

Felhasználói kézikönyv

1. Bevezetés

A BrianQC egy fejlett ab initio kvantumkémiai szoftver, amely felgyorsít minden olyan számítást, amely Coulomb vagy kicserélődési integrálokat használ Gaussz bázisfüggvényekkel, valamint azok első analitikus deriváltját (beleértve az HF-SCF, DFT, SCF geometria optimalizációt, DFT geometria optimalizációt, Molekuláris Mechanikát, stb.). A BrianQC nagy molekulák szimulálásához van optimalizálva, és tesztelve volt 40.000 kartéziánus bázisfüggvényre, miközben teljesen támogatja az s, p, d, f és g típusú pályákat. A BrianQC kompatibilis az NVIDIA Kepler, Maxwell, Pascal, Volta, Turing és Ampere architektúráival, és dupla pontossággal adja a számítási eredményeket.

Két mód van, hogy a BrianQC szoftvert használjuk:

1. **Egy host szoftver által:** a BrianQC potenciálisan képes együttműködni több kvantumkémiai szoftvercsomaggal, jelenleg be van integrálva a Q-Chembe és interfészt képez a PSI4-hez, így a felhasználók könnyedén kipróbálhatják a nyújtott GPU-gyorsítást a jelenlegi munkafolyamataikban. Ez azt jelenti, hogy csak minimális módosítások (például parancssori argumentum vagy környezeti változó) szükségesek a GPU-val történő számításhoz a BrianQC-val. Jelenleg a következő host szoftvercsomagokat támogatja:
 - a. Q-Chem 6.0.2 + BrianQC v 1.3.1
 - b. Q-Chem 6.0, 6.0.1 + BrianQC v 1.3
 - c. Q-Chem 5.4.1, 5.4.2 + BrianQC v1.2.1
 - d. Q-Chem 5.4 + BrianQC v 1.2
 - e. PSI4 1.4 + BrianQC vs 1.2 , 1.2.1
 - f. Q-Chem 5.3 + BrianQC v 1.1
 - g. Q-Chem 5.2.2 + BrianQC v 1.0
 - h. Q-Chem 5.2.0 , 5.2.1 + BrianQC v 0.9
 - i. Q-Chem 5.1.2 + BrianQC v 0.8
 - j. Q-Chem 5.1.1 + BrianQC v 0.7
 - k. Q-Chem 5.0 + BrianQC v 0.5

Ezek közül a host programok közül néhány már nincs támogatva, Kérjük, részletekért érdeklődjön a support@brianqc.com e-mail címen. Ha a BrianQC-t szeretné használni egy adott szoftverrel, kérjük, tekintse meg a kézikönyv későbbi részeit. Ha korábbi verzióját használja a BrianQC-nek, kérjük, tekintse meg a megfelelő kézikönyvet. Felhívjuk figyelmét, hogy nemcsak a BrianQC-hez, hanem a konkrét host szoftverhez is szükség lehet licencre.

2. **BrianQC közvetlenül SDK-ként** lett tervezve, így önállóan is működik, mint egy szoftverfejlesztési csomag, amelyet különféle kvantumkémiai szimulációs szoftverek építésére lehet használni. Ez a módszer főként fejlesztőknek szól, akik hatékony szimulációs programokat szeretnének létrehozni vagy meglévő szoftverüket kibővíteni GPU-gyorsított számításokkal. Ez a kézikönyv főként az első módszerrel foglalkozik, azaz a host szoftveren keresztüli futtatással. A BrianQC használatával kapcsolatos további utasításokért, mint SDK-t, kérjük, tekintse meg az API-dokumentációt a `.../<brianqc_install_dir>/docs/` mappában.

2. Használati előfeltételek

2.1 Szoftveres előfeltételek

A BrianQC-nek a következő szoftverfüggőségei vannak:

- NVIDIA driver CUDA támogatással (libcuda.so.1), legalább 460.91 verzió vagy újabb Bizonyos Ubuntu verziók alatt az alapértelmezett NVIDIA driver csomag (nvidia-current-...) egy régebbi CUDA verziót tartalmaz, amely nem kompatibilis a BrianQC-vel. Ehelyett töltsé le és telepítse a kompatibilis meghajtót a NVIDIA oldaláról. A régi CUDA meghajtóverzióval való BrianQC használata rendszer instabilitást okozhat.

2.2 Rendszerkonfiguráció

Asztali számítógépeken soha ne használja ugyanazt a GPU-t mind a kijelzőhöz, mind a BrianQC számításokhoz, mert ez a kijelző befagyhat. Az újabb Linux rendszerekben az Xorg X szerver automatikusan inicializálja magát az összes GPU-n és egy kernel időkorlátot aktivál, hogy biztosítsa a kijelző folyamatos reagálását. Ez zavarhatja a hosszabb BrianQC GPU-számításokat, de megfelelően konfigurálva az X szervert csökkenthető ezeknek a konfliktusoknak az esélye.

A leggyakoribb felhasználási eset az, hogy a BIOS alapértelmezett GPU-t használják a megjelenítéshez, és a BrianQC csak a másik GPU-t használja. Ebben az esetben az X szervert konfigurálhatjuk úgy, hogy figyelmen kívül hagyja az összes GPU-t, kivéve a BIOS alapértelmezettet. Ehhez hozzon létre egy `noautogpu.conf` fájlt a `/etc/X11/xorg.conf.d/` könyvtárban az alábbi tartalommal:

```
Section "ServerFlags"
Option "AutoAddGPU" "off"
EndSection
```

Egy másik lehetséges megoldás a problémára néhány esetben az, hogy hozzáadja az Option "Interactive" "off" sort az xorg.conf konfigurációs fájl "Screen" szakaszához, például:

```
Section "Screen"
Identifier
  "Screen0"
Device
  "Device2"
Monitor
  "Monitor0"
DefaultDepth
  24
Option
  "Interactive" "off"
SubSection
  "Display"
Depth
  24
EndSubSection
EndSection
```

Mindig konzultáljon az Nvidia meghajtó X konfigurációs szakaszával annak érdekében, hogy biztosan a kívánt hatás érje el. Fontos megjegyezni, hogy a BrianQC-t továbbra is konfigurálni kell, hogy figyelmen kívül hagyja a kijelző GPU-t; részletekért tekintse meg a "BrianQC használata" című részt.

2.3 Támogatott GPUk

A telepítés során megjelenik a jelenleg támogatott GPU-k listája (számítási képesség: 6.0, 6.1, 7.0, 7.5, 8.0, 8.6). Emellett az installer képes felismerni a rendszerben található GPU-kat, és érzékeli azokat, amelyek kompatibilisek a BrianQC-vel. A BrianQC legalább 4 GB GPU-memóriát igényel, azonban 8 GB vagy annál nagyobb mennyiség ajánlott a méretgazdaságosságú rendszerek esetében. A BrianQC 1.2.1 az utolsó verzió, amely támogatja a K80 és M60 GPU-kat. A jövőbeli BrianQC kiadások nem lesznek kompatibilisek a Kepler vagy Maxwell architektúrával.

3. BrianQC telepítése és eltávolítása

3.1 BrianQC telepítése Q-Chem-mel

A BrianQC telepítő teljesen integrált a Q-Chem telepítővel. A Q-Chem telepítőben válassza ki a platformjának megfelelő és "GPU-támogatással" címkézett opciót. Folytassa a Q-Chem telepítővel a normál eljárást a telepítési összegzésig. A BrianQC telepítő automatikusan elindul,

és ellenőrzi a rendszert a kompatibilis GPU-k szempontjából. Kövesse a BrianQC telepítő utasításait. A BrianQC telepítésének elvégzéséhez és egy alapvető teszt végrehajtásához kövesse az alábbi folyamatot. Ha hiba lép fel, tekintse át a kézikönyv többi részét a hibaelhárításhoz.

A BrianQC telepítésének folyamata a Q-Chem számára a következő áttekintést nyújtja:

1. Győződjön meg arról, hogy telepítve van a támogatott NVIDIA meghajtó (legalább 460.91 vagy újabb verzió).
2. Győződjön meg arról, hogy nincs futó számítás a gép GPU-jain.
3. Győződjön meg arról, hogy rendelkezik a Q-Chem telepítővel.
4. Válassza ki a platformjához illő Q-Chem bináris opciót, amelynek címkéje "GPU-támogatással".
5. A BrianQC telepítő automatikusan fut a Q-Chem telepítés végén. Kövesse az alábbi utasításokat.
6. A BrianQC telepítő automatikusan érzékeli, hogy a Q-Chem telepítéből fut, és beállítja a Q-Chem konfigurációját a BrianQC támogatásához.
7. Futtasson egy GPU-támogatott számítást az `-gpu` parancssori argumentum hozzáadásával, például `qchem -nt 8 -gpu input.in` egy nyolcmagos CPU-n.

A BrianQC telepítő interaktív program, amely kérdéseket tesz fel a környezet beállításához. A BrianQC a Q-Chem telepítési könyvtárába települ a `brianqc_qchem` mappába. A BrianQC telepítési folyamat áttekintése:

1. Lekérdezi a célszámítógépet a kompatibilis GPU-k tekintetében, és megkérdezi, melyekhez töltsön le kernel adatbázisokat.
2. Letölti és telepíti a BrianQC-t és a kiválasztott GPU kernel adatbázisokat.
3. Felhasználói adatokat kér, elküldi azokat a szerverünkre, és letölt egy próbaváltozat licencet, ha alkalmazható. Kérjük, itt adjon meg érvényes adatokat, hogy megfelelő licencet tudjunk generálni Önnek.
4. Automatikus e-mailt küld, amely megerősíti a telepítést.
5. Másolja a próbaváltozat licencet a `.../<brianqc_install_dir>/license.json` fájlba. Kérjük, ne változtassa meg a fájlnevet.

3.2 BrianQC telepítése Psi4-hez

A BrianQC használatához a PSI4-ben először a BrianQC-t mint egy SDK-t kell telepíteni, majd le kell fordítani a felhasználói komponenseket. A részletes utasításokért tekintse meg a "BrianQC telepítése SDK-ként" és a "Felhasználó által fordított komponensek" című részt.

Miután sikeresen telepítette a BrianQC SDK-t, a PSI4-t forrásból kell fordítani a BrianQC engedélyezésével. A részletes utasításokért tekintse meg a PSI4 kézikönyv "Interface to the BrianQC GPU module by the BrianQC team" című részét; az alábbiakban pedig egy rövid összefoglalást talál.

Amikor a PSI4-et CMake segítségével fordítja, állítsa be az "ENABLE_BrianQC" CMake változót 1-re, és állítsa be a "BrianQC_DIR" CMake változót a BrianQC komponensek útvonalára (általában a <brianqc_install_path>/build), majd fordítsa a PSI4-et a megszokott módon.

3.3 BrianQC telepítése SDK-ként

A BrianQC SDK-ként történő telepítéséhez a 'BRIANQC_SDK_INSTALL' környezeti változónak be kell állítva lennie 1-re. Ez a telepítési típus főként fejlesztők számára van tervezve. Az installáló indítása kissé eltérő attól függően, hogy melyik installáló típust használja:

Alapértelmezett (online) installáló: Egyszerűen töltsse le és futtassa a 1_3_brianqc_installer.bin fájlt, majd kövesse az utasításokat. Kérjük, vegye figyelembe, hogy a fájlnak rendelkeznie kell futtatási engedéllyel Linuxon, mielőtt futtatná.

Offline installáló: Töltsse le és csomagolja ki a 1_3_brianqc_offline_installer.tar.gz archívumot, majd futtassa a tartalmazott brianqc_offline_installer.bin fájlt. Kérjük, vegye figyelembe, hogy az archívum kicsomagolt tartalmának azonos könyvtárban kell lennie az installáló működéséhez.

A BrianQC telepítő egy interaktív program, amely kérdéseket tesz fel a környezet beállításához. Ha automatizált telepítést szeretne végrehajtani, tekintse meg az "Automatizált telepítés" részt.

A BrianQC telepítési folyamatának áttekintése:

1. Megkérdezi a felhasználót az installálási könyvtárról.
2. Lekérdezi a célszámítógépet a kompatibilis GPU-k tekintetében, és megkérdezi, melyikhez töltsön le kernel adatbázisokat.
3. Letölti és telepíti a BrianQC-t és a kiválasztott GPU kernel adatbázisokat.
4. Felhasználói adatokat kér, elküldi azokat a szerverünkre, és letölt egy próbaváltozat licencet, ha alkalmazható. Kérjük, itt adjon meg érvényes adatokat, hogy megfelelő licencet tudjunk generálni Önnek.
5. Automatikus e-mailt küld, amely megerősíti a telepítést.
6. Másolja a próbaváltozat licencet a .../<brianqc_install_dir>/license.json fájlba. Kérjük, ne változtassa meg a fájlnevet.
7. Felfedezés vagy kérdés a támogatott host szoftverekről és azok telepítési útvonalairól, majd automatikusan konfigurálja őket.

3.3.1 A felhasználó által fordított komponensek fordítása

A BrianQC SDK tartalmaz olyan komponenseket, amelyeket helyben kell építeni. Részletes utasítások találhatóak a README fájlban az SDK telepítési könyvtárban; az alábbiakban pedig egy rövid összefoglalást talál:

1. Hozzon létre egy build könyvtárat, hogy tisztán tartsa a forrást.

```
cd <brianqc_install_path>

mkdir build

cd build
```

2. CMake segítségével konfigurálja a projektet és hozzon létre makefile-okat. A következő parancsot futtassa:

```
cmake ..
```

2. Építse fel a példa programokat és minta programokat:

```
make
```

3. Tesztelje a telepítést egy kis számítás indításával. Győződjön meg róla, hogy beállította a 'BRIANQC_SDK_INSTALL' környezeti változót a <brianqc_install_path> értékre!

```
export BRIANQC_INSTALL_PATH=<brianqc_install_path>
bin/sample_hf_and_dft \
--molecule ../share/qc_molecules/cis-decalin.raw \
--basis ../share/basis_sets/cc-pvdz
```

3.4 Felügyelet nélküli telepítés

Lehetőség van a BrianQC automatikus telepítésére anélkül, hogy bármilyen kézi felhasználói interakcióra lenne szükség. Ehhez egy JSON konfigurációs fájlt kell megadni a telepítőnek, amely leírja a telepítő által szükséges beállításokat. Egy példa JSON konfigurációs fájl generálható a következő paranccsal:

```
.../<installer_path> --generate-unattended-json
```

Ez létrehoz egy `brianqc_unattended_install_example.json` nevű fájlt a lehetséges beállításokkal.

Alapértelmezetten a fájl tartalma a következő:

```
{
  "installDir": "~/brianqc",
  "createInstallDir": "Y",
  "forceInstall": "N",
  "doubleCheckForceInstall": "N",
  "fullName": "",
  "institute": "",
  "emailAddress": "",
  "defaultKerneldb": "",
  "haveQChem": "N",
  "QChemDir": "",
  "addEnvVarToBashrc": "Y"
}
```

Beállítások és jelentésük:

installDir: A könyvtár, amelyben a BrianQC telepítve lesz.

createInstallDir: Megadja, hogy létre kell-e hozni a telepítési könyvtárat, ha még nem létezik. Lehetőségek: "Y" (igen) vagy "N" (nem).

forceInstall: Megadja, hogy kényszerített telepítést kell-e végrehajtani az adott könyvtárba, ha már tartalmaz fájlokat. Lehetőségek: "Y" (igen) vagy "N" (nem).

doubleCheckForceInstall: A kényszerített telepítés dupla ellenőrzését kell elvégezni. Lehetőségek: "Y" (igen) vagy "N" (nem).

fullName: A BrianQC licenchez tartozó felhasználó teljes neve.

institute: A BrianQC licenchez tartozó intézmény.

emailAddress: A BrianQC licenchez tartozó e-mail cím.

defaultKernelDb: Megadja, melyik kernel adatbázist kell letölteni a telepítés során. Ha üres karakterláncra van állítva, automatikusan észleli és letölti a megfelelőt a számítógép GPU hardverének alapján.

haveQChem: Megadja, hogy telepítve van-e a számítógépen támogatott és működőképes Q-Chem verzió.

QChemDir: A Q-Chem telepítési könyvtára. A konfigurációs fájlja automatikusan frissítésre kerül a BrianQC támogatásához.

A haveQChem jelzőnek igaznak kell lennie, hogy érvényesüljön.

addEnvVarToBashrc: Megadja, hogy hozzá kell-e adni a BRIANQC_INSTALL_PATH környezeti változót a felhasználó .bashrc fájljához.

Kérjük, vegye figyelembe, hogy érvényes név, intézmény és e-mail cím szükséges a megfelelő licenc létrehozásához. Az automatikus telepítés elvégzéséhez hozzon létre egy JSON konfigurációs fájlt, vagy bővítse a példát, majd indítsa újra a BrianQC telepítőt a következő módon:

```
.../<installer_path> --unattended-json <unattended install JSON path>
```

3.5 Eltávolítás

Ha el szeretné távolítani a BrianQC telepítését, akkor törölje a telepítési könyvtárat. Ha a BRIANQC_INSTALL_PATH környezeti változó beállítása konfigurációs fájlba került (pl. qcenv.sh a Q-Chem esetében vagy a .bashrc fájlba Linux esetén), akkor a megfelelő sorokat el kell távolítani.

4. BrianQC konfigurálása

Normál telepítés során a BrianQC automatikusan konfigurálja magát, és nem igényel további beavatkozást a felhasználótól. Azonban ha a hardver vagy szoftver környezet megváltozik, lehet, hogy újra kell konfigurálni vagy frissíteni kell a telepítést.

Ehhez két módszer áll rendelkezésre:

A Q-Chem vagy a BrianQC telepítő használata a szoftver újratelepítéséhez. A telepítő utasításainak követése során a konfiguráció frissítésre kerül a jelenlegi állapothoz igazítva.

Emellett az telepítő frissíti a BrianQC-t a telepítő fő- és alverziójához tartozó legújabb javított verzióra. Például a v1.0 telepítő frissíti a v1.0.0 verziót v1.0.1-re, de nem v1.1.0-ra.

A konfigurációs fájl manuális szerkesztése az "A konfigurációs fájl" részben található utasítások alapján. Ez lehetővé teszi a nagyobb szabadságot a beállítások elvégzéséhez a kívánt módon, ami hasznos lehet egy komplex konfigurációban, ahol több számító node van.

4.1 Konfigurációs fájl

A szoftver önmagát konfigurálja a telepítés folyamata során, így ha nincs probléma, további konfigurációra nincs szükség. Ez a rész információt tartalmaz a szoftver újra konfigurálásáról, ha telepítési probléma vagy változások lépnek fel a hardver vagy szoftver környezetben. Minden konfigurációs változó tárolva van a `.../<brianqc_install_dir>/config.json` fájlban. A BrianQC konfigurációs fájlja egy szabványos JSON fájl, amely tárolja a modulhoz szükséges és opcionális konfigurációs paramétereket. Az alábbiakban található a BrianQC konfigurációhoz használt legfelső szintű JSON tulajdonságok leírásai.

`brianRootDir` JSON string, amely az abszolút elérési útvonalat tartalmazza a BrianQC telepítéséhez. Az aktuális verzióban mindig `.../<brianqc_install_dir>/` kell lennie.

`logLevels` JSON objektum, amely szabályozza a BrianQC modul részletességét. Részletekért lásd lentebb.

`kernelDBs` JSON tömb, amely karakterláncokat tartalmaz az integrátor kernel adatbázisok abszolút elérési útvonalairól, amelyeket a szoftver használ. Különböző kernel adatbázisok megadása hasznos, ha a számítógépen különböző GPU-k vannak, amelyeket használni kell.

