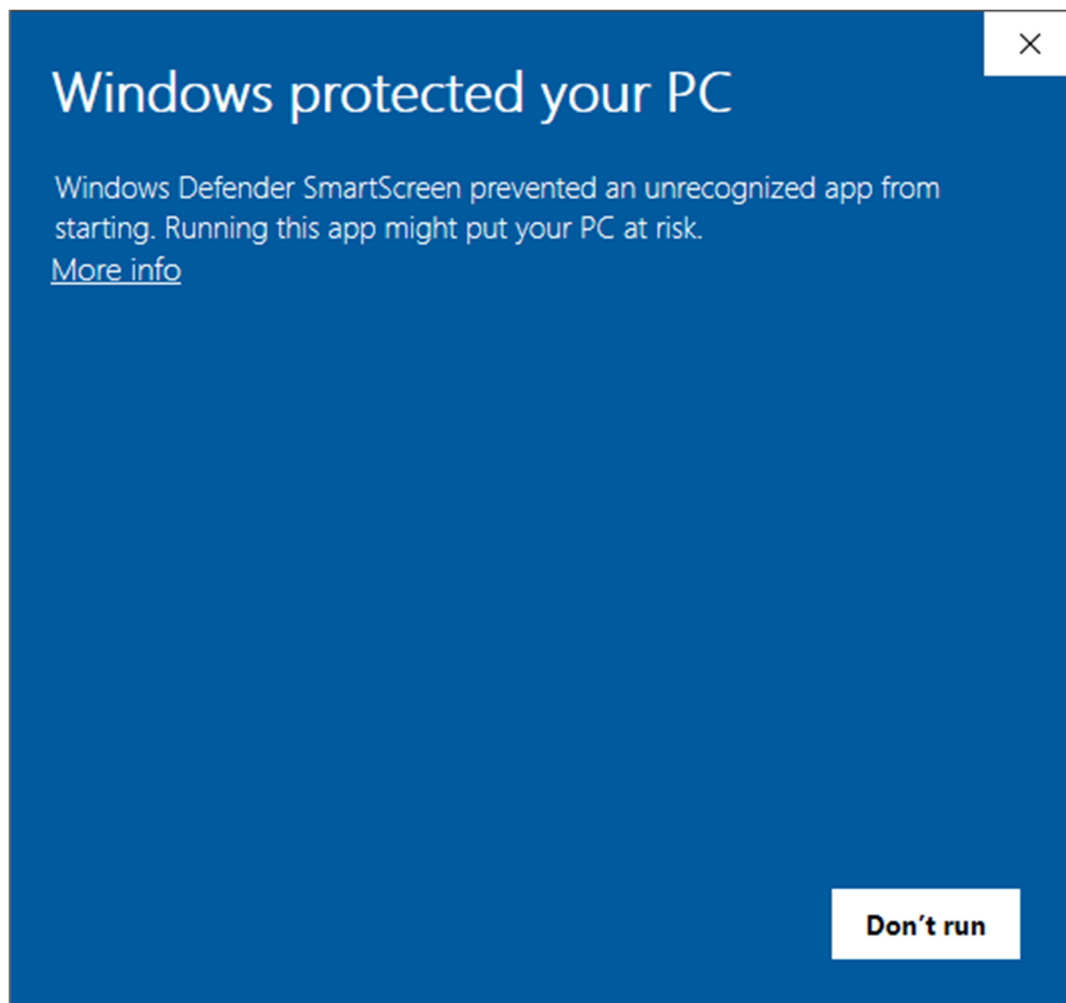


# Установка ORCA и запуск расчётов в ней.

## Установка

Для установки ORCA, необходимо скачать установочный файл по ссылке [https://drive.google.com/open?id=1dpQYc6H4x\\_UJeKFIES2rbkGzwKOPiuwf](https://drive.google.com/open?id=1dpQYc6H4x_UJeKFIES2rbkGzwKOPiuwf) (версия 4.2.1 для Windows), либо с сайта <https://orcaforum.kofo.mpg.de/app.php/portal> после регистрации.

Загруженный установочный файл необходимо запустить. В случае появления окна «Windows protected your PC»:

