

# Plan général

## Création de la géométrie initiale du quantum dot (étape manuelle)

Programme GOSAM

Programme Avogadro

1 – Launcher ORCA

## Optimisation de la géométrie initiale du quantum dot

Méthode DFT B3LYP / def2-TZVP

Programme ORCA

Serveur dragon1 (UMONS)

Serveur dragon2 (UMONS)

2 – Launcher Q-CHEM

## Détermination des énergies d'excitation électronique, des éléments de couplage spin-orbite et des moments dipolaires de transition

Méthode TD-DFT B3LYP / def2-TZVP

Programme Q-CHEM

Serveur HYDRA (ULB)

3 – Launcher contrôle

## Contrôle optimal : conception d'une impulsion laser visant à peupler un état électronique dark du quantum dot

Algorithmes open-source

Serveur VEGA (ULB)

4 - Traitement des résultats

# 1 – Launcher ORCA

Clusters : [dragon1@umons.ac.be](mailto:dragon1@umons.ac.be) ou [dragon2@umons.ac.be](mailto:dragon2@umons.ac.be)

Le launcher peut être stocké dans le CECIHOME (commun à tous les clusters)

<https://support.cec-hpc.be/doc/contents/ManagingFiles/TheCommonFilesystem.html>

Scan le dossier *INITIAL* dans le CECIHOME à la recherche de fichiers de type *nom\_molecule.xyz* (géométrie initiale)

Crée sur le cluster un dossier *nom\_molecule* et y déplace le fichier .xyz

## Calcul du *bigindex* (temporaire)

Déterminer le nombre d'atomes de la molécule (1<sup>ère</sup> ligne fichier .xyz)

Calculer le nombre d'atomes H (nombre d'occurrences de H dans le fichier .xyz)

$bigindex = \text{nombre d'atomes} - (\frac{3}{4} \times \text{nombre H})$

Taille molécule : Petite < 50 ≤ Moyenne ≤ 100 < Grande

## Création du fichier *job.pbs*

- Contient les instructions pour le job scheduler
- Dépend du cluster sur lequel tournera le job (path vers ORCA)
- Déterminer le nombre de cœurs et la durée du calcul via *bigindex*
  - Petite : 10 jours, 8 cœurs
  - Moyenne : 20 jours, 16 cœurs
  - Grande : 30 jours, 32 cœurs
- Voir exemple diapos suivantes

## Création du fichier *nom\_molecule.inp*

- Input pour ORCA
- Basé sur le fichier .xyz (conserver et renommer l'original)
- Ne dépend pas du cluster
- Renseigner le nombre de cœurs utilisables pour le job
- Voir exemple diapos suivantes

