

◆特邀栏目◆

基于氧化锌原胞的晶格优化方法研究^{*}牙莉荀,黄宝丹,劳妃玲,许钟华^{**},房慧,陈春燕

(广西民族师范学院物理与电子工程学院,广西崇左 532200)

摘要:以氧化锌原胞的晶格优化为例,比较 VASP 计算程序包中 2 种晶格优化方法的差异:一种是状态方程拟合法,先设置参数 ISIF = 2,保持晶格体积不变,优化离子位置,对体积进行缩放计算得到能量与体积之间的关系图($E-V$ 关系图),然后通过 Brich-Murnaphan 状态方程(BM 状态方程)拟合 $E-V$ 图得到平衡体积,最后通过平衡体积重新计算得到晶格参数;另一种是自动优化法,直接设置参数 ISIF = 3,同时优化晶格体积和离子位置,计算完毕直接读取晶格参数。结果表明:对于氧化锌原胞而言,2 种优化方法得到的晶格体积、晶格常数 a 、 b 、 c 的误差为 0.28%、0.11%、0.11%、0.06%;在不同的初始晶格体积条件下,自动优化法得到的晶格体积、晶格常数 a 、 b 、 c 的误差为 0.20% - 0.77%、0.04% - 0.55%、0.04% - 0.55%、0.02% - 0.63%。与实验参考值相比,2 种优化方法得到的晶格常数误差不超过 2%,晶体体积误差不超过 4%,属于合理的误差范围。综上可知,对于类似氧化锌原胞的简单晶格体系,直接采用 ISIF = 3 自动优化即可得到较为准确的晶格参数结果。

关键词:第一性原理 氧化锌 晶格优化 BM 方程拟合 VASP

中图分类号: X123 文献标识码: A 文章编号: 1005-9164(2021)02-0181-08

DOI: 10.13656/j.cnki.gxkx.20210610.005

0 引言

氧化锌(ZnO)是一种宽禁带的半导体材料,因其优良的光电性质而备受关注,有着较长的研究历史。许多研究组曾利用第一性原理对 ZnO 材料进行理论研究,比如关于 ZnO 基本电子结构性质、光学性质和磁学性质的研究^[1-4],关于元素掺杂 ZnO 的性质研

究^[5-8],以及关于 ZnO 本征缺陷的研究^[9-11]等,但目前还没有关于利用不同晶格优化方法优化 ZnO 原胞结构的研究报道。

准确的结构优化是获取可信材料性质的前提。VASP 是一款基于第一性原理计算方法的材料性质计算程序包,在材料计算研究中有着广泛的应用^[12-14]。VASP 程序包中也提供了多种晶体优化的

^{*} 广西高校中青年教师科研基础能力提升项目(2020KY20013),广西民族师范学院科学研究人才启动项目(2019BS002)和中国大学生创新创业训练计划项目(201910604066)资助。

【作者简介】

牙莉荀(1996-),女,在读本科生,主要从事物理学研究。

【**通信作者】

许钟华(1991-),女,讲师,主要从事宽禁带半导体研究,E-mail:gxhuahua@163.com。

【引用本文】

牙莉荀,黄宝丹,劳妃玲,等. 基于氧化锌原胞的晶格优化方法研究[J]. 广西科学,2021,28(2):181-188.

YA L X, HUANG B D, LAO F L, et al. Research on Lattice Optimization Methods Based on ZnO Primitive Cell [J]. Guangxi Sciences, 2021, 28(2):181-188.

方法。一般来说,状态方程拟合法可以得到更准确的结果,但过程非常繁琐;自动优化法的结果会有所偏差,但过程方便简单。2种优化方法的对比研究未见有前人报道。

对于很多研究者,特别是初学者而言,常因如何选择合适的晶格优化方法而困扰。本文以 ZnO 原胞作为晶格优化对象,采用 VASP 计算程序包,分别使用状态方程拟合法和自动优化法对 ZnO 原胞进行晶格优化,对比研究 2 种优化方法所得到晶格体积和晶格参数的差异,并研究在不同的初始原胞体积下,自动优化法所得结果的差异,为一般材料的晶格体积优化方法的选择提供一定指导和参考。

1 计算方法

本文使用基于密度泛函理论(DFT)^[15]的第一性原理方法来研究 ZnO 晶体体积的优化方法,其中使用 VASP 计算程序包进行晶格优化,使用 VESTA^[16]软件进行 ZnO 原胞模型构建以及晶格参数的读取。在具体优化过程中,采用超软赝势(USPP)来描述电子与离子的交换作用,使用 PW91 形式的交互关联泛函来处理关联作用,系统总能量的收敛判据为 1×10^{-5} eV/atom,力收敛判据为 1×10^{-3} eV/Å,布里渊区 k 点网格取样采用 Gamma 方法。 k 网格数目(KPOINTS)以及平面波截断能(ENCUT)在不同优化方法下进行具体的优化后选取。所有计算都进行 2 次计算:一次结构优化计算,一次静态计算。读取静态计算得到的能量作为体系能量。

