

**VASPMATE使用手册**

Version 1.0, July 16, 2022

Edit by

Zhaocheng Pan

Ruifeng Zhang

**MICID Lab**

Materials Integrated Computation and Intelligent Design

**目录**

[1 VASPMATE简介 2](#_Toc132221557)

[2 VASPMATE的配置和使用 3](#_Toc132221558)

[3 VASPMATE功能介绍 4](#_Toc132221559)

[3.1 VASP 输入文件 4](#_Toc132221560)

[3.1.1 POSCAR 4](#_Toc132221561)

[3.1.2 INCAR 14](#_Toc132221562)

[3.1.3 KPOINTS 17](#_Toc132221563)

[3.1.4 POTCAR 19](#_Toc132221564)

[3.1.5输入文件检查 20](#_Toc132221565)

[3.2 能带计算 21](#_Toc132221566)

[3.2.1 PBE泛函计算能带步骤 22](#_Toc132221567)

[3.2.2 HSE泛函计算能带步骤 32](#_Toc132221568)

[3.3 态密度计算 34](#_Toc132221569)

[3.4 Bader电荷计算 38](#_Toc132221570)

[3.5 过渡态NEB计算 39](#_Toc132221571)

[3.6 带边电荷计算 41](#_Toc132221572)

[3.7 电荷密度计算 43](#_Toc132221573)

[3.8 实空间波函数可视化分析 45](#_Toc132221574)

[3.9 费米面计算 46](#_Toc132221575)

[3.10 3D能带 49](#_Toc132221576)

[3.11热力学量校正 51](#_Toc132221577)

[3.11.1 气相分子的热力学校正 54](#_Toc132221578)

[3.11.2 吸附分子的热力学校正 55](#_Toc132221579)

[3.12 化合物形成焓计算 56](#_Toc132221580)

[3.13 VASP输入输出参数提取（SDAMS数据库） 57](#_Toc132221581)

[3.14 高通量程序：ABAND和AEDOS 57](#_Toc132221582)

[4 实例 59](#_Toc132221583)

[4.1 B6N能带结构计算（PBE泛函） 59](#_Toc132221584)

[4.2 B6N能带结构计算（HSE泛函） 61](#_Toc132221585)

[4.3 B6N态密度计算 64](#_Toc132221586)

[4.4 Fe的能带和态密度计算（带自旋） 66](#_Toc132221587)

[参考文献 71](#_Toc132221588)

# 1 VASPMATE简介

VASP 的全称 Vienna Ab-initio Simulation Package[1] ，是维也纳大学Hafner小组开发的进行第一性原理计算和从头算分子动力学模拟软件包，是目前材料模拟和计算中最流行的商用软件之一。VASP具有相当高的计算精度和运行效率，针对不同体系和计算目标有着较高的灵活性，然而，VASP没有提供简洁的图形用户界面，给初学者带来了很大困扰。大多数情况下，VASP用户需要依赖第三方程序例如ASE，P4VASP，VASPView，VESTA等进行可视化处理，或者使用的自制脚本或者小程序，例如VTST，VASPMO等。尽管如此，对于新用户来说想要找到理想的处理脚本并成功使用依旧具有一定难度。近年来，vaspkit[2]程序的出现在很大程度上部分解决了该问题，其强大的前、后处理功能对于初学者显得十分友好和方便。但是，vaspkit程序更偏重于简单通用的用户交互控制，对高通量计算流程设计便利性的支持不足。在此背景下，一款面向于简洁高效的高通量流程设计的VASP伙伴程序VASPMATE应运而生。

VASPMATE有着十分友好且强大契合VASP前后处理的功能，运行在linux系统下，由C/C++语言编写，体积量小，可移植性强，操作简单。除此以外，将VASPMATE作为高通量控制子模块，能够轻松添加到课题组开发的集成化平台SPaMD[3]，并由此产生了两款用于能带结构和态密度的高通量计算的图形用户界面软件ABAND和AEDOS。

# 2 VASPMATE的配置和使用

获取VASPMATE安装包

1、发送注册表到zrfcms@buaa.edu.cn，获取百度网盘链接。

2、或直接从github下载，链接如下：https://github.com/zrfcms/VASPMATE

***VASPMATE安装步骤***

tar -xvf VASPMATE-x.x.x.tar

cd VASPMATE-x.x.x.

make

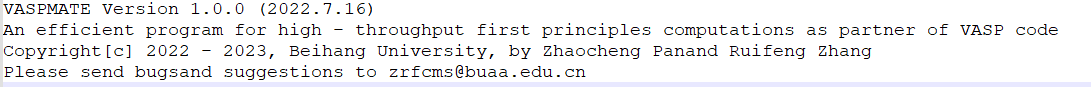
安装好的VASPMATE保存在bin文件夹下。为了方便应用，建议将VASPMATE的绝对路径添加到环境变量中。可以按照如下步骤操作：

pwd 获取当前所在路径

echo ‘export PATH=当前所在路径’ >> ~/.bashrc

source ~/.bashrc

完成以上操作，在终端输入VAPSMATE，出现如下界面：



则表示程序安装成功。

# 3 VASPMATE功能介绍

本手册将介绍VASPMATE基本命令行使用方法，目前包括生成VASP运行所需的输入文件，对输入结构的各种操作和分析，使用GGA-PBE和HSE-PBE方法计算能带结构和态密度等。

## 3.1 VASP 输入文件

### 3.1.1 POSCAR

POSCAR是包含晶胞信息、原子坐标信息、原子约束信息和原子速度信息（MD）的文件，以下命令均为直接对POSCAR进行的操作，注意括号内的参数为不指定参数情况下的默认参数，例如VASPMATE --prim 表示默认对INPOS文件进行生成原胞操作并将新生成的原胞保存到PRIMPOS文件中。

*Mode:***cif**

*Syntax:*

VASPMATE --cif2pos file1 file2

VASPMATE --pos2cif file1 file2

*Description:*

此模块用于cif和POSCAR格式间的互换，对于cif2pos，file1为CIF文件名，file2为POSCAR文件名，对于pos2cif则相反。

*Examples:*

VASPMATE --cif2pos POSCAR POSCAR.cif

VASPMATE --cif2pos POSCAR.cif POSCAR

*Mode:* **volume**

*Syntax:*

VASPMATE --vol file(INPOS)

*Description:*

此模块用于快速获取POSCAR类型文件晶体结构体积。

*Examples:*

VASPMATE --vol POSCAR

VASPMATE --vol

*Mode:* **atom**

*Syntax:*

VASPMATE -- atom file(INPOS)

*Description:*

此模块用于快速获取POSCAR类型文件晶体结构总原子数目。

*Examples:*

VASPMATE -- atom POSCAR

VASPMATE -- atom

*Mode:* **primitive cell**

*Syntax:*

VASPMATE --prim file1(INPOS) file2(PRIMPOS)

*Description:*

原胞是一个晶体结构最小的重复单元，能完整反映晶体内部原子或离子在三维空间分布的化学-结构特征。默认输入文件file1为INPOS，输出文件file2为PRIMPOS。

*Examples:*

VASPMATE --prim

VASPMATE --prim POSCAR POSCAR1

*Mode:* **convention/unit cell**

*Syntax:*

VASPMATE --unit file1(INPOS) file2(UNITPOS)

*Description:*

在很多情况下，需要将原胞还原为单胞，从而更好地反映出晶体结构特征或者对称性。默认输入文件file1为INPOS，输出文件file2为UNITPOS。

*Examples:*

VASPMATE --unit

VASPMATE --unit POSCAR POSCAR1

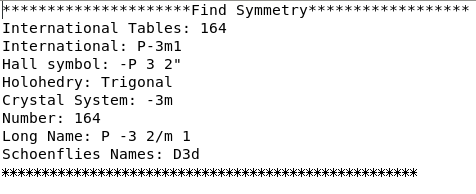
*Mode:* **symm**

*Syntax:*

VASPMATE --symm file（INPOS）

*Description:*

对称性是晶体结构最基本的特征，使用该模块将输出晶体的基本对称性信息，例如空间群，点群，晶系等。输出信息将默认保存在SYMMCAR文件中。



*Examples:*

VASPMATE --symm

VASPMATE --symm POSCAR

*Mode:* **supercell**

*Syntax:*

VASPMATE --super file1(INPOS) file2(SUPERPOS) sup\_1 sup\_2 sup\_3

*Description:*

此模式将构建当前晶胞的重复超胞。超胞的晶格向量是原始晶胞中晶格向量的整数倍。sup\_1、sup\_2和sup\_3是晶格向量的扩胞倍数。请注意，sup\_1、sup\_2和sup\_3必须是整数，并且≥ 1。默认输入文件file1为INPOS，输出文件file2为SUPERPOS。

*Examples:*

VASPMATE –super 4 4 1

VASPMATE --super POSCAR POSCAR1 4 4 1

*Mode:* **affine[4]**

*Syntax:*

VASPMATE --affine (AFFPOS0) -simshear(-purshear,-tension) mode(xx yy zz xy xz yz yx zx zy) init\_strain step\_length step\_num

*Description:*

该命令必须要求AFFPOS0文件的存在，其中-simshear,-purshear,-tension为形变模式，分为简单剪切，纯剪切，单轴拉伸，mode为形变方向，init\_strain为初始应变值，step\_length为应变增加步长，step\_num为应变步数。产生AFFPOS\_\*文件，其中\*表示当前应变值。

*Examples：*

VASPMATE --affine -simshear xy 0 0.1 10

VASPMATE --affine -purshear xy 0 0.1 10

VASPMATE --affine -tension xx 0 0.1 10

*Mode:* **alias[4]**

*Syntax:*

VASPMATE --alias (ALIPOS0) -tensi mode(xx, yy, zz) istart iend ispac [value]

VASPMATE --alias (ALIPOS0) -shear mode(xy, xz, yz) istart1 iend1 ispac1 istart2 iend2 ispac2 [zvalue]

*Description:*

该命令必须要求ALIPOS0文件的存在，分为拉伸tensi和剪切shear两种变形模式，对于tensi模式，mode为形变方向，istart为方向起始应变，iend为结束应变，ispac为每步应变步长，每步总应变值为istart+ispac\*k，k=0,1,2,3,…直到istart+ispac\*k>iend。同理对于shear模式，mode为形变平面，istart1和istart2为确定该平面两个方向上的起始应变，iend1和iend2为两个方向上的终止应变，ispac1和ispac2为两个方向上每步的步长。每步总应变值分别为istart1+i×ispac1和istart2+j×ispac2，i=0,1,2,3…，j=0,1,2,3…直到istart1+i×ispac1>iend1, istart2+j×ispac>iend2。

提示：用alias进行变形操作后，通常需要对输出文件进行原子位置固定，例如对于shear时，所有原子在垂直于变形面需要松弛，其他方向需要固定，此时可以使用VASPMATE的fix功能对原子坐标进行统一松弛或固定。

该命令产生ALIPOS\_\*(tensi)或ALIPOS\_\*\_\*(shear)文件，其中\*表示当前应变值。

*Examples:*

VASPMATE --alias --tensi xx 1 10 1 0

VASPMATE --alias --shear xy 1 10 1 1 10 0.5 0

*Mode:* **proj**

*Syntax:*

VASPMATE --proj -rot file1(INPOS) file2(PROJPOS) rotx roty rotz

VASPMATE --proj -ind file1(INPOS) file2(PROJPOS) pvh pvk pvl uvu uvv uvw

VASPMATE --proj -mat file1(INPOS) file2(PROJPOS) mat11 mat12 mat13 mat21 mat22 mat23 mat31 mat32 mat33

*Description:*

该模式将给定晶胞的一个特定方向（即施加的应变方向）投影为平行于拉伸变形的一个轴向量（如y），从而便于施加单轴拉伸变形；或者将晶胞的滑动面法向投影为平行于一个轴矢量（如x），同时将剪切方向投影为平行于另一个轴矢量（如y），从而便于施加特定滑移系统的剪切变形。

-rot为旋转法，需要提供三个旋转角度rotx，roty，rotz。

-ind 为晶体指数法，需要提供一个垂直于正空间（pvh,pvk,pvl）平面的倒易矢量[pvh,pvk,pvl]\*和一个晶格矢量[uvu uvv uvw]，此时必须保证晶格向量[uvu uvv uvw]位于平面（pvh,pvk,pvl）上，即保证pvh⋅uvu+ pvk⋅uvv+ pvl⋅uvw=0 。请注意，pvh、pvk、pvl、uvu、uvv和uvw必须为整数。

-mat 为广义投影法，其中mat是正交归一化的3×3矩阵，其与初始原子基矢矩阵*R*和投影转换后的原子基矢矩阵*Rproj*满足。此矩阵可由可视化程序VESTA获得。

该模式默认输入文件file1为INPOS，输出文件file2为PROJPOS。

*Examples:*

VASPMATE --proj -rot 30.00 0.00 30.00

VASPMATE --proj -ind 1 1 1 1 1 -2

VASPMATE --proj -mat 0.5774 0.5774 0.5774 0.4082 0.4082 -0.8165 -0.7071 0.7071 0.0000

*Mode:* **redefine**

*Syntax:*

VASPMATE --redef (INPOS) (REDPOS) vect11 vect12 vect13 vect21 vect22 vect23 vect31 vect32 vect33 a1 x1 a2 x2

*Description:*

此模式将重新定义当前晶胞的基矢，根据选定的平行坐标轴和所处平面重新决定晶体取向。坐标轴和平面的选取取决于最后四个参数，a1，a2为重新定义后的晶格矢量，取值为a,b,c；x1和x2分别代表轴和平面，x1=[x,y,z]，x2=[xz,xy,yz]（注意均为小写）。例如a x b xy表示新的晶格矢量a将平行于x轴，矢量b将位于xy平面上。默认输入文件file1为INPOS，输出文件file2为REDPOS。

*Examples:*

VASPMATE --redef 1 -1 0 1 1 -2 2 2 2 a x b xy

VASPMATE --redef POSCAR POSCAR1 1 -1 0 1 1 -2 2 2 2 c x a yz

*Mode:* **ieee***Syntax:*

VASPMATE --ieee file1(INPOS) file2(IEEEPOS)

*Description:*

此模式将一个2D或者3D材料转为参考文献[5]中所要求的IEEE结构格式。默认输入文件file1为INPOS，输出文件file2为IEEEPOS。

*Examples:*

VASPMATE --ieee POSCAR

*Mode:* **fix**

*Syntax:*

VASPMATE --fixc file2(INPOS) file2(FIXPOS) axis m n F F F (fix m-n)

VASPMATE --fixa file2 file2 1 2 3-5... F F F (fix m-n)

VASPMATE --fixe file2 file2 A B C... F F F (fix m-n)

VASPMATE --ufix file(INPOS)

*Description:*

此模式主要用于根据需求固定原子坐标，分为三种固定方式。第一种fixc为根据原子坐标分量固定原子，axis为选定坐标轴[x,y,z]，m和n分别为笛卡尔坐标系下的最小值和最大值，对于axis轴坐标分量处于[m,n]之间的原子，施加某个方向上的固定，例如F F F。第二种fixa是根据原子序号固定原子，最后三个为T或F。第三种fixe是根据元素类型固定原子，A,B,C为元素名称，最后三个为T或F。最后的ufix为清除固定，即放开全部原子进行松弛。fixc和ufix的默认输入文件file1为INPOS，输出文件file2为FIXPOS，fixa和fixe需要手动指定输入输出文件。

*Examples:*

VASPMATE --fixc z 2 10 F F F

VASPMATE --fixa INPOS FIXPOS 2-5 F F T

VASPMATE --fixe INPOS FIXPOS B N F F T

VASPMATE --ufix

*Mode:* **to direct or cartes**

*Syntax:*

VASPMATE --cartes file1(INPOS) file2(NEWPOS)

VASPMATE --direct file1(INPOS) file2(NEWPOS)

*Description:*

此模式主要用于POSCAR的分数坐标和笛卡尔坐标转换。--cartes代表将当前结构转化为笛卡尔坐标，--direct代表将当前结构转化为分数坐标，该功能无需指定初始结构的坐标形式，程序会自行判断并读取。默认输入文件file1为INPOS，输出文件file2为NEWPOS。

*Examples:*

VASPMATE --cartes

VASPMATE --direct POSCAR POSCAR1

*Mode:***sort**

*Syntax:*

VASPMATE --sortc file1(INPOS) file2(SORTPOS) axis

VASPMATE --sorte file1(INPOS) file2(SORTPOS) elem1 elem2

*Description:*

此模块主要用于原子排序，共分为两种方式。sortc是将原子按照选定坐标轴进行排序，根据该坐标轴上原子坐标分量的大小重新排列结构文件中的原子序列。sorte是将两种不同类型的原子在结构文件中交换次序。默认输入文件file1为INPOS，输出文件file2为SORTPOS。

*Examples:*

VASPMATE --sortc z

VASPMATE --sorte B N

*Mode:***move**

*Syntax:*

VASPMATE --move (-c/-d) file1(INPOS) file2(MOVEPOS) axis min max dx dy dz

*Description:*

此模块用于对原子进行定向移动，-c/-d表示移动距离相对于笛卡尔坐标（carts）和分数坐标（direct），如果缺少此参数，则会根据初始文件的坐标形式进行移动，默认输入文件为INPOS，输出文件为MOVEPOS，dx，dy，dz为三个方向上移动的距离，移动的原子选取为axis（x，y，z）坐标轴上坐标分量处于[min,max]之间的原子，注意该坐标分量的数值要与-c/-d选取一致。

