

# 浅谈计算模拟软件在物理教学中的应用

舒华兵

(江苏科技大学理学院 江苏 镇江 212003)

(收稿日期:2017-07-29)

**摘要:**在应用物理学专业的教学过程中,通过引入计算模拟软件,对教学中的物理概念以及基本原理进行操作、演示和模拟;使教学内容更加形象、生动和丰富,便于学生对物理知识的深入理解,从而激发应用物理学专业的学生学习物理的兴趣.通过模拟热门材料的物理性质来建立应用物理学专业的学生对科研的初步认识并且培养其科研兴趣.旨在探索教学方法的改进及创新,将计算模拟方法与物理教学相结合,为应用物理学专业的学生在物理知识的学习和科研兴趣的培养方面提供指引.

**关键词:**应用物理学 计算模拟 Materials Studio Quantum-Espresso Yambo

应用物理学是一个以物理为基础,强调将物理学知识与实际相结合的新型理科专业<sup>[1,2]</sup>.在应用物理学专业的教学过程中,有许多抽象的物理概念和物理模型.为了能够形象地表达这些物理内容,授课人往往需要通过图形和图像进行描述;然而,物理图形的建立,往往包含深刻的物理内容,在教学活动中大多数问题并不能直观地被描述,从而,造成学生学习上的困难和理解上的偏差.如果能够通过实践使学生深入理解应用物理学中的物理概念和物理模型,这将是教学手段和教学方法的创新并且使学生的实践能力得到培养.现阶段,计算模拟方法的发展已经成熟,它已经成为国际上流行的一种科学研究方法,但较少用于应用物理学的教学过程.目前,国内外重要学术期刊中大量采用计算模拟来解释实验现象和验证实验结果,这说明计算模拟能够很好地展现和理解一个物理过程.本文简要介绍Materials Studio, Quantum-Espresso<sup>[3]</sup>和Yambo<sup>[4]</sup>3种开源程序包对应用物理学专业学生的教学和科研兴趣培养的帮助.

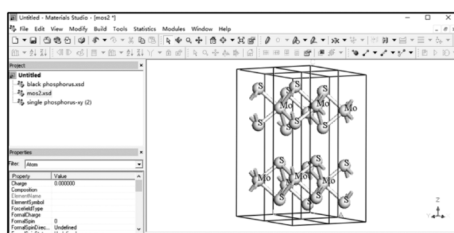
## 1 利用Materials Studio建立模型

在应用物理学专业课程的授课过程中,许多章

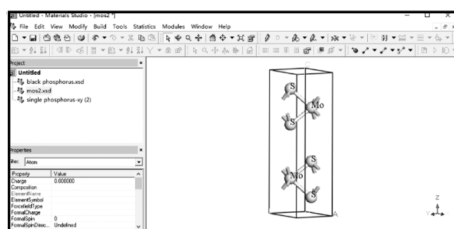
节会涉及材料相关的知识,并通过材料来说明其物理性质.要想深刻地认识材料的物理性质,首先要了解材料的结构是什么?尤其,初学者对复杂的微观结构很难辨认清楚.利用Materials Studio,可以在可视化的操作界面中建立材料的晶体模型,这些晶体模型在Materials Studio里可以任意旋转,便于学生清楚地观察复杂的微观结构.在教学过程中,以目前大家研究的热门材料(比如层状材料硫化钼和黑磷)的晶体结构构建为例来演示其构建过程.与晶体结构相关的结构数据可以查阅实验或理论参考文献来获得,让学生课前查阅相关文献,可以使学生懂得文献调研的重要性,为学生今后做毕业设计提供一个简单的尝试;实际上,做好文献调研也是科学研究的基本本领.学生通过文献调研获得它们的晶体结构参数如表1所示.根据硫化钼和黑磷晶体的结构参数,学生可以对它们进行建模;在建模过程中由Materials Studio输入它们各自的晶格参数并对晶胞数进行任意设定,超胞 $2 \times 2$ 结构如图1(a)和1(c)所示.为了在教学中展示直观且简单的模型,同时为计算模拟节省计算资源,可以选择一个单胞作为研究对象,单胞如图1(b)和1(d)所示.

