



RELATIVISTIC AND QUANTUM ELECTRONIC THEORY

インプットマニュアル

バージョン 1.1

Copyright (C) 2019 Nakai group
Department of Chemistry and Biochemistry,
School of Advanced Science and Engineering, Waseda University
All rights reserved.

目次

インプットファイル

ジョブオプション

molecular information

basis sets

basis sets 2

core potential

\$MOA, \$MOB, \$MOG

ジョブオプション

\$Run

\$Wavefunction

\$Hamiltonian

\$Mol

\$Basis

\$Integral

\$Guess

\$SCF

\$MP2

\$DFT

\$TDDFT

\$Opt

\$Property

\$FCP

\$TCE

基底関数

STO-nG基底関数系

Pople型基底関数系

Sapporo基底関数系

correlation-consistent基底関数系

polarization-consistent基底関数系

その他

インプットファイル

RAQETのインプットファイルは以下のセクションから構成される。

1. ジョブオプション: 計算条件を指定
2. molecular information: 計算対象となる原子・分子の情報を記述
3. basis sets: 基底関数に関する情報を記述
4. basis sets 2: SCF計算の初期軌道生成に用いる基底関数を指定
5. core potential: 内核ポテンシャルを記述 [省略可]
6. \$MOA, \$MOB, \$MOG: SCF計算の初期軌道係数を記述 [省略可]

Job Options

このセクションでは計算条件を指定する。基本的に\$[オプション名]で始まり\$endで各パートが終了する。以下の例のように、1行につき1つのキーワードを指定する。

```
$Run
  JobType=sp
  Mem=1000MB
$end
```

Molecular Information

このセクションでは計算対象となる各原子の元素名および座標を指定する。また、原子ごとに基底関数を指定することもできる。1行目はセクション開始を表す”molecular information”とする。2行目以降には元素名と、原子のCartesian座標をÅ単位で記述する。この座標に原子核と基底関数が置かれる。具体的な書式は次の通り。

元素名	[基底関数名]	[基底関数名(2)]	x座標	y座標	z座標
-----	---------	------------	-----	-----	-----

[]は省略できる。基底関数名(2)はSCFの初期軌道生成に用いる基底関数を指定する。要素間はタブではなくスペースで区切る。

例としてホルムアルデヒドの場合を示す。

```
molecular information
C   0.000000  0.000000  0.000000
O   0.000000  1.219457  0.000000
H   0.465617 -0.542208  0.815579
H   0.465617 -0.542208 -0.815579
```

この例ではbasis setsセクションで指定された基底関数そのまま用いられる。元素名および座標に加えてすべての原子に6-31G(d,p)基底を指定した場合を次に示す。

```
molecular information
C DB:/6-31G(d,p)/C 0.000000 0.000000 0.000000
O DB:/6-31G(d,p)/O 0.000000 1.219457 0.000000
H DB:/6-31G(d,p)/H 0.465617 -0.542208 0.815579
H DB:/6-31G(d,p)/H 0.465617 -0.542208 -0.815579
```

molecular informationセクションで指定した基底関数は、basis setsセクションでの指定より優先される。特定の原子はmolecular informationセクションで基底関数を指定し、他はbasis setsセクションの基底関数を適用することも可能である。

Basis Sets

このセクションでは計算に使用する基底関数を指定する。すべての原子に対して共通の基底関数を指定する場合は

```
basis sets = 6-31G(d,p)
```

のように記述する。重元素のみ異なる基底関数を指定したい、などというときには

```
basis sets = Sapporo-DZP-2012
Rh DB:Sapporo-DKH3-DZP-2012/Rh
Ir DB:Sapporo-DKH3-DZP-2012/Ir
```

のように記述する。基底関数に関する情報を詳細に記述することもできる。以下は共通の基底関数を指定せず、酸素と水素に対して基底関数の詳細を記述した例である。

```
basis sets
O
S 6 1.00
5484.6717000 0.0018311
825.2349500 0.0139501
188.0469600 0.0684451
52.9645000 0.2327143
16.8975700 0.4701930
5.7996353 0.3585209
SP 3 1.00
15.5396160 -0.1107775 0.0708743
3.5999336 -0.1480263 0.3397528
1.0137618 1.1307670 0.7271586
SP 1 1.00
0.2700058 1.0000000 1.0000000
D 1 1.00
0.8000000 1.0000000
```

```

H
S   3   1.00
    18.7311370   0.03349460
    2.8253937   0.23472695
    0.6401217   0.81375733
S   1   1.00
    0.1612778   1.00000000

```

詳細な基底関数の指定は次の書式に従って行われる。

```

basis sets
元素名
関数名      縮約長      スケーリング因子
Gauss関数1の指数  縮約係数1.1  [縮約係数1.2]
Gauss関数2の指数  縮約係数2.1  [縮約係数2.2]
...
関数名      縮約長      スケーリング因子
Gauss関数1の指数  縮約係数1.1  [縮約係数1.2]
Gauss関数2の指数  縮約係数2.1  [縮約係数2.2]
...
...
                                     ← 1行以上の空行
元素名
関数名      縮約長      スケーリング因子
...
...

