



实验报告

姓名:黄德勇 学号:222023319210132 专业班级:材料物理3班 成绩:

实验课程	计算材料学		
实验名称	复杂晶体与有机分子的复合材料建模实验		
实验时间	2026年3月25日	实验地点	25-0006-02

一、实验预习

1. 实验目的

学习有机分子的建模

了解晶体建模原理

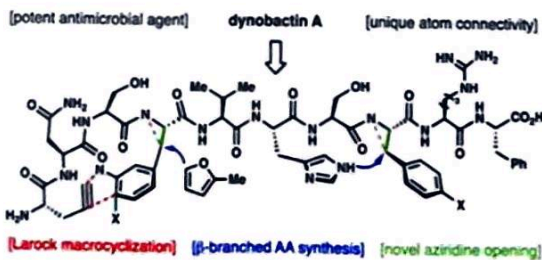
学习晶体建模流程, 如: 断面, 构建孪晶, 建立孪晶胞。

学习晶体-有机复合材料的建模

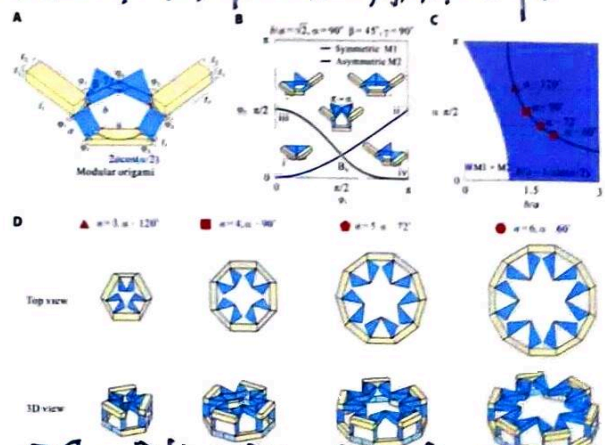
2. 实验原理

晶体学建模与有机建模的区别

相比复杂的多变有机结构而言, 晶体结构是由对称性严格约束的周期性结构。



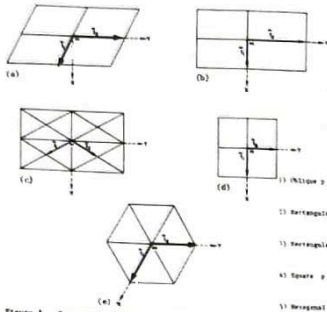
有机结构没有固定的框架, 可选不同的连接键与官能团, 且在研究分子时还能具备超结构, 在建模时相对开放。



晶体 = 晶格 + 晶元, 其中晶格的对称性决定其有限性, 在三维中仅230种空间群。

晶格的平移周期性

所有晶格点是等价的,实际上,230种空间群是建立在14种初基晶格上的,也即晶格对称性 = Bravais 晶格 + 对称操作. 这也就是说当我们确定晶格所属空间群的具体对称形式后,剩下的就是确定空间群名称及其晶格参数.



不同的空间对称性决定了晶格参数

TABLE 16

(1) Oblique p	$a_1 \neq a_2$	$\alpha = 90^\circ$	γ
(2) Rectangular p	$a_1 \neq a_2$	$\alpha = 90^\circ$	γ_{2a}
(3) Rectangular c	$a_1 \neq a_2$	$\alpha = 90^\circ, 90^\circ, 120^\circ$	γ_{2a}
(4) Square p	$a_1 = a_2$	$\alpha = 90^\circ$	γ_{2a}
(5) Hexagonal p	$a_1 = a_2$	$\alpha = 120^\circ$	γ_{2a}

Figure 5. Generators of the two-dimensional translation groups: (a) Oblique p, (b) Rectangular p, (c) Square p, and (d) Hexagonal p.

