

# MagneticKP 使用手册

张泽英

January 18, 2025

# 目录

1	功能简介	2
2	安装	2
3	使用方法	3
3.1	核心模块 . . . . .	3
3.2	IO 模块 . . . . .	3
3.3	画图模块 . . . . .	4
4	例子	4
5	常见问题	6

# 1 功能简介

MagneticKP 是一款开源的软件包。该软件包基于线性代数中的迭代算法，可快速构造  $k \cdot p$  模型。具体功能如下：

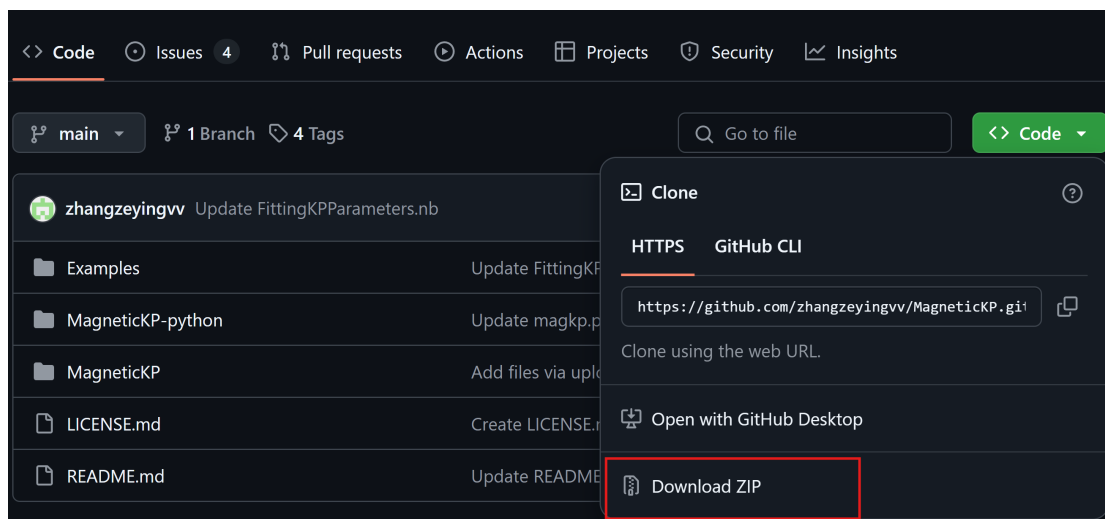
- 仅需输入对称操作和表示矩阵即可构造出相应的  $k \cdot p$  模型
- 可以构造包括磁性、非磁性材料、考虑自旋轨道耦合、大部分自旋群的  $k \cdot p$  模型
- 与 SpaceGrouprep (MSGCorep) 接口后，仅需简单输入空间群（磁群）编号和和不可约表示的编号信息即可构造任意 230 个空间群（1651 个磁群）任意  $k$  点的  $k \cdot p$  模型
- 画能谱图，并且能谱可随参数大小动态显示
- 读取第一性原理软件的能带结果，拟合参数。

# 2 安装

首先登录 github 上的 MagneticKP 程序包首页（无需账号密码）：

<https://github.com/zhangzeyingvv/MagneticKP>

点击“Code”，“Download ZIP”，下载 MagneticKP-main.zip 文件。如下图所示：



打开 Mathematica，运行：

```
$UserBaseDirectory
```

运行时点击 Shift+ 回车。打开显示的目录，并进入 Applications 文件夹。

将刚刚下载的 MagneticKP-main.zip 解压，会得到一个 MagneticKP 文件夹和三个文件。把解压得到的 MagneticKP 文件夹复制到 Applications 文件夹内，安装完成。在 Mathematica 中运行

```
Needs["MagneticKP"]
```

即可载入程序包。有经验的用户可以安装到\$Path中任何地方，部分目录需要管理员权限。以上方法对 Windows 和 Linux 用户均适用，也可参阅 Computer Physics Communications 290, 108784 (2023).

