

`\begin{document} \chemformula[package]{after} \end{document}`



[cjk,slidestop,compress,mathserif,blue]beamer
fontspec,xunicode,xltextra,beamertemesplit handoutWithNotes
xeCJK [BoldFont= 黑体, ItalicFont= 楷体, BoldItalicFont= 仿
宋] 黑体
listings
beamertemeshadow amsmath,amsthm,amsfonts,amssymb,bm
bding mathrsfs xcolor hyperref graphicx subfigure animate
tikz caption
chemformula chemfig
multirow makecell
[dvipdfmx]movie15_dvipdfmx
[sectionbib]chapterbib hypernat
[shadow=true]beamerrinnerthemerounded
[]beamertHEMEberkeley
[]beamercolorthemelily

[]beamerfontthemeprofessionalfonts tikz beamerfoils pgf

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件

MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论

VASP 软件与
PAW 方法

磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

VASP 计算支持的磁结构预测软件 MagGene 简介

格致斯创 (北京) 科技有限公司

2022-01-15

Outline

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

1 基本理论和 VASP 软件的磁性计算

- 密度泛函理论
- VASP 软件与 PAW 方法
- 磁性与自旋波

2 复杂磁性结构与 MagGene 软件

- 复杂磁结构及其起源
- 遗传算法与结构预测

3 MagGene 应用算例

科学研究的范式变更

VASP 计算支持的磁结构预测软件
MagGene 简介

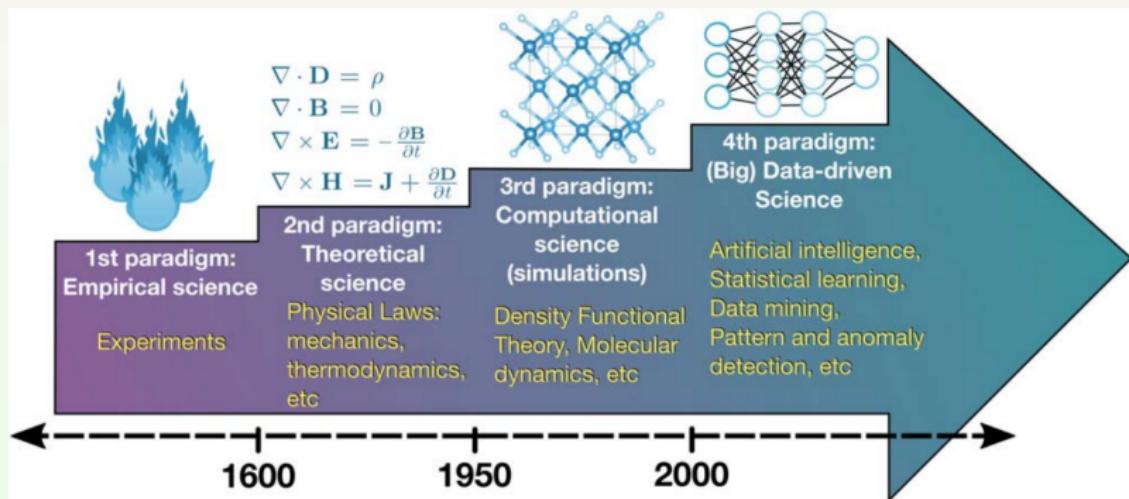
基本理论和 VASP 软件的磁性计算
密度泛函理论

VASP 软件与 PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构与 MagGene 软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例



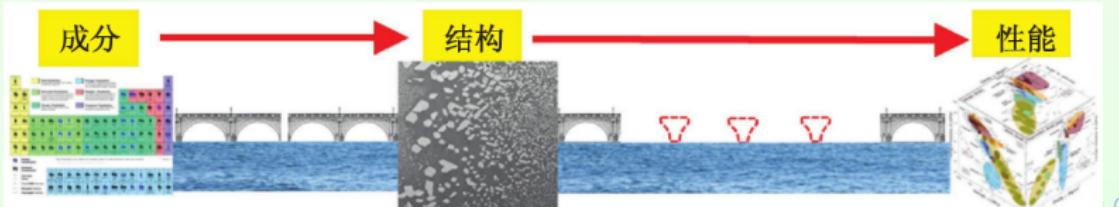
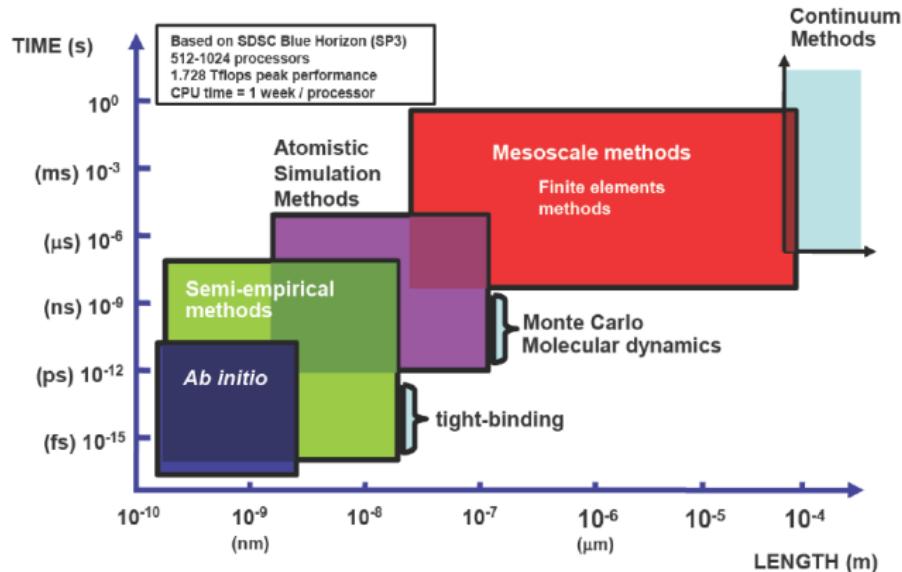
材料模拟的基本思想和方法

VASP 计算支持的磁结构预测软件
MagGene 简介

基本理论和 VASP 软件的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与 PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构与 MagGene 软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例



Outline

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

1 基本理论和 VASP 软件的磁性计算

- 密度泛函理论
- VASP 软件与 PAW 方法
- 磁性与自旋波

2 复杂磁性结构与 MagGene 软件

- 复杂磁结构及其起源
- 遗传算法与结构预测

3 MagGene 应用算例

Thomas-Fermi 模型

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论

VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用
算例

1927 年, Thomas 和 Fermi 基于均匀电子气模型上建立 Thomas-Fermi 模型, 体系能量可用**电子密度表示**:

- 动能表达式

$$T_{\text{TF}}[\rho(\vec{r})] = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int \rho^{\frac{5}{3}}(\vec{r}) d\vec{r}$$

- 外势 $V_{ext}(\vec{r})$ 下电子体系的能量泛函表达式为

$$\begin{aligned} E_{\text{TF}}[\rho(\vec{r})] = & \frac{3}{10} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int \rho^{\frac{5}{3}}(\vec{r}) d\vec{r} \\ & + \int \rho(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}) d\vec{r} + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r}_1)\rho(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \end{aligned}$$

- Thomas-Fermi 模型完全没有考虑电子的交换-相关作用

Thomas-Fermi-Dirac 模型

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测
MagGene 应
用算例

1930 年，Dirac 将 Thomas-Fermi 模型修正，用局域密度近似考虑
电子交换作用

$$E_{TFD}[\rho(\vec{r})] = \frac{3}{10}(3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int \rho^{\frac{5}{3}}(\vec{r}) d\vec{r} + \int \rho(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$+ \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r}_1)\rho(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 - \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \int \rho^{\frac{4}{3}}(\vec{r}) d\vec{r}$$

■ 在总电子数守恒约束条件

$$\int \rho(\vec{r}) d\vec{r} = N$$

下，能量泛函 $E_{TFD}[\rho(\vec{r})]$ 对密度 $\rho(\vec{r})$ 的变分极小获得体系的
基态密度和基态能量

Thomas-Fermi 模型

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

- Thomas-Fermi 模型用电子密度代替波函数描述问题是极大的简化，但模型过于粗糙：
不能正确描述相互作用电子体系的基本特征，如原子的壳层结构
- Thomas-Fermi 模型虽不够精确，但可以通过引入修正项校正：Dirac 交换泛函

$$E_X[\rho(\vec{r})] = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \int \rho^{\frac{4}{3}}(\vec{r}) d\vec{r}$$

Wigner 相关泛函

$$E_C[\rho(\vec{r})] = -0.056 \int \frac{\rho^{\frac{4}{3}}(\vec{r})}{0.079 + \rho^{\frac{1}{3}}(\vec{r})} d\vec{r}$$

Thomas-Fermi 模型为密度泛函理论 (DFT) 提供了重要的启示

密度泛函理论 (DFT)

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

与传统的量子力学方法不同，密度泛函理论的基本变量是体系的基态电子密度。

- 密度泛函理论的基石：Hohenberg-Kohn 定理^[?]

- $E[\rho] = F_{HK}[\rho] + \int \rho(\vec{r})v(\vec{r})d\vec{r}$

其中 $F_{HK}[\rho] = \underset{\Psi \rightarrow \rho}{\text{Min}} \langle \Psi[\rho] | \hat{T} + \hat{W} | \Psi[\rho] \rangle$ 是普适的泛函表达式。第一定理表明多电子体系的性质完全由体系的基态密度决定

- 如果 $\tilde{\Psi} \neq \Psi$, $E[\tilde{\rho}] \geq E[\rho_0]$
第二定理指出基态总能量泛函在体系基态电子密度处取极小值
- 密度泛函理论的优越性：用密度 (ρ) 代替波函数 (Ψ) 描述体系
- 密度泛函理论的困难：能量密度泛函的精确形式未知

密度泛函理论 (DFT)

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波
复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测
MagGene 应
用算例

Kohn-Sham 方程^[?]: 无相互作用体系 + 交换-相关能的贡献

$$(T_S + V_{eff})|\varphi_i\rangle = \varepsilon_i|\varphi_i\rangle, \quad i = 1, \dots, N, \dots$$

其中 $T_S = -\frac{1}{2}\nabla^2$ 是无相互作用体系的动能

$$\begin{aligned} V_{eff}(\vec{r}) &= V_{ext}(\vec{r}) + \int w(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}') d\vec{r}' + V_{XC}[\rho] \\ &= \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{ext}(\vec{r}) + V_{XC}[\rho] \end{aligned}$$

$V_{ext}(\vec{r})$ 是电子体系与外部的电荷或磁场相互作用

$V_{XC}[\rho] = \frac{\delta E_{XC}}{\delta \rho(\vec{r})}$ 称为交换-相关势

Kohn-Sham 方程是形式上的单粒子方程

Kohn-Sham 方程的实质:

将动能泛函的主要部分分离出来, 剩余部分放在交换-相关能中

交换-相关能与交换-相关势

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论

VASP 软件与
PAW 方法

磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

实际考虑交换-相关能时，会将交换-相关能表示为交换能和相关能之和：

$$E_{XC}[\rho] = E_X[\rho] + E_C[\rho] = \int \varepsilon_X[\rho]\rho(\vec{r})d^3\vec{r} + \int \varepsilon_C[\rho]\rho(\vec{r})d^3\vec{r}$$

$\varepsilon_X[\rho]$ 和 $\varepsilon_C[\rho]$ 可理解为单电子的交换能和相关能

交换-相关势通过交换-相关能计算得到：

$$V_{XC}^\sigma[\rho_\alpha, \rho_\beta] = \frac{\delta E_{XC}[\rho_\alpha, \rho_\beta]}{\delta \rho_\sigma} = \frac{\delta \{E_X[\rho_\alpha, \rho_\beta] + E_C[\rho_\alpha, \rho_\beta]\}}{\delta \rho_\sigma}$$

注意：由于 $E_{XC}[\rho_\sigma]$ 对 ρ_σ 是非线性的

$V_{XC} = V_X + V_C$ 和 $\varepsilon_{XC} = \varepsilon_X + \varepsilon_C$ 不同，不要混淆这两个量

交换-相关能密度泛函

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

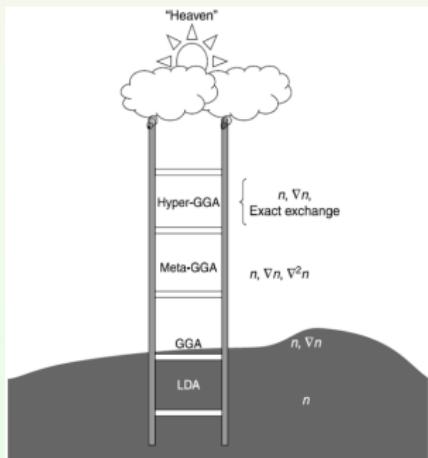
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

密度泛函理论的核心问题:

Kohn-Sham 方程用于实际计算，必须知道 $E_{XC}[\rho]$ 或者 $V_{XC}[\rho]$ 与 $\rho(\vec{r})$ 的泛函关系

- LDA: 泛函只与密度分布的局域值有关
- GGA: 泛函依赖: 局域密度及其梯度
- *meta*-GGA: 泛函依赖的变量还有动能密度
- 杂化 (hybrid) 泛函: 泛函与占据轨道有关
- 其他的交换-相关能泛函
- 完全非局域泛函: 理想泛函, 不现实



Jacob's ladder

近似能量泛函 $E_{XC}[\rho]$ 的主要问题

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测
MagGene 应
用算例

- 1 密度是整体变量: 电子自相互作用抵消不净**
用 DFT 计算电子数很少的体系, 一般都会有较大的误差
- 2 电子相关: 简并和近简并基态的表示不合理**
基态电子密度用不同的简并轨道计算时, 体系能量应保持不变, 但现有的近似能量泛函不具有这个性质
- 3 渐近行为: 处理弱相互作用体系的误差大**
如 Van der Waals 相互作用和现有近似能量泛函本身的计算误差在同一量级

