# Lancement de calcul sous CASTEP avec l'interface accelrys

Cliquer sur « File » puis « Import » :



puis choisir le fichier xx.cif à ouvrir :

Import Document					×
🔾 🗢 📔 🕨 Ordinateur	▶ Dat	ta (D:) → CASTEP → Test → optimisation →	<b>- </b> ↓	Rechercher dans : optin	nisation 🔎
Organiser 🔻 Nouveau de	ossier				
🗼 Téléchargements	*	Nom	Modifié le	Туре	Taille
Pik Kath à surse		🐌 KaAIF4_Files	28/10/2015 15:05	Dossier de fichiers	
		📊 KaAlF4.stp	28/10/2015 15:05	Materials Studio P	1 Ko
Documents	=	🔗 KaAlF4_tetra_16413.cif	18/03/2015 14:12	Crystallographic I	3 Ko
Vidéos					
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·					
🖳 Ordinateur					
🚢 OS (C:)					
👝 Data (D:)					
🖵 informatique (\\cemhti	+ -				•
Nom du	fichie	Ka AIEA tates 16412 aif	_	All Filer (* *)	_
<u>N</u> om du	neme	NaAIF4_LELIa_10415.CIT	•		
			Options	Ou <u>v</u> rir A	nnuler

Le fichier xx.xsd est automatiquement généré (dans l'exemple ci-dessus, KaAIF4\_tetra\_16413.xsd).

Il faut ensuite cliquer sur « Calculation » :



et choisir le type de calcul souhaité (dans notre exemple, une optimisation géométrique) ainsi que les fonctionnelles :

CASTEP Calculation						
Setup   Electronic   Properties   Job Control						
Task: Geometry Op	Task: Geometry Optimization  More					
Quality: Customized 💌						
Functional:	GGA 💌 PBE 💌					
🗆 Use TS 🖃	method for DFT-D correction					
🔲 Spin polarized	☑ Use formal spin as initial					
🗖 Use LDA+U	Initial spin: 0					
🥅 Metal	Charge: 0 •					
Run 👻 Files Help						

Cliquer ensuite sur « More »

La fenêtre qui s'ouvre permet de choisir les paramètres du déplacement ionique pour le calcul d'optimisation ionique

CASTEP Geometry Optimization					
Minimizer Options Stress					
Convergence tolerance					
Quality:	Ultra-fine	-			
Energy:	5,0e-6	eV/atom			
Max. force:	0,01	eV/Â			
Max. stress:	0,02	GPa			
Max. displacement:	5,0e-4	Å			
Max. iterations:	100 .				
Coptimize cell					
Basis set for Variable cell:					
Compressibility:	Hard 💌				
Help					

Il faut ensuite cliquer sur l'onglet « Electronique » de la fenêtre « CASTEP CALCULATION » :

CASTEP Calculation						
Setup Electronic Properties Job Control						
Energy cutoff: Customized 💌 370,0 eV						
SCF tolerance: Medium 💌						
Energy tolerances per: Atom						
k-point set: Medium 💌 1x1x1						
Pseudopotentials: Ultrasoft 🗨						
Pseudopotential representation:						
Use core hole						
More						
Run 👻 Files Help						

et cliquer sur « more » afin de fixer une énergie de cutoff, un maillage dans la zone de Brillouin, etc :

CASTEP Electronic Options						
Basis SCF k-points Potentials DFT-D						
I Use custom energy cutoff 370,0 eV						
FFT grid						
Density: Standard 🗨 90x90x90						
Augmentation density scaling factor: 1.0						
Finite basis correction						
Apply finite basis set correction: Smart						
Correction mode: Automatic 💌						
Numerical differentiation using 3 • points						
Energy derivative w.r.t. cutoff 0,0 eV						
Help						

L'onglet « Properties » de la fenêtre « CASTEP CALCULATION » permet de spécifier ce que nous souhaitons récupérer dans le fichier de sortie :

Dans l'exemple ci-dessous, « Population analysis » est choisie ce qui signifie que nous souhaitons récupérer le résultat de l'optimisation ionique dans les fichiers de sortie :

