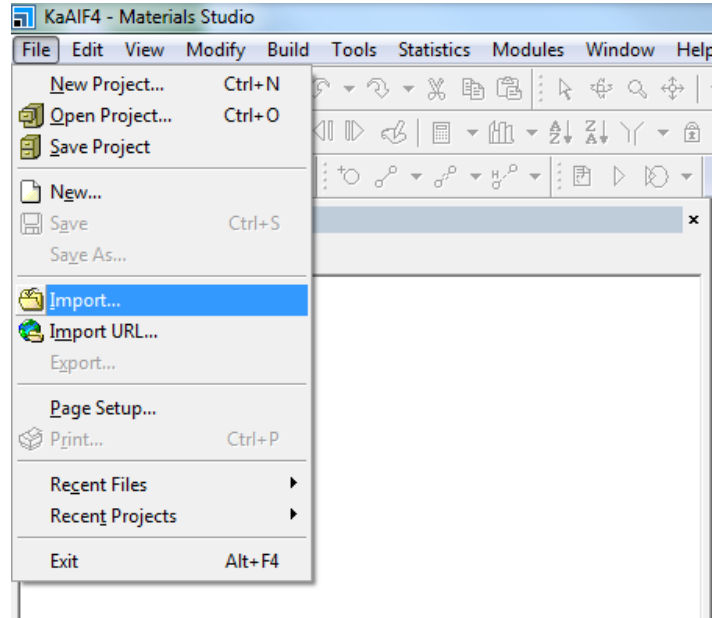
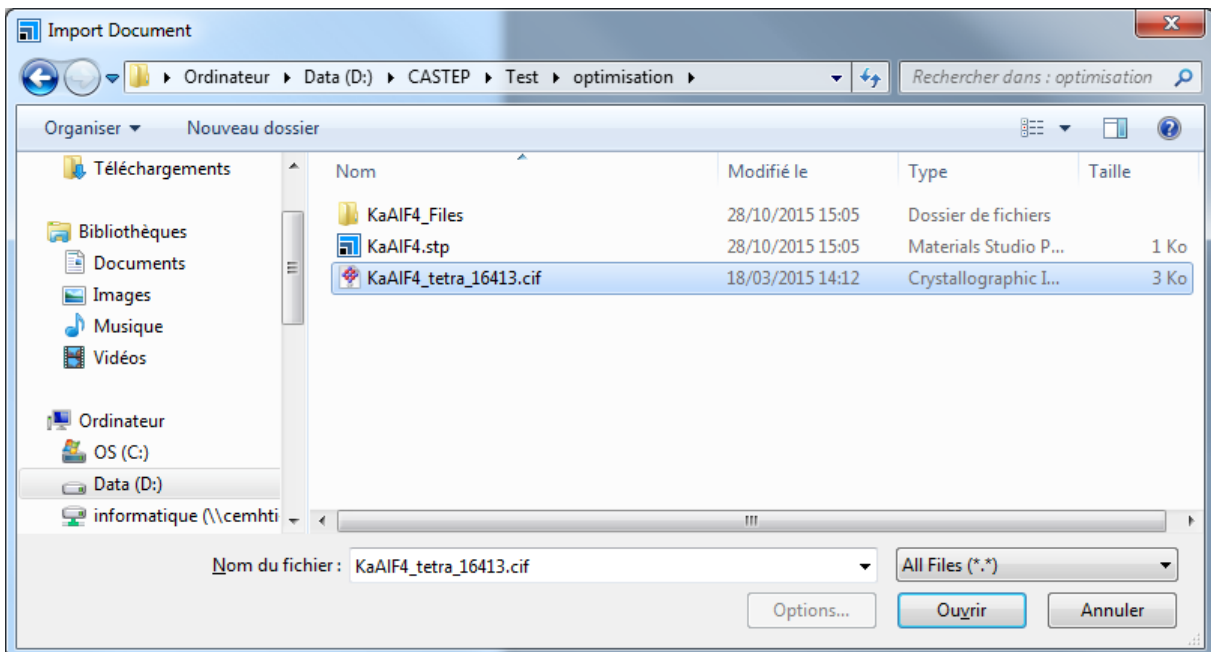


Lancement de calcul sous CASTEP avec l'interface accelrys

Cliquer sur « File » puis « Import » :

