



# Vienna Ab-initio Simulation Package(VASP)介绍及上 机

主讲老师：洪家旺教授

办公 室：宇航学院508B

[hongjw@bit.edu.cn](mailto:hongjw@bit.edu.cn), [www.jiawanghong.org](http://www.jiawanghong.org)

010-68915917

助教：吕鹏

联系方式：[penglvalb@qq.com](mailto:penglvalb@qq.com)



## 主要内容：

- ◆ 一、第一性原理计算常用软件
- ◆ 二、VASP计算流程介绍
- ◆ 三、VASP各输入输出文件介绍
- ◆ 四、上机操作（2D，3D，点缺陷）





# 第一性原理计算常用开源软件

Code Name	Basis Set	Pseudopotential Codes	操作系统	Web Site
ABINIT	Plane waves	Pseudo, PAW	Linux	<a href="http://www.abinit.org">www.abinit.org</a>
Quantum ESPRESSO	Plane waves	Pseudo	Linux	<a href="http://www.pwscf.org/">www.pwscf.org/</a>
CP2K	Mixed gaussian and plane waves	Pseudo or all-electron	Linux	<a href="https://www.cp2k.org">https://www.cp2k.org</a>
Exciting	Plane waves	all-electron, full-potential	Linux	<a href="http://exciting-code.org">http://exciting-code.org</a>
Siesta	atomic orbitals	norm-conserving pseudopotentials	Linux	<a href="https://departments.icmab.es/leem/siesta/">https://departments.icmab.es/leem/siesta/</a>
ELK	Plane waves	all-electron, full-potential,	Linux	<a href="http://elk.sourceforge.net">http://elk.sourceforge.net</a>



# 第一性原理计算常用商业软件

Code Name	Basis Set	Pseudopotential Codes	操作系统	Web Site
Gaussian	Gaussian orbitals	Pseudo	Linux	<a href="http://gaussian.com">http://gaussian.com</a>
CASTEP	Plane waves	Pseudo	Windows Linux	<a href="http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/castep/">www.tcm.phy.cam.ac.uk/castep/</a>
VASP	Plane waves	Pseudo, PAW	Linux	<a href="http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp">cms.mpi.univie.ac.at/vasp</a>
WIEN2K	Plane-waves + local orbitals	all-electron, full-potential	Linux	<a href="http://www.wien2k.at">www.wien2k.at</a>
FHI-aims	numeric atom-centered orbitals	all-electron, full-potential	Linux	<a href="https://aimsclub.fhi-berlin.mpg.de/index.php">https://aimsclub.fhi-berlin.mpg.de/index.php</a>
Pwmat (国内开发)	Plane waves	Pseudo	Linux	<a href="http://www.pwmat.com">http://www.pwmat.com</a>



# VASP软件介绍

VASP全称Vienna Ab-initio Simulation Package, VASP是维也纳大学Hafner小组开发的进行电子结构计算和量子力学-分子动力学模拟软件包。它是目前材料模拟和计算物质科学研究中最流行的商用软件之一。VASP 官网：  
<https://www.vasp.at/>

VASP手册：<http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp.pdf>

VASP官方论坛：<http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp-forum/forum.php>

VASP wiki网站：<http://cms.mpi.univie.ac.at/wiki/index.php/Category:Examples>

VASP **关键词**查询网址：<http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/Index.html>





# VASP计算流程

## 读取输入文件

- INCAR
- POSCAR
- POTCAR
- KPOINTS

## 自洽迭代

- 通过求解薛定谔方程确定波函数
- 在计算过程中确定体系总能量
- 当连续两次总能差值小于能量收敛精度，则完成一次自洽迭代。

## 原子弛豫

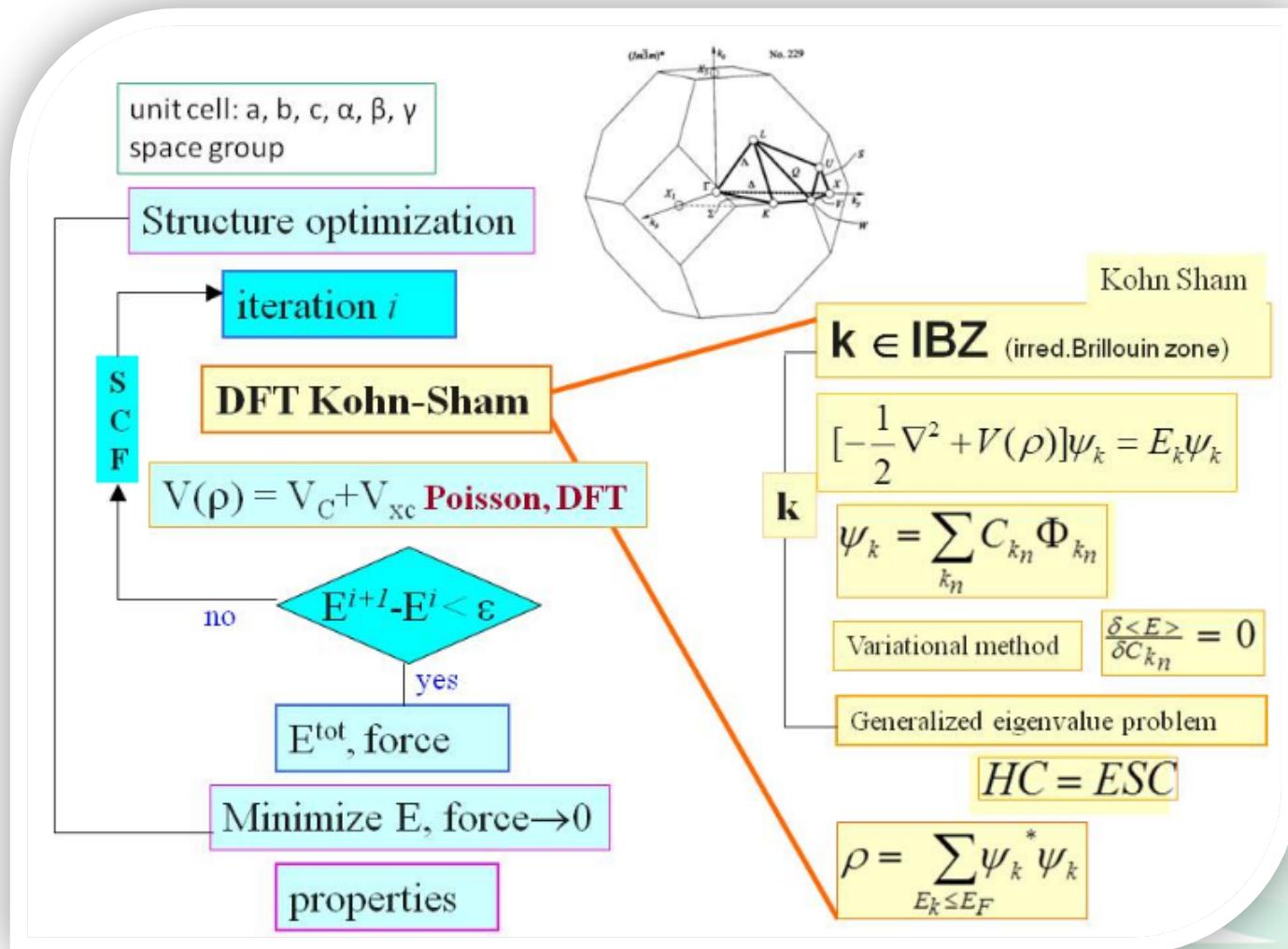
- 每次自洽迭代结束之后输出原子受力。
- 当原子受力满足原子力收敛精度，则结束结构优化。



# VASP计算流程示意图

在给定的结构下优化电子分布，使电子分布达到平衡

自洽计算





# VASP计算流程实例

## 自洽计算

dE 连续两次总能差值



	N	E	dE	d eps	ncg	rms	rms (c)
DAV:	1	0.182758355240E+03	0.18276E+03	-0.73938E+03	72	0.634E+02	
DAV:	2	0.155554893983E+02	-0.16720E+03	-0.15947E+03	80	0.968E+01	
DAV:	3	-0.459559993318E+02	-0.61511E+02	-0.61341E+02	72	0.533E+01	
DAV:	4	-0.490383722034E+02	-0.30824E+01	-0.30739E+01	60	0.188E+01	
DAV:	5	-0.491523323644E+02	-0.11396E+00	-0.11389E+00	96	0.465E+00	0.983E+00
DAV:	6	-0.466514219564E+02	0.25009E+01	-0.58021E+00	72	0.856E+00	0.529E+00
DAV:	7	-0.463398172573E+02	0.31160E+00	-0.33256E+00	80	0.565E+00	0.178E+00
DAV:	8	-0.462528235435E+02	0.86994E-01	-0.44223E-01	72	0.300E+00	0.834E-01
DAV:	9	-0.462266624039E+02	0.26161E-01	-0.77337E-02	88	0.109E+00	0.403E-01
DAV:	10	-0.462237528442E+02	0.29096E-02	-0.45216E-03	84	0.320E-01	0.241E-01
DAV:	11	-0.462160371974E+02	0.77156E-02	-0.13408E-02	64	0.391E-01	0.150E-01
DAV:	12	-0.462174991900E+02	-0.14620E-02	-0.72017E-04	68	0.125E-01	0.104E-01
DAV:	13	-0.462226308073E+02	-0.51316E-02	-0.39255E-03	60	0.191E-01	0.638E-02
DAV:	14	-0.462236995234E+02	-0.10687E-02	-0.39046E-04	80	0.666E-02	0.428E-02
DAV:	15	-0.462295248494E+02	-0.58253E-02	-0.84134E-04	56	0.940E-02	0.352E-02
DAV:	16	-0.462304276498E+02	-0.90280E-03	-0.11102E-04	72	0.425E-02	0.223E-02
DAV:	17	-0.462322451114E+02	-0.18175E-02	-0.24744E-04	68	0.419E-02	0.595E-03
DAV:	18	-0.462327635770E+02	-0.51847E-03	-0.46538E-05	60	0.179E-02	0.754E-03
DAV:	19	-0.462329935235E+02	-0.22995E-03	-0.13274E-05	56	0.111E-02	0.244E-03
DAV:	20	-0.462330504717E+02	-0.56948E-04	-0.41022E-06	64	0.518E-03	0.205E-03
DAV:	21	-0.462330795807E+02	-0.29109E-04	-0.16039E-06	48	0.425E-03	0.158E-03
DAV:	22	-0.462330857867E+02	-0.62060E-05	-0.31854E-07	32	0.250E-03	

1 F= -.46233086E+02 E0= -.46233086E+02 d E =-.462331E+02



# VASP基本输入文件介绍

- **POTCAR** : 文件包含了体系中各类元素的赝势
- **POSCAR** : 文件描述了所计算的体系的晶胞参数  
(包括基矢, 晶格常数, 原子类型, 坐标位置)
- **KPOINTS** : k 点设置, 可手动或自动产生。
- **INCAR** : 文件控制了VASP进行何种性质的计算



# VASP基本输出文件介绍

- OUTCAR :计算结果主要输出文件
- OSZICAR :每次迭代或原子迟豫(或MD)的能量信息
- CONTCAR :原子迟豫或MD后的体系结构文件，分数坐标，用于续算
- CHG和CHGCAR :电荷密度文件
- WAVECAR :波函数文件
- DOSCAR :电子态密度文件
- EIGENVAL :各k点本征值文件，能带数目，能量范围
- XDATCAR :每次原子弛豫后的每一步轨迹文件
  
- IBZKPT :布里渊区中的k点
- PCDAT :对关联函数
- PROCAR和PROOUT :波函数投影或分解的文件
- LOCPO<sub>T</sub> :总的局域势
- ELFCA<sub>R</sub> :电子局域函数



# POTCAR介绍

在VASP最新版本中，VASP赝势库仅提供投影缀加平面波(PAW)赝势：

◆ 按交换关联函数分：

LDA和GGA-PBE

◆ 按是否处理了semi-core态：

A, A\_sv, A\_pv和A\_d (A为元素名称；s、p、d为原子轨道)

◆ 按赝势文件中ENMAX(截断能)的大小：

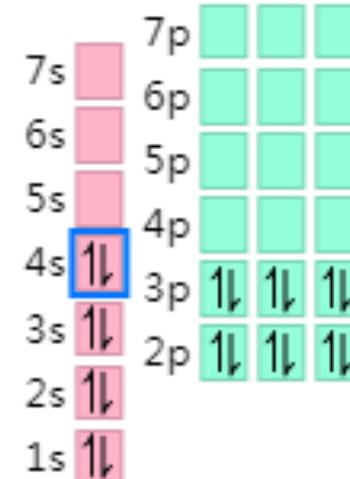
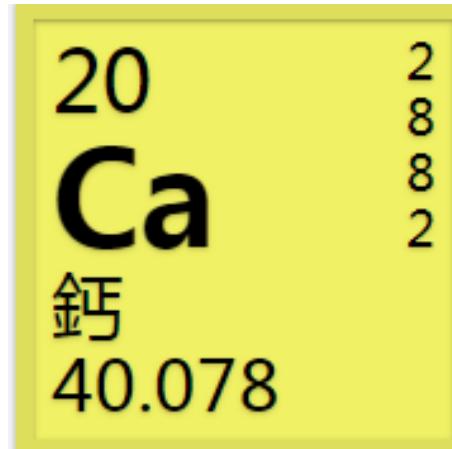
普通赝势A, 软赝势A\_s和硬赝势A\_h

paw\_GGA/ paw\_LDA/ paw\_PBE/ uspp\_GGA/ uspp\_LDA/

Ac/	Be_sv/	Ce_s/	F/	H/	In/	Mg_pv/	Nb_sv/	O_s/	Pt/	S/	Ta_pv/	U/
Ac_s/	B_h/	C_h/	Fe/	H1.25/	In_d/	Mn/	Ne/	Os_pv/	Pu/	Sb/	Tc/	U_s/
Ag/	Bi/	Cl/	Fe_pv/	H1.5/	Ir/	Mn_pv/	N_h/	P/	Pu_s/	Sc_sv/	Tc_pv/	V/
Al/	Bi_d/	Cl_h/	F_h/	H.5/	K_pv/	Mo/	Ni/	Pa/	Rb_pv/	Se/	Te/	V_pv/
Al_h/	Br/	Co/	F_s/	H.75/	Kr/	Mo_pv/	Ni_pv/	Pa_s/	Rb_sv/	S_h/	Th/	V_sv/
Ar/	B_s/	Cr/	Ga/	He/	K_sv/	Mo_sv/	Np/	Pb/	Re/	Si/	Th_s/	W/
As/	C/	Cr_pv/	Ga_d/	Hf/	La/	N/	Np_s/	Pb_d/	Re_pv/	Si_h/	Ti/	W_pv/
Au/	Ca_pv/	C_s/	Ga_h/	Hf_pv/	La_s/	Na/	N_s/	Pd/	Rh/	Sn/	Ti_pv/	Xe/
B/	Ca_sv/	Cs_sv/	Ge/	Hg/	Li/	Na_pv/	O/	Pd_pv/	Rh_pv/	Sn_d/	Ti_sv/	Y_sv/
Ba_sv/	Cd/	Cu/	Ge_d/	H_h/	Li_sv/	Na_sv/	O_h/	P_h/	Ru/	Sr_sv/	Tl/	Zn/
Be/	Ce/	Cu_pv/	Ge_h/	I/	Mg/	Nb_pv/	Os/	Ru_pv/	Ta/	Tl_d/	Zr_sv/	

