



CALYPSO 4.0 版本

<http://www.calypso.cn>

# 目 录

第一章 CALYPSO 软件的简介和安装.....	1
一、 程序简介.....	1
二、 CALYPSO 软件特点.....	1
三、 CALYPSO 软件主要技术.....	2
四、 CALYPSO 软件功能： .....	2
五、 扩展阅读.....	3
六、 错误汇报.....	3
七、 CALYPSO 软件的安装.....	4
第二章 CALYPSO 软件输入参数.....	5
第三章 CALYPSO 软件输出文件及结果分析.....	16
八、 CALYPSO 软件的输出文件.....	16
九、 CALYPSO 软件的结果分析.....	17
第四章 CALYPSO 软件高级专题.....	19
十、 结构弛豫跨节点并行模式.....	19
十一、 远程提交结构弛豫模式.....	19
十二、 产生结构同结构弛豫分离模式.....	21

# 第一章 CALYPSO 软件的简介和安装

## 一、程序简介

CALYPSO (Crystal structure AnaLYsis by Particle Swarm Optimization) 是基于粒子群优化算法的晶体结构预测程序，只根据材料的化学配比和给定的外界条件（如压力和温度），就可以寻找体系的基态及亚稳态结构，进而可以开展材料的结构确定，并进行有效的功能材料（如超导，超硬及热电材料等）设计研究。

我们课题组发展了基于粒子群优化算法的晶体结构预测新方法，首次将粒子群优化算法应用到晶体结构预测领域，在此基础上开发了拥有自主知识产权的大型晶体结构预测 **CALYPSO** 软件。**CALYPSO** 软件包受中国版权局的保护，注册号是：2010SR028200，分类号：61000-75。利用 **CALYPSO** 程序，在只给定化学组分和外界压力的条件下对单质、化合物和分子晶体等多种类型的晶体材料进行了结构预测测试，在很大压力范围内得到的结果与实验吻合，证明了该方法的可靠性。**CALYPSO** 软件克服了前人遗传算法无法考虑晶体结构对称性的缺点，大大提高了结构搜寻的收敛速度。**CALYPSO** 软件的最终将适用于各种材料体系的研究，广泛应用于结构现象丰富的研究领域中，如高压结构相变、功能材料的设计（如超导、超硬、热电、能源材料等）以及大分子和大尺度材料体系的结构确定。目前，**CALYPSO** 结构预测方法和程序已被 40 个国家和地区的 700 余位科研工作者签订版权协议来使用。在 **Nat.Chem.**, **Nat.Commun.**, **Phys.Rev.Lett.**, **PNAS** 和 **JACS** 等国际杂志发表论文 110 多篇。

## 二、CALYPSO 软件特点

2.1 在仅给定化学配比或者外界条件（如压力）的条件下，可以预测零维纳米粒子或者团簇，二维层状结构和表面重构以及三维晶体结构的最稳定的或者亚稳的结构。

2.2 通过功能导向进行新型功能材料的设计，例如超硬材料和具有理想带隙

的光学材料。

2.3 结构演化：全局粒子群优化算法、局域粒子群优化算法和对称性人工蜂群算法等。

2.4 变化学组分的结构预测。

2.5 软件兼容性强。支持同目前主流的结构弛豫和总能计算软件（包括 **VASP**，**CASTEP**，**Quantum Espresso**，**GULP**，**SIESTA**，**LAMMPS**，**Gaussian** 以及 **CP2K** 等）的接口，更可以根据用户需求实现与其他代码的接口。

### 三、CALYPSO 软件主要技术

CALYPSO 方法的成功的主要源于其引入的几个强大的结构处理技术：

3.1 通过粒子群算法进行结构演化。

粒子群优化因具有运用种群智能和自学习能力来跨越整个能量区间上的大的势垒的能力而著名。全局粒子群优化算法的优势在于收敛快，而局域粒子群优化算法擅长避免复杂体系结构的早熟，这两种算法都已经在代码里实现。

3.2 对随机结构的产生进行对称性限制，不但降低了搜索空间而且增强了结构的多样性。

3.3 结构特征技术可以采集结构的指纹，消除相似结构同时可以为局域粒子群优化结构搜索分割势能面。

3.4 通过调节每一代引入随机结构的百分比保证结构的多样性。

3.5 对每一个产生的结构进行结构优化，虽耗时，但却有效降低了势能面的噪音，利于产生物理上更加合理的结构，总体上大大提高了全局的收敛速度。从其极精确的密度泛函方法到可以快速处理大体系的半经验方法，卡利普索与大量的局域结构优化代码创建接口，用户可根据体系需要合理选择。

### 四、CALYPSO 软件功能：

4.1 晶体结构预测

- 4.2 分子晶体结构预测
- 4.3 团簇或者纳米粒子结构预测
- 4.4 二维层状结构预测
- 4.5 表面重构结构预测
- 4.6 超硬材料结构设计
- 4.7 光学材料结构设计

