

MagneticTB 使用手册

张泽英

February 14, 2023

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	画图模块	4
3.3	接口模块	5
4	例子	5
4.1	石墨烯	5
4.2	更多例子	7
5	常见问题	7
6	更新计划	9

1 功能简介

MagneticTB 是一款开源的软件包。该软件包基于磁群的共表示理论开发，可生成符合任意 1651 个磁群对称性的紧束缚模型。具体功能如下：

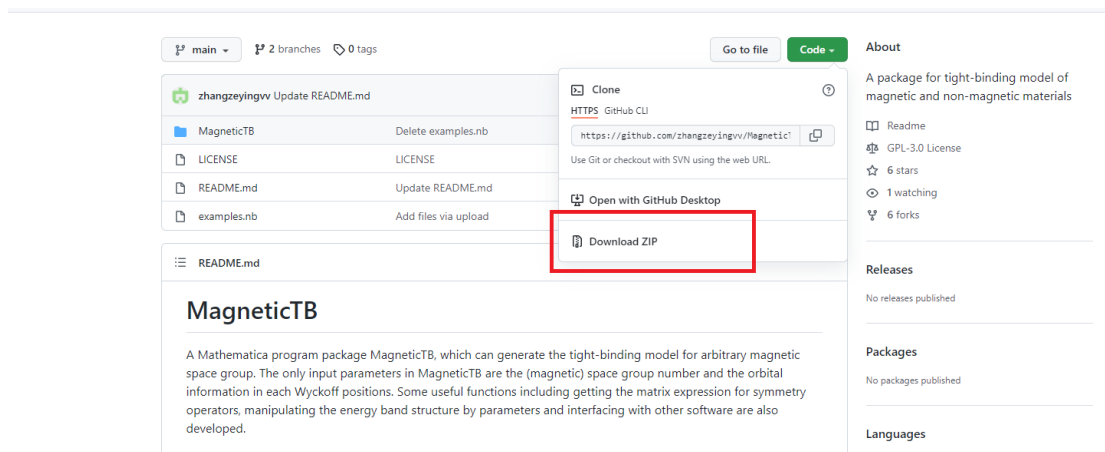
- 仅需简单输入磁群编号和每个 Wyckoff 位置信息即可构造出相应的紧束缚模型
- 获取 1651 个磁群的对称操作
- 与其他软件接口
- 画能谱图，并且能谱可随参数大小动态显示
- 可以构造非磁性材料的紧束缚模型
- 可以考虑非共线磁结构
- 可以构造单群（无自旋）和磁双群（有自旋）的紧束缚模型

2 安装

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

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

点击“Code”，“Download ZIP”，下载 MagneticTB-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 MagneticTB-main.zip 解压，会得到一个 MagneticTB 文件夹和三个文件。把解压得到的 MagneticTB 文件夹复制到 Applications 文件夹内，安装完成。在 Mathematica 中运行

```
Needs["MagneticTB"]
```

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 Comput. Phys. Commun., 270, 108153 (2022)。

3 使用方法

3.1 核心模块

MagneticTB 的核心功能是构造对称化的紧束缚模型。主要有三个函数构成，分别是msgop, init 和symham。

msgop可以给出任意 1651 个磁群的对称操作，例如

```
1 msgop[gray[191]]
2 msgop[bnsdict[{191, 236}]]
3 msgop[ogdict[{191, 8, 1470}]]
```

第一行中gray[191]为获取 191 号灰群（即为考虑时间反演对称性的空间群）的编码；第二行中bnsdict[{191, 236}]为获取 BNS 编号为 191.236 磁群的编码；第三行中ogdict[{191, 8, 1470}]为获取 OG 编号为 191.8.1470 磁群的编码；用msgop[编码]可获取对应磁群的对称操作，以上三条命令实际上是等价的，其输出为

```
1 Magnetic space group (BNS): {191.234,P6/mmm1'}
2 Lattice: HexagonalP
3 Primitive Lattice Vector: {{a,0,0},{-(a/2),(Sqrt[3] a)/2,0},{0,0,c}}
4 Conventional Lattice Vector: {{a,0,0},{-(a/2),(Sqrt[3] a)/2,0},{0,0,c}}
5
6 {"1",{{1,0,0},{0,1,0},{0,0,1}},{0,0,0}, F},
7 {"6z",{{1,-1,0},{1,0,0},{0,0,1}},{0,0,0}, F},
8 {"3z",{{0,-1,0},{1,-1,0},{0,0,1}},{0,0,0}, F},
9 ...
10 {"1",{{1,0,0},{0,1,0},{0,0,1}},{0,0,0}, T},
11 {"6z",{{1,-1,0},{1,0,0},{0,0,1}},{0,0,0}, T},
12 {"3z",{{0,-1,0},{1,-1,0},{0,0,1}},{0,0,0}, T},
13 ...}
```