Lancement du job ORCA

TO DO (?) : Déterminer la multiplicité

si17h36.xyz

si17h36.inp

A renommer

Nombre d'atomes

53

generated by gosam

```
Si -2.715000 -2.715000 0.000000
Si -1.358000 -1.358000 1.358000
Si -2.715000 -0.000000 -2.715000
Si -1.358000 1.358000 -1.358000
Si -2.715000 2.715000 0.000000
Si -2.715000 0.000000 2.715000
Si -0.000000 -2.715000 -2.715000
Si 1.358000 -1.358000 -1.358000
Si 2.715000 -2.715000 0.000000
Si 0.000000 -2.715000 2.715000
Si 0.000000 2.715000 -2.715000
Si 2.715000 -0.000000 -2.715000
Si 0.000000 0.000000 0.000000
Si 2.715000 2.715000 0.000000
Si 0.000000 2.715000 2.715000
Si 2.715000 0.000000 2.715000
Si 1.358000 1.358000 1.358000
H -2.080000 -3.350000 -0.635000
H -3.350000 -3.350000 0.635000
H -3.350000 -2.080000 -0.635000
H -2.080000 -0.635000 -3.350000
H -3.350000 -0.635000 -2.080000
H -3.350000 0.635000 -3.350000
H -2.080000 3.350000 0.635000
H -3.350000 3.350000 -0.635000
H -3.350000 2.080000 0.635000
H -2.080000 0.635000 3.350000
H -3.350000 0.635000 2.080000
H -3.350000 -0.635000 3.350000
H -0.635000 -2.080000 -3.350000
H 0.635000 -3.350000 -3.350000
H -0.635000 -3.350000 -2.080000
H 3.350000 -2.080000 0.635000
H 2.080000 -3.350000 0.635000
H 3.350000 -3.350000 -0.635000
H 0.635000 -2.080000 3.350000
H -0.635000 -3.350000 3.350000
H 0.635000 -3.350000 2.080000
H 0.635000 3.350000 -2.080000
H 0.635000 2.080000 -3.350000
H -0.635000 3.350000 -3.350000
H 3.350000 0.635000 -2.080000
H 3.350000 -0.635000 -3.350000
H 2.080000 0.635000 -3.350000
H 3.350000 3.350000 0.635000
H 3.350000 2.080000 -0.635000
H 2.080000 3.350000 -0.635000
H 0.635000 3.350000 3.350000
H -0.635000 3.350000 2.080000
H -0.635000 2.080000 3.350000
H 3.350000 0.635000 3.350000
H 2.080000 -0.635000 3.350000
H 3.350000 -0.635000 2.080000
```

Nombre de coeurs

! B3LYP def2-TZVP def2/J RIJCOSX Opt xyzfile  
%pal nprocs 8

```
end
* xyz 0 1
Si -2.715000 -2.715000 0.000000
Si -1.358000 -1.358000 1.358000
Si -2.715000 -0.000000 -2.715000
Si -1.358000 1.358000 -1.358000
Si -2.715000 2.715000 0.000000
Si -2.715000 0.000000 2.715000
Si -0.000000 -2.715000 -2.715000
Si 1.358000 -1.358000 -1.358000
Si 2.715000 -2.715000 0.000000
Si 0.000000 -2.715000 2.715000
Si 0.000000 2.715000 -2.715000
Si 2.715000 -0.000000 -2.715000
Si 0.000000 0.000000 0.000000
Si 2.715000 2.715000 0.000000
Si 0.000000 2.715000 2.715000
Si 2.715000 0.000000 2.715000
Si 1.358000 1.358000 1.358000
H -2.080000 -3.350000 -0.635000
H -3.350000 -3.350000 0.635000
H -3.350000 -2.080000 -0.635000
H -2.080000 -0.635000 -3.350000
H -3.350000 -0.635000 -2.080000
H -3.350000 0.635000 -3.350000
H -2.080000 3.350000 0.635000
H -3.350000 3.350000 -0.635000
H -3.350000 2.080000 0.635000
H -2.080000 0.635000 3.350000
H -3.350000 0.635000 2.080000
H -3.350000 -0.635000 3.350000
H -0.635000 -2.080000 -3.350000
H 0.635000 -3.350000 -3.350000
H -0.635000 -3.350000 -2.080000
H 3.350000 -2.080000 0.635000
H 2.080000 -3.350000 0.635000
H 3.350000 -3.350000 -0.635000
H 0.635000 -2.080000 3.350000
H -0.635000 -3.350000 3.350000
H 0.635000 -3.350000 2.080000
H 0.635000 3.350000 -2.080000
H 0.635000 2.080000 -3.350000
H -0.635000 3.350000 -3.350000
H 3.350000 0.635000 -2.080000
H 3.350000 -0.635000 -3.350000
H 2.080000 0.635000 -3.350000
H 3.350000 3.350000 0.635000
H 3.350000 2.080000 -0.635000
H 2.080000 3.350000 -0.635000
H 0.635000 3.350000 3.350000
H -0.635000 3.350000 2.080000
H -0.635000 2.080000 3.350000
H 3.350000 0.635000 3.350000
H 2.080000 -0.635000 3.350000
H 3.350000 -0.635000 2.080000
*
```

