

Manual for tdLagchem & LagChem using EDISON

1. Access & Log-in

1) Insert the domain
http://chem.edison.re.kr:8080/

2) Insert your ID & Password

EDISON_chem

소개 사이언스애플스토어 콘텐츠

Education-research Integration through Simulation On the Net

계산화학

로그인

ID

PW

LOGIN

회원가입 아이디/비밀번호찾기

참여기관 및 활용대학

System Resource Statistics

Cluster	Total	Used	Avail
vCluster	384	1	383

EDISON 설문

로그인 후 이용해 주세요.

공지사항

- EDISON 포털 정식 오픈 안내
- EDISON 서비스용 입출력 프로그래밍 방법 ...
- 계산화학/나노물리 여흥학교 튜토리얼
- 계산화학 여흥학교 사이버랩 실습자료
- 계산화학 여흥학교 강의교재 04

FAQ

등록된 데이터가 없습니다.

Quick

- 앱스토어
- 시뮬레이션
- 사이버랩

미래창조과학부 NRF 한국연구재단 KISTI 한국과학기술정보연구원 국기유리합성연구소 EDISON

개인정보처리방침

EDISON COPYRIGHT(C) 2011 NATIONAL INSTITUTE OF SUPERCOMPUTING AND NETWORKING, KISTI ALL RIGHTS RESERVED.
대전광역시 유성구 대학로 245 한국과학기술정보연구원 | TEL. 042-869-1040 | FAX 042-869-0799 | E-mail jerry@kisti.re.kr

2. Find a simulation program

The screenshot shows the EDISON_chem website interface. At the top, there is a navigation bar with links for '소개' (Introduction), '사이언스앱스토어' (Science App Store), '시뮬레이션' (Simulation), '콘텐츠' (Content), and '가상실험실' (Virtual Lab). The '시뮬레이션' link is highlighted with a red box and labeled '2) Click here'. Below the navigation bar, there is a login section on the left with a message '안세환님이 로그인 되었습니다.' (An Se-hwan has logged in) and a 'LOG OUT' button, both highlighted with a red box and labeled '1) Check log-in state'. The main content area features a large diagram titled 'Molecular Modeling using Multiscale Simulations' with axes for 'Length Scales' and 'Time Scales'. The diagram includes categories: 'Multiscale Systems (MMMS)', 'Bio & Complex Systems (MMBS & MMCS)', 'Dynamics Systems (MMDS)', and 'Quantum Systems (MMQS)'. On the right side of the diagram, there is a 'Quick' menu with icons for '앱스토어' (App Store), '시뮬레이션' (Simulation), and '사이버랩' (CyberLab). Below the diagram, there are sections for '공지사항' (Notice) and 'FAQ'. The '공지사항' section lists several notices related to EDISON services. The 'FAQ' section indicates that there are no registered data. At the bottom of the page, there is a footer with logos of various institutions and a copyright notice for KISTI.



Simulation

시뮬레이션 실행하고 모니터링 할 수 있는 페이지 입니다.

- 에디슨소개
- 계산화학소개
- FAQ
- 공지사항

- SW조회
- SW관리
- 워크스페이스
- 시뮬레이션실행
- 모니터링

Click here

- 콘텐츠 목록

- 가상실험실관리



Simulation
On the
Net



앱스토어

시뮬레이션

사이버랩

System Resource Statistics

Cluster	Total	Used	Avail
vCluster	384	0	384

EDISON 설문

현재 진행 중인 설문이 없습니다.

공지사항

- EDISON 포털 정식 오픈 안내
- EDISON 서비스용 압축력 프로그래밍 방법 ...
- 계산화학/나노물리 여름학교 튜토리얼
- 계산화학 여름학교 사이버랩 실습자료
- 계산화학 여름학교 강의교재 04

[MORE](#)

FAQ

등록된 데이터가 없습니다.

