

xtb 6.5.1

ウェブページ

<https://xtb-docs.readthedocs.io/en/latest/>

<https://github.com/grimme-lab/xtb>

バージョン

6.5.1

ビルド環境

- Intel Compiler Classic 2023.2.0
- Intel MKL 2023.2.0
- Ninja 1.11.1
- Python 3.10 (conda)

ビルドに必要なファイル

- 以下手順中で取得

ビルド手順

```
#!/bin/sh

VERSION=6.5.1
INSTALL_DIR=/apl/xtb/${VERSION}

WORKDIR=/gwork/users/$USER

XTB_GITHUB=https://github.com/grimme-lab/xtb.git
XTB_TAG=v${VERSION}

# -----

cd ${WORKDIR}
if [ -d ${VERSION} ]; then
  mv ${VERSION} ${VERSION}-remove
  rm -rf ${VERSION}-remove &
fi
git clone ${XTB_GITHUB} $VERSION
cd $VERSION
git checkout refs/tags/${XTB_TAG}
```

```
export OMP_NUM_THREADS=8
./apl/conda/20240305/conda_init.sh

module -s purge
module -s load ninja/1.11.1

. ~/intel/oneapi/compiler/latest/env/vars.sh # 2023.2.0

module -s load mkl/2023.2.0

export CC=icc
export FC=ifort

# install meson
pip3 install --user meson==0.64.1
export PATH=~/.local/bin:$PATH

meson setup build \
  --buildtype release \
  --optimization 2 \
  -Dprefix=${INSTALL_DIR} \
  -Dla_backend="mkl-static" \
  -Dopenmp="true"

ninja -C build test
ninja -C build install
```

テスト

すべて通過

メモ

- CENSO 1.2.0 で外部 ORCA を使う場合、xtb 6.6.0 以降では問題が発生するために用意
 - 公式サイトでの情報: <https://github.com/grimme-lab/CENSO/issues/50>
- GCC でビルドした xtb を CENSO 1.2.0 で使った場合、stderr の出力("normal termination of xtb" など)が出力ファイル(ohess.out で確認)のおかしなところに紛れ込むことがある
 - その場合、ERROR: can not convert G(T) というエラーが出力される
 - (改行の入る位置によっては出力結果に影響が出る可能性がある?)
 - インテルコンパイラを使った場合には今のところ問題は確認されていない。