

## 液态RbCl的态密度

何香红; 汤正诠; 程兆年

上海大学理学院, 上海 200436; 中国科学院上海冶金研究所, 上海, 200050

### 摘要:

给出了在分子动力学模拟基础上Fumi-Tosi势离子液体的正则模式分析方法, 用Fumi-Tosi势(包括长程势)代替Lennard-Jones势, 并且用等效Coulomb势处理长程Coulomb作用. 讨论了Hessian矩阵元的计算方法和Hessian矩阵特征值的计算方法. 计算实践表明, 取用余误差函数形式的等效库仑势, 可以合理地得到Hessian矩阵和态密度. 液态RbCl中构型平均态密度的数值结果表明, 液态RbCl的态密度表现出与Lennard-Jones液体的态密度相仿的特点.

关键词: Hessian 矩阵 矩阵的特征值 态密度

收稿日期 2003-09-22 修回日期 2003-12-22 网络版发布日期 2004-05-15

通讯作者: 汤正诠 Email: zqtang@mail.shu.edu.cn

### 本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(569KB\)](#)

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

▶ [Hessian 矩阵](#)

▶ [矩阵的特征值](#)

▶ [态密度](#)

本文作者相关文章

▶ [何香红](#)

▶ [汤正诠](#)

▶ [程兆年](#)