```

Basis Sets 2

basis setsで指定した基底関数とは別に、SCFの初期軌道生成に用いる基底関数を指定する。記述のルールはbasis setsセクションと同様である。一般的には小規模な基底関数が適しているため、ここで指定された基底関数はアウトプットファイルではsmall basisとも呼ばれる。ジョブオプション\$GuessにおいてGuessMethod=Hcoreとする場合は、このセクションは不要である。

Core Potential

凍結内殻ポテンシャル (FCP) に用いる内殻ポテンシャルを指定するセクションである。内殻ポテンシャルを得るには、ジョブオプション\$FCPにて FCPMethod=potentialを指定した計算を行う。得られたパンチファイルの“core potential”以下の部分に内殻ポテンシャルが記述されている。これを、FCPを用いて計算したい系のインプットファイルにそのままコピー&ペーストする。ポテンシャルとして固定する軌道および固定しない価電子軌道は、それぞれ\$FCPにおけるcoreRegionおよびvalRegionで指定する。

```

core potential
DKH3Gen
COR    1S    78
-2.98347169E+03
-9.99727309E-01 -2.77962103E-03  3.95750145E-03 -7.64787402E-04
...
COR    2S    78
-5.31922309E+02
 4.04002299E-04 -1.00320737E+00  4.73374430E-03 -1.09011031E-03
...
COR    2P    78
...
...
COR    4F    78
-3.78970260E+00
 1.68980828E-12 -7.43624793E-11  6.00973024E-10 -9.47083392E-10
...

```

\$MOA, \$MOB, \$MOG

SCFの初期密度行列を生成するために用いる分子軌道係数を記述するセクションである。RAQETを用いた計算で得られるパンチファイルには、SCF解として得られた軌道係数が\$MOA, \$MOB, \$MOG等の書式で出力されている。これをインプットファイルに追加し、ジョブオプション\$GuessでGuessMethod=MOreadを指定し、このセクションに対応する基底関数をbasis sets 2セクションで指定することでSCF収束解から初期密度行列を生成できる。

\$MOAは α スピン軌道に対応し、その書式は以下の通りである。

```

$MOA
 1  軌道係数1.1  軌道係数1.2  軌道係数1.3  軌道係数1.4
 1  軌道係数1.5  軌道係数1.6  軌道係数1.7  軌道係数1.8
...
 2  軌道係数2.1  軌道係数2.2  軌道係数2.3  軌道係数2.4
 2  軌道係数2.5  軌道係数2.6  軌道係数2.7  軌道係数2.8
...
$end

```

左端の数字は分子軌道の番号である。ジョブオプションと同様に、最後に\$endを記入する。\$MOBは β スピン軌道に対応し、その書式は\$MOAと同様である。

ジョブオプション\$WavefunctionにてWavefuncType=GHFを指定した場合、初期軌道の読み込みは一般化スピン軌道の係数を指定する\$MOGを通して行う。\$MOGは次のように軌道係数の実部と虚部を続けて記述する。

```
$MOG
  1  軌道係数1.1 (実部)  軌道係数1.1 (虚部)  軌道係数1.2 (実部)  ...
  1  軌道係数1.5 (実部)  軌道係数1.5 (虚部)  軌道係数1.6 (実部)  ...
  ...
  2  軌道係数2.1 (実部)  軌道係数2.1 (虚部)  軌道係数2.2 (実部)  ...
  ...
$end
```

ジョブオプション

\$Run

計算の基本的な設定を行う。

JobType	実行する計算の種類	
	Energy [sp]	エネルギー計算 (default)
	Gradient [grad]	エネルギー勾配計算
	Optimization [opt]	構造最適化計算
	Property [prop]	プロパティ計算
Mem	計算に使用する最大メモリ容量 (default: 1024MB) KB、MB、GB、KW、MW、GW単位で指定可能	
wayDiag	利用する対角化ルーチンの種類	
	1	*syevd
	2	*syev (default)

\$Wavefunction

WavefuncType	波動関数理論の種類または密度汎関数理論(DFT)におけるスピンの取り扱いを指定	DFT
	RHF 制限Hartree-Fock法、制限DFT (default)	○
	UHF 非制限Hartree-Fock法、非制限DFT	○
	ROHF 制限開殻Hartree-Fock法、制限開殻DFT	○
	GHF 一般化Hartree-Fock法、一般化DFT	○
	RMP2 制限Møller-Plesset 2次摂動法	×
	GMP2 一般化Møller-Plesset 2次摂動法	×