[MORE](#)



시뮬레이션

HOME > 시뮬레이션 > 시뮬레이션 실행

워크플로우 선택: SW선택 | 사용자지정 | 시뮬레이션 생성 | 파라미터 입력 / 작업제출

순번	SW명	버전	기관명	등록자	등록일시	메뉴얼	상세정보
14	Wavepacket Dynamics Program	Ver 1.0	서울대학교	신석민	2013-05-24	매뉴얼	상세보기
13	tdLagChem	Ver 1.0	KAIST	김우연	2013-05-24	매뉴얼	상세보기
12	생체분자의 용매화 자유에너지 계산 프로그램	Ver 1.0	숙명여자대학교	함시현	2013-05-24	매뉴얼	상세보기
11	양자역학을 적용한 다킹 프로그램(QM_esp)	Ver 1.0	고려대학교	조은성	2013-05-24	매뉴얼	상세보기
10	LagChem	Ver 1.0	KAIST	김우연	2013-05-24	매뉴얼	상세보기
9	Huckel orbital method	Ver 1.0	연세대학교	심은지	2013-05-24	매뉴얼	상세보기

You can find Lagchem & tdLagchem

2. LagChem

EDISON_chem

Education+research Integration through Simulation On the Net

계산화학

소개 사이언스애플스토어 시뮬레이션 콘텐츠 가상실험실

시뮬레이션

HOME > 시뮬레이션 > 시뮬레이션 실행

워크플로우 선택
SW선택 사용자지정

시뮬레이션 생성

파라미터 입력 / 작업제출

문제필더 검색 전체보기 등록일시 기관명 SW명

순번	SW명	버전	기관명	등록자	등록일시	메뉴얼	상세정보
14	Wavepacket Dynamics Program	Ver 1.0	서울대학교	신석민	2013-05-24	매뉴얼	상세보기
13	tdLagChem	Ver 1.0	KAIST	김우연	2013-05-24	매뉴얼	상세보기
12	생체분자의 용매화 자유에너지 계산 프로그램	Ver 1.0	숙명여자대학교	함시현	2013-05-24	매뉴얼	상세보기
11	양자역학을 적용한 다킹 프로그램(QM_esp)	Ver 1.0	고려대학교	조은성	2013-05-24	매뉴얼	상세보기
10	LagChem	Ver 1.0	KAIST	김우연	2013-05-24	매뉴얼	상세보기
9	Huckel orbital method	Ver 1.0	연세대학교	심은지	2013-05-24	매뉴얼	상세보기

1 2 3 4

다음 단계

- 1) Click LagChem
- 2) "다음 단계" button is activated and click it

시뮬레이션

HOME > 시뮬레이션 > 시뮬레이션 실행

워크플로우 선택

SW선택 사용자지정

시뮬레이션 생성

파라미터 입력 / 작업제출

워크플로우 정보

1. Dimension 1-D	2. Pre-processor Upload	3. Solver LagChem	4. Post-processor (Auto) Download
----------------------------	-----------------------------------	-----------------------------	---

인스턴스 정보

시뮬레이션 명

1) Fill in your job name

전처리기 정보

전처리기 데이터를 입력 하세요

2) Click and insert parameters

이전 단계

http://chem.edison.re.kr:8080/web/guest/simulation# Edison 계산화학

EDI SON_chem 계산화학

소개 사이언스앱스토어 시뮬레이션 콘텐츠 가상실험실

시뮬레이션

전처리기 데이터를 입력 하세요

인풋 파일의경우 몇 개의 그리드 포인트를 사용하게 될지 또한 어떠한 포텐셜에 대해서 계산하게 될지 정해줍니다

파일 업로드

double_well.txt

1) Click and insert input file(*.txt)
2) Upload and confirm

```
points = 1000
length = 30
potential=100*np.power(np.cos(x/8)-np.cos(0.78),2)
total_wavefunction=10
```

< Input Information >

- points : dividing grid for integrating a length
- length : total length
- potential : any potential
ex) harmonic oscillator, Morse potential
- total_wavefunction : the number of representing wavefunctions

이전 단계 다음 단계

시뮬레이션

HOME > 시뮬레이션 > 시뮬레이션 실행

워크플로우 선택

SW선택 사용지정

시뮬레이션 생성

파라미터 입력 / 작업제출

워크플로우 정보

1. Dimension 1-D	2. Pre-processor Upload	3. Solver LagChem	4. Post-processor (Auto) Download
----------------------------	-----------------------------------	-----------------------------	---

