

PCCP Paper

'OF-DFT SCF calculations for an H₂ molecule using a nonlocal kinetic energy functional defined on energy coordinates'

Hideaki Takahashi

Supplementary Information:

For producing Figs. 1(a) and 1(b), which are, respectively, for the full response function and the composite response function, we provide below the corresponding raw data for these graphs.

1. For Fig. 1(a): full response function (20x20 = 400)

```
2.210580720766345E-015
2.199343381223277E-012
7.424917967019406E-011
5.155926391855923E-010
1.478968564519954E-009
2.648124749067007E-009
3.393045357373820E-009
2.917060776703864E-009
1.565259169588468E-009
-2.278742061970397E-010
-1.778907940127624E-009
-2.567743146429730E-009
-2.856133471896005E-009
-2.171111679354548E-009
-1.087951221841794E-009
-9.838666318689721E-010
-6.982138018297663E-010
0.000000000000000E+000
-1.052824547598378E-010
-1.174174357655836E-010
2.199343381223226E-012
2.510687340591051E-009
9.037207203041426E-008
6.524776148320139E-007
1.905486008866373E-006
3.451264902324405E-006
4.451765279392110E-006
3.850368497840539E-006
2.074950798598274E-006
-2.725664698915268E-007
-2.322259686389899E-006
-3.364184558656468E-006
-3.747331074029785E-006
-2.848601093271711E-006
-1.426701362093881E-006
-1.291634455612944E-006
-9.143545814345367E-007
0.000000000000000E+000
-1.374760123786984E-007
-1.540887668087164E-007
7.424917967019308E-011
9.037207203041491E-008
3.349807263908583E-006
2.462674496799229E-005
```

7.248001592897012E-005
1.320156389188923E-004
1.707878092497256E-004
1.481496466959842E-004
7.987165742908434E-005
-9.962382486063476E-006
-8.893802020482720E-005
-1.290006775887214E-004
-1.437731424508405E-004
-1.092686276546398E-004
-5.469747870380684E-005
-4.955786280641500E-005
-3.501188735543191E-005
0.000000000000000E+000
-5.251864683042591E-006
-5.909822841973654E-006
5.155926391855983E-010
6.524776148320199E-007
2.462674496799035E-005
1.831365912692915E-004
5.415488175398771E-004
9.899588203568900E-004
1.282998203289621E-003
1.115035881113374E-003
6.009916961979749E-004
-7.244710374014620E-005
-6.675386472690315E-004
-9.688348345379825E-004
-1.080127132640811E-003
-8.207325247742642E-004
-4.106634717737247E-004
-3.722928120534801E-004
-2.626105134154846E-004
0.000000000000000E+000
-3.932078395161262E-005
-4.438192378601154E-005
1.478968564519953E-009
1.905486008866311E-006
7.248001592896728E-005
5.415488175398813E-004
1.604506012443063E-003
2.937288864531757E-003
3.809510584186813E-003
3.313255903913815E-003
1.785747134876167E-003
-2.123056050577714E-004
-1.981326216646698E-003
-2.876376066204268E-003
-3.207213324314221E-003
-2.436815909183316E-003
-1.219096921490413E-003
-1.105432942630165E-003
-7.793050132481009E-004
0.000000000000000E+000
-1.166063278666527E-004
-1.317659717564213E-004
2.648124749067030E-009
3.451264902324350E-006
1.320156389188885E-004
9.899588203569614E-004
2.937288864531859E-003
5.383681703895265E-003
6.986316923104021E-003
6.080092932201886E-003
3.276107741019081E-003