\$Hamiltonian

計算に利用するハミルトニアンを設定する。

HamilType	ハミルトニアンの種類。無限次Douglas-Kroll-Hess (IODKH) ハミルトニアンは無限次2成分 (IOTC) ハミルトニアンに等しい		Gradient
	NR	非相対論的ハミルトニアン (Default)	○
	DKH1 [FW]	1次のDouglas-Kroll-Hessハミルトニアン (Foldy-Wouthuysen変換 と同じ)による 1電子ハミルトニアン + 非相対論的2電子ハミルトニアン	×
	IODKH [IOTC]	無限次Douglas-Kroll-Hess1電子ハミルトニアン + 非相対論的2電子ハミルトニアン	×
	LUT-IODKH [LUT-IOTC]	局所ユニタリー変換を利用した 無限次Douglas-Kroll-Hess1電子ハミルトニアン + 非相対論的2電子ハミルトニアン	○
	IODKH-IODKH [IOTC-IOTC]	無限次Douglas-Kroll-Hessハミルトニアン	×
SD1e	1電子スピン依存項を計算する (default: false) WavefuncType=GHFに対して有効。解析的エネルギー勾配はLUT-IODKHハミルトニアンを用いたHartree-Fock計算のみ対応		
ConvY	IODKHハミルトニアンにおけるY演算子反復計算の収束判定値 (default: 1.0d-09)		
tolHess	Hessの変換行列におけるprimitive overlap matrixによる 線形従属性判断のしきい値 (default: 1.0d-10)		
tolLUTtau	LUT法におけるカットオフ半径 (default: 3.5 Å)		
tolRelTEI	2電子IODKH変換における積分のカットオフ値 (default: 1.0d-10)		
Nucleus	原子核の取り扱い		
	point	点電荷モデル (default)	
	finite	Gauss関数モデルによる有限サイズ原子核 VisscherとDyallによるパラメータ を使用 エネルギー計算における原子核-電子引力項に適用される。 原子核反発は点電荷モデルで近似される	

\$Mol

分子の情報を指定する。

mcharge	分子の電荷 (default: 0)
multiplicity	分子のスピン多重度 (default: 1)

\$Basis

基底関数に関する設定を行う。

BasType	基底関数の形式変換	
	None	変換しない
	GC	一般縮約基底への変換 (default)
	SC	部分縮約基底への変換
	UC	非縮約型基底への変換
BasTypeSmall	basis sets 2セクションで指定した基底関数の形式変換 (省略時はBasTypeと同じになる)	
	None	変換しない
	GC	一般縮約基底への変換 (default)
	SC	部分縮約基底への変換
	UC	非縮約型基底への変換
OrbitalShape	軌道の形状	
	Cartesian [xyz]	Cartesian座標系 (default)
	Spherical [SH]	球面調和関数系 (Hartree-Fock, MP2のみ対応)

\$Integral

分子積分の計算に関する設定を行う。

Method_TEI	2電子積分の計算アルゴリズムを指定 Direct SCFは”Hybrid”アルゴリズムにより行われる	
	Gauss-Rys	Gauss-Rys法
	PHMD	Pople-Hehre法 + McMarcie-Davidson法
	ACE-TRR [SC-ACE-TRR]	随伴座標展開-移項漸化関係式法
	GC-ACE-TRR	一般縮約-随伴座標展開-移項漸化関係式法
	Hybrid	上記アルゴリズムのハイブリッド (default)
Cutoff_OEI	1電子積分のカットオフ値 (default: 1.0d-20)	
Cutoff_TEI	2電子積分のカットオフ値 (default: 1.0d-20)	
Cutoff_TEIout	ディスクに保存する2電子積分のカットオフ値 (default: 1.0d-12) isDirectSCF=.false.で有効	
Cutoff_preExp	基底関数の指数に基づくカットオフ値 (default: 20.0 * log(10.0))	
isSchwarz	Schwarzの不等式を用いて2電子積分の計算コストを削減 (default: true)	
Method_DTEI	2電子積分の微分の計算アルゴリズム	
	Gauss-Rys	Gauss-Rys法
	ACE-TRR [SC-ACE-TRR]	随伴座標展開-移項漸化関係式法
	GC-ACE-TRR	一般縮約-随伴座標展開-移項漸化関係式法
	Hybrid	上記アルゴリズムのハイブリッド (default)
Cutoff_DOEI	1電子積分の微分のカットオフ値 (default: 1.0d-15)	
Cutoff_DTEI	2電子積分の微分のカットオフ値 (default: 1.0d-10)	

\$Guess

SCF計算の初期密度行列に関する設定を行う。

GuessMethod		SCF計算に用いる初期密度行列の作成方法
	Hcore	1電子ハミルトニアン行列の対角化
	Huckel	拡張Hückel法 (default) basis sets 2の指定が必須 (DKH3minimalを推奨) 原子番号103まで対応
	Atomic	分子を構成する原子のHartree-Fock計算を行い、 全系の密度行列をbasis setsの基底関数に射影 basis sets 2の指定が必須
	Small	basis sets 2の基底関数を用いてHartree-Fock計算を 行い密度行列をbasis setsの基底関数に射影 WavefuncType=RHF, UHF, ROHFに対応
	MOrad	\$MOA, \$MOB, \$MOGから読み込んだ軌道係数より作成
GuessWavefuncType		初期密度行列を計算する際の波動関数 (default: WavefuncTypeと同じ)
	RHF	制限Hartree-Fock波動関数
	UHF	非制限Hartree-Fock波動関数
	ROHF	制限開殻Hartree-Fock波動関数
	GHF	一般化Hartree-Fock波動関数
GuessMix		一重項UHF・UDFT計算において、 α スピン軌道と β スピン軌道のHOMO・ LUMOを混成する (default: false)