인스턴스 정보

시뮬레이션명 **double_well**

설명

전처리기 정보

전처리기 데이터를 입력 하세요

이전 단계

Check the Simulation name and click "다음 단계 "

다음 단계

EDISON_chem

소개 사이언스맵스토퍼 시뮬레이션 콘텐츠 가상실험실

시뮬레이션

워크플로우 선택 SW선택 시뮬레이션 생성 파라미터 입력 / 작업제출

파라미터 정보
파라미터정보가 없습니다.
작업생성 버튼을 클릭하세요.

스크린 샷

작업 생성 목록

작업명	상태	작업제출시간
-----	----	--------

작업 제출

이전 단계

모니터링

1) Click "작업 생성"

EDISON_chem

소개 사이언스맵스토퍼 시뮬레이션 콘텐츠 가상실험실

시뮬레이션

워크플로우 선택 SW선택 시뮬레이션 생성 파라미터 입력 / 작업제출

파라미터 정보
파라미터정보가 없습니다.
작업생성 버튼을 클릭하세요.

스크린 샷

작업 생성 목록

작업명	상태	작업제출시간
#001 double_well		

작업 제출

이전 단계

3) Click "작업 제출"

2) Change this form and activation "작업 제출"

시뮬레이션

HOME > 시뮬레이션 > 시뮬레이션 실행

워크플로우 선택: SW선택 시뮬레이션 생성 파라미터 입력 / 작업제출

파라미터 정보
파라미터 정보가 없습니다.
작업생성 버튼을 클릭하세요.

스크린 샷

NO IMAGE NO IMAGE

작업생성 목록 Refresh

<input checked="" type="checkbox"/>	작업명	상태	작업제출시간
<input checked="" type="checkbox"/>	#001 double_well	QUEUED	2013-09-06 17:07:21

You can check your job submission

모니터링

모니터링

HOME > 시뮬레이션 > 모니터링

순번	SW명 ▲	작업명 ▲	상세 정보	제출시간	작업완료시간 (대기시간/실행시간)	상태 ▲
10	LagChem	double_well		2013-09-06 17:07:21	(00:00:00 / 실행중)	실행중
9	tdLagChem	td2		2013-09-06 16:23:38	2013-09-06 16:24:19 (00:00:00 / 00:00:41)	성공
8	tdLagChem	td2		2013-09-06 16:20:18	2013-09-06 16:21:01 (00:00:01 / 00:00:43)	성공
7	tdLagChem	td		2013-09-06 16:17:56	2013-09-06 16:18:14 (00:00:01 / 00:00:18)	성공
6	LagChem	double_well_test1		2013-09-06 16:02:39	2013-09-06 16:02:53 (00:00:00 / 00:00:14)	성공
5	LagChem	test2		2013-09-06 14:52:03	2013-09-06 14:52:16 (00:00:00 / 00:00:13)	성공
4	LagChem	test1		2013-09-06 14:45:29	2013-09-06 14:45:47 (00:00:00 / 00:00:18)	성공
3	gamess	ethyl_plan		2013-09-06 13:35:07	2013-09-06 13:49:26 (00:00:01 / 00:14:19)	성공
2	tdLagChem	test		2013-09-05 16:30:39	2013-09-05 16:30:41 (에러)	실패
1	tdLagChem	inversion		2013-09-05 16:25:35	2013-09-05 16:25:38 (에러)	실패

