Chemia

Ta część Podręcznika Użytkownika zawiera odnośniki do dokumentacji związanej z usługami ułatwiającymi wykonywanie obliczeń kwantowochemicznych.

Omówiono zastosowanie oprogramowania QCG do uruchamiania programów z dziedziny chemii kwantowej na przykładzie popularnego programu Gaussian. Pokazaliśmy jak uruchomić obliczenia pakietem Guassian zarówno przy użyciu prostej i przyjaznej użytkownikowi aplikacji QCG-Icon, jak również klienta tekstowego umożliwiającego automatyzację i użycie skryptów. Wspomnieliśmy również, przy okazji prezentacji programu QCG-Icon, jak wykorzystać usługę QCG-Monitoring do śledzenia postępu obliczeń długotrwających obliczeń.

Podręcznik przedstawia dokumentację użytkowania plaftormy InSilicoLab for Chemistry. Platforma ta ułatwia przygotowanie danych oraz uruchomienie obliczeń na infrastrukturze gridowej jako eksperymentów InSilicoLab. Szczegółowo omówiono

- użycie podstawowego eksperymentu kwantowochemicznego
- wykorzystanie eksperymentu tworzącego pliki *cube* programu Gaussian
- zastosowanie narzędzia Trajectory Sculptor do wykonania złożonego eksperymentu, w którym odpowiednio wyselekcjonowane struktury z symulacji dynamiki molekularnej służą jako dane dla obliczeń kwantowochemicznych
- przykłady użycia programu `niedoida` (w szczególności obliczenia dressed-TDDFT)

Zachęcamy do zapoznania się z listą zamieszczoną poniżej (jako "*Child Pages*").