-3.849623894463700E-004
-3.632819131549827E-003
-5.274696897362230E-003
-5.881943836310724E-003
-4.468628377665521E-003
-2.235182640985436E-003
-2.027236665315658E-003
-1.428277797554473E-003
0.000000000000000E+000
-2.135576422995426E-004
-2.416111585650577E-004
3.393045357373881E-009
4.451765279392278E-006
1.707878092497271E-004
1.282998203289602E-003
3.809510584186855E-003
6.986316923104375E-003
9.068539947241029E-003
7.894547034505100E-003
4.253533796847124E-003
-4.970555727600093E-004
-4.714955471328486E-003
-6.846535180580021E-003
-7.635109667773639E-003
-5.800339494801760E-003
-2.901092545415980E-003
-2.631441625388095E-003
-1.853499111104004E-003
0.000000000000000E+000
-2.770552510509242E-004
-3.136055365454117E-004
2.917060776703840E-009
3.850368497840542E-006
1.481496466959835E-004
1.115035881113404E-003
3.313255903913798E-003
6.080092932201773E-003
7.894547034505039E-003
6.874825189749273E-003
3.703544131613404E-003
-4.301110331529694E-004
-4.104142293423267E-003
-5.960014969384601E-003
-6.646804317605826E-003
-5.049269842173777E-003
-2.525198915701726E-003
-2.290759644815567E-003
-1.613004229011114E-003
0.000000000000000E+000
-2.410140912478319E-004
-2.729846688347137E-004
1.565259169588470E-009
2.074950798598266E-006
7.987165742908594E-005
6.009916961979909E-004
1.785747134876167E-003
3.276107741019052E-003
4.253533796847122E-003
3.703544131613413E-003
1.996029301637498E-003
-2.323789009170682E-004
-2.211017324797023E-003
-3.211128250333537E-003
-3.581169973815152E-003
-2.720654677479104E-003

-1.360778011537104E-003
-1.234305987212182E-003
-8.694089248543713E-004
0.000000000000000E+000
-1.299573228598247E-004
-1.471026018726924E-004
-2.278742061970406E-010
-2.725664698915255E-007
-9.962382486063608E-006
-7.244710374014609E-005
-2.123056050577735E-004
-3.849623894463688E-004
-4.970555727600069E-004
-4.301110331529678E-004
-2.323789009170682E-004
3.019115803071920E-005
2.589192976786084E-004
3.754754096013104E-004
4.183544329036350E-004
3.181155086636576E-004
1.593789014544260E-004
1.442558539174100E-004
1.022084372443230E-004
0.000000000000000E+000
1.538270560172602E-005
1.721407680866936E-005
-1.778907940127631E-009
-2.322259686389921E-006
-8.893802020482709E-005
-6.675386472690329E-004
-1.981326216646667E-003
-3.632819131549860E-003
-4.714955471328492E-003
-4.104142293423275E-003
-2.211017324797031E-003
2.589192976786087E-004
2.451690168432214E-003
3.559785523016075E-003
3.969689172548384E-003
3.015723809413332E-003
1.508342378015182E-003
1.368128734505725E-003
9.636824637838209E-004
0.000000000000000E+000
1.440516028772591E-004
1.630479935429535E-004
-2.567743146429722E-009
-3.364184558656429E-006
-1.290006775887228E-004
-9.688348345379856E-004
-2.876376066204282E-003
-5.274696897362211E-003
-6.846535180579991E-003
-5.960014969384613E-003
-3.211128250333546E-003
3.754754096013102E-004
3.559785523016079E-003
5.169017704926842E-003
5.764332285031532E-003
4.379118227752796E-003
2.190259236317483E-003
1.986669786995774E-003
1.399357161874344E-003
0.000000000000000E+000
2.091739225260251E-004

