

## Virtual Box y Quantum Mobile

Antes de la sesión teórica es importante familiarizarse con el entorno. Para ello es necesario descargarse el programa Virtual Box. Tiene versiones para todos los sistemas operativos. Una vez instalado, descargaremos la máquina virtual Quantum Mobile y la importaremos en Virtual Box.

### Pasos para descargar e instalar Virtual Box y Quantum Mobile

Descargar e instalar Virtual Box:

<https://www.virtualbox.org/>

Visitar la página de Quantum Mobile:

<https://quantum-mobile.readthedocs.io/en/latest/>

Seguir las instrucciones y descargar la versión de escritorio:

<https://quantum-mobile.readthedocs.io/en/latest/releases/versions/23.04.03.html>

Importar el fichero descargado en VirtualBox como explica aquí:

<https://quantum-mobile.readthedocs.io/en/latest/users/launch.html>

Una vez instalado podéis familiarizaros con el entorno Ubuntu-Linux. Aunque las siguientes tareas las haremos durante la sesión teórica podéis encontrar tutoriales interesantes en esta web:

<https://docs.abinit.org/tutorial/>

### Configuración de Quantum Mobile

Descargar material de ABINIT

<https://www.abinit.org/sites/default/files/packages/abinit-9.10.1.tar.gz>

Una vez dentro de Ubuntu, abrimos una terminal y configuramos nuestro environment:

```
conda activate abinit
```

```
wget https://www.abinit.org/sites/default/files/packages/abinit-9.10.1.tar.gz
```

```
tar -xvf abinit-9.10.1.tar.gz
```

```
conda install numpy
```

```
conda install pymatgen
```

```
git clone https://github.com/abinit/abipy.git
```

```
cd abipy
```

```
python setup.py install --user
```

```
export ABI_PSPDIR='/home/max/abinit-9.10.1/tests/Psps_for_tests/'
```

Las simulaciones las realizamos en el directorio:  
`/home/max/abinit-9.10.1/tests/tutorial/Input`