

▼ AutoDefect 计算包说明文档

- 计算包介绍
- 运行环境
- ▼ 安装与运行环境
 - 方式一：直接下载安装包
 - 方式二：Mcloud用户直接调用
- 运行目录索引
- 整体运行流程
- ▼ 快速运行案例
 - 案例一：产生硅空位缺陷
 - ▼ 案例二：GaN中的元素化学势和空位形成能计算
 - 2.1 准备超胞结构和缺陷结构
 - 2.2 计算性质预处理
 - 2.3 化学势预处理（非必选）
 - 2.4 形成能计算
 - ▼ 案例三：TeCd中的本征缺陷和载流子浓度分析
 - 3.1 确定缺陷类型
 - 3.2 化学势确定
 - 3.3 计算本征缺陷的能量
 - 3.4 载流子浓度相关计算
 - 案例四：GaN中的Ga空位缺陷的跃迁偶极矩与辐射复合速率计算
 - 案例五：GaN中的Ga空位缺陷的非辐射复合速率计算
- ▼ 附录
 - 1.可能有用的linux命令
 - 参数说明

AutoDefect 计算包说明文档

计算包介绍

AutoDefect旨在帮助用户方便、快捷地利用PWmat进行带电点缺陷相关的计算和分析。该程序目前支持：

- (1) 简单点缺陷的产生，包含空位、反位、替位、间隙缺陷等本征缺陷，外来杂质缺陷以及基于以上点缺陷为基础产生缺陷复合体。
- (2) 元素化学势、缺陷形成能和转变能级的计算，程序调用PWmat对缺陷结构和超胞进行结构优化、电子结构和能量计算。基于体系的电子结构自动寻找可能存在的价态并进行带电缺陷的结构优化和能量计算，对于带电体系还考虑了包含镜像电荷修正并自动修正其能量值。
- (3) 在缺陷形成能结果的基础上，考虑温度，化学势、有效掺杂浓度等工艺条件的影响，根据电中性条件进一步获取载流子浓度、缺陷浓度，以及费米能级的变化。
- (4) 辐射复合速率与非辐射复合速率，对于指定缺陷结构，可以计算缺陷能级与VBM, CBM之间的辐射复合与非辐射复合速率，俘获截面，进而分析少数载流子寿命等性质。

AutoDefect			
Defect Structure generation	Defect Energy caculation	Defect Concentration caculation	Defect Dynamics caculation
1. 自动产生大小合适的最接近方胞的结构。 2. 自动产生各类点缺陷，包含空位、替位、反位、间隙等点缺陷。 3. 基于简单点缺陷形成的缺陷复合体。	1. 程序调用PWmat对缺陷结构进行结构优化和能量计算。 2. 自动判断缺陷可能的价态并进行带电缺陷能量修正。 3. 计算缺陷形成能和转变能级。	基于形成能的结果，考虑温度，化学势、有效掺杂浓度等工艺条件的影响，根据电中性条件进一步获取载流子浓度、缺陷浓度，以及费米能级的分布情况。	1. 计算指定缺陷的电声耦合和声子性质。 2. 计算缺陷能级的辐射复合速率与非辐射复合速率。 3. 计算缺陷的复合截面和少数载流子寿命。

运行环境

1. 用户需要提前编译安装 PWmat 程序，确保 Gap read, convert_wg2rho.x, convert_rho_diff.x, TDM.x 等快捷命令可用；
2. 用户需要确保执行脚本命令的 python 最低版本为 python 3.10。

安装与运行环境

方式一：直接下载安装包

建议采用 conda 虚拟环境并保持联网状态，执行以下命令安装：

(1) 创建虚拟环境

```
conda create --name autodeflect python=3.10
conda activate autodeflect
```

(2) 解压并进入含 `setup.py` 的目录下执行：

```
pip install .
```

方式二：Mcloud用户直接调用

Mcloud用户可以直接调用AutoDefect计算包，调用方式如下：

```
module load conda
source activate autodeflect
```

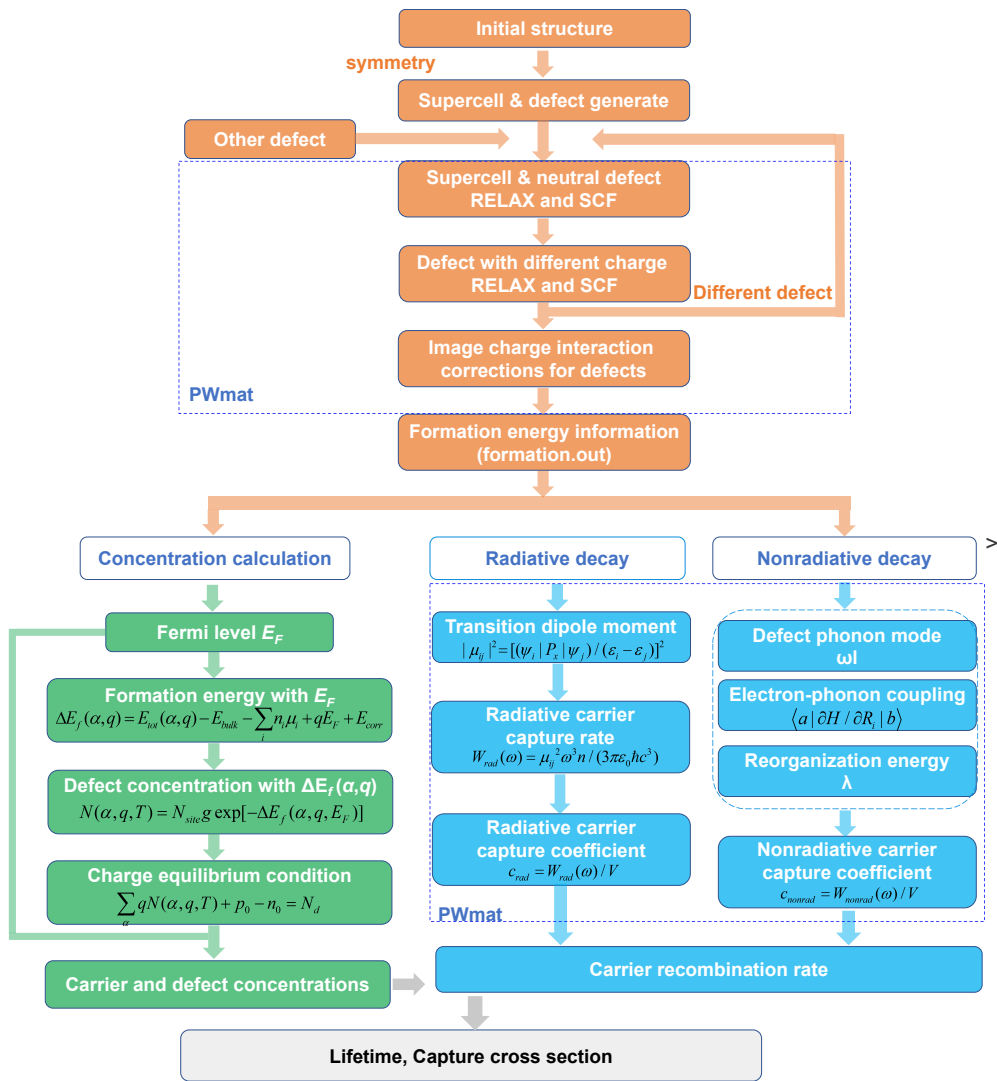
运行目录索引

用户可根据自己的需求查看结果或修改文件内容，但必须遵循以下目录结构：

└─ input	# 输入参数文件
└─ bulk.config	# 初始无缺陷单胞结构文件
└─ structure/	
└─ defect_names.txt	# 缺陷结构索引文件（记录缺陷名称和对应文件）
└─ supercell/	# 自动生成的超胞结构
└─ supercell.config	#超胞结构
└─ defect_type1/	# 缺陷类型1文件夹，如Vacancy, etc
└─ defect1	# 缺陷结构1
└─ defect2	# 缺陷结构2
└─ ...	
└─ defect_type2/	
└─ competition	# 单质和化学物相
└─ prepare/	# 计算准备文件目录
└─ input.json	# 参数配置文件（程序自动生成）
└─ job.sh	# 任务提交脚本模板
└─ relax_etot.input	# 结构优化参数文件模板
└─ scf_etot.input	# 自洽计算参数文件模板
└─ calculate/	# 计算任务目录
└─ bulk/	# 完美超胞计算文件夹
└─ relax/	# 超胞结构优化结果
└─ scf/	# 超胞自洽计算结果
└─ defect1/	#不同缺陷计算文件夹
└─ q0/	
└─ relax/	
└─ scf/	
└─ q1/	
└─ other_q/	
└─ relax/	
└─ scf/	
└─ defect2/	
└─ competition	# 单质和化学物相计算
└─ result/	# 计算结果目录
└─ formation.out	# 缺陷形成能原始数据
└─ E_forms/	# 形成能分析结果
└─ E_formation.txt	# 形成能数据文件
└─ Formation_Energy.png	# 形成能-费米能级曲线图
└─ competition	
└─ chemical_pot_energies.csv	# 单质化合物能量数据文件
└─ chem_limits.txt	# 化学势约束文件
└─ carriers	
└─ carrier_with*.txt	# 载流子相关数据
└─ *.png	# 载流子相关绘图
└─ recombination	
└─ *.png*	# 辐射/非辐射复合速率相关绘图
└─ *.data	# 辐射/非辐射复合速率计算结果
└─ complete.json	# 计算任务检测文件
└─ out.log	# 主程序运行日志
calculate.log	# 计算任务执行日志
prepare.log	# 计算准备文件生成日志

