从头开始用 VASP 做结构优化

张旻烨　王越超　许熙　栾东

登入 Linux

编辑文件

VASP 输入文件解读

执行 VASP 计算

解读结构优化过程

登入 Linux

编辑文件

编辑文件

Vim

VASP 输入文件解读

POSCAR: 晶体结构文件

获取晶体结构 I

Inorganic Crystal Structure Database: 实验结构

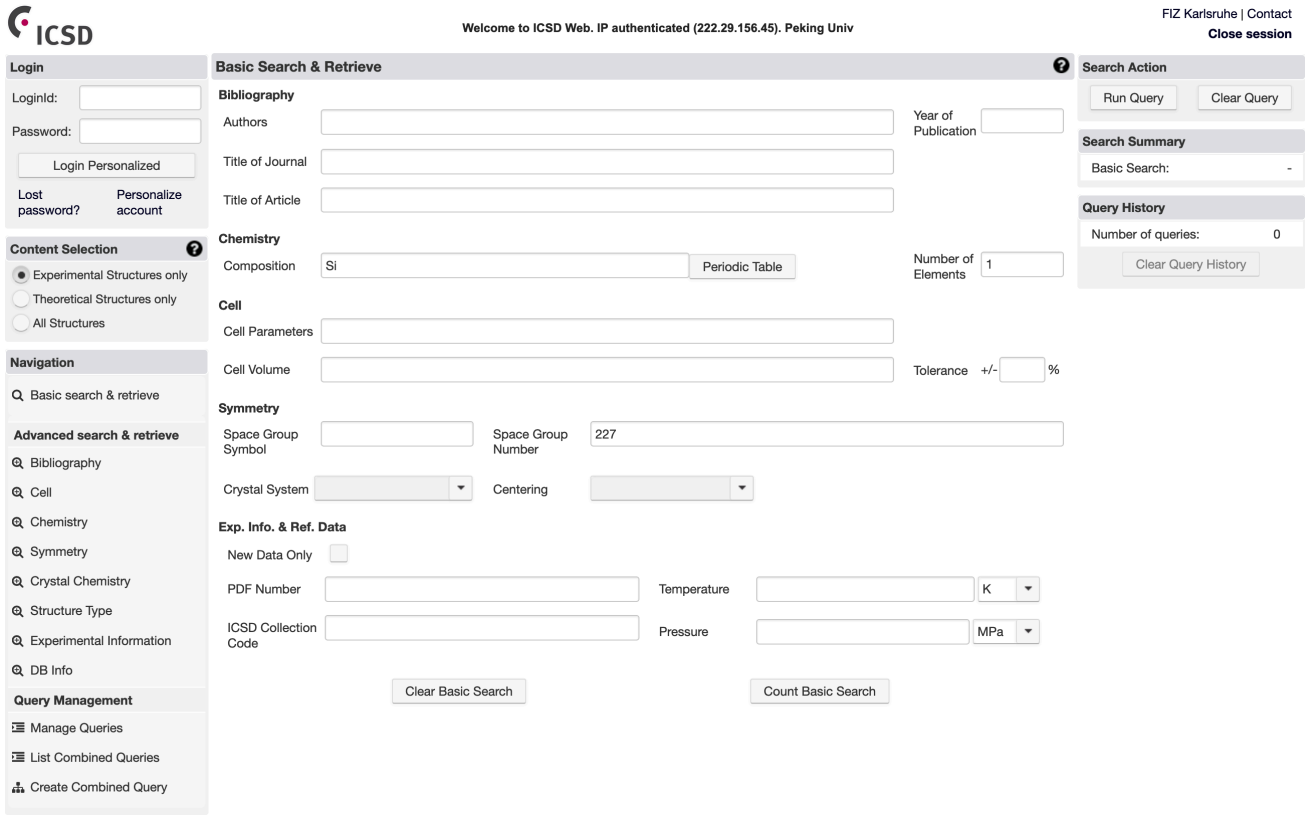

Figure 1: ICSD 搜索页面

获取晶体结构 II

AFLOW: Duke 材料基因组学数据库

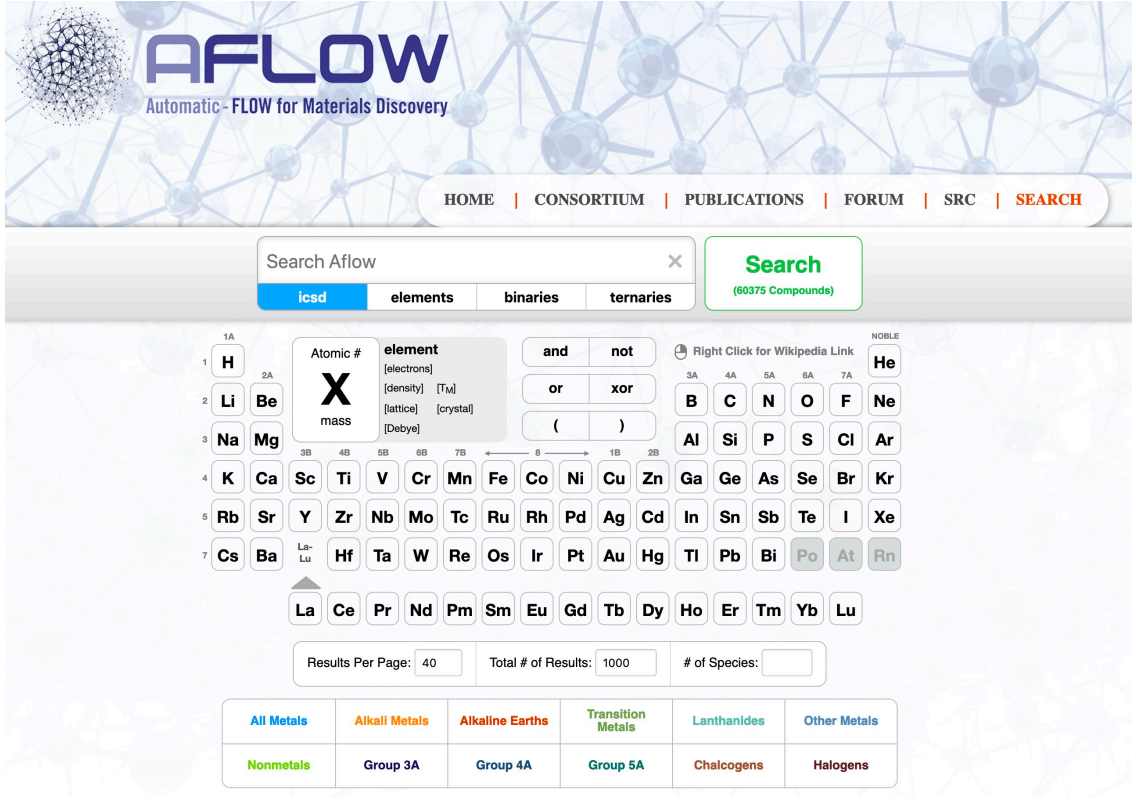

Figure 2: AFLOW 搜索页面

获取晶体结构 III

Materials Project: 基于 `pymatgen` 的材料基因组学数据库

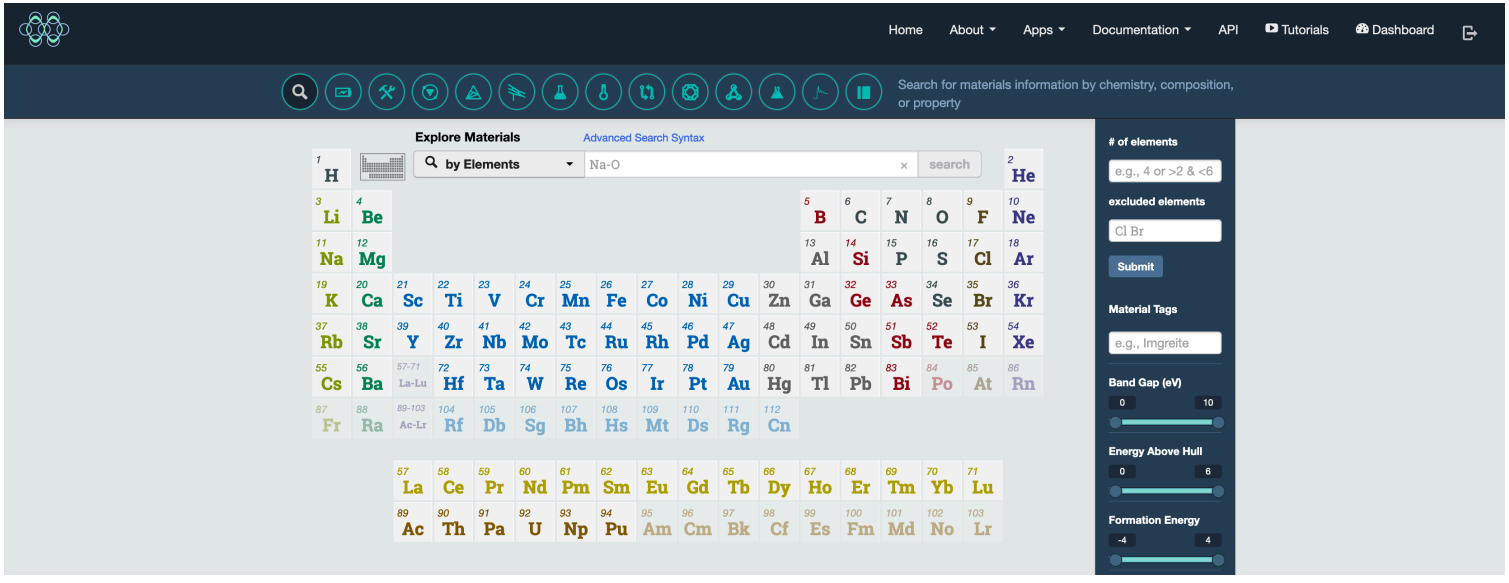

Figure 3: MaterialsProject 搜索页面

执行 VASP 计算

创建运算目录

- 教学一号

```
$ ls
POSCAR POTCAR INCAR KPOINTS sc_run_vasp.sh
$ mkdir session-1/
$ cp POSCAR POTCAR INCAR KPOINTS session-1/
