

# 在微型计算机上建立的一个 超导体模型系统

朱敏慧 石平 张富贵

(中国科学院电子学研究所,北京)

傅亨 陈稚芳 陈学安

(中国科学院化学研究所,北京分子动态及稳态结构开放实验室,北京)

**摘要** 本文叙述了新近在微型机 IBM-PC 上研制的超导体模型系统。它收集了至今所发现的超导材料和相关的化合物,显示和绘制了三维的晶胞结构和配位多面体模型,寻找了超导结构的特征规律,并实现了屏幕网格模块设计。本系统特别适合于高温氧化物超导材料的构效关系的研究,并为寻找新型高温超导材料开辟了可能的途径。

**关键词** 计算机应用;超导体;晶胞结构;配位多面体

## 1. 前言

八十年代以来,利用计算机对物质的复杂结构进行辅助设计是国际上一个引人注目的课题。科学家们在原子和分子层次上研究物质的内部结构,找出它们相关的物化性质及其定量关系,从而对它们的结构进行改造、拼凑、精选,试图能够制造出按人们意愿设计的具有某种特殊性质的新材料和新化合物。世界“超导热”的兴起已近三年,各国科学家致力于研究形成高临界温度超导态的原因,并进一步探索新的室温超导材料及其应用和开发。作为对计算机辅助材料设计的探索,我们对已知的高温氧化物超导材料进行三维图形显示,并对其结构特征进行直观的比较研究,获得了一些有意义的结构与性能间相关性的信息。这些信息可以作为一种寻找高临界温度超导材料的线索。我们认为这是一个加深对超导材料探索的不可忽视的方面。

## 2. 系统的总体设计

本系统的设计目标是综合各国超导材料的资料,以结构信息为背景,运用分子图形技术,结合结晶化学、计算化学的研究,在微型计算机上建立起一个面向用户的超导体模型系统。

(1) 建立一个高温超导材料结构信息数据库,包括收集各国已发表的高临界温度超导材料的资料,物化性能,晶体结构参数等。

(2) 采用交互式分子图形技术显示和绘制化合物的三维空间结构图形。其表示方式可以是棍棒状、棒球状和堆积状的三维模型图,并能沿着  $a$ 、 $b$ 、 $c$  和其它晶胞方向平移重复多个晶胞。晶胞中的原子可用半影、全影、网影和无影四种方式表示。

(3) 用经验原子-原子间势能,对超导体结构进行计算机模拟。

(4) 根据晶胞中不对称单位内原子的位置和晶体结构所决定的空间群的编号, 进行相应的对称操作, 计算出晶胞中所有原子的位置。

(5) 显示和绘制在晶体结构中表示离子配位状况及其规律的多面体模型。

(6) 寻找结构特征规律, 对超导体及其有关化合物结构实现屏幕网格模块设计。

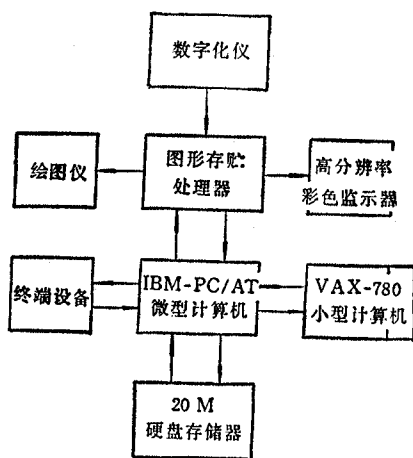


图1 分子模型硬件系统图

### 3. 硬件构成

采用 IBM-PC 微型机作为开发机。通过数据总线接入 ARTIST 图形存储和控制卡, 由 UP 7220 控制, 具备生成 16 种颜色,  $1024 \times 1024$  分辨率的基本图形功能。通过串行口 Com1 与 Roland 彩色绘图仪相接, 实现 8 种颜色的绘制和拷贝, 并加入 80287 协处理器以提高系统的计算速度。

另外一种低配置的方案, 不用增加图形存储和控制卡, 直接在增强的图形适配器 (EGA) 上实现 16 种颜色,  $640 \times 350$  分辨率的图形显示。这样虽然降低了图形显示分辨率, 但降低了成本, 便于推广。

### 4. 软件的构成和功能

本软件包是用 FORTRAN 77 语言写成, 在 IBM-PC/AT 上开发的高分辨图形系统上运行。

软件包含有 16 个子程序, 各子程序的功能绘出在表 1 中。功能可分为四类:

(1) 利用棍棒、棒球和堆积型模型显示超导材料晶体的三维结构, 并可显示多个晶胞各种排列方式的立体结构图, 也可用晶胞中的配位多面体表示晶胞结构。如图 2 所示的  $TlBa_2Ca_2Cu_4O_{10.5}$  的晶胞结构图。图中显示了阳离子 Cu 和 Tl 与氧离子的配位多面体。图中的离子用半影方式表示。

