

1 VASP の使用法

1.1 計算ホストへのログイン

研究室の計算ソフトのインストールされているサーバ（以下計算ホスト）へは，外部から直接ログインできない構成になっている．本節では，研究室内の PC へリモートログインし，その PC から，計算ホストへリモートログインするまでの操作を説明する．

1. 研究室の PC へログインする．下記のアカウント名と Password の欄には，配布したプリントに記載されているアカウント名とパスワードを入力する．

——— ターミナル ———

```
/Users/sakamotoyuichi% ssh {アカウント名}@192.218.172.38
Password:
Last login: Wed Oct 19 17:26:37 2011 from 192.168.1.59
nishitani-shigeruhito-no-mac-mini:~ vaspguest$ pwd
/Users/vaspguest
```

2. 計算ホストにログインする．
※こちらは先ほどのアカウント名とパスワードとは異なる．

——— ターミナル ———

```
nishitani-shigeruhito-no-mac-mini:~ vaspguest$ ssh {アカウント名}@192.168.5.12
Password:
Last login: Fri Oct 14 20:17:27 2011 from 192.168.1.61
Have a lot of fun...
test2@asura0:~>
```

1.2 VASP の実行

VASP では図 1 のようなプロセスで計算が実行される．
VASP を実行するためには INCAR ファイル，POSCAR ファイル，KPOINTS ファイル，POTCAR ファイルの 4 つの Input ファイルを用意する．なお，操作性を向上させるため，一つの計算ごとにディレクトリを作ることを推奨する．これらのファイルの詳細は付録 B 節に記載する．

まず，計算に使用するディレクトリの作成，ファイルのコピーの操作を行う．

——— ターミナル ———

```
#絶対パスを表示
default@asura0:~> pwd
/home/default
default@asura0:~> ls
Documents/ bin/ data/ public_html/
#ディレクトリの作成
default@asura0:~> mkdir guest
default@asura0:~> ls
Documents/ bin/ data/ guest/ public_html/
default@asura0:~> cd guest
default@asura0:~/guest> mkdir Si
#data のディレクトリにあるファイルをコピーする
default@asura0:~/guest> cp /home/default/data/Si/* Si/
#ファイル，ディレクトリを表示
default@asura0:~/guest> ls Si/
INCAR KPOINTS POSCAR POTCAR
default@asura0:~/guest>
```

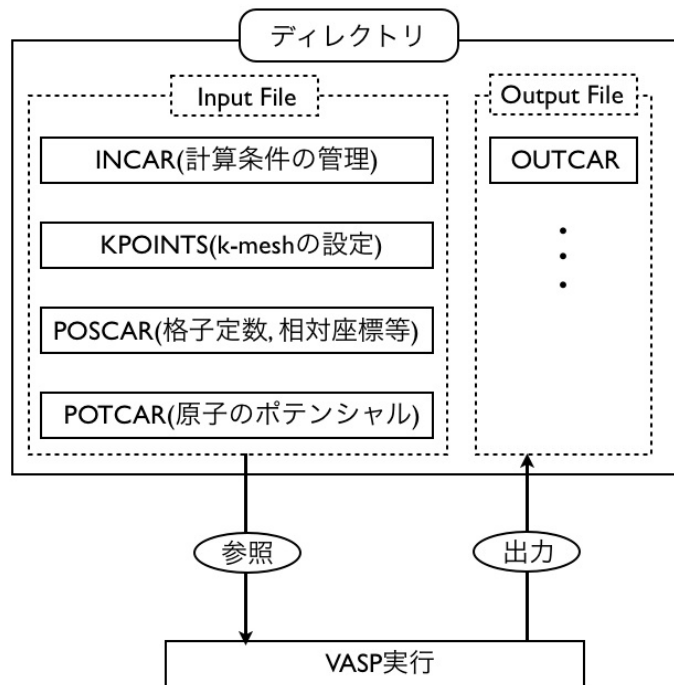


図 1: VASP の計算のプロセス. ディレクトリの中に 4 つの入力ファイルを用意して VASP を実行. 計算終了後, 結果をディレクトリに出力する.

次に, 用意した 4 つのファイルを使い VASP を実行する.

