

四川师范大学本科毕业论文

石墨烯、过渡金属硫化物等二维材料贝里曲率 的第一性原理计算

学生姓名 补宇祺

院系名称 物理与工程学院

专业名称 物理学

班 级 2020 级 5 班

学 号 2020070502

指导教师 程才

完成时间 2024 年 5 月 20 日

四川师范大学学位论文原创性声明

本人声明：所呈交学位论文石墨烯、过渡金属硫化物等二维材料贝里曲率的第一性原理计算，是本人在指导老师 程才 指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品或成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本声明的法律结果由本人承担。

本人承诺：已提交的学位论文电子版与论文纸本的内容一致。如因不符而引起的学术声誉上的损失由本人自负。

学位论文作者： 补宇祺 签字日期：2024 年 5 月 20 日

四川师范大学学位论文授权使用授权书

本人同意所撰写学位论文的使用授权遵照学校的管理规定：

学校作为申请学位的条件之一，学位论文著作权拥有者须授权所在大学拥有学位论文的部分使用权，即：1) 已获学位的学生必须按学校规定提交印刷版和电子版学位论文，可以将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库供检索；2) 为教学、科研和学术交流目的，学校可以将公开的学位论文或解密后的学位论文作为资料在图书馆、资料室等场所或在有关网络上供阅读、浏览。

学位论文作者签名： 补宇祺 指导老师签名： 程才

签字日期：2024 年 5 月 20 日

签字日期：2024 年 5 月 20 日

石墨烯、过渡金属硫化物等二维材料贝里曲率的第一性原理计算

物理学专业

学生姓名：补宇祺 指导教师：程才

摘要：具有原子级厚度和无限平面尺寸的二维材料具备独特的热、光、电性质，长期以来一直受到学者们的关注。其中，作为典型代表的石墨烯备受瞩目，但其零带隙性质在电子器件应用上存在一定的局限。与之相似的过渡金属硫化物 MoS_2 具有 $1.2\sim 1.9\text{eV}$ 的带隙，克服了石墨烯的限制，因此也备受关注。二维材料的谷电子学的研究依赖于材料的贝里曲率，本文通过第一性原理计算了石墨烯、单层 MoS_2 的贝里曲率，为解释谷电子学的贝里曲率提供了理论参考。

首先，本文研究了石墨烯的结构、声子谱、能带和贝里曲率。石墨烯是由碳原子以 sp^2 杂化轨道组成六角型蜂窝晶格的二维碳纳米材料。其声子谱包括三支声学支(LA、TA、ZA)和三支光学支(LO、TO、ZO)。而其能带表现出零带隙特征。石墨烯的贝里曲率在 K^+ 和 K^- 谷处极大，其他点处的值几乎接近于零。

其次，本文研究了与石墨烯具有相似结构的过渡金属硫化物单层 MoS_2 的相应性质以及总态密度。单层 MoS_2 同样呈六角型蜂窝状结构。单层 MoS_2 材料具有 9 条格波，包括 3 支声学支和 6 支光学支。单层 MoS_2 的 K^+ 和 K^- 谷的贝里曲率值互为相反数且极大，其他点相较于 K 谷的数值较小。单层 MoS_2 为直接带隙半导体，其导带部分的能量范围跨度较宽，同时在 1.943eV 和 -2.501eV 两个能量位置附近的能态密度较其他位置高。

综上所述，石墨烯和过渡金属硫化物 MoS_2 都具有良好的能谷性质，在谷电子器件中具有重要的应用价值。

关键词：石墨烯 单层过渡金属硫化物 能带结构 贝里曲率 第一性原理

First-principles calculations of the Berry curvature for two-dimensional materials such as graphene and transition metal dichalcogenides

Specialty: Physics

Undergraduate: Yuqi Bu **Supervisor:** Cai Cheng

ABSTRACT: Two-dimensional materials with atomic-scale thickness and infinite planar dimensions possess unique thermal, optical, and electrical properties, which have long been the focus of researchers. Among them, graphene, as a typical representative, has attracted much attention, but its zero-bandgap nature imposes certain limitations on its application in electronic devices. Transition metal dichalcogenides such as MoS₂, which exhibit similar characteristics, have a bandgap of 1.2~1.9 eV, overcoming the constraints of graphene and thus garnering significant interest. The study of valleytronics in two-dimensional materials relies on the Berry curvature of the materials. This paper calculates the Berry curvature for graphene and monolayer MoS₂, by using the first-principles calculations, providing a theoretical reference for explaining the Berry curvature in Valleytronics.

Firstly, this paper investigates the structure, phonon spectrum, band structure, and Berry curvature of graphene. Graphene consists of two carbon atoms arranged in a hexagonal honeycomb lattice with sp² hybridized orbitals. Its phonon spectrum includes three acoustic branches (LA, TA, ZA) and three optical branches (LO, TO, ZO), while its band structure exhibits a zero-bandgap feature. The Berry curvature of graphene is maximal at the K⁺ and K⁻ valleys, with values close to zero at other points.

Secondly, this paper explores the corresponding properties and total density of states of monolayer MoS₂, which shares a similar structure with graphene. Monolayer MoS₂ also exhibits a hexagonal honeycomb structure. The material has 9 phonon modes, including 3 acoustic branches and 6 optical branches. The Berry curvature values at the K⁺ and K⁻ valleys of monolayer MoS₂ are mutually opposite and maximal, while the values at other points are smaller compared to those at the K valley. Monolayer MoS₂ is a direct bandgap semiconductor, with a wide energy range for its conduction band, and the density of states near energy levels of 1.943 eV and -2.501 eV is higher than at other positions.

In conclusion, both graphene and transition metal dichalcogenide MoS₂ exhibit favorable valley properties, holding significant application value in valleytronic devices.

Keywords: Graphene monolayer transition metal dichalcogenides Berry curvature band structure first principles

目 录

摘要.....	I
ABSTRACT.....	II
目录.....	III
1.1 引言.....	1
1.2 二维材料.....	1
1.2.1 石墨烯.....	1
1.2.2 过渡金属硫化物 MoS_2	2
1.3 贝里曲率.....	2
1.4 本论文主要研究内容.....	3
2. 理论基础.....	4
2.1 第一性原理计算.....	4
2.1.1 薛定谔方程.....	4
2.1.2 绝热近似.....	4
2.1.3 单电子近似 (Hartree-Fock 近似)	5
2.2 密度泛函理论 (DFT)	5
2.3 wannier 函数.....	6
2.4 计算软件包.....	7
3. 石墨烯贝里曲率的第一性原理计算.....	8
3.1 引言.....	8
3.2 计算方法.....	8
3.3 结果与分析.....	9
3.4 本章小结.....	12
4. 过渡金属硫化物 MoS_2 贝里曲率的第一性原理计算.....	13
4.1 引言.....	13
4.2 计算方法.....	13
4.3 结果与分析.....	14
4.4 本章小结.....	17
5. 总结与展望.....	18
参考文献.....	20
附录.....	22
致谢.....	55

石墨烯、过渡金属硫化物等二维材料贝里曲率的第一性原理计算

1.1 引言

二维材料是一类新兴材料，它具有很特殊的性质，电子一般在 1~100 纳米尺度范围内能够自由运动，通常表现为平面运动。2004 年，曼彻斯特大学的 Geim 小组首次在石墨材料中成功的分离出了单碳原子层，命名为石墨烯（graphene）^{[1][2]}。随后一系列二维材料的发现和分离成功引起一波研究热潮。近年来，能谷作为一种新的自由度被发现并引起了研究人员的广泛关注。能带的谷通常指的是固体能带结构中的最高或最低处，类似于山峰形成的谷。学者们发现，能带的这种谷特性与贝里曲率密切相关，因此通过调控贝利相位来调节材料的谷自由度已成为当今凝聚态物理中一个重要的前沿研究课题。

1.2 二维材料

1.2.1 石墨烯

石墨烯是以 sp^2 杂化轨道形成六边形蜂窝状结构的二维纳米材料。石墨烯由于其优异的机械、光电性能，在有机电池、环保节能、药物输送、能源材料等领域有着广泛的应用，是一类极具发展潜力的新型材料。在剥离出石墨烯之前，研究人员认为绝对单层的材料是不可能存在的。然而，石墨烯的出现打破了这一固定思维。随着石墨烯这种原子层结构只有一层的二维材料的出现，实验中成功制备出类石墨烯材料，例如锗烯、硅烯等。这些二维材料具有相似的晶格结构和能带结构，其能带 K^+ 和 K^- 处都具有能谷的性质和相反的贝里曲率。2007 年，Xiao Di 和 Niu Qian 等人认为：石墨烯具有反常谷霍尔效应，成为了二维能谷电子学的开端。

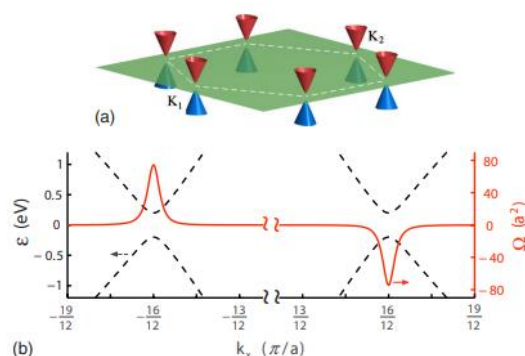


图 1.2.1 石墨烯的能带和轨道磁动量^[3]

Fig 1.2.1 The energy bands and orbital magnetic momentum of graphene

1.2.2 过渡金属硫化物 MoS₂

过渡金属硫化物 (Transition Metal Dichalcogenides, TMDs) 具有层状结构, 单层 MoS₂ 作为一种过渡金属硫化物, 层与层之间依靠范德瓦尔斯力结合在一起, 并且它是一种直接带隙半导体。硫原子和钼原子各自形成类似石墨烯一样的六边形蜂窝结构, 两层硫原子之间通过离子键和共价键相互作用, 中间夹着一层钼原子, 形成类似三明治形式(X-M-X)的层状结构。这种结构使得二硫化钼可以通过机械剥离的方法方便地进行制备。

1.3 贝里曲率

贝里曲率(Berry curvature)的概念由英国物理学家 Michael Berry 最早在 1984 年提出, 是物理学中一个重要的概念^[4]。它表示系统在哈密顿量变化时的几何相位, 在描述一些量子现象时起着关键作用。贝里曲率通常与一些拓扑性质联系在一起, 如拓扑绝缘体和拓扑超导体等, 这些拓扑材料因其特殊的电子结构而受到了广泛研究。在量子力学中, 一个物理系统的哈密顿量通常是由哈密顿算符来描述, 而物理系统的量子态和能量则由哈密顿量的本征态和本征值来描述。当哈密顿量的参数随时间变化时, 物理系统的本征态和本征值也随之变化, 这种变化可以用贝里相位来描述:

$$A_n(\vec{k}) = i \left\langle n(\vec{k}) \left| \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \right| n(\vec{k}) \right\rangle \quad (1.1)$$

贝里曲率是贝里相位的旋度, 它表征了物理系统在参数空间中的几何结构, 通常用矢量场来表示:

$$\Omega_{xy}^n = \frac{\partial}{\partial k_x} A_y^n - \frac{\partial}{\partial k_y} A_x^n \quad (1.2)$$

如果参数空间是三维的, 那么 1.2 式可以表示为:

$$\Omega^n = \nabla_{\vec{k}} \times A_{\vec{k}}^n \quad (1.3)$$

根据 kubo formula 的贝里曲率:

$$\langle m | \nabla | n \rangle = \frac{\langle m | \nabla H | n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} \quad (1.4)$$

以及完备关系:

$$\sum_m |m\rangle \langle m| = 1 \quad (1.5)$$

可以将 1.2 式表达为:

$$\Omega_{xy}^n(\vec{k}) = i \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | \partial H / \partial k_x | m \rangle \langle m | \partial H / \partial k_y | n \rangle - (x \leftrightarrow y)}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2} \quad (1.6)$$