Your job is working

모니터링

HOME > 시뮬레이션 > 모니터링

순번	Solver 명▲	작업명▲	상세 정보	제출시간	작업완료시간 (대기시간/실행시간)	상태▲
10	LagChem	double_well		2013-09-06 17:07:21	2013-09-06 17:07:34 (00:00:00 / 00:00:13)	성공
9	tdLagChem	td2		2013-09-06 16:23:38	2013-09-06 16:24:19 (00:00:00 / 00:00:41)	성공
8	tdLagChem	td2		2013-09-06 16:20:18	2013-09-06 16:21:01 (00:00:01 / 00:00:43)	성공
7	tdLagChem	td		2013-09-06 16:17:56	2013-09-06 16:18:14 (00:00:01 / 00:00:18)	성공
6	LagChem	double_well_test1		2013-09-06 16:02:39	2013-09-06 16:02:53 (00:00:00 / 00:00:14)	성공
5	LagChem	test2		2013-09-06 14:52:03	2013-09-06 14:52:16 (00:00:00 / 00:00:13)	성공
4	LagChem	test1		2013-09-06 14:45:29	2013-09-06 14:45:47 (00:00:00 / 00:00:18)	성공
3	gamess	ethyl_plan		2013-09-06 13:35:07	2013-09-06 13:49:26 (00:00:01 / 00:14:19)	성공
2	tdLagChem	test		2013-09-05 16:30:39	2013-09-05 16:30:41 (에러)	실패
1	tdLagChem	inversion		2013-09-05 16:25:35	2013-09-05 16:25:38 (에러)	실패



Your job is done



It can be post-processing

http://chem.edison.re.kr:8080/web/guest/monitoring?p_p_id=MONITORING&p_p_lifecycle

EDISON_chem Education-research Integration through Simulation On the Net 계산화학

소개 사이언스애플스토어 시뮬레이션 콘텐츠 가상실험실

모니터링 HOME > 시뮬레이션 > 모니터링

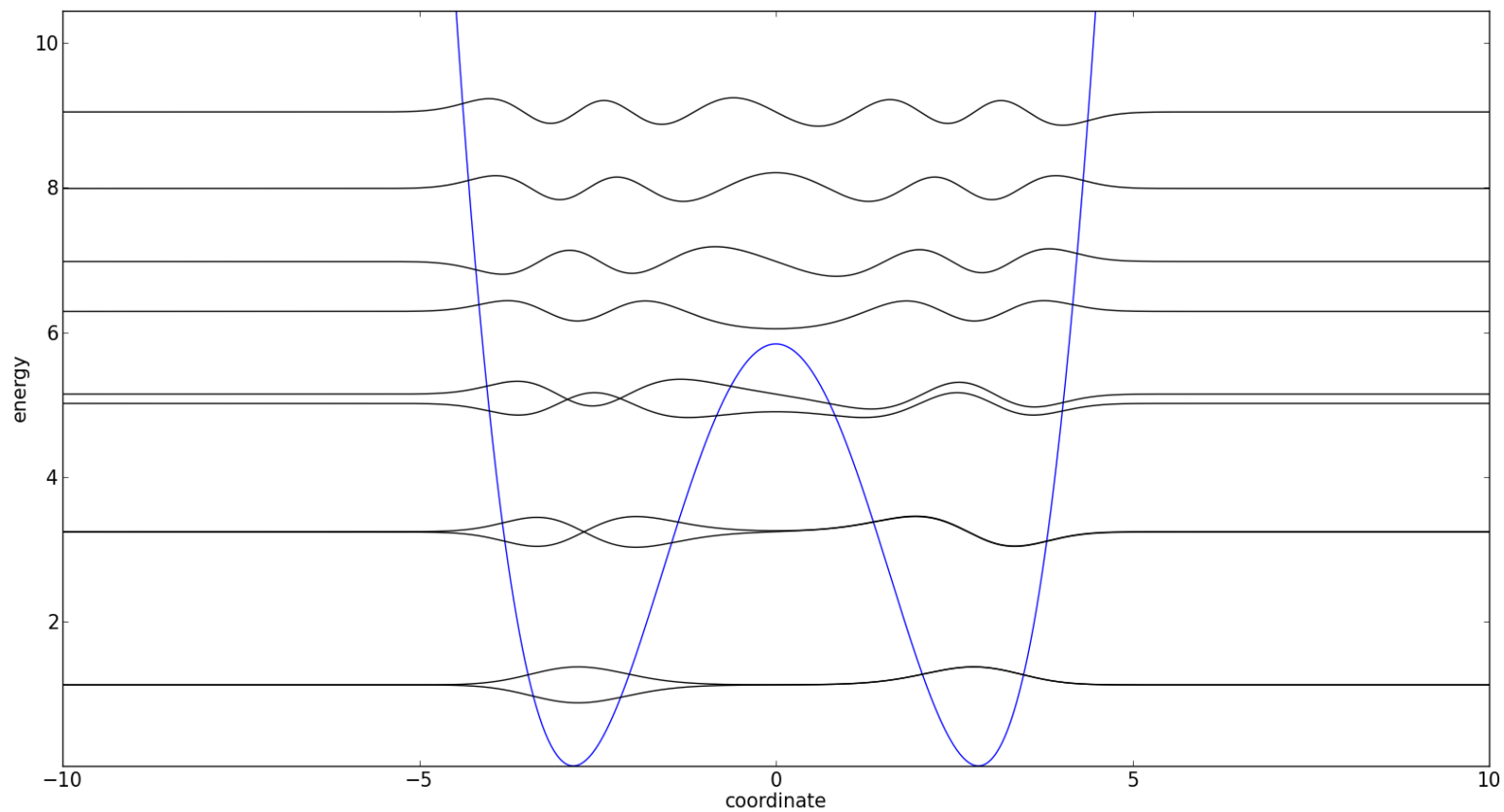
solver명 또는 작업명을 입력하세요 검색

작업명 ▲ 제출시간 ▲ 상태 ▲

순번	Solver 명 작업명	상세 정보	제출시간	작업완료시간 (대기시간/실행시간)	상태	작업 제어	중간 확인	결과 확인
10	LagChem double_well		2013-09-06 17:07:21	2013-09-06 17:07:34 (00:00:00 / 00:00:13)	성공			후처리기 ▼
9	tdLagChem td2		2013-09-06 16:23:38	2013-09-06 16:24:19 (00:00:00 / 00:00:41)	성공			후처리기 ▼
8	tdLagChem td2		2013-09-06 16:20:18	2013-09-06 16:21:01 (00:00:01 / 00:00:43)	성공			후처리기 ▼
7	tdLagChem td		2013-09-06 16:17:56	2013-09-06 16:18:14 (00:00:01 / 00:00:18)	성공			후처리기 ▼
6	LagChem double_well_test1		2013-09-06 16:02:39	2013-09-06 16:02:53 (00:00:00 / 00:00:14)	성공			후처리기 ▼
5	LagChem test2		2013-09-06 14:52:03	2013-09-06 14:52:16 (00:00:00 / 00:00:13)	성공			후처리기 ▼
4	LagChem test1		2013-09-06 14:45:29	2013-09-06 14:45:47 (00:00:00 / 00:00:18)	성공			후처리기 ▼
3	gameSS ethyl_plan		2013-09-06 13:35:07	2013-09-06 13:49:26 (00:00:01 / 00:14:19)	성공			후처리기 ▼
2	tdLagChem test		2013-09-05 16:30:39	2013-09-05 16:30:41 (에러)	실패			
1	tdLagChem inversion		2013-09-05 16:25:35	2013-09-05 16:25:38 (에러)	실패			

Download the results and save them to the computer

After download, extract the file and show the results



LagChem show the eigenstates about the inserting potential.
You can solve many problems.

2. tdLagChem

EDISON_chem
Education-research Integration through Simulation On the Net
계산화학

소개 사이언스애플스토어 시뮬레이션 콘텐츠 가상실험실

시뮬레이션

HOME > 시뮬레이션 > 시뮬레이션 실행

워크플로우 선택
SW선택 사용자지정

시뮬레이션 생성

파라미터 입력 / 작업제출

문제필터 검색 전체보기

등록일시 기판명 SW명

순번	SW명	버전	기관명	등록자	등록일시	메뉴얼	상세정보
14	Wavepacket Dynamics Program	Ver 1.0	서울대학교	신석민	2013-05-24	메뉴얼	상세보기
13	tdLagChem	Ver 1.0	KAIST	김우연	2013-05-24	메뉴얼	상세보기
12	생체분자의 용매화 자유에너지 계산 프로그램	Ver 1.0	숙명여자대학교	함시현	2013-05-24	메뉴얼	상세보기
11	양자역학을 적용한 다킹 프로그램(QM_esp)	Ver 1.0	고려대학교	조은성	2013-05-24	메뉴얼	상세보기
10	LagChem	Ver 1.0	KAIST	김우연	2013-05-24	메뉴얼	상세보기
9	Huckel orbital method	Ver 1.0	연세대학교	심은지	2013-05-24	메뉴얼	상세보기