*Examples:*

VASPMATE --move z 0 1 0.1 0.2 0.3

VASPMATE --move -d z 0 1 0.1 0.2 0.3

VASPMATE --move -d POSCAR POSCAR1 z 0 1 0.1 0.2 0.3

### 3.1.2 INCAR

*Mode:* **incar input files**

*Syntax:*

VASPMATE --i mode1 mode2 …

*Description:*

为了便于使用，VASPMATE内嵌了计算不同任务的默认incar文件，mode选项为计算任务的缩写命令。产生的文件格式为incar\_\*…。详细信息参照下表。

|  |  |
| --- | --- |
| rlx/lar | Lattice & Atomic Relaxtion |
| sst/stc | Static State Calculation |
| mds | Molecular Dynamic Simulation |
| sar | Standard Atomic Relaxtion |
| mpc | Magnetic Property Calculation |
| soc | Spin-Orbit Coupling Calculation |
| hse | Hybrid function HSE06 |
| vdw | DFT-D3 Correction |
| sic | Self-Interaction Correction |
| ecc | Elastic Constants Calculation |
| bca | Bader Charge Analysis |
| elf | Electron Localization Function |
| fpm | Frozen Phonon Method |
| dfp | Density functional Perturbation |
| neb | Nudged Elastic Band method |
| tsd | Transition State Dimer method |
| pbs | Projected Band Structure |
| bbs | Basic Band Structure |
| bcd | Basic Charge Density |
| scd | Spin Charge Density |
| pcd | Partial Charge Density |
| tlp | Total Local Potential |
| esp | Electrostatic Potential |
| wfn | Wave Function Calculation |
| tdm | Transition Dipole Moment |
| los | Linear Optical Spectrums |

*Examples:*

VASPMATE --i rlx

VASPMATE --i stc sic hse

*Mode:* **incar parameters revision**

*Syntax:*

VASPMATE --i\_app keyword value （--i\_append）

VASPMATE --i\_del keyword （--i\_delete）

VASPMATE --i\_rem keyword （--i\_remove）

VASPMATE --i\_rep keyword （--i\_replace）

*Description:*

该功能主要用于对INCAR文件进行动态修改。注意该操作对象必须为INCAR文件。--i\_append和--i\_replace分别为修改INCAR中对应关键字的数值和在文件末尾追加对应数值，--i\_delete为删除keyword所在一行，--i\_remove为注释掉keyword所在行，keyword是INCAR提供的各项参数，value为对应keyword的变量值，可以为单个或多个数字和字符串，用空格分开。对于--i\_app和--i\_rep，如果希望连续追加参数，需要用-分隔符进行分开。

*Examples:*

VASPMATE --i\_app EINT 2 5 - LORBIT 11

VASPMATE --i\_del NSW ENCUT

VASPMATE --i\_remove NSW ENCUT

VASPMATE --i\_replace EINT 2 5 - LORBIT 11

*Mode:* **Default LDA+U parameters**

*Syntax:*

VASPMATE --ldau

*Description:*

该功能用于根据POSCAR中的元素种类对于需要LDA+U修正的VASP计算自动设置对应的INCAR参数，例如LDAL,LDAU,LDAJ等参数。

*Examples:*

VASPMATE --ldau

### 3.1.3 KPOINTS

此处只介绍常用的KPOINTS方式，对于能带计算需要的高对称点能带路径，请参照后续能带计算细节。

*Mode:* **kpt**

*Syntax:*

VASPMATE --ka（INPOS）[kppra] [kscheme]

VASPMATE --kv（INPOS）[kspac] [kscheme]

VASPMATE --km（INPOS）k\_1 k\_2 k\_3 [kmesh] [kscheme]

*Description:*

此模式用于创建非能带自洽计算所需要的KPOINTS文件。在VASPMATE代码中，有三种指定KPOINTS生成方法：KPPRA、 KSPAC和KMESH。

KPPRA是一种在保持k点密度不变的情况下自动设置k点网格的方法，VASPMATE通过严格计算倒易晶格矢量比，每个倒易晶格矢量a轴上的k点数目正比于，和是另外两个倒易矢量。KSPAC方法是另一种使网格尽可能均匀的自动方法。三个倒易晶格矢量上地k点数目通过下式进行计算：。最后VASPMATE还包括一种确定KPOINTS的通用方法，即手动设定k\_1、k\_2、k\_3的数值。KMESH是使用的网格类型，通常分为Gamma shift(“Gamma”)和Monkorst-Pack (“MP”)。

对于每一种设置方式，VASPMATE都尽可能提供了默认参数，即使没有设置撒点精度或者网格类型，依旧能根据默认参数生成较为准确的k点文件，提高了使用的灵活性，生成的k点文件统一命名为NEWKPT（对于PBE计算能带高对称路径上的K点文件，区别命名为NEWKPATH）。对于KPPRA和KSPAC，建议的默认值分别为1000和0.5（对于能带和态密度计算，建议适当提高精度）。

*Examples:*

VASPMATE --ka 8000 G

VASPMATE --kv 0.5 G

VASPMATE --km 7 7 1 G（-kmesh和-k均可）

### 3.1.4 POTCAR

*Mode:* **According To File**

*Syntax:*

VASPMATE --pot (default type)

VASPMATE --pot -type

VASPMATE --pot -type postfix1 postfix2…

(-type = -LDA, -GGA, -PBE)

(postfix = s , d, h, sv, pv, GW)

*Description:*

VASPMATE会根据POSCAR中的元素类型从赝势库中提取并组合生成POTCAR，前提是用户需要在~/目录下创建名为.potpath的文件并输入赝势库的路径，格式如下（注意大小写）。VASPMATE支持三种赝势模型，PBE, LDA和GGA，default type为不带后缀的PBE赝势，postfix为赝势的后缀选项，例如s, h, sv, pv等。

C:\Users\dell\Documents\Tencent Files\1042554418\FileRecv\MobileFile\Image\V@T3MP6YN06W}WWX076E`KN.png

*Examples:*

VASPMATE --pot -PBE

VASPMATE --pot -LDA

VASPMATE --pot -PBE s

VASPMATE --pot -PBE sv GW

*Mode:* **According To Elements**

*Syntax:*

VASPMATE --pote (default type) elem1 elem2... postfix1 postfix2…

VASPMATE --pote -type elem1 elem2... postfix1 postfix2…

(-type = -LDA, -GGA, -PBE)

(elem = B N C …)

(postfix = s , d, h, sv, pv, GW)

*Description:*

除了根据POSCAR文件中的元素类型外，VASPMATE还可以根据用户指定元素生成对应POTCAR文件，同样也需要用户在~/目录下创建名为.potpath的文件并输入赝势库的路径。Default type为PBE赝势。

*Examples:*

VASPMATE --pote B N C

VASPMATE --pote -LDA B N C

VASPMATE --pote -GGA B N C sv GW

### 3.1.5输入文件检查

*Mode:* **check**

*Syntax:*

VASPMATE --check

*Description:*

VASPMATE会根据当前文件夹下的文件对当前是否满足提交任务进行VASP计算做出一个判断。由于VASP在计算时并不会自动检查POSCAR中的元素类型与POTCAR中的元素类型是否一致，即使在计算石墨烯时使用了H元素的赝势，VASP也不会给出报错而是继续进行运算，但是结果肯定是不正确的。VASPMATE会自动检查当前赝势元素是否一致，并给出及时报错。

VASPMATE会检查当前文件夹下是否存在VASP运行需要的四个文件：INCAR，POSCAR，KPOINTS和POTCAR，如果缺少其中之一，则会给出提示。

VASPMATE还会根据INCAR中的控制参数检查当前文件夹下是否存在VASP运行需要的输入文件：当ISTART等于1或2或3时，则检查是否存在WAVECAR，如果不存在则提醒“Attention：ISTART = 1, But No WAVECAR is found!”。当ICHARG等于11或12或13时，则检查是否存在CHGCAR，如果不存在则提醒“Attention：ICHARG = 11, But No CHGCAR is found!”。

## 3.2 能带计算

能带结构计算需要准备一个标准化原胞和相应的k点路径（k-path）以及相应的不可约布里渊区。不可约布里渊区是由晶格点群（晶体点群）中的所有对称性减少的第一个布里渊区。识别和选择高对称点，并沿不可约布里渊区边缘将其连接起来。

传统的做法是通过SeeK-Path网站或者Material Studio软件获得晶体倒易空间第一布里渊区内的高对称点，再通过脚本插值生成高对称点路径上的K点，得到满足要求的KPOINTS，但这些操作往往相对繁琐并且不适合高通量计算。VASPMATE集成了与 SeeK-Path[6]一致的算法分析晶体的高对称点，并给出一套合适的k-path用于能带计算。经过测试，针对七大晶系的24种变种结构，VASPMATE均能产生与SeeK-Path完全一致的高对称点路径。后面通过B6N实例介绍VASPMATE分别采用PBE泛函和HSE06杂化泛函计算能带的具体过程。

### 3.2.1 PBE泛函计算能带步骤

1. 构建好B6N的POSCAR后，首先做一步通常的结构优化计算。下面是一个简单的结构优化命令组合。

|  |
| --- |
| cp POSCAR INPOS  VASPMATE --i rlx  cp incar\_rlx INCAR  VASPMATE --pot PBE  VASPMATE --ka 4000  cp NEWKPT KPOINTS |

1. 可选步骤：做一次单点自洽计算得到CHGCAR。

将CONTCAR复制为INPOS。（注意此案例中所有VASPMATE操作使用默认对象INPOS，因此最后需要将INPOS复制为POSCAR）

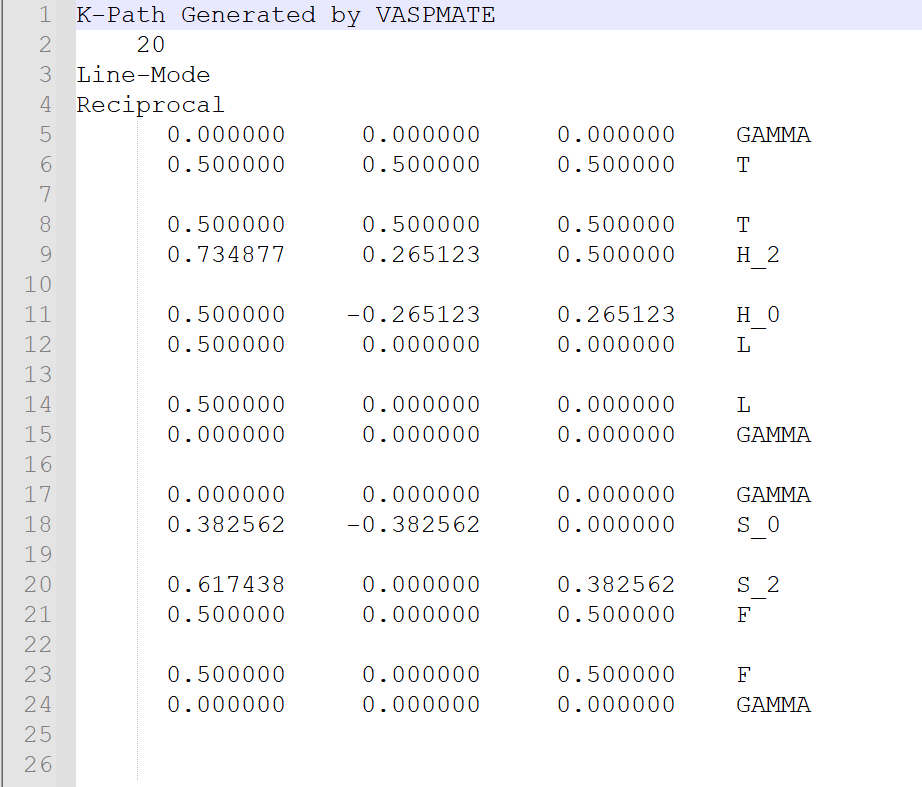
*Syntax:*

VASPMATE --kpt3d file1(INPOS) file2(PRIMPOS) kppra(20)

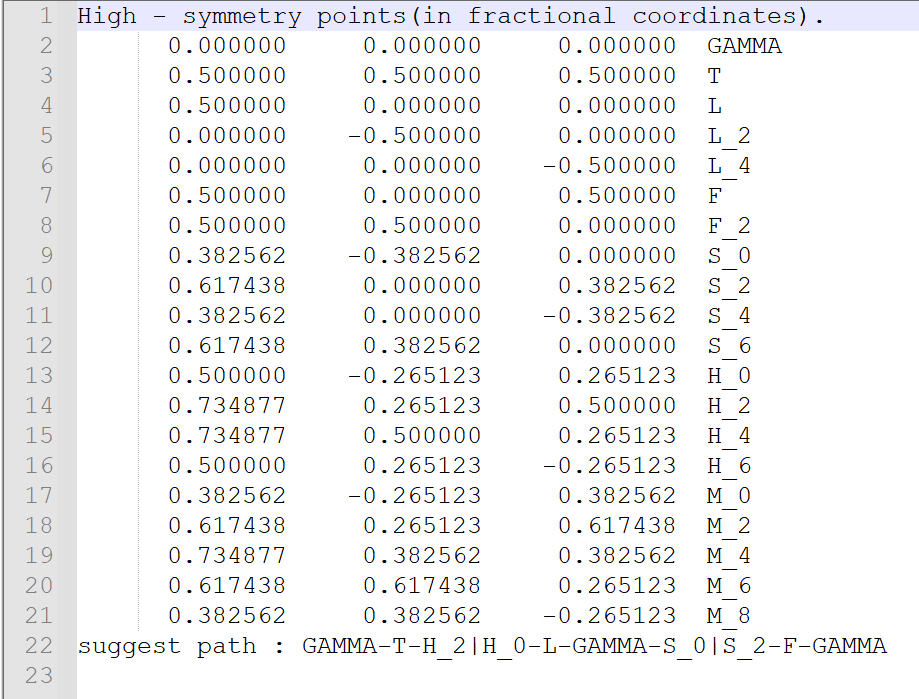
*Description:*

输入VASPMATE --kpt3d 20，VASPMATE将生成一个standard primitive cell，注意能带计算必须使用标准原胞，因此你需要输入cp PRIMPOS INPOS。此命令中3d表示计算的为3D结构，针对二维结构有不同的处理方法，20为每条路径默认撒点数。除此以外，你会得到以下文件：

*NEWKPATH* 包含了高对称点路径，可以直接将其复制为KPOITNS使用。



*HIGH\_SYMMETRY\_POINT*保存了高对称点信息以及推荐路径。



复制前一步的CHGCAR，并准备单点自洽的INCAR(VASPMATE --i stc)，最后提交任务。下面介绍VASPMATE能带计算后处理分析方法。所有数据结果均已将费米能级置0。

值得注意的是，费米能级应该以自洽计算的为准，因此如果想获得准确的费米能级，可以在结构优化或者静态自洽之后执行以下命令提取自洽后DOSCAR中的费米能级给处理能带数据用:

VASPMATE --dos -efermi >> FERMI\_LEVEL

如果VASPMATE没有检测到FERMI\_LEVEL文件，则会以当前文件夹中DOSCAR中的费米能级进行能带分析，并给出如下提示信息：

You should use the self-consistent calculation fermi\_level!

而此时的结果往往是不准确的。

**提取能带数据**

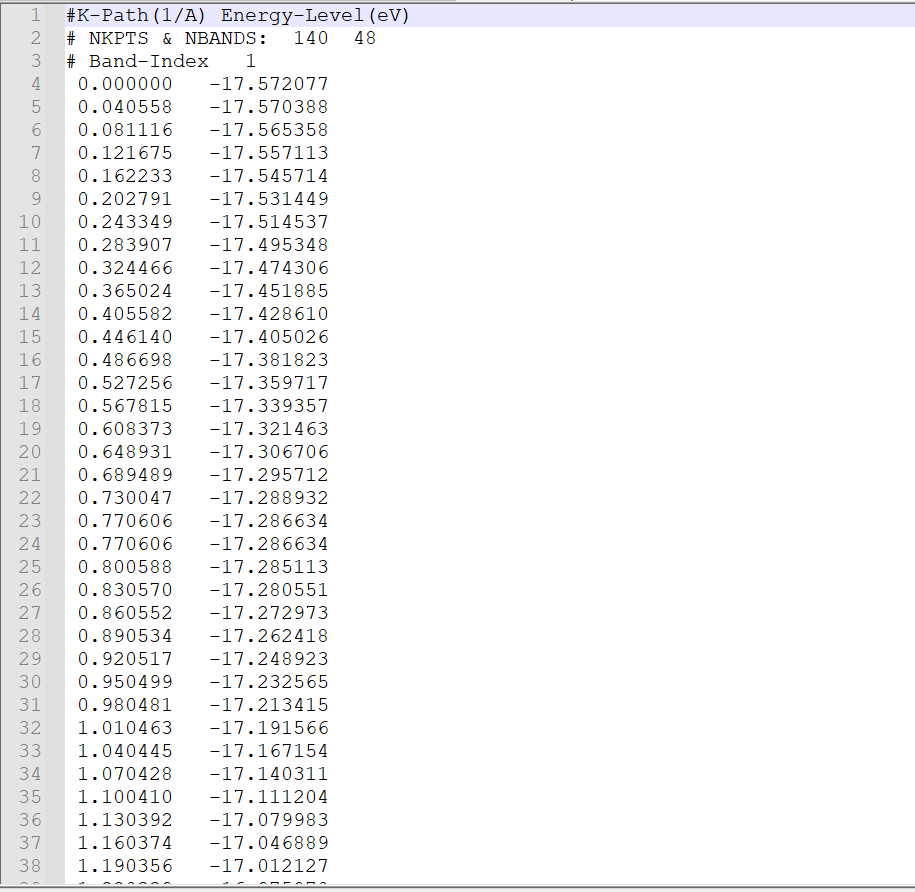
*Mode:* Basic Band Structure

*Syntax:*

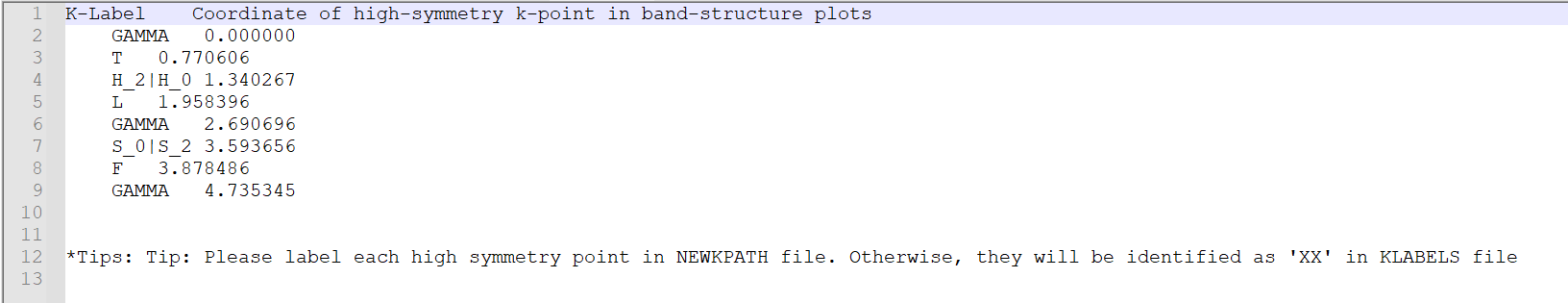
VASPMATE --band -b

*Description:*

输出文件*Band.dat*和*BAND\_REFORMATTED.dat*保存了能带信息，可以直接用于origin绘图，或者直接采用SPaMD自带的能带和态密度分析器绘图。



