

# 武汉大学本科毕业设计(论文)开题报告

题 目	磁阻计算中的能带连续性优化		
学生姓名	徐毅豪	学号	2021302031026
所在学院	物理科学与技术学院	专业	物理学
指导教师	袁声军, 吴泉生	职称	教授, 副研究员

## 一、选题目的和意义

本课题旨在优化半经典方法在磁阻效应计算中的适用性, 简化其计算流程并降低计算资源需求。通过引入基于平面波重构能带的方法, 取代传统的 Wannier 函数构建过程, 同时利用更高自由度最小化误差函数, 从而生成高质量的连续能带。本研究的目标是为传统金属和半导体材料的磁阻效应研究提供一种更加高效、实用的计算手段。

磁阻效应是研究材料在磁场中输运行为的核心现象, 具有重要的理论和应用价值。在实际研究中, 半经典方法因其计算成本较低和实现简便性而被广泛采用。然而, 传统方法依赖于 Wannier 函数构建, 其过程复杂且对研究人员经验要求较高, 这在一定程度上限制了该方法的普适性与高效性。本课题提出的改进方法, 能有效降低对 Wannier 函数构建的依赖, 简化操作流程并提升计算效率, 为磁阻效应的计算研究开辟新途径, 同时也为相关领域的理论探索和实际应用奠定了技术基础。

## 二、国内外研究现状和发展趋势

### 2.1 国内外研究现状

磁阻效应的研究始于对传统金属和半导体材料在磁场中输运行为的探索, 随着实验技术和理论工具的发展, 该领域取得了诸多进展。当前, 半经典方法因其计算效率较高, 广泛应用于磁阻效应的模拟研究。国际上, 如欧洲和美国的研究团队在基于第一性原理的磁阻效应计算中, 利用高质量的 Wannier 函数描述能带结构, 取得了显著成果。这些方法在解释金属中的非线性磁阻和半导体中的负磁阻现象方面表现优异。

国内方面, 包括中科院物理所、清华大学等机构, 也在磁阻效应的研究中

取得了重要进展，特别是在新型拓扑材料和二维材料的磁输运特性研究中，通过结合半经典模型和实验数据，深入揭示了复杂磁阻效应背后的物理机制。

尽管如此，现有方法的局限性逐渐显现：

1. 基于 Wannier 函数的能带构建过程复杂且耗时，对经验要求较高；
2. 高质量的 Wannier 函数生成依赖计算资源，对大规模或复杂材料系统的研究带来挑战；
3. 现有模型在高精度和计算效率之间的平衡尚需进一步优化。

## 2.2 发展趋势

未来，磁阻效应的研究在以下几个方向具有重要发展潜力：

1. **计算方法的简化与优化：**发展新的误差最小化算法，提高连续能带拟合精度，同时简化操作流程。
2. **与新型材料研究的结合：**拓展磁阻效应研究到拓扑材料、二维材料和范德瓦尔斯异质结构等新兴材料领域，探索其潜在的非线性磁阻特性。
3. **高性能计算平台的使用：**依托 GPU 和并行计算技术，显著加速大规模材料系统的磁阻计算。

## 三、研究内容、研究方法、技术路线及可行性分析

本课题旨在优化磁阻效应的半经典计算方法，通过改进能带描述方式，提高计算效率并降低计算复杂度。研究内容主要包括利用平面波基函数重构连续能带，以替代传统的 Wannier 函数构建方法，并通过最小化误差函数实现更高的重构精度。改进后的方法将应用于金属、半导体等传统材料体系，进一步扩展到复杂材料（如拓扑材料和二维材料），以验证其在磁阻效应研究中的适用性和可靠性。

研究过程中，将基于第一性原理计算提取材料的能带结构，结合数值优化方法完成连续能带的构建，并对比分析改进前后的计算效率和结果精度。为验证方法的通用性，将使用自编程序与开源软件工具 Wanniertools 相结合，对多种材料的磁阻效应进行模拟，并与实验数据进行对比分析。研究还将通过参数优化，进一步提高算法的计算效率和稳定性。

从技术角度来看，平面波基函数的广泛应用及其实现的高效性为方法改进

提供了可行性；从资源支持来看，丰富的计算资源和成熟的数值模拟经验能够保障研究的顺利开展。同时，磁阻效应研究在基础物理和新材料开发中的重要性，也赋予本课题较高的理论价值和实际意义，预期研究成果将为磁阻效应计算的广泛应用提供有力支持。

## 四、项目特色与创新点

本课题的主要特色在于将平面波基函数引入磁阻效应的半经典计算中，替代传统的 Wannier 函数方法，用以构建连续能带。这一方法不仅简化了复杂的能带重构流程，还显著降低了对研究人员经验和计算资源的依赖，使磁阻效应计算更加高效和普适。

此外，课题中采用了基于高自由度误差最小化的优化算法，在提升能带重构精度的同时保证了计算的稳定性。这种方法能够更精准地描述材料的电子输运特性，为研究复杂材料体系（如拓扑材料、二维材料）中的非线性磁阻行为提供了有力支持。

