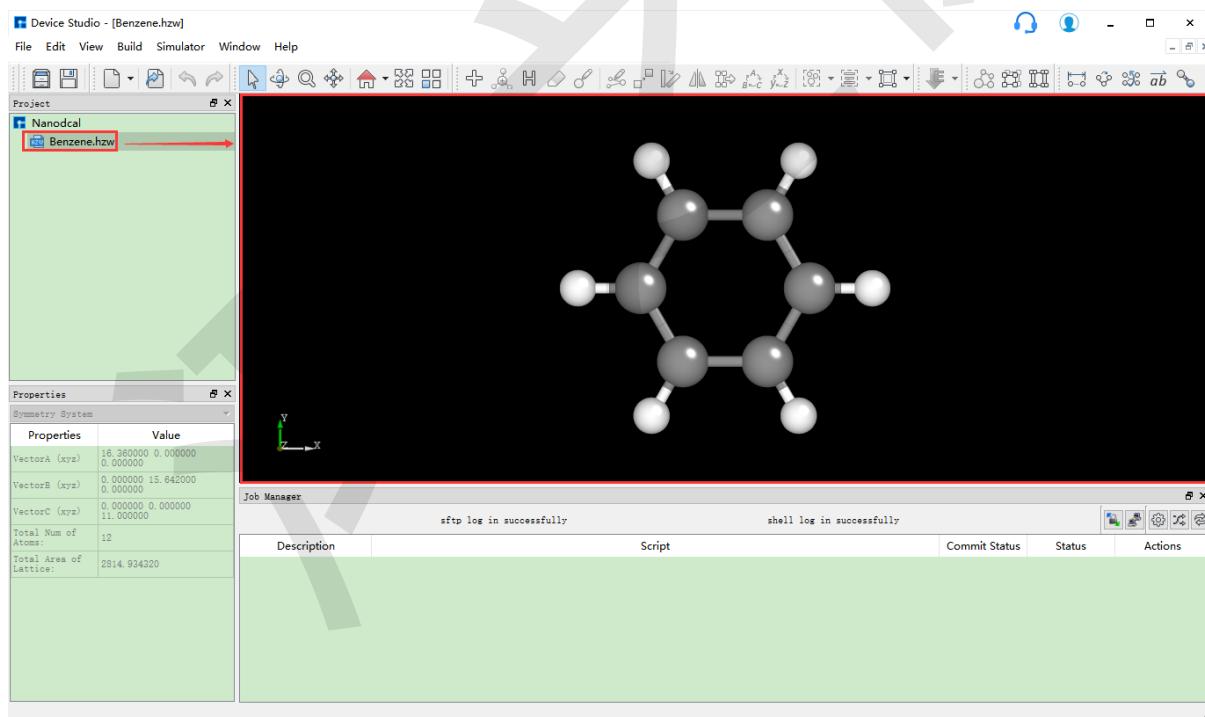


图 10.3: 导入 Benzene 分子结构后的图形界面

10.1.4 Nanodcal 输入文件的生成

10.1.4.1 Nanodcal 生成自洽计算输入文件

在如 图 10.3 所示界面中选中 *Simulator* → *Nanodcal* → *SCF Calculation*, 弹出界面如 图 10.4 所示, 用户可根据所计算的结构及计算需要分别选中 *Basic settings*、*Iteration control*、*Basis set*、*Spin type* 这四个按钮合理设置参数, 之后点击 *Generate files* 即可生成自洽计算输入文件。

如生成 Benzene 分子自洽计算输入文件, 根据计算需要设置参数, 分别选中 *Basic settings*、*Iteration control*、*Basis set*、*Spin type* 设置参数分别如 图 10.4、图 10.5、图 10.6 和 图 10.7 所示, 设置好参数后点击 *Generate files* 即可生成 Benzene 自洽计算输入文件 scf.input。

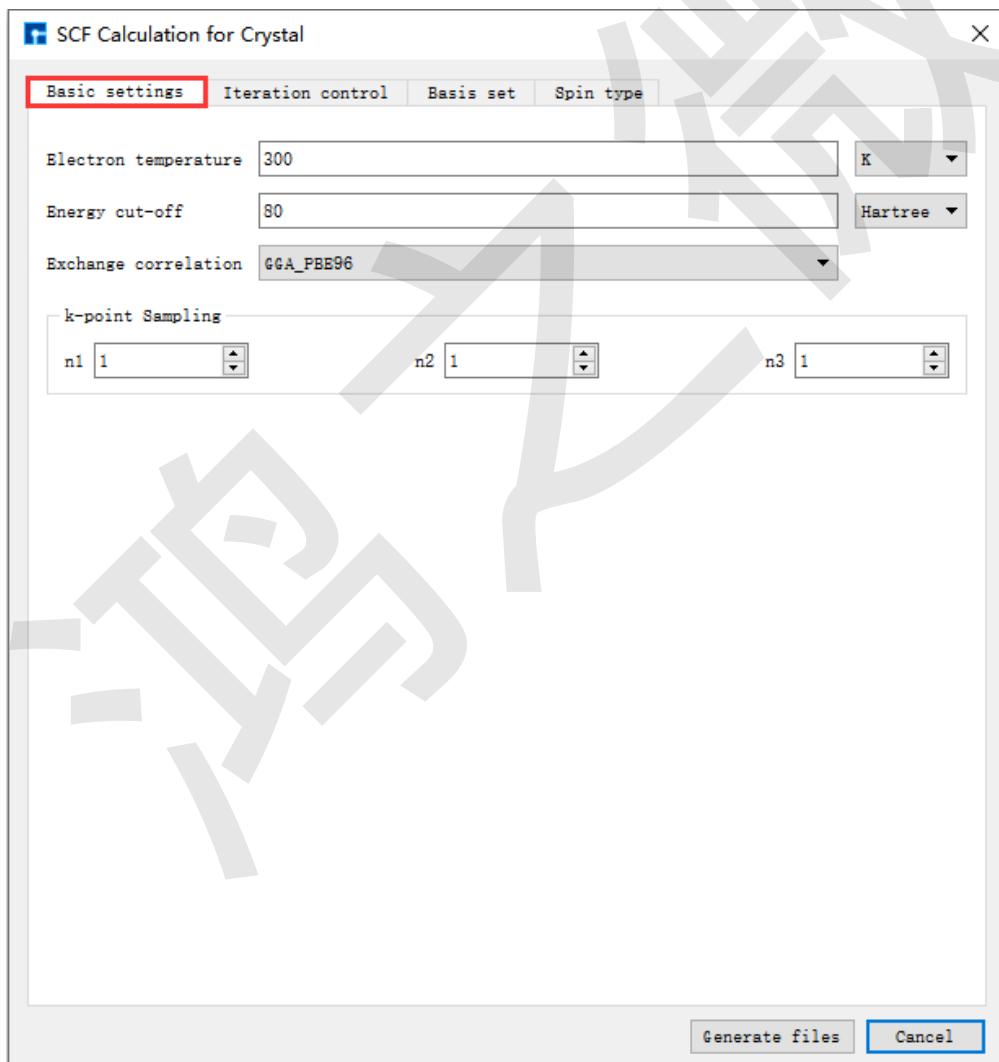


图 10.4: Basic settings 参数设置界面

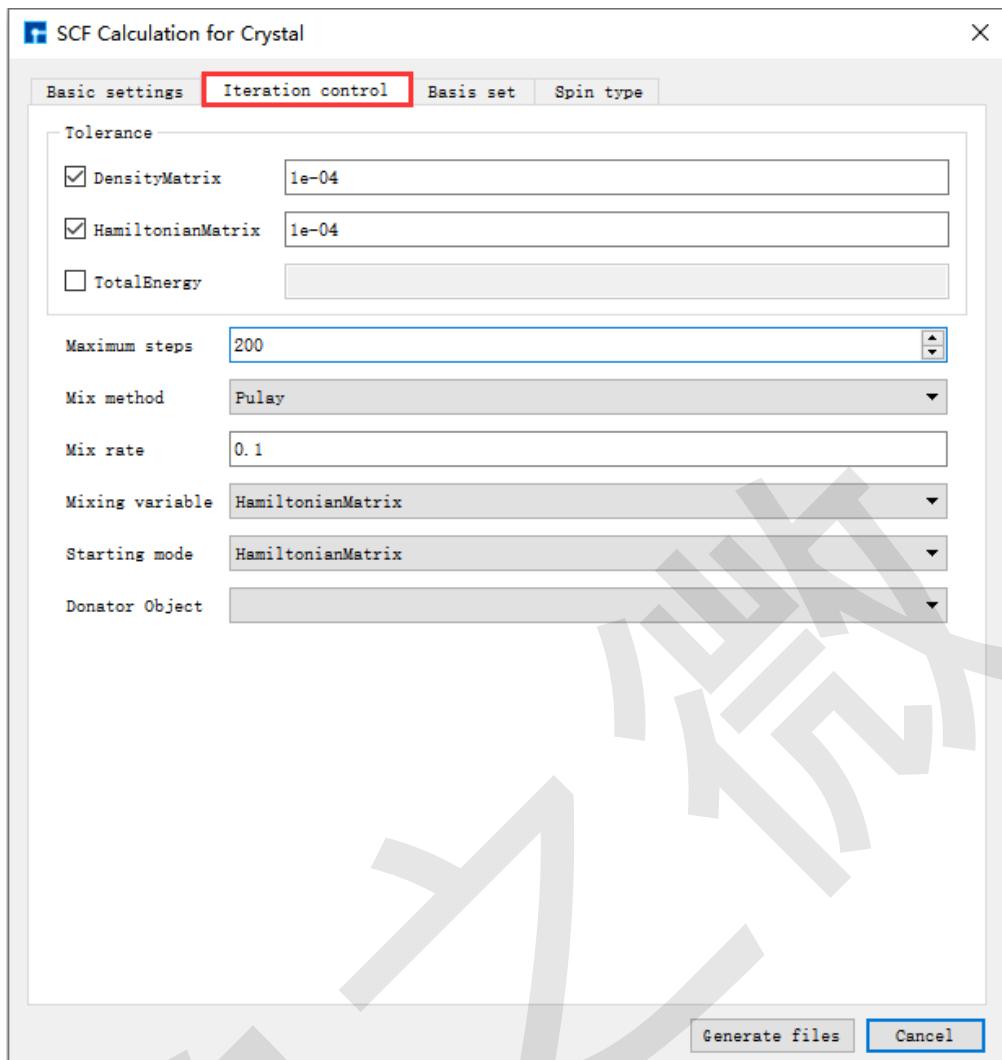


图 10.5: Iteration control 参数设置界面

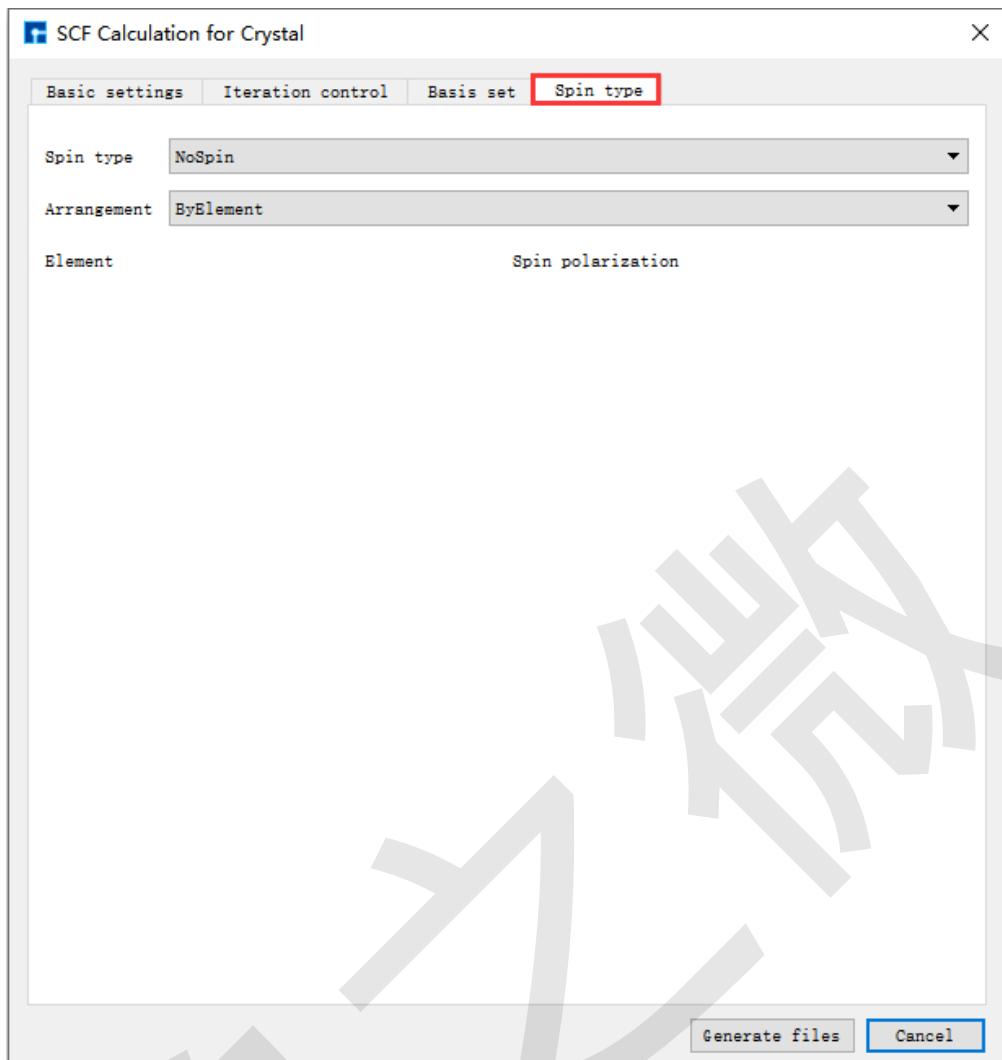


图 10.6: Basis set 参数设置界面

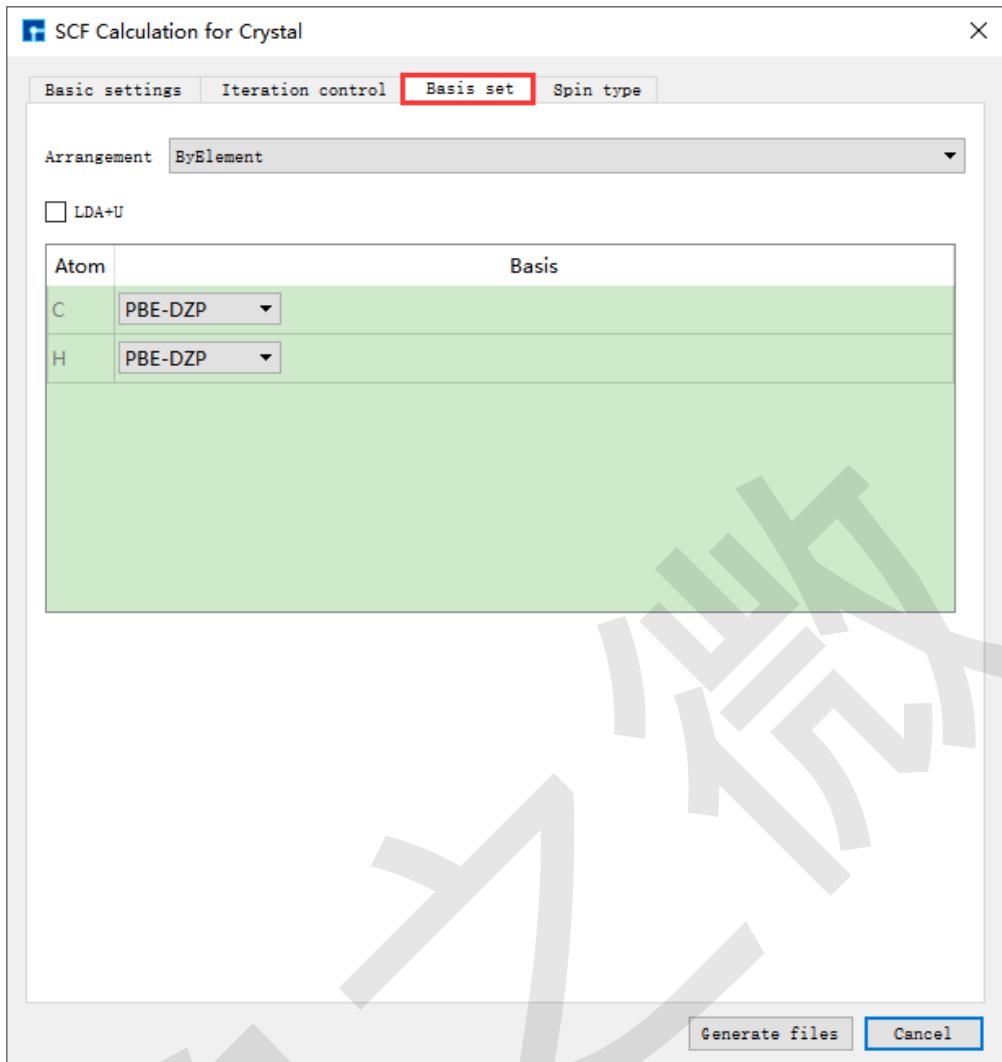


图 10.7: Spin type 参数设置界面

10.1.4.2 Nanodcal 生成本征态计算输入文件

在如 图 10.3 所示界面中选中 *Simulator* → *Nanodcal* → *Analysis*, 弹出 Analysis 界面, 在界面中双击 *EigenStates*, 并设置参数如 图 10.8 所示, 设置好参数后点击 *Generate files* 即可生成 Benzene 本征态计算输入文件 *EigenStates.input*。

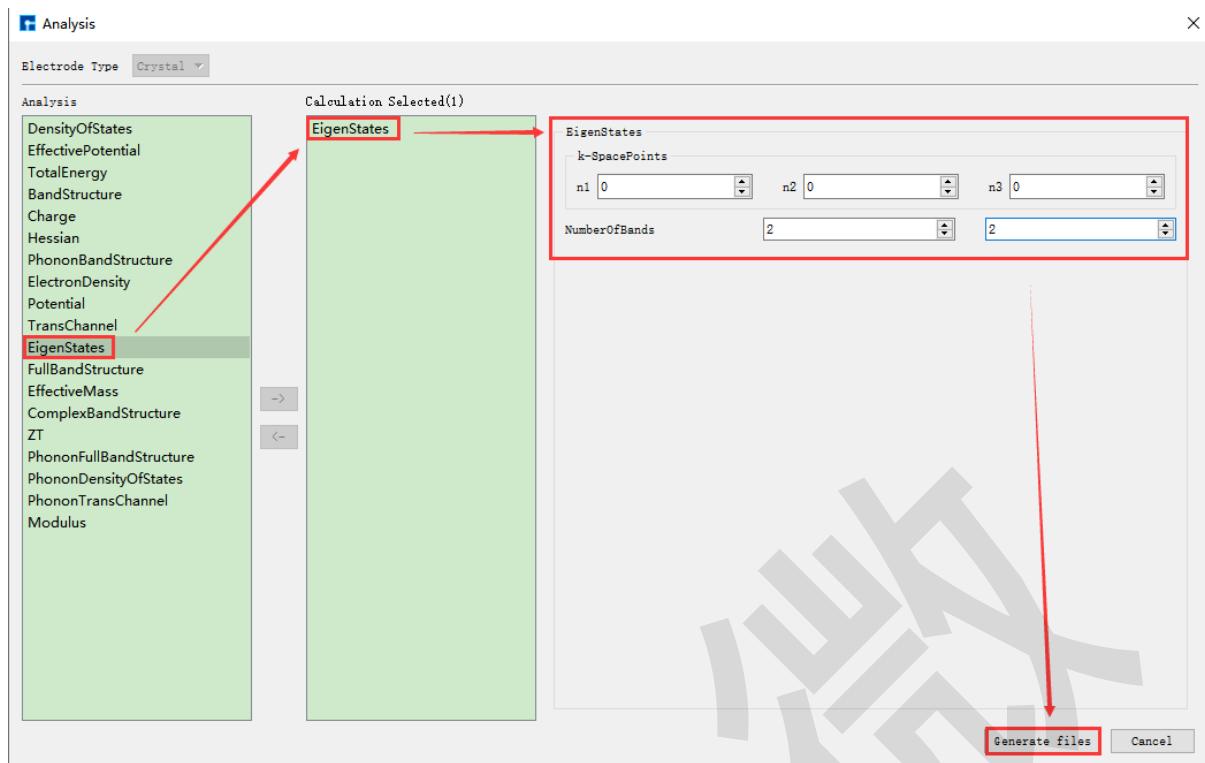


图 10.8: Benzene 分子本征态计算参数设置界面

10.1.5 Nanodcal 连接服务器

生成输入文件之后需要计算，计算之前需连接装有 Nanodcal 的服务器。如连接装有 Nanodcal 的 内蒙 A 区超算服务器，则可在如 图 10.9 所示界面中点击 设置 按钮，弹出 MachineOptions 界面，在 MachineOptions 界面中点击 内蒙 A 区，点击 Select 则连接好装有 Nanodcal 的 内蒙 A 区超算服务器。同理，若要连接装有 Nanodcal 的本地电脑，则在 图 10.9 中所示的 MachineOptions 界面上选中 MyComputer，点击 Select 即可。

若用户想要添加新的装有 Nanodcal 的服务器，在如 图 10.10 所示界面中点击 设置 按钮，弹出 MachineOptions 界面，在该界面中点击 New 按钮，弹出 MachineSet 界面，在该界面中填写 Computer Name、HostIp、Port、Username、Password 等一系列信息，点击 OK 按钮则在 MachineOptions 界面中添加了装有 Nanodcal 的服务器。

Device Studio 使用教程

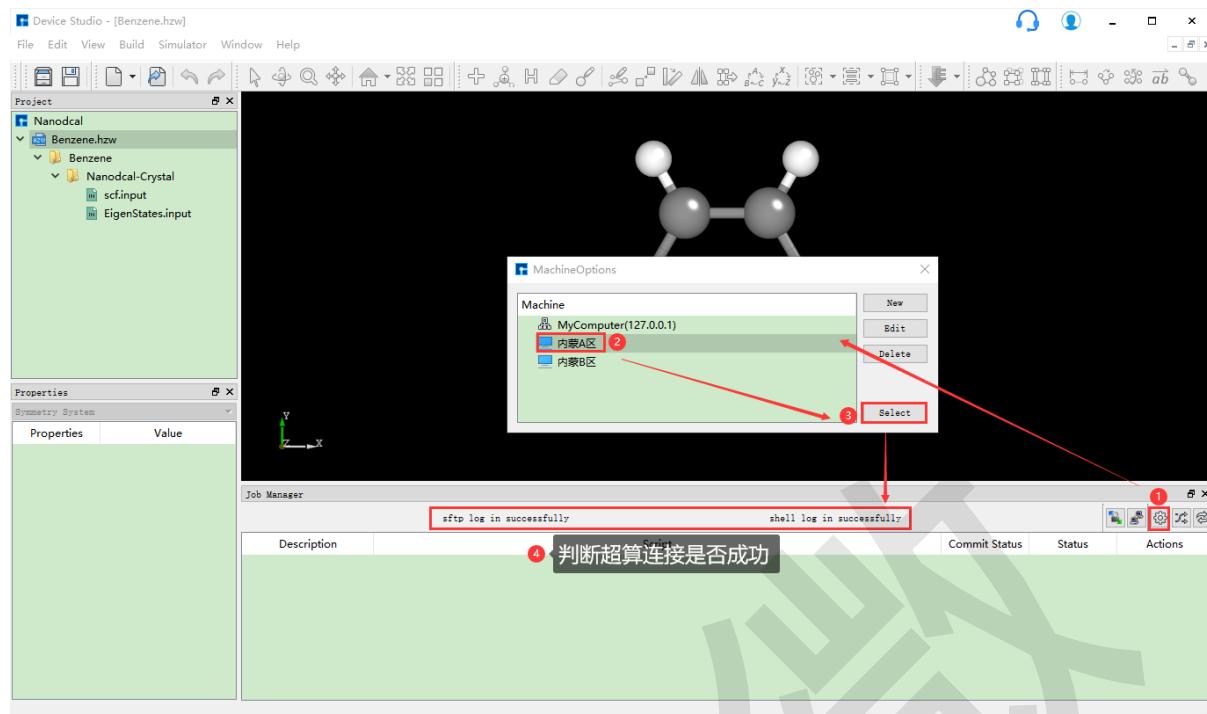


图 10.9: 连接服务器操作界面

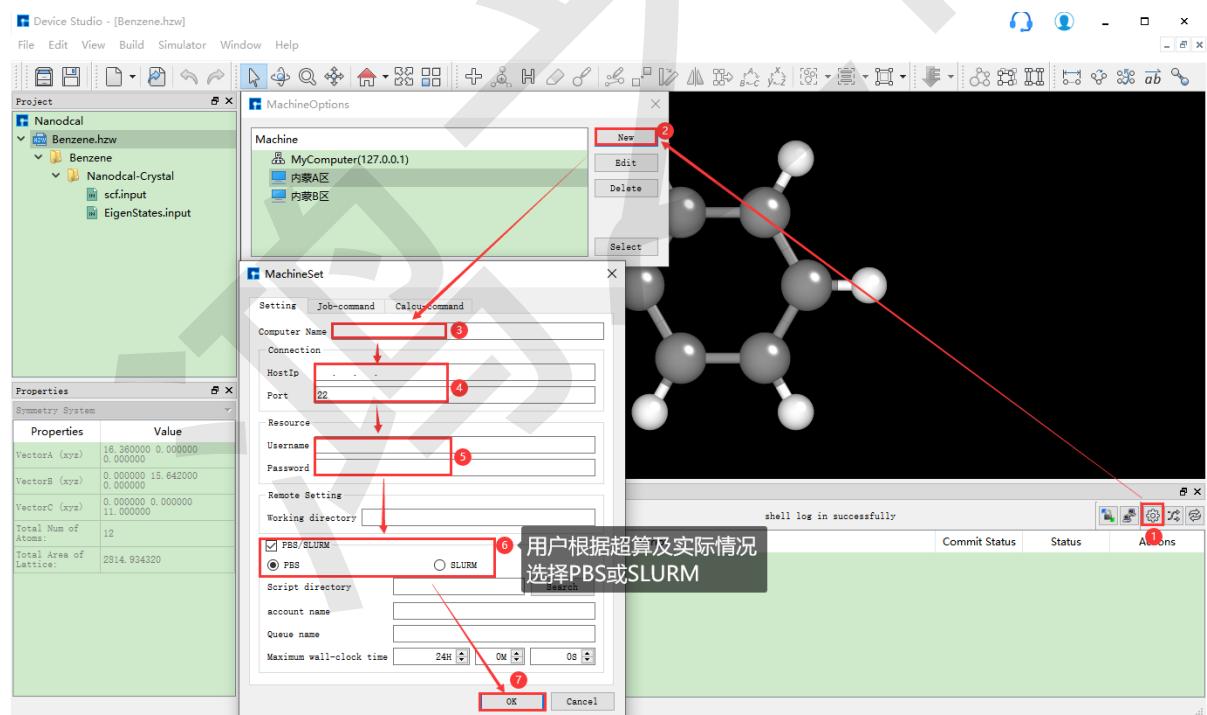


图 10.10: 添加并连接新的超算服务器操作界面

10.1.6 Nanodcal 计算

10.1.6.1 Nanodcal 自治计算

在做自治计算之前需查看计算所需的输入文件（scf.input）和基组文件（C_PBE-DZP.nad 和 H_PBE-DZP.nad）是否齐全，再根据计算需要打开 scf.input 文件并查看文件中的参数设置是否合理，若不合理，则可选择直接在文件中进行编辑或重新生成，最后再进行自治计算。具体步骤如下：

- (1) 连接装有 Nanodcal 的服务器。
- (2) 检查自治计算所需的输入文件（scf.input）和基组文件（C_PBE-DZP.nad 和 H_PBE-DZP.nad）是否齐全。选中 scf.input → 右击 → *Open with* 即可查看到 Benzene 分子自治计算输入文件如下所示：

```
%%What quantities should be calculated
calculation.name = scf

%Basic setting
calculation.occupationFunction.temperature = 300
calculation.realspacegrids.E_cutoff = 80 Hartree
calculation.xcFunctional.Type = GGA_PBE96
calculation.k_spacegrids.number = [ 1 1 1 ]'
system.centralCellVectors = [[16.36 0 0]' [0 15.642 0]' [0 0 11]']
system.spinType = NoSpin
%Iteration control
calculation.SCF.monitoredVariableName = {'rhoMatrix','hMatrix',
←'totalEnergy','bandEnergy','gridCharge','orbitalCharge'}
calculation.SCF.convergenceCriteria = {1e-04,1e-04,[],[],[],[]}
calculation.SCF.maximumSteps = 200
calculation.SCF.mixMethod = Pulay
calculation.SCF.mixRate = 0.1
calculation.SCF.mixingMode = H
calculation.SCF.startingMode = H
%calculation.SCF.donatorObject = NanodcalObject.mat

%Basic set
system.neutralAtomDataDirectory = '../'
system.atomBlock = 12
AtomType OrbitalType X Y Z
C PBE-DZP 5.00900000 5.57200000 5.00000000
```

(续下页)

(接上页)

C	PBE-DZP	5.77900000	4.23800000	5.00000000
C	PBE-DZP	7.31900000	4.23800000	5.00000000
C	PBE-DZP	8.08900000	5.57200000	5.00000000
C	PBE-DZP	7.31900000	6.90500000	5.00000000
C	PBE-DZP	5.77900000	6.90500000	5.00000000
H	PBE-DZP	3.86900000	5.57200000	5.00000000
H	PBE-DZP	5.20900000	3.25100000	5.00000000
H	PBE-DZP	7.88900000	3.25100000	5.00000000
H	PBE-DZP	9.22900000	5.57100000	5.00000000
H	PBE-DZP	7.88900000	7.89200000	5.00000000
H	PBE-DZP	5.21000000	7.89300000	5.00000000
end				

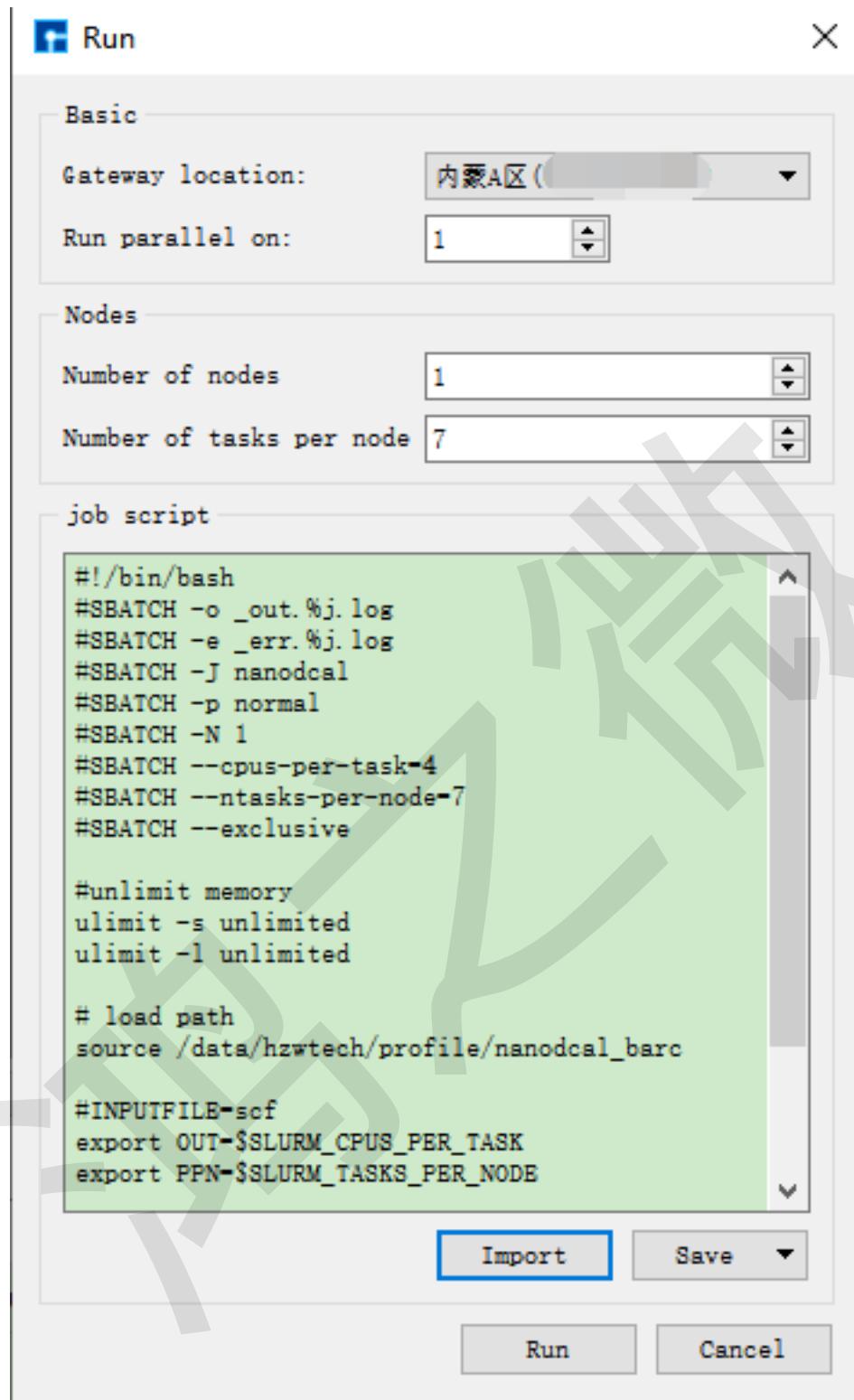


图 10.11: Run 界面

(3) 在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 scf.input → 右击 → Run，弹出 Run 界面如 图 10.11 所示。根据计算需要设置参数后点击 Save 按钮保存相应的脚本，之后点击如 图 10.11 所示界面中的 Run 按钮则可做 Benzene 分子的自洽计算。用户可在 Job

Manager 区域中观察自治计算状态，当自治计算任务处于排队中、计算中和计算完成时，*Status* 分别为 Queued、Running、Finished；在计算过程中，用户可根据需要点击 刷新按钮，通过 *Commit Status*、*Status* 可查看到自治计算的计算进度和计算状态；计算完成后 Device Studio 的 Job Manager 区域如 图 10.12 所示，点击 Action 下的 下载按钮弹出下载 Benzene 分子自治计算结果界面如 图 10.13 所示，在该界面找到自治计算的结果文件 *NanodcalObject.mat*，点击 下载按钮则可下载，下载后可在软件的 Project Explorer 区域查看到该结果文件。

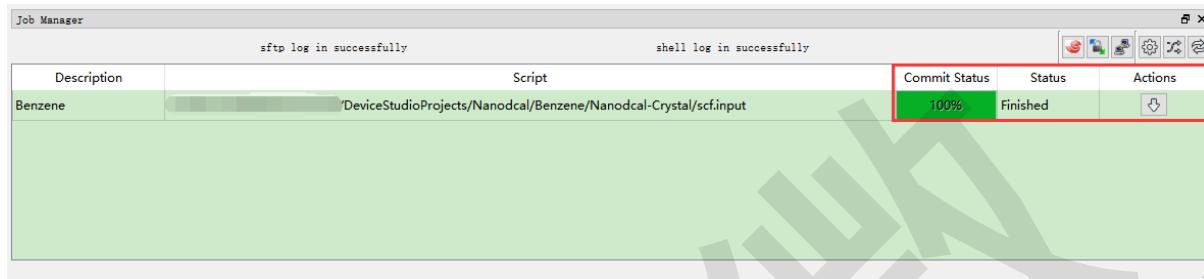


图 10.12: Benzene 分子自治计算完成的 Device Studio 的 Job Manager 区域

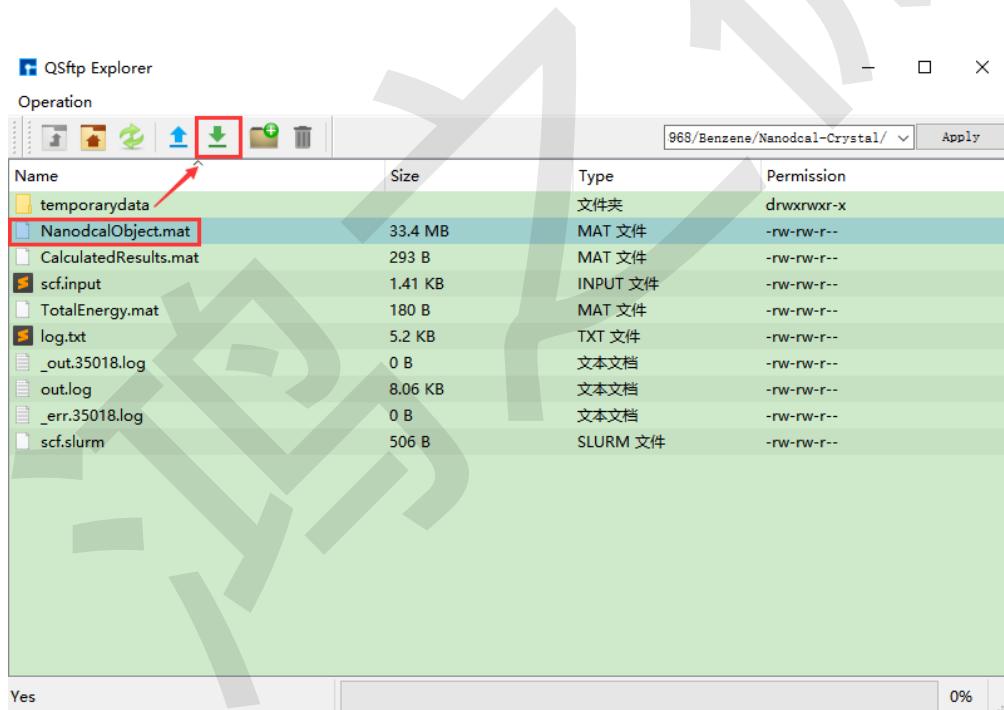


图 10.13: 下载 Benzene 分子自治计算结果界面

10.1.6.2 Nanodcal 本征态计算

本征态计算需调用自治计算结果，故需先做自治计算，再做本征态计算。本算例已经做过自治计算，则不需要再做自治计算，直接调用自治计算结果做本征态计算即可。Benzene 分子的本征态计算的具体步骤如下：

- (1) 连接装有 Nanodcal 的服务器。
- (2) 选中 EigenStates.input → 右击 → *Open with* 即可查看到 Benzene 分子本征态计算输入文件如下所示：

```
system.object = NanodcalObject.mat
calculation.name = eigenStates
calculation.eigenStates.kSpacePoints = [0 0 0]'
```

- (3) 在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 EigenStates.input → 右击 → *Run*，弹出 Run 界面如 图 10.11 所示。根据计算需要设置参数后点击 *Save* 按钮保存相应的脚本，点击界面中的 *Run* 按钮则可做 Benzene 分子的本征态计算，计算完成后下载本征态计算结果文件 EigenStates.dsfs。

10.1.7 Nanodcal 本征态的可视化分析

对于本征态的可视化分析有 3 种情况，分别为 3 维（3D）、2 维（2D）和 1 维（1D），3 种可视化分析可自由切换，其中 2D 的可视化分析又分为平面显示和立体显示 2 种情况，用户可根据需要进行选择。

10.1.7.1 本征态的 3D 可视化分析

在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中本征态计算结果文件 EigenStates.dsfs → 右击 → *Show View*，弹出本征态的 3D 可视化分析界面如 图 10.14，由 图 10.14 可知，用户可根据需要选择在可视化分析结果中是否显示该体系的结构信息以及显示该结构信息的方式；可选择是否显示 Lattice 框以及显示 Lattice 框的方式（分子结构没有 Lattice 框，故本算例中无法使用该功能）；可通过改变 Isovalue 值来改变本征态 3D 可视化分析的形状；可通过选择如 图 10.14 中所示的红色框选部分来选择从不同平面来观察本征

态的 3D 可视化分析结果；可通过滚动鼠标中键将 3D 可视化分析结果放大或缩小；可按住鼠标右键，通过拖动鼠标将 3D 可视化分析结果进行旋转；可根据需要选择不同的 Colormap。在如 图 10.14 所示的界面中 BandValues 部分，用户可通过下拉选择显示第几条带的本征态可视化分析结果。

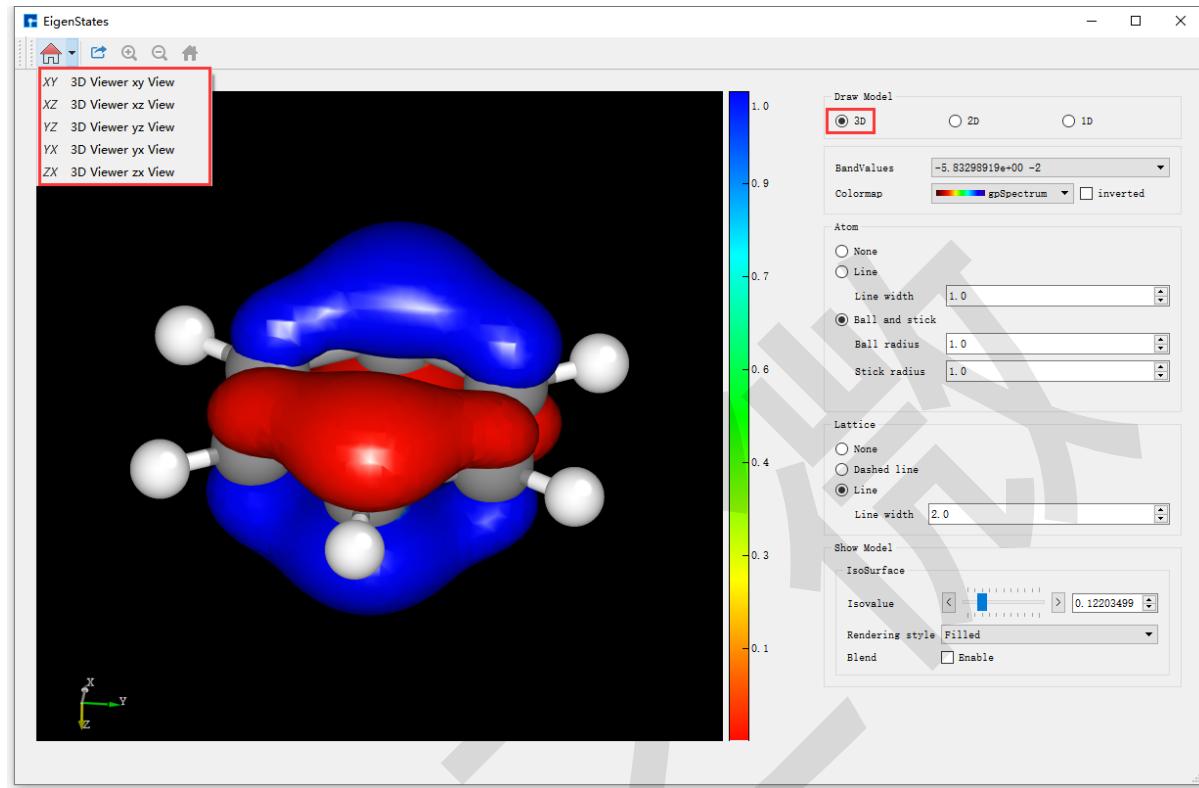


图 10.14: Benzene 分子本征态的 3D 可视化分析界面

选中如 图 10.14 所示界面中 *Export* 快捷图标，弹出导出可视化分析结果的图形界面，用户可根据需要选择图片的保存路径和保存格式，并给所保存的图片命名。

对于不是通过 Device Studio 计算本征态，但含有本征态计算结果文件 EigenStates.ds_f 的用户，可在如 图 10.3 所示界面中选中 Simulator → Nanodcal → Analysis Plot，弹出导入本征态结果文件的图形界面，在界面中选中本征态结果文件 EigenStates.ds_f，点击 打开按钮即可弹出本征态的 3D 可视化分析界面。

10.1.7.2 本征态的 2D 可视化分析

图 10.14 右侧的 Draw Model 栏下的三个选项 3D、2D 和 1D 分别代表着计算结果的 3D、2D 和 1D 的可视化分析。若想对 Benzene 分子本征态计算结果进行 2D 的可视化分析，直接选中 Draw Model 栏下的 2D 按钮即可切换成本征态 2D 的可视化分析界面如 图 10.15 所示。

由 图 10.15 可知，2D 的可视化分析分为两种情况，一种是平面显示（Plane display），一种是立体显示（Stereoscopic display），此刻选中的按钮为 Plane display，即 图 10.15 亦为 average along x 的 Benzene 分子本征态 2D 平面显示的可视化分析结果。用户可根据需要通过选择 Average direction 栏下的 3 个按钮中的 average along x、average along y 或 average along z 来选择沿着 x 轴、y 轴或 z 轴平均来查看并分析本征态的相关性质；可根据需要选择是否显示 Colorbar，选择合适的 Colormap，修改坐标轴的取值范围，修改标题和坐标轴的字体类型、字体大小以及字体是否加粗等。

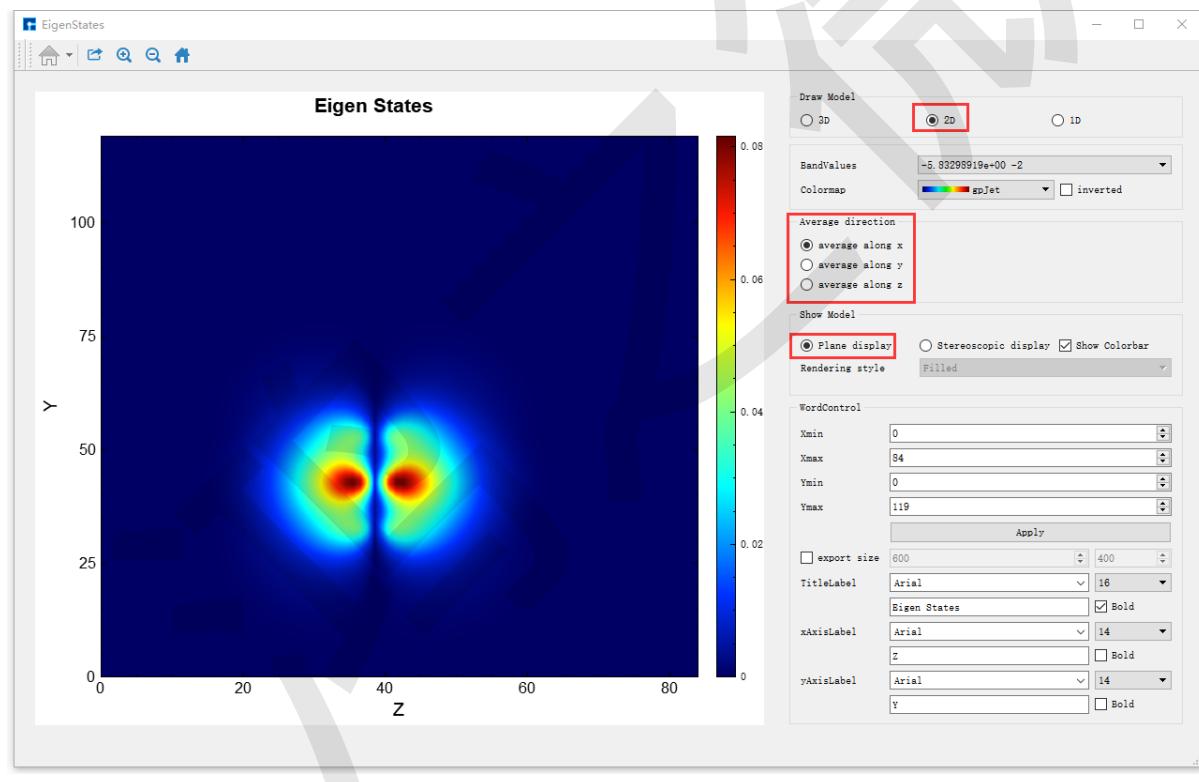


图 10.15: Benzene 分子本征态的 2D 可视化分析界面（平面显示）

若想切换为立体显示，直接选中如 图 10.15 中的 Stereoscopic display 按钮即可，切换后的图形界面如 图 10.16 所示，图 10.16 亦为 average along x 的 Benzene 分子本征态 2D 立体显示的可视化分析结果。对于如 图 10.16 图中左侧的图像，用户可通过滚动鼠标将图像放大或缩小；可通过拖动鼠标使图像发生任意角度和任意方向的旋转；可通过按住鼠标中键，拖动鼠标将图像进行平移。

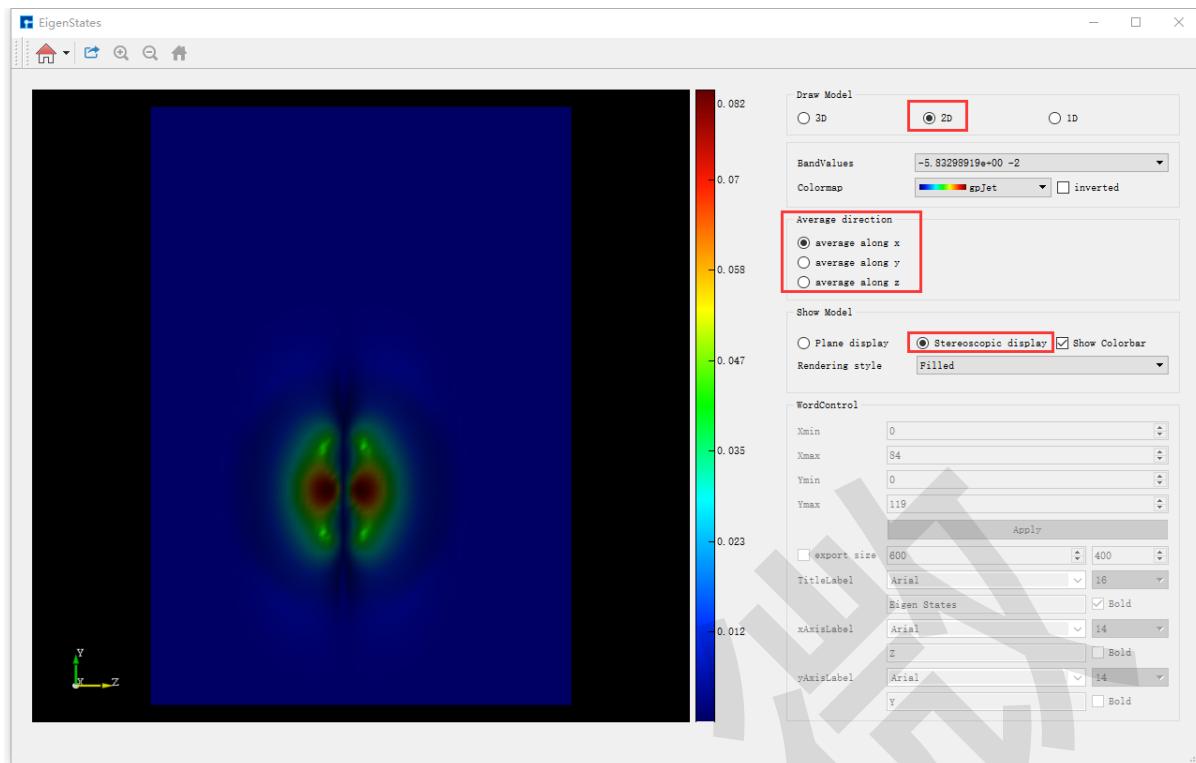


图 10.16: Benzene 分子本征态的 2D 可视化分析界面（立体显示）

10.1.7.3 本征态的 1D 可视化分析

选中如 图 10.17 所示的 Draw Model 栏下的 1D 按钮即可切换成 1D 的可视化分析界面如 图 10.17 所示, 图 10.17 亦为 average in xy plane 的 Benzene 分子本征态 1D 的可视化分析结果。用户可根据需要选择沿着不同的平面平均来观察和分析本征态, 修改图像中线条粗细、坐标轴取值范围; 可自行设置标题和坐标轴的标注, 同时可修改标题、坐标轴和标注的字体类型和字体大小, 以及是否给字体加粗; 可根据需要设定导出本征态 1D 可视化分析结果的图片的大小。