整体运行流程

程序整体运行流程如下图所示，如需计算分析的某些结果，可能需要上一步的计算结果。



快速运行案例

案例一：产生硅空位缺陷

注意：运行案例前需确保加载环境，如mcloud用户需先加载conda环境。

```
module load conda
source activate autodetect
```

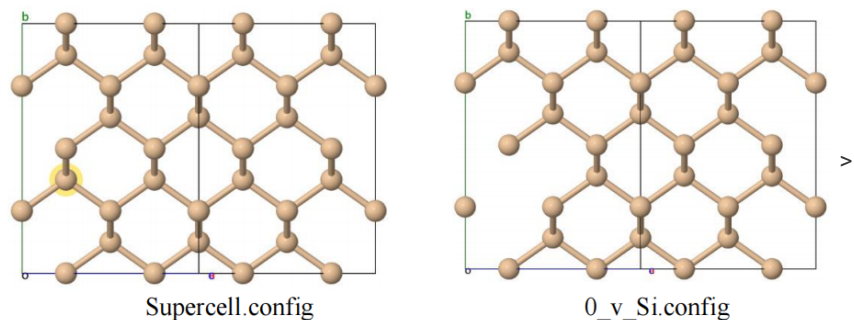
准备好 bulk.config 和 input,
输入文件 input 相关参数如下：

```
num_atoms = 64 320 # 超胞最小原子数和最大原子数 默认 64 320
intrinsic = T # T/F, 是否形成本征缺陷, 默认 T
intrinsic_type = Vacancy # 本征缺陷类型, 可取 Vacancy 或 Antisite 或不取
```

在当前工作目录下执行命令：

```
autodetect -gen 或
autodetect -gen bulk.config
```

其中bulk.config为用户提供的初始结构，可为超胞或单胞(程序将自动寻找最小单胞并进行扩胞和掺杂), 也可为POSCAR或cif格式。
等待程序执行结束后，将在 structure 文件夹下产生相应的超胞结构文件和空位缺陷，以及结构名称索引文件 defect_names.txt。



相应的defect_names.txt文件如下：

```
supercell:['supercell.config']
vacancy:['0_v_Si']
'guess_charge_state':[[-1, 0, 1]]
'multiplicity':[2]
```

其中supercell为固定格式，为扩胞后的正交超胞结构文件，vacancy为缺陷名称，0_v_Si为缺陷结构文件名，guess_charge_state为根据缺陷氧化态推测的电荷，multiplicity为缺陷位点在原胞中的位点数目。

注意，如果缺陷存在确定的价态，可在此处修改guess_charge_state和multiplicity参数以用于后续的缺陷形成能计算和载流子浓度计算。

其它与缺陷形成相关的input参数显示如下，可根据需求自行设置或修改。

num_atoms = 64 300

说明：形成的方胞的最少原子数目和最大原子数目，默认最小原子为64，300

min_length=10

说明：形成的方胞的最小晶格常数，默认为10 Å

intrinsic = default: T

说明：是否产生本征缺陷，默认产生

intrinsic_type default: None choice: Vacancy, Antisite,

说明：本征缺陷类型，包括空位和反位

doping = F default: F

说明：doping=T/F是否产生杂质缺陷，默认为F

doping_atom

说明：设置掺杂元素，例如 doping_atom = Fe

doping_type

说明：设置掺杂类型，可选值包括interstitial, substitute，即间隙和替位

complex=F

说明：是否产生复合缺陷，默认F，如为T，则以固定缺陷（此处记为D1）为中心，在该缺陷周围产生另一个缺陷(D2)。

complex_type=

说明：在何种缺陷的基础上产生复合缺陷，即D1类型。可选vacancy, interstitial, substitution

complex_int_atom=

说明：复合缺陷的间隙原子类型，如D2为间隙，此处设置该元素类型

complex_sub_atom=

说明：复合缺陷的间隙原子类型，如D2为替位，此处设置该元素类型

max_int_complex=2

说明：D2间隙原子的最大数目，此处间隙原子为以D1为中心，r为半径的球内搜寻间隙位点。默认值：2.

defect_radius =

说明：半径r的取值，默认为3，单位Å

interstitial_type = voronoi

说明：产生间隙原子的方式，默认为voronoi方法，也可选为random,此时将采用随机方式寻找最佳的间隙位点。

```
max_nums_interstitials =3
```

说明：产生间隙原子的方式random时，此时将采用随机方式寻找最佳的间隙位点(空洞最大或距离周围原子最远)的最大间隙原子数目，默认为3。

Tips

1. 若用户设置了num_atoms为一个值，则程序将自动生成最小原子数目大于num_atoms的超胞。
2. 生成超胞时有可能由于原子数目限制或胞长限制导致产生的结构并非正交超胞，而是最接近正交超胞的结构。
3. 如需生成本征间隙杂质，如Si中的间隙Si,可设置

```
doping_atom = Si
doping_type = interstitial
```

如需生成双空位，可设置

```
intrinsic = T
intrinsic_type = vacancy
```

```
complex=T
```

```
complex_type=vacancy
```

如需设置空位+间隙，可设置

```
intrinsic = T
intrinsic_type = vacancy
complex=T
complex_type=interstitial
complex_int_atom=Si
```

案例二：GaN中的元素化学势和空位形成能计算

缺陷形成能的理论计算方法可参考缺陷教程[defect](#)

相应的参考文献可参考

[1] Christoph Freysoldt, Blazej Grabowski, Tilmann Hickel, Jörg Neugebauer, Georg Kresse, Anderson Janotti, and Chris G. Van de Walle, Rev. Mod. Phys. 86, 253 2014 DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.86.253>

或其它相关文献

注意使用前需激活环境，如mcloud用户需先加载

```
module load conda
source activate autodefekt
```

2.1 准备超胞结构和缺陷结构

准备input和bulk.config，输入参数input内容如下：

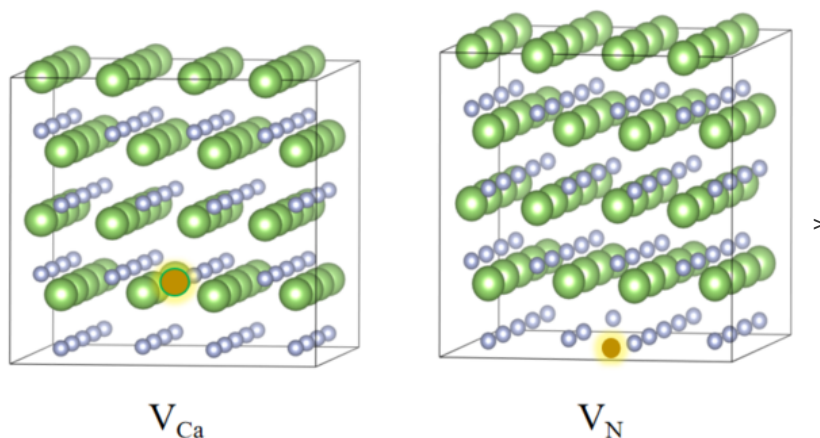
```
queue = slurm                # slurm / pbs
partition = 3080ti           # slurm 分区
nodes = 1                    # 节点数
ntasks-per-node = 4          # 任务数
ngpu = 4                     # gpu 数目
psp_path = /share/psp/allpsp # 赝势所在路径，默认取SG15赝势
level = 2                    # 计算精度，优化+自洽分别采取的方法
charge = 0                   # 0/1,
#默认0, 0:从defect_names.txt读取初次猜测的电荷, 1:根据OUT.WG和OUT.OCC计算判断电荷
# (level=1: PBE+PBE; 2: PBE+HSE; 3: HSE+HSE
Diec = 11.8                  # 介电常数，用于镜像电荷修正
defect_Elements = Ga N       # 缺陷元素
Chemical_potential = -1769.32 -271.51 # 缺陷元素化学势，与缺陷元素对应
intrinsic = T
intrinsic_type = Vacancy
gap =3.5
min_length = 9
```

在当前工作目录下执行

```
autodefekt -gen 或 defect_generate.py 或
autodefekt -gen bulk.config
```

此时将在structure文件夹下产生相应的超胞结构文件和空位缺陷，以及结构名称索引文件defect_names.txt
defect_names.txt内容如下：

```
supercell:['supercell.config']
vacancy:['0_v_Ga', '1_v_N']
'guess_charge_state':[[-4, -3, -2, -1, 0, 1], [-1, 0, 1, 2, 3, 4]]
'multiplicity':[2, 2]
```