KPOINTS 取值的优化方法如下:设置 ENCUT 为 500 eV, KPOINTS 分别取点 $3 \times 3 \times 3$, $4 \times 4 \times 4$, $5 \times 5 \times 5$, $6 \times 6 \times 6$, $7 \times 7 \times 7$, $8 \times 8 \times 8$, $9 \times 9 \times 9$, $10 \times 10 \times 10$, $11 \times 11 \times 11$, $12 \times 12 \times 12$, $13 \times 13 \times 13$, $14 \times 14 \times 14$, $15 \times 15 \times 15$, 计算并绘制体系能量和 KPOINTS 取值的关系图,然后根据关系图选取合适的 KPOINTS 值。

ENCUT 取值的优化方法如下:设置 KPOINTS 为 $9 \times 9 \times 9$, ENCUT 取值分别为 350, 400, 450, 500, 550, 600 eV, 计算并绘制体系能量和 ENCUT 取值的关系图,然后根据关系图选取合适的 ENCUT 值。

ZnO 原胞模型的构建方法如下:使用 VESTA 软件构建纤锌矿 ZnO 的原胞模型,其空间群为 P63mc (NO. 186),每个纤锌矿 ZnO 原胞包含 4 个原子(其中 2 个 Zn 原子,2 个 O 原子),Zn 原子与 O 原子各自以密堆积的方式排列, Zn 原子位于相邻 4 个

O 原子所形成的四面体中心, O 原子位于相邻 4 个 Zn 原子所形成的四面体中心。ZnO 原胞的晶格参数参考多篇实验研究数据^[17-21]后选取,采用的晶格参数为 $a = b = 3.2493 \text{ \AA}$, $c = 5.2054 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$ 。

状态方程拟合法优化 ZnO 原胞的步骤如下:设置参数 ISIF = 2,即在优化过程中保持晶格体积不变,只优化离子位置。对 ENCUT 和 KPOINTS 参数进行优化测试后选定 ENCUT 和 KPOINTS 的取值。在保持原始晶格 $c/a = 1.602$ 不变的情况下,对原胞体积进行缩放,缩放系数分别为 0.80, 0.85, 0.90, 0.95, 1.00, 1.05, 1.10, 1.15, 1.20。经过缩放后,初始体积发生了变化,计算并绘制体系能量与体积之间的关系图($E-V$ 图)。然后根据 Brich-Murnaghan 状态方程^[22](BM 状态方程)对 $E-V$ 图进行拟合,得到平衡体积 V_0 ,其中 BM 状态方程如下:

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0 B_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^3 B'_0 + \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \right\}, \quad (1)$$

其中 V_0 , E_0 , B_0 , B'_0 分别为平衡体积、平衡态能量、平衡态弹性模量和弹性模量的一阶导数。最后将得到的平衡体积再次进行优化计算,得到晶格参数。

自动优化法优化 ZnO 原胞的步骤如下:设置参数 ISIF = 3,即在优化过程中同时优化晶格的体积和离子位置。对 ENCUT 和 KPOINTS 参数进行优化测试后,选定 ENCUT 和 KPOINTS 的取值,直接对 ZnO 原胞进行晶格优化,即可得到优化后的晶格体积和晶格参数。

测试不同初始体积下自动优化法优化结果的步骤如下:设置 ISIF = 3, ENCUT 和 KPOINTS 参数选取测试后的取值,在保持原始晶格 $c/a = 1.602$ 不变的情况下,对初始体积进行缩放,缩放系数分别为 0.80, 0.85, 0.90, 0.95, 1.00, 1.05, 1.10, 1.15, 1.20, 得到不同初始体积的 ZnO 原胞。直接对不同初始体积的 ZnO 原胞进行晶格优化计算,得到优化的结果。

