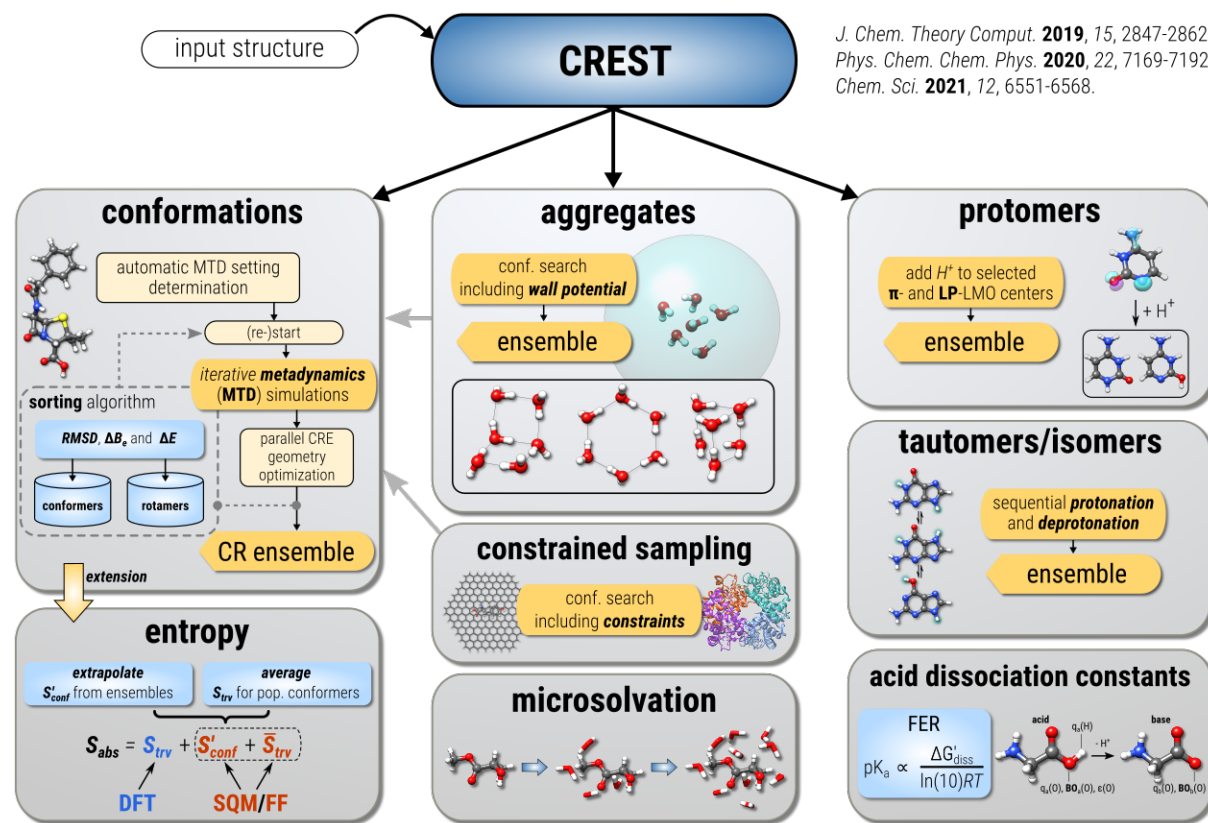


CREST

(know how)