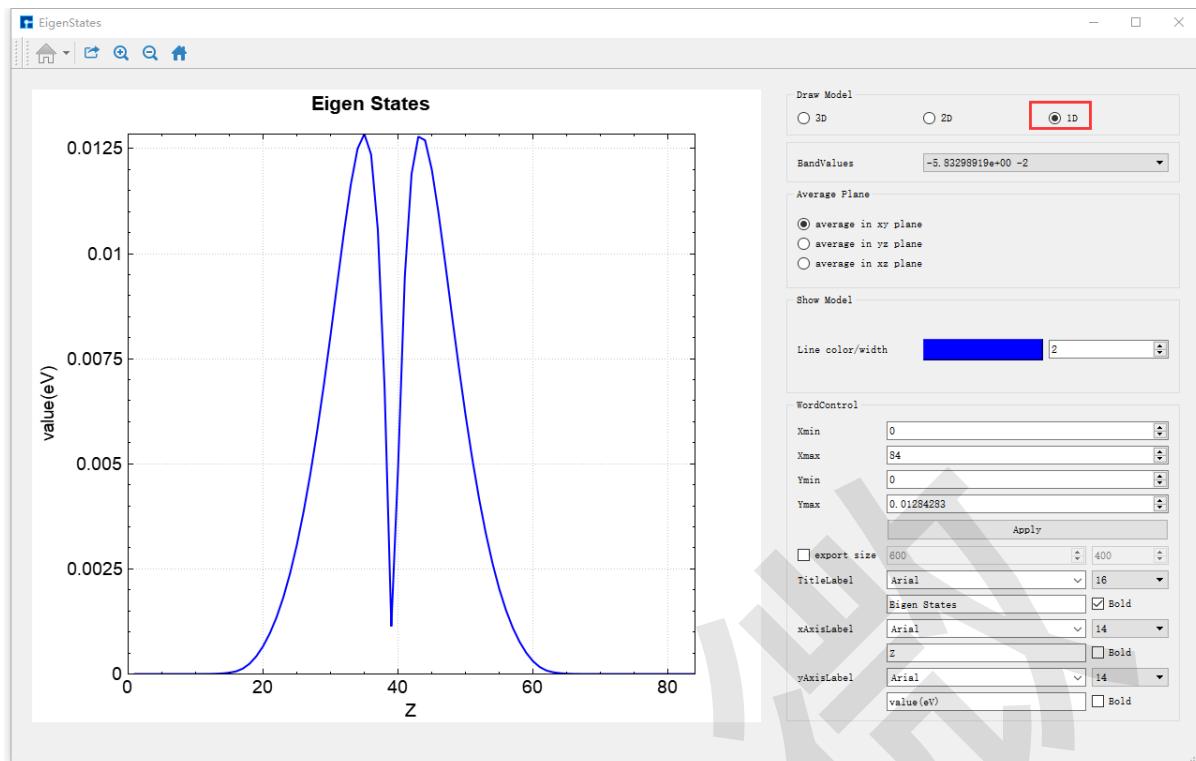


图 10.17: Benzene 分子本征态的 1D 可视化分析界面

10.2 LAMMPS 实例

LAMMPS 即 **Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator**，大规模原子分子并行模拟器，主要用于分子动力学相关的一些计算和模拟工作。一般来讲，分子动力学所涉及到的领域，LAMMPS 代码也都涉及到了。LAMMPS 由美国 Sandia 国家实验室开发，以 GPL license 发布，即开放源代码且可以免费获取使用，这意味着使用者可以根据自己的需要自行修改源代码。LAMMPS 程序在模拟固态材料（金属、半导体）、柔性物质（生物分子、聚合物）、粗粒度介观体系等方向具有广泛的应用。LAMMPS 程序内置多种原子间势（力场模型），可以实现原子、聚合物、生物分子、固态材料（金属、陶瓷、氧化物）、粗粒度体系的建模和模拟。该程序即可以模拟二维体系，也可以模拟三维体系，可以模拟多达数百万甚至数十亿粒子的分子体系，并提供支持多种势函数，具有良好的并行扩展性、模拟效率高、计算时间短等优点。

分子动力学模拟（**Molecular Dynamics**，MD）是近年来飞速发展的一种分子模拟方法，已经被广泛应用于化学化工、材料科学与工程、物理、生物医药等科学和技术领域，起到越来越重要的作用。MD 模拟用来研究不能用解析方法来解决的复合体系的平衡性质和力学性质，用来搭建理论和实验的桥梁，在数学、生物、化学、物理学、材料科学和计算机科学交叉学科占据重要地位。

LAMMPS 软件官网: 详见 <https://lammps.sandia.gov>

鸿之微科技（上海）股份有限公司在 **Device Studio 2021B** 中开发了适用于分子动力学计算软件 **LAMMPS** 的计算模块。使用 Device Studio，用户可在其图形界面中方便快捷的搭建或导入计算所需的结构，并可在 3D 显示区域查看其结构的 3D 视图。搭建好结构后，用户可在 LAMMPS 计算模块，根据计算需要，在简洁友好的界面中设置参数生成计算所需的输入文件，之后连接装有 LAMMPS 的本地电脑或远程服务器进行相关计算，在计算过程中可实时监测任务的计算状态，计算完成后可对 LAMMPS 的计算结果进行可视化分析。

目前用户可通过 Device Studio 生成 LAMMPS 以下计算输入文件的生成：结构弛豫、热力学性质（热膨胀系数、体积热容、等压热容）、输运性质（均方位移、速度自相关函数、热导率）、力学性质（杨氏模量、剪切模量）、淬火、退火模拟；结合 OVITO 软件可对 LAMMPS 计算结果进行结构特征数据分析。

以 对金属铝沿 X 轴方向以一定的恒定应变速率拉伸的形变模拟为例来详细描述 LAMMPS 在 Device Studio 中的应用。

10.2.1 LAMMPS 计算流程

LAMMPS 分子动力学计算在 Device Studio 中的流程如 图 10.18 所示。



图 10.18: LAMMPS 计算流程

10.2.2 LAMMPS 创建项目

双击 Device Studio 图标快捷方式启动软件，根据界面提示选择创建一个新的项目（*Create a new Project*）或打开一个已经存在的项目（*Open an existing Project*）的按钮，选中之后点击界面中的 *OK* 按钮即可。若选择创建一个新的项目，用户可根据需要给该项目命名，如本项目命名为 LAMMPS，或采用软件默认项目名。

10.2.3 LAMMPS 导入结构

在 Device Studio 的图形界面中点击 *File → Import → Import Local*，则弹出导入 LAMMPS 结构文件的界面，根据界面提示找到 Al_Rede.hzw 结构文件的位置，选中 Al_Rede.hzw 结构文件，点击 打开按钮则导入 Al_Rede.hzw 结构后的 Device Studio 界面如 图 10.19 所示。

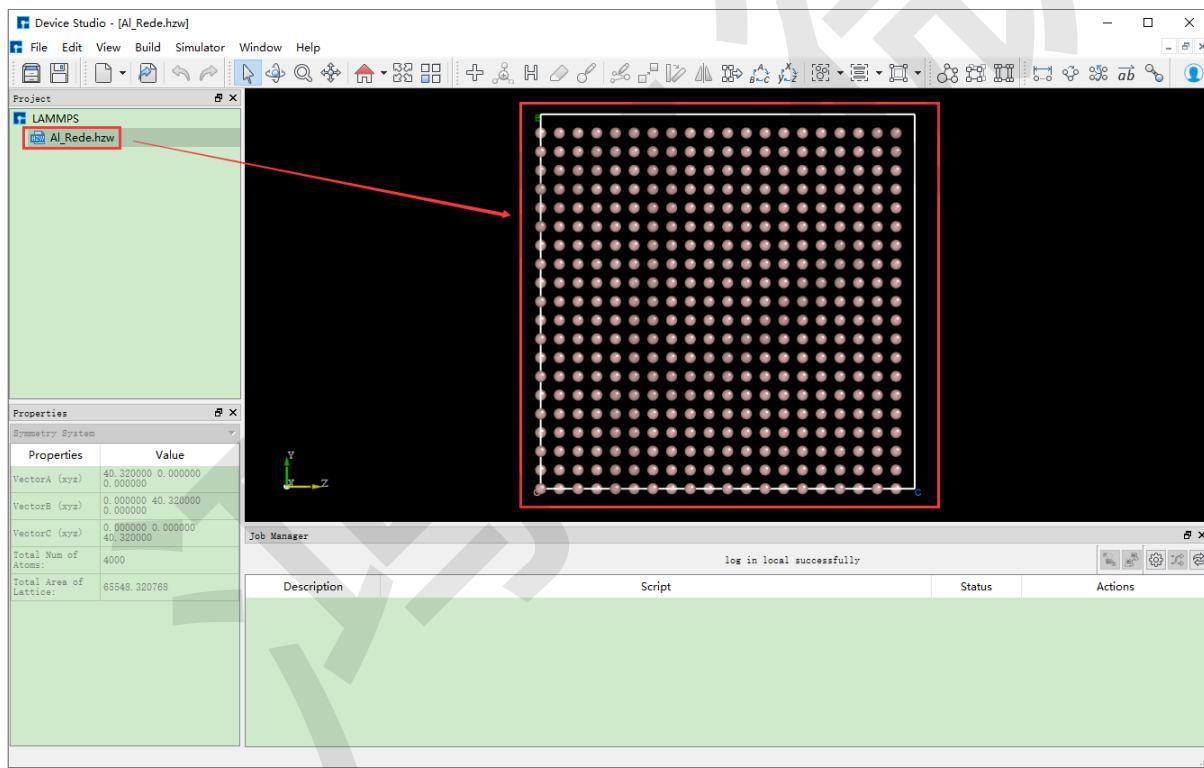


图 10.19: 导入 Al_Rede.hzw 结构后的 Device Studio 图形界面

10.2.4 LAMMPS 输入文件的生成

在如图 10.19 所示的界面中选中 *Simulator* → *LAMMPS* → *Calculation*，弹出 LAMMPS 的参数设置界面 LAMMPS Calculation 如图 10.20 所示。LAMMPS 的参数设置界面主要分为 *Task*、*Force field*、*Setting* 和 *Run simulation* 四个模块，用户可根据计算需要，依次点击四个模块进行参数设置，之后点击 *Generate files* 即可生成对应计算的输入文件。

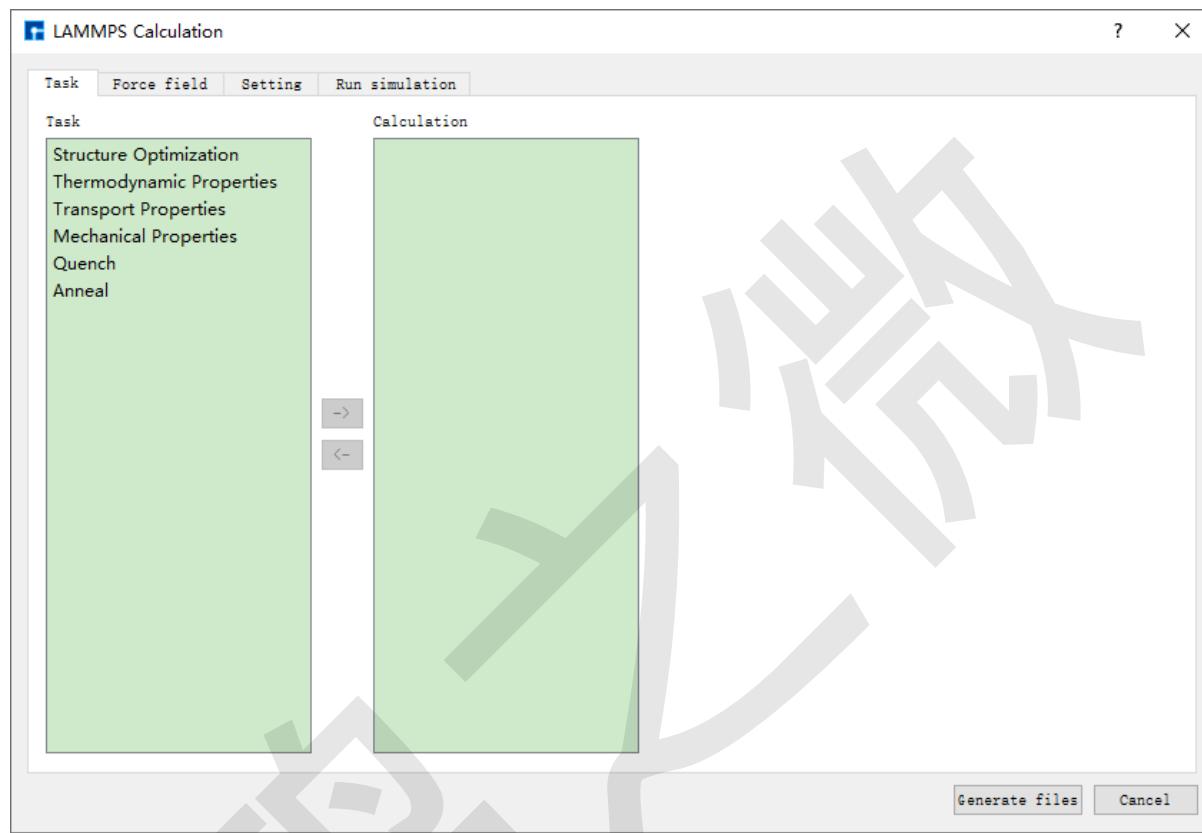


图 10.20: LAMMPS 的参数设置界面 LAMMPS Calculation

以生成对金属铝沿 X 轴方向以一定的恒定应变速率拉伸的形变模拟的输入文件为例，在如图 10.20 所示的 LAMMPS 参数设置界面中，根据计算需要分别选中 *Task*、*Force field*、*Setting* 和 *Run simulation*，设置参数分别如图 10.21、图 10.22 (b)、图 10.23 (c) 和图 10.24 (d) 所示，之后点击界面中的 *Generate files* 即可生成输入文件 Al_Rede.in、Al_Rede.data。

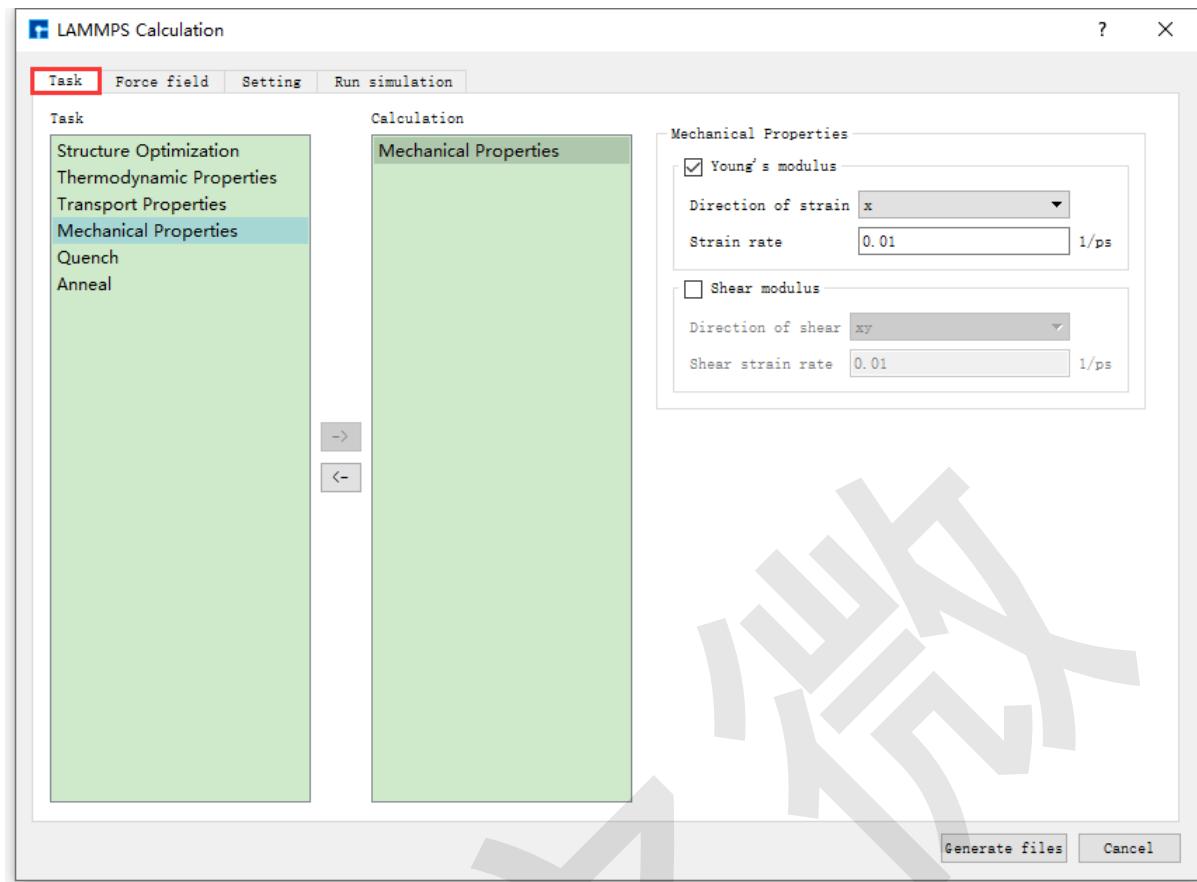


图 10.21: Task 参数设置界面

Task 说明

- 结构弛豫 (*Structure Optimization*)。
- 热力学性质 (*Thermodynamic Properties*)，其中热力学性质任务包括热膨胀系数 (Thermal expansion)、体积热容 (Volumetric heat capacity)、等压热容 (Isobaric heat capacity)。
- 输运性质 (*Transport Properties*)，其中输运性质任务包括均方位移 (MSD)、速度自相关函数 (VACF)、热导率 (Thermal conductivity)。
- 力学性质 (*Mechanical Properties*)，其中力学性质包括杨氏模量 (Young's modulus)、剪切模量 (Shear modulus)。
- 淬火模拟 (*Quench*)。
- 退火模拟 (*Anneal*)。

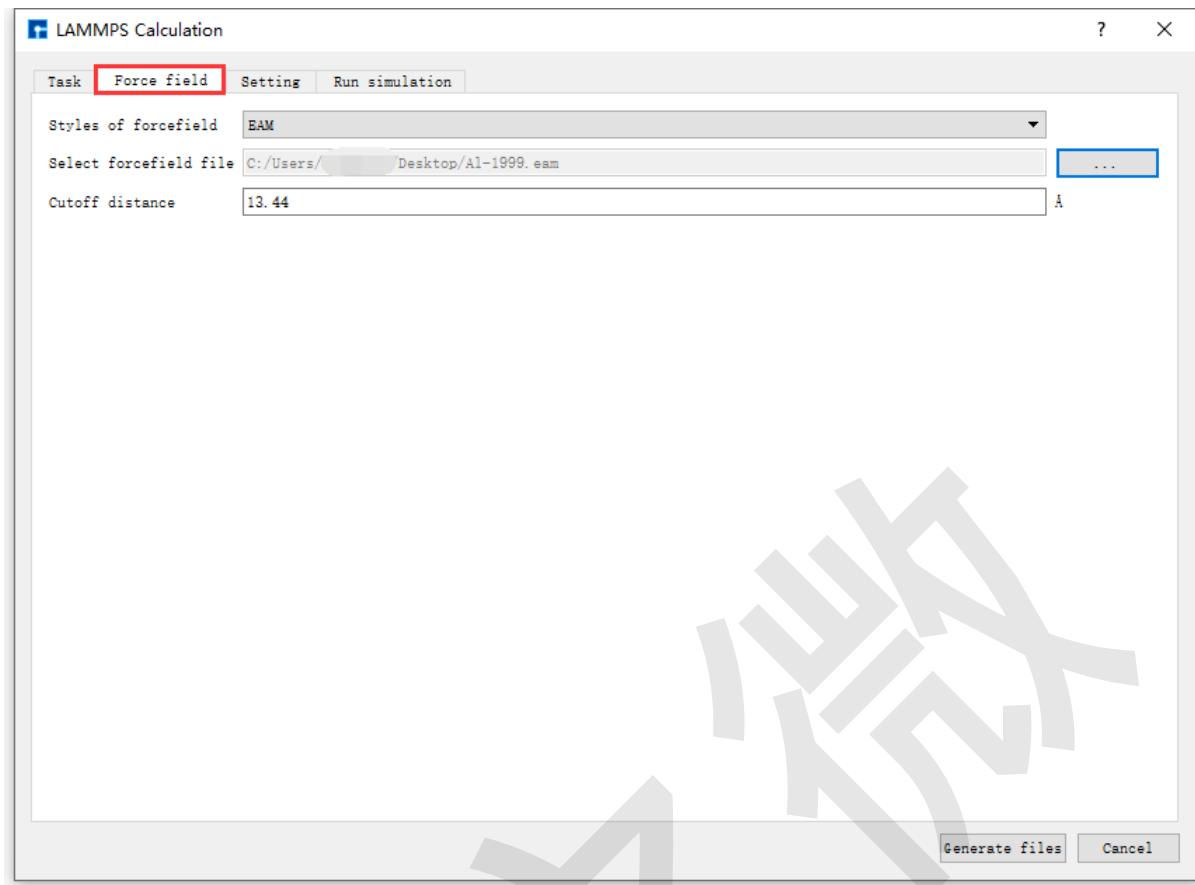


图 10.22: Force field 参数设置界面

Force field 说明

在 *Force field* 模块，目前用户可选择 EAM 和 MEAM 两种力场类型，用户需提前自行准备力场文件，并在 *Select forcefield file* 部分选定所需力场文件。

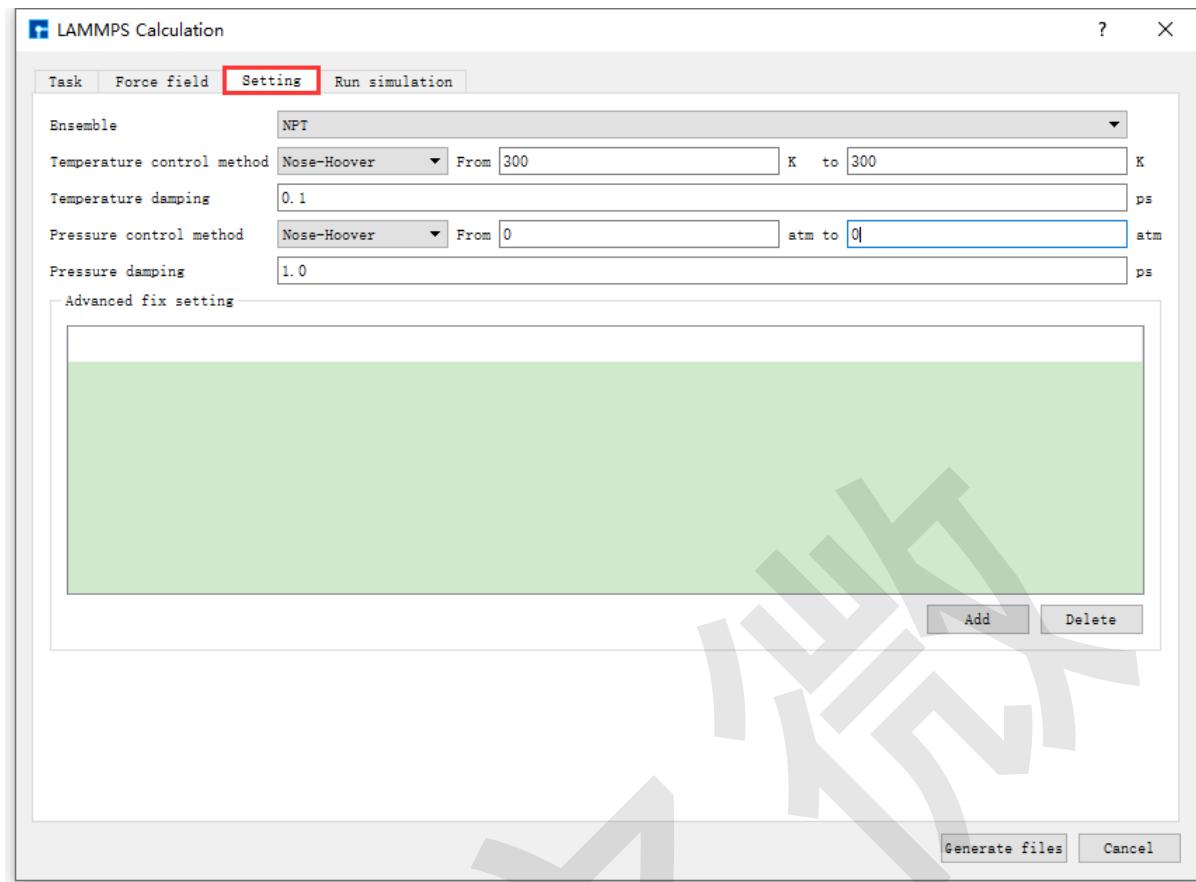


图 10.23: Setting 参数设置界面

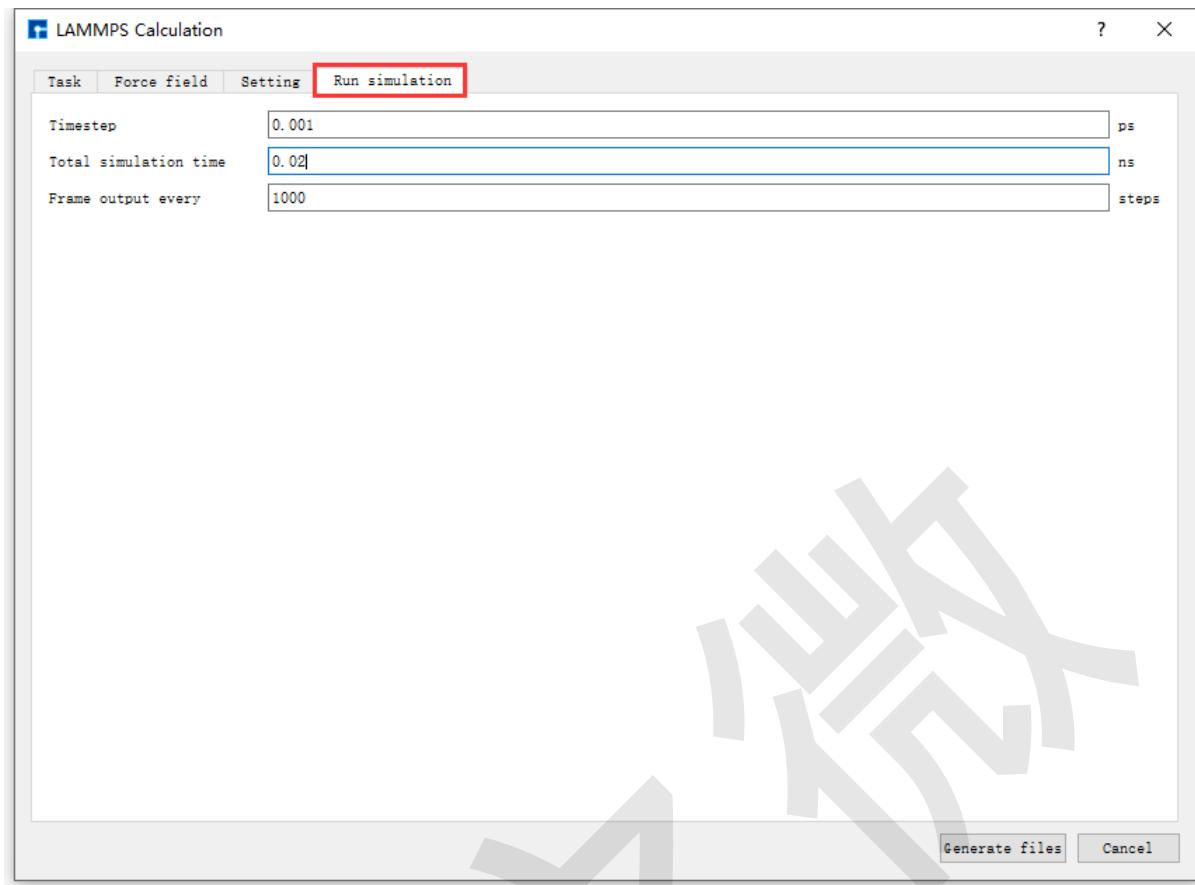


图 10.24: Run simulation 参数设置界面

生成 对金属铝沿 X 轴方向以一定的恒定应变速率拉伸的形变模拟的输入文件 Al_Rede.in、Al_Rede.data 的 Device Studio 界面如 图 10.25 所示。

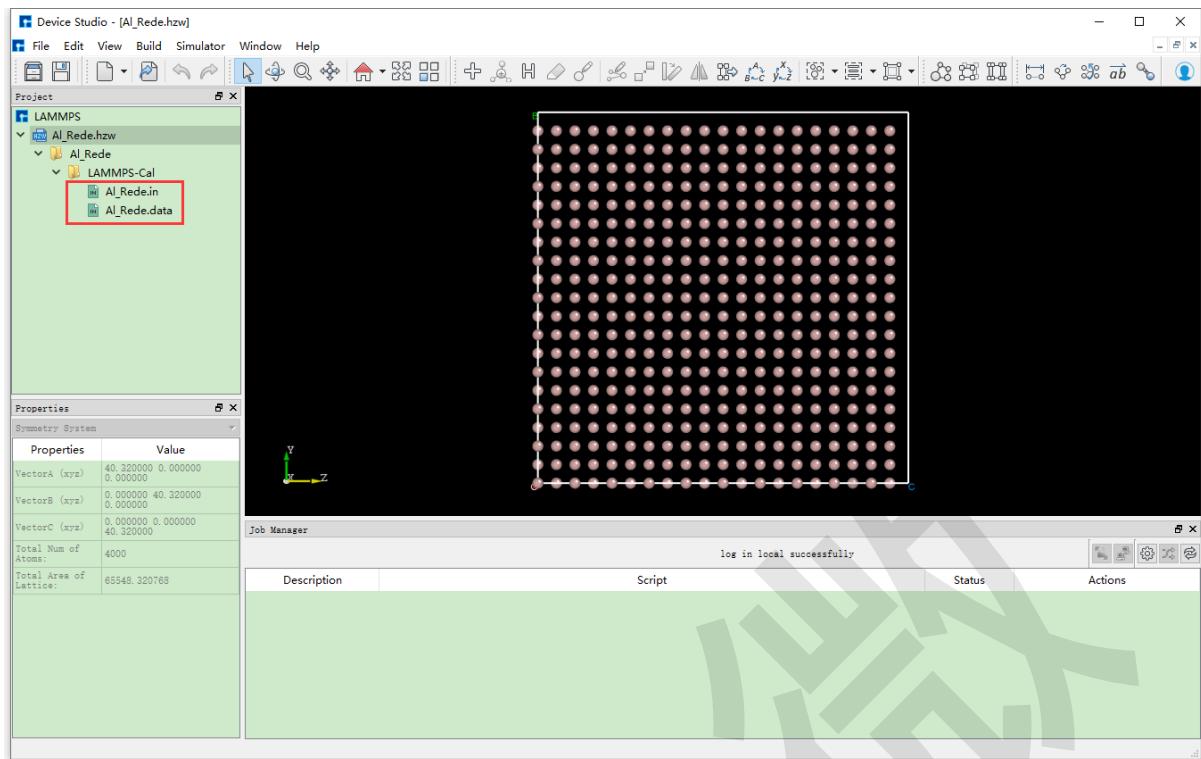
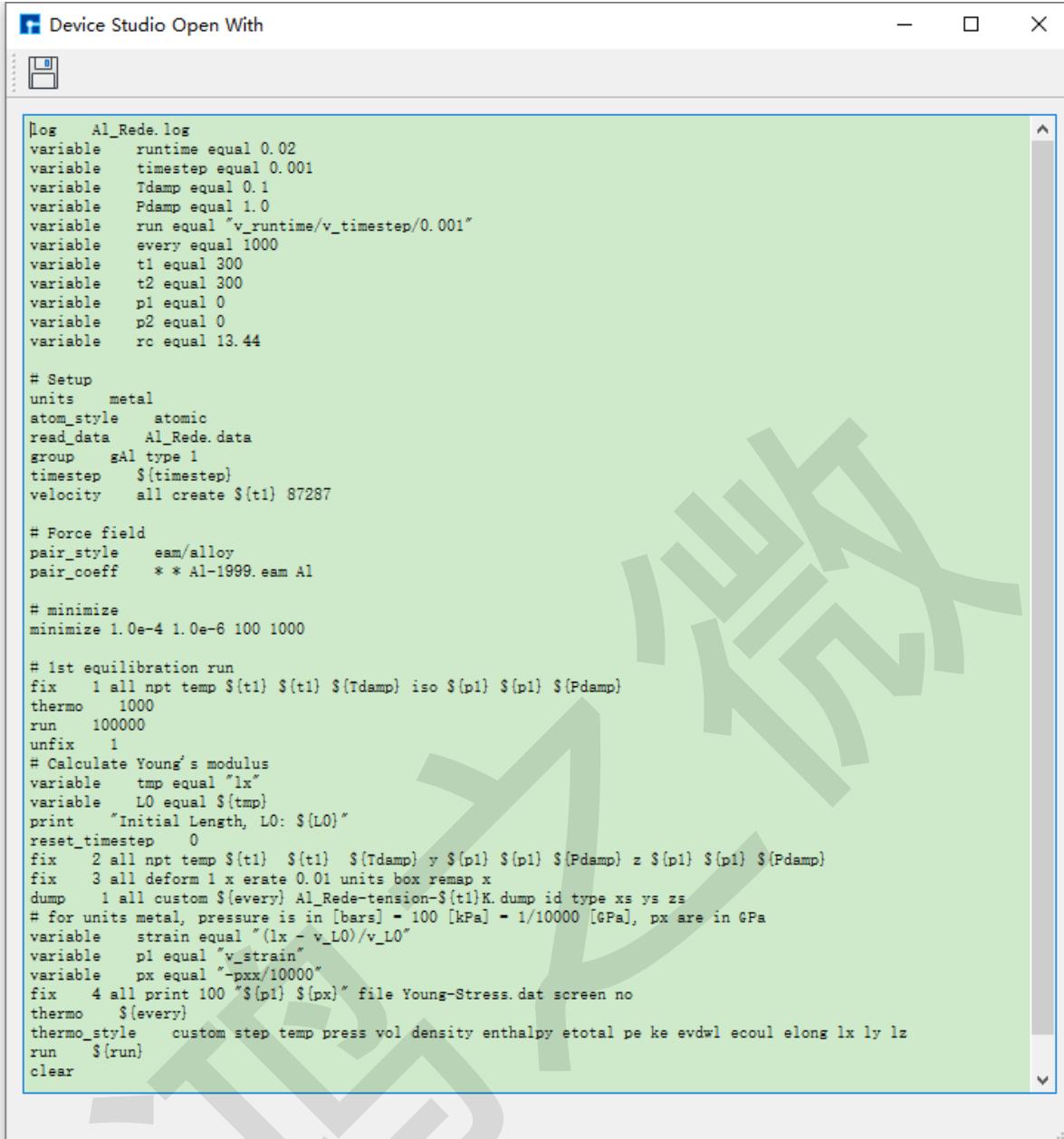


图 10.25: 生成 对金属铝沿 X 轴方向以一定的恒定应变速率拉伸的形变模拟的输入文件的 Device Studio 界面

10.2.5 LAMMPS 计算

在做 对金属铝沿 X 轴方向以一定的恒定应变速率拉伸的形变模拟之前，需连接装有 LAMMPS 的本地电脑或服务器，具体连接过程这里不做详细说明，用户可参考 [Nanodal 连接服务器](#) 节内容。这里以在本地电脑上计算为例，连接好装有 LAMMPS 的本地电脑后，在做计算之前，用户可根据需要打开输入文件并查看文件中的参数设置是否合理，若不合理，则可选择直接在文件中编辑或重新生成，最后再进行 LAMMPS 计算。如打开 `Al_Rede.in` 文件，在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 `Al_Rede.in` → 右击 → *Open with* 即可查看到 `Al_Rede.in` 文件如 图 10.26 所示。对于其他输入文件，用户可根据需要选择是否打开查看，这里不做详细说明。



The screenshot shows a window titled "Device Studio Open With" containing the LAMMPS input script "Al_Rede.in". The script is as follows:

```
log Al_Rede.log
variable runtime equal 0.02
variable timestep equal 0.001
variable Tdamp equal 0.1
variable Pdamp equal 1.0
variable run equal "v_runtime/v_timestep/0.001"
variable every equal 1000
variable t1 equal 300
variable t2 equal 300
variable p1 equal 0
variable p2 equal 0
variable rc equal 13.44

# Setup
units metal
atom_style atomic
read_data Al_Rede.data
group gAl type 1
timestep ${timestep}
velocity all create ${t1} 87287

# Force field
pair_style eam/alloy
pair_coeff * * Al-1999.eam Al

# minimize
minimize 1.0e-4 1.0e-6 100 1000

# 1st equilibration run
fix 1 all npt temp ${t1} ${t1} ${Tdamp} iso ${p1} ${p1} ${Pdamp}
thermo 1000
run 100000
unfix 1
# Calculate Young's modulus
variable tmp equal "lx"
variable L0 equal ${tmp}
print "Initial Length, L0: ${L0}"
reset_timestep 0
fix 2 all npt temp ${t1} ${t1} ${Tdamp} y ${p1} ${p1} ${Pdamp} z ${p1} ${p1} ${Pdamp}
fix 3 all deform 1 x erate 0.01 units box remap x
dump 1 all custom ${every} Al_Rede-tension-${t1}K.dump id type xs ys zs
# for units metal, pressure is in [bars] = 100 [kPa] = 1/10000 [GPa], px are in GPa
variable strain equal "(lx - v_L0)/v_L0"
variable p1 equal "v_strain"
variable px equal "-pxx/10000"
fix 4 all print 100 "${p1} ${px}" file Young-Stress.dat screen no
thermo ${every}
thermo_style custom step temp press vol density enthalpy etotal pe ke evdw1 ecoul elong lx ly lz
run ${run}
clear
```

图 10.26: Al_Rede.in 文件

在如图 10.25 所示界面中，在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 Al_Rede.in → 右击 → Run，弹出 Run 界面，在 Run 界面中点击 Run 按钮则可做 LAMMPS 计算。用户可在 Job Manager 区域中观察 LAMMPS 的计算状态，当 LAMMPS 计算任务处于排队中、计算中和计算完成时，Status 分别为 Queued、Running、Finished。计算完成后，选中 Al_Rede.in → 右击 → Open Containing Folder 可看到 LAMMPS 计算完成的结果文件 Young-Stress.dat 和 Al_Rede-tension-300K.dump，并找到其在本地电脑中存储位置。

10.2.6 LAMMPS 计算结果的可视化分析

在 Device Studio 的图形界面中，选中文件 Al_Rede-tension-300K.dump → 右击 → Show View，则弹出 LAMMPS 计算结果的可视化分析界面如图 10.27 所示。

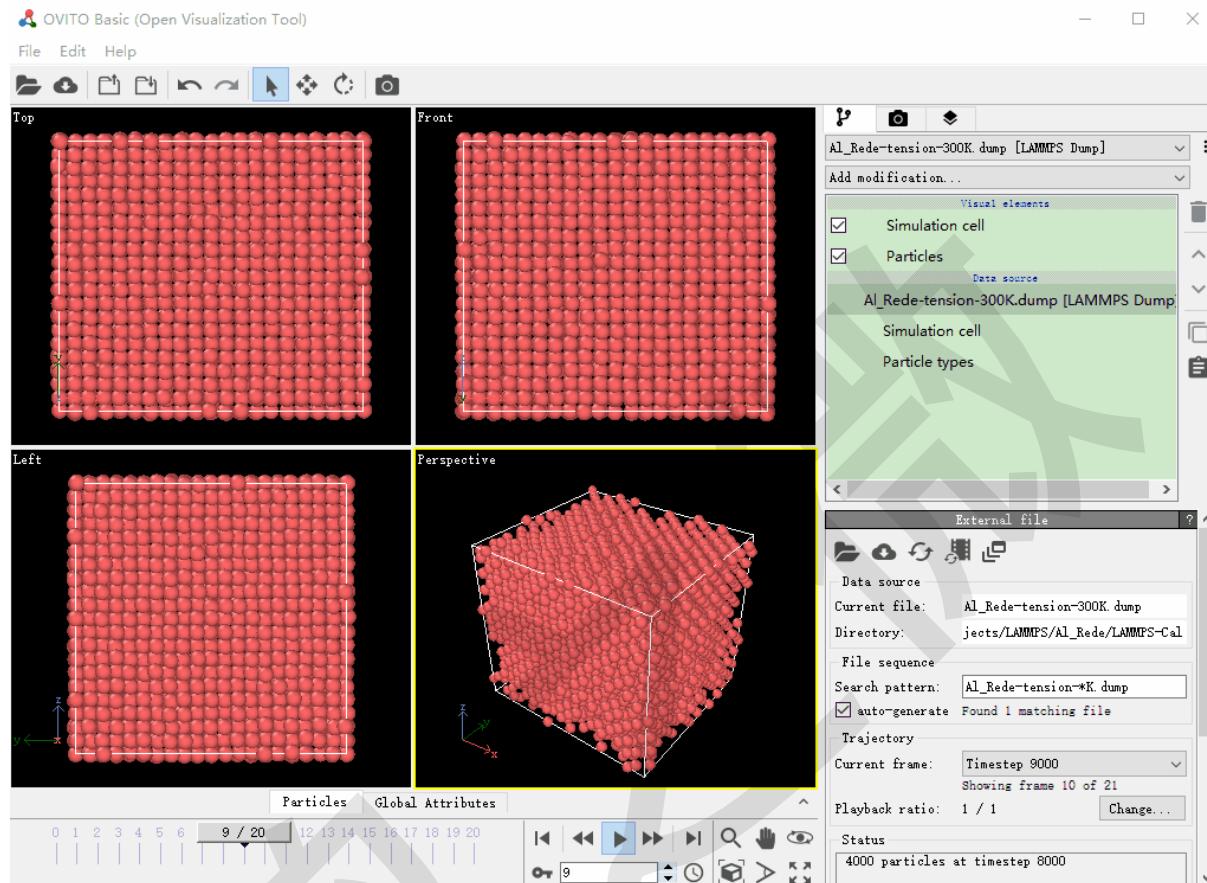


图 10.27: LAMMPS 计算结果的可视化分析界面

备注

2021 年 1 月 7 日鸿之微科技（上海）股份有限公司与 OVITO GmbH 正式成为合作伙伴，OVITO 是一个科学数据可视化和分析软件。OVITO 软件版权问题请用户联系鸿之微科技（上海）股份有限公司或自行解决。

10.3 QUANTUM ESPRESSO 实例

QUANTUM ESPRESSO 是一款功能很强大的第一性原理计算开源软件，ESPRESSO 是 opEn-Source Package 的首字母缩写，基于密度泛函理论、平面波及赝势，可用于纳米尺度下电子结构计算。QUANTUM ESPRESSO 的核心平面波 DFT 模块为 PWscf（平面波自洽场），PWscf（平面波自洽场）使用平面波基集和伪势能在密度泛函理论和密度泛函微扰理论范围内进行电子结构计算的程序。目前，PWscf（平面波自洽场）模块已经集成在 Device Studio 中。

QUANTUM ESPRESSO 软件官网：详见 <http://www.quantum-espresso.org/>

目前用户可通过 Device Studio 进行 QUANTUM ESPRESSO 以下性质的计算：结构驰豫、自洽、能带、态密度、DFT+U、共线自旋、非共线自旋、自旋轨道耦合。

以 Si 晶体结构的自洽、能带及态密度计算为例来详细描述 QUANTUM ESPRESSO 在 Device Studio 中的应用。

10.3.1 QUANTUM ESPRESSO 计算流程

QUANTUM ESPRESSO 在 Device Studio 中的计算流程如 图 10.28 所示。

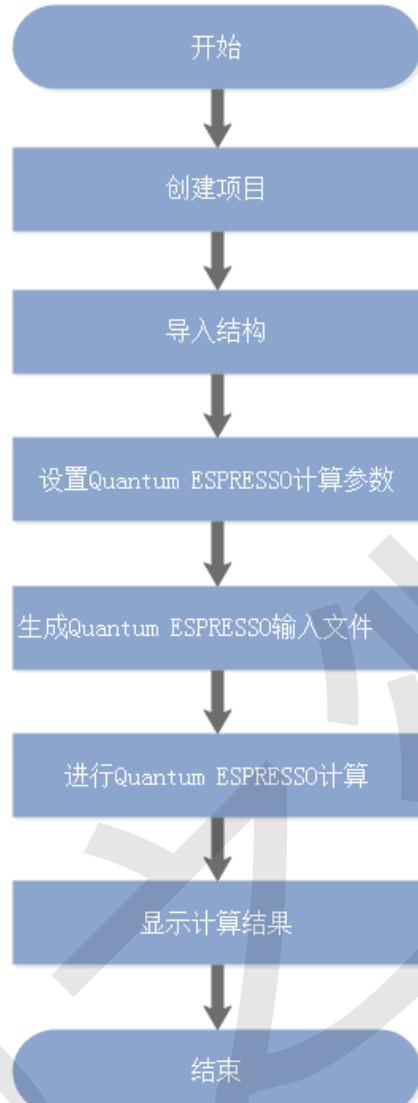


图 10.28: QUANTUM ESPRESSO 计算流程

10.3.2 QUANTUM ESPRESSO 创建项目

双击 Device Studio 图标快捷方式，登录并启动 Device Studio，在创建或打开项目界面中（启动软件后选择创建或打开项目的图形界面），根据界面提示选择创建一个新的项目（*Create a new Project*）或打开一个已经存在的项目（*Open an existing Project*）的按钮，选中之后点击界面中的 *OK* 按钮即可。若选择创建一个新的项目，用户可根据需要给该项目命名，如本项目命名为 QUANTUM ESPRESSO，或采用软件默认项目名。

10.3.3 QUANTUM ESPRESSO 导入结构

在 Device Studio 中导入 Si 晶体结构后的图形界面如 图 10.29。在 Device Studio 中导入 Si 晶体结构的具体操作这里不做详细说明，用户可参照[导入结构](#)节内容。

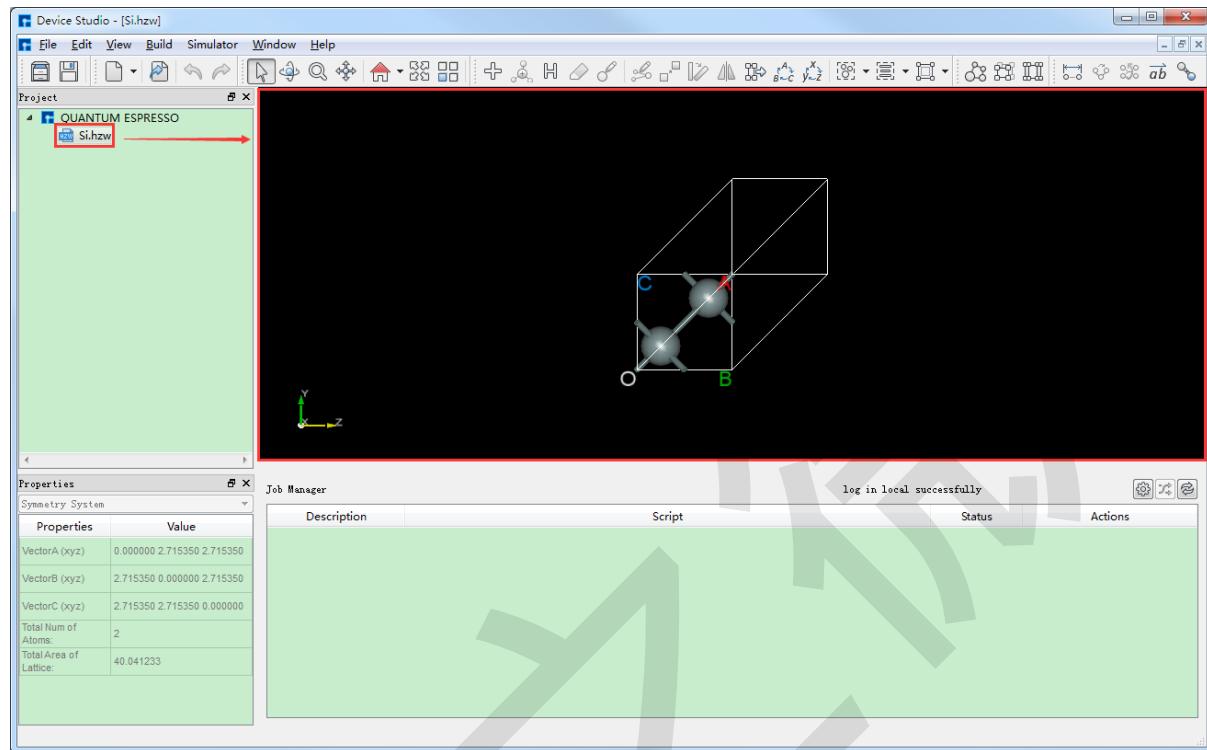


图 10.29: 导入 Si 晶体结构后的 Device Studio 图形界面

10.3.4 QUANTUM ESPRESSO 参数设置

在如 图 10.29 所示界面中选中 *Simulator*→*QUANTUM ESPRESSO*→*QUANTUM ESPRESSO*，弹出界面如 图 10.30 所示，用户可根据所计算的结构及计算需要在该界面中点击不同的按钮合理设置参数，之后点击 *Generate files* 即可生成对应计算的输入文件。

如生成 Si 晶体结构的自洽、能带及态密度计算的输入文件，根据计算需要设置参数，分别选中 *Basic settings*、*Bandstructure*、*DensityOfStates*，设置参数分别如 图 10.31、图 10.32、图 10.33 所示，设置好参数后点击 *Generate files* 即可生成 Si 晶体结构自洽、能带及态密度计算的输入文件 scf.in、band.in、nscf.in、dos.in。

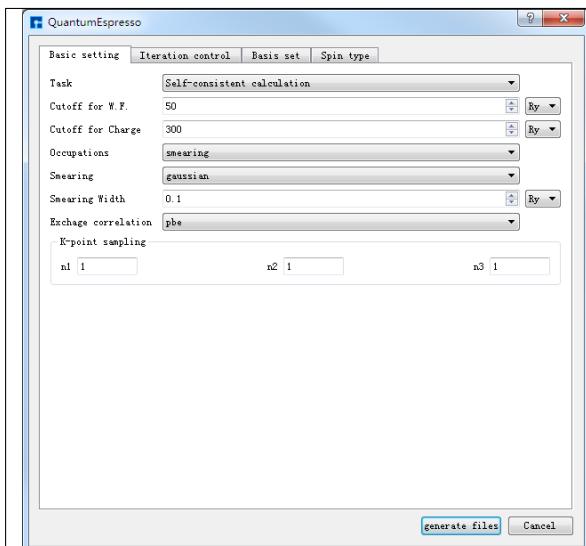


图 10.30: QUANTUM ESPRESSO 界面

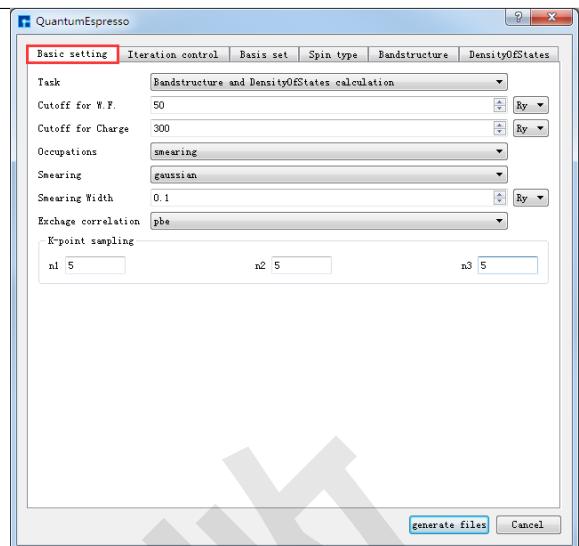


图 10.31: Basic settings 参数设置界面

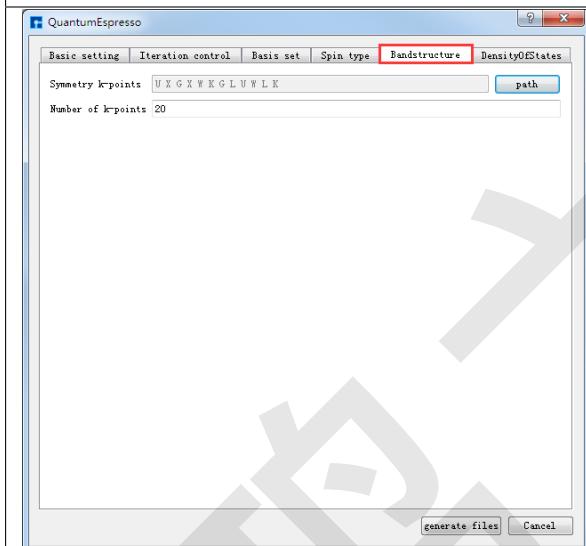


图 10.32: Bandstructure 参数设置界面

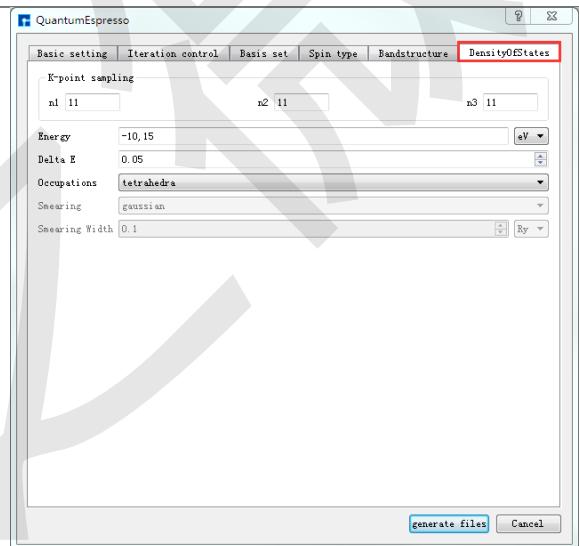


图 10.33: DensityOfStates 参数设置界面

10.3.5 QUANTUM ESPRESSO 输入文件的生成

生成 Si 晶体结构的自洽、能带和态密度计算的输入文件 scf.in、band.in、nscf.in、dos.in 的 Device Studio 界面如 图 10.34 所示。其中，scf.in 为自洽计算输入文件；band.in 为能带计算输入文件；由于态密度计算之前需要先进行一个非自洽计算，因此 nscf.in 和 dos.in 是态密度计算所需的输入文件，计算顺序为先 nscf.in 后 dos.in。