2 结果与分析

2.1 ZnO 原胞模型的构建

图 1 是在 VESTA 软件中构建的纤锌矿 ZnO 原胞模型,其中灰色大球代表锌(Zn)原子,红色小球代表氧(O)原子。

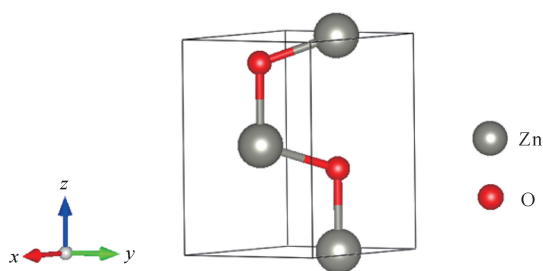


图1 纤锌矿 ZnO 原胞模型

Fig.1 Model of wurzite ZnO primitive cell

2.2 状态方程拟合法

2.2.1 KPOINTS 和 ENCUT 参数优化

在设定 ISIF = 2 的情况下,优化 KPOINTS 和 ENCUT 参数,以保证计算过程能够稳定地收敛。图 2a 为 ISIF = 2 时,体系能量 (Energy) 随 KPOINTS 取值的变化,其中横坐标数字 n 代表 KPOINTS 取值为 $n \times n \times n$ (n 从 3 变化到 15)。从图 2a 可以知道,随着 KPOINTS 取值的增大,整个体系的能量逐渐降低。在 KPOINTS 取值为 $6 \times 6 \times 6$ 以上,整个系统的能量基本趋于稳定,说明 KPOINTS 取值大于 $6 \times 6 \times 6$,系统计算就可以达到很好的收敛效果。KPOINTS 取值越大,计算结果越精确,但同时所需要的计算量也越大。综合考虑,在此部分计算中 KPOINTS 取值为 $9 \times 9 \times 9$ 。

图 2b 为 ISIF = 2 时,体系能量随 ENCUT 取值的变化。从图 2b 可知,随着 ENCUT 取值增大,体系能量逐渐降低,最后达到稳定平衡状态。当 ENCUT 取值由 500 eV 变到 550 eV 时,能量变化只有 1.4×10^{-3} eV,说明当 ENCUT 取值为 500 eV 时,系统计算已经达到很好的收敛效果。随着 ENCUT 取值变大,计算量也会随之增大。综合考虑,在此部分的计算中,ENCUT 的取值为 500 eV。

2.2.2 E-V 图拟合

选取优化后的计算参数(KPOINTS 取值为 $9 \times 9 \times 9$, ENCUT 取值为 500 eV),在保持晶体 $c/a = 1.602$ 不变的情况下,对体积进行缩放,初始原胞的体积为 47.5953 \AA^3 。缩放后对应的晶体体积为 24.368 8, 29.229 5, 34.697 0, 40.807 0, 47.595 3, 55.097 5, 63.349 3, 72.386 5, 82.2446 \AA^3 。

图 3 为体系能量随晶体体积的变化情况,即 E-V 图。从图 3 可以明显看出,体系能量随着晶体体积的增大呈现先减少后增加的“碗状”变化:体积从 24.3688 \AA^3 增大到 47.5953 \AA^3 的过程中,整个体系能量逐渐降低,而体积从 47.5953 \AA^3 增大到

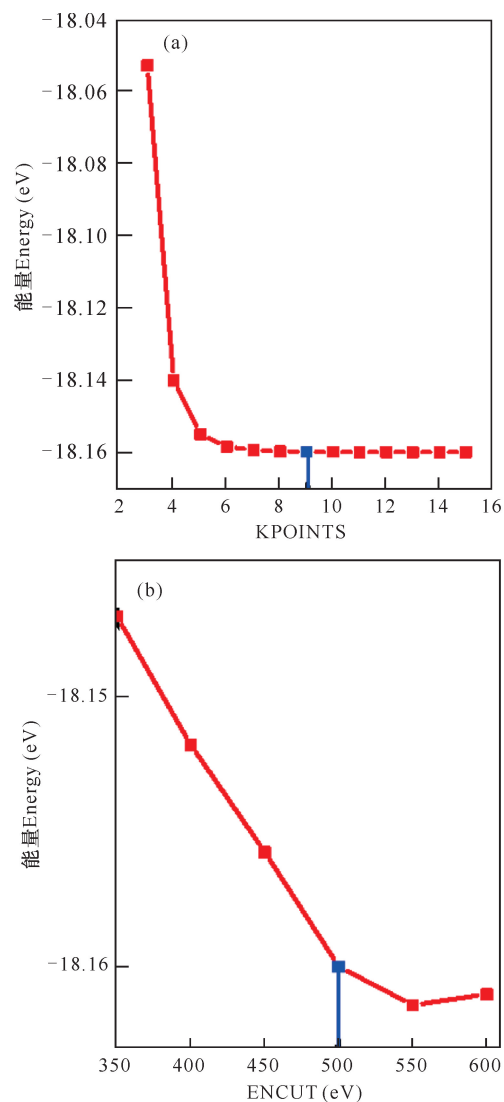


图2 ISIF = 2 时,体系能量随 KPOINTS 和 ENCUT 取值的变化

Fig.2 When ISIF = 2, the system energy changes with the values of KPOINTS and ENCUT