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论

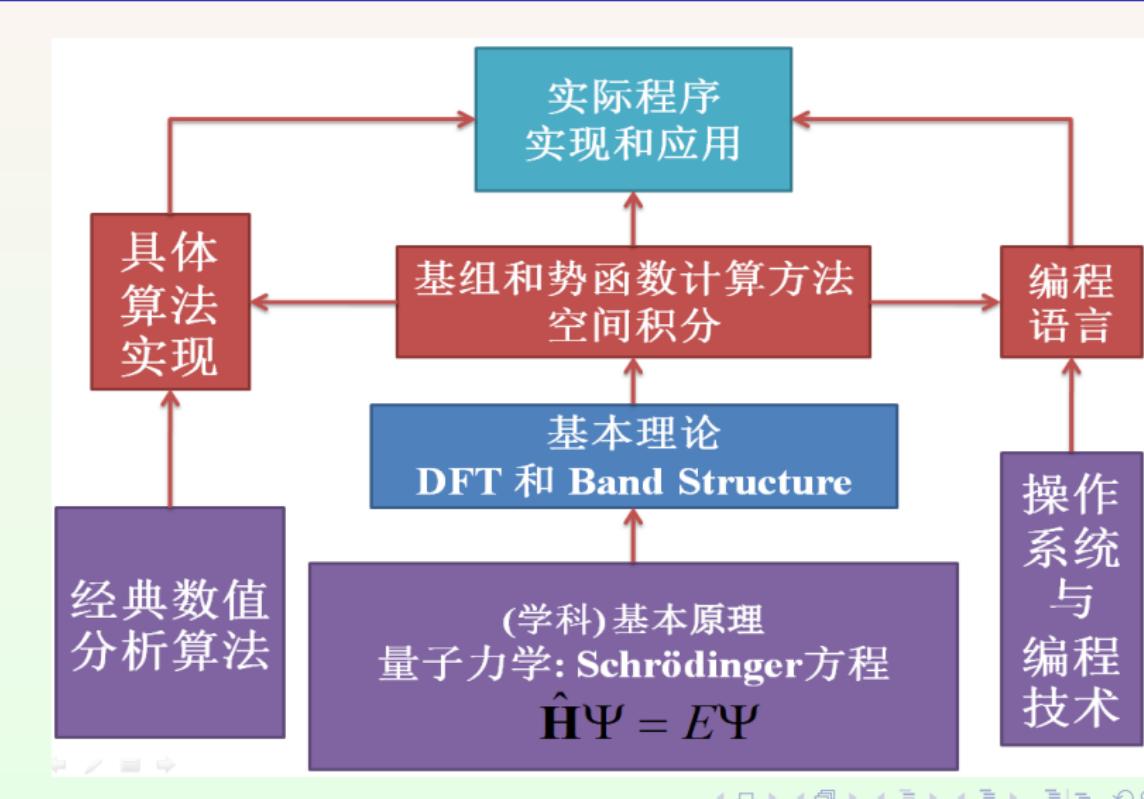
VASP 软件与
PAW 方法

磁性与自旋波

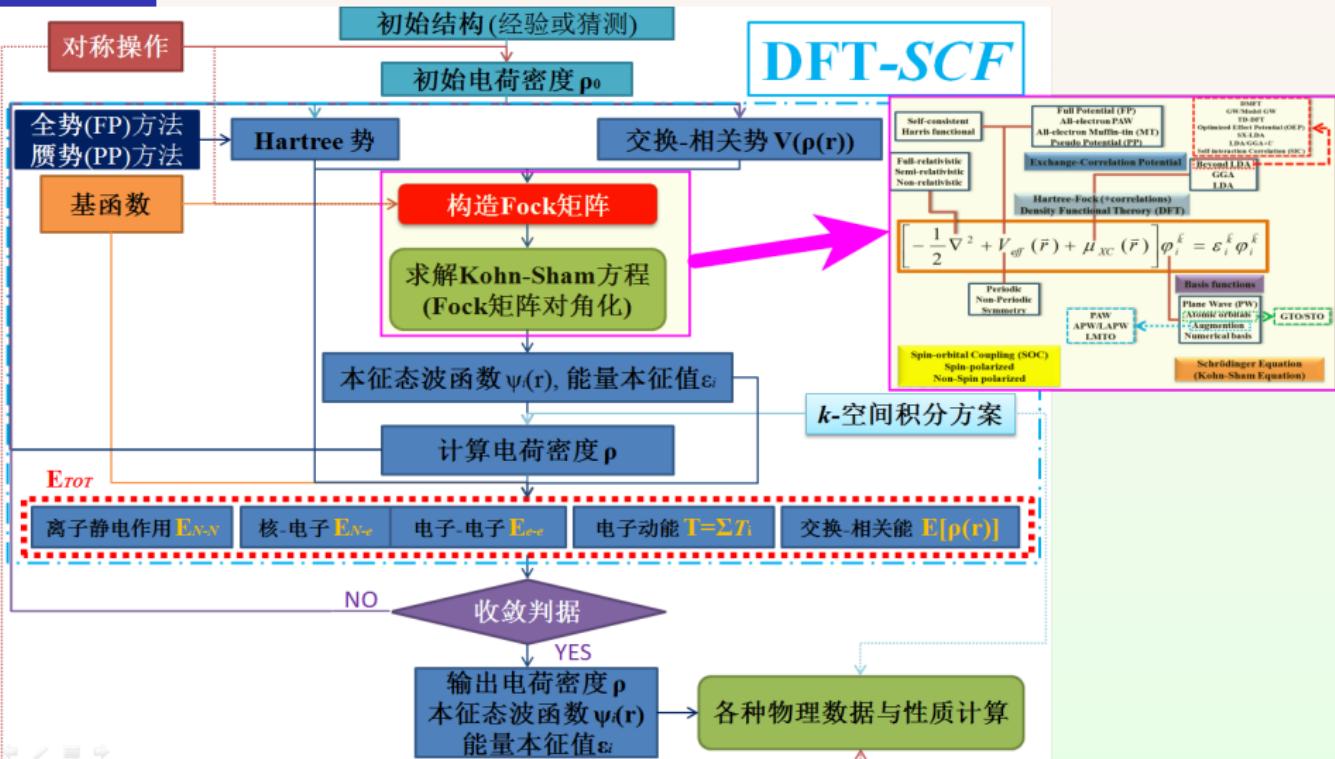
复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例



DFT-SCF



PAW 方法的基本思想

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

$$|\psi\rangle = \underbrace{|\tilde{\psi}\rangle}_{\text{all-electron}} + \underbrace{\sum_{\alpha} |\phi_{\alpha}\rangle \langle \tilde{p}_{\alpha}| \tilde{\psi}\rangle}_{\text{pseudo}} - \underbrace{\sum_{\alpha} |\tilde{\phi}_{\alpha}\rangle \langle \tilde{p}_{\alpha}| \tilde{\psi}\rangle}_{\text{1-center, pseudo}}$$

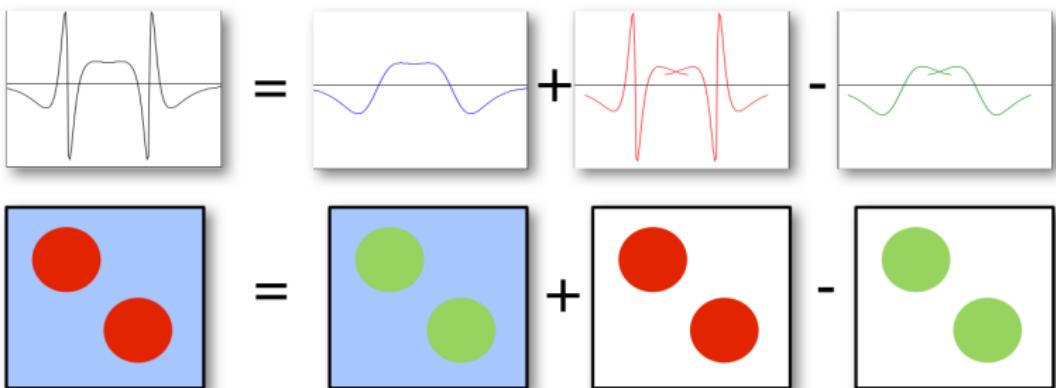


Fig.: The Augmentation of PAW.

赝势-PAW 方法的关系

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

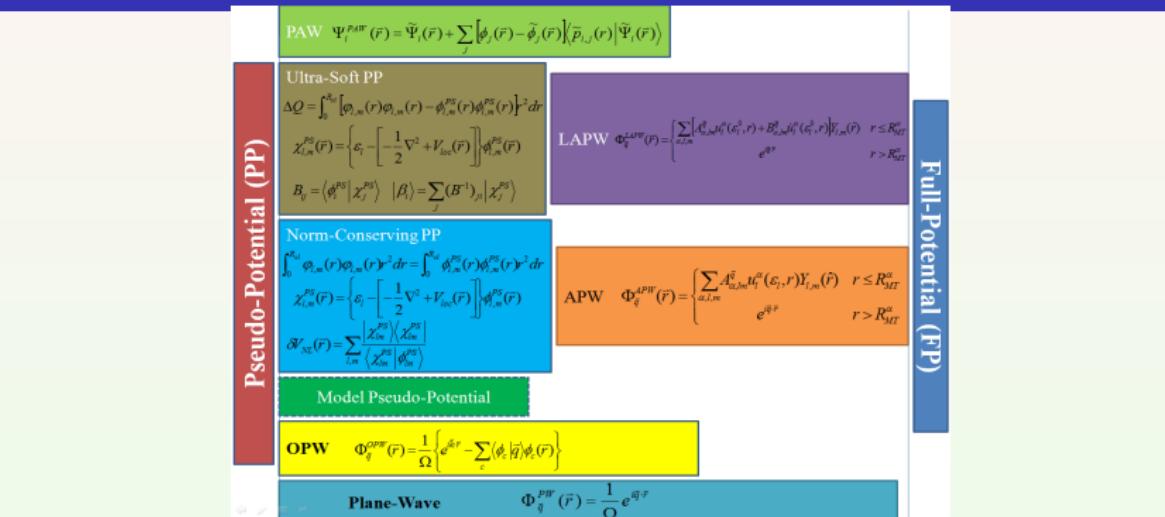
基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例



Pseudo-potential	Norm-Conservation PP	Ultra-Soft PP	PAW	
Separated PP				
Basis set	$\{e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}\}$	$\{e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}\}$	$\{e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}\}$	$\{e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}, \phi_i(\vec{r}), \tilde{\phi}_i(\vec{r})\}$
Projector	-	$\{\tilde{\chi}_i(\vec{r})\}$	$\{\tilde{\beta}_i(\vec{r})\}$	$\{\tilde{p}_i(\vec{r})\}$
Charge	$\tilde{n}(\vec{r})$	$\tilde{n}(\vec{r}), \hat{n}(\vec{r})$	$\tilde{n}(\vec{r}), \hat{n}(\vec{r})$	$\tilde{n}(\vec{r}), n^1(\vec{r}), \hat{n}^1(\vec{r}), \hat{n}(\vec{r})$
Ion-Potential	$\tilde{V}_l^{\text{loc}}(\vec{r})$	$\tilde{V}_l^{\text{loc}}(r)$	$\tilde{V}_l^{\text{loc}}(r)$	$\tilde{V}_l^{\text{loc}}(r)$
	$+ \sum_{l'} \sum_{m'} Y_{lm} V_{ll'} \langle Y_{l'm'} $	$+ \sum_l \tilde{x}_l(\vec{r}) V_{ll'} \langle \tilde{x}_l(\vec{r}') $	$+ \sum_{l'} \tilde{\beta}_l(\vec{r}) D_{ll'} \langle \tilde{\beta}_l(\vec{r}') $	$+ \sum_l \tilde{p}_l(\vec{r}) (D_{ll'}^1 - \hat{D}_{ll'}^1 + \hat{D}_{ll'})(\tilde{p}_l(\vec{r}')) $

VASP 中的电荷密度的分解

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

VASP 的开发者 G. Kresse 等明确了 PAW 方法与 USPP 方法的内在联系:

- 芯层电荷与核电荷构成离子实电荷: $n_{Zc} = n_Z + n_c$
- 质子实电荷的构造

$$\int_{\Omega_c} n_{Zc}(\vec{r}) d^3\vec{r} = \int_{\Omega_c} \tilde{n}_{Zc}(\vec{r}) d^3\vec{r}$$

在此基础上, Blöchl 方案中的电荷可以分解为:

$$n_T = n + n_{Zc} \equiv \underbrace{(\tilde{n} + \hat{n} + \tilde{n}_{Zc})}_{\tilde{n}_T} + \underbrace{(n^1 + \hat{n} + n_{Zc})}_{n_T^1} - \underbrace{(\tilde{n}^1 + \hat{n} + \tilde{n}_{Zc})}_{\tilde{n}_T^1}$$

注意: G. Kresse 方案中补偿电荷 \hat{n} 局域在每个缀加球内。

总能量表达式

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论

VASP 软件与
PAW 方法

磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用
算例

根据总能量表达式

$$E = \tilde{E} + E^1 - \tilde{E}^1$$

其中

$$\begin{aligned}\tilde{E} = & \sum_n f_n \langle \tilde{\Psi}_n | -\frac{1}{2} \nabla^2 | \tilde{\Psi}_n \rangle + E_{XC}[\tilde{n} + \hat{n} + \tilde{n}_c] + E_H[\tilde{n} + \hat{n}] \\ & + \int v_H[\tilde{n}_{Zc}] [\tilde{n}(\vec{r}) + \hat{n}(\vec{r})] d\vec{r} + U(\vec{R}, Z_{ion})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{E}^1 = & \sum_{(i,j)} \rho_{ij} \langle \tilde{\phi}_i | -\frac{1}{2} \nabla^2 | \tilde{\phi}_j \rangle + \overline{E_{XC}[\tilde{n}^1 + \hat{n} + \tilde{n}_c]} + \overline{E_H[\tilde{n}^1 + \hat{n}]} \\ & + \int_{\Omega_r} v_H[\tilde{n}_{Zc}] [\tilde{n}^1(\vec{r}) + \hat{n}(\vec{r})] d\vec{r}\end{aligned}$$

