
【Q-Chem 5.3 のインストール】

— Mac OS・Linux OS へのオンラインインストーラ手順（推奨） —

(株) アフィニティサイエンス

概要 : Mac OS・Linux OS へのインストールには、オンラインインストーラと、予めインストーラパッケージをダウンロードするオフラインインストーラの2つの方法があります。
ここでは、推奨されているオンラインインストーラについて、その手順を説明していきます。

1. 事前準備

1.1 インストール先とスクラッチディレクトリの確認

Q-Chem のインストール時に、場所の指定が可能なディレクトリについて、その設定値を事前に確認します。

◆ インストールディレクトリ

Q-Chem をインストールするディレクトリ。環境変数 `$QC` に対して、インストール先のディレクトリのサーバ上の設置パスを絶対パスで設定します。

(Linux OS の場合の設定例)

例 1) 複数ユーザで使用する場合 (*共有ディレクトリを指定、管理者権限が必要)

`/usr/local/qchem/5.3`

`/home/application/qchem/5.3`

例 2) 単独ユーザで使用する場合

`/home/[ユーザ名]/qchem/5.3`

◆ AUX ディレクトリ

計算に必要な補助的な情報を保存するディレクトリ。環境変数 `$QCAUX` に対して、サーバ上の設置パスを設定します。デフォルトの値は `$QC/qcaux` です。特に必要がなければ変更の必要はありません。

◆ スクラッチディレクトリ

計算の途中結果ファイルなどを一時的に格納するディレクトリで、十分な空き容量が必要です。環境変数 `$QCSCRATCH` は、サーバ上の設置パスを指定します。

クラスタ（複数ノード）環境の場合、**全てのノードで共有されているディレクトリ**のパスを指定します。計算終了後、通常、このディレクトリの中に作成された一時ファイルは全て削除されます。

（必要に応じてファイルを削除せずに保存することが可能です。7.Q-Chem の実行を参照）

（Linux OS の場合の設定例）

例 1) クラスタ環境の場合

/usr/shared/qcscratch

/home/application/ qcscratch

例 2) コンピュータ単体で使用する場合

/tmp

◆ ローカル・スクラッチディレクトリ

※必要に応じて設定する項目。クラスタ環境で並列計算を行う場合、設定することが推奨されています。

ノード毎に行われる計算の途中結果ファイルなどを一時的にローカル領域内に格納するディレクトリ。環境変数 \$QCLOCALSCR に対して、ノード上の設置パスを設定します。

この項目の設定を行うと、各ノードに分散して計算が行うことが可能となり、パフォーマンスが向上します。ノード毎にローカル領域に保存された途中結果ファイルなどは、計算ジョブ終了後、スクラッチディレクトリにコピーされ、まとめられます。

（Linux OS の場合の設定例）

例) クラスタ環境の場合

/tmp

1.2 ご注文番号とメールアドレスの確認

Q-Chem のオンラインインストール作業の中で、自動的に認証ライセンスファイルのリクエストが実行されます。この時、ご注文番号(Q-Chem 社 Order Number)が必要です。認証ライセンスファイルは、指定したメールアドレス宛にメールにて送付されます。

◆ ご注文番号 (Q-Chem 社 Order Number)

ご不明な場合、(株)アフィニティサイエンス 営業部 (sales@affinity-science.com)までご連絡下さい。

◆ メールアドレス

ライセンスファイル受取先のメールアドレスを準備します。

リクエスト後、認証用ライセンスファイルが1～2日程度で届きます。

2. パッケージとライセンスのオプション

2.1. パッケージのオプション

i. 共有メモリ

Linux 64-bit 共有メモリバージョン

”Linux 64-bit shared memory parallel code”

Linux 64-bit NVIDIA/BrianQC GPU サポートバージョン

”Linux 64-bit shared memory parallel code with NVIDIA/BrianQC GPU support”

* BrianQC がインストールされます。

ii. クラスタ

Linux 64-bit クラスタバージョン (MPICH 使用)

”Linux 64-bit cluster-parallel code based on MPICH”

* MPICH が組込まれています。

Linux 64-bit クラスタバージョン (MPICH3 使用)

”Linux 64-bit cluster-parallel code based on MPICH3”

* MPICH3 が別途必要です。

Linux 64-bit クラスタバージョン (OpenMPI 1.10 使用)

”Linux 64-bit cluster-parallel code based on OpenMPI 1.10”

