

本程序旨在计算极性晶体在声子频率附近的光频介电函数张量。本程序使用的计算公式是

$$\varepsilon_{\beta\sigma} = \varepsilon_{\infty} + \frac{e^2}{\varepsilon_0\Omega} \sum_{\mu j' k} \frac{1}{[\omega_{pk}(\vec{q})]^2 - \omega_L^2 - i\gamma\omega_L} \frac{Z_{\beta\mu}(j')}{\sqrt{m_{j'}}} d_k(\mu j', \vec{q}, t) * \sum_{\alpha j} \frac{Z_{\sigma\alpha}(j)}{\sqrt{m_j}} d_k^*(\alpha j, \vec{q}, t)$$

特别注意上式中介电函数不仅依赖于电场偏振方向，还依赖于电磁波（或声子极化激元）的波矢方向。具体的理论请见[Yue Fang, Huanjun Chen, Zhibing Li and Weiliang Wang, Hyperbolic phonon polaritons and wave vector direction dependent dielectric tensors in anisotropic crystals, 各向异性晶体中的双曲声子极化激元与依赖于波矢方向的介电函数张量, *Journal of Physical Chemistry C*, **128** (2024) 7359.]

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.4c01183>

发表本程序的计算结果时，请引用这篇论文。

本程序无需安装，只需将所有 M 文件置于同一文件夹中即可。

需要准备 5 个输入文件

OUTCAR.txt

qpoints.yaml

band.yaml

phonopy.yaml

lifetime.dat

制作输入文件的方法

1) OUTCAR.txt

VASP 静态计算元胞玻恩有效电荷，得到 OUTCAR，将里面的下列内容保存为 OUTCAR.txt。
(注意要把里面的 PIEZOELECTRIC TENSOR 等删掉)

MACROSCOPIC STATIC DIELECTRIC TENSOR (including local field effects)

```
-----
          5.447      -0.000      0.000
        -0.000      6.208      0.000
          0.000      0.000      4.248
-----
```

BORN EFFECTIVE CHARGES (including local field effects)

```
-----
ion      1
  1      6.51576    -0.00000    -0.28531
  2     -0.00000     7.83547     0.00000
  3     -0.54889     0.00000     4.47872
ion      2
  1      6.51576    -0.00000    -0.28531
  2     -0.00000     7.83547     0.00000
  3     -0.54889     0.00000     4.47872
```

ion	3			
1	6.51576	-0.00000	0.28531	
2	-0.00000	7.83547	0.00000	
3	0.54889	0.00000	4.47872	
ion	4			
1	6.51576	-0.00000	0.28531	
2	-0.00000	7.83547	0.00000	
3	0.54889	0.00000	4.47872	
ion	5			
1	-1.14288	0.00000	0.35376	
2	0.00000	-6.11201	0.00000	
3	0.19852	0.00000	-1.59655	
ion	6			
1	-1.14288	0.00000	0.35376	
2	0.00000	-6.11201	0.00000	
3	0.19852	0.00000	-1.59655	
ion	7			
1	-1.14288	0.00000	-0.35376	
2	0.00000	-6.11201	0.00000	
3	-0.19852	0.00000	-1.59655	
ion	8			
1	-1.14288	0.00000	-0.35376	
2	0.00000	-6.11201	0.00000	
3	-0.19852	0.00000	-1.59655	
ion	9			
1	-4.76414	0.00000	0.32873	
2	0.00000	-1.16597	0.00000	
3	0.47715	0.00000	-0.66670	
ion	10			
1	-4.76414	0.00000	0.32873	
2	0.00000	-1.16597	0.00000	
3	0.47715	0.00000	-0.66670	
ion	11			
1	-4.76414	0.00000	-0.32873	
2	0.00000	-1.16597	0.00000	
3	-0.47715	0.00000	-0.66670	
ion	12			
1	-4.76414	0.00000	-0.32873	
2	0.00000	-1.16597	0.00000	
3	-0.47715	0.00000	-0.66670	
ion	13			
1	-0.60880	0.00000	0.36885	
2	0.00000	-0.55743	0.00000	
3	0.30126	0.00000	-2.21650	

```

ion  14
  1   -0.60880    0.00000    0.36885
  2    0.00000   -0.55743    0.00000
  3    0.30126    0.00000   -2.21650
ion  15
  1   -0.60880    0.00000   -0.36885
  2    0.00000   -0.55743    0.00000
  3   -0.30126    0.00000   -2.21650
ion  16
  1   -0.60880    0.00000   -0.36885
  2    0.00000   -0.55743    0.00000
  3   -0.30126    0.00000   -2.21650

```

2) band.yaml、phonopy.yaml

使用下面这个 band.conf

```

ATOM_NAME = ***
DIM = ***
FORCE_SETS = READ
EIGENVECTORS = .TRUE.
BAND_POINTS = 2
BAND = 0.0 0.0 0.0  0.5 0.0 0.0

```

这个是光的波矢的方向沿第一个倒格矢方向, 如果 q 沿第二个倒格矢方向, 最后一行应改为

```
BAND = 0.0 0.0 0.0  0.0 0.5 0.0
```

其它方向同理

执行 `phonopy -c POSCAR -p -s band.conf --nac`

得到 band.yaml、phonopy.yaml

3) qpoints.yaml

使用下面这个 band.conf

```

ATOM_NAME = ***
DIM = ***
FORCE_SETS = READ
EIGENVECTORS = .TRUE.
WRITEDM = .TRUE.
QPOINTS = .TRUE.

```

使用下面这个 QPOINTS 文件

```

2
0.0  0.0  0.0
0.5  0.0  0.0

```

这个是 q 沿第一个倒格矢方向, 如果 q 沿第二个倒格矢方向, 第三行应改为 0.0 0.5 0.0 , 其它方向同理。

执行 `phonopy -c POSCAR -p -s band.conf --nac`

得到 qpoints.yaml

4) lifetime.dat

把 phono3py 输出的 gammas-***.dat 文件命名为 lifetime.dat 。使用 phono3py 时的 q 的方向应与以上两步中的 q 的方向一致。

在 MATLAB 中执行 `calculate_dielectric.m`

结果在 dielectric.txt 中：第一列为频率，第二列为波长，第三列为波数，4、7、9 列分别为偏振方向沿 X、Y、Z 方向时的介电函数实部，10、13、15 列分别为偏振方向沿 X、Y、Z 方向时的介电函数虚部。在主轴坐标系中第 5、6、8、11、12、14 应远小于上述几列介电函数，如果要画介电函数的虚部，需要旋转坐标系至主轴坐标系。