贝里曲率的应用非常广泛，例如在拓扑绝缘体中，它与能隙拓扑不变量相关，可以用来预测材料的电导性质；此外，在量子计算和量子信息处理中，贝里相位也有着重要应用，如量子纠缠和量子比特的实现。

1.4 本论文主要研究内容

本文利用第一性原理计算，研究了石墨烯以及单层二硫化钼的贝里曲率。相关的研究内容如下：

- (1) 研究了石墨烯的晶体结构、声子谱、能带结构以及贝里曲率等性质。
- (2) 基于石墨烯，研究了与其具有同样六角蜂窝状结构的过渡金属硫化物单层 MoS_2 的晶体结构、声子谱、能带结构、贝里曲率以及总态密度。

2. 理论基础

本章主要介绍了研究的理论方法，主要是基于密度泛函理论的第一性原理计算。其在计算物理，计算化学，机器学习等诸多领域有着重要的应用。在计算机的辅助下，计算物理可以研究具有更复杂系统的材料。本章主要介绍了第一性原理计算、密度泛函理论以及相应的方法和软件。

2.1 第一性原理计算

2.1.1 薛定谔方程

对于单粒子体系而言，考虑薛定谔方程不含时的状态， $\hat{H}\psi = E\psi$ 。其中， \hat{H} 表示哈密顿量算符， E 表示本征态的本征能量， ψ 表示本征态。但是许多实际问题都是由多个粒子组成的系统，这使得它变得更加复杂。多粒子体系的薛定谔方程表示为^[5]：

$$\hat{H}\psi(r, R) = E\psi(r, R) \quad (2.1)$$

其中， \hat{H} 是体系的哈密顿量，由动能和势能两部分构成。 $\psi(r, R)$ 表示电子和原子核的波函数。 (r, R) 表示电子和原子核的坐标。体系的哈密顿量 \hat{H} 可表示为：

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad (2.2)$$

但是，由于多体系统哈密顿函数的形式比较复杂，这使得很难找到并求出其解析解。因此，有必要采用合理的近似方法，简化方程来进行求解。

2.1.2 绝热近似

玻恩-奥本海默近似^[6]（Born-Oppenheimer approximation，简称BO近似，又称绝热近似）是由物理学家奥本海默与其导师玻恩共同提出的，是解包含电子与原子核的体系的一种普遍使用的近似方法。该方法认为外界势场变化的影响可以忽略不记，电子仍然按照同一套本征态演化。由于电子的质量与原子核质量相差三个量级，电子的运动速度要比原子核快得多，这种速度上的差异导致了电子每时每刻都仿佛运动在静止原子核构成的势场中。因此，可以将原子核的运动与电子运动分离开来，从而大大降低了求解难度。其简化后的哈密顿量为：

$$\hat{H} = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'} \frac{e^2}{|r_i - r_{i'}|} - \sum_{i,j} \frac{Z_j e}{|r_i - R_j|} \quad (2.3)$$

绝热近似降低了求解的难度，但由于电子与电子之间的相互作用，使得波函数仍具有 $3 \times N$ 的维度。所以仅仅依靠绝热近似求解薛定谔方程是不够的。

2.1.3 单电子近似 (Hartree-Fock 近似)

单电子近似也是一种求解薛定谔方程时的近似方法。它将晶体中的一个电子置于由离子实、其余电子和交换势构成的周期性势场中，用一个有效平均场来代替原子核的静电场及其他电子的作用。通过这种近似，可以简化薛定谔方程的求解过程，使得各个电子看起来是等价的，因此只需要研究一个电子即可。通过求解一个单电子的薛定谔方程来得到系统的能量和波函数，用单电子波函数的线性组合来表示多电子波函数。在 Hartree-Fock 近似^[7]中，每个电子的波函数都被视为独立的，相互作用通过平均场近似来处理。利用单电子近似，可以通过单粒子波函数的乘积来表示多粒子体系的波函数：

$$\Phi(r, R) = \varphi_1(r_1)\varphi_2(r_2)\varphi_3(r_3)\dots\varphi_n(r_n) \quad (2.4)$$

将分离变量后得单电子方程： $\hat{H}_i\varphi(r_i) = E_i\varphi(r_i)$ 。然而，如果有交叉项，则无法简单地变量分离，但依然可以认为 Hartree 波函数是有效的，可以用它展开多电子波函数，然后代入多电子方程。

$$E = \sum_i \langle \varphi_i | \hat{H}_i | \varphi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ii'} \langle \varphi_i \varphi_{i'} | \hat{H}_{ii'} | \varphi_i \varphi_{i'} \rangle \quad (2.5)$$

使用变分法，可得 Hartree 方程。

$$[-\nabla^2 + V(r) + \sum_{j(\neq i)} \int dr' \frac{|\varphi_j(r')|^2}{|r-r'|} \varphi_i(r)]\varphi_i(r) = E\varphi_i(r) \quad (2.6)$$

但是，电子是费米子，需满足交换反对称；并且电子需满足 Pauli 不相容原理。因此 Fock 在 Hartree 的基础上，使用 Slater 行列式来描述多体系电子的波函数，即 Hartree-Fock 近似^[8]：

$$\phi_e(r, R) = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{vmatrix} \varphi_1(r_1) & \varphi_2(r_1) & \cdots & \varphi_N(r_1) \\ \varphi_1(r_2) & \varphi_2(r_2) & \cdots & \varphi_N(r_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(r_N) & \varphi_2(r_N) & \cdots & \varphi_N(r_N) \end{vmatrix} \quad (2.7)$$

通过使用绝热近似和单电子近似这两种近似方法，薛定谔方程的求解难度大大降低了。

2.2 密度泛函理论 (DFT)

绝热近似和单电子近似简单化了复杂薛定谔方程，极大地减少了计算量，但它们忽略了很多的相互作用，导致计算结果不够精确。为了更好的解释物理现象并提高计算结果，1927 年 Thomas 和 Fermi 共同提出了密度泛函理论的基本模型，

即 Thomas-Fermi 模型。他们以密度泛函的形式来表示分子所有的能量，但由于该模型无法对动能泛函进行近似，模拟计算结果并未到达预期。直到二十世纪七十年代 Hohenberg-Kohn (HK) [9] 两大定理被提出，密度泛函的理论基础才得以稳固。密度泛函理论是处理多电子体系的一种重要方法，将研究的基本变量从电子波函数替换为电子密度泛函，并且 Hohenberg-Kohn 原理指出，一切物理量原则上可以表示为基态电子密度的泛函。这与建立在复杂的多电子波函数基础上的经典方法有很大的差异。相比于经典方法，密度泛函理论在概念上更容易理解，实际计算操作上也更为便利。

2.3 wannier 函数

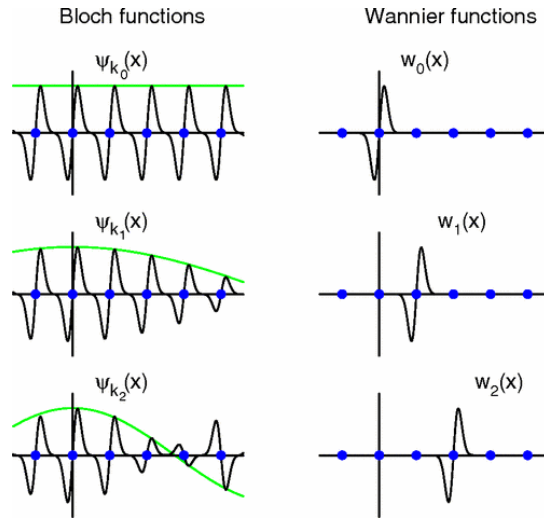


图 2.3.1 一维体系中布洛赫函数和 Wannier 函数的示意图 [10]

Fig 2.3.1 Schematic diagram of the Bloch function and the Wannier function in a one-dimensional system

根据布洛赫定理，晶格具有周期性，电子波函数可以写成周期性函数乘以平面波， $\Psi_{nk}(r) = u_{nk}(r)e^{ikr}$ 其中， k, r 都是倒空间坐标。如图 2.3.1 所示，布洛赫函数属于倒空间，具有周期性，是非局域的。这对于计算材料的电子性质是方便的，但是这种表示不够直观。因此通过傅里叶变换，将布洛赫函数转化为实空间的、局域的 Wannier 函数，直观表示如图 2.3.1 右图所示。

$$\omega_{nR}(r) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{BZ} dk e^{-ikR} \Psi_{nk}(r) \quad (2.8)$$

$$\Psi_{nk}(r) = \sum_R e^{ikR} \omega_{nR}(r) \quad (2.9)$$

式中 R 为实空间坐标, n 为能带指标, V 为原胞体积。然而, 由于布洛赫函数的周期性, 因此具有不确定相位 U_1 , 进而导致 Wannier 函数的不确定性。

Wannier 函数表示为:

$$\omega_{nR}(r) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{BZ} \left[\sum_m U_{mn}^k \Psi_{mk}(r) \right] e^{-ikR} dk \quad (2.10)$$

针对不确定性, Vanderbilt 和 Marzari 提出构造展宽函数得到局域化 Wannier 函数来解决^{[10][12]}。

$$\Omega = \sum_n \left[\langle on | r^2 | 0r \rangle - \langle on | r | 0r \rangle^2 \right] = \sum_n \left[\langle r^2 \rangle_n - (\langle r_n \rangle)^2 \right] \quad (2.11)$$

这种方法将 Ω 最小化, 进而确定相位, 得到最大局域化 Wannier 函数。

2.4 计算软件包

随着计算体系的增大, 理论求解薛定谔方程并不现实, 需借助计算物理提供数值解。因此计算物理的重要功能包括预测材料、实验提供理论支撑。本文使用的第一性原理计算相关软件包含 VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)^{[13][14]}、Wannier90^[15]等软件包。

VASP 是目前应用广泛于计算物理、计算化学等方面的一款软件, 它是由维也纳大学团队开发的。VASP 可以计算的内容非常丰富, 可以优化结构、计算电子能带、电子局域密度、光学性质和磁学性质(包括磁各向异性、居里温度等)、表面和界面、催化等等。Wannier90 可以和多个第一性原理计算软件接口, 用于计算高对称点的贝里曲率。

3. 石墨烯贝里曲率的第一性原理计算

3.1 引言

近年来，石墨烯因其出色的光电性能、机械性能等特性备受瞩目，并在能源、材料、电动汽车、航天航空等领域得到了广泛应用。石墨烯是以单层结构存在，且呈现六角蜂窝状，每个石墨烯原胞中包含两个碳原子，构成通过空间反演对称联系在一起的两套子晶格。石墨烯的能带结构中存在六对狄拉克锥，即其能带在布里渊区角落处呈上下对顶的圆锥形（填充和未填充电子的分离）。在外加电磁场作用下，布洛赫电子的半经典动力学方程可表示为

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{h} \frac{\partial E_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \dot{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) \quad (3.1)$$

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E} - e\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B} \quad (3.2)$$

其中 $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})$ 是用来描述的贝里曲率。如果系统具有空间反演对称，则贝里曲率满足 $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\Omega}_n(-\mathbf{k})$ ；如果系统具有时间反演对称性，则贝里曲率满足 $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) = -\boldsymbol{\Omega}_n(-\mathbf{k})$ ；如果系统同时具有空间反演对称和时间反演对称，则贝里曲率处处为零。

3.2 计算方法

在 VASP 软件包中，采用基于密度泛函理论（DFT）的电子结构计算。选择 Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)泛函的广义梯度近似(GGA)来处理交换关联势。优化原子位置采用共轭梯度法 CG。在计算中，设置截断能为 500eV。在布里渊区中使用了 $6 \times 6 \times 1$ 的 \mathbf{k} 网格。电子部分优化采用 blockedDavidson 算法和 RMM-DIIS 算法混合使用。能量的收敛标准为 1.0E-05eV，力的收敛标准为 1.0E-2eV/Å。通过 $3 \times 3 \times 1$ 的扩胞，利用 Phonopy 代码中的密度泛函微扰理论(DFPT)计算声子谱，以描述材料的动力学稳定性。高对称路径的贝里曲率是通过 Wannier90 包中实现的最大局域化 Wannier 函数(MLWF)计算的。

