

Running NWChem Menggunakan ECCE

Sumber:

<https://neax502.wordpress.com/2013/12/20/running-nwchem-menggunakan-ecce/>

Ecce merupakan interface terbaik untuk nwchem. Dulu ecce didistribusikan secara tertutup, hanya staf dan dosen yang bisa mendownload namun sekarang ecce telah didistribusikan secara bebas.

Untuk mendownload ecce tinggal isi nama, alamat email dan institusi di sini. Kemudian download saja, untuk yang 64 bit sudah ada file binary sementara untuk 32 bit kita harus mengkompilasi secara manual. Oia, kita juga bisa mengecek dependensi ecce apakah semua sudah komplit atau belum, selain itu kita juga bisa mengganti file nwchem bawaan dengan hasil kompilasi sendiri.

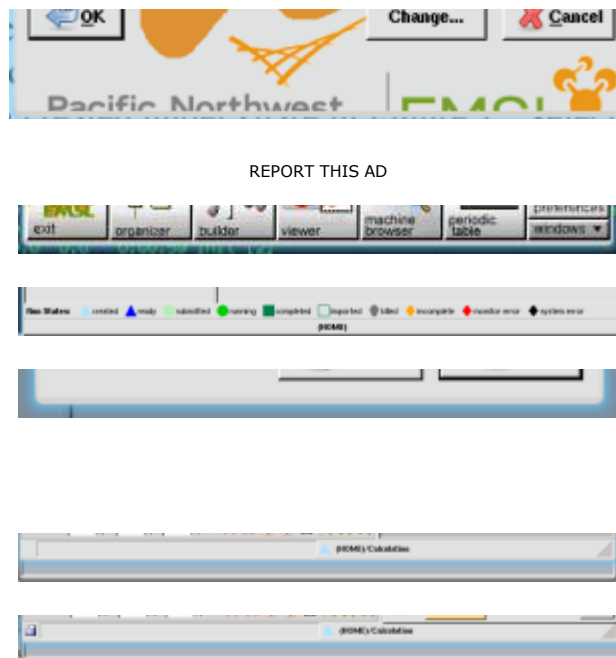
Flag agar output kita bisa dibuka di ecce adalah ecce_print alamat_file_ecce_out/namafilename.out.

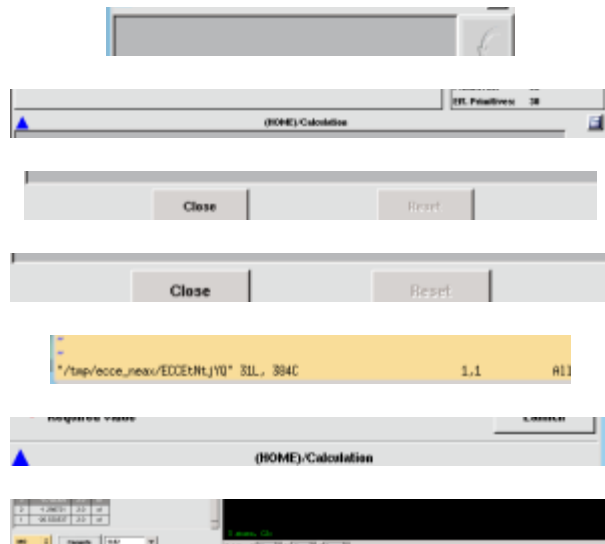
Langkah Instalasi:

1. download ecce
2. `chmod +x install_ecce.v7.0.rhel5-gcc4.1.2-m64.csh`
3. jika csh belum terinstall, install dulu dengan apt-get atau semacamnya)
4. bila perlu cek dependensi/software yang diperlukan
5. ketik 3, jika awal driver belum lengkap sebaiknya ketik 2
6. ikuti saja perintah untuk instalasi

7. masukkan kode di akhir instalasi ke `.bashrc` lalu `source .bashrc`
8. panggil `ecce` dengan perintah `ecce`
9. opsional jika ingin mengatur mesin/server bisa menggunakan perintah `ecce -admin`
10. jika diinstall menggunakan root, eksekusi perintah berikut `ecce-v7.0/server/ecce-admin/start_ecce_server` baru kemudian ketik `ecce`
11. jika ingin menambahkan gaussian03, buka `ecce -admin` kemudian masukkan **alamat file g03 (bukan folder g03)**, misalnya `/home/neax/g03/g03`

Berikut beberapa screenshot `ecce`. Builder `ecce` memiliki cara menggambar mirip dengan Gaussview. Beberapa tutorial sudah disediakan kok tenang saja...





oke, cukup sekian dan semoga bermanfa'at!