

Contents

| | |
|------------------------|-----------|
| 1 Preliminaries | 2 |
| 1.1 常用的命令 | 2 |
| 1.2 Windows上安装客户端 | 4 |
| 2 VASP | 4 |
| 2.1 简介 | 4 |
| 2.2 输入文件 | 4 |
| 2.2.1 INCAR文件 | 4 |
| 2.2.2 POSCAR文件 | 6 |
| 2.2.3 KPOINTS文件 | 7 |
| 2.2.4 POTCAR文件 | 7 |
| 2.3 输出文件 | 8 |
| 2.3.1 OUTCAR文件 | 8 |
| 2.3.2 EIGENVAL文件 | 9 |
| 2.3.3 OSZICAR文件 | 10 |
| 2.3.4 PROCAR文件 | 10 |
| 2.4 提交任务 | 10 |
| 2.5 计算步骤 | 11 |
| 2.6 计算实例 | 11 |
| 2.6.1 结构优化 | 11 |
| 2.6.2 静态自洽 | 12 |
| 2.6.3 非静态自洽·态密度 | 13 |
| 2.6.4 非静态自洽·能带计算 | 14 |
| 2.7 结构优化分析 | 15 |
| 2.7.1 ENCUT | 15 |
| 2.7.2 结构弛豫分析结果 | 18 |
| 2.8 其他问题 | 18 |
| 2.8.1 宇称分析 | 18 |
| 2.8.2 表面计算 | 19 |
| 2.8.3 自洽是否加SOC测试 | 21 |
| 3 WANNIER90 | 22 |
| 3.1 编译 | 22 |
| 3.2 构造Wannier 函数 | 22 |
| 4 WannierTools | 23 |
| 4.1 编译 | 23 |
| 4.2 计算表面态等 | 23 |

1 Preliminaries

1.1 常用的命令

采用 Xshell 等远程连接终端服务器, 所用的指令都是 Linux 平台下的, 下面是一些常用的命令:

1. ls命令 (list 的缩写): 查看目录文件等信息.

ls -a 列出目录所有的目录, 包括以.开始的隐藏文件.

ls -A 列出除.及..的其他文件.

ls -r 反序排列.

ls -S 以文件大小排序.

ls -l 除了文件名之外还将文件的权限、所有者、文件大小等信息详细列出来.

2. cd命令 (change directory 的缩写): 切换目录.

cd ~ (cd 或者cd home) 进入home 目录.

cd directory1 进入 directory1 目录.

cd .. 返回上一级目录.

cd . 当前目录.

cd / 进入根目录.

3. mkdir命令 (make directory 的缩写)、rmdir 命令 (remove directory 的缩写)

mkdir test 在当前目录下创建一个 test 的新文件夹

mkdir -p /tmp/test/test1 在 tmp 目录下创建路径为 test/test1 的目录.

rmdir directory1 在当前目录下删除一个 directory1 的空文件夹, 注意, 该命令不能删除非空目录.

4. touch命令、pwd命令 (print working directory的缩写).

touch file1 新建一个 file1 的空文件. (vim file1 保存退出也能新建一个空文件.)

pwd 查看当前绝对路径.

5. rm命令 (remove 的缩写): 删除文件或目录.

rm -i *.log 删除任何 .log 文件, 删除前逐一询问确认.

rm -rf test 删除 test 子目录及子目录中的所有档案, 并且不用确认.

rm -rf * 删除当前所在目录的所有文件. (一定要谨慎使用!!!)

rm f* 删除以 f 开头的文件.

6. cp命令 (copy 的缩写): 将源文件复制至目标文件.

cp ll.txt test/ 将 ll.txt 文件复制到 test/目录下. (注意绝对路径和相对路径的区别.)

cp ll.txt ll.py 将 ll.txt 文件复制到 ll.py, ll.py 将被覆盖, 不复存在.

7. mv命令 (move的缩写): 移动文件或修改文件名.

mv ll.txt ll.py 将 ll.txt文件重命名为 ll.py 文件.

mv ll.txt test/ 将 ll.txt 文件移至 test/目录下

8. cat命令 (concatenate的缩写): 可以显示内容较少的文件; 可以把几个文件合并为一个文件.

-n 显示每行的行数; -b 显示行数, 但对空白行不编号;

cat file1 查看 file1 文件里的信息.(与 more file1 类似)

cat file1 file2 > file 将 file1 文件、file2 文件合并成一个 file 文件.

cat file1 > file2 将file1的内容复制到file2中, file2原本内容被覆盖.

cat file1 >> file2 将file1的内容追加到file2中.

9. chmod命令: 用于改变文件或者目录的访问权限.

r: 读权限; w: 写权限; x: 执行权限; -: 删除权限; s: 特殊权限.

chmod +x file 增加file文件的用户可执行权限

chmod -x file 删除file文件的用户可执行权限

10. tar命令: 用来解压和压缩文件.

-c: 建立新的压缩文件; -x: 从压缩包中抽取文件; -r: 添加文件到已压缩文件包中;(这几个同时只能有一个!)

-v: 显示操作过程; -Z: 有compress属性的; -z: 有gzip属性的; -j: 有bz2 属性的. (这些可选.)

-f: 指定压缩文件. 这个参数是最后一个参数, 也是必须的, 后面只能接文档名.

tar -cvf file1 file2 将文件全部打包成 tar 包.

tar -xvf file.tar 解压 tar 包.

tar -xzvf file.tar.gz 解压 tar.gz 包.

tar -xjvf file.tar.bz2 解压 tar.bz2 包.

tar -xZvf file.tar.Z 解压 tar.Z 包.

```
[zhj_zhangh@login1 soc]$ ll
total 992
-rw-r--r-- 1 zhj_zhangh zhanghj 12 Nov 9 10:31 comment
-rwxr-xr-x 1 zhj_zhangh zhanghj 2299 Nov 2 21:37 INCAR
-rwxr-xr-x 1 zhj_zhangh zhanghj 170 Nov 2 21:37 jobs
-rw-r--r-- 1 zhj_zhangh zhanghj 41 Nov 2 21:37 KPOINTS
-rwxr-xr-x 1 zhj_zhangh zhanghj 180 Nov 2 21:40 KPOINTS-band
drwxr-xr-x 6 zhj_zhangh zhanghj 32768 Nov 9 14:11 m11d4
drwxr-xr-x 8 zhj_zhangh zhanghj 512 Nov 7 11:08 m11d6
drwxr-xr-x 5 zhj_zhangh zhanghj 512 Nov 7 23:54 m11d7
drwxr-xr-x 3 zhj_zhangh zhanghj 512 Nov 9 10:43 m11d9
drwxr-xr-x 3 zhj_zhangh zhanghj 512 Nov 2 21:43 n11d2
drwxr-xr-x 6 zhj_zhangh zhanghj 512 Nov 4 20:05 n11d3
-rwxr-xr-x 1 zhj_zhangh zhanghj 514 Nov 2 21:37 POSCAR
-rw-r--r-- 1 zhj_zhangh zhanghj 452861 Nov 4 22:09 POTCAR-GGA
-rw-r--r-- 1 zhj_zhangh zhanghj 437265 Nov 4 22:07 POTCAR-LDA
```

Figure 1: ls -l命令将文件的权限、所有者、文件大小等信息详细列出来, 图中红色标注的位置表示该文件是否有权限(x), 文件名颜色可能与其他文件不同.

以后如果想查找某个命令的详细文档, 有两个命令会经常使用:

1. command -help. 例如, command ls 即查看ls名称的帮助文档.
2. man command. 同理, man ls 也能查看.

相关命令参考网页:

1. <https://www.cnblogs.com/qj350760546/p/7890680.html>.
2. https://www.cnblogs.com/yjd_hycf_space/p/7730690.html.

1.2 Windows上安装客户端

1. Xshell 是一个用于 Windows 平台的强大的 SSH, TELNET, 和 RLOGIN 终端仿真软件. 它使得用户能轻松和安全地从 Windows PC 上访问 Unix/Linux 主机.
2. Xftp 是一个用于 Windows 平台的强大的 FTP 和 SFTP 文件传输程序. Xftp 能安全地在 Unix/Linux 和 Windows PC 之间传输文件.
3. Xshell 和 Xftp 是 NetSarang 公司开发的, 具体下载地址(见官网), 我们选择 Free for home/school 的版本:
Xshell下载地址: https://www.netsarang.com/products/xsh_overview.html.
Xftp 下载地址: https://www.netsarang.com/products/xftp_overview.html.
4. Xftp 客户端用来传输文件, 但是对于比较少的文件, 也可以在 Xshell 上通过 rz/sz 命令上传/下载文件.
5. 关于如何登录自己所在课题组的账户, 下载后一定要浏览手册: <https://hpc.nju.edu.cn/zh/manual>. 里面有详细的介绍.
6. 上述两个客户端密码采用的本人设置密码+空格+谷歌验证码. 每次登录需要查看验证码登录, 有时会很麻烦. 例如, 在网页输入: <http://topo.nju.edu.cn/cgi-bin/getkey?key=OIXIN6W3TIK37UYJ> 即查看谷歌验证码, 其中 OIXIN6W3TIK37UYJ 是分配给我的密钥.

