

*推荐项目管理方式:

VASP Studio 和 Material Studio 共享同样的目录, 指定一个超算上的目录, 一一对应。

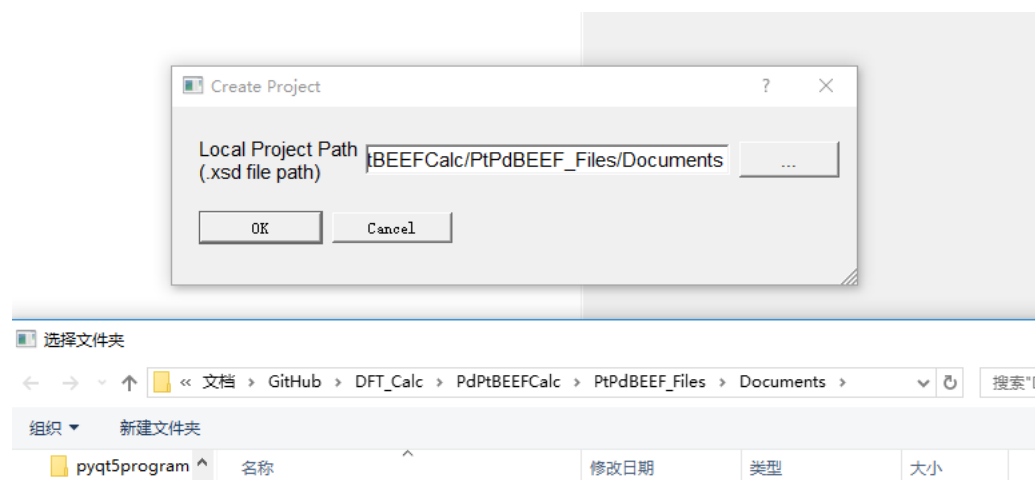
*注意事项:

随时按 Ctrl+S 保存!

如果不需要自动投 job, 只需要提取能量, 频率, RMS 和导出结构等功能, 可以跳过这一段, 直接到 VASP 任务管理流程

自动投 job 流程:

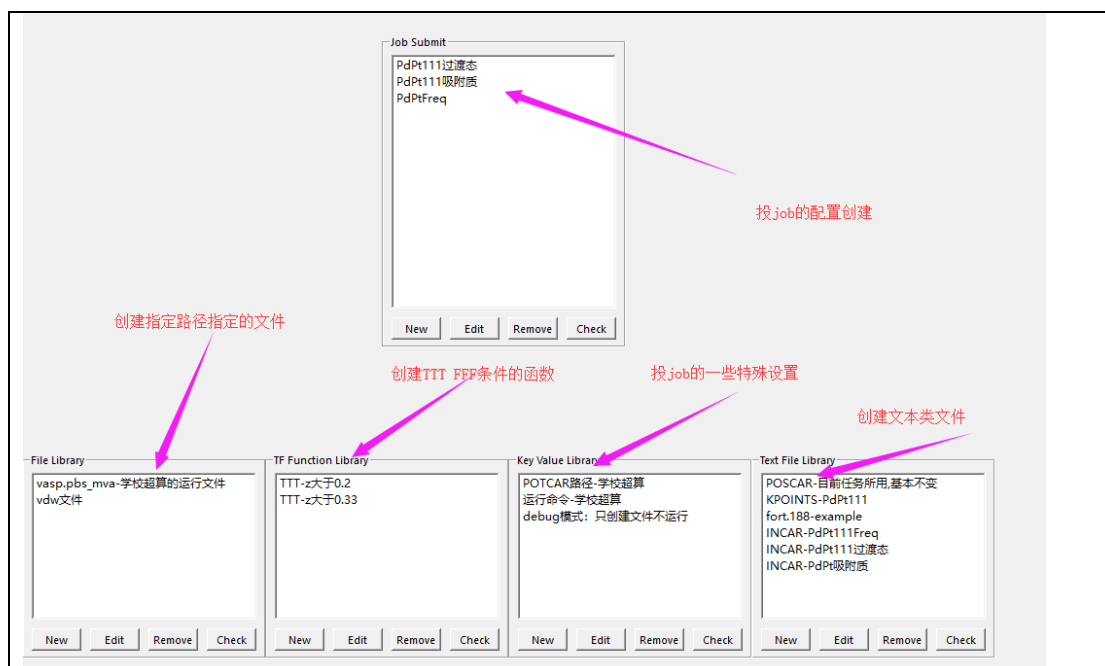
Project-NewProject, 选择一个 xsd 文件的嵌套目录, 推荐 Material Studio 项目的 Documents 目录



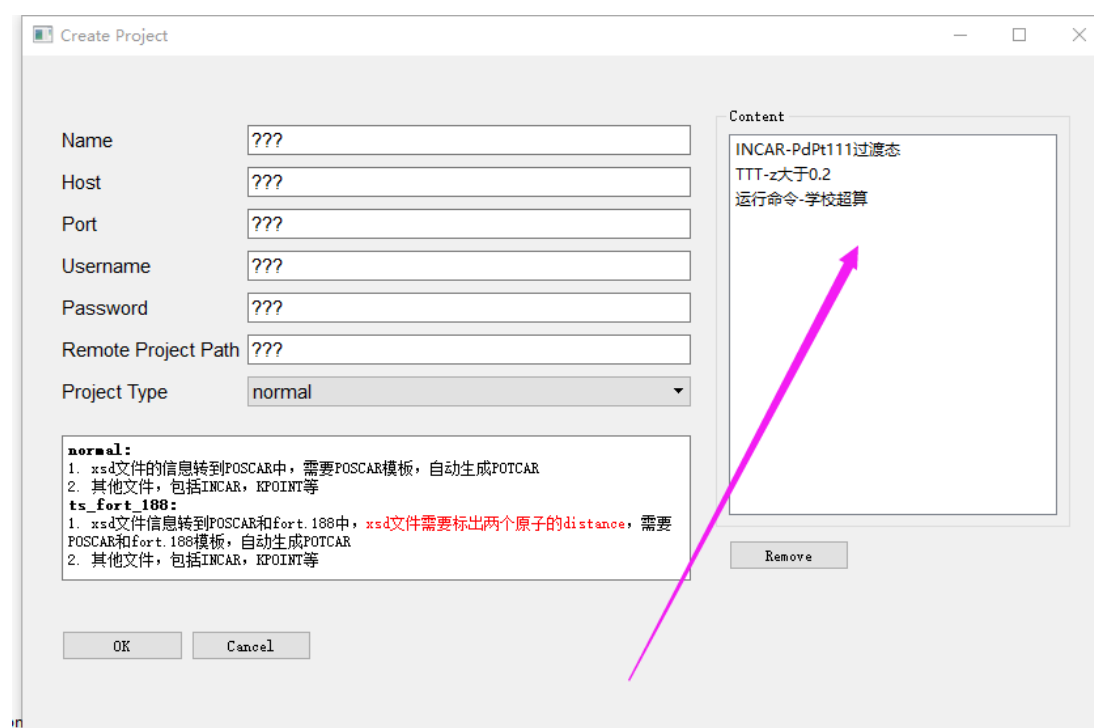
创建项目后会提示给出一个项目文件的存储路径, 之后要用这个打开项目

在 File Library 选项框中创建投 job 所用的文件库:

下面这个是创建完成的一个例子:



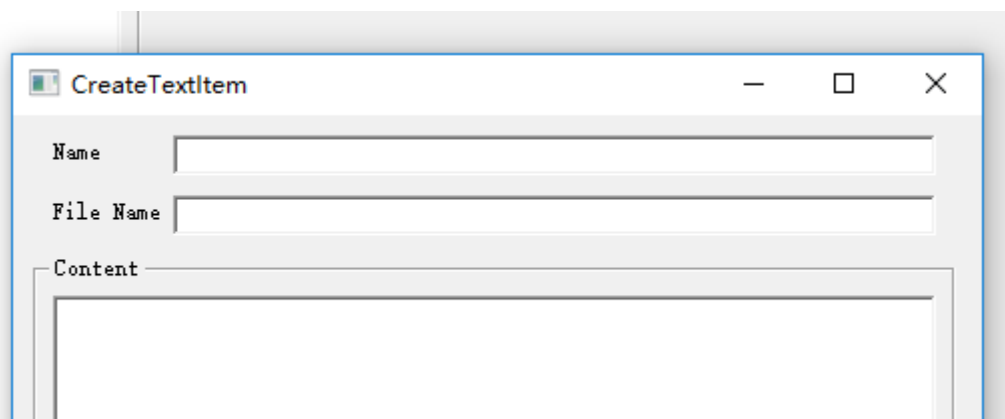
这些库文件可以看作是基础组件，可以任意创建，之后创建 Submit Job 配置文件时会像这样引用这些 Lib，通过拖动把 Lib 放到 content 中



根据任务不同，Job 配置文件中的 Content 不同

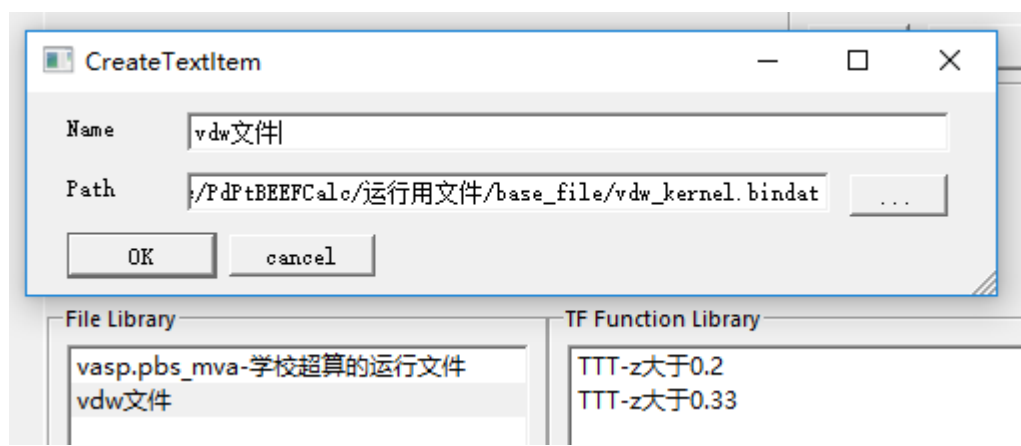
在创建之前的注意事项：

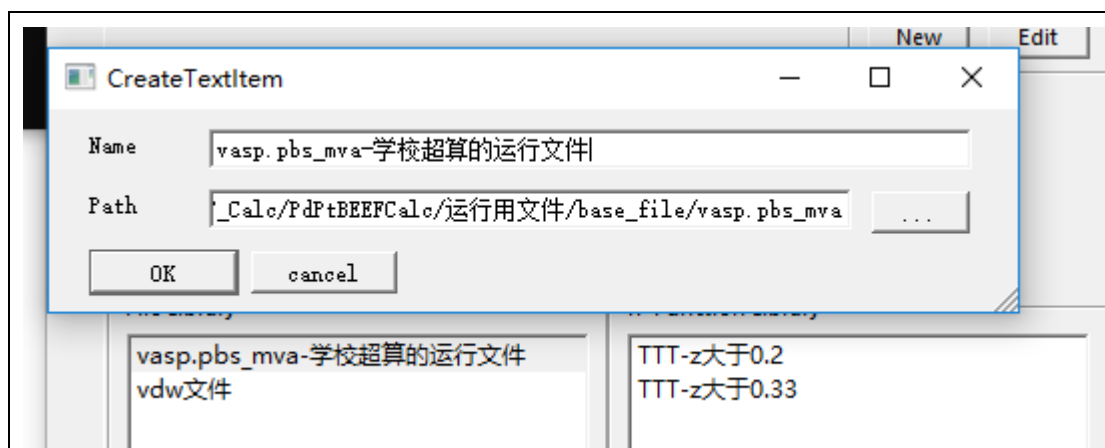
创建窗口一般是这样：



- 1.下面 4 个 lib 新建时，Name 需要是可以任意设置的，但是必须是**唯一的**（如果重复会有提示）
- 2.创建之后不建议修改 Name，其他项目（如上面的 File Name Content）可以随意修改

