

# my rusty gosh v0.0.5 使用说明

*Wenping Guo*

## 1. 基本功能

常见程序输入文件格式的相互转换, 支持自定义输出格式模板. 支持读/写包含多个分子的文件(比如 mol2, pdb 等轨迹格式), 支持读写分子键连关系, 子结构信息等.

## 2. 下载与安装

下载地址

- for centos 5/6: [bin/gosh](#)
- for centos 7: [bin/gosh](#)

安装

- 将 gosh 复制到 Linux 服务器~/bin 下即可.

## 3. 使用说明

调用 gosh 命令, 即进入 gosh 命令行子界面(REPL)

### 3.1 显示支持的格式

siesta/gulp/xtl/car 等格式暂时只支持写入. 其它格式可读可写):

```
gosh> avail
```

```
filetype: "text/xyz", possible extensions: [".xyz"]
filetype: "text/mol2", possible extensions: [".mol2"]
filetype: "text/coord", possible extensions: [".coord"]
filetype: "text/mol", possible extensions: [".sd", ".sdf", ".mol"]
filetype: "vasp/poscar", possible extensions: ["POSCAR", "CONTCAR", ".poscar", ".vasp"]
```

```
filetype: "text/cif", possible extensions: [".cif"]
filetype: "text/pdb", possible extensions: [".pdb", ".ent"]
filetype: "gaussian/input", possible extensions: [".gjf", ".com", ".gau"]
filetype: "ms/car", possible extensions: [".car"]
filetype: "ms/xtl", possible extensions: [".xtl"]
filetype: "siesta/fdf", possible extensions: [".fdf"]
filetype: "gulp/input", possible extensions: [".gin", ".gulp"]
```

## 3.2 读入文件

gosh 会根据文件名(扩展名)自动确认文件格式:

```
gosh> load CONTCAR
```

## 3.3 输入文件

```
gosh> write foo.cif
```

以 gaussian input 格式输出

```
gosh> write foo.gjf
```

以 mol2 格式输出

```
gosh> write foo.mol2
```

## 3.4 格式化模板

gosh 支持自定义输出文件格式. 示例模板: [gulp.hbs](#)

模板语言参考:

1. [gchemol/README.md at master · ybyygu/gchemol](#)
2. [Handlebars.js: Minimal Templating on Steroids](#)

```
gosh> format gchemol/tests/files/templates/gulp.hbs
```

以上命令会根据模板, 将当前分子的信息格式化输出. 下面是示例:

```
# put keywords here
opti conp lbfgs
```

```
title
data_MOR
end
# put coordinates here
fractional
Si core 0.3007 0.0724 0.0412
Si core 0.3037 0.3088 0.0461
O core 0.1243 0.4170 0.4287
O core 0.1226 0.1954 0.4254
```

### 3.5 退出 *REPL*

```
quit
```

或

```
ctrl-d
```