Стартиране на изчисленя на СС2 ниво с

# **TURBOMOLE 7.6**

(кратък наръчник)

# РАБОТИ СЕ В ТЕРМИНАЛА НА LINUX или КОМАНДНИЯ ПРОМПТ НА WINDOWS!!!

Завсяко изчисление се създава отделна директория и в нея се приготвят необходимите файлове за изчисленията. Например директорията Test.

Стъпка 1). В директорията Test се поставя файл с декартовите координати на молекулата. Например файл geom, който трябва да има следния формат:

16	(брой на атомите в съ	единението)	
(пр	азен ред)		
Ν	1.107464760	0.498062415	0.024499344
С	1.311410760	-0.870040585	0.027999344
Ν	0.323264760	-1.756500585	0.038100344
С	-0.910417240	-1.166053585	0.027502344
С	-1.246141240	0.205522415	0.033925344
С	-0.178353240	1.184905415	0.030373344
Ν	-2.629677240	0.379485415	0.033755344
С	-3.122154240	-0.849167585	0.028155344
Ν	-2.124887240	-1.829727585	0.025047344
Ν	2.626455760	-1.317156585	-0.043801656
0	-0.199095240	2.417393415	0.025704344
Н	-4.181773240	-1.109641585	0.026480344
Н	-2.246862240	-2.840980585	0.019591344
Н	2.722083760	-2.317460585	0.130289344
Н	3.345408760	-0.747018585	0.400410344
Н	2.670476240	1.740612585	-0.089799344

Стъпка 2). С помощта на програмата x2t се приготвя входен файл (например coord) с координати във формата за Turbomole като се изпълни командата:

x2t geom > coord



## Създава се файл coord, който изглежда:

\$coord

2.09280508907441	0.94120155731970	0.04629705039299	r
2.47820717328734	-1.64413842295919	0.05291109182918	C
0.61088186214288	-3.31930504339495	0.07199921541403	r
-1.72043924273769	-2.20352192228804	0.05197189794524	c
-2.35486565620155	0.38838107682168	0.06410960884372	c
-0.33703877703965	2.23914671793604	0.05739730164905	c
-4.96936977976179	0.71712350263995	0.06378835540253	r
-5.90001643243912	-1.60469416955987	0.05320588910463	c
-4.01545492931195	-3.45768401832292	0.04733262030929	r
4.96328206484583	-2.48906520889736	-0.08277313364507	r
-0.37623547631664	4.56821148982381	0.04857417037317	c
-7.90240613888895	-2.09691869214565	0.05004059784588	ł
-4.24595427336318	-5.36867523102910	0.03702227457333	ł
5.14399279469155	-4.37936581026502	0.24621117711715	ł
6.32190633132390	-1.41166053565548	0.75666588762719	ł
5.04646871592040	3.28928107472689	-0.16969616633106	h

\$end

Стъпка 3). За приготвяне на останалите файлове в директорията се стартира програмата define, като се изпълнява командата.

define

- Enter

!!! Програмата define може да се прекъсне по всяко време с комбинация от клавишите: <Ctrl>+C

#### Зарежда се програмата, която започва с:

```
define (s1051) : TURBOMOLE rev. V7-6 19 Oct 2021 at 10:10:11 compiled Oct 19th 2021
Copyright (C) 2021 TURBOMOLE GmbH, Karlsruhe
"coord" 18L, 1180C
1,1 All
```

2021-12-19 11:11:12.768

```
HOST NAME = sl051

OPERATING SYSTEM = unix

STANDARD BASIS SET LIBRARY = /home/id3468/xtrastorage/TURBOMOLE//basen/

ALTERNATE BASIS SET LIBRARY = /home/id3468/xtrastorage/TURBOMOLE//basen/

LIBRARY FOR RI-J BASIS SETS = /home/id3468/xtrastorage/TURBOMOLE//jbasen/

LIBRARY FOR RIHDZ/RICC2 SETS = /home/id3468/xtrastorage/TURBOMOLE//jbasen/

LIBRARY FOR RIR12 BASIS SETS = /home/id3468/xtrastorage/TURBOMOLE//cbasen/

LIBRARY FOR RIR12 BASIS SETS = /home/id3468/xtrastorage/TURBOMOLE//cbasen/

LIBRARY FOR OEP BASIS SETS = /home/id3468/xtrastorage/TURBOMOLE//cbasen/

LIBRARY FOR OEP BASIS SETS = /home/id3468/xtrastorage/TURBOMOLE//xbasen/

STRUCTURE LIBRARY = /home/id3468/xtrastorage/TURBOMOLE//structures/
```

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<.

```
(избираме enter)
```

## Следваме стъпките:

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

(тук може да се посочи име на изчислението – по наш избор, ако не -Enter). Показва се първото меню от програмата, и се чака избор.

