## Configuración de la pasarela de Materials Studio para el Clúster Drago

Una vez instalado el programa Materials Studio 2022 e iniciando sesión de VPN-Forticlient, si fuera necesario, configurar la pasarela de la siguiente manera:

- prueba3 Materials Studio [SWNT CASTEP Energy\SWNT DMol3 Energy\SWNT DMol3 Energy (2)\SWNT.xsd]
  File Edit View Modify Build Tools Statistics Modules Window Help Atom Volumes & Surfaces **⋋ ∲│⋔ ∲ - Ҵ @ │ ℓ ⊂ - ル - ル - ⋈ -** 隊 - │ ∅ ║ - ☱ - ⋿ - ӊ - │ ∰ **Ձ** : 🗋 • 🔒 🖄 🎨 🗠 🖾 Find Equivalent Atoms 🔣 - 🛵 🕴 A 🔍 🐵 🕼 🛊 🕼 🛛 🛣 🖗 - 🍪 - 🐲 🛠 - 🙌 - 器 - 😹 - 🚳 - 😹 - 🚱 - 😹 - 🥵 - 🕺 -Reaction Preview e e 1 1 🖸 🛃 📕 Superpose Structures Miller Planes Pro Brillouin Zone Path 🕒 🗙 📬 🔯 🖗 ⊻ibrational Analysis 📊 prueba3 😑 😋 SWNT CASTEP Ene Vectors SWNT DMol3 Er Scripting 🗊 Settings Organizer SWNT DM SWNT -SWNT.: SWNT.i Status. SWNT.i File Transfer Syver Console Options... SWNT - Cal Description Job Id Gateway Server Status Progress Start Time Results Fo... SWNT.inpu SWNT - Calcula 🛐 Status.txt 8 SWNT Converg () () ws the console for managing server configurations and jobs
- 1. Abrir Materials Studio 2022 y seleccionar Tools y Server Console

2. En la Ventana de Server Console seleccionar Nuevo -> Server Gateway

🚡 Server Console - [Console Root\Server Management\Server Gateways] 👘 🔲 🔲 🔀								
Archivo Acción Ver Ayuda								
← → Ref	fresh All Gateway Data							
Consc Nue	evo	Server Gateway	Location		# Serv :	State		
⊡∰ 5¢ ⊡중	portar lista	≹M\$Computer	http://localhost:18888/		35			
		<				>		

3. Introducir los datos señalados en negrita en los apartados correspondientes:

## URL https: dragoms.csic.es

## Port Number: 18888

## y marcar en Https Settings todas las casillas

New Server Gatev	vay	$\times$					
URL: https:// Port Number: Name:	dragoms.csic.es	18888					
Run Diagnostics		10000					
Connection <<	ОК	Cancel					
Proxy Settings    Address:    Port:      C Use proxy    0      Image: Use Internet setting    0      Do not use proxy    0							
Timeout: 10 seconds							
Https Settings							
I✓ Use https							
I gnore invalid cettificate date							
✓ Ignore unknown certificate authority							

4. Comprobar la correcta configuración pulsando en Run Diagnostics. En este paso pedirá los datos de usuario y contraseña que habrá recibido junto con esta documentación o si ya tuviera usuario de pasarela de Material Studio de una versión anterior, utilice esos mismos datos.

5. Si todo ha ido bien, ya estará disponible para ejecutar los módulos en el cluster Drago.