High-Resolution

Space Group Diagrams and Tables

其所对应的唯一空间群

Triclinic

(For the enlarged unit cells, click [here](#))

- 1. P1
- 2. P1

Monoclinic

(For a fuller list with alternative unique axes, origins, or enlarged unit cells click [here](#))

- 3. P121
- 4. P1211
- 5. C121
- 6. P1m1
- 7. P1c1

晶格当中的威科夫位置

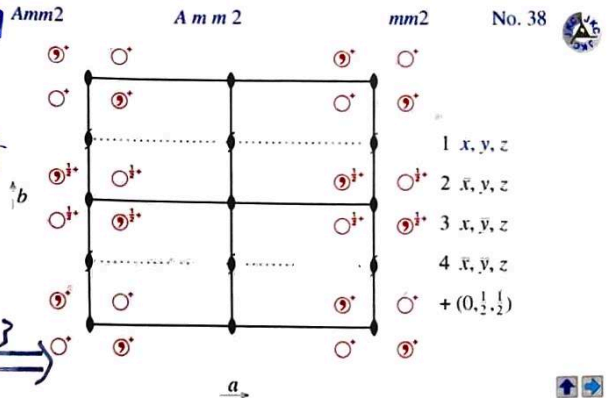
在晶格中,原子不能任意放置,其位置遵循晶体学中的 Wyckoff 位置,定义为,晶体空间群中具有相同点阵对称性的一组等效点.

特殊位置:点位于对称性元素(如旋转轴、镜面或反演中心上). 这些位置的坐标通常是固定的(如, 0, 0, 0)或受限的

(如, x, x, x), 其重性小于一般位置.

一般位置:点不位于任何对称元素上. 每个空间群只有一个一般位置,其重性最高,且坐标没有任何对称性限制.

确定的空间群 $\xrightarrow{\text{决定了}}$ 晶格 $\xrightarrow{\text{决定了}}$ 坐标



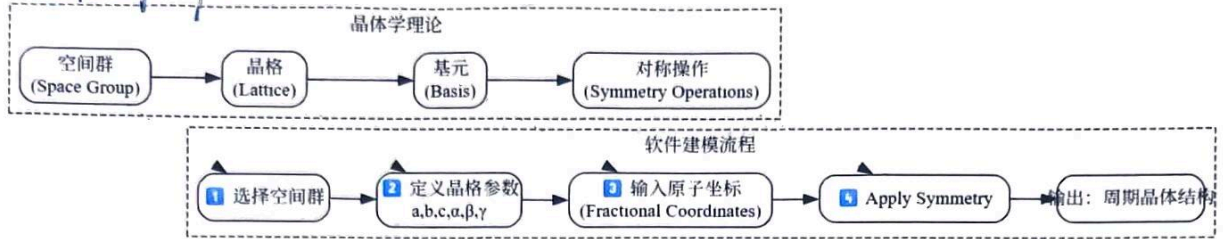
在晶体学中,分数坐标 (Fractional coordinates) 是一种用于描述原子在晶体单位格子(晶胞)内位置的坐标系,并将晶胞的基矢视为单位长度

