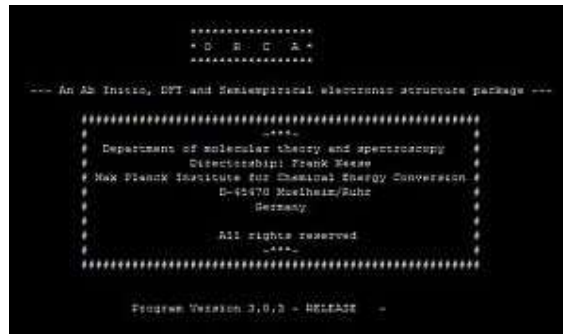


SOFTWARE ORCA DAN PENGGUNAANNYA



ORCA adalah paket program kimia kuantum Ab initio yang berisi metode struktur elektronik modern, termasuk Density Functional Theory, Many-body perturbation, Coupled Cluster, Multireference methods, and Semi-empirical quantum chemistry methods. Bidang penerapan utamanya adalah molekul yang lebih besar, kompleks logam transisi, dan sifat spektroskopi. ORCA dikembangkan oleh kelompok penelitian Frank Neese dan didukung oleh Max Planck Institute untuk kimia dan konversi energi. Versi gratis hanya tersedia untuk penggunaan akademis di institusi akademis.

Apa yang dapat dilakukan ORCA?

ORCA mampu melakukan optimasi geometri dan memprediksi sejumlah besar parameter spektroskopi pada berbagai level teori. Selain penggunaan teori Hartree Fock, teori fungsi kerapatan (DFT) dan metode semiempiris, metode kimia kuantum ab initio tingkat tinggi, berdasarkan interaksi konfigurasi dan metode kluster gabungan, dimasukkan ke dalam ORCA ke tingkat yang semakin meningkat.

ORCA sangat powerful dengan kemampuan komputasi yang beragam namun diberikan dengan lisensi gratis, tetapi kelemahan ORCA adalah tidak adanya Graphical User Interface (GUI) seperti pada software-software kimia lainnya, namun kita bisa mengatasi masalah ini dengan menggunakan software lainnya untuk membuat input file, maupun untuk melihat hasil perhitungan output file.

Kita dapat menggunakan Avogadro untuk membuat input file ORCA. Adapun untuk melihat output file kita dapat menggunakan Avogadro, Gabedit ataupun MoCalc2012.

ORCA juga mendukung untuk parallel programming, yaitu menggunakan beberapa processor dalam satu perhitungan. Metode parallel yang digunakan adalah Message Passing Interface (MPI). Mengingat komputer dan laptop generasi sekarang setidaknya sudah menggunakan 2 atau lebih processor.

Struktur umum file input ORCA mengandung beberapa blok berikut:

- **BASIS:** Basis sets are specified
- **CASSCF:** Control of CASSCF/NEVPT2 and DMRG calculations
- **CIS:** Control of CIS and TD-DFT calculations (synonym is TDDFT)
- **COORDS:** Input of atomic coordinates
- **COSMO:** Control of the conductor like screening model
- **ELPROP:** Control of electric property calculations

- **EPRNMR:** Control of SCF level EPR and NMR calculations
- **FREQ:** Control of frequency calculations
- **GEOM:** Control of geometry optimization
- **MD:** Control of molecular dynamics simulation
- **LOC:** Localization of orbitals
- **MDCI:** Controls single reference correlation methods
- **METHOD:** A computation method is specified here
- **MP2:** Controls the details of the MP2 calculation
- **MRCI:** Control of MRCI calculations
- **OUTPUT:** Control of output
- **PAL:** Control of parallel jobs
- **PARAS:** Input of semiempirical parameters
- **PLOTS:** Control of plot generation
- **REL:** Control of options relativistic
- **RR:** Control of resonance Raman and absorption/fluorescence bandshape calculations
- **SCF:** Control of the SCF procedure

Komentar dalam file dimulai dengan tanda '#' dan ditutup dengan tanda '#'. Suatu Blok dimulai dengan tanda '%' dan diakhiri dengan tanda 'end'.

