



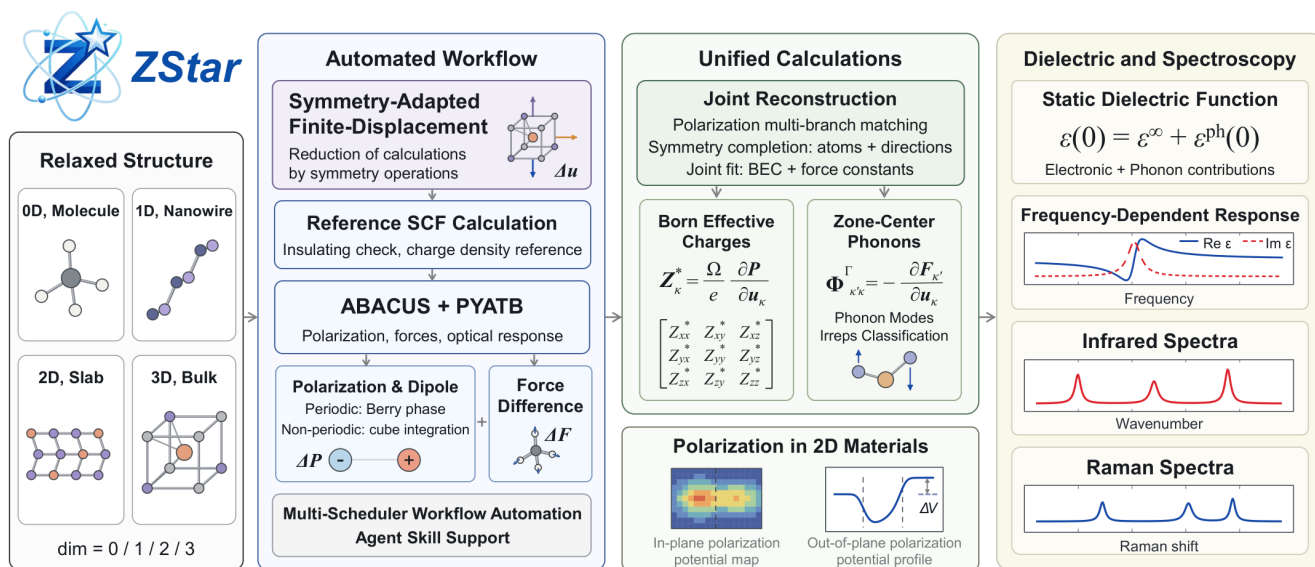
ZStar

面向极化、Born 有效电荷、介电响应以及红外与拉曼谱计算的自动化工具包。

ZStar v0.3.1 Python 3.9+ License GPL-3.0

English | 简体中文 | English PDF | 中文 PDF

workflows 总览



矢量版本见 [PDF](#)。

Unified 谱学

同一套对称性约化 SCF 现在同时支持 BEC/APT、Gamma 声子、IR 与静态非共振 Raman。Raman 复用已有电子矩阵，新增 PYATB 后处理而不新增 SCF。

```
zstar bec pre --stru STRU
zstar spectra pre
zstar spectra run
zstar spectra post
```

二维、一维、分子在 BEC 准备时分别使用 `--dim 2/1/0`。完整教程 · 四维效率与精度对照

项目简介

ZStar 面向高效、精确的响应性质自动化计算。其 Unified ABACUS + PYATB 框架从同一组对称性适配位移中重建 Born 有效电荷 (BEC)、Gamma 点力常数和 Raman 导数，通过极化、力与电子介电响应得到 IR、Raman 和介电结果，并保留明确的精度诊断。VASP、CP2K 和 Quantum ESPRESSO 接口提供各自文档说明的补充计算路线。

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。

按任务查找教程、配置、案例及适用边界，请从[使用手册](#)开始。

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

Unified ABACUS + PYATB 流程由 Phonopy 生成共用位移，同时获取 BEC 与 Gamma 点声子响应。推导、真实位移处理、极化输出精度及验证状态见 [Unified BEC/声子教程](#) 和 [配对案例](#)。已发布版本与历史案例仍保留其原有版本记录。