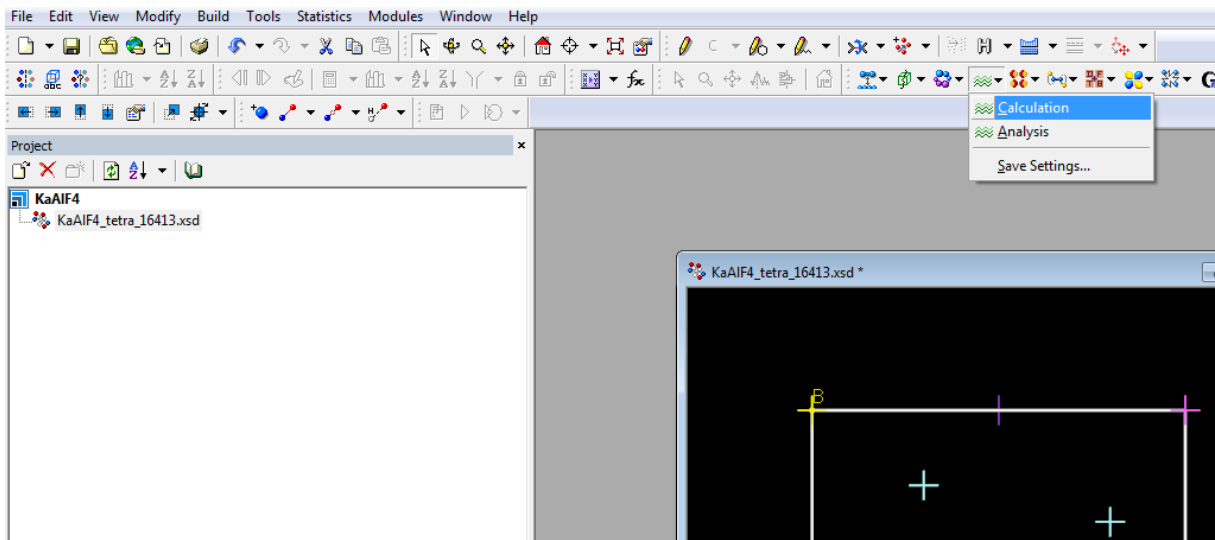


puis choisir le fichier xx.cif à ouvrir :

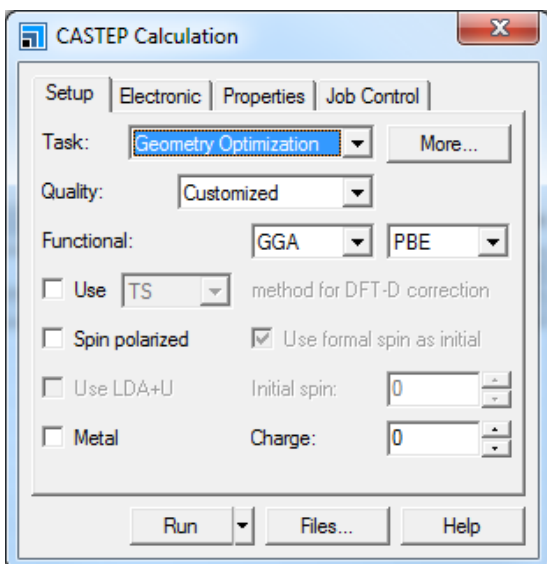


Le fichier xx.xsd est automatiquement généré (dans l'exemple ci-dessus, KaAlF4_tetra_16413.xsd).

Il faut ensuite cliquer sur « Calcul » :



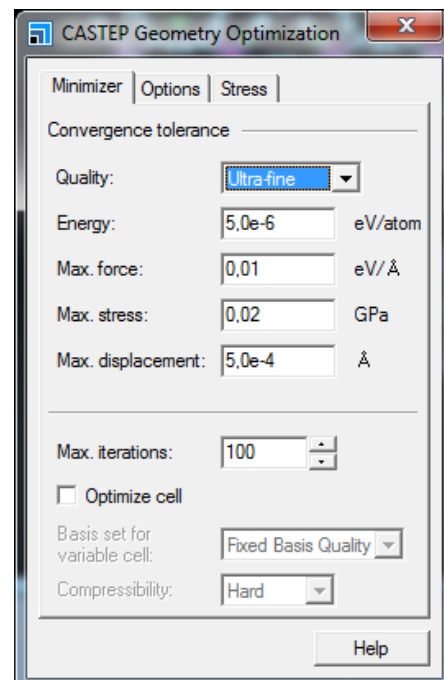
et choisir le type de calcul souhaité (dans notre exemple, une optimisation géométrique) ainsi que les fonctionnelles :