注意

- 该过程中起作用的参数有：

```
intrinsic = T
intrinsic_type = Vacancy
min_length = 9
```

- 其余参数为计算所用参数，对于产生缺陷不生效。
- 如需增加其它特殊的缺陷类型，可在defect_names.txt中手动修改对应文件名并添加对应结构

2.2 计算性质预处理

准备完超胞结构和缺陷结构后，执行

```
autodeflect -pre
```

此时程序完成了两项任务：

- 产生文件夹prepare和calculate。
在prepare文件中保存了程序自动生成的优化计算参数relax_etot.input，自治计算参数scf_etot.input和任务提交脚本job.sh，以及生成的参数文件input.json。
- 在calculate文件夹下生成bulk的计算文件夹和中性缺陷的计算文件夹和preparation文件夹相关计算参数文件。

对于需要更改计算的必要参数（如K点，自旋，电荷密度和波函数读取等）和任务提交脚本的用户，可在此处直接修改对应参数，然后重新执行autodeflect -pre 此时prepare文件夹中的参数文件将不会被覆盖，而calculate文件夹中的参数文件将会被修改。

默认生成的relax_etot.input如下：

```
4 1
job = relax
relax_detail = 1, 100, 0.02, 0, 0, -0.001
in.atom = atom.config
in.psp1 = /share/psp/allpsp/Ga.SG15.PBE.UPF
in.psp2 = /share/psp/allpsp/N.SG15.PBE.UPF
xcfunctional = PBE
ecut = 60
MP_N123 = 1 1 1 0 0 0 1
spin = 2
accuracy = high
convergence = difficult
```

默认生成的scf_etot.input如下：

```
4 1
job = scf
in.atom = atom.config
in.psp1 = /share/psp/allpsp/Ga.SG15.PBE.UPF
in.psp2 = /share/psp/allpsp/N.SG15.PBE.UPF
xcfunctional = HSE
ecut = 60
MP_N123 = 1 1 1 0 0 0 1
spin = 2
accuracy = high
convergence = difficult
out.vatom = T
out.force = T
in.rho = T
in.wg = F
OUT.HSEWR = F
```

默认生成的job.sh脚本如下：

```
#!/bin/sh
#SBATCH --partition=3080ti
#SBATCH --job-name=defect_caculate
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks-per-node=4
#SBATCH --gres=gpu:4
#SBATCH --gpus-per-task=1

module load compiler/2022.0.2
module load mkl/2022.0.2
module load mpi/2021.5.1
module load cuda/11.6
module load pwmat
mpirun -np $SLURM_NPROCS -iface ib0 PWmat | tee output
```

2.3 化学势预处理（非必选）

在上述input中我们已经预先给出了不同元素在相应参数设置下的化学势，如：

```
defect_Elements = Ga N
Chemical_potential = -1769.32 -271.51
```

但通常情况下，化合物的化学势通常是一个约束范围，例如GaN中Ga和N的化学势约束满足：

$$\begin{aligned}\mu_{\text{GaN}} &= \mu_{\text{N}} + \mu_{\text{Ga}} \\ \mu_{\text{Ga}} &\leq \mu_{\text{Ga}}^{\text{bulk}} (\text{金属Ga}) \\ \mu_{\text{N}} &\leq \frac{1}{2} \mu_{\text{N}_2}\end{aligned}$$

如果对于一种全新的体系，在不知道其化学势的情况下，可通过程序从Materials Project中自动下载元素并计算各个单质和化合物的化学势。对应的input中需增加设置：

```
api_key = 'your_api_key' #Materials Project API
defect_Elements = Ga N #可选多种元素
cem_plot=T #是否绘制化学势分布图，默认F
cem_mesh=0.04 #采用单胞计算化学势时的K点密度，默认为0.04
```

运行前需要保证autodefect -pre运行已完成：

ap_key为Materials Project API，可在Materials Project官网注册申请（当前程序仅支持新版API密钥，即通常包含32位字符）。

MP数据库官网<https://legacy.materialsproject.org/>

```
autodefect -cem
```

此时程序将自动下载Materials Project中Ga和N的结构到本地文件夹structure/competition。除结构文件外，在该文件夹下也会产生这些结构在MP数据库中的相关信息，见stable_phases.json

再次执行：

```
autodefect -cem
```

程序将采用prepare文件夹中的参数文件计算structure/competition中的所有结构进行结构优化和自洽计算，默认的k点密度为0.04，若为HSE计算，则结构将自动扩胞为超胞并采用单K点计算能量。

计算将产生cal_chem.log，计算完成后将在result/competition文件夹下产生文件：

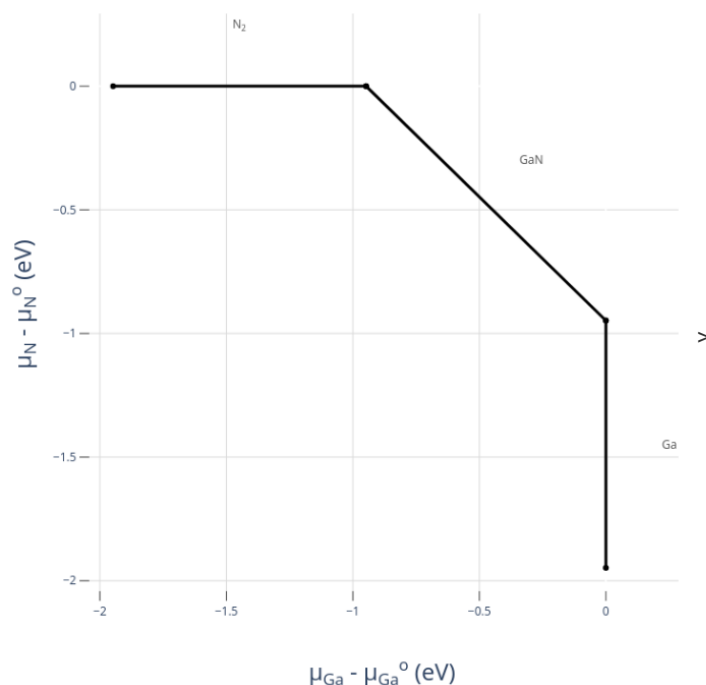
- chemical_pot_energies.csv文件，该文件记录了各个单质和化合物的能量。
- chem_limits.txt文件，程序通过chemical_pot_energies.csv计算得到，该文件记录了化合物的化学势限制和能量范围。该文件可用于后续形成能计算中的化学势设置。如下所示：

abs_chem_pots with respect to GaN:

Ga-rich: {Ga: -1769.4122 eV, N: -271.4290 eV}

N2-rich: {Ga: -1770.3600 eV, N: -270.4813 eV}

- 如设置 cem_plot=T ,还将产生化学势分布图chem_pot_diagram.png，如下图所示：



注意

- 若用户需要计算的体系较大，或需要较高的精度，可修改cem_mesh参数。
- 若已有各单质能量和化学势能量，可将其直接写入chemical_pot_energies.csv，重新执行 autodefect -cem 即可直接计算化学势限制和能量范围，程序并不会重复计算结构优化和自洽。
- 计算化学势时需要默认流程需结构优化和自洽计算，耗时较长，如不想程序执行后再前台等待或网络不稳定，可提交至后台计算。提交方式有两种：
 - 在命令行运行 autodefect -cem &
 - 通过作业系统提交至计算节点，提交脚本sub.sh参考如下：

```
#!/bin/sh
#SBATCH --partition=cpu
#SBATCH --job-name=defect_calculate
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks-per-node=1

module load anaconda
source /share/app/anaconda3/etc/profile.d/conda.sh
conda activate autodefect

autodefect -cem
#autodefect -cal
```

slurm提交方式: sbatch sub.sh

2.4 形成能计算

确保prepare文件夹中的参数文件和job.sh参数合适，并且计算环境准备好，相关的input参数如下：

```
queue = slurm                # slurm / pbs
partition = 3080ti           # slurm 分区
nodes = 1                    # 节点数
ntasks-per-node = 4          # 任务数
ngpu = 4                     # gpu 数目
psp_path = /share/psp/allpsp # 赝势所在路径，默认取SG15赝势
level = 2                    # 计算精度，优化+自洽分别采取的方法
# (level=1: PBE+PBE; 2: PBE+HSE; 3: HSE+HSE
charge = 0                   # 0/1,
#默认0, 0:从defect_names.txt读取初次猜测的电荷, 1:根据OUT.WG和OUT.OCC计算判断电荷
Diec = 11.8                  # 介电常数, 用于镜像电荷修正
defect_Elements = Ga N       # 缺陷元素
Chemical_potential = -1769.32 -271.51 # 缺陷元素化学势, 与缺陷元素对应
```

运行方式如下：

```
autodeflect -cal
```

此时程序将逐步计算体材料，缺陷结构的结构优化，电子结构自洽计算、以及不同电荷下的能量修正计算。

部分实时log输出如下：

```
1-calculate the formation energy
-----
Bulk and neutral defect calculations start
RELAX end result:
It= 2 *END E= -131373.20071 M_F= 0.81E-02 dE= 0.11E-03 dRho= 0.42E-06 SCF= 28
bulk RELAX job has finished
RELAX end result:
It= 56 *END E= -129585.53388 M_F= 0.19E-01 dE= 0.52E-04 dRho= 0.99E-06 SCF= 8
0_v_Ga RELAX job has finished
-----
ending_scf_reason = tol Rho_err 1.000000000000000E-005
bulk SCF job has finished
ending_scf_reason = tol Rho_err 1.000000000000000E-005
0_v_Ga SCF job has finished
Bulk and neutral defect calculations are finished
-----
bulk_VBM(eV): 3.818683
bulk_CBM(eV): 6.640658
bulk_Gap(eV): 2.821975
-----
0_v_Ga
-----
find the difference charge state
.....
```