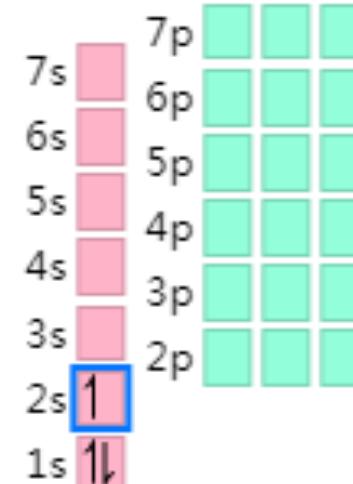
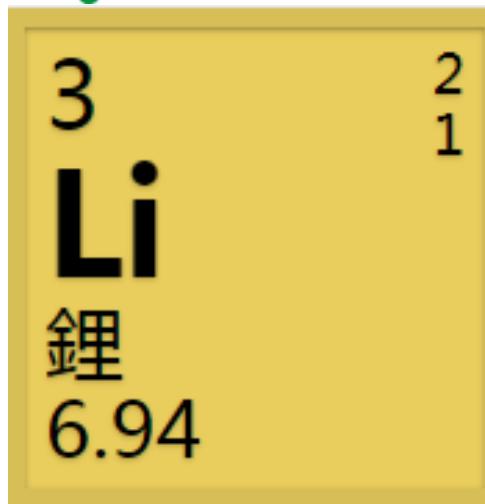


## Ca-POTCAR介绍





## Li-POTCAR介绍





# POTCAR介绍

VASP赝势文件夹中包含两个压缩文件：potpaw\_LDA和potpaw\_PBE。  
potpaw\_LDA ==> PAW, LDA； potpaw\_PBE ==> PAW, GGA, PBE

## 操作：

根据泛函及精确度选择需要的赝势文件；

*cat file1 file2 file3... > POTCAR*，将所有赝势文件合并成一个文件  
POTCAR。

## 注意：

- 蚍势的种类要一致
- 蚍势使用的泛函要与INCAR中选择的泛函一致（PBE的泛函要选择  
PBE的赝势）



# POSCAR介绍-面心立方金属Pd

(conventional cell)

Conventional lattice  
 $\mathbf{a}_1 = (a, 0, 0)$   
 $\mathbf{a}_2 = (0, a, 0)$   
 $\mathbf{a}_3 = (0, 0, a)$

POSCAR文件示例二：

Pd (Fm-3m)

3.86

1.0 0.0 0.0  
0.0 1.0 0.0  
0.0 0.0 1.0

4

Direct

! 分数坐标

0.00 0.00 0.00  
0.00 0.50 0.50  
0.50 0.00 0.50  
0.50 0.50 0.00

Pd (Fm-3m)

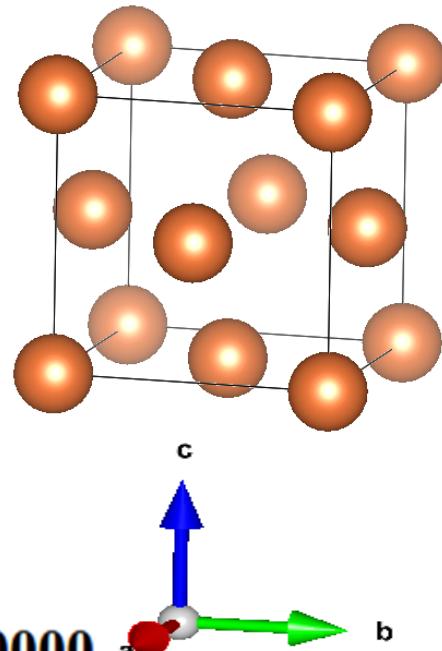
3.86

1.0 0.0 0.0  
0.0 1.0 0.0  
0.0 0.0 1.0

4

C ! 绝对坐标

0.0000 0.0000 0.0000  
0.0000 1.9335 1.9335  
1.9335 0.0000 1.9335  
1.9335 1.9335 0.0000





# POSCAR介绍-面心立方金属Pd

Primitive lattice  
 $\mathbf{a}_1 = (0, a/2, a/2)$   
 $\mathbf{a}_2 = (a/2, 0, a/2)$   
 $\mathbf{a}_3 = (a/2, a/2, 0)$

## POSCAR文件示例一：(primitive cell)

Pd (Fm-3m)

1.93

0.0 0.5 0.5

0.5 0.0 0.5

0.5 0.5 0.0

! 任意文字注释（一般为体系名称）

! 晶胞缩放系数

! 晶格矢量

Pd

1

! 原子种类

! 原子个数

Selective dynamics

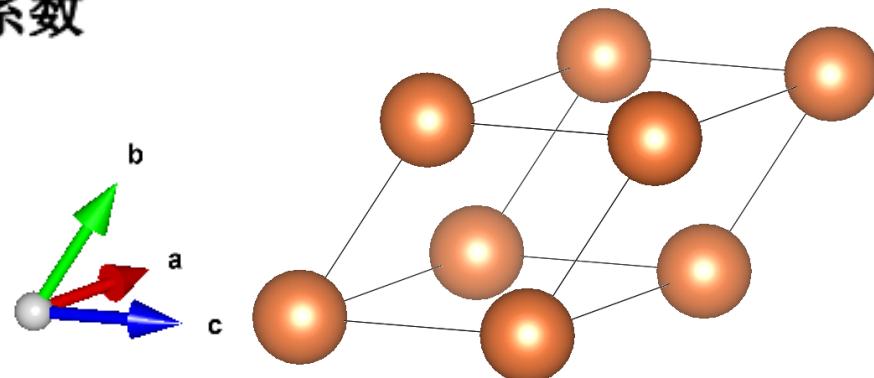
! 是否要固定部分原子的坐标

Direct

! 输入坐标的格式 (direct模式, Carteisan)

0.00 0.00 0.00

F F F ! 原子的位置, T为不固定, F为固定





# POSCAR介绍

## 提示：

- a) 输入坐标的格式（第八行）共有两种：  
‘Direct’ or ‘D’ or ‘d’ for direct mode  
‘Cartesian’ or ‘C’ or ‘c’ or ‘K’ or ‘k’ for cartesian mode
- b) 各元素原子坐标的排列顺序必须与POSCAR中第6行的原子种类的顺序及POTCAR中的赝势顺序一致。
- c) 若需要固定部分原子，则可以在原子位置后边添加对x、y、z三个方向是否固定的判断参数（T为不固定，F为固定）

```
1 generated by phonopy
2 1.0
3 0.0000000000000000 2.0169498920500000 2.0169498920500000
4 2.0169498920500000 0.0000000000000000 2.0169498920500000
5 2.0169498920500000 2.0169498920500000 0.0000000000000000
6 Al
7 1
8 Direct
9 0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
```





# KPOINTS介绍-K点网格

常见格式（自动生成k点）：

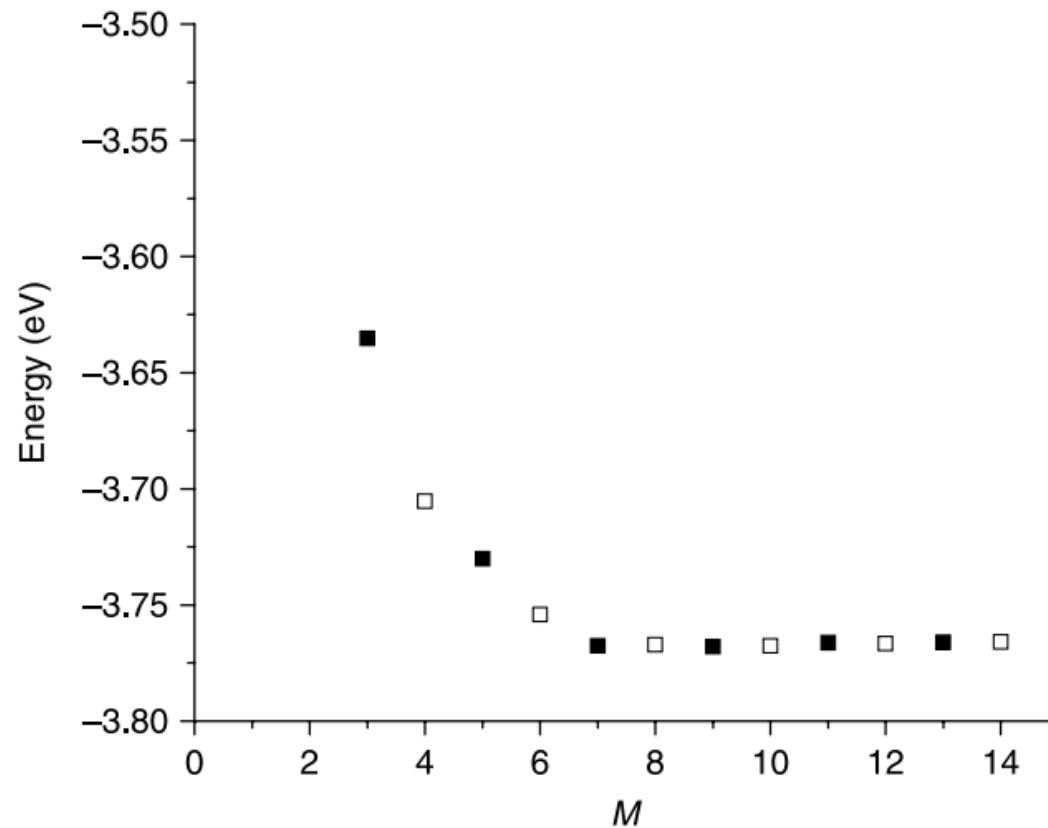
Auto mesh	标题或注释行，无特别意义
0	0表示自动产生k点
G	以字母G开头表示按M-P方法以Γ点为中心自动产生k点
9 9 9	沿各个基矢方向上分割各基矢（K点网格）的点数
0 0 0	对所按网格分割产生的k点进行平移的量（这里不平移）

## 提示：

1. 对六角晶系的结构，强烈推荐采用以Γ为中心按M-P网格产生k点
2. K点网格大小k1, k2, k3按晶格参数a, b, c的长度进行合适选取  
即：尽量保证  $k_1 \cdot a \approx k_2 \cdot b \approx k_3 \cdot c$ 。
3. 一般选取N1, N2和N3为奇数，以便产生的k点包含Γ点，（自动产生K点的模式）
4. 一般来说，k点越密越多，计算精度也越高，计算成本也越高。  
对于k点的需求，金属>>半导体，绝缘体，不过呢，很多时候主要还是受硬件限制，简约化可以使k点的数目大大下降。
5. 一般对于大体系，K点的设置取Gamma点即可（a, b, c均大于10Å）



# KPOINTS 收敛性测试



**Figure 3.2** Total energies (per atom) for bulk Cu calculated as described in Table 3.2 as a function of  $M$  for calculations using  $M \times M \times M$   $k$  points. Results with even (odd)  $M$  are shown with unfilled (filled) symbols.



# KPOINTS 收敛性测试

- 提交脚本test.job

```
#!/bin/bash
#####
for i in 2 4 6 8 10 12
#####
do
    sed "s/AAA/$i/g" KPOINTSO > KPOINTS
    mkdir $i
    cp opencell-vasp544 INCAR POTCAR POSCAR KPOINTS $i/
    cd $i
    qsub opencell-vasp544 >id
    cd ../
done
```

- 结果

#encut	dielec	char	Energy
2			- 8.33662571
4			- 10.66509704
6			- 10.82627637
8			- 10.84601661
10			- 10.84913736
12			- 10.84971482



## VASP的INCAR文件

1. 初始参数
2. 电子的优化
3. 原子弛豫（结构优化；分子动力学）
4. 态密度积分和参数
5. 其他



# INCAR介绍-初始参数

## 1. 初始参数

- SYSTEM:

注释所计算的体系，以示说明。

- ISTART:

如果计算目录中有WAVECAR文件，则默认值为1，否则为0。可赋予值为0|1|2|3。决定是否读入WAVECAR：

- 0: 开始新的计算，按INIWAV初始化波函数
- 1: 接着计算，通常用在测试ENCUT的收敛性以及计算结合能曲线(体积和总能的关系)
- 2: 接着计算，通常用在希望保持基矢不变的计算中
- 3: 接着计算，读入上一次计算得到的电荷密度和波函数，不推荐用



# INCAR介绍-初始参数

## 1. 初始参数

- **ICHARG:**

如果ISTART=0，则默认值为2，否则为0。决定如何构造初始的电荷密度

- 0: 从初始的波函数构造
- 1: 从CHGCAR读入，并同原子密度进行线性插值
- 2: 构造原子电子密度线性组合（LCAO），初始的电子密度由赝势来决定
- 11: 读入自洽的CHGCAR，并进行能带计算或态密度的非自洽计算
- 12: 非自洽的原子密度计算

- **ISTART 和 ICHARG**

- 这两个关键词分别定义了如何构建初始的波函数和电荷密度、读入上一次的波函数和电荷密度。

- **推荐的做法:**

- 进行能带结构、电子态密度等性质的计算时：

**设置ISTART = 1, ICHARG = 11。**

- 其他的情况：

**一般都设置ISTART = 0, ICHARG = 2。**





## 2. 电子优化

- 2.1 自洽迭代步数和收敛标准: **NELM**, NELMIN, NELMDL, **EDIFF**.
- 2.2 平面波截断能和缀加电荷时的切断值 : **ENCUT** .
- 2.3 电荷密度混合方法 :IMIX ,AMIX ,AMIN,BMIX,AMIX-MAG,BMIX-MAG.WC,INIMIX,MIXPRE,MAXMIX.
- 2.4 电子部分优化的方法 : **ALGO** ,IALGO,LDIAG.

电子优化需要设置的参数有`EDIFF` 和`ENCUT` ,其他参数使用默认。由于`NELM`的默认是60，如果无法自洽收敛，需要设置电荷电荷密度混合方法。电子部分优化得参数可以选设，如`IALGO`.



