

Avogadro



- - [Opis](#)
 - [Verzije](#)
 - [Napomene](#)
 - [Primjer korištenja](#)

Opis

Avogadro je računalno-kemijska aplikacija za vizualizaciju molekula.

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Supek	Padobran
1.2.0	scientific/avogadro /1.2.0	CPU	✓	✓

Napomene



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



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

Učitajte modul:

```
$ module load scientific/avogadro/1.2.0
```

Pokrenite aplikaciju, odnosno otvorite željenu strukturu:

```
$ avogadro C2H4BrCl.xyz
```