82.2446 \AA^3 的过程中,整个体系能量是逐渐增加的。根据 BM 状态方程的拟合,得到平衡体积 $V_0 = 49.2062 \text{ \AA}^3$,在平衡体积的条件下再次进行晶格优化,得到晶格常数 $a = b = 3.2856 \text{ \AA}$, $c = 5.2635 \text{ \AA}$ 。状态方程拟合法优化结束后,ZnO 原胞仍然保持纤锌矿的结构。

实验过程中,合成方法环境温度以及形貌等因素都会对 ZnO 晶格参数产生影响,不同实验组测量得到的 ZnO 晶格常数也会有所区别^[17-21]。部分实验组测量的实验数据见表 1。由于 ZnO 原胞建模时所采用的晶格参数是参考多篇实验数值获得,故采用建模时所使用的晶格参数 $a = b = 3.2493 \text{ \AA}$, $c = 5.2054$

\AA , 体积 $V = 47.5953 \text{ \AA}^3$ 作为 ZnO 实验参考值来计算优化的数值进行分析比较。相比于实验参考值, 状态方程拟合法得到的晶格常数 a, b, c 均偏大, 误差都为 1.12%, 晶体体积的误差为 3.38%。综上所述, 晶格常数的误差在 2% 内, 晶体体积的误差在 4% 内, 属于合理的误差范围, 证明计算结果的可靠性。

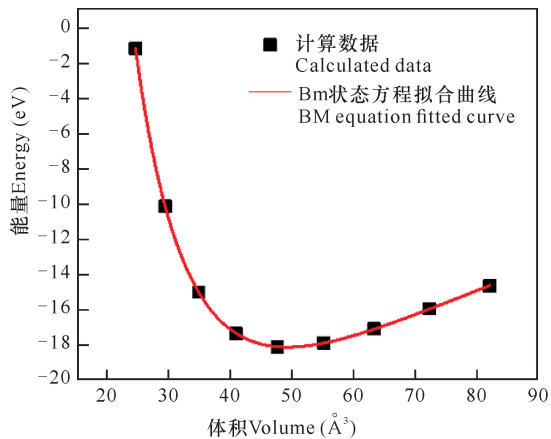


图3 体系能量随晶体体积的变化

Fig. 3 Change of system energy with crystal volume

表1 不同实验组得到的 ZnO 晶格常数

Table 1 ZnO lattice constants obtained from different experimental groups

晶格常数 a, b Lattice constants a, b (\AA)	晶格常数 c Lattice constant c (\AA)	数据来源文献 Data sources reference
3.249 3	5.205 7	[17]
3.249 2	5.205 4	[18]
3.249 5	5.206 6	[19]
3.250 0	5.204 7	[20]
3.249 7	5.205 6	[21]

2.3 自动优化法

2.3.1 计算参数的优化

图 4a 为 ISIF = 3 时, 体系能量随 KPOINTS 取值的变化, 其中横坐标数字 n 代表 KPOINTS 取值为 $n \times n \times n$ (n 从 3 变化到 15)。从图 4a 可以知道, 随着 KPOINTS 取值增大, 整个体系能量逐渐降低。在 KPOINTS 取值为 $6 \times 6 \times 6$ 以上, 整个系统的能量基本趋于稳定, 说明 KPOINTS 取值大于 $6 \times 6 \times 6$, 系统计算就可以达到很好的收敛效果。KPOINTS 取值越大, 计算结果越精确, 同时所需要的计算量也越大。综合考虑, 在此部分计算中 KPOINTS 取值为 $9 \times 9 \times 9$ 。

图 4b 为 ISIF = 3 时, 体系能量随 ENCUT 取值的变化。从图 4b 可知, 随着 ENCUT 取值增大, 体系能量逐渐降低, 最后达到稳定平衡状态。当 ENCUT 取值由 500 eV 变到 550 eV 时, 能量变化只有 1.4×10^{-3} eV, 说明当 ENCUT 取值为 500 eV 时, 系统的能量基本达到最小值并趋于稳定, 说明此时系统计算可以达到很好的收敛效果。随着 ENCUT 的取值变大, 计算量也会随之增大。综合考虑, 在此部分的计算中, ENCUT 的取值为 500 eV。

