

### 1º GERAR ESTRUTURAS ALEATÓRIAS

1. Arquivo .xyz
  - Deixar só as coordenadas atômicas (apagar o número 55, a linha em branco e o elemento)
  - novo arquivo M55
2. Criar uma pasta com a composição desejada (AnBm)
  - Colar o arquivo M55
  - Colar o script randgenfinal.py
3. Abrir o randgenfinal.py
  - Mudar o nome do arquivo (M55)
  - Mudar o nome do range (número de estruturas que devem ser geradas)
4. Rodar o script randgenfinal.py
  - python2 randgenfinal.py
  - \*adicionar elemento 1 e a composição 1
  - \*adicionar elemento 2 e a composição 2

### 2º PROCESSO DE CLUSTERIZAÇÃO

Na pasta anterior, rodar o script "silscript.py"

```
python3 silscript.py 1 AnBm n
```

Onde:

**AnBm** - pasta onde será rodado o script

**n** - número de estruturas que devem ser selecionadas