1 2 3 4

다음 단계

- 1) Click tdLagChem
- 2) “다음 단계” button is activated and click it

시뮬레이션

HOME > 시뮬레이션 > 시뮬레이션 실행

워크플로우 선택

SW선택 | 사용자지정

시뮬레이션 생성

파라미터 입력 / 작업제출

워크플로우 정보

1. Dimension 1-D	2. Pre-processor Upload	3. Solver tdLagChem	4. Post-processor (Auto) Download
----------------------------	-----------------------------------	-------------------------------	---

인스턴스 정보

시뮬레이션 명

1) Fill in your job name

전처리기 정보

전처리기 데이터를 입력 하세요

2) Click and insert parameters

이전 단계

다음 단계

EDISON_chem

소개 사이언스앱스토어 시물레이션 콘텐츠 가상실험실

시물레이션

전처리기 데이터를 입력 하세요

파일 업로드

input_revised_tdLagChem.txt

```
points=1000
length=20
time_step=0.05
total_time=20
normalize_factor=1
indice = 0,1
coef = 1,1
potential=100*np.power(np.cos(x/4)-np.cos(0.71), 2)
```

< Input Information >

- points : dividing grid for integrating a length
- length : total length
- time_step
- total_time
- normalize_factor
- indice: choose the wavefunction that you want to see.
- coef: weight factor for wavefunctions
- potential : any potential

ex) harmonic oscillator, Morse potential

1) Click and insert input file (*.txt)
2) Upload and confirm

시뮬레이션

HOME > 시뮬레이션 > 시뮬레이션 실행

워크플로우 선택

SW선택 사용자지정

시뮬레이션 생성

파라미터 입력 / 작업제출

워크플로우 정보

1. Dimension 1-D	2. Pre-processor Upload	3. Solver tdLagChem	4. Post-processor (Auto) Download
----------------------------	-----------------------------------	-------------------------------	---

인스턴스 정보

시뮬레이션명 **td_double_well**

설명

전처리기 정보

전처리기 데이터를 입력하세요

이전 단계

Check the Simulation name and click "다음 단계"

EDISON_chem

소개 사이언스맵스토어 시뮬레이션 콘텐츠 가상실험실

시뮬레이션

워그플로우 선택 SW선택 시뮬레이션 생성 파라미터 입력 / 작업제출

파라미터 정보
파라미터정보가 없습니다.
작업생성 버튼을 클릭하세요.

스크린 샷

작업 생성

작업제출

이전 단계 모나리방

1) Click "작업 생성"

EDISON_chem

소개 사이언스맵스토어 시뮬레이션 콘텐츠 가상실험실

시뮬레이션

워그플로우 선택 SW선택 시뮬레이션 생성 파라미터 입력 / 작업제출

파라미터 정보
파라미터정보가 없습니다.
작업생성 버튼을 클릭하세요.

스크린 샷

작업 생성 목록

작업명	상태	작업제출시간
#001 td_double_well		

작업 제출

이전 단계

2) Change this form and activation "작업 제출"

3) Click "작업 제출"

시뮬레이션

HOME > 시뮬레이션 > 시뮬레이션 실행

워크플로우 선택 (SW선택, 사용자지정) > 시뮬레이션 생성 > 파라미터 입력 / 작업제출

파라미터 정보
파라미터정보가 없습니다.
작업생성 버튼을 클릭하세요.

