

贝里相位 (Berry phase)

最后编辑时间: 2025.01.17

support@pwmat.com

▼ 贝里相位 (Berry phase)

- 使用说明
- 简介
- 示例

使用说明

- PWmat版本应 \geq 2025-01-17。若版本过低，请到官网更新软件
- 材料需要为半导体，有明确的带隙
- 计算不能使用k点并行，不能使用对称性

简介

根据现代极化理论 (modern theory of polarization) 计算固体材料的电极化性质。需要计算周期性势场下电子波函数的Berry phase:

$$P_e = -\frac{if|e|}{8\pi^3} \sum_{n=1}^M \int_{BZ} d^3k \langle u_{nk} | \nabla_k | u_{nk} \rangle$$

P_e 是电子对极化强度 (polarization) 的贡献，有的也称为离子钳位极化 (ion-clamped polarization)。M代表价带的序号。

示例

计算NaF晶体中，F原子在z方向的波恩有效电荷。

1. 计算原始结构

- 结构文件atom.config:

```
2
LATTICE
  0.00000000  2.33985674  2.33985674
  2.33985674  0.00000000  2.33985674
  2.33985674  2.33985674  0.00000000
POSITION
11  0.00000000  0.00000000  0.00000000  1 1 1
 9  0.50000000  0.50000000  0.50000000  1 1 1
```

- 输入文件etot.input:

```
4 1
JOB = SCF
IN.PSP1 = Na.SG15.PBE.UPF
IN.PSP2 = F.SG15.PBE.UPF
MP_N123 = 4 4 4 0 0 0 2 # k点需大于2，结果受k点数量影响较大，应尽量使用更多k点
ECUT = 50
IBPONLY = T
CENTER_OF_CELL = 0.25 0.25 0.25
```

计算完成后，在屏幕输出结尾找到如下输出:

```
Pe1 (e*Angstrom)= -.41383659018587E-08 0.11689800490596E-07 0.30020469719359E-08
Ionic dipole moment: 0.23399E+01 0.23399E+01 0.23399E+01 e*Angst
```

其中 $Pe1$, Ionic dipole moment 分别为电子部分、离子部分偶极矩, 单位 $e\text{\AA}$ 。

Ionic dipole moment的数值和晶体中心位置(CENTER_OF_CELL参数)的定义相关, 晶体中心位置默认值为(0.25, 0.25, 0.25)。

2. 对F原子在z方向上进行位移, 计算位移后的结构

- 对结构文件atom.config进行修改:

```
2
LATTICE
0.00000000 2.33985674 2.33985674
2.33985674 0.00000000 2.33985674
2.33985674 2.33985674 0.00000000
POSITION
11 0.00000000 0.00000000 0.00000000 1 1 1
9 0.51000000 0.51000000 0.49000000 1 1 1
```

F原子的移动距离 $\Delta d = 0.046797\text{\AA}$

- 输入文件etot.input保持一致:

```
4 1
JOB = SCF
IN.PSP1 = Na.SG15.PBE.UPF
IN.PSP2 = F.SG15.PBE.UPF
MP_N123 = 4 4 4 0 0 0 2
ECUT = 50
IBPONLY = T
CENTER_OF_CELL = 0.25 0.25 0.25
```

计算完成后, 在屏幕输出结尾找到如下输出:

```
Pe1 (e*Angstrom)= -.21073599848632E-08 0.96186320207058E-09 0.37537513640933E+00
Ionic dipole moment: 0.23399E+01 0.23399E+01 0.20123E+01 e*Angst
```

对F原子位移后, 电子部分偶极矩的变化 $\Delta p[ele] = 0.3754$, 离子部分偶极矩的变化 $\Delta p[ion] = -0.3275$, 总电偶极矩变化 $\Delta p[tot] = 0.0479$ 。

F原子在z方向的波恩有效电荷 $Z^* = \frac{\Delta p[tot]}{\Delta d} = -1.02|e|$