\$SCF

自己無撞着場 (SCF) 計算に関する設定を行う。

maxSCFcycle	SCF計算における繰り返し回数の上限 (default: 50)	
convSCF	収束判定に用いるエネルギーのしきい値 (default: 1.0d-09)	
convDen	収束判定に用いる密度行列のしきい値 (default: 1.0d-05)	
convTech	収束オプションの設定 プラス記号 (+) で区切ることで、複数の手法を組み合わせ可能	
	C1-DIIS [DIIS, C-DIIS]	Fock行列に対してDIIS外挿法を利用する
	C2-DIIS	Fock行列に対してC2-DIIS外挿法を利用する maxDIISが大きいときに有効
	EDIIS	Fock行列に対してEDIIS内挿法を利用する
	EDIIS+DIIS	EDIIS内挿法とDIIS外挿法の組み合わせ (default)
	SOSCF	二次収束SCF (SOSCF) 法を有効にする
	sDamp	密度行列に対して静的ダンピングを有効にする
	FON	Fermi分布関数に基づく非整数占有数を利用 収束時には整数占有数に戻る
QmtE_Cutoff	原子軌道の正準直交化における線形従属性判定のしきい値 (default: 1.0d-06)	
isDirectSCF	2電子積分をSCFの繰り返しごとに再計算する手続き (direct SCF) を行う (default: false)	
isFockDiff	Direct SCFを行う際にFock行列の前の繰り返しからの差分のみを計算することでSCF計算を高速化する (default: true)	
Couple	ROHF計算においてFock行列の線形結合に用いる係数 $F_{XX} = A_{XX} \times F^a + B_{XX} \times F^b$ (X = C, O, V)	
	Davidson	Davidsonによる結合係数 (default) $A_{CC}=1/2, A_{OO}=1, A_{VV}=1, B_{CC}=1/2, B_{OO}=0, B_{VV}=0$
	C2006	Plakhutinら (2006) による結合係数 Koopmansの定理を満たす ($A_{CC}=0, A_{OO}=1, A_{VV}=1, B_{CC}=1, B_{OO}=0, B_{VV}=0$)

	Manual [Man, Input]	結合係数 (Acc, Aoo, Avy, Bcc, Boo, Bvv) を\$SCF内で指定
maxDIIS	DIISで用いる過去のSCF繰り返し回数 (default: 10)	
iDIISerrVec	DIISエラーベクトルの計算方法	
	1	通常法 (default)
	2	Anderson型 (軌道が複素数となる場合 default)
maxEDIIS	EDIISで用いる過去のSCF繰り返し回数 (default: 10)	
maxIterEDIIS	EDIISにおける関数最適化サイクルの最大繰り返し回数 (default: 200)	
maxSOSCF	SOSCFで用いる過去のSCF繰り返し回数 (default: 20)	
tolSOSCFini	SOSCF勾配に対するしきい値 勾配の大きさがこの値を下回るとSOSCFが開始される (default: 0.25)	
tolSOSCFgrad	SOSCF勾配計算の収束判定に用いるしきい値 (default: 1.0d-8)	
SCFdampFac	ConvTech=sDampにおける静的ダンピング係数 過去の密度行列の重みを0.0-1.0で表す (default: 0.75)	

\$MP2

Møller-Plesset 2次摂動 (MP2) 計算に関する設定を行う。

nFrzA	RMP2計算において除外する内殻の α 電子数 (default: 0)
nFrz	GMP2計算において除外する内殻の総電子数 (default: 0)
SCSFacS	SCS-MP2計算に用いる反平行スピン項の係数 (default: 1.2d+00)
SCSFacT	SCS-MP2計算に用いる平行スピン項の係数 (default: 0.3333333333d+00)
Cutoff_MP2	MP2計算に用いる分子積分のしきい値 (default: 1.0d-09)

\$DFT

密度汎関数理論 (DFT) 計算に関する設定を行う。

DensfuncType	交換相関汎関数の種類	
	None	波動関数理論 (default)
	交換汎関数のみ	
	Slater	Slater-DiracによるLDA交換
	Becke88	BeckeによるGGA交換
	PBEX	Perdew-Burke-ErnzerhofによるGGA交換
	HF交換 + 相関汎関数	
	VWN	HF交換 + Vosko-Wilk-NusairによるLDA相関 VWN5のパラメータを使用
	VWN3	VWN3のパラメータを使用
	PW92	HF交換 + Perdew-WangによるLDA相関
	LYP	HF交換 + Lee-Yang-ParrによるGGA相関
	PBEC	Perdew-Burke-ErnzerhofによるGGA相関
	Pure汎関数	
	SVWN	Slater交換 + VWN5相関
	SVWN3	Slater交換 + VWN3相関
	SPW92	Slater交換 + PW92相関
	BLYP	Becke88交換 + LYP相関
	PBE	PBE交換 + PBE相関
	revPBE	修正PBE交換 + PBE相関
	VS98	Voorhis-ScuseriaによるメタGGA交換 + 相関
	M06-L	Zhao-TruhlarによるメタGGA交換 + 相関