$ cp sc_run_vasp.sh session-1/
$ cd session-1/
```

- TMC PC

```
$ ls
Documents Downloads tests ...
$ mkdir -p tests/YOUR_NAME
$ cp POSCAR POTCAR INCAR KPOINTS tests/YOUR_NAME
$ cd tests/YOUR_NAME
```

运行 VASP I

确认 vasp 可执行程序的位置: which

- 教学一号

```
$ which vasp_std
$ module load vasp/5.4.4-intel18.0
$ which vasp_std
/nfs-share/software/vasp/intel18.0/bin/vasp_std
```

- TMC PC

```
$ which vasp_std
/home/dft003/software/vasp.5.4.4/bin/vasp_std
```

运行 VASP II

为什么第一次 `which` 的结果不同?

在教学一号上

```
$ echo $PATH
/nfs-share/software/vasp/intel18.0/bin/:
/nfs-share/software/module/bin:/usr/local/bin:/usr/bin:
...
```

运行 VASP III

```
$ cat sc_run_vasp.sh
#!/usr/bin/env bash                    # 解释器
#SBATCH -A 150xxxxxxx                  # 学号
#SBATCH --nodes=1                      # 使用一个节点
#SBATCH -c 2                           # 每个任务用 2 个核心
#SBATCH --partition=compute            # 指定计算分区
#SBATCH -J test                        # 任务名
#SBATCH -o stdout

module load intel/2018.0               # 载入 Intel 编译器环境变量
module load vasp/5.4.4-intel18.0 # 载入 VASP 环境变量 (PATH)

mpirun -np 2 vasp_std                  # 运行
```

运行 VASP IV

- 教学一号

```
$ sbatch sc_run_vasp.sh
Submitted batch job xxxx
$ watch -n 1 stdout
```

- TMC PC

```
$ mpirun -np 2 vasp_std > out &
$ watch -n 1 out
```

解读结构优化过程