

# 第二届 WannierTools 和 TopMat 研讨会

## 会议须知

### 会议时间、地点

会议时间：2025 年 6 月 6 日-11 日

会议地点：江苏溧阳长三角物理研究中心湖光厅（酒店步行 200 米）

住宿酒店：溧阳开元名都酒店（江苏省常州溧阳市昆仑街道永平大道 628 号）

### 报到须知

- 1、报到时间：6 月 6 日（10:00-21:00）
- 2、参会时务必佩戴好“参会证”，6 日会场门口设有大会签到背板签名、留影（09:40-10:00）请于会议开始前 10 分钟进入；
- 3、用餐时间：  
早餐（酒店的自助餐厅）  
午餐 12:00-13:30；  
晚餐 18:00-19:30；（早餐凭房卡用餐、中餐晚餐凭餐券用餐）
- 4、退房时间：退房请于 14:00 前办理相关手续。

### 注意事项

- 1、请您按日程安排准时参加各项活动，保管好随身会议学习材料和贵重物品；
- 2、会议中请将您的手机调为静音或振动状态，会程中如您有任何问题请联系会务组。

### 会务联系

中国科学院物理研究所：齐建为 13601064835

中国科学院物理研究所：何 露 17383977369

中国科学院物理研究所：吴泉生 13810166568

中国科学院物理研究所：王志俊 18618270960

**主办单位：**中国科学院物理研究所

中国科学院凝聚态物质科学数据中心

**承办单位：**江苏溧阳长三角物理研究中心

# 会议日程

会议地点：（中国·溧阳·长三角物理研究中心湖滨会议中心）

会议时间：2025.6.7-6.11

|                      |         |                          |
|----------------------|---------|--------------------------|
| 2025 年 6 月 6 日    报到 |         |                          |
| 2025 年 6 月 7 日    上午 |         |                          |
| 主持人                  | 吴泉生     |                          |
| 8:30-8:40            | 翁红明     | 开幕式                      |
| 8:40-9:40            | 万贤纲     | 对称性在磁性和拓扑物理中的应用          |
| 9:40-10:10           | 中间休息+合影 |                          |
| 10:10-10:40          | 袁声军     | 基于波函数含时演化的大尺度第一性原理计算方法   |
| 10:40-11:10          | 徐刚      | 拓扑超导计算设计                 |
| 11:10-12:00          | 翁红明     | 数据驱动的材料设计和科研数据管理系统       |
| 12:00-14:00          | 午餐      |                          |
| 2025 年 6 月 7 日    下午 |         |                          |
| 主持人                  | 吴泉生     |                          |
| 14:00-15:00          | 王志俊     | 拓扑材料的能带理论和 TopMat 介绍     |
| 15:00-16:00          | 王志俊     | 空间群表示理论（磁群、自旋群）及相关程序介绍   |
| 16:00-16:20          | 中间休息    |                          |
| 16:20-17:30          | 张锐涵     | 电子/声子不可约表示计算 IRVSP/IR2PH |
|                      | 盛昊昊     | 阻塞拓扑电子/声子体系计算            |
|                      |         | 磁性拓扑指标计算 TopMat   （上机训练） |
| 18:00                | 晚餐      |                          |

|                    |           |                                                                                                                                                                                         |
|--------------------|-----------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 2025 年 6 月 8 日  上午 |           |                                                                                                                                                                                         |
| 主持人                | 王志俊       |                                                                                                                                                                                         |
| 9:00-9:30          | 何力新       | 第一性原理紧束缚模型软件 pyatb 介绍                                                                                                                                                                   |
| 9:30-10:00         | 向红军       | 电子结构预测通用大模型                                                                                                                                                                             |
| 10:00-10:20        | 中间休息      |                                                                                                                                                                                         |
| 10:20-11:00        | 吴泉生       | Wannier 函数介绍+上机训练                                                                                                                                                                       |
| 11:00-12:00        | 王禹志       | 自动化构造 Wannier 函数介绍+上机训练                                                                                                                                                                 |
| 12:00-14:00        | 午餐        |                                                                                                                                                                                         |
| 2025 年 6 月 8 日  下午 |           |                                                                                                                                                                                         |
| 主持人                | 王志俊       |                                                                                                                                                                                         |
| 14:00-15:00        | 吴泉生       | 拓扑能带理论和 WannierTools 介绍                                                                                                                                                                 |
| 15:00-15:50        | 张衍<br>沈远忱 | WannierTools 基础训练：Haldane、BHZ 等模型介绍和上机练习                                                                                                                                                |
| 15:50-16:10        | 中间休息      |                                                                                                                                                                                         |
| 16:10-17:50        | 吴泉生<br>张衍 | 使用 WannierTools 表征材料能带拓扑：拓扑绝缘体(1T'-MoS <sub>2</sub> 和 Bi <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> )、Weyl semimetal (model 和 TaAs)（包括 Wilson loop、Berry curvature、Chirality、FindNodes 和表面态计算等）（上机练习） |
| 18:00              | 晚餐        |                                                                                                                                                                                         |