#### Меню 1

- Enter

```
symmetry group of the molecule : c1
the group has the following generators :
  c1(z)
   1 symmetry operations found
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)
                : DETERMINE MOLECULAR SYMMETRY AND ADJUST
desy <eps>
                    COORDINATES (default for eps=1d-6)
                : LIKE DESY, BUT FIND ONLY GROUPS WITH NON-
syndi <eps>
                    DEGENERATE IRREPS (D2h AND SUBGROUPS)
susy
                 : ADJUST COORDINATES FOR SUBGROUPS
```

ai	: ADD ATOMIC COORDINATES INTERACTIVELY
a <file></file>	: ADD ATOMIC COORDINATES FROM FILE <file></file>
aa <file></file>	: ADD ATOMIC COORDINATES IN ANGSTROEM UNITS FROM FILE <file></file>
sub	: SUBSTITUTE AN ATOM BY A GROUP OF ATOMS
i	: INTERNAL COORDINATE MENU
ired	: REDUNDANT INTERNAL COORDINATES
pbc_ired	: PERIODIC REDUNDANT INTERNAL COORDINATES
red_info	: DISPLAY REDUNDANT INTERNAL COORDINATES
ff	: UFF-FORCEFIELD CALCULATION
m	: MANIPULATE GEOMETRY
frag	: Define Fragments for BSSE calculation
w <file></file>	: WRITE MOLECULAR COORDINATES TO FILE <file></file>
r <file></file>	: RELOAD ATOMIC AND INTERNAL COORDINATES FROM FILE <file></file>
name	: CHANGE ATOMIC IDENTIFIERS
del	: DELETE ATOMS
fix	: FIX 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

Тук задаваме файла с координати на съединението като записваме:

coord	🗕 Enter
-------	---------

Отново се появява Меню 1 за въвеждане на други желани от нас неща. Тях ще коментираме по-нататък. Тук записваме още:

ired

а

За излизане от Меню 1 избираме:



Автоматично се завережда следващото меню – за избор на базисни функции.

## Меню 2

• • •

ATOMIC	2	ATTRIBUTE DEFINITION MENU ( #atoms=16 #bas=16 #ecp=0 )	
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)	
С	:	ASSIGN NUCLEAR CHARGES (IF DIFFERENT FROM DEFAULTS)	
cem	:	ASSIGN NUCLEAR CHARGES FOR EMBEDDING	
m	:	ASSIGN ATOMIC MASSES (IF DIFFERENT FROM DEFAULTS)	
iso	:	ASSIGN ISOTOPE FOR NUCLEAR COUPLING CALCULATION	
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 !)

Задаваме базисен набор за всички атоми в молекулата като записваме:

b	all	CC-pVDZ

(с тази опция е зададен базисен набор сс-pVDZ за всички атоми) За излизане от Меню 2 се избира:

- Enter

*	1.5.4.1	

след което програмата define отваря автоматично Меню 3:

## Меню 3

CHOOSE COMMAND

infsao : 🤇	OUTPUT SAO INFORMATION
atb :	Switch for writing MOs in ASCII or binary format
eht : 1	PROVIDE MOS && OCCUPATION NUMBERS FROM EXTENDED HUECKEL GUESS
use <file> : :</file>	SUPPLY MO INFORMATION USING DATA FROM <file></file>
man : l	MANUAL SPECIFICATION OF OCCUPATION NUMBERS
hcore : 1	HAMILTON CORE GUESS FOR MOS
flip : 1	FLIP SPIN OF A SELECTED ATOM
& : I	MOVE BACK TO THE ATOMIC ATTRIBUTES MENU
THE COMMANDS	use OR eht OR * ORq(uit) TERMINATE THIS MENU !!!
FOR EXPLANATION	ONS APPEND A QUESTION MARK (?) TO ANY COMMAND

