

Molden

blocked URL

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

Opis

Molden je besplatna aplikacija za vizualizaciju molekularnih struktura u računalnoj kemiji.

Podržava različite formate datoteka, uključujući Gaussian, GAMESS i druge, a omogućuje prikaz molekulskih orbitala, elektronske gustoće, vibracijskih modova itd. Također ima mnoge alate za prilagodbu prikaza i analizu podataka.

Službena dokumentacija

- <https://www.theochem.ru.nl/molden/>

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Supek	Padobran
6.9	scientific/molden/6.9	CPU	✓	✓

Napomene

! Kako bi se aplikacija uspješno pokrenula, potrebno je spojiti se na pristupni čvor uz proslijeđivanje 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/molden/6.9
```

```
gmolden azithromycin.xyz
```