*KLABELS*文件保存能带图上高对称点的位置。



*Fermi\_Energy*保存费米能级信息。

*Examples：*

VASPMATE --band -b

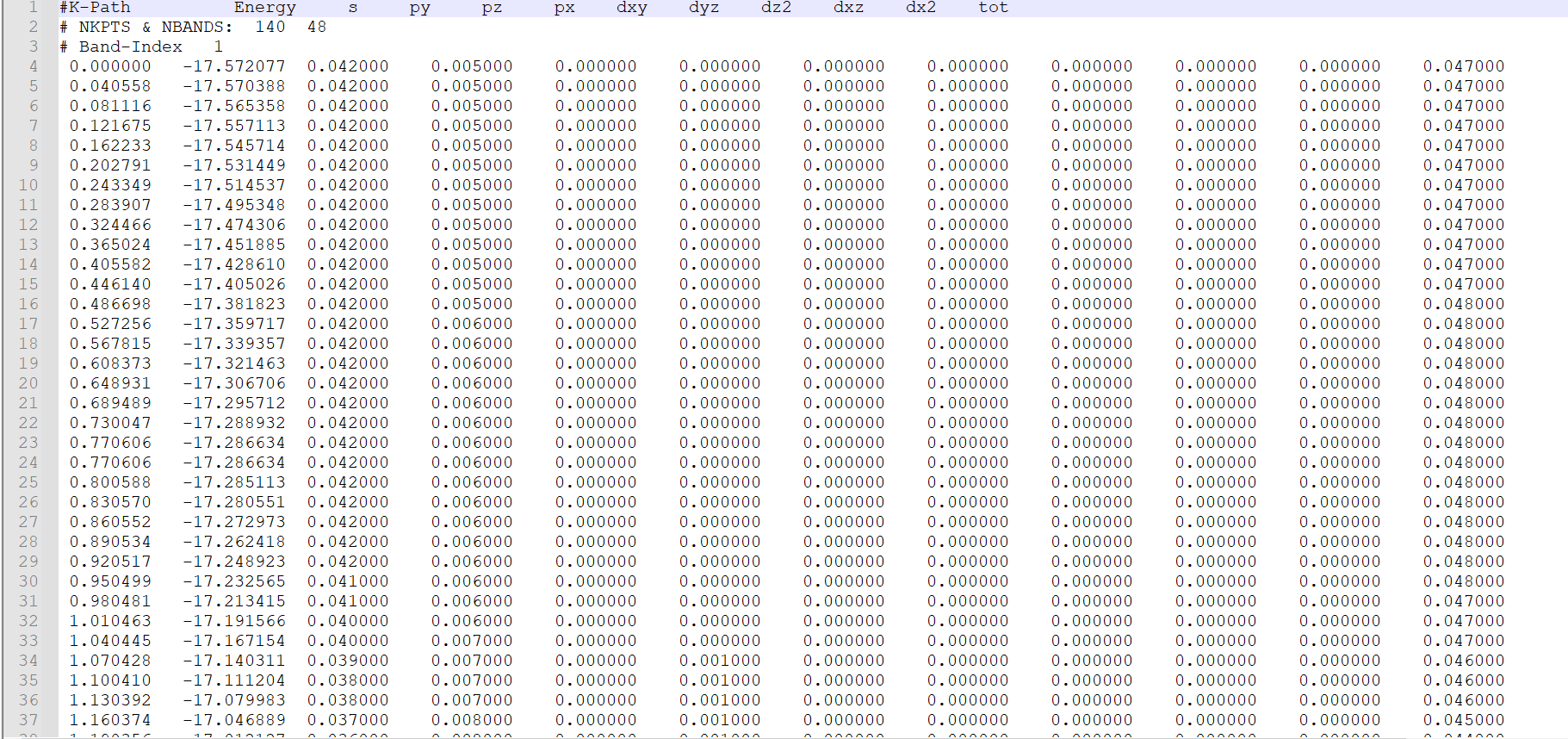
*Mode:* Projected Band-Structure for Each Atom

*Syntax:*

VASPMATE --band -a

*Description:*

产生的输出文件名称为*PBAND\_A\*.dat*，其中\*为原子序号。每个文件包括一个原子上的投影信息，以及每个角动量上的权重，s py pz px dxy dyz dz2 dxz dx2+y2 tot。第一列是K路径的长度，单位为Å-1。第二列是带的能量。下一列是lm轨道在此带上的投影。最后一列是原子在此频带上的总投影。



*Examples：*

VASPMATE --band -a

*Mode:* Projected Band-Structure for Each Element

*Syntax:*

VASPMATE --band -e

*Description:*

产生的输出文件名称为*PBAND\_\*.dat*，其中\*为元素符号。每个文件包括一种元素的投影信息，以及每个角动量上的权重，s py pz px dxy dyz dz2 dxz dx2+y2 tot。第一列是K路径的长度，单位为Å-1。第二列是带的能量。下一列是lm轨道在此带上的投影。最后一列是元素在此能带上的总投影。

*Examples：*

VASPMATE --band -e

*Mode:* Projected Band-Structure for Selected Atoms & Elements

*Syntax:*

VASPMATE --band -s <atom-index> <element-index>

*Description:*

产生的输出文件名称为*PBAND\_A\*.dat和PBAND\_B\*.dat*，其中\*为所选原子序号。所有产生的例如*PBAND\_A1.dat，PBAND\_B2.dat...*文件可用于origin画图，KLABELS用于标出图上高对称点位置。

*Examples：*

VASPMATE --band -s 1-4 B N

*Mode:* Projected Band-Structure for Selected Atoms

*Syntax:*

VASPMATE --band -sa <atom-index>

*Description:*

产生的输出文件名称为*PBAND\_A\*.dat*，其中\*为所选原子序号。每个文件包括选定原子上的投影信息，以及每个角动量上的权重，s py pz px dxy dyz dz2 dxz dx2+y2 tot。第一列是K路径的长度，单位为Å-1。第二列是带的能量。下一列是lm轨道在此带上的投影。最后一列是选定原子在此能带上的总投影。

*Examples：*

VASPMATE --band -sa 1

VASPMATE --band -sa 2-5

*Mode:* Projected Band-Structure for Selected Elements

*Syntax:*

VASPMATE --band -se <element-index>

*Description:*

产生的输出文件名称为*PBAND\_B\*.dat*，其中B为所选元素名，\*为该元素中对应原子序号。所有产生的例如*PBAND\_B1.dat，PBAND\_B2.dat...*文件可用于origin画图，KLABELS用于标出图上高对称点位置。

*Examples：*

VASPMATE --band -se B

VASPMATE --band -se B N

*Mode:* Projected Band-Structure for Multiple Atoms or Elements

*Syntax:*

VASPMATE --band -m/-ma/-me <atom-index>**/**<element-index>

*Description:*

可以在命令后面以自由格式选择原子序号1-4，B，N。输出*PBAND\_SUM\_A1-4\_B-N.dat*文件包括选定原子和投影。这有助于研究层状带并比较表面带和内部带。

*Examples：*

VASPMATE --band -m 1-4 B N

VASPMATE --band -ma 1-4

VASPMATE --band -me B N

*Mode:* Sum of Projected Band for Selected Orbitals of Selected Atoms/Elements

*Syntax:*

VASPMATE --band -o/-oa/-oe <atom-index>**/**<element-index> <orbit-index>

*Description:*

此模块用于选择原子或元素以及对应轨道产生*PBAND\_SUM.dat*。轨道类型有s py pz px dxy dyz dz2 dxz dx2+y2（f1-f7）。可以用all选取全部轨道。注意只能进行一次原子+轨道的组合，如果连续追加，结果是不准确的。

*Examples：*

VASPMATE --band -oa 1-3 B N

VASPMATE --band -oa 1-3 s px py

VASPMATE --band -oe B all

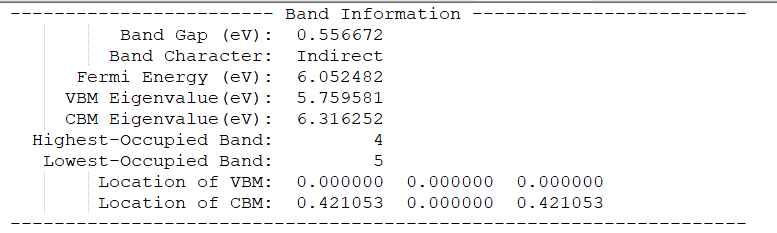
*Mode:* Summary of band structure

*Syntax:*

VASPMATE --band -bg

*Description:*

此模块用于提取能带计算的Band Gap, VBM, CBM, Highest-Occupied band&Lowest-Occupied Band, Location of VBM&CBM以及是否为直接带隙等信息。注意以上信息均只对于具有带隙的绝缘体或半导体晶体，即band\_gap > 0。对于金属晶体， VBM与CBM均不具意义，只给出Band Character: Metallic信息。



*Examples：*

VASPMATE --band -bg

*Mode:* Effective Mass

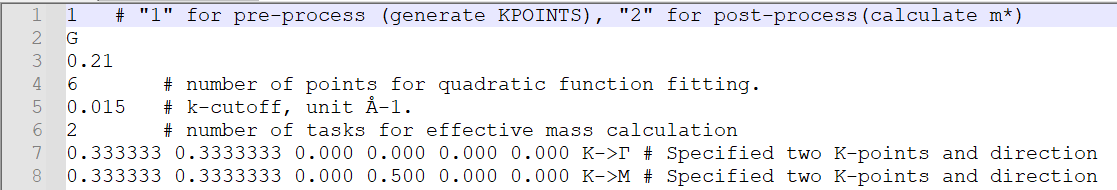
*Syntax:*

VASPMATE --em

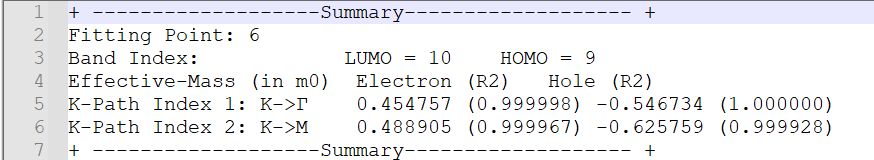
*Description:*

此模块用于计算半导体或者绝缘体的有效质量，目前VASPMATE仅支持非带电和非磁性半导体的有效质量计算。有效质量的计算分为前处理和后处理两部分，VASPMATE采取的计算方式是在指定高对称路径上重新按照等间距撒点，然后将计算得到的每个点的能量本征值同k-path进行二次曲线拟合并求得该高对称点下的电子/空穴有效质量。在这过程中，VASPMATE采取的拟合方式是从起始点开始拟合所有数据点，选择R方最小作为拟合标准，这样能保证在最大程度上减小信息的损失。具体而言，有效质量计算依靠EMC.in一个文件，里面包含了如下信息：1.处理模式 2. kmesh 3.布里渊区撒点精度（同KSPACING参数) 4.高对称路径上撒点个数5.高对称路径撒点间距 6.高对称点之间的路径方向

如下所示是计算MoS2的有效质量前处理的EMC.in文件



使用VASPMATE --em此时VASPMATE会根据文件信息生成EMCKPT文件，将其拷贝为KPOINTS文件进行VASP计算。计算完毕后，将第一行的计算模式改为2，其余不变，使用VASPMATE --em再次分析便可输出包含了有效质量信息的Effective\_Mass文件，如下所示。计算得到的电子有效质量为0.45m0，空穴有效质量为0.54m0，分别同Kormányos[14]等人的结果0.44和0.54非常接近。



*Examples:*

VASPMATE --em

虽然上述方法较为简洁，但是考虑到以下两种情况时，我们需要引入另外一种拟合方式计算有效质量：1. 对于已经进行过能带计算的材料，我们无需再次进行对应高对称路径上的撒点，而是可以直接对能带的数据结果进行拟合 2. 对于价带顶和导带底出现简并的材料时，上述方法无法保证精度，而直接从能带数据出发计算则可以有效的避免这一点。

*Syntax:*

VASPMATE --band -em <point> <direct> … (-np <fitting-point>) (-nb <band-index>)

*Description:*

此模块用于计算半导体或者绝缘体的有效质量，其中<point>为高对称点名称，例如G,K,M等，<direct>表示在该高对称点的方向选择，分为l（left）和r（right），<point>和<direct>可连续搭配使用。<fitting-point>为拟合点数，默认为6，可以使用关键字-np进行选择（提示：尽量在极值点周围选择少的点以提高二次曲线拟合精度建议3-6）。<band-index>为cbm对应的能带指数，可以使用-nb进行选择，默认由VASPMATE自动进行寻找。注意如果想要使用原本计算时未使用的高对称点，只需在KPOINTS文件末尾追加坐标和高对称点名称即可。

*Examples：*

VASPMATE --band -em K l K r

VASPMATE --band -em -np 4 GAMMA l M r -nb 5

### 3.2.2 HSE泛函计算能带步骤

（1）与PBE泛函计算相同，对POSCAR进行结构优化。

（2）用VASPMATE --kpt3d 20获得PRIMPOS原胞和NEKPATH高对称路径文件。

（3）选择修改高对称路径（可以使用默认路径）。

（4）选取下面三种方式生成hybrid functional band-structure计算ｋ点。

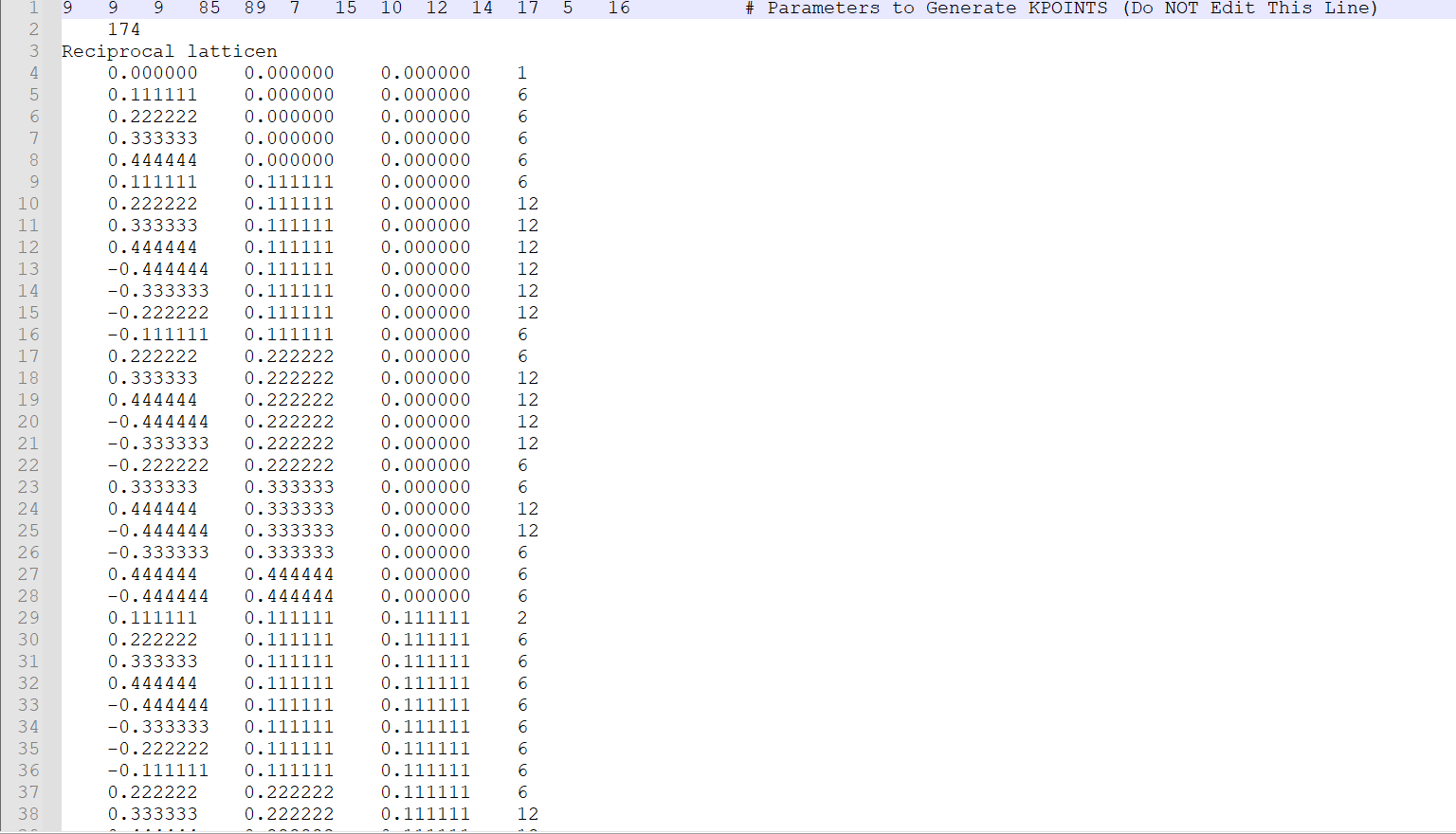
VASPMATE --kahse [kppra] [resolution] [kscheme]