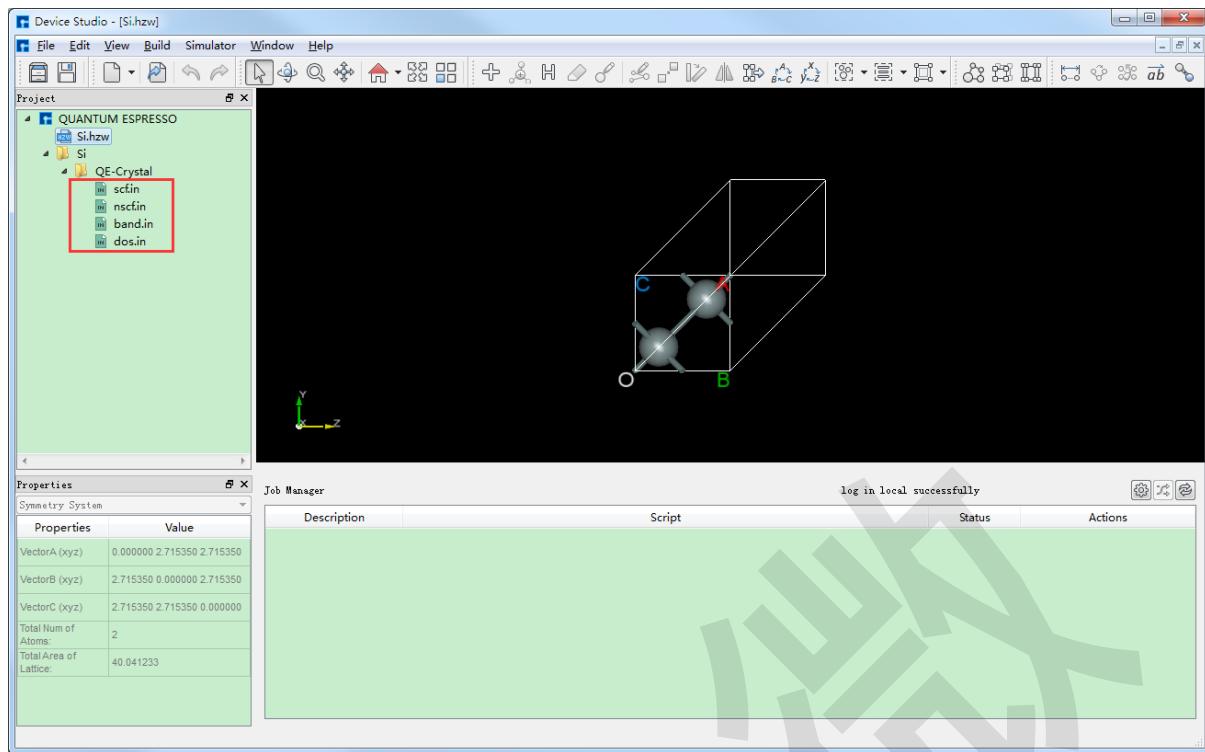


图 10.34: 生成 Si 晶体结构自洽、能带、态密度计算输入文件的 Device Studio 图形界面

在如 图 10.34 所示界面中，选中 scf.in → 右击 → *Open with* 即可查看到 Si 晶体结构自洽计算输入文件如下所示。对于其他输入文件，用户可根据计算需要选择是否打开查看，这里不做详细说明。

```
&CONTROL
  calculation='scf',
 outdir='results',
prefix='Si',
pseudo_dir='../',
verbosity='high',
/
&SYSTEM
  ibrav=0,
  nat=2,
  ntyp=1,
  ecutwfc=50,
  ecutrho=300,
  input_dft='pbe',
  occupations='smearing',
```

(续下页)

(接上页)

```

smearing='gaussian',
degauss=0.1,
/

&ELECTRONS
diagonalization='david',
conv_thr=1.D-6,
mixing_mode='plain',
mixing_beta=0.7D0,
electron_maxstep=200
/


ATOMIC_SPECIES
Si 28.0855 Si.pbe-n-kjpaw_psl.1.0.0.UPF
CELL_PARAMETERS {angstrom}
0 2.71535 2.71535
2.71535 0 2.71535
2.71535 2.71535 0
ATOMIC_POSITIONS {angstrom}
Si 0.678837 0.678837 0.678837
Si 2.03651 2.03651 2.03651
K_POINTS {automatic}
5 5 5 0 0 0

```

10.3.6 QUANTUM ESPRESSO 计算

在如 图 10.34 所示界面中，在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 scf.in → 右击 → Run，弹出 Run 界面如 图 10.35 所示，点击界面中的 Run 按钮则可进行 Si 晶体结构的自洽计算。以此类推，分别选中 band.in、nscf.in、dos.in 文件重复上述步骤进行 Si 的能带和态密度计算。

在计算过程中，用户可在 Job Manager 区域观察自洽、能带和态密度计算的计算状态，当计算任务处于排队中、计算中和计算完成时，Status 分别为 Queued、Running、Finished，计算完成后 Device Studio 图形界面如 图 10.36 所示。其中，scf.out、bs.out 和 nscf.out 分别为 Si 晶体结构自洽、能带和非自洽计算的日志文件；dos.out 和 Si.dos 分别为 Si 态密度计算的日志文件和数据文件。

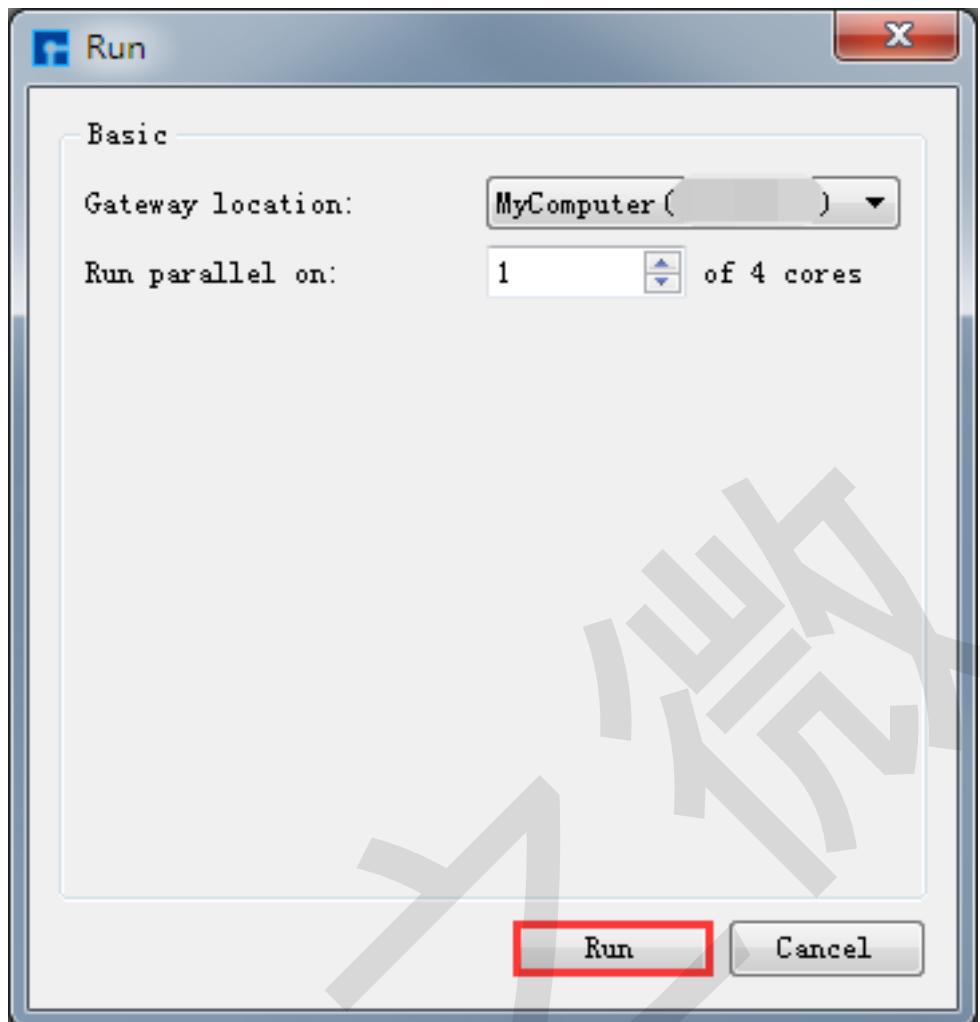


图 10.35: Run 界面

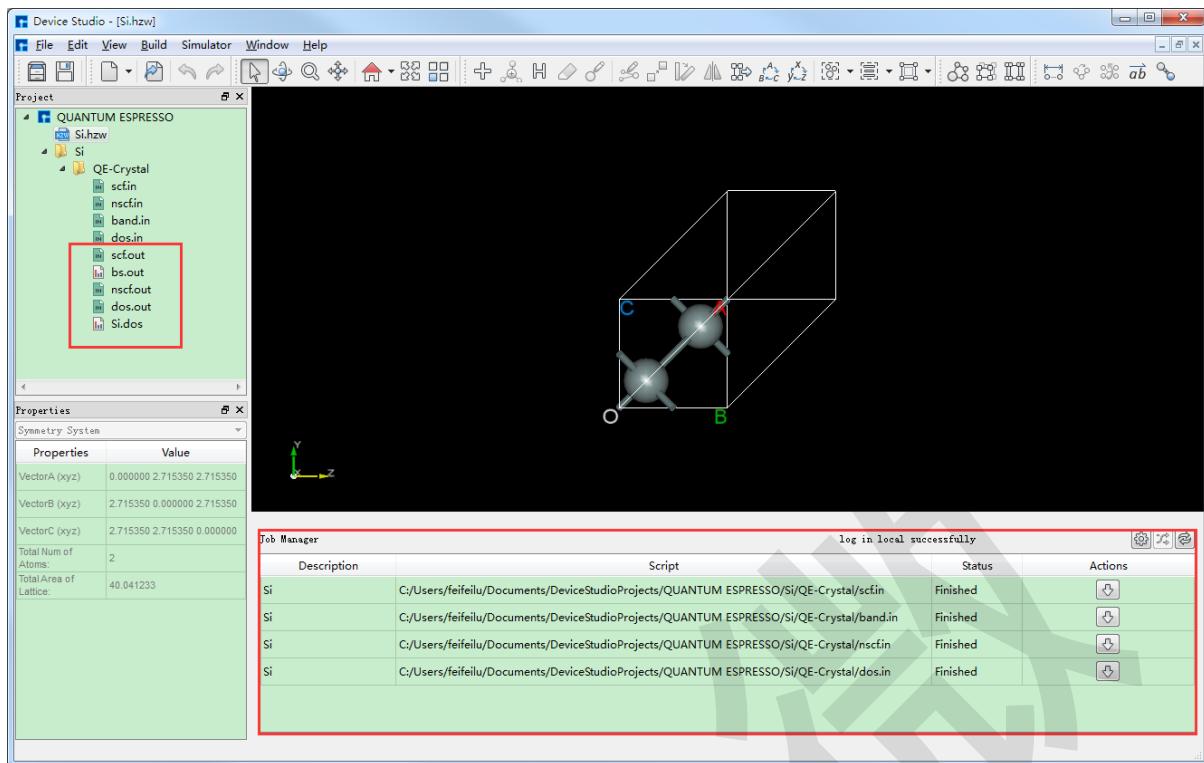


图 10.36: Si 晶体结构、能带和态密度计算完成的 Device Studio 图形界面

10.3.7 QUANTUM ESPRESSO 计算结果的可视化分析

对于 Si 的能带和态密度计算结果 `bs.out` 和 `Si.dos`, Device Studio 可将其进行显示供用户进行相关分析, 即计算结果的可视化分析。如 `bs.out`, 在如图 10.36 所示界面的 Project Explorer 区域选中 `bs.out` → 右击 → *Show View*, 则弹出 Si 的能带可视化分析界面如图 10.37 所示, 用户可通过滚动鼠标中键将可视化分析结果放大或缩小。选中如图 10.37 所示界面中 *Export* 快捷图标, 弹出导出可视化分析结果的图形界面, 用户可根据需要选择图片的保存路径和保存格式, 并给所保存的图片命名。

在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 `Si.dos` → 右击 → *Show View*, 则弹出 Si 的态密度可视化分析界面如图 10.38 所示。

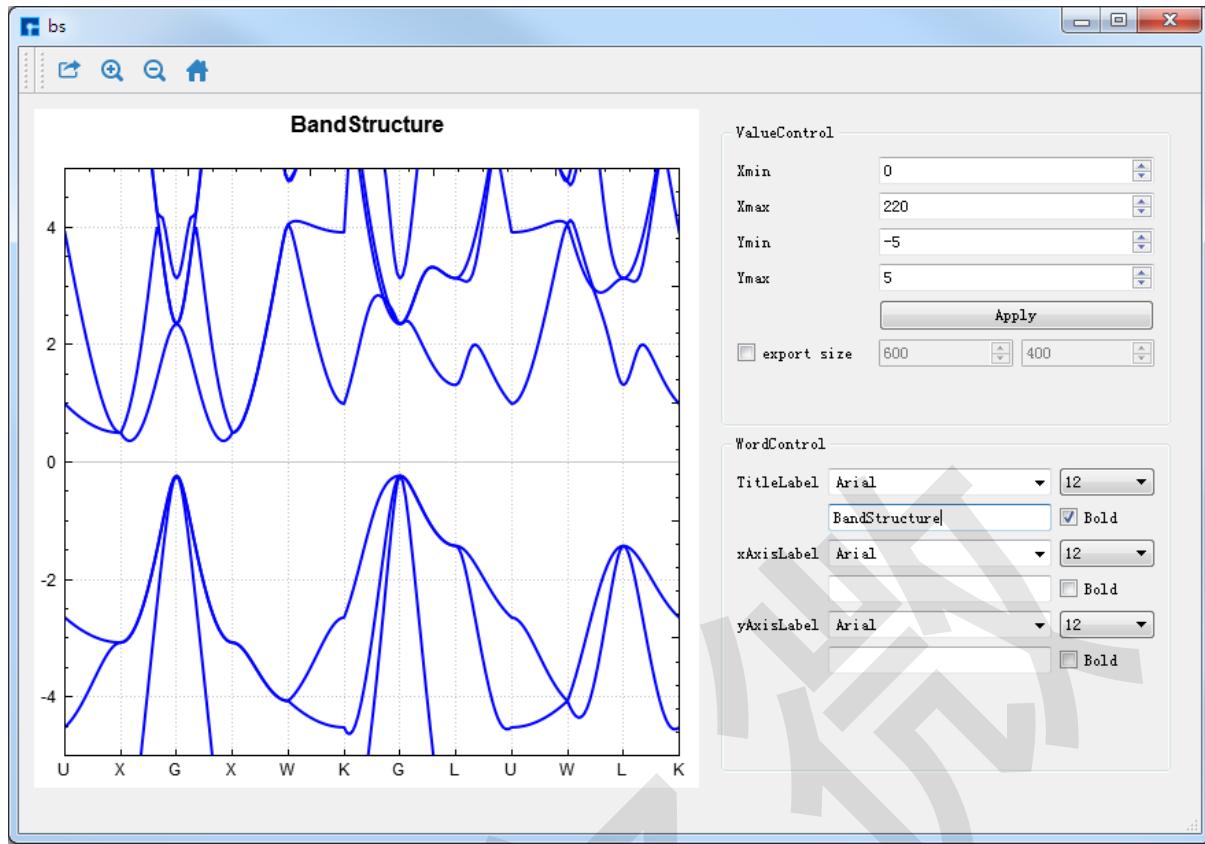


图 10.37: Si 晶体能带 (bs.out) 的可视化分析界面

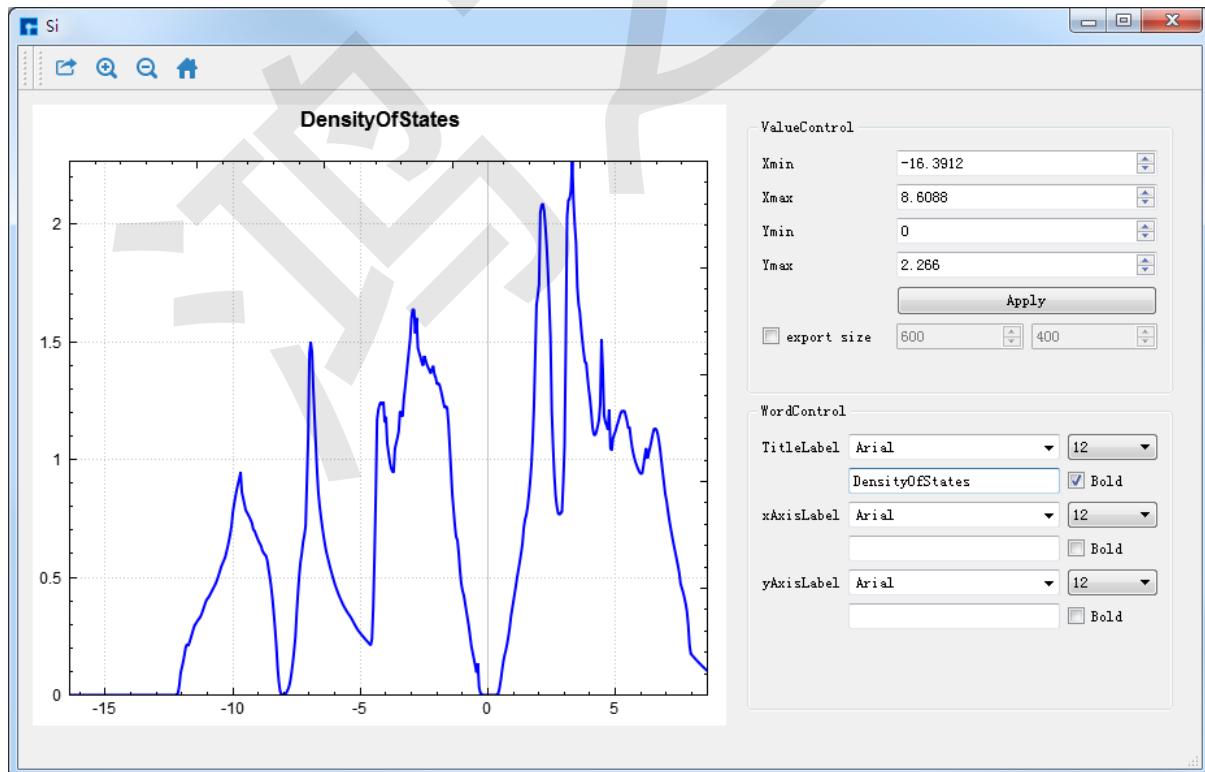


图 10.38: Si 晶体态密度 (Si.dos) 的可视化分析界面

10.4 RESCU 实例

RESCU 是一款仅仅用小型计算机就能研究超大体系的 KS-DFT 计算软件。RESCU 是 Real Space Electronic Structure CalcUlator（实空间电子结构计算程序）的缩写，它的核心是一种全新、极其强大、并行效率超高的 KS-DFT 自洽计算方法。

RESCU 可以使用各类计算机资源，从笔记本电脑、桌面单机、到 16 核、64 核、256 核、到更大的超算、包括用 GPU 加速等等，来计算包含一千、数千、上万、乃至更大体系的电子结构性质。RESCU 是解决超大体系 KS-DFT 问题的新方法，正在被应用于金属、半导体、绝缘体、液体、DNA、1 维、2 维、3 维、表面、分子、磁性、非磁性、杂质、固体等不同系统的 KS-DFT 计算。

这里以晶体 Ni 的自洽、能带、态密度计算为例详细描述 RESCU 软件在 Device Studio 中的应用。包含创建项目，从建模到计算，到数据的可视化分析整个流程。实际上，RESCU 的功能不仅于此，详情可参照 RESCU 应用教程或点击对应的紫色或蓝色字体软件名称。Device Studio 可以生成 RESCU 很多功能计算的输入文件，用户可根据计算需要选择生成。

10.4.1 RESCU 计算流程

RESCU 在 Device Studio 中的计算流程如 图 10.39 所示。

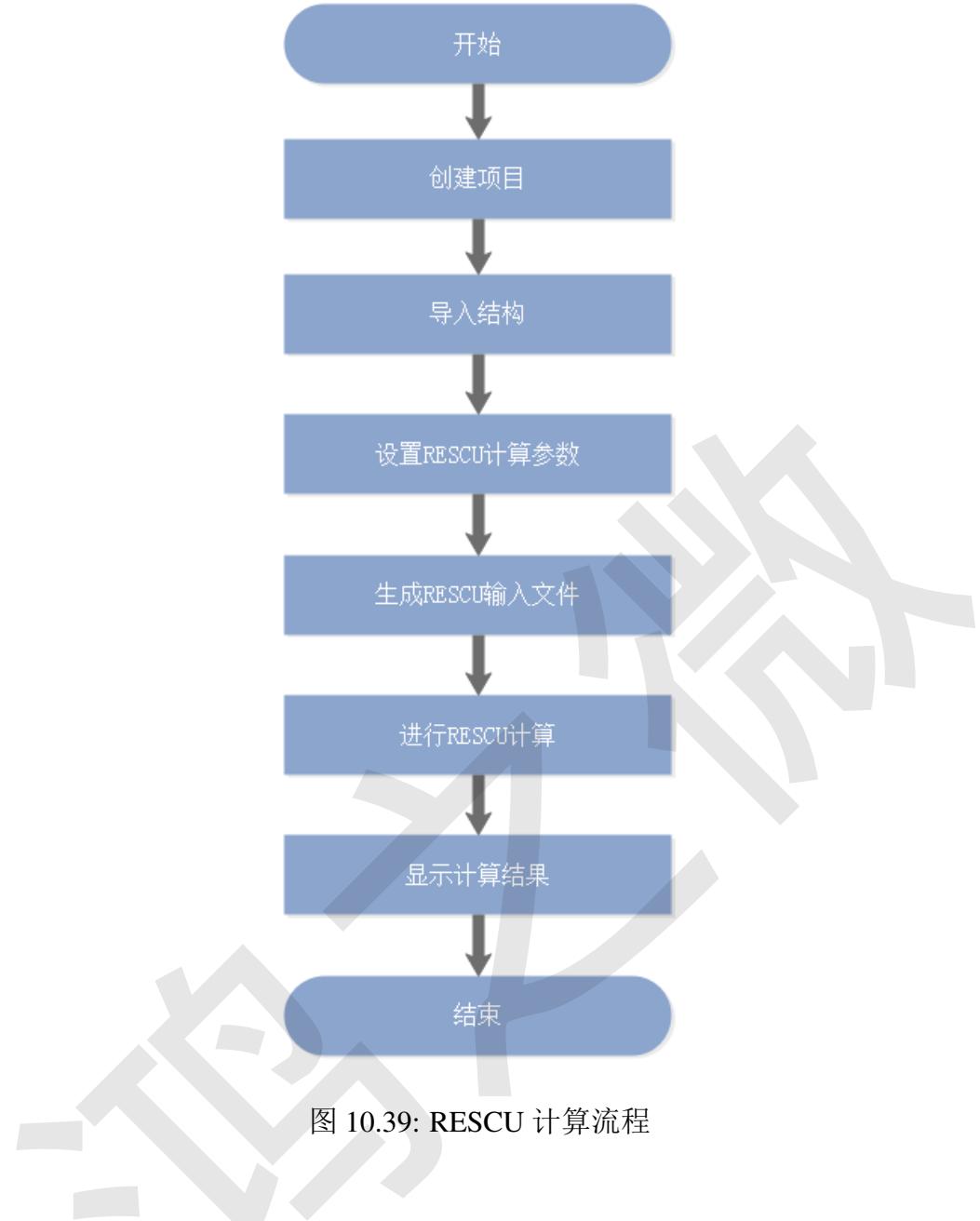


图 10.39: RESCU 计算流程

10.4.2 RESCU 创建项目

双击 Device Studio 图标快捷方式，登录并启动 Device Studio，在创建或打开项目界面中（启动软件后选择创建或打开项目的图形界面），根据界面提示选择创建一个新的项目（*Create a new Project*）或打开一个已经存在的项目（*Open an existing Project*）的按钮，选中之后点击界面中的 *OK* 按钮即可。若选择创建一个新的项目，用户可根据需要给该项目命名，如本项目命名为 RESCU，或采用软件默认项目名。

10.4.3 RESCU 导入结构

在 Device Studio 中导入晶体 Ni 后的界面如 图 10.40。在 Device Studio 中导入晶体 Ni 的具体操作这里不做详细说明，用户可参照导入结构 节内容。

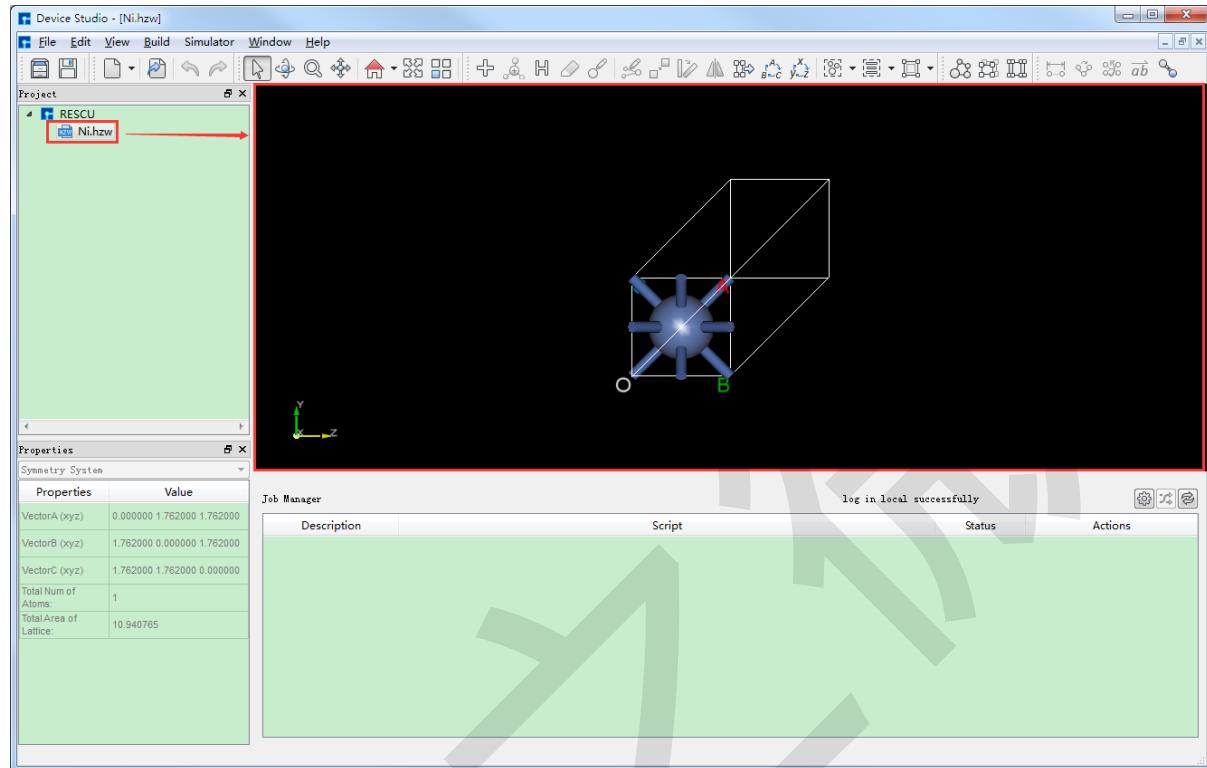


图 10.40: 导入晶体 Ni 后的 Device Studio 图形界面

10.4.4 RESCU 输入文件的生成

10.4.4.1 RESCU 生成自洽计算输入文件

在如 图 10.40 所示界面中选中 *Simulator* → *RESCU* → *SCF Calculation*, 弹出界面如 图 10.41 所示, 用户可根据所计算的结构及计算需要分别选中 *Basic settings*、*Iteration control*、*Basis set*、*Spin type* 这四个按钮合理设置参数, 之后点击 *Generate files* 即可生成自洽计算输入文件。

如生成晶体 Ni 自洽计算输入文件, 根据计算需要设置参数, 分别选中 *Basic settings*、*Iteration control*、*Basis set*、*Spin type* 设置参数分别如 图 10.41、图 10.42、图 10.43 和 图 10.44 所示, 设置好参数后点击 *Generate files* 即可生成晶体 Ni 自洽计算输入文件 *scf.input* 及原子坐标文件 *Atom.xyz*。

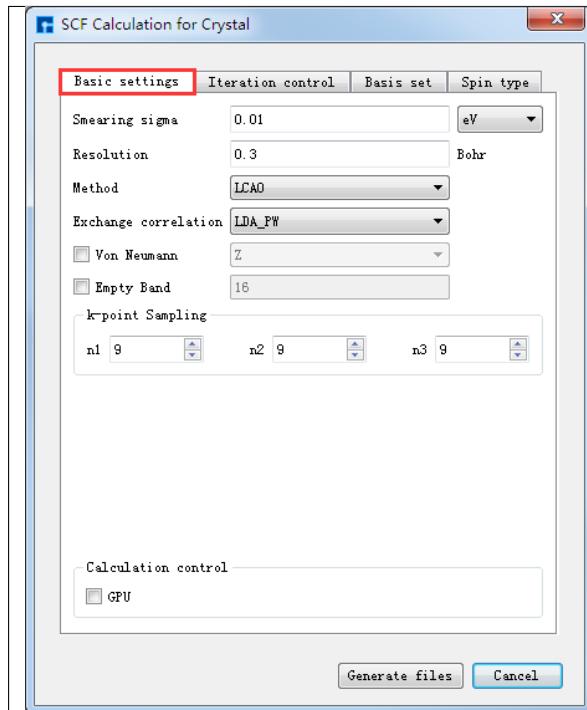


图 10.41: Basic settings 参数设置界面

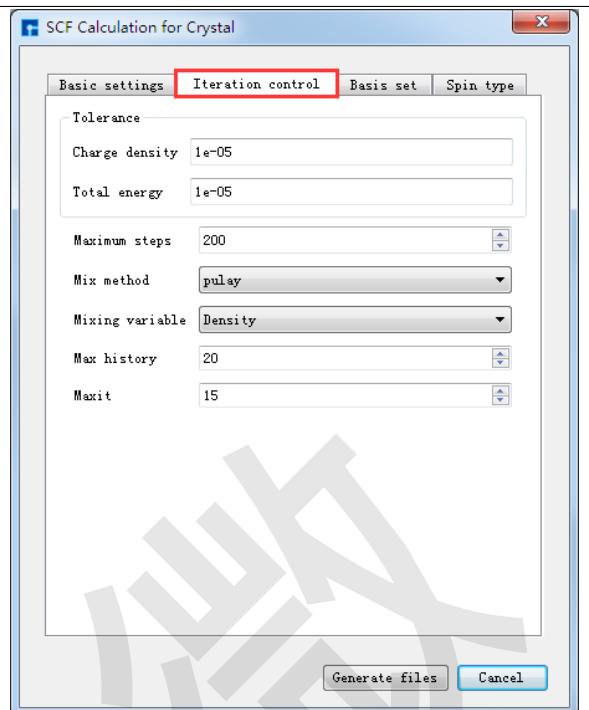


图 10.42: Iteration control 参数设置界面

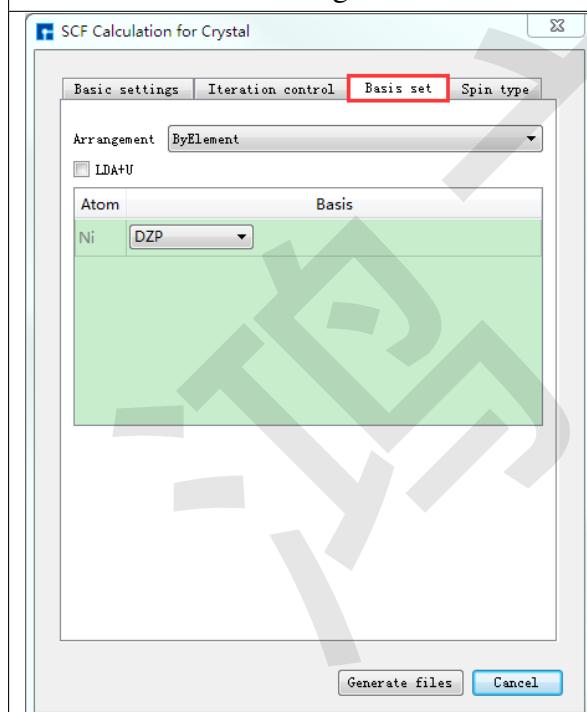


图 10.43: Basis set 参数设置界面

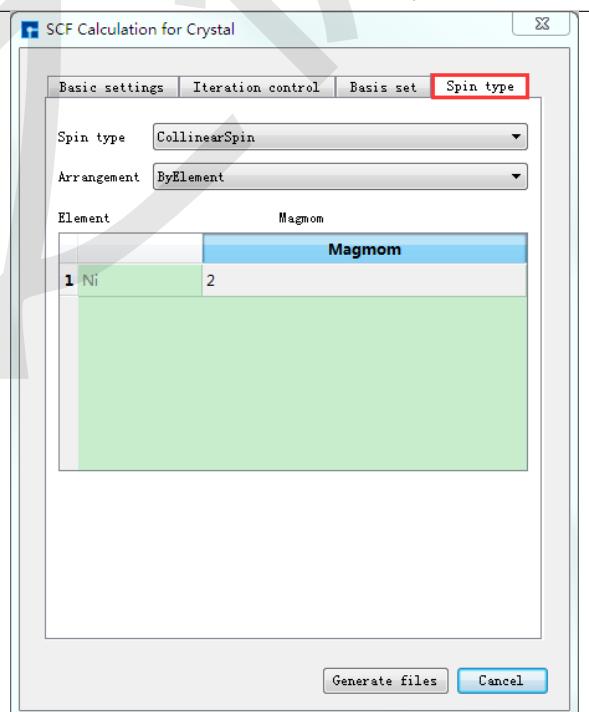


图 10.44: Spin type 参数设置界面

10.4.4.2 RESCU 生成能带计算输入文件

在如 图 10.40 所示界面（即：Device Studio 图形界面）中选中 *Simulator* → *RESCU* → *Analysis*，弹出 *Analysis* 界面，在界面中双击 *BandStructure*，点击 *path* 按钮弹出 Brillouin Zone Path 参数设置界面，设置高对称点为 **W-L-G-X-W-K**，并点击 *Apply* 如图 10.45 所示。能带计算的参数设置如 图 10.46 所示，设置好参数后点击 *Generate files* 即可生成晶体 Ni 能带计算输入文件 *BandStructure.input*。

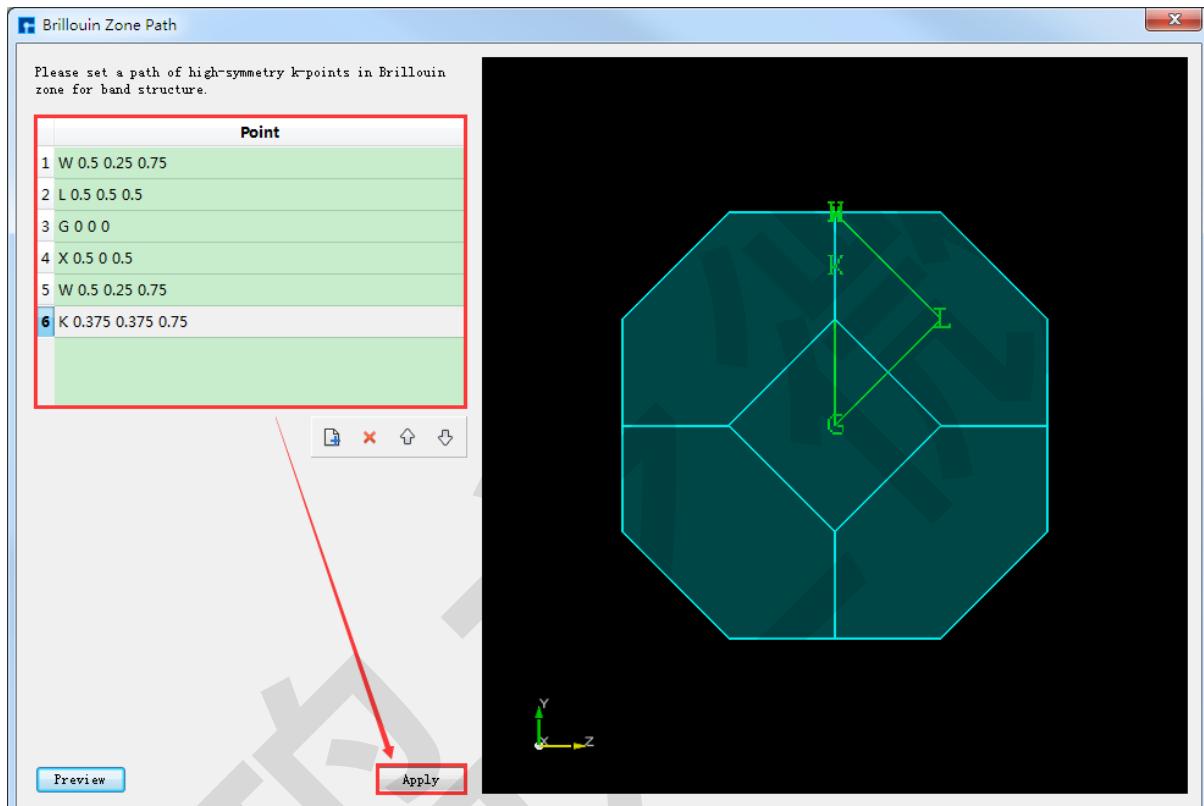


图 10.45: Brillouin Zone Path 参数设置界面

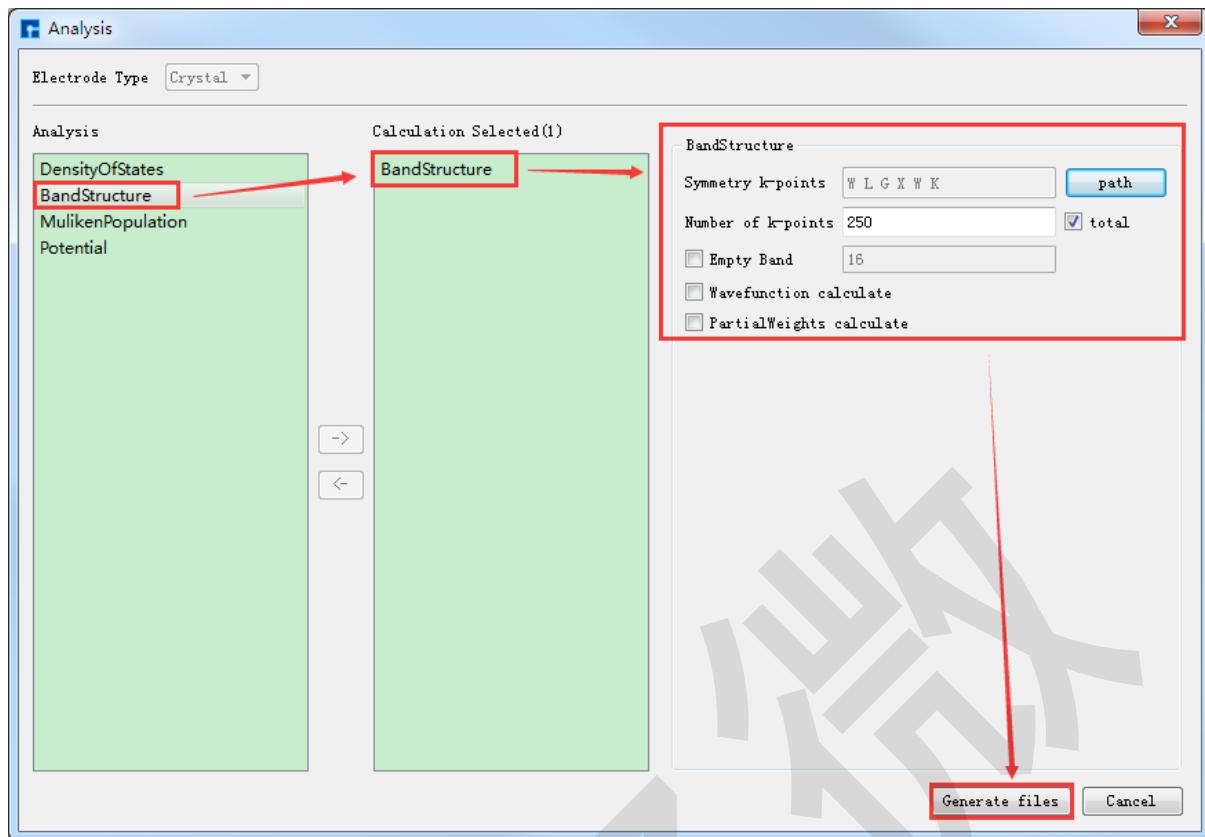


图 10.46: 晶体 Ni 能带计算参数设置界面

10.4.4.3 RESCU 生成态密度计算输入文件

在如图 10.40 所示界面（即：Device Studio 图形界面）中选中 Simulator → RESCU → Analysis，弹出 Analysis 界面，在界面中双击 DensityOfStates，并设置参数如图 10.47 所示，设置好参数后点击 Generate files 即可生成晶体 Ni 态密度计算输入文件 DensityOfStates.input。

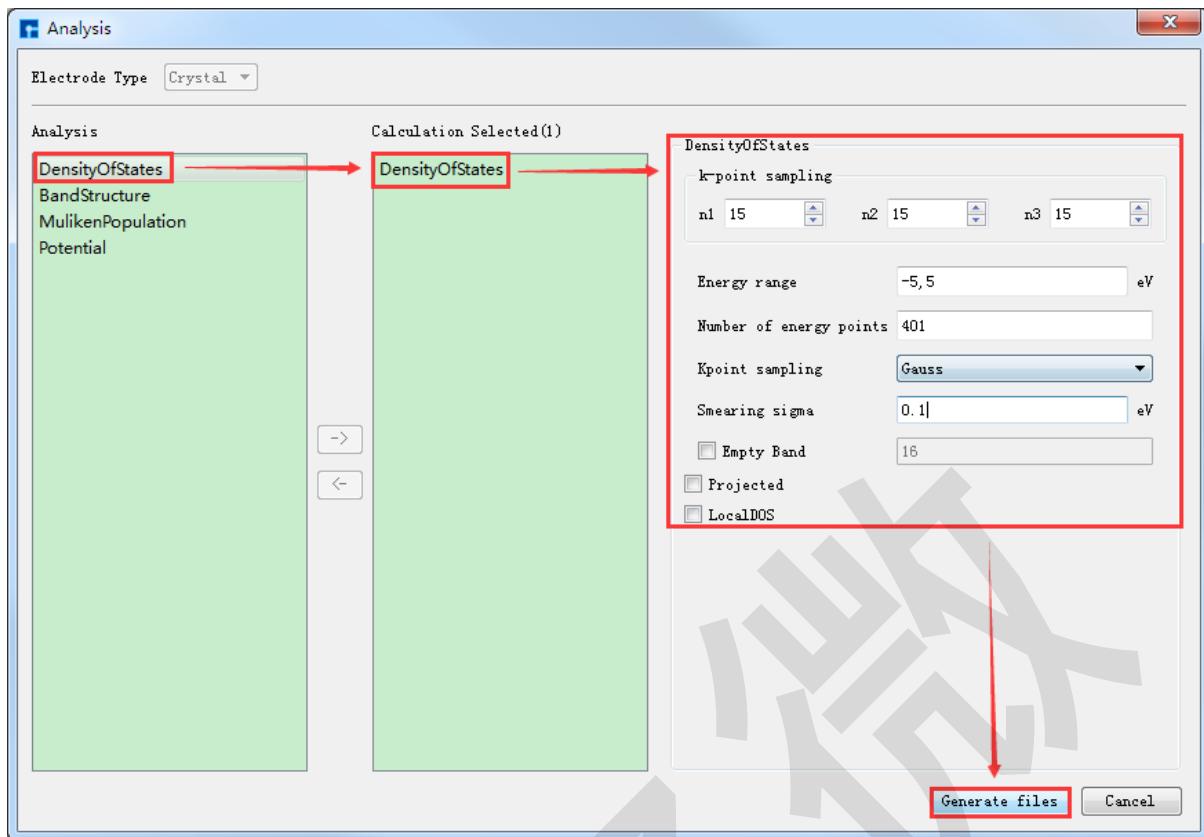


图 10.47: 晶体 Ni 态密度计算参数设置界面

10.4.5 RESCU 计算

10.4.5.1 RESCU 自洽计算

在做自洽计算之前，用户可根据计算需要打开 scf.input 文件并查看文件中的参数设置是否合理，若不合理，则可选择直接在文件中进行编辑或重新生成，最后再进行自洽计算。选中 scf.input → 右击 → *Open with* 即可查看到晶体 Ni 自洽计算输入文件如下所示：

```
info.calculationType = 'self-consistent'
info.savepath        = './results/Ni_scf'

%symmetry.spacesymmetry = 0
domain.latvec        = [[0 1.762 1.762]; [1.762 0 1.762]; [1.762 1.
                           ↪762 0]]

%eigensolver.emptyBand = 16
```

(续下页)

(接上页)

```

eigensolver.maxit      = 15
eigensolver.algo       = 'cfsi'
LCAO.status            = 1

smearing.sigma         = 0.01
units.energy           = 'eV'
kpoint.gridn          = [9, 9, 9]

domain.lowres          = 0.3
%domain.highres        = 0.3
functional.libxc       = 1
functional.list         = {'XC_LDA_X', 'XC_LDA_C_PW'}

option.maxSCFiteration = 200
mixing.type             = 'density'
mixing.method           = 'pulay'
mixing.tol              = [1e-05, 1e-05]
mixing.maxhistory       = 20

spin.type               = 'collinear'
atom.magmom             = 'Atom.xyz'

element(1).species     = 'Ni'
element(1).path         = '../Ni_DZP.mat'
atom.xyz                = 'Atom.xyz'
units.length            = 'Angstrom'

gpu.status              = 0

```

在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 scf.input → 右击 → Run，弹出 Run 界面如 图 10.48 Run 界面 所示，点击界面中的 Run 按钮则可进行晶体 Ni 的自洽计算。在计算过程中，用户可在 Job Manager 区域观察晶体 Ni 自洽计算的计算状态，当计算任务处于排队中、计算中和计算完成时，Status 分别为 Queued、Running、Finished。计算完成后可看到 Device Studio 的 Project Explorer 区域看到日志文件 resculog.out。选中 resculog.out → 右击 → Open Containing Folder 则找到 resculog.out 文件在本地电脑中的存储位置，其中 results 文件夹则含有晶体 Ni 自洽计算完成后的结果文件 Ni_scf.h5、Ni_scf.mat 和 Density.txt。

备注

对于 RESCU 计算，选中其在 Device Studio 的 Project Explorer 区域任何一个输入文件 → 右击 → *Open Containing Folder* 均可找到该输入文件在本地电脑中的存储位置，若计算完成，可在与输入文件同一目录下找到 results 文件，results 文件中存储着计算结果。

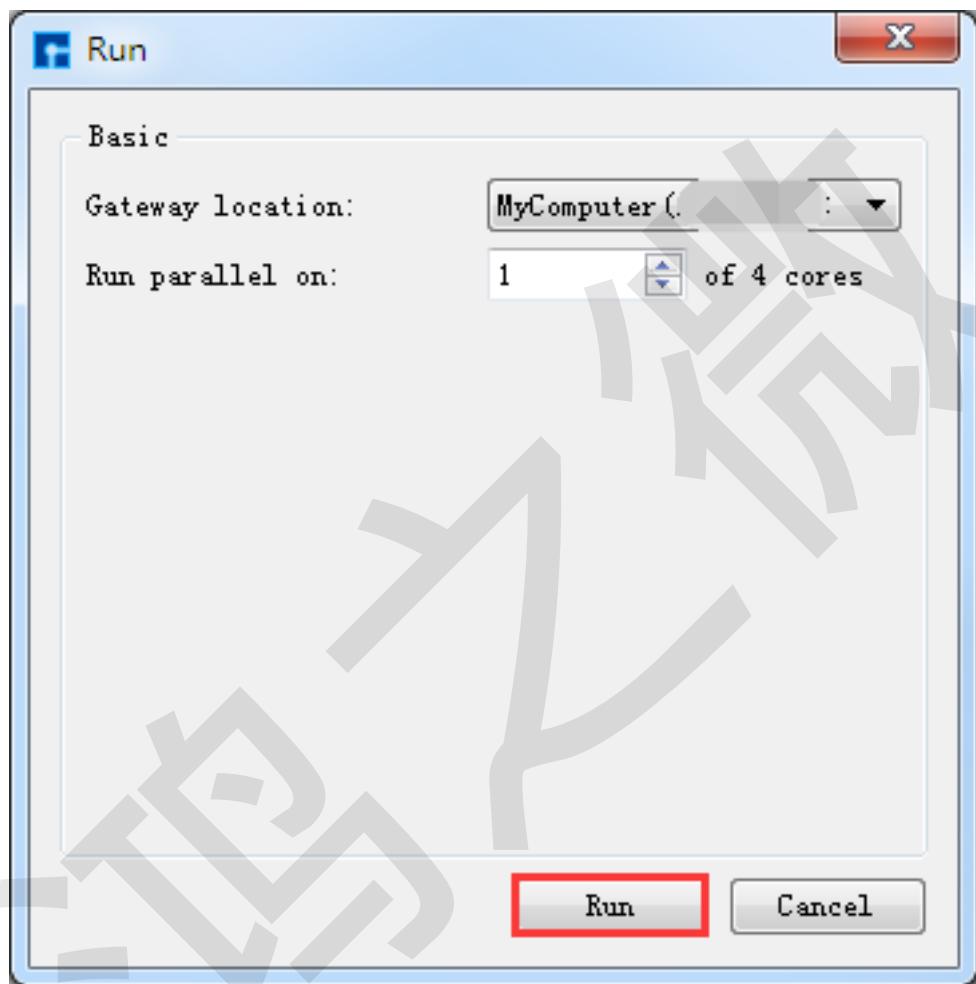


图 10.48: Run 界面

10.4.5.2 RESCU 能带计算

能带计算需调用自洽计算结果，故需先做自洽计算，再做能带计算。本算例已经做过自洽计算，则不需要再做自洽计算，直接调用自洽计算结果做能带计算即可。选中 Bandstructure.input → 右击 → *Open with* 即可查看到晶体 Ni 能带计算输入文件如下所示：

```
info.calculationType = 'band-structure'
info.savepath        = './results/Ni_bs'
rho.in              = './results/Ni_scf'

LCAO.status         = 1

domain.bravaisLattice= 'FCC'
kpoint.gridn       = 250
kpoint.sympoints   = {'W', 'L', 'G', 'X', 'W', 'K'}
%kpoint.sympoints  = {[0.5 0.25 0.75], [0.5 0.5 0.5], [0 0 0], [0.5
→0 0.5], [0.5 0.25 0.75], [0.375 0.375 0.75]}

%eigensolver.emptyBand = 16
```

在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 Bandstructure.input → 右击 → Run，弹出 Run 界面如 图 10.48 Run 界面 所示，点击界面中的 Run 按钮则可进行晶体 Ni 的能带计算。计算完成后则可在 results 文件夹中看到晶体 Ni 能带计算完成后的结果文件 Ni_bs.h5、Ni_bs.mat 和 BandStructure.txt。

10.4.5.3 RESCU 态密度计算

态密度计算需调用自洽计算结果，故需先做自洽计算，再做态密度计算。本算例已经做过自洽计算，则不需要再做自洽计算，直接调用自洽计算结果做态密度计算即可。选中 DensityOfStates.input → 右击 → Open with 即可查看到晶体 Ni 态密度计算输入文件如下所示：

```
info.calculationType = 'dos'
info.savepath        = './results/Ni_dos'
rho.in              = './results/Ni_scf'

LCAO.status         = 1

smearing.sigma     = 0.1
units.energy       = 'eV'
kpoint.gridn       = [ 15, 15, 15 ]
kpoint.sampling    = 'gauss'
dos.range          = [-5 , 5]
dos.resolution     = 0.025
```

(续下页)

(接上页)

```
%eigensolver.emptyBand = 16
```

在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 DensityOfStates.input → 右击 → Run，弹出 Run 界面，点击界面中的 Run 按钮则可进行晶体 Ni 的态密度计算。计算完成后则可在 results 文件夹中看到晶体 Ni 态密度计算完成后的结果文件 Ni_dos.h5、Ni_dos.mat 和 DensityOfStates.txt。

10.4.6 RESCU 计算结果的可视化分析

选中 resculog.out → 右击 → Open Containing Folder 则找到 resculog.out 文件在本地电脑中的存储位置，在同一目录下找到计算结果文件夹 results，该文件夹下含有晶体 Ni 的自洽、能带和态密度计算的结果文件。

在如 图 10.40 所示界面（即：Device Studio 图形界面）中选中 Simulator → RESCU → Analysis Plot，弹出导入计算结果文件的图形界面如 图 10.49 所示，在该界面中选中能带计算结果文件 Bandstructure.txt，点击 打开按钮即可弹出能带的可视化分析界面如 图 10.50 所示。用户可根据需要调节坐标轴的取值范围，通过点击界面中的 Spin Type 的下拉按钮选择只显示 Spin Up 或 Spin Down，或 Spin Up 和 Spin Down 都显示。用户可通过滚动鼠标中键将可视化分析结果放大或缩小；可根据需要编辑坐标轴标注和标题，选择字体的大小和类型。选中如 图 10.50 所示界面中 Export 快捷图标，弹出导出可视化分析结果的图形界面，用户可根据需要选择图片的保存路径和保存格式，并给所保存的图片命名。

