



华南师范大学
SOUTH CHINA NORMAL UNIVERSITY

实验报告

学生姓名

Jade 非绝热动力学模拟

专业

年级、班级

课程名称

实验项目

实验类型

☐ 验证 ☐ 设计 ☐ 综合

实验时间

年 月 日

实验指导老师

实验评分

template

~~CAS~~ 用 hf 预先作 single point

1. 打开 hf.inp 文件 (打印显示). 会改 basis

(在 template 内)

{ r hf 电子总数

wf, 32, 1, 0 轨道数
单重态

Orbital, 2100.2 轨道输出, 另存到文件内

sub-molpro.sh 是交任务的文件

看 .out 判断是否完成或是否出错

2. 把得出的 wfu 目录拷到 cas. 处. (与 hf 同级)

CAS.inp 文件, 需改参数及具体语法

{ close, 11 } 封闭 1~13 个 orbital, 14, 15, 16 不封, 这只有 6 个 e⁻.

{ occ, 11 } 表示比原来多一个轨道, 3+1=4 个轨道, 共 17 个轨道

{ state, 2 wf, 32, 1, 0 } 表示 CAS(6, 4) 6 个电子, 4 个轨道

共 32 e⁻, 即其余需要 16 个 orbital

表示
2 个平均

交任务 (主操作 molpro...) 得 cas.molden 可以看轨道长相 (用 molden 看)

3. 再把 wfu 复制到 ~/MOLPRO.EXAM

跑 ~~MC~~ 动力学时需给参考轨道. 模板文件
wfu molpro-template.inp

不同步:

CPMCSF, GRAD, 1.1, spin=0.0, record=5101.1

CPMCSF, GRAD, 2.1, spin=0.0, record=5102.1

二. sampling.

1. wigner 需 {
 check.xyz
 opt.log ← 作 freq 后的 .log 文件
 input.ini
 manyjob.py

① python2 ~/soft/jade-mapping/src/sampling/prepare.py

gaussian

10 原子数

Normal mode 24 (3n-6)

>> opt.log

>> force.dat

② python2 ~/soft/jade-mapping/src/sampling2/sampling.py
默认 input.ini

labelmethod=1 是 wigner 采样

生成一大堆文件 用 molden 看 x-Q ang.dat 是否合理

↓
有很多个点结构, 采样的结构



实验报告

学生姓名	_____	学 号	_____
专 业	_____	年级、班级	_____
课程名称	_____	实验项目	_____
实验类型	<input type="checkbox"/> 验证 <input type="checkbox"/> 设计 <input type="checkbox"/> 综合	实验时间	_____ 年 _____ 月 _____ 日
实验指导老师	_____	实验评分	_____

用 manyjob.py 把这些结构分开。 → yes. 带 vel 跑 → 得 workspace

完成采样!

三、跑动力学 (目录 dynamics)

1. cp.sh → { 把采样的速度与结构复制过来
dyn.inp. ~~参考文件~~ (参考文件) 放一起. 再把文件的脚本放
MOLPRO-EXAM 模板文件 到跟 1-2-3 ...

dyn.inp: dyn.method = 1 用 TF

ntime = ... 一个轨迹跑的步数

dtime = ... 飞秒为单位 步长

n timer_ele = ... 核跑 1 号 电子跑 1 步

n sav-stat = ... 间隔多少步存一次

qm-method = 2 ...

n-state = 2 全过程包含 2 个态

md-state-list = '1, 2' 哪两个态, (表示 S₀, 2 表示 S₁)

i-state = 2, 当前态放在哪?

hope-e = 1 ... (eV) 在哪个范围你认为没跃迁

qm-package = 105 是用哪个软件跑

四. 分析数据.

pe-time.out : 5列数据
① 步数 ② 时间 ③ S₀的势能 ④ S₁势能 ⑤ 当前势能

current-state.out : ①步数 ②时间 ③当前在哪个态
④当前势能

vsplit 文件
可同时看多文件

traj-time.out

energy-time.out

(在 pop 下进行)

1. 先看 population. 建 pop 目录, 把轨迹放进去

* 把 current-time.out 的步数与当前态读出来得 state.dat (creat state.sh)

把 state.dat 全写进 data.ls 内 ls */state.dat >> date.ls

./mean.py -s 得 date.mean

xmgrace -nxy date.mean

ll */state.dat 看大小,
减去没跑完的轨迹

Tr

2. 看 Bond. angle 随时间变化

③ 在 analytics 下运行 python \$ jade-mapping/contrib/jobstatus.py

依次输入步数、轨迹数 \Rightarrow 会生成 state.dat

↓

python2 \$ jade-mapping/contrib/jobfilter.py

然后回车即可, 得 prepare.dat

↓

python2 \$ jade-mapping/contrib/geom-time.py

-l 12 traj-time.out
-h 看 help.

options 选项, 可有 -r, -l, -a, -d, -o, -x, -s, -z

得 tmpdirs 目录 (每次都是这个名字)

↓
进入 tmpdirs, xmgrace -nxy {
geom-aver.dat 平均值?
*.dat 可把全部画在一个图

在 analysis 下. python jade-mapping/contrib/hop-prints.py

提取 $S_1 \rightarrow S_0$, 就是 2 to 1 (设空树)

生成 tmpdirs, hop_...dat 内可看跳的层数

states_...dat

首先安装好 GPU 版的 amber

安装 jade:

(1) 解压 jade_mapping.tgz 安装包，在终端输入 `tar -xvf jade_mapping.tgz`

(2) 在 `jade_mapping/src` 目录下，输入 `make`

(要有编译器，先输入 `source /share/intel/bin/ifortvars.sh intel64`，再 `make`)

(3) 在刚刚的目录下输入 `make install`

(4) 改一下 `jade_mapping/bin/JADERC` 内的 `JADE_HOME=...`，改成这个程序所在位置，就是 `jade_mapping` 位置

```
(base) [luohx@comp2 jade_mapping]$ pwd
/share/home/luohx/soft/jade_mapping
```

如果在这：

改成这样：`export JADE_HOME=/share/home/luohx/soft/jade_mapping`

(5) 若没有 `netCDF4`，需要安装，因为服务器的 `python3` 有的模块没有，但这个也不是刚需，这个模块用于调用 `amber` 里的一些坐标信息。在 `jade_mapping/src/sampling_qmmm` 下安装。假如超时，换源一把，上网搜索“`pip 换源`”，随便复制一个

```
p2 sampling_qmmm]$ pip3 install netCDF4 -i http://pypi.douban.com/simple --trusted-host pypi.douban.com
```

再输入 `python3`，再 `import netCDF4 as nc`

```
Successfully installed cftime-1.6.2 netCDF4-1.6.3
(base) [luohx@comp2 sampling_qmmm]$ python3
Python 3.10.9 (main, Mar 1 2023, 18:23:06) [GCC 11.2.0] on linux
Type "help", "copyright", "credits" or "license" for more information.
>>> import netCDF4 as nc
>>>
(base) [luohx@comp2 sampling_qmmm]$
```

(6) 装 `conda` 环境，分成两个环境

```
amber_dev.yaml  amber_run.yaml
```

以偶氮甲烷和水的体系为例：

1、构建力场：

(1) 因为偶氮甲烷在 amber 内没有一个标准的库，所以手动去加。

首先用高斯对偶氮甲烷进行优化，输入文件 AZ_resp.gif（名字随便起，是.gif 文件就行）如下，amber 的精度为 HF/6-31g*（这个不能改），后面的内容看体系而定，最后一定要随便加个东西，如：resp。用高斯计算 g16 AZ_resp.gif

```
1 #chk=AZ_resp.chk
2 %mem=4GB
3 %nprocshared=4
4 #p HF/6-31g* scrf=(smd,solvent=water) nosym Pop=MK iop(6/33=2,6/42=6,6/50=1)
5
6 Generated by Multiwfn
7
8 0 1
9 N 0.621461 -0.784020 -0.000008
10 N -0.621461 -0.784020 -0.000011
11 C 1.359395 0.502253 0.000009
12 C -1.359395 0.502253 -0.000013
13 H 2.424665 0.272981 -0.001001
14 H 1.120237 1.100367 -0.887470
15 H 1.118738 1.101275 0.886467
16 H -1.119389 1.100747 0.886983
17 H -1.119586 1.100896 -0.886954
18 H -2.424666 0.272981 0.000126
19
20 resp
21
```

然后拿刚刚得到的 AZ_resp.log 文件进行电荷分析。将 AZ_resp.log（刚刚得到的）与 prep.sh（自己写的）放在同一个目录下，prep.sh 内容如下。先激活 amber_run 环境，假如报错说找不到 .so.5，就 export 环境地址，例如 export LD_LIBRARY_PATH="/share/home/luohx/anaconda3/envs/amber_run/lib:\$LD_LIBRARY_PATH"。然后运行，在终端输入 sh prep.sh

```
1 antechamber -fi gout -i AZ_resp.log -rn DAZ -fo prep1 -o daz.prepin -c resp
2 parmchk2 -i daz.prepin -f prep1 -o frcmod.daz
```

(2) 现在准备工作完成，可以建力场了。将上一步得到的 daz.prepin frcmod.daz（这两个对应上图框框内容，上面是什么就用什么文件）两个文件放在一个目录下。再写一个 tleap.in（记得改地址）文件放在里面，如下图。然后在该目录下输入 tleap -s -f tleap.in 即可得到 all.rst7，all.parm7，主要是看力常数（BOND）是否正确

```
1 Source /share/home/huanghy/bin/amber20/dat/leap/cmd/oldff/leaprc.ff14SB
2 #source leaprc.protein.ff19SB
3 set default nocenter on
4 source leaprc.water.tip3p
5 source leaprc.gaff
6 #set default PBRadii mbondi3
7 loadAmberPrep daz.prepin
8 loadAmberParams frcmod.daz
9 #bond all 9.C1 all.8.C5
10 #addions DAZ Na+ 0
11 #addions DAZ Cl- 0
12 solvateBox DAZ TIP3PBOX 20
13 saveAmberParm DAZ all.parm7 all.rst7
14 savepdb DAZ new.pdb
15 quit
```

把 amber 里水的库 (tip3p) 放进

读取上一步得到的文件

建一个 20 埃的盒子

输出的力场文件

2、Wigner 采样

输入文件 input.ini 如下，这个输入文件也可以看 jade_mapping/doc/sampling-doc 里的

KEYWORDS-NEW。参数代表的意思可以看 jade_mapping/src/sampling2 里的 DOC，文件的数值根据实际情况更改。

```
[wigner]
# dimensional info.
n_atom = 10  # 原子数.
n_mode = 24
# generate random number, if 0, reuse random data file
label_random = 1
nr = 50000
nbin = 50
#
label_read_vib = 1
# specify the format of the force calc.
label_es_output = 3
filename_es_output = force.dat  # 对应名字.
# do displacement & wigner distribution
label_displacement = 1
n_geom = 200
label_method = 2
t_k = 300
# frozen some atoms;
label_frozen = 0
number_frozen = 2
list_frozen = 1 2
```

如果这个 1, 下面 t_k 只能是 OK

如果想冻结一些东西, 把 label_frozen 改成 1
Number_frozen 是冻结的模块数量,
List_frozen 是想冻结的模式

首先, 将刚刚优化好的偶氮甲烷进行频率分析 freq.gjf, 关键词 nosym freq=hpmode, 最后那个 (empiricaldispersion=gd3b) 加不加都行

```
1 chk=A2_resp.chk
2 %mem=4GB
3 %nprocshared=4
4 #p b3lyp/6-31g*% nosym freq=hpmode empiricaldispersion=gd3bj
5
6 Generated by Multiwfn
7
8 0 1
9 N 0.621461 -0.784020 -0.000008
10 N -0.621461 -0.784020 -0.000011
11 C 1.359395 0.502253 0.000009
12 C -1.359395 0.502253 -0.000013
13 H 2.424665 0.272981 0.001001
14 H 1.120237 1.100367 -0.887470
15 H 1.118738 1.101275 0.886467
16 H -1.119389 1.100747 0.886983
17 H -1.119586 1.100896 -0.886954
18 H -2.424666 0.272981 0.000126
19
```

freq.gjf" [dos] 19L, 510C

然后将得到的结果 freq.log 用于 Wigner 采样, 将 freq.log 和 input.ini 文件放在一个目录下, 在该目录下输入路径: /jade_mapping/src/sampling/prepare.py

```
huanghy@comp1:~/qmmm_les/azm/ff/wigner$ ~/bin/jade_mapping/src/sampling/prepare.py
LOG TYPE (available): gaussian/turbomole/mndo
>> gaussian
Number of Atoms: 10
Number of Normal Mode: 24
LOG file name: >> freq.log
output file name: >> force.dat
Extract NORMAL MODE data.
gaussian case, n_atom&n_mode is useless
GAUSSIAN LOG FREQ TYPE: <hpmode/other>: [default: hpmode]
>
Read Input orientation: Find Geometry
Find the normal modes
```

程序的位置

根据情况填写, normal mode=3n-6, n 是原子数

再。。。。 jade_mapping/src/sampling2/sampling.py ，然后就可以得到一堆文件

```
modules
~/qmmm_les/azm/ff/wigner$ ~/bin/jade_mapping/src/sampling2/sampling.py
```

如果要提取刚刚得到的文件，先 source ~/soft/jade_mapping/bin/JADERC，再输入 manyjob.py，再输入 yes，就会得到 workspace，可以进 workspace 看看坐标有没有问题，也可以直接在该目录下看看 log 文件有没有报错

```
huanghy@comp1:~/qmmm_les/azm/ff/wigner$ manyjob.py
Do you want to get the velocity in, please input no or yes
>yes
```

3、用 MD 进行初步采样

jade_mapping/src/sampling_qmmm/amber_in_files 下有需要用到的对应的文件夹和脚本文件

将 1（2）得到的 all.rst7，all.parm7 和 min、nvt、npt（这三个目录里面都有对应 in 文件），qsub_amber.sh 放在同一个目录 sampling 下（目录名可以改，但改了的话 qsub_amber.sh 脚本也要对应更改），并将 all.rst7，all.parm7 复制到那三个目录下，并改名字。qsub_amber.sh 与 min、nvt、npt 内文件对照着看就明白了，脚本用到的文件要与目录下文件名一致，

```
$ cp all.rst7 min/min.rst7
$ cp all.parm7 min/prmtop
$ cp all.parm7 npt/prmtop
$ cp all.parm7 nvt/prmtop
```

复制到对应目录并改名

脚本如下：

```
1  #!/bin/bash
2
3  #PBS -l nodes=node78:ppn=1
4  #PBS -q eth
5  #PBS -j oe
6  #PBS -V
7
8  cd $PBS_O_WORKDIR
9  export CUDA_VISIBLE_DEVICES=1
10 #mpirun -np 128 \
11 cd min
12   pmemd.cuda -O -i min.in -o min.out -p prmtop -c \
13   min.rst7 -r min.ncrst -inf min.mdinfo -ref min.rst7
14
15 cp min.ncrst ../nvt
16 cd ../nvt
17   pmemd.cuda -O -i nvt.in -o nvt.out -p prmtop -c \
18   min.ncrst -r nvt.ncrst -x \
19   | nvt.nc -inf nvt.mdinfo -ref min.ncrst
20
21 cp nvt.ncrst ../npt
22 cd ../npt
23   pmemd.cuda -O -i npt.in -o npt.out -p prmtop -c \
24   nvt.ncrst -r npt.ncrst -x \
25   | npt.nc -inf npt.mdinfo -ref nvt.ncrst
26
27 if [ -d ../product ]
28 then
29   cp npt.ncrst ../product
30   cd ../product
31   pmemd.cuda -O -i pro.in -o pro.out -p prmtop -c \
32   npt.ncrst -r pro.ncrst -x \
33   | pro.nc -inf pro.mdinfo -ref npt.ncrst \
34   -x coord.nc -v vel.nc
35 fi
36
```

再 qsub qsub_amber.sh，运行后就会得到 npt.ncrst（这个在 npt 目录下），这是最终的速

度坐标文件。

然后把 npt.ncrst、prmtop（就是 npt 下那个文件）复制到 wigner 目录（这个是新建的目录，与 min、nvt、npt 同级）下，同时需要 npt.in，和输入文件 inp，如下图。

```
1 in_crd = ../npt.ncrst
2 in_top = ../prmtop
3
4 qm_mask = :1
5
6 qm_stru_au = 1
7
8 out_crd = inpcrd
9
10 label_sort = 1
11 sorted_file = ../ref.inp
```

然后在 wigner，将之前的 workspace 内的 1 复制到该目录下，在该目录 1 下运行，先输入 `source ~/soft/jade_mapping/bin/JADERC`（红色那个看你的 jade_mapping 放哪），再运行 `gen_amber_crd_with_qm.py`（在 jade_mapping/src/sampling_qmmm），就是输入 `gen_amber_crd_with_qm.py ../inp`。假如成功的话会得到文件 inpcrd。假如想弄出 200 个文件，可以 for 循环一把。然后准备 inp.in，qsub_amber.sh（和之前说的内容不一样）放在 wigner 目录下，到节点 78 上（或指定节点，用 qsub 提交）运行，向 wigner 目录下，终端首先输入 `ssh node78`，再输入 `./qsub_amber.sh` 最终会在目录 1 中得到 npt.ncrst。这完成初步采样

4、跑 BOMD

在 sampling 目录下新建目录 qm，将 sampling/wigner/1 里的 npt.ncrst 复制到 qm/1 里并改名为 inpcrd（对映 sampling/wigner 里的 inp 文件，里面的 out_crd 是什么名字就改成什么），再在 qm 中准备 inp 文件和 prmtop（就是之前提到的 prmtop 文件），如下图。

```
1 shake_atom_mask = @H=&:WAT&@5<:15.0
2
3 qm_mask = :1
4 mm_mask = !(:1)&@5<:20.0
5
6 fro_mask = @5>:15.0
7
8 in_top = ../prmtop
9 in_crd = inpcrd
10
11 reshape_mask = @5<:20.0
12
13 label_auto_image = 1
14 label_reshape = 1
15
16 label_zero_vel = 0

"inp" 16L, 220C
```

想要 shake 的原子，这个表示在 5 号原子 15 埃范围内水的氢原子

然后在 qm 目录下先 source ~/soft/jade_mapping/bin/JADERC，再运行 gen_all.py，就是 gen_all.py -finp，成功的话会显示下图信息，然后 sampling/qm/1 里会出现很多文件，其中里面的 .nc 和 .log 和 .rst7 和 CONN 和 inpcrd 没用。有这些就行了

```
huanghy@comp1:~/qmmm_les/azm/sampling/qm/1$ ls
atom_pair QMMM_EXAM qmmm_index stru_xyz.in vel_xyz.in
```

```
sorted_file
-----
/share/home/huanghy/qmmm_les/azm/sampling/qm/1
Generating topology files...clear!
Generating group file...clear!
Generating atom pair file...clear!
Generating atom index file...clear!
Generating coordinate and velocity file...clear!
Complete! (0.021085 min)
huanghy@comp1:~/qmmm_les/azm/sampling/qm$
```

在 sampling/qm/1 下准备 dyn.inp，有关动力学的一些参数可以看 jade_mapping > src > electronic > interface_qmmm >  qmmm_inp.py 看看变量的含义

在 qm/1/QMMM_EXAM 目录，在该目录下准备 mm.in（不用修改里面的东西）和 qm_template.in 文件。然后就可以进行基态的 qmmm，首先在目录 1 下输入 source ~/soft/jade_mapping/bin/JADERC（红色那个看你的 jade_mapping 放哪），然后再输入 jade.exe 就可以了，然后 qm/1 里面就会多了一些文件，一般看 traj_time.out、vel_time.out 和 qm_energy_time.out、pe_time.out。

```
Time interval of MM calculation for QM region: 0.01 seconds
Finish QM and MM calculation!
Finish QMMM calculation!
Total time interval of qm/mm interface process : 8.10 seconds
huanghy@comp1:~/qmmm_les/azm/sampling/qm/2$
```

看到 finish 一般是没问题。

- ▼ sampling
- > min
- > non
- > npt
- > nvt
- ▼ qm
- ▼ 1
- > old_chk
- ▼ QMMM_EXAM
- { } group.json
- ≡ mm.in
- ≡ mm.top
- ≡ qm_mm.top
- ≡ qm_template.in
- ≡ qm.top

```

1  molecular dynamics run
2  &cntrl
3  imin  = 1,
4  maxcyc = 0,
5  ioutfm=0,
6  ntb   = 0,
7  igb   = 0,
8  ntr   = 0,
9  cut   = 9999.0
10 /
11 &debugf
12 do_debugf=1,
13 dumpfrfc=1,
14 /
15
16
```

```

    sampling
    > min
    > non
    > npt
    > nvt
    > qm
    > 1
    > old_chk
    > QMMM_EXAM
    > group.json
    > mm.in
    > mm.top
    > qm_mm.top
    > qm_template.in
    > qm.top
    > QMMM_TMP
    > atom_pair
    > CONN

```

```

1 %chk=gaussian.chk
2 %mem=8GB
3 %nproc=4
4 #p b3lyp/6-31g** NoSymm Force Guess=Read Charge Prop=(Field,Read)
5
6 title
7
8 0 1
9
10 N 23.821528286 20.800726515 21.736294392
11 C 24.557537756 22.018479706 21.652866306
12 C 21.756814832 22.106196391 21.696876760
13 H 25.580745354 21.897861344 21.359021551
14 H 24.317024293 22.565332139 20.730833782
15 H 24.328244215 22.736592546 22.535759582
16 H 22.006943647 22.842148676 22.445968337
17 H 21.811118307 22.541881709 20.692754568
18 H 20.754191373 21.796230197 21.973512764
19
20

```

不能改，只能用这个

Force Guess=Read Charge Prop=(Field,Read)

必须有

没有也行

5、跑非绝热动力学

在 sampling 下新建目录 non。

利用 gen_jade_cond_by_step.py 进行，下图是说明。-sp 说明输入文件位置（就是上一步得到的结果，在目录 qm），-dp 输出文件位置，-s 指定第几步，-n 核数，-rp 替换掉输入文件目录下原有的目录。

```

options:
-h, --help            show this help message and exit
-sp SOUR_PATH, --sour_path SOUR_PATH
                        coordinate and velocity path for save path
-dp DES_PATH, --des_path DES_PATH
                        destination path for saving files
-s STEP, --step STEP  step
-rd RECURSION_DIR, --recursion_dir RECURSION_DIR
                        dir in destination path
-rp REPLACE, --replace REPLACE
                        replace the existed path(0 no (default) or 1 yes)
-n PPN, --ppn PPN     number of processors

```

```

(base) [luohx@comp2 non]$ gen_jade_cond_by_step.py -sp ../qm -dp . -s 4
1/.
Writing /share/home/luohx/qmmm/test2/azm/sampling/non/1/stru_xyz.in..., from /share/home/luohx/qmmm/test2/azm/sampling/qm/1/.
Writing /share/home/luohx/qmmm/test2/azm/sampling/non/1/vel_xyz.in..., from /share/home/luohx/qmmm/test2/azm/sampling/qm/1/.
Copying ['QMMM_EXAM', 'atom_pair', 'qmmm_index', 'dyn.inp', 'ref.inp'] ..., from /share/home/luohx/qmmm/test2/azm/sampling/qm/1/.
cp: cannot stat '/share/home/luohx/qmmm/test2/azm/sampling/qm/1./ref.inp': No such file or directory

```

例如：

然后在 non 下就会得到这些（因为我的 qm 只有 1，所以计算后只有 1），需要改 dyn.inp 内参数，和 QMMM_EXAM 内 min.in, qm_template.in, 的内容。QMMM_EXAM 内加入 qm_opt.xyz（qm 优化后的结构）。或者给个优化的输入 qm_opt_template.in, 就可以自己生成了。

```

(base) [luohx@comp2 non]$ ls
1
(base) [luohx@comp2 non]$ cd 1
(base) [luohx@comp2 1]$ ls
atom_pair  dyn.inp  QMMM_EXAM  qmmm_index  stru_xyz.in  vel_xyz.in

```

dyn.inp: 改 hop_e = 0.5、label_qmmm_bomd = 0、qm_method_qmmm = 2、i_state = 2，最后加上 qmmm_nac = 2（改了之后就要多个 qm_nac_template.in 文件

qm_template.in 中根据情况改计算细节，坐标不会读取，所以没有关系。qm_nac_template.in（只用 qm 部分计算）与 qm_template.in（只是算梯度）区别就是少了 LATTICE，

lat.in 这一行。

在 1 下输入 jade.exe

qm_template.in:

```
1 *** Title
2 memory,360,m
3 file,2,wfu
4 gprint,civector
5 symmetry, nosym
6 LATTICE, lat.in
7 basis, 6-31G
8
9 geomtyp=xyz
10 geometry={
11     10
12
13     C      0.816000060    -1.526000117    -0.718000053
14     H      1.144000089    -2.257000171    -1.394000107
15     H      1.278000099    -0.607000045    -0.570000046
16     H      1.050000080    -2.239000170     0.254000020
17     N     -0.588000047    -1.619000124    -0.988000076
18     N     -1.370000104    -0.929000072    -0.343000026
19     C     -0.818000064     0.029000002     0.568000042
20     H     -0.157000012    -0.285000022     1.228000093
21     H     -0.200000015     0.778000059    -0.148000011
22     H     -1.714000130     0.489000037     0.856000065
23 }
24
25 {multi
26 closed, 13
27 occ, 17
28 wf,32,1,0
29 state,2
30 start,2140.2
31 orbital,2140.2
32 CPMSCF,GRAD,1.1,spin=0.0,record=5101.1
33 CPMSCF,GRAD,2.1,spin=0.0,record=5102.1}
34
35 put,molden,cas.molden;orb,2140.2
36
37 Force; samc, 5101.1;
38 Force; samc, 5102.1;
39
NORMAL qm_template.in
```

qm_opt_template.in 如下，一般只有框框内容需要改，坐标也不用在意不会用到

```
qm_template [3].in - 记事本
文件(F)  编辑(E)  格式(O)  查看(V)  帮助(H)

*** Title
memory,400,m
file,2,wfu
gprint,civector
symmetry, nosym
LATTICE, lat.in
basis, 6-31G*

geomtyp=xyz
geometry={
    10

    C      0.816000060    -1.526000117    -0.718000053
    H      1.144000089    -2.257000171    -1.394000107
    H      1.278000099    -0.607000045    -0.570000046
    H      1.050000080    -2.239000170     0.254000020
    N     -0.588000047    -1.619000124    -0.988000076
    N     -1.370000104    -0.929000072    -0.343000026
    C     -0.818000064     0.029000002     0.568000042
    H     -0.157000012    -0.285000022     1.228000093
    H     -0.200000015     0.778000059    -0.148000011
    H     -1.714000130     0.489000037     0.856000065
}

{multi
closed, 47
occ, 49
wf,96,1,0
state,2
start,2140.2
orbital,2140.2
CPMSCF,GRAD,1.1,spin=0.0,record=5101.1
CPMSCF,GRAD,2.1,spin=0.0,record=5102.1}

put,molden,cas.molden;orb,2140.2

Force; samc, 5101.1;
Force; samc, 5102.1;
```

ASR 蛋白质体系：

1、处理蛋白质内的键连问题（pre 工作）

基体结构 5jje.pdb，但该文件 amber 读不了，就要对其进行处理。首先用 amber 内的 pdb4amber 工具将其变为 amber 可读取文件。在终端输入下图内容，-i 表示输入文件，-o 表示输出文件。

```
huanghy@comp1:~/qmmm_les/ASR/pre$ pdb4amber -i 5jje.pdb -o 5jje_clean.pdb
```

得到 5jje_clean.pdb 后还要确定主链。因为后续要将反应活性中心（老师会说，一般是生色基团，这个体系是 RET）和残基分开，可用 prepgen 将其分开。确定主链的方法，知道反应活性中心。然后是反应活性中心连着的那个残基，那个残基同时两侧也连着残基，主链就是残基和连着的那个残基，得到主链文件 mc（是要自己写吗）。

2、处理残基的电荷信息

反应活性中心（qm-la）也需优化，电荷分析，构建力场。

反应活性中心+残基+相连的残基组成一个片段，先优化 opt 该片段，然后再做电荷分析 resp，得到的 log 文件放入 ff/2 内，在终端输入 antechamber -fi gout -i LRR.log -rn RET -fo ac -o ret.ac -c resp -at amber -nc 1，用于生成.ac 文件。将.ac 文件和主链 mc 文件放入 ff/3 即可得到力场信息。

mc、pt.pdb 怎么来的

TURBOMOLE 做 ADC(2)计算教程

一、TURBOMOLE 单独做 ADC(2)计算

1. 准备一个 xyz 格式的坐标文件。

如: ch2nh2+.xyz

6

```
C -2.47466202 0.31481988 0.18790893
N -1.20155953 0.14665294 0.08936896
H -2.87509887 0.88004865 1.03300159
H -3.13044877 -0.11033996 -0.57576377
H -0.79250869 -0.37659185 -0.68849573
H -0.55851778 0.53106079 0.78572369
```

2. 创建 TURBOMOLE 坐标文件 (xyz 坐标转化为 coord 坐标)

x2t ch2nh2+.xyz > coord

```
[nscc540_WJ@gcn02 tddft]$cat coord
$coord
-4.67643348925357      0.59492335438792      0.35509641562358      c
-2.27061844405879      0.27713389318251      0.16888285918081      n
-5.43314946926898      1.66305093211573      1.95209009993542      h
-5.91569084832872      -0.20851230591356      -1.08803584253776      h
-1.49762438203197      -0.71165546037675      -1.30106837336118      h
-1.05544564454727      1.00355945301389      1.48480259022034      h
$end
```

3. define 命令。

(1) define 回车

```
[nscc540_WJ@gcn02 tddft]$define

define (gcn02) : TURBOMOLE V6.5( 18169 ) 26 Apr 2013 at 11:50:51
Copyright (C) 2013 TURBOMOLE GmbH, Karlsruhe

2020-08-17 15:15:25.488

      OPERATING SYSTEM = unix
      HOST NAME = gcn02
      STANDARD BASIS SET LIBRARY = /home-gg/Soft/Turbomole/TURBOMOLE/basen/
      ALTERNATE BASIS SET LIBRARY = /home-gg/Soft/Turbomole/TURBOMOLE/basold/
      LIBRARY FOR RI-J BASIS SETS = /home-gg/Soft/Turbomole/TURBOMOLE/jbasen/
      LIBRARY FOR RI-JK BASIS SETS = /home-gg/Soft/Turbomole/TURBOMOLE/jkbasen/
      LIBRARY FOR RIMP2/RICC2 SETS = /home-gg/Soft/Turbomole/TURBOMOLE/cbasen/
      LIBRARY FOR RIR12 BASIS SETS = /home-gg/Soft/Turbomole/TURBOMOLE/cabasen/
      LIBRARY FOR OEP BASIS SETS = /home-gg/Soft/Turbomole/TURBOMOLE/xbasen/
      STRUCTURE LIBRARY = /home-gg/Soft/Turbomole/TURBOMOLE/structures/

*****
*
*               D E F I N E
*
*   TURBOMOLE'S INTERACTIVE INPUT PROGRAM
*
*   Quantum Chemistry Group      University of Karlsruhe
*
*****

DATA WILL BE WRITTEN TO THE NEW FILE control

IF YOU WANT TO READ DEFAULT-DATA FROM ANOTHER control-TYPE FILE,
THEN ENTER ITS LOCATION/NAME OR OTHERWISE HIT >return<.

█
```

回车

(2) 输入 title

例如: adc2 回车

```
INPUT TITLE OR  
ENTER & TO REPEAT DEFINITION OF DEFAULT INPUT FILE  
adc2
```

(3) 定义分子结构

```
SPECIFICATION OF MOLECULAR GEOMETRY ( #ATOMS=0      SYMMETRY=c1 )  
YOU MAY USE ONE OF THE FOLLOWING COMMANDS :  
sy <group> <eps> : DEFINE MOLECULAR SYMMETRY (default for eps=3d-1)  
desy <eps>       : DETERMINE MOLECULAR SYMMETRY AND ADJUST  
                   COORDINATES (default for eps=1d-6)  
susy            : ADJUST COORDINATES FOR SUBGROUPS  
ai              : ADD ATOMIC COORDINATES INTERACTIVELY  
a <file>        : ADD ATOMIC COORDINATES FROM FILE <file>  
aa <file>       : ADD ATOMIC COORDINATES IN ANGSTROEM UNITS FROM FILE <file>  
sub            : SUBSTITUTE AN ATOM BY A GROUP OF ATOMS  
i              : INTERNAL COORDINATE MENU  
ired           : REDUNDANT INTERNAL COORDINATES  
red_info       : DISPLAY REDUNDANT INTERNAL COORDINATES  
ff             : UFF-FORCEFIELD CALCULATION  
m              : MANIPULATE GEOMETRY  
frag           : Define Fragments for BSSE calculation  
w <file>        : WRITE MOLECULAR COORDINATES TO FILE <file>  
r <file>        : RELOAD ATOMIC AND INTERNAL COORDINATES FROM FILE <file>  
name           : CHANGE ATOMIC IDENTIFIERS  
del            : DELETE ATOMS  
dis            : DISPLAY MOLECULAR GEOMETRY  
banal          : CARRY OUT BOND ANALYSIS  
*             : TERMINATE MOLECULAR GEOMETRY SPECIFICATION  
                AND WRITE GEOMETRY DATA TO CONTROL FILE  
  
IF YOU APPEND A QUESTION MARK TO ANY COMMAND AN EXPLANATION  
OF THAT COMMAND MAY BE GIVEN
```

sy c1 回车*****写入分子对称性

a coord 回车*****加入原子坐标文件

*回车

```
YOU DID NOT YET DEFINE ANY INTERNAL COORDINATES !  
  
ONLY AN INCOMPLETE SET OF  -1 INTERNALS SPECIFIED  
RECOMMENDATION: USE CARTESIAN COORDINATES (ENTER no BELOW)  
FOR ANY OTHER ANSWER YOU RETURN TO THE PREVIOUS MENU AGAIN  
  
IF YOU DO NOT WANT TO USE INTERNAL COORDINATES ENTER  no
```

no 回车*****不使用内坐标

(4) 基组选择。

```
b      : ASSIGN ATOMIC BASIS SETS  
bb     : b RESTRICTED TO BASIS SET LIBRARY  
bl     : LIST ATOMIC BASIS SETS ASSIGNED  
bm     : MODIFY DEFINITION OF ATOMIC BASIS SET  
bp     : SWITCH BETWEEN 5d/7f AND 6d/10f  
lib    : SELECT BASIS SET LIBRARY  
ecp    : ASSIGN EFFECTIVE CORE POTENTIALS  
ecpb   : ecp RESTRICTED TO BASIS SET LIBRARY  
ecpi   : GENERAL INFORMATION ABOUT EFFECTIVE CORE POTENTIALS  
ecpl   : LIST EFFECTIVE CORE POTENTIALS ASSIGNED  
ecprm  : REMOVE EFFECTIVE CORE POTENTIAL(S)  
c      : ASSIGN NUCLEAR CHARGES (IF DIFFERENT FROM DEFAULTS)  
cem    : ASSIGN NUCLEAR CHARGES FOR EMBEDDING  
m      : ASSIGN ATOMIC MASSES (IF DIFFERENT FROM DEFAULTS)  
dis    : DISPLAY MOLECULAR GEOMETRY  
dat    : DISPLAY ATOMIC ATTRIBUTES YET ESTABLISHED  
h      : EXPLANATION OF ATTRIBUTE DEFINITION SYNTAX  
*      : TERMINATE THIS SECTION AND WRITE DATA OR DATA REFERENCES TO control  
GOBACK=& (TO GEOMETRY MENU !)
```

b all def-SVP*****所有的原子，基组定义为一样的
 或 b 1-4 def-SVP 回车
 b 5,6 def-TZVP 回车*****按原子编号定义不同的基组
 或 b “c” def-SVP 回车
 b “h” def-TZVP 回车*****按原子类型定义不同的基组
 注意 基组 SVP 和 TZVP 一定要大写，如果基组为 def-SV (P) 括号要标出。
 *回车

(5) 占据数和分子轨道，选择轨道信息初始猜方法

```
CHOOSE COMMAND
infsao      : OUTPUT SAO INFORMATION
atb         : Switch for writing MOs in ASCII or binary format
eht         : PROVIDE MOs & OCCUPATION NUMBERS FROM EXTENDED HUECKEL GUESS
use <file>  : SUPPLY MO INFORMATION USING DATA FROM <file>
man         : MANUAL SPECIFICATION OF OCCUPATION NUMBERS
hcore       : HAMILTON CORE GUESS FOR MOs
flip        : FLIP SPIN OF A SELECTED ATOM
&           : MOVE BACK TO THE ATOMIC ATTRIBUTES MENU
THE COMMANDS use OR eht OR * OR q(uit) TERMINATE THIS MENU !!!
FOR EXPLANATIONS APPEND A QUESTION MARK (?) TO ANY COMMAND
```

eht 回车*****Extended Hueckel guess

```
reading orbital data 2S(DZ) from file /home-gg/Soft/Turbomole/TURBOMOLE/basen/h .

sao summary :
irrep      number of sao's referring to
           old basis   new basis
a          14         48

EFFECTIVE NUMBER OF NON-VANISHING CARTESIAN
OVERLAP MATRIX ELEMENTS : 2080

DO YOU WANT THE DEFAULT PARAMETERS FOR THE EXTENDED HUECKEL CALCULATION ?
DEFAULT=y HELP=?
```

y 回车

```
ENTER THE MOLECULAR CHARGE (DEFAULT=0)
```

+1 回车*****电荷数为 1

```
AUTOMATIC OCCUPATION NUMBER ASSIGNMENT ESTABLISHED !
FOUND CLOSED SHELL SYSTEM !
HOMO/LUMO-SEPARATION : 0.198553
ORBITAL SYMMETRY ENERGY DEFAULT
(SHELL) TYPE OCCUPATION
5 5a -0.66896 2
6 6a -0.59614 2
7 7a -0.58617 2
8 8a -0.52462 2
9 9a -0.32607 0
10 10a 0.30572 0
11 11a 0.42517 0

DO YOU ACCEPT THIS OCCUPATION ? DEFAULT=y
```

y 回车

(6) 方法选择


```

GENERAL MENU : SELECT YOUR TOPIC
scf      : SELECT NON-DEFAULT SCF PARAMETER
mp2      : OPTIONS AND DATA GROUPS FOR rimp2 and mpgrad
cc       : OPTIONS AND DATA GROUPS FOR ricc2
ex       : EXCITED STATE AND RESPONSE OPTIONS
prop     : SELECT TOOLS FOR SCF-ORBITAL ANALYSIS
drv      : SELECT NON-DEFAULT INPUT PARAMETER FOR EVALUATION
          OF ANALYTICAL ENERGY DERIVATIVES
          (GRADIENTS, FORCE CONSTANTS)
rex      : SELECT OPTIONS FOR GEOMETRY UPDATES USING RELAX
stp      : SELECT NON-DEFAULT STRUCTURE OPTIMIZATION PARAMETER
e        : DEFINE EXTERNAL ELECTROSTATIC FIELD
dft      : DFT Parameters
ri       : RI Parameters
rijk    : RI-JK-HF Parameters
senex    : seminumeric exchange parameters
hybno    : hybrid Noga/Diag parameters
dsp      : DFT dispersion correction
trunc    : USE TRUNCATED AUXBASIS DURING ITERATIONS
marij    : MULTIPOLE ACCELERATED RI-J
dis      : DISPLAY MOLECULAR GEOMETRY
list     : LIST OF CONTROL FILE
&        : GO BACK TO OCCUPATION/ORBITAL ASSIGNMENT MENU
* or q   : END OF DEFINE SESSION

```

cc 回车*****设置 couple cluster 方法

```

INPUT MENU FOR CALCULATIONS WITH ricc2:
(#atoms= 6 #bas= 6 #cbas= 0 #cabs= 0 #jkbas= 0 )
freeze  : SET FROZEN OCCUPIED/VIRTUAL ORBITAL OPTIONS
cbas    : ASSIGN AUXILIARY (CBAS) BASIS SETS
memory  : SET MAXIMUM CORE MEMORY (PRESENT VALUE: 500 Mb)
denconv : CONVERGENCE THRESHOLD FOR SCF DENSITY (0.1E-06 )
tmpdir  : DEFINE PATH FOR TEMPORARY FILES
ricc2   : DATA GROUP $ricc2 (MODELS AND GLOBAL OPTIONS)
f12     : DATA GROUP $f12 (F12 APPROX. AND OPTIONS)
exci    : INPUT FOR CALCULATION OF EXCITATION ENERGIES
resp    : INPUT FOR GROUND STATE PROPERTIES
cabs    : ASSIGN COMPLEMENTARY AUXILIARY (CABS) BASIS SETS
jkbas   : ASSIGN AUXILIARY BASIS FOR FOCK MATRICES (JKBAS)
other   : OTHER DIVERSE OPTIONS
* / end : SAVE DEFINITIONS AND LEAVE MENU

```

ricc2 回车

```

<model> : add wavefunction model to calculation
          (type 'list models' for a list)
scs,sos  : switches for spin component scaled MP2
          (type 'list scs' for details)
oconv <n> : threshold for vector function (10^-5.)
conv <n>  : convergence threshold for energy (10^-6.)
lindep   : linear dependence threshold (10^-15.)
maxiter  : max. number of iterations (100)
mxdiis   : max. number of DIIS vectors (10)
maxred   : max. dim. of reduced space (100)
geoopt <m> <x> : optimize geometry for wavefunction <m>
               and state <x> (type 'list geoopt' for details)
*,end    : write $ricc2 to file and leave the menu
&        : go back - leaving $ricc2 unchanged...

```

adc(2)回车*****使用 adc(2)方法

*回车

(7) RI 近似伴随基组

```

INPUT MENU FOR CALCULATIONS WITH ricc2:
(#atoms= 6 #bas= 6 #cbas= 0 #cabs= 0 #jkbases= 0 )
freeze : SET FROZEN OCCUPIED/VIRTUAL ORBITAL OPTIONS
cbas : ASSIGN AUXILIARY (CBAS) BASIS SETS
memory : SET MAXIMUM CORE MEMORY (PRESENT VALUE: 500 Mb)
denconv : CONVERGENCE THRESHOLD FOR SCF DENSITY (0.1E-06 )
tmpdir : DEFINE PATH FOR TEMPORARY FILES
ricc2 : DATA GROUP $ricc2 (MODELS AND GLOBAL OPTIONS)
f12 : DATA GROUP $f12 (F12 APPROX. AND OPTIONS)
exci : INPUT FOR CALCULATION OF EXCITATION ENERGIES
resp : INPUT FOR GROUND STATE PROPERTIES
cabs : ASSIGN COMPLEMENTARY AUXILIARY (CABS) BASIS SETS
jkbases : ASSIGN AUXILIARY BASIS FOR FOCK MATRICES (JKBAS)
other : OTHER DIVERSE OPTIONS
* / end : SAVE DEFINITIONS AND LEAVE MENU

```

cbas 回车

```

AUXILIARY BASIS SET DEFINITION MENU
( #atoms=6 #cbas=6 )
b : ASSIGN ATOMIC BASIS SETS
bb : b RESTRICTED TO BASIS SET LIBRARY
bl : LIST ATOMIC BASIS SETS ASSIGNED
bm : MODIFY DEFINITION OF ATOMIC BASIS SET
lib : SELECT BASIS SET LIBRARY
dis : DISPLAY MOLECULAR GEOMETRY
dat : DISPLAY ATOMIC ATTRIBUTES YET ESTABLISHED
h : EXPLANATION OF ATTRIBUTE DEFINITION SYNTAX
* / end: END THIS SECTION AND SAVE DATA ON FILE control

```

b all def2-SVP 回车*****与之前的基组保持一致

*回车

(8) 激发态计算参数设置

```

INPUT MENU FOR CALCULATIONS WITH ricc2:
(#atoms= 6 #bas= 6 #cbas= 6 #cabs= 0 #jkbases= 0 )
freeze : SET FROZEN OCCUPIED/VIRTUAL ORBITAL OPTIONS
cbas : ASSIGN AUXILIARY (CBAS) BASIS SETS
memory : SET MAXIMUM CORE MEMORY (PRESENT VALUE: 500 Mb)
denconv : CONVERGENCE THRESHOLD FOR SCF DENSITY (0.1E-06 )
tmpdir : DEFINE PATH FOR TEMPORARY FILES
ricc2 : DATA GROUP $ricc2 (MODELS AND GLOBAL OPTIONS)
f12 : DATA GROUP $f12 (F12 APPROX. AND OPTIONS)
exci : INPUT FOR CALCULATION OF EXCITATION ENERGIES
resp : INPUT FOR GROUND STATE PROPERTIES
cabs : ASSIGN COMPLEMENTARY AUXILIARY (CABS) BASIS SETS
jkbases : ASSIGN AUXILIARY BASIS FOR FOCK MATRICES (JKBAS)
other : OTHER DIVERSE OPTIONS
* / end : SAVE DEFINITIONS AND LEAVE MENU

```

exci 回车

```

irrep : number of excitations for a given symmetry
spectrum : give input for spectrum (transition moments)
exprop : give input for excited state properties
conv <n> : convergence threshold for energy (10^-6.)
thrddiis <n> : threshold for switching on DIIS (10^-2.)
preopt <n> : threshold for pre-optimization (10^-3.)
list <opt> : print status & help for option <opt>
del <opt> : delete input for option <opt>
* / end : write $ricc2 to file and leave the menu
& : go back - leaving $ricc2 unchanged...
<opt> = irrep, spectrum, or exprop

```

irrep=a charge=0 multiplicity=1 nexc=3 回车*****计算 a 对称性，电荷为 0，自旋多重度为 1 的三个激发态

spectrum states=all 回车*****计算光谱

*回车

*回车

*回车

```

-----
total cpu-time : 0.22 seconds
total wall-time : 1 minutes and 49 seconds
-----

**** define : all done ****

2020-08-17 17:05:24.771
define ended normally

```

此时目录下有以下文件：

auxbasis basis control coord mos

生成 control 文件后，

修改 control 文件 \$scfiterlimit 30 为 \$scfiterlimit 100，即增大 SCF 循环次数

如果需要做三重激发态，只需将 multiplicity= 1 改为 multiplicity= 3 即可。

4. 提交作业。

作业脚本计算部分依次写上

export PARNODES=8*****8 个核并行

dscf> dscf.out*****先进行 SCF 计算

ricc2> ricc2.out*****再进行 ricc2 计算。

作业脚本放在深圳超算 script 目录下

5. 结果。

激发态能量

```

+=====+
| sym | multi | state |          ADC(2) excitation energies          | ||T1|| | ||T2|| |
|-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
|      |      |      |      Hartree      |      eV      |      cm-1      |      %      |      %      |
+=====+
| a | 1 | 1 | 0.3150725 | 8.57356 | 69150.411 | 97.10 | 2.90 |
| a | 1 | 2 | 0.3453406 | 9.39719 | 75793.492 | 96.51 | 3.49 |
| a | 1 | 3 | 0.4168456 | 11.34295 | 91487.034 | 97.10 | 2.90 |
+=====+

```

激发态跃迁轨道贡献

```

Energy:      0.3150725 H      8.57356 eV      69150.411 cm-1

+=====+
| type: RE0 | symmetry: a | state: 1 |
+-----+-----+-----+-----+-----+
| occ. orb. | index | spin | vir. orb. | index | spin | coeff./amp | % |
+-----+-----+-----+-----+-----+
| 7 a | 7 | | 9 a | 9 | | 0.99007 | 98.0 |
+-----+-----+-----+-----+-----+
norm of printed elements: 0.98023

```


激发态振子强度。

+=====+			
Transition	model: ADC(2)		
number, symmetry, multiplicity:	1 a 1		
frequency :	0.3150724572 a.u.	8.57356 e.V.	69150.4 rcm
+=====+			
+-----+-----+-----+-----+			
operator	left moment	right moment	transition strength
+-----+-----+-----+-----+			
xdiplen	-0.00013775	-0.00013775	0.00000002
ydiplen	0.00008021	0.00008021	0.00000001
zdiplen	0.00010835	0.00010835	0.00000001
+-----+-----+-----+-----+			
oscillator strength (length gauge) : 0.00000001			

在工作目录下运行 `tm2molden` 命令，一路回车，即可得到带有轨道信息的 `molden.input` 文件。

二、TURBOMOLE 结合 JADE 做 ADC(2)动力学

1. 准备 ADC(2)模版文件。

与上面步骤完全一样，最后在生成的 `control` 文件中添加

```
geoopt model=adc(2) state=(a 1)
```

如下所示

```
$ricc2
  adc(2)
  geoopt model=adc(2) state=(a 1)
$excitations
  irrep=a charge= 0 multiplicity= 1 nexc= 3 npre= 3 nstart= 3
  spectrum states=all operators=xdiplen,ydiplen,zdiplen
```

新建目录 `TUR_EXAM`，将 `auxbasis basis control coord mos` 文件拷入

2. 准备 JADE 动力学参数文件 `dyn.inp`

```
&control
```

```
dyn_method = 2,
```

```
ntime = 200,
```

```
dtime = 0.5,
```

```
ntime_ele = 100,
```

```
n_sav_stat = 1,
```

```
n_sav_traj = 1,
```

```
qm_method = 12,
```

```
n_state = 3,
```

```
md_state_list = "1, 2, 3",
```

```
i_state = 2,
```

```
seed_random = -1,
```

```
cor_dec = 0.1,
```

```
label_nac_phase = 1,
```

```
label_reject_hops = 1,
```

```
hop_e = 10,
```

```
label_read_velocity = 0,
```

```

label_restart = 0,
/

&quantum
qm_method = 12,
qm_package = 101,
ci_td_use_file_type = "chk",
ci_assign_problem = "X+Y",
is_do_cis_casida = "no",
/

```

相关参数详细信息参考 JADE 程序包 doc 下的 KEYWORDS 文件。

3. 准备初始坐标文件

例如 stru_xyz.in

```

6
ang
C -2.47466202  0.31481988  0.18790893
N -1.20155953  0.14665294  0.08936896
H -2.87509887  0.88004865  1.03300159
H -3.13044877 -0.11033996 -0.57576377
H -0.79250869 -0.37659185 -0.68849573
H -0.55851778  0.53106079  0.78572369

```

4. 动力学计算

运行 jade.exe > jade.log

作业脚本放在深圳超算 script 目录下。

zhuyifei 讲 Jade. 接口是 python2.

跟动力学一般分为: 采样 sampling.
(基于freq)

经典化量子学 wigner.
xample
动力学采样
:

为什么采样: 为了用
经典方式近似量子
情况. 希望样
本有量子性质.

动力学部分 TSH surface hopping.

(跳跃几率计算的算法来区分
不同版本的 surface hopping.)

程序 contrib 关于 Jade 脚本. 一些基本功能.

doc 介绍.

dyn freq 是 fortran 代码

make , make install

src 主要部分 源码

采样准备: 优化. 作 freq 去看 gaussian 官网.

↓
加 HPModes, 精度会更高.

python2 prepre.py. → gaussian → 原子...