## 五、扩展阅读

如果想了解更多的关于卡利普索的方法和程序，请参考以下文献：

1. CALYPSO:A Method for Crystal Structure Prediction, **Comput.Phys.Commun.183,2063(2012).**
2. Crystal structure prediction via particle-swarm optimization, **Phys.Rev.B 82,094116(2010).**
3. Particle-Swarm Structure Prediction on Clusters, **J.Chem.Phys.137,084104(2012).**
4. Predicting Two-Dimensional Boron-Carbon Compounds by the global optimization method, **J.Am.Chem.Soc.133,16285(2011).**
5. An effective Structure Prediction Method for Layered Materials Based on 2D Particle Swarm Optimization Algorithm, **J.Chem.Phys.137,224108(2012).**
6. First-Principles Structural Design of Superhard Materials, **J.Chem.Phys.138,114101(2013).**
7. Self-assembled ultrathin nanotubes on diamond(100)surface, **Nat.Commun.5,3666(2014).**

## 六、错误汇报

虽然 CALYPSO 开发团队和其他用户已经对 CALYPSO 软件包进行了大量的测试，但由于新功能的不断添加和算法的不断完善，因此我们不能保证没有任何错

误。当您在使用过程中发现任何问题，请随时和我们联系，我们将非常高兴地接受用户提出的宝贵建议和批评。

如果发现程序中的错误，用户可以通过电子邮件发送输入和输出文件的副本到 CALYPSO 开发团队（calypso@calypso.cn），谢谢大家的理解与支持。

## 七、CALYPSO 软件的安装

CALYPSO 软件需要在 Linux 或者 Mac 系统下安装，大家根据自己的系统下载适应自己操作系统的 calypso 软件包。

- 1) 解压 CALYPSO 软件包。

```
$tar -zxvf Calypso_*.tar.gz
$cd CALYPSO_*
```

在 CALYPSO\_\* 目录里会有一个 bin 目录，里面就是 calypso 的可执行文件。

（注：为了方便大家使用 calypso，避免编译过程产生的问题，从 4.0 版本以后我们将直接发布 calypso 的可执行文件）。

- 2) 运行 CALYPSO 软件。

一个快速测试 CALYPSO 的方法：

运行如下命令：

```
$cd CALYPSO_*/Tests
$cp ../bin/calypso.x.
$./calypso.x>caly.log &
```

（注：在 Examples 目录下提供了一些运行 CALYPSO 的例子。）

- 3) 下面以立方 BN 为例，详细地介绍一下如何进行晶体结构预测。

在此例子中，几何优化采用的是 VASP 程序包，因此需要事先安装 vasp 软件。

```
$mkdir BN #到工作目录建立一个新的文件夹
$cd BN
$cp path-to-package/Examples/BN/* ./
$cp path-to-package/bin/calypso.x ./
```

当前目录下应该包含以下文件：

- ✓ input.dat: CALYPSO 的输入文件
- ✓ calypso.x: CALYPSO 的执行文件
- ✓ INCAR\_\*和 POTCAR: VASP 的输入文件

```
$. /calypso.x>caly.log&
```

- 4) CALYPSO 如果运行成功的话，会产生 VASP 输出文件和一个名为“results”

的目录。

## 第二章 CALYPSO 软件输入参数

由于 CALYPSO 软件的结构演化需要利用其它软件对其产生的结构进行弛豫，因为在运行 CALYPSO 软件的时候需要调用其它结构弛豫软件。针对不同的结构弛豫软件需要用户自己设置相应地输入文件。例如，如使用 VASP 进行局部弛豫，需要 VASP 的输入文件 (INCAR\_\*) 和赝势文件 (POTCAR)；如使用 SIESTA 进行局域弛豫，需要 SIESTA 的输入文件 (sinput\_\*) 和赝势文件 (\*.psf) 等。具体的输入文件命名规则请参考我们发布软件包种 Examples 里面的实例。

**input.dat** 是 CALYPSO 软件的核心输入文件，包含结构预测需要的所有参数。各参数的顺序是任意的。对于有默认值的参数，如果省略，程序会按照默认值进行处理。

输入参数的一般语法是：“tag labels” = “value1 value2 value3...”

对于以矩阵形式输入的参数的语法是：

```
@tag  
xx xx...  
xx xx...  
...  
@End
```

输入的参数是区分大小写的并且通过空格分开。因此一定要注意输入参数的 tag 的正确性。#后面的文本都是注释。逻辑变量的取值是 T(True) 或者 F(False)。

下面介绍各个输入变量和设置方法以及个人经验，希望对刚刚接触 CALYPSO 的用户有一些帮助。大家在使用过程中，有什么心得可以随时联系我们，及时更新这个说明书!!!

