

# Tutorial uso de Gaussian: nivel básico



**Expanding the limits of  
computational chemistry**

Kerry Wrighton Araneda

# Programa y archivo de entrada

El funcionamiento del programa Gaussian en el SCC-PIDI, permite el uso de dos versiones G09 y G16.

Ambas versiones comparten muchas funciones y estructura de cálculos de entrada.

Todos archivos de entrada o input, contienen la serie de secciones que vamos a mencionar:

- Rendimiento: incluye número de procesadores, uso de memoria ram.
- Archivos complementarios: incluye checkpoint-file (chk) y read-write file (rwf)
- Ruta: incluye el nivel de teoría y las opciones de cálculo a usar
- Título: nombre del cálculo
- Carga y multiplicidad: la carga total de sistema y la multiplicidad (información del momento magnético de spin del sistema).
- Geometría molecular: Indica los átomos y las coordenadas cartesianas y/o redundantes que definen el sistema

# Ejemplo

Archivo input.gjf. Revisar "Exploring chemistry..." de Foresmann

----

```
%nprocs=8  
%mem=20GB  
%chk=input.chk  
%rwf=input.rwf  
#p opt uhf 6-31g
```

Rendimiento

Archivos complementarios

Ruta

Molecula de hidrogeno → Titulo

```
0 1  
H 0.00000 0.00000 0.00000  
H 0.00000 0.00000 1.20000
```

Carga y multiplicidad

Coordenadas

----

# Modo de uso en SCC-PIDI

Para usar Gaussian09. Ejemplo:

```
qG09 -q intel input.gjf output.log H2-opt
```

Para usar Gaussian16. Ejemplo

```
qG16 input.gjf output.log H2-opt
```

```
[kwrighton@faraday ~]$ qG09 --h
Usage: qG09 [options] <Archivo de input> <Archivo Output> <Nombre del proceso>

Options:
  -h, --help                show this help message and exit
  -q QUEUE                  Cola de destino
  --extencion=EXTENCION    extensiones a copiar
  --parametros=PARAMETROS  Parametros adicionales (Se ingresan entre comillas)
```

```
[kwrighton@faraday ~]$ qG16 --h
Usage: qG16 [options] <Archivo de input> <Archivo Output> <Nombre del proceso>

Options:
  -h, --help                show this help message and exit
  -q QUEUE                  Cola de destino
  --extencion=EXTENCION    extensiones a copiar
  --parametros=PARAMETROS  Parametros adicionales (Se ingresan entre comillas)
```

# Default

- Por defecto los cálculos corren en la partición Intel y reservan el número de procesadores y memoria indicados en el archivo de entrada.

Para elegir una partición se agrega la sección `-q`.  
Ejemplo:

```
qG16 -q intel input.gjf output.log H2-opt
```

# Standalone programs

Muchos subprogramas de Gaussian están disponibles para el procesamiento de los archivos. Todos están en /opt/g09 o /opt/g16

Por ejemplo:

chkchk cubegen cubman formchk freqchk freqmem  
rwfdump newzmat testrt unfchk

Ejemplo práctico:

/opt/g16/formchk archivo.chk