

ORCA 설치 방법 정리

작성일자 : 20250120

작성자 : 안용상

ORCA 다운로드

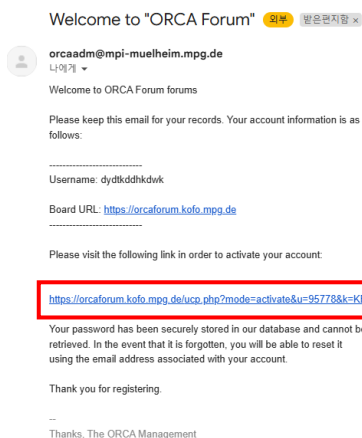
ORCA Download

1. orca 사이트에 접속 및 "Register" 버튼 클릭

<https://orcaforum.kofo.mpg.de/app.php/portal>

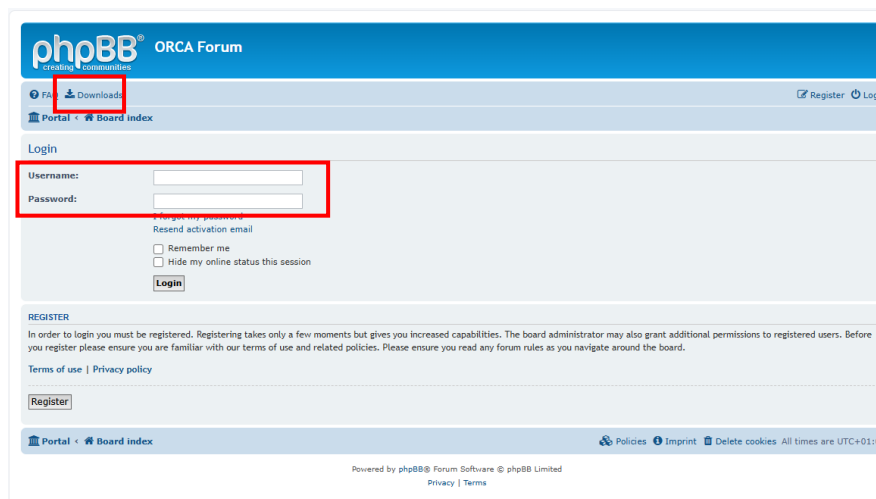


2. Register 과정을 거치면 email로 계정 등록 메일이 오게 된다.



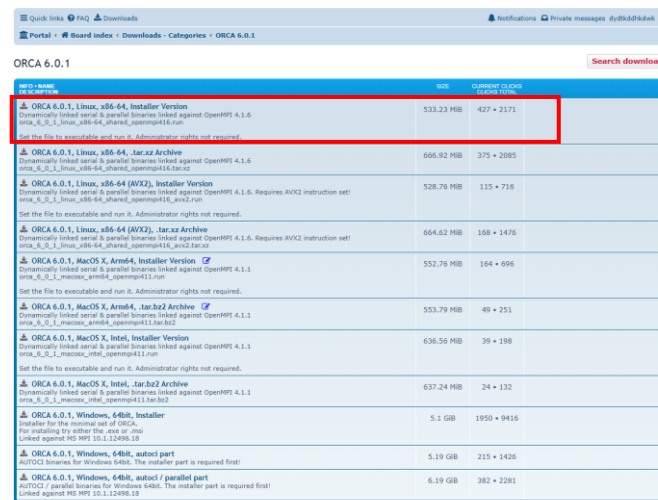
지시대로 링크 접속
후 등록 완료

3. orca 사이트에 로그인 및 Download 페이지로 이동



4. 최신 버전의 Orca를 본인의 OS에 맞게 다운로드

* 본 정리 글은 리눅스를 기준으로 함



최근 다운로드 기록

orca_6_0_1_linux_x86-64_shared_openmpi416.tar.xz
19.7/667MB • 6시간 남음

orca_6_0_1_linux_x86-64_shared_openmpi416 (1).tar.xz
취소됨

Orca6.0.1.Win64.zip
취소됨

전체 다운로드 기록

1. 압축 해제

```
tar -xvf orca~~~.tar.xz
```

```

(base) [yongsang@ga04 ~]$ ls -l
total 682972
drwxrwxr-x 2 yongsang yongsang 4096 2025-01-16 01:19 a
drwxrwxr-x 31 yongsang yongsang 4096 2025-01-12 17:05 anaconda3
-rw-r--r-- 1 yongsang yongsang 24 2024-01-22 14:22 mvapich2.hosts
-rw-r--r-- 1 yongsang yongsang 42 2024-01-22 14:22 openmpi.hosts
drwxrwxr-x 5 yongsang yongsang 20480 2025-01-20 09:07 orca_6_0_1_linux_x86-64_shared_openmpi416
-rw-rw-r-- 1 yongsang yongsang 699312476 2025-01-20 09:04 orca_6_0_1_linux_x86-64_shared_openmpi416.tar.xz
drwxrwxr-x 15 yongsang yongsang 4096 2025-01-15 23:54 RASPA2
drwxrwxr-x 4 yongsang yongsang 4096 2025-01-20 09:03 Research

```

폴더가 생기면 OK

2. 생긴 폴더로 들어가서 ls

[illegible]

3. 환경 변수 설정 ~/.bashrc 파일 수정

```
# ORCA
export PATH=/home/yongsang/orca_6_0_1_linux_x86-64_shared_openmpi416:$PATH
export LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:/home/yongsang/orca_6_0_1_linux_x86-64_shared_openmpi416
```

/home/<username>/0|하 통일

vi ~/.bashrc (수정 작업)

source ~/.bashrc (수정 후 변경 내역 활성화)

4. 잘 깔렸는지 확인

```
(base) [yongsang@ga04 ~]$ orca
orca_eca
orca_2aim
orca_2json
orca_2mkl
orca_aifft
orca_asa
orca_autoci
orca_autoci_mpi
orca_blockf
orca_casscf
orca_casscf_mpi
orca_casscfresp
orca_casscfresp_mpi
orca_cclib
orca_cclib_mpi
orca_euler
orca_chelpg
orca_ciprep
orca_cipsi
orca_cipsi_mpi
orca_cis
orca_cis_mpi
orca_crystalprep
orca_eca
orca_leanscf
orca_leanscf_mpi
orca_fft
orca_esd
orca_euler
orca_listdensities
orca_loc
orca_mapspc
orca_mcpa
orca_mcpa_mpi
orca_md
orca_mdci
orca_mdci_mpi
orca_mergefrag
orca_mm
orca_nmr_mpi
orca_mp2
orca_nm2_mpi
orca_mrct
orca_mrct_mpi
orca_ndoint
orca_nmrsppectrum
orca_numfreq
orca_pc
orca_pc_mpi
orca_plot
orca_plot_mpi
orca_pltvtb
orca_pnmr
orca_pnmr_mpi
orca_pop
orca_pop_mpi
orca_prop
orca_propint
orca_propint_mpi
orca_rel
orca_rel_mpi
orca_rocis
orca_rocis_mpi
orca_scfgrad
orca_scfgrad_mpi
orca_scfresp
orca_scfresp_mpi
orca_startup
orca_startup_mpi
orca_toys
orca_toys_mpi
orca_util
orca_util_mpi
orca_vib
orca_vpot
orca_vpot_mpi
orca_vpt2
```

아무 Working Directory상에서 orca를 입력하고 Tab을 누르면 orca 키워드로 시작하는 모든 명령이 리스트로 제공됩니다.

이와 같이 많은 명령들이 나오면 설치 성공

참고 자료

다운로드 관련 포스팅

<https://blog.naver.com/shiraiyoru/222185659466>

설치 관련 유튜브

<https://www.youtube.com/watch?v=fTIZ199cVSA>