	Hybrid(混成)汎関数	
	B3LYP	Beckeによる3パラメータ混成汎関数 (HF交換20%)
	B3LYP3	VWN3のパラメータを使用したB3LYP汎関数
	BHHLYP	Bekce88交換50%+HF交換50%+LYP相関
	PBE0	PBE交換75%+HF交換25%+PBE相関
	M05	Zhao-Schultz-Truhlarによる混成メタGGA汎関数 (HF交換28%)
	M05-2X	Zhao-Schultz-Truhlarによる混成メタGGA汎関数 (HF交換56%)
	M06	Zhao-Truhlarによる混成メタGGA汎関数 (HF交換27%)
	M06-2X	Zhao-Truhlarによる混成メタGGA汎関数 (HF交換54%)
	M06-HF	Zhao-Truhlarによる混成メタGGA汎関数 (HF交換100%)
	Double hybrid汎関数	
	B2PLYP	Becke88交換47%+HF交換53% +LYP相関73%+MP2相関27%
	B2GPPLYP	Becke88交換35%+HF交換65% +LYP相関64%+MP2相関36%
	PBE0-DH	PBE交換50%+HF交換50% +PBE相関87.5%+MP2相関12.5%
	PBE0-2	PBE交換20.6299%+HF交換79.3701% +PBE相関50%+MP2相関50%
nRad	交換相関項の数値積分で用いる原子核に対する動径方向のグリッド点数 (default: 96)	
nLeb	交換相関項の数値積分で用いる原子核に対する角度方向のグリッド点数。対応している値は 6, 14, 26, 38, 50, 74, 86, 110, 146, 170, 194, 230, 266, 302, 350, 434, 590, 770, 974, 1202, 1454 (default: 302)	
sdCol	スピン依存計算における共線的 (collinear) スピン密度の軸	
	X	X軸

	Y	Y軸
	Z	Z軸
	None	特定の軸を指定せず 非共線的 (noncollinear) スピン密度に基づく計算 を行う (default)
isRelPC	<p>相対論的DFTおよびTDDFT計算における交換相関項の計算でIODKH (IOTC) 変換によるpicture-change補正を行う (default: false) WavefuncType=RHF, UHF, ROHF かつ HamilType=IODKH-IODKH (IOTC-IOTC) の組み合わせのみ有効</p>	
isRelFun	<p>Slater-Dirac交換汎関数およびBecke88交換汎関数を相対論補正された汎関数に置き換える (default: false) DensfuncType=SVWN, BLYP, B3LYP, B2PLYPなどに有効 基底状態計算に適用される。すなわちTDDFTにおけるカップリング行列は非相対論的汎関数で計算される</p>	

\$TDDFT

時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) による励起状態計算に関する設定を行う。

isExcited	TDDFTと線形応答理論に基づく励起状態計算を実行する。\$DFTのDensfuncTypeで指定した交換相関汎関数が用いられる WavefuncType=RHF, GHF (閉殻系のみ) に対応 (default: false)	
isTDA	Tamm-Dancoff近似を使用 (default: false) WavefuncType=GHFでは強制的にtrueが指定される	
wayDiag	固有値方程式の解法	
	Davidson	Davidson法により一部の固有値を計算 (default)
	QR	QR法によりすべての固有値を計算
nEigen	wayDiag=Davidsonのときに求める固有値すなわち励起状態の数 (default: 10)	
maxVec	wayDiag=Davidsonのときに広げる部分空間の最大値を指定 (default: 100) 部分空間の最大値 = nEigen × maxVec	
TDmulti	励起状態のスピン多重度	
	1	1重項励起状態を計算 (default)
	3	3重項励起状態を計算
TDnRad	交換相関項の数値積分で用いる原子核に対する動径方向のグリッド点数 (default: 48)	
TDnLeb	交換相関項の数値積分で用いる原子核に対する角度方向のグリッド点数。対応している値は 6, 14, 26, 38, 50, 74, 86, 110, 146, 170, 194, 230, 266, 302, 350, 434, 590, 770, 974, 1202, 1454 (default: 110)	

\$DFT (new routine)

