

Tutorials for WannierTools: an open-source software for novel topological materials

Hands-on session

第一届 WannierTools 和 TopMat 研讨会

The 1st Workshop on WannierTools and TopMat (2024 Liyang)

Hands-on based on WannierTools v2.7.1

Useful information about WannierTools:

Documentation: www.wanniertools.com

Forum: www.wanniertools.org

Open source: https://github.com/quanshengwu/wannier_tools

Corresponding to: Prof. QuanSheng Wu, quansheng.wu@iphy.ac.cn

Tips: Open file.eps, file.pdf file in Linux, you can use command "evince". such as

```
1 $ evince file.eps
```

Open file.png file, you can use command "gwenview" in GUI Linux mode. such as

```
1 $ gwenview file.png
```

Or you can download the file to open it, png files viewing in command line mode is infeasible.

第一届 WannierTools 和 TopMat 研讨会

2024 年 9 月 5 日

文档编纂成员：

- 前期准备 (张衍)
- 软件安装 (张衍)
- Wannier 函数构造 (王禹志, 吴泉生)
- BHZ 模型 (吴泉生)
- Haldane 模型 (吴泉生, 由叶财渊翻译)
- 拓扑绝缘体模型 (吴泉生, 由刘家轩翻译)
- 外尔半金属模型 (吴泉生, 由叶财渊翻译)
- 表面态计算 (闫亿)
- 能带解折叠 (Band unfolding) (沈远忱)
- 磁阻和 Hall 效应 (刘智豪)
- 反常霍尔效应 AHE (尹博)
- 自旋霍尔效应 SHC (郑佳新)
- 反常能斯特效应 ANE (皮涵琦)
- Landau 能级 (王禹志)
- 转角石墨烯体系 (吴泉生, 由齐梓越翻译)
- 拓扑超导 (胡敬南)



吴泉生



皮涵琦



刘智豪



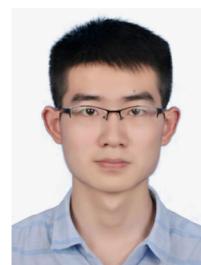
尹博



胡敬南



郑佳新



张衍



王禹志



沈远忱



刘家轩



叶财渊



齐梓越



闫亿

目录

1 前期准备	7
2 软件安装	10
2.1 LAPACK 和 BLAS 库安装	10
2.2 ARPACK 安装	10
2.3 WannierTools 安装	11
3 构造高质量的 Wannier 函数	13
3.1 选择投影算符	13
3.2 选择解纠缠能量窗 dis_win	15
3.3 选择冻结能量窗口 froz_win	15
3.4 结果	15
3.5 讨论	16
3.6 Bi_2Se_3 构造 Wannier 函数具体操作	16
3.7 Cu 构造 Wannier 函数具体操作	17
4 Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) 模型	20
4.1 BHZ 模型介绍	20
4.2 Half-BHZ 模型研究	20
4.3 Full BHZ 模型研究	22
4.4 添加塞曼 (Zeeman) 效应	24
5 拓扑绝缘体	27
5.1 二维拓扑绝缘体 $1T'$ -WSe ₂	27
5.2 三维拓扑绝缘体 Bi_2Se_3	31
6 Weyl 半金属	34
6.1 Weyl 半金属的一个简化模型	34
6.2 Weyl 半金属 TaAs	39
7 表面态计算	41
7.1 表面态的计算方法	41
7.2 Bi_2Se_3 表面态计算	42
7.2.1 六方原胞	42
7.2.2 菱方原胞	44
7.3 石墨烯边界态计算	47
8 反常霍尔效应	50
8.1 三维外尔半金属反常霍尔电导计算	50
8.2 Fe 反常霍尔电导计算	51
8.3 Co ₂ MnGa 反常霍尔电导计算	53

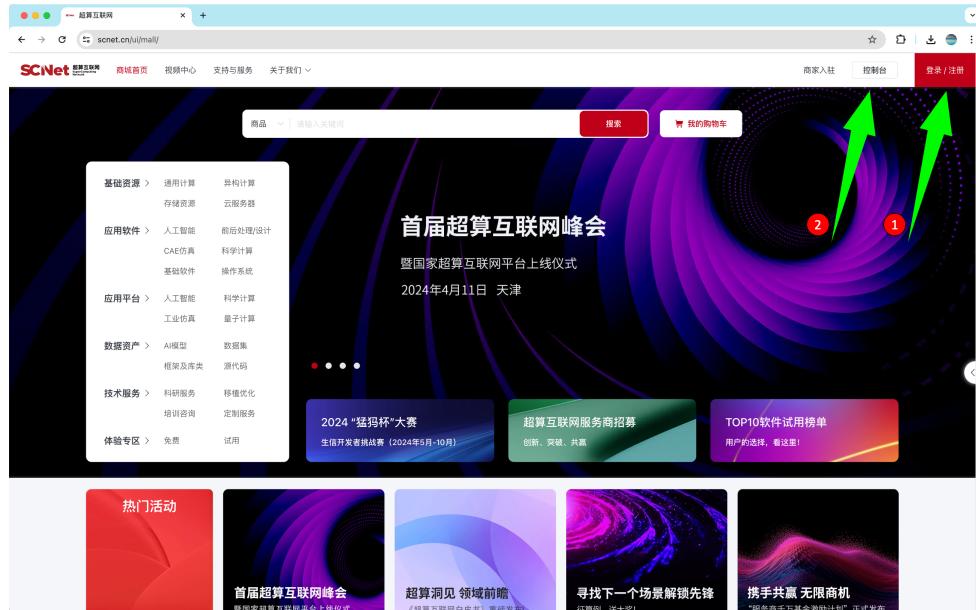
8.4 Haldane 模型反常霍尔电导计算	55
9 反常能斯特效应	58
9.1 Co ₂ MnGa 反常能斯特系数计算	58
10 自旋霍尔电导率	61
10.1 基本思想	61
10.2 Pt 自旋霍尔电导率计算	61
10.3 Co ₃ Sn ₂ S ₂ 自旋霍尔电导率计算	63
11 由洛伦兹力引起的磁阻和普通霍尔效应	66
11.1 固定磁场方向下的 $\rho_{xx}\tau$, $\rho_{yy}\tau$, $\rho_{zz}\tau$ 和 $\rho_{xy}\tau$	67
11.2 不同磁场方向下的 $\rho_{xx}\tau$	68
11.3 固定截面的等能线图	69
11.4 磁场下倒空间以及实空间的电子运动轨迹	71
11.5 磁电阻的各向异性	72
11.6 精度控制说明	75
12 朗道能级计算	77
12.1 磁超胞的边界态	78
12.2 计算 HB 图像	80
12.2.1 精确对角化	80
12.2.2 Lanczos 方法	82
12.3 不同 K 点的 HB 图像	83
13 转角石墨烯	87
13.1 如何使用”tgtbgen”生成扭曲石墨烯系统的晶体结构和紧束缚模型?	87
13.2 Wilson 环、紧束缚模型的能带展开	89
13.3 Wilson 环 (瓦尼尔中心荷)	89
13.4 能带展开	90
14 能带展开与矩阵元效应	92
14.1 基本思想	92
14.2 Graphene 的矩阵元效应	92
14.3 TBG 体系的能带展开与矩阵元效应	95
15 Haldane 模型	98
15.1 一般绝缘体	98
15.2 Chern 绝缘体	103
15.3 Gapless 半金属	105

16 拓扑超导体	107
16.1 3D TI 模型实现 2D 拓扑超导	109
16.2 Bi ₂ Se ₃ 实现 2D 拓扑超导	119
16.3 SnTe 实现 2D 拓扑超导	121

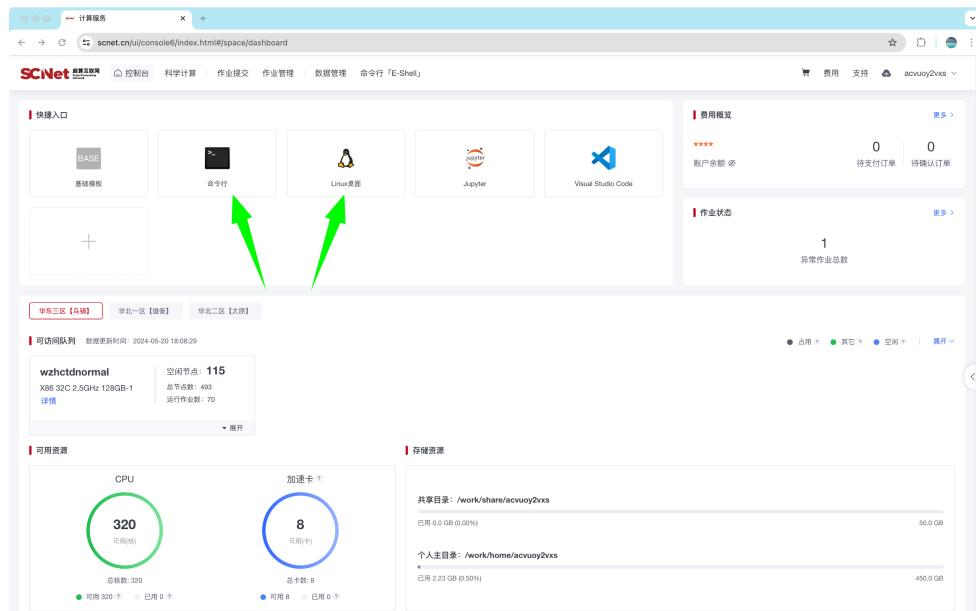
1 前期准备

登陆曙光服务器及准备 WannierTools 培训资料

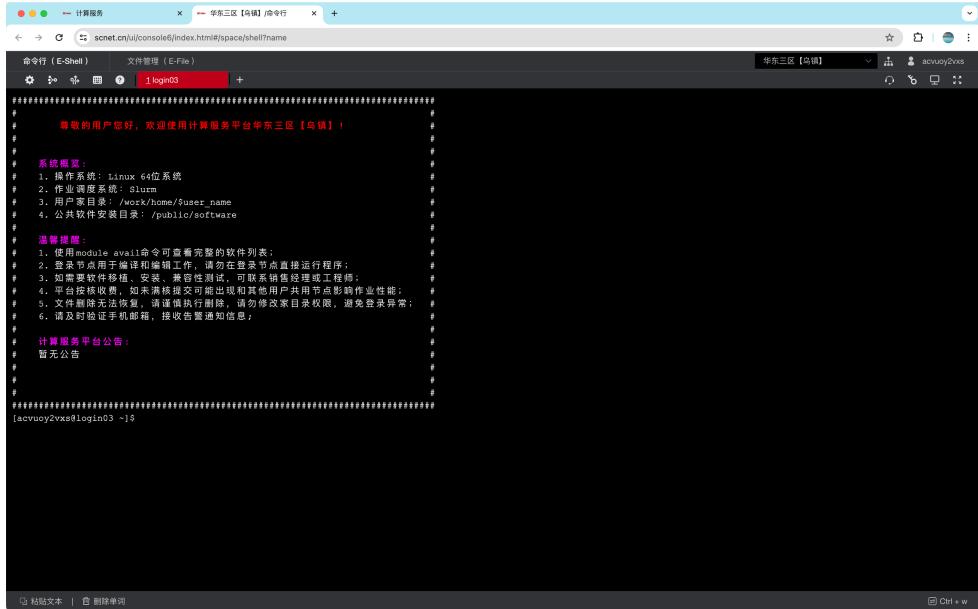
1. 登陆曙光服务器<https://www.scnet.cn>, 点击右上角登陆, 输入注册时的手机号和密码(或者验证码登录)登录。



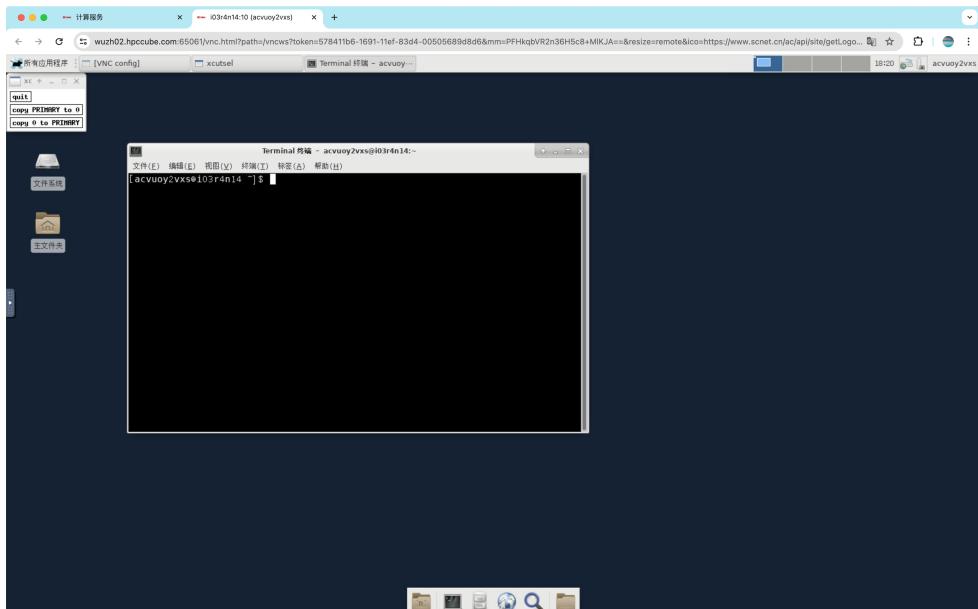
2. 登陆完成后, 登陆完之后点击右上角控制台, 将会看到如下界面, 点击命令行或者 Linux 界面



3. 点击命令行将会看到如下界面



4. 点击 Linux 界面将会看到如下界面。如果没有弹出这个页面，请看一下地址栏右侧是否拦截了这个窗口。



5. 在您当前的主目录 ~/ 下，执行如下命令，

```
1 $ ssh login03
2 $ cd ~
3 $ cp -r /tmp/wt2024 .
4 $ cd wt2024
5 $ source env.sh
```

文件夹 `wt2024/`下存放了运行 `WannierTools` 和 `Wannier90` 编译后的程序 `bin/wannier90.x`, `bin/wt.x` 和在曙光集群上提交任务所需要的脚本 `sub-w90.slurm` 和 `sub-wt.slurm` 以及 `WannierTools` 的 examples。

```
$ ls  
bin examples env.sh sub-w90.slurm sub-wt.slurm
```

接下来，您就可以提交任务运行 WannierTools 的例子了。比如

```
1 # 进入到某个例子的目录中  
2 $ cd ~/wt2024/examples/Graphene  
3 # 准备集群提交任务的脚本  
4 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .  
5 # 准备WannierTools的输入文件  
6 $ cp wt.in-bands wt.in  
7 # 提交任务  
8 $ sbatch sub-wt.slurm  
9 # 查看排队情况  
10 $ squeue  
11 # 杀掉任务 任务id为23132132的任务  
12 $ scancel 23132132  
13 # 查看WannierTools的运行情况  
14 $ tail WT.out
```

2 软件安装

在安装之前，请先确保系统满足如下条件：

- Fortran 编译器 (gfortran 或者 ifort)
- LAPACK 和 BLAS 库（推荐 IntelMKL）
- MPICH(可选)
- ARPACK(可选)

如果不确定使用的 fortran 编译器，可以在命令行输入对应的编译命令，例如

```
1 $ mpif90 --version
```

将会显示

```
1 GNU Fortran (GCC) 11.2.1 20210728 (Red Hat 11.2.1-1)
2 Copyright (C) 2021 Free Software Foundation, Inc.
3 This is free software; see the source for copying conditions. There is NO
4 warranty; not even for MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE.
```

则使用的是 gfortran 编译器，版本为 11.2.1 20210728。

2.1 LAPACK 和 BLAS 库安装

1. LAPACK 下载地址<http://www.netlib.org/lapack/>，BLAS 库包含在 LAPACK 文件夹中，无需另外下载。(如果系统已经有 IntelMKL 则可跳过，IntelMKL 已经集成 LAPACK 和 BLAS 库)
2. 安装编译（默认使用 gfortran，使用 ifort 需在 make.inc 中将编译器改为 ifort。make -j8 为并行编译，如果中途报错，多运行几次即可）

```
1 $ tar -zxvf lapack-3.12.0.tar.gz
2 $ cd lapack-3.12.0
3 $ cp make.inc.example make.inc
4 $ make -j8
```

3. 如果编译成功，则在 lapack-3.12.0 目录下会生成我们所需的 libblas.a 和 liblapack.a 文件

2.2 ARPACK 安装

1. ARPACK 下载链接<https://github.com/opencollab/arpacck-ng> (如果不涉及转角体系计算以及使用稀疏格式的哈密顿矩阵进行朗道能级计算，就可以不安装 ARPACK)。
2. 安装编译，默认使用 gfortran 编译，如果没有 sudo 权限，需要在把 configure 文件第 581 行存储生成库文件的地址修改一下。

```
1 $ unzip arpack-ng.zip
2 $ cd arpack-ng-master
3 $ sh bootstrap
4 $ ./configure
5 $ make all install
```

如果使用 ifort, 第二条命令改为

```
1 $ CXX=icx CC=icx FC=ifort F77=ifort ./configure
```

3. 如果编译成功, 则会在存储库文件的地址下看到我们需要的 libarpack.so 等动态库文件, 接着将此目录添加到环境变量 LD_LIBRARY_PATH 即可, 即加入到.bashrc 文件的最后。

```
1 export LD_LIBRARY_PATH=/path/to/your/arpack-ng-master/lib:$LD_LIBRARY_PATH
```

2.3 WannierTools 安装

1. 首先下载最新版本的 WannierTools, 有两种方式下载:

1). 通过这个网址下载具有版本号的版本

https://github.com/quanshengwu/wannier_tools/releases

2). 通过 git 命令下载最新的正在开发的版本

```
1 $ git clone https://github.com/quanshengwu/wannier_tools.git
```

2. 接下来, 进入 wannier_tools/src 目录, 并选择编辑 Makefile。目前, 我们提供了四个典型的 Makefile, 分别是 gfortran、mpi+gfortran、ifort 和 mpi+ifort。您需要将 ARPACK 库以及 IntelMKL 库或者 BLAS、LAPACK 库的路径设置为您系统中的路径。

3. 对于使用 mpi 编译器的情况, 您需要打开编译标志 -DMPI, 对于使用 ARPACK 的情况, 您需要打开编译标志 -DARPACK。

4. 执行 make (或 make -j8) 进行编译

5. 编译完成后, 二进制文件 wt.x 将会被复制到 wannier-tools/bin/ 目录下。您可以将此路径添加到系统环境变量 PATH 中, 方法是将以下行添加到您的主目录下的 .bashrc 文件中的最后添加一行:

```
1 export PATH=/path/to/your/wannier-tools/bin:$PATH
```

例 I: mpi+ifort+arpack 编译

```
1 OBJ = ...
2
3 #=====
4 # compiler For Linux with ifort
5 #=====
6 F90 = mpiifort -fpp -DMPI -DARPACK
7 WFLAG = -nogen-interface
8 OFLAG = -O3
9 FFLAG = $(OFLAG) $(WFLAG)
10 LFLAG = $(OFLAG)
11
12 #=====
13 # ARPACK library (optional)
14 #=====
```

```
15  
16 # dynamic linking  
17 ARPACK_NG_ROOT = /path/to/your/arpack-ng  
18 ARPACK = -L${ARPACK_NG_ROOT}/lib -larpack  
19 LIBS = ${ARPACK} -L/${MKLROOT}/lib/intel64 -lmkl_core -lmkl_sequential -  
    lmkl_intel_lp64 -lpthread  
20  
21 # static linking  
22 # ARPACK = #/path/to/your/arpack/libarpack_ifort.a  
23 ...  
24  
25 main : $(OBJ)  
26 ...
```

例 II: mpi+ifort 编译, 没有调用 ARPACK 库

```
1 OBJ = ...  
2  
3 #####  
4 # compiler For Linux with ifort  
5 #####  
6 F90 = mpiifort -fpp -O3 -DMPI  
7 WFLAG = -nogen-interface  
8 OFLAG = -O3  
9 FFLAG = $(OFLAG) $(WFLAG)  
10 LFLAG = $(OFLAG)  
11  
12 # dynamic linking  
13 LIBS = -L/${MKLROOT}/lib/intel64 -lmkl_core -lmkl_sequential -lmkl_intel_lp64 -  
    lpthread  
14 ...  
15  
16 main : $(OBJ)  
17 ...
```

3 构造高质量的 Wannier 函数

在我们从第一原理计算中获得自洽电荷密度后，高质量的 Wannier 函数（WFs）对于物理性质计算非常有用。然而，对于初学者来说，获得好的 WF 不容易。这里我们想介绍一种利用第一原理软件包和软件 Wannier90 构建高质量 Wannier 函数的标准方法。这里我们不关注构建最大局域 Wannier 函数（MLWF）。我们只想基于 WF 构建一个良好的紧束缚模型，能够在我们感兴趣的能量范围内重现能带结构。以下是高质量 WF 的四个标准。

- 1. 完美拟合您感兴趣的能量范围内的 DFT 能带。
- 2. 保持原子轨道对称性。
- 3. 具有很好的局域化。
- 4. WF 数量尽可能少。

达到四个标准需要三个重要步骤。

- 1. 选择投影算符。
- 2. 选择解纠缠能量窗口。
- 3. 选择冷冻能量窗口。

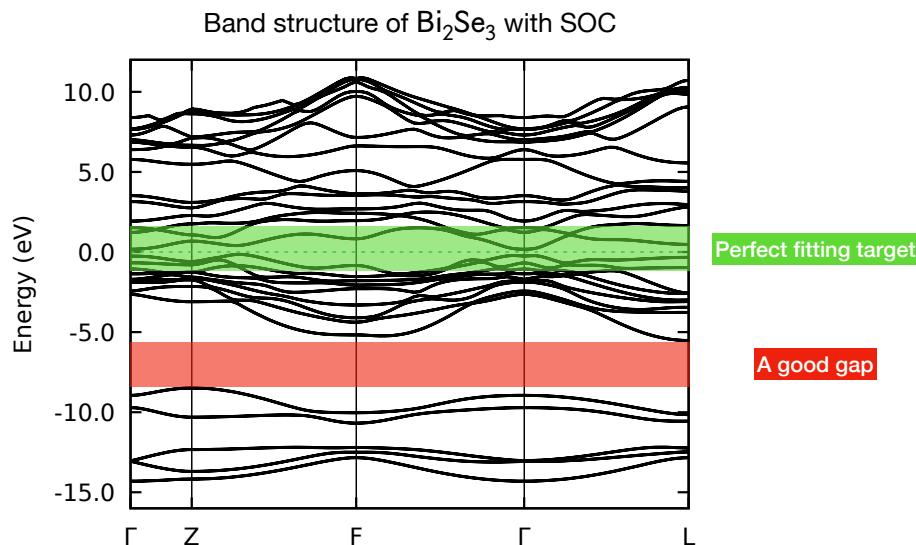
我们以 Bi_2Se_3 为例。在这里我们考虑了自选轨道耦合 (SOC) 效应。

参考文献

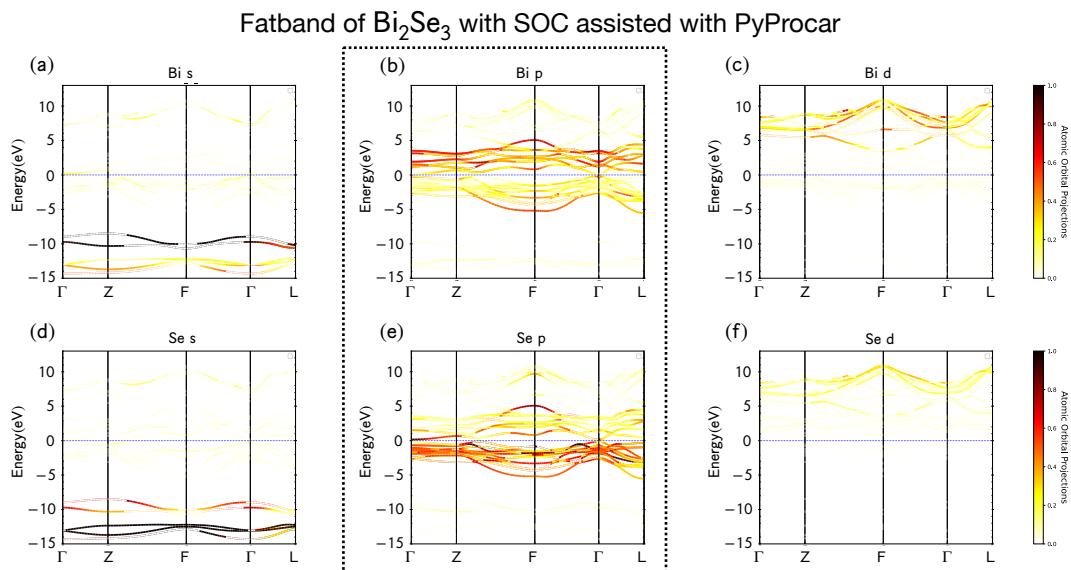
1. WannierTools: An open-source software package for novel topological materials, QS Wu, SN Zhang, HF Song, M Troyer, AA Soluyanov, Computer Physics Communications, 224: 405-416 (2018) [1]
2. Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface, Haijun Zhang, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, Xi Dai, Zhong Fang, Shou-Cheng Zhang, Nature Physics 5, 438–442 (2009) [2]

3.1 选择投影算符

我们先进行能带分析。图3.8是考虑 SOC 的 Bi_2Se_3 的能带结构。绿色阴影部分是我们关心的能量范围。我们想要构建一个紧束缚模型，它可以很好地重现该感兴趣的能带。然而，这些频段与下方和上方的其他频段相连。值得注意的是，-8.4eV 和 -6eV 之间存在很大差距。这是一个好兆头，因为该间隙下方的带没有与我们感兴趣的带杂交。在这种情况下，间隙下方的那些带不需要在我们的紧密结合模型中呈现。最终，WFs 的数量减少。它满足第四个标准。

图 3.1: 在考虑 soc 的情况下 Bi_2Se_3 的能带

在初步了解能带结构后，我们仍然需要弄清楚感兴趣的能量范围内能带的特征是什么，并找出哪些能带与它们高度杂化。此步骤称为“胖带分析”，我们需要将原子轨道投影到布洛赫波函数上，这称为投影权重。我们将布洛赫波函数投影到 Bi 和 Se 的 s、p、d 原子轨道上。结果如图3.7所示。图3.7 (a) 和 (d) 显示 [-15, -8]eV 之间的能带主要由 Bi 和 Se 的 s 轨道决定。图3.7(c) 和 (f) 显示 Bi 和 Se 的 d 轨道位于 5eV 以上。图 3.7(b) 和 (e) 显示能量范围 [-6, 5] eV 主要由 Bi 和 Se 的 p 轨道决定。我们感兴趣的能量范围（图 3.8 中绿色阴影所示）就在这个能量范围内。尽管 p 和 d 轨道之间在 4eV 左右存在能带重叠，但我们仍然可以忽略 d 轨道的贡献，因为它们与 p 轨道的杂化程度不高，并且可以通过能带结构的一些变形而移开。

图 3.2: Bi_2Se_3 的胖带图。虚线框是我们的选择区域。Bi 的 p 轨道和 Se 的 p 轨道被用作投影算符。该图使用开源软件包 PyProcar 绘制。

经过“胖带分析”后，我们选择 Bi 和 Se 的 p 轨道作为 WFs 的投影轨道。那么就会有 $2*((2 \text{ 个 Bi 原子})*(3 \text{ 个 p 轨道})+(3 \text{ 个 Se 原子})*(3 \text{ 个 p 轨道}))=30 \text{ 个原子轨道}$ ，总共 30 个 WFs。

3.2 选择解纠缠能量窗 dis_win

解纠缠窗口是提取目标谱带的窗口。有两个规则可以设置此窗口。1) 不仅目标频段应包含在该窗口中，而且投影轨道的主要权重也应落入该窗口中。2) 该窗口应尽可能小，以减少计算成本。图 3.3 给出了标记为彩色阴影的窗口的三种选择。图 3.3(a) 是正确的选择。图 3.3(b) 是一个非常糟糕的选择，因为缺少一个带（用虚线圆圈标记），其权重来自投影算符（见图 3.7b 和 4e）。如果缺少这个权重，那么 WFs 的分布可能会变大。图 3.3(c) 显示了一个不好的选择，因为它包含不包含投影仪特征的不必要的带。

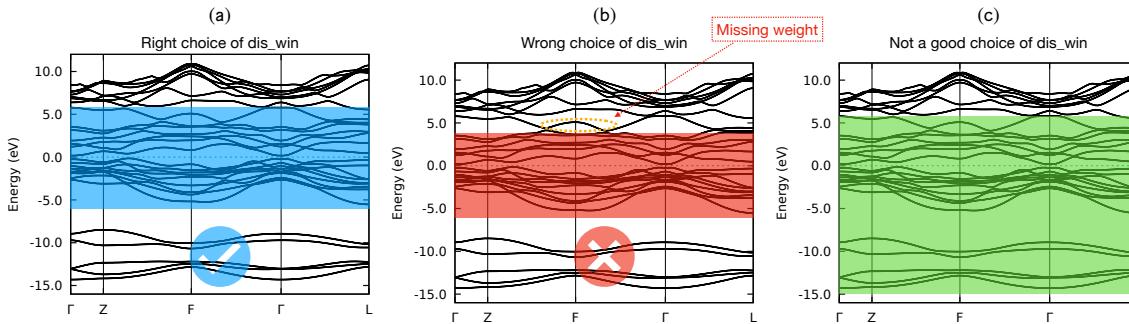


图 3.3: Bi_2Se_3 的解缠窗口 dis_win 的选择。(a) 是正确的选择。(b) 是错误的选择，因为缺少一个属于 Bi 和 Se 的 p 轨道的权重。(c) 也不是一个好的选择，因为在不必要的能量窗口 [-16, -8]eV 内几乎没有来自投影算符的权重

3.3 选择冻结能量窗口 froz_win

冻结窗口是用于解纠缠过程的窗口。布洛赫状态不会与此窗口之外的其他带一起旋转。选择 froz_win 有三个规则。1) 在 froz_win 中，除了投影轨道之外，不应该有来自其他轨道的权重（贡献）。2) 纯粹来自投影轨道的能量范围应包含在 froz_win 中。3) froz_win 应尽可能大。图 3.4 显示了三个选择。(a) 是一个不错的选择，因为它满足三个规则。(b) 是一个错误的选择，因为它违反了第一条规则。(c) 是正确的选择，但不是完美的选择，因为它不遵循规则 2 和 3。

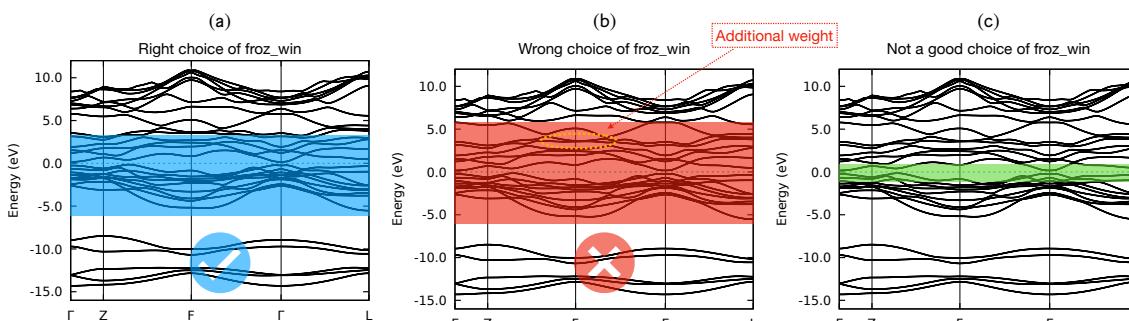


图 3.4: Bi_2Se_3 的冻结窗口 froz_win 的选择。(a) 是一个好的选择。(b) 是错误的选择，因为它包含来自 Bi 的 d 轨道的能带，而这些轨道不是投影算符。(c) 不是最佳选择，因为它应该包含更多纯粹来自投影算符的能带。

3.4 结果

经过上述过程后，您将可能性很高得获得非常好的 WFs。图 3.5 显示了冻结窗口在 3 个选择下 DFT（黑线）和 Wannier 插值（红点）之间的能带结构比较。在 (a) 图中，它显示出在费米面附近几乎完美的一致性，(b) 图我们发现 Wannier 包含了来自 Bi 的 d 轨道的能带，这与我们在 Wannier90.win 文件中设置的投影轨道不相符。(c) 图在不是最佳选择点情况下，我们发现 DFT 和 Wannier 重合得不是特别好。

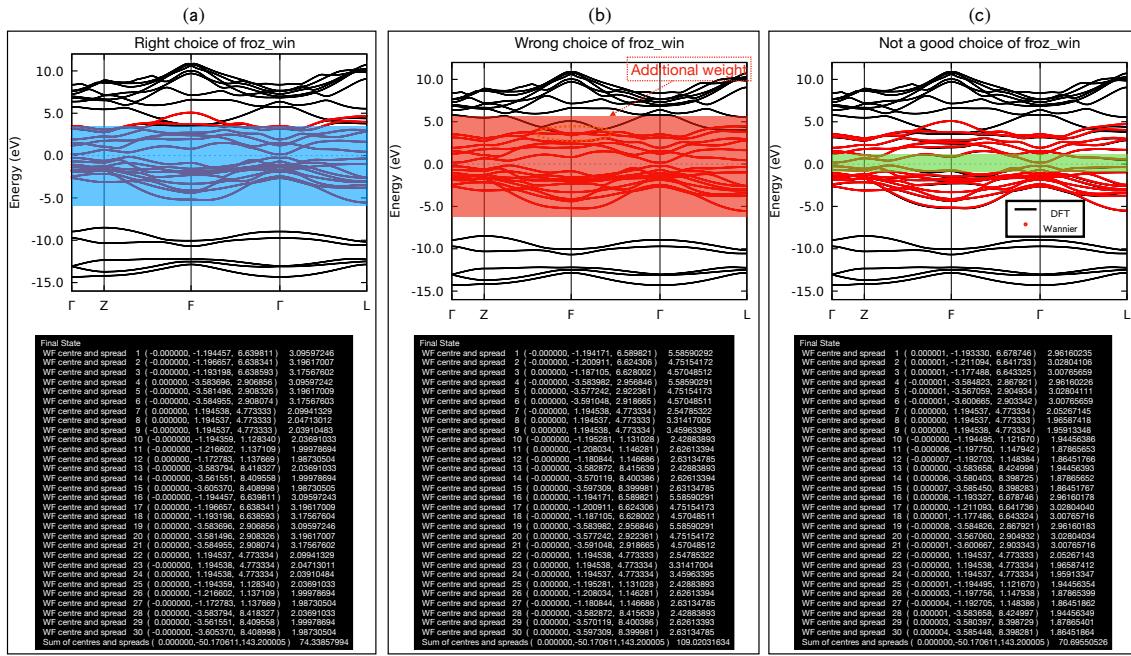


图 3.5: DFT (黑线) 与 Wannier 插值 (红点) 的能带结构对比和对应的 wannier90.wout 中所对应的 spread 的值。(a) 在一个好的 froz_win 选择下, 我们可以看到 DFT 与 Wannier 在费米面附近能够基本重合。(b) 在错误的选择下, 我们发现 Wannier 包含了来自 Bi 的 d 轨道的能带。(c) 在不是最佳选择点情况下, 我们发现 DFT 和 Wannier 重合得不是特别好。每个图对应 spread 值代表了这个图 Wannier 函数构造的局域性, 可以作为构造 Wannier 函数是否高质量的参考之一, 一般来说, 值越小, 构造的 Wannier 函数越好 (但是有时候当你选择的窗口过小的时候, spread 值也会变小, 所以这个值只能作为参考之一)。

3.5 讨论

最后, 我们想分享一些其他的技巧。

- 1. dis_num_iter 最好不要设置太大, 大多数情况下 200 就足够了。如果它太大, 那么布洛赫带可能会过度混合。
- 2. 如果您希望得到类似原子的 Wannier 函数, 建议将 num_iter 设置为 20 以下。较大的 num_iter 值会导致 Wannier 函数的混合, 使得输出的 Wannier 函数不像原子轨道。
- 3. 如果您发现 Wannier 函数的扩展非常大或者在 Wannier 插值带中出现一些波动, 请尝试仔细调整投影算符、dis_win 和 froz_win。

特别提示 VASP 用户:

如果您要为具有自旋轨道耦合 (SOC) 系统构建 Wannier 函数, 请在 INCAR 文件中设置 “ISYM=-1”, 如果存在 “LWANNIER90 = T”。由于 VASP 在将自旋波函数从一个 k 点复制到对称相关的 k 点时存在一些问题, 因此关闭这个对称性标志后, Wannier 函数的质量将显著提高。

3.6 Bi_2Se_3 构造 Wannier 函数具体操作

下面是 Bi_2Se_3 构造 Wannier 函数在 Wanniertools 中的一些具体操作。

【注: 在本次培训我们没有在集群上安装 VASP, 只安装了 wannier90, 相关 VASP 的计算无法运行, 不过我们已经准备了 Wannier90 相关的输入文件, 可以直接运行下面步骤中的 Wannier90 计算。若要运行 VASP 相关部分, 可以在自己已经安装了 VASP 的电脑上运行】

► 进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/w90_Bi2Se3
```

你可以看到有 3 个文件夹，为 scf、band 和 vaspwannier，分别对应着自洽、能带和 wannier 函数构造的过程。我们先进入 scf 文件夹进行自洽计算，

► VASP-scf 计算

```
1 $ cd scf
2 $ mpirun vasp_ncl
```

然后进入 band 文件夹，并把 scf 文件夹的 CHGCAR 和 WAVECAR 拷贝进入 band 文件夹加快能带计算，然后可以运行 band 文件夹中准备好的 fatband.py 来画出 fatband 图。然后根据画出的 fatband 图来选取所需要的轨道和能量窗口。我们在这个文件夹里已经放了能带数据文件 BAND.dat 和对应的画图脚本 bulkek.gnu0，我们也可以直接用画图脚本来画出对应的能带图，

► VASP-band 计算

```
1 $ cd ../band
2 $ cp ../scf/CHGCAR ../scf/WAVECAR .
3 $ mpirun vasp_ncl
4 $ python fatband.py
5 $ gnuplot bulkek.gnu0
```

在 vaspwannier 文件夹中，分别有 right_choice_froz_win、wrong_choice_froz_win 以及 not_a_good_choice_froz_win 这三个文件夹，每一个文件夹里含有 VASP 的输入文件 INCAR、KPOINTS、POSCAR、POTCAR 和 wannier90.win。我们将 scf 文件夹的 CHGCAR 和 WAVECAR 拷贝进来加快运算，然后在当前目录运行 vasp，这里我们以 right_choice_froz_win 这个文件夹为例：

► VASP-Wannier 计算

```
1 $ cd ../../vaspwannier/right_choice_froz_win
2 $ cp ../../scf/CHGCAR ../../scf/WAVECAR .
3 $ mpirun vasp_ncl
```

就可以得到 wannier90.mmn、wannier90.amn 和 wannier90.eig 等其他文件。然后继续在当前目录运行 wannier90 就可以得到 wannier90.wout 和 wannier90_hr.dat 等其他文件。同时我们也准备了画图脚本 bulkek-compare-DFT-wannier.gnu0，用来比较 DFT 和 Wannier 画出来的能带差异，用来检验你构造的 Wannier 函数是否合理。

► Wannier90 计算

```
1 $ cp ~/wt2024/sub-w90.slurm .
2 $ sbatch sub-w90.slurm
3 $ gnuplot bulkek-compare-DFT-wannier.gnu0
```

3.7 Cu 构造 Wannier 函数具体操作

下面是 Cu 构造 Wannier 函数在 Wanniertools 中的一些具体操作。与上面 Bi_2Se_3 操作不同的是，这里我们不断增加构造 Cu 的 Wannier 轨道数量，观察增加轨道数量后，Wannier 构造的能带与原能带的比较。

► 进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/w90_Cu
```

你可以看到有 3 个文件夹, 为 scf、band 和 vaspwannier, 分别对应着自洽、能带和 wannier 函数构造的过程。我们先进入 scf 文件夹进行自洽计算,

► VASP-scf 计算

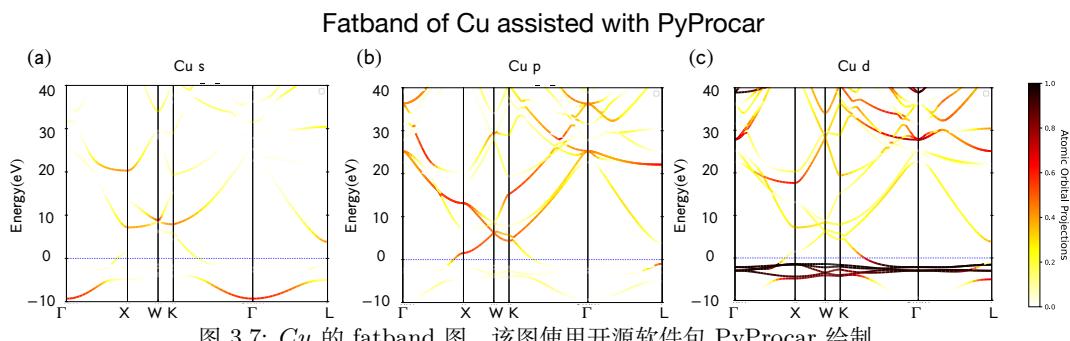
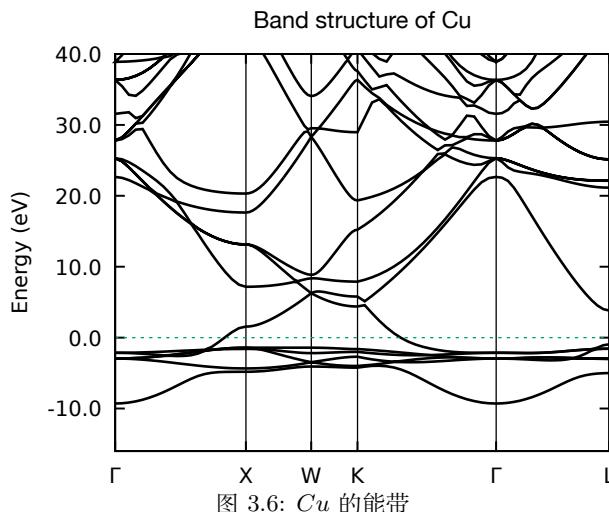
```
1 $ cd scf
2 $ mpirun vasp_std
```

然后进入 band 文件夹, 并把 scf 文件夹的 CHGCAR 和 WAVECAR 拷贝进入 band 文件夹加快能带计算, 然后可以运行 band 文件夹中准备好的 fatband.py 来画出 fatband 图。然后根据画出的 fatband 图来选取所需要的轨道和能量窗口。我们在这个文件夹里已经放了能带数据文件 BAND.dat 和对应的画图脚本 bulkek.gnu0, 我们也可以直接用画图脚本来画出对应的能带图,

► VASP-band 计算

```
1 $ cd ../band
2 $ cp ../scf/CHGCAR ../scf/WAVECAR .
3 $ mpirun vasp_std
4 $ python fatband.py
5 $ gnuplot bulkek.gnu0
```

在这里我们可以得到 Cu 的能带图和 fatband 图:



在 vaspwannier 文件夹中, 分别有 d、s+d 以及 s+p+d 这三个文件夹, 每一个文件夹里含有 VASP 的输入文件 INCAR、KPOINTS、POSCAR、POTCAR 和 wannier90.win。我们将 scf 文件夹的 CHGCAR 和 WAVECAR 拷贝进来加快运算, 然后在当前目录运行 vasp, 这里我们以 s+p+d 这个文件夹为例:

► VASP-Wannier 计算

```
1 $ cd ../../vaspwannier/s+p+d
2 $ cp ../../scf/CHGCAR ../../scf/WAVECAR .
3 $ mpirun vasp_std
```

