

IMODE应用教程

下载与安装

- 下载：
 - <https://github.com/YueyuZhang/IM2ODE>
- 安装：
 - make

开源协议

- IMODE程序包在General Public License (GPL) 下开源（协议的具体条款见IM2ODE协议.doc）。GPL同其它的自由软件许可证一样，许可社会公众享有：运行、复制软件的自由，发行传播软件的自由，获得软件源码的自由，改进软件并将自己作出的改进版本向社会发行传播的自由。

基本参数介绍

(未加说明的长度单位都是 Å, 能量单位是 eV) ↵

↵

%%%

%%主要输入参数↵

%%晶体结构搜索↵

%%%

↵

SystemName #体系名称, 后面加一个字符串, 长度不超过 20↵

↵

NumberOfSpecies #体系元素种类, 输入整数,范围[1,10]↵

↵

NumberOfElements #每种元素对应的原子个数, 输入 NumberOfSpecies 个, 整数, 范围[1,100]↵

↵

NameOfElements #每种元素对应的元素名称, 输入 NumberOfSpecies 个, 字符串, 长度不超过 2↵

↵

Volumn #初始原胞体积 (大概估一下), 浮点数, 以后每代会自动更新↵

↵

DistanceOfAtom #下面跟着 NumberOfSpecies 行, 每行有 NumberOfSpecies 个数 (浮点型), 输入↵

##元素间的最小距离, 每种元素与其他元素间的距离用一个向量 DIS1, DIS2 表示↵

(例子, 黑色部分写在 de.in 里, 灰色部分隐去不写)↵

↵	DistanceOfAtom =↵	Ti↵	O↵	↵
Ti↵	DIS1=↵	1.6↵	1.2↵	↵
O↵	DIS2=↵	1.2↵	1.0↵	↵

↵

差分演化的参数

Population

#种群数，即每代产生的结构数，整数，范围[4, 500]

MaxStep

#最大代数，即程序总共跑几代，整数

De_ratio

#每代有多少比例的结构直接由 DE 产生，其余随机产生，浮点数，范围(0,1)
##要满足 $\text{De_ratio} * \text{Population} > 4$ ，否则无法进行 DE 的操作（DE 算法本身限制）
##如果想要每代都 random，不用 DE，可以使 $\text{De_ratio} * \text{Population} = 0$

SelectiveDynamics

#只动一部分的原子（仅在输入文件 struct.in 的情况下有效，bool, default = F）
##在 T 时，struct.in 文件的写法有所变化，在原子坐标后面加上 T/F, T 表示由
##vasp 进行位置优化，F 表示固定（见程序包里的 struct.in_selective_dynamics）

对称性优化

Symmetry

spg_front

#是否加上空间群优化, bool, default = T(仅在产生块体结构时有效)