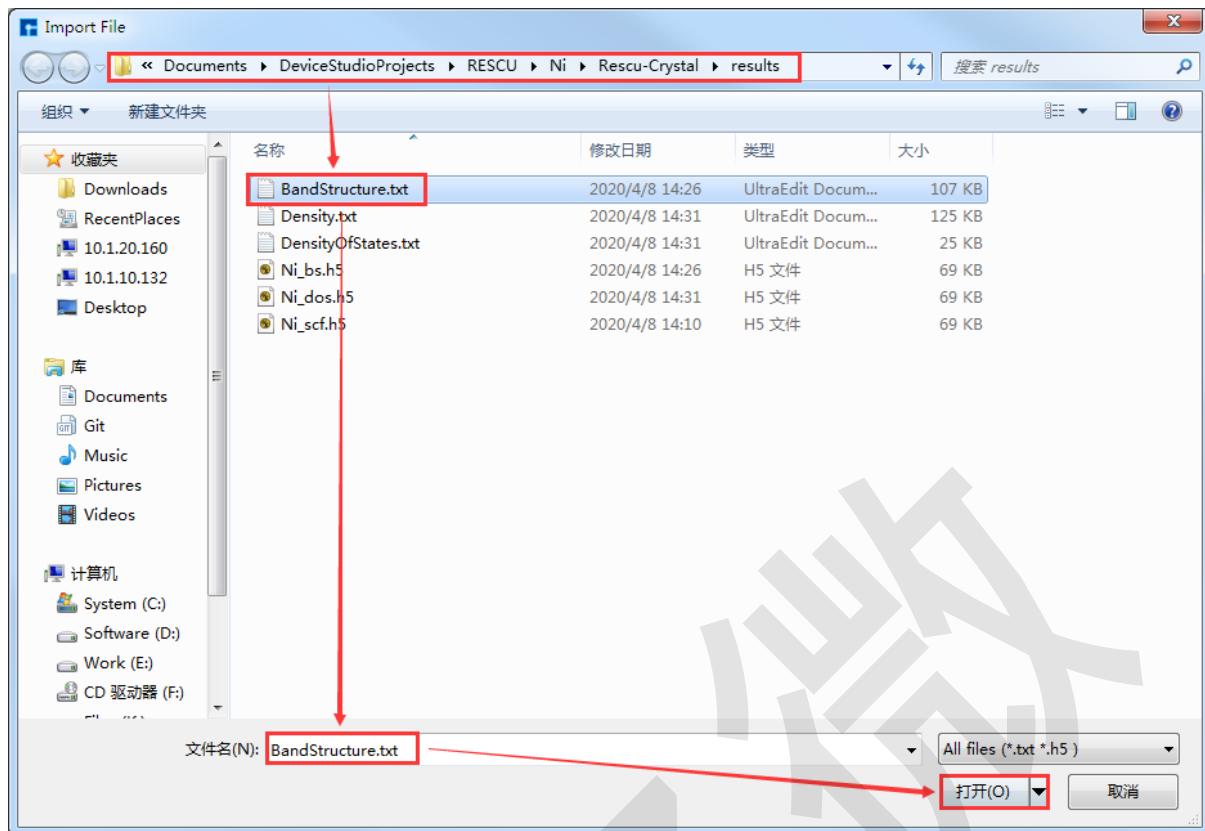


图 10.49: RESCU 导入计算结果文件的图形界面

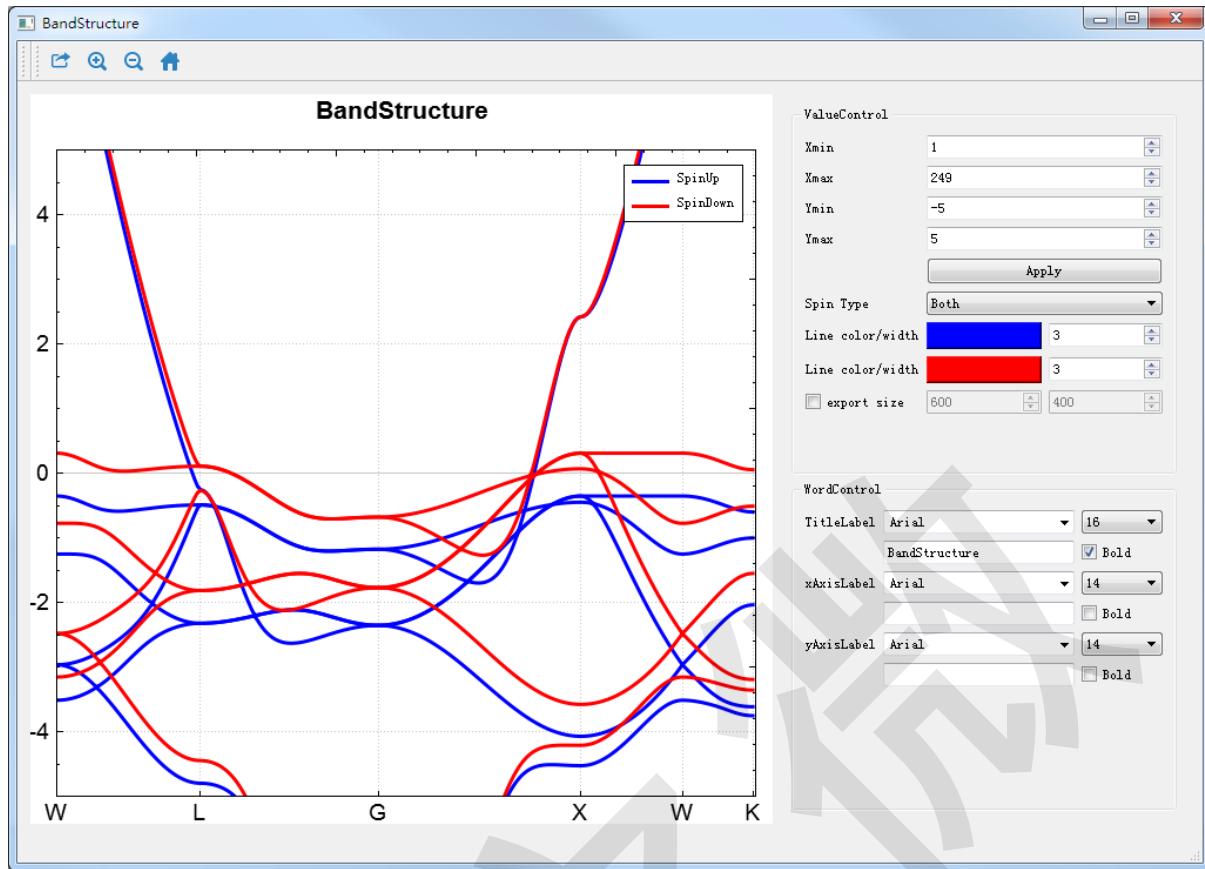


图 10.50: RESCU 能带的可视化分析界面

在如 图 10.40 所示界面（即：Device Studio 图形界面）中选中 *Simulator* → *RESCU* → *Analysis Plot*，弹出导入计算结果文件的图形界面如 图 10.49 所示，在该界面中选中能带计算结果文件 *DensityOfStates.txt*，点击 打开按钮即可弹出态密度的可视化分析界面如 图 10.51 所示。

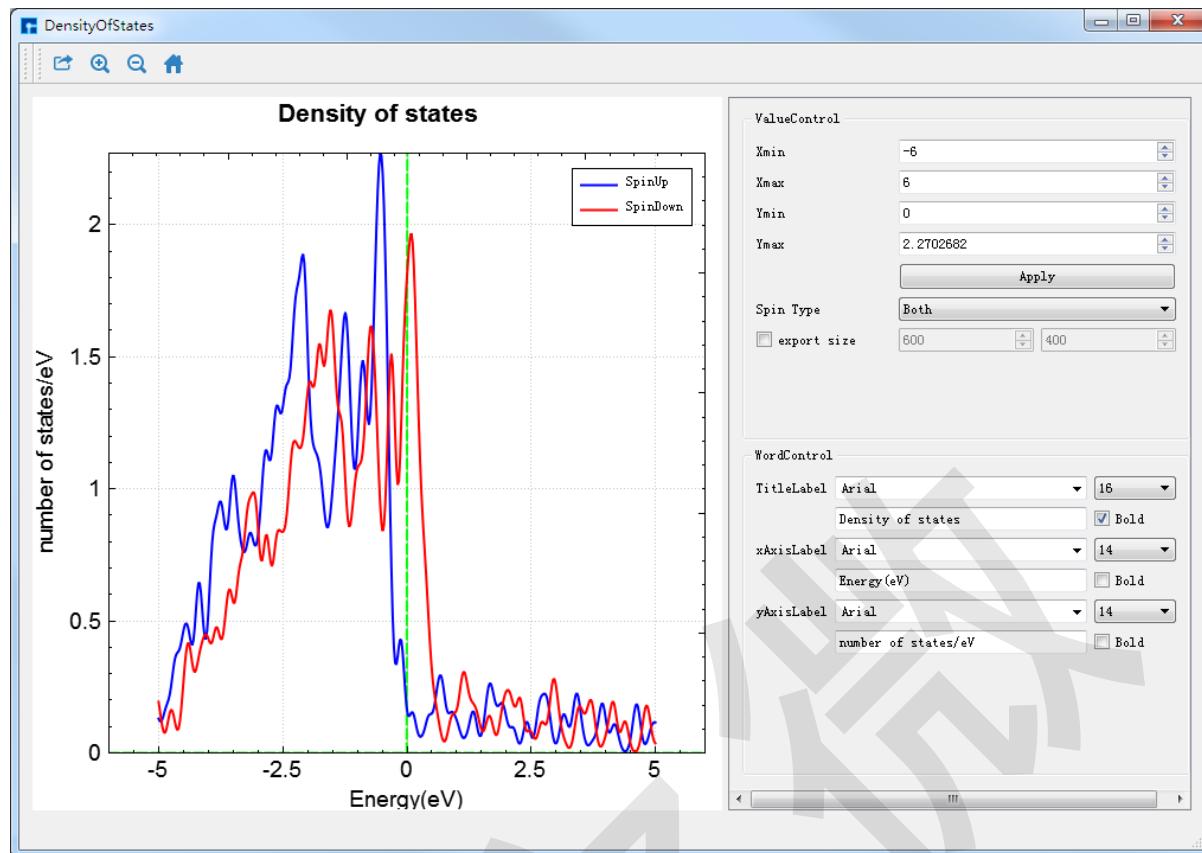


图 10.51: RESCU 态密度的可视化分析界面

10.5 Nanoskim 实例

Nanoskim 即 **Nanostructure Slater-Koster Integrals Manifesting package**，是一款基于 Slater-Koster 紧束缚势场的量子输运仿真软件，可以从原子层级来构建纳米器件。在非平衡条件下，通过自洽求解非平衡格林函数（Non-equilibrium Green's function，简称:NEGF）和，得到纳米器件的电子密度和静电势，从而可以充分考虑量子力学效应（如源漏隧穿效应、量子受限效应），以及具体的原子细节（如截面形状、杂质位置）等。

Nanoskim 软件官网：详见 <https://cloud.hzwtech.com/web/product-service?id=4>

以环栅型的硅纳米线晶体管结构的电流电压特性为例详细描述 **Nanoskim** 软件在 Device Studio 中的应用。

10.5.1 Nanoskim 计算流程

Nanoskim 在 Device Studio 中的计算流程如 图 10.52 所示。



图 10.52: Nanoskim 计算流程

10.5.2 Nanoskim 创建项目

双击 Device Studio 图标快捷方式，登录并启动 Device Studio，在创建或打开项目界面中(启动软件后选择创建或打开项目的图形界面)，根据界面提示选择创建一个新的项目(*Create a new Project*)或打开一个已经存在的项目(*Open an existing Project*)的按钮，选中之后点击界面中的 *OK* 按钮即可。若选择创建一个新的项目，用户可根据需要给该项目命名，如本项目命名为 Nanoskim，或采用软件默认项目名。

10.5.3 Nanoskim 导入结构

在 Device Studio 中导入纯硅器件结构 (Device_Si.hzw) 后的图形界面如 图 10.53。在 Device Studio 中导入纯硅器件结构的具体操作这里不做详细说明，用户可参照[导入结构](#)节内容。

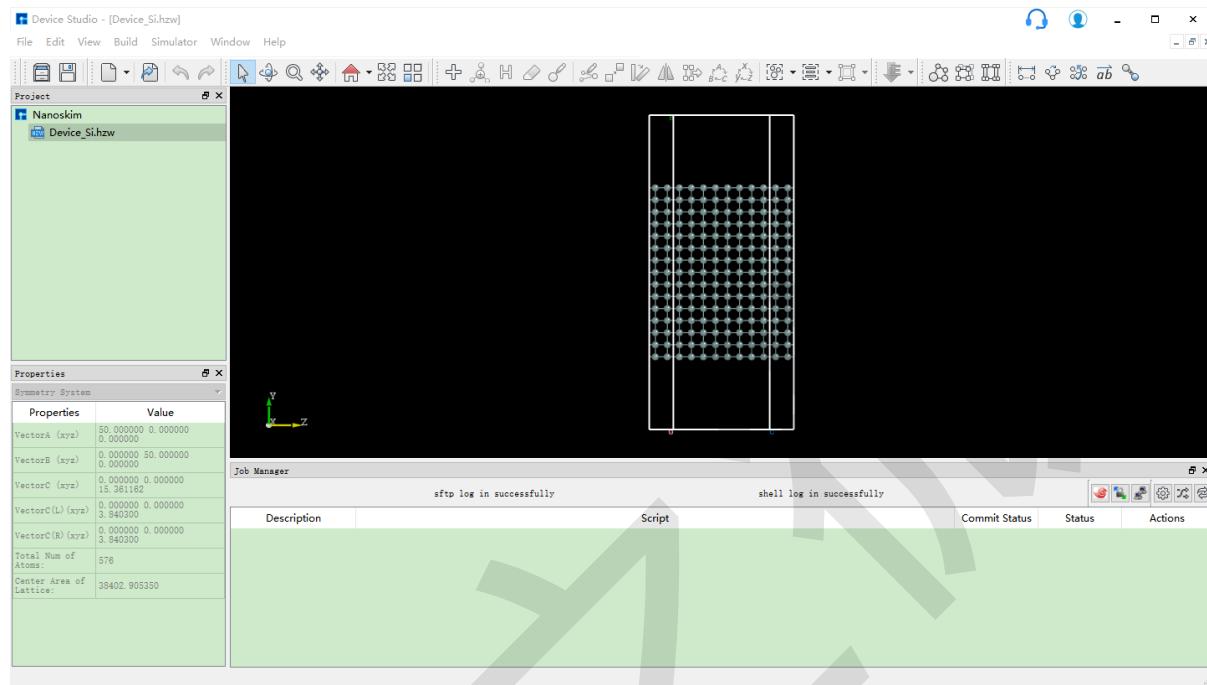


图 10.53: 导入纯硅器件结构 (Device_Si.hzw) 后的 Device Studio 图形界面

10.5.4 Nanoskim 输入文件的生成

10.5.4.1 Nanoskim 生成准备文件

在如 图 10.53 所示界面中选中 *Simulator* → *Nanoskim* → *Preparation*，弹出界面如 图 10.54 所示，用户可根据所计算的结构及计算需要分别选中 *Hamiltonian*、*Bandstructure* 这 2 个按钮合理设置参数，之后点击 *Generate files* 即可生成准备文件。

如生成纯硅器件结构的准备文件，分别选中 *Hamiltonian*、*Bandstructure* 设置参数分别如 图 10.54、图 10.55 所示，设置好参数后点击 *Generate files* 即可生成纯硅器件结构的准备文件 *Structure.input*、*Hamiltonian.input*、*BandStructure.input*。

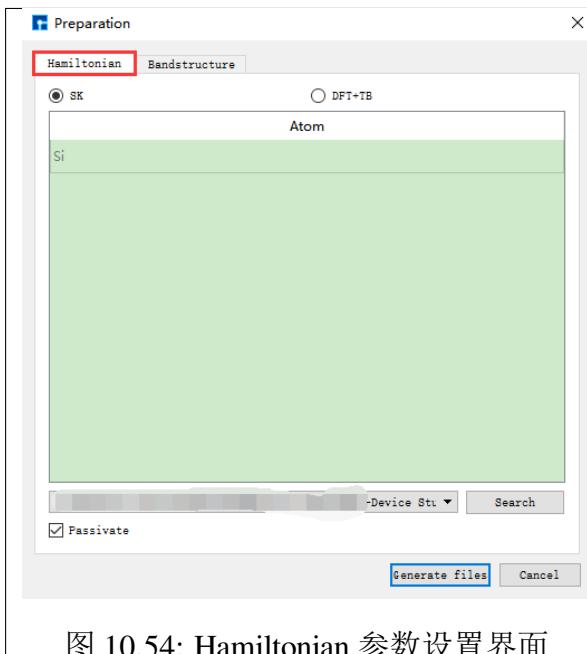


图 10.54: Hamiltonian 参数设置界面

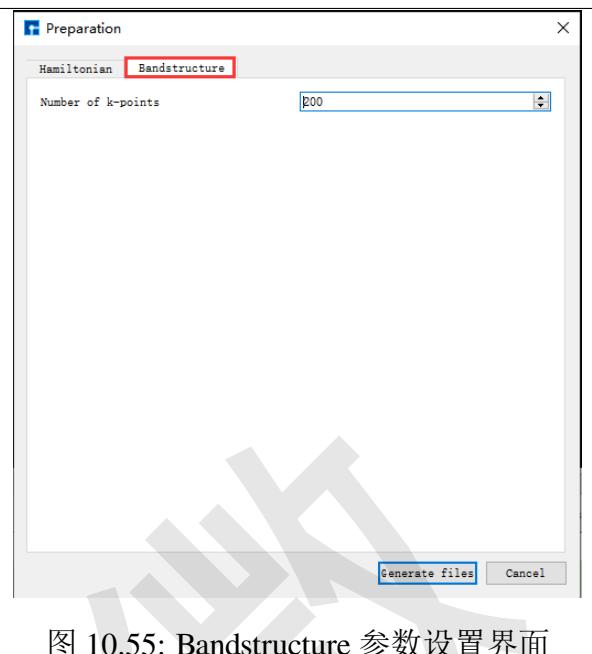


图 10.55: Bandstructure 参数设置界面

10.5.4.2 Nanoskim 生成自洽输入文件

在如 图 10.53 所示界面（即：Device Studio 图形界面）中选中 *Simulator* → *Nanoskim* → *SCF Calculation*，弹出 SCF Calculation 界面，在界面中分别选中 *Basis settings*、*Contour integral*、*Boundary conditions* 设置参数分别如 图 10.56、图 10.57、图 10.58 所示，设置好参数后点击 *Generate files* 即可生成纯硅器件结构自洽的输入文件 *SCF.input*。

备注

本算例生成自洽输入文件均采用的 Device Studio 的默认参数，实际计算过程中用户通过 Nanoskim 快速使用说明手册了解各参数的详细意义，从而根据计算需要合理设置参数。若想详细了解 Nanoskim，点击对应紫色或蓝色字体软件名称，或发送邮件到邮箱 support@hzwtech.com 咨询。

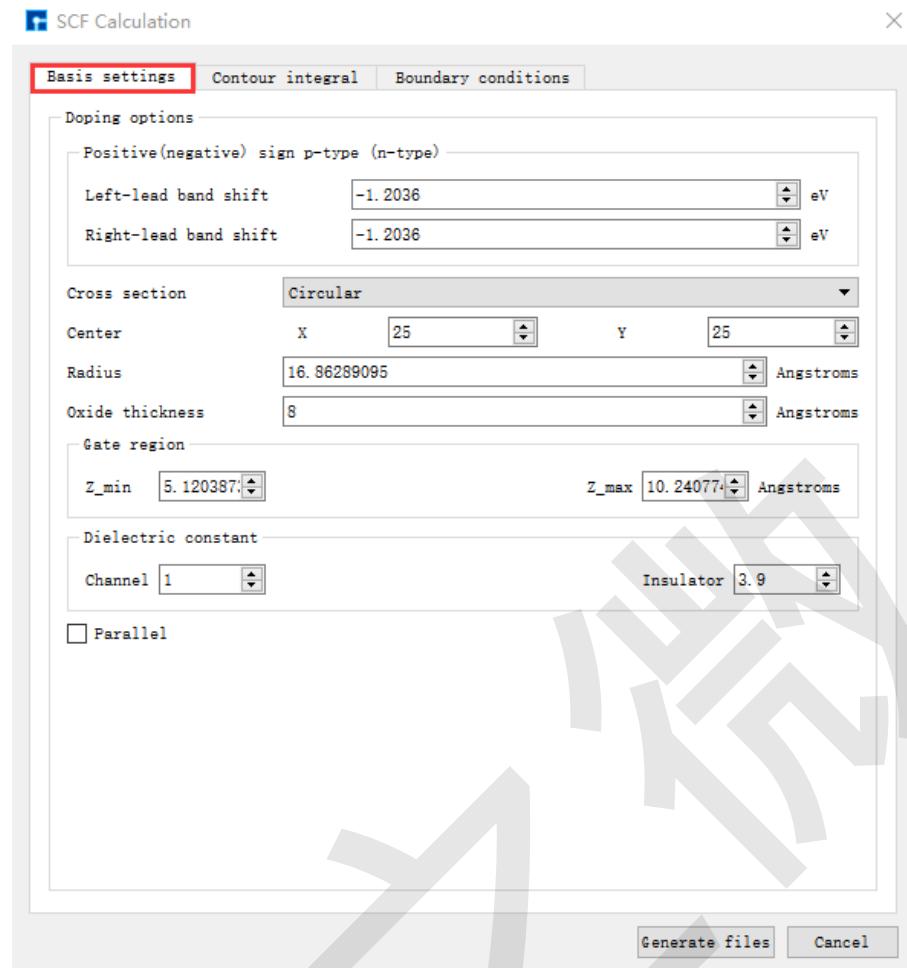


图 10.56: Basis settings 参数设置界面

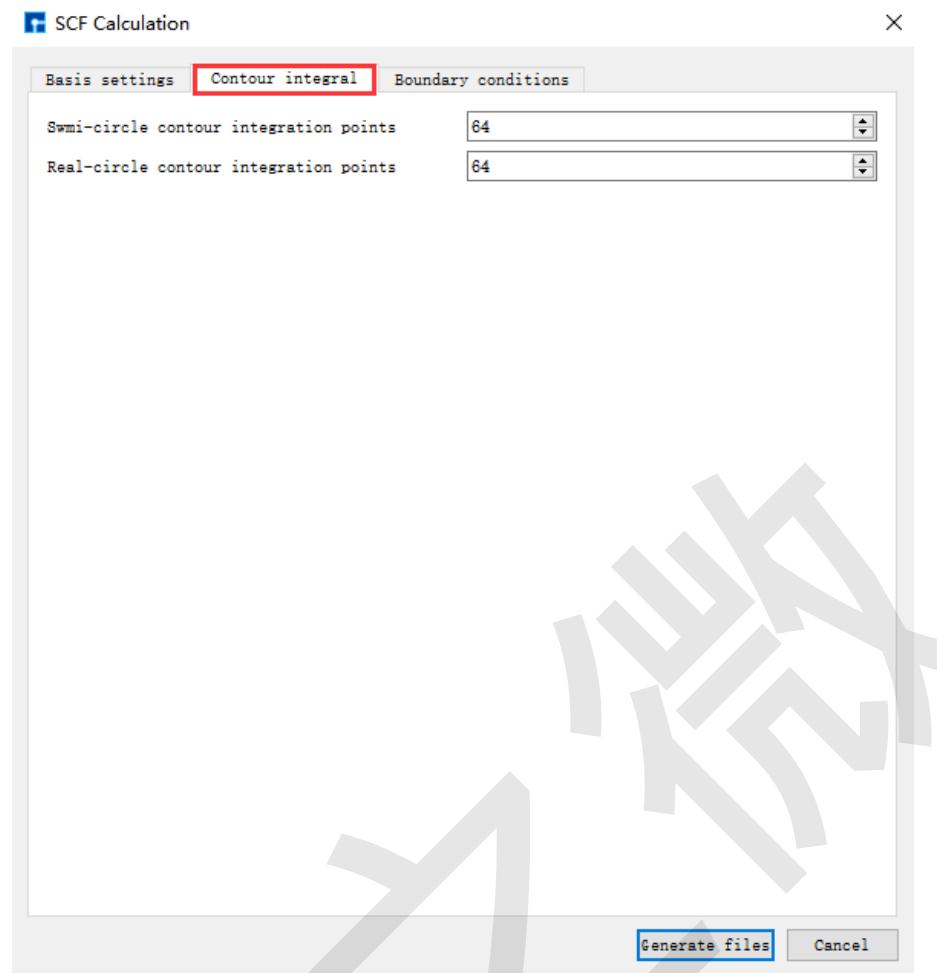


图 10.57: Contour integral 参数设置界面

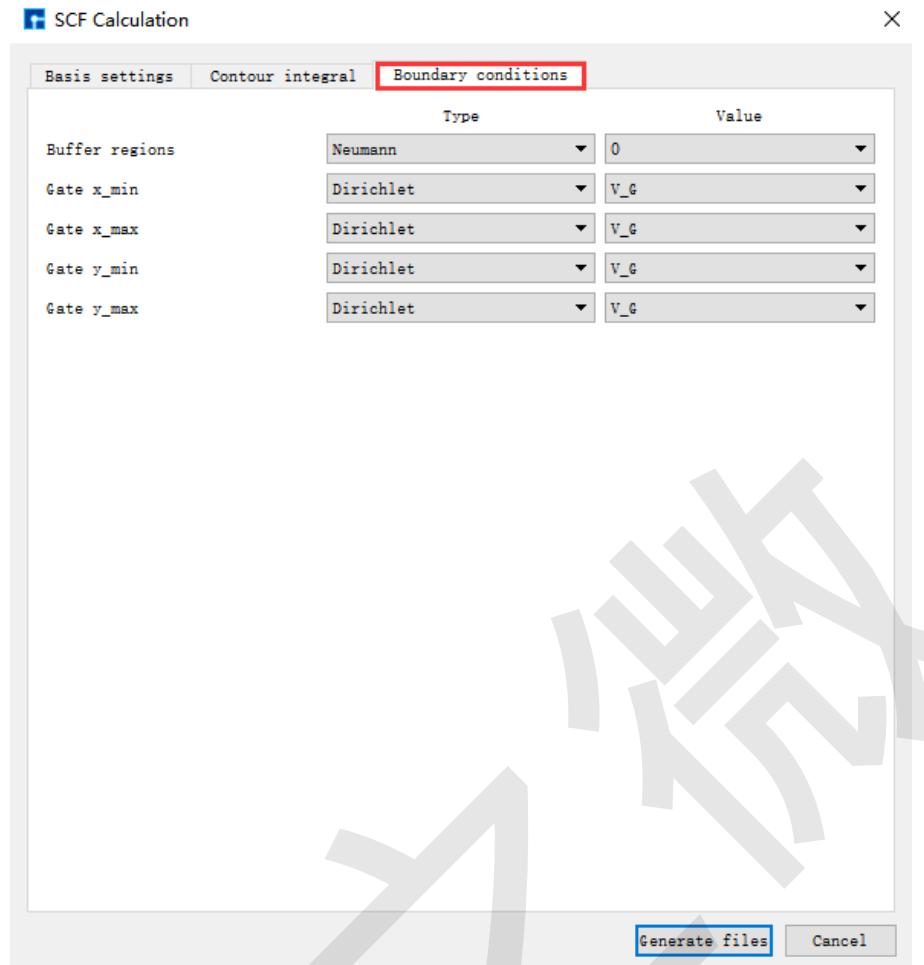


图 10.58: Boundary conditions 参数设置界面

10.5.4.3 Nanoskim 生成电流、电子透射谱输入文件

在如 图 10.53 所示界面（即：Device Studio 图形界面）中选中 *Simulator* → *Nanoskim* → *Analysis*，弹出 Post Analysis 界面，在界面中先双击 *Transmission*，再双击 *IVcurve*，并设置参数如 图 10.59 所示，设置好参数后点击 *Generate files* 即可生成纯硅器件结构电流、电子透射谱输入文件 *IVcurve.input* 和 *Transmission.input*。

备注

在 Post Analysis 界面左侧双击 *Transmission*，会发现不需要设置相关参数，属于正常现象，Device Studio 已自动设置好相关参数。在双击 *IVcurve* 之前一定要先双击 *Transmission*。

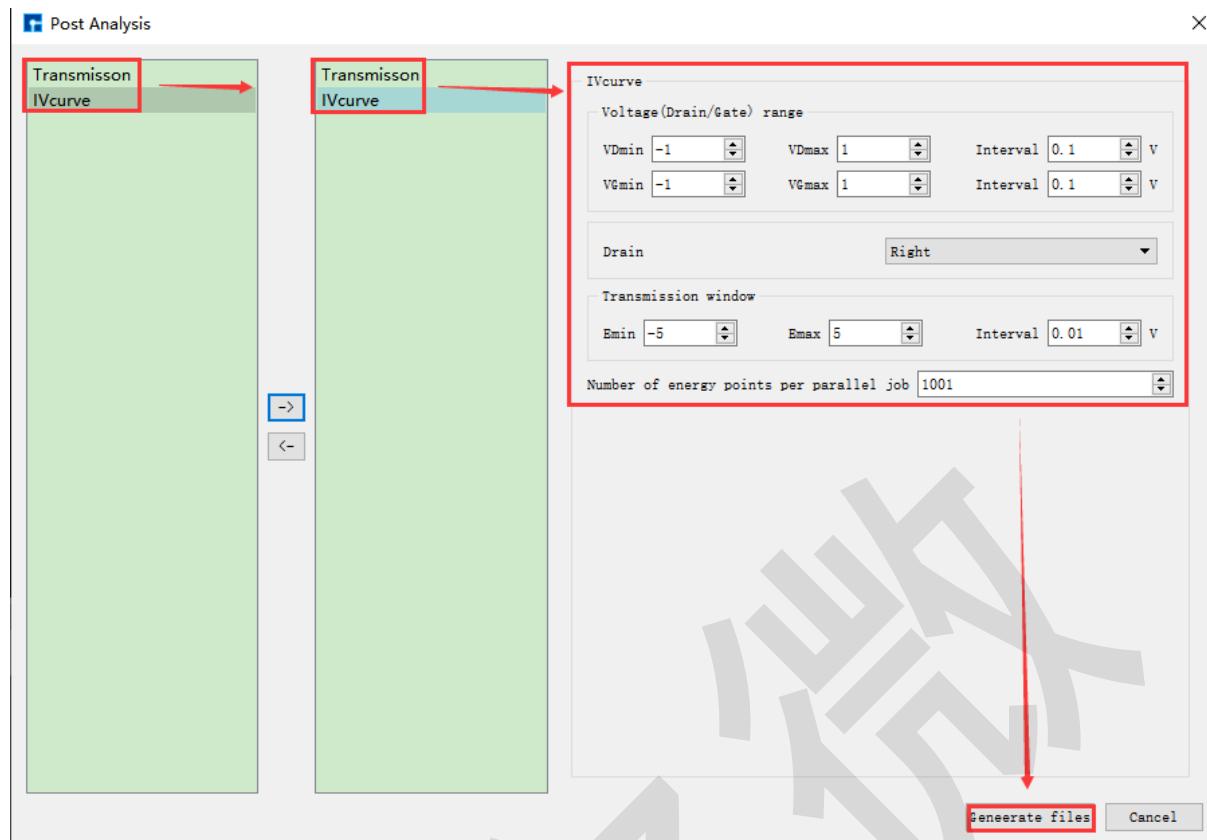


图 10.59: 纯硅器件结构电流、电子透射谱输入文件参数设置界面

10.5.5 Nanoskim 计算

10.5.5.1 Hamiltonian 计算

生成 Nanoskim 计算各个输入文件后的 Device Studio 界面如 图 10.60 所示。以纯硅器件结构的 Hamiltonian 计算为例，在如 图 10.60 所示界面中，Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 Hamiltonian.input → 右击 → Run，弹出 Run 界面如 图 10.48 (Run 界面) 所示，点击界面中的 Run 按钮则可进行纯硅器件结构的 Hamiltonian 计算，在计算过程中，用户可在 Device Studio 的 Job Manager 区域查看计算状态。当计算任务处于排队中、计算中和计算完成时，Status 分别为 Queued、Running、Finished。计算完成后，在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 Hamiltonian.input → 右击 → Open Containing Folder 则找到 Hamiltonian.input 文件在本地电脑中的存储位置，并且可看到纯硅器件结构的 Hamiltonian 计算的结果文件 Hresult.mat，该文件在 **IVSource** 文件夹内。

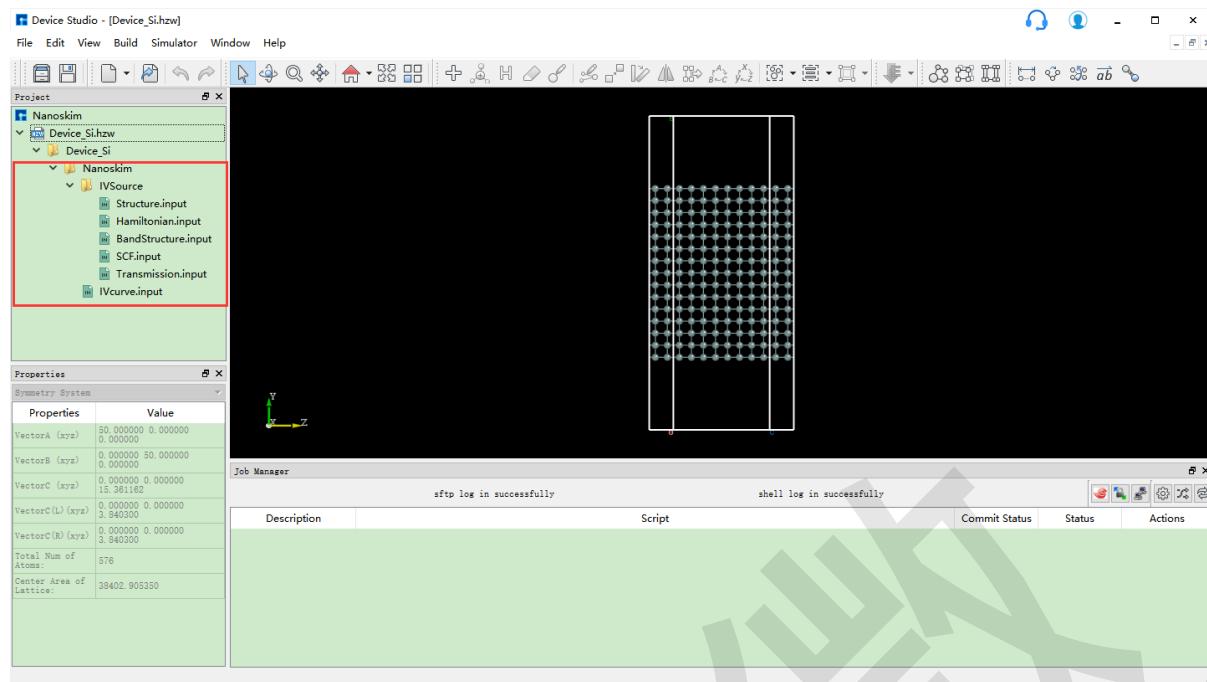


图 10.60: 生成 Nanoskim 计算各个输入文件后的 Device Studio 界面

10.5.5.2 BandStructure 计算

BandStructure 计算需调用 Hamiltonian 计算的结果, 故需先做 Hamiltonian 计算, 再做 BandStructure 计算。本算例已经做过 Hamiltonian 计算, 则直接调用 Hamiltonian 计算结果做 BandStructure 计算即可。在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 Bandstructure.input → 右击 → Run, 弹出 Run 界面如 图 10.48 Run 界面 所示, 点击界面中的 Run 按钮则可进行纯硅器件结构的能带计算。计算完成后, 在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 Bandstructure.input → 右击 → Open Containing Folder 则找到 Bandstructure.input 文件在本地电脑中的存储位置, 并且可看到纯硅器件结构的能带计算的结果文件 BSresult.mat 和 BSresult.txt, 这 2 个文件都在 **IVSource** 文件夹内。

备注

Nanoskim 的计算较为复杂, 顺序为 Hamiltonian.input → Bandstructure.input → IVcurve.input, IVcurve.input 文件运行完成后, 会在与 IVSource 文件夹同一目录下生成一系列 **VD=##_VG=##** 文件夹。如 **VD=0.1_VG=0** 文件夹下的一系列输入文件如下图所示, 对于该文件夹下的各输入文件的运行这里不做详细说明, 用户可参考 Nanoskim 快速使用说明手册, 或发送邮件到邮箱 support@hzwtech.com 咨询。

 BandStructure.input	2020/4/17 16:09	INPUT 文件	1 KB
 BSresult.mat	2020/4/17 16:32	MAT 文件	1,309 KB
 BSresult.txt	2020/4/17 16:32	TXT 文件	1,832 KB
 Hamiltonian.input	2020/4/17 16:09	INPUT 文件	1 KB
 Hresult.mat	2020/4/17 16:32	MAT 文件	247 KB
 SCF.input	2020/4/17 16:35	INPUT 文件	2 KB
 Si_Niquet.ski	2019/12/17 11:22	SKI 文件	2 KB
 Structure.input	2020/4/17 16:09	INPUT 文件	35 KB
 Transmission.input	2020/4/17 16:09	INPUT 文件	1 KB
 Transmission_1.input	2020/4/17 16:35	INPUT 文件	6 KB

10.5.6 Nanoskim 计算结果的可视化分析

在如 图 10.60 所示界面（即：Device Studio 图形界面）的 Project Explorer 区域选中 `BSresult.txt` → 右击 → `Show View`，则弹出 `Nanoskim` 能带的可视化分析界面如 图 10.61 所示。用户可根据需要调节坐标轴的取值范围；可通过滚动鼠标中键将可视化分析结果放大或缩小；可根据需要编辑坐标轴标注和标题，选择字体的大小和类型。选中如 图 10.60 所示界面中 `Export` 快捷图标，弹出导出可视化分析结果的图形界面，用户可根据需要设置导出图片的大小，选择图片的保存路径和保存格式，并给所保存的图片命名。

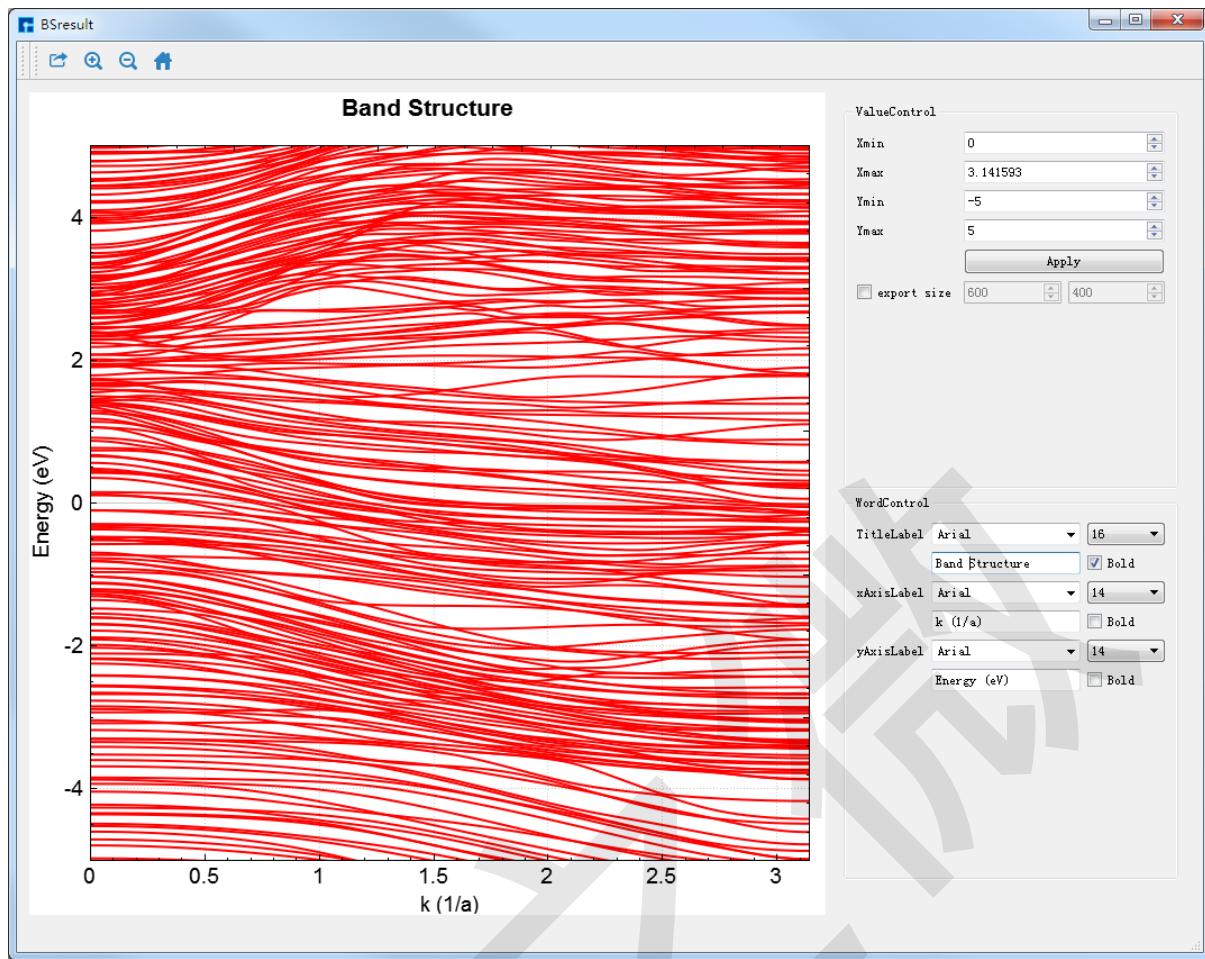


图 10.61: Nanoskim 能带的可视化分析界面

亦可在 Device Studio 图形界面中选中 *Simulator → Nanoskim → Analysis Plot*, 弹出导入能带结果文件的图形界面, 在界面中找到 `BSresult.txt` 文件并选中, 点击 打开按钮即可弹出 Nanoskim 能带的可视化分析界面。

10.6 STEMS 实例

STEMS (Simulation Tools for the Evolution of Micro-Strucure) 是一款基于相场或晶体相场理论方法 (Phase-Field /Phase-Field-Crystal Methods) 的材料微观组织结构演化模拟软件。其中相场方法部分适用于研究多种合金凝固过程中的组织结构演化过程, 如支晶生长, 共晶生长等现象。晶体相场部分用于研究晚期凝固过程中和凝固压力相关的纳米尺度机制, 可以弥补相场方法在描述凝固缺陷方面的不足。

相场或晶体相场方法具有坚实的物理基础。相场方法通过求解一组描述凝固过程中固液界面移动过程的经典偏微分方程来研究材料在凝固过程中的微观组织结构演化。晶

体相场方法通过求解基于变分方法和原子密度泛函的偏微分方程组来研究、模拟、理解和预测凝固过程中在纳米尺度发生的材料微组织演化。

STEMS 基于最新的相场和晶体相场方法，由领域内的世界著名科学家团队领衔开发，是目前唯一结合了相场和晶体相场方法，能够研究凝固过程中的晶体生长和缺陷生成机制等重要问题的模拟软件。相场部分使用新的巨势多相场模型，便于耦合多种合金的热力学自由能数据，可以研究快速凝固过程。

STEMS 可模拟的过程如下：凝固过程中的枝晶生长现象、共晶生长现象、定向凝固、快速凝固、凝固缺陷、凝固压力。

10.6.1 STEMS 计算流程

STEMS 在 Device Studio 中的计算流程如 图 10.62 所示。



图 10.62: STEMS 计算流程

10.6.2 STEMS 创建项目

双击 Device Studio 图标快捷方式，登录并启动 Device Studio，在创建或打开项目界面中（启动软件后选择创建或打开项目的图形界面），根据界面提示选择创建一个新的项目（*Create a new Project*）或打开一个已经存在的项目（*Open an existing Project*）的按钮，选中之后点击界面中的 *OK* 按钮即可。若选择创建一个新的项目，用户可根据需要给该项目命名，如本项目命名为 STEMS，或采用软件默认项目名。

10.6.3 STEMS 导入文件

在 Device Studio 的图形界面点击 *File → Import → Import Local*，则弹出导入 STEMS 文件的界面如 图 10.63 所示，根据界面提示找到 *PF-PFC.hzw* 文件的位置，选中 *PF-PFC.hzw* 文件，点击 *打开* 按钮则导入 *PF-PFC.hzw* 文件后的 Device Studio 界面如 图 10.64 所示。在 Device Studio 中导入结构的其他方法这里不做详细说明，用户可参照导入结构节内容。

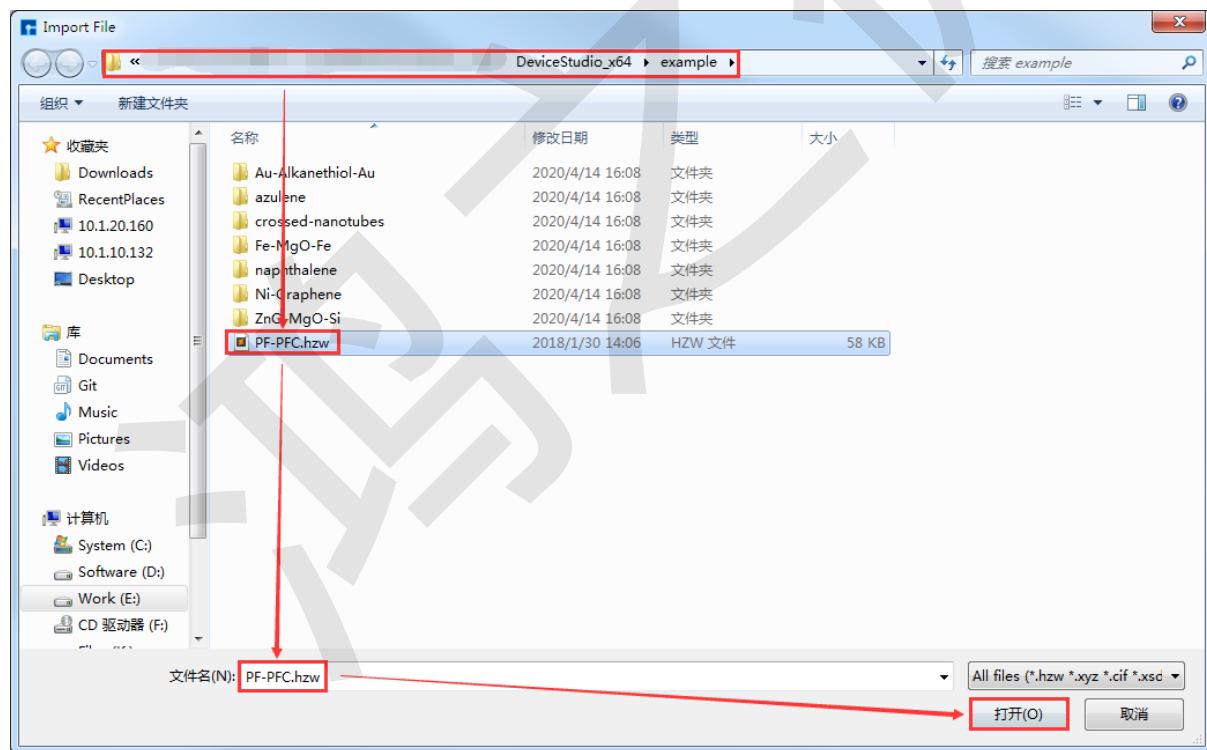


图 10.63: STEMS 导入文件的界面

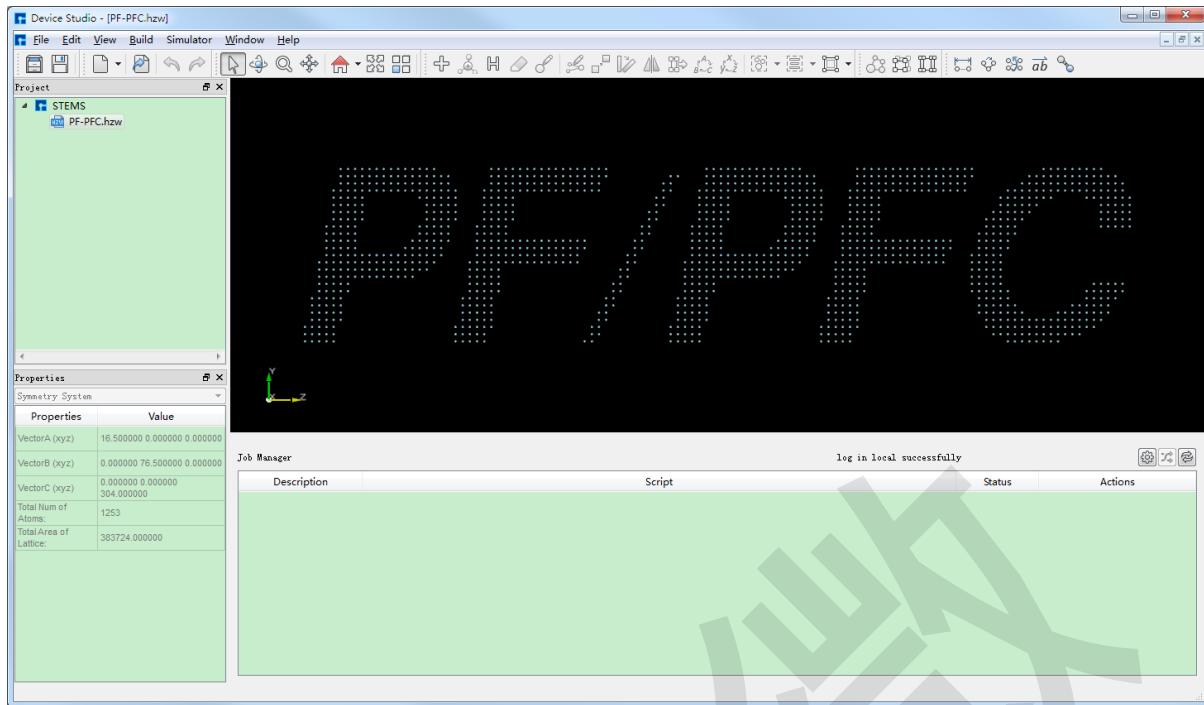


图 10.64: 导入 PF-PFC.hzw 文件后的 Device Studio 界面

10.6.4 PFC 计算输入文件的生成

在如 图 10.64 所示界面中选中 *Simulator* → *STEMS* → *PFC*, 弹出 PFC 参数设置界面如 图 10.65 所示, 用户可根据计算需要分别选中界面中的 *Init*、*Func*、*Run* 分别设置参数如 图 10.65、图 10.66 和 图 10.67 所示, 之后点击界面中的 *Generate files* 即可生成 PFC 计算输入文件 *Init.param*、*Func.param* 和 *Run.Param*, 生成 PFC 计算输入文件后的 Device Studio 图形界面如 图 10.68 所示。