От менюто задаваме начален набор от МО, с които да започне изчислението. Найчесто избираме хюкелови МО, т.е. записва се:

## eht



#### и на въпроса

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

#### се натиска



## а на въпроса

ENTER THE MOLECULAR CHARGE (DEFAULT=0)

ако не се задава конктретен заряд на молекулната система (т.е. различен от 0) се натиска



След това програмата предлага МО и заселености:

NUMBER OF ELECTRONS IN YOUR MOLECULE IS 78

AUTOMATIC FOUND CLC	C OCCUPATION N SED SHELL SYS	NUMBER ASSI	GNMENT ESTABLISHED	!
HOMO/LUMC	SEPARATION :	0.048480	)	
ORBITAL	SYMMETRY	ENERGY	DEFAULT	
(SHELL)	TYPE		OCCUPATION	
36	36a	-0.51479	2	
37	37a	-0.48606	2	
38	38a	-0.44082	2	
39	39a	-0.43648	2	
40	40a	-0.38800	0	
41	41a	-0.28568	0	
42	42a	-0.24151	0	
111111111	1111111111111	1111111111		!!!!

11 !!! !!!

			4	2				4	4:	2	a													-	- C	).	. 2	2	4	1	5	1								С	)																		
!	!	!!	!	!	!	!!		!	!	!	!	!	1		!	!	!	!	!	1	!	!	!	!	!	1	!	!	!	!	!	!	!		!	!	!	!	!	!	!		!	!	!	!	!	!	!	!	!	!	!	!	!	!	!	!	1
!	!	!	W	Al	RÌ	11	1	10	G		!		ŀ	ł	DI	М	0	/	Ι	JL	JI	Μ	0		- 5	SE	ΞĒ	2	A	R	A	T	Ί	0	IC	N		L	С	N	IE	CE	R	1	T:	H.	A	N		0	•	0	15	5	P	U	ſ	!	!

		,		
				 !
42	42a	-0.24151	0	
41	41a	-0.28568	0	
40	40a	-0.38800	0	
39	39a	-0.43040	2	

1.1

40	40a	-0.	38800	0
41	41a	-0.	28568	0
42	42a	-0.	24151	0
!!!!!	!!!!!!!!		111111111111	11111111111111111111
WARN	ING ! H	OMO/LUMO-SE	PARATION LO	WER THAN 0.05 AU
!!!!!	!!!!!!!!		111111111111	11111111111111111111

: OPTIONS AND DATA GROUPS FOR rimp2 and mpgrad

: SELECT NON-DEFAULT INPUT PARAMETER FOR EVALUATION

: SELECT OPTIONS FOR GEOMETRY UPDATES USING RELAX : SELECT NON-DEFAULT STRUCTURE OPTIMIZATION PARAMETER

Автоматично се зарежда Меню 4:

GENERAL MENU : SELECT YOUR TOPIC

: DFT Parameters

: RI Parameters

rirpa : RIRPA Parameters

: RI-JK-HF Parameters

: NMR shift parameters ncoup : NMR coupling parameters

senex : seminumeric exchange parameters hybno : hybrid Noga/Diag parameters

: DFT dispersion correction

- Enter

Меню 4

. . .

scf

mp2

CC

ex prop drv

rex

stp

e dft

ri

qw

dsp

nmr

fde

rijk

DO YOU ACCEPT THIS OCCUPATION ? DEFAULT=y

Ако се приема това предложение се избира:

: SELECT NON-DEFAULT SCF PARAMETER

: OPTIONS AND DATA GROUPS FOR ricc2

: EXCITED STATE AND RESPONSE OPTIONS : SELECT TOOLS FOR SCF-ORBITAL ANALYSIS

OF ANALYTICAL ENERGY DERIVATIVES (GRADIENTS, FORCE CONSTANTS)

: DEFINE EXTERNAL ELECTROSTATIC FIELD

: OPTIONS AND DATA GROUPS FOR GW (escf)

pnocc : OPTIONS AND DATA GROUPS FOR pnoccsd

marij : MULTIPOLE ACCELERATED RI-J : Frozen Density Embedding

: DISPLAY MOLECULAR GEOMETRY dis

- list : LIST OF CONTROL FILE
- : GO BACK TO OCCUPATION/ORBITAL ASSIGNMENT MENU &

trunc : USE TRUNCATED AUXBASIS DURING ITERATIONS

\* or q : END OF DEFINE SESSION

и програмата чака за избор на опция. За СС2 изчисленията е важно в работната директория да присъства файл auxbasis (разширен базисен набор). Той се генерира чрез следната последователност от действия:

6

## Избира се:



## В отвореното Подменю 4.1:

## Меню 4.1

INPUT MEN	1U	FOR CALCULATIONS WITH ricc2:
(#atoms=	=	16
freeze	:	SET FROZEN OCCUPIED/VIRTUAL ORBITAL OPTIONS
cbas	:	ASSIGN AUXILIARY (CBAS) BASIS SETS
memory	:	SET MAXIMUM CORE MEMORY (PRESENT VALUE: 500 MiB per_core)
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

## записваме:

cbas

## Enter

## след, което от предложеното ново подменю:

🛶 🗕 Enter

•••	
AUXILIARY	BASIS SET DEFINITION MENU
( #atoms=	=16 #cbas=16 )
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

записваме

b	all	cc-pVDZ
		+

## След което:





## за да се върнем в Меню 4. Излизаме и от него с въвеждане на:

\* Enter

Програмата define приключва с успешен край, който е виден от надписа:

define ended normally

Така в работната директория са налични файловете:

auxbasis basis control coord geom mos

Файлът, който контролира всичко по изчисленията е contol.



Стъпка 4). В зависимост от това, какво искаме да правим с СС2 метода във файла control се прибавят следните редове (след реда \$symmetry c1).

----- оптимизация на основно съсотяние-----

\$ricc2	
cc2	
geoopt	model=CC2

----- изчисляване енергията на възбудени състояния – без симетрия-----

```
$ricc2
cc2
maxiter=100
$response
fop unrelaxed_only operators=diplen
$excitations
irrep=a multiplicity=1 nexc=4
exprop states=all operators=diplen
spectrum states=all operators=diplen
```

----- изчисляване енергията на възбудени състояния – със симетрия Cs -----

\$ricc2

!!! При използване на симетрия в програмата define трябва да се направят допълнителни стъпки – виж по-долу.

```
cc2
maxiter=300
$response
fop unrelaxed_only operators=diplen
$excitations
irrep=a' multiplicity=1 nexc=2
irrep=a" multiplicity=1 nexc=2
exprop states=all operators=diplen
spectrum states=all operators=diplen
```

----- оптимизация на възбудени състояния – без симетрия-----

```
$ricc2
cc2
geoopt model=CC2
maxiter=300
$excitations
irrep=a multiplicity=1 nexc=1
xgrad states=(a{1} 1)
```

----- оптимизация на възбудени състояния – със симетрия Cs -----

```
$ricc2
cc2
geoopt model=CC2
maxiter=300
$excitations
irrep=a" multiplicity=1 nexc=1
xgrad states=(a"{1} 1)
```

!!! При използване на симетрия в програмата define трябва да се направят допълнителни стъпки – виж по-долу.

Стъпка 5). Пускане на изчисления на СС2 ниво – за оптимизациите и изчисляване на енергии (single-point) се използват различи команди.

- за оптимизации:

jobex -c 200 -level cc2 -ri > opt.out.cc2 2>&1



- за изчисляване на енерии:

ricc2 >& ricc2.out

 Enter	1

## <u>ДЕФИНИРАНЕ НА СИМЕТРИЯ</u>

## В Меню 1

#### Меню 1

symmetry group of the molecule : c1

the group has the following generators : cl(z)