## 2. 电子优化

- **NELM:** 允许电子自洽迭代的最大步数。默认值为60。如果超过了40步还没有收敛的话，推荐对IALGO、LDIAG和混合参数进行手动设置到合理的值。
- **EDIFF:** EDIFF是电子自洽收敛标准参数。默认值为1E-4。当连续两次迭代中总能和本征值的变化都小于EDIFF时，则电子自洽迭代循环停止。
- **ENCUT:** 确定平面波截断能，默认值从POTCAR中读入
- **ALGO:** 确定电子优化的算法：
  - Normal: 则IALGO=38(也就是blocked Davidson方法)
  - VeryFast: 则IALGO=48(RMM-DIIS算法)
  - Fast: 上面两种算法混着使用

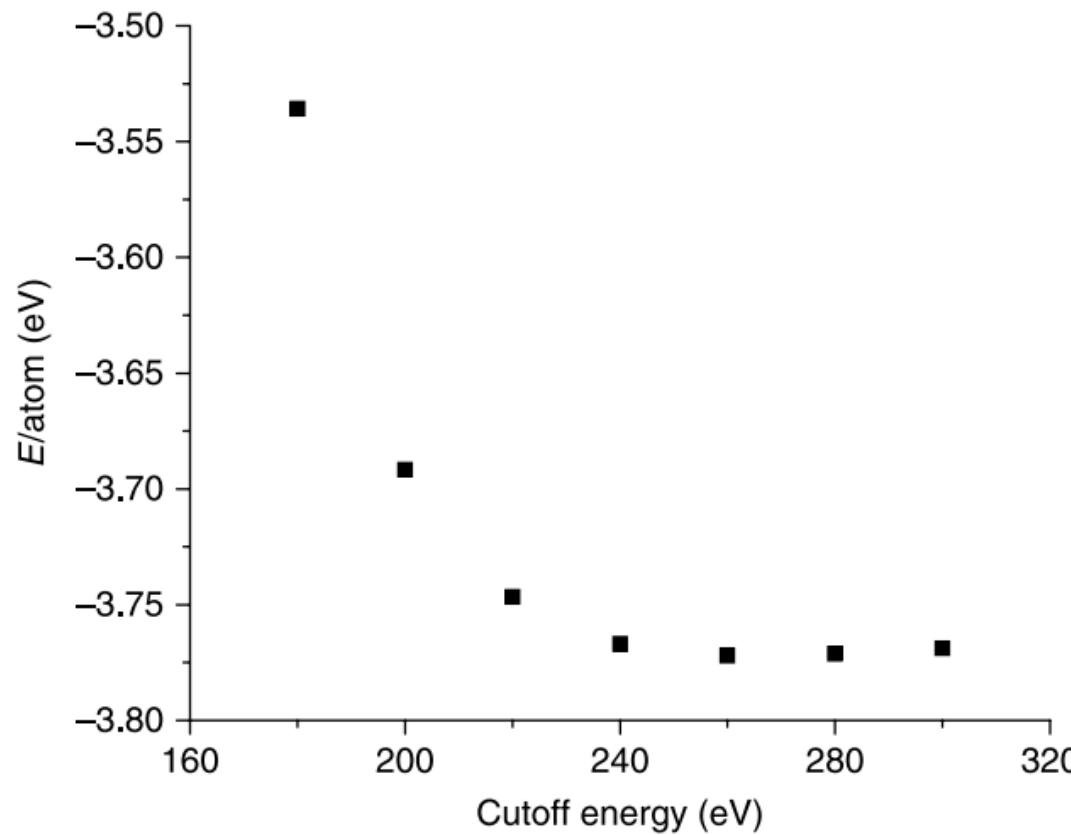


**ENCUT:** 确定平面波截断能，默认值从POTCAR中读入

- 截断能是表示平面波展开后取到多大能量的平面波，对于高能部分，展开后所占的比例非常小，而且**影响计算速度**，所以并不是截断能越大越好。
- 截断能是在计算赝势中把价态电子和核(芯态)电子分开(cut off)的能量。赝势的目的就是得到一个势来最好地描述其对价态电子的行为，因此如何选择价态与芯态对赝势行为有本质的影响。在确定了价态与芯态之后，我们需要选择核区半径(截断半径)来截断核区电子的波函数，也就是所谓match radii 这个半径选取直接影响生成



# ENCUT 收敛性测试



**Figure 3.4** Energy per atom of fcc Cu with a lattice constant of  $3.64 \text{ \AA}$  using  $12 \times 12 \times 12$   $k$  points as a function of the energy cutoff, plotted using a similar energy scale to Fig. 3.2.

Density Functional Theory: A Practical Introduction. By David S. Sholl and Janice A. Steckel



# ENCUT 收敛性测试

- 提交脚本  
test.job

```
#!/bin/bash
#####
for i in 200 250 300 350 400 450 500 550 600
#####
do
    sed "s/AAA/$i/g" INCAR0 >INCAR
    mkdir $i
    cp opencell-vasp544 INCAR POTCAR POSCAR KPOINTS $i/
    cd $i
    qsub opencell-vasp544 >id
    cd ../
done
```

- 结果
- 测试标准：

#encut	dielec	char	Energy
200			-10.80454174
250			-10.82936753
300			-10.84312617
350			-10.84706435
400			-10.84894004
450			-10.84918708
500			-10.84913736
550			-10.84917782
600			-10.84928350



## 3. 原子弛豫

- 1. 原子如何移动以及步长，步数和弛豫收敛条件：  
IBRION, ISIF, POTIM, NSW, EDIFFG
- 2. 分子动力学相关参数：  
SMASS, TEBEG, TEEND, POMASS, NBLOCK,  
KBLOCK, PSTRESS, NSW, POTIM.





# INCAR介绍-ISIF

- ISIF:** 决定了是否计算应力以及如何对结构进行优化。当IBRION=0时，默认值为0，否则为2。可赋予值为0|1|2|3|4|5|6|7|

ISIF	计算离子所受的力	计算原胞的stress tensor	离子位置驰豫	改变原胞的形状	改变原胞的体积
0	是	否	是	否	否
1	是	trace only	是	否	否
2	是	是	是	否	否
3	是	是	是	是	是
4	是	是	是	是	否
5	是	是	否	是	否
6	是	是	否	是	是
7	是	是	否	否	是



# INCAR介绍-ISIF

W (Im-3m) Convention Cell

1.0

3.1649999619	0.0000000000	0.0000000000
0.0000000000	3.1649999619	0.0000000000
0.0000000000	0.0000000000	3.1649999619

ISIF = 2

ISIF= 3



W

2

Direct

0.000	0.000	0.000
0.500	0.500	0.510





## 3. 原子弛豫

### 3.1 原子如何移动以及步长和步数

- **POTIM:** 当IBRION= 1, 2或3时，是力的一个缩放常数(相当于确定原子每步移动的大小)，默认值为0.5。当IBRION=0时，是MD的时间步长，无默认值，必须手动设置。
- **NSW:** 原子迟豫的最大步数和分子动力学的步数。默认值为0。在每一步内，电子进行自洽计算，并精确计算原子所受的H-F力和应力。
- **EDIFFG:** 原子迟豫收敛的标准。默认值为EDIFF\*10。如果它的值为正的，则表示前后两次的总自由能之差小于EDIFFG，原子停止迟豫。如果为负的，则原子所受的最大的力小于EDIFFG的绝对值，原子停止迟豫。



# INCAR介绍-分子动力学相关参数

## 3.2 分子动力学相关参数

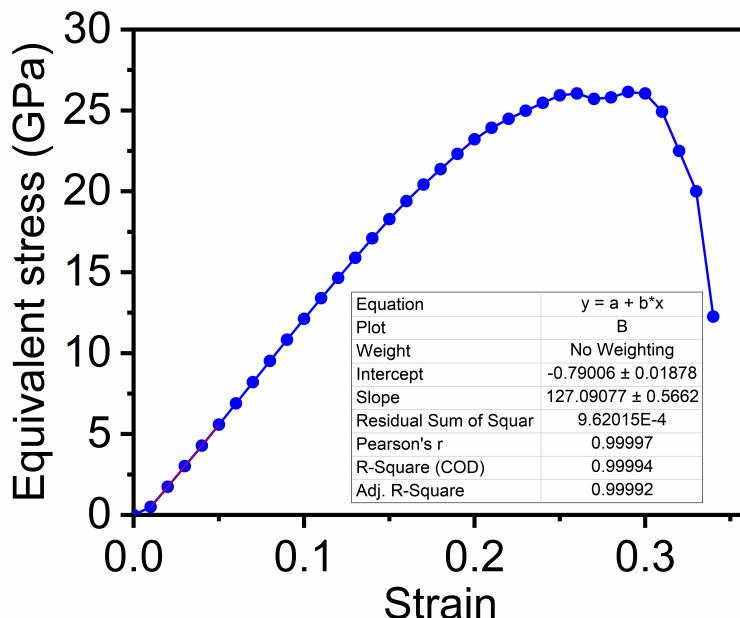
- **SMASS:** 确定分子动力学中原子的速度。默认值为-3。可赋予值为-3 | -2 | -1 | 0。
  - -3: 微正则系综(总的自由能守恒)
  - -2: 保持初始速度不变，计算体系总能随原子位置的变化情况
  - -1: 在每NBLOCK步之后对初始速度进行缩放
  - 0或>0, 正则系综, 对温度进行Nose调控
- **TEBEG:** 分子动力学模拟时的初始温度。默认值为0。
- **TEEND :** 分子动力学模拟时的末态温度。默认值为TEBEG
- **POMASS:** 每类原子的质量
- **PSTRESS :** 设置加到体系的应力张量上的应力大小



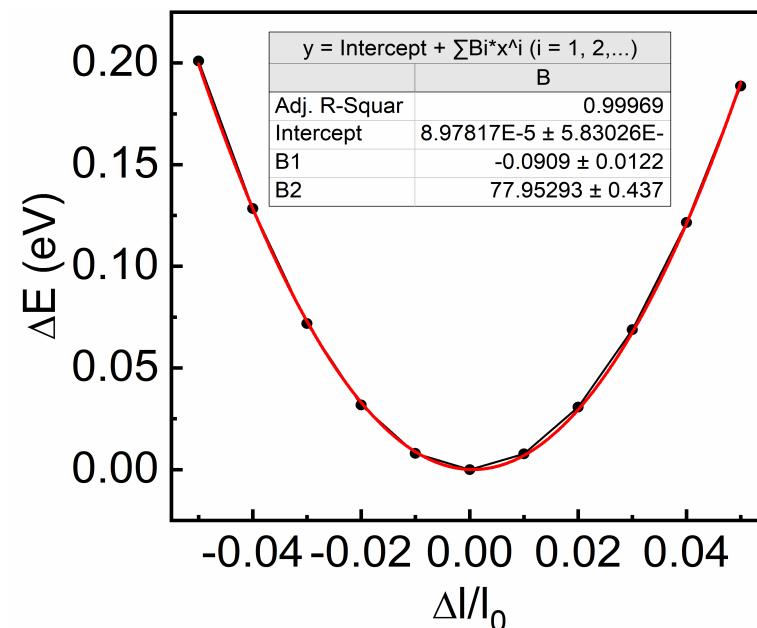
# 三种方法计算弹性常数

$$E_s = \frac{1}{2} S_0 C \epsilon^2,$$

① 应力-应变关系  $y = kx$



② 能量-应变关系  $y = \frac{1}{2} kx^2$



③ VASP直接算

## INCAR中的参数

IBRION = 6 (Determine the Hessian matrix)

NFREE = 2 (How many displacements are used for each direction; 2-4)

ISIF = 3 (Stress/relaxation: 3-Shape/Ions/V)

NSW = 1 (Max electronic SCF steps)

ENCUT = 700 (1.3 ~ 1.5 \* default cutoff, need to check convergence)



# 三种方法计算弹性常数-VASP直接计算

TOTAL ELASTIC MODULI (kBar)						
Direction	XX	YY	ZZ	XY	YZ	ZX
XX	1591.5516	620.0573	620.0573	0.0000	-0.0000	-0.0000
YY	620.0573	1591.5516	620.0573	-0.0000	-0.0000	0.0000
ZZ	620.0573	620.0573	1591.5516	-0.0000	-0.0000	-0.0000
XY	0.0000	-0.0000	-0.0000	757.4816	0.0000	-0.0000
YZ	-0.0000	-0.0000	-0.0000	0.0000	757.4816	0.0000
ZX	-0.0000	0.0000	-0.0000	-0.0000	0.0000	757.4816

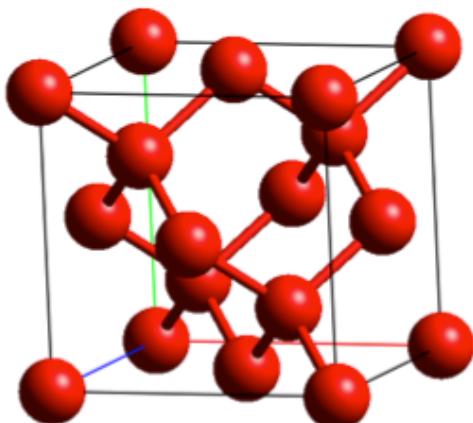
(GPa)	$E_{100}$	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$
应力应变法	127.09			
能量拟合法		155.27		
VASP直接算	124.39	159.16	62.01	75.75

$$E_{100} = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{C_{11} + C_{12}}$$

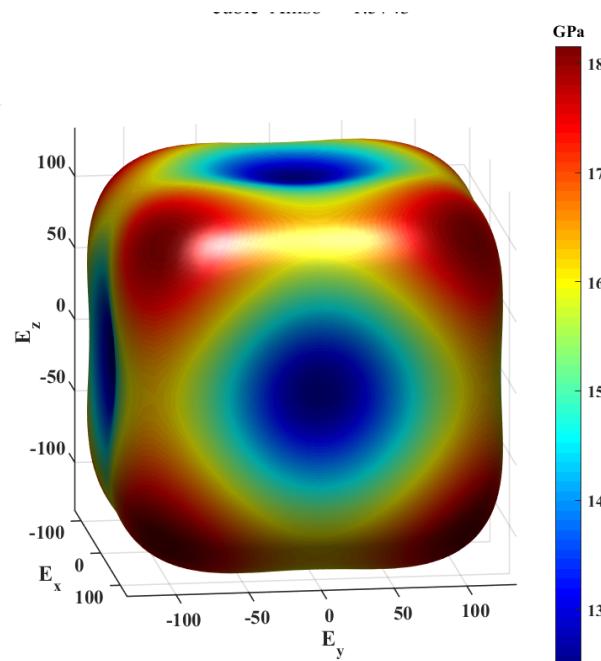


# 算例——硅的弹性常数计算

(GPa)	实验值	计算值	误差
$C_{11}$	167.4	161.7	3.4%
$C_{12}$	65.2	64.6	0.9%
$C_{44}$	79.6	76.4	4.0%



