TSINGHUA UNIVERSITY

计算凝聚态物理选讲

HomeWork 4
Wannier 函数

邹念龙

2018311420

January 22, 2019

1 wannier 与局域基组

1.1 局域基与紧束缚模型

在第一性原理的计算中引入局域基组与紧束缚模型主要出于两点考量：

- 一般的第一性原理计算出于减少计算量的考量，除了在高对称线上会进行较为密集的计算，在倒空间取点往往是相当稀疏的。而计算材料的 berry curvature 等性质的时候会涉及到对能带在 k 空间的求导，通过紧束缚计算我们可以对原来稀疏的结果进行插值。

- 材料的很多性质仅仅涉及材料在局域的表现 (locality)，通过适当的改变紧束缚模型，可以简单的对这些性质加以描述，比如材料的表面态或者掺杂，材料对于应力的相应等。这样就给出我们一种从材料体内性质去外推材料在缺陷附近性质的能力。

通过第一性原理的计算，我们已经得到能带和能量本征态，那么如何选择局域基就是很重要的。最一般来说，局域基并不一定非常局域，其只需要满足如下的要求：$|\psi_R\rangle(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = |\psi_{R'}\rangle(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R'})$。若基组具有这样的特性，则由哈密顿量的对称性我们可以得到交叠积分具有如下性质

$$\langle\psi_R|\hat{H}|\psi_{R'}\rangle = \langle\psi_0|\hat{H}|\psi_{R'-R}\rangle = \langle\psi_{R-R'}|\hat{H}|\psi_0\rangle \tag{1}$$

同时，由于当 $\boldsymbol{R}$ 与 $\boldsymbol{R'}$ 之间距离渐渐变大大，积分给出的值就开始衰减，局域性越好衰减越快。我们可以从某段距离之后进行截断，则整个哈密顿量的信息就可以通过有限个交叠积分来表达。获得最大局域化的局域基组便成为了我目标。而且局域性更好的基在描述局域缺陷等性质时表现也更好

1.2 wannier 基组

其中一个获得局域基组的办法就是直接对 bloch 态进行傅里叶变换，从而得到 wannier 基组。定义如下

$$|\psi_R\rangle = \frac{V}{2\pi^3}\int_{B.Z.} d\boldsymbol{k} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\psi_k\rangle \tag{2}$$

其中 $|\psi_k\rangle$ 为能量本征态，其反变换为

$$|\psi_k\rangle = \sum_R e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\psi_R\rangle \tag{3}$$

但是一个严重的问题在于，一般计算给出的 $|\psi_k\rangle$ 包含一个随机的相位，从而导致 wannier 函数存在着一个规范变化。如果直接对计算结果进行公式(2)形式的变换，由于一个随机相位的影响，给出的 $|\psi_R\rangle$ 就会非常的离域。

若我们需要获得多带的 wannier 基，则除了规范以外，为了获得更局域的态，我们往我会对 $|\psi_{nk}\rangle$ 做一个幺正变换，舍弃 wannier 基能够直接通过反傅里叶变换得到能量本征态的能力从而获得更大的局域性。

$$|\tilde{\psi}_{kn}\rangle = \sum_m \hat{U}(k)_{mn}|\psi_{km}\rangle \tag{4}$$

2 wannier90 计算：Bi_2Se_3

首先我们设置变量 prtwant 为 2。prtwant 是一个 flag, 用来指明到底使用 ABINIT-WanT 接口（prtwant=1）还是使用使用 ABINIT-Wannier 接口（prtwant=2），亦或者是先做一步自洽 GW 得到准粒子的波函数之后再使用 ABINIT-Wannier 接口（prtwant=3）

之后我们需要给出 wannier90.win 文件，再一开始提交作业的时候，他内部仅包含两个关键参数传输给 wannier90，分别是：num_wann，需要构造的 wannier 函数的个数，num_iter，最大迭代步数。

再自洽步结束后，我们得到了如下由 ABINIT 生成的 wannier 输入文件：

- wannier90random.amn: 用于初始 wannier function 的投影矩阵 A_{mn}
- wannier90.eig: 各个 k 点的本征值
- wannier90.mmn：本征函数周期部分的交叠积分
- UNK: 每个 k 点的实空间波函数

最终我们可以得到如下表格，给出迭代中收敛的情况。

Iter	Omega_I(i-1)	Omega_I(i)	Delta (frac.)	Time
1	75.77049522	73.56370960	3.000E-02	79.36
2	74.19897209	72.86027275	1.837E-02	97.45
3	73.43004148	72.39469046	1.430E-02	115.15
4	72.83693608	72.04316126	1.102E-02	132.53
...	...	...	...	...
...	...	...	...	...
457	70.12628397	70.12628398	-7.648E-11	8376.89
458	70.12628397	70.12628398	-6.345E-11	8393.57

最终给出 wannier 插值后的能带

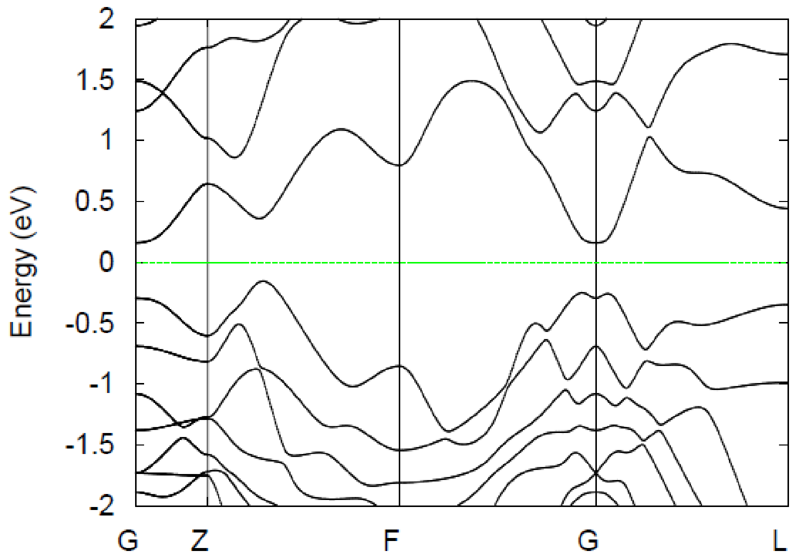

Figure 1: 图 1 Bi2Se3-wannier 插值