

1. はじめに

本書は、Gaussianを東京工業大学学術国際情報センターのTSUBAME3で利用する方法について説明しています。また、TSUBAME3を利用するにあたっては、「TSUBAME利用の手引き」もご覧下さい。利用環境や注意事項などが詳細に記述されています。Gaussian Inc.では、Gaussianに関するWebページを公開しています。次のアドレスを参照してください。

<http://Gaussian.com/>

また、ヒューリンクス Gaussianのページのページは次の通りです。

<https://www.hulinks.co.jp/software/chem/gaussian>

1.1. 利用できるバージョン

TSUBAME3で利用可能な最新バージョンについてはTSUBAME計算サービスWebサイトのアプリケーション ページをご確認下さい。

研究に支障がない限り、バグ修正の入っている最新版をご利用下さい。

B01ではTSUBAMEに導入されているTesla P100に対応したためGPU計算が可能です。GPU利用に際する詳細は GPUの利用 をご確認ください。

1.2. 概要

Gaussianは、ab initio分子軌道プログラムパッケージです。数多いGaussianの手法の中でよく利用されるもののいくつかは並列実行が可能で、現在でも改良が進んでいます。このプログラムには常に最新の理論的手法やアルゴリズムが取り込まれており、Hartree-Fock法とそれに電子相関を取り込んだ高精度な方法及び半経験的分子軌道と密度汎関数に基づいた以下のような分子の性質や化学反応について量子化学計算を行うことができます。

- 分子の構造とそのエネルギー
- 遷移状態の構造とそのエネルギー

- 励起状態の構造とそのエネルギー
- 基準振動、IR及びRamanスペクトル
- 振動の円二色性強度
- 熱力学的性質、理想気体のエンタルピー、エントロピー、熱容量
- 結合エネルギー、相互作用エネルギー、反応熱
- 化学反応の経路探索
- 分子軌道
- 多重極モーメント、分極率、超分極率
- 電子親和力、イオン化ポテンシャル
- 静電ポテンシャル、電子密度
- NMR遮蔽及び磁化率
- 溶媒効果

TSUBAMEでは、Gauss Viewが用意されています。このようなユーザ・インターフェースを用いれば、Gaussianだけでなく、MOPACなどによる量子化学計算を初心者であっても簡単に行うことができます。

いずれにしても、Gaussianの入出力データはだいたい共通ですので、ユーザ・インターフェースを用いる方も本書を参考にしてください。また、出力された数値を鵜呑みにしたり、使用した手法を良く知らないで理論の限界を越えて使うことの無いようにしなければなりません。これらについては、計算の前に本マニュアルの参考文献を確認、研究に関連した論文を検索して読むなどあらかじめ良く調べるようにして下さい。

Gaussianには、様々なRevisionが存在します。Revisionによっては、使用できる手法やアルゴリズム、デフォルト、バグ・フィックスなどが異なっていますので、注意が必要です。

1.3. マニュアル

Gaussian Manuals (gaussian.com)

2. Gaussianの使用方法

2.1. Gaussianの実行

2.1.1. インタラクティブ実行

ログインノードは計算ノードとは別構成となっており、ログインノード上でアプリケーションを実行することは想定されておりません。ログインノードに負荷がかからないように「インタラクティブジョブの投入」の方法でインタラクティブ利用（計算ノードに接続して直接コマンド実行）を行ってください。以下のコマンドで計算ノードに接続します。

```
$ qcrsh -g [TSUBAME3グループ] -l [資源タイプ]=[個数] -l h_rt=[経過時間]
```

以下はあくまでもコマンドサンプルです。実際の計算にはインプットファイルや初期パラメータを記載したファイルが必要となります。Gaussianではインプットファイルで並列数を制御するため、コマンドとしては逐次処理も並列処理も同一でしたが、B01からコマンドオプションや環境変数に対応したため、インプットファイル中に指定しなくても様々な計算設定が可能となりました。詳細はメーカーURLを確認してください。

インプットファイルにて計算指定を行う従来どおりの方法

```
$ cd [利用したいディレクトリ]  
$ module load gaussian16/B01  
$ g16 [インプットファイル]
```

モジュールファイルにて環境変数GAUSS_CDEF及びGAUSS_GDEFを自動設定する方法

```
$ cd [利用したいディレクトリ]  
$ module load gaussian16/B01_gpu  
$ echo $GAUSS_CDEF  
14-27  
$ echo $GAUSS_GDEF  
0-1=14-15  
$ g16 [インプットファイル]
```

コマンドオプションにて計算指定を行う方法(リビジョンB01から対応)
以下は28CPU,20GB,GPUをGPUを4枚利用する場合の例(f_nodeを想定)

```
$ cd [利用したいディレクトリ]
$ module load gaussian16/B01
$ g16 -c="0-27" -m="20GB" -g="0-3=0-3" [インプットファイル]
```

以下は14CPU,20GB,GPUを2枚利用する場合の例(CPU1が割り当てられたh_nodeを想定)

```
$ cd [利用したいディレクトリ]
$ module load gaussian16/B01
$ g16 -c="14-27" -m="20GB" -g="0,1=14,15" [インプットファイル]
```

CPUの割り当ては `qstat -j job_ID` コマンドで確認できます。

以下の例ではjob_IDが2920693の場合の例で、CPU1が割り当てられています。
(f_nodeであれば必ず0,1が割り当てられるため、確認は不要です)

```
$ qstat -j 2920693 | grep binding
binding          1:
r6i6n7=1,0:1,1:1,2:1,3:1,4:1,5:1,6:1,7:1,8:1,9:1,10:1,11:1,12:1,13
```

h_nodeやq_nodeの場合はCPUの割当をジョブスケジューラから割り当てられたCPUコアと正しく一致させないとエラーが発生します。

h_nodeにてCPU1が割り当てられているにもかかわらずCPU0のコアを指定した例

```
$ g16 -c="0-13" -m="20GB" -g="0,1=0,1" [インプットファイル]
Set GAUSS_CDEF to "0-13".
Set GAUSS_MDEF to "20GB".
Set GAUSS_GDEF to "0,1=0,1".
Error: MP_BLIST has an invalid value
```

q_nodeにてCPU1が割り当てられているにもかかわらずCPU0のコアを指定した例

```
$ g16 -c="7-13" -m="20GB" -g="0=7" [インプットファイル]
Set GAUSS_CDEF to "7-13".
Set GAUSS_MDEF to "20GB".
Set GAUSS_GDEF to "0=7".
Error: MP_BLIST has an invalid value
```

2.1.2. バッチジョブスケジューラーUGEによる実行

Glycineの構造最適化および振動解析(IR+ラマン強度)を計算する場合のサンプルスクリプトです。

下記のglycine.sh、glycine.gjfを同一ディレクトリ上に配置し、下記コマンドを実行することで計算ができます。解析結果の確認についてはGaussViewにてご説明します。

```
$ qsub glycine.sh
```

f_nodeを使用する場合の例を示します。

計算後にglycinetest.log、glycinetest.chkが生成されます。

計算指定をコマンドオプションや環境変数で行う場合は上記のインタラクティブ実行やメーカーURLを確認してください。

glycine.sh (f_nodeを使用する場合)

```
#!/bin/bash
#$ -cwd
#$ -N Gaussian_sample_job
#$ -l f_node=1
#$ -l h_rt=0:10:0
#$ -V

#下記は必須ではありません。[-Nで指定した名称].o[JOB_ID]ファイルに出力されます
echo Running on host `hostname`
echo "UGE job id: ${JOB_ID}"
echo Time is `date`
echo Directory is `pwd`
echo This job runs on the following processors:
echo This job has allocated ${NSLOTS} processors

#以下は必須です。
. /etc/profile.d/modules.sh
module load gaussian16/B01

g16 glycine.gjf
```

glycine.gjf

```
%rwf=glycinetest.rwf
%NoSave
%chk=glycinetest.chk
```

```
%cpu=0-27
%mem=120GB
#P opt=(calcfc,tight,rfo) freq=(raman)

glycine Test Job

0 2
N          0   -2.15739574   -1.69517043   -0.01896033 H
H          0   -1.15783574   -1.72483643   -0.01896033 H
C          0   -2.84434974   -0.41935843   -0.01896033 H
C          0   -1.83982674    0.72406557   -0.01896033 H
H          0   -3.46918274   -0.34255543   -0.90878333 H
H          0   -3.46918274   -0.34255543    0.87086267 H
O          0   -0.63259574    0.49377357   -0.01896033 H
O          0   -2.22368674    1.89158057   -0.01896033 H
H          0   -2.68286796   -2.54598119   -0.01896033 H

1 2 1.0 3 1.0 9 1.0
2
3 4 1.0 5 1.0 6 1.0
4 7 1.5 8 1.5
5
6
7
8
9
```

f_node以外を使用する場合は、ジョブ実行時に動的に割り当てられるCPUコアをインプットファイルのLink0コマンド行で指定する必要があります。下記の例では、Link0コマンド未記入のglycine.gjfファイルにLink0コマンドを追記したglycine_[JOB_ID].gjfが作成され、計算が実行されます。計算後にglycine_[JOB_ID].log、glycinetest_[JOB_ID].chkが生成されます。