Si的晶体结构

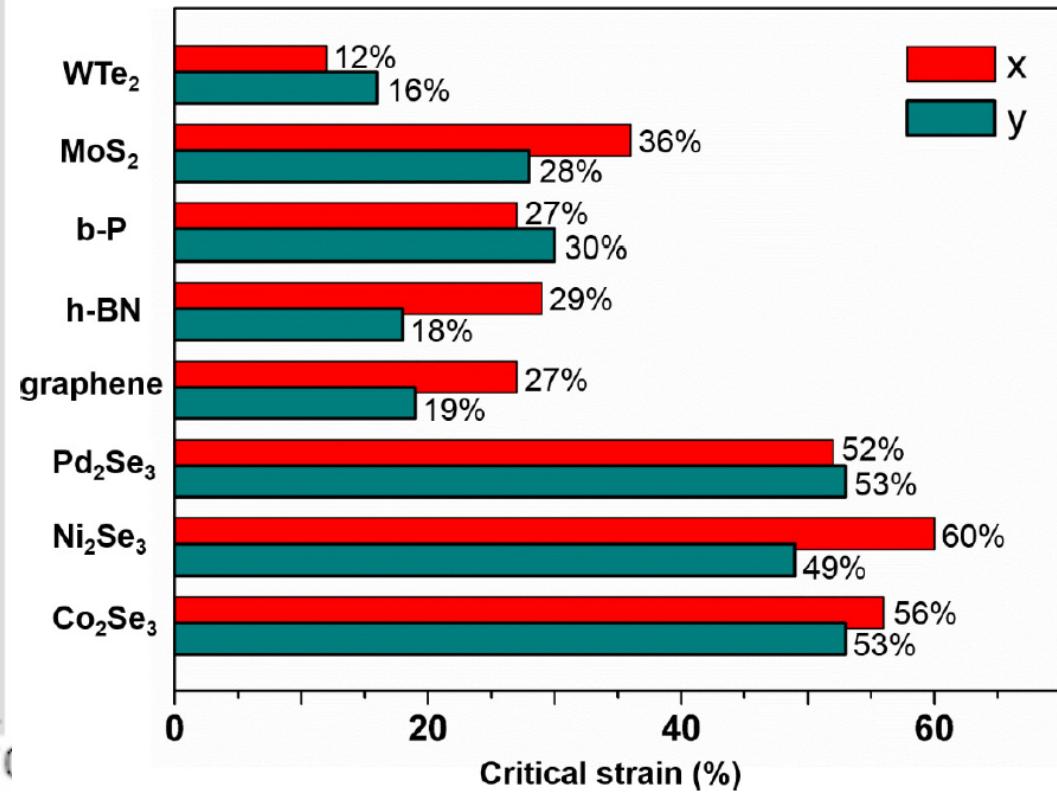
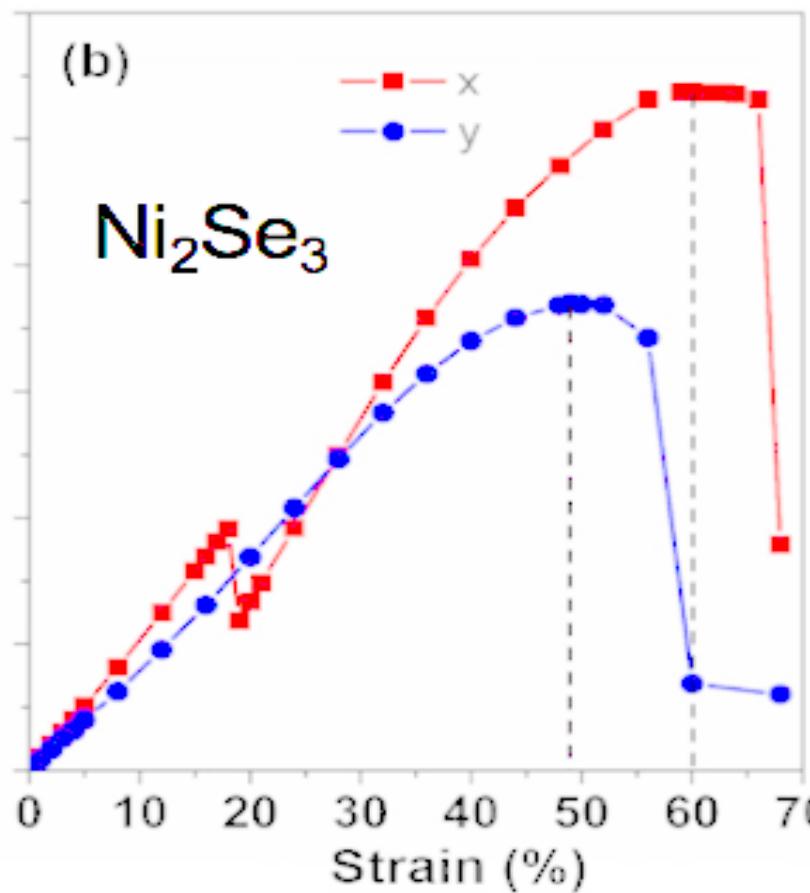


在线作图工具  
<http://progs.coudert.name/elite>



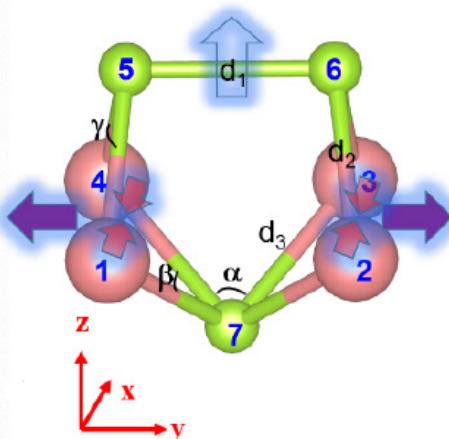
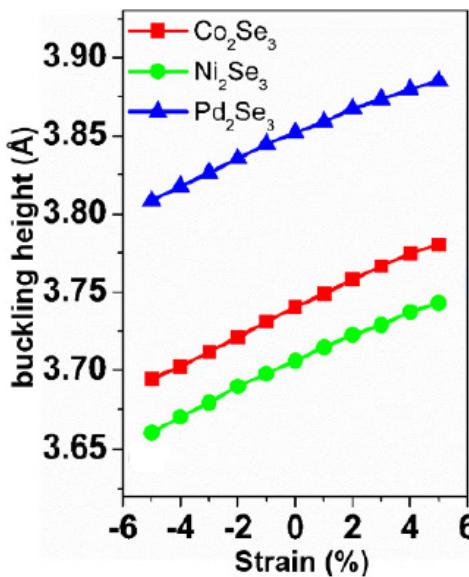
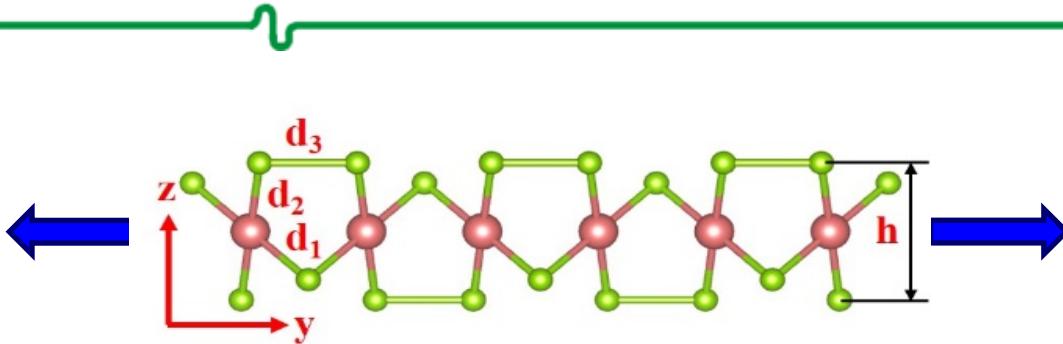


# 算例——应力应变曲线





# 算例——泊松比



方法一：( vasp直接求得 $c_{ij}$ )

the corresponding Poisson's ratios are

$$\nu_{[10]}^{2D} = c_{12}/c_{22} \quad \text{and} \quad \nu_{[01]}^{2D} = c_{12}/c_{11},$$

方法二：( 手动拉伸vasp计算  
, 查看另一方向变化 )

$$\nu = -\frac{\epsilon_x}{\epsilon_z}$$

Structures	$E_x$	$E_y$	$\nu_{xy}$	$\nu_{xz}$	$\nu_{yx}$	$\nu_{yz}$
$\text{Co}_2\text{Se}_3$	32.77 (33.85)	28.00 (28.09)	0.73 (0.77)	0.44	0.61 (0.64)	-0.24
$\text{Ni}_2\text{Se}_3$	31.06 (30.54)	25.02 (28.71)	0.73 (0.72)	0.43	0.65 (0.68)	-0.22
$\text{Pd}_2\text{Se}_3$	34.29 (36.47)	32.10 (33.44)	0.60 (0.59)	0.52	0.54 (0.54)	-0.20



---

第一性原理  
Vienna Ab-initio Simulation  
Package (VASP)  
上机操作





# 一、结构查找

(1) ICSD , <https://icsd.fiz-karlsruhe.de/search/index.xhtml>

注：需要购买才能正常使用，网页版注册后可以试用，查询的结果不全，对应的桌面版软件为findit。

(2) CSD , <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures>

small-molecule organic and metal-organic crystal structures.

(3) COD , <http://www.crystallography.net/cod/search.html>

注：网页版可以直接使用，也有对应的桌面版软件。

(4) Materials Project , <https://www.materialsproject.org>

注：需要用邮箱注册登陆后才可正常使用，这也是一个丰富的电子结构、力学、压电等数据库网站。

(5) ChemSpider, <http://www.chemspider.com/>

注：相比于前面几个网站用于查找晶体材料的结构，这个网站可以很方便查找化学有机材料的结构。



# 一、结构查找

## 二维材料数据库：

Materials Cloud :

<https://www.materialscloud.org/discover/2dstructures/dashboard/pstable>

2D Materials : <https://materialsweb.org/twodmaterials>

2D Materials Encyclopedia : <http://www.2dmatpedia.org>

Computational 2D Materials Database (C2DB) :

<https://cmr.fysik.dtu.dk/c2db/c2db.html#c2db>

JARVIS-DFT : <https://www.ctcms.nist.gov/~knc6/JVASP.html>

Structure map of AB2 type 2D materials : <http://www.openmx-square.org/2d-ab2/?tdsourcetag=spcqqlqiomsg>





# 一、结构查找与建模POSCAR

COD , <http://www.crystallography.net/cod/search.html>

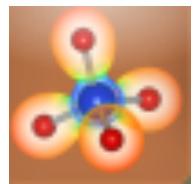
text (1 or 2 words)			
journal			
year			
volume			
issue			
DOI			
Z (min, max)			
Z' (min, max)			
chemical formula (in Hill notation)			
1 to 8 elements	C	Si	
NOT these elements			
volume min and max			
number of distinct elements min and max			
filters	<input type="checkbox"/> has $F_{\text{obs}}$ <input type="checkbox"/> include <a href="#">duplicate entries</a> <input type="checkbox"/> include <a href="#">entries with errors</a> <input type="checkbox"/> include theoretical structures		
Reset	<input type="button" value="Send"/>		

COD ID ▲	Links	Formula ▲	Space group ▲	Cell parameters	Cell volume ▲
<a href="#">1000509</a>	<a href="#">CIF</a>	C23 H34 O4 Si	<a href="#">C 12/c 1</a>	28.084; 8.3502; 20.303 90; 98.37; 90	4710.48
<a href="#">1000510</a>	<a href="#">CIF</a>	C23 H34 O4 Si	<a href="#">P -1</a>	9.4586; 11.1593; 12.4892 89.406; 72.021; 70.117	1172.52
<a href="#">1008106</a>	<a href="#">CIF</a>	C Mn4 Mo Si	<a href="#">C m c 21</a>	10.198; 8.035; 7.63 90; 90; 90	625.2
<a href="#">1008107</a>	<a href="#">CIF</a>	C Mn5 Si	<a href="#">C m c 21</a>	10.198; 8.035; 7.63 90; 90; 90	625.2
<a href="#">1008689</a>	<a href="#">CIF</a>	C0.6 Co9 Si2 Sm	<a href="#">I 41/a m d .2</a>	9.838; 9.838; 6.377 90; 90; 90	617.2
<a href="#">1008897</a>	<a href="#">CIF</a>	C1.575 Co9 Si2 Sm	<a href="#">I 41/a m d .2</a>	9.954; 9.954; 6.48 90; 90; 90	642.1
<a href="#">1010549</a>	<a href="#">CIF</a>	C Al3 Ca Na3 O15 Si3	<a href="#">P 63</a>	12.72; 12.72; 5.18 90; 90; 120	725.8
<a href="#">1010995</a>	<a href="#">CIF</a>	Si C	<a href="#">F -4 3 m</a>	4.348; 4.348; 4.348 90; 90; 90	82.2
<a href="#">1011031</a>	<a href="#">CIF</a>	Si C	<a href="#">F -4 3 m</a>	4.358; 4.358; 4.358	82.8