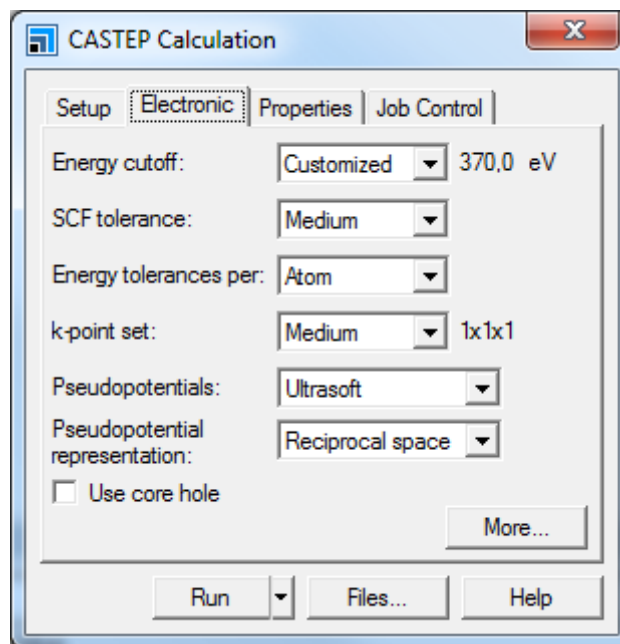
Cliquer ensuite sur « More »



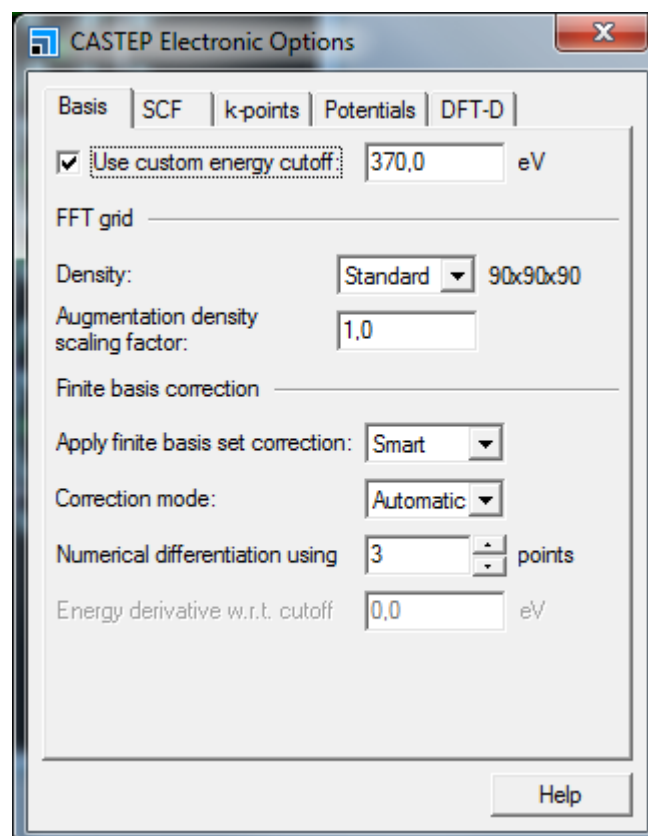
La fenêtre qui s'ouvre permet de choisir les paramètres du déplacement ionique pour le calcul d'optimisation ionique



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

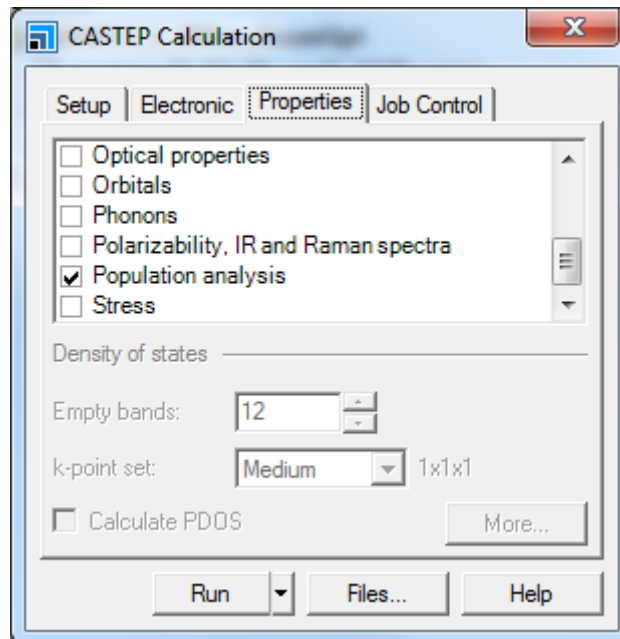


et cliquer sur « more » afin de fixer une énergie de cutoff, un maillage dans la zone de Brillouin, etc :