3.3 结果与分析

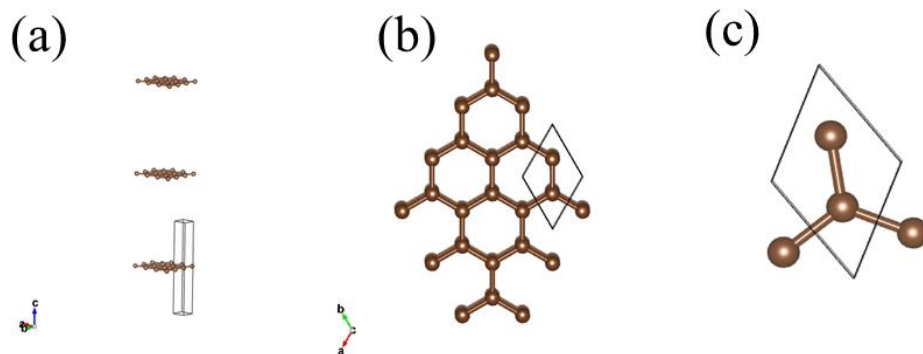


图 3.3.1 (a)石墨烯侧视图、(b)石墨烯顶视图(c)石墨烯原胞

Fig 3.3.1 (a)Side view (b) Top view (c) graphene primitive cell

石墨烯是一种二维材料，如图 3.3.1 (a)、(b)展示了层状的石墨烯，(c)展示了石墨烯的原胞。其中 C 原子分别占据了 $1a$ (0.66667, 0.33333, 0.50000)， $1a$ (0.33333, 0.66667, 0.50000) 的 Wyckoff 位置。经过结构优化后，石墨烯的晶格参数分别为 $a=2.46950\text{\AA}$ ， $b=2.46950\text{\AA}$ ， $c=11.99980\text{\AA}$ ， $\alpha=\beta=90^\circ$ ， $\gamma=120^\circ$ 。

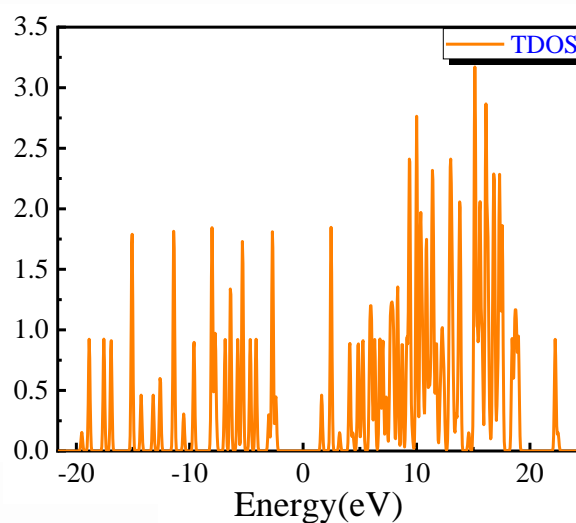


图 3.3.2 石墨烯总态密度图

Fig.3.3.2 Density of stats diagram of graphene

优化的晶格进行静态自洽后，随后进行能态密度的计算，获得图 3.3.2，石墨烯没有带隙，在 15.14788eV 能量位置附近的能态密度较其他位置高，说明在该位置能带分布密集。

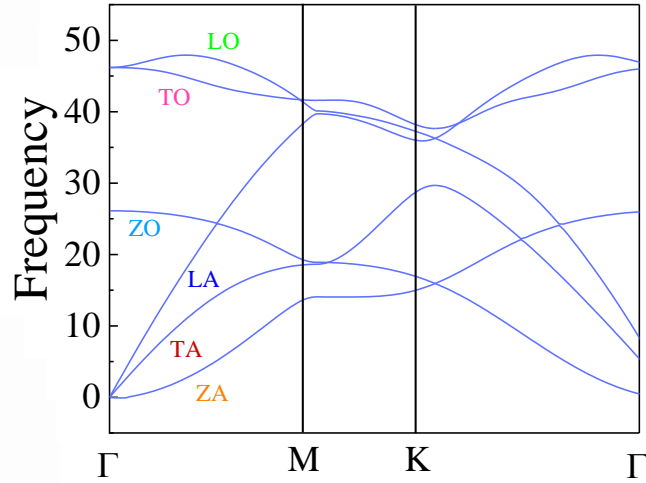


图 3.3.3 石墨烯的声子谱

Figure 3.3.3 Phonon spectrum of graphene

沿着布里渊区的高对称点连线 ΓM 、 MK 、 $K\Gamma$ 画出石墨烯的声子谱便得到图 3.3.3 所示的石墨烯声子谱。声子谱没有虚频，这表明石墨烯是动力学稳定的。其声子谱包括三支声学支(LA、TA、ZA)和三支光学支(LO、TO、ZO)。

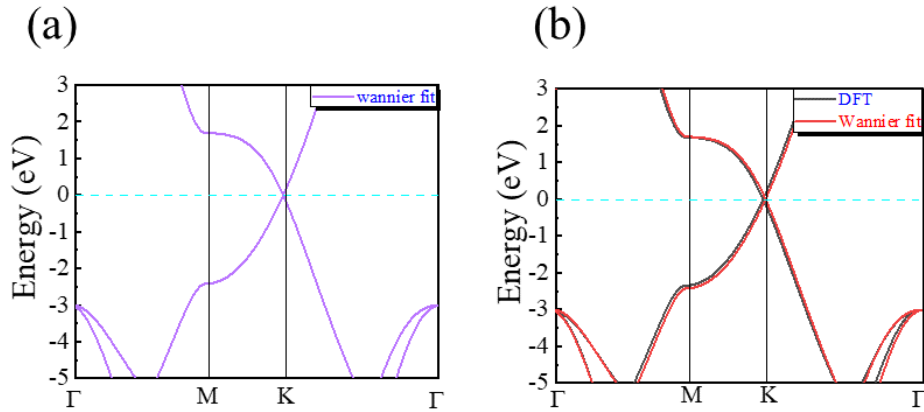


图 3.3.4 nosoc: (a) wannier 计算的能带 (b) DFT 和 wannier 计算的石墨烯能带拟合

Fig 3.3.4 nosoc:(a)The energy band calculated by wannier

(b)Graphene band fitting under DFT and wannier calculations

在 nosoc(非自旋轨道耦合)下，基于对称性，拟合了高对称 K 点处的能带能量，即 Γ 、M、K。先后采用 DFT、wannier 计算石墨烯的能带，拟合计算后，两种方式计算出的能带基本吻合。价带和导带在费米能级处相切从而使石墨烯成为零带隙半导体。

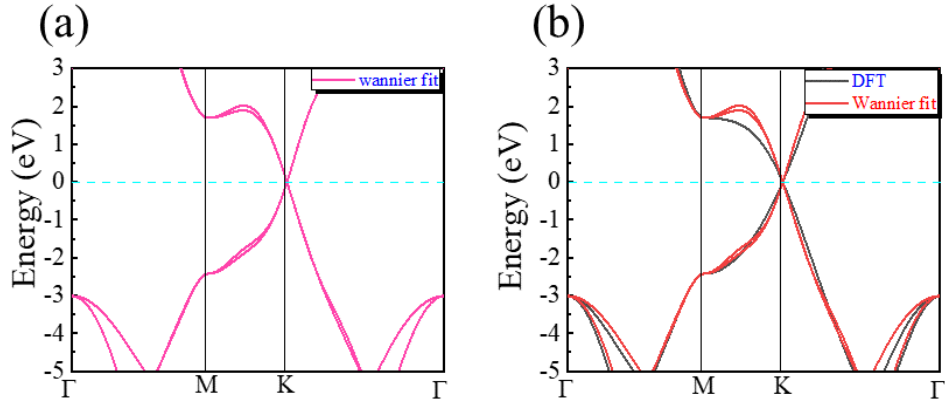


图 3.3.5 soc: (a) wannier 计算的能带 (b) DFT 和 wannier 计算的石墨烯能带拟合

Figure 3.3.5 soc: (a)The energy band calculated by wannier

(b)Graphene band fitting under DFT and wannier calculations

在 soc（自旋轨道耦合）下，基于对称性，拟合了高对称 K 点处的能带能量，即 Γ 、M、K。先后采用 DFT、wannier 计算石墨烯的能带，拟合计算后，两种方式计算出的能带基本吻合。由于自旋轨道耦合作用，石墨烯的能带出现劈裂。对于较轻元素，即原子序数较小的元素构成的二维狄拉克材料，自旋轨道耦合效应是非常弱的，仅仅能在狄拉克点打开微不可见的带隙，计算出 soc 作用下石墨烯的带隙为 0.0019eV 。

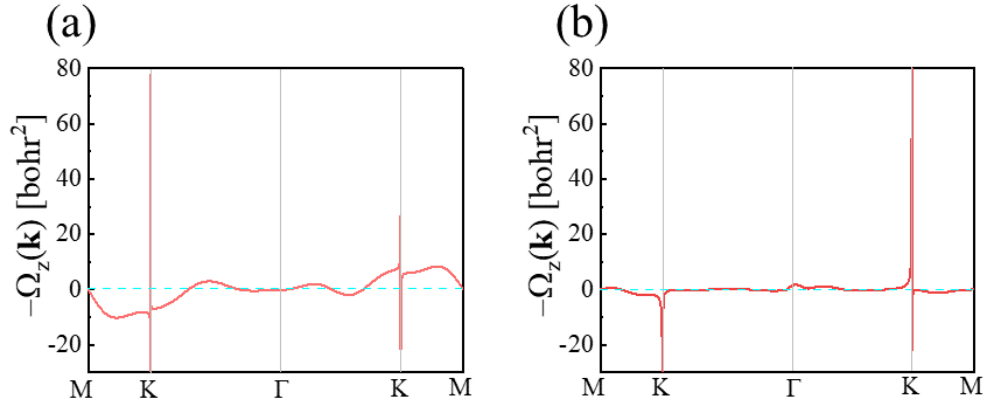


图 3.3.6 石墨烯 z 轴高对称路径的贝里曲率图: (a) nosoc;(b) soc

Fig 3.3.6 Berry curvature diagram of a graphene z-axis highly symmetrical path: (a) nosoc;(b)

soc

如图 3.3.6 所示，(a)图为无自旋轨道耦合下的贝里曲率，(b)图为自旋轨道耦合作用下的贝里曲率，石墨烯在 K^+ 和 K^- 谷处贝里曲率值都极大，其他点相较于K谷的数值很小。但是自旋轨道耦合作用下两个谷之间的数值更接近于零，这说明自旋轨道耦合作用有助于其贝里曲率的调控。

3.4 本章小结

总之，第三章通过第一性原理计算，计算了石墨烯的电子结构、声子谱、能带以及贝里曲率。石墨烯是一种典型的二维材料，具有六角型蜂巢状晶格，晶格参数分别为 $a=2.46950\text{\AA}$ ， $b=2.46950\text{\AA}$ ， $c=11.99980\text{\AA}$ ， $\alpha=\beta=90^\circ$ ， $\gamma=120^\circ$ 。石墨烯的声子谱包括三支声学支(LA、TA、ZA)和三支光学支(LO、TO、ZO)。其声子谱没有虚频，这表明石墨烯是动力学稳定的。石墨烯的带隙为零,且带隙可以进行调控，因此具有优异的电学性能。由于自旋轨道耦合作用，石墨烯的能带会出现劈裂。石墨烯的 K^+ 和 K^- 谷的贝里曲率值极大，其他点相较于 K^- 谷的数较小。因此，石墨烯是谷电子器件和光电子器件的良好材料。