**SystemName=string:**命名预测体系（通常最大 40 个字符）。

默认值:CALYPSO

**NumberOfSpecies=integer:**预测的体系包含的元素种类的个数。

默认值:这一参数没有默认值，用户必须提供相应数值。（以后简称无）

例如，对于  $MgB_2$  体系，包含 Mg 和 B 两种元素，这个参数的值设置为“2”。



**NameOfAtoms=string1 string2...:**每种元素的元素符号，用空格分开。

默认值：无

例如，对于  $\text{MgB}_2$  和  $\text{MgSiO}_3$  体系，这个参数分别被设置为 “NameOfAtoms=Mg B” 和 “NameOfAtoms=Mg Si O”。

**NumberOfAtoms=integer1 integer2...:**一个分子式中每种化学元素的原子个数，用空格分开。

默认值：无

例如，对于  $\text{MgB}_2$  或者  $\text{MgSiO}_3$  体系，这个参数分别设置为 “NumberOfAtoms=1 2” 和 “NumberOfAtoms=1 1 3”。

**NumberOfFormula=integer1,integer2:**定义预测模拟包中所包含的分子式数量。

默认值:1 4

Integer1 和 integer2 分别用来模拟的最小和最大分子式。如果 integer1=integer2，只有模拟一个分子式。例如，“NumberOfFormula=4 4” 意味着在预测中只预测 4 倍分子式的结构；当 “NumberOfFormula=1 4” 意味着分别进行 1，2，3 和 4 倍分子式的预测。

（注：NumberOfFormula 和 NumberOfAtoms 共同决定预测胞内的原子数，如对于  $\text{MgB}_2$ ，如果我们设置 “NumberOfAtoms=1 2”；“NumberOfFormula=4 4”，表明我们预测的胞内包含  $(1+2) * 4$  个原子）

（注：运用该技术时需要特别小心，由于可能的结构特别多，所以搜索空间很大，因此我们建议预测的结果需要利用定胞预测的结果进行验证。）

**Volume=real:**每个分子式的体积（单位： $\text{\AA}^3$ ）

默认值:0

如果用户不能确定体积，请使用默认值 0。CALYPSO 软件将会根据给定元素的离子半径产生一个估测体积。

（注：可以通过利用相似结构进行替换元素，然后进行结构弛豫，根据优化后的结构给出一个初猜的体积。这个参数只对第一代结构预测的优化效率会产生影响）

**@DistanceOfIon** 原子间的最短距离限制(单位： $\text{\AA}$ )

real11 real12 real13...

real21 real22 real23...

....

**@End**

默认值:0.7 $\text{\AA}$

以  $n \times n$  矩阵形式出现.N 的值由 “NumberOfSpecies” 决定。我们以  $\text{MgB}_2$  为例，其 “NumberOfSpecies=2”，所以此参数是一个  $2 \times 2$  的矩阵

@DistanceOfIon

d11 d12

d21 d22

@End

d11 和 d12 分别为最短的 Mg-Mg 和 Mg-B 距离, 而 d21 和 d22 分别为最短的 B-Mg and B-B 距离。也就是说 CALYPSO 软件所产生的结构中的所有原子距离不能小于这个值。一般情况下, d21 和 d12 值是相等的。

(注: 可以利用赝势中的截断半径来确定这个值。一般把元素的截断半径和的 0.7 倍设置为这个参数的参考值。如果这个值设置的过大, 可能会降低 CALYPSO 软件产生合理结构的效率)

**Ialgo=integer:** 在结构预测中结构演化所采用的全局优化算法。

默认值: 2

- 1: 全局粒子群优化算法
- 2: 局域粒子群优化算法
- 3: 对称性限制条件下的人工蜂群算法 (适合预测大体系, 原子数 > 30)

**ICode=integer:** CALYPSO 软件在结构预测中所采用的结构弛豫的软件包。

默认值: 1

- 1: VASP
- 2: SIESTA
- 3: GULP
- 4: PWSCF
- 5: CASTEP
- 6: CP2K
- 7: Gaussian
- 8: DFTB+
- 9: LAMMPS

**NumberOfLocalOptim=integer:** 确定在结构预测过程中针对每一个结构进行结构弛豫的次数。

默认值: 3

一般建议采用多次结构弛豫, 原因在于在结构预测中产生的结构离局域极小值点所对应的结构较远。单一精细结构优化可能会存在不收敛的情况。

(注: 我们的测试表明对一个结构进行 2-3 次结构优化是不错的选择。在多次优化的过程中, 优化的精度应该逐渐增加: 粗糙-中等-精确。如果用户选择使用 VASP 进行结构优化, 应该提供多个 INCAR 文件。具体参考 CALYPSO 的软件包中的 Examples。)