Berikut ini contoh file input untuk hitungan energi single point pada air.

```
## avogadro generated ORCA input file
# Advanced Mode
#
! B3LYP SP 6-31G NormalPrint NoGrid NormalSCF

%scf
MaxIter 125
end

* xyz 0 1
C -0.21662 1.77127 0.00000
H 0.85338 1.77127 0.00000
H -0.57328 1.92340 0.99727
H -0.57329 0.83155 -0.36689
H -0.57329 2.55887 -0.63038
```

Secara umum file input tidak peka terhadap huruf besar/kecil. Namun, di dalam string input bersifat “case sensitive” pada sistem Linux.

Versi paralel ORCA dapat diinstal di sistem cluster HPC. Ini dapat dijalankan dalam mode single-core atau parallel (MPI). ORCA membutuhkan MPI bahkan untuk komunikasi antar core pada satu node. Operasi inti tunggal tidak memerlukan spesifikasi apa pun. Untuk mode MPI, Anda harus memberikan jumlah proses di file input ORCA:

```
%pal nprocs n end
```

di mana n (bilangan bulat positif) mewakili jumlah prosesor yang akan digunakan.

Berikut modul yang dapat diparalelkan:

- SCF
- SCFGRAD
- CASSCF / NEVPT2
- MDCI (Coupled-Cluster)
- CPSCF
- CIS/TDDFT
- MP2 and RI-MP2 (including gradient)
- EPRNMR
- SOC
- ROCIS
- PC
- MRCI
- Numerical Gradients and Frequencies

Sitasi:

Karya yang diterbitkan berdasarkan penggunaan ORCA harus memuat kutipan yang sesuai. Referensi umum untuk ORCA adalah

1. Neese, F. (2012) The ORCA program system, *Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci.*, 2, 73-78.
2. Neese, F. (2017) Software update: the ORCA program system, version 4.0, *Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci.*, 8, e1327.

Informasi tambahan:

Official ORCA website: <https://orcaforum.kofo.mpg.de/>

ORCA download: <https://orcaforum.kofo.mpg.de/app.php/dlxt/>

ORCA online manual: https://orcaforum.kofo.mpg.de/app.php/dlxt/?view=detail&df_id=80

ORCA Input Library: <http://sites.google.com/site/orcainputlibrary/>

ORCA setting up: <https://sites.google.com/site/orcainputlibrary/setting-up-orca>

ORCA configuration: [download](#)

TUTORIAL PENGGUNAAN ORCA

ORCA tidak memiliki Graphical User Interface (GUI) seperti pada software-software kimia lainnya, namun kita bisa mengatasi masalah ini dengan menggunakan software lainnya untuk membuat input file, maupun untuk menjalankan dan melihat hasil perhitungan output file.

Untuk menjalankan ORCA dapat dilakukan menggunakan cara-cara berikut:

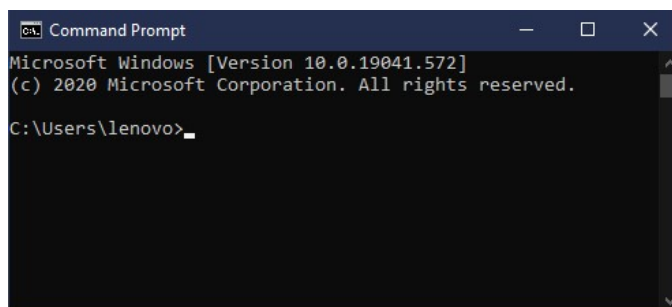
1. Menggunakan terminal/console Windows atau Linux
2. Menggunakan GUI Gabedit
3. Menggunakan GUI MoCalc2012

Tentu saja sebelum menggunakan 3 cara di atas kita harus sudah memasang ORCA dulu, untuk itu silahkan download software-software yang diperlukan seperti yang terdapat di bawah ini.

