

Q-Chem



- [Opis](#)
- [Verzije](#)
- [Službena dokumentacija](#)
- [Primjeri](#)

Opis

Q-Chem je računalno-kemijska aplikacija općenitog tipa, a koristi se za proračune elektronske i molekularne strukture, svojstava, reaktivnosti i dr.

Zatvorenog je koda, a može se paralelizirati na **OpenMP** razini što znači da radi s dijeljenom memorijom te se ne može širiti van jednog računalnog čvora.

U verziji 6.0 uklonjena je podrška za MPI.

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Paralelizacija	Supek	Padobran
* 6.1.0	<code>scientific/q-chem/latest</code>	CPU	OpenMP	✓	✗

* Verzija Q-Chem-a na Supeku prati posljednju produkcijsku verziju.

Službena dokumentacija

- [Q-Chem priručnik](#)

Primjeri

Za pripremu ulaznih podataka, odnosno *input* datoteka, kao i udaljeno izvođenje može se koristiti i komplementarna aplikacija s grafičkim sučeljem, [IQmol](#).

ChemSol_CH30.in

```
$comment
Example of the ChemSol calculation of the hydration free energy of CH3O-
HF/6-31G wavefunction, user-defined radius of 2.5 A for carbon
Results (kcal/mol):
ES      VdW  Hydrophob    dG_nld    dG_ild
ChemSol Run      -91.7    -1.9    0.3    -92.0    -93.4
ChemSol Run      -95.1    -1.9    0.3    -94.5    -96.8
ChemSol Run      -96.0    -1.9    0.3    -95.1    -97.7
ChemSol Run      -96.2    -1.9    0.3    -95.2    -97.8
ChemSol Converged -96.2    -1.9    0.3    -95.3    -97.9
$end

$rem
method = hf
basis = 6-31g Basis Set
scf_convergence = 6
solvent_method = chem_sol
integral_symmetry = on
$end

$molecule
-1 1
C      .0000    .0000   -.5274
O      .0000    .0000    .7831
H      .0000    1.0140  -1.0335
H      .8782   -.5070  -1.0335
H     -.8782   -.5070  -1.0335
$end

$chem_sol
readradii
$end

$van_der_waals
2
1 2.5
$end
```

Niže je jednostavan primjer PBS skripte koja će koristiti 4 procesorske jezgre, odnosno 4 OpenMP threada.

PBS skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l ncpus=4

module load scientific/q-chem/latest

cd ${PBS_O_WORKDIR}

qchem -nt ${OMP_NUM_THREADS} ChemSol_CH30.in
```