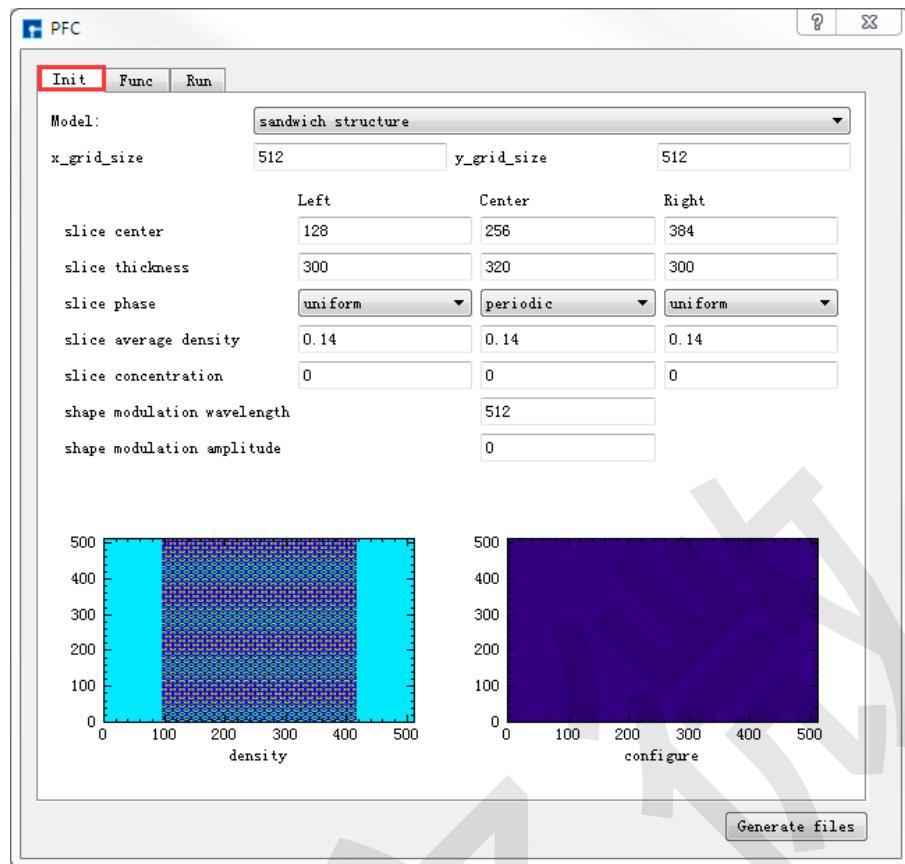


图 10.65: Init 参数设置界面

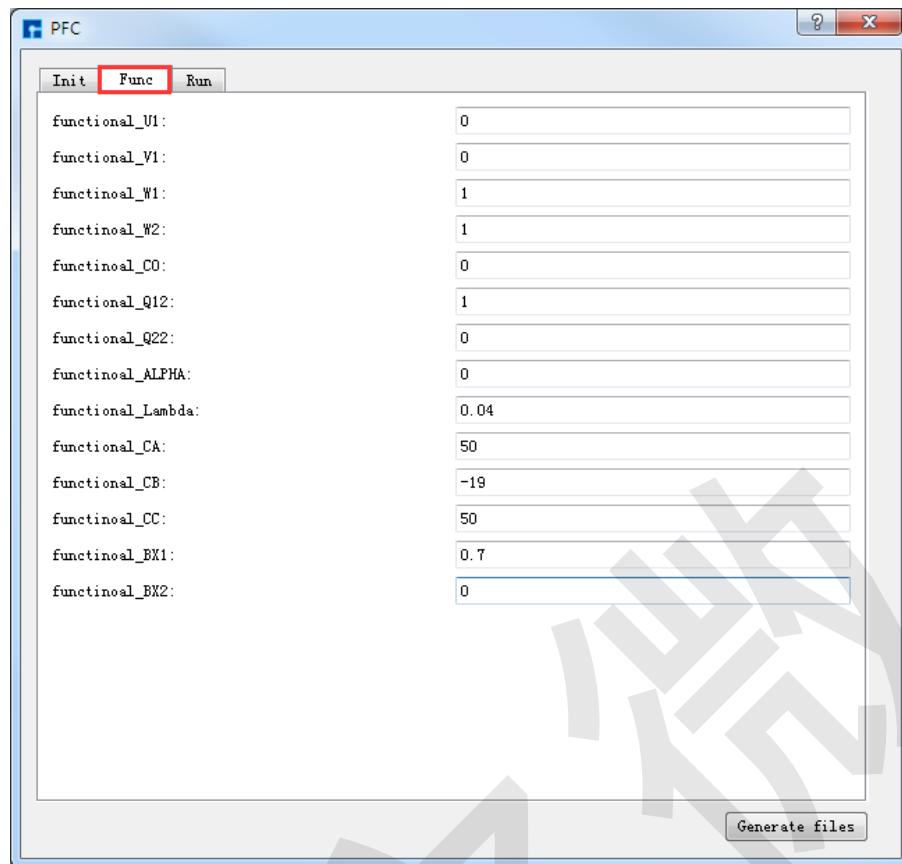


图 10.66: Func 参数设置界面

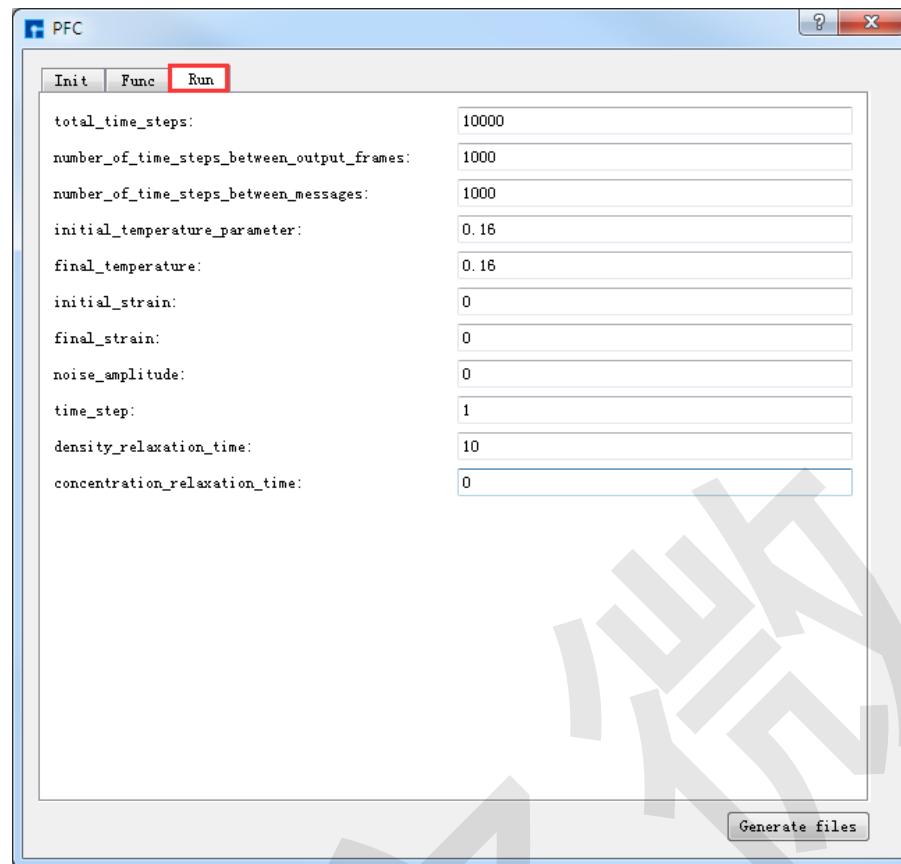


图 10.67: Run 参数设置界面

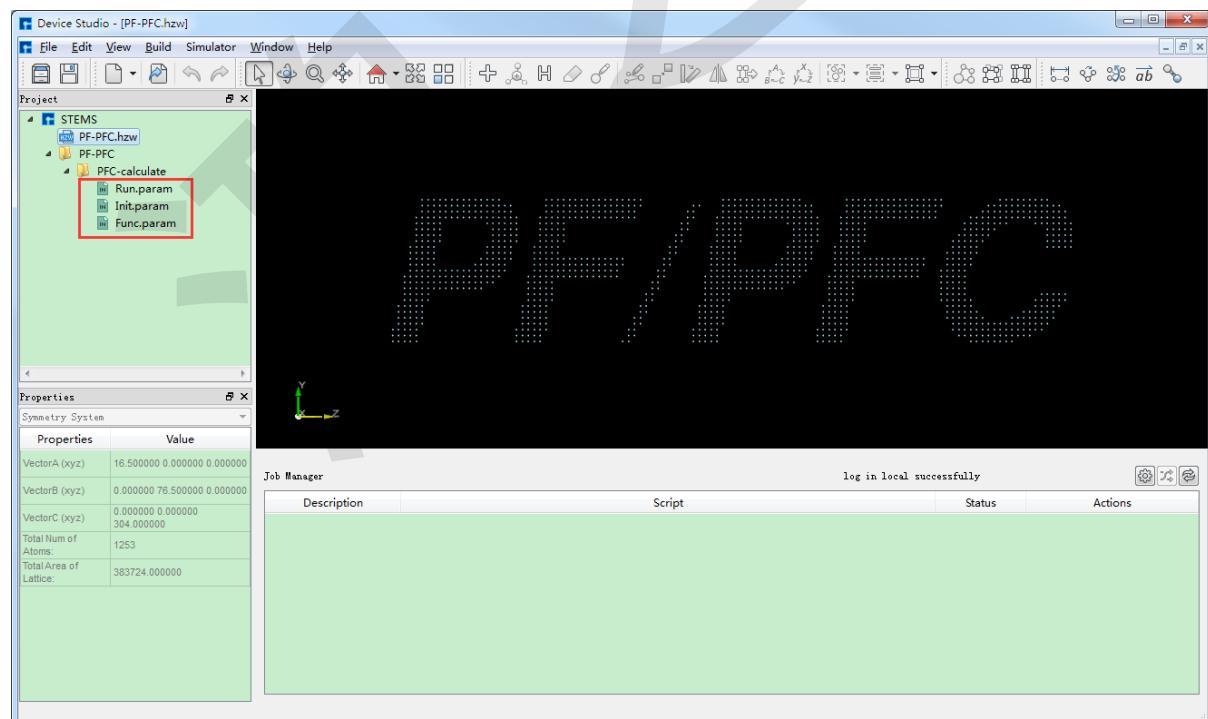


图 10.68: 生成 PFC 计算输入文件后的 Device Studio 界面

10.6.5 PFC 计算

在做 PFC 计算之前，需连接装有 STEMS 的服务器，具体连接过程这里不做详细说明，用户可参考 [Nanodcal 连接服务器](#) 节内容。连接好装有 STEMS 的服务器，在做 PFC 计算之前，用户可根据需要打开输入文件并查看文件中的参数设置是否合理，若不合理，则可选择直接在文件中进行编辑或重新生成，最后再进行 PFC 计算。如打开 Init.param 文件，在图 10.68 所示的界面中，选中 Init.param → 右击 → *Open with* 即可查看到 Init.param 文件如下所示。对于其他输入文件，用户可根据需要选择是否打开查看，这里不做详细说明。

```

initial_model          = 3
x_grid_size            = 512
y_grid_size            = 512
slice_center_left      = 128
slice_thickness_left   = 300
slice_phase_left       = 1
slice_average_density_left = 0.14
slice_concentration_left = 0
slice_center_center    = 256
slice_thickness_center = 320
slice_phase_center     = 0
slice_average_density_center = 0.14
slice_concentration_center = 0
shape_modulation_wavelength = 512
shape_modulation_amplitude = 0
slice_center_right     = 384
slice_thickness_right  = 300
slice_phase_right      = 1
slice_average_density_right = 0.14
slice_concentration_right = 0

```

备注

在实际计算过程中，用户可通过 STEMS 使用教程了解各参数的详细意义，从而根据计算需要合理设置参数。若想详细了解 STEMS，可发送邮件到邮箱 support@hzwtech.com 咨询。

在如 图 10.68 所示的界面的 Project Explorer 区域中，选中 Run.param → 右击 → *Run*,

弹出 Run 界面如 图 10.69 所示，根据计算需要设置参数后点击 *Save* 按钮保存相应的脚本，之后点击如 图 10.69 所示界面中的 *Run* 按钮则可做 STEMS 的 PFC 计算。用户可在 Job Manager 区域中观察 PFC 计算状态，当 PFC 计算任务处于排队中、计算中和计算完成时，*Status* 分别为 *Queued*、*Running*、*Finished*；在计算过程中，点击 刷新按钮（即 *refresh* 按钮），通过 *Commit Status*、*Status* 可查看到 PFC 计算的计算进度和计算状态；计算完成后 Device Studio 的 Job Manager 区域如 图 10.70 所示，点击 *Action* 下的 下载按钮弹出下载 PFC 计算结果界面如 图 10.71 所示，在该界面找到 PFC 计算的结果文件（**PFC 计算结果文件即后缀名为 .dat 的文件，如 d_mpi.0.dat**），点击 *Download* 则可下载，下载后可在软件的 Project Explorer 区域查看到该结果文件。



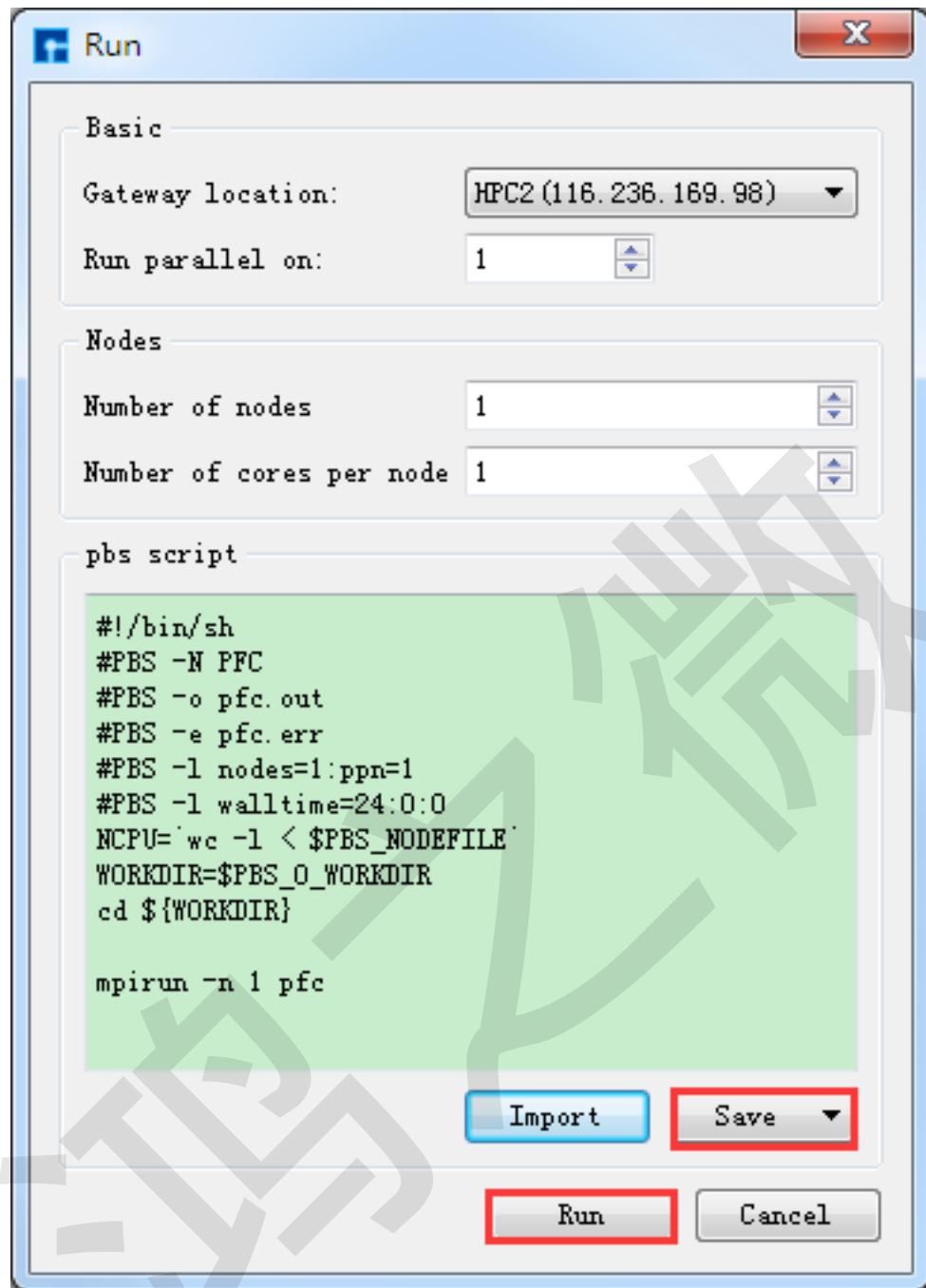


图 10.69: STEMS 的 Run 界面

Job Manager		sftp log in successfully	log in successfully			
Description	Script		Commit Status	Status	Actions	
PF-PFC	/STEMS/PF-PFC/PFC-calculate/Run.param		100%	Finished		

图 10.70: PFC 计算完成后的 Device Studio 的 Job Manager 区域

Filename	Status	
d_mpi.0.dat	100%	
d_mpi.10.dat	100%	
d_mpi.1.dat	100%	
d_mpi.2.dat	0%	
d_mpi.3.dat	0%	
d_mpi.4.dat	0%	
d_mpi.5.dat	0%	
d_mpi.6.dat	0%	
d_mpi.7.dat	0%	
d_mpi.8.dat	0%	
d_mpi.999.dat	0%	
d_mpi.9.dat	0%	
Func.param	0%	
Init.param	0%	
mf10.dat	0%	

图 10.71: 下载 PFC 计算结果的界面

PFC 计算结果下载完成后的 Device Studio 界面如 图 10.72 所示。

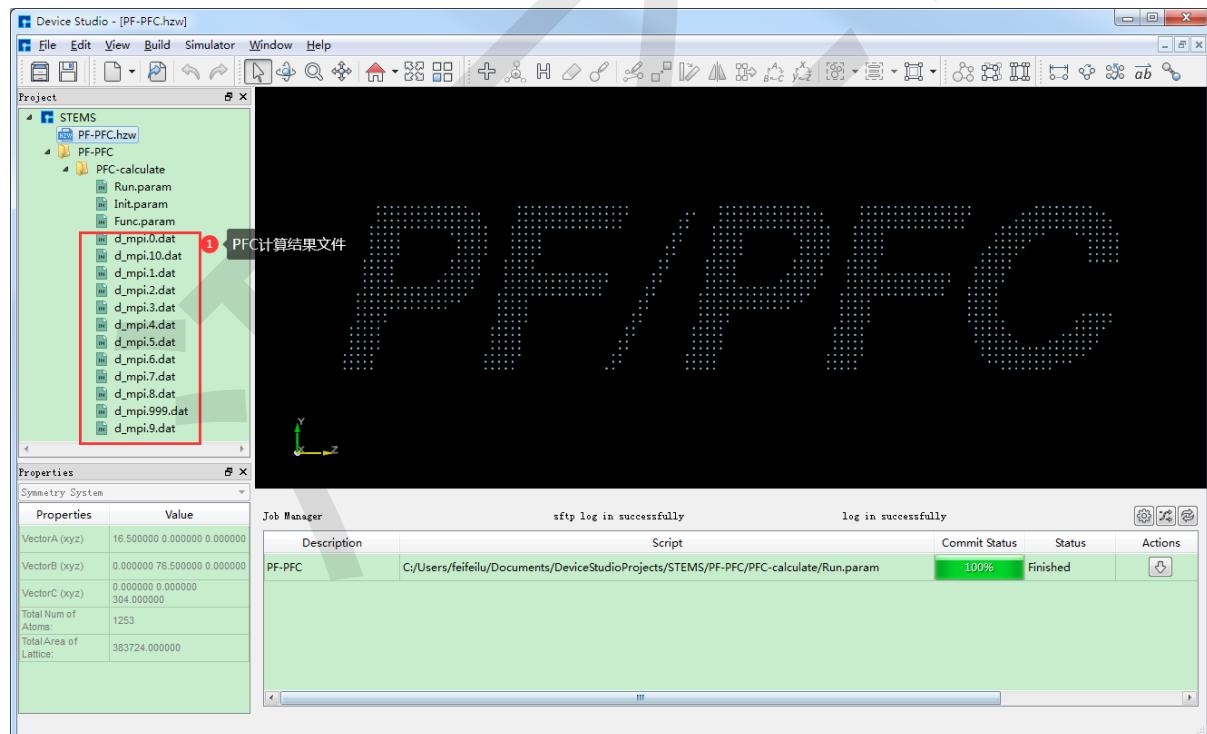


图 10.72: PFC 计算结果下载完成后的 Device Studio 界面

10.6.6 PFC 计算结果的可视化分析

在如图 10.72 所示界面中的 Project Explorer 区域内，选中任意一个 PFC 计算的结果文件，如 `d_mpi.0.dat` → 右击 → *Open Containing Folder* 则找到 PFC 计算结果文件在本地电脑中的存储位置如图 10.73 所示。在如图 10.72 所示的 Device Studio 图形界面中，点击 *View* → *generate GIF*，弹出 *generategif* 界面如图 10.74 所示，在该界面中点击 *File* → *import*，弹出导入 PFC 计算结果文件的界面，按照提示将结果文件导入后，在 *generategif* 界面中点击 *File* → *export*，弹出将 PFC 计算结果的可视化分析结果导出的界面，用户可根据需要选择导出的位置，并给可视化分析结果命名，或采用默认命名，如命名为 `PFC.gif`，PFC 计算结果的可视化分析（即 `PFC.gif` 文件）如图 10.75 所示。

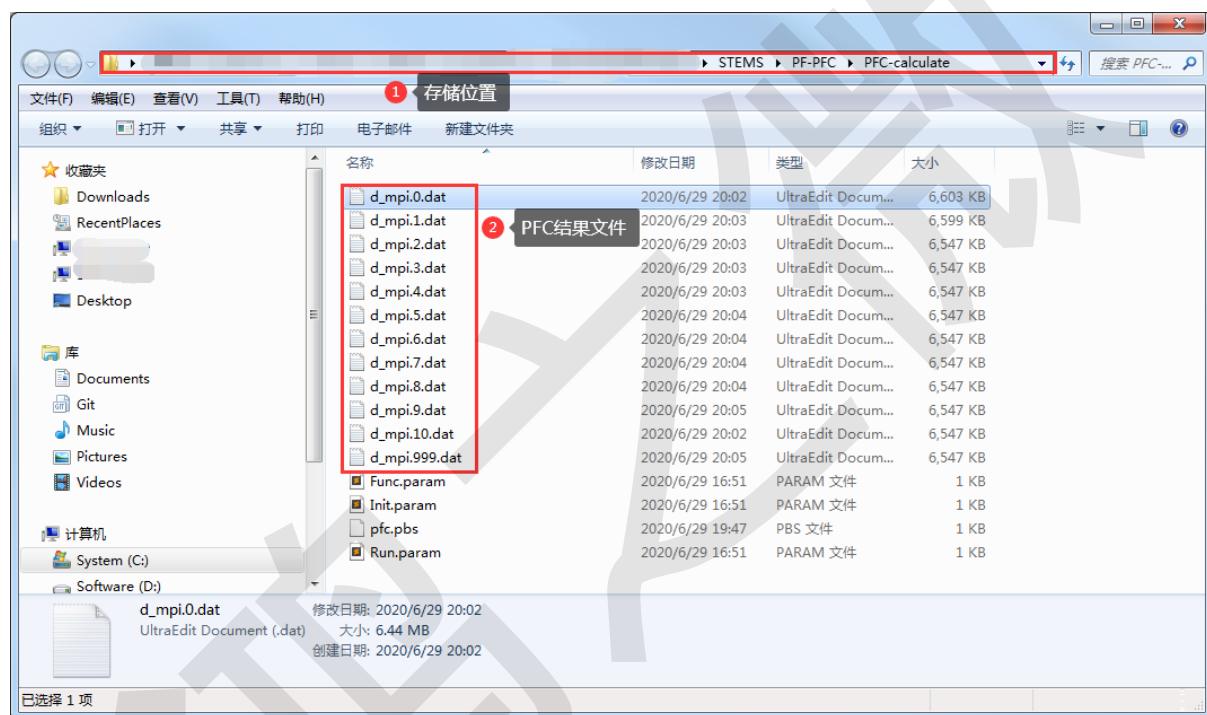


图 10.73: PFC 计算结果文件在本地电脑中的存储位置

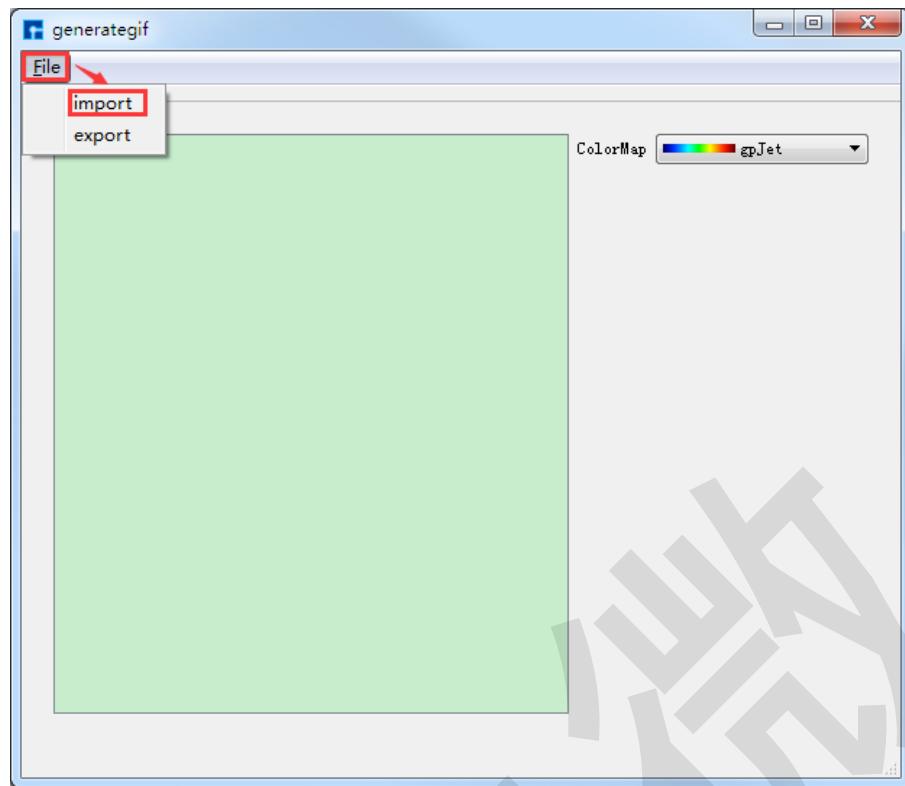


图 10.74: generategif 界面

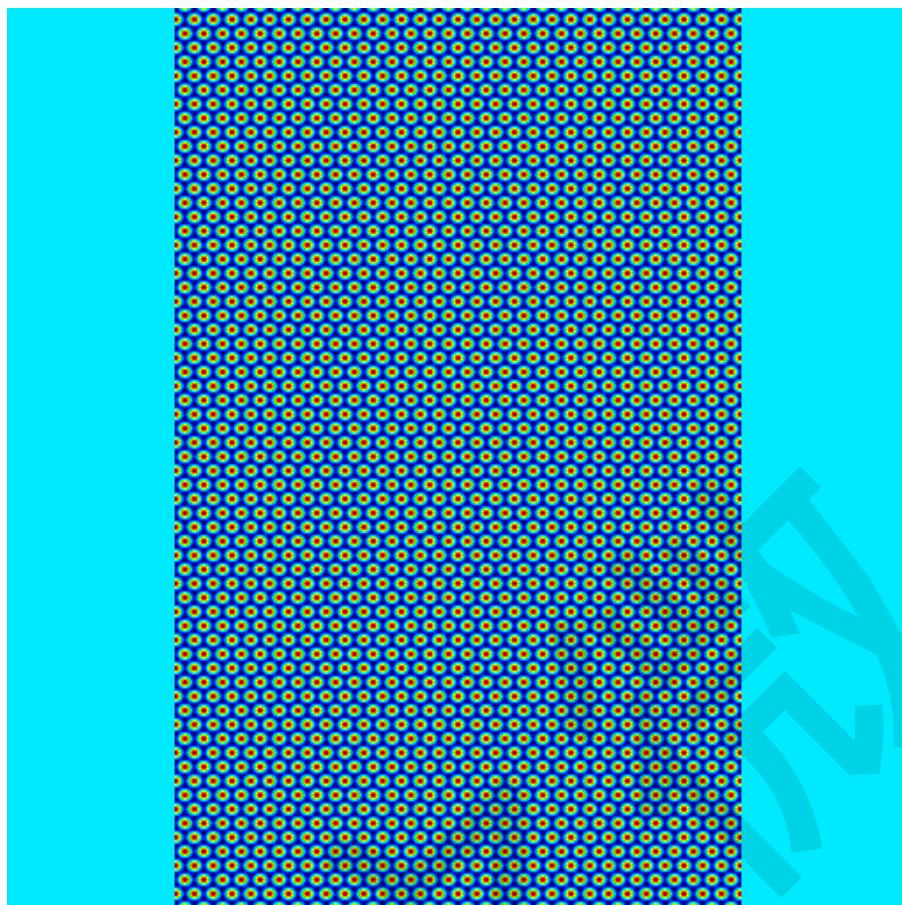
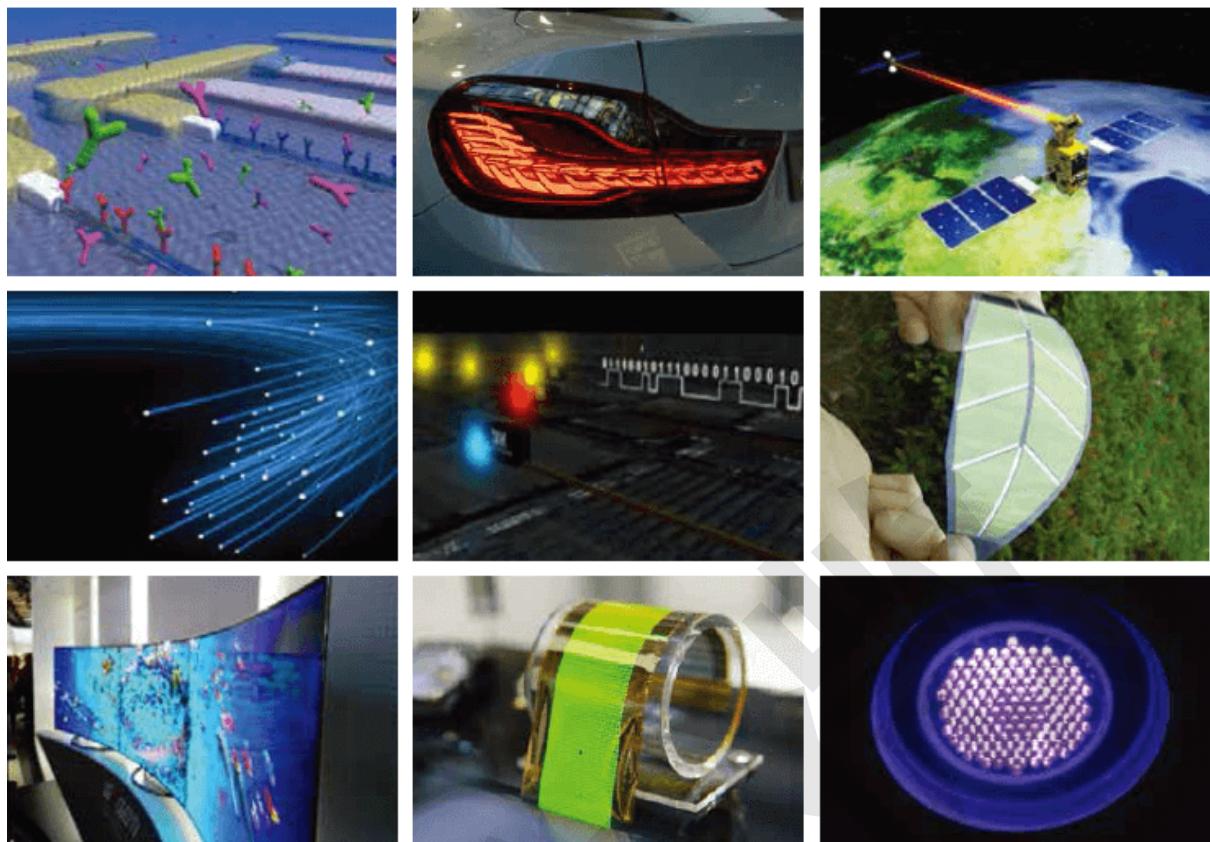


图 10.75: PFC 计算结果的可视化分析（即 PFC.gif 文件）

10.7 MOMAP 实例

MOMAP (**Molecular Materials Property Prediction Package**) 是一款研究和设计有机分子材料发光和传输性能以及定量预测发光效率和迁移率的软件。目前广泛应用于有机显示材料、有机照明材料、有机半导体材料、有机太阳能电池材料、有机光检测、生物传感材料、有机光通讯材料、有机光催化等领域。



与无机发光材料相比，有机发光材料具有很多优点：光程范围大、易得到蓝光、亮度大、效率高、驱动电压低、耗能少、具有特有的柔性、制作工艺简单、来源丰富、易加工、可大面积制作等优势，在有机光电器件方面得到了广泛应用和快速发展。由于典型的有机发光体系的激发态衰减时间尺度从纳秒级别直到微秒和毫秒，因此基于微扰理论的费米黄金规则成为处理复杂体系激发态衰减过程的最有效的理论方法之一。

以 azulene 的吸收光谱、荧光光谱以及辐射速率的计算为例详细描述 MOMAP 软件在 Device Studio 中的应用。

10.7.1 MOMAP 软件功能结构

MOMAP 的软件功能结构如图 10.76 所示，能够根据其他量化软件计算得到分子基态、激发态信息，利用电子——振动耦合程序计算频率、模式位移、Duschinsky 转动矩阵，为接下来的计算做准备。MOMAP 所需的分子基态、激发态信息主要包括：分子在基态以及激发态的平衡构型、能量、振动模式以及两个电子态之间的跃迁偶极矩、非绝热耦合向量、自旋轨道耦合常数、转移积分等，这些信息可通过目前成熟的量化软件，如 Gaussian、Turbomole、NWChem、Dalton、BDF 等计算得到。

基于电子——振动耦合程序的结构，用户能够利用 MOMAP 内各种程序计算分子吸收光谱、荧光光谱、磷光光谱、辐射速率、内转换速率、系间窜越速率以及电荷转移速率，

并以此最终定量的得到分子的荧光、磷光的量子产率以及迁移率。

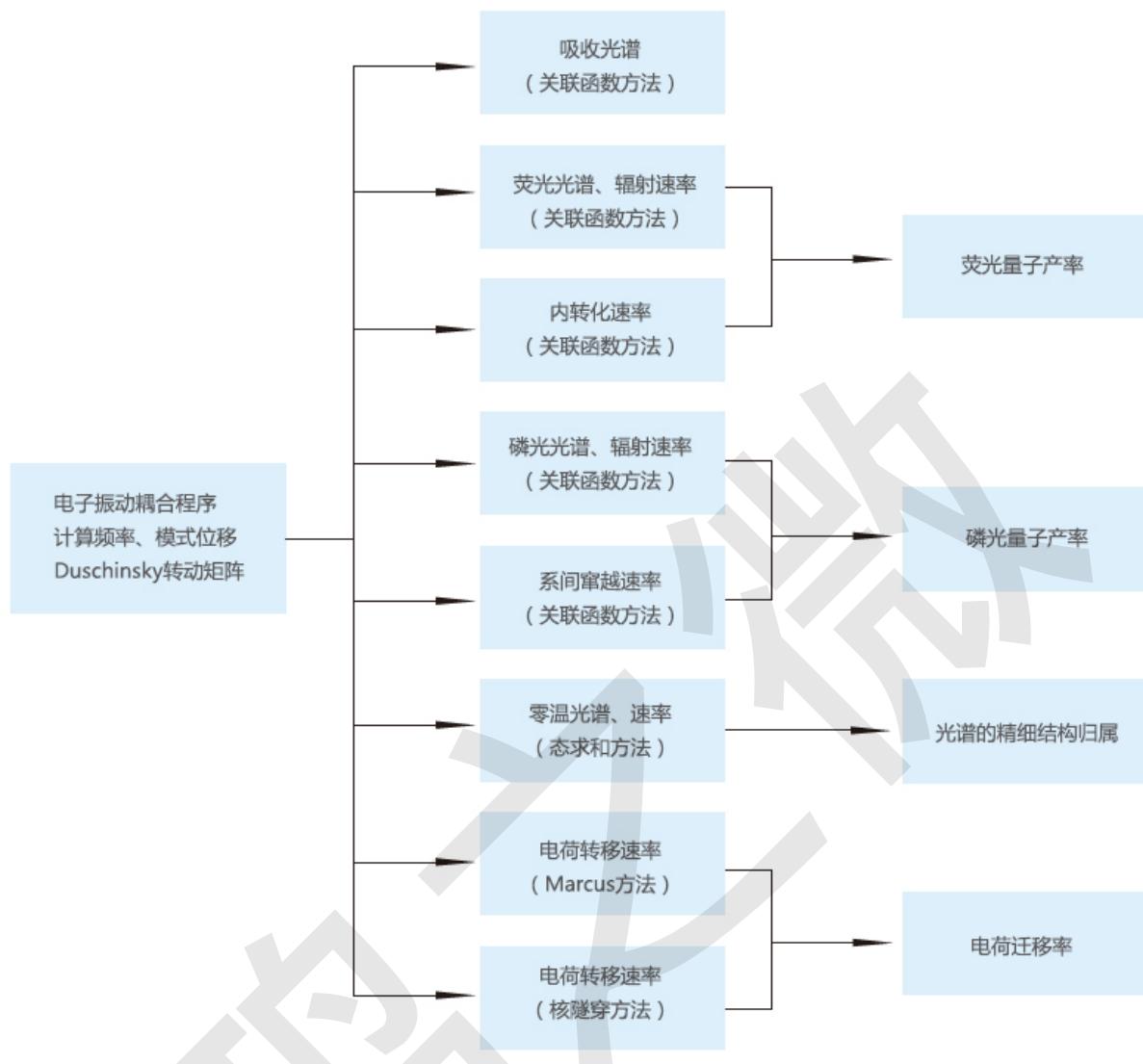


图 10.76: MOMAP 软件功能结构图

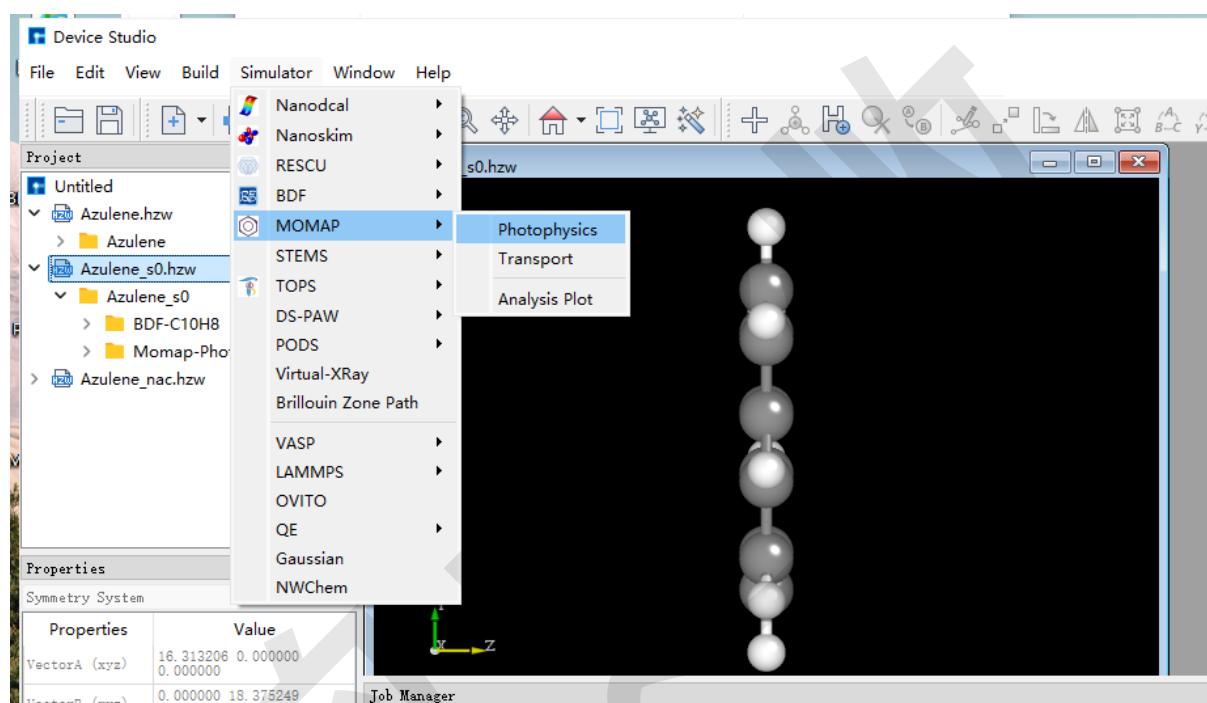
10.7.2 BDF 计算部分

BDF 完成基态和激发态的优化任务后 (opt+freq 和 TDDFT+opt+freq)，收集基态和激发态的输出文件 azulene-s0.out、azulene-s1.out 和 azulene-s1.out.tmp。以及 hess 文件 azulene-s0.hess 和 azulene-s1.hess。再进行非绝热耦合计算任务，收集输出文件 azulene-nacme.out。

10.7.3 MOMAP 计算部分

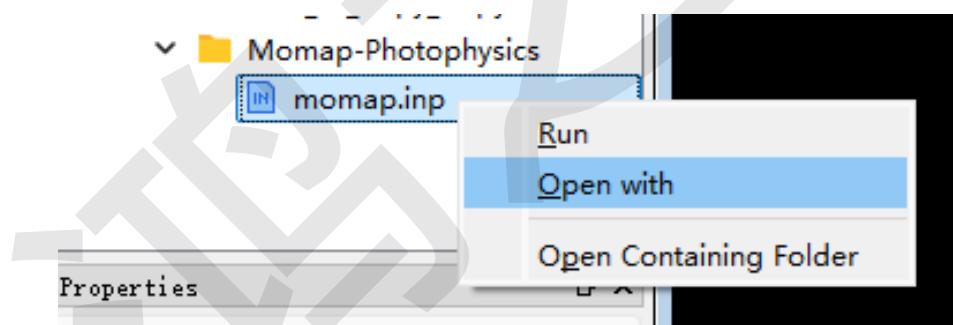
10.7.3.1 EVC 计算

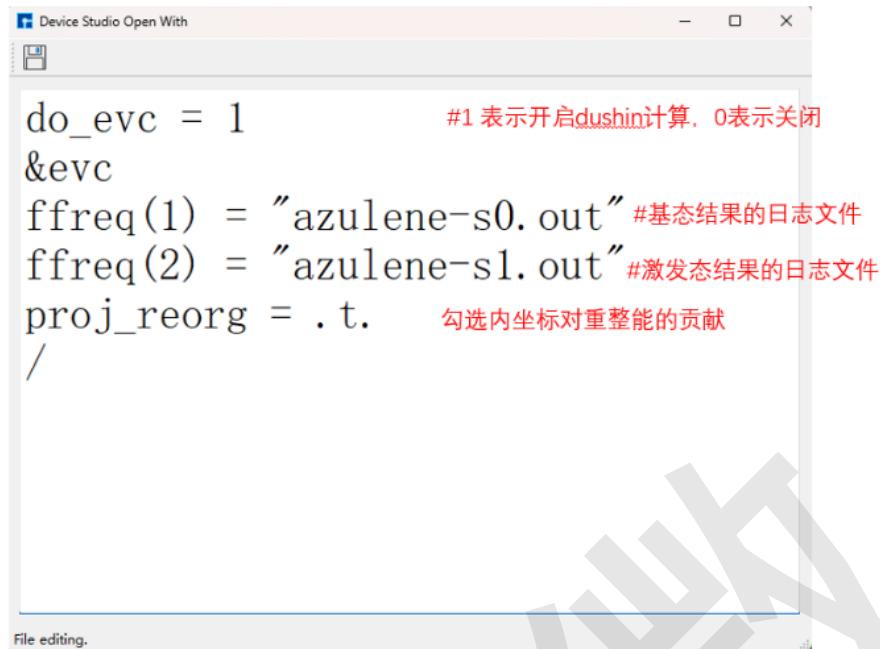
电子振动耦合（electron-vibration coupling, EVC）计算，该计算基于量化计算输出的分子振动频率、力常数矩阵，同时在内坐标以及直角坐标系下，计算分子跃迁发生初末态间的模式位移、黄昆因子、重整合能以及 Duschinsky 转动矩阵。双击基态结构，依次点击 Simulator、MOMAP 和 Photophysics 进入 MOMAP 参数设置：





选定 azulene-s0.out 和 azulene-s1.out 路径后, 点击 Generate files 生成 MOMAP 输入文件 momap.inp, 选择 momap.inp 并点击右键, 点击 open with 可查看 momap.inp:

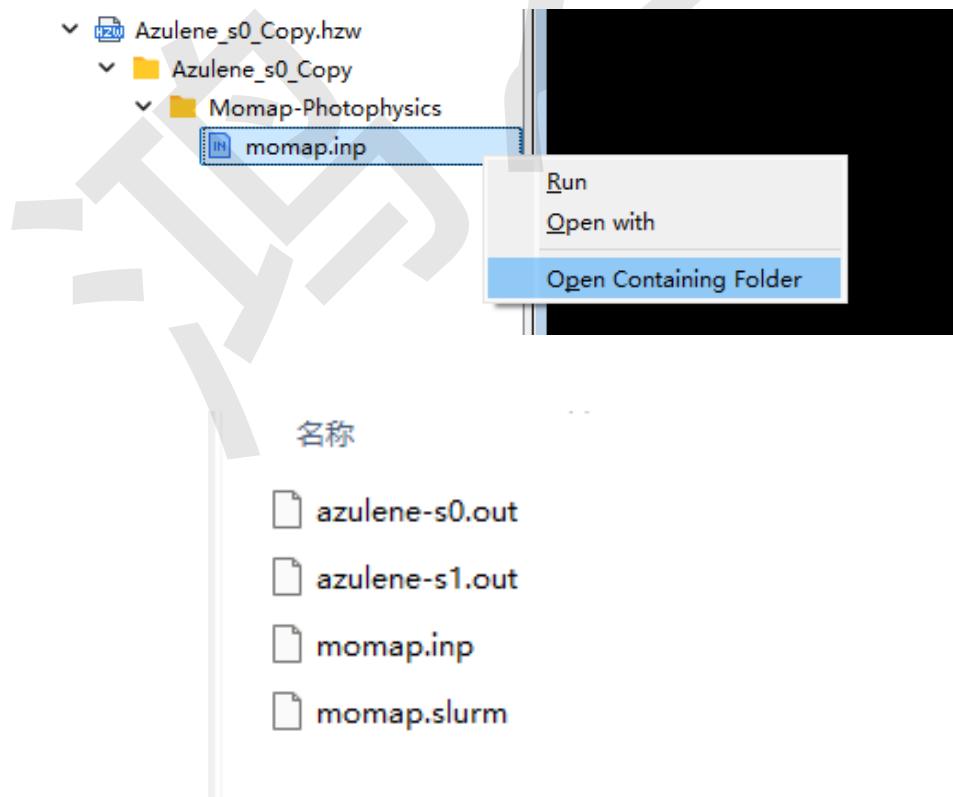




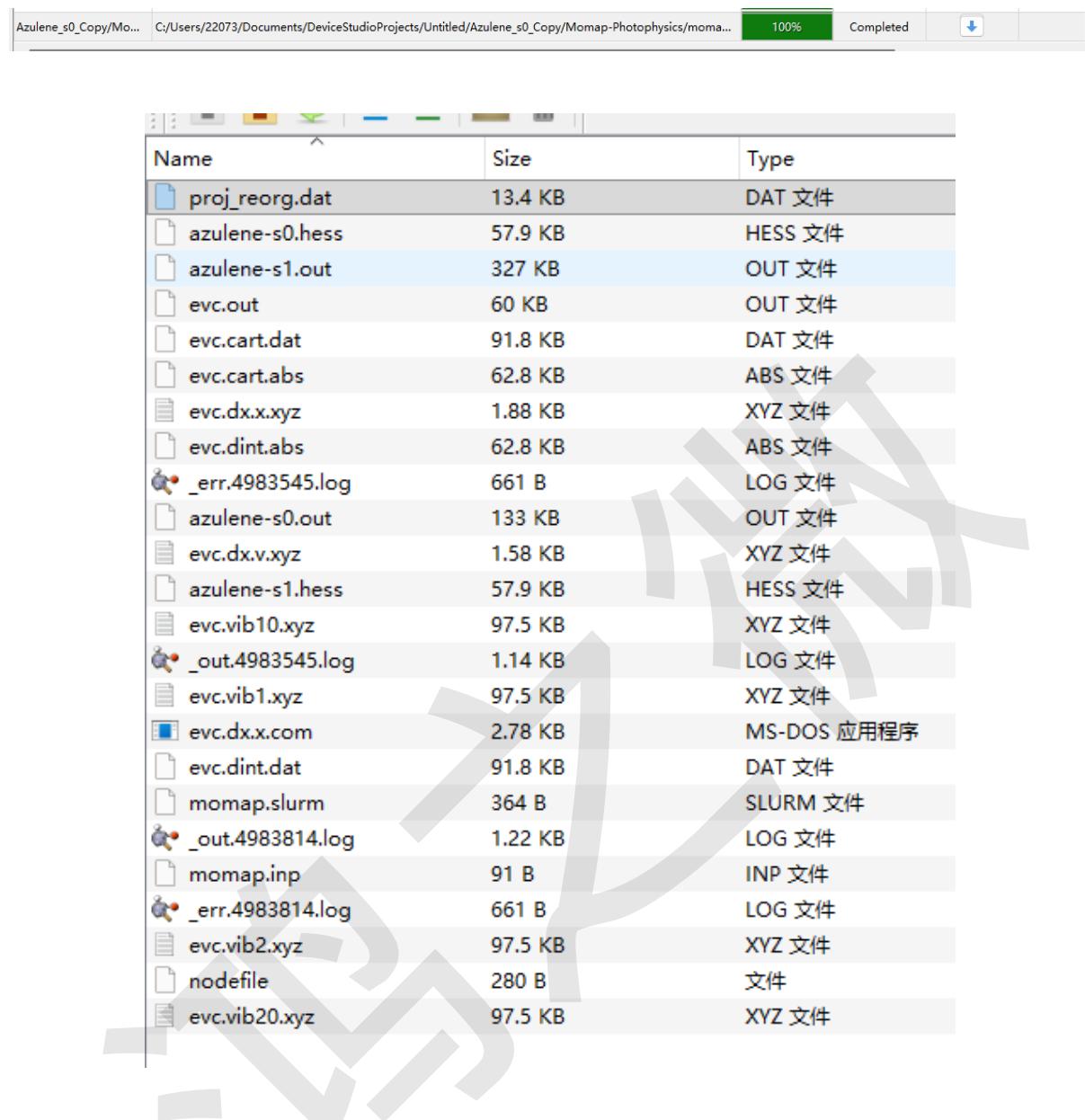
```
do_evc = 1          #1 表示开启dushin计算, 0表示关闭  
&evc  
ffreq(1) = "azulene-s0.out" #基态结果的日志文件  
ffreq(2) = "azulene-s1.out" #激发态结果的日志文件  
proj_reorg = .t.      勾选内坐标对重整能的贡献  
/
```

File editing.

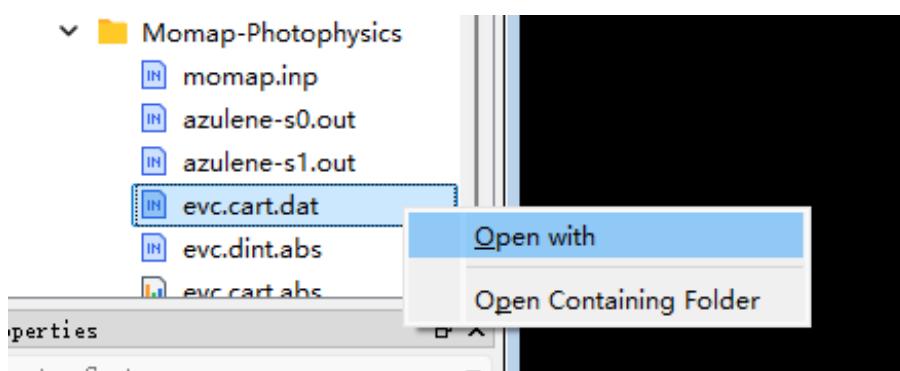
生成输入文件后 azulene-s0.out 和 azulene-s1.out 会直接复制到 EVC 计算文件夹中。按照下图选择 momap.inp 并右键点击，左击 open Containing Folder 打开 EVC 计算文件夹，会发现已经存在基态和激发态的输出文件，momap.slurm 为 momap 的提交脚本。将 azulene-s0.hess 和 azulene-s1.hess 文件复制至此文件夹后，即可点击 run 提交计算任务。



计算完成后任务栏 Status 下显示 Completed, 点击右侧的下载按钮——向下箭头:



双击文件即可下载。其中 evc.cart.dat 为利用直角坐标系计算得到的模式位移、黄昆因子、重整能以及 Duschinsky 转动矩阵的结果；而 evc.dint.dat 为内坐标计算模式位移、黄昆因子、重整能，直角坐标计算 Duschinsky 转动矩阵的结果。



Open with 打开 evc.cart.dat 文件，查看总重组能的数值：

Total reorganization energy	(cm ⁻¹):	2587.772606	5272.808935
-----------------------------	----------------------	-------------	-------------

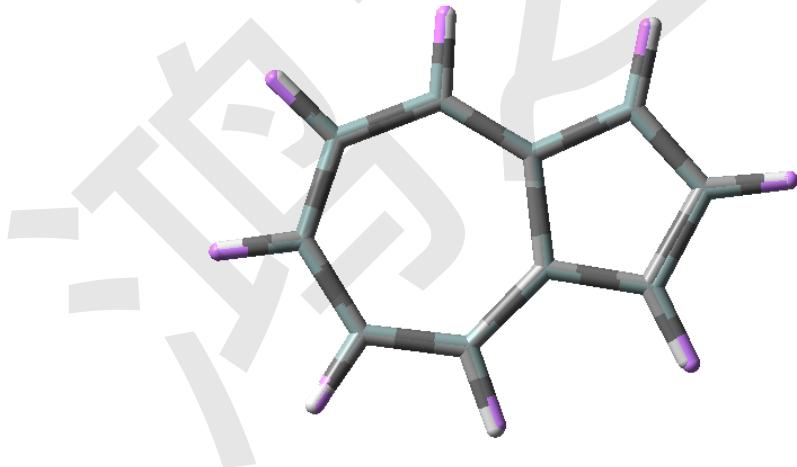
并与 evc.dint.dat 文件中的数值进行比较：

Total reorganization energy	(cm ⁻¹):	2601.048659	5261.267014
-----------------------------	----------------------	-------------	-------------

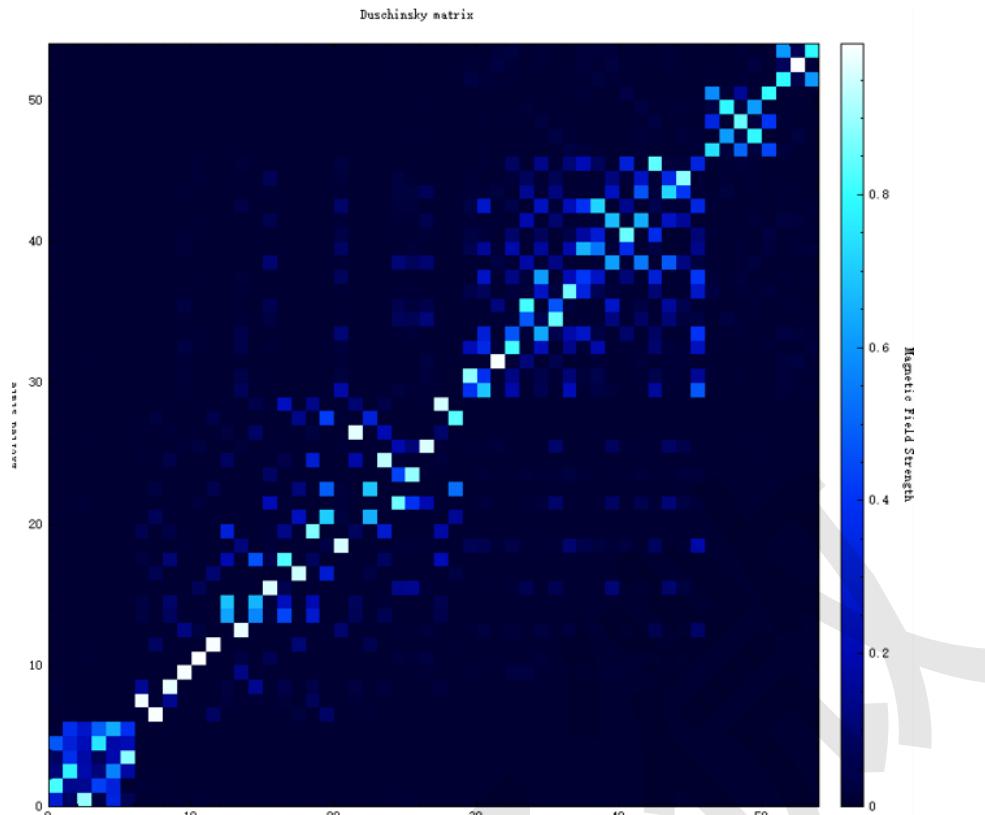
比较 evc.cart.dat 以及 evc.dint.dat 文件的重整合能，若重整合能相差不大 ($< 1000 \text{ cm}^{-1}$)，使用 evc.cart.dat 文件进行后续计算，若重整合能相差较大 (一般情况 evc.cart.dat 大于 evc.dint.dat)，使用 evc.dint.dat 文件进行后续计算。这里可使用 evc.cart.dat 进行下一步 S1 \rightarrow S0 的荧光辐射速率计算。

此外，还可以根据 EVC 计算的结果文件做更多的后处理。

evc.dx.x.com 和 evc.dx.x.xyz 为两个电子态分子叠加图，其中 evc.dx.x.com 可用 GaussView 打开，在 View-Display Format-Molecule 中选择 Tube 类型，显示如下：



evc.cart.abs 为 Duschinsky 矩阵文件，可用来画 Duschinsky 矩阵二维图。可以在 Device Studio 中，选择 Simulator-momap-analysis，打开 evc.cart.abs 文件，显示如下：



10.7.3.2 荧光光谱及荧光辐射速率的计算

接下来进行 $S_1 \rightarrow S_0$ 的荧光光谱及荧光辐射速率的计算。首先需要计算绝热激发能和吸收跃迁偶极矩（Electronic Transition Dipole Absorption, EDMA）以及发射跃迁偶极矩（Electronic ransition Dipole Emission, EDME）。

选择 azulene-s0.out，右击 open with containing folder，打开 azulene-s0.out。从文件开始向下查找字段“Electronic total energy”，其后即为基态能量， $E_{s0} = -385.878076$ Hartree。

```
*****
*** Thermal Contributions to Energies ***
*****
```

Molecular mass : 128.025302 AMU
 Electronic total energy : -385.878076 Hartree
 Scaling factor of Freq. : 1.000000
 Tolerance of scaling : 0.000000 cm^-1
 Rotational symmetry number: 1
 The C1 point group is used to calculate rotational entropy.

