



VASP ユーザーマニュアル



目次

1	VASP について	2
2	VASP 実行ファイル	3
2.1	vasp	3
2.2	vasp-gamma	3
2.3	vasp-spin	3
3	VASP 実行例	4
3.1	シリアル(1CPU コア)の実行例	4
3.2	MPI 並列の実行例	4
4	既知の問題点	5
5	可視化ツール	6
5.1	VESTA	6
5.2	VMD	6
付録 A	7
A.1	HPC システムズ お問い合わせ先	7

1 VASP について

VASP は、密度汎関数法による平面波・擬ポテンシャル基底を用いた第一原理電子状態計算プログラムパッケージです。結晶や無機固体の周期境界条件を用いた計算を行います。VASP はウィーン大学で開発された有償のソフトウェアです。VASP を使用する際は開発元とライセンス契約を行う必要があります。ライセンス契約の詳細については VASP ホームページ (<http://www.vasp.at/>) の FAQs をご確認ください。

VASP のパッケージはライセンス契約をしているユーザーであれば VASP ホームページからダウンロードをすることが可能です。当社では VASP のファイルをお借りして計算機へインストールをしています。

本マニュアルでは VASP の実行方法をご案内します。VASP の詳細については VASP Wiki をご確認ください。

https://www.vasp.at/wiki/index.php/The_VASP_Manual

2 VASP 実行ファイル

VASP の実行ファイルは標準のビルドで作成した `vasp` と `Makefile` のパラメータを修正してビルドした `vasp-gamma`、`vasp-spin` の 3 種類があります。

2.1 vasp

ビルド時に `DNGZhalf` の宣言をつけてビルドを行ったものです。基本的な VASP の実行ファイルです。

2.2 vasp-gamma

ビルド時に `DwNGZhalf` の宣言をつけてビルドを行ったものです。ガンマ点のみの計算をする VASP の実行ファイルです。

VASP Wiki に記載されておりますので、詳しくは以下 URL をご参照下さい。

https://www.vasp.at/wiki/index.php/Installing_VASP

2.3 vasp-spin

`INCAR` 中の `LNONCOLLINER` タグや `LSORBIT` タグを使用して計算を行う機能です。この機能は VASP 5.3.3 では β ステージ扱いで、バグが存在するかもしれないという記述も明記されています。

VASP Wiki に記載されておりますので、詳しくは以下 URL をご参照下さい。

https://www.vasp.at/wiki/index.php/Installing_VASP

なお、"`vasp-spin`" という名称は以下の経緯があります。この実行ファイルをビルドする際にマニュアルに記載の `NGZhalf` の宣言を外しておく必要がありますが、この実行ファイルに共通の決まった名前がありません。海外の大学の計算機センターなどでも様々な名称が付けられています。当社では、`non-collinear spin calculations` が実行可能な事から `vasp-spin` という名前にしています。

3 VASP 実行例

3.1 シリアル(1CPU コア)の実行例

インプットファイルがあるディレクトリに移動して `vasp` コマンドを実行します。

```
$ cd jobdir
$ ls
INCAR KPOINTS POSCAR POTCAR
$ vasp
```

3.2 MPI 並列の実行例

```
$ cd jobdir
$ ls
INCAR KPOINTS POSCAR POTCAR
$ mpirun -np 16 /usr/local/VASP-5.3.3-22May2013/bin/vasp
```

※ `-np` 以降に並列数を指定します。`-np` の値は 2 のべき乗の数字でない場合、VASP が動作しないことがあるのでご注意ください。

※ `mpirun` 以降の実行ファイルは絶対パスで指定する必要があります。実行ファイルがあるディレクトリにパスが通っていても同様です。

4 既知の問題点

2013年10月31日現在、VASP 5.3.3 で明らかになっている問題点はありません。

5 可視化ツール

VASP はテキスト形式で入力用データファイルを作成し、計算結果もテキスト形式で出力されます。VASP のユーザーはこうした形式に慣れていますが、VASP をこれから始めるという場合や、VASP の計算結果を可視化したい場合、簡単なツールはないかとお問い合わせを頂く場合があります。

VASP の可視化に使えるソフトウェアとして知られているものを以下に紹介いたします。セットアップについては弊社までお問い合わせください。

5.1 VESTA

結晶構造、電子・核密度等の三次元データ、及び結晶外形の可視化プログラムです。

配布元 : <https://jp-minerals.org/vesta/jp/>

5.2 VMD

結晶構造や電子密度分布を可視化することができます。

配布元 : <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

付録A

A.1 HPC システムズ お問い合わせ先



弊社ホームページ http://www.hpc.co.jp/support_index.html

サポート案内やお問い合わせの多い内容など様々な情報を掲載しております。
是非ご活用ください。

HPC システムズ株式会社

〒108-0022 東京都港区海岸 3-9-15 LOOP-X 8 階

HPC 事業部



【営業】 03-5446-5531 【サポート】 03-5446-5532

お電話によるサポート受付は祝日、弊社指定休日を除く月曜日から金曜日の 9:30～17:30
とさせていただきます。



【FAX】 03-5446-5550



【電子メール】 hpcs_support@hpc.co.jp