

# BioAtom

# Manual de

# usuario



*Por: Arturo Aley Cruz Colen, Jairo Josué Hernández Hernández y Lizeth Hernández Reyes. Versión 1.0*

# Contenido

<b>1. Módulo de entrada de datos .....</b>	<b>3</b>
1.1 Ventana de coordenadas atómicas .....	3
1.2 Ventana de etiqueta de especies químicas .....	4
1.3 Generación de archivo FDF .....	4
<b>2. Módulo de envío de datos al servidor .....</b>	<b>5</b>
<b>3. Módulo de visualización de resultados .....</b>	<b>6</b>
<b>4. Dudas frecuentes .....</b>	<b>7</b>
¿Dónde se guarda el archivo fdf generado y que nombre tiene? .....	7
¿Dónde se guardan los archivos descargados generados por la simulación? ....	7
No se abre la ventana de coordenadas atómicas ni la de especies químicas .....	7

Gracias por usar nuestro software. El software cuenta con el acceso a tres módulos principales. En caso de que necesites ayuda en alguno siempre podrás acceder a su apartado guiándote por el índice de la página anterior.

## 1. Módulo de entrada de datos

En este apartado se genera el archivo FDF mediante el llenado de un formulario. Algunas de las cajas de entrada muestran información sobre lo que debe ir en ellas. Se muestra al pasar el puntero encima de ellas. Tal como se muestra a continuación:

Nombre del sistema :      Etiqueta del sistema :  
[ ]      [ ]  
Número de átomos :      Número de especies :  
[5]      [4]

Nombre descriptivo. Establece el nombre del FDF.

### 1.1 Ventana de coordenadas atómicas

Aquí podrás introducir la matriz de coordenadas atómicas, en caso de que la matriz a ingresar sea muy grande puede generar altos problemas de rendimiento. Para ello puedes recurrir al archivo contenido en la carpeta del programa llamado *archivocoordenadas.txt* y copiarla directamente, si se introduce la matriz desde la ventana de coordenadas atómicas se debe de pulsar el botón de enviar para guardar la matriz.

En la siguiente imagen se muestra la ventana de coordenadas atómicas.