## 3 使用方法

### 3.1 核心模块

MagneticKP 包的核心部分是函数 kpHam，该函数计算  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量。格式为：

```
1 kpHam[korder, input]
```

在这里，korder 可以是一个整数或一个整数列表，指定要计算的  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量的截止阶数。当 korder 是一个列表时，kpHam将输出列表中每个整数  $n$  对应的哈密顿量的和。当korder kpHam将输出阶数小于等于这个整数的哈密顿量input 的格式为 Mathematica 中的 Association。它包含构建哈密顿量所需的输入信息。input有三个必要的输入：

- Q 的旋转部分
- Q 的（共）表示矩阵
- Q 是么正算符还是反么正算符

```
1 input = <|
2 "Unitary" -><|Q1 -> {D(Q1), R1 $\mathbf{k}$ },...|>,
3 "Aniunitary" -><|Q2 -> {D(Q2), -R2 $\mathbf{k}$ },...|>
4 |>
```

注意，input["Unitary"] 或 input["Antiunitary"] 中 Keys 的作用是使输入更加清晰，MagneticKP 将分别读取 input["Unitary"] 和 input["Antiunitary"] 的 Values 进行计算。 $R_1 \mathbf{k}$  可以使用笛卡尔坐标或分数坐标。用户只需输入 input 中非空的 Keys。当没有反么正操作时，"Antiunitary" 不需要作为输入。

kpHam输出的格式为：

```
1 <|"ham" ->  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  哈密顿量的表达式, "korder" -> 哈密顿量的阶数,
2 "dim" -> 哈密顿量矩阵的维度, "NumberOfParameters" -> 参数的个数|>
```

### 3.2 IO 模块

kpHam的输入包含小群的表示矩阵  $D(Q_i)$ 。一般来说，对于  $Q_i \in G$ ，可以使用投影表示法来获得不可约表示矩阵  $\Delta(Q_i)$  计算时比较繁琐。更直接的方法是从教科书或是一些成熟的数据库中获取  $D(Q_i)$ 。这里，我们给出一个接口函数 interfaceRep 来与 SpaceGroupRep 和 MSGCorep 软件包进行接口。

interfaceRep 的格式为：

```
1 interfaceRep [群编号, k点, 表示的编号, "CartesianCoordinates" -> True or False, "
  CalculateGenerators" -> True or False]
```

其中 MSGNO 可以是空间群编号（一个整数）或 BNS 磁空间群编号（一个包含两个整数的列表）。当 MSGNO 是一个整数（列表）时，必须加载 SpaceGroupIrep (MSGCorep) 包。k 可以以  $\mathbf{K}$  坐标形式或  $\mathbf{K}$  点的符号（ $\mathbf{k}$  为高对称点）给出。reps 是一个整数或整数列表，表示在 showLGIrepTab (showMLGCorep) 中不可约（共）表示的序列号。当 reps 是一个列表时，MagneticKP 将自动计算（共）表示的直和。“CartesianCoordinates”（默认值为 True）告诉 MagneticKP 是否将操作转换为笛卡尔坐标。最后，“CalculateGenerators”告诉 MagneticKP 是否仅给出小陪群的生成元，若“CalculateGenerators”为 False（默认为 True）则输出所有小陪群中的元素。

### 3.3 画图模块

构造出  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  模型后将能带画出来或与第一性原理比较可以很直观的检验  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  模型的好坏。MagneticKP 提供了三个函数 bandManipulate, bandplot 和 bandManipulateWithVASP 来实现这一点。bandManipulate 可以随参数动态显示  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  模型的能带，用法为

```
1 bandManipulate[path, n, ham, "PlotRange" -> {a,b}]
```