表1 硫化钼和黑磷的结构参数

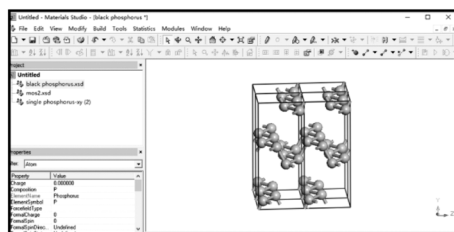
名称	点阵群	晶体结构	晶格参数	原子坐标
硫化钼	P6 <sub>3</sub> /MMC (194)	六方	$a = 3.167 \text{ \AA}$ $b = 3.167 \text{ \AA}$ $c = 12.303 \text{ \AA}$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	$\text{Mo} \left( \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{4} \right)$ $\text{S} \left( \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0.625 \right)$
黑磷	CMCA (64)	正交	$a = 3.314 \text{ \AA}$ $b = 10.473 \text{ \AA}$ $c = 4.376 \text{ \AA}$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P(0, 0, 103, 0.081)



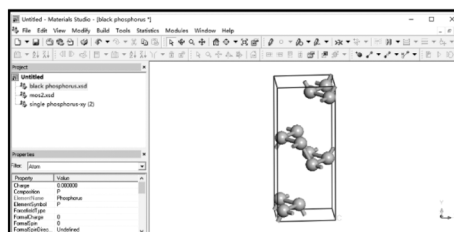
(a) 硫化钼超胞结构模型



(b) 硫化钼单胞结构模型



(c) 黑磷晶体超胞结构模型



(d) 黑磷晶体单胞结构模型

图1 Materials Studio 操作界面中呈现的硫化钼和黑磷的晶体结构

在授课过程中, 尽管学生暂时无法完全理解空间群、点群的抽象概念, 但是晶体模型建立过程是可视化且晶格位置可以在 Materials Studio 中自由旋转, 有利于学生直观地了解所关注的晶体结构, 为更深入地理解不同材料的结构特点及物理性质奠定了基础。同时, 在教学过程中, 可以向学生提出一些与目前研究前沿相关的简单问题, 比如: 现有实验技术可以把层状材料剥离成少数层的二维结构, 在 Materials Studio 中, 黑磷晶体如何实现少数层结构(单层、二层、三层)? 它们结构上的变化能否使其物理性质发生改变? 通过这些问题来激发学生强烈的好奇心, 提高学生学习的热情和课堂教学质量。

## 2 利用 Quantum - Espresso 和 Yambo 进行物理性质的计算

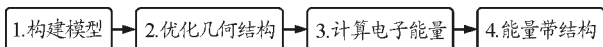
在授课过程中, 通过具体材料来讲解物理概念(比如带隙、能带、激发能、激子、激子束缚能)和物理过程(比如光激发和跃迁)既具体又形象, 具有十分重要的意义。当讲解带隙、能带、光激发和跃迁以及激子知识时, 可以通过学生自己对半导体材料物性计算来理解这些知识。例如: 带隙的定义是导带的最低点和价带的最高点的能量之差。对于不同的材料, 导带的最低点和价带的最高点它们在哪里? 导带和价带是什么? 对于初学者, 这些物理名词都是抽象的。如何能够把导带、价带以及带隙讲清楚, 只要获得具体材料的电子能量带结构, 这些物理名词就可以完全理解。

以半导体黑磷单层为例, 首先, 学生在 Materials Studio 中构建好黑磷单层模型, 导出结构参数; 其次, 在 Quantum - Espresso 的输入文件中写入结构参数并优化其结构; 然后, 计算出电子的能量; 最后, 通过电子在倒空间的能量画出黑磷单层的电子能量带结构, 计算步骤和结果如图 2 所示。图 2(c) 虚线和实线分别表示价带(在绝对零度, 被电子占满的能带)和导带(所有价电子所处的能带), 费米能级为参考零点, 图中价带最高(价带顶)和导带最低(导带底)的位置很清楚; 并且价带顶和导带底在倒空间同一高对称点( $\Gamma$ 点), 这一结果还表明: 黑磷单层为直接带隙的半导体, 从图中还可以直接度量出带隙值为 0.80 eV; 这样, 学生就很容易理解价带、导带和能隙这些物理概念。在此基础上, 进一