* OpenMPI 1.10 が別途必要です。

* Q-Chem 4.x までで提供されていた “Linux 64-bit serial/multicore-parallel code” バージョンは提供されません。

* Q-Chem 5.0 以降は BrianQC による GPU サポート版が提供されています。

2.2. ライセンスのオプション

i. ノード固定ライセンス ”Node-locked licensing“

* ライセンスは特定の MAC アドレス固定でマシン毎に付与されます。

* コンピュータ単体での使用、小さなクラスタ環境に適しています。

ii. リモートライセンス ”FlexNet based remote licensing”

* FlexNet を使用したライセンスサーバが必要です。

* 大規模なクラスタやマルチユーザ環境に適しています。

3. インストール

3.1. オンライン用インストールスクリプトのダウンロード

```
$ wget -N https://downloads.q-chem.com/qcinstall.sh
```

を実行します。

※ Mac OS で上記の wget が利用できない場合、curl コマンドを利用します。

```
$ curl http://www.q-chem.com/download/qcinstall/qcinstall.sh >
```

3.2. インストールスクリプトのパーミッションを実行可能に変更

```
$ chmod +x ./qcinstall.sh
```

を実行します。

3.3. インストールスクリプトの実行

```
$ ./qcinstall.sh
```

を実行します。

3.4. インストール画面上の指示に従って進行

welcome 画面

```
*****  
*                                     *  
*               Welcome to Q-Chem Installation               *  
*                                     *  
*                                     *  
*****  
  
This is the online installation package for Q-Chem.  
Internet access is required to download the distribution.
```

3.4.1. Q-Chem をインストールするディレクトリの入力

1.1 で確認したインストールディレクトリのサーバ上の設置パスを**絶対パス**で入力します。

例 1) 複数ユーザで使用する場合

```
/usr/local/qchem/5.3
```

```
/home/application/qchem/5.3
```

例 2) 単独ユーザで使用する場合

/home/[ユーザ名]/qchem

```
Please specify the path of the new Q-Chem installation directory,
or type 'x' to exit

> /home/application/qchem/5.3.0

Q-Chem will be installed in /home/application/qchem/5.3.0
```

3.4.2. インストールするパッケージの選択

上記 2.1 パッケージのオプションの使用可能パッケージが表示されますので、インストールするパッケージの番号を選択します。

```
You are installing Q-Chem 5.3.0
Available packages for LINUX_Ix86_64:
1 -- Linux 64-bit shared-memory version
2 -- Linux 64-bit cluster version (requires MPICH3)
3 -- Linux 64-bit cluster version (requires OpenMPI 1.10)
4 -- Linux 64-bit version with NVIDIA GPU support (installs BrianQC)

Please choose package to install or press 'x' to exit [1-4]
```

必要な追加コンポーネントが自動的にダウンロードされます。

3.4.3. QC スクラッチディレクトリの入力

1.1 で確認したスクラッチディレクトリの設定パスを絶対パスで入力します。

```
*****
*                                     *
*               Q-Chem Runtime Environment               *
*                                     *
*****

$QCSCRATCH:
A scratch directory, specified by the $QCSCRATCH variable, is
required for storing temporary files and for restarting jobs.
In a cluster environment the scratch directory must be a
shared directory available to all of the nodes.

Please specify the full path for a scratch directory
```

例 1) クラスタ環境の場合

/usr/shared/qcscratch

/home/application/ qcscratch

例 2) コンピュータ単体で使用する場合

/tmp

3.4.4. ローカル・スクラッチディレクトリの入力

次に、ローカル・スクラッチディレクトリを使用するかどうかを **y** か **n** で入力します。

```
Please specify the full path for a scratch directory
> /tmp

For performance reasons, some parallel platforms provide
scratch space local to each node
Do you want to use a local scratch directory? (y/n) > █
```

コンピュータ単体で使用する場合は必要がないので、**n** を入力します。

クラスタ環境で、ローカル・スクラッチディレクトリを設定する場合には、**y** を入力し、続けて、1.1 で確認したローカル・スクラッチディレクトリのパスを入力します。

例) 複数クラスタ環境の場合

```
/tmp
/var/tmp
```

クラスタ環境で並列計算を行う場合、ローカル・スクラッチディレクトリを設定することにより、よりパフォーマンスを高くすることができます。

3.4.5. リモートコマンドの選択

次に、リモートのコマンド実行をするためのシェルコマンドを入力するように求められるので、**rsh** あるいは **ssh** を入力します。

```
To run Q-Chem in parallel passwordless rsh/ssh between
computing nodes is required.

Please select or enter the remote shell command to use
(rsh/<ssh>) > █
```

