

Jasp

Jasp是一个用来学习量子化学算法的小软件。

1 编译和运行

```
cd jasp-1-0
cmake CMakeLists.txt
make
./jasp-1-0 < examples/H2O.gjf
```

在bin文件夹中已存放两个静态编译的版本

```
jasp-1-0      Linux版本
jasp-1-0.exe  Windows版本
```

可直接运行

```
cd jasp-1-0
cp bin/jasp-1-0 ./
chmod +x ./jasp-1-0
./jasp-1-0 < examples/H2O.gjf
```

2 输入文件

在examples文件夹中提供了部分输入文件，下面说明输入文件的构成：

- 输入文件的第一行为执行路径部分，以 # 开头，指定所需的化学模型，计算类型等（结束有空行）。关键词之间用斜杠/或空格隔开，不区分大小写。第一个关键词必须为计算方法关键词，第二个关键词必须为基组关键词。例如：

```
# HF/STO-3G
```

- 分子说明在执行路径输入结束后输入。分子信息的第一行指定分子的净电荷（一个有正负号的整数）和自选多重度（一个正整数）。随后每行输入一个原子的坐标信息，格式为

```
元素符号      x      y      z
```

- 输入文件中一行中感叹号 ! 后面的内容被视为注释。

3 关键词

指定所需的化学模型，计算类型等。关键词和关键词参数之间用等于号=连接，等于号前后不能有空格。例如

```
UNIT=BOHR
```

3.1 计算方法

目前计算方法只支持RHF方法，输入HF或RHF关键词都可以指定使用RHF的计算方法。

3.2 基组

基组文件存放于basis文件夹，可自行添加基组，添加方法参见下一节。

3.3 SCF

SCF 关键词指定计算单点能，目前只支持 SCF 计算，不输入计算类型关键词时默认执行 SCF 计算。SCF 可指定的参数有：

- Auto 在计算大基组体系时，容易产生震荡不收敛的情况，程序在更新密度矩阵时可以混合部分上一轮迭代的密度矩阵，以增加迭代次数为代价，防止震荡不收敛的迭代现象发生。此参数为默认参数，程序将自动考虑是否混合之前的密度矩阵。
- Mix 在计算新的密度矩阵时，强制混合上次迭代的密度矩阵。
- NoMix 完全不混合上一轮的密度矩阵。

3.4 UNIT

UNIT 关键词说明分子说明部分的分子坐标使用的单位，UNIT 可以先择的参数有：

- ANG 长度单位为angstrom，这也是默认长度单位。
- BOHR 长度单位为bohr。

4 添加基组

Jasp支持STO基组，目前支持包含不超过D轨道的基组。基组存放于basis文件夹中，该文件夹与可执行程序放于同一目录下。可以自行导入基组，可从基组数据库[EMSL](#)选择所需基组（格式选择Gaussian94），保存成文本文件（文件名中的字母大写），存放于basis文件夹中。只需基组文件名与输入参数的基组名相同即可调用该基组。

执行路径中的基组关键词目前不支持 Gen 关键词，即为分子中的原子指定不同基组。该功能将于下一版添加。

5 更新期待

下一个版本将主要更新两个方面：

- 支持格点积分的DFT
- 支持openMP并行