VASPMATE --kvhse [kspac] [resolution] [kscheme]

VASPMATE --kmhse k\_1 k\_2 k\_3 [resolution] [kscheme]

相比于普通的k点生成路径，HSE多引进了高对称路径上撒点密度参数resolution，默认推荐值为0.05。产生文件NEWKPT保存HSE计算的k点信息，可直接用于VASP计算。

注意HSE计算能带的k点包括了SCF部分，所以得到的费米能级是准确的，不需要同PBE计算时额外准备FERMI\_LEVEL文件。



*Examples：*

VASPMATE --kahse 8000 0.05 G

VASPMATE --kvhse 0.5 0.05 G

VASPMATE --kmhse 7 7 1 0.05 G

（5）可以选择新生成的NEWKPT进行PBE 自洽计算，然后读取波函数用于下一步HSE计算，通常这样做可以减少计算时间。也可以跳过此步直接进行HSE能带计算。注意生成HSE计算的INCAR可以使用命令VASPMATE --i stc hse。

（6）做HSE能带计算。

对于HSE计算能带的后处理部分VASPMATE将其命令格式设计成与PBE计算类似，仅label有细微区别。具体输入格式参照PBE计算细节即可。

*Syntax:*

VASPMATE --band -hb

VASPMATE --band -ha

VASPMATE --band -he

VASPMATE --band -hs <atom-index> <element-index>

VASPMATE --band -hsa <atom-index>

VASPMATE --band -hse <element-index>

VASPMATE --band -hm/-hma/-hme <atom-index>**/**<element-index>

VASPMATE --band -ho/-hoa/-hoe <atom-index>**/**<element-index>

VASPMATE --band -hbg

*Examples：*

VASPMATE --band -hb

VASPMATE --band -ha

VASPMATE --band -he

VASPMATE --band -hs 1-4 B N

VASPMATE --band -hsa 1-4

VASPMATE --band -hse B N C

VASPMATE --band -hm/-hma/-hme 1-4 B N

VASPMATE --band -ho/-hoa/-hoe 1-3 s px py

VASPMATE --band -hbg

## 3.3 态密度计算

VASPMATE为态密度的提取提供了强大的后处理分析功能。使用此功能时请确保LORBIT=10或者11。所有数据结果均已将费米能级置0。

原则上讲，态密度可以作为能带结构的一个可视化结果。很多分析和能带的分析结果可以一一对应，很多术语也和能带分析相通。但是因为它更直观，因此在结果讨论中用得比能带分析更广泛一些。在电子能级为准连续分布的情况下，单位能量间隔内的电子态数目。即能量介于E ~ E +ΔE之间的量子态数目ΔZ与能量差ΔE之比，即为态密度。能态密度与能带结构密切相关，是一个重要的基本函数。固体的许多特性，如电子比热、光和X射线的吸收和发射等，都与能态密度有关。

在VASP中，通过将态密度分别投影到轨道或者原子，可以得到分波态密度PDOS(partial DOS)和局域态密度LDOS(local DOS)，分别用于轨道分析和成分分析。除此之外，当INCAR中LORBIT=10时，投影轨道为s,p,d(f)；而当LOBRIT=11时，投影轨道进一步细分为*s,px,py,pz,dxy,dyz,dxz,dx2+y2,dz2(f1-f7)。*

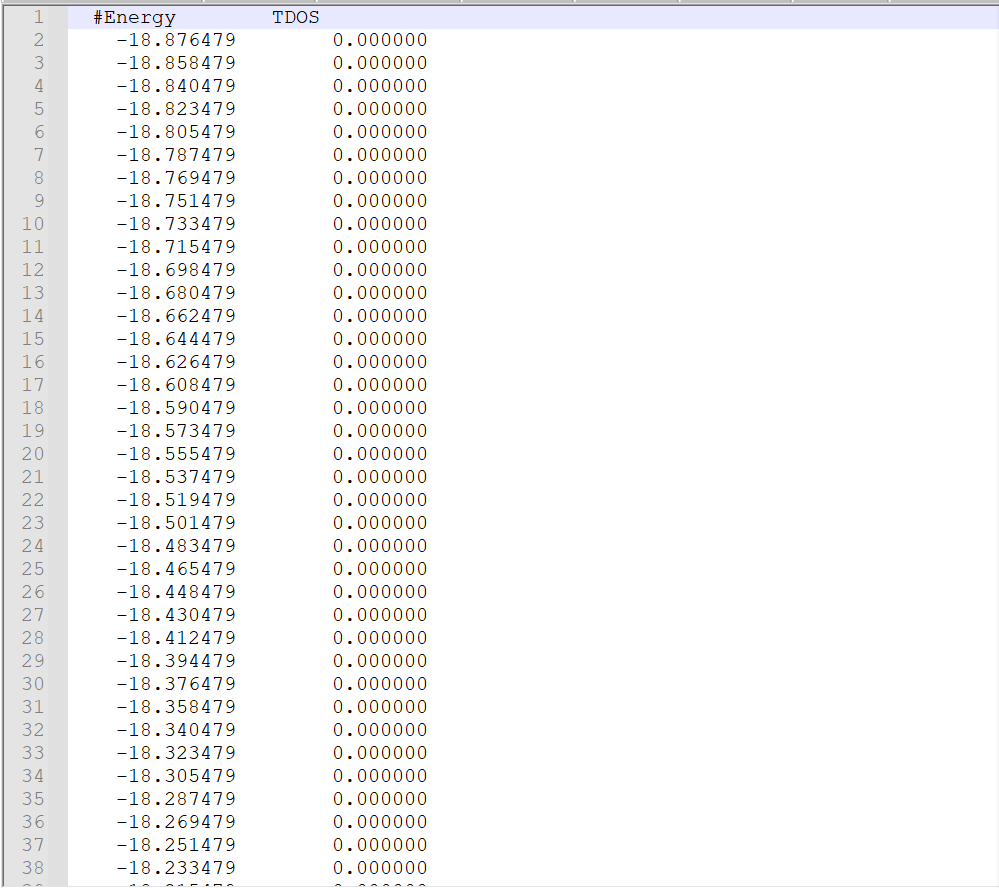
*Mode:* **Density of States**

|  |  |
| --- | --- |
| *Syntax* | *Description* |
| VASPMATE --dos -t <none> | Get the total DOS |
| VASPMATE --dos -a <none> | Output projected DOS for each atom to separate file. |
| VASPMATE --dos -e <none> | Output projected DOS for each element to separate file. |
| VASPMATE --dos -s <atom-index> | Output the projected DOS for selected atoms/element to separate file. |
| VASPMATE --dos -sa <atom-index> | Output the projected DOS for selected atoms to separate file. |
| VASPMATE --dos -se <element-index> | Output the projected DOS for selected elements to separate file. |
| VASPMATE --dos -m/-me/-ma <select-list> | Output sum of projected DOS for selected multiple atoms/elements |
| VASPMATE --dos -o/-oe/-oa <atom&orbit-list> | Output sum of projected DOS for selected atoms and orbitals |
| VASPMATE --dos -bc | Output Band Center(s,p,d,f) or (s,px,py,pz,dxy,dyz,dxz,fn...) |

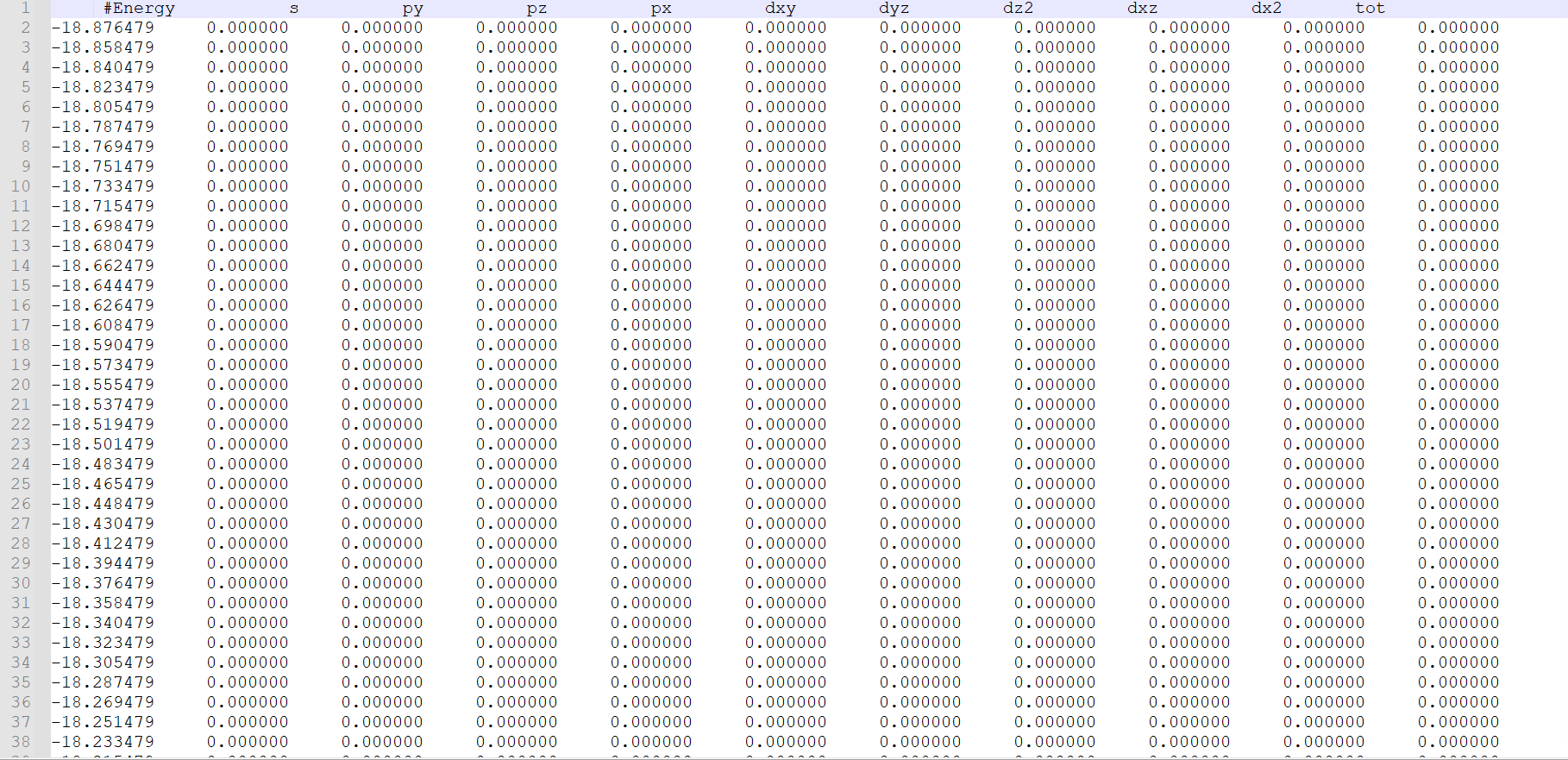
*Examples：*(I开头的文件为DOS积分结果，结构为B6N，原子数为14)

|  |  |
| --- | --- |
| *Input command* | *Output files* |
| VASPMATE --dos -t | TDOS.dat & ITDOS.dat |
| VASPMATE --dos -a | PDOS\_A1.dat & IPDOS\_A1.dat ~ PDOS\_A9.dat & IPDOS\_A9.dat |
| VASPMATE --dos -e | PDOS\_B.dat & IPDOS\_B.dat & PDOS\_N.dat & IPDOS\_N.dat |
| VASPMATE --dos -s 1-5 | PDOS\_A1.dat & IPDOS\_A1.dat ~ PDOS\_A5.dat & IPDOS\_A5.dat |
| VASPMATE --dos -m 1-5 N | PDOS\_SUM\_A1-5\_N.dat & IPDOS\_SUM\_A1-5\_N.dat SELECT\_ATOMS\_LIST |
| VASPMATE --dos -oa 1-4 s px | PDOS\_USER.dat |
| VASPMATE --dos -bc all | Band\_Center |

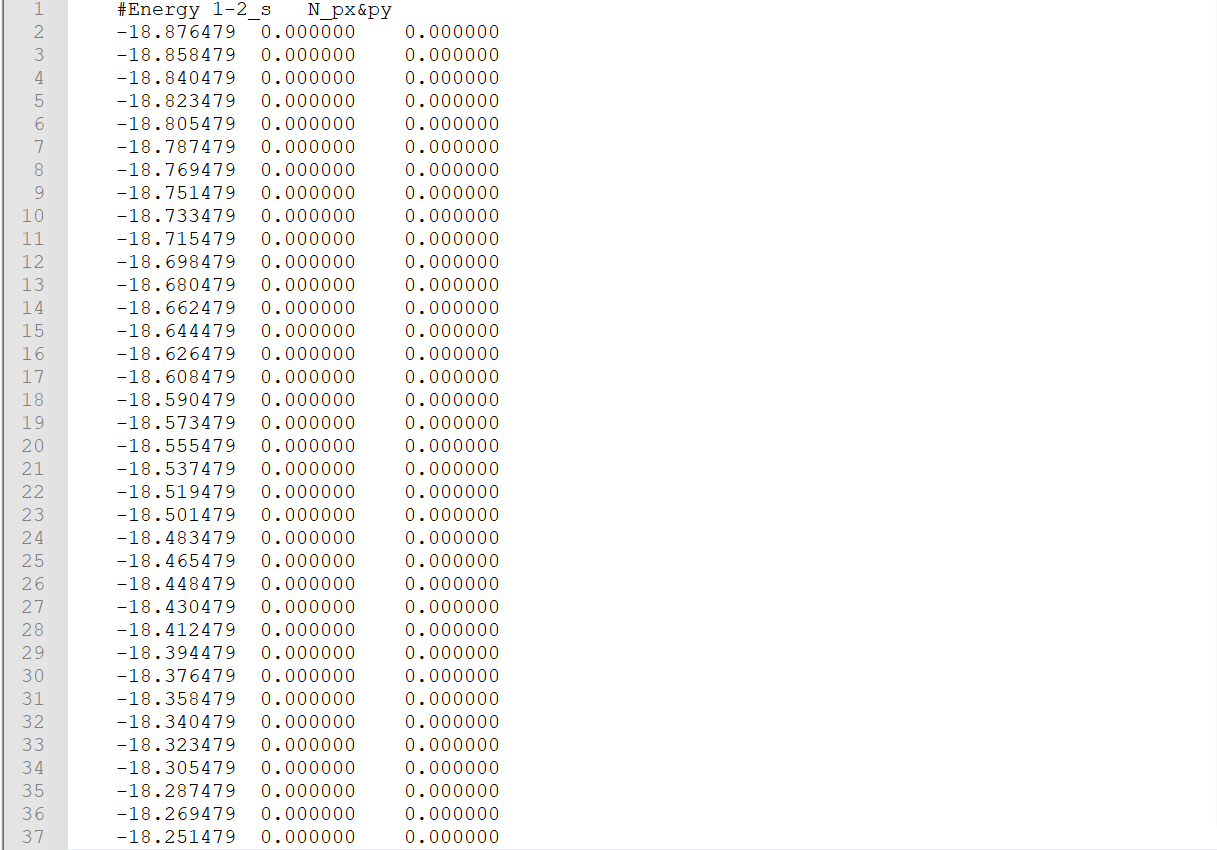
*TDOS.dat(PDOS\_A\*.dat,PDOS\_\*.dat,PDOS\_SUM\_A\*\_\*.dat,PDOS\_SUM\_\*\_\*.dat格式均相同，可用于origin画图)*



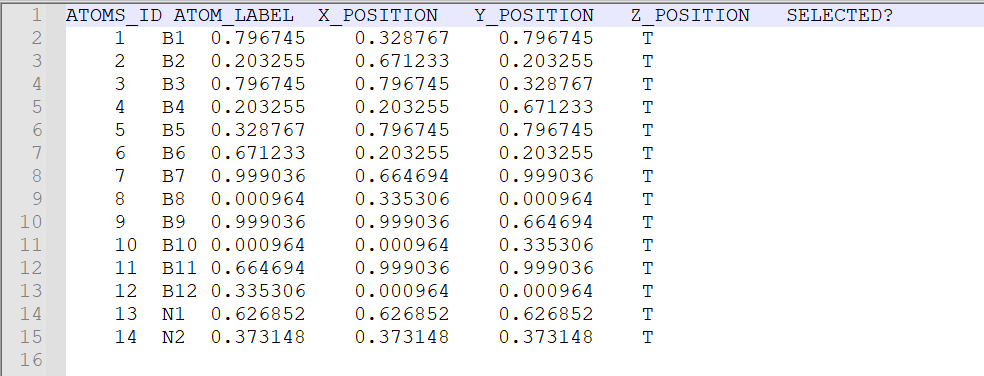
*PDOS\_SUM\_A1-5\_N.dat (保存能量和选中原子投影轨道信息，所选原子信息可在SELECT\_ATOMS\_LIST查看)*



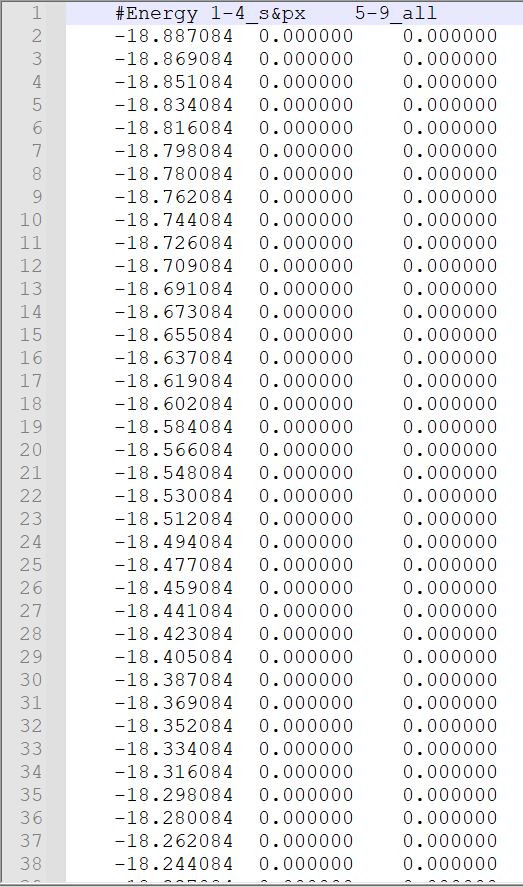
*PDOS\_USER.dat（第一行对应命令VASPMATE --dos -o 1-2 s N px py）*



