

ORCA简介

ORCA起源于Frank Neese于1999年在斯坦福大学完成博士后研究时开发的一个量子化学软件包，目前由MaxPlanck Institut für Kohlenforschung分子理论和光谱学系的研究小组和FACCTs GmbH开发维护。经过多年发展，目前版本的ORCA 6.1（截止2025年9月）已经可以实现多种量子化学方法，包括半经验、密度泛函理论、多体微扰、耦合簇和多参考方法等。ORCA本身功能强大，近些年来流行程度越来越高，用户也越来越多。

ORCA对学术用户免费但闭源，只提供编译好的二进制程序，因此ORCA的安装很简单，不需要编译源代码。

ORCA下载方式

ORCA官网是<https://orcaforum.kofo.mpg.de>，同时也是ORCA的论坛，进去注册个账号即可下载，但国内这个网址一般上不去。自ORCA 6.0之后，也可以在[faccts官网](https://www.faccts.de/)：<https://www.faccts.de/> 下载ORCA及其手册，同样也需要注册。

ORCA的手册内容详细(6.1版手册有1600多页)，既有理论知识也有丰富的例子，是非常有用的学习资料，十分建议阅读。

目前ORCA提供了windows、Linux、Macos三个平台的二进制版本，Windows下有三个版本。ORCA有一部分后HF和多参考计算功能是只有autoCI模块才能做的，比如FIC-MRCI、CCSDT等，因此需要用到这部分功能的话需要下载含autoci的包，本课程一般用不到，所以三个包都可以，推荐下载名字带有msmpi10的版本，实测Orca6.1.0.Win64.zip也可正常运行。

注意：含autoci的包解压后可能会很大，约30G。

ORCA 6.1.0-f.0

Released: 2025-06-16

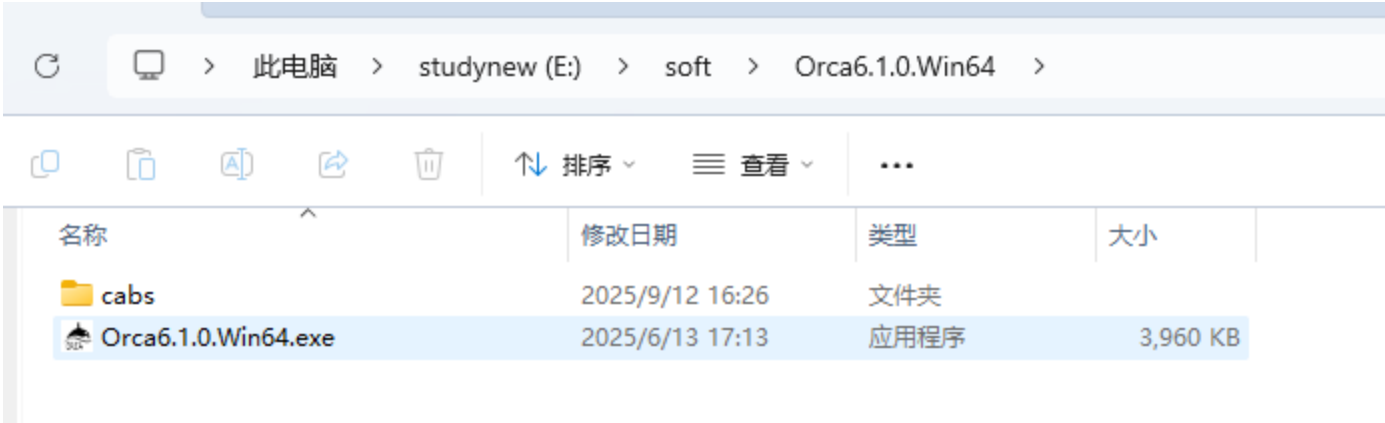
	orca_6_1_0_macosx_arm64_openmpi411.tar.bz2	macos	arm64	687.5 MiB	SHA256 
	Orca6.1.0.Win64_autoci_msmpi10.zip	windows	x86_64	8 GiB	SHA256 
	orca-6.1.0-f.0_linux_x86-64_openmpi41.tar.xz	linux	x86_64	415.6 MiB	SHA256 
	orca_6_1_0_macosx_intel_openmpi411.tar.bz2	macos	x86_64	793.5 MiB	SHA256 
	Orca6.1.0.Win64_autoci.zip	windows	x86_64	7 GiB	SHA256 
	Orca6.1.0.Win64.zip	windows	x86_64	6 GiB	SHA256 

