Gaussian

Svim zaposlenicima i suradnicima Sveučilišta u Zagrebu dostupan je programski paket Gaussian.

Za Gaussian nisu pripremljeni moduli nego se pokreće pomoću pripremljenih skripti. Skripte su spremljene u direktoriju /usr/local/bin pa nije potrebno navoditi punu putanju. Dostupne verzije su:

Verzija	Skripta
Gaussian 3	dog03-64
Gaussian 9 rev. D01	dog09
Gaussian 16 rev. A03	dog16-A03
Gaussian 16 rev. C01	dog16

> ⚠ **BITNO**
>
> Nužno je koristiti paralelne okoline ***mpisingle**.

Primjer skripte:

```
#!/bin/bash
#$ -N gauss
#$ -cwd
#$ -pe *mpisingle 28
#$ -e error/
#$ -o output/

dog16 ulaz.com
```

GaussView

Na pristupnom čvoru instaliran je GaussView verzija 6.

Za korištenje s klijenta s operacijskim sustavom Linux potrebno je uspostaviti konekciju s naredbom:

```
ssh -X teran.srce.hr
```

U slučaju operacijskog sustava MS Windows potrebno je koristiti Cygwin X Server.

Pokretanja programa se izvodi s naredbama:

```
export g16root=/usr/local/chem
source $g16root/g16/bsd/g16.profile
gv -soft
```