2.367643702509549E-004
-2.856133471896001E-009
-3.747331074029802E-006
-1.437731424508394E-004
-1.080127132640812E-003
-3.207213324314237E-003
-5.881943836310724E-003
-7.635109667773645E-003
-6.646804317605828E-003
-3.581169973815156E-003
4.183544329036350E-004
3.969689172548386E-003
5.764332285031532E-003
6.428269637289097E-003
4.883487501751627E-003
2.442501444712231E-003
2.215495121910099E-003
1.560480352552261E-003
0.000000000000000E+000
2.332487721569927E-004
2.640328612628811E-004
-2.171111679354548E-009
-2.848601093271723E-006
-1.092686276546398E-004
-8.207325247742650E-004
-2.436815909183319E-003
-4.468628377665513E-003
-5.800339494801757E-003
-5.049269842173772E-003
-2.720654677479105E-003
3.181155086636579E-004
3.015723809413331E-003
4.379118227752797E-003
4.883487501751629E-003
3.709989968546499E-003
1.855614281333792E-003
1.683108810765817E-003
1.185584952515752E-003
0.000000000000000E+000
1.772280373739782E-004
2.005891278200987E-004
-1.087951221841794E-009
-1.426701362093881E-006
-5.469747870380702E-005
-4.106634717737216E-004
-1.219096921490417E-003
-2.235182640985435E-003
-2.901092545415980E-003
-2.525198915701728E-003
-1.360778011537104E-003
1.593789014544261E-004
1.508342378015181E-003
2.190259236317483E-003
2.442501444712232E-003
1.855614281333792E-003
9.281521357682867E-004
8.418306624590570E-004
5.930610856768203E-004
0.000000000000000E+000
8.866710147551558E-005
1.003305477087145E-004
-9.838666318689729E-010
-1.291634455612942E-006
-4.955786280641492E-005
-3.722928120534801E-004

[illegible]

1.538270560172602E-005
1.440516028772589E-004
2.091739225260251E-004
2.332487721569927E-004
1.772280373739782E-004
8.866710147551557E-005
8.039958477841421E-005
5.668325757627330E-005
0.000000000000000E+000
8.482009107360009E-006
9.583871780721515E-006
-1.174174357655835E-010
-1.540887668087165E-007
-5.909822841973605E-006
-4.438192378601128E-005
-1.317659717564208E-004
-2.416111585650579E-004
-3.136055365454111E-004
-2.729846688347134E-004
-1.471026018726923E-004
1.721407680866934E-005
1.630479935429536E-004
2.367643702509550E-004
2.640328612628811E-004
2.005891278200986E-004
1.003305477087145E-004
9.100104355668413E-005
6.410641791904533E-005
0.000000000000000E+000
9.583871780721518E-006
1.084557973580200E-005

2. For Fig. 1(b): composite response function ($20 \times 20 = 400$)

2.004954148388850E-015
2.196561701634096E-012
7.786396409879755E-011
5.630916783278485E-010
1.654150695261043E-009
3.022692584407102E-009
3.923482745919310E-009
3.415192355577573E-009
1.846443363599250E-009
-2.168885086811324E-010
-2.040721274935228E-009
-2.966162502017065E-009
-3.309531118472404E-009
-2.514734890478651E-009
-1.259015566650621E-009
-1.140041393646739E-009
-8.024108621911585E-010
0.000000000000000E+000
-1.199563395199467E-010
-1.356534972537423E-010
2.196561701634093E-012
2.547549833624041E-009
9.225887233135102E-008
6.742281380989053E-007
1.987881454757445E-006
3.638330022759297E-006
4.726315655572319E-006
4.116750223862054E-006
2.227934572108457E-006
-2.579009505705403E-007