当前仓库包含论文使用的可复现输入和保留结果；历史案例保留原始版本与来源记录。

混合位移不仅需要检查 SCF 与位移步长，也要检查 PYATB 的 Berry 积分网格。[直接验证报告](#) 保留了 SiC、四方 HfO₂、重新优化的 α -In₂Se₃ 的原始张量、网格与步长收敛检查，以及分别记录的 CPU 核时，不将输出小数位数等同于物理精度。

主要功能

- Unified BEC/APT、Gamma 力常数与静态非共振 Raman 导数，保留独立的 Separate 对照采用笛卡尔或模式位移。
- 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、可恢复工作流。
- 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

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

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](#)。

BN(9,0) 纳米管与 Sb2S3 单链提供完整 unified BEC/Gamma 计算、全张量、IR/Raman 结果、赝势轨道及可续算的 `run.sh`。BEC 与力常数来自同一套 SCF。Sb2S3 图中的参考为公开计算数据集，尚未核实对应期刊论文；保留原始参考曲线及实际存在的 Raman 相对强度差异，不作峰位平移或强度拟合。

二维材料

二维薄膜的面内与面外响应采用不同处理：

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

旧版带编号的 `Z-BORN-*.out` 表采用行表示位移、列表示极化的排列；Phonopy `BORN` 和统一重建内核采用极化优先排列，与上面的定义公式一致，结构化记录明确标出轴含义。完整二维 BEC 需要覆盖三个方向的位移信息。默认统一流程通过 Phonopy 种子位移及其位点对称性像获得满秩的信息；旧式笛卡尔流程则显式生成 `x`、`y`、`z` 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。

完整二维响应计算使用规范 BEC 生命周期：

```
zstar bec pre --stru STRU --dim 2
zstar bec run
zstar bec post
```

后处理会组合面内 Berry 相位响应与面外 cube 积分偶极。底层 `zstar polar2d` 仅保留用于审计已有参考/位移 cube 文件对，不作为新工作流入口。

安装

ZStar 要求 Python 3.9 或更高版本。

仓库中的 `examples/` 目录提供可复现输入和保留结果。PyPI 安装包不包含案例目录。参见[可复现基准](#)及[本轮验证记录](#)。

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。

核心安装使用 `spglib` 完成周期对称性处理，不再强制依赖 `pymatgen`。如果使用 `vasprun.xml`、`CHGCAR/POTCAR` 转换，或旧版 smodes/Wyckoff 适配器，请安装可选的 VASP 扩展：

```
pip install -U "zstar[vasp]"
```

POSCAR/CONTCAR、ABACUS `STRU`、MD 结构帧读取以及核心对称性约化均由 ZStar 自带的轻量读取器完成。

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 --stru STRU
```

`bec pre` 默认使用 ABACUS + PYATB 与 Unified 对称性适配位移，自动选择正负位移，因此不必重复写这些参数。只有切换到其他后端时，才使用 `--calculator cp2k`、`--calculator vasp` 或 `--calculator qe`。

二维薄膜：

```
zstar bec pre --stru STRU --dim 2
```

沿 `z` 周期的一维纳米线：

```
zstar bec pre --stru STRU --dim 1 --method central
```

默认 ABACUS + PYATB 目录从 `0.no-move` 开始，后面是 `disp-001`、`disp-002` 等 Phonopy 位移目录，自动打开 `cal_force 1`，同一批 SCF 同时提供 BEC 和 Gamma 声子响应。`--ensemble cartesian` 保留 `1.Ti/x+` 等旧布局。无需向每个位移目录单独复制任务脚本。

常用选项：

选项	含义
<code>--method auto forward central</code>	自动选择正负位移（Unified 默认）、单边或显式中心差分。
<code>--ensemble phonopy cartesian</code>	默认共用 BEC/Gamma 位移，或采用旧笛卡尔布局。
<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>	显式指定方向，使用旧笛卡尔流程。
<code>--displacement 0.01</code>	指定位移长度，单位 Å；共享默认 0.02 bohr，重建使用实际结构差分向量。
<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。
<code>--pp DIR</code>	ABACUS 赝势（ <code>.upf</code> ）目录。
<code>--orb DIR</code>	ABACUS 数值轨道（ <code>.orb</code> ）目录。

