

MagneticTB 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	画图模块	4
3.3	接口模块	5
3.4	能带表示模块	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：

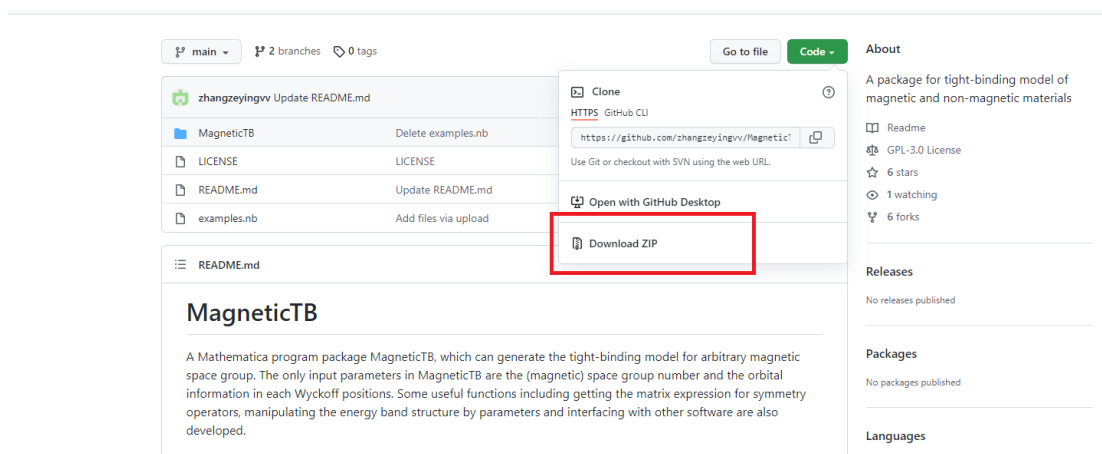
- 仅需简单输入磁群编号和每个 Wyckoff 位置信息即可构造出相应的紧束缚模型
- 获取 1651 个磁群的对称操作
- 与其他软件接口
- 画能谱图，并且能谱可随参数大小动态显示
- 可以构造非磁性材料的紧束缚模型
- 可以考虑非共线磁结构
- 可以构造单群（无自旋）和磁双群（有自旋）的紧束缚模型

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。

3.4 能带表示模块

能带表示模块可以计算紧束缚模型的能带表示。需要安装 SpaceGroupIrep 和 MSGCorep 软件包。能带表示模块主要有一下 2 个函数

```
getMSGElemFromMSGCorep[{N1, N2}]
```

从 MSGCorep 软件包中获取磁空间群元素，其中 N1.N2 是 BNS 磁空间群编号。

```
getTBBandCorep[BNSNo, Hamiltonian, parameters, kset]
```

给出紧束缚模型的共表示，其中 BNSNo 是 BNS 磁空间群编号，Hamiltonian 是由 MagneticTB 生成的哈密顿量，parameters 是紧束缚模型中的参数，kset 是包含多个 k 点的列表。

计算紧束缚能带表示的一般流程是

- 使用 getMSGElemFromMSGCorep （而不是msgop）获取磁群元素和对应的晶格向量
- 用得到的磁群元素和对应的晶格向量结合自己设置 Wyckoff 位置和基函数构造紧束缚模型
- 用getTBBandCorep获取能带表示

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", "pzdnd"}];
```

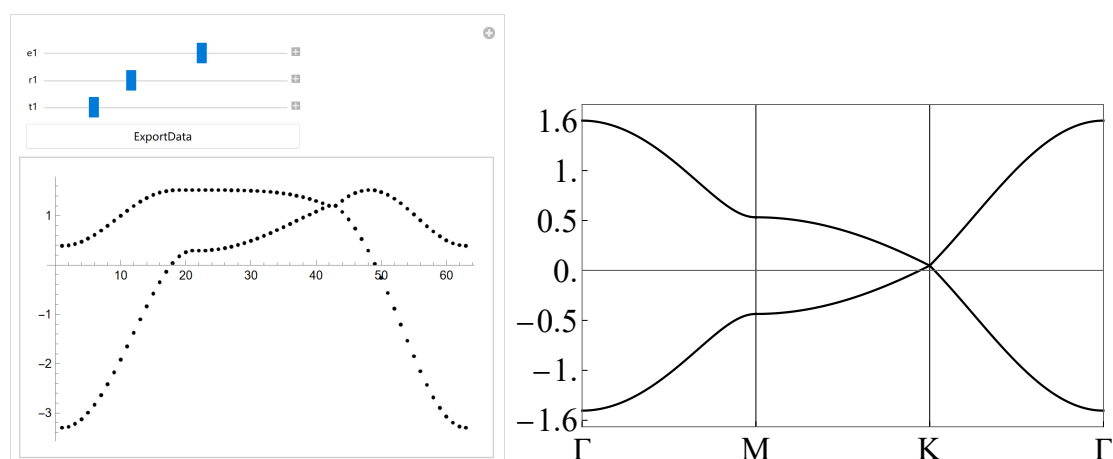
即

```
sgop = msgop[gray[191]];
init [ lattice -> {{a, 0, 0}, {(a/2), (Sqrt[3] a)/2, 0}, {0, 0, c}},
latticepar -> {a -> 1, c -> 3},
wyckoffposition -> {{1/3, 2/3, 0}, {0, 0, 0}},
symminformation -> sgop,
basisFunctions -> {"pzup", "pzdnd"}];
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	$\rho_{\vec{k}}$
$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\}$	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 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. 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 SpaceGroupRep 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 QQ 群里提问，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：可以转发，同时如果想修改本手册，请通过 github 向我提 issue(s)。

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

划线为已经完成的部分

- 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
- ...