本课题还强调理论简化与实际效率的结合，既保持了计算结果的可靠性，又降低了对高性能计算平台的需求。通过将平面波方法与第一性原理计算相融合，提出了一种在效率和精度之间取得平衡的新方法，不仅对磁阻效应研究具有重要意义，也为其它与能带相关的物理现象的计算研究提供了参考价值。

## 五、进度安排

①2024 年 11 月—12 月 学习基于平面波展开的能带重构方法，熟悉半经典磁阻计算的基本理论框架；系统调研现有基于 Wannier 函数的磁阻计算方法和其局限性。

②2025 年 1 月 针对 Wannier 函数构建过程中的局限性，调研并尝试采用高自由度误差函数最小化策略的替代方法；评估基于平面波重构的连续能带的精度与适用性。

③2025 年 2 月—4 月 将平面波展开的连续能带方法融入现有的半经典磁阻计算框架，优化算法以降低计算复杂度；通过对多种材料体系（如传统金属、半导体）的验证实验，测试方法的有效性和通用性。

④2025 年 4 月—5 月 完成改进算法的优化与评估，总结研究结果并撰写论文。

## 六、参考文献

- [1] Zhang, ShengNan, et al. "Magnetoresistance from Fermi surface topology." *Physical Review B* 99.3 (2019): 035142.
- [2] Pi, Hanqi, et al. "First principles methodology for studying magnetotransport in narrow gap semiconductors with ZrTe5 example." *npj Computational Materials* 10.1 (2024): 276.
- [3] Zhang, ShengNan, et al. "Complex field-, temperature-, and angle-dependent Hall effects from intrinsic Fermi surface revealed by first-principles calculations." *Physical Review B* 110.20 (2024): 205132.
- [4] Desai, Dhruv C., et al. "Magnetotransport in semiconductors and two-dimensional materials from first principles." *Physical Review B* 103.16 (2021): L161103.
- [5] Chen, Qin, et al. "Large magnetoresistance and nonzero Berry phase in the nodal-line semimetal MoO<sub>2</sub>." *Physical Review B* 102.16 (2020): 165133.
- [6] Kolincio, Kamil K., Marta Roman, and Tomasz Klimczuk. "Enhanced mobility and large linear nonsaturating magnetoresistance in the magnetically ordered states of TmNiC<sub>2</sub>." *Physical Review Letters* 125.17 (2020): 176601.
- [7] Cheng, Erjian, et al. "Magnetism-induced topological transition in EuAs<sub>3</sub>." *Nature Communications* 12.1 (2021): 6970.
- [8] Dong, Wen-Han, et al. "Realizing Strong and Robust Quasi-1D Superconductors via Multiorbital Chains: NaBe as an Example." *Physical Review Letters* 133.23 (2024): 236001.
- [9] Liu, Zhihao, et al. "Combined first-principles and Boltzmann transport theory methodology for studying magnetotransport in

- magnetic materials." *Physical Review Research* 6.4 (2024): 043185.
- [10] Chen, Qin, et al. "Extremely large magnetoresistance in the "ordinary" metal  $\text{ReO}_3$ ." *Physical Review B* 104.11 (2021): 115104.
- [11] Pi, Hanqi, et al. "Sign reversal of Hall effect in single-crystalline semimetal ruthenium thin films." *Physical Review B* 110.23 (2024): 235123.
- [12] Chambers, Robert G. *Electrons in metals and semiconductors*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [13] Pippard, Alfred Brian. *Magnetoresistance in metals*. Vol. 2. Cambridge university press, 1989.
- [14] Danner, G. M., W. Kang, and P. M. Chaikin. "Measuring the Fermi surface of quasi-one-dimensional metals." *Physical review letters* 72.23 (1994): 3714.
- [15] Tanaka, Masayuki, Masashi Hasegawa, and Humihiko Takei. "Growth and anisotropic physical properties of  $\text{PdCoO}_2$  single crystals." *Journal of the Physical Society of Japan* 65.12 (1996): 3973–3977.
- [16] Takatsu, Hiroshi, et al. "Extremely large magnetoresistance in the nonmagnetic metal  $\text{PdCoO}_2$ ." *Physical Review Letters* 111.5 (2013): 056601.
- [17] Yang, Huan, et al. "Fully Band-Resolved Scattering Rate in  $\text{MgB}_2$  Revealed by the Nonlinear Hall Effect and Magnetoresistance Measurements." *Physical review letters* 101.6 (2008): 067001.
- [18] Liu, Yi, Hai-Jun Zhang, and Yugui Yao. "Ab initio investigation of magnetic transport properties by Wannier interpolation." *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics* 79.24 (2009): 245123.
- [19] Marzari, Nicola, et al. "Maximally localized Wannier functions: Theory and applications." *Reviews of Modern Physics* 84.4 (2012):

1419–1475.

[20] Souza, Ivo, Nicola Marzari, and David Vanderbilt. "Maximally localized Wannier functions for entangled energy bands." *Physical Review B* 65.3 (2001): 035109.