
Instalada a nova versión de Gaussian 98

- Actualizado (17.11.2005)

Xa está instalada e dispoñible en fase de probas a última versión do programa Gaussian 98, en concreto a versión A.11.3. Polo de agora, esta versión atópase instalada no multiprocesador vectorial VPP300 no directorio /opt/g98A11/g98.

Para executar a nova versión utilice /opt/g98A11/g98/g98

Os resultados dos tests realizados atópanse en /opt/g98A11/g98/tests/fujitsu

Mentres que os tests de referencia están en /opt/g98A11/g98/tests/sgi

A nova versión inclúe novas funcionalidades así como correccións de erros existentes en versións anteriores (ver as "release Notes") en <http://www.gaussian.com/00000010.htm> ou neste arquivo .pdf

Tamén cambiou a referencia para as citas nas publicacións. A nova versión entrará en fase de produción a partir do vindeiro 15 de maio. Para calquera dúbida póñase en contacto con .