

PIO with Winmostar

1. コンパイル

Cygwin上で、Cygwin無しで動くexeをビルド

```
g77 -O -mno-cygwin -o *.exe *.f
```

```
gfortran -static -o *.exe *.f
```

```
readfort7.f, pio.f, lcao2.f, lcao2fchk.f
```

lcao2.fはJmolで読込できるように修正

g03, g09も可

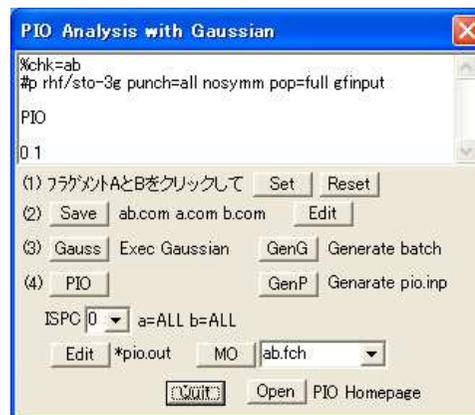
2. readfort7.fの代わりにreadgau.log.f作成

logファイルだけで計算できるように修正

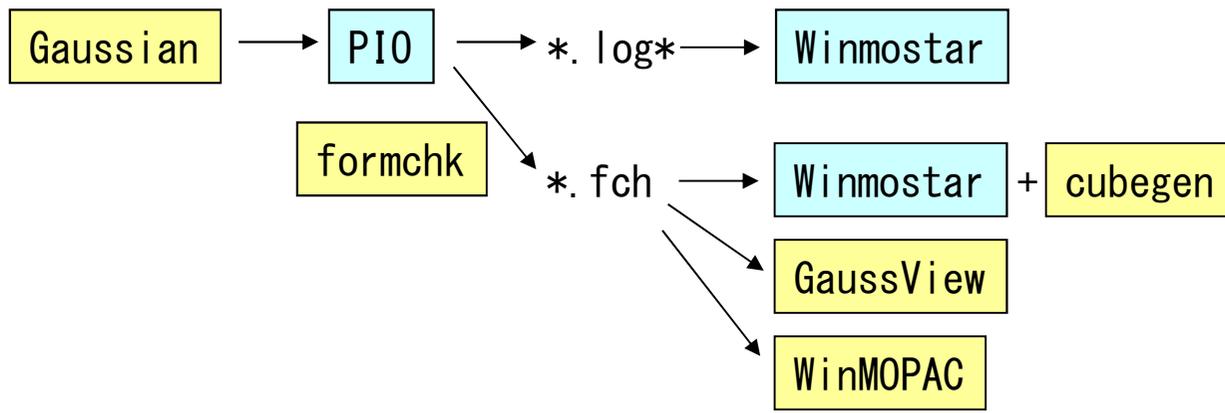
3. GAMESS用作成

```
readgamout.f, lcao2gamout.f, lcao2gampun.f
```

4. WinmostarのGUIでPIO解析



5. 軌道表示



有償

フリー、アカデミックフリー