2 VASP

2.1 简介

VASP 英文全称为 Vienna Ab-initio Simulation Package, 是一种使用赝势和平面波基组进行从头 (abinitio) 量子力学分子动力学计算和第一性原理计算的软件包. 通过集群里载有的VASP 进行相关的计算. 可简单地认为是求解该方程, 来获得我们所需要的结果.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k^2 + V(r) + \int \frac{|\varphi_{k'}(r')|^2}{|r-r'|} + \frac{\delta E_{xc}(\rho)}{\delta \rho}\right)\varphi_k(r) = E_k\varphi_k(r) \quad (1)$$

VASP 输入四个重要的文件 (input files): INCAR、POSCAR、POTCAR、KPOINTS, 会输出几个重要的文件 (output files): CHGCAR, CONTCAR, OSZICAR, EIGENVAL等等.

下面是一些 VASP 教程, 里面有详细的介绍和操作流程.

1. VASP manual: http://cms.mpi.univie.ac.at/wiki/index.php/The_VASP_Manual.
2. PDF 教程: <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp.pdf>.
3. 网页版教程: <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/vasp.html>.

若无法登录上述网站, 厦大计算凝聚态物理研究室的网页版: <http://cmp.xmu.edu.cn/vasp/Contents.html>.

2.2 输入文件

2.2.1 INCAR文件

这是 VASP 中最重要的输入文件, 它控制着 VASP 将进行怎样的计算以及各种参数的设置. 例如, 大概分为下面几类参数: 运行参数, 电子弛豫参数, 离子弛豫参数, 能带以及态密度计算参数, 其他性质参数等等.

对于 INCAR 文件中的参数, VASP 已经基本上都设置了相关默认值(OUTCAR文件含有INCAR的所有参数). 在计算的时候, 绝大多数参数可以采用默认值, 只需设置几个我们需要的参数就可以了. 下面是相关参数的介绍:(具体请看官网手册)

SYSTEM: 描述所计算的体系.

ISTART: 0-初始化波函数、1-从WAVECAR读取波函数 (重定义平面波)、2-从WAVECAR读取波函数(平面波不变). 默认值: 若存在 WAVECAR 文件, ISTART=1, 否则, ISTART=0.

ICHARG: 0-初始波函数计算电荷密度、1-从CHGCAR读取电荷密度、2-ISTART=0、+10-非自治运算. 默认值: 若 ISTART=0, ICHARG=2, 否则, ICHARG=0.

PREC: 决定 ENCUT 的大小. 默认值: PREC=Normal (VASP5.X 版本).

LREAL: .TRUE.-实空间、.FALSE.-倒空间. 默认值: LREAL=.FALSE..

ISMEAR: 决定用何种方法来设置每个波函数的部分占据数. 默认值: ISMEAR=1.

SIGMA: 决定 smearing 的宽度(eV). 默认值: SIGMA=0.2.

RWGS: DOS计算使用. 默认值: RWGS=POTCAR 文件中的值.

LORBIT: 与适当的 RWGS 一起决定是否创建 PROOUT 或者 PROOUT 文件. 默认值: LORBIT=0, 创建 DOSCAR 和 PROCAR.

ENCUT: 默认值: POTCAR 文件中最大的 ENMAX 值.

ENAUG: 默认值: POTCAR文件中的 ENAUG 值.

EDIFF: 电子自治的收敛标准. 默认值: EDIFF=E-04.

NELM: 电子自治最大步数. 默认值: NELM=60.

NELMIN: 电子自治最小步数. 默认值: NELMIN=2.

NSW: 离子移动步数. 默认值: NSW=0, 表示离子不移动.

EDIFFG: 离子自治的收敛标准. 默认值: EDIFFG=EDIFF*10.

POTIM: 离子移动步长, 默认值: 若 IBRION=1,2,3, POTIM=0.5, 若IBRION=0, 用户自行设置.

IBRION: 离子如何移动和更新, 默认值: 若 NSW=0 或者 NSW=1, IBRION=-1, 否则, IBRION=0.

ISIF: 结构优化参数, 默认值: 若 IBRION=0, ISIF=0, 否则, ISIF=2.

LSORBIT: .TRUE.表示自旋轨道耦合打开, 只适用于 PAW 赝势.

ISPIN: 自旋极化计算, 1-不进行计算, 2-进行计算. 默认值: ISPIN=1.

MAGMOM: 指定每个原子的初始磁矩. 默认值: 对于 ISPIN = 2, MAGMOM=NIONS*1.0, 对于 non-collinear 磁性体系, MAGMOM=3*NIONS*1.0.

ISYM: 1、2、3-保持对称性, -1、0-无对称性. 默认值: US赝势ISYM=1, PAW 赝势ISYM=2. 当 ISYM=3 时, 仅考虑力和应力张量的对称性, 电荷密度是非对称的.

注意:

ISMEAR 取值: -5: 采用 Blochl 修正的四面体方法、-4: 采用四面体方法、-1: 采用 Fermi-smearing 方法、0-Gaussian smearing、1-N: 采用 Methfessel-Paxton 方法, N为阶数. 对于半导体和绝缘体, k点数目大于4时, 取 ISMEAR=-5; 当原胞较大而k点数目较少时, 取 ISMEAR=0, SIGMA=0.05, 尽量避免 ISMEAR>0; 对于金属, 取 ISMEAR=1 或2, SIGMA= 0.2.

| ISIF | 计算原子 所受的力 | 计算原胞的 stress tensor | 原子位置 弛豫 | 改变原胞的 形状 | 改变原胞的 体积 |
|------|--------------|------------------------|------------|-------------|-------------|
| 0 | 是 | 否 | 是 | 否 | 否 |
| 1 | 是 | trace only | 是 | 否 | 否 |
| 2 | 是 | 是 | 是 | 否 | 否 |
| 3 | 是 | 是 | 是 | 是 | 是 |
| 4 | 是 | 是 | 是 | 是 | 否 |
| 5 | 是 | 是 | 否 | 是 | 否 |
| 6 | 是 | 是 | 否 | 是 | 是 |
| 7 | 是 | 是 | 否 | 否 | 是 |

接下来,我们以 Bi₂Se₃ 为例,进行结构优化时,其 INCAR 文件内容为:

```
SYSTEM=Bi2Se3 !注释行, 简短描述体系
ISTART =0 !开始新的计算
ICHARG =2 !从原子的电荷密度重叠构造初始电荷密度
PREC =Accurate !计算精度
ENCUT =450 !平面波截断能
EDIFF =0.1E-07 !电子收敛标准
NSW =60 !驰豫最大步数
IBRION =2 !离子如何移动
ISIF =3 !结构优化参数
ISMEAR =-5 !采用Blochl修正的四面体方法
GGA= PE !采用的PBE赝势
```

2.2.2 POSCAR文件

描述所计算体系的晶胞参数,原子个数及晶胞中原子位置.接着以 Bi₂Se₃ 为例.

```
Bi2Se3 !注释行, 描述Bi2Se3体系.
1.0 !基矢的缩放系数.
10.4216690063 0.0000000000 0.0000000000 !这三行是基矢
9.5794746485 4.1042478406 0.0000000000
9.5794746485 1.9657145021 3.6028900668
Bi Se !原子类型, 可不写.
2 3 !原子个数.
Direct !表示原子的坐标是相对于基矢给出的.
0.602659948 0.602659985 0.602660024 !原子的位置.
0.397339969 0.397340044 0.397339994
0.0000000000 0.0000000000 0.0000000000
0.217852976 0.217853019 0.217852988
0.782146873 0.782147034 0.782146981
```

在上述文件的第八行中,也可以使用笛卡尔坐标(那么 Direct 改写成 Cartesian, 原子相应的位置也有所改动),它表示的是原子的绝对坐标.并且该行以 'C', 'c', 'K' or 'k' 开头的单词 (忽略大小写) 都表示采用的笛卡尔坐标.

关于构建一个体系的 POSCAR,可以根据实验数据自行构建,下载 Material Studio 软件设置相应的参数,也可以从网站上个数据库直接下载 POSCAR,例如,

Material Project: <https://www.materialsproject.org/>
COD: <http://www.crystallography.net/cod/search.html>
Aflow: <http://www.aflowlib.org/advanced.php>等等.

从网站下载的一般是 .cif 格式的文件,再下载一个名为 VESTA 的可视化软件查看该结构,并输出 POSCAR 格式的文件. VESTA 下载地址: <http://www.jp-minerals.org/vesta/en/download.html>,

2.2.3 KPOINTS文件

布里渊区 k 点, 可分为自动产生和手动输入: 手动选择 k 点只在能带计算的时候是必要的, 在做优化和性质计算时我们通常选择自动产生 k 点.

1. 自动产生: 一般各基矢方向的网格点数为奇数, 使得产生的 k 点是以 G 为中心.

```
Automatic generation !注释行
0 !0表示自动产生 k 点
Monkhorst-pack !采用 Monkhorst-pack 方法产生 k 点
2 6 6 !沿倒格子各方向上网格点的数目
0 0 0 !对所按网格分割产生的 k 点进行平移的量
```

2. Line-mode 模式(半手写模式), 用于计算能带.

```
k-points along high symmetry lines !注释行
50 !每对高对称点之间产生50个 k 点
Line-mode !以字母'L','l'开头表示按line模式产生 k 点
Reciprocal !以字母'R'开头表示k点按倒空间, 以字母'c','k'开头表示笛卡尔坐标.
0.0 0.0 0.0 !G !各高对称点的位置
0.5 0.5 0.5 !Z
0.5 0.5 0.5 !Z
0.5 0.5 0.0 !F
0.5 0.5 0.0 !F
0.0 0.0 0.0 !G
0.0 0.0 0.0 !G
0.5 0.0 0.0 !L
```

3. 手写输入, (此情况程序运行时间最短.)

```
k-points along high symmetry lines !注释行
50 !有50个 k 点
Reciprocal !以字母'R'开头表示 k 点按倒空间, 以字母'c','k'开头表示笛卡尔坐标.
0.0 0.0 0.0 !各 k 点的位置
...
0.5 0.5 0.5
```

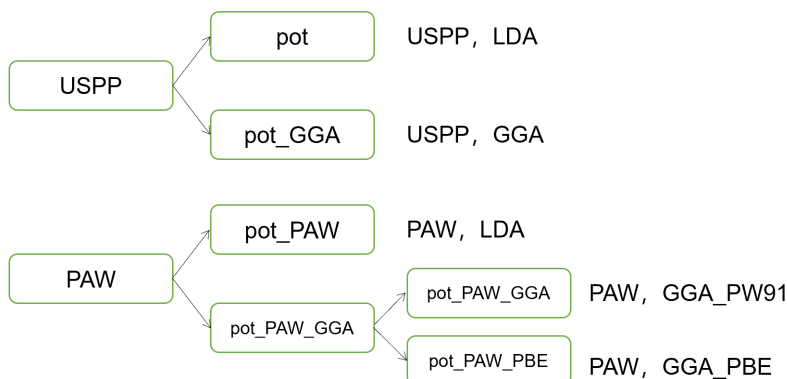
关于高对称点的选取, 参考该文献: Setyawan W, Curtarolo S. High-throughput electronic band structure calculations: Challenges and tools[J]. Computational Materials Science, 2010, 49(2):299-312.

下载地址: <http://materials.duke.edu/auro/AUROARTICULA/j.commatsci.2010.05.010.pdf>

2.2.4 POTCAR文件

赝势文件, 根据赝势处理方法不同有 Ultra-soft 赝势 (USPP) 和投影缀加波的赝势 (PAW); 根据交换关联函数的不同有 LDA 和 GGA; 根据处理半芯态有 A, Asv 和 Apv; 根据 ENMAX 大小有 A, As 和 Ah,s(soft)、h(hard).

在处理磁性材料时,所计算的体系含有碱金属、碱土金属、周期表左边的3d过渡元素、镧系和锕系元素时,推荐用 PAW 势。



集群 VASP 程序包中载有 PAW 投影缀加平面波势。具体查看命令: `ls /fs00/software/vasp/potpaw`. 最好提前将所需要的势库压缩包复制解压到自己设置的目录下。

例如我将 `potpaw-PBE.54.tar.gz` 复制解压到我创建的 `~/POTENTIAL` 目录下,具体的操作命令依次为:

```
>> cd /fs00/software/vasp/potpaw
>> cp potpaw-PBE.54.tar.gz ~/POTENTIAL
>> tar -xvzf potpaw-PBE.54.tar.gz
```

这样就得到我们所需的势库文件。在使用时,按照 POSCAR 文件中的原子顺序依次添加势库,以 Bi2Se3 为例,先切换到 Bi 原子的势库,使用命令为: `cat POTCAR >> ~/test/POTCAR`,然后在切换到 Se 原子的势库,使用相同的命令为: `cat POTCAR >> ~/test/POTCAR`. 这样,在我们要计算的 `~/test/` 目录下,有一个包含 Bi 原子和 Se 原子的 POTCAR 文件。

当然,也可采用 `cp` 复制命令,将所需原子的势库拷贝到计算目录下(不同原子势库拷贝时命名不能一致,否则会覆盖原先文件),之后仍采用 `cat` 命令进行合并,命令为: `cat POTCAR-Bi POTCAR-Se > POTCAR`.

2.3 输出文件

2.3.1 OUTCAR文件

OUTCAR 文件是 VASP 的主要输出文件,但官网并没有给出太多详细具体的说明,所以关于该 OUTCAR 文件的介绍,可参考: http://blog.sina.com.cn/s/blog_180f8354b0102xb31.html.

OUTCAR 文件几乎包含所有的计算信息,文件前面部分是这些输入文件的信息,大致顺序为: POTCAR, POSCAR, KPOINTS, INCAR 等文件的信息,后面是该计算的每一步的详细信息,例如产生的能带数据,优化或者自洽每一步迭代的运行时间等等。

| ion | position | | | nearest neighbor table | | | | | |
|-----|----------|-------|-------|------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|
| 1 | 0.398 | 0.398 | 0.398 | 4 2.89 | 4 2.89 | 4 2.89 | 5 3.11 | 5 3.11 | 5 3.11 |
| 2 | 0.602 | 0.602 | 0.602 | 3 2.89 | 3 2.89 | 3 2.89 | 5 3.11 | 5 3.11 | 5 3.11 |
| 3 | 0.216 | 0.216 | 0.216 | 2 2.89 | 2 2.89 | 2 2.89 | | | |
| 4 | 0.784 | 0.784 | 0.784 | 1 2.89 | 1 2.89 | 1 2.89 | | | |
| 5 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 1 3.11 | 1 3.11 | 1 3.11 | 2 3.11 | 2 3.11 | 2 3.11 |

Figure 2: OUTCAR 部分信息,最近邻原子以及距离。

如果想知道计算过程中 INCAR 文件的所有参数,可以认真查阅该文件的 INCAR 部分。

例如, 在 OUTCAR 文件中, 可以找到该体系每个原子周围近邻的原子类型以及距离. 我们也能找到该体系原胞的体积以及正格子矢量对应的倒格子矢量.

若想查看 OUTCAR 文件中的总能, 命令为: `grep "TOTEN" OUTCAR | tail -1`.

```
energy-cutoff :      600.00
volume of cell :      151.78
  direct lattice vectors      reciprocal lattice vectors
 10.265524864  0.000000000  0.000000000  0.097413431 -0.223403847 -0.132722562
  9.409867310  4.103096141  0.000000000  0.000000000  0.243718394 -0.132722562
  9.409867310  1.962328878  3.603423833  0.000000000  0.000000000  0.277513844

length of vectors
10.265524864 10.265524864 10.265524864  0.277513844  0.277513844  0.277513844
```

另外, 如果我们要估计计算的运行时间, 可以在OUTCAR文件中找到LOOP 这个关键词查看每个步的运行时间, 或者直接使用`grep LOOP OUTCAR` 命令输出下图形式的信息, 每一个LOOP 就是一次自洽迭代, LOOP+ 是一次离子迭代.

```

LOOP:  cpu time    2.9927: real time    3.0030
LOOP:  cpu time    3.2724: real time    3.3256
LOOP:  cpu time    3.8203: real time    3.9417
LOOP:  cpu time    3.2939: real time    3.3001
LOOP:  cpu time    2.7166: real time    2.7216
LOOP+:  cpu time   18.1755: real time   18.3807
LOOP:  cpu time    3.0588: real time    3.0839
LOOP:  cpu time    3.3344: real time    3.3403
LOOP:  cpu time    3.4182: real time    3.4244
LOOP:  cpu time    3.2970: real time    3.3025
LOOP:  cpu time    3.4323: real time    3.4780
LOOP:  cpu time    3.4263: real time    3.5880
LOOP:  cpu time    2.2768: real time    2.2822
LOOP:  cpu time    1.9788: real time    1.9938
LOOP+:  cpu time   26.2745: real time   26.5624
```

Figure 3: OUTCAR部分信息

2.3.2 EIGENVAL文件

EIGENVAL(eigenvalues)文件的信息其实就是能量本征值, 文件头部四行可以忽略, 从第五行数开始为体系的名称(对应INCAR文件中的SYSTEM参数), 下一行第一个数据为体系的总价电子数, 第二个数据是总的k点数, 第三个数据为计算的能带. 接着是整块的数据, 每个k 点记为一块, 每块里面又有每条能带的能量本征值.

```

5      5 100      1
0.3035556E+02  0.1026552E-08  0.1026552E-08  0.1026552E-08
1.0000000000000000E-004
CAR
Bi2Se3
28      65      18

0.0000000E+00  0.0000000E+00  0.0000000E+00  0.1953125E-02
1      -10.747079  1.000000
2      -10.208162  1.000000
3      -9.173517  1.000000
4      -6.249377  1.000000
```

Figure 4: EIGENVAL部分信息

2.3.3 OSZICAR文件

OSZICAR 文件就是每次迭代或离子移动情况的简单的汇总, 打开 OSZICAR 文件查看弛豫步数以及是否收敛。

对于电子自洽, 只有一块数据, 对于离子迭代, 每一步离子迭代中含有一整块电子迭代. DAV 是迭代用到的算法。

关于 OSZICAR 文件, 也可以参考: http://blog.sina.com.cn/s/blog_180f8354b0102xb3h.html.

```
DAV: 13 -0.202226553578E+02 -0.10391E-05 -0.21864E-05 3194 0.233E-02 0.112E-02
DAV: 14 -0.202226555568E+02 -0.19899E-06 -0.60416E-06 3590 0.121E-02 0.262E-03
DAV: 15 -0.202226559734E+02 -0.41665E-06 -0.12520E-06 3022 0.626E-03 0.270E-03
DAV: 16 -0.202226559273E+02 0.46082E-07 -0.66869E-08 1508 0.162E-03
1 F= -.20222656E+02 E0= -.20222656E+02 d E =-.202227E+02
N E dE d eps ncg rms rms (c)
DAV: 1 -0.202227216117E+02 -0.65638E-04 -0.59259E-04 2424 0.127E-01 0.741E-03
DAV: 2 -0.202227240741E+02 -0.24623E-05 -0.30816E-05 2740 0.277E-02 0.302E-03
DAV: 3 -0.202227239180E+02 0.15602E-06 -0.66952E-07 2948 0.539E-03 0.220E-03
DAV: 4 -0.202227238812E+02 0.36826E-07 -0.32068E-07 2022 0.295E-03
2 F= -.20222724E+02 E0= -.20222724E+02 d E =-.679539E-04
```

Figure 5: OSZICAR部分信息

2.3.4 PROCAR文件

PROCAR文件包含分波投影的信息, 在INCAR里设置LORBIT=10,11,12等就能输出该文件。

对于LORBIT = 11:

```
# of k-points: 5 # of bands: 26 # of ions: 3
k-point 1 : 0.00000000 0.00000000 0.00000000 weight = 0.06250000
band 1 # energy -17.37867948 # occ. 1.00000000
ion s py pz px dxy dyz dz2 dxz x2-y2 tot
1 0.144 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.145
2 0.291 0.000 0.006 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.298
3 0.291 0.000 0.006 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.298
tot 0.727 0.000 0.013 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.740
```

第一行分别为 k 点数目, 能带数目, 离子数目. 后面是每个 k 点每条能带对应的投影信息. 每个值为 $|\langle Y_{lm}^{\alpha} | \phi_{nk} \rangle|^2$. 其中 α 表示离子指标, l, m 分别为角动量以及磁量子数, ϕ_{nk} 为波函数。

对于自旋极化计算, 有两块投影信息, 分别为自旋上和自旋下。

对于非共性计算, 会有四块投影信息, 第一块是总的投影信息, 后面是三个方向的, 其值为:

$$p = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu=1}^2 \sigma_{\mu\nu}^j \langle \chi_{nk}^{\mu} | Y_{lm}^{\alpha} \rangle \langle Y_{lm}^{\alpha} | \chi_{nk}^{\nu} \rangle. \quad |\Psi_{nk}\rangle = (\chi_{nk}^{\uparrow}, \chi_{nk}^{\downarrow})^T \quad (2)$$

2.4 提交任务

集群使用作业调度系统管理所有计算作业, 我们需要通过作业调度系统提交计算作业, 可以采用命令行或者脚本方式提交任务. 具体见集群手册: <https://hpc.nju.edu.cn/zh/manual/34-submit>.

1. 命令行

```
bsub -q e52680v3ib! -n 24 -J jobs -o out -e err "module load ips/2017u2;module load  
vasp/5.4.4;mpiexec.hydra vasp.ncl"
```

2. 脚本方式(若脚本名为file, 在计算目录下输入命令: bsub <file 即可提交任务):

```
#BSUB -q e52680v3ib!  
#BSUB -n 24  
#BSUB -J jobs  
#BSUB -oo out  
#BSUB -e err  
module load ips/2017u2  
module load vasp/5.4.4  
mpiexec.hydra vasp.ncl
```

这样, 我们便构造好了 VASP 输入文件, 通过提交任务即可计算. 在后面我们将以 Bi₂Se₃ 为例, 计算有自旋耦合时(SOC)的能带及态密度.

2.5 计算步骤

可大致分为以下三个步骤:

1, 结构优化, 是为了得到最稳定的结构(能量最低), 得到 CONTCAR.

2, 静态自洽, 将上述的优化结构 CONTCAR 改成 POSCAR 文件, 其他参数不变, 得到了 CHGCAR(为得到能带与 DOS 做准备).

3, DOS 和能带计算, 输入文件除了 INCAR、POSCAR、POTCAR、KPOINTS 外还要有静态自洽的 CHGCAR, 另外能带计算时, KPOINTS 要设成高对称点的形式.

注意, 每一个计算最好在一个新的文件夹中进行, 这三个计算中的 INCAR 的某些参数设置不同, 具体查阅手册. 如果一开始使用的 POSCAR 文件是已经优化了的, 就不需要再进行第一步的结构优化.

具体这三步的理解, 可以参考网页:

<http://muchong.com/html/200910/1614952.html>.

https://blog.csdn.net/kyang_823/article/details/59110848.

2.6 计算实例

2.6.1 结构优化

第一步优化原子结构, 其内嵌电子结构, 故同时优化离子实和电子的结构. 其目的为了使得晶格能量最稳定(最低), 设置迭代数, 使得最终的总能与本征值的变化在一定的可允许范围, 即可输出最稳定的晶格结构、电荷密度等来进行之后的非自洽计算.

INCAR文件:

```
SYSTEM=Bi2Se3 !注释行, 简短描述体系  
ISTART =0 !开始新的计算  
ICHARG =2 !从原子的电荷密度重叠构造初始电荷密度  
PREC =Accurate !计算精度  
ENCUT =450 !平面波截断能  
EDIFF =0.1E-07 !电子收敛标准
```

```

NSW =100 !驰豫最大步数
IBRION =2 !离子如何移动
POTIM = 0.1
ISIF =3 !结构优化参数
ISMear =-5 !采用Blochl修正的四面体方法
LWAVE=.FALSE.
NPAR = 2
MAGMOM =0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

```

从 Material Project 网站上下载 POSCAR 文件:

```

Bi2Se3 !注释行, 描述 Bi2Se3 体系.
1.0 !基矢的缩放系数.
10.2655248642 0.00000000000 0.00000000000 !这三行是基矢
9.4098673101 4.1030961412 0.00000000000
9.4098673101 1.9623288780 3.6034238328
Bi Se !原子类型, 可不写.
2 3 !原子个数.
Direct !表示原子的坐标是相对于基矢给出的.
0.398434981 0.398434959 0.398435012 !原子的位置.
0.601564944 0.601565016 0.601564988
0.215714983 0.215714994 0.215715001
0.784284953 0.784285003 0.784285016
0.0000000000 0.0000000000 0.0000000000

```

KPOINTS文件:

```

Automatic generation
0
Gamma
8 8 8
0 0 0

```

POTCAR文件采用 PAW LDA 型赝势(之后会讲为什么使用 LDA 型赝势), 从集群中拷贝到计算目录.

最后提交脚本任务: `bsub < jobs`. (假设脚本文件名为 `jobs`), 计算完成后, VASP 输出许多文件: DOSCAR、EIGENVAL、CONTCAR、OSZICAR、CHGCAR、OUTCAR、WAVECAR、IBZKPT等等.

2.6.2 静态自洽

把结构优化的输入文件 INCAR、KPOINTS、POTCAR、POSCAR 复制到静态自洽计算目录. 并且将所产生的 CONTCAR 复制到 POSCAR.

POSCAR 文件(上一步的 CONTCAR 文件):

```

Bi2Se3
1.0000000000000000
9.5969283073465217 -0.0973464676471235 -0.0578328114596895
8.7580909140311700 3.9250927139069343 -0.0578328114601191
8.7580909140307348 1.8264077643587071 3.4747564123831474
Bi Se
2 3
Direct
0.4012483452648447 0.4012483232648424 0.4012483762648427
0.5987515797351598 0.5987516517351590 0.5987516237351572
0.2091980495048141 0.2091980605048191 0.2091980675048168
0.7908018864951806 0.7908019364951842 0.7908019494951810
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

```

修改INCAR文件里的参数:

```

SYSTEM=Bi2Se3 !注释行, 简短描述体系
ISTART =0 !开始新的计算
ICHARG =2 !从原子的电荷密度重叠构造初始电荷密度
PREC =Accurate !计算精度
ENCUT =450 !平面波截断能
EDIFF =0.1E-07 !电子收敛标准
#NSW =100 !驰豫最大步数
#IBRION =2 !离子如何移动
#ISIF =3 !结构优化参数
ISMear =-5 !采用Blochl修正的四面体方法
LWAVE=.FALSE.
MAGMOM =0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

```

其他文件不用修改, 提交任务.

2.6.3 非静态自洽态密度

将静态自洽的INCAR、POSCAR、POTCAR、KPOINTS、**CHGCAR** 文件复制到要计算态密度的目录. 需要修改INCAR文件里的参数, 其他文件不变.

INCAR文件:

```

SYSTEM=Bi2Se3
ISTART =1
ICHARG =11
PREC =Accurate

```

```

ENCUT =450
EDIFF =0.1E-07
#NSW =100
#IBRION =2
#ISIF =3
ISMear =-5
LSORBIT=.TRUE.
MAGMOM =0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
LORBIT = 11

```

这样, 运行 VASP, 得到 `vasprun.xml` 文件(也可通过命令 `sz` 下载到本地), 用 `p4vasp` 查看态密度 (`p4vasp` 在集群 `/fs00/software` 里面有, 在集群图形界面可以打开, 或者将它拷贝到本地电脑). 另外也可通过编写脚本文件分析 `DOSCAR` 文件来绘制出态密度.

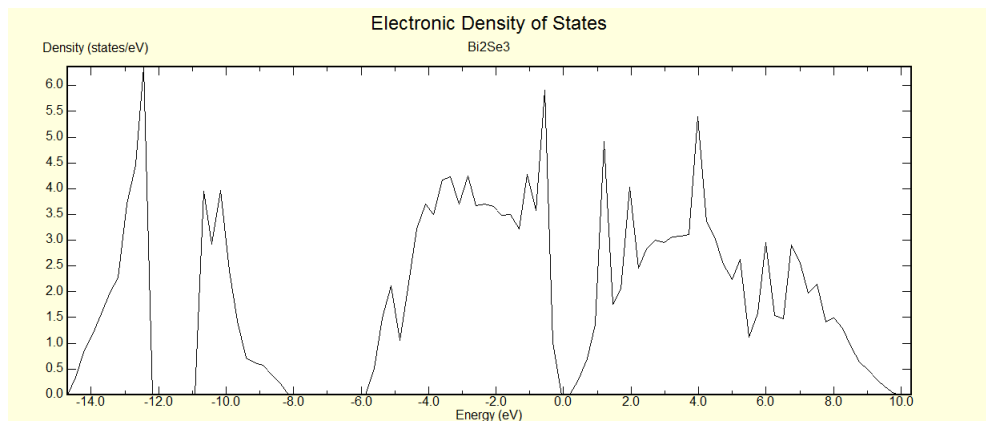


Figure 6: Bi2Se3态密度图. 图中有一段很小的带隙.

2.6.4 非静态自洽能带计算

接下来进行 Bi2Se3 能带的计算, 将静态自洽的 `INCAR`、`POSCAR`、`POTCAR`、`KPOINTS`、`CHGCAR` 文件复制到新的计算能带的目录. 修改 `INCAR` 文件:

```

SYSTEM=Bi2Se3
ISTART =1
ICHARG =11
PREC =Accurate
ENCUT =450
EDIFF =0.1E-07
ISMear =0
LSORBIT=.TRUE.
MAGMOM =0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
LORBIT = 11

```

修改KPOINTS文件, 设置为高对称点的形式.

```
k-points along high symmetry lines !注释行
50 !每对高对称点之间产生50个k点
Line-mode !以字母'L','l'开头表示按line模式产生k点
Reciproc !以字母'R'开头表示k点按倒空间, 以字母'c','k'开头表示笛卡尔坐标.
0.0 0.0 0.0 !G !各高对称点的位置
0.5 0.5 0.5 !Z
0.5 0.5 0.5 !Z
0.5 0.5 0.0 !F
0.5 0.5 0.0 !F
0.0 0.0 0.0 !G
0.0 0.0 0.0 !G
0.5 0.0 0.0 !L
```

其他文件不变, 提交脚本任务, VASP 输出vasprun.xml, 用 p4vasp 打开该文件, 即可查看 Bi2Se3 的能带.

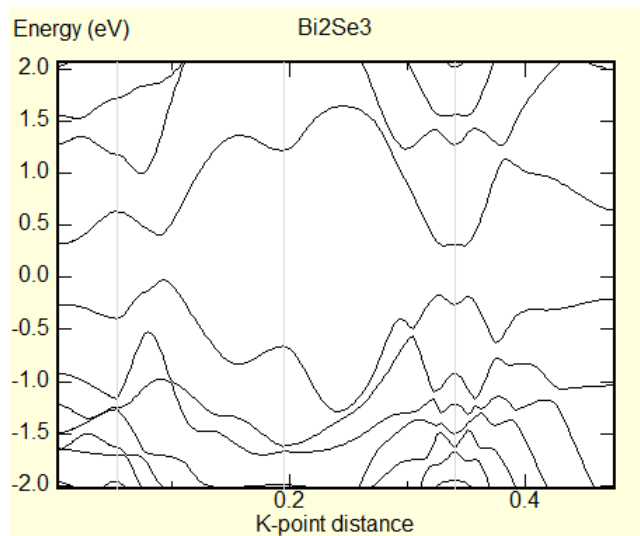


Figure 7: Bi2Se3能带图. 在G 点出现能带反转

通过 p4vasp 对能带进行 fatband 分析, 可知能带在费米面附近由哪些轨道成分组成. 具体操作为: 在 p4vasp 界面上, 选择 Electronic→ Local dos+ bands control, 然后选择所要分析的原子以及 s,p,d 轨道, 从下图中, 我们发现 Bi2Se3 费米面附近的轨道是 Bi原子和 Se 原子的 px, py, pz 轨道. 值得注意的是, 打开 SOC 后, 能带数据都在 p4vasp 的 spin up 选项.

2.7 结构优化分析

2.7.1 ENCUT

平面波的切断动能, 默认值为 POTCAR 文件中的最大的 ENMAX. 如果没做测试, ENCUT 一般取ENMAX 的1.3 倍. 采用默认值还是手动的输入, 推荐的做法是手动输入, 在任何性质的计算之前, 进行 ENCUT 收敛情况的计算, 由

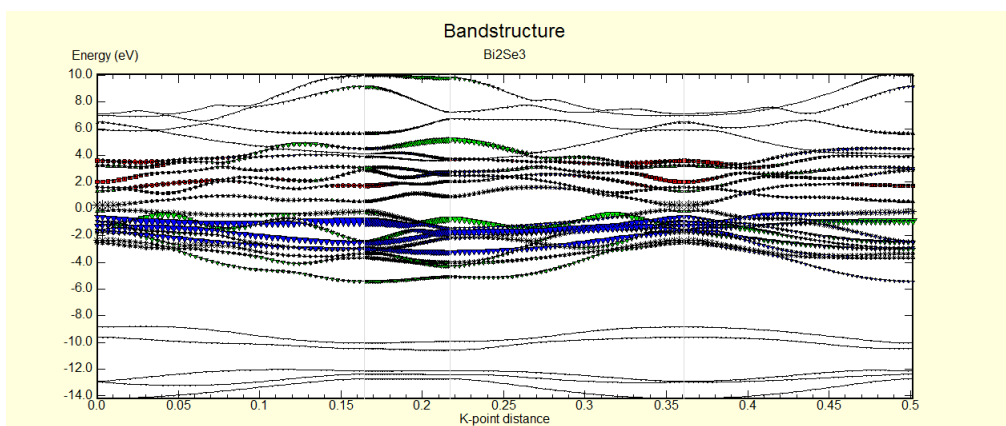


Figure 8: Bi2Se3能带图. 费米面附近是 px,py,pz 轨道组成.

此来确定一个合适的切断动能值, 然后手动设置. 接下来, 我们做个简单测试: POTCAR 文件采用 GGA 型, POSCAR, KPOINTS 文件同前面结构优化部分, 用来进行计算的脚本文件为:

```
#!/bin/sh

for i in 200 250 300 350 400 450 500 550 600
do
mkdir ENCUT$i
cp POSCAR POTCAR jobs KPOINTS ENCUT$i/
cd ENCUT$i
cat > INCAR <<!
SYSTEM=Bi2Se3
ISTART =0
ICHARG =2
PREC =Accurate
ENCUT =$i
EDIFF =0.1E-07
ISMear =-5
!
echo "ENCUT = $i eV";
bsub < jobs
cd ..
done
```

运行该脚本文件 (脚本名为script), 命令: sh script 执行该脚本文件, 若该脚本文件有可执行权限, 命令: ./script也可执行该脚本文件. 待各个任务完成后, 运用另一个脚本文件 (script1)查看 OUTCAR 里面的总能, 将其保持在 comment 文件中, script1 脚本文件为:


```
#!/bin/sh
for i in 200 250 300 350 400 450 500 550 600
do
cd ENCUT$i
E='grep "TOTEN" OUTCAR | tail -1 | awk 'printf "%12.6f ", $5''
echo $i $E >> ../comment
cd ..
done
```

注意, script1 脚本中的 `E='grep ...'` 中的符号不是引号, 是键盘上 Tab 键上方的符号, 而且 `E=...` 等号后面不能留空格.

产生的 comment 文件为:

```
200 -19.242745  250 -19.260254  300 -19.262753  350 -19.262983
400 -19.263110  450 -19.263244  500 -19.263399  550 -19.263495  600 -19.263554
```

总能变化在 0.001eV 左右就可以, 故可以取 `ENCUT=400eV`. 对于设置合适的晶格常数, 也可采用上述的脚本测试模式, 以实验值为对照, 设置晶格常数该值附近的数, 来得出不同结构的总能, 总能最小, 其结果越稳定.

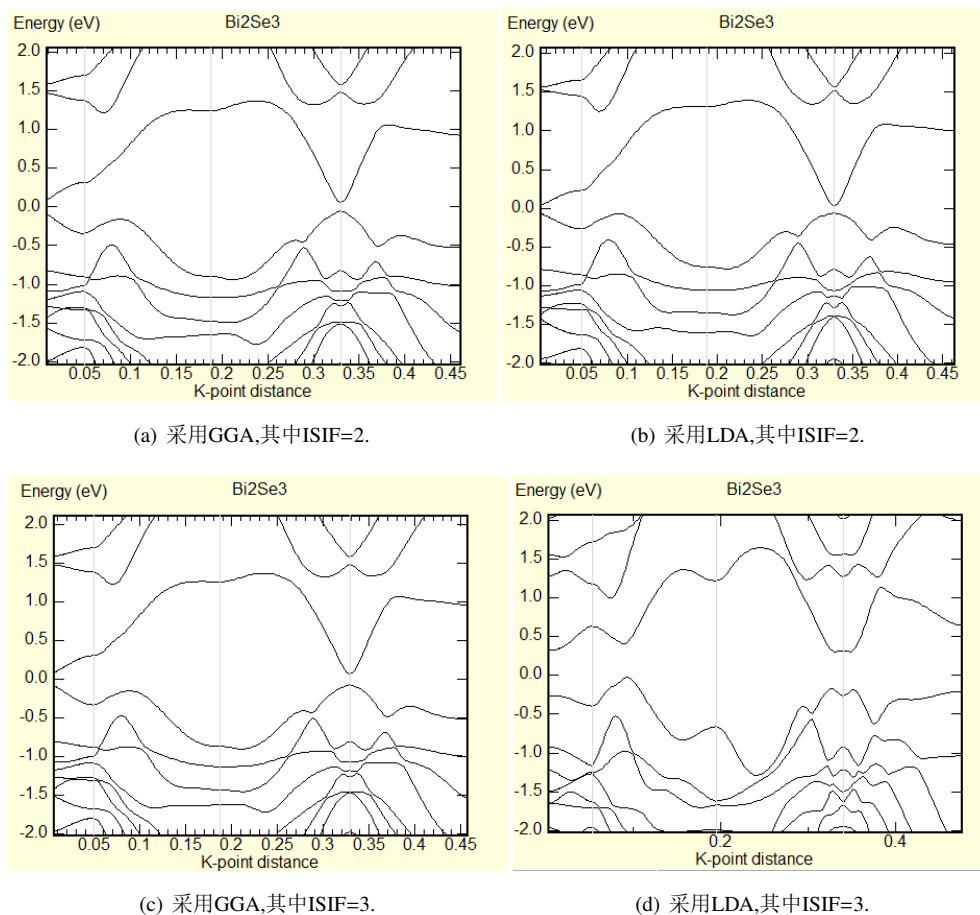


Figure 9: 采用不同的赝势和ISIF值进行结构优化后所得的Bi2Se3能带测试图. 只在图(d)中出现能带反转.

2.7.2 结构弛豫分析结果

ENCUT 参数选取后, 我们分别采用 LDA 和 GGA 赝势文件进行结构弛豫, 并且设置不同的 ISIF 值(ISIF = 2 不改变原胞的形状和体积, ISIF = 3 是改变原胞的形状和体积). 分别在 INCAR 中设置相应的参数, 然后选取合适的赝势文件来进行结构优化, 依次进行静态自洽和能带计算, 最终能带结果如图9:

分析能带图发现, 只在图(d)中出现了能带反转, 说明在图(a)/(b)/(c) 所构造的结构不理想, 这是可能由于第一步的结构优化导致的, 可以看出, 采用不同的赝势对其结果影响还是很大的,

因此接下来, 我们来分析结构优化部分, 先查看结构优化产生的CONTCAR 文件, 采用 GGA(ISIF=2), GGA(ISIF=3), LDA(ISIF=2) 这三种结构优化后所得的 CONTCAR 大致一样, 而采用 LDA(ISIF=3) 结构优化产生的 CONTCAR 文件有较大变化. (是不是 LDA 型赝势可能会把晶格常数变小, GGA 型赝势会把晶格常数变大???)

```
bi2 se3
1.0000000000000000
10.4982612100679553 0.0108022856745205 0.0064118104130032
9.6541314363379929 4.1244819475400307 0.0064118104131335
9.6541314363380160 1.9810341240961511 3.6175815465870862
Bi Se
2 3
Direct
0.6030880212156111 0.6030880582156107 0.6030880972156104
0.3969118957843926 0.3969119707843952 0.3969119207843911
0.0000000000000000 -0.0000000000000000 0.0000000000000000
0.2183315813972583 0.2183316243972582 0.2183315933972521
0.7816682676027471 0.7816684286027428 0.7816683756027419

0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
```

(a) 采用GGA(ISIF=2)结构优化后的CONTCAR

```
bi2 se3
1.0000000000000000
9.5412324291053032 -0.1434435640655068 -0.0851424379492899
8.7136970265608404 3.8893671018226494 -0.0851424379505564
8.7136970265605367 1.7880563643102072 3.4550369210264513
Bi Se
2 3
Direct
0.5982583440045366 0.5982583810045407 0.5982584200045407
0.4017415729954673 0.4017416479954651 0.4017415979954608
-0.0000000000000000 -0.0000000000000000 0.0000000000000000
0.2078826805086393 0.2078827235086371 0.2078826925086308
0.7921171684913658 0.7921173294913638 0.7921172764913631

0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
```

(b) 采用LDA(ISIF=3)结构优化后的CONTCAR

Figure 10: 两种结构优化得出的CONTCAR.

我们查看 OUTCAR 文件中的总能, 命令为: `grep "TOTEN" OUTCAR | tail -1`. 详细信息见下表, 从表中看出, 第四种情况的总能最低, 此时的结构相对上面三种更稳定.

| | 弛豫步数 | 总能 | dE | E-fermi |
|------------|------|----------------|--------------|----------|
| GGA(ISIF2) | 7 | -21.10889049eV | -.430843E-03 | 3.3370eV |
| GGA(ISIF3) | 7 | -21.10951893eV | -.777915E-06 | 3.2398eV |
| LDA(ISIF2) | 12 | -24.19229146eV | -.141887E-05 | 3.1353eV |
| LDA(ISIF3) | 24 | -24.38485441eV | -.248665E-07 | 4.6458eV |

2.8 其他问题

2.8.1 宇称分析

宇称通过波函数的系数来分析, 在 VASP 产生的 WAVECAR 文件(二进制文件, 直接打开为乱码) 有大量的波函数系数. 需要借助脚本文件分析该文件, 例如我们利用该脚本: <https://github.com/yangzhl/Transwave?from=singmessage>, 里面有一个 Fortran 文件 Transwave.f90 和一个 python 文件 parity.py, 将其上传到要分析的目录上.

加载 Fortran 编译器: `module load ips/2017u6`. 有两种编译方式:

```
-gfortran
gfortran Transwave.f90 -o Transwave
-ifort
ifort Transwave.f90 -assume byterecl -o Transwave
```

然后运行 Transwave 文件: `./Transwave -k kpoint -b band`, 其中, kpoint 是哪一个 k 点, band 是指几条能带.

也可以借助 parity.py 文件, 只需输入分析的 k 点以及能带数, 程序会自动输出高对称点的宇称.

相关参考: https://www.researchgate.net/post/How_can_one_calculate_parity_of_electronic_bands_from_first_principles_method_VASP_wien2k#opennewwindow.

最近, 中科院物理所王志俊研究员发布的 vasp2trace 小程序能够更方便地来分析宇称. 具体网址为: <https://www.cryst.ehu.es/cgi-bin/cryst/programs/topological.pl>. 该程序产生的 trace.txt 有着每个对称操作的本征值, 包括宇称操作(第二个对称操作), 再根据 Fu-Kane 理论分析出该体系的拓扑性质.

2.8.2 表面计算

在本节中我们将以 MnBi_2Te_4 体系(111面)为例, 在垂直于该面的方向上加个真空厚度, 大概 15 \AA 左右, 构造 6 种不同类型的 slab 模型来计算体系的表面态. (加真空目的是禁止体系与外界的 Hopping 来模拟表面.)

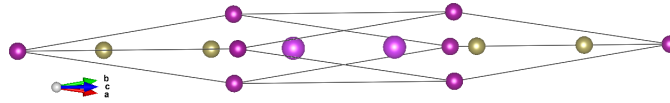
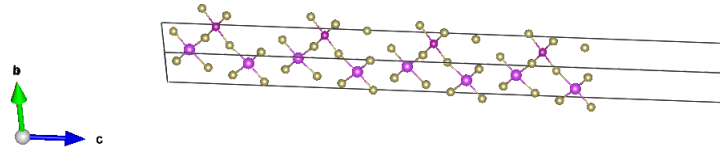
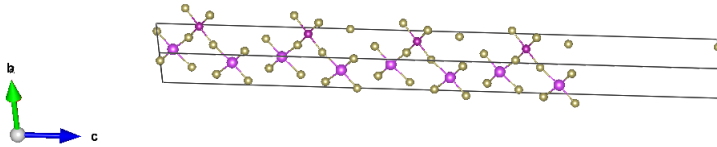


Figure 11: MnBi_2Te_4 原胞结构

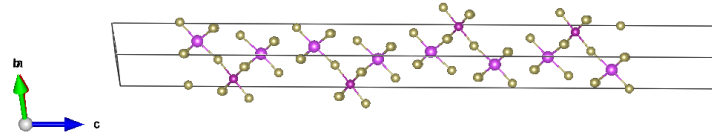
1, 斜基矢, 底部有一部分真空, 真空主要在一端.



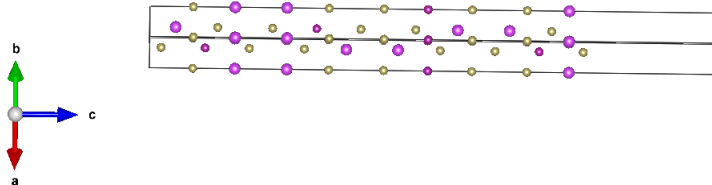
2, 斜基矢, 底部为原子占据, 真空在一端.



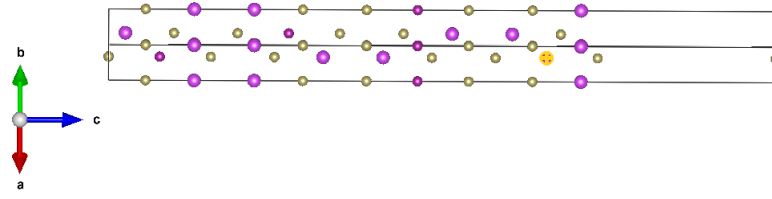
3, 斜基矢, 两端为均匀的真空.



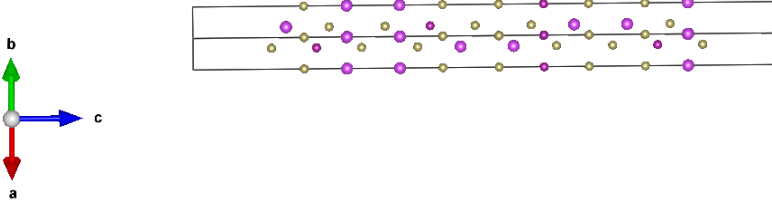
4, 正交基矢, 底部有一部分真空, 真空主要在一端.



5, 正交基矢, 底部为原子占据, 真空在一端.



6, 正交基矢, 两端为均匀的真空.



计算的能带如下图所示, 可以说基本没什么区别. 但是在 Γ 点附近放大, 就会发现它们之间还是有微小的差别, 比如第 3,6 种slab模型计算的能带比较理想, 能带简并比较吻合, 可以看出, 计算某表面态时最好在结构两端设置相同的真空层比较理想.

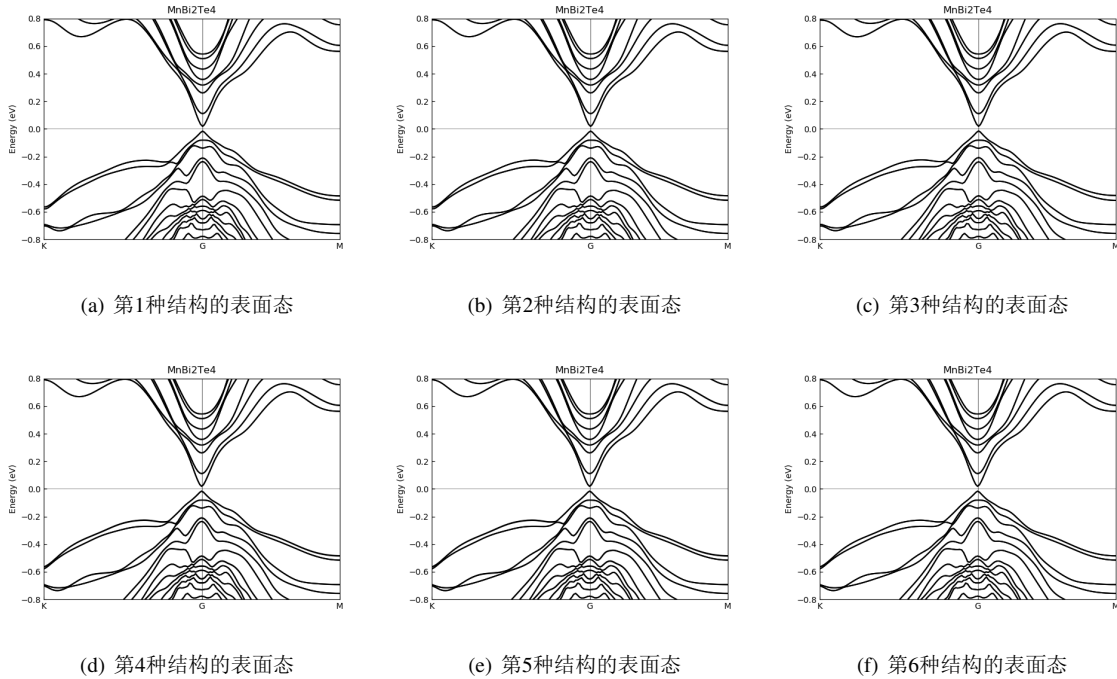


Figure 12: MnBi2Te4的表面态.

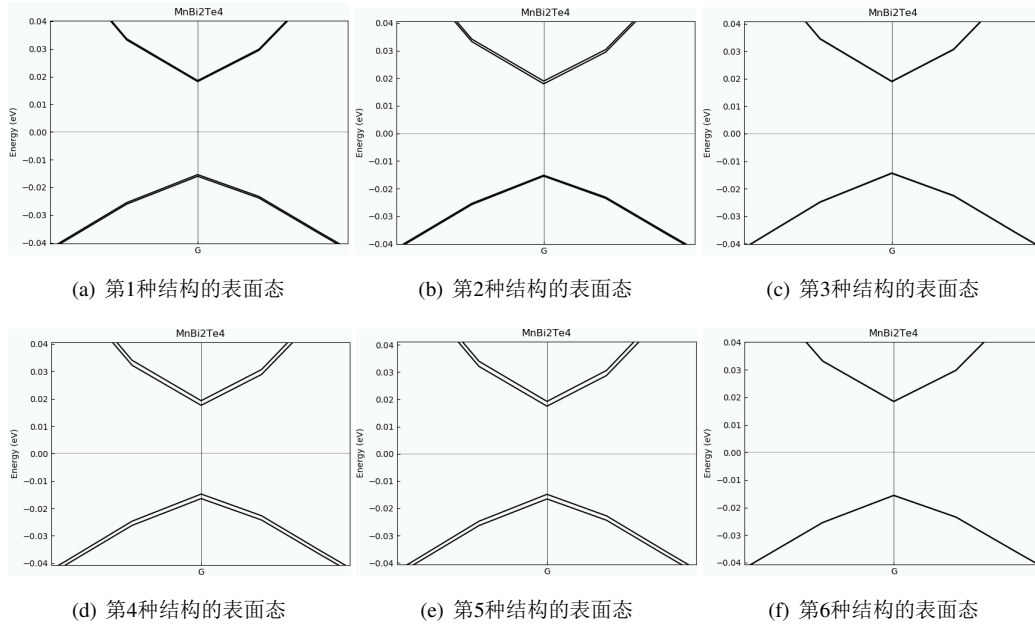
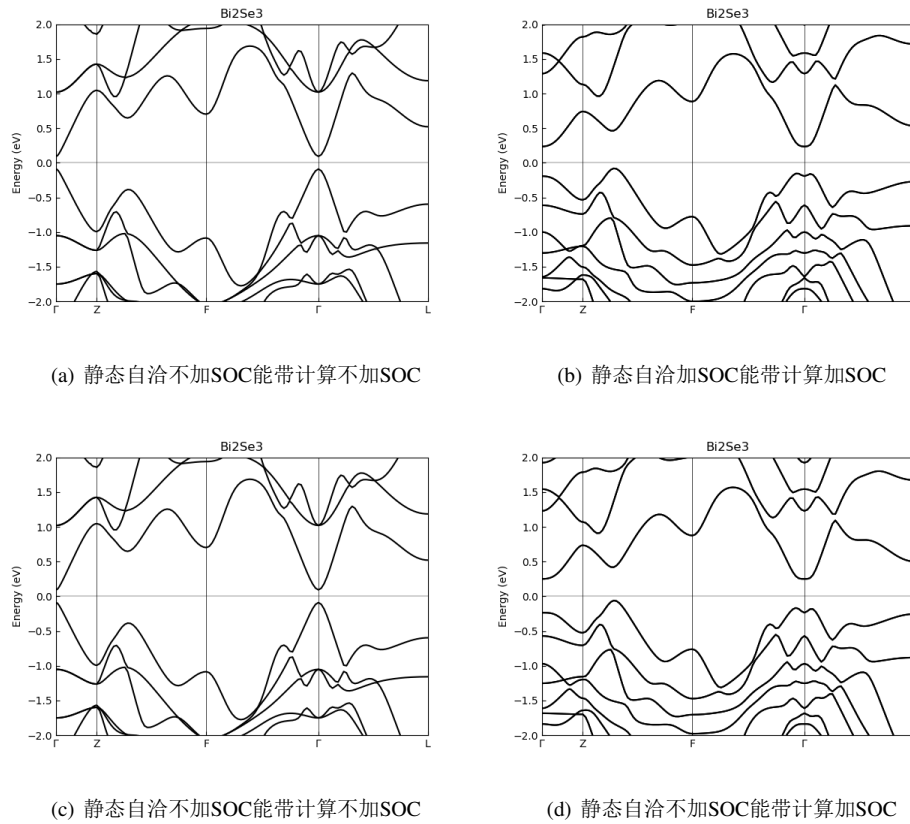


Figure 13: Γ 点附近的能带.

2.8.3 自洽是否加SOC测试

在本节中, 我们以 Bi_2Se_3 为例计算自洽是否加自旋轨道耦合(SOC)的影响, 以下是两组对比组. 计算结果表明静态自洽是否加SOC对能带影响不大.



3 WANNIER90

3.1 编译

WANNIER90 下载地址: <http://www.wannier.org/download>, 建议下载 wannier90-1.2 版本, 网上有许多这版本的介绍, 如果出现问题可参考前人的经验. 将文件拷贝到自己的目录上, 进入 wannier90-1.2 目录, 阅读 README.install 文件, 输入命令:

```
>> cp config/make.sys.ifort make.sys
```

修改 make.sys 文件: 去掉-Vaxlib.(该命令ifort不支持)

```
LIBDIR = /fs00/software/intel/ps2015u3/composer_xe_2015.3.187/mkl/lib/intel64
```

```
LIBS = -L$(LIBDIR) -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -lpthread
```

加载 Fortran 模块 (module load ips/2017u6), 最终输入命令: make all, wannier90-1.2 就编译成功了.

因为需要 VASP 产生 wannier 函数, 所以要在 VASP 程序里面接入 wannier90. 从集群中将 VASP 拷贝到自己的目录, 阅读 README 文件, 按文件指示重新编译 VASP, 其中需要修改 makefile.include 文件:

```
CPP_OPTIONS= -DHOST= "LinuxIFC "
```

```
...
```

```
-Duse_shmem
```

```
-DVASP2WANNIER90
```

```
-----snip-----
```

```
LLIBS = /fs12/home/zhj_zhangh/software/wannier90-1.2/libwannier.a $(SCALAPACK)
```

```
$(LAPACK) $(BLAS)
```

其中/fs12/home/zhj_zhangh/software/wannier90-1.2/libwannier.a 是我自己的 WANNIER90 的路径. 然后输入 make all, VASP 就编译成功了. 另外, 如果用脚本提交任务, 脚本文件的执行程序要改成:

```
mpiexec.hydra /fs12/home/zhj_zhangh/software/vasp.5.4.4/bin/vasp_std
```

其中/fs12/home/zhj_zhangh/software/vasp.5.4.4/bin/vasp_std 是我的 VASP 绝对路径.

3.2 构造Wannier 函数

为了得到 Wannier, 在完成 VASP 静态自洽后, 我们要在 INCAR 文件中加入 LWANNIER90=TRUE, LCHARG = 11, 再进行自洽计算, 并且自行添加一个文件 wannier90.win.

```
num_wann = 30

begin projections

Bi:  px;py;pz

Se:  px;py;pz

end projections
```

本次自洽运算会生成额外的 wannier90.eig, wannier90.mmn, wannier90.amn, wannier90.wout 四个文件, 把这 wannier90.eig, wannier90.mmn, wannier90.amn 文件和 wannier90.win 文件拷贝到新的目录下, 运行 wannier90. 注意这次运行需要在 wannier90.win文件加入:

```
dis_num_iter=1000
```

```
num_iter=400
```

```
iprint=2
```

```

!min of outer window

dis_win_min = -2.0

dis_win_max = 18.0

!inner -

dis_froz_min = -2.0000

dis_froz_max = 5.5000

hr_plot = .true.

write_xyz = .true.

bands_plot = .true.

```

构造好 Wannier 函数以后, 仔细检查一下 wannier90.wout, 搜索 "Final State", 在这里可以看到每条 Wannier 轨道的展宽, 由此可以检查你构造的 Wannier 函数是否足够局域. 如果有某个 Wannier 函数的展宽比晶格常数大许多, 就表明你的 Wannier 函数构造不是很理想, 需要不断调节投影轨道, 解纠缠窗口以及 Frozen 窗口等. 从这些轨道的中心和展宽也能看出轨道之间的简并性如何, 由此也可以判断所构造的 Wannier 函数对称性如何. 为了更明显地看出 Wannier 函数是否局域, 也可与第一性计算的能带进行对比.

具体请参考该网页: <http://blog.sciencenet.cn/blog-567091-802483.html>. 该页面有 WANNIER90 以及 VASP 安装编译的全套流程, 而且还介绍了如何结合使用 VASP 和 WANNIER90.

网上的不用 WANNIER90 接口直接绘费米面的 VASP 后处理脚本程序:

<http://blog.sciencenet.cn/home.php?mod=space&uid=1502061&do=blog&id=1093325>.

使用 MATLAB 将 BXSf 文件转换为可以用 VESTA 打开的 XSF 文件:

<http://blog.sciencenet.cn/blog-1502061-1026133.html>.

4 WannierTools

4.1 编译

WannierTools 主要用于计算拓扑不变量从而判断一个材料是否为新的拓扑材料, 同时还能够给出拓扑材料的一些特征性质, 如表面态等, 详见: <http://blog.sciencenet.cn/blog-2626210-1011066.html>.

下载地址: https://github.com/quanshengwu/wannier_tools. 仔细阅读其中的 install 文件安装编译该程序. 另外, 阅读 doc 文件夹下的 User Guide, 里面有详细的说明文档.

注意, 该程序中文件的注释行, 只能以 ! 开头, # 不行, 因为它用的是 Fortran 语言.

4.2 计算表面态等

该程序有两个输入文件: wt.in, wannier90_hr.dat. 在 wt.in 文件中设置相应的参数, 即可得到我们所需的结果. wt.in 文件很多内容都可以直接从 wannier90.win 和 wannier90.wout 中拷贝, wannier90_hr.dat 通过构造 Wannier 所得.

FORTTRAN namelist 每类参数都以 & 开头, 以 / 结尾. 对于某些特定的参数格式需要严格遵守, 例如 ATOM_POSITIONS, 原子数目决定其读取到第几行. 不论进行何种计算, 关于 wanniertools 的输入文件, &SYSTEM 这些参数需要首先设置好.

例如计算体能带, 以 WannierTools 程序中 examples 的 Bi2Se3 为例. wt.in 输入文件为:

```

&TB_FILE

Hrfile = 'wannier90_hr.dat'

Particle= 'electron'

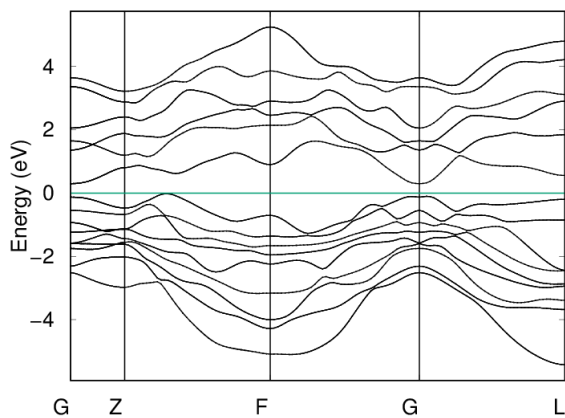
```

```

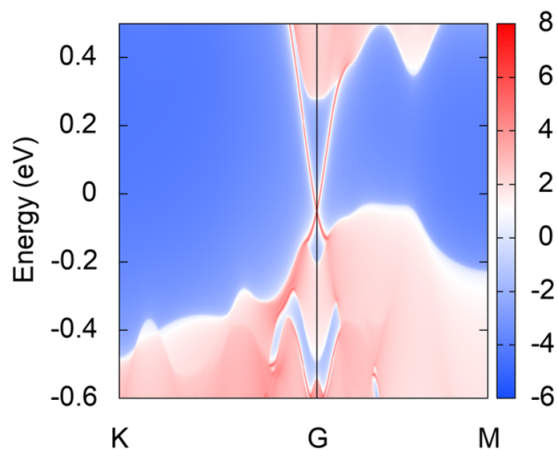
/
LATTICE
Angstrom
-2.069 -3.583614 0.000000 ! crystal lattice information
2.069 -3.583614 0.000000
0.000 2.389075 9.546667
ATOM.POSITIONS
5 ! number of atoms for projectors
Direct ! Direct or Cartesian coordinate
Bi 0.3990 0.3990 0.6970
Bi 0.6010 0.6010 0.3030
Se 0 0 0.5
Se 0.2060 0.2060 0.1180
Se 0.7940 0.7940 0.8820
PROJECTORS
3 3 3 3 3 ! number of projectors
Bi px py pz ! projectors
Bi px py pz
Se px py pz
Se px py pz
Se px py pz
&CONTROL
BulkBand_calc = T
/
&SYSTEM
SOC = 1 ! soc
E_FERMI = 4.4195 ! e-fermi
/
&PARAMETERS
Nk1 = 41 ! number k points odd number would be better
/
KPATH.BULK ! k point path
4 ! number of k line only for bulk band
G 0.00000 0.00000 0.0000 Z 0.00000 0.00000 0.5000
Z 0.00000 0.00000 0.5000 F 0.50000 0.50000 0.0000
F 0.50000 0.50000 0.0000 G 0.00000 0.00000 0.0000
G 0.00000 0.00000 0.0000 L 0.50000 0.0000 0.0000

```


运行完成后,可以在当前文件夹下看到 bulkek.gnu, bulkek.dat. 使用 gnuplot5.0 以上版本的软件,就可以得到 bulkek.eps.



(e) wannier.tools生成的能带



(f) wannier.tools生成的表面态

后续的求解过程可以参考网页: <http://blog.sciencenet.cn/blog-2626210-1035936.html>.
<http://zhuanlan.zhihu.com/p/25432728>, 这两个网页上都有详细的说明.