就可以得到 wannier90.mmn、wannier90.ann 和 wannier90.eig 等其他文件。然后继续在当前目录运行 wannier90 就可以得到 wannier90.wout 和 wannier90_hr.dat 等其他文件。同时我们也准备了画图脚本 bulkek-compare-DFT-wannier.gnu0，用来比较 DFT 和 Wannier 画出来的能带差异，用来检验你构造的 Wannier 函数是否合理。

► Wannier90 计算

```
1 $ cp ~/wt2024/sub-w90.slurm .
2 $ sbatch sub-w90.slurm
3 $ gnuplot bulkek-compare-DFT-wannier.gnu0
```

在这里你会得到在不同数量的 Wannier 轨道下与原能带的对比图，比较下图你会发现，当我们增加 Wannier 轨道数量后，费米面附近的能带与原能带的差异会越来越小。

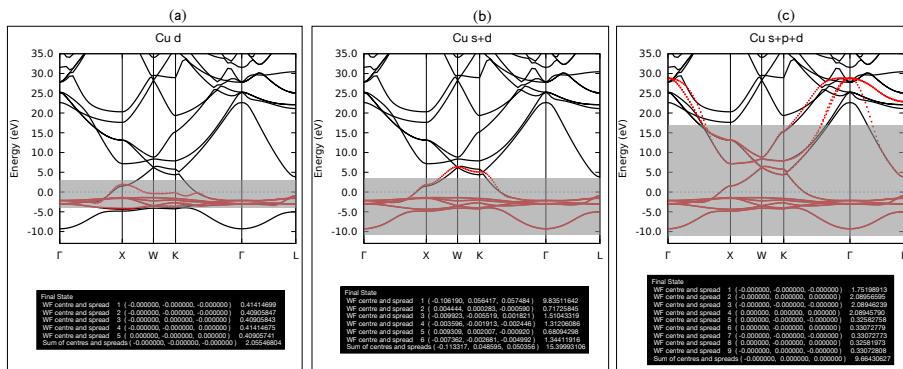


图 3.8: DFT (黑线) 与 Wannier 插值 (红点) 的能带结构对比和对应的 wannier90.wout 中所对应的 spread 的值。(a)、(b) 和 (c) 图分别代表只用 d 轨道、用 s、d 轨道和用 s、p、d 轨道来构造的 Wannier 函数计算出的能带图。我们发现 (b) 图的第一行 spread 非常大，因为这一段窗口区间含有 p 轨道成分，所以导致这一个 spread 值偏大。通过上图比较我们会发现，增加 Wannier 轨道数量后，费米面附近的能带与原能带的拟合会越来越好。

接下来，你就可以用生成的 wannier90_hr.dat 和 WannierTools 在你感兴趣的领域进行探索。

4 Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) 模型

在本节中，我们将使用简单 Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) 模型来讨论能带反转和不同种类的能带杂化对拓扑数的影响。

参考文献

- Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells, M Konig, S Wiedmann, C Brune, A Roth, H Buhmann, LW Molenkamp, XL Qi, SC Zhang, Science, 318(5851): 766-770 (2007) [3]

► 两个办法获得教程输入文件:

- 直接从集群的/tmp/目录下把本教程拷贝到你的 home 目录下:

```
1 $ cp -r /tmp/wt2024 ~
```

- 如果你从别处看到这个教程，可以直接从 github 上下载教程:

```
1 $ cd ~
2 $ git clone https://github.com/quanshengwu/wannier_tools.git
```

本部分对应的目录为

`~/wt2024/examples/BHZ-model`

和

`~/wt2024/examples/Half-BHZ-model`

4.1 BHZ 模型介绍

首先介绍一下 BHZ 模型，BHZ 模型是一个用来描述能带反转会给我们带来非平庸拓扑的最简单的玩具模型。当下面公式中 $\Delta = 0$ 时，就是原始的 BHZ 模型。

$$\text{BHZ model : } \mathbf{H} = \begin{pmatrix} s \uparrow & p \uparrow & s \downarrow & p \downarrow \\ M - Bk^2 & \Delta + A(k_x + ik_y) & & \\ \Delta + A(k_x - ik_y) & -M + Bk^2 & M - Bk^2 & \Delta + A(-k_x + ik_y) \\ & & \Delta + A(-k_x - ik_y) & -M + Bk^2 \end{pmatrix} \quad (1)$$

公式中 $M * B$ 的符号控制是否反带， $M * B > 0$ 对应反带， $M * B < 0$ 对应不反带。 Δ 控制 trivial hybridization (平庸杂化)， A 控制非平庸杂化。

4.2 Half-BHZ 模型研究

为了更好的看出这些参数是如何调控能带拓扑，我们只考虑一半的 BHZ 模型 (Half-BHZ)。由于 Half-BHZ 模型没有时间反演对称性，所以对应的拓扑数是 Chern 数。

$$\text{Half-BHZ model : } H = \begin{pmatrix} s \uparrow & p \uparrow \\ M - Bk^2 & \Delta + A(k_x + ik_y) \\ \Delta + A(k_x - ik_y) & -M + Bk^2 \end{pmatrix} \quad (2)$$

目前 WannierTools 只能处理 tight-binding (TB) 模型，因此我们需要将 kp 模型变成 TB 模型。下面是一种常见的做法：

$$k \rightarrow \sin(k) \quad (3)$$

$$k^2 \rightarrow 2(1 - \cos(k)) \quad (4)$$

$$H_{mn}(R) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k H_{mn}(k) e^{-ikR} \quad (5)$$

为了探索杂化和反带对能带拓扑的影响，我们将研究一下四种情况（见表格1）

表 1: 四种杂化和反带的组合

Case	I	II	III	IV
反带	$M * B < 0$ (No)	$M * B > 0$ (Yes)	$M * B < 0$ (No)	$M * B > 0$ (Yes)
杂化	$A = 0$ (trivial)	$A = 0$ (trivial)	$\Delta = 0$ (non-trivial)	$\Delta = 0$ (non-trivial)
能带拓扑	trivial	trivial	trivial	non-trivial

利用这四种参数，我们计算了体能带，边界态和 Wilson loop (WCC)，见图4.1。边界态和 WCC 谱中我们可以看出，只有能带反转和 non-trivial 的杂化对应的 case IV 才会有非平庸的能带拓扑。

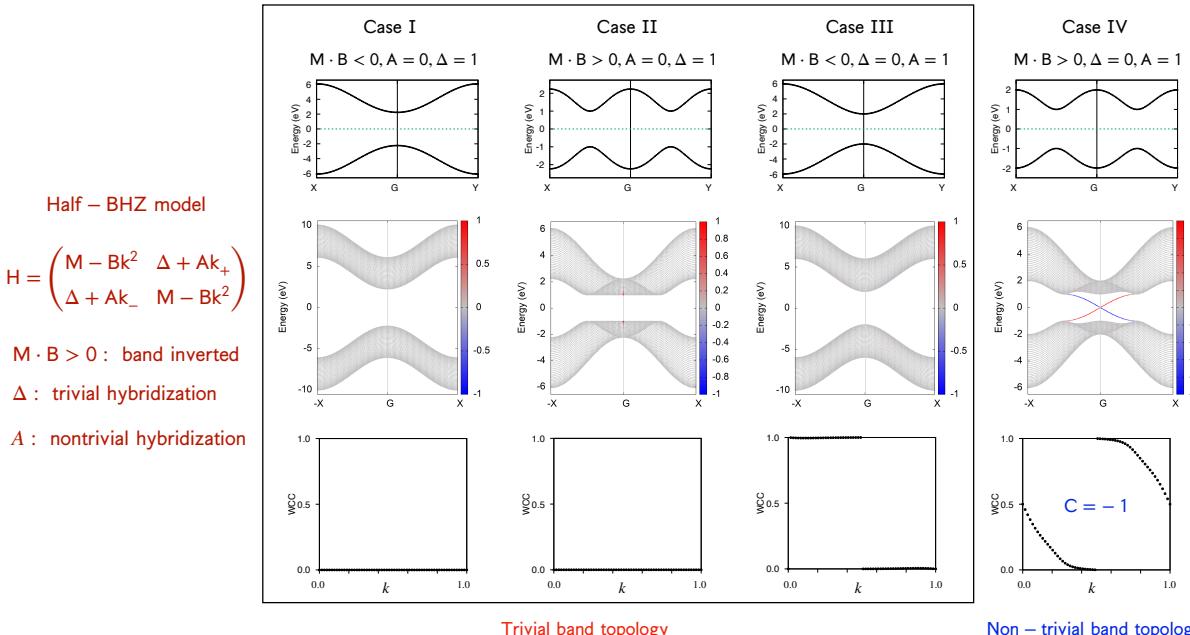


图 4.1: Half-BHZ 模型在 4 种参数组合下分别对应的能带，边界态和 Wilson loop 的结果。前三种参数对应的是平庸的能带拓扑，只有第四种情况下，同时有能带反转和非平庸的杂化才能给我们带来非平庸的能带拓扑。

为了画出上图，我们准备了一个 Python 程序来生成 Half-BHZ 模型的 TB 模型，存储成 HalfBHZ_hr.dat 文件。下面是实操代码：

```
1 # 进入工作目录
2 $ cd ~/wt2024/examples/Half-BHZ-model
```

```

3
4 # 1. You need to generate the wannier TB model HalfBHZ_hr.dat
5 $ python3 Half_BHZ_hr_gen-case1.py
6
7 #2. run WannierTools binary wt.x
8 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
9 $ sbatch sub-wt.slurm
10
11 #3. get the plots with gnuplot version>5.4
12 $ gnuplot bulkek.gnu
13 $ gnuplot slabek.gnu
14 $ gnuplot wcc.gnu
15 $ gnuplot sigma_ahc.gnu
16 $ gnuplot Berrycurvature.gnu
17
18 # use "ll -tr" to check the latest files
19 $ ll -tr

```

4.3 Full BHZ 模型研究

上一节告诉我们将能带反转和非平庸的杂化才能给我们带来非平庸的能带拓扑。我们知道 BHZ 模型只是 Half-BHZ 模型的考虑了自旋上下和时间反演后的模型。因此，BHZ 的非平庸的能带拓扑条件和之前一样的。为此我们准备了两个例子，一个是 Case I: $\Delta = 0, M = 2, B = 1, M * B > 0, A = 1$ ，另一个是 Case II: $\Delta = 0.5, M = 2, B = 1, M * B > 0, A = 1$ 。后者 trivial 和 nontrivial hybridization 项都存在。我们计算了两种情况下的能带结构、边界态、Wilson loop、spin Hall conductivity (SHC)。

为此我们准备了两个 Python 程序用来生成 TB 模型，以及准备了 WannierTools 输入文件 wt.in。

wt.in 里头主要的控制参数有：

```

1 !> flags to control different functionalities
2 &CONTROL
3 BulkBand_calc      = T      ! bulk band structure
4 SlabBand_calc      = T      ! slab band structure
5 SHC_calc           = T      ! spin Hall conductivity
6 Wilsonloop_calc   = T      ! Wilson loop
7 /
8
9 &SYSTEM
10 SOC = 1            ! soc
11 E_FERMI = 0         ! e-fermi
12 NumOccupied = 2     ! number of filling bands for Wilson loop calculation
13 /
14
15 &PARAMETERS
16 Fermi_broadening = 0.001    ! infinite small value, like broadening
17 iso_energy = 0.0          ! energy for calculate Fermi Arc
18 OmegaNum = 400           ! omega number

```

```

19 OmegaMin = -8.0      ! energy interval
20 OmegaMax =  8.0      ! energy interval
21 Nk1  = 60            ! number k points
22 Nk2  = 60            ! number k points
23 Nk3  = 2             ! number k points
24 /
25
26 SURFACE      ! edge states
27 0 0 1
28 1 0 0
29 0 1 0
30 ...

```

接下来可以直接运行程序：

```

1 # 进入工作目录
2 $ cd ~/wt2024/examples/BHZ-model
3
4 # 1. You need to generate the wannier TB model BHZ_hr.dat with python3 script and
   prepare wt.in
5 $ python3 BHZ_hr_gen-case1.py
6 $ cp wt.in-normal wt.in
7
8 #2. run WannierTools binary wt.x
9 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
10 $ sbatch sub-wt.slurm
11
12 #3. get the plots with gnuplot version>5.4
13 $ gnuplot bulkek.gnu
14 $ gnuplot slabek.gnu
15 $ gnuplot wcc.gnu
16 $ gnuplot sigma_shc.gnu
17
18 # use "ll -tr" to check the latest files
19 $ ll -tr

```

得到的结果如图4.2所示，能带反转很明显，有非平庸的 Dirac 锥表面态，Wilson loop 也是非平庸的，同时自旋霍尔效应在能隙中间也是量子化的。

如果你想看一下平庸杂化和非平庸杂化同时存在的时候，你可以学习 Case II：

► 练习：

```

1 # 进入工作目录
2 $ cd ~/wt2024/examples/BHZ-model
3
4 # 1. You need to generate the wannier TB model BHZ_hr.dat with python3 script and
   prepare wt.in
5 $ python3 BHZ_hr_gen-case2.py
6 $ cp wt.in-normal wt.in
7
8 #2. run WannierTools binary wt.x
9 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .

```

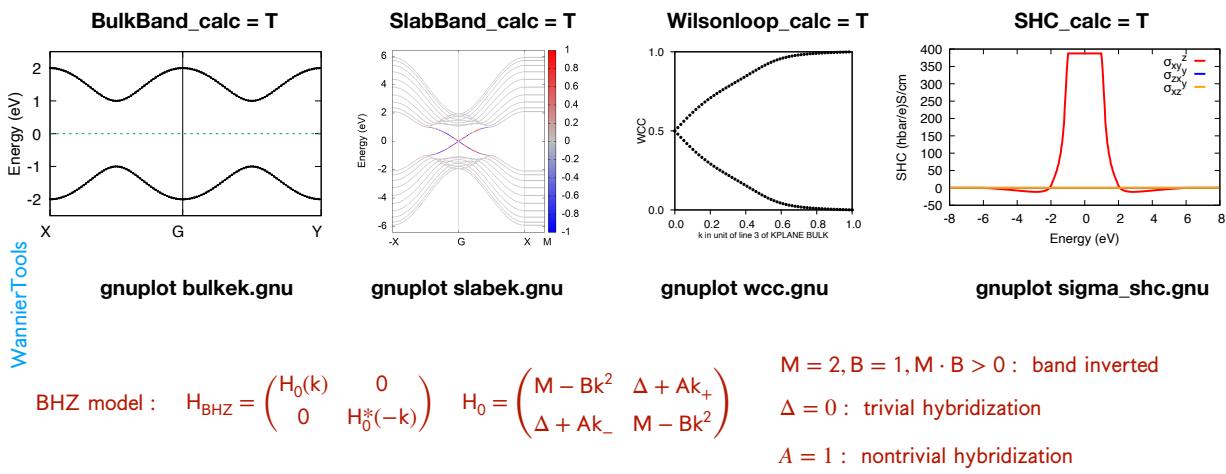


图 4.2: $\Delta = 0, M = 2, B = 1, M * B > 0, A = 1$ 参数下的 BHZ 模型使用 WannierTools 计算得到的能带、边界态、Wilson loop 和自旋霍尔电导的结果。

```

10 $ sbatch sub-wt.slurm
11
12 #3. get the plots with gnuplot version>5.4
13 $ gnuplot bulkek.gnu
14 $ gnuplot slabek.gnu
15 $ gnuplot wcc.gnu
16 $ gnuplot sigma_shc.gnu
17
18 # use "ll -tr" to check the latest files
19 $ ll -tr

```

得到的结果如图4.3所示，能带反转很明显，不过能带不再简并了；有非平庸的 Dirac 锥表面态，而且上（红色）、下（蓝色）表面的 Dirac 锥能量不再简并，Wilson loop 也是非平庸的，同时自旋霍尔效应在能隙中间也是量子化的。

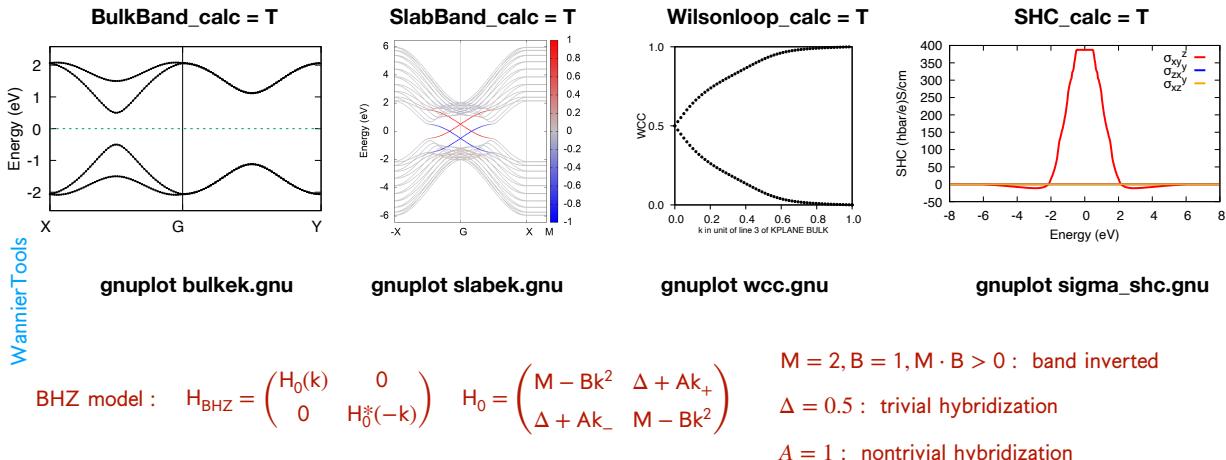


图 4.3: $\Delta = 0.5, M = 2, B = 1, M * B > 0, A = 1$ 参数下的 BHZ 模型使用 WannierTools 计算得到的能带、边界态、Wilson loop 和自旋霍尔电导的结果。

4.4 添加塞曼 (Zeeman) 效应

我们还可以在 WannierTools 中研究塞曼效应对 BHZ 模型的影响，塞曼效应会打破自旋简并。WannierTools 通过在紧束缚哈密顿量的对角项上加上一个随磁场方向的塞曼能，从而改变整个 H 。目前可以通过在 wt.in 的 SYSTEM namelist 上添加下列选项：

```

1 &SYSTEM
2 ...
3 Bx= 0, By= 0, Bz= 1      ! Bx By Bz, 只控制方向, 不管大小
4 Add_Zeeman_Field = T      ! 确定添加塞曼项
5 Zeeman_energy_in_eV = 0.5 ! in eV 添加塞曼能
6 /

```

对应的塞曼矩阵公式为：

$$H_z = \frac{1}{2} \text{Zeeman_energy_in_eV} * (\sigma_x * Bx + \sigma_y * By + \sigma_z * Bz) / \sqrt{Bx^2 + By^2 + Bz^2} \quad (6)$$

其中 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 为泡利矩阵，只作用在自旋上。

针对 BHZ 模型，我们准备了一个 WannierTools 输入文件 wt.in-with-zeeman，同时我们可以计算反常霍尔电导率 (AHC)。下面是实操步骤：

```

1 # 进入工作目录
2 $ cd ~/wt2024/examples/BHZ-model
3
4 # 1. You need to generate the wannier TB model BHZ_hr.dat with python3 script and
   prepare wt.in
5 $ python3 BHZ_hr_gen-case1.py
6 $ cp wt.in-with-zeeman wt.in
7
8 #2. run WannierTools binary wt.x
9 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
10 $ sbatch sub-wt.slurm
11
12 #3. get the plots with gnuplot version>5.4
13 $ gnuplot bulkek.gnu
14 $ gnuplot slabek.gnu
15 $ gnuplot wcc.gnu
16 $ gnuplot sigma_shc.gnu
17 $ gnuplot sigma_ahc.gnu
18
19 # use "ll -tr" to check the latest files
20 $ ll -tr

```

得到的结果如图4.4所示，能带反转很明显，不过能带的自旋上下简并被破除了；上下自旋分别对应有非平庸的 Dirac 锥表面态，而且上（红色）、下（蓝色）表面的 Dirac 锥能量不再简并；尽管时间反演被破坏了，但是 Wilson loop 也是非平庸的（可以思考为什么？）；同时自旋霍尔效应在能隙中间也是量子化的；反常霍尔电导不再是整个能量区间都是零。

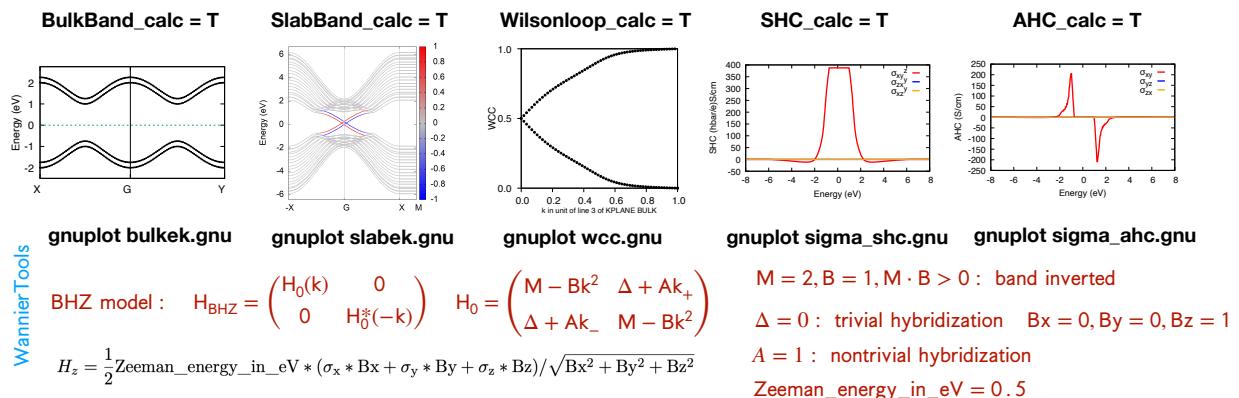


图 4.4: 考虑了塞曼效应后的 BHZ 模型使用 WannierTools 计算得到的能带、边界态、Wilson loop 和自旋霍尔电导的结果。对应的参数为 $\Delta = 0, M = 2, B = 1, M * B > 0, A = 1$, 塞曼场沿着 z 方向, 塞曼能为 0.5eV

5 拓扑绝缘体

在本节中，我们将要用 WannierTools 研究二维拓扑绝缘体 WSe₂ 和三维拓扑绝缘体 Bi₂Se₃。

参考文献

1. Observation of topologically protected states at crystalline phase boundaries in single-layer WSe₂. Miguel M. Ugeda, Artem Pulkin, Shujie Tang, Hyejin Ryu, Quan-sheng Wu, Yi Zhang, Dillon Wong, Zahra Pedramrazi, Ana Martín-Recio, Yi Chen, Feng Wang, Zhi-Xun Shen, Sung-Kwan Mo, Oleg V. Yazyev, Michael F. Crommie, Nat Commun 9, 3401 (2018) [4]
2. Topological insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a single Dirac cone on the surface, Haijun Zhang, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, Xi Dai, Zhong Fang, Shou-Cheng Zhang, Nature Physics 5, 438–442 (2009) [2]

► 两个办法获得教程输入文件:

1. 直接从集群的/tmp/目录下把本教程拷贝到你的 home 目录下:

```
1 $ cp -r /tmp/wt2024 ~
```

2. 如果你从别处看到这个教程，可以直接从 github 上下载教程:

```
1 $ cd ~
2 $ git clone https://github.com/quanshengwu/wannier_tools.git
```

本章对应的目录为

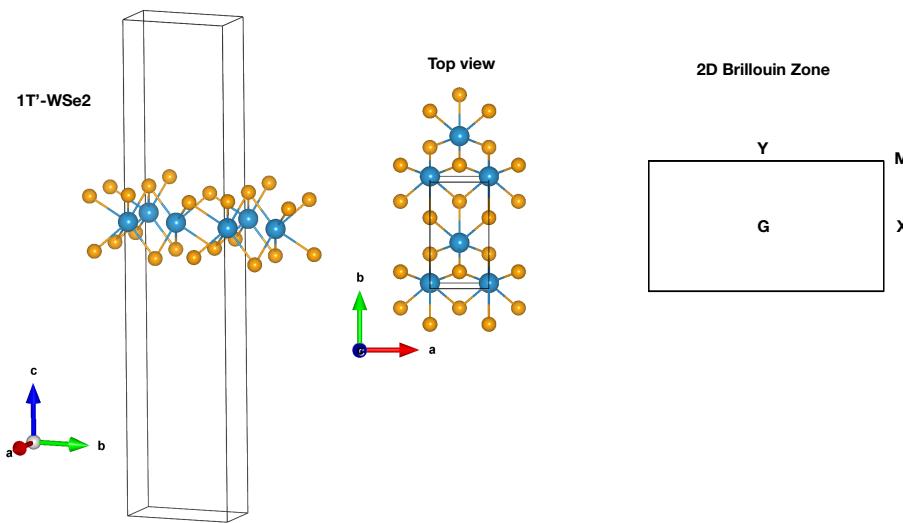
~/wt2024/examples/WSe2-1Tp

和

~/wt2024/examples/Bi2Se3

5.1 二维拓扑绝缘体 1T'-WSe₂

1T'-WSe₂ 被预测为一种 2 维拓扑绝缘体，同时也被称为量子自旋霍尔 (Quantum spin hall, QSH) 绝缘体。在我们的计算中，我们认为它是一个在 z 方向上有很厚的真空层的三维材料。在 z 方向上没有色散，所以我们只要研究 $k_z = 0$ 平面上的性质。晶体结构和布里渊区如下图所示：



► 准备 首先，进入下面这个目录：

```
1 cd ~/wt2024/examples/WSe2-1Tp
```

我们已经准备好了紧束缚模型文件 wannier90_hr.dat 以及 WannierTools 的输入文件 wt.in。如果你打开 wt.in 文件，你会发现我们将要计算体能带、表面态谱，以及万尼尔电荷中心 (Wannier charge center, WCC)。

这里我们不列出计算的所有参数，我们只讨论那些与 WCC 计算有关的参数以得到 \mathbb{Z}_2 拓扑数

```

1 &CONTROL
2 Wanniercenter_calc    = T
3 /
4
5 &SYSTEM
6 NumOccupied = 28 ! We assume bands below NumOccupied-th band are full occupied.
7 /
8
9 &PARAMETERS
10 Nk1 = 61           ! number k points
11 Nk2 = 101          ! number k points
12 /
13
14 KPLANE_BULK
15 0.00  0.00  0.00  ! Starting point of the k-slice
16 1.00  0.00  0.00  ! The first vector is used for integration. k1
17 0.00  0.50  0.00  ! the WCC is along this vector. k2

```

► 注意： \mathbb{Z}_2 计算中 KPLANE_BULK 部分的第三个矢量 k_2 与 Haldane 模型陈数计算不同，仅仅是倒格矢的一半。

混合万尼尔电荷中心被定义为：

$$\bar{x}_n(k_2) = \frac{a_1}{2\pi} \int dk_1 \mathcal{A}_n(k) \quad (7)$$

$$\mathcal{A}_n(k) = i \langle u_{nk} | \nabla_k | u_{nk} \rangle \quad (8)$$

k_1 (k_2) 是 KPLANE_BULK 区域参数的第二 (第三) 行。

► 运行 WannierTools:

```
1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm
```

► 用 Gnuplot 画图:

1). 现在，我们可以用以下命令画出能带:

```
1 $ gnuplot bulkek.gnu
```

能带图的文件名为“bulkek.pdf”，结果如图5.1所示:

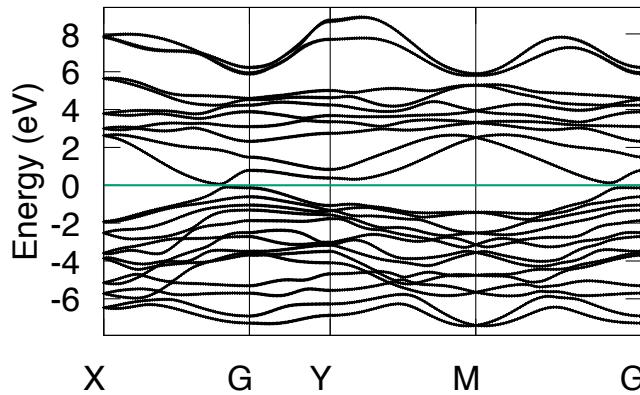


图 5.1: 使用 WannierTools 计算得到的 1T'-WSe₂ 的能带结构。

能带图表示它应当是一个绝缘体。

2). 我们可以画出万尼尔电荷中心 (Wilson loop) 以得到 \mathbb{Z}_2 拓扑数.

```
1 $ gnuplot wcc.gnu
```

图片的文件名为 wcc.eps，结果如图5.2所示:

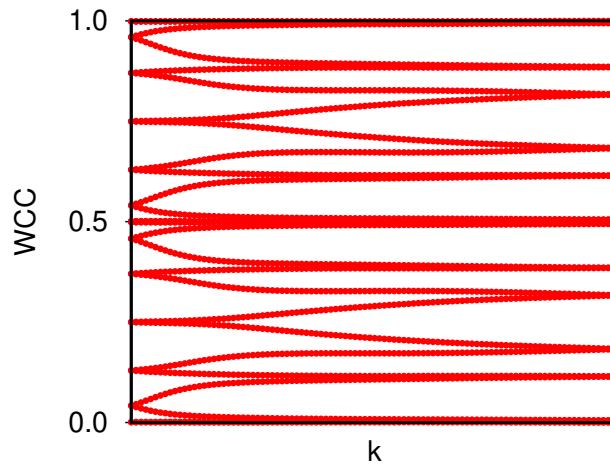


图 5.2: 使用 WannierTools 计算 1T'-WSe₂ 得到的 Wilson loop 图，图中显示 \mathbb{Z}_2 数为 1。

在图中从左至右任意画一条直线，WCC 与其交叉次数为奇数次。因此我们可以得到 $\mathbb{Z}_2 = 1$ 。

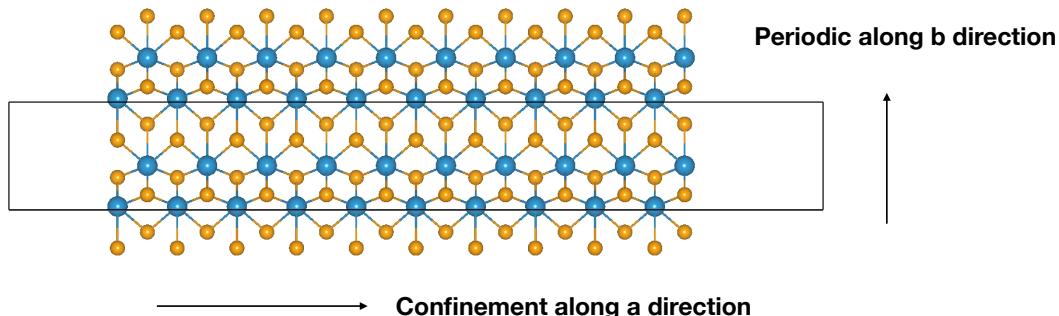
4). 由于体边对应，如果我们沿着一个方向切割材料的话，应该能得到非平庸的边缘态。因此，我们想要画出边缘态能谱。这里，我们沿着 a 格矢方向切出边缘态并让 b 方向保有周期性。这意味着表面是由 b 格矢方向定义的。因此，SURFACE 区参数应当如下设置:

```

1 SURFACE ! define two vectors on the surface
2 0 1 0
3 0 0 1

```

我们可以通过 VESTA 软件来看一看得到的结构，结构的文件名为：POSCAR-slab.



这次，我们不再使用参数 SlabBand_calc=T 来计算 slab 系统的能带。相应的，我们使用表面格林函数技术来计算半周期 slab 系统的表面态。通过下面两行代码，我们可以画出得到的表面态能谱：

```

1 $ gnuplot surfdos_l.gnu
2 $ gnuplot surfdos_r.gnu

```

于是，我们得到了 surfdos_l.png 和 surfdos_r.png 两个文件。由于具有相同的切面，两幅图看起来一模一样。得到的能谱图如下所示：

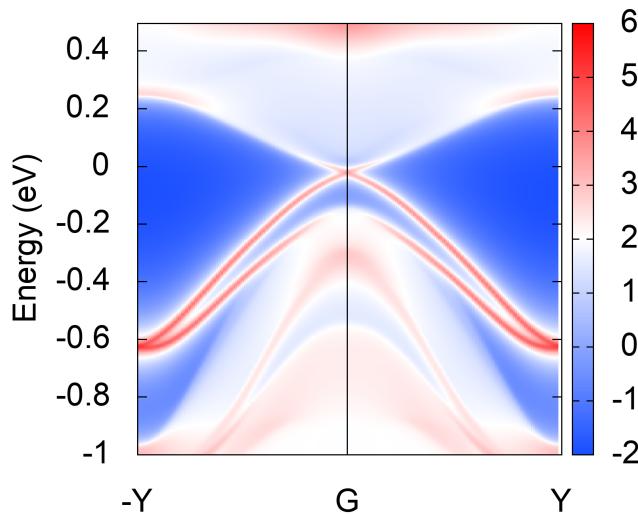


图 5.3: 使用 WannierTools 计算得到的 1T'-WSe2 的边界态

这表示边缘态是非平庸的，因为它将导带和价带连接在一起了。

► 练习

- 尝试增大输入文件 wt.in 中的 Nk1 和 OmegaNum 参数，并用 SlabSS_calc=T 来计算表面态能谱。
- 以更大的能量窗口计算表面态能谱，能量窗口由 PARAMETERS 区域中的 OmegaMin 和 OmegaMax 参数控制。

3. 计算沿 b 方向切, a 方向保留周期性时的表面态能谱。画出两个面的表面态能谱。

5.2 三维拓扑绝缘体 Bi_2Se_3

Bi_2Se_3 被理论预测和实验发现为是一种三维拓扑绝缘体。在这个小节中, 我们将要研究它的拓扑性质, 研究它的拓扑数和表面态能带。

► 准备 首先, 请进入工作目录:

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/Bi2Se3
```

► 运行 WannierTools:

```
1 $ cp wt.in-bi2se3 wt.in
2 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
3 $ sbatch sub-wt.slurm
```

► 用 Gnuplot 画图

► 1). 照例, 我们先画出能带结构

```
1 $ gnuplot bulkek.gnu
```

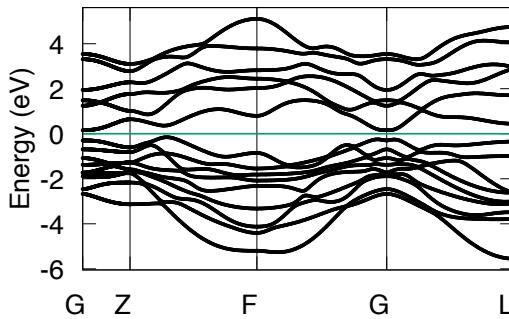


图 5.4: Bi_2Se_3 能带结构

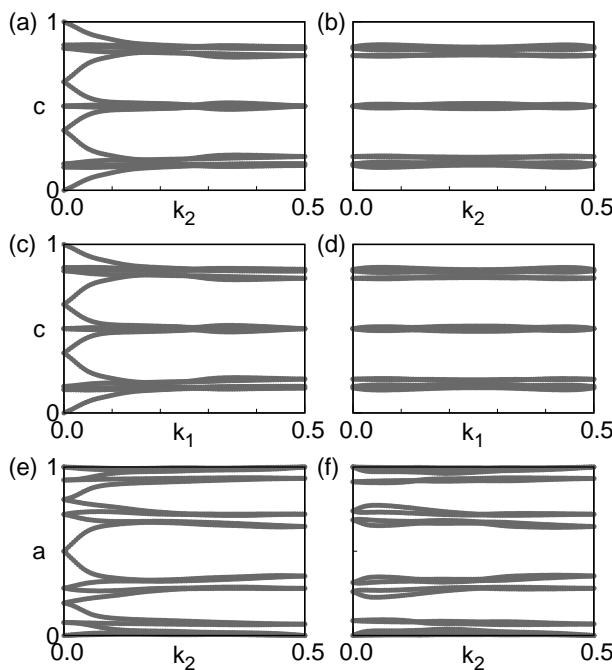
体态能带结构显示它是绝缘体 (这里的“绝缘体”意思是它在每个 k 点处导带与价带都不相交)

► 2). 让我们看看拓扑数

Bi_2Se_3 是一种磁性材料, 它具有时间反演对称性。由于它是三维材料, 我们必须在六个时间反演不变的平面内计算它的 WCC。在 WannierTools 中, 我们可以通过设置 `Z2_3D_calc=T` 把它们全部算出来。通过运行下面的命令, 我们可以画出计算好的 WCC 图。

```
1 $ gnuplot wanniercenter3D_Z2.gnu
```

得到的文件 `wanniercenter3D_Z2.pdf` 应该是这样的:

图 5.5: Bi_2Se_3 对应六个时间反演不变平面的 Wilson loop

根据 WCC 规则, a、c 和 e 图中的 Z_2 拓扑数为 1; b、d 和 f 的拓扑数为 0。这也可以通过直接读取 WT.out 来得到。运行以下命令:

```
1 $ sed -n '/# z2 number/,/Time/p' WT.out
```

得到:

```
1 # z2 number for 6 planes
2 k1=0.0, k2-k3 plane:          1
3 k1=0.5, k2-k3 plane:          0
4 k2=0.0, k1-k3 plane:          1
5 k2=0.5, k1-k3 plane:          0
6 k3=0.0, k1-k2 plane:          1
7 k3=0.5, k1-k2 plane:          0
8 Time cost for Z2_calc is about      62.250 s
```

三维绝缘体的 Z_2 数由四个数组成 $(\nu_0; \nu_1 \nu_2 \nu_3)$ 。 $\nu_0 = Z_2(k_i = 0) + Z_2(k_i = 0.5)$ 表示它是一个强 ($\nu_0 = 1$) 拓扑绝缘体还是一个 ($\nu_0 = 0$) 弱拓扑绝缘体。 $\nu_1 = Z_2(k_1 = 0.5)$, $\nu_2 = Z_2(k_2 = 0.5)$, $\nu_3 = Z_2(k_3 = 0.5)$ 被称为弱拓扑不变量 [5]。最后, Bi_2Se_3 的 Z_2 拓扑数是 (1;000), 这表示 Bi_2Se_3 是一个强拓扑绝缘体。这表示在任意切面上 Bi_2Se_3 均有拓扑保护的表面态。

► 3). 让我们来研究表面态性质

在本教程中, 我们将要学习 (001) 解理面。SURFACE 区域的参数应当如下设置:

```
1 SURFACE ! define two vectors on the surface
2 1 0 0
3 0 1 0
```

在我们初始的晶体结构中, 第一和第二格矢在 (001) 面内。因此, SURFACE 区域的参数相当简单。

现在, 让我们画出表面态的能谱。

```

1 $ gnuplot surfdos_l.gnu
2 $ gnuplot arc_l.gnu
3 $ gnuplot spintext_l.gnu

```

得到的三个能谱图分别是 surfdo_1.png, arc_1.png, and spintext_1.png, 如图5.6所示:

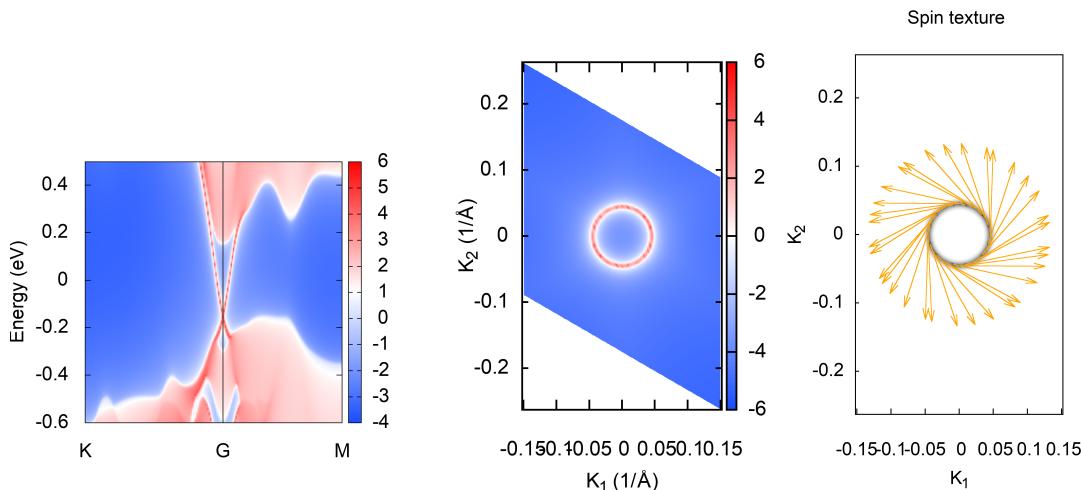


图 5.6: Bi_2Se_3 解理面 (001) 的表面态和自旋纹路 (spin texture), 使用了表面格林函数方法计算。左图 surfdo_1.png 给出了指定 K 点路径的能谱图。K 点路径在 KPATH_SLAVE 区域设置, 而能量窗口则是由 OmegaMin 和 OmegaMax 参数设置。中间 arc_1.png 则是等能图, 能量由 Fermi_broadening 参数给定。右图 spintexture.png 表示给定的 KPLANE_SLAVE 和 Fermi_broadening 中的自旋纹理。

还有另一种方法研究表面态, 那就是通过给定 slab 厚度 (由参数 Nslab 控制) 计算 slab 能带。

```

1 $ gnuplot slabek.gnu

```

产生的图片文件名为 slabek.png, 如图5.7所示:

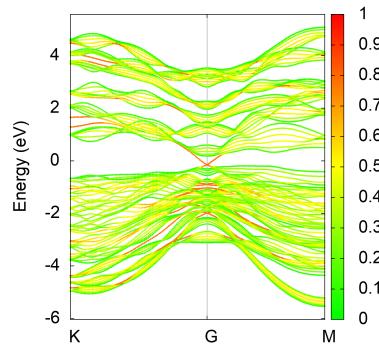


图 5.7: 通过构造 Slab 体系来计算 Bi_2Se_3 体系解理面的表面态, 红色表示表面的贡献, 绿色表示体态。

► 练习

1. 研究由第二、第三晶格矢定义的表面的表面态。
2. 更改 Fermi_broadening 参数, 并设置 SlabArc_calc=T 以重新计算表面态能谱。
3. 将 Nslab 参数从 1 改到 6, 用不同的 slab 厚度计算 slab 能带结构。

6 Weyl 半金属

在本节中，我们将使用 WannierTools 研究 Weyl 半金属。

参考文献

1. Type-ii weyl semimetals, Soluyanov, Alexey A and Gresch, Dominik and Wang, Zhijun and Wu, QuanSheng and Troyer, Matthias and Dai, Xi and Bernevig, B Andrei, Nature, 527(7579): 495-498 (2015) [6]
2. Observation of the chiral-anomaly-induced negative magnetoresistance in 3D Weyl semimetal TaAs, Xiaochun Huang, Lingxiao Zhao, Yujia Long, Peipei Wang, Dong Chen, Zhanhai Yang, Hui Liang, Mianqi Xue, Hongming Weng, Zhong Fang, Xi Dai, Genfu Chen, Physical Review X, 5(3): 031023 (2015) [7]
3. Observation of Weyl nodes in TaAs, BQ Lv, N Xu, HM Weng, JZ Ma, P Richard, XC Huang, LX Zhao, GF Chen, CE Matt, F Bisti, VN Strocov, Joël Mesot, Z Fang, X Dai, Tian Qian, M Shi, H Ding Nature Physics, 11(9): 724-727. (2015) [8]
4. Observation of Fermi-arc spin texture in TaAs, BQ Lv, Stefan Muff, Tian Qian, ZD Song, SM Nie, N Xu, P Richard, Christian E Matt, Nicholas C Plumb, LX Zhao, GF Chen, Zhong Fang, Xi Dai, JH Dil, J Mesot, M Shi, HM Weng, H Ding, Physical review letters, 115(21): 217601. (2015) [9]

► 两个办法获得教程输入文件:

1. 直接从集群的/tmp/目录下把本教程拷贝到你的 home 目录下:

```
1 $ cp -r /tmp/wt2024 ~
```

2. 如果你从别处看到这个教程，可以直接从 github 上下载教程:

```
1 $ cd ~
2 $ git clone https://github.com/quanshengwu/wannier_tools.git
```

本部分对应的目录为

`~/wt2024/examples/3DWeyl`

和

`~/wt2024/examples/TaAs`

6.1 Weyl 半金属的一个简化模型

Weyl 点是最稳定的拓扑对象，因为它不需要任何对称性保护。让我们从一个简化模型哈密顿算符开始。

$$H = A(k_x\sigma_x + k_y\sigma_y) + [M_0 - M_1(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)]\sigma_z \quad (9)$$

这是最简单的 3D Weyl 半金属模型，在 z 方向上只有两个 Weyl 点。时间反演对称性被打破。在本教程中，我们设置 $A = M_0 = M_1 = 1$ 。

► 准备工作

首先，请进入工作目录：

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/3DWeyl-model
```

► 计算能带结构

```
1 $ cp wt.in-bands wt.in
2 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
3 $ sbatch sub-wt.slurm
4 $ gnuplot bulkek.gnu
```

得到的能带如图6.1所示：

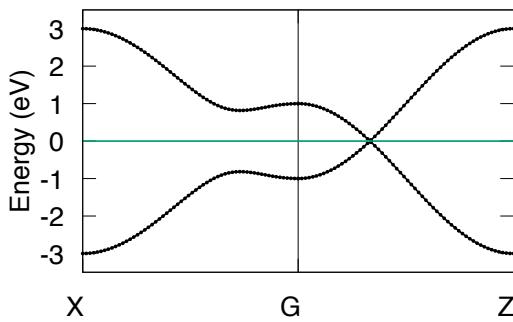


图 6.1：简单三维 Weyl 模型对应的能带结构，有一对 Weyl 点在 z 方向。

结果表明，沿 G-Z 方向存在一个交叉点。

► 找到所有 Weyl 点

通常，Weyl 点不在高对称线上。我们需要通过设置 FindNodes_calc = T 和 NumOccupied = 1 来找到它们。

```
1 $ cp wt.in-findnodes wt.in
2 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
3 $ sbatch sub-wt.slurm
4 $ gnuplot Nodes.gnu
```

Weyl 点在这里也称为节点。节点数据包含在 Nodes.dat 文件中，如下所示

```
-- Nodes.dat
# local minimal position and the related energy gap
#   kx      ky      kz      gap        E      k1      k2      k3
  0.00000000  0.00000000  1.04719755  0.00000000 -0.00000000  0.00000000  0.00000000  0.16666667
  0.00000000 -0.00000000 -1.04719755  0.00000000 -0.00000000  0.00000000 -0.00000000 -0.16666667
```

Nodes.png 则如图6.2所示。

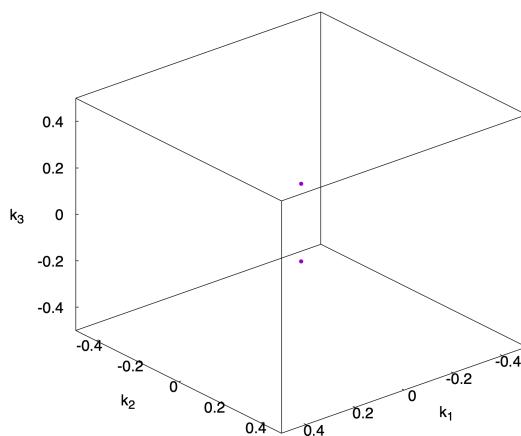


图 6.2: 三维简单 Weyl 模型的 Weyl 点在 BZ 中的分布。

► 计算 Weyl 点的手性

为了计算手性，我们需要将 Weyl 点的坐标输入到 wt.in 文件中。这些坐标可以在上面计算的 Nodes.dat 中找到。我们准备了一个输入文件 wt.in-chirality。

```

1 $ cp wt.in-chirality wt.in
2 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
3 $ sbatch sub-wt.slurm
4 $ gnuplot wanniercenter3D_Weyl_1.gnu
5 $ gnuplot wanniercenter3D_Weyl_2.gnu

```

包裹单个 Weyl 点的球的 WCCS 文件被命名为 wanniercenter3D_Weyl_1.eps 和 wanniercenter3D_Weyl_2.eps，结果如图 6.3 所示：

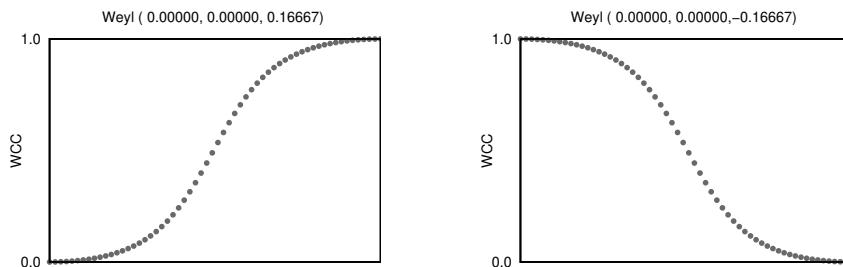


图 6.3: 两个 Weyl 点对应的 Wilson loop

这告诉我们，它们的手性分别是 +1 和 -1。Weyl 点的手性也可以直接从 WT.out 中读取。

```
1 $ sed -n '/Chiralities/,/Time/p' WT.out
```

结果应该如下所示：

```

1 --                                         WT.out
2 Chiralities
3 #      k1        k2        k3        kx        ky        kz        Chirality
4  0.00000   0.00000   0.16667   0.00000  -0.00000   1.04720    1
5  0.00000   0.00000  -0.16667   0.00000   0.00000  -1.04720   -1
6 Time cost for WeylChirality_calc is about          0.030 s

```

► 计算 Berry 曲率

Weyl 点的手性也可以在 Berry 曲率中表现出来。现在我们通过设置 KPLANE_BULK 来计算 $k_y = 0$ 平面上的 Berry 曲率。

```

1 KPLANE_BULK
2 Direct
3 0.00 0.00 0.00 ! Center of 3D k slice
4 1.00 0.00 0.00 ! The first vector along x direction
5 0.00 0.00 1.00 ! The second vector along z direction

```

```

1 $ cp wt.in-Berry-curvature wt.in
2 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
3 $ sbatch sub-wt.slurm

```

Berry 曲率在 Weyl 点的位置发散。所以我们归一化了 Berry 曲率向量 $\tilde{\Omega}(k) = \Omega(k)/|\Omega(k)|$ 。归一化的 Berry 曲率被输出到 Berrycurvature-normalized.dat 中。现在我们需要修改 gnuplot 脚本 Berrycurvature-normalized.dat 来绘制数据。这里我们准备了一个脚本来绘制它。

```
1 $ gnuplot Berrycurvature-normalized.gnu-tutorial
```

生成的图 Berrycurvature-normalized.png 应该是这样的（见图6.4）。

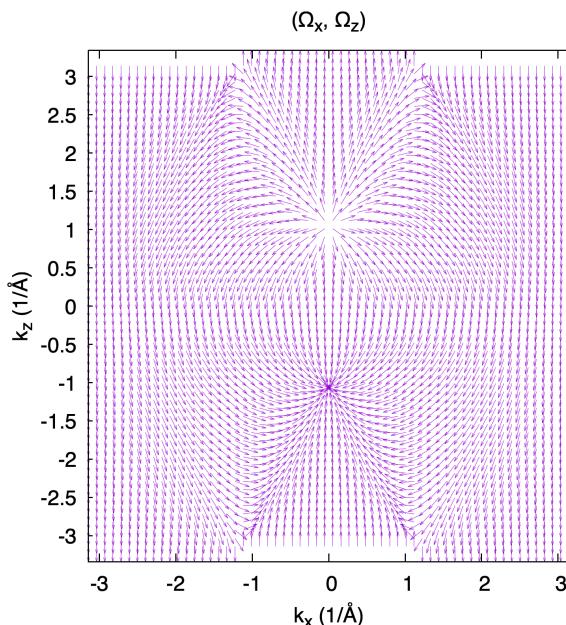


图 6.4: 三维简单 Weyl 模型在 $k_y = 0$ 平面内的贝利曲率分布

具有正手性的 Weyl 点是 Berry 曲率的源，而具有负手性的 Weyl 点是 Berry 曲率的汇。

► 计算表面态谱

因为两个 Weyl 点在 z 轴上，我们将研究 (010) 面来研究费米弧态。SURFACE card 设置为：

```

1 SURFACE           ! (010) surface
2 1 0 0
3 0 0 1

```

运行 WannierTools:

```

1 $ cp wt.in-surfacestates wt.in
2 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
3 $ sbatch sub-wt.slurm

```

使用一些命令生成 $k - E$ 和 $k - k$ 模式下的表面态谱

```
1 $ gnuplot surfdos_l.gnu
2 $ gnuplot arc_l.gnu
```

生成的文件 `surfdos_l.png` 和 `arc_l.png` 应该如下图6.5所示。

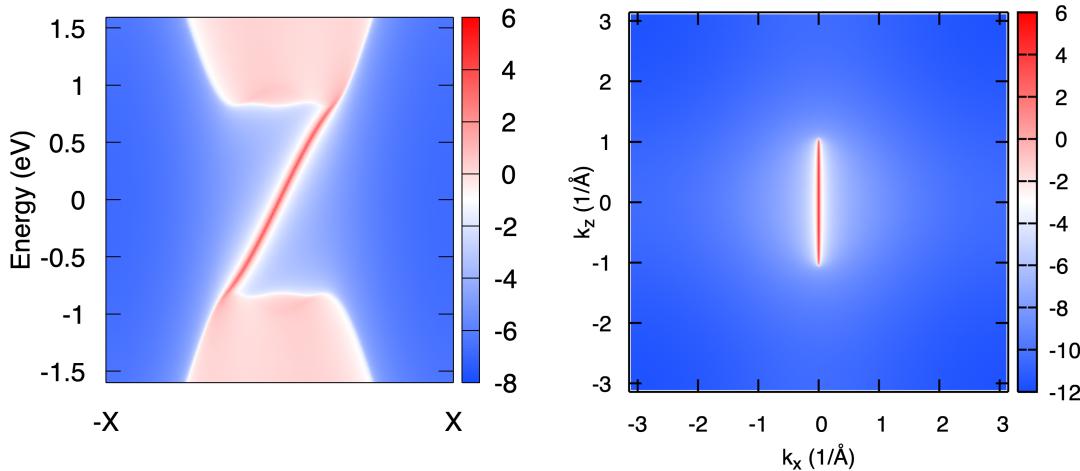


图 6.5: 左图: $k - E$ 模式的表面态谱; 右图: $k - k$ 模式下的表面态, 对应费米弧。

$k - E$ 模式的表面态谱表明它是手性的, 这意味着速度总是正的或负的。 $k - k$ 模式下的表面态谱表明, 表面态的费米表面并不闭合。它起始于一个 Weyl 点, 终止于另一个 Weyl 点。这种费米曲面被称为费米弧态。

► 使用 WCCs 来理解费米弧

Weyl 点的位置为 $(0, 0, \pm k_{z0})$ 。费米弧只出现在两个 Weyl 点之间。这可以从 WCCs 中理解。让我们研究 $k_z = 0$ 和 $k_z = 0.5$ 平面上的 WCCs。

```
1 $ cp wt.in-wcc-kz0 wt.in
2 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
3 $ sbatch sub-wt.slurm
4 $ gnuplot wcc.gnu
5 $ cp wcc.pdf wcc-kz0.pdf
6 $ cp wt.in-wcc-kz0.5 wt.in
7 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
8 $ sbatch sub-wt.slurm
9 $ gnuplot wcc.gnu
10 $ cp wcc.pdf wcc-kz0.5.pdf
```

两个图如下6.6所示

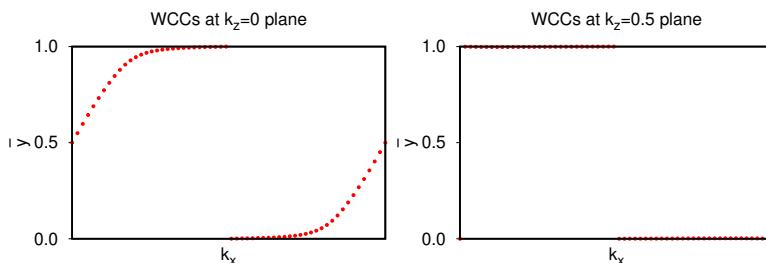


图 6.6: 左右图对应的是 $k_z = 0$ 和 $k_z = \pi/a$ 对应的 Wilson loop。

图6.6中的 Wilson loop 显示, $k_z = 0$ 平面上的 Chern 数为 1, 可以得到手性模式, 而 $k_z = 0.5$ 平面上的 Chern 数为 0, 不能得到拓扑保护的表面态。这就是费米弧的拓扑起源。

► 练习

1. 通过设置 KPLANE_BULK 的原点, 计算不同 k_z 平面上的 WCCs。比如 $k_z = 0.1, 0.2, 0.3$ 。
2. 通过设置 SURFACE card, 来研究 (100) 面的表面态。

```
1 SURFACE           ! (100) surface
2   0   1   0
3   0   0   1
```

3. 通过设置 SURFACE card, 来研究 (001) 面的表面态。

```
1 SURFACE           ! (001) surface
2   1   0   0
3   0   1   0
```

6.2 Weyl 半金属 TaAs

现在我们可以开始研究真正的 Weyl 半金属了。经理论计算和 ARPES 测量证实, TaAs 是一种 Weyl 半金属。由于系统相当大, 在本教程中, 我们将只向您展示如何找到所有 Weyl 点。

► 准备工作

首先, 请进入工作目录:

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/TaAs
2 $ tar xzvf wannier90_hr.dat.tar.gz
```

► 运行 WannierTools 来找到所有 Weyl 点

```
1 $ cp wt.in-findnodes wt.in
2 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
3 $ sbatch sub-wt.slurm
```

计算完成后, 你会发现文件 Nodes.dat 中有 24 个节点, 如下所示:

	Nodes.dat							
#	kx	ky	kz	gap	E	k1	k2	k3
-0.93249310	-0.01476294	0.00000000	0.00000000	0.23118145	-0.51008822	-0.00807556	0.25908189	
0.93249310	0.01476294	0.00000000	0.00000000	0.23118145	0.51008822	0.00807556	-0.25908189	
-0.93249310	0.01476294	0.00000000	0.00000000	0.23118145	-0.51008822	0.00807556	0.25100633	
0.93249310	-0.01476294	0.00000000	0.00000000	0.23118145	0.51008822	-0.00807556	-0.25100633	
-0.51671209	0.03600882	-0.31744043	0.00000000	0.23782847	-0.28264954	0.01969738	-0.16296738	
-0.51671209	-0.03600882	-0.31744043	0.00000000	0.23782847	-0.28264955	-0.01969738	-0.14327000	
-0.51671209	0.03600882	0.31744043	0.00000000	0.23782847	-0.28264954	0.01969738	0.42591955	
-0.03600882	0.51671209	-0.31744043	0.00000000	0.23782847	-0.01969738	0.28264954	-0.42591955	
-0.03600881	0.51671209	0.31744043	0.00000000	0.23782847	-0.01969738	0.28264954	0.16296738	
0.03600882	0.51671209	0.31744043	0.00000000	0.23782847	0.01969738	0.28264954	0.14327000	
-0.03600882	-0.51671209	0.31744043	0.00000000	0.23782847	-0.01969738	-0.28264955	0.44561693	
-0.51671209	-0.03600881	0.31744043	0.00000000	0.23782847	-0.28264955	-0.01969738	0.44561693	
-0.01476294	-0.93249310	-0.00000000	0.00000000	0.23118145	-0.00807556	-0.51008822	0.25908189	
0.01476294	0.93249310	-0.00000000	0.00000000	0.23118145	0.00807556	0.51008822	-0.25908189	
0.01476294	-0.93249310	0.00000000	0.00000000	0.23118145	0.00807556	-0.51008822	0.25100633	
0.03600882	-0.51671209	-0.31744043	0.00000000	0.23782847	0.01969738	-0.28264955	-0.16296738	
0.03600882	-0.51671209	0.31744043	0.00000000	0.23782847	0.01969738	-0.28264955	0.42591955	
-0.03600882	-0.51671209	-0.31744043	0.00000000	0.23782847	-0.01969738	-0.28264954	-0.14327000	
0.03600882	0.51671209	-0.31744043	0.00000000	0.23782847	0.01969738	0.28264955	-0.44561693	
0.51671209	-0.03600882	-0.31744043	0.00000000	0.23782847	0.28264955	-0.01969738	-0.42591955	
0.51671209	0.03600882	0.31744043	0.00000000	0.23782847	0.28264954	0.01969738	-0.44561693	
0.51671209	0.03600882	0.31744043	0.00000000	0.23782847	0.28264955	0.01969738	0.16296738	
-0.01476294	0.93249310	-0.00000000	0.00000000	0.23118145	-0.00807556	0.51008822	-0.25100633	

► 练习

1. 计算所有 Weyl 点的手性。
2. 通过设置 SURFACE card, 来研究 (001) 面的表面态。

```
1 SURFACE           ! (100) surface
2   1   0   0
3   0   1   0
```

这可能会很耗时。我们准备了一个输入文件的示例 `wt.in-surfacestates`。修改参数可以得到高分辨率的表面态图。

7 表面态计算

拓扑材料最重要的特性是受拓扑保护的非平庸表面态。在本章，我们将讲解使用 Wannier-Tools 计算表面态的方法，并计算 Bi_2Se_3 以及石墨烯的表面态。

参考文献

1. Correlated states in twisted double bilayer graphene, Shen Cheng and Chu Yanbang and Wu QuanSheng and Li, Na et al, Nature Physics, 16(5): 520-525 (2020) [10]
2. Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface, Haijun Zhang, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, Xi Dai, Zhong Fang, Shou-Cheng Zhang, Nature Physics 5, 438–442 (2009) [2]
3. Quasiparticle interference of surface states in the type-II Weyl semimetal WTe_2 , Wenhan Zhang, Quansheng Wu, Lunyong Zhang, et al, Physical Review B, 96(16): 165125 (2017) [11]
4. Observation of a nodal chain with Dirac surface states in TiB_2 , Yi C J, Lv B Q, Wu Q S, et al. Physical Review B, 97(20): 201107 (2018) [12]

► 两个办法获得教程输入文件:

1. 直接从集群的/tmp/目录下把本教程拷贝到你的 home 目录下:

```
1 $ cp -r /tmp/wt2024 ~
```

2. 如果你从别处看到这个教程，可以直接从 github 上下载教程:

```
1 $ cd ~
2 $ git clone https://github.com/quanshengwu/wannier_tools.git
```

本部分对应的目录为

`~/wt2024/examples/SurfaceStates`

7.1 表面态的计算方法

在 WannierTools 中，我们通过在主输入文件 `wt.in` 中设置 SURFACE card 来控制所要计算的表面。SURFACE card 具有以下的形式：

```
1 SURFACE ! example
2 -1 1 0 ! a11,a12,a13
3 0 0 1 ! a21,a22,a23
```

其设置方法如图7.1所示，我们需要在所要研究的平面内找出两个线性无关的矢量。注意，两个矢量是以格矢来标记的，即 $a_{11}, a_{12}, a_{13}, \dots, a_{23}$ 需要是整数。

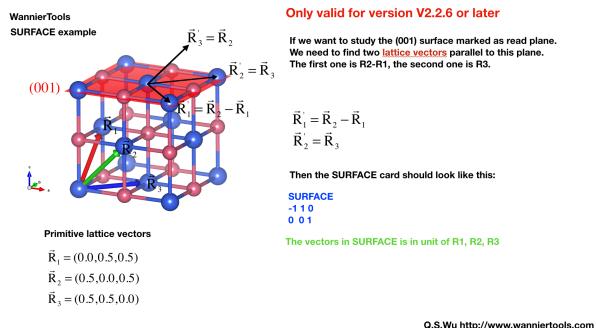


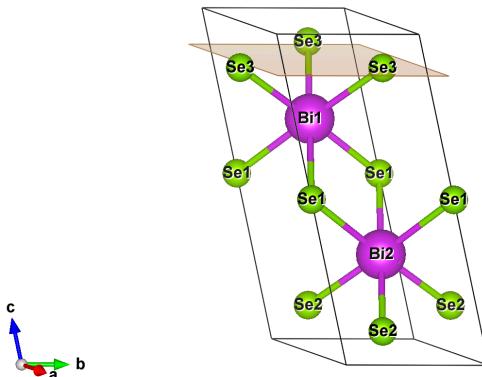
图 7.1: SURFACE card 的设置方法

下面，我们给出两个表面态计算的例子。

7.2 Bi₂Se₃ 表面态计算

在这个例子中，我们将分别使用六方原胞和菱方原胞，计算 Bi₂Se₃ 解理面的表面态。

7.2.1 六方原胞

图 7.2: 六方 Bi₂Se₃ 原胞

我们可以按照如图7.2的方式选取 Bi₂Se₃ 的原胞，这种原胞称为六方原胞。图中阴影所示平面就是 Bi₂Se₃ 的解理面。在六方原胞中，其晶面指数为 (001)。下面我们计算解理面的表面态：

► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/SurfaceStates/Bi2Se3-hex
```

目录中有以下文件：

wt.in：这是 WannierTools 计算表面态时的主输入文件

Bi2Se3_hr.tar.gz：六方原胞 Bi₂Se₃ 的实空间哈密顿量。使用前请用以下命令解压：

```
1 $ tar xzvf Bi2Se3_hr.tar.gz
```

► 第 2 步：准备输入文件

wt.in 中，与表面态计算有关的参数设置如下所示：

```
1 ...
2 &CONTROL
3 SlabBand_calc      = T
4 SlabSS_calc         = T
```

```

5 SlabArc_calc      = T
6 /
7
8 SURFACE          ! (001) surface
9 1 0 0
10 0 1 0
11 ...
12
13 &SYSTEM
14 NSLAB = 20        ! for thin film system
15 ...
16 /
17
18 &PARAMETERS
19 Fermi_broadening = 0.010    ! infinite small value, like broadening
20 iso_energy = 0.0           ! energy for calculate Fermi Arc
21 ...
22 /
23 ...
24
25 KPATH_SLAB
26 2          ! number of k line for 2D case
27 K 0.33 0.67 G 0.0 0.0 ! k path for 2D case
28 G 0.0 0.0 M 0.5 0.5
29 ...

```

► 第3步：提交计算任务

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm

```

► 第4步：分析计算结果

计算结束后，我们用 gnuplot 将计算结果画出来，命令如下：

```

1 $ gnuplot slabek.gnu
2 $ gnuplot surfdos_l.gnu
3 $ gnuplot arc_l.gnu

```

我们将得到以下文件：

(1) slabek.png

图7.3是 Bi₂Se₃ 的表面态能带图。图中的红色/蓝色表示这个态来自上表面/下表面的权重。由于上下表面是简并的，所以图片展示不是很准确。可以更改 slabek.gnu 文件把上下表面的权重加起来展示。

(2) surfdos_l.png

图7.4是 Bi₂Se₃ 的表面谱函数图。图中的红色/蓝色表示这个态的态密度的大/小。

(3) arc_l.png

图7.5是 Bi₂Se₃ 的二维费米面。这是 E_arc 在二维空间的等能线。

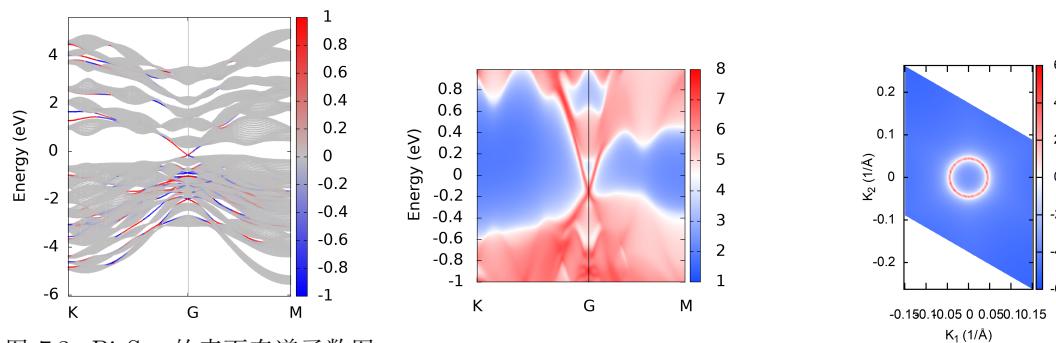


图 7.3: Bi_2Se_3 的表面态谱函数图,
这是 SlabBand_calc = T 的计算结
果

图 7.4: Bi_2Se_3 的表面态谱函数图, 图 7.5: Bi_2Se_3 的二维费米面, 这是
这是 SlabSS_calc = T 的计算结果 SlabArc_calc = T 的计算结果

7.2.2 菱方原胞

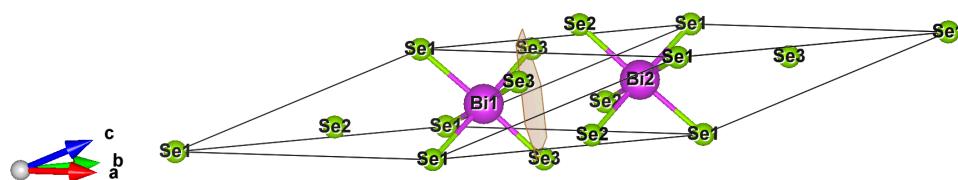


图 7.6: 菱方 Bi_2Se_3 原胞

我们还可以按照如图7.6的方式选取 Bi_2Se_3 的原胞, 这种原胞称为菱方原胞。图中阴影所示平面就是 Bi_2Se_3 的解理面。在菱方原胞中, 其晶面指数是 (111), 因此 SURFACE card 应该如图7.7设置.

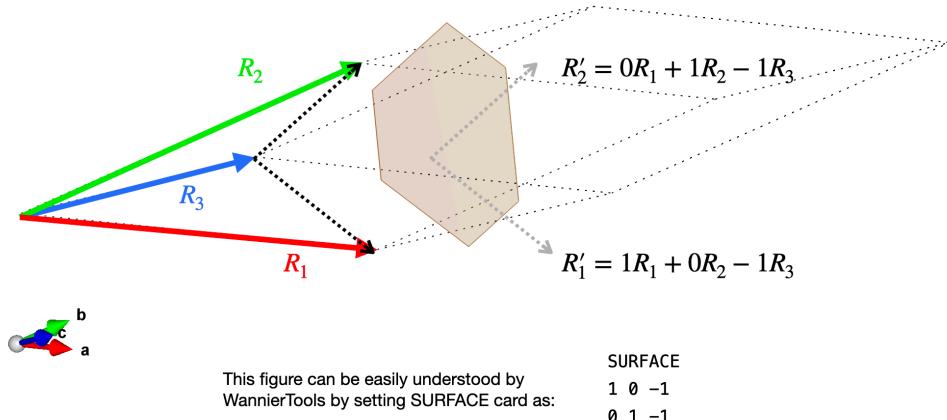


图 7.7: 用菱方 Bi_2Se_3 原胞计算解理面表面态时, SURFACE card 的设置方法

需要注意的是, 在菱方原胞中, 解理面是以 Se3 作为最表面原子的。也就是说, 我们不仅需要用 SURFACE card 来控制晶面指数, 还需要一个参数来控制最表面原子。在 WannierTools V2.7.0 及以前版本中, 我们无法指定最表面原子, 导致生成的表面是崎岖不平的, 无法得到正确的表面态。在 WannierTools V2.7.1 及以后的版本中, 我们可以使用参数 topsurface_atom_index 来控制最表面原子, 来生成一个平滑的正确的表面。

► 第 1 步: 进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/SurfaceStates/Bi2Se3-rhom
```

目录中有以下文件:

wt.in: 这是 WannierTools 计算表面态时的主输入文件

Bi2Se3_hr.tar.gz: 菱方原胞 Bi₂Se₃ 的实空间哈密顿量。使用前请用以下命令解压:

```
1 $ tar xzvf Bi2Se3_hr.tar.gz
```

► 第 2 步: 准备输入文件

wt.in 中, 与表面态计算有关的参数设置如下所示:

```

1 ...
2
3 ATOM_POSITIONS
4      5           ! number of atoms for projectors
5 Direct          ! Direct or Cartisen coordinate
6 Bi 0.3990    0.3990    0.6970  ! topsurface_atom_index=1
7 Bi 0.6010    0.6010    0.3030  ! topsurface_atom_index=2
8 Se 0.0000    0.0000    0.5000  ! topsurface_atom_index=3
9 Se 0.2060    0.2060    0.1180  ! topsurface_atom_index=4
10 Se 0.7940   0.7940    0.8820  ! topsurface_atom_index=5
11 ...
12
13 &CONTROL
14 SlabBand_calc = T
15 SlabSS_calc   = T
16 SlabArc_calc  = T
17 /
18
19 SURFACE        ! (111) surface 解理面
20 1 0 -1
21 0 1 -1
22
23 ...
24
25 &SYSTEM
26 NSLAB = 20      ! for thin film system
27 NSLAB1= 4       ! nanowire system
28 NSLAB2= 4       ! nanowire system
29 NumOccupied = 18 ! NumOccupied
30 SOC = 1         ! soc
31 E_FERMI = 4.4195 ! e-fermi
32 /
33
34 &PARAMETERS
35 Fermi_broadening = 0.010    ! infinite small value, like broadening
36 iso_energy = 0.0          ! energy for calculate Fermi Arc
37 ...
38 topsurface_atom_index = 5  ! The index of the terminal atom of the surface
39 /
40

```

```

41 ...
42
43 KPATH_SLAB
44 2           ! number of k line for 2D case
45 K 0.33 0.67 G 0.0 0.0 ! k path for 2D case
46 G 0.0 0.0 M 0.5 0.5
47
48 ...

```

在通过 SURFACE 确定了新原胞的基矢之后, 还需要通过确定最表面的原子, 才能完全确定新原胞。我们通过设置 topsurface_atom_index 指定原胞最表面的原子, 它的编号与 ATOM_POSITIONS 中的顺序是一致的。在这个例子中, 我们使用的是菱方原胞, 我们所希望计算的解理面 (图中阴影所示平面) 是以 Se3 作为最表面原子的。而 Se3 在 ATOM_POSITIONS 中排在第 5 个, 因此我们就设置 topsurface_atom_index = 5。对于复杂的体系, 我们可以借助 VESTA 找到所要研究的晶面和最表面原子的编号。

► 第 3 步: 提交计算任务

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm

```

► 第 4 步: 分析计算结果

计算结束后, 我们用 gnuplot 将计算结果画出来, 命令如下:

```

1 $ gnuplot slabek.gnu
2 $ gnuplot surfdos_l.gnu
3 $ gnuplot arc_l.gnu

```

我们将得到以下文件:

(1) slabek.png

图7.8是菱方原胞 Bi_2Se_3 的表面态能带图。图中的红色/蓝色表示这个态来自上表面/下表面的权重。由于上下表面是简并的, 所以图片展示不是很准确。可以更改 slabek.gnu 文件把上下表面的权重加起来展示。

(2) surfdos_l.png

图7.9是菱方原胞 Bi_2Se_3 的解理面的表面态谱函数图。图中的红色/蓝色表示这个态的态密度的大/小。

(3) arc_l.png

图7.10是菱方原胞 Bi_2Se_3 的解理面的二维费米面图。这是 E_arc 在二维空间的等能线。

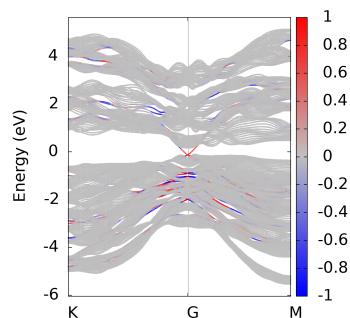


图 7.8: 菱方 Bi_2Se_3 的表面态能带
图, 这是 SlabBand_calc = T 的计
算结果

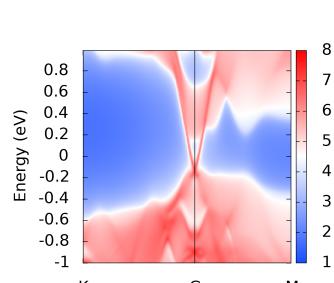


图 7.9: 菱方原胞 Bi_2Se_3 的表面态
图, 这是 SlabSS_calc = T 的计
算结果

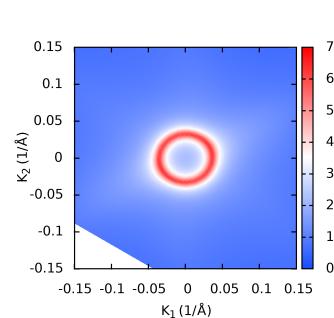


图 7.10: 菱方原胞 Bi_2Se_3 解理面的
图, 这是 SlabArc_calc = T 的计
算结果

可以看出, 用两种原胞算出的解理面表面态是一致的。

7.3 石墨烯边界态计算

在这个例子中, 我们将计算石墨烯的边界态。石墨烯的晶体结构如图7.11所示。下面我们在表示晶向时, 都是在这个原胞中定义的。

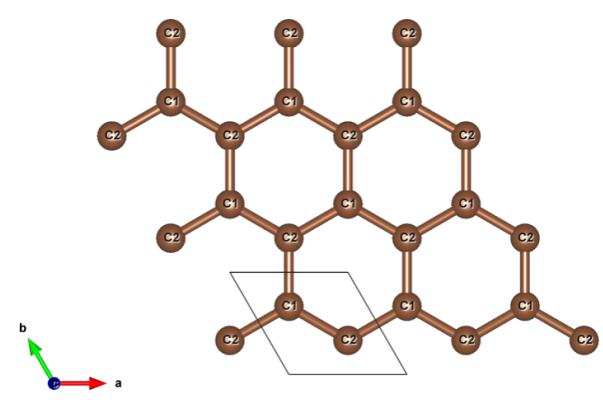


图 7.11: 石墨烯的晶体结构

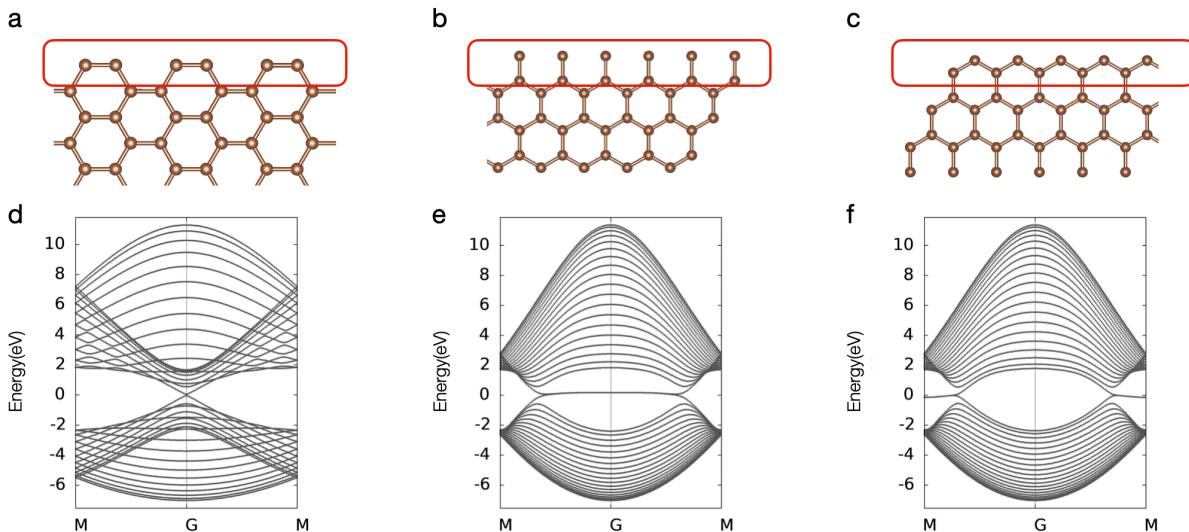


图 7.12: 石墨烯的三种边界态。(a) 扶手椅形边界 (b) 胡须形边界 (c) 锯齿形边界 (d) 扶手椅形边界态 (e) 胡须形边界态 (f) 锯齿形边界态

石墨烯的三种边界态如图7.12所示。其中，扶手椅型边界是沿着 [210] 方向的（注意：这里是晶向指数），而胡须型边界和锯齿形边界都是沿着 [100] 方向的，只是最表面的原子不同。

下面，我们以计算扶手椅型边界作为例子。

► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/SurfaceStates/Graphene
```

目录中有以下文件：

wt.in-Armchair：主输入文件，计算扶手椅形边界时使用

wt.in-Beared：主输入文件，计算胡须形边界时使用

wt.in-ZigZag：主输入文件，计算锯齿形边界时使用

Graphene_hr.dat：用图7.11所示原胞构建的石墨烯的实空间哈密顿量。

► 第 2 步：准备输入文件

首先复制主输入文件：

```
1 $ cp wt.in-Armchair wt.in
```

wt.in 中，与表面态计算有关的参数设置如下所示：

```
1 ...
2
3 &CONTROL
4 SlabBand_calc = T
5 /
6
7 &SYSTEM
8 SOC = 0 ! soc
9 E_FERMI = -1.2533 ! e-fermi
10 Nslab = 20
11 /
12
13 SURFACE card
14 2 1 0
15 0 0 1
16
17 KPATH_SLAB ! k point path
18 2 ! number of k line
19 M 0.5 0.5 G 0.0 0.0
20 G 0.0 0.0 M 0.5 0.5
21 ...
```

石墨烯是二维材料，其边界态是一维的。但是 SURFACE card 的设置方法是相同的。例如，我们需要计算扶手椅型边界，是沿着 [210] 晶向的，slab 的堆叠方向垂直于这个方向。简单起见，我们这样设置 SURFACE card 即可：

```
1 SURFACE
2 2 1 0
3 0 0 1
```

► 第 3 步：提交计算任务

```
1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm
```

► 第 4 步：分析计算结果

计算结束后，我们用 gnuplot 将计算结果画出来，命令如下：

```
1 $ gnuplot slabek.gnu
```

slabek.png 所展示的能带结构应该如图7.12(d) 所示。

我们还可以计算胡须型边界和锯齿形边界的边界态。主输入文件都已经准备好，分别是 wt.in-Beared 和 wt.in-ZigZag，在准备输入文件时请注意它们的差别

```
1 $ cp wt.in-Beared wt.in 或者 cp wt.in-ZigZag wt.in
```

其余的流程与上面所述完全相同。值得一提的是，wt.in-Beared 和 wt.in-ZigZag 的差别仅仅在于 topsurface_atom_index 不同 (Beared 设为 1,ZigZag 设为 2)，结合图7.11所示的石墨烯原胞结构和 ATOM_POSITIONS 中的原子顺序，我们就可以理解在计算表面态（边界态）时，要先确定晶向，再确定最表面原子，二者同样重要。

8 反常霍尔效应

反常霍尔效应 (anomalous Hall effect, AHE) 是由于材料本身的自发磁化而产生的重要物理效应。霍尔效应 (Hall effect) 指的是当电流垂直于外磁场通过导体时，在导体的垂直于磁场和电流方向的两个端面之间会出现电势差；而反常霍尔效应指的是在没有外加磁场，破坏时间反演对称性下，电流和磁矩之间的自旋轨道耦合相互作用导致的霍尔效应。反常霍尔效应包括三种机制，side jump, skew scattering 和 intrinsic 的贝利曲率部分，这里只考虑 intrinsic 的部分。

我们把反常霍尔电导 σ_{xy}^A 定义为 $\sigma_{xy}^A = \frac{j_x}{E_y}$ ，可以得到其形式如下

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{\hbar} \int_{BZ} \frac{dk}{(2\pi)^3} f_n(k) \Omega_{n,z}(k) \quad (10)$$

参考文献

1. Intercorrelated anomalous Hall and spin Hall effect in kagome-lattice Co₃Sn₂S₂-based shandite films, Yong-Chang Lau, Junya Ikeda, Kohei Fujiwara, Akihiro Ozawa, Jiaxin Zheng, Takeshi Seki, Kentaro Nomura, Liang Du, Quansheng Wu, Atsushi Tsukazaki, Koki Takanashi, Physical Review B, 108(6): 064429. (2023) [13]

8.1 三维外尔半金属反常霍尔电导计算

本节中，我们将以三维外尔半金属作为例子，演示如何计算反常霍尔电导。

► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/3DWeyl-model/
```

目录中有以下文件：

wt.in：这是 WannierTools 的主输入文件。

Wannier90_hr.tar.gz：用三维外尔半金属构造的实空间哈密顿量。使用前请解压。

► 第 2 步：准备输入文件

```
1 $ cp wt.in-AHC wt.in
```

wt.in 文件说明：

```

1 --
2           wt.in
3 &TB_FILE
4 Hrfile = "Weyl3D_hr.dat"
5 /
6 !> bulk band structure calculation flag
7 &CONTROL
8 AHC_calc = T
9 /
10
11 &PARAMETERS
12 Fermi_broadening=0.1          ! a broadening factor for Delta function
13 Nk1 =101                      ! number k points

```

```

14 Nk2 =101           ! number k points
15 Nk3 =101           ! number k points
16 OmegaNum=401       !number omega number
17 OmegaMin=-6         ! energy interval
18 OmegaMax=6          ! energy interval
19 /
20
21 KCUBE_BULK
22 0 0 0               ! Original point for 3D k plane
23 1 0 0               ! The first vector to define 3d k space plane
24 0 1 0               ! The second vector to define 3d k space plane
25 0 0 1               ! The third vector to define 3d k cube

```

► 第 3 步：提交计算任务

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm

```

计算完成后，将会得到如下文件：

(1) sigma_ahc_eta***.00meV.txt: 在某个展宽下的反常霍尔电导，单位为 $(\text{Ohm} * \text{cm})^{-1}$ ，从左到右一共四列数据，依次为化学势（相对于 E_FERMI）、 σ_{xy}^A 、 σ_{yz}^A 和 σ_{zx}^A 。eta 代表费米分布的展宽， $f(E) = \frac{1}{1+e^{(\omega-\mu)\times\frac{1}{\text{eta}}}}$ 。因此，Eta 越小，费米-狄拉克的分布就越尖锐。

(2) sigma_ahc.gnu: 画图脚本

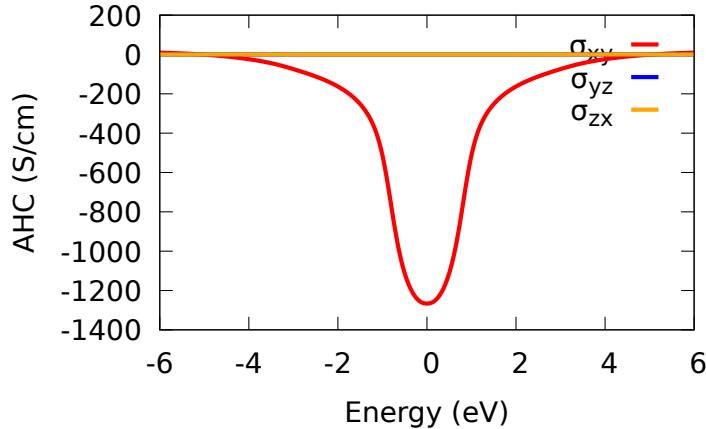
► 第 4 步：作图

```

1 $ gnuplot sigma_ahc.gnu

```

可以得到名为 sigma_ahc.pdf 的图像：



8.2 Fe 反常霍尔电导计算

本节中，我们将以 Fe 作为例子，演示如何计算反常霍尔电导。

► 第 1 步：进入工作目录

```

1 $ cd ~/wt2024/examples/Fe/

```

目录中有以下文件：

wt.in: 这是 WannierTools 的主输入文件。

Wannier90_hr.tar.gz: 用 Fe 构造的实空间哈密顿量。使用前请解压。

► 第 2 步：准备输入文件

```
1 $ cp wt.in-ahe wt.in
```

wt.in 文件主要参数说明：

```

1 &TB_FILE
2 Hrfile = wannier90_hr.dat
3 /
4
5 &CONTROL
6 !> bulk band structure calculation flag
7 AHC_calc = T
8 /
9
10 &PARAMETERS
11 Fermi_broadening = 0.01 ! infinite small value
12 iso_energy = 0.00 ! energy for calculate Fermi Arc
13 OmegaNum = 800 ! omega number
14 OmegaMin = -1.0 ! energy interval
15 OmegaMax = 1.0 ! energy interval
16 Nk1 = 101 ! number k points
17 Nk2 = 101 ! number k points
18 Nk3 = 101 ! number k points
19 /
20
21 KCUBE_BULK
22 0.0 0.0 0. ! Original point for 3D k plane
23 1.0 0.00 0.00 ! The first vector to define 3d k space plane
24 0.00 1.0 0.00 ! The second vector to define 3d k space plane
25 0.00 0.00 1.0 ! The third vector to define 3d k cube