3.4.6. 使用メモリのデフォルト最大値の入力

使用メモリの最大値を**数字**で入力します。(既定値は 8000MB です。)

```

Default Upper Memory Limit:
The MEM_TOTAL keyword in Q-Chem input files specifies the
maximum amount of memory used by each Q-Chem process.
Here you can set a default value for MEM_TOTAL, which
will be saved in $QC/config/preference file. You can edit
this file later or specify MEM_TOTAL in input files.

Please specify a default value for MEM_TOTAL in megabytes [8000]
> 8000

```

3.4.7. システム設定ファイルの場所表示

作成されたシステム設定ファイルの場所が表示されます。

```

*****
*                                     *
*               Q-Chem Runtime Environment               *
*                                     *
*****

The Q-Chem system configuration preference file is:
/home/application/qchem/5.3.0/config/preferences

The environment variables file is:
/home/application/qchem/5.3.0/config/shellvar.txt

*****

```

3.4.8. ライセンス契約の確認

ライセンス契約内容を閲覧するかどうかを聞いてきますので、**y**を入力し内容をご確認下さい。

```

*****
*                                     *
*               Q-Chem License Agreement               *
*                                     *
*****

Please review Q-Chem's licensing agreement before registration.

Would you like to view the licensing agreement? <y/n>...<y>

```

3.4.9. ライセンス契約の受諾

ライセンス契約に合意するかどうかを聞いてきますので、(よろしければ) **y**を入力します。

8. **Limited Warranty.** The Licensor warrants that the software medium will be free from defects in materials and workmanship under normal use and service for a period of one (1) year from the date of receipt. To the extent allowed by applicable law, implied warranties on the software medium, if any, are limited to ninety (90) days.

The Licensor specifically does NOT warrant the results of calculations performed using the Software Product. The Licensee is responsible for assuring that the mathematical, engineering, scientific use or any other application of the Software Product is qualified according to the applicable professional norms.

9. **Customer Remedy Under Warranty.** The Licensor's entire liability and exclusive remedy shall be replacement of the software medium that does not meet the Licensor's Limited Warranty and which is returned to the Licensor with a copy of the Licensee's receipt, paid invoice or other proof of purchase. This Limited Warranty is void if failure of the software medium has resulted from accident, abuse or misapplication. Any replacement software medium will be warranted for the remainder of the original warranty period or thirty (30) days, whichever is longer. Outside the United States, neither these remedies nor any product support services offered by the Licensor are available without a copy of the Licensee's receipt, paid invoice or other proof of purchase from an authorized distributor.
10. **Disclaimer of Warranty.** The Licensor and its suppliers disclaim all other warranties, either expressed or implied, including, but not limited to, implied warranties of merchantability and fitness for a particular purpose with regard to the Software Product and any accompanying software medium.
11. **No Liability for Consequential Damages.** In no event shall the Licensor or its suppliers be liable for any special incidental, indirect or consequential damages whatsoever (including, without limitation, damages for loss of business profits, business interruptions, loss of business information or any other pecuniary loss) arising out of the use of or inability to use the Software Product, even if the Licensor has been advised of the possibility of such damages.
12. **No Third Party Liability.** The Licensee agrees to indemnify the Licensor, its distributors and its suppliers from assertions by Third Parties against the Licensor resulting from the use of this Software Product by Licensee for the benefit of said Third Parties. Under no circumstance shall the Licensor be held liable for the application selected, employed or otherwise made the responsibility of the Licensee for the benefit of any Third Party.

*Q-Chem is a trademark of Q-Chem, Inc.