1 symmetry operations found

SPECIFICATION OF	M	)LECULAR GEOMETRY ( #ATOMS=0 SYMMETRY=c1 )
YOU MAY USE ONE (	ΟF	THE FOLLOWING COMMANDS :
sy <group> <eps></eps></group>	:	DEFINE MOLECULAR SYMMETRY (default for eps=3d-1)
desy <eps></eps>	:	DETERMINE MOLECULAR SYMMETRY AND ADJUST
		COORDINATES (default for eps=1d-6)
syndi <eps></eps>	:	LIKE DESY, BUT FIND ONLY GROUPS WITH NON-
		DEGENERATE IRREPS (D2h AND SUBGROUPS)
susy	:	ADJUST COORDINATES FOR SUBGROUPS
ai	:	ADD ATOMIC COORDINATES INTERACTIVELY
a <file></file>	:	ADD ATOMIC COORDINATES FROM FILE <file></file>
aa <file></file>	:	ADD ATOMIC COORDINATES IN ANGSTROEM UNITS FROM FILE <file></file>
sub	:	SUBSTITUTE AN ATOM BY A GROUP OF ATOMS
i	:	INTERNAL COORDINATE MENU
ired	:	REDUNDANT INTERNAL COORDINATES
pbc_ired	:	PERIODIC REDUNDANT INTERNAL COORDINATES
red_info	:	DISPLAY REDUNDANT INTERNAL COORDINATES
ff	:	UFF-FORCEFIELD CALCULATION
m	:	MANIPULATE GEOMETRY
frag	:	Define Fragments for BSSE calculation
w <file></file>	:	WRITE MOLECULAR COORDINATES TO FILE <file></file>
r <file></file>	:	RELOAD ATOMIC AND INTERNAL COORDINATES FROM FILE <file></file>
name	:	CHANGE ATOMIC IDENTIFIERS
del	:	DELETE ATOMS
fix	:	FIX 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

## след задаване на файла с координати, например

a coord

се избира

-	Enter	

- Enter

Програмата автоматично определя точковата група на симетрия (симетрията на съединението)

## ЗАМРАЗЯВАНЕ НА ВЪТРЕШНА КООРДИНАТА (ВРЪЗКА, ДИЕДРИЧЕН ЪГЪЛ) ПРИ ОПТИМИЗАЦИИТЕ

В редица случаи е наложително да се замрази (фиксира) координата по време на оптимизацията. Това става след задаване на файл с координати (coord) в Меню 1 на програмата define.

#### Меню 1

symmetry group of the molecule : c1 the group has the following generators : c1(z) 1 symmetry operations found 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) : DETERMINE MOLECULAR SYMMETRY AND ADJUST desy <eps> COORDINATES (default for eps=1d-6) syndi <eps> : LIKE DESY, BUT FIND ONLY GROUPS WITH NON-DEGENERATE IRREPS (D2h AND SUBGROUPS) : ADJUST COORDINATES FOR SUBGROUPS susy : ADD ATOMIC COORDINATES INTERACTIVELY ai : ADD ATOMIC COORDINATES FROM FILE <file> : ADD ATOMIC COORDINATES IN ANGSTROEM UNITS FROM FILE <file> a <file> aa <file> : SUBSTITUTE AN ATOM BY A GROUP OF ATOMS sub : INTERNAL COORDINATE MENU i. ired : REDUNDANT INTERNAL COORDINATES pbc\_ired : PERIODIC REDUNDANT INTERNAL COORDINATES : DISPLAY REDUNDANT INTERNAL COORDINATES red\_info ff : UFF-FORCEFIELD CALCULATION : MANIPULATE GEOMETRY m : Define Fragments for BSSE calculation frag : WRITE MOLECULAR COORDINATES TO FILE <file> w <file> r <file> : RELOAD ATOMIC AND INTERNAL COORDINATES FROM FILE <file> : CHANGE ATOMIC IDENTIFIERS name del : DELETE ATOMS fix : FIX ATOMS : DISPLAY MOLECULAR GEOMETRY dis : CARRY OUT BOND ANALYSIS banal : 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

#### Избира се:

Enter

ВНИМАНИЕ!!! За да се фиксира координатата е необходимо това да стане преди избор на опция ired.