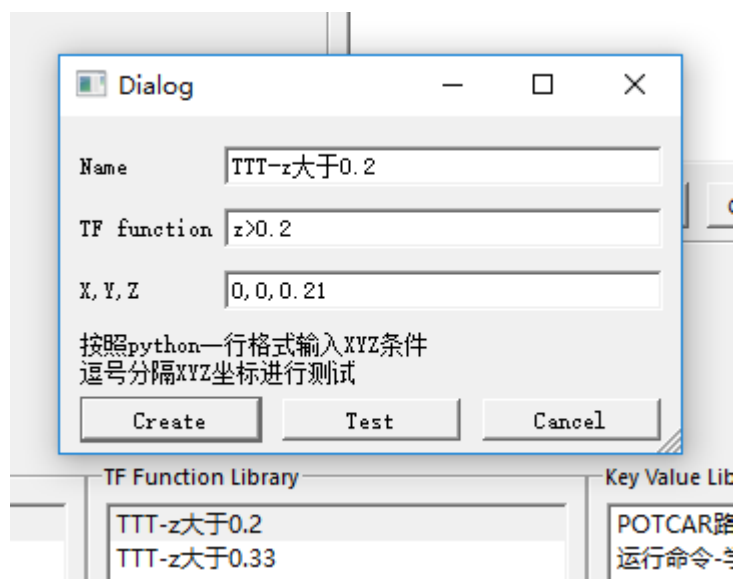
首先创建 File Library，**这里面的文件是直接复制到每个投job 的目录中**，主要是需要的特殊文件和投job 的脚本，比如：





注意 linux 下投 job 所用的 vasp.pbs_mva 和.sh 后缀的脚本只能是从 linux 上下载的文件，不能在 windows 中用记事本创建

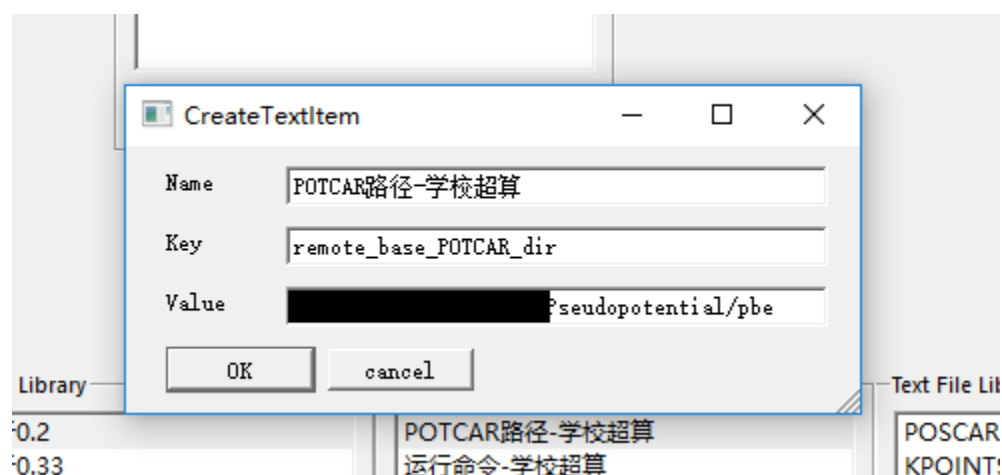
TF Tunction Library: 用于在 POSCAR 中判断 TTT 还是 FFF，比如：



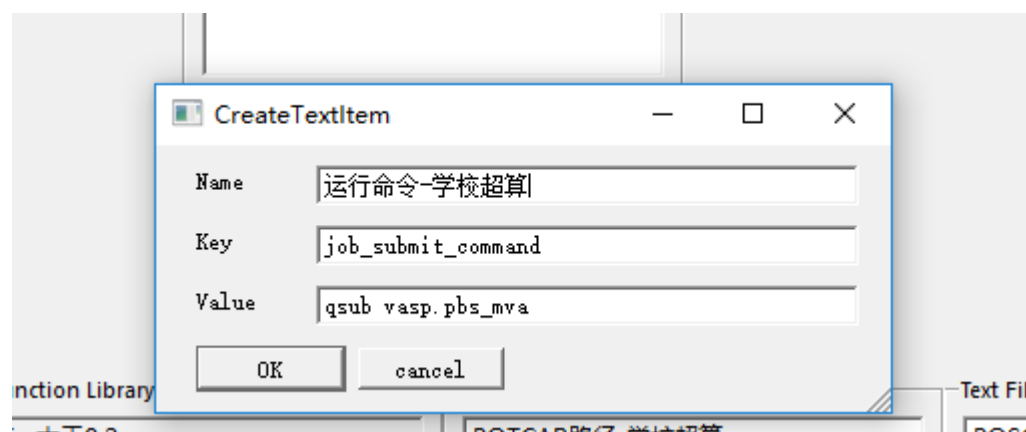
TF function 接受 x y z 三个变量，需要符合 python 语法，比如 $x > 0.5$ or $y < 0.1$ or $z > 2$ ，之后可以在 X,Y,Z 中输入坐标，用英文逗号分隔，按 Test 测试是 TTT 还是 FFF，测试好后点 Create 创建

Key Value Library，这里有两个**必须创建**的内容：

remote_base_POTCAR_dir



与



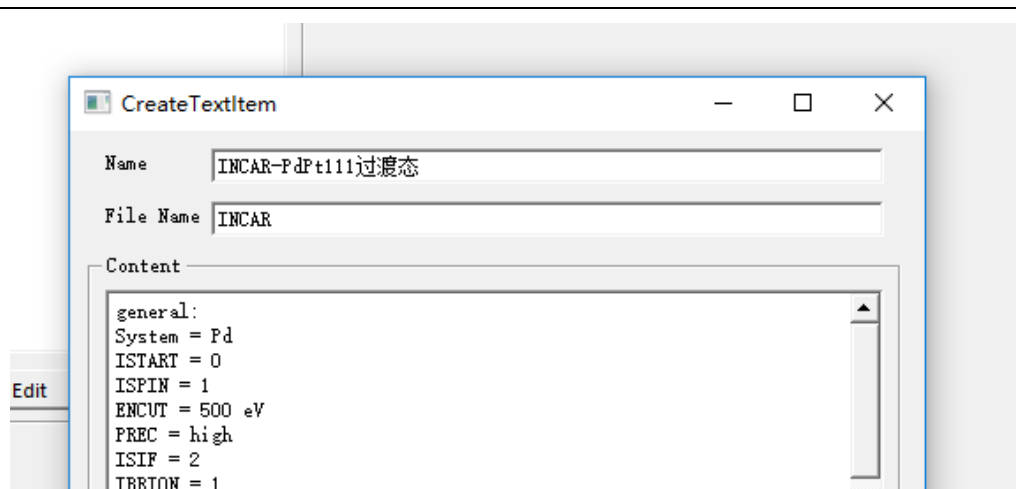
job_submit_command

这些根据投 job 所在的超算平台进行更改。

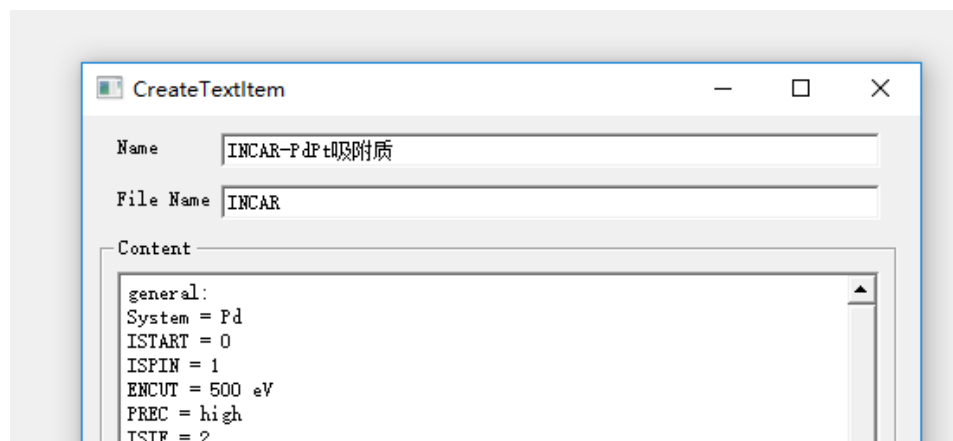
Text File Library:

这里面的创建的项目，在投job时会创建一个内容为 Content，名为 File Name 的文件放在 VASP 运行的文件夹中

创建 INCAR, KPOINTS 等内容, 需要注意 File Name 必须是 INCAR POSCAR KPOINTS 等等，如：

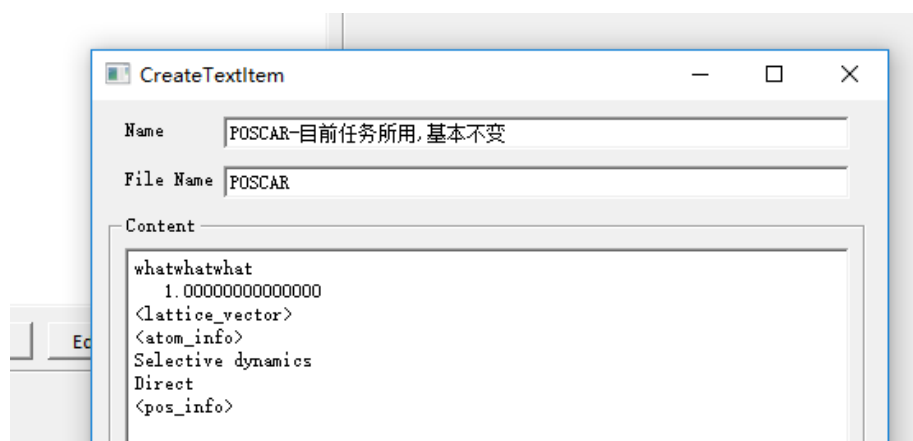


和



按照这个方法创建 INCAR 和 KPOINTS,

但是 POSCAR 和 fort.188 是固定内容:



whatwhatwhat

1.0000000000000000

<lattice_vector>

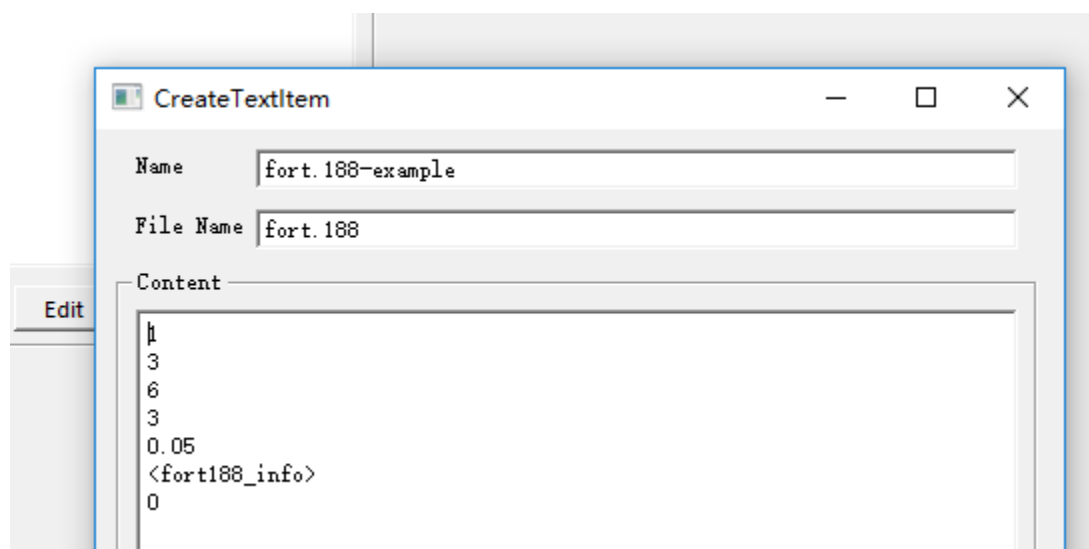
<atom_info>

Selective dynamics

Direct

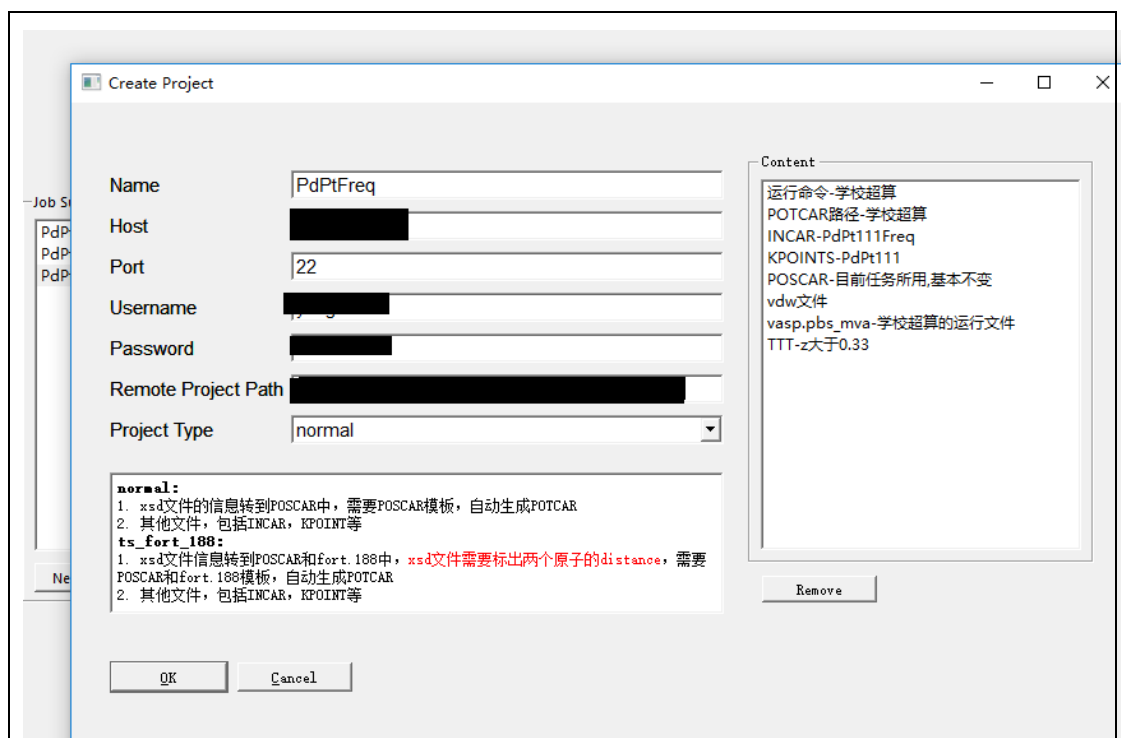
<pos_info>

fort.188 是使用特定方法计算过渡态的时候使用，其他方法找过渡态用不到



除了<...>占位符的内容和位置，其他可以根据需要随意改

创建完成上述内容后，开始创建投 job 的配置，比如：



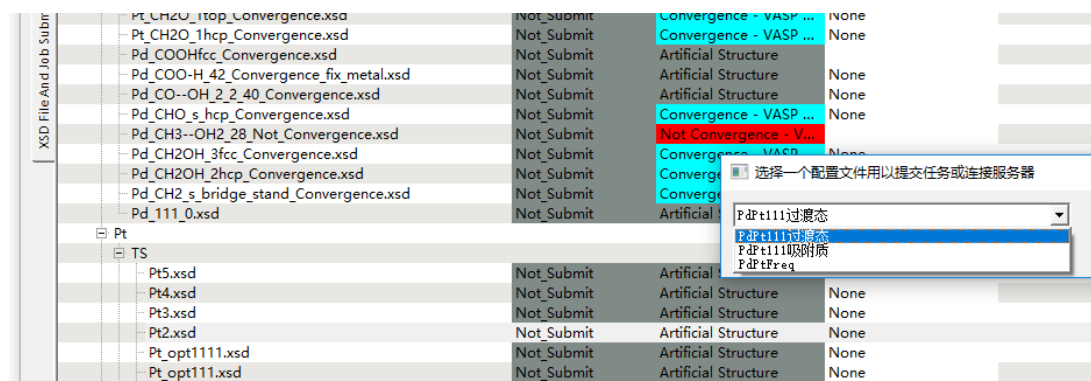
建议 remote project path 按照任务类型创建，比如

PdPt111/freq 或者 PdPt111/interm 或者 PdPt111/trans 等

过渡态需要在 Project Type 中更改，其他选 normal 即可，

Content 需要把底下 4 个 lib 的内容拖进去，所有需要的都要拖够，就像上面一样。

创建完成之后，转到第三个选项框，选中（可以使用 ctrl+A, shift 等）需要投的 job，右键选择 submit job，选择一个配置投 job



接着确认一下投的内容，弹出提示窗口点掉，等待投 job，如果成功

投 job, WorkNode 会显示所投 job 的节点

	149265.node1
0.04913	146618.node1
	146665.node1
0.04774	146505.node1
	146666.node1
0.04800	146506.node1

WorkNode 在右边, 要拖到左边来

Status	Type	Mark	Energy	Final RMS	Work Node	Job	Match	submit
Not_Submit	Not Convergence - VASP ...	None					None	None
Not_Submit	Convergence - VASP ...	None					None	local_va
Not_Submit	Convergence - VASP ...	None					None	energy
Not_Submit	Convergence - VASP ...	None					None	final_RA
Not_Submit	Convergence - VASP ...	None					None	type
Not_Submit	Convergence - VASP ...	None					None	Artificial
Not_Submit	Not Convergence - VASP ...	None					None	status
Not_Submit	Artificial Structure	None					None	Not_Sub
Not_Submit	Convergence - VASP ...	None					None	node1
Not_Submit	Convergence - VASP ...	None					None	note
xsd	Artificial Structure	None				PdPt111吸...	None	
Not_Submit	Artificial Structure	None					None	
Not_Submit	Artificial Structure	None				PdPt吸附质	None	
Not_Submit	Convergence - VASP ...	None					None	
d	Not_Submit	Not Convergence - VASP ...					None	
Not_Submit	Convergence - VASP ...	None					None	
Not_Submit	Convergence - VASP ...	None					None	
xsd	Not_Submit	Convergence - VASP ...					None	
Not_Submit	Artificial Structure	None					None	
Not_Submit	Artificial Structure	None					None	
Not_Submit	Artificial Structure	None					None	
Not_Submit	Artificial Structure	None					None	
Not_Submit	Artificial Structure	None					None	
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...	None			149265.node1	PdPtFreq	None	
Convergence	Artificial Structure	None	-108.2587...	0.04913	146618.node1	PdPt111过...	39/38	
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...	None			146665.node1	PdPtFreq	None	

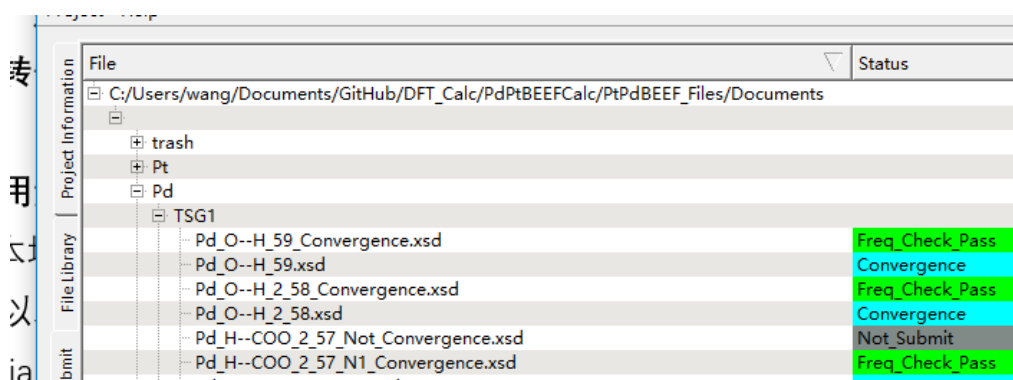
VASP 任务管理流程

首先从超算下载投的 VASP 文件夹, 注意要保持嵌套结构下载, 使用过之前自动投 job 的软件直接下载 remote project path 中的内容即可, 如果之前是手动投的, 需要改一下 path