4. 过渡金属硫化物 MoS_2 贝里曲率的第一性原理计算

4.1 引言

二维六方结构的原型材料是石墨烯，已被广泛研究。近年来，单层过渡金属硫化物作为二维材料也备受关注。与石墨烯不同，单层 TMDs 可能具有更合适的带隙尺寸和自旋轨道耦合 (soc) 的直接带隙。因此，它是光电和谷电子器件的良好候选材料。TMDs 是非中心对称的二维材料，具有两个非等效的 K^+ 谷和 K^- 谷，因为它天然的空间反演对称性破缺，其贝里曲率的符号是相反的即 $\Omega_n(k) = -\Omega_n(-k)$ 。并且，其相邻的两个谷不简并也是其天然的空间反演对称性破缺所致。

4.2 计算方法

在 VASP 软件包中，采用基于密度泛函理论 (DFT) 的电子结构计算。交换关联势选用 Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE) 泛函的广义梯度近似(GGA)来处理。在计算中考虑了自旋轨道耦合效应(SOC)。设置截断能为 500eV 。在布里渊区中使用了 $6 \times 6 \times 1$ 的 k 网格。电子部分优化采用 blockedDavidson 算法和 RMM-DIIS 算法混合使用。能量收敛标准为 $1.0\text{E-}05\text{eV}$ ，力的收敛标准为 $-1.0\text{E-}2\text{eV}/\text{\AA}$ 。采用共轭梯度法 CG 来优化原子位置。通过 $3 \times 3 \times 1$ 的扩胞，用 Phonopy 代码中的密度泛函微扰理论(DFPT)计算声子谱，来描述材料的动力学稳定性。高对称路径的贝里曲率是通过 Wannier90 包中实现的最大局域化 Wannier 函数(MLWF)计算的。

4.3 结果与分析

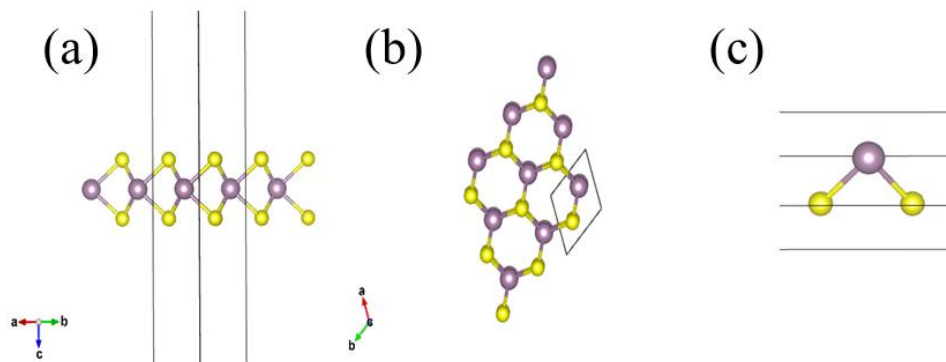


图 4.3.1 层状 MoS_2 : (a) 正视图 (b) 顶视图 (c) MoS_2 原胞

Fig. 4.3.1 Side view of MoS_2 : (a) Top view of MoS_2 (b) Top view (c) MoS_2 primitive cell

过渡金属硫化物单层 MoS_2 是一种二维材料。图 4.3.1 (a) 和 (b) 分别展示了在不同视角下层状 MoS_2 的晶体结构，图 4.3.2 展示了 MoS_2 的晶胞机构，其中 Mo 原子占据了 $1a$ (0.66667, 0.33334, 0.50000) 的 Wyckoff 位置，两个 S 原子分别占据了 $1a$ (0.33333, 0.66666, 0.43222), $1a$ (0.33333, 0.66666, 0.56778) 的 Wyckoff 位置。通过结构优化之后， MoS_2 的晶格参数分别为 $a=3.18235\text{\AA}$, $b=3.18229\text{\AA}$, $c=23.07207\text{\AA}$, $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$ 。

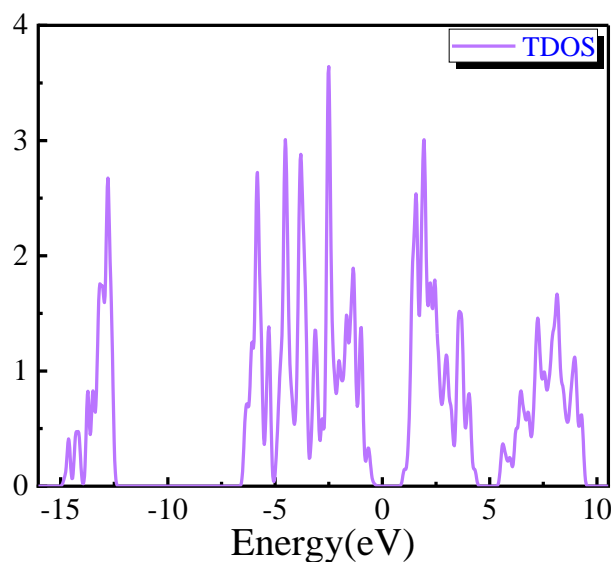


图 4.3.2 MoS_2 总态密度图

Fig.4.3.2 Density of stats diagram of MoS_2

优化的晶格进行静态自洽后，随后进行能态密度的计算，获得图 4.3.2， MoS_2 的导带部分的能量范围跨度较价带部分能量跨度更宽，在 1.943eV 和 -2.501eV 两个能量位置附近的能态密度较其他位置高，为价带中具有较高能量的电子选择向这些能态跃迁奠定了基础。

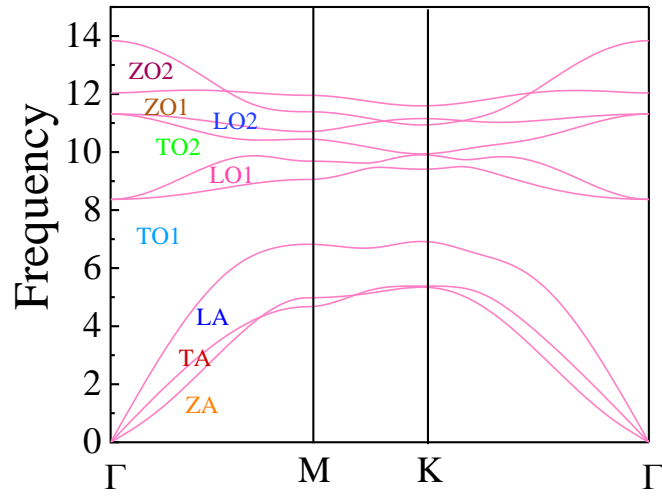


图 4.3.3 MoS₂ 的声子谱

Figure 4.3.3 Phonon spectrum of MoS₂

沿着布里渊区的高对称点连线 ΓM 、 MK 、 $K\Gamma$ 画出 MoS₂ 的声子谱便得到图 4.3.3 所示的声子谱。如图中所示，每个 MoS₂ 原胞共有九支格波，其中，有 3 支声学支格波和 6 支光学支格波，这与晶格振动理论的分析是符合的。因为单层 MoS₂ 不具有中心反演对称性，使得其声子谱线不再有简并特性，九条格波曲线应该没有简并部分，这正如图中所示。单层 MoS₂ 的声子谱没有虚频，这表明其是动力学稳定的。

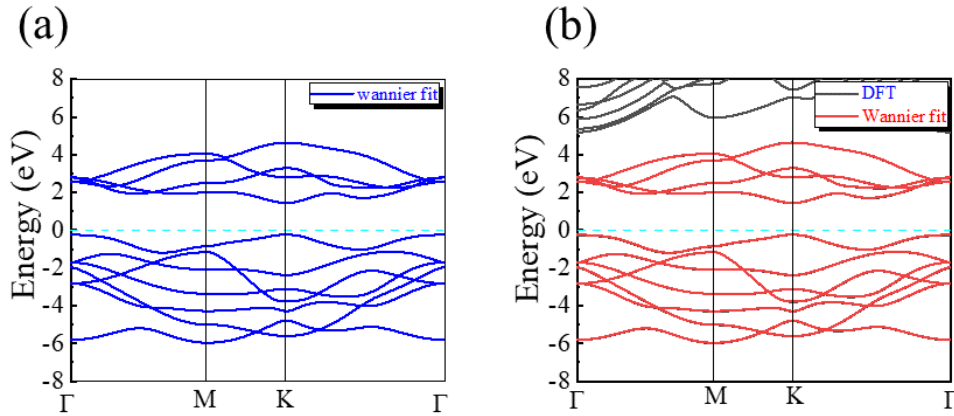


图 4.3.4 nosoc: (a) wannier 计算的能带 (b) DFT 和 wannier 计算的 MoS₂ 能带拟合

Fig 4.3.4 nosoc:(a) The energy band calculated by wannier

(b)MoS₂ band fitting under DFT and wannier calculations

在 nosoc(非自旋轨道耦合)下，基于对称性，拟合了高对称 K 点处的能带能量，即 Γ 、M、K。先后采用 DFT、wannier 计算 MoS₂ 的能带，拟合后如图 4.3.5，两种方式计算出的能带基本吻合。MoS₂ 是直接带隙半导体，导带和价带边缘都位于第一布里渊区的两个角，即 K^+ 和 K^- 点，计算出能带带隙为 1.5927 eV。

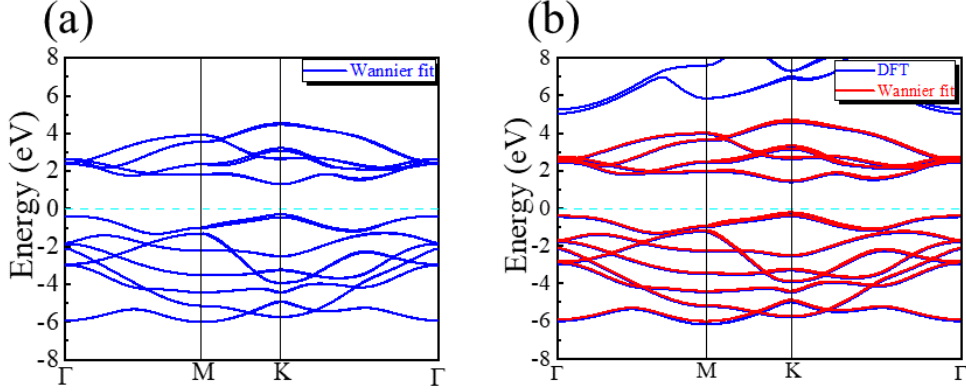


图 4.3.5 soc: (a) wannier 计算的能带 (b) DFT 和 wannier 计算的 MoS₂ 能带拟合
Fig 4.3.5 soc:(a) The energy band calculated by wannier
(b)MoS₂ band fitting under DFT and wannier calculations

在 soc(自旋轨道耦合)下，基于对称性，拟合了高对称 K 点处的能带能量，即 Γ 、M、K。先后采用 DFT、wannier 计算 MoS₂ 的能带，拟合后如图 4.3.5，两种方式计算出的能带基本吻合。由于自旋轨道耦合作用，MoS₂ 的价带出现劈裂。

由于过渡金属硫原子，材料的 soc（自旋轨道耦合）可能很大，这也是单层过渡金属硫化物的一个迷人的特性，导致其具有丰富的物理特性。并且 MoS₂ 反转对称性的缺失也允许自旋和谷自由度之间的强耦合，这些表明单层 MoS₂ 可能是自旋电子学和谷电子学的优异材料。对于一级 soc 强度，单层 MoS₂ 的 TB 模型^[16] 只能再现在 K 点处价带的自旋分裂，将价带最大值分裂为 $\Delta_{soc}^V = 2\lambda$ 。但事实上，导带自旋分裂（CBSS）并不是零，而是一个有限的小值^{[17]–[21]}，并且与价带中的强谷自旋耦合类似，由于时间反转对称性，CBSS 也依赖于谷，并导致弱谷自旋耦合。