`DFTDBs` JSON tömb, amely karakterláncokat tartalmazza a Density Functional Theory kernel adatbázisok abszolút elérési útvonalait, amelyeket a szoftver használ. Hasonlóan az integrátor kernel adatbázisokhoz, többet is meg lehet adni a különböző GPU-k támogatásához.

`MMDBs` JSON tömb, amely karakterláncokat tartalmazza a Molecular Mechanics kernel adatbázisok abszolút elérési útvonalait, amelyeket a szoftver használ. Hasonlóan az integrátor és DFT kernel adatbázisokhoz, többet is meg lehet adni a különböző GPU-k támogatásához.

`GPUNameFilter` JSON string, amely szabályozza, hogy melyik GPU-kat próbálja lefoglalni a BrianQC. Részletekért lásd lentebb. `nodes` JSON objektum, amelyet lehet használni a specifikus GPU-k letiltásához specifikus `,node`-okban. Részletekért lásd lentebb.

`scratchDir` JSON string, amely megadja a Scratch könyvtárhoz vezető elérési útvonalat. Jelenleg csak a DIIS előzmények tárolására használatos. Felülírható a `BRIANQC_SCRATCH_DIR` környezeti változóval. Hasznos nagy rendszerek szimulálásakor, amikor a DIIS előzmények nagyok.

4.1.1 A logLevels tulajdonság

A logLevels egy JSON objektum, amely rendelkezik a következő tulajdonságokkal: TRACE2, TRACE1, DEBUG2, DEBUG1, DEBUG, TIMING2, TIMING1, INFO, WARNING, DEVMARNING. Minden tulajdonság értéke lehet true vagy false, amely kikapcsolja vagy engedélyezi a megfelelő típusú naplőüzeneteket. Normál körülmények között az alapértelmezett beállítások elegendőek; a másik naplőszintek hasznosak lehetnek hibajelentés küldésekor.

4.1.2 A GPUNameFilter tulajdonság

A GPUNameFilter egy JSON string. Ha meg van adva, akkor csak azok a GPU-k kerülnek felhasználásra a BrianQC által, amelyek nevében megtalálható ez a részsstring. Ez lehetővé teszi bizonyos GPU-k szelektív letiltását bizonyos használati esetekben:

Példa 1: Egy NVIDIA 1080 Ti GPU-t használunk számíthatáshoz és egy másik NVIDIA 970 GPU-t használunk rendereléshez:

- Ebben az esetben a BrianQC-t arra kell utasítani, hogy csak a 1080 Ti kártyát használja, hogy ne zavarja a renderelést. Például ezt el lehet érni azzal, hogy "1080" -t adunk meg GPUNameFilter-ként, ami kizárja a 970 kártyát, még akkor is, ha egyébként rendelkezésre állnak kernelek hozzá.

Példa 2: Egy NVIDIA 1080 Ti GPU-t használunk számíthatáshoz és egy másik NVIDIA 1080 Ti GPU-t használunk rendereléshez:

- Ebben az esetben a GPU-kat csak a PCIe buszazonosítójuk alapján lehet megkülönböztetni. Az NVIDIA nvidia-smi eszköze felsorolja a gépben található GPU-k listáját (teljes PCIe buszazonosítóval), és megadja, hogy melyik kártya van kiosztva az X ablakkezelő rendszernek. Ha például a 0. GPU PCIe buszazonosítója "00000000:01:00.0", a 1. GPU-é pedig "00000000:83:00.0", és az Xorg a 1. GPU-n fut, akkor a GPUNameFilter-t "01:00.0"-ra kell állítani, hogy csak az 0. GPU legyen engedélyezve. Fontos megjegyezni, hogy az NVIDIA és a BrianQC formátuma kissé eltér a PCIe buszazonosító tekintetében (a vezető nullák száma eltérő lehet), ezért csak az első kettőspont utáni részt kell használni.

Példa 3: Három NVIDIA 1080 Ti GPU-t használunk számíthatáshoz és egy másik NVIDIA 1080 Ti GPU-t használunk rendereléshez:

- Ebben az esetben a GPUNameFilter tulajdonságot nem lehet használni, mivel valószínűleg nincs olyan karakterlánc, amely megtalálható lenne a számítási GPU-k teljes nevében vagy PCIe buszazonosítójában, de nem a renderelő GPU-kban. Ehelyett az Nvidia-SMI eszköz használható a számítási kártyák PCIe buszazonosítóinak meghatározásához, és a nodes tulajdonságot kell használni a megengedett GPU-k meghatározásához.

Példa 4: Négy NVIDIA 1080 Ti GPU-t használunk számításhoz, és nincs renderelő GPU (csak számítási node, amelyhez nincs csatlakoztatva monitor, és nem fut X szerver):

- Ha az összes rendelkezésre álló kártyát használhatja a BrianQC, akkor a GPUNameFilter-t nem kell megadni, vagy üres stringként lehet beállítani.

Példa 5: Egy NVIDIA 1080 Ti GPU-t használunk számításhoz, és egy másik NVIDIA 630 GPU-t használunk rendereléshez:

- Mivel a BrianQC jelenleg nem támogatja a GTX 630-at, a GPUNameFilter-t nem kell megadni (vagy üres stringként lehet beállítani), mivel a BrianQC úgyis figyelmen kívül fogja hagyni a renderelő GPU-t.

4.1.3 nodes tulajdonság

A "nodes" tulajdonság egy JSON objektum, amelynek minden tulajdonsága egy node MAC-címe kell legyen. A tulajdonsághoz tartozó érték önmagában egy JSON objektum, amely az alábbi tulajdonságokkal rendelkezik:

- GPUs: Ez egy JSON tömb, amelynek minden eleme egy GPU neve, amelyet a `.../<brianqc_install_dir>/bin/list_compute_devices` segédprogram jelent.
- maxAllocableGPUs: Csak az első ennyi GPU van engedélyezve a listából.

Ha egy node-nak nincs megfelelő bejegyzése (vagy a nodes tulajdonság nem létezik), akkor az összes GPU engedélyezett. Ha van bejegyzés a node-hoz, akkor csak az adott GPU-k vannak engedélyezve a megfelelő GPU-k tömbében. Ha van bejegyzés a node-hoz, és van maxAllocableGPUs tulajdonsága, akkor csak az első ennyi GPU van engedélyezve. Vegye figyelembe, hogy ha a node-nak van bejegyzése, de a GPU-k listája üres (vagy nincs GPU-tulajdonság jelen), akkor az összes GPU tiltva lesz az adott ,node-ra. Tehát ha szeretné, hogy a BrianQC minden GPU-t használhasson a számítási ,node-okon, akkor teljesen el lehet kerülni ezt a szakaszt.

4.1.4 példa konfigurációs fájl

```
{
  "brianRootDir": "/home/simulation/brianqc/",
  "logLevels": {
    "DEBUG": true
  },
  "kernelDBs": [
    "/home/simulation/brianqc/integrators/kernel.db"
  ],
  "DFTDBs": [
    "/home/simulation/brianqc/integrators/dft.db"
  ],
}
```

```

"GPUNameFilter": "CUDA",
"nodes": {
"ab:cd:ef:00:11:23": {
"maxAllocableGPUs": 1,
"GPUs": [
"CUDA GeForce GT 970#0000:01:00.0",
"CUDA GeForce GTX 1080#0000:08:00.0",
"CUDA GeForce GTX 1080#0000:09:00.0"
]
},
"ab:cd:ef:00:11:24": {
"GPUs": [
"CUDA GeForce GT 970#0000:01:00.0",
"CUDA GeForce GTX 1080#0000:08:00.0",
"CUDA GeForce GTX 1080#0000:09:00.0"
]
},
"ab:cd:ef:00:11:25": {
}
}
}

```

Ez a konfiguráció azt fogja utasítani a BrianQC-t, hogy:

- Engedélyezze a DEBUG-szintű naplóbejegyzéseket futás közben.
- Töltse be a kernel.db integrátor kernel adatbázist az alapértelmezett helyről.
- Töltse be a dft.db DFT kernel adatbázist az alapértelmezett helyről.
- Engedélyezze a GTX 970 GPU-t a "...:23" csomópontban.
- Engedélyezze az összes felsorolt GPU-t a "...:24" csomópontban, de tiltsa le az összes többit.
- Tiltsa le az összes GPU-t a "...:25" csomópontban.
- Engedélyezze az összes GPU-t a többi csomópontban.

4.2 A licenckulcs fájl

A BrianQC-hez tartozó licenckulcs fájlt a `.../<brianqc_install_dir>/license.json` helyre kell másolni. Ez a fájl olvasható mezőket tartalmaz, például a lejárat dátumot, és kriptográfiailag alá van írva. Normál körülmények között nem szabad módosítani, mivel ez érvénytelenítheti az aláírást, és használhatatlanná teheti a telepítést. Emellett a licenc másolása és beillesztése is megszakíthatja az érvényességét. Ha probléma merül fel a licenccel kapcsolatban, kérjük, lépjen kapcsolatba velünk a support@brianqc.com e-mail címen, és segítünk a probléma megoldásában.

4.3 A kernel adatbázis fájlok

A kernel adatbázisok a `.../<brianqc_install_dir>/integrators/` mappában találhatóak, és az elérési útvonaluk a konfigurációs fájlban van tárolva. Az alapértelmezett elhelyezésük általában elegendő a legtöbb felhasználási esethez, de lásd a "Általános használati megjegyzések" című részt az NFS-en keresztüli kernel adatbázisok olvasásáról. Ha az adatbázisokat bármilyen okból áthelyezik, frissíteni kell az elérési útvonalukat a konfigurációs fájlban; részletekért lásd a "A konfigurációs fájl" című részt.

5. Felhasználás BrianQC-vel

5.1 Áttekintés

A BrianQC nem önálló szoftver alapesetben; az indítás mindig alapesetben egy host/házigazda szoftver futtatásával történik, mint a bemeneti fájl (geometria + paraméterek) szokásos módjára, és bizonyos parancssori argumentumok vagy környezeti változók beállításával a GPU számítás engedélyezése érdekében. Fontos megjegyezni, hogy csak bizonyos teljesítményigényes számítások lesznek végrehajtva a GPU-n; a többi számítást a házigazda szoftver végzi a megszokott módon. A BrianQC képességeinek teszteléséhez néhány minta példa programot tartalmaz az SDK telepítővel; kérjük, tekintse meg az "BrianQC telepítése SDK-ként" és az "SDK minta- és példaprogramok" fejezeteket.

5.2 Általános használati megjegyzések

- A BrianQC jelentős adatmennyiséget olvas a kernel adatbázisokból a `.../<brianqc_install_dir>/integrators/` könyvtárban, ami hatékonytalan lehet NFS-en keresztüli olvasás esetén, és negatívan befolyásolhatja a teljesítményt. A kernel adatbázisok áthelyezésének részleteiért lásd a "A kernel adatbázis fájlok" részt.
- Szimmetrikus molekulák esetén az eredmények csak akkor helyesek, ha a c1 szimmetria érvényes a számításra. A bemeneti fájl beállításainak részleteiért tekintse meg a házigazda szoftver specifikus részeket.
- A BrianQC számításai során néhány szokatlan kernel futtatására kerül sor a GPU-n, amelyek végrehajtása hosszú ideig tarthat. Asztali rendszerek esetén a Linux kernel a kijelző kezelése miatt a hosszú ideig tartó kernel futtatása a GPU-n, amely kezeli a kijelzőt, rendszerinstabilitást okozhat. Ennek elkerülése érdekében győződjön meg arról, hogy megtiltja a BrianQC-nak a kijelzőt kezelő GPU használatát. A konfigurációs fájl és a környezeti változók fejezeteiben található két módszerrel teheti ezt meg.
- Jelenleg csak a CUDA-t támogatjuk a GPU-k eléréséhez.
- A BrianQC működni kell a klasztereken anélkül is, hogy a vezérlő csomópontnak lenne GPU-ja (feltéve, hogy legalább egy szolgaközponti csomópont rendelkezik). Azonban a telepítő figyelmeztetést adhat ki, ha nem találhatóak GPU-k a futtatott csomóponton. Ez nem hiba, és biztonságosan figyelmen kívül hagyható.

- Egy hiba merült fel a NVIDIA fordítóban, és az érintett integrátor kernel fájlokat eltávolítottuk; azonban lehet, hogy más kernel fájlokat is érint. A hibát jelentettük a NVIDIA-nak; azonban tartalma és állapota nem nyilvános a NVIDIA irányelvei szerint. A hiba, ha előfordul, súlyos pontossági hibákat okozhat. Ha találkozik ezzel a hibával, kérjük, küldje el nekünk a bemeneti és kimeneti fájlt, hogy kiegészíthessük a hibajelentésünket a NVIDIA számára.
- A BrianQC általában a saját műveleteihez szálak számát maximalizáló teljesítményt állít be, de megosztott rendszerek esetén lehet, hogy korlátozni kell a szálak számát. Amikor a BRIANQC_LIMIT_THREADS környezeti változó be van állítva, a BrianQC korlátozza a szálak számát bizonyos műveletekhez (például BLAS/LAPACK hívásokhoz) a házigazda program szálainak számára. Jelenleg ez csak akkor működik alapértelmezetten, amikor a BrianQC-t a Q-Chem használja; más házigazda programok esetén a szálak számának korlátozásához állítsa be a BRIANQC_LIMIT_THREADS változót 1-re, és emulálja a Q-Chem viselkedését a QCTHREADS környezeti változó kézi beállításával a kívánt szálak számára. A szálak számának korlátozása teljesítményromlást okozhat.

5.2.1 Két- és négy-GPU-s kártyák kezelése

A BrianQC különleges módon kezeli a két- és négy-GPU-s kártyákat. Amikor beállítja a használandó GPU-k számát, a két-GPU-s kártyákat két eszközként számolja. Azonban a licenzelés szempontjából egy kártyaként tekintenek rájuk. Tehát például, ha egy olyan gépen szeretné számolni, amelyen két teljes K80 kártya van, akkor a BrianQC-t két kártyára kell licenzelni, de négy GPU-t kell paraméterezni a használathoz.

5.3 Több GPU kezelése

Alapértelmezés szerint a BrianQC minden elérhető GPU-t használ a végrehajtás során. Ennek eredményeként, ha nem ad meg a fent említett környezeti változók közül egyet sem, a BrianQC az összes engedélyezett eszközt használja a rendszerben, amelyre a licenz vonatkozik. Három módja van annak, hogy ellenőrizze a használt GPU-k számát:

- Minden számításhoz a GPUName tulajdonsággal a konfigurációs fájlban.
- A CUDA_VISIBLE_DEVICES környezeti változóval, további információkért látogasson el erre az oldalra.
- A BRIANQC_GPU_COUNT környezeti változóval, ezzel csak a GPU-k számát adja meg, nem pedig a konkrét eszközöket (a BRIANQC_GPU_COUNT=2 lehetővé teszi a BrianQC számára, hogy két GPU-t használjon).

Például, ha korlátozni szeretné a BrianQC-t két GPU-ra Linuxon a Q-Chem használatakor:

```
$ BRIANQC_GPU_COUNT=2 qchem -gpu <útvonal a bemeneti
fájlhoz>/input.in
```

vagy alternatívaként:

```
$ export BRIANQC_GPU_COUNT=2
$ qchem -gpu <útvonal a bemeneti fájlhoz>/input.in
```

Hasonlóan a Windows platformon:

```
set BRIANQC_GPU_COUNT=2 qchem -gpu <útvonal a bemeneti
fájlhoz>/input.in
```

Ha konkrét eszközöket szeretne kiválasztani, akkor használja a CUDA_VISIBLE_DEVICES környezeti változókat (ez meghatározza, hogy az első két GPU-n fusson a rendszerben):

```
$ CUDA_VISIBLE_DEVICES=0,1 qchem -gpu <útvonal a bemeneti
fájlhoz>/input.in
```

Hasonlóan működnek ezek a környezeti változók más házigazda szoftverekkel vagy az SDK-mintákkal (például sample_hf_and_df).

5.4 Támogatott számítások

A BrianQC jelenleg több számítási lépést képes elvégezni, többek között zárt héjú (RHF) és nyílt héjú (UHF) rendszerekre:

- Egy- és két-elektron integrálok és azok első deriváltjainak kiszámítása
- Hartree-Fock Coulomb és pontos csere mátrixok kiszámítása;
- Hosszú és rövid hatótávolságú részlet kiszámítása a pontos csere mátrixokból;
- DFT csere-korreációs mátrix és energia kiszámítása különböző funkcionálokhoz (lásd: "Támogatott DFT funkcionálok");
- Az összes DIIS konvergencia gyorsítási módszer lépésének végrehajtása;
- A Hartree-Fock energia molekuláris gradiensenek összes tagjának kiszámítása;
- A CPHF egyenletek Fock-szerű tagjainak kiszámítása;
- A Molekuláris Mechanika energia és annak gradiense különböző erőterrel (lásd: "Támogatott MM erőter");
- Hatékonyan kiszámítja a lineáris algebrai számításokat igénylő lépéseket, például a Fock-mátrix diagonalizálását és a Fock-sűrűség kommutátorának kiszámítását. Ez lehetővé teszi a házigazda program számára, hogy felgyorsítsa bármely olyan feladatot, amely legalább az egyik felsorolt számítást igényli.

A BrianQC pontosságát és gyorsítását több feladattípusban tesztelték:

- HF energia számítása
- DFT energia számítása
- MM energia számítása
- HF geometria optimalizáció
- DFT geometria optimalizáció
- HF rezgési analízis

- DFT rezgési analízis
- MM analitikus gradiens számítása

Megjegyzés, hogy a fent említett munkák bizonyos részeit továbbra is a házigazda program végzi a CPU-n. Ezért a teljesítmény továbbra is függ a CPU képességeitől és a házigazda program beállításaitól, például a szálak számától. Emellett, bármely más módszer, amely a felsorolt számítási lépéseket használja, lehetőséget ad a GPU használatára, de ez nem lett tesztelve, ezért csak a kifejezetten felsorolt munkákhoz ajánlott a BrianQC engedélyezése.

A GPU-számítások teljesítménye eltér a CPU-implementációktól. Gyakorlatban ez azt jelenti, hogy van egy alsó határ a molekula méretére és a bázisfüggvények számára, amely alatt nincs előny a számítások áthelyezése a grafikus kártyára. Ezenkívül kis rendszerek esetén a CPU és a GPU közötti adatátviteli költség meghaladhatja a GPU gyorsítás előnyeit. Ezért javasolt, hogy minden egyes számítás előtt benchmarkot készítsen és értékelje ki a teljesítménynövekedést a BrianQC engedélyezése előtt.

A GPU-számítások teljesítményjellemzői eltérőek a CPU-implementációktól. Gyakorlatban ez azt jelenti, hogy van egy alsó határ a molekula méretére és a bázisfüggvények számára, amely alatt nincs előny a számítások áthelyezése a grafikus kártyára. A tipikus CPU-GPU kombinációk esetén ez az alsó határ körülbelül 500 bázisfüggvény, tehát csak olyan bemenetekhez használja a BrianQC-t, amelyek ennél nagyobbak. Részletes benchmark adatokat (beleértve bizonyos hardverkonfigurációk számára az egyensúlyi rendszerméreteket) megtalálhatja a BrianQC honlapján található Benchmarkok részben.

