

MOKIT

blocked URL

- blocked URL
 - [Opis](#)
 - [Službena dokumentacija](#)
 - [Verzije](#)
 - [Primjer korištenja](#)

Opis

MOKIT (Molecular Orbital **KIT**) je alat za konverziju molekulskih orbitala generiranih različitim računalno-kemijskim aplikacijama (GAMESS, Gaussian, ORCA...) iz jednog formata u drugi.

Službena dokumentacija

- <https://github.com/1234zou/MOKIT>
- <https://gitlab.com/jxzou/mokit>

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Supek	Padobran
1.2.5	scientific/mokit/1.2.5	CPU	✓	✗

Primjer korištenja

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=8:mem=200mb
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/mokit/1.2.5
module load scientific/orca/5.0.4

fch2mkl 04-PhCOOH_def2TZVP_rhf.fchk
orca_2mkl 04-PhCOOH_def2TZVP_rhf_o -gbw
runorca.mpi --input 04-PhCOOH_def2TZVP_rhf_o.inp
```

Preuzimate polaznu *input* datoteku:

[04-PhCOOH_def2TZVP_rhf.fchk](#)