- MANUAL
- TUTORIALS

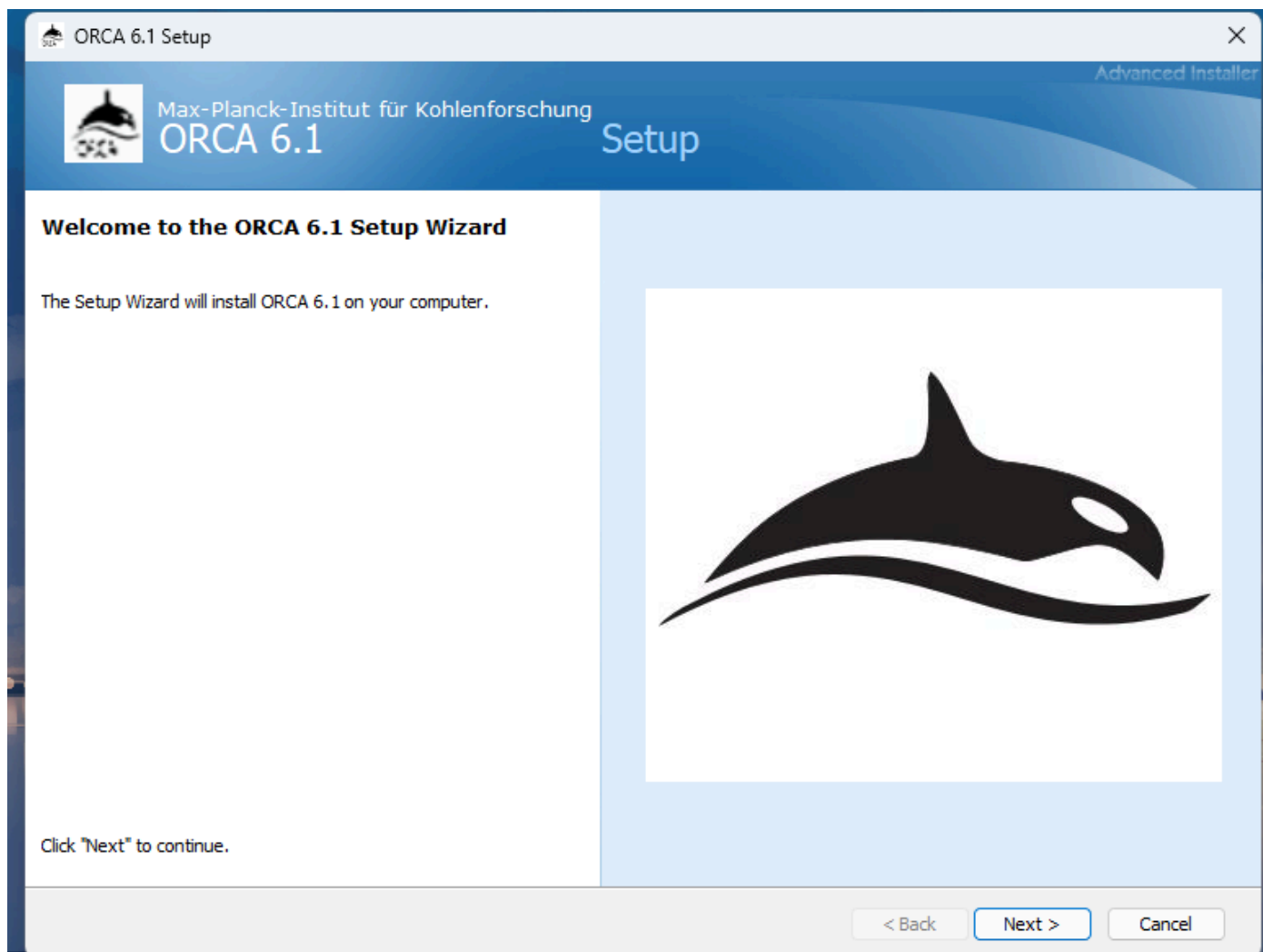
具体安装过程

ORCA 6.0 版本之后安装方式大幅度简化，可以完全通过GUI引导完成安装，下面以 Orca6.1.0.Win64.zip 为例演示安装过程：