|                    |            |                                                                                                                   |
|--------------------|------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 2025 年 6 月 9 日  上午 |            |                                                                                                                   |
| 主持人                | 王志俊        |                                                                                                                   |
| 9:00-9:30          | 王彦超        | 基于数据驱动的晶体结构预测方法及应用                                                                                                |
| 9:30-10:00         | 吴泉生        | 能带拓扑与反常输运性质                                                                                                       |
| 10:00-10:10        | 中间休息       |                                                                                                                   |
| 10:10-12:00        | 尹博         | 使用 WannierTools 计算由能带拓扑导致的物理性质，包括表面态，自旋霍尔效应，反常霍尔效应，反常能斯特系数、轨道霍尔效应等 （上机练习）<br><br>WannierTools 练习：Band unfolding 等 |
| 12:00-14:00        | 午餐         |                                                                                                                   |
| 2025 年 6 月 9 日  下午 |            |                                                                                                                   |
| 主持人                | 吴泉生        |                                                                                                                   |
| 14:00-16:10        | 王志俊<br>章盛  | 基于 DFT 计算的 KP 模型介绍<br><br>和 VASP2KP 实例训练                                                                          |
| 16:10-16:30        | 中间休息       |                                                                                                                   |
| 16:30-17:40        | 盛昊昊<br>梁晨昊 | 基于 DFT 的 Wilson loop 和 (spin) Berry Curvature 计算实例训练                                                              |
| 18:00              | 晚餐         |                                                                                                                   |

|                    |      |                                                                                                      |
|--------------------|------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 2025 年 6 月10 日 上午  |      |                                                                                                      |
| 主持人                | 王志俊  |                                                                                                      |
| 9:00-9:30          | 卢仲毅  | 交错磁性中的新奇物理性质研究                                                                                       |
| 9:30-10:00         | 余睿   | 电子线路中新奇物态设计                                                                                          |
| 10:00-10:10        | 中间休息 |                                                                                                      |
| 10:10-12:00        | 刘智豪  | 洛伦兹力导致的磁电输运效应（不饱和磁阻、各向异性磁阻、Hall 效应）<br><br>（WannierTools 上机练习）                                       |
|                    | 闫旭   |                                                                                                      |
|                    | 王禹志  |                                                                                                      |
| 12:00-14:00        | 午餐   |                                                                                                      |
| 2025 年 6 月 10 日 下午 |      |                                                                                                      |
| 14:00-14:30        | 刘家轩  | 构造 Moiré 体系的机器学习势：DPMoire 简介和上机练习                                                                    |
| 14:30-15:00        | 叶财渊  | 按属性逆向设计晶体结构：Con-CDVAE 和 PODGen 简介和上机练习                                                               |
| 15:00-16:20        | 刘智豪  | 磁性材料磁电输运计算培训（磁性 Weyl 半金属 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 、交错磁体 $\text{CrSb}$ ）（WannierTools 上机练习） |
|                    | 王禹志  |                                                                                                      |
|                    | 闫旭   |                                                                                                      |
| 16:20-16:30        | 中间休息 |                                                                                                      |
| 16:30-17:50        | 吴泉生  | Moiré 体系的电子结构和能带拓扑计算：能带结构，Wilson loop，Landau 能级等以及非正交基底实例（上机练习）                                      |
|                    | 王禹志  |                                                                                                      |
|                    | 张衍   |                                                                                                      |
| 18:00              | 晚餐   |                                                                                                      |

|                    |      |              |
|--------------------|------|--------------|
| 2025 年 6 月 11 日 上午 |      |              |
| 主持人                | 吴泉生  |              |
| 9:00-10:00         | 黄理   | 第一原理动力学平均场方法 |
| 10:00-10:10        | 中间休息 |              |
| 10:10-12:00        | 徐勇   | DeepH 用户培训   |
| 下午                 | 离会   |              |

# 参会路线

## 一、溧阳站—溧阳长三角物理研究中心



会议地址：江苏省溧阳市长三角物理研究中心昆仑街道中关村大道1号

出发点：溧阳站出站口

全程：约11公里

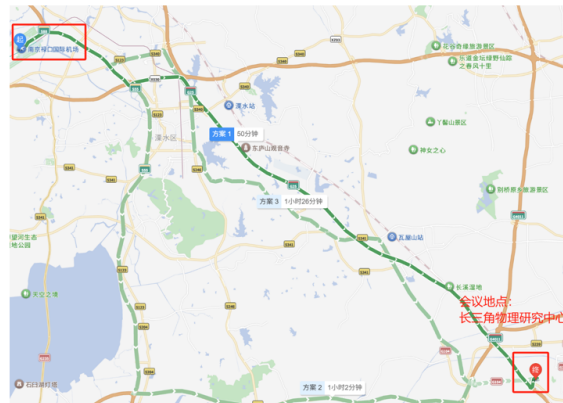
➢ 打车：途径游子吟大道->天目湖大道->永平大道->平陵西路

约20分钟 预估20元

➢ 公交：溧阳23路或溧阳2路（上车站：溧阳站；下车站：城西佳苑/义筑村）

约1小时 预估2元

## 二、南京禄口国际机场—溧阳长三角物理研究中心



会议地址：江苏省溧阳市长三角物理研究中心昆仑街道中关村大道1号

出发点：南京禄口国际机场

全程：约70公里

➢ 打车：途径S55宁宣高速->G4221沪武高速->G25长深高速->中关村大道

约1小时 预估150元

➢ 公交：机场巴士溧阳专线->溧阳66路/2路/65路等

约2小时 预估62元