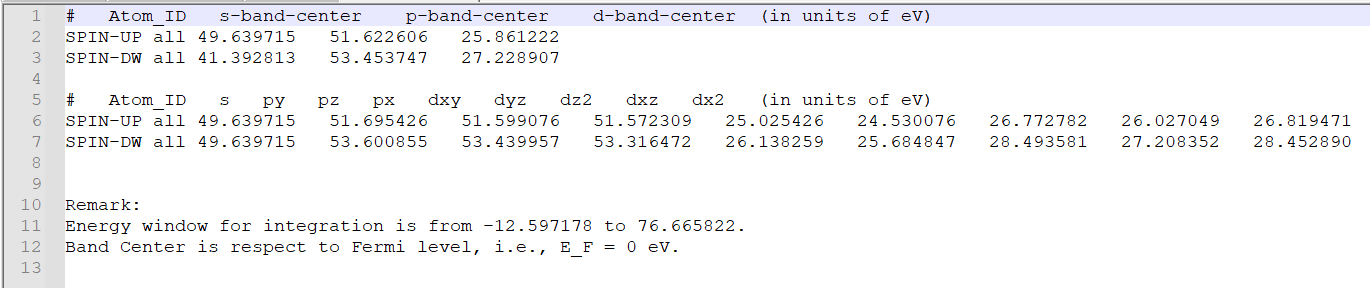
*SELECT\_ATOMS\_LIST（原子选取信息，图中为所有原子均被选中）*

**

*PDOS\_USER.dat(VASPMATE --dos -oa 1-4 s px 5-9 all)*

**

*Band\_Center（保存s,p,d带中心数据）*

**

## 3.4 Bader电荷计算

*Mode:* **Combine Charge Density**

*Syntax:*

VASPMATE --bader -comb AECCAR0 AECCAR2 (factor1) (factor2)

*Description:*

该功能用于将两个CHGCAR中的电荷密度相加，factor1和factor2为比例系数,如不指定默认均为1。输出电荷密度AECCAR0\*factor1+ AECCAR2\*factor2，输出文件为CHGCAR\_SUM。

*Examples:*

VASPMATE --bader -comb AECCAR0 AECCAR2

VASPMATE --bader -comb AECCAR0 AECCAR2 1.1 0.9

## 3.5 过渡态NEB计算

VASPMATE为NEB过渡态能垒计算提供了如下功能：1）始末结构相似对比 2）根据始末结构差异计算插点数，并自动生成中间态文件 3）在每个中间态结构计算完成后，分析OUTCAR，提取数据并输出相应文件、

*Mode:* **Structure Similarity**

*Syntax:*

VASPMATE --neb -sim (ini) (fin)

*Description:*

该功能主要用于比较始末结构的结构差异性，并且给出建议插点值。默认两个输入文件为ini和fin。

*Examples:*

VASPMATE --neb -sim

VASPMATE --neb -sim POSCAR POSCAR1

*Mode:* **Insert Points**

*Syntax:*

VASPMATE --neb -ins

*Description:*

该功能用于根据计算所得的建议插点值创建中间态文件用于NEB计算。要求当前文件夹下四个文件:ini,ini.OUTCAR,fin,fin.OUTCAR，分别为初态结构，初态计算OUTCAR，末态结构，末态计算OUTCAR。然后VASPMATE会根据插点数创建从初态到末态的文件夹，命名为00，01，02…初态和末态的文件夹中保存了其对应的POSCAR和OUTCAR，中间态文件夹保存了其对应的POSCAR。

*Examples:*

VASPMATE --neb -ins

*Mode:* **Output Data**

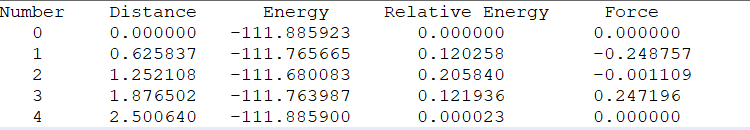
*Syntax:*

VASPMATE --neb -out

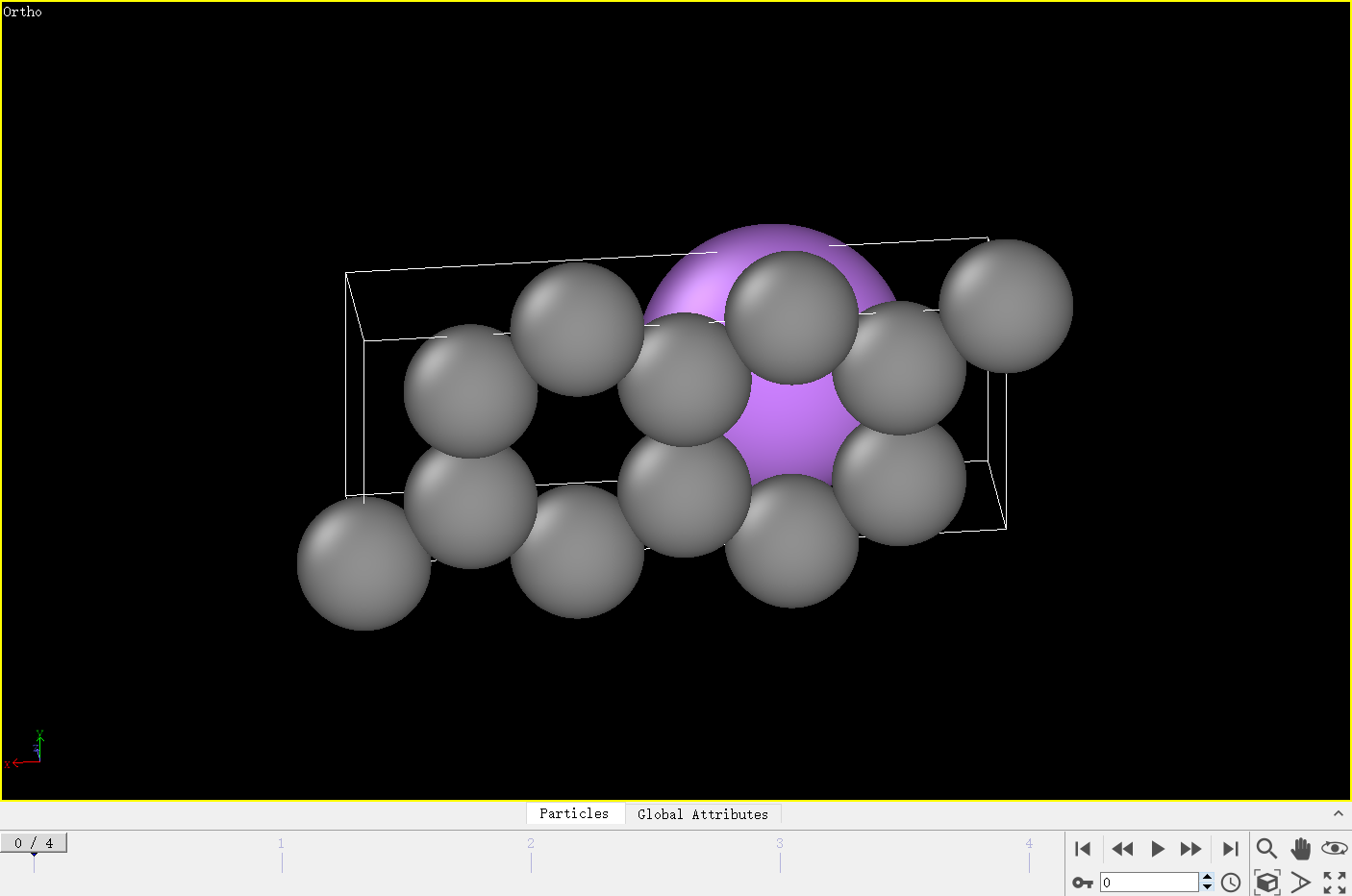
*Description:*

在使用VASPMATE --neb -ins插点完成并且计算完中间态结构后（每个中间态文件夹中应当有对应的OUTCAR,CONTCAR两个文件），此时可以用该功能对计算完毕的数据进行分析提取，输出文件为neb.dat和movie.xyz。

neb.dat文件如下所示，第一列表示结构序号，第二列表示距离（即临近两结构的dist.pl的计算结果），第三列表示能量（以初态能量为参考值），第四列为力（forces along the neb）。



movie.xyz文件可在VMD中进行动画演示，或者在OVITO(jmol)中查看整个过程，下面是LiC12结构NEB计算完后其movie.xyz文件导入到OVITO中的效果。



*Examples:*

VASPMATE --neb -out

## 3.6 带边电荷计算

在文献中我们经常见到计算价带顶和导带底对应的电荷密度，通过分析这些特殊位置的电荷密度来说明具体哪个或者哪些原子在价带顶和导带底的贡献。在有表面态的体系中，也经常计算表面态对应的电荷密度，从而分析引起表面态的机制。该部分主要介绍如何通过VASPMATE去准备带边电荷密度的计算。

首先我们需要对目标结构进行结构优化和静态自洽（参考前面命令）得到CHGCAR和WAVECAR文件。对于带边电荷密度计算有三种模式：1. 指定能带b和k点； 2. 指定能量区间[E1,E2]； 3. 指定费米能级附近区域（[Ef-EINT, Ef]）。VASPMATE为用户提供了默认pcd模板（参考incar）以及三种模式下的简易修改方式。

*Mode:* **Partial Charge Density**

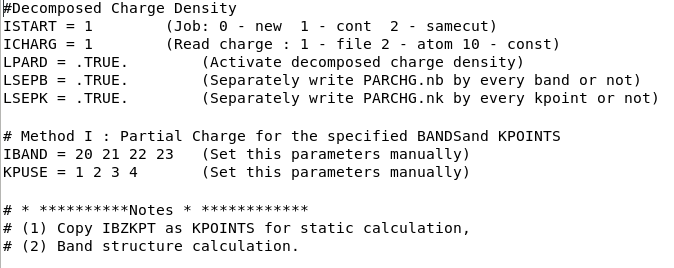
*Syntax:*

VASPMATE --i -pcd <mode>

*Description:*

针对上述三种模式，我们在<mode>处提供了-ib/-ik/-en/-ef四种方法用来修改所选能带，所选k点，能量区间以及费米能级附近宽度。注意修改模式要同INCAR中的method对应，其中-ik和-ib均为method I，可连续使用（见exmaple）。

下图为命令VASPMATE --i pcd\_ik产生的incar\_pcd\_ik文件，对应method I。



*Examples:*

VASPMATE --i -pcd -ik 1 2 3 4

VASPMATE --i -pcd -ib 1 2 3 4

VASPMATE --i -pcd -ik 1 2 -ib 3 4

VASPMATE --i -pcd -en -10 -5

VASPMATE --i -pcd -ef -1

## 3.7 电荷密度计算

VASPMATE为差分电荷密度计算提供了强大简易的后处理命令，目标文件格式为CHGCAR。电荷密度差分Charge Density Diffenrece是研究电子结构的重要途经之一，它可以直观地从两个结构相互作用得到电子流，从而分析化学键本质。

差分电荷密度主要分为以下几种：

1. 整体电荷密度减去其组成的两个或多个结构的电荷密度

2. 自洽前后电荷密度差，也就是变形电荷密度（deforming charge density）

3. 一种电子态的密度减去另一种电子态的密度。

注意在所用电荷密度计算中，都必须保持晶胞参数，原子数目以及网格大小一致。除此以外，对于具有CHGCAR格式的文件例如静电势（LOCPOT）、电子定位函数（ELFCAR）和部分电荷（PARCHG）密度差计算也可以通过相同的方法来完成。

*Mode:* **Split**

*Syntax:*

VASPMATE --vcd -split file(CHGCAR)

*Description:*

当使用自旋极化参数（ISPIN=2）时，CHGCAR中将包含电荷密度和自旋密度，该功能用于分别提取两者。参数file为读取的CHGCAR文件，默认为VASP产生的CHGCAR。输出文件为CHGTOT.vasp，CHGSPIN.vasp，CHGSPIN\_UP.vasp和CHGSPIN\_DW.vasp，可用VESTAH或SPAMD读取。

*Examples:*

VASPMATE --vcd -split

*Mode:* **Charge Density Summation**

*Syntax:*

VASPMATE --vcd -sum <File\_list>

*Description:*

该功能用于快速计算多个电荷密度文件的求和。<File\_list>为需要进行处理的CHGCAR文件列表，-sum命令用于多个电荷密度求和，输出文件分别为CHGSUMM.vasp，均可以用VESTA或SPAMD查看。

*Examples:*

VASPMATE --vcd -sum CHGCAR\_C CHGCAR\_O

*Mode:* **Charge Density Difference**

*Syntax:*

VASPMATE --vcd -diff <File\_list>

*Description:*

该功能用于快速计算多个电荷密度文件的差值。<File\_list>为需要进行处理的CHGCAR文件列表，-diff命令则用于差分电荷密度计算，输出文件分别为CHGDIFF.vasp，均可以用VESTA或SPAMD查看。

*Examples:*

VASPMATE --vcd -diff CHGCAR\_CO CHGCAR\_C CHGCAR\_O

## 3.8 实空间波函数可视化分析

VASPMATE 可以从 WAVECAR 文件中提取 Kohn-Sham (KS) 轨道的平面波系数，并输出实空间波函数，使用者只需指定对应k点和能带即可。

*Mode:* **WaveFunction Visualization**

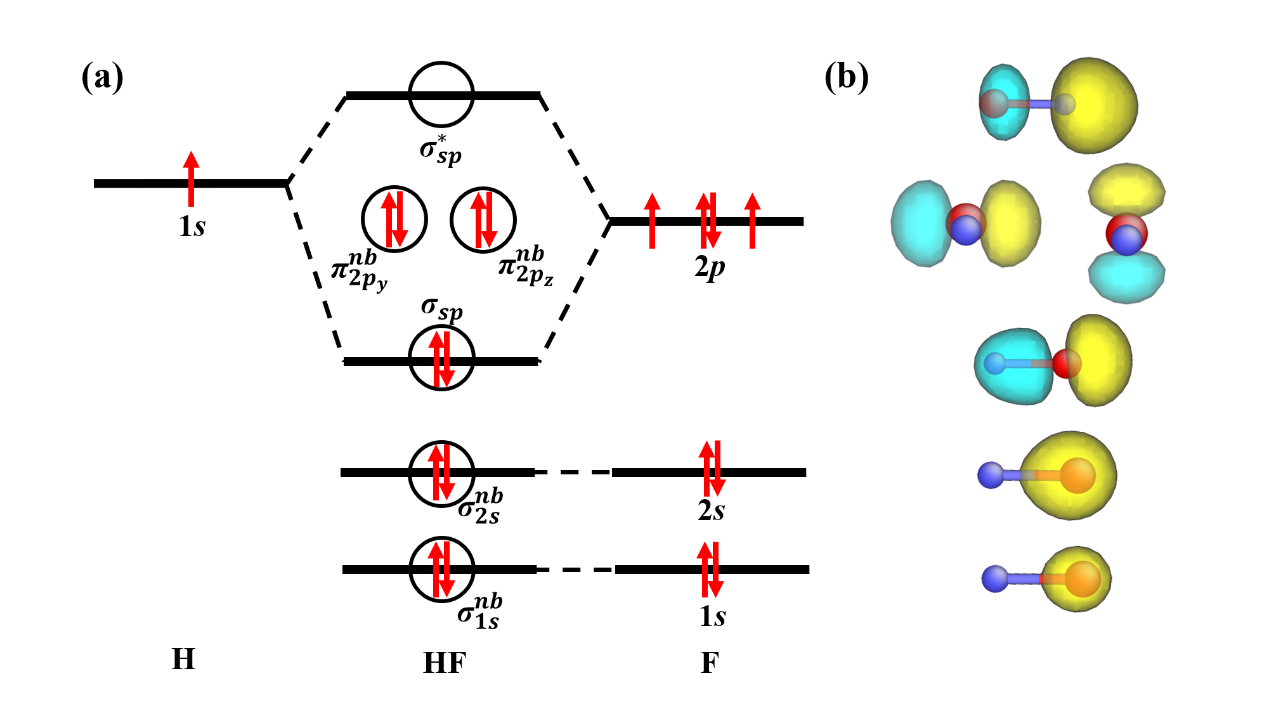
*Syntax:*

VASPMATE --wfun -k <kpoint\_index> -b <band\_index>

*Description:*

该功能用于快速便捷的获取实空间内的波函数数据，可以用-k，-b参数自由选择希望绘制的k点和能带，如若不指定则均默认为最小值1。输出文件名为wfn \_Bxxx\_Kxxx\_REAL.vasp和wfn \_Bxxx\_Kxxx\_IMAG.vasp分别代表实空间内波函数的实部和虚部，对于ISPIN = 2的情况会分别输出UP和DW文件，输出文件可用VESTA或SPAMD查看。

下图显示了HF的计算分子轨道能级，这表明H和F原子轨道的组合形成了HF的6个分子轨道，而相应的轨道能量从下到上逐渐增加。



*Examples:*

VASPMATE --wfun

VASPMATE --wfun -k 10 -b 10

## 3.9 费米面计算

在凝聚态物理中，通常使用费米面来表征占据态和未占据态的分界，其形状有倒易空间的周期性和对称性以及电子能带占据决定。VASPMATE为费米面的计算提供了以下两种模块：1) 费米面计算时的k点自动生成 2) 生成包含费米面数据的FERMISURFACE.bxsf或FERMISURFACE.frmsf文件，可用XcrySDen[7]和fermisufer[8]程序进行可视化。

