

INTRODUCCIÓN A CRYSTAL 14 PARA ANÁLISIS DE COMPUESTOS ORGÁNICOS

Para uso en el cluster LNS-Knights Landing

Fernando Robles Morales
Judith Percino Zacarías

ISBN: 978-607-525-721-1



9 786075 257211



BUAP

Primera edición 2020
ISBN: 978-607-525-721-1

D.R. © Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

4 sur 104, Col. Centro, Puebla, México. C.P. 72000

Teléfono 01 (222) 2295500

www.buap.mx

Dirección General de Publicaciones

2 norte 1404, Col. Centro, Puebla, México. C.P. 72000

Teléfono 01 (222) 2295500 Ext. 5768

www.publicaciones.buap.mx

Este libro fue sometido a un riguroso proceso de dictaminación a doble ciego, por dos dictaminadores externos a la BUAP.

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

Rector: Alfonso Esparza Ortiz

Secretaría General: Guadalupe Grajales y Porras

Director General de Publicaciones: Hugo Vargas Comsille

INTRODUCCIÓN A CRYSTAL 14 PARA ANÁLISIS DE COMPUESTOS ORGÁNICOS

Para uso en el cluster LNS-Knights Landing

**Fernando Robles Morales
Judith Percino Zacarías**

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

2 0 2 0

CONTENIDO

Presentación	6
Introducción	8
Uso de Crystal 14 en cluster KNL	11
Preparación de moléculas por analizar	11
Uso de CIF2CELL	12
Definir cálculos AB INITIO	13
Edición archivo  .D12	14
Someter trabajo de cálculo DFT en	
Sistema de Colas Torque	25
Visualizar resultados en XCRYSDEN	29
Obtener información de propiedades	34
Desplegar bandas	37
Densidad de estados	40
Estructuras de bandas	45
Conclusiones	53
Referencias	54

USO DE CRYSTAL 14 EN CLUSTER KNL

Este software es una implementación de los métodos Ab initio. Su primera versión *Crystal 88* fue implementada hace 30 años, después se han desarrollado siete versiones más hasta la que se emplea actualmente.

Este software puede utilizarse para el cálculo de propiedades en varios tipos de compuestos caracterizados por su periodicidad, por ejemplo, en una dimensión (cuasilineal y polímeros helicoidales, nanotubos), en dos dimensiones (monocapas, slabs), en tres dimensiones (cristales, soluciones sólidas, sistemas sustitucionales desordenados) y en una forma limitada las moléculas.

En este manual se describe el uso del software *Crystal 14*, para realizar el cálculos Ab Initio de polímeros.

PREPARACIÓN DE MOLÉCULAS POR ANALIZAR

Para realizar el cálculo, se necesita de un archivo de cristalografía en formato CIF, es decir con extensión .cif.

USO DE CIF2CELL

En el cluster HPC KNL se cuenta con el script **cif2crystal14.sh** para convertir el archivo de cristalografía extensión **.cif** en un archivo de entrada para *Crystal 14* de extensión **.d12**.

Una vez iniciada la sesión en el cluster **KNL** en la terminal **>** para convertir el archivo **.cif** se ejecutan el script como que se muestra a continuación:

NOTA

Se recomienda crear un directorio por molécula a analizar para evitar confusión en los archivos que se generan. Por ejemplo, si el archivo de la molécula se llama **benzene.cif** y está en su directorio **~** crear el directorio **benzene**, copiar el archivo **.cif** y convertir en formato *Crystal 14* como se describe a continuación:

```
[user@rogueone ~]$mkdir benzene
[user@rogueone ~]$cd benzene
[user@rogueone benzene]$cp ~/benzene.cif ./
[user@rogueone benzene]$cif2crystal14.sh benzene.cif
```

Una vez ejecutado el script **cif2crystal.sh** se generan los archivos de entrada de *Crystal 14*, esto se puede comprobar listando los archivos que se generan, como se muestra a continuación:

```
[user@rogueone ~]$ls
archivo.d12 archivo.cif
```