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

- 优点在于:
- 与晶格参数解耦
 - 方便周期变换
 - 方便对称操作

晶体建模的标准流程

即通过ICSD检索空间群、晶格参数及非对称单元坐标，并利用其对称性自动还原完整晶体结构。



二、实验过程

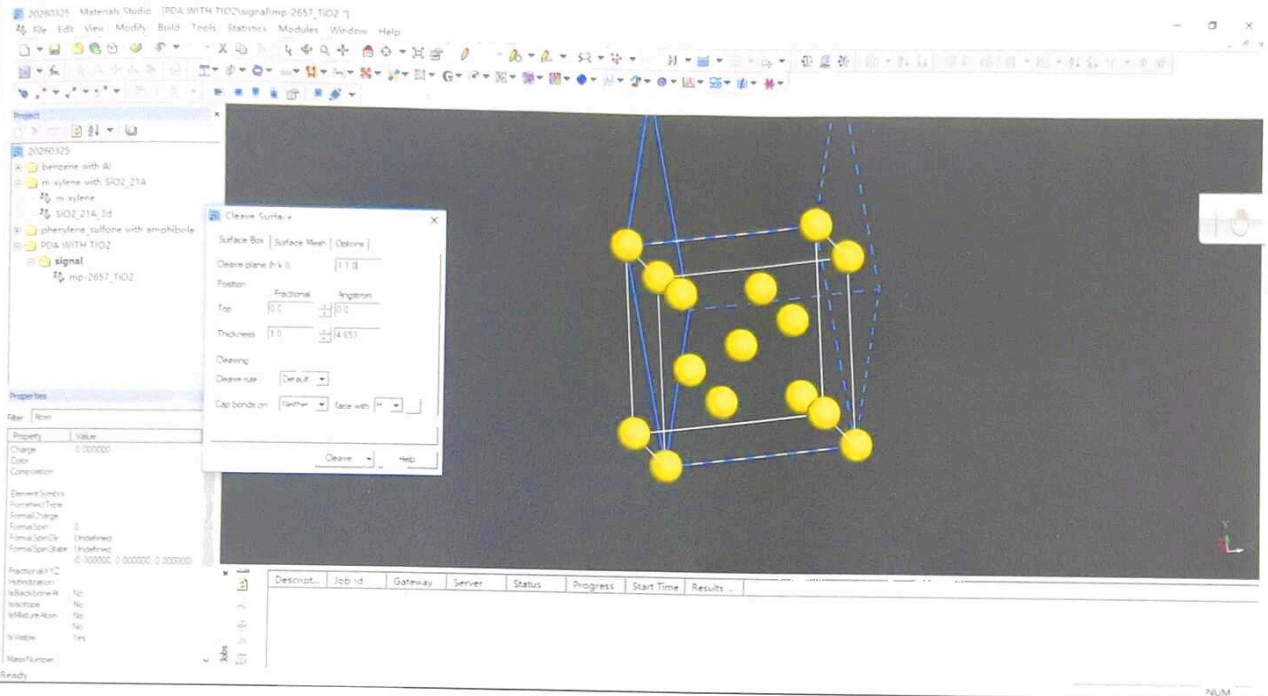
1. 实验过程记录

对于复合结构模型来说，为了表示其为复合结构，考虑分子间作用力的作用长度范围，范德华力的作用范围是3 Å到15 Å。当低于3 Å时，一般倾向于开成化学键。

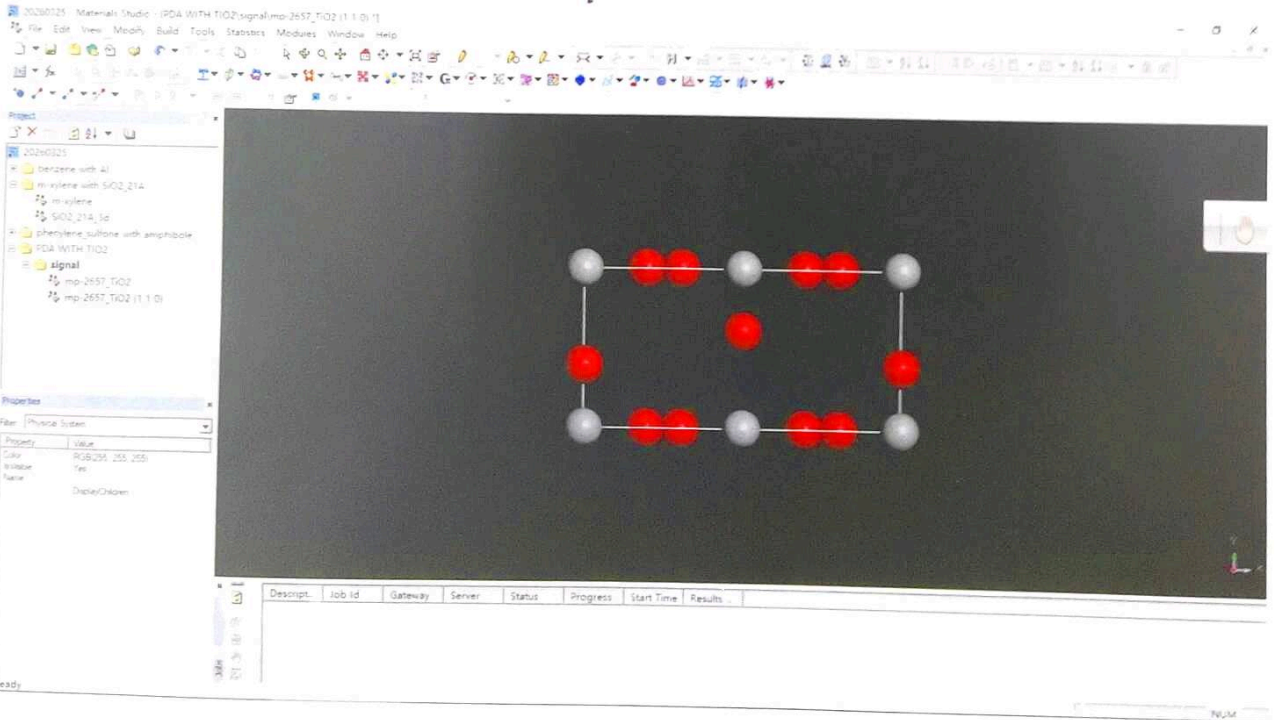
考虑在氧化铁表面附着PDA，首先下载TiO₂的晶体结构文件。

