



# 安装和使用说明

苏长荣

清华大学物理系  
二〇〇三年五月

# 目录

目录 .....	i
第1章 VASP的获得 .....	1
第2章 VASP的安装 .....	2
2.1 在Origin2000 上安装 .....	2
2.1.1 串行版本 .....	2
2.1.2 并行版本 .....	2
2.2 在Linux Beowolf 平台上安装 .....	3
2.2.1 串行版本 .....	3
2.2.2 并行版本 .....	4
2.3 pre-compiler flags .....	4
2.4 不同BLAS库对VASP运行的影响 .....	5
2.5 不同FFT库的影响 .....	6
第3章 VASP的运行 .....	7
第4章 VASP的输入文件 .....	8
4.1 KPOINTS 文件 .....	8
4.1.1 K点手工产生 .....	8
4.1.2 K点自动产生 .....	9
4.1.3 Line 模式.....	9
4.2 POSCAR 文件 .....	10
4.3 POTCAR 文件 .....	11
4.4 INCAR 文件 .....	11
4.4.1 SYSTEM .....	11
4.4.2 NWRITE.....	11
4.4.3 ENCUT .....	12
4.4.4 PREC .....	12
4.4.5 ISPIN .....	12
4.4.6 MAGMOM.....	12
4.4.7 ISTART .....	12
4.4.8 ICHARG.....	13
4.4.9 INIWAV.....	13
4.4.10 NELM,NELMIN& NELMDL.....	13
4.4.11 EDIFF .....	14
4.4.12 EDIFFG .....	14
4.4.13 NSW .....	14
4.4.14 NBLOCK & KBLOCK .....	14
4.4.15 IBRION& NFREE .....	14
4.4.16 POTIM .....	14
4.4.17 ISIF .....	15
4.4.18 PSTRESS.....	15

4.4.19	IWAVPAR .....	15
4.4.20	ISYM& PRECSYM .....	16
4.4.21	LCORR .....	16
4.4.22	TEBEG& TEEND.....	16
4.4.23	SMASS.....	16
4.4.24	NPACO& APACO.....	17
4.4.25	POMASS& ZVAL.....	17
4.4.26	RWIGS .....	17
4.4.27	LORBIT .....	17
4.4.28	NELECT.....	17
4.4.29	NUPDOWN.....	17
4.4.30	EMIN& EMAX .....	17
4.4.31	ISMear & SIGMA .....	18
4.4.32	LREAL.....	18
4.4.33	GGA .....	19
4.4.34	VOSKOWN .....	19
4.4.35	DIPOL.....	19
4.4.36	ALGO .....	19
4.4.37	IALGO& LDIAG.....	20
4.4.38	NSIM .....	21
4.4.39	混合参数 .....	21
4.4.40	WEIMIN,EBREAK & DEPER .....	21
4.4.41	TIME .....	21
4.4.42	LWAVE& LCHARG.....	22
4.4.43	LVTOT .....	22
4.4.44	LELF .....	22
4.4.45	NPAR& LPLANE .....	22
4.4.46	LPARD,IBAND,EINT, NBMOD,KPUSE,LSEPB & LSEPK .....	22
4.4.47	STM .....	23
4.4.48	NBANDS.....	23
4.5	STOPCAR文件 .....	23
4.6	DENSU文件 .....	24
第5章	VASP的输出文件 .....	25
5.1	CHG/CHGCAR .....	25
5.2	EIGENVALUE .....	25
第6章	VASP的计算专题和例子 .....	26
6.1	并行计算参数设置.....	26
6.2	结构弛豫.....	27
6.3	能带计算.....	27
6.4	表面计算应注意的问题.....	28
6.5	模拟STM像的办法 .....	28
6.6	计算中途停电怎么办 .....	29
6.7	晶体总能随元胞体积变化不光滑怎么办.....	29

## 表格

---

6.8 自旋校正问题 .....	29
第7章 辅助软件使用说明 .....	30
7.1 VASPViewer.....	30
7.2 vaspchg .....	30
7.3 vaspxyz .....	30
7.4 surf.....	30
索引 .....	31

## 表格

2.3 在不同平台上的测试结果 .....	5
6.1 VASP中与波函数相关的参数定义。 <b>im</b> 是平面波基的变量， <b>ib</b> 是能带的变量， <b>nk</b> 是k点的变量， <b>isp</b> 是自旋的变量 .....	28

## 第二章 VASP的安装

VASP程序的源代码包括库和主程序两部分，分别为vasp.4.X.X.tar.gz和vasp.4.lib.tar.gz。用下列命令进行解压缩：

```
gunzip vasp.4.4.5.tar.gz
```

```
tar -xf vasp.4.4.5.tar
```

```
gunzip vasp.4.lib.tar.gz
```

```
tar -xf vasp.4.lib.tar
```

将分别产生vasp.4.4 和vasp.4.lib 目录。

### 2.1 在Origin2000 上安装

#### 2.1.1 串行版本

进入vasp.4.lib目录，进行如下操作：

```
ln -s makefile.sgi Makfile
```

```
make
```

进入vasp.4.4 目录进行如下操作：

```
ln -s makefile.sgi Makefile
```

```
make
```

可能在编译sphpro.f文件时会出错，只需将该文件360行的下列语句

```
IF (LOVERL.AND.FALSE.) THEN
```

修改为

```
IF (LOVERL.AND..FALSE.) THEN
```

就可以了。

#### 2.1.2 并行版本

进入vasp.4.lib目录，进行如下操作：

```
ln -s makefile.sgi Makfile
```

```
make
```

进入vasp.4.4，首先将MPICH目录<sup>1</sup>(/disk4/local/mpich/include/)下的mpif.h文件拷贝到当前目录，用VASP带的convert工具将它转化为FORTRAN 90格式。即：

```
cp /disk4/local/mpich/include/mpif.h .
./convert mpif.h
```

将makefile.sgi拷贝为makefile.mpi，  
ln -s makefile.mpi Makefile  
编辑Makefile文件，找到mpi部分，

```
#-----
#MPI VERSION
#-----

#CPP      = /usr/lib/cc -P -DNGZhalf -Dkind8 \
#          -DMPI -DCACHE_SIZE=4000 -Dpro_loop $*.F ;\
#          mv $*.i $*.f
#LIB      = -L../vasp.4.lib -lmpi -ldmy -lblas \
#          ../vasp.4.lib/linpack_double.o \
#          ../vasp.4.lib/lapack_double.o -lblas -lmpi
#FFT3D    = fftmpi.o fftmpi_map.o fft3dlib.o
```