(2) 根据给定的空间群编号进行相互的对称操作, 将晶胞中不对称单位内原子的位置转换成晶胞中全部原子的位置。根据原子或离子的大小及其相互间的距离确定其连接关系, 计算键长、键角和多面体的体积。用直方图对统计特性进行分析和研究。

(3) 对晶体性能与结构的关系进行研究; 对氧化物原子计算键能、角半径等参数。

(4) 根据高临界温度超导材料的分层网格模块特性, 设计新的结构, 为设计新的超导材料提供依据。

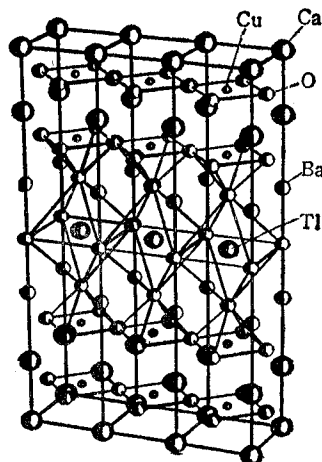


图2 表示 3 个  $TlBa_2Ca_2Cu_4O_{10.5}$  晶胞排列的结构, 并显示了阳离子 Cu 和 Tl 与氧离子的配位多面体 (Cu 为五配位四方单锥和四配位平面四方, Tl 为六配位畸变八面体)

表 1 软件的构成和功能

程序名	功能
METDRAW	显示晶胞的三维结构和晶胞的三维排列重建,并用配位多面体表示晶胞的结构。
METPLOT	绘制晶胞的三维结构和晶胞的三维排列重建,并用配位多面体表示晶胞的结构。
PACKAGE	晶胞沿 $a$ 、 $b$ 、 $c$ 及其它方向的排列重建。
CRYSTAL	将晶胞的分数坐标变换为以 $\text{\AA}$ 为单位的直角坐标。
CONTAB	根据原子或离子的大小和距离建立连接关系表。
POLYCONT	计算晶胞中配位多面体的连接关系。
SYMETRY	给定空间群编号和不对称单位中原子的坐标,计算晶胞中全部原子的坐标。
BOND	计算键长、键角和二面角。
VOLCAL	计算多面体体积。
HISTO	显示统计参数的直方图。
HISTOP	绘制统计参数的直方图。
PPST	计算温度与晶胞参数的变化关系。
LAYDRAW	利用网格模块方式,设计并显示新的晶胞结构。
WMIN	氧化物分子的势能计算和结构优化。
HELP	帮助用户查找原子或离子类型和半径。
HSPACE	帮助用户查找空间群和相应的编号。

该软件包采用菜单方式进行管理.用户可用移动键或字符方式对菜单项进行选择,执行相应的程序.这样大大减少了用户键盘的输入量.

### 5. 晶体结构的对称操作的处理方法

晶体结构具有空间点阵式的周期结构,点阵结构的对称操作群称为空间群.空间群共有 230 个,在空间群中,最多的等效点有 192 个.根据晶体的结构具有点阵结构的特点,在绘制或显示一个晶体的结构时,只要给出晶胞参数、空间群、晶胞中所含原子及其数目和晶胞中不对称单位内诸原子的坐标.由于晶胞内部不对称单位内的原子与其它原子之间有对称操作将它们联系起来,所以当表达原子的坐标参数时,不需要将晶胞中每一个原子的坐标参数都给出来,而只要给出不对称单位中的原子的坐标参数.根据不对称单位中的原子坐标参数,通过对称操作,可计算出晶胞中全部原子的坐标参数.由于每一个空间群中等效点的数目可能有很多,所以在绘制或显示一个晶胞的结构时,用户需要自己输入大量的等效点坐标.为了便于用户使用,我们把 230 个空间群中的等效点坐标用无格式直接存取文件存储起来,用户使用,只需输入空间群的编号而不必输入所有的等效点坐标.我们采用无格式的直接存取文件,是因为直接存取文件可以加快数据的存取速度,对每个记录可以直接存取.另外,无格式记号不必通过 FORMAT 语句来对存取的内容进行整理,因此可进一步提高存取速度.

HSPACE 程序帮助用户查找空间群的相应的编号.空间群采用简短的国际记号.

