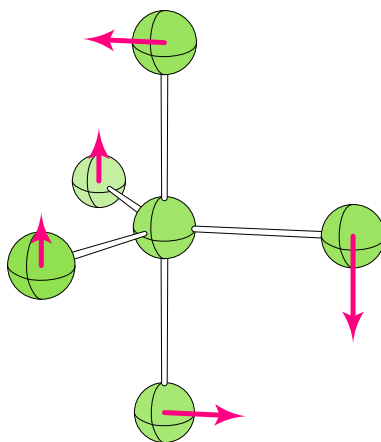


# UNIMOVIB 使用手册

(1.3.0 版)



邹文利

西北大学现代物理研究所，西安，710127

[qcband@gmail.com](mailto:qcband@gmail.com)

2020 年 4 月 26 日

# 目 录

第一章 关于 UniMoVib	1
1.1 功能	1
1.2 对称性	1
第二章 编译与运行	3
2.1 编译程序	3
2.2 运行程序	3
第三章 输入说明	4
3.1 \$Contrl 输入组	4
3.1.1 保存数据的关键词	6
3.1.2 专业级关键词	6
3.2 \$QCData 输入组	7
3.3 \$IsoMas 输入组	9
3.4 \$ExpFrq 输入组	9
3.5 \$Thermo 输入组	10
3.6 原子热化学计算	11
第四章 示例	12
4.1 原子热化学计算	12
4.2 来自 GAUSSIAN 的频率计算数据	12
4.3 来自 MOLPRO 的频率计算数据	13
4.4 计算 HDO 振动频率的“实验值”	13
第五章 已知问题	15
附录 A 附录	16
A.1 UniMoVib 数据文件格式	16
A.2 开发人员：到其它量子化学程序的接口	16



# 第一章 关于 UNIMoViB

UNIMoViB 是进行分子振动频率计算的统一接口。程序最初是我于 2014 至 2015 年在德州达拉斯市的南方卫理公会大学期间用 FORTRAN 77 编写，用作CATCO 小组的分子局域模式程序 LOCALMODE（现在叫LMODEA）的前端接口。本项工作得到美国 NSF 项目 CHE 1152357 和 CHE 1464906 的支持，并得到已故的 Dieter Cremer 教授的鼎力支持和指导。从 2017 年春天开始，UNIMoViB 用 Fortran 90 重新改写，作为独立程序发布。

## 1.1 功能

- 从 Hessian、坐标等数据计算谐振频率和（可选的）红外强度，这些数据可以由量子化学程序产生，或者由用户手工编写。  
目前已经支持近 30 个量子化学程序（参见第3.1节），尽管有些程序可能自己做得更好。
- 分析结构的最高点群以及简正振动模式的不可约表示 (*irreps.*)。(*irreps.*: 仅闭壳层分子。) 对称性分析基于 MOPAC 7.1 程序包中的对称性子程序，MOPAC 7.1 的源代码已经开放，不受版权限制（参见[openmopac.net](http://openmopac.net) and [sourceforge.net](http://sourceforge.net)）。
- 使用最高点群做热化学计算，并打印 Gaussian 风格的热化学计算结果（详细解释，参见：Foresman and Frisch, *Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods*, Ed.2, Gaussian Inc., Pittsburgh, PA, 1996, p.66）。
- 保存 MOLDEN 文件，用于动画显示振动模式。
- 设定同位素，温度，压强，频率换算因子或实验频率，等。
- 可作为量子化学程序（尤其是不支持非阿贝尔点群的程序）的第三方模块，用于频率和热化学计算。

## 1.2 对称性

程序支持的点群列于表1.1中。

程序会打印分子的两个点群对称性，即“Electronic Wavefunctions”的点群对称性和“Nuclear & Total Wavefunctions”的点群对称性。二者的区别是，前者不依赖同位素质量，而后者依赖同位素质量。应当用后者去分析振动模式和进行热化学计算。不过，有些量子化学程序并不是这么做的，导致无法分析振动模式的不可约表示，并导致错误的 Gibbs 自由能。一个极端的例子是富勒烯  $^{12}\text{C}_{59}^{13}\text{C}$ ，其电子波函的对称性是  $I_h$ ，而核波函以及总波函的对称性是  $C_1$ 。若热化学计算使用  $I_h$ ，Gibbs 自由能的误差将会达到 2.5 kcal/mol！