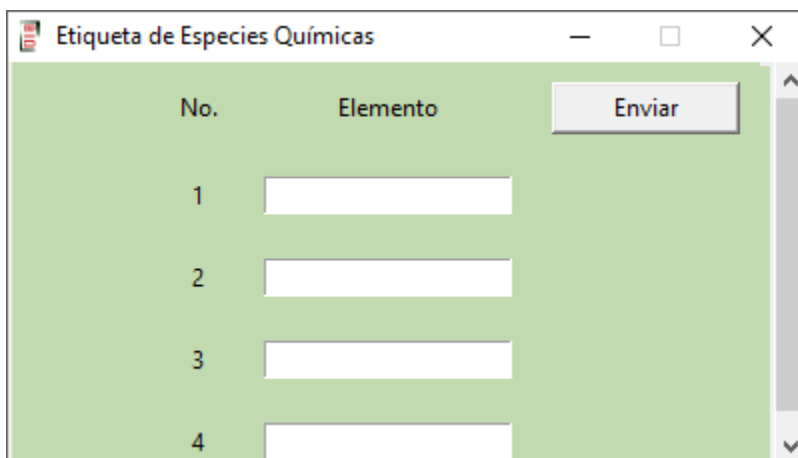
Coordenadas Atómicas

0.00000	0.00000	0.00000	0
0.00000	0.00000	0.00000	0
0.00000	0.00000	0.00000	0

Enviar

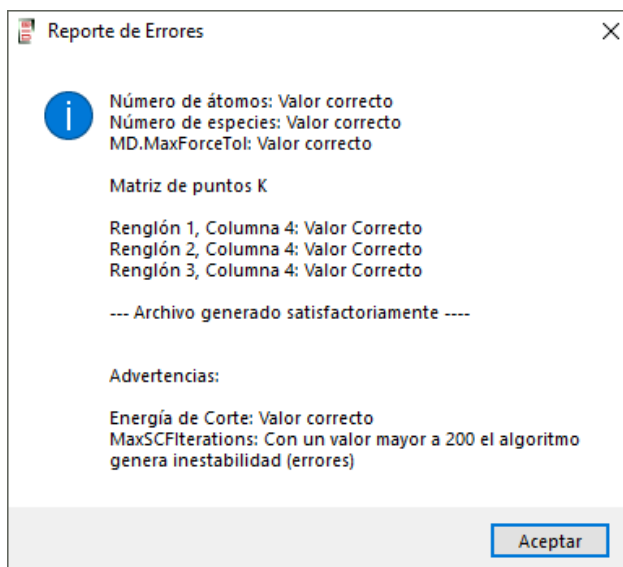
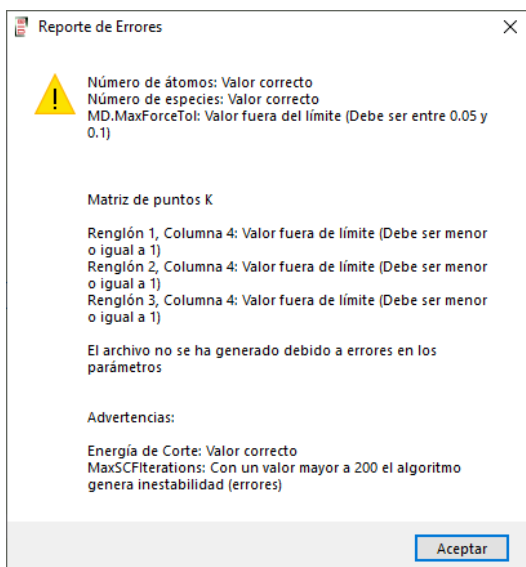
## 1.2 Ventana de etiqueta de especies químicas

Aquí podrás generar la matriz de especies químicas, para ello bastaras con que introduzcas los símbolos de los elementos tal cual aparecen en la tabla periódica, ejemplo: He, Si, O. La matriz puede ser introducida directamente en el archivo *Registro.txt* en caso de que se desee. En la siguiente imagen se muestra la ventana de etiqueta de especies químicas.



## 1.3 Generación de archivo FDF

Para generar el archivo fdf debes de llenar todos los campos del formulario y haber generado las matrices de coordenadas atómicas y especies químicas. Posteriormente al hacer clic en el botón de Generar FDF se lanzará un reporte de errores, en caso de que exista alguno se mostrar una ventana como la siguiente (izquierda), la cual indica los errores y advertencias, en caso de que no haya errores se ejecutara la ventana de la derecha:



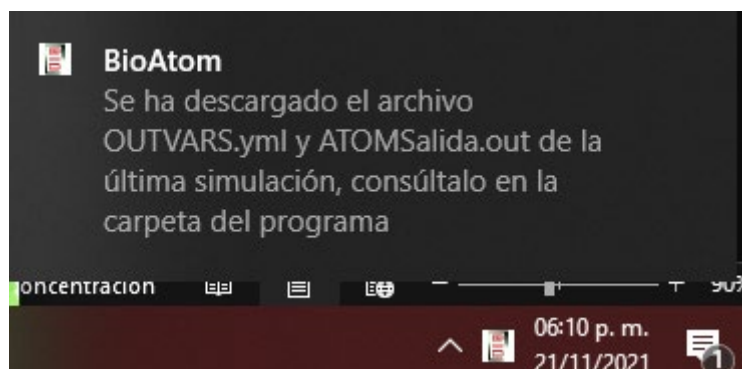
**Nota:** Si existen errores no se genera el archivo FDF, sin embargo, un archivo FDF puede generarse si hay advertencias, pero no errores.

## 2. Módulo de envío de datos al servidor

Este modulo permite conectarse a un servidor que contenga SIESTA y permitirá ejecutar la simulación, así como subir los archivos FDF y descargar los archivos *OUTVARS.yml* y *ATOMSalida.out* generados por las simulaciones.

El primer paso es conectarse al servidor poniendo las credenciales correspondientes en los campos que se indican. Posteriormente se sube el archivo FDF al servidor, se introducen los campos de Cola y Cantidad de procesadores y se da al botón de Iniciar.