注意

- 计算形成能时需结构优化和自洽计算，耗时较长，如不想程序执行后再前台等待或网络不稳定，可提交至后台计算。提交方式有两种：
 - 在命令行运行 `autodeflect -cem &`
 - 通过作业系统提交至计算节点，提交脚本sub.sh参考2.3化学势计算提交脚本：
 - 镜像电荷修正当前存在多种方法，本程序内提供的方法参考文献如下：

[2] Zhao-Jun Suo, Jun-Wei Luo, Shu-Shen Li, and Lin-Wang Wang Phys. Rev. B 102, 174110 2020 DOI:
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.174110>

程序计算完成后，将在result文件夹下产生文件formation.out：

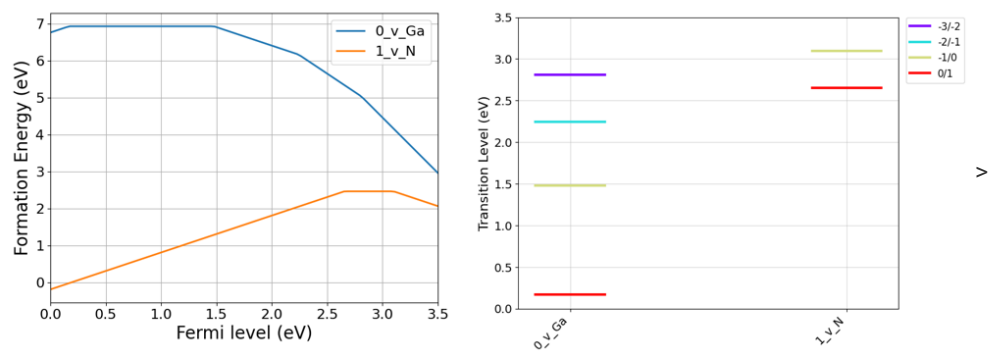
```
bulk Energy (eV):      -130614.1510
VBM value  (eV):       3.8187
Gap value  (eV):       3.5000
chemical_potential(eV): [Ga:-1769.45] [N:-271.43]

defect_type: 0_v_Ga
diff_bulk_element: [Ga]
diff_defect_element: []
charge_states: [-3, -2, -1, 0, 1]
defect spin1_VBM  spin1_CBM
           571      572
defect spin2_VBM  spin2_CBM
           567      572

q   Initial_energy(eV)   Energy_corr(eV)   Tot energy(eV)   Formation energy(eV)
-3   -128822.71933       2.76678       -128819.95256       13.29239       -3 *Ef
-2   -128827.97289       1.31488       -128826.65802       10.40561       -2 *Ef
-1   -128832.68800       0.39026       -128832.29774       8.58457        -1 *Ef
0    -128837.78401       0.00000       -128837.78401       6.91699
+1   -128842.03159       0.16387       -128841.86772       6.65196       +1 *Ef

transition levels (eV): {'-3/-2': 2.8868, '-2/-1': 1.821, '-1/0': 1.6676, '0/1': 0.265}
site_conc (cm^-3): 4.2283876940284196e+22
g_list: [1, 3, 3, 3, 1]
.....
```

此外还将在result/E_forms文件夹下产生E_formation.png和E_levels.png，分别为形成能和转变能级图，如下图所示：



- 注意
- 绘图数据仅依赖于formation.out文件，直接绘图命令为：autodeflect -ef
 - 当计算完成后再次执行autodeflect -cal，将不会重复提交计算，而是直接读取对应文件夹下的REPORT文件获取能量并进行后处理。
 - 形成能结构的初始结构来源于structure/defect_names.txt文件，用户可修改该文件来选择计算哪些缺陷结构。
 - 若设置charge=0,则根据structure/defect_names.txt中的可能价态信息计算电荷，如仅需计算部分电荷或更多电荷态用户可自行修改，guess_charge_state值设置要计算的电荷。若设置charge=1,则根据OUT.WG和OUT.OCC文件计算缺陷能级和其可能价态。注意，当charge=1时，电荷态的计算将依赖计算精度（特别是正确带隙），如没找到缺陷态，程序将自动计算-4到4电荷态。注意这两种方法不能完全保证覆盖所有可能的价态。

案例三：TeCd中的本征缺陷和载流子浓度分析

注意使用前需激活环境，如mcloud用户需先加载

```
module load conda
source activate autodeflect
```

3.1 确定缺陷类型

本案例研究的材料为CdTe，其中的本征缺陷可能有两种：一种为Te缺陷，另一种为Cd缺陷。具体而言可能有空位、替位、间隙，反位形式等。准备好bulk.config和etot.input,input文件如下：

```

intrinsic = T                # default: T
intrinsic_type =             # Vacancy, Antisite,if not set, will use all types
doping = T                   # default: F,if not set, doping_atom and doping_type is useless
doping_atom = Te Cd
doping_type = interstitial   #choice: interstitial,substitute

```

执行如下命令：

```
autodefect -gen
```

此时程序将产生structure/defect_names.txt文件和所有结构，该文件记录了所有本征缺陷的结构，用户可根据需要修改该文件来选择研究的缺陷类型。

文件内容下：

```

supercell:['supercell.config']
interstitial:['0_Te_i', '1_Te_i', '2_Te_i', '3_Cd_i', '4_Cd_i', '5_Cd_i']
'guess_charge_state' :[[-1, 0, 1, 2], [-1, 0, 1, 2], [-1, 0, 1, 2], [-1, 0, 1, 2], [-1, 0, 1, 2], [-1, 0, 1, 2]]
'multiplicity' :[4, 1, 1, 4, 1, 1]
native:['0_v_Cd', '1_v_Te', '2_Te_Cd', '3_Cd_Te']
'guess_charge_state' :[[-2, -1, 0, 1], [-1, 0, 1, 2], [-2, -1, 0, 1], [-1, 0, 1, 2]]
'multiplicity' :[1, 1, 1, 1]

```

注意：此处为减小计算量，缺陷电荷态进行了手动删减。

3.2 化学势确定

准备好job.sh文件，input文件如下：

```

queue = slurm                # slurm / pbs
partition = 3080ti           # slurm parameter
nodes = 1
ntasks-per-node = 4
ngpu = 4
###          caculate set      ###
psp_path = /share/psp/allpsp/
E_cut = 60
spin = 2
# 1: no spin   2: spin polarisation
level = 1
# (level=1: PBE+PBE; level=2: PBE+HSE; level=3: HSE+HSE

api_key=your_api_key # must set
defect_Elements = Cd Te                # defect elements

```

执行命令：

```
auto_defect -pre
```

此时程序产生prepare文件夹，包含了计算所需的参数文件relax_etot.input,scf_etot.input,job.sh等,确认无误后执行：

```
autodefect -cem
```

此时程序将自动下载Materials Project中Cd和Te相关的所有稳定结构到本地文件夹structure/competition内。

检查后再次执行：

```
autodefect -cem
```

此时程序将对structure/competition中的所有结构进行结构弛豫和自治计算，并将能量计算结果存入result/competition文件夹。

注意：

- 计算耗时较长，如网络不稳定或不想程序执行后前台等待，可提交至后台计算。提交方式有两种：

- 在命令行运行 `autodefect -cem &`
- 通过作业系统提交至计算节点，提交脚本sub.sh参考2.3化学势计算提交脚本：
结束后输出result/competition/chem_limits.txt

abs_chem_pots with respect to CdTe:
Cd-rich: {Cd: -4226.0686 eV, Te: -2373.8057 eV}
Te-rich: {Cd: -4226.9978 eV, Te: -2372.8766 eV}

3.3 计算本征缺陷的能量

准备好job.sh文件，input文件相关参数如下：

```
queue = slurm          # slurm / pbs
partition = 3080ti     # slurm parameter
nodes = 1
ntasks-per-node = 4
ngpu = 4
###      caculate set      ###
psp_path = /share/psp/allpsp/
E_cut = 60
spin = 2
# 1: no spin    2: spin polarisation
level = 1
# (level=1: PBE+PBE; level=2: PBE+HSE; level=3: HSE+HSE

###      Formation energy caculation      ###
defect_Elements = Cd Te          # defect elements
Chemical_potential = -4226.9978 -2372.8766
diec = 7.28
effectivemass=0.27 0.8
gap = 1.45
```

执行命令：

```
autodefect -pre
# 查看prepare文件夹内容，确认无误后执行：
autodefect -cal
```

此时程序将计算所有本征缺陷的能量，并将结果存入result/formation_out文件。

注意：

- 计算耗时较长，如不想程序执行后再前台等待或网络不稳定，可提交至后台计算。提交方式有两种：
 - 在命令行运行 `autodefect -cal &`
 - 通过作业系统提交至计算节点，提交脚本sub.sh参考2.3化学势计算提交脚本：

