

Gaussian 中 IOP 的使用简介

在 Gaussian 的高级输入文件中，经常可以看到如下格式的 IOP 指令：

Iop (n1/n2=n3)

说到底，Iop 就是 Gaussian 程序内部的一些高级指令，从更加底层设置程序运行的各种参数。gaussian 是个傻瓜型软件，所以很多比较深入的细节都要通过 IOP 来设置。

上述指令中，n1 表示 overlay，n2 表示指令序号，n3 表示 n1/n2 指令的值。

具体的 IOP 的 overlay 和指令号及所对应值的含义可以在 Gaussian 网上的 IOP 大全上找到。

具体网址为：

<http://www.gaussian.com/iops.htm>

比如有 IOP(2/15=3)的指令，

则我们找到 Overlay2 的第 15 个指令序号，点击进入后可以看到如下的信息

IOP(2/15)

SYMMETRY CONTROL.

-1 Turns on symmetry; same as 0 for molecules but turns on assignment of space group ops. for PBC.

0 Leave symmetry in whatever state it is presently in.

1 Unconditionally turn symmetry off. Note that symm is still called, and will determine the framework group. However, the molecule is not oriented.

2 Bring the molecule to a symmetry orientation, but then disable further use of symmetry.

3 Don't even call symm.

4 Call Symm once with loose cutoffs, symmetrize the resulting coordinates, then confirm symmetry with tight cutoffs.

5 Recover the previous symmetry operations from the rwf, and confirm that the new structure has the same symmetry.

6 Same as 5, but get symmetry info from the chk.

00 Default (10)

10 Do re-orientation for PBC.

20 Suppress re-orientation for PBC.

100 Turn on symmetry operations for PBC.

由于我们将其值设为 3，则表明计算中不要调用对称性判定的程序。

另外常用的 IOP 的设置

`Iop(5/33=3,3/33=1)` 用来输出 Fock 矩阵和 overlap 矩阵。