ターミナル

```
#コマンドのパスを表示
test@asura0:~/Si> which vasp
/usr/local/vasp/vasp.4.6.28/vasp
#計算実行のコマンド
test@asura0:~/Si> vasp
running on      1 nodes
distr:  one band on      1 nodes,      1 groups
vasp.4.6.28 25Jul05 complex
POSCAR found :  1 types and      2 ions
LDA part: xc-table for Pade appr. of Perdew
POSCAR, INCAR and KPOINTS ok, starting setup
FFT: planning ...           1
reading WAVECAR
entering main loop
      N      E          dE          d eps          ncg          rms ...
DAV:   1      0.912638858489E+01    0.91264E+01   -0.30406E+03    560    0.809E+02.
DAV:   2     -0.873197391498E+01   -0.44878E+00   -0.44879E+00    720    0.138E+01
DAV:   3     -0.873458183285E+01   -0.26079E-02   -0.26075E-02    832    0.130E+00
DAV:   4     -0.873458882206E+01   -0.69892E-05   -0.69892E-05    768    0.611E-02 ...
DAV:   5     -0.872574201848E+01   -0.11826E-02   -0.17346E-03    640    0.263E-01 ...
DAV:   6     -0.872581715611E+01   -0.13583E-04   -0.25872E-05    568    0.323E-02 ...
DAV:   7     -0.872581713107E+01    0.25041E-07   -0.70291E-07    288    0.681E-03
      1 F= -.87258171E+01 E0= -.87256900E+01 d E =-.872582E+01
curvature:  0.00 expect dE= 0.000E+00 dE for cont linesearch 0.000E+00
trial: gam= 0.00000 g(F)= 0.144E-44 g(S)= 0.000E+00 ort = 0.000E+00 ...
search vector abs. value= 0.100E-09
reached required accuracy - stopping structural energy minimisation
```

計算終了後, ディレクトリ内に OUTCAR ファイル等が生成される.

ターミナル

```
test@asura0:~/Si> ls
CHG      CONTCAR  EIGENVAL  INCAR*   KPOINTS*  OUTCAR   POSCAR*  POTCAR*  WAVECAR  vasprun.xml
CHGCAR  DOSCAR    IBZKPT   INCAR~*  OSZICAR   PCDAT   POSCAR~*  PROCAR   XDATCAR
```

OUTCAR ファイルは計算終了後に作成されるファイルである。この OUTCAR ファイルには計算終了後の自由エネルギー、基本並進ベクトル、各座標座標データなどのデータが出力される。また、他にもバンドの数、原子にかかるフォースの大きさや計算時間も出力される。

ターミナル

```
test2@asura0:~/Si> cat OUTCAR
vasp.4.6.28 25Jul05 complex
executed on      LinuxIFC date 2011.10.14  21:58:52
running on      1 nodes
distr: one band on 1 nodes, 1 groups
      :
      :
      :
VOLUME and BASIS-vectors are now :
-----
energy-cutoff   :      600.00
volume of cell  :      70.65
  direct lattice vectors      reciprocal lattice vectors
0.0000000122  3.281162598  3.281162538  -0.152385014  0.152385017  0.152385014
3.281162598  0.0000000061  3.281162538   0.152385014 -0.152385017  0.152385014
3.281162598  3.281162538  0.0000000001   0.152385014  0.152385011 -0.152385020
```

1.3 E-V 曲線の作成

E-V 曲線は系のエネルギーの体積依存性を示す。この E-V 曲線を利用して、最安定の体積を求めることや正しく緩和できているかの確認などができる。さらに、エネルギーを体積で一次微分して圧力を得ることができ、二次微分では、固体の硬さを求めることもできる。以下では、ダイヤモンド構造をもつ Si をモデルとして E-V 曲線を描く操作を示した。

1. VASP の計算を実行する。

ターミナル

```
test@asura0:~/Si> ls
INCAR KPOINTS POSCAR POTCAR
test@asura0:~/Si> vasp
```

2. 計算実行後、まずはエラーが起こっていないかを確認するため、cat で OUTCAR ファイルを確認する。エラーがなければ、OUTCAR ファイルから体積とエネルギーを抽出する。OUTCAR ファイルは行数が多いため、grep することを勧める。TOTEN は一番最後に出された値がエネルギーの収束値を表す。

ターミナル

```
test@asura0:~/Si> grep "TOTEN" OUTCAR
free energy TOTEN =      6.85808160 eV
free energy TOTEN =     -10.78884267 eV
free energy TOTEN =     -11.01663957 eV
free energy TOTEN =     -10.90056580 eV
test@asura0:~/Si> grep "volume of cell" OUTCAR
volume of cell :      40.89
volume of cell :      40.89
```

