
Novas aplicacións de modelización molecular e de química cuántica

- Actualizado (17.11.2005)

O paquete de modelización en química molecular NWChem xa se atopa ao dispor dos usuarios no superordenador HPC 4500. Poden atopar información acerca das características e funcionalidades deste paquete na sección Computación-Aplicacións.

Por outra banda, o paquete de química cuántica GAMESS que se atopaba dispoñible no VPP300 está agora tamén ao dispor dos usuarios no HPC 4500.

Atopará máis información acerca deste paquete na sección Computación-Aplicacións.

Se ten alguna dúbida sobre o emprego destes paquetes, contacte cos técnicos do CESGA a través do buzón .