



ZStar

面向极化、Born 有效电荷、声子、红外、拉曼与介电响应的可复现 workflow 工具。

PyPI v0.2.0

Python 3.9+

License GPL-3.0

[English](#) | [简体中文](#) | [English PDF](#) | [中文 PDF](#)

项目简介

ZStar 是连接 ABACUS/PyATB、VASP、CP2K、Quantum ESPRESSO 与 Phonopy 的 Python 响应性质 workflow 工具。其核心任务是把不同计算器的原子响应数据整理为 满足晶体对称性与声学求和规则的 Born 有效电荷 (BEC) 张量，并进一步完成声子、红外 (IR)、介电、拉曼与分子动力学 (MD) 介电分析。

ZStar 不会隐藏中间步骤。结构、输入文件、绝缘性门控、极化值、电荷密度、张量重构报告、光谱和任务状态都会保留下来，便于检查、复现与断点续算。

当前版本的数值验证与运行环境汇总见 [docs/validation.zh-CN.md](#)。

主要功能

- 前向差分与中心差分 BEC。
- 对称性约化、全原子张量重构和声学求和规则修正。
- `0.no-move` -> `位移结构` 的单任务串行、可恢复 workflow。
- 所有位移任务复用 `0.no-move` 的收敛电荷密度。
- 参考 SCF 完成后只执行一次绝缘性检查。
- 生成 shell、Slurm 和 Torque/PBS 驱动脚本。
- 自动兼容旧版 PyATB 与支持静态直算的新版本 PyATB。
- CP2K Berry 相位 BEC 的串行断点续算后端及原生 APT 对照。
- 三维与二维混合极化/BEC 处理。
- 声子生成、后处理、模式分类、红外谱、拉曼谱和介电响应。
- 使用固定或逐帧 BEC 的 MD 偶极涨落介电计算。
- 面向薄膜和极性材料的静电势辅助分析。
- 随软件打包的规范化 Agent Skill 和 JSON 工作区预检查。

- 版本化的计算器无关响应规范和后端插件注册机制。
- 面向分子和三维 bulk 的 Quantum ESPRESSO 原生 DFPT BEC/IR 收集流程。

计算器无关接口、`dim=0/1/2/3` 物理约定、QE 工作流、电荷密度适配器、Phonopy 数据交换、偏振 Raman、光学常数及 MD 外部 BEC provider 详见 [计算器无关中文手册](#)。

物理处理范围

三维周期晶体

对于三维周期晶体，ZStar 根据

$$Z^*(\kappa, \alpha, \beta) = \Omega/e * dP_{\alpha} / du_{\kappa, \beta}$$

计算 BEC。有限差分之前会按照极化量子对 Berry 相位极化分支进行匹配，避免直接相减导致的分支跳变。

二维材料

二维薄膜的面内与面外响应采用不同处理：

- ****面内分量****：在体系保持绝缘的前提下，沿用 Berry 相位极化差分。
- ****面外分量****：从 ABACUS 电荷密度 cube 文件做实空间积分，同时包含离子和电子偶极。
- ****归一化****：面内 BEC 通过超胞体积因子消除真空层高度依赖；二维介电谱默认输出与真空无关的片层极化率。

因此，完整二维 BEC 也需要 `x`、`y`、`z` 三个方向的位移。`zstar gen --dim 2` 默认会生成全部三个方向。当前混合算法要求薄膜法向与笛卡尔 `z` 轴对齐；对于倾斜薄膜会明确报错退出。

可以独立审计一对参考/位移电荷密度 cube：

```
zstar polar2d --reference-cube reference.cube \  
  --displaced-cube atom_zplus.cube \  
  --displacement 0.01 --outdir slab_dipole_check
```

程序会输出平面电荷重排、偶极有限差分、有效电荷、诊断信息，以及 PNG/PDF/SVG 图片。

安装

ZStar 要求 Python 3.9 或更高版本。

从 PyPI 安装：

```
pip install -U zstar
```

从本地仓库安装：

```
git clone https://github.com/xdzhu/zstar.git
cd zstar
pip install .
```

外部程序只在对应功能中需要：

- ABACUS：SCF、电荷密度、力与稀疏矩阵。
- PyATB：Berry 相位极化、能带检查和电子介电响应。
- Phonopy：位移结构生成与声子后处理。
- CP2K：可选的 CP2K 有限位移 BEC 后端。
- VASP：原生三维 BEC 和模式位移介电响应 workflow。
- Quantum ESPRESSO：可选的原生 DFPT BEC、介电和 IR 路线。