总能量表达式

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法

磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

$$E^1 = \sum_{(i,j)} \rho_{ij} \langle \phi_i | - \frac{1}{2} \nabla^2 | \phi_j \rangle + \overline{E_{XC}[n^1 + n_c]} + \overline{E_H[n^1]}$$

$$+ \int_{\Omega_r} v_H[n_{Zc}] n^1(\vec{r}) d\vec{r}$$

v_H 是电荷密度 n 产生的静电势

$$v_H[n](\vec{r}) = \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'$$

$E_H[n]$ 是对应的静电能

$$E_H[n] = \frac{1}{2}(n)(n) = \frac{1}{2} \int d\vec{r} d\vec{r}' \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

$U(\vec{R}, Z_{ion})$ 由 Ewald 求和计算

补充电荷的构造

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论

VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

根据约束条件

$$\int_{\Omega_c} (n^1 - \tilde{n}^1 - \hat{n}) |\vec{r} - \vec{R}|^l Y_{lm}^*(\widehat{\vec{r} - \vec{R}}) d\vec{r} = 0$$

定义电荷密度差

$$Q_{ij}(\vec{r}) = \phi_i^*(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}) - \tilde{\phi}_i^*(\vec{r}) \tilde{\phi}_j(\vec{r})$$

电荷密度差的多极矩为

$$q_{ij}^L(\vec{r}) = \int_{\Omega_r} Q_{ij}(\vec{r}) |\vec{r} - \vec{R}|^l Y_{lm}^*(\widehat{\vec{r} - \vec{R}}) d\vec{r}$$

因此，补充电荷的计算为：

$$\hat{n} = \sum_{(i,j), L} \sum_n f_n \langle \tilde{\Psi}_n | \tilde{p}_i \rangle \langle \tilde{p}_j | \Psi_n \rangle \hat{Q}_{ij}^L(\vec{r})$$

$$\hat{Q}_{ij}^L(\vec{r}) = q_{ij}^L g_l(|\vec{r} - \vec{R}|) Y_{lm}(\widehat{\vec{r} - \vec{R}})$$

重叠矩阵和 Hamiltonian 的构造

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

重叠矩阵

$$\langle \tilde{\Psi}_n | \mathbf{S} | \tilde{\Psi}_m \rangle = \delta_{nm}$$

其中重叠矩阵

$$S[\{\mathbf{R}\}] = 1 + \sum_i |\tilde{p}_i\rangle q_{ij} \langle \tilde{p}_j|$$

而

$$q_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle - \langle \tilde{\phi}_i | \tilde{\phi}_j \rangle$$

Hamiltonian 的计算

$$H[\rho, \{\mathbf{R}\}] = -\frac{1}{2} \nabla^2 + \tilde{v}_{eff} + \sum_{(i,j)} |\tilde{p}_i\rangle (\hat{D}_{ij} + D_{ij}^1 - \tilde{D}_{ij}^1) \langle \tilde{p}_j|$$

$$\tilde{v}_{eff} = v_H [\tilde{n} + \hat{n} + \tilde{n}_{Zc}] + v_{XC} [\tilde{n} + \hat{n} + \tilde{n}_{Zc}]$$

重叠矩阵和 Hamiltonian 的构造

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

$$\hat{D}_{ij} = \frac{\partial \tilde{E}}{\partial \rho_{ij}} = \int \frac{\delta \tilde{E}}{\delta \hat{n}(\vec{r})} \frac{\partial \hat{n}(\vec{r})}{\partial \rho_{ij}} d\vec{r} = \sum_L \int \tilde{v}_{eff} \hat{Q}_{ij}^L(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$D_{ij}^1 = \frac{\partial E^1}{\partial \rho_{ij}} = \langle \phi_i | -\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{eff}^1 | \phi_j \rangle$$

其中

$$v_{eff}^1[n^1] = v_H[n^1 + n_{Zc}] + v_{XC}[n^1 + n_c]$$

$$\tilde{D}_{ij}^1 = \frac{\partial \tilde{E}^1}{\partial \rho_{ij}} = \langle \tilde{\phi}_i | -\frac{1}{2} \nabla^2 + \tilde{v}_{eff}^1 | \tilde{\phi}_j \rangle + \sum_L \int_{\Omega_r} d\vec{r} \tilde{v}_{eff}^1(\vec{r}) \hat{Q}_{ij}^L$$

其中

$$\tilde{v}_{eff}^1[\tilde{n}^1] = v_H[\tilde{n}^1 + \hat{n} + \tilde{n}_{Zc}] + v_{XC}[\tilde{n}^1 + \hat{n} + \tilde{n}_c]$$

Double counting correlations

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

能带计算中，总能量可通过 Kohn-Sham 本征值求和扣除 Double counting 计算更方便，其中修正项

$$\tilde{E}_{dc} = -E_H[\tilde{n} + \hat{n}] + E_{XC}[\tilde{n} + \hat{n} + \tilde{n}_c] \\ - \int v_{XC}[\tilde{n} + \hat{n} + \tilde{n}_c](\tilde{n} + \hat{n}) d\vec{r}$$

$$E_{dc}^1 = -\overline{E_H[n^1]} + \overline{E_{XC}[n^1 + n_c]} - \int_{\Omega_r} v_{XC}[n^1 + n_c] n^1 d\vec{r}$$

$$\tilde{E}_{dc}^1 = -\overline{E_H[\tilde{n}^1 + \hat{n}]} + \overline{E_{XC}[\tilde{n}^1 + \hat{n} + \tilde{n}_c]} \\ - \int v_{XC}[\tilde{n}^1 + \hat{n} + \tilde{n}_c](\tilde{n}^1 + \hat{n}) d\vec{r}$$

因此总能量的计算表达式是

$$E = \sum_n f_n \langle \tilde{\Psi}_n | H | \tilde{\Psi}_n \rangle + \tilde{E}_{dc} + E_{dc}^1 - \tilde{E}_{dc}^1 + U(\vec{R}, Z_{ion})$$

计算流程

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

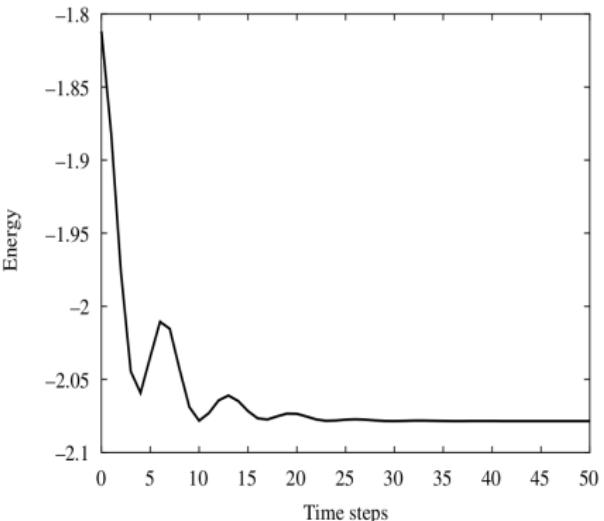
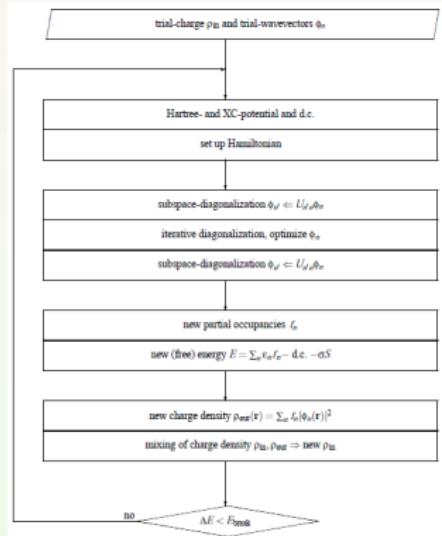


Fig.: The Flow of calculation for the KS-ground states.

VASP 计算的特色

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

相比于与普通的第一原理计算软件，VASP 很好地平衡了计算效率和精度的问题，总的来说，VASP 主要通过这几个特色保证了计算的高效能

■ 迭代与优化算法的多样性

本质上电荷密度迭代 && 体系总能量优化是相同的优化问题，采用了类似的算法^[?, ?]:

Pseudo-Newton、Conjugate-Gradient、Broyden mix、damping-factor、RMM-DIIS

■ 尽可能采用局域基 (原子轨道基) 函数:

LREAL=.TRUE.

优化的投影函数也尽可能在实空间表示

■ PAW 原子数据集:优异的赝势^[?]

双网格技术

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

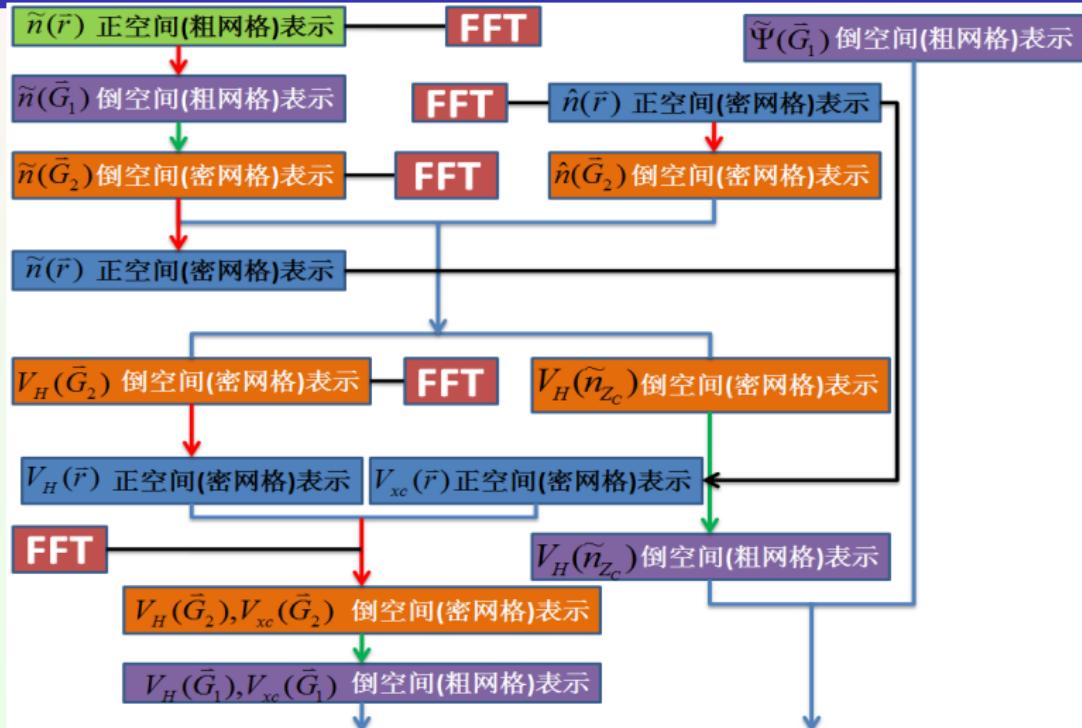
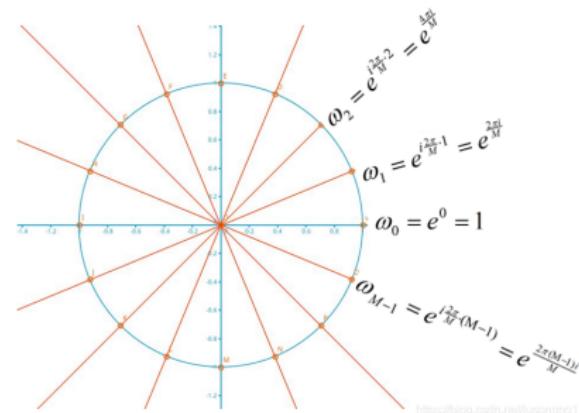


Fig.: The Schematic description of the dual grid technique.

一维 FFT 的 MPI 并行



0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7

0, 2, 4, 6

1, 3, 5, 7

0, 4

2, 6

1, 5

3, 7

0

4

2

6

1

5

3

7

Fig.: The Schematic description for FFT in MPI.

VASP 计算的并行实现

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波
复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

- 中间层设计: FFT 网格、实空间基组与计算节点的匹配
通过子程序 mgrid.F 生成中间层, 实现并行负载与计算节点分配的匹配, 减少 FFT 变换和实空间并行的节点间通信

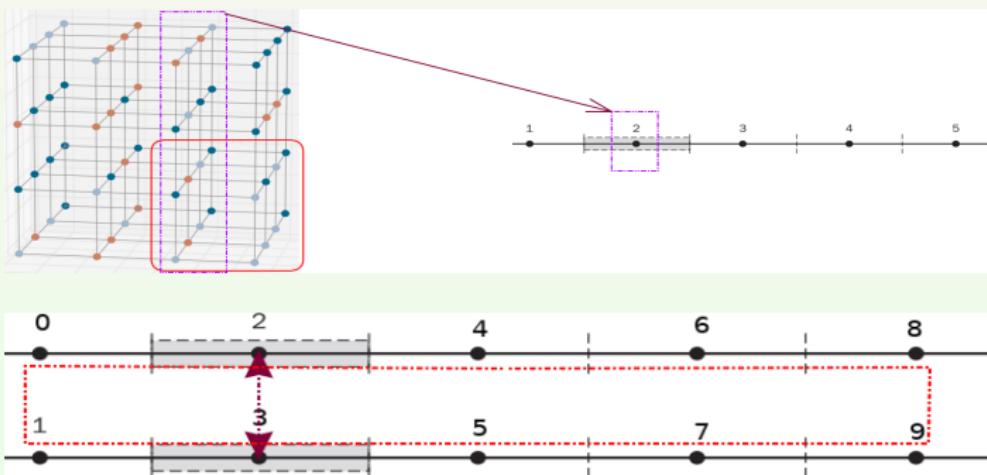


Fig.: VASP: Reciprocal-Real space layout for grids in MPI.