QTA

Annia Galano



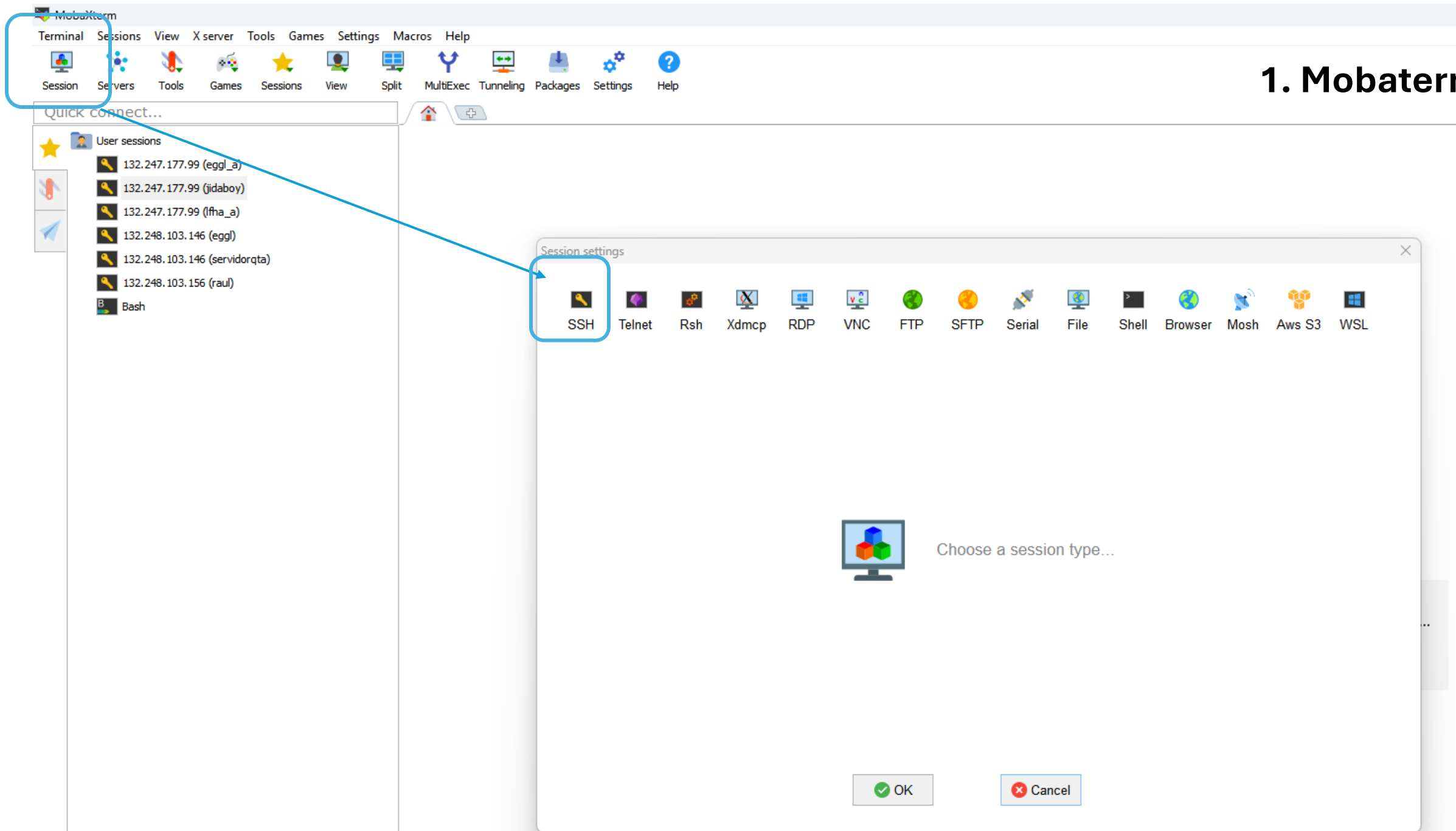
Conformer-Rotamer Ensemble Sampling Tool

