

MODELOWANIE MOLEKULARNE  
(30.05.09)

1. Otworzyć okno przeglądarki, wejść na stronę: [www.student.chemia.uj.edu.pl](http://www.student.chemia.uj.edu.pl) Przejść do zakładki *Regulamin sieci studenckiej WCh* i go dokładnie przeczytać.
2. Na tej samej stronie (patrz punkt 1) zalogować się do swojej poczty wydziałowej i wysłać maila do prowadzącego zajęcia ([wkulig@chemia.uj.edu.pl](mailto:wkulig@chemia.uj.edu.pl)), podając w tytule nazwę przedmiotu, a w treści maila swoje imię i nazwisko oraz dzień i godzinę w których odbywają się zajęcia.
3. Otworzyć okno powłoki (shell) i wykonać następujące polecenia:
  - a) sprawdzić zawartość katalogu domowego
  - b) utworzyć katalog o nazwie *ModMol*
  - c) przejść z katalogu domowego do właśnie utworzonego katalogu *ModMol*
  - d) utworzyć plik o nazwie *plik1.inp* za pomocą edytora tekstu (UWAGA: Na zajęciach posługujemy się edytorem *kwrite*, komenda uruchamiająca edytor to **kwrite &** ) wpisując dowolny tekst
  - e) kopiujemy utworzony plik nadając mu nową nazwę *plik2.inp*, a następnie przenosimy go do katalogu domowego
  - f) przechodzimy do katalogu domowego i usuwamy plik o nazwie *plik2.inp*
4. Ponownie wchodzimy do pliku *ModMol* i tworzymy katalogi o następujących nazwach:  
*29\_04\_09, 07\_05\_09, 14\_05\_09, 21\_05\_09, 28\_05\_09, 04\_06\_09, 11\_06\_09*
5. Ze strony [www.chemia.uj.edu.pl/~wkulig](http://www.chemia.uj.edu.pl/~wkulig) w zakładce Teaching ściągamy przykładowy input dla programu Gamess o nazwie *example.inp* i zapisujemy go w katalogu domowym, następnie przenosimy go do katalogu o nazwie *29\_04\_09* i otwieramy w edytorze tekstu za pomocą komendy: **kwrite example.inp&**
6. Za pomocą komendy **rungms example > example.out** uruchamiamy program Gamess. Po zakończeniu obliczeń otwieramy nowo powstały plik wynikowy za pomocą edytora tekstu.

**UWAGA!!!** Po zakończeniu każdego ćwiczenia z punktu nr 7 należy zgłosić ten fakt prowadzącemu.

Przed wyjściem z zajęć należy wysłać prowadzącemu WSZYSTKIE pliki stworzone w trakcie zajęć. Aby to zrobić należy w katalogu w którym wykonywano obliczenia (*29\_04\_09*) utworzyć archiwum za pomocą polecenia **tar cvfz 29\_04\_09.tar.gz \*** a następnie wysłać za pomocą poczty przesłać nowo utworzony plik (*29\_04\_09.tar.gz*) jako załącznik.

7. Wejść na stronę [www.chemia.uj.edu.pl/~michalak/PCK2009/](http://www.chemia.uj.edu.pl/~michalak/PCK2009/) gdzie w sekcji *Ćwiczenia(laboratorium komputerowe)* przygotowane są trzy ćwiczenia. Należy kolejno otworzyć instrukcje do ćwiczenia nr 1, 2 oraz 3 i postępować zgodnie z nimi.