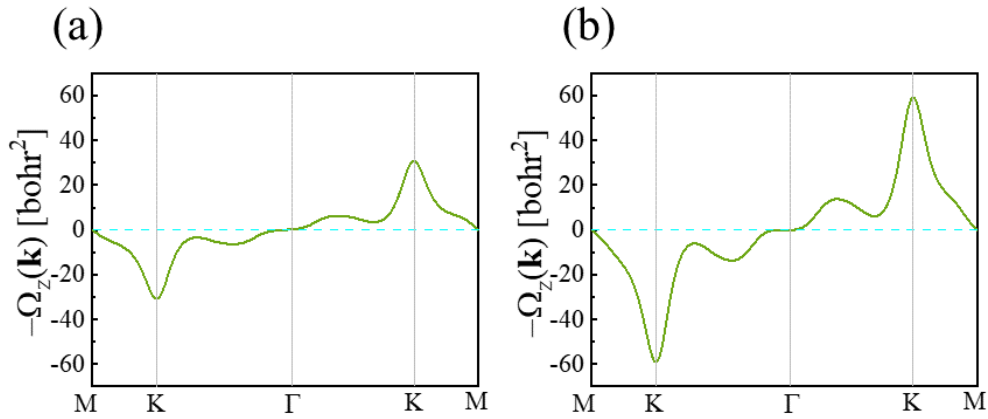


图 4.3.6 二维 MoS_2 z 轴高对称路径的贝里曲率图: (a) nosoc;(b) soc

Fig 4.3.6 Berry curvature diagram of a 2D MoS_2 z-axis highly symmetrical path: (a) nosoc;(b) soc

如图 4.3.6 所示, (a)图为无自旋轨道耦合下的贝里曲率, (b)图为自旋轨道耦合作用下的贝里曲率, 二维 MoS_2 的 K^+ 和 K^- 谷的贝里曲率值都互为相反数且极大, 其他点相较于 K 谷的数值较小, 并且在 K^+ 和 K^- 谷之间的数值具有相反的符号, 自旋轨道耦合作用对其贝里曲率没有影响。两个谷中的电荷载流子在施加的外部电场下会以不同的方式偏转。当存在面内电场时, 可以产生谷霍尔效应。

4.4 本章小结

总之, 第四章通过第一性原理计算, 计算了过渡金属硫化物 MoS_2 的电子结构、声子谱、能带结构、贝里曲率以及总态密度。单层 MoS_2 同样为典型的二维材料, 具有与石墨烯相似的六边形蜂窝状晶格。 MoS_2 的晶格参数分别为 $a=3.18235\text{\AA}$, $b=3.18229\text{\AA}$, $c=23.07207\text{\AA}$, $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$ 。从对单层 MoS_2 能带结构计算分析来看, 其表现出的直接带隙的能带结构特点意味着单层 MoS_2 非常适合用来制作微电子器件, 同时, 态密度中优异的禁带宽度也同样证实这一点。因为单层 MoS_2 不具有中心反演对称性, 使得其声子谱线不再有简并特性, 九条格波曲线应该没有简并部分。且单层 MoS_2 的声子谱没有虚频, 这表明其是动力学稳定的。二维 MoS_2 的 K^+ 和 K^- 谷的贝里曲率值互为相反数且极大, 其他点相较于 K 谷的数值较小, 自旋轨道耦合作用对其贝里曲率没有影响。但是自旋轨道耦合效应在价带产生谷自旋劈裂值, K^+ 谷和 K^- 谷的不同特性可以产生反常谷霍尔效应。

5. 总结与展望

随着谷电子学的发展，能谷材料的研究经历了单原子层石墨烯、三个原子层过渡金属硫化物等几个阶段。本文基于第一性原理计算，计算了石墨烯和过渡金属硫化物 MoS_2 的能带结构、贝里曲率。

在第一个工作中，计算了石墨烯的电子结构、声子谱、能带以及贝里曲率。石墨烯是一种典型的二维材料，具有六角型蜂巢状晶格，晶格参数分别为 $a=2.46950\text{\AA}$ ， $b=2.46950\text{\AA}$ ， $c=11.99980\text{\AA}$ ， $\alpha=\beta=90^\circ$ ， $\gamma=120^\circ$ 。石墨烯的声子谱包括三支声学支(LA、TA、ZA)和三支光学支(LO、TO、ZO)。其声子谱没有虚频，这表明石墨烯是动力学稳定的。石墨烯的带隙为零带隙,且带隙可调控，因此具有优异的电学性能。由于自旋轨道耦合作用，石墨烯的能带会出现劈裂。石墨烯的 K^+ 和 K^- 谷的贝里曲率值极大，其他点相较于 K 谷的数值很小。因此，石墨烯是谷电子器件和光电子器件的良好材料。

在第二个工作中，计算了过渡金属硫化物 MoS_2 的电子结构、声子谱、能带结构、贝里曲率以及总态密度的。单层 MoS_2 同样为典型的二维材料，具有与石墨烯相似的六边形蜂窝状晶格。 MoS_2 的晶格参数分别为 $a=3.18235\text{\AA}$ ， $b=3.18229\text{\AA}$ ， $c=23.07207\text{\AA}$ ， $\alpha=\beta=90^\circ$ ， $\gamma=120^\circ$ 。从对单层 MoS_2 能带结构计算分析来看，其表现出的直接带隙的能带结构特点意味着单层 MoS_2 非常适合用来制作微电子器件，同时，态密度中优异的禁带宽度也同样证实这一点。因为单层 MoS_2 不具有中心反演对称性，使得其声子谱线不再有简并特性，九条格波曲线应该没有简并部分。且单层 MoS_2 的声子谱没有虚频，这表明其是动力学稳定的。二维 MoS_2 的 K^+ 和 K^- 谷的贝里曲率值互为相反数且极大，其他点相较于 K 谷的数值较小，自旋轨道耦合作用对其贝里曲率没有影响。但是自旋轨道耦合效应在价带产生谷自旋劈裂值， K^+ 谷和 K^- 谷的不同特性可以产生反常谷霍尔效应。

我国的石墨烯产业经过十几年的发展，其产业化进程在世界上处于领先地位。在这么短的时间里，能有这么好的成果是十分不易的。石墨烯作为一种二维材料，具有许多独特的物理性质，使得它在多个领域有着广泛的应用前景。而贝里曲率作为石墨烯的一个重要特性，其未来展望也充满了无限可能。

首先，随着科学技术的不断进步，对于石墨烯中贝里曲率的理解和研究将会更加深入。通过精确控制石墨烯的层间电位和间隙分布，科学家们有望实现对贝里曲率的精确调控，从而进一步揭示石墨烯中的拓扑和量子几何响应。

其次，贝里曲率的研究有望为石墨烯在电子学、光学与光电子学、储能技术、测量和传感以及材料增强等领域的应用提供新的思路和方法。例如，在电子学领域，通过调控石墨烯的贝里曲率，可能会实现更高性能、更稳定的电子器件；在光学与光电子学领域，石墨烯的宽带吸收和强光学非线性特性可能会得到进一步

的应用；在储能技术领域，石墨烯的高比表面积和优异的电化学性能可能会得到更好的发挥。

此外，石墨烯的贝里曲率还有望在量子信息科学领域发挥重要作用。石墨烯的量子反常霍尔效应和无旋磁效应等现象使其成为研究量子信息科学的重要材料。随着量子计算技术的不断发展，石墨烯量子计算机可能会成为未来量子计算领域的热门研究方向之一。

单层二硫化钼（ MoS_2 ）作为一种典型的二维过渡金属硫化物，具有巨大的发展潜力。贝里曲率作为描述电子在动量空间中运动的重要参数，对于理解单层二硫化钼的电子输运特性和量子几何效应具有重要意义。单层二硫化钼具有两个能量相近但不等价的谷态，这使得它成为研究谷电子学的理想材料。贝里曲率与谷极化输运和谷霍尔效应密切相关。通过对单层二硫化钼中贝里曲率的研究，可以进一步揭示谷电子学的基本规律和物理机制，为开发高性能的谷电子学器件提供理论基础。总的来说，单层二硫化钼的贝里曲率研究具有广阔的前景和潜在的应用价值。然而，要实现这些前景，还需要在理论计算、实验制备和器件应用等方面取得更多的突破和进展。因此，未来对于单层二硫化钼贝里曲率的研究将是一个充满挑战和机遇的领域。

参考文献

- [1] Wei Kong, Hyun Kum, Sang-Hoon Bae Path towards graphene commercialization from lab to market [J]. Nature Nanotechnology. 2019-10-03
- [2] A.K.Geim, K.S.Novoselov The rise of graphene [J]. Nature Materials. 2007-03-15
- [3] Xiao D, Yao W, Niu Q. Valley-contrasting physics in graphene: magnetic moment and topological transport [J]. Physical Review Letters, 2007, 99(23): 236809.
- [4] Berry M V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes [J]. Proceedings of the Royal Society of London A Mathematical and Physical Sciences, 1984, 392(1802): 45.
- [5] Sakurai J J, Tuan S F, Commins E D. Modern quantum mechanics, revised edition [J]. American Journal of Physics, 1995, 63(1): 93.
- [6] Born M, Huang K, Lax M. Dynamical theory of crystal lattices [J]. American Journal of Physics, 1955, 23(7): 474.
- [7] Hartree D R. The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. part I. theory and methods [J]. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 1928, 24(1): 89.
- [8] Fock.V. Naherungsmethode zur losung des quantenmechanischen mehrkorperproblems [J]. Zeitschrift für Physik, 1930, 61: 126.
- [9] Hohenberg P, Kohn W. Inhomogeneous electron gas [J]. Physical Review, 1964, 136(3B): B864.
- [10] Marzari N, Mostofi A , Yates J R, et al. Maximally localized wannier functions: theory and applications [J]. Reviews of Modern Physics, 2012, 84(4): 1419.
- [11] Marzari N, Vanderbilt D. Maximally localized generalized wannier functions for composite energy bands [J]. Physical Review B, 1997, 56(20): 12847.
- [12] Souza I, Marzari N, Vanderbilt D. Maximally localized wannier functions for entangled energy bands [J]. Physical Review B, 2001, 65(3): 035109.
- [13] Kresse G, Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set [J]. Physical Review B, 1996, 54(16): 11169.

- [14] Kresse G, Furthmüller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set [J]. Computational Materials Science, 1996, 6: 15.
- [15] Mostofi A A, Yates J R, Lee Y S, et al. wannier90: A tool for obtaining maximally-localised wannier functions [J]. Computer Physics Communications, 2008, 178(9): 685.
- [16] Gui-Bin Liu, Wen-Yu Shan, Yugui Yao, Three-band tight-binding model for monolayers of group-VIB transition metal dichalcogenides [J]. Physical. Review B, 88, 085433 (2013)
- [17] T. Cheiwchanchamnangij and W. R. L. Lambrecht, Quasiparticle band structure calculation of monolayer, bilayer, and bulk MoS₂ [J]. Physical. Review. B 85, 205302 (2012).
- [18] E. S. Kadantsev and P. Hawrylak, Electronic structure of a single MoS₂ monolayer [J]. Solid State Commun. 152, 909 (2012).
- [19] H. Zeng, B. Zhu, K. Liu, Low-frequency Raman modes and electronic excitations in atomically thin MoS₂ films [J]. Physical. Review. B 86, 241301(R) (2012).
- [20] K. Kosmider and J. Fernandez-Rossier, Electronic properties of the MoS₂-WS₂ heterojunction [J]. Physical. Review. B 87, 075451 (2013).
- [21] Y. Song and H. Dery, Phys. Transport Theory of Monolayer Transition-Metal Dichalcogenides through Symmetry [J]. Rev. Lett. 111, 026601 (2013).

