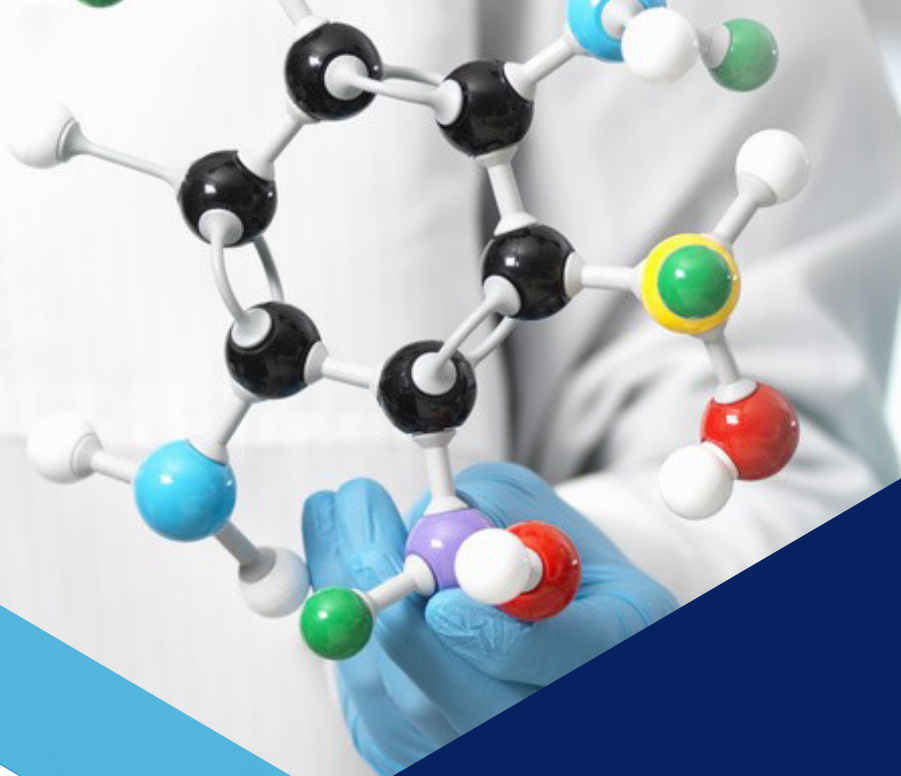




VASP

第一性原理计算模拟软件包

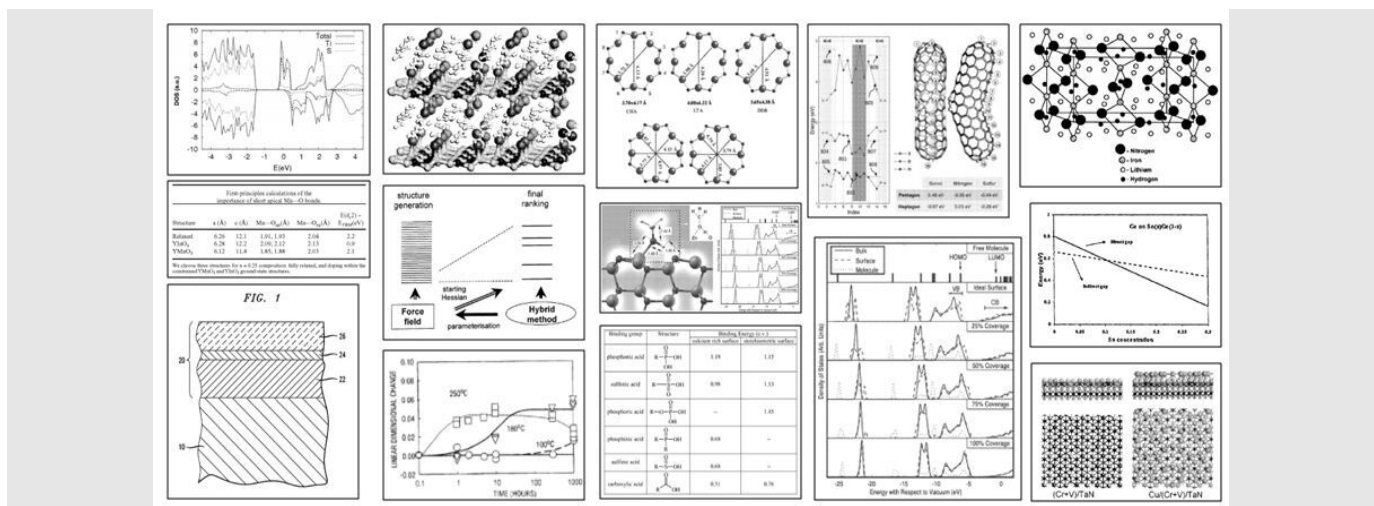
源资信息科技（上海）有限公司



VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) 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，适用于材料模拟和计算物质科学研究。VASP是基于赝势平面波基组的第一性原理密度泛函计算程序，它作为目前国内国际上先进的第一性原理计算软件，可以研究多种体系，包括金属及其氧化物、半导体、晶体、掺杂体系、纳米材料、分子、团簇、表面体系和界面体系等。