3. 次の計算を実行すると、OUTCAR ファイル等の出力ファイルが上書きされてしまうため、バックアップをとっておく。

```
test@asura0:~/Si> mkdir default
test@asura0:~/Si> cp ./* default/
cp: omitting directory './default'
test@asura0:~/Si> ls
CHG  CONTCAR  EIGENVAL  INCAR  OSZICAR  PCDAT  POSCAR~  PROCAR  XDATCAR
vasprun.xml  CHGCAR  DOSCAR  IBZKPT  KPOINTS  OUTCAR  POSCAR  POTCAR  WAVECAR  default/
test@asura0:~/Si> ls default/
CHG  CONTCAR  EIGENVAL  INCAR  OSZICAR  PCDAT  POSCAR~  PROCAR  XDATCAR
CHGCAR  DOSCAR  IBZKPT  KPOINTS  OUTCAR  POSCAR  POTCAR  WAVECAR  vasprun.xml
```

4. POSCAR ファイルの格子定数の倍率を 1.0 から 0.8 や 1.2 など書き換える.

```
test2@asura0:~/Si> emacs POSCAR
```

倍率の変え方は 1 を基準に 0.1 (0.8,0.9,1.0,1.1,1.2) や 0.05(0.9,0.95,1.00,1.05,1.10) 刻みでとることをお勧めする.

```
(Si)8 (P1) diamond Si / k-0.3 / cut 400
1.0000000000000000
5.4689000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
0.0000000000000000 5.4689000000000000 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 5.4689000000000000
8
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
0.5000000000000000 0.5000000000000000 0.0000000000000000
0.5000000000000000 0.0000000000000000 0.5000000000000000
0.0000000000000000 0.5000000000000000 0.5000000000000000
0.2500000000000000 0.2500000000000000 0.2500000000000000
0.7500000000000000 0.7500000000000000 0.2500000000000000
0.7500000000000000 0.2500000000000000 0.7500000000000000
0.2500000000000000 0.7500000000000000 0.7500000000000000
```

- : 格子定数の倍率
- ⋯ : 基本並進ベクトル
- ⋯ : 原子数
- : 原子位置

図 2: POSCAR ファイル

5. 計算を実行する.

ターミナル

```
test2@asura0:~/Si> vasp
```

6. 2 と同様に 6 で計算した OUTCAR ファイルを cat し, エラーがないかを確認する. その後, 体積とエネルギーを抽出する.

7. 新しいディレクトリを作り, 入力ファイルと出力ファイルのコピーを取る.

ターミナル

```
test@asura0:~/Si> mkdir scale08
test@asura0:~/Si> cp ./scale08/
cp: omitting directory './default'
cp: omitting directory './scale08'
test@asura0:~/Si> ls
CHG      CONTCAR  EIGENVAL  INCAR      OSZICAR  PCDAT  POSCAR~
PROCAR   XDATCAR   scale08/ CHGCAR  DOSCAR  IBZKPT
KPOINTS  OUTCAR    POSCAR  POTCAR  WAVECAR  default/
test@asura0:~/Si> ls scale08/
CHG      CONTCAR  EIGENVAL  INCAR      OSZICAR  PCDAT  POSCAR~
PROCAR   XDATCAR  CHGCAR   DOSCAR    IBZKPT   KPOINTS  OUTCAR
POSCAR   POTCAR   WAVECAR  vasprun.xml
```

8. 格子定数の倍率を変化させる分だけ, 5 から 8 の作業を繰り返す.

9. OUTCAR ファイルから抽出した体積を横軸に, エネルギーを縦軸にしてプロットし, E-V 曲線を作成する.

以上のプロセスから図 3 のようなダイヤモンド構造の Si の E-V 曲線を作成した. この図を作成するにあたり数値計算ソフトである Maple を使用した.

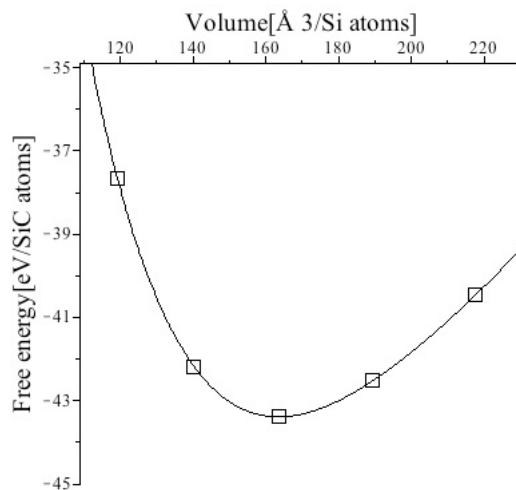


図 3: Si の E-V 曲線

A Linux コマンド

- cd

- cd コマンドは、現在作業しているディレクトリを指定したディレクトリに移動するためのコマンド。cd [ディレクトリ名] で指定したディレクトリに移動できる。コマンド名 cd は Change Directory に由来する。