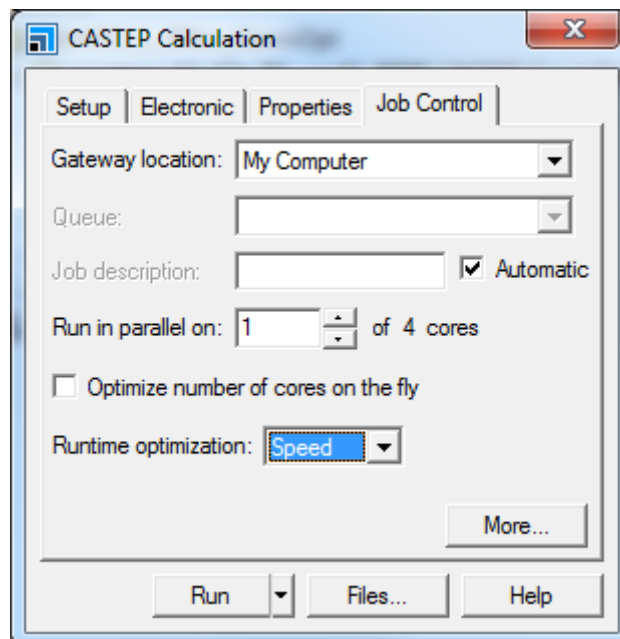


L'onglet « Properties » de la fenêtre « CASTEP CALCULATION » permet de spécifier ce que nous souhaitons récupérer dans le fichier de sortie :

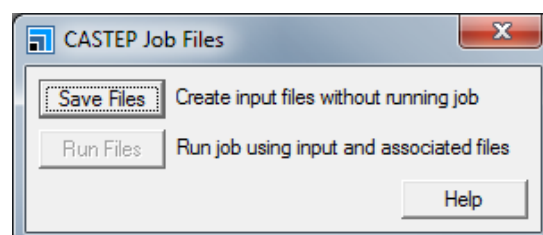
Dans l'exemple ci-dessous, « Population analysis » est choisie ce qui signifie que nous souhaitons récupérer le résultat de l'optimisation ionique dans les fichiers de sortie :



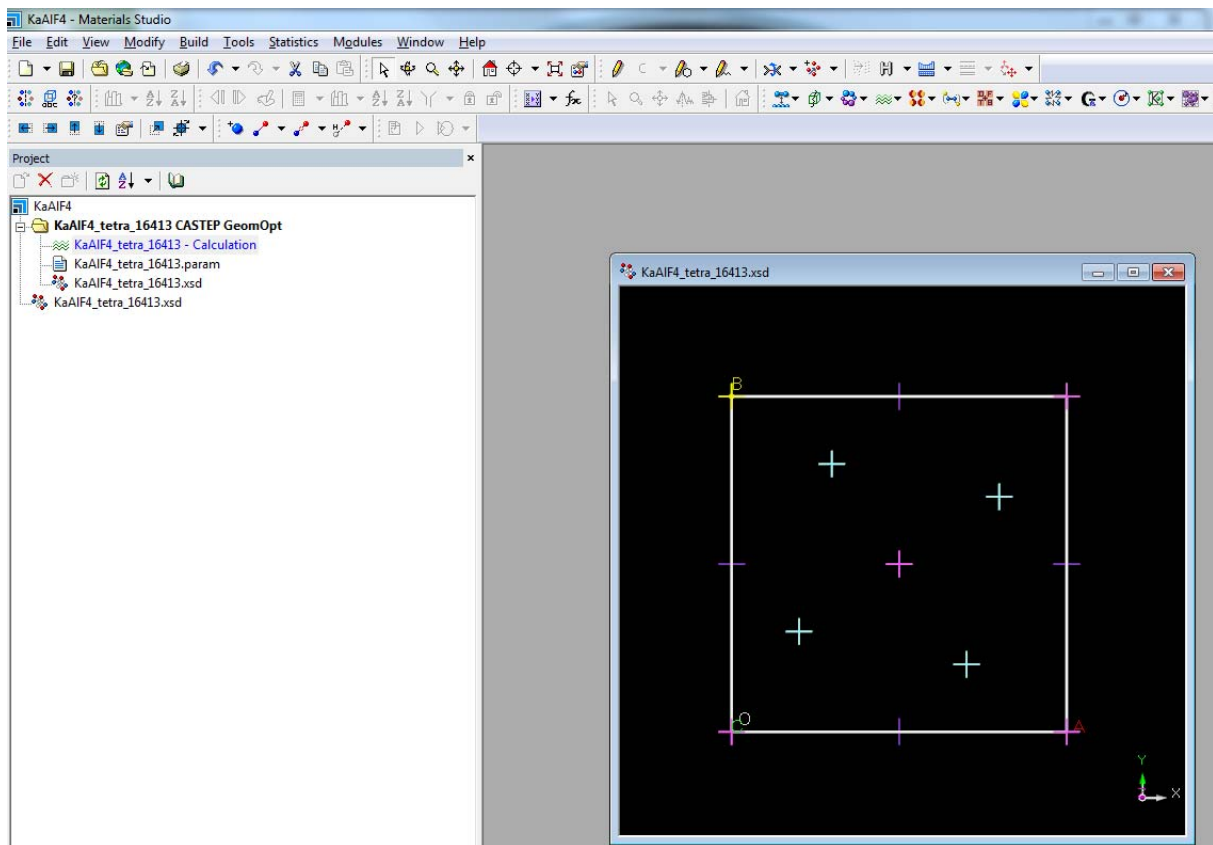
L'onglet « Job Control » de la fenêtre « CASTEP CALCULATION » permet de spécifier ce que l'on souhaite favoriser : vitesse, mémoire, ... (plutôt choisir Speed)