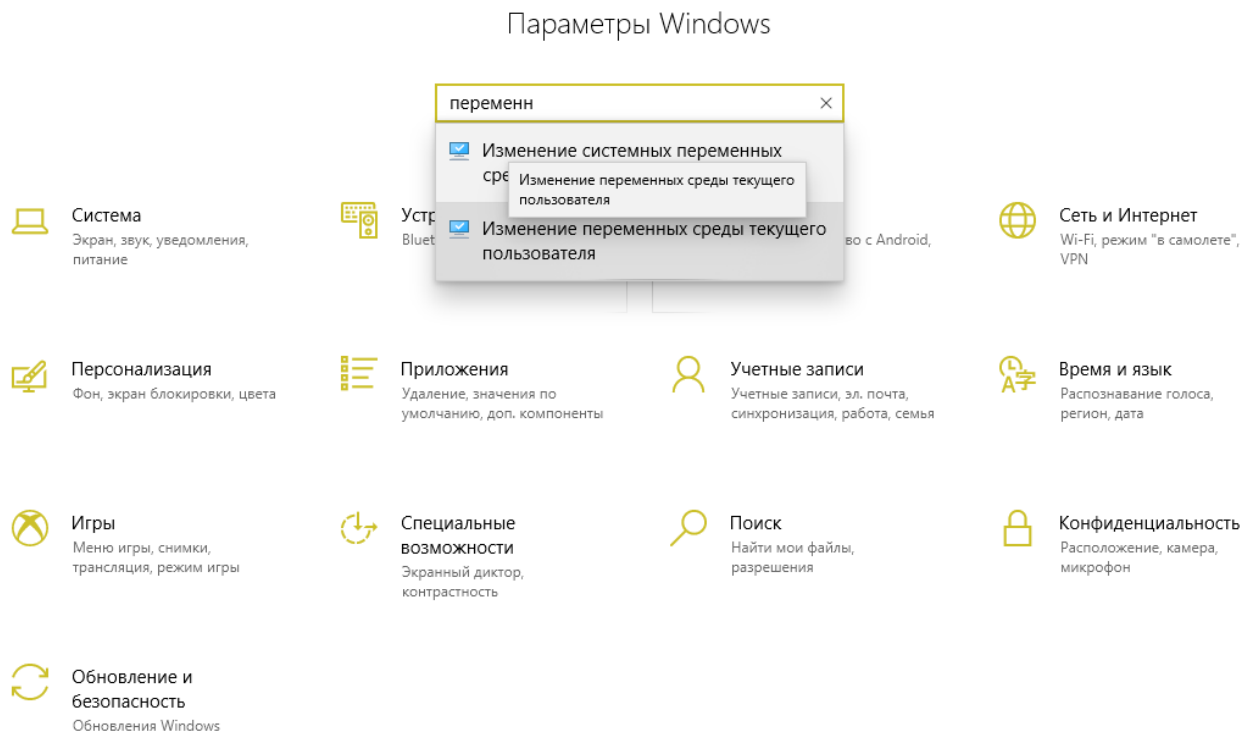


Нужно нажать “More info” и далее “Run anyway”. Далее выберете расположение, куда Orca будет установлена и запомните его.

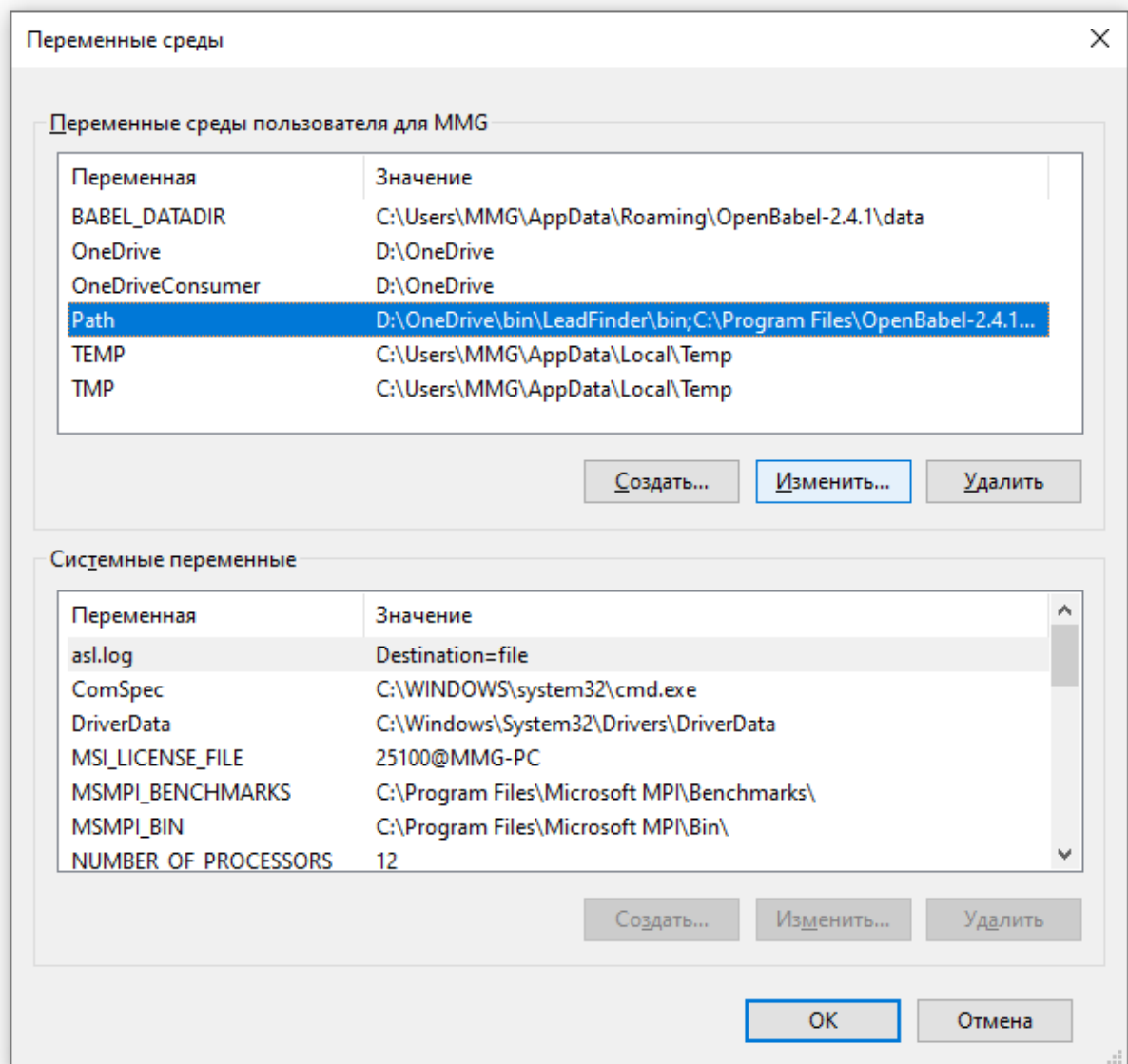
## Прописывание Orca в PATH environment variable