下载好之后是cif文件，  
可以直接用VESTA打开，  
查看结构



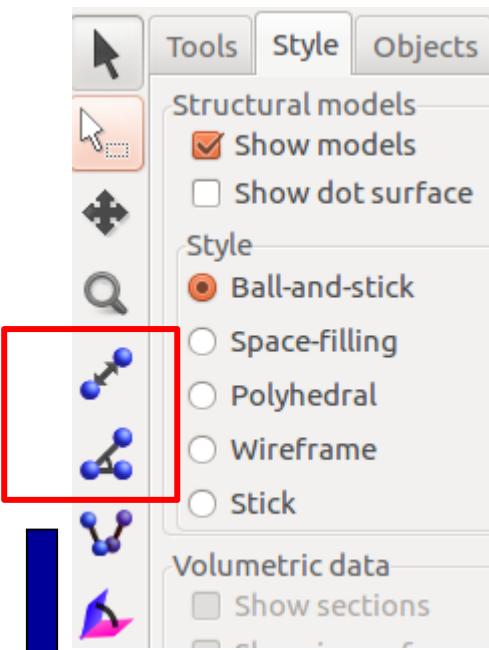
# 一、结构查找与建模POSCAR



结构可视化软件-VESTA：建模工具

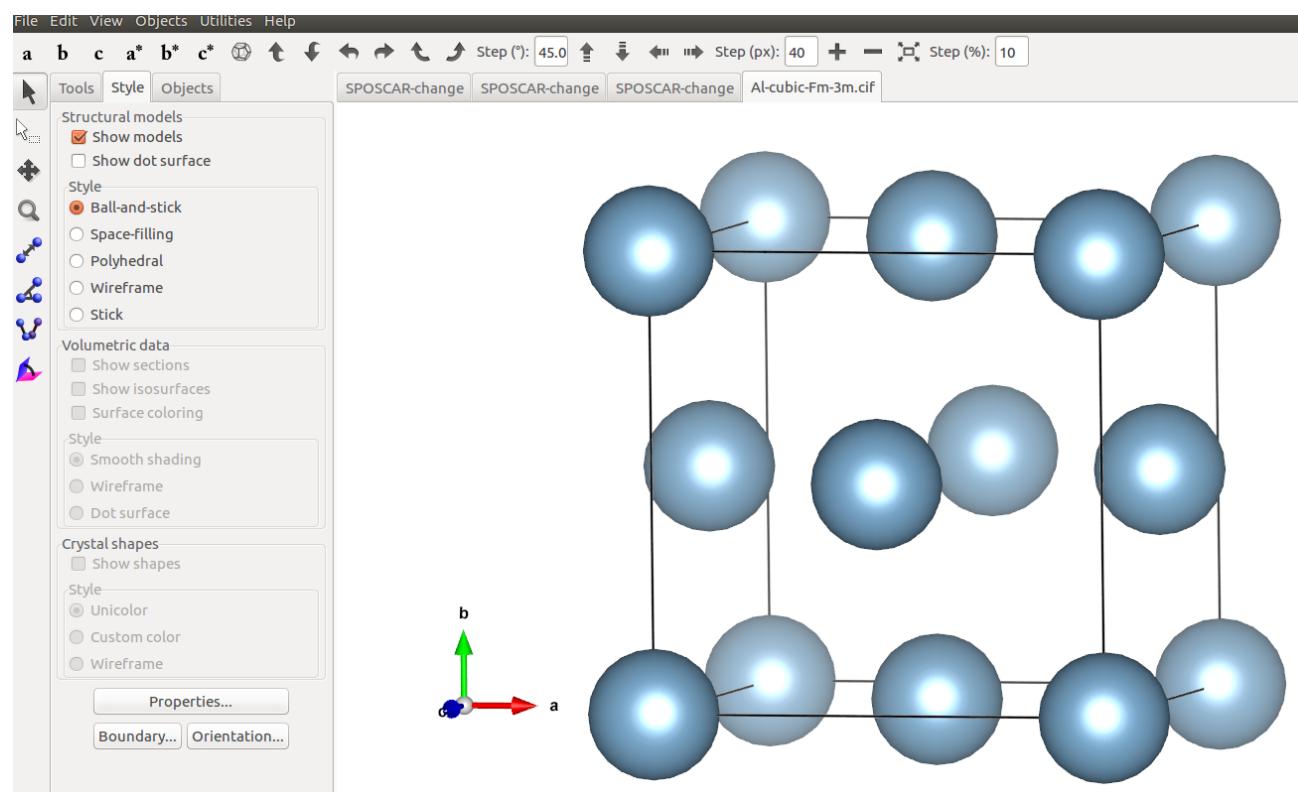
cif 格式→POSCAR.vasp

- VESTA, <http://jp-minerals.org/vesta/en/>



量键长

量键角





# 一、准备计算输入文件

- **POTCAR** : 文件包含了体系中各类元素的赝势
- **POSCAR** : 文件描述了所计算的体系的晶胞参数  
(包括基矢, 晶格常数, 原子类型, 坐标位置)
- **KPOINTS** : k 点设置, 可手动或自动产生。
- **INCAR** : 文件控制了VASP进行何种性质的计算

除了上面的基本文件, 还有提交任务脚本, 以及特定任务的文件:

```
[lvp@node01 encut]$ ls  
INCAR0  job.sh  KPOINTS  POTCAR  test.collect  test.job
```

POTCAR(指定元素种类)来自目录bin/psudopotential :



# 一、准备计算输入文件

POTCAR(指定元素种类)来自目录bin/psudopotential/paw\_pbe :

```
[students@node01 bin]$ cd psudopotential/  
paw paw_gga paw_pbe pot pot_GGA  
[students@node01 psudopotential]$ cd paw_pbe/  
Ac Be Cd Cs_sv Fe Ge_d Hg La Mo  
Ac_s Be_sv Ce Cu Fe_pv Ge_h H_h La_s Mo_pv  
Ag B_h Ce_3 Cu_pv F_h H Ho_3 Li N  
Al Bi C_h data_base F_s H1.25 I Li_sv Na  
Al_h Bi_d Cl Dy_3 Ga H1.5 In Lu Na_pv  
Ar Br Cl_h Er_2 Ga_d H.5 In_d Lu_3 Na_sv  
As B_s Co Er_3 Ga_h H.75 Ir Mg Nb_pv  
Au C Cr Eu Gd He K_pv Mg_pv Nb_sv  
B Ca_pv Cr_pv Eu_2 Gd_3 Hf Kr Mn Nd  
Ba_sv Ca_sv C_s F Ge Hf_pv K_sv Mn_pv Nd_3
```

注：1.一般用标准的就可以；2. 复制出来进行编辑合成（cat 命令）多个元素的 POTCAR，不要在目录bin/psudopotential/paw\_pbe/Si/ 中编辑

```
[students@node01 paw_pbe]$ cd Si  
DDE.Z POTCAR PSCTR.Z V_RHFIN.Z V_TABIN.Z
```



## 二、精度测试-Encut（先假设一个K）

- 测试两种：INCAR中的ENCUT和KPOINTS中的k点

```
[students@node01 examples]$ cd encut-kpoints-test/  
encut k
```

### 1. 测试INCAR中的ENCUT参数（./test.job提交任务；./test.collect收集体系能量）

```
INCAR0 job.sh KPOINTS POSCAR POTCAR test.collect test.job
```

Global Parameters  
ISTART = 1  
ISPIN = 1  
# ICHARG = 11  
LREAL = .FALSE.  
**ENCUT = AAA**  
PREC = Normal  
Ionic Relaxation  
NSW = 0  
IBRION = 2  
ISIF = 2  
EDIFFG = -2E-02  
# ISYM = 2

测试中不需要优化结构，即不优化  
原子位置和晶胞参数





## 二、测试--INCAR文件中的Encut参数

### test.job脚本文件

```
#!/bin/bash
#####
# find $i #####
for i in 200 250 300 350 400 450 500 550 600
#for i in 0.16 0.17 0.18 0.19 0.20 0.21 0.22 0.
#####
# find $i #####
do
sed "s/AAA/$i/g" INCAR0 >INCAR
mkdir $i
cp job.sh INCAR POTCAR POSCAR KPOINTS $i/
cd $i
qsub job.sh>id
cd ../
done
```

Global Parameters  
ISTART = 1  
ISPIN = 1  
# ICHARG = 11  
LREAL = .FALSE.  
ENCUT = AAA  
PREC = Normal  
Ionic Relaxation  
NSW = 0  
IBRION = 2  
ISIF = 2  
EDIFFG = -2E-02  
# ISYM = 2

提交任务命令：  
sbatch job.sh >id



## 二、精度测试-Encut

```
[lvp@node01 encut]$ ./test.job
```

提交

```
[lvp@node01 encut]$ ./test.collect
```

收集数据

```
[lvp@node01 encut]$ cat energy
```

查看数据

#encut	dielec	char	Energy
200			-4.17722314
250			-4.18468268
300			-4.18990479
350			-4.19217660
400			-4.19271565
450			-4.19285299
500			-4.19281721
550			-4.19280584
600			-4.19285137

结论：选取 Encut= 350 eV ,  
INCAR输入文件确定

能量单位： eV



## 二、精度测试-KPOINTS

2. 确定好第一项测试中的ENCUT之后，在此ENCUT值基础，  
测试KPOINTS中的k点（./test.job提交任务；./test.collect收集体系能量）

```
[lvp@node01 k]$ ls  
INCAR  job.sh  KPOINTSO  POSCAR  POTCAR  test.collect  test.job
```

Global Parameters  
ISTART = 1  
ISPIN = 1  
# ICHARG = 11  
LREAL = .FALSE.  
ENCUT = 350  
PREC = Normal

```
[lvp@node01 k]$ cat KPOINTSO  
Automatic kpoint scheme  
0  
Gamma  
AAA AAA AAA
```



## 二、精度测试-KPOINTS

test.job脚本文件

```
#!/bin/bash
#####
#find $i #####
#for i in 200 250 300 350 400 450 500 550
for i in 6 8 10 12 14 16 18 20 22 24 26
#####
#find $i #####
do
    sed "s/AAA/$i/g" KPOINTS0 > KPOINTS
    mkdir $i
    cp job.sh INCAR POTCAR POSCAR KPOINTS $i/
    cd $i
    qsub job.sh>id
    cd ../
done
```

```
[lvp@node01 encut]$ ./test.job
```

提交任务命令：  
sbatch job.sh >id



## 二、精度测试-KPOINTS

```
[lvp@node01 k]$ ./test.job
```

提交

```
[lvp@node01 k]$ ./test.collect
```

收集数据

```
[lvp@node01 k]$ cat energy
```

#KPOINTS	dielec	char
6		-4.25323449
8		-4.18118939
10		-4.16635103
12		-4.19453076
14		-4.17835363
16		-4.19217659
18		-4.18431822
20		-4.18592226
22		-4.18854635
24		-4.18489938
26		-4.18817000

能量单位： eV

结论：选取 K = 18，  
INCAR输入文件确定



### 三、 ISIF=3优化晶格

提交任务命令：

**sbatch job.sh >id**

id中查看自己的任务id

**squeue -u train1** 查看任务运行

```
[lvp@node01 isif3]$ ls  
INCAR  job.sh  KPOINTS  POSCAR  POTCAR
```

#### INCAR中部分参数

```
ENCUT = 455 !350*1.3 → 使用测试好的值*1.3倍  
Ionic Relaxation  
NSW = 60 → 允许的最大离子步数  
IBRION = 2  
ISIF = 3 → 优化晶格常数  
EDIFFG = -1E-02 → 离子受力收敛精度  
# ISYM = 2
```

```
Electronic Relaxation  
ISMEAR = 1          (Gaussian smearing; metals:1)  
SIGMA = 0.2         (Smearing value in eV; metals:0.2)  
NELM = 60           (Max electronic SCF steps)  
NELMIN = 2          (Min electronic SCF steps)  
EDIFF = 1E-06        (SCF energy convergence, in eV)  
# GGA = PS          (PBEsol exchange-correlation)
```

允许的最大电子步数



### 三、 ISIF=3优化晶格

```
[lvp@node01 isif3]$ tail log
      N      E          dE      d  eps      ncg
DAV:  1 -0.419075083790E+01 -0.13946E-03 -0.14559E-03 3856
DAV:  2 -0.419074237234E+01  0.84656E-05 -0.81043E-06 4096
DAV:  3 -0.419073664900E+01  0.57233E-05 -0.31210E-06 3856
DAV:  4 -0.419073664745E+01  0.15493E-08 -0.78405E-09 1808
  3 F= -.41907366E+01 E0= -.41903673E+01 d E =-.553199E-02
curvature: -0.43 expect dE=-0.257E-07 dE for cont linesearch -0.25
trial: gam= 0.00000 g(F)= 0.157E-66 g(S)= 0.595E-07 ort =-0.272E-0
search vector abs. value= 0.596E-07
reached required accuracy - stopping structural energy minimisation
```

```
[lvp@node01 isif3]$ head POSCAR
generated by phonopy
 1.0
 0.0000000000000000 2.0169498920500000 2.0169498920500000
 2.0169498920500000 0.0000000000000000 2.0169498920500000
 2.0169498920500000 2.0169498920500000 0.0000000000000000
Al
 1
Direct
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
```

```
[lvp@node01 isif3]$ cat CONTCAR
generated by phonopy
 1.0000000000000000
 0.0000000000000000 1.9920476159561906 1.9920476159561906
 1.9920476159561906 -0.0000000000000000 1.9920476159561906
 1.9920476159561906 1.9920476159561906 -0.0000000000000000
Al
 1
Direct
 0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
```

任务已成功结束

晶格常数变化



## 四、 ISIF=2固定晶格优化原子位置

在ISIF=3的结果基础（**cp CONTCAR POSCAR**）上另建一个文件夹**isif2**，进行优化或驰豫原子位置任务。

```
[lvp@node01 isif2]$ ls  
INCAR  job.sh  KPOINTS  POSCAR  POTCAR  
[lvp@node01 isif2]$ qsub job.sh >id
```

```
Ionic Relaxation  
NSW      = 60  
IBRION   = 2  
ISIF     = 2  
EDIFFG   = -1E-02  
# ISYM   = 2
```

```
LREAL    = .FALSE.          (P)  
ENCUT   = 350 !350*1.0  
PREC    = Normal           (P)  
LWAVE   = F                (Write V)  
LCHARG  = F                (Write C)
```

提交任务命令：

**sbatch job.sh >id**

id中查看自己的任务id

**squeue -u train1** 查看任务运行

不优化晶格常数

使用测试好的ENCUT值\*1倍



## 四、ISIF=2固定晶格优化原子位置

```
[lvp@node01 isif2]$ tail log
DAV: 5 -0.421979025268E+01 -0.42329E-08 -0.45155E-08 3640
DAV: 6 -0.420169109872E+01 0.18099E-01 -0.23522E-03 4080
DAV: 7 -0.418992889304E+01 0.11762E-01 -0.62750E-03 4024
DAV: 8 -0.418992600788E+01 0.28852E-05 -0.12877E-05 4544
DAV: 9 -0.418992560294E+01 0.40494E-06 -0.24827E-07 4184
    1 F= -.41899256E+01 E= -.41895555E+01 d E =-.418993E+01
curvature: 0.00 expect dE= 0.000E+00 dE for cont linesearch 0.000
trial: gam= 0.00000 g(F)= 0.504E-67 g(S)= 0.000E+00 ort = 0.000E+00
search vector abs. value= 0.100E-09
reached required accuracy - stopping structural energy minimisation
```

```
[lvp@node01 isif2]$ head CONTCAR
generated by phonopy
1.000000000000000
0.000000000000000 1.9920476159561906 1.9920476159561906
1.9920476159561906 0.000000000000000 1.9920476159561906
1.9920476159561906 1.9920476159561906 0.000000000000000
Al
1
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
```

```
[lvp@node01 isif2]$ head POSCAR
generated by phonopy
1.000000000000000
0.000000000000000 1.9920476159561906 1.9920476159561906
1.9920476159561906 -0.000000000000000 1.9920476159561906
1.9920476159561906 1.9920476159561906 -0.000000000000000
```

```
Di TOTAL-FORCE (eV/Angst)
- 0.000000 0.000000 -0.000000
```

任务已成功结束

晶格常数不变化

原子坐标会变化 (已达到收敛精度的不变化)



# 五、力学性质-求cij

之后所有的求材料性质的计算都在ISIF=2的结果CONTCAR基础上（**cp CONTCAR POSCAR**）上另建文件夹，进行力学性质，电学性质，磁学性质等任务。**KPOINTS**中k点\*2.0（金属精确）

## Elastic constants Calculation

IBRION = 6 (Determine the Hessian matrix)

NFREE = 2 (How many displacements are used for each direction; 2-4)

ISIF = 3 (Stress/relaxation: 3-Shape/Ions/V)

NSW = 1 (Max electronic SCF steps)

ENCUT = 455 (1.3 ~ 1.5 \* default cutoff, need to check convergence)