資源タイプによってメモリ容量やCPU数が異なりますので、%memや%cpuの記述にご注意ください。

```
glycine.sh(h_nodeの場合)
#!/bin/bash
#$ -cwd
#$ -N Gaussian_sample_job
#$ -l h_node=1
#$ -l h_rt=0:10:0
#$ -V

#下記は必須ではありません。-Nで指定した名称.o<JOBID>ファイルに記載されます
echo Running on host `hostname`
```



```

echo "UGE job id: ${JOB_ID}"
echo Time is `date`
echo Directory is `pwd`
echo This job runs on the following processors:
echo This job has allocated ${NSLOTS} processors

#以下は必須です。
G16JOB=glycine
INPUT_ORG=${G16JOB}.gjf                    #Link0コマンド未記入の入力ファイル
INPUT=${G16JOB}_${JOB_ID}.gjf            #Link0コマンドを追記した入力ファイル
OUTPUT=${G16JOB}.log

#Link0コマンドを追記したインプットファイルを作成
echo "%rwf=${G16JOB}_${JOB_ID}.rwf" > ${INPUT}
echo "%NoSave" >> ${INPUT}
echo "%chk=${G16JOB}_${JOB_ID}.chk" >> ${INPUT}
echo "%mem=100GB" >> ${INPUT}
echo "%cpu=`numactl -s | awk '/physcpubind:/ { print $2 "-" $15 }'`" >> ${INPUT}
cat ${INPUT_ORG} >> ${INPUT}

. /etc/profile.d/modules.sh
module load gaussian16/B01

g16 ${INPUT}

```

glycine.gjf (Link0コマンドは記入しない)

```

#P opt=(calcfc,tight,rfo) freq=(raman)

glycine Test Job

0 2
N      0    -2.15739574   -1.69517043   -0.01896033  H
H      0    -1.15783574   -1.72483643   -0.01896033  H
C      0    -2.84434974   -0.41935843   -0.01896033  H
C      0    -1.83982674    0.72406557   -0.01896033  H
H      0    -3.46918274   -0.34255543   -0.90878333  H
H      0    -3.46918274   -0.34255543    0.87086267  H
O      0    -0.63259574    0.49377357   -0.01896033  H
O      0    -2.22368674    1.89158057   -0.01896033  H
H      0    -2.68286796   -2.54598119   -0.01896033  H

1 2 1.0 3 1.0 9 1.0
2

```

```
3 4 1.0 5 1.0 6 1.0
4 7 1.5 8 1.5
5
6
7
8
9
```

2.1.3. gaussian NBO7の実行

Gaussianと連携して利用可能なNBOについて最新バージョンであるNBO7を学内からサイトライセンスで提供いただき、ライセンスの問題がなく利益も大きいためTSUBAMEユーザ全員が使えるようにインストールを行いました。

`module load gaussian16/C01_nbo7` をご利用頂けます。

3. Gaussianの計算の流れ

Gaussianの計算を行う場合の、基本的な作業の流れを以下に示します。ここでは流れに沿って、Gaussianの入力ファイルの作成方法とデータ確認方法をご説明します。

- 前準備
Gaussianの入力ファイルを準備 qsub用ジョブスクリプトを準備
- 計算投入
バッチジョブとして実行
- 計算結果の解析
データ確認(Gaussviewによる確認は別のドキュメントで紹介します)

4. Gaussianの入力データ

4.1. 入力データの構成

入力データの並びは、以下のように5つのセクションに分かれています。

- Link0コマンド
「%」で始まる行で.chkや.rwfなどのスクラッチファイル、使用メモリ量やCPU数を指定します。
- ルートセクション
「#」で始まる行で、理論の選択、計算内容の設定を行います。複数行に分けることができるため、セクションの終わりを示す空白行が必須です。
- タイトルセクション
コメントを付けます。このセクションも終わりを示す空白行が必須です。
- 分子指定セクション
分子の電荷、多重度の後にZ行列やCartesian座標を用いて分子構造を記述します。このセクションも終わりを示す空白行が必須です。
- 付加情報
計算内容によっては、付加情報が必要になります。その場合には、ここに記述します。このセクションは内容によって空白行がいない場合があります。下記の例は、水分子の最適化構造をHF/6-31G*レベルで求める際のGaussianの入力データです。

入力データ例 (h2o.dat)

```
1 %CPU=0-1
2 %Mem=48Mb
3 %Chk=h2o
4 # HF/6-31G* Opt=Z-Matrix Test
5
6 h2o
7
8 0 1
9 0
10 H, 1, r1
11 H, 1, r1, 2, a1
```

```
12  
13  r1=0.958  
14  a1=104.5
```

入力データ中で、タイトル行のコメント、ファイル名以外は大文字・小文字の区別がありません。上の例では、キーワードを見やすいように大文字を使っている部分があります。また、漢字フォントやエスケープなどの表示できない文字は使えません。全角の空白が紛れこんでいても気が付かない場合があります。この例をもとに、各セクションの説明をしましょう。

4.1.1. Link0コマンド

Link0コマンドは、「%」で始まる行で、一項目ごとに一行ずつ記述します。また、各行の順番は任意で、省略した場合はデフォルト値が使われます。

1行目の%CPUでは、使用するコア番号を指定します。f_nodeの28コアを使用する場合は %CPU=0-27 と指定してください。f_node以外を使用する場合は、バッチジョブまたはインタラクティブジョブ投入により動的に割り当てられるコア番号を指定してください。コア番号は numactl -s コマンドのphyscpubindで確認できます。例えば、q_nodeの7コアを確保し numactl -s コマンドで以下のように表示された場合は、%CPU=7-13 と指定します。(28から55まではハイパースレッディングによる論理コアであり、指定すると計算効率が低下するため指定しないことを推奨します)

```
$ numactl -s | grep physcpubind  
physcpubind: 7 8 9 10 11 12 13 35 36 37 38 39 40 41
```

2行目の%Memでは、使用するメモリを指定します。この例では、48Mbにしてあります。単位を省略するとGaussianword(=8Bytes)になります。出力リストには Gaussianword単位で、使用メモリ量が出力されます。単位の指定には、他にMb、Mw、Gb、などが使えます。デフォルトは、100MW(=800MB)です。

3行目の%Chkでは、チェックポイントファイルのファイル名を指定します。この例の場合、実行ディレクトリにh2o.chkというファイルが作成され、計算結果の要約がバイナリ形式で保存されます。チェックポイントファイルは、他のグラフィックソフトで構造や分子軌道を描いたり、さらに進んだ計算を引き続き行うときに使うことができます。省略した場合は、ファイルが保存されません。

使用するメモリの指定は重要で、場合によってはメモリ不足で計算が実行できない場合があります。メモリの指定とともに、後述する、ハードディスク上の.rwfファイルのサイズを制限するキーワード、MaxDiskの指定によって使用するアルゴリズムが変わる場合が

あります。ただし、使用メモリ・ディスク使用量をいたずらに大きくすると、必ずしも計算を速くするわけではありません。計算する系の大きさ、使用する基底関数、そして計算手法によってメモリ及びハードディスクサイズを変えなければなりません。限られた計算機資源を有効に使うには、無闇な計算はせず、経験を積んでいただく必要があります。

4.1.2. ルートセクション

4行目の「#」で始まる行からルートセクションが始まります。この例では一行ですが、数行に渡って記述することができるので、セクションの終わりを示す空白行が必須です。5行目の空白行がルートセクションの終わりを示します。

このセクションで、計算に用いる手法のキーワードを記します。HF/6-31Gとあるのは、基底関数として6-31Gを用い、Hartree-Fockによる計算を行うことを指定しています。Optは構造最適化、Testは結果の要約をアーカイブとして出力しないことをそれぞれ意味するキーワードです。

Gaussianでは、構造最適化をする際のデフォルトがredundantintemalcoordinate (RIC)という新しい手法になっています。RICではデカルト座標を用い、すべての原子間の結合情報を判定する手法です。この手法の利点は、Z行列などで明確に指定できない結合や結合角についても考慮できるため、環構造を持つ化合物などの構造最適化の収束がよいということです。この例でOpt=Z-Matrixを単にOptとすると、RICでの計算を行うことになります。ただし、通常分子ではZ行列の方が収束がよいことも多く(計算時間が短い)、慣れてきたら座標の入力方法を使い分けて下さい。