CASTEP Calculation					
Setup Electronic Properties Job Control					
Optical properties Orbitals Phonons					
Polarizability, IR and Raman spectra     Population analysis     Stress					
Density of states					
Empty bands: 12					
k-point set: Medium 💌 1x1x1					
Calculate PDOS More					
Run 🔻 Files Help					

L'onglet « Job Control » de la fenêtre « CASTEP CALCULATION » permet de spécifier ce que l'on souhaite favoriser : vitesse, mémoire, ... (plutôt choisir Speed)

CASTEP Calculation					
Setup Electronic Properties Job Control					
Gateway location: My Computer					
Queue:					
Job description: 🔽 Automatic					
Run in parallel on: 1 of 4 cores					
C Optimize number of cores on the fly					
Runtime optimization: Speed					
More					
Run 👻 Files Help					

Une fois tous les paramètres renseignés, nous allons générer le projet en cliquant sur « Files » puis « Save Files » :



Les fichiers du projet sont maintenant visibles :



Il reste maintenant à copier les fichiers ayant les extensions suivantes sur ARTEMIS :

\*.param

\*.xsd

\*.cell

\*.kptaux

\*.trjaux

\*.xms

Tous se trouvent sous le répertoire\*- Calculation. Dans notre exemple, le fichier cif était sous :

### D:\CASTEP\Test\optimisation

et les fichiers du projet ont été créés sous :

### D:\CASTEP\Test\optimisation\KaAlF4\_Files\Documents\KaAlF4\_tetra\_16413 CASTEP GeomOpt

Copier le script run\_optim\_geom.job et modifier SEEDNAME : lui donner le nom du fichier .xsd sans l'extension.

Une fois le job lancé, CASTEP écrit dans les fichiers suivants /scratch/votrelogin/n°job/\*.castep

À la fin du calcul, ces fichiers sont copiés sous le répertoire result\_jobID créé dans le répertoire contenant les fichiers initiaux du calcul ainsi que le script de lancement.

## Lancer un calcul de RMN après une optimisation de structure

1°: Sur Artemis

 aller sous le répertoire contenant les dossiers et fichiers du calcul (~/moncalcul/result\_idjob) et lancer castepclean.exe (installé dans /home/votrelogin/bin déclaré dans le PATH) : ça supprime tous les fichiers non nécessaires (\*.pid, \*.check,...)

**2°:** Rapatriement de result\_jobid sur votre PC dans le répertoire contenant le projet (D:\CASTEP\Ba5AlF13\_Files\Documents\Ba5AlF13\_1\_300ev\_GeomOpt\BaAlF\_GO\_US\_1\_600eV\_UF par exemple)

### **3°** : Sous Material Studio



- cliquer sur les vagues et choisir analysis puis choisir Structure :



- Cliquer sur update pour charger la structure optimisée



puis sauvegarder cette nouvelle structure en tant que nouveau fichier de position en entrée de calcul.

Save As						×
OO- 🖉 « Do	cuments > Ba5AIF13_1_300ev_GeomOpt	► Ba	AIF_GO_US_1_600eV_UF  result_104869	<b>▼</b> \$ <del>1</del>	Rechercher dans : result_	104869 🔎
Organiser 🔻 No	ouveau dossier				8== •	0
☆ Favoris		^	Nom	Modifié le	Туре	Taille
Emplacements	récents		🍇 neutron_F3_32e_P1_conf1_NMR.xsd	14/04/2015 22:53	Materials Studio 3	151
🔒 Téléchargeme	nts	-				
Bibliothèques		=				
Musique Vidéos						
🖳 Ordinateur						
🚢 OS (C:)						
Data (D:)	\\cempti_2) (Iv)	-	•			•
Nom du fichier :	neutron_F3_32e_P1_conf1_NMR_optimise	xsd				-
	Materials Studio 3D Atomistic Files (*.xsd)					•
Cacher les dossier	S			Options	Enregistrer	nuler

Pour relancer le calcul à partir de la structure optimisée, cliquer sur les vagues après avoir chargé le fichier xsd correspondant à la structure optimisée et choisir calculation

CASTEP Calculation						
Setup Electronic Properties Job Control						
Task: Geometry Op	Task: Geometry Optimization  More					
Quality: Custon	nized 💌					
Functional:	GGA 💌 PBE 💌					
🗆 Use TS 🖃	method for DFT-D correction					
Spin polarized	☑ Use formal spin as initial					
🗖 Use LDA+U	Initial spin: 0					
Metal	Charge: 0					
Run	Files Help					