自旋极化与磁振子

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

- 凝聚态物质中，体系磁性态表现为长程的自旋磁矩有序状态

1 由于电子-电子相互作用引起的原子局域磁矩 (**自旋极化**)

考虑自旋极化，单电子 Hamiltonian 可写成二维矩阵

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 + \sum_{jn} V_C(|\vec{r} - \vec{t}_n - \vec{a}_j|)\mathbf{I} + \sum_{jn} U^{jn} \hat{V}_{\text{ex}}(|\vec{r} - \vec{t}_n - \vec{a}_j|)(U^{jn})^{-1}$$

矩阵 **I** 是二维的单位矩阵， $V_C\mathbf{I}$ 表示 Coulomb 势

矩阵 **U** 表示空间坐标与局域坐标的变换关系，选定 z -轴平行于磁场方向，用 Euler 角表示为

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \cos(\frac{1}{2}\beta)\exp[-i(\alpha + \gamma)/2] & -\sin(\frac{1}{2}\beta)\exp[-i(\alpha - \gamma)/2] \\ \sin(\frac{1}{2}\beta)\exp[i(\alpha - \gamma)/2] & \cos(\frac{1}{2}\beta)\exp[i(\alpha + \gamma)/2] \end{pmatrix}$$

自旋极化与磁振子

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

局域坐标下，交换势可以表示为

$$\hat{V}_{\text{ex}}(r) = \begin{pmatrix} V_{\text{ex}}^+(r) & 0 \\ 0 & V_{\text{ex}}^-(r) \end{pmatrix}$$

- 局域磁矩间交换作用引起长程磁有序 (Heisenberg 交换)
- 除了局域磁矩交换引起的磁有序结构，还有由于能带中巡游电子引起的磁性，称为能带磁性 (或巡游电子磁性)

在能带理论中，磁有序态通过考虑自旋极化，引起 Hamiltonian 的改变 (Zeeman 场强 H_{Zeeman}) 引入：

自旋极化磁矩 $m = n^\uparrow - n^\downarrow$ ，引起的势能改变 $V_m = \mu H_{\text{Zeeman}}$

$$E = E(V_m) \equiv E_{\text{total}}(V_m)$$

$$m(\vec{r}) = - \frac{dE}{dV_m(\vec{r})}$$

$$\chi(\vec{r}, \vec{r}') = - \frac{dm(\vec{r})}{dV_m(\vec{r}')} = \frac{d^2 E}{dV_m(\vec{r}) dV_m(\vec{r}')}$$

Heisenberg 交换模型

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

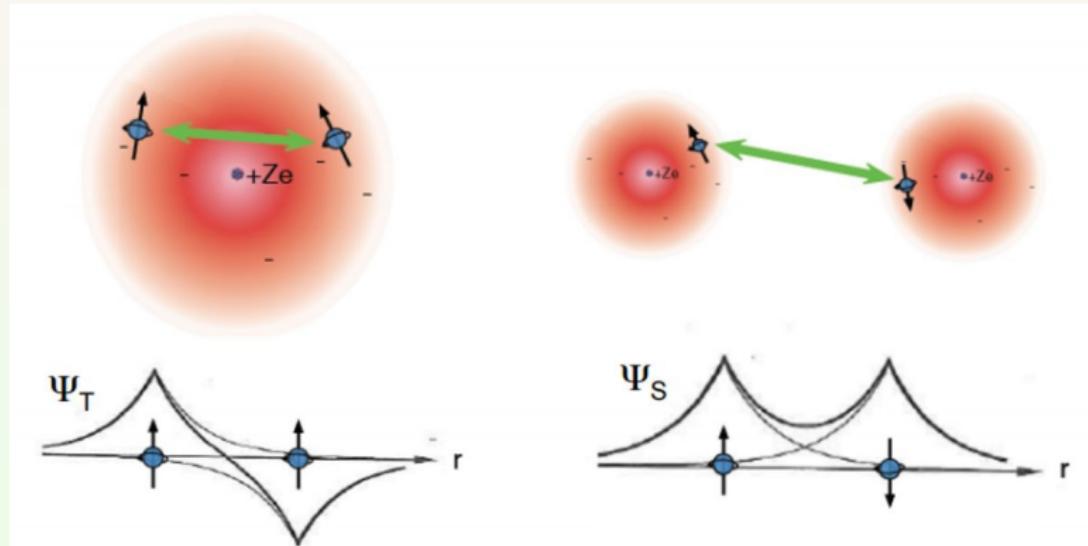


Fig.: The model of Heisenberg-exchange coupling.

磁振子与自旋响应函数

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

- 如果不考虑电子间相互作用, $E - \chi$ 曲线在净磁矩为 0 时有极小值, 对应于自旋成对 (抗磁态)
- 考虑电子交换作用, 自旋有序 (磁性态) 能量更有利, 因此 $V_m(\vec{r})$ 将依赖于 $m(\vec{r}')$:
 - 1 如果基态对应 $\bar{m} > 0$, 则为铁磁态
 - 2 如果基态对应 $\bar{m} = 0$, 则为反铁磁态
- 平均场理论下, 磁化率 χ 即外加磁场的响应函数, Stoner 首先导出磁化率与电子态密度的关系

$$\chi = \frac{N(0)}{1 - IN(0)}$$

其中 $N(0)$ 是 Fermi 能级的态密度, 磁化有关的有效外势
 $V_m = V_m^{ext} + Im$

铁磁、反铁磁和亚铁磁

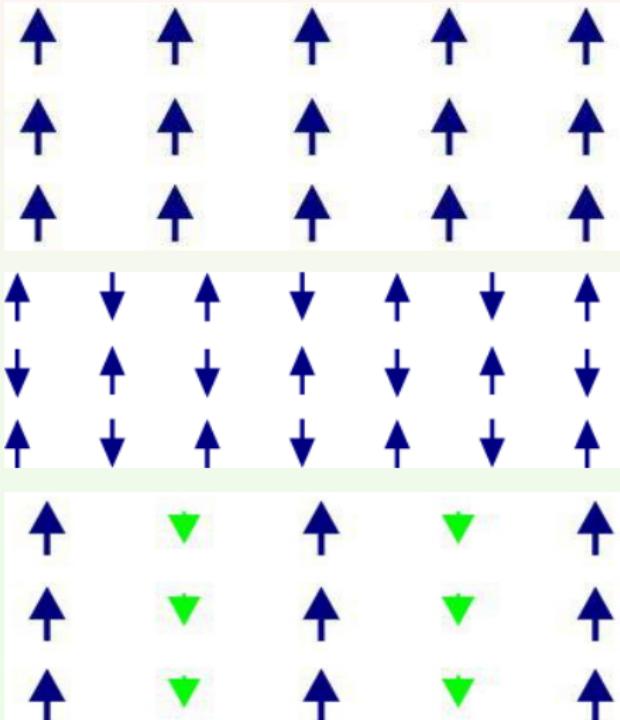


Fig.: The model of Ferromagnetic, Antiferromagnetic and Ferrimagnetic.

Stoner 模型

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

- Stoner 将金属的磁性考虑为晶格中巡游的 $3d$ 、 $4s$ 电子贡献，其相互作用为 I ，Fermi 面附近的 DOS 为 $N(E_F)$

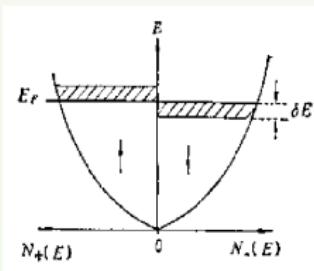


Fig.: The Stoner model.

- 体系的磁性由转变由 Fermi 面附近能量变化确定

$$\Delta E = N(E_F) [1 - I N(E_F)] (\delta E)^2$$

Stoner 模型

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

- Stoner 模型中参数 I 主要反应 $3d$ 电子的紧束缚特征，与晶体结构关系不大
- Stoner 用于孤立原子体系，参数 I 描述自旋电子的裂分，要求：
 - 1 对 LSDA 描述的单行列式态，参数 I 可以精确描述原子态的裂分
 - 2 LSDA 中应用 Stoner 模型，参数 I 与 Hubbard 规则的交换参数 U 一致
- 参数 U (或 I)、 J 的大小
 - 1 Hund 规则的交换参数 J 的数量级：1eV
 - 2 Hubbard 参数 U 的数量级：10eV

自旋波模型

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

- 作为平均场近似，分子场理论成功描述了强磁性物质的自发磁化行为，但在低温和 Curie 温度附近，理论与实验存在明显偏差
- 自旋波理论是从体系**整体激发**的角度出发，解释自发磁化的低温行为

1 0K 下电子自旋有序排列 (系统基态)

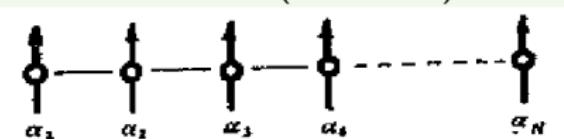


Fig.: The ground state $|0\rangle$.

2 温度略有升高时，电子自旋有一个发生翻转

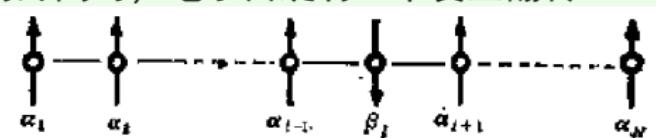


Fig.: The spin flips at i . [1]

自旋波模型

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论

VASP 软件与
PAW 方法

磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

某个格点上出现自旋翻转，由于相邻格点间存在交换作用，使自旋趋于同向排列

- 翻转的自旋将牵动临近格点自旋，使之趋于翻转
- 近邻格点自旋力图驱使翻转的自旋重新翻转过来

自旋的翻转不会停留在一个格点，而是以波的形式向周围传播：这种自旋翻转在晶体中的传播称为自旋波（又称磁激子）

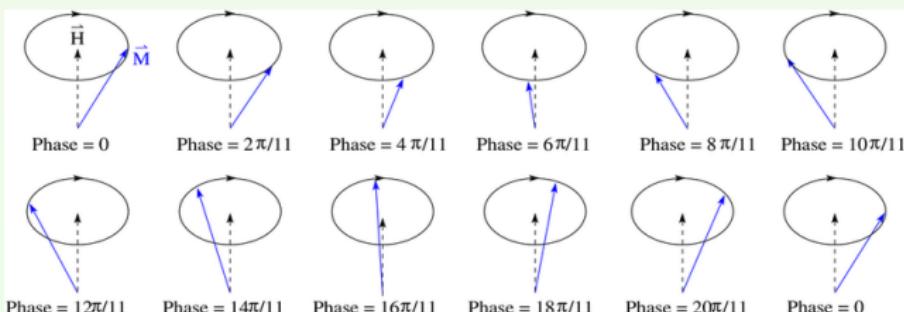


Fig.: The schematic spin-wave.

非共线磁矩

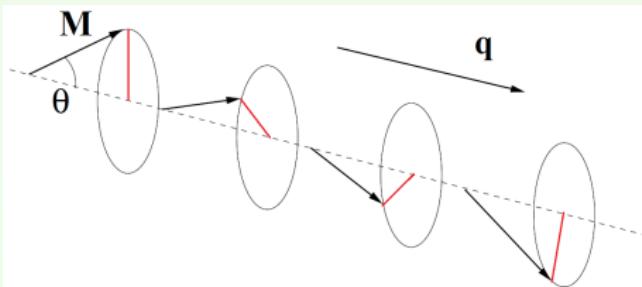
VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

- 真实的物理体系中总会出现非共线的磁结构:
特别是在铁磁/非磁金属界面上，铁磁性原子磁矩有可能形成
非共线排列
- 非共线体系中出现的新现象:电流诱导的自旋转矩
非共线的原子磁矩与电子的自旋之间能够通过交换作用，进而引起电子在输运过程中发生自旋翻转，使得自旋向上和自旋向下的输运通道发生了混合
- 由于非共线磁结构的引入使得问题变得复杂，目前的实验和理论还并不完备



spin-spirals

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论

VASP 软件与
PAW 方法

磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

如果自旋方向随晶格周期也有周期性变化，这种自旋进动 (spin-spiral) 引起体系具有额外的**自旋进动周期性**，因此自旋磁矩可以表示为

$$\vec{m}(\vec{r} + \vec{R}) = \begin{pmatrix} m_x(\vec{r}) \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}) - m_y(\vec{r}) \sin(\vec{q} \cdot \vec{R}) \\ m_x(\vec{r}) \sin(\vec{q} \cdot \vec{R}) + m_y(\vec{r}) \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}) \\ m_z(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

这里 \vec{q} 是倒空间中自旋进动的单位平移量，因此广义 Blöch 定理，波函数和 Hamiltonian 满足

$$\begin{pmatrix} \Psi_{\vec{k}}^{\uparrow}(\vec{r}) \\ \Psi_{\vec{k}}^{\downarrow}(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}/2} & 0 \\ 0 & e^{+i\vec{q} \cdot \vec{R}/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{\vec{k}}^{\uparrow}(\vec{r} - \vec{R}) \\ \Psi_{\vec{k}}^{\downarrow}(\vec{r} - \vec{R}) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} H^{\alpha\alpha}(\vec{q}) & V_{xc}^{\alpha\beta} \\ V_{xc}^{\beta\alpha} & H^{\beta\beta}(\vec{q}) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} H^{\alpha\alpha}(\vec{q}) & V_{xc}^{\alpha\beta} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \\ V_{xc}^{\beta\alpha} e^{+i\vec{q} \cdot \vec{r}} & H^{\beta\beta}(\vec{q}) \end{pmatrix}$$

DFT 框架下处理非共线磁矩

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

一般地，磁性体系下的 DFT 的 Hamiltonian:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}} + \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_{\text{eff}}$$