3.4 载流子浓度相关计算

载流子浓度计算方法

载流子浓度计算方法有多种，我们这里采用的是基于有效质量近似的方法计算带边态密度，从而获取载流子浓度。对于非简并半导体，导带电子浓度（ n_0 ）与价带空穴浓度（ p_0 ），我们可以用下式计算：

$$n_0 = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right), \quad p_0 = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right)$$

其中：

- $N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2}$ （导带有效态密度）
- $N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2}$ （价带有效态密度）
- E_C 、 E_V 分别为导带底和价带顶能量， E_F 为费米能级， k_B 为玻尔兹曼常数， T 为温度， h 为普朗克常数，
- m_n^* 为电子有效质量， m_p^* 为空穴有效质量。

点缺陷浓度

缺陷浓度计算方法：

$$C = N * g * \exp \left(-\frac{\Delta E(E_f, T)}{k_B T} \right)$$

其中：

- N 为晶格原子位点密度， g 为简并度因子， $\Delta E(E_f, T)$ 为不同缺陷态的缺陷形成能， k_B 为玻尔兹曼常数， T 为温度。
- 该公式假设缺陷间无相互作用且浓度较低。

电中性条件下的载流子浓度分布

不同缺陷和电荷态存在下体系的电中性条件满足：

$$\Sigma(q_i * C_i) + p_0 - n_0 - N_{eff} = 0$$

其中：

- q_i 为电荷量
- C_i 为各电荷态浓度

结合上述公式可求解中电荷平衡时的费米能级，缺陷形成能，载流子和缺陷浓度等一系列信息。

此外也程序也引入了高温下的“缺陷冻结”近似，即缺陷总浓度在淬火过程中保持不变，等于退火温度下计算得到的总浓度。假设在退火温度下第*i*种缺陷的总浓度为 $C_{i,total,annealing}$ ，那么在淬火温度下，该缺陷的总浓度 $C_{i,total,quenched}$ 为：

$$C_{i,total,quenched} = C_{i,total,annealing}$$

每种电荷态的缺陷浓度 C_{ij} 表示为：

$$C_{ij} = N_i * g_i * \exp \left(-\frac{\Delta E(E_f, T)}{k_B T} \right)$$

其中， N_i 是第 i 种缺陷可占据的晶格位置数， g_{ij} 是第 i 种缺陷处于电荷态 q_{ij} 时的简并度， $\Delta E_{f,ij}(E_f, T)$ 是第 i 种缺陷处于电荷态 q_{ij} 时的形成能，它是费米能级 E_f 和温度 T 的函数。

实际操作中

设置的input核心参数如下：

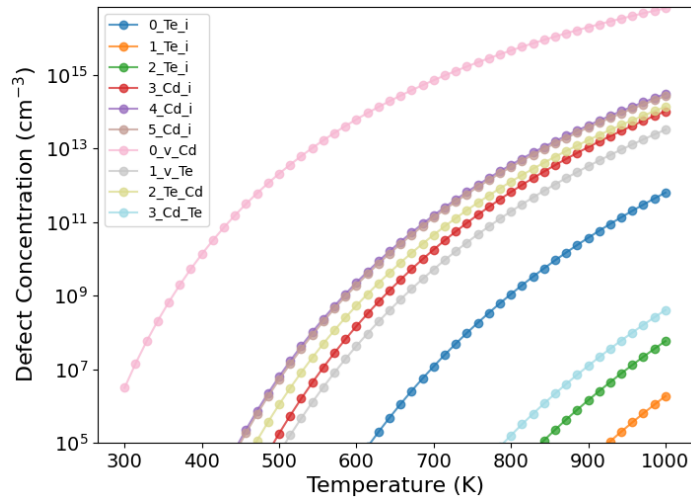
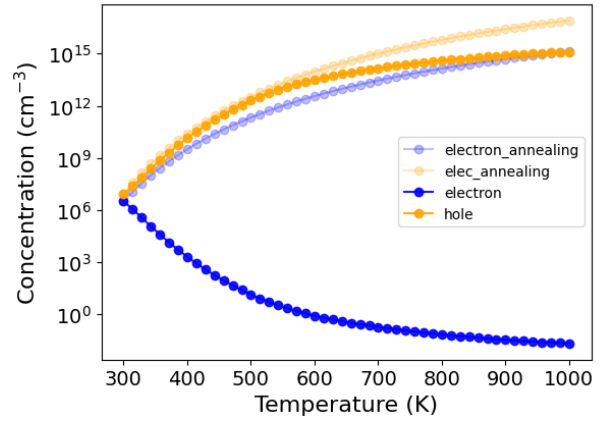
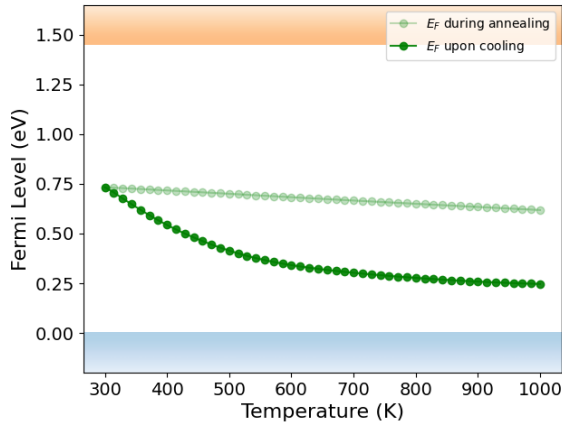
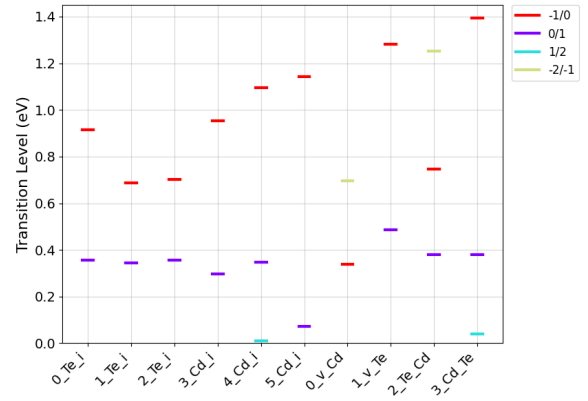
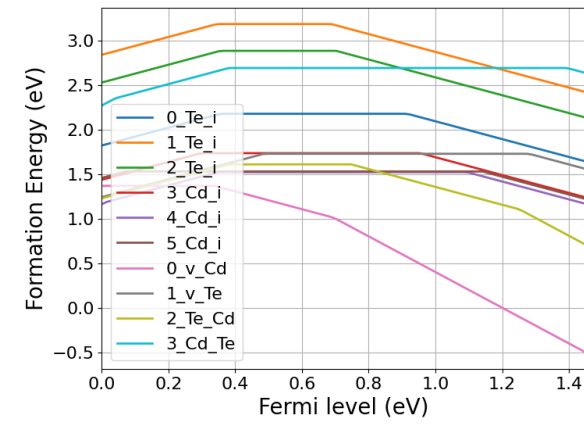
```
effectivemass = 0.27 0.8
gap = 1.45
anneal_T = 300 1000
#ferimi_range= 0 1.5
#mu_range=T
#limit_phase=CdTe
#work_t=300
```

其中

effectivemass 表示电子/空穴的有效质量，
gap 表示CdTe的带隙，用于设置绘图范围，
anneal_T 表示退火温度范围，可以设置单个值，也可设置两个值，即最大值，最小值，设置两个值时默认取点为50。
ferimi_range 表示绘图的费米能级范围，仅anneal_T取单个值时生效，可绘制固定温度，不同费米能级下缺陷和载流子浓度分布。
mu_range 表示是否绘制化学势变化引起的载流子浓度的变化曲线，仅anneal_T取单个值时生效
limit_phase 当mu_range=T时生效，如在CdTe本征缺陷计算中可选CdTe，设置时程序读取result/competition/chem_limits.txt文件，获取对应的化学势范围。

此处程序计算了不同退火温度下的缺陷浓度和载流子浓度并进行了可视化
保证存在formation_out文件，执行命令：

```
autodeflect -ef
```

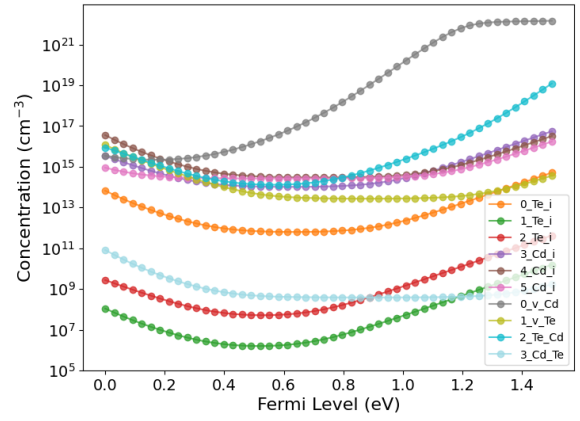
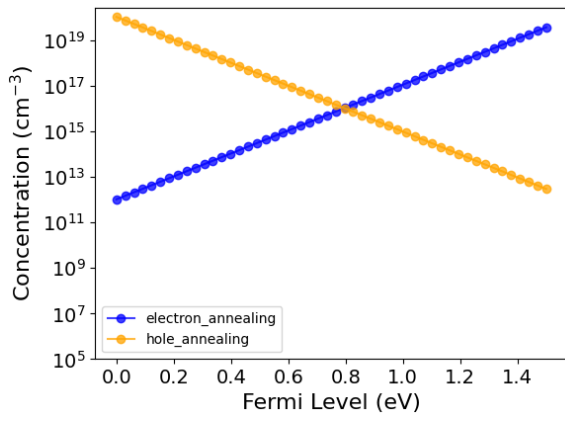