- pwd

- pwd コマンドは、現在作業しているディレクトリを表示させるためのコマンド。現在作業しているディレクトリのことをカレントディレクトリと呼ぶ。コマンド名 pwd は Print Working Directory に由来する。Linux のファイルシステムはルート「/」を起点とするツリー構造である。このルートから順にツリー構造をたどっていく指定方式を絶対パスと呼び、この方法では目的のディレクトリやファイルは必ず一意に指定できる。一方、カレントディレクトリから相対的にパスを指定する方法を相対パスと呼ぶ。カレントディレクトリは「.」という絶対パスで表されるという慣例があり、カレントディレクトリを基準にして相対パスを入力するには「./(目的のディレクトリまでの相対パス)」という体裁をとる。例えば、UNIX のコマンドラインで「./bin/xedit」というコマンドを入力した場合、このコマンドは「カレントディレクトリの真下にある「bin」というディレクトリから、「xedit」というファイルを探して実行する」と解釈される。GUI ベースのプログラムではカレントディレクトリを把握しにくいと、ほとんどの処理は絶対パスを用いて行われている。

- ls

- ls コマンドは、ls [オプション] でカレントディレクトリにあるファイルやディレクトリを表示するためのコマンド。コマンド名 ls は List directory に由来する。

- * オプション

- a 隠しファイルを含む全てのファイルを表示する。
 - l ファイルの詳細を表示する。
 - G ファイルタイプに応じて色分けする。
 - t タイムスタンプ順にソートする。
 - F ディレクトリには/, 実行ファイルには*をつけて出力する。

- mkdir

- mkdir コマンドは、mkdir [作成ディレクトリ名] で指定したディレクトリを作成する。コマンド名 mkdir は Make Directory に由来する。

- touch

- touch コマンドは touch [オプション] [変更ファイル名] で更新日時を変更する。また指定した名前のファイルやディレクトリが存在しない場合、空ファイルを作成する。

- オプション

- c 指定したファイルが存在しない場合でもファイルを作成しない。

- cat

- cat コマンドはファイルの内容の閲覧をしたり、ファイルを連結するためのコマンドであり、cat [ファイル名] で指定したファイルの内容を標準出力に出力する。コマンド名 cat は concatenate stdout に由来する。

- more

- more コマンドは、more [オプション] [閲覧したいファイル名] でファイルの内容を閲覧するためのコマンド。

- オプション

- +/[パターン] パターン検索をし、そこから表示を開始する。
 - + [行数] 表示開始行を指定する。

- less

- less コマンドは、less [オプション] [閲覧したいファイル名] でファイルの内容を閲覧するためのコマンド。

- オプション

- e ファイルの終端に二度到達すると終了する。
 - f テキストファイル以外でも警告を表示せずにファイルを開く。
 - E ファイルの終端に一度到達すると終了する。

- grep

- grep コマンドは、grep [オプション] [文字列パターン] [ファイル名] で文字列を検索するためのコマンド。

- オプション

- n 入力ファイルにおける行番号を表示する。
 - v 指定した文字列パターンを含まない行を表示する。

- diff

- diff コマンドは、diff [オプション] [ファイル名 1] [ファイル名 2] で指定したファイルの内容の違いを調べられるコマンド。

- オプション

- a 全てのファイルをテキストとみなして比較を行う。
 - b 空白の数だけが違う場合には違いを無視する。
 - i 英大文字と小文字の違いを無視する。
 - q ファイルが違うかどうかだけを報告する。

- cp

- cp コマンドは、cp [オプション] [コピー元ファイル名] [コピー先ファイル名] で指定したファイルをコピーするためのコマンド。コマンド名は Copy file に由来する。

* オプション

- i ファイルの上書きを確認する.
- R ディレクトリを再帰的にコピーする.
- p コピー元ファイルのオーナー、グループ、パーミッション、最終更新日時、最終アクセス日時を可能な限り保持してコピーする.
- a コピー元ファイルの構成と属性を可能な限り保持してコピーする.