附录

一、 计算贝里曲率的 mathematica 代码如下:

1. 二阶矩阵

$$H_m \begin{pmatrix} m & d_1 - id_2 \\ d_1 + id_2 & -m \end{pmatrix}$$

(*取值第一个特征值所对应的特征向量,列向量*)

v1=Transpose[Eigenvectors[Hm]][[;;,1]];

(*取值第二个特征值所对应的特征向量,列向量*)

v2=Transpose[Eigenvectors[Hm]][[;;,2]];

(*归一化 v1,v2 两个列向量, 得到还是列向量*)

v1norm=FullSimplify[ComplexExpand[Normalize[v1]]];

v2norm=FullSimplify[ComplexExpand[Normalize[v2]]];

(*d(v1norm)/dkx,求偏导数, 得到列向量*)

v1diffkx=FullSimplify[D[v1norm,d1]];

(*d(v1norm)/dky,求偏导数, 得到列向量*)

v1diffky=FullSimplify[D[v1norm,d2]];

(*d(v2norm)/dkx,求偏导数, 得到列向量*)

v2diffkx=FullSimplify[D[v2norm,d1]];

(*d(v2norm)/dky,求偏导数, 得到列向量*)

v2diffky=FullSimplify[D[v2norm,d2]];

F11=FullSimplify[

ComplexExpand[i*(Conjugate[v1diffkx].v1diffky-Conjugate[v1diffky].v1diffkx)]]

F22=FullSimplify[

ComplexExpand[i*(Conjugate[v2diffkx].v2diffky-Conjugate[v2diffky].v2diffkx)]]

(*化简 F11*)

FullSimplify

$$\left[\frac{m(d_1^2 + d_2^2 + m(m + \sqrt{d_1^2 + d_2^2 + m^2}))}{2(d_1^2 + d_2^2 + m^2)^{3/2}} \sqrt{1 + \frac{m(m + 2\sqrt{d_1^2 + d_2^2 + m^2})}{d_1^2 + d_2^2 + m^2}} \right] / \{d_1 \rightarrow k \cos[\phi], d_2 \rightarrow k \sin[\phi]\}$$

$$\left((m \text{Expand}[(k^2 + m(m + \sqrt{k^2 + m^2}))]) \sqrt{\frac{k^2 + m^2}{\text{Expand}[k^2 + 2m(m + \sqrt{k^2 + m^2})]}} \right) / (2(k^2 + m^2)^{5/2})$$

(*霍尔电导*)

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{m}{2(x^2 + m^2)^{3/2}} dx$$

2. 三阶矩阵

(*求贝利相位*)

(*Det[tmat],行列式为 1,正交矩阵, $AA^T = A^T A = E$ *)

$$tmat = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

(*能够得到解析的贝利曲率和贝利相位*)

$$H_m = \begin{pmatrix} 0 & k_1 & -ik_2 \\ k_1 & 0 & \Delta \\ ik_2 & \Delta & 0 \end{pmatrix}$$

(*取值第一个特征值所对应的特征向量,列向量*)

v1=Transpose[Eigenvectors[Hm]][[;;,1]];

(*取值第二个特征值所对应的特征向量,列向量*)

v2=Transpose[Eigenvectors[Hm]][[;;,2]];

(*取值第三个特征值所对应的特征向量,列向量*)

v3=Transpose[Eigenvectors[Hm]][[;;,3]];

(*归一化 v1,v2,v3 三个列向量, 得到还是列向量*)

v1norm=FullSimplify[ComplexExpand[Normalize[v1]]];

v2norm=FullSimplify[ComplexExpand[Normalize[v2]]];

v3norm=FullSimplify[ComplexExpand[Normalize[v3]]];

(*d(v1norm)/dkx,求偏导数, 得到列向量*)

v1diffkx=FullSimplify[D[v1norm,k1]];

(*d(v1norm)/dky,求偏导数, 得到列向量*)

v1diffky=FullSimplify[D[v1norm,k2]];

```

(*d(v2norm)/dkx,求偏导数, 得到列向量*)
v2diffkx=FullSimplify[D[v2norm,k1]];
(*d(v2norm)/dky,求偏导数, 得到列向量*)
v2diffky=FullSimplify[D[v2norm,k2]];
(*d(v3norm)/dkx,求偏导数, 得到列向量*)
v3diffkx=FullSimplify[D[v3norm,k1]];
(*d(v3norm)/dky,求偏导数, 得到列向量*)
v3diffky=FullSimplify[D[v3norm,k2]];
F11=
FullSimplify[
ComplexExpand[i*(Conjugate[v1diffkx].v1diffky-Conjugate[v1diffky].v1diffkx)
]]
F22=
FullSimplify[
ComplexExpand[i*(Conjugate[v2diffkx].v2diffky-Conjugate[v2diffky].v2diffkx)
]]
F33=
FullSimplify[
ComplexExpand[i*(Conjugate[v3diffkx].v3diffky-Conjugate[v3diffky].v3diffkx)
]]
(*霍尔电导*)

```

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{m}{2(x^2 + m^2)^{3/2}} dx$$

$$\sigma_{yx} = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{m}{2(y^2 + m^2)^{3/2}} dy$$

二、 VASP、Wannier90 计算流程

1. 石墨烯

1.1 DFT 计算

1.1.1 结构优化

输入文件： INCAR、 KPOINTS、 POSCAR、 POTCAR

INCAR:

```
SYSTEM = Graphene
#Startparameter for this run:
PREC = Accurate
ISTART = 0
ICHARG = 2
LREAL = .FALSE.
#Ionic Relaxation
IBRION = 2
ISIF = 3
NSW = 150
EDIFFG = -1.0E-2
POTIM = 0.25
#Electronic Relaxation
EDIFF = 1.0E-05
ENCUT = 500 eV
ALGO = Fast
#DOS related values
ISMEAR = 0
SIGMA = 0.05
#Field Calculation
#EFIELD = 0.1
#LDIPOL = .TRUE.
#IDIPOL = 3
#DIPOL = 0.5 0.5 0.1374
#Writing items
LWAVE = .FALSE.
LCHARG = .FALSE.
LVTOT = .FALSE.
```

KPOINTS:

Automatic mesh
0
GMonkhorst-Pack
6 6 1
0 0 0

POSCAR:

graphene
1.0
2.460000 0.000000 0.000000
-1.230000 2.130422 0.000000
0.000000 0.000000 12.000000
C
2
Selective dynamics
Direct
0.6666667 0.3333333 0.500000 T T T
0.3333333 0.6666667 0.500000 T T T

POTCAR:

PAW_PBE C 08Apr2002
4.000000000000000000
parameters from PSCTR are:
VRHFIN =C: s2p2
LEXCH = PE
EATOM = 147.1560 eV, 10.8157 Ry

1.1.2 静态自洽

输入文件：INCAR、KPOINTS、POSCAR（结构优化后产生的
CONTCAR）、POTCAR

INCAR:

SYSTEM = Graphene
#Startparameter for this run:
PREC = Accurate
ISTART = 0
ICHARG = 2
LREAL = .FALSE.
#Ionic Relaxation

```

IBRION = 2
ISIF = 2
NSW = 0
#EDIFFG = -1.0E-2
POTIM = 0.25
#Electronic Relaxation
EDIFF = 1.0E-05
ENCUT = 500
ALGO = Fast
#DOS related values
ISMear = 0
SIGMA = 0.05
#Writing items
LWAVE = .FALSE.
LCHARG = .TRUE.
LVTOT = .FALSE.
KPOINTS:
Automatic mesh
0
GMonkhorst-Pack
12 12 1
0 0 0
POSCAR (结构优化后产生的 CONTCAR) :
graphene
1.0000000000000000
2.4695120741967065 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.2347560370983532 2.1386596921745942 0.0000000000000000
0.0000000000000000 -0.0000000000000000 11.9998015979722155
C
2
Selective dynamics
Direct
0.666666700000 0.333333299999 0.500000000000 T T T
0.333333299999 0.666666700000 0.500000000000 T T T

```


POTCAR:

```
PAW_PBE C 08Apr2002
4.000000000000000000
parameters from PSCTR are:
VRHFIN =C: s2p2
LEXCH = PE
EATOM = 147.1560 eV, 10.8157 Ry
```

1.1.3 能带计算

输入文件：INCAR（增加 NBANDS）、KPOINTS（高度对称的路径）、POSCAR（结构优化后产生的 CONTCAR）、POTCAR

INCAR:

```
SYSTEM = Graphene
#Startparameter for this run:
PREC = Accurate
ISTART = 0
ICHARG = 11
LREAL = .FALSE.
#Ionic Relaxation
IBRION = 2
ISIF = 2
NSW = 0
#EDIFFG = -1.0E-2
POTIM = 0.25
#Electronic Relaxation
EDIFF = 1.0E-05
ENCUT = 500
ALGO = Fast
LORBIT = 11
NBANDS = 12
#DOS related values
ISMear = 0
SIGMA = 0.05
#Writing items
```

```

LWAVE = .FALSE.
LCHARG = .FALSE.
LVTOT = .FALSE.
KPOINTS (高度对称的路径) :
k-points along high symmetry lines
50 !50 intersections
Line-mode
rec
0.0000 0.0000 0.0 ! gamma
0.5000 0.0000 0.0 ! M

0.5000 0.0000 0.0 ! M
0.3333 0.3333 0.0 ! K

0.3333 0.3333 0.0 ! K
0.0000 0.0000 0.0 ! gamma
POSCAR (结构优化后产生的 CONTCAR) :
graphene
1.0000000000000000
2.4695120741967065 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.2347560370983532 2.1386596921745942 0.0000000000000000
0.0000000000000000 -0.0000000000000000 11.9998015979722155
C
2
Selective dynamics
Direct
0.666666700000 0.333333299999 0.500000000000 T T T
0.333333299999 0.666666700000 0.500000000000 T T T

POTCAR:
PAW_PBE C 08Apr2002
4.0000000000000000
parameters from PSCTR are:
VRHFIN =C: s2p2

```

LEXCH = PE

EATOM = 147.1560 eV, 10.8157 Ry

1.1.4 声子谱计算

结构优化后进行声子谱的计算

输入文件：POSCAR-unitcell

POSCAR-unitcell:

graphene

1.0

2.4695000648	0.0000000000	0.0000000000
-1.2347500324	2.1386497908	0.0000000000
0.0000000000	0.0000000000	11.9997997284

C

2

Selective dynamics

Direct

0.6666666660	0.333333320	0.500000000	T T T
0.333333292	0.666666583	0.500000000	T T T

运行：phonopy -v -d --dim="3 3 1" -c POSCAR-unitcell

输出文件：disp.yaml、phonopy_disp.yamp、POSCAR-001、POSCAR-002、POSCAR-003、SPOSCAR

输入文件：INCAR、KPOINTS、POSCAR（上一步生成的 SPOSCAR）、POTCAR

输出文件：OUTCAR

运行：phonopy --fc vasprun.xml ## --hdf5

cp POSCAR-unitcell POSCAR

phonopy --dim="3 3 1" -c POSCAR-unitcell band.conf

band.conf: phonopy1.10 sudo 123456

bandplot band.yaml #obtain the phonon dispersion figure, mobaxterm open

bandplot --gnuplot band.yaml > phonon.dat # obtain the phonon.dat for orgin

plot

1.2wannier 计算

1.2.1 打开 wannier 通道

输入文件：INCAR（增加 NABNDS、LWANNIER90=.T.）、KPOINTS、
POSCAR、POTCAR、wannier90.win
INCAR（增加 NABNDS、LWANNIER90=.T.）：

```
SYSTEM = graphene
#Startparameter for this run:
PREC = Accurate
ISTART = 0
ICHARG = 2
LREAL = .FALSE.
#Ionic Relaxation
IBRION = 2
ISIF = 2
NSW = 0
#EDIFFG = -1.0E-2
POTIM = 0.25
#soc-Calculation
#ISYM = 0
#ISPIN = 2
#LSORBIT = .TRUE.
#SAXIS = 0 0 1
#MAGMOM = 18*0
#local potential calculation
#LVTOT = .TRUE.
#LVHAR = .TRUE.
#Dipol_Field Calculation
#EFIELD = 0.125 ! unit eV
#LDIPOL = .TRUE.
#IDIPOL = 3 ! z direction
#DIPOL = 0.5 0.5 0.1175 !center
#Electronic Relaxation
EDIFF = 1.0E-05
ENCUT = 500
ALGO = Fast
#DOS related values
ISMear = 0
```

```

    SIGMA = 0.05
#Writing items
    LWAVE = .FALSE.
    LCHARG = .FALSE.
    LVTOT = .FALSE.
#Wannier fit
    NBANDS = 24
    LWANNIER90 = .T. ! it is key to open wannier
    #LWRITE_MMN_AMN = .TRUE.
KPOINTS:
    Automatic mesh
    0
    GMonkhorst-Pack
    6 6 1
    0 0 0
POSCAR:
    graphene
    1.0
    2.440000  0.000000  0.000000
    -1.220000  2.113101  0.000000
    0.000000  0.000000  10.000000
    C
    2
    Selective dynamics
    Direct
    0.6666667  0.3333333  0.500000  T  T  T
    0.3333333  0.6666667  0.500000  T  T  T
POTCAR:
    PAW_PBE C 08Apr2002
    4.000000000000000000
    parameters from PSCTR are:
    VRHFIN =C: s2p2
    LEXCH = PE
    EATOM = 147.1560 eV, 10.8157 Ry

