一个完整的VASP程序主要包括输入文件以及输出文件两个部分。其中输入文件主要由以下几个部分构成：

1、KPIONT：K点选取

2、POTCAR：所使用的势函数文件

3、POSCAR：体系初始元素以及位置构成

1. INCAR：如何进行计算。

KPOINT

此文件较为简单，文件主要设置了布里渊区里的k点网格或能带结构计算时沿高对称方向的k点。可以采用手动输入或自动产生k点两种方法，其中后者是最常用的。对于初次计算的体系，我们需要对K点取值进行测试，下面用一个KPOINT文件的实例进行介绍：

--------------------------------------------------------------------------------------------------------

K-Points ！注释行，无实意

0 ！自动生成K点，即标记为0；若手动，此行为K点选取个数

Monkhorst Pack ！用Monhkorst-Pack方法产生K点

3 3 3 ！在各个基矢方向上分割的数目

0 0 0 ！网格点相对的位移（此处不移动）

---------------------------------------------------------------------------------------------------------

POSCAR

此文件主要包含了所计算体系初始的状态，即所计算的元素个数，各个原子的数目及位置，是否弛豫等信息。也就是说，POSCAR决定了计算什么的问题。下面则为He在BCC结构的W晶格中所写入的POSCAR文件：

---------------------------------------------------------------------------------------------------------

PERFECT BCC W ！注释行，无实意

4.0 ！体系缩放系数

3.1740524962 0.0000000000 0.0000000000 ！体系在x方向的晶格常数

0.0000000000 3.1740524962 0.0000000000 ！体系在y方向的晶格常数

0.0000000000 0.0000000000 3.1740524962 ！体系在z方向的晶格常数

1 128 ！各元素原子在体系中的个数

Selective dynamics

Direct ！狄拉克坐标系

0.125 0.125 0.00 T T T ！第一种元素第一个原子的坐标（在x，y，z方向上都弛豫，下同）

0.00 0.00 0.00 T T T ！第二种元素第一个原子的坐标

0.25 0.00 0.00 T T T ！第二种元素第二个原子的坐标

……

0.875 0.875 0.875 T T T ！第二种元素第127原子的坐标

0.375 0.375 0.375 T T T ！第二种元素第128原子的坐标

---------------------------------------------------------------------------------------------------------

POTCAR

此文件主要描述了所计算的体系所用到元素的势函数。

需要注意的是，当有两种或两种以上元素同时存在于体系的时候，需要将元素的先后顺序与POSCAR中各个元素原子在体系中的个数的顺序对应起来。也就是说，比如我POSCAR为1 128（1表示He的数目，128表示W的数目），那么POTCAR中必须He在势函数排放在W的势函数之前，且两个势函数之间不能有空行。

INCAR

此文件为最重要的输入文件，主要决定了VASP如何进行计算的问题。同样通过下述文件进行说明：

---------------------------------------------------------------------------------------------------------

SYSTEM=WHe ! Name of the system

NWRITE=2 ! verbosity write flag

ISTART=0 ! startjo: 0-new 1-const 2-samecut

ISPIN=1 ! spin polarized calculation (2-yes 1-no)

GGA=91

INIWAV=1 ! initial elect. wf : 0-lowe 1-rand

PREC=Accurate ! precission:medium h

NELM=60

EDIFF=10E-6 ! stopping criterion for electr updt

EDIFFG=-0.01 ! stopping criterion for + energy - forces

ENCUT=350 ! max cut off introduced based on previous calc.

NSW=600 ! number of steps for ionic update

POTIM=0.5 ! default value for IBRION=1&2

IBRION=2 ! ionic relaxation:0-MD 1-quasi new 2-CG

ISIF=3 ! switch to control if calculate stress tensor etc. and what to relax?

ISYM=1 ! symmetry:0-nonsym 1-usesym

LCORR=.TRUE. ! Harris correction to forces and stress tensor

ISMEAR=1 ! for semiconductor, and using 1 or 2 k points, otherwise <0,=1 for metals

SIGMA=0.2 ! broadening in eV -4 tet -1 fermi 0-gaus

IALGO=38 ! algorithm:Use only 8(CG) or 48 (RMM-DIIS,for parallel)

LREAL=.FALSE. ! non local projectors in real space,note:using the same parameters for all calculations to avoid errors

NSIM=1 ! make the cal faster, no influ on TE

IMIX=4 ! IMIX, AMIX, BMIX for default values

BMIX=1.0 ! tags for mixing

LWAVE=.FALSE.

LCHARG=.TRUE.

LVTOT=.FALSE. ! create WAVECAR, CHGCAR,LOCPOT

---------------------------------------------------------------------------------------------------------

除了上述已经写入的参数之外,INCAR还有很多可以设置的参数。比如NELECT（设置体系电子个数）、PSTRESS（外加压力）等。而在此，将着重介绍一下几个关键的参数设置：

1. ENCUT即平面波基组的截断能，直接影响了计算的快慢与精度。
2. ISPIN即是否计算自旋，本次计算中设置为1，即不考虑自旋。
3. EDIFF即允许误差，精度的设置。
4. ISIF即控制是否弛豫离子、是否改变晶胞的大小与形状等设置。本次计算中对于无应变情况设置为2，即离子位置和晶胞大小都弛豫；对于有应变情况，设置为3，即内层粒子都弛豫，但不改变晶胞大小与形状。ISIF具体值所对应情况如下图:



图表 3‑0‑1 ISIF值所对应的体系计算

而VASP的输出文件也相当丰富。主要输出文件有OUTCAR，CHG，CHGCAR，WAVECAR，DOSCAR，EIGENVAL，OSZICAR，CONTCAR，PCDAT，IBZKPT，XDATCAR、PROCAR等。

OUTCAR

OUTCAR文件几乎包含使用VASP软件包进行计算后所得到的绝大部分结果，每步迭代后的详细情况。通过输入相应的命令，就可以从OUTCAR取出一些有用的信息，如计算体系的体积、计算体系的总能、计算体系的费米能级、计算体系的倒格子基矢、体系中原子的受力情况等。本次计算中主要使用的就是OUTCAR文件输出的总能结果。

CHG和CHAGECAR

这两个文件给出了体系的电荷密度文件，内容是相同的，只是前者给出的数据精度要比后者的精度略低一些。

每步迭代之后，这两个文件都会被更新，并且使用这两个文件，可以通过画图得到电荷密度分布图。

DOSCAR和EIGENVAL文件

DOSCAR给出的计算体系的电子态密度，EIGENVAL给出体系的本征值。这两个文件给出的能量值都是绝对的，而不是以费米能级做为参考零点。

OTHERS

WAVECAR给出的是所计算体系的电子波函数，二进制文件，不可编辑；

OSZICAR每次迭代或离子移动情况的简单汇总；

CONTCAR给也离子进行弛豫时，每次移动后体系的晶格参数弛豫，与POSCAR的内容相同。在对体系进行弛豫或分子动力学计算时，最后得到的CONTCAR可以直接拷贝成POSCAR进行后面的计算。不仅如此，分析CONTCAR相对于完美晶格的形变也可以解释粒子的溶解与扩散现象。

IBZKPT给出的是不可约布里渊区K点的坐标。

VASPRUN可以利用相应的软件（如P4VASP）读出DOS（dengsity of states）即态密度的信息。注意：在计算态密度的时候，需要先计算出体系弛豫后的位置，再将其设为POSCAR，在INCAR中将NSW设为0（即离子不弛豫），加入LOBRIT=11，这样输出的vasprun才包含态密度的信息。