表 1.1: 可用的点群

$C_n$	$n = 1 \dots 8$
$C_s, C_{nv}$	$n = 2 \dots 8$
$C_i, C_{nh}$	$n = 2 \dots 8$
$D_n$	$n = 2 \dots 8$
$D_{nd}$	$n = 2 \dots 7$
$D_{nh}$	$n = 2 \dots 8$
$S_n$	$n = 4, 6, 8$
其它	$R_3, T, T_d, T_h, O, O_h, I, I_h, C_{\infty v}, D_{\infty h}$

## 第二章 编译与运行

### 2.1 编译程序

```
UserID $> cd $UniMoVib/src  
UserID $> make
```

需要在Makefile 中定义合适的 Fortran90 编译器。

### 2.2 运行程序

运行方法：

用鼠标双击二进制程序unimovib.exe，并键入输入文件名（仅 MS-Windows），

或者

在终端中键入

```
UserID $> ./unimovib.exe
```

接下来，键入输入文件名（若不提供输入文件名，使用默认文件名job.inp），

或者

在终端中键入

```
UserID $> ./unimovib.exe -b < input > output
```

最后一种方式可以用来准备批处理脚本，做一系列计算。

## 第三章 输入说明

输入选项按照 `namelist` 分组，每一组结束用 `$END`。这些组的输入顺序任意。注意：每个 `$` 符号之前，至少要有一个空格。

输入内容不区分大小写，但 `$QCData` 输入组中的数据文件名除外（参见第3.2节）。

### 3.1 `$Contr1` 输入组

该输入组指定计算类型。关键词：

`QCProg="XXXX":` XXXX 是产生 Hessian 和振动频率的量子化学程序名或数据格式。支持以下程序/格式：

- Gaussian（默认）。
- GAMESS（同义词：GAMESS-US, GAMESSUS）。
- Firefly（同义词：PCGameSS, PC-GameSS）。
- GAMESS-UK（同义词：GAMESSUK）。
- ORCA。
- Molpro。
- QChem（同义词：Q-Chem）。
- NWChem。
- CFour。
- Turbomole。
- deMon2k（同义词：deMon）。
- PQS。

- OpenMOPAC (同义词: MOPAC)。同时支持 MOPAC 6 和 MOPAC 7, 但 FUJITSU MOPAC 200x (如今是 SCIGRESS 中的 MO-G 模块) 未测试。
- AMSOL (同义词: AMPAC)。支持 AMPAC 2.x, 但以后版本的 AMPAC 未测试。
- Dalton。
- FHI-AIMS (同义词: FHIAIMS, AIMS)。
- CP2k。QUICKSTEP 模块。
- Hyperchem。
- Jaguar。SCHRÖDINGER SUITE 中的量子化学计算模块。
- ADF。仅支持分子模块 ADF。
- MOLDEN。由频率计算产生, 至少应当包含以下三部分: [FREQ], [FR-COORD], [FR-NORM-COORD]。ACES-II, COLUMBUS, DALTON (解析频率计算), MOLCAS 等程序都可以通过 MOLDEN 文件被支持。
- Crystal。支持分子谐振频率计算, 只对 CRYSTAL 14 进行了测试。
- Spartan。
- PSI。仅对 Psi 4 进行了测试。
- DMOL3 (同义词: DMOL)。仅支持分子的谐振频率计算。
- ACES。对 ACES-II 和 ACES-III 都进行了测试。
- UniMoVib (同义词: ALM)。UniMoVib 或第三方案程序产生的纯文本数据文件。参见附录A.1。此外, QCProg="AtomCalc" 可用于做原子热化学计算 (参见第3.6节)。

Isotop: 设定同位素质量。

- = 0: (默认) 从频率计算的数据文件读入全部原子量; 若不存在, 原子量从程序的数据库读取 (除个别程序外, 都使用最丰同位素质量)。
- = 1: 从频率计算的数据文件或程序的数据库读入全部原子量 (同0), 但是接下来, 指定原子序号的同位素质量将用\$IsoMas 输入组 (参见第3.3节) 后的质量替换。
- = 2: 所有的原子质量都在\$IsoMas 输入组 (参见第3.3节) 之后提供。

IFExp: (.True./.False.) 用实验振动频率校正 Hessian 矩阵, 在\$ExpFrq 输入组 (参见第3.4节) 之后提供。默认: .False.