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

*.triaux

*.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

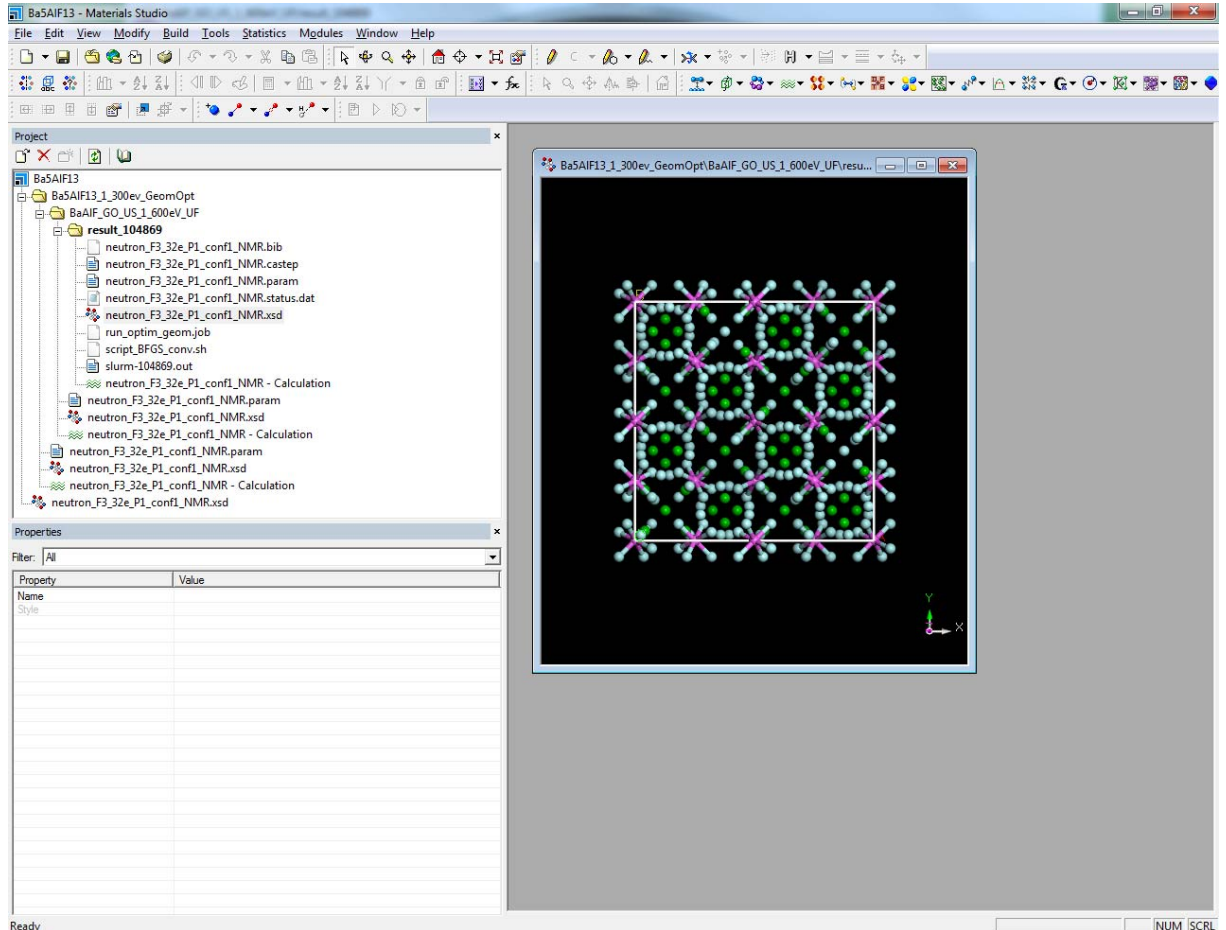
1° : Sur Artemis

- 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,...)