i

#### при което се отваря подменю за вътрешните координати:

NTERNAL COO	DINATE MENU ( #ideg=42
imet <a></a>	PROVIDE B-MATRIX FOR ACTIVE INTERNAL COORDINATES (CHECK COMPLETENESS AND NUMERICAL QUALITY AND CHANGE REDUNDANT INTERNALS TO display)
idef	SUB-MENU FOR INTERACTIVE DEFINITION OF INTERNAL COORDINATES
ideg <a></a>	OUTPUT NUMBER OF TOT. SYMMETRIC INTERNAL DEGREES OF FREEDOM
iaut	TRY AUTOMATIC DEFINITION OF INTERNAL COORDINATES
iman <a> imanat <i></i></a>	MANIPULATE GEOMETRY BY CHANGING INTERNAL COORDINATE VALUES AS iman BUT STARTING AT INTERNAL COORD. NUMBER i

```
ic <i> <x>: CHANGE STATUS OF INTERNAL COORDINATE <i> TO <x>
        e.g. ic 5 d TO MAKE 5TH COORD. display OR ic k d
irem <i> : REMOVE INTERNAL COORDINATE <i>,
        e.g. irem d TO REMOVE ALL display COORDS
dis : ANY DISPLAY COMMAND e.g. disi OR disc
disiat <i> : AS disi BUT STARTING AT INTERNAL COORD. NUMBER i
WHERE <a>= OPTIONAL ATOMIC SET (DEFAULT=all)
        <i>> index (LIST) OF INTERNAL COORDINATE (S) LIKE 3-6,8 OR <i>=<x>
        <x>= STATUS OF INTERNAL COORDINATE = k, f, d OR i
ADDING A QUESTION MARK TO ANY COMMAND MAY PROVIDE EXPLANATIONS
```

ENTER COMMAND OR HIT >return< TO GET BACK TO GEOMETRY MAIN MENU

## Избираме:

Enter

idef

## Отваря се:

ENTER INTERNAL COORDINATE DEFINITION COMMAND

<x> <type> <indices>

THESE COMMANDS WILL BE EXPLAINED IN DETAIL IF YOU ENTER  $\ <\!\!x\!\!>\!\!<\!\!type\!\!>$  ? FOR SOME CHOICE OF  $<\!\!x\!\!>\!$  AND  $<\!\!type\!\!>$  , E.G. k stre ?

DEFAULT=GO BACK TO INTERNAL MAIN MENU DISPLAY=dis

Ако искаме да фиксираме връзка – например разстоянието между първи и втори атом, записваме:

f stre 1 2

- Enter

Ако искаме да фиксираме диедричен ъгъл – например този между първи, втори, трети и четвърти атом, записваме:

ftors 1 2 3 4

За да излезем от менюто:



Продъжава се със следващите стъпки от define.

## ГЕНЕРИРАНЕ НА ХҮΖ-ФАЙЛ С ГЕОМЕТРИИ ОТ ИЗЧИСЛЕНИЯТА

След приключване на изчисленията оптимизираната геометрия се записва във файла coord. Тя може да се "извлече" от там и да се запише в XYZ-файл, който се отваря с ChemCraft за визуализация. Използва се командата:

t2x coord > [име на файл].хуг

- Enter	

Възможно е записване на всички геометрии по оптимизационните цикли и оптимизираната в XYZ-файл, след изпълняване на командата:

Enter

t2x > [име на файл].xyz

## <u>ГЕНЕРИРАНЕ НА ФАЙЛ ЗА ПРОГРАМАТА MOLDEN</u>

## Стартира се

tm2molden

Enter

#### В менюто, което се появява се задава име на файла:

symmetry group of the molecule : cs the group has the following generators : c1(z) mirror plane sigma(xy) 2 symmetry operations found there are 2 real representations : a' a" maximum number of shells which are related by symmetry : 1 ENTER NAME OF MOLDEN INPUT FILE (DEFAULT: molden.input): [име на файл].molden 🛶 Enter freezing orbitals : frozen occupied orbitals: 1 a' -20.628814 H 2 a' -20.561466 H 3 a' -20.523577 H 4 a' -15.579916 H 5 a' -11.388099 H -11.364445 H 6 a' 7 a' -11.359175 H 8 a' -11.296247 H 9 a' -11.294175 H 10 a' -11.292344 H -11.292191 H 11 a' 12 a' -11.286265 H -11.285099 H 13 a' 14 a' -11.232585 H number of non-frozen orbitals 217 : number of non-frozen occupied orbitals : 35 WRITE DATA GROUPS [GTO] AND [MO] (BASIS SET AND MOLECULAR ORBITAL DATA) TO a.molden (Y/N, DEFAULT: Y)? 🛶 Enter WRITE DATA GROUPS [GEOCONV] ETC. (GEOMETRY CONVERGENCE DATA) TO a.molden (Y/N, DEFAULT: Y)?



\*\*\*\* tm2molden : all done \*\*\*\*

2021-12-19 19:56:12.424

tm2molden ended normally