检查安装：

```
zstar --version
zstar --help
```

Agent Skill

安装 ZStar 后，可直接安装随软件提供的 `$run-zstar-workflows` 技能：

```
zstar agent-skill install
zstar agent-skill preflight --root . --lane bec --dim bulk
```

安装后新建智能体会话。升级 ZStar 后使用 `--force` 刷新技能；其他兼容框架可用 `--dest /path/to/skills` 指定技能父目录。该 Skill 固化了维度约定、参考态优先执行、断点续算、调度系统权限边界和基于产物的完成判据。详见 [docs/agent_skill.zh-CN.md](#)。

Born 有效电荷 workflow

1. 生成参考与位移目录

在包含 `STRU` 的目录中执行：

```
zstar gen --stru STRU --pyatb --method forward --force
```

二维薄膜：

```
zstar gen --stru STRU --dim 2 --pyatb --method forward --force
```

生成的目录从 `0.no-move` 开始，后面是类似 `1.Ti/x+` 的原子/方向位移目录。每个位移目录不再需要单独复制一份任务脚本。

常用选项：

选项	含义
<code>--method forward</code>	central`
<code>--reduce / --all</code>	默认只算对称性代表原子，或强制计算全部原子。
<code>--move "x y z"</code>	显式指定原子位移方向。
<code>--dim 2</code>	3`
<code>--input-mode abacus</code>	pyatb
<code>--input_sets FILES</code>	复制到任务目录的附加文件或文件夹。

2. 串行执行并支持断点续算

本地 shell 运行：

```
zstar workflow run --root . --dim 3 \  
  --abacus-command "mpirun -np 1 abacus" \  
  --pyatb-command "mpirun -np 1 pyatb" \  
  --omp-threads 28
```

二维材料使用 `--dim 2`。

默认执行顺序如下：

- 1. 执行 `0.no-move` SCF，输出电荷密度与稀疏矩阵。
- 2. 使用 `pyatb_input --band` 生成常规高对称能带路径。
- 3. 如果参考结构为金属，在任何位移计算开始前报错退出。
- 4. 计算参考结构的极化和电子介电张量。
- 5. 将参考电荷 cube/restart 文件复制到每个位移任务的 `OUT.<suffix>/`。
- 6. 按确定顺序串行执行全部位移及其极化计算。
- 7. 在 `.zstar/` 保存阶段状态；中断后再次执行同一命令即可继续。

默认采用普通能带路径进行轻量绝缘性门控。它可以发现所采样路径上的闭隙，但不能排除路径之外的小型费米面。只有显式指定时才采用更严格的 MP 网格：

```
zstar workflow run --gap-mode mp --mp-density 0.08
```

查看进度：

```
zstar workflow status
```

3. 生成不同运行环境的脚本

本地 shell:

```
zstar workflow script --backend shell --dim 3
```

Slurm:

```
zstar workflow script --backend slurm --dim 3 \
  --queue compute --cpus-per-task 28 --walltime 24:00:00
```

Torque/PBS:

```
zstar workflow script --backend torque --dim 3 \
  --queue batch --cpus-per-task 28 --walltime 24:00:00
```

后端默认启动命令会自动适配: shell/Torque 使用 `mpirun -np N`, Slurm 使用 `srun --ntasks=N`。加入 `--dry-run` 可以在不启动计算的情况下检查 脚本、环境、执行顺序和断点状态。三类后端及调度器接收验证见 [docs/validation.zh-CN.md](#)。

只有在检查脚本内容并确认运行环境正确后, 再使用 `--submit`。

4. 后处理极化并构造 BEC

三维:

```
zstar deal --dim 3 --method forward --pyatb
```

二维混合处理:

```
zstar deal --dim 2 --method forward --pyatb
```

中心差分必须在 `gen` 和 `deal` 两步中都使用 `--method central`。

关键输出:

文件	含义
<code>Z-BORN-reduced.out</code>	显式计算的对称性代表原子的原始张量。
<code>Z-BORN-symm.out</code>	经对称性展开并满足声学求和规则的全原子张量。
<code>Z-BORN-reduced-neutral.out</code>	对称展开与电中性修正后的约化张量。
<code>BORN</code>	电子介电张量和 Phonopy 原子顺序的 BEC。
<code>BORN-for-phonopy.out</code>	与 <code>BORN</code> 内容一致、名称更明确的输出。