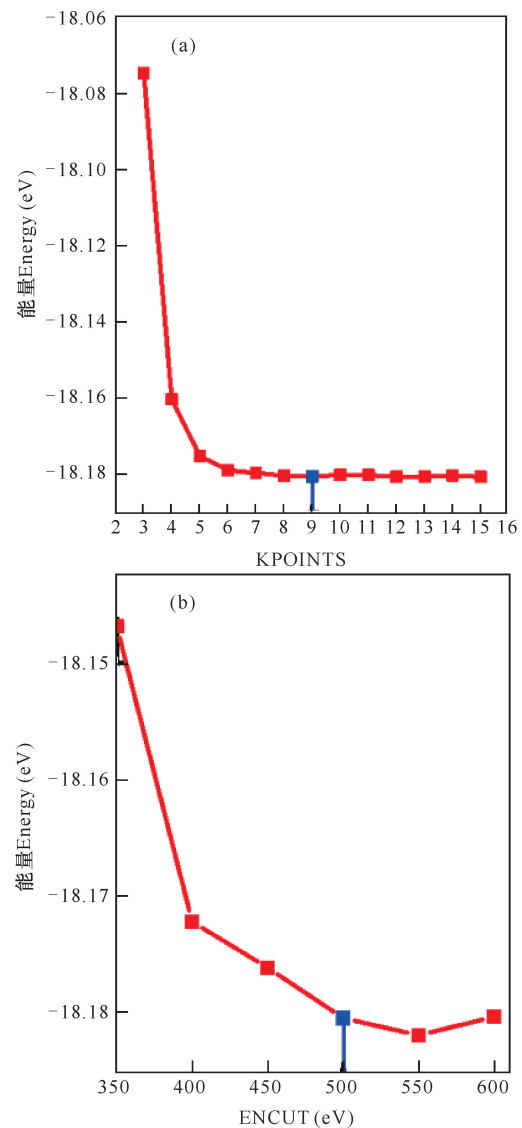


图4 ISIF = 3 时, 体系能量随 KPOINTS 和 ENCUT 取值的变化

Fig. 4 When ISIF = 3, the system energy changes with the values of KPOINTS and ENCUT

2.3.2 自动优化的结果

在 VASP 的计算中, 设置 ISIF = 3, 即在晶格优化过程中, 计算系统会同时优化离子位置和晶格体积。自动优化结束后, ZnO 原胞仍保持纤锌矿结构, 晶格常数 $a = b = 3.2820 \text{ \AA}$, $c = 5.2601 \text{ \AA}$, 晶格体积为 49.0684 \AA^3 。与实验参考值相比, 晶格常数 a, b 的误差为 1.01% , 晶格常数 c 的误差为 1.05% , 晶体体积的误差为 3.1% , 均属于合理的误差范围, 证明计算结果的可靠性。与状态方程拟合法得到的参数相比, 自动优化法晶格常数 a, b 的误差为 0.11% , 晶格常数 c 的误差为 0.06% , 晶体体积的误差为 0.28% 。2 种优化方法的结果相近, 所以对于一般晶格的优化, 直接采用方便快捷的自动优化法即可。

2.3.3 不同初始体积下自动优化的结果

为进一步研究不同的初始体积下使用自动优化法对最后计算结果是否有影响, 本文首先通过不同的缩放系数得到不同的晶格初始体积, 再通过系统自动优化得到晶格参数。初始的晶体体积分别为 $24.3688, 29.2295, 34.6970, 40.8070, 47.5953, 55.0975, 63.3493, 72.3865, 82.2446 \text{ \AA}^3$ 。图 5 为自动优化得到的晶体体积随不同初始体积的变化情况。由图 5 可以看出, 整体而言, 随着初始体积的增加, 优化后体积一直在波动, 无明显的函数关系。

不同初始体积条件下自动优化得到的晶格参数见表 2。对于不同的晶格初始体积, 优化后的体积为 $48.8260 - 49.1084 \text{ \AA}^3$; 晶格常数 a, b 为 $3.2674 - 3.2869 \text{ \AA}$; 晶格常数 c 为 $5.2398 - 5.2968 \text{ \AA}$ 。

不同初始体积下自动优化法得到的晶格参数与

实验参考值的误差见表 3。从表 3 可以看出, 对比实验参考值, 不同初始体积自动优化得到的晶格体积的误差为 $2.59\% - 3.18\%$, 晶格常数 a, b 的误差为 $0.56\% - 1.16\%$, 晶格常数 c 的误差为 $0.66\% - 1.76\%$, 都在合理的误差范围内, 证明在不同的初始体积下, 自动优化法仍能给出合理的优化结果。

不同初始体积下自动优化法得到的晶格参数与状态方程拟合值的误差见表 4。从表 4 可以看出, 对比状态方程拟合值, 不同初始体积自动优化得到的晶格体积误差为 $0.20\% - 0.77\%$, 晶格常数 a, b 的误差为 $0.04\% - 0.55\%$, 晶格常数 c 的误差为 $0.02\% - 0.63\%$ 。整体误差不超过 1% , 证明在不同晶格初始体积的条件下, 自动优化法仍然能给出与状态方程拟合法相似的结果。由此进一步说明, 对于类似 ZnO 原胞晶格体系的优化, 采用方便简单的自动优化法取代状态方程拟合法是可行的。