Так как Orca является консольной программой – то есть, не имеет графического интерфейса и вызывается из командной строки – для её вызова из любой папки необходимо добавить путь к ней в переменную окружения PATH. Для этого определите, в какой папке лежит исполняемый файл orca.exe – искать нужно там, куда вы устанавливали Orca. Допустим, этот файл лежит у вас в папке C:\Orca, как у меня.

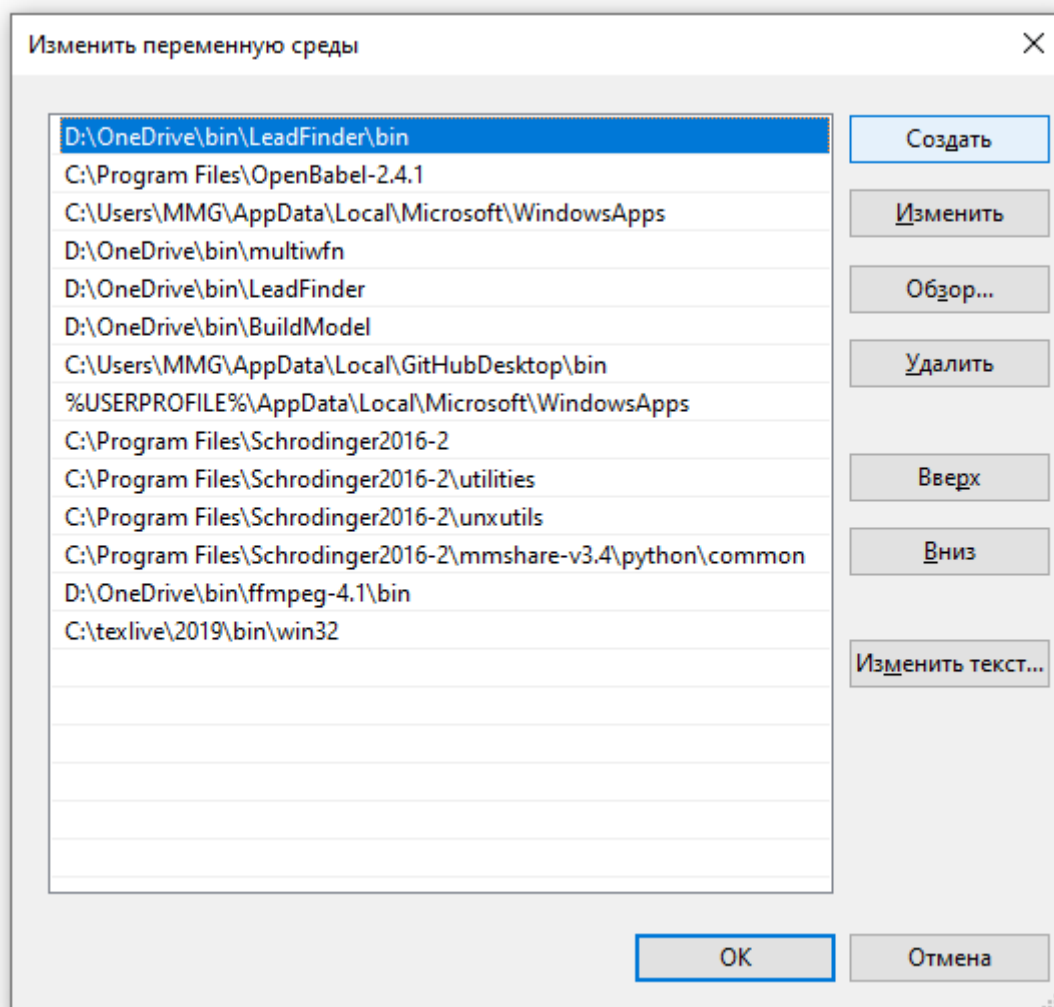
Для добавления этого пути в переменную окружения PATH, откройте «Параметры Windows» и введите в поле поиска «Изменение переменных среды текущего пользователя»:



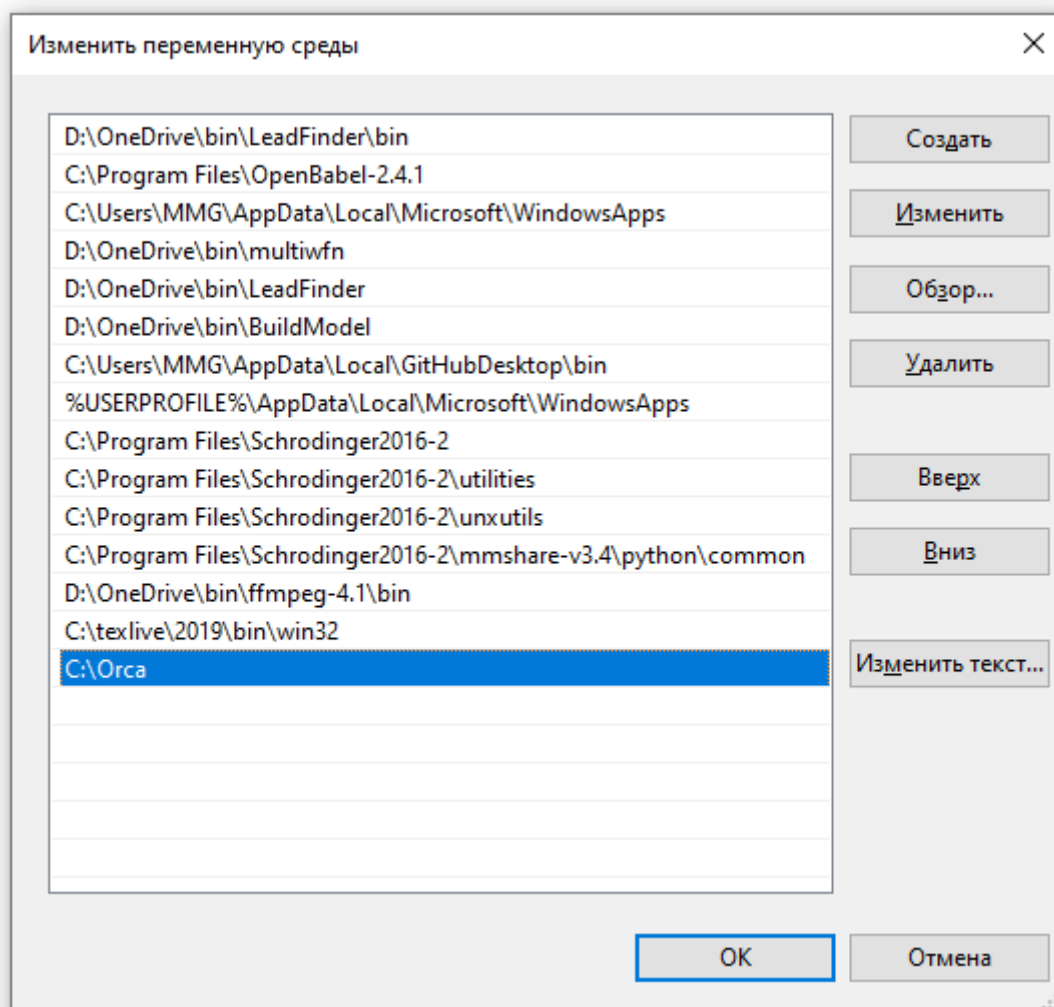
В верхней части открывшегося окна ткните на строчку с переменной Path и нажмите «Изменить»:



В открывшемся окне нажмите «Создать»:



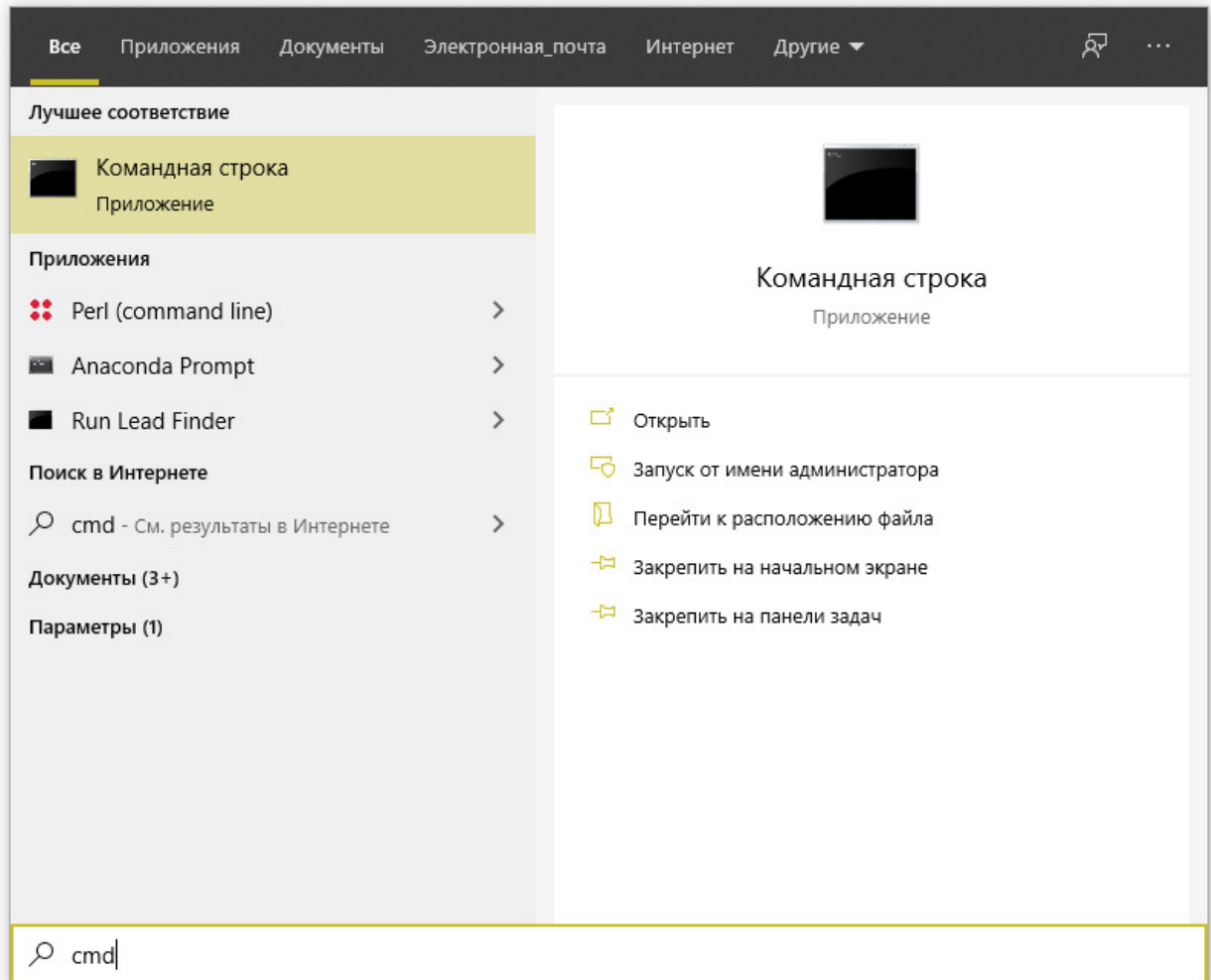
И введете в появившемся поле ваш путь к папке с orca.exe (мы его приняли за C:\Orca), затем ткните вне этого поля:



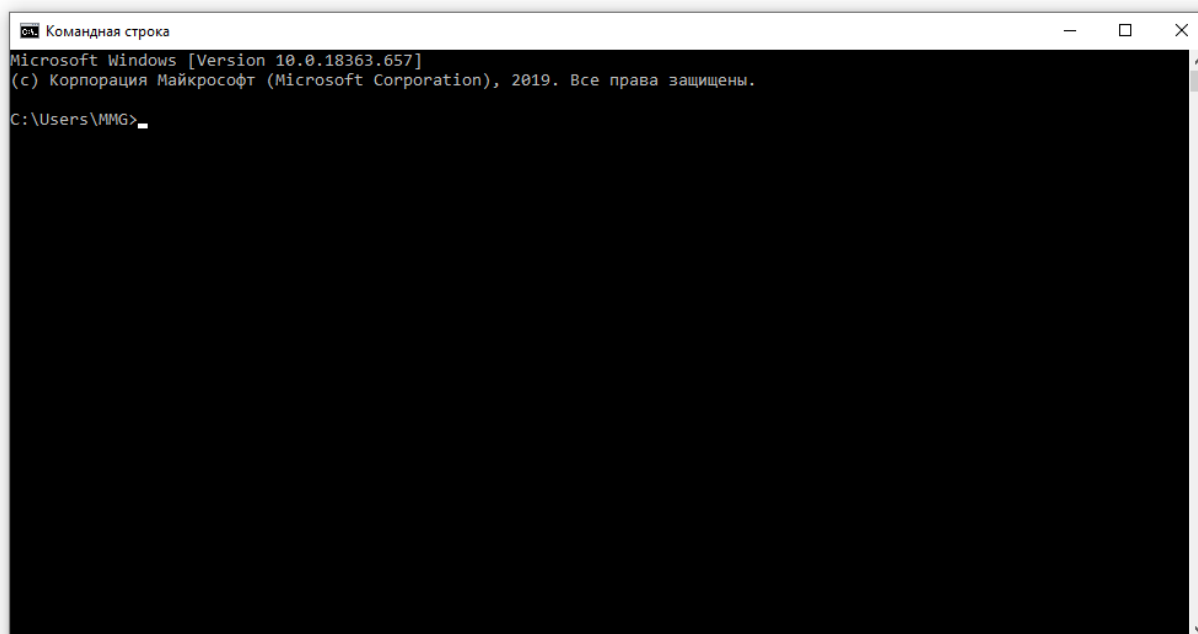
Теперь вы можете нажать ОК в данном и предыдущем окнах (по очереди), и ваши изменения в переменную PATH сохранятся. Теперь вы можете вызывать Orca в любой папке.