```

► 第 3 步：提交计算任务

```
1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm
```

计算完成后，将会得到如下文件：

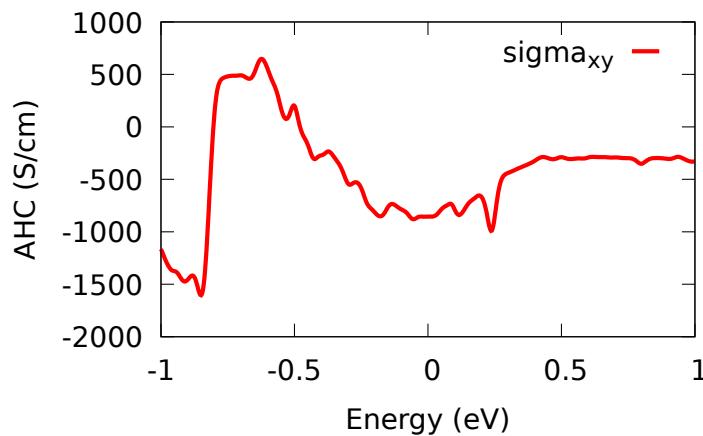
(1) sigma_ahc_eta***.00meV.txt：在某个展宽下的反常霍尔电导，单位为 $(\text{Ohm} * \text{cm})^{-1}$ ，从左到右一共四列数据，依次为化学势（相对于 E_FERMI）、 σ_{xy}^A 、 σ_{yz}^A 和 σ_{zx}^A 。eta 代表费米分布的展宽， $f(E) = \frac{1}{1+e^{(\omega-\mu)\times\frac{1}{eta}}}$ 。因此，Eta 越小，费米-狄拉克的分布就越尖锐。

(2) sigma_ahc.gnu：画图脚本

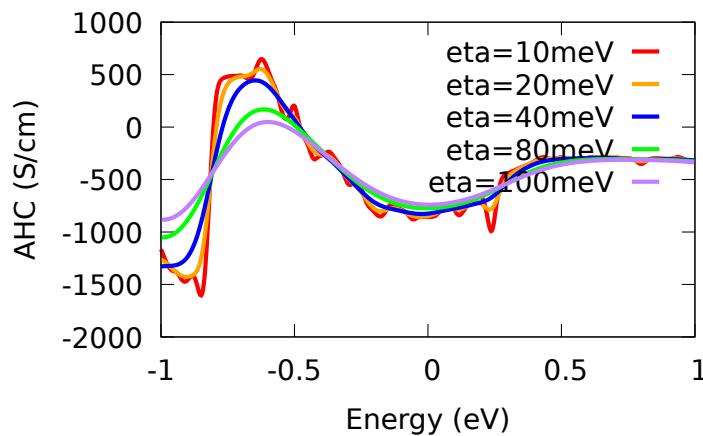
► 第 4 步：作图

```
1 $ gnuplot sigma_ahc.gnu
```

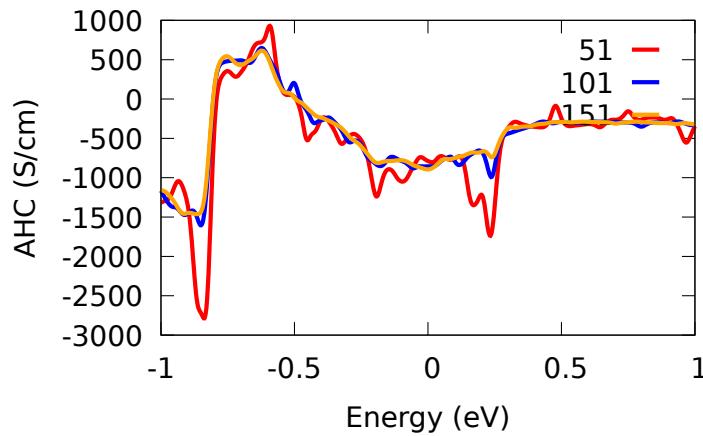
可以得到名为 sigma_ahc.pdf 的图像：



费米分布的展宽 η 取 10 到 100meV 的计算结果收敛性:



把 k 点的数量取 51, 101, 151 的三次计算 σ_{xy} 的结果放在一起可以看出收敛性:



8.3 Co₂MnGa 反常霍尔电导计算

本节中，我们将以 Co₂MnGa 作为例子，演示如何计算反常霍尔电导。

► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/Co2MnGa
```

目录中有以下文件：

wt.in: 这是 WannierTools 的主输入文件。

Wannier90_hr.tar.gz: 用 Fe 构造的实空间哈密顿量。使用前请解压。

► 第 2 步: 准备输入文件

```
1 $ cp wt.in-ahe wt.in
```

wt.in 文件说明:

```

1 &TB_FILE
2 Hrfile = 'wannier90_hr.dat'
3 /
4
5 !> bulk band structure calculation flag
6 &CONTROL
7 AHC_calc = T
8 /
9
10 &PARAMETERS
11 Fermi_broadening = 0.01 ! infinite small value, like broadening
12 OmegaNum = 901 ! omega number
13 OmegaMin = -1 ! energy interval
14 OmegaMax = 1 ! energy interval
15 Nk1 = 101 ! number k points odd number would be better
16 Nk2 = 101 ! number k points odd number would be better
17 Nk3 = 101 ! number k points odd number would be better
18 /
19
20 KCUBE_BULK
21 -0.50 -0.50 -0.50 ! Original point for 3D k plane
22 1.00 0.00 0.00 ! The first vector to define 3d k space plane
23 0.00 1.00 0.00 ! The second vector to define 3d k space plane
24 0.00 0.00 1.00 ! The third vector to define 3d k cube

```

► 第 3 步: 提交计算任务

```
1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm
```

计算完成后，将会得到如下文件:

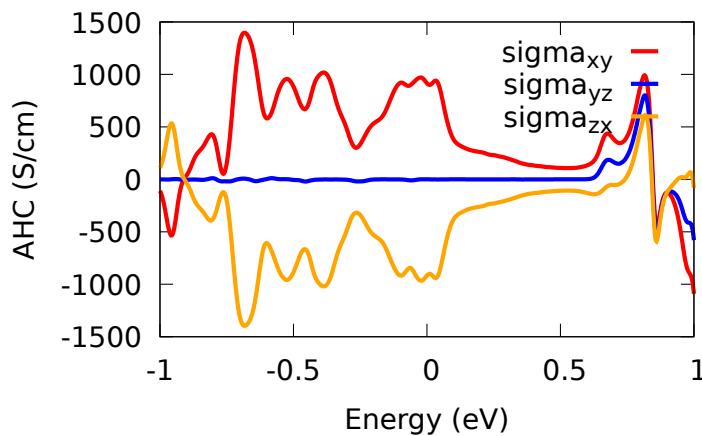
(1) sigma_ahc_eta***.00meV.txt: 在某个展宽下的反常霍尔电导，单位为 $(\text{Ohm} * \text{cm})^{-1}$ ，从左到右一共四列数据，依次为化学势（相对于 E_FERMI）、 σ_{xy}^A 、 σ_{yz}^A 和 σ_{zx}^A 。eta 代表费米分布的展宽， $f(E) = \frac{1}{1+e^{(\omega-\mu)\times\frac{1}{eta}}}$ 。因此，Eta 越小，费米-狄拉克的分布就越尖锐。

(2) sigma_ahc.gnu: 画图脚本

► 第 4 步: 作图

```
1 $ gnuplot sigma_ahc.gnu
```

可以得到名为 sigma_ahc.pdf 的图像:



如果要收敛的话，kmesh 要取 251^3 即 $N_{k1}=N_{k2}=N_{k3}=251$ ，可以回到自己集群上去计算。

8.4 Haldane 模型反常霍尔电导计算

本节中，我们将以 Haldane 模型作为例子，演示如何计算反常霍尔电导。

► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/Haldane_model
```

► 第 2 步：准备输入文件

```
1 $ python haldane_hr_gen-chern-insulator.py
2 $ cp wt.in-ahe wt.in
```

wt.in 文件说明：

```

1 &TB_FILE
2 Hrfile = "Haldane_hr.dat"
3 /
4
5
6 !> bulk band structure calculation flag
7 &CONTROL
8 AHC_calc = T
9 /
10
11 &PARAMETERS
12 Fermi_broadening = 0.01      ! infinite small value
13 OmegaNum = 1000            ! omega number
14 OmegaMin = -2.0             ! energy interval
15 OmegaMax = 2.0              ! energy interval
16 Nk1 = 60                  ! x number k points
17 Nk2 = 60                  ! y number k points
18 Nk3 = 1                   ! z number k points
19 /
20
21 LATTICE
22 Angstrom
23 2.1377110   -1.2342080   0.0000000
24 0.0000000   2.4684160   0.0000000

```

```

25 0.0000000 0.0000000 10.000000
26
27 KCUBE_BULK
28 0.00 0.00 0.00 ! Original point for 3D k plane
29 1.00 0.00 0.00 ! The first vector to define 3d k space plane
30 0.00 1.00 0.00 ! The second vector to define 3d k space plane
31 0.00 0.00 1.00 ! The third vector to define 3d k cube

```

► 第 3 步：提交计算任务

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm

```

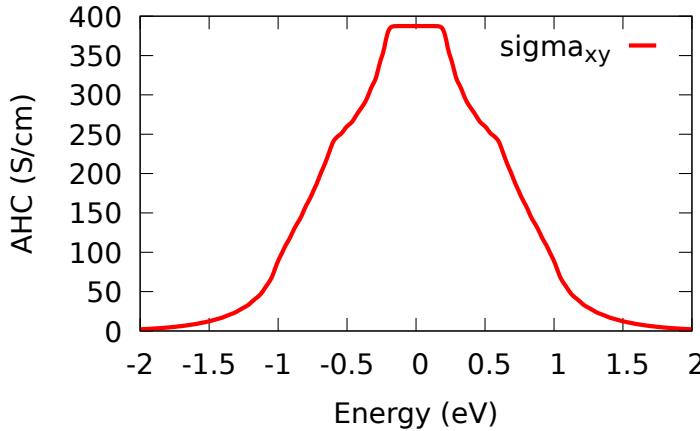
计算完成后，将会得到如下文件：

- (1) sigma_ahc_eta***.00meV.txt：在某个展宽下的反常霍尔电导，单位为 $(\text{Ohm} * \text{cm})^{-1}$ ，从左到右一共四列数据，依次为化学势（相对于 E_FERMI）、 σ_{xy}^A 、 σ_{yz}^A 和 σ_{zx}^A 。eta 代表费米分布的展宽， $f(E) = \frac{1}{1+e^{(\omega-\mu)\times\frac{1}{eta}}}$ 。因此，Eta 越小，费米-狄拉克的分布就越尖锐。
- (2) sigma_ahc.gnu：画图脚本

► 第 4 步：作图

```
1 $ gnuplot sigma_ahc.gnu
```

可以得到名为 sigma_ahc.pdf 的图像：



打开任意输出文件，可以看到在 gap 内霍尔电导的值为 387.4S/cm，这是三维的霍尔电导，电导的定义：

$$\sigma_{xy}^{3D} = -\frac{e^2}{\hbar} \int_{BZ} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} F(k) \quad (11)$$

$$\sigma_{xy}^{2D} = -\frac{e^2}{\hbar} \int_{BZ} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} F(k) \quad (12)$$

离散化积分化求和后：

$$\sigma_{xy}^{3D} = -\frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{N_x N_y N_z X Y Z} \sum_{kx,ky,kz} F(k) \quad (13)$$

与 kz 无关

$$\sigma_{xy}^{2D} = -\frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{N_x N_y X Y} \sum_{kx,ky} F(k) \quad (14)$$

$$\sigma_{xy}^{2D} = \sigma_{xy}^{3D} \times Z \quad (15)$$

其中 G 是电导率, N_x, N_y, N_z 是 x,y,z 方向格点数, X,Y,Z 分别为 x,y,z 方向的样品长度, 假设 X 为电流方向。换算到二维需要乘样品 z 方向的长度, 由 wt.in 里 lattice 中 z 方向格矢知是 $10 \times 10^{-8} cm$, 再从西门子 ($1/\Omega$) 换算 e^2/h , 需要乘以冯克利青常数 25812.807449Ω , 最后得到 $0.999988e^2/h$, 是量子化的电导。

9 反常能斯特效应

反常能斯特效应 (anomalous Nernst effect, ANE) 是一种横向热电响应，它把热能转换成电能。普通能斯特效应 (Nernst effect) 指的是在外加磁场和温度梯度的作用下、产生一个横向的热电电压，这三者的方向相互垂直；而反常能斯特效应指的是，在没有外加磁场的情况下，材料在垂直热流的方向上产生的反常横向电压。反常能斯特效应通常发生在铁磁材料中，可以看作反常霍尔效应在热电方面的对应。

我们把反常能斯特系数 α_{xy}^A 定义为 $j_x = \alpha_{xy}^A(-\nabla_y T)$, α_{xy}^A 的表达式为 [14]

$$\alpha_{xy}^A = \frac{e}{T\hbar} \sum_n \int [d\mathbf{k}] \Omega_{n,z}(k) \left\{ f_n(\mathbf{k}) (\varepsilon_{nk} - \mu) + k_B T \ln \left[1 + e^{-\beta(\varepsilon_{nk} - \mu)} \right] \right\} \quad (16)$$

可以看到，反常能斯特效应来自费米能级附近贝里曲率的贡献，而反常霍尔效应来自所有占据带的贝里曲率的贡献。我们也可以用反常霍尔系数来表示反常能斯特系数 [14]，即

$$\alpha_{xy}^A = \frac{1}{e} \int d\varepsilon \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \frac{(\varepsilon - \mu)}{T} \sigma_{xy}^A(\varepsilon, T = 0) \quad (17)$$

在 WannierTools 中，我们采用公式 (17) 进行计算。

参考文献

1. Large anomalous Nernst effects at room temperature in Fe3Pt thin films, Minghang Li, Hanqi Pi, Yunchi Zhao, Ting Lin, Qinghua Zhang, Xinzhe Hu, Changmin Xiong, Zhiyong Qiu, Lichen Wang, Ying Zhang, Jianwang Cai, Wuming Liu, Jirong Sun, Fengxia Hu, Lin Gu, Hongming Weng, Quansheng Wu, Shouguo Wang, Yunzhong Chen, Baogen Shen, Advanced Materials, 35(32): 2301339. (2023) [15]
2. Anomalous Nernst effect beyond the magnetization scaling relation in the ferromagnetic Heusler compound Co₂MnGa, Guin S N, Manna K, Noky J, et al, NPG Asia Materials, 11(1): 16 (2019) [16]

9.1 Co₂MnGa 反常能斯特系数计算

本节中，我们将以 Co₂MnGa 作为例子，演示如何计算反常能斯特系数。

► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/Co2MnGa
```

目录中有以下文件：

(1) wt.in-ane: WannierTools 计算反常能斯特系数的输入文件。在计算时请将其重命名

```
1 $ cp wt.in-ane wt.in
```

(2) Wannier90_hr.tar.gz: Co₂MnGa 的实空间哈密顿量，使用前请用以下命令解压

```
1 $ tar xzvf wannier90_hr.dat.tar.gz
```

(3) README.txt: 本例的说明文档

► 第 2 步：准备输入文件

wt.in 文件如下所示：

```

1 -- wt.in --
2 ...
3
4 &CONTROL
5 ANE_calc = T
6 /
7 ...
8
9 &PARAMETERS
10 Fermi_broadening = 0.01
11 OmegaNum = 901
12 OmegaMin = -1
13 OmegaMax = 1
14 Nk1 = 261      ! number k points odd number would be better
15 Nk2 = 261      ! number k points odd number would be better
16 Nk3 = 261      ! number k points odd number would be better
17 Tmin = 20
18 Tmax = 320
19 NumT = 33
20 /
21 ...

```

wt.in 文件中，几个重要的参数为：

(1) Eta_arc: 控制费米狄拉克函数的展宽，单位为 eV，假如用户给定的数值为 η ，最后的输出文件中包含展宽为 $0.1\eta, 0.2\eta, 0.4\eta, 0.8\eta, \eta, 2\eta, 4\eta, 8\eta, 10\eta$ 的结果，展宽太小可能导致数值不稳定。

(2) OmegaMin/OmegaMax/OmegaNum: 计算化学势在 $[E_{\text{FERMI}} + \Omega_{\text{Min}}, E_{\text{FERMI}} + \Omega_{\text{Max}}]$ 范围内的反常能斯特系数，化学势的取点数目为 OmegaNum。

(3) Tmin/TMax/NumT: 计算温度在 $[T_{\text{Min}}, T_{\text{Max}}]$ 范围内的反常能斯特系数，温度的取点数目为 NumT。

► 第 3 步：提交计算任务

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm

```

计算完成后，将会得到如下文件：

(1) alpha_ane_eta***.00meV.txt: 在某个展宽下的反常能斯特系数，单位为 $A/(m \cdot K)$ ，从左到右一共四列数据，依次为化学势（相对于 E_{FERMI} ）、温度、 α_{xy}^A 、 α_{yz}^A 和 α_{zx}^A 。

(2) alpha_ane.gnu: 画图脚本

► 第 4 步：作图

通过注释 alpha_ane.gnu 脚本中 “plot the temperature-dependent alpha_yx” 或者 “plot the chemical potential dependent alpha_yx” 下的内容，可以获得 α_{yx}^A 随化学势/温度变化的曲线，存储在 ane.pdf 中。

运行如下命令

```

1 $ gnuplot alpha_ane.gnu

```

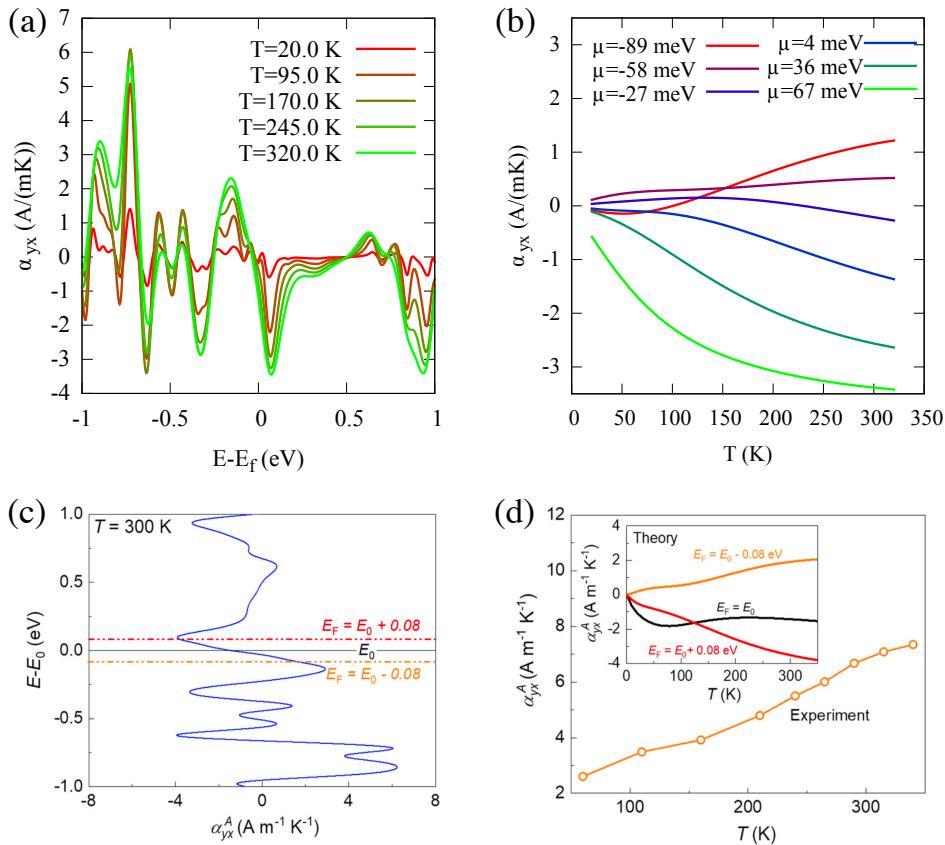


图 9.1: (a) 不同温度下, α_{yx} 随化学势的变化, 不同颜色的曲线表示不同的温度。(b) 移动化学势时, α_{yx} 随温度的变化, 不同颜色的曲线表示不同化学势下的结果。(c) $T=300$ K 时, α_{yx} 随化学势的变化, 图片取自 [16]。(d) 实验上 α_{yx} 随温度的变化, 小图是改变化学势、计算得到的 α_{yx} 随温度的变化, 图片取自 [16]。

得到下图, (a) 图结果和文献 [16]Fig.3(c) 一致。需要注意由于费米能级有微小差别, 因此本例中的化学势和文献中的化学势不能直接对应。

10 自旋霍尔电导率

本节我们将要介绍自旋霍尔电导率的基本方法，以 Pt 和 Co₃Sn₂S₂ 为例，展示如何利用 WannierTools 计算材料的 SHC。

参考文献

1. Intercorrelated anomalous Hall and spin Hall effect in kagome-lattice Co₃Sn₂S₂-based shandite films, Yong-Chang Lau, Junya Ikeda, Kohei Fujiwara, Akihiro Ozawa, Jiaxin Zheng, Takeshi Seki, Kentaro Nomura, Liang Du, Quansheng Wu, Atsushi Tsukazaki, Koki Takanashi, Physical Review B, 108(6): 064429. (2023) [13]

10.1 基本思想

自旋霍尔效应 (spin Hall effect, SHE) 是施加电场可产生横向纯自旋电流的现象。在具有强自旋轨道耦合的材料中，本征 SHE 对总 SHE 有重要贡献，可以基于 DFT 理论准确计算。根据 Kubo 公式，本征自旋霍尔电导率 (SHC) 可以写成

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{spinz}(\mu) = & \frac{\hbar}{VN_k^3} \sum_k \sum_n f(\epsilon_{nk} - \mu) \\ & \times \sum_{m \neq n} \frac{2Im[\langle nk | \hat{j}_x^{spinz} | mk \rangle \langle mk | - e\hat{v}_y | nk \rangle]}{(\epsilon_{nk} - \epsilon_{mk})^2 + \eta^2} \end{aligned} \quad (18)$$

10.2 Pt 自旋霍尔电导率计算

► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/Pt
```

目录中有以下文件：

wt.in：这是 WannierTools 的主输入文件。

Wannier90_hr.tar.gz：Pt 的实空间哈密顿量，使用前请解压：

```
1 $ tar xzvf wannier90_hr.dat.tar.gz
```

► 第 2 步：准备输入文件

wt.in 文件如下所示（可以根据自己的需要对文件中的相关参数进行修改）：

```
1 --                               wt.in
2 ...
3 &CONTROL
4 BulkBand_calc      = T
5 SHC_calc          = T
6 /
7
8 &SYSTEM
9 NumOccupied = 6           ! NumOccupied not used here but set it anyway
10 SOC = 1                 ! soc
11 E_FERMI = 11.3158       ! e-fermi in unit of eV
```

```

12 /
13
14 &PARAMETERS
15 Fermi_broadening = 0.05      ! infinite small value, like broadening in unit of eV,
   smearing
16 OmegaNum = 1001      ! omega number
17 OmegaMin = -10       ! energy interval min in unit of eV
18 OmegaMax = 10        ! energy interval max in unit of eV
19 Nk1 =21            ! number k points
20 Nk2 =21            ! number k points
21 Nk3 =21            ! number k points
22 /
23 ...
24 KCUBE_BULK
25 0.00 0.00 0.00    ! Original point for 3D k plane !-0.50 -0.50 - 0.50    ! Original
   point for 3D k plane
26 1.00 0.00 0.00    ! The first vector to define 3d k space plane
27 0.00 1.00 0.00    ! The second vector to define 3d k space plane
28 0.00 0.00 1.00    ! The third vector to define 3d k cube

```

对于自旋霍尔电导率 (SHC) 计算，比较关键的是以下参数的设置：

- (1) Eta_arc: 控制费米狄拉克函数的展宽，单位为 eV，假如用户给定的数值为 η ，最后的输出文件中包含展宽为 $0.1\eta, 0.2\eta, 0.4\eta, 0.8\eta, \eta, 2\eta, 4\eta, 8\eta, 10\eta$ 的结果，展宽太小可能导致数值不稳定。
- (2) SHC_calc: 控制是否计算体系的自旋霍尔电导率。如果 SHC_calc=T，则意味着开启自旋霍尔电导率的计算。如果 SHC_calc=F，则意味着关闭自旋霍尔电导率的计算。
- (3) SOC: 为整数，是自旋轨道耦合的标志。如果 SOC=0，则意味着在给定的紧束缚模型中不包含 SOC。如果 SOC=1 或 >0，则表示 SOC 已经包含在紧束缚模型中。

► 第 3 步：提交计算任务

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm

```

计算完成后，将会得到如下文件：

- (1) sigma_shc_eta***.00meV.txt: 在某个展宽下的自旋霍尔电导率，单位为 $(\hbar/e)(\Omega \cdot cm)^{-1}$ ，从左到右一共 28 列数据，分别为能量 (Energy (eV)) 和自旋霍尔电导率的各个分量值 (σ_{**}^*)。
- (2) sigma_shc.gnu: 画图脚本

► 第 4 步：作图

如果需要更加精细的图像，可以自己在画图脚本中进行更改，得到 sigma_shc.gnu0

```

1 $ gnuplot sigma_shc.gnu0

```

可以得到名为 sigma_shc.pdf 的图像：

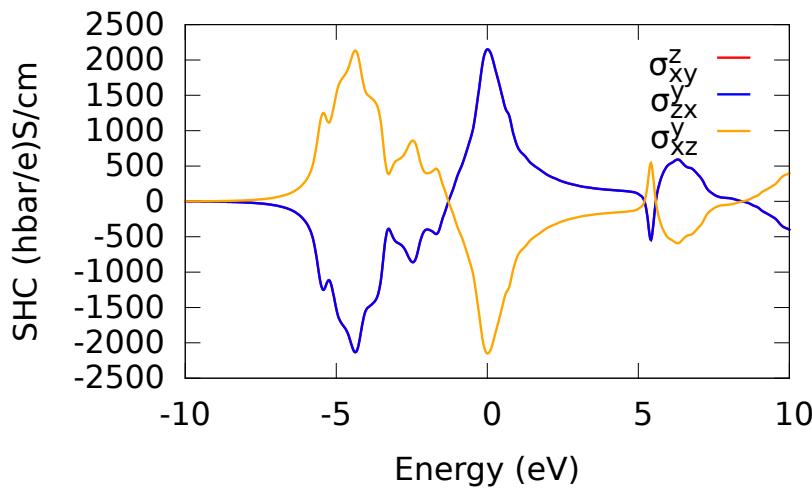


图 10.1: Pt-SHC 图像

Pt-SHC 计算的其他相关文献:

1. Intrinsic Spin Hall Effect in Platinum: First-Principles Calculations. DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.096401 [17]

2. Calculation of intrinsic spin Hall conductivity by Wannier interpolation. DOI: 10.1103/PhysRevB.98.214402 [18]

及其文章中对应的图像:

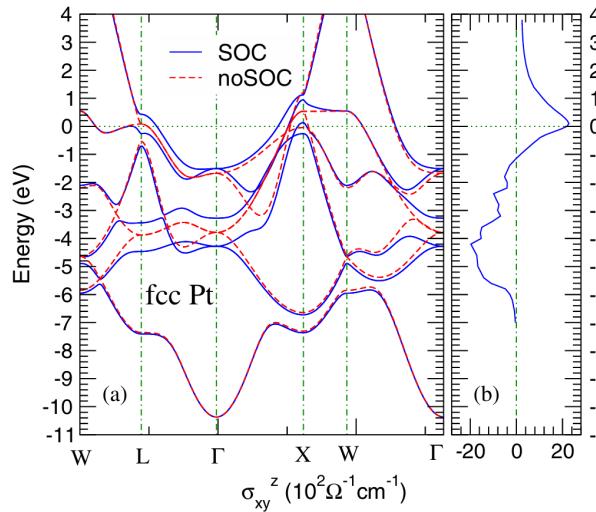


图 10.2: Pt-SHC 计算的其他相关文献 1

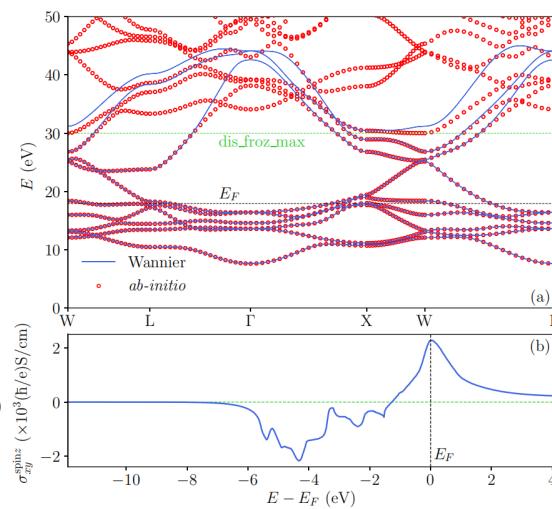


图 10.3: Pt-SHC 计算的其他相关文献 2

10.3 Co₃Sn₂S₂ 自旋霍尔电导率计算

► 第 1 步: 进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/Co3Sn2S2/non-magnetic
```

目录中有以下文件:

wt.in: 这是 WannierTools 的主输入文件。

Wannier90_hr.tar.gz: Co₃Sn₂S₂ 的实空间哈密顿量 (注意: 在获得实空间哈密顿量的过程中, 要保证 Co₃Sn₂S₂ 处于顺磁态), 使用前请解压:

```
1 $tar xzvf wannier90_hr.dat.tar.gz
```

► 第 2 步：准备输入文件

wt.in 文件如下所示（可以根据自己的需要对文件中的相关参数进行修改）：

```

1 --
2      wt.in
3 ...
4 &CONTROL
5 ! BulkBand_calc      = T
6 SHC_calc              = T
7 /
8
9 &SYSTEM
10 NumOccupied = 6          ! NumOccupied not used here but set it anyway
11 SOC = 1                  ! soc
12 E_FERMI = 8.3357        ! e-fermi in unit of eV
13 /
14 &PARAMETERS
15 Fermi_broadening = 0.01   ! infinite small value, like broadening in unit of eV,
   smearing
16 OmegaNum = 1001          ! omega number
17 OmegaMin = -1            ! energy interval min in unit of eV
18 OmegaMax = 1             ! energy interval max in unit of eV
19 Nk1 = 50                 ! number k points
20 Nk2 = 50                 ! number k points
21 Nk3 = 50                 ! number k points
22 /
23 ...
24 KCUBE_BULK
25 0.00 0.00 0.00    ! Original point for 3D k plane
26 1.00 0.00 0.00    ! The first vector to define 3d k space plane
27 0.00 1.00 0.00    ! The second vector to define 3d k space plane
28 0.00 0.00 1.00    ! The third vector to define 3d k cube

```

对于自旋霍尔电导率 (SHC) 计算，比较关键的是以下参数的设置：

- (1) **Eta_arc**: 控制费米狄拉克函数的展宽，单位为 eV，假如用户给定的数值为 η ，最后的输出文件中包含展宽为 $0.1\eta, 0.2\eta, 0.4\eta, 0.8\eta, \eta, 2\eta, 4\eta, 8\eta, 10\eta$ 的结果，展宽太小可能导致数值不稳定。
- (2) **SHC_calc**: 控制是否计算体系的自旋霍尔电导率。如果 **SHC_calc=T**，则意味着开启自旋霍尔电导率的计算。如果 **SHC_calc=F**，则意味着关闭自旋霍尔电导率的计算。
- (3) **SOC**: 为整数，是自旋轨道耦合的标志。如果 **SOC=0**，则意味着在给定的紧束缚模型中不包含 SOC。如果 **SOC=1** 或 **>0**，则表示 SOC 已经包含在紧束缚模型中。

► 第 3 步：提交计算任务

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm

```

计算完成后，将会得到如下文件：

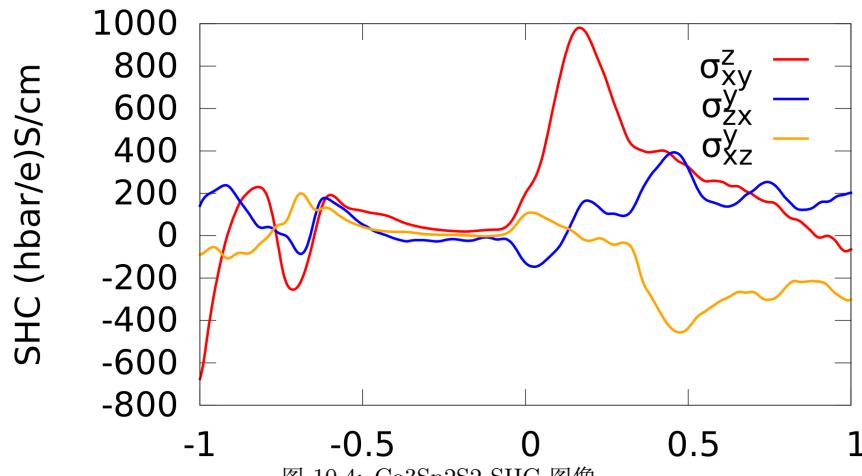
- (1) sigma_shc_eta***.00meV.txt：在某个展宽下的自旋霍尔电导率，单位为 $(\hbar/e)(\Omega \cdot cm)^{-1}$ ，从左到右一共 28 列数据，分别为能量 (Energy (eV)) 和自旋霍尔电导率的各个分量值 (σ_{**}^*)。
- (2) sigma_shc.gnu：画图脚本

► 第 4 步：作图

如果需要更加精细的图像，可以自己在画图脚本中进行更改，得到 sigma_shc.gnu0

```
1 $ gnuplot sigma_shc.gnu0
```

可以得到名为 sigma_shc.pdf 的图像：



我们的此项功能已经在文章 Intercorrelated anomalous Hall and spin Hall effect in kagome-lattice Co₃n₂S₂-based shandite films [19] 中有所体现。

11 由洛伦兹力引起的磁阻和普通霍尔效应

在本节中我们将以 Cu 为例，研究磁阻以及常规霍尔效应。在新版本的 Wanniertools 中，我们新增了提高计算精度的参数，这里我们将一并讨论，介绍精度控制参数的调控以及结果的收敛性判断，以尽可能避免使用者得出因计算误差带来的不合理结果。

参考文献

1. First-principles Methodology for studying magnetotransport in magnetic materials, Z Liu, S Zhang, Z Fang, H Weng, Q Wu arXiv preprint arXiv:2401.15146 [20]
2. New perspectives of Hall effects from first-principles calculations, SN Zhang, H Pi, Z Fang, H Weng, QS Wu arXiv preprint arXiv:2401.15150 [21]
3. First-principles methodology for studying magnetotransport in narrow-gap semiconductors: an application to Zirconium Pentatelluride ZrTe5, H Pi, S Zhang, Y Xu, Z Fang, H Weng, Q Wu arXiv preprint arXiv:2401.15151 [22]
4. Quantum oscillations and transport evidence of topological bands in La 3 Mg Bi 5 single crystals, Han X, Pi H, Yan D, et al. , Physical Review B, 108(7): 075157 (2023) [23]
5. Origin of large magnetoresistance in the topological nonsymmorphic semimetal TaSe3, Gatti G, Gosálbez-Martínez D, Wu Q S, et al, Physical Review B, 104(15): 155122 (2021) [24]
6. Extremely large magnetoresistance in the “ordinary” metal ReO3, Chen Q, Lou Z, Zhang S N, et al, Physical Review B, 104(11): 115104 (2021) [25]
7. Linear and quadratic magnetoresistance in the semimetal Si P 2, Zhou Y, Lou Z, Zhang S N, et al, Physical Review B, 102(11): 115145 (2020) [26]
8. Highly anisotropic interlayer magnetoresistance in ZrSiS nodal-line Dirac semimetal, Novak M, Zhang S N, Orbanić F, et al, Physical Review B, 100(8): 085137 (2019) [27]
9. Magnetoresistance from Fermi surface topology, Zhang S N, Wu Q S, Liu Y, et al, Physical Review B, 99(3): 035142 (2019) [28]

我们将本节分为 6 个小节，前 5 个小节分别给出不同场景下的磁阻及其霍尔效应计算的应用，最后一个小节进行精度控制的说明。

弛豫时间近似下常规霍尔电导的计算公式为：

$$\begin{aligned}\sigma_n^O / \tau_n &= e^2 \int_{\text{BZ}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left(-\frac{\partial f(\epsilon, T)}{\partial \epsilon} \right)_{\epsilon=\epsilon_n(\mathbf{k})} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \bar{\mathbf{v}}_n(\mathbf{k}), \\ \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_n(\mathbf{k}), \quad \bar{\mathbf{v}}_n(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^0 \frac{dt}{\tau_n} e^{t/\tau_n} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}(t)).\end{aligned}$$

11.1 固定磁场方向下的 $\rho_{xx}\tau$, $\rho_{yy}\tau$, $\rho_{zz}\tau$ 和 $\rho_{xy}\tau$

我们以磁场沿着 z 方向为例, 计算磁电阻张量并绘制 $\rho_{xx}\tau$, $\rho_{yy}\tau$, $\rho_{zz}\tau$ 和 $\rho_{xy}\tau$ 。

► 第 1 步: 进入工作目录, 创建新目录并准备 (复制) 输入文件

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/Cu
2 $ mkdir OHE-theta0
```

拷贝当前目录下的 wannier90_hr.dat_nsymm48 以及 wt.in-OHE-theta0 到新目录 OHE-theta0 下:

其中 wt.in 部分内容如下:

```
1 --
2         wt.in
3 .
4 &CONTROL
5 Boltz_OHE_calc      = T
6 Symmetry_Import_calc = T ! please set it to be true for magnetoresistance
7             calculation
8 /
9
10 &SYSTEM
11 SOC = 0           ! without soc : SOC=0; with soc : SOC=1
12 E_FERMI = 7.7083   ! e-fermi
13 Btheta= 0, Bphi= 90 ! magnetic field direction
14 NumOccupied = 6
15 /
16 &PARAMETERS
17 OmegaNum = 3       ! omega number
18 OmegaMin = -0.01    ! energy interval
19 OmegaMax = 0.01     ! energy interval E_i= OmegaMin+ (OmegaMax-OmegaMin)/(OmegaNum
20      -1)*(i-1)
21 EF_integral_range = 0.15 ! in eV, a broadening factor to choose the k points for
22             integration
23 Nk1 =41            ! Kmsh(1) for KCUBE_BULK
24 Nk2 =41            ! Kmsh(2) for KCUBE_BULK
25 Nk3 =41            ! Kmsh(3) for KCUBE_BULK
26 BTauNum= 100        ! Number of B*tau we calculate
27 BTauMax = 40.0      ! The maximum B*tau, starting from Btau=0.
28 Tmin = 30           ! Temperature in Kelvin
29 Tmax = 330          ! Temperature in Kelvin
30 NumT = 11            ! number temperature we calculate. T_i=Tmin+(Tmax-Tmin)*(i-1)/(
31             NumT-1)
32 Nslice_BTau_Max = 20000 ! default =5000
33 /
34 .
35 &SELECTEDBANDS
36 1
37 6
```

```

34
35 KCUBE_BULK
36 0.00 0.00 0.00 ! Original point for 3D k plane
37 1.00 0.00 0.00 ! The first vector to define 3d k space plane
38 0.00 1.00 0.00 ! The second vector to define 3d k space plane
39 0.00 0.00 1.00 ! The third vector to define 3d k cube

```

注意：

(1) OmegaMin 和 OmegaMax 用于移动费米能级, OmegaNum 为移动能量数目, 但移动范围应远小于 EF_integral_range (默认值为 0.05)。如需较大范围的移动, 应当直接更改 E_FERMI。

(2) SELECTEDBANDS 为对电导有贡献的能带 (费米能附近 EF_integral_range 范围内的能带)。可以一开始不设置该参数直接运行, 观察 WT.out 里输出语句: “However there are only N k points contribute to the conductance for band M”。M 为能带编号, N 为该条带落在费米能附近 EF_integral_range 内的 k 点数目。排除 N 为 0 或者极小值的能带编号, 取剩余的能带编号写入 SELECTEDBANDS。

► 第 2 步：运行任务，拷贝输出文件到上级目录

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm
3 $ cp rho_total_mu_0.00eV.dat ../rho_total_mu_0.00eV.dat-theta0
4 $ cd ..

```

rho_total_mu_0.00eV.dat 为输出文件, 以温度分块, 包含了 10 列数据, 第 1 列为 $B\tau$ 值, 2-9 列为电阻张量分量值。

► 第 3 步：绘制 $\rho_{xx}\tau(B\tau)$ 图

```
1 $ gnuplot rho.gnu
```

绘图见图11.1。

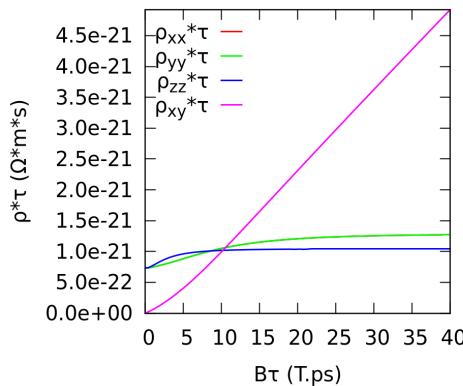


图 11.1: z 方向磁场下 $\rho_{xx}\tau$, $\rho_{yy}\tau$, $\rho_{zz}\tau$ 和 $\rho_{xy}\tau$ 随 $B\tau$ 的演化。

11.2 不同磁场方向下的 $\rho_{xx}\tau$

与上节类似, 计算磁场与 z 轴角度为 18° , 30° , 45° 下的磁电阻。

```

1 $ cd ~/wt2024/examples/Cu
2 $ mkdir OHE-theta18
3 $ cp wannier90_hr.dat_nsymm48 OHE-theta18/
4 $ cp wt.in-OHE-theta18 OHE-theta18/wt.in

```

```

5 $ cd OHE-theta18
6 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
7 $ sbatch sub-wt.slurm
8 $ cp rho_total_mu_0.00eV.dat ../rho_total_mu_0.00eV.dat-theta18
9 $ cd ..

```

其中 wt.in 的部分内容为：

```

1 --
2      wt.in
3 .
4 &SYSTEM
5 SOC = 0           ! without soc : SOC=0; with soc : SOC=1
6 E_FERMI = 7.7083   ! e-fermi
7 Btheta= 18, Bphi= 90 ! magnetic field direction
8 /
9 &PARAMETERS
10 OmegaNum = 1       ! omega number
11 OmegaMin = 0        ! energy interval
12 OmegaMax = 0        ! energy interval E_i= OmegaMin+ (OmegaMax-OmegaMin)/(OmegaNum-1)*(
13     i-1)
13 EF_integral_range = 0.15
14 .

```

对其他角度 Btheta 参数随之更改，重复操作，依次生成 rho_total_mu_0.00eV.dat-theta0, rho_total_mu_0.00eV.dat-theta18, rho_total_mu_0.00eV.dat-theta30, rho_total_mu_0.00eV.dat-theta45 4 个文件，最后运行 rhotheta.gnu