VASP不仅能够计算得到各种体系的平衡结构和能量，而且还能够对材料的电子性质进行精确的预测，深度剖析材料的各种理化性质。VASP软件功能强大，性能稳定，每年在许多国际核心期刊上发表上万篇文章（知名的杂志诸如Science、Journal of the American Society、Nano letters、Physical Review Letters等）。同时，VASP支持CPU和GPU计算，具有非常高效的计算效率，可以使用较小的内存就能实现大规模的高效率并行计算，是目前做固体材料第一性原理计算效率极高的商用软件之一。

○ VASP能计算的性质



✓ VASP软件的基本原理是通过近似求解Schrödinger方程得到体系的电子态和能量，在密度泛函理论（Density Functional Theory, DFT）框架内求解Kohn-Sham方程。

VASP采用周期性边界条件（或超晶胞模型），基于密度泛函理论对原子、分子、表面、团簇等多种体系进行几何结构优化得到稳定构型，进而获得各种结构参数，包括稳定构型的晶格常数、各原子的位置、原子间的键长和键角。

✓ VASP软件通过求解Kohn-Sham方程获得体系的波函数和状态方程，进而计算出体系的总能量（包括体系总自由能及不含熵的能量），同时，再采用共轭梯度、最速下降法及Damped算法等计算出体系中各原子在xyz三个方向上的受力。

✓ VASP软件通过求解Kohn-Sham方程能够描述体系中的电子结构，计算多种电子性质，其中包括波函数（Wave function）、每个k点上的能级分布、每个原子在每个轨道上的电子态密度（Density of State, DOS）、能带结构（Band Structure, BS）、电子局域化函数（Electron Localization Function, ELF）、电荷密度（Charge Density）、自旋密度（Spin Density）等。

✓ VASP软件通过求解Kohn-Sham方程，在离子位置和格矢中加入有限差分，从而得到二阶导，用于计算原子间力常数和声子（需要超晶胞近似），和弹性常数。计算中自动考虑对称性。

✓ VASP软件通过求解Kohn-Sham方程，在离子位置和静电场中加入线性响应，从而得到二阶导，用于计算原子间力常数和声子（需要超晶胞近似），Born有效电荷张量，静态介电张量（电子和离子贡献），内应变张量，压电张量（电子和离子贡献）。线性响应只能用于局域和半局域泛函。

✓ VASP软件通过求解Kohn-Sham方程能够获得体系的光学性质，如介电函数矩阵（实部和虚部），进而得到吸收光谱等。

✓ VASP软件能够搜索表面或扩散过程中的过渡态结构并计算能量，进而获得反应或扩散能垒。

✓ VASP软件能够基于Zacharias-Giustino方法考虑电子-声子耦合，研究声子诱导半导体的带隙变化。

✓ VASP软件能够计算X-ray吸收光谱（XAS）。

VASP的赝势库

☑ VASP软件是基于赝势和平面波基组的第一性原理密度泛函计算程序。VASP使用的是平面波基组，电子与原子核之间的相互作用使用投影缀加波赝势（Projector Augmented Wave, PAW）方法描述，从而进行量子力学计算。VASP采用PAW赝势，使得平面波基组尺寸非常小，描述原子一般不超过100个平面波基组，大多数情况下每原子50个平面波就能得到可靠结果。

☑ VASP软件中的PAW赝势分为以下几种分类方法：

- 1) 按赝势支持的泛函种类分为GGA和LDA；
- 2) 按原子中是否处理的半芯态（semi-core），分为A, A_sv, A_pv和A_d；
- 3) 按赝势文件中截断能参数ENMAX的大小，分为普通赝势A, 软赝势A_s（精度较低，速度较快）和硬赝势A_h（精度较高，速度较慢）；
- 4) 用于支持GW/RPA计算的赝势为A_GW。

○ VASP支持的泛函

☑ VASP软件在密度泛函理论框架下，支持多种基于局域密度近似（LDA）与广义梯度近似（GGA）两种方法的混合泛函，版本包括：LDA、GGA-AM05、GGA-PBESol（适用于固体材料）、GGA-PBE（应用最广）、GGA-rPBE（经过修正的GGA-PBE泛函）、BLYP泛函。