这里 $\mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_{\text{eff}}$ 表示自旋与有效磁场的相互作用
有效势、有效磁场是外场 和交换-相关势、交换-相关场 之和

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{ext}} + V_H + V_{xc}$$

$$\vec{B}_{\text{eff}} = \vec{B}_{\text{ext}} + \vec{B}_{xc}$$

在 LDA 下， $E_{xc}(n, \vec{m}) = \int n \epsilon_{xc}(n, m) d^3r$ ，因此交换-相互势和交
换-相关场的表示

$$V_{xc} = \frac{\partial E_{xc}(n, \vec{m})}{\partial n} = \epsilon_{xc}(n, m) + n \frac{\partial \epsilon_{xc}(n, m)}{\partial n}$$

$$\vec{B}_{xc} = \frac{\partial E_{xc}(n, \vec{m})}{\partial \vec{m}} = \frac{\partial \epsilon_{xc}(n, m)}{\partial m} \vec{m}$$

DFT 框架下处理非共线磁矩

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

- 对共线磁性，取外磁场方向与 z 轴方向一致

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{B}_{\text{eff}} = \sigma_z B_{\text{eff}}$$

因为

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

由此可得

$$\hat{V} = V_{\text{eff}} \mathbf{I} + B_{\text{eff}} \sigma_z = \begin{pmatrix} V_{\text{eff}} + \mu_B B_{\text{eff}} & 0 \\ 0 & V_{\text{eff}} - \mu_B B_{\text{eff}} \end{pmatrix}$$

这种情况下，忽略旋-轨耦合 (SOC)，spin-up 和 spin-dn 解耦

DFT 框架下处理非共线磁矩

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法

磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

- 对非共线磁性，标量点积 $\mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_{\text{eff}}$ 必须考虑三个分量的贡献，注意到

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

由此可得

$$\hat{V} = V_{\text{eff}} \mathbf{I} + \mu_B \mathbf{B}_{\text{eff}} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} V_{\text{eff}} + \mu_B B_z & \mu_B (B_x - iB_y) \\ \mu_B (B_x + iB_y) & V_{\text{eff}} - \mu_B B_z \end{pmatrix}$$

这种情况下，非对角元项将 spin-up 和 spin-dn 耦合在一起

VASP 中一般非共线磁性态的计算

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测
MagGene 应用
算例

J. Kübler 等指出^[?]，根据密度泛函理论，当外势是矩阵元为 $w^{\alpha\beta}(\vec{r})$ 的 2×2 矩阵时，令体系的密度矩阵为 $\rho^{\alpha\beta}(\vec{r})$ ，则体系的电荷密度可以表示为

$$Tr[\rho^{\alpha\beta}(r)] \equiv n_{Tr}(r) = \sum_{\alpha} n^{\alpha\alpha}(\vec{r})$$

因此总能量可以表示为

$$\begin{aligned} E[\rho^{\alpha\beta}] = & T_0 + \sum_{\alpha\beta} \int w^{\alpha\beta}(\vec{r}) \rho^{\alpha\beta}(\vec{r}) d^3r \\ & + \iint \frac{n_{Tr}(\vec{r}') n_{Tr}(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r' + E_{XC}[\rho^{\alpha\beta}] \end{aligned}$$

VASP 中一般非共线磁性态的计算

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

D. Hobbs 等^[?]考虑磁化密度的贡献后，将总电荷密度矩阵表示为

$$\rho^{\alpha\beta}(\vec{r}) = [n_{\text{Tr}}(\vec{r})\delta_{\alpha\beta} + \vec{m}(\vec{r})\vec{\sigma}^{\alpha\beta}] / 2$$

磁化密度的表示为

$$\vec{m}(\vec{r}) = \sum_{\alpha\beta} \rho^{\alpha\beta}(\vec{r}) \cdot \vec{\sigma}^{\alpha\beta}$$

其中 Pauli 自旋矩阵 $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 定义为

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

因此在 DFT 框架下能量密度泛函可以表示为

$$E = \sum_{\alpha} \sum_n f_n \langle \Psi_n^{\alpha} | -\frac{1}{2} \nabla^2 | \Psi_n^{\alpha} \rangle + E_{\text{H}}[n_{\text{Tr}} + n_Z] + E_{\text{XC}}[\rho^{\alpha\beta}]$$

VASP 中一般非共线磁性态的计算

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测
MagGene 应
用算例

上述表达式中 f_n 是轨道占据数
 $E_H[n_{Tr} + n_Z]$ 是静电相互作用

$$E_H[\rho] = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}'$$

这里 $\rho = n_{Tr} + n_Z$
 在 LSDA 下，交换-相关能泛函表示为

$$\begin{aligned} E_{XC}[\rho^{\alpha\beta}] &= \int n_{Tr}(\vec{r}) \epsilon_{XC}[\rho^{\alpha\beta}] d\vec{r} \\ &= \int n_{Tr}(\vec{r}) \epsilon_{XC}[n_{Tr}(\vec{r}), |\vec{m}(\vec{r})|] d\vec{r} \end{aligned}$$

主要参考文献

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

Outline

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

1 基本理论和 VASP 软件的磁性计算

- 密度泛函理论
- VASP 软件与 PAW 方法
- 磁性与自旋波

2 复杂磁性结构与 MagGene 软件

- 复杂磁结构及其起源
- 遗传算法与结构预测

3 MagGene 应用算例

磁随机存储器 (MRAM)

VASP 计算支持的磁结构预测软件
MagGene 简介

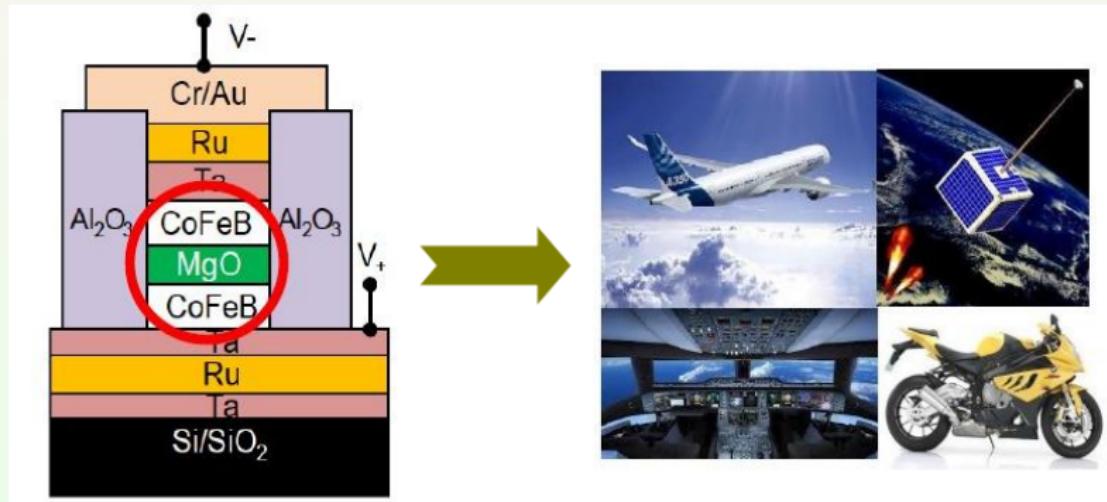
基本理论和 VASP 软件的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与 PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构与 MagGene 软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

磁性材料的核心问题：材料自旋磁结构的构筑、调控与设计



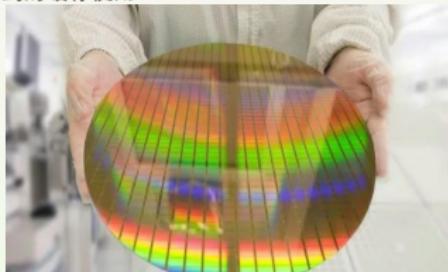
磁随机存储器 (MRAM)

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测
MagGene 应
用算例

- 日本东北大学的科研团队成功开发出存储密度达 128Mb 的 STT-MRAM，写入速度达 14ns，可作为物联网和人工智能中用到的缓存使用



- 韩国 Samsung 公司宣布已在一条基于 28nm FD-SOI 工艺的生产线上，开始大规模生产和商业运用嵌入式 MRAM(eMRAM) 解决方案



反铁磁存储

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

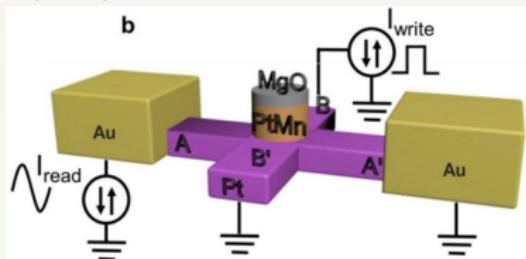
基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

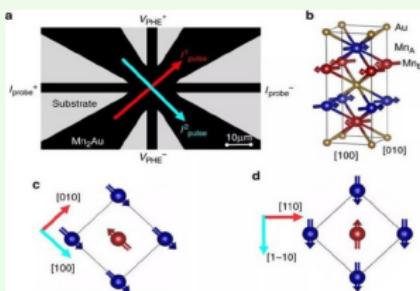
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

- 美国西北大学和意大利墨西拿大学的电气工程师们联合开发出一种新型的小巧但功能强大的存储设备，该设备使用创新的反铁磁 (AFM) 材料，而所需的耗电量之低创纪录



- 德国美因茨大学物理学家在反铁磁体中读出和写入信息，未来有望实现超高速、稳定的磁存储器



拓扑绝缘体

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

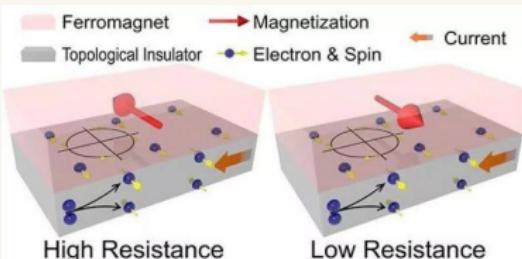
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

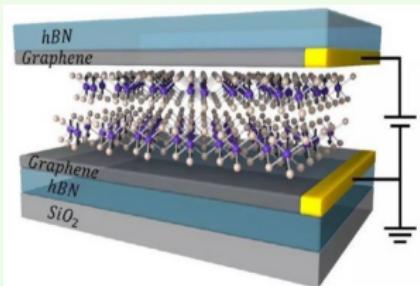
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

- 美国明尼苏达大学研究人员研究出一种涉及磁阻效应的新型拓扑绝缘体，有望应用于改善计算与存储



- 美国华盛顿大学研究人员采用仅有几个原子层厚度的二维磁性材料 CrI₃来编码信息，有望实现更高密度的数据存储，并提高能量效率，从而革新计算技术和电子设备



开发 MRAM 技术瓶颈问题

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

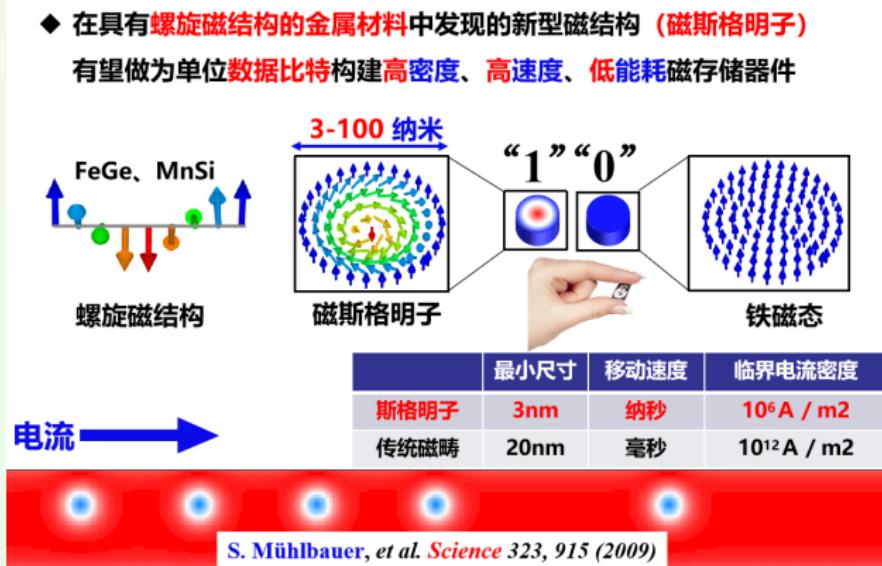
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

- 如何构建一套具有范式意义的技术方法，使得我们能够**快速、精准地预测各类磁性材料的磁结构及磁参数**
对加速开发 MRAM 具有至关重要的作用，目前属于国际空白



简单磁结构 .VS. 复杂磁结构

VASP 计算支持的磁结构预测软件
MagGene 简介

基本理论和 VASP 软件的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与 PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构与 MagGene 软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

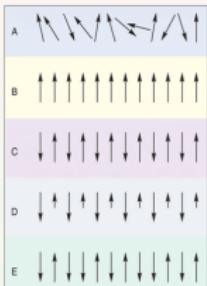


Fig.1: Simple Magnetic structure: Ferromagnetism, Anti-Ferromagnetism, Ferrimagnetism

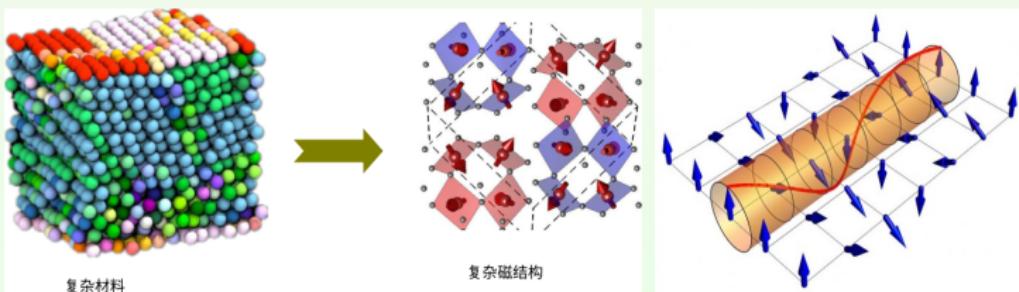


Fig.2: Complex Magnetic structure: Spiral magnet, All-in-all-out, 3k-ordered

复杂磁结构的两大起源

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

■ 强磁阻挫: Kagome 晶格

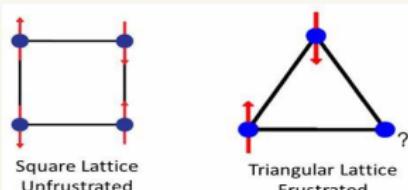


Fig.: The Kagome lattice

■ 强自旋-轨道耦合: 稀土、铜系元素, 核材料

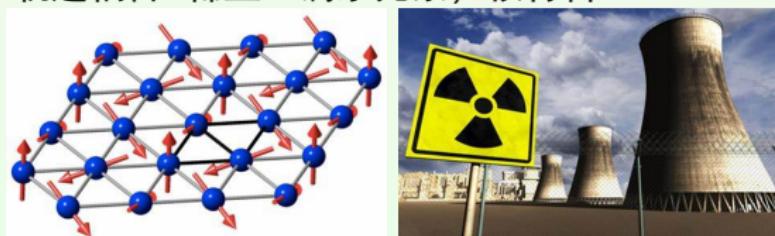


Fig.: Strong spin-orbit coupling and nuclear materials.