#起始空间群号, default=1



spg_rear

#终止空间群号, default=230, 这两个数限定产生结构选取的空间群范围

1-2

三斜

3-15

单斜

16-74

正交

75-142

四方

143-167

三角

168-194

六角

195-230

立方

其他参数

↵

Pickup

#是否从某一代继续计算, bool↵

###注: 在 **results** 文件夹里一定要有 **de_opt_***. 比如从第 5 代开始跑, 把

###Pickup_step 设成 5, 准备好 **results/de_opt_5** 文件↵

#继续计算的代数, 整数↵

Pickup_step

↵

Mystruct

#输入自己认为比较好的结构的个数, 整数↵

##结构文件放在 **mystruct1**, **mystruct2**, 其中原子种类顺序、要和 **de.in** 的一致↵

##如果遇到有衬底的情况, 先写衬底原子, 再写全局优化的原子↵

↵

多目标优化

```
%%多目标结构搜索（参见 example1）
%%在晶体结构搜索的基础上加下面标签
%%目前支持 free energy & hardness 同时优化和 free energy & bandgap 同时优化
%%

Multi-Objective      #多目标，bool

Hardness              #（计算方法用的 PRB32,7988 && Mat. Sci. & Eng. A209 1996 1-4）是否最大化
                      ##bulk modulus, bool，需同时加 rcut 和 ionicity）

Rcut                  #max bondlength，取一个第一近邻和第二近邻间的数，浮点数
Iconicity             #根据元素不同来取，详细参考 Cohen 的文章（PRB41,10727）

ESflag               #是否考虑 bandgap，bool，需要写 Matrix_elements 来判断哪里有跃迁
Es_mod               #bandgap 的优化方式，整数，范围[1,6]
                      ## 1: maximal bandgap
                      ## 2: minimal bandgap
                      ## 3: a target bandgap
                      ## 4: only direct gap, largest
                      ## 5: only direct gap, largest (recommended)
                      ## 6: a target direct gap
ES_Eg                 #目标 gap，浮点数，当 Es_mod=3/6 时需要设置
ES_opt               #在 es_mod=3/6 时，用于处理直接带隙是否有跃迁的情况，当且仅当 vasp 写
                      ##Matrix_elements 的时候有效，需要直接带隙跃迁把 ES_opt 的值设的和 ES_Eg
                      一样，其余的在 ES_opt 以下有跃迁的都可以
```

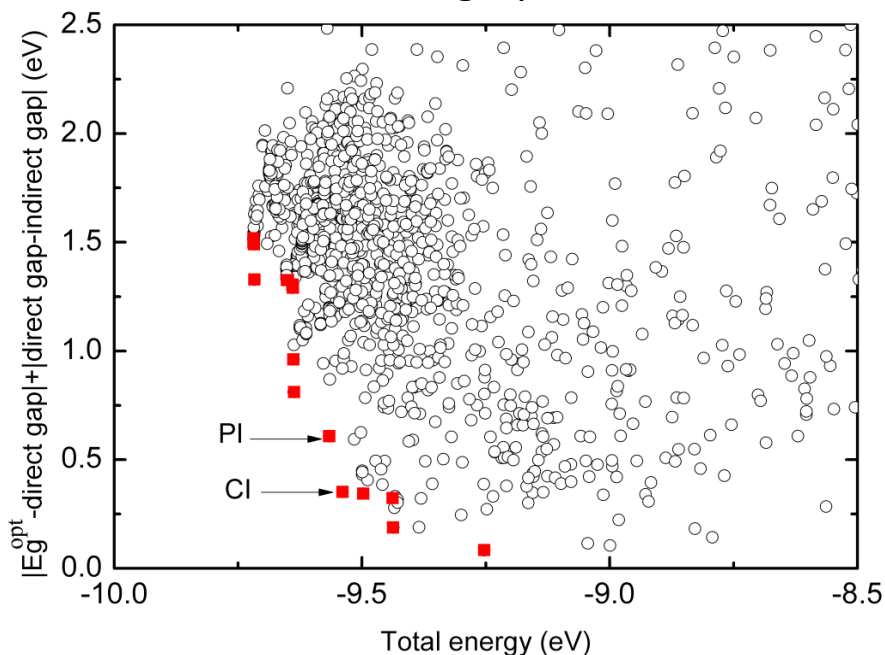
准二维

```
#####  
%%准二维结构搜索（参见 example2）  
%%在晶体结构搜索的基础上加上以上标签  
#####  
  
Q2D                                #准二维, bool  
vacuum_laver                      #真空层，浮点数，需要先测试（通常在 10Å 左右，这里产生的结构真空层沿 c 方向）+  
Area                              #准二维材料原胞在二维平面内投影的面积，浮点数  
  
Laver_hight                       #准二维材料的原子层厚度，浮点数
```