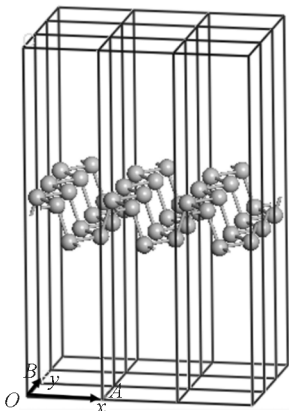
步引导学生,从黑磷单层的带结构信息还可以得到什么物理量?利用带结构数据,即通过

$$m^* = \hbar^2 \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$$

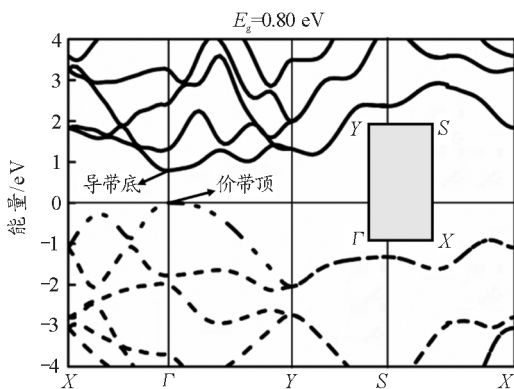
式中  $m^*$  为载流子有效质量,  $E$  为电子能量,  $k$  为倒空间位置,可以获得它的载流子(电子即导带底和空穴即价带顶)有效质量,提高学生利用已学的数学知识来解决物理实际问题的能力. Quantum - Espresso 除了可以模拟电子能量带结构外,还可以用来搜索过渡态、分子动力学、声子谱、有效电荷、介电张量、电声子相互作用、声子寿命以及 X 射线吸收谱和电子激发性质的模拟. 这些计算模拟过程都能够让学生更好地理解重要的物理概念和物理过程.



(a) 模拟电子能带结构的步骤



(b) 黑磷单层结构图(3×3超胞)



(c) 单层黑磷电子能量带结构

图2 计算步骤和结果

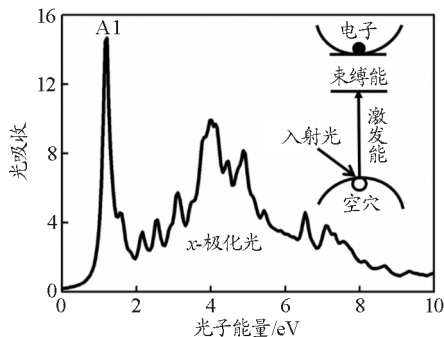
材料的能带结构将决定多种特性,特别是它的电子学和光学性质.能够准确地获得材料的能带结构其实是很重要的,在授课过程中,就能带结构计算的准确性可以向学生简单介绍能够准确获得能带结构的国际通用且认可的方法(GW方法).这样既可

以拓宽学生的知识面又让学生了解到当前准确计算带结构的方法.通过GW方法获得黑磷准粒子的能带结构和上述获得的能带结构的差别在于导带全部上移和价带全部下移,能带结构的形状未变但带隙显著变大(2 eV).

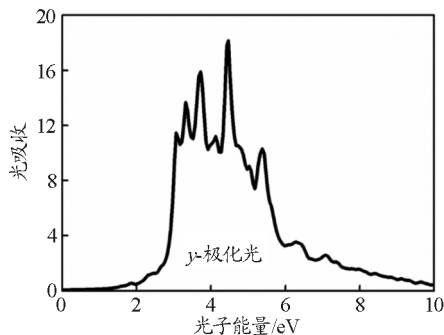
在材料准确的能带结构基础上,向学生继续讲授材料的光学性质,探讨光激发的物理过程以及激子现象.仍然以近年来受到大家关注的黑磷单层为例来浅谈它的光激发和激子.Yambo是基于多体微扰理论和含时密度泛函理论来计算准粒子能量和光学性质的开源软件包,能够处理多原子的分子体系和周期性体系.对于学生来说,多体微扰理论和密度泛函理论不是很容易理解;但是,学生通过Yambo实践可以较容易地获得其光学吸收谱和激子波函数.光学吸收谱可以分析出每一个光子吸收所带来的跃迁过程,激子波函数可以展现出电子-空穴对在实空间的具体分布.虽然Yambo的理论背景很复杂,但是通过它所获得材料的光学性质却很清楚,学生完全可以理解.

