

龙讯教学大纲





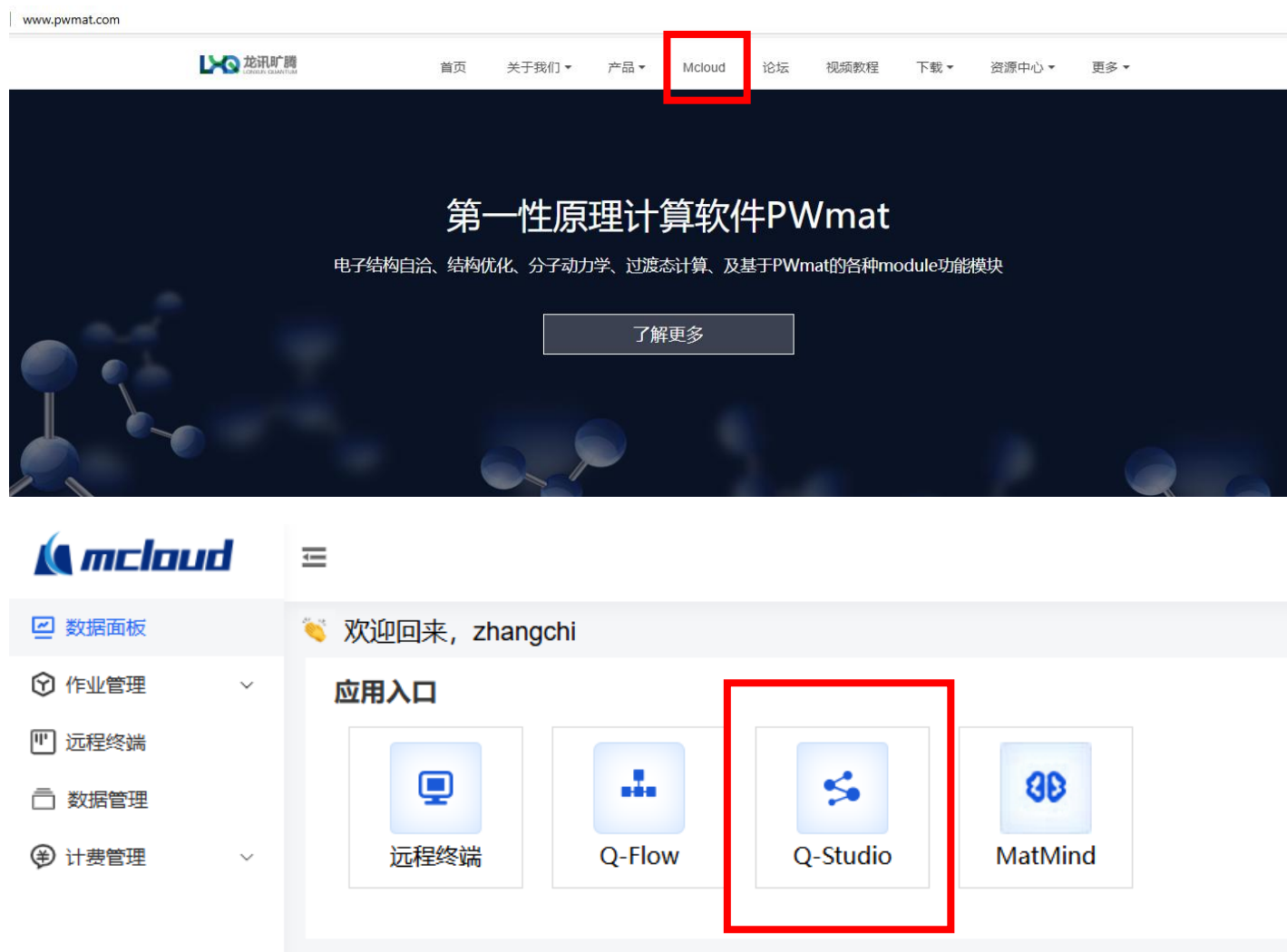
第二单元

材料原子结构理论及建模实践

- 4.Q-Studio 简介;
- 5.晶体结构、空间群、在线数据库;
- 6.分子结构、无序结构的搭建;
- 7.表面、界面及二维材料模型的搭建;

4. Q-Studio 简介

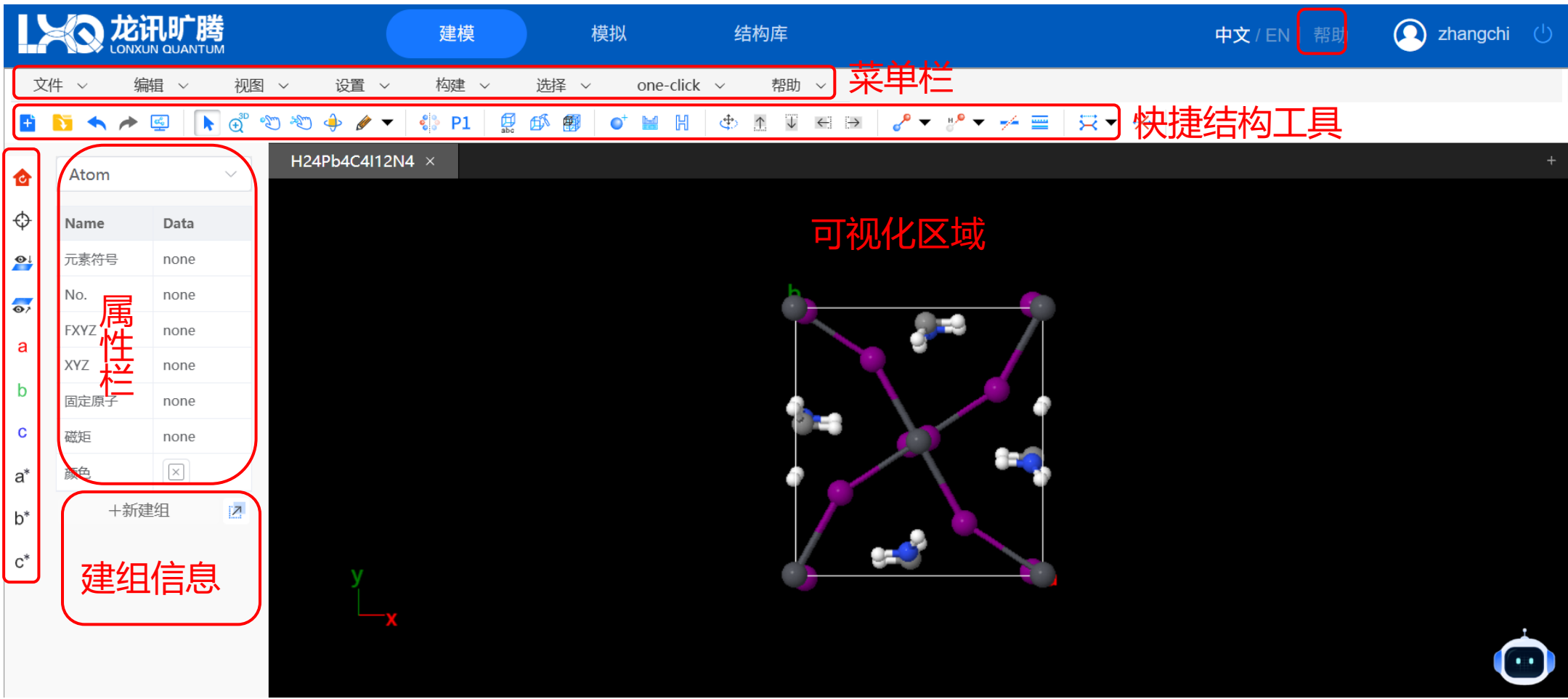
- <http://www.pwmat.com/> 用于结构可视化/建模的web平台



4. Q-Studio 简介

• 界面及功能

在线帮助文档



The screenshot shows the Q-Studio software interface. The top blue bar contains the LX logo, the text '龙讯旷腾 LONXUN QUANTUM', and tabs for '建模' (Modeling), '模拟' (Simulation), and '结构库' (Structure Library). On the right of the top bar are language options '中文 / EN', a '帮助' (Help) button, a user profile 'zhangchi', and a power icon.

Below the top bar is a menu bar with dropdown menus for '文件' (File), '编辑' (Edit), '视图' (View), '设置' (Settings), '构建' (Build), '选择' (Select), 'one-click', and '帮助' (Help). A red box highlights this menu bar with the label '菜单栏' (Menu Bar).

Below the menu bar is a toolbar with various icons for file operations, editing, and visualization. A red box highlights a portion of the toolbar with the label '快捷结构工具' (Quick Structure Tools).

On the left side, there is a vertical toolbar with icons for different views and a list of atom properties. A red box highlights this vertical toolbar with the label '快捷视角工具' (Quick View Tools).

Next to the vertical toolbar is a table titled 'Atom' with columns 'Name' and 'Data'. The table lists properties like '元素符号' (Element Symbol), 'No.', 'FXYZ', 'XYZ', '固定原子' (Fixed Atom), '磁矩' (Magnetic Moment), and '颜色' (Color). A red box highlights this table with the label '属性栏' (Property Bar).

Below the table is a button '+新建组' (New Group) and a red box with the label '建组信息' (Grouping Information).

The main area of the interface is a large black rectangle labeled '可视化区域' (Visualization Area) in red. It displays a 3D molecular structure model of H₂₄Pb₄C₄I₁₂N₄. The model consists of a central lead (Pb) atom (grey) surrounded by a cage of carbon (C) atoms (purple) and nitrogen (N) atoms (blue) with hydrogen (H) atoms (white). A coordinate system with x, y, and z axes is shown in the bottom left of the visualization area.

In the bottom right corner, there is a small robot icon and a blue square button with a white play icon.

4. Q-Studio 简介

- 文件——文件导入(pwmat、cif、pdb、mol、xsf等格式)、导出 (pwmat、cif、pdb、mol等) ； 在线数据库



The screenshot displays the Q-Studio web application interface. At the top, there's a navigation bar with the LXQ logo, user name 'zhangchi', and language options. Below this, a search bar contains the text 'C-H-N-Pb-I'. To the left of the search bar is a periodic table of elements. Below the search bar, a table lists search results from the Materials Project database. The first result is highlighted with a red box.

Search results table:

	id	Formula	Spacegroup	Volume	Density
1	mp-995214	H ₂₄ Pb ₄ C ₄₁ I ₂ N ₄	Pnma	1026.12	4.013
2	mp-995227	H ₄₈ Pb ₈ C ₈₁ I ₂₄ N ₈	Cc	2049.254	4.019
3	mp-1194604	H ₂₄ Pb ₄ C ₄₁ I ₂ N ₄	Pnma	1020.631	4.035
4	mp-977013	H ₆ Pb ₁ C ₁₁ I ₃ N ₁	Pm	269.038	3.827
5	mp-1194995	H ₁₄₄ Pb ₁₂ C ₄₀ I ₄₀ N ₁₆	Aea2	4379.376	3.19
6	mp-995203	H ₂₄ Pb ₄ C ₄₁ I ₂ N ₄	Pnma	1024.208	4.021

Below the search bar, there's a detailed view of the first result (mp-995214). It includes a table with crystallographic data:

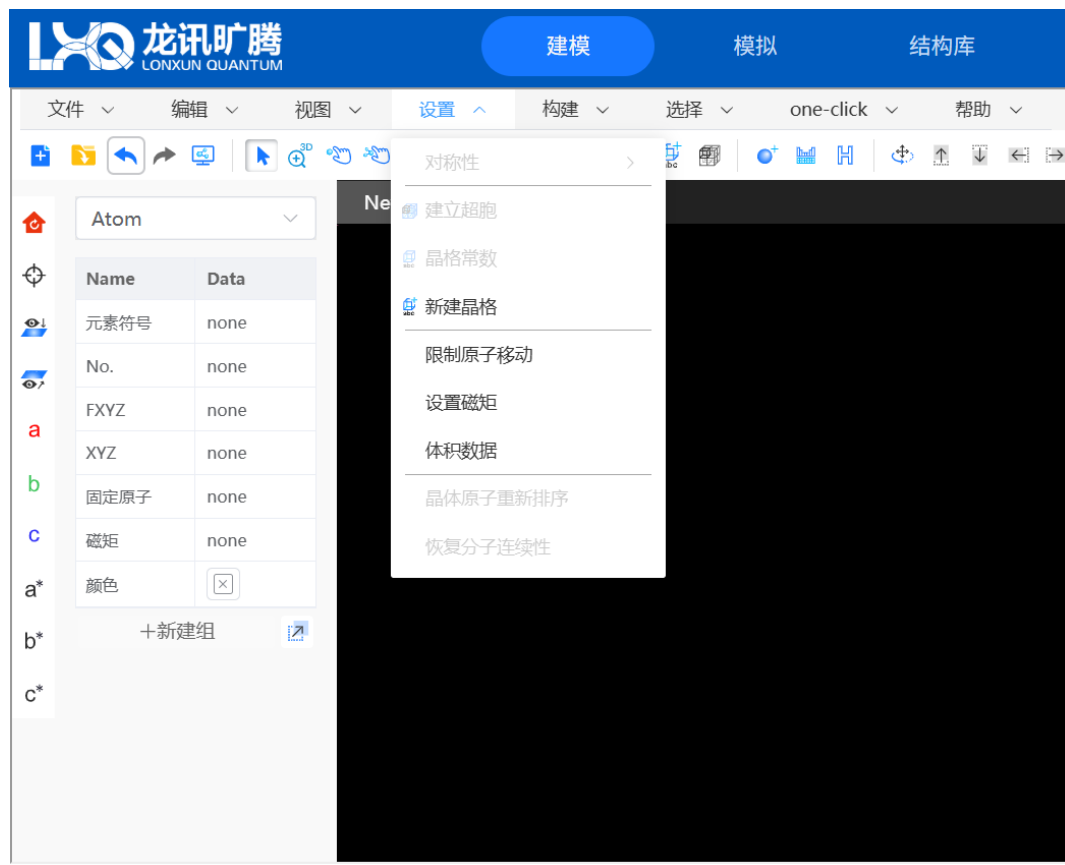
id	Full Formula	Pretty Formula	Nsites
mp-995214	H ₂₄ Pb ₄ C ₄₁ I ₂ N ₄	H ₆ PbCl ₃ N	48

Below this table, there's a 3D visualization of the crystal structure.

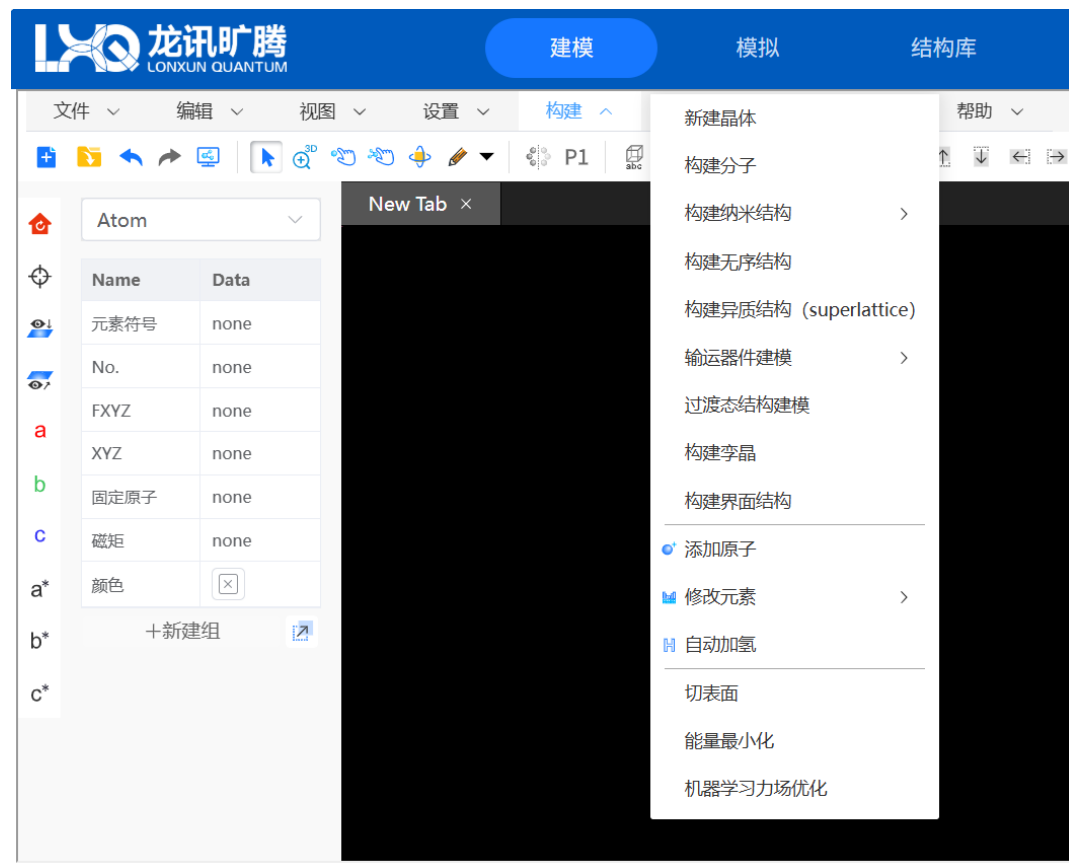


4. Q-Studio 简介

- 设置 对模型进行更多操作



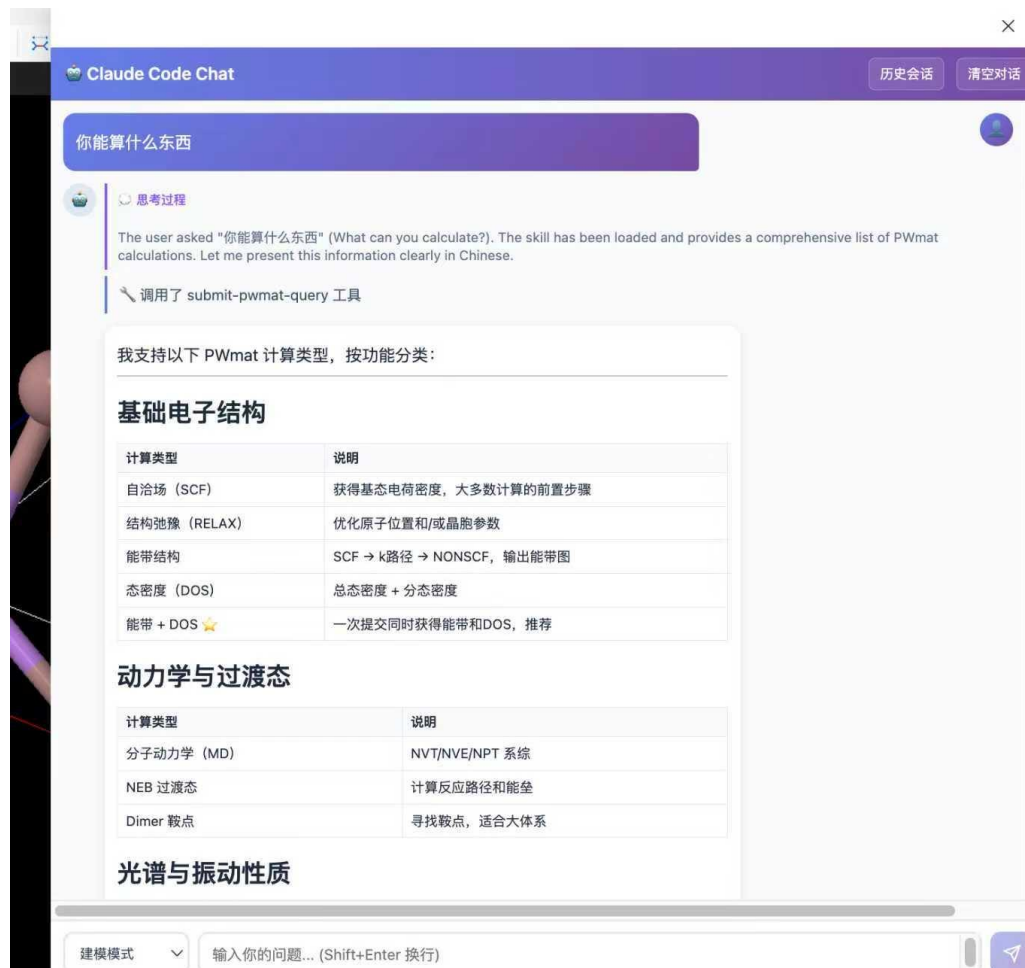
- 构建 创建各种结构模型



4. Q-Studio 简介

智能建模功能

接入claude code聊天，通过大语言模型可以做辅助建模助手，计算性质等



5. 晶体结构、空间群、在线数据库

晶体:格子构造，长程有序，周期性重复

点阵:为了便于研究，晶体质点排列的周期性，可以抽象成只有数学意义的周期性图形，称为点阵，也就空间点阵

阵点:空间点阵中的每一个点，也称为结点

晶体结构 = 晶体点阵 + 结构基元

反映原子周期排列的方式

反映周期排列的内容

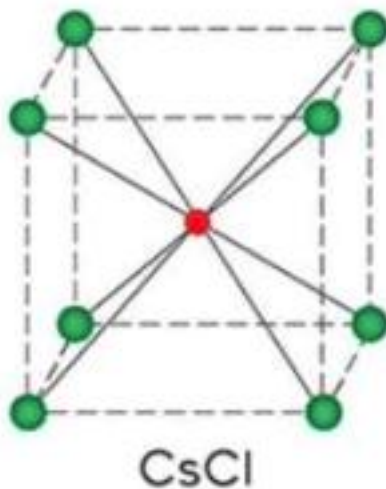
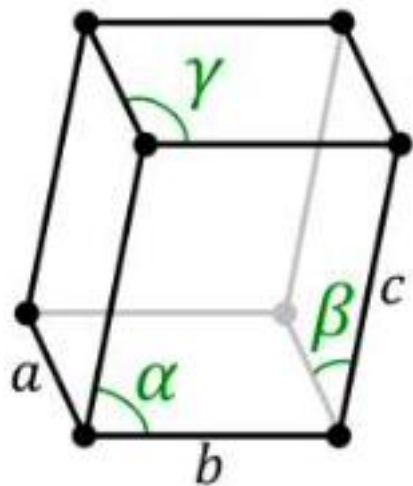
它是等同点的集合，反映的是理想的、无限大的、没有缺陷的晶体中，原子排列的情况。是抓住晶体核心特点后的一种高度概括

可以是一个原子可以是一个分子可以是一组原子可以是分子集团

5. 晶体结构、空间群、在线数据库

晶胞与点阵基础

单位晶胞两要素:晶胞的大小和形状，晶胞内部各原子的坐标位置



晶胞的大小和形状:由晶体空间点阵中3个不共面的单位矢量 a , b , c 所规定，其大小形状用晶胞参数 a , b , c , α , β , γ 表示

晶胞内部各原子的坐标位置:由原子坐标参数 (x, y, z) 表示

几个常用词的理解:

Unit cell 晶胞

Primitive cell 原胞(初基晶胞)

Wigner-Seitz primitive cell 维格纳-塞茨原胞

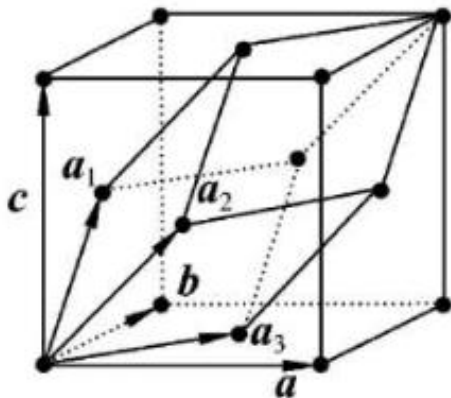
Conventional cell 惯用晶胞(晶胞)

惯用晶胞是人们约定的能够反映点阵对称性特点的单位，它可能是点阵的一种原胞，也可能是非初基晶胞，但体积一定是原胞的整数倍。

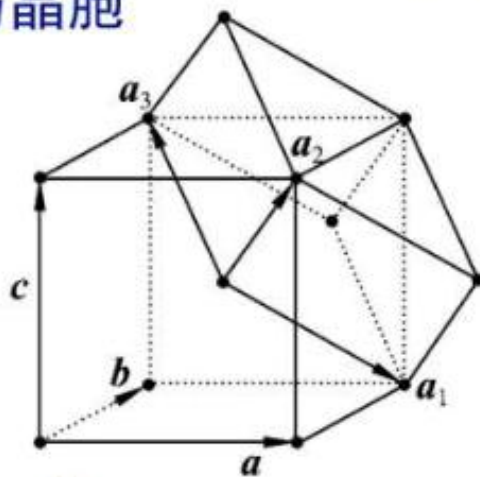
5. 晶体结构、空间群、在线数据库

单胞与基矢

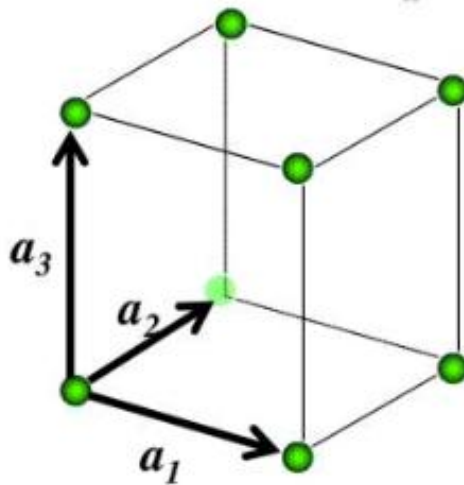
◆面心立方晶格的原胞与晶胞



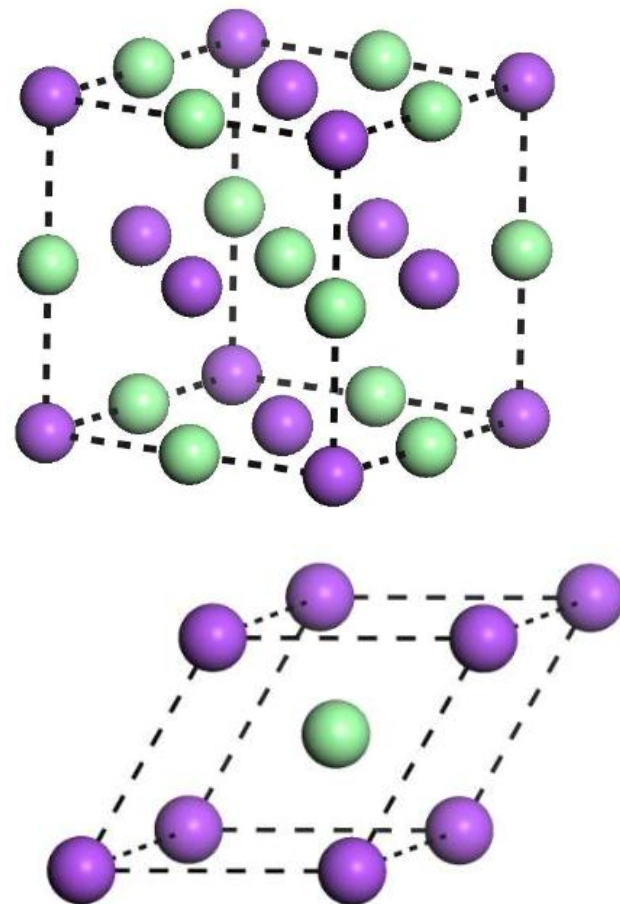
◆体心立方晶格的原胞与晶胞



◆简单立方晶格的原胞与晶胞



NaCl的晶胞与原胞，基元



5. 晶体结构、空间群、在线数据库

基本概念

“群”：指一组对称元素或一组对称操作的集合。

点群：相交于一点的对称要素的集合所构成的对称群。

即晶体宏观观察中所具有的点对称元素的组合或宏观对称类型称为点群

“点”：指所有的对称元素有一个公共点，它在全部对称操作中始终不动（通常取为原点）。

群定义

假设G是由一些元素组成的集合，即 $G = \{..., g, ...\}$ 。在G中定义了一种二元合成规则(操作、运算，群的乘法)。如果G对这种合成规则满足以下四个条件：

a) **封闭性**：G中任意两个元素的乘积仍然属于G。 $\forall f, g \in G \Rightarrow fg = h \in G$

b) **结合律**： $\forall f, g, h \in G \Rightarrow (fg)h = f(gh)$

c) **单位元素** 集合G中存在一个单位元素e，对G中任意元素f， $ef = fe = f$

d) **可逆性** 对任意元素 $f \in G$ ，存在逆元素 $f^{-1} \in G$ ，使 $f^{-1}f = ff^{-1} = e$



5. 晶体结构、空间群、在线数据库

点群的Schönflies符号

- C : 具有一个 n 次旋转轴的点群。
- C_{nh}^n : 具有一个 n 次旋转轴和一个垂直于该轴的镜面的点群。
- C_{nv} : 具有一个 n 次旋转轴和 n 个通过该轴的镜面的点群。
- D_n^n : 具有一个 n 次旋转主轴和 n 个垂直该轴的二次轴的点群。
- S_n : 具有一个 n 次反轴的点群。
- T : 具有4个3次轴和3个2次轴的正四面体点群。
- O : 具有3个4次轴,4个3次轴和6个2次轴的八面体点群。

表 3-2 晶体的 32 种点群

点 群							
A 类	L^n	$L^n n L^2$	$L^n P_{\perp}(C)$	$L^n n P_{//}$	$L^n n L^2 (n+1) PC$	L^n	$L^n^{(n)} n L^2 n P$ $L^n^{(n)} n / 2 L^2 n / 2 P$
	L^1					$L_1^1 = C$	
	L^2	$3 L^2$	$L^2 PC$	$L^2 2 P$	$3 L^2 3 PC$	$L_1^2 = P$	
	L^3	$L^3 3 L^2$		$L^3 3 P$		$L_1^3 = L^3 C$	$L_1^3 3 L^2 3 P$
	L^4	$L^4 4 L^2$	$L^4 PC$	$L^4 4 P$	$L^4 4 L^2 5 PC$	L_1^4	$L_1^4 2 L^2 2 P$
	L^6	$L^6 6 L^2$	$L^6 PC$	$L^6 6 P$	$L^6 6 L^2 7 PC$	$L_1^6 = L^3 P$	$L_1^6 3 L^2 3 P$
B 类	$3 L^2 4 L^3$	$3 L^4 4 L^3 6 L^2$	$3 L^2 4 L^3 3 PC$	$3 L_1^4 4 L^3 6 P$	$3 L^4 4 L^3 6 L^2 9 PC$		

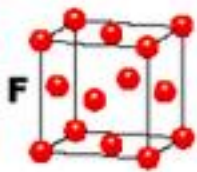
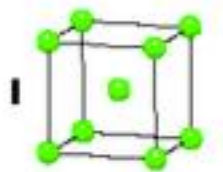
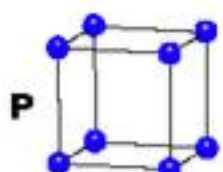
思考，为什么只有32种点群？

5. 晶体结构、空间群、在线数据库

布拉菲点阵 Bravais

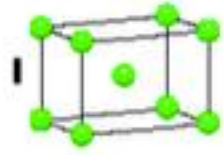
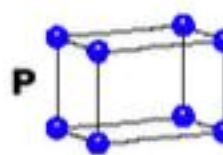
CUBIC

$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



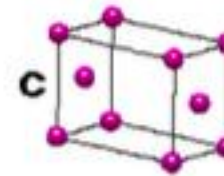
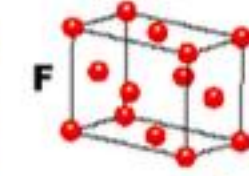
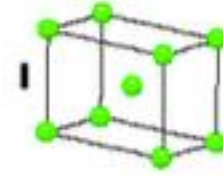
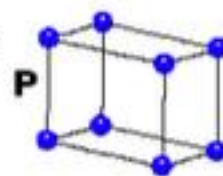
TETRAGONAL

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



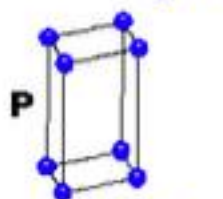
ORTHORHOMBIC

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



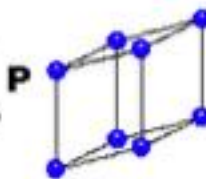
HEXAGONAL

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$
$$\gamma = 120^\circ$$



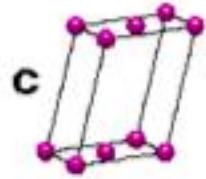
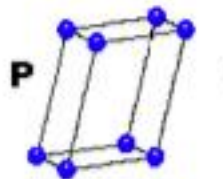
TRIGONAL

$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



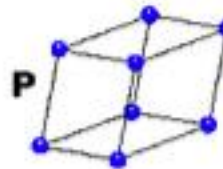
MONOCLINIC

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$
$$\beta \neq 120^\circ$$



TRICLINIC

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



4 Types of Unit Cell

P = Primitive

I = Body-Centred

F = Face-Centred

C = Side-Centred

+

7 Crystal Classes

→ 14 Bravais Lattices

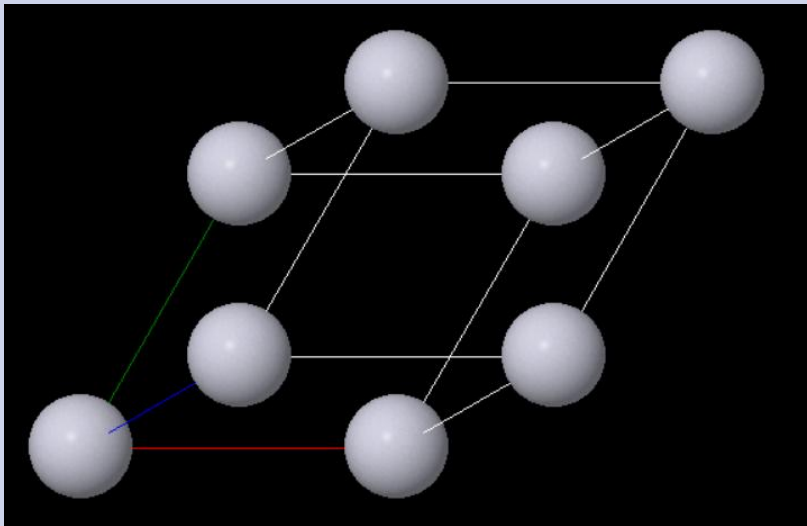
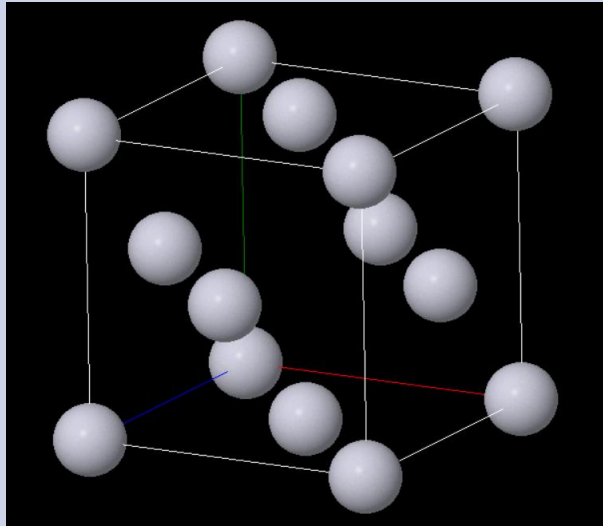
点阵结构表示的是晶体的微观原子对称性，而晶体按照晶系分类是考虑的晶体宏观对称性。那么在7种可能的晶系中存在哪些微观对称性？也就是存在多少种点阵结构。以晶胞平行六面体的顶点为基元可能得到最简单的7种初级单胞，及P单胞。如果在这七种晶胞的基础上，在特殊位置加入点阵点，如面心，体心，不破坏晶体的点对称性，可以得到一些新的空间格子。1866年布拉维推导出晶体中存在14点阵结构，即Bravais格子。

5. 晶体结构、空间群、在线数据库

原胞：晶体周期性重复的最小单元

GUI界面上设置->对称性->转换为原胞

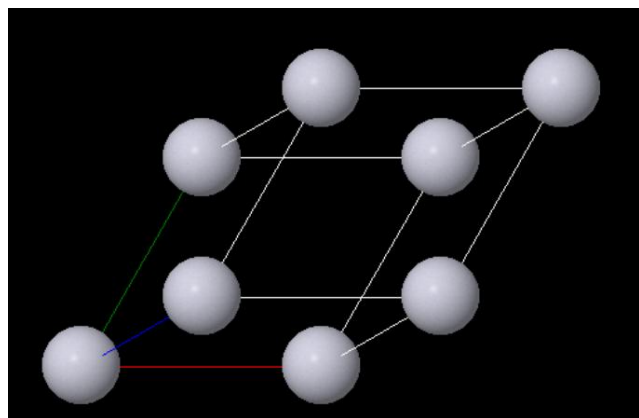
惯胞：也称为单胞或晶胞，为了反映晶体的对称性，常取最小重复单元的几倍

原胞	惯胞
	
总原子数1	总原子数4

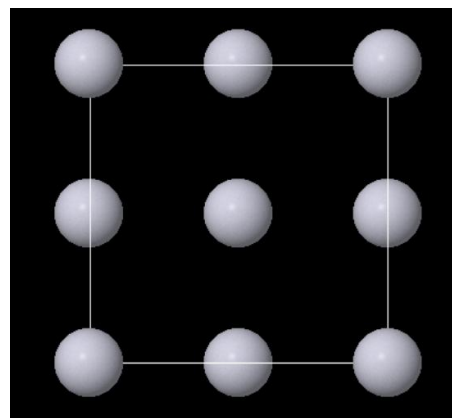


5. 晶体结构、空间群、在线数据库

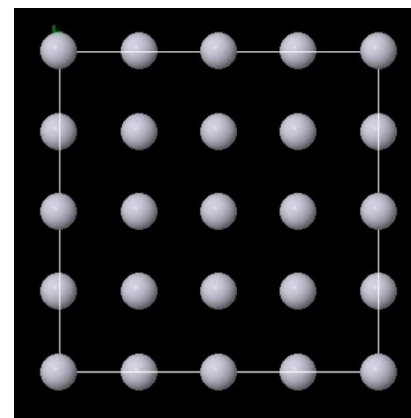
- (1) Pt体相材料（原胞、惯胞转换；建立超胞）；Fe铁磁结构
- (2) Pt超胞-构建空位缺陷；
- (3) Pt超胞-构建替位掺杂缺陷；



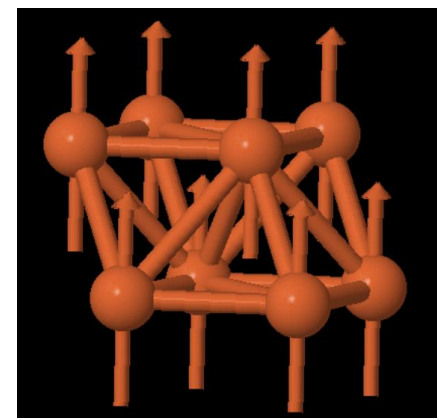
Pt原胞



Pt惯胞



Pt超胞
2*2*2



Fe铁磁结构



5. 晶体结构、空间群、在线数据库

The screenshot displays the LONXUN QUANTUM software interface. The top navigation bar includes '建模' (Modeling), '模拟' (Simulation), and '结构库' (Structure Library). The main menu bar contains '文件' (File), '编辑' (Edit), '视图' (View), '设置' (Settings), '构建' (Build), '选择' (Select), 'one-click', and '帮助' (Help). The '设置' (Settings) menu is open, showing options like '对称性' (Symmetry), '建立超胞' (Build Supercell), '晶格常数' (Lattice Constants), '拆除晶格' (Remove Lattice), '限制原子移动' (Restrict Atom Movement), '设置磁矩' (Set Magnetic Moment), '体积数据' (Volume Data), '晶体原子重新排序' (Reorder Crystal Atoms), and '恢复分子连续性' (Restore Molecular Continuity). The '对称性' (Symmetry) sub-menu is also open, listing '取消对称性(Make P1)' (Cancel Symmetry (Make P1)), '查找对称性' (Find Symmetry), '晶格变换' (Lattice Transformation), '晶轴重定向' (Crystal Axis Reorientation), '布里渊区路径' (Brillouin Zone Path), and '转换为原胞' (Convert to Primitive Cell). On the left, the 'System' panel shows a table of crystal parameters:

Name	Data
a	3.977Å
b	3.977Å
c	3.977Å
α	90°
β	90°
γ	90°
Total atoms	4
Symmetry	Fm-3m
Formula	Pt4

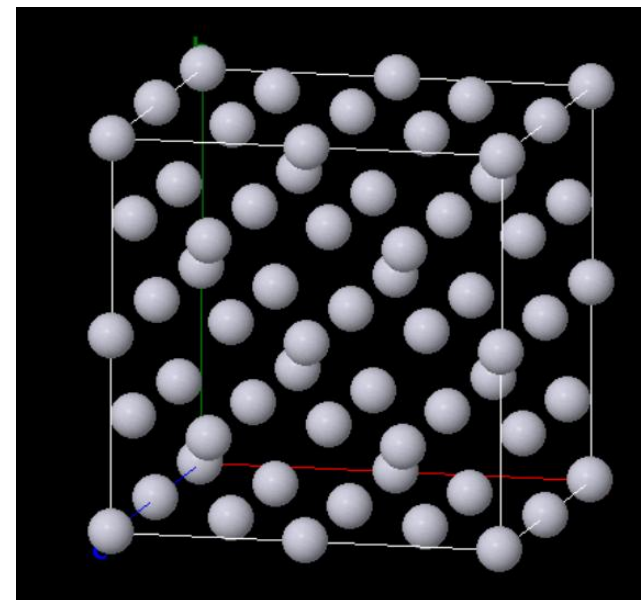
The 'Symmetry' and 'Total atoms' rows are highlighted with a red box. The main 3D view shows a cubic lattice structure with 4 atoms (Pt4) and a coordinate system (x, y, z).

提供晶体结构对称性工具
可以查找结构对称性
和取消对称性，用于空位等结构的建模



5. 晶体结构、空间群、在线数据库

- 创建超胞的参数界面，右侧是结构预览，输入参数后，点击修改，就会生成超胞

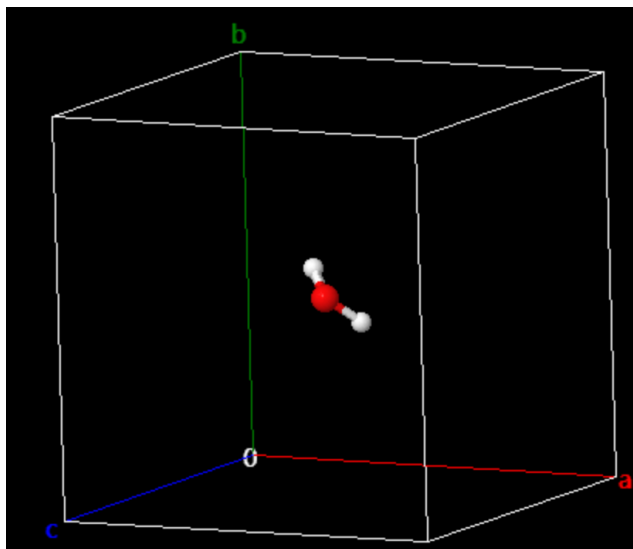


6. 分子结构/无序结构搭建

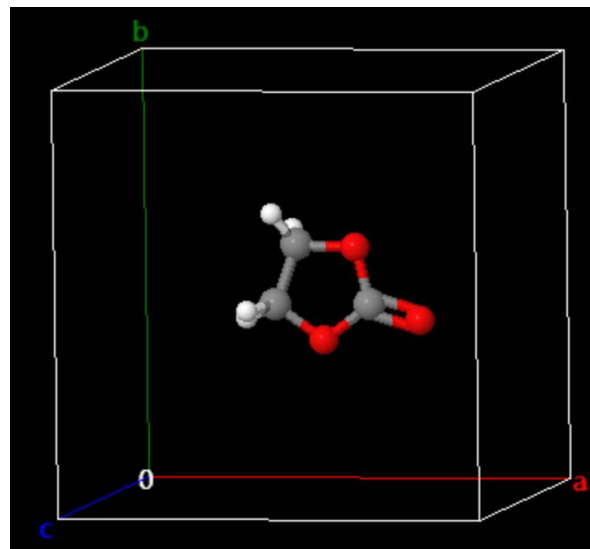
Qstudio 支持分子结构和无序分子的构建

分子构建方式：支持2D分子绘图，
支持读取SMILES/mol/xyz
读取数据库

- (1) H_2O 分子
- (2) $\text{C}_3\text{H}_4\text{O}_3$ (碳酸乙烯酯) 分子



H_2O



$\text{C}_3\text{H}_4\text{O}_3$



6. 分子结构/无序结构搭建

Q-Studio里的2D分子绘制工具，支持编辑，3D结构预览，通过力场进行分子优化



6. 分子结构/无序结构搭建

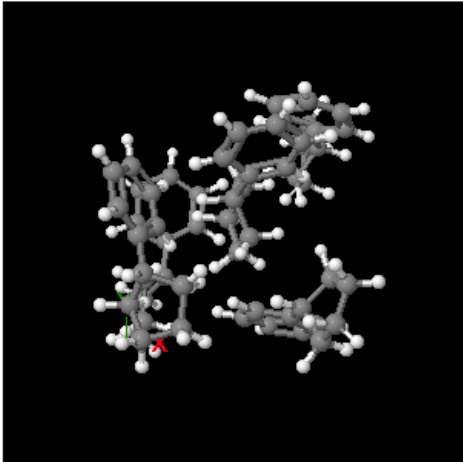
创建无序分子堆积的时，先构建分子，再选择创建无序结构， 导入之前的分子，选择填充以及分子数量/区域大小等，先预览，然后载入即可

构建无序结构 [帮助](#)

通过指定填充规则和容忍距离，将多个分子/结构单元按固定位置或区域填充方式混合成无序结构。

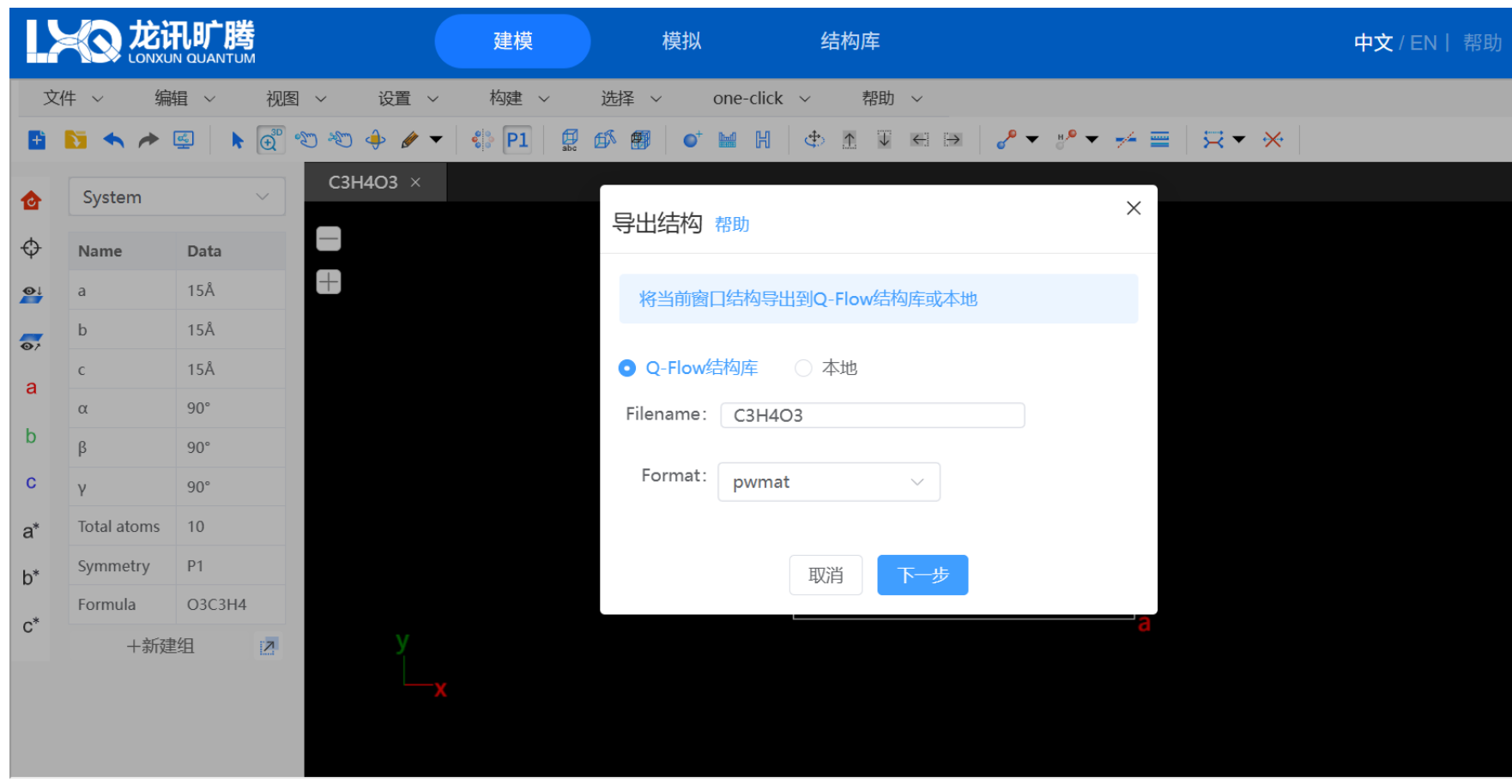
容忍距离(Å):

结构	规则	数量	区域(Å)	操作
C11H14	☐ 固定 ☒ 填充	5	在x: 0.0 - 10.0 y: 0.0 - 10.0 z: 0.0 - 10.0 盒子 内 在x: - y: - z: - 盒子 外 ☐	+ 删除





6. 分子结构/无序结构搭建



可以导出pwmat/cif/xyz/pdb等
常用格式文件
可以导出到Q-Flow数据库中
方便管理
也可以直接保存到本地



6. 分子结构/无序结构搭建

通过分子数据库 管理各种分子结构

 龙讯旷腾
LONXUN QUANTUM

建模 模拟 结构库

中文 / EN | 帮助 zhangchi

私有结构库

系统结构库

结构库 / 私有结构库

晶体结构 输运结构

文件名

查询 上传 新建

文件名	文件格式	化学式	原子总数	空间群	创建时间	操作
C3H4O3	pwmat	H4C3O3	10	P1 (1)	2025-11-12 23:52:35	   
Pt4_surface(111)	pwmat	Pt64	64	P1 (1)	2025-11-12 22:50:31	   
C8-pri	pwmat	C2	2	P1 (1)	2025-11-12 22:14:30	   

← → ↑ ↻

此电脑 > data (D:) > download >

在 download 中搜索

+ 新建

排序 查看 ...

名称	修改日期	类型	大小
C3H4O3.pwmat	2025/11/12 23:53	PWMAT 文件	1 KB



7. 表面、界面及二维材料模型的搭建

• Pt表面添加间隙原子;

添加原子:

通过**新建组**功能将间隙原子和构成间隙中心的原子分为两个组:

构建 → 添加原子

添加原子 帮助

支持通过元素周期表选择元素并指定坐标位置添加原子, 自动计算键长并防止原子重叠。

元素: H

☒ 分数坐标 ☐ 笛卡尔坐标

fx: 0.5000000

fy: 0.5200000

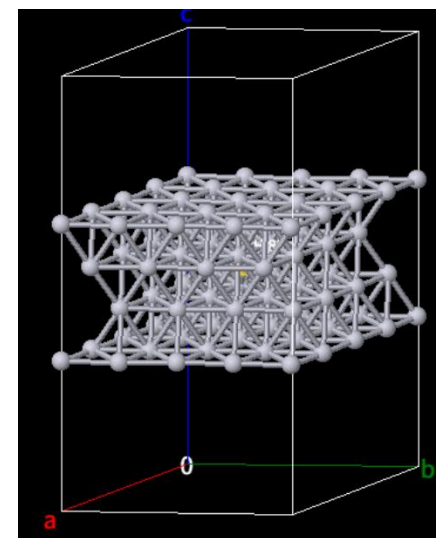
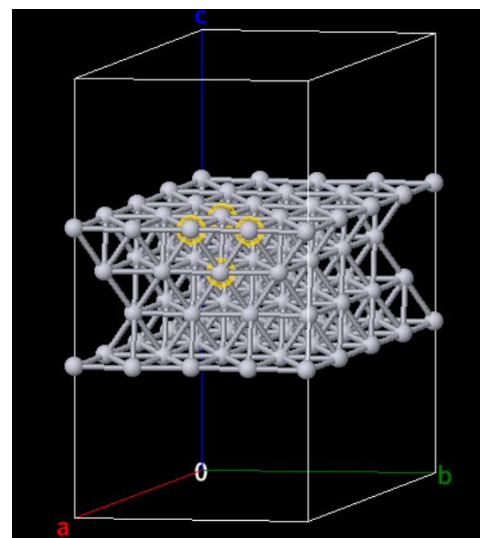
fz: 0.5100000

☒ 计算化学键

取消

Apply

a	11.248Å
b	11.248Å
c	21.888Å
α	90°
β	90°
γ	120°
Total atoms	64
Symmetry	P 1 [P 1] #1
Formula	Pt64
+新建组	



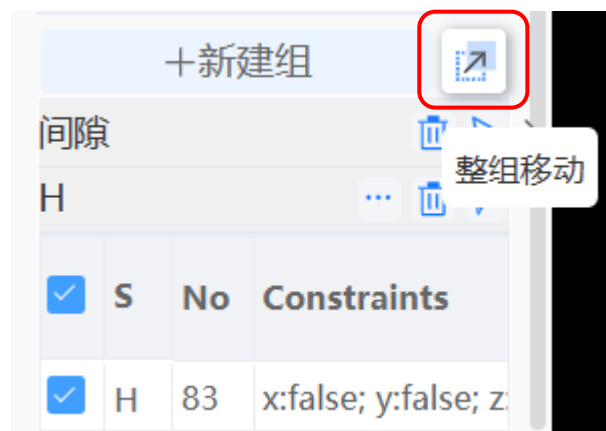
+新建组			
间隙			
☒	S	No	Constraints
☒	Pt	28	x:true; y:true; z:t
☒	Pt	45	x:false; y:false; z:
☒	Pt	78	x:false; y:false; z:
☒	Pt	79	x:false; y:false; z:

H			
☒	S	No	Constraints
☒	H	83	x:false; y:false; z:

7. 表面、界面及二维材料模型的搭建

- Pt表面添加间隙原子;

通过**整组移动**功能将间隙原子移至间隙中心位置:



整组移动 帮助

将原子组以质心/原子为基准点，移动至目标位置。

Move

☒ Group: H (基准点: 质心)

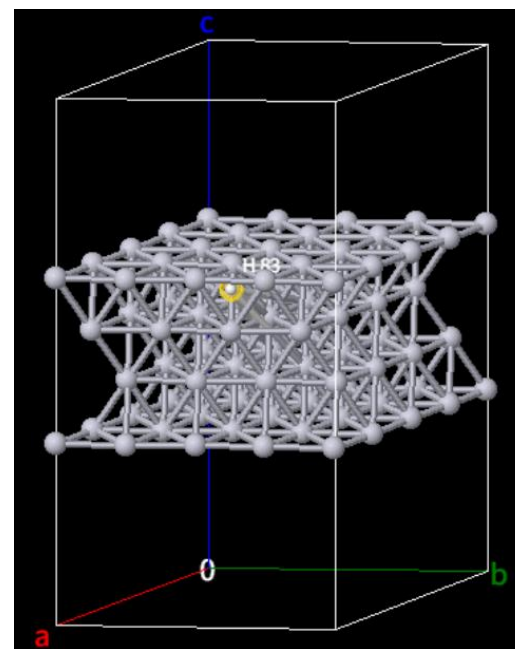
☐ 当前选择原子

To

☒ Group: 间隙 (基准点: 质心)

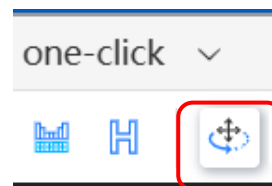
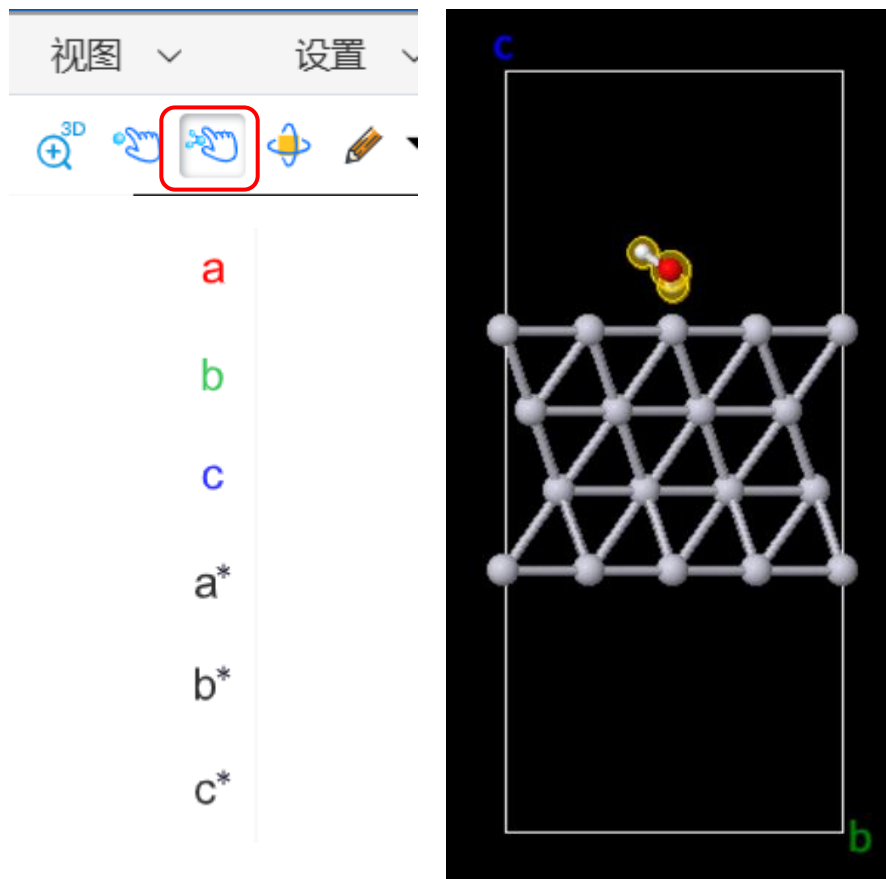
☐ 自定义

Move



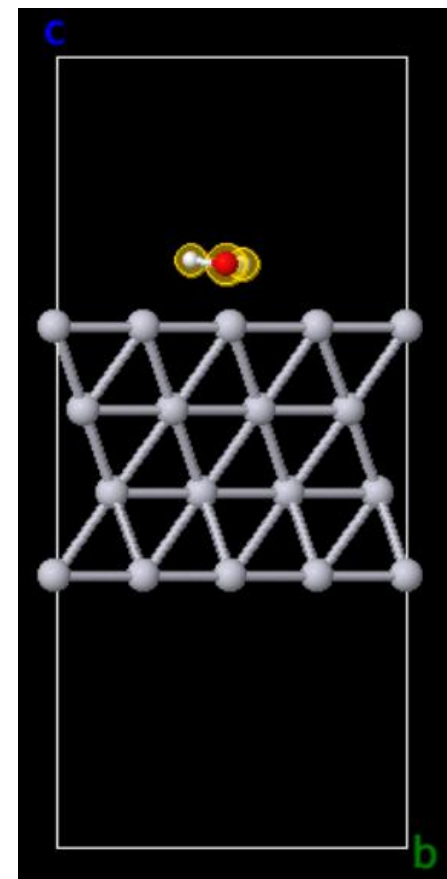
7. 表面、界面及二维材料模型的搭建

- Pt表面吸附 H_2O 分子;



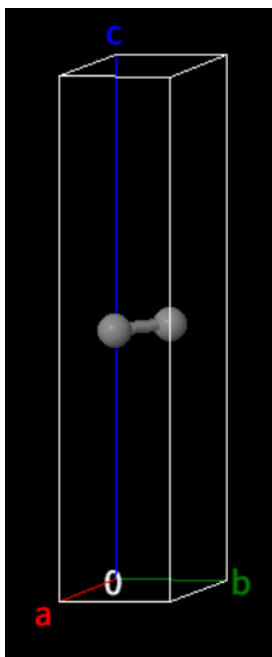
持续按步长平移和绕质心旋转操作。

以当前视角为坐标系旋转原子

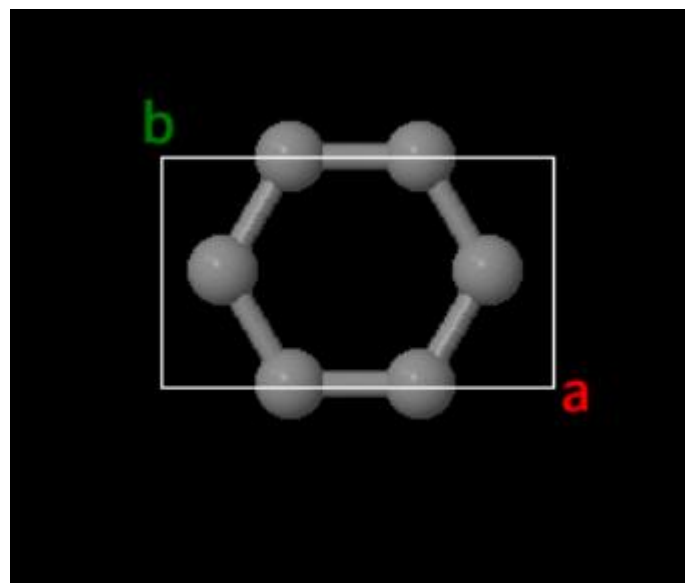


7. 表面、界面及二维材料模型的搭建

- (1) 单层石墨烯;
- (2) 晶格格矢变换;



单层石墨烯



正交变换



7. 表面、界面及二维材料模型的搭建

- (1) 单层石墨烯；首先通过切表面的方式构建表面模型

龙讯旷腾 LONXUN QUANTUM

建模 模拟 结构库 中文 / EN | 帮助 zh

切表面 帮助

通过设置hkl晶面指数，从晶体结构建立表面，可调节slab的偏移量、厚度和真空层参数。

选择晶体结构: C6

hkl: 0 0 1

切面偏移量(hkl晶面数): 0.00 表面厚度(hkl晶面数): 0.40

真空层厚度(Å): 15.00

预览

载入



7. 表面、界面及二维材料模型的搭建

- (1) 单层石墨烯；取消对称性，删除上小两个面的原子

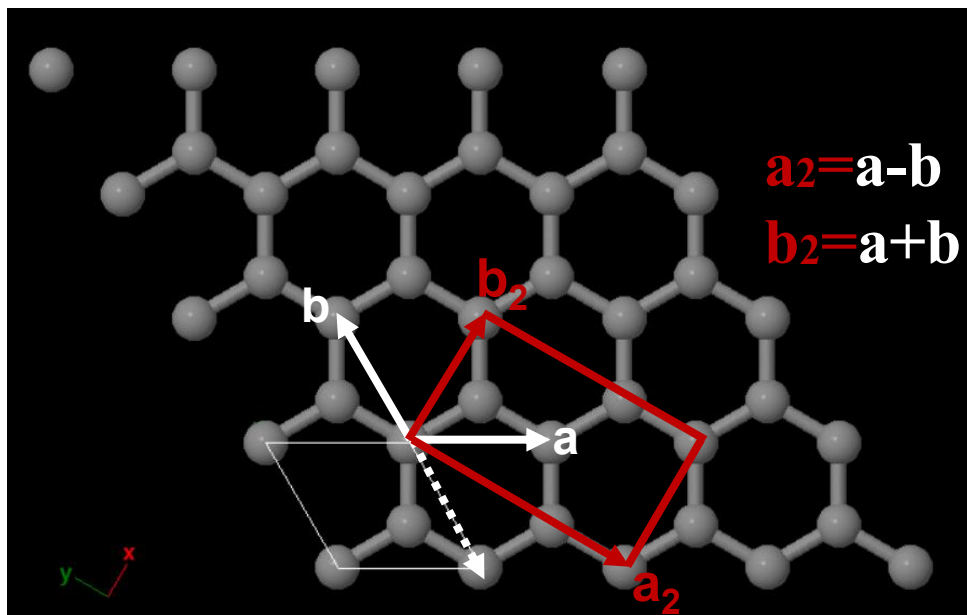


7. 表面、界面及二维材料模型的搭建

• (2) 晶格变换;

对旧基矢进行矢量运算得到新的基矢:

正交变换



晶格变换:

设置



对称性



晶格变换

晶格变换 帮助

查找将当前表面结构正交化的变换矩阵，表面法向为c轴。

自定义

根号表面

正交表面

矩阵元搜索范围 $\pm$ 10

最大表面积 ($\text{\AA}^2$) 2000

可接受的角度误差 ($^\circ$) 1.0

可选变换矩阵:

< 1 / 5 >

$$\vec{a}' = 1 \vec{a} + -1 \vec{b} + 0 \vec{c}$$

$$\vec{b}' = 1 \vec{a} + 1 \vec{b} + 0 \vec{c}$$

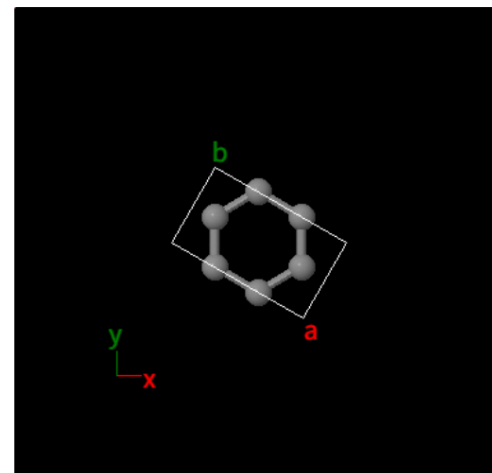
$$\vec{c}' = 0 \vec{a} + 0 \vec{b} + 1 \vec{c}$$

变换后晶格常数:

$$a = 4.275 \text{\AA} \quad b = 2.468 \text{\AA} \quad c = 12.061 \text{\AA}$$

$$\alpha = 90.000^\circ \quad \beta = 90.000^\circ \quad \gamma = 90.000^\circ$$

体积变化2倍



7. 表面、界面及二维材料模型的搭建

构建界面结构：导入A/B两种表面结构，调整参数，生成不同的界面结构

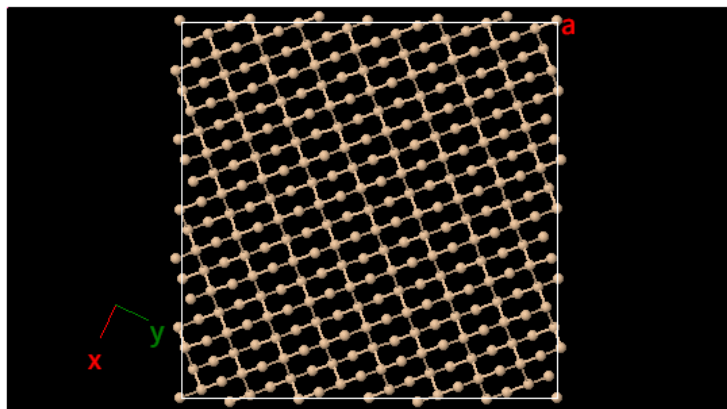
构建界面结构 帮助

返回Q-Studio界面

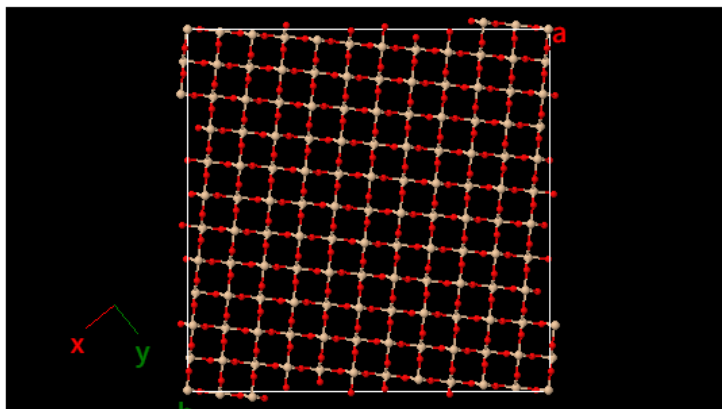
关闭

自动搜索两个表面结构的最佳晶格匹配方案，计算应变分布并生成低应变界面模型，支持设置晶格搜索范围、旋转角度、应变容差等参数，并提供界面平移和真空层厚度调节功能。

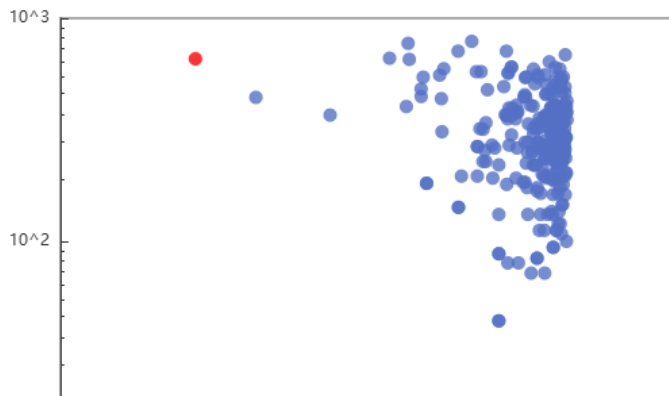
表面结构A(基底):



表面结构B:



表面匹配



参数设置:

表面晶格搜索范围

n_max 6

m_max 6

旋转角度搜索范围

旋转角度步长

4

可接受的应变范围 (%)

应变容差 (%)

0.0001

可接受的界面晶轴夹角

匹配详情

原子数: 658

应变:

界面结构参数:

表面平移

u 0

v 0

表面间距

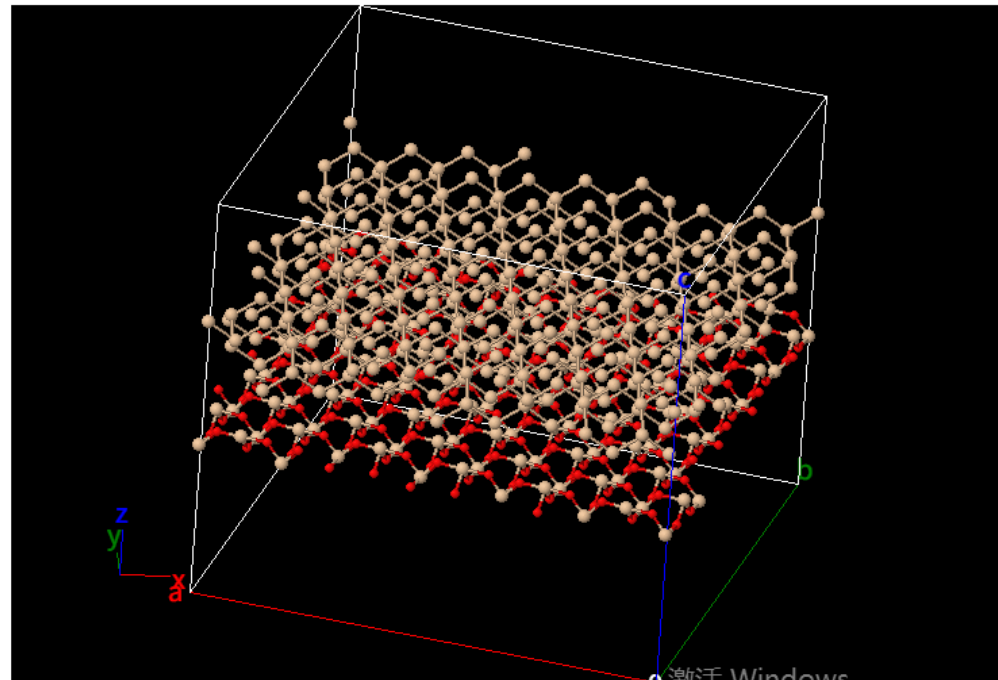
☒ 范德华半径

☐ 共价键半径

真空层厚度 (Å)

10

界面结构预览:



激活 Windows
转到“设置”以激活 Windows

载入