其中 path 为能带路径，其格式为

```
1 {
2   {{k1 的坐标, k2 的坐标 }, {k1, k2}},
3   {{k3 的坐标, k4 的坐标 }, {k3, k4}},
4   ...
5 };
```

n 为每段能带的撒点数，ham 为 kpHam 输出的哈密顿量，“PlotRange” 为能带的能量范围。bandplot 可以用来画标好高对称点的能带图，其用法为

```
1 bandplot[path, n, ham, rule, "PlotRange" -> {a,b}]
```

其中 path 为能带路径，n 为每段能带的撒点数，ham 为 kpHam 输出的哈密顿量，rule 为哈密顿量中参数的大小，“PlotRange” 为能带的能量范围。bandManipulateWithVASP 可以同时显示第一性原理和  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  模型的能带用法详见“FittingKPPParameters.nb”文件

## 4 例子

计算 13 号空间群 ( $P2/c$ )  $B(-\frac{1}{2}, 0, 0)$  点  $B_2$  不可约表示对应的  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  模型。B 点小陪群的生成元可以选择为  $C_{2z}$  和  $I$ 。那么  $Rk$  及  $B_2$  表示矩阵可以写为

$$\begin{aligned} C_{2z} : (k_x, k_y, k_z) &\rightarrow (-k_x, -k_y, k_z) \\ I : (k_x, k_y, k_z) &\rightarrow (-k_x, -k_y, -k_z) \\ D(C_{2z}) &= \sigma_1, D(I) = \sigma_3 \end{aligned}$$

因此，仅需输入

```
1 Needs["MagneticKP"];
2 input = <|"Unitary" -> <|C2z -> {{{{0, 1}, {-1, 0}}, {-kx, -ky, kz}}, | -> {{{{1, 0}, {0,
3   -1}}, {-kx, -ky, -kz}}}|>|>;
4 kpHam[1, input]["ham"]
```

若不想自己计算表示矩阵，仅需与 MSGCorep 软件包接口。首先看一下  $P2/c$   $B(-\frac{1}{2}, 0, 0)$  有哪些不可约表示

```

1 Needs["MSGCorep"];
2 showMLGCorep[{13, 65}, "B"]

```

结果为

showMLGCorep[{13, 65}, "B"]  
MSG 13.65 (P2/c, BC: P2/b): k-point name is B, for MonoPrim  
►  $k = (-\frac{1}{2}, 0, 0)$  standard

Index	1	2	3	4
Element	$\{E 000\}$	$\{C_{2z} 000\}$	$\{I \frac{1}{2}00\}$	$\{\sigma_z \frac{1}{2}00\}$
Rotation matrix	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
Spin ( $\downarrow\uparrow$ ) rotation matrix	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$
1 B <sub>1</sub> x	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$
2 B <sub>2</sub> x	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

可以看到  $B_2$  对应showMLGCorep的第二个表示，用interfaceRep获取表示矩阵

```

1 input = interfaceRep[{13, 65}, "B", {2}]
2 ham=kpHam[1, input][["ham"]]

```

得到的哈密顿量与手动输入完全相同为：

$$H(\mathbf{k}) = \varepsilon + c_1\sigma_1k_x + c_2\sigma_1k_y + c_3\sigma_2k_z$$

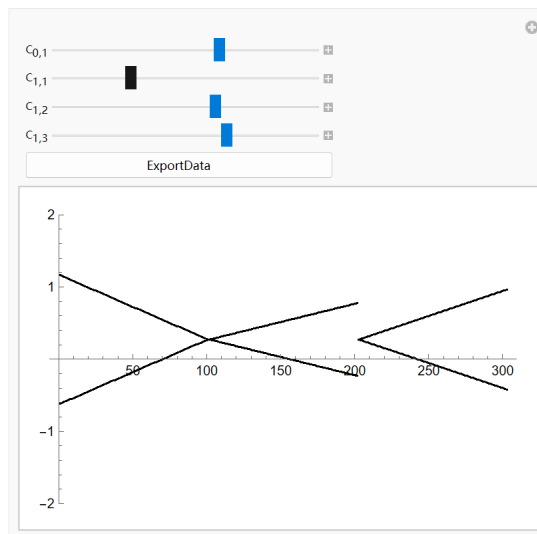
可以利用 bandManipulate 动态显示能带

```

1 path = {{{{1/3, 0, 0}, {0, 0, 0}}, {"X", "B"}},
2         {{{0, 0, 0}, {0, 1/3, 0}}, {"B", "Y"}},
3         {{{0, 0, 0}, {0, 0, 1/3}}, {"B", "Z"}}}
4 };
5 bandManipulate[path, 100, ham,
6 "PlotRange" -> {-2, 2}]