-2.455543469242364E-006
-3.571403654245465E-006
-3.985416933402241E-006
-3.029277239537189E-006
-1.516614763186420E-006
-1.373748075102026E-006
-9.679384730640257E-007
0.000000000000000E+000
-1.448422101136330E-007
-1.635629174213845E-007
7.786396409879862E-011
9.225887233135323E-008
3.370190234332283E-006
2.474607182729088E-005
7.307552115963674E-005
1.338597158098476E-004
1.739521651894579E-004
1.515822059413681E-004
8.204896540192118E-005
-9.416310861602348E-006
-9.033657271957253E-005
-1.314218383439378E-004
-1.466647876249217E-004
-1.114941145082985E-004
-5.581588206652807E-005
-5.057057046458800E-005
-3.564757102889089E-005
0.000000000000000E+000
-5.336275137189088E-006
-6.023249544613156E-006
5.630916783278602E-010
6.742281380989186E-007
2.474607182729032E-005
1.823236054372311E-004
5.390086487330415E-004
9.880760871801922E-004
1.284345751952486E-003
1.119595918249993E-003
6.057868239584203E-004
-6.905068708645584E-005
-6.669627278903151E-004
-9.703050077788157E-004
-1.082887569058375E-003
-8.231196409334062E-004
-4.120228810456842E-004
-3.733474712122321E-004
-2.630448603729884E-004
0.000000000000000E+000
-3.935549130491834E-005
-4.446136188529829E-005
1.654150695261066E-009
1.987881454757436E-006
7.307552115964079E-005
5.390086487330415E-004
1.594172128647062E-003
2.922876891913596E-003
3.799651289419300E-003
3.312609265719348E-003
1.792727330233066E-003
-2.038672791347530E-004
-1.972755105312372E-003
-2.870358376031025E-003
-3.203446089849219E-003
-2.435262941862083E-003
-1.218992546855526E-003

-1.104679343877992E-003
-7.786232554438598E-004
0.000000000000000E+000
-1.165371571619139E-004
-1.315885159016949E-004
3.022692584407059E-009
3.638330022759359E-006
1.338597158098429E-004
9.880760871802392E-004
2.922876891913642E-003
5.360174373098854E-003
6.968382589103289E-003
6.075771096092296E-003
3.286788209824604E-003
-3.732129672274227E-004
-3.618603413049076E-003
-5.264431491256098E-003
-5.875376781731515E-003
-4.465734186112450E-003
-2.235243413244967E-003
-2.025571808833065E-003
-1.426779374847389E-003
0.000000000000000E+000
-2.134095954436862E-004
-2.412072839924947E-004
3.923482745919323E-009
4.726315655572195E-006
1.739521651894507E-004
1.284345751952484E-003
3.799651289419218E-003
6.968382589103319E-003
9.059325203054018E-003
7.899148136783482E-003
4.273477595019625E-003
-4.848962073310447E-004
-4.704065398325130E-003
-6.843906000890276E-003
-7.638169208062271E-003
-5.805871998895436E-003
-2.906016548034625E-003
-2.633536304476566E-003
-1.855351954111271E-003
0.000000000000000E+000
-2.775592274205916E-004
-3.136401221129068E-004
3.415192355577559E-009
4.116750223862093E-006
1.515822059413651E-004
1.119595918249992E-003
3.312609265719284E-003
6.075771096092360E-003
7.899148136783468E-003
6.888061182496404E-003
3.726421826667960E-003
-4.222436135687070E-004
-4.101432705078321E-003
-5.967339809564381E-003
-6.659879527859805E-003
-5.062449553012491E-003
-2.533855068887449E-003
-2.296425696519686E-003
-1.618071595385059E-003
0.000000000000000E+000
-2.420895562429211E-004
-2.735226712482513E-004

1.846443363599250E-009
2.227934572108465E-006
8.204896540192172E-005
6.057868239584167E-004
1.792727330233059E-003
3.286788209824593E-003
4.273477595019609E-003
3.726421826667959E-003
2.020898444798829E-003
-2.285120472240913E-004
-2.215395335296234E-003
-3.226581806970805E-003
-3.601007482669856E-003
-2.740702143713756E-003
-1.372018788281635E-003
-1.244241570450318E-003
-8.809158119271713E-004
0.000000000000000E+000
-1.324075112310819E-004
-1.485964791549388E-004
-2.168885086811313E-010
-2.579009505705432E-007
-9.416310861602367E-006
-6.905068708645522E-005
-2.038672791347538E-004
-3.732129672274233E-004
-4.848962073310487E-004
-4.222436135687082E-004
-2.285120472240908E-004
2.655588951853926E-005
2.519948894293972E-004
3.664249241694077E-004
4.089409028207636E-004
3.106596751387456E-004
1.555552378305474E-004
1.408086804401343E-004
9.899392398814284E-005
0.000000000000000E+000
1.478384014056919E-005
1.673926679691367E-005
-2.040721274935229E-009
-2.455543469242377E-006
-9.033657271957226E-005
-6.669627278903143E-004
-1.972755105312372E-003
-3.618603413049071E-003
-4.704065398325116E-003
-4.101432705078329E-003
-2.215395335296241E-003
2.519948894293972E-004
2.445205247464173E-003
3.555033971117195E-003
3.967635324457231E-003
3.013293837780318E-003
1.508098741951325E-003
1.366050935309077E-003
9.592548607323837E-004
0.000000000000000E+000
1.430526236842546E-004
1.623884099361680E-004
-2.966162502017060E-009
-3.571403654245442E-006
-1.314218383439373E-004
-9.703050077788059E-004
-2.870358376031029E-003