可以看出，随着温度升高，体系的费米能级逐渐降低，即缺陷导致了p型掺杂的效果。而退火温度下费米能级的变化趋势不显著，而当冻结缺陷浓度，采用工作温度计算时，费米能级的下降速率更为明显。相应的电子和空穴的浓度也反映了费米能级变化的原因。对应每个缺陷的总浓度也显示在图中。

如果希望观察缺陷和载流子浓度随费米能级的变化趋势，可设置：

```
anneal_T = 1000
ferimi_range = 0 1.5
gap = 1.45
```

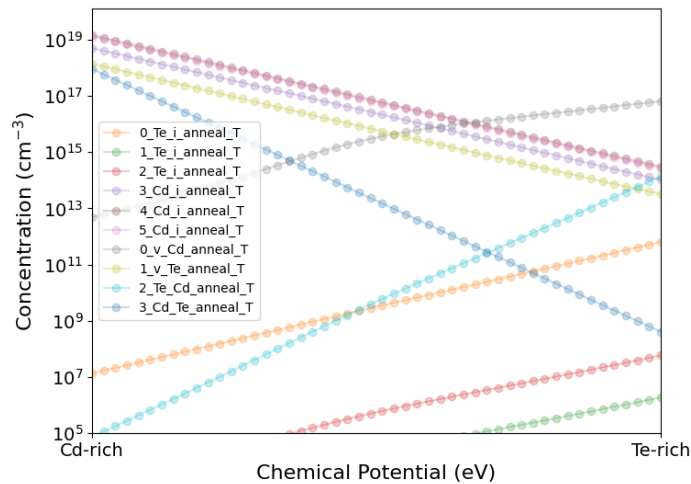
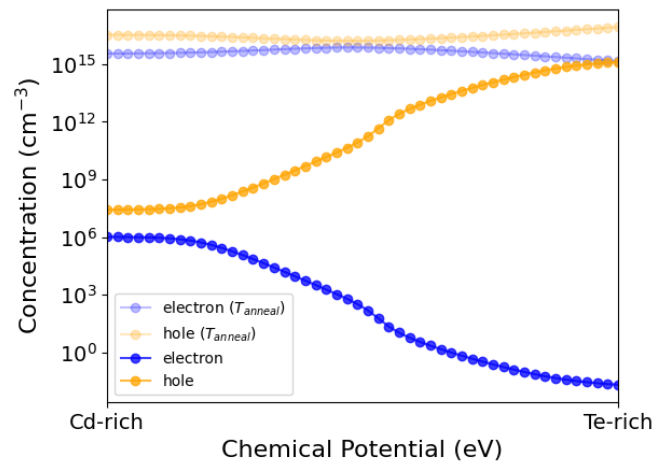
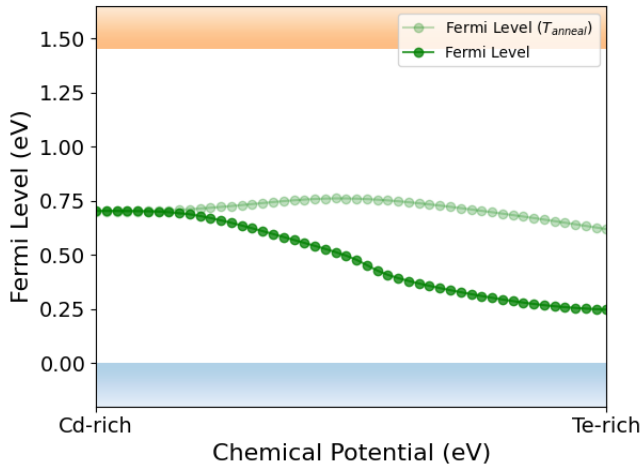
可以看出在电中性条件下，载流子、缺陷的浓度与费米能级的关系如下：



当研究不同化学势的影响时，用户可设置：

```
mu_range = T
anneal_T = 1000
limit_phase = CdTe
```

此时程序读取result/competition/chem_limits.txt文件，获取对应的化学势范围，并绘制不同化学势下的载流子浓度变化曲线：



上述计算结果均保存至result/carriers/文件夹下，可根据需要进行绘图分析。

案例四：GaN中的Ga空位缺陷的跃迁偶极矩与辐射复合速率计算

基于缺陷形成能计算结果，详见[案例二](#)，我们可以计算GaN中的Ga空位缺陷的跃迁偶极矩与辐射复合速率。

辐射复合速率的表达式为[3]：

[3] H. Zhang, L. Shi, X. Yang, Y. Zhao, K. Xu 和 L. Wang, Adv. Optical Mater. 5, 1700404 (2017).

$$W_{\text{rad}}(\omega) = \frac{\omega^3 n |\mu_{ij}|^2}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} = \frac{4\alpha\omega^3 n |\langle i|r|j \rangle|^2}{3c^2} = \frac{4\alpha\omega^3 n |\langle i|p|j \rangle|^2}{3c^2} \times \frac{\hbar^2}{\Delta E_{ij}^2 m_e^2}$$

$$\frac{|\mu_{ij}|^2}{\pi\epsilon_0 \hbar c} = 4\alpha |\langle i|r|j \rangle|^2 = 4\alpha |\langle i|p|j \rangle|^2 \times \frac{\hbar^2}{\Delta E_{ij}^2 m_e^2}$$

其中 ω 是激发频率, n 是折射率, μ_{12} 是跃迁偶极矩, ϵ_0 真空介电常数, $\hbar$ 是普朗克常数, c 是真空中光速, α 是精细结构常数
我们可以利用本程序批量进行跃迁偶极矩的计算, 从而获取不同缺陷能级间的跃迁概率。也可以针对单个缺陷能级输出其辐射复合系数。

注意

tdm_range 参数开启时默认使用中性缺陷的电子结构; 而使用 recomb_charge 和 recomb_band 参数时, 需指定载流子复合发生的初态和末态, 以及发生的能带, 并设置 radiative=T 参数, 此时程序将计算依据初态的电子结构计算辐射复合系数。
相应的input参数如下:

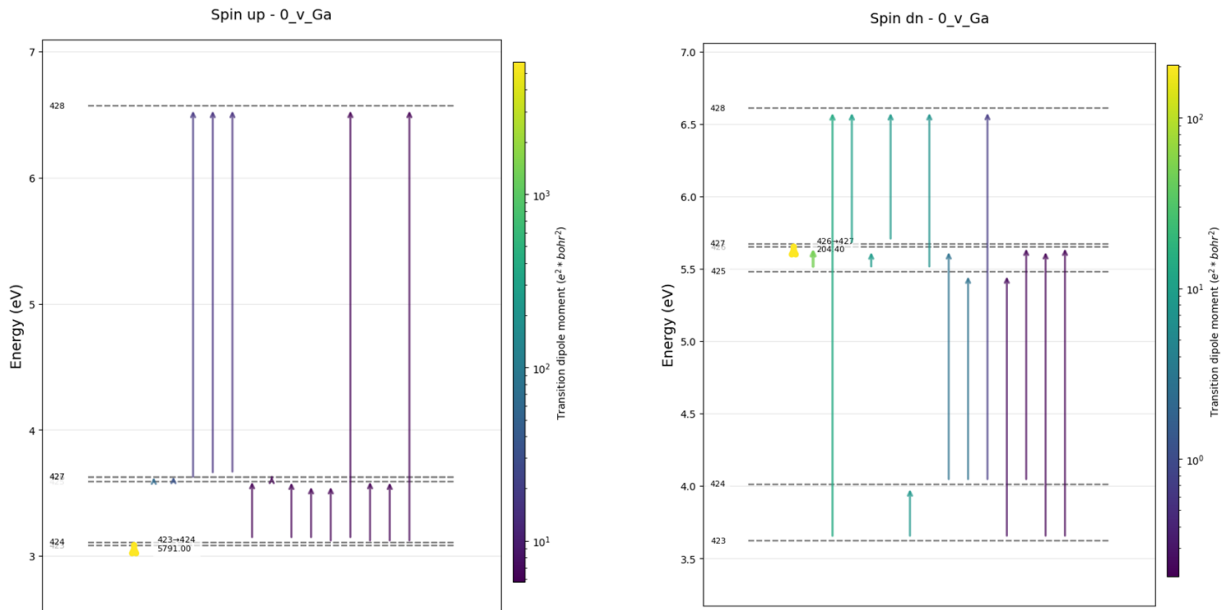
```
refractive = 2.2          # 折射率
defect_name = 0_v_Ga      # 研究的缺陷名称
#recomb_charge = -1 0     # 载流子复合发生的初态和末态
#recomb_band = 567 568    # 载流子复合发生的能带
#radiative = T           # T/F是否计算辐射复合, 默认T
tdm_range = 567 572       # 是否单独计算跃迁偶极矩
spin_channel = 2          # 复合发生的自旋通道, 1/2表示无自旋或自旋向上/向下
```