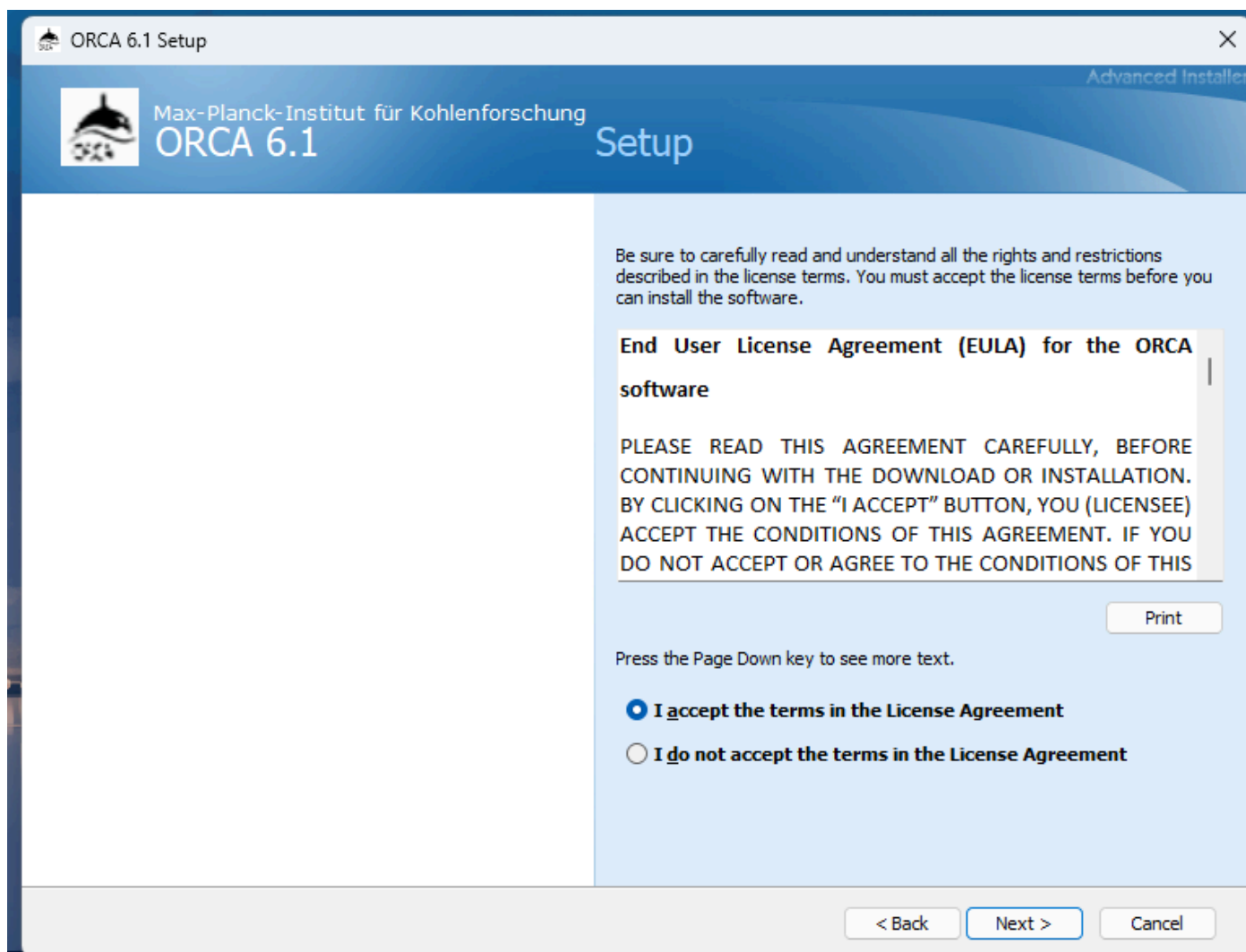
- 1. 下载相应的安装包Orca6.1.0.Win64.zip ，然后解压缩。
- 2. 进入解压缩后的 Orca6.1.0.Win64 文件夹，会看到有一个.exe程序