### 3.1.1 保存数据的关键词

**IFSAVE:** (.True./.False.) 把原子质量 (受 **Isotop** 影响), 直角坐标, **Hessian** 矩阵 (受 **IFExp** 影响), **APT** 矩阵保存到纯文本数据文件 \*.umv 中。该关键词不能与 **QCProg="AtomCalc"** 或 "**UniMoVib**" 同时用。默认: .False.。关于数据格式, 参见附录 A.1。

**IFMOLDEN:** (.True./.False.) 除了 **QCProg="AtomCalc"** 之外, 保存 **MOLDEN** 文件, 它可以用 **MOLDEN** 或 **GABEDIT** 程序打开, 用于显示分子结构和振动模式。默认: .False.。

**IFLOCAL:** (.True./.False.) 保存数据文件, 用于 **LMODEA** 程序的局域模式分析 (主页: <https://sites.smu.edu/dedman/catco/>)。该关键词不能用于 **QCProg="AtomCalc"**。默认: .False.。

**IFGauTS:** (.True./.False.) 把结构和 **Hessian** 矩阵存为 **GAUSSIAN** 的输入文件模板, 用于过渡态优化计算。该关键词不能用于 **QCProg="AtomCalc"**。默认: .False.。注意: 此输入对于 **ONIOM** 计算类型无效, 因为 **GAUSSIAN** 此时只能使用默认的冗余内坐标进行优化。

### 3.1.2 专业级关键词

一般不需要在 **\$Contrl** 中设置这些关键词。

**QCProg="XYZ":** 仅用于调试。

**IFConc:** (.True./.False.) 控制是否简明频率输出。默认: .False.。

**ISyTol = MN:** 判断对称性的精度阈值  $M * 10^{N-3}$ , 其中 **M** 总为正数, 正负号只分配给 **N**。于是, **ISyTol = 21** 表示 0.02, 而 **-21** 表示 0.0002。默认: 10, 即 0.001。

**IFRdNM:** (.True./.False.) 是否从 **\$QCData** 输入组指定的数据文件直接读取简正模式, 避免做对角化, 从而节省内存并加快计算速度。若设定该关键词, 不能同时用 **Isotop** 设定同位素质量, 或者用 **IFExp=.True.** 进行振动频率校正。该关键词目前仅支持 **QCProg="Gaussian"**。默认: .False.。

**IFSyntz:** (.True./.False.) 由于 **Jahn-Teller** 效应 (开壳层体系) 或者数值噪声, 有时无法判断简正振动模式的不可约表示符号。该关键词可以把简正振动模式做对称化处理。该关键词不能与 **IFRdNM=.True.** 同时使用。默认: .False.。

**IFApprx:** (.True./.False.) 是否从外部文件读取内坐标力常数 (伸缩:  $\text{mDyn}/\text{\AA}$ , 角度:  $\text{mDyn}\cdot\text{\AA}/\text{Rad}^2$ ) 和 **Wilson B** 矩阵, 并构造近似的 **Hessian** 矩阵进行简正振动频率计算。数据文件在 **\$QCData** 输入组指定。该关键词不能与 **IFRdNM=.True.** 同时使用。默认: .False.。

## 3.2 \$QCData 输入组

这一输入组指定数据文件（包含原子质量，坐标，APT，和 Hessian），用双引号括起。一般只需要一个数据文件，由选项FCHK 指定，但是对于有些程序，需要使用关键词 HESS，DDIP，和/或GEOM 指定多个数据文件。