```

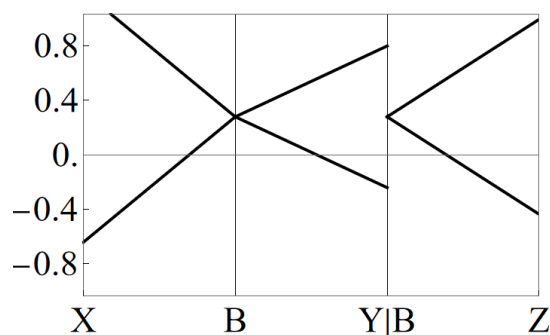
结果为



确定好参数后，可以用bandplot画出比较好看的能带图

```
1 bandplot[path,200,ham,{C0,1->0.27,C1,1->-0.425,C1,2->0.24,C1,3->0.33},"PlotRange"
   ->{-1,1}]
```

结果为



更多例子请参阅 example.nb 文件。

## 5 常见问题

1. 安装完以后运行没反应怎么办？

回答：仔细检查安装步骤，先把 examples.nb 文件中几个例子跑出来，实在不行在 QQ 群里提问。

2. QQ 群怎么加？

回答：群号为 625192239。可以扫描以下二维码：



3. 想构造非磁材料的  $k \cdot p$  模型，应该和 SpaceGroupIrep 接口吗??

回答：一般非磁材料均有时间反演对称性，用于描述具有时间反演对称性的群为第二类磁群，即灰群。而 `SpaceGroupRep` 虽然给出了每一个不可约表示表示的类型，但没有给出共表示矩阵。因此要计算第二类磁群的  $k \cdot p$  模型还是需要和 `MSGCorep` 接口。

4. 我发现了 Bug，该怎么办？

回答：在<https://github.com/zhangzeyingvv/MagneticKP/issues>上提问，在 QQ 群里提问，给我发邮件 [zhangzeyingvv@gmail.com](mailto:zhangzeyingvv@gmail.com)。

5. `MagneticKP` 支持构造自旋群的  $k \cdot p$  模型吗？

回答：只要给出表示矩阵和对称操作，`MagneticKP` 就可以给出  $k \cdot p$  模型。但是自旋群表示矩阵需要自己计算。

6. 可以转发该手册吗？

回答：可以转发，同时如果想修改本手册，请通过 github 向我提 issue(s)。

7. 如何引用 `MagneticKP`？

回答：Zeying Zhang, Zhi-Ming Yu, Gui-Bin Liu, Zhenye Li, Shengyuan A. Yang, Yugui Yao, *Computer Physics Communications*, 290, 108784 (2023)

BibTeX:

---

```
@article{ZHANG2023108784,
  title = {MagneticKP: A package for quickly constructing k p models of
    magnetic and non-magnetic crystals},
  journal = {Computer Physics Communications},
  volume = {290},
  pages = {108784},
  year = {2023},
  issn = {0010-4655},
  doi = {https://doi.org/10.1016/j.cpc.2023.108784},
  url = {https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465523001297},
  author = {Zeying Zhang and Zhi-Ming Yu and Gui-Bin Liu and Zhenye Li and
    Shengyuan A. Yang and Yugui Yao}
}
```

---