**PsoRatio=real:** 每一代通过粒子群优化算法产生的结构占种群总数的比例。

默认值: 0.6

其余的结构是通过随机产生的, 增加随机产生的结构可以增加结构的多样性, 避免算法陷入某个极小值点而停滞。

**PopSize=integer:** 结构演化过程中每一代群体的大小, 即每代所产生的结构总数。

默认值: 30

一般体系包含的原子数越多，这个值越大。

(注：我们的建议是对于原子数<10 的体系，这个值设为 20；对于 10<原子数<20 的体系，这个值设为 30-40；对于原子数>20 体系，这个值设为 50。)

**Kgrid=real1 real2:** 用于确定结构弛豫过程中所采用的 K 点的间隔。

默认值: 0.12 0.06

布里渊区取样用间隔为  $2\pi \times Kgrid \text{\AA}^{-1}$  的网格。Real1 控制前两步或者前三步局域优化 K 点精度，real2 控制着更密 K 点网格，对应的是最后一步局域优化。值越小，优化结果越精细。

(注：这个参数的设置目前仅仅适用于低于 5.3 版本的 VASP, Quantum-Esspresso 和 DFTB+。对于其他的第一性原理程序包 (CASTEP, CP2K 和 Gaussian) 和 5.3 版本以上的 VASP，请在它们的输入文件里设置合适的 K 点，此时这个参数可以删掉。)

**Command=string:** 提交结构弛豫的命令。

默认值: submit.sh

**MaxStep=integer:** 在结构预测过程中演化的最大代数。

默认值: 50

一般对于包含原子数较多的大体系 (>20)，这个参数的值需要设置大一点。

**PickUp=logical:** 如果设置为 True, 当前一次结构预测意外中断，预测任务将从指定某一代重新开始。(具体请参考 PickStep)

默认值: False

**PickStep=integer:** 从意外中断那代重新开始预测。

默认值: 无

**MaxTime=integer:** 结构预测中某一个结构弛豫所使用的最长时间 (单位: 秒)

默认值: 7200 秒

如果结构弛豫超过此规定的时间，任务将会被自动被终止，目前这个参数只对 VASP 适用。

**LMC=logical:** 该参数决定在 CALYPSO 结构演化中是否加入 Metropolis 能量判别准则。

默认值: False

对于团簇结构预测，我们强烈推荐设置为 “True”。

#####二维层状材料结构的所需要的参数#####

**2D=logical:** 这个参数设置为“T”时, CALYPSO 将开展二维层状结构预测。

默认值: False

**Area=real:** 每个分子式的面积 (单位:  $\text{\AA}^2$ )

默认值: 没有默认值

一般可根据原子半径初猜一个面积。

(注: 可以通过利用相似结构进行替换元素, 然后进行结构弛豫, 根据优化后的结构给出一个初猜的体积。这个参数只对第一代结构预测的优化效率会产生影响)

**DeltaZ=real:** 沿着 C 轴的形变值 (单位:  $\text{\AA}$ )

默认值: 0.2

设计褶皱的层状结构。

**MultiLayer=integer:** 预测体系所包含层数

默认值: 1

**LayerGap=real:** 任意两层之间的间隙大小

默认值: 5.0

层与层之间的距离 (单位:  $\text{\AA}$ ), 仅用于多层结构预测。

**VacuumGap=real:** 真空层大小

默认值: 10.0

确定了单 (多) 层和其最近邻的重复单元之间的距离 (单位:  $\text{\AA}$ )。

该参数一定要设置的足够大, 以确保所研究的层与其最近邻的重复单元之间相互作用可以忽略。

(注: 在结构预测之后做精细优化时, 建议对此参数进行测试。)

**@LayerType**

**integer11 integer12 integer13...**

**integer21 integer22 integer23..**

...

**@End**

对于理想配比的多层材料设计, 该参数是  $m \times n$  的矩阵。行数  $m$  是体系的层数, 列数  $n$  是元素的个数。对每一行 (即每层), 矩阵每列定义每种化学元素的原子数。

默认值: 无

这里我们以双层的 B-C-N 材料为例子。

“MultiLayer=2”,

“NumberOfSpecies=3”,

“NameOfAtoms=B C N”.