将前面的#去掉<sup>2</sup>。

为与串行版本的vasp区分开来，可以将Makefile中vasp改为vaspmpi，即并行版本的VASP执行文件将为vaspmpi。

## 2.2 在Linux Beowolf 平台上安装

### 2.2.1 串行版本

进入vasp.4.lib目录，进行如下操作：

```
ln -s makefile.linux_pg Makefile
make
```

<sup>1</sup>MPICH的安装 在Origin2000上的MPICH版本是1.2.1，安装时只需按以下指令进行就可以了。将下载的mpich-1.2.1.tar.gz 放在一个临时目录中，如将MPICH安装到/disk4/local/mpich目录下。

```
gunzip mpich-1.2.1.tar.gz
tar xf mpich-1.2.1.tar
cd mpich-1.2.1
./configure -prefix=/disk4/local/mpich
make
```

<sup>2</sup>因为mpi的库没有安装在系统默认的目录下，必须人工指定mpi库的位置，即须将上述语句LIB项中的-lmpi 改为-L[放mpi库的目录]-lmpi

进入vasp.4.4 目录进行如下操作：

```
ln -s makefile.linux_pg Makefile
```

编辑Makefile，将其中的LIB项改为：

```
LIB      = -L../vasp.4.lib -ldmy ../vasp.4.lib/linpack_double.o \
          ../vasp.4.lib/lapack_double.o \
          -L/home/users/crsu/LAPACK /home/users/crsu/LAPACK/blas_LINUX.a
```

并在cpp 的预处理参数项中加入-DNOZTRMM 和将-DCACHE\_SIZE=1000改为-DCACHE\_SIZE=16000。保存Makefile退出。

make

在编译中可能会出错，只需将出错文件中多余的“\\)”等去掉就行了，这是由cpp 造成的。同时sphpro.f文件的IF (LOVERL.AND.FALSE.) THEN 也要修改为IF (LOVERL.AND..FALSE.) THEN

### 2.2.2 并行版本

VASP 需要LAM/MPI 平台，已经安装在/usr/local/lam下，在Makefile中要指定LAM/MPI 编译器的位置。进入vasp.4.4 目录，cp makefile.linux\_pg makefile.liunux\_pg\_mpi ln -s makefile.linux\_pg\_mpi Makefile 编辑Makefile 将MPI 部分的# 去掉（与Origin2000上的情况一样），将LIB 语句替换为：

```
LIB      = -L../vasp.4.lib -ldmy ../vasp.4.lib/linpack_double.o \
          -L/home/users/crsu/SCALAPACK \
          /home/users/crsu/SCALAPACK/scalapack_LINUX.a \
          ../vasp.4.lib/lapack_double.o \
          -L/home/users/crsu/LAPACK /home/users/crsu/LAPACK/blas_LINUX
```

在cpp 中加入-DNOZTRMM -DSCALAPACK 和将-DCACHE\_SIZE=1000 改为-DCACHE\_SIZE=16000。最好将目标程序VASP改为VASPMPI以区别。保存Makefile退出，键入make 就可以进行编译连接了。编译中出现的错误是cpp 引起的，只需将出错文件中多出来的“\\)”等去掉就行了。

## 2.3 Makefile中cpp预编译参数(pre-compiler flags)的影响

在VASP中使用了cpp 预处理器将源码转化为适合不同平FORTRAN代码，涉及到的参数对VASP的运行有很大的影响。

single_BLAS	使用单精度BLAS/LAPACK 库
vector	编译矢量化并行版本
essl	对DSYGV 使用essl 库
NGXhalf	减少X方向一半的电荷密度存储量，串行版本适用
NGZhalf	减少Z 方向一半的电荷密度存储量，并行版本适用

wNGXhalf	
wNGZhalf	
NOZTRMM	不使用ZTRMM
REAL_to_DBL	把REAL(X) 变成DBLE(X)
Debug	在OUTCAR中输出更多的运行信息
noSTOPCAR	不重读STOPCAR 文件
F90_T3D	编译T3D 版本
MPI	编译并行版本
MPI_CHAIN	支持nudged chain 的串行版本
scaLAPACK	使用scaLAPACK 库
T3D_SMA	在T3D上，使用shmem 进行通信，而不使用MPI
MY_TINY	对称包中里的精度
CACHE_SIZE	指定CACHE的大小，会影响FFT的效率

其中CACHE的大小与系统平台有关，下面是一些例子：

```

IBM      -DCACHE_SIZE=32768
T3D      -DCACHE_SIZE=8000
DEC ev5  -DCACHE_SIZE=8000
LINUX    -DCACHE_SIZE=16000

```

## 2.4 不同BLAS库对VASP运行的影响

VASP中涉及到的三种主要运算：矩阵—矩阵，矩阵—向量和FFT中的前两种都与BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms)有关，因此BLAS是否优化对VASP的性能有很大的影响。Origin2000上的BLAS是其系统自带的，优化的比较好，以此库编译的VASP运行的性能很高，可用dgemmtest和ffftest 来测试。但LINUX平台上的BLAS优化的不好，尤其是BLAS Level 3部分，即涉及矩阵—矩阵运算的部分。在LINUX平台上我尝试了三种不同的BLAS库，LINUX—Red Hat6.2 自带的BLAS，NETLIB上的免费BLAS（含在LAPACK中）和对Pentium III 优化的BLAS（从<http://www.cs.utk.edu/~ghenry/hidden/gemmiibeta/dgemm.html> 下载），并进行了测试，结果如下表：

平台	Origin2000	Linux Beowolf		
		Red Hat BLAS	NETLIB BLAS	PIII OPT BLAS
Lincom-TPP	27.6 s	56.3 s	41.2 s	14.1 s
Matrix-Vector	36.8 s	36.9 s	26.0 s	38.7 s
FFT	21.9 s	20.2 s	20.0 s	19.9 s
Bench.Hg	1153.674 s		3010.790 s	1300.320 s

表 2.3: 在不同平台上的测试结果



Goto的BLAS库[http://www.cs.utexas.edu/users/kgoto/signup\\_first.html](http://www.cs.utexas.edu/users/kgoto/signup_first.html)

## 2.5 不同FFT库的影响

## 第三章 VASP的运行

将存放VASP执行文件的目录加到用户的路径中去，运行串行版本的VASP只需在工作目录中敲`vasp`就可以了，最好将`vasp`的屏幕输出输入到一个文件中，即执行如下命令：

```
vasp > &look&
```

运行并行版本的VASP须将`vaspmpi`拷贝到工作目录下，执行如下命令：

```
mpirun -np N vaspmpi > &look&
```

其中N为使用的CPU数。注意必须将`vaspmpi`的屏幕输出输入到文件中，否则在退出NetTerm后将会出现`core dump`。

在Linux cluster 并行机上，串行程序的运行与上相同。而在运行并行版本的VASP时，需要先启动`lamd`，并指定使用的CPU：

```
lamboot -v lamroot
```

`lamroot`是一个关于CPU 信息的文件，如

```
nfs1  
nfs2  
nfs3  
...  
nfs30
```

一般情况下，`lam`的路径已经加到了系统路径中，如果没有的话，可以用下面的方法将`lam`的路径名写全：

```
/usr/local/lam-6.4/bin/lamboot -v lamhost
```

和

```
/usr/local/lam-6.4/bin/mpirun -np 2 /usr/local/bin/vaspmpi > & look &
```

.