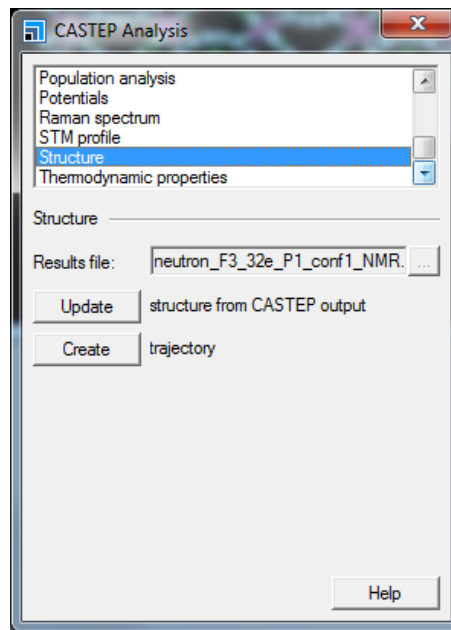
2° : Rapatriement de result_jobid sur votre PC dans le répertoire contenant le projet (D:\CASTEP\Ba5AIF13_Files\Documents\Ba5AIF13_1_300ev_GeomOpt\BaAIF_GO_US_1_600eV_UF par exemple)

3° : Sous Material Studio

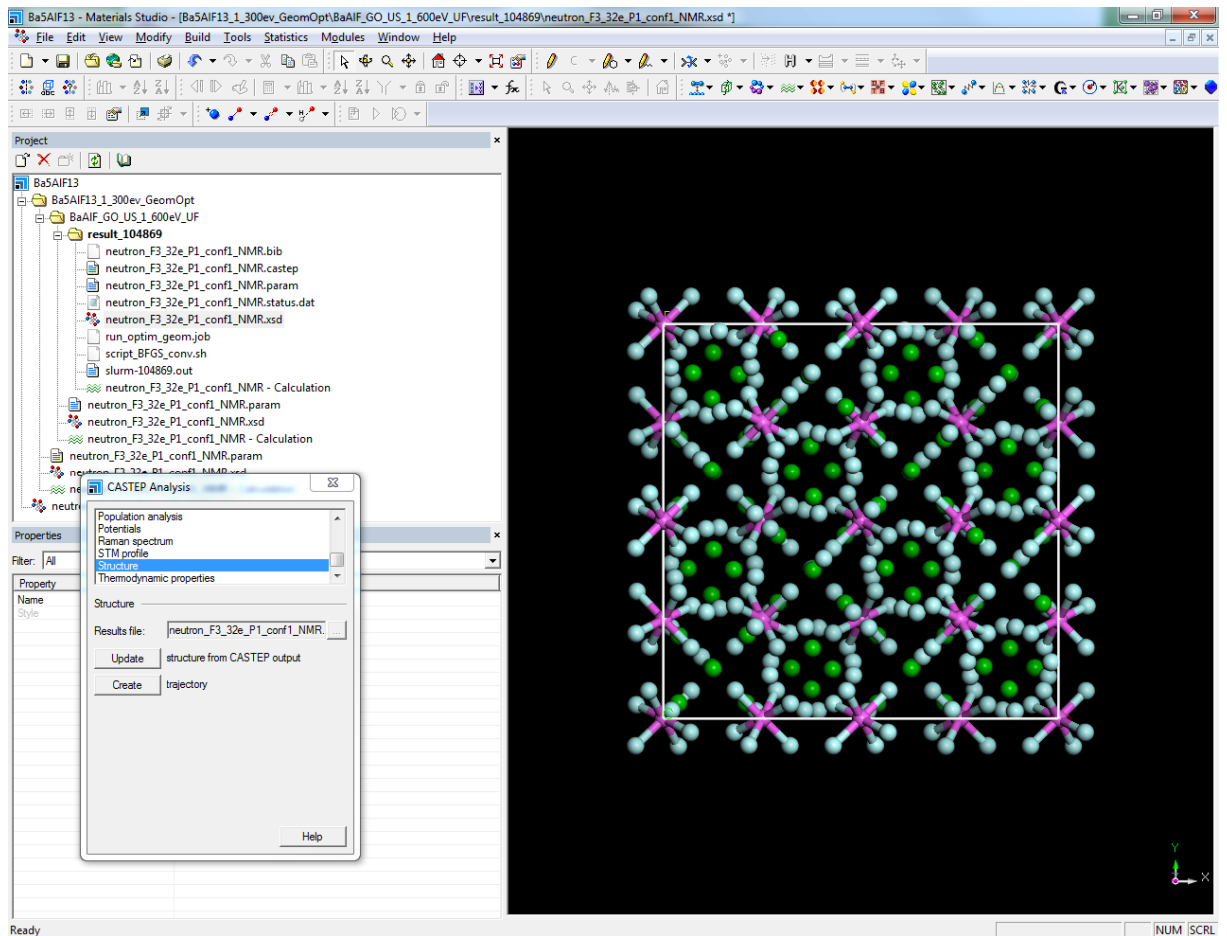
- ouvrir le fichier *.xsd contenu dans result_jobid