*Mode:* **Fermi Kpoints**

*Syntax:*

VASPMATE --fska [kppra] [kscheme]

VASPMATE --fskv [kspac] [kscheme]

VASPMATE --fskm k\_1 k\_2 k\_3 [kmesh] [kscheme]

*Description:*

同自动生成k点的方法类似，VASPMATE提供了三种撒点方式，不同的是，计算费米面生成的k点为第一布里渊区内施加权重后的不可约k点（这点同HSE计算生成k点方式类似）。我们建议使用--fskv均匀撒点的方式，对于费米面计算我们希望使用更高的精度，kspac建议值为0.05，生成FERMIKPT文件保存k点信息。

*Examples:*

VASPMATE --fskv 0.05

*Mode:* **Fermi Surface**

*Syntax:*

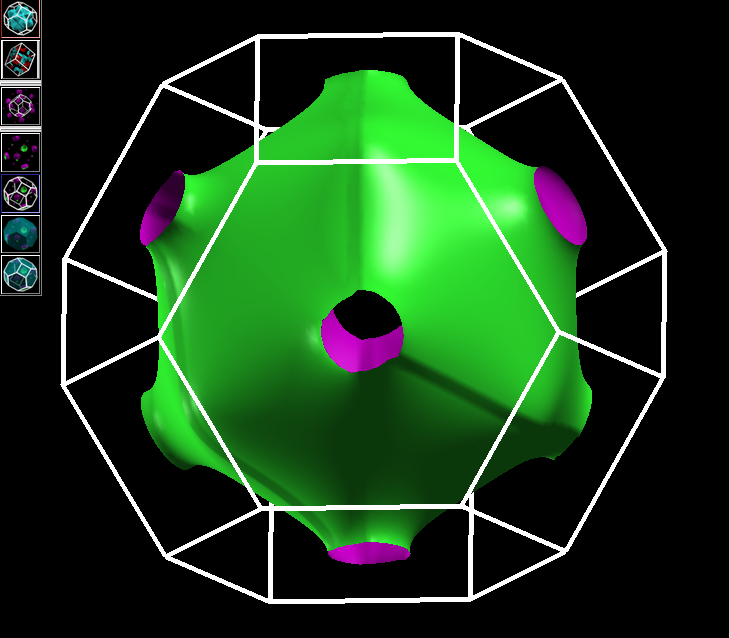
VASPMATE --fsxd -b <band\_index>

VASPMATE --fs -b <band\_index> -o <atom&orbit index>

*Description:*

对于费米面计算的后处理部分，VASPMATE为目前两种主流的费米面分析软件XcrySDen和fermisurfer提供了对应接口。VASPMATE的处理方式是通过从EIGENVAL文件中提取能级数据，根据对称性分配到每一个k点，除此之外，通过比较EIGENVAL文件中的能级值，找出最靠近或者穿过费米能级（费米能级大小可以在FERMI\_LEVEL文件中指定，默认读取DOSCAR中的费米能级，更多细节参考态密度计算介绍）的能带作为费米面，最后将数据输出到对应文件中。除了以上默认的选取费米能级附近的能带外，用户可以通过-b参数指定希望获取的能带序号。下面分别介绍两种输出方式。

第一种命令形式--fsxd表示将费米面数据输出为XcrySDen程序可识别格式，下图为Cu计算结束后将VASPMATE处理得到的FERMISURFACE.bxsf文件导入到XcrySDen得到的其费米面可视化图形。



不过XcrySDen目前只能识别不附加任何权重的费米面，相比之下，fermisufer程序显得更为完善，VASPMATE可以根据用户选择的原子及其轨道将PROCAR中不同的dos权重施加给每一个k点，最后输出带有对应权重的数据文件用于fermisufer程序读取，这点同VASPMATE对能带权重处理时类似的。用-o参数以及原子序号或者元素符号选择atom\_index,用轨道名称选择对应轨道（注意，当设置LORBIT=11是，VASPMATE依旧可以识别spdf轨道，此时输出值将为对应split orbit总和）。 下图为Cu计算结束后将VASPMATE处理得到的的费米面数据文件FERMISURFACE.frmsf导入到SPaMD或者fermisufer得到的其可视化图形，从左往右分别为不施加权重，以及分别以Fe原子的spd轨道贡献施加权重数据。



*Examples:*

VASPMATE --fsxd

VASPMATE --fsxd -b 1 2

VASPMATE --fs -o B s dx

VASPMATE --fs -b 1 2 -o 1 s

## 3.10 3D能带

对于二维材料例如石墨烯等，VASPMATE可以通过在不可约布里渊区表面撒点，自动生成k点文件，并且将VASP计算结果经VASPMATE处理后，可以生成易于origin画图的k点和能量文件。

*Mode:* **3dband Kpoints**

*Syntax:*

VASPMATE --3dka [kppra] [kscheme]

VASPMATE --3dkv [kspac] [kscheme]

VASPMATE --3dkm k\_1 k\_2 k\_3 [kmesh] [kscheme]

*Description:*

3d能带的k点也是延续了VASPMATE撒点风格，提供了三种不同的撒点方式。我们建议使用--3dkv均匀撒点的方式，对于3D能带计算我们希望使用更高的精度，kspac建议值为0.05，生成3dbandKPT文件保存k点信息。

*Examples:*

VASPMATE --3dkv 0.05

*Mode:* **3dband**

*Syntax:*

VASPMATE --3dbs -b <band\_index>

*Description:*

对于计算3d能带完成后的VASP输出文件，VASPMATE提供了两种处理方式。一种是指定能带编号，即输出对应编号的能带，并且可以一次性指定多条能带，用参数-b控制，分别输出到BAND\_B\*.grd文件中（对于带有自旋体系，则是分别输出到BAND\_B\*\_UP.grd和BAND\_B\*\_DW.grd文件）；第二种是不指定编号，VASPMATE自动寻找LUMO和HOMO所在能带并输出其结构。除此以外，VASPMATE还将输出KX.grd和KY.grd两个文件，分别保存倒易空间内每个k点的x和y坐标。通过将以上三个文件导入到Origin或者SPaMD中，使用3D颜色映射曲面作图，最终可以得到如下能带结构图（该图导入了费米能级附近两条能带）。

*Examples:*

VASPMATE --3dbs

VASPMATE --3dbs -b 5 6



## 3.11热力学量校正

VASP作为一款十分优秀的从头算第一性原理软件包，在热力学计算部分却显得不尽人意，它只能计算体系在0K下的电子能量，而无法考虑温度的贡献，这显然无法满足当我们计算自由能时的需求，为了获得反应热需要计算焓， 为了获得0K下的体系内能要计算ZPE。相比之下，Gaussian[9]在这点上做的比较好，但这显然无法满足习惯了VASP的使用者，并且计算也相对繁琐。好消息是Sobereva开发了一款十分全面的热力学计算程序Shermo[10]，它主要，通过分析高斯的输出结果，计算平动、转动、振动和电子贡献，得到给定温度、压力下体系的内能、焓、熵、自由能、热容。我们非常推荐VASPMATE的使用者在计算热力学各项数据之前能仔细阅读Shermo的附录，里面详实的介绍了各项物理化学性质的计算方法以及最终贡献，这对理解输出结果能起到很大帮助。尽管如此，Shermo依然无法对VASP的使用者提供直接性的帮助，因为其无法识别VASP的输出文件，并且其对于高通量计算来说也不够友好。最后VASPMATE集成了以上特点，并精简了其中可能VASP计算者可能并不感兴趣的部分，最后设计了该模块用于方便高效的对VASP输出结构进行热力学校正。

*Mode:* **Thermo**

*Syntax:*

VASPMATE --thermo <key-word> <key-value>

*Description:*

为了提供便捷精准的热力学校正，该模块一共提供了六种控制参数以及他们合适的默认值，分别为-T/-t , -P/-p , -sm/-s , -im /-i, -lf/-f, -cv/-v，以下逐一介绍。

1）-T/-t  300 该参数用于设置热力学温度，单位为K，默认为298.15K。

2）-P/-p 1 该参数用于设置当前大气压，单位为Atm，即当前实际气压为p\*101.375kpa，默认为1个大气压。

3）-sm/-s 1 该参数用于设置当前体系的自旋多重度Spin multiplicity，可以简单的将其设置为单电子数+1，该参数默认值为1，但我们更希望由用户针对不同计算体系而设置，错误的自旋多重度会很大程度影响转动贡献。

4）-im /-i 1 该参数用于设置计算过程中的imode，即是否忽略平动和转动对热力学的贡献，这在计算吸附分子自由能中起到很大作用，将在后续进一步介绍，默认为0，即考虑所有贡献。

5）-lf/-f 1 该参数用于设置ilowfreq参数，即对较低频率的处理方式。众所周知，振动频率越小对熵的贡献越大。很小的振动频率很可能会导致异常的熵和自由能校正。根据Sobereva在Shermo中提到的对低频的修正方式，VASPMATE也相应的提供了三种频率处理方式。第一种为谐波近似（Harmonic approximation），也叫做刚性转子谐振子模型（RRHO），这对应 -l=0 的情况，也是默认参数设置。但是普通的RRHO模型在计算较低频率的自由能过程中容易引发较大误差，从而表现十分不稳定。第二种处理方式为Raising low frequencies[11] ,[12]，即人为地将低频提高到某一水准，例如VASPMATE设置的默认值为100cm-1，这将在很大程度上改善自由能计算。第三种处理方式为Grimme's entropy interpolation[13]，本质上，该方法在谐波近似（SRRHO）和自由转子模型（SFR）下计算的振动熵之间进行插值，相比于人工干预提升阈值，该方法显得更为优雅。我们建议对于一般自由能计算开启-l 1减弱低频对结果的影响，而针对比较灵活的体系（例如具有许多可旋转键或分子络合物的大分子），我们建议将其设置为2。

6） -cv/-v 100 该参数即对应频率处理模式的第二种，即人为设置频率阈值，即临界振动critical vibra，默认值为100cm-1。

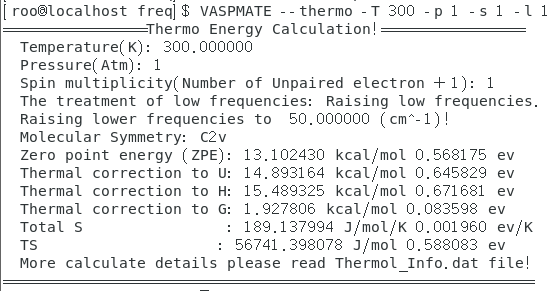
*Examples:*

VASPMATE --thermo -T 300 -p 1 -s 3 -i 1 -l 1 -v 100

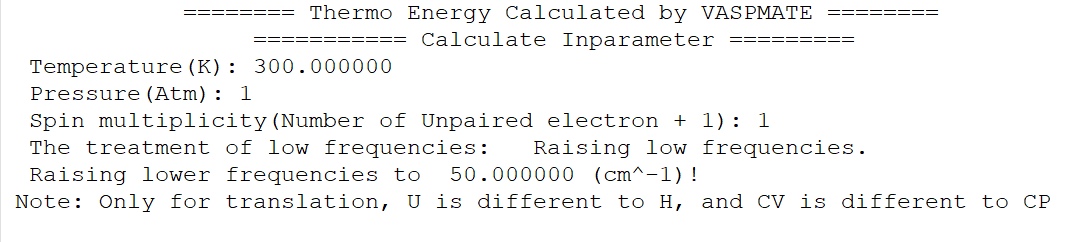
对于输出结果，VASPMATE会将VASP热力学计算者最感兴趣的内容即修正后的热力学量打印在屏幕上，用户可使用linux重定向符号>>将输出内容保存到一个文件中，例如VASPMATE --thermo -T 300 -p 1 -s 3 -i 1 -l 1 -r 100 >> H2O.dat，这将方便高通量地提取热力学数据。除此以外，VASPMATE还会输出一个包含了平动，转动，振动，电子各自对热力学的贡献以及最终贡献总和，方便用户进一步了解整个热力学计算过程。以下通过气相分子的热力学校正和吸附分子的热力学校正两个实例进一步介绍整个使用过程。

### 3.11.1 气相分子的热力学校正

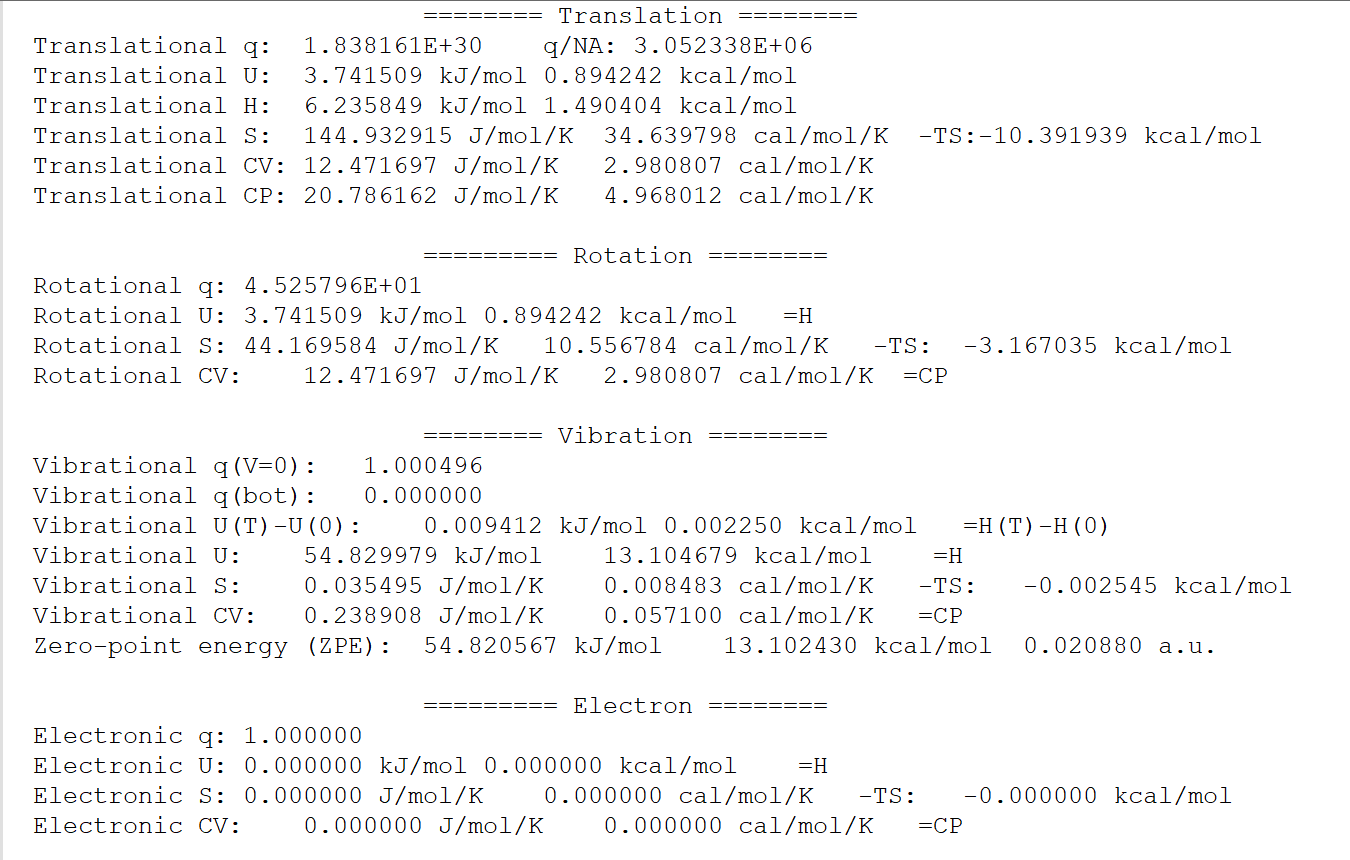
我们以H2O分子的热力学校正为例，在分子频率计算中，我们使用默认值imode = 0，即考虑平动和转动对热力学贡献。对于线性分子，将忽略最小的五个频率，对于非线性分子，将忽略最小的六个频率（这并不是并直接忽略了平动和转动的贡献。而是通过平动和转动的配分函数另外计算其对热力学量的贡献）。其中平动熵是气体分子熵的主要贡献)。我们使用命令VASPMATE --thermo -T 300 -p 1 -s 1 -l 1，之后我们将在屏幕上得到以下信息。



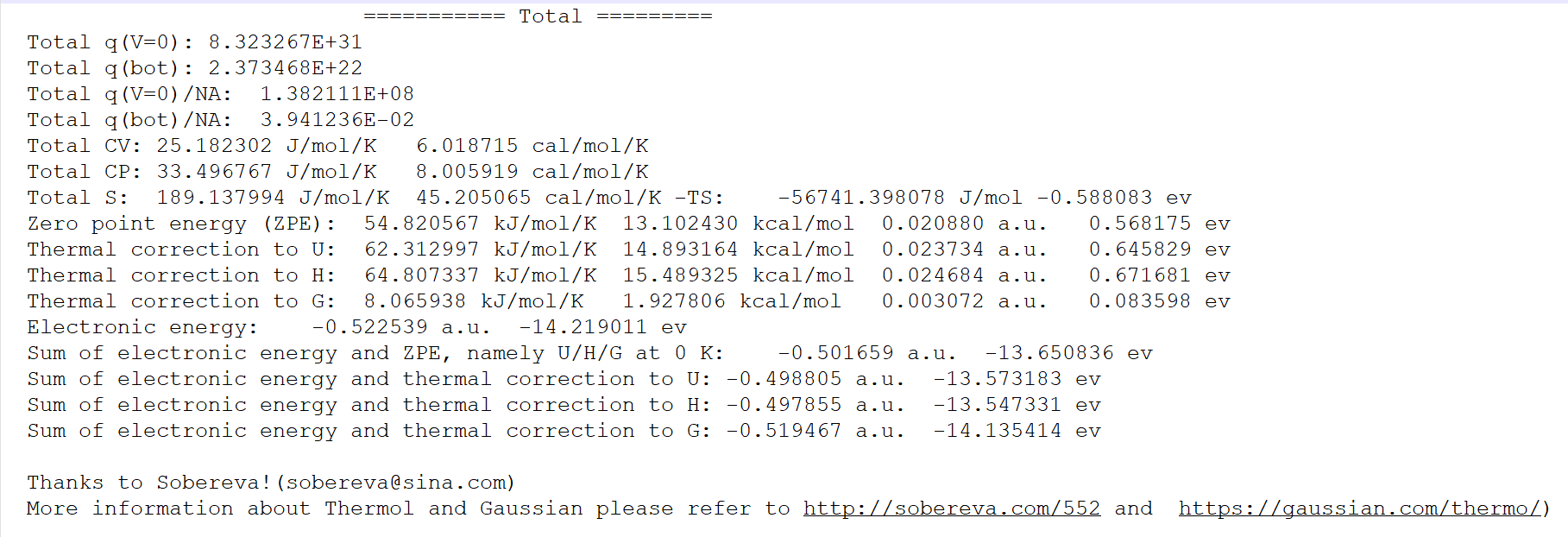
从VASPMATE输出的信息我们可以看到当前计算所采用输入参数，例如温度，压强，低频处理方法以及该分子的点群。在各种输出量中，我们要获得H2O的自由能，只需将G值即同种的0.083598加到VASP最终计算的能量上即可。除此以外在输出文件Thermol\_Info.dat文件中，我们首先会看到计算体系的信息和计算输入量