## 第四章 VASP的输入文件

VASP的输入文件主要有四个，分别为KPOINTS、POSCAR、POTCAR和INCAR。还有一个控制在程序运行过程中是否停止的输入文件，STOPCAR。在我修改的版本中，增加了在程序运行过程中输出能窗内电荷密度的功能，由文件DENSU控制。现分别介绍各输入文件的格式和功能。

### 4.1 KPOINTS 文件

VASP的计算是在倒空间和实空间中交互进行的，对k的积分在实际计算中用对k点的权重求和代替。k点的选择对计算精度有很大影响，须小心。

KPOINTS

VASP中k点的输入有手工输入和自动生成两种方法。在进行能带计算等需要不规则k点时必须使用手工输入的方式，也可利用新版本VASP中提供的Line模式。

#### 4.1.1 K点手工产生

下面是手工产生的一个例子。

```
Example file      : 注释行
4                 : k点的数目
Cartesian         : k点的类型
0.0  0.0  0.0  1. : k点的坐标和权重（只有相对意义）
0.0  0.0  0.5  1.
0.0  0.5  0.5  2.
0.5  0.5  0.5  4.
Tetrahedron       : 是否采用四面体方法，可选
1  0.1833333333333333 : 四面体的个数和体积与布里渊区体积比
6  1  2  3  4       : 权重，四面体的四个角
```

其中第三行，k点的类型，决定了下面的k点是在什么坐标架里的。Cartesian（只有第一个字母有用，C, c, K 或k 都一样）说明下面的k点是直角坐标，即以 $2\pi/a$ 为单位；其他字母则表示下面的k点是以倒格矢 $\vec{b}_1$ ,  $\vec{b}_2$  和 $\vec{b}_3$ 为单位，即 $\vec{K} = k_1\vec{b}_1 + k_2\vec{b}_2 + k_3\vec{b}_3$ 。

Tetrahedron是在k点的smearing方法采用四面体方法时需要的（见第4.4.31节），它的输入是可选的，如果没有输入，VASP会自动产生。这个方法可用在k点数较少或者一些不规则的k网格，但是k点数少于4个时程序会报错。

### 4.1.2 K点自动产生

下面是自动产生的一个例子。

```
Automatic mesh      : 注释行
0                  : 0 表示自动产生
Monkhorst-Pack     : 自动产生的方法
4 4 4             : 网格尺寸
0. 0. 0.          : k点相对网格原点的平移
```

第二行的0表示网格将自动生成。第三行指定了产生的方法，只有第一个字母有用；‘M’或‘m’表示原始的Monkhorst-Pack网格，‘G’或‘g’表示原点在 $\Gamma$ 点的Monkhorst-Pack型网格。‘M’与‘G’的差别是，当网格尺寸是偶数的话，‘M’产生的网格原点不在 $\Gamma$ 点，因而更对称。‘M’与‘G’产生的网格是以倒格式为单位的。网格尺寸决定了网格的大小，例子中产生的是一个 $4 \times 4 \times 4$ 的网格。最后一行是k点对自动产生网格的一个平移，以倒格式为单位，一般取为0。

### 4.1.3 Line 模式

Line模式是特为能带计算设计的。采用此模式时，KPOINTS文件的第三行必须以‘L’开头。下面是一个例子

```
k-points along high symmetry lines
10 ! 10 intersections
Line-mode
cart
0 0 0 ! gamma
0 0 1 ! X

0 0 1 ! X
0.5 0 1 ! W

0.5 0 1 ! W
0 0 0 ! gamma
```

VASP 将会在第一个点( $\Gamma$ )和第二个点(X)、第三个点(X)和第四个点(W)、第五个点(W)和第六个点( $\Gamma$ )间各产生10个k点。k点的输入方法可以是直角坐标的(第四行以‘c’或‘k’开头)，如上例；也可以用倒格矢为单位(第四行以‘r’开头)，如下例

```
k-points along high symmetry lines
10 ! 10 intersections
```

```

Line-mode
rec
  0    0    0    ! gamma
  0.5 0.5 0    ! X

  0.5 0.5 0    ! X
  0.5 0.75 0.25 ! W

  0.5 0.75 0.25 ! W
  0    0    0    ! gamma

```

## 4.2 POSCAR 文件

POSCAR文件包含了晶胞基矢和原子坐标。在做分子动力学模拟时，还包含原子的起始速度和预测—修正（predictor-corrector）坐标。下面的例子是嵌套fcc结构的BN晶胞。

POSCAR

```

Cubic BN          : 注释行，可标记题目
  3.57            : 缩放系数，对下面的数字都有效
0.0  0.5  0.5     : 晶胞的基矢
0.5  0.0  0.5
0.5  0.5  0.0
  1  1           : 各类原子的数目
Selective Dynamics : 是否进行受限动力学（可选）
Cartesian          : 坐标的类型
0.00  0.00  0.00  T  T  F : 原子坐标，是否受限（可选）
0.25  0.25  0.25  F  F  F
Cartesian          : 坐标类型
0.01  0.01  0.01   : 原子的初始速度
0.00  0.00  0.00

```

VASP中坐标的单位是Å。第二行的缩放系数对下面的数字都有效，可取为晶格常数。接着三行定义了晶胞的基矢。在POSCAR文件中不出现原子的名称，不同类原子的个数顺序写在一行上，以后的坐标和赝势（参照POTCAR文件）都要与之对应。第七行的“Selective Dynamics”（第一个字母有用，‘S’或者‘s’）是可选的，当此行出现时，必须指定原子在分子动力学或弛豫中是否可以移动，在原子坐标后必须跟三个逻辑符T（可动）或F（不可动）。如果没有使用“Selective Dynamics”，则原子坐标后的不需要。原子坐标也有两种不同的单位，Cartesian（‘C’，‘c’，‘K’或者‘k’）模式时原子坐标是直角坐标，Directe（‘D’或者‘d’）模式时原子坐标以晶胞基矢为单位。即在Directe模式下 $\vec{R} = x_1\vec{a}_1 + x_2\vec{a}_2 + x_3\vec{a}_3$ ，其中 $\vec{a}_{1,2,3}$ 是晶胞的基

矢。而在Cartesian模式下

$$\vec{R} = s \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

s是缩放系数。

原子的初始速度一般不指定。在作分子动力学计算时，程序会根据初始温度（TEBEG，见INCAR文件4.4.22）按照Maxwell-Boltzmann分布随机产生。

### 4.3 POTCAR 文件

在VASP中采用超软赝势来描述核和芯电子对价电子的作用，输入文件是POTCAR。由于超软赝势的产生比较困难，VASP开发组已经产生了一套赝势，只需将它们拷贝到相应的计算目录就可以了。

