

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 gl6root=/usr/local/chem
source $gl6root/gl6/bsd/gl6.profile
gv -soft
```