● mv

- mv コマンドは、mv [変更前ファイル名] [変更後ファイル名] でファイルの名前を変更するコマンド。また、mv [ファイル名] [移動先ディレクトリ名] でファイルを移動させることができる。コマンド名は Move file に由来する。

● rm

- rm コマンドはrm [オプション] [削除ファイル名, ディレクトリ名] で指定したファイルやディレクトリを削除する。コマンド名 rm は Remove file に由来する。

* オプション

- f ファイルを削除するとき、削除の確認をしない.
- i ファイルを削除するとき、削除の確認をする.
- r ディレクトリを再帰的に削除する.

● emacs

- emacs コマンドは、emacs [ファイル名] で指定したファイルを emacs というエディタで開き、編集するコマンド。

● top

- top コマンドは、現在の実行プロセスを表示させるコマンド。終了するには q を入力する。

● ps

- ps コマンドは、ps [オプション] で現在起動しているプロセスを表示するためのコマンド。

* オプション

- a 他のユーザーのものも含め、このターミナルの全てのプロセスを選択する.
- u プロセスを実行しているユーザの名前を表示する.
- x 制御端末の無いプロセスの情報も含める.

● which

- which コマンドは、which [コマンド名] で指定したコマンドのパスを表示するコマンド。

● ssh

- ssh コマンドは, ssh [ユーザー名]@[ホスト名 or IP アドレス] で指定したホストに ssh で接続するコマンド. ssh は通信が暗号化されるため, セキュリティ上, 比較的安全な接続が実現される.

- man

- man コマンドは, man [コマンド名] で指定したコマンドのマニュアルを表示するコマンド. 終了するには q を入力する.

B 設定ファイル

B.1 INCAR

INCAR ファイルは VASP における入力ファイルである. INCAR ファイルにはどのような条件下で第一原理計算を行うかを決定するパラメータが明記されている.

例として, Si の計算を行う際の INCAR ファイルを図 4 に示した. 以下に示されているパラメータを説明する.

```
PREC = Accurate
ENCUT = 600
IBRION = 2
NSW = 100
ISIF = 3
NELMIN = 2
EDIFF = 1.0e-05
EDIFFG = -0.02
VOSKOWN = 1
NBLOCK = 1
NELM = 60
ALGO = Normal (blocked Davidson)
ISPIN = 1
INIWAV = 1
ISTART = 0
ICHARG = 2
LWAVE = .FALSE.
LCHARG = .FALSE.
ADDGRID = .FALSE.
ISMear = 1
SIGMA = 0.2
LREAL = .FALSE.
RWIGS = 1.11
```

図 4: INCAR ファイル.

PREC(Precision) 計算の精度をつかさどるパラメータである. Low, Medium, High, Normal, Accurate などがあり, Normal と Accurate は VASP4.5 以降の ver. のみで利用できる. なお, 構造最適化を目的とした計算の場合, より正確なエネルギーを求める必要があるため, もっとも精度の高い Accurate と設定するのが望ましい.

default PREC=Mediam

ENCUT(Energy Cut-off) Cut-off energy と呼ばれる値を入力するパラメータである。これは、どれだけ短波長の平面波を使い、波動関数をより精密に表現することに関連するパラメータである。また、入力した値が大きいほど、短波長の平面波も計算に考慮し、より精密な計算を行うことができる。なお、計算系によって最適な Cut-off energy の値は異なるため、まず系毎に適切な精度の検証を行い、十分にエネルギーが収束する値を用いることが理想的である。

default ENCUT=largest ENMAX from POTCAR

NBANDS(Number of Bands) バンドの数を決定するパラメータである。一般的には、記述しなくても適当な値をとる。

ISIF(Ion Stress Ion Freedom) 応力テンソルをどのように計算するかを決めるパラメータである。force や応力テンソル、イオンのリラックス、セルの形や体積の変化などを考慮するか否かを決定できる。詳細は表 1 に示す。応力テンソルの計算は比較的時間がかかる。

default

if IBRION=0 ISIF=0

else ISIF=2

表 1: ISIF (0~7) による相違点

| ISIF | calculate force | calculate stress tensor | relax ions | change cell shape | change cell volume |
|------|--------------------|----------------------------|---------------|----------------------|-----------------------|
| 0 | yes | no | yes | no | no |
| 1 | yes | trace only | yes | no | no |
| 2 | yes | yes | yes | no | no |
| 3 | yes | yes | yes | yes | yes |
| 4 | yes | yes | yes | yes | no |
| 5 | yes | yes | no | yes | no |
| 6 | yes | yes | no | yes | yes |
| 7 | yes | yes | no | no | yes |

IBRION(Ionic Relaxation) 構造緩和に利用する計算手法を決定する.

default

if NSW=0 or 1 IBRION=-1.

else IBRION=0

-1 イオンをリラックスさせない.