若IFApprx=.True.，构造近似 Hessian 矩阵的数据文件由BMAT 指定。

- GAUSSIAN: \*.fchk。默认情况下，fchk 文件不包含原子质量，于是程序假定为最丰同位素质量。但是对于 GAUSSIAN 09（以及更高的版本），可以用 `FREQ(SaveNormalModes)` 把原子质量保存到 fchk 文件。用关键词 `FREQ(Raman)` 可以保存拉曼强度计算所需的极化率导数。
- GAMESS: \*.dat（通过FCHK）+ \*.out（通过GEOM）。
- FIREFLY: data 文件（通过FCHK；默认为PUNCH）+ \*.out（通过GEOM）。
- GAMESS-UK: \*.out 文件。如果对红外强度感兴趣，可以在频率计算中指定关键词 `RUNTYPE INFRARED`，用于输出 APT。
- ORCA: \*.hess。
- MOLPRO: \*.out 文件。用以下命令打印 Hessian 和 APT：  
`{frequencies,print=1;print,hessian}`
- Q-CHEM: \*.fchk。在 Q-CHEM 的频率计算中，用 `GUI=2` 产生 \*.fchk 文件。fchk 文件不包含原子质量，程序假定为最丰同位素质量。
- NWCHEM: \*.out 文件（通过FCHK）+ \*.fd\_ddipole（通过DDIP）+ \*.hess（通过HESS），其中DDIP 是可选的，若对红外强度不感兴趣可以忽略。
- CFour

解析频率计算（VIB=ANALYTIC）: \*.out 文件（通过FCHK）+ GRD（通过GEOM）。

数值频率（VIB=FINDIF）和解析频率计算：使用 MOLDEN 文件。但是无红外强度。参见下面的 MOLDEN。

如果没有 GRD 文件或 MOLDEN 文件，或者由于某些原因导致 MOLDEN 文件缺少频率数据，也可以仅指定 \*.out 文件（通过FCHK），UNIMOVIB 将尝试从 \*.out 中打印的原子量，振动频率，和简正模式构造 Hessian 矩阵。但是，由于 CFour 打印的简正模式存在一些缺陷和错误（参见第 5 章），本选项可能无法正常工作，因此不建议使用。

- TURBOMOLE: aoforce 模块的 \*.out 文件（通过FCHK；默认: aoforce.out）+ dipgrad（通过DDIP），其中DDIP 是可选的，若对红外强度不感兴趣可以忽略。

- **DEMON2K**: \*.out 文件 (通过FCHK; 默认: deMon.out)。DEMON2K 可以通过 PRINT DE2 打印 Hessian。
- **PQS**: \*.coord 文件 (通过FCHK) + \*.deriv (通过DDIP) + \*.hess (通过HESS), 其中DDIP 是可选的, 若对红外强度不感兴趣可以忽略。
- **OPENMOPAC**: \*.out 文件 (通过FCHK)。使用 FORCE DFORCE 或 FORCE=DFORCE 打印 Hessian。使用平均原子量, 可能与非常早期版本的 MOPAC 不一致。
- **AMSOL**: \*.out 文件 (通过FCHK)。使用 FORCE DFORCE 打印 Hessian。使用平均原子量, 可能与非常早期版本的 AMSOL/AMPAC 不一致。
- **DALTON**: \*.out 文件 (通过FCHK)。由于 DALTON 不打印核电荷数和元素符号, 因此在 DALTON 频率计算的输入文件中, 必须指定标准的元素符号 (例如, Mg 可以, 而 Mg01、Mgxx 则不行)。
- **FHI-AIMS**: masses/\*.dat 文件 (通过FCHK) + grad\_dipole/\*.dat (通过DDIP) + hessian/\*.dat (通过HESS), 其中DDIP 是可选的, 若对红外强度不感兴趣可以忽略。
- **CP2K**: QUICKSTEP 模块频率计算产生的输出文件 (通过FCHK)。
- **HYPERCHEM**: 频率计算的日志文件 (通过FCHK)。HYPERCHEM 默认不产生日志文件。在做频率计算前, 来到 **File** 菜单, 选择 **Save log** 的打印级别为 9, 就可以保存日志文件。
- **JAGUAR**: 频率计算的输出文件 (通过FCHK)。
- **ADF**: 格式化的数据文件 TAPE21 或 TAPE13 (通过FCHK)。数值频率计算时有些问题, 参见第[五](#)章。
- **MOLDEN**: 数据文件 (通过FCHK), 其中包含 [FREQ], [FR-COORD], [FR-NORM-COORD] 数据区。一些问题参见第[五](#)章。
- **CRYSTAL**: 分子谐振频率计算产生的输出文件 (通过FCHK)。
- **SPARTAN**: \*.smol 存档文件 (通过FCHK)。假定为最丰同位素质量。
- **PSI**: 输出文件 (通过FCHK)。在 PSI 4 的数值频率计算中, 用 set print 3 打印 Hessian。
- **DMOL3**: 输出文件 (通过FCHK)。
- **ACES**: 输出文件 (通过FCHK), 但是建议使用 MOLDEN 文件, 可以得到更高的数字精度。一些问题参见第[五](#)章。