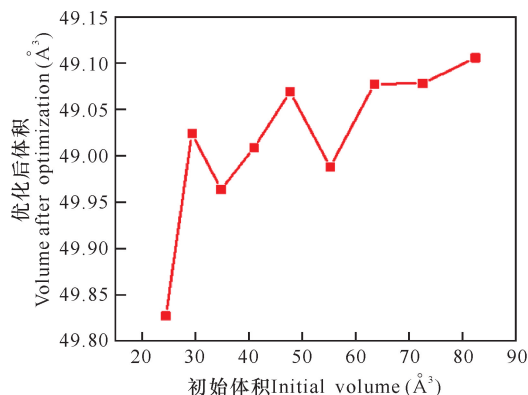


图 5 自动优化后的晶格体积随初始体积的变化

Fig. 5 Change of lattice volume with initial volume after automatic optimization

表 2 不同初始体积下自动优化法得到的晶格参数

Table 2 Lattice parameters obtained by auto-optimization under different initial volumes

初始体积 Initial volumes (\AA^3)	优化后体积 Volume after optimization (\AA^3)	晶格常数 Lattice constants a, b (\AA)	晶格常数 Lattice constant c (\AA)
24.3688	48.8260	3.2700	5.2726
29.2295	49.0251	3.2869	5.2398
34.6970	48.9721	3.2674	5.2968
40.8070	49.0086	3.2731	5.2823
47.5953	49.0684	3.2820	5.2601
55.0975	48.9882	3.2786	5.2624
63.3493	49.0796	3.2764	5.2793
72.3865	49.0781	3.2757	5.2814
82.2446	49.1084	3.2751	5.2866

表3 不同初始体积下自动优化法得到的晶格参数与实验参考值的误差

Table 3 Errors of lattice parameters obtained by auto-optimization under different initial volumes and experimental reference value

初始体积 Initial volumes (\AA^3)	误差 Errors (%)		
	优化后体积 Volume after optimization	晶格常数 a, b Lattice constants a, b	晶格常数 c Lattice constant c
24.368 8	2.59	0.64	1.29
29.229 5	3.00	1.16	0.66
34.697 0	2.89	0.56	1.76
40.807 0	2.97	0.73	1.48
47.595 3	3.10	1.01	1.05
55.097 5	2.93	0.90	1.10
63.349 3	3.12	0.83	1.42
72.386 5	3.12	0.81	1.46
82.244 6	3.18	0.79	1.56

表4 不同初始体积下自动优化法得到的晶格参数与状态方程拟合值的误差

Table 4 Errors of lattice parameters obtained by auto-optimization under different initial volumes and state equation fitted value

初始体积 Initial volumes (\AA^3)	误差 Errors (%)		
	优化后体积 Volume after optimization	晶格常数 a, b Lattice constants a, b	晶格常数 c Lattice constant c
24.368 8	0.77	0.47	0.17
29.229 5	0.37	0.04	0.45
34.697 0	0.48	0.55	0.63
40.807 0	0.40	0.38	0.36
47.595 3	0.28	0.11	0.06
55.097 5	0.44	0.21	0.02
63.349 3	0.26	0.28	0.30
72.386 5	0.26	0.30	0.34
82.244 6	0.20	0.32	0.44

3 结论

与实验参考值相比, 2种优化方法得到的晶格常数误差不超过2%, 晶体体积误差不超过4%, 属于合理的误差范围, 2种优化方法都能得到比较合理的晶体参数结果。使用状态方程拟合法和自动优化法优化得到的晶格体积之间的误差为0.28%, 晶格常数

a, b 的误差为0.11%, 晶格常数 c 的误差为0.06%。在不同的初始体积下, 自动优化法的结果随着初始体积的增加无明显变化关系。与状态方程拟合值相比, 在不同的初始体积下使用自动优化法得到的晶格体积误差为0.20% - 0.77%, 晶格常数 a, b 的误差为0.04% - 0.55%, 晶格常数 c 的误差为0.02% - 0.63%, 误差都不超过1%。可见, 对于类似 ZnO 原胞简单晶格体系的优化, 完全可以使用系统自动优化法代替状态方程拟合法。本研究结果为晶格体积优化方法的选择提供了一定的理论参考价值。