스크린 샷

no image no image

작업생성 목록 Refresh

<input checked="" type="checkbox"/>	작업명	상태	작업제출시간
<input checked="" type="checkbox"/>	#001 td_double_well	QUEUED	2013-09-06 18:13:33

You can check your job submission

모니터링

모니터링

HOME > 시뮬레이션 > 모니터링

solVer명 또는 작업명을 입력하세요

순번	SW명 ▲	작업명 ▲	상세 정보	제출시간	작업완료시간 (대기시간/실행시간)	상태 ▲
11	tdLagChem	td_double_well		2013-09-06 18:07:31	(00:00:00 / 실행중)	
10	LagChem	double_well		2013-09-06 17:07:21	2013-09-06 17:07:34 (00:00:00 / 00:00:13)	
9	tdLagChem	td2		2013-09-06 16:23:38	2013-09-06 16:24:19 (00:00:00 / 00:00:41)	
8	tdLagChem	td2		2013-09-06 16:20:18	2013-09-06 16:21:01 (00:00:01 / 00:00:43)	
7	tdLagChem	td		2013-09-06 16:17:56	2013-09-06 16:18:14 (00:00:01 / 00:00:18)	
6	LagChem	double_well_test1		2013-09-06 16:02:39	2013-09-06 16:02:53 (00:00:00 / 00:00:14)	
5	LagChem	test2		2013-09-06 14:52:03	2013-09-06 14:52:16 (00:00:00 / 00:00:13)	
4	LagChem	test1		2013-09-06 14:45:29	2013-09-06 14:45:47 (00:00:00 / 00:00:18)	
3	gameSS	ethyl_plan		2013-09-06 13:35:07	2013-09-06 13:49:26 (00:00:01 / 00:14:19)	
2	tdLagChem	test		2013-09-05 16:30:39	2013-09-05 16:30:41 (에러)	

Your job is working

모니터링

HOME > 시뮬레이션 > 모니터링

solver명 또는 작업명을 입력하세요 검색

작업명 ▲ 제출시간 ▲ 상태 ▲

순번	SW명 ▲	작업명 ▲	상세 정보	제출시간	작업완료시간 (대기시간/실행시간)	상태 ▲
11	tdLagChem	td_double_well		2013-09-06 18:07:31	2013-09-06 18:08:12 (00:00:00 / 00:00:41)	성공
10	LagChem	double_well		2013-09-06 17:07:21	2013-09-06 17:07:34 (00:00:00 / 00:00:13)	성공
9	tdLagChem	td2		2013-09-06 16:23:38	2013-09-06 16:24:19 (00:00:00 / 00:00:41)	성공
8	tdLagChem	td2		2013-09-06 16:20:18	2013-09-06 16:21:01 (00:00:01 / 00:00:43)	성공
7	tdLagChem	td		2013-09-06 16:17:56	2013-09-06 16:18:14 (00:00:01 / 00:00:18)	성공
6	LagChem	double_well_test1		2013-09-06 16:02:39	2013-09-06 16:02:53 (00:00:00 / 00:00:14)	성공
5	LagChem	test2		2013-09-06 14:52:03	2013-09-06 14:52:16 (00:00:00 / 00:00:13)	성공
4	LagChem	test1		2013-09-06 14:45:29	2013-09-06 14:45:47 (00:00:00 / 00:00:18)	성공
3	gamess	ethyl_plan		2013-09-06 13:35:07	2013-09-06 13:49:26 (00:00:01 / 00:14:19)	성공
2	tdLagChem	test		2013-09-05 16:30:39	2013-09-05 16:30:41 (에러)	실패