0 分子動力学 (MD:molecular dynamics) .

1 準ニュートン法 (quasi-Newton) .

2 共役勾配法 (conjugate-gradient) .

3 最急降下法 (Steepest descent method) .

NSW(Number of ion Steps) イオンの最大ステップ数を決定するパラメータである. 原子への力やストレスはイオンのステップ数の計算により求まるので, 構造緩和において重要な項目である. つまり, 少なすぎると, 計算精度が落ち, 収束せずに計算を終える場合がある. その反面大きくすると計算時間が長くなるが, 収束した際にはその時点で計算は打ち切られる.

default NSW=0

NELM(Number of Electronic Maximum) セルフコンシステントループのループ数の上限を決定するパラメータである. NSW と同様に計算結果が収束すると, 上限に達せずとも計算は終了する.

default NELM=60

NELMIN(Number of Electronic Minimum) セルフコンシステントループの下限を決定するパラメータである.

default NELMIN=2

EDIFF(Energy Difference) 電子計算の際, どの程度の収束で計算を終了するかを決めるパラメータである. イタレーション毎のエネルギー差を算出し, その値が EDIFF で指定した値以下になれば, 計算が終了する.

default EDIFF=1.0e-04= 10^{-4}

EDIFFG(Energy Difference) イオン計算の際に, どの程度の収束で計算を終了するかを決めるパラメータである. イタレーションごとに前の結果とのエネルギー差を算出し, その値が EDIFF で指定した値以下になれば, 計算が終了する.

default EDIFFG=EDIFF*10

VOSKWN(Vosko-Wilk-Nusair) 一般的な計算で, 電子の相関がある一部を補間する場合に使う, 補間の方法を決定するパラメータである.

default VOSKWN=0

0 磁性を考慮する

1 磁性を考慮しない

ISPIN(Ion Spin) スピンを考慮するかどうかを指定するパラメータである.

default ISPIN=1

1 スピンを考慮しない.

2 スピンを考慮する.

MAGMOM(Magnetic Moment) 計算対象とするモデルに含まれる各原子の磁気モーメントを指定するパラメータである。もし、ISPIN=1 の場合は考慮しない。

default

if non-collinear magnetic systems MAGMOM=3*NIONS*1.0

else MAGMOM=NIONS*1.0

NIONS は POSCAR ファイルの原子数である。強磁性の場合は、MAGMOM=8*1.0 のように入力する。反強磁性の場合は、MAGMOM=1 -1 1 -1 1 -1 1 -1 のように原子ごとに磁性の方向を入力する。

INIWAV(Initial Wave) 計算をスタートさせるときに使用する初期の波動関数を決定するパラメータである。また ISTART=0 なら意味をなさない。

default INIWAV=1

0 Jellium wave function simply

1 wave function arrays random numbers definitely

ISTART(Iteration Start) WAVECAR ファイルを読み込み、波動関数に使用するかを指定するパラメータである。

default

if WAVECAR exists ISTART=1

else ISTART=0

1 WAVECAR ファイルを読み込む。

0 WAVECAR ファイルを読み込まない。常に初期化された波動関数を使用。

ICHARG(Initial Charge) 電荷密度の初期状態の構成法を決定するパラメータである。

default

if ISTART=0 ICHARG=2

else ICHARG=0

0 電子密度を初期の波動関数から導出。

1 CHGCAR ファイルから初期のポジションを読み取り、線形的な組み合わせで新しいポジションへと外挿法から推定し導出。

2 スーパーポジションを取り電化密度を導出（磁性を考慮する場合は設定）

LWAVE(Less Wave) 波動関数を WAVECAR に書き込むかどうか決定するパラメータである。TRUE. の場合、WAVECAR ファイルが作成される。

default LWAVE=TRUE.

LCHARG(Less Charge) 電化密度を CHGCAR に書き込むかどうか決定するパラメータである。TRUE. の場合は CHGCAR ファイルが作成される。

default LCHARG=TRUE.