文件	含义
<code>born_symmetry_report.json</code>	对称重构与残差报告。
<code>zstar_2d_bec.json</code>	二维混合 BEC 的逐原子积分诊断。

CP2K BEC 后端

对于三维、绝缘、Gamma 点 CP2K 输入，ZStar 可以从周期 Berry 相位偶极直接构造 BEC 张量：

```
zstar cp2k-bec prepare --input input.inp --root cp2k_bec \
  --method central --displacement 0.005
zstar cp2k-bec run --root cp2k_bec --cp2k-command cp2k.smp \
  --omp-threads 20 --data-dir /path/to/cp2k/data
zstar cp2k-bec collect --root cp2k_bec
```

参考波函数会被所有位移任务复用，中断后从 `.zstar/cp2k_bec_state.json` 恢复。对于 CP2K 2025.2 及以上版本，还可以用 `cp2k-bec native` 和 `cp2k-bec compare` 生成并比较原生 `APT_FD` 张量。张量约定、输入限制、收敛检查 和直连计算节点验证见[完整中文文档](#)。

VASP BEC 后端

ZStar 也可直接驱动 VASP 的原生 BEC 功能：`dfpt` 对应 `LEPSILON` 线性响应，`finite-field` 对应 `LCALCEPS` / `PEAD` 有限场：

```
zstar vasp-bec prepare --input-dir vasp_input --root vasp_bec --method dfpt
zstar vasp-bec run --root vasp_bec --vasp-command "mpirun -np 20 vasp_std"
zstar vasp-bec collect --root vasp_bec
```

工作流会先完成参考 SCF 并检查带隙，确认绝缘后才进入响应阶段；已完成阶段可以断点续算。收集器统一输出 JSON、ZStar 张量和 Phonopy 兼容的 `BORN` 文件。有限场保护、集群脚本、张量约定及 VASP 6.3.2 SiC 实验验证见 [完整中文文档](#)。

声子与介电响应

1. 生成声子位移任务

在包含 `STRU`、`KPT` 以及已设置 `cal_force 1` 的 `INPUT` 的声子目录中执行：

```
zstar ph --stru STRU --dim "2 2 2" --symprec 1e-3
```

随后按照本地运行环境完成全部 `disp-*` 目录中的力计算。`zstar ph` 不要求也不会强制复制 `abacus_x.sh`；若当前目录确有该脚本，则只把它作为可选便利文件复制。

2. 后处理力并查看 Gamma 模式分类

```
zstar postph
zstar irrep --file irreps.yaml --mode db
```

如果需要非解析项修正，应先把 BEC workflow 中的 **BORN** 复制到声子目录：

```
cp ../polar/BORN .
zstar postph --nac
```

3. 静态与频率相关介电响应

同时复制完整 BEC：

```
cp ../polar/BORN .
cp ../polar/Z-BORN-symm.out .
```

静态介电响应：

```
zstar calc --qpoints qpoints.yaml --born Z-BORN-symm.out \
--dielectric BORN --dim 3
```

频率相关介电响应：

```
zstar freq --qpoints qpoints.yaml --born Z-BORN-symm.out \
--dielectric BORN --dim 3 --plot
```

默认排除低于 5 cm^{-1} 的声学模式；可以通过 **--acoustic-cutoff** 调整。

二维体系不指定 **--thickness** 时，输出与真空层无关、单位为埃的片层极化率：

```
zstar calc --qpoints qpoints.yaml --born Z-BORN-symm.out \
--dielectric BORN --dim 2
```

只有需要定义某个等效三维介电张量时，才设置 **--thickness ANGSTROM**。

红外谱

计算模式有效电荷、振子强度、展宽后的红外谱和介电/片层响应：

```
zstar ir --qpoints qpoints.yaml \
--born Z-BORN-symm.out --dielectric BORN \
--dim 3 --broadening 10 --outdir ir_spectrum
```

也可以显式选择模式：

```
zstar ir --modes "4,5,8-10" --outdir ir_selected
```

典型输出包括 `ir_modes.csv`、`ir_spectrum.dat`、`ir_response_real.dat`、`ir_response_imag.dat`、`ir_spectrum.png`、`ir_spectrum.pdf`、`ir_spectrum.svg` 和 `ir_summary.json`。