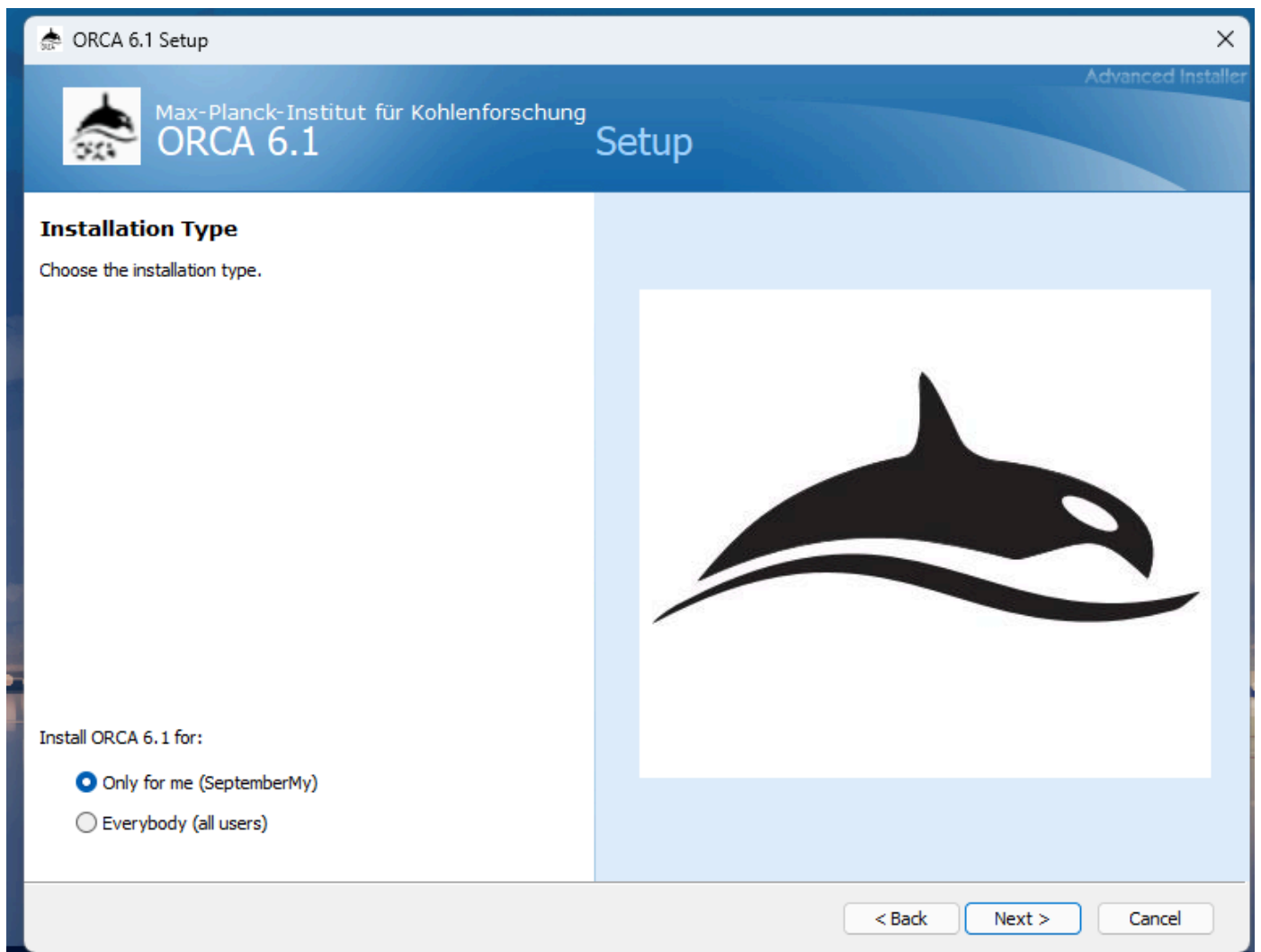
- 3. 双击运行这个.exe文件，按照指引点击 next



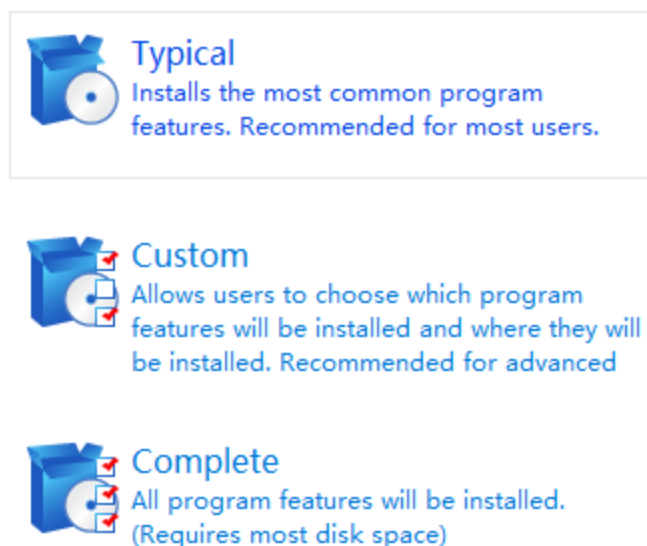
选择接受协议，即 I accept