POTCAR

在Origin2000机器上，赝势放在/disk4/my\_usr/VASP/pot/目录的lda和gga子目录下。在lda和gga子目录下有各种元素的赝势，只需将相应元素目录中的POTCAR.Z文件拷贝到工作目录下，用uncompress命令解压缩就可以了。如果在计算中涉及多种元素，可以先将各元素的POTCAR拷贝成不同的名字，再用cat命令按POSCAR的元素次序拼起来，如：

```
cat POTCAR_Si POTCAR_H > POTCAR
```

### 4.4 INCAR 文件

INCAR文件是VASP中最核心的输入，它将决定作业做什么和怎么做（WHAT TO DO AND HOW TO DO）。INCAR文件采用关键字输入的方法，格式比较自由，同时都有默认值，所以INCAR文件即使是个空文件，VASP也可运行，但必须存在。这儿对INCAR文件中的各参数作一简单说明。

INCAR

#### 4.4.1 SYSTEM

SYSTEM=string  
默认：unknown system  
作业说明语句。

SYSTEM

#### 4.4.2 NWRITE

NWRITE=0|1|2|3|4  
默认：2  
控制输出到OUTCAR文件信息的多少，具体见VASP手册50页。

NWRITE

## 4.4.3 ENCUT

ENCUT=Ecut (eV)

默认：从POTCAR文件读入  
平面波基的截断能。

ENCUT

## 4.4.4 PREC

PREC=Low|Medium|High|Accurate

默认：Medium

PREC 作用有三：

PREC

1. INCAR中未指定ENCUT 时（即从POTCAR文件读入），PREC 控制了ENCUT 应取什么值。 $PREC = Low$  时，ENCUT 取POTCAR 中的最小值ENMIN， $PREC = Medium$  或  $Accurate$  时，ENCUT 取POTCAR 中的最大值ENMAX，而 $PREC = High$  时，ENCUT 将取ENMAX 的1.3倍。
2. 控制FFT格子。 $PREC = High$  或  $Accurate$  时，在FFT时考虑了所有大小在两倍于平面波基最大波矢的G-矢量，因而不会有“warp around error”； $PREC = Low$  或  $Medium$  时，FFT格子的大小只有 $PREC = High$  或  $Accurate$  时的3/4。
3. 采用实空间投影方法时，PREC也决定了ROPT（控制离子周围积分球中的格点数）的默认值。

$PREC = Low$	700 点( $ROPT = 0.67$ )
$PREC = Medium(Accurate)$	1000 点( $ROPT = 1.0$ )
$PREC = High$	1500 点( $ROPT = 1.5$ )

## 4.4.5 ISPIN

指定电子体系的总自旋， $2S+1$ 。

ISPIN

## 4.4.6 MAGMOM

MAGMOM

## 4.4.7 ISTART

ISTART=0|1|2

默认：存在WAVECAR文件时，1；否则0。

ISTART

0 新作业，由INIWAV决定初始波函数的产生方法。

- 1 Restart作业。波函数从WAVECAR文件读入，并根据现在的元胞几何(POSCAR文件)和ENCUT(INCAR 文件)进行调整。如WAVECAR不存在或不合适时，ISTART将回到0。当在restart作业时，元胞几何或ENCUT改变时推荐此设置。

- 2 Restart作业。波函数从WAVECAR文件读入，并不作波函数的调整（即使元胞几何和ENCUT已经改变）。如WAVECAR不存在或不合适时，ISTART将回到0。在作离子驰豫时，如果同时也做元胞几何的驰豫时，在restart作业时可用此设置。在一般情况下不用。

#### 4.4.8 ICHARG

ICHARG=0|1|2

默认：ISTART取0时，2；否则0。

ICHARG控制如何产生初始电荷密度。

ICHARG

- 0 从初始波函数计算电荷密度。
  - 1 从CHGCAR文件读入。
  - 2 用原子电荷密度组装（LCAO）
- +10 非自洽计算，电荷密度保持不变
  - 10 从初始波函数计算电荷密度并保持不变。
  - 11 由给定电荷密度求得能级本征值和态密度，用于能带计算。
  - 12 以LCAO密度进行的非自洽计算。依据Harris-Foulkes 泛函，非自洽密度得到的力和应力是正确的，所以可以用来进行第一原理的分子动力学模拟。

#### 4.4.9 INIWAV

INIWAV=0|1

默认：1

INIWAV控制如何产生初始波函数，此设置只在ISTART=0时有用。

INIWAV

- 0 采用凝胶波函数，即从低能开始填波函数数组
- 1 用随机数来填波函数数组。

#### 4.4.10 NELM,NELMIN& NELMDL

NELM=整数，NELMIN=整数，NELMDL=整数

默认：

NELM	=	60	
NELMIN	=	2	
NELMDL	=	-5	当ISTART=0, INIWAV=1, IALGO=8
NELMDL	=	-12	当ISTART=0, INIWAV=1, IALGO=48
	=	0	其他

NELM给出了在电子自洽过程中最多的迭代次数，一般用默认值就可以了。如果进行了40次迭代电子还没有自洽，则一般不会自洽了，



应改变其他设置（如LALGO和LDIAG，见4.4.37）。NELMIN则是最小的迭代次数，在进行表面的结构弛豫或分子动力学计算时，应该增大次变量。NELMDL规定了自洽计算开始的几步迭代不自洽处理，即在前NELMDL次迭代不改变体系的哈密而顿量。

#### 4.4.11 EDIFF

总能计算中的允许误差，默认值为 $10^{-4}$ 。

EDIFF

#### 4.4.12 EDIFFG

离子弛豫运动的结束条件，默认值为 $EDIFF \times 10$ 。

EDIFFG

#### 4.4.13 NSW

离子运动的步数，默认值为0。

NSW

#### 4.4.14 NBLOCK & KBLOCK

NBLOCK=整数，KBLOCK=整数

NBLOCK

默认： NBLOCK=1  
KBLOCK=NSW

每过NBLOCK次离子运动，计算一次对关联函数，DOS和输出离子构形。每过KBLOCK $\times$ NBLOCK次离子运动输出平均对关联函数和DOS。

#### 4.4.15 IBRION& NFREE

IBRION=-1|0|1|2|3|4

IBRION

默认：当NSW=0或1时，-1；其他0。

IBRION决定了离子是否运动及运动的方法和算法。

- 1 离子不运动，但要作NSW次外循环。
- 0 分子动力学模拟。
- 1 准牛顿法离子弛豫。
- 2 CG算法的离子弛豫，在作离子弛豫时推荐使用此设置。
- 3 采用衰减二阶运动方程进行离子弛豫。
- 4

#### 4.4.16 POTIM

POTIM

IBRION=0 POTIM为分子动力学离子运动时间步长（单位：fs）

IBRION=1,2,3 POTIM为作用在力上的比例系数。

默认: IBRION=0 时无默认值, 必须用户指定。  
IBRION=1,2,3时, POTIM取0.5

#### 4.4.17 ISIF

ISIF=0|1|2|3|4|5|6

默认: IBRION=0时, 0, 其他2。

ISIF

ISIF控制在离子运动中计算应力张量。如在作离子弛豫时的默认值2, 将计算力, 应力张量, 离子可移动, 但元胞的形状和大小都不改变。具体参考下表。

ISIF	计算力	应力张量	弛豫离子	改变元胞形状	改变元胞体积
0	是	否	是	否	否
1	是	trace only <sup>a</sup>	是	否	否
2	是	是	是	否	否
3	是	是	是	是	是
4	是	是	是	是	否
5	是	是	否	是	否
6	是	是	否	是	是
7	是	是	否	否	是