4.1.3. タイトルセクション

6行目がタイトル行です。この行はコメント用に自由に使えます。この行も複数行になっても構いません。このセクションも、7行目のように空白行で終わりを示します。

4.1.4. 分子指定セクション

8行目から分子定義のセクションが始まります。この行の「01」という数値は、全電荷とスピン多重度をそれぞれ示しており、この場合は中性分子で一重項です。これに続く行は分子の構造データであり、CartesianやZ行列などを用いて構造を記述します。この例では、Z行列の形式で記述して、r1とa1の2つのパラメータを使って2つのO-H結合を等価に扱っています(C_{2v}対称)。Z行列の作り方は、後述します。12行目の空白行でこ

のセクションの終わりを示しています。

この例では、Z行列でパラメータを使っているので、付加情報としてr1とa1を定義するセクションが必要になります。15行目の空白行で、このセクションの終わりを示します。

4.1.5. 付加情報

計算内容によっては、この外にも付加情報を必要とする場合があります。その場合は、必要な数だけ付加情報セクションを繰り返します。この時、空白行で終わりを示す必要があるかどうかは、キーワードによります。

テスト用入力データは/apps/t3/sles12sp2/isv/gaussian/g16/B01/g16/tests/com/というディレクトリに1152個の入力例があります。grepコマンドなどを使って関連する入力例を探すと便利です。

4.2. 理論の選択

Gaussianに含まれる代表的な理論のキーワードを下表に示します。これらはほんの一部で、他にもたくさんありますし、マニュアルに記載されていても現在のRevisionに含まれていないものがあります。将来のRevisionアップで新たに計算できる手法が加わる場合があります。また、Gaussianから、分子をいくつかのレイヤーに分けて異なるレベルの理論を混在させることができる、ONIOMモデルが使えるようになりました。

代表的手法のキーワード

キーワード	手法
HF	Hartree-Fock (HF) Self-Consistent Field (SCF) 計算
CASSCF	active電子及び軌道で構成される多配置参照SCF計算
GVB	Generalized Valence Bond
MP2	2次の摂動論
MP3	3次の摂動論
MP4(SDTQ)	4次の摂動論

キーワード	手法
MP5	5次の摂動論
CIS	1電子励起の配置間相互作用
CISD	1電子及び2電子励起の配置間相互作用
QCISD	Quadratic CISD
CCSD	1電子及び2電子励起のcoupled cluster法
Slater	LSD交換汎関数による密度汎関数理論(DFT)計算
Xalpha	Xalpha交換汎関数によるDFT計算
HFB	Becke1988交換汎関数によるDFT計算
VWN	Vosko, Wilk, Nusair相関汎関数によるDFT計算
VWN5	Vosko, Wilk, Nus&ir相関汎関数VによるDFT計算
LYP	Lee, Yang, Parr相関汎関数によるDFT計算
PL	Perdew1981相関汎関数によるDFT計算
P86	Perdew1986相関汎関数によるDFT計算
PW91	Perdew/Wang1991相関汎関数によるDFT計算
Becke3	Becke3-parameter汎関数によるDFT計算

HF以外は、ほとんどが電子相関の効果を取り入れるための手法でそれぞれに特徴があり、必要な計算機資源の大きさも大きく異なります。また、高いレベルの手法にはそれに応じた精度の高い基底関数を選択する必要があります。従って、いきなり高度な理論を使って計算するのは避けて、対象によって使い分ける必要があります。最も良く使われるのは、HF、MP2あるいはB3LYPで構造最適化を行い、得られた構造を元にさらに基底関数を大きくしたり、レベルの高いMP4、CISD、QCISD、CCSDなどによる一点計算をすることです。電子相関の効果を取り入れた手法では、内殻電子の励起は考え

ないfrozen-core (FC) 近似がデフォルトであることに注意しましょう。内殻電子の寄与も取り入れたいときは、例えばMP2=fullのようにします。

最近、盛んに使われるようになった密度汎関数理論 (DFT) は、従来の電子相関を取り入れた手法と比べ、計算時間、使用メモリ量、ディスク使用量ともに少なくすみ、しかもMP2と同程度かそれ以上の計算精度を与えることが多いことが知られています。ただし、現在、まだ従来の分子軌道法や実測値との比較が盛んに行われている段階ですので、使用に当たっては注意が必要です。いくつかの問題点も指摘されています。できるだけ自分の研究に近く、しかも新しい論文を探していくつか読んでみることをおすすめします。最終的にどの程度の理論や基底関数を選ぶかは、計算対象の性質に加え、使用できるメモリ使用量、ディスクの空き容量を考慮に入れなければなりません。何も考えずにMP2などの計算をすると数十GBのディスク容量が必要になることがあります。TSUBAME3では、バッチジョブによる計算用のスクラッチ領域としてSSDによる約1.9TBの高速テンポラリディレクトリが準備されています。計算ノードの /scr/\$JOB_ID.\$Qname に自動生成されますが、batch終了時に自動的に削除されるため、注意が必要です。

また、自分のジョブがどの程度ディスクを使うかという感覚が必要です。あらかじめMaxDiskというキーワードで、使用するディスクの大きさを指定しておく安全です。デフォルトの単位は、Gaussianword (=8Bytes) なので、誤解を防ぐためにも単位を付けましょう。単位にはMb、Mw、Gbなどが使えます。

```
(例) # MP2=(Full,Direct)/Aug-cc-pVQZ Scf=Direct MaxDisk=2Gb
```

4.3. 基底関数の選択

Gaussianに内蔵されている基底関数を下表に示します。一般によく用いられる基底は、3-21G、6-31G、6-311G、D95V、D95、LANL2B、LANL2DZなどです。また、必要に応じ分極関数として、Li以降の原子にd軌道を(一般に*で表す)、さらに水素原子にもp軌道を(**で表す)加えることも良く行われます。ただし、3-21G*は、Na以降の原子にのみ34軌道を加えた基底です(論文には、3-21G(*)と記されていることがあります)。

6-31G*あるいは6-31G**が、標準的基底関数として定評があり、最もよく使われています。陰イオンの場合には、Li以降の原子にdiffuse関数として拡がったs軌道及びp軌道を(+で表す)、さらに水素原子には拡がった8軌道を(++で表す)加えることも良く行われます。Gaussianでは使える元素の種類も増えるとともに、最近、電子相関用にDunningが新たに開発したcc-pVDZ、cc-pVTZ、cc-pVQZ、cc-pV5Z、cc-pV6Z(※2)という新しい基底関数が含まれています。これらの基底の評判は良く、論文でもよく使われるように

なっています。ただし、cc-pVTZ以上は大きな基底関数ですので、適用する分子でどの程度の数の基底となるか見積もっておく必要があります。どのような基底を選択するかという判断の元にもなりますから、基底関数の総数は計算の前に必ず調べておく必要があります。

(※2)Dz, Tz, QzのD, T, Qはそれぞれ、Double, Triple, Quadrupleの略で、2倍、3倍、4倍を意味します。5倍、6倍は一般的ではないので数字が使われていますが、そこまで拡張する時代が来るとは、誰も思っていなかったのでしょうか。

Gaussian内蔵基底関数

基底関数	使用可能元素	内容
STO-3G	H-Xe	Popleの最小基底
3-21G	H-Xe	Popleのvalence double-zeta
6-21G	H-Ci	Popleのvalence double-zeta
4-31G	4-31G	Popleのvalence double-zeta
6-31G	H-Kr	Popleのvalence double-zeta
6-311G	H-Kr	Popleのvalence tripe-zeta
D95V	H-Ne	Dunning-Huzinagaのvalence double-zeta (NaとMgを除く)
D95	H-Cl	Dumling-Huzinagaのdouble-zeta
SHC	FrとRaを除く	D95V (H-Ne)+Effective-CorePotential (ECP) (Na以下の元素)
CEP-4G	H-Rn	最小基底ECP
CEP-31G	H-Rn	valence double-zeta ECP
CEP-121G	H-Rn	valence triple-zeta ECP
LANL2MB	H-Ba, La-Bi	STO-3G (H-Ne)+最小基底ECP (Na-Bi)

基底関数	使用可能元素	内容
LANL2DZ	H, Li-Ba, La-Bi	
cc-pVDZ	H-Ar	電子相関用valence double-zeta (Li, Be, Na, Mgを除く)
cc-pVDZ	H-Ar	電子相関用valence double-zeta (Li, Be, Na, Mgを除く)
cc-pVTZ	H-Ar	電子相関用valence triple-zeta (Li, Be, Na, Mgを除く)
cc-pVQZ	H-Ar	電子相関用valence quadruple-zeta (Li, Be, Na, Mgを除く)
cc-pV5Z	H-Ar	電子相関用valence quintuple-zeta (He, Li, Be, Na, Mgを除く)
cc-pV6Z	H-N	電子相関用valence sextuple-zeta (He, Li, Beを除く)
SV, SVP, TZV	H-Kr	Ahlrichseの基底関数
Midix	H,C,N,O,F,P,S,Cl	TruhlarのMIDI!基底関数