Do you accept the terms of the licensing agreement? <y/n>...<y>y

4. 認証ライセンスファイルのリクエスト

4.1. ご注文番号とメールアドレスの入力

認証ライセンスファイルの送付のリクエストを行うにあたって、

ご注文番号(Q-Chem社 Order Number)と、ご連絡用のメールアドレスを入力します。

```

*****
*
*           Q-Chem License Registration
*
*
*****

Registration is required to use Q-Chem. Please provide a valid
e-mail address in order to receive a Q-Chem license file.

- If you are a current Q-Chem user, please provide the order number
  below. It can be found in the e-mail you received from Q-Chem.

- If you are a new Q-Chem user without an order number, please enter 0
  below and provide the registration information subsequently.

Please enter your order number:  ご注文番号

[IMPORTANT: a valid Email is REQUIRED to receive license]
Please enter your email address CORRECTLY: メールアドレス

User Registration Information:
-----
Order Number: ####
Email: *****@*****.***

Is the above information correct?<y/n>...<y>

```

表示された内容で宜しければ **y** を入力します。

4.2. ライセンスオプションの選択

上記 **2.2 ライセンスのオプション** の、ノード固定ライセンスか FlexNet を使用するリモートライセンスにするかを選択し、**1** か **2** を入力します。

```

*****
*
*           Q-Chem Licensing Options
*
*
*****

Q-Chem has two options for licensing:

1-- Node-locked licensing where licenses are issued
   for specific machines. This is appropriate for
   single computers and most small clusters.

2-- FlexNet based remote licensing. This option
   requires a central licensing server and is
   appropriate for larger clusters and multi-
   user environments.

Please specify the licensing scheme from above. (<1>/2)
> 1

```

4.3. 登録内容の確認

表示された内容を確認し、よろしければ **y** を入力します。

```
*****
*
*                               Q-Chem License Registration
*
*                               *****
*****

The following procedure will run the license program,
$QC/bin/get_hostid, on all the cluster nodes to collect
the require data for node-locked licensing, provided:

1. the Q-Chem directory is installed as a shared directory among all
   the nodes
2. passwordless rsh/ssh between all the nodes is enabled.

If the above criteria are not met, you will need to perform the
licensing procedure manually. Please see the file README.License for
details.

Would you like to proceed with the automated procedure?
Enter "y" or press <enter> to continue or "n" to exit: █
```

ライセンスを持つノードのリストのインポート方法を聞かれるので、**F** か **E** を入力します。

1. マシンのホスト名のリストを並べたファイル(**File**)を指定する
2. 各マシンを使用する都度、メッセージダイアログを表示する(**Explicit**)

```
You have two options for entering the list of nodes to be licensed.

1. Specifying a file containing the list of all the machine. This is
   just a straight text file that has the hostname of each machine.

2. Explicitly entering each machine. You will be prompted to enter
   each name individually.

Which method would you like to use: [F]ile or [E]xplicit? (F or E) █
```

E を選択した場合には下のよう、マシン ID の入力を求められます。

入力後、接続の許可を求められるので、**yes** を入力します。

```
Enter Machine Names:
Please enter the hostname of the machine you would like to license
[just press return to exit]:
  マシン ID
Please enter the hostname of the machine you would like to license
[just press return to exit]:

Start collecting node license data:
licensing node zeta ... please wait ...
The authenticity of host [マシン ID] can't be established.
ECDSA key fingerprint is SHA256:59ydxciMZZDdLJlRgpfng3qiZn3fSp906G63QLur4.
ECDSA key fingerprint is MD5:3b:cb:02:ad:7b:cd:bf:5c:3c:89:27:c5:39:8e:5e:a9.
Are you sure you want to continue connecting (yes/no)? █
```

4.4. 要求データの Q-Chem サーバへの送信

ご注文番号、メールアドレス、インストールしたマシンのデータが自動的に Q-Chem サーバに送られます。また、ここで画面上に表示されたライセンス要求内容が登録したメールアドレスに送られます。(ライセンスデータの内容ではありません。)

```

Finished licensing 1 total nodes, 1 valid SIDs obtained.
[redacted] マシン ID
The installer is now submitting license data to the Q-Chem server

Message from Q-Chem Server:

The following license data has been received.
A copy of this message has been sent to
[redacted] *****@*****

2020年 7月 31日 金曜日 15:27:29 JST
#sta_regi
  Order Number: [redacted] ご注文番号
  User Name:
  Department:
  Group Leader:
  Institute:
  Email: [redacted] メールアドレス
#end_regi
QCPLATFORM LINUX_Ix86_64
QCMPI MPICH3
QCVERSION 5.3.0
QCOLDVER
QCLICOPT nodelocked
#sta_sid
[redacted] マシン ID
#end_sid
This is not your license, you will receive the license
in another email shortly.

-----

Summary of License Data Gathering

The licenses data has been submitted to Q-Chem
office. You should receive a confirmation email
and subsequently the license file at the email
address [redacted] *****@*****

If you do not receive the confirmation email
within an hour please email the file
/home/application/qchem/5.3.0/license.data
to license@q-chem.com to request your license.

-----

