

AIMAI

AIMAI je računalno-kemijski softver (zatvorenog koda) za izvođenje kvantitativnih i vizualnih QTAIM analiza molekulskih sustava (Quantum Theory of Atom s In Molecules), polazeći od podataka molekulskih valnih funkcija.

AIMAI je dostupan u standardnoj (besplatnoj) verziji te u profesionalnoj (s plaćenom licencom). Standardna verzija, kakva je trenutno dostupna na računalnom klasteru Isabella, nameće ograničenje na veličinu molekulske valne funkcije koja se koristi za izvođenje paralelnih poslova na **dijeljenoj memoriji** (*mpisingle) te za generiranje podatkovnih datoteka za vizualizaciju (*.viz). Ovo ograničenje iznosi 12 atoma i 400 primitivnih osnovnih funkcija.

Moduli

Moduli koji dopremaju AIMAI u vašu okolinu definirani su u tablici niže:

Verzija	Modul
19.10.12	aimall/19.10.12

Primjer korištenja

AIMQB je "pokretačka" aplikacija za postavljanje i pokretanje većine QTAIM izračuna s AIMAI-om. AIMQB automatski pokreće punu QTAIM numeričku analizu jedne ili više molekulskih valnih funkcija s različitim opcijama, pomoću programa AIMExt, AIMInt i AIMSum. Rezultati iz ovih programa sažeti su u tekstualnim .sum datotekama. Aplikacija AIMQB se može u potpunosti postaviti i/ili pokrenuti s bilo kojim opcijama iz **komandno-linjskog** načina rada.



Prilikom pozivanja aplikacije, nužno je koristiti opciju: **-nogui**

Za dodatnu pomoć oko parametara/postavki za pozivanje, pokrenite: **aimqb.ish -nogui -help**

Ulazne tj. *input* podatke za primjere možete preuzeti u [test.zip](#).

Primjer paralelnog izvođenja

run.sge

```
#!/bin/bash
```

```
#$ -N aimall
```

```
#$ -cwd
```

```
#$ -pe *mpisingle 4
```

```
module load aimall/19.10.12
```

```
aimqb.ish -nogui -nproc=${NSLOTS} oxirane.wfn
```