Charmm

Por uma restrição da licença desse programa, é necessária uma permissão especial para utilizá-lo. Envie um email para support [at] ncc.unesp.br para solicitar esse acesso.

Envio local, exemplos de scripts

Informações sobre o uso direto do cluster local estão em [[SLURM|aqui]].

MPI

```
#!/bin/bash
#SBATCH -t 3:00 -n 16

module load charmm
goo-job-nanny srun -n16 charmm < input.inp
```

Serial

```
#!/bin/bash
#SBATCH -t 3:00

module load charmm/c37b2-serial
goo-job-nanny charmm < input.inp
```