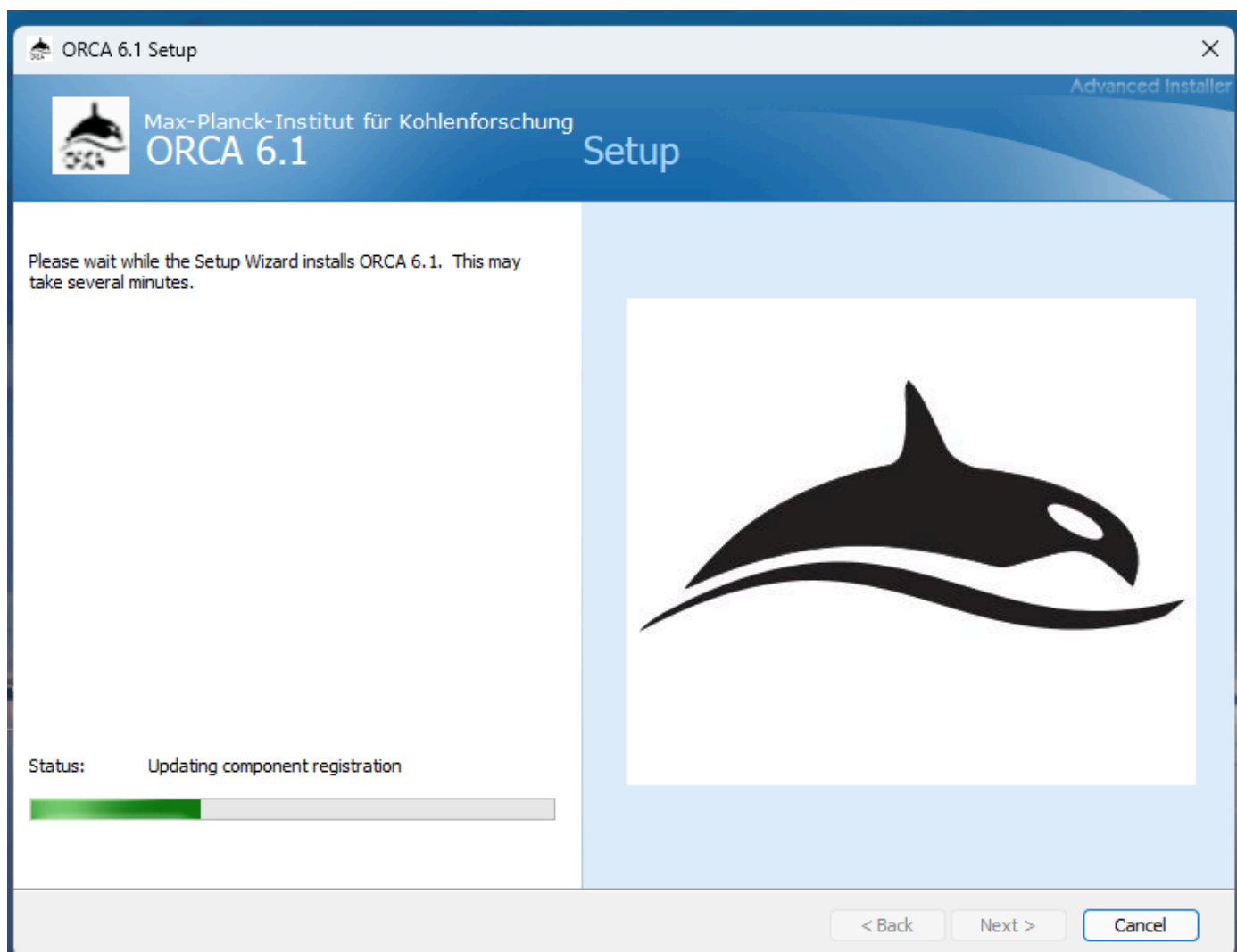
4. 选择安装方式，是仅为当前用户安装还是为所有用户安装，这里关系到安装程序是仅向当前用户的环境变量中添加ORCA路径还是为所有用户都添加，一般情况下选择 only for me (xxx) 即可。



