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 analisis 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





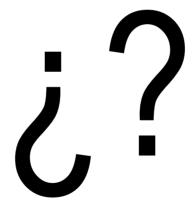
Uso

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