A BrianQC-t tesztelték olyan munkaállomásokon, amelyek a következő rendszer memóriakonfigurációval rendelkeznek:

- 16 GB RAM akár 8000 bázisfüggvényig
- 32 GB RAM akár 13000 bázisfüggvényig
- 128 GB RAM akár 20000 bázisfüggvényig
- 256 GB RAM akár 40000 bázisfüggvényig

5.5 Támogatott MM erőtér

A BrianQC támogatja a következő Molekuláris Mechanikai (MM) erőtéreket:

- MMFF94 (Merck Molekuláris Erőtér) - Hivatkozások:

Thomas A. Halgren, J. Comput. Chem. 17, 490-519 (1996)
(10.1002/(SICI)1096-987X(199604)17:5/6<490::AID-JCC1>3.0.CO;2-P)

Thomas A. Halgren, J. Comput. Chem. 17, 520-552 (1996)
(10.1002/(SICI)1096-987X(199604)17:5/6<520::AID-JCC2>3.0.CO;2-W)

Thomas A. Halgren, J. Comput. Chem. 17, 553-586 (1996)
(10.1002/(SICI)1096-987X(199604)17:5/6<553::AID-JCC3>3.0.CO;2-T)

Thomas A. Halgren, J. Comput. Chem. 17, 587-615 (1996)
(10.1002/(SICI)1096-987X(199604)17:5/6<587::AID-JCC4>3.0.CO;2-Q)

Thomas A. Halgren, J. Comput. Chem. 17, 616-641 (1996)
(10.1002/(SICI)1096-987X(199604)17:5/6<616::AID-JCC5>3.0.CO;2-X)

- UFF (Universal Force Field) - Hivatkozások:

A. K. Rappe, C. J. Casewit, K. S. Colwell, W. A. Goddard III és W. M. Skiff, J. Am. Chem. Soc. 114 (25), 10024-10035 (1992) (10.1021/ja00051a040)

5.6 További segédprogramok

A BrianQC tartalmaz néhány további segédprogramot. Normál körülmények között ritkán lesz szükség ezek közül bármelyik használatára.

`list_compute_devices` - Felsorolja az összes olyan eszközt a csomópontban, amelyekhez hozzáférhetünk a CUDA segítségével, általában beleértve magát a CPU-t is. Hasznos a GPU teljes azonosítójának megszerzéséhez, amikor létrehoz egy csomópontleíró a konfigurációban.

`check_compute_devices` - A számítási eszközök felsorolása mellett alapvető tesztet is végrehajt azok működésének ellenőrzésére.

6 BrianQC használata a Q-Chemmel

A BrianQC használatához szükséges egy megfelelő Q-Chem verzió (6.0 a BrianQC 1.3-hoz), valamint egy Q-Chem licenz minden olyan csomópontban, amelyet a számításokhoz használni fogunk.

6.1 A bemeneti fájl

Amikor a BrianQC engedélyezve van, a Q-Chem a megszokott módon működik bármilyen szabványos bemeneti fájlal. Azonban vannak olyan mezők a bemeneti fájlban, amelyek hatással lehetnek az eredmény pontosságára.

- A Q-Chem és a BrianQC eltérő numerikus jellemzői miatt a pontosság nem optimális, hacsak a Q-Chem nem kap utasítást az egyelektronos integrálok nagy pontossággal történő számítására. Ezt megtehetjük a `S2THRESH` kulcsszó beállításával a bemeneti fájlban legalább 12-re, vagy még inkább 16-ra. (Mivel az egyelektronos integrálok számítása nagyon kevés időt vesz igénybe, ez nem befolyásolja a teljesítményt.)
- A BrianQC jelenleg csak a `c1` molekuláris szimmetriacsoporttal támogatott számításokat támogatja. Ha a bemeneti geometriának vannak szimmetriái, akkor a Q-Chem-nek úgy kell konfigurálva lennie, hogy ne használja ki ezeket a szimmetriákat. Ezt a `SYM_IGNORE` kulcsszó `True`-ra és a `SYMMETRY` kulcsszó `False`-ra állításával tehetjük meg. Ha a `c1` szimmetria nincs kényszerítve, az eredmények helytelenek lehetnek.

6.2 G függvényeket tartalmazó bázisfüggvények használata

A magas pontosságú G függvényeket tartalmazó bázisfüggvények (pl. def2-qzvp vagy cc-pvqz) esetén a következő paramétereket kell beállítani a bemeneti fájl \$rem részében:

- Állítsa be a S2THRESH értékét legalább 12-re, vagy még inkább 16-ra, ahogy a "A bemeneti fájl" részben is említették. Ez minimális, 1-2% -os lassulással járhat a számítás sebességére.
- Állítsa be a THRESH értékét legalább 9-re, mivel az alapértelmezett értékkel (8) a Q-Chem nem konvergálhat.

6.3 A Q-Chem által támogatott számítások

A Q-Chem nagyon sok területen alkalmazható. A következő területeken képes számításokat végezni:

- Alapállapotú energia meghatározása átlagtér módszerekkel (SCF), mint a Hartree Fock (HF) és a Sűrűségfüggvény elmélet (DFT)
 - A DFT esetén LDA, GGA, mGGA, hybrid funkcionálok, távolság szeparált funkcionálok, diszperzió korrigált funkcionálok, nem lokális diszperzió számítás, dupla hybrid funkcionálok. A teljes lista elérhető az alábbi linkről navigálva: <https://manual.q-chem.com/6.0/Ch5.S3.SS1.html>
- Hullámfüggvény alapú korrelációs módszerek:
 - Perturbatív módszerek, mint az: MP2, RI-MP2, L-MP2, MP3, MP4 A teljes lista és részletes leírás innen navigálva érhető el: <https://manual.q-chem.com/6.0/Ch6.S3.SS1.html>
 - Iteratív módszerek: CCD, CCD(2), CCSD, CC2, CCSD(T), CCSD(2), aktív tér módszerek. Teljes lista és részletes leírás itt: <https://manual.q-chem.com/6.0/Ch6.S10.SS1.html>
- Nyílt héjú és gerjesztett állapotú számítások:
 - Egy elektron hullámfüggvény alapú módszerek: egyszer gerjesztett konfigurációs interakció (CIS), bővebben: https://manual.q-chem.com/6.0/subsec_CIS.html
 - Időfüggő DFT (TDDFT), bővebben: https://manual.q-chem.com/6.0/sect_tddftintro.html
- A potenciális energia felület feltérképezése: kritikus pontok és dinamika:
 - Egyensúlyi geometria és átmeneti állapotok: <https://manual.q-chem.com/6.0/Ch9.S1.SS1.html>
 - Geometria optimalás: https://manual.q-chem.com/6.0/topic_ts_Job-Control.html
 - Reakciókinetika, fázisátalakulás: <https://manual.q-chem.com/6.0/Ch9.S7.SS1.html>
 - Ab initio molekula dinamika: <https://manual.q-chem.com/6.0/Ch9.S10.SS1.html>
- Molekuláris tulajdonságok és analízis:
 - Hullámfüggvény analízis, természetes kötési pályák (NBO): <https://manual.q-chem.com/6.0/Ch10.S2.SS1.html>
 - Harmonikus Vibráció analízis: <https://manual.q-chem.com/6.0/Ch10.S9.SS1.html>

- Nem harmonikus Vibráció analízis:
<https://manual.q-chem.com/6.0/Ch10.S10.SS1.html>
- Mágneses perturbáció (NMR és kémiai eltolódások):
<https://manual.q-chem.com/6.0/Ch10.S12.SS1.html>
- Egyéb tulajdonságok (alkalmazható nanoanyagok érzékenységeinek becslése szennyezőkre, anyagok mechanikai tulajdonságainak becslésére):
<https://manual.q-chem.com/6.0/Ch11.S1.SS1.html>

7 A BrianQC használata PSI4-gyel

A BrianQC használatához PSI4-gyel, a BrianQC-t SDK módban kell telepíteni, és a PSI4-et BrianQC támogatással kell lefordítani. Lásd: BrianQC telepítése PSI4-hez.

7.1 BrianQC engedélyezése PSI4-ben

Két módszer létezik a BrianQC engedélyezésére PSI4-ben egy adott számításhoz:

- Állítsa a `brianqc_enable` opciót a PSI4 bemeneti fájlban True értékre.
- Állítsa a "BRIANQC_ENABLE" környezeti változót 1 értékre.

A BrianQC működése a felhasználó számára transzparens; minden belső számítás vagy a PSI4 által végrehajtott (ha a BrianQC nem támogatja), vagy átvállalja a BrianQC, és azonos eredményt ad a szükséges pontosságon belül. Különösen fontos megjegyezni, hogy a BrianQC tiszteletben tartja a PSI4 szokásos pontossági paramétereit, például az `ints_tolerance`-t és az `e_convergence`-t.

A BrianQC gyorsíthatja a belső számítások számos részét, ideértve a Fock és a gradiens számítását is. Ezért a BrianQC felgyorsítja azokat a számításokat, amelyek ezeket a kifejezéseket tartalmazzák, például:

- HF és DFT egy pont energia számítások
- HF és DFT geometria optimalizációk
- HF és DFT frekvenciaelemzések.

Fontos megjegyezni, hogy nem minden számítás minden eleme kezelhető a BrianQC-val, így a tényleges gyorsulás a számítás részleteitől függ.

7.2 Szükséges és ajánlott beállítások

Annak érdekében, hogy a számítás működjön a BrianQC-vel, a következő beállításokat kell megadni a BrianQC engedélyezésekor:

- A BrianQC jelenleg csak a C1 molekuláris szimmetria pontcsoportot kezeli. Tehát, ha a molekulának vannak szimmetriái (amelyeket a PSI4 alapértelmezetten észlelne), a bemeneti geometriában szerepelnie kell a "symmetry c1" sorának, hogy a PSI4 figyelmen kívül hagyja a szimmetriát.

A csúcsteljesítmény elérése érdekében az alábbi beállítások ajánlottak a BrianQC engedélyezésekor:

- Alapértelmezetten a PSI4 sűrűségi illesztést használ az SCF-hez, amit a BrianQC még nem kezel. Annak biztosítása érdekében, hogy ne végezzenek nem-BrianQC-gyorsított iterációkat, kapcsolja ki a preiterációkat a `df_scf_guess` értékének beállításával `False`-ra.
- Alapértelmezetten a PSI4 lemezalapú Fock-építést használ, de a BrianQC jelenleg csak közvetlen Fock-építést gyorsít. Annak biztosítása érdekében, hogy a Fock-építést a BrianQC gyorsítsa, állítsa be a `scf_type` értékét "direct" értékre.

8 BrianQC használata SDK-ként

A BrianQC SDK részletes képességeihez, elérhető funkcionalitásához és tanácsokhoz a házigazda program írásához a BrianQC API dokumentációját érdemes konzultálni.

8.1 SDK minta- és példaprogramok

A BrianQC SDK több nagyobb, összetettebb, paraméterezhető bemutató programot ("minták") és több kisebb, egyszerűbb, paraméter nélküli bemutató programot ("példák") tartalmaz.

8.1.1 Minta programok

Az SDK-val szállított mintaprogramoknak két függősége van:

- Boost (1.62-vel tesztelve)
- Eigen (3.1.2-vel tesztelve)

Ajánlott a Boost és az Eigen csomagolt verziójának használata a kiválasztott disztribúcióban. Ha ez nem lehetséges, akkor kérjük, vegye figyelembe, hogy az Eigen egy fejléc-alapú lineáris algebrai könyvtár. A Boost kézi építéséhez tekintse meg a Boost honlapját: <https://www.boost.org>. A megadott mintákhoz CMake projekt fájlok is rendelkezésre állnak. A forráskódok a `.../<brianqc_telepitési_könyvtar>/samples` könyvtárban találhatók.

Az alábbi mintaprogramokat biztosítjuk:

`sample_hf_and_dft` Képes Hartree-Fock vagy Sűrűség Funkcionál Elmélet szintű energiaszámításra. A következő programbeállításokkal rendelkezik:

`--molecule` Bemeneti molekulageometria, az `.xyz` vagy `.raw` fájl elérési útja. A `.raw` formátum leírásához lásd lentebb.

`--basis` NWChem formátumú bázishalmaz teljes elérési útvonala.

`--basis-type` A bázis alapértelmezett kartézis/szférás beállításának felülírása; csak 'szférás' vagy 'kartézis' lehet.

--unrestricted Ha igaz, akkor UHF-t használ, egyébként RHF-t használ. Fontos megjegyezni, hogy jelenleg a mintaprogram nem támogatja a ROHF-t.

--initial-guess Kezdeti kitalálás használata; csak 'core', 'diagonal' vagy 'atomic' lehet.

--overlap-threshold A bázis ortogonalizálásához használt átfedési sajátérték küszöbértéke. Az alapértelmezett 6, ami azt jelenti, hogy a tényleges küszöbérték 10-6.

--integral-threshold Integrál számítás küszöbértéke. Az alapértelmezett 8, ami azt jelenti, hogy a tényleges érték 10-8.

--differential-density Differenciális sűrűség használata. Kérjük, vegye figyelembe, hogy a differenciális sűrűség a stabilitás és a teljesítmény közötti egyensúlyt jelenti!

--differential-density-reset Ha nem nulla, akkor a differenciális sűrűséget (és a DIIS-t, ha engedélyezve van) ennyi iteráció után visszaállítja.

--diis DIIS engedélyezése.

--diis-algorithm A használandó DIIS algoritmus; csak 'basic' vagy 'stabilized' lehet.

--diis-start-iter DIIS kezdő iteráció. --diis-history-size DIIS előzmények mérete.

--diis-commutator-method A DIIS kommutátor módszer, amelyet használjon; csak 'basic', 'projected', 'corrected' vagy 'cholesky' lehet.

--diis-reset-if-failed Ha igaz, akkor visszaállítja a DIIS előzményeit, ha a DIIS extrapoláció sikertelen.

--scf-convergence-condition SCF konvergencia feltétele; csak 'energy-and-density-difference' vagy 'commutator-norm' lehet.

--scf-convergence-threshold SCF konvergencia küszöbértéke. Az alapértelmezett érték 5, ami azt jelenti, hogy a tényleges küszöbérték 10-5.

--scf-max-iter SCF maximális iterációk száma. Az alapértelmezett érték 50.

--dft-functional DFT funkcionál neve; 'HF' letiltja a DFT-t. Az alapértelmezett érték 'HF'. Lásd a "Támogatott DFT funkcionálok" listát a támogatott DFT funkcionálokhoz.

--dft-grid DFT rács neve, pl. 'SG-0', az alapértelmezett érték 'EML(50,110)'. Lásd lentebb a támogatott rácsokat.

sample_hf_geom_opt Képes Hartree-Fock szintű geometriai optimalizáció számítására. Az alábbi programbeállítások állnak rendelkezésre a sample_hf_and_dft opcióihoz képest:

--opt-coords Geometriai optimalizáció koordináta rendszere; vagy 'kartézus', vagy 'z-mátrix' lehet, alapértelmezett értéke 'z-mátrix'.

--opt-method Geometriai optimalizáció módszere; vagy 'gradient', vagy 'konjugált gradiens', vagy 'newton', vagy 'sajátvektor-követés' lehet, alapértelmezett értéke 'sajátvektor-követés'.

--opt-max-iter Geometriai optimalizáció maximális iterációszáma, alapértelmezett értéke 50.

--opt-max-step Geometriai optimalizáció maximális lépésköze, alapértelmezett értéke 0,3.

--opt-gradient-threshold Geometriai optimalizáció gradiens küszöbértéke, alapértelmezett értéke 3×10^{-4} .

--opt-displacement-threshold Geometriai optimalizáció elmozdulási küszöbértéke, alapértelmezett értéke $1,2 \times 10^{-6}$.

--opt-energy-threshold Geometriai optimalizáció energia küszöbértéke, alapértelmezett értéke 10^{-6} . A geometriai optimalizáció konvergensenek tekinthető, ha a rendelkezésre álló három feltétel közül (gradiens, elmozdulás vagy energia) a gradiens az összegzési küszöbérték alatt van, és az elmozdulás vagy az energia különbsége az összegzési küszöbérték alatt van. Kérjük, vegye figyelembe, hogy a Sűrűségfüggvény-elmélet szintű geometriai optimalizáció még nem támogatott a jelenlegi verzióban.

sample_mm Képes Molekuláris Mechanika szintű energia és az energia térbeli kartézián gradiense számítására.

--molecule Bemeneti molekulageometria, az .sdf fájl elérési útja.

--forcefield Használandó erőter; vagy 'mmff94', vagy 'uff' lehet. sample_oniom Képes ONIOM szintű energia számítására. Az alábbi programbeállítások állnak rendelkezésre a sample_hf_and_dft és a sample_mm opcióihoz képest:

--model-atom-indices Az ONIOM modellező rendszer atomjainak nulla alapú indexei.

8.1.2 A DFT rács meghatározása a mintaprogramokhoz

A --dft-grid argumentum által elfogadott értékek és jelentésük a következők: SG-x Standard rácsok SG-0, SG-1, SG-2 és SG-3. Fontos megjegyezni, hogy a standard rácsok nem minden atomra vannak meghatározva.

- EML(x,y) Euler-Maclaurin radiális rács x ponttal, Lebedev anguláris rács y ponttal.
- MKL(x,y) Mura-Knowles radiális rács x ponttal, Lebedev anguláris rács y ponttal.
- MEL(x,y) MultiExp radiális rács x ponttal, Lebedev anguláris rács y ponttal.
- DEL(x,y) Double Exponential radiális rács x ponttal, Lebedev anguláris rács y ponttal.

TAL(x,y) Treutler-Ahlich radiális rács x ponttal, Lebedev anguláris rács y ponttal. Kérjük, vegye figyelembe, hogy míg az összes radiális rács meghatározott minden lehetséges méretre,

a Lebedev anguláris rács csak bizonyos méretekre van meghatározva. A érvényes értékek listáját megtalálhatja a szakirodalomban vagy a brianCOMGenerateDFTAngularAtomicGrid bejegyzésben az API dokumentációban.

8.1.3 A DFT funkcionál meghatározása a mintaprogramokhoz

A mintaprogramok --dft-functional argumentuma vagy egyetlen DFT funkcionál nevét, vagy funkcionálok lineáris kombinációját fogadja el. Az egyes BrianQC által támogatott funkcionálok nevét megtalálhatja a "DFT funkcionál azonosítók" című fejezetben az API dokumentációban. A mintaprogram által elfogadott nevek megegyeznek a makró nevekkel, a BRIAN_FUNCTIONAL_ előtag nélkül. A funkcionál nevek nem érzékenyek a kis- és nagybetűkre. Például a B3LYP csere-korreációs funkcionált a hgga_b3lyp_xc névvel lehet megadni a --dft-functional argumentumban. A "HF" nevű speciális funkcionál elérhető a Hartree-Fock pontos csere-korreáció megadására, ami le is tiltja a DFT számítást.

Funkcionálok lineáris kombinációjának átadásához a funkcionál neveket össze kell fűzni plusz (+) jelekkel, és opcionálisan minden funkcionál mögé elhelyezhetünk egy konstans szorzót, amit csillaggal (*) választunk el. Például, ha a B3LYP, 0,5-szeres PBE és 0,1-szeres PW összegét szeretnénk megadni, akkor az ehhez megfelelő karakterlánc a "hgga_b3lyp_xc+gga_pbe_x*0.5+lda_pw_c*0.1" lenne, ahol a B3LYP tag szorzója el lett hagyva, mivel az 1. Megjegyzendő, hogy a paraméter karakterláncnak nem szabad tartalmaznia szóközöket.

8.1.4 Molekulák átadása a mintaprogramoknak

A HF és DFT minták két molekulafájl-formátumot fogadnak el: a szabványos .xyz és a saját .raw formátumot. Az .raw fájl lényegében egy Q-Chem bemeneti fájl \$molecule szakasza; az első sor a molekula töltése, majd az elektronspin sokszorozása következik. A fennmaradó sorok a .xyz fájlban található azonos formátumban tartalmazzák az atomokat. Fontos megjegyezni, hogy jelenleg a töltés és az elektronspin sokszorozása csak egy .raw bemeneti fájl segítségével állítható be, és alapértelmezettként vannak beállítva, ha .xyz fájlt adunk át bemenetként.