<sup>a</sup>Trace only 指只有总压强, 即external pressure = ...kB 是正确的。

#### 4.4.18 PSTRESS

PSTRESS 是外加压力导致的应力, 当指定此参数时, 在应力张量中将增加一项, 同时在总能中也要加入  $E = V \times PSTRESS$ 。

PSTRESS

#### 4.4.19 IWAVPAR

IWAVPAR = 0|1|2|3

IWAVPAR

默认: IBRION=0(MD)            2        12  
IBRION=1,2(relaxation) 1        11  
其他(static calculation) 0

IBRION决定在从一个离子构形到另一个离子构形改变时, 波函数和 (或) 电荷密度如何外推。一般情况下老的波函数存在临时文件TMPCAR中, 如果IWAVPAR大于10时, 则VASP不读TMPCAR而直接从内存中读入。

0 无外推。

1,11 对电荷密度进行简单外推。对元胞几何改变情况也适用。

2,12 对波函数和电荷密度进行二阶外推。进行分子动力学时必须采用此值。

3,13 对波函数进行二阶外推，对电荷密度进行简单外推。不推荐使用。

#### 4.4.20 ISYM& PRECSYM

ISYM= 0|1|2

默认：1

ISYM

是否具有对称性，1具有，0不具有，采用2内存对电荷密度的对称处理更有效。PRECSYM是对称判断精度，默认为 $10^{-5}$ 。

#### 4.4.21 Lcorr

Lcorr= .FALSE.|.TRUE.

默认：.TRUE.

Lcorr

对力是否进行Harris校正。由于电子体系的计算不可能完全自洽，由此会带来力计算的误差，Harris校正可以把这个误差校正过来。

#### 4.4.22 TEBEG& TEEND

TEBEG: 开始温度，TEEND: 结束温度

TEBEG

默认：TEBEG=0

TEEND=TEBEG

这两个参数对分子动力学模拟起作用，分别为模拟开始和结束的温度。在分子动力学模拟中如果POSCAR文件中没有给出体系的初始速度，VASP将根据TEBEG用Maxwell-Boltzmann分布自动生成体系的初始速度。由于在模拟中，体系的质心保持不变，因而体系的运动自由度是 $3 \times (N_{ion} - 1)$ ，而不是 $3 \times N_{ion}$ ，所以在模拟中的真实温度是

$$T = TEBEG \times \frac{N_{ion}}{N_{ion} - 1}$$

#### 4.4.23 SMASS

SMASS=-3|-2|-1|0|Nosé-mass

默认：-3

SMASS

SMASS是分子动力学模拟的参数，它控制速度在模拟过程中如何变。

-3 微正则系综，体系的能量在模拟过程中保持不变。

-2 保持初始速度不变。

- 1 每过NBLOCK步离子运动（即MOD(NSTEP,NBLOCK).EQ.1），体系温度作如下调整： $TEMP = TELEG + (TEEND - TELEG) \times NSTEP / NSW$
- >=0 采用Nosé算法的正则系综。Nosé质量控制模拟过程中的温度振荡频率，应设置得与研究体系的典型声子频率相当。

#### 4.4.24 NPACO& APACO

NPACO: 对关联函数的跟踪数

APACO: 计算对关联函数的最大间距（单位：Å）

默认：NPACO=256 APACO=16

NPACO

#### 4.4.25 POMASS& ZVAL

POMASS: 计算中每种元素的质量（单位：a.u.）

ZVAL: 每种元素的价电子数

默认：从POTCAR文件读入。

POMASS

#### 4.4.26 RWIGS

元素的Wigner-Seitz半径，是可选输入，在进行partial DOS计算时，必须指定次值。

RWIGS

#### 4.4.27 LORBIT

LORBIT可以逻辑值也可以取整数，默认为.FALSE.或0。它控制是否输出投影波函数到文件PROCAR和PROOUT中。具体见VASP手册63页。

LORBIT

#### 4.4.28 NELECT

NELECT: 电子数

一般不需要指定，VASP会自动决定。当NELECT与从价电子和原子数目计算得到的电子数不相同，将会产生一个均匀的背景电荷。如果在POSCAR文件中离子的个数为0，即无离子，而NELECT=n，VASP将用LDA方法计算此均匀电子气的能量，即凝胶电子气情况。

NELECT

#### 4.4.29 NUPDOWN

NUPDOWN: 自旋朝上朝下个数的差别。

VASP将进行保持自旋多重态的计算。

NUPDOWN

#### 4.4.30 EMIN& EMAX

EMIN: 计算DOS的最小能量

EMAX: 计算DOS的最大能量

这两个参数决定了计算DOS的能窗（单位：eV）。

EMIN  
EMAX

## 4.4.31 ISMEAR &amp; SIGMA

ISMEAR= -5| -4| -3| -2| -1|0|N

SIGMA: 展开的宽度 (单位: eV)

默认: ISMEAR=1 SIGMA=0.2

ISMEAR决定如何确定电子的部分占据数。

ISMEAR  
SIGMA

- 5 采用Blöchl校正的四面体方法。计算大块总能时推荐使用。
- 4 不采用Blöchl校正的四面体方法
- 3 对不同的ISMEAR进行循环, 在INCAR文件中额外加一行  
 $SMEARINGS = ismear1\ sigma1\ ismear2\ sigma2 \dots$
- 2 电子占据数从INCAR文件中读入, 并在计算中保持不变。在INCAR文件中加额外一行如:  
 $FERWE = f1\ f2\ f3 \dots$   
 如进行电子自旋极化计算, 则加入如下行:  
 $FERDO = f1\ f2\ f3 \dots$   
 上述占据数按每个k点每个能带排列。上述两种情况占据数都在0和1之间。
- 1 费米展开
- 0 高斯展开

1...N N阶Methfessel-Paxton 方法, 此时占据数可能为负。

在计算大块材料的总能和DOS时, 建议采用Blöchl校正的四面体方法, 即ISMEAR=-5。但是这个方法由于没有对电子的部分占据进行变分计算, 所以对金属的力的计算误差较大, 而对半导体影响不大。金属的弛豫计算可采用Methfessel-Paxton方法。

## 4.4.32 LREAL

LREAL= .FALSE.|.TRUE.|On|Auto

默认: .FALSE.