新たに実装されたルーチンを用いた密度汎関数理論 (DFT) 計算に関する設定を行う。

isExCorDM	密度行列ベースのルーチンを用いて交換相関エネルギーおよびポテンシャル計算を行う (default: false) WavefuncType=RHF, UHF, ROHFに対応	
isRelPC	Coulomb反発項と交換相関項を IODKH (IOTC) 法によるpicture-change変換 を行って計算 (default: false) WavefuncType=RHF, UHF, ROHF かつ HamilType=IODKH-IODKH (IOTC-IOTC) の組み合わせのみ有効	
isRelFun	Slater-Dirac交換汎関数およびBecke88交換汎関数を 相対論補正された汎関数 に置き換える (default: false) DensfuncType=SVWN, BLYP, B3LYP, BHHLYP, B2PLYPなどの他に、 局所混成汎関数 に対しても有効。isRelPC=.true. が強制的に指定される	
DensfuncType	交換相関汎関数の種類 従来のDFT計算ルーチンと同じ汎関数 (meta-GGAを除く) を指定できる。さらに以下の局所混成汎関数が利用可能	
	局所混成汎関数	
	Lh07t-SVWN	Hartree-Fock交換とSlater交換を局所的に混成 + VWN相関、混成比率は運動エネルギー密度に依存
	Lh07s-SVWN	Hartree-Fock交換とSlater交換を局所的に混成 + VWN相関、混成比率は電子密度の勾配に依存
	Lh12ct-SVWN	Hartree-Fock交換とSlater交換を局所的に混成 + VWN相関、混成比率は運動エネルギー密度に依存
	Lh12ct-SsirPW92	自己相互作用を削減したPW92相関を用いた局所混成汎関数
	Lh12ct-SsifPW92	自己相互作用のないPW92相関を用いた局所混成汎関数
	Lh14t-calPBE	Hartree-Fock交換とPBE交換を局所的に混成 + PBE相関、混成比率は運動エネルギー密度依存、calibration関数による補正
	Hartree-Fock法	

	snHF	半数値積分を交換項の計算に用いたHartree-Fock計算を行う
GridType	交換相関項の計算に用いるグリッドの種類	
	SMASH	SMASHプログラム に実装されているLebedevグリッド (default)
	Ahlrichs	Ahlrichsによる standardグリッド
nRad	GridType=SMASHIにおける原子核に対する動径方向のグリッド点数 (default: 96)	
nLeb	GridType=SMASHIにおける原子核に対する角度方向のグリッド点数。対応している値は 6, 14, 26, 38, 50, 74, 86, 110, 146, 170, 194, 230, 266, 302, 350, 434, 590, 770, 974, 1202, 1454 (default: 302)	
GridSize	GridType=Ahlrichsで用いるグリッドのサイズ	
	1	テスト計算のための小規模なグリッド
	2	高速な計算のための小規模なグリッド
	3	標準的なグリッド (default)
	4	より大規模な標準的なグリッド
	5	より大規模で高精度なグリッド
	6	小規模な参照値計算用グリッド
	7	高精度な参照値計算用グリッド
	8	非常に高精度な参照値計算用グリッド
	9	原子の計算で用いる計算コストの低い参照値計算用グリッド
	42	厳密な結果に近い非常に大規模なグリッド
Junc	Hartree-Fock交換エネルギー密度の半数値積分におけるスクリーニングのしきい値 (default: 12,12,12) “Junc=s,d,f”は、S-ジャンクション (重なりによるスクリーニング), P-ジャンクション (密度行列によるスクリーニング), F-ジャンクション (Fock 行列構築前	

のスクリーニング)のそれぞれに対して 10^{-s} , 10^{-p} , and 10^{-f} のしきい値となる

\$Opt

構造最適化計算に関する設定を行う。

Coord	構造最適化計算に用いる座標	
	Redundant [RD, Redun]	Redundant内部座標 (default)
	Cartesian [Cart]	Cartesian座標
maxOptCycle	構造最適化サイクルの最大数 (default: 50)	
convOpt	収束判定に用いるForceのしきい値、単位はhartree/bohr (default: 1.0d-04)	
Numerical	Force計算を全エネルギーの数値微分により行う (default: false)	
StepSize	数値微分の際に原子の座標を変化させる幅、単位はÅ (default: 1.0d-04)	
numPoint	数値微分を実行する際の点数	
	3	3点のエネルギーを用いた数値微分 (default)
	5	5点のエネルギーを用いた数値微分
	7	7点のエネルギーを用いた数値微分
	9	9点のエネルギーを用いた数値微分

\$FCP

[凍結内殻ポテンシャル \(FCP\)](#)に関する設定を行う。

FCPmethod	FCPの作成およびFCPを用いた計算の指定	
	None	通常の計算 (default)
	Potential	FCPの作成
	FCP	FCPを用いた計算の実行
nCoreOut(n)	ポテンシャル作成とする内殻軌道の数指定。n=1,2,3,4 がそれぞれs,p,d,f軌道に対応	
CoreRegion(1)	内殻電子として扱う軌道の番号をすべて指定	
ValRegion(1)	価電子として扱う軌道の番号をすべて指定	
isUcore	WavefuncType=UHFで求めた内殻軌道を用いる (default: false)	
isCorePotEx	内殻ポテンシャル生成における交換積分の有無 (default: true)	
isValPotEx	価電子ポテンシャル生成における交換積分の有無 (default: true)	
doCVint	内殻・価電子積分によりポテンシャルを作成 (default: true) OrbitalType=Sphericalの場合にはfalseを指定すること	