参考のため、上表に代表的基底関数について、原子1個あたりに必要な基底関数の数を示しておきます。これを元に、例としてベンゼンの基底関数を実際に数えてみましょう。

3-21Gでは $9 \times 6(C) + 2 \times 6(H) = 66$ 個
 6-31G*では $15 \times 6(C) + 2 \times 6(H) = 102$ 個 6-31G**では $15 \times 6(C) + 5 \times 6(H) = 120$ 個

原子1個あたりに必要な基底関数の数

	STO-3G	3-21G	3-21G*	6-31G	6-31G*	6-31+G*	6-31G**
H	1	2	2	2	2	2	5
Li-Ne	5	9	9	9	15	19	15
Na-Ar	9	13	19	13	19	23	19

4.4. Z 行列

構造の記述には、対称性の導入などが比較的簡単で便利なため、古くからZ行列表示がよく使われています。Z行列では、結合長、結合角及び二面角を用いて原子の位置を指定します。以下にいくつか例を示します。

H2O

```
0
H 1 r1
H 1 r1 2 a1
r1=0.947
a1=105.5
```

HOOH

```
0
O 1 r1
H 1 r2 2 a1
H 2 r2 1 a1 3 t1
r1=1.1393
r2=0.949
a1=102.2
t1=115.2
```

H2CO

```
0
C 1 r1
H 2 r2 1 a1
H 2 r2 1 a1 4 180.

r1=1.184
r2=1.092
a1=122.15
```

下記の2つは、ダミー原子を使った例です。ダミー原子はXで表しますが仮想的なもので、分子軌道の計算自体に直接影響することはありません。このように直線分子の場合や対称性を明確にする場合には、しばしばダミー原子を使う必要があります。

HCN

```
X
C 1 1.
N 2 r1 90.
H 2 r2 90. 3 180.

r1=1.133
r2=31.059
```

NH3

```
X
N 1 1.
H 2 r1 1 a1
H 2 r1 1 a1 3 120.
H 2 r1 1 a1 3 -120.

r1=1.0025
a1=111.68
```

この場合、Z行列中に直接書き込んだ1.、120.、-120.という数値はOpt=Z-Matrixで構造最適化する場合は変数として扱われません。r1、a1のみが変数として扱われます。

```
X
N 1 1.
K 2 r1 1 a1
H 2 r1 1 a1 3 t1
H 2 r1 1 a1 3 -t1
r1=1.0025
a1=111.68
t1=120.
```

4.5. その他

4.5.1. キーワード使用例

構造最適化

```
# hf/6-31g* opt=z-matrix test
# mp2=(full,direct)/6-31g* opt=zmatrix test maxdisk=2Gb
```

遷移状態の構造最適化

```
# hf/6-31g* opt=(ts,z-matrix,noeigentest) test  
# hf/6-31g* opt=(ts,z-matrix,noeigentest,calcfc) test
```

振動解析

```
# hf/6-31g* freq pop=(reg,npa)
```

電子相関の一点計算

```
# mp4/6-31g** test  
# cisd/6-31g**test*
```

分子軌道の数値を出力する場合、pop=regかpop=fullを加えます。pop=regの場合は占有軌道5つと空軌道を5つ、pop=fullではすべての軌道を出力します。デフォルトではHFの軌道なので、使用した手法の軌道や電子密度を知りたい場合は、densit=currentも同時に指定して置くことが必要です。既存のチェックポイントファイルを利用する場合は、さらに、'geom=checkguess=read'の二つを加えます。

また、一つの入力ファイルに連続するジョブを含めることができます。例えば、構造最適化に続いて振動解析を連続で行う場合、OptとFreqを同時に指定せずに、-Link1-で二つ目のジョブを繋ぐことができます。-Link1-を使えばいくらかでもジョブを継続できますが、出力リストが大きくなりすぎる場合があります。

4.5.2. 便利なGaussianユーティリティ

チェックポイントファイルから構造データを取り出すユーティリティnewzmatが用意されています。

h2o.chkからmopac形式の構造データ(h2o.inp)として取り出す方法

```
(例) newzmat -ichk -omopac h2o
```

cache形式の構造データ(h2o.cac)として取り出す方法

```
(例) newzmat -ichk -ocache h2o
```

protein data bank (PDB)形式(h2o.pdb)の構造データとして取り出す方法

```
(例) newzmat -ichk -opdb h2o
```

チェックポイントファイルをASCII形式に変換するユーティリティfomchkが用意されています。

```
(例) formchk h2o
```

上記のように実行するとh2o.fchkというASCII形式のファイルが作られます。このデータを使ってGaussViewなどで分子軌道を描くことができます。

さらに詳しい使い方や他のユーティリティ、ワードに関してはGaussianのユーザーマニュアルを参照して下さい。

5. 出力ファイル

5.1. 出力結果ファイル

以下は、3章で説明した入力データ h2o.dat を実行した結果、出力される h2o.log です。

```
Entering Gaussian System, Link 0=g16
Input=h2o.dat
Output=h2o.log
Initial command:
/apps/t3/sles12sp2/isv/gaussian/g16/B01/g16/l1.exe "/scr/49672.1.all.q/Gau-19739.
scr/49672.1.all.q/" //g16が実行したコマンド
Entering Link 1 = /apps/t3/sles12sp2/isv/gaussian/g16/B01/g16/l1.exe PID= 197
```

```
Copyright (c) 1988,1990,1992,1993,1995,1998,2003,2009,2016,
Gaussian, Inc. All Rights Reserved.
```

```
This is part of the Gaussian(R) 16 program. It is based on
the Gaussian(R) 09 system (copyright 2009, Gaussian, Inc.),
the Gaussian(R) 03 system (copyright 2003, Gaussian, Inc.),
the Gaussian(R) 98 system (copyright 1998, Gaussian, Inc.),
the Gaussian(R) 94 system (copyright 1995, Gaussian, Inc.),
the Gaussian 92(TM) system (copyright 1992, Gaussian, Inc.),
the Gaussian 90(TM) system (copyright 1990, Gaussian, Inc.),
the Gaussian 88(TM) system (copyright 1988, Gaussian, Inc.),
the Gaussian 86(TM) system (copyright 1986, Carnegie Mellon
University), and the Gaussian 82(TM) system (copyright 1983,
Carnegie Mellon University). Gaussian is a federally registered
trademark of Gaussian, Inc.
```

```
This software contains proprietary and confidential information,
including trade secrets, belonging to Gaussian, Inc.
```

```
This software is provided under written license and may be
used, copied, transmitted, or stored only in accord with that
written license.
```

```
The following legend is applicable only to US Government
contracts under FAR:
```

RESTRICTED RIGHTS LEGEND

```
Use, reproduction and disclosure by the US Government is
subject to restrictions as set forth in subparagraphs (a)
```

and (c) of the Commercial Computer Software - Restricted Rights clause in FAR 52.227-19.

Gaussian, Inc.
340 Quinnipiac St., Bldg. 40, Wallingford CT 06492

Warning -- This program may not be used in any manner that competes with the business of Gaussian, Inc. or will provide assistance to any competitor of Gaussian, Inc. The licensee of this program is prohibited from giving any competitor of Gaussian, Inc. access to this program. By using this program, the user acknowledges that Gaussian, Inc. is engaged in the business of creating and licensing software in the field of computational chemistry and represents and warrants to the licensee that it is not a competitor of Gaussian, Inc. and that it will not use this program in any manner prohibited above.

Cite this work as:

Gaussian 16, Revision A.03,
M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria,
M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone,
G. A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A. V. Marenich,
J. Bloino, B. G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H. P. Hratchian,
J. V. Ortiz, A. F. Izmaylov, J. L. Sonnenberg, D. Williams-Young,
F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone,
T. Henderson, D. Ranasinghe, V. G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega,
G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda,
J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai,
T. Vreven, K. Throssell, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta,
F. Ogliaro, M. J. Bearpark, J. J. Heyd, E. N. Brothers, K. N. Kudin,
V. N. Staroverov, T. A. Keith, R. Kobayashi, J. Normand,
K. Raghavachari, A. P. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar,
J. Tomasi, M. Cossi, J. M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi,
J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas,
J. B. Foresman, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.

Gaussian 16: ES64L-G16RevA.03 25-Dec-2016
5-Sep-2017

%CPU=2

SetSPE: set environment variable "MP_BIND" = "yes"

SetSPE: set environment variable "MP_BLIST" = "0,1"

Will use up to 2 processors via shared memory.