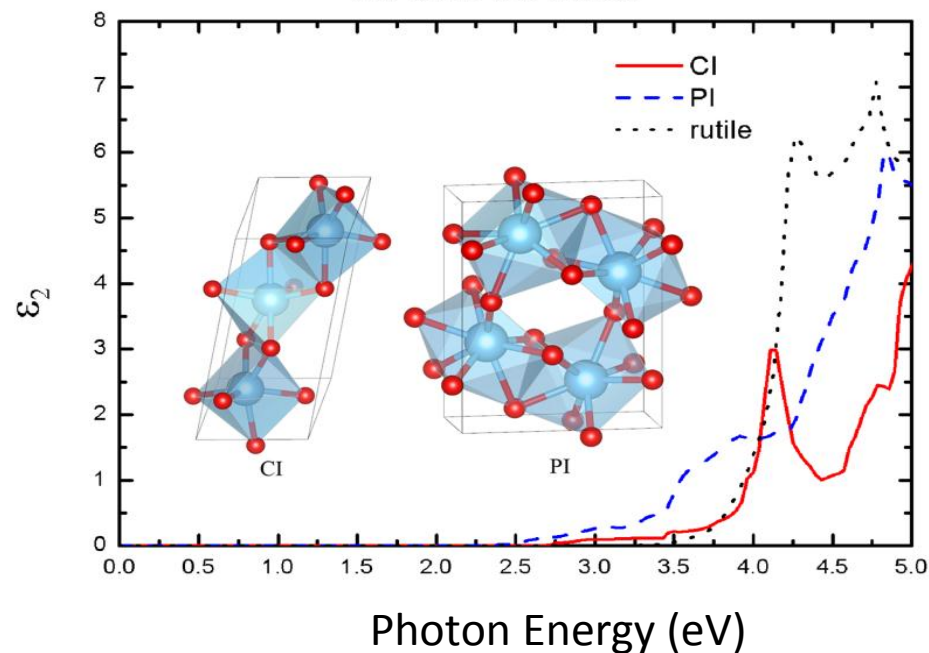
4应用案例

预言具有合适带隙的二氧化钛材料

distribution graph of solutions



Optical Absorption Property of
CI and PI TiO₂



IM²ODE能够设计出有着更强可见光吸收的TiO₂相

HZ Chen, YY Zhang, X Gong, H Xiang, *J. Phys. Chem. C*, **2014**, 118 (5)

输入文件

```
# input file for de
SystemName=TiO
NumberOfSpecies=2
NumberOfElements=4 8
NameOfElements=Ti O
Volumn=132
DistanceOfAtom=
DIS1=1.6 1.2
DIS2=1.2 1.0
Population=30
MaxStep=20
De_ratio=0.6
Symmetry=T
Multi-Objective=T
hardness=F
#rcut=2.5
#ionicity=0.0
ESflag=T
ES_mod=6
ES_Eg=0.8
ES_opt=1.5
```

样例：多目标的TiO2

- results
- vasp_3
- vasp_6
- vasp_9
- vasp_12
- vasp_15
- vasp_18
- vasp_21
- vasp_24
- vasp_27
- vasp_30
- clean.sh
- de.pbs
- INCAR
- INCAR_3
- Matrix_elements
- POSCAR1
- POSCAR4
- POSCAR7
- POSCAR10
- POSCAR13
- POSCAR16
- POSCAR19
- POSCAR22
- POSCAR25
- POSCAR28
- POTCAR
- run_jobs
- vasp.pbs
- zyy-TiO2-1.o957566

- vasp_1
- vasp_4
- vasp_7
- vasp_10
- vasp_13
- vasp_16
- vasp_19
- vasp_22
- vasp_25
- vasp_28
- 976106.node2
- CONTCAR
- de.x
- INCAR_1
- KPOINTS
- OSZICAR
- POSCAR2
- POSCAR5
- POSCAR8
- POSCAR11
- POSCAR14
- POSCAR17
- POSCAR20
- POSCAR23
- POSCAR26
- POSCAR29
- run
- run_pvasp.sh
- writekp.py
- zyy-TiO2-1.o976807

- vasp_2
- vasp_5
- vasp_8
- vasp_11
- vasp_14
- vasp_17
- vasp_20
- vasp_23
- vasp_26
- vasp_29
- 976807.node2
- de.in
- EIGENVAL
- INCAR_2
- log.out
- OUTCAR
- POSCAR3
- POSCAR6
- POSCAR9
- POSCAR12
- POSCAR15
- POSCAR18
- POSCAR21
- POSCAR24
- POSCAR27
- POSCAR30
- run_de
- runvasp
- zyy-TiO2-1.o956035

Any questions?