```

1 $ gnuplot rhotheta.gnu

```

绘图见图11.2。

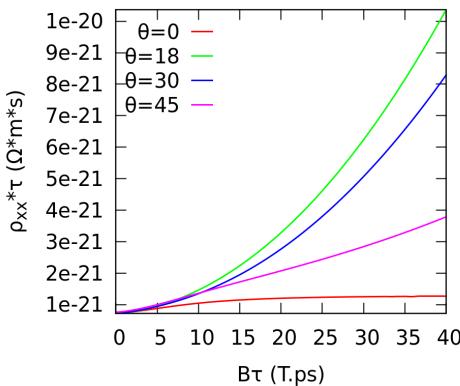


图 11.2：磁场在 yz 面内旋转时，与 z 轴夹角分别为 $0^\circ, 18^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ 时磁电阻 $\rho_{xx}\tau$ 随 $B\tau$ 的演化。

11.3 固定截面的等能线图

绘制等能线图，得到费米面截面的形状，可以和下一节倒空间电子运动轨迹图相互比较。

► 第 1 步：创建新目录并准备（复制）输入文件

```

1 $ cd ~/wt2024/examples/Cu
2 $ mkdir FS-contour

```

```

3 $ cp wannier90_hr.dat_nsymm48 FS-contour/
4 $ cp wt.in-FS-contour FS-contour/wt.in
5 $ cd FS-contour

```

其中 wt.in 文件部分设置如下：

```

1 --
2      wt.in
3 .
4 &CONTROL
5 BulkFS_Plane_calc      = T
6 /
7 &SYSTEM
8 SOC = 0                  ! without soc : SOC=0; with soc : SOC=1
9 E_FERMI = 7.7083         ! e-fermi
10 /
11
12 &PARAMETERS
13 Nk1 =201                 ! Kmesh(1)
14 Nk2 =201                 ! Kmesh(2)
15 .
16 KPLANE_BULK
17 Cartesian
18 0.00 0.00 0.00 ! Center point for 3D k plane
19 8.00 0.00 0.00 ! Eight times the first reciprocal lattice vector to define 3d k
                  space plane
20 0.00 8.00 0.00 ! Eight times the second reciprocal lattice vector to define 3d k
                  space plane

```

KPLANE_BULK 为所选截面，Nk1, Nk2 控制撒点密度。

► 第 2 步：运行并绘图

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm
3 $ gnuplot fs_kplane.gnu

```

绘图见图11.3。

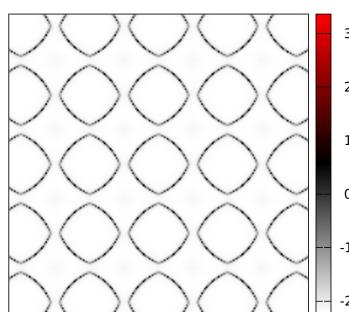


图 11.3: 固定截面下费米面的截线图。

11.4 磁场下倒空间以及实空间的电子运动轨迹

计算固定磁场方向下电子在倒空间和实空间的运动轨迹。

► 第 1 步：创建新目录并准备（复制）输入文件

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/Cu
2 $ mkdir OHE-evolve
3 $ cp wannier90_hr.dat_nsymm48 OHE-evolve/
4 $ cp wt.in-OHE-evolve OHE-evolve/wt.in
5 $ cd OHE-evolve
```

其中 wt.in 文件部分设置如下：

```
1 --
2      wt.in
3 .
4 &CONTROL
5 Boltz_evolve_k = T
6 /
7 &PARAMETERS
8 Nk1 = 51          ! Kmesh(1) for KCUBE_BULK
9 BTauNum= 100      ! Number of B*tau we calculate
10 BTauMax = 40.0    ! The maximum B*tau, starting from Btau=0.
11 Nslice_BTau_Max = 5000 ! default =5000
12 /
13 .
14 &SELECTEDBANDS
15 6
16
17 KPATH_BULK          ! k point path
18 1
19 G  0.00000  0.00000  0.00000  W  0.50000  0.00000  0.50000
```

KPATH_BULK 为撒点（起始 k 点）路径，Nk1 为路径撒点数目。

► 第 2 步：运行并提取数据

```
1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm
```

计算完成后生成 evolve_band_6.txt 文件，其中落在 EF_integral_range 范围内的起始 k 点（Starting k point）才有数据输出，挑选出有输出的起始 k 点数据保存为 K.txt 文件。注意，输出文件中的 2-7 列为当前坐标系下的结果，而 8-13 列是将磁场方向定为 z 轴方向后的新坐标系下的结果。

► 第 3 步：生成倒空间和实空间路径图

```
1 $ cp ./kpath.gnu .
2 $ cp ./lpath.gnu .
3 $ gnuplot kpath.gnu
4 $ gnuplot lpath.gnu
```

绘图见图11.4，其中倒空间路径图和上一节等能线图类似，说明电子在磁场下绕着费米面运动。

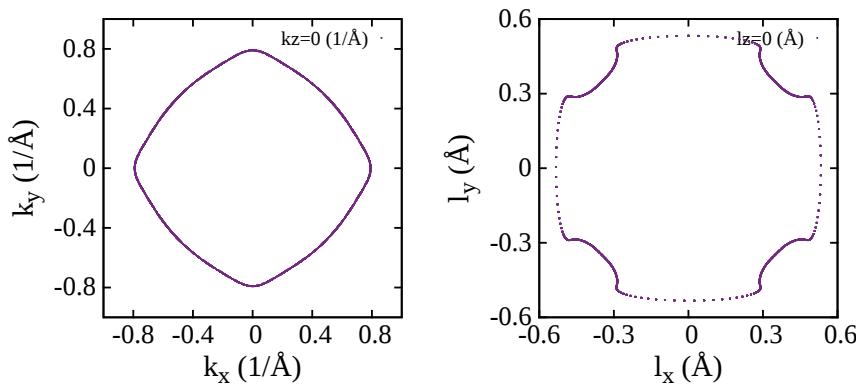


图 11.4: z 方向磁场下, 电子在 xy 面内运动的倒空间和实空间轨迹。

11.5 磁电阻的各向异性

磁电阻各向异性需要计算不同磁场方向下, 磁电阻值的变化。我们计算磁场在面内旋转时, 面内磁电阻以及面外磁电阻的角度依赖。

► 第 1 步: 进入工作目录并运行批量任务脚本

```

1 $ cd ~/wt2024/examples/Cu
2 $ cd AMR-xy
3 $ cp ../wannier90_hr.dat_nsymm48 .
4 $ chmod 777 xyplane.sh
5 $ ./xyplane.sh

```

目录下存在若干文件:xyplane.sh, AMR_rhoT.py, AMR_rhotheta.py, AMR_rhoxx.gnu, AMR_rhozz.gnu。其中 xyplane.sh 脚本用于批量提交任务, 以计算磁场在 xy 面内旋转时的磁电阻。内容如下:

```

1 --
2      xyplane.sh
3 #!/bin/bash
4
5 for ((iphi=0; iphi<=36; iphi++))
6 do
7
8 theta=90
9 phi=`echo "$iphi*5" |bc `
10 dir='Btheta'$theta'Bphi'$phi
11 echo $theta $phi $dir
12 mkdir $dir
13 cat >$dir/wt.in <<EOF
14 &TB_FILE
15 Hrfile = 'wannier90_hr.dat_nsymm48'
16 /
17
18 &CONTROL
19 Boltz_OHE_calc      = T
20 Symmetry_Import_calc = T ! please set it to be true for magnetoresistance
21   calculation
22 /

```

```

23 &SYSTEM
24 SOC = 0           ! without soc : SOC=0; with soc : SOC=1
25 E_FERMI = 7.7083 ! e-fermi
26 Btheta= $theta, Bphi= $phi    ! magnetic field direction
27 /
28
29 &PARAMETERS
30 OmegaNum = 1      ! omega number
31 OmegaMin = 0       ! energy interval
32 OmegaMax = 0       ! energy interval E_i= OmegaMin+ (OmegaMax-OmegaMin)/(OmegaNum-1)*(i-1)
33 EF_integral_range = 0.05 ! in eV, a broadening factor to choose the k points for integration
34 Nk1 =41           ! Kmsh(1) for KCUBE_BULK
35 Nk2 =41           ! Kmsh(2) for KCUBE_BULK
36 Nk3 =41           ! Kmsh(3) for KCUBE_BULK
37 BTauNum= 101      ! Number of B*tau we calculate
38 BTauMax = 10.0    ! The maximum B*tau, starting from Btau=0.
39 Tmin = 30          ! Temperature in Kelvin
40 Tmax = 120         ! Temperature in Kelvin
41 NumT = 4           ! number temperature we calculate. T_i=Tmin+(Tmax-Tmin)*(i-1)/(NumT-1)
42 Nslice_BTau_Max = 5000 ! default =5000
43 /
44 .....
45 SELECTEDBANDS
46 1
47 6
48
49 KCUBE_BULK
50 0.00 0.00 0.00   ! Original point for 3D k plane
51 1.00 0.00 0.00   ! The first vector to define 3d k space plane
52 0.00 1.00 0.00   ! The second vector to define 3d k space plane
53 0.00 0.00 1.00   ! The third vector to define 3d k cube
54 EOF
55
56 cat>$dir/wt-theta.sh<<EOF
57 #!/bin/bash
58 #SBATCH -J $phi
59 #SBATCH -p tyhctest
60 #SBATCH -N 1
61 #SBATCH --ntasks-per-node=2
62 #SBATCH -o out
63 #SBATCH -e error
64
65 module purge
66 module load compiler/intel/2021.3.0
67 module load mpi/intelmpi/2021.3.0
68
69 export I_MPI_PMI_LIBRARY=/opt/gridview/slurm/lib/libpmi.so

```

```

70 export PATH=~/wt2024/bin:$PATH
71
72 srun --mpi=pmi2 wt.x
73 EOF
74
75 cp wannier90_hr.dat_nsymm48 $dir/
76 cd $dir
77 sbatch wt-theta.sh
78 cd ..
79 done

```

该脚本第一部分：cat >\$dir/wt.in «EOF 用以生成不同角度的 wt.in 文件：Btheta= \$theta, Bphi= \$phi。这里我们固定 theta=90°，变化 phi。

脚本第二部分：cat>\$dir/wt-theta.sh«EOF 用以生成提交任务的 shell 脚本，请替换该部分为使用者所用的集群任务脚本提交到计算节点。

计算完成后，当前目录下生成一系列 Btheta90BphiM 的文件夹，M 为生成的角度值。

► 第 2 步：运行 python 脚本，提取整合数据

```
1 $ python AMR_rhoT.py
```

AMR_rhoT.py 脚本主程序可更改部分如下

```

1 --
2     AMR_rhoT.py
3 .....
4 if __name__ == '__main__':
5     number=1 #Btheta as the variable, number=0; Bphi as the variable, number=1
6 .....
7     #dir_name = 'Btheta' + str(dir_name_num) + 'Bphi90'
8     dir_name = 'Btheta90'+ 'Bphi' + str(dir_name_num)

```

根据实际情况进行更改，若批量提交的文件夹名称 (BthetaNBphiM) 可变部分是 BthetaN, number=0；可变部分是 BphiM, number=1。相应地，dir_name 也应根据实际情况进行修改。

运行后出现名为 rho 的文件夹，包含了数据提取整合后不同温度的数据文件 “*K.dat”，每个数据文件按照角度值进行了分块。可以根据个人需要绘制固定温度时，不同角度下的磁电阻随 $B\tau$ 的变化曲线。这里我们进行进一步数据整合，以绘制固定温度时，不同磁场下的磁电阻随角度的变化曲线。

```

1 $ cp AMR_rhodata.py rho/
2 $ cd rho/
3 $ python AMR_rhodata.py

```

AMR_rhodata.py 脚本主程序可更改部分如下

```

1 --
2     AMR_rhodata.py
3 .....
4 if __name__ == '__main__':
5     theta_interval=5
6     Btau_show=6
7     Btau_num=101

```

```

7 Btau_max=10
8 Btau_list=np.linspace(0,Btau_max,Btau_num)
9 Btau_interval=int((Btau_num-1)/(Btau_show-1))
10 Btau_choose=Btau_list [::Btau_interval]
11 .....

```

theta_interval 代表磁场从 0° 开始增大的角度间隔, Btau_show 代表想要展示的磁场数目, Btau_num 和 Btau_max 为 wt.in 文件对应的 BTauNum 和 BTauMax 值。请根据 wt.in 的实际设定参数更改以上部分。如果你的磁场不是从 0 度开始计数, 请更改函数 extract_rho_theta 中的第三行。

运行后出现名为 rhotheta 的文件夹, 包含了数据文件 “*K_Btau.dat”, 每个数据文件按照磁场的值 Btau_choose 进行了分块。

► 第 3 步: 绘制磁电阻各向异性图

进入 rhotheta 文件夹, 拷贝画图脚本到该文件夹并运行

```

1 $ cd rhotheta/
2 $ cp ../../AMR_rhoxx.gnu ../../AMR_rhozz.gnu ./
3 $ gnuplot AMR_rhoxx.gnu
4 $ gnuplot AMR_rhozz.gnu

```

绘图见图11.5。

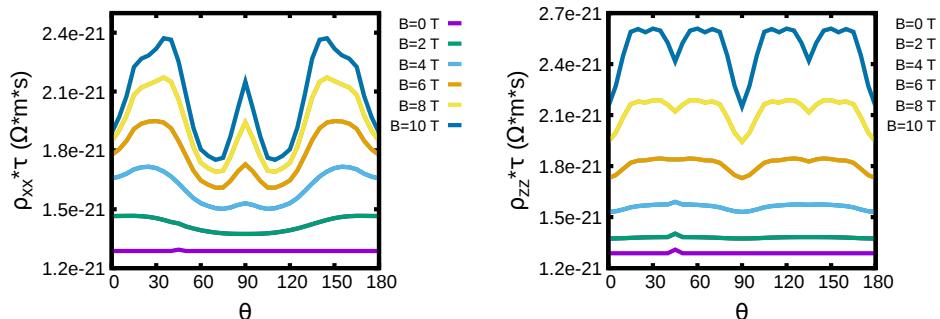


图 11.5: 磁场在 xy 面内旋转, 温度为 90K 时 $\rho_{xx}\tau$, $\rho_{zz}\tau$ 随 $B\tau$ 的演化。为了提高计算精度, Nk1, Nk2, Nk3 增大到 81。对于不同的计算精度, 请自行更改 gnu 脚本中 yrange 范围。

11.6 精度控制说明

► RKF45_PERIODIC_LEVEL (新增参数)

Wanniertools 中磁阻的计算需要进行电子运动轨迹的求解, 电子轨迹计算精度直接影响计算结果。在离散的时间序列中, 如果电子某一时刻的倒空间位置与初始点距离小于设定值, 即认为该点与初始点重合视为同一点, 剩余的时间序列不再计算而是周期性重复已计算的序列。RKF45_PERIODIC_LEVEL 用于调控该距离设定值, 调控值越大, 距离设定值越小, 计算越精确。可以在 WT.out 观察序列长度 (icycle), 如果过小请增大 RKF45_PERIODIC_LEVEL 的值。默认值为 1。对于费米面口袋很大的体系 (大部分金属体系), 使用默认值即足够。

► EF_integral_range

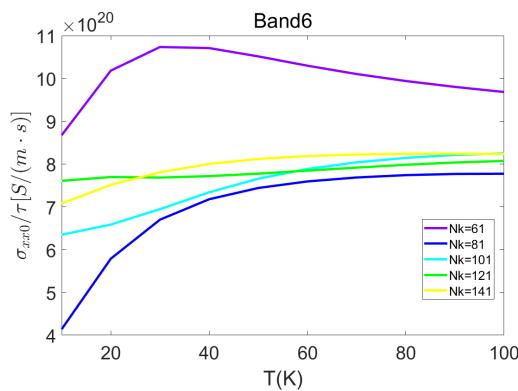
用以决定费米面附近多大能量范围内的 k 点被用以参与电导的计算。根据费米分布函数随温度变化的特性，经过测试推荐使用以下公式来决定 EF_integral_range 的大小：

$$\text{EF_integral_range} \approx \frac{T}{300\text{K}} \times 0.026\text{eV} \times 5$$

T 为所计算温度范围内的最大温度。默认为 0.05 (eV)，适用于 100K 左右的温度。

► Nk1,Nk2,Nk3

控制倒空间散点数目。尤其在温度较低时由于费米分布函数导数较为尖锐，应当适当增大散点数目。可以仅设置一个磁场点 (BTauMax=0, BTauNum=1)，比较不同的 N_k 大小电导值进行收敛性判断。例如 Cu 的电导在低温区的收敛性判断绘图如下：



温度不太低时如 50K 以上 $N_{k1}=N_{k2}=N_{k3}=N_k=81$ 时即具有较好的收敛性；而温度小于 50K 时， N_k 增大到 121 时具有较好的收敛性。

► Nslice_BTau_Max

电子运动轨迹点序列切片数。该值越大，相邻两个轨迹点之间距离越小，在进行平均速度的积分时精度越高。与 RKF45_PERIODIC_LEVEL 共同决定平均速度积分的精度。默认为 5000。RKF45_PERIODIC_LEVEL 的调控优先级高于 Nslice_BTau_Max。如果计算结果出现负磁阻，请尝试调节这两项参数。

12 朗道能级计算

参考文献：

1. Periodic Landau gauge and quantum Hall effect in twisted bilayer graphene, Yasumasa Hasegawa and Mahito Kohmoto, Phys. Rev. B 88, 125426 (2013) [29]
2. Landau Levels as a Probe for Band Topology in Graphene Moiré Superlattices, QuanSheng Wu, Jianpeng Liu, Yifei Guan, and Oleg V. Yazyev, Phys. Rev. Lett. 126, 056401 (2021) [30]

通过沿着一个晶格矢量施加均匀磁场，朗道能级谱可以通过 Peierls 代换来计算。在这里我们以正方晶格为例子简单说明一下外部磁场作用下对跃迁能相位的改变。

在没有外部磁场的作用下，体系的哈密顿量可以写成

$$H = - \sum_{i,j} (t_{ij} c_j^\dagger c_i + h.c.). \quad (19)$$

当我们沿垂直正方晶格平面的方向加磁场 H 时，穿过的磁通

$$\Phi = HS = \frac{p}{q} \Phi_0, \quad (20)$$

上式中， $\phi_0 = h/e$ 是单位磁通， p 和 q 是互质的整数。同时，外部场的存在将导致跃迁项 t 中出现额外的相位，使哈密顿量变成：

$$H = - \sum_{i,j} (e^{i\theta_{ij}} t_{ij} c_j^\dagger c_i + h.c.), \quad \theta_{i,j} = \frac{2\pi}{\phi_0} \int_{r_i}^{r_j} A dl. \quad (21)$$

通常的朗道规范写成以下的形式

$$\mathbf{A}^{(L)} = H x \hat{\mathbf{y}}, \quad (22)$$

其中 $\hat{\mathbf{y}}$ 是沿 y 方向的单位向量，与 y 无关。但是通常的朗道规范无法保证系统的周期性。在 WannierTools 中，我们采用周期 Landau 规范。正方晶格中的周期性朗道规范 [29]

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{(pL)} &= H [x \hat{\mathbf{y}} - \nabla(\lfloor x \rfloor y)] \\ &= H \left((x - \lfloor x \rfloor) \hat{\mathbf{y}} - y \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n + \epsilon) \hat{\mathbf{x}} \right) \end{aligned} \quad (23)$$

因为 $\nabla \times \nabla(\lfloor x \rfloor y) = 0$ ，我们可以得到与通常的朗道规范相同的磁场大小。(我们可以用近似函数 $x - \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin(2\pi kx)}{k}$ 来表示 $\lfloor x \rfloor$ ，而这个近似函数可以求得梯度， $\nabla(\lfloor x \rfloor y) = y(1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos(2\pi kx)) \hat{\mathbf{x}} + [x - \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin(2\pi kx)}{k}] \hat{\mathbf{y}}$ ，梯度结果可以通过取无限来逼近。)

在下图12.1 [29] 中标出了通常的朗道规范和周期性朗道规范下对应的相位：

当磁场施加到二维晶格的垂直方向时，能带将分裂成朗道能级。当磁场从零通量增加到每晶胞 2π 通量时，能级的演化将形成霍夫施塔特蝴蝶 (HB) 图像。

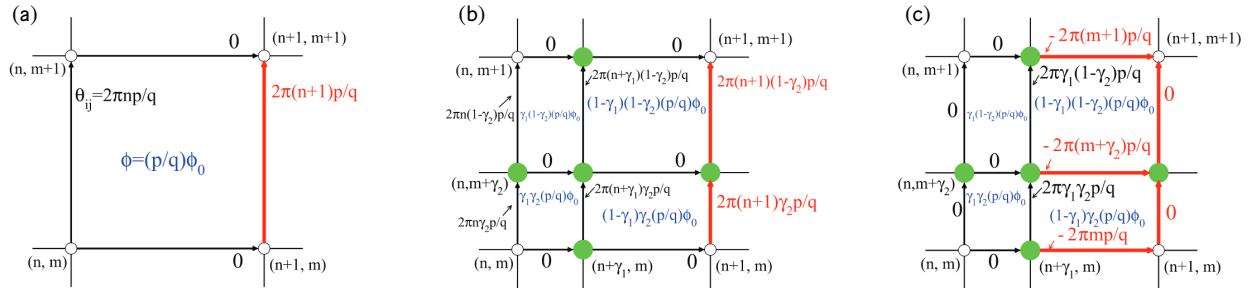


图 12.1: (a) 箭头旁边的数字是单位晶胞中通量为 $(p/q)\phi_0$ 的方晶格的常用朗道规范中的相位。该系统在 x 方向上是周期性的，周期为 q 。(b) 在 $(n + \gamma_1, m)$ 、 $(n, m + \gamma_2)$ 和 $(n + \gamma_1, m + \gamma_2)$ 处添加位点，其中 n 和 m 是整数， $0 < \gamma_1 < 1$ 且 $0 < \gamma_2 < 1$ (实心绿色圆圈)。蓝色字母是矩形中的通量。仅当 γ_2 为有理数时，系统才是周期性的。(c) 周期朗道规范中的相位 (箭头旁边) 和通过矩形 (蓝色字母) 的通量。该系统在 x 方向上具有周期性，周期为 1，在 y 方向上具有周期 q 。[29]

在本教程中，我们将主要研究石墨烯，而不是扭曲的双层石墨烯，因为石墨烯晶胞中只有 2 个轨道。获得扭曲的双层石墨烯 (TBG) 系统的 Landau 能级谱的过程是相同的，但需要更多的计算资源。

12.1 磁超胞的边界态

在 WannierTools 中，我们重新定义了磁超胞的坐标，这里我们以正方晶格为例子进行说明，如下图12.2所示：

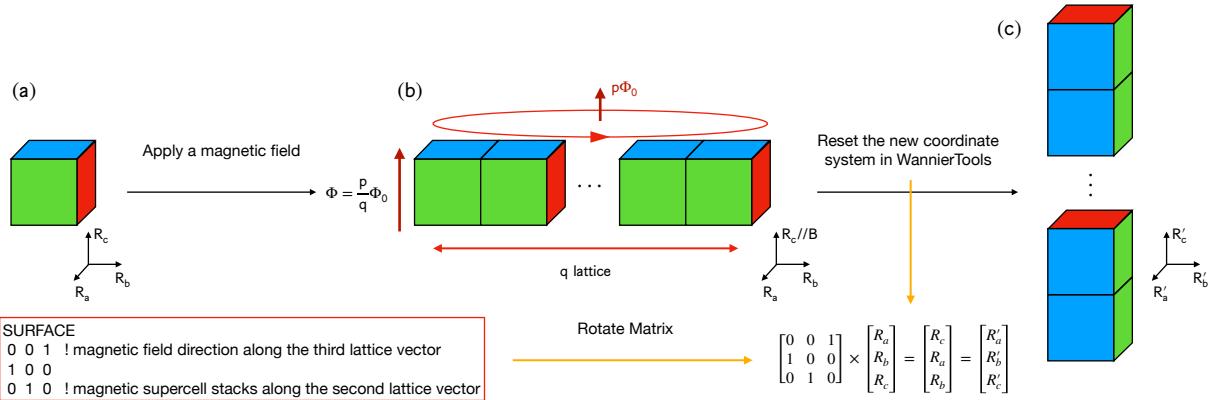


图 12.2: 我们初始是一个 (a) 正方晶格， $R_{a,b,c}$ 分别代表晶格基矢的三个方向。(b) 我们沿着晶格基矢 R_c 增加了磁场 B ，穿过的磁通为 $\Phi = \frac{p}{q}\Phi_0$ ，相当于在晶格基矢 R_b 方向扩胞 q 倍，穿过的整个磁通为 $p\Phi_0$ 。(c) 我们在 wt.in 中的 SURFACE 模块设置了旋转矩阵，磁超胞在旋转之后有了新的晶格基矢，将原坐标系下的 R_a ， R_b 和 R_c 转到新坐标系下的 R'_b ， R'_c 和 R'_a 。在程序中我们的 k 点是在新的晶格基矢下指定的。

我们在新的坐标系下计算磁超胞的边界态，计算的边界是图12.2b(c) 中磁超胞左右 (下上) 两个边界。我们可以在“CONTROL”名称列表中设置标签“LandauLevel_k_calc=T”，“landau_chern_calc=T”和“LandauLevel_wavefunction_calc=T”。

下面我们要计算 $\Phi/\Phi_0=10/10, 10/20, \dots, 10/60$ 这 6 种情况下对应的能带图，下面给出 $\Phi/\Phi_0=10/30$ 的 wt.in 的输入例子。其中比较重要的参数分别是 NSLAB 和 Magp，代表磁超胞的大小和 WannierTools 将计算从通量 0 到 $(Magp-1)/Nslab \times \Phi_0$ 朗道能级。

► 进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/Graphene/landaulevel
```

► 准备 wt.in 文件

目录下有现有的文件 wt.in-landaulevel-k-10_30，我们将此重命名为 wt.in

```
1 $ cp wt.in-landaulevel-k-10_30 wt.in
```

根据自己的需要修改 wt.in 里面对应的内容

```

1 --
2      wt.in
3 &CONTROL
4 LandauLevel_k_calc = T
5 LandauLevel_wavefunction_calc=T ! Wavefunction of landaulevel
6 landau_chern_calc=T           ! Weights of two edges
7 /
8
9 &SYSTEM
10 NSLAB = 30      ! magnetic supercell size
11 SOC = 0          ! There is no SOC in the hr.dat
12 E_FERMI = -1.2533    ! e-fermi
13 /
14 &PARAMETERS
15 OmegaMin = -8.      ! energy interval
16 OmegaMax = 12.      ! energy interval
17 Nk1 = 52           ! number k points
18 Magp= 10      ! magnetic field flux=Magp/Nslab*\Phi_0
19 /
20
21 SURFACE
22 0 0 1      ! magnetic field direction along the third lattice vector
23 1 0 0
24 0 1 0
25
26 KPATH_BULK          ! k point path
27 6             ! number of k line only for bulk band
28 -Z -0.50000 0.00000 0.00000 G 0.00000 0.00000 0.00000
29 G 0.00000 0.00000 0.00000 Z 0.50000 0.00000 0.00000
30 -X 0.00000 -0.50000 0.00000 G 0.00000 0.00000 0.00000
31 G 0.00000 0.00000 0.00000 X 0.00000 0.50000 0.00000
32 -Y 0.00000 0.00000 -0.50000 G 0.00000 0.00000 0.00000
33 G 0.00000 0.00000 0.00000 Y 0.00000 0.00000 0.50000

```

注意：我们这里的 KPATH 指定的 k 点是在新的坐标系下。比如我们想要计算在原坐标系下 $\Gamma(0, 0, 0)$ 到 $Z(0, 0, 0.5)$ 路径下的能带，那么我们应该在 KPATH_BULK 中这样设置：

```
1 G 0.00000 0.00000 0.00000 Z 0.50000 0.00000 0.00000
```

► 提交计算任务

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm

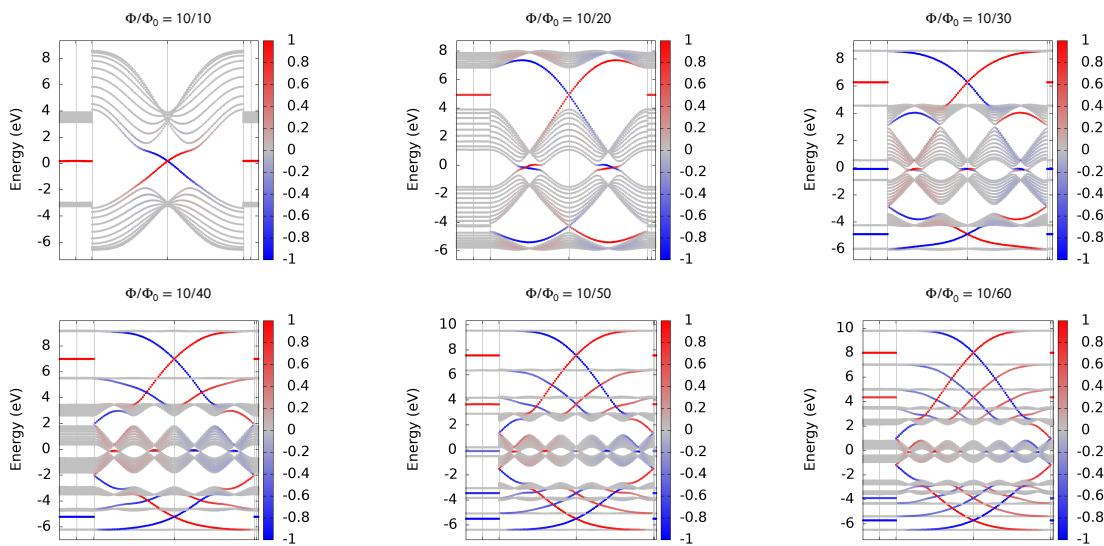
```

我们将会得到 landaulevel_k.gnu 和 landaulevel_k.dat 这两个文件。

► 通过 Gnuplot 将结果可视化

可以根据自己的需要修改.gnu 里面的参数。

```
1 $ gnuplot landaulevel_k.gnu
```



KPATH : $-Z \leftrightarrow \Gamma \leftrightarrow Z | -X \leftrightarrow \Gamma \leftrightarrow X | -Y \leftrightarrow \Gamma \leftrightarrow Y$

图 12.3：我们在指定 k 点的路径为 $-Z \leftrightarrow \Gamma \leftrightarrow Z | -X \leftrightarrow \Gamma \leftrightarrow X | -Y \leftrightarrow \Gamma \leftrightarrow Y$ 的情况下，分别画出在 $\Phi/\Phi_0=10/10, 10/20, \dots, 10/60$ 这 6 种情况下对应的能带图。我们可以看到随着 Φ/Φ_0 的分母变大，平带变得越平，同时数量也变多。边界态在平带之间能够清楚地看到，蓝色和红色的边界态分别代表图 12.2b(c) 中磁超胞左右（下上）两个边界。

在图 12.3 中我们可以看到，路径 $-Y \leftrightarrow \Gamma \leftrightarrow Y$ 随着 Φ/Φ_0 的分母增大而长度变小，这是因为随着分母增大，原胞沿着 R_b 的方向扩胞的倍数增大，这意味着在倒格空间对应的倒格矢 $(-Y \leftrightarrow \Gamma \leftrightarrow Y)$ 变小。两个平带之间的边界态数量对应着这个 gap 的陈数大小。

12.2 计算 HB 图像

我们有两种方法可以获得 HB 图像。

第一种是通过在“CONTROL”名称列表中设置标签“LandauLevel_B_calc=T”来精确对角化磁哈密顿量。

第二种是通过设置标签“LandauLevel_B_dos_calc=T”来使用 Lanczos 方法。

12.2.1 精确对角化

► 进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/Graphene/landaulevel
```

► 准备 wt.in 文件

```
1 $ cp wt.in-landaulevel-B wt.in
```

打开 wt.in 文件查看，根据自己的需要修改参数：

```
1 --  
2      wt.in  
3 &CONTROL  
3 LandauLevel_B_calc = T      ! Hofstadter butterfly by diagonalization
```

```

4 /
5
6 &SYSTEM
7 NSLAB = 400      ! magnetic supercell size
8 SOC = 0           ! There is no SOC in the hr.dat
9 E_FERMI = -1.2533 ! e-fermi
10 /
11
12 &PARAMETERS
13 OmegaMin = -8.    ! energy interval
14 OmegaMax = 12.     ! energy interval
15 Magp= 100         ! magnetic field flux=Magp/Nslab*\Phi_0
16 /
17
18 SURFACE
19 0 0 1      ! magnetic field direction along the third lattice vector
20 1 0 0
21 0 1 0

```

► 提交计算任务

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm

```

我们将会得到 landaulevel_B.gnu 和 landaulevel_B.dat 这两个文件

► 通过 Gnuplot 将结果可视化

可以根据自己的需要修改.gnu 里面的参数，这里提供了修改过的 landaulevel_B.gnu0。

```
1 $ gnuplot landaulevel_B.gnu0
```

可以得到名为 landaulevel_B.png 的图像12.4:

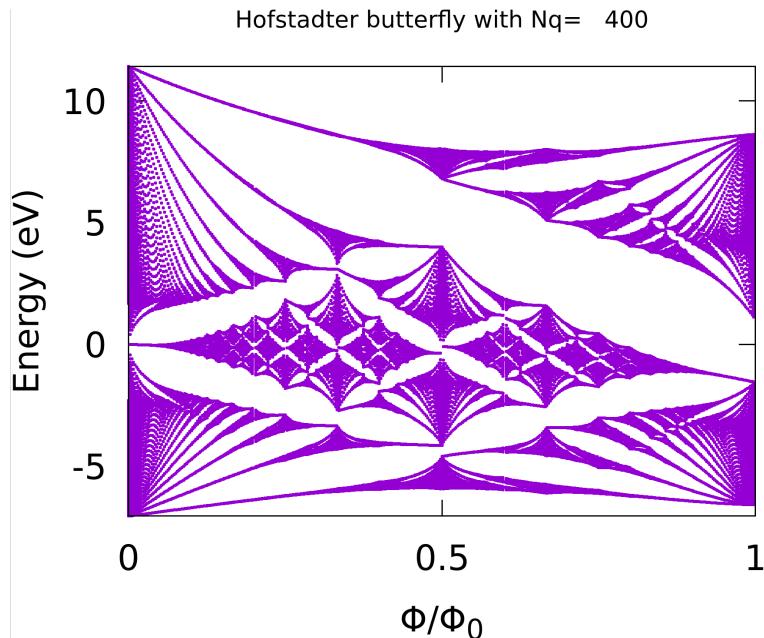


图 12.4: 磁场大小随着 $\Phi/\Phi_0=0/400, 1/400, \dots, 399/400$ 改变的 HB 图像

12.2.2 Lanczos 方法

► 进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/Graphene/landaulevel
```

► 准备 wt.in 文件

```
1 $ cp wt.in-landaulevel-B-dos wt.in
```

```

1 --
2           wt.in
3 &CONTROL
4 LandauLevel_B_dos_calc = T      ! Hofstadter butterfly by Lanczos method
5 /
6 &SYSTEM
7 NSLAB = 400      ! magnetic supercell size
8 SOC = 0          ! There is no SOC in the hr.dat
9 E_FERMI = -1.2533    ! e-fermi
10 /
11 &PARAMETERS
12 Fermi_broadening = 0.1      ! infinite small value, like broadening
13 iso_energy = 0.00          ! energy for calculate Fermi Arc
14 OmegaNum = 1001            ! omega number
15 OmegaMin = -8.              ! energy interval
16 OmegaMax = 12.              ! energy interval
17 Magp= 400      ! magnetic field flux=Magp/Nslab*\Phi_0
18 NumRandomConfs = 10      ! Number of random initial Lanczos vectors used in the Lanczos
19                         .method.
20 /
21 &SURFACE
22 0 0 1      ! magnetic field direction along the third lattice vector
23 1 0 0
24 0 1 0
25

```

► 提交计算任务

```
1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm
```

我们将会得到 LandauLevel_B_dos.gnu , LandauLevel_B_dos.dat, wannierdiagram.gnu 和 wannierdiagram.dat 这 4 个文件。

【注: 这时如果你直接运行命令 gnuplot wannierdiagram.gnu, 你会得到一个波动较大的 wannierdiagram.png, 这是因为在这里得到的 wannierdiagram.dat 并没有进行归一化处理。为了让图变得美观, 你可以对 wannierdiagram.dat 这个文件进行归一化处理, 比如在以上参数的情况下, 在 wannierdiagram.dat 文件中给定磁场下, 得到 1001 个 n, 计算每一个 n 与在这个磁场下最小的 n (即第一个 n) 的差值, 然后就可以得到在这个磁场下的一系列差值, 然后除以在

这个磁场下最大的差值（即最后一个 n 与第一个 n 的差值），就可以得到归一化的 wannierdiagram.dat。在这里我们提供了用以上 wt.in 计算得到的 wannierdiagram_norm.dat 和对应的画图脚本 wannierdiagram_norm.gnu】

▶ 通过 Gnuplot 将结果可视化

可以根据自己的需要修改.gnu 里面的参数，这里提供了 landaulevel_B_dos.gnu0 和 wannierdiagram_norm.gnu 两个画图脚本分别对应 LandauLevel_B_dos.dat 和 wannierdiagram.dat 这两个文件。

```
1 $ gnuplot LandauLevel_B_dos.gnu0
2 $ gnuplot wannierdiagram_norm.gnu
```

可以分别得到名为 LandauLevel_B_dos.png 和 wannierdiagram.png 的图像12.5和12.6:

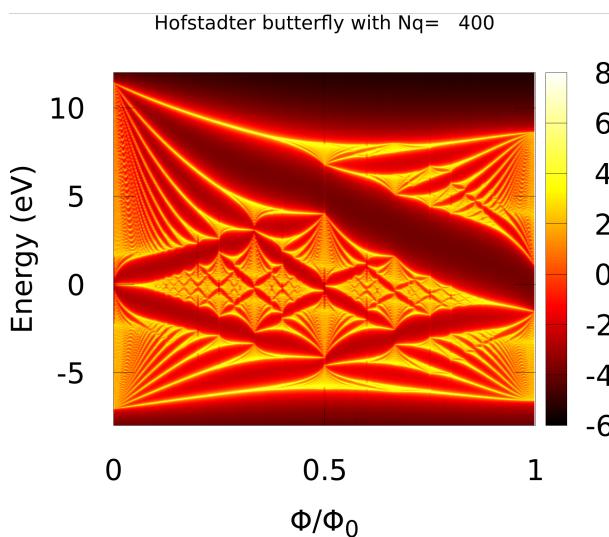


图 12.5: 磁场大小随着 $\Phi/\Phi_0=0/400, 1/400, \dots, 399/400$ 改变的 HB 图像

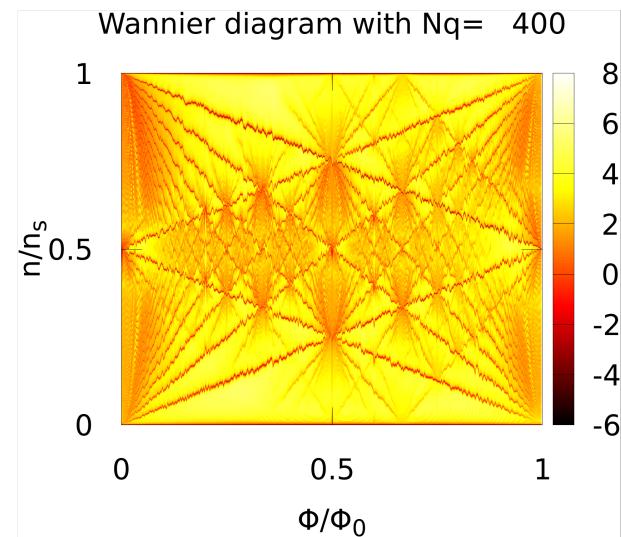


图 12.6: 磁场大小随着 $\Phi/\Phi_0=0/400, 1/400, \dots, 399/400$ 改变的 HB 图像， n/n_s 代表磁超胞的归一化载流子密度。

我们可以看到 landaulevel_B_dos.png 和 landaulevel_B.png 是相同的。wannierdiagram.png 里的红线对应朗道能级之间的 gap，这些红线的斜率可以代表对应 gap 的陈数大小。

为了增加图12.5和12.6的光滑程度，我们有两种方法：

第一种是增加 NSLAB 的大小；

第二种是增加 NumRandomConfs 的大小。

如果因为增加了这两个参数导致内存过大，而无法运行，那么我们可以设定较小的 NumRandomConfs，然后运行多次。比如我们可以设置 NumRandomConfs=5，然后分别运行 10 次，得到 10 个 wannierdiagram.dat，然后对这 10 个 wannierdiagram.dat 内对应的数据求平均，这样的得到的效果与 NumRandomConfs 设置为 50 的效果是一样的。

12.3 不同 K 点的 HB 图像

上面的 HB 图像中都是在默认的 k 点 (0, 0, 0) 上求得的，我们可以 wt.in 中，添加 “SINGLEKPOINT_3D” 这一模块来实现在指定 k 点进行 HB 图像计算。

▶ 进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/3DWeyl-model/landaulevel
```

► 准备 wt.in 文件

```
1 $ cp wt.in-landaulevel-B_0.5 wt.in
```

打开 wt.in 文件，添加“SINGLEKPOINT_3D”模块，这里我们指定在 k 点 (0.5, 0, 0) 上进行计算：

```

1 --
2      wt.in
3 &CONTROL
4 LandauLevel_B_calc = T          ! Hofstadter butterfly by diagonalization
5 /
6 &SYSTEM
7 NSLAB = 100      ! magnetic supercell size
8 SOC = 0           ! There is no SOC in the hr.dat
9 E_FERMI = -1.2533      ! e-fermi
10 /
11 &PARAMETERS
12 Magp= 100      ! magnetic field flux=Magp/Nslab*\Phi_0
13 /
14
15
16 SURFACE
17 0 0 1      ! magnetic field direction along the third lattice vector
18 1 0 0
19 0 1 0
20
21 SINGLEKPOINT_3D
22 Direct
23 0.5 0 0

```

► 提交计算任务

```
1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm
```

► 通过 Gnuplot 将结果可视化

可以根据自己的需要修改.gnu 里面的参数，这里提供了修改过的 landaulevel_B_0.5.gnu。

```
1 $ gnuplot landaulevel_B_0.5.gnu
```

我们也可以计算在 Weyl 点的 HB 图像，我们可以通过设置“FindNodes_calc = T”来找到 Weyl 点。

► 进入工作目录

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/3DWeyl-model/landaulevel
```

► 准备 wt.in 文件

```
1 $ cp ../wt.in-findnodes wt.in
```

► 提交计算任务

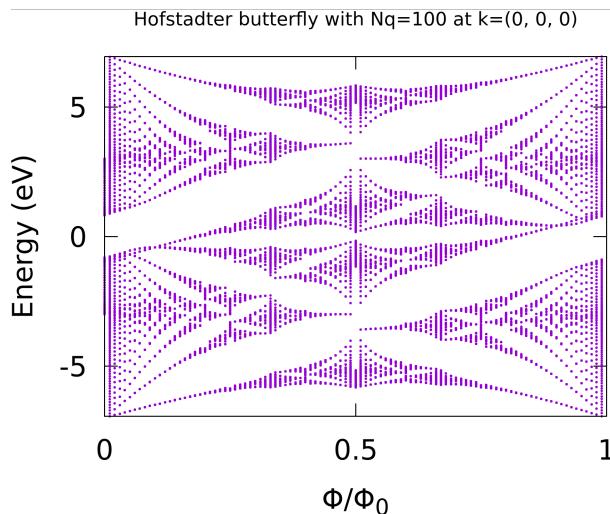


图 12.7: 磁场大小在 k 点 $(0, 0, 0)$ 随着 $\Phi/\Phi_0=0/100, 1/100, \dots, 99/100$ 改变的 HB 图像