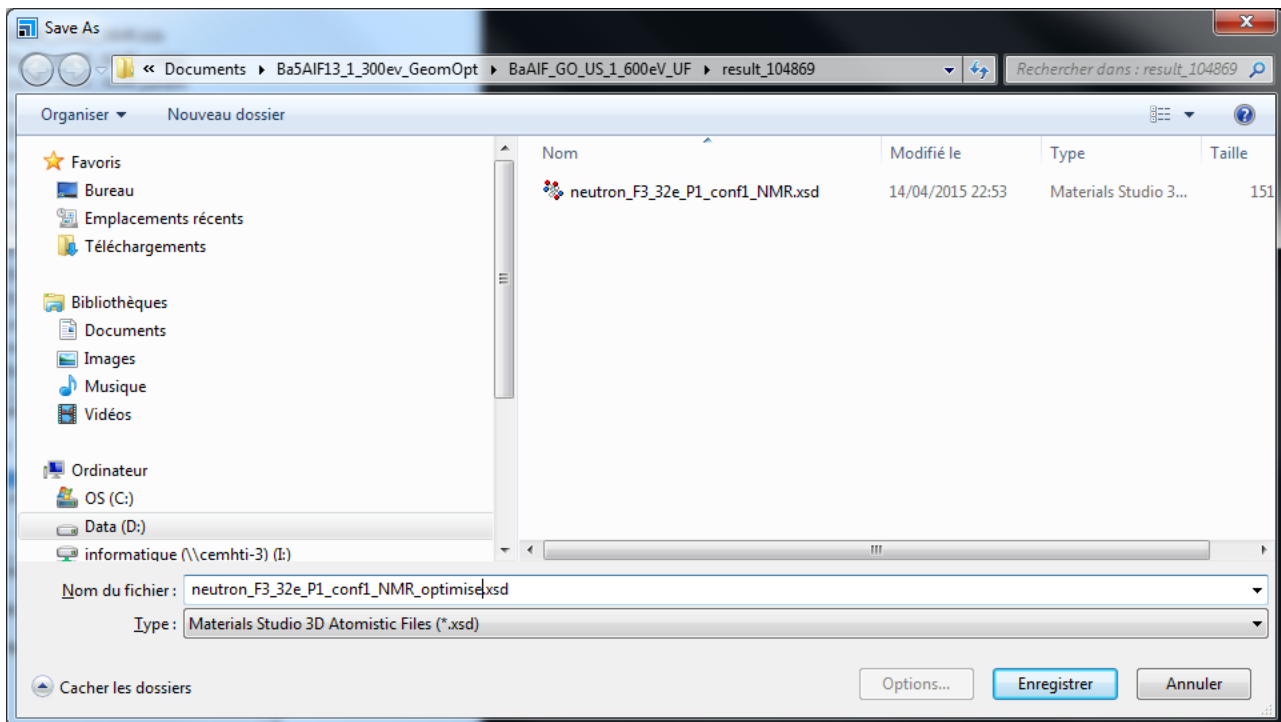
- cliquer sur les vagues et choisir analysis puis choisir Structure :



