



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)、介电与拉曼分析。

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、二维混合以及一维混合极化/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。
- 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、光学常数及不同维度响应归一化详见 [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。

一维链与纳米线

对于沿 `z` 周期的纳米线，ZStar 将周期 `z` 方向的 PYATB Berry 极化与非周期 `x/y` 方向的 ABACUS 电荷 cube 实空间偶极结合，输出与真空无关的 BEC 和单位为 `Angstrom^2` 的线极化率，并支持 Gamma 点 IR/Raman。程序会拒绝错误的 bulk NAC，因为有限波矢极性声子需要真正的 1D Coulomb cutoff。详见 [一维工作流中文手册](#)。

二维材料

二维薄膜的面内与面外响应采用不同处理：

- ****面内极化列：****在体系保持绝缘的前提下，沿用 Berry 相位极化差分。
- ****面外极化列：****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。

ZStar 的统一张量约定为：行表示原子位移/力，列表示极化/电场。因此，完整二维 BEC 需要 `x`、`y`、`z` 三个方向的位移。`zstar bec pre --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工作流。
- Quantum ESPRESSO: 可选的原生 DFPT BEC、介电和 IR 路线。

检查安装:

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

计算软件路径只需在项目内配置一次 (加 `--user` 可写入用户配置), 随后任务脚本 会按 shell/Torque 或 Slurm 自动选择 `mpirun` 或 `srun`:

```
zstar config init
zstar config set executables.abacus /opt/abacus/bin/abacus
zstar config set executables.pyatb /opt/pyatb/bin/pyatb
zstar config check
zstar backend list --check
```

Agent Skill

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

```
zstar skill install
zstar 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](#)。

规范 CLI、兼容别名、配置优先级和全部公共工具族见 [命令行参考](#)。

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 bec pre --calculator abacus --stru STRU --pyatb --method forward --force
```

二维薄膜：

```
zstar bec pre --calculator abacus --stru STRU --dim 2 --pyatb --method forward --force
```

沿 `z` 周期的一维纳米线：

```
zstar bec pre --calculator abacus --stru STRU --dim 1 --pyatb --method central --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 central</code>	前向或中心有限差分。
<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>--displacement 0.01</code>	有限位移的半步长，单位为 Angstrom。
<code>--dim 0 1 2 3</code>	分子、一维、二维或三维处理。
<code>--input-mode abacus pyatb hamgnn custom</code>	输入文件准备方式。
<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 bec run --root . \  
  --abacus-command "mpirun -np 1 abacus" \  
  --pyatb-command "mpirun -np 1 pyatb" \  
  --omp-threads 28
```

一维纳米线和二维材料分别使用 `--dim 1` 与 `--dim 2`。孤立分子使用 `--dim 0`；程序采用 Gamma 点真空超胞并输出原子极化张量（APT），不把它误称为周期晶体的 BEC。低维极化/BEC 任务会自动写入 `out_chg 1 10`，避免 ABACUS cube 默认舍入精度限制 横向偶极差分。

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 bec run --root . --gap-mode mp --mp-density 0.08
```

查看进度：

```
zstar bec stat --root .
```

3. 生成不同运行环境的脚本

本地 shell：

```
zstar bec job --root . --system shell
```

Slurm：

```
zstar bec job --root . --system slurm \  
--queue compute --tasks 28 --cpus-per-task 1 --walltime 24:00:00
```

Torque/PBS：

```
zstar bec job --root . --system torque \  
--queue batch --tasks 28 --cpus-per-task 1 --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

ABACUS + PYATB 分子 APT:

```
zstar bec pre --calculator abacus --dim 0 --method central --displacement 0.01 --pyatb
zstar bec run --root . \
    --abacus-command abacus --pyatb-command pyatb --omp-threads 20
zstar bec post --root .
```

分子收集器会展开对称等价原子、施加平移不变性约束，并写出 `molecular_apt.json` 和统一格式的 `zstar_response.json`。当 PYATB 最终极化行 因六位小数舍入而不足以解析分子微小响应时，解析器会从分别输出的离子相位和 电子相位重构更高精度的极化。

三维:

```
zstar bec post --root .
```

二维混合处理:

```
zstar bec post --root .
```

沿 `z` 周期的一维混合处理:

```
zstar bec post --root .
```

工作流清单会把 `pre` 选择的维度与差分方法传递给后续动作。旧的 `gen/workflow/deal` 命令继续作为兼容入口保留。

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。
<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。
<code>zstar_1d_bec.json</code>	一维混合 BEC 的逐原子积分诊断。
<code>molecular_apt.json</code>	分子 APT、对称展开和平移求和诊断。

CP2K BEC 后端

对于分子 (`--dim 0`) 或三维绝缘 Gamma 点 CP2K 输入, ZStar 可以从偶极直接 构造 APT 或 BEC 张量:

```
zstar bec pre --calculator cp2k --input input.inp --root cp2k_bec --dim 0 \  
  --method central --displacement 0.005  
zstar bec run --root cp2k_bec --cp2k-command cp2k.ssmc \  
  --omp-threads 20 --data-dir /path/to/cp2k/data  
zstar bec post --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 bec pre --calculator vasp --input-dir vasp_input --root vasp_bec --method dfpt  
zstar bec run --root vasp_bec --vasp-command "mpirun -np 20 vasp_std"  
zstar bec post --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 实机验证见 [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 phonon pre --root . --calculator abacus \  
  --stru STRU --dim "2 2 2" --symmprec 1e-3  
zstar phonon run --root .
```

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 phonon stat --root .
zstar phonon post --root .
zstar phonon irrep --root . --file irreps.yaml --mode db
```

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

```
cp ../polar/BORN .
zstar phonon post --root . --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 dielectric static --qpoints qpoints.yaml --born Z-BORN-symm.out \
--dielectric BORN --dim 3
```

频率相关介电响应：

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

程序默认写出零频张量、响应实部/虚部数据以及 PNG/PDF/SVG 图；只需数据时使用 **--no-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 dielectric static --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**。完整物理约定、三维与二维算例及输出规范见 [介电响应指南](#)。

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 spectra pre --calculator abacus --kind ir --root ir_spectrum \  
  --qpoints qpoints.yaml \  
  --born Z-BORN-symm.out --dielectric BORN \  
  --dim 3  
zstar spectra post --root ir_spectrum
```

需要显式选择模式或精细控制绘图时，可调用保留的底层专家命令：

```
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 spectra pre --calculator abacus --kind raman --root raman \  
  --stru STRU --qpoints qpoints.yaml \  
  --modes "4-12" --amplitude 0.02 \  
  --copy INPUT-scf --copy KPT
```

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

2. 串行计算、收集并绘谱

```
zstar spectra run --root raman --reference 0.no-move \  
  --abacus-command "mpirun -np 1 abacus" \  
  --pyatb-command "mpirun -np 1 pyatb" \  
  --omp-threads 28  
zstar spectra stat --root raman  
zstar spectra post --root raman
```

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。

保留的 `zstar raman collect` 与 `zstar raman spectrum` 专家命令可用于对已有 模式位移树重新后处理。

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 spectra pre --calculator abacus --kind all --root raman --dim 0 \  
  --stru STRU --qpoints qpoints.yaml \  
  --acoustic-cutoff 100 --amplitude 0.02 \  
  --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 spectra run --root raman --reference 0.no-move \  
  --abacus-command "mpirun -np 1 abacus" \  
  --pyatb-command "mpirun -np 1 pyatb" \  
  --spectrum-outdir raman_spectrum --ir-outdir ir_spectrum  
zstar spectra post --root raman
```

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 $\text{angstrom} * \text{sqrt}(\text{amu})$ 。

已有位移结果仍可用底层专家命令独立后处理：

```
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

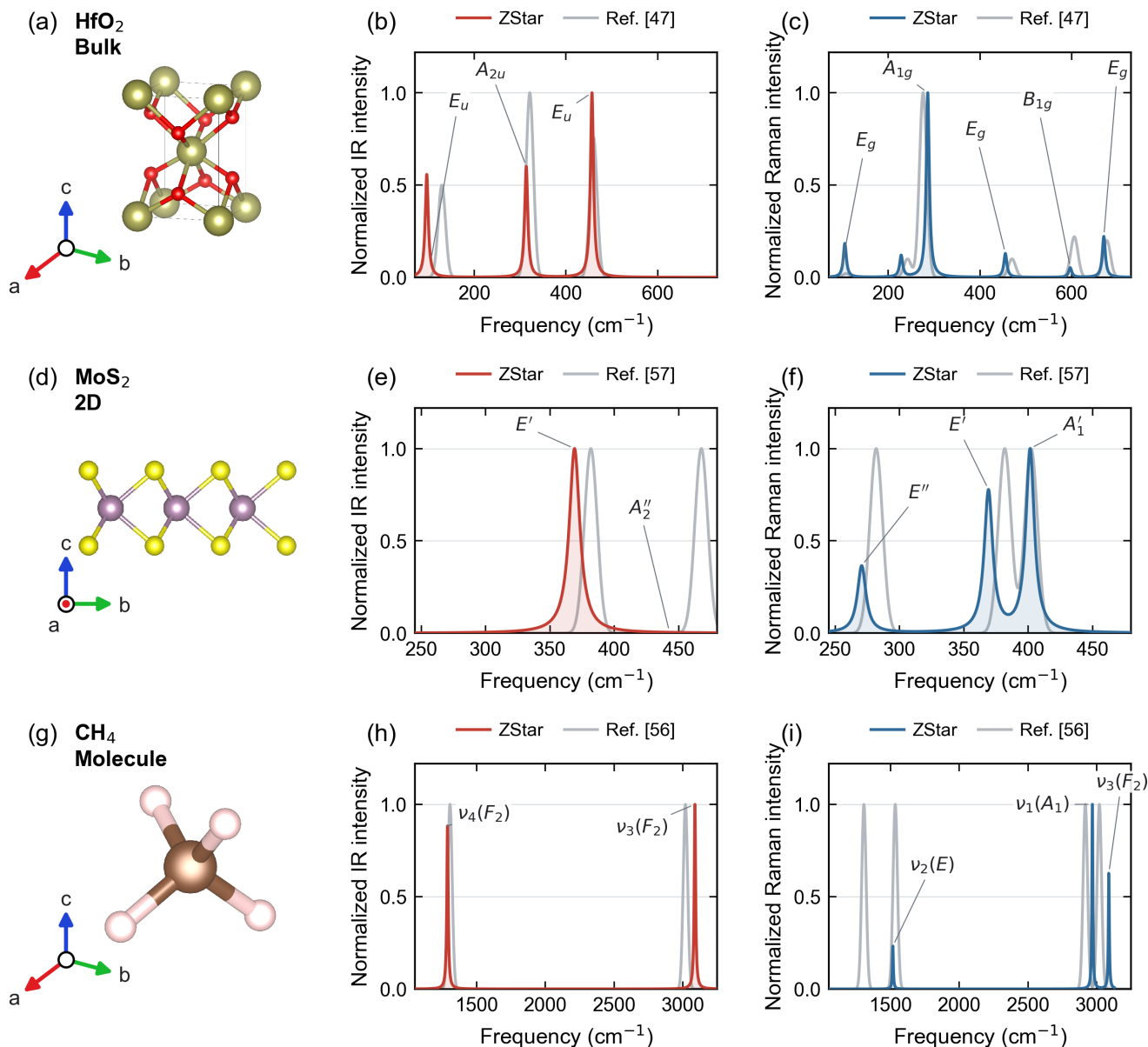
计算器无关谱学层也支持 VASP 和 CP2K：

```
zstar spectra pre --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 post --root vasp_spectra  
  
zstar spectra pre --calculator cp2k --input h2o.inp \  
  --root cp2k_spectra --dim 0
```

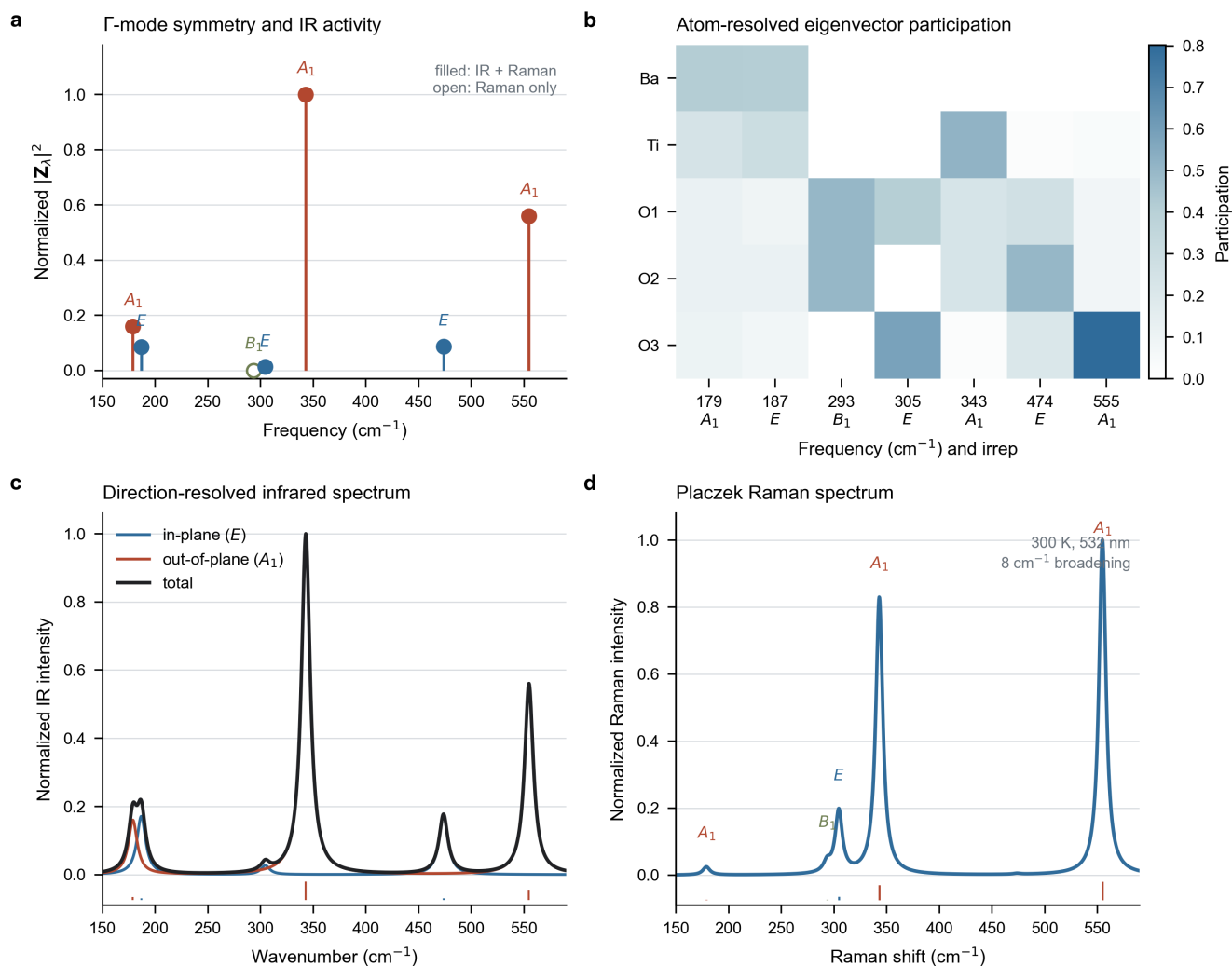
VASP 对原生介电响应做模式中心差分；CP2K 使用原生振动偶极和 **LINRES/POLAR** 活动度。详见计算器谱学文档。

代表性验证图

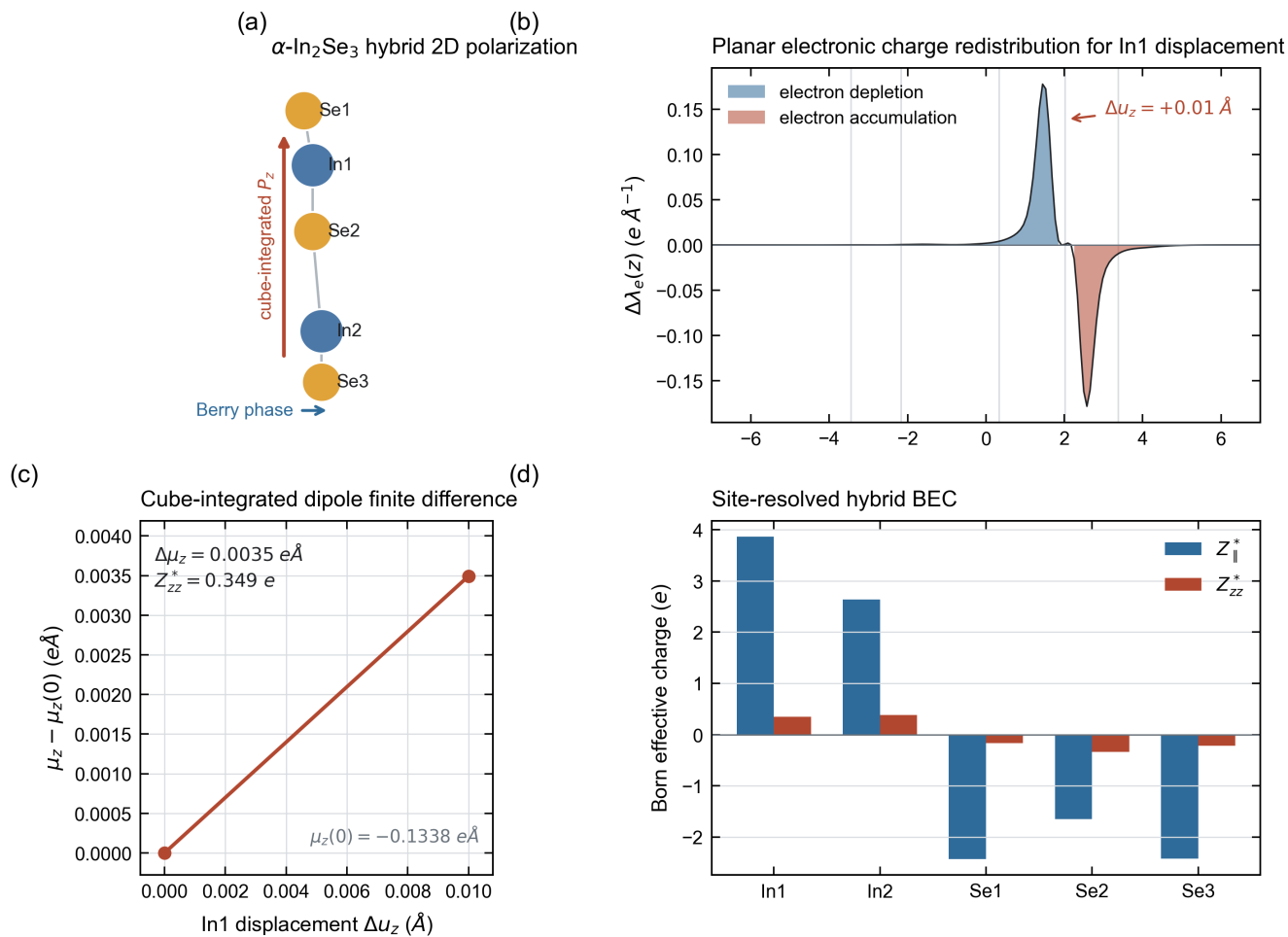
紧凑源数据、绘图脚本、矢量图片和完整性清单均归档在 [docs/paper_figures](#)。



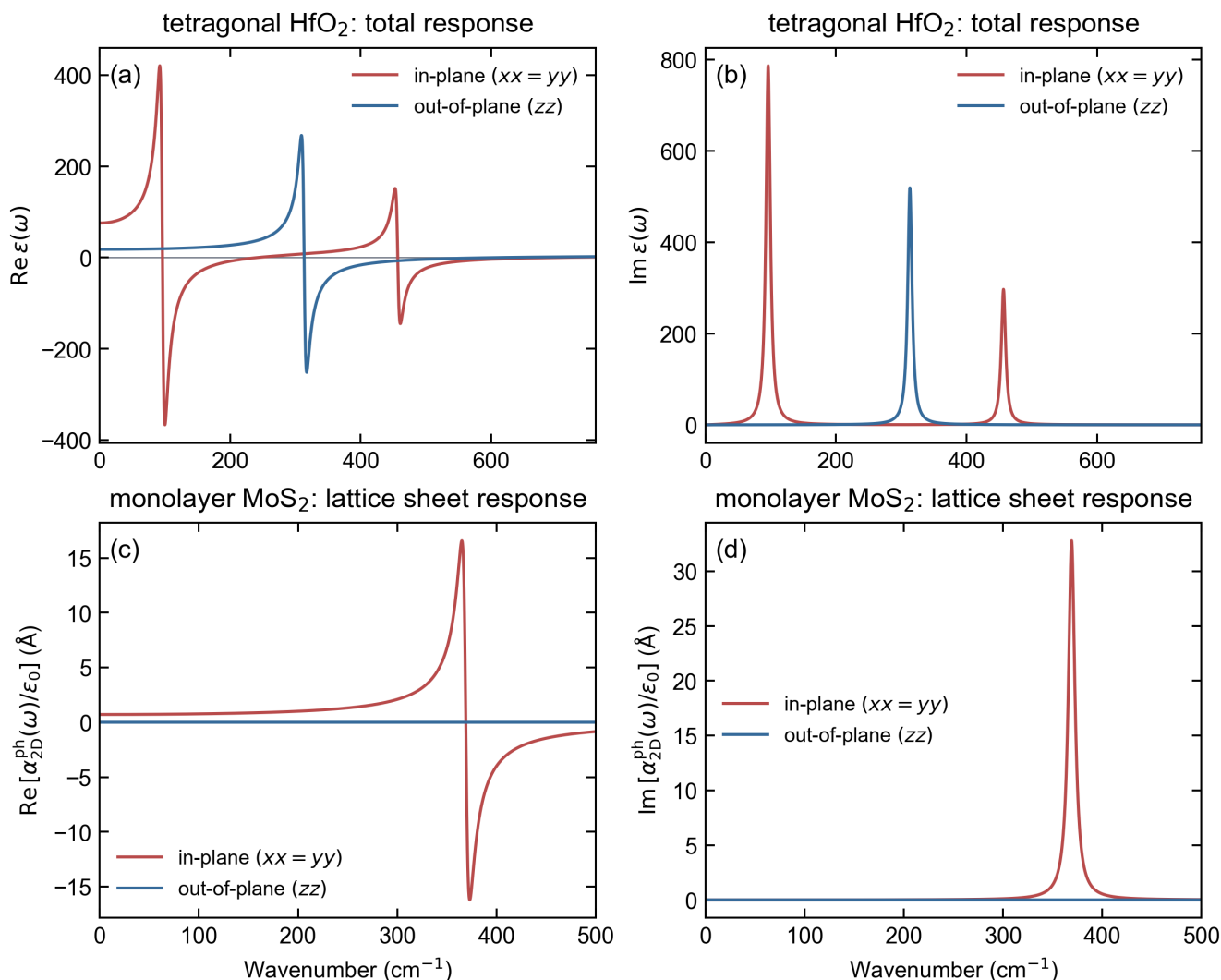
三行对比图按论文顺序展示四方 HfO2 (**Bulk**)、单层 MoS2 (**2D**) 和 CH4 (**Molecule**)。PBEsol HfO2 行包含全部 15 个 稳定光学模式和 30 个已完成的 Raman 响应阶段；更新后的 ABACUS/PBE-D3(BJ) MoS2 行则将全部 6 个光学模式与生产级 BEC 导出的 IR 强度及 12 个已完成的中心差分 Raman 响应阶段结合起来。



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。



HfO₂ 面板给出包含电子背景的三维总响应，PBEsol/TZDP 9-au 闭环得到 `epsilon(0) = diag(75.761034, 75.761034, 18.045191)`；MoS₂ 面板给出不依赖真空层的晶格片层极化率，而不是依赖超胞高度的“二维介电常数”。

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`。

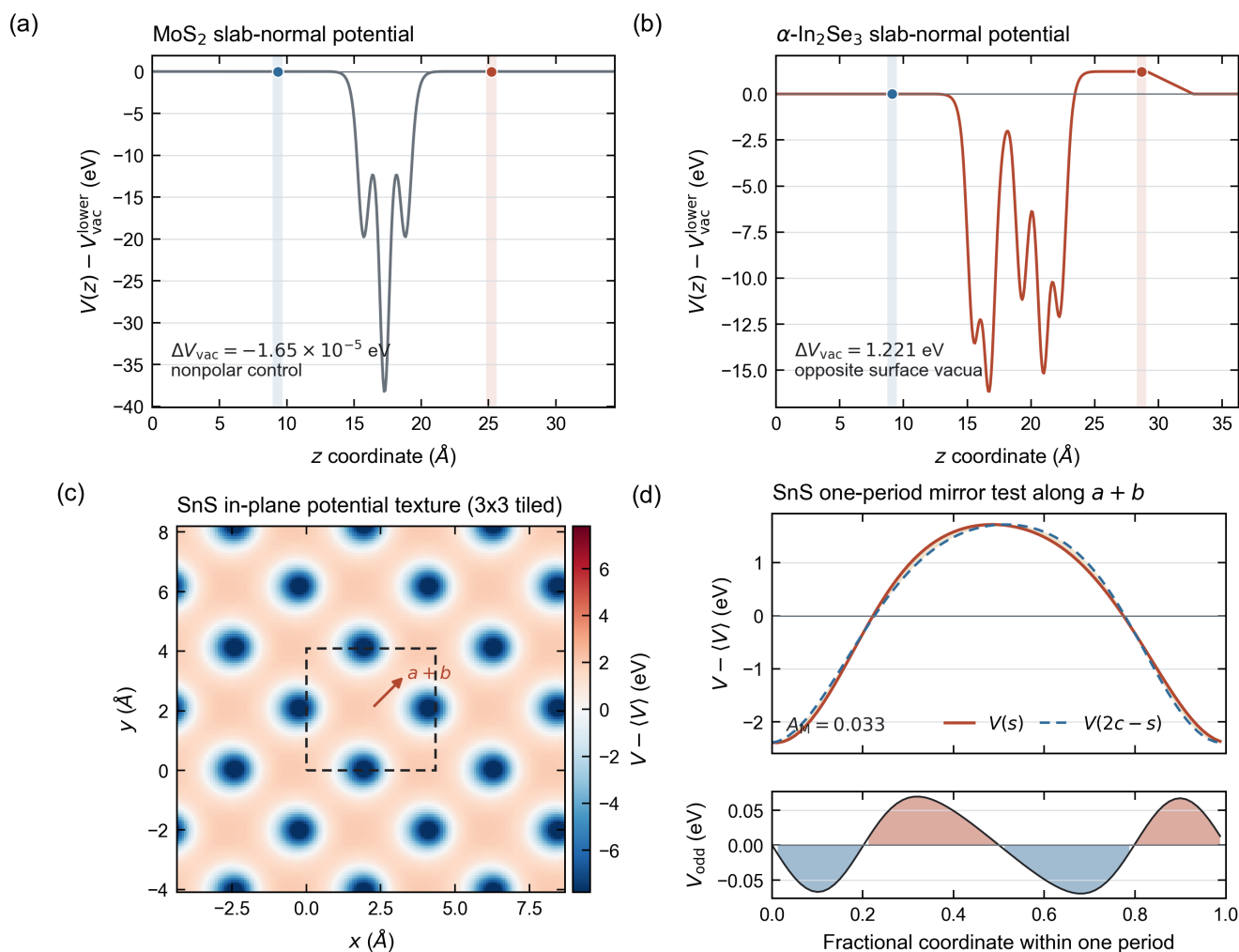
探测到的版本和实际选择会记录在 `zstar_pyatb_compat.json`。

静电势分析

`zstar 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 \
  --direction a+b --mirror-test \
  --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、单侧或双侧真空能级诊断，以及单周期最佳镜面中心和对称度。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 $\Delta V_{\text{vac}} = -1.65 \times 10^{-5} \text{ eV}$ ， $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$ 的 $\Delta V_{\text{vac}} = 1.220812 \text{ eV}$ 。



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 bec pre/run/job/stat/post</code>	极化、APT/BEC、 BORN 、续算状态和任务脚本。
<code>zstar phonon pre/run/job/stat/post/irrep</code>	位移、串行力计算、力常数、频率和不可约表示。

命令	功能
<code>zstar spectra pre/run/job/stat/post</code>	计算器感知的 IR 与 Raman 工作流。
<code>zstar dielectric static/freq/optics</code>	静态、振动及电子介电响应。
<code>zstar backend list</code>	列出能力，并可检查程序或插件。
<code>zstar config init/show/set/check</code>	配置计算软件可执行文件路径。
<code>zstar response</code>	校验并统一计算器无关响应数据。
<code>zstar density</code>	生成电荷密度导出适配器和来源 sidecar。
<code>zstar stru convert/wyckoff</code>	转换结构或检查 Wyckoff 位置。
<code>zstar data qnep/db</code>	导出 qNEP 数据或管理 BEC/High-K 数据库。
<code>zstar skill install/path/preflight</code>	安装 Agent Skill 或检查工作区。
<code>zstar pot</code>	绘制势曲线/平面图、真空势差和镜面非对称度。

别名、全部叶节点和软件路径解析规则见[完整命令行参考](#)。

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.