然后VASPMATE会输出平动、转动、振动和电子各自对热力学量的贡献。

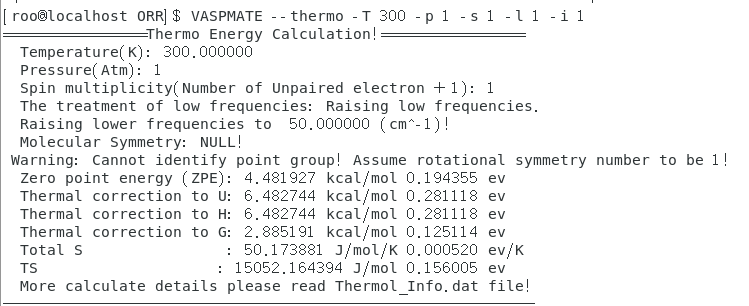


最后输出各项贡献总和以及校正后的热力学结果。其中`Electronic energy`为VASP计算的电子能 -14.219011ev，通过将VASPMATE对吉布斯自由能校正量`G `0.083598ev加到上面，最后得到的`Sum of electronic energy and thermal correction to G` -14.135414ev即H2O分子在当前温度压力下的自由能。



### 3.11.2 吸附分子的热力学校正

与气体分子自由能计算不同，吸附分子与基底形成化学键，使得平移和转动的自由度降低，从而限制了平移和旋转对熵和焓的贡献。VASPMATE对此采用的方法是将平动和转动的贡献归于振动，即吸附表面分子的3N个自由度全部归于振动用于热力学计算（注意VASPMATE忽略了虚频的作用），而这些操作只需要将imode参数设为0即可（注意当imode为0时由于此时电子运动的贡献非常小，VASPMATE也将忽略）。我们以石墨表面吸附PO2分子为例，输入命令VASPMATE --thermo -T 300 -p 1 -s 1 -l 1 -i 1，将在屏幕山得到以下结果



可以清晰地看到零点能ZPE以及U，H，G校正后的结果，通过将数据同Shermo输出对比是完全一直的，表明了VASPMATE计算结果的准确性。

## 3.12 化合物形成焓计算

*Mode:* **Enthalpy of formation**

*Syntax:*

VASPMATE --enth enx eny enz …

*Description:*

多元化合物AxByCz…的形成焓ΔH由如下公式计算

enx, eny, enz为对应的H(A), H(B), H(C)，代表A,B,C的总焓。VASPMATE通过读取当前文件夹下OUTCAR中的能量信息进一步计算得到对应化合物的形成焓。

*Examples:*

VASPMATE --enth -6.70392 -4.94403 (计算BO二元化合物的形成焓)

## 3.13 VASP输入输出参数提取（SDAMS数据库）

*Syntax:*

VASPMATE --db

*Description:*

针对每次VASP计算，VASPMATE通过解析OUTCAR文件，提取出本次计算的主要输入参数和输出结果，前者包括计算模式，截断能量，泛函方式，修正方法等，后者包括能量，应力，原子受力，电荷和磁矩。VASPMATE将这些输出信息按照key-value的储存方式分别保存到.sdata格式文件，最后结合spd.sh(位于VASPMATE安装包目录下)脚本将所有提取到的信息保存到SDAMS数据库。

*Examples:*

VASPMATE --db

## 3.14 高通量程序：ABAND和AEDOS

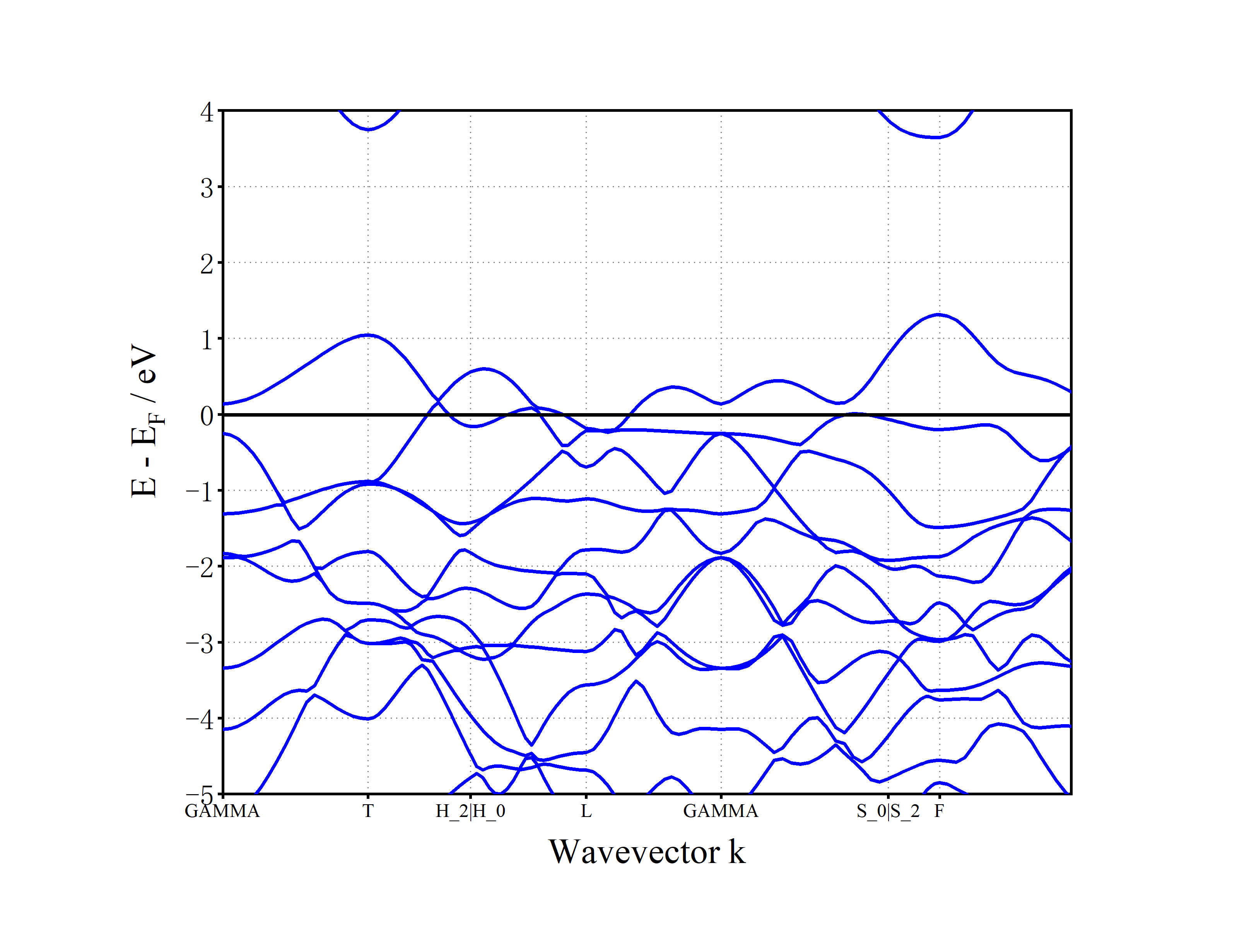
VASPMATE将能带和态密度高通量计算模块添加到组内研发的集成化平台SPaMD，设计了高通量第一性原理计算GUI程序ABAND和AEDOS，将繁琐的命令行和脚本格式转化为友好的GUI交互界面，将能带和态密度的计算效率大大提高。关于此部分功能的详细介绍可以参照AEDOS和ABAND的说明书。

# 4 实例

## 4.1 B6N能带结构计算（PBE泛函）

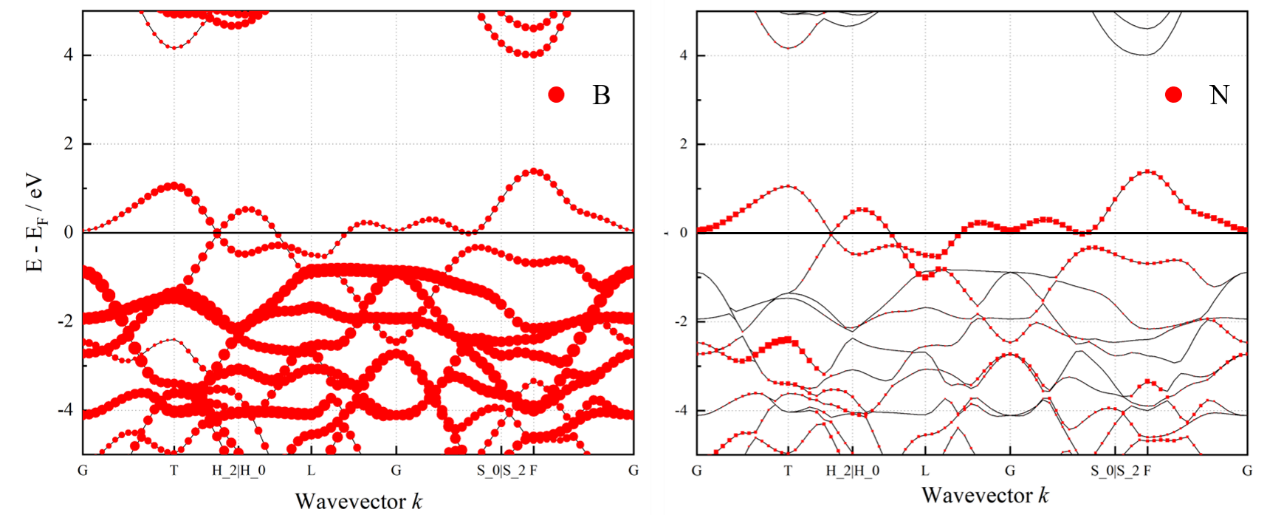
|  |
| --- |
| #! /bin/bash  VASPMATE\_DIR**=**''  VASP\_CAL**=**''  **cp** **./**structure**/\*** **./**INPOS  VASPMATE **--**kpt3d 20  #>>> create POSCAR file  **cp** PRIMPOS POSCAR  **cp** POSCAR INPOS  #--------------------------Relaxtion--------------------------  #>>> create INCAR file using VASPMATE and the file incar\_rlx and incar\_stc are created  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i rlx  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i stc  #>>> HSE calculation  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i hse stc  **cp** incar\_rlx INCAR  #>>> correct parameters  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ISPIN 2  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ENCUT 400  #>>> create KPOINTS file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**ka 4000  **cp** NEWKPT KPOINTS  #>>> create POSAR file  **cp** INPOS POSCAR  #>>> create POTCAR file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**pot **-**PBE  ${VASP\_CAL} **>>** log1.vasp  #--------------------------------------------------------------  #------------------option(self-consistent)---------------------  **cp** CONTCAR INPOS  **cp** incar\_stc INCAR  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i\_replace LCHARG T  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ISPIN 2  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ICHARG 2  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**ka 4000  **cp** NEWKPT KPOINTS  **cp** INPOS POSCAR  ${VASP\_CAL} **>>** log2.vasp  #--------------------------------------------------------------  #>>> get the efermi energy from the self-consistent calculation  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**dos **-**efermi **>>** FERMI\_LEVEL  #----------------------band calculation--------------------------  #>>> Bandstructure calculation  **mkdir** band  **cd** band  **cp** **../**CONTCAR POSCAR  **cp** **../**POTCAR **./**  **cp** **../**CHGCAR **./**  **cp** **../**NEWKPATH **./**  **cp** **../**FERMI\_LEVEL **./**  #>>> create KPOINTS file  **cp** NEWKPATH KPOINTS  #>>> HSEcalculaiton  #VASPMATE --kahse 8000 0.05 G  #>>> create INCAR file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i pbs  **cp** incar\_pbs INCAR  ${VASP\_CAL} **>>** log3.vasp  #--------------------------------------------------------------  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**band **-**bg  #>>>select output mode  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -b >> vaspmate.log  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -a  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -e  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -s 1-4 N  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -m 1-4 N  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -o 1-3 s px py  #rm POSCAR KPOINTS\* INCAR\* POTCAR  #rm CHG\* CONTCAR DOSCAR OSZICAR OUTCAR EIGENVAL PCDAT WAVECAR XDATCAR IBZKPT vasprun.xml  #END |

根据*Band.txt*和*KLABELS*用origin绘制的B6N的能带图。



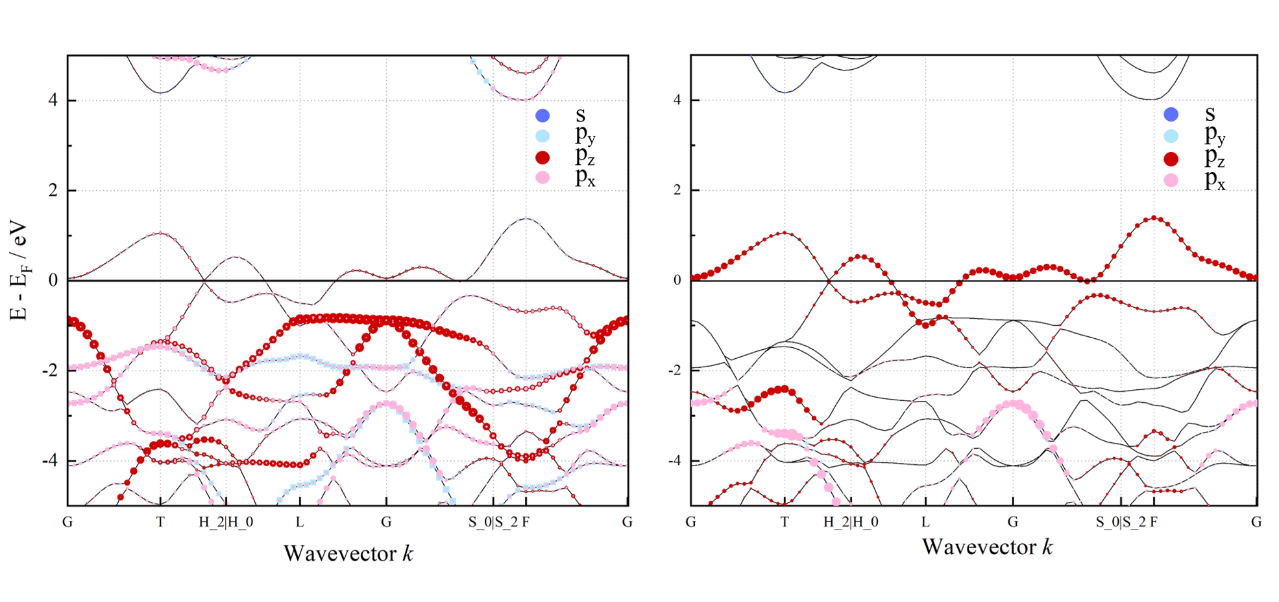
## 4.2 B6N能带结构计算（HSE泛函）

|  |
| --- |
| #! /bin/bash  VASPMATE\_DIR**=**''  VASP\_CAL**=**''  **cp** **./**structure**/\*** **./**INPOS  VASPMATE **--**kpt3d 20  #>>> create POSCAR file  **cp** PRIMPOS POSCAR  **cp** POSCAR INPOS  #--------------------------Relaxtion--------------------------  #>>> create INCAR file using VASPMATE and the file incar\_rlx and incar\_stc are created  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i rlx  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i stc  #>>> HSE calculation  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i hse stc  **cp** incar\_rlx INCAR  #>>> correct parameters  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ISPIN 2  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ENCUT 400  #>>> create KPOINTS file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**ka 4000  **cp** NEWKPT KPOINTS  #>>> create POSAR file  **cp** INPOS POSCAR  #>>> create POTCAR file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**pot **-**PBE  ${VASP\_CAL} **>>** log1.vasp  #--------------------------------------------------------------  #------------------option(self-consistent)---------------------  **cp** CONTCAR INPOS  **cp** incar\_stc INCAR  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i\_replace LCHARG T  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ISPIN 2  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ICHARG 2  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**ka 4000  **cp** NEWKPT KPOINTS  **cp** INPOS POSCAR  ${VASP\_CAL} **>>** log2.vasp  #--------------------------------------------------------------  #>>> get the efermi energy from the self-consistent calculation  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**dos **-**efermi **>>** FERMI\_LEVEL  #-------------------hse band calculation-----------------------  #>>> Bandstructure calculation  **mkdir** band  **cd** band  **cp** **../**CONTCAR POSCAR  **cp** **../**POTCAR **./**  **cp** **../**CHGCAR **./**  **cp** **../**NEWKPATH **./**  **cp** **../**FERMI\_LEVEL **./**  #>>> create KPOINTS file  #cp NEWKPATH KPOINTS  #>>> HSEcalculaiton  VASPMATE **--**kahse 8000 0**.**05 G  **cp** NEWKPT KPOINTS  #>>> create INCAR file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i pbs hse  **cp** incar\_pbs\_hse INCAR  ${VASP\_CAL} **>>** log3.vasp  #--------------------------------------------------------------  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**band **-**bg  #>>>select output mode  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -hb >> vaspmate.log  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -ha  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -he  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -hs 1-4 N  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -hm 1-4 N  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -ho 1-3 s px py  #rm POSCAR KPOINTS\* INCAR\* POTCAR  #rm CHG\* CONTCAR DOSCAR OSZICAR OUTCAR EIGENVAL PCDAT WAVECAR XDATCAR IBZKPT vasprun.xml  #END |