LREAL决定投影操作在实空间进行还是在倒空间进行。

LREAL

.FALSE. 投影操作在倒空间进行

.TRUE. 投影操作在实空间进行

On 投影操作在实空间进行, 但投影操作进行了优化

Auto 投影操作在实空间进行, 对投影操作进行了全优化

进行投影操作是在计算赝势的非局域部分时需要计算 $\sum_{ij} D_{ij} |\beta_j\rangle \langle \beta_i | \psi_{nk}\rangle$ , 投影波函数系数可以在实空间也可以在倒空间中计算:

$$\begin{aligned} \langle \beta_i | \psi_{nk} \rangle &= \frac{\Omega}{N_{FFT}} \sum_r \langle \beta_i | r \rangle \langle r | \psi_{nk} \rangle = \frac{\Omega}{N_{FFT}} \sum_r \beta_i(r) \psi_{nk}(r) \\ &= \sum_G \langle \beta_i | k + G \rangle \langle k + G | \psi_{nk} \rangle = \sum_G \beta_i(k + G) C_{Gnk} \end{aligned}$$

#### 4.4.33 GGA

GGA=PW|PB|LM|91|PE|RP

默认: —

GGA

对LDA方法生成的赝势进行GGA计算。其选项分别指定了使用何种交换-关联泛函:

PB	Perdew-Becke
PW	Perdew-Wang 86
LM	Langreth-Mehl-Hu
91	Perdew-Wang 91
PE	Perdew-Burke-Ernzerhof
RP	revised Perdew-Burke-Ernzerhof

#### 4.4.34 VOSKOWN

VOSKOWN= 0|1

默认: 0

VOSKOWN

VOSKOWN决定对交换-关联泛函是否采用Vosko Wilkhe和Nusair形式。1采用, 0不采用而采用标准的交换-关联泛函。采用Vosko Wilkhe和Nusair形式的交换-关联泛函对磁性质计算有用。

#### 4.4.35 DIPOL

DIPOL: 元胞中心坐标 (直接坐标形式)

默认: —

DIPOL

计算胞的总偶极矩。只在VASP.3.2中 useful。

#### 4.4.36 ALGO

ALGO是从VASP.4.5开始增加的简化选择电子优化算法的开关。

ALGO = "Normal" 与IALGO=38相同, 即选择块Davidson优化算法;

ALGO = "Very\_Fast" 与IALGO=48, 即选择RMM-DIIS算法;

ALGO 还提供了一种更稳定的电子优化选项, 即ALGO = "Fast", 此时在初始化时采用IALGO=38, 在随后的计算中采用IALGO=48。

#### 4.4.37 IALGO& LDIAG

IALGO: 指定电子自洽计算的算法

LDIAG: 执行子空间对角化

默认: IALGO=8 LDIAG=.TRUE.

IALGO

LDIAG

IALGO和LDIAG决定了电子自洽计算的算法。IALGO的第一个数字决定主要的算法，第二个数字决定在该算法中实际使用的设置。IALGO推荐使用8和48，对大系统推荐使用48。IALGO可以有如下设置：

- 1 执行测试。不作实际运算，只运行一些关键程序，并给出每部分的执行时间。

#### 5-8 梯度耦合(Conjugate Gradient, CG) 算法

CG

5 最速下降算法

6 CG算法

7 加预处理的最速下降算法

8 加预处理的CG算法

#### 44-48 在迭代子空间直接求逆的残量最小化算法(Residual Minimization Method Direct Inversion in the Iterative Subspace, RMM-DIIS )

44 最速下降本征值最小化

46 残量最小化+预测

48 预处理后的残量最小化

3 波函数保持不变，只重新计算能带结构

4 波函数保持不变，只作子空间旋转

#### 15-18 CG算法

子空间对角化在CG迭代后进行，5—8的意义与前相同。

28 CG算法

子空间对角化在CG迭代前进行。

38 Kosugi 算法（特定块分解法）

此算法在VASP 4.X 中不再支持。

58 将自由能作为变分量，对自由能泛函进行完全自洽优化。此算法对绝缘体能给出很好的结果，对金属则比其他算法要慢。

## 4.4.38 NSIM

并行计算相关参数，表示有 $NSIM$ 条带一起优化。

If NSIM is specified in VASP.4.4 and newer versions the RMM-DIIS algorithm (IALGO=48) works in a blocked mode. In that case NSIM bands are optimized at the same time. This allows to use matrix-matrix operations instead of matrix-vector operation for the evaluations of the non local projection operators in real space, and might speed up calculations on some machines. There should be no difference in the total energy and the convergence behavior between  $NSIM=1$  and  $NSIM \neq 1$ , only the performance should improve.

NSIM

## 4.4.39 混合参数

IMIX	= 混合的类型	默认: 4
AMIX	= 线性混合参数	默认: 0.8
BMIX	= Kerker混合方法的截断波矢	默认: 1.0
AMIX_MAG	= 磁的线性混合参数	
BMIX_MAG	= 磁的Kerker混合方法的截断波矢	
WC	= Broyden混合方法中每步的权重	默认: 1000.
INIMIX	= Broyden混合方法中的初始的混合类型	默认: 1
MIXPRE	= Broyden混合方法中的预测的混合类型	默认: 1
MAXMIX	= Broyden混合器中储存的最大步数	默认: -45

IMIX

## 4.4.40 WEIMIN,EBREAK &amp; DEPER

**WEIMIN:** 对一个带被认为空态的最大权重。当一个带的占据数小于此值时，被认为空态。

WEIMIN

**EBREAK:** 本征值优化的绝对停止判据。当本征值的改变小于此值时，停止优化。

**DEPER:** 本征值优化的相对停止判据

EBREAK  
DEPER

默认: WEIMIN = 0.001      当IBRON  $\geq$  0  
              = 0              当IBRON = -1  
              EBREAK = EDIFF/N-BANDS/4  
              DEPER = 0.3

这些参数已被优化，一般情况下不要改变。

## 4.4.41 TIME

**TIME:** IALGO为5X时的尝试时间步长  
 默认: 0.1

TIME



#### 4.4.42 LWAVE& LCHARG

默认: LWAVE=.TRUE. LCHARG=.TRUE.

控制是否输出波函数(WAVECAR 文件)和电荷密度(CHG CAR 和CHG)。

LWAVE  
LCHARG

#### 4.4.43 LVTOT

默认: LVTOT= .FLASE.

控制是否输出总局域势(LOCPOT 文件)。

LVTOT

#### 4.4.44 LELF

默认: LELF=.FALSE.

控制是否输出电子局域函数(ELFCAR 文件)

LELF

#### 4.4.45 NPAR& LPLANE

默认: NPAR=1

LPLANE= .TRUE.|.FALSE.

这两个参数与并行计算有关。在VASP中提供两种并行方式; 一种对带并行, 一种对平面波系数并行。只有RMM-DIIS算法 (IALGO=48) 支持带并行, CG算法 (IALGO) 只支持平面波系数并行。当NPAR取默认值1时, 意味着只对平面波系数并行 (IALGO=8和48都可以)。参见第6.1节。

NPAR  
LPLANE

#### 4.4.46 LPARD,IBAND,EINT, NBMOD,KPUSE,LSEPB & LSEPK

LPARD

LPARD = .TRUE.|.FALSE.