- 1) Download Avogadro melalui link:
<https://drive.google.com/file/d/14gx4xs6ZVemXZbJvyZyXYzDIgaaik0mb/view>
- 2) Download Gabedit melalui link:
<https://drive.google.com/file/d/1wWoLyFjMKQQRXKN91boKyFSUbJ4kg-JY/view>
- 3) Download MoCalc2012 melalui link:
<https://liquidtelecom.dl.sourceforge.net/project/mocalc2012/MoCalc2012-setup4203-win64.exe>
- 4) Download ORCA melalui link:
 1. https://orcaforum.kofo.mpg.de/app.php/dlxt/?sort_by=0&order=ASC
 2. https://drive.google.com/file/d/1uwX2K3ZPateLjSjQ9q03quPSPQa_MuLT/view
- 5) Instalasi dan tutorial menggunakan ORCA dengan bantuan AVOGADRO dan Gabedit dapat dilihat pada link:
<https://drive.google.com/file/d/1fDLOVC4ybmztTLJ-RlpEMxkbjIzD3eBS/view>
- 6) Modul kimia komputasi dapat didownload melalui link:
https://drive.google.com/file/d/192vf71Y4_Jac76NMfh4ZrZR8KYdYb4Ra/view
- 7) Video tutorial menggunakan Avogadro:
<https://drive.google.com/file/d/1oIW83CKNA377sUNmsmH8r5-5rzYxmkjg/view>

Running ORCA Menggunakan Terminal/Console Windows

1. Pastikan sudah mendownload dan memasang ORCA pada direktori tertentu
2. Buka terminal di Windows dengan klik kiri pada **Search** Windows, kemudian ketik: **cmd**, lalu klik **Command Prompt App**, muncul gambar berikut:



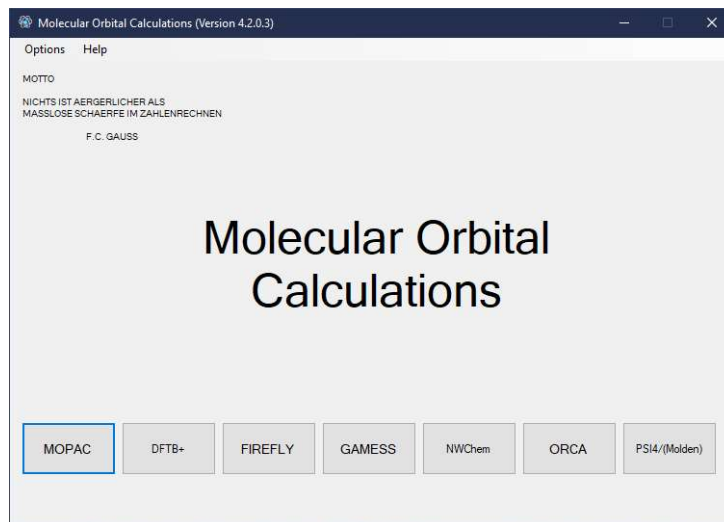
3. Misal kita menempatkan ORCA di direktori **C:\Orca**, maka di kotak **Command Prompt** di atas kita ketik: **cd /Orca**
4. Bisa juga dilakukan bertahap sebagai berikut: 1) ketik: **cd /**, lalu ketik: **cd Orca**, bisa juga ketik: **cd orca** (huruf o kecil)
5. Perintah lain yang penting, untuk melihat isi direktori kita gunakan perintah: **dir** atau **dir/w** atau **dir/l** (bukan angka 1), untuk mundur 1 direktori ketik: **cd ..** (2 titik), untuk kembali ke root (C:\) ketik: **cd /**. Untuk membersihkan layar, ketik: **cls**.
6. Untuk menjalankan ORCA, misal kita sudah punya file **ch4.txt** (di Windows nama file input menggunakan ekstensi file TXT) pada folder **ch4**, maka ketik perintah berikut: **Orca ch4/ch4.txt > ch4/ch4.out**. Artinya ORCA akan menjalankan file input **ch4.txt** di folder **ch4** dan hasilnya (file output **ch4.out**) akan diletakkan di folder **ch4** juga.

CATATAN: Sebaiknya file input diletakkan pada folder masing-masing, jadi setiap file input masing-masing diletakkan pada folder terpisah, karena nanti file output-nya akan ditempatkan sesuai folder file input, sehingga tidak bercampur dengan file input dan output lainnya.