```

wannier90.win:

```
num_bands = 24
num_wann = 5
guiding_centres=true
#hr_plot = TRUE
#use_bloch_phases = T

#dis_win_max    = 5.0d0
#dis_win_min    = -10.0d0
#dis_froz_max    = 1.0d0
#dis_froz_min    = -5.0d0
#dis_num_iter    = 200
#dis_mix_ratio   = 1.d0

num_iter        = 200
num_print_cycles = 10

begin projections
f=0.666667, 0.333333, 0.500000:sp2,pz
f=0.333333, 0.666667, 0.500000:pz
end projections

begin unit_cell_cart
2.4400000  0.0000000  0.0000000
-1.2200000  2.1131010  0.0000000
0.0000000  0.0000000  10.0000000
end unit_cell_cart

begin atoms_cart
C    1.2200001  0.7043669  5.0000000
C    -0.0000001  1.4087341  5.0000000
```

```
end atoms_cart
```

```
mp_grid = 6 6 1
```

1.2.2 静态自洽

输入文件: wannier90.win、wannier90.amn、wannier90.mmn、wannier90.eig

运行 wannier90.x

wannier90.win:

```
num_bands = 24
```

```
num_wann = 5
```

```
guiding_centres=true
```

```
#hr_plot = TRUE
```

```
#use_bloch_phases = T
```

```
dis_win_max = 15.0d0
```

```
dis_win_min = -15.0d0
```

```
dis_froz_max = 3.11d0
```

```
dis_froz_min = -10.11d0
```

```
dis_num_iter = 200
```

```
dis_mix_ratio = 1.d0
```

```
num_iter = 200
```

```
num_print_cycles = 10
```

```
begin projections
```

```
f=0.666667, 0.333333, 0.500000:sp2,pz
```

```
f=0.333333, 0.666667, 0.500000:pz
```

```
end projections
```

```
begin unit_cell_cart
```

```
2.4400000 0.0000000 0.0000000
```

```
-1.2200000 2.1131010 0.0000000
```

```
0.0000000 0.0000000 10.0000000
```

```
end unit_cell_cart
```

```

begin atoms_cart
C      1.2200001   0.7043669   5.0000000
C     -0.0000001   1.4087341   5.0000000
end atoms_cart

```

```

mp_grid =   6   6   1

```

1.2.3 能带计算

输入文件：wannier90.win、wannier90.amn、wannier90.mmn、wannier90.eig

运行 wannier90.x

wannier90.win:

```

num_bands = 24
num_wann = 5
guiding_centres=true
write_hr = TRUE
#use_bloch_phases = T

```

```

dis_win_max   = 15.0d0
dis_win_min   = -15.0d0
dis_froz_max   = 3.11d0
dis_froz_min   = -10.11d0
dis_num_iter   = 200
dis_mix_ratio  = 1.d0

```

```

num_iter      = 200
num_print_cycles = 10

```

```

begin projections
f=0.666667, 0.333333, 0.500000:sp2,pz
f=0.333333, 0.666667, 0.500000:pz
end projections

```



```

begin unit_cell_cart
    2.4400000  0.0000000  0.0000000
    -1.2200000  2.1131010  0.0000000
    0.0000000  0.0000000  10.0000000
end unit_cell_cart

begin atoms_cart
C    1.2200001  0.7043669  5.0000000
C   -0.0000001  1.4087341  5.0000000
end atoms_cart

mp_grid =    6    6    1

!Band Structure Plot
!restart = plot
begin kpoint_path
G 0.0000 0.0000 0.0000  M 0.5000 0.0000 0.0000
M 0.5000 0.0000 0.0000  K 0.3333 0.3333 0.0000
K 0.3333 0.3333 0.0000  G 0.0000 0.0000 0.0000
end kpoint_path
bands_plot = TRUE
bands_num_points = 100

!Fermi Surface Plot
!restart=plot
!fermi_energy=-2.6418
!fermi_surface_plot=true

!Wannier plot
!write_unk=true
!restart = plot
!wannier_plot=true
!wannier_plot_list=11-12
!wannier_plot_supercell=2 !2(default)

```

```
!wannier_plot_format=xcrysden !xcrysden(default);cube
!wannier_plot_radius=3.5 !3.5(default)
!wannier_plot_mode=crystal !crystal(default);molecule
```

1.2.4 贝里曲率计算

输入文件： wannier90.win、 wannier90.amn、 wannier90.mmn、 wannier90.eig、
wannier90.chk

运行 postw90.x

wannier90.win:

```
num_bands = 24
num_wann = 5
guiding_centres=true
#write_hr = TRUE
#use_bloch_phases = T
```

```
dis_win_max    = 15.0d0
dis_win_min    = -15.0d0
dis_froz_max    = 3.11d0
dis_froz_min    = -10.11d0
dis_num_iter    = 200
dis_mix_ratio   = 1.d0
```

```
num_iter       = 200
num_print_cycles = 10
```

```
begin projections
f=0.666667, 0.333333, 0.500000:sp2,pz
f=0.333333, 0.666667, 0.500000:pz
end projections
```

```
begin unit_cell_cart
2.4400000  0.0000000  0.0000000
-1.2200000 2.1131010  0.0000000
```

```

0.0000000 0.0000000 10.0000000
end unit_cell_cart

begin atoms_cart
C 1.2200001 0.7043669 5.0000000
C -0.0000001 1.4087341 5.0000000
end atoms_cart

mp_grid = 6 6 1

#### berry curvature of lines ####
kpath = true
kpath_task = curv
kpath_num_points = 500
berry_curv_unit = bohr2
fermi_energy = -1.1140
begin kpoint_path
M 0.5000 0.0000 0.0000 K 0.3333 0.3333 0.0000
K 0.3333 0.3333 0.0000 G 0.0000 0.0000 0.0000
G 0.0000 0.0000 0.0000 K' -0.3333 0.6667 0.0000
K' -0.3333 0.6667 0.0000 M' 0.0000 0.5000 0.0000
end kpoint_path
#### berry curvature of lines ####

```

2. MoS₂

2.1DFT 计算

2.1.1 结构优化

输入文件：INCAR、KPOINTS、POSCAR、POTCAR

INCAR:

```

SYSTEM = TMDCs
#Startparameter for this run:
PREC = Accurate
ISTART = 0
ICHARG = 2
LREAL = .FALSE.
#Ionic Relaxation

```

```

IBRION = 2
ISIF = 3
NSW = 150
EDIFFG = -1.0E-2
POTIM = 0.25
#Electronic Relaxation
EDIFF = 1.0E-05
ENCUT = 500
ALGO = Fast
#DOS related values
ISMear = 0
SIGMA = 0.05
#Field Calculation
#EFIELD = 0.1
#LDIPOL = .TRUE.
#IDIPOL = 3
#DIPOL = 0.5 0.5 0.1374
#Writing items
LWAVE = .FALSE.
LCHARG = .FALSE.
LVTOT = .FALSE.
KPOINTS:
Automatic mesh
0
GMonkhorst-Pack
6 6 1
0 0 0
POSCAR:
MoS2
1.0
3.1823000908      0.0000000000      0.0000000000
-1.5911500454     2.7559527211      0.0000000000
0.0000000000      0.0000000000     23.0720996857
Mo   S

```

1 2

Direct

0.000000000	0.000000000	0.500000000
0.333333343	0.666666687	0.432220012
0.333333343	0.666666687	0.567780018

POTCAR:

PAW_PBE Mo 08Apr2002

6.000000000000000000

parameters from PSCTR are:

VRHFIN =Mo: 4p5s4d

LEXCH = PE

EATOM = 217.5180 eV, 15.9871 Ry

2.1.2 静态自洽（自旋轨道耦合）

输入文件：INCAR、KPOINTS、POSCAR（结构优化后产生的
CONTCAR）、POTCAR

INCAR:

SYSTEM = MoS₂

#Startparameter for this run:

PREC = Accurate

ISTART = 0

ICHARG = 2

LREAL = .FALSE.

#Ionic Relaxation

IBRION = 2

ISIF = 2

NSW = 0

#EDIFFG = -1.0E-2

POTIM = 0.25

#soc-Calculation

#ISYM = 0

#ISPIN = 2

LSORBIT = .TRUE.

SAXIS = 0 0 1

MAGMOM = 18*0

```

#Electronic Relaxation
EDIFF = 1.0E-05
ENCUT = 500
ALGO = Fast
#DOS related values
ISMear = 0
SIGMA = 0.05
#Writing items
LWAVE = .FALSE.
LCHARG = .TRUE.
LVTOT = .FALSE.
KPOINTS:
Automatic mesh
0
GMonkhorst-Pack
6 6 1
0 0 0
POSCAR (结构优化后产生的 CONTCAR) :
Mo1 S2
1.0000000000000000
3.1810152599923303 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5905076299961651 2.7545478861163315 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 23.0821483604693469
Mo S
1 2
Direct
0.6666698474529125 0.3333386949058345 0.5000000000000000
0.3333315762735454 0.6666641525470811 0.4322160726401378
0.3333315762735454 0.6666641525470811 0.5677839273598623

POTCAR:
PAW_PBE Mo 08Apr2002
6.0000000000000000
parameters from PSCTR are:

```

```
VRHFIN = Mo: 4p5s4d
LEXCH = PE
EATOM = 217.5180 eV, 15.9871 Ry
```

2.1.3 能带计算

输入文件：INCAR（增加 NBANDS）、KPOINTS（高度对称的路径）、POSCAR（结构优化后产生的 CONTCAR）、POTCAR

INCAR（增加 NBANDS）：

```
SYSTEM = MoS2
#Startparameter for this run:
PREC = Accurate
ISTART = 0
ICHARG = 11
LREAL = .FALSE.
#Ionic Relaxation
IBRION = 2
ISIF = 2
NSW = 0
#EDIFFG = -1.0E-2
POTIM = 0.25
#soc-Calculation
#ISYM = 0
#ISPIN = 2
LSORBIT = .TRUE.
SAXIS = 0 0 1
MAGMOM = 18*0
#Electronic Relaxation
EDIFF = 1.0E-05
ENCUT = 500
ALGO = Fast
#LORBIT = 11
NBANDS = 32
#DOS related values
ISMear = 0
SIGMA = 0.05
```

#Writing items

LWAVE = .FALSE.

LCHARG = .FALSE.

LVTOT = .FALSE.