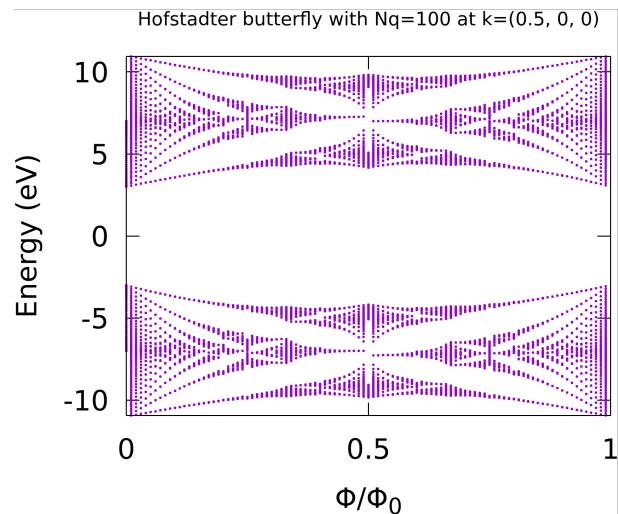


图 12.8: 磁场大小 $(0.5, 0, 0)$ 随着 $\Phi/\Phi_0=0/100, 1/100, \dots, 99/100$ 在 k 点改变的 HB 图像

```
1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm
```

根据计算得到的 Nodes.dat 文件, 我们可以得到 Weyl 点在原分数坐标系下位于 $(0, 0, 0.166667)$ 和 $(0, 0, -0.166667)$, 即在新的坐标系下位于 $(0.166667, 0, 0)$ 和 $(-0.166667, 0, 0)$ 这两个位置。

下面我们计算在 Weyl 点的 HB 图像, 计算的步骤与上面展示在 k 点 $(0.5, 0, 0)$ 计算的步骤相同, 只不过把 k 点改成对应的 Weyl 的坐标, 下面以 0.166667 为例子。

►准备 wt.in 文件

```
1 $ cp wt.in-landaulevel-B_0.1667 wt.in
```

打开 wt.in 文件, 添加 “SINGLEKPOINT_3D” 模块, 这里我们指定在 k 点 $(0.166667, 0, 0)$ 上进行计算:

```
1 --
2      wt.in
3 &CONTROL
4 LandauLevel_B_calc = T           ! Hofstadter butterfly by diagonalization
5 /
6 &SYSTEM
7 NSLAB = 100      ! magnetic supercell size
8 SOC = 0          ! There is no SOC in the hr.dat
9 E_FERMI = -1.2533      ! e-fermi
10 /
11 &PARAMETERS
12 OmegaMin = -8.      ! energy interval
13 OmegaMax = 12.      ! energy interval
14 Magp= 100      ! magnetic field flux=Magp/Nslab*\Phi_0
15 /
16 &SURFACE
```

```

19 0 0 1 ! magnetic field direction along the third lattice vector
20 1 0 0
21 0 1 0
22
23 SINGLEKPOINT_3D
24 Direct
25 0.166667 0 0

```

► 提交计算任务

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm

```

► 通过 Gnuplot 将结果可视化

可以根据自己的需要修改.gnu 里面的参数, 这里提供了修改过的 landaulevel_B_0.1667.gnu。

```
1 $ gnuplot landaulevel_B.gnu
```

我们可以得到在 Weyl 点计算的 HB 图像12.9和12.10。

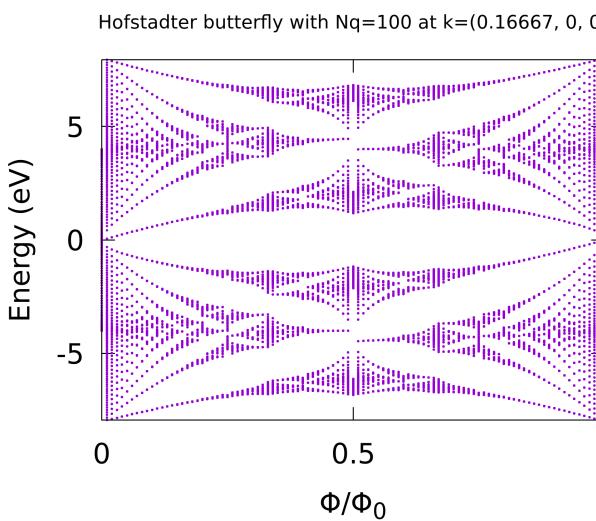


图 12.9: 磁场大小在 k 点 $(0.166667, 0, 0)$ 随着 $\Phi/\Phi_0=0/100, 1/100, \dots, 99/100$ 改变的 HB 图像

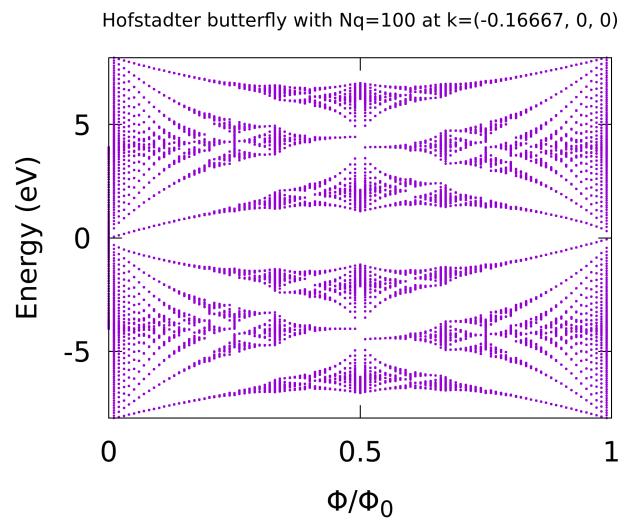


图 12.10: 磁场大小在 k 点 $(-0.166667, 0, 0)$ 随着 $\Phi/\Phi_0=0/100, 1/100, \dots, 99/100$ 改变的 HB 图像

我们可以看到在 $\Phi/\Phi_0=0$ 和 1 的两个边界处, 朗道能级的 gap 闭合了。

13 转角石墨烯

在本节中，我们将使用 WannierTools 研究扭曲双层石墨烯。

参考文献

1. Correlated states in twisted double bilayer graphene, Shen Cheng and Chu Yanbang and Wu QuanSheng and Li, Na et al, Nature Physics, 16(5): 520-525 (2020) [10]
2. Moiré flat bands in twisted double bilayer graphene, Fatemeh Haddadi, QuanSheng Wu, Alex J Kruchkov, Oleg V Yazyev, Nano letters, 20(4): 2410-2415 (2020) [31]
3. Chiral decomposition of twisted graphene multilayers with arbitrary stacking, Sheng-Nan Zhang, Bo Xie, QuanSheng Wu, Jianpeng Liu, Oleg V Yazyev, Nano Letters, 23(7): 2921-2926 (2023) [32]

13.1 如何使用”tgtbgen”生成扭曲石墨烯系统的晶体结构和紧束缚模型？

扭曲双层石墨烯是将两个石墨烯片层叠在一起并进行扭转制成的。最近，更复杂的扭曲石墨烯系统堆叠构型被制备，如扭曲单-双层石墨烯、扭曲双层石墨烯、镜像对称扭曲三层石墨烯、扭曲 N+M 通用堆叠石墨烯。”tgtbgen”程序将生成通用堆叠扭曲石墨烯系统的晶体结构和紧束缚模型。”tgtbgen”是 WannierTools 的子程序。

```
1 https://github.com/quanshengwu/wannier_tools/master/utility/
  twisted_graphene_system_tight_binding
```

输入文件是”system.in”，输出文件是”wt.in” 和”TG_hr.dat”，它们是”WannierTools”的输入输出文件。”tgtbgen”可以接受以 VASP 格式 POSCAR 存储的提供的晶体结构，也可以生成具有给定堆叠配置的 POSCAR。这由一个名为”use_poscar”的标签控制。”tgtbgen”可以生成存储为密集格式或稀疏格式的紧束缚参数”TG_hr.dat”。这由一个名为”hr_generate”的标签控制。

以下是一个典型的输入文件”system.in”，用于”tgtbgen”生成一个稀疏格式存储的紧束缚模型，用于镜像对称的扭曲 A-B-A 三层石墨烯，扭转角度为 7.34°(m=4)。

```
1 &PARAMETERS
2 ! number of layers      trilayer
3 number_layers =          3
4
5 ! twisted index m, theta= acos((3d0*m*m + 3d0*m + 0.5d0)/(3d0*m*m + 3d0*m + 1d0))
6 twisted_index_m =         4
7
8 ! twisted angle array, unit is theta; number_layers numbers; mirror symmetrical
   twisted trilayer graphene
9 twisted_angle_array_input = 0 1 0
10
11 ! stacking sequences only three values "A", "B", "C"; Number_layers numbers
12 stacking_sequences_input =  A  B  A
13
14 ! in plane lattice constant of graphene in unit of Angstrom
```

```

15 lattice_constant_a =      2.460000
16
17 ! out of plane lattice constant of graphne in unit of Angstrom
18 lattice_constant_c =      3.360000
19
20 ! vpppi (eV) p-p pi bond energy of Graphene, vpppi=-2.7 is a classical setting
21 vpppi =      -2.810000
22
23 ! use POSCAR or not, use_poscar=F we will generate POSCAR, use_poscar=T use the
   given POSCAR
24 use_poscar =    F
25
26 ! hr_generate = T, will generate hr.dat, hr_generate = F, will not generate hr.dat
27 hr_generate =    T
28
29 ! gen_sparse_hr = F, hr.dat is in wannier90 format, hr_generate = T, hr.dat is in
   sparse format
30 gen_sparse_hr =    F
31
32 ! hr_cutoff (eV) HmnR is set to zero if HmnR< hr_cutoff
33 hr_cutoff =      0.000100
34
35 ! R is in [-iR_cut, -iR_cut+1, ..., iR_cut]
36 iR_cut =      1
37 /

```

我们为单层、双层、不同角度的扭曲双层石墨烯以及扭曲三层石墨烯准备了几个输入文件。

```

1 system.in-monolayer,system.in-AB,system.in-TBG-m1,system.in-TBG-m4,system.in-TBG-m4-
  sparse,system.in-T-A-B-A-m4

```

首先，请复制练习的教程输入文件：

```

1 $ cd ~/wt2024/examples/TBG-bands

```

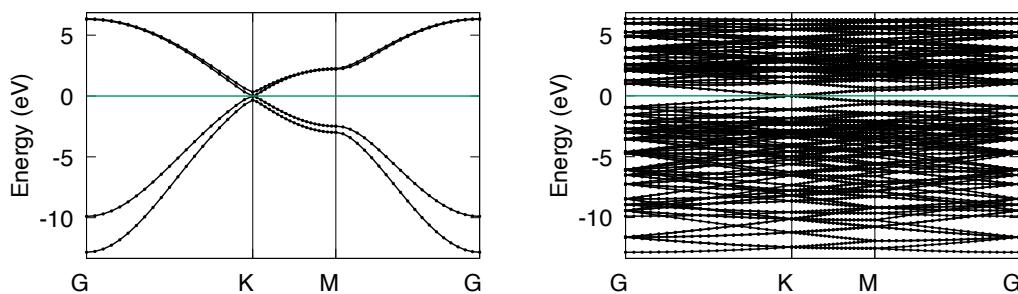
▶ 获取双层石墨烯和扭曲双层石墨烯（扭转角度为 7.34° , $m=4$ ）的”wt.in” 和”TG_hr.dat”文件，并运行 WannierTools 以获得能带结构。

```

1 # scripts for bilayer graphene
2 $ cp system.in-AB system.in
3 $ tgtbgen
4 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
5 $ sbatch sub-wt.slurm
6 $ gnuplot bulkek.gnu
7
8 # scripts for TBG
9 $ cp system.in-TBG-m4 system.in
10 $ tgtbgen
11 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
12 $ sbatch sub-wt.slurm
13 $ gnuplot bulkek.gnu

```

能带结构如下所示：



► 练习

- 生成扭曲双层石墨烯 (TBG) 的稀疏格式存储的紧束缚模型，扭转角度为 7.34° 。tgtbgen 的输入文件准备为”system.in-TBG-m4-sparse”。
- 比较由 tgtbgen 生成的稀疏格式和密集格式紧束缚模型的”wt.in” 和”TG_hr.dat”之间的差异。
- 运行 WannierTools 以获取能带结构，并比较两种方法之间的时间成本差异。
- 使用输入文件”system.in-T-A-B-A-m4” 获取镜像对称扭曲三层石墨烯的能带结构。
- 通过更改”system.in” 来使用 tgtbgen 进行调整，以获取不同扭曲石墨烯系统的不同堆叠配置的能带结构。例如：AB-AB、A-AB-A、A-ABA 等，其中”-” 表示两个片段之间存在扭曲。

13.2 Wilson 环、紧束缚模型的能带展开

在前一节中，我们学习了如何构建紧束缚模型并获取扭曲石墨烯系统的能带结构。在本节中，我们将使用 WannierTools 研究“平带”的 Wilson 环，并对扭曲角度为 7.34° 的双层石墨烯进行能带展开。

工作目录是

```
1 $ cd ~ /wt2024/examples/TBG-7.34degree
2 $ tar xzvf TG_hr.dat-dense.tar.gz
3 $ tar xzvf TG_hr.dat-sparse.tar.gz
```

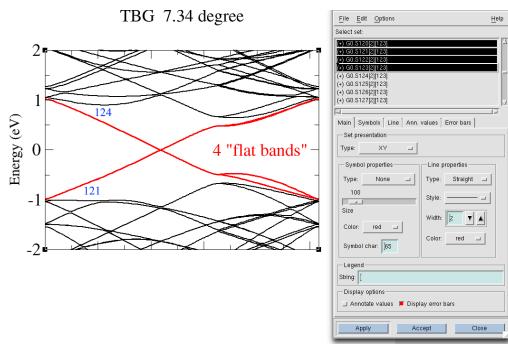
13.3 Wilson 环 (瓦尼尔中心荷)

为了获得 Wilson 环，我们需要确定 4 个“平带”的能带指标。对于大的扭转角度，稀疏版本更加棘手，因为“平带”与远程带并不“很好地”分离，因此很难获得它们的能带。然而，对于小角度来说，单元格的尺寸非常巨大（例如， 1.08° 的情况下 num_wann=11164），因此不适合于教程。因此，在本教程中，我们将以密集格式的情况作为示例。

首先，我们需要获取能带结构，并使用软件 xmgrace 来获取能带的指标。（注：本次研讨会所用集群中未安装 xmgrace，如想练习请在自己的服务器中进行）

```
1 $ cp wt.in-bands-dense wt.in
2 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
3 $ sbatch sub-wt.slurm
4 $ xmgrace bulkek.dat
```

你可以双击 xmgrace 绘图中的能带线来获取能带的指标。请注意，xmgrace 中的起始索引是 0。请查看以下图示。



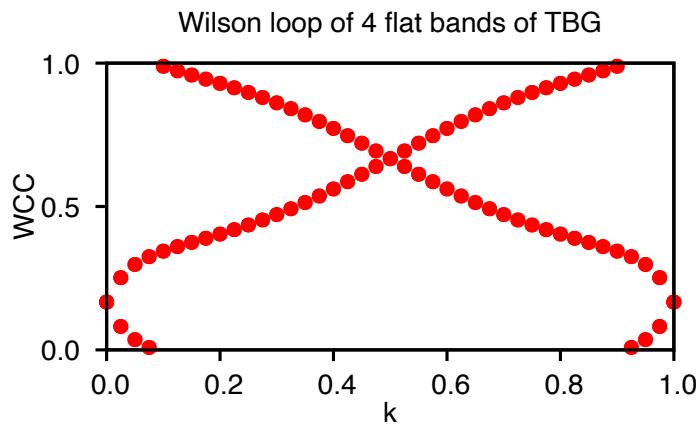
4 个“平带”的索引从 121 开始，而不是从 1 开始。因此，我们必须在“wt.in”中通过设置卡片“SELECTED_OCCUPIED_BANDS”来指定它，如下所示：

```
1 SELECTED_OCCUPIED_BANDS
2 121-124
```

完整的设置已经在文件“wt.in-wilsonloop-dense”中准备好了。

```
1 $ cp wt.in-wilsonloop-dense wt.in
2 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
3 $ sbatch sub-wt.slurm
4 $ gnuplot wcc.gnu0
```

然后，您将得到如参考文献图 1b 一致的非平凡 Wilson 环 [PhysRevLett.123.036401](#)。



13.4 能带展开

当我们观察 TBG 系统的能带时，能带非常复杂。除了靠近费米能级的 4 个平带外，很难从中得出什么结论。为了了解 moire 图案如何影响石墨烯的能带，我们需要将超晶胞中的波函数投影到由石墨烯的晶胞定义的平面波上。这种投影称为能带展开过程。展开的单位胞的定义可以在网页上找到<https://www.wanniertools.org/examples/band-unfolding/>。

在执行能带展开时，WannierTools 提供了 k-path 模式和 k-plane 模式。

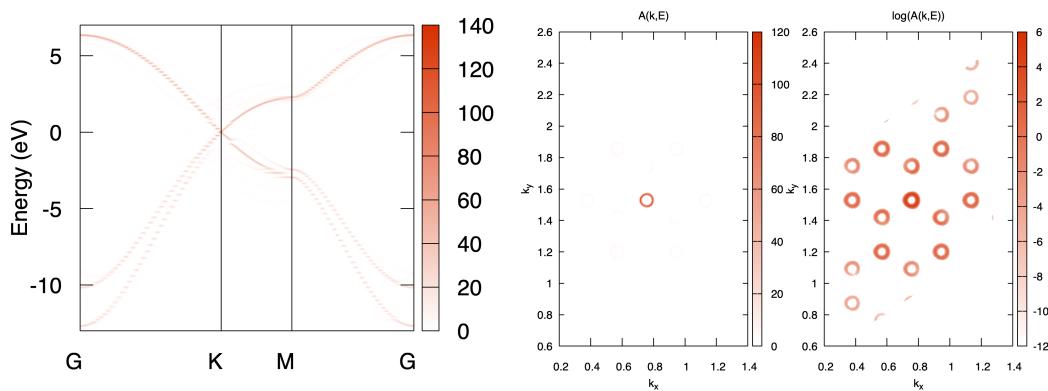
```
1 # k-path mode
2 $ cp wt.in-unfolding-kpath wt.in
3 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
```

```

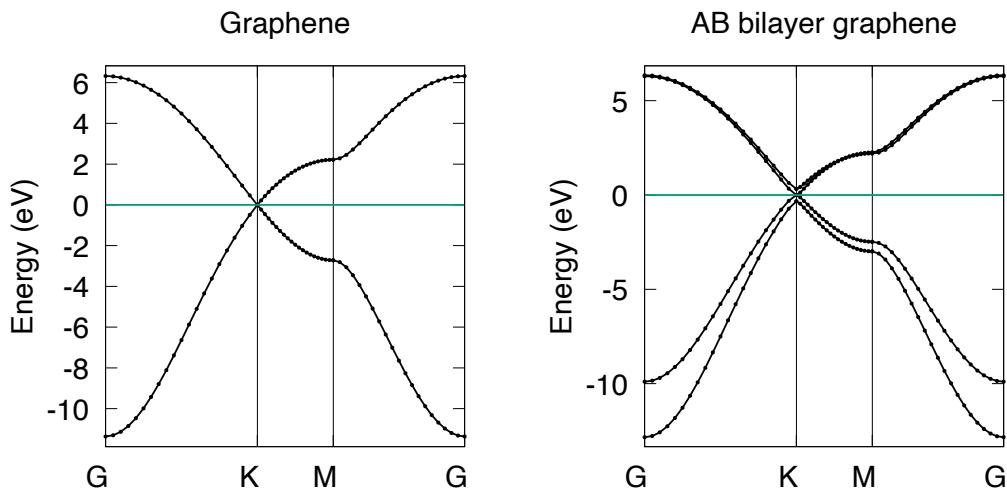
4 $ sbatch sub-wt.slurm
5 $ gnuplot spectrum_unfold_kpath.gnu
6
7 # k-plane mode
8 $ cp wt.in-unfolding-kplane wt.in
9 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
10 $ sbatch sub-wt.slurm
11 $ gnuplot spectrum_unfold_kplane.gnu0

```

结果应该如下所示：



单层石墨烯和双层石墨烯的能带结构如下所示：



► 练习

1. 请比较展开后的能带与单层和双层石墨烯的能带结构。
2. 将"wt.in-unfolding-kplane" 中的"Nr1" 和"Nr2" 参数增加以获得高分辨率的绘图。
3. 改变"wt.in-unfolding-kplane" 中的"E_arc" 参数以获得不同的等能谱图。

14 能带展开与矩阵元效应

本章我们将介绍能带展开的基本方法，以及矩阵元效应（ME）对 ARPES 实验测量得到的实验谱的影响，并以 Graphene 和 TBG 为例，展示如何利用 WannierTools 计算在这些效应影响下的实验谱。

参考文献

1. Correlated states in twisted double bilayer graphene, Shen Cheng and Chu Yanbang and Wu QuanSheng and Li, Na et al, Nature Physics, 16(5): 520-525 (2020) [10]
2. Moiré flat bands in twisted double bilayer graphene, Fatemeh Haddadi, QuanSheng Wu, Alex J Kruchkov, Oleg V Yazyev, Nano letters, 20(4): 2410-2415 (2020) [31]
3. Chiral decomposition of twisted graphene multilayers with arbitrary stacking, Sheng-Nan Zhang, Bo Xie, QuanSheng Wu, Jianpeng Liu, Oleg V Yazyev, Nano Letters, 23(7): 2921-2926 (2023) [32]
4. Landau levels as a probe for band topology in graphene moiré superlattices, Quan-Sheng Wu, Jianpeng Liu, Yifei Guan, Oleg V Yazyev, Physical Review Letters, 126(5): 056401 (2021) [30]

14.1 基本思想

在研究一些因杂质、缺陷、掺杂剂、晶格畸变等各种影响而产生弱平移对称性破缺的材料时，不得不采用超胞来进行理论计算。当超胞的体型变大时，超胞的第一布里渊区（SBZ）尺寸会缩小。因此，未扩充的原胞的第一布里渊区（PBZ）中的能带被“折叠”到 SBZ 中。我们要做的就是将这些折叠的能带以正确的权重重新排列到未折叠的能带上，得到受到弱平移对称性破缺影响下的原胞能带，这个正确的权重实际上就是一个表象变换

$$\langle kn\beta | KJ \rangle = \sum_{N\alpha} C_{N\alpha}^{KJ} \frac{\sqrt{V}}{\sqrt{v}} e^{i(K-k)\xi_\alpha} \delta(K - [k]) \delta_{nN} \delta_{[\alpha]\beta} \quad (24)$$

再配以正确计算的偶极跃迁矩阵元（ME），可以做到利用紧束缚模型直接计算得到对应的 ARPES 谱。

14.2 Graphene 的矩阵元效应

我们先来看 Graphene，其晶格结构与能带结构如图14.1所示

但在 ARPES 实验中看到的图谱并非上面所示的那样完美，在 $\Gamma - K$ 的方向上会出现缺口，这实际是由于 Graphene 两套格子的 C 原子提供的 ME 相同，在发射谱上相互干涉造成的结果，下面我们通过计算将这一效应展示出来。

► 1. 进入工作目录并准备 wt.in 文件

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/band_unfolding/Graphene ! ~/ means WannierTools main file
2
```

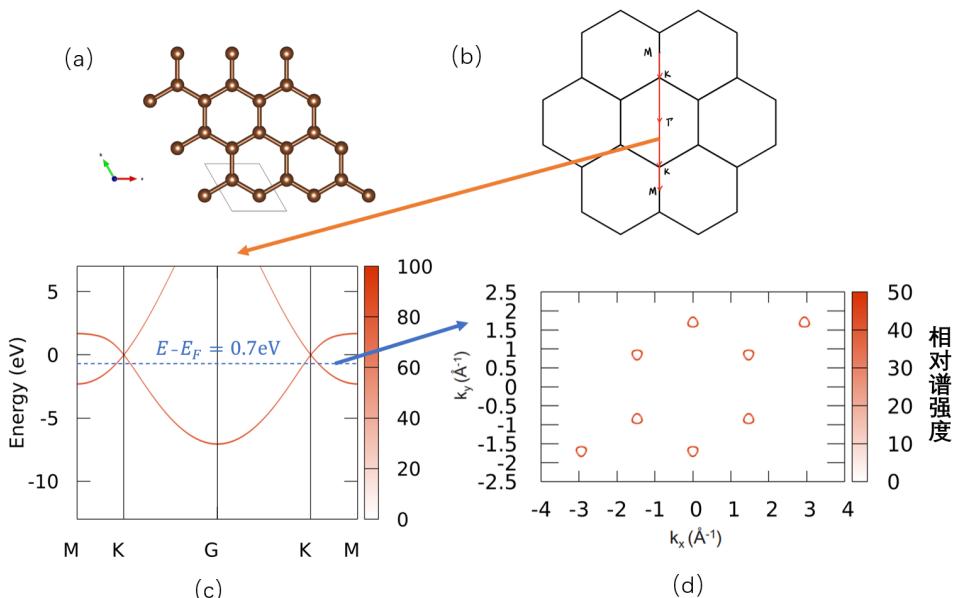


图 14.1: Graphene 的晶格结构, 以及无矩阵元时的能带结构, 图 (b) 给出了下面我们将计算以及实验中取的高对称点路径, 图 (c) 为高对称点路径上的能带结构, 图 (d) 为 $E - E_F = -0.7 \text{ eV}$ 的能量平面切片上的能带结构

进入 Graphene 范例文件夹后, 如果 hr.dat 文件未解压请先将其解压, 然后将准备好的输入文件更名为 wt.in 以供 wt.x 识别

```
1 $ cp wt.in-me wt.in
2
```

打开 wt.in 文件查看, 可以根据自己的需要修改参数, 下面仅展示部分重要设置

```

1 --
2
3 !> Task control flag
4 &CONTROL
5 BulkBand_Unfold_line_calc      = T ! unfolding kpath mode
6 BulkBand_Unfold_plane_calc     = T ! unfolding plane mode
7 Matrix_Element_calc = T ! calculate the Matrix Element and add it to the result of
   unfolding
8 spectrum
9 /
10
11 &SYSTEM
12 NumOccupied =1      ! NumOccupied
13 SOC = 0           ! without spin orbital in hr.dat
14 E_FERMI = -1.2533 ! e-fermi
15 /
16
17 &PARAMETERS
18 Eta_Arc = 0.010      ! infinite small value, like broadening
19 E_arc = -0.7        ! energy contour plot
20 OmegaNum_unfold = 500      ! omega number
21 OmegaMin = -5       ! energy interval
22 OmegaMax = 5        ! energy interval
23 Nk1 =201          ! number k points

```

```

24 Nk2 =201           ! number k points
25 photon_energy_arpes = 50 ! photon energy in ev
26 penetration_lambda_arpes = 3 ! penetration depth of photon in hartree unit
27 polarization_xi_arpes = 1.57
28 polarization_alpha_arpes = 1.57
29 polarization_phi_arpes = 0.0
30 polarization_delta_arpes = 0.0
31 /

```

由于目前矩阵元效应是与能带展开合并于同一个子例程中，因此如果想要计算矩阵元效应必须打开 BulkBand_Unfold_line_calc 与 BulkBand_Unfold_plane_calc 其中之一，它们两个一个 K 点路径模式，另一个是 K 点平面模式，本身在计算能带展开与矩阵元上没有任何区别，请按需使用。在此之上，如果我们需要计算矩阵元效应以及考虑不同原子发射光电子之间的干涉效应，请在计算能带展开的同时把 Matrix_Element_calc 打开。

PARAMETERS 中，E_arc 控制了我们在 kplane 模式中所选等能面的能量与费米能的差值，Nk1 与 Nk2 决定了我们所要计算的 k 点个数为 Nk1*Nk2，注意 kpath 模式中 k 点个数只由 Nk1 决定，omega 开头的参数控制了我们在 kpath 模式中能量采点的范围与密度。

再往下以 arpes 结尾的参数是矩阵元效应计算时所需的参数，photon_energy_arpes 为入射光子能量，单位为 eV，penetration_lambda_arpes 为入射光穿透深度，单位为埃，余下的四个角度确定了 ARPES 的实验架构，由于 ME 的值与 ARPES 的实验架构息息相关，因此在进行 ME 研究时务必仔细确认计算时的实验架构是否与真实实验中相同，否则结果无法进行比较。这些角度的具体含义详见图14.2

wt.in 中的 LATTICE, ATOM_POSITIONS, PROJECTORS 为超胞对应的晶格各项参数，而带 UNFOLD 后缀的为之后能带展开所需的小原胞对应晶格的各项参数，最后 KPATH_BULK 与 KPLANE_BULK 可以设置 k 点的采样路径与采样范围，分别对应前面提到的 K 点路径模式与 K 点平面模式。

► 思考

请仔细观察范例文件夹内的 wt.in-me，思考一下我们在计算如现在的 Graphene 这样无需进行任何能带展开计算的体系考虑矩阵元效应的 ARPES 谱时，做出了怎样的设置呢？

► 2. 提交计算任务

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm
3

```

► 3. 结果可视化

运行如下命令，可以用 WannierTools 自动生成的 gnuplot 脚本画出结果图

```

1 $ gnuplot spectrum_unfold_kpath.gnu
2 $ gnuplot spectrum_unfold_kplane.gnu

```

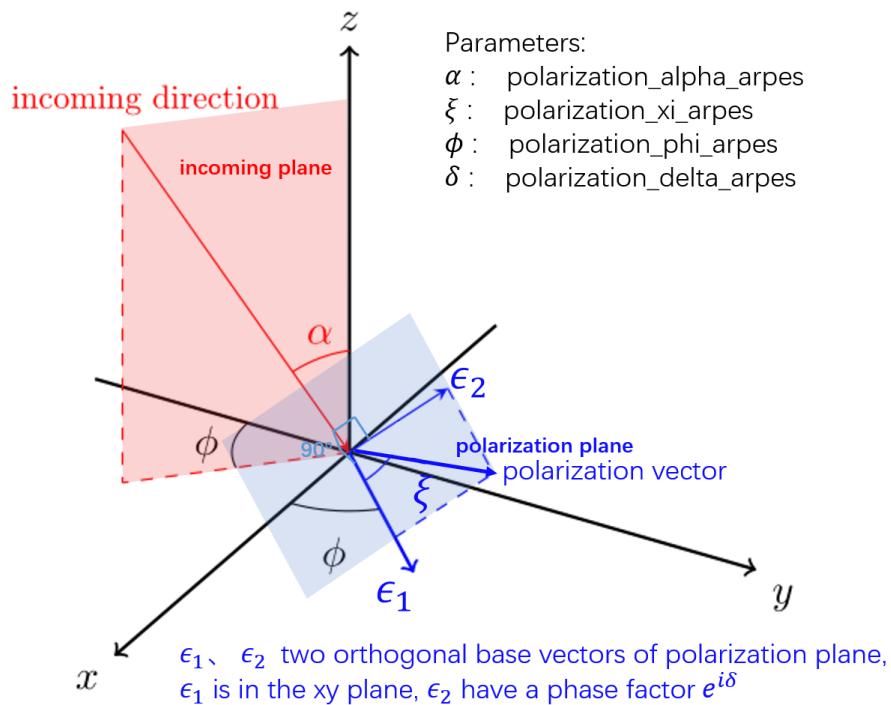


图 14.2: ARPES 实验架构与 wt.in 中参数的对应关系, 右上角给出了图中角度与 wt.in 中参数名的对应, 注意由于我们考虑横波, 红色的入射光方向为蓝色的极化矢量平面的法线方向

3

我们准备好的 gnuplot 脚本对上 WannierTools 自动生成的做了些许调整使得结果更加美观, 使用下面的命令

```

1 $ gnuplot unfolding_graphene_kpath.gnu
2 $ gnuplot unfolding_graphene_kplane.gnu
3

```

可以得到对应的计算了偶极辐射矩阵元并考虑两套格子之间干涉的 ARPES 谱, 下图左为 spectrum_unfold_kpath.png 右为 spectrum_unfold_kplane.png

实验 ARPES 谱得到的数据如下14.4, 可以看到左图红线标注的能带和右图红框内的区域分别对应的我们前面计算的 spectrum_unfold_kpath.png 与 spectrum_unfold_kplane.png 中的结果

14.3 TBG 体系的能带展开与矩阵元效应

同理我们可以计算带能带展开的 TBG 体系, 这里我们选择计算 13.2 度 TBG

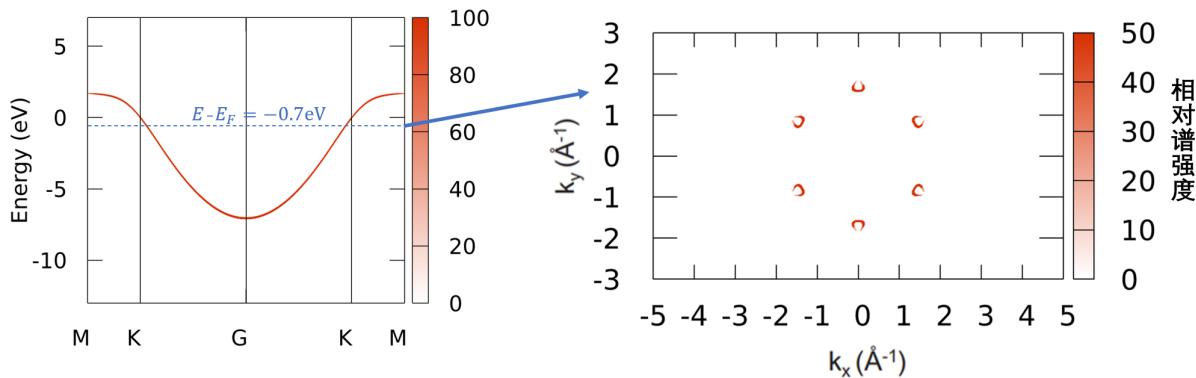


图 14.3: WannierTools 计算的含矩阵元效应的 Graphene 能带结构 ARPES 谱，左为高对称点路径上的 ARPES 谱模拟结果，右图为费米面以下 0.7eV 能量平面上的能带结构 ARPES 谱模拟结果

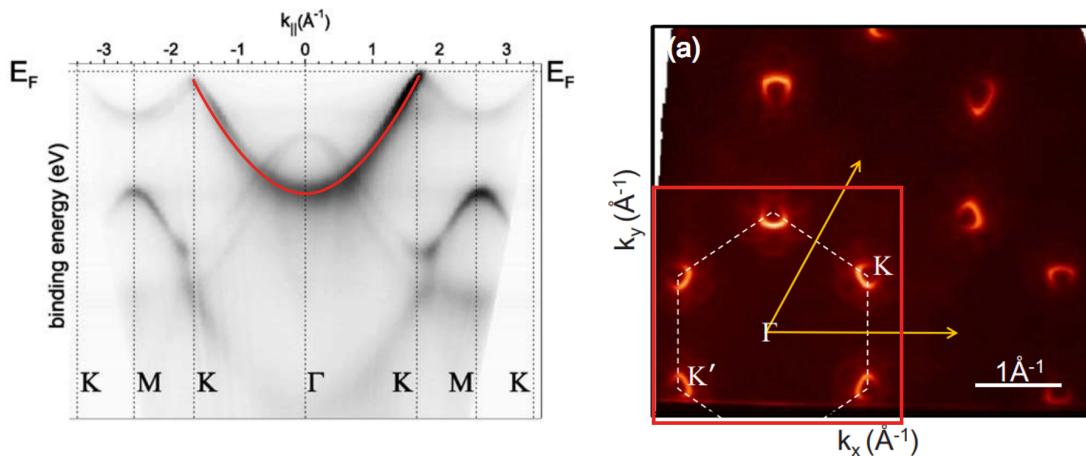


图 14.4: 实验测量的 ARPES 谱，左图为高对称点路径上测量的 ARPES 谱，红线部分为与上面计算结果对应的带 [33]，右图同样是费米面以下 0.7eV 能量平面上测得的能带结构 ARPES 谱 [34]

► 1. 进入工作目录并计算 TBG 超胞能带

```

1 $ cd ~/wt2024/examples/band_unfolding/twisted_bilayer_graphene_13.2degree
2 $ cp wt.in-bands wt.in
3 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
4 $ sbatch sub-wt.slurm
5
6

```

► 2. 计算展开后的能带

```

1 $ cd ~/wt2024/examples/band_unfolding/twisted_bilayer_graphene_13.2degree
2 $ cp wt.in-me wt.in
3 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
4 $ sbatch sub-wt.slurm
5
6

```

这里我们需要特别注意，在 TBG 体系中，为了让我们能带展开可以顺利进行，我们必须选定某一层的 Graphene 格子，使得小原胞与某一层的 Graphene 格子保持一致，比如在范例中我们取了下层为小原胞参考格子，此时的小原胞原子位置的 z 轴分量需要与超胞晶格中下层原子的 z 轴分量保持一致，否则能带展开将因为找不到对应展开的原子而输出全为 0 的结果。

► 3. 结果可视化

```

1 $ gnuplot bulkek.gnu
2 $ gnuplot spectrum_unfold_kpath.gnu
3

```

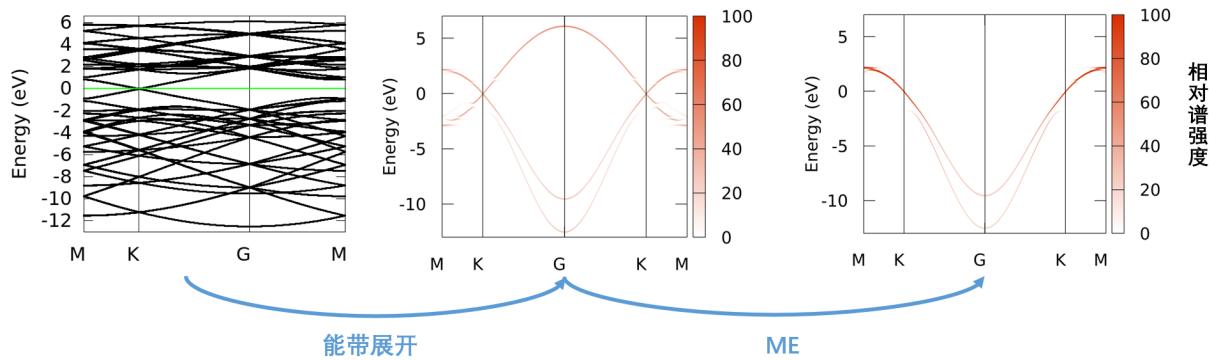


图 14.5: TBG 体系展开后的能带以及计算了矩阵元之后的能带 ARPES 谱

最后得到的结果如图14.5所示，左图为未展开时的超胞能带，中图为展开之后的能带，右图为添加了 ME 之后，考虑了偶极辐射矩阵元以及未扩充原胞两套格子之间干涉之后的图谱。可以看到在进行展开之后，我们大致能看到其展开的结果和单层 Graphene 的能带有类似的地方，但是一些地方打开了微小的 Gap，这是由于转角带来的能带变化，在能带展开之后这些现象变得十分明显可以观察。而 ME 的影响简单直接，使得 ARPES 上可以观测到的带数减少了一条。

► 注

Graphene 的范例中展示的能带结构以及 TBG 范例中未添加矩阵元效应的效果图都可以通过使用对应文件夹下 `wt.in-nome` 替换 `wt.in-me` 作为输入文件运行 WannierTools 得到，二者的区别仅仅是将 `Matrix_Element_calc` 给关掉而已

► 练习

尝试对参数进行调整，添加合适的 `KPLANE_BULK`，作出 TBG 在 `kplane` 模式下的能带展开图与考虑矩阵元效应的能谱图，参考结果如下

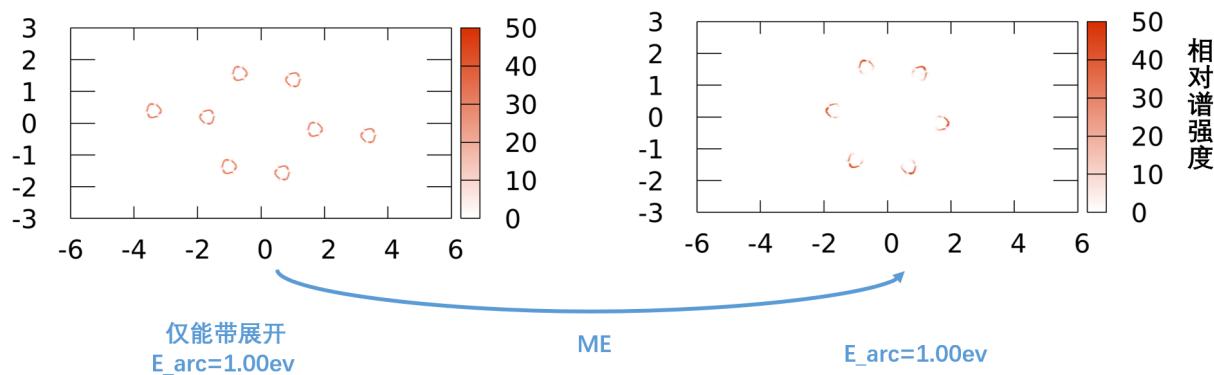


图 14.6: 在 1.00eV 的能量平面下看到的 TBG 体系展开后的能带以及计算了矩阵元之后的能带 ARPES 谱

15 Haldane 模型

在本节中，我们将使用 WannierTools 研究给定的紧束缚模型的拓扑性质。

参考文献

- Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly", Haldane F D M, Physical review letters, 61(18): 2015 (1988) [35]

► 两个办法获得教程输入文件:

- 直接从集群的/tmp/目录下把本教程拷贝到你的 home 目录下:

```
1 $ cp -r /tmp/wt2024 ~
```

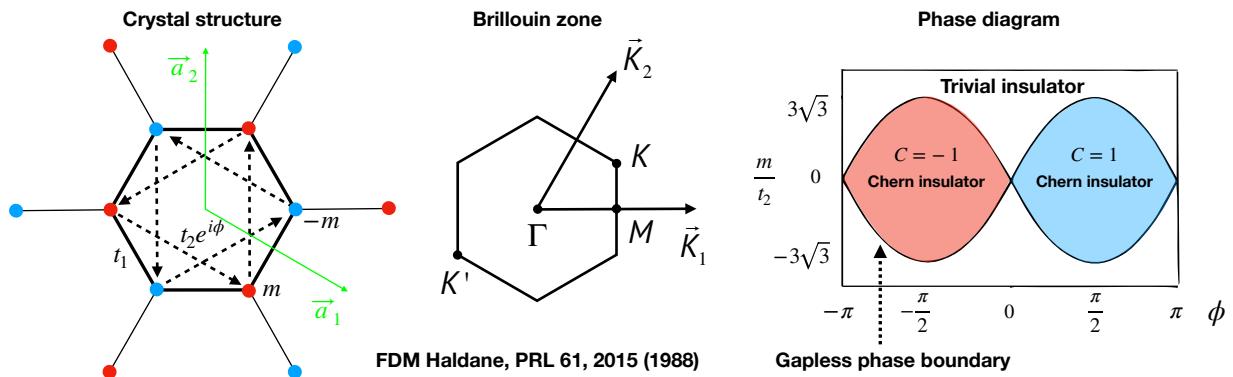
- 如果你从别处看到这个教程，可以直接从 github 上下载教程:

```
1 $ cd ~
2 $ git clone https://github.com/quanshengwu/wannier_tools.git
```

本章对应的目录为

`~/wt2024/examples/Haldane_model`

在这个练习中，我们将研究 Haldane 模型的三种相，拓扑绝缘体 ($\phi = \pi/2, m = 0.2; t_1 = 1.0, m/t_2 < -3\sqrt{3}$ or $m/t_2 > 3\sqrt{3}$)，gapless 半金属 ($\phi = \pi/2, m = 0.2; t_1 = 1.0, m/t_2 = \pm 3\sqrt{3}$) 和 Chern 绝缘体 ($\phi = \pi/2, m = 0.2; t_1 = 1.0, -3\sqrt{3} < m/t_2 < 3\sqrt{3}$)。



15.1 一般绝缘体

► 生成紧束缚模型:

首先，我们需要用脚本 `haldane_hr_gen-trivial-insulator.py` 生成紧束缚模型 `Haldane_hr.dat`。

```
1 $ python haldane_hr_gen-trivial-insulator.py
```

► 生成 `wt.in` 文件:

```
1 $ cp wt.in-trivial-insulator wt.in
```

如果你打开并检查 wt.in 文件，你会发现我们将计算 kpath 和 kplane 模式下的体能带，面能带， $k_z = 0$ 平面上的 Wannier 电荷中心以及 $k_z = 0$ 平面上的 Berry 曲率。

以下是计算所必要的参数：