确定磁结构的方法和困难

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

■ 确定磁结构的常用方法

- 1 实验方法: 中子散射
- 2 理论方法: 人工猜测-计算验证方法
- 3 理论方法: 拟合磁自由度 Hamiltonian-模拟退火

■ 复杂磁有序结构测定的困难

- 1 中子散射: 某些实验材料质量欠佳、极端条件
- 2 人工猜想-计算验证方法: 效率低下, 不适合复杂材料
- 3 Hamiltonian-模拟退火: Hamiltonian 拟合困难, 精度无法保证

本质的困难: 海量潜在的可能结构导致常用方法失效

深度神经网络基础

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波
复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

- 感知机 (Perceptron Learning Algorithm, PLA): 最早的监督式训练算法，是神经网络构建的基础

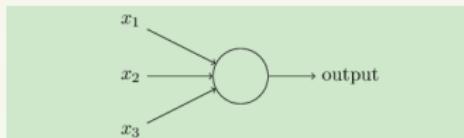


Fig.: Perceptron Learning Algorithm.

输出与输入之间将学习到一个线性关系，可有中间输出结果

$$z = \sum_{i=1}^m w_i x_i + b$$

中间结果连接一个神经元激活函数

$$\text{sign}(z) = \begin{cases} -1 & z < 0 \\ 1 & z \geq 0 \end{cases}$$

深度神经网络基础

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例



在本例中，每一个输入数据都可以表示为一个向量 $x = (x_1, x_2)$ ，而函数则是要实现“如果线以下，输出 0；线以上，输出 1”

深度神经网络基础

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用
算例

感知机模型只能用于二元分类，无法学习较为复杂的非线性模型，
神经网络在感知机模型基础上作了扩展

- 加入隐藏层 (hide layer): 隐藏层可以有很多层，增强模型的表达能力
- 输出层的神经元可以有不止一个输出
- 对激活函数作扩展，如 Sigmoid 函数

$$f(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

其他的激活函数还有 tanx、softmax 和 ReLU 等

深度神经网络

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

当前的深度神经网络 (Deep Learning Neural Network) 可以包含上百层神经元，通常有上万个参数，再加上超参数，实际的参数空间几乎是无限大的。如何从海量潜在的可能参数中做选择极具挑战性。

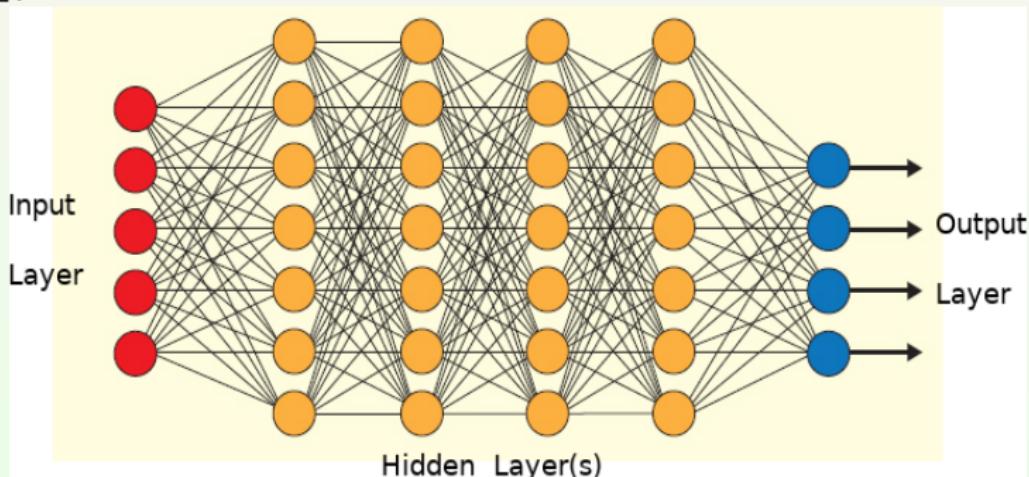


Fig.: Deep Learning Neural Network.

深度神经网络的前馈算法

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

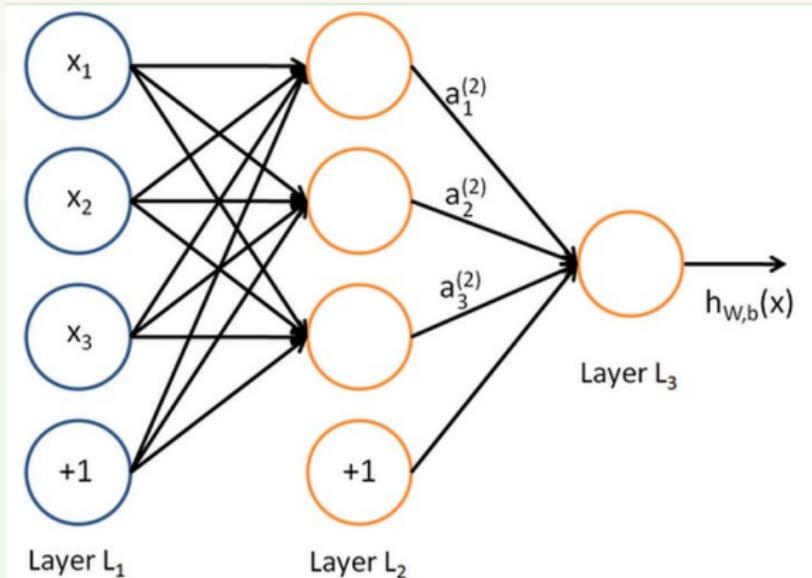
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

以三层深度神经网络为例，说明深度神经网络的前馈算法



深度神经网络的前馈算法

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

假设激活函数为 $\sigma(z)$, 隐藏层和输出层的输出值为 a , 与感知机类似的思路, 对于第二层的输出 a_1^2, a_2^2, a_3^2 ,

$$\begin{aligned} a_1^2 &= \sigma(z_1^2) = \sigma(w_{11}^2 x_1 + w_{12}^2 x_2 + w_{13}^2 x_3 + b_1^2) \\ a_2^2 &= \sigma(z_2^2) = \sigma(w_{21}^2 x_1 + w_{22}^2 x_2 + w_{23}^2 x_3 + b_2^2) \\ a_3^2 &= \sigma(z_3^2) = \sigma(w_{31}^2 x_1 + w_{32}^2 x_2 + w_{33}^2 x_3 + b_3^2) \end{aligned}$$

对于第三层的输出 a_1^3 , 可有

$$a_1^3 = \sigma(z_1^3) = \sigma(w_{11}^3 a_1^2 + w_{12}^3 a_2^2 + w_{13}^3 a_3^2 + b_1^3)$$

一般地, 假设第 $l - 1$ 层有 m 各神经元, 则对于第 l 层的第 j 各神经元的输出 a_j^l 可以表示为

$$a_j^l = \sigma(z_j^l) = \sigma\left(\sum_{k=1}^m w_{jk}^l a_k^{l-1} + b_j^l\right)$$

如果 $l = 2$, 则 a_k^1 就是输入层 x_k
用矩阵表示

$$\vec{a}^l = \sigma(\vec{z}^l) = \sigma(\mathbf{W}^l \vec{a}^{l-1} + \vec{b}^l)$$

遗传算法的基本原理

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

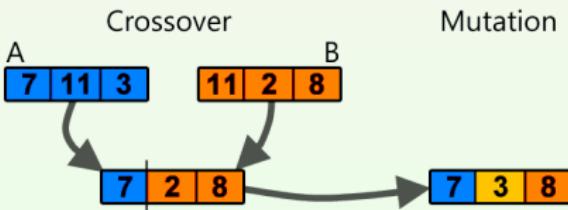
基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

遗传算法 (Genetic Algorithm, GA) 是模拟生物进化论的自然选择和遗传学机理的计算模型，通过模拟自然进化过程搜索最优解

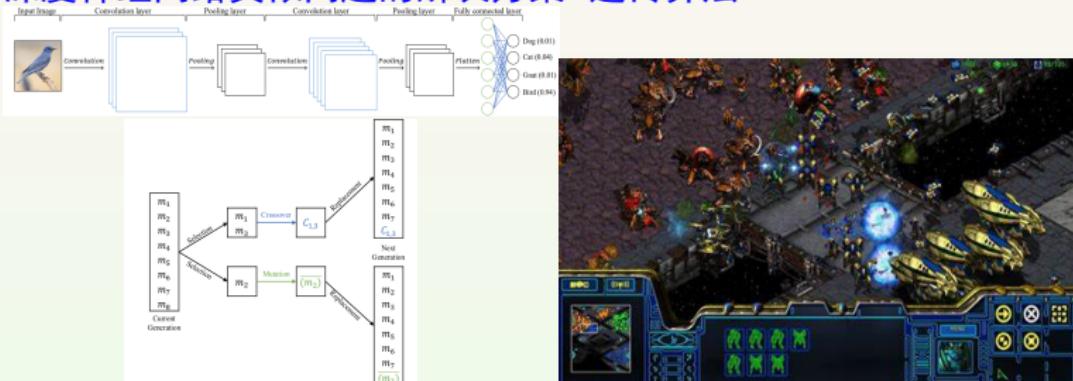
- 1 优化问题可能潜在的解集构成一个种群，该种群由经过基因编码的一定数目的个体组成，每个个体是带有一定的优化特征
- 2 种群产生之后，借助于自然遗传学的遗传算子进行组合交叉 (crossover) 和变异 (mutation)，产生新一代个体



- 3 按照适者生存和优胜劣汰的原理，在每一代，根据问题域中个体的适应度，选择合适的个体，构成代表新的解集的种群
- 4 逐代演化后，产生出越来越好的近似解（优化目标）

深度神经网络与遗传算法

深度神经网络类似问题的解决方案: 遗传算法



GACNN: TRAINING DEEP CONVOLUTIONAL NEURAL NETWORKS WITH GENETIC ALGORITHM

Parsa Esfahanian
 Department of Computer Science
 Institute for Research in Fundamental Sciences
 parsa.esfahanian@ipm.ir

Mohammad Akhavan
 Department of Computer Science
 Institute for Research in Fundamental Sciences
 mohammad.akhavan@ipm.ir

AlphaStar: An Evolutionary Computation Perspective

Kai Arulkumaran
 Imperial College London
 London, United Kingdom
 ka709@ic.ac.uk

Antoine Cully
 Imperial College London
 London, United Kingdom
 a.cully@imperial.ac.uk

Julian Togelius
 New York City, NY, United States
 julian.togelius.com

ABSTRACT
 In January 2019, Deepmind revealed AlphaStar to the world—the first artificial intelligence (AI) system to beat a professional player at the game of StarCraft II—representing a milestone in the progress of AI. AlphaStar draws on many areas of AI research, including the original game, and its expert SC II have several properties that make it considerably more challenging than even Go: real-time play, partial observability, no single dominant strategy, complex rules that make it hard to build a fast forward model, and a particularly large and varied action space.

GACNN: 利用遗传算法训练深度卷积神经网络

多智能体强化学习: 神经网络

晶体结构优化的复杂性

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

■ 晶体结构预测与搜索中也遇到类似问题

在已知元素种类的条件下，有可能预测或搜索材料晶体的结构；但是材料的等能面存在无数个局部极小点，因而可能的晶体结构也是无限多的。这使得晶体结构的预测与搜索极其困难。

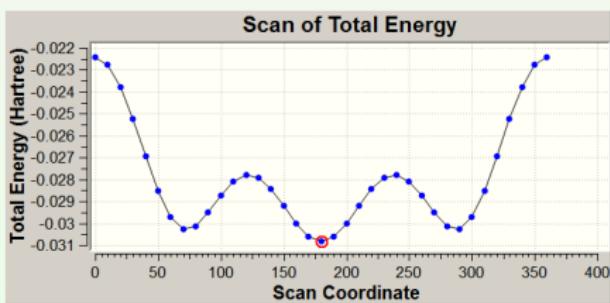
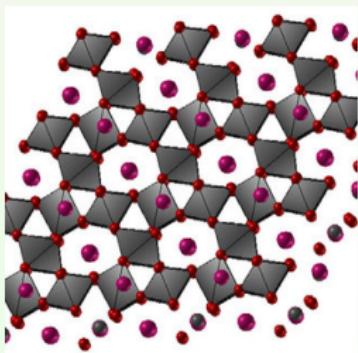


Fig.: The structure of Perovskite and schematic for the energy minimum searching.

晶体结构优化问题的解决

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法

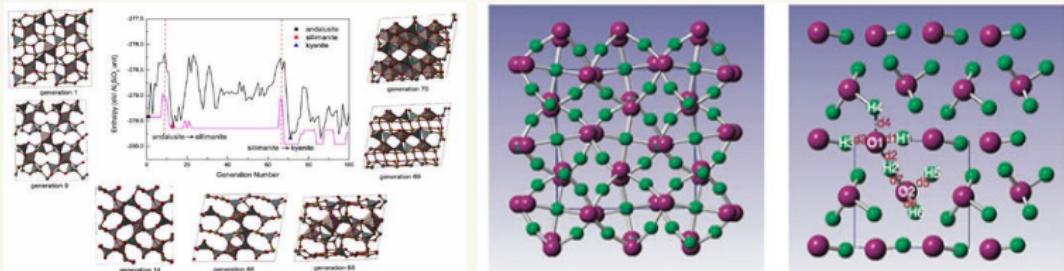
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

解决方案: 遗传算法、粒子群方法等



USPEX Computational Materials Discovery

CALYPSO

磁结构遗传算法预测软件 MagGene

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论

VASP 软件与
PAW 方法

磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例



磁结构遗传算法预测软件 MagGene

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

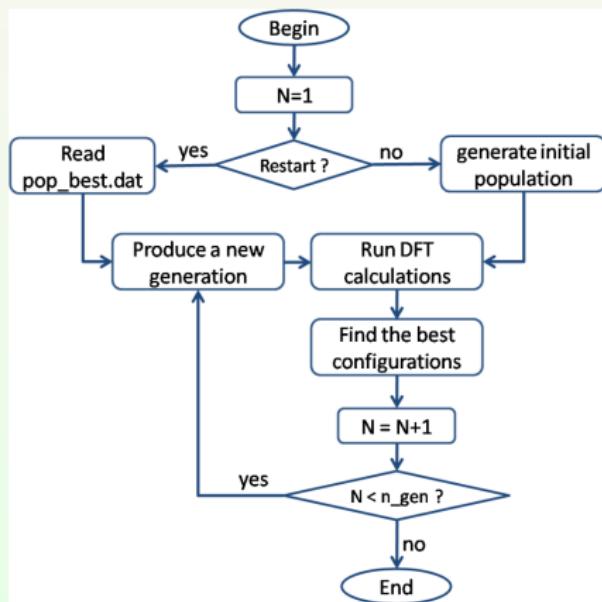
基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例



磁结构计算中的一些处理

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

遗传算法预测磁结构过程中的多样性 (diversity) 保持

- 磁结构搜索中的每一代都引入随机结构
- 放弃重复结构

1 **collinear**:

通过对比产生每个新一代磁结构，去除重复结构

2 **noncollinear**:

引入磁结构相似度系数

$$s_{i,j} = \sqrt{\frac{\sum_{\substack{n=1 \\ t=x,y,z}}^N (M_i^{n,t} - M_j^{n,t})^2}{N}}$$

$M_i^{n,t}$ 表示第 i 种结构的第 n 个磁性原子的磁矩 t 分量
当相似度系数大于某个指定的临界值 **similarity_criteria**，
则放弃相对稳定性低的结构

磁结构计算中的一些处理

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

由于磁相互作用一般都较弱，相比非磁性体系，磁性计算的收敛困难得多，难收敛体系的处理是控制磁结构搜索计算量的重要因素

- 经验表明：真实基态一般不是难收敛结构
- 每一代的难收敛结构存在，会通过误差带（error bar），指向伪基态（fake ground state），导致磁结构搜索时间延长
- MagGene 通过对难收敛结构的能量外加高的赝能量（pseudo energy），尽可能排除难收敛结构的干扰

MagGene 通过  **扩大搜索结构多样性**
经验地消除伪基态

有效地提高了磁结构搜索的效率和可靠性

MagGene 的主要功能

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

■ MagGene 的主要功能:

- 1 自动产生可能的磁结构
- 2 自动生成第一性原理程序的输入文件
- 3 自动分析第一性原理程序的计算结果
- 4 筛选并优化磁结构，反复迭代，直至最终得到基态磁结构

■ 程序语言: Fortran 95

■ 第一原理计算程序: VASP

MagGene 的主要文件

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

■ 主输入文件: input.dat

```
input.dat
noncollinear=1
m_atom_list = 1 2 3 4
generation = 100
population = 30
pop_best = 8
n_random=3
n_opt=10
delta_opt=0.3
norm_mag= 1.5 1.5 1.5 1.5
afm=1
restart=0
```

■ 第一性原理程序调用脚本: submit.sh

```
submit.sh
#!/bin/bash
yhrun -N 4 -n 96 ~ /bin/vasp_ncl >output
```

■ 第一原理程序输入文件:

INCAR, POSCAR, KPOINTS, POTCAR

MagGene 的主要输入参数

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

- **noncollinear**: 0 或 1; 指定是否在非共线磁有序中搜索基态
- **restart**: 0 或 1; 指定当前计算是否是续算
- **m_atom_list**: 整数序列; 指定哪些原子带有磁性
- **generation**: 整数; 指定最大遗传算法代数
- **population**: 整数; 指定一代中的结构数
- **similarity_criteria**: 实数; 指定两个结构是否相同的判定标准
- **pop_best**: 整数; 指定每代中保留的最佳结构数

MagGene 的主要输入参数 (cont.)

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

- **n_random**: 整数; 在每代中随机生成的结构数
- **n_mutation**: 整数; 在每代中引入的变异结构数
- **delta_mutation**: 整数; 变异程度
- **norm_mag**: 实数序列; 指定每个原子的磁矩大小
- **fixm**: 一个或三个实数; 限定系统总磁矩大小
- **afm**: 0 或 1; 是否进行反铁磁结构搜索
- **dft_coverage**: 0 或 1; 是否抛掉密度泛函计算中未收敛的结构

Outline

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

1 基本理论和 VASP 软件的磁性计算

- 密度泛函理论
- VASP 软件与 PAW 方法
- 磁性与自旋波

2 复杂磁性结构与 MagGene 软件

- 复杂磁结构及其起源
- 遗传算法与结构预测

3 MagGene 应用算例

块体 FeSe

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波
复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测
MagGene 应
用算例

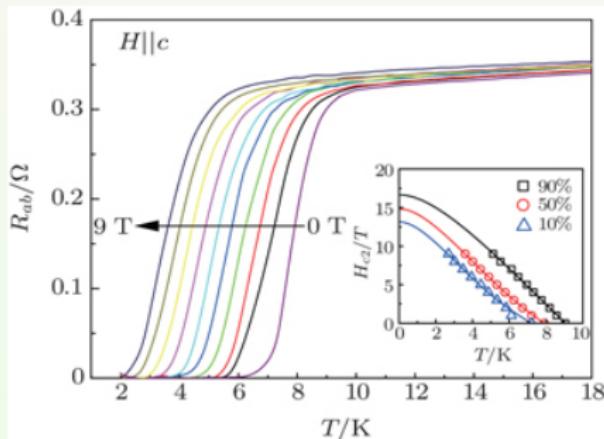


Fig.: The hysteresis loop of FeSe (bulk-structure).

F-C. Hsu, *et al.* PNAS **23**, 14262 (2008)

单层 FeSe

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

■ 单层 FeSe 具有更高的转变温度 $T_c \sim 65\text{K}$

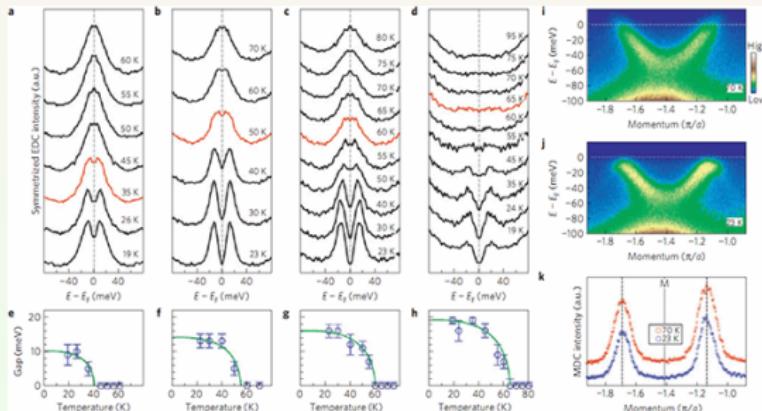


Fig.: The T_c for the monolayer-structure FeSe.

S. He, et al. Nat. Mater. **12**, 605 (2013)

FeSe 磁结构的预测

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

计算使用包含 32 个原子的超元胞

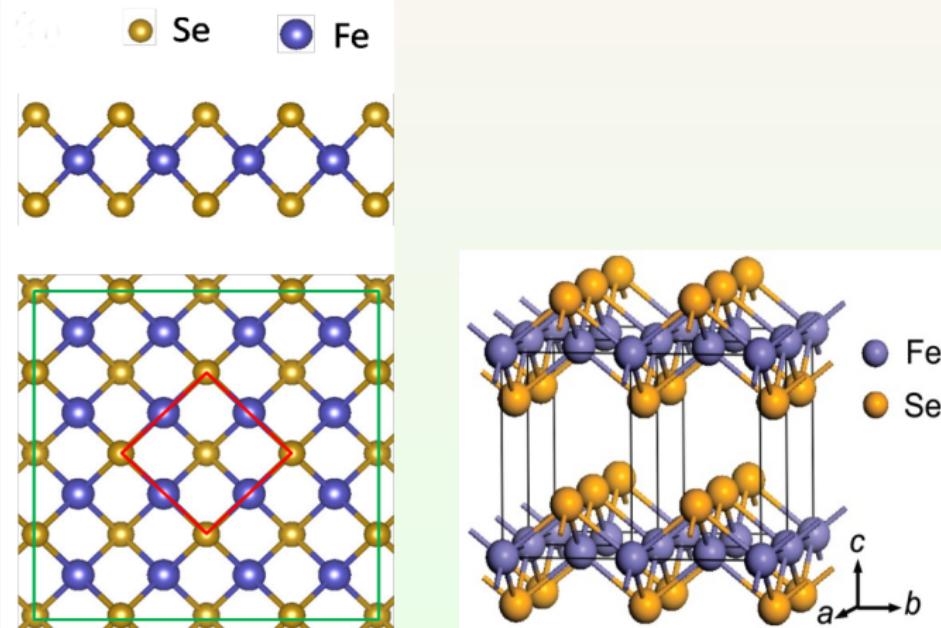


Fig.: The monolayer- and bulk-structure of FeSe for calculated.

FeSe 磁结构的预测

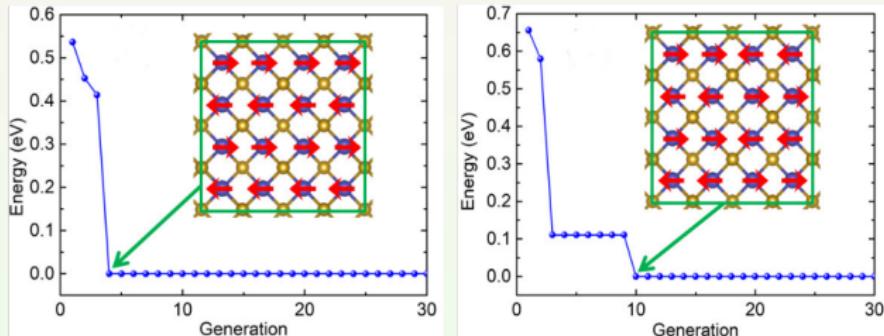
VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算
密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

单层 FeSe 在第四代找到了最稳定的磁结构
块体 FeSe 在第十代找到了最稳定的磁结构



计算参数 input.data 文件设置:

```
noncollinear=0: # 共线磁结构搜索
afm=1: # 搜索反铁磁结构
generation=30: # 演化 30 代
population=30: # 每一代计算 30 个结构
pop_best=8: # 保留 8 个最优结构
n_random=10: # 每一代包含 10 个随机结构
```

单层 CrI₃

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

■ 单层 CrI₃在不同条件下具有不同的磁结构

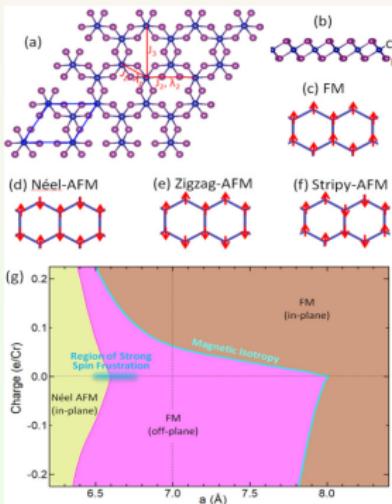


Fig.: The different magnetic structure of monolayer-structure FeSe.

F. Zheng, et al. Nanoscale. **10**, 14298 (2018)

单层 CrI₃

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

■ CrI₃层间也有复杂的磁耦合行为

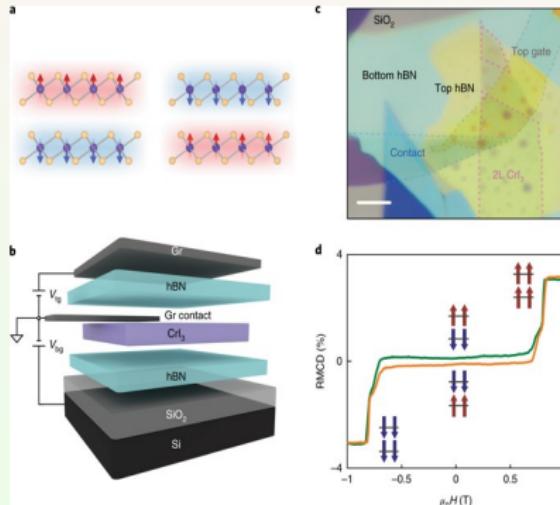


Fig.: The inter-layer magnet-coupling of FeSe.

B. Huang, et al. Nat. Nanotech. **13**, 544 (2018)

单层 CrI₃磁结构的预测

VASP 计算支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件
复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用算例

晶格常数为 6.3Å、7Å 和 8Å 的单层 CrI₃在第 21、6 和 10 代找到了最稳定的磁结构，分别是面内反铁磁、面外铁磁和面内铁磁。

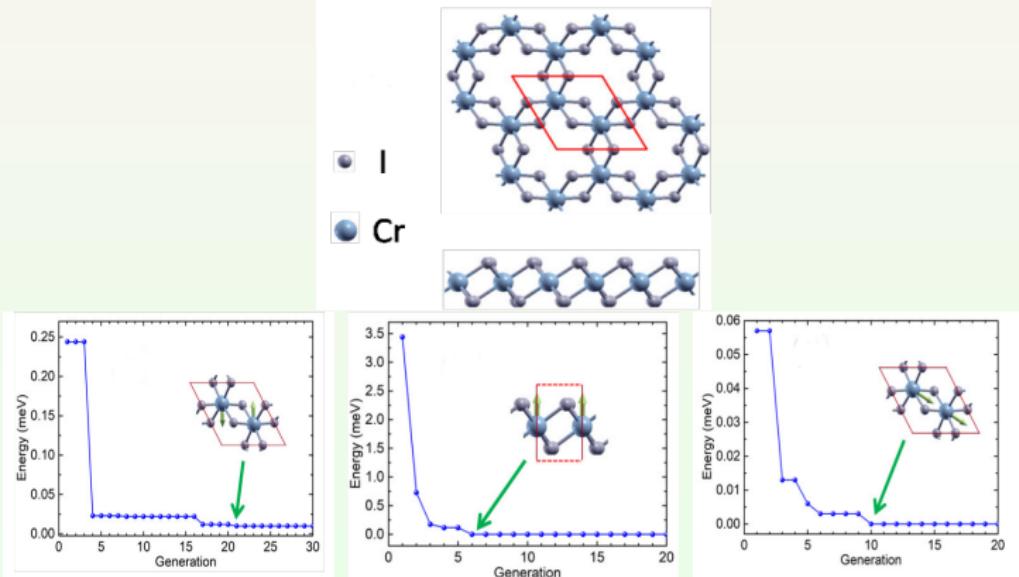


Fig.: Atomic structure of CrI₃ single layer and the MagGene calculation results for single layer with lattice parameters 6.3Å, 7.0Å, and 8.0Å respectively.

单层 CrI₃磁结构的预测

计算参数 input.data 文件设置:

```
noncollinear=1: # 非共线磁结构搜索  
afm=0: # 不限于搜索反铁磁结构  
generation=30: # 演化 30 代  
population=30: # 每一代计算 30 个结构  
pop_best=8: # 保留 8 个最优结构  
n_random=10: # 每一代包含 10 个随机结构
```

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

UO₂晶体

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论
VASP 软件与
PAW 方法
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应
用算例

■ UO₂具有非常复杂的磁有序结构

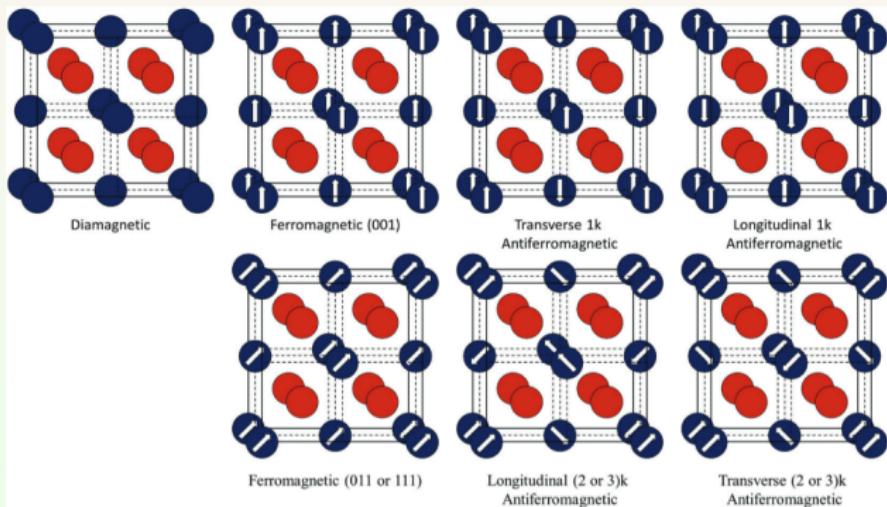


Fig.: The complexed magnetic-ordered structure of UO₂.

J. T. Pegg, et al. Phys. Chem. Chem. Phys. **21**, 760 (2019)

UO₂磁结构的预测

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介

基本理论和
VASP 软件
的磁性计算

密度泛函理论

VASP 软件与
PAW 方法

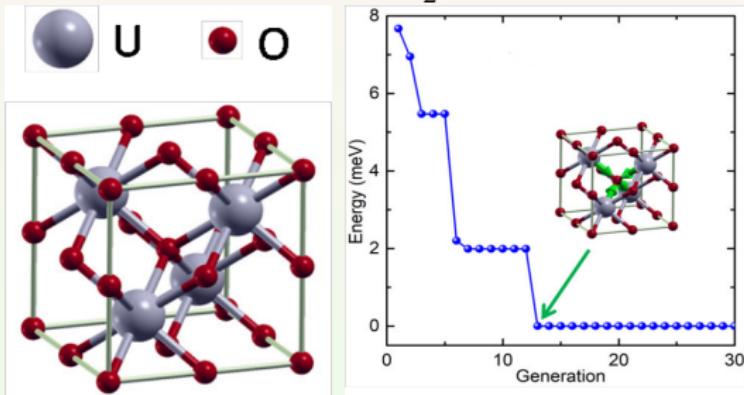
磁性与自旋波

复杂磁性结构
与 MagGene
软件

复杂磁结构及其起源
遗传算法与结构预测

MagGene 应用
算例

计算程序在第 13 代演化中找到 UO₂正确的磁结构: 3k 反铁磁



计算中使用了描述关联性之更好的 Meta-GGA 泛函 SCAN 来研究 UO₂

计算参数 input.data 文件设置:

```
noncollinear=1: # 非共线磁结构搜索
afm=1: # 搜索反铁磁结构
generation=30: # 演化 30 代
population=30: # 每一代计算 30 个结构
pop_best=8: # 保留 8 个最优结构
n_random=3: # 每一代包含 3 个随机结构
```

FeSe 磁结构的预测: INCAR

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

1	System = FeSe-Monolayer	1	System = FeSe-Bulk
2	ISTART = 0	2	ISTART = 0
3	INIWAV = 1	3	INIWAV = 1
4	ICHARG = 2	4	ICHARG = 2
5		5	
6	IALGO = 38	6	IVDW=11
7	LREAL = .TRUE.	7	
8	PREC = Normal	8	IALGO = 38
9	ENCUT = 268.0	9	LREAL = .TRUE.
10	NELMIN = 4	10	PREC = Normal
11	NELM = 150	11	ENCUT = 268.0
12	ISMEAR = 0	12	NELMIN = 4
13	SIGMA = 0.1	13	NELM = 150
14	EDIFF = 1E-7	14	ISMEAR = 0
15		15	SIGMA = 0.1
16	EDIFFG = -0.001	16	EDIFF = 1E-7
17	IBRION = 1	17	
18	ISIF = 2	18	EDIFFG = -0.001
19	NSW = 0	19	IBRION = 1
20		20	ISIF = 2
21	RWIGS = 1.302 1.164	21	NSW = 0
22		22	
23	AMIX = 0.2	23	RWIGS = 1.302 1.164
24	Bmix = 0.00001	24	
25	AMIX_MAG = 0.8	25	AMIX = 0.2
26	Bmix_MAG = 0.00001	26	Bmix = 0.00001
27		27	AMIX_MAG = 0.8
28	ISPIN = 2	28	Bmix_MAG = 0.00001
29		29	
30	# KPAR=8	30	ISPIN = 2
31	# NPAR=3	31	LMAXMIX = 4
32		32	
33	LWAVE = .FALSE.	33	
34	LCHARG = .FALSE.	34	# KPAR=16
35	LVTOT = .FALSE.	35	# NPAR=2

CrI₃磁结构的预测: INCAR

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

<pre> 1 System = CrI3-6.3A 2 ISTART = 0 3 INIWAV = 1 4 ICHARG = 2 5 LSORBIT = .TRUE. 6 ISYM = -1 7 8 IALGO = 38 9 LREAL = .FALSE. 10 PREC = Normal 11 ENCUT = 227.1 12 NELMIN = 4 13 NELM = 150 14 ISMEAR = -5 15 SIGMA = 0.1 16 EDIFF = 1E-07 17 18 EDIFFG = -0.01 19 IBRION = 2 20 ISIF = 2 21 NSW = 0 22 23 24 RWIGS = 1.323 1.487 25 26 AMIX = 0.2 27 BMIX = 0.0001 28 AMIX_MAG= 0.8 29 BMIX_MAG= 0.0001 30 31 LMAXMIX = 4 32 33 34 #KPAR=32 35 #NPAR=2 36 37 LWAVE = .FALSE. 38 LCHARG = .FALSE. 39 LVTOT = .FALSE. </pre>	<pre> 1 System = CrI3-7.0A 2 ISTART = 0 3 INIWAV = 1 4 ICHARG = 2 5 LSORBIT = .TRUE. 6 ISYM = -1 7 8 IALGO = 38 9 LREAL = .FALSE. 10 PREC = Normal 11 ENCUT = 227.1 12 NELMIN = 4 13 NELM = 150 14 ISMEAR = -5 15 SIGMA = 0.1 16 EDIFF = 1E-07 17 18 EDIFFG = -0.01 19 IBRION = 2 20 ISIF = 2 21 NSW = 0 22 23 24 RWIGS = 1.323 1.487 25 26 AMIX = 0.2 27 BMIX = 0.0001 28 AMIX_MAG= 0.8 29 BMIX_MAG= 0.0001 30 31 ISPIN = 2 # spin freedom 32 LMAXMIX = 4 33 34 35 #KPAR=32 36 37 LWAVE = .FALSE. 38 LCHARG = .FALSE. 39 LVTOT = .FALSE. 40 </pre>
---	---

UO₂磁结构的预测: INCAR

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简
介

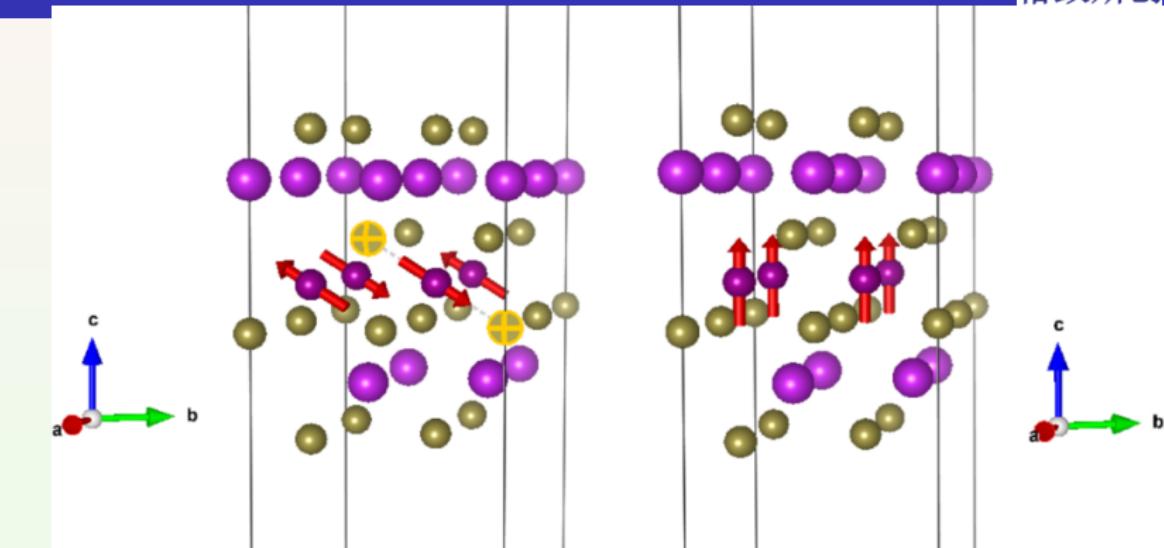
```

1   System = UO2
2   ISTART = 0
3   INIWAV = 1
4   ITCHARG = 2
5   METAGGA=SCAN
6   LSORBIT = .TRUE.
7   ISYM = -1
8
9   LDAU = .TRUE.
10  LDAUTYPE = 2
11  LDAUL = 3 -1
12  LDAUPRING =2
13  LDAUU = 3.46  0.0
14  LDAUJ = 0.30  0.0
15
16
17  IALGO = 38
18  LREAL = .FALSE.
19  PREC = Normal
20  ENCUT = 400
21  NELMIN = 4
22  NELMDL =15
23  NELM = 150
24  ISMEAR = 0
25  SIGMA = 0.1
26  EDIFF = 1E-6
27
28  EDIFFG = -0.001
29  IBRION = 2
30  ISIF = 2
31  NSW = 0
32
33
34  RWIGS = 1.588 0.820
35
36  AMIX = 0.2
37  BMIX = 0.0001
38  AMIX_MAG= 0.8
39  BMIX_MAG= 0.0001
40
41  LMAXMIX = 6
42
43
44 #KPAR=64
45 #NCORE=8
46
47  LWAVE = .FALSE.
48  LCHARG = .FALSE.
49  LVTOT = .FALSE.
50
51
52
53
54
55
56

```

MnBiTe 基态磁结构的预测

VASP 计算
支持的磁结构
预测软件
MagGene 简介



易磁化轴指向最近邻 Te 的反铁磁基态
计算框架: 标准 DFT+SOC(PBE 泛函)

易磁化轴沿着 z 方向的铁磁基态
计算框架: 标准 DFT+U ($U=3$ eV for Mn-
d)+SOC(PBE 泛函)

考虑了 Hubbard+U 修正电子相关效应的计算框架下得到的基态磁
结构与实验相符

谢谢大家！