ESTRATEGIA GENERAL

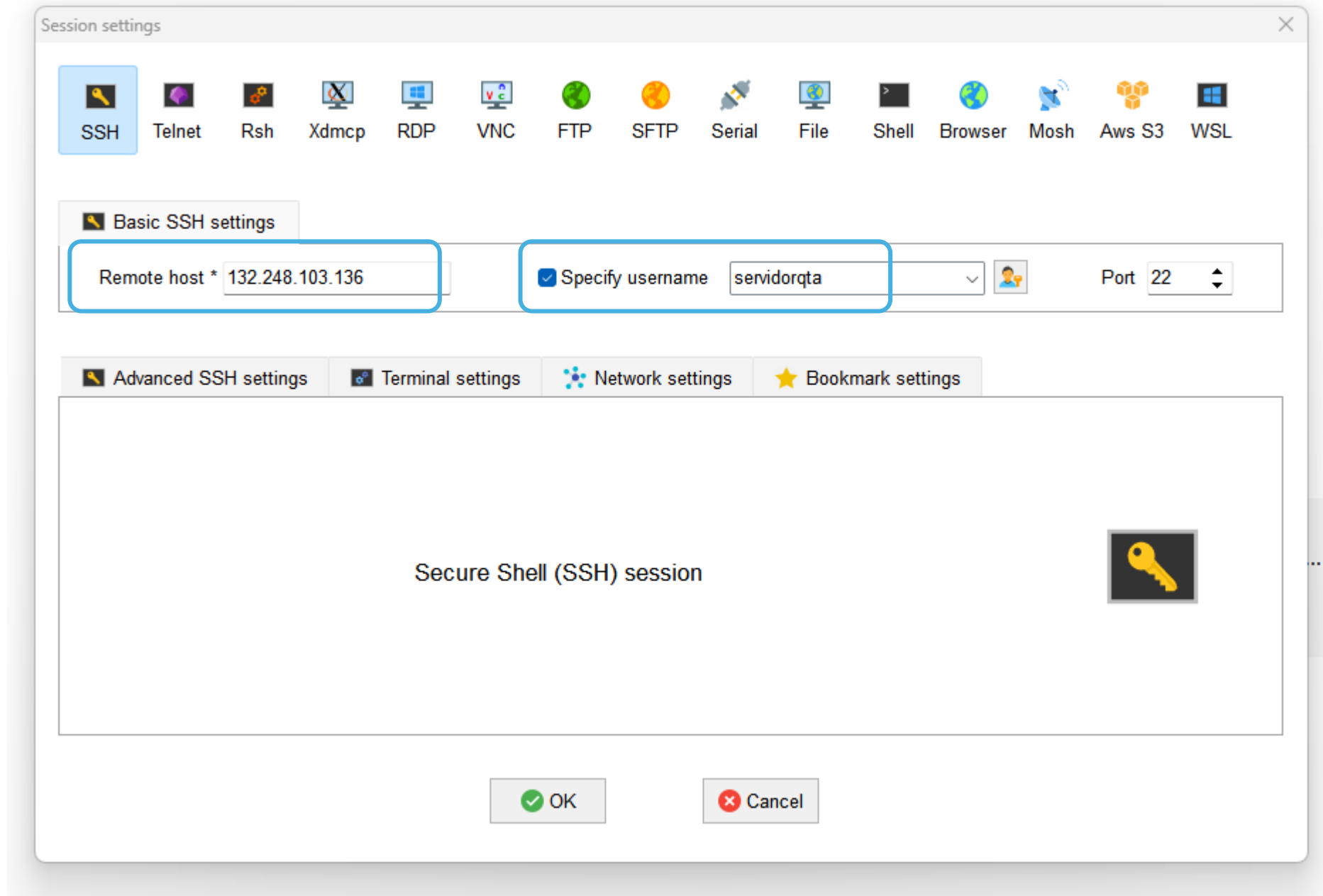
- I. Optimizar la geometría que nos interesa.
- II. A partir de ella generar confórmeros con CREST.
- III. Seleccionar los de menor energía (por ejemplo 100).
- IV. Para estos hacer cálculos de punto simple.
- V. A partir de los puntos simples escoger los de menor energía (por ejemplo 20).
- VI. Para este subconjunto optimizar geometrías y calcular frecuencias.
- VII. Comprobar que ninguno tenga frecuencias imaginarias.
- VIII. Escoger el de energía más baja.

