

SHARC

Korištenje

Više o korištenju aplikacije možete pročitati u [praktičnom vodiču](#) ili [priručniku](#) sa službenih stranica. Dostupni moduli na Isabelli su:

Verzija	Modul
2.1.2	sharc/2.1.2

SHARC 2.1.2 je preveden korištenjem Intelovog kompajlera te Intelovih MKL knjižnica.

SHARC radi u "suradnji", tj. ima sučelja s drugim programima kao što su MOLCAS, ORCA, Gaussian, TURBOMOLE, Molpro, BAGEL i dr.

Jednostavan primjer za pokretanje posla možete preuzeti na linku [sharc-gaussian.zip](#). Osnovna struktura radnog direktorija (iz *zipanog* primjera) sastoji se od sljedećih datoteka/direktorija:

- **input** - SHARC ulazna datoteka koji sadrži postavke te imena ostalih ulaznih datoteka (*geometry*, *velocity*, ...).
- **geom** - datoteka koji sadrži inicijalnu geometriju molekule (simboli, naboji te *x*, *y* i *z* koordinate)
- **veloc** - datoteka koja sadrži inicijalne brzine
- **QM/**
 - **GAUSSIAN.resources** - datoteka sučelja; sadrži postavke kao što su korišteni resursi, putanje, varijable i dr. (ovdje se primjerice definira i varijabla broja jezgara tj. **ncpu**)
 - **GAUSSIAN.template** - datoteka sučelja (dodatna ulazna datoteka) koja sadrži dodatne postavke za izračun elektronske strukture
 - **runQM.sh** - jednostavna skripta karakteristična za sučelje s kojim SHARC radi (npr. **SHARC_GAUSSIAN.py**); čita datoteku **QM.in** te kreira datoteku **QM.out**
- **run.sge** - SGE skripta za podnošenje posla



Napomena

Varijabla **NSLOTS** iz podnesene SGE skripte pregazit će vrijednost varijable **ncpu** definirane u **.resources** datoteci!

Primjer SGE skripte

run.sge

```
#!/bin/bash

#$ -N sharc
#$ -cwd
#$ -pe test 4

export SCRDIR=${TMPDIR}

module load sharc/2.1.2

sharc.x input
```