C7800
Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

Referenční manuál - Nemesis

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

Nemesis

Nemesis

Spuštění programu:

```
$ module add nemesis
$ nemesis
```

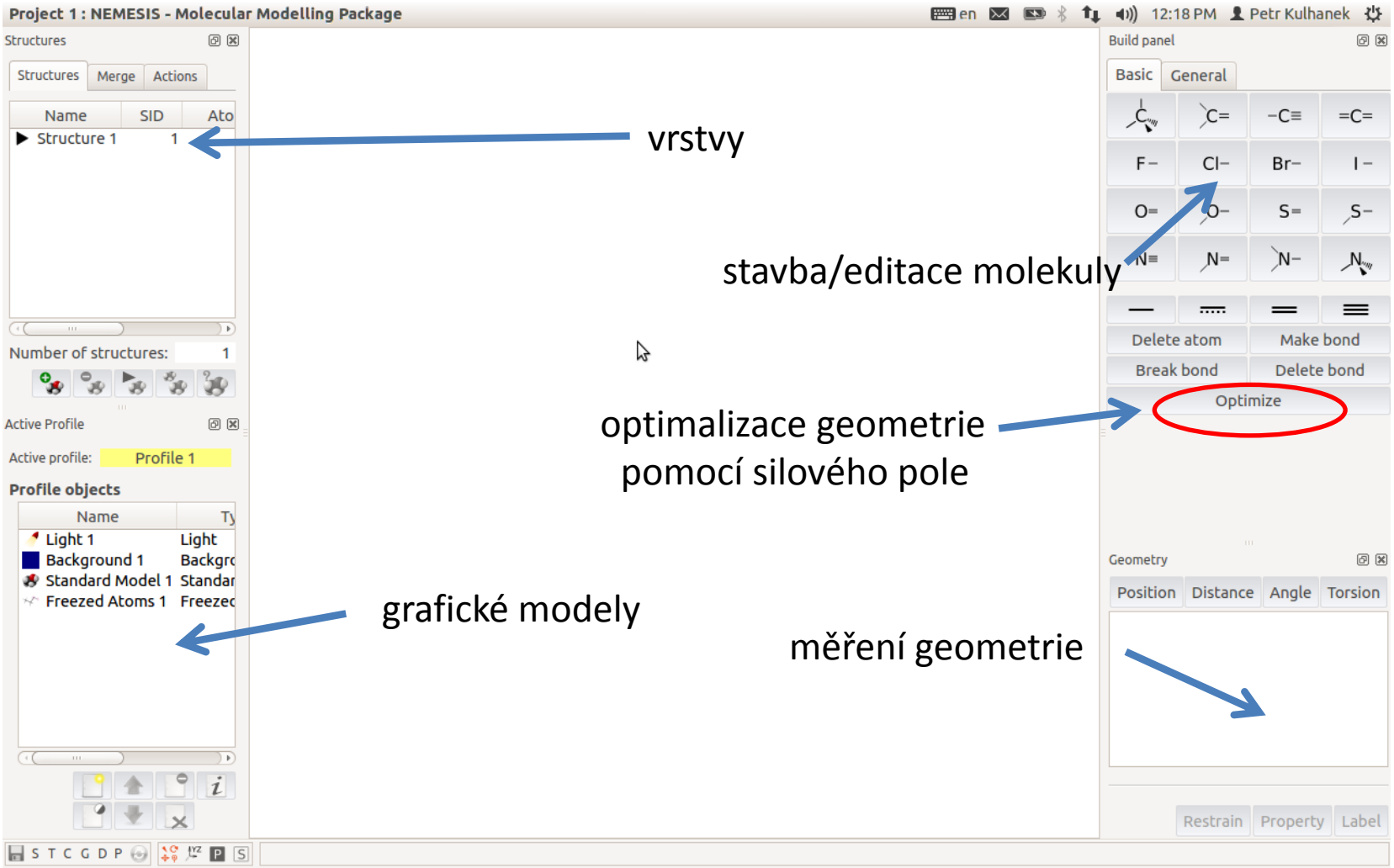
Myš:

Levé tlačítko	selekce
Prostřední tlačítko	rotace
Levé tlačítko	posun
Kolečko	zoom

Modifikátory:

Shift	XZ -> Y pohyby
Ctrl	přepíná mezi sekundárním a primárním manipulátorem

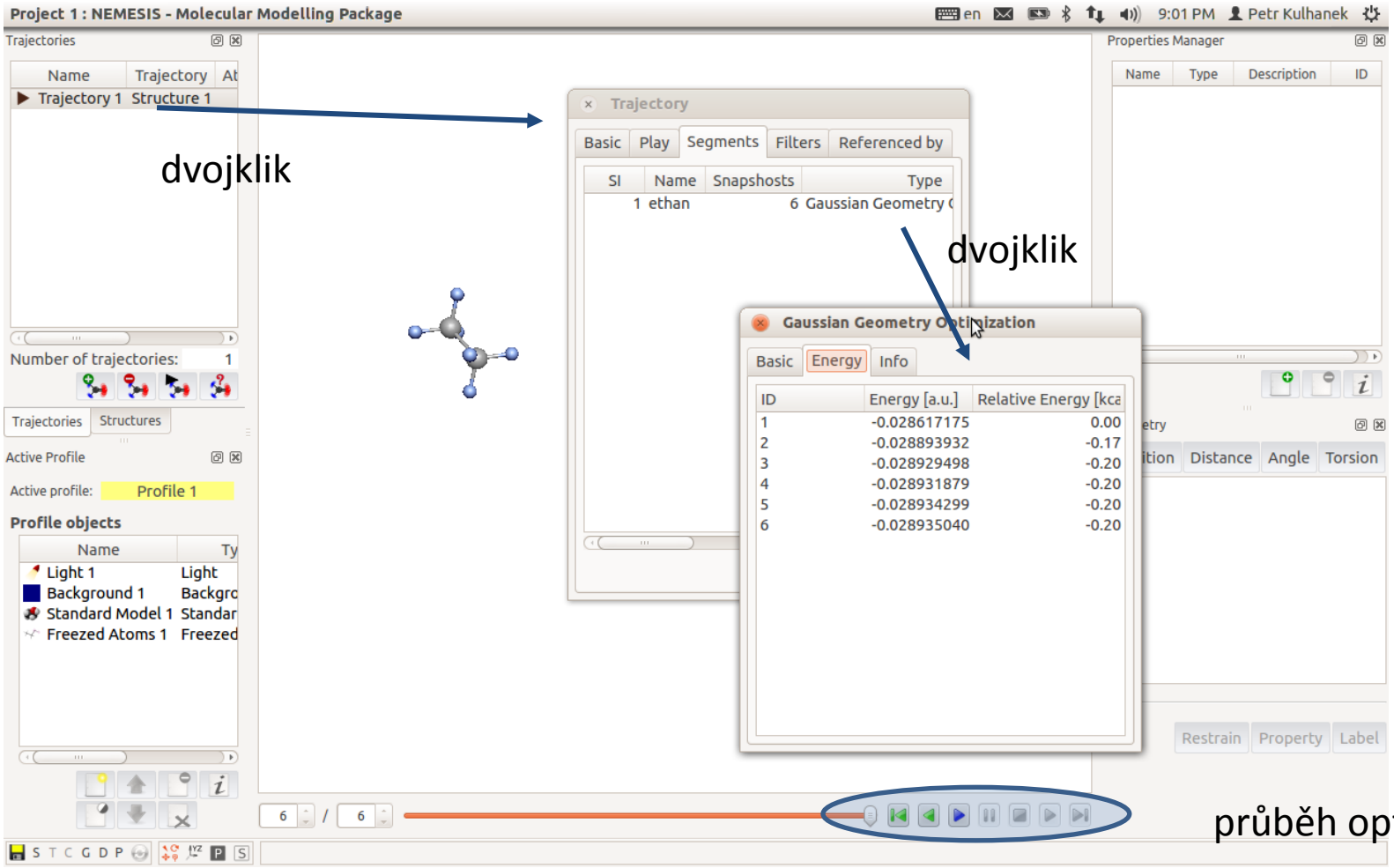
Nemesis – Build Project



Nastavení silového pole pro optimalizaci: menu Geometry-> Optimizer Setup

Vizualizace optimalizace geometrie

1) Projekt: Trajectory
2) File->Import Trajectory as -> Gaussian Geometry Optimization



průběh optimalizace

Vizualizace vibrací

1) Projekt: Trajectory
2) File->Import Trajectory as -> Gaussian Vibrations