1-4 行为磁群的基本信息，包括符号、晶格类型和晶格矢量。6-13 行为 191 号灰群的对称操作，1-4 列分别为对称操作的名称、旋转部分、平移部分和是否包含时间反演操作。

有了对称操作就可以使用 init 函数对结构进行初始化：

```
1 sgop=msgop[gray[191]];
2 init [
3   lattice -> {{a, 0, 0}, {-(a/2), (Sqrt[3] a)/2, 0}, {0, 0, c}},
4   lattpar -> {a -> 1, c -> 3},
5   wyckoffposition -> {{{1/3, 2/3, 0}, {0, 0, 0}}},
6   symminformation -> sgop,
7   basisFunctions -> {"pz"}};
```

init 有五个选项必须设置（Mathematica 中选项用一个横杠“-”和一个大于号“>”连起来表示即“->”），其中 lattice 为晶格矢量和symminformation为对称操作的集合可以直接使用msgop的输出作为选项的值，也可以使用自己定义的对称操作。lattpar 为晶格矢量中参数的数值。wyckoffposition 为要考虑的 Wyckoff 点。其格式为：

$$\{\{\mathbf{a}_1, \mathbf{m}_1\}, \{\mathbf{a}_2, \mathbf{m}_2\}, \dots\}$$

\mathbf{a}_i 和 \mathbf{m}_i 为第 i 个 Wyckoff 点的坐标和磁化方向。对于等价的 Wyckoff 点仅需输入其中任意一个即可。

basisFunctions 为每个 Wyckoff 点要考虑的基函数。其格式为：

$$\{b_1, b_2, \dots\}$$

b_i 为第 i 个 Wyckoff 点要考虑的基函数列表。其中基函数和字符串的对应关系如下表所示:

基函数	代码	基函数	代码
s	"s"	p_x	"px"
p_y	"py"	p_z	"pz"
$p_x + ip_y$	"px+ipy"	$p_x - ip_y$	"px-ipy"
d_{z^2}	"dz2"	d_{xy}	"dxy"
d_{yz}	"dyz"	d_{xz}	"dxz"
$d_{x^2-y^2}$	"dx2-y2"		

对于考虑自旋的情况, 直接在代码后加"up"或"dn"。例如{"pzup","dxydn"}。如果遇到上表中没有的基函数, 直接输入基函数的解析表达式也没问题, 例如若想考虑 f_{xyz} 轨道, 直接输入 `basisFunctions -> {{x*y*z}}`。

在初始化函数运行完以后可以用 `atompos` 检查一下生成的结构是否正确

```
1 In:= atompos
2 Out:= {{{{1/3, 2/3, 0}, {0, 0, 0}}, {{2/3, 1/3, 0}, {0, 0, 0}}}}
```

表明该结构原胞中有两个要考虑的原子坐标为 $(1/3, 2/3, 0)$ 和 $(2/3, 1/3, 0)$ 。 $\{0, 0, 0\}$ 为原子的磁化方向, 在这里两个原子均没有磁性。运行完 `init` 后可获取的基本性质如下表所示:

代码	性质说明
<code>atompos</code>	给出原胞中每个原子的原子坐标和磁化方向
<code>wcc</code>	给出每条轨道的中心
<code>reclatt</code>	倒格子
<code>symmetryops</code>	对称操作的 (共) 表示矩阵
<code>unsymham[n]</code>	生成除平移对称性外没有任何对称性约束的 $n - 1$ 阶近邻的哈密顿量
<code>symham[n]</code>	生成对称性约束的 $n - 1$ 阶近邻的哈密顿量
<code>symmcompile</code>	给出对称操作、表示矩阵等信息
<code>bondclassify</code>	给出所有近邻的键长信息
<code>showbonds[n]</code>	给出 $n - 1$ 阶近邻的键长信息