```

もし、メール送信に失敗した場合は、インストールディレクトリに作成された **license.dat** ファイルをメール添付して、Q-Chem 社 (license@q-chem.com) までライセンスをリクエストして下さい。

4.5. セットアップ手順の表示

最後に、この後のインストール作業後の手順が表示されます。

表示例)

```

*****
*
*               Q-Chem Installation Summary
*
*
*****

Q-Chem installation/update has been completed.

To run Q-Chem calculations simply source the setup script below.

For tcsh or csh:
source /home/application/qchem/5.3.0/qcenv.csh

For bash:
. /home/application/qchem/5.3.0/qcenv.sh

You can put the above lines in your shell startup script
~/.cshrc for tcsh/csh or ~/.bashrc for bash.

To get the latest Q-Chem updates please run

/home/application/qchem/5.3.0/qcupdate.sh

To regenerate license data please run

/home/application/qchem/5.3.0/qcinstall.sh --update-lic

*****

```

5. セットアップスクリプトのリソースファイルへの反映

Q-Chem の計算をさせるためのセットアップスクリプトを、シェルの実行環境に反映させる必要があります。

次のコマンドを実行し、ユーザのデフォルトログインシェルを確認します。

```
$ echo _$SHELL
```

出力が/bin/bash の場合、デフォルトログインシェルは、bash です。

出力が/bin/tcsh または/bin/csh の場合、tcsh 又は csh です。

・ bash 系ユーザは、シェルのリソースファイル `~/.bashrc` に

```
export QC=[インストールディレクトリのパス]
export QCSCRATCH=[QC スクラッチディレクトリのパス]
.$QC/qcenv.sh
```

を追加します。その後、シェルを再起動するか `source` コマンドを使って環境設定を現在のシェルに反映させます。

```
$ source ~/.bashrc
```

・ tcsh 又は csh 系ユーザは、シェルのリソースファイル `~/.cshrc` に

```
setenv QC [インストールディレクトリのパス]
setenv QCSCRATCH [QC スクラッチディレクトリのパス]
source $QC/qcenv.csh
```

を追加します。その後、シェルを再起動するか `source` コマンドを使って環境設定を現在のシェルに反映させます。

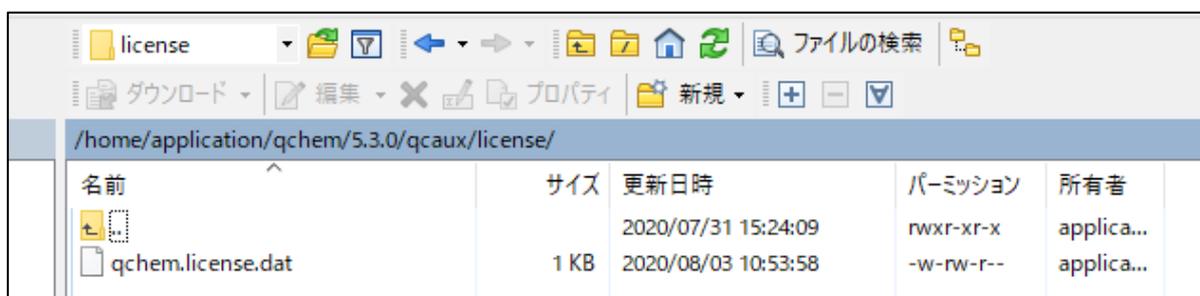
```
$ source ~/.cshrc
```

6. 認証ライセンスファイルの保存

インストールから 1~2 日で “Q-Chem 5.3 License – OrderID: #####” というタイトルのメールが “Q-Chem License” office@q-chem.com より送られてきます。

‘`qchem.license.dat.[ホストマシン名]`’ という名前で認証ライセンスファイルが添付されています。

最後の [ホストマシン名] を削除し、‘`qchem.license.dat`’ という名前で Q-Chem インストールディレクトリ直下にある `qcaux/license` ディレクトリ内に保存します。



名前	サイズ	更新日時	パーミッション	所有者
qchem.license.dat	1 KB	2020/08/03 10:53:58	-w-rw-r--	applica...