Les paramètres à choisir dans l'onglet Electronic

CASTEP Calculation					
Setup Electronic P	roperties Job Control				
Energy cutoff:	Customized 💌 600,0 eV				
SCF tolerance:	Ultra-fine 💌				
Energy tolerances per:	Atom				
k-point set:	Fine 1x1x1				
Pseudopotentials:	On the fly				
Pseudopotential representation:	Reciprocal space 💌				
Use core hole					
	More				
Run	Files     Help				

## **Onglet Properties**

CASTEP Calculation					
Setup Electronic Properties Job Control					
Electron density difference  Electron localization function  Electron localization function					
Optical properties     Orbitals					
Nuclear magnetic resonance					
Calculate: Shielding and EFG 💌					
System type: Crystal					
Max. steps: 250 More					
Run 👻 Files Help					

Fenêtre optimisation ionique

CASTEP Geometry Optimization					
Minimizer Options Stress					
Convergence tolerance					
Quality:	Quality:				
Energy:	5,0e-6	eV/atom			
Max. force:	0,01	eV/Å			
Max. stress:	0,02	GPa			
Max. displacement:	5,0e-4	Å			
Max. iterations:	200 •				
C Optimize cell					
Basis set for variable cell:	Fixed Basis Qu	ality 👻			
Compressibility:	Hard				
Help					

Pour lancer un calcul de RMN, il faut modifier le fichier run\_optim\_geom.job (le script) :

▲ 123 -	run_optim_geom.job - WordPad	- O X
Accueil	Affichage	(P)
Couper	Courier New y 11 y Afric Hill Hand Hand Hand Hand Hand Hand Hand Hand	
Copier		
Coller	G I S abe ×₂ x² Z · A · = = = = = = mage Dessin Date et Insérer · Paint heure un obiet □ Sélectionner tout	
Presse-papiers	Police Paragraphe Insertion Édition	
	· X · · · 1 · · · · 2 · · · 3 · · · 4 · · · 5 · · · 6 · · · 7 · · · 8 · · · 9 · · · 10 · · · 11 · · · 12 · · · 13 · · · 14 · · · 15 · · · 16 · · · 17 · · · 18 · · · 19 · · · 20 · ·	
	<pre>#!/bin/bash # # In this script one comment before SBATCH is for enable option # # two comment before SBATCH is for disable option SEEDNAME=neutron_F3_32e_P1_conf1_NMR_optimise # Uncomment the line below to run NMR calculations # Other types of calculations can be run with the same syntax, # changing "_NMR" to "_DOS" for exemaple SEEDNAME2=\$SEEDNAME\_NMR #****** OPTIONS TO CHANGE IN PRIORITY ****** # op to gravedef(_default); uplimited</pre>	E
	<pre># -p : queue - defg (default): unlimited # - express (15 min &amp; 4 nodes max) # -n : processors (20 per node in defq and express) # -N : nodes # -t : walltime (format h:mm:ss): default is 12h #mem=<memory in="" megabytes=""> : 64 GB per node (3.2 GB per core) on defq #mem-per-cpu=2048M :3.2 GB per CPU on defq #exclusive : Job allocation can not share nodes with other running jobs</memory></pre>	
	<pre>#SBATCH -p defq #SBATCH -n 20 #SBATCH -N 1 #SBATCH -t 120:00:00 ##SBATCHmem=256000 ##SBATCHmem-per-cpu=2048M ##SBATCHexclusive</pre>	
	<pre>#****** OTHER (LESS-IMPORTANT OPTIONS TO CHANGE OPTIONALLY ******* # -J : job name #mail-type=ALL : Send mail: valid types are BEGIN, END, FAIL, REQUEUE, and ALL #mail-user=user@cnrs-orleans.fr #output slurm-%j.txt : Write stdout output, %j is replaced with the job number #error slurm-%j.txt : Write stderr output, %j is replaced with the job number # use same path name to write everything to one file #workdir=<directory> : Set the working directory of the batch script to directory before it is executed #exclusive</directory></pre>	
	100 % (-) -	