

# 如何阅读高斯的计算输出文件

高斯输出文件的关键是看 Link,每个 Link 对应不同的部分,以单点计算为例:单点计算的流程(见附件)

输入行在#后加入 P,不然的话就只会显示 Link 1 和 0,输出文件一般很长。对于单点计算,只有 300 多行。

第一部分:

基本运行信息

输入输出文件名, 初始命令

进入 Link 1, 显示进程号

首先是版权说明,

然后是作者,利用 gaussian 计算所发的文章, 参考文献上必须列的

进入

Link 101

读入输入文件,

将控制命令转化为程序能够看得懂的 IOP 占位段的选项和应用设置

Leave Link 101

进入

Link 202:

判断体系对称性, 并决定实际计算中对称性应该如何利用

判断体系点群

例如

Stoichiometry CH2O

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

Deg. of freedom 3

Full point group C2V NOp 4

Largest Abelian subgroup C2V NOp 4

Largest concise Abelian subgroup C2 NOp 2

再将输入的分子坐标转换为标准内坐标, 就是

Standard orientation:

这是程序默认, 充分利用分子的对称性来达到方便计算的目的。就是将体系的质量中心放在坐标轴的主轴或者原点上。可以用 nosym 来禁止这个操作

Leave Link 202

进入

Link 301 产生基组信息

基组函数对称性

计算出核排斥能

Leave Link 301

进入

Link 302, 303 ,这部分是计算积分的具体算法,一般不会列出详细过程,一句话带过

leave Link302,303

进入

Link 401 在实际计算之前,必须有初始猜测,这部分的功能就是产生初始猜测,可以从 `chk` 文件读入,也可以程序自动产生。这部分可以用 `guess` 关键字来指定。

我这个体系,程序默认是:

Projected INDO Guess(请仔细看手册,不同的体系 Guess 是不一样的)

Leave Link 401

进入

Link 502 (主角登场!) 自恰迭代求解 SCF 方程

设定收敛标准:

除了对包含比 Ar 重的原子的分子全电子 (非 ECP) 计算外,积分只计算到  $10^{-6}$  的精度。 $\lambda$  SCF 计算的能量和电子密度都收敛到  $10^{-4}$ , 或只有能量收敛到  $10^{-5}$  为止,无论哪一个先达到。 $\lambda$

给出每一步迭代的信息 (?) (这只有在程序输入中加入 `#p` 才会显示)

如果成功计算完毕

SCF Done,接下来就是打印计算出来的能量,自旋,维力值和收敛判据了。

Leave Link502(一般计算经常会在这一步挂掉,哈哈)