```
zstar bec pre --stru STRU \  
  --pp /path/to/PSEUDO \  
  --orb /path/to/ORBITAL
```

如果赝势和数值轨道不与案例放在一起，可以在生成任务前指定资源目录。ZStar 会先按照 `STRU` 中的精确文件名查找；如果找不到，只有在元素前缀匹配结果唯一时才会自动选取文件。多个候选文件会使命令停止，并列出候选项以及如何填写精确 文件名或指定更窄的目录。ZStar 不会修改原始 `STRU`，解析后的副本写入 `.zstar/STRU.resolved`，资源来源和 SHA256 校验值写入 `.zstar/assets.json`。

常用目录可以配置为全局默认值：

```
zstar config init --user  
zstar config set abacus.pseudo_dir /opt/abacus/PSEUDO --user  
zstar config set abacus.orbital_dir /opt/abacus/ORBITAL --user  
zstar config check
```

单次命令中的 `--pp` 和 `--orb` 优先于全局配置。原始 `STRU` 中的相对路径 始终相对于 `STRU` 所在目录解析，而不是相对于偶然的 shell 当前目录。

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。

默认沿常规高对称能带路径检查 band gap。也可显式选择更密的 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 --system slurm
```

Torque/PBS：

```
zstar bec job --system torque
```

队列、资源、时限、账号和 `module` /环境命令放在一个 header 中，依次选择： **Specified** `--header FILE` > **Current** 工作流根目录的 `header.sh` > **Global** `~/.zstar/header.sh`。不合并；都没有时生成带简短指引的默认模板。软件路径和 MPI/OMP 仍放在 `zstar config`：

```
zstar config set execution.mpi 1
zstar config set execution.omp 40
zstar bec job --system slurm --header /path/to/header.sh
```

header 申请的资源须与 MPI/OMP 匹配；选中的内容会嵌入生成脚本并记录哈希。 `zstar phonon job` 和 `zstar spectra job` 使用相同规则。Slurm、Torque、本地运行的完整例子见 [header 教程](#)。旧资源参数及 `--env-script` 继续兼容。

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

Unified 收集器同时重构分子 APT 与力常数，将原始及投影后张量保存在 `response_fit.json`，并写出统一格式的 `response.json`。PYATB 输出适配器保留完整精度的极化数值，不修改已安装的 PYATB 内核。旧式分子收集流程（`--ensemble cartesian`）仍写出 `apt.json`；对于旧的舍入输出，它也可以从分别打印的离子相位与电子相位中恢复微小的极化信号。

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 .
```

workflow 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>BEC.rep.raw.dat</code>	显式计算的对称性代表原子的原始张量。
<code>BEC.raw.dat</code>	电中性投影前的全原子原始张量。
<code>BEC.dat</code>	经对称性展开并满足声学求和规则的全原子张量。
<code>BEC.rep.dat</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>force_fit.json</code>	力响应拟合诊断，与统一响应交换记录分开保存。
<code>response_fit.json</code>	Unified 原始及投影后的 BEC/APT、力常数、单位与诊断。
<code>response.json</code>	统一响应记录，包括维度和数据来源。
<code>BEC_symmetry.json</code>	旧式笛卡尔位移结果的对称重构与残差报告。
<code>zstar_2d_bec.json</code>	旧式笛卡尔位移的二维混合 BEC 诊断。
<code>zstar_1d_bec.json</code>	旧式笛卡尔位移的一维混合 BEC 诊断。
<code>apt.json</code>	旧式笛卡尔位移/cube 分子 APT 及平移求和诊断。

新计算使用上述短文件名。历史档案保留 `Z-BORN-symm.out`、`zstar_response.json`、`molecular_apt.json` 等原名和原始哈希。读取时，仅当指定的标准文件不存在，才回退到对应旧名；已存在的明确路径优先。更名不改变张量方向或单位。`BORN` 只输出一份，不再重复生成 `BORN-for-phonopy.out`。

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.smp \
  --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

共享 BEC 流程的 `zstar bec post` 已同时写出 Gamma 力常数、`qpoints.yaml`、`irreps.yaml` 和 `BORN`，可直接继续 `zstar phonon irrep` 与 `zstar dielectric static`，无需重复生成 Gamma 力计算。下面的独立声子目录用于超胞声子或旧档案；有限波矢超胞计算不能与共享 Gamma 目录混用。

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" --symprec 1e-3
zstar phonon run --root .
```

随后按照选定运行环境完成全部 `disp-*` 目录中的力计算。`zstar phonon pre` 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/BEC.dat .
```

静态介电响应:

