1. **创建合适的Cell 文件**

1）设置 **Hubbard U**，找Cell文件里的这部分：

%BLOCK HUBBARD\_U

Fe 1 d: 0.500000000000000

%ENDBLOCK HUBBARD\_U

2) 设置U 为0，如下：

%BLOCK HUBBARD\_U

Fe 1 d: 0.000000010000000

%ENDBLOCK HUBBARD\_U

3）需要在cell文件里面加上一组HUBBARD\_ALPHA U的设置，格式如下：

这里的U值设定 U = 0/2/4/6/8，需要步长可控，也可以改为步长为1

微扰前:

例子如下：

%BLOCK HUBBARD\_ALPHA

Fe 1 d: 0.000000000100000

%ENDBLOCK HUBBARD\_ALPHA

%BLOCK HUBBARD\_ALPHA

Fe 1 d: 2.000000000100000

%ENDBLOCK HUBBARD\_ALPHA

1. **Param File 设置**

微扰前：

1. 现有Param File里面加

task : SinglePoint

! continuation : default

iprint=3

elec\_energy\_tol : 1e-5

cut\_off\_energy 按照ultrafine来设置

grid\_scale : 1.750000000000000

去掉fine\_grid\_scale

**生成：spin-polarized和LDA+U必须打开来生成param file的参数**

微扰后：

Param File里面修改：

1. 去掉“! continuation : default”的感叹号!
2. Param File里面elec\_energy\_tol 除以10，改为1e-6

Cell 文件HUBBARD\_ALPHA U 的值需要加0.05, 如下：

微扰后：(每次+0.05)，例子如下：

%BLOCK HUBBARD\_ALPHA

Fe 1 d: 0.050000000100000

%ENDBLOCK HUBBARD\_ALPHA

%BLOCK HUBBARD\_ALPHA

Fe 1 d: 2.050000000100000

%ENDBLOCK HUBBARD\_ALPHA

**一切param file里的参数要按照MS生成的来做，empty band里面要72个**

3. 判定微扰前计算完成，并开启加入微扰后的计算。

1）CASTEP文件出现Finalisation Time后，判定为计算完成结束

2）执行复制文件夹的操作

3）修改复制后文件夹里Cell与Param 文件参数，加入微扰

4）删除之前生成的CASTEP文件

4）开始执行加入微扰后的计算

5）CASTEP文件出现Finalisation Time后，判定为计算完成结束