A partir del confórmero de menor energía construiremos las especies siguientes,
sin volver a hacer búsqueda conformacional para todo lo relacionado con
CADMA-Chem y QM-ORSA

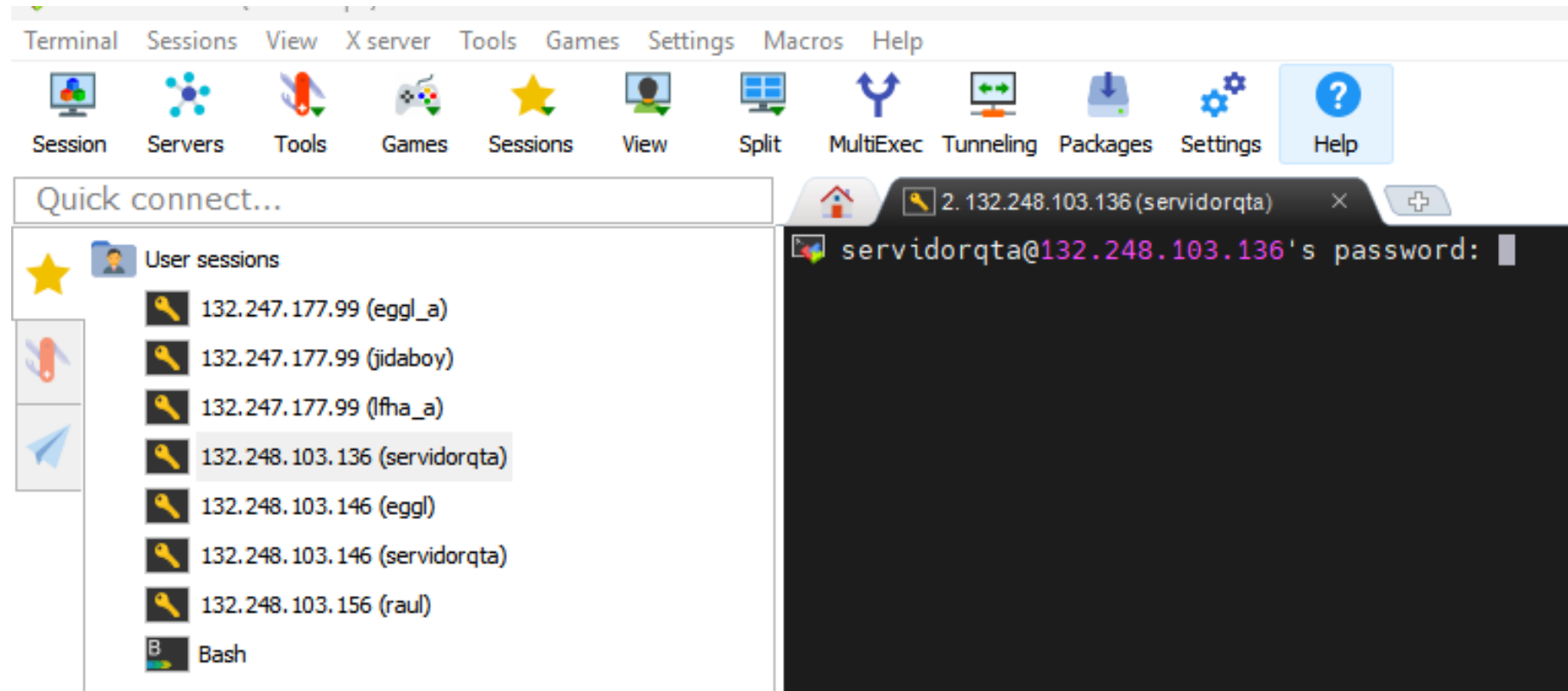
1. Mobaterm



1. Mobaterm



1. Mobaterm



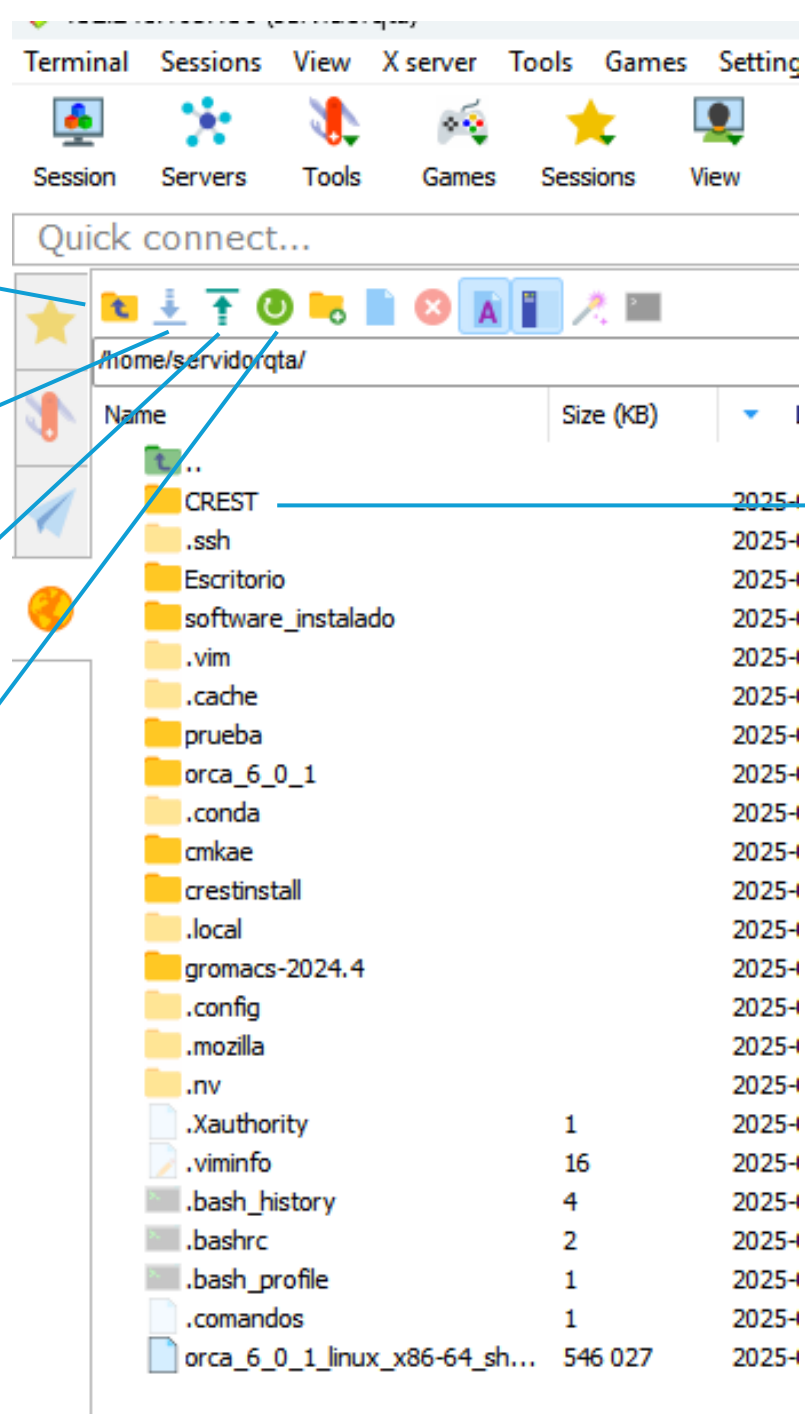
1. Mobaterm

Subir en el árbol de carpetas

Download a su PC

Upload desde su PC

Refresh



TRABAJAR AQUÍ

Empezar haciendo SU carpeta de trabajo

```
[servidorqta@gabriela ~]$ cd CREST
[servidorqta@gabriela CREST]$ mkdir annia
[servidorqta@gabriela CREST]$ cd annia
[servidorqta@gabriela annia]$
```

2. Preparar el archivo de coordenadas xyz, a partir de la geometría de interés previamente optimizada, por ejemplo a nivel M052x/6-31+G(d) y guardarla en **nombre.xyz** con siguiente formato:

20	→ Número de átomos		
title	→ Título, el que quieran		
C	2.081440	0.615100	-0.508430
C	2.742230	1.824030	-1.200820
N	4.117790	1.799870	-1.190410
C	4.943570	2.827040	-1.822060
C	6.440080	2.569360	-1.637600
O	7.351600	3.252270	-2.069090
N	0.610100	0.695090	-0.538780
O	2.095560	2.724940	-1.739670
O	6.705220	1.463410	-0.897460
H	0.303080	1.426060	0.103770
H	0.338420	1.050680	-1.460480
C	2.488753	-0.593400	-1.198448
H	2.416500	0.557400	0.532050
H	4.614100	1.081980	-0.670550
H	4.699850	3.794460	-1.373720
H	4.722890	2.844690	-2.894180
H	7.687400	1.448620	-0.860340
H	2.029201	-1.457008	-0.719999
H	2.170233	-0.542411	-2.238576
H	3.572730	-0.688405	-1.154998

Coordenadas cartesianas

3. Preparar el archivo **template-g09.gjf** , este archivo tendrá el formato de siempre para correr Gaussian, con las palabras clave que quieran para correr los puntos simples, por ejemplo:

Ejemplo 1:

```
%nprocshared=16
%mem=10GB
%chk={conformer_name}.chk
# m052x/6-31+G(d) SCRF=(SMD,solvent=water)

Title Card Required

0 1
{GEOMETRY}
```

Ejemplo 2:

```
%nprocshared=16
%mem=10GB
%chk={conformer_name}.chk
# wb97xd/genecp

Title Card Required

0 1
{GEOMETRY}

@/tmpu/jidaboy_g/jidaboy/annia/CREST/pcseg-1.gbs/N
@/tmpu/jidaboy_g/jidaboy/annia/CREST/bse.acp/N
```


4. Cargar los siguientes archivos en SU carpeta del servidor:

```
script_crest.sh  
template-g09.gjf
```

Y dar permiso de ejecutar al script:

```
(crest) [servidorqta@gabriela annia]$ chmod +x script_crest.sh
```

Sugerencia, hacer una carpeta (dentro de SU carpeta) para cada sistema y en esa subir el archivo nombre.xyz correspondiente a cada caso.

```
[servidorqta@gabriela annia]$ mkdir prueba
```

```
[servidorqta@gabriela annia]$ cd prueba
```

5. Activar CREST:

```
[servidorqta@gabriela prueba]$ conda activate crest  
(crest) [servidorqta@gabriela prueba]$ export OPENBLAS_NUM_THREADS=1
```

6. Correr CREST:

```
(crest) [servidorqta@gabriela prueba]$ ../../script_crest.sh struc.xyz 100 ../template-g09.gjf
```

Nombre del archivo
de coordenadas

Nombre del template
Para G09

Número de confórmers
para los que quieren crear
archivos de entrada para
G09 (puntos simples)