Nombre de H (pas toujours en un bloc)

```
#!/bin/bash
```

```
#SBATCH --job-name=si17h36
```

 ← *nom\_molecule*

```
#SBATCH --mail-user=niacobel@ulb.ac.be
```

```
#SBATCH --mail-type=ALL
```

```
#SBATCH --output=output.log
```

```
#SBATCH -e error.log
```

```
#SBATCH --partition=long
```

```
#SBATCH --time=10-00:00:00
```

 ← *Durée*

```
#SBATCH --ntasks=8
```

 ← *Nombre de coeurs*

## *module\_load*

```
WORKDIR=/scratch/$SLURM_JOB_ID
```

```
mkdir $WORKDIR
```

```
export SCRDIR=$WORKDIR
```

```
cd $SLURM_SUBMIT_DIR
```

```
cp ${SLURM_JOB_NAME}.inp $SCRDIR
```

```
cd $SCRDIR
```

```
path ${SLURM_JOB_NAME}.inp > $SLURM_SUBMIT_DIR/${SLURM_JOB_NAME}.out
```

```
cp $SCRDIR/* $SLURM_SUBMIT_DIR
```

```
rm -rf $SCRDIR
```

## TO DO :

- Vérifier que le calcul s'est bien déroulé (contrôler fichier *nom\_molecule.out*)
- Exporter vers le dossier ORCA du CECIHOME, dans un dossier *nom\_molecule* :
  - le fichier *nom\_molecule.xyz* original
  - le nouveau fichier *nom\_molecule.xyz* fourni par ORCA
  - le fichier *nom\_molecule.out* issu du job ORCA (à renommer pour éviter la confusion avec le fichier de Q-CHEM)

[dragon1@umons.ac.be](mailto:dragon1@umons.ac.be)

*module\_load* = module load orca/4.0.1.2

*path* = /usr/local/orca/orca\_4\_0\_1\_2\_linux\_x86-64\_openmpi202/orca

[dragon2@umons.ac.be](mailto:dragon2@umons.ac.be)

*module\_load* = module load ORCA/4.0.1-OpenMPI-2.0.2

*path* = /opt/cecisw/arch/easybuild/2018b/software/ORCA/4.0.1-OpenMPI-2.0.2/orca

## 2 – Launcher Q-CHEM

Clusters : [vega@ulb.ac.be](mailto:vega@ulb.ac.be) puis [hydra@ulb.ac.be](mailto:hydra@ulb.ac.be)

[vega@ulb.ac.be](mailto:vega@ulb.ac.be)

Détecter la présence du dossier *nom\_molecule* dans le dossier ORCA du CECIHOME (CRONTAB ?)

Rapatrie le dossier sur le cluster dans le dossier *backup*

Envoie le fichier .xyz fourni par ORCA sur le cluster [hydra@ulb.ac.be](mailto:hydra@ulb.ac.be)

Exécute le launcher QCHEM sur le cluster [hydra@ulb.ac.be](mailto:hydra@ulb.ac.be)



### Création du fichier *job.pbs*

- Contient les instructions pour le job scheduler
- Déterminer le nombre de cœurs (et la mémoire ?) via *bigindex*
  - Petite : 8 cœurs
  - Moyenne : 16 cœurs
  - Grande : 32 cœurs
- Voir exemple diapos suivantes
- Note : deux possibilités : MPI ou multithread, le meilleur reste à déterminer



### Création du fichier *nom\_molecule.in*

- Input pour Q-CHEM
- Basé sur le fichier .xyz fourni par ORCA
- Voir exemple diapos suivantes