从黑磷单层结构图上可以看出它具有各项异性,对不同极化方向的入射光将有不同程度的光吸收,如图3所示.对入射光光子能量在2 eV的能量范围内,黑磷单层对x方向有较强的吸收,对y方向的光吸收几乎为零,且在约1.2 eV处有一个很强的吸收峰A1,此峰对应的光子能量称为“激发能”.再分析可知,此峰来源于能带结构图中 $\Gamma$ 点的价带顶到导带底的垂直跃迁即带隙(2 eV),跃迁过程如图3(a)中内插.除此以外,能够发现此峰的激发能小于跃迁的能量差,向学生提出问题,这是为什么?利用学生已有的知识和学生讨论,得出的结论就是在光激发过程中电子和空穴之间有强库仑相互作用.其实,这种电子和空穴之间的强库仑相互作用是由于材料维度的降低而使电子屏蔽作用下降导致的,结果就是此吸收峰对应的一个束缚激子(激发能小于跃迁之间的能量差的激子)的束缚能达到约800 meV,这是黑磷晶体激子束缚能的10倍(约几十个毫电子伏特<sup>[5]</sup>);此束缚激子在实空间的分布如图4所示,黑色小球为空穴位置,灰色为电子在实空间的概率分布.利用Yambo对黑磷单层光学性质的研究,可以让学生深刻地认识到什么是激发能、吸收峰、激子、激子束缚能以及跃迁过程.通过计算模拟

材料的物理性质来提高学生对物理的兴趣,培养学生独立思考、深入研究的习惯.

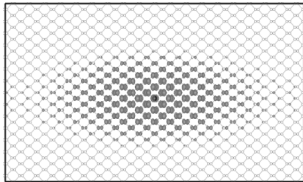


(a) 沿 $x$ 方向极化的入射光



(b) 沿 $y$ 方向极化的入射光  
 $x$ 和 $y$ 方向标明在图2(b)中

图3 黑磷单层的光学吸收谱



黑色小球为空穴位置,灰色为电子在实空间的概率分布,白色小球为磷原子

图4 沿 $x$ 极化光的吸收谱中束缚激子(A1)的实空间分布

### 3 结论

通过对物理学专业学生的授课和自身的科学研究,发现 Materials Studio, Quantum - Espresso 和 Yambo 3 种开源程序包对物理学专业学生的学习和引导学生对科学研究的兴趣有很大帮助. 可以进一步加深学生对应用物理学理论的理解,提高学生对应用物理学专业学习的积极性和主动性,培养学生科学研究的兴趣,为培养适应社会发展的创新性人才打下基础.

### 参考文献

- 1 黄曙江,郑飞跃,徐经梅. 应用物理专业实验特色和教学的研究. 杭州电子科技大学学报, 2005, 1(2): 61 ~ 64
- 2 陈国祥,杨旭. 应用物理学专业实验课程教学改革的探索. 物理通报, 2017, 36(7): 82 ~ 84
- 3 P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, et al. QUANTUM ESPRESSO: A Modular and Open - Source Software Project for Quantum Simulations of Materials. J. Phys. Condens. Matter, 2009, 21: 395502 - 1 ~ 395502 - 19
- 4 A. Marini, C. Hogan, M. Grüning, et al. Yambo: An Ab Initio Tool for Excited State Calculations. Comput. Phys. Commun., 2009, 180:1392 ~ 1403
- 5 V. Tran, R. Soklaski, Y. Liang, et al. Layer - Controlled Band Gap and anisotropic Excitons in Few - Layer Black Phosphorus. Phys. Rev. B, 2014, 89(23): 235319 - 1 ~ 235319 - 6

## Brief Discussion on the Application of Computational Simulation Software in Physics Teaching

Shu Huabing

(College of Science, Jiangsu University of Science and Technology, Zhenjiang, Jiangsu 212001)

**Abstract:** By introducing computational simulation software, teachers can operate, demonstrate, and simulate the physical concept and basic principle in the process of teaching of applied physics major, which make the teaching content more vivid and rich and make students deeply understand the knowledge of physics. Thus, it will stimulate students of applied physics major more interest in learning physics. By simulating the physical properties of hot materials, students will build preliminary understanding of scientific research and develop their interest in scientific research. This paper mainly explores the improvement and innovation of teaching methods by the combination between simulation method and physics teaching. It will provide a guidance for learning in the knowledge of physics and training the scientific research interest for students of applied physics major.

**Key words:** applied physics; computational simulation; Materials Studio; Quantum - Espresso; Yambo