Cuby Installationsanleitung

Kim Radke und Şirin Cebe

8. April 2019

1 Download von cuby4

Unter folgendem Link kann die neuste Version von Cuby heruntergeladen werden. Dafür muss zunächst das auf der Seite gegebene Formular ausgefüllt werden. Danach steht der Download bereit.

http://cuby4.molecular.cz/download.php

2 Installation

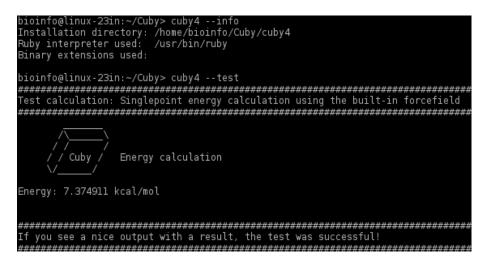
Erstelle zuerst den Ordner Cuby an beliebiger Stelle im Laufwerk. Um das heruntergeladene Package zu installieren, muss zunächst in der Shell Konsole in den Installationspfadordner Cuby navigiert werden. Setze die Umgebungsvariable mit folgendem Befehl in der Shell Konsole:

\$ export PATH=~/Cuby/cuby4:\$PATH

Mit den folgenden zwei Befehlen kann überprüft werden, ob die Installation erfolgreich war:

```
$ cuby4 --info
$ cuby4 --test
```

Dann sollte folgende Ausgabe erscheinen:



3 Konfiguration

Um in Cuby externe Programme verwenden zu können müssen diese zunächst konfiguriert werden. Dazu wird in der Ordnerstruktur von cuby4 in den Ordner config navigiert und die Datei mit dem Namen keyword_defaults.yaml geöffnet. Für jedes externe Programm, wie zum Beispiel Turbomole, Mopac und Charmm, werden nun die entsprechenden Pfade angegeben. Bei einigen Programmen ist es auch wichtig die Version anzupassen.

Diese yaml-Datei wird dann in demselben Pfad wie der Ordner cuby4 gespeichert und in cuby4_config.yaml umgenannt.

- 1. Navigiere in den Ordner config
- 2. Offne die Datei keyword_defaults.yaml
- 3. Gebe alle Pfade für externe Programme an.
- 4. Speichere die Datei mit dem Namen cuby4_config.yaml in demselben Pfad wie der Ordner cuby4 ein.

4 Beispiel

Um zu überprüfen, ob alles geklappt hat, kann folgendes Beispiel ausgeführt werden. Es wird eine yaml-Datei mit dem Namen input.yaml erstellt. In der Datei wird folgender Code implementiert und abgespeichert.

```
job: optimize
```

geometry: start.xyz
interface: water_ff

Als nächstes wird die Datei start.xyz erstellt. Diese Datei erhält folgenden Beispielinput:

```
0
    -0.702196054
                  -0.056060256
                                 0.009942262
    -1.022193224
                   0.846775782
                                -0.011488714
Η
Η
     0.257521062
                   0.042121496
                                 0.005218999
0
     2.220871067
                   0.026716792
                                 0.000620476
Η
     2.597492682 -0.411663274
                                 0.766744858
     2.593135384 -0.449496183
Η
                               -0.744782026
```

In der Shell Konsole wird dann folgender Befehl ausgeführt:

```
$ cuby4 input.yaml
```