

▶ \subsection{計算ホストへのログイン}

▼ \subsection{VASPの実行}

▼ VASPでは図\ref{FLOW}のようなプロセスで計算が実行される.

- \begin{figure}[htbp]

- \begin{center}

- \includegraphics[width=9cm]{./sakamoto/Figure/FLOW.jpg}

- \caption{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. }

- \label{FLOW}

- \end{center}

- \end{figure}

▶ 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. かつ、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推奨する. これらのファイルの詳細は付録\ref{inputfile}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.

▶ 次に, 用意した4つのファイルを使いVASPを実行する.

▶

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.

▶ \subsection{E-V曲線の作成}\label{makeE-VCurve}

▶ \subsection{Linuxコマンド}

▶ \subsection{設定ファイル}\label{inputfile}