比如现在 xsd 文件在<Material Studio 目录>/Pd111/trans/C-1.xsd 对应的 VASP 文件夹是 C1, 那么就把 VASP 文件夹下载下来, 放入一

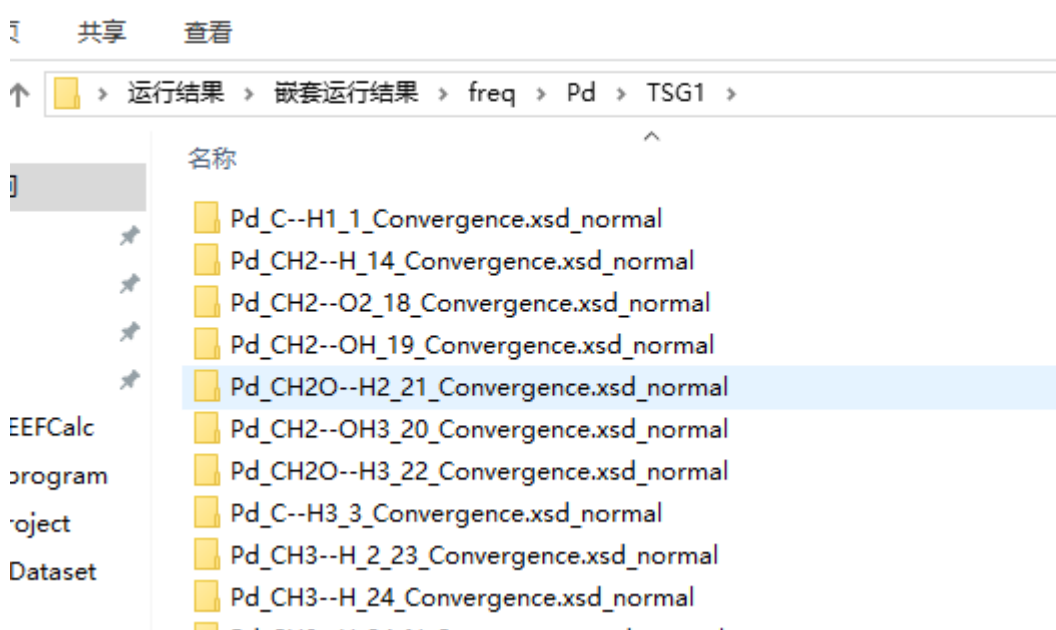
个文件夹中，里面创建 Pd111/trans/，然后把 C1 改名为 C-1 放进去。

比如我这里的 Material Studio 文件是：



实际上就是 Pd/TSG1/...

然后我下载到：



之后便可以创建 Link，将 xsd 文件和 VASP 项目文件夹 Link 起来，首先选中需要 Link 的 xsd 项目，右键点击 Local Link-By Path，**By Path** 的意思是指相对路径是完全一样的（VASP 文件夹.xsd 及其后面的内容可以忽略），比如需要 Link 一个 Documents/Pd/TSG1/C.xsd 的项目，然后 VASP 文件夹在

Freq/Pd/TSG1/C, 于是就可以选择 Freq 文件夹。

By Name 是指只要 xsd 文件名字和 VASP 文件夹名字一样就可以 Link, 但是如果重名就只会 Link 第一个, 所以不推荐, 除非文件名足够特殊, 比如

```
Pd_CHO_s_fcc.xsd
Pd_CH3OH_s_hcp_OHH_on_surface.xsd
Pd_CH3OH_s_hcp_HHH_on_surface.xsd
Pd_CH3OH_s_fcc_OHH_on_surface_Convergence.x
Pd_CH3OH_s_fcc_OHH_on_surface.xsd
Pd_CH3OH_s_fcc_OHH_on_surface.cif.xsd
Pd_CH3OH_s_fcc_OH_on_surface.xsd
Pd_CH3OH_s_fcc_HHH_on_surface.xsd
```

Link 完成之后, 文件的状态是:

```
Pd_CO--O_3_39_Convergence.xsd
Pd_CO--O_3_39.xsd
Pd_CO--O_3_39_1.xsd
```

freq_Check_Pass
Finished_And_Linked

并且可以在右边看到 Link 的文件夹

Match State	submit_job
40/40	None
None	local_vasp_dir
40/40	C:/Users/wang/Desktop/运行结果/PdPt/Trans/Pd_CO--
None	H_2_36.xsd
None	energy
42/42	-75.52907546
None	final_RMS
42/42	0.04776
None	status
41/41	Convergence
None	node1
None	None
41/41	RMS_array
41/41	[9.22577 3.402625 2.672418 1.506582 1.624839
None	1.538977 1.608241 1.60049 1.605023 1.48716 1.679707
40/40	1.605857 1.635767 1.543055 1.692345 1.606243
None	1.559212 1.577216 1.59837 1.864123 1.788493 1.72908
40/40	1.546752 1.577258 1.543795 1.595025 1.681746
40/40	1.691829 1.513386 1.677089 1.682785 1.71486
None	1.509171 1.638177 1.667782 1.578501 1.705071
39/39	1.71099 1.578838 1.596421 1.666546 1.726072
None	1.509589 1.628675 1.660586 1.835065 1.681786
None	1.768173 1.744815 1.704875 1.556155 1.687256
39/39	1.671395 1.72863 1.530025 1.715776 1.591006
None	1.480324 1.619744 1.60855 1.580527 1.57314 1.640447
39/39	1.560066 1.594244 1.637002 1.677088 1.7264 1.907673
None	1.694282 1.680459 1.576208 1.446227 1.533758
39/39	1.416869 1.418625 1.550014 1.569683 1.733522
39/39	
None	