检查无误后就可以用 `symham[n]` 生成考虑 $n - 1$ 近邻的对称化紧束缚哈密顿量。例如

```
symham[1]
```

会生成仅考虑在位能的哈密顿量。

```
Sum[symham[n], {n, 1, 3}];
```

会生成考虑在位能、最近邻和次近邻的哈密顿量。

3.2 画图模块

画图模块有两个函数 `bandplot` 和 `bandManipulate`。用法分别为

```
bandplot[能带路径, 每段能带中点的数目, symham生成的哈密顿量, 参数大小]
bandManipulate[能带路径, 每段能带中点的数目, symham生成的哈密顿量]
```

`bandplot` 可以画出较为美观的能带图, 可以直接作为论文中的插图。`bandManipulate` 可以画出随参数大小动态显示的能带。具体例子见 4.1。

3.3 接口模块

接口模块可以把symham生成的哈密顿量转换为 wannier90_hr.dat 格式的文件。用法为

```
hop[symham生成的哈密顿量, 参数大小]
```

具体例子见4.1。注意要用symham生成的哈密顿量。**不要用自己化解后的哈密顿量作为输入，若想让某些参数等于 0，直接在参数大小里指定某些参数为 0。**

4 例子

4.1 石墨烯

要生成石墨烯的费米面附近的紧束缚模型，仅需知道两个碳原子位于 191 号空间群的 2c Wyckoff 点以及费米面附近的电子态由碳原子的 p_z 轨道构成就足够了。具体代码如下：

```
1 Needs["MagneticTB"];
2 sgop = msgop[gray[191]];
3 init [
4   lattice -> {{a, 0, 0}, {-(a/2), (Sqrt[3] a)/2, 0}, {0, 0, c}},
5   lattpar -> {a -> 1, c -> 3},
6   wyckoffposition -> {{{1/3, 2/3, 0}, {0, 0, 0}}},
7   symminformation -> sgop,
8   basisFunctions -> {"pz"}];
9 ham = Sum[symham[i], {i, 3}];
10 MatrixForm[ham]
```

其中第 1 行为载入 MagneticTB 程序包；第 2 行为获取第 191 号灰空间群的对称操作；第 3 行为初始化函数；第 4-8 行为初始化函数的参数；第 4 行为晶格矢量；第 5 行为晶格常数中参数的数值；第 6 行为要考虑的 Wyckoff 点坐标和磁化方向；第 7 行为对称化紧束缚模型所满足的对称性；第 8 行为要考虑的原子轨道；第 9 行为输出考虑到次近邻的哈密顿量。若要考虑自旋轨道耦合，仅需把第 8 行的

```
basisFunctions -> {"pz"}];
```

改为

```
basisFunctions -> {"pzup", "pzdn"}];
```

即

```
sgop = msgop[gray[191]];
init [ lattice -> {{a, 0, 0}, {-(a/2), (Sqrt[3] a)/2, 0}, {0, 0, c}},
      lattpar -> {a -> 1, c -> 3},
      wyckoffposition -> {{{1/3, 2/3, 0}, {0, 0, 0}}},
      symminformation -> sgop,
      basisFunctions -> {"pzup", "pzdn"}];
hamsoc = Sum[symham[i], {i, 3}];
MatrixForm[hamsoc]
```

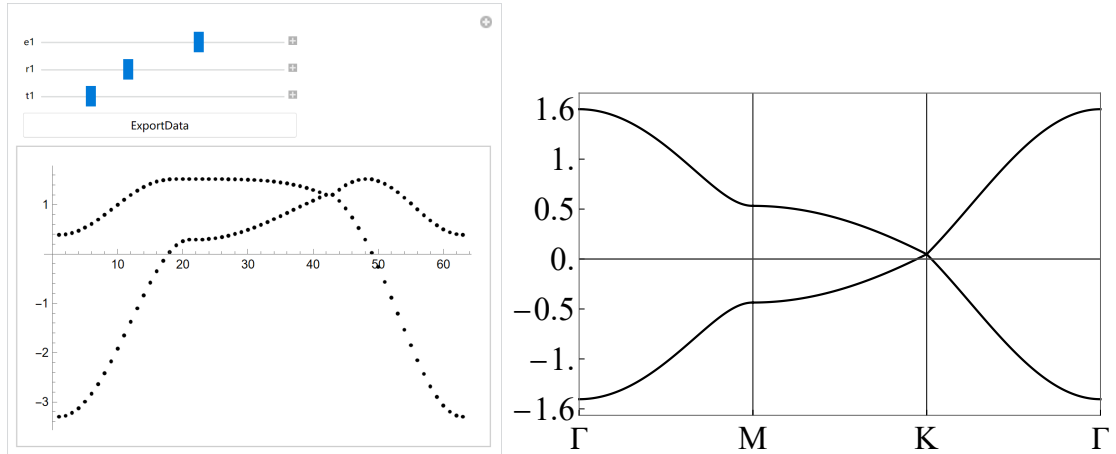
就可以生成考虑自旋轨道耦合时的哈密顿量。得到哈密顿量后就可以画能带和生成 wannier90_hr.dat 了。以下为画能带的具体代码：

```

1 path={
2   {{{0,0,0},{0,1/2,0}},{"G","M"}},
3   {{{0,1/2,0},{1/3,1/3,0}},{"M","K"}},
4   {{{1/3,1/3,0},{0,0,0}},{"K","G"}}
5 };
6 bandManipulate[path, 20, ham]
7 bandplot[path, 200, ham, {e1 -> 0.05, t1 -> 0.5, r1-> 0}]

```

其中 1-5 行为定义 k 点路径，第 6 行可以动态显示能带，第 7 行可以画出给定参数的能带。效果如下：



可以点击“ExportData”显示参数的大小。

也可以用showbonds查看石墨烯各个近邻之间的键长，例如查看次近邻键长用showbonds[3]，其输出为：

2-th neighbour, Bond length = 1.		
Atom position	Num of bonds	\vec{p}_k
$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\}$	6	$\{\{\frac{4}{3}, \frac{5}{3}, 0\}, \{\frac{4}{3}, \frac{2}{3}, 0\}, \{\frac{1}{3}, \frac{5}{3}, 0\}, \{\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, 0\}, \{-\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, 0\}, \{-\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}, 0\}\}$
$\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0\}$	6	$\{\{\frac{5}{3}, \frac{4}{3}, 0\}, \{\frac{5}{3}, \frac{1}{3}, 0\}, \{\frac{2}{3}, \frac{4}{3}, 0\}, \{\frac{2}{3}, -\frac{2}{3}, 0\}, \{-\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0\}, \{-\frac{1}{3}, -\frac{2}{3}, 0\}\}$

要生成 wannier90_hr.dat，仅需运行以下命令：

```
hop[ham, {e1 -> 0, r1 -> 0.02, t1 -> 0.5}]
```

其结果为：

Generated by MagneticTB

```

2
7
1 1 1 1 1 1 1
-1 -1 0 1 1 0.02000000 0.00000000
-1 -1 0 2 1 0.00000000 0.00000000
-1 -1 0 1 2 0.00000000 0.00000000
-1 -1 0 2 2 0.02000000 0.00000000
-1 0 0 1 1 0.02000000 0.00000000
-1 0 0 2 1 0.00000000 0.00000000
-1 0 0 1 2 0.50000000 0.00000000
-1 0 0 2 2 0.02000000 0.00000000
0 -1 0 1 1 0.02000000 0.00000000
0 -1 0 2 1 0.50000000 0.00000000
0 -1 0 1 2 0.00000000 0.00000000

```

0	-1	0	2	2	0.02000000	0.00000000
0	0	0	1	1	0.00000000	0.00000000
0	0	0	2	1	0.50000000	0.00000000
0	0	0	1	2	0.50000000	0.00000000
0	0	0	2	2	0.00000000	0.00000000
0	1	0	1	1	0.02000000	0.00000000
0	1	0	2	1	0.00000000	0.00000000
0	1	0	1	2	0.50000000	0.00000000
0	1	0	2	2	0.02000000	0.00000000
1	0	0	1	1	0.02000000	0.00000000
1	0	0	2	1	0.50000000	0.00000000
1	0	0	1	2	0.00000000	0.00000000
1	0	0	2	2	0.02000000	0.00000000
1	1	0	1	1	0.02000000	0.00000000
1	1	0	2	1	0.00000000	0.00000000
1	1	0	1	2	0.00000000	0.00000000
1	1	0	2	2	0.02000000	0.00000000