## Работа с командной строкой

Для вызова командной строки в Windows необходимо нажать кнопку «Пуск» и ввести «cmd» в поиске:



Командная строка выглядит как чёрное поле с белыми буквами, в котором можно писать команды и смотреть результаты их выполнения:



Команды исполняются сразу после их ввода и нажатия кнопки «Enter». После завершения исполнения команды, управление возвращается пользователю, при этом появляется приглашающая строка: ТЕКУЩИЙ\_ПУТЬ >

Полезные команды для работы в командной строке в Windows:

Команда	Действие
dir	выводит список файлов в директории
chdir something	переходит в директорию something. Если something начинается с буквы диска – то по абсолютному пути; если нет – то относительно текущей директории. Например, chdir Desktop перейдёт в папку Desktop в вашей текущей директории, если она есть, либо вернёт ошибку в противном случае. chdir C:// перейдёт в корень диска C из любого расположения
chdir /d smth	переходит в директорию smth, находящуюся на другом диске.
explorer	запускает Проводник в той папке, где вы сейчас находитесь

Полезные клавишные сокращения для работы с командной строкой в Windows:

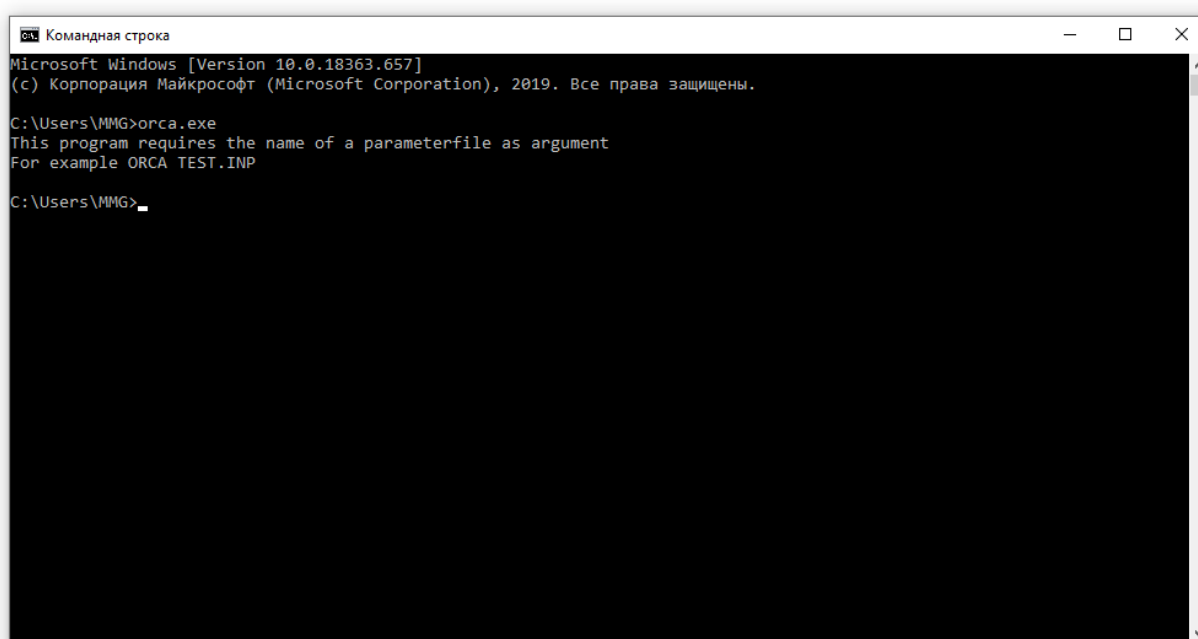
Сокращение*	Действие
Shift+выделить+правый клик	Копирование выделенного текста из командной строки
Правый клик	Вставить скопированный ранее текст
Shift+Insert	Вставить скопированный ранее текст
Ctrl+C	Отменить выполнение текущей команды
Стрелка вверх	Предыдущая команда (можно листать)
Tab	Автодополнение вводимой команды

\*все сокращения набираются путём ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО нажатия клавиш в указанном порядке, причём ранее нажатые клавиши УДЕРЖИВАЮТСЯ нажатыми. Не нужно пытаться нажать все клавиши в одну секунду; не нужно отпускать нажатую клавишу до того, как вы нажали всё сокращение.

В принципе, вместо командной строки удобно использовать файловый менеджер Far, который включает её в себя, но позволяет более комфортно пользоваться файловой системой. Его можно скачать здесь <https://www.farmanager.com/>, но для выполнения расчётов в рамках домашних заданий это не обязательно. Список полезных клавишных сокращений для работы с Far доступен тут: <https://cheatography.com/alexzaitzev/cheat-sheets/far-3/>.

## Запуск Orca

Для того чтобы проверить, корректно ли вы установили Orca и прописали её в PATH, введите в командной строке “orca.exe” и нажмите Enter. Вы должны увидеть следующее:

A screenshot of a Windows Command Prompt window titled "Командная строка". The window shows the following text: "Microsoft Windows [Version 10.0.18363.657] (c) Корпорация Майкрософт (Microsoft Corporation), 2019. Все права защищены. C:\Users\MMG>orca.exe This program requires the name of a parameterfile as argument For example ORCA TEST.INP C:\Users\MMG>". The text is displayed in a black background with white font. The window has standard Windows window controls (minimize, maximize, close) in the top right corner.

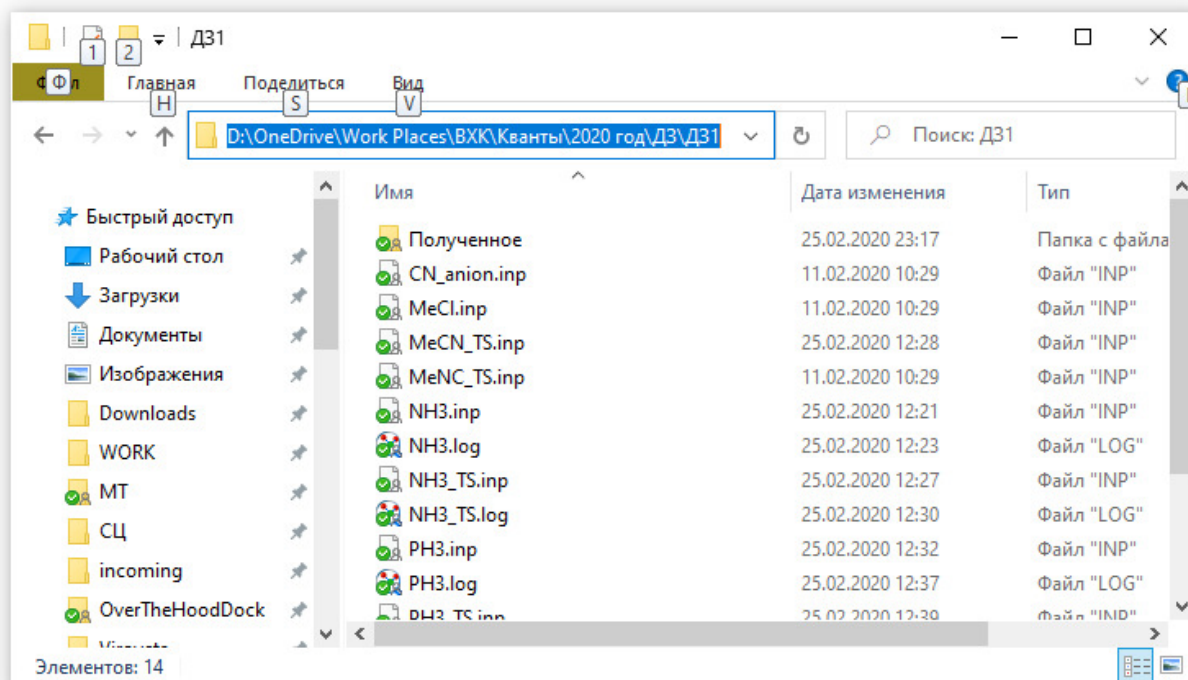
```
Командная строка
Microsoft Windows [Version 10.0.18363.657]
(c) Корпорация Майкрософт (Microsoft Corporation), 2019. Все права защищены.

C:\Users\MMG>orca.exe
This program requires the name of a parameterfile as argument
For example ORCA TEST.INP

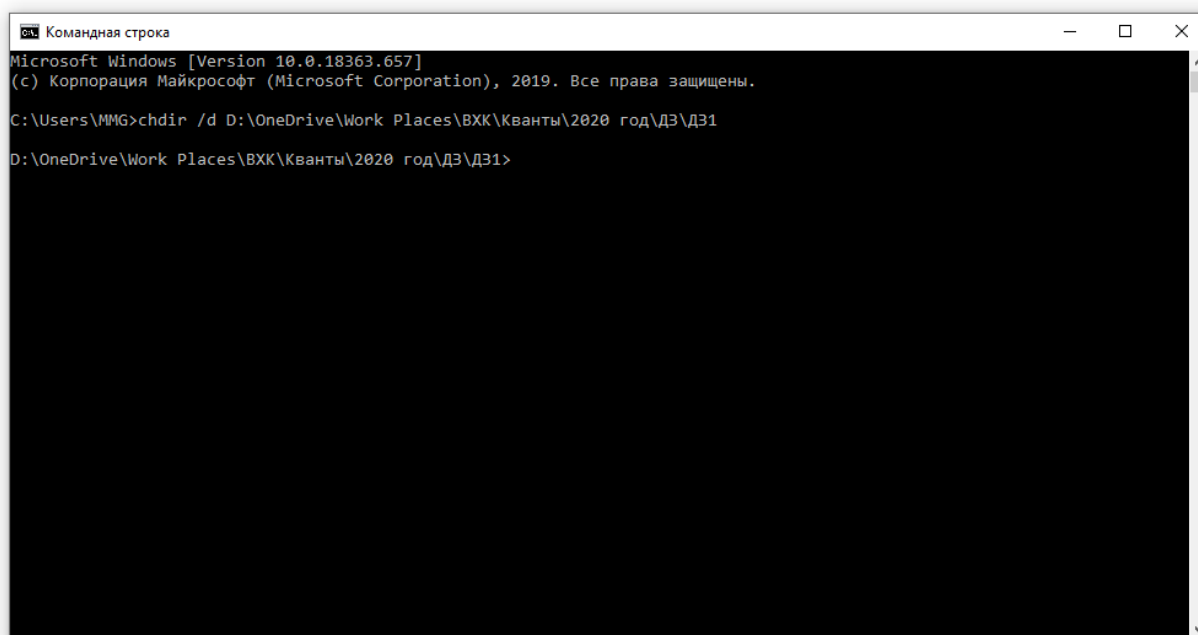
C:\Users\MMG>
```

Это означает, что Orca работает. Теперь с помощью команды `chdir` идите в папку, куда вы распаковали инпут-файлы из домашнего задания. Из-за особенностей работы в командной строке, необходимо чтобы файлы лежали в папке, путь к которой не содержит русских символов или пробелов. Путь к папке можно скопировать из проводника:





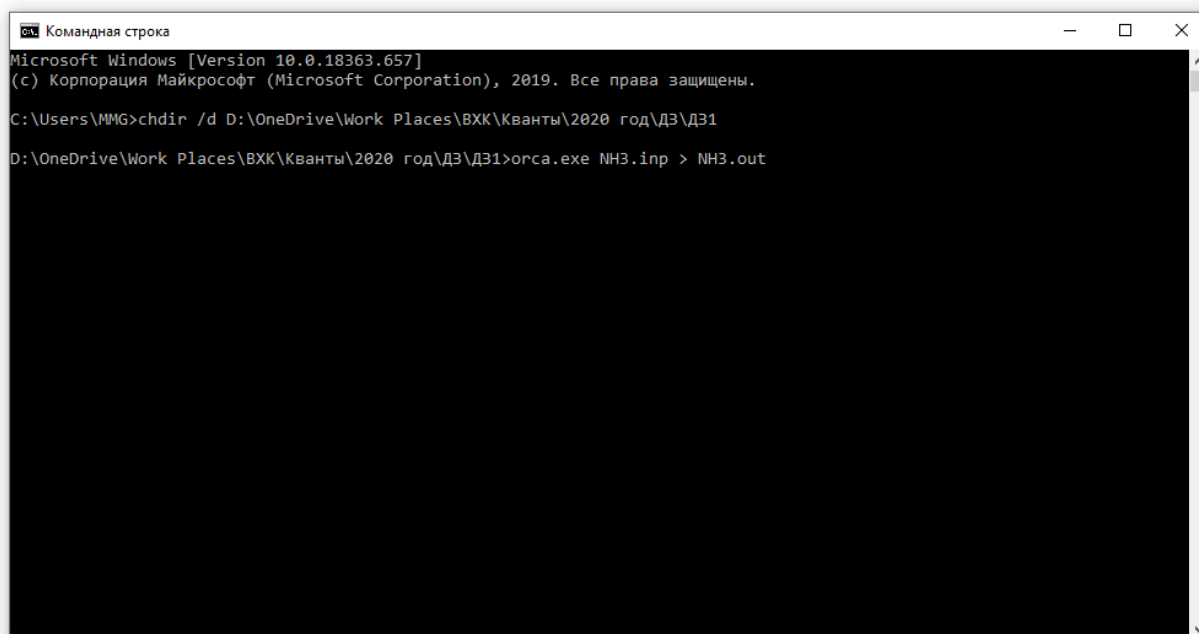
И вставить в командную строку с помощью Shift+Insert:



Теперь в этой папке можно запустить расчёты в Orca из находящихся в ней инпут-файлов. Общая команда запуска:

```
orca.exe input.inp > output.out
```

Эта строка означает: вызови orca.exe, передай ей файл input.inp в качестве параметра и запиши всё, что она ответит в файл output.out (он создаётся этой командой). Вот пример рабочей команды:



```
Командная строка
Microsoft Windows [Version 10.0.18363.657]
(c) Корпорация Майкрософт (Microsoft Corporation), 2019. Все права защищены.

C:\Users\MMG>chdir /d D:\OneDrive\Work Places\ВХК\Кванты\2020 год\ДЗ\ДЗ1
D:\OneDrive\Work Places\ВХК\Кванты\2020 год\ДЗ\ДЗ1>orca.exe NH3.inp > NH3.out
```

После её запуска начнётся расчёт, который будет продолжаться некоторое время. По итогам расчёта в папке появится некоторое количество новых файлов, самый важный из которых - .out, в который была записана основная выдача программы.

Файл .out можно открыть с помощью блокнота (отдельно рекомендую [notepad-plus-plus.org/](https://notepad-plus-plus.org/)), либо с помощью ChemCraft (<https://www.chemcraftprog.com/download.html>), который может визуализировать геометрию молекулы, а также различные рассчитываемые параметры.

Руководство пользователя Orca, где подробно описано, что она умеет и как её об этом можно попросить, можно скачать по ссылке: [https://drive.google.com/open?id=1phagbfqoQdlxzx1D3zU6zrFOCr\\_p3GEX](https://drive.google.com/open?id=1phagbfqoQdlxzx1D3zU6zrFOCr_p3GEX) (версия 4.2.1), либо с сайта <https://orcaforum.kofo.mpg.de/app.php/portal>.