



Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Grupo de Química para Simulações *In Silico*

Manual de uso dos *scripts*

Heitor Leite

Introdução

Scripts são arquivos contendo sequências de comandos a serem executados pelo sistema a fim de realizar alguma tarefa.

Instalação

O script de instalação baixa e instala automaticamente a última versão disponível dos scripts. Ele pode ser acessado na página git.io/scripts_ic. Para executá-lo basta usar o seguinte comando:

```
source <(curl -sL git.io/scripts_ic)
```

Descrição

substitui

Substitui um elemento e sua multiplicidade em todos arquivos `.inp` de um diretório e seus subdiretórios.

verifica

Verifica se o cálculo de um arquivo `.out` foi bem sucedido e faz a análise vibracional.

gera__script__srm

Gera um script `.srm` que pode ser submetido ao comando `sbatch` para todo arquivo `.inp` de um diretório e seus subdiretórios.

lista__jobs

Lista os *jobs* do usuário atual no *slurm* mostrando o nome completo de cada *job*.

gera__csv

Verifica o resultado de todos os arquivos `.out` de um diretório e seus subdiretórios e gera uma tabela `.csv` com os dados relevantes (energia eletrônica, energia livre de gibbs e entalpia total).

plota__trj

Plota um gráfico dos valores de energia de cada uma das estruturas de um arquivo `.trj`

separa__trj

Separa uma estrutura de um arquivo `.trj` em um novo arquivo `.xyz`