8.1.5 Példaprogramok

Az alacsony szintű funkcionalitás implementálását bemutató kis példákat is biztosítunk a BrianQC-vel, például az alapokkörü halmazok kezelését, egy Fock-mátrix létrehozását, egy DFT rács inicializálását stb. Ezeknek a példáknak a forráskódjai megtalálhatók a .../<brianqc_install_dir>/examples könyvtárban. A legtöbb példaprogram egyszerű üzenetet nyomtat ki, ha sikeresen lefut; néhány pedig összehasonlítja az eredményeket egy referenciaértékkel, és jelzi a különbséget.

Alapvető API használat bemutatása

- example_multiple_init Megmutatja a BrianQC inicializálását, felszabadítását és újrainicializálását.
- example_basis Mutatja a molekula és az alapokkörü adatok beállítását.

HF számítások bemutatása

- `example_1e_build` Mutatja az egyelektronos integrálok számítását.
- `example_fock_build` Mutatja a Coulomb- és a pontos csere-mátrix számítását.
- `example_diagonalization` Mutatja a Fock-mátrix diagonalizálását. Kiírja az eredeti Fock-mátrix és a diagonalizáció eredményeként rekonstruált mátrix közötti különbséget.

DFT használatának bemutatása

- `example_dft_simple_functional` Mutatja egy DFT funkcionál beállítását.
- `example_dft_composite_functional` Mutatja egy DFT funkcionálok lineáris kombinációjának beállítását.
- `example_dft_grid` Mutatja a DFT rács beállítását.

HF gradiens számítások bemutatása

- `example_1e_gradient` Mutatja az egyelektronos hozzájárulást az energia gradienséhez történő számítását.
- `example_repulsion_gradient` Mutatja a két-elektronos hozzájárulást az energia gradienséhez történő számítását.

A támogatott funkcionálok listája

Ahol a BrianQC külön számíthatja a csere hozzájárulást, az a funkcionál nevének végén (X)-szel van jelölve. Ahol a BrianQC külön számíthatja a korrelációs hozzájárulást, az a funkcionál nevének végén (C)-vel van jelölve. Ahol a BrianQC együtt tudja számolni a kombinált csere-korrelációs hozzájárulást, az a funkcionál nevének végén (XC)-vel van jelölve.

- EXACT_EXCHANGE
- EXACT_EXCHANGE_LONG_RANGE
- EXACT_EXCHANGE_SHORT_RANGE
- GGA_AIRY_X

Constantin et al based on the Airy gas

References:

L. A. Constantin, A. Ruzsinszky, and J. P. Perdew, Phys. Rev. B 80, 035125 (2009)
(10.1103/PhysRevB.80.035125)

- GGA_AK13_X

Armiento & Kuemmel 2013

References:

R. Armiento and S. Kümmel, Phys. Rev. Lett. 111, 036402 (2013)
(10.1103/PhysRevLett.111.036402)

- GGA_AM05_C

Armiento & Mattsson 05

References:

R. Armiento and A. E. Mattsson, Phys. Rev. B 72, 085108 (2005)
(10.1103/PhysRevB.72.085108)

A. E. Mattsson, R. Armiento, J. Paier, G. Kresse, J. M. Wills, and T. R. Mattsson, J. Chem. Phys. 128, 084714 (2008) (10.1063/1.2835596)

• GGA_AM05_X

Armiento & Mattsson 05

References:

R. Armiento and A. E. Mattsson, Phys. Rev. B 72, 085108 (2005)
(10.1103/PhysRevB.72.085108)

A. E. Mattsson, R. Armiento, J. Paier, G. Kresse, J. M. Wills, and T. R. Mattsson, J. Chem. Phys. 128, 084714 (2008) (10.1063/1.2835596)

• GGA_APBE_C

mu fixed from the semiclassical neutral atom

References:

L. A. Constantin, E. Fabiano, S. Laricchia, and F. Della Sala, Phys. Rev. Lett. 106, 186406 (2011) (10.1103/PhysRevLett.106.186406)

• GGA_APBE_X

mu fixed from the semiclassical neutral atom

References:

L. A. Constantin, E. Fabiano, S. Laricchia, and F. Della Sala, Phys. Rev. Lett. 106, 186406 (2011) (10.1103/PhysRevLett.106.186406)

• GGA_B86_MGC_X

Becke 86 with modified gradient correction

References:

A. D. Becke, J. Chem. Phys. 84, 4524 (1986) (10.1063/1.450025)

A. D. Becke, J. Chem. Phys. 85, 7184 (1986) (10.1063/1.451353)

• GGA_B86_R_X

Revised Becke 86 with modified gradient correction

References:

I. Hamada, Phys. Rev. B 89, 121103 (2014) (10.1103/PhysRevB.89.121103)

A. D. Becke, J. Chem. Phys. 84, 4524 (1986) (10.1063/1.450025)

A. D. Becke, J. Chem. Phys. 85, 7184 (1986) (10.1063/1.451353)

• GGA_B86_X

Becke 86

References:

A. D. Becke, J. Chem. Phys. 84, 4524 (1986) (10.1063/1.450025)

• GGA_B88_X

Becke 88

References:

A. D. Becke, Phys. Rev. A 38, 3098 (1988) (10.1103/PhysRevA.38.3098)

• GGA_B88M_X

Becke 88 reoptimized to be used with tau1

References:

E. Proynov, H. Chermette, and D. R. Salahub, J. Chem. Phys. 113, 10013 (2000)
(10.1063/1.1321309)

- GGA_B97_D3_XC

Becke 97-D

References:

S. Grimme, J. Comput. Chem. 27, 1787 (2006) (10.1002/jcc.20495)

- GGA_B97_D_XC

Becke 97-D

References:

S. Grimme, J. Comput. Chem. 27, 1787 (2006) (10.1002/jcc.20495)

- GGA_B97_GGA1_XC

Becke 97 GGA-1

References:

A. J. Cohen and N. C. Handy, Chem. Phys. Lett. 316, 160 (2000)

(10.1016/S0009-2614(99)01273-

7)

- GGA_BAYESIAN_X

Bayesian best fit for the enhancement factor

References:

J. J. Mortensen, K. Kaasbjerg, S. L. Frederiksen, J. K. Nørskov, J. P. Sethna, and K. W. Jacobsen,

Phys. Rev. Lett. 95, 216401 (2005) (10.1103/PhysRevLett.95.216401)

- GGA_BCGP_C

Burke, Cancio, Gould, and Pittalis

References:

K. Burke, A. Cancio, T. Gould, and S. Pittalis, ArXiv e-prints (2014), arXiv:1409.4834 [cond-mat.mtrl-sci].

26

- GGA_BCGP_X

Burke, Cancio, Gould, and Pittalis

References:

K. Burke, A. Cancio, T. Gould, and S. Pittalis, ArXiv e-prints (2014), arXiv:1409.4834 [cond-mat.mtrl-sci].

- GGA_BEEFVDW_X

BEEF-vdW exchange

References:

J. Wellendorff, K. T. Lundgaard, A. Mohr, V. Petzold, D. D. Landis, J. K. Nørskov, T. Bligaard, and K. W. Jacobsen, Phys. Rev. B 85, 235149 (2012)

(10.1103/PhysRevB.85.235149)

- GGA_BEEFVDW_XC

BEEF-vdW exchange-correlation

References:

J. Wellendorff, K. T. Lundgaard, A. Mohr, V. Petzold, D. D. Landis, J. K. Nørskov, T. Bligaard, and K. W. Jacobsen, }Phys. Rev. B 85, 235149 (2012)
(10.1103/PhysRevB.85.235149)

• GGA_BLYP_XC

B88 exchange and LYP correlation

Functional components: GGA_B88_X + GGA_LYP_C

References:

A. D. Becke, Phys. Rev. A 38, 3098 (1988) (10.1103/PhysRevA.38.3098)

C. Lee, W. Yang, and R. G. Parr, Phys. Rev. B 37, 785 (1988) (10.1103/PhysRevB.37.785)

B. Miehlich, A. Savin, H. Stoll, and H. Preuss, Chem. Phys. Lett. 157, 200 (1989)

(10.1016/0009-

2614(89)87234-3)

• GGA_BMK_C

Boese-Martin for kinetics

References:

A. D. Boese and J. M. L. Martin, J. Chem. Phys. 121, 3405 (2004) (10.1063/1.1774975)

• GGA_BPCCAC_X

BPCCAC (GRAC for the energy)

References:

E. Brémond, D. Pilard, I. Ciofini, H. Chermette, C. Adamo, and P. Cortona, Theor. Chem. Acc. 131, 1184 (2012) (10.1007/s00214-012-1184-0)

• GGA_C09X_X

C09x to be used with the VdW of Rutgers-Chalmers

References:

V. R. Cooper, Phys. Rev. B 81, 161104 (2010) (10.1103/PhysRevB.81.161104)

• GGA_CAP_X

Correct Asymptotic Potential

References:

J. Carmona-Espíndola, J. L. Gázquez, A. Vela, and S. B. Trickey, J. Chem. Phys. 142, 054105 (2015), 10.1063/1.4906606 (10.1063/1.4906606)

• GGA_CHACHIYO_X

Chachiyo exchange

References:

T. Chachiyo and H. Chachiyo, }ArXiv e-prints (2017), arXiv:1706.01343 [cond-mat.mtrl-sci].

• GGA_CS1_C

A dynamical correlation functional

References:

27

N. C. Handy and A. J. Cohen, J. Chem. Phys. 116, 5411 (2002) (10.1063/1.1457432)

E. I. Proynov and A. J. Thakkar, Int. J. Quantum Chem. 106, 436 (2006) (10.1002/qua.20758)

• GGA_DK87_R1_X

dePristo & Kress 87 version R1

References:

A. E. DePristo and J. D. Kress, J. Chem. Phys. 86, 1425 (1987) (10.1063/1.452230)

• GGA_DK87_R2_X

dePristo & Kress 87 version R2

References:

A. E. DePristo and J. D. Kress, J. Chem. Phys. 86, 1425 (1987) (10.1063/1.452230)

• GGA_EB88_X

Non-empirical (excogitated) B88 functional of Becke and Elliott

References:

P. Elliott and K. Burke, Can. J. Chem. 87, 1485 (2009) (10.1139/V09-095)

• GGA_EDF1_XC

EDF1

References:

R. D. Adamson, P. M. W. Gill, and J. A. Pople, Chem. Phys. Lett. 284, 6 (1998) (10.1016/S0009-2614(97)01282-7)

• GGA_EV93_X

Engel and Vosko

References:

E. Engel and S. H. Vosko, Phys. Rev. B 47, 13164 (1993) (10.1103/PhysRevB.47.13164)

• GGA_FT97_A_X

Filatov & Thiel 97 (version A)

References:

M. Filatov and W. Thiel, Mol. Phys. 91, 847 (1997) (10.1080/002689797170950)

• GGA_FT97_B_X

Filatov & Thiel 97 (version B)

References:

M. Filatov and W. Thiel, Mol. Phys. 91, 847 (1997) (10.1080/002689797170950)

• GGA_FT97_C

Filatov & Thiel correlation

References:

M. Filatov and W. Thiel, Int. J. Quantum Chem. 62, 603 (1997)

(10.1002/(SICI)1097-461X(1997)62:6<603::AID-QUA4>3.0.CO;2-#)

M. Filatov and W. Thiel, Mol. Phys. 91, 847 (1997) (10.1080/002689797170950)

• GGA_G96_X

Gill 96

References:

P. M. W. Gill, Mol. Phys. 89, 433 (1996) (10.1080/002689796173813)

• GGA_GAM_X

Minnesota GAM exchange functional

References:

H. S. Yu, W. Zhang, P. Verma, X. He, and D. G. Truhlar, Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 12146

(2015) (10.1039/C5CP01425E)

28

- GGA_GAPC_C

GapC

References:

E. Fabiano, P. E. Trevisanutto, A. Terentjevs, and L. A. Constantin, J. Chem. Theory Comput. 10, 2016 (2014), pMID: 26580528 (10.1021/ct500073b)

- GGA_GAPLOC_C

Gaploc

References:

E. Fabiano, P. E. Trevisanutto, A. Terentjevs, and L. A. Constantin, J. Chem. Theory Comput. 10, 2016 (2014), pMID: 26580528 (10.1021/ct500073b)

- GGA_GG99_X

Gilbert and Gill 1999

References:

A. T. Gilbert and P. M. Gill, Chem. Phys. Lett. 312, 511 (1999) (10.1016/S0009-2614(99)00836-2)

- GGA_HCTH_120_XC

HCTH/120

References:

A. D. Boese, N. L. Doltsinis, N. C. Handy, and M. Sprik, J. Chem. Phys. 112, 1670 (2000) (10.1063/1.480732)

- GGA_HCTH_147_XC

HCTH/147

References:

A. D. Boese, N. L. Doltsinis, N. C. Handy, and M. Sprik, J. Chem. Phys. 112, 1670 (2000) (10.1063/1.480732)

- GGA_HCTH_407_XC

HCTH/407

References:

A. D. Boese and N. C. Handy, J. Chem. Phys. 114, 5497 (2001) (10.1063/1.1347371)

- GGA_HCTH_407P_XC

HCTH/407+

References:

A. D. Boese, A. Chandra, J. M. L. Martin, and D. Marx, J. Chem. Phys. 119, 5965 (2003) (10.1063/1.1599338)

- GGA_HCTH_93_XC

HCTH/93

References:

F. A. Hamprecht, A. J. Cohen, D. J. Tozer, and N. C. Handy, J. Chem. Phys. 109, 6264 (1998) (10.1063/1.477267)

- GGA_HCTH_A_C

HCTH-A

References:

F. A. Hamprecht, A. J. Cohen, D. J. Tozer, and N. C. Handy, J. Chem. Phys. 109, 6264 (1998)
(10.1063/1.477267)

• GGA_HCTH_A_X

HCTH-A

References:

F. A. Hamprecht, A. J. Cohen, D. J. Tozer, and N. C. Handy, J. Chem. Phys. 109, 6264 (1998)
(10.1063/1.477267)

29

• GGA_HCTH_P14_XC

HCTH $p=1/4$

References:

G. Menconi, P. J. Wilson, and D. J. Tozer, J. Chem. Phys. 114, 3958 (2001)
(10.1063/1.1342776)

• GGA_HCTH_P76_XC

HCTH $p=7/6$

References:

G. Menconi, P. J. Wilson, and D. J. Tozer, J. Chem. Phys. 114, 3958 (2001)
(10.1063/1.1342776)

• GGA_HERMAN_X

Herman Xalphabeta GGA

References:

F. Herman, J. P. V. Dyke, and I. B. Ortenburger, Phys. Rev. Lett. 22, 807 (1969) (10.1103/Phys-
RevLett.22.807)

F. Herman, I. B. Ortenburger, and J. P. V. Dyke, Int. J. Quantum Chem. 4, 827 (1969)
(10.1002/qua.560040746)

• GGA_HJS_B88_V2_X

HJS screened exchange B88 corrected version

References:

E. Weintraub, T. M. Henderson, and G. E. Scuseria, J. Chem. Theory Comput. 5, 754 (2009)
(10.1021/ct800530u)

• GGA_HJS_B88_X

HJS screened exchange B88 version

References:

T. M. Henderson, B. G. Janesko, and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 128, 194105 (2008)
(10.1063/1.2921797)

• GGA_HJS_B97X_X

HJS screened exchange B97x version

References:

T. M. Henderson, B. G. Janesko, and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 128, 194105 (2008)
(10.1063/1.2921797)

• GGA_HJS_PBE_SOL_X

HJS screened exchange PBE_SOL version

References:

T. M. Henderson, B. G. Janesko, and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 128, 194105 (2008) (10.1063/1.2921797)

- GGA_HJS_PBE_X

HJS screened exchange PBE version

References:

T. M. Henderson, B. G. Janesko, and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 128, 194105 (2008) (10.1063/1.2921797)

- GGA_HLE16_XC

high local exchange 2016

References:

P. Verma and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. Lett. 8, 380 (2017), pMID: 28033712 (10.1021/acs.jpcllett.6b02757)

- GGA_HTBS_X

Haas, Tran, Blaha, and Schwarz

References:

30

P. Haas, F. Tran, P. Blaha, and K. Schwarz, Phys. Rev. B 83, 205117 (2011) (10.1103/PhysRevB.83.205117)

- GGA_HYB_TAU_HCTH_C

correlation part of hyb-tau-hcth

References:

A. D. Boese and N. C. Handy, J. Chem. Phys. 116, 9559 (2002) (10.1063/1.1476309)

- GGA_ITYH_X

Short-range recipe for exchange GGA functionals

References:

H. Iikura, T. Tsuneda, T. Yanai, and K. Hirao, J. Chem. Phys. 115, 3540 (2001) (10.1063/1.1383587)

- GGA_KGG99_X

Gilbert and Gill 1999 (mixed)

References:

A. T. Gilbert and P. M. Gill, Chem. Phys. Lett. 312, 511 (1999) (10.1016/S0009-2614(99)00836-2)

- GGA_KT1_X

Exchange part of Keal and Tozer version 1

References:

T. W. Keal and D. J. Tozer, J. Chem. Phys. 119, 3015 (2003) (10.1063/1.1590634)

- GGA_KT1_XC

Keal and Tozer, version 1

References:

T. W. Keal and D. J. Tozer, J. Chem. Phys. 119, 3015 (2003) (10.1063/1.1590634)

- GGA_KT2_XC

Keal and Tozer, version 2

References:

T. W. Keal and D. J. Tozer, J. Chem. Phys. 119, 3015 (2003) (10.1063/1.1590634)

•GGA_LAG_X

Local Airy Gas

References:

L. Vitos, B. Johansson, J. Kollár, and H. L. Skriver, Phys. Rev. B 62, 10046 (2000)

(10.1103/Phys-

RevB.62.10046)

• GGA_LAMBDA_CH_N_X

lambda_CH(N) version of PBE

References:

M. M. Odashima, K. Capelle, and S. B. Trickey, J. Chem. Theory Comput. 5, 798 (2009)

(10.1021/ct8005634)

• GGA_LAMBDA_LO_N_X

lambda_LO(N) version of PBE

References:

M. M. Odashima, K. Capelle, and S. B. Trickey, J. Chem. Theory Comput. 5, 798 (2009)

(10.1021/ct8005634)

• GGA_LAMBDA_OC2_N_X

lambda_OC2(N) version of PBE

References:

M. M. Odashima, K. Capelle, and S. B. Trickey, J. Chem. Theory Comput. 5, 798 (2009)

(10.1021/ct8005634)

31

• GGA_LB_X

van Leeuwen & Baerends

References:

R. van Leeuwen and E. J. Baerends, Phys. Rev. A 49, 2421 (1994)

(10.1103/PhysRevA.49.2421)

• GGA_LBM_X

van Leeuwen & Baerends modified

References:

P. R. T. Schipper, O. V. Gritsenko, S. J. A. van Gisbergen, and E. J. Baerends, J. Chem. Phys.

112, 1344 (2000) (10.1063/1.480688)

• GGA_LG93_X

Lacks & Gordon 93

References:

D. J. Lacks and R. G. Gordon, Phys. Rev. A 47, 4681 (1993) (10.1103/PhysRevA.47.4681)

• GGA_LM_C

Langreth & Mehl

References:

D. C. Langreth and M. J. Mehl, Phys. Rev. Lett. 47, 446 (1981) (10.1103/PhysRevLett.47.446)

C. D. Hu and D. C. Langreth, Phys. Scr. 32, 391 (1985) (10.1088/0031-8949/32/4/024)

• GGA_LV_RPW86_X

Berland and Hyldgaard

References:

K. Berland and P. Hyldgaard, Phys. Rev. B 89, 035412 (2014) (10.1103/PhysRevB.89.035412)

• GGA_LYP_C

Lee, Yang & Parr

References:

C. Lee, W. Yang, and R. G. Parr, Phys. Rev. B 37, 785 (1988) (10.1103/PhysRevB.37.785)

B. Miehlich, A. Savin, H. Stoll, and H. Preuss, Chem. Phys. Lett. 157, 200 (1989)

(10.1016/0009-

2614(89)87234-3)

• GGA_MB88_X

Modified Becke 88 for proton transfer

References:

V. Tognetti and C. Adamo, J. Phys. Chem. A 113, 14415 (2009) (10.1021/jp903672e)

• GGA_MOHLYP2_XC

Functional for barrier heights

References:

J. Zheng, Y. Zhao, and D. G. Truhlar, J. Chem. Theory Comput. 5, 808 (2009)

(10.1021/ct800568m)

• GGA_MOHLYP_XC

Functional for organometallic chemistry

References:

N. E. Schultz, Y. Zhao, and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. A 109, 11127 (2005)

(10.1021/jp0539223)

• GGA_MPBE_X

Adamo & Barone modification to PBE

References:

C. Adamo and V. Barone, J. Chem. Phys. 116, 5933 (2002) (10.1063/1.1458927)

32

• GGA_MPW91_X

mPW91 of Adamo & Barone

References:

C. Adamo and V. Barone, J. Chem. Phys. 108, 664 (1998) (10.1063/1.475428)

• GGA_MPWLYP1W_XC

mPWLYP1w

References:

E. E. Dahlke and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. B 109, 15677 (2005) (10.1021/jp052436c)

• GGA_N12_C

Minnesota N12 functional

References:

R. Peverati and D. G. Truhlar, J. Chem. Theory Comput. 8, 2310 (2012) (10.1021/ct3002656)

• GGA_N12_SX_C

Minnesota N12-SX functional

References:

R. Peverati and D. G. Truhlar, Phys. Chem. Chem. Phys. 14, 16187 (2012)
(10.1039/C2CP42576A)

- GGA_N12_X

Minnesota N12 exchange functional

References:

R. Peverati and D. G. Truhlar, J. Chem. Theory Comput. 8, 2310 (2012) (10.1021/ct3002656)

- GGA_OBLYP_D_XC

oBLYP-D functional of Goerigk and Grimme

References:

L. Goerigk and S. Grimme, J. Chem. Theory Comput. 6, 107 (2010) (10.1021/ct900489g)

- GGA_OL2_X

Exchange form based on Ou-Yang and Levy v.2

References:

P. Fuentealba and O. Reyes, Chem. Phys. Lett. 232, 31 (1995)

(10.1016/0009-2614(94)01321-L)

H. Ou-Yang and M. Levy, Int. J. Quantum Chem. 40, 379 (1991) (10.1002/qua.560400309)

- GGA_OP_B88_C

one-parameter progressive functional (B88 version)

References:

T. Tsuneda, T. Suzumura, and K. Hirao, J. Chem. Phys. 110, 10664 (1999) (10.1063/1.479012)

- GGA_OP_G96_C

one-parameter progressive functional (G96 version)

References:

T. Tsuneda, T. Suzumura, and K. Hirao, J. Chem. Phys. 110, 10664 (1999) (10.1063/1.479012)

T. Tsuneda, T. Suzumura, and K. Hirao, J. Chem. Phys. 111, 5656 (1999) (10.1063/1.479954)

- GGA_OP_PBE_C

one-parameter progressive functional (PBE version)

References:

T. Tsuneda, T. Suzumura, and K. Hirao, J. Chem. Phys. 110, 10664 (1999) (10.1063/1.479012)

T. Tsuneda, T. Suzumura, and K. Hirao, J. Chem. Phys. 111, 5656 (1999) (10.1063/1.479954)

- GGA_OP_PW91_C

one-parameter progressive functional (PW91 version)

References:

33

T. Tsuneda, T. Suzumura, and K. Hirao, J. Chem. Phys. 110, 10664 (1999) (10.1063/1.479012)

T. Tsuneda, T. Suzumura, and K. Hirao, J. Chem. Phys. 111, 5656 (1999) (10.1063/1.479954)

- GGA_OP_XALPHA_C

one-parameter progressive functional (Xalpha version)

References:

T. Tsuneda, T. Suzumura, and K. Hirao, J. Chem. Phys. 110, 10664 (1999) (10.1063/1.479012)

T. Tsuneda, T. Suzumura, and K. Hirao, J. Chem. Phys. 111, 5656 (1999) (10.1063/1.479954)

- GGA_OPBE_D_XC

oPBE-D functional of Goerigk and Grimme

References:

L. Goerigk and S. Grimme, J. Chem. Theory Comput. 6, 107 (2010) (10.1021/ct900489g)

• GGA_OPTB88_VDW_X

opt-Becke 88 for vdW

References:

J. Klimeš, D. R. Bowler, and A. Michaelides, J. Phys.: Condens. Matter 22, 022201 (2010) (10.1088/0953-8984/22/2/022201)

• GGA_OPTC_C

Optimized correlation functional of Cohen and Handy

References:

A. J. Cohen and N. C. Handy, Mol. Phys. 99, 607 (2001) (10.1080/00268970010023435)

• GGA_OPTPBE_VDW_X

Reparametrized PBE for vdW

References:

J. Klimeš, D. R. Bowler, and A. Michaelides, J. Phys.: Condens. Matter 22, 022201 (2010) (10.1088/0953-8984/22/2/022201)

• GGA_OPTX_X

Handy & Cohen OPTX 01

References:

N. C. Handy and A. J. Cohen, Mol. Phys. 99, 403 (2001) (10.1080/00268970010018431)

• GGA_OPWLYP_D_XC

oPWLYP-D functional of Goerigk and Grimme

References:

L. Goerigk and S. Grimme, J. Chem. Theory Comput. 6, 107 (2010) (10.1021/ct900489g)

• GGA_P86_C

Perdew 86

References:

J. P. Perdew, Phys. Rev. B 33, 8822 (1986) (10.1103/PhysRevB.33.8822)

• GGA_PBE1W_XC

PBE1W

References:

E. E. Dahlke and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. B 109, 15677 (2005) (10.1021/jp052436c)

• GGA_PBE_C

Perdew, Burke & Ernzerhof

References:

J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996) (10.1103/PhysRevLett.77.3865)

J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 78, 1396 (1997) (10.1103/PhysRevLett.78.1396)

34

• GGA_PBE_JRGX_C

Reparametrized PBE by Pedroza, Silva & Capelle

References:

L. S. Pedroza, A. J. R. da Silva, and K. Capelle, Phys. Rev. B 79, 201106 (2009) (10.1103/Phys-

RevB.79.201106)

- GGA_PBE_JSJR_X

Reparametrized PBE by Pedroza, Silva & Capelle

References:

L. S. Pedroza, A. J. R. da Silva, and K. Capelle, Phys. Rev. B 79, 201106 (2009) (10.1103/PhysRevB.79.201106)

- GGA_PBE_MOL_C

Reparametrized PBE by del Campo, Gazquez, Trickey & Vela

References:

J. M. del Campo, J. L. Gázquez, S. B. Trickey, and A. Vela, J. Chem. Phys. 136, 104108 (2012) (10.1063/1.3691197)

- GGA_PBE_MOL_X

Reparametrized PBE by del Campo, Gazquez, Trickey & Vela

References:

J. M. del Campo, J. L. Gázquez, S. B. Trickey, and A. Vela, J. Chem. Phys. 136, 104108 (2012) (10.1063/1.3691197)

- GGA_PBE_R_X

Revised PBE from Zhang & Yang

References:

Y. Zhang and W. Yang, Phys. Rev. Lett. 80, 890 (1998) (10.1103/PhysRevLett.80.890)

- GGA_PBE_SOL_C

Perdew, Burke & Ernzerhof SOL

References:

J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, O. A. Vydrov, G. E. Scuseria, L. A. Constantin, X. Zhou, and K. Burke, Phys. Rev. Lett. 100, 136406 (2008) (10.1103/PhysRevLett.100.136406)

- GGA_PBE_SOL_X

Perdew, Burke & Ernzerhof SOL

References:

J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, O. A. Vydrov, G. E. Scuseria, L. A. Constantin, X. Zhou, and K. Burke, Phys. Rev. Lett. 100, 136406 (2008) (10.1103/PhysRevLett.100.136406)

- GGA_PBE_TCA_X

PBE revised by Tognetti et al

References:

V. Tognetti, P. Cortona, and C. Adamo, Chem. Phys. Lett. 460, 536 (2008) (10.1016/j.cplett.2008.06.032)

- GGA_PBE_X

Perdew, Burke & Ernzerhof

References:

J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996) (10.1103/PhysRevLett.77.3865)

J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 78, 1396 (1997) (10.1103/PhysRevLett.78.1396)

- GGA_PBE_XC

35

Functional components: GGA_PBE_X + GGA_PBE_C

References:

J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996) (10.1103/PhysRevLett.77.3865)

J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 78, 1396 (1997) (10.1103/PhysRevLett.78.1396)

J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996) (10.1103/PhysRevLett.77.3865)

J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 78, 1396 (1997) (10.1103/PhysRevLett.78.1396)

• GGA_PBEA_X

Madsen 07

References:

G. K. H. Madsen, Phys. Rev. B 75, 195108 (2007) (10.1103/PhysRevB.75.195108)

• GGA_PBEFE_C

PBE for formation energies

References:

R. Sarmiento-Pérez, S. Botti, and M. A. L. Marques, J. Chem. Theory Comput. 11, 3844 (2015) (10.1021/acs.jctc.5b00529)

• GGA_PBEFE_X

PBE for formation energies

References:

R. Sarmiento-Pérez, S. Botti, and M. A. L. Marques, J. Chem. Theory Comput. 11, 3844 (2015) (10.1021/acs.jctc.5b00529)

• GGA_PBEINT_C

PBE for hybrid interfaces

References:

E. Fabiano, L. A. Constantin, and F. Della Sala, Phys. Rev. B 82, 113104 (2010) (10.1103/PhysRevB.82.113104)

• GGA_PBEINT_X

PBE for hybrid interfaces

References:

E. Fabiano, L. A. Constantin, and F. Della Sala, Phys. Rev. B 82, 113104 (2010) (10.1103/PhysRevB.82.113104)

• GGA_PBEK1_VDW_X

Reparametrized PBE for vdW

References:

J. Klimeš, D. R. Bowler, and A. Michaelides, J. Phys.: Condens. Matter 22, 022201 (2010) (10.1088/0953-8984/22/2/022201)

• GGA_PBELOC_C

Semilocal dynamical correlation

References:

L. A. Constantin, E. Fabiano, and F. Della Sala, Phys. Rev. B 86, 035130 (2012) (10.1103/PhysRevB.86.035130)

- GGA_PBELYP1W_XC

PBELYP1W

References:

E. E. Dahlke and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. B 109, 15677 (2005) (10.1021/jp052436c)
36

- GGA_PBEPOW_X

PBE power

References:

Éric Brémond, J. Chem. Phys. 145, 244102 (2016) (10.1063/1.4972815)

- GGA_PBETRANS_X

Gradient-regulated connection-based correction for the PBE exchange

References:

Éric Brémond, I. Ciofini, and C. Adamo, Mol. Phys. 114, 1059 (2016)
(10.1080/00268976.2015.1132788)

- GGA_PW86_X

Perdew & Wang 86

References:

J. P. Perdew and W. Yue, Phys. Rev. B 33, 8800 (1986) (10.1103/PhysRevB.33.8800)

- GGA_PW91_C

Perdew & Wang 91

References:

J. P. Perdew, in Proceedings of the 75. WE-Heraeus-Seminar and 21st Annual International Symposium on Electronic Structure of Solids, edited by P. Ziesche and H. Eschrig (Akademie Verlag, Berlin, 1991) p. 11

J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, and C. Fiolhais, Phys. Rev. B 46, 6671 (1992) (10.1103/PhysRevB.46.6671)

J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, and C. Fiolhais, Phys. Rev. B 48, 4978 (1993) (10.1103/PhysRevB.48.4978.2)

- GGA_PW91_X

Perdew & Wang 91

References:

J. P. Perdew, in Proceedings of the 75. WE-Heraeus-Seminar and 21st Annual International Symposium on Electronic Structure of Solids, edited by P. Ziesche and H. Eschrig (Akademie Verlag, Berlin, 1991) p. 11

J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, and C. Fiolhais, Phys. Rev. B 46, 6671 (1992) (10.1103/PhysRevB.46.6671)

J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, and C. Fiolhais, Phys. Rev. B 48, 4978 (1993) (10.1103/PhysRevB.48.4978.2)

- GGA_Q2D_C

Chiodo et al

References:

L. Chiodo, L. A. Constantin, E. Fabiano, and F. Della Sala, Phys. Rev. Lett. 108, 126402 (2012) (10.1103/PhysRevLett.108.126402)

• GGA_Q2D_X

Chiodo et al

References:

L. Chiodo, L. A. Constantin, E. Fabiano, and F. Della Sala, Phys. Rev. Lett. 108, 126402 (2012) (10.1103/PhysRevLett.108.126402)

• GGA_REGTPSS_C

regularized TPSS correlation

References:

J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, L. A. Constantin, and J. Sun, Phys. Rev. Lett. 103, 026403 (2009) (10.1103/PhysRevLett.103.026403)

37

• GGA_REVTCA_C

Tognetti, Cortona, Adamo (revised)

References:

V. Tognetti, P. Cortona, and C. Adamo, Chem. Phys. Lett. 460, 536 (2008)

(10.1016/j.cplett.2008.06.032)

• GGA_RGE2_C

Regularized PBE

References:

A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, and G. E. Scuseria, J. Chem. Theory Comput. 5, 763 (2009)

(10.1021/ct8005369)

• GGA_RGE2_X

Regularized PBE

References:

A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, and G. E. Scuseria, J. Chem. Theory Comput. 5, 763 (2009)

(10.1021/ct8005369)

• GGA_RPBE_X

Hammer, Hansen, and Norskov

References:

B. Hammer, L. B. Hansen, and J. K. Nørskov, Phys. Rev. B 59, 7413 (1999) (10.1103/PhysRevB.59.7413)

• GGA_RPW86_X

Refitted Perdew & Wang 86

References:

E. D. Murray, K. Lee, and D. C. Langreth, J. Chem. Theory Comput. 5, 2754 (2009)

(10.1021/ct900365q)

• GGA_SCAN_E0_C

GGA component of SCAN

References:

J. Sun, A. Ruzsinszky, and J. P. Perdew, Phys. Rev. Lett. 115, 036402 (2015) (10.1103/PhysRevLett.115.036402)

• GGA_SFAT_X

Short-range recipe for exchange GGA functionals - Yukawa

References:

A. Savin and H.-J. Flad, Int. J. Quantum Chem. 56, 327 (1995) (10.1002/qua.560560417)

Y. Akinaga and S. Ten-no, Chem. Phys. Lett. 462, 348 (2008) (10.1016/j.cplett.2008.07.103)

• GGA_SG4_C

Semiclassical GGA at fourth order

References:

L. A. Constantin, A. Terentjevs, F. Della Sala, P. Cortona, and E. Fabiano, Phys. Rev. B 93, 045126 (2016) (10.1103/PhysRevB.93.045126)

• GGA_SG4_X

Semiclassical GGA at fourth order

References:

L. A. Constantin, A. Terentjevs, F. Della Sala, P. Cortona, and E. Fabiano, Phys. Rev. B 93, 045126 (2016) (10.1103/PhysRevB.93.045126)

• GGA_SOGGA11_C

Second-order generalized gradient approximation 2011

References:

38

R. Peverati, Y. Zhao, and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. Lett. 2, 1991 (2011)

(10.1021/jz200616w)

• GGA_SOGGA11_X

Second-order generalized gradient approximation 2011

References:

R. Peverati, Y. Zhao, and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. Lett. 2, 1991 (2011)

(10.1021/jz200616w)

• GGA_SOGGA11_X_C

To be used with HYB_GGA_X_SOGGA11_X

References:

R. Peverati and D. G. Truhlar, J. Chem. Phys. 135, 191102 (2011) (10.1063/1.3663871)

• GGA_SOGGA_X

Second-order generalized gradient approximation

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, J. Chem. Phys. 128, 184109 (2008) (10.1063/1.2912068)

• GGA_SPBE_C

PBE correlation to be used with the SSB exchange

References:

M. Swart, M. Solá, and F. M. Bickelhaupt, J. Chem. Phys. 131, 094103 (2009)
(10.1063/1.3213193)

• GGA_SSB_D_X

Swart, Sola and Bickelhaupt dispersion

References:

M. Swart, M. Solá, and F. M. Bickelhaupt, J. Chem. Phys. 131, 094103 (2009)
(10.1063/1.3213193)

• GGA_SSB_SW_X

Swart, Sola and Bickelhaupt correction to PBE

References:

M. Swart, M. Solá, and F. M. Bickelhaupt, J. Comput. Methods Sci. Eng. 9, 69 (2009)
(10.3233/JCM-2009-0230)

• GGA_SSB_X

Swart, Sola and Bickelhaupt

References:

M. Swart, M. Solá, and F. M. Bickelhaupt, J. Chem. Phys. 131, 094103 (2009)
(10.1063/1.3213193)

• GGA_TAU_HCTH_C

correlation part of tau-hcth

References:

A. D. Boese and N. C. Handy, J. Chem. Phys. 116, 9559 (2002) (10.1063/1.1476309)

• GGA_TCA_C

Tognetti, Cortona, Adamo

References:

V. Tognetti, P. Cortona, and C. Adamo, J. Chem. Phys. 128, 034101 (2008)
(10.1063/1.2816137)

• GGA_TH1_XC

Tozer and Handy v. 1

References:

D. J. Tozer and N. C. Handy, J. Chem. Phys. 108, 2545 (1998) (10.1063/1.475638)
39

• GGA_TH2_XC

Tozer and Handy v. 2

References:

D. J. Tozer and N. C. Handy, J. Phys. Chem. A 102, 3162 (1998) (10.1021/jp980259s)

• GGA_TH3_XC

Tozer and Handy v. 3

References:

N. C. Handy and D. J. Tozer, Mol. Phys. 94, 707 (1998) (10.1080/002689798167863)

• GGA_TH4_XC

Tozer and Handy v. 4

References:

N. C. Handy and D. J. Tozer, Mol. Phys. 94, 707 (1998) (10.1080/002689798167863)

• GGA_TH_FC_XC

Tozer and Handy v. FC

References:

D. J. Tozer, N. C. Handy, and W. H. Green, Chem. Phys. Lett. 273, 183 (1997) (10.1016/S0009-2614(97)00586-1)

• GGA_TH_FCFO_XC

Tozer and Handy v. FCFO

References:

D. J. Tozer, N. C. Handy, and W. H. Green, Chem. Phys. Lett. 273, 183 (1997) (10.1016/S0009-2614(97)00586-1)

• GGA_TH_FCO_XC

Tozer and Handy v. FCO

References:

D. J. Tozer, N. C. Handy, and W. H. Green, Chem. Phys. Lett. 273, 183 (1997) (10.1016/S0009-2614(97)00586-1)

• GGA_TH_FL_XC

Tozer and Handy v. FL

References:

D. J. Tozer, N. C. Handy, and W. H. Green, Chem. Phys. Lett. 273, 183 (1997) (10.1016/S0009-2614(97)00586-1)

• GGA_TM_LYP_C

Takkar and McCarthy reparametrization

References:

A. J. Thakkar and S. P. McCarthy, J. Chem. Phys. 131, 134109 (2009) (10.1063/1.3243845)

• GGA_TM_PBE_C

Thakkar and McCarthy reparametrization

References:

A. J. Thakkar and S. P. McCarthy, J. Chem. Phys. 131, 134109 (2009) (10.1063/1.3243845)

• GGA_VMT84_GE_X

VMT{8,4} with constraint satisfaction with $\mu = \mu_{GE}$

References:

A. Vela, J. C. Pacheco-Kato, J. L. Gázquez, J. M. del Campo, and S. B. Trickey, J. Chem. Phys. 136, 144115 (2012) (10.1063/1.3701132)

• GGA_VMT84_PBE_X

VMT{8,4} with constraint satisfaction with $\mu = \mu_{PBE}$

40

References:

A. Vela, J. C. Pacheco-Kato, J. L. Gázquez, J. M. del Campo, and S. B. Trickey, J. Chem. Phys. 136, 144115 (2012) (10.1063/1.3701132)

• GGA_VMT_GE_X

Vela, Medel, and Trickey with $\mu = \mu_{GE}$

References:

A. Vela, V. Medel, and S. B. Trickey, J. Chem. Phys. 130, 244103 (2009) (10.1063/1.3152713)

• GGA_VMT_PBE_X

Vela, Medel, and Trickey with $\mu = \mu_{PBE}$

References:

A. Vela, V. Medel, and S. B. Trickey, J. Chem. Phys. 130, 244103 (2009) (10.1063/1.3152713)

• GGA_VV10_XC

Vydrov and Van Voorhis

References:

O. A. Vydrov and T. Van Voorhis, J. Chem. Phys. 133, 244103 (2010) (10.1063/1.3521275)

• GGA_W94_C

Wilson 94 (Eq. 25)

References:

L. C. Wilson, Chemical Physics 181, 337 (1994) (10.1016/0301-0104(93)E0444-Z)

• GGA_WC_X

Wu & Cohen

References:

Z. Wu and R. E. Cohen, Phys. Rev. B 73, 235116 (2006) (10.1103/PhysRevB.73.235116)

• GGA_WI0_C

Wilson & Ivanov initial version

References:

L. C. Wilson and S. Ivanov, Int. J. Quantum Chem. 69, 523 (1998) (10.1002/(SICI)1097-461X(1998)69:4<523::AID-QUA9>3.0.CO;2-X)

• GGA_WI_C

Wilson & Ivanov

References:

L. C. Wilson and S. Ivanov, Int. J. Quantum Chem. 69, 523 (1998) (10.1002/(SICI)1097-461X(1998)69:4<523::AID-QUA9>3.0.CO;2-X)

• GGA_WL_C

Wilson & Levy

References:

L. C. Wilson and M. Levy, Phys. Rev. B 41, 12930 (1990) (10.1103/PhysRevB.41.12930)

• GGA_WPBEH_X

short-range part of the PBE (default $w=0$ gives PBEh)

References:

J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, J. Chem. Phys. 118, 8207 (2003) (10.1063/1.1564060)

J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, J. Chem. Phys. 124, 219906 (2006) (10.1063/1.2204597)

M. Ernzerhof and J. P. Perdew, J. Chem. Phys. 109, 3313 (1998) (10.1063/1.476928)
J. Heyd and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 120, 7274 (2004) (10.1063/1.1668634)
T. M. Henderson, A. F. Izmaylov, G. Scalmani, and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 131, 044108 (2009) (10.1063/1.3185673)

41

• GGA_XLYP_XC

XLYP

References:

X. Xu and W. A. Goddard, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 101, 2673 (2004) (10.1073/pnas.0308730100)

• GGA_XPBE_C

Extended PBE by Xu & Goddard III

References:

X. Xu and W. A. Goddard, J. Chem. Phys. 121, 4068 (2004) (10.1063/1.1771632)

• GGA_XPBE_X

Extended PBE by Xu & Goddard III

References:

X. Xu and W. A. Goddard, J. Chem. Phys. 121, 4068 (2004) (10.1063/1.1771632)

• GGA_ZPBEINT_C

spin-dependent gradient correction to PBEint

References:

L. A. Constantin, E. Fabiano, and F. Della Sala, Phys. Rev. B 84, 233103 (2011) (10.1103/PhysRevB.84.233103)

• GGA_ZPBESOL_C

spin-dependent gradient correction to PBEsol

References:

L. A. Constantin, E. Fabiano, and F. Della Sala, Phys. Rev. B 84, 233103 (2011) (10.1103/PhysRevB.84.233103)

• GGA_ZVPBEINT_C

another spin-dependent correction to PBEint

References:

L. A. Constantin, E. Fabiano, and F. D. Sala, J. Chem. Phys. 137, 194105 (2012) (10.1063/1.4766324)

• GGA_ZPBESOL_C

another spin-dependent correction to PBEsol

References:

L. A. Constantin, E. Fabiano, and F. D. Sala, J. Chem. Phys. 137, 194105 (2012) (10.1063/1.4766324)

• HGGA_B1LYP_XC

B1LYP

Functional components: 0.25*HF_Exchange

References:

C. Adamo and V. Barone, Chem. Phys. Lett. 274, 242 (1997)
(10.1016/S0009-2614(97)00651-9)

• HGGA_B1PW91_XC
B1PW91

Functional components: 0.25*HF_Exchange

References:

C. Adamo and V. Barone, Chem. Phys. Lett. 274, 242 (1997)
(10.1016/S0009-2614(97)00651-9)

• HGGA_B1WC_XC
B1WC

Functional components: 0.16*HF_Exchange

References:

D. I. Bilc, R. Orlando, R. Shaltaf, G.-M. Rignanese, J. Íñiguez, and P. Ghosez, Phys. Rev. B 77, 165107 (2008) (10.1103/PhysRevB.77.165107)

42

• HGGA_B3LYP5_XC
B3LYP with VWN functional 5 instead of RPA

Functional components: 0.2*HF_Exchange

References:

P. J. Stephens, F. J. Devlin, C. F. Chabalowski, and M. J. Frisch, J. Phys. Chem. 98, 11623 (1994) (10.1021/j100096a001)

• HGGA_B3LYP_LXC_XC
B3LYP

Functional components: 0.2*HF_Exchange

References:

P. J. Stephens, F. J. Devlin, C. F. Chabalowski, and M. J. Frisch, J. Phys. Chem. 98, 11623 (1994) (10.1021/j100096a001)

• HGGA_B3LYP_XC
B3LYP

Functional components: 0.2*HF_Exchange + 0.08*LDA_SLATER_X + 0.19*LDA_VWN1RPA_C + 0.72*GGA_B88_X + 0.81*GGA_LYP_C

References:

P. J. Stephens, F. J. Devlin, C. F. Chabalowski, and M. J. Frisch, J. Phys. Chem. 98, 11623 (1994) (10.1021/j100096a001)

• HGGA_B3LYPS_XC
B3LYP*

Functional components: 0.15*HF_Exchange

References:

M. Reiher, O. Salomon, and B. A. Hess, *Theor. Chem. Acc.* 107, 48 (2001)

(10.1007/s00214-001-

0300-3)

• HGGA_B3P86_XC

B3P86

Functional components: 0.2*HF_Exchange

References:

Defined through Gaussian implementation.

• HGGA_B3PW91_XC

The original (ACM, B3PW91) hybrid of Becke

Functional components: 0.2*HF_Exchange

References:

A. D. Becke, *J. Chem. Phys.* 98, 5648 (1993) (10.1063/1.464913)

• HGGA_B5050LYP_XC

B5050LYP

Functional components: 0.5*HF_Exchange

References:

Y. Shao, M. Head-Gordon, and A. I. Krylov, *J. Chem. Phys.* 118, 4807 (2003)

(10.1063/1.1545679)

• HGGA_B97_1_XC

Becke 97-1

Functional components: 0.21*HF_Exchange

References:

F. A. Hamprecht, A. J. Cohen, D. J. Tozer, and N. C. Handy, *J. Chem. Phys.* 109, 6264 (1998)

(10.1063/1.477267)

• HGGA_B97_1P_XC

version of B97 by Cohen and Handy

43

Functional components: 0.15*HF_Exchange

References:

A. J. Cohen and N. C. Handy, *Chem. Phys. Lett.* 316, 160 (2000)

(10.1016/S0009-2614(99)01273-

7)

• HGGA_B97_2_XC

Becke 97-2

Functional components: 0.21*HF_Exchange

References:

P. J. Wilson, T. J. Bradley, and D. J. Tozer, *J. Chem. Phys.* 115, 9233 (2001)

(10.1063/1.1412605)

• HGGA_B97_3_XC

Becke 97-3

Functional components: 0.269288*HF_Exchange

References:

T. W. Keal and D. J. Tozer, J. Chem. Phys. 123, 121103 (2005) (10.1063/1.2061227)

• HGGA_B97_K_XC

Boese-Martin for Kinetics

Functional components: 0.42*HF_Exchange

References:

A. D. Boese and J. M. L. Martin, J. Chem. Phys. 121, 3405 (2004) (10.1063/1.1774975)

• HGGA_B97_XC

Becke 97

Functional components: 0.1943*HF_Exchange

References:

A. D. Becke, J. Chem. Phys. 107, 8554 (1997) (10.1063/1.475007)

• HGGA_BHANDH_XC

BHandH

Functional components: 0.5*HF_Exchange

References:

A. D. Becke, J. Chem. Phys. 98, 1372 (1993) (10.1063/1.464304)

Defined through Gaussian implementation.

• HGGA_BHANDHLYP_XC

BHandHLYP

Functional components: 0.5*HF_Exchange

References:

A. D. Becke, J. Chem. Phys. 98, 1372 (1993) (10.1063/1.464304)

Defined through Gaussian implementation.

• HGGA_CAM_B3LYP_XC

CAM version of B3LYP

Functional components: 0.19*HF_Exchange_ShortRange + 0.65*HF_Exchange_LongRange

References:

T. Yanai, D. P. Tew, and N. C. Handy, Chem. Phys. Lett. 393, 51 (2004)

(10.1016/j.cplett.2004.06.011)

• HGGA_CAM_QTP_01_XC

CAM-B3LYP retuned using ionization potentials of water

Functional components: 0.23*HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange

References:

Y. Jin and R. J. Bartlett, J. Chem. Phys. 145, 034107 (2016),

<http://dx.doi.org/10.1063/1.4955497>

(10.1063/1.4955497)

44

• HGGA_CAMY_B3LYP_XC

CAMY version of B3LYP

Functional components: 0.19*HF_Exchange_ShortRange + 0.65*HF_Exchange_LongRange

References:

M. Seth and T. Ziegler, *J. Chem. Theory Comput.* 8, 901 (2012) (10.1021/ct300006h)

• HGGA_CAMY_BLYP_XC

CAMY version of BLYP

Functional components: 0.2*HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange

References:

Y. Akinaga and S. Ten-no, *Chem. Phys. Lett.* 462, 348 (2008) (10.1016/j.cplett.2008.07.103)

• HGGA_CAP0_XC

Correct Asymptotic Potential hybrid

Functional components: 0.25*HF_Exchange

References:

J. Carmona-Espíndola, J. L. Gázquez, A. Vela, and S. B. Trickey, *Theor. Chem. Acc.* 135, 120 (2016) (10.1007/s00214-016-1864-2)

• HGGA_EDF2_XC

EDF2

Functional components: 0.1695*HF_Exchange

References:

C. Y. Lin, M. W. George, and P. M. W. Gill, *Australian Journal of Chemistry* 57, 365 (2004) (10.1071/CH03263)

• HGGA_HJS_B88_XC

HJS hybrid screened exchange B88 version

Functional components: 0.25*HF_Exchange_ShortRange + 0*HF_Exchange_LongRange

References:

T. M. Henderson, B. G. Janesko, and G. E. Scuseria, *J. Chem. Phys.* 128, 194105 (2008) (10.1063/1.2921797)

• HGGA_HJS_B97X_XC

HJS hybrid screened exchange B97x version

Functional components: 0.25*HF_Exchange_ShortRange + 0*HF_Exchange_LongRange

References:

T. M. Henderson, B. G. Janesko, and G. E. Scuseria, *J. Chem. Phys.* 128, 194105 (2008) (10.1063/1.2921797)

• HGGA_HJS_PBE_SOL_XC

HJS hybrid screened exchange PBE_SOL version

Functional components: 0.25*HF_Exchange_ShortRange + 0*HF_Exchange_LongRange

References:

T. M. Henderson, B. G. Janesko, and G. E. Scuseria, *J. Chem. Phys.* 128, 194105 (2008) (10.1063/1.2921797)

• HGGA_HJS_PBE_XC

HJS hybrid screened exchange PBE version

Functional components: 0.25*HF_Exchange_ShortRange + 0*HF_Exchange_LongRange

References:

T. M. Henderson, B. G. Janesko, and G. E. Scuseria, *J. Chem. Phys.* 128, 194105 (2008) (10.1063/1.2921797)

• HGGA_HSE03_XC

HSE03

Functional components: $0.25*HF_Exchange_ShortRange + 0*HF_Exchange_LongRange$
45

References:

J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, J. Chem. Phys. 118, 8207 (2003)
(10.1063/1.1564060)

J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, J. Chem. Phys. 124, 219906 (2006)
(10.1063/1.2204597)

• HGGA_HSE06_XC

HSE06

Functional components: $0.25*HF_Exchange_ShortRange + 0*HF_Exchange_LongRange$

References:

J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, J. Chem. Phys. 118, 8207 (2003)
(10.1063/1.1564060)

J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, J. Chem. Phys. 124, 219906 (2006)
(10.1063/1.2204597)

A. V. Kruckau, O. A. Vydrov, A. F. Izmaylov, and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 125, 224106
(2006) (10.1063/1.2404663)

• HGGA_HSE12_XC

HSE12

Functional components: $0.313*HF_Exchange_ShortRange + 0*HF_Exchange_LongRange$

References:

J. E. Moussa, P. A. Schultz, and J. R. Chelikowsky, J. Chem. Phys. 136, 204117 (2012)
(10.1063/1.4722993)

• HGGA_HSE12S_XC

HSE12 (short-range version)

Functional components: $0.425*HF_Exchange_ShortRange + 0*HF_Exchange_LongRange$

References:

J. E. Moussa, P. A. Schultz, and J. R. Chelikowsky, J. Chem. Phys. 136, 204117 (2012)
(10.1063/1.4722993)

• HGGA_HSE_SOL_XC

HSEsol

Functional components: $0.25*HF_Exchange_ShortRange + 0*HF_Exchange_LongRange$

References:

L. Schimka, J. Harl, and G. Kresse, J. Chem. Phys. 134, 024116 (2011) (10.1063/1.3524336)

• HGGA_KMLYP_XC

Kang-Musgrave hybrid

Functional components: $0.557*HF_Exchange$

References:

J. K. Kang and C. B. Musgrave, J. Chem. Phys. 115, 11040 (2001),

<http://dx.doi.org/10.1063/1.1415079>

(10.1063/1.1415079)

• HGGA_LC_VV10_XC

Vydrov and Van Voorhis

Functional components: $0*HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange$

References:

O. A. Vydrov and T. Van Voorhis, J. Chem. Phys. 133, 244103 (2010) (10.1063/1.3521275)

• HGGA_LC_WPBE_XC

Long-range corrected PBE (LC-wPBE) by Vydrov and Scuseria

Functional components: $0*HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange$

References:

O. A. Vydrov and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 125, 234109 (2006), 10.1063/1.2409292 (10.1063/1.2409292)

• HGGA_LCY_BLYP_XC

LCY version of BLYP

Functional components: $0*HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange$

46

References:

Y. Akinaga and S. Ten-no, Chem. Phys. Lett. 462, 348 (2008) (10.1016/j.cplett.2008.07.103)

M. Seth, T. Ziegler, M. Steinmetz, and S. Grimme, J. Chem. Theory Comput. 9, 2286 (2013) (10.1021/ct301112m)

• HGGA_LCY_PBE_XC

LCY version of PBE

Functional components: $0*HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange$

References:

M. Seth and T. Ziegler, J. Chem. Theory Comput. 8, 901 (2012) (10.1021/ct300006h)

M. Seth, T. Ziegler, M. Steinmetz, and S. Grimme, J. Chem. Theory Comput. 9, 2286 (2013) (10.1021/ct301112m)

• HGGA_LRC_WPBE_XC

Long-range corrected PBE (LRC-wPBE) by Rohrdanz, Martins and Herbert

Functional components: $0*HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange$

References:

M. A. Rohrdanz, K. M. Martins, and J. M. Herbert, J. Chem. Phys. 130, 054112 (2009) (10.1063/1.3073302)

• HGGA_LRC_WPBEH_XC

Long-range corrected short-range hybrid PBE (LRC-wPBEh) by Rohrdanz, Martins and Herbert

Functional components: $0.2*HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange$

References:

M. A. Rohrdanz, K. M. Martins, and J. M. Herbert, J. Chem. Phys. 130, 054112 (2009) (10.1063/1.3073302)

• HGGA_MB3LYP_RC04_XC

B3LYP with RC04 LDA

Functional components: $0.2*HF_Exchange$

References:

V. Tognetti, P. Cortona, and C. Adamo, Chem. Phys. Lett. 439, 381 (2007) (10.1016/j.cplett.2007.03.081)

- HGGA_MPW1K_XC

mPW1K

Functional components: 0.428*HF_Exchange

References:

B. J. Lynch, P. L. Fast, M. Harris, and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. A 104, 4811 (2000) (10.1021/jp000497z)

- HGGA_MPW1LYP_XC

mPW1LYP

Functional components: 0.25*HF_Exchange

References:

C. Adamo and V. Barone, J. Chem. Phys. 108, 664 (1998) (10.1063/1.475428)

- HGGA_MPW1PBE_XC

mPW1PBE

Functional components: 0.25*HF_Exchange

References:

C. Adamo and V. Barone, J. Chem. Phys. 108, 664 (1998) (10.1063/1.475428)

- HGGA_MPW1PW_XC

mPW1PW

Functional components: 0.25*HF_Exchange

References:

C. Adamo and V. Barone, J. Chem. Phys. 108, 664 (1998) (10.1063/1.475428)
47

- HGGA_MPW3LYP_XC

MPW3LYP

Functional components: 0.218*HF_Exchange

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. A 108, 6908 (2004) (10.1021/jp048147q)

- HGGA_MPW3PW_XC

MPW3PW of Adamo & Barone

Functional components: 0.2*HF_Exchange

References:

C. Adamo and V. Barone, J. Chem. Phys. 108, 664 (1998) (10.1063/1.475428)

- HGGA_MPWLYP1M_XC

MPW with 1 par. for metals/LYP

Functional components: 0.05*HF_Exchange

References:

N. E. Schultz, Y. Zhao, and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. A 109, 11127 (2005) (10.1021/jp0539223)

- HGGA_N12_SX_X

Minnesota N12-SX exchange functional

Functional components: 0.25*HF_Exchange_ShortRange + 0*HF_Exchange_LongRange

References:

R. Peverati and D. G. Truhlar, Phys. Chem. Chem. Phys. 14, 16187 (2012)

(10.1039/C2CP42576A)

• HGGA_O3LYP_XC

O3LYP

Functional components: 0.1161*HF_Exchange

References:

A. J. Cohen and N. C. Handy, Mol. Phys. 99, 607 (2001) (10.1080/00268970010023435)

• HGGA_PBE0_13_XC

PBE0-1/3

Functional components: 0.333333*HF_Exchange

References:

P. Cortona, J. Chem. Phys. 136, 086101 (2012) (10.1063/1.3690462)

• HGGA_PBE50_XC

PBE50

Functional components: 0.5*HF_Exchange

References:

Y. A. Bernard, Y. Shao, and A. I. Krylov, J. Chem. Phys. 136, 204103 (2012)

(10.1063/1.4714499)