其中 tdm_range 的取值可参考 formation_out 文件中预计的VBM和CBM的位置

确保存在formation_out文件和其它输出文件, 如中性体系的OUT.WG, OUT.EIGEN, OUT.OCC等计算输出文件, 执行命令:

```
autodefect -tdm
```

此时程序会输出不同缺陷能级间的跃迁概率, 以及不同缺陷能级的辐射复合系数, 如下图所示:



图片被保存至result/recombination文件夹下, 与此同时, 所有跃迁偶极矩的信息也被保存至result/recombination/0_v_Ga_TDM.json中, 可根据需要分析各类缺陷的跃迁概率。

如果需分析特定缺陷的复合系数, 可设置 recomb_charge 和 recomb_band 参数, 并设置 radiative=T (如上input所示), 程序将计算依据初态的电子结构计算辐射复合系数。执行:

```
autodefect -rec
```

此时程序输出的Log文件recombination.log将输出对应辐射复合相关的信息, 如:

```
start to run recombination calculations
trans_level (eV) is 1.6712100000000003
calculate the reorganization energy ...

reorganization energy calculate is finished in path:
your_path/calculate/0_v_Ga/q_-1/Reorganization_energy_-1-0
radiative calculation start ...
Volume of supercell (cm^3) is 1.4899296034034992e-21
hole from band 567 -> 568 spin_channel = 2
transition_moment(e^2*bohr^2) in Gamma point = 13.36
radiative rate is 1.2087e+08 s^-1
radiative captured coefficient is 1.8009e-13 cm^3.s^-1
radiative calculation has finished, calculate path =

your_path/calculate/0_v_Ga/q_-1/radiative_hole_567-568
```

案例五：GaN中的Ga空位缺陷的非辐射复合速率计算

基于缺陷形成能计算结果，详见[案例二](#)，我们可以计算GaN中的Ga空位缺陷的非辐射复合速率。

程序中的非辐射复合的计算方法是基于静态耦合下的黄昆公式,具体可参考以下文献

[4] L. Shi, L.W. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 245501 (2012).
[5] L. Shi, K. Xu, L.W. Wang, *Phys. Rev. B* **91**, 205315 (2015).
[6] L. Shi, K. Xu, L.W. Wang, *Phys. Rev. B* **97**, 077302 (2018).

具体的计算流程可参考[非辐射复合速率计算方法](#)

非辐射复合的具体公式如下：

$$W_{ab} \approx \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\pi k_B T}{\lambda} \right)^{1/2} \left(\sum_l \left(\frac{1}{\omega_l^2} \right) \left| \sum_i \left\langle a \left| \frac{\partial H}{\partial R_i} \right| b \right\rangle V_l(i) / \sqrt{M_i} \right|^2 \right) \exp \left(-\frac{(E_a - E_b - \lambda)^2}{4\lambda k_B T} \right)$$

其中，a,b是初始和最终的电子态， $V_l(i)$ 是归一化的声子模式 l 的向量， i 是原子的索引， E_a, E_b 是初态和末态的能量， λ 是重组能

实际操作中，我们需设置以下参数：

```
defect_name = 0_v_Ga      # 研究的缺陷名称
recomb_charge = -1 0      # 载流子复合发生的初态和末态
recomb_band = 567 568    # 载流子复合发生的能带
radiative = F            # T/F是否计算辐射复合，默认T
nonradiative = T         # T/F是否计算非辐射复合，默认F
spin_channel = 2          # 复合发生的自旋通道，1/2表示无自旋或自旋向上/向下
temperature = 300 1000   # 非辐射复合发生的温度范围
```

执行命令：

```
autodeflect -rec
```

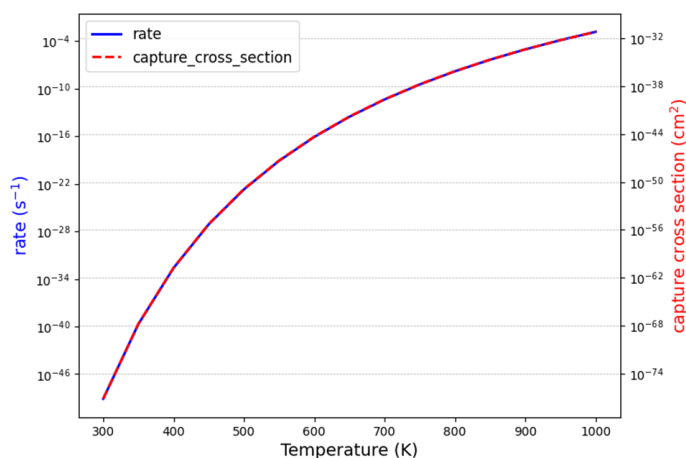
此时程序将自行计算重组能，电声耦合系数和缺陷声子模式，输出的Log文件recombination.log将输出对应非辐射复合相关的信息，如下所示：

```

nonradiative calculation start ...
Volume of supercell (cm^3) is 1.4899296034034992e-21
hole from band 567 to 568 spin_channel = 2
Reorganization_energy(eV) from charge -1 to 0 = 0.10183870000764728
job = scfep is completed
ep_path = your_path/calculate/0_v_Ga/q_-1/epc_hole_567-568_2
ending_scf_reason = tol Rho_err 1.000000000000000E-005
prepare to calculate defect phonon
defect_center is [0.37, 0.42, 0.24] radius = 3.0
job = phonon_std is completed
path: your_path/calculate/bulk/phonon_std/phonon_std
job = phonon_defect is completed
path = your_path/calculate/0_v_Ga/q_-1/phonon_defect/phonon_defect
nonradiative rate is 2.040847e-14 with E_f-E_i(eV) = 1.6712100000000003
nonradiative rate is 2.040847e-14 s^-1
nonradiative captured coefficient is 3.040718361317221e-35 cm^3.s^-1
thermal velocity is [13057902.097362885] (m/s)
capture cross-section is 2.3286e-42 (cm^2)
nonradiative calculation has finished, calculate path =
your_path/calculate/0_v_Ga/q_-1/nonradiative_hole_567-568_2
-----
start to calculate nonradiative rate with different temperatures
nonradiative rate with different temperatures is:
T(K)   rate(s^-1)   thermal_velocity(m/s)   capture_cross_section(cm^2)
300.0  1.143825e-85  1.3058e+07  1.3051e-113
320.0  2.574943e-79  1.3486e+07  2.8448e-107
340.0  1.039041e-73  1.3901e+07  1.1136e-101
.....

```

输出的文件均被保存至result/recombination文件夹下，
相应不同温度下的非辐射复合速率和俘获截面如下图所示：



注意：

- 当前版本非辐射复合计算依赖于PyPWmat，用户需在当前安装环境下同时安装PyPWmat，如声子执行不成功，需要户根据log提示到指定文件夹下检测(或者执行PWmatPhonon.py提交任务，PyPWmat的详细安装和使用计算见[PyPWmat-2.0](#))
- Mcloud用户已经提前安装好PyPWmat,无需重新安装。
- 由于声子计算时间长，并且提交的任务多，部分情况下可能需要等待较长时间，用户可通过后台提交任务（即运行 `autodefect -rec &`）的方式，或者提交slurm任务的形式（提交脚本sub.sh参考2.3化学势计算提交脚本）检测和控制声子任务提交。
- 部分情况下声子计算可能出现错误，如遇到提交任务失败，请根据 `recombination.log` 文件检查是否有报错信息，并根据报错信息排查问题或手动提交。
- 缺陷声子计算需保证高精度的收敛标准以保证无缺陷体系没有虚频，此时的缺陷结构声子模式才可靠。
- 该案例仅提供计算流程，实际计算时应该根据体系采取合适的计算方法和参数，以得到更精确的结果。

附录

1.可能有用的linux命令

由于缺陷形成能计算本身耗费时间较长，所占用存储空间也较大，因此确认计算完成后可删除相关文件，以节约存储空间，进行计算前也应保证存储空间充足。

删除当前文件夹及其所有子文件夹下的软链接，可以使用以下命令

```
find . -type l -exec rm {} +
```

在当前路径下删除所有子目录内的OUT.WG*文件（可替换为其它文件名）

```
find . -type f -name 'OUT.WG*' -delete
```

请谨慎使用上述命令，防止误删除重要文件

参数说明

1. 任务设置参数：

```
queue = slurm
```

说明：队列配置名称，支持 slurm 和 pbs 队列，对于 slurm 队列，常见配置如下：

```
partition = 3080ti
nodes = 1
ntasks-per-node = 4
ngpu = 4
```

其中，partition为分区名称，nodes为节点数，ntasks-per-node为每个节点任务数，ngpu为gpu数目。

对于pbs队列，常见配置如下：

```
nodes = 1
ntasks-per-node = 4
squeue_name = batch
walltime = 1000:00:00
```

其中，squeue_name 为队列名称，walltime 为程序最大运行时间。

2. 计算设置参数：

```
in.atom = atom.config
```

说明：其中，in.atom为PWmat计算的结构名称，默认为atom.config

```
psp_path
```

说明：psp_path为指定赝势文件库的路径，无默认值时，则用户需提前将赝势文件放置到对应的prepare文件夹下

```
psp_name
```

说明：赝势名称，默认赝势为SG15赝势，如需更改，可在input中设置，例如：

```
psp_name = Mg.SG15.PBE.UPF  O.SG15.PBE.UPF
```

```
e_cut = 70
```

