
Quantenchemie

Übungsblatt 1

1. Vorbereitung der Infrastruktur¹

Sicherstellung des Rechnerzugangs:

1. Bei der Nutzerselbstverwaltung des IMT-Accounts anmelden und Administrierung durch Theoretische Physik erlauben:
`https://benutzerverwaltung.uni-paderborn.de/cgi-bin/zituser/admin.pl` → Benutzerdaten selbst verwalten → Dezentrale Dienste → Rechnerbetreuung Theoretische Physik erlauben → Ausloggen.
2. E-Mail an `admins@phys.upb.de` mit der bitte um Freigabe eueres IMT-Accounts für den Poolraum, sowie Freischaltung für "ssh"² wer dies nutzen möchte.
3. Testen des Zugangs: Es muss ein Einloggen auf den Poolraumrechnern vor Ort oder wenn gewünscht per ssh (z.B. mit einem Terminal unter Linux oder entsprechendem freiem Programm für Windows:
`ssh YourIMTAccount@cmspool01.phys.uni-paderborn.de`) möglich sein.
4. Nach dem Einloggen ist das Programm Konsole zu starten.
5. `.profile` anpassen: Der Befehl `emacs ~/.profile` öffnet das Startskript zum bearbeiten. Folgender Code muss darin eingefügt werden (Besonderes Augenmerk auf Leerzeichen!):

```
if [ -a /opt/g09 ] ;then  
    echo "setting up Gaussian environment"  
    export g09root="/opt"  
    export PATH=$PATH:$g09root  
    source $g09root/g09/bsd/g09.profile  
fi
```

¹Wenn der Poolraum schon in früheren Kursen beutzt wurde, kann direkt mit Punkt 4 fortgefahren werden.

²ssh steht für secure shell und ermöglicht ein einloggen von einem anderen Rechner aus, z.B. von Zuhause.

Nun startet man die bash³ mit `bash -l`, danach muss das Startskript durch `source ~/.profile` neu geladen werden. Nun steht das Programm Gaussian als `g09` zur Verfügung. Das bedeutet um mit gaussian arbeiten zu können muss immer die bash benutzt werden.

2. Befehle in der Konsole (bash)

Hilfe zu Befehl und dessen Optionen aufrufen	<code>man BEFEHL</code>
Verzeichniss wechseln/erstellen/löschen	<code>cd/mkdir/rmdir VERZEICHNISS</code>
Kopieren/verschieben einer Datei	<code>cp/mv DATEI DATEINEU</code>
Inhalt eines Verzeichnisses anzeigen	<code>ls VERZEICHNISS</code>
Inhalt einer Datei Anzeigen	<code>less DATEI</code>
Zeilen ausgeben die eine Zeichenkette enthalten	<code>grep "ZEICHENKETTE" DATEI</code>
Skript ausführen	<code>./SKRIPT</code>
Datei mit Editor öffnen, z.B. emacs	<code>emacs DATEI</code>

3. Gaussian

Manual http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/g09help.htm

Folgende Dateie ist nötig um ein Gaussianrechnung zu starten:

- BEISPIEL.com: Enthält alle Anweisungen/Parameter für die Rechnung

Eine Rechnung wird gestartet mit `g09 <BEISPIEL.com >Beispiel.log`
Ergebnisse müssen in einem Verzeichniss im eigenen Homeverzeichnis gesichert werden.

³bash steht für "bourne again shell"

4. Das Wasserstoff Atom

Vergleichen sie die Gesamtenergie des Grundzustands für die verschiedene in der Vorlesung besprochene Basissätze und Theorien (z.B.: Hartree-Fock, DFT-LDA, DFT-GGA, hybrid-DFT).

Folgende Schritte sind dazu nötig:

- einloggen und Terminal starten
- einen Ordner für die Übung erstellen, mit einem Unterordner für die Ergebnisse
- die BEISPIEL.com Datei wird in den Ordner abgelegt
`cp ~/rohry/QC_uebung_share/uebung1/BEISPIEL.com .`
- mit `emacs` `BEISPIEL.com` kann die Datei geöffnet und bearbeitet werden
- auf http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/m_input.htm ist ein Überblick über die Struktur der Eingabedatei gegeben
- in der Datei muss für eine Berechnung noch ein Basissatz und eine Theorie gewählt werden. Informieren sie sich auf http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/g09help.htm → "keywordlist" → "Basis Sets" oder "Density Functional (DFT) Methods" und wählen sie ein beliebiges Paar aus

Der Poolraum N3.216 steht ihnen außer wenn andere Veranstaltungen stattfinden zur Verfügung und kann von diversen Personen am N3 Flur aufgeschlossen werden.