- **UniMoVib**: ASCII 数据文件 (通过FCHK), UniMoVib 通过选项IFSAVE=.TRUE. 产生, 也可以由用户手工编写 (参见附录A.1)。
- **XYZ**: 标准的 XYZ 数据文件 (通过FCHK)。仅用于调试。

参见\$UniMoVib/test 中的示例。

### 3.3 \$IsoMas 输入组

Isotop = 1 或2 时需要该输入组。输入组不需要选项。输入组之后, 提供同位素质量。

若Isotop = 1, 每行定义一个原子, 包括原子序号及质量。程序连续读取, 直到遇到空行或输入结束为止。例如,

```
1 $IsoMas $End
2 2 15.99491
3 4 2.01410
```

这里指定第二和第五个原子的质量分别为 15.99491 和 2.01410。

若Isotop = 2, 全部 N 个原子的质量以自由格式提供。例如,

```
1 $IsoMas $End
2 12.0 1.0 1.0
3 1.0
4 1.0
```

以上定义了 CH<sub>4</sub> 的 5 个原子质量。

### 3.4 \$ExpFrq 输入组

IFExp=.True. 时需要该输入组。该输入组只有一个选项MODE。在该选项组之后, 提供频率实验值。

若MODE = 0 (默认), 以自由格式定义所有的  $N_{Vib}$  个振动频率值, 它们必须正确地排序, 与频率计算值一致。例如:

```
1 $ExpFrq $End
2 835.0248 835.3904 926.0930 926.2148
3 2160.9759
```

若MODE = 1, 一系列理论频率值将用实验频率值替代。每行一个频率, 包括频率的编号, 及其实验值。程序连续读取, 直到遇到空行或输入结束为止。例如,

```

1 $ExpFrq MODE=1 $End
2 3 926.0930
3 5 2160.9759

```

### 3.5 \$Thermo 输入组

该输入组控制热化学计算。关键词有：

**Eel**: 来自量子化学计算的总能量（单位：Hartree）。默认：0。

**NDeg**: 自旋-轨道态的简并度。默认：1。

**Temp**: 温度（单位：K）。默认：298.15。若Temp < 0，表示除了默认温度以外，在 \$Thermo 输入组之后还提供多个额外的温度值。

**Press**: 压强（单位：大气压 atm）。默认：1.0。若Press < 0，表示除了默认压强以外，在 \$Thermo 输入组之后还提供多个额外的压强值。

**Scale**: 实频率的换算因子。默认：1.0。\$ExpFrq 输入组中定义的实验频率不做换算。

**ScTol**: 换算因子的阈值（单位：cm<sup>-1</sup>）。此值以下的低频不做换算。默认除实验频率和虚频以外的全部频率都做换算。

**PG**: 用于计算转动熵的点群名。它影响熵和 Gibbs 自由能的结果，因此必须指定正确的点群。

= 0: (默认) 2。

= 1: 使用不依赖同位素的点群。若同位素导致对称性降低，该选项可以重复某些量子化学程序计算的错误结果。

= 2: 使用依赖同位素的点群。

= "XXXX": 直接指定点群名称，特别适用于程序不支持的高点群，例如，"D10h"。不要忘记加上引号。

在以上关键词中除了Eel 以外，都会影响 Gibbs 自由能的结果。

输入组之后是额外提供的温度（若Temp < 0）或压强（若Press < 0）值，每行一个数值，连续多行，直到遇到空行或输入结束为止。例如，

```

1 $Thermo Temp=-1 $End