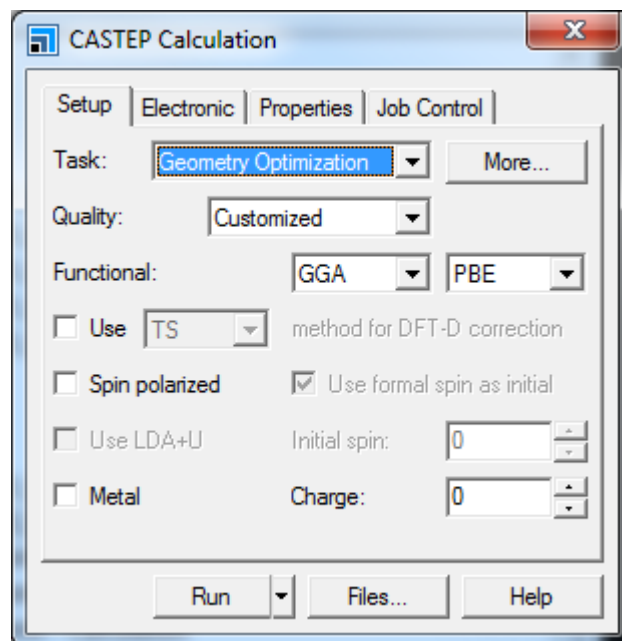
- Cliquer sur update pour charger la structure optimisée



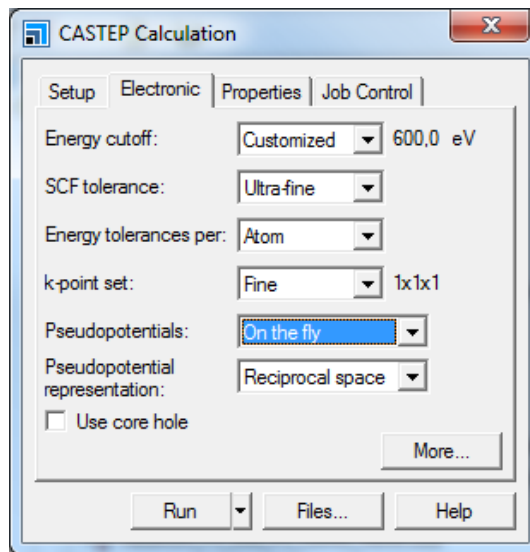
puis sauvegarder cette nouvelle structure en tant que nouveau fichier de position en entrée de calcul.



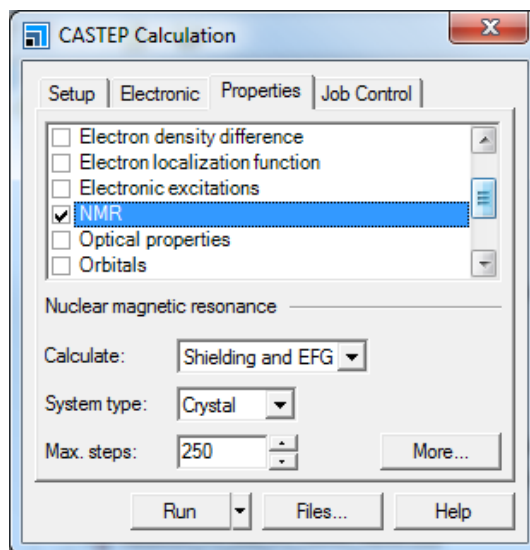
Pour relancer le calcul à partir de la structure optimisée, cliquer sur les vagues après avoir chargé le fichier xsd correspondant à la structure optimisée et choisir calcul



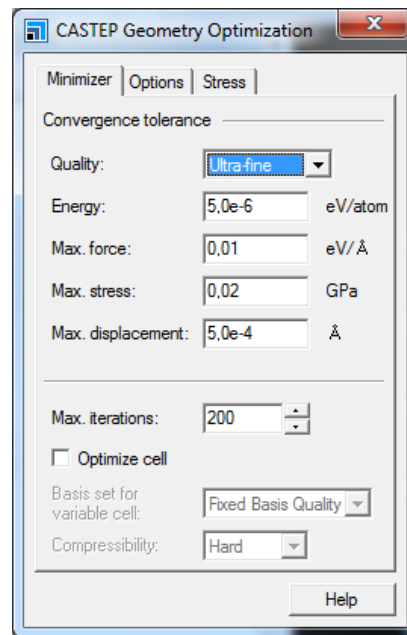
Les paramètres à choisir dans l'onglet Electronic



Onglet Properties



Fenêtre optimisation ionique



Pour lancer un calcul de RMN, il faut modifier le fichier run_optim_geom.job (le script) :

```
#!/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 exemple

SEEDNAME2=${SEEDNAME}\_NMR

#***** OPTIONS TO CHANGE IN PRIORITY *****
# -p : queue - defq (default): unlimited
# - express (15 min & 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

#SBATCH -p defq
#SBATCH -n 20
#SBATCH -N 1
#SBATCH -t 120:00:00
##SBATCH --mem=256000
##SBATCH --mem-per-cpu=2048M
##SBATCH --exclusive

#***** 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
```