### Lancement du job Q-CHEM

TO DO (?) : Split job pour les plus grosses molécules

si17h36.xyz

si17h36.in

Fourni par ORCA

Nombre d'atomes

53

Coordinates from ORCA-job si17h36

```

Si -3.22541988490863 -2.36518869816157 0.26110467437661
Si -1.38693207899072 -1.38227308325625 1.37965453317913
Si -2.37175217165820 0.27616777099927 -3.21944528385479
Si -1.37988465990324 1.38696841790779 -1.38058598599964
Si -3.21347234134992 2.38017005778453 -0.26275377343287
Si -2.37184815958123 -0.26505240379169 3.21811363421243
Si 0.25995883129836 -3.21456684763183 -2.37753283472080
Si 1.37983708192913 -1.38238835339761 -1.38394950693962
Si 3.21430231919559 -2.38034179525241 -0.27138520982889
Si -0.27456363719240 -3.22318040864006 2.36535093437363
Si -0.25831614217415 3.22241347761960 -2.36607047387938
Si 2.37103409854994 -0.26496120014003 -3.21881339573160
Si -0.00075589704777 -0.00019665320599 0.00069703883571
Si 3.22192457305030 2.36469428880175 0.27114754088747
Si 0.27187891998775 3.21481115023008 2.38093332956574
Si 2.37402042346338 0.25608160395838 3.21909007519675
Si 1.38327823395717 1.37789180197072 1.38634793445711
H 2.81304235666262 -3.11029455609337 -0.95159102485279
H -3.85694071847842 -3.32091152428435 1.20670142414474
H -4.23825609389247 -1.35447276346113 -0.12538716657822
H -1.36494346885665 -0.11056479308854 -4.23621363472776
H -3.11950250966442 -0.93540177600546 -2.80854598338888
H -3.32598021980964 1.22684658199449 -3.84560578882972
H -2.79666103134991 3.12569660121040 0.94822733688891
H -3.84111801021519 3.33718938350552 -1.20959766095853
H -4.23088313389568 1.37511722215285 0.12651933798345
H -1.36102372861398 0.11411655607515 4.23370441621727
H -3.11165990571842 0.95178206820032 2.80853119669625
H -3.33253981623748 -1.20870662707112 3.84503435586565
H -0.95463687588777 -2.79986556259499 -3.11844264105715
H 1.20454000437386 -3.83975225496676 -3.33846541600969
H -0.12377704811917 -4.23332737780247 -1.37175902671791
H 4.23475102662681 -1.37676425682795 0.11365759517856
H 2.80132687496334 -3.12528607532287 0.94118287886444
H 3.83671254386340 -3.33833396104696 -1.22078892976681
H 0.93985342639365 -2.81454903916614 3.10976889124965
H -1.22235384784098 -3.85026510991224 3.32190852574854
H 0.10802547381450 -4.23836241798384 1.35561044777347
H 0.12856561976561 4.23557624179016 -1.35582004494003
H 0.95453752918474 2.80862943120548 -3.11036011043144
H -1.20273803568579 3.85410714215148 -3.32283432654941
H 3.11603158036243 0.94748955486328 -2.80578338924299
H 3.32772713791738 -1.21276204680625 -3.84564931339414
H 1.36399751435117 0.12145596275615 -4.23534847914355
H 3.84940998883766 3.32321337354942 1.21665117765369
H 4.23634169602775 1.35302617858319 -0.10867719148476
H 2.81402406281567 3.10643498959847 -0.94498672001279
H 1.22177474013701 3.83565407065407 3.33947174521752
H -0.10973459891651 4.23550165742999 1.37626763623154
H -0.94255423185594 2.80473084080622 3.12450312653335
H 3.33379638113423 1.19973721794448 3.84738967892241
H 1.36764952239100 -0.13057819543746 4.23625860577050
H 3.11599100011544 -0.95715586239395 2.80256524044961

