

XCrySDen



- - Opis
 - Verzije
 - Službena dokumentacija
 - Napomene
 - Primjer korištenja

Opis

XCrySDen ((X-Window) CRYstalline Structures and DENSities) je računalno-kemijska aplikacija za vizualizaciju kristala i molekula.

Osim uobičajenih tipova datoteka, može učitavati i datoteke (inpute) računalno-kemijskih aplikacija poput Quantum ESPRESSO, Gaussian, ORCA i dr.

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Supek	Padobran
1.6.2	scientific/xcrsden /1.6.2	CPU	✓	✗

Službena dokumentacija

- <http://www.xcrysden.org/doc/HOWTO.html>

Napomene



XCrySDen je potrebno koristiti isključivo za **vizualizaciju**.



Kako bi se aplikacija uspješno pokrenula, potrebno je spojiti se na pristupni čvor uz prosljeđivanje X11.

U slučaju korištenja **Linuxa** ili **macOS-a**, koristite naredbu:

```
ssh -X -i ~/.ssh/id_rsa username@login-cpu.hpc.srce.hr
```

U slučaju korištenja **Windowsa**, potrebno je preuzeti aplikaciju **Xming** te je pokrenuti prije pokretanja **PutTY**-ja.

Unutar **PutTY**-ja, potrebno je uključiti **X11 forwarding** (*Connection → SSH → X11, Enable X11 forwarding*).

Primjer korištenja

```
module load scientific/xcrysden/1.6.2
```

```
xcrysden --pw_inp calcite.in
```