如果 Link 过后修改了 Link 到的文件夹，那么需要重新 Link，除非不再使用提取能量等功能而只作为信息记录存储

Link 过后就可以右键选这些 Link 状态的项目，然后选 Information，Final Energy 是最终的能量

Final RMS 是最终的收敛的力

Frequency 是频率，如果投的 job 是算频率的话

提取这些过后，可以在右边看到：

Status	Type	Mark	Energy	Final RMS	Work Node	Job	Match State	submit job
Not Convergence	Artificial Structure		-86.08999420	0.06861	145821.no...	PdPt1111过...	None	local_vasp_dir
Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...		-82.58592483	0.33330	145997.no...	PdPt-过渡...	None	C:/Users/wang/Desktop/运行结果/嵌套运行结果/freq/
Convergence	Artificial Structure		-82.58592483	0.04504	149386.no...	PdPt1111过...	None	Pd/TS61/Pd_CO--H_37_Convergence.xsd_normal
Submitted	Artificial Structure	None			149386.no...	PdPt1111过...	None	energy
Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...		-82.59965946	0.04962	148667.no...	PdPtFreq	None	final_RMS
Convergence	Artificial Structure		-82.58985499	0.04851	146448.no...	PdPt1111过...	None	0.77103
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...			0.45701	146109.no...	PdPt-过渡...	None	status
Convergence	Artificial Structure		-80.85489653	0.04713			40/40	Freq_Check_Pass
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...	finished	-81.14862388	1.09703	145072.no...	PdPt-过渡...	None	node1
Convergence	Artificial Structure	finished	-81.15597522	0.04699			40/40	note
Convergence	Artificial Structure	finished	-81.15524724	0.04958			40/40	type
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...		-76.60075747	0.04300	146354.no...	PdPtFreq	None	Convergence - VASP Opted Structure
Finished And Linked	Artificial Structure		-75.94733304	0.08930	145819.no...	PdPt1111过...	39/39	real_freq
Not Convergence	Artificial Structure		-74.35035682	0.28258	144749.no...	PdPt-过渡...	None	[1476.865107, 1306.577287, 568.212648, 409.89273,
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...		-74.35172410	0.04854			39/39	393.312004, 365.736723, 216.97061, 146.733729]
Convergence	Artificial Structure			0.77103	146111.no...	PdPt-过渡...	None	virtual_freq
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...		-75.49047157	0.04697			39/39	[1551.357911]
Convergence	Artificial Structure		-72.66342647	0.17393			39/39	mark_text
Not Submit	Not Convergence - V...		-75.52907546	0.04776			39/39	RMS_array
Convergence	Artificial Structure		-75.58690600	0.67845	145071.no...	PdPt-过渡...	None	[0.038787 0.00193 0.103932 0.112041 0.138002
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...		-75.59179115	0.03771	149364.no...	PdPt1111过...	None	0.151623 0.120179 0.208952 0.20195 0.298163
Convergence	Artificial Structure		-69.68312823	0.04286	146447.no...	PdPt1111过...	38/38	0.275192 0.733117 0.621748 0.087669 0.092929
Submitted	Artificial Structure	None			146708.no...	PdPtFreq	None	0.138605 0.137692 0.656905 0.771025]
Convergence	Artificial Structure							
Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...							

Final RMS 会让设置一个收敛阈值，一般是 0.05，收敛和不收敛的状态如下：

Convergence	Artificial Structure
Not Convergence	Artificial Structure

不管收没收敛，此时都可以右键 Structure-Export Final Structure 导出最终结构，然后左下角刷新一下，会检测到新导出的文件

Not Convergence	Artificial Structure	完成
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...	AAA
Convergence	Artificial Structure	AAA
Convergence	Artificial Structure	AAA
Not Submit	Not Convergence - V...	AAA
Not Convergence	Artificial Structure	AAA

此时新导出的文件是具有 Type 的（Type 的检测是根据文件后缀来的），用于区分是导出的还是原来手摆的结构，此时需要检查 Match

State

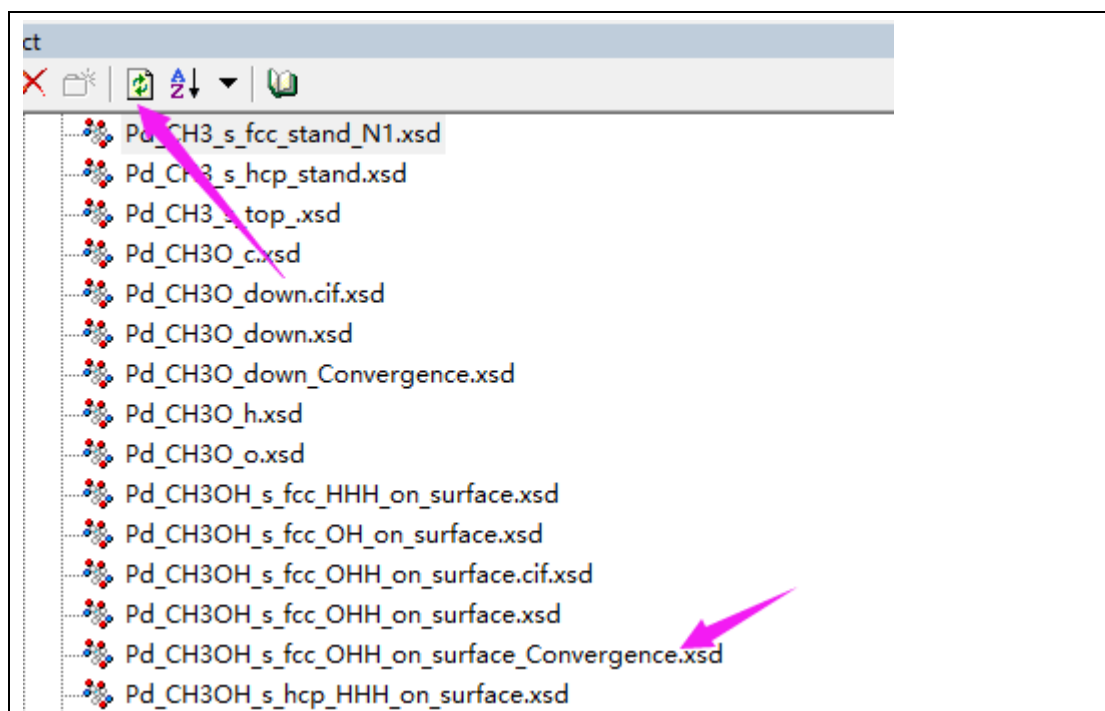
rk Node	Job	Match State
950.no...	PdPtFreq	None
		43/42
		None
		None
375.no...	PdPtFreq	None
374.no...	PdPt111吸...	None
373.no...	PdPt111吸...	None
		42/41
		42/41
		42/41
		42/41
		None
		None
377.no...	PdPt111吸...	None
		41/40

Match State 需要大于 1，才算作导出的

结构是合理的，导出结构不合理的情况少见，但存在：

↓... 36/40
↓... 38/38
↓... 38/38
↓... 38/38

导出之后可以立即在 Material Studio 中刷新，然后导出的结构可以查看，无论是否收敛。



导出的结构之后可以：

- 1.收敛的结构可以直接继续投 job，比如过渡态收敛之后直接投频率
- 2.没有收敛的结构可以在没收敛的基础上重新摆，但注意需要改名，改名后刷新可以得到新项目来投 job，注意需要将 Convergence 或者 Not Convergence 后缀改掉。

导出的结构继续投 job：

Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...	Non
Submitted	Convergence - VASP ...	
Not_Submit	Not Convergence - V...	