选择 azulene-s1.out.tmp，右击 open with containing folder，打开 azulene-s0.

out.tmp。搜索字段“Statistics for [dvdson_rpa_block]:”，读取 No.1 态的能量， $E_{s1} = -385.803048$ a.u.，即为 S1 态的单点能。

```

Statistics for [dvdson_rpa_block]:
No. of blocks = 1
Size of blocks = 500000
No. of eigens = 6
No. of HxProd = 71 Averaged = 11.833
Eigenvalues (a.u.) =
  0.0593087100  0.1241078247  0.1718168961
  0.1756509998  0.2122820362  0.2131404344

No. 1 w= 1.6139 eV -385.803048 a.u. f= 0.0026 D<Pab>= 0.0000 Ova= 0.4879
CV(0): A( 33 )-> A( 36 ) c_i: 0.1359 Per: 1.8% IPA: 5.455 eV Oai: 0.7153
CV(0): A( 34 )-> A( 35 ) c_i: -0.9848 Per: 97.0% IPA: 2.581 eV Oai: 0.4813

No. 2 w= 3.3771 eV -385.738249 a.u. f= 0.0013 D<Pab>= 0.0000 Ova= 0.8095
CV(0): A( 33 )-> A( 35 ) c_i: -0.6839 Per: 46.8% IPA: 4.083 eV Oai: 0.8194
CV(0): A( 34 )-> A( 36 ) c_i: -0.7092 Per: 50.3% IPA: 3.953 eV Oai: 0.8077

No. 3 w= 4.6754 eV -385.690540 a.u. f= 0.0089 D<Pab>= 0.0000 Ova= 0.7196
CV(0): A( 32 )-> A( 35 ) c_i: -0.5416 Per: 29.3% IPA: 5.769 eV Oai: 0.7331
CV(0): A( 33 )-> A( 36 ) c_i: 0.8167 Per: 66.7% IPA: 5.455 eV Oai: 0.7153
CV(0): A( 34 )-> A( 38 ) c_i: -0.1417 Per: 2.0% IPA: 7.164 eV Oai: 0.7495

No. 4 w= 4.7797 eV -385.686706 a.u. f= 0.8694 D<Pab>= 0.0000 Ova= 0.7948
CV(0): A( 32 )-> A( 36 ) c_i: 0.1706 Per: 2.9% IPA: 7.141 eV Oai: 0.8644
CV(0): A( 33 )-> A( 35 ) c_i: 0.6795 Per: 46.2% IPA: 4.083 eV Oai: 0.8194
CV(0): A( 33 )-> A( 38 ) c_i: -0.1022 Per: 1.0% IPA: 8.666 eV Oai: 0.8001
CV(0): A( 34 )-> A( 36 ) c_i: -0.6312 Per: 39.8% IPA: 3.953 eV Oai: 0.8077

No. 5 w= 5.7765 eV -385.650075 a.u. f= 0.2403 D<Pab>= 0.0000 Ova= 0.7166
CV(0): A( 31 )-> A( 36 ) c_i: 0.1796 Per: 3.2% IPA: 8.009 eV Oai: 0.7625
CV(0): A( 32 )-> A( 35 ) c_i: -0.7747 Per: 60.0% IPA: 5.769 eV Oai: 0.7331
CV(0): A( 33 )-> A( 36 ) c_i: -0.4523 Per: 20.5% IPA: 5.455 eV Oai: 0.7153
CV(0): A( 34 )-> A( 38 ) c_i: 0.1741 Per: 3.0% IPA: 7.164 eV Oai: 0.7495
CV(0): A( 34 )-> A( 40 ) c_i: -0.2683 Per: 7.2% IPA: 8.034 eV Oai: 0.6275

No. 6 w= 5.7998 eV -385.649217 a.u. f= 0.0000 D<Pab>= 0.0000 Ova= 0.4332
CV(0): A( 29 )-> A( 35 ) c_i: 0.9970 Per: 99.4% IPA: 7.062 eV Oai: 0.4331

```

得到绝热激发能 E_{ad}

$$E_{ad} = E_{s1} - E_{s0} = 0.07503 \text{ a.u.}$$

从 azulene-s1.out.tmp 文件开始向下查找第一个 tddft 模块的内容，字段“Ground to excited state Transition electric dipole moments (Au)”下的 State 1 的跃迁电偶极矩，可以得到 momap 需要的参数 EDMA。

*** Ground to excited state Transition electric dipole moments (Au) ***					
State	X	Y	Z	Osc.	
1	-0.3595	-0.0587	0.0000	0.0079	0.0079
2	-0.0269	0.1642	0.0000	0.0025	0.0025
3	-0.6668	-0.1088	-0.0000	0.0526	0.0526
4	-0.4612	2.8257	-0.0000	1.0363	1.0363
5	-0.0001	-0.0001	0.0201	0.0001	0.0001
6	-1.2511	-0.2040	0.0000	0.2383	0.2383

$$EDMA = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \sqrt{(-0.3595)^2 + (-0.0587)^2 + (0.0000)^2} \text{ a.u.} = 0.3643 \text{ a.u.}$$

$$EDMA = 0.3643 \text{ a.u.} \times 2.5417 \text{ Debye/a.u.} = 0.9259 \text{ Debye}$$

在文件末尾向上查找第一个 tddft 计算模块 module tddft。根据 tddft 模块的“Ground to excited state Transition electric dipole moments (Au)”中的 State 1 的跃迁电偶极矩，得到 momap 需要的参数 EDME。

*** Ground to excited state Transition electric dipole moments (Au) ***					
State	X	Y	Z	Osc.	
1	0.2523	0.0412	0.0000	0.0026	0.0026
2	-0.0204	0.1251	-0.0001	0.0013	0.0013
3	-0.2752	-0.0446	0.0000	0.0089	0.0089
4	-0.4389	2.6892	0.0001	0.8694	0.8694
5	1.2862	0.2098	-0.0000	0.2403	0.2403
6	0.0048	0.0008	0.0005	0.0000	0.0000

$$EDME = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \sqrt{(0.2523)^2 + (0.0412)^2 + (0.0000)^2} \text{ a.u.} = 0.2556 \text{ a.u.}$$

$$EDME = 0.2556 \text{ a.u.} \times 2.5417 \text{ Debye/a.u.} = 0.6497 \text{ Debye}$$

上述绝 E_{ad} 、EDMA 和 EDME 计算完成即可开始荧光光谱及荧光辐射速率的计算。此部分计算需要 EVC 计算所得的 evc.*.dat 文件作为输入。和 EVC 一样，双击基态结构，依次点击 Simulator、MOMAP 和 Photophysics 进入 MOMAP 参数设置，选定 azulene-s0.out 和 azulene-s1.out 路径后，点击 Photophysical Settings 进入光谱计算参数设定界面，选择荧光辐射速率项目，填入绝热激发能和吸收、发生跃迁偶极矩，并设置好其他参数：



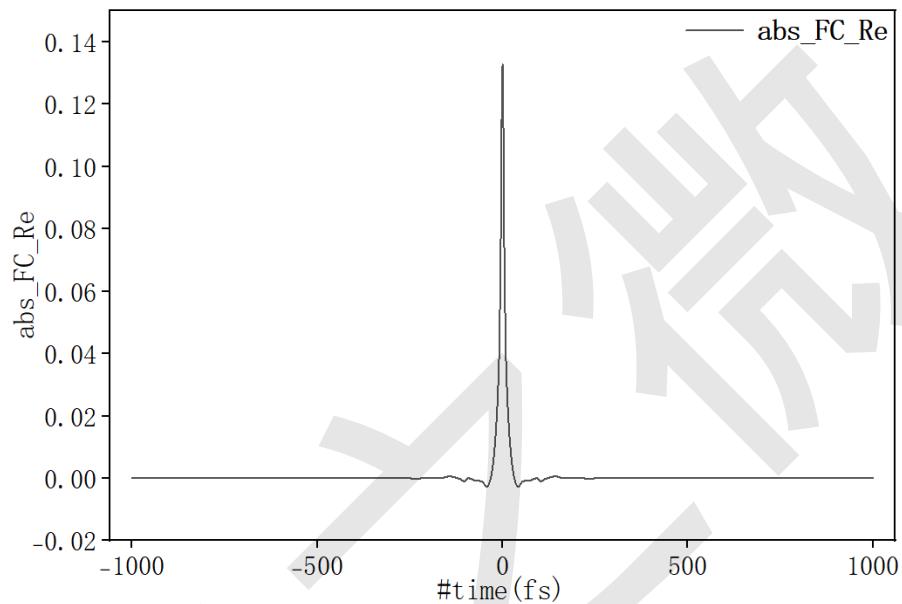
选择 momap.inp 并点击右键，点击 open with 可查看到 momap.inp

```
Device Studio Open With
do_evc = 1
&evc
ffreq(1) = "azulene-s0.out"
ffreq(2) = "azulene-s1.out"
proj_reorg = .t.
/
do_spec_tvcf_ft = 1
do_spec_tvcf_spec = 1
&spec_tvcf
DUSHIN = .t.
EDMA = 0.9259 debye
EDME = 0.2556 debye
Ead = 0.07503 au
Temp = 300 K
tmax = 1000 fs
dt = 1 fs
Emax = 0.3 au
FreqScale = 0.4
DSFile = "evc.cart.dat"
logFile = "spec.tvcf.log"
FtFile = "spec.tvcf.ft.dat"
FoFile = "spec.tvcf.fo.dat"
FoSFile = "spec.tvcf.spec.dat"
/
```

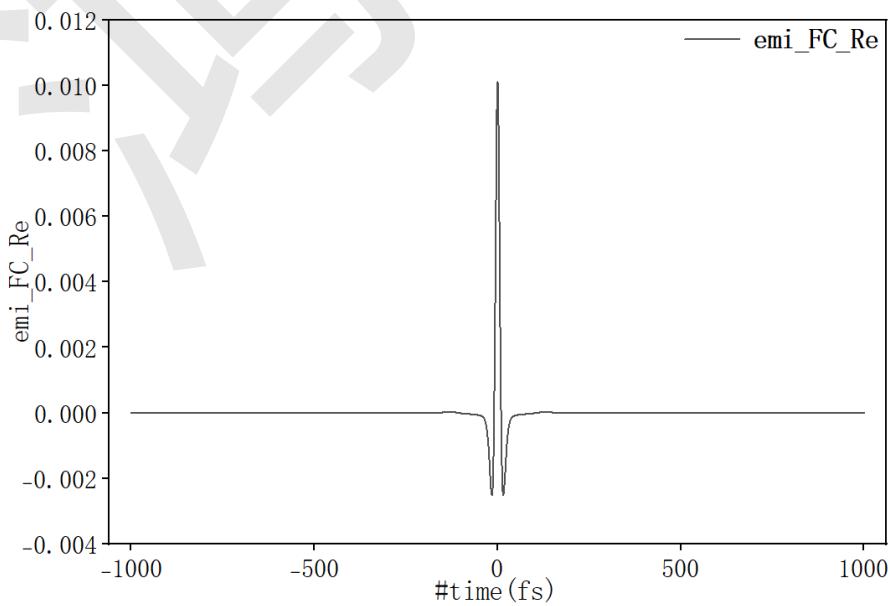
选择 momap.inp 并点击右键，点击 run 即可提交计算任务，进行荧光光谱及荧光辐射速率的计算。计算完成后主要有以下文件输出：

```
spec.tvcf.fo.dat      #谱函数输出文件  
spec.tvcf.ft.dat     #关联函数输出文件  
spec.tvcf.log         #log 文件  
spec.tvcf.spec.dat   #光谱文件
```

计算完成后先确认关联函数是否收敛，将 spec.tvcf.ft.dat 拖入 origin 中，选择第一列和第二列作图：

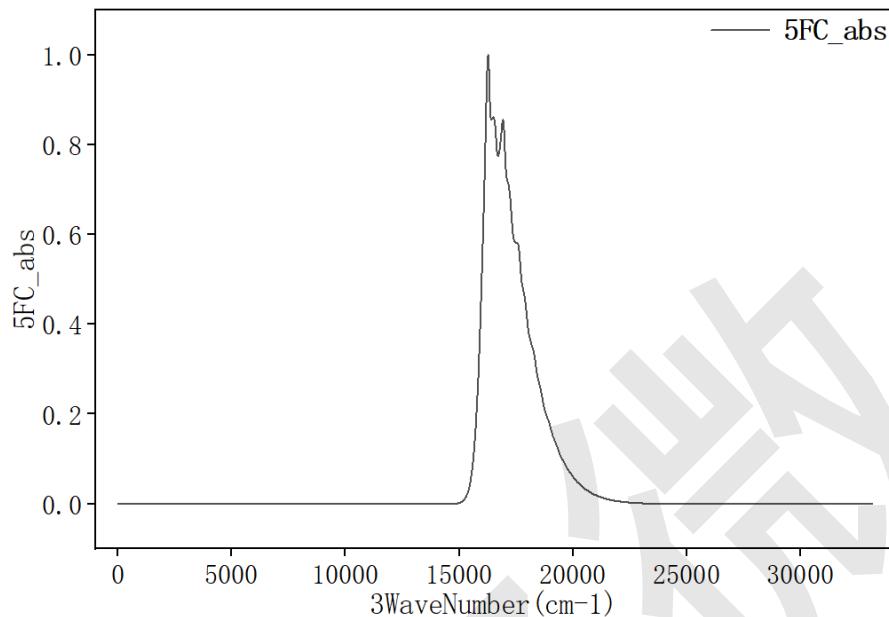


随时间趋于 0 表示吸收光谱计算收敛。选择第一列和第四列作图：

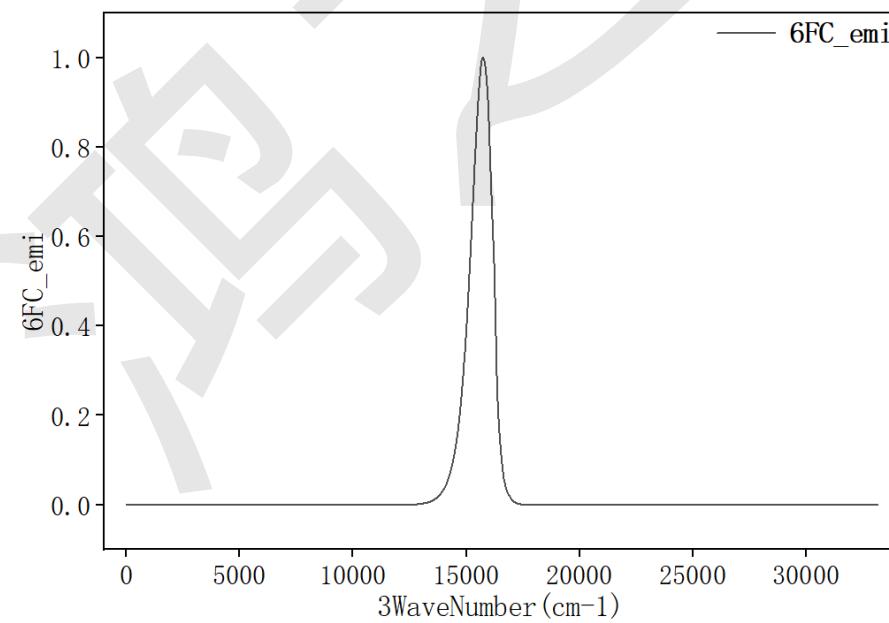


随时间趋于 0 表示发射光谱计算收敛。

确认关联函数收敛后，根据光谱文件 spec.tvcf.spec.dat，将 spec.tvcf.spec.dat 拖入 origin 中，选择第三列和第五列作图，得到吸收光谱：



选择第三列和第六列作图，得到发射光谱：



辐射速率 kr 可在 spec.tvcf.log 文件末端读取。如下图所示，radiative rate 第一个数值和第二个数值都表示辐射速率，单位分别是 a.u. 和 s⁻¹，第三个数值表示寿命。计算得到该分子的荧光辐射速率 kr 为 $7.68731507 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$ 。

```

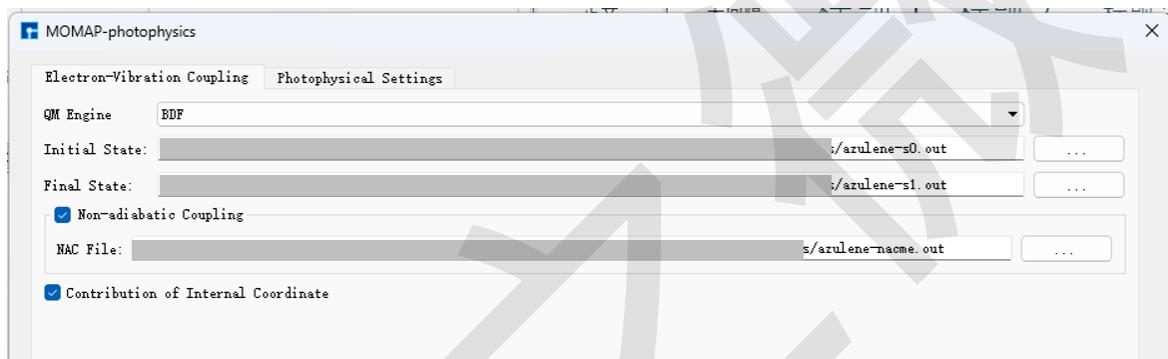
Spectra overlap integral = I ( Energy^-1 )
I^-1 = 3.51530770E-02 Hartree = 7.71520860E+03 cm^-1 = 9.56564306E-01 eV

radiative rate (0): 1.85947259E-12 7.68731507E+04 /s, 13008.44 ns
Oscillator strength = 0.0000000000

```

10.7.3.3 内转换速率

内转换速率的 EVC 振动分析计算需要非绝热耦合计算结果文件。第一步为 EVC 振动分析计算。将非绝热耦合计算结果文件改名为 azulene-nacme.out，将 azulene-s0.out 和 azulene-s1.out，以及 azulene-s0.hess 和 azulene-s1.hess 放在内转换速率计算文件夹下，以下操作选择基态、激发态和 NAC 结果的路径后，生成 momap 输入文件。



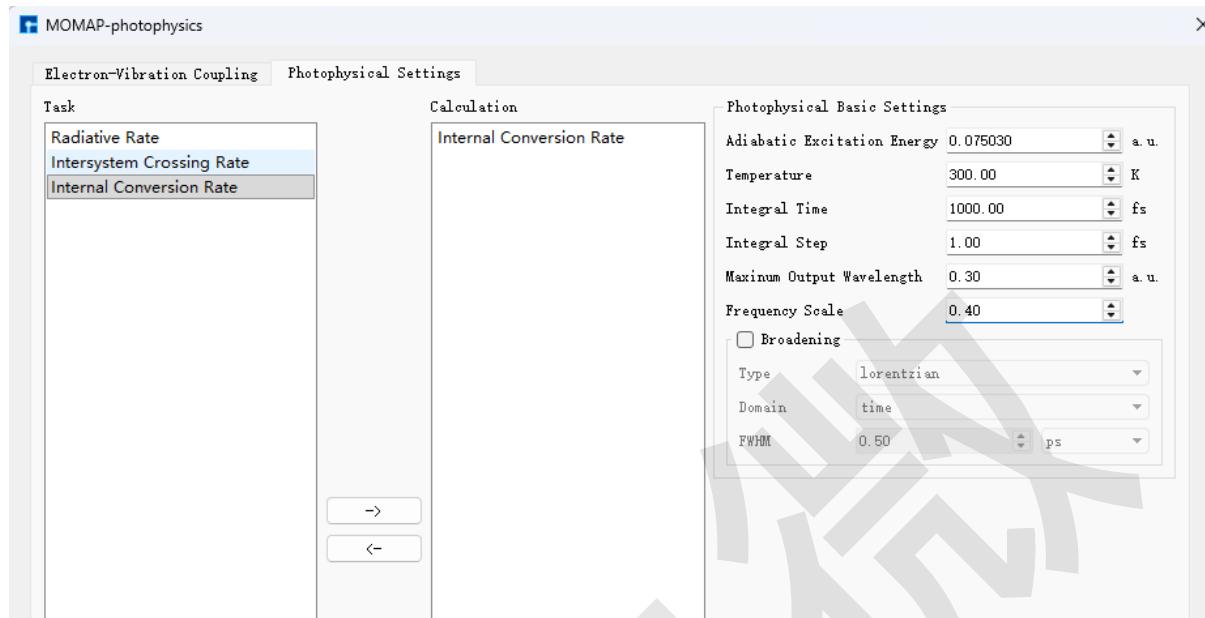
选择 momap.inp 并点击右键，点击 open with 可查看到 momap.inp：

```

do_evc = 1
&evc
ffreq(1) = "azulene-s0.out"
ffreq(2) = "azulene-s1.out"
fnacme = "azulene-nacme.out"
proj_reorg = .t.
/

```

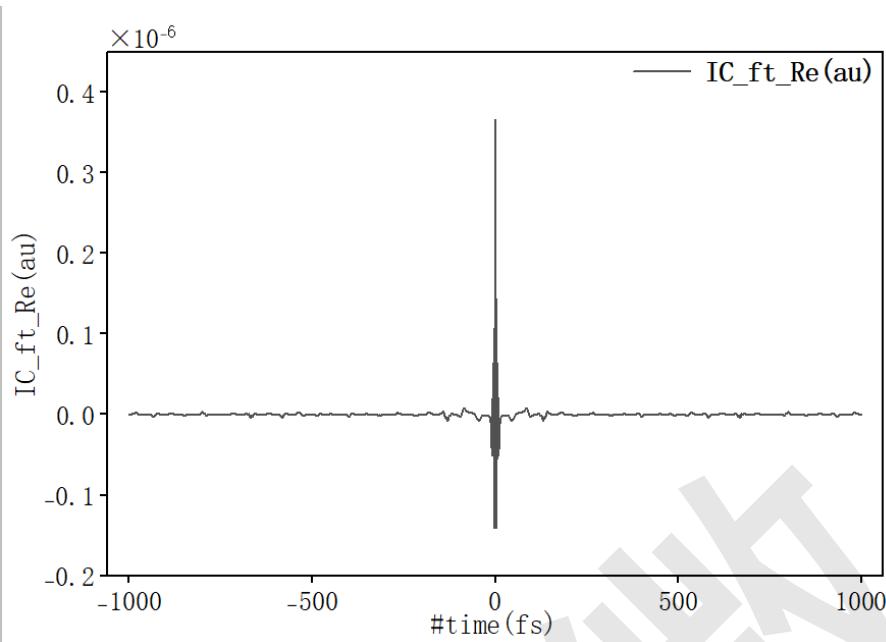
与前述荧光辐射速率的 evc 计算相比,多出一个 evc.cart.nac 文件,该文件将和 evc.cart.dat 文件一起用于接下来的内转换速率的计算。选择 Internal Conversion Rate 项目内转换速率计算,参数设置如下:



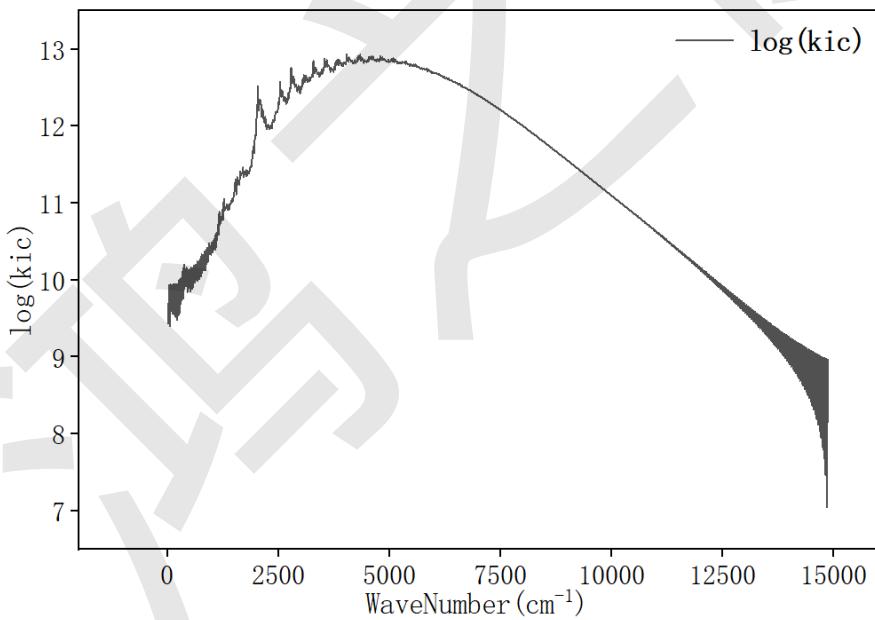
选择 momap.inp 并点击右键, 点击 open with 可查看到 momap.inp:

A screenshot of a Windows context menu titled "Device Studio Open With". The menu lists several options, with "Device Studio" being the selected item. Below the menu, a code editor window displays the contents of the momap.inp file. The code includes parameters for internal conversion rate calculations, such as Ead, Temp, tmax, dt, Emax, FreqScale, DSFile, CoulFile, logFile, FtFile, and FoFile.

其中 ic.tvcf.ft.dat 为关联函数文件, 计算结束后首先确认关联函数是否收敛, 将 ic.tvcf.ft.dat 拖入 origin 中, 选择第一列和第二列作图:



随时间趋于 0 表示关联函数收敛。其中 `ic.tvcf.fo.dat` 为谱函数文件，为检查是否满足能隙定律，将 `ic.tvcf.fo.dat` 拖入 origin 中，选择第三列和第七列作图



此外，`ic.tvcf.fo.dat` 文件中第一列和第六列表示不同 Ead 下的非辐射速率。

#1Energy(Hartree)	2Energy(eV)	3WaveNumber(cm ⁻¹)	4WaveLength(nm)	5radi-spectrum	6kic(s ^{-1})	7log(kic)	8time(ns)
7.50036029E-02	2.04095275E+00	1.64613880E+04	6.07482186E+02	1.13968200E-08	4.71160189E+08	3.67316859E+00	2.12242041

这里 S1→S0 的非辐射速率为 2.70536301E+8。

10.8 VASP 实例

VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) 是维也纳大学 Hafner 小组开发的进行电子结构计算和量子力学-分子动力学模拟软件包。它是目前材料模拟和计算物质科学研究中十分流行的商用软件之一。**VASP** 使用平面波基组，电子与离子间的相互作用使用模守恒赝势 (NCP)、超软赝势 (USP) 或投影扩充波 (PAW) 方法描述。**VASP** 软件作为目前国内国际上权威的第一性原理计算软件，可以研究多种体系，包括金属及其氧化物、半导体、晶体、掺杂体系、纳米材料、分子、团簇、表面体系和界面体系等。

VASP 不仅能够计算得到各种体系的平衡结构和能量，而且还能够对材料的电子性质进行精确的预测，深度剖析材料的各种理化性质。**VASP** 软件功能强大，性能稳定，具有非常高效的计算效率，可以使用较小的内存实现大规模的高效率并行计算，是目前做固体材料第一性原理计算效率很高的商用软件之一。

VASP 软件官网: 详见 <https://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/vasp.html>

鸿之微科技（上海）股份有限公司在 **Device Studio 2020B** 中开发了适用于第一性原理科学计算软件 **VASP** 的计算模块。使用 Device Studio，用户可在其图形界面中方便快捷的搭建或导入计算所需的结构，并可在结构 3D 显示区域查看其结构的 3D 视图。搭建好结构后用户可在 **VASP** 计算模块，根据计算需要，在简洁友好的界面中设置参数生成计算所需的输入文件，之后连接装有 **VASP** 的远程服务器进行相关计算，在计算过程中可实时监测任务的计算状态，计算完成后可对 **VASP** 的计算结果进行可视化分析。

目前用户可通过 Device Studio 生成 **VASP** 以下计算输入文件的生成：自洽、能带、态密度、AIMD、NEB、结构弛豫；支持 **VASP** 的能带、投影能带、态密度、投影态密度、电荷密度 CHGCAR、势函数 LOCPOF 等计算结果的可视化分析。

以 **GaSe** 晶体结构的结构弛豫计算为例来详细描述 **VASP** 在 Device Studio 中的应用。

备注

Device Studio 仅提供 **VASP** 软件使用接口，**VASP** 软件自身相关版权请用户自行负责。

10.8.1 VASP 计算流程

VASP 在 Device Studio 中的计算流程如 图 10.77 所示。

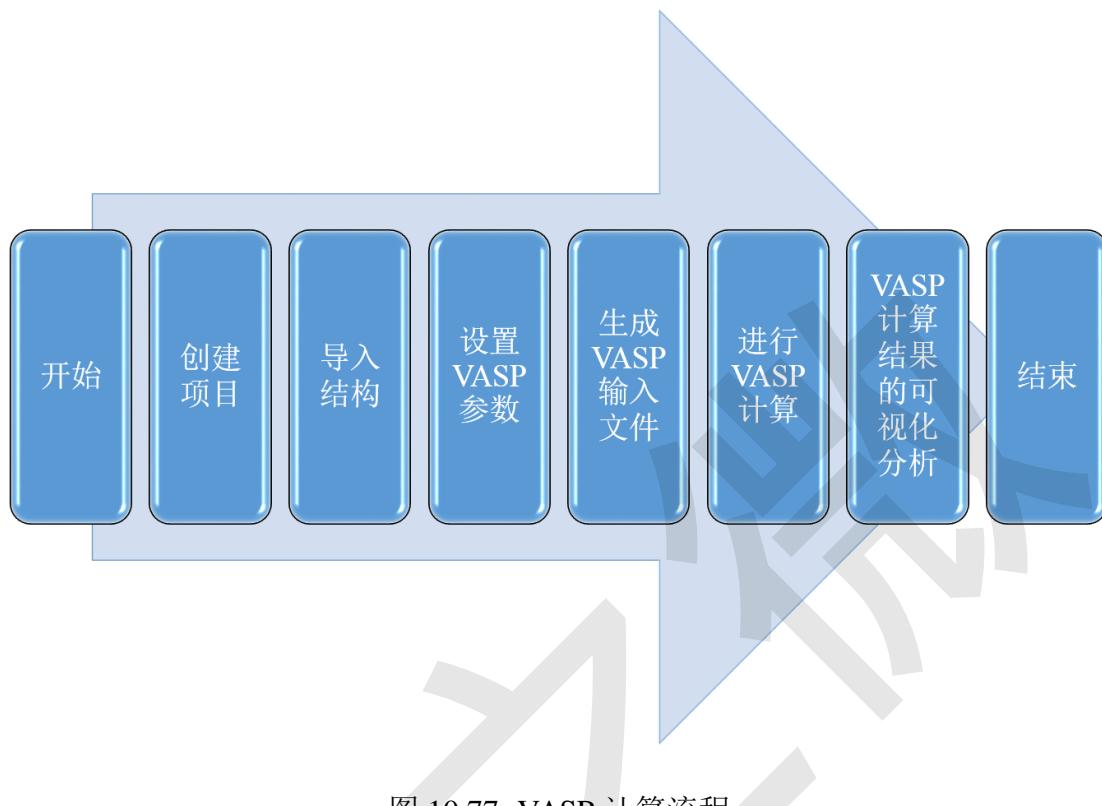


图 10.77: VASP 计算流程

10.8.2 VASP 创建项目

双击 Device Studio 图标快捷方式，登录并启动 Device Studio，在创建或打开项目界面中(启动软件后选择创建或打开项目的图形界面)，根据界面提示选择创建一个新的项目(*Create a new Project*)或打开一个已经存在的项目(*Open an existing Project*)的按钮，选中之后点击界面中的 *OK* 按钮即可。若选择创建一个新的项目，用户可根据需要给该项目命名，如本项目命名为 VASP，或采用软件默认项目名。

10.8.3 VASP 导入结构

在 Device Studio 的图形界面中点击 *File → Import → Import Local*，则弹出导入 VASP 结构文件的界面如 图 10.78 所示，根据界面提示找到 GaSe.hzw 结构文件的位置，选中 GaSe.hzw 结构文件，点击 打开按钮则导入 GaSe.hzw 结构后的 Device Studio 界面如图 10.79 所示。在 Device Studio 中导入结构的其他方法这里不做详细说明，用户可参照导入结构节内容。

Device Studio 使用教程

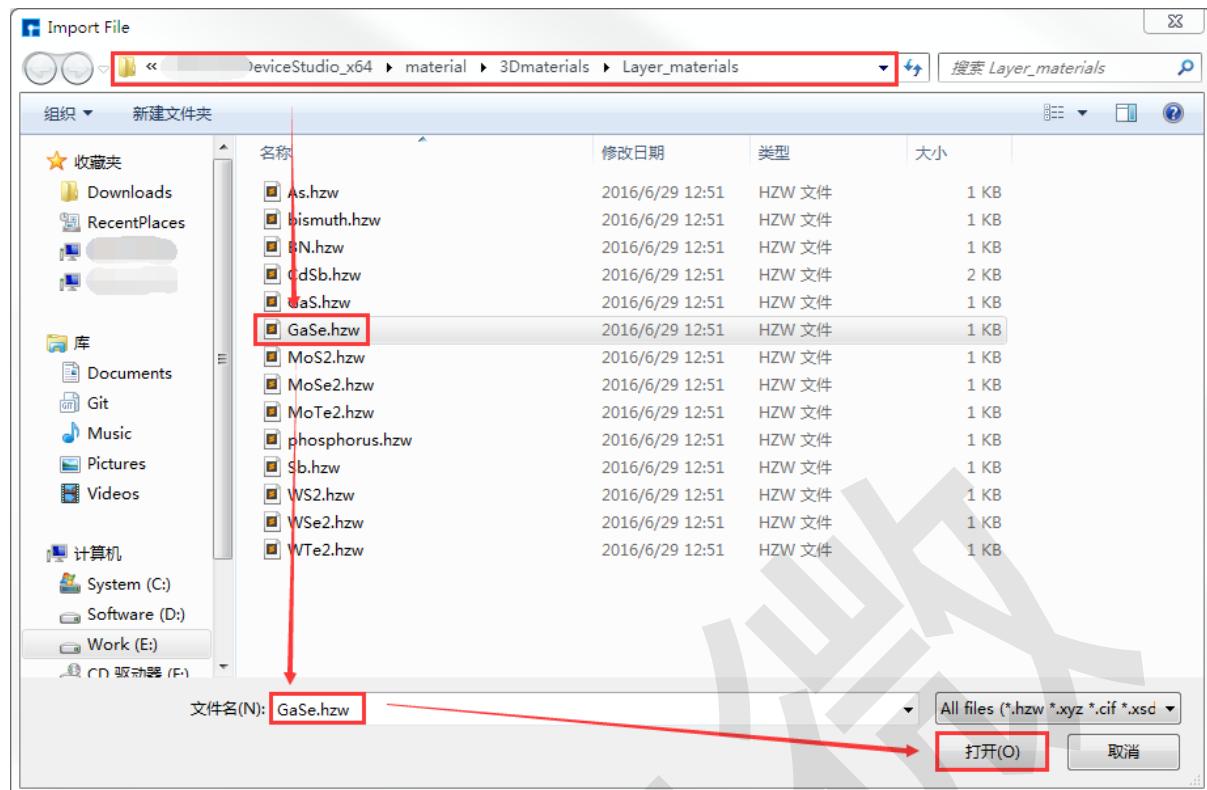


图 10.78: 导入结构文件的界面

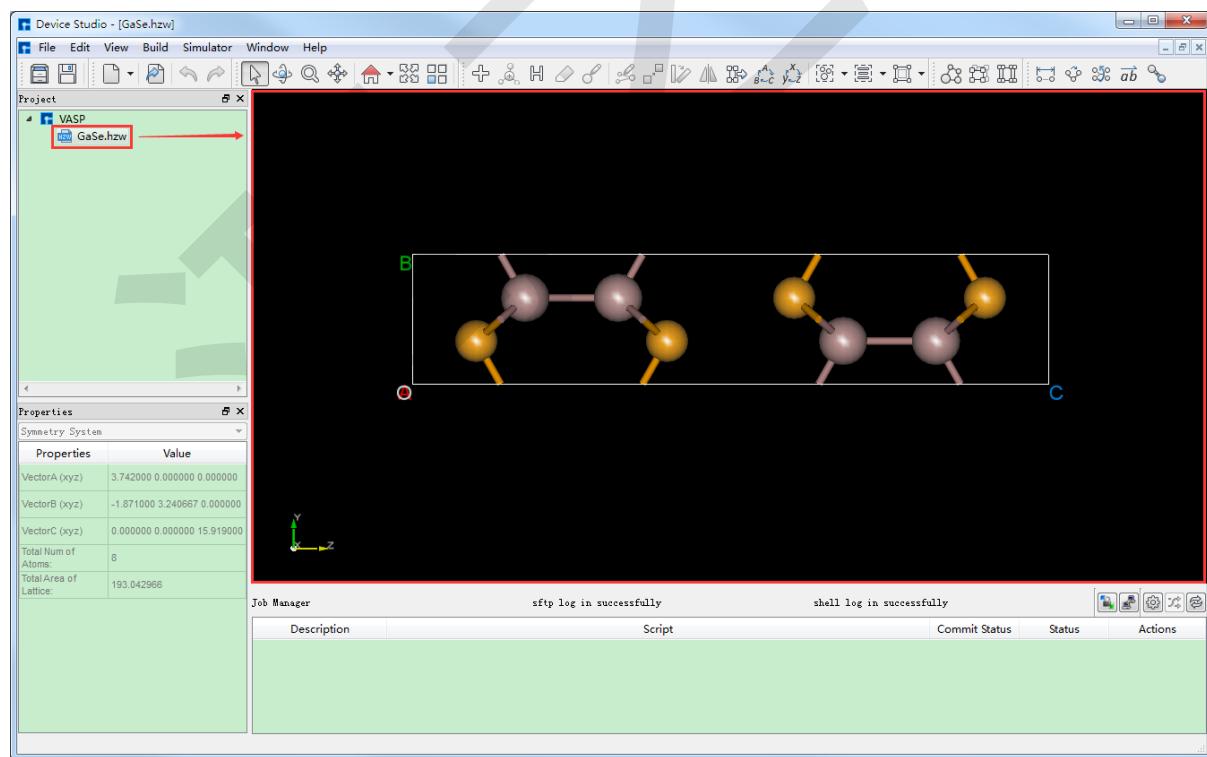


图 10.79: 导入 GaSe.hzw 结构后的 Device Studio 界面

10.8.4 VASP 输入文件的生成

VASP 计算需要用到 VASP 的赝势文件，故在生成输入文件之前，可先在 Device Studio 中设置 VASP 蚝势文件的调用路径。在 Device Studio 的图形界面中点击 *File → Options*，则弹出 Options 界面如图 10.80 所示，在 Options 界面 ① 处点击 *Browse* 按钮，则弹出 Open Directory 界面，用户可根据界面指示找到 VASP 的赝势文件并导入，导入 VASP 蚝势文件后，则 Options 界面中的 ② 处显示 VASP 蚥势文件的调用路径。

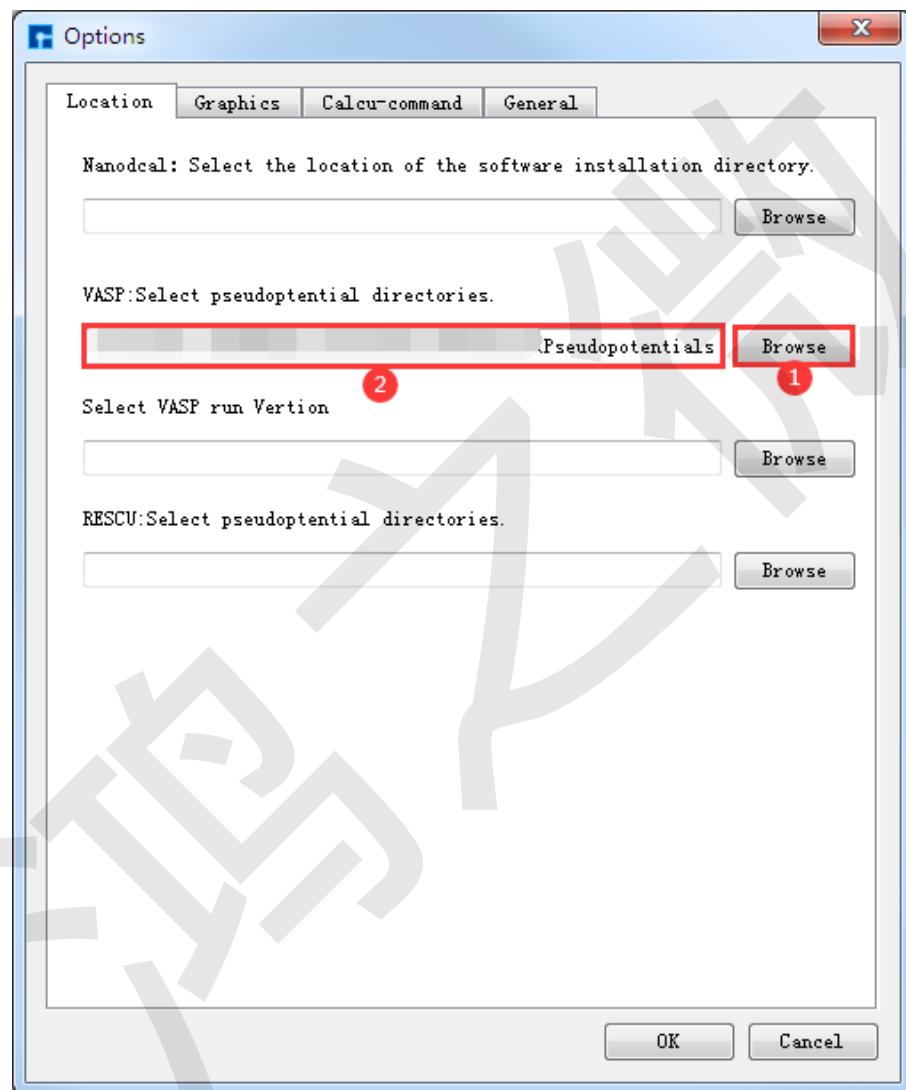


图 10.80: Device Studio 的 Options 界面

以生成 **GaSe** 晶体结构的结构弛豫计算的输入文件为例，在如图 10.79 所示 Device Studio 图形界面中，选中 *Simulator → VASP → Relaxation*，弹出 VASPRelaxation 界面。根据计算需要分别选中 VASPRelaxation 界面中 *Relaxation*、*Basic setting*、*Advanced* 设置参数分别如图 10.81、图 10.82 和图 10.83 所示，设置好参数后，可分别点击界面中的 *INCAR*、*KPOINTS*、*POSCAR*、*POTCAR* 预览生成的 GaSe 晶体结构的结构弛豫计算的输入文件

INCAR、KPOINTS、POSCAR、POTCAR 分别如 图 10.84、图 10.85、图 10.86 和 图 10.87 所示，之后点击界面中的 *Generate files* 即可生成 GaSe 结构弛豫计算的输入文件 INCAR、KPOINTS、POSCAR、POTCAR。

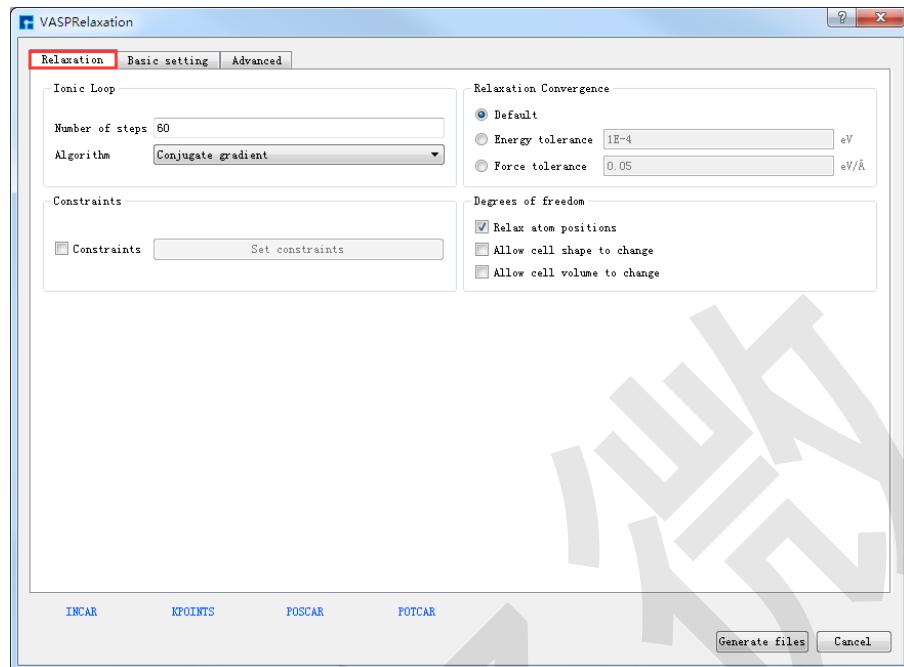


图 10.81: Relaxation 参数设置界面

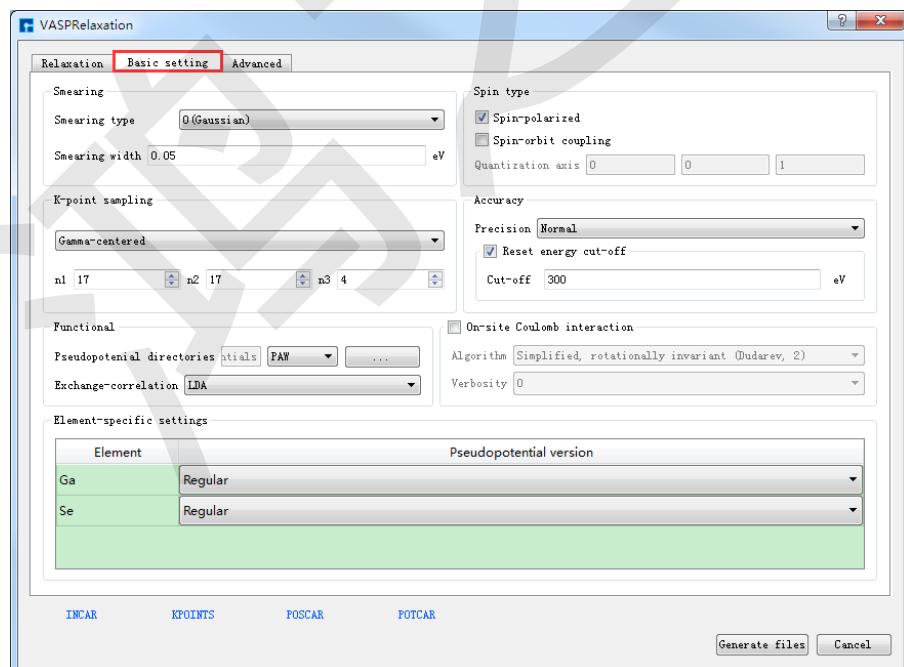


图 10.82: Basic setting 参数设置界面

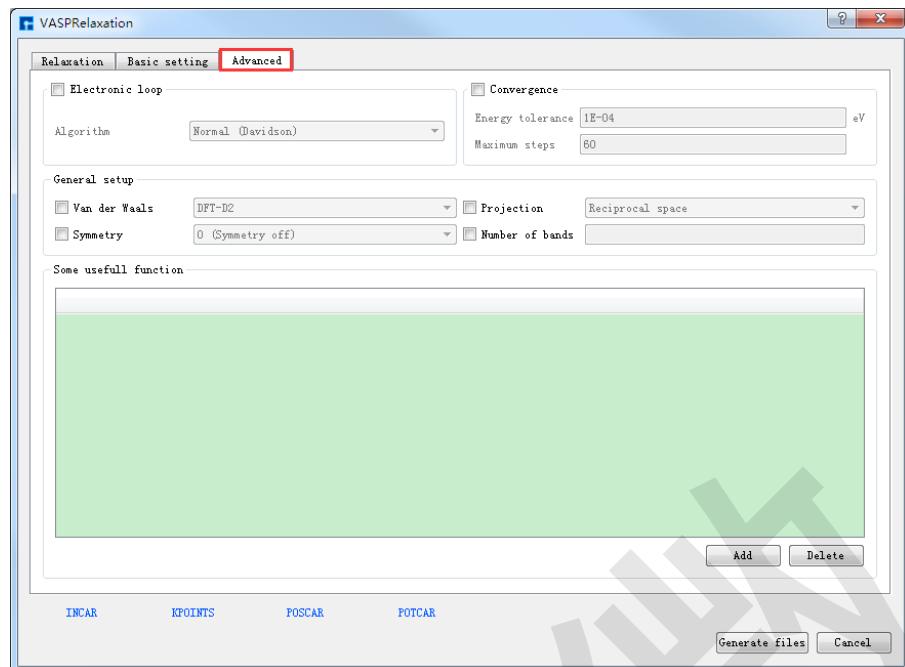


图 10.83: Advanced 参数设置界面

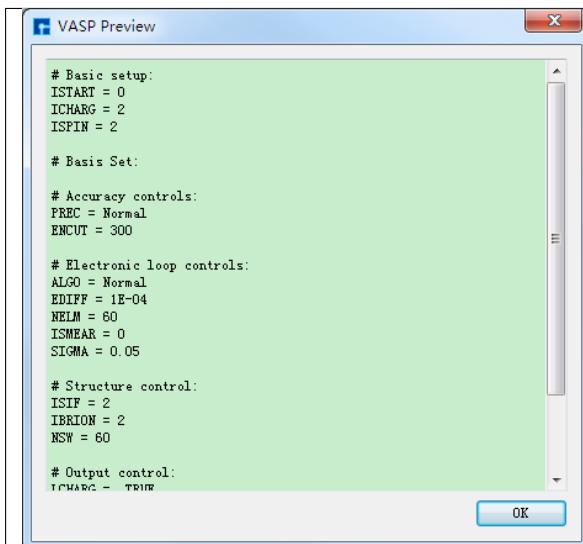


图 10.84: INCAR 预览

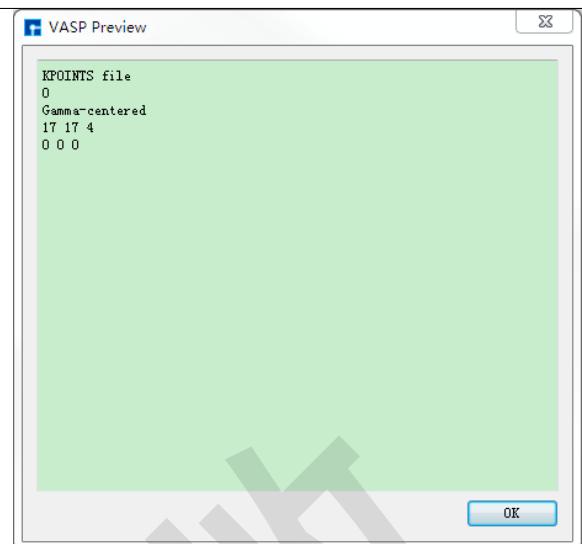


图 10.85: KPOINTS 预览

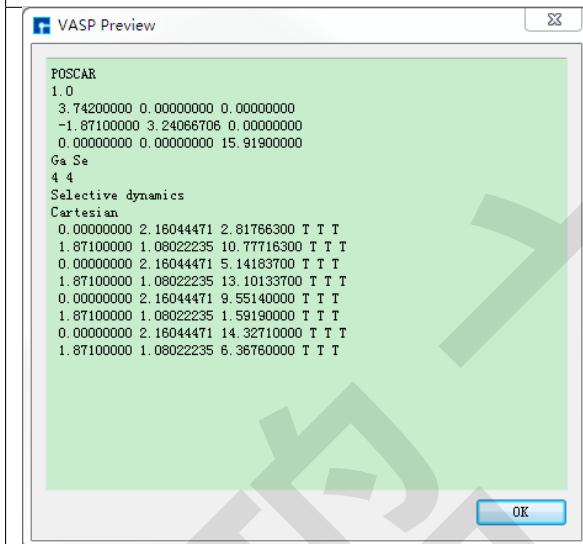


图 10.86: POSCAR 预览

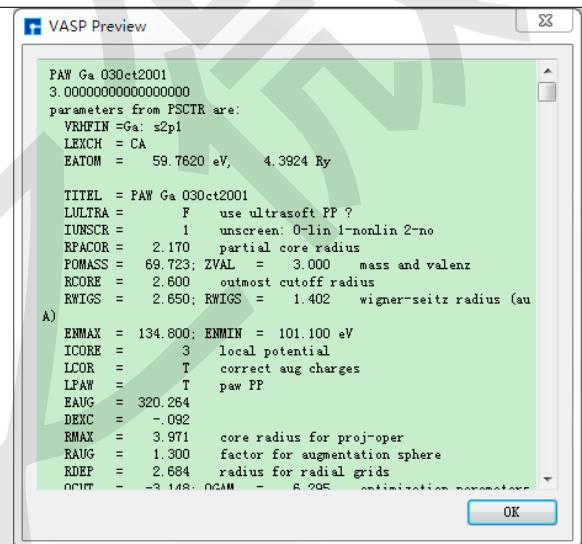


图 10.87: POTCAR 预览

生成 GaSe 晶体结构的结构弛豫计算的输入文件 INCAR、KPOINTS、POSCAR、POTCAR 的 Device Studio 界面如图 10.88 所示。

