
Nova versión 09 de Gaussian no Finis Terrae

- Actualizado (28.12.2009)

O día 23 de Decembro de 2009, instalouse a versión 09 de Gaussian no Finis Terrae.

Este paquete permite o cálculo de propiedades (enerxías, frecuencias de vibración, xeometría óptima, etc.) de moléculas e intermedios de reacción, fundamentalmente mediante métodos ab initio (teóricos). Tamén incorpora algúns métodos semiempíricos O paquete ten requirimentos de CPU, memoria e disco considerables nos cálculos ab initio, que son os utilizados habitualmente. Ademais, dependendo da complexidade/exactitude do método utilizado, os requirimentos de CPU e disco aumentan. Os métodos máis exactos (p.ex., MP4) manexan arquivos temporais superiores aos 2 GB na maioría dos casos.

Na páxina [WEB Changes Between Gaussian 09 and Gaussian 03](#) pode consultar os principais cambios desde a versión 03.

Máis información