%Mem=256Mb

```
%Chk=h2o
-----
# HF/6-31G* Opt=Z-Matrix Test
-----
1/10=7,18=40,38=1/1,3; // ← ルートカードを展開した結果で、使用するリンクの順番とオプションの定
2/12=2,17=6,18=5,29=3,40=1/2;
3/5=1,6=6,7=1,11=9,25=1,30=1,71=1/1,2,3;
4//1;
5/5=2,38=5/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,28=1/1;
7/29=1/1,2,3,16;
1/10=7,18=40/3(2);
2/29=3/2;
99//99;
2/29=3/2;
3/5=1,6=6,7=1,11=9,25=1,30=1,71=1/1,2,3;
4/5=5,16=3,69=1/1;
5/5=2,38=5/2;
7//1,2,3,16;
1/18=40/3(-5);
2/29=3/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,19=2,28=1/1;
99/9=1/99;
---
h2o
---
Symbolic Z-matrix:
Charge = 0 Multiplicity = 1
0
H           1   r1
H           1   r1           2   a1
Variables:
r1           0.958
a1           104.5

GradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGrad
Berny optimization.
Initialization pass.
----- // ← 構造最適化の初期構造を表示
! Initial Parameters !
! (Angstroms and Degrees) !
-----
! Name Value Derivative information (Atomic Units) !
-----
! r1 0.958 estimate D2E/DX2 !
! a1 104.5 estimate D2E/DX2 !
-----
Trust Radius=3.00D-01 FncErr=1.00D-07 GrdErr=1.00D-07 EigMax=2.50D+02 EigMin=1.00D-07
```

Number of steps in this run= 20 maximum allowed number of steps= 100.
Grad

Z-MATRIX (ANGSTROMS AND DEGREES)

CD	Cent	Atom	N1	Length/X	N2	Alpha/Y	N3
J							
1	1	O					
2	2	H	1	0.958000(1)			
3	3	H	1	0.958000(2)	2	104.500(3)	

Z-Matrix orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	8	O	0.000000	0.000000	0.000000
2	1	H	0.000000	0.000000	0.958000
3	1	H	0.927485	0.000000	-0.239864

Distance matrix (angstroms):

	1	2	3
1 O	0.000000		
2 H	0.958000	0.000000	
3 H	0.958000	1.514961	0.000000

Stoichiometry H2O // ← 分子の示性式、対称性を表示

Framework group C2V[C2(0),SGV(H2)]

Deg. of freedom 2

Full point group C2V NOp 4

Largest Abelian subgroup C2V NOp 4

Largest concise Abelian subgroup C2 NOp 2

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	8	O	0.000000	0.000000	0.117301
2	1	H	0.000000	0.757481	-0.469203
3	1	H	-0.000000	-0.757481	-0.469203

Rotational constants (GHZ): 820.7393935 436.9774424 285.1

Standard basis: 6-31G(d) (6D, 7F) // ← 基底関数の情報

There are 10 symmetry adapted cartesian basis functions of A1 symmetry.

There are 1 symmetry adapted cartesian basis functions of A2 symmetry.

There are 3 symmetry adapted cartesian basis functions of B1 symmetry.

```
There are      5 symmetry adapted cartesian basis functions of B2 symmetry.
There are     10 symmetry adapted basis functions of A1 symmetry.
There are      1 symmetry adapted basis functions of A2 symmetry.
There are      3 symmetry adapted basis functions of B1 symmetry.
There are      5 symmetry adapted basis functions of B2 symmetry.
  19 basis functions,   36 primitive gaussians,   19 cartesian basis functions
Gaussianの数
  5 alpha electrons      5 beta electrons // ← α電子、β電子の個数
  nuclear repulsion energy      9.1873335790 Hartrees.
NAtoms=   3 NActive=   3 NUniq=   2 SFac= 2.25D+00 NATFMM=   60 NAOKFM=F Big=F
Integral buffers will be   131072 words long.
Raffenetti 1 integral format.
Two-electron integral symmetry is turned on.
One-electron integrals computed using PRISM.
NBasis=   19 RedA0= T EigKep=  2.23D-02 NBF=   10   1   3   5
NBsUse=   19 1.00D-06 EigRej= -1.00D+00 NBFU=   10   1   3   5
ExpMin= 1.61D-01 ExpMax= 5.48D+03 ExpMxC= 8.25D+02 IAcc=3 IRadAn=           5 AccDe
Harris functional with IExCor=  205 and IRadAn=           5 diagonalized for initial
HarFok: IExCor=  205 AccDes= 0.00D+00 IRadAn=           5 IDoV= 1 UseB2=F ITyADJ=1
ICtDFT= 3500011 ScaDFX=  1.000000  1.000000  1.000000  1.000000
FoFCou: FMM=F IPFlag=           0 FMFlag=   100000 FMFlg1=           0
      NFxFlg=           0 DoJE=T BraDBF=F KetDBF=T FulRan=T
      wScrn= 0.000000 ICntrl=           500 IOpCl=  0 I1Cent=  200000004 NGrid=
      NMat0=   1 NMatS0=   1 NMatT0=   0 NMatD0=   1 NMtDS0=   0 NMtDT0=
Petite list used in FoFCou.
Initial guess orbital symmetries:
  Occupied (A1) (A1) (B2) (A1) (B1)
  Virtual  (A1) (B2) (B2) (A1) (B1) (A1) (B2) (A1) (A1) (A2)
          (B1) (A1) (B2) (A1)
The electronic state of the initial guess is 1-A1.
Keep R1 ints in memory in symmetry-blocked form, NReq=845746.
Requested convergence on RMS density matrix=1.00D-08 within 128 cycles.
Requested convergence on MAX density matrix=1.00D-06.
Requested convergence on           energy=1.00D-06.
No special actions if energy rises.
SCF Done: E(RHF) = -76.0104963113      A.U. after   10 cycles // ← 初期構造のエネルギー
          NFock= 10 Conv=0.40D-08      -V/T= 2.0025

*****

Population analysis using the SCF density.

*****

Orbital symmetries:
  Occupied (A1) (A1) (B2) (A1) (B1) // ← 軌道の対称性
  Virtual  (A1) (B2) (B2) (A1) (B1) (A1) (B2) (A1) (A1) (A2)
          (B1) (A1) (B2) (A1)
```

```

The electronic state is 1-A1.
Alpha occ. eigenvalues -- -20.56054 -1.34140 -0.70647 -0.57090 -0.49786
Alpha virt. eigenvalues --  0.21058  0.30395  1.02223  1.13154  1.16779
Alpha virt. eigenvalues --  1.17096  1.38059  1.43406  2.02028  2.03398
Alpha virt. eigenvalues --  2.06791  2.62132  2.94589  3.97014
      Condensed to atoms (all electrons):
            1          2          3
      1  O   8.335873   0.265188   0.265188
      2  H   0.265188   0.320390  -0.018702
      3  H   0.265188  -0.018702   0.320390
Mulliken charges: // ← Mulliken法による原子上の部分電荷
            1
      1  O  -0.866249
      2  H   0.433124
      3  H   0.433124
Sum of Mulliken charges = -0.00000
Mulliken charges with hydrogens summed into heavy atoms:
            1
      1  O  -0.000000
Electronic spatial extent (au): <R**2>=          18.9527
Charge=          -0.0000 electrons
Dipole moment (field-independent basis, Debye): // ← 双極子モーメントと多重極子が続
      X=          -0.0000      Y=          0.0000      Z=          -2.2259  To
2.2259
Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
      XX=          -7.2281      YY=          -4.1302      ZZ=          -5.9782
      XY=          0.0000      XZ=          0.0000      YZ=          -0.0000
Traceless Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
      XX=          -1.4493      YY=          1.6486      ZZ=          -0.1994
      XY=          0.0000      XZ=          0.0000      YZ=          -0.0000
Octapole moment (field-independent basis, Debye-Ang**2):
      XXX=          0.0000      YYY=          0.0000      ZZZ=          -1.4457  XY
-0.0000
      XXY=          -0.0000      XXZ=          -0.3842      XZZ=          -0.0000  YZ
-0.0000
      YYZ=          -1.3830      XYZ=          -0.0000
Hexadecapole moment (field-independent basis, Debye-Ang**3):
      XXXX=          -5.2087      YYYY=          -5.4726      ZZZZ=          -6.0688  XXX
-0.0000
      XXXZ=          -0.0000      YYYYX=          0.0000      YYYZ=          -0.0000  ZZZ
-0.0000
      ZZZY=          -0.0000      XXYY=          -2.0428      XXZZ=          -1.9302  YYZ
-1.5873
      XXYZ=          -0.0000      YYXZ=          0.0000      ZZXY=          0.0000
N-N= 9.187333579045D+00 E-N=-1.988596914604D+02 KE= 7.581838981513D+01
Symmetry A1 KE= 6.774003774686D+01
Symmetry A2 KE= 2.904585704475D-34
Symmetry B1 KE= 4.554902672613D+00
Symmetry B2 KE= 3.523449395664D+00

```


Z-MATRIX (ANGSTROMS AND DEGREES)

CD	Cent	Atom	N1	Length/X	N2	Alpha/Y	N3
J							
1	1	O					
2	2	H	1	0.947309(1)			
3	3	H	1	0.947309(2)	2	105.289(3)	