IBAND = 要考虑的带

EINT = 要考虑的能窗

NBMOD = > 0|0| - 1| - 2| - 3

KPUSE = 要考虑的K点

LSEPB = .TRUE.|.FALSE.

LSEPK = .TRUE.|.FALSE.

这些参数是为了计算部分电荷密度的。LPARD控制是否要计算部分电荷, 当LPARD取.TRUE.时将进行计算部分电荷密度, 有几种不同的方式, 分别有IBAND, EINT和NBMOD 控制。

IBAND: 指定要计算的带, 如IBAND=20 21 22 23

EINT: 指定要计算的能窗, 分别为能窗的上限和下限。一般为两个数, 如只有一个数, 则第二个为费米能。

## 4.4.47 STM

STM = STM(1) STM(2) STM(3) STM(4) STM(5)

默认：无

STM

STM行给出了Bardeen近似模拟STM像的五个参数。在一行上连续给出五个值，分别意义如下：

STM(1) 最小Z坐标

STM(2) 最大Z坐标，

STM(3) Z坐标变化的间隔，一般取0.1 a.u.，即0.052918 Å。

STM(4) G矢量的截断能，即考虑 $\hbar^2 G^2 / m_e < |STM(4)|$  的波矢。当此值为负时，在波函数上将作用一个窗函数：

$$\phi(G) = \phi(G) \times 0.5 \times (1.0 + \cos(\frac{G - G_{min}}{G_{max} - G_{min}} \pi))$$

其中 $G_{min}$ 取0。

STM(5) 费米面附近的能窗，即考虑 $E_{ferm} \pm STM(5)eV$  能窗内的波函数

为了保证有50个Z点，STM(2)应取为 $STM(1) + 49.5 \times STM(3)$ 。

## 4.4.48 NBANDS

指定计算中的总能带数，从而可以指定空带的数目，对大系统来讲可取为 $NELEC/2 + N_{ion}/4$ ，对一般的系统可取为 $NELEC/2 + N_{ion}/2$ ，对过渡金属可取为 $NELEC/2 + 2 \times N_{ion}$ 。

NBANDS

## 4.5 STOPCAR文件

STOPCAR 中可有LSTOP和LABORT参数中的一个。当STOPCAR文件中包含如下行时，

STOPCAR

$$LSTOP = .TRUE.$$

VASP将在下一次离子移动时停止运算，并输出WAVECAR和CHGCAR文件。当STOPCAR文件中包含如下行时，

$$LABORT = .TRUE.$$

VASP将在下一次电子迭代时停止运算，并输出WAVECAR和CHGCAR文件。注意此时输出的波函数和电荷密度是不自洽的，因而不能用来可视化。

## 4.6 DENSU文件

在电子自洽完成后，程序VASP将读DENSU文件，DENSU 文件中的参数和格式与4.4.46 中的参数相同，只是少了个LPARD参数，多了个逻辑型参数LSU 来代替LPARD的作用。如LSU 为.TRUE.，则读DENSU文件；如LSU为.FALSE.或者LSU不存在则不读DENSU文件。在程序读完DENSU文件后，将删除此文件，因此如果以后还想输出电荷密度的话，还需要准备DENSU文件。下面是一个简单的例子。

DENSU

```
LSU      = .TRUE.
EINT     = -2
NBMOD    = -3
```

## 第五章 VASP的输出文件

VASP的输出文件主要有IB、CHG/CHGCAR、WAVECAR、EIGENVALUE、DOSCAR、PAR

### 5.1 CHG/CHGCAR

### 5.2 EIGENVALUE

## 第六章 VASP的计算专题和例子

### 6.1 并行计算参数设置

并行计算主要涉及三个参数：**NP**AR、**L**PLANE以及一个辅助的**NS**IM。

**V**ASP有两种并行方式：对能带的并行和对平面波系数的并行。为了得到好的并行效果建议两种并行方法同时使用，但是这受电子优化算法的限制。对能带并行的方法只有**R**MM-**D**IIS 迭代矩阵对角化算法 (**I**ALGO=48) 支持，常用的**C**G算法 (**I**ALGO=8) 只支持对平面波系数的并行方法，所以为了得到好的并行效果，对大体系建议使用 (**I**ALGO=48)。

**N**PAR告诉**V**ASP对能带进行并行。默认情况 $NP\text{AR} = 1$ ，意味着只对平面波系数进行并行，**I**ALGO=48 和 **I**ALGO=8 都能支持这一方法。在这种情况下，一个带只被一个节点处理，适用于网络带宽比较小的计算平台，但是每个节点需要较大的内存。当**N**PAR不等于1也不等于计算的总节点数**N**是，每个能带在 $N/N\text{PAR}$ 个节点上处理。如计算中共用了16个节点，**N**PAR=4，**V**ASP将会把节点分成如下的二维图：

节点号				
0	1	2	3	bands 1,5,9,...
4	5	6	7	bands 2,6,10,...
8	9	10	11	bands 3,7,11,...
12	13	14	15	bands 4,8,12,...

一个带将会在一组节点上计算，如能带1将会在0、1、2、3号节点上计算，而在节点0上将有能带1, 5, 9, ...在计算。可进一步指定**NS**IM，使得在同一个节点上的**NS**IM个能带一起优化，即采用矩阵-矩阵操作，这样可进一步提高并行效率。

**L**PLANE是影响并行的另一个参数。如**L**PLANE取为.true., the data distribution in real space is done plane wise. **L**PLANE为.true. 一般可减小FFT时的网络通讯，但会破坏计算的负载平衡。**L**PLANE=.true.只能用在**NG**Z (实空间网格**Z**方向的格点数) 大于 $3 * N/N\text{PAR}$ 时。同时**NG**Z如果是**N**PAR的整数倍时有利于保持负载平衡。

上述三参数需要根据计算平台的特点而进行不同的设置，才能最大发挥计算平台的优势。下面是一些测试效果比较好的设置：

- SGI Origin

```
LPLANE = .TRUE.  
NPAR   = 4  
NSIM   = 4
```

- Linux Cluster

```
LPLANE = .TRUE.  
NPAR   = number of nodes.  
LSCALU = .FALSE.  
NSIM   = 4
```

## 6.2 结构弛豫

做结构弛豫一定要在INCAR文件里指定IBRION，参见4.4.15节，其他参数都可以使用默认值，所以最简单的INCAR文件可以为

```
IBRION =      2      ionic relax: 0-MD 1-quasi-New 2-CG
```