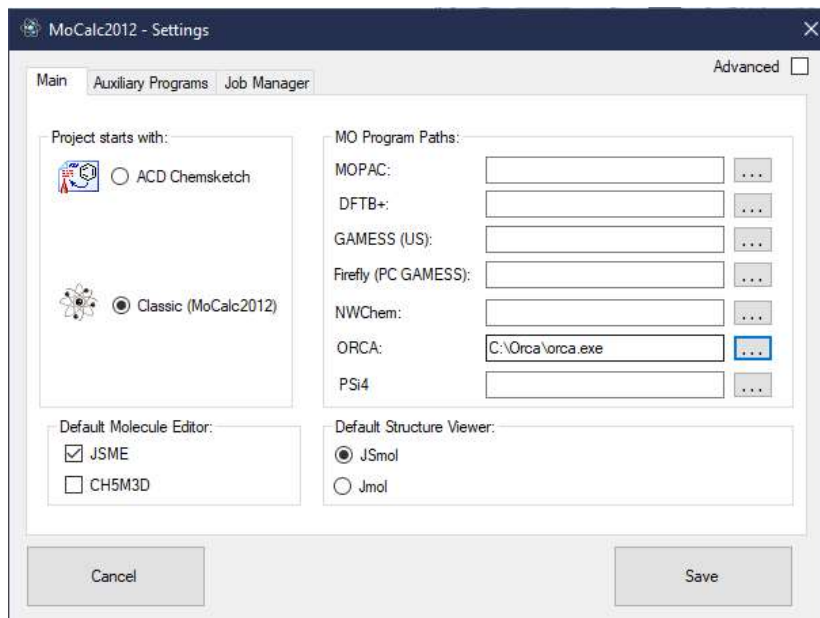
7. Jika “running” sudah selesai maka file output (**ch4.out**) dapat dilihat menggunakan **notepad** atau editor lainnya, tampilan gambar 3 dimensinya dapat dilihat menggunakan Avogadro atau aplikasi viewer lainnya.

Running ORCA menggunakan MoCalc2012

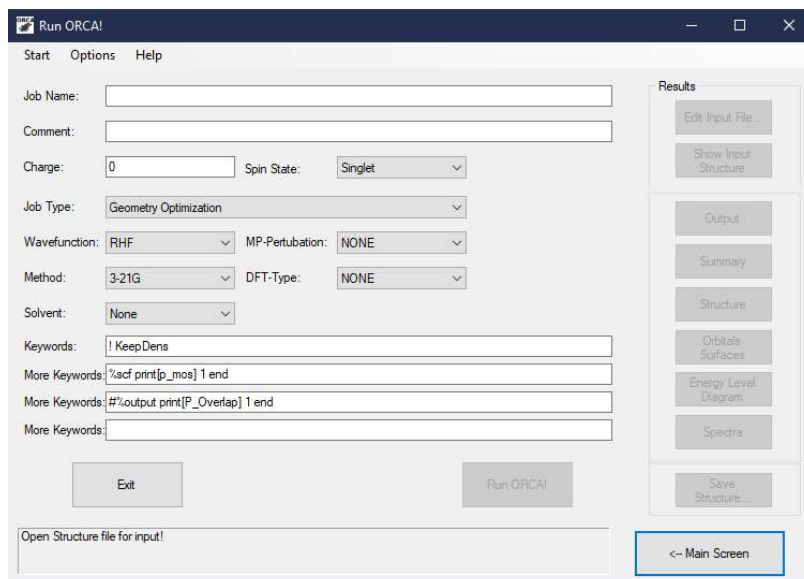
1. Pastikan sudah mendownload dan memasang ORCA pada direktori tertentu
2. Download dan install MoCalc2012, link di atas
3. Jalankan MoCalc2012, muncul gambar berikut:



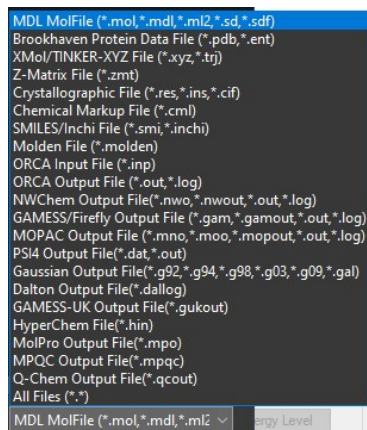
4. Jika instalasi pertama kali maka perlu mengatur **Settings**, pada Menu klik **Options > Settings...**
5. Pada **Main Settings** atur seperti gambar berikut:



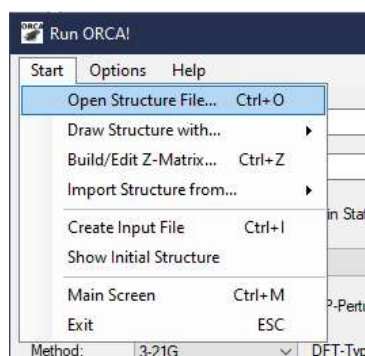
6. Bagi pemula, pilih **Classic (MoCalc2012)**, **JSME**, **Jsmol**, dan atur alamat sistem ORCA sesuai penempatan folder ORCA ketika instalasi, klik [...] untuk menuju folder lokasi sistem ORCA, misal di **C:\Orca\orca.exe**, lalu klik **Save** untuk menyimpan.
7. Bagian **Auxiliary Programs** boleh diabaikan (default), bagi yang faham bisa dilakukan pengaturan
8. Masuk ke **Job Manager**, pada bagian **Visibility** pilih semua, lalu klik **Save** untuk menyimpan
9. Pada Menu **Options > Unit Converter** bisa dilakukan pengaturan,
10. Pada halaman utama, pilih menu **ORCA** sehingga muncul tampilan



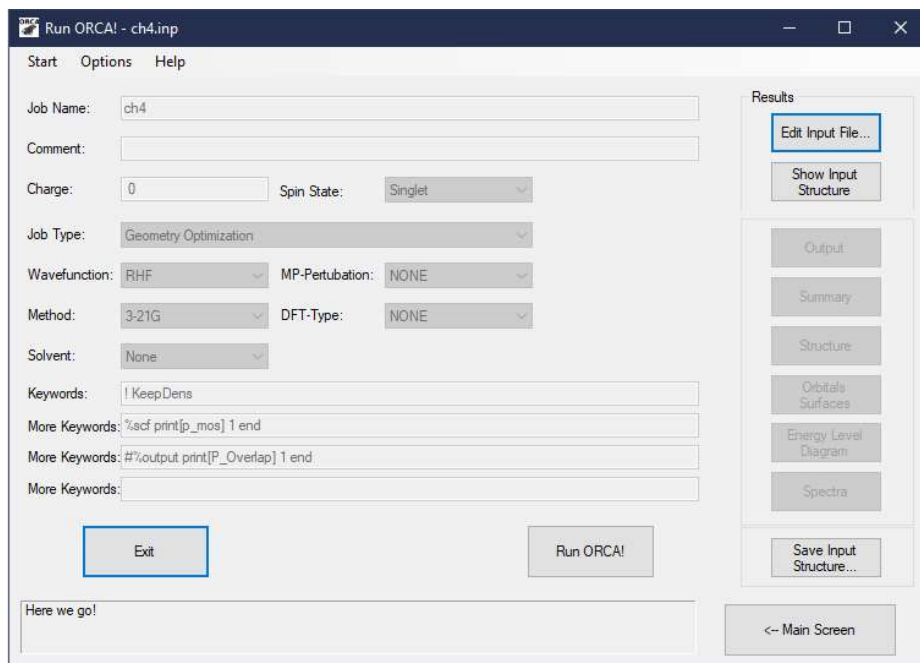
11. Sebaiknya kita sudah membuat file struktur molekulnya, bisa menggunakan Avogadro ataupun aplikasi editor lainnya, lengkapi semua dengan perintah yang diinginkan, kemudian simpan dengan ekstensi file misal **ch4.inp** atau seperti ekstensi file berikut dan **disimpan pada sebuah folder terpisah**.