说明：PWmat结构优化和自洽计算的截断能，单位为 Ryd。

```
spin = 2
```

可选值：1/2

说明：PWmat优化和自洽的自旋，spin = 1表示不区分自旋，spin=2表示区分自旋。

```
level= 2
```

可选值：1/2/3

说明：PWmat优化和自洽的计算精度水平，1表示PBE优化+PBE自洽，2表示PBE优化+HSE自洽，3表示HSE优化+HSE自洽，默认不做晶格弛豫。

更多参数可以查阅PWmat 官方手册，用户可自定义修改参数。

```
api-key
```

说明：用于调用Materials Project的API，无默认值，如需调用，需在input中设置，当前只支持新版Materials Project API()。

```
cem_plot = F :
```

可选值：F/T，默认 F

说明：是否运行时绘制化学势约束图，默认F，如需绘制，需设置成T，此外需注意绘图时需额外安装kaleido库：pip install kaleido。

```
cem_mesh=0.04
```

可选值：float,默认值0.04

说明：设置化学势时单质和化合物的k点网格密度，默认0.04，即0.04 /Å。对于 level=3，该参数无效。对于 level=2，该参数对于scf计算无效。其余情况将从prepare/scf_etot.input和prepare/relax_etot.input中读取k点网格参数。

3. 材料固有参数

`num_atoms = 64 300`

可选值: int int

说明: 形成的方胞的最少原子数目和最大原子数目, 默认最小原子为64, 300

如果用户只设置一个参数, 一般设置最小原子数目或默认即可, 程序将自动构建大于最小原子数目的方胞。

`min_length = 10`

说明: 形成的方胞的最小晶格常数, 默认为10 Å

4. 缺陷设置

`intrinsic = T`

可选值: T/F

说明: 是否产生本征缺陷, 默认为T

`intrinsic_type`

可选值: Vacancy / Antisite

说明: 本征缺陷类型, 包括空位和反位

`doping = F`

可选值: T / F

说明: doping=T/F是否产生杂质缺陷, 默认为F

`doping_atom`

可选值: 元素名称 或元素名称列表

说明: 设置 掺杂元素, 例如 `doping_atom = Fe`

`doping_type`

可选值: interstitial / substitution

说明: 设置掺杂类型, 包括间隙和替位

`complex = F`

可选值: T/F

说明: 是否产生复合缺陷, 默认F, 如为T, 则以固定缺陷(此处记为D1)为中心, 在该缺陷周围产生另一个缺陷(D2)。

`complex_type=`

可选值: vacancy / interstitial / substitution

说明: 在何种缺陷的基础上产生复合缺陷, 即D1类型。可选空位, 间隙, 替位。

`complex_int_atom =`

可选值: 元素名称

说明: 复合缺陷的间隙原子类型, 如D2为间隙, 此处设置该元素类型

`complex_sub_atom =`

可选值: 元素名称

说明: 复合缺陷的间隙原子类型, 如D2为替位, 此处设置该元素类型

`max_int_complex = 2`

可选值: 整数

说明: D2间隙原子的最大数目, 此处间隙原子为以D1为中心, r为半径的球内搜寻间隙位点。默认值: 2.

`defect_radius =`

可选值: int/float

说明: 半径r的取值, 默认为3, 单位Å

`n_eff_doping=`

说明: 有效掺杂浓度, 用于载流子浓度计算中电中性条件的求解, 默认为0.0

`interstitial_type = voronoi`

可选值: voronoi / random

说明: 产生间隙原子的方式, 默认为voronoi方法, 也可选为random, 此时将采用随机方式寻找最佳的间隙位点。

`max_nums_interstitials = 3`

可选值: int

说明: 产生间隙原子的方式random时, 此时将采用随机方式寻找最佳的间隙位点的最大间隙原子数目

5. 形成能与载流子计算设置

`charge=`

可选值: 0 / 1, 默认为 0

说明: 缺陷形成能计算时缺陷态价态的确定方式, 如为0, 则程序将从structrue/defect_names.txt中读取缺陷价态, 如为1, 则程序根据波函数OUT.WG以及占据数OUT.OCC获取可能的缺陷态。**注意**设置为0需保证defect_names.txt中的价态预测合理, 如对于多个缺陷, 需保证缺陷态价态的一致性。设置为1时需要保证存在中性缺陷和无缺陷材料的OUT,WG, OUT.OCC文件存在, 此外合理的参数有助于缺陷价态分析的准确度。

`E_corr = T`

可选值: T/F, 默认为 T

说明：是否进行形成能修正，能量修正包含镜像电荷修正和势能修正。

`initial_mag =`

可选值：元素名称 磁矩值

说明：设置初始磁矩，例如，`initial_mag = Fe 2 Si 0`表示Fe初始磁矩设为2，Si初始磁矩设为0。

`anneal_t =`

可选值：`float / [float float int]`

说明：载流子浓度计算时的退火温度范围，单位K。可设为单个温度点，如`anneal_t = 300`；也可以设为 [最小值, 最大值, 能量点（可省略）]，如`anneal_t = 300 1000`。

`ferimi_range`

可选值：`[float float]`

说明：载流子浓度计算时的费米能级范围(zui)，单位eV。无默认值，如`ferimi_range = 0 1.2`。注意如使用该参数，需设置 `anneal_t` 为单值。

`mu_range`

可选值：`F/T`, 默认值为F,

说明：表示是否绘制化学势 vs.载流子浓度曲线。仅 `anneal_t` 取单值时生效

`limit_phase`

可选值：化合物名称，如GaN, 无默认值

说明：当`mu_range=T`时生效，设置时程序读取`result/competition/chem_limits.txt`文件，获取对应的化学势范围。

`work_t = 300`

可选值：`float`，默认值为300，单位K

说明：载流子浓度计算时的考虑的工作温度。

`defect_elements = Si Fe`

`chemical_potential = -107.27 -3216.56`

说明：`defect_elements`为缺陷结构包含的元素，`chemical_potential` 为 `defect_elements` 对应的化学势，用户可根据元素的环境和计算参数等信息指定修改，请注意，不同计算参数下，元素的化学势会有所不同，此处所需要的化学势应当和SCF计算参数下的结果保持一致。

6. 载流子复合计算参数

`defect_name`

可选值：缺陷名称

说明：`defect_name`为所研究的载流子复合相关缺陷名称，该参数与`defect_names.txt`中的缺陷名称保持一致。

`recomb_charge = 0 1`

可选值：`[int int]`

说明：复合前后电荷的初态和末态，例如 `0 1` 表示初态为 0价态，末态为 +1 价态。

`recomb_band = 135 136`

可选值：`[int int]`

说明：复合发生的能带数，与`recomb_charge`一致，对于`recomb_charge = 0 1`，如计算空穴复合，相应的复合带为 `recomb_band = 135 136` 表示 (135能带为VBM, 136表示缺陷能级)；若计算电子复合，复合带为 `recomb_band = 135 136`表示（135表示缺陷能级，136表示 CBM）

`radiactive = T`

可选值：`T/F`,默认值为T

说明：是否计算辐射复合速率。

`nonradiactive = T`

可选值：`T/F`, 默认值为F

说明：是否计算非辐射复合速率。

`spin_channel = 2`

可选值：`1/2`，无默认值

说明：载流子复合发生的自旋通道。`spin_channel = 1`表示自旋通道为spin up或不区分自旋`spin_channel = 2`表示自旋通道为spin down。

`temperature = 300`

可选值：`float / [float float (int)]`

说明：非辐射复合的温度。默认为300 K，也可取[min max]或[min max points],points默认为50

`tdm_range`

可选值：`[int int]`

说明：计算跃迁偶极矩的能带范围,如`120 124`表示计算120-124能带间所有跃迁偶极矩。通常可取vmb,cbm

ChangeLog:

v1.0.0:

- 初始版本，计算框架基本完成，包含缺陷产生，能量修正、载流子浓度分析、复合计算等功能。

v1.0.1:

- 优化了代码结构，增加了复合缺陷的产生。用户可一次性计算多个缺陷。
- 优化了能量修正的计算，增加了能量修正的可选参数。

v1.0.2:

- 载流子浓度分析优化，增加了费米能级和化学势范围的设置。

v1.0.3:

- 增加了缺陷位点预测和电荷预测新方法。
- 修改了部分参数默认值和取值，如charge,anneal_t, mu_range，移除了原有参数t_range

v1.1.0:

- 增加了Materials Project调用接口和化学势的计算，用户可在线从Materials Project下载结构数据并自动利用PWmat进行能量值计算和化学势约束计算
- 优化了能量修正的计算，增加了能量修正的可选参数。
- 增加了退火温度，用户可以固定退火温度下的缺陷浓度从而计算工作温度下的缺陷分布和载流子分布和费米能级分布。
- 优化了载流子浓度计算的绘图样式。
- 增加了不同缺陷间的跃迁偶极矩的批量计算。
- 增加了不同温度下非辐射复合系数和俘获截面的直接输出。