

- ▼ `¥subsection{構造緩和}`  
CUIから構造緩和を実行するには、INCARファイルのIBRION, NSW, ISIFという3つの要素を設定する.
- `¥paragraph{IBRION}`  
原子の構造緩和を行う手法を指定するパラメータ.  
`¥begin{center}`  
`¥begin{tabular}{cl}`  
`¥hline`  
IBRION & 手法`¥¥ ¥hline`  
-1 & 原子を緩和しない`¥¥`  
0 & 分子動力学(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) `¥¥ ¥hline`  
`¥end{tabular}`  
`¥end{center}`
- `¥paragraph{NSW}`  
構造緩和において原子, または原子の集団を動かす回数を決めるパラメータである. 少なすぎると収束せずに終わる場合がある. 緩和を行わない場合は0とし, 内部緩和と外部緩和の両方を考慮する場合は100とする. (これほんま??)
- `¥paragraph{ISIF}`  
応力テンソルをどのように計算させるかを定めるパラメータ. forceや応力テンソル, 原子(ion)の移動, セルの形や体積を変化させるかを指定.  
`¥begin{center}`  
`¥begin{tabular}{clcccc}`  
`¥hline`  
`¥hline`  
ISIF & `¥shortstack{calculate¥¥ force}` & `¥shortstack{calculate¥¥ stress tensor}` & `¥shortstack{relax¥¥ ion}` & `¥shortstack{change¥¥ cell shape}` & `¥shortstack{change¥¥ cell volume}` `¥¥ ¥hline`  
0 & yes & no & yes & no & no`¥¥`  
1 & yes & total pressure & 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`¥¥ ¥hline`  
`¥end{tabular}`  
`¥end{center}`