已创建环境变量文件(/public/software/g09/g09-env.sh)，内容如下：

```
export g09root=/public/software
export GAUSS_SCRDIR=/tmp                    #指定缓存文件目录
source $g09root/g09/bsd/g09.profile         #读取相应的环境变量
```

运行 Gaussian09

由于 Gaussian 软件的计算参数均在输入文件中设置， 在此简单介绍一下输入格式。在终端下直接运行 Gaussian 程序， 可以从 test 目录下复制标准算例， 也可以按照以下内容新建一个文件作为输入， 注意其中空行都不可省略：

```
%nproc=2                                    #并行的线程数
%mem=128MB                                  #允许使用的最大内存数量
# hf/6-31g                                  #指定计算方法
                                            #空行，不可省略
water gauss                                 #注释行，任务说明
                                            #空行，不可省略
0 1                                         #体系净电荷与自旋多重度
O                                           #以下为体系的三维结构描述
H   1    B1
H   1    B2    2   A1

B1       0.96
B2       0.96
A1     109.50
                                            #空行，表示输入结束
```

接下来切换到 gauss 用户，进行试算：

```
[root@node1]# su – gauss                    #切换用户
[gauss@node1]# mkdir -p gaussian_test       #创建测试目录
[gauss@node1]# cd gaussian_test             #切换目录
[gauss@node1]# vi h2o.com                   #创建输入文件，内容如上
                                            #或者复制输入文件

[gauss@node1]# source /public/software/g09/g09-env.sh    #载入 g09 环境变量
[gauss@node1]#  /public/software/g09/g09  <  h2o.com  >  h2o.log    #开始计算
```

```
[gauss@node1]# /public/software/g09/g09    < h2o.com    > h2o.log
```