# NWChem

## 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 nwchem
goo-job-nanny srun -n16 nwchem nwchem-mpi.nw
```