```

1 &TB_FILE
2 Hrfile = "Haldane_hr.dat"
3 /
4
5 &SYSTEM
6 SOC = 0           ! soc
7 E_FERMI = 0       ! e-fermi
8 /
9
10 LATTICE
11 Angstrom
12 2.1377110 -1.2342080 0.0000000
13 0.0000000 2.4684160 0.0000000
14 0.0000000 0.0000000 10.000000
15
16 ATOM_POSITIONS
17 2               ! number of atoms for projectors
18 Direct          ! Direct or Cartisen coordinate
19 C 0.333333 0.666667 0.500000 C
20 C 0.666667 0.333333 0.500000 C
21
22 PROJECTORS
23 1 1             ! number of projectors
24 C pz
25 C pz

```

kpath 模式下的能带由以下参数控制：

```

1 &CONTROL
2 BulkBand_calc      = T ! calculate band structure in kpath mode
3 /
4
5 &PARAMETERS
6 Nk1 = 60           ! number k points along each kpath
7 /
8
9 KPATH_BULK         ! k point path in unit of reciprocal lattice vectors
10 3                 ! number of k line only for bulk band
11 M 0.50000 0.00000 0.00000 K' -.33333 -.33333 0.00000
12 K' -.33333 -.33333 0.00000 G 0.00000 0.00000 0.00000
13 G 0.00000 0.00000 0.00000 K 0.33333 0.33333 0.00000

```

kplane 模式下的能带由以下参数控制：

```

1 &CONTROL
2 BulkBand_plane_calc = T ! calculate band structure in kpath mode
3 /
4

```

```

5 &SYSTEM
6 NumOccupied = 1 ! we will only write out two energy eigenvalue close to NumOccupied
    -th band
7 /
8
9 &PARAMETERS
10 Nk1 = 60           ! number k points
11 Nk2 = 60           ! number k points
12 /
13
14 KPLANE_BULK
15 0.00 0.00 0.00   ! central point for 3D k slice
16 1.00 0.00 0.00   ! The first vector to define 3d k space slice
17 0.00 1.00 0.00   ! The second vector to define 3d k space slice

```

给定 k 平面的 Berry 曲率计算由以下参数控制：

```

1 &CONTROL
2 BerryCurvature_calc = T
3 /
4
5 &SYSTEM
6 NumOccupied = 1 ! We assume the band below NumOccupied-th band are full occupied.
7 /
8
9 &PARAMETERS
10 Nk1 = 60           ! number k points
11 Nk2 = 60           ! number k points
12 /
13
14 KPLANE_BULK
15 0.00 0.00 0.00   ! central point for 3D k slice
16 1.00 0.00 0.00   ! The first vector to define 3d k space slice
17 0.00 1.00 0.00   ! The second vector to define 3d k space slice

```

给定 k 平面的 Wannier 电荷中心 (Wilson 环) 计算由以下参数控制：

```

1 &CONTROL
2 Wanniercenter_calc = T
3 /
4
5 &SYSTEM
6 NumOccupied = 1 ! We assume the band below NumOccupied-th band are full occupied.
7 /
8
9 &PARAMETERS
10 Nk1 = 60           ! number k points
11 Nk2 = 60           ! number k points
12 /
13
14 KPLANE_BULK
15 0.00 0.00 0.00   ! Starting point of the k-slice

```

```

16 1.00 0.00 0.00 ! The first vector is used for integration.
17 0.00 1.00 0.00 ! the WCC is along this vector.

```

注意，在 Wanniercenter_calc=T 中 KPLANE_BULK card 的第一个向量的用法与 BerryCurvature_calc=T 和 BulkBand_plane_calc=T 中的用法不同。您可以从文档中阅读 KPLANE_BULK card 使用方法的详细信息。

沿给定 kpath 的平面体系的能带计算由以下参数控制：

```

1 &CONTROL
2 SlabBand_calc = T
3 /
4
5 &SYSTEM
6 NSLAB =60 ! We assume the band below NumOccupied-th band are full occupied.
7 /
8
9 &PARAMETERS
10 Nk1 = 60 ! number k points
11 /
12
13 SURFACE ! See doc for details
14 0 0 1
15 1 0 0
16 0 1 0
17
18 KPATH_SLAB
19 1 ! number of k line for 2D case
20 KO 0.0 0.0 K1 0. 1.0 ! k path in unit of 2D reciprocal lattice vectors

```

▶ 运行 WannierTools:

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm

```

运行以下命令，如果程序正常运行，WT.out 文件的末尾会出现”See you next time :)”

```

1 $ tail WT.out

```

WT.out 的文末应该是这样的

```

1 WannierTools : An open-source software package for novel topological materials
2 QuanSheng Wu and ShengNan Zhang and Hai-Feng Song and Matthias Troyer and Alexey A
   . Soluyanov
3 Computer Physics Communications 224, 405 (2018)
4 https://doi.org/10.1016/j.cpc.2017.09.033
5
6 For bugs, please report to wuquansheng@gmail.com
7 or wanniertools@groups.google.com.
8 More information could find on www.wanniertools.com
9 See you next time :)
=====

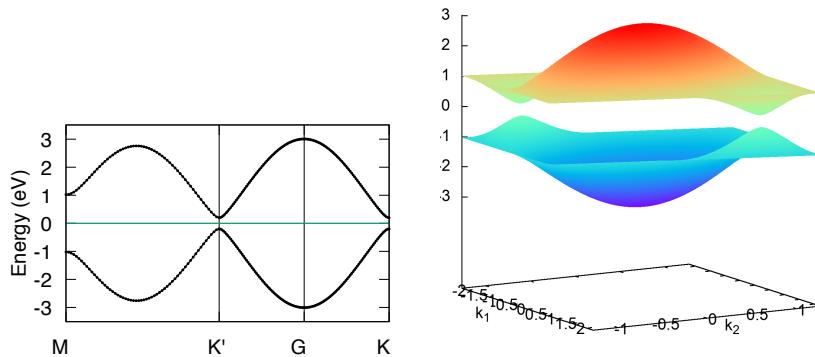
```

► 使用 Gnuplot 可视化结果

1). 现在我们可以用以下命令绘制能带结构:

```
1 $ gnuplot bulkek.gnu
2 $ gnuplot bulkek_plane.gnu0
```

被命名为 bulkek.pdf 和 bulkek_plane.png 的两幅图应该如下所示:

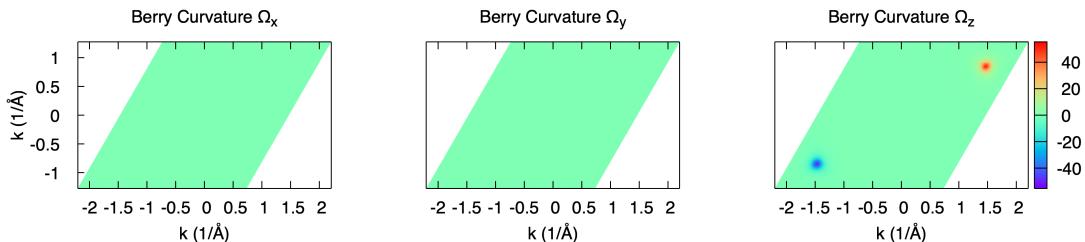


该相的能带结构表明它是绝缘体。

2). 然后我们可以用以下命令绘制 Berry 曲率:

```
1 $ gnuplot Berrycurvature.gnu0
```

得到的图被命名为 Berrycurvature.png。它应该是这样的:



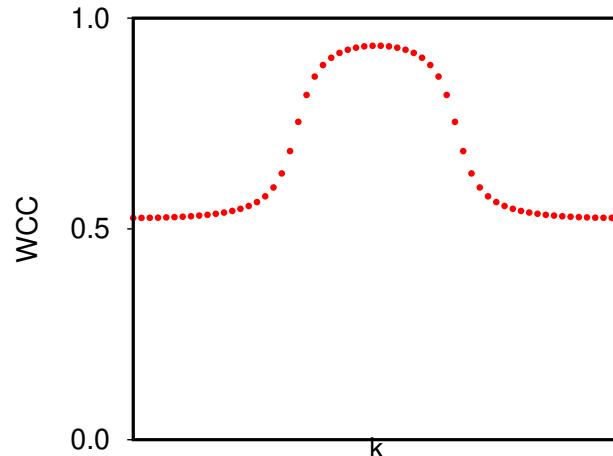
它证明了 Ω_x 和 Ω_y 都是零, 因为它是二维系统。 Ω_z 有正值和负值, 它们相互抵消。最终

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} dk \Omega_z(k) = 0 \quad (25)$$

3). 我们也可以画出 Wannier 电荷中心 (Wilson 环) 来得到 Chern 数。

```
1 $ gnuplot wcc.gnu
```

得到的图被命名为 wcc.pdf。它应该是这样的:

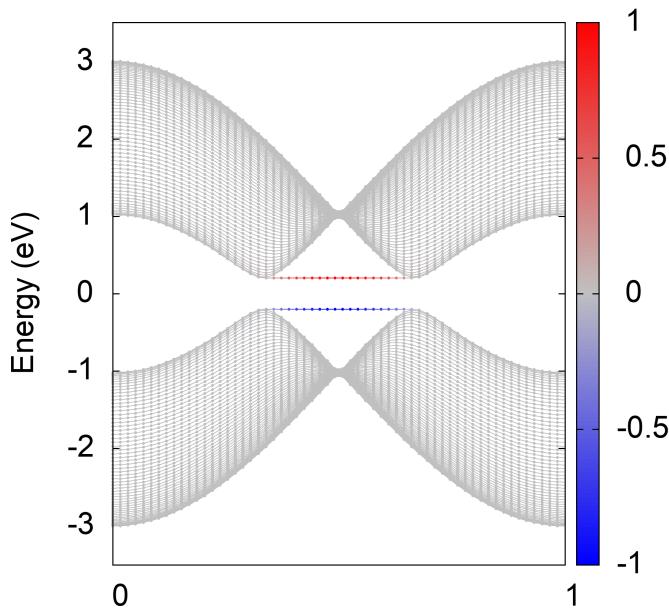


这样的 WCC 表面它是平庸的绝缘体，因为没有绕数。

4). 最后，我们可以得到一个平面系统的能带结构。在这里，平面指的是一个带状结构，因为 Haldane 模型是一个二维模型。然而，WannierTools 通过沿 z 方向插入足够厚的真空层并赋予周期性来将其视为三维系统。

```
1 $ gnuplot slabek.gnu
```

我们将得到 slabek.png，它看起来像这样：



其中红色和蓝色分别表示投射到顶部和底部表面的权重。这表明边缘态是平庸的，因为它们没有将价带和导带连接在一起。

15.2 Chern 绝缘体

现在，我们要研究以下参数的 Chern 绝缘体： $\phi = \pi/2$, $m = 0.2$; $t_1 = 1.0$, $m/t_2 = 3\sqrt{3}/2$ ，其 Chern 数为 $C = 1$ 。

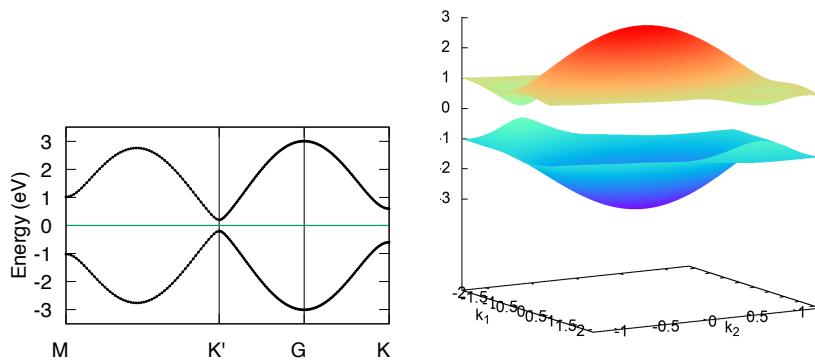
► 生成紧束缚模型和输入文件 wt.in

```
1 $ python haldane_hr_gen-chern-insulator.py
2 $ cp wt.in-chern-insulator wt.in
```

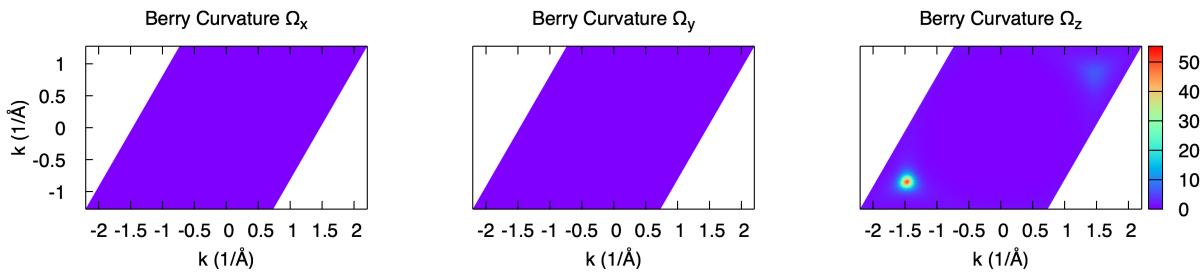
在这之后，我们运行 wt.x

```
1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm
```

► 按照上述过程绘制体能带、Berry 曲率、Wannier 电荷中心和面能带。



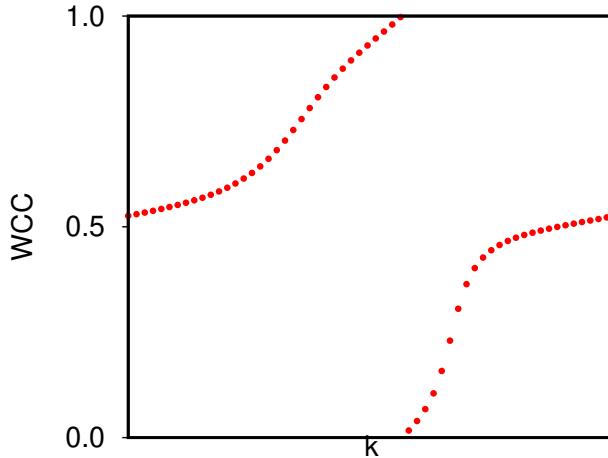
其能带看起来与普通绝缘体相几乎完全相同。



Berry 曲率不同于平庸相的曲率。 Ω_z 没有负值。 $\Omega_z(k)$ 在布里渊区的积分应该是 1。

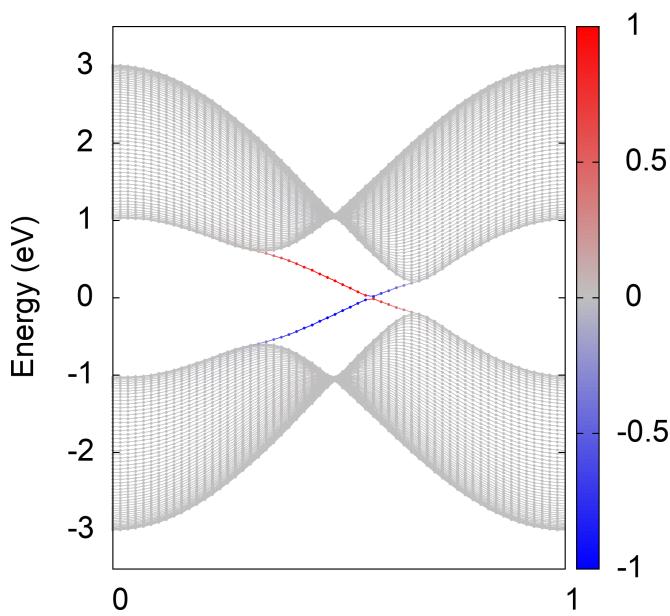
$$C = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} dk \Omega_z(k) = 1 \quad (26)$$

该拓扑数可以通过 Wilson loop 图验证，如图所示：



依据绕数，该 WCC 图的 Chern 数为 1。

由于 WCC 和边缘状态之间的等价性，边缘状态应该具有相同的特征。



标记为红色和蓝色的两个边缘态位于左侧和右侧。在每一边，能隙中的边缘态是手性状态，其速度保持相同的符号。

15.3 Gapless 半金属

Gapless 半金属是连接平庸绝缘体与 Chern 绝缘子相的中间相。生成这个相的参数是 $\phi = \pi/2$, $m = 0.2$; $t_1 = 1.0$, $m/t_2 = 3\sqrt{3}$

► 执行相同的程序来运行 WannierTools。

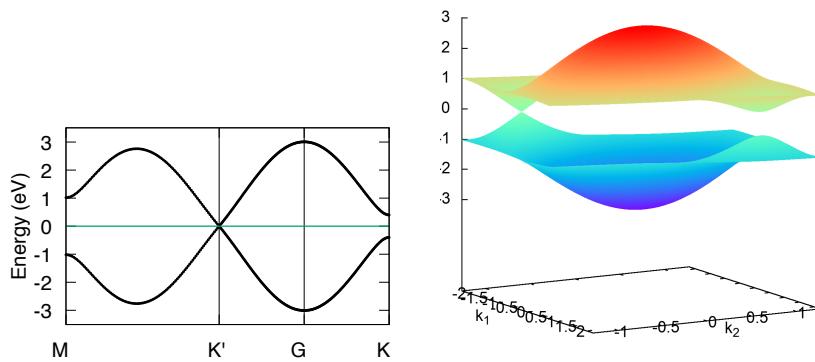
```

1 $ python haldane_hr_gen-gapless.py
2 $ cp wt.in-gapless wt.in
3 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
4 $ sbatch sub-wt.slurm

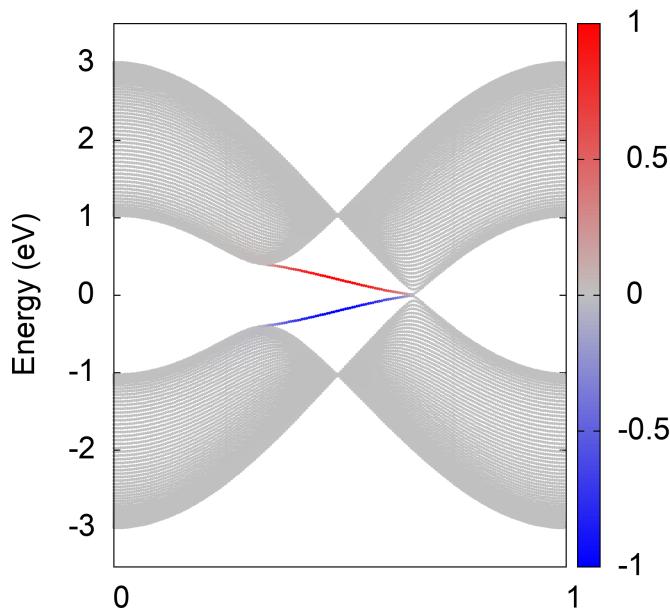
```

如果你查看输入文件 wt.in, 你会发现我们设置了 Wanniercenter_calc = F, BerryCurvature_calc = F 是为了不计算 Wannier 电荷中心和 Berry 曲率。原因是, 如果我们感兴趣的 k 平面上存在无间隙状态, 这两个量就没有很好的定义。

体能带和面能带如下所示:



K' 点的能隙闭合，而 K 点的能隙仍然打开。通过比较平庸绝缘体相和 Chern 绝缘体相的 Berry 曲率，可以清楚地看出能隙闭合是 Berry 曲率的来源。



► 练习

1. 比较石墨烯和 Haldane 模型中无间隙相的能带。

Tips: 石墨烯的紧束缚模型可通过设置参数 $\phi = 0, m = 0; t_1 = 1.0, t_2 = 0$ 获得。

2. 通过将参数 t_2 修改为略大于或略小于 $m/3/\sqrt{3}$ ，研究接近无间隙相的两个相的 Berry 曲率和 Wannier 电荷中心。

16 拓扑超导体

参考文献

1. Superconducting proximity effect and Majorana fermions at the surface of a topological insulator, Fu, Liang and Kane, Charles L, Physical review letters, 100(9): 096407 (2008) [36]
2. Platform of chiral Majorana edge modes and its quantum transport phenomena, He J J, Liang T, Tanaka Y, et al, Communications Physics, 2(1): 149 (2019) [37]
3. Topological insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a single Dirac cone on the surface, Haijun Zhang, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, Xi Dai, Zhong Fang, Shou-Cheng Zhang, Nature Physics 5, 438–442 (2009) [2]
4. Superconducting properties of the In-substituted topological crystalline insulator SnTe, Balakrishnan G, Bawden L, Cavendish S, et al, Physical Review B, 87(14): 140507 (2013) [38]
5. Topological superconductor candidates PdBi₂Te₄ and PdBi₂Te₅ from a generic ab initio strategy, Aiyun Luo, Gang Xu, et al, npj Computational Materials, 9(1), 188 (2023) [39]
6. Chiral Topological Superconductivity in Superconductor-Obstructed Atomic Insulator-Ferromagnetic Insulator Heterostructures, Jingnan hu, Fei Yu, Gang Xu, et al, Physical Review Letters, 132(3), 036601 (2024) [40]

在自然界中，能够形成本征拓扑超导的 p 波超导体非常稀少。所以，通过更为普遍的 s 波超导体来实现拓扑超导成了人们关注的重点，近年来，有许多通过 s 波超导体的超导近邻效应，在拓扑绝缘体 (TI) 或者具有 Rashba 自旋轨道耦合的半导体的表面实现拓扑超导的方案被提出，这里，我们简单介绍其中两种：

► Fu-kane 方案 [36]

由于超导近邻效应，在 3D 强拓扑绝缘体和 s 波超导体的界面处的 Bogoliubov-de Gennes (BdG) 哈密顿量可以写为：

$$H_{interface}(k) = k_x \tau_0 \sigma_x + k_y \tau_z \sigma_y - \mu \tau_z \sigma_0 + \Delta \tau_y \sigma_y \quad (27)$$

这个哈密顿量写在 Nambu 基矢 $(c_{\uparrow,k}^\dagger, c_{\downarrow,k}^\dagger, c_{\uparrow,-k}, c_{\downarrow,-k})$ 下， τ 和 σ 分别表示粒子-空穴空间和自旋空间的泡利矩阵， μ 表示化学势， Δ 表示超导配对强度。对这个哈密顿量做一个规范变换 $a_k = c_{\uparrow,k} + e^{i\theta_k} c_{\downarrow,k}$ ，其中 θ_k 通过 $|k|(\cos\theta_k, \sin\theta_k) = (k_x, k_y)$ 来定义，就可以得到一个有效的 p 波配对：

$$H_{eff}^{p_x+ipy}(k) = \begin{bmatrix} -|k| - \mu & 0 & 0 & -\Delta e^{i\theta_k} \\ 0 & |k| - \mu & \Delta e^{i\theta_k} & 0 \\ 0 & \Delta e^{-i\theta_k} & -|k| + \mu & 0 \\ -\Delta e^{-i\theta_k} & 0 & 0 & |k| + \mu \end{bmatrix} \quad (28)$$

这个过程的物理意义是将 Δ 视为微扰，把哈密顿量投影在不含微扰哈密顿量的本征态上。令 $\mu = 0$ ，此时体系的色散为 $E = \pm\sqrt{|k|^2 + \Delta^2}$ ，系统中仍然不存在拓扑。当在体系中加入赛曼场 $M_z\tau_z\sigma_z$ 破坏时间反演对称性时，体系的色散变为 $E = \pm\sqrt{|k|^2 + (M_z \pm \Delta)^2}$ ，如果 $M_z > \Delta$ ，该系统可以实现由陈数表征的 2D 手性拓扑超导。

► 注意：将该方案中的狄拉克锥表面态换为 Rashba 型能带，同样可以实现 2D 手性拓扑超导。

► Nagaosa 方案 [37]

考虑一个如下图所示的超导体—TI 薄膜-铁磁体的异质结构：

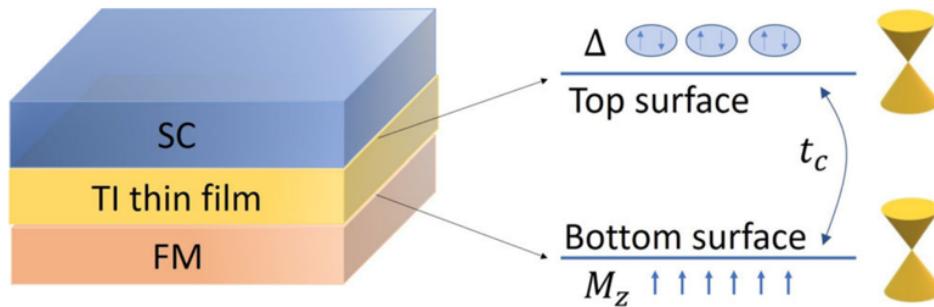


图 16.1: Nagaosa 方案的示意图。

由于这个体系的低能物理是由 TI 的两个狄拉克表面态决定的，所以该体系在 Nambu 基矢 $(c_{t\uparrow,k}^\dagger, c_{t\downarrow,k}^\dagger, c_{b\uparrow,k}^\dagger, c_{b\downarrow,k}^\dagger, c_{t\uparrow,-k}^\dagger, c_{t\downarrow,-k}^\dagger, c_{b\uparrow,-k}^\dagger, c_{b\downarrow,-k}^\dagger)$ 下的 BdG 哈密顿量为：

$$H_{twosurface}(k) = v(k_x\sigma_y\tau_z - k_y\sigma_x\tau_0)s_z + M_z\sigma_z\tau_z\frac{s_z - s_0}{2} + t_c\sigma_0s_x\tau_z - \sigma_0(\mu s_0 + \delta E s_z)\tau_z + \Delta\sigma_y\tau_y\frac{s_z + s_0}{2} \quad (29)$$

τ , σ 和 s 分别表示粒子空穴空间，自旋空间和层空间的泡利矩阵， M_z 代表赛曼场， Δ 表示 s 波超导配对强度， t_c 表示上下表面的耦合， μ 表示化学势， δE 表示上下表面的能量差。可以看出这个哈密顿量描述了两个有不同质量项的狄拉克锥之间的界面（一侧质量为 Δ ，一侧为 M_z ），根据 [41] 中的判据，该系统为手性拓扑超导态。如果忽略 t_c 和 δE ，得出的相图为：

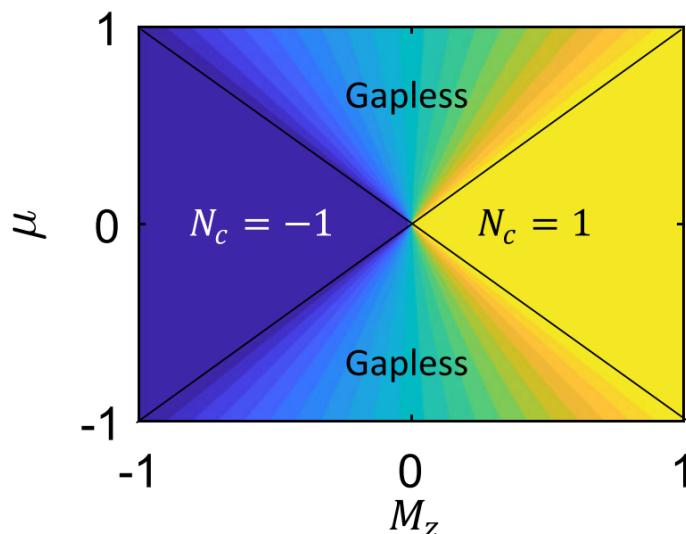


图 16.2: 忽略上下表面耦合以及能量差时, Nagaosa 方案的相图。

► 注意: 忽略 t_c 和 δE 后, 哈密顿量变为上下表面块对角形式, 而再 Fu-kane 方案中以及指出, 没有赛曼场的上表面是拓扑平庸的。这时体系的拓扑性质完全由下表面决定, 而下表面的哈密顿量为:

$$H_{bottom}(k) = k_x \tau_0 \sigma_x + k_y \tau_z \sigma_y - \mu \tau_z \sigma_0 + M_z \tau_z \sigma_z \quad (30)$$

这也是一个块对角哈密顿量, 对应两个螺旋度相反, 质量也相反的狄拉克哈密顿量。也就是说, Δ 为 0 时, 这个体系必然是拓扑的 (这两个狄拉克哈密顿量始终有一个拓扑), 而拓扑性质由质量项 (也就是 M_z) 决定。

► 注意: 该方案不需要 $M_z > \Delta$, 可实现拓扑超导的参数区间更大, 但是不适用于 Rashba 型表面能带, 因为一般体系中 t_c 很小, 会导致下表面的 BdG 能谱变成无带隙的。

接下来, 我们通过具体的三个例子, 来展示如何通过 WannierTools 进行这两种方案的计算。

16.1 3D TI 模型实现 2D 拓扑超导

首先, 我们可以构造一个简单立方晶格中的 4 带模型:

$$H_{TI}(k) = \begin{bmatrix} M(k) \cdot \sigma_0 & \vec{T} \cdot \vec{\sigma} \\ \vec{T} \cdot \vec{\sigma} & -M(k) \cdot \sigma_0 \end{bmatrix} \quad (31)$$

其中 $M(k) = M + m_0 \sum_i \cos(k_i)$, $i = x, y, z$, $\vec{T} = (2t \sin(k_x), 2t \sin(k_y), 2t \sin(k_z))$, M 表示不同轨道中在位能的差别, m_0 表示最近邻的轨道内跃迁, t 表示最近邻的轨道间耦合。 σ 表示自旋空间中的泡利矩阵。当 $-3 < \frac{M}{m_0} < -1$ 时, 该模型是处于强拓扑绝缘体相。因此, 根据上述两种方案, 可以在通过构造 slab 哈密顿量来得到手性拓扑超导。在 wanniertools 中, 我们首先构造一个包括表面赛曼场的 slab 哈密顿量:

$$H_{\text{slab}}(k) = \begin{bmatrix} H_{xy}(k) & H_z & 0 & \cdots & 0 \\ H_z^* & H_{xy}(k) & H_z & \ddots & 0 \\ 0 & H_z^* & H_{xy}(k) & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & H_z \\ 0 & 0 & 0 & H_z^* & H_{xy}(k) + B_z \cdot \tau_0 \otimes \sigma_z \end{bmatrix} \quad (32)$$

在这里我们的 slab 垂直于 z 方向，其中 τ 表示轨道空间的泡利矩阵， $H_{xy}(k)$ 表示只包含 xy 方向耦合的哈密顿量：

$$H_{xy}(k) = \begin{bmatrix} (M + m_0 \cos(k_x) + m_0 \cos(k_y)) \cdot \sigma_0 & T_x \cdot \sigma_x + T_y \cdot \sigma_y \\ T_x \cdot \sigma_x + T_y \cdot \sigma_y & -(M + m_0 \cos(k_x) + m_0 \cos(k_y)) \cdot \sigma_0 \end{bmatrix} \quad (33)$$

H_z 表示 z 方向的耦合：

$$H_z = \begin{bmatrix} \frac{m_0}{2} \cdot \sigma_0 & it \cdot \sigma_z \\ -it \cdot \sigma_z & -\frac{m_0}{2} \cdot \sigma_0 \end{bmatrix} \quad (34)$$

然后，我们将超导邻近效应引起的超导配对引入到 slab 系统的哈密顿量中，取化学势 μ 为 0，并写出相应的 BdG 方程：

$$H_{BdG}(k) = \begin{bmatrix} H_{\text{slab}}(k) & \Delta \cdot I_n \otimes \tau_0 \otimes i\sigma_y \\ -\Delta \cdot I_n \otimes \tau_0 \otimes i\sigma_y & -H_{\text{slab}}(-k)^* \end{bmatrix} \quad (35)$$

其中 Δ 是由超导邻近效应引入的超导配对， I_n 表示 slab 空间中的 n 维单位矩阵。整个哈密顿量的基矢为 $\{\phi_{n,j,\sigma}(k), \phi_{n,j,\sigma}^\dagger(-k)\}$ ， n, j, σ 分别表示层数，轨道和自旋自由度。根据 Fu-kane 方案，在 $B_z > \Delta$ 时，这个 slab 系统可以实现二维手性拓扑超导。而根据 Nagaosa 方案，将 I_n 替换为只有 (1, 1) 矩阵元为 1，其他都为 0 的 n 维方阵，取不为 0 的 B_z 就可以实现二维手性拓扑超导。接下来，我们将示范如何进行上述计算。

► 进入例子所在的目录

输入这个命令：

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/TI_model_TSC/
```

这个目录中有用来生成紧束缚模型的 write_hr_TI_model.py，用来绘制合适能量范围能谱的 slabek.gnu0 和 slabek_BdG.gnu0，以及两种方案对应的输入文件 wt.in-Fu-band，wt.in-Fu-WCC 和 wt.in-Nagaosa-band，wt.in-Nagaosa-WCC。

► 生成紧束缚模型

首先，我们通过 write_hr_TI_model.py 生成上述 TI 的紧束缚模型 wannier90_hr.dat

```
1 $ python write_hr_TI_model.py
```

这里我们把模型参数取为 $t = 0.5$, $M = 2.5$, $m_0 = -1$ 。

► 生成 wt.in 文件

```
1 $ cp wt.in-Fu-band wt.in
```

或

```
1 $ cp wt.in-Fu-WCC wt.in
```

来进行 Fu-kane 方案计算。

```
1 $ cp wt.in-Nagaosa-band wt.in
```

或

```
1 $ cp wt.in-Nagaosa-WCC wt.in
```

来进行 Nagaosa 方案计算。

如果用户打开 wt.in 文件查看，就会发现我们要计算模型的体能带，slab 能带，slab 体系的 BdG 能带和 slab 体系 BdG 哈密顿量的 wilson loop。

对于所有计算都必须的参数为：

```
1 --
2           wt.in
3 &SYSTEM
4 SOC = 1                         ! soc
5 E_FERMI = 0.00                   ! e-fermi
6 /
```

体能带计算需要的参数为：

```
1 --
2           wt.in
3 &CONTROL
4 BulkBand_calc      = T
5 /
6 &PARAMETERS
7 Nk1 = 201                      ! number k points
8 /
9
10 KPATH_BULK                  ! k point path
11 4                               ! number of k line only for bulk band
12 G 0.00000 0.00000 0.00000 X 0.50000 0.00000 0.00000
13 X 0.00000 0.50000 0.00000 M 0.50000 0.50000 0.00000
14 M 0.50000 0.50000 0.00000 G 0.00000 0.00000 0.00000
15 G 0.00000 0.00000 0.00000 R 0.50000 0.50000 0.50000
```

slab 系统能带计算需要的参数为：

```

1 --
2      wt.in
3 &CONTROL
4 SlabBand_calc      = T
5 /
6
7 &SYSTEM
8 Nslab = 20
9 Add_surf_zeeman_field = 1          ! Add zeeman field in bottom suface of slab
10      system
11 Bx_surf    = 0.0                  ! Suface zeeman field
12 By_surf    = 0.0                  ! Suface zeeman field
13 Bz_surf    = 0.20                 ! Suface zeeman field
14 /
15 &PARAMETERS
16 Nk1 = 201                      ! number k points
17 /
18 SURFACE
19 1 0 0
20 0 1 0
21 0 0 1
22
23 KPATH_SLAB
24 2                         ! numker of k line for 2D case
25 X 0.5 0.0 G 0.0 0.0          ! k path for 2D case
26 G 0.0 0.0 M 0.5 0.5

```

▶ 其中 Add_surf_zeeman_field 表示添加表面赛曼场的方式，1 代表只在下表面添加，2 代表只在上表面添加，3 代表上下表面都添加（默认值为 1）。Bx_surf, By_surf, Bz_surf 表示添加表面赛曼场的强度 (eV)。

slab 系统对应的 BdG 能带计算需要的参数为：

```

1 --
2      wt.in
3 &CONTROL
4 SlabBdG_calc      = T
5 /
6
7 &SYSTEM
8 Nslab = 20
9 Add_surf_zeeman_field = 1          ! Add zeeman field in bottom suface of slab
10      system
11 Add_Delta_BdG = 3                ! Add s-wave superconducting gap in whole slab
12      system
13 Bx_surf    = 0.0                  ! Suface zeeman field
14 By_surf    = 0.0                  ! Suface zeeman field

```

```

12 Bz_surf    = 0.20           ! Surface zeeman field
13 mu_BdG     = 0.0            ! The chemical potential of the BdG Hamiltonian
14 Delta_BdG  = 0.10          ! Uniform s-wave superconducting gap
15 /
16
17 &PARAMETERS
18 Nk1 = 201                  ! number k points
19 /
20
21 SURFACE
22 1 0 0
23 0 1 0
24 0 0 1
25
26 KPATH_SLAB
27 2                      ! number of k line for 2D case
28 X 0.5 0.0 G 0.0 0.0      ! k path for 2D case
29 G 0.0 0.0 M 0.5 0.5

```

► 其中 Add_Delta_BdG 表示添加 s 波超导配对的方式，1 代表只在下表面添加，2 代表只在上表面添加，3 代表在整个 slab 系统中添加（默认值为 3）。mu_BdG 和 Delta_BdG 分别表示 BdG 哈密顿量中的化学势 (eV) 和 s 波超导配对强度 (eV)。计算 Nagaosa 方案时，读者可以发现我们只是将 Add_Delta_BdG 设置为 2，表示只在上表面添加超导配对，再将 Bz_surf 改为 0.1。

在这个 slab 体系的 BdG 哈密顿量中，对应的 wilson loop 计算所需要的参数为：

```

1 --
2           wt.in
3 &CONTROL
4 BdGChern_calc      = T
5 /
6
7 &SYSTEM
8 Nslab = 20
9 Add_surf_zeeman_field = 1           ! Add zeeman field in bottom surface of slab
10          system
11 Add_Delta_BdG = 3                  ! Add s-wave superconducting gap in whole slab
12          system
13 Bx_surf    = 0.0                  ! Surface zeeman field
14 By_surf    = 0.0                  ! Surface zeeman field
15 Bz_surf    = 0.20                 ! Surface zeeman field
16 mu_BdG     = 0.0                  ! The chemical potential of the BdG Hamiltonian
17 Delta_BdG  = 0.10                 ! Uniform s-wave superconducting gap
18 /
19
20 &PARAMETERS
21 Nk1 = 41                         ! number k points
22 Nk2 = 401                         ! number k points
23 /

```

```

21
22 SURFACE
23 1 0 0
24 0 1 0
25 0 0 1
26
27 KPLANE_SLAB
28 -0.5 -0.5          ! Original point for 2D k plane
29 1.0 0.0            ! The first vector is used for integration. k1
30 0.0 1.0            ! The WCC is along this vector. k2

```

► 注意：由于粒子空穴对称性，体系 BdG 能带的负能态为总能带数的一半，所以在计算 WCC 时不需要用户指定占据数。另外，减小积分方向的 k 点数，也就是 Nk1 可以显著增加计算速度。

► 运行 WannierTools

```

1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm

```

用户可以通过 WT.out 文件来确定计算是否顺利，运行如下命令：

```
1 $ tail WT.out
```

如果一切顺利，则用户会看到以下内容

```

1 --
2           WT.out
3 WannierTools : An open-source software package for novel topological materials
4 QuanSheng Wu and ShengNan Zhang and Hai-Feng Song and Matthias Troyer and Alexey A.
5           Soluyanov
6 Computer Physics Communications 224, 405 (2018)
7 https://doi.org/10.1016/j.cpc.2017.09.033
8
9 For bugs, please report to wuquansheng@gmail.com
10 or wanniertools@groups.google.com.
11 More information could find on www.wanniertools.com
12 See you next time :)
13 =====

```

► 通过 Gnuplot 将结果可视化

1). 我们可以通过这个命令画出体能带：

```
1 $ gnuplot bulkek.gnu
```

输出的文件叫 bulkek.pdf。它看起来应该是这样：

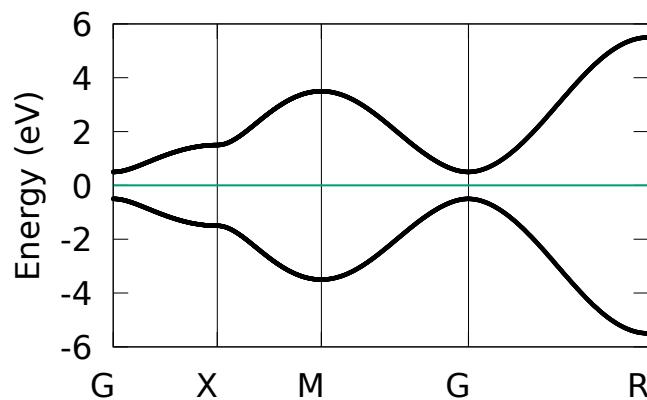


图 16.3: TI 模型对应的体能带图

2). 接下来，我们可以通过这个命令画出 slab 系统的能带：

```
1 $ gnuplot slabek.gnu0
```

输出的文件叫 slabek.png。Fu-Kane 方案和 Nagaosa 方案得到的结果分别如下图左右所示：

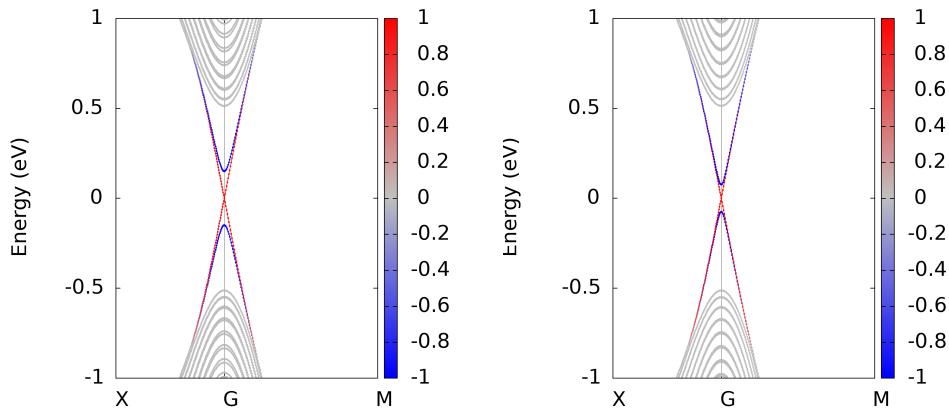


图 16.4: 左: Fu-kane 方案的 slab 能带图。右: Nagaosa 方案的 slab 能带图。

其中红色和蓝色分别表示投影到顶部和底部表面的权重。该能带结构对应于 $H_{slab}(k)$ ，可以看出底面狄拉克锥由于表面塞曼场引入了质量。

3). 然后，我们可以通过这个命令画出 slab 系统的 BdG 能带：

```
1 $ gnuplot slabek_BdG.gnu0
```

输出的文件叫 slabek_BdG.png。Fu-Kane 方案和 Nagaosa 方案得到的结果分别如下图左右所示：

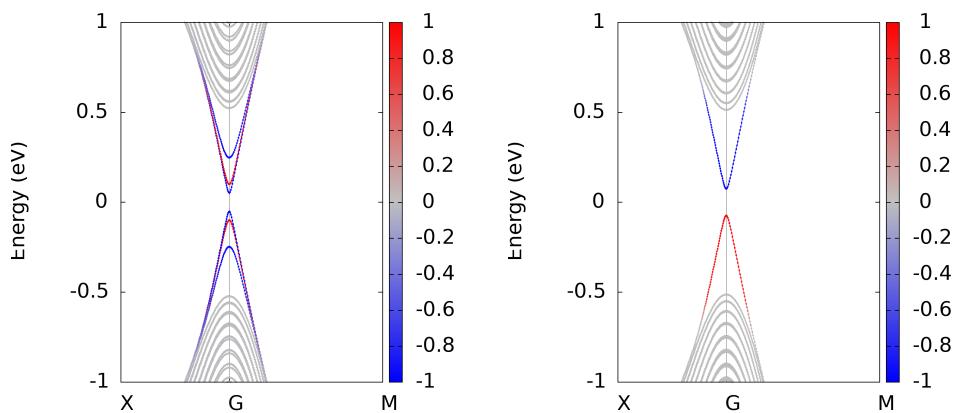


图 16.5: 左: Fu-kane 方案的 slab-BdG 能带图。右: Nagaosa 方案的 slab-BdG 能带图。

该能带结构对应于 $H_{BdG}(k)$ 。根据 Fu-Kane 方案, 当 $Bz_surf > \text{Delta_BdG}$ 时, 该体系可以实现二维手性拓扑超导态, 而根据 Nagaosa 方案, 则 Bz_surf 非 0 就可以实现二维手性拓扑超导, 可以通过 Wilson loop 来验证这个结果。

4). 我们可以画出 Wannier charge center (Wilson loop) 谱来确定体系的陈数:

```
1 $ gnuplot wcc_slab_BdG_total.gnu
```

输出的文件叫 `wcc_slab_BdG_total.eps`。Fu-Kane 方案和 Nagaosa 方案得到的结果分别如下图左右所示:

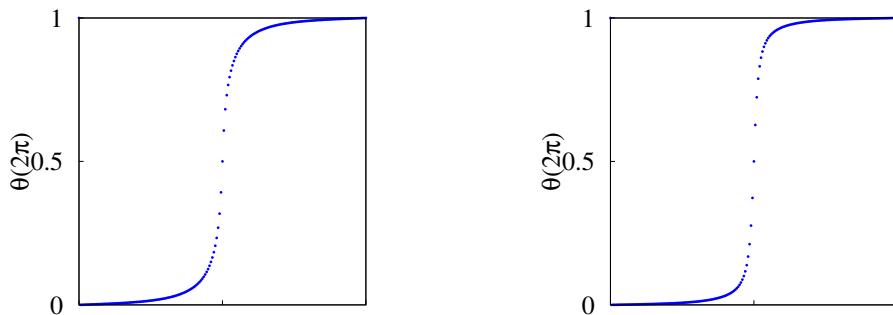


图 16.6: 左: Fu-kan π e 方案中 slab-BdG 的 wilson loop。右: Nagaosa π 方案中 slab-BdG 的 wilson π loop。

可以从这个 wcc 谱中的 winding number 得到, 两种方案对应的陈数都为 1。

► 练习

1. 减小 Bz_surf , 并执行上述计算。通过相应的 wilson loop 判断体系的拓扑性质, 观察体系的拓扑相变, 思考两种方案相变性质不同的原因。

参考答案: Fu-Kane 方案中, 如果将 Bz_surf 减小, 体系会在 $Bz_surf=0.132$ 时经历能隙的闭合再打开, 从而导致拓扑相变, Bz_surf 从 0.15 减小到 0.132 和 0.1 变化时, 体系的 BdG 能谱如下图:

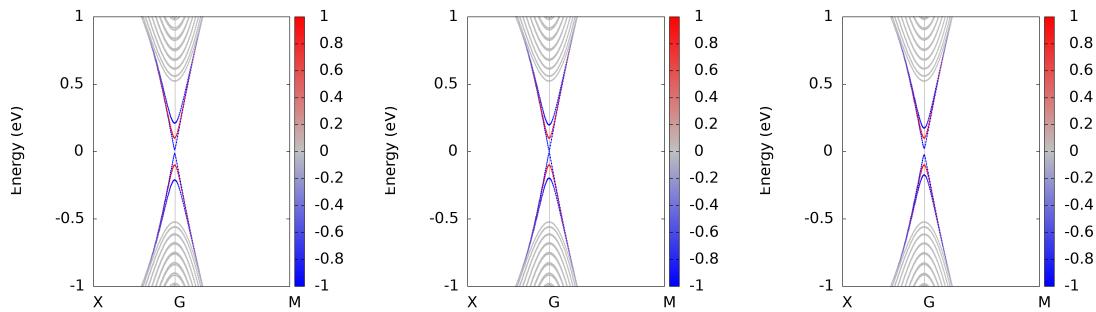
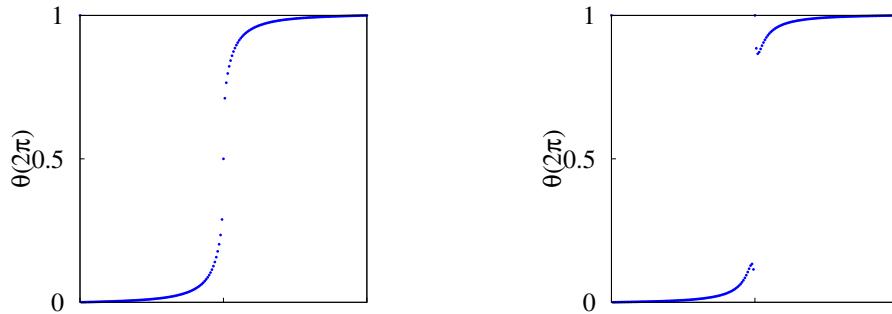


图 16.7: 表面赛曼场为 0.15eV (左), 0.132eV (中), 0.1eV (右) 时, Fu-Kane 方案的 BdG 能谱。

可以看到系统确实经历了能隙的闭合再打开, 确实发生了拓扑相变。细心的用户可以发现, 拓扑相变临界点并不是理论分析的 $Bz_surf=0.1$, 这是由于 slab 系统的表面态并不是完全局域在表面一层中, 所以其感受到的有效赛曼场要小于表面赛曼场。而 Bz_surf 为 0.15eV 和 0.1eV 时系统的 BdG 哈密顿量的 wilson loop 也可以验证这一点, 如下图所示:

图 16.8: Fu-kane 方案中表面赛曼场为 0.15eV (左) 和 0.1eV (右) 时, $\pi_{\text{slab-BdG}}$ 哈密顿的 wilson loop。

而在 Nagaosa 方案中, 如果上下表面态耦合非常小, 那表面赛曼场大于 0 就可以产生拓扑态, Bz_surf 为 0.05eV 和 0.01eV 时, 体系的 BdG 能谱如下图:

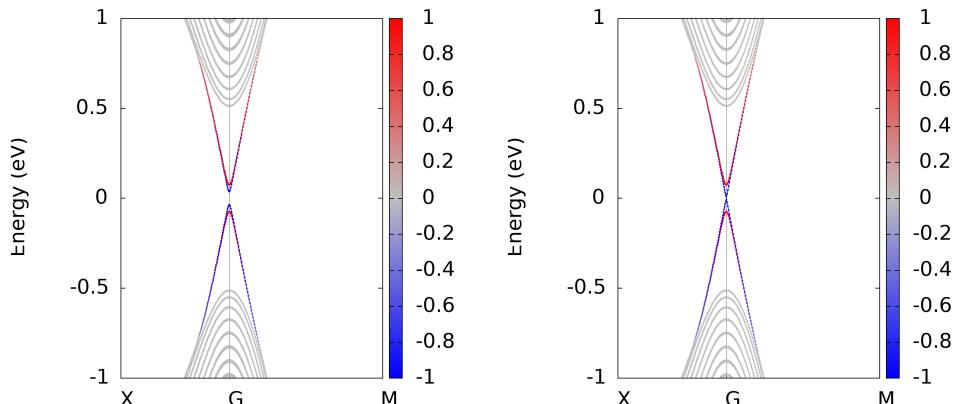


图 16.9: 表面赛曼场为 0.05eV (左), 0.01eV (右) 时 Nagaosa 方案的 BdG 能谱。

而 wilson loop 谱也能证明体系一直处于拓扑超导态:

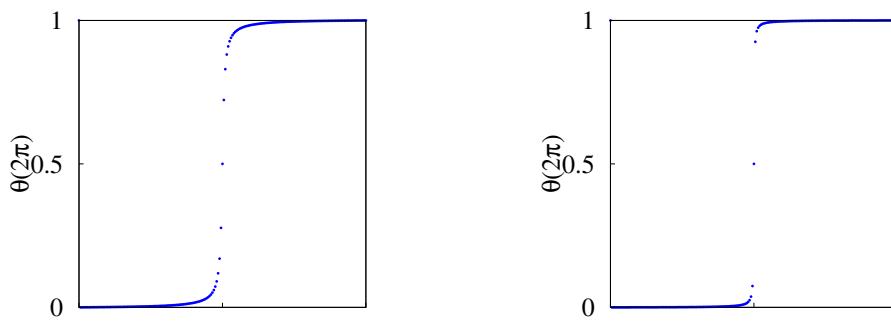


图 16.10: Nagaosa 方案中表面赛曼场为 0.05eV (左) 和 0.01eV (右) 时 slab-BdG 哈密顿的 wilson loop。

2. 通过将两种方案 `Bz_surf` 修改为负数来研究体系的拓扑性质，并考虑拓扑性质变化的原因。

参考答案：两种方案的陈数都将变为-1，这是由于产生拓扑的低能态发生了改变，对应的低能 Dirac 模型的螺旋度反号，所以陈数发生了改变（和 Nagaosa 方案部分的讨论相同）。

3. 思考两种方案中化学势 μ 对于体系拓扑的影响，可以使用计算结果佐证。

参考答案：Nagaosa 方案中，下表面哈密顿是块对角的，对应的色散为 $E = \pm\mu \pm \sqrt{|k|^2 + B_z^2}$ ，可以发现 μ 大于 B_z 时，体系变为无能隙的，这时也无法定义拓扑，为了简洁就不给出对应的计算结果了。

而在 Fu-kane 方案中，表面态对应的色散稍显复杂，但是其能隙闭合再打开的条件为 $B_z = \pm\sqrt{\mu^2 + \Delta^2}$ 。在计算中，如果保持 `Delta_BdG=0.1`，上面已经证实了 `Bz_surf=0.132` 为体系的相变点，在设置 `mu_BdG=0.05`，则体系的相变点应该变为 $Bz_surf=\sqrt{0.1^2 + 0.05^2} \times 0.132 = 0.148$ 。保持 `Bz_surf=0.15`，`mu_BdG=0.05` 和 `0.1` 时，体系的 BdG 能谱如下图：

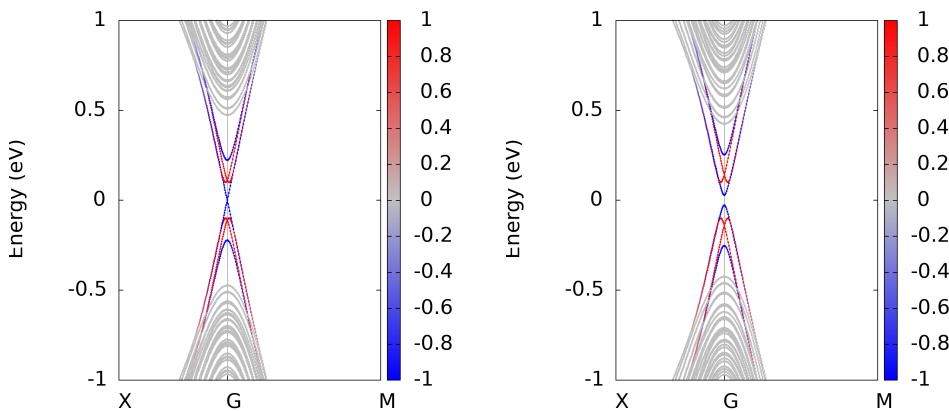


图 16.11: 化学势为 0.05eV (左), 0.1eV (右) 时 Fu-kane 方案的 BdG 能谱。

根据上面的分析，我们可以预测 `mu_BdG=0.05` 时，体系仍然处于拓扑超导态，而 `mu_BdG=0.1` 时，体系则处于拓扑平庸态，这可以用 wilson loop 谱来验证：

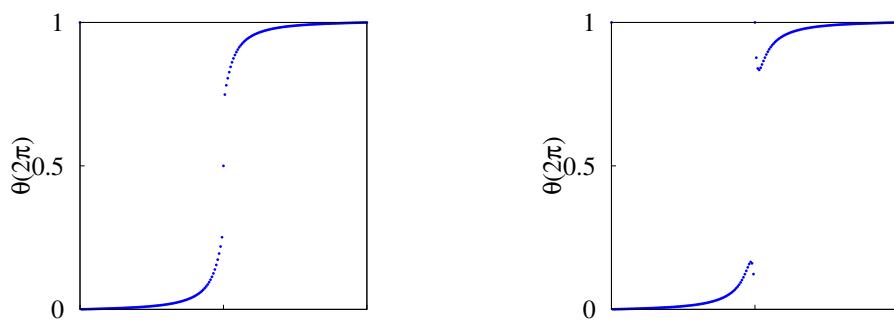


图 16.12: Fu-kane π 方案中化学势为 0.05eV (左), 0.1eV (右) 时, slab-BdG 哈密顿的 wilson loop。

16.2 Bi₂Se₃ 实现 2D 拓扑超导

Bi₂Se₃ 是一种理想的 3D 强拓扑绝缘体, 其材料性质在拓扑绝缘体一章已经有详细的展示, 在此不再重复介绍。接下来我们将基于第一性原理计算, 使用 Bi₂Se₃ 来进行上述的模型计算。

► 准备 首先, 请进入这个例子所在的目录, 并生成输入文件

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/Bi2Se3_TSC/
2 $ tar xzvf Bi2Se3_hr.tar.gz
3 $ cp wt.in-Fu-band wt.in
```

或

```
1 $ cp wt.in-Fu-WCC wt.in
```

来进行 Fu-kane 方案计算。

```
1 $ cp wt.in-Nagaosa-band wt.in
```

或

```
1 $ cp wt.in-Nagaosa-WCC wt.in
```

来进行 Nagaosa 方案计算。

这个目录中有用来生成紧束缚模型的 Bi2Se3_hr.tar.gz, 用来绘制合适能量范围能谱的 slabek.gnu0 和 slabek_BdG.gnu0, 以及两种方案对应的输入文件 wt.in-Fu-band, wt.in-Fu-WCC 和 wt.in-Nagaosa-band, wt.in-Nagaosa-WCC。

如果用户打开 wt.in 查看, 就能发现我们将 Fu-Kane 方案和 Nagaosa 方案的 Bz_surf 分别设为了 0.4 和 0.1。计算所需要的参数和 9.1 中模型计算相同, 这里不再赘述。

► 运行 WannierTools

```
1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm
```

► 通过 Gnuplot 将结果可视化

1). 我们可以通过这个命令画出体能带:

```
1 $ gnuplot bulkek.gnu
```

输出的文件叫 bulkek.pdf。它看起来应该是这样：

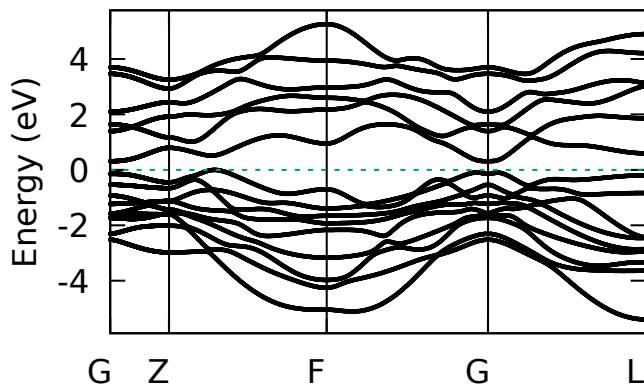


图 16.13: Bi_2Se_3 的体能带图

2). 接下来，我们可以通过这个命令画出 slab 系统的能带：

```
1 $ gnuplot slabek.gnu0
```

输出的文件叫 slabek.png。Fu-Kane 方案和 Nagaosa 方案得到的结果分别如下图左右所示：

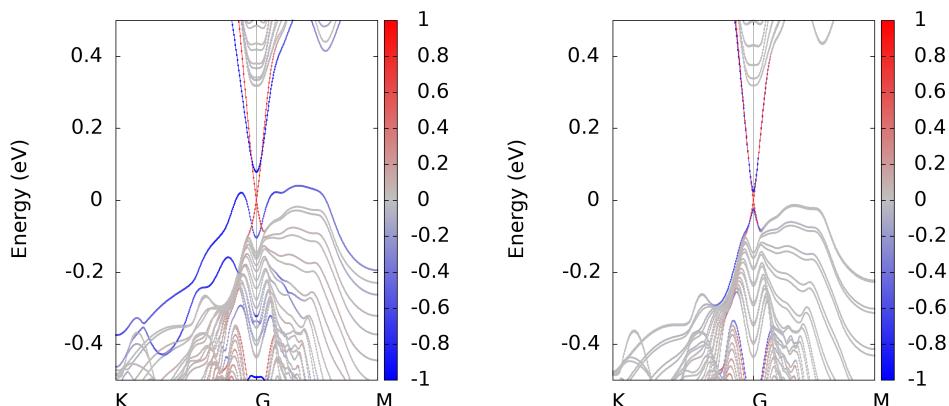


图 16.14: 左: Fu-kane 方案的 slab 能带图。右: Nagaosa 方案的 slab 能带图。

其中红色和蓝色分别表示投影到顶部和底部表面的权重。该能带结构对应于 $H_{\text{slab}}(k)$ ，可以看出底面狄拉克锥由于表面塞曼场引入了质量。

3). 然后，我们可以通过这个命令画出 slab 系统的 BdG 能带：

```
1 $ gnuplot slabek_BdG.gnu0
```

输出的文件叫 slabek_BdG.png。Fu-Kane 方案和 Nagaosa 方案得到的结果分别如下图左右所示：

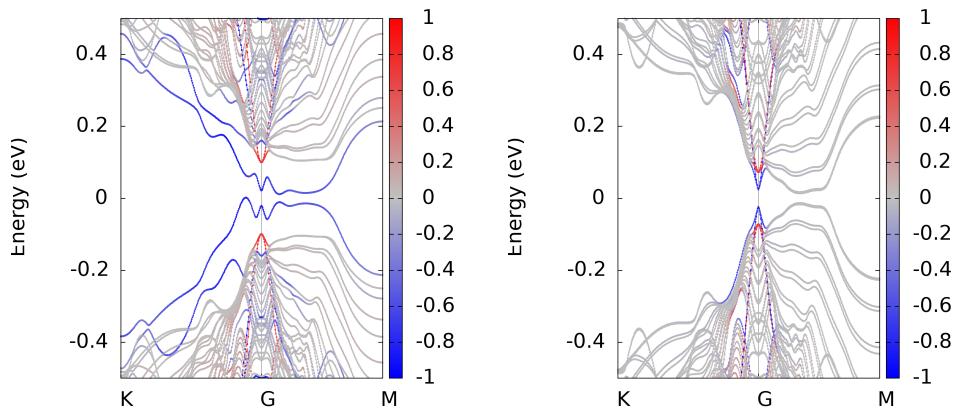


图 16.15: 左: Fu-kane 方案的 slab-BdG 能带图。右: Nagaosa 方案的 slab-BdG 能带图。

该能带结构对应于 $H_{BdG}(k)$ 。

4). 我们可以画出 Wannier charge center (Wilson loop) 谱来确定体系的陈数:

```
1 $ gnuplot wcc_slab_BdG_total.gnu
```

输出的文件叫 wcc_slab_BdG_total.eps。Fu-Kane 方案和 Nagaosa 方案得到的结果分别如下图左右所示:

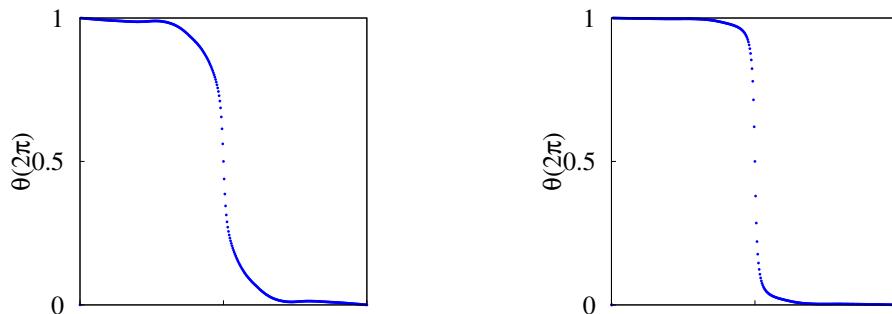


图 16.16: 左: Fu-kane 方案中 slab-BdG 的 wilson loop。右: Nagaosa 方案中 slab-BdG 的 wilson loop。

可以发现两种方案都给出了-1 的陈数。

16.3 SnTe 实现 2D 拓扑超导

通过前两节的计算, 我们已经确定狄拉克锥表面态可以用来构建 2D 手性拓扑超导体。接下来, 我们将使用 wanniertools 探索存在多个表面狄拉克锥的体系能否实现高陈数的 2D 拓扑超导。SnTe 是一种由镜面对称性保护的拓扑晶体绝缘体, 其 (001) 表面存在 4 个受到晶体对称性保护的狄拉克锥表面态, 其晶体结构如下图所示 [42]:

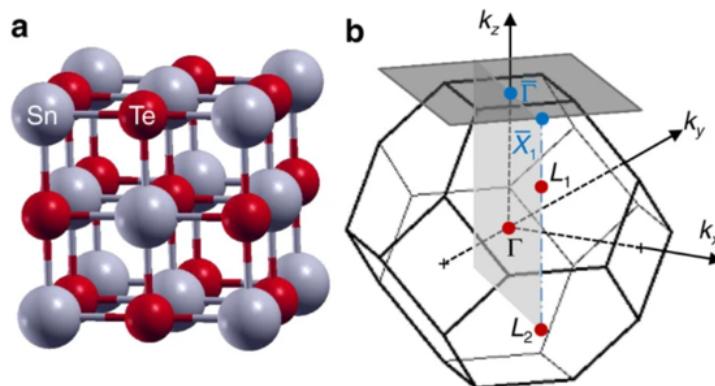


图 16.17: a: SnTe 的晶体结构。b: 对应的布里渊区。

它的 (001) 表面能带如下图所示：

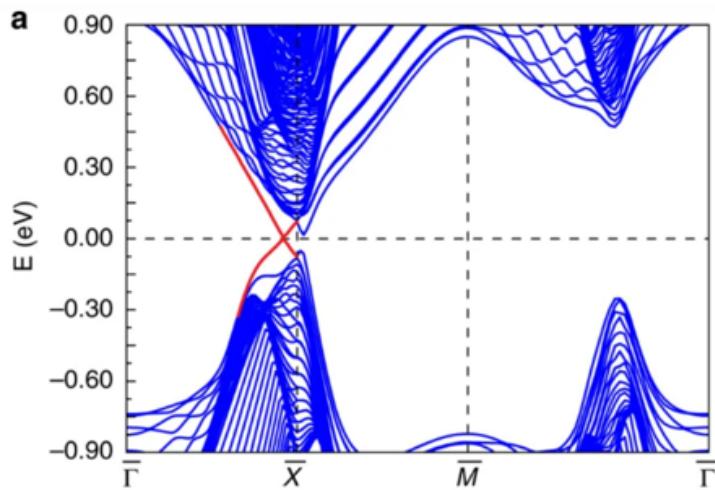


图 16.18: (001) 表面的 slab 能带图

► 准备 首先, 请进入这个例子所在的目录, 并生成输入文件

```
1 $ cd ~/wt2024/examples/SnTe_TSC/
2 $ tar xzvf SnTe_hr.tar.gz
3 $ cp wt.in-Fu-band wt.in
```

或

```
1 $ cp wt.in-Fu-WCC wt.in
```

来进行 Fu-kane 方案计算。

```
1 $ cp wt.in-Nagaosa-band wt.in
```

或

```
1 $ cp wt.in-Nagaosa-WCC wt.in
```

来进行 Nagaosa 方案计算。

这个目录中有用来生成紧束缚模型的 SnTe_hr.tar.gz, 用来绘制合适能量范围能谱的 slabek.gnu0 和 slabek_BdG.gnu0, 以及两种方案对应的输入文件 wt.in-Fu-band, wt.in-Fu-WCC 和 wt.in-Nagaosa-band, wt.in-Nagaosa-WCC。此外, 还有计算局部 wilson loop 谱的 wt.in-Fu-zoom-in

和 wt.in-Nagaosa-zoom-in。还有绘制局部 wilson loop 谱的 wcc_slab_BdG_total-zoom-in.gnu0。

如果用户打开 wt.in 查看，就能发现我们将 Fu-Kane 方案和 Nagaosa 方案的 Bz_surf 分别设为了 0.2 和 0.1（和之前的不同指出在于，Fu-Kane 方案中的 Delta_BdG 改为了 0.01，这是由于 SnTe 的表面态局域性较差，全局添加超导 gap 和只添加表面超导 gap 对表面态的影响有较大差别）。计算所需要的参数和 9.1 中模型计算相同，这里不再赘述。

▶ 运行 WannierTools

```
1 $ cp ~/wt2024/sub-wt.slurm .
2 $ sbatch sub-wt.slurm
```

▶ 通过 Gnuplot 将结果可视化

1). 我们可以通过这个命令画出体能带：

```
1 $ gnuplot bulkek.gnu
```

输出的文件叫 bulkek.pdf。它看起来应该是这样：

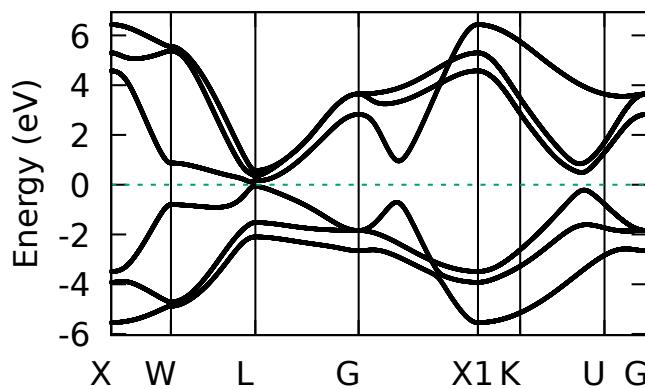


图 16.19: SnTe 的体能带图

2). 接下来，我们可以通过这个命令画出 slab 系统的能带：

```
1 $ gnuplot slabek.gnu0
```

输出的文件叫 slabek.png。Fu-Kane 方案和 Nagaosa 方案得到的结果分别如下图左右所示：

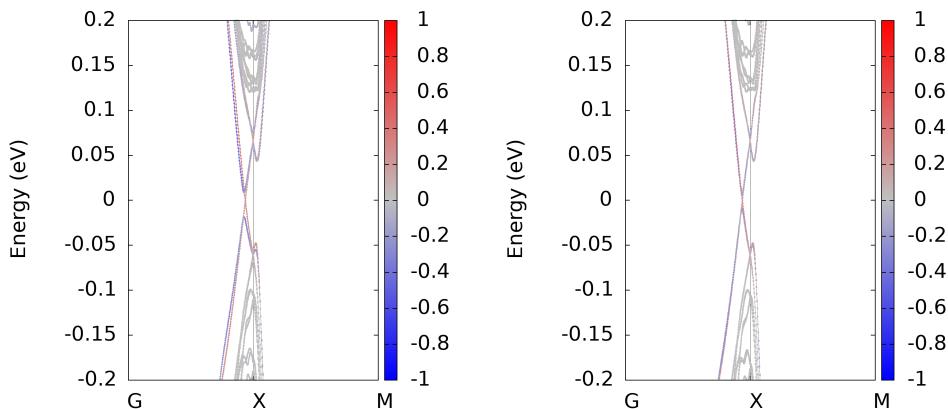


图 16.20: 左: Fu-kane 方案的 slab 能带图。右: Nagaosa 方案的 slab 能带图。

其中红色和蓝色分别表示投影到顶部和底部表面的权重。该能带结构对应于 $H_{slab}(k)$ ，可以看出底面狄拉克锥由于表面塞曼场引入了质量。

3). 然后，我们可以通过这个命令画出 slab 系统的 BdG 能带：

```
1 $ gnuplot slabek_BdG.gnu0
```

输出的文件叫 slabek_BdG.png。Fu-Kane 方案和 Nagaosa 方案得到的结果分别如下图左右所示：

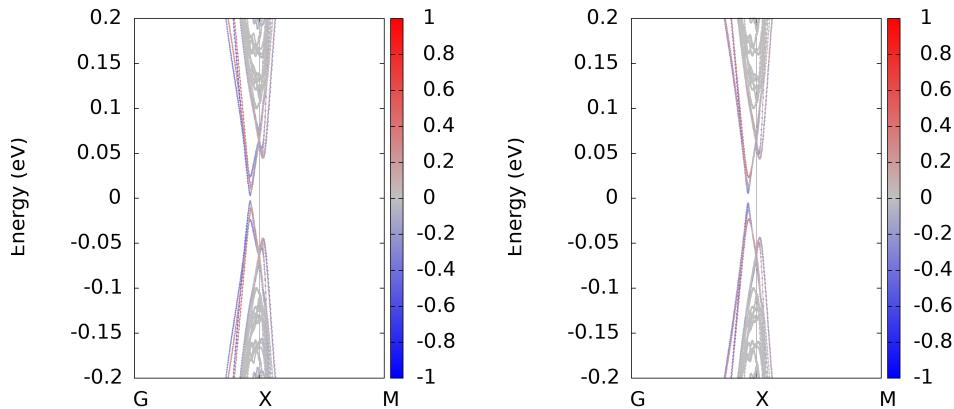


图 16.21: 左: Fu-kane 方案的 slab-BdG 能带图。右: Nagaosa 方案的 slab-BdG 能带图。

该能带结构对应于 $H_{BdG}(k)$ 。

4). 我们可以画出 Wannier charge center (Wilson loop) 谱来确定体系的陈数：

```
1 $ gnuplot wcc_slab_BdG_total.gnu
```

输出的文件叫 wcc_slab_BdG_total.eps。Fu-Kane 方案和 Nagaosa 方案得到的结果分别如下图左右所示：

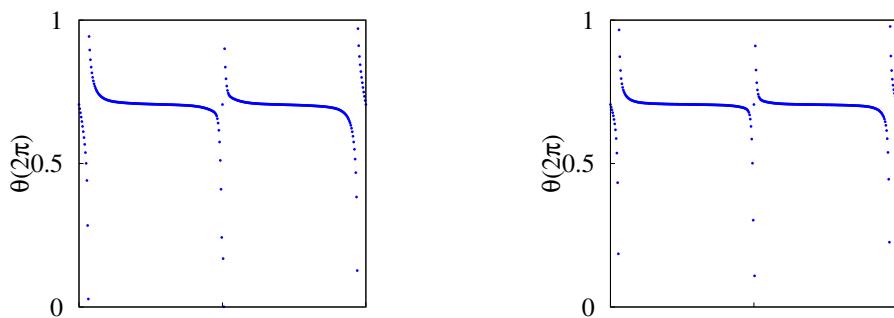


图 16.22: 左: Fu-ka \bar{n} e 方案中 slab-BdG 的 wil \bar{n} loop。右: Nagaosa \bar{n} 方案中 slab-BdG 的 wil \bar{n} loop。

看起来好像得出了-3 的陈数，这并不符合我们的预期——4 个狄拉克锥表面态会得出-4 的陈数，如果我们仔细计算两种方案中 k_y 在 0 附近的 WCC 谱（使用 wt.in-Fu-zoom-in 和 wt.in-Nagaosa-zoom-in 作为输入文件，并使用 wcc_slab_BdG_total-zoom-in.gnu0 来绘制局部的谱），就会发现：

```
1 $ gnuplot wcc_slab_BdG_total-zoom-in.gnu
```

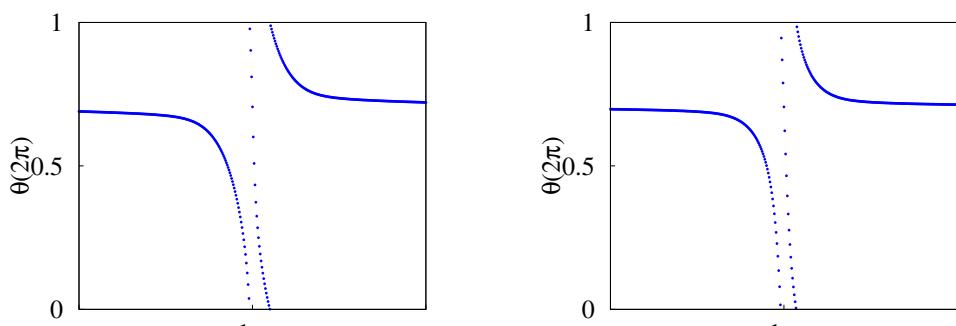


图 16.23: 左: Fu-kane $-\frac{1}{4}\pi$ 方案中 slab-BdG 的 wilson loop $\theta(2\pi)$ 的放大图。右: $-\frac{1}{4}\pi$ Nagaosa 方案中 slab-BdG 的 wilson loop $\theta(2\pi)$ 的放大图。

这是由于两个表面狄拉克锥在同一条积分路径上，导致 WCC 谱过于尖锐。最终，发现两种方案都给出了-4 的陈数，也符合我们的预期。

目前，已经基于该程序包进行了一些工作 [39, 40],，欢迎大家共同讨论指正。

- [1] QuanSheng Wu, ShengNan Zhang, Hai-Feng Song, Matthias Troyer, and Alexey A Soluyanov. Wanniertools: An open-source software package for novel topological materials. Computer Physics Communications, 224:405–416, 2018.
- [2] Haijun Zhang, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, Xi Dai, Zhong Fang, and Shou-Cheng Zhang. Topological insulators in bi₂se₃, bi₂te₃ and sb₂te₃ with a single dirac cone on the surface. Nature Physics, 5(6):438–442, May 2009.
- [3] Markus König, Steffen Wiedmann, Christoph Brüne, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang. Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. Science, 318(5851):766–770, November 2007.
- [4] Miguel M. Ugeda, Artem Pulkin, Shujie Tang, Hyejin Ryu, Quansheng Wu, Yi Zhang, Dillon Wong, Zahra Pedramrazi, Ana Martín-Recio, Yi Chen, Feng Wang, Zhi-Xun Shen, Sung-Kwan Mo, Oleg V. Yazyev, and Michael F. Crommie. Observation of topologically protected states at crystalline phase boundaries in single-layer wse₂. Nature Communications, 9(1), August 2018.
- [5] Liang Fu and C. L. Kane. Topological insulators with inversion symmetry. Physical Review B, 76(4):045302, July 2007.
- [6] Alexey A Soluyanov, Dominik Gresch, Zhijun Wang, QuanSheng Wu, Matthias Troyer, Xi Dai, and B Andrei Bernevig. Type-ii weyl semimetals. Nature, 527(7579):495–498, 2015.
- [7] Xiaochun Huang, Lingxiao Zhao, Yujia Long, Peipei Wang, Dong Chen, Zhanhai Yang, Hui Liang, Mianqi Xue, Hongming Weng, Zhong Fang, et al. Observation of the chiral-anomaly-induced negative magnetoresistance in 3d weyl semimetal taas. Physical Review X, 5(3):031023, 2015.
- [8] BQ Lv, N Xu, HM Weng, JZ Ma, P Richard, XC Huang, LX Zhao, GF Chen, CE Matt, F Bisti, et al. Observation of weyl nodes in taas. Nature Physics, 11(9):724–727, 2015.
- [9] BQ Lv, Stefan Muff, Tian Qian, ZD Song, SM Nie, N Xu, P Richard, Christian E Matt, Nicholas C Plumb, LX Zhao, et al. Observation of fermi-arc spin texture in taas. Physical review letters, 115(21):217601, 2015.
- [10] Cheng Shen, Yanbang Chu, QuanSheng Wu, Na Li, Shuopei Wang, Yanchong Zhao, Jian Tang, Jieying Liu, Jinpeng Tian, Kenji Watanabe, et al. Correlated states in twisted double bilayer graphene. Nature Physics, 16(5):520–525, 2020.
- [11] Wenhan Zhang, Quansheng Wu, Lunyong Zhang, Sang-Wook Cheong, Alexey A Soluyanov, and Weida Wu. Quasiparticle interference of surface states in the type-ii weyl semimetal wte 2. Physical Review B, 96(16):165125, 2017.

- [12] C-J Yi, BQ Lv, QS Wu, B-B Fu, X Gao, M Yang, X-L Peng, M Li, Y-B Huang, P Richard, et al. Observation of a nodal chain with dirac surface states in ti b_2 . Physical Review B, 97(20):201107, 2018.
- [13] Yong-Chang Lau, Junya Ikeda, Kohei Fujiwara, Akihiro Ozawa, Jiaxin Zheng, Takeshi Seki, Kentaro Nomura, Liang Du, Quansheng Wu, Atsushi Tsukazaki, et al. Intercorrelated anomalous hall and spin hall effect in kagome-lattice $\text{co}_3\text{sn}_2\text{s}_2$ -based shandite films. Physical Review B, 108(6):064429, 2023.
- [14] Di Xiao, Yugui Yao, Zhong Fang, and Qian Niu. Berry-phase effect in anomalous thermoelectric transport. Physical review letters, 97(2):026603, 2006.
- [15] Minghang Li, Hanqi Pi, Yunchi Zhao, Ting Lin, Qinghua Zhang, Xinzhe Hu, Changmin Xiong, Zhiyong Qiu, Lichen Wang, Ying Zhang, et al. Large anomalous nernst effects at room temperature in fe_3pt thin films. Advanced Materials, 35(32):2301339, 2023.
- [16] Satya N Guin, Kaustuv Manna, Jonathan Noky, Sarah J Watzman, Chenguang Fu, Nitesh Kumar, Walter Schnelle, Chandra Shekhar, Yan Sun, Johannes Gooth, et al. Anomalous nernst effect beyond the magnetization scaling relation in the ferromagnetic heusler compound co_2mnga . NPG Asia Materials, 11(1):16, 2019.
- [17] G. Y. Guo, S. Murakami, T.-W. Chen, and N. Nagaosa. Intrinsic spin hall effect in platinum: First-principles calculations. Phys. Rev. Lett., 100:096401, Mar 2008.
- [18] Junfeng Qiao, Jiaqi Zhou, Zhe Yuan, and Weisheng Zhao. Calculation of intrinsic spin hall conductivity by wannier interpolation. Phys. Rev. B, 98:214402, Dec 2018.
- [19] Yong-Chang Lau, Junya Ikeda, Kohei Fujiwara, Akihiro Ozawa, Jiaxin Zheng, Takeshi Seki, Kentaro Nomura, Liang Du, Quansheng Wu, Atsushi Tsukazaki, and Koki Takanashi. Intercorrelated anomalous hall and spin hall effect in kagome-lattice $\text{co}_3\text{sn}_2\text{s}_2$ -based shandite films. Phys. Rev. B, 108:064429, Aug 2023.
- [20] Zhihao Liu, Shengnan Zhang, Zhong Fang, Hongming Weng, and Quansheng Wu. First-principles methodology for studying magnetotransport in magnetic materials. arXiv preprint arXiv:2401.15146, 2024.
- [21] ShengNan Zhang, Hanqi Pi, Zhong Fang, Hongming Weng, and QuanSheng Wu. New perspectives of hall effects from first-principles calculations. arXiv preprint arXiv:2401.15150, 2024.
- [22] Hanqi Pi, Shengnan Zhang, Yang Xu, Zhong Fang, Hongming Weng, and Quansheng Wu. First-principles methodology for studying magnetotransport in narrow-gap semiconductors: an application to zirconium pentatelluride zrte_5 . arXiv preprint arXiv:2401.15151, 2024.
- [23] Xin Han, Hanqi Pi, Dayu Yan, Ruihan Zhang, Yong Li, Xiang Wang, Zhiling Dun, Zhijun Wang, Hai L Feng, Quansheng Wu, et al. Quantum oscillations and transport evidence of topological bands in $\text{la}_3\text{mg}\text{bi}_5$ single crystals. Physical Review B, 108(7):075157, 2023.

- [24] G Gatti, D Gosálbez-Martínez, QS Wu, J Hu, SN Zhang, G Autès, M Puppin, D Bugini, H Berger, L Moreschini, et al. Origin of large magnetoresistance in the topological nonsymmorphic semimetal tase 3. *Physical Review B*, 104(15):155122, 2021.
- [25] Qin Chen, Zhefeng Lou, ShengNan Zhang, Yuxing Zhou, Binjie Xu, Huancheng Chen, Shuijin Chen, Jianhua Du, Hangdong Wang, Jinhu Yang, et al. Extremely large magnetoresistance in the “ordinary” metal reo 3. *Physical Review B*, 104(11):115104, 2021.
- [26] Yuxing Zhou, Zhefeng Lou, ShengNan Zhang, Huancheng Chen, Qin Chen, Binjie Xu, Jianhua Du, Jinhu Yang, Hangdong Wang, Chuanying Xi, et al. Linear and quadratic magnetoresistance in the semimetal si p 2. *Physical Review B*, 102(11):115145, 2020.
- [27] Mario Novak, SN Zhang, Filip Orbanić, Nikola Biliškov, Gaku Eguchi, Silke Paschen, A Kimura, XX Wang, T Osada, K Uchida, et al. Highly anisotropic interlayer magnetoresistance in zrsis nodal-line dirac semimetal. *Physical Review B*, 100(8):085137, 2019.
- [28] ShengNan Zhang, QuanSheng Wu, Yi Liu, and Oleg V Yazyev. Magnetoresistance from fermi surface topology. *Physical Review B*, 99(3):035142, 2019.
- [29] Yasumasa Hasegawa and Mahito Kohmoto. Periodic landau gauge and quantum hall effect in twisted bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, 88:125426, Sep 2013.
- [30] QuanSheng Wu, Jianpeng Liu, Yifei Guan, and Oleg V. Yazyev. Landau levels as a probe for band topology in graphene moiré superlattices. *Physical Review Letters*, 126(5), February 2021.
- [31] Fatemeh Haddadi, QuanSheng Wu, Alex J Kruchkov, and Oleg V Yazyev. Moiré flat bands in twisted double bilayer graphene. *Nano letters*, 20(4):2410–2415, 2020.
- [32] ShengNan Zhang, Bo Xie, QuanSheng Wu, Jianpeng Liu, and Oleg V Yazyev. Chiral decomposition of twisted graphene multilayers with arbitrary stacking. *Nano Letters*, 23(7):2921–2926, 2023.
- [33] Th. Seyller, K.V. Emtsev, K. Gao, F. Speck, L. Ley, A. Tadich, L. Broekman, J.D. Riley, R.C.G. Leckey, O. Rader, A. Varykhalov, and A.M. Shikin. Structural and electronic properties of graphite layers grown on sic(0001). *Surface Science*, 600(18):3906–3911, 2006. Berlin, Germany: 4–9 September 2005.
- [34] W. S. Jung, C. S. Leem, Chul Kim, S. R. Park, S. Y. Park, B. J. Kim, E. Rotenberg, and C. Kim. Imaging the electron density in solids by using multi-brillouin-zone angle resolved photoelectron spectroscopy. *Phys. Rev. B*, 82:235105, Dec 2010.
- [35] F Duncan M Haldane. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the” parity anomaly”. *Physical review letters*, 61(18):2015, 1988.
- [36] Liang Fu and Charles L Kane. Superconducting proximity effect and majorana fermions at the surface of a topological insulator. *Physical review letters*, 100(9):096407, 2008.

-
- [37] James Jun He, Tian Liang, Yukio Tanaka, and Naoto Nagaosa. Platform of chiral majorana edge modes and its quantum transport phenomena. *Communications Physics*, 2(1):149, 2019.
 - [38] Geetha Balakrishnan, L Bawden, S Cavendish, and Martin R Lees. Superconducting properties of the in-substituted topological crystalline insulator snTe. *Physical Review B*, 87(14):140507, 2013.
 - [39] Aiyun Luo, Ying Li, Yi Qin, Jingnan Hu, Xiaoxu Wang, Jinyu Zou, Biao Lian, and Gang Xu. Topological superconductor candidates pdBi₂Te₄ and pdBi₂Te₅ from a generic ab initio strategy. *npj Computational Materials*, 9(1):188, 2023.
 - [40] Jingnan Hu, Fei Yu, Aiyun Luo, Xiao-Hong Pan, Jinyu Zou, Xin Liu, and Gang Xu. Chiral topological superconductivity in superconductor-obstructed atomic insulator-ferromagnetic insulator heterostructures. *Physical Review Letters*, 132(3):036601, 2024.
 - [41] B Andrei Bernevig. *Topological insulators and topological superconductors*. Princeton university press, 2013.
 - [42] Timothy H Hsieh, Hsin Lin, Junwei Liu, Wenhui Duan, Arun Bansil, and Liang Fu. Topological crystalline insulators in the snTe material class. *Nature communications*, 3(1):982, 2012.