

# 花巷：一个用于进行非共价相互作用指数(NCI)分析的脚本

王秀<sup>12</sup> 戚达炜<sup>12</sup>

<sup>1</sup>物理与能源学院，福建师范大学

<sup>2</sup>福建物质结构研究所，中国科学院

Johnson, E. R., Keinan, S., Mori-Sánchez, P., Contreras-García, J., Cohen, A. J. & Yang, W. (2010). J Am Chem Soc 132, 6498–6506.

## 定义

$$\text{RDG} = \frac{|\nabla\rho(\mathbf{r})|}{2(3\pi^2)^{1/3}\rho(\mathbf{r})^{4/3}}$$

在  $\text{RDG} = 0.5 a.u.$  的位置画等值面。

$$H(\rho) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2\rho}{\partial x^2} & \frac{\partial^2\rho}{\partial x\partial y} & \frac{\partial^2\rho}{\partial x\partial z} \\ \frac{\partial^2\rho}{\partial y\partial x} & \frac{\partial^2\rho}{\partial y^2} & \frac{\partial^2\rho}{\partial y\partial z} \\ \frac{\partial^2\rho}{\partial z\partial x} & \frac{\partial^2\rho}{\partial z\partial y} & \frac{\partial^2\rho}{\partial z^2} \end{pmatrix} \text{三个特征值 } \lambda_1, \lambda_2, \text{ and } \lambda_3$$

等值面的颜色由  $\rho \text{sign}(\lambda_2)$  给出，越偏向于负值（冷色）相互作用约偏向于吸引，越偏向于正值（暖色）相互作用约偏向于排斥。

求解的重点在于各种类型的数值导数。

常规算法往往结合了插值和快速傅里叶变换，在倒空间求解。

我们的程序充分利用计算机的性能，在实空间中进行有限差分：

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!}f''(x_0) + \mathcal{O}(h^3) \quad (1)$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!}f''(x_0) + \mathcal{O}(h^3) \quad (2)$$

$$\implies f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}$$

计算所需的数据点由径向基函数查询得到。根据具体的任务和CPU的类型分配并行计算。

我们算法的结果与理想情况下的数值解更加接近。

# 示例 mp-1218409 $\text{SrCaAl}_2(\text{SiN}_3)_2$