Z-Matrix orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	8	O	0.000000	0.000000	0.000000
2	1	H	0.000000	0.000000	0.947309
3	1	H	0.913782	0.000000	-0.249795

Distance matrix (angstroms):

	1	2	3
1 O	0.000000		
2 H	0.947309	0.000000	
3 H	0.947309	1.506006	0.000000

Stoichiometry H2O

Framework group C2V[C2(0),SGV(H2)]

Deg. of freedom 2

Full point group C2V NOp 4

Largest Abelian subgroup C2V NOp 4

Largest concise Abelian subgroup C2 NOp 2

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	8	O	0.000000	0.000000	0.114958
2	1	H	-0.000000	0.753003	-0.459830
3	1	H	-0.000000	-0.753003	-0.459830

Rotational constants (GHZ): 854.5405516 442.1897515 291.4

Standard basis: 6-31G(d) (6D, 7F)

There are 10 symmetry adapted cartesian basis functions of A1 symmetry.
 There are 1 symmetry adapted cartesian basis functions of A2 symmetry.
 There are 3 symmetry adapted cartesian basis functions of B1 symmetry.
 There are 5 symmetry adapted cartesian basis functions of B2 symmetry.
 There are 10 symmetry adapted basis functions of A1 symmetry.
 There are 1 symmetry adapted basis functions of A2 symmetry.
 There are 3 symmetry adapted basis functions of B1 symmetry.
 There are 5 symmetry adapted basis functions of B2 symmetry.

```

19 basis functions,      36 primitive gaussians,      19 cartesian basis functions
5 alpha electrons       5 beta electrons
nuclear repulsion energy      9.2891539427 Hartrees.
NAtoms=   3 NActive=   3 NUniq=   2 SFac= 2.25D+00 NATFMM=  60 NAOKFM=F Big=F
Integral buffers will be 131072 words long.
Raffenetti 1 integral format.
Two-electron integral symmetry is turned on.
One-electron integrals computed using PRISM.
NBasis=   19 RedAO= T EigKep= 2.19D-02 NBF=   10   1   3   5
NBsUse=   19 1.00D-06 EigRej= -1.00D+00 NBFU=   10   1   3   5
Initial guess from the checkpoint file: "h2o.chk"
B after Tr=   0.000000  -0.000000  -0.000000
           Rot=   1.000000  -0.000000  -0.000000  -0.000000 Ang=   0.00 deg.
Initial guess orbital symmetries:
  Occupied (A1) (A1) (B2) (A1) (B1)
  Virtual  (A1) (B2) (B2) (A1) (B1) (A1) (B2) (A1) (A1) (A2)
           (B1) (A1) (B2) (A1)
ExpMin= 1.61D-01 ExpMax= 5.48D+03 ExpMxC= 8.25D+02 IAcc=2 IRadAn=   4 AccDe
Harris functional with IExCor= 205 and IRadAn=   4 diagonalized for initial
HarFok: IExCor= 205 AccDes= 0.00D+00 IRadAn=   4 IDoV= 1 UseB2=F ITyADJ=1
ICtDFT= 3500011 ScaDFX= 1.000000 1.000000 1.000000 1.000000
FoFCou: FMM=F IPFflag=   0 FMFlag= 100000 FMFlg1=   0
       NFxFlg=   0 DoJE=T BraDBF=F KetDBF=T FulRan=T
       wScrn= 0.000000 ICntrl=   500 IOpCl= 0 I1Cent= 200000004 NGrid=
       NMat0= 1 NMatS0= 1 NMatT0= 0 NMatD0= 1 NMtDS0= 0 NMtDT0=
Petite list used in FoFCou.
Keep R1 ints in memory in symmetry-blocked form, NReq=845746.
Requested convergence on RMS density matrix=1.00D-08 within 128 cycles.
Requested convergence on MAX density matrix=1.00D-06.
Requested convergence on energy=1.00D-06.
No special actions if energy rises.
SCF Done: E(RHF) = -76.0107452153 A.U. after 9 cycles
           NFock= 9 Conv=0.32D-08 -V/T= 2.0020
Calling FoFJK, ICntrl= 2127 FMM=F ISym2X=1 I1Cent= 0 IOpClX= 0 NMat=1 NMatS=
***** Axes restored to original set *****
-----
Center      Atomic      Forces (Hartrees/Bohr)
Number      Number          X          Y          Z
-----
   1         8          0.000386587  0.000000000  0.000295092
   2         1         -0.000394635 -0.000000000  0.000116222
   3         1          0.000008048 -0.000000000 -0.000411314
-----
Cartesian Forces: Max      0.000411314 RMS      0.000252766
-----
Internal Coordinate Forces (Hartree/Bohr or radian)
Cent  Atom  N1      Length/X      N2      Alpha/Y      N3      Bet
-----
  1    0

```

```

2 H      1  0.000116( 1)
3 H      1  0.000116( 2)      2  0.000706( 3)

```

Internal Forces: Max 0.000706458 RMS 0.000418767

Grad
Bery optimization.

Search for a local minimum.

Step number 2 out of a maximum of 20 // ← 構造最適化ステップの2回目

All quantities printed in internal units (Hartrees-Bohrs-Radians)

Update second derivatives using D2CorN and points 1 2

DE= -2.49D-04 DEPred=-2.44D-04 R= 1.02D+00

TightC=F SS= 1.41D+00 RLast= 2.45D-02 DXNew= 5.0454D-01 7.3351D-02

Trust test= 1.02D+00 RLast= 2.45D-02 DXMaxT set to 3.00D-01

The second derivative matrix:

```

          r1      a1
      r1      1.12630
      a1      0.00903  0.14388

```

ITU= 1 0

Eigenvalues --- 0.14380 1.12639

RFO step: Lambda=-3.44317636D-06 EMin= 1.43797375D-01

Quartic linear search produced a step of 0.01007.

Variable	Old X	-DE/DX	Delta X (Linear)	Delta X (Quad)	Delta X (Total)	New X
r1	1.79015	0.00023	-0.00020	0.00038	0.00017	1.79033
a1	1.83764	0.00071	0.00014	0.00475	0.00489	1.84253

Item	Value	Threshold	Converged?
Maximum Force	0.000706	0.000450	NO
RMS Force	0.000526	0.000300	NO
Maximum Displacement	0.004891	0.001800	NO
RMS Displacement	0.003461	0.001200	NO

Predicted change in Energy=-1.750045D-06

Grad

Z-MATRIX (ANGSTROMS AND DEGREES)

CD	Cent	Atom	N1	Length/X	N2	Alpha/Y	N3
J							
	1	1	0				
	2	2	H	1 0.947401(1)			
	3	3	H	1 0.947401(2)	2	105.569(3)	

Z-Matrix orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number	Number	Type	X	Y	Z
1	8	0	0.000000	0.000000	0.000000
2	1	0	0.000000	0.000000	0.947401
3	1	0	0.912638	0.000000	-0.254286

Distance matrix (angstroms):

	1	2	3
1 O	0.000000		
2 H	0.947401	0.000000	
3 H	0.947401	1.508960	0.000000

Stoichiometry H2O

Framework group C2V[C2(0),SGV(H2)]

Deg. of freedom 2

Full point group C2V NOp 4

Largest Abelian subgroup C2V NOp 4

Largest concise Abelian subgroup C2 NOp 2

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	8	0	-0.000000	-0.000000	0.114600
2	1	0	-0.000000	0.754480	-0.458400
3	1	0	-0.000000	-0.754480	-0.458400

Rotational constants (GHZ): 859.8805266 440.4602469 291.2

Standard basis: 6-31G(d) (6D, 7F)

There are 10 symmetry adapted cartesian basis functions of A1 symmetry.

There are 1 symmetry adapted cartesian basis functions of A2 symmetry.

There are 3 symmetry adapted cartesian basis functions of B1 symmetry.

There are 5 symmetry adapted cartesian basis functions of B2 symmetry.

There are 10 symmetry adapted basis functions of A1 symmetry.

There are 1 symmetry adapted basis functions of A2 symmetry.

There are 3 symmetry adapted basis functions of B1 symmetry.

There are 5 symmetry adapted basis functions of B2 symmetry.

19 basis functions, 36 primitive gaussians, 19 cartesian basis functions

5 alpha electrons 5 beta electrons

nuclear repulsion energy 9.2875961733 Hartrees.

NAtoms= 3 NActive= 3 NUniq= 2 SFac= 2.25D+00 NATFMM= 60 NAOKFM=F Big=F

Integral buffers will be 131072 words long.

Raffenetti 1 integral format.

Two-electron integral symmetry is turned on.

One-electron integrals computed using PRISM.

NBasis= 19 RedAO= T EigKep= 2.19D-02 NBF= 10 1 3 5

NBsUse= 19 1.00D-06 EigRej= -1.00D+00 NBFU= 10 1 3 5

Initial guess from the checkpoint file: "h2o.chk"

B after Tr= -0.000000 0.000000 0.000000

Rot= 1.000000 -0.000000 -0.000000 -0.000000 Ang= 0.00 deg.

Initial guess orbital symmetries:

```

Occupied (A1) (A1) (B2) (A1) (B1)
Virtual  (A1) (B2) (B2) (A1) (B1) (A1) (B2) (A1) (A1) (A2)
          (B1) (A1) (B2) (A1)

```

Keep R1 ints in memory in symmetry-blocked form, NReq=845746.

Requested convergence on RMS density matrix=1.00D-08 within 128 cycles.

Requested convergence on MAX density matrix=1.00D-06.

Requested convergence on energy=1.00D-06.

No special actions if energy rises.

SCF Done: E(RHF) = -76.0107463490 A.U. after 7 cycles

NFock= 7 Conv=0.80D-08 -V/T= 2.0020

Calling FoFJK, ICntrl= 2127 FMM=F ISym2X=1 I1Cent= 0 IOpClX= 0 NMat=1 NMatS=

***** Axes restored to original set *****

```

-----
Center      Atomic      Forces (Hartrees/Bohr)
Number      Number          X              Y              Z
-----
   1         8      -0.000046900    0.000000000   -0.000035619
   2         1       0.000134735   -0.000000000   -0.000128721
   3         1      -0.000087835   -0.000000000    0.000164340
-----

```

Cartesian Forces: Max 0.000164340 RMS 0.000090008

```

-----
Internal Coordinate Forces (Hartree/Bohr or radian)
Cent  Atom  N1      Length/X      N2      Alpha/Y      N3      Bet
-----
   1   0
   2   H    1  -0.000129( 1)
   3   H    1  -0.000129( 2)    2  -0.000241( 3)
-----

```

Internal Forces: Max 0.000241219 RMS 0.000174475

GradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGrad

Berny optimization.

Search for a local minimum.

Step number 3 out of a maximum of 20 // ← 構造最適化ステップの

All quantities printed in internal units (Hartrees-Bohrs-Radians)

Update second derivatives using D2CorN and points 1 2 3

DE= -1.13D-06 DEPred=-1.75D-06 R= 6.48D-01

TightC=F SS= 1.41D+00 RLast= 4.89D-03 DXNew= 5.0454D-01 1.4683D-02

Trust test= 6.48D-01 RLast= 4.89D-03 DXMaxT set to 3.00D-01

The second derivative matrix:

```

          r1      a1
        r1      1.12679
        a1      0.03608  0.19331

```

ITU= 1 1 0

Eigenvalues --- 0.19192 1.12818

RFO step: Lambda=-1.54338049D-08 EMin= 1.91921501D-01

Quartic linear search produced a step of -0.25989.

```

Variable      Old X      -DE/DX      Delta X      Delta X      Delta X      New X
              (Linear)    (Quad)     (Total)
   r1         1.79033  -0.00026  -0.00005  -0.00012  -0.00016  1.79017
   a1         1.84253  -0.00024  -0.00127   0.00005  -0.00123  1.84131

      Item              Value      Threshold  Converged?
Maximum Force          0.000257    0.000450    YES          // ← 全ての項目をパス
RMS      Force          0.000249    0.000300    YES
Maximum Displacement    0.001225    0.001800    YES
RMS      Displacement    0.000874    0.001200    YES
Predicted change in Energy=-1.702147D-07
Optimization completed.          // ← 以下の値がパラメータの収束値
  -- Stationary point found.

      -----
      !   Optimized Parameters   !
      ! (Angstroms and Degrees) !
      -----

!   Name              Value      Derivative information (Atomic Units)   !
-----
!   r1                0.9474      -DE/DX =  -0.0003                       !
!   a1                105.5693     -DE/DX =  -0.0002                       !
-----

GradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGrad

-----
                        Z-MATRIX (ANGSTROMS AND DEGREES)
      CD      Cent      Atom      N1      Length/X      N2      Alpha/Y      N3
J
-----
      1      1      O
      2      2      H      1      0.947401( 1)
      3      3      H      1      0.947401( 2)      2      105.569( 3)

-----
                        Z-Matrix orientation:
-----
Center      Atomic      Atomic      Coordinates (Angstroms)
Number      Number      Type      X      Y      Z
-----
      1      8      0      0.000000      0.000000      0.000000
      2      1      0      0.000000      0.000000      0.947401
      3      1      0      0.912638      0.000000      -0.254286

-----
                        Distance matrix (angstroms):
                        1      2      3
1  O      0.000000
2  H      0.947401      0.000000
3  H      0.947401      1.508960      0.000000

```

```
Stoichiometry      H2O
Framework group    C2V[C2(0),SGV(H2)]
Deg. of freedom    2
Full point group    C2V      N0p    4
Largest Abelian subgroup    C2V      N0p    4
Largest concise Abelian subgroup    C2      N0p    2
```

Standard orientation:

```
-----
Center      Atomic      Atomic      Coordinates (Angstroms)
Number      Number      Type        X           Y           Z
-----
   1         8           0          -0.000000   -0.000000    0.114600
   2         1           0          -0.000000    0.754480   -0.458400
   3         1           0          -0.000000   -0.754480   -0.458400
-----
```

```
Rotational constants (GHZ):          859.8805266          440.4602469          291.2
```

Population analysis using the SCF density.

Orbital symmetries:

```
Occupied (A1) (A1) (B2) (A1) (B1)
Virtual (A1) (B2) (B2) (A1) (B1) (A1) (B2) (A1) (A1) (A2)
        (B1) (A1) (B2) (A1)
```

The electronic state is 1-A1.

```
Alpha occ. eigenvalues -- -20.55785 -1.34603 -0.71435 -0.57064 -0.49817
Alpha virt. eigenvalues --  0.21301  0.30685  1.03200  1.13331  1.16805
Alpha virt. eigenvalues --  1.17810  1.38514  1.43095  2.02080  2.03054
Alpha virt. eigenvalues --  2.06733  2.63561  2.96570  3.97780
```

Condensed to atoms (all electrons):

```
          1          2          3
  1  O   8.333071   0.267909   0.267909
  2  H   0.267909   0.316090  -0.018443
  3  H   0.267909  -0.018443   0.316090
```

Mulliken charges:

```
          1
  1  O  -0.868889
  2  H   0.434444
  3  H   0.434444
```

Sum of Mulliken charges = 0.00000

Mulliken charges with hydrogens summed into heavy atoms:

```
          1
  1  O   0.000000
```

Electronic spatial extent (au): <R**2>= 18.8118

Charge= 0.0000 electrons

Dipole moment (field-independent basis, Debye):

```

      X=          -0.0000      Y=          -0.0000      Z=          -2.1977  To
2.1977
  Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
      XX=          -7.2059      YY=          -4.1022      ZZ=          -6.0028
      XY=           0.0000      XZ=           0.0000      YZ=           0.0000
  Traceless Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
      XX=          -1.4356      YY=           1.6681      ZZ=          -0.2326
      XY=           0.0000      XZ=           0.0000      YZ=           0.0000
  Octapole moment (field-independent basis, Debye-Ang**2):
      XXX=           0.0000      YYY=          -0.0000      ZZZ=          -1.4288  XY
-0.0000
      XXY=           0.0000      XXZ=          -0.3870      XZZ=          -0.0000  YZ
-0.0000
      YYZ=          -1.3553      XYZ=          -0.0000
  Hexadecapole moment (field-independent basis, Debye-Ang**3):
      XXXX=          -5.1843      YYYY=          -5.3615      ZZZZ=          -5.9889  XXX
-0.0000
      XXXZ=          -0.0000      YYYYX=           0.0000      YYYZ=           0.0000  ZZZ
-0.0000
      ZZZY=          -0.0000      XXYY=          -2.0172      XXZZ=          -1.9084  YYZ
-1.5813
      XXYZ=          -0.0000      YYXZ=           0.0000      ZZXY=           0.0000
N-N= 9.287596173269D+00 E-N=-1.990817855112D+02 KE= 7.585918805302D+01
Symmetry A1  KE= 6.776054239959D+01
Symmetry A2  KE= 8.998074294512D-35
Symmetry B1  KE= 4.551517540655D+00
Symmetry B2  KE= 3.547128112774D+00

```

Test job not archived.

```

1\1\GINC-R3I4N7\F0pt\RHF\6-31G(d)\H201\Gaussian\05-Sep-2017\1\#\ HF/6-
31G* Opt=Z-Matrix Test\h2o\0,1\0\H,1,r1\H,1,r1,2,a1\r1=0.94740118\A
1=105.56929929\Version=ES64L-G16RevA.03\State=1-A1\HF=-76.0107463\RMS
D=8.049e-09\RMSF=9.001e-05\Dipole=0.6885853,0.,0.5229555\Quadrupole=0.
3440127,-1.0673063,0.7232935,0.,-0.6806234,0.\PG=C02V [C2(01),SGV(H2)]
\ \@

```

The earth never tires,
 The earth is rude, silent, incomprehensible at first,
 Nature is rude and incomprehensible at first,
 Be not discouraged, keep on,
 There are divine things well envelop'd,
 I swear to you there are divine things more beautiful than words can tell.

