
Problemas con chkmove de Gaussian 98

- Actualizado (17.11.2005)

Detectáronse algúns problemas na utilidade "chkmove" de Gaussian 98 cando se migran arquivos de checkpoint dende o HPC320 ao SVG o BeoWulf (en xeral, a sistemas baseados en Linux). O problema comunicouse a Gaussian Inc., pero polo momento non existe un parche para resolvelo.

Se teñen algún problema deste tipo, utilicen o seguinte procedemento recomendado por Gaussian Inc. para realizar o cambio do sistema operativo:

1. No HPC320 utilízalo programa "formchk". Por exemplo:

```
sc1/agomez> formchk Checkpoint file? nada.chk Read checkpoint file nada.chk Write formatted file nada.fchk
```

Esto xera un arquivo con extensión fchk

2. Copiar ese arquivo á nova máquina.

3. Executar na máquina destino o programa "unfchk". Por exemplo:

```
$ unfchk Formatted Checkpoint file? nada.fchk Read checkpoint file nada.fchk Write formatted file nada.chk
```

Se teñen algún problema con esta solución ou con calquera das utilidades de Gaussian 98, non dubiden en poñerse contacto con .