```

```
2 100
3 200
4 400
```

这个输入例子表示除了标准温度 298.15 K 之外，还分别进行 100, 200, 和 400 K 温度下的热化学计算。若同时提供温度和压强值（Temp < 0, 且 Press < 0），则每行两个数值，温度在前压强在后。例如，

```
1 $Thermo Temp=-1 Press=-1 $End
2 100 0.5
3 200 -1
4 -1 2.0
```

额外温度/压强中的负值表示使用默认的温度（298.15 K）或压强（1.0 atm）。

## 3.6 原子热化学计算

UNIMOVIB 还可以做原子热化学计算，在研究某些涉及原子的化学反应时会很有用，例如， $CH_3 + H_2 \rightarrow CH_4 + H$ 。除了可选的总能量以外，原子热化学计算不需要来自量子化学计算的任何数据和文件。需要提供三组关键词：

\$Contrl 输入组（参见第3.1节）：需要指定qcprog="atomcalc"。

\$IsoMas 输入组（参见第3.3节）：需要提供原子质量（\$Contrl 输入组中的Isotop 永远被程序设定为 2）。

\$Thermo 输入组（参见第3.5节）：可以指定Eel, NDeg, Temp, Press, 都是可选的。

其它的 namelist 和关键词不起作用，会被忽略。参见示例4.1。

## 第四章 示例

### 4.1 原子热化学计算

```
1 Atomic thermochemistry calculation (Ne atom)
2 The total energy was calculated at the HF/STO-3G level
3
4 $contrl
5   qcprog="atomcalc"
6 $end
7
8 $Thermo
9   Eel=-127.8038245 Temp=500 Press=10
10 $end
11
12 $IsoMas $End
13 19.99244
```

### 4.2 来自 GAUSSIAN 的频率计算数据

```
1 a test job
2
3 $contrl
4   qcprog="gaussian"
5 $end
6
7 $qcddata
8   fchk="xef6.fchk"
9 $end
```

## 4.3 来自 MOLPRO 的频率计算数据

MOLPRO 无法使用非阿贝尔群对称性，如  $\text{CH}_4$  的  $T_d$  群。通过 UNIMOVIB，你可以得到振动模式在最高点群下的不可约表示。

```
1 a test job
2
3 $contrl
4   qcprog="molpro"
5 $end
6
7 $qcdata
8   fchk="ch4.out"
9 $end
```

## 4.4 计算 HDO 振动频率的“实验值”

我们可以从  $\text{H}_2\text{O}$  的实验频率，估算 HDO 的频率。

```
1 Step 1.
2 Save data file using experimental frequencies of H2O.
3 The normal modes should be calculated at high level of theory.
4
5 $contrl
6   qcprog="cfour"
7   ifsave=.true.
8   ifexp=.true.
9 $end
10
11 $qcdata
12   fchk="h2o.out"
13   geom="GRD"
14 $end
15
16 $expfrq mode=1 $end
17 1 1595
18 2 3657
19 3 3756 B2
```

```
1 Step 2.
2 Calculate "experimental" frequencies of HDO using the experimental frequencies of H2O.
3 CCSD(T)/cc-pVTZ frequencies:      1463  2828  3895 cm-1
4 "experimental" frequencies:      1398  2692  3708 cm-1
5 genuine experimental frequencies: 1402  2727  3707 cm-1
6
```



```
7  $contrl
8    qcprog="unimovib"
9    isotop=1
10 $end
11
12 $qcdata
13   fchk="step1.umv"
14 $end
15
16 $IsoMas $End
17 2 2.01410
```

## 第五章 已知问题

- ADF

数值频率计算中（如，旋轨耦合 ZORA），若 ADF 使用了对称性，且存在对称等价原子，则会导致 APT 部分矩阵元的缺失，得到错误的红外强度。若关心红外强度，可以从 ADF 的输出结果中得到它们。

- MOLDEN

1. 若存在虚频，某些量子化学程序会错误地打印为实频（例如 CFour），导致错误结果。用户需要检查 MOLDEN 文件中的虚频，必要的话手工更正。
2. 由于 MOLDEN 文件缺少同位素质量信息，程序假定为最丰同位素，若不符合，结果可能会完全错误。因此必须在产生 MOLDEN 文件的频率计算中使用最丰同位素。