ISMEAR(Ion Smearing) 波動関数の表現法を設定するパラメータである。

default ISMEAR=1

0 Gaussian モデル

-1 fermi モデル

1..N Methfessel-Paxton 法

-4 Tetrahedron with Bloch correction (use a Γ -centered k-mesh)

金属の緩和法を考慮する場合は1か2を用いるが、この二つは比較的同じような解を算出する。より正確に全エネルギーを計算する場合、Tetrahedron with Blochol correction (-5) を推奨する。しかし、この手法はForceに対する評価が正しく行えないことがある。そのため、構造最適化計算やPhonon計算の場合には、Methfessel-Paxton を推奨する。半導体、もしくは絶縁体の場合、Methfessel-Paxton では、電子の占有数が2以上になる場合がある。そのため、Tetrahedron with Blochol correction を推奨する。k 点数が少ない場合は、Gaussian を推奨する。

LREAL(Less Real) 積分法を決定するパラメータである。Real space と Reciprocal space は積分の方法が異なる。大きな系（格子定数が5Å以上）のときは、Real spaceの方が、計算が速い。小さな系の場合には、Reciprocal spaceで計算することを推奨する。高精度の計算を行いたい場合は、Reciprocal spaceで計算することを推奨する。

default LREAL = .FALSE.

.FALSE. Reciprocal space を使用。

.TRUE. Real space を使用。

RWIGS(Winger Seitz Radius) 原子半径を表すパラメータである。

default RWIGS = RCORE

B.2 POSCAR

POSCAR ファイルは原子モデルを構築するために使用するファイルである。格子定数や原子数、および各原子の相対座標を入力でき、局所的な原子緩和の指定も行える。図5には、Siのダイヤモンド構造のPOSCAR ファイルを、図6には、そのPOSCAR ファイルに対応するSiのダイヤモンド構造を示した。

図5の実線で囲まれた部分は、格子定数の倍率である。この倍率を1.1や1.2に変更することで、基本並進ベクトルはすべて1.1倍、1.2倍され、格子を膨張させることができる。点線で囲まれた部分は基本並進ベクトルで、1, 2, 3行目はa, b, cのベクトルを表す。破線で囲まれた部分は原子数を表し、太線で囲まれた部分はそれぞれの原子の相対座標を表している。2元系の計算を行う際、1つ目の原子数の後にスペースを入力し、続けて2つ目の原子数を入力する。この際、原子数を表す各原子の順序は後述のPOTCAR ファイルに明記された各原子のポテンシャルの順序と対応させなければならない。

次に、各原子を個別に緩和させたい場合のPOSCAR ファイルを図7に示した。先ほど示したファイルとの違いは、各原子の相対座標の横に実線で囲まれた部分が追加されていることである。この実線で囲まれた部分を変更することで、それぞれの原子のa, b, cの方向にそれぞれ緩和させるかを定めることができる。TはTrue, FはFalseを表している。例えばこの図に示された点線で囲まれた部分は緩和を行わないが、破線で囲まれた部分はz軸方向にだけ緩和を行う。

```

(Si)8 (P1) diamond Si / k-0.3 / cut 400
1.0000000000000000
5.4689000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
0.0000000000000000 5.4689000000000000 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 5.4689000000000000
(8)
Direct
0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
0.5000000000000000 0.5000000000000000 0.0000000000000000
0.5000000000000000 0.0000000000000000 0.5000000000000000
0.0000000000000000 0.5000000000000000 0.5000000000000000
0.2500000000000000 0.2500000000000000 0.2500000000000000
0.7500000000000000 0.7500000000000000 0.2500000000000000
0.7500000000000000 0.2500000000000000 0.7500000000000000
0.2500000000000000 0.7500000000000000 0.7500000000000000

```

- : 格子定数の倍率
- ⋯ : 基本並進ベクトル
- ⋯ : 原子数
- : 原子位置

図 5: POSCAR ファイル.