如果为了设计第一层有 6 个碳原子和 4 个氮原子, 第二层有 3 个硼原子, 4 个碳原子和 7 个氮原子。该  $2 \times 3$  的矩阵为:

@LayerType  
0 6 4  
3 4 7  
@End

**LAtom\_Dis=real:** 层状材料结构中原子之间的最小距离 (单位: Å)。

默认值: 1.0

#####End#####

#####团簇结构预测所需要的参数#####

**Cluster=logical:** 当这个参数设置为 “True “, CALYPSO 将开展团簇结构预测。

默认值: False

**Vacancy=real1 real2 real3:** 孤立的团簇若放在具有周期性的正交盒子里, 该参数定义所研究的团簇与其最近邻的重复单元之间的距离 (单位: Å)。

默认值: 10.0 10.0 10.0

该值一定要设置的足够大以确保所研究的团簇与其最近邻的重复单元之间的相互作用可以忽略不计。

#####End#####

#####刚性分子结构预测所需要的参数#####

**MOL=logical:** 当该参数设置为 “True”, CALYPSO 将进行刚性分子结构预测。

默认值: False

**NumberOfTypeMolecule=integer:** 模拟胞所包含的分子类型数

默认值: 无

**NumberOfMolecule=integer1 integer2...:** 模拟胞中每一类分子的分子个数。

默认值: 无

**DistOfMol=real:** 两个刚性分子之间的最小距离 (单位: Å)

默认值: 1.5

#####End#####

#####特殊约束参数设置#####

**SpeSpaceGroup=integer1 integer2:** 根据给定的空间群来预测结构。

默认值: 1 230

在对称性限制的条件下, 对于随机产生的结构给定特定的空间群。如果

integer1=integer2, 随机产生的机构限制在这个空间群里。该参数适用于固定空间群的结构搜索。对于一般的结构预测, 请使用默认值。在随机产生的结构随机地分布在所有的空间群中, 以保证结构预测的无偏特性。

**FixCell=logical:** 如果该参数设置为“True”, 将进行固定晶格参数的结构预测。

默认值: False

(注: 需要一个文件名为 cell.dat 的文件来定义固定的胞晶格参数。请参考 cell.dat 的设置。)

**FixAtom=logical:** 如果这个参数设置为“True”, 将进行固定原子位置的结构预测。

默认值: False

(注: 需要一个文件名为 cell.dat 的文件来定义固定的原子位置。请参考 cell.dat 的设置。)

#####End#####

#####变配比的预测所需要的参数#####

**VSC=logical:** 当该参数设置为“True”, 将进行自动变化学配比的预测。

该技术用于搜索给定二元体所有化学配比(例如, AxBy 体系)。

默认值: False

(注: 运用该技术时需要特别小心, 由于可能的配比数目特别多, 所以搜索空间很大, 因此我们建议预测的结果需要利用固定化学配比预测的结果进行验证。)

**MaxNumAtom=integer:** 在变组分结构预测中, 模拟胞中所允许预测的最多原子数。

默认值: 20

**@CtrlRange**

integer11 integer12

integer21 integer22

**@End**

定义二元体系中每种元素的原子数变化的范围。对于 A 原子, x 从 integer11 到 integer12, 而对于 B 原子, y 从 integer21 到 integer22。

默认值: 1 6

1 6

#####End#####

#####表面结构预测所需要的参数#####

**LSurface=logical:** 该参数设置为“True”时, CALYPSO 软件将进行晶体表面重构预测。

默认值: False

**CalSubstrate=logical:** 当这一参数设为“True”时, 程序将作为衬底的理想表面的能量, 这个能量为计算表面形成能时的参考能量。

默认值: False

**SurfaceThickness=real:** 重构表面的厚度。(单位Å)

默认值: 3.0

(注: 建议该值设定得比体材料中两个相邻原子层间距离的 2 倍值略大。)

**Substrate=string:** 该命令行允许用户定义其所选择的基底, 并将基底文件命名为“string”。

默认值: SUBSTRATE.surf

基底文件包含基底的结构信息(例如: 晶格参数和原子占位)。这里, POSCAR 和 cif 文件的格式均适用。对于格式为 POSCAR 的文件, 可以使用‘Selective dynamics’标签来设定原子层的弛豫范围, 否则, 基底中的所有原子在表面重构的计算中会保持固定。对于格式为 cif 的文件, 用户需要在‘\_atom\_site\_fract\_z’标签下面插入‘\_selective’标签。在原子位置之后选择‘T’来限定可变的原子层; 对于原子层不变的体材料, 选择‘F’。

更多细节请参阅例子。

**@SURFACE\_ATOMS:** 设定重构表面区域内原子。

```
string11 integer12
```

```
string21 integer22
```

```
...
```

```
@End
```

默认值: 无

这个参数由一个  $m \times 2$  矩阵构成。化学组分的种类数决定了矩阵的行( $m$ )。对于每一行, 矩阵包含两列。第一列(string)是个元素对应的元素符号, 第二列是该元素的原子序数(整数)。具体设置参数的细节请参阅例子。

**ECR=logical:** 当该值设为“True”时, 则只有满足电子计数规则的初始结构会被保留。

默认值: True

更多描述电子计数规则的信息请参阅以下文献[Nat. Commun. 5, 3666(2014)]。

*以下参数用于从晶体直接产生表面, 并且将此表面作为衬底用于表面结构预测。注意这些参数只有在设置 Substrate 为 Automatic (或者 Auto) 时才起作用。*