\$TCE

[Tensor contraction engine \(TCE\)](#) により自動実装した電子相関理論に関する設定を行う。

TCEmethod	電子相関モデルの指定 WavefuncType=RHFのみ対応	
	None	TCEによる電子相関計算を行わない (default)
	MP2	second-order Møller-Plesset perturbation theory
	MP2.5	average of MP2 & MP3
	MP3	third-order Møller-Plesset perturbation theory
	LCCD	linearized coupled cluster doubles
	CCD	coupled cluster doubles
	LCCSD	linearized coupled cluster singles and doubles
	CCSD	coupled cluster singles and doubles
	CCSD[T]	coupled cluster singles and doubles with non-iterative connected triples
	CCSD(T)	coupled cluster singles and doubles with non-iterative connected triples
	CCSDT	coupled cluster singles, doubles, and triples
	CCSDTQ	coupled cluster singles, doubles, triples, and quadruples
nFrzA	電子相関計算において除外する内殻の α 電子数を設定 (default: 0)	
nFrzVirA	電子相関計算において除外する α 仮想軌道の数を設定 (default: 0)	
CutoffTransInt	電子相関計算に用いる分子積分のしきい値 (default: 1.0d-09)	
maxTCEcycle	反復が必要な電子相関計算における最大繰り返し回数 (default: 100)	
TCEtol	電子相関計算の収束判定に用いる振幅のしきい値 (default: 1.0d-08)	

\$Prop

プロパティ計算に関する設定を行う。

一点計算では、Mulliken電荷およびMullikenスピン密度 (WavefuncType=UHF, ROHF)、Mullikenスピンベクトル (WavefuncType=GHF) が出力される。WavefuncType=RHF, UHF, ROHFでは、RunType=propと以下のオプションの指定によりその他のプロパティを計算できる。

isContact	接触密度、すなわち原子核の座標における電子密度およびスピン密度を計算する (default: false)
isGridProperty	グリッドルーチンを用いて原子の電荷、双極子モーメント、有効電場勾配テンソルを計算する (default: false) 原子の電荷はDFTおよびTDDFTのルーチンで用いる Beckeによる分割関数 と 共有結合半径の値 を用いて計算される
isPCC	接触密度やグリッドルーチンを用いたプロパティの計算にて 密度演算子のpicture-change変換 を考慮する (default: true) HamilType=IOTC, IOTC-IOTC, LUT-IOTCに対して有効

基底関数

RAQETIには様々な基底関数がデータベースとして搭載されている。それぞれの基底関数はbasisの下位ディレクトリとして存在する。必要に応じて基底関数を追加することも可能である。追加の手順は以下の通り。

1. 追加する基底関数のディレクトリをbasisの下位ディレクトリとして作成
(例: basis/MyDZP)
2. 作成したディレクトリに元素ごとに基底関数ファイルを作成(例: basis/MyDZP/H)
基底関数ファイルの形式は既存のものを参照のこと。
3. シンボリックリンクを作成することで、異なる基底関数名を利用することもできる。

初期状態で利用可能な基底関数は次の通り。

STO-nG基底関数系

	元素	備考
STO-2G	H-Ca, Sr	
STO-3G	H-Cd	
STO-6G	H-Zn	

Pople型基底関数系

	別名	元素	備考
3-21G		H-Cs	
3-21G(d)	3-21G*	Na-Ar	
3-21++G		H, Li-Ca	
3-21++G(d)	3-21++G*	Na-Ar	
4-31G		H-Ne, P-Cl	
6-31G		H-Zn	
6-31G(d)	6-31G*	H-Zn	
6-31G(d,p)	6-31G**	H-Zn	
6-31+G		H-Ar	
6-31+G(d)	6-31+G*	H-Ca	

6-31++G		H-Ca	
6-31++G(d)	6-31++G*	H-Ca	
6-31++G(d,p)	6-31++G**	H-Ar	
6-311G		H-Ca, Ga-Kr, I	
6-311G(d)	6-311G*	H-Ca, Ga-Kr, I	
6-311G(d,p)	6-311G**	H-Ca, Ga-Kr, I	
6-311G(2df,2pd)		H-Ne, K-Ca	
6-311+G(d)	6-311+G*	H-Ca	
6-311++G(d,p)	6-311++G**	H-Ca	
6-311++G(2d,2p)		H-Ca	
6-311++G(3df,3pd)		H-Ar	

Sapporo基底関数系

	元素	備考
Sapporo-DZP	H-Xe	
Sapporo-DZP+d	H-Xe	
Sapporo-DZP-2012	H-Xe	
Sapporo-DZP-2012+d	H-Xe	
Sapporo-TZP	H-Xe	
Sapporo-TZP+d	H-Xe	
Sapporo-TZP-2012	H-Xe	
Sapporo-TZP-2012+d	H-Xe	
Sapporo-QZP	H-Xe	
Sapporo-QZP+d	H-Xe	
Sapporo-QZP-2012	H-Xe	
Sapporo-QZP-2012+d	H-Xe	
Sapporo-DKH3-DZP	K-Xe	相対論計算向け

Sapporo-DKH3-DZP+d	K-Xe	相対論計算向け
Sapporo-DKH3-DZP-2012	K-Rn	相対論計算向け
Sapporo-DKH3-DZP-2012+d	K-Rn	相対論計算向け
Sapporo-DKH3-TZP	K-Xe	相対論計算向け
Sapporo-DKH3-TZP+d	K-Xe	相対論計算向け
Sapporo-DKH3-TZP-2012	K-Rn	相対論計算向け
Sapporo-DKH3-TZP-2012+d	K-Rn	相対論計算向け
Sapporo-DKH3-QZP	K-Xe	相対論計算向け
Sapporo-DKH3-QZP+d	K-Xe	相対論計算向け
Sapporo-DKH3-QZP-2012	K-Rn	相対論計算向け
Sapporo-DKH3-QZP-2012+d	K-Rn	相対論計算向け

