

## 性质

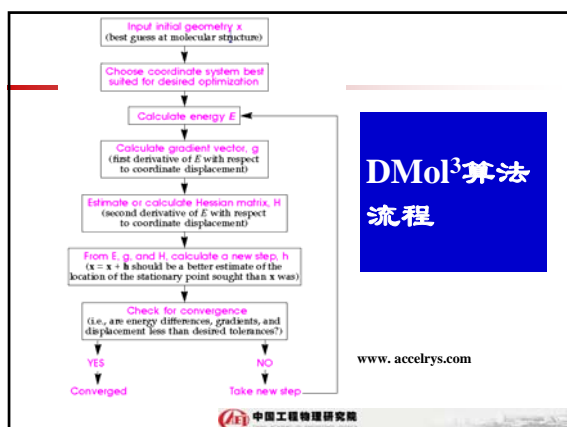
- Mulliken, Hirshfeld, ESP 电荷
- 静电偶极矩 (Electrostatic moments)
- Fukui 指数
- 核电场梯度 (Nuclear electric field gradients)
- 键级分析 (Bond order analysis)
- 生成热, 自由能, 焓, 熵, 热容, 零点能

中国工程物理研究院

## DMol<sup>3</sup>并行化技术

- 分布内存模型
  - 每个处理器有自己的内存和文件系统
  - setenv DMOL\_TMP临时文件系统
- 消息传递界面 (MPI)
- 全体网格均衡分布到所有节点
- 并行化的任务
  - 构造势和Hamiltonian
  - 合成电子密度
  - 计算能量梯度
- 没有并行化的任务
  - 对角化
  - 初始化

中国工程物理研究院



- 详细数学过程与公式以后补上
- (公式输入太耗时)

•  $\sqrt{(\hat{o})}$

中国工程物理研究院

- 理论结合实验
- 理论结合实践 (包括上机)
- 祝大家在学术上取得新进展

•  $\sqrt{(\hat{o})}$

中国工程物理研究院

谢谢!

中国工程物理研究院