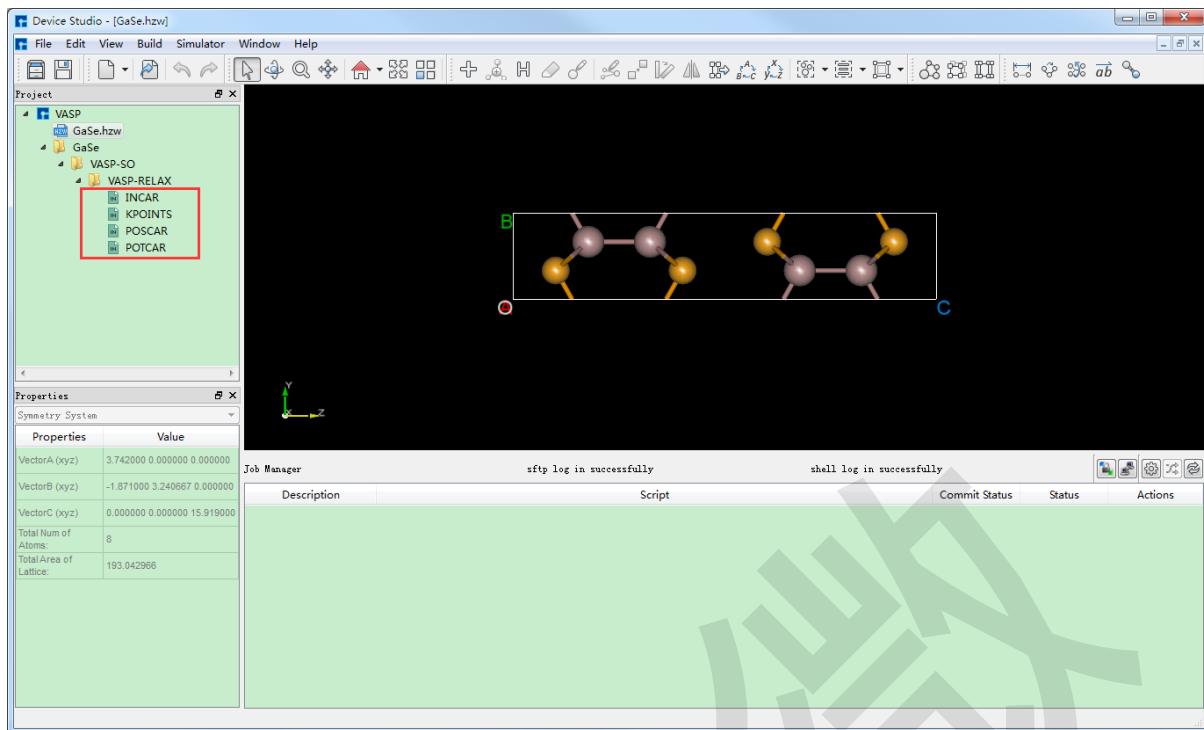


图 10.88: 生成 GaSe 晶体结构的结构弛豫计算的输入文件的 Device Studio 图形界面

10.8.5 VASP 计算

在做 **GaSe** 晶体结构的结构弛豫计算之前，需连接装有 VASP 的服务器，具体连接过程这里不做详细说明，用户可参考 [Nanodcal 连接服务器](#) 节内容。连接好装有 VASP 的服务器，在做计算之前，用户可根据需要打开输入文件并查看文件中的参数设置是否合理，若不合理，则可选择直接在文件中编辑或重新生成，最后再进行 VASP 计算（这里 VASP 计算指 **GaSe** 晶体结构的结构弛豫计算）。如打开 INCAR 文件，在如 图 10.88 所示的界面中，选中 INCAR → 右击 → *Open with* 即可查看到 INCAR 文件如下所示。对于其他输入文件，用户可根据需要选择是否打开查看，这里不做详细说明。

```
# Basic setup:
ISTART = 0
ICHARG = 2
ISPIN = 2

# Basis Set:

# Accuracy controls:
PREC = Normal
```

(续下页)

(接上页)

```
ENCUT = 300

# Electronic loop controls:
ALGO = Normal
EDIFF = 1E-04
NELM = 60
ISMEAR = 0
SIGMA = 0.05

# Structure control:
ISIF = 2
IBRION = 2
NSW = 60

# Output control:
LCHARG = .TRUE.
LWAVE = .FALSE.
LELF = .FALSE.
LVTOT = .FALSE.
LVHAR = .FALSE.
```

备注

在实际计算过程中，用户可通过 VASP 使用教程了解各参数的详细意义，从而根据计算需要合理设置参数。

在如 图 10.88 所示的界面中，选中 *VASP-RELAX* → 右击 → *Run*，弹出 Run 界面，在 Run 界面中点击 *Save* 按钮保存相应的脚本，再点击 Run 界面中的 *Run* 按钮则可做 VASP 计算。用户可在 Job Manager 区域中观察 VASP 计算状态，当 VASP 计算任务处于排队中、计算中和计算完成时，*Status* 分别为 *Queued*、*Running*、*Finished*。计算完成后，点击 Job Manager 区域 *Action* 下的 *Download* 按钮弹出下载 VASP 计算结果的界面，在该界面中点击 *Download* 则可下载，下载后可在软件的 Project Explorer 区域查看到该结果文件，如结果文件 CHGCAR，下载后可在 Device Studio 的 Project Explorer 区域看到该文件。

10.8.6 VASP 计算结果的可视化分析

在 Device Studio 图形界面的 Project Explorer 区域内，选中结果文件 CHGCAR → 右击 → Show View，则弹出 VASP 计算结果电荷密度的可视化分析界面。

10.9 TOPS 实例

Topological Polymeric Self-Consistent Field Theory 是一款基于自洽平均场理论（Self-Consistent Field Theory）的嵌段共聚物自组装相行为计算与模拟软件，简称 **TOPS**。嵌段共聚物作为一种特殊的高分子，因其独特的分相机制，适宜的分相尺度（10-100 nm）和在材料、半导体纳米刻蚀领域内的潜在应用受到人们的广泛关注和研究。但由于嵌段共聚物自组装体系参数空间巨大且形成的自由能曲面非常复杂，其热力学平衡态结构的预测对于理论计算来说非常具有挑战性。

复旦大学李卫华教授课题组结合其在嵌段共聚物自洽场计算领域内数十年的经验开发了这款软件 **TOPS**，其具有以下功能和特点：

1. 精确计算几乎任意拓扑结构体系中的目标相结构的自由能，实现稳定相结构的预测、构建相图和分析机理。
2. 适用于嵌段共聚物熔体体系、共混体系和溶液体系，为计算理论探讨和实验先行筛选出合适的参数空间。
3. 拥有非常丰富的一元和二元结构库。
4. 结合自动优化周期及特殊初始化算法，兼备高效率和高精度。
5. 结合快速傅里叶变换（FFT）和 Anderson Mixing，进一步加速了收敛过程。
6. 可快速创建分子模型，可视化其结构和计算结果。
7. 支持 Windows 和 Linux 平台，搭载鸿之微科技（上海）股份有限公司的 Device Studio，可快速在本地和服务器递交任务并进行计算。
8. 对石油化工、塑料加工、特种塑料盒纤维生产都有潜在的应用。

TOPS 具有以下应用：

1. **构建相图：** **TOPS** 可以计算给定参数下备选结构的自由能，然后通过自由能的比较构建热力学平衡态结构的相图。
2. **分析自由能数据：** **TOPS** 计算可以得到所有备选结构的自由能、界面能和熵。通过这些数据可以分析结构的稳定性及相关机制。

3. 分析嵌段在结构中的分布: TOPS 计算可以获得每个嵌段的密度分布, 从而可以进一步探讨嵌段共聚物的自组装机理。
4. TOPS 采用随机初始化, 可以进行嵌段共聚物自组装形成新结构的探索, 为实验制备新的有序结构提供指导。

以 AB 两嵌段共聚物计算 BCC 结构为例来详细描述 TOPS 在 Device Studio 中的应用。

10.9.1 TOPS 计算流程

TOPS 在 Device Studio 中的计算流程如 图 10.89 所示。



图 10.89: TOPS 计算流程

10.9.2 TOPS 创建项目

双击 Device Studio 图标快捷方式, 登录并启动 Device Studio, 在创建或打开项目界面中(启动软件后选择创建或打开项目的图形界面), 根据界面提示选择创建一个新的项目(*Create a new Project*)或打开一个已经存在的项目(*Open an existing Project*)的按钮, 选中之后点击界面中的 *OK* 按钮即可。若选择创建一个新的项目, 用户可根据需要给该项目命名, 如本项目命名为 TOPS, 或采用软件默认项目名。

10.9.3 TOPS 建模 (分子结构)

以构建 **AB** 两嵌段共聚物为例，在 Device Studio 的图形界面中，选中 *Simulator* → *TOPS* → *TOPS*，弹出 TOPS 界面如图 10.90 所示。

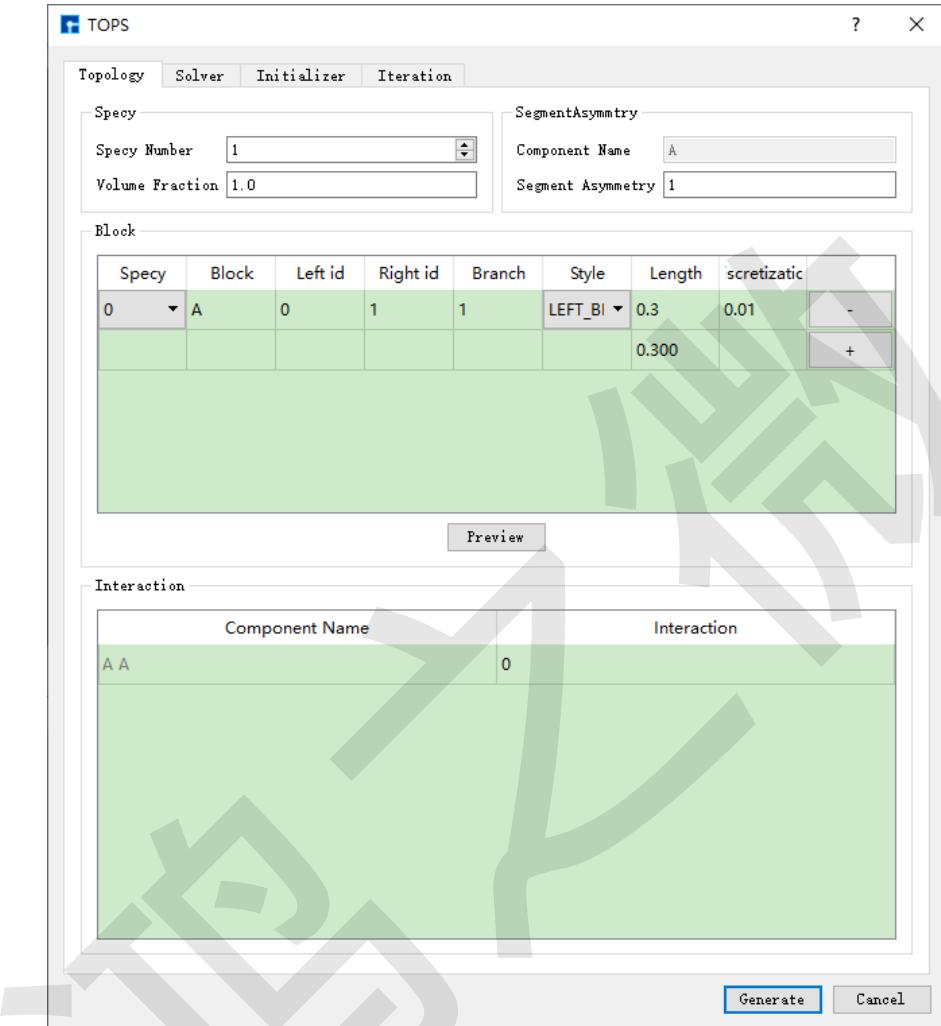


图 10.90: TOPS 界面

在图 10.90 所示界面中，设置参数如图 10.91 中红色框选部分所示，点击 *Preview* 则可预览搭建好的 **AB** 两嵌段共聚物分子结构。

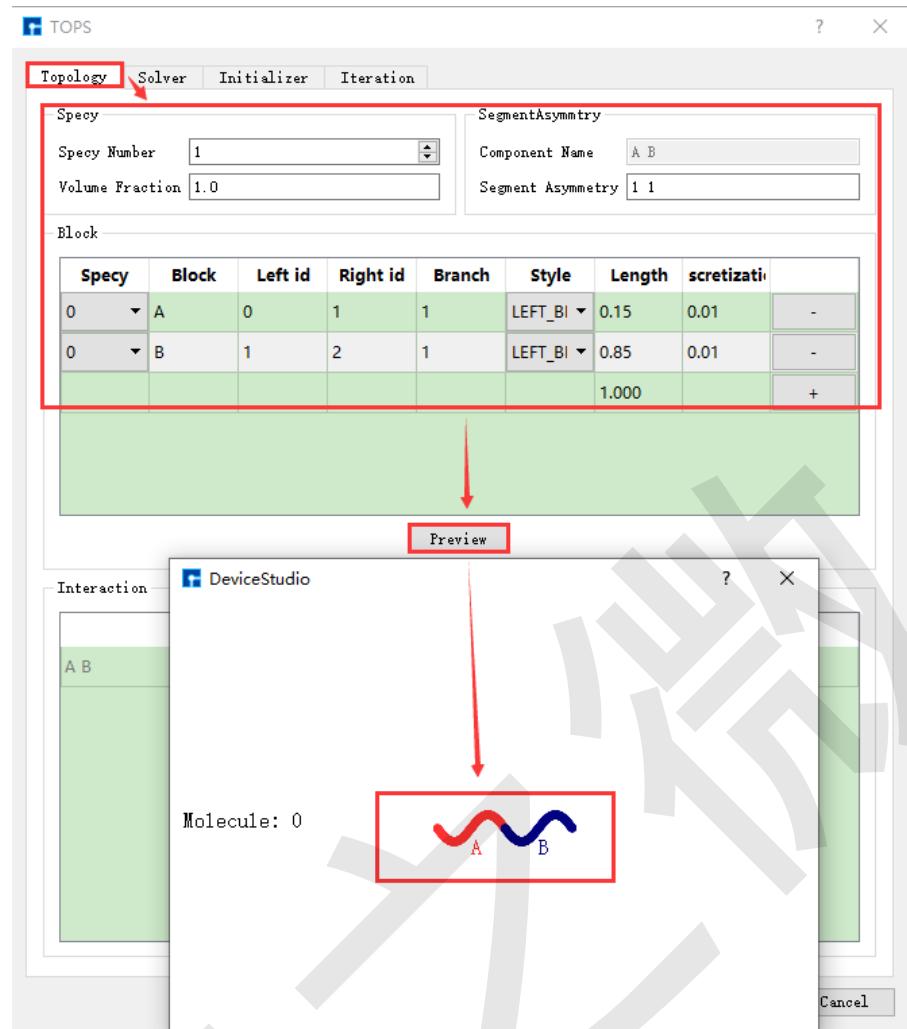


图 10.91: TOPS 构建 AB 两嵌段共聚物界面

10.9.4 TOPS 输入文件的生成

以生成 AB 两嵌段共聚物计算 BCC 结构的输入文件为例，在如 图 10.90 所示 TOPS 界面上分别选中 *Topology*、*Solver*、*Initializer*、*Iteration* 设置参数分别如 图 10.92、图 10.93、图 10.94 和 图 10.95 所示，设置好参数后，点击 TOPS 界面中的 *Generate* 即可生成 AB 两嵌段共聚物计算 BCC 结构的输入文件 input。

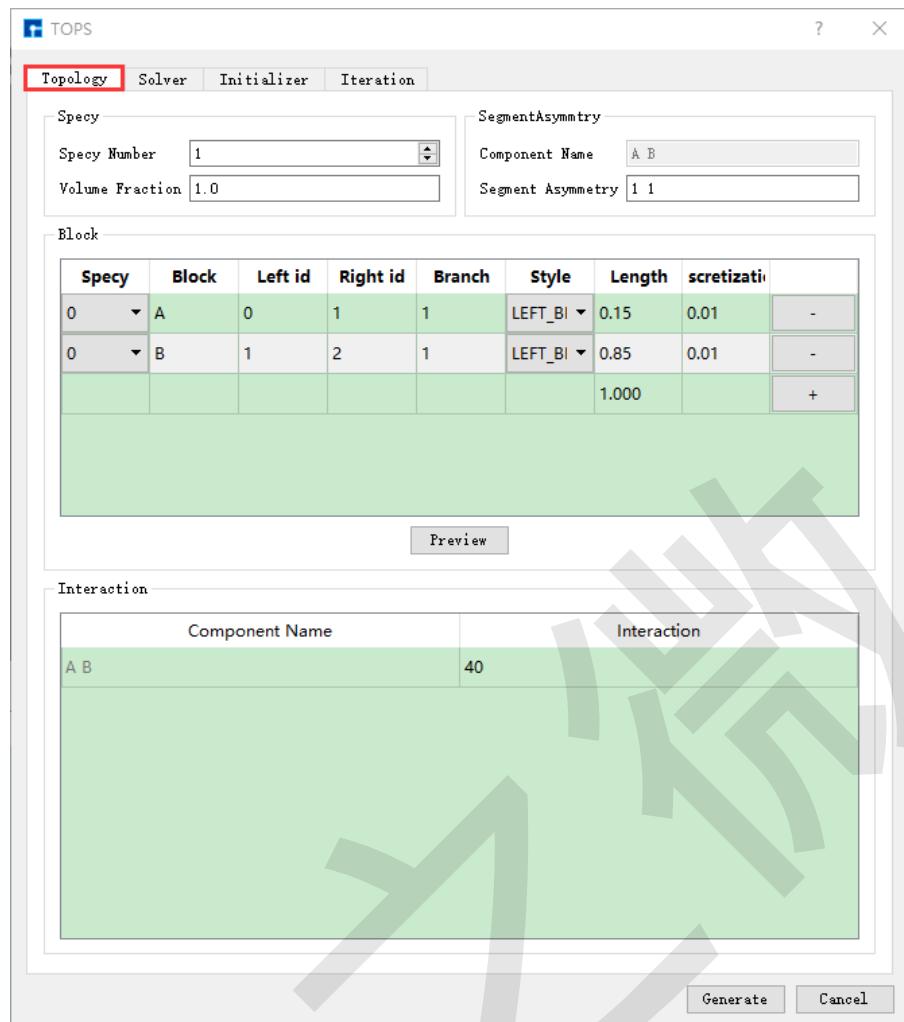


图 10.92: Topology 参数设置界面

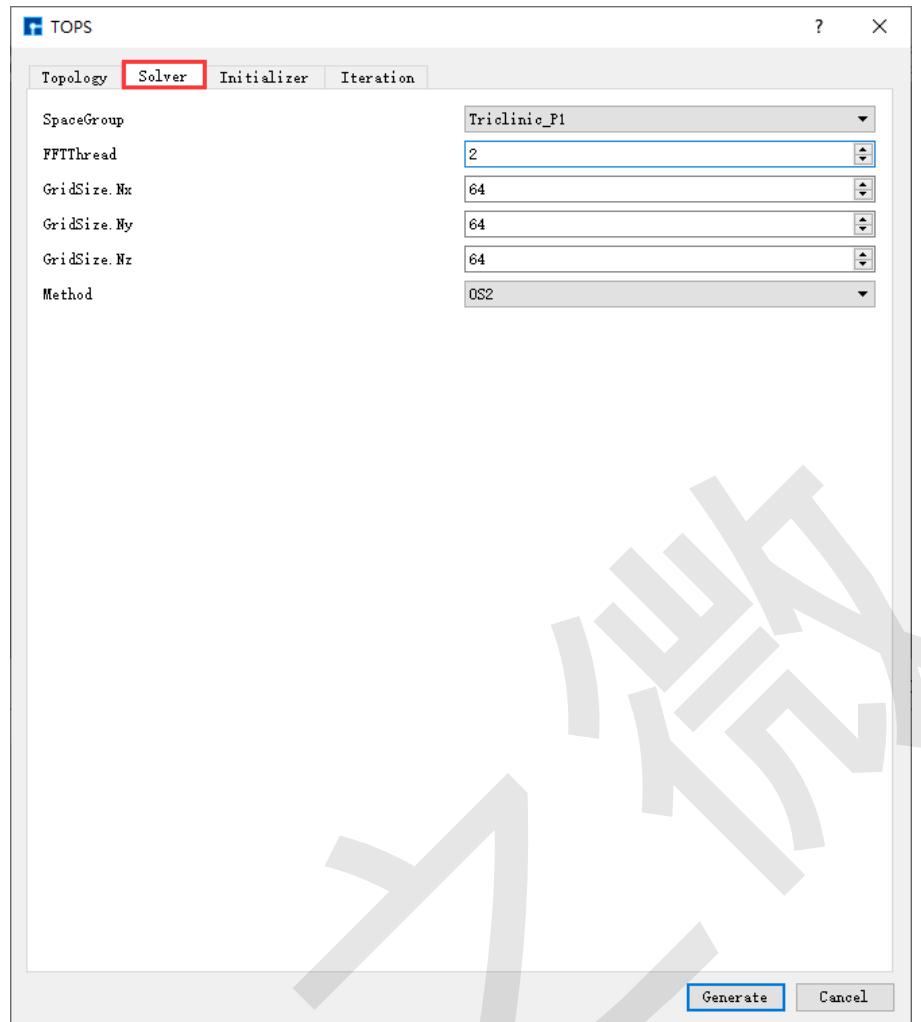


图 10.93: Solver 参数设置界面

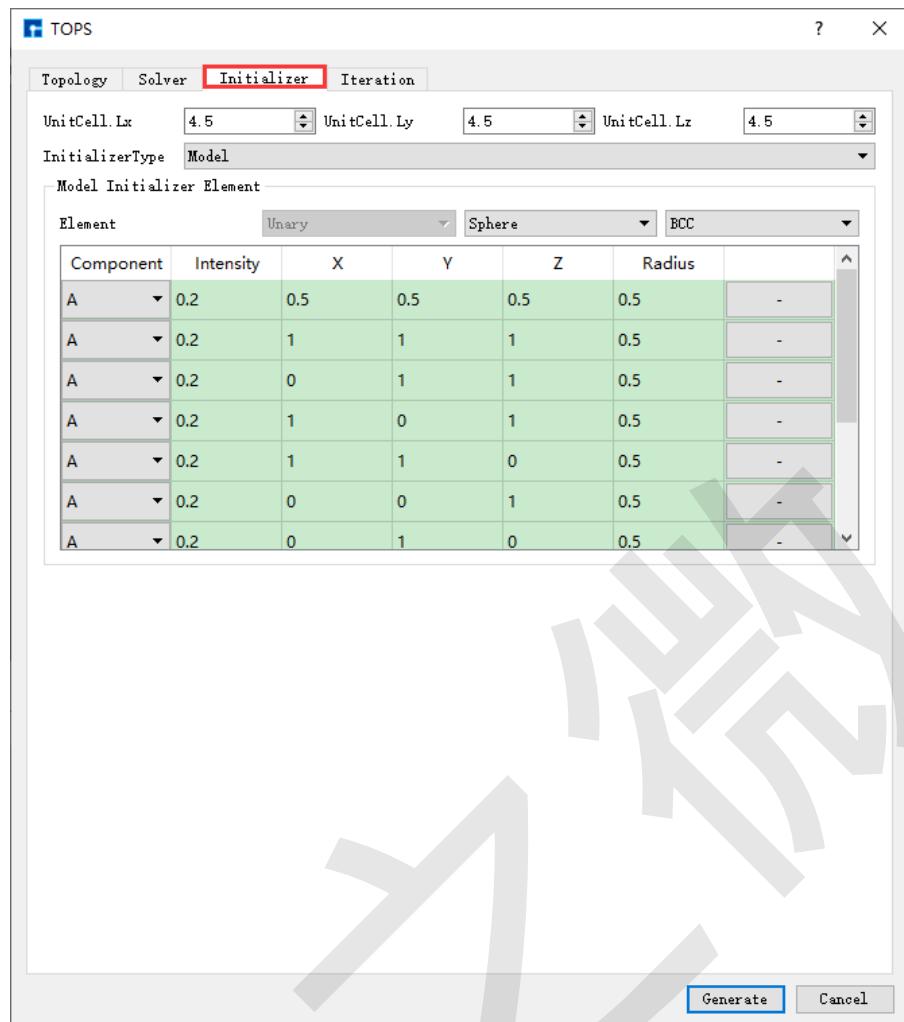


图 10.94: Initializer 参数设置界面

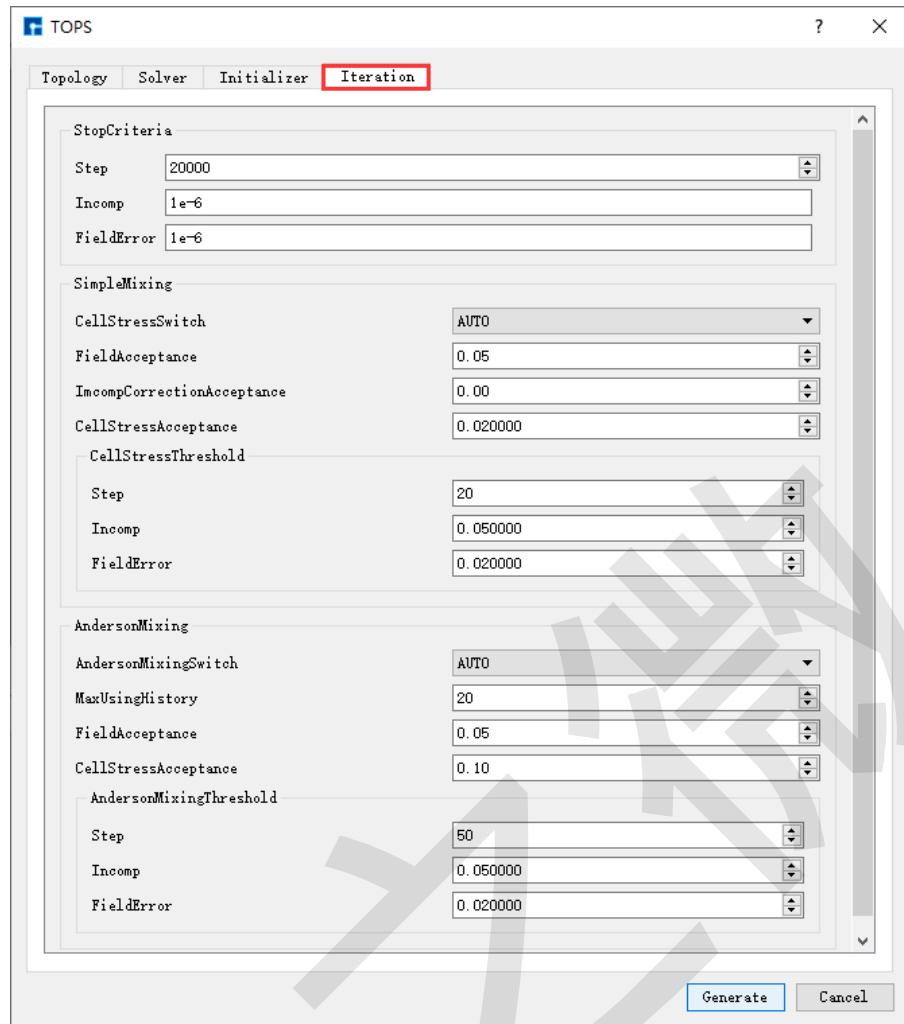


图 10.95: Iteration 参数设置界面

生成 AB 两嵌段共聚物计算 BCC 结构输入文件 input 的 Device Studio 界面如 图 10.96 所示。

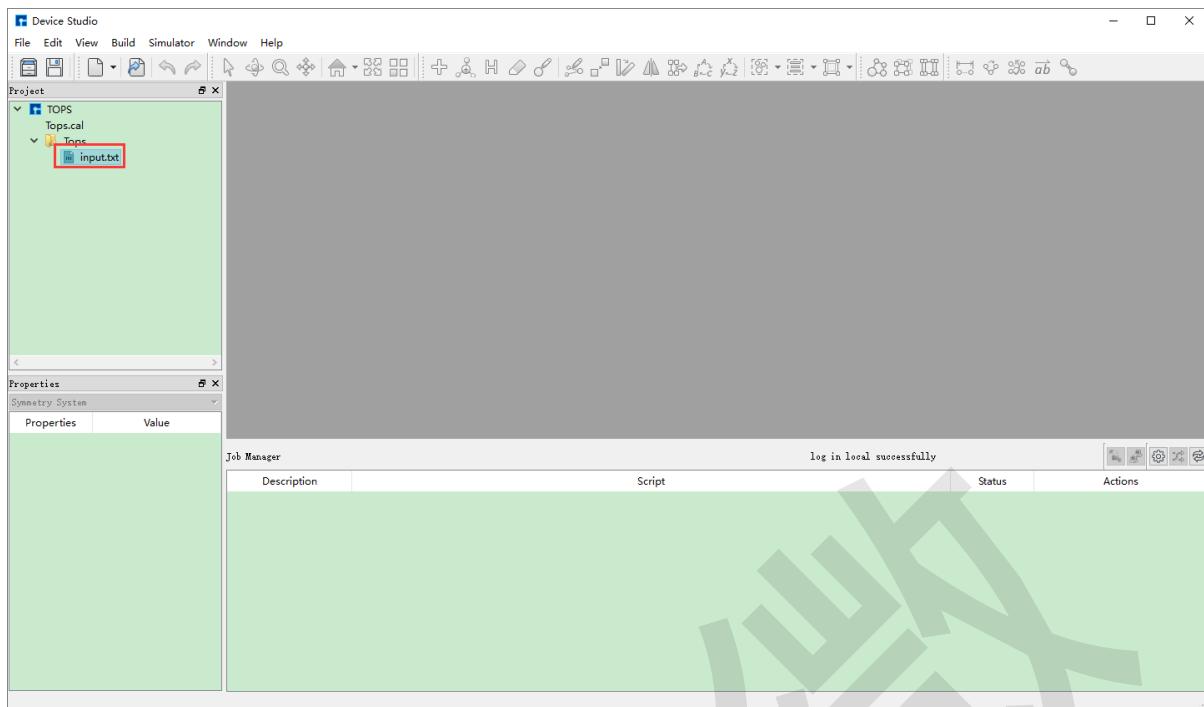


图 10.96: 生成 AB 两嵌段共聚物计算 BCC 结构输入文件的 Device Studio 图形界面

10.9.5 TOPS 计算

在做 AB 两嵌段共聚物计算 BCC 结构之前，需连接装有 TOPS 的本地电脑或服务器，具体连接过程这里不做详细说明，用户可参考 [Nanodcal 连接服务器](#) 节内容。这里以在本地电脑上计算为例，连接好本地电脑后，在做计算之前，用户可根据需要打开输入文件查看文件中的参数设置是否合理，若不合理，则可选择直接在文件中编辑或重新生成，最后再进行 TOPS 计算。如打开 input 文件，在 8.9-5 所示界面中，选中 input → 右击 → *Open with* 即可查看到 input 文件如下所示。

```

Topology.Specy =
0           1.0
//SpecyID   VolFrac

Topology.Block =
0  A  0  1  1  LEFT_BRANCH  0.15  0.01
0  B  1  2  1  LEFT_BRANCH  0.85  0.01

Topology.Interaction =
A B  40

```

(续下页)

(接上页)

```
Topology.SegmentAsymmtry =
A 1
B 1

Solver.SpaceGroup = Triclinic_P1
Solver.Method = OS2
Solver.FFTThread = 2
Solver.GridSize.Nx = 64
Solver.GridSize.Ny = 64
Solver.GridSize.Nz = 64

Initializer.UnitCell.Lx = 4.5
Initializer.UnitCell.Ly = 4.5
Initializer.UnitCell.Lz = 4.5
Initializer.InitializerType = Model
Initializer.ModelInitializer.Element =
Sphere A 0.2 0.5 0.5 0.5 0.5
Sphere A 0.2 1 1 1 0.5
Sphere A 0.2 0 1 1 0.5
Sphere A 0.2 1 0 1 0.5
Sphere A 0.2 1 1 0 0.5
Sphere A 0.2 0 0 1 0.5
Sphere A 0.2 0 1 0 0.5
Sphere A 0.2 1 0 0 0.5
Sphere A 0.2 0 0 0 0.5

Iteration.StopCriteria.Step = 20000
Iteration.StopCriteria.Incomp = 1e-6
Iteration.StopCriteria.FieldError = 1e-6

Iteration.SimpleMixing.FieldAcceptance = 0.05
Iteration.SimpleMixing.ImcompCorrectionAcceptance = 0
Iteration.SimpleMixing.CellStressSwitch = AUTO
Iteration.SimpleMixing.CellStressAcceptance = 0.02
Iteration.SimpleMixing.CellStressThreshold.Step = 20
Iteration.SimpleMixing.CellStressThreshold.Incomp = 0.05
Iteration.SimpleMixing.CellStressThreshold.FieldError = 0.02
```

(续下页)

(接上页)

```
Iteration.AndersonMixing.MaxUsingHistory = 20
Iteration.AndersonMixing.FieldAcceptance = 0.05
Iteration.AndersonMixing.AndersonMixingSwitch = AUTO
Iteration.AndersonMixing.CellStressAcceptance = 0.1
Iteration.AndersonMixing.AndersonMixingThreshold.Step = 50
Iteration.AndersonMixing.AndersonMixingThreshold.Incomp = 0.05
Iteration.AndersonMixing.AndersonMixingThreshold.FieldError = 0.02
```

在如 图 10.96 所示界面中，在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 input → 右击 → Run，弹出 Run 界面，在 Run 界面中点击 Run 按钮则可做 TOPS 计算。用户可在 Job Manager 区域中观察 TOPS 计算状态，当 TOPS 计算任务处于排队中、计算中和计算完成时，Status 分别为 Queued、Running、Finished。计算完成后，选中 input → 右击 → Open Containing Folder 可看到 TOPS 计算完成的结果文件（密度文件）phout.txt 和记录文件（能量文件）printout.txt，并找到其在本地电脑中存储位置。

10.9.6 TOPS 计算结果的可视化分析

在 Device Studio 的图形界面中，选中 Simulator → TOPS → Analysis Plot，弹出导入 TOPS 结果文件的图形界面，在界面中选中 TOPS 计算结果文件 phout.txt，点击 打开按钮即可弹出 TOPS 计算结果的可视化分析界面如 图 10.97 所示。

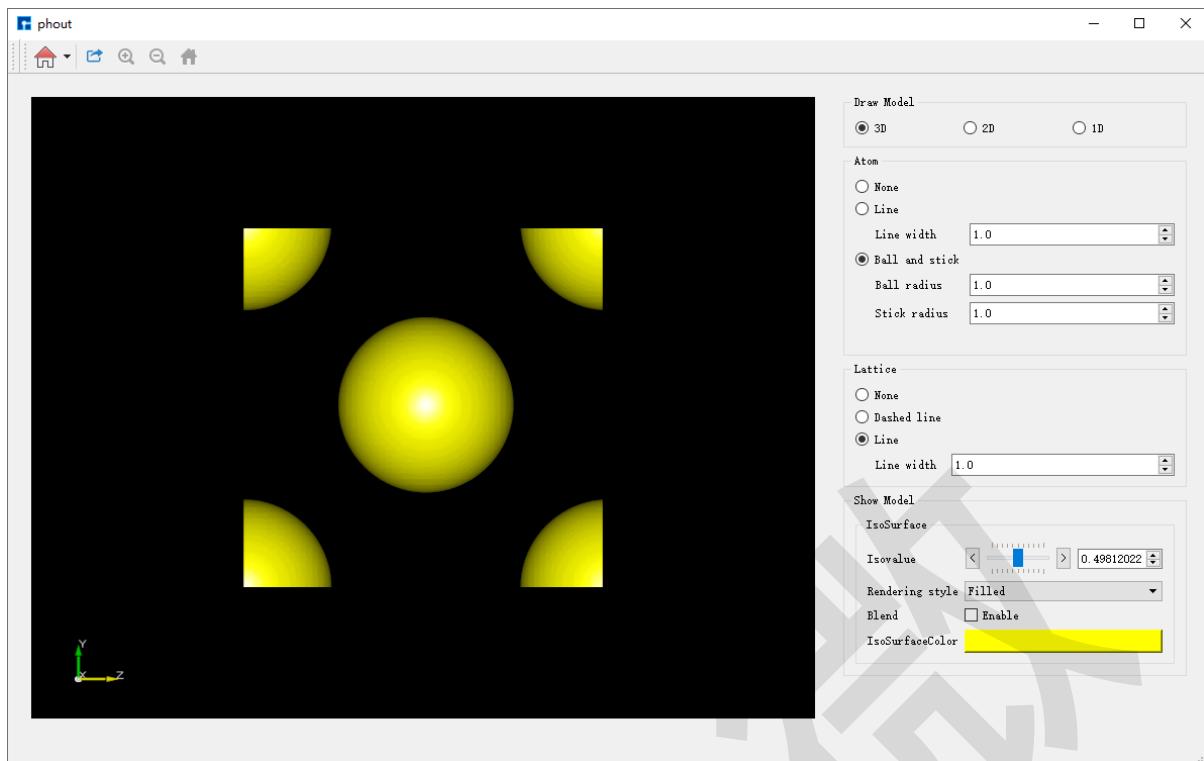


图 10.97: TOPS 计算结果的可视化分析界面

10.10 DS-PAW 实例

DS-PAW 是 Device Studio 平台下的一款第一性原理平面波计算软件，使用平面波作为基函数组，优势是使用投影缀加平面波方法构造的。DS-PAW 功能强大，能够应用于不同场景，例如金属、半导体、绝缘体、表面、磁性、非磁性、锂电等；能够精确预测材料的电子分布；能够进行原子几何结构优化；能够广泛的应用于材料科学领域。DS-PAW 性能稳定，在 Intel 芯片及国产海光芯片下经过百万案例的内部测试，包括各项功能及并行效率。

如图 10.98 所示，DS-PAW 2021B 版本已实现了 结构弛豫、电子结构、力学性质、磁性计算、过渡态、杂化泛函、范德瓦尔斯修正、光学性质、自旋轨道耦合、声子计算、强关联计算、第一性原理分子动力学等共计 28 个计算功能，更多的功能仍在持续增加中。

以 Si 晶体结构杂化泛函带计算为例来详细描述 DS-PAW 在 Device Studio 中的应用。



图 10.98: DS-PAW 软件功能图

10.10.1 DS-PAW 计算流程

DS-PAW 在 Device Studio 中的计算流程如 图 10.99 所示。



图 10.99: DS-PAW 计算流程

10.10.2 DS-PAW 创建项目

双击 Device Studio 图标快捷方式，登录并启动 Device Studio，在创建或打开项目界面中（启动软件后选择创建或打开项目的图形界面），根据界面提示选择创建一个新的项目（*Create a new Project*）或打开一个已经存在的项目（*Open an existing Project*）的按钮，选中之后点击界面中的 *OK* 按钮即可。若选择创建一个新的项目，用户可根据需要给该项目命名，如本项目命名为 DS-PAW，或采用软件默认项目名。

10.10.3 DS-PAW 导入结构

在 Device Studio 的图形界面中点击 *File → Import → Import Local*，则弹出导入 DS-PAW 结构文件的界面，根据界面提示找到 *Si.hzw* 结构文件的位置，选中 *Si.hzw* 结构文件，点击 *打开* 按钮则导入 *Si.hzw* 结构后的 Device Studio 界面如 图 10.100 所示。在 Device Studio 中导入结构的其他方法这里不做详细说明，用户可参照导入结构 节内容。

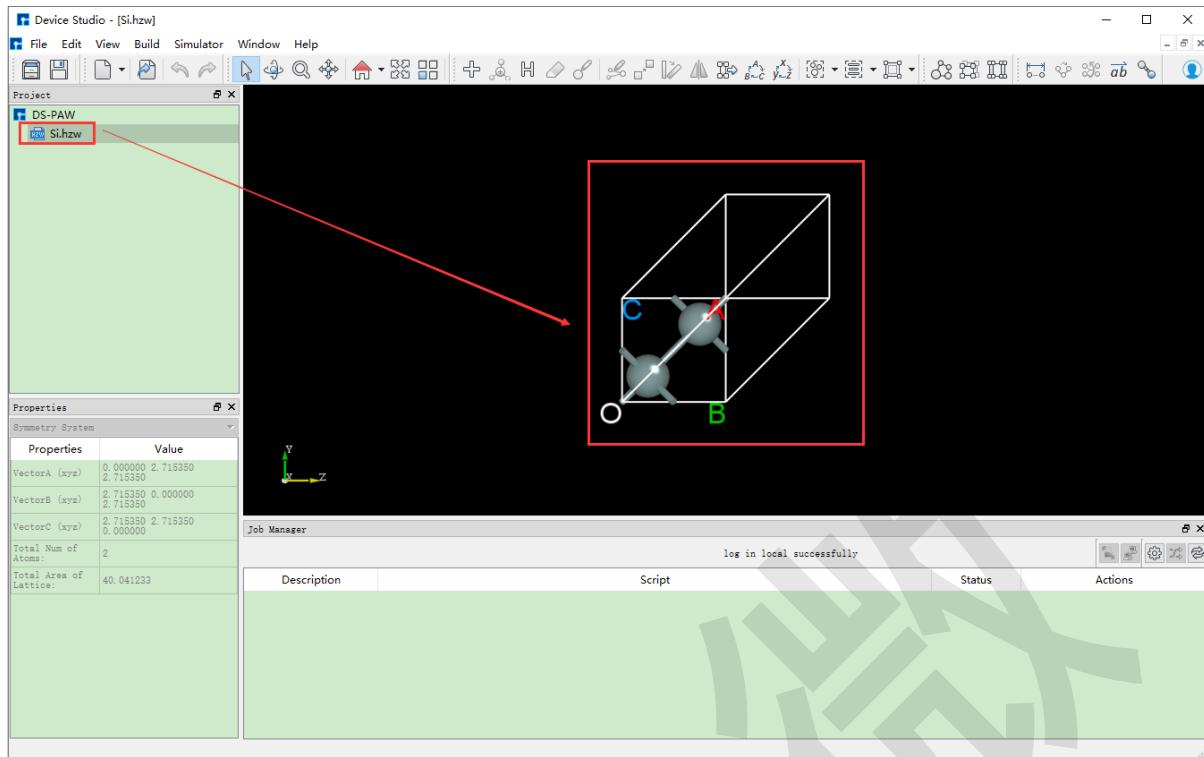


图 10.100: 导入 Si.hzw 结构后的 Device Studio 图形界面

10.10.4 DS-PAW 输入文件的生成

在如 图 10.100 所示界面中选中 *Simulator* → *DS-PAW* → *Electronic Structure*，弹出 DS-PAW 的参数设置界面 Electronic structure 如 图 10.101 所示。Electronic structure 界面主要分为 *Task*、*Solver setting*、*Physical setting* 和 *Advanced* 四个模块，用户可根据计算需要，依次点击四个模块进行参数设置，之后点击 *Generate files* 即可生成对应计算的输入文件。

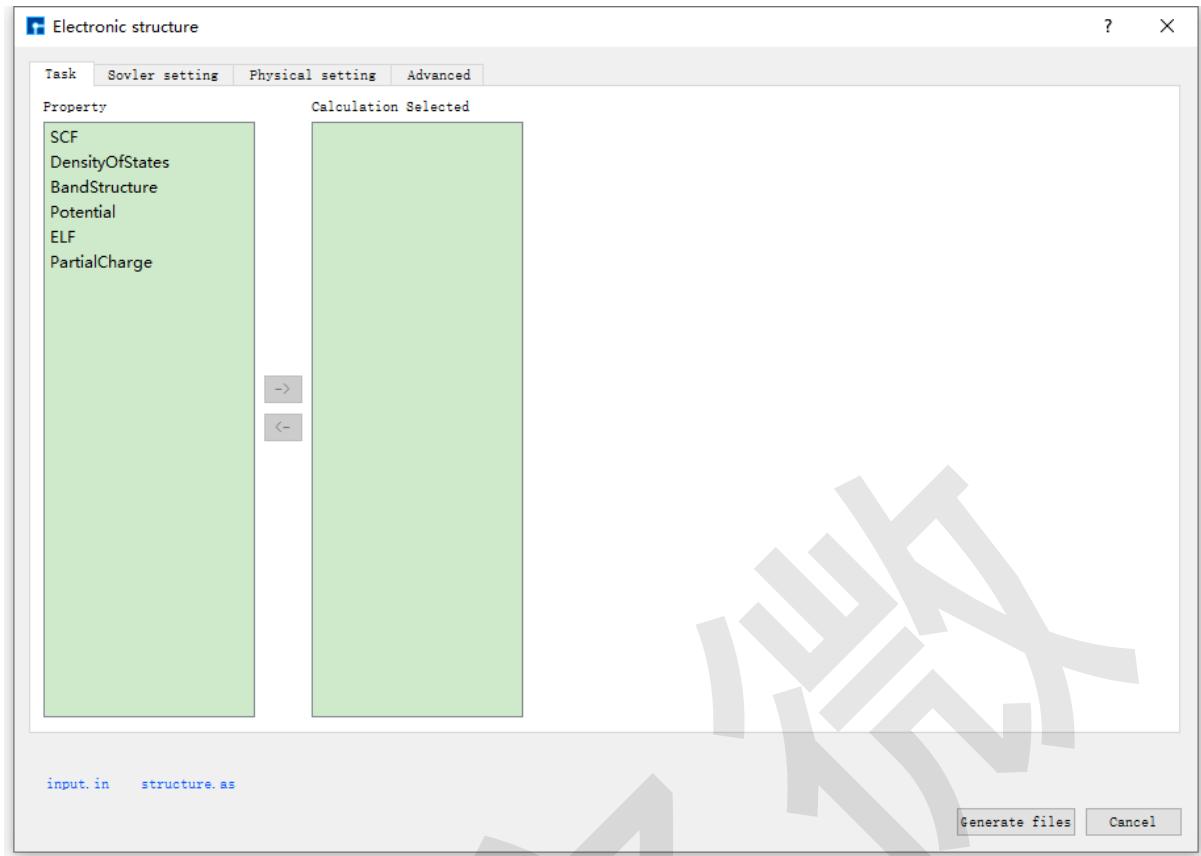


图 10.101: DS-PAW 的参数设置界面 Electronic structure

以生成 Si 晶体结构杂化泛函能带计算的输入文件为例，在如图 10.101 所示的 Electronic structure 界面中，根据计算需要分别选中 *Task*、*Solver setting*、*Physical setting* 和 *Advanced*，设置参数分别如图 10.102、图 10.103、图 10.104 和图 10.105 所示，之后点击界面中的 *Generate files* 即可生成输入文件 scf.in 和 structure。

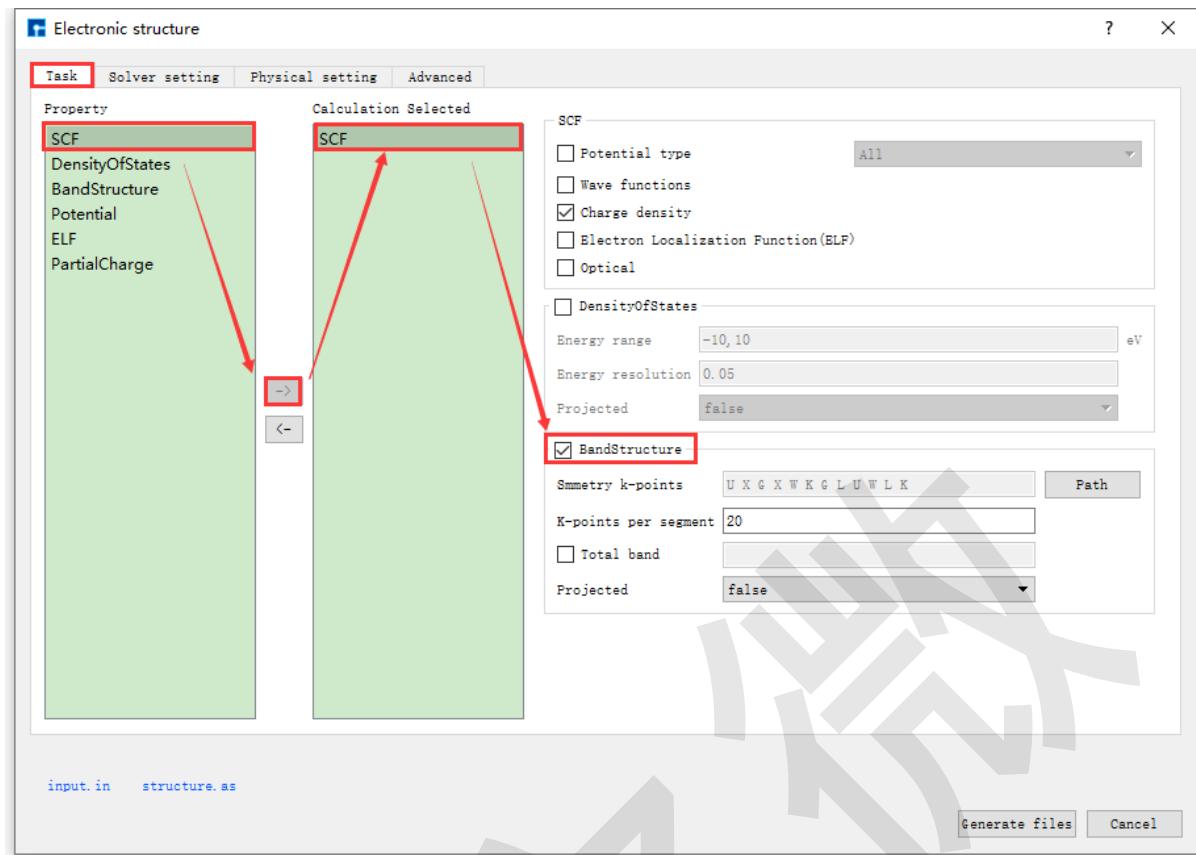


图 10.102: Task 参数设置界面

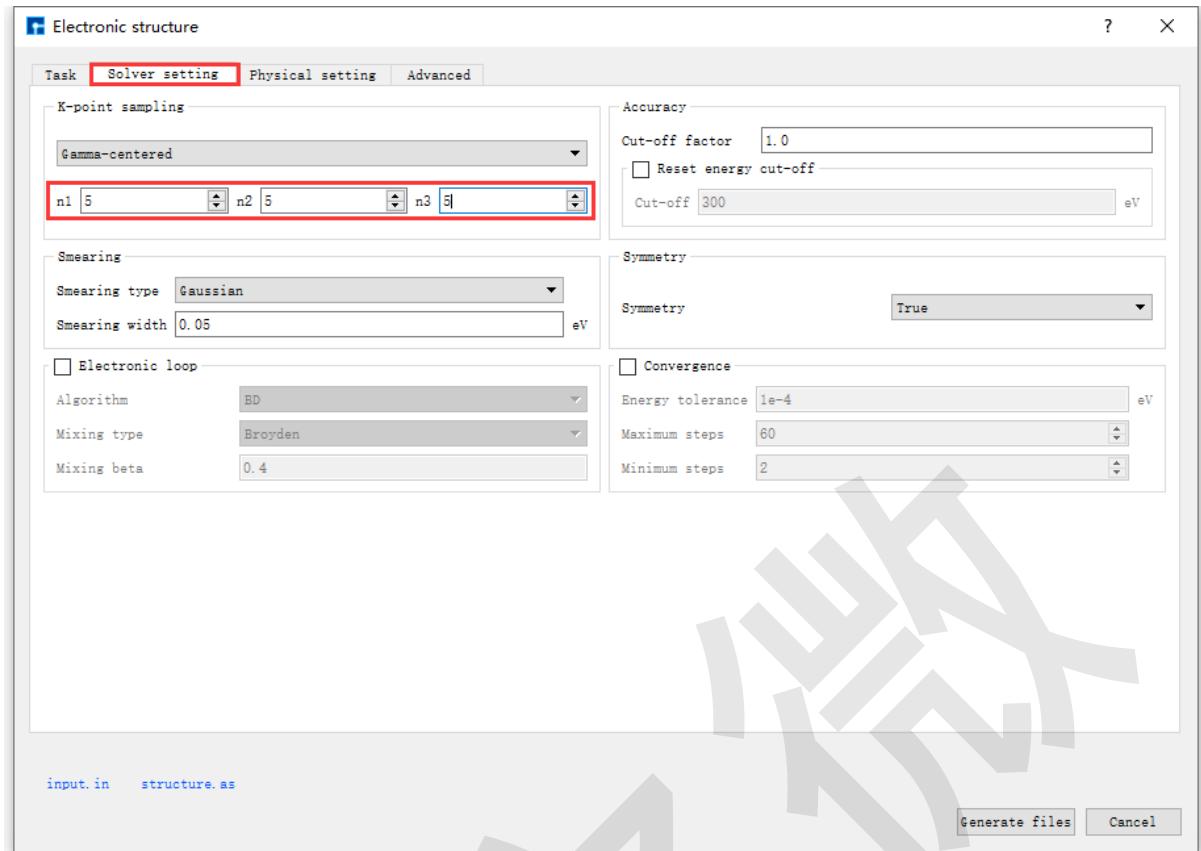


图 10.103: Solver setting 参数设置界面

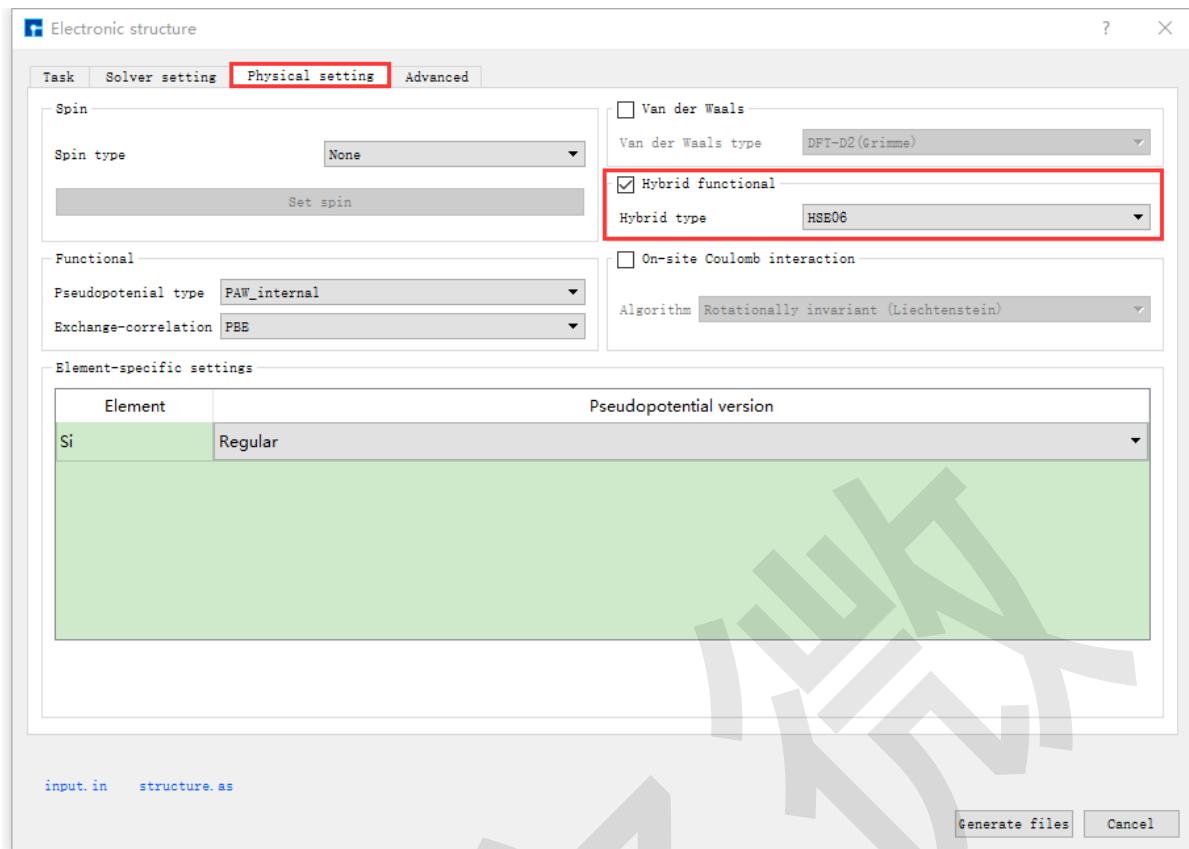


图 10.104: Physical setting 参数设置界面

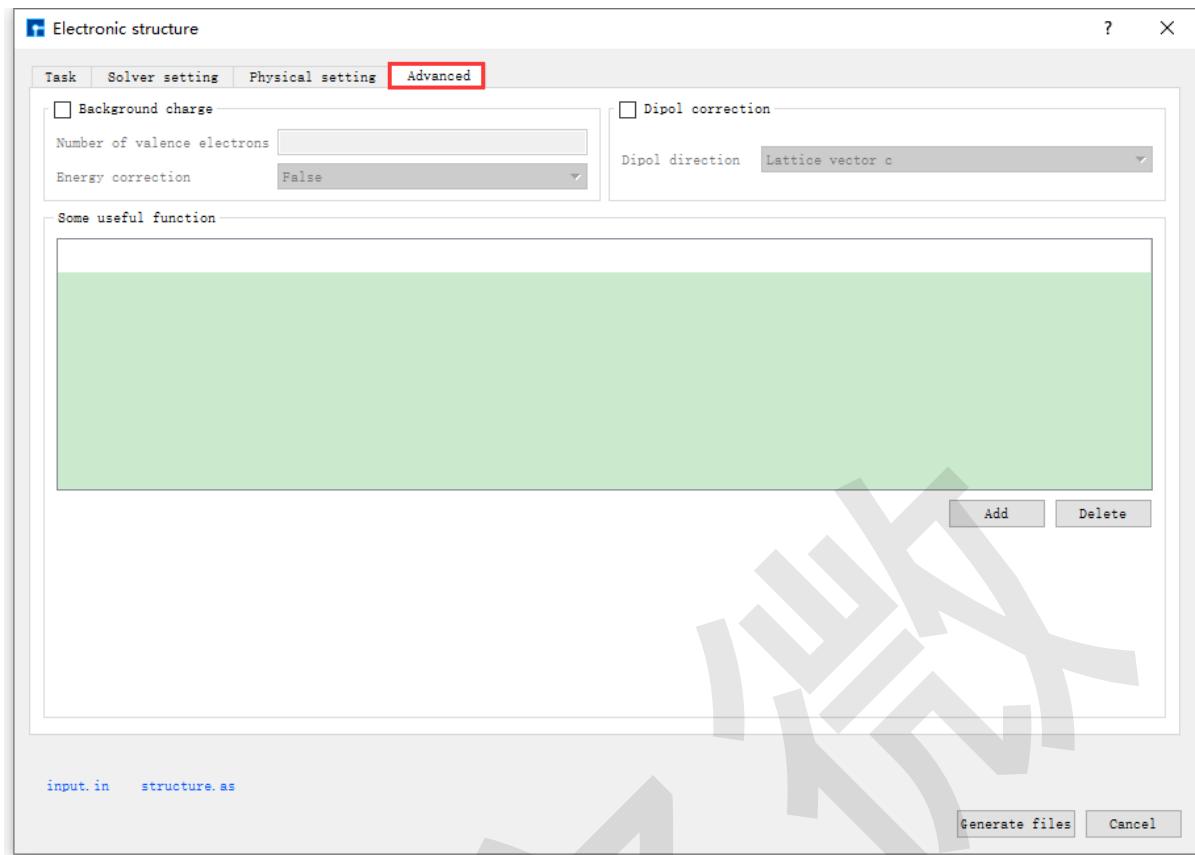


图 10.105: Advanced 参数设置界面

生成 Si 晶体结构杂化泛函能带计算的输入文件 scf.in 和 structure 的 Device Studio 界面如 图 10.106 所示。

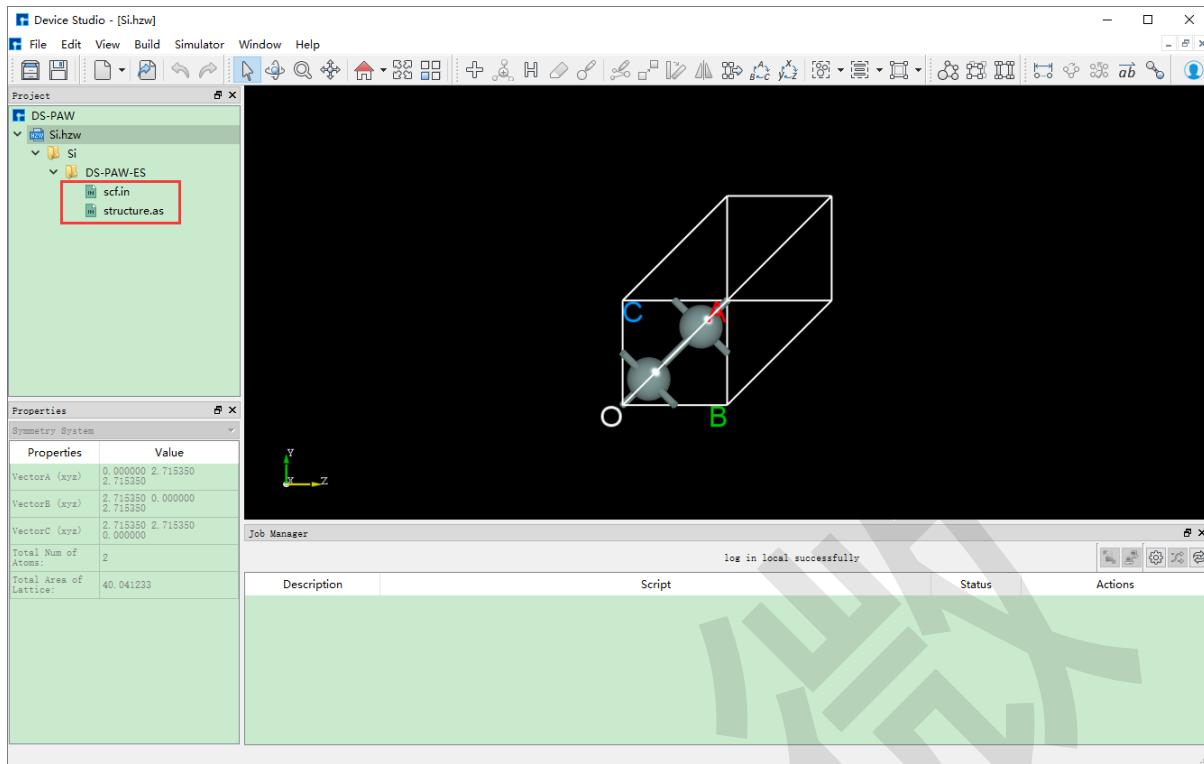
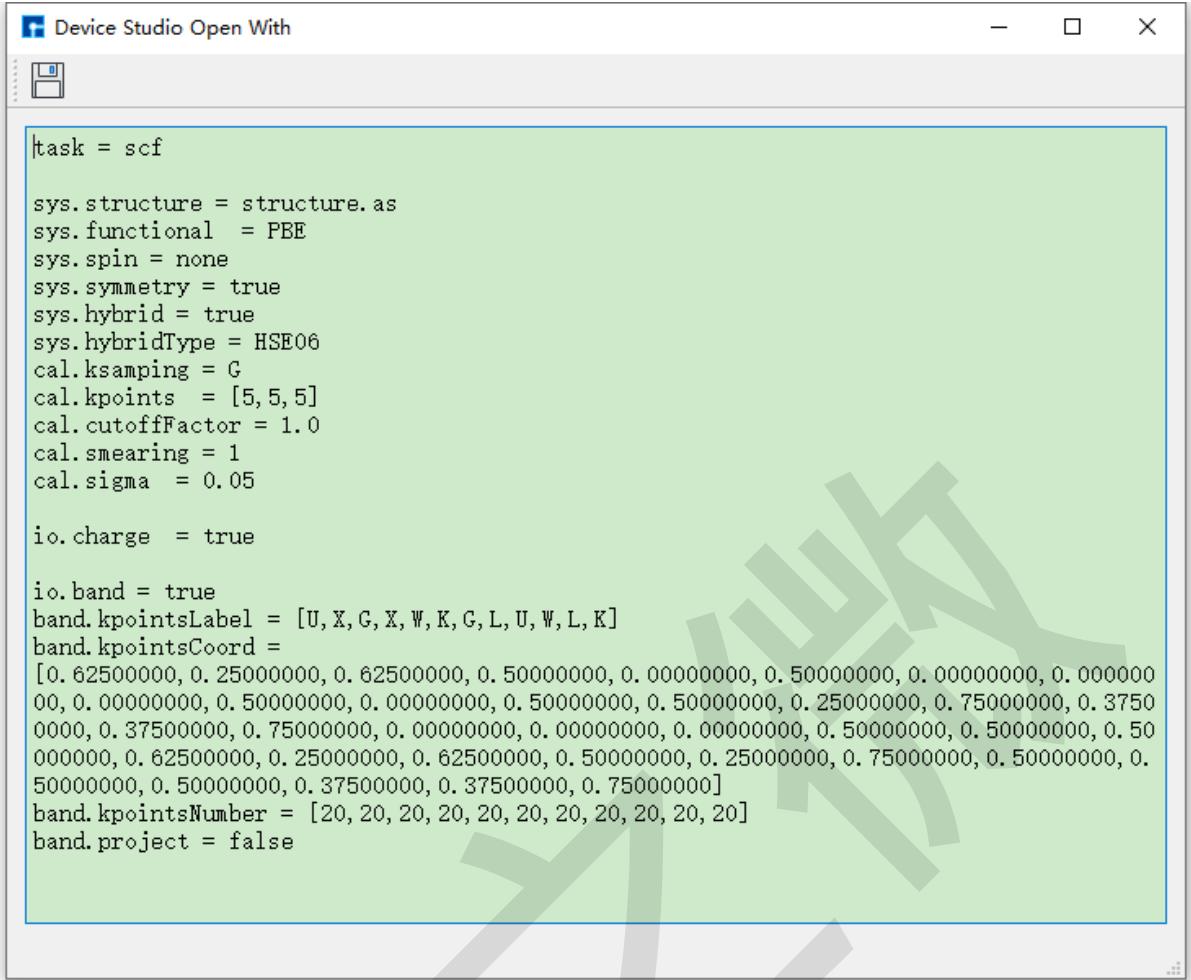


图 10.106: 生成 Si 晶体结构杂化泛函能带计算输入文件的 Device Studio 界面

10.10.5 DS-PAW 计算

在做 Si 晶体结构杂化泛函能带计算之前，需连接装有 DS-PAW 的本地电脑或服务器，具体连接过程这里不做详细说明，用户可参考 [Nanodcal 连接服务器](#) 节内容。这里以在本地电脑上计算为例，连接好装有 DS-PAW 的本地电脑后，在做计算之前，用户可根据需要打开输入文件并查看文件中的参数设置是否合理，若不合理，则可选择直接在文件中编辑或重新生成，最后再进行 DS-PAW 计算。如打开 scf.in 文件，在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 scf.in → 右击 → *Open with* 即可查看到 scf.in 文件如图 10.107 所示。对于其他输入文件，用户可根据需要选择是否打开查看，这里不做详细说明。



```
task = scf

sys.structure = structure.as
sys.functional = PBE
sys.spin = none
sys.symmetry = true
sys.hybrid = true
sys.hybridType = HSE06
cal.ksampling = G
cal.kpoints = [5, 5, 5]
cal.cutoffFactor = 1.0
cal.smearing = 1
cal.sigma = 0.05

io.charge = true

io.band = true
band.kpointsLabel = [U, X, G, X, W, K, G, L, U, W, L, K]
band.kpointsCoord =
[0.62500000, 0.25000000, 0.62500000, 0.50000000, 0.00000000, 0.50000000, 0.00000000, 0.00000000,
0.0, 0.00000000, 0.50000000, 0.00000000, 0.50000000, 0.50000000, 0.25000000, 0.75000000, 0.3750
0000, 0.37500000, 0.75000000, 0.00000000, 0.00000000, 0.50000000, 0.50000000, 0.50000000, 0.
50000000, 0.62500000, 0.25000000, 0.62500000, 0.50000000, 0.25000000, 0.75000000, 0.50000000,
0.50000000, 0.37500000, 0.37500000, 0.75000000, 0.75000000]
band.kpointsNumber = [20, 20, 20, 20, 20, 20, 20, 20, 20, 20, 20, 20]
band.project = false
```

图 10.107: scf.in 文件

在图 10.106 所示界面中，在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 scf.in → 右击 → Run，弹出 Run 界面，在 Run 界面中点击 Run 按钮则可做 DS-PAW 计算。用户可在 Job Manager 区域中观察 DS-PAW 的计算状态，当 DS-PAW 计算任务处于排队中、计算中和计算完成时，Status 分别为 Queued、Running、Finished。计算完成后，可在 Device Studio 的 Project Explorer 区域中看到结果文件 band.json 和日志文件 DS-PAW.log。

10.10.6 DS-PAW 计算结果的可视化分析

在 Device Studio 的 Project Explorer 区域中选中 `band.json` → 右击 → *Show View*, 则弹出 DS-PAW 计算结果的可视化分析界面如 图 10.108 所示。

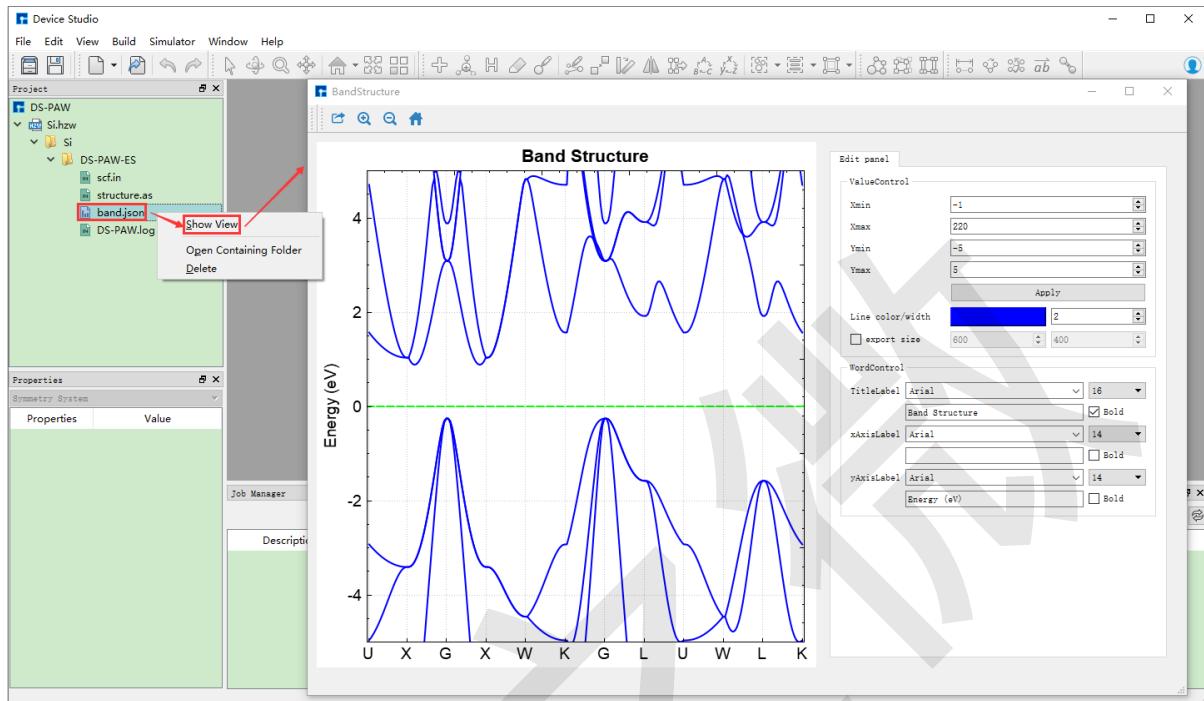


图 10.108: DS-PAW 计算结果的可视化分析界面

注意事项

DS-PAW 的计算结果往往以 `.json` 或 `.h5` 格式存储, 目前 Device Studio 支持 DS-PAW 小于 **68MB** 的 `.json` 格式的结果文件的可视化分析。对于大于 **68MB** 的 `.json` 文件建议用户使用 DS-PAW 辅助工具包 `dspawpy` 进行数据分析。

10.11 BDF 实例

BDF (Beijing Density Functional) 是一个独立完整、具有完全自主知识产权的 量子化学 计算软件包。也是国际上第一个 基于现代密度泛函理论、能准确计算分子体系基态总能量的完全相对论密度泛函程序 (早期的类似程序因数值积分精度太差不能准确计算总能量)。

BDF 官方用户手册网址为: https://bdf-manual.readthedocs.io/zh_CN/latest/index.html

BDF 的研发团队信息：

- 国际量子分子科学院院士刘文剑研发团队。
- 鸿之微研发团队、服务团队。

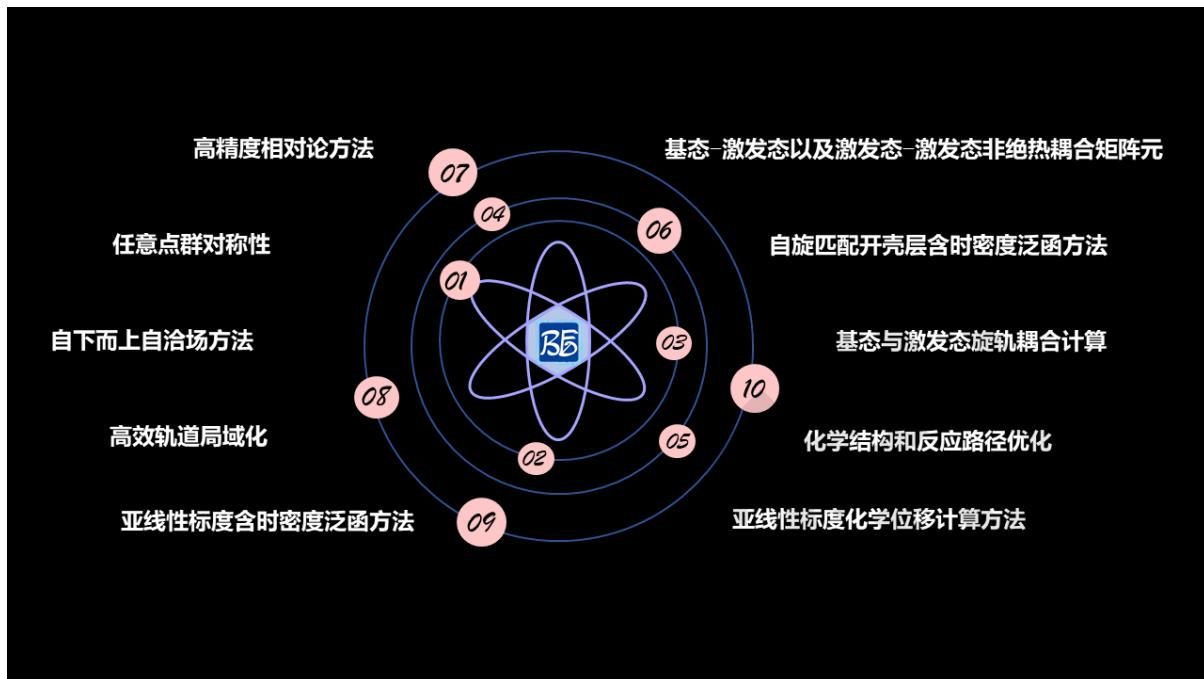


图 10.109: BDF 软件特色图

BDF 软件特色：

1. 高精度相对论方法。
2. 任意点群对称性。
3. 自下而上自治场方法。
4. 高效轨道局域化。
5. 亚线性标度含时密度泛函方法。
6. 亚线性标度化学位移计算方法。
7. 自旋匹配开壳层含时密度泛函方法。
8. 基态与激发态旋轨耦合计算。
9. 基态——激发态以及激发态——激发态非绝热耦合矩阵元。
10. 化学结构和反应路径优化。

以基态分子 CH₂S 完成 sf-X2C/TDDFT-SOC 的自旋轨道耦合计算为例来详细描述 BDF 在 Device Studio 中的应用。

10.11.1 BDF 的发展史

BDF 的研发始于 1993 年，并于 1997 年正式命名。最初的想法是对稀土、锕系、过渡金属、超重元素等小分子体系进行高精度计算，考察这些体系中的相对论效应，因此一开始就采用基于 Dirac 算符的完全相对论密度泛函理论 (4C-DFT) 和近乎完备的基函数“数值基 +STO”(Slater-type orbital)。正因为如此，BDF 对稀土、锕系、超重元素的计算结果一直被作为检验其他近似相对论方法的基准。BDF 对重元素体系电子、分子结构的计算结果被后续 20 余个实验验证。

2009 年开始引入 基于高斯基的解析积分，BDF 进入一个新的发展阶段。

毋庸讳言，BDF 一开始就定位于发展新理论、新方法和新算法的平台，因此是一款“科研软件”。基于 BDF 发展的理论和方法包括：相对论含时密度泛函理论 (4C/ZORA/X2C-TDDFT)、精确二分量 (X2C) 相对论理论、准四分量 (Q4C) 相对论理论、自旋分离的 X2C 相对论理论 (sf-X2C+so-DKHn)、多体有效量子电动力学 (eQED)、相对论核磁理论 (4C/X2C-NMR)、相对论核自旋-转动理论 (4C-NSR)、相对论能带理论 (X2C-PBC)、X2C 解析梯度和 Hessian；激发态 HF/KS 方法 (mom)；基于“用分子片合成分子”(F2M) 思想的轨道局域化方案 (FLMO)、亚线性标度含时密度泛函理论 (FLMO-TDDFT)、亚线性标度 NMR 方法 (FLMO-NMR)、迭代轨道相互作用“自下而上”自洽场方法 (iOI)；自旋匹配开壳层含时密度泛函理论 (SA-TDDFT)、自旋反转含时密度泛函理论 (SF-TDDFT)、基态/激发态-激发态非绝热耦合含时密度泛函理论 (NAC-TDDFT)、含时密度泛函理论解析能量梯度、任意单值/双值点群对称化等。

除了上述相对论/非相对论密度泛函、含时密度泛函理论，BDF 还有基于“先静态再动态又静态”(SDS) 思想的波函数电子相关方法 SDSPT2SDSCI、iCI、iCIPT2、iCAS、iCISCF、SOC-iCI、iCI-SOC，以及直接求解大矩阵内部本征态的 iVI 方法等等。

鉴于 BDF 的现状，首期商业化版本将以荧/磷光材料发光机理和材料设计为主要应用目标，因此不包括 4C/X2C 相对论、波函数电子相关、固体能带/核磁等方法。即首期商业化的 BDF 将以 DFT、TDDFT 为主，包括基态与激发态 KS、QM/MM、FLMO-TDDFT、SF-TDDFT、NAC-TDDFT、sf-X2C-SA-TDDFT/SOC、SA-TDDFT 解析能量梯度和数值 Hessian、稳定结构和过渡态优化、反应路径优化、隐式溶剂化模型、FLMO-NMR、基于局域轨道 (FLMO) 的性质计算和分析等特色功能。

10.11.2 BDF 计算流程

BDF 在 Device Studio 中的计算流程如 图 10.110 所示。



图 10.110: BDF 计算流程

10.11.3 BDF 创建项目

双击 Device Studio 图标快捷方式，登录并启动 Device Studio，在创建或打开项目界面中(启动软件后选择创建或打开项目的图形界面)，根据界面提示选择创建一个新的项目(*Create a new Project*)或打开一个已经存在的项目(*Open an existing Project*)的按钮，选中之后点击界面中的 *OK* 按钮即可。若选择创建一个新的项目，用户可根据需要给该项目命名，如本项目命名为 BDF，或采用软件默认项目名。

10.11.4 BDF 导入结构

在 Device Studio 的图形界面中点击 *File* → *Import* → *Import Local*, 则弹出导入 BDF 结构文件的界面，根据界面提示找到 CH2S.hzw 结构文件的位置，选中 CH2S.hzw 结构文件，点击 打开按钮则导入 CH2S.hzw 结构后的 Device Studio 界面如 图 10.111 所示。在 Device Studio 中导入结构的其他方法这里不做详细说明，用户可参照导入结构 节内容。

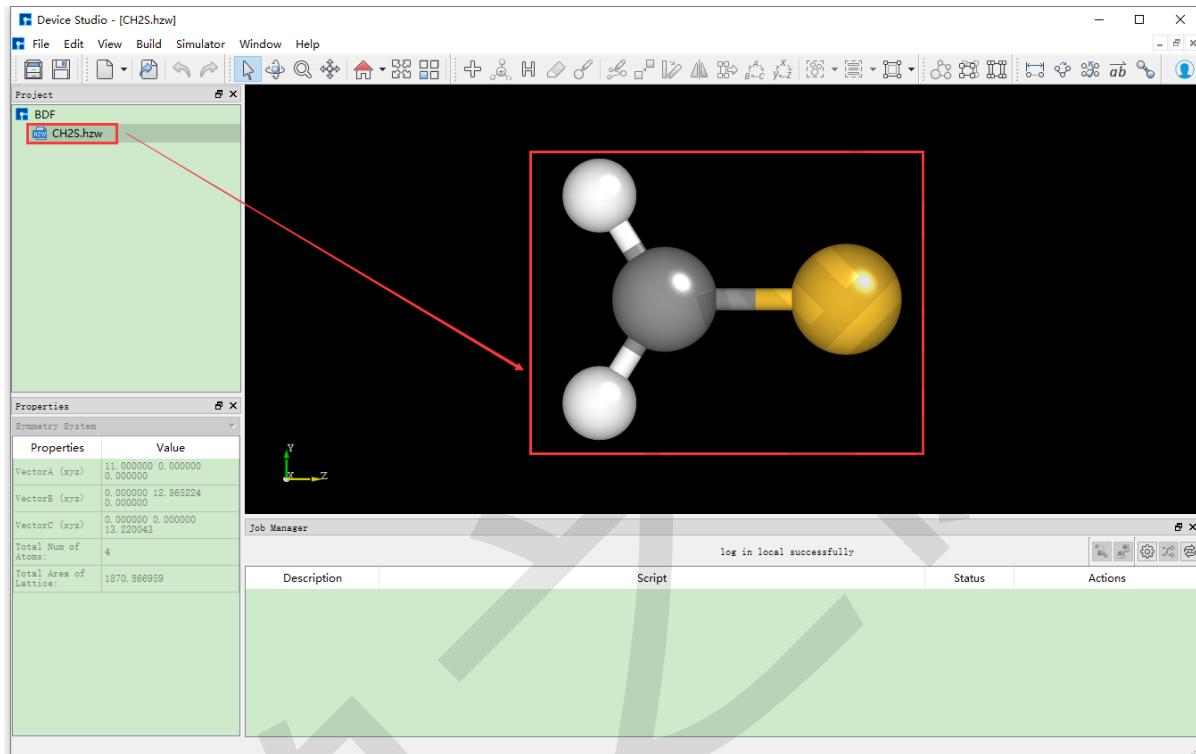


图 10.111: 导入 CH2S.hzw 结构后的 Device Studio 图形界面

10.11.5 BDF 输入文件的生成

在如 图 10.111 所示界面中选中 *Simulator* → *BDF* → *BDF*, 弹出 BDF 的参数设置界面 BDF Job Setup 如 图 10.112 所示。

以生成 基态分子 CH2S 完成 sf-X2C/TDDFT-SOC 的自旋轨道耦合计算的输入文件为例，在如 图 10.111 所示的 BDF Job Setup 界面中，根据计算需要分别选中 *Basic Settings*、*SCF Settings*、*TDDFT Settings* 和 *Preview Script*，设置参数分别如 图 10.112、图 10.113、图 10.114 和 图 10.115 所示，之后点击界面中的 *Generate files* 即可生成输入文件 bdf.inp。

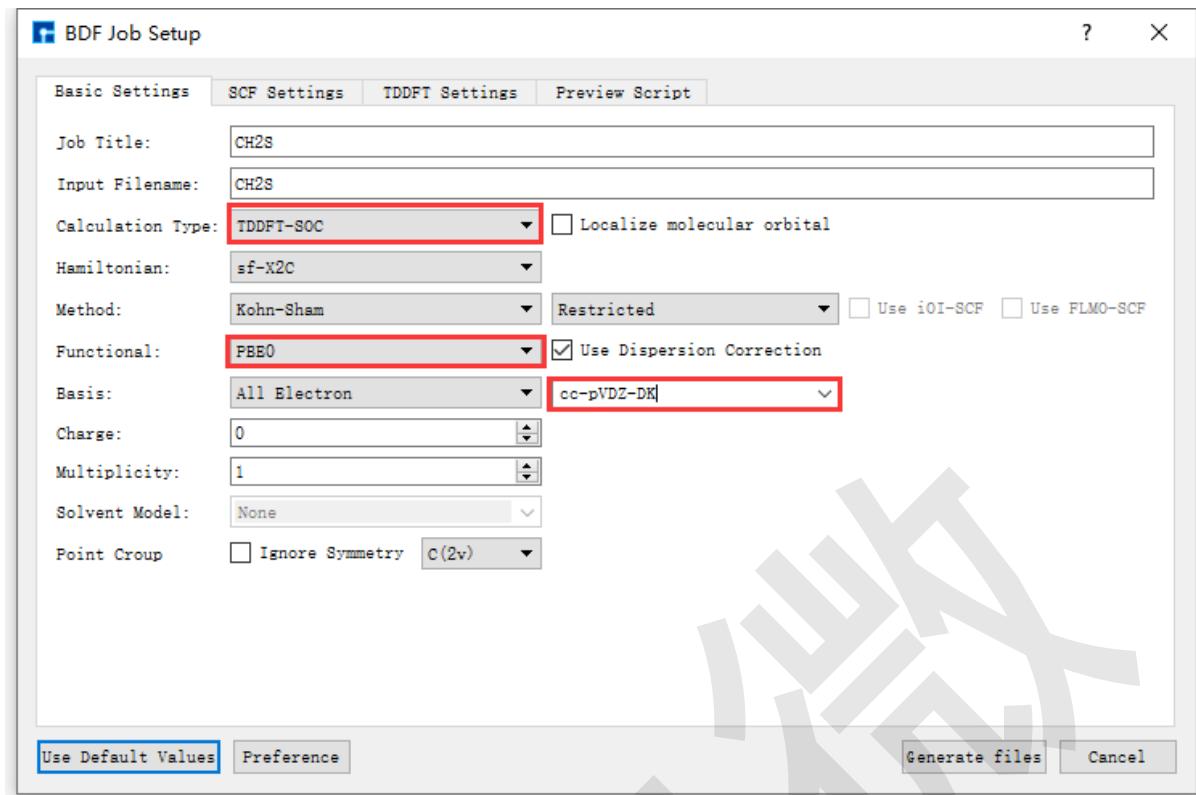


图 10.112: Basic Settings 参数设置界面

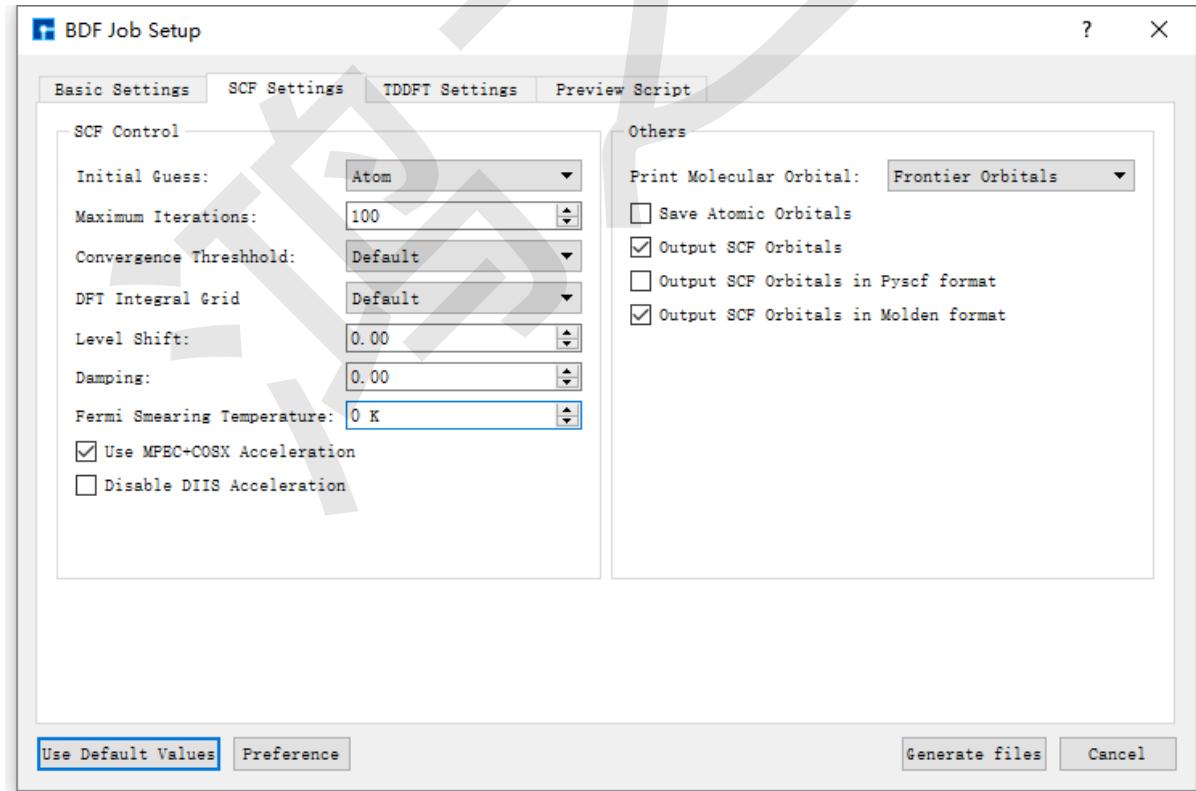


图 10.113: SCF Settings 参数设置界面

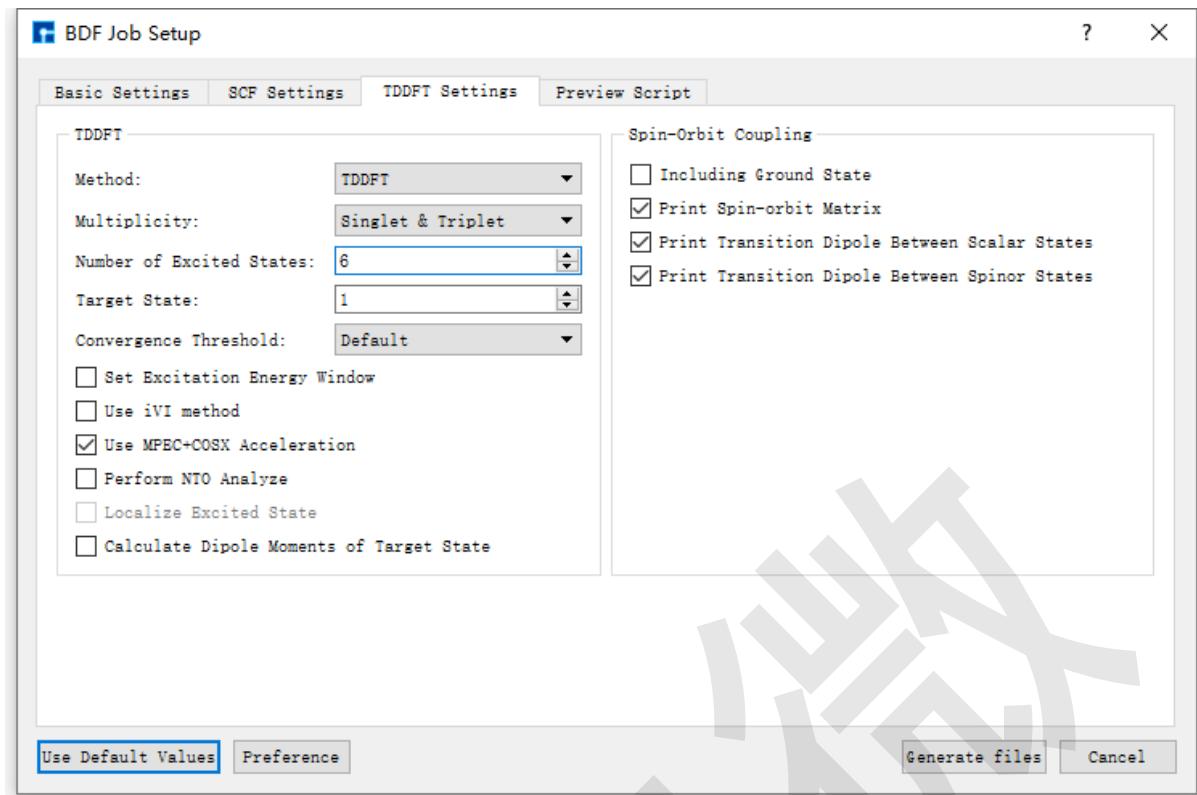


图 10.114: TDDFT Settings 参数设置界面

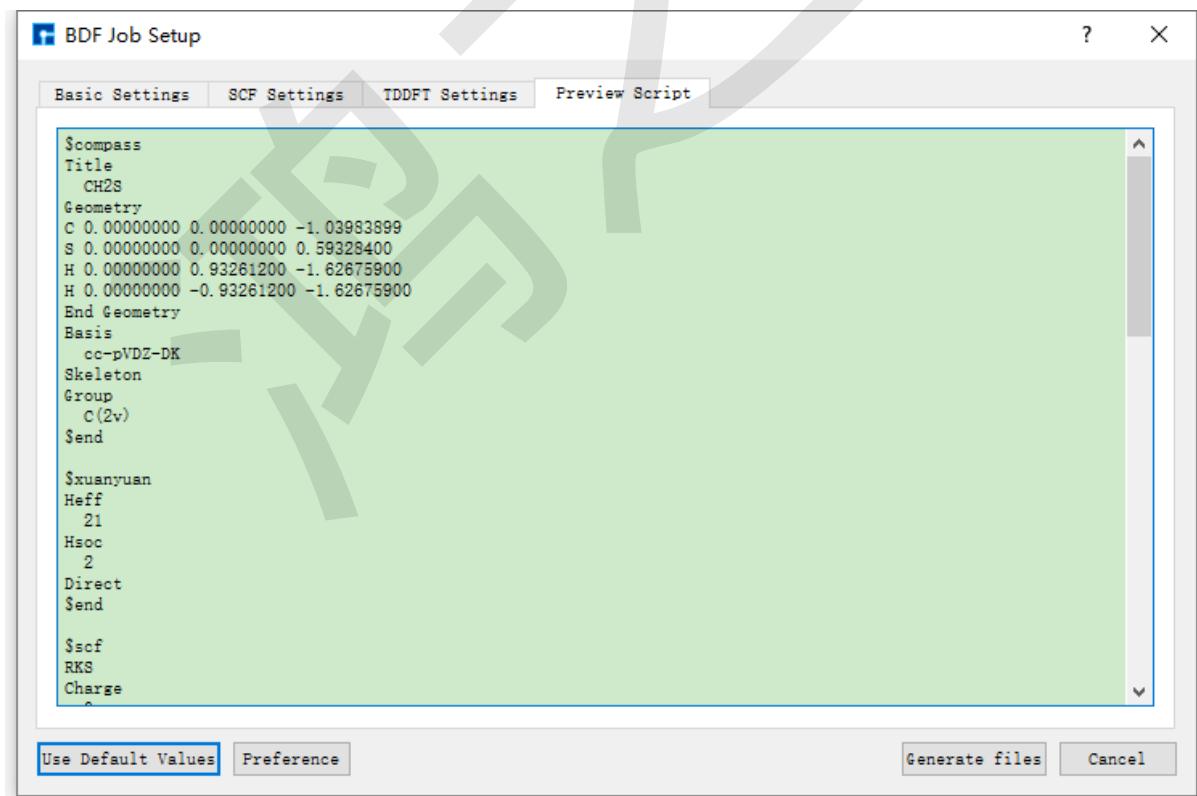


图 10.115: Preview Script 参数设置界面

生成 基态分子 CH₂S 完成 sf-X2C/TDDFT-SOC 的自旋轨道耦合计算的输入文件 bdf.inp 的 Device Studio 界面如 图 10.116 所示。

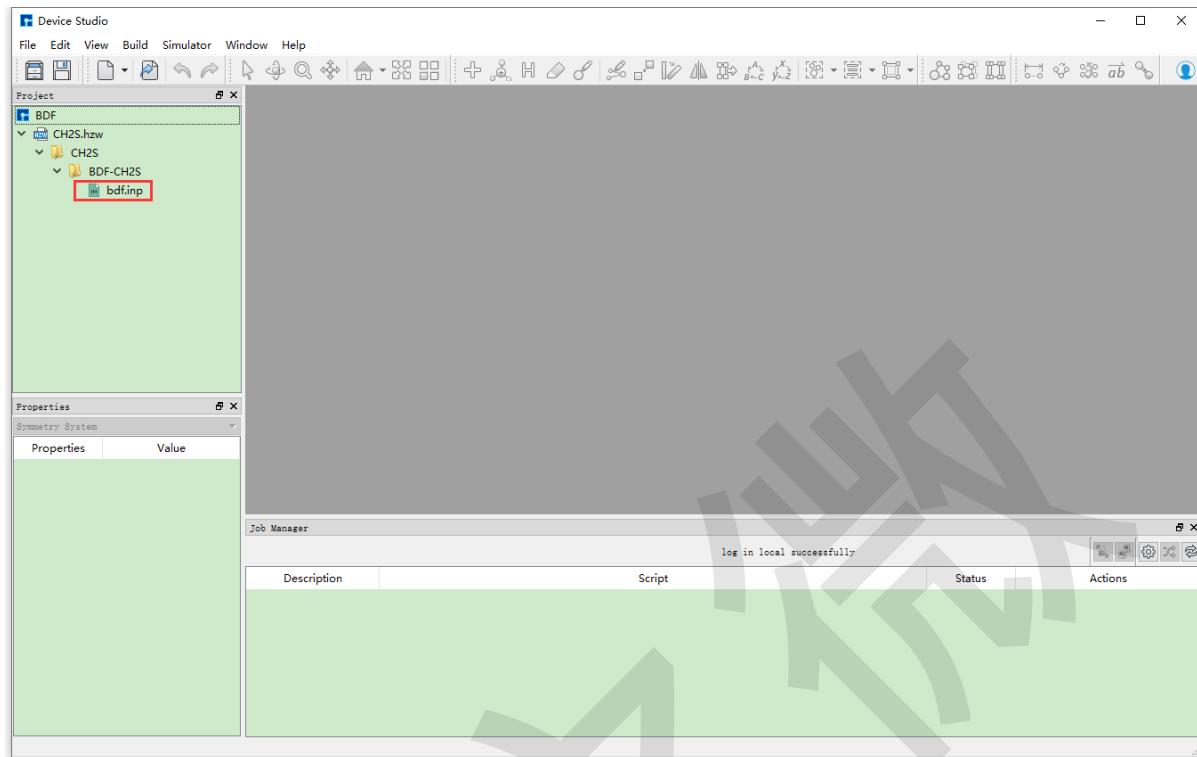


图 10.116: 生成 基态分子 CH₂S 完成 sf-X2C/TDDFT-SOC 的自旋轨道耦合计算输入文件的 Device Studio 界面

10.11.6 BDF 计算

在做 基态分子 CH₂S 完成 sf-X2C/TDDFT-SOC 的自旋轨道耦合计算之前，需连接装有 BDF 的服务器，具体连接过程这里不做详细说明，用户可参考 [Nanodcal 连接服务器](#) 节内容。连接好装有 BDF 的服务器，在做计算之前，用户可根据需要打开输入文件并查看文件中的参数设置是否合理，若不合理，则可选择直接在文件中编辑或重新生成，最后再进行 BDF 计算（这里 BDF 计算指 基态分子 CH₂S 完成 sf-X2C/TDDFT-SOC 的自旋轨道耦合计算）。如打开 bdf.inp 文件，在 Device Studio 的 Project Explorer 区域选中 bdf.inp → 右击 → *Open with* 即可查看到 bdf.inp 文件如下所示。

```
$compass
Title
CH2S
Geometry
C 0.00000000 0.00000000 -1.03983899
```

(续下页)

(接上页)

```
S 0.00000000 0.00000000 0.59328400
H 0.00000000 0.93261200 -1.62675900
H 0.00000000 -0.93261200 -1.62675900
End Geometry
Basis
  cc-pVDZ-DK
Skeleton
Group
  C (2v)
$end

$xuanyuan
Heff
  21
Hsoc
  2
Direct
$end

$scf
RKS
Charge
  0
SpinMulti
  1
DFT
  PBE0
D3
MPEC+COSX
Molden
$end

$tddft
Imethod
  1
Isf
  0
Idiag
```

(续下页)

(接上页)

```
1
Iroot
6
MPEC+COSX
Istore
1
$end

$tddft
Imethod
1
Isf
1
Idiag
1
Iroot
6
MPEC+COSX
Istore
2
$end

$tddft
Isoc
2
Nfiles
2
Imatsoc
-1
Imatrsf
-1
Imatrso
-1
$end
```

备注

在实际计算过程中，用户可通过 [BDF 用户手册](#) 了解各参数的详细意义，从而根据计算

需要合理设置参数。若想详细了解 **BDF**，点击对应紫色或蓝色字体软件名称，或发送邮件到邮箱 support@hzwtech.com 咨询。

在如图 11-5 所示界面中，在 Device Studio 的 Project Explorer 区域，选中 `bdf.inp` → 右击 → *Run*，弹出 *Run* 界面，在 *Run* 界面中点击 *Run* 按钮则可做 BDF 计算。用户可在 Job Manager 区域中观察 BDF 的计算状态，当 BDF 计算任务处于排队中、计算中和计算完成时，*Status* 分别为 *Queued*、*Running*、*Finished*。计算完成后，点击 Job Manager 区域的 Actions 按钮，则弹出 Qsftp Explorer 界面，在该界面中，找到计算结果文件，点击下载按钮即可将计算结果文件从服务器下载到本地，下载后的结果文件可在 Device Studio 的 Project Explorer 区域查看到。

10.11.7 BDF 计算结果的可视化分析

目前 Device Studio 中没接入关于 **BDF** 计算结果的可视化分析功能，用户可自行分析，具体分析过程可参考 **BDF** 用户手册。后续 Device Studio 版本更新将会接入对 **BDF** 计算结果进行数据可视化分析的功能。

科学计算
软件应用实例

CHAPTER 11

常见问题及解决方案

11.1 如何下载 Device Studio 安装包？

Device Studio 安装包下载网址：<https://cloud.hzwtech.com/web/product-service?id=6>，若想了解更多可参考[下载安装](#)节内容。

11.2 如何找到 Device Studio 的快捷方式？

将安装包 DeviceStudio***.zip 放置在本地电脑的英文目录下 → 解压 → 找到 bin 目录下的 *DeviceStudio.exe* 文件 → 右击 → 发送到 (N) → 桌面快捷方式，则电脑桌面具有 Device Studio 快捷方式。

11.3 如何引用 Device Studio？

Device Studio 具有文章引用模板，用户可参考[Device Studio 引用说明](#)节内容。

11.4 如何修改 Device Studio 的背景颜色为白色?

修改 Device Studio 的背景颜色有 2 种，分别为：

1. 修改 Device Studio 主界面中显示原子结构的背景颜色，即修改 Device Studio 中结构 3D 显示区域（3D Viewer）背景颜色，可参考[修改 Device Studio 主界面背景颜色](#)节内容。
2. 修改 Device Studio 中原子结构精修模块背景颜色，及修改[SRM-结构显示区域](#)背景颜色，可参考[修改原子结构精修模块背景颜色](#)节内容。



CHAPTER 12

使用教程下载

- PDF 格式: DeviceStudio2023A_Tutorials.pdf