另一个重要的参数是ISIF，参见第4.4.17节说明，它决定弛豫哪些东西，比如是只弛豫原子还是原子和元胞都弛豫等。

还可以加上一些其他参数，如电子自洽算法的选择、k点smearing的方法等。

## 6.3 能带计算

由于在能带计算时k点是一些在倒空间高对称线上的点，不能进行自洽计算，因此在能带计算前必须加一次自洽计算以得到精确的电荷密度值。在进行自洽计算时，为了得到较精确的电荷密度，应该将k空间的网格取得尽可能密一些，如可以用 $8 \times 8 \times 8$ 的自动产生的网格，同时k点的smearing方法选成-5，即Blöchl校正的四面体方法。自洽计算得到的电荷密度文件CHGCAR是能带计算需要的输入文件。在进行能带计算时要注意以下几点。

- 在INCAR文件中将ICHARG设为11，见第4.4.8节
- 如研究的体系为半导体性，将ISMEAR设为-5，见第4.4.31节

- 在进行能带和DOS计算时，ISMEAR不能使用N阶MP方法。因为MP方法在空轨道上有负的占据，所以求得的能带和DOS是不正确的
- 根据晶格的不同，设定倒空间上高对称线上的k点，可以手工将每个k点输入到KPOINTS文件，也可利用VASP提供的k点输入的Line模式，见第4.1.3节

## 6.4 表面计算应注意的问题

## 6.5 模拟STM像的办法

采用 Tersoff-Hamann 模型来模拟STM，电流与局域态密度成正比

$$I \propto \sum_{E_\mu=E_F-eV}^{E_F} |\Psi_\mu(r_0)|^2 \quad (6.1)$$

其中V是偏压。VASP中提供的计算部分电荷密度 (partial density) 的功能正好可以用来计算局域态密度，下面简述VASP实现这一功能的方法。

电荷密度的计算可由

$$\rho = \sum_k \omega_k \sum_i f_{ik} \langle \psi_{ik} | \psi_{ik} \rangle \quad (6.2)$$

得到，其中 $\omega_k$ 是k点的权重， $f_{ik}$ 是占据数， $\psi_{ik}$ 是本征波函数，对应的本征能量为 $\epsilon_{ik}$ 。程序中波函数相关的变量包含在wdes和w两个类中，类的定义在wave.inc中，变量定义在main.F中，一些重要的参数定义见表6.1。

表 6.1: VASP中与波函数相关的参数定义。im是平面波基的变量，ib是能带的变量，nk是k点的变量，isp是自旋的变量

k点数	wdes%nkpts
权重	wdes%wtkpt(nk)
波函数系数	w%cptwfp(im,ib,nk,isp)
本征值	w%celtot(ib,nk,isp)
占据数	w%fertot(ib,nk,isp)

VASP中提供的计算部分电荷密度的几种模式，参见第4.4.46节的参数说明，与计算LDOS相匹配的是能窗的模式，其典型的输入可以为

```
LPARD    =    .TRUE.
ENIT     =     $\epsilon_1$    $\epsilon_2$ 
NBMOD    =    -3
```

部分电荷密度计算是非自洽计算，VASP从WAVECAR文件中读入波函数信息，然后将本征能量 $\epsilon_{ik}$ 与能窗 $[\epsilon_1, \epsilon_2]$ 比较，如果 $\epsilon_1 \leq \epsilon_{ik} \leq \epsilon_2$ ，则将 $f_{ik}$ 赋为1，否则 $f_{ik}$ 赋为0，然后用此 $\{f_{ik}\}$ 去计算电荷密度。

计算完成后在当前目录下会产生一个名为PARCHG的文件，用vaspchg（见第7.2节）或者VASPViewer（见第7.1节）处理后就可以模拟的STM像了。

## 6.6 计算中途停电怎么办

VASP针对这种情况在程序里加了软开关，可将中间状态的电子波函数和电荷密度保存下来，参见第4.5节说明。再次启动程序时，将INCAR文件中的ISTART的值从0改成1，参见第4.4.7节说明，就可以使用这些中间保存的数据来继续运算。

## 6.7 晶体总能随元胞体积变化不光滑怎么办

总能计算的一个重要应用就是计算不同元胞时晶体的总能量而得到晶体的稳定元胞，但是在实际计算中经常会出现总能随体积（或为晶格常数）变化不光滑的现象，这主要是计算的精度不够导致的。晶格变化时，到空间的基矢会相应变化，比如晶格变大则倒格矢变小，所以在相同截断动能情况下平面波的展开项会增多，这就导致不同晶格常数时总能计算的精度是不同的。解决的办法可有

- 增加平面波的截断能，即将INCAR文件中的ENMAX增大
- 增加计算中k网格的密度
- 增加计算的精度，将INCAR文件中的PREC设为HIGH

## 6.8 自旋校正问题



## 索引

- A  
ALGO, 19  
APACO, 17
- B  
BLAS, 5
- C  
CG, 20
- D  
DENSU, 24  
DEPER, 21  
DIPOL, 19
- E  
EBREAK, 21  
EDIFF, 14  
EDIFFG, 14  
EINT, 22  
EMAX, 17  
EMIN, 17  
ENCUT, 12
- G  
GGA, 19  
91, 19  
LM, 19  
PB, 19  
PE, 19  
PW, 19  
RP, 19
- I  
IALGO, 20  
IBAND, 22  
IBRION, 14, 27  
ICHARG, 13  
INCAR, 11  
INIWAV, 13  
ISIF, 15  
ISMEAR, 18  
ISPIN, 12  
ISTART, 12  
ISYM, 16  
IWAVPAR, 15
- K  
KBLOCK, 14  
KPOINTS, 8  
KPUSE, 22
- L  
LCHARG, 22  
LCORR, 16  
LDIAG, 20  
LDOS, 28  
LELF, 22  
LORBIT, 17  
LPARD, 22, 24  
LPLANE, 22, 26  
LREAL, 18  
LSEPB, 22  
LSEPK, 22  
LSU, 24  
LVTOT, 22  
LWAVE, 22
- M  
MAGMOM, 12
- N  
NBANDS, 23  
NBLOCK, 14  
NBMOD, 22  
NELECT, 17  
NELM, 13  
NELMDL, 13  
NELMIN, 13  
NFREE, 14

- 
- NPACO, 17  
NPAR, 22, 26  
NSIM, 21, 26  
NSW, 14  
NUPDOWN, 17  
NWRITE, 11
- P
- POMASS, 17  
POSCAR, 10  
POTCAR, 11  
POTIM, 14  
PREC, 12  
PRECSYM, 16  
PSTRESS, 15
- R
- RMM-DIIS, 20  
RWIGS, 17
- S
- SIGMA, 18  
SMASS, 16  
STM, 23  
STOPCAR, 23  
SYSTEM, 11
- T
- TEBEG, 16  
TEEND, 16  
Tetrahedron, 8  
TIME, 21
- V
- vaspchg, 29  
VASPViewer, 29  
VOSKOWN, 19
- W
- WEIMIN, 21
- Z
- ZVAL, 17
- 混合参数, 21  
AMIX, 21
- AMIX\_MAG, 21  
BMIX, 21  
BMIX\_MAG, 21  
IMIX, 21  
INIMIX, 21  
MAXMIX, 21  
MIXPRE, 21  
WC, 21