
O GAUSSIAN 98 xa está ao dispor dos usuarios do CESGA

- Actualizado (17.11.2005)

Dende o día 18 de xaneiro está dispoñible a última versión de Gaussian, Gaussian 98, no ordenador VPP300E do CESGA. Todos os usuarios con acceso a este sistema poderán utilizar o novo software co comando g98. O resto da utilización do software é similar á da versión anterior, se ben engade novas capacidades de cálculo. Na seguinte dirección atópase unha descrición das capacidades e xeito de utilización do Gaussian 98:

<http://www.gaussian.com/g98.htm>

Ao empregar Gaussian 98 no CESGA deben terse en conta as seguintes particularidades:

1. Gaussian 98 só se pode executar en cola.
2. O sistema está configurado para asignar automaticamente un ficheiro de scratch, polo que o usuario non debe configurar esta variable. Sen embargo, si é conveniente especificar a memoria que require o cálculo que se quere realizar.
3. Cada usuario deberá engadir a ruta /opt/g98 ao seu PATH para poder empregar a nova versión.

A anterior versión do Gaussian (Gaussian 94) seguirá dispoñible e totalmente funcional para os usuarios do centro.

Ante calquera dúbida respecto ao uso do paquete, poden poñerse en contacto con nós chamando ao teléfono do CESGA: 981 569 810, ou ben por correo electrónico á dirección: .