Your job is done



It can be post-processing

모니터링

HOME > 시뮬레이션 > 모니터링

solver명 또는 작업명을 입력하세요 검색

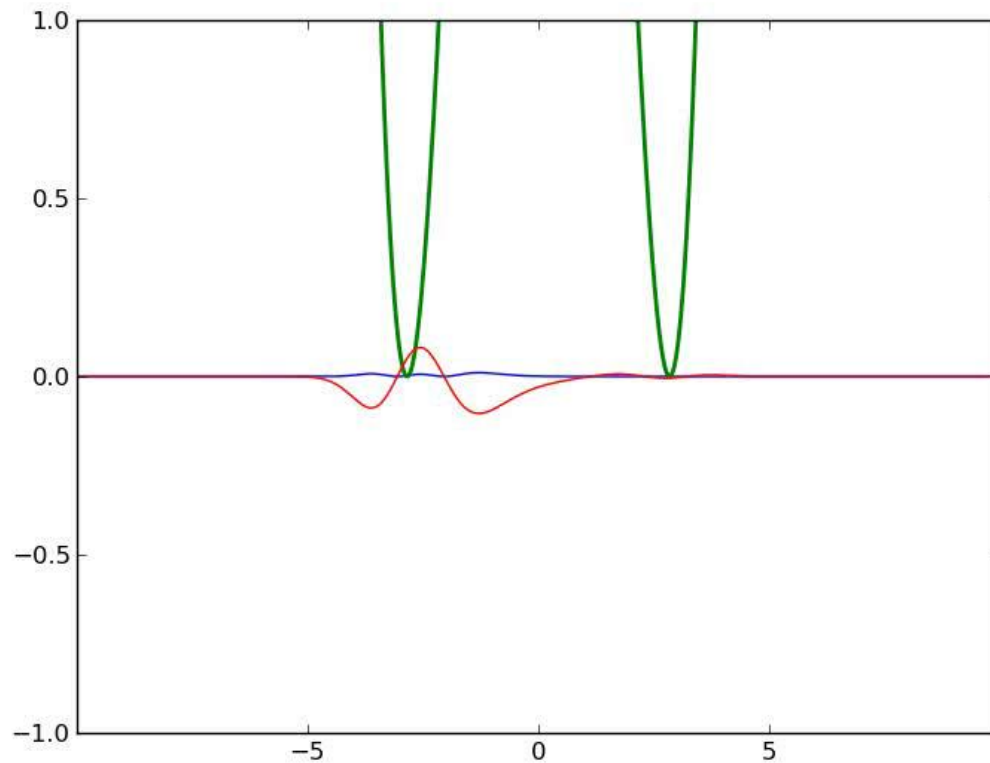
작업명 ▲ 제출시간 ▲ 상태 ▲

순번	Solver 명 작업명	상세 정보	제출시간	작업완료시간 (대기시간/실행시간)	상태
11	tdLagChem td_double_well		2013-09-06 18:07:31	2013-09-06 18:08:12 (00:00:00 / 00:00:41)	성공
10	LagChem double_well		2013-09-06 17:07:21	2013-09-06 17:07:34 (00:00:00 / 00:00:13)	성공
9	tdLagChem td2		2013-09-06 16:23:38	2013-09-06 16:24:19 (00:00:00 / 00:00:41)	성공
8	tdLagChem td2		2013-09-06 16:20:18	2013-09-06 16:21:01 (00:00:01 / 00:00:43)	성공
7	tdLagChem td		2013-09-06 16:17:56	2013-09-06 16:18:14 (00:00:01 / 00:00:18)	성공
6	LagChem double_well_test1		2013-09-06 16:02:39	2013-09-06 16:02:53 (00:00:00 / 00:00:14)	성공
5	LagChem test2		2013-09-06 14:52:03	2013-09-06 14:52:16 (00:00:00 / 00:00:13)	성공
4	LagChem test1		2013-09-06 14:45:29	2013-09-06 14:45:47 (00:00:00 / 00:00:18)	성공
3	gamess ethyl_plan		2013-09-06 13:35:07	2013-09-06 13:49:26 (00:00:01 / 00:14:19)	성공
2	tdLagChem test		2013-09-05 16:30:39	2013-09-05 16:30:41 (메러)	실패

작업 제어	중간 확인	결과 확인
		후처리기 ▼
		후처리기 ▼
		후처리기 ▼
		후처리기 ▼
		후처리기 ▼
		후처리기 ▼
		후처리기 ▼
		후처리기 ▼
		후처리기 ▼
		후처리기 ▼
		후처리기 ▼

Download the results and save computer

After download, extract the file and show the results



tdLagChem shows the wavepacket propagation.
You can solve many problems.

THE END