• HGGA_PBE_MOL0_XC

PBEmol0

Functional components: 0.25*HF_Exchange

References:

J. M. del Campo, J. L. Gázquez, S. B. Trickey, and A. Vela, J. Chem. Phys. 136, 104108 (2012)

(10.1063/1.3691197)

• HGGA_PBE_MOLB0_XC

PBEmolbeta0

Functional components: 0.25*HF_Exchange

References:

J. M. del Campo, J. L. Gázquez, S. B. Trickey, and A. Vela, J. Chem. Phys. 136, 104108 (2012)

(10.1063/1.3691197)

48

• HGGA_PBE_SOL0_XC

PBEsol0

Functional components: 0.25*HF_Exchange

References:

J. M. del Campo, J. L. Gázquez, S. B. Trickey, and A. Vela, J. Chem. Phys. 136, 104108 (2012)

(10.1063/1.3691197)

• HGGA_PBEB0_XC

PBEbeta0

Functional components: 0.25*HF_Exchange

References:

J. M. del Campo, J. L. Gázquez, S. B. Trickey, and A. Vela, J. Chem. Phys. 136, 104108 (2012) (10.1063/1.3691197)

• HGGA_PBEH_XC

PBEH (PBE0)

Functional components: 0.25*HF_Exchange

References:

C. Adamo and V. Barone, J. Chem. Phys. 110, 6158 (1999) (10.1063/1.478522)

M. Ernzerhof and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 110, 5029 (1999) (10.1063/1.478401)

• HGGA_REVB3LYP_XC

Revised B3LYP

Functional components: 0.2*HF_Exchange

References:

L. Lu, H. Hu, H. Hou, and B. Wang, Comput. Theor. Chem. 1015, 64 (2013)

(10.1016/j.comptc.2013.04.009)

• HGGA_SB98_1A_XC

SB98 (1a)

Functional components: 0.229015*HF_Exchange

References:

H. L. Schmider and A. D. Becke, J. Chem. Phys. 108, 9624 (1998) (10.1063/1.476438)

• HGGA_SB98_1B_XC

SB98 (1b)

Functional components: 0.199352*HF_Exchange

References:

H. L. Schmider and A. D. Becke, J. Chem. Phys. 108, 9624 (1998) (10.1063/1.476438)

• HGGA_SB98_1C_XC

SB98 (1c)

Functional components: 0.192416*HF_Exchange

References:

H. L. Schmider and A. D. Becke, J. Chem. Phys. 108, 9624 (1998) (10.1063/1.476438)

• HGGA_SB98_2A_XC

SB98 (2a)

Functional components: 0.232055*HF_Exchange

References:

H. L. Schmider and A. D. Becke, J. Chem. Phys. 108, 9624 (1998) (10.1063/1.476438)

• HGGA_SB98_2B_XC

SB98 (2b)

Functional components: 0.237978*HF_Exchange

References:

H. L. Schmider and A. D. Becke, J. Chem. Phys. 108, 9624 (1998) (10.1063/1.476438)

49

• HGGA_SB98_2C_XC

SB98 (2c)

Functional components: 0.219847*HF_Exchange

References:

H. L. Schmider and A. D. Becke, J. Chem. Phys. 108, 9624 (1998) (10.1063/1.476438)

• HGGA_SOGGA11_X_X

Hybrid based on SOGGA11 form

Functional components: 0.4015*HF_Exchange

References:

R. Peverati and D. G. Truhlar, J. Chem. Phys. 135, 191102 (2011) (10.1063/1.3663871)

• HGGA_TUNED_CAM_B3LYP_XC

CAM version of B3LYP, tuned for excitations and properties

Functional components: 0.0799*HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange

References:

K. Okuno, Y. Shigeta, R. Kishi, H. Miyasaka, and M. Nakano, J. Photochem. Photobiol., A 235, 29 (2012) (10.1016/j.jphotochem.2012.03.003)

• HGGA_WB97_XC

wB97 range-separated functional

Functional components: 0*HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange

References:

J.-D. Chai and M. Head-Gordon, J. Chem. Phys. 128, 084106 (2008) (10.1063/1.2834918)

• HGGA_WB97X_D_XC

wB97D range-separated functional

Functional components: 0.222036*HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange

References:

J.-D. Chai and M. Head-Gordon, Phys. Chem. Chem. Phys. 10, 6615 (2008)

(10.1039/B810189B)

• HGGA_WB97X_V_XC

wB97X-V range-separated functional

Functional components: 0.167*HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange

References:

N. Mardirossian and M. Head-Gordon, Phys. Chem. Chem. Phys. 16, 9904 (2014)

(10.1039/C3CP54374A)

• HGGA_WB97X_XC

wB97X range-separated functional

Functional components: 0.157706*HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange

References:

J.-D. Chai and M. Head-Gordon, J. Chem. Phys. 128, 084106 (2008) (10.1063/1.2834918)

• HGGA_X3LYP_XC

X3LYP

Functional components: 0.218*HF_Exchange

References:

X. Xu and W. A. Goddard, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 101, 2673 (2004)
(10.1073/pnas.0308730100)

• HMGGA_B86B95_XC

Mixture of B86 with BC95

Functional components: 0.28*HF_Exchange

References:

A. D. Becke, J. Chem. Phys. 104, 1040 (1996) (10.1063/1.470829)
50

• HMGGA_B88B95_XC

Mixture of B88 with BC95 (B1B95)

Functional components: 0.28*HF_Exchange

References:

A. D. Becke, J. Chem. Phys. 104, 1040 (1996) (10.1063/1.470829)

• HMGGA_BB1K_XC

Mixture of B88 with BC95 from Zhao and Truhlar

Functional components: 0.42*HF_Exchange

References:

Y. Zhao, B. J. Lynch, and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. A 108, 2715 (2004)
(10.1021/jp049908s)

• HMGGA_BMK_X

Boese-Martin for kinetics

Functional components: 0.42*HF_Exchange

References:

A. D. Boese and J. M. L. Martin, J. Chem. Phys. 121, 3405 (2004) (10.1063/1.1774975)

• HMGGA_DLDF_X

Dispersionless Density Functional

Functional components: 0.614413*HF_Exchange

References:

K. Pernal, R. Podeszwa, K. Patkowski, and K. Szalewicz, Phys. Rev. Lett. 103, 263201 (2009)
(10.1103/PhysRevLett.103.263201)

• HMGGA_M05_2X_X

Minnesota M05-2X hybrid exchange functional

Functional components: 0.56*HF_Exchange

References:

Y. Zhao, N. E. Schultz, and D. G. Truhlar, J. Chem. Theory Comput. 2, 364 (2006)
(10.1021/ct0502763)

• HMGGA_M05_X

Minnesota M05 hybrid exchange functional

Functional components: 0.28*HF_Exchange

References:

Y. Zhao, N. E. Schultz, and D. G. Truhlar, J. Chem. Phys. 123, 161103 (2005)
(10.1063/1.2126975)

- HMGGA_M06_2X_X

Minnesota M06-2X hybrid exchange functional

Functional components: $0.54 * HF_Exchange$

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, *Theor. Chem. Acc.* 120, 215 (2008) (10.1007/s00214-007-0310-x)

- HMGGA_M06_HF_X

Minnesota M06-HF hybrid exchange functional

Functional components: $HF_Exchange$

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, *J. Phys. Chem. A* 110, 13126 (2006) (10.1021/jp066479k)

- HMGGA_M06_X

Minnesota M06 hybrid exchange functional

Functional components: $0.27 * HF_Exchange$

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, *Theor. Chem. Acc.* 120, 215 (2008) (10.1007/s00214-007-0310-x)
51

- HMGGA_M08_HX_X

Minnesota M08-HX hybrid exchange functional

Functional components: $0.5223 * HF_Exchange$

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, *J. Chem. Theory Comput.* 4, 1849 (2008) (10.1021/ct800246v)

- HMGGA_M08_SO_X

Minnesota M08-SO hybrid exchange functional

Functional components: $0.5679 * HF_Exchange$

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, *J. Chem. Theory Comput.* 4, 1849 (2008) (10.1021/ct800246v)

- HMGGA_M11_X

Minnesota M11 hybrid exchange functional

Functional components: $0.428 * HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange$

References:

R. Peverati and D. G. Truhlar, *J. Phys. Chem. Lett.* 2, 2810 (2011) (10.1021/jz201170d)

- HMGGA_MN12_SX_X

Minnesota MN12-SX hybrid exchange functional

Functional components: $0.25 * HF_Exchange_ShortRange + 0 * HF_Exchange_LongRange$

References:

R. Peverati and D. G. Truhlar, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 14, 16187 (2012)
(10.1039/C2CP42576A)

- HMGGA_MN15_X

Minnesota MN15 hybrid exchange functional

Functional components: $0.44 * HF_Exchange$

References:

H. S. Yu, X. He, S. L. Li, and D. G. Truhlar, Chem. Sci. 7, 5032 (2016) (10.1039/C6SC00705H)

• HMGGGA_MPW1B95_XC

Mixture of mPW91 with BC95 from Zhao and Truhlar

Functional components: 0.31*HF_Exchange

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. A 108, 6908 (2004) (10.1021/jp048147q)

• HMGGGA_MPWB1K_XC

Mixture of mPW91 with BC95 for kinetics

Functional components: 0.44*HF_Exchange

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. A 108, 6908 (2004) (10.1021/jp048147q)

• HMGGGA_MS2H_X

MS2 hybrid exchange of Sun, et al

Functional components: 0.09*HF_Exchange

References:

J. Sun, R. Haunschild, B. Xiao, I. W. Bulik, G. E. Scuseria, and J. P. Perdew, J. Chem. Phys. 138, 044113 (2013) (10.1063/1.4789414)

• HMGGGA_MVSH_X

MVSh hybrid exchange functional

Functional components: 0.25*HF_Exchange

References:

J. Sun, J. P. Perdew, and A. Ruzsinszky, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 112, 685 (2015) (10.1073/pnas.1423145112)

52

• HMGGGA_PW6B95_XC

Mixture of PW91 with BC95 from Zhao and Truhlar

Functional components: 0.28*HF_Exchange

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. A 109, 5656 (2005) (10.1021/jp050536c)

• HMGGGA_PW86B95_XC

Mixture of PW86 with BC95

Functional components: 0.29*HF_Exchange

References:

A. D. Becke, J. Chem. Phys. 104, 1040 (1996) (10.1063/1.470829)

• HMGGGA_PWB6K_XC

Mixture of PW91 with BC95 from Zhao and Truhlar for kinetics

Functional components: 0.46*HF_Exchange

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. A 109, 5656 (2005) (10.1021/jp050536c)

• HMGGGA_REVSCAN0_X

revised SCAN hybrid exchange (SCAN0)

Functional components: 0.25*HF_Exchange

References:

P. D. Mezei, G. I. Csonka, and M. Kállay, J. Chem. Theory Comput. 0, null (0)
(10.1021/acs.jctc.8b00072)

• HMGGGA_REVTPSSH_XC
revTPSSH

Functional components: 0.1*HF_Exchange

References:

G. I. Csonka, J. P. Perdew, and A. Ruzsinszky, J. Chem. Theory Comput. 6, 3688 (2010)
(10.1021/ct100488v)

• HMGGGA_SCAN0_X

SCAN hybrid exchange (SCAN0)

Functional components: 0.25*HF_Exchange

References:

K. Hui and J.-D. Chai, J. Chem. Phys. 144, 044114 (2016), 10.1063/1.4940734
(10.1063/1.4940734)

• HMGGGA_TAU_HCTH_X

Hybrid version of tau-HCTH

Functional components: 0.15*HF_Exchange

References:

A. D. Boese and N. C. Handy, J. Chem. Phys. 116, 9559 (2002) (10.1063/1.1476309)

• HMGGGA_TPSSH_XC

TPSSH

Functional components: 0.1*HF_Exchange

References:

V. N. Staroverov, G. E. Scuseria, J. Tao, and J. P. Perdew, J. Chem. Phys. 119, 12129 (2003)
(10.1063/1.1626543)

• HMGGGA_WB97M_V_XC

wB97M-V exchange-correlation functional

Functional components: 0.15*HF_Exchange_ShortRange + HF_Exchange_LongRange

References:

N. Mardirossian and M. Head-Gordon, J. Chem. Phys. 144, 214110 (2016) (10.1063/1.4952647)
53

• HMGGGA_X1B95_XC

Mixture of X with BC95

Functional components: 0.3*HF_Exchange

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. A 108, 6908 (2004) (10.1021/jp048147q)

• HMGGGA_XB1K_XC

Mixture of X with BC95 for kinetics

Functional components: 0.43*HF_Exchange

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. A 108, 6908 (2004) (10.1021/jp048147q)

• LDA_BR78_C

Bruhl & Rothstein 78

References:

G. B. Jr. and S. M. Rothstein, J. Chem. Phys. 69, 1177 (1978) (10.1063/1.436705)

• LDA_CHACHIYO_C

Chachiyo simple 2 parameter correlation

References:

T. Chachiyo, J. Chem. Phys. 145, 021101 (2016) (10.1063/1.4958669)

• LDA_ERF_X

Attenuated exchange LDA (erf)

References:

J. Toulouse, A. Savin, and H.-J. Flad, Int. J. Quantum Chem. 100, 1047 (2004)

(10.1002/qua.20259)

Y. Tawada, T. Tsuneda, S. Yanagisawa, T. Yanai, and K. Hirao, J. Chem. Phys. 120, 8425 (2004)

(10.1063/1.1688752)

• LDA_GDSMFB_XC

Groth, Dornheim, Sjostrom, Malone, Foulkes, Bonitz

References:

S. {Groth, T. {Dornheim}, T. {Sjostrom}, F. D. {Malone}, W. M. C. {Foulkes}, and M. {Bonitz},
}ArXiv e-prints (2017), arXiv:1703.08074 [physics.plasm-ph].

• LDA_GK72_C

Gordon and Kim 1972

References:

R. G. Gordon and Y. S. Kim, J. Chem. Phys. 56, 3122 (1972), <https://doi.org/10.1063/1.1677649>

(10.1063/1.1677649)

• LDA_GL_C

Gunnarson & Lundqvist

References:

O. Gunnarsson and B. I. Lundqvist, Phys. Rev. B 13, 4274 (1976) (10.1103/PhysRevB.13.4274)

• LDA_GOMBAS_C

Gombas

References:

P. Gombas, Pseudopotentiale (Springer-Verlag, Wien, New York, 1967)

• LDA_HL_C

Hedin & Lundqvist

References:

L. Hedin and B. I. Lundqvist, J. Phys. C: Solid State Phys. 4, 2064 (1971) (10.1088/0022-3719/4/14/022)

54

• LDA_KARASIEV_C

Karasiev reparameterization of Chachiyo

References:

V. V. Karasiev, J. Chem. Phys. 145, 157101 (2016), <https://doi.org/10.1063/1.4964758>
(10.1063/1.4964758)

• LDA_KSDT_XC

Karasiev, Sjostrom, Dufty & Trickey

References:

V. V. Karasiev, T. Sjostrom, J. Dufty, and S. B. Trickey, Phys. Rev. Lett. 112, 076403 (2014)
(10.1103/PhysRevLett.112.076403)

• LDA_LP96_C

Liu-Parr correlation

References:

S. Liu and R. G. Parr, Phys. Rev. A 53, 2211 (1996) (10.1103/PhysRevA.53.2211)

S. Liu and R. Parr, Journal of Molecular Structure:THEOCHEM 501–502, 29 (2000)}

(10.1016/S0166-

1280(99)00410-8)

• LDA_LP_A_XC

Lee-Parr reparametrization A

References:

C. Lee and R. G. Parr, Phys. Rev. A 42, 193 (1990) (10.1103/PhysRevA.42.193)

• LDA_LP_B_XC

Lee-Parr reparametrization B

References:

C. Lee and R. G. Parr, Phys. Rev. A 42, 193 (1990) (10.1103/PhysRevA.42.193)

• LDA_MCWEENY_C

McWeeny 76

References:

R. McWeeny, in The New World of Quantum Chemistry, edited by {editor {B. Pullman} and R. Parr} (Reidel, Boston, 1976) pp. 3–31

G. B. Jr. and S. M. Rothstein, J. Chem. Phys. 69, 1177 (1978) (10.1063/1.436705)

• LDA_ML1_C

Modified LSD (version 1) of Proynov and Salahub

References:

E. I. Proynov and D. R. Salahub, Phys. Rev. B 49, 7874 (1994) (10.1103/PhysRevB.49.7874)

• LDA_ML2_C

Modified LSD (version 2) of Proynov and Salahub

References:

E. I. Proynov and D. R. Salahub, Phys. Rev. B 49, 7874 (1994) (10.1103/PhysRevB.49.7874)

• LDA_OB_PW_C

Ortiz & Ballone (PW parametrization)

References:

G. Ortiz and P. Ballone, Phys. Rev. B 50, 1391 (1994) (10.1103/PhysRevB.50.1391)
G. Ortiz and P. Ballone, Phys. Rev. B 56, 9970 (1997) (10.1103/PhysRevB.56.9970)
J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B 45, 13244 (1992), added extra digits to some constants
as in the PBE routine (<http://dft.rutgers.edu/pubs/PBE.asc>) (10.1103/PhysRevB.45.13244)

• LDA_OB_PZ_C

Ortiz & Ballone (PZ parametrization)

References:

55

G. Ortiz and P. Ballone, Phys. Rev. B 50, 1391 (1994) (10.1103/PhysRevB.50.1391)

G. Ortiz and P. Ballone, Phys. Rev. B 56, 9970 (1997) (10.1103/PhysRevB.56.9970)

•LDA_OW_C

Optimized Wigner

References:

P. A. Stewart and P. M. W. Gill, J. Chem. Soc. {, Faraday Trans. 91, 4337 (1995)}
(10.1039/FT9959104337)

•LDA_OW_LYP_C

Wigner with corresponding LYP parameters

References:

P. A. Stewart and P. M. W. Gill, J. Chem. Soc. {, Faraday Trans. 91, 4337 (1995)}
(10.1039/FT9959104337)

•LDA_PK09_C

Proynov and Kong 2009

References:

E. Proynov and J. Kong, Phys. Rev. A 79, 014103 (2009) (10.1103/PhysRevA.79.014103)

E. Proynov and J. Kong, Phys. Rev. A 95, 059904 (2017) (10.1103/PhysRevA.95.059904)

•LDA_PW_C

Perdew & Wang

References:

J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B 45, 13244 (1992) (10.1103/PhysRevB.45.13244)

•LDA_PW_MOD_C

Perdew & Wang (modified)

References:

J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B 45, 13244 (1992), added extra digits to some constants
as in the PBE routine (<http://dft.rutgers.edu/pubs/PBE.asc>) (10.1103/PhysRevB.45.13244)

•LDA_PW_RPA_C

Perdew & Wang (fit to the RPA energy)

References:

J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B 45, 13244 (1992) (10.1103/PhysRevB.45.13244)

•LDA_PZ_C

Perdew & Zunger

References:

J. P. Perdew and A. Zunger, Phys. Rev. B 23, 5048 (1981) (10.1103/PhysRevB.23.5048)

•LDA_PZ_MOD_C

Perdew & Zunger (Modified)

References:

J. P. Perdew and A. Zunger, Phys. Rev. B 23, 5048 (1981), modified to improve the matching between the low- and high-rs parts (10.1103/PhysRevB.23.5048)

- LDA_RAE_X

Rae self-energy corrected exchange

References:

A. Rae, Chem. Phys. Lett. 18, 574 (1973) (10.1016/0009-2614(73)80469-5)

- LDA_RC04_C

Ragot-Cortona

References:

S. Ragot and P. Cortona, J. Chem. Phys. 121, 7671 (2004) (10.1063/1.1792153)
56

- LDA_REL_X

Slater exchange with relativistic corrections

References:

A. K. Rajagopal, J. Phys. C: Solid State Phys. 11, L943 (1978) (10.1088/0022-3719/11/24/002)

A. H. MacDonald and S. H. Vosko, J. Phys. C: Solid State Phys. 12, 2977 (1979)

(10.1088/0022-

3719/12/15/007)

E. Engel, S. Keller, A. F. Bonetti, H. Müller, and R. M. Dreizler, Phys. Rev. A 52, 2750 (1995)

(10.1103/PhysRevA.52.2750)

- LDA_RPA_C

Random Phase Approximation (RPA)

References:

M. Gell-Mann and K. A. Brueckner, Phys. Rev. 106, 364 (1957) (10.1103/PhysRev.106.364)

- LDA_SLATER_LXC_X

Slater exchange

References:

P. A. M. Dirac, Math. Proc. Cambridge Philos. Soc. 26, 376 (1930)

(10.1017/S0305004100016108)

F. Bloch, Z. Phys. 57, 545 (1929) (10.1007/BF01340281)

- LDA_SLATER_X

Slater exchange

References:

P. A. M. Dirac, Math. Proc. Cambridge Philos. Soc. 26, 376 (1930)

(10.1017/S0305004100016108)

F. Bloch, Z. Phys. 57, 545 (1929) (10.1007/BF01340281)

- LDA_TETER93_XC

Teter 93

References:

S. Goedecker, M. Teter, and J. Hutter, Phys. Rev. B 54, 1703 (1996)

(10.1103/PhysRevB.54.1703)

- LDA_VBH_C

von Barth & Hedin

References:

U. von Barth and L. Hedin, J. Phys. C: Solid State Phys. 5, 1629 (1972) (10.1088/0022-3719/5/13/012)

• LDA_VWN1_C

Vosko, Wilk & Nusair (VWN1)

References:

S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, Can. J. Phys. 58, 1200 (1980) (10.1139/p80-159)

• LDA_VWN1RPA_C

Vosko, Wilk & Nusair (VWN5_RPA)

References:

S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, Can. J. Phys. 58, 1200 (1980) (10.1139/p80-159)

• LDA_VWN5_C

Vosko, Wilk & Nusair (VWN5)

References:

S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, Can. J. Phys. 58, 1200 (1980) (10.1139/p80-159)

• LDA_VWN5RPA_C

Vosko, Wilk & Nusair (VWN5_RPA)

References:

S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, Can. J. Phys. 58, 1200 (1980) (10.1139/p80-159)
57

• LDA_VWN_1_C

Vosko, Wilk & Nusair (VWN1)

References:

S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, Can. J. Phys. 58, 1200 (1980) (10.1139/p80-159)

• LDA_VWN_2_C

Vosko, Wilk & Nusair (VWN2)

References:

S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, Can. J. Phys. 58, 1200 (1980) (10.1139/p80-159)

• LDA_VWN_3_C

Vosko, Wilk & Nusair (VWN3)

References:

S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, Can. J. Phys. 58, 1200 (1980) (10.1139/p80-159)

• LDA_VWN_4_C

Vosko, Wilk & Nusair (VWN4)

References:

S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, Can. J. Phys. 58, 1200 (1980) (10.1139/p80-159)

• LDA_VWN_C

Vosko, Wilk & Nusair (VWN5)

References:

S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, Can. J. Phys. 58, 1200 (1980) (10.1139/p80-159)

• LDA_VWN_RPA_C

Vosko, Wilk & Nusair (VWN5_RPA)

References:

S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, *Can. J. Phys.* 58, 1200 (1980) (10.1139/p80-159)

• LDA_WIGNER_C

Wigner

References:

E. Wigner, *Trans. Faraday Soc.* 34, 678 (1938) (10.1039/TF9383400678)

P. A. Stewart and P. M. W. Gill, *J. Chem. Soc. {, Faraday Trans. 91, 4337 (1995)}*
(10.1039/FT9959104337)

• LDA_XALPHA_C

Slater's Xalpha

References:

J. C. Slater, *Phys. Rev.* 81, 385 (1951) (10.1103/PhysRev.81.385)

• LDA_ZLP_XC

Zhao, Levy & Parr, Eq. (20)

References:

Q. Zhao, M. Levy, and R. G. Parr, *Phys. Rev. A* 47, 918 (1993) (10.1103/PhysRevA.47.918)

• MGGA_B88_C

Meta-GGA correlation by Becke

References:

A. D. Becke, *J. Chem. Phys.* 88, 1053 (1988) (10.1063/1.454274)

• MGGA_B97M_V_XC

B97M-V exchange-correlation functional

References:

N. Mardirossian and M. Head-Gordon, *J. Chem. Phys.* 142, 074111 (2015) (10.1063/1.4907719)
58

• MGGA_BC95_C

Becke correlation 95

References:

A. D. Becke, *J. Chem. Phys.* 104, 1040 (1996) (10.1063/1.470829)

• MGGA_BLOC_X

functional with balanced localization

References:

L. A. Constantin, E. Fabiano, and F. Della Sala, *J. Chem. Theory Comput.* 9, 2256 (2013)
(10.1021/ct400148r)

• MGGA_DLDF_C

Dispersionless Density Functional

References:

K. Pernal, R. Podeszwa, K. Patkowski, and K. Szalewicz, *Phys. Rev. Lett.* 103, 263201 (2009)
(10.1103/PhysRevLett.103.263201)

• MGGA_GVT4_X

GVT4 (X part of VSXC)

References:

T. V. Voorhis and G. E. Scuseria, *J. Chem. Phys.* 109, 400 (1998) (10.1063/1.476577)

• MGGA_GX_X

GX functional of Loos

References:

P.-F. Loos, J. Chem. Phys. 146, 114108 (2017) (10.1063/1.4978409)

• MGGA_HLE17_XC

high local exchange 2017

References:

P. Verma and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem C 121, 7144 (2017) (10.1021/acs.jpcc.7b01066)

• MGGA_LTA_X

Local tau approximation

References:

M. Ernzerhof and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 111, 911 (1999) (10.1063/1.479374)

• MGGA_M05_2X_C

Minnesota M05-2X correlation functional

References:

Y. Zhao, N. E. Schultz, and D. G. Truhlar, J. Chem. Theory Comput. 2, 364 (2006)

(10.1021/ct0502763)

• MGGA_M05_C

Minnesota M05 correlation functional

References:

Y. Zhao, N. E. Schultz, and D. G. Truhlar, J. Chem. Phys. 123, 161103 (2005)

(10.1063/1.2126975)

• MGGA_M06_2X_C

Minnesota M06-2X correlation functional

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, Theor. Chem. Acc. 120, 215 (2008) (10.1007/s00214-007-0310-x)

• MGGA_M06_C

Minnesota M06 correlation functional

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, Theor. Chem. Acc. 120, 215 (2008) (10.1007/s00214-007-0310-x)

59

• MGGA_M06_HF_C

Minnesota M06-HF correlation functional

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. A 110, 13126 (2006) (10.1021/jp066479k)

• MGGA_M06_L_C

Minnesota M06-L correlation functional

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, J. Chem. Phys. 125, 194101 (2006) (10.1063/1.2370993)

Y. Zhao and D. G. Truhlar, Theor. Chem. Acc. 120, 215 (2008) (10.1007/s00214-007-0310-x)

• MGGA_M06_L_X

Minnesota M06-L exchange functional

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, J. Chem. Phys. 125, 194101 (2006) (10.1063/1.2370993)

Y. Zhao and D. G. Truhlar, Theor. Chem. Acc. 120, 215 (2008) (10.1007/s00214-007-0310-x)

• MGGA_M08_HX_C

Minnesota M08 correlation functional

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, *J. Chem. Theory Comput.* 4, 1849 (2008) (10.1021/ct800246v)

• MGGA_M08_SO_C

Minnesota M08-SO correlation functional

References:

Y. Zhao and D. G. Truhlar, *J. Chem. Theory Comput.* 4, 1849 (2008) (10.1021/ct800246v)

• MGGA_M11_C

Minnesota M11 correlation functional

References:

R. Peverati and D. G. Truhlar, *J. Phys. Chem. Lett.* 2, 2810 (2011) (10.1021/jz201170d)

• MGGA_M11_L_C

Minnesota M11-L correlation functional

References:

R. Peverati and D. G. Truhlar, *J. Phys. Chem. Lett.* 3, 117 (2012) (10.1021/jz201525m)

• MGGA_M11_L_X

Minnesota M11-L exchange functional

References:

R. Peverati and D. G. Truhlar, *J. Phys. Chem. Lett.* 3, 117 (2012) (10.1021/jz201525m)

• MGGA_MBEEF_X

mBEEF exchange

References:

J. Wellendorff, K. T. Lundgaard, K. W. Jacobsen, and T. Bligaard, *J. Chem. Phys.* 140, 144107 (2014) (10.1063/1.4870397)

• MGGA_MBEEFVDW_X

mBEEF-vdW exchange

References:

K. T. Lundgaard, J. Wellendorff, J. Voss, K. W. Jacobsen, and T. Bligaard, *Phys. Rev. B* 93, 235162 (2016) (10.1103/PhysRevB.93.235162)

• MGGA_MN12_L_C

Minnesota MN12-L correlation functional

References:

60

R. Peverati and D. G. Truhlar, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 14, 13171 (2012)

(10.1039/C2CP42025B)

• MGGA_MN12_L_X

Minnesota MN12-L exchange functional

References:

R. Peverati and D. G. Truhlar, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 14, 13171 (2012)

(10.1039/C2CP42025B)

• MGGA_MN12_SX_C

Minnesota MN12-SX correlation functional

References:

R. Peverati and D. G. Truhlar, Phys. Chem. Chem. Phys. 14, 16187 (2012)
(10.1039/C2CP42576A)

• MGGA_MN15_C

Minnesota MN15 correlation functional

References:

H. S. Yu, X. He, S. L. Li, and D. G. Truhlar, Chem. Sci. 7, 5032 (2016) (10.1039/C6SC00705H)

• MGGA_MN15_L_C

Minnesota MN15-L correlation functional

References:

H. S. Yu, X. He, and D. G. Truhlar, J. Chem. Theory Comput. 12, 1280 (2016)
(10.1021/acs.jctc.5b01082)

• MGGA_MN15_L_X

Minnesota MN15-L exchange functional

References:

H. S. Yu, X. He, and D. G. Truhlar, J. Chem. Theory Comput. 12, 1280 (2016)
(10.1021/acs.jctc.5b01082)

• MGGA_MODTPSS_X

Modified Tao, Perdew, Staroverov & Scuseria

References:

J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, J. Tao, G. I. Csonka, and G. E. Scuseria, Phys. Rev. A 76, 042506
(2007) (10.1103/PhysRevA.76.042506)

• MGGA_MS0_X

MS exchange of Sun, Xiao, and Ruzsinszky

References:

J. Sun, B. Xiao, and A. Ruzsinszky, J. Chem. Phys. 137, 051101 (2012) (10.1063/1.4742312)

• MGGA_MS1_X

MS1 exchange of Sun, et al

References:

J. Sun, R. Haunschild, B. Xiao, I. W. Bulik, G. E. Scuseria, and J. P. Perdew, J. Chem. Phys.
138, 044113 (2013) (10.1063/1.4789414)

• MGGA_MS2_X

MS2 exchange of Sun, et al

References:

J. Sun, R. Haunschild, B. Xiao, I. W. Bulik, G. E. Scuseria, and J. P. Perdew, J. Chem. Phys.
138, 044113 (2013) (10.1063/1.4789414)

• MGGA_MVS_X

MVS exchange of Sun, Perdew, and Ruzsinszky

61

References:

J. Sun, J. P. Perdew, and A. Ruzsinszky, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 112, 685 (2015)
(10.1073/pnas.1423145112)

• MGGA_OTPSS_D_XC

oTPSS-D functional of Goerigk and Grimme

References:

L. Goerigk and S. Grimme, J. Chem. Theory Comput. 6, 107 (2010) (10.1021/ct900489g)

• MGGA_PBE_GX_X

PBE-GX functional of Loos

References:

P.-F. Loos, J. Chem. Phys. 146, 114108 (2017) (10.1063/1.4978409)

• MGGA_PKZB_C

Perdew, Kurth, Zupan, and Blaha

References:

J. P. Perdew, S. Kurth, A. Zupan, and P. Blaha, Phys. Rev. Lett. 82, 2544 (1999) (10.1103/PhysRevLett.82.2544)

• MGGA_PKZB_X

Perdew, Kurth, Zupan, and Blaha

References:

J. P. Perdew, S. Kurth, A. Zupan, and P. Blaha, Phys. Rev. Lett. 82, 2544 (1999) (10.1103/PhysRevLett.82.2544)

• MGGA_REVM06_L_C

Minnesota revM06-L correlation functional

References:

Y. Wang, X. Jin, H. S. Yu, D. G. Truhlar, and X. He, Proceedings of the National Academy of Sciences 114, 8487 (2017) (10.1073/pnas.1705670114)

• MGGA_REVM06_L_X

Minnesota revM06-L exchange functional

References:

Y. Wang, X. Jin, H. S. Yu, D. G. Truhlar, and X. He, Proceedings of the National Academy of Sciences 114, 8487 (2017) (10.1073/pnas.1705670114)

• MGGA_REVSCAN_C

revised SCAN

References:

P. D. Mezei, G. I. Csonka, and M. Kállay, J. Chem. Theory Comput. 0, null (0) (10.1021/acs.jctc.8b00072)

• MGGA_REVSCAN_VV10_C

REVSCAN + VV10 correlation

References:

P. D. Mezei, G. I. Csonka, and M. Kállay, J. Chem. Theory Comput. 0, null (0) (10.1021/acs.jctc.8b00072)

• MGGA_REVSCAN_X

revised SCAN

References:

P. D. Mezei, G. I. Csonka, and M. Kállay, J. Chem. Theory Comput. 0, null (0) (10.1021/acs.jctc.8b00072)

62

• MGGA_REVTPSS_C
revised TPSS correlation

References:

J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, L. A. Constantin, and J. Sun, Phys. Rev. Lett. 103, 026403 (2009) (10.1103/PhysRevLett.103.026403)

J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, L. A. Constantin, and J. Sun, Phys. Rev. Lett. 106, 179902 (2011) (10.1103/PhysRevLett.106.179902)

• MGGA_REVTPSS_X

revised Tao, Perdew, Staroverov & Scuseria

References:

J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, L. A. Constantin, and J. Sun, Phys. Rev. Lett. 103, 026403 (2009) (10.1103/PhysRevLett.103.026403)

J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, L. A. Constantin, and J. Sun, Phys. Rev. Lett. 106, 179902 (2011) (10.1103/PhysRevLett.106.179902)

• MGGA_SA_TPSS_X

TPSS with correct surface asymptotics

References:

L. A. Constantin, E. Fabiano, J. M. Pitarke, and F. Della Sala, Phys. Rev. B 93, 115127 (2016) (10.1103/PhysRevB.93.115127)

• MGGA_SCAN_C

SCAN correlation of Sun, Ruzsinszky, and Perdew

References:

J. Sun, A. Ruzsinszky, and J. P. Perdew, Phys. Rev. Lett. 115, 036402 (2015) (10.1103/PhysRevLett.115.036402)

• MGGA_SCAN_RVV10_C

SCAN + rVV10 correlation

References:

H. Peng, Z.-H. Yang, J. P. Perdew, and J. Sun, Phys. Rev. X 6, 041005 (2016) (10.1103/PhysRevX.6.041005)

• MGGA_SCAN_VV10_C

SCAN + VV10 correlation

References:

J. G. Brandenburg, J. E. Bates, J. Sun, and J. P. Perdew, Phys. Rev. B 94, 115144 (2016) (10.1103/PhysRevB.94.115144)

• MGGA_SCAN_X

SCAN exchange of Sun, Ruzsinszky, and Perdew

References:

J. Sun, A. Ruzsinszky, and J. P. Perdew, Phys. Rev. Lett. 115, 036402 (2015) (10.1103/PhysRevLett.115.036402)

• MGGA_TAU_HCTH_X

tau-HCTH from Boese and Handy

References:

A. D. Boese and N. C. Handy, J. Chem. Phys. 116, 9559 (2002) (10.1063/1.1476309)

• MGGA_TM_X

Tao and Mo 2016

References:

J. Tao and Y. Mo, Phys. Rev. Lett. 117, 073001 (2016) (10.1103/PhysRevLett.117.073001)
63

• MGGA_TPSS_C

Tao, Perdew, Staroverov & Scuseria

References:

J. Tao, J. P. Perdew, V. N. Staroverov, and G. E. Scuseria, Phys. Rev. Lett. 91, 146401 (2003)
(10.1103/PhysRevLett.91.146401)

J. P. Perdew, J. Tao, V. N. Staroverov, and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 120, 6898 (2004)
(10.1063/1.1665298)

• MGGA_TPSS_LXC_C

Tao, Perdew, Staroverov & Scuseria

References:

J. Tao, J. P. Perdew, V. N. Staroverov, and G. E. Scuseria, Phys. Rev. Lett. 91, 146401 (2003)
(10.1103/PhysRevLett.91.146401)

J. P. Perdew, J. Tao, V. N. Staroverov, and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 120, 6898 (2004)
(10.1063/1.1665298)

• MGGA_TPSS_LXC_X

Tao, Perdew, Staroverov & Scuseria

References:

J. Tao, J. P. Perdew, V. N. Staroverov, and G. E. Scuseria, Phys. Rev. Lett. 91, 146401 (2003)
(10.1103/PhysRevLett.91.146401)

J. P. Perdew, J. Tao, V. N. Staroverov, and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 120, 6898 (2004)
(10.1063/1.1665298)

• MGGA_TPSS_X

Tao, Perdew, Staroverov & Scuseria

References:

J. Tao, J. P. Perdew, V. N. Staroverov, and G. E. Scuseria, Phys. Rev. Lett. 91, 146401 (2003)
(10.1103/PhysRevLett.91.146401)

J. P. Perdew, J. Tao, V. N. Staroverov, and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 120, 6898 (2004)
(10.1063/1.1665298)

• MGGA_TPSS_XC

Functional components: MGGA_TPSS_C + MGGA_TPSS_X

References:

J. Tao, J. P. Perdew, V. N. Staroverov, and G. E. Scuseria, Phys. Rev. Lett. 91, 146401 (2003)
(10.1103/PhysRevLett.91.146401)

J. P. Perdew, J. Tao, V. N. Staroverov, and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 120, 6898 (2004)
(10.1063/1.1665298)

J. Tao, J. P. Perdew, V. N. Staroverov, and G. E. Scuseria, Phys. Rev. Lett. 91, 146401 (2003) (10.1103/PhysRevLett.91.146401)

J. P. Perdew, J. Tao, V. N. Staroverov, and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 120, 6898 (2004) (10.1063/1.1665298)

• MGGA_TPSSLOC_C

Semilocal dynamical correlation

References:

L. A. Constantin, E. Fabiano, and F. Della Sala, Phys. Rev. B 86, 035130 (2012) (10.1103/PhysRevB.86.035130)

• MGGA_TPSSLYP1W_XC

TPSSLYP1W

References:

E. E. Dahlke and D. G. Truhlar, J. Phys. Chem. B 109, 15677 (2005) (10.1021/jp052436c) 64

• MGGA_VSXC_C

VSXC (correlation part)

References:

T. V. Voorhis and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 109, 400 (1998) (10.1063/1.476577)

• MGGA_VT84_X

meta-GGA version of VT{8,4} GGA

References:

J. M. del Campo, J. L. Gázquez, S. Trickey, and A. Vela, Chem. Phys. Lett. 543, 179 (2012) (10.1016/j.cplett.2012.06.025)