7. Q-Chem の実行

正しいライセンスファイルが格納されると、コマンド

```
$ qchem [入力ファイル名] [出力ファイル名]
```

により Q-Chem を実行することができます。入力ファイル *.in と同じ階層に *.out の出力ファイルが生成されます。この場合、計算途中に生成される一時ファイルは全て出力ファイル生成後に削除されます。

計算中に一時的に生成されるスクラッチファイルを保存したい場合には、以下のコマンドを使用します。QC スクラッチディレクトリ内に、指定した[保存ディレクトリ]が生成され、分子形状、分子軌道、密度行列、力の定数を含む、必要最低限のファイルが保存されます。

```
$ qchem [入力ファイル名] [出力ファイル名] [保存ディレクトリ名]
```

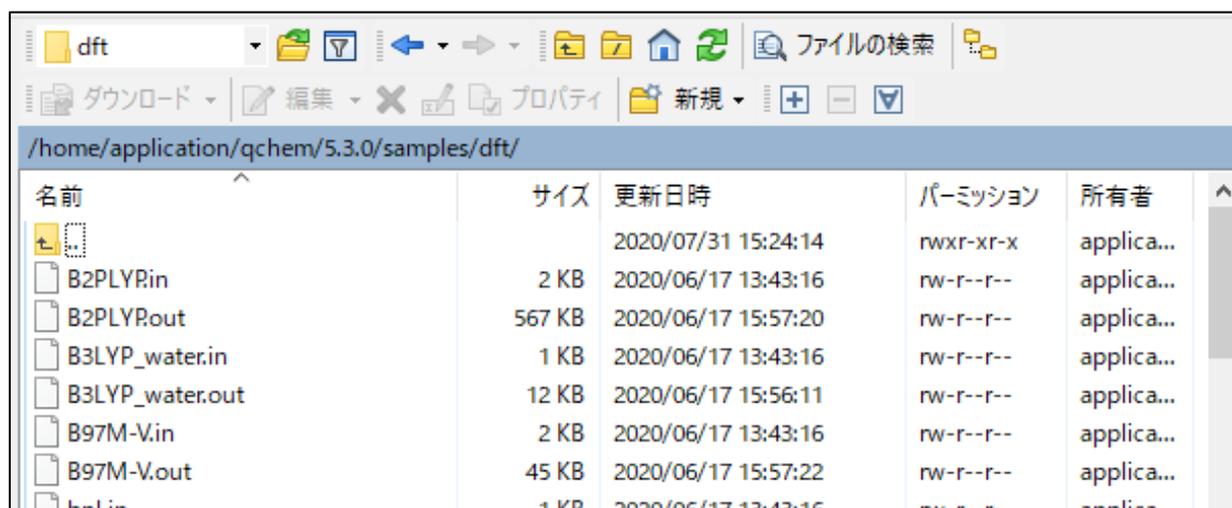
計算に関わった全てのスクラッチファイルを保存したい場合には、以下のコマンドを使用します。

```
$ qchem -save [入力ファイル名] [出力ファイル名] [保存ディレクトリ名]
```

8. サンプルファイルを使用した動作確認

Q-Chem インストールディレクトリの直下にサンプル用のファイルが格納されている samples ディレクトリがあります。

これを、ユーザのホームディレクトリ以下の任意の場所にコピーします。



ユーザのホームディレクトリ以下にコピーした samples/dft ディレクトリに移動します。

ここでは、サンプル用入力ファイル B3LYP_water.in を入力ファイルとして使用します。(元々存在する

B3LYP_water.out ファイルは、B3LYP_water.out.backup などリネームをしてバックアップしておいてください。)

次のコマンドを実行します。

```
$ qchem B3LYP_water.in B3LYP_water.out
```

コマンドの出力結果にエラーがなく、作成された、**B3LYP_water.out** の内容を確認します。バックアップファイルと比較して同じように出力されていれば、動作確認は終了です。