- ACES

由于 ACES 输出文件缺少同位素质量信息，程序假定为最丰同位素，若不符合，结果可能会完全错误。因此必须在产生 ACES 输出文件的频率计算中使用最丰同位素（ACES 默认）。

- CFour

在只有单个 \*.out 文件使用的情况下（通过 FCHK），UniMoVib 尝试构造 Hessian 矩阵。但是由于 CFour 打印的简正模式存在缺陷和错误，结果可能有问题：

1. 对于高对称分子，在频率输出部分可能会重新排列原子，导致原子顺序在几何结构部分和频率部分不一致。
2. 对于线形多原子分子，可能会少打印一个简正模式。
3. 由于打印的简正模式数据精度很低（第一列只有 3 个有效数字，其余列 4 个），一些低频可能无法被 UniMoVib 复现。

# 附录 A 附录

## A.1 UniMoVib 数据文件格式

UniMoVib 数据文件是纯文本自由格式。

1.0.3 版 (2020.02.10)

```
1  ( 一个标题行 )
2  NATM
3  ( 一个正整数 )
4  AMASS
5  ( NATM 个原子质量；若不提供原子质量，改用 NOMASS )
6  ZA
7  ( NATM 个核电荷数 )
8  XYZ
9  ( 3*NATM, 原子单位的直角坐标；若单位为埃，改用 XYZANG )
10 FFX
11 ( 3*NATM*3*NATM, Hessian 矩阵元；若为下三角矩阵数据，改用 FFXLT )
12 APT
13 ( 3*3*NATM, APT 数据值；若不提供 APT 数据，改用 NOAPT )
14 DPR
15 ( 6*3*NATM, 极化率导数数据值；若以 9*3*NATM 格式给出，改用 DPRSQ；
16 若不提供 DPR 数据，改用 NODPR )
17 GRD
18 ( 3*NATM, 直角坐标下的梯度数组；若不提供梯度，改用 NOGRD )
```

目前 DPR 数据和拉曼强度仅支持 GAUSSIAN 产生的 fchk 文件。GRD 数据仅用于某些外部程序（如 LMODEA）。

## A.2 开发人员：到其它量子化学程序的接口

要接入到其它支持谐振频率计算的量子化学程序，需要在 *interface.f90* 中提供两个接口子例程。

- 1 读取或统计原子数 (NAtm)。虚原子不包含在内。该子例程在 subroutine RdNAtm1 中调用。  
例如：

```

1  !-----
2  ! Read NATm from XXXX output
3  !-----
4  subroutine RdNAtmXXXX(ifchk,NAtm,tag,ctmp)
5  implicit real(kind=8) (a-h,o-z)
6  character*100 :: ctmp
7  character*100 :: tag
8  (...)
9  return
10 end

```

- 2 读取原子单位的直角坐标 (XYZ)，原子核电荷数 (ZA)，原子单位的原子量或同位素质量 (AMass; 可选)，原子单位的直角坐标力常数矩阵 (FFx, 必须是未做质量加权的对称方阵)，原子单位的偶极矩梯度 (即原子极化张量, APT; 可选)，以及原子单位的极化率导数 (DPol; 可选)。该子例程在 subroutine RdData1 中调用。例如：

```

1  !-----
2  ! Read data from XXXX output
3  !-----
4  subroutine RdXXXX(ifchk,tag,ctmp,NAtm,AMass,ZA,XYZ,FFx,APT,DPol)
5  implicit real(kind=8) (a-h,o-z)
6  real(kind=8) :: AMass(NAtm),ZA(NAtm),XYZ(3,NAtm),FFx(3*NAtm,3*NAtm), &
7    APT(3,3*NAtm),DPol(6,3*NAtm)
8  character*100 :: ctmp
9  character*100 :: tag
10 (...)
11 return
12 end

```

- 3 此外，在 *rwf90* 的 subroutine RdContrl 中加入量子化学程序名作为 QCProg 的新选项。

- 4 最后，别忘了升级使用手册。