参考文献

- [1] FENG C, CHEN Z Y, LI W B, et al. First-principle calculation of the electronic structures and optical properties of the metallic and nonmetallic elements-doped ZnO on the basis of photocatalysis [J]. *Physica B: Condensed Matter*, 2019, 555: 53-60.
- [2] KALAY M, KART H H, KARTS O, et al. Elastic properties and pressure induced transitions of ZnO polymorphs from first-principle calculations [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2009, 484(1): 431-438.
- [3] ZHANG Z Y. Strain engineering for ZnO nanowires: First-principle calculations [J]. *Physics Letters A*, 2014, 378(16/17): 1174-1179.
- [4] LIU C R, LI J B. Thermoelectric properties of ZnO nanowires: A first principle research [J]. *Physics Letters A*, 2011, 375(30/31): 2878-2881.
- [5] SHEN L, WU R Q, PAN H, et al. Mechanism of ferromagnetism in nitrogen-doped ZnO: First-principle calculations [J]. *Physical Review B*, 2008, 78(7): 073306. DOI: 10.1103/PhysRevB.78.073306.
- [6] ZHANG X D, GUO M L, SHEN Y Y, et al. Electronic structure and optical transition in heavy metal doped ZnO by first-principle calculations [J]. *Computational Materials Science*, 2012, 54: 75-80.
- [7] BAI S L, GUO T, ZHAO Y B, et al. Mechanism enhancing gas sensing and first-principle calculations of Al-doped ZnO nanostructures [J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2013, 1(37): 11335-11342.
- [8] XIE F W, YANG P, LI P, et al. First-principle study of optical properties of (N, Ga) codoped ZnO [J]. *Optics Communications*, 2012, 285(10/11): 2660-2664.
- [9] LYONS J L, VARLEY J B, STIAUF D, et al. First-principles characterization of native-defect-related optical transitions in ZnO [J]. *Journal of Applied Physics*, 2017, 122(3): 035704. DOI: 10.1063/1.4992128.

- [10] BOVHYRA R V, POPOVYCH D I, BOVGYRA O V, et al. First principle study of native point defects in $(\text{ZnO})_n$ nanoclusters ($n = 34, 60$) [J]. *Applied Nanoscience*, 2019, 9(5): 1067-1074.
- [11] ZHENG F B, ZHANG C W, WANG P J, et al. The electronic and magnetic properties with intrinsic defects in ZnO nanosheets: First-principles prediction [J]. *Current Applied Physics*, 2013, 13(4): 799-802.
- [12] 宁华, 李柳杰, 王旭坡, 等. Nb(100)表面吸附和解离氮气的密度泛函理论计算[J]. *广西科学*, 2014, 21(3): 236-240.
- [13] 陶小马, 姚佩, 刘科成, 等. Ta-C化合物物理性质的第一性原理研究[J]. *广西科学*, 2017, 24(6): 545-550.
- [14] 韦柳婷, 童张法, 吴东海, 等. 氧化钙(100)、(110)和 Ca-terminated(111)表面性能的第一性原理研究[J]. *广西科学*, 2015, 22(6): 670-674, 680.
- [15] HOHENBERG P, KOHN W. Inhomogeneous electron gas [J]. *Physical Review B*, 1964, 136(3B): 864-871.
- [16] MOMMA K, IZUMI F. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data [J]. *Journal of Applied Crystallography*, 2011, 44(6): 1272-1276.
- [17] SCHREYER M, GUO L, THIRUNAHARI S, et al. Simultaneous determination of several crystal structures from powder mixtures: The combination of powder X-ray diffraction, band-target entropy minimization and rietveld methods [J]. *Journal of Applied Crystallography*, 2014, 47(2): 659-667.
- [18] BUNN C W. The lattice-dimensions of zinc oxide [J]. *Proceedings of the Physical Society*, 1935, 47(5): 835-842.
- [19] GRAY T J. Sintering of zinc oxide [J]. *Journal of the American Ceramic Society-Gray*, 1954, 37(11): 534-539.
- [20] REEBER R R. Lattice parameters of ZnO from 4.2° to 296°K [J]. *Journal of Applied Physics*, 1970, 41(13): 5063-5066.
- [21] CIMINO A, MAZZONE G, PORTA P. A lattice parameter study of defective zinc oxide [J]. *Zeitschrift Für Physikalische Chemie*, 1964, 41(3/4): 154-172.
- [22] BIRCH F. The effect of pressure upon the elastic parameters of isotropic solids, according to Murnaghan's theory of finite strain [J]. *Journal of Applied Physics*, 1938, 9(4): 279-288.