コマンド実行後のターミナル画面表示

```
You are running Q-Chem version: 5.3.0
#
# job setting
#
local host: zeta.localdomain
current dir: /home/shiomi/qchem/samples/dft
input file: B3LYP_water.in
output file: B3LYP_water.out
nprocs      : 0
nthreads    : 1
#
# qchem installation setting
#
QC:          /home/application/qchem/5.3.0
QCAUX:       /home/application/qchem/5.3.0/qcaux
QCPRG:       /home/application/qchem/5.3.0/exe/qcprog.exe_s
QCPRG_S:     /home/application/qchem/5.3.0/exe/qcprog.exe_s
PARALLEL:    -D SERIAL
QCMPI:       mpich3
#
# qchem directory setting
#
qcrun:       qchem13124
QCSCRATCH:   /tmp
QCLOCALSCR:  /tmp
QCTMPDIR:    /tmp
QCFILEPREF:  /tmp/qchem13124
QCSAVEDIR:   /tmp/qchem13124
workdirs:    /tmp/qchem13124
workdir0:    /tmp/qchem13124
partmpdirs =
#
# parallel setting
#
QCRSH:       ssh
QCMPI:       mpich3
QCMPIRUN:    mpirun
QCMACHINEFILE: /home/application/qchem/5.3.0/bin/mpi/machines
#
# env setting
#
exported envs:  QC QCAUX QCSCRATCH QCRUNNAME QCFILEPREF QCPRG QCPRG_S GUIFILE
remove work dirs /tmp/qchem13124.0 -- /tmp/qchem13124.-1
rm -rf /tmp/qchem13124
```

出力された B3LYP_water.out ファイル

```
Running Job 1 of 1 B3LYP_water.in
qchem B3LYP_water.in_13124.0 /tmp/qchem13124/ 0
/home/application/qchem/5.3.0/exe/qcprog.exe_s B3LYP_water.in_13124.0 /tmp/qchem13124/
Welcome to Q-Chem
A Quantum Leap Into The Future Of Chemistry
```

Q-Chem 5.3, Q-Chem, Inc., Pleasanton, CA (2020)

Yihan Shao, Zhengting Gan, E. Epifanovsky, A. T. B. Gilbert, M. Wormit, J. Kussmann, A. W. Lange, A. Behn, Jia Deng, Xintian Feng, D. Ghosh, M. Goldey, P. R. Horn, L. D. Jacobson, I. Kaliman, T. Kus, A. Landau, Jie Liu, E. I. Proynov, R. M. Richard, R. P. Steele, E. J. Sundstrom, H. L. Woodcock III, P. M. Zimmerman, D. Zuev, B. Alam, B. Albrecht, A. Aldossary, E. Alguire, S. A. Baeppler, D. Barton, Z. Benda, Y. A. Bernard, E. J. Berquist, K. B. Bravaya, H. Burton, K. Carter-Fenk, D. Casanova, Chun-Min Chang, Yunqing Chen, A. Chien, K. D. Closser,

(中略)

Ground-State Mulliken Net Atomic Charges

Atom	Charge (a.u.)
1 O	-0.781752
2 H	0.390876
3 H	0.390876
Sum of atomic charges =	0.000000

Cartesian Multipole Moments

Charge (ESU x 10 ¹⁰)					
-0.0000					
Dipole Moment (Debye)					
X	0.0000	Y	-0.0000	Z	-2.0591
Tot	2.0591				
Quadrupole Moments (Debye-Ang)					
XX	-4.2355	XY	0.0000	YY	-7.1602
XZ	-0.0000	YZ	-0.0000	ZZ	-6.0262
Octopole Moments (Debye-Ang ²)					
XXX	0.0000	XXY	-0.0000	XYY	0.0000
YYY	-0.0000	XXZ	-1.1736	XYZ	-0.0000
YYZ	-0.3347	XZZ	0.0000	YZZ	-0.0000
ZZZ	-1.2139				
Hexadecapole Moments (Debye-Ang ³)					
XXXX	-5.8166	XXXY	0.0000	XXYY	-2.0619
XYYY	0.0000	YYYY	-5.1640	XXXZ	-0.0000
XXYZ	-0.0000	YYYZ	-0.0000	YYYZ	-0.0000
XXZZ	-1.7138	XYZZ	0.0000	YYZZ	-1.9223
XZZZ	-0.0000	YZZZ	-0.0000	ZZZZ	-6.1153

Archival summary:

l\l\zetaeta.localdomain\SP\ProcedureUnspecified\6-31G*\12\shiom\MonAug311:20:132020MonAug311:20:132020\0\#\ProcedureUnspecified,6-31G*,\0,1\0\H,1,0.947\H,1,0.947,2,105.5\@@

Total job time: 0.60s(wall), 0.60s(cpu)
Mon Aug 3 11:20:13 2020

```
*****
*
* Thank you very much for using Q-Chem. Have a nice day.
*
*****
```