

介紹在 CPMD 中使用 DIIS 方法作 Wavefunction Optimization 運算

學生：余文彥

指導教授：葉立明

國立交通大學應用數學系（研究所）碩士班

摘 要

CPMD (Car-Parrinello Molecular Dynamics simulations) 是一個用來計算量子系統能量和性質的程式。本篇論文是依據 CPMD 中的程式碼，來介紹其中一種基礎運算 — Wavefunction optimizations。