**run.pl**

林子越

1. 首先用ca -m -de xxx列出所需的结构，将所选结构.res（.param）拷贝入文件夹内；

把airss结构搜寻到的res文件拷到另外一个新的文件夹下test

将airss结构搜索的初始.cell，.param文件一同拷入

只把配比最稳定的列出然后拷贝入tmp文件夹

ca -f \*\*\* -r -t|awk '{print $1".res"}' |xargs cp -t tmp/

下面是其他方法可跳过

ca -m -de 0.05 --delete 列出离凸包图0.05的点，并删掉其余.res文件

1、把airss结构搜寻到的res文件拷到另外一个新的文件夹下test

2、然后输入ca -m -de 0.04 -r --delete，删除单个原子能量差大于0.04eV的res文件，0,04这个值要根据实际情况变化

3、把结构搜索的cell和param文件拷的这个新文件夹里test，把cell的K点提高，加上压力，param文件的截断能提高

Param文件加入一条：WRITE\_CIF\_STRUCTURE : true

就可以不用Vesta再转一遍

直接把cif扔到MS加对称性得到cell并得到高对称点

4、用命令run.pl -mpinp 8 -keep就可以连续计算文件夹test的所有结构

5、比较这几个结构的焓值，最低的焓值是最稳定的结构

先建立tmp文件夹

ca -m -de 0.05 |awk '{print $1".res"}' |xargs cp -t tmp/

找某个配比的前十个稳定结构然后拷贝入tmp文件夹

ca –m | sort –n –k 6 –k 5

1. 提高初始.cell文件内的K点密度，例：如果是0.07则提高精度为0.03

并在最后给出压力点；提高初始.param文件中的截断能

1. 准备脚本runpl.pbs

#!/bin/bash

#PBS -q CT1

#PBS -l nodes=1:ppn=12

#PBS -j oe

#PBS -V

#PBS -N run.pl

cd $PBS\_O\_WORKDIR

run.pl -mpinp 12

1. 提交.
2. 运行后会得到新的结构，在每个结构的.res里面可以看到k点网格和优化计算截断能；jobs.txt里可以看到已经优化的结构

*Notes:*

有些服务器上优化出来的结构会有空行，导致ca -m、ca -s 显示不正常，

输入以下命令sed -i '/^$/d' \*.res

ca -m -1 A -2 B | sort -n -k 6 -k 5 以A和B为参考线画凸包图