之后也是同样地进行 Link，一般收敛的结构是用来投频率 job 的，对于 Link 之后的收敛结构，右键 Information-Frequency 提取频率，然后输入允许的频率数目，一般过渡态为 1，吸附质为 0，然后会得到频率的检测结果：

	Not_Submit	Not Convergence - V...	
	Convergence	Artificial Structure	
	Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...	
	Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...	None
	Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...	None
	Submitted	Convergence - VASP ...	
	Not_Submit	Not Convergence - V...	
	Not_Submit	Not Convergence - V...	

Freq_Check_Fail 是频率不满足要求的，需要重新摆

一般一种吸附质或过渡态有多个状态，比如

Pd_CHO--O_34_Convergence.xsd	Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...	
Pd_CHO--O_34.xsd	Convergence	Artificial Structure	
Pd_CHO--O_2_33.xsd	Not_Convergence	Artificial Structure	
Pd_CHO--O_2_2_2_32_Not_Convergence.xsd	Not_Submit	Not Convergence - V...	
Pd_CHO--O_2_2_2_32.xsd	Not_Convergence	Artificial Structure	

有些是没有收敛，有些收敛但频率不符合要求，有些比如

Freq_Check_Pass 的就是完成了的。此时可以右键选中完成了的项

目，使用 Mark 选一个颜色和文字进行标记，比如

Pt_LU_s_bridge.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-114.623474
Pt_CHOHplane2.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-121.472790
Pt_CHOHplane1_Convergence.xsd	Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...	完成	
Pt_CHOHplane1.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-121.470597
Pt_CHOHplane1.cif.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-121.470597
Pt_CHOHofcc.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-120.920406
Pt_CHOHofcc.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-120.910442
Pt_CHOHchcp.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-121.470105
Pt_CHOHfcc.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-121.466276
Pt_CHOH22.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-121.277705
Pt_CHO_s_top_Convergence.xsd	Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...	正在投	
Pt_CHO_s_top.xsd	Convergence	Artificial Structure	正在投	-117.806586
Pt_CHO_s_top.cif.xsd	Convergence	Artificial Structure	正在投	-117.806586
Pt_CHO_s_hcp1.xsd	Submitted	Artificial Structure	正在投	
Pt_CHO_s_hcp.xsd	Convergence	Artificial Structure	正在投	-117.809126
Pt_CHO_s_fcc.xsd	Convergence	Artificial Structure	正在投	-117.525266
Pt_CH3OH_s_hcp_OHH_on_surface_Convergence.xsd	Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...	完成	
Pt_CH3OH_s_hcp_OHH_on_surface.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-129.148671
Pt_CH3OH_s_hcp_OHH_on_surface.cif.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-129.148671
Pt_CH3OH_s_hcp_HHH_on_surface.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-128.988185
Pt_CH3OH_s_fcc_OHH_on_surface_Convergence.xsd	Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...	完成	
Pt_CH3OH_s_fcc_OHH_on_surface.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-129.164281
Pt_CH3OH_s_fcc_OH_on_surface.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-129.027902
Pt_CH3OH_s_fcc_HHH_on_surface.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-128.992551

点上面的 header 可以排序：

	Status	Type
	Convergence	Artificial Stru
	Convergence	Artificial Stru
	Convergence	Artificial Stru
	Convergence	Artificial Stru
	Convergence	Artificial Stru
	Convergence	Artificial Stru
	Freq_Check_Fail	Convergence
	Freq_Check_Fail	Convergence
rgence.xsd	Freq_Check_Fail	Convergence
	Freq_Check_Fail	Convergence
	Freq_Check_Fail	Convergence
	Freq_Check_Fail	Convergence
	Freq_Check_Fail	Convergence
	Freq_Check_Fail	Convergence
	Freq_Check_Pass	Convergence
	Freq_Check_Pass	Convergence
	Freq_Check_Pass	Convergence
	Freq_Check_Pass	Convergence
	Freq_Check_Pass	Convergence
	Freq_Check_Pass	Convergence
rgence.xsd	Freq_Check_Pass	Convergence
	Freq_Check_Pass	Convergence
	Freq_Check_Pass	Convergence
	Freq_Check_Pass	Convergence
	Not_Convergence	Artificial Stru
	Not_Convergence	Artificial Stru
	Not_Submit	Convergence
	Submitted	Artificial Stru
	Submitted	Artificial Stru
	Submitted	Convergence
	Submitted	Artificial Stru
	Submitted	Artificial Stru
	Submitted	Artificial Stru
	Submitted	Artificial Stru
	Submitted	Artificial Stru

如果有不需要的文件，右键 File-Delete，文件不会直接删除而是移动到目录下 Trash 文件夹中，需要手动清除。

使用方式例子，以找 Pd 过渡态为例

- 1.摆好所有结构，自动投过渡态 job
- 2.及时停掉任务，下载跑好的文件，进行 Link
- 3.提取能量和 RMS 查看收敛情况，没有收敛则导出结构继续摆
- 4.收敛的结构，根据能量找最低，直接导出投频率
- 5.收频率任务文件，提取频率，如果虚频满足要求，完成，不满足则继续

目前遇到的 bug 和解决方法：

1. KeyValue Library 中运行命令加了个回车
2. 修改 Job Submit 配置时程序未响应：可能最近修改了底下 4 个 Lib 中文件的 Name，解决方法是删掉有问题的配置重新建立
3. 投过渡态失败，命令行提示 KeyError：在 Display Style-Lattice 中设置 Original，确认所有原子都在 slab 上面，把超出范围的原子拖回来，删除标的 distance，然后重新标。