如果你的单点计算只写了这些,输出结束,如果你加入了 `population` 的内容,那么,基于 `scf` 计算的结果,布局分析开始

进入 Link601

Link 601 利用优化后的波函数,

进行 Mulliken population,得到

轨道对称性

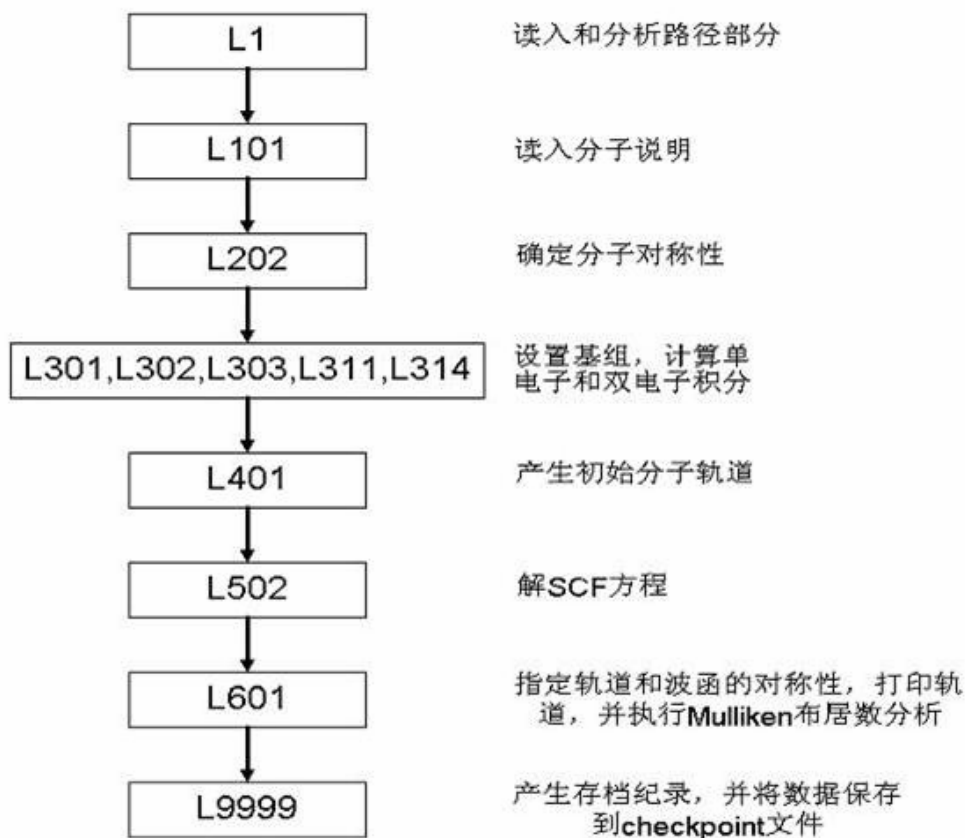
电子态

各个轨道的本征值

然后是一些电荷,自旋密度的分析

leav Link601

最后是整个计算结果的一个总结,各小节之间用\分开



单点计算看明白之后看几何优化的就比较清楚了

优化计算的第一步必须和以后各步骤分开处理, 因为有几个操作只需做一次。例如读入最初的 Z-矩阵和产生初始分子轨道。

必需有一个对分子几何构型做优化计算的循环, 用优化程序 (本例中使用 Berny 优化模块 L103) 决定是否需要做另一个优化, 以及是否获得了最优的分子结构。 $\lambda$

如果分子结构收敛, 则程序计算能量梯度, 确认已得到最优的分子结构后, 退出。 $\lambda$

只在第一个和最后一个分子结构进行布居数分析并打印轨道, 不要在不感兴趣的中间结构进行这些操作。 $\lambda$

第一个点的处理分成两部分, 计算路径各由一系列的积分、猜测、SCF、以及积分求导的计算组成。第一部分包括模块 L101 (读入分子初始结构) 和模块 L103 (进行本身的初始化), 并有选项指示模块 L401 产生最初的猜测波函数。第二部分计算在优化过程中使用由模块 L103 产生的分子结构, 并且有选项指示模块 L401 取回前一结构的波函数, 做为下一步的最初猜测波函数。

第八行中指示向前跳行, 表示如果模块 L103 正常结束 (没有任何特殊的操作), 下一行 (模块 L9999) 则跳过不执行。通常在第二次激活模块 L103 时, 会检查最初的能量梯度, 然后选出新的结构。下一个要执行的是模块 L202, 用来处理 Z-矩阵, 接着是第二部分其它的能量和梯度计算, 它们构成主要的优化计算循环部分。如果模块 L103 第二次激活时发现几何结构已经收敛, 计算将会终止并产生禁止向前跳行的信号, 然后执行下一行的模块 L9999, 完成整个计算。

第 10-15 行构成主要的优化计算循环。该循环计算积分、波函、以及优化计算中第二个点与后面各点的梯度。它以模块 L103 结束。如果几何结构还未收敛, 模块 L103 选择新的结构并正常结束计算, 这会造成执行次序由第 15 行向后跳到第 10 行, 进行新的计算循环。如果

模块 L103 发现几何结构已经收敛，将退出并禁止跳行，执行结束行第 16-18 行。  
结束前使用模块 L601 在最后的分子结构产生多极积分，将打印出多极矩、分子轨道和布居数分析，如果需要的话。最后模块 L9999 产生存档项目并结束计算任务。

