

PWgui



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

Opis

PWgui je GUI aplikacija za izradu Quantum ESPRESSO *inputa*.

Aplikacija podržava sljedeće potprograme Quantum ESPRESSO-a: `pw.x`, `neb.x`, `ph.x`, `pp.x`, `projwfc.x`, `bands.x`, `dos.x`, `hp.x` i `ld1.x`. Može stvarati nove i uređivati postojeće *inpute* za te programe.

Aplikacija može koristiti **XCrySDen** za vizualizaciju atomskih struktura iz `pw.x` *input* i *output* ili za vizualizaciju svojstava izračunatih pomoću `pp.x` (kad su ona pohranjena u XSF formatu).

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Supek	Padobran
7.0	scientific/pwgui/7.0	CPU	✓	✗
6.1	scientific/pwgui/6.1	CPU	✓	✗

Službena dokumentacija

- <http://www-k3.ijs.si/kokalj/pwgui/pwgui.html>

Napomene

❗ 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/pwgui/7.0
```

```
pwgui
```