```

\$molecule

0 1

*Copier ici le contenu du fichier .xyz  
(pas les deux premières lignes)*

\$send

\$rem

```

JOBTYP      sp
EXCHANGE    b3lyp
BASIS       def2-tzvp
CIS_N_ROOTS 4
CIS_CONVERGENCE 8
CORRELATION none
MAX_SCF_CYCLES 600
MAX_CIS_CYCLES 50
SCF_ALGORITHM diis_gdm
SYMMETRY     false
SYM_IGNORE   true
UNRESTRICTED false
CIS_SINGLETs true
CIS_TRIPLETs true
CALC_SOC     true
SET_ITER     300
STS_MOM      true

```

\$send

Nombre de H (pas toujours en un bloc)

# job.pbs

## Version multithread

```
#!/bin/bash -l
```

```
#PBS -l nodes=1:ppn=8
```

Nombre de coeurs

```
#PBS -l walltime=120:00:00
```

```
#PBS -N si17h36
```

*nom\_molecule*

```
#PBS -o output
```

```
#PBS -e error
```

```
#PBS -m bae
```

```
#PBS -M niacobel@ulb.ac.be
```

```
module load Q-Chem/5.2.1-intel-2019a-mpich3
```

```
ulimit -s unlimited
```

```
cd $PBS_O_WORKDIR
```

```
input="${PBS_JOBNAME}.in"
```

```
output="${PBS_JOBNAME}.out"
```

```
qchem -nt 8 $input $output
```

Nombre de coeurs

### TO DO :

- Vérifier que le calcul s'est bien déroulé (contrôler fichier *nom\_molecule.out*)
- Exporter vers le dossier *backup* sur [vega@ulb.ac.be](mailto:vega@ulb.ac.be), dans le dossier *nom\_molecule*, le fichier *nom\_molecule.out* issu du job Q-CHEM (à renommer pour éviter la confusion avec le fichier d'ORCA)
- Exécuter sur [vega@ulb.ac.be](mailto:vega@ulb.ac.be) le launcher contrôle

# job.pbs

Version MPI

```
#!/bin/bash -l
```

```
#PBS -l nodes=2:ppn=4
```

Nombre de coeurs

```
#PBS -l walltime=120:00:00
```

```
#PBS -N si17h36
```

*nom\_molecule*

```
#PBS -o output
```

```
#PBS -e error
```

```
#PBS -m bae
```

```
#PBS -M niacobel@ulb.ac.be
```

```
module load Q-Chem/5.2.1-intel-2019a-mpich3
```

```
ulimit -s unlimited
```

```
export QCMPIRUN=$I_MPI_ROOT/bin64/mpirun
```

```
cd $PBS_O_WORKDIR
```

```
input="${PBS_JOBNAME}.in"
```

```
output="${PBS_JOBNAME}.out"
```

```
qchem -mpi -np 8 $input $output
```

Nombre de coeurs

## TO DO :

- Vérifier que le calcul s'est bien déroulé (contrôler fichier *nom\_molecule.out*)
- Exporter vers le dossier *backup* sur [vega@ulb.ac.be](mailto:vega@ulb.ac.be), dans le dossier *nom\_molecule*, le fichier *nom\_molecule.out* issu du job Q-CHEM (à renommer pour éviter la confusion avec le fichier d'ORCA)
- Exécuter sur [vega@ulb.ac.be](mailto:vega@ulb.ac.be) le launcher contrôle



## 3 – Launcher contrôle

Cluster : [vega@ulb.ac.be](mailto:vega@ulb.ac.be)

Rapatrie le fichier *nom\_molecule.out* de Q-CHEM dans le dossier *contrôle/Dat*



Exécute le script *ibfoc* qui prépare les différents fichiers d'input nécessaires aux contrôles et les sous-dossiers correspondants (via notamment *qchem-parser.py*)



TO DO : créer les différents fichiers champs possibles pour la molécule et tester toutes les combinaisons projector-champ possibles, **en lançant à chaque fois le job correspondant**