POTIM = 0.015

```
[lvp@node01 cij]$ qsub job.sh >id
```

```
[students@node01 cij]$ tail log
```

```
DAV: 3 -0.108477218263E+02 0.37130E-04 -0.18565E-04 3136 0.911E-02 0.522E-03  
DAV: 4 -0.108477217462E+02 0.80176E-07 -0.14838E-05 3992 0.307E-02 0.378E-03  
DAV: 5 -0.108477207451E+02 0.10010E-05 -0.43271E-06 3272 0.128E-02 0.618E-04  
DAV: 6 -0.108477207781E+02 -0.32946E-07 -0.50103E-07 2016 0.524E-03  
15 F= -.10847721E+02 E0= -.10847721E+02 d E =-.624998E-19
```

```
Finite differences progress:
```

```
Degree of freedom: 7/ 7
```

```
Displacement: 2/ 2
```

```
Total: 14/ 14
```

```
generate k-points for: 10 10 10
```

任务已成功结束



# 五、力学性质-求cij

- Cij 位于OUTCAR中，查找关键词ELASTIC  
(vi OUTCAR 打开，再输入/ELAS)

TOTAL ELASTIC MODULI (kBar)						
Direction	XX	YY	ZZ	XY	YZ	ZX
-----						
XX	1271.1237	629.5370	629.5370	0.0000	-0.0000	-0.0000
YY	629.5370	1271.1237	629.5370	0.0000	-0.0000	-0.0000
ZZ	629.5370	629.5370	1271.1237	0.0000	0.0000	-0.0000
XY	0.0000	0.0000	0.0000	371.9911	-0.0000	-0.0000
YZ	-0.0000	-0.0000	0.0000	-0.0000	371.9911	0.0000
ZX	-0.0000	-0.0000	-0.0000	-0.0000	0.0000	371.9911

10 kBar=1GPa





# Cubic-fcc-Al 面心立方金属铝

	<b>lattice (Å)</b>	<b>C<sub>11</sub></b>	<b>C<sub>12</sub></b>	<b>C<sub>44</sub></b>
Our-DFT	3.98	127.1	63.0	37.1
exp-ref1		123	70.8	30.9
exp-ref2	4.02	114.3	61.9	31.6
exp-ref3		106.8	60.4	28.3
DFT-ref5	3.98	117.5	63.5	35.5
DFT-ref6		108.2	56.6	30.5



# 计算模拟中加应变的方式

- 通过下列等式将晶体的无应变晶格矢量 ( $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$ ) 转换为应变矢量 ( $\mathbf{a}'$ ,  $\mathbf{b}'$ ,  $\mathbf{c}'$ ) :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}' \\ \mathbf{b}' \\ \mathbf{c}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{pmatrix} \bullet (I + \boldsymbol{\varepsilon})$$

*I is the identity matrix,  
 $\boldsymbol{\varepsilon}$  is the strain matrix.*

- 因此，对于正交晶系的晶体结构，通过下列等式沿 $\mathbf{a}$ 方向直接施加单轴应变 $\boldsymbol{\varepsilon}$ :

$$\begin{pmatrix} a+a\boldsymbol{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} 1+\boldsymbol{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- 根据下列等式，在 $ab$ 平面上施加剪切应变 $\boldsymbol{\varepsilon}$ :

$$\begin{pmatrix} a & a\boldsymbol{\varepsilon}/2 & 0 \\ b\boldsymbol{\varepsilon}/2 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} 1 & \boldsymbol{\varepsilon}/2 & 0 \\ \boldsymbol{\varepsilon}/2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$





# 六、力学性质-应力应变曲线

- 应变 $\varepsilon = a_0/a$ ：（在unit-cell正交晶格中计算应变，可用vaspkit工具实现）
- 拉伸单轴，由于泊松比效应，其他轴会变化（用ISIF=3功能计算其他晶格常数），要用到OPTCELL文件（1代表优化或驰豫；0代表不优化）。
- 假如a原始长度10Å, 做5%应变，把POSCAR中的10改为10.5Å，再编辑OPTCELL，拉伸的轴为0，其他轴为1。（金属Al以5%应变为单元递增，减少计算量）

```
collect-data INCAR KPOINTS POTCAR strain-job.sh strain-x
```

- INCAR文件与isif3 优化晶格的INCAR一致
- KPOINTS 文件 k点为16，因原胞晶格常数是2.82，此时unit-cell的晶格常数是3.98，因此k点变为 $2.82*16/3.98$ ，取偶数12
- strain-x是一个施加应变再生成POSCAR的脚本
- collect-data是收集应变计算后的脚本





# strain-x脚本 命令： ./strain-x

```
#!/bin/bash
for i in 0.01 0.05 0.10 0.15 0.20 0.25 0.30 0.33 0.34 0.35 0.36 0.37 0.38 0.39 0.40
do
frac=`echo "$i 3.9840952319123812" | awk '{printf("%18.15f\n",$1*$2)}'` 
a=`echo "3.9840952319123812+$frac " |bc` 
cat > POSCAR << !
al
1.000000000000000
`printf "%18.15f \n" $a` 0.000000000000000 0.000000000000000
0.000000000000000 3.9840952319123812 0.000000000000000
0.000000000000000 -0.000000000000000 3.9840952319123812
Al
4
Direct
0.000000000000000 0.000000000000000 -0.000000000000000
0.000000000000000 0.500000000000000 0.500000000000000
0.500000000000000 -0.000000000000000 0.500000000000000
0.500000000000000 0.500000000000000 0.000000000000000
!
cp POSCAR POSCAR_$i
mkdir $i
cp strain-job.sh INCAR POTCAR KPOINTS POSCAR_$i $i/
cd $i
cp POSCAR_$i POSCAR
qsub strain-job.sh >id
```



# 六、力学性质-应力应变曲线

➤ OUTCAR中从最后开始的第一个 in kB 这一行：

Direction	XX	YY	ZZ	XY	YZ	ZX
-----						
Alpha Z	-0.77812	-0.77812	-0.77812			
Ewald	-103.22554	-92.18676	-92.18676	-0.00000	-0.00000	0.00000
Hartree	0.24161	0.12267	0.12267	-0.00000	-0.00000	-0.00000
E(xc)	-35.93196	-36.64945	-36.64945	0.00000	0.00000	-0.00000
Local	5.56994	-6.19999	-6.19999	0.00000	0.00000	0.00000
n-local	76.56226	81.09789	83.61685	-0.08721	0.59762	0.39820
augment	-4.93534	-5.23932	-5.23932	0.00000	0.00000	0.00000
Kinetic	57.77024	62.90056	54.24320	4.30045	-6.44756	-3.40123
Fock	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
-----						
Total	-4.72690	-0.00172	-0.00172	0.00000	0.00000	0.00000
in kB	<b>-108.01083</b>	<b>-0.03926</b>	<b>-0.03926</b>	<b>0.00000</b>	<b>0.00000</b>	<b>0.00000</b>

$$10 \text{ kBar} = 1 \text{ GPa}$$

0.20应变对应的stress应力是 10.8GPa



## 六、收集应力-应变数据

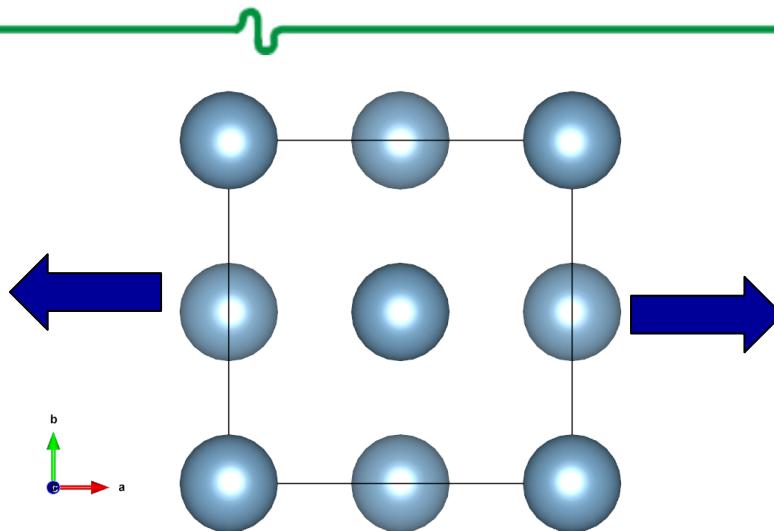
➤ **tail log**命令查看是否已结束计算任务

```
[lvp@node01 strain]$ ./collect-data
[lvp@node01 strain]$ cat stress
#strain          dielec      char          stress
0.01              -3.45151
0.05              -37.60110
0.10              -63.99354
0.15              -94.71907
0.20              -108.01083
0.25              -125.20507
0.30              -128.46091
0.33              -130.32411
0.34              -131.94348
0.35              -133.00879
0.36              -132.92544
0.37              -132.16590
0.38              -131.40869
0.39              -130.96584
0.40              -130.94492
```

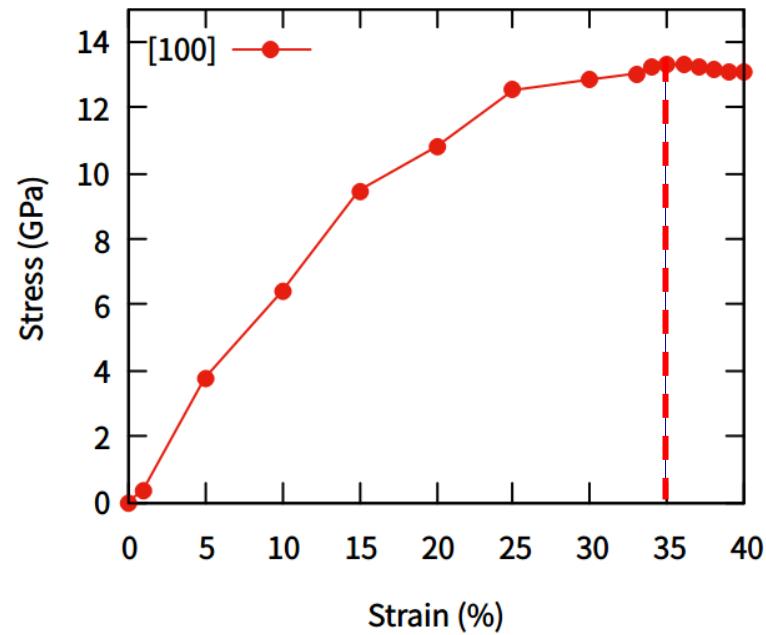
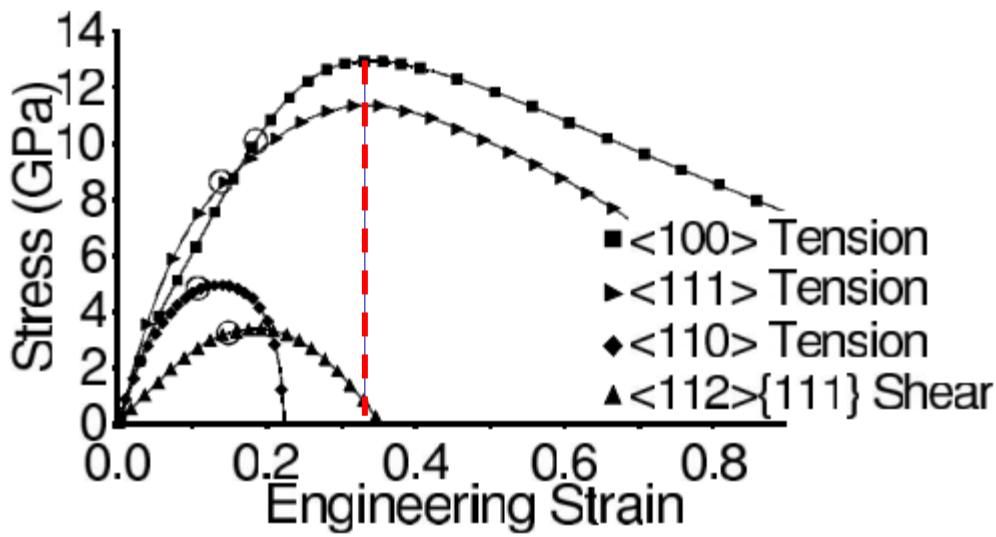




# Cubic-fcc-Al 面心立方金属铝



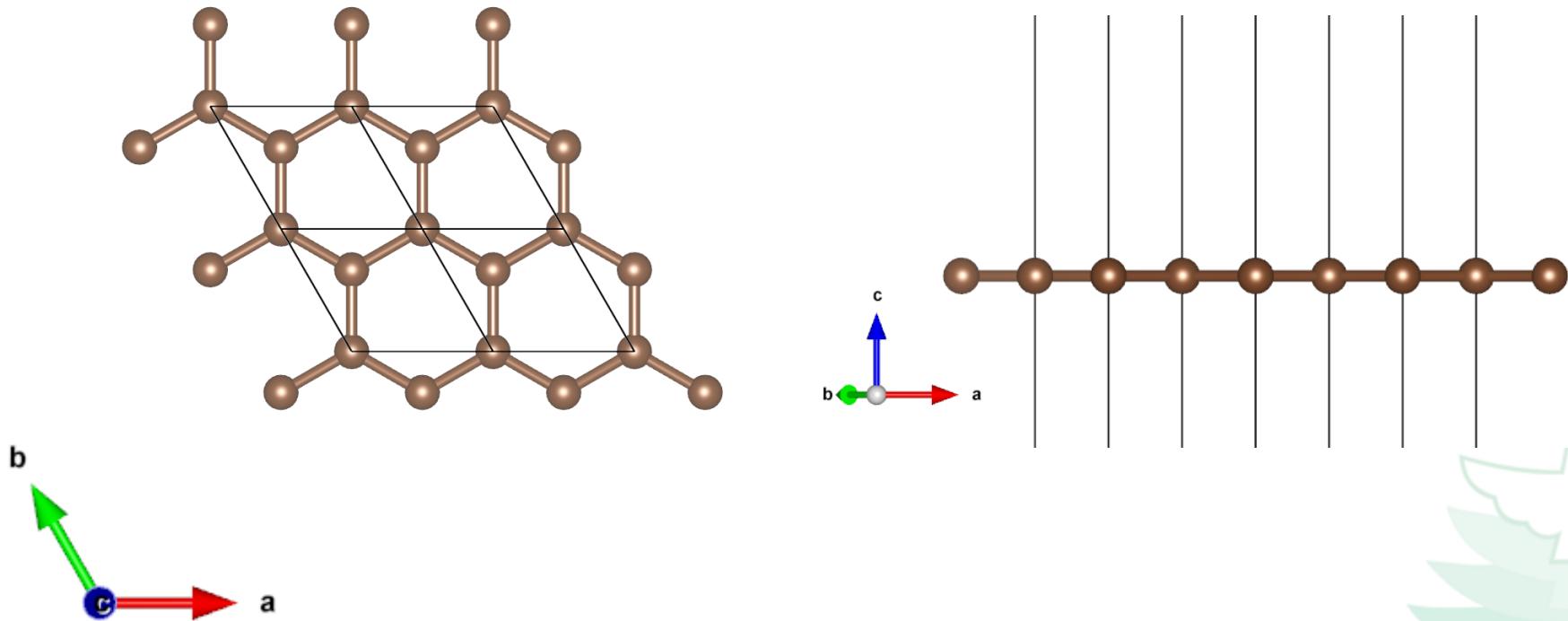
	critical-strain	ideal-stress ( GPa )
our-calculated	0.35	13.3
ref-calculated	0.34	12.92





