

Gaussian 09 Revision E.01 发布说明

*新特性与用法说明: Rev E.01

此版本主要针对用户在使用过程中发现的问题, 以及 *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods* (第三版) 一书中未涉及的相关问题, 进行了修正。

- ◆ Fchk 文件已经包含了所使用 G09 版本信息以及作业状态标签, 这样 GUI(图形用户界面)通过 fchk 文件能检测到该作业是否还在运行、运行失败或者是运行完成。此版本 fchk 文件同样包含了频率计算中的虚频数目。
- ◆ EOMCC=ListWindow 该选项目前只读取“窗口”一次, 而不是此前的二次。
- ◆ 能量数值较大的刚性扫描作业此版本会以表格形式列出相对能量, 而不是此前的****'S。
- ◆ TDHF 激发态方法此版本默认使用分子轨道基(MO basis), CIS 方法也默认使用分子轨道基
- ◆ Hirshfeld 电荷计算中参考原子电荷问题已经修复
- ◆ Linda 并行时由于使用 ECP 方法占用的额外资源已经剔除。
- ◆ 支持 Sandybridge (AVX) x86_64 处理器, AVX-enabled ATLAS 数据库的编译程序已经发布。Sandybridge/Haswell 编译版本目前也已经发布。
- ◆ 增加了 divide-and-conquer 对角化方法以及 大部分 SVD 计算方法。

*Gaussian 09 Rev. D.01 至 Rev. E.01 之间已经修复的问题

- ◆ Bruckner Doubles 方法使用线性独立基组计算梯度时的问题已经修复。
- ◆ Opt Freq 组合计算最开始时由于某些基组导致的错误已经修复。
- ◆ 使用某些 ECP (有效核势) 进行 NBO (NBO 3) 分析时产生的问题已经修复。
- ◆ 闭壳层优化计算中, 当某一步能量升高时线性相关基函数减少的问题已经修复。
- ◆ Stable=opt 联合 SCF=XQC 选项计算时的问题已经修复。
- ◆ 使用 unfchk 功能处理 RO (限制性开壳层) 计算产生的.fchk 时出现的问题已经修复。
- ◆ AM1 和 PM6 等半经验计算时与“DCore”参数相关的输出和读入诸多问题已经修复。
- ◆ Opt Freq 组合计算频率计算部分一些问题已经修复, 包括:
 - 使用 PBEH1 及 wPBE 交换泛函时的一致性问题
 - DFT TDA Opt Freq 组合计算时产生的无用内容
- ◆ CM5 电荷计算时的问题已经修复
- ◆ SMD 溶剂化模型计算时用户自定义非标准水溶剂参数问题已经修复
- ◆ 额外输出时正则电场梯度(normal mode electric field derivatives) 输出问题已经修复
- ◆ CIS=50-50 及 TD=50-50 计算时不再输出不同对称性态之间的错误的跃迁矩矢量信息。
- ◆ ECP 旋-轨积分计算中遗漏的 1/2 因子已经加入; ECP 不需要旋-轨积分计算的问题已经修复。含有旋-轨积分计算的全电子 DKH 计算相关问题也已经修复。
- ◆ 输入文件中非整数核电荷数说明问题已经修复。
- ◆ FMM 计算磁化率时的问题已经修复。

- ◆ 使用 ECP 赝势并进行 NMR=Mixed 计算时的问题已经修复。
- ◆ O3LYP 计算时产生的错误报错信息已经修复。
- ◆ 使用完全非收缩基组进行 Douglas-Kroll-Hess 计算时产生的无用能量错误已经修复。
- ◆ MP2 进行 NMR=Mixed 计算时目前报错而不是此前的无用信息。
- ◆ ADMP=Restart 目前对于开壳层系统已经适用。
- ◆ 超过 255 个基函数的 CAS 计算时产生的维度问题已经修复。
- ◆ Opt=MaxCyc=N 之前限制最多步数是 6N,现在取消了该限制, 目前版本已经能正确执行。
- ◆ Iterative Hirshfeld 电荷计算已经能正确执行。
- ◆ 加入 GD3BJ 色散校正时的频率计算问题已经修复; Grimme 的其他 D3 色散校正在 D.01 里给出的频率是正确的, 此外在 D.01 中, 如果有原子配位数大于 8 的体系, 则无法正确进行 D3 校正下的频率计算, E.01 版本修复了该问题。
- ◆ TDA Freq 已经能够正确调用。