12. Jika sudah tersedia file dengan ekstensi di atas maka klik **menu Start > Open Structure File ... Ctrl+O**



13. Cari file yang akan di-running, misal **ch4.inp**, jika nama file tidak muncul padahal sudah dibuat dan alamat foldernya betul, maka gunakan tipe file **All Files (*.*)** lalu pilih file yang diinginkan, lalu klik **Open**, maka pada kotak **Run ORCA!** Akan muncul gambar seperti berikut:

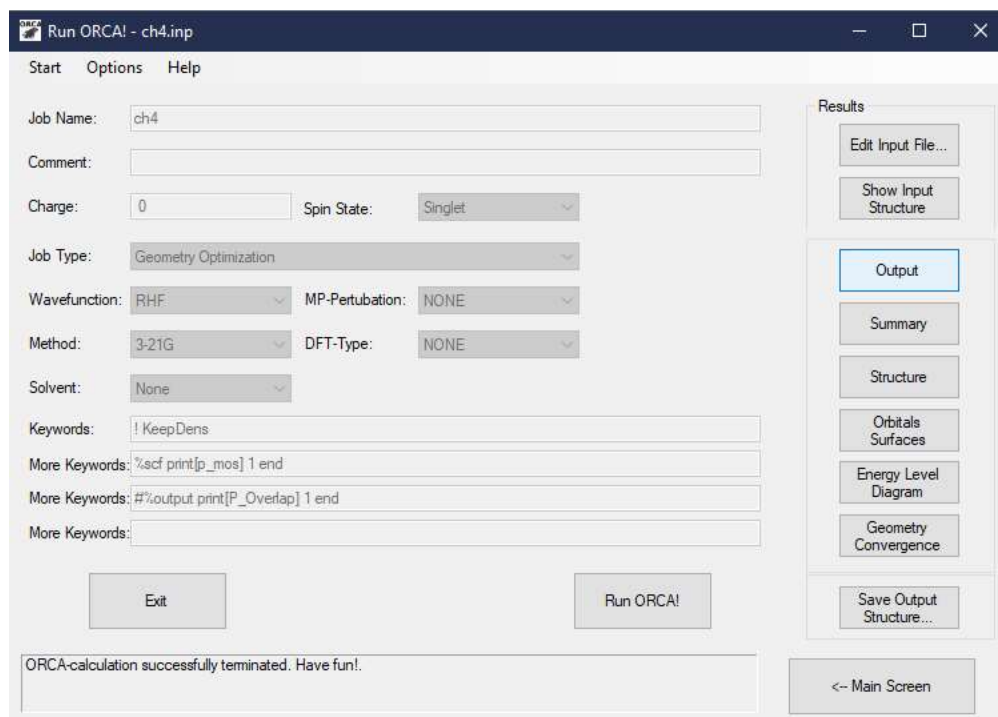


Terlihat pada kotak, bagian kiri sudah **disable**, tetapi menu bagian kanan: **Edit Input File...**, **Show Input Structure** dan **Save Input Structure** masih aktif.

14. Jika ingin mengubah file input silahkan klik menu **Edit Input File**, jika ingin melihat struktur 3D file input silahkan klik menu **Show Input Structure**, jika ingin menyimpan struktur file input maka klik **Save Input Structure**.
15. Jika edit sudah selesai maka siap untuk running. Klik menu **Run ORCA!** Maka jika tidak ada kesalahan pada file input sistem akan berjalan sampai selesai, akan terlihat keterangan sistem sedang berjalan pada bagian kotak bawah yang bertuliskan: "Here we go! Seperti gambar berikut jika sedang running



16. Tunggu sampai selesai. Jika sudah selesai, maka semua menu pada bagian kanan yang sebelumnya masih **disable** akan menjadi aktif, sebagai tanda hitungan sudah selesai.



17. Silahkan bereksplorasi dengan klik menu **OUTPUT, SUMMARY, STRUCTURE, ORBITALS SURFACES, ENERGY LEVEL DIAGRAM, GEOMETRY CONVERGENCE DAN SAVE OUTPUT STRUCURE...**
18. Selamat berkarya semoga selalu sukses! Aamiin!