**CifFilePath=string:** 控制输入晶体结构的结构文件名

默认值: 无

由于在确定表面的二维原胞的时候需要用到晶格类型，而最简单的方式是给定晶体的对称性信息。因此规定输入的文件必须导入晶体对称性信息。

**MillerIndex=h k l:** 所要进行结构搜索的米勒面。

默认值: 无

程序也可以识别用于六角、三角晶系 4-参数的米勒面指数。

**@MatrixNotation:** 这个 $2 \times 2$ 的矩阵控制重构表面单元格子。

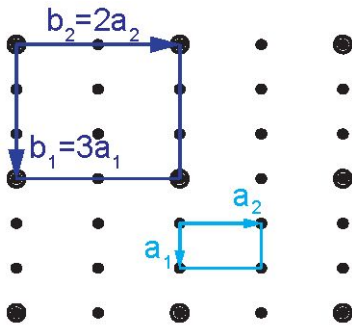
**integer11 integer12**

**integer21 integer22**

**@End**

默认值: 无

新格子可以通过使用这个矩阵乘以单元晶格的格矢。如下图所示，重构的表面晶格参数（蓝色所示）可以使用理想表面晶格格矢（绿色）得到。



**SlabVacuumThick=real:** 相邻薄板间真空层的厚度(单位: Å)

默认值: 10

**SlabDepth=real:** 控制哪一层原子位于理想表面的最上层。

默认值: 0.0

默认情况下，最上层的原子层为晶体中原点所在的平面。通过调节这个参数，可以使不同的原子层位于衬底的最上层。

**SlabNumLayers=integer:** 衬底包含的原子层数。

默认值: 6

**NumRelaxedLayers=integer:** 可以弛豫的原子层数。

默认值: 2



**CapBondsWithH=logical:** 如果这个参数设置为“True”时，程序将使用氢原子（或者膺氢原子）来饱和衬底的下表面悬挂键。

默认值: True

#####End#####

#####硬度结构设计所需参数#####

**Hardness=logical:**当该参数设为“True”，可进行具有超硬特性的功能材料的设计。

默认值: False

#####End#####

#####指定带隙结构设计所需参数#####

**Band\_edge=logical:** 当该参数设为“True”，可进行指定带隙大小的功能材料的设计。

默认值: False

**TarBandGap=real:** 所需材料的带隙大小（单位:eV）

默认值: 无

目前指定带隙结构的设计只有与 VASP 软件的接口。

#####End#####

#####二维吸附预测所需参数#####

**Adsorption=logical:** 当该参数设为“True”，进行二维吸附材料设计。

默认值: False

**AdsorptionStyle=integer:** 产生结构的方法

默认值: 1

1. 不固定吸附位置进行吸附
2. 固定吸附位置进行吸附

**NumberOfTypeAtom=integer:** 体系中吸附单元的种类

默认值: 无

**@InformationOfAdatoms:** 吸附原子的信息，写成  $m \times 3$  矩阵的格式

string11 integer12 integer13

string21 integer22 integer23

...

**@End**

默认值: 无

行数  $m$  与 **NumberOfTypeAtom** 一致。每一行包含三个参数，第一个参数代表此吸附单元中所含元素的名称，第二个参数代表在一个晶胞中此吸附单元的个数。第三个参数代表此吸附单元的类型。我们规定 1 代表原子，2 代表分子或官能团。

**SuperCell=integer1 integer2:** 扩胞的比例

默认值: 1 1

**RangeOfBondLenth=real1 real2:** 二维材料与吸附单元的成键键长范围。

默认值: 1.2 1.7

**real1** 代表键长的最小值，**real2** 代表键长的最大值。

**AdsorptionSymmetry=integer:** 在产生结构中引入对称性的方法

默认值: 0

0. 在产生结构中不引入对称性
1. 在产生结构中根据基底晶格产生空间群，引入对称性
2. 产生具有局部对称的结构基元，将此基元移植到产生的结构中

**TypeOfSubstrate=integer:** 二维基底的晶格类型

默认值: 无

如果 **AdsorptionSymmetry** 选为 1，需要设置此参数。

1. 简单格子
2. 矩形格子
3. 正方格子
4. 六方格子

**BothSide=logical:** 当该参数设为“true”，进行双面的二维材料吸附

默认值: False

**@AdatomsOnBothsides** 双面的吸附单元的个数，写成  $m \times 2$  矩阵的格式。

**Integer11 integer12**

**Integer21 integer22**

...

**@end**

默认值: 无

行数  $m$  与 **NumberOfTypeAtom** 一致。注意每一行的单元与 **InformationOfAdatoms** 保持一致。每一行包含两个参数，第一个参数表示其中一面吸附的单元个数，第二个参数表示另一面吸附的单元个数。

**@DistanceOfAdatom**

**real11 real12...**

**real21 real22...**

...

**@end**

吸附单元与基底和吸附单元之间的最短距离限制，写成  $n*n$  矩阵的格式。N 的值为基底元素和 NumberOfTypeAtom 的加和。

默认值：无

以石墨烷为例，基底为 C，吸附原子为 H。

@DistanceOfAdatom

real<sub>11</sub> real<sub>12</sub>

real<sub>21</sub> real<sub>22</sub>

@end

real<sub>11</sub> 为基底元素 C 之间的最短距离，real<sub>12</sub>，real<sub>21</sub> 为 C，H 之间的最短距离，real<sub>22</sub> 为 H 之间的最短距离。

#####End#####

# 第三章 CALYPSO 软件输出文件 及结果分析

## 八、CALYPSO 软件的输出文件

在运行 CALYPSO 软件后，会在工作目录下产生一个名为“**results**”文件夹。此文件夹中包含所有 CALYPSO 软件的重要输出文件：

- 1 **CALYPSO\_input.dat**: 初始输入文件的备份文件
- 2 **similar.dat**: 包含了所有预测结构的指纹函数值
- 3 **pso\_ini\_\***: 记录了初始产生结构的结构信息
- 4 **pso\_opt\_\***: 记录了经过结构弛豫后的结构能量值和结构信息
- 5 **pso\_sor\_\***: 按照能量递增的顺序，记录第\*代结构中产生结构的能量值
- 6 **struct.dat**: 包含所有被预测的结构的信息（空间群，体积，原子数等）

## 九、CALYPSO 软件的结果分析

CALYPSO 软件在运行过程中，会产生了大量的候选结构。为了方便用户处理这些候选结构，我们发展了 CALYPSO\_ANALYSIS KIT (CAK) 程序，对 CALYPSO 所产生的海量数据进行自动化的处理。

### 2.1 CAK 安装

CAK 需安装在 Linux 和 Mac OS X 系统的平台下并且需要预先安装 python 的数据库 **numpy**。用户必须在 Makefile 中通过变量 ‘PYBIN’ 来指定 Python 路径。

安装过程如下：

```
$cd CALYPSO_ANALYSIS_KIT
```

```
$make
```

然后在 .bashrc 文件中设置 “source/somepath/caly.sh”。

### 2.2 CAK 命令

进入 “**results**” 目录，输入命令 ‘cak.py’。

```
$cd results
```

```
$cak.py
```

执行 cak.py 命令后，将产生 ‘Analysis\_Output.dat’ 文件。Analysis\_Output.dat 中默认输出能量最低的 50 个结构的空間群和对应的能量值。（注：默认分析结构空間群的允许误差为 0.1Å。）

通过加入更多的可选参数可以实现更高级的分析功能:

**Scak.py-a**

对 CALYPSO 所产生的全部结构进行分析输出。

**Scak.py-n integer**

指定输出 **integer** 个能量最低结构的分析结果。

**Scak.py-t real**

按指定的确定空间群所允许的误差 (0.01 - 1.0Å), 默认值是 0.1。

**Scak.py-m'real1 real2...realn'**

可按指定的多个精度 (由空格分开) 对给定结构进行对称性分析。

**Scak.py-p**

通过利用 CALYPSO 演化过程每一代中能量最低的结构, 给出 CALYPSO 历史演化图。

**Scak.py--cif**

将分析后的结构以 cif 格式的形式保存起来, 其结构文件保存在 'dir\_n' 文件夹中 (n 为对称性分析中的允许误差)。

**Scak.py--vasp-m'real1 real2...realn'**

将分析后的结构以 VASP 的 POSCAR 格式保存起来, 其结构文件保存在 'dir\_n' 文件夹中 (n 为对称性分析中的允许误差)。

**Scak.py--pri-vasp/cif**

以原包的形式保存结构信息。

**Scak.py--hard**

按硬度的递减次序输出结构信息。

## 2.3 输出文件

**Analysis\_Output.dat**

此文件中默认输出至少四列。第一列是按结构焓值的递减次序输出序号。第二列 (括号里的数表明该结构在由 CALYPSO 产生的所有结构中是第几个产生的)。第三列显示能量值信息。第四列显示的是按指定允许误差得到的空间群。