## 七、二维材料计算

- 二维材料只在ab面内有周期性，c方向上是真空层。





# 七、二维材料计算

```
[students@node01 if-opt-2D-material]$ head POSCAR
Si2
1.0
2.73436403275      0.00000000000  0.00000000000
0.00000000000  2.73436403275  0.00000000000
0.00000000000  0.00000000000  20.00000000000
Si
2
Direct
0      0      0
0.25    0.25    0.25
[students@node01 if-opt-2D-material]$ head OPTCELL
110
[students@node01 if-opt-2D-material]$ ls
INCAR  KPOINTS  opencell-vasp544  OPTCELL  POSCAR  POTCAR
```

真空层

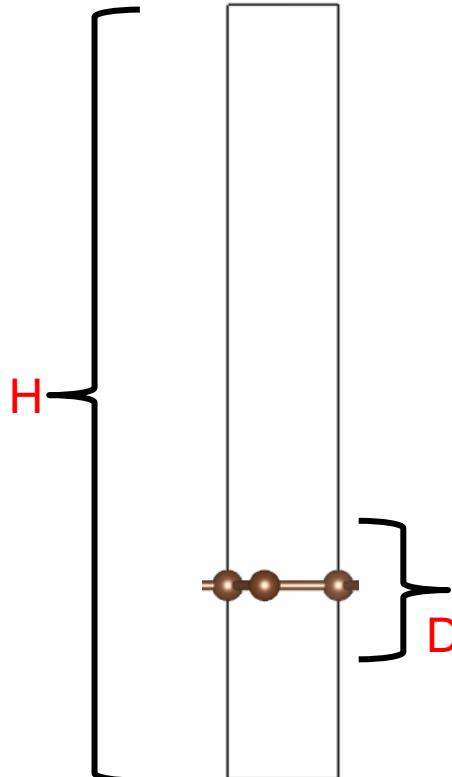
1优化；0固定不优化

二维材料计算  $xy$  或者  $ab$  面内的晶格常数必须要 OPTCELL 同时 INCAR 中 ISIF=3。



# 七、二维材料计算 $C_{ij}$

TOTAL ELASTIC MODULI (kBar)						
Direction	XX	YY	ZZ	XY	YZ	ZX
XX	2433.8548	460.5675	12.1314	0.0000	0.0000	0.0000
YY	460.5675	2433.8548	12.1314	-0.0000	-0.0000	-0.0000
ZZ	12.1314	12.1314	0.3200	0.0000	0.0000	-0.0000
XY	0.0000	0.0000	0.0000	986.6436	0.0000	-0.0000
YZ	0.0000	-0.0000	0.0000	0.0000	0.4876	0.0000
ZX	0.0000	0.0000	-0.0000	0.0000	0.0000	0.4869



由VASP默认情况下输出的是整个晶格（包括真空层）的应力。需要消除真空层的影响，重新定义石墨烯面板。通过以下求得等效应力 $\sigma$ 或者等效弹性常数  $C_{ij}'$ ：

$$C_{ij}' = C_{ij}^*(H/D); \sigma' = \sigma^*(H/D)$$

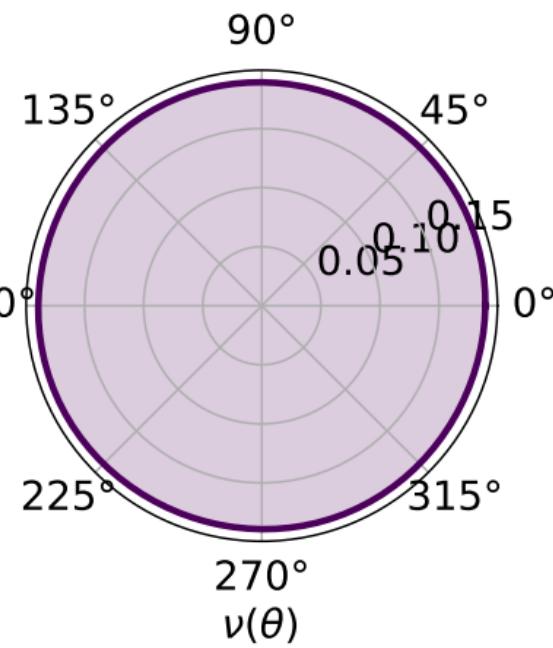
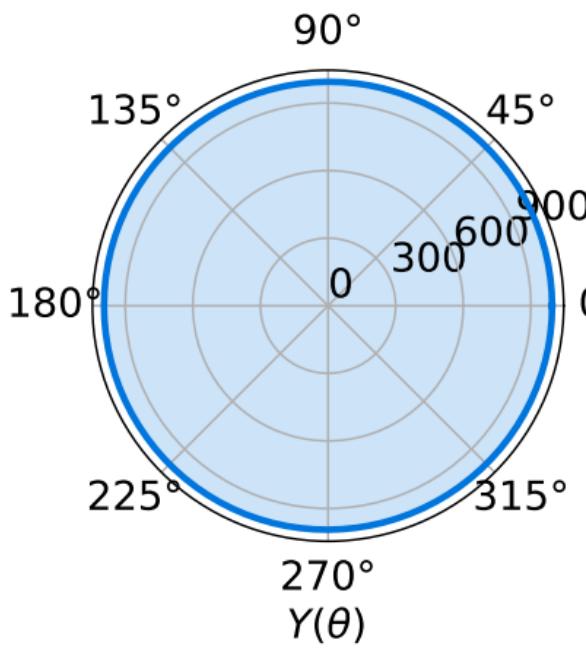
其中  $H$  是整个晶格厚度， $D$ 是材料有效厚度  $D=d+2R_{vdw}$ ， $d$ 是最上层原子到最下层原子的距离， $R_{vdw}$ 是最外层原子vdW半径

在单层石墨烯计算中， $H= 15 \text{ \AA}$ ,  $d=0$ ,  $R_{vdw}= 1.77 \text{ \AA}$



# 七、单层石墨烯有效 $C_{ij}$

$C_{11}$ ( GPa )	$C_{12}$ ( GPa )	$C_{66}$ ( GPa )	$E$ ( GPa )	$\nu$
1031	195	418	994	0.19



$$Y_{[10]}^{2D} = \frac{c_{11} c_{22} - c_{12}^2}{c_{22}}$$

$$Y_{[01]}^{2D} = \frac{c_{11} c_{22} - c_{12}^2}{c_{11}}$$

$$\nu_{[10]}^{2D} = c_{12}/c_{22}$$

$$\nu_{[01]}^{2D} = c_{12}/c_{11},$$

由vaspkit实现二维图



# 二维单层石墨烯力学性质

primitive-cell

(b)

unit-cell

(a)



armchair



zigzag





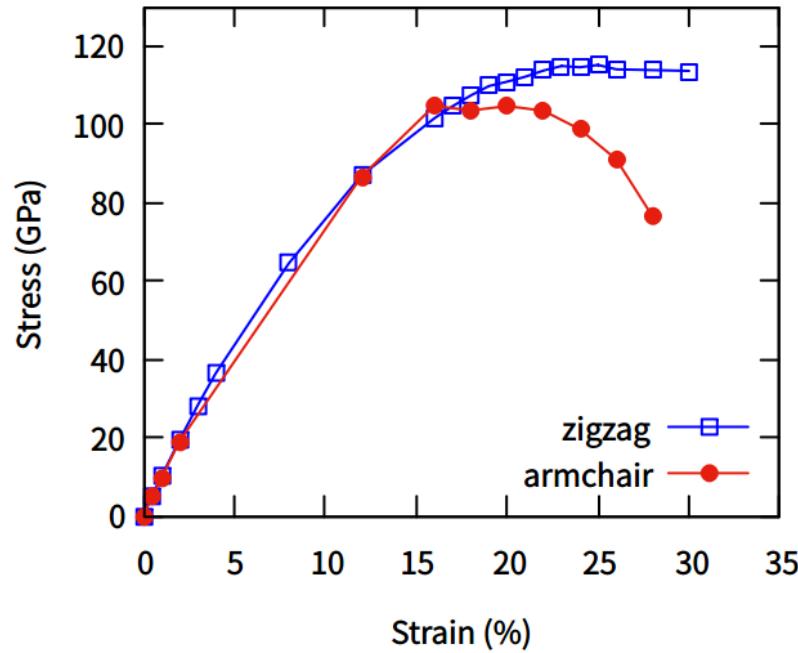
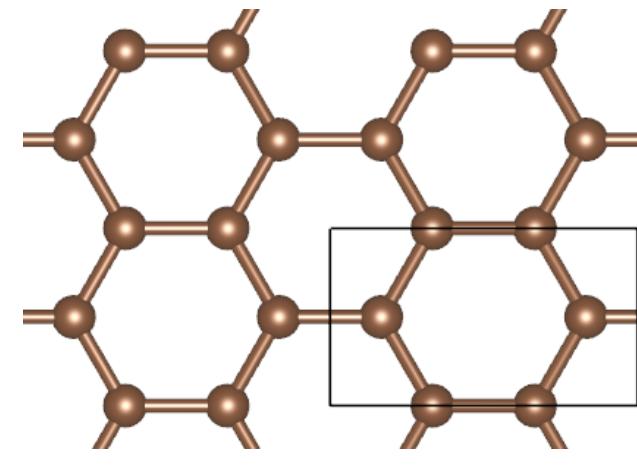
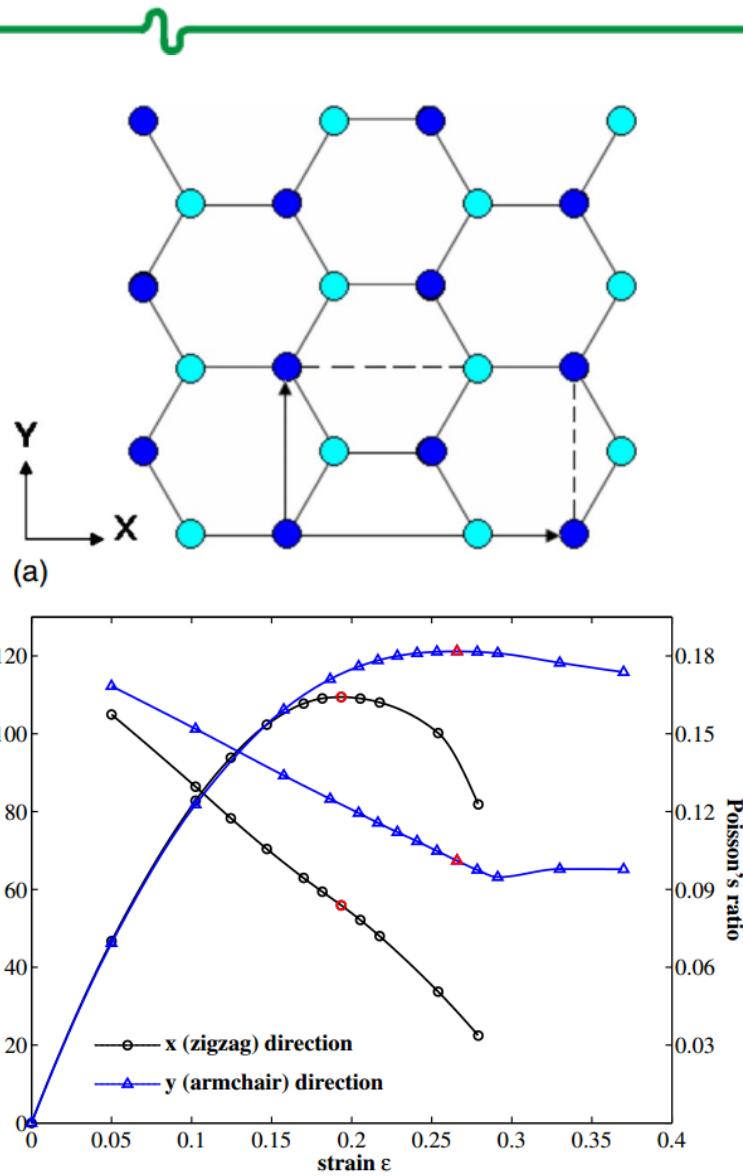
# strain-x脚本 命令： ./strain-x

```
#!/bin/bash
for i in 0.005 0.01 0.02 0.12 0.16 0.18 0.20 0.22 0.24 0.26 0.28
do
frac=`echo "$i 4.236313946805357" | awk '{printf("%18.15f\n", $1*$2)}'` 
b=`echo "4.236313946805357+$frac " |bc` 
cat > POSCAR << !
unit
1.0
    2.4458369975598391      0.0000000000      0.0000000000
    0.0000000000      `printf "%18.15f \n" $b`      0.0000000000
    0.0000000000      0.0000000000      15.0000000000
C
4
Direct
    -0.0000000000      0.333333333333      0.5000000000
    0.5000000000      0.833333333333      0.5000000000
    0.5000000000      0.166666666666      0.5000000000
    -0.0000000000      0.666666666666      0.5000000000
!
cp POSCAR POSCAR_$i
mkdir $i
cp job.sh OPTCELL INCAR POTCAR KPOINTS POSCAR_$i $i/
cd $i
cp POSCAR_$i POSCAR
qsub job.sh >id
cd ..

done
```