拉曼谱

ZStar 沿 Gamma 点简正坐标对电子介电响应做中心差分，得到非共振 Raman 张量与 Placzek 强度。

1. 生成简正模式正负位移

```
zstar raman prepare --stru STRU --qpoints qpoints.yaml \  
  --modes "4-12" --amplitude 0.02 --outdir raman \  
  --copy INPUT-scf --copy KPT
```

`--amplitude` 的单位为 `angstrom * sqrt(amu)`。

2. 串行计算、收集并绘谱

```
zstar raman run --raman-dir raman \  
  --reference 0.no-move --qpoints qpoints.yaml \  
  --dim 3 \  
  --abacus-command "mpirun -np 1 abacus" \  
  --pyatb-command "mpirun -np 1 pyatb" \  
  --omp-threads 28
```

参考结构的绝缘性门控只复用一次，不会对每个模式位移重复计算。所有 `plus/minus` 阶段都复用参考电荷密度，并记录可恢复状态。

也可以分步执行：

```
zstar raman status --raman-dir raman  
zstar raman collect --raman-dir raman --qpoints qpoints.yaml --dim 3  
zstar raman spectrum --raman-dir raman --qpoints qpoints.yaml --dim 3
```

二维体系使用 `--dim 2`。程序会利用声子数据中的超胞高度，将依赖真空的介电导数转换为片层极化率导数。

分子 IR 与 Raman

完整的物理约定、工作流、输出文件与 benchmark 请见 [分子 IR 与 Raman 光谱](#)。

孤立分子使用足够大的周期真空超胞表示。首先沿正频分子振动模式生成 Raman 与 IR 共用的简正坐标正负位移：

```
zstar raman prepare --stru STRU --qpoints qpoints.yaml \
  --acoustic-cutoff 100 --amplitude 0.02 --outdir raman \
  --copy INPUT-scf --copy KPT
```

以下命令以可断点续算的串行工作流同时生成两种谱：

```
zstar raman run --raman-dir raman --reference 0.no-move \
  --qpoints qpoints.yaml --dim 0 \
  --abacus-command "mpirun -np 1 abacus" \
  --pyatb-command "mpirun -np 1 pyatb" \
  --spectrum-outdir raman_spectrum --ir-outdir ir_spectrum
```

每个已完成的位移 SCF 只增加两个很轻的 PYATB 后处理阶段。静态介电响应按照 $d\alpha/dQ = V/(4\pi) * d(\epsilon_{r})/dQ$ 转换为分子极化率导数；完成极化分支回绕 后的 Berry 极化按照 $d\mu/dQ = V * dP/dQ$ 转换为分子偶极矩导数。简正坐标步长 Q 的单位为 $\text{angstrom} * \text{sqrt}(\text{amu})$ 。

已有位移结果也可以独立后处理：

```
zstar ir --dim 0 --qpoints qpoints.yaml \
  --displacements raman --outdir ir_spectrum
zstar raman spectrum --dim 0 --qpoints qpoints.yaml \
  --raman-dir raman --outdir raman_spectrum
```

分子谱默认归一化，用于模式归属和工作流验证，不宣称为气相积分截面。定量强度计算 需要分别检查真空尺寸、基组、位移幅度和电子响应网格的收敛性。

VASP 与 CP2K 计算器

计算器无关谱学层也支持 VASP 和 CP2K：

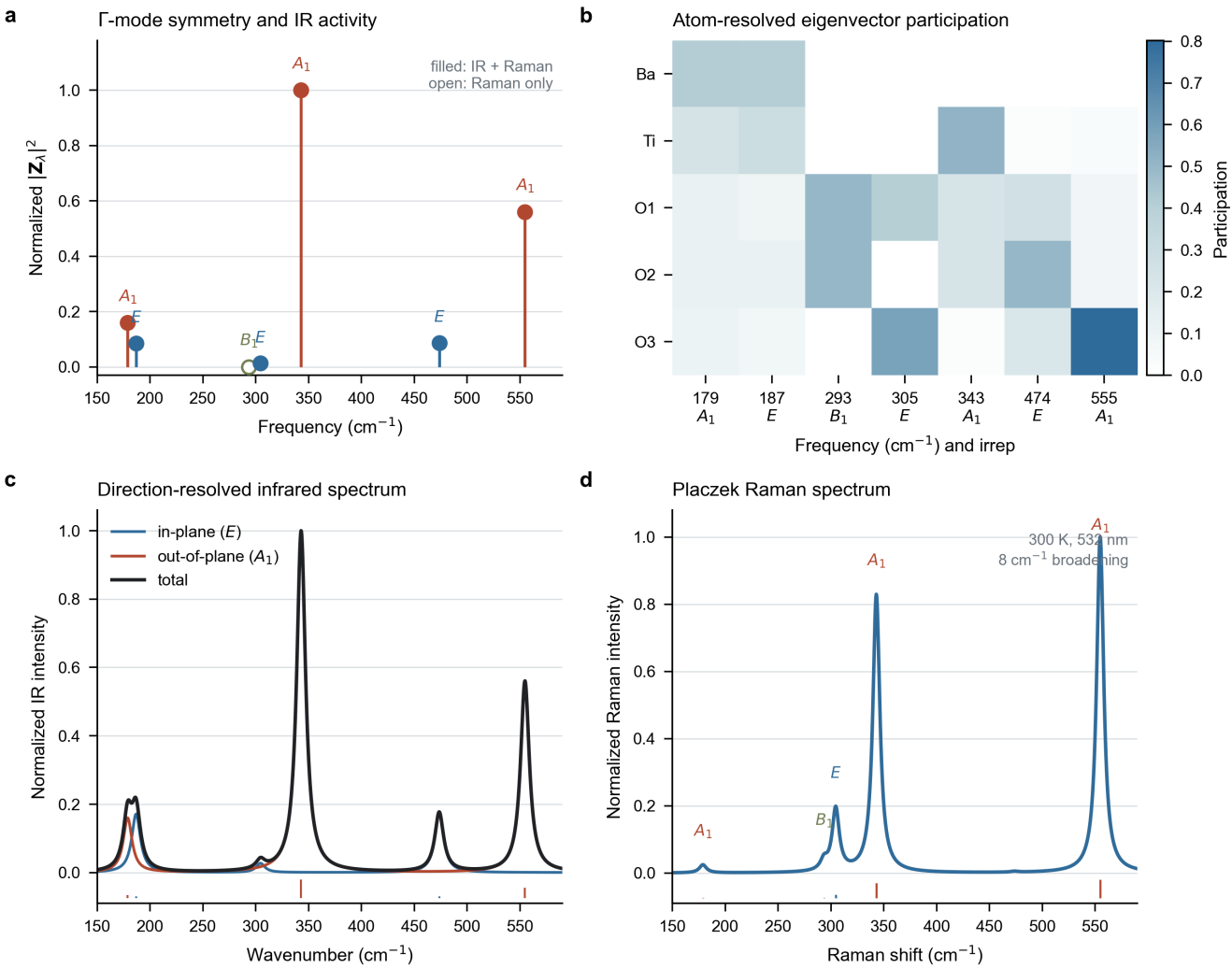
```
zstar spectra prepare --calculator vasp --input-dir vasp_input \
  --modes-xml phonon/vasprun.xml --root vasp_spectra --dim 3
zstar spectra run --root vasp_spectra --command "mpirun -np 20 vasp_std"
zstar spectra collect --root vasp_spectra

zstar spectra prepare --calculator cp2k --input h2o.inp \
  --root cp2k_spectra --dim 0
```

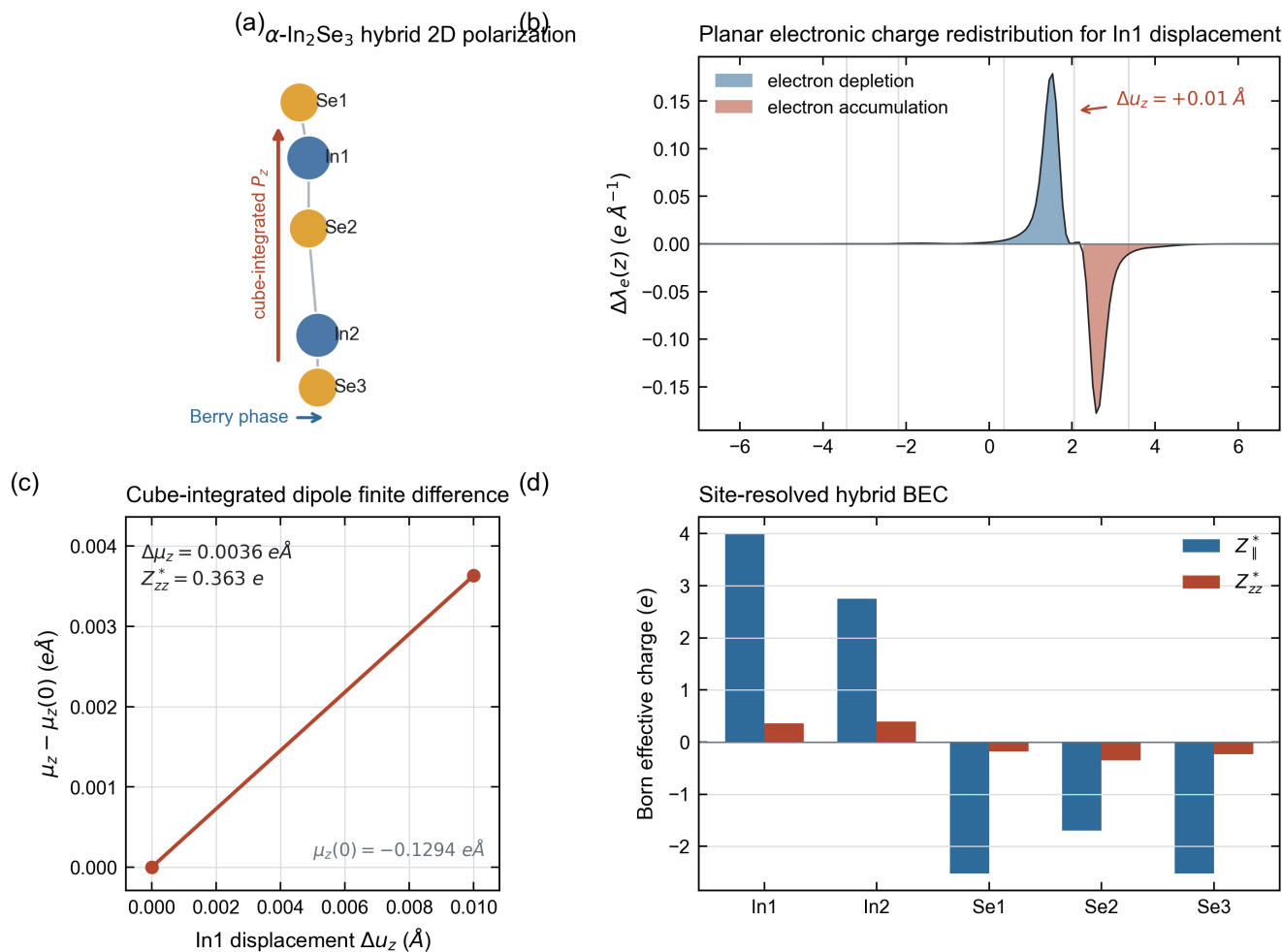
VASP 对原生介电响应做模式中心差分；CP2K 使用原生振动偶极和 **LINRES/POLAR** 活动度。详见计算器谱学文档。

代表性验证图

紧凑源数据、绘图脚本、矢量图片和完整性清单均归档在 [docs/paper_figures](#)。



BTO 验证包含全部 10 个正频光学模式和 20 个已完成的 Raman 正负有限差分 响应任务，其中 293.38 cm^{-1} 的 B_1 模式 Raman 活性但 IR 静默。



In₂Se₃ 验证展示了 Berry 相位/cube 积分的维度分工，以及 In 原子面外位移 引起的真实平面电荷重排。

MD + BEC 介电响应

zstar md 不限定逐帧 BEC 的来源。BEC 可以来自：

- ZStar 对选定 MD 快照做的单帧有限差分计算。
- 对所有帧强制使用同一套固定张量。
- QNEP 或其他外部电荷/BEC 预测模型。

ZStar 负责将张量与轨迹匹配、重建周期性位移、构造离子偶极时间序列，并计算偶极涨落极化率。

固定 BEC：

```
zstar md --dump dump.lammpstrj \
  --fixed-bec Z-BORN-symm.out \
  --electronic-dielectric BORN \
  --temperature 300 --type-map "1:Hf,2:Zr,3:O" \
  --outdir md_fixed
```

逐帧 BEC：

```
zstar md --dump dump.lampstrj \  
  --bec-dir bec_frames --bec-pattern "frame_{step}.npy" \  
  --electronic-dielectric BORN \  
  --temperature 300 --type-map "1:Hf,2:Zr,3:O" \  
  --start-step 200000 --stride-step 100 \  
  --outdir md_dynamic
```

总静态介电张量为

```
epsilon_total = epsilon_infinity + chi_ionic
```

程序分别写出 `chi_ionic.dat`、`epsilon_ionic.dat`、`epsilon_electronic.dat` 与 `epsilon_total.dat`。如果省略 `--electronic-dielectric`，程序使用单位张量，并明确将结果标识为 `I + chi_ionic`。

PyATB 新旧版本兼容

ZStar 会探测实际使用的 PyATB 可执行文件：

- 支持静态直算的新版本使用 `static_dielectric_only`。
- 旧版本使用经新版静态截距对照验证的 0-30 eV 紧凑光学区间，步长为 0.1 eV；粗网格避免为静态介电常数计算不必要的高密度完整光谱。
- 同时兼容 `static_dielectric_function.dat` 与旧版 `dielectric_function_real_part.dat`。

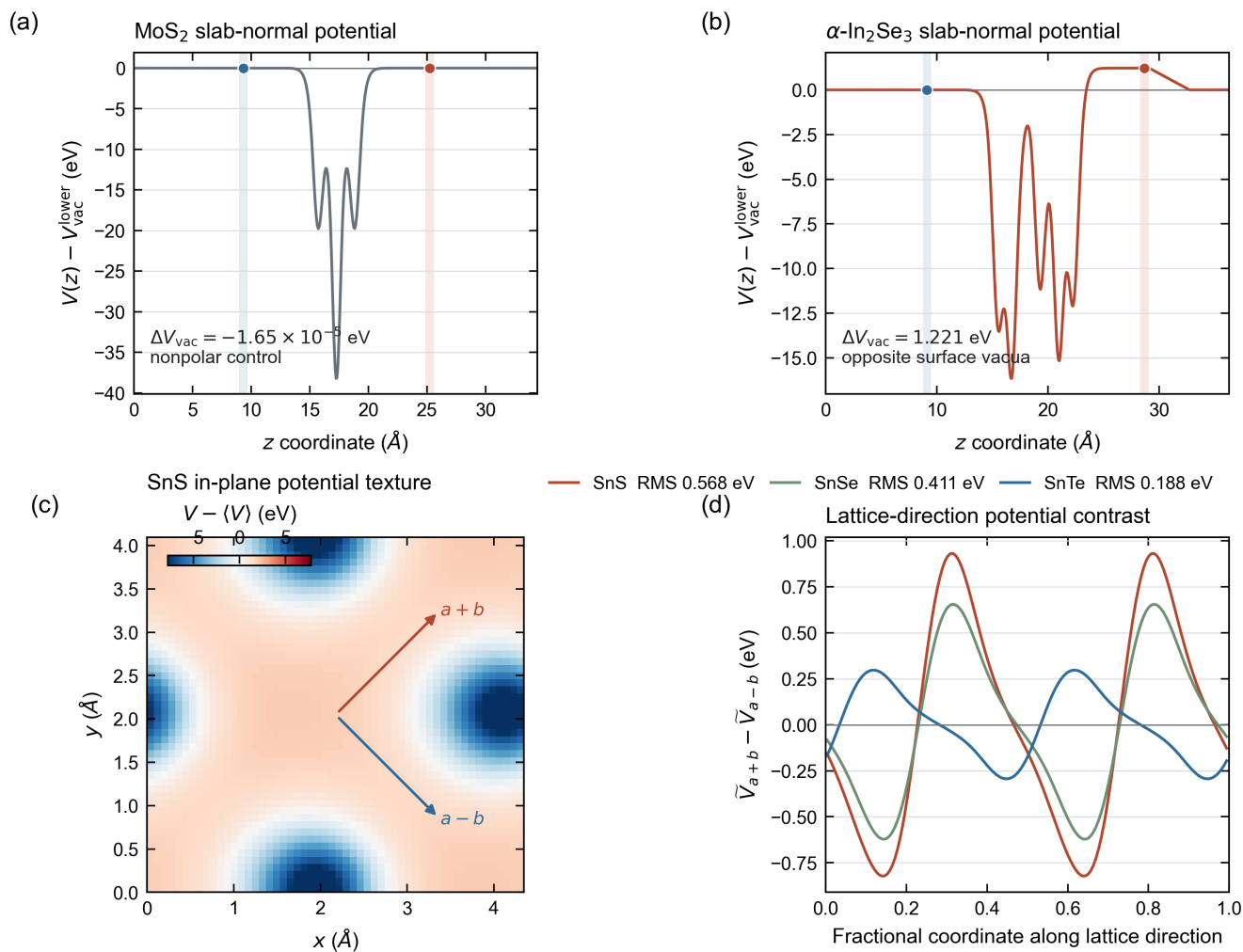
探测到的版本和实际选择会记录在 `zstar_pyatb_compat.json`。

静电势分析

`zstar potential` (别名 `zstar pot`) 可分析 ABACUS 的 `ElecStaticPot.cube`：

```
zstar pot --cube OUT.ABACUS/ElecStaticPot.cube \  
  --axes z --plane xy --plane-average --tile 5 5 \  
  --vacuum-level --vacuum-sides --vacuum-window 0.75 \  
  --polar-arrow auto \  
  --outdir potential
```

它可以输出轴向平均势、平面周期拼接图、方向平均曲线，以及单侧或双侧真空能级诊断。局部平台窗口可避免把 dipole correction 的真空复位段混入极性薄膜表面平台。代表性结果中，MoS₂ 的 `Delta V_vac = -1.65e-5 eV`，alpha-In₂Se₃ 的 `Delta V_vac = 1.220812 eV`。



完整命令、适用边界和 SnS/SnSe/SnTe 方向对比见[中文示例文档](#)。

命令总览

命令	功能
<code>zstar gen</code>	生成参考和 BEC 位移目录。
<code>zstar workflow run/status/script</code>	执行、查看或生成串行可恢复工作流。
<code>zstar deal / born / polar</code>	收集极化并构造 BEC。
<code>zstar polar2d</code>	审计薄膜 cube 对的偶极差与面外 BEC。
<code>zstar bornsym / symcheck</code>	按对称性重构或校验张量。
<code>zstar ph / postph</code>	生成和后处理声子任务。
<code>zstar irrep</code>	分类 Gamma 点模式的光学活性。
<code>zstar calc / freq</code>	计算静态或频率相关介电响应。
<code>zstar ir</code>	计算模式有效电荷与红外谱。

命令	功能
<code>zstar raman</code>	生成、运行、收集并绘制拉曼谱。
<code>zstar spectra</code>	统一执行 VASP 或 CP2K 的 IR/Raman 工作流。
<code>zstar md</code>	将 MD 轨迹与固定或逐帧 BEC 结合。
<code>zstar cp2k-bec</code>	生成、串行执行、续算、汇总并验证 CP2K BEC。
<code>zstar db init/collect</code>	建立候选清单并汇总可审计的 BEC/High-K 数据库。
<code>zstar potential / pot</code>	分析静电势 cube 文件。
<code>zstar wyckoff / vasp</code>	查看 Wyckoff 位置或转换 <code>STRU</code> 。
<code>zstar agent-skill</code>	安装 Agent Skill 或输出 JSON 工作区预检查。

仓库与发布约定

- `examples/` 只保存本地验证数据，已加入忽略列表。
- `dist/` 与 `build/` 是本地构建产物，不提交。
- `job_scripts/` 保存可复用任务模板，随代码提交。
- PyPI 更新流程见 [docs/how_to_update_pypi.md](#)。

私有 GitHub 仓库中的 README 可以使用相对路径 logo，因为已登录的仓库访问者能够读取图片；PyPI 无法访问私有仓库的图片地址。因此 `README_PYPI.md` 不引用私有相对图片。若希望 PyPI 展示 logo，必须提供长期稳定、无需登录即可访问的 HTTPS 图片地址。

引用与许可证

如果 ZStar 支持了您的论文工作，请引用 ZStar 软件论文或对应仓库版本，同时引用实际使用的电子结构与晶格动力学程序。

本版本的机器可读引用信息见 [CITATION.cff](#)。

ZStar 使用 GNU General Public License v3.0。

Copyright (c) Xudong Zhu.