KPOINTS:

k-points along high symmetry lines

50 !50 intersections

Line-mode

rec

0.0000 0.0000 0.0 ! gamma

0.5000 0.0000 0.0 ! M

0.5000 0.0000 0.0 ! M

0.3333 0.3333 0.0 ! K

0.3333 0.3333 0.0 ! K

0.0000 0.0000 0.0 ! gamma

POSCAR (结构优化后产生的 CONTCAR) :

Mo1 S2

1.0000000000000000

3.1810152599923303 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5905076299961651 2.7545478861163315 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 23.0821483604693469

Mo S

1 2

Direct

0.6666698474529125 0.3333386949058345 0.5000000000000000

0.3333315762735454 0.6666641525470811 0.4322160726401378

0.3333315762735454 0.6666641525470811 0.5677839273598623

POTCAR:

PAW_PBE Mo 08Apr2002

6.0000000000000000

parameters from PSCTR are:

VRHFIN = Mo: 4p5s4d
LEXCH = PE
EATOM = 217.5180 eV, 15.9871 Ry
使用 vaspkit 工具获得 BAND.dat、BAND_GAP

2.1.4 态密度计算

静态自洽之后进行态密度计算

输入文件：INCAR（增加 NEDOS）、KPOINTS、POSCAR（结构优化后产生的 CONTCAR）、POTCAR

INCAR:

```
SYSTEM=MoS2
##Start parameter for this run
ISTART = 1
ICHARG = 11
NEDOS = 1000
PREC = Normal
##ionic Relaxation
IBRION = -1
ISIF = 3
NSW = 0
EDIFFG = 0.05
##Electronic Relaxation
ALGO=N
ENCUT=400
ISPIN=2
EDIFF=1E-06
LREAL = Auto
POTIM = 0.5
NELM = 500
NELMIN = 5
GGA = PE
ISMear=0 #zero
SIGMA=0.1 #For atoms or molecules, use 0.01
##vdw correction
```

```

IVDW=11
##Write flags
LWAVE = .TRUE.
LCHARG = .TRUE.
LORBIT = 10
#ISYM = -1
#NBANDS = 128
#LREAL = Auto
#ELF = .FALSE.
KPOINTS:
Automatic mesh
0
GMonkhorst-Pack
6 6 1
0 0 0
POSCAR:
Mo1 S2
1.0000000000000000
3.1810152599923303 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-1.5905076299961651 2.7545478861163315 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 23.0821483604693469
Mo S
1 2
Direct
0.6666698474529125 0.3333386949058345 0.5000000000000000
0.3333315762735454 0.6666641525470811 0.4322160726401378
0.3333315762735454 0.6666641525470811 0.5677839273598623

POTCAR:
PAW_PBE Mo 08Apr2002
6.0000000000000000
parameters from PSCTR are:
VRHFIN =Mo: 4p5s4d
LEXCH = PE

```

EATOM = 217.5180 eV, 15.9871 Ry
使用 vaspkit 工具获得 TDOS.dat

2.1.5 声子谱计算

静态自洽后进行声子谱计算

输入文件：POSCAR-unitcell

运行：phonopy -v -d --dim="3 3 1" -c POSCAR-unitcell

输出文件：disp.yaml、phonopy_disp.yamp、POSCAR-001、POSCAR-002、POSCAR-003、SPOSCAR

输入文件：INCAR、KPOINTS、POSCAR（上一步生成的 SPOSCAR）、POTCAR

输出文件：OUTCAR

运行：phonopy --fc vasprun.xml ## --hdf5

cp POSCAR-unitcell POSCAR

phonopy --dim="3 3 1" -c POSCAR-unitcell band.conf

band.conf: phonopy1.10 sudo 123456

bandplot band.yaml #obtain the phonon dispersion figure, mobaxterm open

bandplot --gnuplot band.yaml > phonon.dat # obtain the phonon.dat for origin plot

2.2 wannier 计算

2.2.1 打开 wannier 通道

输入文件：INCAR（增加 NABNDS、LWANNIER90=.T.）、KPOINTS、POSCAR、POTCAR、wannier90.win
INCAR（增加 NABNDS、LWANNIER90=.T.）：

SYSTEM = TMDCs

#Startparameter for this run:

PREC = Accurate

ISTART = 0

ICHARG = 2

LREAL = .FALSE.

#Ionic Relaxation

IBRION = 2

ISIF = 2

NSW = 0

```

#EDIFFG = -1.0E-2
POTIM = 0.25
#soc-Calculation
#ISYM = 0
#ISPIN = 2
#LSORBIT = .TRUE.
#SAXIS = 0 0 1
#MAGMOM = 18*0
#local potential calculation
#LVTOT = .TRUE.
#LVHAR = .TRUE.
#Dipol_Field Calculation
#EFIELD = 0.125 ! unit eV
#LDIPOL = .TRUE.
#IDIPOL = 3 ! z direction
#DIPOL = 0.5 0.5 0.1175 !center
#Electronic Relaxation
EDIFF = 1.0E-05
ENCUT = 500
ALGO = Fast
#DOS related values
ISMear = 0
SIGMA = 0.05
#Writing items
LWAVE = .FALSE.
LCHARG = .FALSE.
LVTOT = .FALSE.
#Wannier fit
NBANDS = 32
LWANNIER90 = .T. ! it is key to open wannier
#LWRITE_MMN_AMN = .TRUE.
KPOINTS:
Automatic mesh
0
GMonkhorst-Pack
9 9 1

```

0 0 0

POSCAR:

Mo1 S2

1.0000000000000000

3.1810152599923303 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-1.5905076299961651 2.7545478861163315 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 23.0821483604693469

Mo S

1 2

Direct

0.6666698474529125 0.3333386949058345 0.5000000000000000

0.3333315762735454 0.6666641525470811 0.4322160726401378

0.3333315762735454 0.6666641525470811 0.5677839273598623

POTCAR:

PAW_PBE Mo 08Apr2002

6.0000000000000000

parameters from PSCTR are:

VRHFIN =Mo: 4p5s4d

LEXCH = PE

EATOM = 217.5180 eV, 15.9871 Ry

wannier90.win:

num_bands = 32

num_wann = 11

guiding_centres=true

#hr_plot = TRUE

#use_bloch_phases = T

#dis_win_max = 5.0d0

#dis_win_min = -10.0d0

#dis_froz_max = 1.0d0

#dis_froz_min = -5.0d0

```
#dis_num_iter    = 200
#dis_mix_ratio   = 1.d0
```

```
#num_iter        = 200
#num_print_cycles = 10
```

```
begin projections
Mo:d
S:p
end projections
```

```
begin unit_cell_cart
  3.1823001  0.0000000  0.0000000
 -1.5911500  2.7559527  0.0000000
  0.0000000  0.0000000  23.0720997
end unit_cell_cart
```

```
begin atoms_cart
Mo  0.0000000  0.0000000  11.5360498
S   -0.0000000  1.8373019  9.9722232
S   -0.0000000  1.8373019  13.0998772
end atoms_cart
```

```
mp_grid = 9 9 1
```

2.2.2 静态自洽

输入文件： wannier90.win、 wannier90.amn、 wannier90.mmn、 wannier90.eig
wannier90.win:

```
num_bands = 32
num_wann = 11
guiding_centres=true
#hr_plot = TRUE
#use_bloch_phases = T
```

```

dis_win_max    = 13.0d0
dis_win_min    =-17.0d0
dis_froz_max   = 1.7820d0
dis_froz_min   =-8.7820d0
dis_num_iter   = 200
dis_mix_ratio  = 1.d0

```

```

num_iter       = 0
num_print_cycles = 10

```

```

begin projections
Mo:d
S:p
end projections

```

```

begin unit_cell_cart
  3.1823001  0.0000000  0.0000000
 -1.5911500  2.7559527  0.0000000
  0.0000000  0.0000000  23.0720997
end unit_cell_cart

```

```

begin atoms_cart
Mo   0.0000000  0.0000000  11.5360498
S   -0.0000000  1.8373019  9.9722232
S   -0.0000000  1.8373019  13.0998772
end atoms_cart

```

```

mp_grid = 9 9 1

```

2.2.3 能带计算

输入文件：wannier90.win、wannier90.amn、wannier90.mmn、wannier90.eig、
wannier90.chk

wannier90.win:

```
num_bands = 32
num_wann = 11
guiding_centres=true
write_hr = TRUE
#use_bloch_phases = T
```

```
dis_win_max    = 13.0d0
dis_win_min    = -17.0d0
dis_froz_max    = 1.7820d0
dis_froz_min    = -8.7820d0
dis_num_iter    = 200
dis_mix_ratio   = 1.d0
```

```
num_iter       = 0
num_print_cycles = 10
```

```
begin projections
Mo:d
S:p
end projections
```

```
begin unit_cell_cart
  3.1823001  0.0000000  0.0000000
 -1.5911500  2.7559527  0.0000000
  0.0000000  0.0000000  23.0720997
end unit_cell_cart
```

```
begin atoms_cart
Mo    0.0000000  0.0000000  11.5360498
```



```

S    -0.0000000    1.8373019    9.9722232
S    -0.0000000    1.8373019    13.0998772
end atoms_cart

```

```

mp_grid =    9    9    1

```

```

!Band Structure Plot

```

```

!restart = plot

```

```

begin kpoint_path

```

```

G 0.0000 0.0000 0.0000  M 0.5000 0.0000 0.0000

```

```

M 0.5000 0.0000 0.0000  K 0.3333 0.3333 0.0000

```

```

K 0.3333 0.3333 0.0000  G 0.0000 0.0000 0.0000

```

```

end kpoint_path

```

```

bands_plot = TRUE

```

```

bands_num_points = 100

```

```

!Fermi Surface Plot

```

```

!restart=plot

```

```

!fermi_energy=-2.6418

```

```

!fermi_surface_plot=true

```

```

!Wannier plot

```

```

!write_unk=true

```

```

!restart = plot

```

```

!wannier_plot=true

```

```

!wannier_plot_list=11-12

```

```

!wannier_plot_supercell=2 !2(default)

```

```

!wannier_plot_format=xcrysden !xcrysden(default);cube

```

```

!wannier_plot_radius=3.5 !3.5(default)

```

```

!wannier_plot_mode=crystal !crystal(default);molecule

```

2.2.4 贝里曲率计算

输入文件： wannier90.win、 wannier90.amn、 wannier90.mmn、 wannier90.eig、
wannier90.chk

wannier90.win:

```

num_bands = 32
num_wann = 11
guiding_centres=true
#write_hr = TRUE
#use_bloch_phases = T

```

```

dis_win_max    = 13.0d0
dis_win_min    = -17.0d0
dis_froz_max   = 1.7820d0
dis_froz_min   = -8.7820d0
dis_num_iter   = 200
dis_mix_ratio  = 1.d0

```

```

num_iter       = 0
num_print_cycles = 10

```

```

begin projections
Mo:d
S:p
end projections

```

```

begin unit_cell_cart
  3.1823001  0.0000000  0.0000000
 -1.5911500  2.7559527  0.0000000
  0.0000000  0.0000000  23.0720997
end unit_cell_cart

```

```

begin atoms_cart
Mo   0.0000000  0.0000000  11.5360498
S    -0.0000000  1.8373019  9.9722232
S    -0.0000000  1.8373019  13.0998772

```

```

end atoms_cart

mp_grid = 9 9 1

#### berry curvature of lines ####
kpath = true
kpath_task = curv
kpath_num_points = 500
berry_curv_unit = bohr2
fermi_energy = -2.7820
begin kpoint_path
M 0.5000 0.0000 0.0000 K 0.3333 0.3333 0.0000
K 0.3333 0.3333 0.0000 G 0.0000 0.0000 0.0000
G 0.0000 0.0000 0.0000 K' -0.3333 0.6667 0.0000
K' -0.3333 0.6667 0.0000 M' 0.0000 0.5000 0.0000
end kpoint_path
#### berry curvature of lines ####
运行 postw90.x

```

致谢

自此，论文的写作就告一段落。感谢大学四年的培养，感谢我的指导老师对本论文从选题、构思、计算到最后定稿的各个环节给予的细心的指引和教导，对此，我发自内心地表示衷心的感谢，真诚祝福恩师们生活圆满、工作顺利、桃李满天下。

感谢我的同学在论文写作过程中给予我很大的鼓励和帮助，总是在我脆弱失意时给我安慰和包容，让我拥有前进的勇气和力量，一路有你们我真的知足又幸福。

感谢父母对我二十多年来的悉心培养，父母之爱子，则为之计深远，女儿深知养育不易，感谢你们一直以来的支持，爱不挂口，常记于心。

感谢党和国家，为人民为我们提供的一切。

最后，我要感谢我自己，感谢自己一步一个脚印走到了现在，并且会一直坚定地走下去。