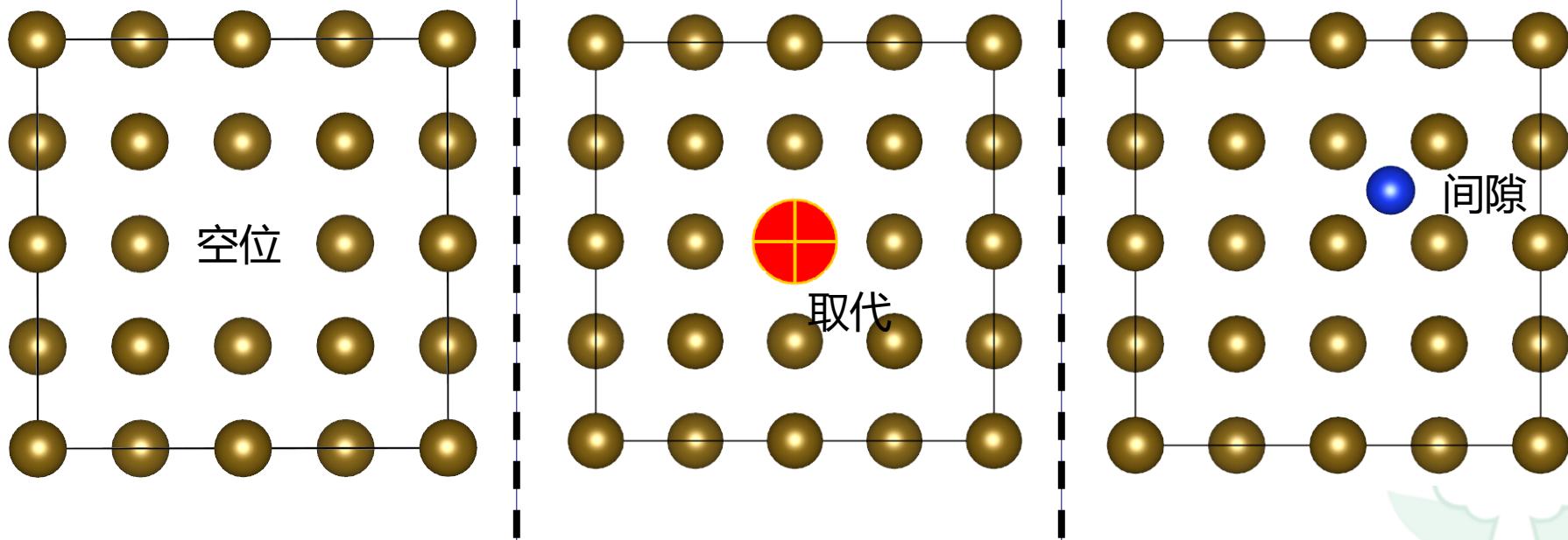
## 七、单层石墨烯应力-应变曲线



# 八、点缺陷

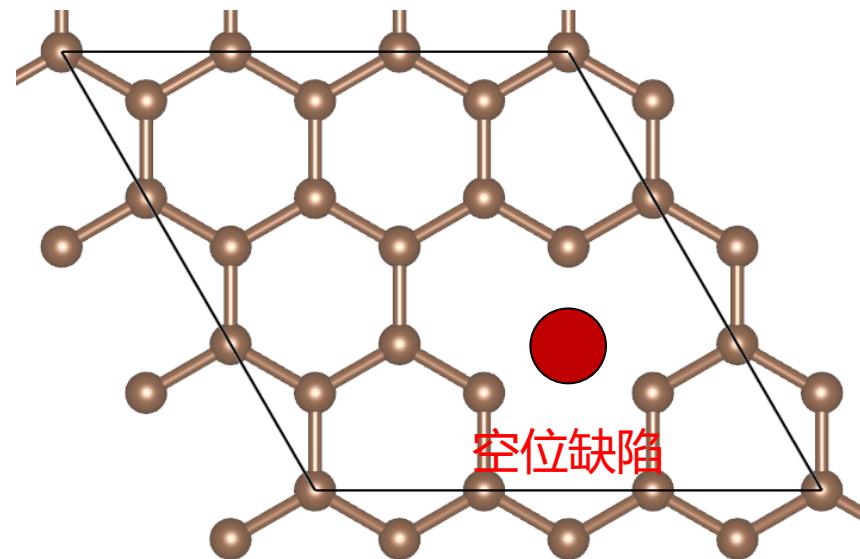
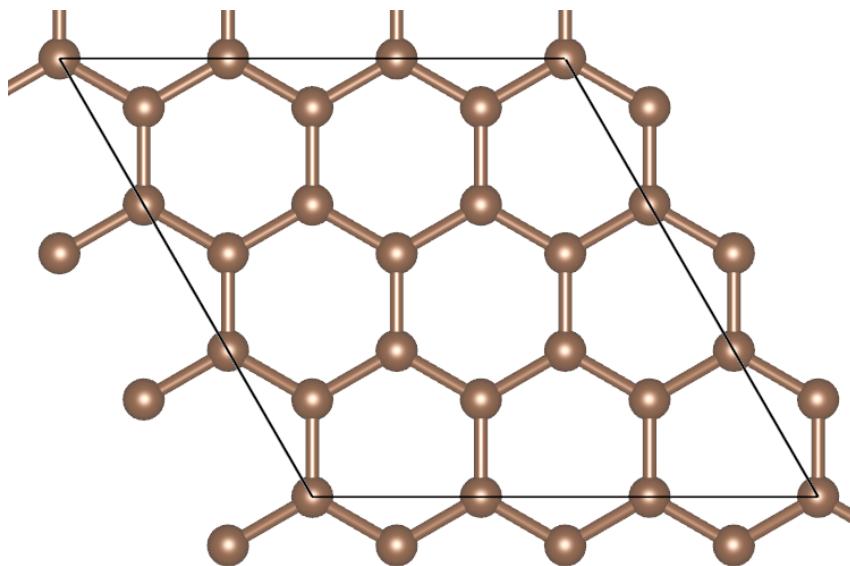
- 空位（肖脱基缺陷、晶格丢失一个原子）
- 取代（杂质原子替代材料中原来的原子）
- 间隙（杂质原子位于材料中原来原子形成的空隙之间）

➤ .....





## 八、单层石墨烯空位缺陷计算



坐标文件**POSCAR**形式：

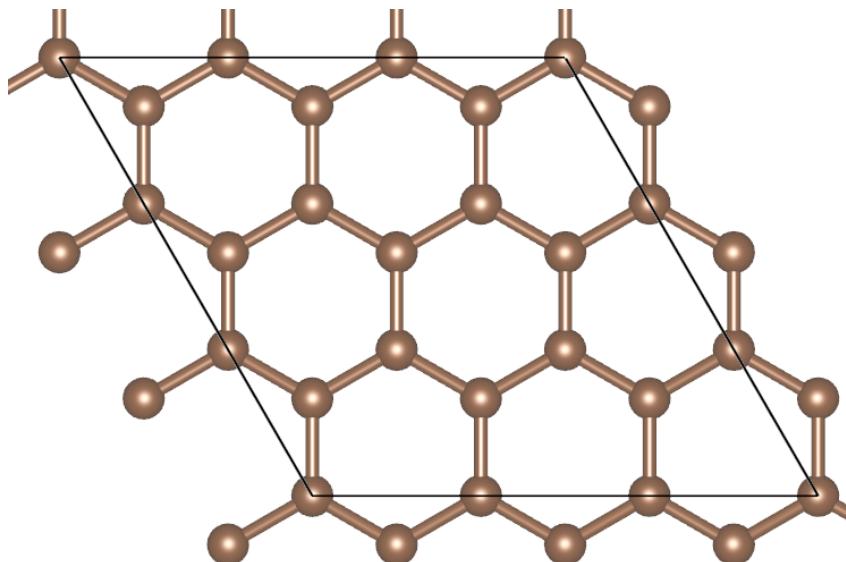
```
Repeated-UnitCell:      3   3   1  
1.000000  
 7.3375109926795172    0.0000000000000000    0.00  
-3.6687554963397586    6.3544709204423864    0.00  
 0.0000000000000000    0.0000000000000000    15.00  
C  
18  
Direct
```

```
Repeated-UnitCell:      3   3   1  
1.000000  
 7.3375109926795172    0.0000000000000000    0.00  
-3.6687554963397586    6.3544709204423864    0.00  
 0.0000000000000000    0.0000000000000000    15.00  
C  
17  
Direct
```

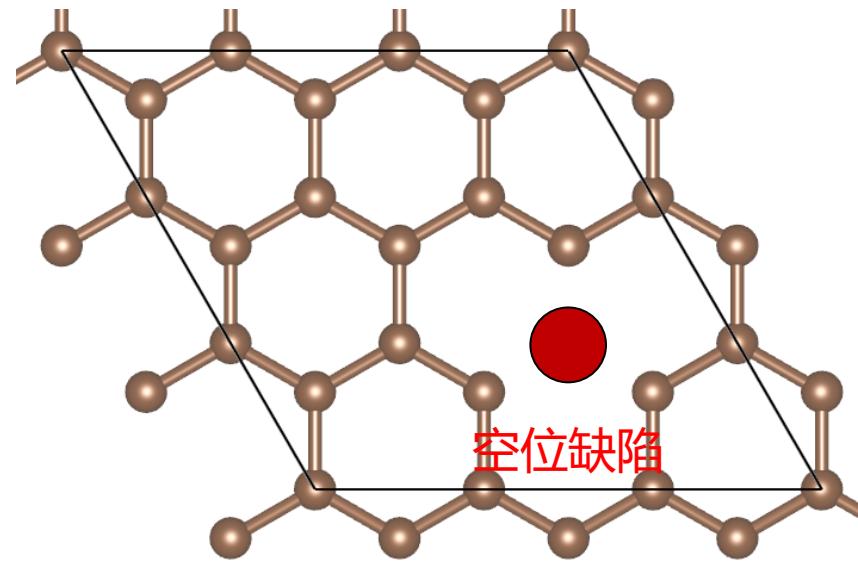
模型建好之后，结构优化即可，即 isif2 任务。



## 八、单层石墨烯空位缺陷计算



Perfect-supercell-331



空位缺陷

缺陷形成能的简单公式：

$$E(\text{formation}) = E(\text{defective}) - E(\text{perfect}) - \mu(C)$$

$$\mu(C) = E(\text{perfect}) / n, \quad \text{原子化学势,} \quad n = \text{原子数目}$$



## 八、单层石墨烯空位缺陷计算

- 缺陷形成能的简单公式：
- $E(\text{formation}) = E(\text{defective}) - E(\text{perfect}) - \mu(C)$
- $\mu(C) = E(\text{perfect}) / n$ , 原子化学势,  $n$ = 原子数目

perfect与defect目录下的结构优化之后：

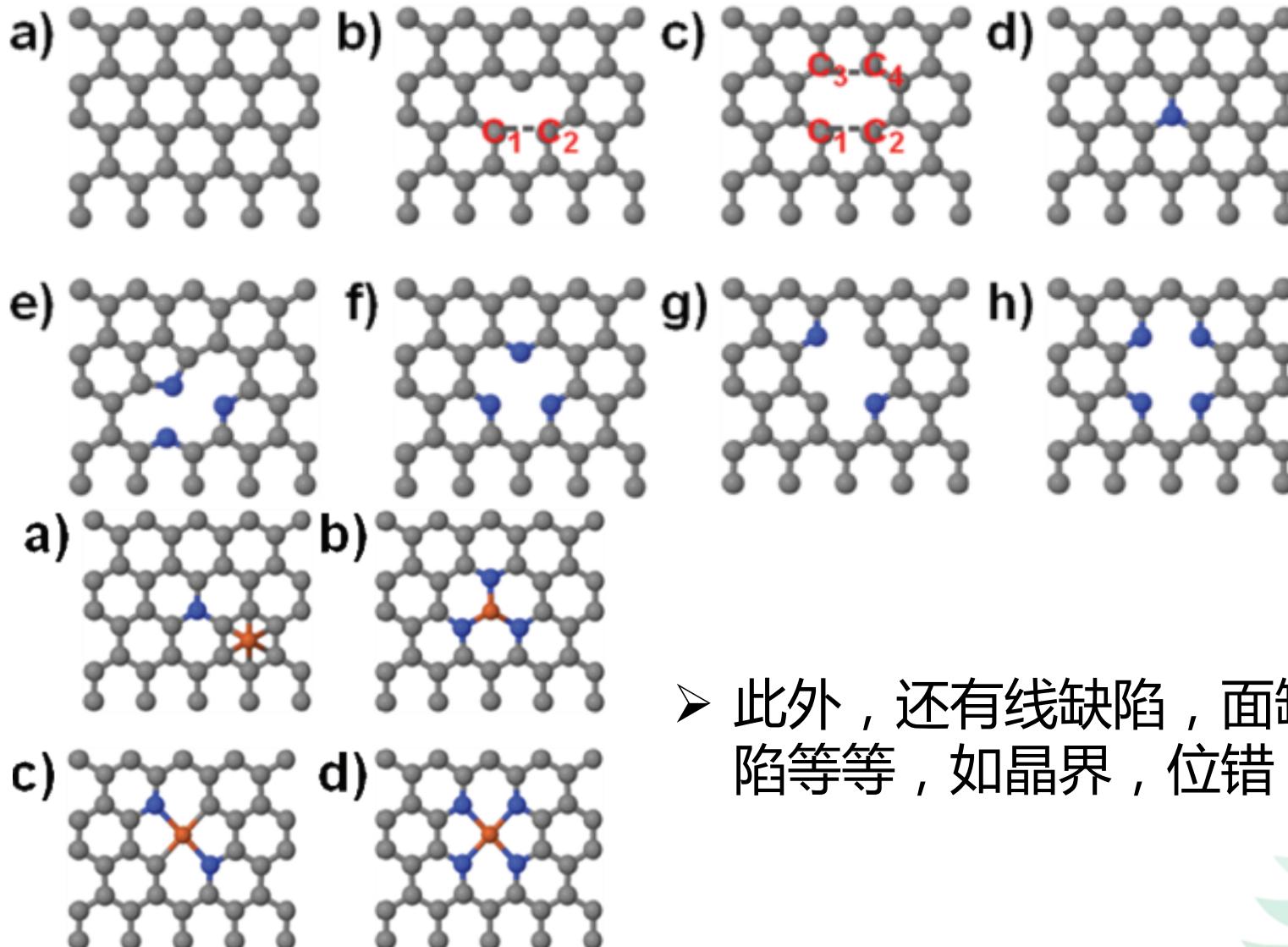
$$E(\text{defective}) = -.18178636E+03 \text{ eV}$$

$$E(\text{perfect}) = -.16353624E+03 \text{ eV}$$

$$\mu(C) = E(\text{graphene}) / 2 = -.20203196E+02 / 2$$

得  $E(\text{formation}) = 8.15 \text{ eV}$

# 石墨烯的各种点缺陷计算

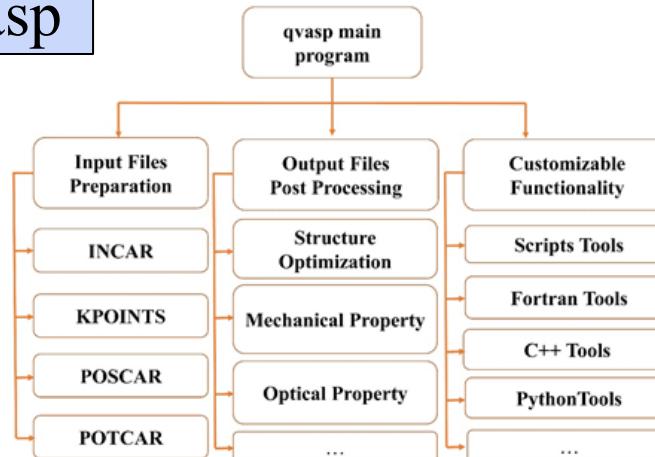


➤ 此外，还有线缺陷，面缺陷等等，如晶界，位错



# VASP后处理工具

qvasp



vaspkit



<https://sourceforge.net/projects/qvasp>

*Computer Physics Communications*  
257:107535 (2020)

<http://vaspkit.sourceforge.net/>

*arXiv:1908.08269*



DFT学术之友: