



# 实验报告

学生姓名

Jade3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

一、template

~~CAS107~~ 单点 用hf预先作 single point

1. 打开hf.inp文件 (打开目录). 会改basis

(在 template/hf)

{ rhf 电子总个数

wf, 32, 1, 0 电荷

单重态

Orbital, 2100.2 轨道输出另存到文件内

sub-molpro.sh 是父任务的文件

看.out 判断是否完成或是不出错

2. 把得出的 wfu 直接拷到 cas.6.4. (与hf同级)

cas.inp 文件, 需改的参数及具体语义

{ close, 01 } → 封闭 1~13 个 orbit, 14, 15, 16 不封, 选取有 6Te<sup>-</sup>

{ occ, 01 } → 表示比原来多 3 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

632e<sup>-</sup>, 即共需要 16 个 orbit

输出

2 个平均

父任务 (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

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

不建议:

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

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

二. sampling.

1. wigner 需 {  
  check.xyz  
  opt.log ← HF freq log. 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

label method=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  验证  设计  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 80 → 得 workspace

完成采样!

## 三、跑动力学 (目录 dynamics)

lcp.sh → { 把采样的速度与结构复制过来  
dyn.inp. (参考文件) 放一起, 再把文件放脚本放  
MOLPRO\_EXAM 模板文件 到目录 1-2-3 ...

dyninp: dyn\_method=1 用 TF

ntime=... 一个轨迹跑的步数

dttime=... 飞秒为单位 步长

ntime\_ele=... 核跑1步电子跑几步

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, 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跑进

qm\_package=105 是用哪个软件跑

## 四. 分析数据

pe-time.out : 5列数据  
 ⑤ ⑥ ⑦ ⑧ ⑨  
 步数 时间 so的帮助 s,帮助 当前帮助

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

vsplite 文件名  
 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 >> data.ls

./mean.py -s 得 date.mean

xmgrace -nxy date.mean

ll \* / state.dat 看大小,  
 去没跑完的轨迹

True

2. 看 Bond, angle 随时间变化

② 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 -h traj-time.out  
 看 help

(~~无~~ options 选项, 可有 -r, -l, -a, -d, -o, -x, -s, -2)

得 tmpdirs 目录(每次都得这个名字)

进入 tmpdir tmpdirs, xmgrace -nxy { geom-aver.dat 平均值  
 \*.dat -1条  
 \*.dat 可把全部画在一个图

在 analysis F. python \$jade-mapping/contrib/hop-points.py

提取  $s_1 \rightarrow s_0$ , 就是 2 to 1 (没空格)

生成 `tmpdirs` , `hop-... .dat` 内可看跳步的层数

`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
```

如果在这: `/share/home/luohx/soft/jade_mapping`

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.gjf (名字随便起，是.gjf 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.gjf

```
1 <chk=AZ_resp.chk
2 %mem=4GB
3 %procshared=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.prep1 -c resp
2 parmchk2 -i daz.prep1 -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.prep1 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.prep1
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
如果这个是 1, 下面 t_k 只能是 OK
t_k = 300
# frozen some atoms;
label_frozen = 0
如果想冻结一些东西, 把 label_frozen 改成 1
number_frozen = 2
Number_frozen 是冻结的模块数量,
list_frozen = 1 2
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=AZ_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
程序的位置
>> gaussian
Number of Atoms: 10
Number of Normal Mode: 24
LOG file name: >> freq.log
output file name: >> force.dat
根据情况填写, normal mode=3n-6, n 是原子数
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

```

再 ..... jade\_mapping/src/sampling2/sampling.py , 然后就可以得到一堆文件

```
huanghy@comp1:~/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
```

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 `inpqr`。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 = !(1:8@5<:20.0T
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 -f inp](#)，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

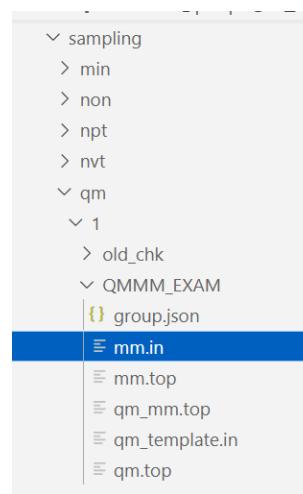
```
huanghy@comp1:~/qmmm_les/azm/sampling/qm/1$ ls
atom_pair  QMMM_EXAM  qmmm_index  stru_xyz.in  vel_xyz.in
```

```
shake_atom_mask
sorted_file
-----
/share/home/huanghy/qmmm_les/azm/sampling/qm/1
Generating topology files...clear!  I
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
看到 finish huanghy@comp1:~/qmmm_les/azm/sampling/qm/2$ 一般是没问题。
```



```
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 dumpfrc=1,
14 /
15
16
```

```

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 N 23.821528286 20.800726515 21.736294392
10 N 22.534931876 20.875486460 21.624484722
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

```

## 5、跑非绝热力学

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 ['QM/MM_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 QM/MM\_EXAM 内 min.in, qm\_template.in, 的内容。QM/MM\_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  QM/MM_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 - i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 pregen 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
infao      : 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 TEMPORY FILES
ricc2 : DATA GROUP $ricc2 (MODELS AND GLOBAL OPTIONS)
f12   : DATA GROUP $rir12 (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 近似伴隨基組

```

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 TEMPORY FILES
ricc2   : DATA GROUP $ricc2 (MODELS AND GLOBAL OPTIONS)
f12     : DATA GROUP $rir12 (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

```

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  #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 TEMPORY FILES
ricc2   : DATA GROUP $ricc2 (MODELS AND GLOBAL OPTIONS)
f12     : DATA GROUP $rir12 (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

```

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.)
thrdiis <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.

跑动力学一般分为：采样 sampling.

（基于 freq）

经典化量子学 Wigner.

xamble

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平局  
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 f90 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 propre.py → gaussian → freq ...