[correlation-consistent](#)基底関数系

	元素	備考
cc-pVDZ	H-Ar, Ca-Kr	
cc-pVTZ	H-Ar, Ca-Kr	
cc-pVQZ	H-Ar, Ca-Kr	
cc-pV5Z	H-Ar, Ca-Kr	
cc-pV6Z	H-He, B-Ne, Al-Ar	
cc-pVDZ-DK	H-He, B-Ne, Al-Ar, Sc-Kr	相対論計算向け
cc-pVTZ-DK	H-He, B-Ne, Al-Ar, Sc-Kr	相対論計算向け
cc-pVQZ-DK	H-He, B-Ne, Al-Ar, Sc-Kr	相対論計算向け
cc-pV5Z-DK	H-He, B-Ne, Al-Ar, Sc-Kr	相対論計算向け
cc-pCVDZ	H-He, B-Ar, Ca	
cc-pCVTZ	H-He, B-Ar, Ca	
cc-pCVQZ	H-He, B-Ar, Ca	
cc-pCV5Z	H-He, B-Ne	

cc-pwCVDZ	H-He, B-Ne, Al-Ar	
cc-pwCVTZ	H-He, B-Ne, Al-Ar, Sc-Zn	
cc-pwCVQZ	H-He, B-Ne, Al-Ar, Sc-Zn	
cc-pwCV5Z	H-He, B-Ne, Al-Ar, Sc-Zn	
cc-pwCVTZ-DK	B-Ne, Al-Ar, Sc-Zn	相対論計算向け
cc-pwCVQZ-DK	B-Ne, Al-Ar, Sc-Zn	相対論計算向け
cc-pwCV5Z-DK	B-Ne, Al-Ar, Sc-Zn	相対論計算向け
cc-pV(D+d)Z	Al-Ar	
cc-pV(T+d)Z	Al-Ar	
cc-pV(Q+d)Z	Al-Ar	
cc-pV(5+d)Z	Al-Ar	
cc-pV(6+d)Z	Al-Ar	
aug-cc-pVDZ	H-Ar, Sc-Kr	
aug-cc-pVTZ	H-Ar, Sc-Kr	
aug-cc-pVQZ	H-Ar, Sc-Kr	
aug-cc-pV5Z	H-He, B-Be, Al-Ar, Sc-Kr	
aug-cc-pV6Z	H-He, B-Ne, Al-Ar	
aug-cc-pVDZ-DK	H-He, B-Ne, Al-Ar, Sc-Kr	相対論計算向け
aug-cc-pVTZ-DK	H-He, B-Ne, Al-Ar, Sc-Kr	相対論計算向け
aug-cc-pVQZ-DK	H-He, B-Ne, Al-Ar, Sc-Kr	相対論計算向け
aug-cc-pV5Z-DK	H-He, B-Ne, Al-Ar, Sc-Kr	相対論計算向け
aug-cc-pCVDZ	H-Ar	
aug-cc-pCVTZ	H-Ar	
aug-cc-pCVQZ	H-Ar	
aug-cc-pCV5Z	H-He, B-Ne, Al-Ar	
aug-cc-pV(D+d)Z	Al-Ar	

aug-cc-pV(T+d)Z	Al-Ar	
aug-cc-pV(Q+d)Z	Al-Ar	
aug-cc-pV(5+d)Z	Al-Ar	
aug-cc-pV(6+d)Z	Al-Ar	
cc-pVQZdenfit	H, B-F, Al-Cl	
aug-pV7Z	H, C-F, S	
aug-cc-pCVTZ-CTOCD-uc	H, C-F	
aug-cc-pVTZ-J	H, C-F, S	

polarization-consistent基底関数系

	元素	備考
pc-0	H-Ca, Ga-Kr	一般縮約
pc-1	H-Kr	一般縮約
pc-2	H-Kr	一般縮約
pc-3	H-Kr	一般縮約
pc-4	H-Kr	一般縮約
pcseg-0	H-Kr	
pcseg-1	H-Kr	
pcseg-2	H-Kr	
pcseg-3	H-Kr	
pcseg-4	H-Kr	

その他

	元素	備考
ANO-RCC	H-Cm	一般縮約、相対論計算向け
DKH3minimal	H-Lr	一般縮約、相対論計算向け
SARC-DKH	La-Rn, Ac-Lr	相対論計算向け

Sadlej-pol	H-Ca, Cu-Sr, Ag-Ba, Au-Fr	分極率計算向け
Sadlej-pol-DK	H-Ca, Cu-Sr, Ag-Ba, Pt-Fr	相対論計算向け 分極率計算向け
UGBS	H-Th, Pu-Am, Cf-Lr	汎用基底関数
WTBS	He-Rn	

原子核用基底関数系

	元素	備考
N1G-VD97	H-Rn	VisscherとDyallのパラメータ によるGauss関数モデル Nucleus=finiteで使用