Gaussian 09 Revision D.01 发布说明

*新特性与用法说明: Rev D.01

- ◆ Raman 和 ROA 光谱振动强度可以独立地由力常数和简则振动模的计算得到, [Cheeseman11a]的这个建议使得当使用大基组计算这些性质时变得更容易。关键词 **Polar=Raman** (或者 **Polar=ROA**) 表示力常数从 checkpoint 文件中提取 (例如, 从之前的 **Freq** 计算中得到), 并且计算新的极化率导数 (以及 ROA 光谱涉及到的另外两个张量), 通过这两个步骤组合从而预测光谱及其强度。测试文件 **test931** 提供了一个两步 ROA 计算的实例。
- ◆ **Freq=Anharmonic** 进行非谐振频率计算时的 output 文件中包含了 IR 强度。output 文件本版本可读性更强。
- ◆ 本版本 TD-DFT 计算可以使用 Tamm-Dancoff 近似方法, 关键词为 **TDA**。
- ◆ CIS 和 TD 激发能计算时能够定义能量范围, 适用于 **CIS**、**TD**、**TDA** 方法:
 - GOccSt=N** 仅使用 N 个活性占据轨道以及更高占据轨道生成初始猜测。
 - GOccEnd=N** 如果 $N>0$, 仅使用前 N 个活性占据轨道生成初始猜测; 如果 $N<0$, 则不使用最高占据的 $|N|$ 个轨道进行初始猜测。
 - GDEMin=N** 生成激发态能量 $\geq N/1000$ eV 的初始猜测。
 - DEMin=N** 仅收敛到激发态能量 $\geq N/1000$ eV 的态; 如果 $N=-2$, 从 input 文件中读入阈值; 如果 $N<-2$, 则设定阈值为 $|N|/1000$ Hartrees。
 - IFact=N** 初步迭代后给指定的态定义一个因子。
 - WhenReduce=M** M 次迭代后把态数目降低到期望值。

IFact 默认值为 $Max(4, g)$, g 为 Abelian 点群的阶数。TD 计算时 **WhenReduce** 默认值为 1, 而 TDA 和 CIS 计算时 **WhenReduce** 默认值为 2。如果感兴趣的区域有很多的态则需要指定更大的值。
- ◆ 新增一些列新 DFT 泛函以及两个半经验色散模型:
 - **EmpiricalDispersion=PF**、**GD3**、**GD3BJ** 显示考虑 Petersson-Frisch 色散 [Austin12]、Grimme 的 D3 [Grimme10] 以及 D3BJ [Grimme11] 色散项。
 - **APFD** 使用 Austin-Frisch-Petersson 泛函 (包含色散 [Austin12]), **APF** 则表示使用无色散项的 Austin-Frisch-Petersson 泛函。
 - **B97D3**、**B2PLYPD3** 表示泛函中加入 Grimme 的 D3BJ [Grimme11] 色散项。
 - **HISSbPBE** 使用 HISS 泛函 [Henderson08]。
 - **SOGGA11** [Peverati11]、**M11** [Peverati 11a]、**SOGGA11X** [Peverati11b]、**M11L** [Peverati12]、**MN12L** [Peverati12c]、**N12** [Peverati12b]、**N12SX** [Peverati12a]、**MN12SX** [Peverati12a] 使用 Truhlar 小组最近开发的一系列泛函。
- ◆ 新增 augmenting **cc-pV*Z** 基组一系列选项:
 - **spAug-cc-pV*Z** 仅增加 s,p 弥散函数, 包括对 H 和 He 增加 s 函数。
 - **dAug-cc-pV*Z** 每一个角动量函数增加为 2 层, 此前为一层。
 - 增加 Truhlar 的“日期(Calendar)”基组变体 [Papajak11]。这一系列基组的命名来自于 **cc-pV*Z** 基组加上极化函数得到的, 也就是大家熟知的 **Aug-cc-pV*Z**。Truhlar 评论道, “Aug”也是英文中 August 的缩写形式, 因此他提出新的 augmentation 基组系列以月份来命名。比如, **Jul-cc-pV*Z** 弥散基组增加函数到 L-1, 此处 L 为所使用极化函数的最高角动量。类似的, **Jun-cc-pV*Z** 弥散基组增加函数到 L-2, **May-cc-pV*Z** 弥散基组增加函数到 L-3, 以及 **Apr-cc-pV*Z** 弥散基组增加函数到 L-4。此处请注意, 为了避免不一致, 默认情况下是总是包含 s,p 弥散函数的。但是它又有别于 Truhlar 等人最初的定义。可以使用 **TJul**、**TJun** 等形式来指定最初的版本 (无条件限制), 例如 **TJun-cc-pVDZ** 仅增加 s 函数给 Cl, 而同时增加 s, p 函数给 Fe 和 Br。
- ◆ 对于 MM 和 ONIOM(MO:MM) 计算, 新增对输入文件的初步分析。对 MM 电荷给出的电荷分布进行报告。

如果输入文件中包含 PDB 信息，则会报告 residues 的净 MM 电荷，即为 ONIOM 分层中的净 MM 电荷。

◆ 新增 SCF 选项及新特点:

- **SCF=Big** 关闭可选的步骤 $O(N^3)$ 来加速大型计算 (>5000 基函数)
- **SCF=Restart** 当重启 SCF 计算时跳过不必要的步骤，但是不跳过那些必须的步骤，如以不同基组从之前计算读入猜测或者不同的几何构型这类情况。相反，如果你想从一个不同的几何构型或者(和)不同基组重启 SCF 计算，请使用 **Guess=Restart**。
- **SCF=YQC** 当计算非常大的分子而又难以收敛时，此选项很有用。此方法开始和 **SCF=QC** 一样使用最陡下降法 (SD)，然后使用经过校正的最陡下降法，但是最后使用常规 SCF 方法而不是二次收敛方法，二次收敛方法仅在 SCF 收敛失败时推荐使用。
- **SCF=MaxNR=N** 设置启用二次收敛方法的阈值， 10^{-N} 。默认值为 10^{-2} 。
- 常规 SCF 方法现在对于任意角动量函数都适用。这对于外部程序来说显得尤为重要。Gaussian 09 中默认使用的直接 SCF 方法仍是推荐选项。

◆ 提供一种新的、大格点积分方法，**Int=SuperFineGrid**。这比 **UltraFine** 格点大 3 倍，期望得到高精度数值时可启用。此种格点为周期表前两排元素设置的格点为(150,974)，之后的元素为(225,974)

◆ 原子电荷:

- 提供 CM5 原子电荷[Marenich12]。
- 计算得到的原子电荷能够储存于 checkpoint 文件中，并可用于之后的 MM 计算(使用关键词 **Geom=Check**)。 **Pop=SaveMulliken**、**Pop=SaveESP**、**Pop=SaveNPA**、**Pop=SaveCM5** 等等可存储相应的电荷到 checkpoint 文件中。在多层 ONIOM 计算中，仅有指定计算电荷的部分默认保存，例如 QM 层中的原子电荷。任何在输入文件中指定的原子电荷将不会被采用，取而代之的是新拟合的电荷。附加选项 **Uncharged** 将保留输入文件中的原子电荷并且仅会对 QM 层中的未指定电荷原子进行电荷拟合。组合选项 **Pop=(Uncharged,SaveMulliken)**、**Pop=(Uncharged,SaveCM5)** 等等将保存原始电荷以及新拟合的电荷。
- 使用新版本 QEq 进行电荷计算[Rappe07]。**OldQEq** 表示使用旧版本进行电荷计算，这是 Rev C 的默认项。**QEq=Uncharged** 仅给 MM 电荷等于 0 的原子赋值(本版本已可以正确指定)，而其它原子保持已给定的值。

◆ 提供 NBO 6 版本的接口。**Pop=NPA6**、**Pop=NBO6**、**Pop=NBO6Read** 以及 **Pop=NBO6Delete** 关键词表示通过外部接口使用独立的 NBO6 程序。使用 NBO6 的脚本可以从 Frank Weinhold 教授处得到(nbo6.chem.wisc.edu)。

◆ **Freq=NoPrintNM** 关闭频率计算中简则振动模的输出。每个简则振动模的频率值以及强度仍旧保留。

◆ **External** 表示在 Gaussian 09 中运行其它的程序。D.01 版本这一功能得到大大提升。此版本可以提供单电子、双电子积分以及其它的矩阵元给外部程序，并且可以重新获得其它程序得到的分子轨道或者密度。更多的细节和实例可以查看 g09/doc 子文件夹 (Windows 系统 doc 文件夹) 新的 **External** 关键词选项(必须跟在脚本名后)如下:

InUnf 需提供一个包含坐标和单电子矩阵元的未格式化的 Fortran 文件给外部程序，具体请参考 g09/doc/unfdat.txt 和 g09/doc/rdmat.F 文件。**1EIintegrals** 是这个选项的同义词。

2EIintegrals 需提供一个包含双电子积分，未格式化的 Fortran 文件。这一选项意味着将同时使用 **SCF=Conventional**。

InputFchk 提供一个 formatted checkpoint 文件给外部程序。

OutputUnf 提供一个未格式化的 Fortran 文件给外部程序，并且一个有着相同结构的更新或者替代文件将会被 G09 读入，用以替代外部程序或脚本的默认输入文件。

IOFchk 生成一个 formatted checkpoint 文件，用以提供给外部程序并且一个新的 .fchk 结果文件将会被 Gaussian 09 读入。