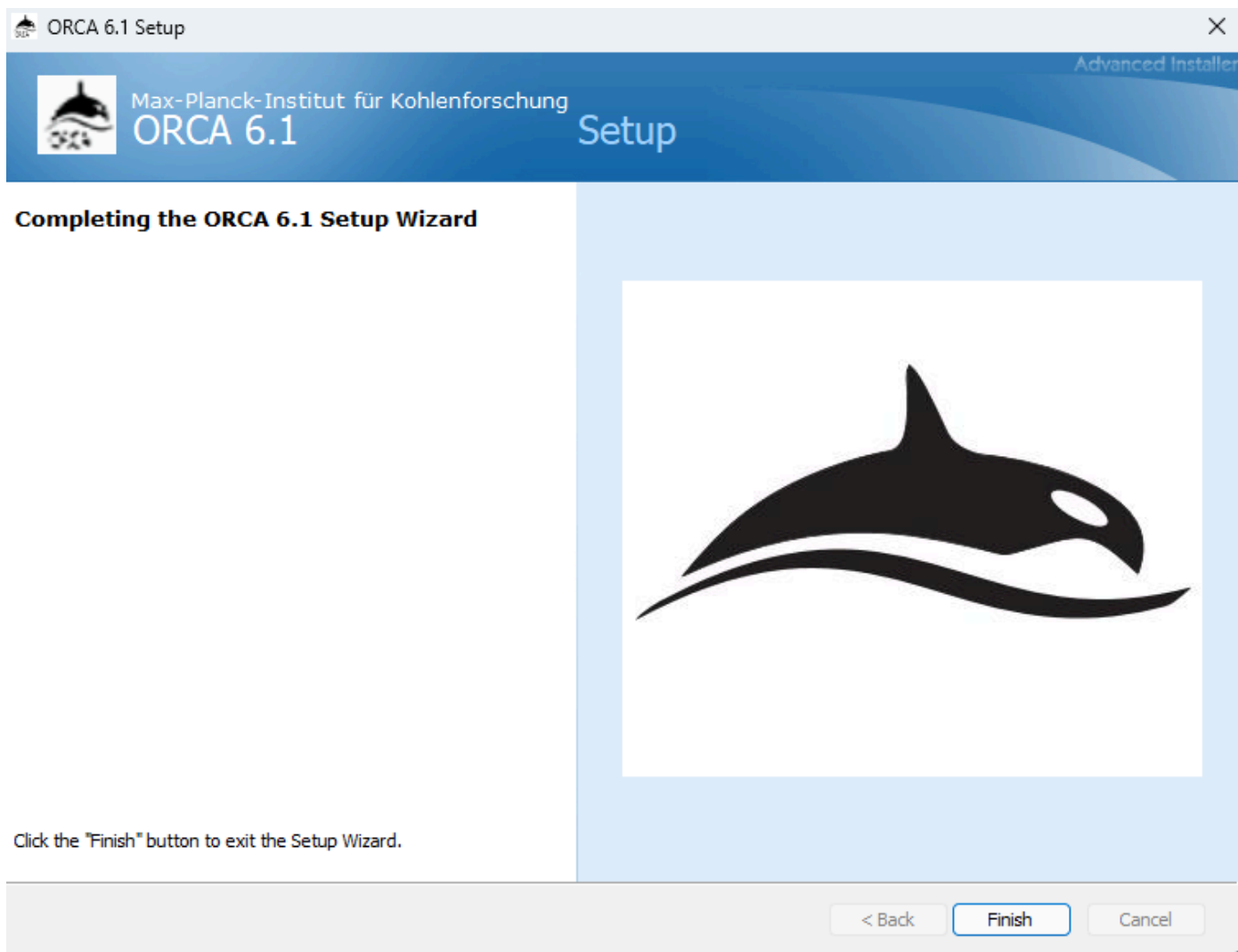
5. 这里可以选择性的安装串行版和并行版，建议选 Complete ，并在此步指定安装路径。
全部安装大概需要16GB硬盘空间。