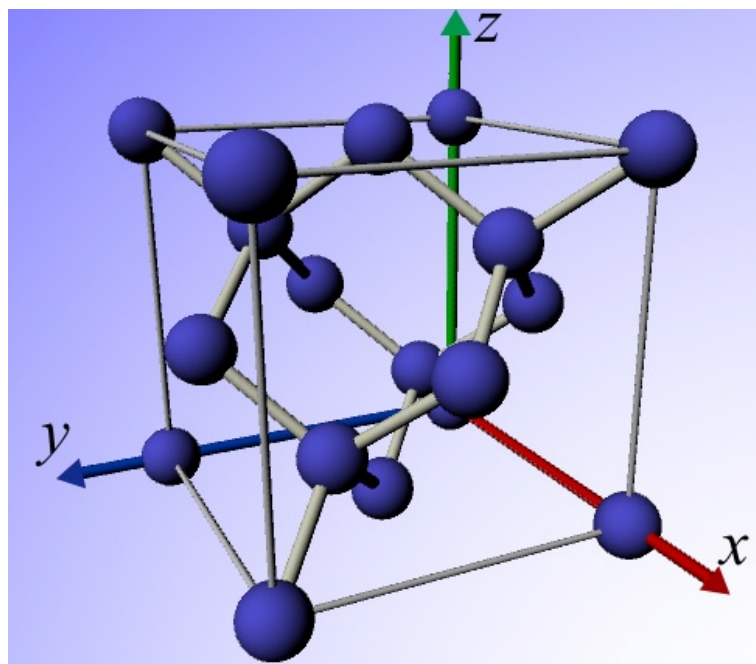


図 6: Si のダイヤモンド構造

```

yosuke Si64 C65 4H-SiC 0 0 1 Si _face 4x
1.0
  12.320000000000000  0.000000000000000  0.000000000000000
 -6.159999740000000  10.669433130000000  0.000000000000000
  0.000000370000000  0.000000640000000  20.100000000000000
64 49
Selective dynamics
Direct
0.000000000000000  0.000000000000000  0.750000000000000 F F F
0.000000000000000  0.000000000000000  0.500000000000000 F F F
0.0833333300000021  0.1666666699999979  0.6250874999999994 F F F
0.1666666699999979  0.0833333300000021  0.3750874999999994 F F F
0.000000000000000  0.250000000000000  0.750000000000000 F F F
0.000000000000000  0.250000000000000  0.500000000000000 F.F.F.
      ⋮
0.750000000000000  0.750000000000000  0.656250000000000 F F F
0.750000000000000  0.750000000000000  0.406250000000000 F F F
0.8333333300000021  0.9166666699999979  0.5313374999999994 F F F
0.500000000000000  0.500000000000000  0.312500000000000 F.F.F.

```

- ：各原子における緩和手法の記述
- ⋯：a方向-緩和しない，b方向-緩和しない，c方向-緩和しない
- ⋯○：a方向-緩和しない，b方向-緩和しない，c方向-緩和する

図 7: 各原子ごとに緩和させるか指定する POSCAR ファイル.

B.3 KPOINTS

逆格子空間における点のことをk点と呼ぶ。KPOINTS ファイルはそのk点のメッシュの細かさ、またk点の数を指定するファイルである。Siのダイヤモンド構造のKPOINTS ファイルを図8に示した。図の実線で囲まれた部分はメッシュを区切る方法である。defaultはAutomatic meshであるが、k点の数から可能な最大限の精度を得たい場合は、最適なk点を選択するMonkhorst-Pachを用いることが望ましい。点線で囲まれた部分でメッシュの区切りたいメッシュの数を入力する。defaultは0である。点線の部分が0の場合は、破線で囲まれた部分でk点を決定する。例えばこの図の場合は、 $4*4*4=64$ 個のメッシュに区切って計算する。

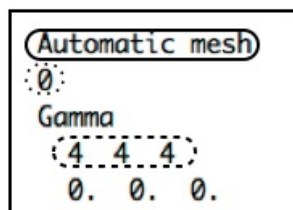


図 8: Siのダイヤモンド構造のKPOINTS ファイル。

B.4 POTCAR

POTCAR ファイルは計算に用いる各原子の擬ポテンシャルを示したファイルである。POTCAR ファイルはCut-off energyのデフォルトの値も含んでいるため、基本的にはINCAR ファイルでENCUTを指定する必要はない。INCAR ファイルのENCUTを指定した場合は、POTCAR ファイルにその値が上書きされる。図9にSiの簡単なPOTCAR ファイルを示した。実線で示した部分では原子の種類を確認できる。また、破線で示した部分はファイルの終端である。もし、2元系以上の計算を行う場合は、この終端直後に別の原子のポテンシャルを記述する。注意点として、ポテンシャルを記述する順番は、POSCAR ファイルに対応させなければならない。

```
PAW_PBE Si 05Jan2001
4.0000000000000000
parameters from PSCTR are:
VRHFIN =Si: s2p2
LEXCH = PE
EATOM = 103.0669 eV, 7.5752 Ry
.
.
.
-.631516436073E-01 -.757171941354E-01 -.896411710603E-01 -.105014918512E+00 -.121930338317E+00
-.140479159189E+00 -.160752140242E+00 -.182838197398E+00
(End of Dataset)
```

図 9: SiのPOTCAR ファイル。