-- Walt Whitman

```

Job cpu time:      0 days  0 hours  0 minutes  4.8 seconds.
Elapsed time:     0 days  0 hours  0 minutes  2.7 seconds.
File lengths (MBytes):  RWF=      6 Int=      0 D2E=      0 Chk=      2 Scr=
Normal termination of Gaussian 16 at Tue Sep  5 13:58:06 2017.

```


5.2. 結果の確認

3章で説明した入力データ h2o.dat の計算後にできる h2o.log を tail コマンドで確認してください。

```
$ tail h2o.log
The earth is rude, silent, incomprehensible at first,
Nature is rude and incomprehensible at first,
Be not discouraged, keep on,
There are divine things well envelop'd,
I swear to you there are divine things more beautiful than words can tell.
                                -- Walt Whitman
Job cpu time:           0 days  0 hours  0 minutes  4.8 seconds.
Elapsed time:          0 days  0 hours  0 minutes  2.7 seconds.
File lengths (MBytes):  RWF=         6 Int=         0 D2E=         0 Chk=         2 Scr=
Normal termination of Gaussian 16 at Tue Sep  5 13:58:06 2017.
```

無事終了したときの出力の最後はこのようにNormal termination of Gaussian 16で終わっているはずで、エラーメッセージが出ているようでしたら、出力のもう少し上の方を見てエラー出力が無いか確認してください。なお、プロセッサを2個以上使った場合のJob cpu time:は実際の計算時間とは全く異なりますので参考。また、エラーではありませんが、構造最適化の途中で最適化のサイクルの上限回数を上回ったためにストップします。その場合は、出力の最後は以下のようになっています。

```
-- Number of steps exceeded, NStep= 22
-- Flag reset to prevent archiving.
-----
! Non-Optimized Parameters !
! (AngstromsandDegrees) !
-----
! Name Value Derivative information (Atomic Units) !
-----
! r1 1.4959 -DE/DX = -0.000032 !
! r2 1.496 -DE/Dx = 0.000064 !

(中略)

-----
GradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGrad
Error termination request processed by link 9999.
Error terminatio in Lnkle.

(中略)
```

```
Job cpu time: 0 days 0 hours 38minutes 35.7 seconds.  
File lengths (MBytes): RWF= 9 Int= 0 D2E= 0 Chk= 3 Scr= 1
```

このような場合にチェック・ポイントファイルを残しておけば、簡単に構造最適化をリスタートさせることが

```
%Mem=256Mb  
%Chk=h2o  
# hf/6-31g* opt=restart  
  
H2O  
  
0 1
```

この場合、Z行列などの構造データはチェックポイントファイルから読み込むので、入力する必要はありません。

6. TCP Linda Gaussian

6.1. TCP Linda Gaussian概要

Gaussianの並列実現方法は2つあり、並列ライブラリTCP Lindaを利用して、分散メモリ並列による方法がTCP Linda Gaussianと呼ばれ、ノード内ノード間共に並列化できます。ただしLindaで並列可能な計算は下記のもののみとなり、系によっては高速化が望めず、1ノードでの計算結果と変わらない場合があります。

リンク	概要
l106.exel	分極率および超分極率を得るための力および双極子の数値微分
l302.exel	重なり積分、運動および位置の積分の計算
l401.exel	初期MO係数 (guess) の生成
l502.exel	SCF方程式の繰り返し計算 (conventional UHF、ROHF、すべてのDirect法、SCRF)
l506.exel	ROHFやGVB-PP計算の実行
l508.exel	二次的な収束SCFプログラム
l510.exel	MC-SCF
l602.exel	1電子プロパティ (ポテンシャル、電場、電場の勾配)
l701.exel	1電子積分の一次または二次微分
l703.exel	2電子積分の一次または二次微分 (spdf)
l906.exel	セミダイレクトMP2
l913.exel	ポストSCFエネルギーとその勾配項の計算
l914.exel	CIS、RPA、ZINDO励起状態とSCF安定性

リンク	概要
l1002.exel	CPHF方程式の繰り返し計算とNMRを含む様々なプロパティの計算
l1014.exel	CI-Singlesの二次微分
l1101.exel	1電子積分の導関数計算
l1110.exel	F(x)に対する2電子積分の微分の寄与
l1112.exel	MP2の2次微分

6.2. Gaussian Lindaの実行

Lindaは資源タイプf_nodeを指定する場合のみ利用可能です。Lindaに対応したモジュールファイルを読み込み、インプットファイルのLink0コマンド%lindaworkersを以下の形式で記述し実行します。

```
%lindaworkers=hostname1,hostname2, ...
```

バッチジョブ投入を行う場合は、バッチスクリプト内で sed や awk を利用して \$PE_HOSTFILE をパースする必要があります。以下に例を示します。

```
$ echo "%lindaworkers=$(echo `cat $PE_HOSTFILE | awk '{print $1}'  
| tr '\n' ',' | sed -e 's/,$/\n/g'`)" >> ${INPUT}  
  
$ cat ${INPUT}  
...  
%lindaworkers=r4i2n4,r1i5n3  
...
```


7. GPUの利用

7.1. 概要

GPUに対応したRev. B.01からGPUの利用が可能です。利用の詳細は<http://gaussian.com/gpu/>をご確認下さい。系によってはCPUだけの計算よりも遅くなる場合がありますので安易な利用は推奨しません。

GPUは、DFTのエネルギー、グラジエントおよび振動数(基底、励起状態の両方)計算を行うときには効果的ですが、小規模系やMP2やCCSDなどのpost-SCF計算効果がありません。複数ノードのGPU利用はf_nodeでのみ可能です。

7.2. GPUを利用する計算の実行

GAUSS_CDEF 環境変数及び GAUSS_GDEF 環境変数を設定することにより、インプットファイル中での%cpuや%gpucpuの指定や、コマンドオプション -c 及び -g の指定を省略できます。手動で設定しても構いませんが、TSUBAMEでは、Gaussianモジュール gaussian16/B01_gpu で GAUSS_CDEF 環境変数及び GAUSS_GDEF 環境変数が自動設定されます。

h_nodeでの実行例を以下に示します。

```
$ cd [利用したいディレクトリ]
$ module load gaussian16/B01_gpu
$ echo $GAUSS_CDEF
14-27
$ echo $GAUSS_GDEF
0-1=14-15
$ g16 [インプットファイル]
```

上記モジュールを使用せず手動で指定したい場合は、Link0コマンドに%cpu及び%gpucpuを記述するか、コマンドオプション -c 及び -g を指定してください。その際、確保した資源タイプによってGPU数が異なりますのでご注意ください。

Link0コマンドへの記述例を以下に示します。コマンドオプションについては、インタラクティブ実行をご参照ください。

f_nodeの場合

```
%cpu=0-27  
%gpucpu=0-3=0,1,2,3
```

f_node以外の資源タイプを使用してバッチジョブ投入を行う場合は、バッチスクリプト内で sed や awk を利用してコア番号をパースする必要があります。

h_nodeの場合

```
echo "%cpu=`numactl -s | awk '/physcpubind:/ { print $2 "-"  
$15 }`'" >> ${INPUT}  
echo "%gpucpu=0-1=`numactl -s | awk '/physcpubind:/ { print $2  
"," $3 }`'" >> ${INPUT}
```

q_nodeの場合

```
echo "%cpu=`numactl -s | awk '/physcpubind:/ { print $2 "-"  
$8 }`'" >> ${INPUT}  
echo "%gpucpu=0=`numactl -s | awk '/physcpubind:/ { print $2 }`'"  
>> ${INPUT}
```

バッチスクリプト例については、バッチジョブスケジューラーUGEによる実行をご覧ください。

改訂履歴

改定日付	内容
2020/06/09	「2.1.3. gaussian NBO7の実行」を追記
2020/03/06	「1. はじめに」のリンクを修正
2019/09/03	mkdocs版作成
2019/04/05	誤字を修正
2018/09/19	「インタラクティブ実行」にモジュールファイルにて環境変数GAUSS_CDEF及びGAUSS_GDEFを自動設定する方法を追記 「GPUの利用」を修正
2018/09/04	「インタラクティブ実行」にコマンドオプション例を追記
2018/07/27	「バージョン切り替え」をデフォルトバージョンを指定する様に修正
2018/05/28	glycine.sh内の誤記修正 glycine.sh →glycine.gjf
2018/04/04	「バッチスケジューラーUGEによる実行」にCPUの割り当ての例を追記 「Link0コマンド」に%cpuに関する説明を追記 「GPUを利用する計算の実行」にGPUの割り当ての例を追記
2018/03/16	Linda(6章)およびGPU(7章)を追記
2017/09/12	初版