ReadInputSection 此选项用于改变 Gaussian 09 自动生成的提供给外部程序的输入文件的内容。当 Gaussian 09 与外部程序的文件传输方式被之前的选项定义好时(如 **IOFchk**)，就不再需要默认的外部文本输入。此部分的文本将会被外部文本输入文件替代，而不是常规文件类型。

这样做可以为外部程序提供更加便捷的额外说明。

测试文件 test769 就是这些选项的一个实例。

- ◆ 多个第三程序所需要的数据文件可以通过以下方式生成:

- **SCRF=COSMORS** 生成 COSMO/RS 以及其它程序需要的数据文件。
- **Pop=MK IOp(6/50=1)** 生成 Antechamber 数据文件 (AMBER 程序中用于生成 RESP 荷)。
- **NMR=CSGT IOp(10/93=1)** 生成 ACID 程序的数据文件。

- ◆ 新的 Default.Route 命令:

- U- 使用应用程序时默认使用内存, 如 **formchk**、**freqchk**。
- F- **formchk** 的默认文件理性参数。
- M- 默认内存 (与 **%Mem** 意义等同)
- L- Linda 默认选项 (传递给环境变量 **GAUSS_LFLAGS**)
- R- 与 #- 同义

所有以上的选项都可以通过环境变量或者 Unix 命令来设置。环境变量 **GAUSS_XDEF** 提供了与在 **Default.Route** 文件中 -X- 等同的一行。类似地, 命令 **g09 -x="value"** 也给出相同的定义。例如, 以下的定义都生成同一个效果:

```
-M- 4GB Default.Route
Export GAUSS_MDEF=4GB
g09 -m="4GB" ...
```

上述命令的优先级依次为: 命令行定义、环境变量、**Default.Route**、程序内部默认值。

- ◆ **Geom=NGeom=N** 从 checkpoint 文件中取得几何优化中第 N 个点的结构 (与 GaussView 中显示的顺序一致, 此处 N=1 时意味着获取最初输入文件中的分子结构)。**Geom=Step=M** 如果之前的优化使用了冗余内坐标则自动转为 **Geom=NGeom=M+1**。
- ◆ **Geom=Connectivity** 关键词下可以使用键级为 0.1 的设定来定义一个化学键, 定义的化学键用于生成内坐标, 但它不影响分子力学输入文件的原子类型或者键连关系。

- ◆ 新的 Link0 命令:

- %UseSSH** Linda 并行时使用 ssh 通讯而不是 rsh。
- %DebugLinda** 报告 Linda 并行时开始和结束的细节。

- ◆ 有效势 **def2** 或者同义词 **QZV** 可以使用 **GenECP** 关键词来读入赅势以及定义 **def2** 和 **QZV** 基组。

- ◆ 避免生成各种类型的内坐标:

- Geom=SkipAll** 不自动生成任何内坐标; 全部坐标必须显示地定义在输入文件部分 (**Geom=ModRedundant**)。
- Geom=SkipAng** 生成键长但不生成键角和二面角。
- Geom=SkipDihedral** 不生成二面角。
- Geom=SkipHBond** 不生成氢键坐标。

- ◆ **IRC=GradientOnly** 现在默认使用 **EulerPC** 而不是 **DVV**。使用 **IRC=(CalcFc,RecalcFc=(Predictor=N,Corrector=M))** 时可以间断地得到解析二阶梯度, 即在最初构型下计算二阶梯度, 然后每过 N 步 predictor 和 M 步 corrector 再计算一次。

- ◆ 程序运行效率改进:

- 现在使用 CIS 和 TD 计算时能够更有效的利用对称性。
- 在计算储存于内存中的双电子积分时使用对称性匹配基函数, 当对称性存在时可以加速计算以及减少内存的占用。
- **Force=Nostep** 当计算大体系 MM 作用力计算时, 用于在几何优化时避免 $O(N^3)$ 的计算量。

- ◆ 输入文件中的小修改:

- 修改了 **DFTB** 方法输入文件的兼容性。具体细节可参考

http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/k_dftb.htm

- Scratch 文件扩展名 **.scr** 已变成 **.skr**，此处修改用于避免 Windows 下杀毒软件扫描造成的问题。
- Unix 以及 Mac OS X 版本下，如果没有指定后缀名，Gaussian 09 程序会优先寻找后缀名为 **.gjf** 的输入文件；如果没有发现以 **.gjf** 为后缀的文件，则会继续寻找以 **.com** 为后缀的文件。
- **Opt=ModRedundant** 不再支持指定一个特定的初始值。取而代之的是输入结构需给出所期望的初始值，并且坐标定义中不需要输入此值。
- **Freq=AnHarmonic** 这一附加选项的格式已经更改。具体请参考 **Frequency** 关键词中 **Freq=ReadAnHarmon** 的附加输入部分。
http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/k_freq.htm
-