
MOPAC 93 en SPARC

- Actualizado (17.11.2005)

Instalouse en probas a versión de MOPAC93 para os ordenadores HPC4500 e AP3000. Os resultados iniciais indican unha mellora sustancial na velocidade de execución con respecto á versión que xa existe no VPP.

Para executar a nova versión deberase utilizar o comando:

`/opt/cesga/mopac/bin/mopac` (con ou sen extensión `.dat`)

Só se compilou a versión grande de ata 200 átomos. Se necesita máis de 200 átomos non dubide en poñerse en contacto con . Os exemplos dos diferentes programas pódense atopar no directorio:

`/opt/cesga/mopac/examples`

No caso de ter problemas con esta nova versión, póñase en contacto co CESGA a través de indicando no asunto do mail: ERRO MOPAC.