-5.264431491256116E-003
-6.843906000890285E-003
-5.967339809564390E-003
-3.226581806970800E-003
3.664249241694071E-004
3.555033971117190E-003
5.170933640016599E-003
5.771052769444397E-003
4.385357800159298E-003
2.194930657918679E-003
1.988800607973757E-003
1.399539397224631E-003
0.000000000000000E+000
2.091415971594620E-004
2.367033354686681E-004
-3.309531118472404E-009
-3.985416933402232E-006
-1.466647876249218E-004
-1.082887569058379E-003
-3.203446089849217E-003
-5.875376781731540E-003
-7.638169208062266E-003
-6.659879527859815E-003
-3.601007482669858E-003
4.089409028207635E-004
3.967635324457231E-003
5.771052769444397E-003
6.440825109371635E-003
4.894272208016026E-003
2.449648255151612E-003
2.219585846634339E-003
1.561896865559627E-003
0.000000000000000E+000
2.333967126429712E-004
2.641661792218882E-004
-2.514734890478654E-009
-3.029277239537188E-006
-1.114941145082987E-004
-8.231196409334055E-004
-2.435262941862079E-003
-4.465734186112458E-003
-5.805871998895443E-003
-5.062449553012494E-003
-2.740702143713756E-003
3.106596751387456E-004
3.013293837780319E-003
4.385357800159299E-003
4.894272208016028E-003
3.721610237944721E-003
1.862857411746092E-003
1.688547028940328E-003
1.191332975402253E-003
0.000000000000000E+000
1.784715918720485E-004
2.012636040125165E-004
-1.259015566650620E-009
-1.516614763186407E-006
-5.581588206652794E-005
-4.120228810456843E-004
-1.218992546855529E-003
-2.235243413244966E-003
-2.906016548034625E-003
-2.533855068887450E-003
-1.372018788281635E-003
1.555552378305474E-004

[illegible]

0.000000000000000E+000
0.000000000000000E+000
0.000000000000000E+000
0.000000000000000E+000
0.000000000000000E+000
-1.199563395199469E-010
-1.448422101136324E-007
-5.336275137189083E-006
-3.935549130491826E-005
-1.165371571619140E-004
-2.134095954436863E-004
-2.775592274205920E-004
-2.420895562429212E-004
-1.324075112310819E-004
1.478384014056921E-005
1.430526236842547E-004
2.091415971594619E-004
2.333967126429712E-004
1.784715918720484E-004
8.939015201016586E-005
8.127791872643097E-005
5.857004343558556E-005
0.000000000000000E+000
8.949984145717419E-006
9.805312291550209E-006
-1.356534972537419E-010
-1.635629174213848E-007
-6.023249544613223E-006
-4.446136188529821E-005
-1.315885159016955E-004
-2.412072839924943E-004
-3.136401221129074E-004
-2.735226712482516E-004
-1.485964791549388E-004
1.673926679691366E-005
1.623884099361680E-004
2.367033354686680E-004
2.641661792218883E-004
2.012636040125165E-004
1.007625524841753E-004
9.143665141148645E-005
6.499296697752051E-005
0.000000000000000E+000
9.805312291550208E-006
1.094510381023043E-005