6. 点击 install 进行安装，等安装条走完即可。



7. 进度完成后点击 Finish ，即可完成安装。



8. (可选) 如果需要并行，还需要安装MSMPI，见下文。

MSMPI的安装（可选）

上文提到，ORCA安装不需要用户自己编译源代码，理论上下载得到的二进制程序开箱即用即可，但ORCA基于MPI的方式进行并行计算，因此如果想要并行计算需要提供MPI库。

目前的6.1版本在Windows下是依赖于Microsoft MPI (MSMPI)库运行的，因此还要给系统安装MSMPI。ORCA 6可以搭配MSMPI 10.0运行。MSMPI 安装过程如下：

1. 微软官方下载MSMPI 10.0，网址为：<https://www.microsoft.com/en-us/download/details.aspx?id=57467> 有.exe和.msi两种后缀的文件，下载.exe的即可。

Microsoft MPI v10.0

Stand-alone, redistributable and SDK installers for Microsoft MPI

Important! Selecting a language below will dynamically change the complete page content to that language.

Select language

English ▼

Download

Expand all | [Collapse all](#)

▼ Details

Version:

10.0.12498.5

Date Published:

7/15/2024

File Name:

msmpisdk.msi

File Size:

2.4 MB

msmpisetup.exe

7.5 MB

Microsoft MPI (MS-MPI) v10.0 is the successor to MS-MPI v9.0.1 (9.0.12497.11, released on 3/23/2018).

MS-MPI enables you to develop and run MPI applications without having to set up an HPC Pack cluster.

This release includes the installer for the software development kit (SDK) as a separate file.

The installers for MS-MPI may be redistributed with your own applications, facilitating stand-alone installations on workstation computers as well as HPC Pack clusters.