☑ VASP软件支持由密度泛函理论（DFT）的交换作用能和Hartree-Fock中的精确交换作用能按一定比例结合形成的杂化泛函（hybrid functional），用于精确计算材料的禁带宽度及相关的电子性质，包括版本有适用于固体的HSE06和PBE0、适用于分子的B3LYP（实验性的），VASP软件新增介电相关杂化泛函（DDH/DSH）。

☑ VASP软件包含适用于处理含有长程作用体系的范德华密度泛函（Van der Waals density functional），其中版本包括vdW-DF, vdW-DF2, optB86b-vdW, optB88-vdW, optPBE-vdW, rPW86-vdW2, revPBE-vdW、BEEF-vdW、SCAN+rw10。

☑ VASP软件支持meta-GGA泛函，通过减少在交换相关能公式中的动能密度部分误差，进一步提高VASP对不同体系总能量和原子结构及电子结构的计算精度。此种泛函包含多种版本：revTPSS、TPSS、M06-L、MBJLDA、SCAN、MS0、MS1、MS2。

☑ VASP软件支持的meta-GGA泛函中的MBJLDA泛函，即为经过修正的Becke-Johnson meta-GGA泛函，此种泛函能够使用较少的计算量，但最终得到与杂化泛函（hybrid functionals）或GW方法这两种精确的计算方法接近的计算精度，适用于计算电子性质和能隙。

○ VASP软件的算法特征

☑ VASP软件通过近似求解Schrödinger方程得到体系的电子态和能量，既可以在密度泛函理论（DFT）框架内求解Kohn-Sham方程（已实现了混合泛函计算），也可以在Hartree-Fock（HF）的近似下求解Roothaan方程。此外，VASP软件也支持格林函数方法（GW准粒子近似，Low Scaling GW，ACFDT-RPA）和微扰理论（二阶Møller-Plesset），支持屏蔽交换（Screened Exchange）。

☑ VASP软件可以自动确定任意构型的对称性。利用对称性方便设定Monkhorst-Pack特殊点，可用于高效地计算材料和对称团簇。Brillouin区的积分使用模糊方法或Blochl改进的四面体布点-积分方法，实现更快的k点收敛。

☑ VASP软件为基于第一性原理的量子力学和分子动力学（从头分子动力学，ab initio MD）计算软件，在VASP软件的分子动力学中，每一步都采用有效矩阵对角和Pulay方法混合求解瞬时电子基态，能够指定温度、压力、总时间、时间步长等参数，系统方面支持蒙特卡洛计算具代表性的正则系综（NVT）和分子动力学计算具代表性的微正则系综（NVE）。

☑ VASP软件支持Machine Learning机器学习方法训练生成适合VASP软件分子动力学的力场文件。

☑ VASP软件支持基于GW准粒子修正方法的材料激发态计算，完全含频GW，速度达到等离子极点模型:单发G0W0;在G和W中迭代本征矢直至自洽;(实验性的)迭代G(也可以选W)本征矢的自洽GW;(实验性的)对相关能使用RPA近似的GW总能量;用LDA计算G和W的顶点校正(局域场效应)，

仅能用于非自旋极化的情况。GW顶点的Bethe-Salpeter（仅能用于非自旋极化的Tamm-Dancoff近似）。

☑ VASP软件支持Low Scaling GW方法，Low Scaling GW提供温度效应模式，计算准粒子光谱（包括金属体系）。

☑ VASP软件针对电子间的库伦交互作用不可忽略的强关联电子体系（d层电子、f层电子）的过渡金属氧化物以及镧系稀土金属氧化物，增加了在位库伦修正的方法（on-site coulomb correction），通过Hubbard模型对各种体系的d或f轨道进行DFT+U的计算。

☑ VASP软件支持scaLAPACK大尺度快速计算；VASP软件提供ACFDT-RPA方法，ACFDT-RPA提供温度效应模式，计算大体系（包括半导体、绝缘体、金属等）精确能量，结合Hartree-Fock交换关联，精确计算受力和G点处声子频率，并能自动优化原子位置。

☑ VASP软件能够基于Space-time算法在ACFDT/RPA理论层面上自动优化原子位置，适用于计算大体系的精确能量和力。

☑ VASP软件提供Moeller-Plesset微扰理论（MP2），能得到精确能量。

☑ VASP软件采用one-shot采样或蒙特卡洛采样法，精确计算电子-声子耦合。

☑ VASP软件能够实现大规模的高效率并行计算，支持多核多节点并行计算，对核数和节点数均没有限制，支持单用户多用户同时使用。

源资信息科技(上海)有限公司
电话:+86-21-32504385
网址:www.tri-ibitech.com
邮箱:support@tri-ibitech.com

上海总公司
地址:上海市长宁区天山路18号701
北京分公司
地址:北京市顺义区安泰大街融慧园15-3

重庆办事处
地址:重庆市渝中区石油路大坪时代
天街B馆3栋2803