```
zstar dielectric static --qpoints qpoints.yaml --born BEC.dat \
--dielectric BORN --dim 3
```

频率相关介电响应:

```
zstar dielectric freq --qpoints qpoints.yaml --born BEC.dat \
--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 BEC.dat \
--dielectric BORN --dim 2
```

`--thickness` `ANGSTROM` 输出厚度归一化的源电场响应, 不能直接称为面外本征 介电常数。明确输入为相容且包含屏蔽的宏观超胞响应时, 可加 `--slab-boundary macroscopic`, 采用面内直接、面外逆响应转换; 该选项不会为 PYATB 增加局域场修正。电场约定及分子/1D/2D/bulk Raman 单位详见 [响应定义与单位](#)。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 --kind ir
zstar spectra post
```

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 --stru STRU --kind raman \  
  --modes "4-12" --amplitude 0.02
```

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

2. 串行计算、收集并绘谱

```
zstar spectra run --omp-threads 28  
zstar spectra stat  
zstar spectra post
```

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。

已有模式位移树可用 `zstar spectra stat --root raman` 检查，并用 `zstar spectra post --root raman` 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 --stru STRU --dim 0 \  
  --acoustic-cutoff 100 --amplitude 0.02
```

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  
zstar spectra post
```

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 $d\alpha/dQ = V/(4\pi) * d(\epsilon_{\text{r}})/dQ$ 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 `angstrom * sqrt(amu)`。

已有分子位移结果仍通过同一套规范生命周期检查和重新后处理：