**plot.dat**

该文件包含两列。第一列显示的是代数。第二列显示的是该代中最低的焓值。

**UCell\_m\_n.vasp**

该文件以 VASP 的 POSCAR 格式保存了单胞的结构信息。m 和 n 分别为焓值的排序和结构的空間群号。

**PCell\_m\_n.vasp**

该文件以 VASP 的 POSCAR 格式保存了原胞的结构数据。m 和 n 分别为焓值的排序和结构的空間群号。

**m\_n.cif**

该文件以 .cif 格式保存了单胞的结构数据。m 和 n 分别为焓值的排序和结构的空間群号。

**m\_n\_p.cif**

该文件以 .cif 格式保存了原胞的结构数据。m 和 n 分别为焓值的排序和结构的空間群号。

## 第四章 CALYPSO 软件高级专题

### 十、结构弛豫跨节点并行模式

在CALYPSO结构预测过程中，同一代会产生PopSize个结构，为了提高结构弛豫的速度，我们设计了通过不同的节点对这些结构进行弛豫的并行结构弛豫模式。运行此模式的CALYPSO需要以下几步：

1. 在 input.dat 文件中设置 Parallel=T 并且设置 NumberOfParallel= 并行的节点数。

2. 修改 pbs 脚本产生 machinefile。一个机器文件是包含一系列想要运行 MPI 程序可能的机器。例如在执行命令行 calypso.x 之前增加

‘cat\$PBS\_NODEFILE>machinefile ‘，具体参见 CALYPSO 的 Examples 实例 (caly.pbs)。

3. 修改执行 vasp 脚本 (submit.sh)：

```
mpiexec -machine snodefile -n 12 vasp>out.vasp 2>/dev/null
```

4. 通过 qsub 提交 caly.pbs

### 十一、远程提交结构弛豫模式

远程提交结构弛豫模式是 CALYPSO 在本地机器上运行，而将结构弛豫计算在远程的集群上运行。目前，此功能只能在 Torque PBS 系统上进行运行。

具体运行需要以下几个步骤：

1. 在 input.dat 文件里设置 RemoteParallel=T 以启动远程提交结构弛豫模式

2. 保障本地机器同远程的集群之间不需要密码登陆。具体操作如下：

在本地机器上执行

```
[user@local]$ssh-keygen
```

```
[user@local]$scp ~/.ssh/id_rsa.pub test@cluster.cn:~/ssh/local.pub
```

在远程集群上执行：

```
[test@cluser]$cd~/ssh/
```

```
[test@cluser]$cat local.pub>>authorized_keys
```

3. 编辑 submitremote.sh 文件

```
server=' test@10.60.36.168'
```

```
port=' 22'
```

请修改server与port来建立本地机器同远程机器的连接。

4. 准备 vasp.pbs, pbs 脚本以计算 vasp。下面是 **vasp.pbs** 的具体内容。

```
#!/bin/bash

#PBS-l nodes=1:ppn=6

#PBS-j oe

#PBS-V

cd$PBS_O_WORKDIR

if[!-f~/ .mpd.conf];then

/bin/echo"secretword=dfadfs">>~/ .mpd.conf

/bin/chmod 600~/ .mpd.conf

fi

#Intel MPI Home

MPI_HOME=/opt/intel/impi/4.0.0.027

#setup Nums of Processor

NP=`cat$PBS_NODEFILE|wc-l`

echo"Numbers of Processors:$NP"

echo"-----"

#Number of MPD

N_MPD=`cat$PBS_NODEFILE|uniq|wc-l`

echo"started mpd Number:$N_MPD"

echo"-----"

#setup mpi env(em64t)

$MPI_HOME/bin64/mpdboot-r ssh-n$N_MPD-f$PBS_NODEFILE
```

```

#running program

for i in 1 2 3

do

cp INCAR_$i INCAR

python writekp.py 0.1

mpiexec-n$NP/share/apps/vasp/vasp.4.6>log 2>/dev/null

cp CONTCAR POSCAR

done

cp INCAR_4 INCAR

python writekp.py 0.07

mpiexec-n$NP/share/apps/vasp/vasp.4.6>log 2>/dev/null

```

（注：蓝色数字，可以将其修改以改变局域优化的 K 点取样）

5. 在本地机器上执行 calypso. x。

## 十二、产生结构同结构弛豫分离模式

CALYPSO 的产生结构同结构弛豫分离模式可以提供一种非常灵活的弛豫结构的方法。可以通过使用 calypso. x 产生结构并把这些结构信息保存到

‘POSCAR\_\*

文件。此时可以在任何集群或者工作站上对这些结构进行弛豫。具体步骤如下：

1. 通过在 input. dat 中设置 ‘Split=T’ 开启产生结构同结构弛豫分离模式。
2. 执行 calypso. x 产生 ‘POSCAR\_1, POSCAR\_2, … ‘格式的结构文件。
3. 弛豫这些结构并把输出的 OUTCAR 与 CONTCAR 拷贝成 OUTCAR\_1, OUTCAR\_2, CONTCAR\_1, CONTCAR\_2, …。并且把这些结构拷贝到工作目录下。
4. 再次执行 calypso. x, 将会得到下一代的 POSCAR\_\*
5. 重复 2-4 步。