

精确固定节面量子Monte Carlo差值法

黄宏新

湖南师范大学化学化工学院, 长沙 410081

摘要:

提出了精确固定节面量子Monte Carlo差值法, 这个新算法能够在精确固定节面量子Monte Carlo方法的基础上直接计算两个体系之间的能量差, 且使计算结果的统计误差达到 10^{-5} hartree 数量级, 获得电子相关能90%以上. 我们把这个新算法应用于分子势能面的研究中, 使用一个“刚性移动”模型, 利用Jacobi变换使分子两个几何构型的能量计算具有很好的正相关性, 因而能得到准确的能量差值, 由此就可以得到精确的分子势能面.

关键词: 精确固定节面量子Monte Carlo方法 差值法 相关取样 势能面

收稿日期 2004-10-25 修回日期 2005-01-03 网络版发布日期 2005-06-15

通讯作者: 黄宏新 Email: huanghongxin@etang.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(1328KB\)](#)

服务与反馈

[把本文推荐给朋友](#)

[加入我的书架](#)

[加入引用管理器](#)

[引用本文](#)

[Email Alert](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

▶ [精确固定节面量子Monte Carlo方法](#)

▶ [差值法](#)

▶ [相关取样](#)

▶ [势能面](#)

本文作者相关文章

▶ [黄宏新](#)