> System Requirements

> Install Instructions

- 运行下载的后缀为exe的文件，按照引导完成安装即可，完成后会自动将MSMPI路径增加到环境变量中。

测试

安装完成后需要测试ORCA是否可以正常运行，下面给出一个例子并对Windows系统下运行ORCA的方式进行演示。

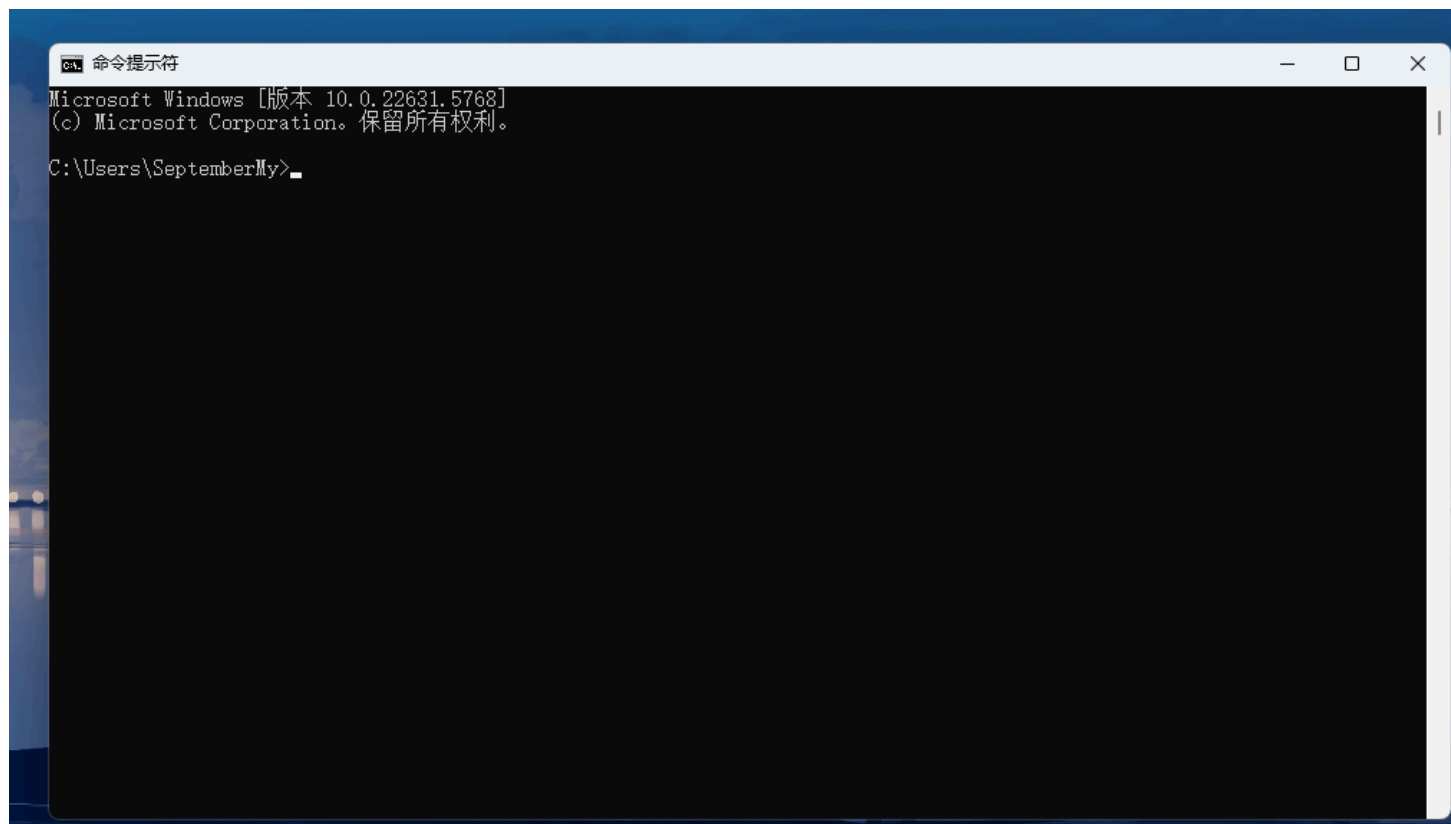
测试例子为cc-pVQZ基组下使用BLYP泛函对甲醛分子单点能的计算，输入文件内容如下：


```
%pal
  nprocs 1
end
! BLYP cc-pvqz

* xyz 0 1
C          0.00000000    0.00000000   -0.56221066
H          0.00000000   -0.92444767   -1.10110537
H          -0.00000000    0.92444767   -1.10110537
O          0.00000000    0.00000000    0.69618930
*
```

将上述文件保存为`test.inp`。

ORCA运行需要使用命令行进行，所以首先在系统搜索栏中输入 `cmd` ，打开命令提示符终端。



一般终端默认路径在C盘，假设ORCA安装路径为 `E:\orca` ，输入文件保存在 `E:\orcatest` 目录下，则需要先输入

`E:`

切换到E盘目录，然后

```
cd orcatest
```

进入到输入文件所在目录下，同时，此目录也是ORCA默认的工作目录。然后输入命令

```
E:\orca\orca test.inp > test.out
```

运行ORCA，此命令会将输出内容写入 test.out 文件中。运行完成后，如果在 test.out 文件末尾发现 ******ORCA TERMINATED NORMALLY****** 字样，那么就表示本次任务正常结束。

上述例子是单核运行ORCA，若要测试多核运行，将上述输入文件中 `nprocs 1` 改为 `nprocs n` 即可，n 为想要并行的核数。

注意：n不要超过电脑的物理核心数

此外，安装程序会自动将ORCA安装路径写入到环境变量中，因此运行命令也可以简写为

```
orca test.inp > test.out
```

如果不能运行，可以右键点击 此电脑 依次打开 属性、高级系统设置、环境变量、Path 查看ORCA安装路径是否被正确的写入到环境变量中。

参考资料

[1] [ORCA Manual Release 6.1](#)

[2] 卢天, [量子化学程序ORCA的安装方法](#)