4.2 更多例子

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，实在不行在微信群里提问。

2. 微信群怎么加？

回答：可以扫描以下二维码：



MagneticTB使用交流群



该二维码 7 天内 (3 月 18 日前) 有效，重新进入将更新

若二维码过期，可联系 zhangzeyingvv@gmail.com

3. example.nb 文件里二硫化钼的例子中的钼原子的 Wyckoff 点和 BCS 网站对不上，为什么？

回答：这个例子是为了完全重复 Phys. Rev. B 88, 085433 (2013) 的结果。数据库中默认的六角晶格 \mathbf{a}, \mathbf{b} 轴的夹角为 $\frac{2\pi}{3}$ 。而 Phys. Rev. B 88, 085433 (2013) 中使用的晶格矢量 \mathbf{a}, \mathbf{b} 轴的夹角为 $\frac{\pi}{3}$ 。所以为了保证对称操作与原包取法一致用 `sgoptr=MapAt[FullSimplify[tran . # . Inverse@tran] &, sgop, {;;, 2}]` 把数据库中的对称操作转换了一下，得到的哈密顿量就与文献完全对上了。可以参考 SpaceGroupIrep 的文章 Comput. Phys. Commun. 265, 107993 (2021) 里说怎么具体转换。未来 MagneticTB 将集成自动转换功能。但是需要注意，不管原包的取法怎么变，最后得到的哈密顿量能带的简并和参数个数是一样的，仅会有形式上的不同。

4. 既然能算非磁性体系，为什么软件包叫 MagneticTB？

回答：因为 230 个空间群是 1651 个磁群的子集，MagneticTB 可以构造任意 1651 个磁群的 TB 模型，包含了非磁性材料。

5. 我发现了 Bug，该怎么办？

回答：在微信群里提问（建议首选），在 <https://github.com/zhangzeyingvv/MagneticTB/issues> 上提问，给我发邮件 zhangzeyingvv@gmail.com。

6. 除了想构造 TB 模型，我还算模型的拓扑性质，该怎么办？

回答：\$UserBaseDirectory/MagneticTB/WilsonLoop.wl 里有 Wilson loop 相关函数，可以参考，但该部分代码并未经过系统的测试，本文档不会提供 Wilson loop 相关函数使用方法。也可以将 TB 模型转换成 `wannier90_hr.dat` 文件用其他软件算。

7. MagneticTB 支持构造自旋空间群的 TB 模型吗？

回答：目前不支持，自旋空间群相关代码还在测试中，未来会发布。

8. 我又想考虑自旋，又不想考虑自旋轨道耦合，可以实现吗？

回答：目前不行，更新了自旋空间群相关代码才能实现。

9. 有关于 Mathematica 的参考书吗？

回答：推荐创造 WOLFRAM 语言的 Wolfram 本人写的《WOLFRAM MATHEMATICA 实用编程指南》或《MATHEMATICA 全书》。

10. 可以转发该手册吗？

回答：可以，但是转发时不要对该手册做任何修改。

11. 如何引用 MagneticTB？

回答：Zeying Zhang, Zhi-Ming Yu, Gui-Bin Liu, Yugui Yao, Computer Physics Communications, 270, 108153 (2022).

Bibtex:

```
@article{ZHANG2022108153,  
  title = {MagneticTB: A package for tight-binding model of magnetic and non-  
    magnetic materials},  
  journal = {Computer Physics Communications},  
  volume = {270},  
  pages = {108153},  
  year = {2022},  
  doi = {https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108153},  
  url = {https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465521002654},  
  author = {Zeying Zhang and Zhi-Ming Yu and Gui-Bin Liu and Yugui Yao}  
}
```

6 更新计划

- 优化算法
- 将支持磁层群，磁杆群和自旋空间群
- 与 SpaceGroupRep 和 MSGCorep 软件包接口
- 增加拟合参数模块
- 加入磁群的原点平移变换和晶格整体旋转变换
- ...