7. Resultados CREST

```
(crest) [servidorqta@gabriela prueba]$ ls
struc struc.xyz
```

```
(crest) [servidorqta@gabriela prueba]$ cd struc
(crest) [servidorqta@gabriela struc]$ ls
confcross.xyz  cre_members      crest_conformers.xyz  crest.engrad      crestopt.xyz      ensemble_energies.log  gfnff_topo      template-g09_files  wbo
coord          crest_0.mdrestart  crest_dynamics.trj    crest_input_copy.xyz  crest.restart     file.toml             search.toml     template-g09.gjf
coord.original crest_best.xyz     crest.energies        crestopt.log        crest_rotamers.xyz  gfnff_adjacency      struc.xyz       Top_90.txt
```

```
(crest) [servidorqta@gabriela struc]$ cd template-g09_files/
(crest) [servidorqta@gabriela template-g09_files]$ ls
struc_conformer_10.gjf  struc_conformer_22.gjf  struc_conformer_34.gjf  struc_conformer_46.gjf  struc_conformer_58.gjf  struc_conformer_6.gjf  struc_conformer_81.gjf
struc_conformer_11.gjf  struc_conformer_23.gjf  struc_conformer_35.gjf  struc_conformer_47.gjf  struc_conformer_59.gjf  struc_conformer_70.gjf  struc_conformer_82.gjf
struc_conformer_12.gjf  struc_conformer_24.gjf  struc_conformer_36.gjf  struc_conformer_48.gjf  struc_conformer_5.gjf   struc_conformer_71.gjf  struc_conformer_83.gjf
struc_conformer_13.gjf  struc_conformer_25.gjf  struc_conformer_37.gjf  struc_conformer_49.gjf  struc_conformer_60.gjf  struc_conformer_72.gjf  struc_conformer_84.gjf
struc_conformer_14.gjf  struc_conformer_26.gjf  struc_conformer_38.gjf  struc_conformer_4.gjf   struc_conformer_61.gjf  struc_conformer_73.gjf  struc_conformer_85.gjf
struc_conformer_15.gjf  struc_conformer_27.gjf  struc_conformer_39.gjf  struc_conformer_50.gjf  struc_conformer_62.gjf  struc_conformer_74.gjf  struc_conformer_86.gjf
struc_conformer_16.gjf  struc_conformer_28.gjf  struc_conformer_3.gjf   struc_conformer_51.gjf  struc_conformer_63.gjf  struc_conformer_75.gjf  struc_conformer_8.gjf
struc_conformer_17.gjf  struc_conformer_29.gjf  struc_conformer_40.gjf  struc_conformer_52.gjf  struc_conformer_64.gjf  struc_conformer_76.gjf  struc_conformer_9.gjf
struc_conformer_18.gjf  struc_conformer_2.gjf   struc_conformer_41.gjf  struc_conformer_53.gjf  struc_conformer_65.gjf  struc_conformer_77.gjf
struc_conformer_19.gjf  struc_conformer_30.gjf  struc_conformer_42.gjf  struc_conformer_54.gjf  struc_conformer_66.gjf  struc_conformer_78.gjf
struc_conformer_1.gjf   struc_conformer_31.gjf  struc_conformer_43.gjf  struc_conformer_55.gjf  struc_conformer_67.gjf  struc_conformer_79.gjf
struc_conformer_20.gjf  struc_conformer_32.gjf  struc_conformer_44.gjf  struc_conformer_56.gjf  struc_conformer_68.gjf  struc_conformer_7.gjf
struc_conformer_21.gjf  struc_conformer_33.gjf  struc_conformer_45.gjf  struc_conformer_57.gjf  struc_conformer_69.gjf  struc_conformer_80.gjf
```

Descargar los archivos .gjf a su PC y de ahí llevarlos a YOLTLA para correrlos.

8. Seleccionar los confórmers de menor energía a partir de los puntos simples:

- Subir el script **best_n_conf_to_opt.sh** a la carpeta de trabajo.
- Darle permisos de ejecución (**chmod +x best_n_conf_to_opt.sh**).
- Cuando estén completos los puntos simples, ejecutar el script (**./best_n_conf_to_opt.sh 20**, si está en la misma carpeta que los archivos).

Se habrán creado los archivos de entrada para los cálculos de optimización y frecuencia:

```
caf-conf10-opt.gjf  cafeic_conformer_10_opt.gjf  cafeic_conformer_13_opt.gjf  cafeic_conformer_2_opt.gjf  cafeic_conformer_5_opt.gjf
caf-conf2-opt.gjf  cafeic_conformer_11_opt.gjf  cafeic_conformer_14_opt.gjf  cafeic_conformer_3_opt.gjf  cafeic_conformer_6_opt.gjf
caf-conf4-opt.gjf  cafeic_conformer_12_opt.gjf  cafeic_conformer_1_opt.gjf   cafeic_conformer_4_opt.gjf  cafeic_conformer_7_opt.gjf
```

Se corren como cualquier otro. Cuando estos terminen, hay que checar que no tengan frecuencias imaginarias y escoger el de menor energía.

FIN