通过*PBAND\_B.dat*和*PBAND\_N.dat*所绘制的fatband图能清晰的看出不同元素对能带的贡献。

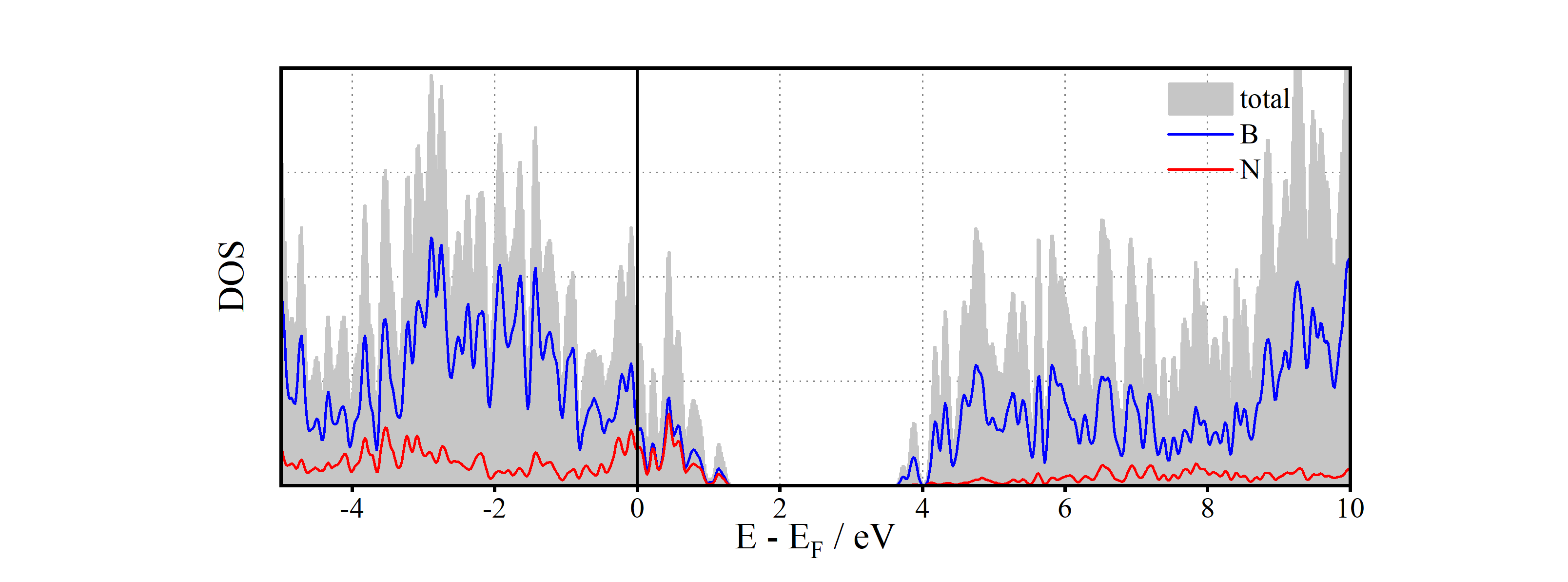
除此之外，通过选择不同轨道的贡献作为权重进行绘图，可以更为清晰的看出每个轨道对能带的作用。下图是根据B和N元素中s,py,pz,px轨道贡献绘制的fatband图，可以看出pz和px轨道在B6N体系中起到了主导作用。



## 4.3 B6N态密度计算

|  |
| --- |
| #! /bin/bash  VASPMATE\_DIR**=**''  VASP\_CAL**=**''  **cp** **./**structure**/\*** **./**INPOS  #>>> create POSCAR file  **cp** INPOS POSCAR  #--------------------------Relaxtion--------------------------  #>>> create INCAR file using VASPMATE and the file incar\_rlx and incar\_stc are created  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i rlx  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i stc  #>>> HSE calculation  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i hse stc  **cp** incar\_rlx INCAR  #>>> correct parameters  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ISPIN 2  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ENCUT 400  #>>> create KPOINTS file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**ka 4000  **cp** NEWKPT KPOINTS  #>>> create POSAR file  **cp** INPOS POSCAR  #>>> create POTCAR file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**pot **-**PBE  ${VASP\_CAL} **>>** log1.vasp  #--------------------------------------------------------------  #------------------option(self-consistent)---------------------  **cp** CONTCAR INPOS  **cp** incar\_stc INCAR  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i\_replace LCHARG T  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ISPIN 2  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ICHARG 2  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**ka 4000  **cp** NEWKPT KPOINTS  **cp** INPOS POSCAR  ${VASP\_CAL} **>>** log2.vasp  #--------------------------------------------------------------  #----------------------dos calculation--------------------------  #>>> DOS calculation  **mkdir** dos  **cd** dos  **cp** **../**CONTCAR POSCAR  **cp** **../**POTCAR **./**  **cp** **../**CHGCAR **./**  #>>> create KPOINTS file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**ka 4000  **cp** NEWKPT KPOINTS  #>>> create INCAR file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i dos  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i\_replace ICHARG 11  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace LORBIT 11  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace NEDOS 1000  **cp** incar\_dos INCAR  ${VASP\_CAL} **>>** log3.vasp  #--------------------------------------------------------------  #>>>select output mode  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**dos -t **>>** vaspmate.log  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --dos -a  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --dos -e  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --dos -s 1-4 N  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --dos -m 1-4 N  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --dos -o 1-3 s px py  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --dos -bc all  #rm POSCAR KPOINTS\* INCAR\* POTCAR  #rm CHG\* CONTCAR DOSCAR OSZICAR OUTCAR EIGENVAL PCDAT WAVECAR XDATCAR IBZKPT vasprun.xml  #END |

用*TDOS.dat*，*PDOS\_B.dat*和*PDOS\_N.dat*绘制的B6N的态密度图。



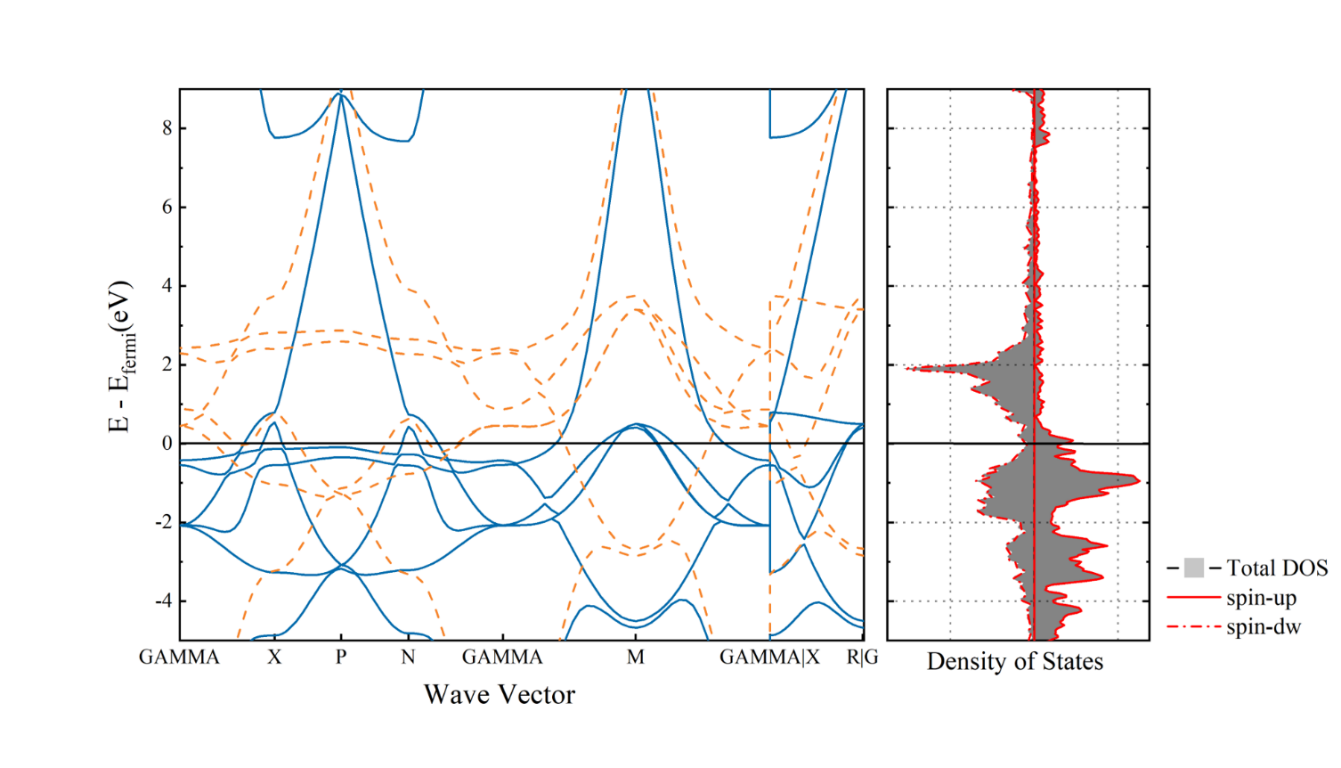
## 4.4 Fe的能带和态密度计算（带自旋）

能带Shell

|  |
| --- |
| #! /bin/bash  VASPMATE\_DIR**=**''  VASP\_CAL**=**''  **cp** **./**structure**/\*** **./**INPOS  VASPMATE **--**kpt3d 20  #>>> create POSCAR file  **cp** PRIMPOS POSCAR  **cp** POSCAR INPOS  #--------------------------Relaxtion--------------------------  #>>> create INCAR file using VASPMATE and the file incar\_rlx and incar\_stc are created  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i rlx  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i stc  #>>> HSE calculation  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i hse stc  **cp** incar\_rlx INCAR  #>>> correct parameters  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i\_replace ISPIN 2  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ENCUT 400  #>>> create KPOINTS file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**ka 4000  **cp** NEWKPT KPOINTS  #>>> create POSAR file  **cp** INPOS POSCAR  #>>> create POTCAR file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**pot **-**PBE  ${VASP\_CAL} **>>** log1.vasp  #--------------------------------------------------------------  #------------------option(self-consistent)---------------------  **cp** CONTCAR INPOS  **cp** incar\_stc INCAR  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i\_replace LCHARG T  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i\_replace ISPIN 2  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ICHARG 2  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**ka 4000  **cp** NEWKPT KPOINTS  **cp** INPOS POSCAR  ${VASP\_CAL} **>>** log2.vasp  #--------------------------------------------------------------  #>>> get the efermi energy from the self-consistent calculation  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**dos **-**efermi **>>** FERMI\_LEVEL  #----------------------band calculation--------------------------  #>>> Bandstructure calculation  **mkdir** band  **cd** band  **cp** **../**CONTCAR POSCAR  **cp** **../**POTCAR **./**  **cp** **../**CHGCAR **./**  **cp** **../**NEWKPATH **./**  **cp** **../**FERMI\_LEVEL **./**  #>>> create KPOINTS file  **cp** NEWKPATH KPOINTS  #>>> HSEcalculaiton  #VASPMATE --kahse 8000 0.05 G  #>>> create INCAR file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i pbs  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i\_replace ISPIN 2  **cp** incar\_pbs INCAR  ${VASP\_CAL} **>>** log3.vasp  #--------------------------------------------------------------  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**band **-**bg  #>>>select output mode  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -b >> vaspmate.log  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -a  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -e  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -s 1-4 N  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -m 1-4 N  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --band -o 1-3 s px py  #rm POSCAR KPOINTS\* INCAR\* POTCAR  #rm CHG\* CONTCAR DOSCAR OSZICAR OUTCAR EIGENVAL PCDAT WAVECAR XDATCAR IBZKPT vasprun.xml  #END |

态密度Shell

|  |
| --- |
| #! /bin/bash  VASPMATE\_DIR**=**''  VASP\_CAL**=**''  **cp** **./**structure**/\*** **./**INPOS  #>>> create POSCAR file  **cp** INPOS POSCAR  #--------------------------Relaxtion--------------------------  #>>> create INCAR file using VASPMATE and the file incar\_rlx and incar\_stc are created  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i rlx  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i stc  #>>> HSE calculation  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i hse stc  **cp** incar\_rlx INCAR  #>>> correct parameters  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i\_replace ISPIN 2  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ENCUT 400  #>>> create KPOINTS file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**ka 4000  **cp** NEWKPT KPOINTS  #>>> create POSAR file  **cp** INPOS POSCAR  #>>> create POTCAR file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**pot **-**PBE  ${VASP\_CAL} **>>** log1.vasp  #--------------------------------------------------------------  #------------------option(self-consistent)---------------------  **cp** CONTCAR INPOS  **cp** incar\_stc INCAR  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i\_replace LCHARG T  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i\_replace ISPIN 2  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace ICHARG 2  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**ka 4000  **cp** NEWKPT KPOINTS  **cp** INPOS POSCAR  ${VASP\_CAL} **>>** log2.vasp  #--------------------------------------------------------------  #----------------------dos calculation--------------------------  #>>> DOS calculation  **mkdir** dos  **cd** dos  **cp** **../**CONTCAR POSCAR  **cp** **../**POTCAR **./**  **cp** **../**CHGCAR **./**  #>>> create KPOINTS file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**ka 4000  **cp** NEWKPT KPOINTS  #>>> create INCAR file  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i dos  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i\_replace ICHARG 11  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**i\_replace ISPIN 2  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace LORBIT 11  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --i\_replace NEDOS 1000  **cp** incar\_dos INCAR  ${VASP\_CAL} **>>** log3.vasp  #--------------------------------------------------------------  #>>>select output mode  ${VASPMATE\_DIR}**/**VASPMATE **--**dos -t **>>** vaspmate.log  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --dos -a  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --dos -e  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --dos -s 1-4 N  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --dos -m 1-4 N  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --dos -o 1-3 s px py  #${VASPMATE\_DIR}/VASPMATE --dos -bc all  #rm POSCAR KPOINTS\* INCAR\* POTCAR  #rm CHG\* CONTCAR DOSCAR OSZICAR OUTCAR EIGENVAL PCDAT WAVECAR XDATCAR IBZKPT vasprun.xml  #END |



# 参考文献

[1] J. Hafner. Ab‐initio simulations of materials using VASP: Density‐functional theory and beyond[J]. Journal of computational chemistry, 2008, 29(13): 2044-2078.

[2] V. Wang, N. Xu, J.-C. Liu, G. Tang, W.-T. Geng, VASPKIT: A User-Friendly Interface Facilitating High-Throughput Computing and Analysis Using VASP Code, Computer Physics Communications 267, 108033, (2021), DOI: 10.1016/j.cpc.2021.108033.

[3] Z. R. Liu , B. N. Yao , R. F. Zhang . SPaMD studio: An integrated platform for atomistic modeling, simulation, analysis, and visualization[J]. Computational Materials Science, 2022, 210: 111027.

[4] S. H. Zhang, and R. F. Zhang, ADAIS: Automatic Derivation of Anisotropic Ideal Strength via high-throughput first-principles computations, in preparation.

[5] S. H. Zhang, R. F. Zhang. AELAS: Automatic ELAStic property derivations via high-throughput first-principles computation, Computer Physics Communications 220 (2017).

[6] Y. Hinuma, G. Pizzi, Y. Kumagai, F. Oba, I. Tanaka, Band structure diagram paths based on crystallography, Comp. Mat. Sci. 128, 140 (2017).

[7] Kokalj A. XCrySDen—a new program for displaying crystalline structures and electron densities[J]. Journal of Molecular Graphics and Modelling, 1999, 17(3-4): 176-179.

[8] Kawamura M. FermiSurfer: Fermi-surface viewer providing multiple representation schemes[J]. Computer Physics Communications, 2019, 239: 197-203.

[9] M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A.V. Marenich, J. Bloino, B.G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H.P. Hratchian, J.V. Ortiz, A.F. Izmaylov, J.L. Sonnenberg, Williams, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V.G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J.A. Montgomery Jr., J.E. Peralta, F. Ogliaro, M.J. Bearpark, J.J. Heyd, E.N. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, T.A. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A.P. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J.M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J.B. Foresman, D.J. Fox, Gaussian 16 A.03. Wallingford, CT, 2016.

[10] Tian Lu, Qinxue Chen, Shermo: A general code for calculating molecular thermodynamic properties, Comput. Theor. Chem., 1200, 113249 (2021) DOI: 10.1016/j.comptc.2021.113249

[11] R.F. Ribeiro, A.V. Marenich, C.J. Cramer, D.G. Truhlar Use of Solution-Phase Vibrational Frequencies in Continuum Models for the Free Energy of Solvation J. Phys. Chem. B, 115 (49) (2011), pp. 14556-14562

[12] A.V. Marenich, W. Ding, C.J. Cramer, D.G. Truhlar Resolution of a Challenge for Solvation Modeling: Calculation of Dicarboxylic Acid Dissociation Constants Using Mixed Discrete-Continuum Solvation Models

[13] L. Xu, M.L. Coote Methods To Improve the Calculations of Solvation Model Density Solvation Free Energies and Associated Aqueous pKa Values: Comparison between Choosing an Optimal Theoretical Level, Solute Cavity Scaling, and Using Explicit Solvent Molecules J. Phys. Chem. A, 123 (34) (2019), pp. 7430-7438

[14] Kormanyos A, Burkard G, Gmitra M, Fabian J, Zolyomi V, Drummond N D and Falḱo V 2015 k.p theory for two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconductors 2D Mater. 2 022001