```
zstar spectra stat --root raman
zstar spectra post --root raman
```

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。SiC/HfO2 的 ABACUS-VASP 全流程数值与核时对照见 [后端基准](#)。

分子 APT 案例还包含紧凑的 HSE 参考记录：

[examples/0D_Molecules/{H2O,CH4}/results/hse_apt_summary.json](#)。完整求解器 临时目录和 cube 文件 有意不纳入仓库；JSON 保留泛函、收敛阈值、位移、张量约定 和对称性修正后的结果，足以追溯该基准。两套 HSE 案例均采用 ABACUS 电荷密度 cube 积分，不经过 PYATB。

代表性 BEC 与 APT 结果

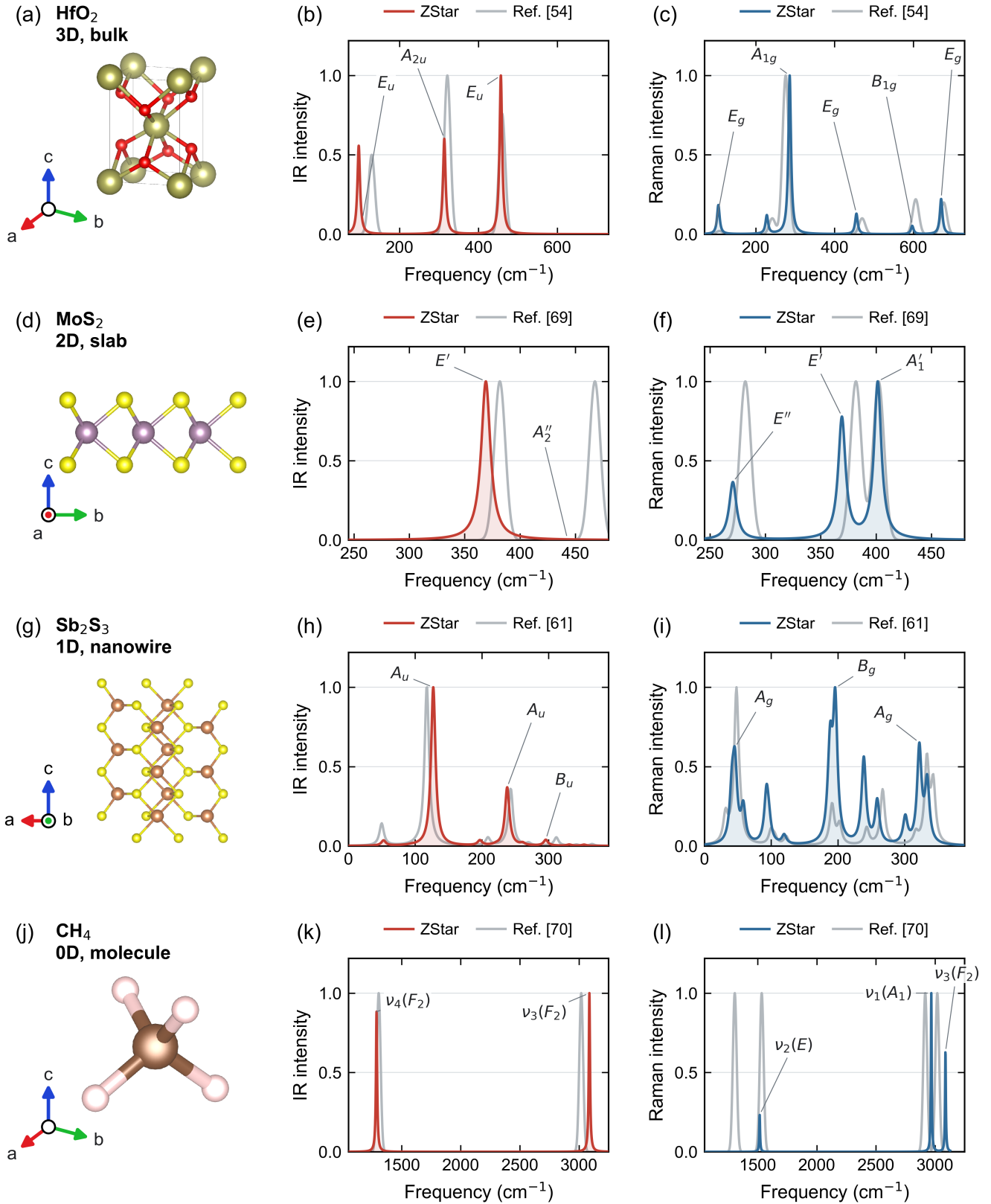
案例库保留了下列代表值对应的完整张量、原始响应记录和计算设置：

维度	体系	方法	代表性结果
3D	立方 BaTiO3	ABACUS + PYATB, PBEsol	$Z^*(\text{Ti}) = 7.440 \text{ e}$; $Z^*(\text{Ba}) = 2.734 \text{ e}$
3D	四方 HfO2	ABACUS + PYATB, PBEsol	$Z^*(\text{Hf},xx) = 5.394 \text{ e}$; $Z^*(\text{Hf},zz) = 4.828 \text{ e}$
2D	单层 hBN	ABACUS + PYATB, PBE	$Z^*(\text{B},\text{parallel}) = 2.702 \text{ e}$; $Z^*(\text{B},z) = 0.343 \text{ e}$
2D	alpha-In2Se3	ABACUS + PYATB, PBE	$Z^*(\text{In}(2),\text{parallel}) = 4.016 \text{ e}$; $Z^*(\text{In}(2),zz) = 0.278 \text{ e}$
1D	BN(9,0)	ABACUS + PYATB, PBE	$(Z_{rr},Z_{tt},Z_{zz})_B = (0.397,1.256,2.745) \text{ e}$
0D	H2O	ABACUS + PYATB, PBE	$q_{\text{GAPT}}(O) = -0.481 \text{ e}$; $q_{\text{GAPT}}(H) = +0.240 \text{ e}$
0D	CH4	ABACUS + PYATB, PBE	$q_{\text{GAPT}}(C) = -0.0208 \text{ e}$; $q_{\text{GAPT}}(H) = +0.0052 \text{ e}$

周期体系行列出 BEC 的代表分量。分子行列出原子极化张量的旋转不变量 $q_{\text{GAPT}} = \text{Tr}(A)/3$ ，不应将其解释为周期晶体 BEC。

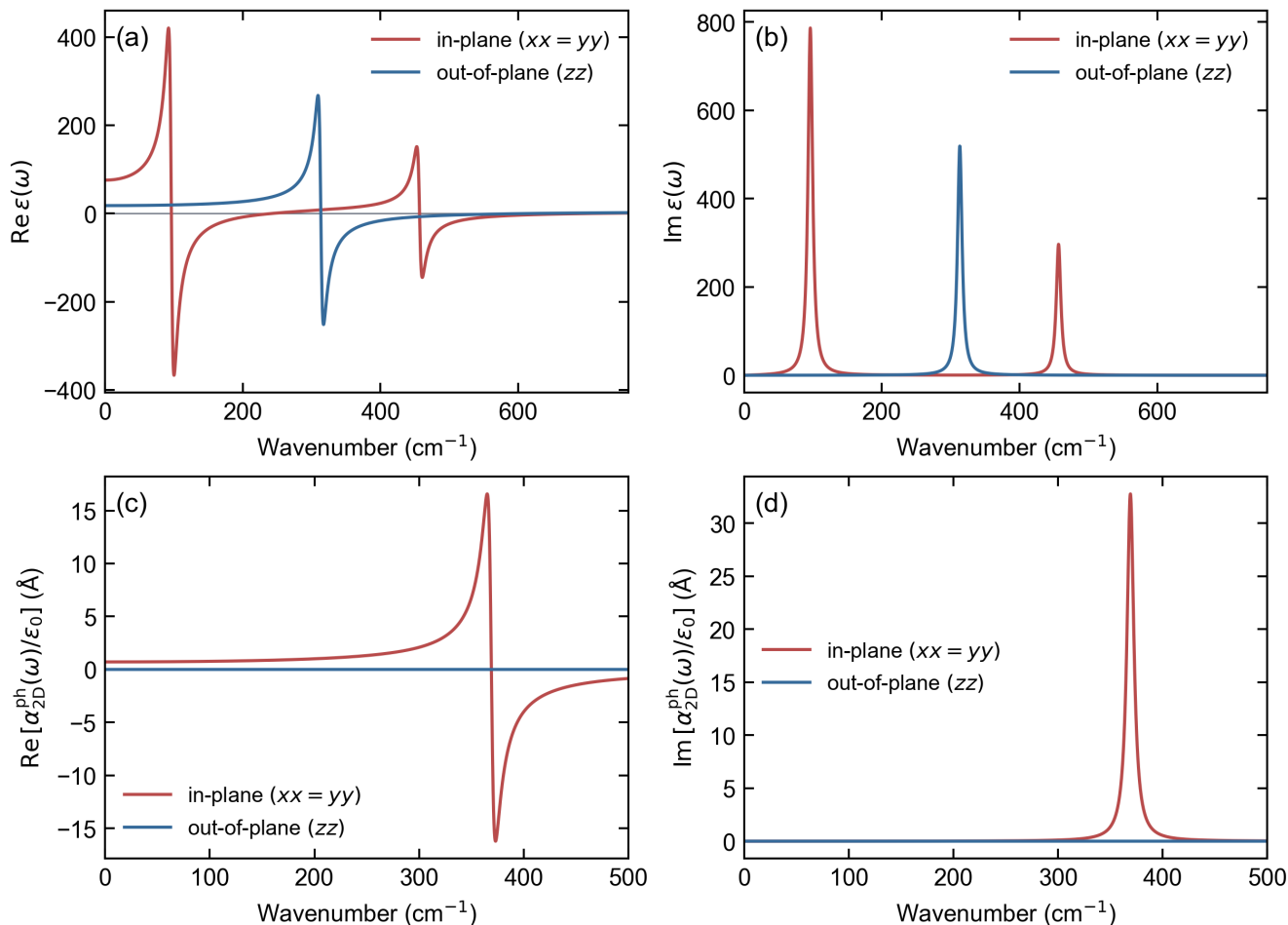
代表性验证图

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](#)。



四行对比图按论文顺序展示四方 HfO₂ (3D, bulk)、单层 MoS₂ (2D, slab)、Sb₂S₃ (1D, nanowire) 和 CH₄ (0D, 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。



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

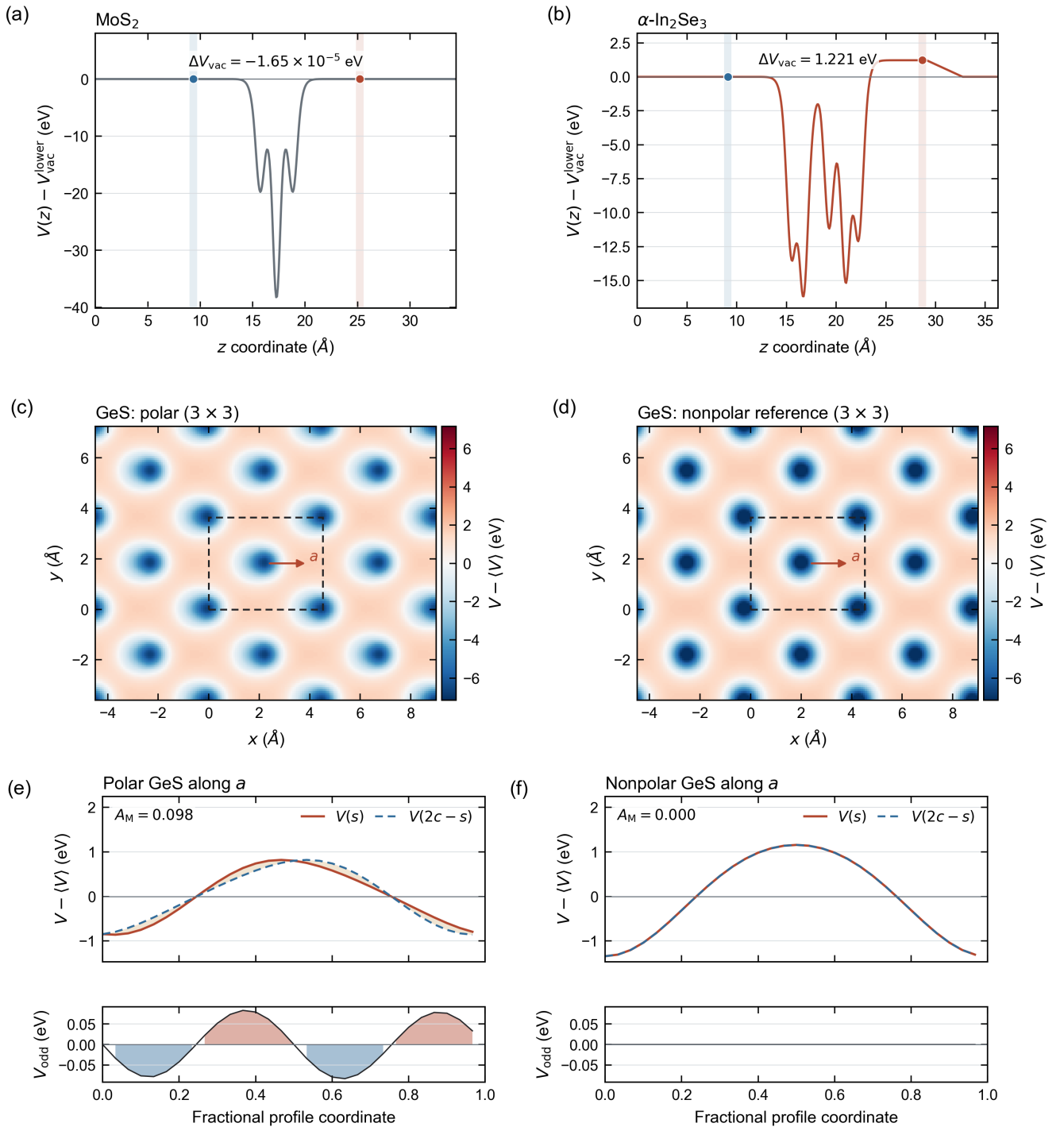
`zstar pot` 可分析 ABACUS 的 `ElecStaticPot.cube`：

```

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/job/run/stat/post</code>	极化、APT/BEC、 BORN 、续算状态和任务脚本。
<code>zstar phonon pre/job/run/stat/post/irrep</code>	位移、串行力计算、力常数、频率和不可约表示。
<code>zstar spectra pre/job/run/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>	配置计算软件路径、运行时默认值和 ABACUS 全局资源目录。
<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 db/qnep</code>	管理可追溯 BEC/High-K 数据库或导出 qNEP 数据。
<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/` 保存可直接运行的精简案例输入、参考结果和后端示例；大型 求解器 scratch 输出仍保留在仓库之外，不提交到 GitHub。
- `dist/` 与 `build/` 是本地构建产物，不提交。
- 调度脚本由 `zstar bec job`、`zstar phonon job` 和 `zstar spectra job` 自动生成；集群资源和环境命令通过 Specified、Current、Global header 设置。
- 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.

持续构建与发布

每次推送到 `main` 以及每个面向 `main` 的 pull request, GitHub Actions 都会自动构建 wheel 和源码包, 并将其保存为 workflow artifact。推送类似 `v0.2.1` 的版本标签时, 还会创建 GitHub Release 并附加构建文件。PyPI 发布仍然保持为 单独、明确执行的发布步骤。