### 6. 屏幕网格模块设计

到目前为止所发现的具有超导性能的铜氧化物的晶体结构可用两种基本结构类型来描述.第一类包括  $\text{La}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+2}$ 、 $(\text{Tl},\text{Bi})_2(\text{Ba},\text{Sr})_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+4}$  和  $\text{TlBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+3}$ , 可看做是由氯化钠和钙钛矿的部分结构交替构成.另一类包括  $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_8$  和  $\text{Ba}_4\text{Y}_2\text{Cu}_7\text{O}_{14+x}$  是由钙钛矿和从其晶体上剪裁的部分结构交替构成.这些超导材料的基

本构成部分可进一步划分为不同类型的网格，如图 3 所示。这样使我们能够用这些存在于目前已知的超导材料中的具有关键结构的各种类型的网格，相互嵌镶构成新的可能的结构。

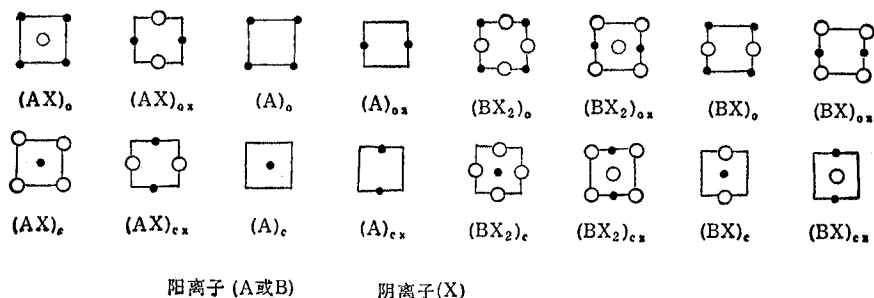


图 3 构成超导材料所有可能的网格模块

基于上述原理，我们把图 3 所示的 16 种网格模块建立一个基本图形库。用户可以

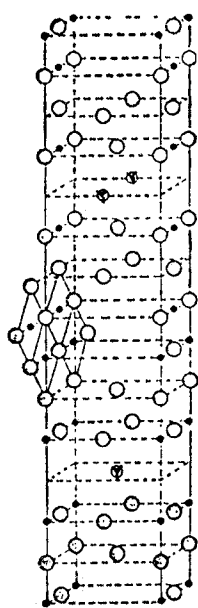


图 4 用网格模块表示的  $Ba_2YCu_4O_8$  的晶胞结构

根据自己的经验和需要选择不同的网格模块，并给出网格中原子的种类。再在屏幕上设计并显示各种可能的新的超导材料，并通过特性计算验证其拼凑的合理性。然后再通过实验来检查其设计的效果。

图 4 为用网格模块表示的  $Ba_2YCu_4O_8$  的晶胞结构。

## 7. 结论

本文试图利用计算机辅助材料设计技术，根据到目前为止所发现的高临界温度的氧化物超导材料及其结构特征规律，通过建立超导体模型系统的办法，实现无机化合物的计算机辅助设计和开辟寻找新型高温超导体的可能途径。我们深信，该系统在高温氧化物超导材料结构与性能关系的研究中定能发挥积极作用。

感谢张英同志在中国科学院化学冶金研究所做论文期间给予我们的大力帮助。

## 参 考 文 献

- [1] T. Hahn, International Tables for Crystallography, (1983), Vol. A. The Kynoch Press.
- [2] A. Santoro, et al., *Physica C*, **156**(1988), 693—700.
- [3] 北京大学图书馆国际联机情报检索部，超导技术联合研究开发中心情报网，国家自然科学基金委员会超导情报'88, Vol.1—4, 中国物资出版社, 北京.
- [4] 梁敬魁等, 中国科学, A 辑, 1989 年第 1 期, 第 32—39 页.

- [5] 石平、朱敏慧、张富贵、傅亨、陈学安,无机晶体结构及配位多面体显示软件包,全国X射线衍射计算机软件会议论文集,第9—11页,北京,1990年4月.

## A GRAPHIC SYSTEM OF SUPERCONDUCTOR MODELS DEVELOPED BY MICROCOMPUTER

Zhu Minhui Shi Ping Zhang Fugui

*(Institute of Electronics, Academia Sinica, Beijing)*

Fu Heng Cheng Zhifang Cheng Xuean

*(Institute of Chemistry, Academia Sinica, Beijing)*

**Abstract** A graphic system of superconductor models developed by the aid of a basic IBM-PC microcomputer is presented. This system has been designed to store information on structures and properties of superconductors and related compounds discovered so far, to display and plot three dimensional crystallographic structure and coordination polyhedron structure, to search for oxide superconductive structural features to realize 'screen module design'. A suite of interactive programs has been written to run on this system, and it fits especially for the study of high temperature oxide superconductive structure-property relationship. Meanwhile it is also expected to be useful in the guidance of discovering new high temperature superconductors.

**Key words** Microcomputer application; Superconductor; Crystallographic structure; Coordination polyhedron structure