Research on Lattice Optimization Methods Based on ZnO Primitive Cell

YA Lixun, HUANG Baodan, LAO Feiling, XU Zhonghua, FANG Hui, CHEN Chunyan

(College of Physics and Electronic Engineering, Guangxi Normal University for Nationalities, Chongzuo, Guangxi, 532200, China)

Abstract: Taking the lattice optimization of ZnO primitive cell as an example, the differences of two lattice optimization approaches in VASP package are compared. One approach is the state equation fitted method. Firstly, the parameter ISIF = 2 is set to keep the lattice volume unchanged, the ion position is optimized, and the volume is performed scaling calculation to obtain the E - V diagram. Then, the equilibrium volume is obtained by fitting the E - V diagram with the Birch-Murnaghan equation. Finally, the lattice parameters are recalculated by the equilibrium volume. The other approach is the auto-optimization method. The parameter ISIF = 3 is set directly, the lattice volume and ion position are optimized, and the lattice parameters are read directly after calculation. For ZnO primitive cell, the results show that the error of lattice volume, lattice constants a , b , and c obtained by the two optimization methods is 0.28%, 0.11%, 0.11%, and 0.06%, respectively. Under different initial lattice volume conditions, the error range of lattice volume, lattice constants a , b and c obtained by auto-optimization method is 0.20% - 0.77%, 0.04% - 0.55%, 0.04% - 0.55%, 0.02% - 0.63%. Compared with the experimental reference value, the error of lattice constant obtained by the two op-

timization methods is not more than 2%, and the error of crystal volume is not more than 4%, which belong to a reasonable error range. In summary, for the simple lattice system similar to ZnO primitive cell, the accurate lattice parameters can be obtained by directly using ISIF = 3 auto-optimization.

Key words: first principles, znic oxide, lattice optimization, BM equation fitting, VASP

责任编辑: 陆 雁

投稿指南

1 来稿要求

1.1 稿件要素

稿件内容必须包括题目、作者姓名、作者所在单位、作者所在省份和城市、邮政编码、中文摘要、关键词、英文题目、作者英文姓名、作者英文单位、英文摘要、英文关键词、正文、致谢(非必选)、参考文献等内容。

1.2 题目

应以简明、确切的语言反映稿件的重要思想和内容,一般不超过 20 字。

1.3 作者与单位

多位作者姓名用逗号隔开。所有作者均须注明所在单位全称、省份城市及邮编。

1.4 汉语姓名译法

姓在前名在后,姓用大写字母,名首字母大写(如:欧阳奋发, OUYANG Fenfa)。

1.5 中、英文摘要

用第三人称撰写,应完整准确概括论文的实质性内容,试验研究论文摘要须包含目的、方法、结果、结论 4 个要素。英文摘要与中文摘要内容相对应。

1.6 首页脚注标识要素

资助项目:项目名称(项目编号)。作者简介包括姓名(出生年—),性别,职称或职务,主要研究方向。如有通信作者,请注明 ××× 为通信作者,包括姓名(出生年—),性别,职称或职务,主要研究方向, E-mail。

1.7 稿件正文

试验研究论文应包括引言、材料与方法、结果与分析、讨论、结论等要素。引言须包含研究意义、前人研究进展、本研究切入点、拟解决的关键问题等基本内容,“讨论”与“结论”部分须分开阐述。各层次标题用阿拉伯数字连续编号,如 0; 1, 1. 1, 1. 1. 1……; 2, 2. 1, 2. 1. 1……层次划分一般不超过 3 级。

1.8 参考文献

参考文献表采用顺序编码制组织,其编排格式示例如下:

[1] 陈宝玲, 宋希强, 余文刚, 等. 濒危兰科植物再引入技术及其应用[J]. 生态学报, 2010, 30(24): 7055-7063.

[2] CHEN B L, SONG X Q, YU W G, et al. Re-introduction technology and its annlication in the connervation of endangered orchid [J]. Acta Ecologica Sinica, 2010, 30(24): 7055-7063.

1.9 图和表

稿件可附必要的图和表,表用三线表表示,忌与文字表述重复,表的主题标目要明确。图表名、图表注及图表中所有的中文须有英文对照。图要大小适中,清晰,标注完整;照片尽量选用黑白照片。

1.10 量和单位

量名称及其符号须符合国家标准,采用法定计量单位(用国际通用符号,如面积单位“亩”换算成“公顷 hm²”)。书写要规范化,并注明外文字母的大小写、正斜体及上下角标。容易混淆的字母、符号,请特别注明。

2 注意事项

2.1 本刊已开通网络投稿系统,投稿请登录 <http://gxkx.ijournal.cn/gxkx/ch/index.aspx>,使用网上投稿和查稿系统。我刊审稿周期为 1 个月,1 个月未收到审稿结果可另投他刊。

2.2 稿件一经采用,酌收版面费;刊登后,付稿酬含网络发行(《中国学术期刊(光盘版)》、中国期刊网、万方数据网及台湾华艺 CEPS 中文电子期刊服务网等)的稿酬,同时赠送样刊 2 本。

2.3 本刊入编《中国学术期刊(光盘版)》、中国期刊网、万方数据网及台湾华艺 CEPS 中文电子期刊数据库并已签订 CNKI 优先数字出版合作协议。

2.4 囿于人力、物力有限,本刊只通过期刊采编系统发送“稿件处理意见”,如需纸质意见,请向编辑部索取。