1. **Cell 文件的修改**

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 = 0/2/4/6/8 ，需要在小数点第七位加1，步长可控，也可以改为U值间隔为1。这组U值在微扰前后不需要修改，保持不变。

请参考以下例子：

如果U = 0

%BLOCK HUBBARD\_U

Fe 1 d: 0.000000010000000

%ENDBLOCK HUBBARD\_U

如果U = 2

%BLOCK HUBBARD\_U

Fe 1 d: 2.000000010000000

%ENDBLOCK HUBBARD\_U

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

微扰前：

%BLOCK HUBBARD\_ALPHA

Fe 1 d: 0.000000000100000

%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：(最好做到步长可控，例如每一次微扰增加+0.05)，目前先完成一次微扰的

%BLOCK HUBBARD\_ALPHA

Fe 1 d: 0.050000000100000

%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

情况一：

1. 批量提交微扰前的5个计算文件夹(U = 0, 2,4,6,8)
2. 全部判定为计算完成后，开始复制出新的5个计算文件夹
3. 修改新的5个文件夹中Cell与Param 文件参数，加入微扰
4. 批量提交加入微扰后的5个计算文件夹
5. 全部判定为计算完成后，开始读取关键参数

情况二：

1. 批量提交微扰前的5个计算文件夹(U = 0, 2,4,6,8)
2. 只要有计算判定为计算完成后，就开始复制出新的计算文件夹
3. 修改新的文件夹中Cell与Param 文件参数，加入微扰
4. 判定全部5个新的文件夹都已经生成修改之后，开始提交批量计算
5. 全部判定为计算完成后，开始读取关键参数