Material Details		Lattice Parameters	
Final Magnetic Moment	0.000 μ_B	a	4.653 Å
Magnetic Ordering	NM	b	4.653 Å
Formation Energy / Atom	-3.475 eV	c	2.969 Å
Energy Above Hull / Atom	0.037 eV	Volume	64.292 Å ³
Density	4.13 g/cm ³	Final Structure	
Decomposes To	Ti, O	Fractional Coordinates	
Band Gap		Ti	
		O	

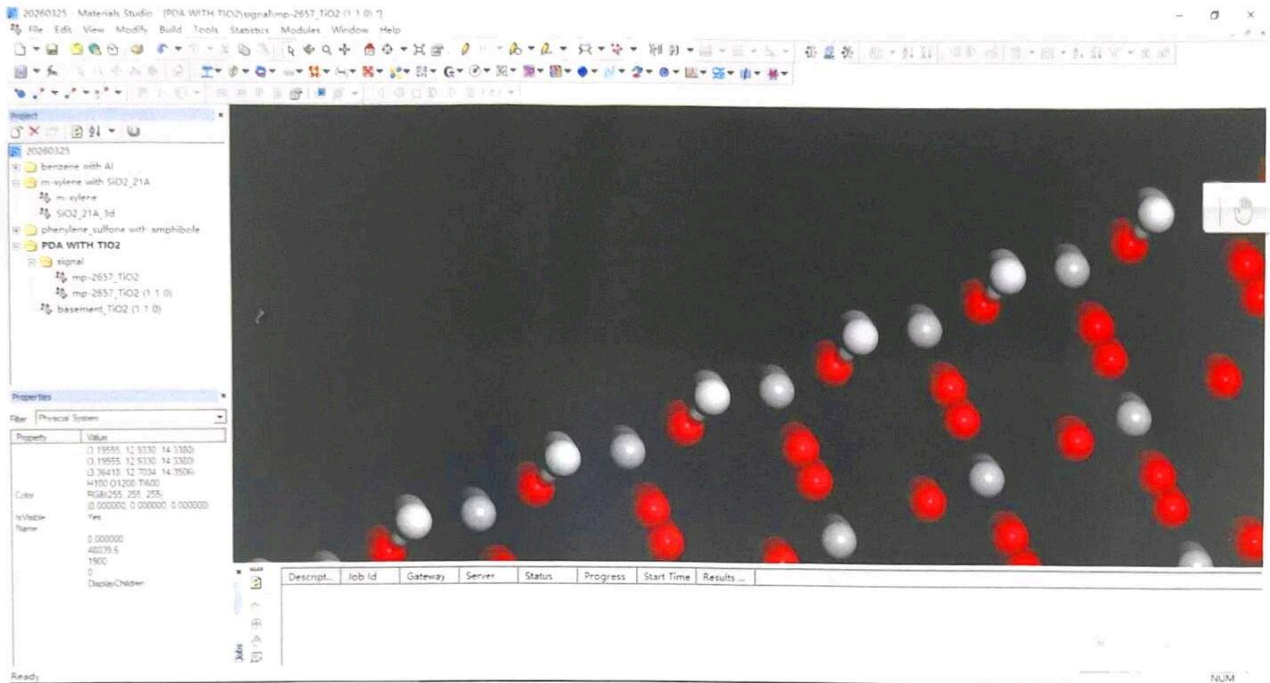
考虑最低能的(110)面, 它是 Rutile 的最稳定表面, 进行截取.



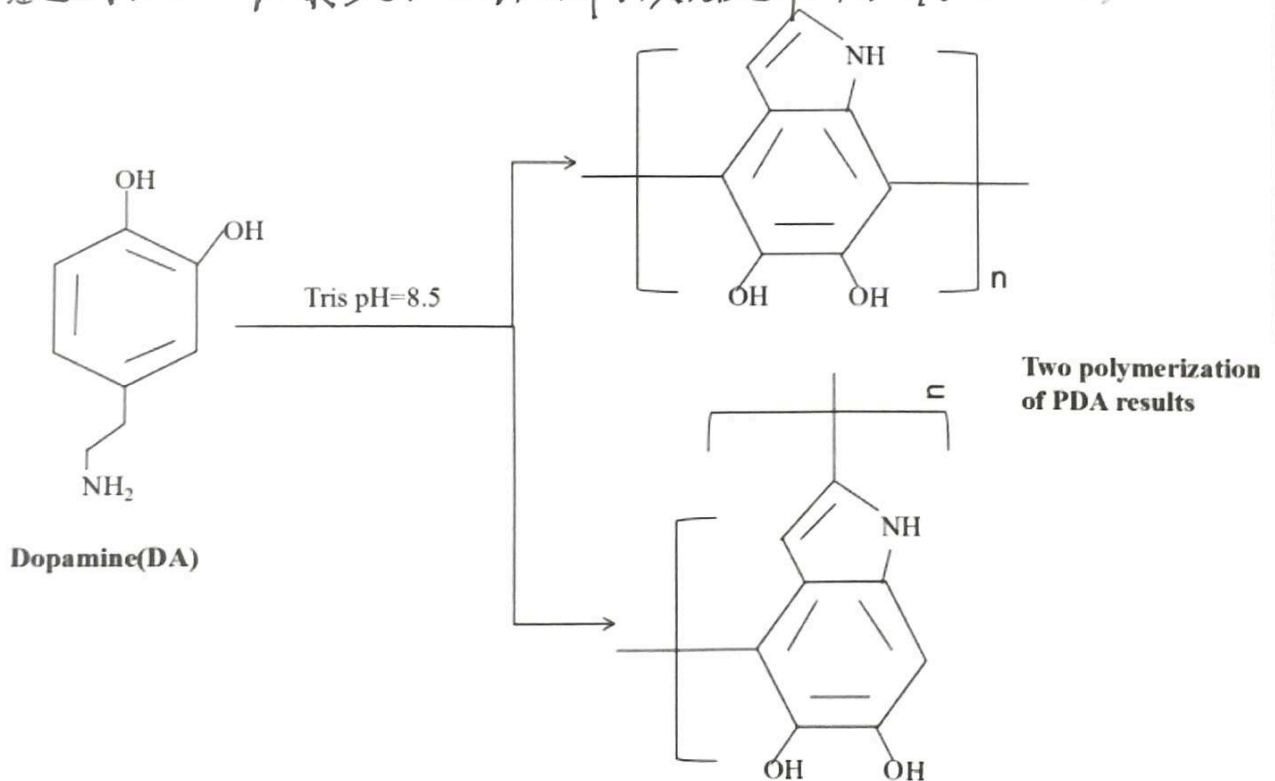
截取其最小的重复周期后, 重建晶体, 且设置真空层为0.



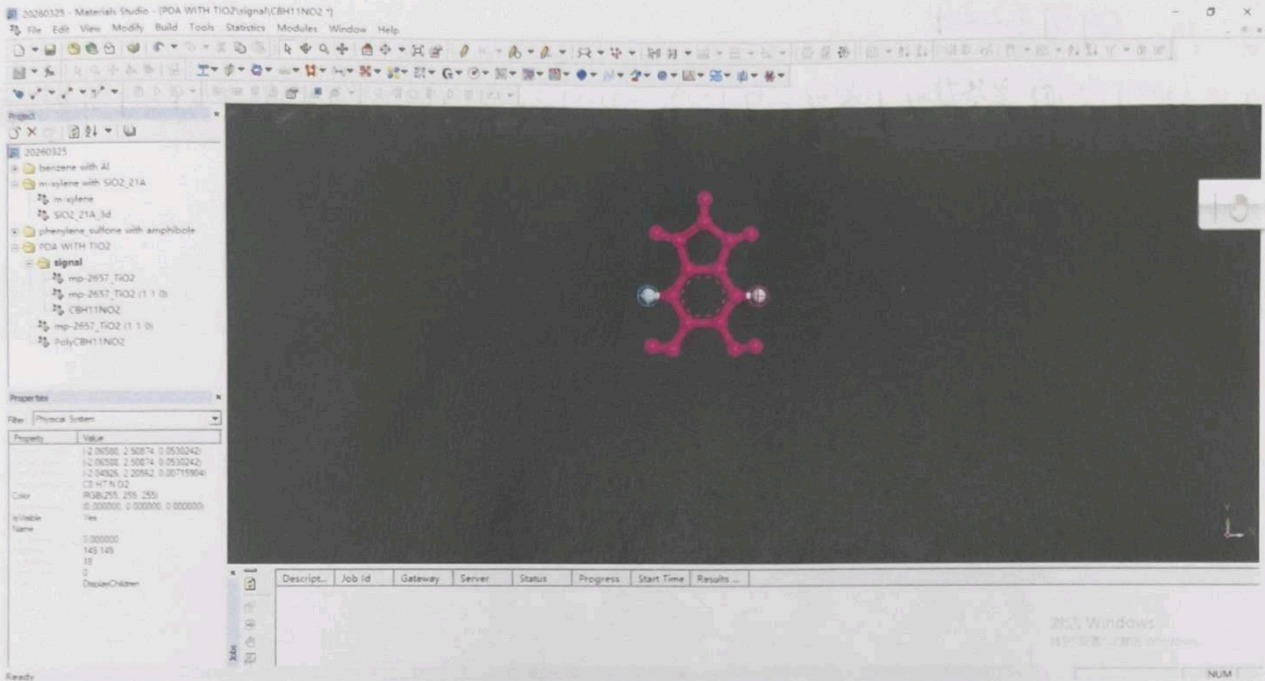
构建长宽高大致在 $30 \times 30 \times 15$ (单位: \AA) 的表面, 并且考虑 TiO_2 表面的 O 需要羟基化, 选择所有的 O 添加批量数值, 即可得到 $-\text{OH}$ 。



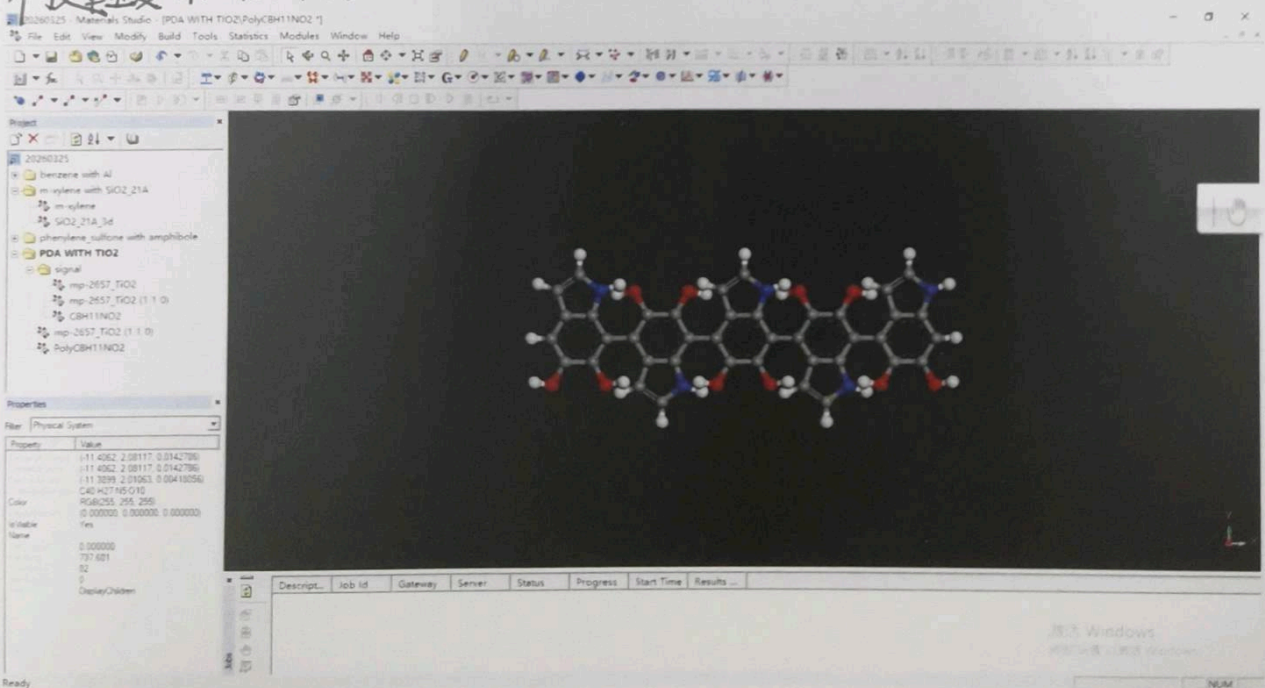
在这里我们绘制聚多巴胺单体结构, 其合成过程如下所示:



为简单处理, 在这里选择直链PDA结构, 选择单体时, 重复单元头和尾都在苯环上, 如下所示:



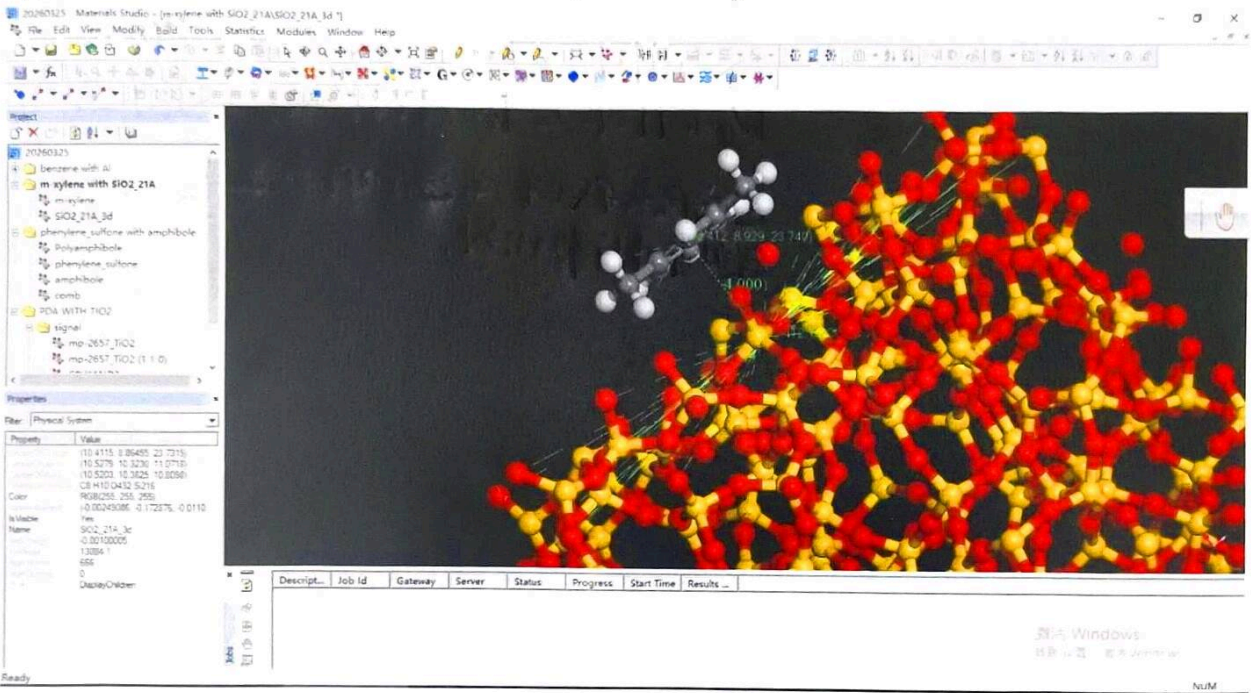
构建重复单元分子, 得到:



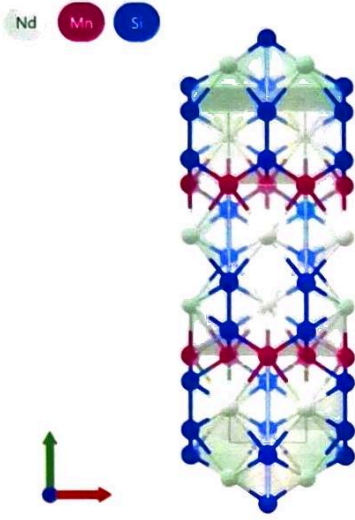
三、分析讨论

1. 实验结果与分析

相同操作办法还可得到表面 $m\text{-xylene}$ 修饰的 $\text{SiO}_2\text{-ZnO}$.



2. 问题提出与讨论



在 Materials studio 中手动构建 Nd/MnSi₂ (四方 I4/mmm) 结构后, 执行 Find Symmetry 无法识别空间群 (降为 P1), 原因及修正方法是什么?

该问题本质是 对称性被建模细节破坏, 主要来源于 数值和结构输入不规范:

分数坐标精度误差: 微小偏差 (如 0.5 代替 0.5001) 即可破坏对称性, 应使用高精度坐标或几何清理.

Wyckoff 占位不严格: 原子未精确位于对称位置.

应该优先导入 cif, 并进行几何清理, 检查晶格与坐标, 再进行对称性识别.

指导教师签名:

日期:

四、其它

备注：

1. 第四部分（其它）由教师自行规定填写内容，可为课程大纲设置但本实验报告前三部分未包含在内的学习任务。
2. 若本课程不涉及其它内容，教师不需要在第四部分后的“指导教师签名”处签名。

A large, empty rectangular box with a thin black border, occupying most of the page. It is intended for the student to write their name, ID number, and other identifying information.

指导教师签名:

日期: