

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

## Manual

Hands-on based on WannierTools v2.7.2

Useful information about WannierTools:

Documentation: [www.wanniertools.com](http://www.wanniertools.com)

Forum: [www.wanniertools.org](http://www.wanniertools.org)

Open source: [https://github.com/quanshengwu/wannier\\_tools](https://github.com/quanshengwu/wannier_tools)

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

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

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

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

```
1 $ eog file.png
```

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

# 第二届 WannierTools 和 TopMat 研讨会

2025 年 7 月 24 日

文档编纂成员：

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



吴泉生



皮涵琦



闫旭



刘智豪



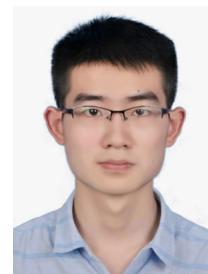
尹博



胡敬南



郑佳新



张衍



王禹志



沈远忱



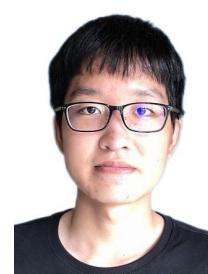
刘家轩



叶财渊



齐梓越



闫亿

## 目录

1 软件安装	7
1.1 LAPACK 和 BLAS 库安装	8
1.2 ARPACK 安装	8
1.3 WannierTools 安装	8
2 构造高质量的 Wannier 函数	11
2.1 选择投影算符	11
2.2 选择解纠缠能量窗 dis_win	13
2.3 选择冻结能量窗口 froz_win	13
2.4 结果	13
2.5 讨论	14
2.6 Bi <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> 构造 Wannier 函数具体操作	14
2.7 Cu 构造 Wannier 函数具体操作	15
2.8 自动化构造 Wannier 函数具体操作	17
2.8.1 input_parameters.py: 配置文件	18
2.8.2 生成 VASP 输入: vasp_input_hfe_cif.py	18
2.8.3 自动构建 wannier90.win: autoconstruction.py	19
2.8.4 compare_band.py: 对比能带	19
2.8.5 脚本运行步骤	20
2.8.6 示例目录大致结构	20
2.8.7 注意事项与拓展	20
2.8.8 例子: 自动化构造 Cu 的 Wannier 函数	21
3 Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) 模型	22
3.1 BHZ 模型介绍	22
3.2 Half-BHZ 模型研究	22
3.3 Full BHZ 模型研究	24
3.4 添加塞曼 (Zeeman) 效应	26
4 拓扑绝缘体	29
4.1 二维拓扑绝缘体 1T'-WSe <sub>2</sub>	29
4.2 三维拓扑绝缘体 Bi <sub>2</sub> Se <sub>3</sub>	33
5 Weyl 半金属	36
5.1 Weyl 半金属的一个简化模型	36
5.2 Weyl 半金属 TaAs	41
6 表面态计算	43
6.1 表面态的计算方法	43
6.2 Bi <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> 表面态计算	44
6.2.1 六方原胞	44

6.2.2 菱方原胞 . . . . .	46
6.3 石墨烯边界态计算 . . . . .	49
<b>7 反常霍尔效应</b>	<b>52</b>
7.1 三维外尔半金属反常霍尔电导计算 . . . . .	52
7.2 Fe 反常霍尔电导计算 . . . . .	53
7.3 Co <sub>2</sub> MnGa 反常霍尔电导计算 . . . . .	55
7.4 Haldane 模型反常霍尔电导计算 . . . . .	57
<b>8 反常能斯特效应</b>	<b>60</b>
8.1 Co <sub>2</sub> MnGa 反常能斯特系数计算 . . . . .	60
<b>9 自旋霍尔电导率</b>	<b>63</b>
9.1 基本思想 . . . . .	63
9.2 Pt 自旋霍尔电导率计算 . . . . .	63
9.3 Co <sub>3</sub> Sn <sub>2</sub> S <sub>2</sub> 自旋霍尔电导率计算 . . . . .	65
<b>10 轨道霍尔电导率</b>	<b>68</b>
10.1 基本思想 . . . . .	68
10.2 WS <sub>2</sub> 和 CrS <sub>2</sub> 的轨道霍尔电导计算 . . . . .	69
<b>11 由洛伦兹力引起的磁阻和普通霍尔效应</b>	<b>73</b>
11.1 固定磁场方向下的 $\rho_{xx}\tau$ , $\rho_{yy}\tau$ , $\rho_{zz}\tau$ 和 $\rho_{xy}\tau$ . . . . .	74
11.2 不同磁场方向下的 $\rho_{xx}\tau$ . . . . .	75
11.3 固定截面的等能线图 . . . . .	76
11.4 磁场下倒空间以及实空间的电子运动轨迹 . . . . .	78
11.5 磁电阻的各向异性 . . . . .	79
11.6 精度控制说明 . . . . .	83
11.7 CrSb 例子 . . . . .	84
11.7.1 交错磁构型下的 CrSb . . . . .	84
11.7.2 非磁结构下的 CrSb . . . . .	89
11.8 Co <sub>3</sub> Sn <sub>2</sub> S <sub>2</sub> 中的负磁阻 . . . . .	93
<b>12 朗道能级计算</b>	<b>99</b>
12.1 磁超胞的边界态 . . . . .	100
12.2 计算 HB 图像 . . . . .	102
12.2.1 精确对角化 . . . . .	102
12.2.2 Lanczos 方法 . . . . .	104
12.3 不同 K 点的 HB 图像 . . . . .	105
<b>13 转角石墨烯</b>	<b>109</b>
13.1 如何使用“tgbgen”生成扭曲石墨烯系统的晶体结构和紧束缚模型? . . . . .	109
13.2 Wilson 环、紧束缚模型的能带展开 . . . . .	111

---

13.3 Wilson 环 (瓦尼尔中心荷) . . . . .	111
13.4 能带展开 . . . . .	112
<b>14 能带展开与矩阵元效应</b>	<b>114</b>
14.1 基本思想 . . . . .	114
14.2 Graphene 的矩阵元效应 . . . . .	114
14.3 TBG 体系的能带展开与矩阵元效应 . . . . .	118
<b>15 Haldane 模型</b>	<b>121</b>
15.1 一般绝缘体 . . . . .	121
15.2 Chern 绝缘体 . . . . .	126
15.3 Gapless 半金属 . . . . .	128
<b>16 拓扑超导体</b>	<b>130</b>
16.1 3D TI 模型实现 2D 拓扑超导 . . . . .	133
16.2 Bi <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> 实现 2D 拓扑超导 . . . . .	142
16.3 SnTe 实现 2D 拓扑超导 . . . . .	145
<b>17 体光伏效应</b>	<b>150</b>
17.1 体光伏响应理论 . . . . .	150
17.2 体光伏效应计算: 以 WS <sub>2</sub> 为例 . . . . .	152
17.3 利用体光伏响应探测拓扑相变: 以 ReC <sub>2</sub> H 为例 . . . . .	154

## 1 软件安装

我们推荐通过 pip 安装 wannier-tools, 安装说明可见 <https://test.pypi.org/project/wannier-tools/>:

```
1 $ pip install -i https://test.pypi.org/simple/ wannier-tools
```

本教程中的所有示例文件可以从 <https://github.com/quanshengwu/WannierToolsTutorials> 网站下载

### 依赖环境

- 操作系统:
  - Linux: CentOS 7 及以上版本 (仅支持串行计算)
  - macOS: 版本 14.6 (Sonoma) 及以上, 仅支持 Apple Silicon (ARM) 芯片 (支持串行和并行计算)
  - Windows: 功能仍在开发中 (暂不支持运行)
- Python: 支持版本为 3.9 至 3.12
- NumPy: 版本要求为  $\geq 2.0$
- MPI: 无需额外安装

### 使用

```
1 串行运行 (适用于所有平台)
2 默认输入文件为当前目录下的 wt.in
3 如需指定其他输入文件, 可使用参数 -i 指定文件
4 $ wt-py -i wt.in
5
6 并行运行 (仅限 macOS)
7 <N> 是并行进程数, 例如 4
8 $ wt-py -n <N> -i wt.in
```

如果上面安装顺利进行且能够正常使用, 则不需要进行下面的手动安装步骤, 若无法通过上面的方法使用 pip 安装, 可参考以下步骤手动编译并安装。

在安装之前, 请先确保系统满足如下条件:

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

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

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

将会显示

```

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

```

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

## 1.1 LAPACK 和 BLAS 库安装

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

```

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

```

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

## 1.2 ARPACK 安装

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

```

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

```

如果使用 ifort，第二条命令改为

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

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

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

## 1.3 WannierTools 安装

1. 首先下载最新版本的 WannierTools，有两种方式下载：
  - 1). 通过这个网址下载具有版本号的版本

[https://github.com/quanshengwu/wannier\\_tools/releases](https://github.com/quanshengwu/wannier_tools/releases)

2). 通过 git 命令下载最新的正在开发的版本

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

2. 接下来，进入 wannier\_tools/src 目录，并选择编辑 Makefile。目前，我们提供了四个典型的 Makefile，分别是 gfortran、mpi+gfortran、ifort 和 mpi+ifort。您需要将 ARPACK 库以及 IntelMKL 库或者 BLAS、LAPACK 库的路径设置为您系统中的路径。
3. 对于使用 mpi 编译器的情况，您需要打开编译标志 -DMPI，对于使用 ARPACK 的情况，您需要打开编译标志 -DARPACK。
4. 执行 make (或 make -j8) 进行编译
5. 编译完成后，二进制文件 wt.x 将会被复制到 wanniertools/bin/ 目录下。您可以将此路径添加到系统环境变量 PATH 中，方法是将以下行添加到您的主目录下的 .bashrc 文件中的最后添加一行：

```
1 export PATH=/path/to/your/wanniertools/bin:$PATH
```

#### 例 I: mpi+ifort+arpack 编译

```
1 OBJ = ...
2
3 #=====
4 # compiler For Linux with ifort
5 #=====
6 F90 = mpiifort -fpp -DMPI -DARPACK
7 WFLAG = -nogen-interface
8 OFLAG = -O3
9 FFLAG = $(OFLAG) $(WFLAG)
10 LFLAG = $(OFLAG)
11
12 #=====
13 # ARPACK library (optional)
14 #=====
15
16 # dynamic linking
17 ARPACK_NG_ROOT = /path/to/your/arpack-ng
18 ARPACK = -L${ARPACK_NG_ROOT}/lib -larpack
19 LIBS = ${ARPACK} -L${MKLROOT}/lib/intel64 -lmkl_core -lmkl_sequential -
20     lmkl_intel_lp64 -lpthread
21
22 # static linking
23 # ARPACK = #/path/to/your/arpack/libarpack_ifort.a
24 ...
25 main : $(OBJ)
26 ...
```

#### 例 II: mpi+ifort 编译，没有调用 ARPACK 库

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

## 2 构造高质量的 Wannier 函数

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

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

达到四个标准需要三个重要步骤。

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

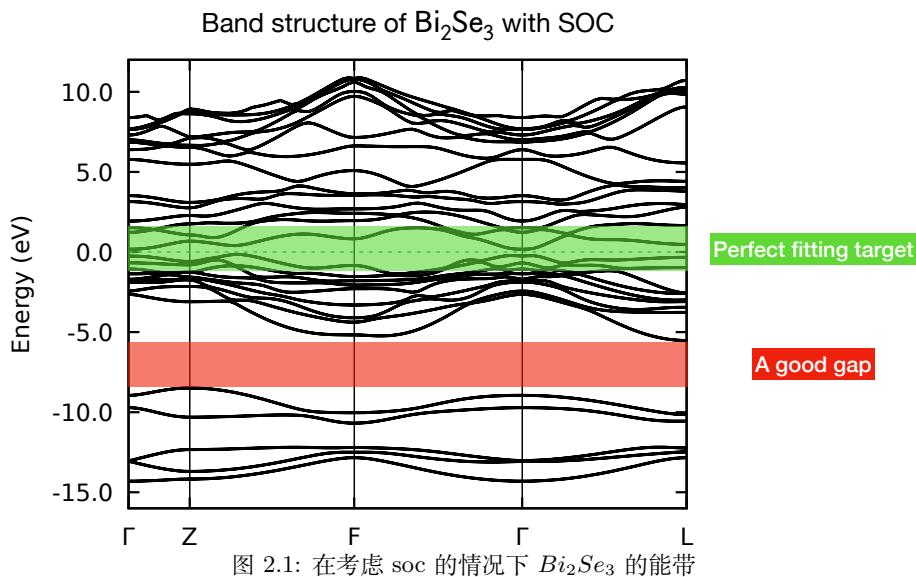
我们以  $Bi_2Se_3$  为例。在这里我们考虑了自选轨道耦合 (SOC) 效应。

### 参考文献

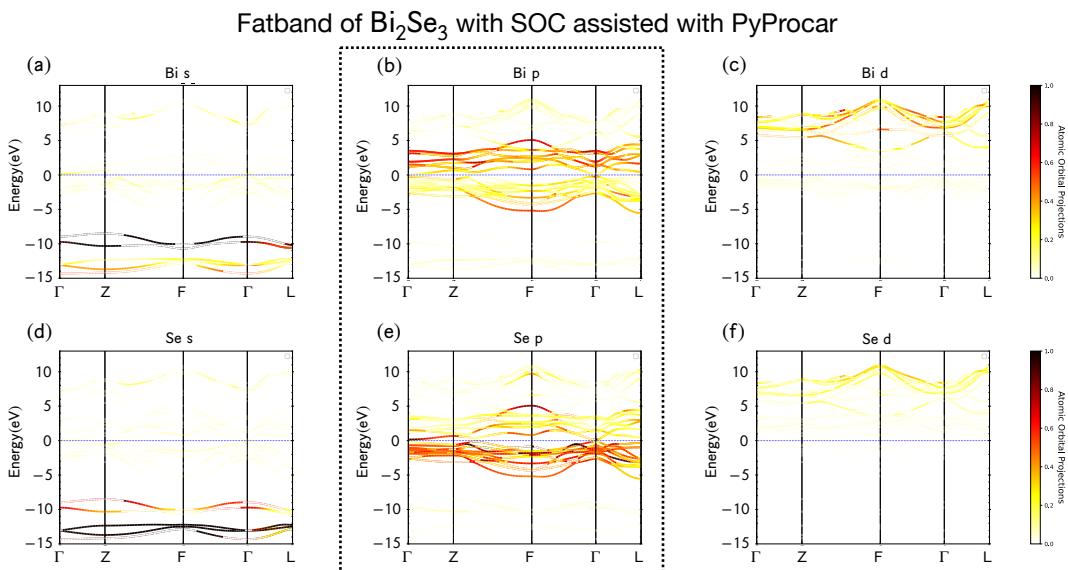
1. WannierTools: An open-source software package for novel topological materials, QS Wu, SN Zhang, HF Song, M Troyer, AA Soluyanov, Computer Physics Communications, 224: 405-416 (2018) [1]
2. Topological insulators in  $Bi_2Se_3$ ,  $Bi_2Te_3$  and  $Sb_2Te_3$  with a single Dirac cone on the surface,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

### 2.1 选择投影算符

我们先进行能带分析。图2.1是考虑 SOC 的  $Bi_2Se_3$  的能带结构。绿色阴影部分是我们关心的能量范围。我们想要构建一个紧束缚模型，它可以很好地重现该感兴趣的能带。然而，这些频段与下方和上方的其他频段相连。值得注意的是，-8.4 eV 和 -6 eV 之间存在很大差距。这是一个好兆头，因为该能隙下方的带没有与我们感兴趣的带杂交。在这种情况下，间隙下方的那些带不需要在我们的紧密结合模型中呈现。最终，WFs 的数量减少。它满足第四个标准。

图 2.1: 在考虑 soc 的情况下  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的能带

在初步了解能带结构后，我们仍然需要弄清楚感兴趣的能量范围内能带的特征是什么，并找出哪些能带与它们高度杂化。此步骤称为“胖带分析”，我们需要将原子轨道投影到布洛赫波函数上，这称为投影权重。我们将布洛赫波函数投影到 Bi 和 Se 的 s、p、d 原子轨道上。结果如图2.2所示。图2.2 (a) 和 (d) 显示 [-15, -8] eV 之间的能带主要由 Bi 和 Se 的 s 轨道决定。图2.2(c) 和 (f) 显示 Bi 和 Se 的 d 轨道位于 5 eV 以上。图 2.2(b) 和 (e) 显示能量范围 [-6, 5] eV 主要由 Bi 和 Se 的 p 轨道决定。我们感兴趣的能量范围（图 2.1 中绿色阴影所示）就在这个能量范围内。尽管 p 和 d 轨道之间在 4 eV 左右存在能带重叠，但我们仍然可以忽略 d 轨道的贡献，因为它们与 p 轨道的杂化程度不高，并且可以通过能带结构的一些变形而移开。

图 2.2:  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的胖带图。虚线框是我们的选择区域。Bi 的 p 轨道和 Se 的 p 轨道被用作投影算符。该图使用开源软件包 PyProcar 绘制。

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

## 2.2 选择解纠缠能量窗 dis\_win

解纠缠窗口是提取目标谱带的窗口。有两个规则可以设置此窗口。1) 不仅目标频段应包含在该窗口中，而且投影轨道的主要权重也应落入该窗口中。2) 该窗口应尽可能小，以减少计算成本。图 2.3 给出了标记为彩色阴影的窗口的三种选择。图 2.3(a) 是正确的选择。图 2.3(b) 是一个非常糟糕的选择，因为缺少一个带（用虚线圆圈标记），其权重来自投影算符（见图 2.2b 和 e）。如果缺少这个权重，那么 WFs 的分布可能会变大。图 2.3(c) 显示了一个不好的选择，因为它包含不包含投影仪特征的不必要的带。

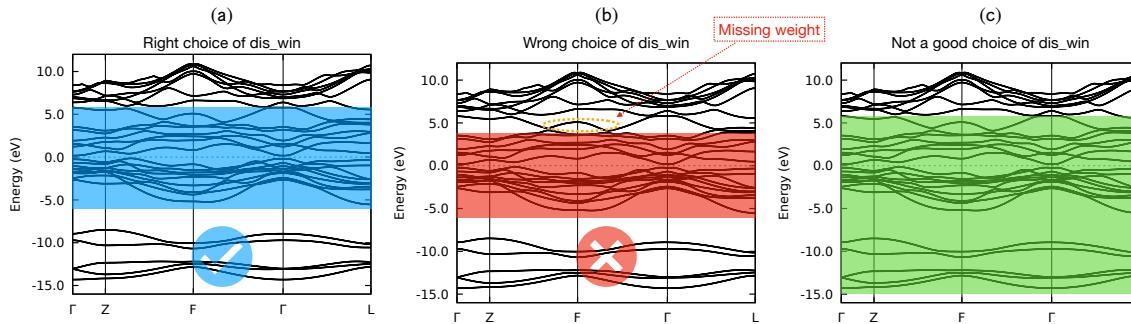


图 2.3:  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的解缠窗口 dis\_win 的选择。(a) 是正确的选择。(b) 是错误的选择，因为缺少一个属于 Bi 和 Se 的 p 轨道的权重。(c) 也不是一个好的选择，因为在不必要的能量窗口  $[-16, -8]$  eV 内几乎没有来自投影算符的权重

## 2.3 选择冻结能量窗口 froz\_win

冻结窗口是用于解纠缠过程的窗口。布洛赫状态不会与此窗口之外的其他带一起旋转。选择 froz\_win 有三个规则。1) 在 froz\_win 中，除了投影轨道之外，不应该有来自其他轨道的权重（贡献）。2) 纯粹来自投影轨道的能量范围应包含在 froz\_win 中。3) froz\_win 应尽可能大。图 2.4 显示了三个选择。(a) 是一个不错的选择，因为它满足三个规则。(b) 是一个错误的选择，因为它违反了第一条规则。(c) 是正确的选择，但不是完美的选择，因为它不遵循规则 2 和 3。

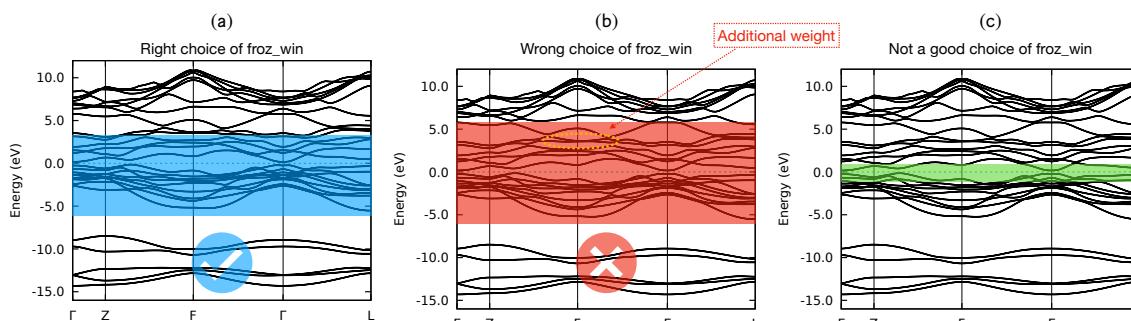


图 2.4:  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的冻结窗口 froz\_win 的选择。(a) 是一个好的选择。(b) 是错误的选择，因为它包含来自 Bi 的 d 轨道的能带，而这些轨道不是投影算符。(c) 不是最佳选择，因为它应该包含更多纯粹来自投影算符的能带。

## 2.4 结果

经过上述过程后，您将可能性很高得获得非常好的 WFs。图 2.5 显示了冻结窗口在 3 个选择下 DFT（黑线）和 Wannier 插值（红点）之间的能带结构比较。在 (a) 图中，它显示出在费米面附近几乎完美的一致性，(b) 图我们发现 Wannier 包含了来自 Bi 的 d 轨道的能带，这与我们在 Wannier90.win 文件中设置的投影轨道不相符。(c) 图在不是最佳选择点情况下，我们发现 DFT 和 Wannier 重合得不是特别好。

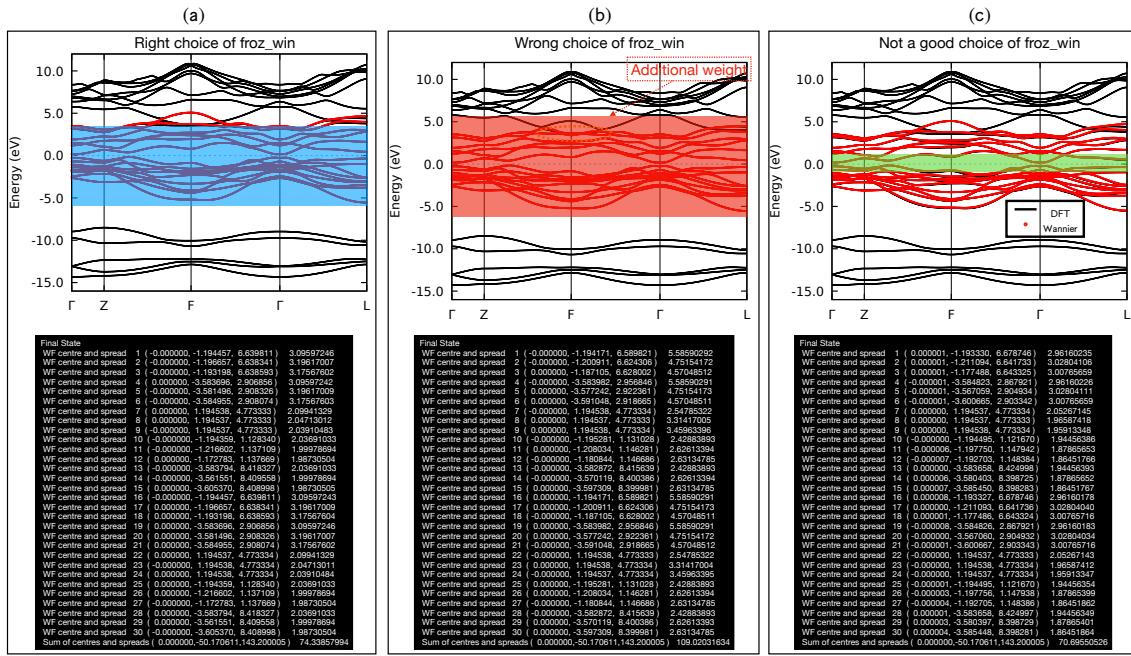


图 2.5: DFT (黑线) 与 Wannier 插值 (红点) 的能带结构对比和对应的 wannier90.wout 中所对应的 spread 的值。(a) 在一个好的 froz\_win 选择下，我们可以看到 DFT 与 Wannier 在费米面附近能够基本重合。(b) 在错误的选择下，我们发现 Wannier 包含了来自 Bi 的 d 轨道的能带。(c) 在不是最佳选择点情况下，我们发现 DFT 和 Wannier 重合得不是特别好。每个图对应 spread 值代表了这个图 Wannier 函数构造的局域性，可以作为构造 Wannier 函数是否高质量的参考之一，一般来说，值越小，构造的 Wannier 函数越好（但是有时候当你选择的窗口过小的时候，spread 值也会变小，所以这个值只能作为参考之一）。

## 2.5 讨论

最后，我们想分享一些其他的技巧。

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

特别提示 VASP 用户：

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

## 2.6 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 构造 Wannier 函数具体操作

下面是 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 构造 Wannier 函数在 Wanniertools 中的一些具体操作。

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

### ► 进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/w90_Bi2Se3
```

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

### ► VASP-scf 计算

```
1 $ cd scf
2 $ cp WannierToolsTutorials/sub-vasp_ncl.sh .
3 $ sbatch sub-vasp_ncl.sh
```

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

### ► VASP-band 计算

```
1 $ cd ../band
2 $ cp ../scf/CHGCAR ../scf/WAVECAR .
3 $ cp WannierToolsTutorials/sub-vasp_ncl.sh .
4 $ sbatch sub-vasp_ncl.sh
5 $ python fatband.py
6 $ gnuplot bulkek.gnu0
```

在 vaspwannier 文件夹中，分别有 right\_choice\_froz\_win、wrong\_choice\_froz\_win 以及 not\_a\_good\_choice\_froz\_win 这三个文件夹，每一个文件夹里含有 VASP 的输入文件 INCAR、KPOINTS、POSCAR、POTCAR 和 wannier90.win。我们将 scf 文件夹的 CHGCAR 和 WAVECAR 拷贝进来加快运算，然后在当前目录运行 vasp，这里我们以 right\_choice\_froz\_win 这个文件夹为例：

### ► VASP-Wannier 计算

```
1 $ cd ../../vaspwannier/right_choice_froz_win
2 $ cp ../../scf/CHGCAR ../../scf/WAVECAR .
3 $ cp WannierToolsTutorials/sub-vasp_ncl.sh .
4 $ sbatch sub-vasp_ncl.sh
```

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

### ► Wannier90 计算

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-w90.sh .
2 $ sbatch sub-w90.sh
3 $ gnuplot bulkek-compare-DFT-wannier.gnu0
```

## 2.7 Cu 构造 Wannier 函数具体操作

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

## ► 进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/w90_Cu
```

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

## ► VASP-scf 计算

```
1 $ cd scf
2 $ cp WannierToolsTutorials/sub-vasp_std.sh .
3 $ sbatch sub-vasp_std.sh
```

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

## ► VASP-band 计算

```
1 $ cd ../band
2 $ cp ../scf/CHGCAR ../scf/WAVECAR .
3 $ cp WannierToolsTutorials/sub-vasp_std.sh .
4 $ sbatch sub-vasp_std.sh
5 $ python fatband.py
6 $ gnuplot bulkek.gnu0
```

在这里我们可以得到 Cu 的能带图和 fatband 图:

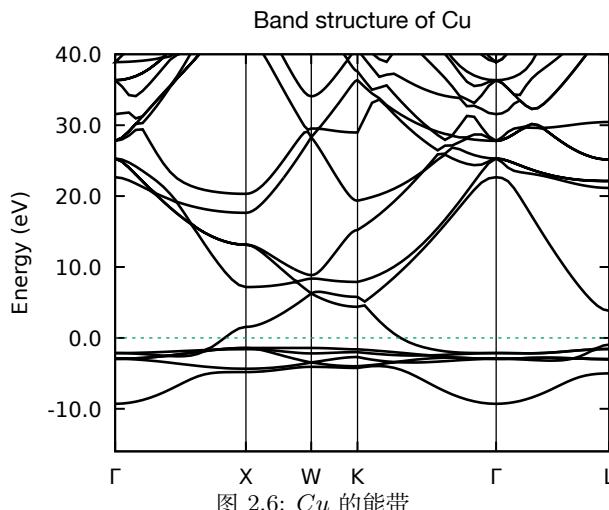


图 2.6: Cu 的能带

Band structure of Cu

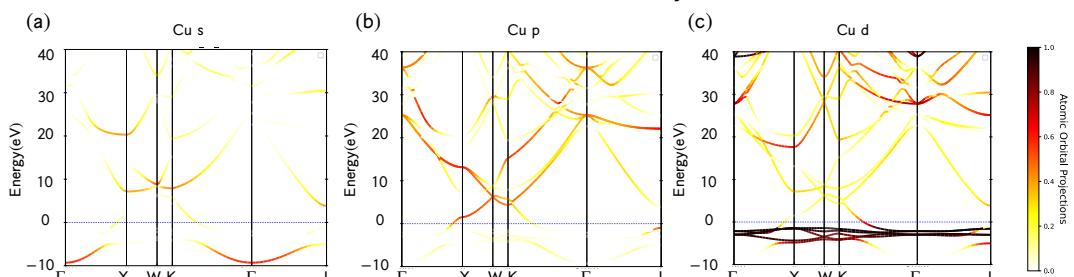


图 2.7: Cu 的 fatband 图。该图使用开源软件包 PyProcar 绘制。

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

### ► VASP-Wannier 计算

```
1 $ cd ../vaspwannier/s+p+d
2 $ cp ../../scf/CHGCAR ../../scf/WAVECAR .
3 $ cp WannierToolsTutorials/sub-vasp_std.sh .
4 $ sbatch sub-vasp_std.sh
```

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

### ► Wannier90 计算

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-w90.sh .
2 $ sbatch sub-w90.sh
3 $ gnuplot bulkek-compare-DFT-wannier.gnu0
```

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

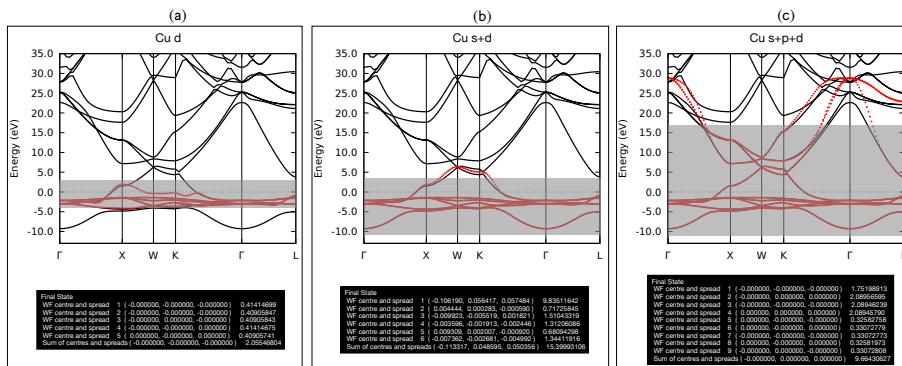


图 2.8: DFT (黑线) 与 Wannier 插值 (红点) 的能带结构对比和对应的 wannier90.wout 中所对应的 spread 的值。(a)、(b) 和 (c) 图分别代表只用 d 轨道、用 s、d 轨道和用 s、p、d 轨道来构造的 Wannier 函数计算出的能带图。我们发现 (b) 图的第一行 spread 非常大，因为这一段窗口区间含有 p 轨道成分，所以导致这一个 spread 值偏大。通过上图比较我们会发现，增加 Wannier 轨道数量后，费米面附近的能带与原能带的拟合会越来越好。

接下来，你就可以用生成的 wannier90\_hr.dat 和 WannierTools 在你感兴趣的领域进行探索。

## 2.8 自动化构造 Wannier 函数具体操作

下面我们将介绍如何使用一系列 Python 脚本，实现从 VASP 到 Wannier90 再到能带计算的自动化流程。我们的输入文件至少有 5 个，分别为 autoconstruction.py、compare\_band.py、vasp\_input\_ite\_cif.py、input\_parameters.py 和 POSCAR，这 5 个文件作为输入文件要放在你打算构造 Wannier 函数的文件夹里（如果你在当前文件夹内提供了 POTCAR，那么我们不将自动生成 POTCAR），主要功能包括：

1. 根据 POSCAR 信息自动生成 VASP 输入文件 (INCAR、KPOINTS、POTCAR、sh 提交脚本等)
2. 运行自洽计算 (SCF)、结构弛豫 (Relax)、能带计算 (Band)、Wannier90 构建
3. 根据 DOS/PDOS 自动生成 wannier90.win
4. 对比 DFT 与 Wannier 能带后输出相似度

### 2.8.1 input\_parameters.py: 配置文件

input\_parameters.py 中有大量可调节参数:

- **calc\_type()**: 控制运行哪些步骤, 返回 (SC, WANN, BAND, RELAX) 四个布尔值
  - SC: 自洽计算
  - WANN: Wannier90 构建
  - BAND: 静态能带
  - RELAX: 结构弛豫
- **running\_parameters()**: SLURM 作业设置
  - cores: MPI 核数
  - time: 时长 (小时)
  - memory: 内存 (GB, 设置为 0 则默认为自动)
  - pr\_id: 项目/账号 ID
- **directories()**: 可执行文件和伪势目录

```

1 vasp_dir          # VASP 可执行文件路径
2 wannier90_dir     # wannier90.x 路径
3 pseudopotentials_dir
4 python_dir        # 如 "python"
5 vasp_output       # 如 "vasp.out"
6 wannier_output    # 如 "wannier90.wout"

```

- **htc\_tags()**: INCAR/KPOINTS 基础标签和标志包括磁性、自旋轨道耦合、U 计算等, 以及 incar\_tags 字典 (ENCUT、EDIFF...) 等
- **pseudopotentials()**: 元素到 POTCAR 子文件夹的映射
- **ldau\_values()**: f 电子元素的 U/J/L 参数

### 2.8.2 生成 VASP 输入: vasp\_input\_htc\_cif.py

该脚本功能:

- 解析 POSCAR, 确定元素种类、原子数、晶胞参数
- 生成 RELAX/SCF/BAND/WFS 四套 INCAR 与 KPOINTS

- 合并得到 POTCAR
- 写出 SLURM 提交脚本 sub-vasp.sh

### 2.8.3 自动构建 wannier90.win: autoconstruction.py

该脚本功能：

- 读取 vasprun.xml，提取 DOS/PDOS 和费米能
- 根据能窗及投影准则，自动生成 Projections 块
- 写出 wannier90.win（包含 k-point 路径）

可在脚本中修改如下参数块以调整收敛：

```

1 projstr += '''
2 num_iter = 20
3 dis_num_iter = 300
4 search_shells = 25
5 hr_plot = true
6 iprint = 2
7 dis_conv_tol = 1.0E-10
8 num_cg_steps = 30
9 guiding_centres = .true.'''
```

以及可以修改如下参数来调整 froz 窗口：

```
1 a.output(froz=[True, 1])
```

调用 a.output(froz=[...]) 时，可以灵活地调整冻结窗口 dis\_froz\_min 和 dis\_froz\_max，主要有以下几种形式，以及 dis\_froz\_min 和 dis\_froz\_max 所对应的值：

```

1 # E_F means fermi energy
2
3 a.output(froz=[True, 1])
4 # dis_froz_min = dis_win_min
5 # dis_froz_max = E_F + 1
6
7 a.output(froz=[1, 1])
8 # dis_froz_min = E_F - 1
9 # dis_froz_max = E_F + 1
```

通过修改 froz 参数的布尔值或数值，就能快速设置不同的冻结能带区间。

### 2.8.4 compare\_band.py：对比能带

该脚本功能：

1. 提取并写出 band/DFT\_band.dat
2. 绘制并保存 plots/dft.png、plots/wan.png
3. 计算 Jaccard 和 Dice 系数（用来衡量两个图的相同程度）
4. 生成合并 PDF plots/combined.pdf

### 2.8.5 脚本运行步骤

在开始之前，请先激活配置好的环境 mp\_api：

```
1 $ conda activate mp_api
```

然后生成所需的输入文件

```
1 $ python vasp_input_hfe_cif.py
```

在命令行提交任务

```
1 $ sbatch sub-vasp.sh
```

sub-vasp.sh 包含以下五个模块，根据 calc\_type() 配置有选择执行：

1. Relax: 结构弛豫（更新 POSCAR）
2. SCF: 自洽计算并提取带隙
3. Band: 静态能带
4. Wannier90: 生成 wannier90.win
5. Compare: 对比 DFT 与 Wannier 能带

可手动编辑或注释某些模块，只运行所需步骤。下面的自动构建 wannier90.win 和对比能带的步骤已经包含在这个提交的脚本中。

### 2.8.6 示例目录大致结构

```
.  
|-- input_parameters.py  
|-- vasp_input_hfe_cif.py  
|-- autoconstruction.py  
|-- compare_band.py  
|-- requirements.txt  
|-- POSCAR  
|-- plots/  
|   |-- combined.pdf  
|-- band/  
|   |-- vasprun.xml  
|   |-- OUTCAR  
|   |-- DFT_band.dat  
|-- wan/  
    |-- wannier90_hr.dat
```

### 2.8.7 注意事项与拓展

- 本脚本仅支持 POSCAR 格式输入

- 修改 `calc_type()` 控制计算步骤
- `memory=0` 时自动根据原子数分配
- 可自由调整 `hte_tags()`、`ldau_values()` 及其他阈值

### 2.8.8 例子：自动化构造 Cu 的 Wannier 函数

#### ► 进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Cu_auto_construct_wannier
```

在开始之前，请先激活配置好的环境 `mp_api`:

```
1 $ conda activate mp_api
```

运行:

```
1 $ python vasp_input_hte_cif.py
```

生成对应的输入文件，然后在命令行执行:

```
1 $ sbatch sub-vasp.sh
```

运行完后，我们可以在 `plots` 文件夹中看到 DFT 和 Wannier 两者之间能带的比较图 `combined.pdf`

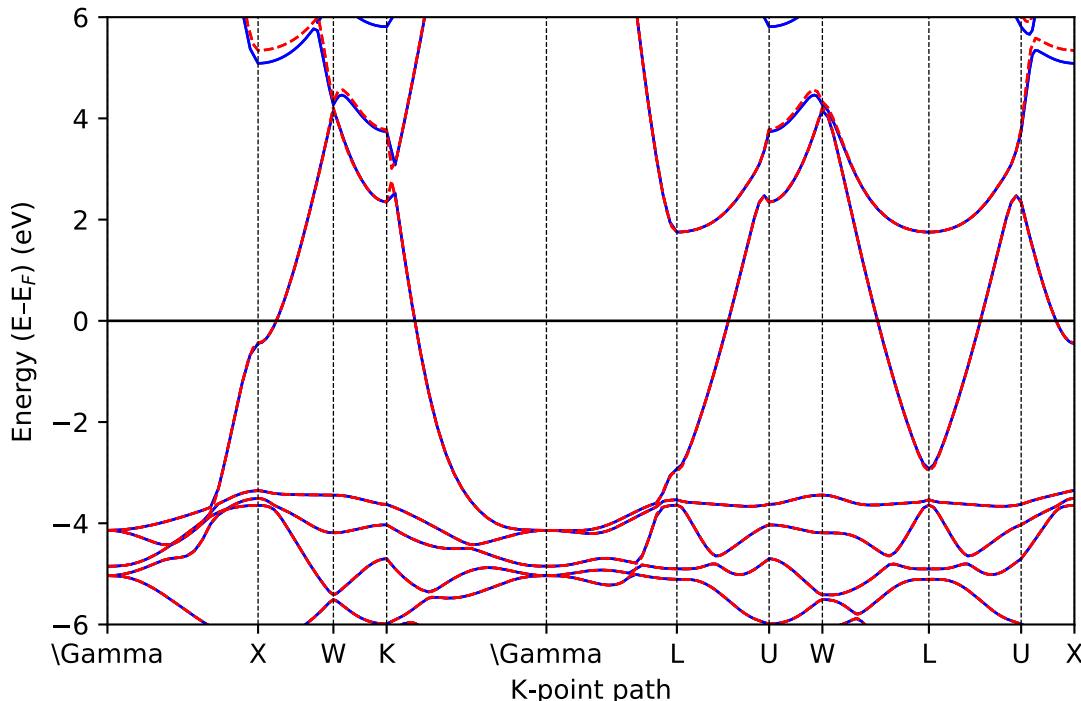


图 2.9: 图中红色虚线代表 Wannier 算出来的能带，蓝色实线代表 DFT 算出来的能带。

#### ► 练习

1. 大家可以用自己提供的 POSCAR 和 POTCAR 进行自动构造 Wannier 函数的训练。

### 3 Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) 模型

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

#### 参考文献

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

► 两个办法获得教程输入文件:

- 直接从集群的/tmp/目录下把本教程拷贝到你的/home/data/目录下:

```
1 $ cp -r /tmp/WannierToolsTutorials ~/data/
```

- 如果你从别处看到这个教程，可以直接从 github 上下载教程:

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

本部分对应的目录为

`~/data/WannierToolsTutorials/examples/BHZ-model`

和

`~/data/WannierToolsTutorials/examples/Half-BHZ-model`

#### 3.1 BHZ 模型介绍

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

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

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

#### 3.2 Half-BHZ 模型研究

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

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

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

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

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

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

为了探索杂化和反带对能带拓扑的影响，我们将研究一下四种情况（见表格1）

表 1: 四种杂化和反带的组合

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

利用这四种参数，我们计算了体能带，边界态和 Wilson loop (WCC)，见图3.1。边界态和 WCC 谱中我们可以看出，只有能带反转和 non-trivial 的杂化对应的 case IV 才会有非平庸的能带拓扑。

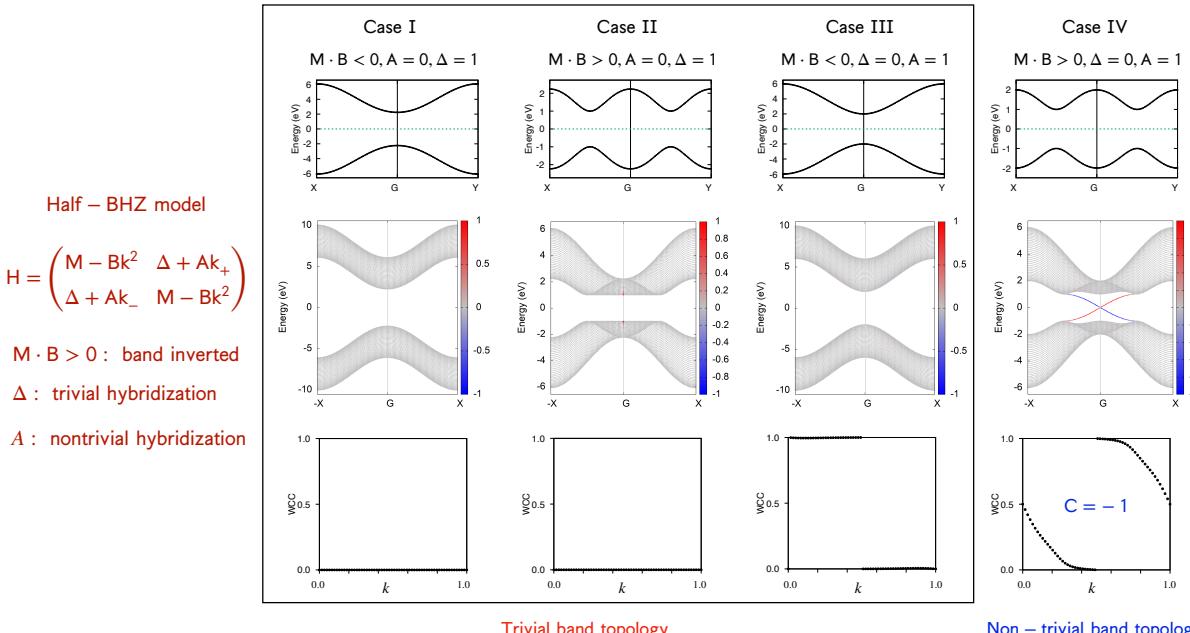


图 3.1: Half-BHZ 模型在 4 种参数组合下分别对应的能带，边界态和 Wilson loop 的结果。前三种参数对应的是平庸的能带拓扑，只有第四种情况下，同时有能带反转和非平庸的杂化才能给我们带来非平庸的能带拓扑。

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

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

```

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

```

### 3.3 Full BHZ 模型研究

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

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

wt.in 里头主要的控制参数有：

```

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

```

```

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

```

接下来可以直接运行程序：

```

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

```

得到的结果如图3.2所示，能带反转很明显，有非平庸的 Dirac 锥表面态，Wilson loop 也是非平庸的，同时自旋霍尔效应在能隙中间也是量子化的。

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

► 练习：

```

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

```

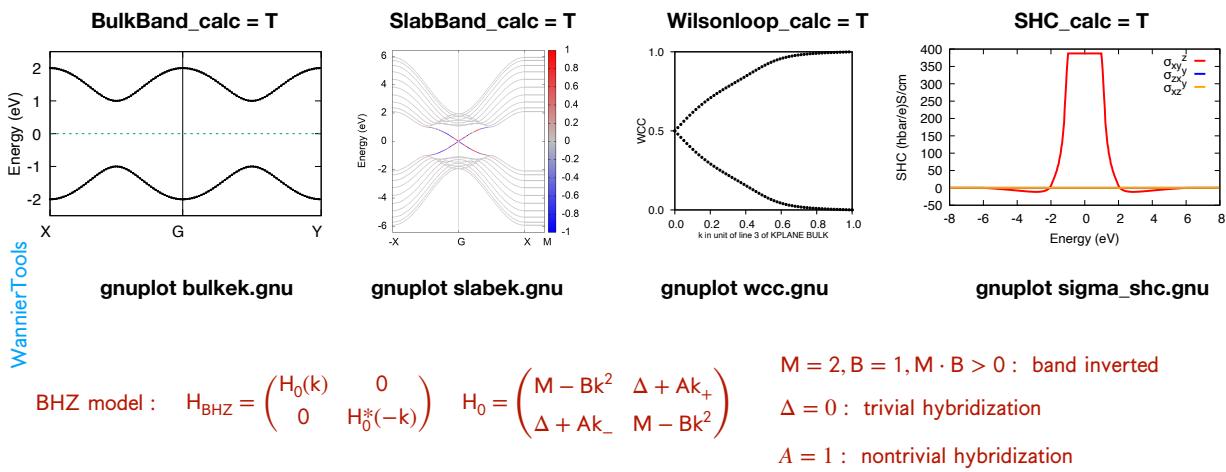


图 3.2:  $\Delta = 0, M = 2, B = 1, M * B > 0, A = 1$  参数下的 BHZ 模型使用 WannierTools 计算得到的能带、边界态、Wilson loop 和自旋霍尔电导的结果。

```

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

```

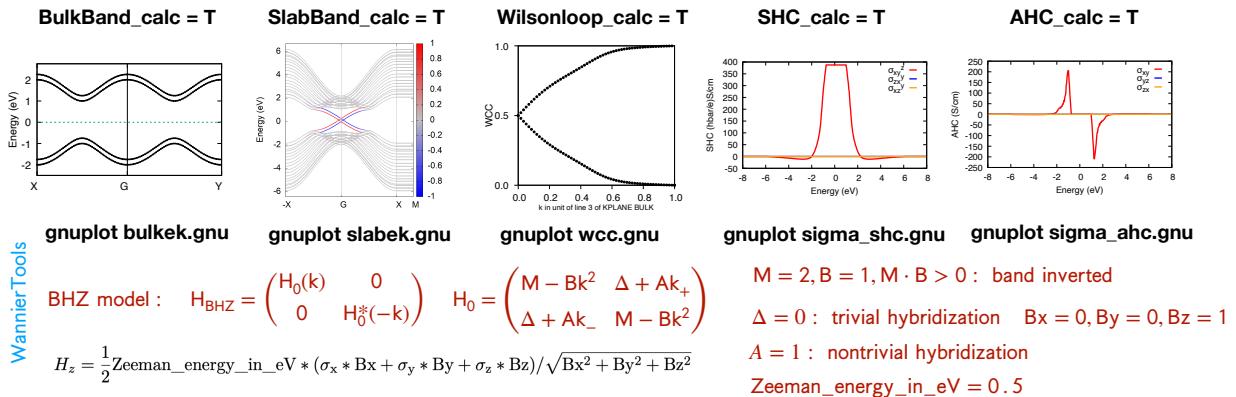


图 3.3: 考虑了塞曼效应后的 BHZ 模型使用 WannierTools 计算得到的能带、边界态、Wilson loop 和自旋霍尔电导的结果。对应的参数为  $\Delta = 0, M = 2, B = 1, M * B > 0, A = 1$ , 塞曼场沿着 z 方向, 塞曼能为 0.5 eV。

得到的结果如图3.4所示, 能带反转很明显, 不过能带不再简并了; 有非平庸的 Dirac 锥表面态, 而且上(红色)、下(蓝色)表面的 Dirac 锥能量不再简并, Wilson loop 也是非平庸的, 同时自旋霍尔效应在能隙中间也是量子化的。

### 3.4 添加塞曼 (Zeeman) 效应

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

```

1 &SYSTEM

```

```

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

```

对应的塞曼矩阵公式为：

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

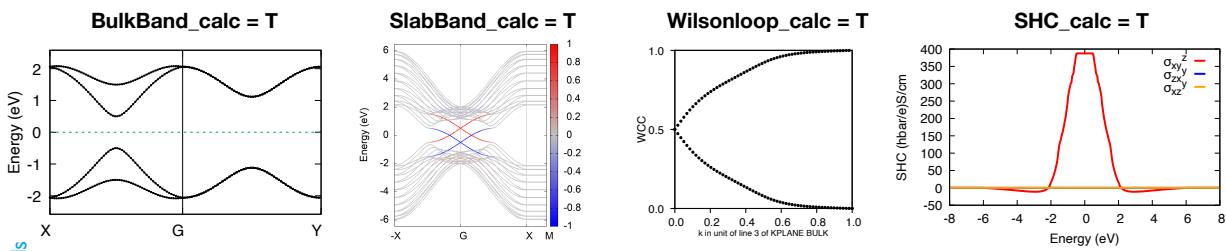
其中  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  为泡利矩阵，只作用在自旋上。

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

```

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

```



**WannierTools**

**BHZ model :**  $H_{\text{BHZ}} = \begin{pmatrix} H_0(k) & 0 \\ 0 & H_0^*(-k) \end{pmatrix}$     $H_0 = \begin{pmatrix} M - Bk^2 & \Delta + Ak_+ \\ \Delta + Ak_- & M - Bk^2 \end{pmatrix}$     $M = 2, B = 1, M \cdot B > 0 : \text{band inverted}$   
 $\Delta = 0.5 : \text{trivial hybridization}$   
 $A = 1 : \text{nontrivial hybridization}$

图 3.4:  $\Delta = 0.5, M = 2, B = 1, M \cdot B > 0, A = 1$  参数下的 BHZ 模型使用 WannierTools 计算得到的能带、边界态、Wilson loop 和自旋霍尔电导的结果。

得到的结果如图3.3所示，能带反转很明显，不过能带的自旋上下简并被破除了；上下自旋分别对应有非平庸的 Dirac 锥表面态，而且上（红色）、下（蓝色）表面的 Dirac 锥能量不再简并；尽管时间反演被破坏了，但是 Wilson loop 也是非平庸的（可以思考为什么？）；同时自旋霍尔效应在能隙中间也是量子化的；反常霍尔电导不再是整个能量区间都是零。

## 4 拓扑绝缘体

在本节中，我们将要用 WannierTools 研究二维拓扑绝缘体 WSe<sub>2</sub> 和三维拓扑绝缘体 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>。

### 参考文献

1. Observation of topologically protected states at crystalline phase boundaries in single-layer WSe<sub>2</sub>. Miguel M. Ugeda, Artem Pulkin, Shujie Tang, Hyejin Ryu, Quan-sheng Wu, Yi Zhang, Dillon Wong, Zahra Pedramrazi, Ana Martín-Recio, Yi Chen, Feng Wang, Zhi-Xun Shen, Sung-Kwan Mo, Oleg V. Yazyev, Michael F. Crommie, Nat Commun 9, 3401 (2018) [4].
2. Topological insulators in Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> and Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> with a single Dirac cone on the surface, Haijun Zhang, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, Xi Dai, Zhong Fang, Shou-Cheng Zhang, Nature Physics 5, 438–442 (2009) [2].

► 两个办法获得教程输入文件:

1. 直接从集群的/tmp/目录下把本教程拷贝到你的/home/data/目录下:

```
1 $ cp -r /tmp/WannierToolsTutorials ~/data/
```

2. 如果你从别处看到这个教程，可以直接从 github 上下载教程:

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

本章对应的目录为

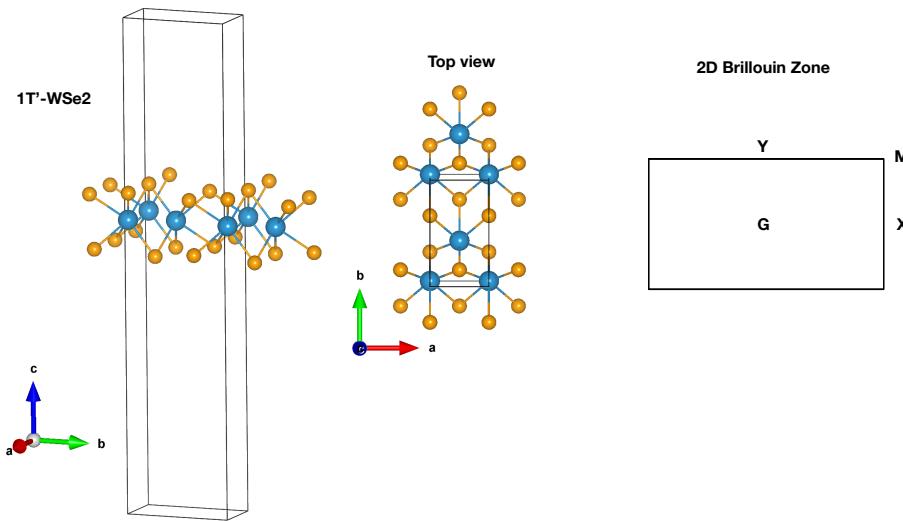
~/data/WannierToolsTutorials/examples/WSe2-1Tp

和

~/data/WannierToolsTutorials/examples/Bi2Se3

### 4.1 二维拓扑绝缘体 1T'-WSe<sub>2</sub>

1T'-WSe<sub>2</sub> 被预测为一种二维拓扑绝缘体，同时也被称为量子自旋霍尔 (Quantum spin hall, QSH) 绝缘体。在我们的计算中，我们认为它是一个在  $z$  方向上有很厚的真空层的三维材料。在  $z$  方向上没有色散，所以我们只要研究  $k_z = 0$  平面上的性质。晶体结构和布里渊区如下图所示：



►准备 首先，进入下面这个目录：

```
1 cd WannierToolsTutorials/examples/WSe2-1Tp
```

我们已经准备好了紧束缚模型文件 wannier90\_hr.dat 以及 WannierTools 的输入文件 wt.in。如果你打开 wt.in 文件，你会发现我们将要计算体能带、表面态谱，以及万尼尔电荷中心 (Wannier charge center, WCC)。

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

```

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

```

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

混合万尼尔电荷中心被定义为：

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

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

$k_1$  ( $k_2$ ) 是 KPLANE\_BULK 区域参数的第二 (第三) 行。

► 运行 WannierTools:

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
```

► 用 Gnuplot 画图:

1). 现在，我们可以用以下命令画出能带:

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

能带图的文件名为“bulkek.pdf”，结果如图4.1所示：

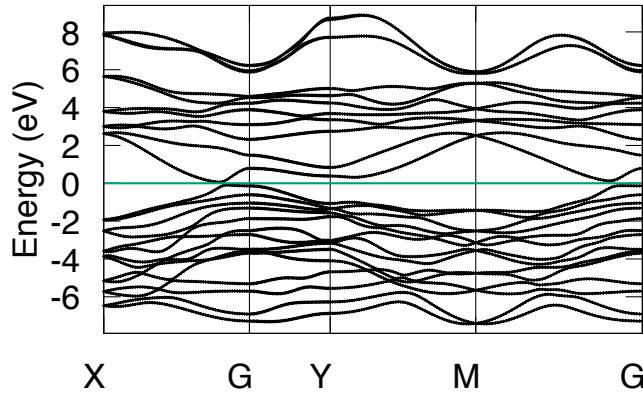


图 4.1: 使用 WannierTools 计算得到的 1T'-WSe<sub>2</sub> 的能带结构。

能带图表示它应当是一个绝缘体。

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

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

图片的文件名为 wcc.eps，结果如图4.2所示：

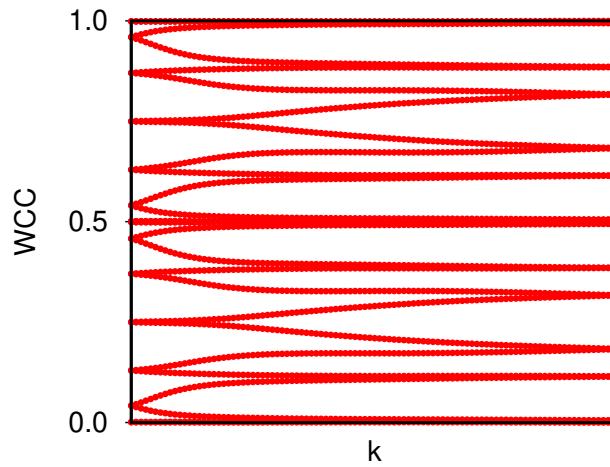


图 4.2: 使用 WannierTools 计算 1T'-WSe<sub>2</sub> 得到的 Wilson loop 图，图中显示  $\mathbb{Z}_2$  数为 1。

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

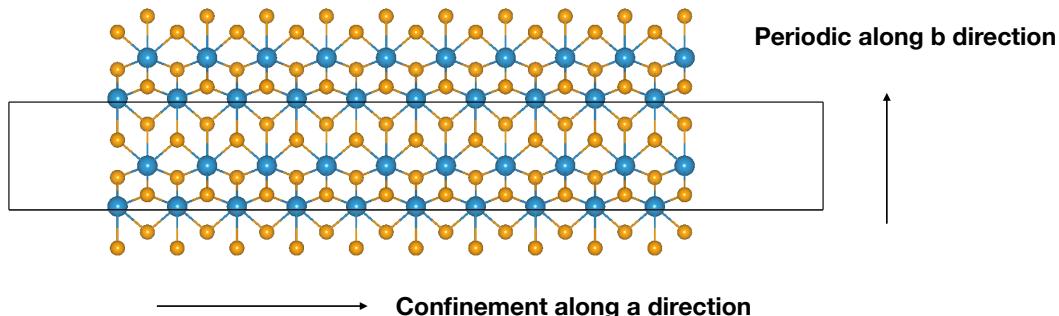
4). 由于体边对应，如果我们沿着一个方向切割材料的话，应该能得到非平庸的边缘态。因此，我们想要画出边缘态能谱。这里，我们沿着 a 格矢方向切出边缘态并让 b 方向保有周期性。这意味着表面是由 b 格矢方向定义的。因此，SURFACE 区参数应当如下设置：

```

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

```

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



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

```

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

```

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

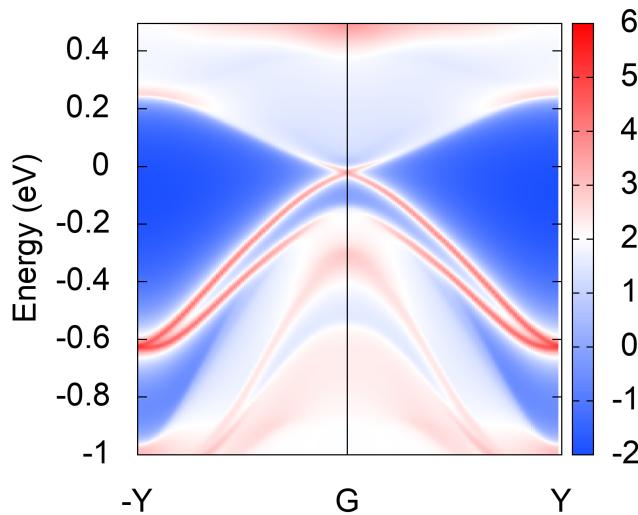


图 4.3: 使用 WannierTools 计算得到的 1T'-WSe2 的边界态

这表示边缘态是非平庸的，因为它将导带和价带连接在一起了。

### ► 练习

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

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

## 4.2 三维拓扑绝缘体 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$

$\text{Bi}_2\text{Se}_3$  被理论预测和实验发现为是一种三维拓扑绝缘体。在这个小节中, 我们将要研究它的拓扑性质, 研究它的拓扑数和表面态能带。

► 准备 首先, 请进入工作目录:

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Bi2Se3
```

► 运行 WannierTools:

```
1 $ cp wt.in-bi2se3 wt.in
2 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
3 $ sbatch sub-wt.sh
```

► 用 Gnuplot 画图

► 1). 照例, 我们先画出能带结构

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

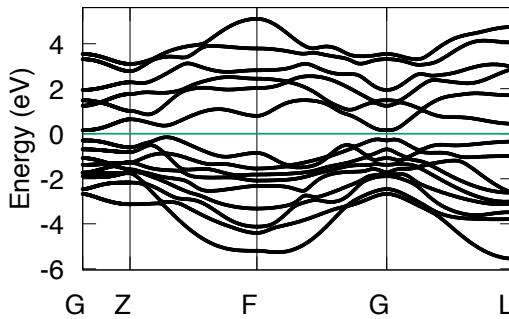


图 4.4:  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  能带结构

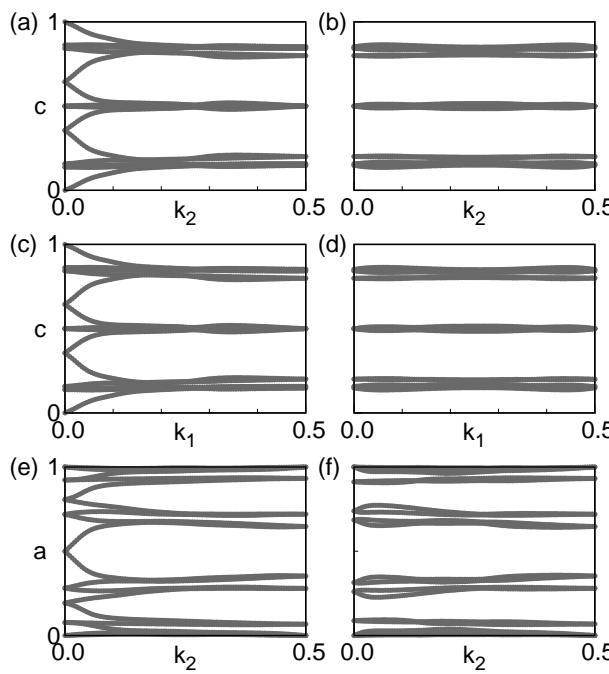
体态能带结构显示它是绝缘体 (这里的“绝缘体”意思是它在每个  $k$  点处导带与价带都不相交)。

► 2). 让我们看看拓扑数

$\text{Bi}_2\text{Se}_3$  是一种非磁性材料, 它具有时间反演对称性。由于它是三维材料, 我们必须在六个时间反演不变的平面内计算它的 WCC。在 WannierTools 中, 我们可以通过设置 `Z2_3D_calc=T` 把它们全部算出来。通过运行下面的命令, 我们可以画出计算好的 WCC 图。

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

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

图 4.5: Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 对应六个时间反演不变平面的 Wilson loop

根据 WCC 规则, a、c 和 e 图中的  $\mathcal{Z}_2$  拓扑数为 1; b、d 和 f 的拓扑数为 0。这也可以通过直接读取 WT.out 来得到。运行以下命令:

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

得到:

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

三维绝缘体的  $\mathcal{Z}_2$  数由四个数组成  $(\nu_0; \nu_1 \nu_2 \nu_3)$ 。 $\nu_0 = \mathcal{Z}_2(k_i = 0) + \mathcal{Z}_2(k_i = 0.5)$  表示它是一个强 ( $\nu_0 = 1$ ) 拓扑绝缘体还是一个 ( $\nu_0 = 0$ ) 弱拓扑绝缘体。 $\nu_1 = \mathcal{Z}_2(k_1 = 0.5), \nu_2 = \mathcal{Z}_2(k_2 = 0.5), \nu_3 = \mathcal{Z}_2(k_3 = 0.5)$  被称为弱拓扑不变量 [5]。最后, Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 的  $\mathcal{Z}_2$  拓扑数是 (1;000), 这表示 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 是一个强拓扑绝缘体。这表示在任意切面上 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 均有拓扑保护的表面态。

### ► 3). 让我们来研究表面态性质

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

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

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

现在, 让我们画出表面态的能谱。

```

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

```

得到的三个能谱图分别是 surfdo\_1.png, arc\_1.png, and spintext\_1.png, 如图4.6所示:

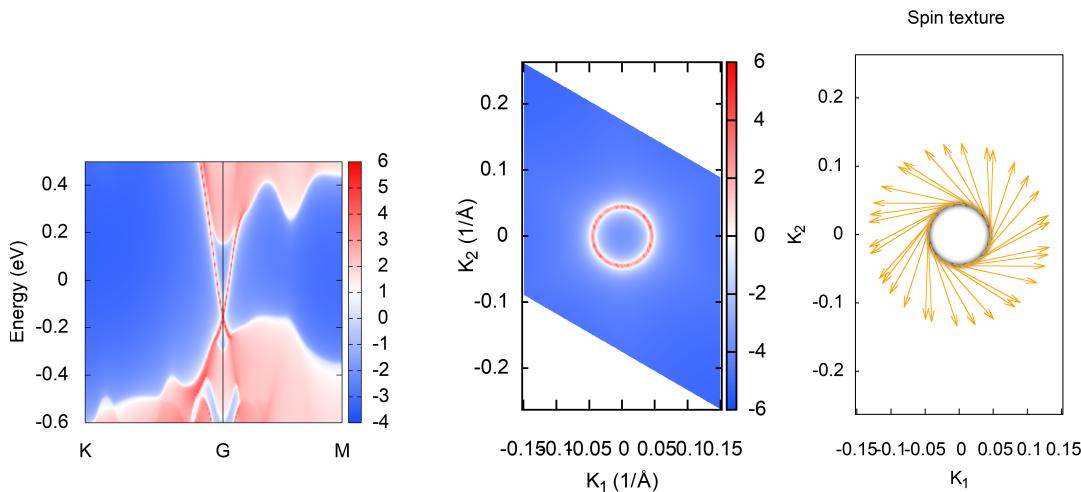


图 4.6:  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  解理面 (001) 的表面态和自旋纹路 (spin texture), 使用了表面格林函数方法计算。左图 surfdo\_1.png 给出了指定 K 点路径的能谱图。K 点路径在 KPATH\_SLAVE 区域设置, 而能量窗口则是由 OmegaMin 和 OmegaMax 参数设置。中间 arc\_1.png 则是等能图, 能量由 Fermi\_broadening 参数给定。右图 spintexture.png 表示给定的 KPLANE\_SLAVE 和 Fermi\_broadening 中的自旋纹理。

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

```

1 $ gnuplot slabek.gnu

```

产生的图片文件名为 slabek.png, 如图4.7所示:

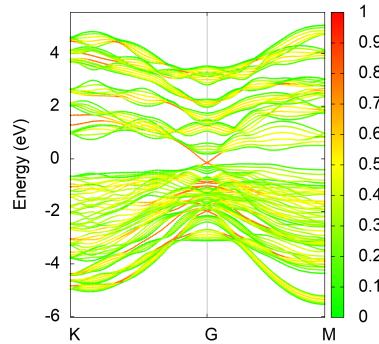


图 4.7: 通过构造 Slab 体系来计算  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  体系解理面的表面态, 红色表示表面的贡献, 绿色表示体态。

## ► 练习

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

## 5 Weyl 半金属

在本节中，我们将使用 WannierTools 研究 Weyl 半金属。

### 参考文献

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

#### ► 两个办法获得教程输入文件:

1. 直接从集群的/tmp/目录下把本教程拷贝到你的/home/data/目录下:

```
1 $ cp -r /tmp/WannierToolsTutorials ~/data/
```

2. 如果你从别处看到这个教程，可以直接从 github 上下载教程:

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

本部分对应的目录为

`~/data/WannierToolsTutorials/examples/3DWeyl`

和

`~/data/WannierToolsTutorials/examples/TaAs`

### 5.1 Weyl 半金属的一个简化模型

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

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

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

### ► 准备工作

首先，请进入工作目录：

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/3DWeyl-model
```

### ► 计算能带结构

```
1 $ cp wt.in-bands wt.in
2 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
3 $ sbatch sub-wt.sh
4 $ gnuplot bulkek.gnu
```

得到的能带如图5.1所示：

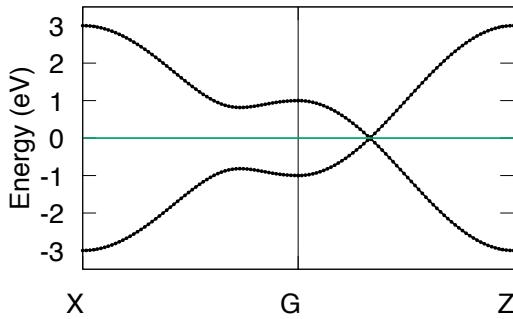


图 5.1：简单三维 Weyl 模型对应的能带结构，有一对 Weyl 点在 z 方向。

结果表明，沿 G-Z 方向存在一个交叉点。

### ► 找到所有 Weyl 点

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

```
1 $ cp wt.in-findnodes wt.in
2 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
3 $ sbatch sub-wt.sh
4 $ gnuplot Nodes.gnu
```

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

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

Nodes.png 则如图5.2所示。

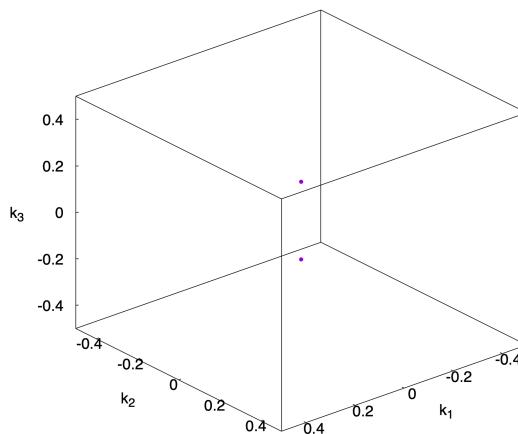


图 5.2: 三维简单 Weyl 模型的 Weyl 点在 BZ 中的分布。

### ► 计算 Weyl 点的手性

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

```

1 $ cp wt.in-chirality wt.in
2 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
3 $ sbatch sub-wt.sh
4 $ gnuplot wanniercenter3D_Weyl_1.gnu
5 $ gnuplot wanniercenter3D_Weyl_2.gnu

```

wanniercenter3D\_Weyl\_1.eps 和 wanniercenter3D\_Weyl\_2.eps 为包裹单个 Weyl 点的球的 WCCS 文件，结果如图5.3所示：

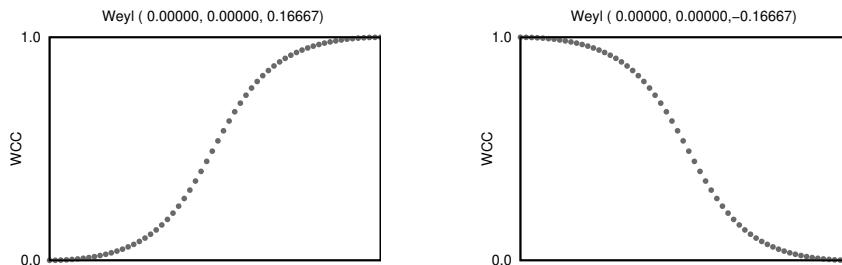


图 5.3: 两个 Weyl 点对应的 Wilson loop

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

```

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

```

结果应该如下所示：

```

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

```

### ► 计算 Berry 曲率

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

```

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

```

```

1 $ cp wt.in-Berry-curvature wt.in
2 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
3 $ sbatch sub-wt.sh

```

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

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

生成的图 Berrycurvature-normalized.png 应该是这样的（见图5.4）。

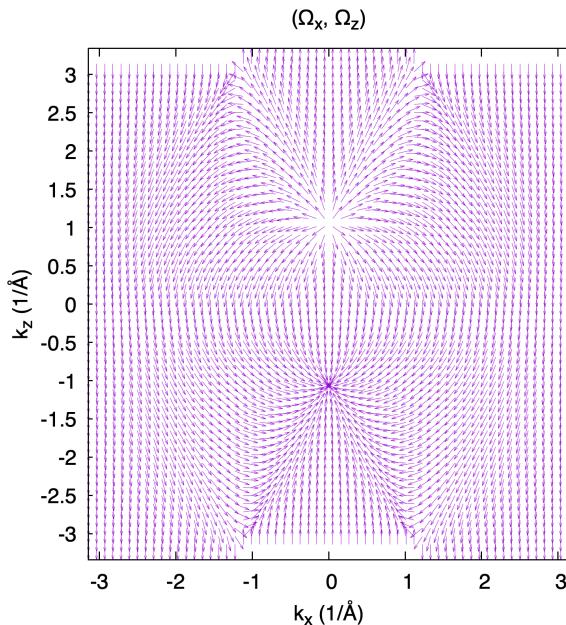


图 5.4: 三维简单 Weyl 模型在  $k_y = 0$  平面内的贝利曲率分布

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

### ► 计算表面态谱

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

```

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

```

运行 WannierTools:

```

1 $ cp wt.in-surfacestates wt.in
2 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
3 $ sbatch sub-wt.sh

```

使用一些命令生成  $k - E$  和  $k - k$  模式下的表面态谱

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

生成的文件 `surfdos_l.png` 和 `arc_l.png` 应该如下图5.5所示。

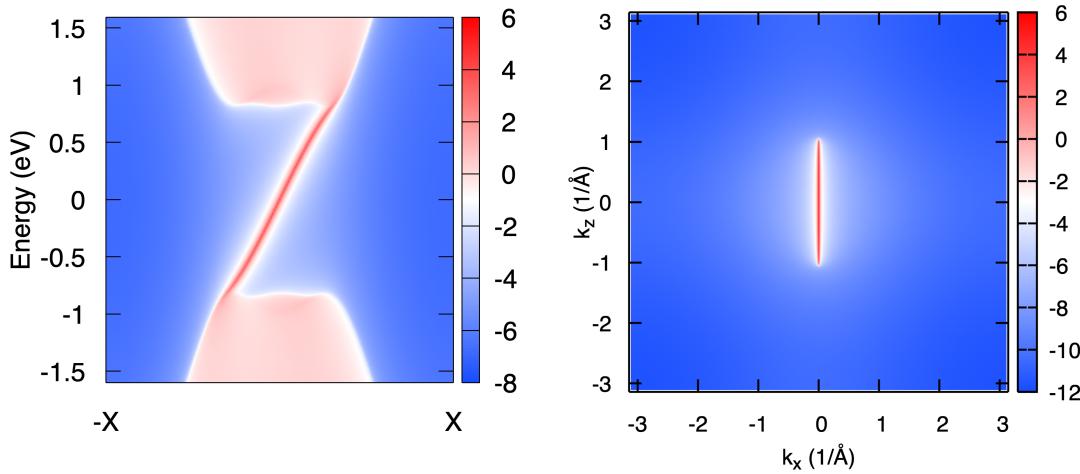


图 5.5: 左图:  $k - E$  模式的表面态谱; 右图:  $k - k$  模式下的表面态, 对应费米弧。

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

### ► 使用 WCCs 来理解费米弧

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

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

两个图如下5.6所示

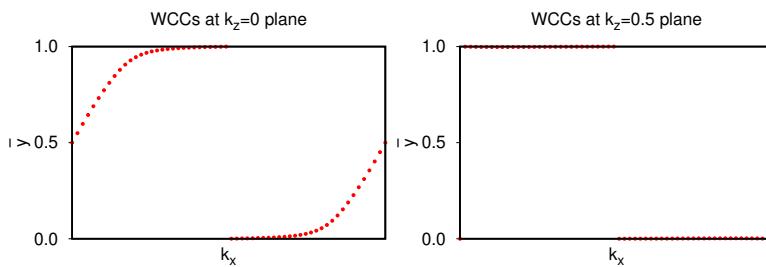


图 5.6: 左右图对应的是  $k_z = 0$  和  $k_z = \pi/a$  对应的 Wilson loop。

图5.6中的 Wilson loop 显示,  $k_z = 0$  平面上的 Chern 数为 1, 可以得到手性模式, 而  $k_z = 0.5$  平面上的 Chern 数为 0, 不能得到拓扑保护的表面态。这就是费米弧的拓扑起源。

### ► 练习

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

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

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

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

## 5.2 Weyl 半金属 TaAs

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

### ► 准备工作

首先, 请进入工作目录:

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

### ► 运行 WannierTools 来找到所有 Weyl 点

```
1 $ cp wt.in-findnodes wt.in
2 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
3 $ sbatch sub-wt.sh
```

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

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

### ► 练习

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

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

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

## 6 表面态计算

拓扑材料最重要的特性是受拓扑保护的非平庸表面态。在本章，我们将讲解使用 Wannier-Tools 计算表面态的方法，并计算  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  以及石墨烯的表面态。

### 参考文献

1. Correlated states in twisted double bilayer graphene, Shen Cheng and Chu Yanbang and Wu QuanSheng and Li, Na et al, Nature Physics 16, 520-525 (2020) [10].
2. Topological insulators in  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  and  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  with a single Dirac cone on the surface, Haijun Zhang, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, Xi Dai, Zhong Fang, Shou-Cheng Zhang, Nature Physics 5, 438–442 (2009) [2].
3. Quasiparticle interference of surface states in the type-II Weyl semimetal  $\text{WTe}_2$ , Wenhan Zhang, Quansheng Wu, Lunyong Zhang, et al, Physical Review B 96, 165125 (2017) [11].
4. Observation of a nodal chain with Dirac surface states in  $\text{TiB}_2$ , Yi C J, Lv B Q, Wu Q S, et al. Physical Review B 97, 201107 (2018) [12].

► 两个办法获得教程输入文件:

1. 直接从集群的/tmp/目录下把本教程拷贝到你的/home/data/目录下:

```
1 $ cp -r /tmp/WannierToolsTutorials ~/data/
```

2. 如果你从别处看到这个教程，可以直接从 github 上下载教程:

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

本部分对应的目录为

`~/data/WannierToolsTutorials/examples/SurfaceStates`

### 6.1 表面态的计算方法

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

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

其设置方法如图6.1所示，我们需要在所要研究的平面内找出两个线性无关的矢量。注意，两个矢量是以格矢来标记的，即  $a_{11}, a_{12}, a_{13}, \dots, a_{23}$  需要是整数。

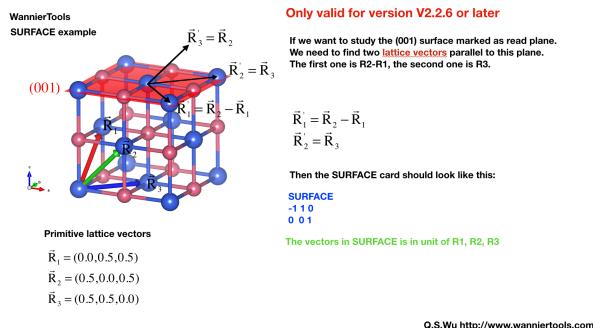


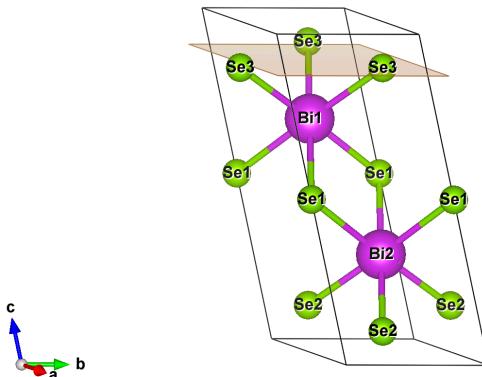
图 6.1: SURFACE card 的设置方法

下面，我们给出两个表面态计算的例子。

## 6.2 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 表面态计算

在这个例子中，我们将分别使用六方原胞和菱方原胞，计算 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 解理面的表面态。

### 6.2.1 六方原胞

图 6.2: 六方 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 原胞

我们可以按照如图6.2的方式选取 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 的原胞，这种原胞称为六方原胞。图中阴影所示平面就是 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 的解理面。在六方原胞中，其晶面指数为 (001)。下面我们计算解理面的表面态：

#### ► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/SurfaceStates/Bi2Se3-hex
```

目录中有以下文件：

wt.in：这是 WannierTools 计算表面态时的主输入文件

Bi2Se3\_hr.tar.gz：六方原胞 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 的实空间哈密顿量。使用前请用以下命令解压：

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

#### ► 第 2 步：准备输入文件

wt.in 中，与表面态计算有关的参数设置如下所示：

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

```

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

```

### ► 第3步：提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

### ► 第4步：分析计算结果

计算结束后，我们用 gnuplot 将计算结果画出来，命令如下：

```

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

```

我们将得到以下文件：

(1) slabek.png

图6.3是 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 的表面态能带图。图中的红色/蓝色表示这个态来自上表面/下表面的权重。由于上下表面是简并的，所以图片展示不是很准确。可以更改 slabek.gnu 文件把上下表面的权重加起来展示。

(2) surfdos\_l.png

图6.4是 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 的表面谱函数图。图中的红色/蓝色表示这个态的态密度的大/小。

(3) arc\_l.png

图6.5是 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 的二维费米面。这是 E\_arc 在二维空间的等能线。

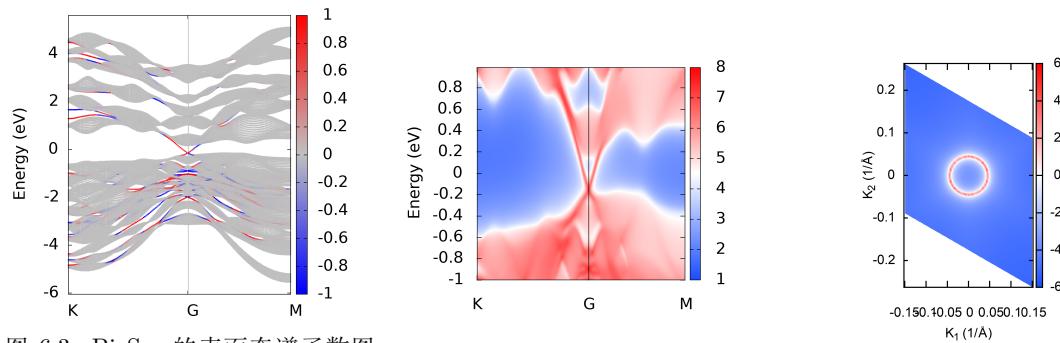


图 6.3:  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的表面态谱函数图,  
这是 SlabBand\_calc = T 的计算结  
果

图 6.4:  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的表面态谱函数图, 图 6.5:  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的二维费米面, 这是  
这是 SlabSS\_calc = T 的计算结果 SlabArc\_calc = T 的计算结果

## 6.2.2 菱方原胞

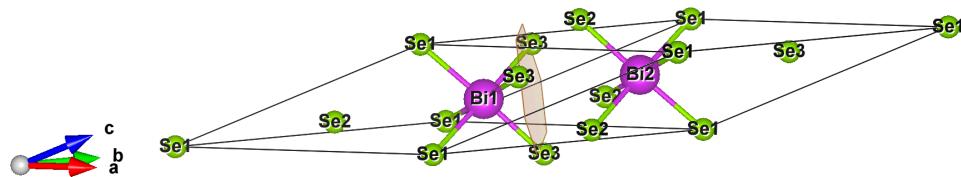


图 6.6: 菱方  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  原胞

我们还可以按照如图6.6的方式选取  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的原胞, 这种原胞称为菱方原胞。图中阴影所示平面就是  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的解理面。在菱方原胞中, 其晶面指数是 (111), 因此 SURFACE card 应该如图6.7设置.

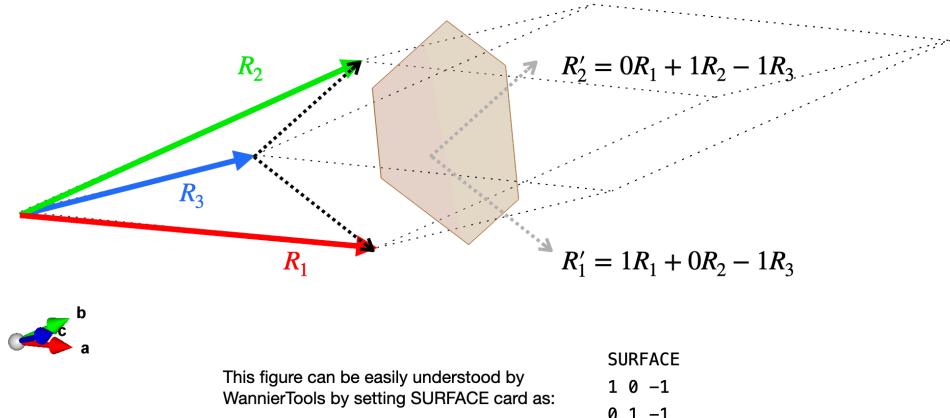


图 6.7: 用菱方  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  原胞计算解理面表面态时, SURFACE card 的设置方法

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

### ► 第 1 步: 进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/SurfaceStates/Bi2Se3-rhom
```

目录中有以下文件:

wt.in: 这是 WannierTools 计算表面态时的主输入文件

Bi2Se3\_hr.tar.gz: 菱方原胞 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 的实空间哈密顿量。使用前请用以下命令解压:

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

## ► 第 2 步: 准备输入文件

wt.in 中, 与表面态计算有关的参数设置如下所示:

```

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

```

```

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

```

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

### ► 第 3 步: 提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

### ► 第 4 步: 分析计算结果

计算结束后, 我们用 gnuplot 将计算结果画出来, 命令如下:

```

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

```

我们将得到以下文件:

(1) slabek.png

图6.8是菱方原胞  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的表面态能带图。图中的红色/蓝色表示这个态来自上表面/下表面的权重。由于上下表面是简并的, 所以图片展示不是很准确。可以更改 slabek.gnu 文件把上下表面的权重加起来展示。

(2) surfdos\_l.png

图6.9是菱方原胞  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的解理面的表面态谱函数图。图中的红色/蓝色表示这个态的态密度的大/小。

(3) arc\_l.png

图6.10是菱方原胞  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的解理面的二维费米面图。这是  $E_{\text{arc}}$  在二维空间的等能线。

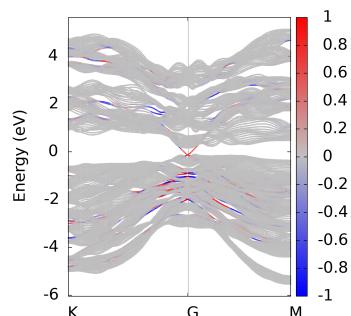


图 6.8: 菱方  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的表面态能带  
这是 SlabBand\_calc = T 的计算结果

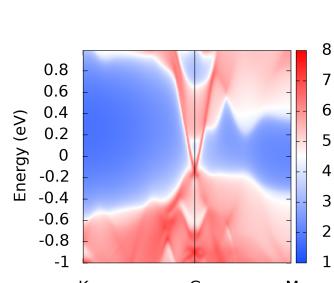


图 6.9: 菱方原胞  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的表面态  
这是 SlabSS\_calc = T 的计算结果

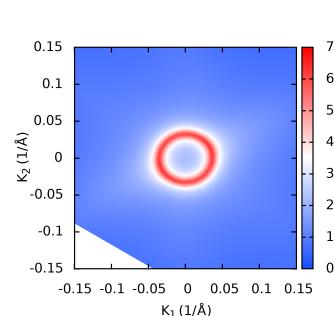


图 6.10: 菱方原胞  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  解理面的  
二维费米面，这是 SlabArc\_calc =  
T 的计算结果

可以看出，用两种原胞算出的解理面表面态是一致的。

### 6.3 石墨烯边界态计算

在这个例子中，我们将计算石墨烯的边界态。石墨烯的晶体结构如图6.11所示。下面我们在表示晶向时，都是在这个原胞中定义的。

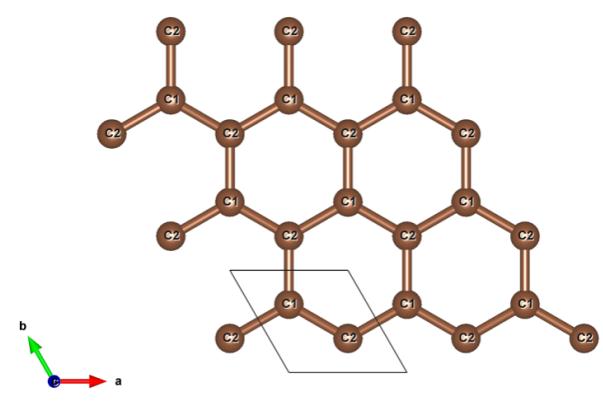


图 6.11: 石墨烯的晶体结构

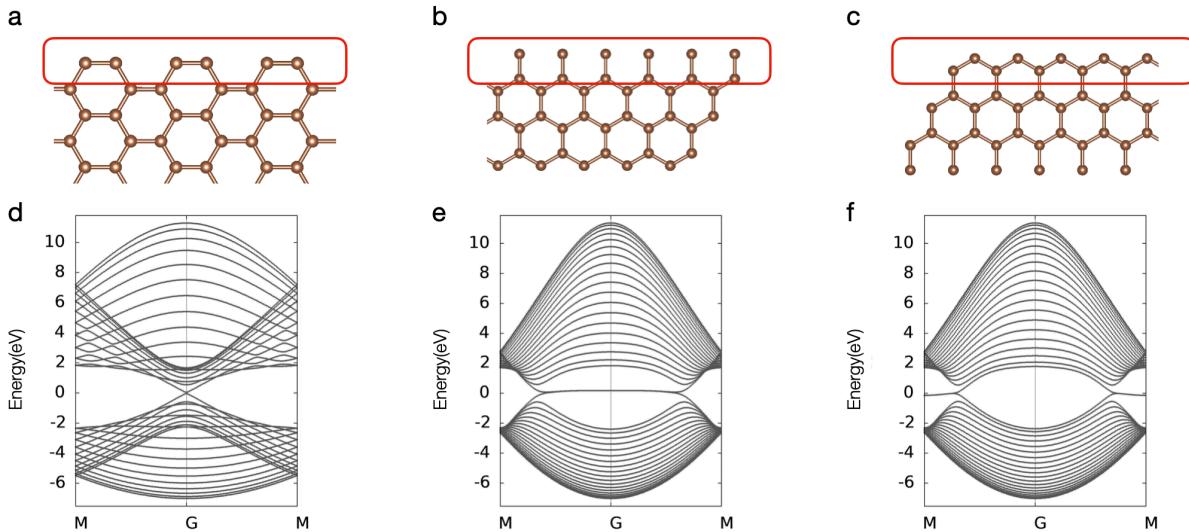


图 6.12: 石墨烯的三种边界态。(a,d) 扶手椅形边界态 (b,e) 胡须形边界态 (c,f) 锯齿形边界态

石墨烯的三种边界态如图6.12所示。其中，扶手椅型边界是沿着 [210] 方向的（注意：这里

是晶向指数)，而胡须型边界和锯齿形边界都是沿着 [100] 方向的，只是最表面的原子不同。

下面，我们以计算扶手椅型边界作为例子。

### ► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/SurfaceStates/Graphene
```

目录中有以下文件：

wt.in-Armchair：主输入文件，计算扶手椅型边界时使用

wt.in-Beared：主输入文件，计算胡须形边界时使用

wt.in-ZigZag：主输入文件，计算锯齿形边界时使用

Graphene\_hr.dat：用图6.11所示原胞构建的石墨烯的实空间哈密顿量。

### ► 第 2 步：准备输入文件

首先复制主输入文件：

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

wt.in 中，与表面态计算有关的参数设置如下所示：

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

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

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

### ► 第 3 步：提交计算任务

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .  
2 $ sbatch sub-wt.sh
```

### ► 第 4 步：分析计算结果

计算结束后，我们用 gnuplot 将计算结果画出来，命令如下：

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

slabek.png 所展示的能带结构应该如图6.12(d) 所示。

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

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

其余的流程与上面所述完全相同。值得一提的是，wt.in-Beared 和 wt.in-ZigZag 的差别仅仅在于 topsurface\_atom\_index 不同 (Beared 设为 1, ZigZag 设为 2)，结合图6.11所示的石墨烯原胞结构和 ATOM\_POSITIONS 中的原子顺序，我们就可以理解在计算表面态（边界态）时，要先确定晶向，再确定最表面原子，二者同样重要。

## 7 反常霍尔效应

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

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

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

### 参考文献

1. Intercorrelated anomalous Hall and spin Hall effect in kagome-lattice Co<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub>S<sub>2</sub>-based shandite films, Yong-Chang Lau, Junya Ikeda, Kohei Fujiwara, Akihiro Ozawa, Jiaxin Zheng, Takeshi Seki, Kentaro Nomura, Liang Du, Quansheng Wu, Atsushi Tsukazaki, Koki Takanashi, Physical Review B, 108(6): 064429. (2023) [13]

### 7.1 三维外尔半金属反常霍尔电导计算

本节中，我们将以三维外尔半金属作为例子，演示如何计算反常霍尔电导。

#### ► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/3DWeyl-model/
```

目录中有以下文件：

wt.in：这是 WannierTools 的主输入文件。

Wannier90\_hr.tar.gz：用三维外尔半金属构造的实空间哈密顿量。使用前请解压。

#### ► 第 2 步：准备输入文件

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

wt.in 文件说明：

```

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

```

```

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

```

### ► 第 3 步：提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

计算完成后，将会得到如下文件：

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

(2) sigma\_ahc.gnu：画图脚本

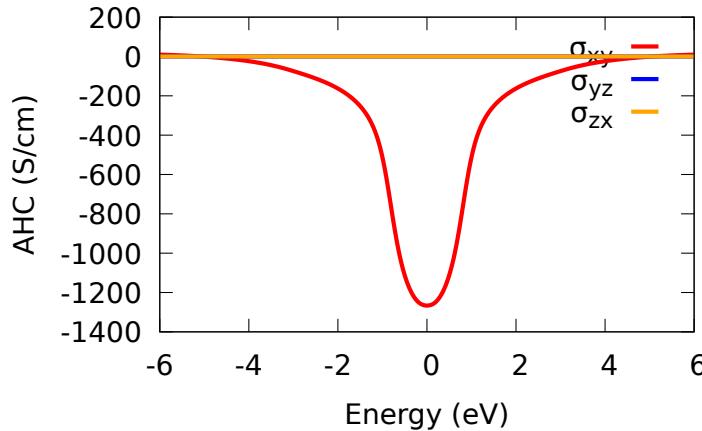
### ► 第 4 步：作图

```

1 $ gnuplot sigma_ahc.gnu

```

可以得到名为 sigma\_ahc.pdf 的图像：



## 7.2 Fe 反常霍尔电导计算

本节中，我们将以 Fe 作为例子，演示如何计算反常霍尔电导。

### ► 第 1 步：进入工作目录

```

1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Fe/

```

目录中有以下文件：

wt.in：这是 WannierTools 的主输入文件。

Wannier90\_hr.tar.gz：用 Fe 构造的实空间哈密顿量。使用前请解压。

### ► 第 2 步：准备输入文件

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

wt.in 文件主要参数说明：

```

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

```

### ► 第 3 步：提交计算任务

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
```

计算完成后，将会得到如下文件：

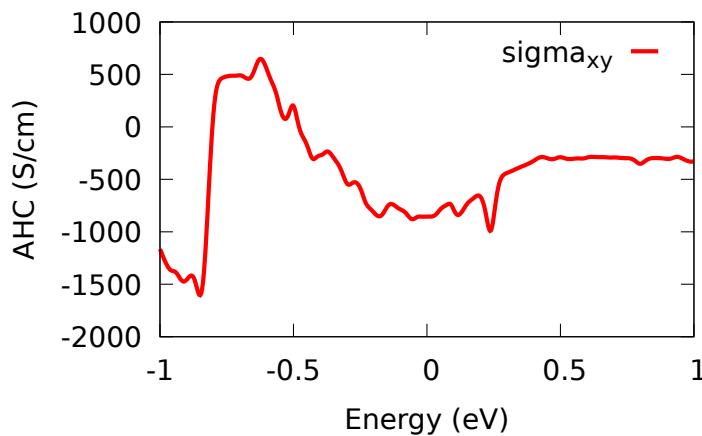
(1) sigma\_ahc\_eta\*\*\*.00meV.txt：在某个展宽下的反常霍尔电导，单位为  $(\text{Ohm} * \text{cm})^{-1}$ ，从左到右一共四列数据，依次为化学势（相对于 E\_FERMI）、 $\sigma_{xy}^A$ 、 $\sigma_{yz}^A$  和  $\sigma_{zx}^A$ 。eta 代表费米分布的展宽， $f(E) = \frac{1}{1+e^{(\omega-\mu)\times\frac{1}{eta}}}$ 。因此，Eta 越小，费米-狄拉克的分布就越尖锐。

(2) sigma\_ahc.gnu：画图脚本

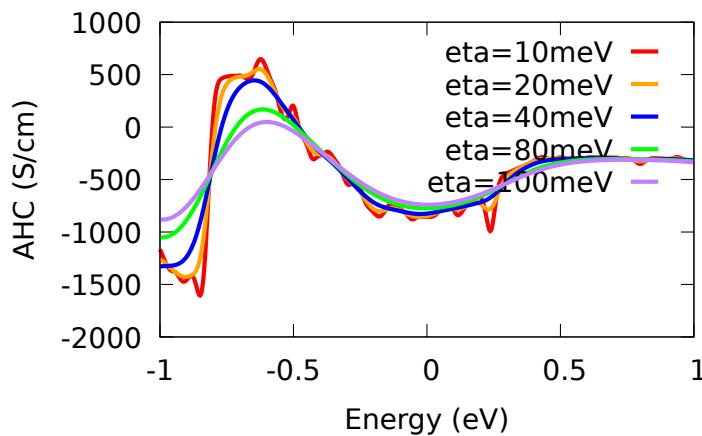
### ► 第 4 步：作图

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

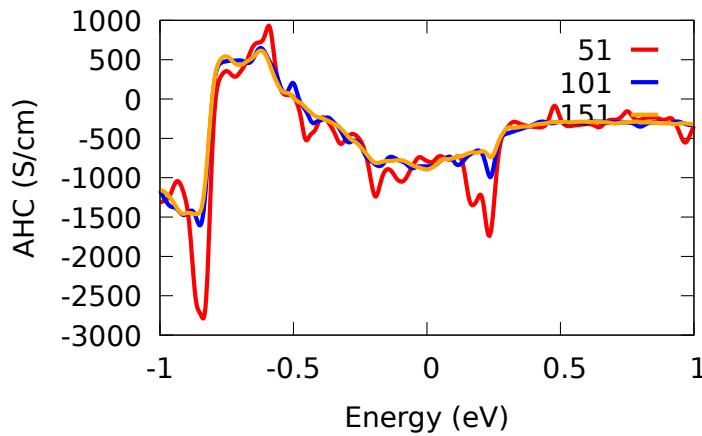
可以得到名为 sigma\_ahc.pdf 的图像：



费米分布的展宽  $\eta$  取 10 到 100 meV 的计算结果收敛性:



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



### 7.3 Co<sub>2</sub>MnGa 反常霍尔电导计算

本节中，我们将以 Co<sub>2</sub>MnGa 作为例子，演示如何计算反常霍尔电导。

#### ► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Co2MnGa
```

目录中有以下文件:

wt.in: 这是 WannierTools 的主输入文件。

Wannier90\_hr.tar.gz: 用 Fe 构造的实空间哈密顿量。使用前请解压。

### ► 第 2 步: 准备输入文件

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

wt.in 文件说明:

```

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

```

### ► 第 3 步: 提交计算任务

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
```

计算完成后，将会得到如下文件:

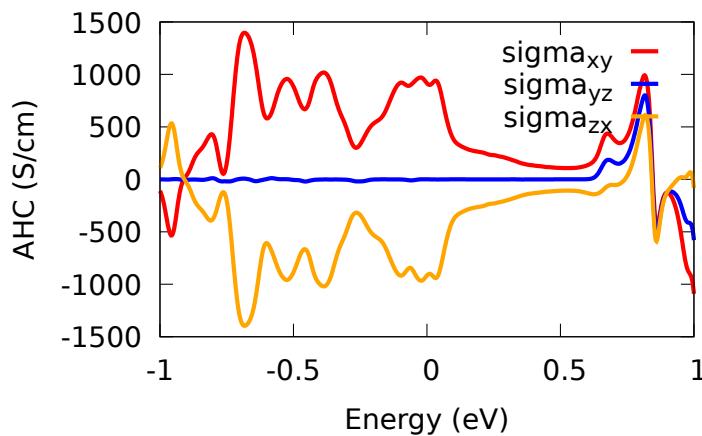
(1) sigma\_ahc\_eta\*\*\*.00meV.txt: 在某个展宽下的反常霍尔电导，单位为  $(\text{Ohm} * \text{cm})^{-1}$ ，从左到右一共四列数据，依次为化学势（相对于 E\_FERMI）、 $\sigma_{xy}^A$ 、 $\sigma_{yz}^A$  和  $\sigma_{zx}^A$ 。eta 代表费米分布的展宽， $f(E) = \frac{1}{1+e^{(\omega-\mu)\times\frac{1}{eta}}}$ 。因此，Eta 越小，费米-狄拉克的分布就越尖锐。

(2) sigma\_ahc.gnu: 画图脚本

### ► 第 4 步: 作图

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

可以得到名为 sigma\_ahc.pdf 的图像:



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

## 7.4 Haldane 模型反常霍尔电导计算

本节中，我们将以 Haldane 模型作为例子，演示如何计算反常霍尔电导。

### ► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Haldane_model
```

### ► 第 2 步：准备输入文件

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

wt.in 文件说明：

```

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

```

```

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

```

### ► 第3步：提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

计算完成后，将会得到如下文件：

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

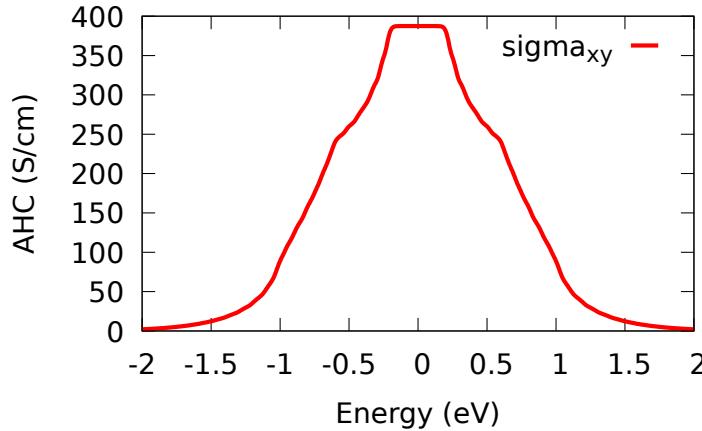
### ► 第4步：作图

```

1 $ gnuplot sigma_ahc.gnu

```

可以得到名为 sigma\_ahc.pdf 的图像：



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

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

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

离散化积分化求和后：

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

与 kz 无关

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

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

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

## 8 反常能斯特效应

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

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

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

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

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

在 WannierTools 中，我们采用公式 (17) 进行计算。

### 参考文献

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

### 8.1 Co<sub>2</sub>MnGa 反常能斯特系数计算

本节中，我们将以 Co<sub>2</sub>MnGa 作为例子，演示如何计算反常能斯特系数。

#### ► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd ~/data/data/WannierToolsTutorials/examples/Co2MnGa
```

目录中有以下文件：

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

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

(2) Wannier90\_hr.tar.gz: Co<sub>2</sub>MnGa 的实空间哈密顿量，使用前请用以下命令解压

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

(3) README.txt: 本例的说明文档

#### ► 第 2 步：准备输入文件

wt.in 文件如下所示：

```

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

```

wt.in 文件中，几个重要的参数为：

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

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

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

### ► 第 3 步：提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

计算完成后，将会得到如下文件：

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

(2)alpha\_ane.gnu: 画图脚本

### ► 第 4 步：作图

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

运行如下命令

```

1 $ gnuplot alpha_ane.gnu

```

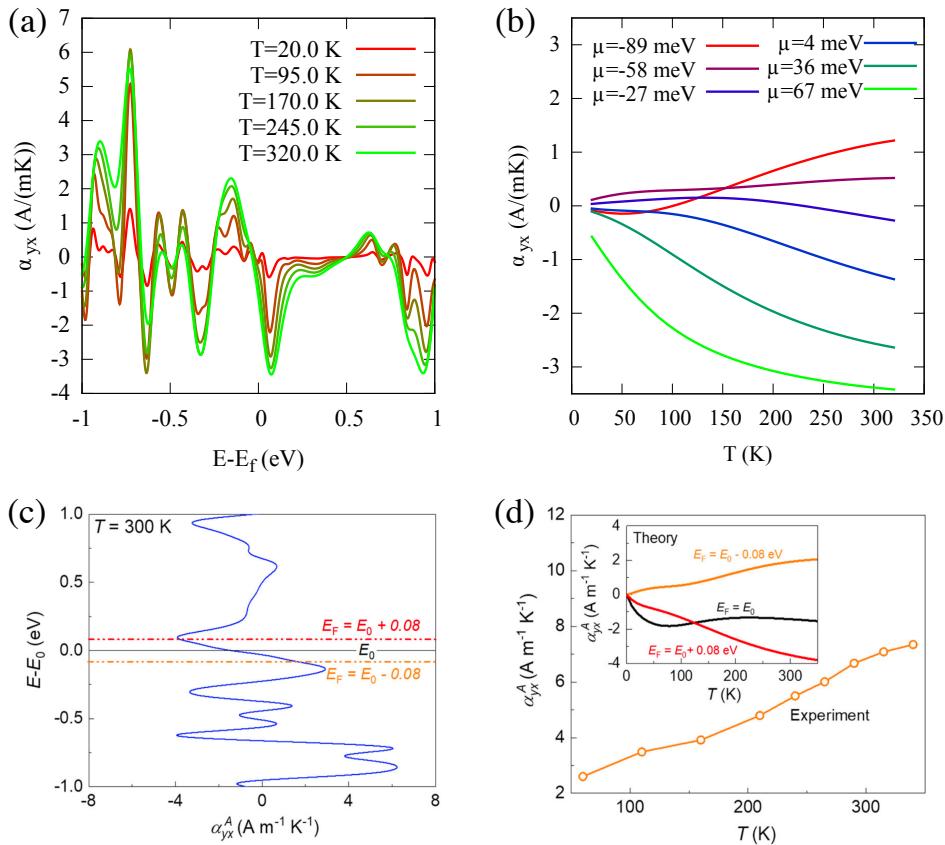


图 8.1: (a) 不同温度下,  $\alpha_{yx}$  随化学势的变化, 不同颜色的曲线表示不同的温度。(b) 移动化学势时,  $\alpha_{yx}$  随温度的变化, 不同颜色的曲线表示不同化学势下的结果。(c)  $T=300$  K 时,  $\alpha_{yx}$  随化学势的变化, 图片取自 [16]。(d) 实验上  $\alpha_{yx}$  随温度的变化, 小图是改变化学势、计算得到的  $\alpha_{yx}$  随温度的变化, 图片取自 [16]。

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

## 9 自旋霍尔电导率

本节我们将要介绍自旋霍尔电导率的基本方法，以 Pt 和  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$  为例，展示如何利用 WannierTools 计算材料的 SHC。

### 参考文献

1. Intercorrelated anomalous Hall and spin Hall effect in kagome-lattice  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ -based shandite films, Yong-Chang Lau, Junya Ikeda, Kohei Fujiwara, Akihiro Ozawa, Jiaxin Zheng, Takeshi Seki, Kentaro Nomura, Liang Du, Quansheng Wu, Atsushi Tsukazaki, Koki Takanashi, Physical Review B, 108(6): 064429. (2023) [13]

### 9.1 基本思想

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

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

### 9.2 Pt 自旋霍尔电导率计算

#### ► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Pt
```

目录中有以下文件：

wt.in：这是 WannierTools 的主输入文件。

Wannier90\_hr.tar.gz：Pt 的实空间哈密顿量，使用前请解压：

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

#### ► 第 2 步：准备输入文件

wt.in 文件如下所示（可以根据自己的需要对文件中的相关参数进行修改）：

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

```

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

```

对于自旋霍尔电导率 (SHC) 计算，比较关键的是以下参数的设置：

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

(2) SHC\_calc: 控制是否计算体系的自旋霍尔电导率。如果 SHC\_calc=T，则意味着开启自旋霍尔电导率的计算。如果 SHC\_calc=F，则意味着关闭自旋霍尔电导率的计算。

(3) SOC: 为整数，是自旋轨道耦合的标志。如果 SOC=0，则意味着在给定的紧束缚模型中不包含 SOC。如果 SOC=1 或 >0，则表示 SOC 已经包含在紧束缚模型中。

### ► 第 3 步：提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

计算完成后，将会得到如下文件：

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

(2) sigma\_shc.gnu: 画图脚本

### ► 第 4 步：作图

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

```

1 $ gnuplot sigma_shc.gnu0

```

可以得到名为 sigma\_shc.pdf 的图像：

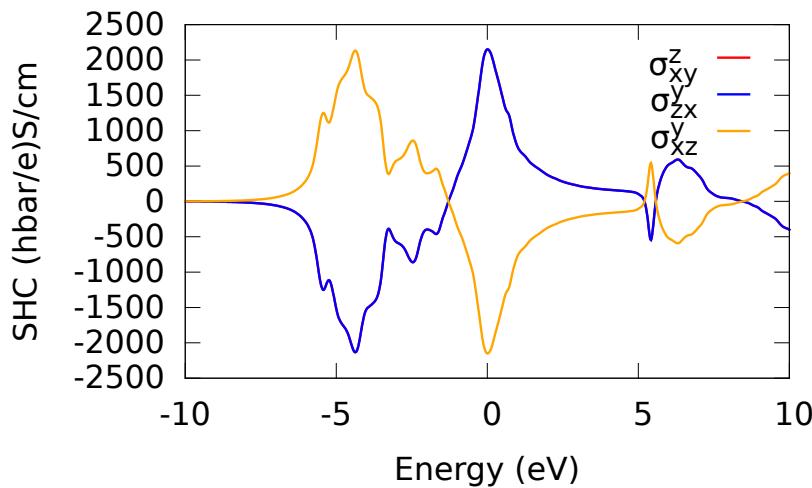


图 9.1: Pt-SHC 图像

Pt-SHC 计算的其他相关文献:

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

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

及其文章中对应的图像:

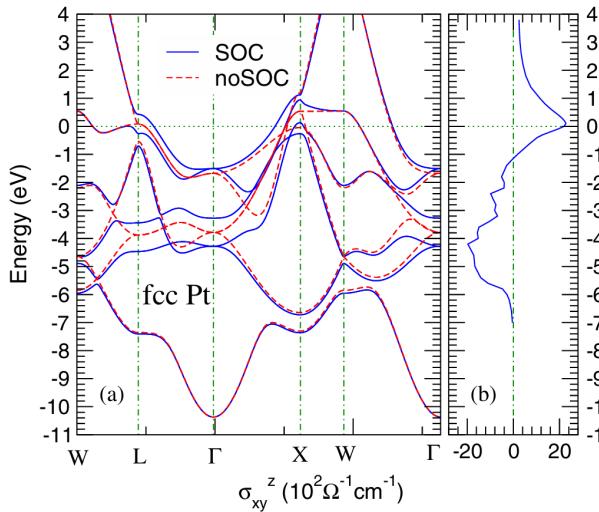


图 9.2: Pt-SHC 计算的其他相关文献 1

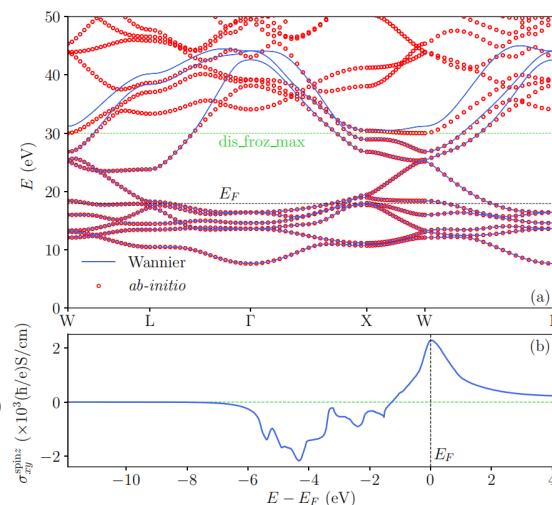


图 9.3: Pt-SHC 计算的其他相关文献 2

### 9.3 Co<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub>S<sub>2</sub> 自旋霍尔电导率计算

#### ► 第 1 步: 进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Co3Sn2S2/non-magnetic
```

目录中有以下文件:

wt.in: 这是 WannierTools 的主输入文件。

Wannier90\_hr.tar.gz: Co<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub>S<sub>2</sub> 的实空间哈密顿量 (注意: 在获得实空间哈密顿量的过程中, 要保证 Co<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub>S<sub>2</sub> 处于顺磁态), 使用前请解压:

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

### ► 第 2 步：准备输入文件

wt.in 文件如下所示（可以根据自己的需要对文件中的相关参数进行修改）：

```

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

```

对于自旋霍尔电导率 (SHC) 计算，比较关键的是以下参数的设置：

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

### ► 第 3 步：提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

计算完成后，将会得到如下文件：

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

#### ► 第 4 步：作图

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

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

可以得到名为 sigma\_shc.pdf 的图像：

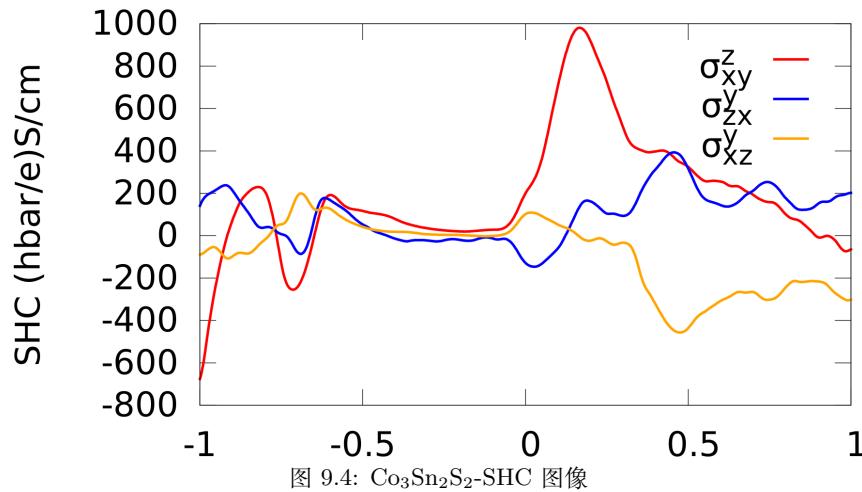


图 9.4:  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ -SHC 图像

我们的此项功能已经在文章 Intercorrelated anomalous Hall and spin Hall effect in kagome-lattice  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ -based shandite films [19] 中有所体现。

## 10 轨道霍尔电导率

本节我们将要介绍轨道霍尔电导率 (OHC) 的基本方法，以 WS<sub>2</sub> 和 CrS<sub>2</sub> 为例，展示如何利用 WannierTools 计算材料的 OHC。

### 参考文献

1. 1. Orbital Hall insulating phase in transition metal dichalcogenide monolayers. Canonico, Luis M. and Cysne, Tarik P. and Molina-Sanchez, Alejandro and Muniz, R. B. and Rapoport, Tatiana G. PhysRevB.101.161409 [20].
2. 2. Connecting Higher-Order Topology with the Orbital Hall Effect in Monolayers of Transition Metal Dichalcogenides. Costa, Marcio and Focassio, Bruno and Canonico, Luis M. and Cysne, Tarik P. and Schleider, Gabrie. PhysRevLett.130.116204 [21].

### 10.1 基本思想

与自旋霍尔效应 (SHE) 类似，轨道霍尔效应 (OHE) 是施加电场可产生横向纯轨道电流的现象。但不同于 SHE 的是，OHE 的产生并不需要自旋轨道耦合效应，只需要合适的轨道杂化即可。因此，其产生条件相较于 SHE 更加容易。根据 Kubo 公式，本征轨道霍尔电导率 (OHC) 可以写成

$$\sigma_{\alpha\beta}^{L_\gamma}(\mu, T) = e \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \sum_n f_{n,k} \Omega_{\alpha,\beta,n}^{L_\gamma}(k) \quad (19)$$

其中， $\Omega_{\alpha,\beta,n}^{L_\gamma}(k)$  定义为轨道角动量  $L_\gamma$  投影的贝利曲率，其表达式如下

$$\Omega_{\alpha,\beta,n}^{L_\gamma}(k) = \hbar \sum_{m \neq n} \text{Im} \left[ \frac{[j_\alpha^{L_\gamma}(k)]_{nm} [j_\beta(k)]_{mn}}{(E_{n,k} - E_{m,k} + i0^+)^2} \right] \quad (20)$$

其中  $j_\alpha^{L_\gamma} = \frac{1}{2}(j_\alpha \cdot L_\gamma + L_\gamma \cdot j_\alpha)$  是携带  $L_\gamma$  的流向  $\alpha$  方向的轨道角动量流， $j_\alpha = \frac{\partial H(k)}{\partial k^\alpha}$ 。

对于使用者而言，相较于 SHC 的计算需要额外注意的是，轨道角动量算符在不同的体系中有所不同，需要根据哈密顿量的原子轨道基组顺序进行构建。在使用 WannierTools 的时候，轨道角动量算符需要单独作为一个输入文件（文件名要命名为：oam.dat）。这里给出角动量算符的在  $p,d$  原子轨道基矢下的表达式。在基组  $\{p_z, p_x, p_y\}$  下，不同方向的角动量算符的表达式为

$$\hat{L}_x = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{L}_y = \hbar \begin{bmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{L}_z = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{bmatrix} \quad (21)$$

在基组  $\{d_{z^2}, d_{xz}, d_{yz}, d_{xy}, d_{x^2-y^2}\}$  下，不同方向的角动量算符的表达式为

$$\hat{L}_x = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & -i\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i & 0 \\ i\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{L}_y = \hbar \begin{bmatrix} 0 & i\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \\ -i\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{L}_z = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2i \\ 0 & 0 & 0 & 2i & 0 \end{bmatrix} \quad (22)$$

根据上面的表达式，我们已经写好了基于”wt.in”的信息自动生成轨道角动量算符的程序“OAM\_generator.py”，运行这个 python 程序就可以生成需要的轨道角动量算符文件”oam.dat”。

## 10.2 WS<sub>2</sub> 和 CrS<sub>2</sub> 的轨道霍尔电导计算

下面的文件名和文件内容以 WS<sub>2</sub> 为例，CrS<sub>2</sub> 同理适用。

### ► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/OHC/WS2
```

目录中有以下文件：

wt.in：这是 WannierTools 的主输入文件。

WS2\_wannier90\_hr.dat：WS2 的实空间哈密顿量。

OAM\_generator.py：生成轨道角动量文件的程序。

oam.dat：轨道角动量算符的信息。

TMD\_OHC\_Lz.py, TMD\_OHC\_Lx\_and\_Ly.py：后处理的作图程序，用于绘制携带不同轨道角动量的 OHC。

### ► 第 2 步：准备输入文件

wt.in 文件如下所示（可以根据自己的需要对文件中的相关参数进行修改）：

```
1 --
2           wt.in
3 ...
4 &TB_FILE
5 Hrfile = 'WS2_wannier90_hr.dat'
6 Package = 'VASP'
7 /
8 LATTICE
9 Angstrom          ! crystal lattice information
10    3.0475636     0.0000000   0.0000000
11   -1.5237818     2.6392675   0.0000000
12    0.0000000     0.0000000   17.9481697
13 ATOM_POSITIONS
14 3
15 Cartisen          ! Direct or Cartisen coordinate
16 Cr     0.0000000   0.0000000   8.9740849
17 S      1.5237818   0.8797558   10.4481694
18 S      1.5237818   0.8797558   7.5000003
19
```

```

20 PROJECTORS
21 5 3 3
22 Cr dz2 dxz dyz dx2-y2 dxy
23 S pz px py
24 S pz px py
25
26 SURFACE           ! See doc for details
27 0 0 1
28 1 0 0
29 0 1 0
30
31 !> bulk band structure calculation flag
32 &CONTROL
33 BulkBand_calc      = T
34 Intra_orbital_hall_calc = T
35 /
36
37 &SYSTEM
38 NSLAB = 20          ! for thin film system
39 NSLAB1= 4            ! nanowire system
40 NSLAB2= 4            ! nanowire system
41 NumOccupied = 14     ! NumOccupied
42 SOC = 1              ! soc
43 E_FERMI = -1.3727    ! e-fermi
44 /
45
46 &PARAMETERS
47 Eta_Arc = 0.001     ! infinite small value, like broadening
48 E_arc = 0.0           ! energy for calculate Fermi Arc
49 OmegaNum = 500         ! omega number
50 OmegaMin = -3         ! energy interval
51 OmegaMax = 3           ! energy interval
52 Nk1 = 201             ! number k points odd number would be better
53 Nk2 = 201             ! number k points odd number would be better
54 Nk3 = 1               ! number k points odd number would be better
55 NP = 2                ! number of principle layers
56 /
57
58 KPATH_BULK           ! k point path
59 3
60 G 0.0 0.0 0.0 K -0.33333333 0.66666667 0.0
61 K -0.33333333 0.66666667 0.0 M 0.0 0.5 0.0
62 M 0.0 0.5 0.0 G 0.0 0.0 0.0

```

对于 OHC 的计算，以下几点需要注意：

(1) **Intra\_orbital\_hall\_calc**: 控制是否计算体系的轨道霍尔电导率。如果 **Intra\_orbital\_hall\_calc=T**，则意味着开启轨道霍尔电导率的计算。如果 **Intra\_orbital\_hall\_calc=F**，则意味着关闭轨道霍尔电导率的计算。

(2) **SOC**: 为整数，是自旋轨道耦合的标志。如果 **SOC=0**，则意味着在给定的紧束缚模型中不

包含 SOC。如果 SOC=1 或 >0，则表示 SOC 已经包含在紧束缚模型中。对于 SOC=1 (spinful) 的情况，相对于 SOC=0 (spinless) 的情况，哈密顿量的基矢要扩充一倍，相应的轨道角动量算符 (oam.dat) 也要有相应的扩充和改变。

(3) PROJECTORS: 原子轨道基组的顺序要与轨道角动量算符基矢的顺序一致。

(4) 上述 wt.in 文件的 kmesh 设置 (Nk1,Nk2,Nk3) 是针对二维材料。计算三维材料时，需要将三个值设为相等。

### ► 第 3 步：提交计算任务

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
```

计算完成后，将会得到如下文件：

(1) Intra\_Orbital\_Hall\_Conductivity.dat: 这个文件中存储的时 OHC 张量的信息。OHC 张量  $\sigma_{\alpha\beta}^{L_z}$  有 27 个分量。第一列是不同费米面的值，后面 54 个分别为 27 个张量元的实部和虚部。对于正确的计算结果，虚部应该都为 0。计算结果的单位是  $\frac{e}{2\pi}$ 。对于三维和二维电导张量以及单位的转换，请参考“反常霍尔效应”章节。

(2) bulkek.dat, bulkek.gnu: 绘制能带的数据和程序

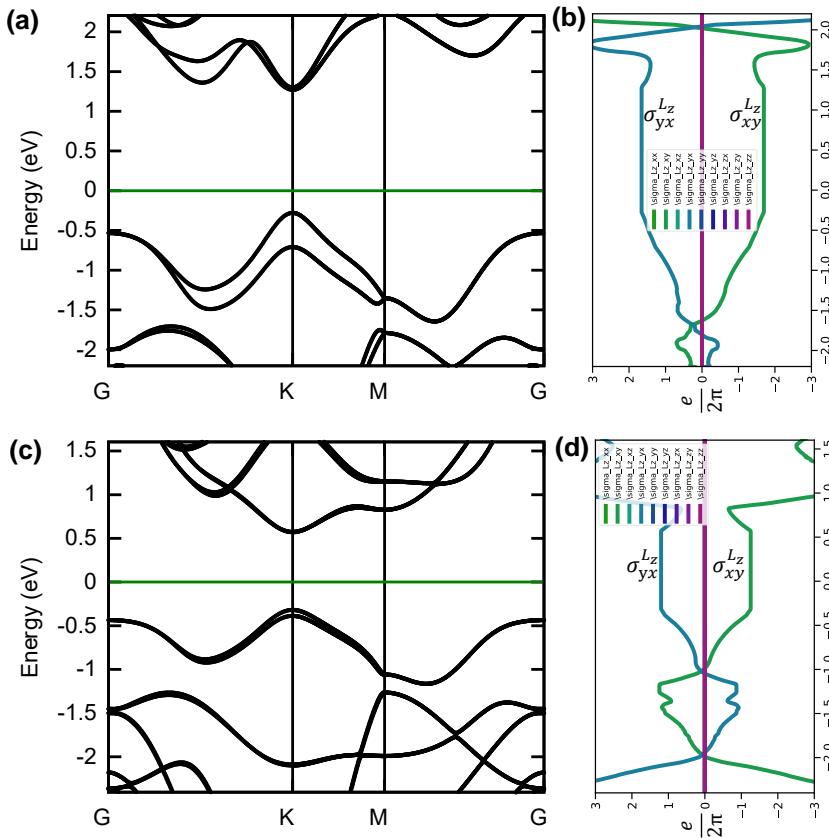


图 10.1: WS<sub>2</sub> 的能带 (a) 和 OHC 张量 (b), CrS<sub>2</sub> 的能带 (c) 和 OHC 张量 (d)

### ► 第 4 步：作图

```
1 $ python TMD_OHC_Lz.py
```

运行上述 python 程序，可以得到 OHC\_Lz.pdf 的图像，如图10.1所示即为 WS<sub>2</sub> 和 CrS<sub>2</sub> 的能带和随费米面变化的 OHC，其中  $\sigma_{xy}^{L_z}$  在能隙中有较大平台。同时，计算的结果在误差允许

的范围内，满足对称性限制：对于这里计算的 2H-TMD，WS<sub>2</sub> 和 CrS<sub>2</sub>，均属于  $D_{3h}$  点群，其 OHC 张量满足  $\sigma_{xy}^{L_z} = -\sigma_{yz}^{L_z}$ ,  $\sigma_{yz}^{L_x} = -\sigma_{xz}^{L_y}$ ,  $\sigma_{zx}^{L_y} = -\sigma_{zy}^{L_x}$ ，并且其他张量元均为 0。

另外，文件夹中还有一个 TMD\_OHC\_Lx\_and\_Ly.py 文件。这个文件是求解携带角动量  $L_x$  和  $L_y$  的 OHC 张量元。由于这里是二维材料，且  $Nk3 = 1$ ，所以这个 python 画图得到的结果没有物理意义，在计算三维材料的时候，如果需要得到这些张量元，直接运行这个 python 程序即可。在这里，运行这个程序也会得到 OHC\_Lx\_and\_Ly.pdf 的图像，虽然没有实际意义，但是其结果也是满足上述对称性限制的，是自洽的结果。

我们的此项功能已经在文章 Connecting Higher-Order Topology with the Orbital Hall Effect in Monolayers of Transition Metal Dichalcogenides. [21] 中有所体现，微小的数值差别可以接受，因为我们的方法和文中的方法有所不同，我们是在 VASP 的第一性原理计算的基础上构建的 Wannier 哈密顿量，进而计算的 OHC，而文章中是基于 PAOFLOW CODE 构建的赝原子轨道基下的哈密顿量，进而计算的 OHC。

## 11 由洛伦兹力引起的磁阻和普通霍尔效应

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

在 2025 版本中，我们新增了 CrSb 以及  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$  研究磁输运性质的例子，参考文献 [22] 和 [23]。

### 参考文献

1. Scaling behavior of magnetoresistance and Hall resistivity in the altermagnet CrSb, Peng X, Wang Y, et al, Physical Review B, 111:144402 (2025) [22].
2. Combined first-principles and Boltzmann transport theory methodology for studying magnetotransport in magnetic materials, Z Liu, S Zhang, Z Fang, H Weng, Q Wu, Physical Review Research 6 (4), 043185 (2024) [23].
3. Complex field-, temperature-, and angle-dependent Hall effects from intrinsic Fermi surface revealed by first-principles calculations, SN Zhang, Z Liu, H Pi, Z Fang, H Weng, QS Wu, Physical Review B 110 (20), 205132 (2024) [24].
4. First-principles methodology for studying magnetotransport in narrow-gap semiconductors with  $\text{ZrTe}_5$  example, H Pi, S Zhang, Y Xu, Z Fang, H Weng, Q Wu, npj Computational Materials 10 (1), 276 (2024) [25].
5. Quantum oscillations and transport evidence of topological bands in  $\text{La}_3\text{MgBi}_5$  single crystals, Han X, Pi H, Yan D, et al., Physical Review B, 108(7): 075157 (2023) [26].
6. Origin of large magnetoresistance in the topological nonsymmorphic semimetal  $\text{TaSe}_3$ , Gatti G, Gosálbez-Martínez D, Wu Q S, et al, Physical Review B, 104(15): 155122 (2021) [27].
7. Extremely large magnetoresistance in the “ordinary” metal  $\text{ReO}_3$ , Chen Q, Lou Z, Zhang S N, et al, Physical Review B, 104(11): 115104 (2021) [28].
8. Linear and quadratic magnetoresistance in the semimetal  $\text{SiP}_2$ , Zhou Y, Lou Z, Zhang S N, et al, Physical Review B, 102(11): 115145 (2020) [29].
9. Highly anisotropic interlayer magnetoresistance in  $\text{ZrSiS}$  nodal-line Dirac semimetal, Novak M, Zhang S N, Orbanić F, et al, Physical Review B, 100(8): 085137 (2019) [30].
10. Magnetoresistance from Fermi surface topology, Zhang S N, Wu Q S, Liu Y, et al, Physical Review B, 99(3): 035142 (2019) [31].

弛豫时间近似下常规霍尔电导的计算公式为：

$$\sigma_n^O/\tau_n = e^2 \int_{\text{BZ}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left( -\frac{\partial f(\epsilon, T)}{\partial \epsilon} \right)_{\epsilon=\epsilon_n(\mathbf{k})} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \bar{\mathbf{v}}_n(\mathbf{k}),$$

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_n(\mathbf{k}), \quad \bar{\mathbf{v}}_n(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^0 \frac{dt}{\tau_n} e^{t/\tau_n} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}(t)).$$

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

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

#### ► 第 1 步：进入工作目录, 创建新目录并准备 (复制) 输入文件

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Cu
2 $ mkdir OHE-theta0
3 $ tar -xzvf wannier90_hr.dat_nsymm48.tar.gz
```

拷贝当前目录下的 wannier90\_hr.dat\_nsymm48 以及 wt.in-OHE-theta0 到新目录 OHE-theta0 下：

```
1 $ cp wannier90_hr.dat_nsymm48 OHE-theta0/
2 $ cp wt.in-OHE-theta0 OHE-theta0/wt.in
3 $ cd OHE-theta0
```

其中 wt.in 部分内容如下：

```
1 --
2           wt.in
3 .....
4 &CONTROL
5 Boltz_OHE_calc      = T
6 Symmetry_Import_calc = T ! please set it to be true for magnetoresistance
7   calculation
8 /
9 &SYSTEM
10 SOC = 0             ! without soc : SOC=0; with soc : SOC=1
11 E_FERMI = 7.7083    ! e-fermi
12 Btheta= 0, Bphi= 90  ! magnetic field direction
13 NumOccupied = 6
14 /
15 &PARAMETERS
16 OmegaNum = 3        ! omega number
17 OmegaMin = -0.01     ! energy interval
18 OmegaMax = 0.01      ! energy interval E_i= OmegaMin+ (OmegaMax-OmegaMin)/(OmegaNum
19   -1)*(i-1)
20 EF_integral_range = 0.15 ! in eV, a broadening factor to choose the k points for
21   integration
22 Nk1 =41              ! Kmsh(1) for KCUBE_BULK
23 Nk2 =41              ! Kmsh(2) for KCUBE_BULK
24 Nk3 =41              ! Kmsh(3) for KCUBE_BULK
25 BTauNum= 100          ! Number of B*tau we calculate
```

```

24 BTauMax = 40.0      ! The maximum B*tau, starting from Btau=0.
25 Tmin = 30           ! Temperature in Kelvin
26 Tmax = 330          ! Temperature in Kelvin
27 NumT = 11            ! number temperature we calculate. T_i=Tmin+(Tmax-Tmin)*(i-1)/(
                           NumT-1)
28 Nslice_BTau_Max = 20000 ! default =5000
29 /
30 .....
31 SELECTEDBANDS
32 1
33 6
34
35 KCUBE_BULK
36 0.00 0.00 0.00    ! Original point for 3D k plane
37 1.00 0.00 0.00    ! The first vector to define 3d k space plane
38 0.00 1.00 0.00    ! The second vector to define 3d k space plane
39 0.00 0.00 1.00    ! The third vector to define 3d k cube

```

注意：

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

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

### ► 第 2 步：运行任务，拷贝输出文件到上级目录

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
3 $ cp rho_total_mu_0.0meV.dat .. /rho_total_mu_0.0meV.dat -theta0
4 $ cd ..

```

rho\_total\_mu\_0.0meV.dat 为输出文件, 以温度分块, 包含了 10 列数据, 第 1 列为  $B\tau$  值, 2-9 列为电阻张量分量值。

### ► 第 3 步：绘制 $\rho_{xx}\tau(B\tau)$ 图

```

1 $ gnuplot rho.gnu

```

绘图见图11.1。

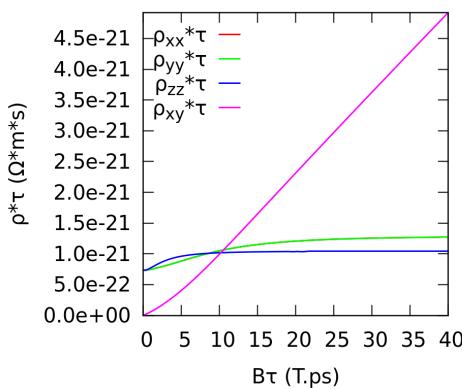
## 11.2 不同磁场方向下的 $\rho_{xx}\tau$

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

```

1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Cu
2 $ mkdir OHE-theta18
3 $ cp wannier90_hr.dat_nsymm48 OHE-theta18/
4 $ cp wt.in-OHE-theta18 OHE-theta18/wt.in
5 $ cd OHE-theta18
6 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .

```

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

```

7 $ sbatch sub-wt.sh
8 $ cp rho_total_mu_0.0meV.dat ../rho_total_mu_0.0meV.dat-theta18
9 $ cd ..

```

其中 wt.in 的部分内容为:

```

1 --
2      wt.in
3 .
4 &SYSTEM
5 SOC = 0           ! without soc : SOC=0; with soc : SOC=1
6 E_FERMI = 7.7083   ! e-fermi
7 Btheta= 18, Bphi= 90    ! magnetic field direction
8 /
9 &PARAMETERS
10 OmegaNum = 1        ! omega number
11 OmegaMin = 0         ! energy interval
12 OmegaMax = 0         ! energy interval E_i= OmegaMin+ (OmegaMax-OmegaMin)/(OmegaNum-1)*(
13     i-1)
14 EF_integral_range = 0.15
15 .

```

对其他角度 Btheta 参数随之更改, 重复操作, 依次生成 rho\_total\_mu\_0.0meV.dat-theta0、rho\_total\_mu\_0.0meV.dat-theta18、rho\_total\_mu\_0.0meV.dat-theta30、rho\_total\_mu\_0.0meV.dat-theta45 4 个文件, 最后运行 rhotheta.gnu。

```

1 $ gnuplot rhotheta.gnu

```

绘图见图11.2。

### 11.3 固定截面的等能线图

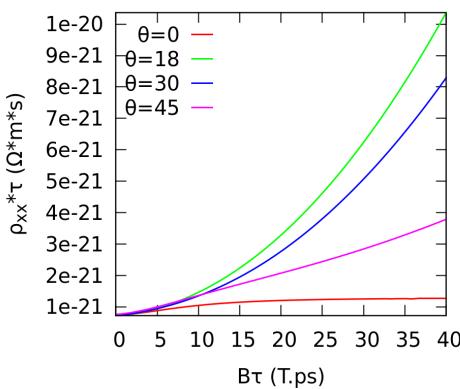
绘制等能线图, 得到费米面截面的形状, 可以和下一节倒空间电子运动轨迹图相互比较。

#### ► 第 1 步: 创建新目录并准备(复制)输入文件

```

1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Cu
2 $ mkdir FS-contour
3 $ cp wannier90_hr.dat_nsymm48 FS-contour/
4 $ cp wt.in-FS-contour FS-contour/wt.in

```

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

```
5 $ cd FS-contour
```

其中 wt.in 文件部分设置如下:

```

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

```

KPLANE\_BULK 为所选截面, Nk1, Nk2 控制撒点密度。

## ► 第 2 步: 运行并绘图

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
3 $ gnuplot fs_kplane.gnu

```

绘图见图11.3。

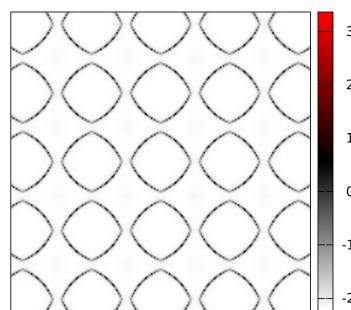


图 11.3: 固定截面下费米面的截线图。

## 11.4 磁场下倒空间以及实空间的电子运动轨迹

计算固定磁场方向下电子在倒空间和实空间的运动轨迹。

### ► 第 1 步：创建新目录并准备（复制）输入文件

```

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

```

其中 wt.in 文件部分设置如下：

```

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

```

KPATH\_BULK 为撒点（起始 k 点）路径，Nk1 为路径撒点数目。

### ► 第 2 步：运行并提取数据

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

计算完成后生成 evolve\_band\_6.txt 文件，其中落在 EF\_integral\_range 范围内的起始 k 点 (Starting k point) 才有数据输出，挑选出有输出的起始 k 点数据保存为 K.txt 文件。注意，输出文件中的 2-7 列为当前坐标系下的结果，而 8-13 列是将磁场方向定为 z 轴方向后的新坐标系下的结果。

### ► 第 3 步：生成倒空间和实空间路径图

```

1 $ cp evolve_band_6.txt K.txt
2 $ cp ./kpath.gnu .
3 $ cp ./lpath.gnu .
4 $ gnuplot kpath.gnu
5 $ gnuplot lpath.gnu

```

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

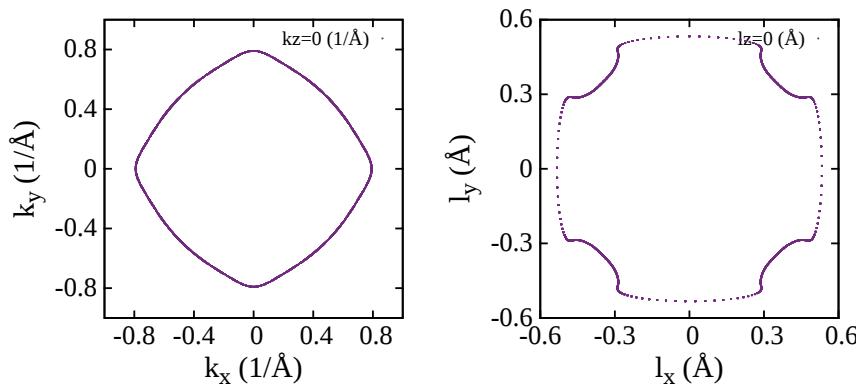


图 11.4: z 方向磁场下，电子在 xy 面内运动的倒空间和实空间轨迹。

## 11.5 磁电阻的各向异性

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

### ► 第 1 步：进入工作目录并运行批量任务脚本

```

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

```

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

```

1 --
2     xyplane.sh
3 #!/bin/bash
4
5 for ((iphi=0; iphi<=36; iphi++))
6 do
7
8 theta=90
9 phi=`echo "$iphi*5"|bc`$theta`$phi`$phi

```

```
10 echo $theta $phi $dir
11 mkdir $dir
12
13 cat >$dir/wt.in <<EOF
14 &TB_FILE
15 Hrfile = 'wannier90_hr.dat_nsymm48'
16 /
17
18 &CONTROL
19 Boltz_OHE_calc      = T
20 Symmetry_Import_calc = T ! please set it to be true for magnetoresistance
   calculation
21 /
22
23 &SYSTEM
24 SOC = 0              ! without soc : SOC=0; with soc : SOC=1
25 E_FERMI = 7.7083     ! e-fermi
26 Btheta= $theta, Bphi= $phi    ! magnetic field direction
27 /
28
29 &PARAMETERS
30 OmegaNum = 1          ! omega number
31 OmegaMin = 0           ! energy interval
32 OmegaMax = 0           ! energy interval E_i= OmegaMin+ (OmegaMax-OmegaMin)/(OmegaNum-1)*(
   i-1)
33 EF_integral_range = 0.05 ! in eV, a broadening factor to choose the k points for
   integration
34 Nk1 =41                ! Kmesh(1) for KCUBE_BULK
35 Nk2 =41                ! Kmesh(2) for KCUBE_BULK
36 Nk3 =41                ! Kmesh(3) for KCUBE_BULK
37 BTauNum= 101           ! Number of B*tau we calculate
38 BTauMax = 10.0          ! The maximum B*tau, starting from Btau=0.
39 Tmin = 30               ! Temperature in Kelvin
40 Tmax = 120              ! Temperature in Kelvin
41 NumT = 4                ! number temperature we calculate. T_i=Tmin+(Tmax-Tmin)*(i-1)/(
   NumT-1)
42 Nslice_BTau_Max = 5000 ! default =5000
43 /
44 .....
45 SELECTEDBANDS
46 1
47 6
48
49 KCUBE_BULK
50 0.00 0.00 0.00 ! Original point for 3D k plane
51 1.00 0.00 0.00 ! The first vector to define 3d k space plane
52 0.00 1.00 0.00 ! The second vector to define 3d k space plane
53 0.00 0.00 1.00 ! The third vector to define 3d k cube
54 EOF
55
```

```

56 cat>$dir/wt-theta.sh<<EOF
57 #!/bin/bash
58 #SBATCH -J $phi
59 #SBATCH -p tyhctest
60 #SBATCH -N 1
61 #SBATCH --ntasks-per-node=2
62 #SBATCH -o out
63 #SBATCH -e error
64
65 module purge
66 module load compiler/intel/2021.3.0
67 module load mpi/intelmpi/2021.3.0
68
69 export I_MPI_PMI_LIBRARY=/opt/gridview/slurm/lib/libpmi.so
70 export PATH=WannierToolsTutorials/bin:$PATH
71
72 srun --mpi=pmi2 wt.x
73 EOF
74
75 cp wannier90_hr.dat_nsymm48 $dir/
76 cd $dir
77 sbatch wt-theta.sh
78 cd ..
79 done

```

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

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

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

#### ► 第 2 步：运行 python 脚本，提取整合数据

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

AMR\_rhoT.py 脚本主程序可更改部分如下

```

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

```

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

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

度的变化曲线。

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

AMR\_rhotheta.py 脚本主程序可更改部分如下

```
1 --
2 . . .
3 if __name__ == '__main__':
4     theta_interval=5
5     Btau_show=6
6     Btau_num=101
7     Btau_max=10
8     Btau_list=np.linspace(0,Btau_max,Btau_num)
9     Btau_interval=int((Btau_num-1)/(Btau_show-1))
10    Btau_choose=Btau_list[::-Btau_interval]
11 . . .
```

theta\_interval 代表磁场从  $0^\circ$  开始增大的角度间隔, Btau\_show 代表想要展示的磁场数目, Btau\_num 和 Btau\_max 为 wt.in 文件对应的 BTauNum 和 BTauMax 值。请根据 wt.in 的实际设定参数更改以上部分。如果你的磁场不是从  $0^\circ$  开始计数, 请更改函数 extract\_rho\_theta 中的第三行。

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

### ► 第3步：绘制磁电阻各向异性图

进入 rhotheta 文件夹，拷贝画图脚本到该文件夹并运行

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

绘图见图11.5。

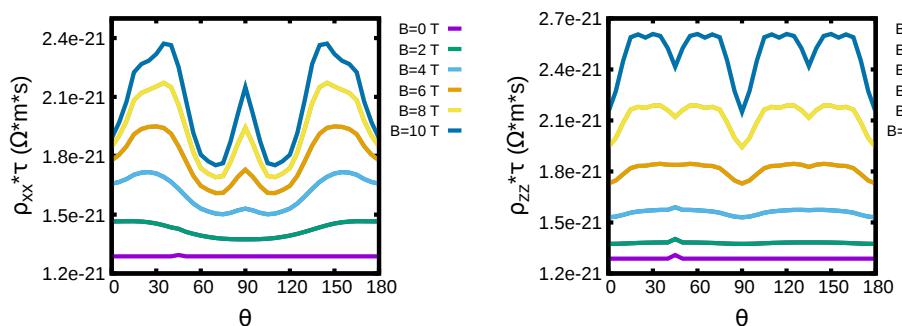


图 11.5: 磁场在 xy 面内旋转, 温度为 90K 时  $\rho_{xx}\tau$ ,  $\rho_{zz}\tau$  随  $B\tau$  的演化。为了提高计算精度, Nk1, Nk2, Nk3 增大到 81。对于不同的计算精度, 请自行更改 gnu 脚本中 yrangle 范围。

## 11.6 精度控制说明

### ► RKF45\_PERIODIC\_LEVEL (新增参数)

WannierTools 中磁阻的计算需要进行电子运动轨迹的求解，电子轨迹计算精度直接影响计算结果。在离散的时间序列中，如果电子某一时刻的倒空间位置与初始点距离小于设定值，即认为该点与初始点重合视为同一点，剩余的时间序列不再计算而是周期性重复已计算的序列。RKF45\_PERIODIC\_LEVEL 用于调控该距离设定值，调控值越大，距离设定值越小，计算越精确。可以在 WT.out 观察序列长度 (icycle)，如果过小请增大 RKF45\_PERIODIC\_LEVEL 的值。默认值为 1。对于费米面口袋很大的体系（大部分金属体系），使用默认值即足够。

### ► EF\_integral\_range

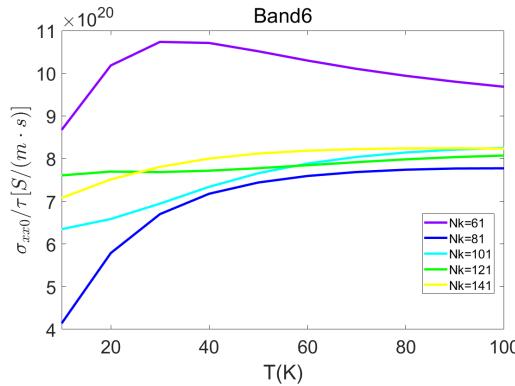
用以决定费米面附近多大能量范围内的  $k$  点被用以参与电导的计算。根据费米分布函数随温度变化的特性，经过测试推荐使用以下公式来决定 EF\_integral\_range 的大小：

$$\text{EF\_integral\_range} \approx \frac{T}{300\text{K}} \times 0.026\text{eV} \times 5$$

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

### ► Nk1,Nk2,Nk3

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



温度不太低时如 50 K 以上  $Nk1=Nk2=Nk3=Nk=81$  时即具有较好的收敛性；而温度小于 50 K 时， $Nk$  增大到 121 时具有较好的收敛性。

### ► Nslice\_BTau\_Max

电子运动轨迹点序列切片数。该值越大，相邻两个轨迹点之间距离越小，在进行平均速度的积分时精度越高。与 RKF45\_PERIODIC\_LEVEL 共同决定平均速度积分的精度。默认为 5000。

RKF45\_PERIODIC\_LEVEL 的调控优先级高于 Nslice\_BTau\_Max。如果计算结果出现负磁阻, 请尝试调节这两项参数。

## 11.7 CrSb 例子

CrSb 是一种典型的交错磁体 (Altermagnet), 其实验测得的抗铁磁转变温度极高 ( $T_N \approx 712K$ ), 磁结构在外加磁场下几乎保持不变, 如图11.6。我们对该材料的计算表明, 其反常霍尔效应 (AHC) 几乎为零。因此, 无论是实验测量还是数值模拟, 其磁输运性质均完全由洛伦兹力主导, 而非来自任何反常霍尔效应贡献。

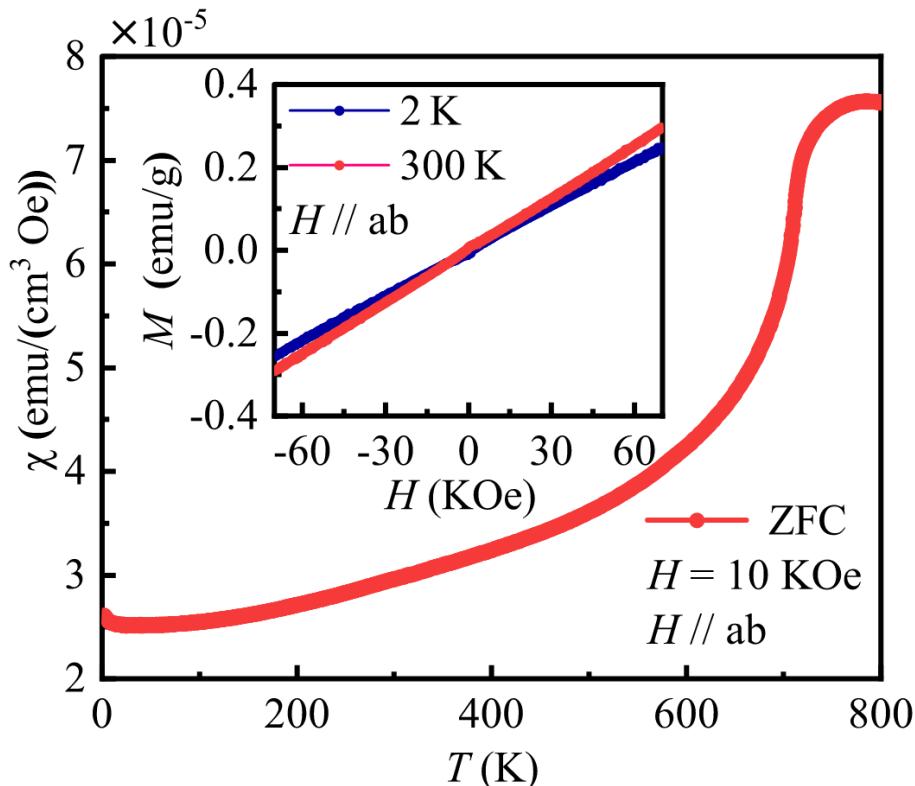


图 11.6: 在零场冷却 (ZFC) 条件下, 施加  $\mu_0 H = 1 \text{ T}$ 、磁场沿 ab 面方向时测得的磁化率  $\chi(T)$  随温度变化曲线。插图显示在  $T = 2 \text{ K}$  和  $300 \text{ K}$  下, 磁化强度  $M$  随外加磁场的变化。

在本文中, 我们分别构建了两种假设结构: 一种保持交错磁序 (altermagnetic), 另一种则假设为非磁态。通过对比它们的电学与磁输运结果, 可以更深入地理解 CrSb 中交错磁序对输运行为的影响。

### 11.7.1 交错磁构型下的 CrSb

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/CrSb/magnetic
```

目录下存在若干文件夹: band, bulkFS, ahc, ohc。分别用于计算能带, 费米面, 反常霍尔效应, 普通霍尔效应。

► 进入 band 文件夹

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/CrSb/magnetic/band
```

其中 wt.in 文件部分设置如下:

```

1 --  

2 wt.in  

3 .....  

4 &CONTROL  

5 BulkBand_calc = T  

6 /  

7  

8 &SYSTEM  

9 NumOccupied = 18 ! NumOccupied  

10 SOC = 1 ! soc  

11 E_FERMI = 8.053362 ! e-fermi  

12 /  

13 &PARAMETERS  

14 Nk1 =55 ! number k points odd number would be better  

15 /  

16  

17 KPATH_BULK ! k point path  

18 7 ! number of k line only for bulk band  

19 G 0.00000 0.00000 0.00000 M 0.00000 0.50000 0.00000  

20 M 0.00000 0.50000 0.00000 K -0.33333 0.66667 0.00000  

21 K -0.33333 0.66667 0.00000 G 0.00000 0.00000 0.00000  

22 G 0.00000 0.00000 0.00000 A 0.00000 0.00000 0.50000  

23 A 0.00000 0.00000 0.50000 L 0.00000 0.50000 0.50000  

24 L 0.00000 0.50000 0.50000 H -0.33333 0.66667 0.50000  

25 H -0.33333 0.66667 0.50000 A -0.00000 0.00000 0.50000

```

### ► 提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .  

2 $ sbatch sub-wt.sh

```

### ► 利用 Gnuplot 将结果可视化

```

1 $ gnuplot bulkek.gnu0

```

### ► 进入 bulkFS 文件夹

```

1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/CrSb/magnetic/bulkFS

```

其中 wt.in 文件部分设置如下:

```

1 --  

2 wt.in  

3 .....  

4 &CONTROL  

5 BulkFS_calc = T  

6 /  

7  

8 &SYSTEM  

9 NumOccupied = 18 ! NumOccupied
10 SOC = 1 ! soc

```

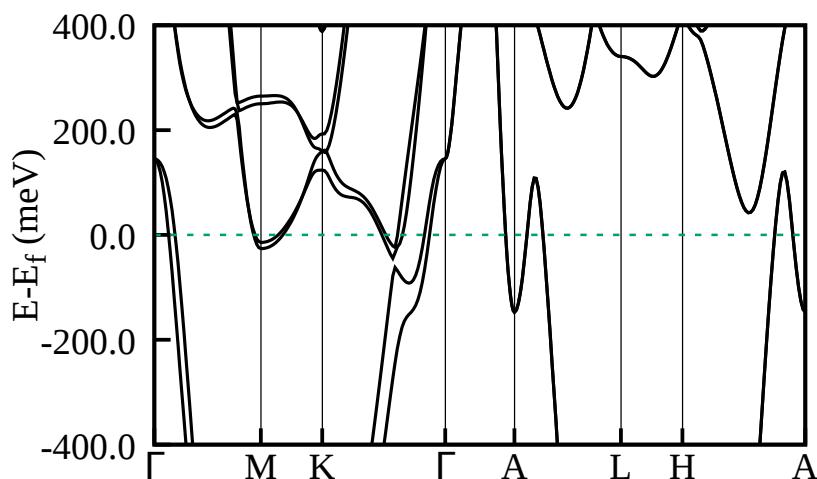


图 11.7: 交错磁结构下的 CrSb 的能带

```

10 E_FERMI = 8.053362      ! e-fermi
11 /
12
13 &PARAMETERS
14 Nk1 =41          ! Kmsh(1) for KCUBE_BULK
15 Nk2 =41          ! Kmsh(2) for KCUBE_BULK
16 Nk3 =41          ! Kmsh(3) for KCUBE_BULK
17 /

```

### ► 提交计算任务

```

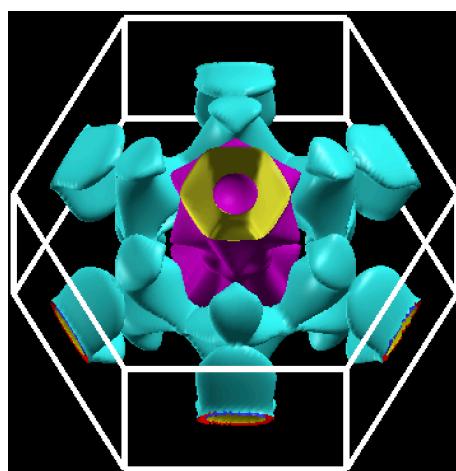
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

### ► 可以通过 XCrySDen 将结果可视化

```
1 $ xcrysden --bxsf FS3D.bxsf
```

由于该集群无法使用 XCrySDen 将费米面可视化，请大家自行将结果下载到自己的电脑本地上操作。如果想要费米面图更加清楚一点，我们可以设置  $N_{k1}=N_{k2}=N_{k3}=81$ ，图11.8就是在该参数下的结果

图 11.8: 交错磁结构下的 CrSb 的费米面结构 ( $N_{k1}=N_{k2}=N_{k3}=81$ )

► 进入 ahc 文件夹 (验证是否有反常霍尔效应)

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/CrSb/magnetic/ahc
```

其中 wt.in 文件部分设置如下:

```

1 --
2      wt.in
3 .
4 &CONTROL
5 AHC_calc = T
6 /
7 &SYSTEM
8 NumOccupied = 18          ! NumOccupied
9 SOC = 1                  ! soc
10 E_FERMI = 8.053362       ! e-fermi
11 /
12
13 &PARAMETERS
14 OmegaNum = 201           ! omega number
15 OmegaMin = -1.1           ! energy interval
16 OmegaMax = 1.1            ! energy interval
17 Nk1 =31                  ! Kmesh(1) for KCUBE_BULK
18 Nk2 =31                  ! Kmesh(2) for KCUBE_BULK
19 Nk3 =31                  ! Kmesh(3) for KCUBE_BULK
20 Fermi_broadening=0.001
21 /
22
23
24 KCUBE_BULK
25 0.00 0.00 0.00 ! Original point for 3D k plane !-0.50 -0.50 - 0.50 ! Original
   point for 3D k plane
26 1.00 0.00 0.00 ! The first vector to define 3d k space plane
27 0.00 1.00 0.00 ! The second vector to define 3d k space plane
28 0.00 0.00 1.00 ! The third vector to define 3d k cube

```

► 提交计算任务

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
```

► 通过 Gnuplot 将结果可视化

```
1 $ gnuplot sigma_ahc.gnu0
```

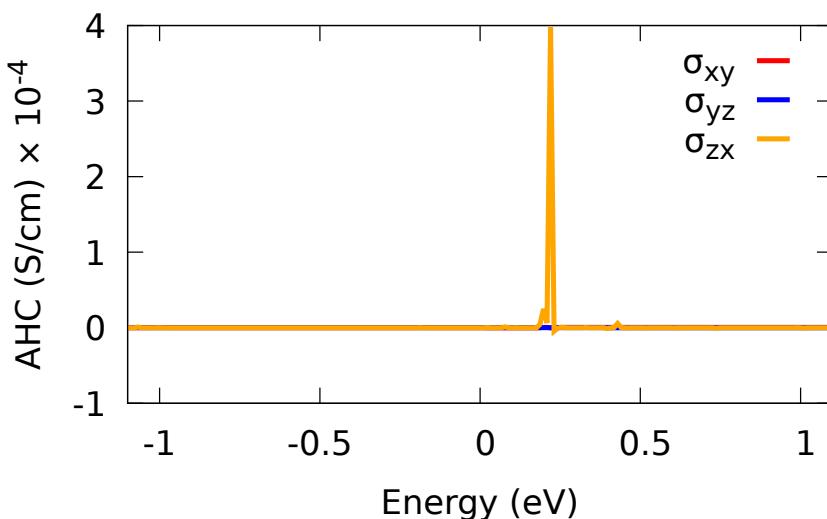
如果想要计算的更加精确一点，可以设置参数 Nk1=Nk2=Nk3=101，图11.9就是在该参数下的结果

由图11.9我们可以看出，反常霍尔效应在这个 CrSb 这个材料里面很小，可以忽略不计。

► 进入 ohc 文件夹

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/CrSb/magnetic/ohc
```

其中 wt.in 文件部分设置如下:

图 11.9: 交错磁构型下的 CrSb 的反常霍尔效应 ( $Nk1=Nk2=Nk3=101$ )

```

1 --
2      wt.in
3 .
4 &CONTROL
5 Boltz_OHE_calc      = T
6 Symmetry_import_calc = T
7 /
8
9 &SYSTEM
10 NumOccupied = 18          ! NumOccupied
11 SOC = 1                  ! soc
12 E_FERMI = 8.053362       ! e-fermi
13 Btheta= 0, Bphi= 90       ! magnetic field direction, Btheta is the angle with z axial,
                           Bphi is the angle with respect to x axial in the x-y plane
14 /
15 &PARAMETERS
16 OmegaNum = 1             ! omega number
17 OmegaMin = 0.0            ! energy interval
18 OmegaMax = 0.0            ! energy interval
19 Nk1 =17                  ! Kmesh(1) for KCUBE_BULK
20 Nk2 =17                  ! Kmesh(2) for KCUBE_BULK
21 Nk3 =17                  ! Kmesh(3) for KCUBE_BULK
22 BTauNum = 201            ! Number of B*tau we calculate
23 BTauMax = 1               ! The maximum B*tau, starting from Btau=0.
24 Tmin = 30                ! Temperature in Kelvin
25 Tmax = 200                ! Temperature in Kelvin
26 NumT = 18                 ! number temperature we calculate. T=Tmin+(Tmax-Tmin)/(NumT-1)
27 Nslice_BTau_Max = 1000
28 EF_integral_range=0.05
29 RKF45_PERIODIC_LEVEL=1
30 /
31

```

```

32 SELECTEDBANDS
33 4
34 17 18 19 20
35
36 KCUBE_BULK
37 0.00 0.00 0.00 ! Original point for 3D k plane ! -0.50 -0.50 - 0.50 ! Original
      point for 3D k plane
38 1.00 0.00 0.00 ! The first vector to define 3d k space plane
39 0.00 1.00 0.00 ! The second vector to define 3d k space plane
40 0.00 0.00 1.00 ! The third vector to define 3d k cube

```

### ► 提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

CrSb 的普通霍尔效应计算时间太长，这里我们只是提供可以计算的一些比较小的参数，如果想要得到准确的结果，请增大相应参数（比如设置 NK1=NK2=NK3=41, Nslice\_BTau\_Max = 10000, EF\_integral\_range=0.1, RKF45\_PERIODIC\_LEVEL=2）。

### ► 通过 Gnuplot 将结果可视化

这里我们选择 150 K 的结果

```
1 $ gnuplot sigma.gnu_150k
```

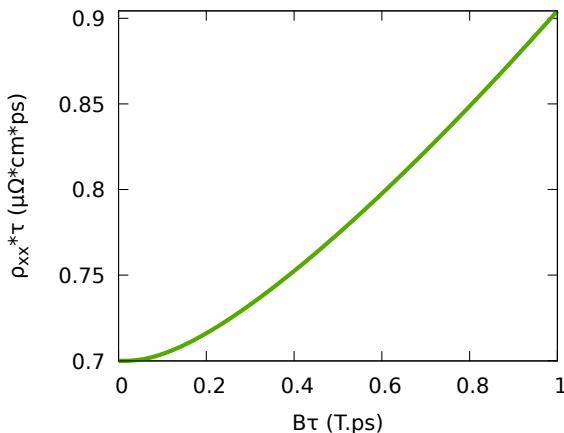


图 11.10: 交错磁构型下的 CrSb 的  $\rho_{xx}$  ( $Nk1=Nk2=Nk3=41$ )

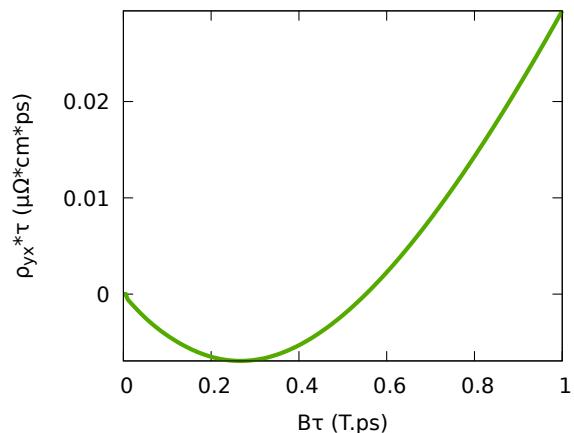


图 11.11: 交错磁构型下的 CrSb 的  $\rho_{yx}$  ( $Nk1=Nk2=Nk3=41$ )

### 11.7.2 非磁结构下的 CrSb

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/CrSb/nonmagnetic
```

目录下存在若干文件夹：band, bulkFS, ohc。分别对应计算能带，费米面，普通霍尔效应。

### ► 进入 band 文件夹

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/CrSb/nonmagnetic/band
```

其中 wt.in 文件部分设置如下：

```

1 --  

2 wt.in  

3 .....  

4 &CONTROL  

5 BulkBand_calc = T  

6 /  

7  

8 &SYSTEM  

9 NumOccupied = 18 ! NumOccupied  

10 SOC = 1 ! soc  

11 E_FERMI = 7.502819 ! e-fermi  

12 /  

13 &PARAMETERS  

14 Nk1 =55 ! number k points odd number would be better  

15 /  

16  

17 KPATH_BULK ! k point path  

18 7 ! number of k line only for bulk band  

19 G 0.00000 0.00000 0.00000 M 0.00000 0.50000 0.00000  

20 M 0.00000 0.50000 0.00000 K -0.33333 0.66667 0.00000  

21 K -0.33333 0.66667 0.00000 G 0.00000 0.00000 0.00000  

22 G 0.00000 0.00000 0.00000 A 0.00000 0.00000 0.50000  

23 A 0.00000 0.00000 0.50000 L 0.00000 0.50000 0.50000  

24 L 0.00000 0.50000 0.50000 H -0.33333 0.66667 0.50000  

25 H -0.33333 0.66667 0.50000 A -0.00000 0.00000 0.50000

```

### ► 提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .  

2 $ sbatch sub-wt.sh

```

### ► 通过 Gnuplot 将结果可视化

```

1 $ gnuplot bulkek.gnu0

```

### ► 进入 bulkFS 文件夹

```

1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/CrSb/nonmagnetic/bulkFS

```

其中 wt.in 文件部分设置如下:

```

1 --  

2 wt.in  

3 .....  

4 &CONTROL  

5 BulkFS_calc = T  

6 /  

7  

8 &SYSTEM  

9 NumOccupied = 18 ! NumOccupied
10 SOC = 1 ! soc

```

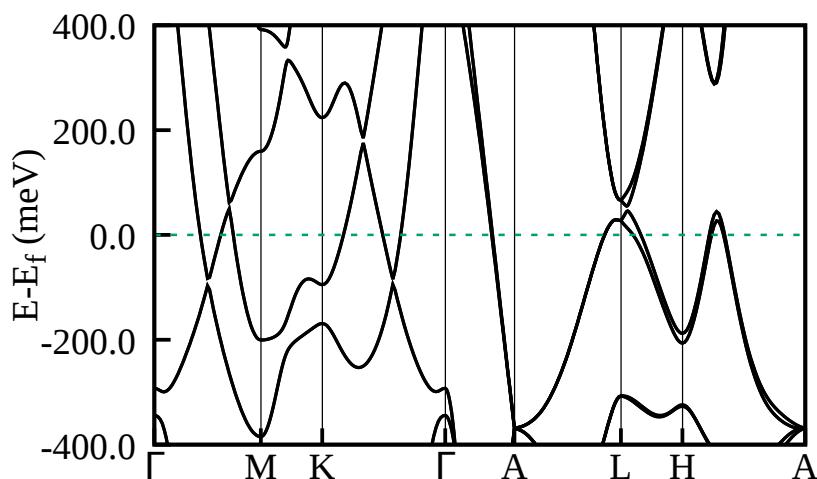


图 11.12: 非磁结构下的 CrSb 的能带

```

10 E_FERMI = 7.502819      ! e-fermi
11 /
12
13 &PARAMETERS
14 Nk1 =41          ! Kmesh(1) for KCUBE_BULK
15 Nk2 =41          ! Kmesh(2) for KCUBE_BULK
16 Nk3 =41          ! Kmesh(3) for KCUBE_BULK
17 /

```

### ► 提交计算任务

```

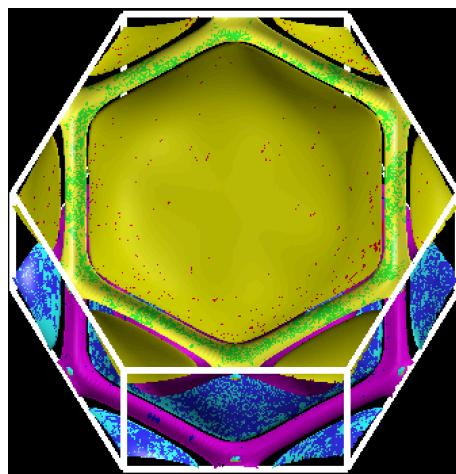
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

### ► 可以通过 XCrySDen 将结果可视化

由于该集群无法使用 XCrySDen 将费米面可视化，请大家自行将结果下载到自己的电脑本地上操作。如果想要费米面图更加清楚一点，我们可以设置  $Nk1=Nk2=Nk3=81$ ，图11.13就是在该参数下的结果

```
1 $ xcrysden --bxsf FS3D.bxsf
```

图 11.13: 非磁结构下的 CrSb 的费米面结构 ( $Nk1=Nk2=Nk3=81$ )

### ► 进入 ohc 文件夹

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/CrSb/nonmagnetic/ohc
```

其中 wt.in 文件部分设置如下：

```

1 --
2           wt.in
3 .....
4 &CONTROL
5 Boltz_OHE_calc      = T
6 Symmetry_import_calc = T
7 /
8
9 &SYSTEM
10 NumOccupied = 18          ! NumOccupied
11 SOC = 1                  ! soc
12 E_FERMI = 8.053362        ! e-fermi
13 Btheta= 0, Bphi= 90       ! magnetic field direction, Btheta is the angle with z axial,
                           Bphi is the angle with respect to x axial in the x-y plane
14 /
15 &PARAMETERS
16 OmegaNum = 1             ! omega number
17 OmegaMin = 0.0            ! energy interval
18 OmegaMax = 0.0            ! energy interval
19 Nk1 =17                  ! Kmesh(1) for KCUBE_BULK
20 Nk2 =17                  ! Kmesh(2) for KCUBE_BULK
21 Nk3 =17                  ! Kmesh(3) for KCUBE_BULK
22 BTauNum = 201            ! Number of B*tau we calculate
23 BTauMax = 1              ! The maximum B*tau, starting from Btau=0.
24 Tmin = 30                ! Temperature in Kelvin
25 Tmax = 200               ! Temperature in Kelvin
26 NumT = 18                ! number temperature we calculate. T=Tmin+(Tmax-Tmin)/(NumT-1)
27 Nslice_BTau_Max = 1000
28 EF_integral_range=0.05
29 RKF45_PERIODIC_LEVEL=1
30 /
31
32 SELECTEDBANDS
33 4
34 17 18 19 20
35
36 KCUBE_BULK
37 0.00 0.00 0.00 ! Original point for 3D k plane ! -0.50 -0.50 - 0.50 ! Original
                  point for 3D k plane
38 1.00 0.00 0.00 ! The first vector to define 3d k space plane
39 0.00 1.00 0.00 ! The second vector to define 3d k space plane
40 0.00 0.00 1.00 ! The third vector to define 3d k cube

```

### ► 提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

CrSb 的普通霍尔效应计算时间太长，这里我们只是提供可以计算的一些比较小的参数，如果想要得到准确的结果，请增大相应参数（比如设置 NK1=NK2=NK3=41, Nslice\_BTau\_Max = 10000, EF\_integral\_range=0.1, RKF45\_PERIODIC\_LEVEL=2）。

### ▶ 通过 Gnuplot 将结果可视化

这里我们选择 150K 的结果

```
$ gnuplot sigma.gnu_150k
```

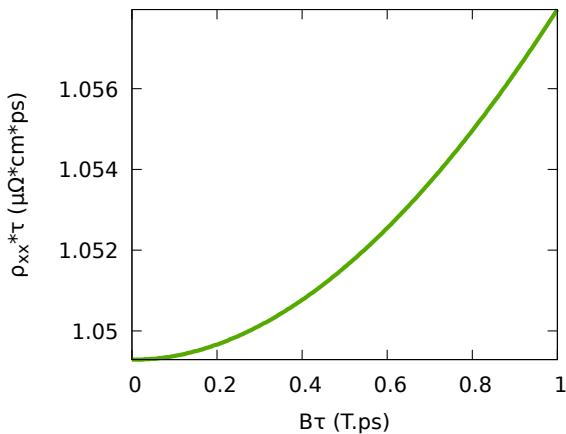


图 11.14: 非磁结构下的 CrSb 的  $\rho_{xx}$ (Nk1=Nk2=Nk3=41)

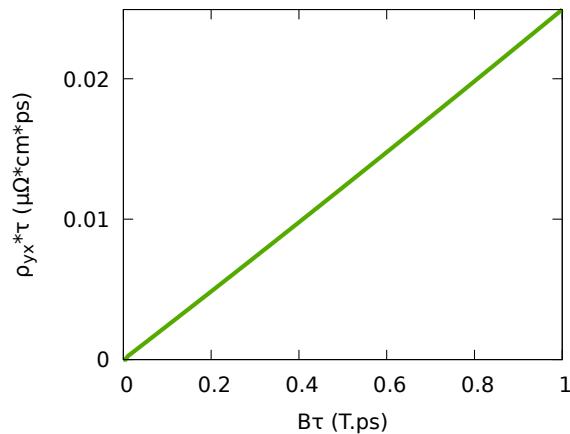


图 11.15: 非磁结构下的 CrSb 的  $\rho_{yx}$ (Nk1=Nk2=Nk3=41)

通过对交错磁结构与非磁结构的计算结果进行对比，我们发现在能带、费米面拓扑以及常规霍尔效应方面，两者均存在显著差异。基于交错磁构型的输运数据，应用 Kohler 定则对横纵坐标同时进行缩放后，得到的计算结果与实验数据高度吻合（见图 11.16 和图 11.17），这进一步证明了 CrSb 的交错磁性，其磁输运完全可归因于洛伦兹力。

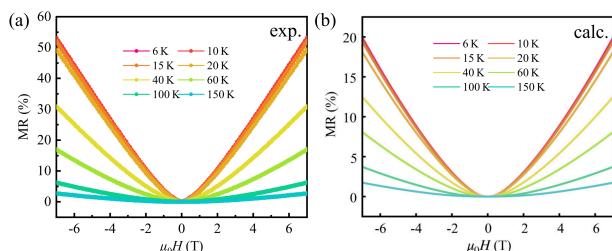


图 11.16: (a) 在不同温度下测量的磁阻随磁场的变化关系  $MR(H)$ 。(b) 不同温度下数值模拟计算得到的磁阻随磁场的变化关系  $MR(H)$ 。[22]

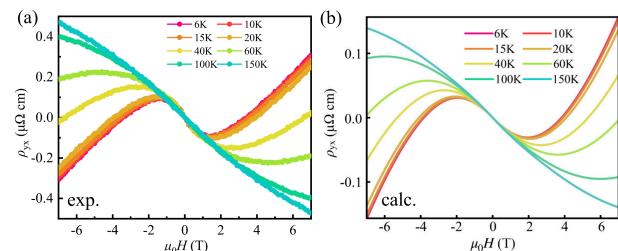


图 11.17: (a) 在不同温度下测量得到的霍尔电阻率随磁场变化的关系  $\rho_{yx}(H)$ 。(b) 数值模拟计算得到的  $\rho_{yx}(H)$ 。[22]

## 11.8 Co<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub>S<sub>2</sub> 中的负磁阻

Co<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub>S<sub>2</sub> 是铁磁外尔半金属材料，具有很大的反常霍尔电导。显著的反常霍尔电导会对磁输运性质造成影响。尤其是在高温时，散射增强，普通电导部分的量级可能会下降到和反常霍尔电导一个量级，此时额外引入的反常霍尔电导影响显著，甚至可以导致负磁阻的出现。

以经典的两带 Drude 模型为例，引入反常霍尔电导后，总电导公式由以下式子决定：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{\sigma}_e + \boldsymbol{\sigma}_h + \boldsymbol{\sigma}^A, \\ \boldsymbol{\sigma}_e &= n_e e \mu_e \begin{bmatrix} \frac{1}{1 + \mu_e^2 B^2} & \frac{-\mu_e B}{1 + \mu_e^2 B^2} \\ \frac{\mu_e B}{1 + \mu_e^2 B^2} & \frac{1}{1 + \mu_e^2 B^2} \end{bmatrix}, \\ \boldsymbol{\sigma}_h &= n_h e \mu_h \begin{bmatrix} \frac{1}{1 + \mu_h^2 B^2} & \frac{\mu_h B}{1 + \mu_h^2 B^2} \\ \frac{-\mu_h B}{1 + \mu_h^2 B^2} & \frac{1}{1 + \mu_h^2 B^2} \end{bmatrix}, \\ \boldsymbol{\sigma}^A &= \begin{bmatrix} 0 & \sigma_{xy}^A(B, T) \\ -\sigma_{xy}^A(B, T) & 0 \end{bmatrix},\end{aligned}$$

$n, \mu$  对应着载流子浓度和迁移率， $\boldsymbol{\sigma}^A$  对应着反常霍尔电导张量。总电导  $\sigma$  求逆后得到对应的修正后磁阻和霍尔电阻：

$$\begin{aligned}\rho_{xx} &= \frac{e [(n_e \mu_e + n_h \mu_h) + (n_e \mu_e \mu_h^2 + n_h \mu_h \mu_e^2) B^2]}{e^2 [(n_e \mu_e + n_h \mu_h)^2 + (n_e - n_h)^2 \mu_e^2 \mu_h^2 B^2] + D(B)}, \\ \rho_{yx} &= \frac{e [(n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) B + \mu_e^2 \mu_h^2 (n_h - n_e) B^3] + C(B) \sigma_{xy}^A}{e^2 [(n_e \mu_e + n_h \mu_h)^2 + (n_e - n_h)^2 \mu_e^2 \mu_h^2 B^2] + D(B)}.\end{aligned}$$

其中  $C(B) = (1 + \mu_e^2 B^2)(1 + \mu_h^2 B^2)$ ,  $D(B) = 2e [(n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) B + \mu_e^2 \mu_h^2 (n_h - n_e) B^3] \sigma_{xy}^A + C(B) \sigma_{xy}^A$ 。  
 $\rho_{xx}$  和  $\rho_{yx}$  中的  $C(B)$  和  $D(B)$  依赖项便是考虑反常霍尔电导后引入的额外修正项。注意到  $\rho_{xx}$  中的额外修正项仅出现在分母中，这个分母的额外增加量可能导致负磁阻的出现。此外注意到反常霍尔电导可以是磁场和温度依赖的。在铁磁金属材料中，反常霍尔电导和面外磁化强度是常常是正相关的，甚至是近似线性依赖的，因此我们拟设  $\sigma_{xy}^A = \frac{M(B, T)}{M_s} (\sigma_{xy}^A)_s$ ，其中  $M_s$  是饱和磁化强度，对应着材料磁矩完全磁化到一个方向； $M(B, T)$  对应着实验观测的磁化曲线； $(\sigma_{xy}^A)_s$  是饱和磁化下的反常霍尔电导数值。

结合上述基本公式，我们就可以从实验的磁化曲线或者模型构造的磁化曲线出发，得到磁化强度依赖的反常霍尔电导；再结合两带模型的基本参数设置，便可以尝试着调出各种各样的磁输运曲线。而 WannierTools 的计算则更进一步，从第一性原理出发计算总电导公式中的普通电导部分  $\boldsymbol{\sigma}_n^O(B, T)$ :  $\boldsymbol{\sigma} = \sum_n \boldsymbol{\sigma}_n^O(B, T) + \boldsymbol{\sigma}^A(B, T)$  ( $n$  为能带指标)，进而更物理地捕捉到实际材料的输运性质，避免了传统多带拟合潜在的过拟合问题。

从本章开头介绍的公式可知（将  $\bar{\mathbf{v}}_n(\mathbf{k})$  改写为  $\bar{\mathbf{v}}_n(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^0 \frac{dBt}{B\tau_n} e^{Bt/B\tau_n} \mathbf{v}_n(\mathbf{k}(Bt))$ ），WannierTools 计算的电导数据实际上为  $\boldsymbol{\sigma}_n^O/\tau_n = f(B\tau_n)$ ，即输出数据为  $B\tau_n$  的函数；为了得到  $\boldsymbol{\sigma}_n^O(B)$ ，我们需要对  $\boldsymbol{\sigma}_n^O/\tau_n$  乘上  $\tau_n$ ，并对自变量  $B\tau_n$  除以一个  $\tau_n$ 。高温时散射较强， $\tau$  较小，因此在期望计算的磁场范围内可以设置较小的  $B\tau$ ；反之低温时  $\tau$  较大，需要设置较大的  $B\tau$ 。这个设置对应于 wt.in 文件中 BTauMax 参数。

下面我们进行  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$  材料的磁输运计算，复现出实验观察到的高温区下的负磁阻曲线、低温区下的正磁阻曲线。

## ► 第 1 步：进入工作目录，准备输入文件

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Co3Sn2S2/magneto-transport
2 $ tar -xzvf wannier90_hr.dat.tar.gz
```

当前目录下有 initial 和 already 文件目录，already 中存放已经计算过的电导文件数据：  
 $\text{sigma\_bands\_mu\_0.0meV.dat}$ ，可直接运行 python 脚本进行绘图。

我们进入 intial 目录，目录下有 Btau1.0-OHE-2bands 和 Btau10-OHE-2bands，分别计算

高温区和低温区的普通电导数据。我们首先进入 Btau1.0-OHE-2bands 文件，复现实验上 150 K 得到的负磁阻曲线。

```

1 $ cd initial
2 $ cd Btau1.0-OHE-2bands
3 $ cp ../../wannier90_hr.dat .
4 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
5 $ sbatch sub-wt.sh

```

其中 wt.in 部分内容如下，BTauMax 设置为 1.0

```

1 --
2      wt.in
3 .....
4 &CONTROL
5 Boltz_OHE_calc      = T
6 Symmetry_Import_calc = T ! please set it to be true for magnetoresistance
7           calculation
8 /
9 &SYSTEM
10 SOC = 1             ! without soc : SOC=0; with soc : SOC=1
11 E_FERMI = 9.6429
12 Btheta= 0, Bphi= 90   ! magnetic field direction, Btheta is the angle with z axial,
13           Bphi is the angle with respect to x axial in the x-y plane
14 NumOccupied = 39     ! set it anyway even do not use it.
15 /
16 &PARAMETERS
17 OmegaNum = 1          ! omega number
18 OmegaMin = 0.0         ! energy interval
19 OmegaMax = 0.0         ! energy interval
20 Nk1 =41               ! Kmesh(1) for KCUBE_BULK
21 Nk2 =41               ! Kmesh(2) for KCUBE_BULK
22 Nk3 =41               ! Kmesh(3) for KCUBE_BULK
23 BTauNum = 101          ! Number of B*tau we calculate
24 BTauMax = 1.0          ! The maximum B*tau, starting from Btau=0.
25 Tmin = 20              ! Temperature in Kelvin
26 Tmax = 50              ! Temperature in Kelvin
27 NumT = 4                ! number temperature we calculate. T=Tmin+(Tmax-Tmin)/(NumT-1)
28 Nslice_BTau_Max = 5000
29 EF_integral_range=0.02
30 /
31 .....
32 SELECTEDBANDS
33 39
34 40
35 KCUBE_BULK
36 0.00 0.00 0.00 ! Original point for 3D k plane
37 1.00 0.00 0.00 ! The first vector to define 3d k space plane
38 0.00 1.00 0.00 ! The second vector to define 3d k space plane

```

```
39 0.00 0.00 1.00 ! The third vector to define 3d k cube
```

最终会生成数据文件 sigma\_bands\_mu\_0.0meV.dat。作为测试，wt.in 中 Nk1,Nk2,Nk3 可设置较小数值，如 20。

### ► 第 2 步：运行 python 文件，生成后处理数据文件

```
1 $ python sigmadata_extract.py
2 $ python MR_CSS.py
```

其中 sigmadata\_extract.py 文件读取 sigma\_bands\_mu\_0.0meV.dat，生成不同能带不同温度的电导数据文件（如 sigma\_band\_39\_mu\_0.0meV\_T\_50.00K.dat）。

在我们的电导计算公式中，温度的影响仅仅体现在费米分布函数  $f(\epsilon, T)$  中，影响它的展宽。由于所计算体系是个金属体系，费米面很大，费米分布函数的展宽对最终的电导结果影响甚微，主要的影响在弛豫时间  $\tau(T)$  中。因此我们可以只用其中的一个温度对应文件如：sigma\_band\_39\_mu\_0.0meV\_T\_50.00K.dat 和 sigma\_band\_40\_mu\_0.0meV\_T\_50.00K.dat 来进行磁输运曲线计算，而通过调节  $\tau(T)$  来反映温度的影响。

MR\_CSS.py 文件用以生成磁化强度磁滞曲线、设置不同能带弛豫时间、对原始数据进行插值、最终生成绘图所需的电导和电阻数据。其中 def Magnet\_BT(Barry, T, alpha) 为生成磁化曲线所用的函数：

```
1 --
2          MR_CSS.py
3 .....
4 # Magnetization function
5 def Magnet_BT(Barry, T, alpha):
6     kb=1.0; qJ=175.0
7     B=np.array(Barry, dtype=float)
8     M=np.zeros_like(B)
9     beta=1.0/(kb*T)
10    for i, Bval in enumerate(B):
11        f_sup=abs(np.tanh(alpha*Bval))
12        s0=0.5 if Bval>0 else (-0.5 if Bval<0 else 1e-4)
13        fun=lambda s: np.tanh(beta*(Bval+qJ*s))/s-1
14        try:
15            sol=fsolve(fun, s0, maxfev=10000)
16            sval=sol[0]
17        except:
18            sval=0.0
19            if sval*Bval<0: sval=-sval
20            M[i]=sval*f_sup
21    return M
22 .....
```

弛豫时间设置部分为：

```
1 --
2          MR_CSS.py
3 .....
4 tauT=np.array([[0,0,1.0,0.55],[0,0,0.5,0.4]])*tau_scal
```

```

5 idx=np.where(T_array==T)[0][0]
6 tau=tauT[:,idx]; tau_cm=tau*1e-12*1e-2
7 .....

```

$\tau_a = \text{np.array}([[0,0,1.0,0.55],[0,0,0.5,0.4]]) * \tau_{\text{scal}}$  有 4 列数据，由于所选电导数据文件为 \*\*\*50.00K.dat，对应第四列，因此只需设置第 4 列弛豫时间即可，这里对应为  $0.55 * \tau_{\text{scal}}$  和  $0.4 * \tau_{\text{scal}}$ 。

反常霍尔电导值设置为： $AHC_{\text{cal}} = 0.12046739e4 (\text{S/cm})$ ，计算值与实验值一致。

最终生成 CSS\_150K.mat 文件。

### ► 第 3 步：运行 python 绘图文件

```
1 $ python plot.py
```

读取 CSS\_150K.mat 文件，运行后生成：

M.pdf、MR.pdf、rhoxx.pdf、rhoxy.pdf、sigmaxy.pdf、sigmaxx\_OHE.pdf、sigmaxy\_OHE.pdf 文件，分别为磁化曲线、磁阻曲线、电阻曲线、霍尔电阻曲线、霍尔电导曲线、不考虑反常贡献的电导和霍尔电导曲线。下面选取 M.pdf、MR.pdf、rhoxy.pdf 和 sigmaxy.pdf 进行展示：

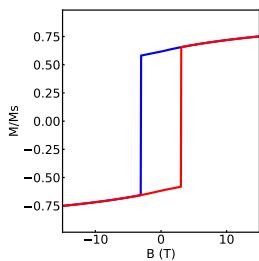


图 11.18: 模拟的磁化曲线

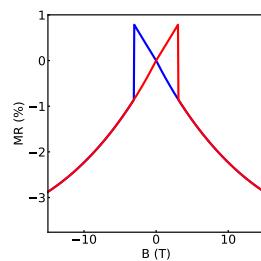


图 11.19: 蝶型负磁阻曲线

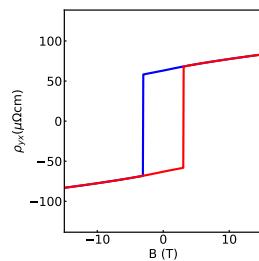


图 11.20: 霍尔电阻曲线

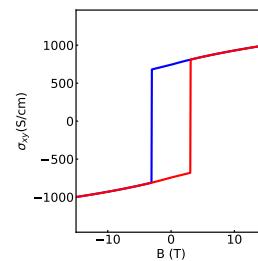


图 11.21: 霍尔电导曲线

### ► 复现 30K 下的磁阻

由前所述，低温下需要增大 wt.in 里的 BTauMax，这里设置为 10。

```

1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Co3Sn2S2/magneto-transport
2 $ cd initial
3 $ cd Btau10-OHE-2bands
4 $ cp ../../wannier90_hr.dat .
5 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
6 $ sbatch sub-wt.sh

```

程序运行结束后同样依次运行 sigmadata\_extract.py、MR\_CSS\_py、plot.py3 个 python 脚本。sigmadata\_extract.py 中的弛豫时间已经更改为较大值。绘图结果如下：

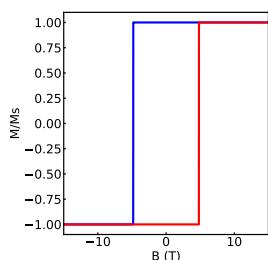


图 11.22: 模拟的磁化曲线

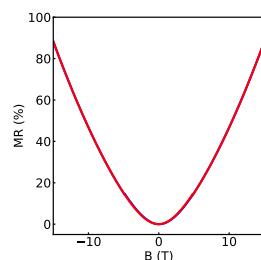


图 11.23: 蝶型负磁阻曲线

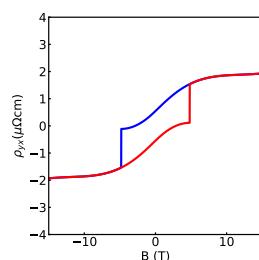


图 11.24: 霍尔电阻曲线

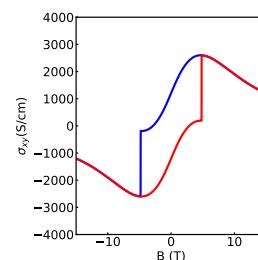


图 11.25: 霍尔电导曲线

### ► 补充说明：弛豫时间 $\tau_n$ 的设置

WannierTools 运行磁阻程序的生成文件中，有一个名为 rho\_total\_mu\_0.0meV.dat 的文件。它

假设所有能带的弛豫时间相等，进而得到  $\rho\tau(B\tau)$  数据： $\rho\tau(B\tau) = (\frac{\sum_n \sigma_n}{\tau})^{-1}$ 。结合实验上得到的零场电阻曲线  $\rho(T)$ ，我们便能估算出  $\tau$  的大致数值： $\tau(T) = \rho\tau(B\tau = 0)/\rho(T)$ ；以此为基础微调不同能带的  $\tau_n(T)$ 。

## 12 朗道能级计算

参考文献：

1. Periodic Landau gauge and quantum Hall effect in twisted bilayer graphene, Yasumasa Hasegawa and Mahito Kohmoto, Phys. Rev. B 88, 125426 (2013). [32]
2. Landau Levels as a Probe for Band Topology in Graphene Moiré Superlattices, QuanSheng Wu, Jianpeng Liu, Yifei Guan, and Oleg V. Yazyev, Phys. Rev. Lett. 126, 056401 (2021) [33].

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

在没有外部磁场的作用下，体系的哈密顿量可以写成

$$H = - \sum_{i,j} (t_{ij} c_j^\dagger c_i + h.c.). \quad (23)$$

当我们沿垂直正方晶格平面的方向加磁场  $H$  时，穿过的磁通为：

$$\Phi = HS = \frac{p}{q} \Phi_0, \quad (24)$$

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

$$H = - \sum_{i,j} (e^{i\theta_{ij}} t_{ij} c_j^\dagger c_i + h.c.), \quad \theta_{i,j} = \frac{2\pi}{\phi_0} \int_{r_i}^{r_j} A dl. \quad (25)$$

通常的朗道规范写成以下的形式

$$\mathbf{A}^{(L)} = H x \hat{\mathbf{y}}, \quad (26)$$

其中  $\hat{\mathbf{y}}$  是沿  $y$  方向的单位向量，与  $y$  无关。但是通常的朗道规范无法保证系统的周期性。在 WannierTools 中，我们采用周期 Landau 规范。正方晶格中的周期性朗道规范 [32]

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{(pL)} &= H [x \hat{\mathbf{y}} - \nabla(\lfloor x \rfloor y)] \\ &= H \left( (x - \lfloor x \rfloor) \hat{\mathbf{y}} - y \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n + \epsilon) \hat{\mathbf{x}} \right) \end{aligned} \quad (27)$$

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

在下图12.1 [32] 中标出了通常的朗道规范和周期性朗道规范下对应的相位：

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

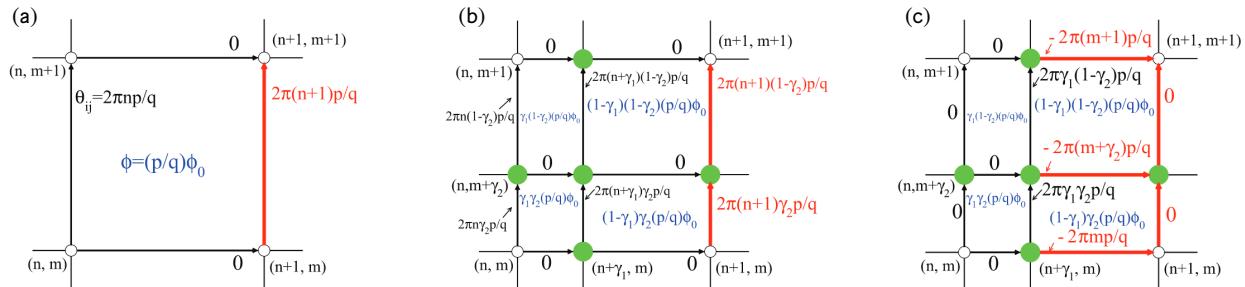


图 12.1: (a) 箭头旁边的数字是单位晶胞中通量为  $(p/q)\phi_0$  的方晶格的常用朗道规范中的相位。该系统在 x 方向上是周期性的，周期为 q。 (b) 在  $(n + \gamma_1, m)$ 、 $(n, m + \gamma_2)$  和  $(n + \gamma_1, m + \gamma_2)$  处添加位点，其中 n 和 m 是整数， $0 < \gamma_1 < 1$  且  $0 < \gamma_2 < 1$  (实心绿色圆圈)。蓝色字母是矩形中的通量。仅当  $\gamma_2$  为有理数时，系统才是周期性的。 (c) 周期朗道规范中的相位 (箭头旁边) 和通过矩形 (蓝色字母) 的通量。该系统在 x 方向上具有周期性，周期为 1，在 y 方向上具有周期 q。[32]

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

## 12.1 磁超胞的边界态

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

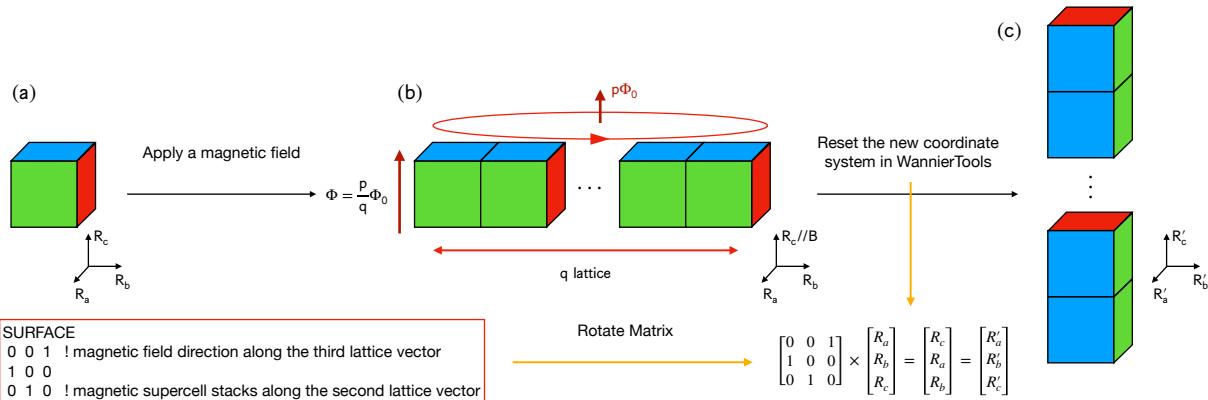


图 12.2: 我们初始是一个 (a) 正方晶格， $R_{a,b,c}$  分别代表晶格基矢的三个方向。(b) 我们沿着晶格基矢  $R_c$  增加了磁场 B，穿过的磁通为  $\Phi = \frac{p}{q}\Phi_0$ ，相当于在晶格基矢  $R_b$  方向扩胞 q 倍，穿过的整个磁通为  $p\Phi_0$ 。(c) 我们在 wt.in 中的 SURFACE 模块设置了旋转矩阵，磁超胞在旋转之后有了新的晶格基矢，将原坐标系下的  $R_a$ ， $R_b$  和  $R_c$  转到新坐标系下的  $R'_b$ ， $R'_c$  和  $R'_a$ 。在程序中我们的 k 点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

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

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

### ► 进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Graphene/landaulevel
```

### ► 准备 wt.in 文件

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

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

根据自己的需要修改 wt.in 里面对应的内容

```

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

```

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

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

### ► 提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

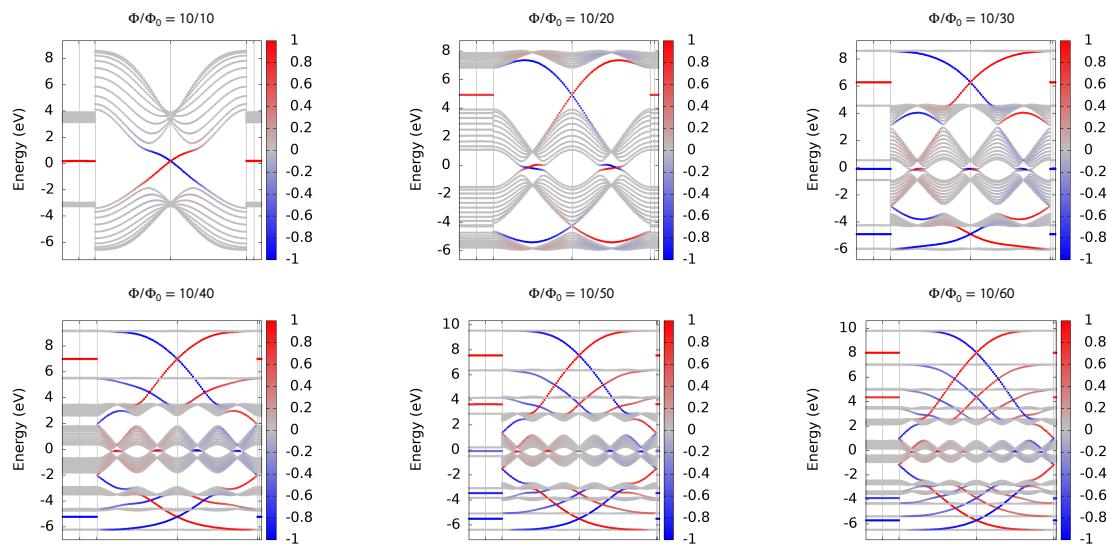
```

我们将会得到 landaulevel\_k.gnu 和 landaulevel\_k.dat 这两个文件。

### ► 通过 Gnuplot 将结果可视化

可以根据自己的需要修改.gnu 里面的参数。

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



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

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

在图 12.3 中我们可以看到，路径  $-Y \leftrightarrow \Gamma \leftrightarrow Y$  随着  $\Phi/\Phi_0$  的分母增大而长度变小，这是因为随着分母增大，原胞沿着  $R_b$  的方向扩胞的倍数增大，这意味着在倒格空间对应的倒格矢  $(-Y \leftrightarrow \Gamma \leftrightarrow Y)$  变小。两个平带之间的边界态数量对应着这个 gap 的陈数大小。

## 12.2 计算 HB 图像

我们有两种方法可以获得 HB 图像。

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

第二种是通过设置标签“LandauLevel\_B\_dos\_calc=T”来使用 Lanczos 方法。

### 12.2.1 精确对角化

#### ► 进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Graphene/landaulevel
```

#### ► 准备 wt.in 文件

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

打开 wt.in 文件查看，根据自己的需要修改参数：

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

```

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

```

### ► 提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

我们将会得到 landaulevel\_B.gnu 和 landaulevel\_B.dat 这两个文件

### ► 通过 Gnuplot 将结果可视化

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

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

可以得到名为 landaulevel\_B.png 的图像12.4:

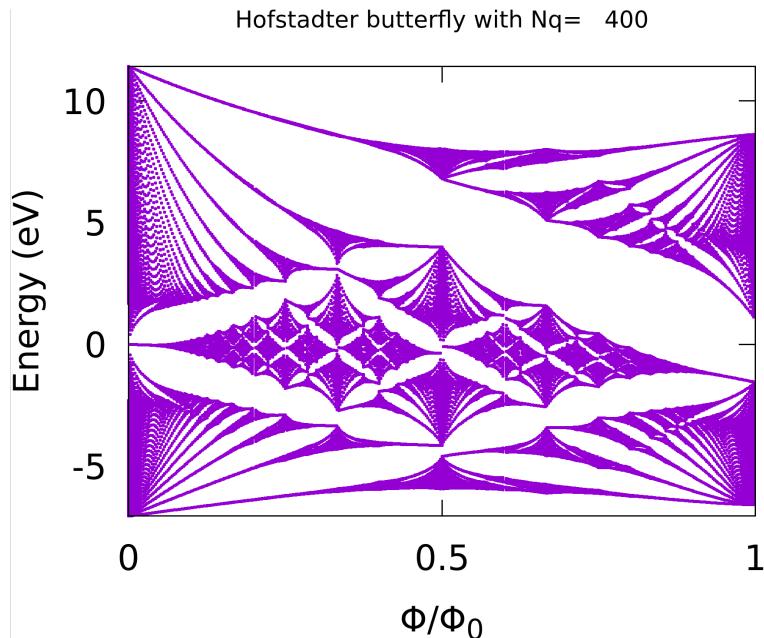


图 12.4: 磁场大小随着  $\Phi/\Phi_0=0/400, 1/400, \dots, 399/400$  改变的 HB 图像

### 12.2.2 Lanczos 方法

#### ► 进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/Graphene/landaulevel
```

#### ► 准备 wt.in 文件

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

```

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

```

#### ► 提交计算任务

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
```

我们将会得到 LandauLevel\_B\_dos.gnu、LandauLevel\_B\_dos.dat、wannierdiagram.gnu 和 wannierdiagram.dat 这 4 个文件。

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

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

### ▶ 通过 Gnuplot 将结果可视化

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

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

可以分别得到名为 LandauLevel\_B\_dos.png 和 wannierdiagram.png 的图像12.5和12.6:

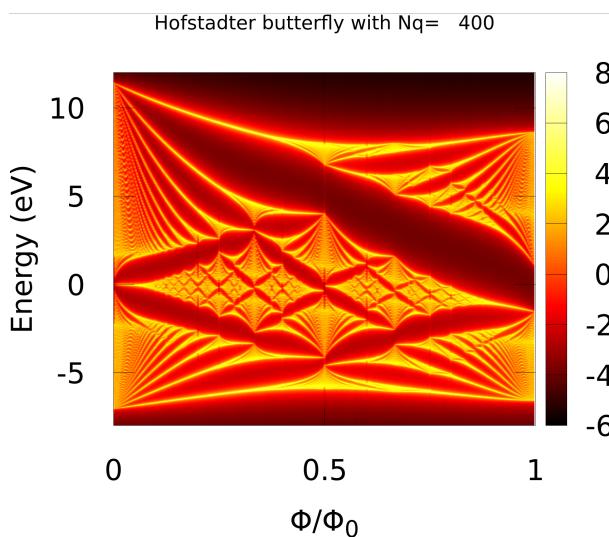


图 12.5: 磁场大小随着  $\Phi/\Phi_0=0/400, 1/400, \dots, 399/400$  改变的 HB 图像

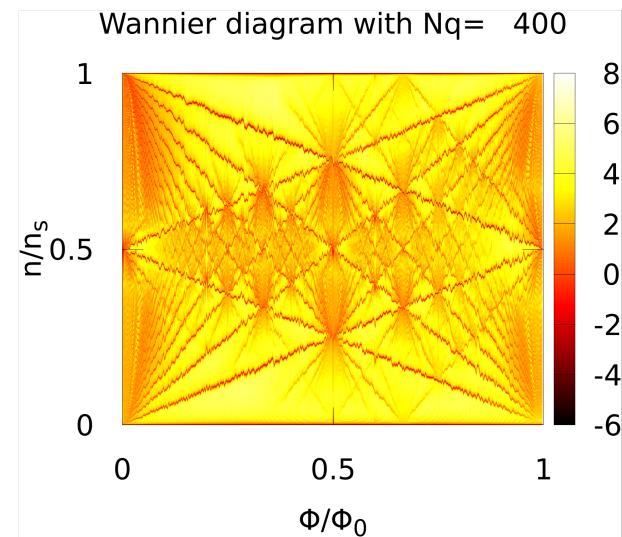


图 12.6: 磁场大小随着  $\Phi/\Phi_0=0/400, 1/400, \dots, 399/400$  改变的 HB 图像， $n/n_s$  代表磁超胞的归一化载流子密度。

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

为了增加图12.5和12.6的光滑程度，我们有两种方法：

第一种是增加 NSLAB 的大小；

第二种是增加 NumRandomConfs 的大小。

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

### 12.3 不同 K 点的 HB 图像

上面的 HB 图像中都是在默认的 k 点 (0, 0, 0) 上求得的，我们可以 wt.in 中，添加 “SINGLEKPOINT\_3D” 这一模块来实现在指定 k 点进行 HB 图像计算。

### ▶ 进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/3DWeyl-model/landaulevel
```

### ► 准备 wt.in 文件

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

打开 wt.in 文件，添加“SINGLEKPOINT\_3D”模块，这里我们指定在 k 点 (0.5, 0, 0) 上进行计算：

```

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

```

### ► 提交计算任务

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
```

### ► 通过 Gnuplot 将结果可视化

可以根据自己的需要修改.gnu 里面的参数，这里提供了修改过的 landaulevel\_B\_0.5.gnu。

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

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

### ► 进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/3DWeyl-model/landaulevel
```

### ► 准备 wt.in 文件

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

### ► 提交计算任务

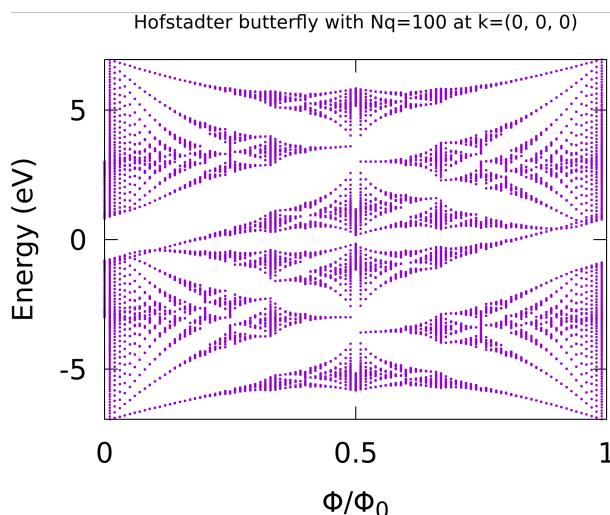


图 12.7: 磁场大小在  $k$  点  $(0, 0, 0)$  随着  $\Phi/\Phi_0=0/100, 1/100, \dots, 99/100$  改变的 HB 图像

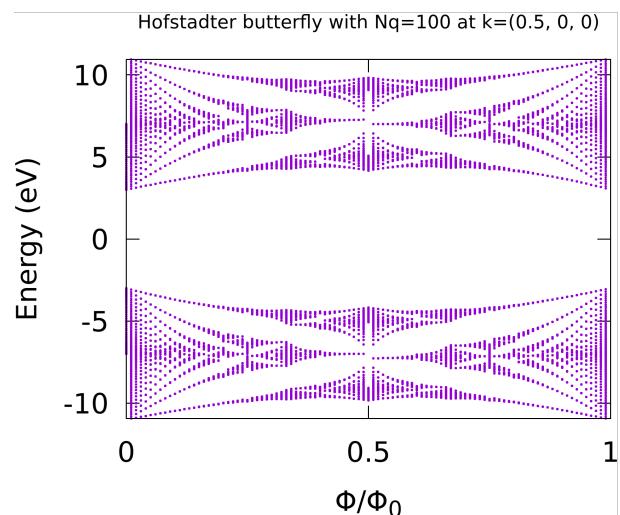


图 12.8: 磁场大小  $(0.5, 0, 0)$  随着  $\Phi/\Phi_0=0/100, 1/100, \dots, 99/100$  在  $k$  点改变的 HB 图像

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
```

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

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

### ► 准备 wt.in 文件

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

打开 wt.in 文件, 添加 “SINGLEKPOINT\_3D” 模块, 这里我们指定在  $k$  点  $(0.166667, 0, 0)$  上进行计算:

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

```

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

```

### ► 提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

### ► 通过 Gnuplot 将结果可视化

可以根据自己的需要修改.gnu 里面的参数, 这里提供了修改过的 landaulevel\_B\_0.1667.gnu。

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

我们可以得到在 Weyl 点计算的 HB 图像12.9和12.10。

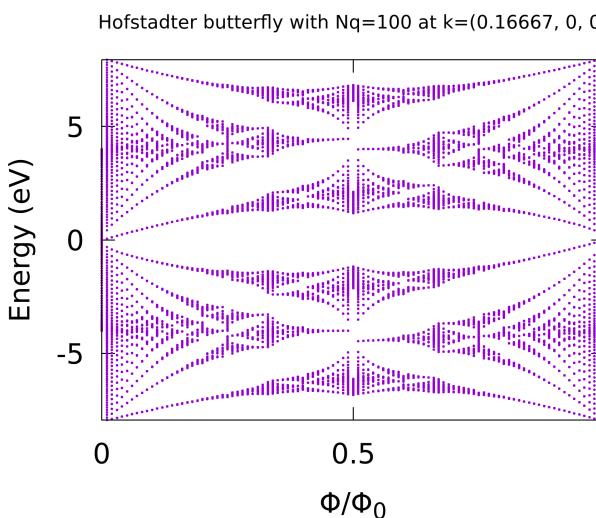


图 12.9: 磁场大小在  $k$  点  $(0.166667, 0, 0)$  随着  $\Phi/\Phi_0=0/100, 1/100, \dots, 99/100$  改变的 HB 图像

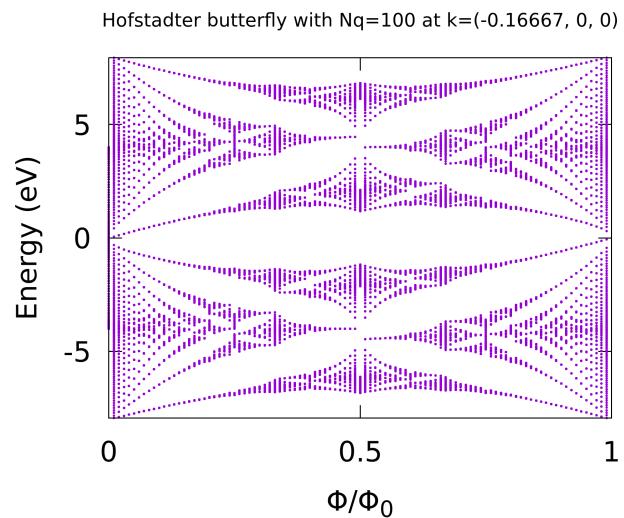


图 12.10: 磁场大小在  $k$  点  $(-0.166667, 0, 0)$  随着  $\Phi/\Phi_0=0/100, 1/100, \dots, 99/100$  改变的 HB 图像

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

## 13 转角石墨烯

在本节中，我们将使用 WannierTools 研究扭曲双层石墨烯。

### 参考文献

1. Correlated states in twisted double bilayer graphene, Shen Cheng and Chu Yanbang and Wu QuanSheng and Li, Na et al, Nature Physics, 16(5): 520-525 (2020) [10].
2. Moiré flat bands in twisted double bilayer graphene, Fatemeh Haddadi, QuanSheng Wu, Alex J Kruchkov, Oleg V Yazyev, Nano letters, 20(4): 2410-2415 (2020) [34].
3. Chiral decomposition of twisted graphene multilayers with arbitrary stacking, Sheng-Nan Zhang, Bo Xie, QuanSheng Wu, Jianpeng Liu, Oleg V Yazyev, Nano Letters, 23(7): 2921-2926 (2023) [35].

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

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

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

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

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

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

```

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

```

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

```

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

```

首先，请复制练习的教程输入文件：

```

1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/TBG-bands

```

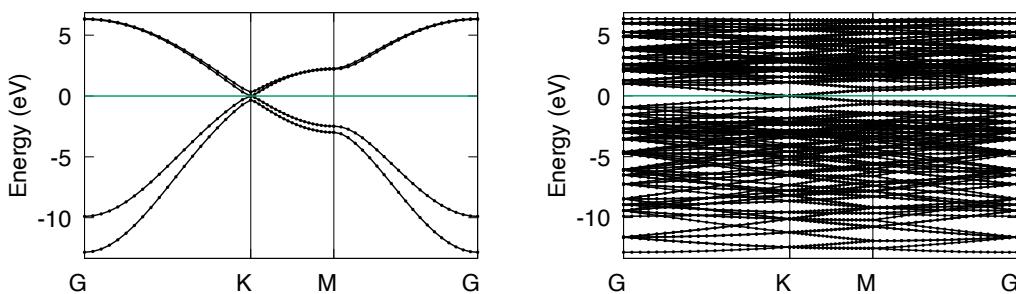
▶ 获取双层石墨烯和扭曲双层石墨烯（扭转角度为  $7.34^\circ$ ,  $m=4$ ）的”wt.in” 和”TG\_hr.dat”文件，并运行 WannierTools 以获得能带结构。

```

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

```

能带结构如下所示：



### ► 练习

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

## 13.2 Wilson 环、紧束缚模型的能带展开

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

工作目录是

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

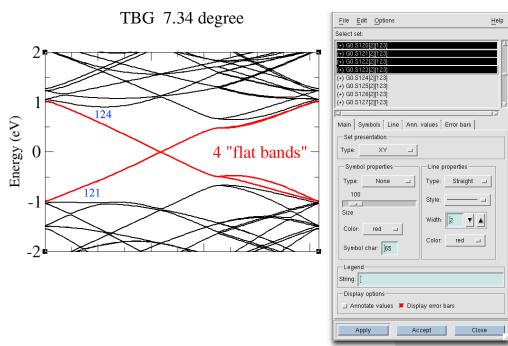
## 13.3 Wilson 环（瓦尼尔中心荷）

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

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

```
1 $ cp wt.in-bands-dense wt.in
2 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
3 $ sbatch sub-wt.sh
4 $ xmgrace bulkek.dat
```

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



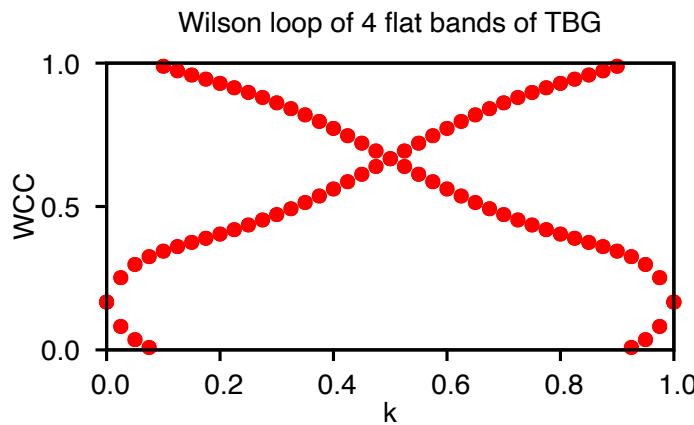
4 个“平带”的索引从 121 开始，而不是从 1 开始。因此，我们必须在“wt.in”中通过设置卡片“SELECTED\_OCCUPIED\_BANDS”来指定它，如下所示：

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

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

```
1 $ cp wt.in-wilsonloop-dense wt.in
2 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
3 $ sbatch sub-wt.sh
4 $ gnuplot wcc.gnu0
```

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



### 13.4 能带展开

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

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

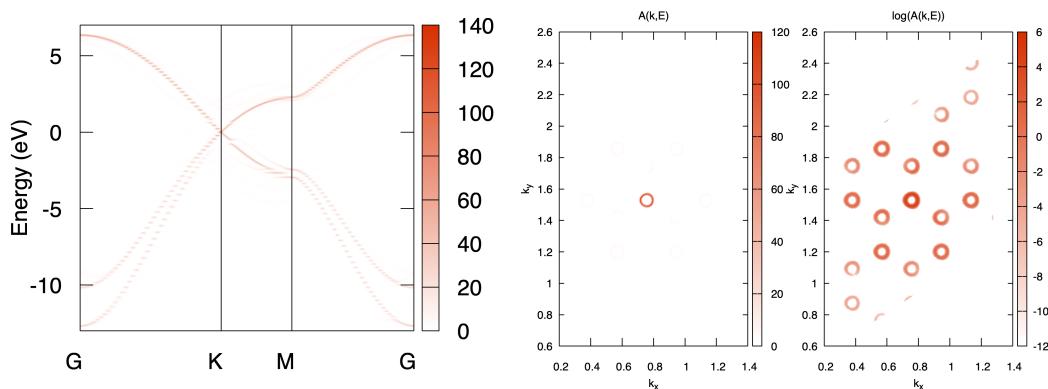
```
1 # k-path mode
2 $ cp wt.in-unfolding-kpath wt.in
3 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
```

```

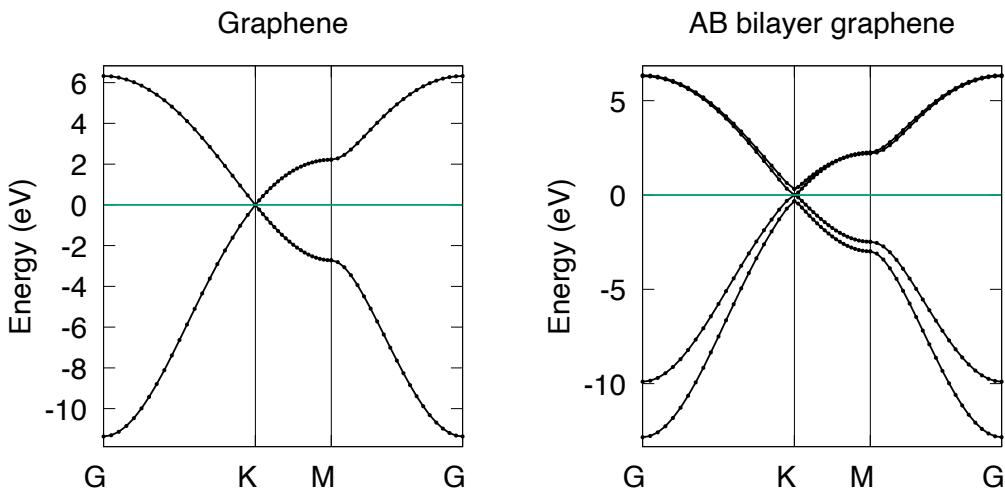
4 $ sbatch sub-wt.sh
5 $ gnuplot spectrum_unfold_kpath.gnu
6
7 # k-plane mode
8 $ cp wt.in-unfolding-kplane wt.in
9 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
10 $ sbatch sub-wt.sh
11 $ gnuplot spectrum_unfold_kplane.gnu0

```

结果应该如下所示：



单层石墨烯和双层石墨烯的能带结构如下所示：



### ► 练习

1. 请比较展开后的能带与单层和双层石墨烯的能带结构。
2. 将”wt.in-unfolding-kplane” 中的”Nk1” 和”Nk2” 参数增加以获得高分辨率的绘图。
3. 改变”wt.in-unfolding-kplane” 中的”E\_arc” 参数以获得不同的等能谱图。

## 14 能带展开与矩阵元效应

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

### 参考文献

1. Correlated states in twisted double bilayer graphene, Shen Cheng and Chu Yanbang and Wu QuanSheng and Li, Na et al, Nature Physics, 16(5): 520-525 (2020) [10].
2. Moiré flat bands in twisted double bilayer graphene, Fatemeh Haddadi, QuanSheng Wu, Alex J Kruchkov, Oleg V Yazyev, Nano letters, 20(4): 2410-2415 (2020) [34].
3. Chiral decomposition of twisted graphene multilayers with arbitrary stacking, Sheng-Nan Zhang, Bo Xie, QuanSheng Wu, Jianpeng Liu, Oleg V Yazyev, Nano Letters, 23(7): 2921-2926 (2023) [35].
4. Landau levels as a probe for band topology in graphene moiré superlattices, Quan-Sheng Wu, Jianpeng Liu, Yifei Guan, Oleg V Yazyev, Physical Review Letters, 126(5): 056401 (2021) [33].

### 14.1 基本思想

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

$$\langle kn\beta | KJ \rangle = \sum_{N\alpha} C_{N\alpha}^{KJ} \frac{\sqrt{V}}{\sqrt{v}} e^{i(K-k)\xi_\alpha} \delta(K - [k]) \delta_{nN} \delta_{[\alpha]\beta} \quad (28)$$

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

### 14.2 Graphene 的矩阵元效应

我们先来看 Graphene，其晶格结构与能带结构如图14.1所示

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

#### ► 1. 进入工作目录并准备 wt.in 文件

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/band_unfolding/Graphene ! ~/data/ means
      WannierTools main file
```

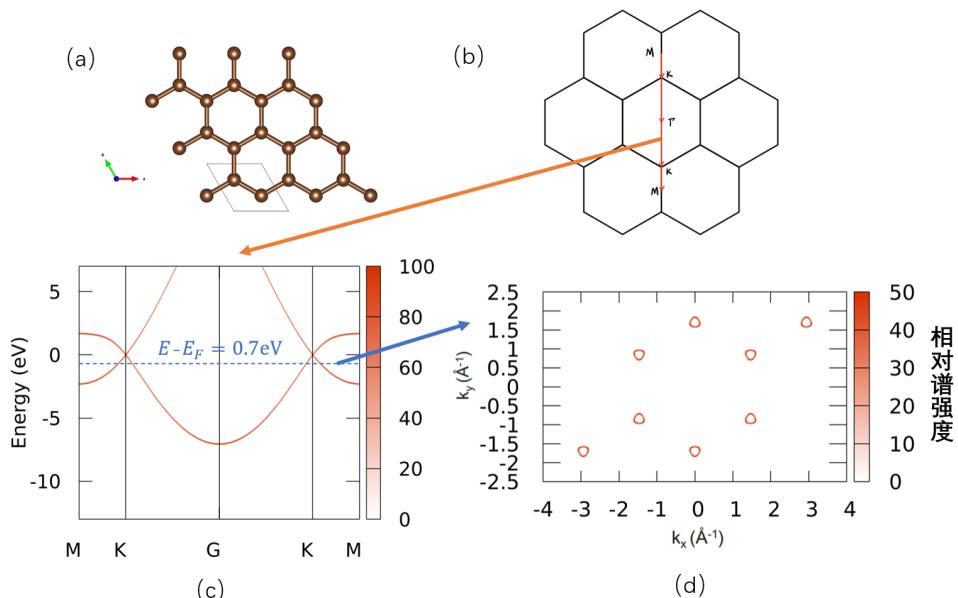


图 14.1: Graphene 的晶格结构, 以及无矩阵元时的能带结构, 图 (b) 给出了下面我们将计算以及实验中取的高对称点路径, 图 (c) 为高对称点路径上的能带结构, 图 (d) 为  $E - E_F = -0.7 \text{ eV}$  的能量平面切片上的能带结构。

2

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

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

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

```

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

```

```

23 Nk1 =201           ! number k points
24 Nk2 =201           ! number k points
25 photon_energy_arpes = 50 ! photon energy in ev
26 penetration_lambda_arpes = 3 ! penetration depth of photon in hartree unit
27 polarization_xi_arpes = 1.57
28 polarization_alpha_arpes = 1.57
29 polarization_phi_arpes = 0.0
30 polarization_delta_arpes = 0.0
31 /

```

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

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

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

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

### ► 思考

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

### ► 2. 提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
3

```

### ► 3. 结果可视化

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

```
1 $ gnuplot spectrum_unfold_kpath.gnu
```

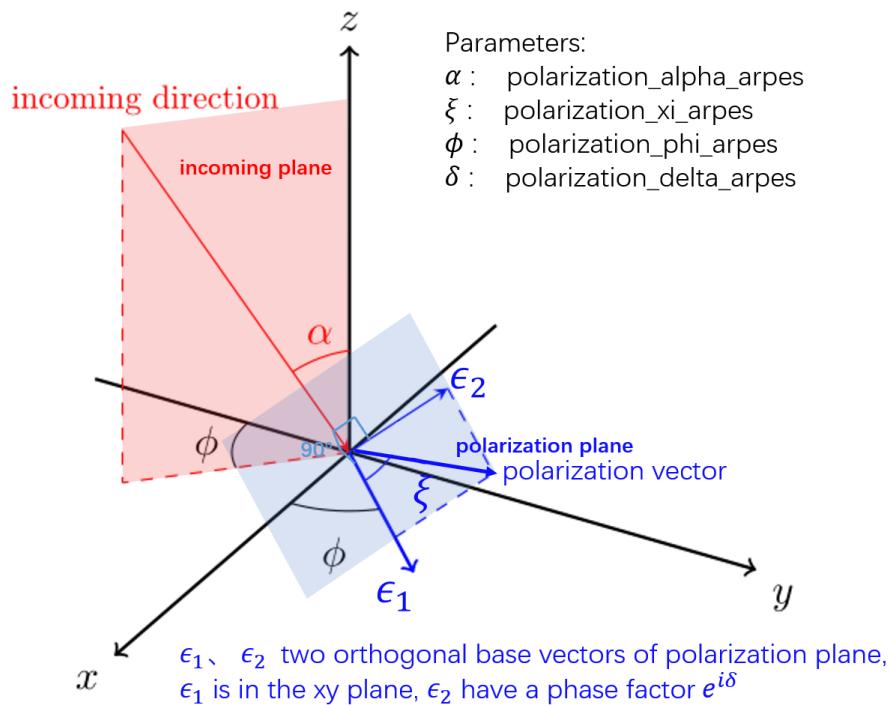


图 14.2: ARPES 实验架构与 wt.in 中参数的对应关系, 右上角给出了图中角度与 wt.in 中参数名的对应, 注意由于我们考虑横波, 红色的入射光方向为蓝色的极化矢量平面的法线方向。

```

2 $ gnuplot spectrum_unfold_kpath.gnu
3

```

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

```

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

```

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

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

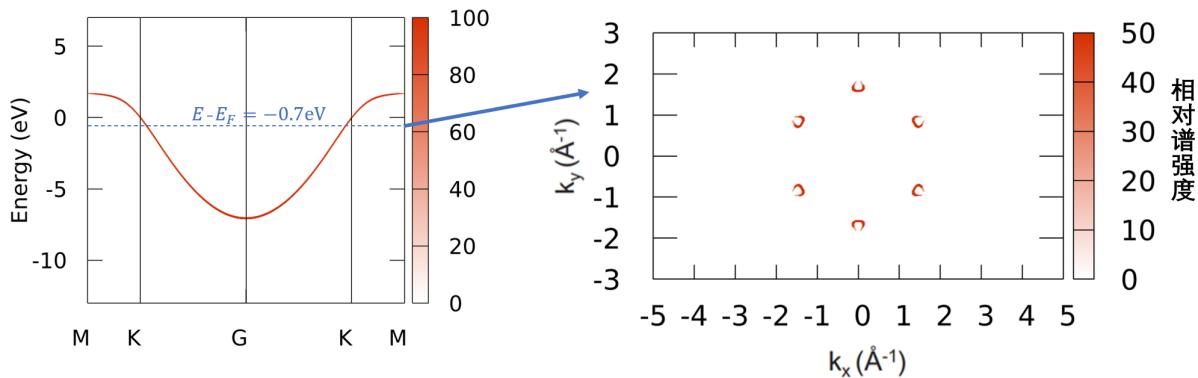


图 14.3: WannierTools 计算的含矩阵元效应的 Graphene 能带结构 ARPES 谱, 左为高对称点路径上的 ARPES 谱模拟结果, 右图为费米面以下 0.7 eV 能量平面上的能带结构 ARPES 谱模拟结果。

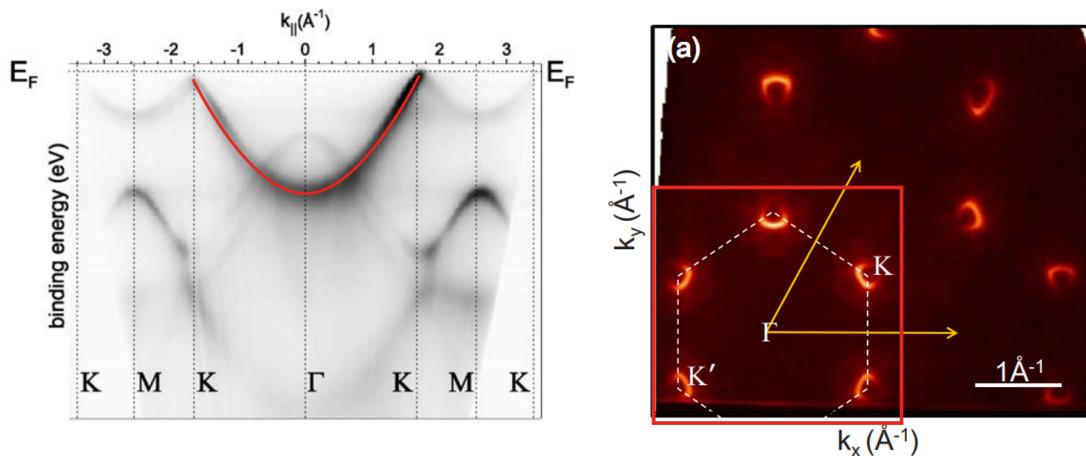


图 14.4: 实验测量的 ARPES 谱, 左图为高对称点路径上测量的 ARPES 谱, 红线部分为与上面计算结果对应的带。[36], 右图同样是费米面以下 0.7 eV 能量平面上测得的能带结构 ARPES 谱 [37]。

### 14.3 TBG 体系的能带展开与矩阵元效应

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

#### ► 1. 进入工作目录并计算 TBG 超胞能带

```

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

```

#### ► 2. 计算展开后的能带

```

1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/band_unfolding/twisted_bilayer_graphene_13.2
2   degree
3 $ cp wt.in-me wt.in
4 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
5 $ sbatch sub-wt.sh

```

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

### ► 3. 结果可视化

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

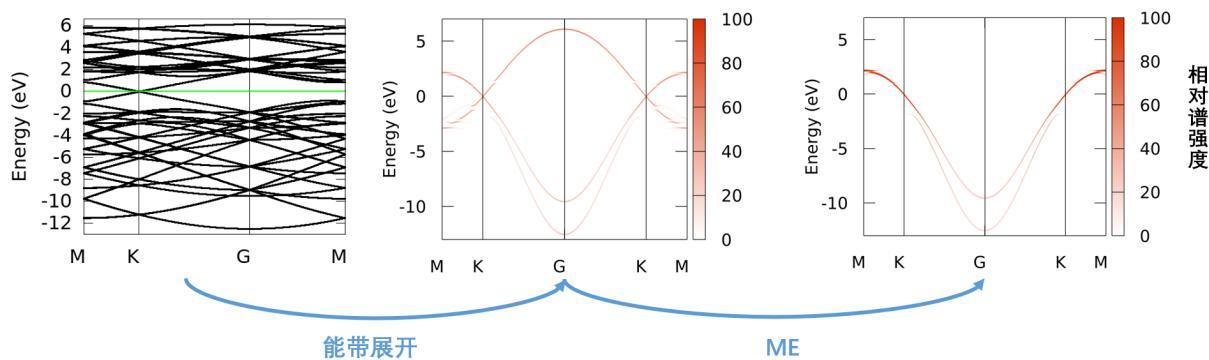


图 14.5: TBG 体系展开后的能带以及计算了矩阵元之后的能带 ARPES 谱。

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

### ► 注

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

### ► 练习

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

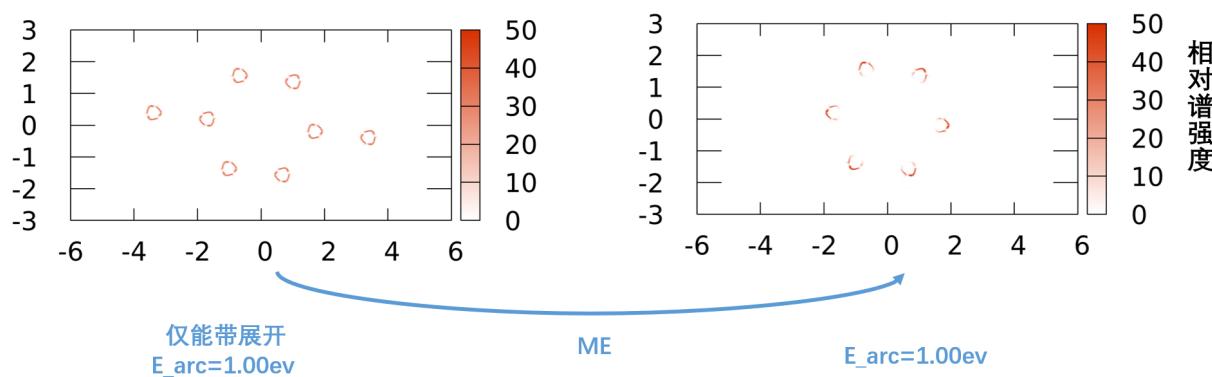


图 14.6: 在 1.00 eV 的能量平面下看到的 TBG 体系展开后的能带以及计算了矩阵元之后的能带 ARPES 谱。

## 15 Haldane 模型

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

### 参考文献

- Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly", Haldane F D M, Physical review letters, 61(18): 2015 (1988) [38].

#### ► 两个办法获得教程输入文件:

- 直接从集群的/tmp/目录下把本教程拷贝到你的/home/data/目录下：

```
1 $ cp -r /tmp/WannierToolsTutorials ~/data/
```

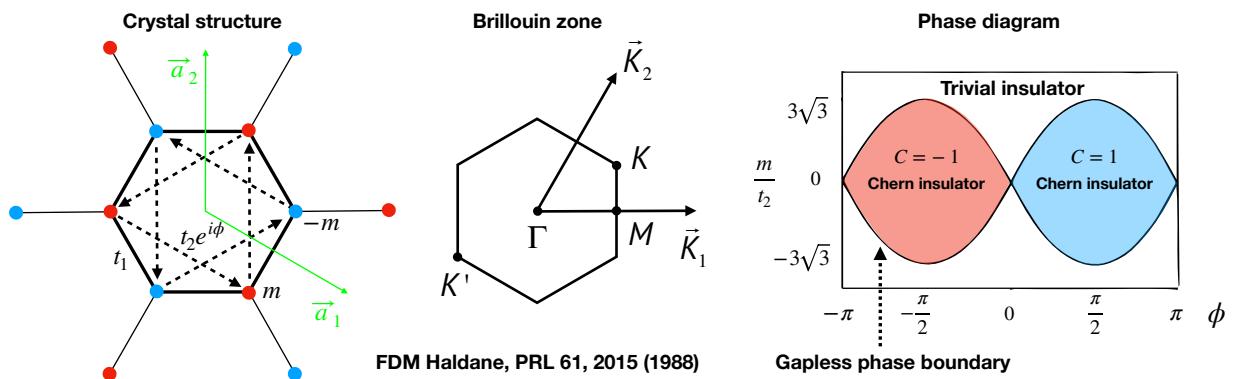
- 如果你从别处看到这个教程，可以直接从 github 上下载教程：

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

本章对应的目录为

`~/data/WannierToolsTutorials/examples/Haldane_model`

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



### 15.1 一般绝缘体

#### ► 生成紧束缚模型:

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

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

#### ► 生成 `wt.in` 文件:

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

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

以下是计算所必要的参数：

```

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

```

kpath 模式下的能带由以下参数控制：

```

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

```

kplane 模式下的能带由以下参数控制：

```

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

```

```

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

```

给定 k 平面的 Berry 曲率计算由以下参数控制:

```

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

```

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

```

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

```

```

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

```

注意,在 Wanniercenter\_calc=T 中 KPLANE\_BULK card 的第一个向量的用法与 BerryCurvature\_calc=T 和 BulkBand\_plane\_calc=T 中的用法不同。您可以从文档中阅读 KPLANE\_BULK card 使用方法的详细信息。

沿给定 kpath 的平面体系的能带计算由以下参数控制:

```

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

```

▶ 运行 WannierTools:

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

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

```

1 $ tail WT.out

```

*WT.out* 的文末应该是这样的:

```

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

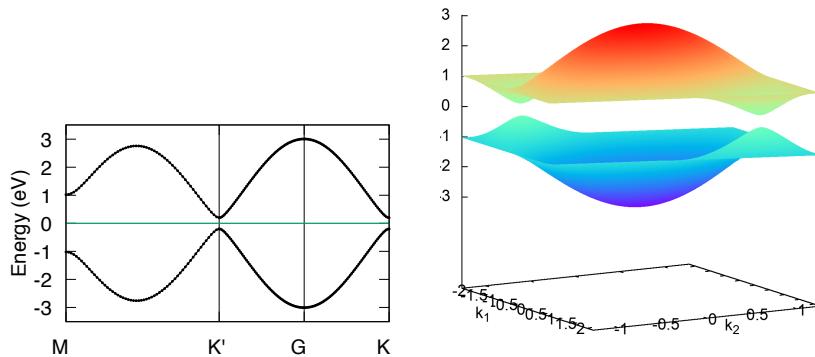
```

### ► 使用 Gnuplot 可视化结果

1). 现在我们可以用以下命令绘制能带结构:

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

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

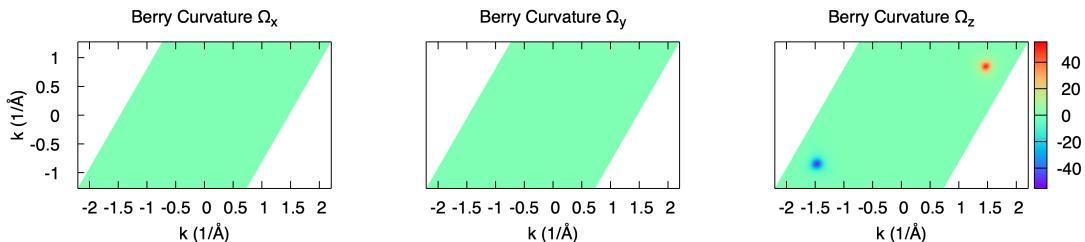


该相的能带结构表明它是绝缘体。

2). 然后我们可以用以下命令绘制 Berry 曲率:

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

得到的图被命名为 Berrycurvature.png。它应该是这样的:



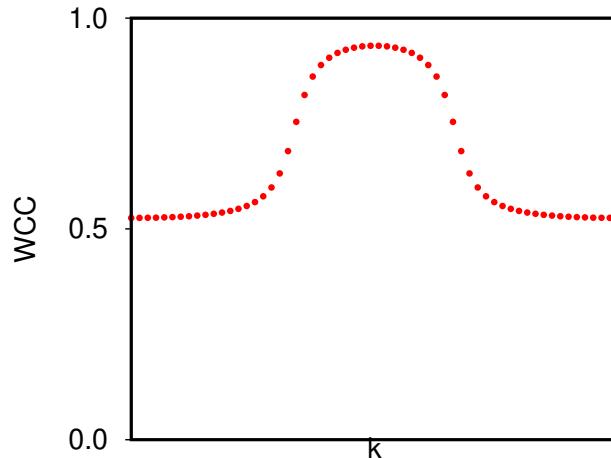
它证明了  $\Omega_x$  和  $\Omega_y$  都是零, 因为它是二维系统。 $\Omega_z$  有正值和负值, 它们相互抵消。最终

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} dk \Omega_z(k) = 0 \quad (29)$$

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

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

得到的图被命名为 wcc.pdf。它应该是这样的:

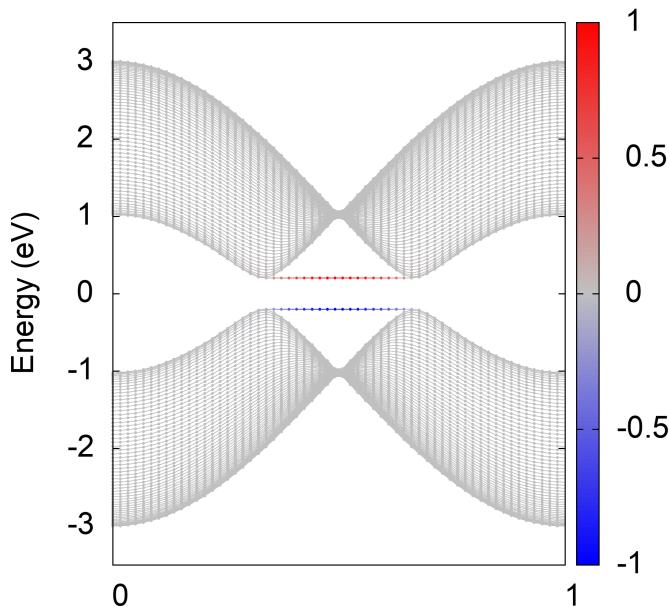


这样的 WCC 表面它是平庸的绝缘体，因为没有绕数。

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

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

我们将得到 slabek.png，它看起来像这样：



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

## 15.2 Chern 绝缘体

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

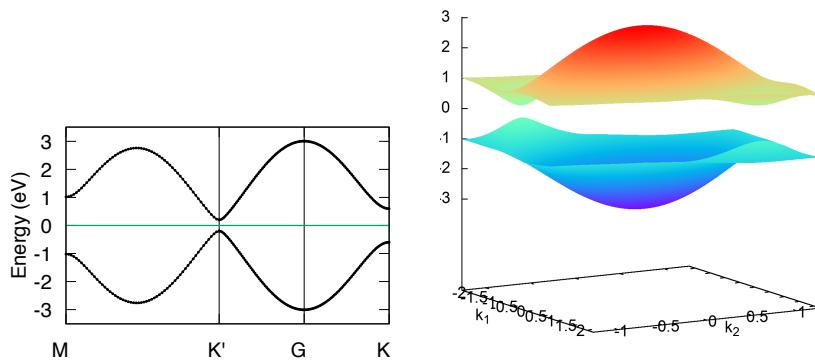
► 生成紧束缚模型和输入文件 wt.in

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

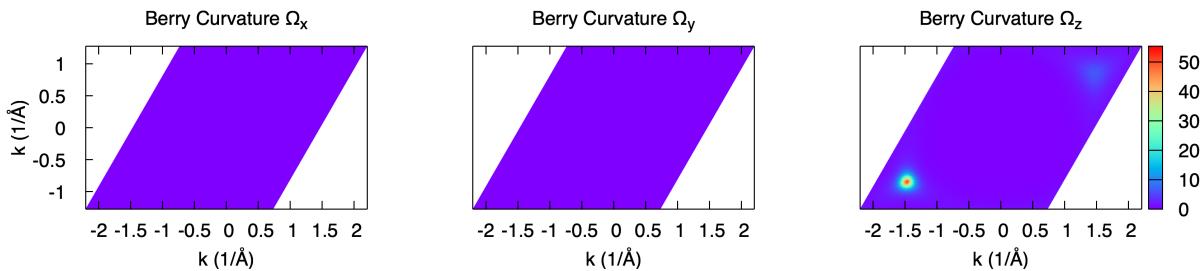
在这之后，我们运行 wt.x

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
```

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



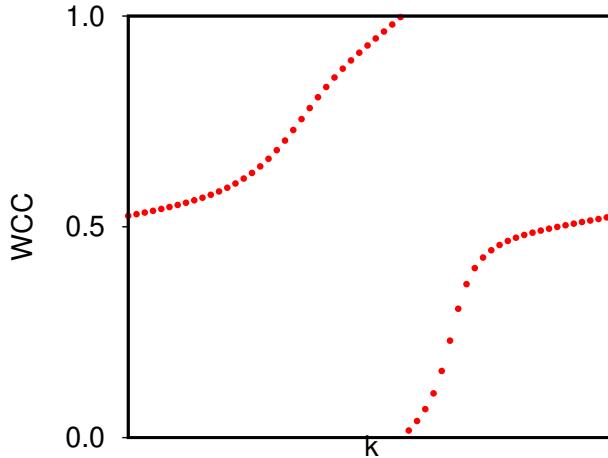
其能带看起来与普通绝缘体相几乎完全相同。



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

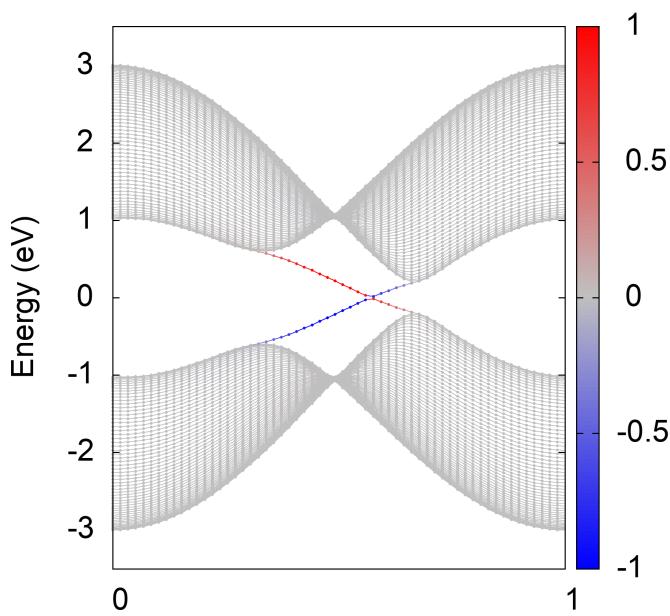
$$C = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} dk \Omega_z(k) = 1 \quad (30)$$

该拓扑数可以通过 Wilson loop 图验证，如图所示：



依据绕数，该 WCC 图的 Chern 数为 1。

由于 WCC 和边缘状态之间的等价性，边缘状态应该具有相同的特征。



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

### 15.3 Gapless 半金属

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

► 执行相同的程序来运行 WannierTools。

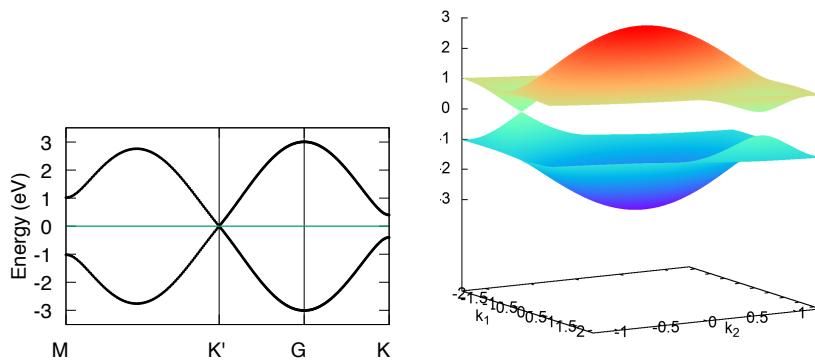
```

1 $ python haldane_hr_gen-gapless.py
2 $ cp wt.in-gapless wt.in
3 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
4 $ sbatch sub-wt.sh

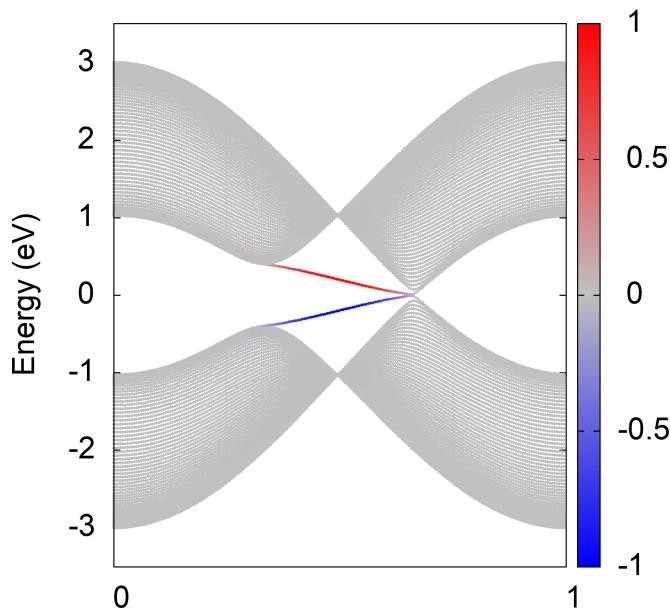
```

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

体能带和面能带如下所示:



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



### ► 练习

1. 比较石墨烯和 Haldane 模型中无间隙相的能带。

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

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

## 16 拓扑超导体

### 参考文献

1. Superconducting proximity effect and Majorana fermions at the surface of a topological insulator, Fu, Liang and Kane, Charles L, Physical review letters, 100(9): 096407 (2008) [39].
2. Platform of chiral Majorana edge modes and its quantum transport phenomena, He J J, Liang T, Tanaka Y, et al, Communications Physics, 2(1): 149 (2019) [40].
3. Topological insulators in  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  and  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  with a single Dirac cone on the surface, Haijun Zhang, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, Xi Dai, Zhong Fang, Shou-Cheng Zhang, Nature Physics 5, 438–442 (2009) [2].
4. Superconducting properties of the In-substituted topological crystalline insulator SnTe, Balakrishnan G, Bawden L, Cavendish S, et al, Physical Review B, 87(14): 140507 (2013) [41].
5. Topological superconductor candidates  $\text{PdBi}_2\text{Te}_4$  and  $\text{PdBi}_2\text{Te}_5$  from a generic ab initio strategy, Aiyun Luo, Gang Xu, et al, npj Computational Materials, 9(1), 188 (2023) [42].
6. Chiral Topological Superconductivity in Superconductor-Obstructed Atomic Insulator-Ferromagnetic Insulator Heterostructures, Jingnan hu, Fei Yu, Gang Xu, et al, Physical Review Letters, 132(3), 036601 (2024) [43].
7. A numerical method for designing topological superconductivity induced by s-wave pairing, Jingnan hu, Quansheng Wu, Gang Xu, et al, npj Computational Materials, 11, 113 (2025) [44].
8. Theory of the superconducting proximity effect, William Silvert, Journal of Low Temperature Physics, 20(5), 439-477 (1975) [45].

在自然界中，能够形成本征拓扑超导的 p 波超导体非常稀少。所以，通过更为普遍的 s 波超导体来实现拓扑超导成了人们关注的重点，近年来，有许多通过 s 波超导体的超导近邻效应，在拓扑绝缘体 (TI) 或者具有 Rashba 自旋轨道耦合的半导体的表面实现拓扑超导的方案被提出，这里，我们简单介绍两个开创性工作：

#### ► Fu-kane 方案 [39]

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

$$H_{interface}(k) = k_x \tau_0 \sigma_x + k_y \tau_z \sigma_y - \mu \tau_z \sigma_0 + \Delta \tau_y \sigma_y \quad (31)$$

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

$$H_{eff}^{px+ipy}(k) = \begin{bmatrix} -|k| - \mu & 0 & 0 & -\Delta e^{i\theta_k} \\ 0 & |k| - \mu & \Delta e^{i\theta_k} & 0 \\ 0 & \Delta e^{-i\theta_k} & -|k| + \mu & 0 \\ -\Delta e^{-i\theta_k} & 0 & 0 & |k| + \mu \end{bmatrix} \quad (32)$$

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

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

### ► Nagaosa 方案 [40]

考虑一个如下图所示的超导体-TI 薄膜-铁磁体的异质结构:

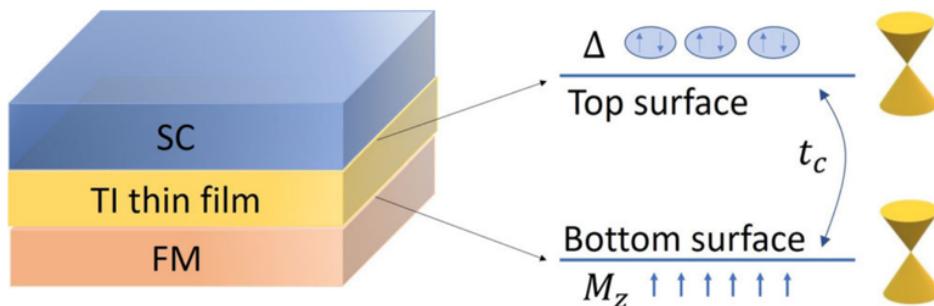


图 16.1: Nagaosa 方案的示意图。

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

$$H_{twosurface}(k) = v(k_x \sigma_y \tau_z - k_y \sigma_x \tau_0) s_z + M_z \sigma_z \tau_z \frac{s_z - s_0}{2} + t_c \sigma_0 s_x \tau_z - \sigma_0 (\mu s_0 + \delta E s_z) \tau_z + \Delta \sigma_y \tau_y \frac{s_z + s_0}{2} \quad (33)$$

$\tau$ ,  $\sigma$  和  $s$  分别表示粒子空穴空间, 自旋空间和层空间的泡利矩阵,  $M_z$  代表赛曼场,  $\Delta$  表示 s 波超导配对强度,  $t_c$  表示上下表面的耦合,  $\mu$  表示化学势,  $\delta E$  表示上下表面的能量差。可以看出这个哈密顿量描述了两个有不同质量项的狄拉克锥之间的界面 (一侧质量为  $\Delta$ , 一侧为  $M_z$ ), 根据 [46] 中的判据, 该系统为手性拓扑超导态。如果忽略  $t_c$  和  $\delta E$ , 得出的相图为:

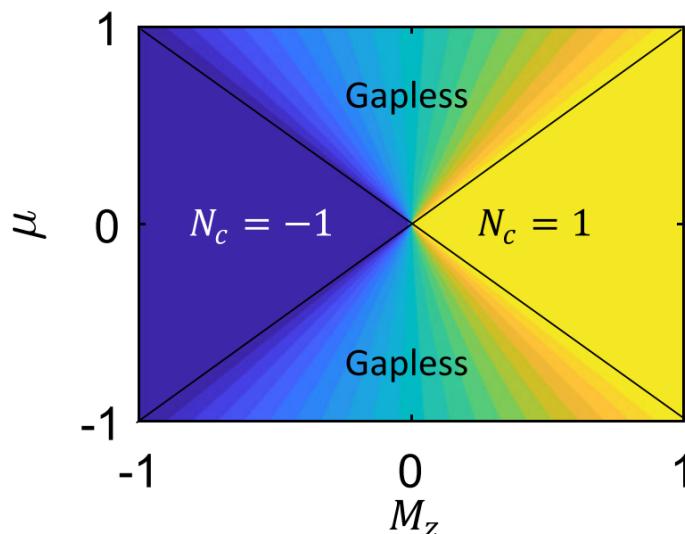


图 16.2: 忽略上下表面耦合以及能量差时, Nagaosa 方案的相图。

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

$$H_{bottom}(k) = k_x \tau_0 \sigma_x + k_y \tau_z \sigma_y - \mu \tau_z \sigma_0 + M_z \tau_z \sigma_z \quad (34)$$

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

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

### ► 更现实的情况 [45]

而在真实的异质结体系中, 超导近邻效应在空间中的衰减既不能像 Fu-kane 方案中一样忽略不计, 也不能像 Nagaosa 方案中一样简单的用上下表面的耦合来代替。更为现实的情况则可以表示为 [45]:

$$\begin{aligned} \Delta_{\text{decay}} &= \Delta_{\text{SC}} \frac{\cosh[\alpha(z-d)]}{\cosh[\alpha d]}, \quad 0 < z < d \\ \alpha^2 &= \frac{t}{\Xi_0} \left( \frac{t}{\Xi_0} + \frac{3}{l} \right), \end{aligned} \quad (35)$$

其中  $t = T/T_c$ ,  $\Xi_0$  代表超导关联长度,  $z$  代表候选材料中到超导体表面的距离,  $d$  表示候选材料的厚度。我们通过这个式子分析了一下 NiSe<sub>2</sub>/Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 体系中的超导近邻效应, 在这个计算中, 我们使用  $\Xi_0 = 7.7$  nm [47],  $l = 16$  nm [48], 温度选取了实验对应温度  $t$  为 0.6, 发现结果和 NiSe<sub>2</sub>/Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> [48, 49] 的实验结果基本一致。如图所示:

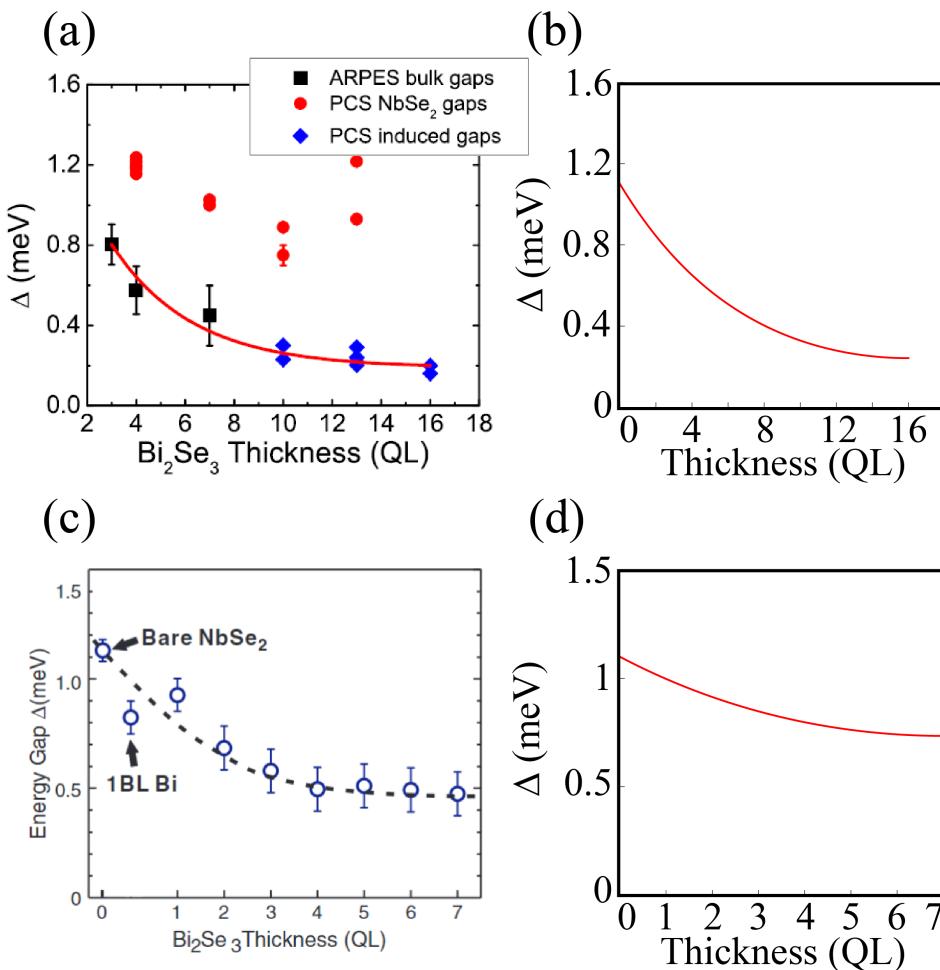


图 16.3: (a)(c): 实验中  $\text{NiSe}_2/\text{Bi}_2\text{Se}_3$  体系中不同层的超导 gap, 这代表了超导近邻效应在空间中的衰减情况 [48,49]。(b)(d): 我们的计算结果, 计算中使用  $\Xi_0 = 7.7 \text{ nm}$  [47],  $l = 16 \text{ nm}$  [48], 而温度选取对应的实验温度。

由此可见, Fu-kane 方案对应于温度  $t$  为 0 的理想模型情况, 而 Nagaosa 方案则对应于有限温度的情形, 因此, 我们可以通过调节超导近邻效应的参数来模拟比这两种理想模型更为真实的情况, 此时, 体系的相变条件变为  $B_z > \Delta_{\text{Bottom}}$ 。接下来, 我们通过具体的三个例子, 来展示如何通过 WannierTools 进行拓扑超导的计算计算。

### 16.1 3D TI 模型实现 2D 拓扑超导

首先, 我们可以构造一个简单立方晶格中的 4 带模型:

$$H_{TI}(k) = \begin{bmatrix} M(k) \cdot \sigma_0 & \vec{T} \cdot \vec{\sigma} \\ \vec{T} \cdot \vec{\sigma} & -M(k) \cdot \sigma_0 \end{bmatrix} \quad (36)$$

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

$$H_{\text{slab}}(k) = \begin{bmatrix} H_{xy}(k) & H_z & 0 & \cdots & 0 \\ H_z^* & H_{xy}(k) & H_z & \ddots & 0 \\ 0 & H_z^* & H_{xy}(k) & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & H_z \\ 0 & 0 & 0 & H_z^* & H_{xy}(k) + B_z \cdot \tau_0 \otimes \sigma_z \end{bmatrix} \quad (37)$$

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

$$H_{xy}(k) = \begin{bmatrix} (M + m_0 \cos(k_x) + m_0 \cos(k_y)) \cdot \sigma_0 & T_x \cdot \sigma_x + T_y \cdot \sigma_y \\ T_x \cdot \sigma_x + T_y \cdot \sigma_y & -(M + m_0 \cos(k_x) + m_0 \cos(k_y)) \cdot \sigma_0 \end{bmatrix} \quad (38)$$

$H_z$  表示 z 方向的耦合：

$$H_z = \begin{bmatrix} \frac{m_0}{2} \cdot \sigma_0 & it \cdot \sigma_z \\ -it \cdot \sigma_z & -\frac{m_0}{2} \cdot \sigma_0 \end{bmatrix} \quad (39)$$

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

$$H_{BdG}(k) = \begin{bmatrix} H_{\text{slab}}(k) & \Delta \cdot I_n \otimes \tau_0 \otimes i\sigma_y \\ -\Delta \cdot I_n \otimes \tau_0 \otimes i\sigma_y & -H_{\text{slab}}(-k)^* \end{bmatrix} \quad (40)$$

其中  $\Delta$  是由超导邻近效应引入的超导配对，如果考虑了超导邻近效应的衰减，则应该替换为  $\Delta_{\text{decay}}$ 。 $I_n$  表示 slab 空间中的 n 维单位矩阵。整个哈密顿量的基矢为  $\{\phi_{n,j,\sigma}(k), \phi_{n,j,\sigma}^\dagger(-k)\}$ ， $n, j, \sigma$  分别表示层数，轨道和自旋自由度。由上所述，在  $B_z > \Delta_{\text{Bottom}}$  时，体系进入拓扑超导态。接下来，我们将示范如何进行上述计算。

### ► 进入例子所在的目录

输入这个命令：

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/TI_model_TSC/
```

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

### ► 生成紧束缚模型

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

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

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

### ► 生成 `wt.in` 文件

```
1 $ cp wt.in-band wt.in 或 $ cp wt.in-WCC wt.in
```

来进行计算。

如果用户打开 wt.in 文件查看，就会发现我们要计算模型的体能带，slab 能带，slab 体系的 BdG 能带以及对应的拓扑相图和 slab 体系 BdG 哈密顿量的 Wilson Loop。

对于所有计算都必须的参数为：

```
1 --
2           wt.in
3 &SYSTEM
4 SOC = 1                           ! soc
5 E_FERMI = 0.00                      ! e-fermi
6 /
7
```

体能带计算需要的参数为：

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

slab 系统能带计算需要的参数为：

```
1 --
2           wt.in
3 &CONTROL
4 SlabBand_calc      = T
5 /
6
7 &SYSTEM
8 Nslab = 20
9 Add_surf_zeeman_field = 1          ! Add zeeman field in bottom surface of slab
10   system
11 Bx_surf    = 0.0                  ! Surface zeeman field
12 By_surf    = 0.0                  ! Surface zeeman field
13 Bz_surf    = 0.0                  ! Surface zeeman field
14 /
15
```

```

13
14 &PARAMETERS
15 Nk1 = 201                                ! number k points
16 /
17
18 SURFACE
19 1 0 0
20 0 1 0
21 0 0 1
22
23 KPATH_SLAB
24 2                                         ! number of k line for 2D case
25 X 0.5 0.0 G 0.0 0.0                      ! k path for 2D case
26 G 0.0 0.0 M 0.5 0.5

```

► 其中 Add\_surf\_zeeman\_field 表示添加表面赛曼场的方式，1 代表只在下表面添加，2 代表只在上表面添加，3 代表上下表面都添加（默认值为 2）。Bx\_surf, By\_surf, Bz\_surf 表示添加表面赛曼场的强度 (eV)。

slab 系统对应的 BdG 能带计算需要的参数为：

```

1 --
2 wt.in
3 &CONTROL
4 SlabBdG_calc      = T
5 /
6 &SYSTEM
7 Nslab = 20
8 Add_surf_zeeman_field = 1                  ! Add zeeman field in bottom surface of slab
9          system
10 Add_Delta_BdG = 2                         ! Superconducting proximity effect decay from
11          the top surface
12 Bx_surf    = 0.0                           ! Surface zeeman field
13 By_surf    = 0.0                           ! Surface zeeman field
14 Bz_surf    = 0.2                           ! Surface zeeman field
15 mu_BdG     = 0.0                           ! The chemical potential of the BdG Hamiltonian
16 Delta_BdG = 0.1                           ! Uniform s-wave superconducting gap
17 t_BdG      = 0.0                           ! The ratio of temperature T to Tc
18 /
19 &PARAMETERS
20 Nk1 = 201                                ! number k points
21 /
22 SURFACE
23 1 0 0
24 0 1 0
25 0 0 1

```

```

26
27 KPATH_SLAB
28 2                                     ! number of k line for 2D case
29 X 0.5 0.0 G 0.0 0.0                 ! k path for 2D case
30 G 0.0 0.0 M 0.5 0.5

```

► 其中 Add\_Delta\_BdG 表示超导近邻效应的衰减方式，1 代表从下表面开始衰减，2 代表从上表面开始衰减（默认值为 1）。mu\_BdG 和 Delta\_BdG 分别表示 BdG 哈密顿量中的化学势 (eV) 和 s 波超导配对强度 (eV)，t 则表示温度 T 和 T<sub>c</sub> 的比值（默认值为 0.6，在此由于是模型体系，我们就没有考虑近邻效应的衰减），用户也可以设置超导关联长度 xi\_BdG 和平均自由程 l\_BdG，在此我们使用了默认值  $\Xi_0 = 7.7 \text{ nm}$  [47],  $l = 16 \text{ nm}$  [48]（也就是上文中的实验值）。

而如果要计算体系的拓扑相图（也就是体系的 BdG 能谱在高对称点的能隙闭合再打开的情况），需要的参数为：

```

1 --
2      wt.in
3 &CONTROL
4 BdG_phase_calc      = T
5 /
6 &SYSTEM
7 Nslab = 20
8 Add_surf_zeeeman_field = 1          ! Add zeeman field in bottom surface of slab
9           system
10 Add_Delta_BdG = 2                  ! Superconducting proximity effect decay from
11           the top surface
12 Bx_surf   = 0.0                   ! Surface zeeman field
13 By_surf   = 0.0                   ! Surface zeeman field
14 Bz_surf   = 0.2                   ! Surface zeeman field
15 mu_BdG    = 0.0                   ! The chemical potential of the BdG Hamiltonian
16 Delta_BdG = 0.1                  ! Uniform s-wave superconducting gap
17 t_BdG     = 0.0                   ! The ratio of temperature T to Tc
18 /
19 &PARAMETERS
20 Nk1 = 201                      ! number k points
21 /
22 SURFACE
23 1 0 0
24 0 1 0
25 0 0 1
26
27 SINGLEKPOINT_2D
28 Direct
29 0.0 0.0

```

► 其中由 SINGLEKPOINT\_2D 所设置的二维布里渊区中的高对称点用来绘制体系的拓扑相图，用户需判断系统在哪个高对称点发生拓扑相变。

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

```

1 --  
2      wt.in  
3 &CONTROL  
4 BdGChern_calc      = T  
5 /  
6  
7 &SYSTEM  
8 Nslab = 20  
9 Add_surf_zeeeman_field = 1          ! Add zeeman field in bottom surface of slab  
10   system  
11 Add_Delta_BdG = 2                  ! Superconducting proximity effect decay from  
12   the top surface  
13 Bx_surf    = 0.0                   ! Surface zeeman field  
14 By_surf    = 0.0                   ! Surface zeeman field  
15 Bz_surf    = 0.2                   ! Surface zeeman field  
16 mu_BdG     = 0.0                   ! The chemical potential of the BdG Hamiltonian  
17 Delta_BdG  = 0.1                   ! Uniform s-wave superconducting gap  
18 t_BdG      = 0.0                   ! The ratio of temperature T to Tc  
19 /  
20  
21 &PARAMETERS  
22 Nk1 = 41                         ! number k points  
23 Nk2 = 401                         ! number k points  
24 /  
25  
26 SURFACE  
27 1 0 0  
28 0 1 0  
29 0 0 1  
30  
31 KPLANE_SLAB  
32 -0.5 -0.5                         ! Original point for 2D k plane  
33 1.0  0.0                           ! The first vector is used for integration. k1  
34 0.0  1.0                           ! The WCC is along this vector. k2

```

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

► 运行 WannierTools

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .  
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

用户可以通过 WT.out 文件来确定计算是否顺利，运行如下命令：

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

如果一切顺利，则用户会看到以下内容：

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

### ▶ 通过 Gnuplot 将结果可视化

1). 我们可以通过这个命令画出体能带：

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

输出的文件叫 bulkek.pdf。它看起来应该是这样：

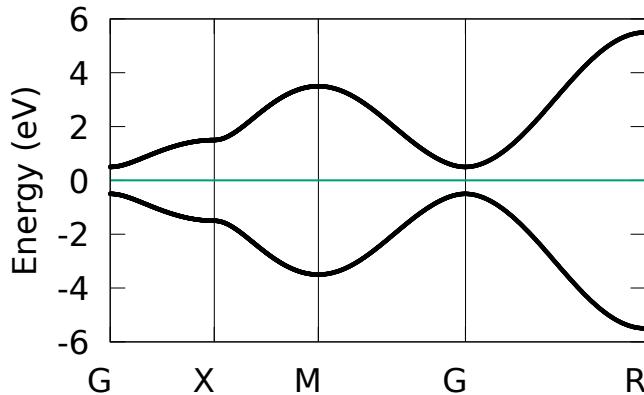


图 16.4: TI 模型对应的体能带图

2). 接下来，我们可以通过这个命令画出 slab 系统的能带：

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

输出的文件叫 slabek.png，得到的结果如下图所示：

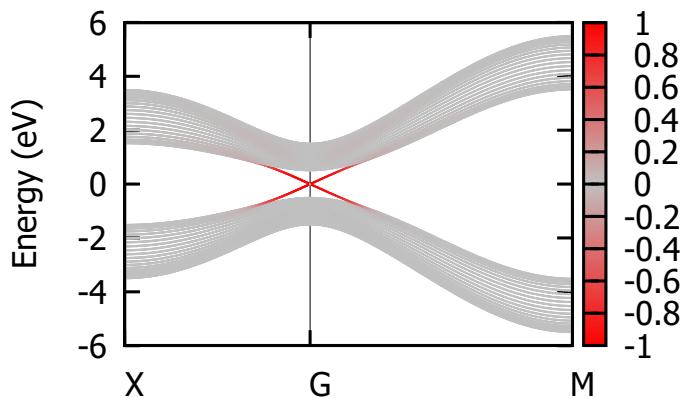


图 16.5: TI 模型对应的 slab 体能带图

其中红色表示系统的表面态。该能带结构对应于  $H_{slab}(k)$ 。(注意此时表面塞曼劈裂设为 0)

3). 由此，我们发现体系的拓扑相变发生在 Gamma 点，可以通过这个命令画出 slab 系统的拓扑相图：

```
1 $ gnuplot slabek_BdG_phase.gnu
```

输出的文件 slabek\_BdG\_phase.pdf，得到的结果如下图所示：

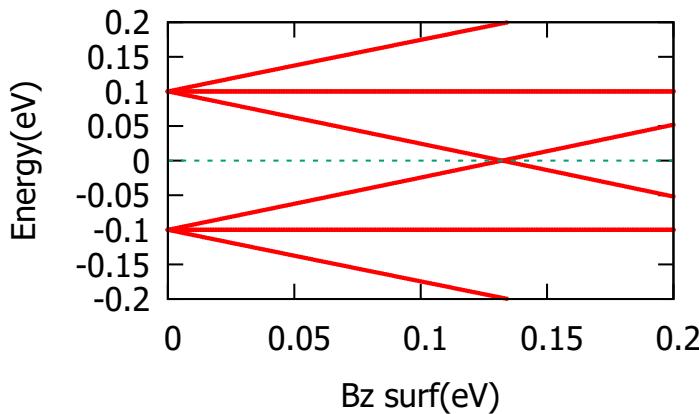


图 16.6: TI 模型对应的拓扑超导相图

该图表示系统在 Gamma 点的 BdG 哈密顿量本征值随着表面塞曼场  $B_z$  变换的情况，可以看出体系经历了能隙的闭合再打开，这可以视为体系的拓扑相图。

4). 接下来，我们可以通过这个命令画出 slab 系统的 BdG 能带：

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

输出的文件叫 slabek\_BdG.png。在相变临界点  $B_z=0.132$  和拓扑相  $B_z=0.2$  时，得到的结果如下图所示：

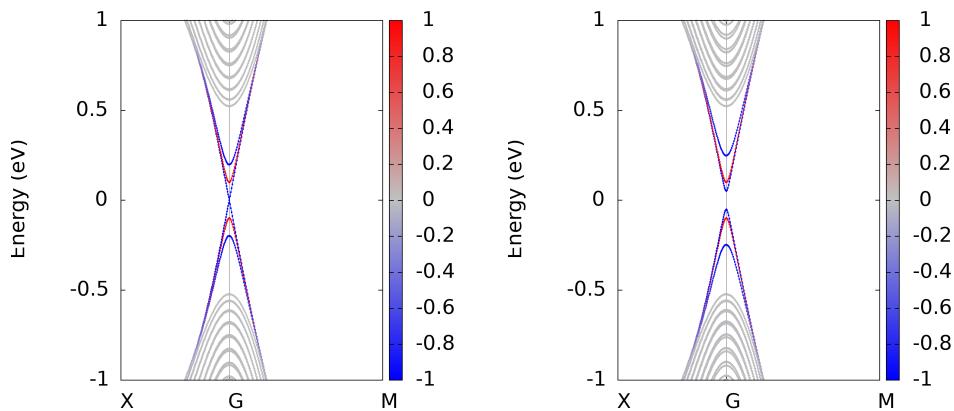


图 16.7: 左: 表面塞曼场为 0.132 时体系的 BdG 能带图。右: 表面塞曼场为 0.2 时体系的 BdG 能带图。

该能带结构对应于  $H_{BdG}(k)$ 。可以通过 Wilson loop 来验证这个结果。

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

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

输出的文件叫 wcc\_slab\_BdG\_total.eps。表面塞曼场为 0.2 时得到的结果如下图所示:

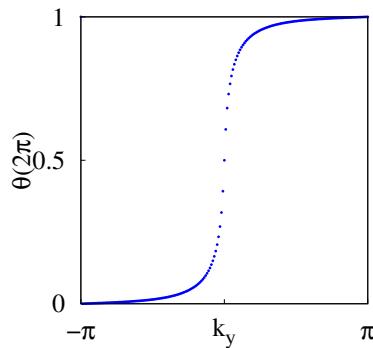


图 16.8: 表面塞曼场为 0.2 时体系的 Wilson loop 谱。

可以从这个 wcc 谱中的 winding number 得到, 此时体系对应的陈数为 1。

### ► 练习

1. 通过将 Bz\_surf 修改为负数来研究体系的拓扑性质, 并考虑拓扑性质变化的原因。

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

2. 思考化学势  $\mu$  对于体系拓扑的影响, 可以使用计算结果佐证。

参考答案: 表面态对应的色散稍显复杂, 但是其能隙闭合再打开的条件为  $B_z = \pm\sqrt{\mu^2 + \Delta^2}$ 。在计算中, 如果保持 Delta\_BdG=0.1, 上面已经证实了 Bz\_surf=0.132 为体系的相变点, 在设

置  $\mu_{\text{BdG}}=0.05$ , 则体系的相变点应该变为  $Bz_{\text{surf}}=\sqrt{0.1^2+0.05^2} \times 0.132 = 0.148$ 。保持  $Bz_{\text{surf}}=0.15$ ,  $\mu_{\text{BdG}}=0.05$  和 0.1 时, 体系的 BdG 能谱如下图:

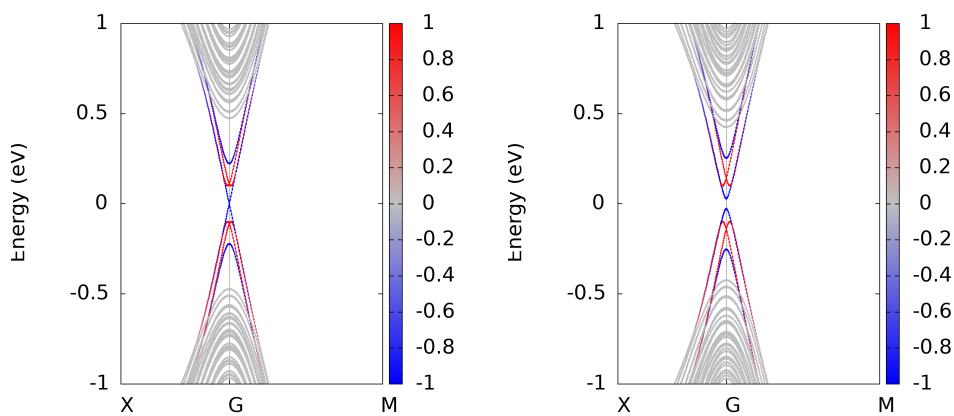


图 16.9: 化学势为 0.05eV (左), 0.1eV (右) 时的 BdG 能谱。

根据上面的分析, 我们可以预测  $\mu_{\text{BdG}}=0.05$  时, 体系仍然处于拓扑超导态, 而  $\mu_{\text{BdG}}=0.1$  时, 体系则处于拓扑平庸态, 这可以用 Wilson loop 谱来验证:

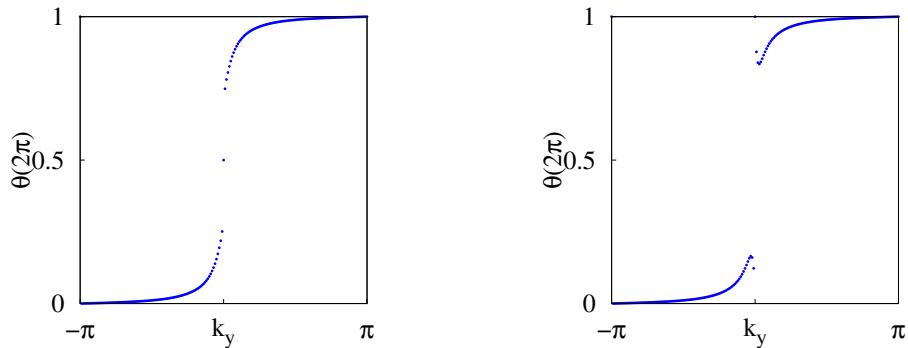


图 16.10: 化学势为 0.05eV (左), 0.1eV (右) 时, slab-BdG 哈密顿的 wilson loop。

## 16.2 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 实现 2D 拓扑超导

Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 是一种理想的 3D 强拓扑绝缘体, 其材料性质在拓扑绝缘体一章已经有详细的展示, 在此不再重复介绍。接下来我们将基于第一性原理计算, 使用 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 来进行上述的模型计算。

► **准备** 首先, 请进入这个例子所在的目录, 并生成输入文件

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

或

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

来进行计算。

这个目录中有用来生成紧束缚模型的 Bi2Se3\_hr.tar.gz, 用来绘制合适能量范围能谱的 slabek.gnu0 和 slabek\_BdG.gnu0, 以及考虑不考虑超导近邻效应衰减时对应的输入文件 wt.in-band, wt.in-

WCC, wt.in-nodecay-band, wt.in-nodecay-WCC。

如果用户打开 wt.in 查看，就会发现我们在考虑超导近邻效应衰减时设置了温度比 t\_BdG 为 0.6，而在不考虑衰减时设为了 0。

► 运行 WannierTools

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
```

► 通过 Gnuplot 将结果可视化

1). 我们可以通过这个命令画出体能带：

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

输出的文件叫 bulkek.pdf。它看起来应该是这样：

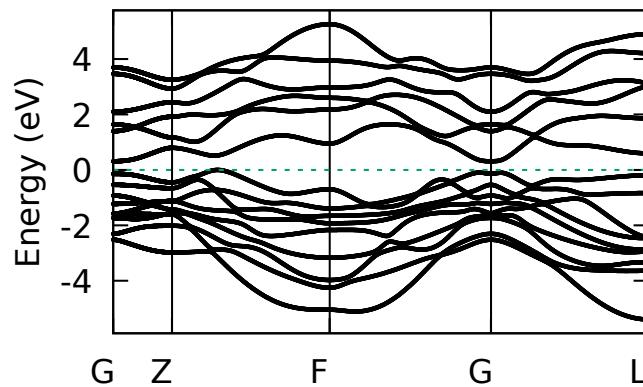


图 16.11:  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的体能带图。

2). 接下来，我们可以通过这个命令画出 slab 系统的能带：

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

输出的文件叫 slabek.png。得到的结果如下图所示：

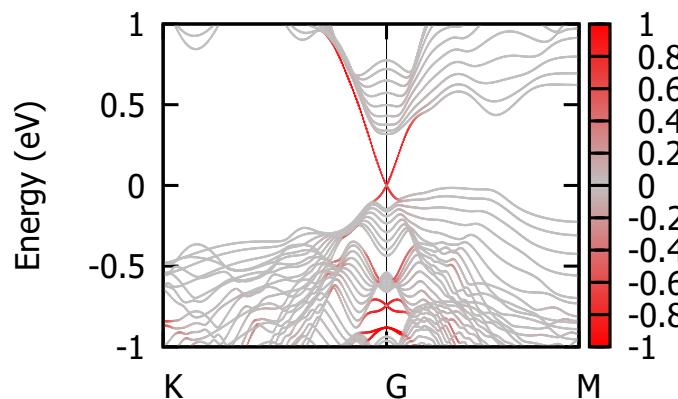


图 16.12:  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的 slab 能带图。

该能带结构对应于  $H_{\text{slab}}(k)$  (注意此时表面塞曼劈裂设为 0)。

3). 我们还可以通过这个命令画出超导近邻效应随层数衰减的趋势:

```
1 $ gnuplot Delta_decay
```

输出文件叫 Delta\_decay.pdf, 设置  $t=0.6$  时的结果如下图所示:

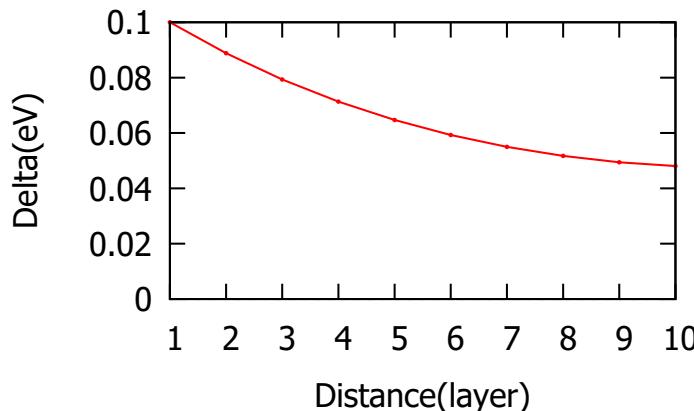


图 16.13:  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  中超导近邻效应的衰减。

4). 我们发现体系的拓扑相变发生在 Gamma 点, 可以通过这个命令画出 slab 系统的拓扑相图:

```
1 $ gnuplot slabek_BdG_phase.gnu
```

输出的文件叫 slabek\_BdG\_phase.pdf, 其中, 考虑超导近邻效应衰减和不考虑衰减时的拓扑相图分别为:

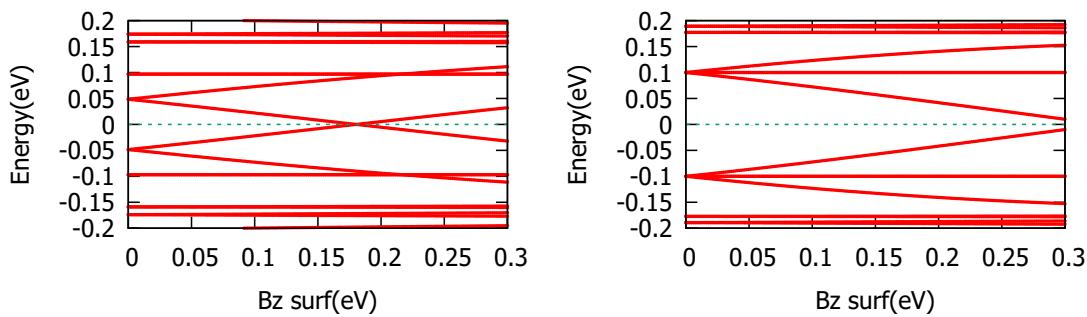


图 16.14: 左: 考虑 Decay 时的拓扑相图。右: 不考虑 Decay 时的拓扑相图

可以发现, 在考虑衰减时, 系统能在更小的塞曼劈裂下实现拓扑超导相。

5). 然后, 我们可以通过这个命令画出 slab 系统的 BdG 能带:

```
1 $ gnuplot slabek_BdG.gnu
```

输出的文件叫 slabek\_BdG.png。考虑超导近邻效应衰减和不考虑衰减时的结果分别如下图左右所示:

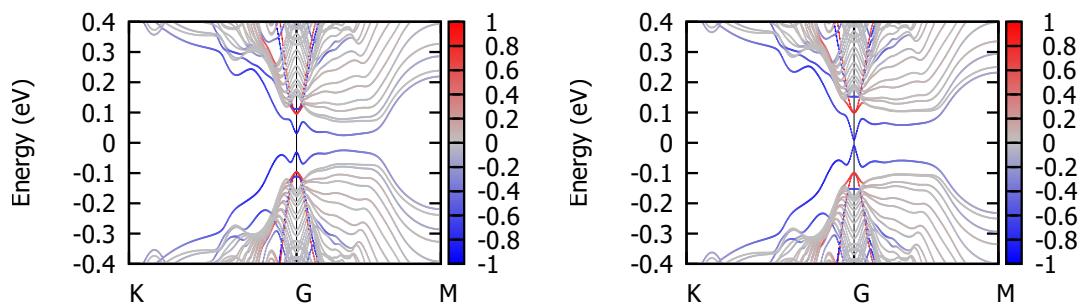


图 16.15: 左: 考虑超导近邻效应衰减时的 BdG 能带图。右: 不考虑衰减时的 BdG 能带图。

该能带结构对应于  $H_{BdG}(k)$ 。

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

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

输出的文件叫 wcc\_slab\_BdG\_total.eps。考虑超导近邻效应衰减和不考虑衰减时的结果分别如下图左右所示:

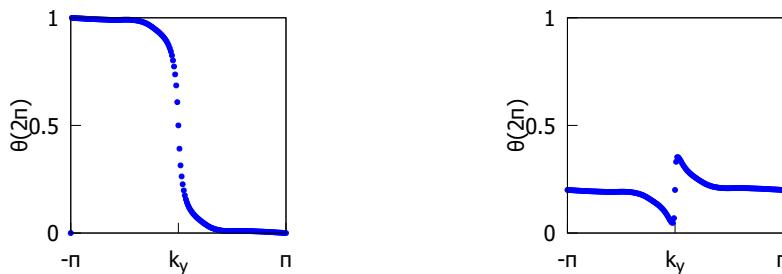


图 16.16: 左: 考虑超导近邻效应衰减时的 Wilson loop。右: 不考虑衰减时的 Wilson loop。

可以发现在相图塞曼劈裂的情况下, 考虑超导近邻效应的衰减更有利于实现拓扑超导。

### 16.3 SnTe 实现 2D 拓扑超导

通过前两节的计算, 我们已经确定狄拉克锥表面态可以用来构建 2D 手性拓扑超导体。接下来, 我们将使用 WannierTools 探索存在多个表面狄拉克锥的体系能否实现高陈数的 2D 拓扑超导。SnTe 是一种由镜面对称性保护的拓扑晶体绝缘体, 其 (001) 表面存在 4 个受到晶体对称性保护的狄拉克锥表面态, 其晶体结构如下图所示 [50]:

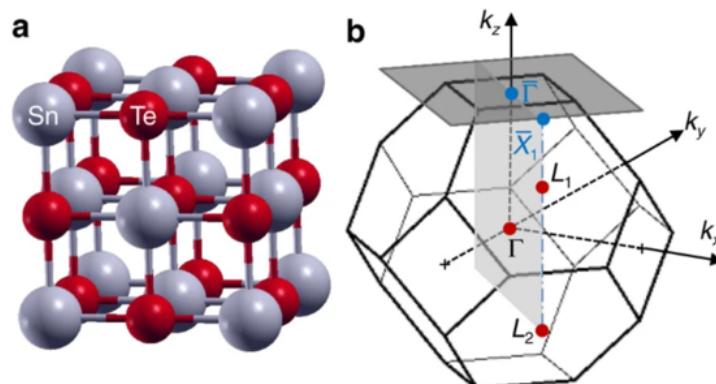


图 16.17: a: SnTe 的晶体结构。b: 对应的布里渊区。

它的 (001) 表面能带如下图所示：

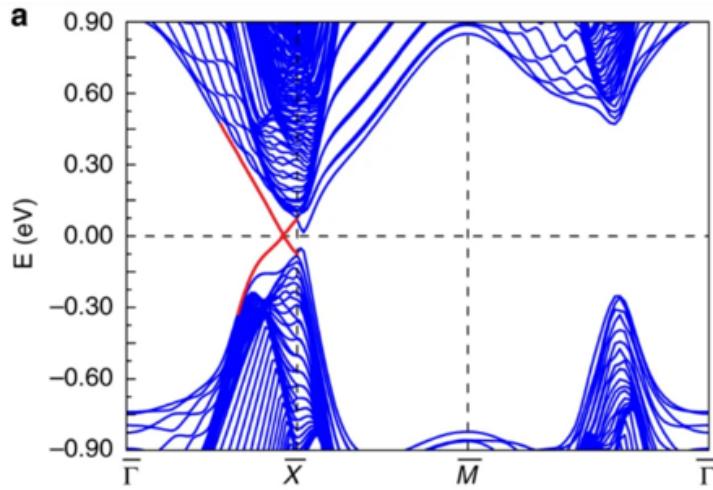


图 16.18: (001) 表面的 slab 能带图

► 准备 首先，请进入这个例子所在的目录，并生成输入文件

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

或

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

来进行计算。

这个目录中有用来生成紧束缚模型的 SnTe\_hr.tar.gz，用来绘制合适能量范围能谱的 slabek.gnu0 和 slabek\_BdG.gnu0，以及对应的输入文件 wt.in-band, wt.in-WCC。

► 运行 WannierTools

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
```

► 通过 Gnuplot 将结果可视化

1). 我们可以通过这个命令画出体能带：

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

输出的文件叫 bulkek.pdf。它看起来应该是这样：

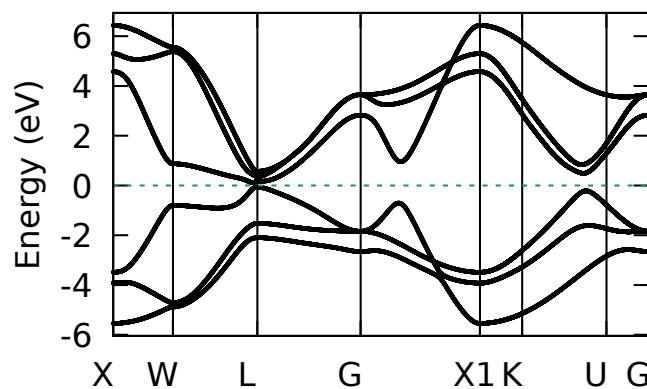


图 16.19: SnTe 的体能带图

2). 接下来，我们可以通过这个命令画出 slab 系统的能带：

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

输出的文件叫 slabek.png。得到的结果如下图所示：

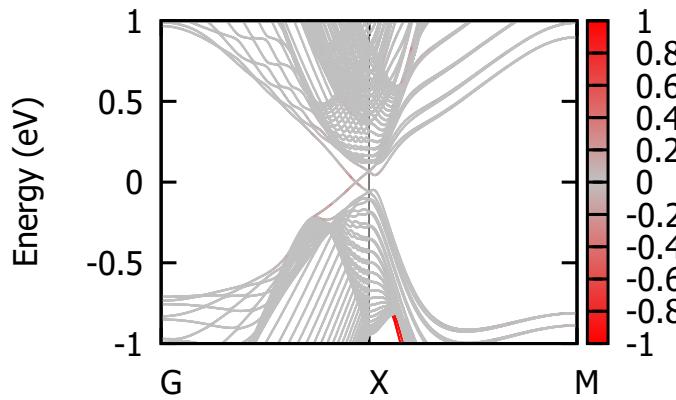


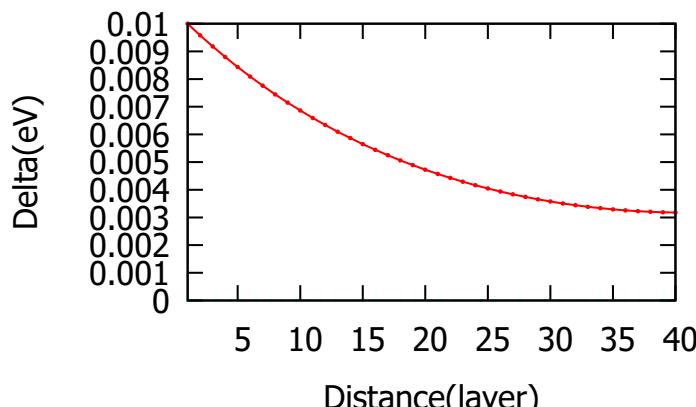
图 16.20: SnTe 的 slab 能带图。

该能带结构对应于  $H_{\text{slab}}(k)$  (注意此时表面塞曼劈裂设为 0)。

3). 我们还可以通过这个命令画出超导近邻效应随层数衰减的趋势：

```
1 $ gnuplot Delta_decay
```

输出文件叫 Delta\_decay.pdf, 设置  $t=0.6$  时的结果如下图所示：

图 16.21:  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  中超导近邻效应的衰减。

4). 这时, 体系的拓扑相变点发生在  $(0.4683, 0.0)$  附近, 可以通过这个命令画出 slab 系统的拓扑相图:

```
1 $ gnuplot slabek_BdG_phase.gnu
```

输出的文件叫 slabek\_BdG\_phase.pdf, 拓扑相图为:

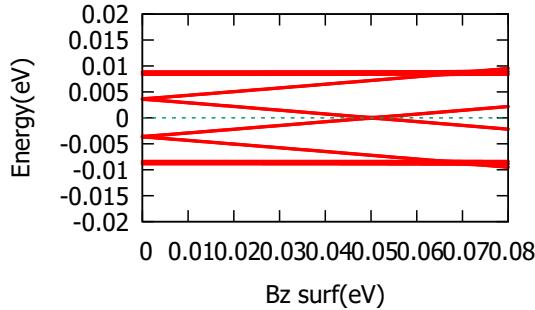


图 16.22: SnTe 体系的拓扑相图

5). 然后, 我们可以通过这个命令画出 slab 系统的 BdG 能带:

```
1 $ gnuplot slabek_BdG.gnu
```

输出的文件叫 slabek\_BdG.png。得到的结果如下图所示:

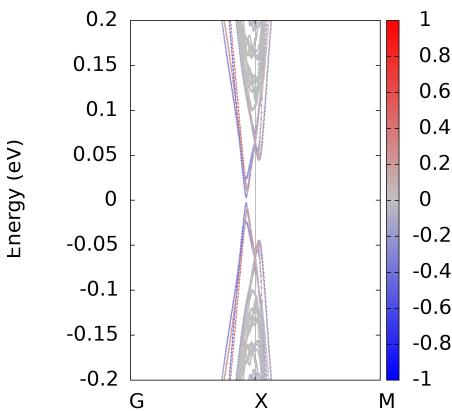


图 16.23: 塞曼劈裂为 0.08 时体系的 BdG 能带图。

该能带结构对应于  $H_{BdG}(k)$ 。

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

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

输出的文件叫 wcc\_slab\_BdG\_total.eps。得到的结果如下图所示:

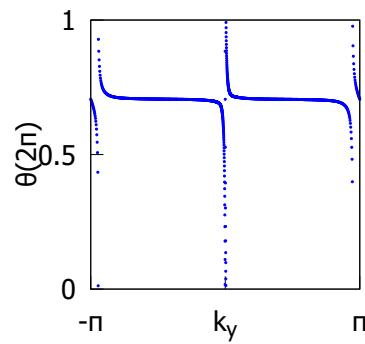


图 16.24: 塞曼劈裂为 0.08 时体系的 wilson loop。

由于两个表面狄拉克锥在同一条积分路径上，导致 WCC 谱过于尖锐。不过，进行仔细的分析和放大计算，还是得到了-4 的陈数，也符合我们的预期。

目前，已经基于该程序包进行了一些工作 [42, 43]，欢迎大家共同讨论指正。

## 17 体光伏效应

本章将简要介绍体光伏效应的理论基础，并通过两个示例说明如何使用 WannierTools 计算材料的体光伏响应。

### 参考文献

1. Second-order optical response in semiconductors, J. E. Sipe and A. I. Shkrebtii, Phys. Rev. B 61, 5337 (2000) [51].
2. First-principles calculation of nonlinear optical responses by Wannier interpolation, Wang Chong et.al, Phys. Rev. B 96, 115147 (2017) [52].
3. First-principles calculation of optical responses based on nonorthogonal localized orbitals, Wang Chong et.al, New J. Phys. 21, 093001 (2019) [53].
4. Switchable topological phase transition and nonlinear optical properties in a ReC<sub>2</sub>H, Zhang Chunmei, Pi Hanqi, Zhou Liqin, Li Si, Zhou Jian, Du Aijun and Weng Hongming, Phys. Rev. B 105, 245108 (2022) [54].
5. Magnetic bulk photovoltaic effect as a probe of magnetic structures of EuSn<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, Pi Hanqi, Zhang Shuai and Weng Hongming, Quantum Front 2, 6 (2023) [55].

### 17.1 体光伏响应理论

材料在均匀光照射下产生稳态直流电流的效应，称为体光伏效应（Bulk Photovoltaic Effect, BPVE）。体光伏效应是一个二阶非线性光学过程，只能发生在非中心对称系统中。

假设一列单色光  $\tilde{E}(t) = E(\omega)e^{-i\omega t} + \text{c.c.}$  入射到非中心对称材料上，材料内部可以产生稳态直流电流：

$$\begin{aligned} J^a &= \sigma^{abc}(0; -\omega, \omega)E_b(-\omega)E_c(\omega) + \sigma^{abc}(0; \omega, -\omega)E_b(\omega)E_c(-\omega) \\ &= \sigma^{abc}(0; -\omega, \omega)E_b(-\omega)E_c(\omega) + \text{c.c.} \\ &= 2\text{Re} \left[ \sigma^{abc}E_b(-\omega)E_c(\omega) \right] \end{aligned} \quad (41)$$

$\sigma^{abc}(0; -\omega, \omega)$  是二阶光电流对应的非线性光电导，描述材料在受到 b、c 方向的单色均匀电场作用时，沿 a 方向产生直流电流的能力。

体光伏效应可以分为两类。通过对  $\sigma^{abc}$  进行对称化处理等步骤，可以得到：

$$\begin{aligned} \frac{dJ_{\text{inject}}^a}{dt} &= \eta_{\text{inject}}^{abc}(0; -\omega, \omega)E_b(-\omega)E_c(\omega) \\ &= -\frac{e^3\pi}{\hbar^2} \sum_{n,m,k} \Delta_{mn}^a r_{nm}^b r_{mn}^c f_{nm} \delta(\omega_{mn} - \omega)E_b(-\omega)E_c(\omega) \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned}
J_{\text{shift}}^a &= \sigma_{\text{shift}}^{abc}(0; -\omega, \omega) E_b(-\omega) E_c(\omega) \\
&= -\frac{ie^3\pi}{2\hbar^2} \sum_{n,m,k} f_{nm} \left[ (r_{mn}^c)_{;k^a} r_{nm}^b - (r_{nm}^b)_{;k^a} r_{mn}^c \right] \delta(\omega_{mn} - \omega) E_b(-\omega) E_c(\omega) \\
&= -\frac{e^3\pi}{2\hbar^2} \sum_{n,m,k} f_{nm} r_{nm}^b r_{mn}^c (\mathcal{R}_{mn;c}^a - \mathcal{R}_{nm;b}^a) \delta(\omega_{mn} - \omega) E_b(-\omega) E_c(\omega)
\end{aligned} \tag{43}$$

第一种电流描述了一个随时间线性增长的直流电流（由于材料内部对载流子散射等机制，电流最后会保持稳定），我们称之为注射电流  $J_{\text{inject}}^a$ 。第二种电流描述了一种由于电子在实空间中发生位置移动而产生的响应，公式中的矢量  $\mathcal{R}_{mn;a}^c = i \frac{\partial}{\partial k^a} \ln r_{mn}^c + A_{mm}^a - A_{nn}^a$  具有长度的量纲，可以理解为电子实空间位置在  $a$  方向的改变，我们称之为位移电流  $J_{\text{shift}}^a$ 。

我们把  $\sigma^{abc}$  的实部记为  $\text{Re } \sigma_{abc} \equiv \sigma_L^{abc}$ ，虚部记为  $\text{Im } \sigma_{abc} \equiv \epsilon_{bcd} \sigma_C^{ad}$ ，并把体光伏电流的定义式改写成如下形式：

$$J^a = 2\sigma_L^{abc} E_b^* E_c + 2i \sigma_C^{ad} [\mathbf{E}^* \times \mathbf{E}]_d \tag{44}$$

上式中的第一项对应于由电场分量之间的干涉项所诱导的电流，其方向依赖于光的偏振态，因此我们称之为**线偏光伏效应** (linear photovoltaic effect, LPGE)。该项在入射光为线偏振或圆偏振时均可能产生响应。第二项则与光场螺旋度  $\mathbf{E}^* \times \mathbf{E}$  相关，代表入射光的自旋角动量对电流的贡献。由于仅有圆偏光才具有非零的螺旋度，因此该项电流只能由圆偏振光激发，我们称之为**圆偏光伏效应** (circular photovoltaic effect, CPGE)。

综上分类，体光伏效应可以分为四类：线偏位移电流、圆偏位移电流、线偏注射电流、圆偏注射电流。我们把位移电流和注射电流的响应系数分解出实部和虚部，就能得到这四种光电流对应的响应系数的表达式：

#### 线偏注射电流响应系数

$$\eta_{LI}^{abc}(0; -\omega, \omega) \equiv \text{Re} [\eta_{\text{inject}}^{abc}(0; -\omega, \omega)] \tag{45}$$

$$= -\frac{e^3\pi}{2\hbar^2} \sum_{nmk} f_{nm} \Delta_{mn}^a \{r_{nm}^b, r_{mn}^c\} \delta(\omega_{mn} - \omega) \tag{46}$$

#### 圆偏注射电流响应系数

$$\eta_{CI}^{abc}(0; -\omega, \omega) \equiv \text{Im} [\eta_{\text{inject}}^{abc}(0; -\omega, \omega)] \tag{47}$$

$$= \frac{ie^3\pi}{2\hbar^2} \sum_{nmk} f_{nm} \Delta_{mn}^a [r_{nm}^b, r_{mn}^c] \delta(\omega_{mn} - \omega) \tag{48}$$

#### 线偏位移电流响应系数

$$\sigma_{LS}^{abc}(0; -\omega, \omega) \equiv \text{Re} [\sigma_{\text{shift}}^{abc}(0; -\omega, \omega)] \tag{49}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{ie^3\pi}{4\hbar^2} \sum_{nmk} f_{nm} \left[ (r_{mn}^c)_{;k^a} r_{nm}^b + (r_{mn}^b)_{;k^a} r_{nm}^c \right] \\
&\quad \times [\delta(\omega_{mn} - \omega) + \delta(\omega_{mn} + \omega)]
\end{aligned} \tag{50}$$

圆偏注射电流响应系数

$$\sigma_{CS}^{abc}(0; -\omega, \omega) \equiv \text{Im} \left[ \sigma_{\text{shift}}^{abc}(0; -\omega, \omega) \right] \quad (51)$$

$$= -\frac{e^3 \pi}{4 \hbar^2} \sum_{nmk} f_{nm} \left[ (r_{mn}^c)_{;k^a} r_{nm}^b - (r_{mn}^b)_{;k^a} r_{nm}^c \right] \\ \times [\delta(\omega_{mn} - \omega) - \delta(\omega_{mn} + \omega)] \quad (52)$$

关于体光伏效应更详细的理论推导与讨论，可参考文献 [51] 和 [55]。

## 17.2 体光伏效应计算：以 WS<sub>2</sub> 为例

我们首先以单层 WS<sub>2</sub> 为例，介绍如何使用 WannierTools 做一个最基本的体光伏效应计算。单层 WS<sub>2</sub> 缺乏中心反演对称性，是研究体光伏效应的理想体系。

### ► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/BPVE/WS2
```

该目录中，有以下输入文件：

wt.in: WannierTools 的主输入文件。

WS2\_hr.dat: 紧束缚哈密顿量。

### ► 第 2 步：准备输入文件

以下是 wt.in 文件的节选，重点列举了计算体光伏响应的关键参数：

```
1 ...
2 &CONTROL
3 BPVE_calc = T
4 /
5 ...
6 ...
7 &PARAMETERS
8 Nk1 = 1800      ! number k points
9 Nk2 = 1800      ! number k points
10 Nk3 = 1         ! number k points
11 FreqMin=0
12 FreqMax=1
13 FreqNum=400
14 eta_smr_fixed=0.02
15 /
16 ...
17 ...
```

对关键参数的解释：

BPVE\_calc: 体光伏效应计算的开关。

Nk1, Nk2, Nk3: 在布里渊区不同方向上的 k 点采样数目。

FreqMin, FreqMax: 光子频率采样的下限和上限，单位是 eV。

FreqNum: 光子频率采样的数目。

eta\_smr\_fixed: delta 函数展宽。

**请注意：**由于集群计算资源有限，运行以上计算可能需要相当长的时间。建议在运行此示例时酌情降低 k 点采样密度，或在个人集群上进行计算。文件夹内已经提供按照以上参数运行完成的结果文件，直接运行绘图脚本即可。

### ► 第 3 步：提交计算任务

```
1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh
```

### ► 第 4 步：分析计算结果

计算完成后，会有四个输出文件：

`linear_inject.dat`: 线偏注射电流响应张量。  
`circular_inject.dat`: 圆偏注射电流响应张量。  
`linear_shift.dat`: 线偏位移电流响应张量。  
`circular_shift.dat`: 圆偏位移电流响应张量。

作图脚本 `bpve.gnu` 由 WannierTools 自动生成，其前两行分别需要由用户指定响应类型及响应张量的分量（脚本中已列出序号和张量分量的对应关系）。

```
1 # BPVE Spectrum: Type and Component
2 type = "LS"      # LS, LI, CS, CI
3 col = 11         # See below
4
5 component = ""
6 if (col == 2) component = "xxx"
7 if (col == 3) component = "xxy"
8 if (col == 4) component = "xxz"
9 ...
10 if (col == 11) component = "yyy"
11 ...
```

在这个例子中，我们已经把结果整理好。只需进入 `result` 文件夹，运行此作图脚本

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/BPVE/WS2/result
2 $ gnuplot bpve.gnu
```

得到 `sigma_LS_yyy.pdf`，即线偏位移电流响应张量的 `yyy` 分量随光子频率的变化，如下图所示。

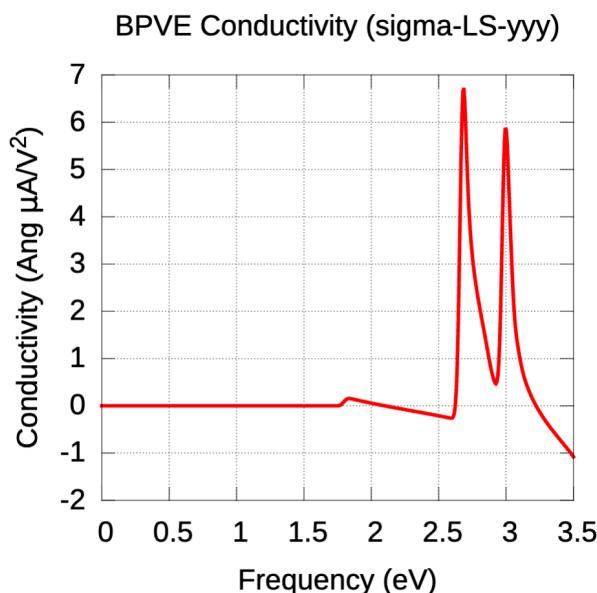


图 17.1:  $\text{WS}_2$  线偏位移电流响应张量的  $yyy$  分量  $\sigma_{yyy}$  分量随光子频率的变化

### 17.3 利用体光伏响应探测拓扑相变：以 $\text{ReC}_2\text{H}$ 为例

在拓扑相变点附近，材料往往会表现出一些奇异的物理现象，而这些现象可以用来探测材料的拓扑相。由于大多数的光学过程来源于价带和导带之间的电子跃迁，所以人们自然地猜想是否能通过材料的光学响应来探测拓扑相变。由于拓扑相变通常伴随着导带和价带能带成分的交换，因此位移矢量在拓扑相变前后会随能带反转而改变符号。而位移电流来自于位移矢量和光子吸收率的乘积在整个布里渊区的积分，由于吸收率总是一个非负数，所以位移电流也被预期在相变前后改变方向，从而用来探测材料中拓扑相变的存在。需要注意的是，然而，由于位移电流来自整个布里渊区的贡献，位移矢量方向在相变  $k$  点处的反转并不能保证位移电流的方向改变，尤其是当非相变区域对位移电流贡献更大的时候。

单层  $\text{ReC}_2\text{H}$  所属空间群是  $P3m1$ ，吸附的氢原子层破缺了体系的中心反演对称性，从而允许了体光伏效应的产生。尽管如此，体系仍保留一条垂直于锯齿形（zigzag）方向的镜面对称面（定义 zigzag 为  $\hat{x}$  方向），以及沿  $\hat{z}$  的三重旋转对称性。这些对称性约束下，允许存在四个独立非零的位移电流响应张量分量，包括面内分量  $\sigma_{yyy} = -\sigma_{yxx} = -\sigma_{xxy}$ ，以及面外分量  $\sigma_{zxx} = \sigma_{zyy}$ 、 $\sigma_{zzz}$ 、 $\sigma_{xxz} = \sigma_{yyz}$ 。因为单层  $\text{ReC}_2\text{H}$  是一个二维材料，所以接下来主要讨论面内分量  $\sigma_{yyy}$ 。

单层  $\text{ReC}_2\text{H}$  在拉伸应变下，会产生两次拓扑相变：当应变达到  $\varepsilon_{c1} \approx 2.3\%$  时，体系由普通绝缘体转变为拓扑绝缘体。这一转变可以通过计算边界态确认；当应变超过  $\varepsilon_{c2} \approx 7.8\%$  时，则重新转变为普通绝缘体。这一转变可以通过计算高对称  $K$  点上最高价带和最低导带的不可约表示确认。因此，我们可以在这个体系中研究两次不同的拓扑相变对非线性光学响应的影响。

#### ► 第 1 步：进入工作目录

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/BPVE/ReC2H
```

目录中有  $0.9\%$ ,  $2.2\%$ ,  $4\%$ ,  $6\%$ ,  $7.8\%$ ,  $12\%$  几个文件夹，分别对应单层  $\text{ReC}_2\text{H}$  在不同双轴应变值下的结构。

下面以计算  $0.9\%$  的应变为例，其它应变下的计算流程与此相同。

进入  $0.9\%$  文件夹：

```
1 $ cd 0.9%
```

该目录中，有以下输入文件：

wt.in: WannierTools 的主输入文件。  
ReC2H\_hr.dat: 紧束缚哈密顿量。

### ► 第 2 步：准备输入文件

以下是 wt.in 文件的节选

```

1 ...
2 &CONTROL
3 BPVE_calc = T
4 /
5
6 ...
7 &PARAMETERS
8 Nk1 = 1800           ! number k points
9 Nk2 = 1800           ! number k points
10 Nk3 = 1              ! number k points
11 FreqMin=0
12 FreqMax=1
13 FreqNum=400
14 eta_smr_fixed=0.02
15 /
16
17 ...

```

**请注意：**由于集群计算资源有限，运行以上计算可能需要相当长的时间。建议在运行此示例时酌情降低 k 点采样密度，或在个人集群上进行计算。文件夹内已经提供按照以上参数运行完成的结果文件，直接运行绘图脚本即可。

### ► 第 3 步：提交计算任务

```

1 $ cp WannierToolsTutorials/sub-wt.sh .
2 $ sbatch sub-wt.sh

```

### ► 第 4 步：分析计算结果

在修改好作图脚本中的响应类型和分量后，

```

1 # BPVE Spectrum: Type and Component
2 type = "LS"      # LS, LI, CS, CI
3 col = 11         # See below
4
5 component = ""
6 if (col == 2) component = "xxx"
7 if (col == 3) component = "xxy"
8 if (col == 4) component = "xxz"
9 ...
10 if (col == 11) component = "yyy"
11 ...

```

运行此作图脚本，

```

1 $ gnuplot bpve.gnu

```

得到我们想要研究的 `sigma_LS_yyy.pdf`。

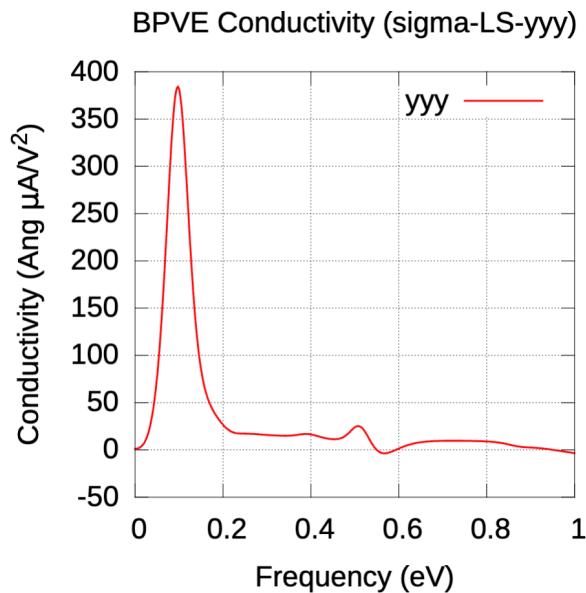


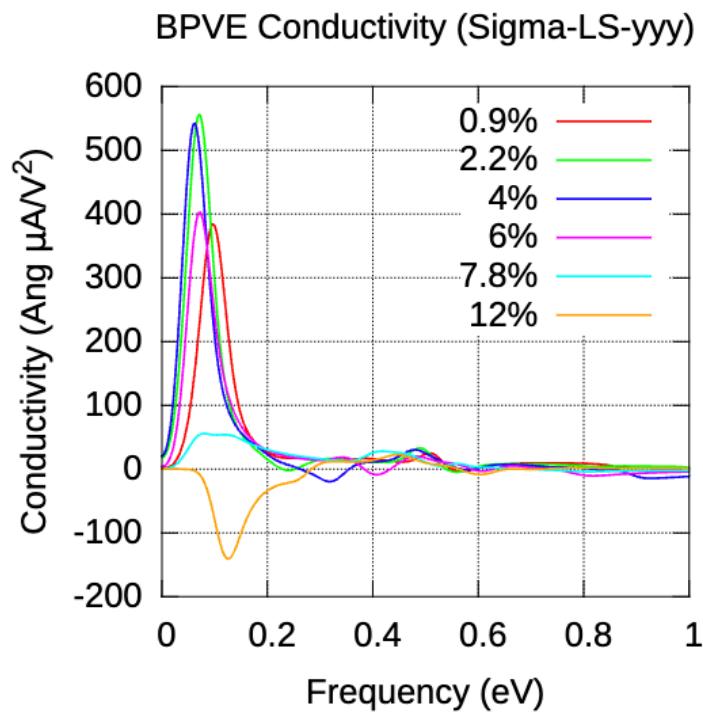
图 17.2: 在 0.9% 双轴应变下,  $\text{ReC}_2\text{H}$  线偏位移电流响应分量  $\sigma_{yyy}$  随光子频率的变化

对于剩余各应变条件下的计算, 请在对应文件夹中按照相同步骤完成操作。

我们将不同双轴应变下的  $\sigma_{yyy}$  绘制到同一张图中。在例子中, 我们已经将数据整理好, 只需进入到结果文件夹中运行绘图脚本。

```
1 $ cd WannierToolsTutorials/examples/BPVE/result
2 $ gnuplot bpve.gnu
```

可以看见, 在第一次拓扑相变过程中 ( $\varepsilon_{c1} \approx 2.3\%$ , 即图中 0.9%-2.2%-4% 三条曲线所描绘的过程),  $\sigma_{yyy}$  的峰值先上升后下降, 峰值对应的入射光子能量一直减小。在第二次拓扑相变过程中 ( $\varepsilon_{c2} \approx 7.8\%$ , 即图中 6%-7.8%-12% 三条曲线所描绘的过程),  $\sigma_{yyy}$  的峰值减小, 且在相变后发生符号反转。

图 17.3: 在不同拉伸条件下的位移电导率  $\sigma_{yyy}$ 

通过以上分析，拓扑相变并不必然导致整体位移电流方向的翻转。这是因为位移电流来自于在整个布里渊区内位移矢量的加权积分，权重因子是  $k$  点的光子吸收率。在相变点，位移矢量将改变方向，在非相变点，位移矢量不改变方向。但如果非相变区域能隙较小、联合态密度较大，那么这些区域对位移电流的贡献可能会超过相变区域，即便后者的位移矢量方向发生了翻转。因此，拓扑相变不一定引起位移电流方向的变化。

对这项工作更详细的介绍，可参考文献 [54]。

- [1] QuanSheng Wu, ShengNan Zhang, Hai-Feng Song, Matthias Troyer, and Alexey A Soluyanov. Wanniertools: An open-source software package for novel topological materials. Computer Physics Communications, 224:405–416, 2018.
- [2] Haijun Zhang, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, Xi Dai, Zhong Fang, and Shou-Cheng Zhang. Topological insulators in  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  and  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  with a single Dirac cone on the surface. Nature Physics, 5(6):438–442, 2009.
- [3] Markus König, Steffen Wiedmann, Christoph Brüne, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells. Science, 318(5851):766–770, 2007.
- [4] Miguel M. Ugeda, Artem Pulkin, Shujie Tang, Hyejin Ryu, Quansheng Wu, Yi Zhang, Dillon Wong, Zahra Pedramrazi, Ana Martín-Recio, Yi Chen, Feng Wang, Zhi-Xun Shen, Sung-Kwan Mo, Oleg V. Yazyev, and Michael F. Crommie. Observation of topologically protected states at crystalline phase boundaries in single-layer WSe<sub>2</sub>. Nature Communications, 9(1), 2018.
- [5] Liang Fu and C. L. Kane. Topological insulators with inversion symmetry. Physical Review B, 76(4):045302, 2007.
- [6] Alexey A Soluyanov, Dominik Gresch, Zhijun Wang, QuanSheng Wu, Matthias Troyer, Xi Dai, and B Andrei Bernevig. Type-ii Weyl semimetals. Nature, 527:495–498, 2015.
- [7] Xiaochun Huang, Lingxiao Zhao, Yujia Long, Peipei Wang, Dong Chen, Zhanhai Yang, Hui Liang, Mianqi Xue, Hongming Weng, Zhong Fang, et al. Observation of the chiral-anomaly-induced negative magnetoresistance in 3D Weyl semimetal TaAs. Physical Review X, 5:031023, 2015.
- [8] BQ Lv, N Xu, HM Weng, JZ Ma, P Richard, XC Huang, LX Zhao, GF Chen, CE Matt, F Bisti, et al. Observation of Weyl nodes in TaAs. Nature Physics, 11:724–727, 2015.
- [9] BQ Lv, Stefan Muff, Tian Qian, ZD Song, SM Nie, N Xu, P Richard, Christian E Matt, Nicholas C Plumb, LX Zhao, et al. Observation of Fermi-arc spin texture in TaAs. Physical Review Letters, 115:217601, 2015.
- [10] Cheng Shen, Yanbang Chu, QuanSheng Wu, Na Li, Shuopei Wang, Yanchong Zhao, Jian Tang, Jieying Liu, Jinpeng Tian, Kenji Watanabe, et al. Correlated states in twisted double bilayer graphene. Nature Physics, 16:520–525, 2020.
- [11] Wenhan Zhang, Quansheng Wu, Lunyong Zhang, Sang-Wook Cheong, Alexey A Soluyanov, and Weida Wu. Quasiparticle interference of surface states in the type-ii weyl semimetal WTe<sub>2</sub>. Physical Review B, 96:165125, 2017.

- [12] C-J Yi, BQ Lv, QS Wu, B-B Fu, X Gao, M Yang, X-L Peng, M Li, Y-B Huang, P Richard, et al. Observation of a nodal chain with Dirac surface states in TiB<sub>3</sub>. Physical Review B, 97:201107, 2018.
- [13] Yong-Chang Lau, Junya Ikeda, Kohei Fujiwara, Akihiro Ozawa, Jiaxin Zheng, Takeshi Seki, Kentaro Nomura, Liang Du, Quansheng Wu, Atsushi Tsukazaki, et al. Intercorrelated anomalous Hall and spin Hall effect in Kagome-lattice Co<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub>S<sub>2</sub>-based shandite films. Physical Review B, 108:064429, 2023.
- [14] Di Xiao, Yugui Yao, Zhong Fang, and Qian Niu. Berry-phase effect in anomalous thermoelectric transport. Physical Review Letters, 97(2):026603, 2006.
- [15] Minghang Li, Hanqi Pi, Yunchi Zhao, Ting Lin, Qinghua Zhang, Xinzhe Hu, Changmin Xiong, Zhiyong Qiu, Lichen Wang, Ying Zhang, et al. Large anomalous Nernst effects at room temperature in Fe<sub>3</sub>Pt thin films. Advanced Materials, 35:2301339, 2023.
- [16] Satya N Guin, Kaustuv Manna, Jonathan Noky, Sarah J Watzman, Chenguang Fu, Nitesh Kumar, Walter Schnelle, Chandra Shekhar, Yan Sun, Johannes Gooth, et al. Anomalous Nernst effect beyond the magnetization scaling relation in the ferromagnetic Heusler compound Co<sub>2</sub>MnGa. NPG Asia Materials, 11(1):16, 2019.
- [17] G. Y. Guo, S. Murakami, T.-W. Chen, and N. Nagaosa. Intrinsic spin Hall effect in Platinum: First-principles calculations. Physical Review Letters, 100:096401, 2008.
- [18] Junfeng Qiao, Jiaqi Zhou, Zhe Yuan, and Weisheng Zhao. Calculation of intrinsic spin Hall conductivity by Wannier interpolation. Physical Review B, 98:214402, 2018.
- [19] Yong-Chang Lau, Junya Ikeda, Kohei Fujiwara, Akihiro Ozawa, Jiaxin Zheng, Takeshi Seki, Kentaro Nomura, Liang Du, Quansheng Wu, Atsushi Tsukazaki, and Koki Takanashi. Intercorrelated anomalous Hall and spin Hall effect in Kagome-lattice co<sub>3</sub>sn<sub>2</sub>s<sub>2</sub>-based shandite films. Physical Review B, 108:064429, 2023.
- [20] Luis M. Canónico, Tarik P. Cysne, Alejandro Molina-Sánchez, R. B. Muniz, and Tatiana G. Rappoport. Orbital Hall insulating phase in transition metal dichalcogenide monolayers. Physical Review B, 101:161409, 2020.
- [21] Marcio Costa, Bruno Focassio, Luis M. Canónico, Tarik P. Cysne, Gabriel R. Schleider, R. B. Muniz, Adalberto Fazzio, and Tatiana G. Rappoport. Connecting higher-order topology with the orbital Hall effect in monolayers of transition metal dichalcogenides. Physical Review Letters, 130:116204, 2023.
- [22] Xin Peng, Yuzhi Wang, Shengnan Zhang, Yi Zhou, Yuran Sun, Yahui Su, Chunxiang Wu, Tingyu Zhou, Le Liu, Hangdong Wang, Jinhu Yang, Bin Chen, Zhong Fang, Jianhua Du, Zhiwei Jiao, Quansheng Wu, and Minghu Fang. Scaling behavior of magnetoresistance and hall resistivity in the altermagnet crsb. Physical Review B, 111:144402, 2025.

- [23] Zhihao Liu, Shengnan Zhang, Zhong Fang, Hongming Weng, and Quansheng Wu. Combined first-principles and boltzmann transport theory methodology for studying magnetotransport in magnetic materials. *Physical Review Research*, 6:043185, 2024.
- [24] ShengNan Zhang, Hanqi Pi, Zhong Fang, Hongming Weng, and QuanSheng Wu. New perspectives of hall effects from first-principles calculations. arXiv preprint arXiv:2401.15150, 2024.
- [25] Hanqi Pi, Shengnan Zhang, Yang Xu, Zhong Fang, Hongming Weng, and Quansheng Wu. First-principles methodology for studying magnetotransport in narrow-gap semiconductors: an application to zirconium pentatelluride  $ZrTe_5$ . arXiv preprint arXiv:2401.15151, 2024.
- [26] Xin Han, Hanqi Pi, Dayu Yan, Ruihan Zhang, Yong Li, Xiang Wang, Zhiling Dun, Zhijun Wang, Hai L Feng, Quansheng Wu, et al. Quantum oscillations and transport evidence of topological bands in  $La_3MgBi_5$  single crystals. *Physical Review B*, 108(7):075157, 2023.
- [27] G Gatti, D Gosálbez-Martínez, QS Wu, J Hu, SN Zhang, G Autès, M Puppin, D Bugini, H Berger, L Moreschini, et al. Origin of large magnetoresistance in the topological nonsymmorphic semimetal  $TaSe_3$ . *Physical Review B*, 104(15):155122, 2021.
- [28] Qin Chen, Zhefeng Lou, ShengNan Zhang, Yuxing Zhou, Binjie Xu, Huancheng Chen, Shuijin Chen, Jianhua Du, Hangdong Wang, Jinhu Yang, et al. Extremely large magnetoresistance in the “ordinary” metal  $ReO_3$ . *Physical Review B*, 104(11):115104, 2021.
- [29] Yuxing Zhou, Zhefeng Lou, ShengNan Zhang, Huancheng Chen, Qin Chen, Binjie Xu, Jianhua Du, Jinhu Yang, Hangdong Wang, Chuanying Xi, et al. Linear and quadratic magnetoresistance in the semimetal  $SiP_2$ . *Physical Review B*, 102(11):115145, 2020.
- [30] Mario Novak, SN Zhang, Filip Orbanić, Nikola Biliškov, Gaku Eguchi, Silke Paschen, A Kimura, XX Wang, T Osada, K Uchida, et al. Highly anisotropic interlayer magnetoresistance in  $ZrSiS$  nodal-line dirac semimetal. *Physical Review B*, 100(8):085137, 2019.
- [31] ShengNan Zhang, QuanSheng Wu, Yi Liu, and Oleg V Yazyev. Magnetoresistance from fermi surface topology. *Physical Review B*, 99(3):035142, 2019.
- [32] Yasumasa Hasegawa and Mahito Kohmoto. Periodic Landau gauge and quantum Hall effect in twisted bilayer graphene. *Physical Review B*, 88:125426, 2013.
- [33] QuanSheng Wu, Jianpeng Liu, Yifei Guan, and Oleg V. Yazyev. Landau levels as a probe for band topology in graphene Moiré superlattices. *Physical Review Letters*, 126:056401, 2021.
- [34] Fatemeh Haddadi, QuanSheng Wu, Alex J Kruchkov, and Oleg V Yazyev. Moiré flat bands in twisted double bilayer graphene. *Nano letters*, 20:2410–2415, 2020.
- [35] ShengNan Zhang, Bo Xie, QuanSheng Wu, Jianpeng Liu, and Oleg V Yazyev. Chiral decomposition of twisted graphene multilayers with arbitrary stacking. *Nano Letters*, 23:2921–2926, 2023.

- [36] Th. Seyller, K.V. Emtsev, K. Gao, F. Speck, L. Ley, A. Tadich, L. Broekman, J.D. Riley, R.C.G. Leckey, O. Rader, A. Varykhalov, and A.M. Shikin. Structural and electronic properties of graphite layers grown on SiC(0001). *Surface Science*, 600(18):3906–3911, 2006. Berlin, Germany: 4–9 September 2005.
- [37] W. S. Jung, C. S. Leem, Chul Kim, S. R. Park, S. Y. Park, B. J. Kim, E. Rotenberg, and C. Kim. Imaging the electron density in solids by using multi-Brillouin-zone angle resolved photoelectron spectroscopy. *Physical Review B*, 82:235105, 2010.
- [38] F Duncan M Haldane. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the” parity anomaly”. *Physical Review Letters*, 61:2015, 1988.
- [39] Liang Fu and Charles L Kane. Superconducting proximity effect and Majorana fermions at the surface of a topological insulator. *Physical Review Letters*, 100(9):096407, 2008.
- [40] James Jun He, Tian Liang, Yukio Tanaka, and Naoto Nagaosa. Platform of chiral Majorana edge modes and its quantum transport phenomena. *Communications Physics*, 2(1):149, 2019.
- [41] Geetha Balakrishnan, L Bawden, S Cavendish, and Martin R Lees. Superconducting properties of the in-substituted topological crystalline insulator SnTe. *Physical Review B*, 87:140507, 2013.
- [42] Aiyun Luo, Ying Li, Yi Qin, Jingnan Hu, Xiaoxu Wang, Jinyu Zou, Biao Lian, and Gang Xu. Topological superconductor candidates PdB<sub>2</sub>T<sub>4</sub> and PdB<sub>2</sub>T<sub>5</sub> from a generic ab initio strategy. *npj Computational Materials*, 9(1):188, 2023.
- [43] Jingnan Hu, Fei Yu, Aiyun Luo, Xiao-Hong Pan, Jinyu Zou, Xin Liu, and Gang Xu. Chiral topological superconductivity in superconductor-obstructed atomic insulator-ferromagnetic insulator heterostructures. *Physical Review Letters*, 132(3):036601, 2024.
- [44] Jingnan Hu, Aiyun Luo, Zhijun Wang, Jingyu Zou, Quansheng Wu, and Gang Xu. A numerical method for designing topological superconductivity induced by s-wave pairing. *npj Computational Materials*, 11(1):1–11, 2025.
- [45] William Silvert. Theory of the superconducting proximity effect. *Journal of Low Temperature Physics*, 20(5):439–477, 1975.
- [46] B Andrei Bernevig. Topological insulators and topological superconductors. Princeton university press, 2013.
- [47] SS Banerjee, NG Patil, K Ghosh, Subir Saha, GI Menon, S Ramakrishnan, AK Grover, PK Mishra, TV Chandrasekhar Rao, G Ravikumar, et al. Magnetic phase diagram of anisotropic superconductor 2H-NbSe<sub>2</sub>. *Physica B. Condensed Matter*, 237:315–317, 1997.

- [48] Wenqing Dai, Anthony Richardella, Renzhong Du, Weiwei Zhao, Xin Liu, CX Liu, Song-Hsun Huang, Raman Sankar, Fangcheng Chou, Nitin Samarth, et al. Proximity-effect-induced superconducting gap in topological surface states—a point contact spectroscopy study of NbSe<sub>2</sub>/Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> superconductor-topological insulator heterostructures. *Scientific reports*, 7(1):7631, 2017.
- [49] Mei-Xiao Wang, Canhua Liu, Jin-Peng Xu, Fang Yang, Lin Miao, Meng-Yu Yao, CL Gao, Chenyi Shen, Xucun Ma, X Chen, et al. The coexistence of superconductivity and topological order in the Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin films. *Science*, 336(6077):52–55, 2012.
- [50] Timothy H Hsieh, Hsin Lin, Junwei Liu, Wenhui Duan, Arun Bansil, and Liang Fu. Topological crystalline insulators in the SnTe material class. *Nature Communications*, 3(1):982, 2012.
- [51] J. E. Sipe and A. I. Shkrebta. Second-order optical response in semiconductors. *Physical Review B*, 61(8):5337–5352, 2000.
- [52] Chong Wang, Sibo Zhao, Xiaomi Guo, Xinguo Ren, Bing-Lin Gu, Yong Xu, and Wenhui Duan. First-principles calculation of optical responses based on nonorthogonal localized orbitals. *New Journal of Physics*, 21(9):093001, 2019.
- [53] Chong Wang, Xiaoyu Liu, Lei Kang, Bing-Lin Gu, Yong Xu, and Wenhui Duan. First-principles calculation of nonlinear optical responses by Wannier interpolation. *Physical Review B*, 96(11):115147, 2017.
- [54] Chunmei Zhang, Hanqi Pi, Liqin Zhou, Si Li, Jian Zhou, Aijun Du, and Hongming Weng. Switchable topological phase transition and nonlinear optical properties in a ReC<sub>2</sub>H monolayer. *Physical Review B*, 105(24):245108, 2022.
- [55] Hanqi Pi, Shuai Zhang, and Hongming Weng. Magnetic bulk photovoltaic effect as a probe of magnetic structures of EuSn<sub>2</sub>As<sub>2</sub>. *Quantum Frontiers*, 2(1):6, 2023.