

AG09

(Analizador de datos de salida de Gaussian09)

Jonathan Alfaro



Agenda

- Descripción
- Lista de opciones
- Uso

Descripción

¿Qué es?

Es un programa, hecho en Python, que sirve para analizar y extraer datos de los archivos de salida de Gaussian09

Descripción (cont.)

¿Cómo funciona?

Búsqueda de patrones mediante expresiones regulares en el archivo de salida.

Lista de opciones

- hf (Hirshfeld)
- m (Mulliken)
- apt (Atomic polar tensor)
- tc (thermochemical)
- acm (Atomic charges matrix)

Lista de opciones (cont.)

- asd (Atomic spin densities matrix)
- hsd (Hirshfeld spin densities)
- nao (Natural atomic orbital occupancies)
- mep (Molecular electrostatic potential)
- a (ALL)



Opción -hf

Muestra el valor de la energía de Hirshfeld con unidades Hartrees

Opción -m (Mulliken)

Muestra el análisis poblacional de Mulliken

- Mulliken atomic charges
- Mulliken atomic charges with hydrogens summed
- Mulliken atomic spin densities

Opción -apt (Atomic polar tensor)

- Muestra el análisis poblacional APT
 - APT atomic charges
 - APT atomic charges with hydrogens summed

Opción -tc (thermochemical)

- Muestra los datos termoquímicos
 - Dipolo
 - Temperatura
 - Presión

Opción -acm (Atomic charges matrix)

Muestra la diagonal de la matriz de cargas atómicas

Opción -asd (Atomic spin densities matrix)

Muestra la diagonal de la matriz de densidades atómicas

Opción -hsd (Hirshfeld spin densities)

Muestra las densidades de spin y las cargas de la matriz de Hirshfeld

Opción -nao (Natural atomic orbital occupancies)

Muestra Natural atomic orbital occupancies

Opción -mep (Molecular electrostatic potential)

Muestra molecular electrostatic potential

Opción -a (All)

Hace un análisis buscando todas las opciones anteriores

Uso

<https://ag09.readthedocs.io/es/latest/index.html>



Preguntas

¿?

Páginas web

<https://github.com/Jonathanalfaro>

<https://github.com/Jonathanalfaro/ag09>

<https://ag09.readthedocs.io/es/latest/index.html>

<https://github.com/Jonathanalfaro/presentaciones/raw/master/ag09.pdf>