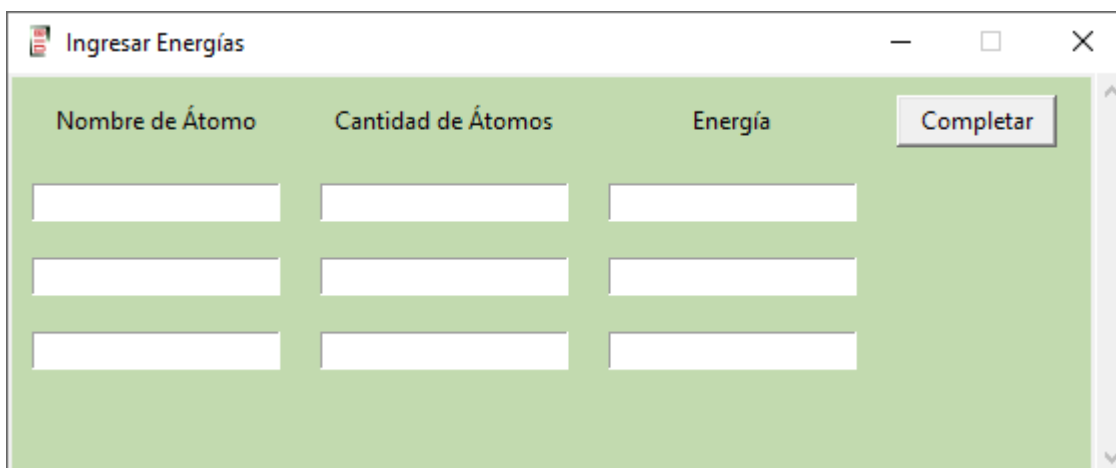
El botón de descarga intentará realizar la descarga de los archivos OUTVARS Y ATOMSalida, en caso de que no se hayan generado aun o no existan se emitirá una alerta, en caso contrario saldrá una notificación como la siguiente:



**Nota:** Los archivos se guardan en la carpeta del programa.

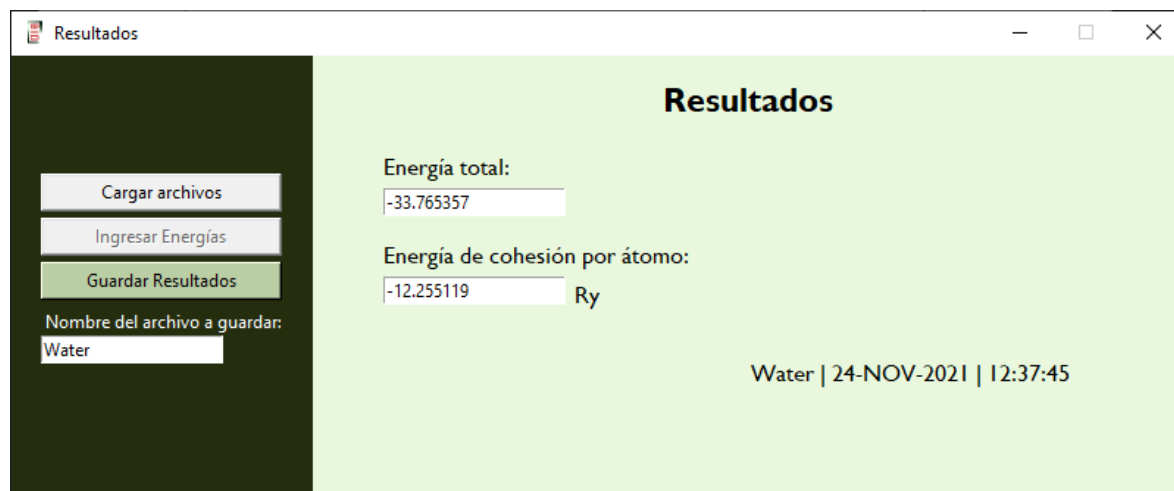
### 3. Módulo de visualización de resultados

En este módulo es posible visualizar la información de energía total y de energía de cohesión por átomo de las simulaciones realizadas, para utilizar este modulo se hace clic en *Cargar archivos* para lo cual deben de subirse de manera simultanea los archivos con extensión **.yml** y **.out**, uno de cada uno. Posterior a ello se ingresan los valores de energía de los átomos haciendo clic en Ingresar energías. Cargando una ventana como la siguiente:



Nombre de Átomo	Cantidad de Átomos	Energía
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

Una vez que se ingresan los valores correspondientes, hacer clic en completar y se mostraran los resultados de energía total y energía de cohesión por átomo.



**Resultados**

Energía total:

Energía de cohesión por átomo:  
 Ry

Water | 24-NOV-2021 | 12:37:45

Cargar archivos

Ingresar Energías

Guardar Resultados

Nombre del archivo a guardar:

La información puede ser guardada en un fichero mediante el botón de *Guardar Resultados*.

#### **4. Dudas frecuentes**

**¿Dónde se guarda el archivo fdf generado y que nombre tiene?**

*El archivo fdf se guarda en la carpeta del programa y tiene el nombre de la cadena introducida en Nombre del sistema en el formulario.*

**¿Dónde se guardan los archivos descargados generados por la simulación?**

*Los archivos son guardados en la carpeta del programa.*

**No se abre la ventana de coordenadas atómicas ni la de especies químicas**

*Los campos de Numero de átomos y número de especies deben de contener un valor para poder abrir la ventana.*