Spherical Jellium with Impurity and Self-healing QMC for atoms and molecules.

Michal Bajdich¹, Fernando A. Reboredo¹, G. Malcolm Stocks¹ and Paul R.C. Kent² in collaboration with Jeongnim Kim³

¹Materials Science and Technology Division, ORNL, Oak Ridge, TN ²Center for Nanophase Materials Sciences, ORNL, Oak Ridge, TN ³National Center for Supercomputing Applications, UIUC, Urbana, IL

Quantum Monte Carlo in the Apuan Alps VI Vallico Sotto, Italy July, 2010

M. Bajdich bajdichm@ornl.gov (ORNL)

Workshop in Apuan Alps

• • • • • • • • • • • • •

Spherical Jellium Model

• Benchmarks for closed-shell spherical states

- DFT [Almeida, Perdew, Fiolhais, 02'][Tao, P, A, F, Kümmel, 08']
- VMC [Ballone, Umrigar, Delay, 92'], DMC [Sottile, Ballone, 01']



Spherical Jellium Model

• Benchmarks for closed-shell spherical states

- DFT [Almeida, Perdew, Fiolhais, 02'][Tao, P, A, F, Kümmel, 08']
- VMC [Ballone, Umrigar, Delay, 92'], DMC [Sottile, Ballone, 01']



• Advantages of central potential (next step after HEG)

- lowest state of each symmetry (e.g. *L*, *S*, *M* and *M_s*) has
 - \Longrightarrow rigorous theorems apply for DMC and Kohn-Sham DFT
 - \implies meaningful phase diagram

< □ > < □ > < □ > < □ >

Beyond Spherical Jellium Model

- Benchmarks for closed-shell spherical states
 - DFT [Almeida, Perdew, Fiolhais, 02'][Tao, P, A, F, Kümmel, 08']
 - VMC [Ballone, Umrigar, Delay, 92'], DMC [Sottile, Ballone, 01']
- Advantages of central potential (next step after HEG)
 - lowest state of each symmetry (e.g. L, S, M and M_s) has
 - \Longrightarrow rigorous theorems apply for DMC and Kohn-Sham DFT
 - \implies meaningful phase diagram
- Embedded Gaussian impurity



Beyond Spherical Jellium Model

- Benchmarks for closed-shell spherical states
 - DFT [Almeida, Perdew, Fiolhais, 02'][Tao, P, A, F, Kümmel, 08']
 - VMC [Ballone, Umrigar, Delay, 92'], DMC [Sottile, Ballone, 01']
- Advantages of central potential (next step after HEG)
 - lowest state of each symmetry (e.g. L, S, M and M_s) has
 - \Longrightarrow rigorous theorems apply for DMC and Kohn-Sham DFT
 - \implies meaningful phase diagram

• Embedded Gaussian impurity

- Z and σ continuous dependence (in addition to r_s)
- inhomogeneity effects
 localized vs deloc. states
 closed vs open shells
- but simpler then real atom or pseudo atom



Beyond Spherical Jellium Model

- Benchmarks for closed-shell spherical states
 - DFT [Almeida, Perdew, Fiolhais, 02'][Tao, P, A, F, Kümmel, 08']
 - VMC [Ballone, Umrigar, Delay, 92'], DMC [Sottile, Ballone, 01']
- Advantages of central potential (next step after HEG)
 - lowest state of each symmetry (e.g. L, S, M and M_s) has
 - \Longrightarrow rigorous theorems apply for DMC and Kohn-Sham DFT
 - \implies meaningful phase diagram
- Embedded Gaussian impurity
- Z and σ continuous dependence (in addition to r_s)
- inhomogeneity effects
 localized vs deloc. states
 closed vs open shells



- but simpler then real atom or
 - ps Our goal: Employ QMC as the most accurate method and compare it with mean-field approximations



M. Bajdich bajdichm@ornl.gov (ORNL)



[1] J. E. Vincent, PhD. Thesis, UIUC (2006). [2] F. Sottile, P. Ballone, PRB (2001).







Total Energy per Electron: Effect of Backflow $r_s = 1.0, 2.0, 3.25, 4.0$ (shown), 5.62



^a Tao, Perdew, Almeida, Fiolhais, Kümmel, PRB (2008). ^bSottile, Ballone, PRB (2001).

Recall: Jellium with Gaussian Impurity

 Z and σ continuous dependence (in addition to r_s)
 inhomogeneity effects localized vs deloc. states closed vs open shells
 but simpler then real atom or pseudo atom



< <p>A < </p>

Impurity Phase Space Diag.: *d*-shell (*N*=18, σ =0.6) $1d^{(10-n)} \rightarrow 2s^n$ transition



M. Bajdich bajdichm@ornl.gov (ORNL)

Impurity Phase Space Diag.: d-shell (N=18, σ =0.6) $1d^{(10-n)} \rightarrow 2s^n$ transition



M. Bajdich bajdichm@ornl.gov (ORNL)

Workshop in Apuan Alps

Impurity Phase Space Diag.: *f*-shell (*N*=30, σ =1.5) 1*f*⁽¹⁰⁻ⁿ⁾ \rightarrow 2*p*ⁿ transition



M. Bajdich bajdichm@ornl.gov (ORNL)

Workshop in Apuan Alps

July 25, 2010 7 / 14

Impurity Phase Space Diag.: *f*-shell (*N*=30, σ =1.5) 1*f*⁽¹⁰⁻ⁿ⁾ \rightarrow 2*p*ⁿ transition



• Assuming: $\Psi_T(\mathbf{R}, \tau) = e^{J(\mathbf{R})} \sum_n \lambda_n(\tau) \Phi_n(\mathbf{R})$

< 口 > < 同 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ >

- Assuming: $\Psi_T(\mathbf{R}, \tau) = e^{J(\mathbf{R})} \sum_n \lambda_n(\tau) \Phi_n(\mathbf{R})$
- and evaluating in DMC

$$\lambda_n(\tau + \delta \tau) = \left\langle e^{-J(\mathbf{R})} \frac{\Phi_n^*(\mathbf{R})}{\Psi_T^*(\mathbf{R}, \tau)} \right\rangle_{f(\mathbf{R}, \tau)}$$

< 口 > < 同 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ >

- Assuming: $\Psi_T(\mathbf{R}, \tau) = e^{J(\mathbf{R})} \sum_n \lambda_n(\tau) \Phi_n(\mathbf{R})$
- and evaluating in DMC

$$\lambda_n(\tau + \delta \tau) = \left\langle e^{-J(\mathbf{R})} \frac{\Phi_n^*(\mathbf{R})}{\Psi_T^*(\mathbf{R}, \tau)} \right\rangle_{f(\mathbf{R}, \tau)}$$

- Iterative updates of $\{\lambda_n\}$ (with increasing $\delta \tau$) lead to
 - maximization of $\langle \Psi_T | \Psi_0 \rangle$
 - minimization of E_{DMC} and variance of $E_L(\mathbf{R})$

イロト イ押ト イヨト イヨト

- Assuming: $\Psi_T(\mathbf{R}, \tau) = e^{J(\mathbf{R})} \sum_n \lambda_n(\tau) \Phi_n(\mathbf{R})$
- and evaluating in DMC

$$\lambda_n(\tau + \delta \tau) = \left\langle e^{-J(\mathbf{R})} \frac{\Phi_n^*(\mathbf{R})}{\Psi_T^*(\mathbf{R}, \tau)} \right\rangle_{f(\mathbf{R}, \tau)}$$

- Iterative updates of $\{\lambda_n\}$ (with increasing $\delta \tau$) lead to
 - maximization of $\langle \Psi_T | \Psi_0 \rangle$
 - minimization of E_{DMC} and variance of $E_L(\mathbf{R})$
- **Exact if** size of $\{\Phi_n\}$ basis set $\to \infty$

< □ > < 同 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □

- Assuming: $\Psi_T(\mathbf{R}, \tau) = e^{J(\mathbf{R})} \sum_n \lambda_n(\tau) \Phi_n(\mathbf{R})$
- and evaluating in DMC

$$\lambda_n(\tau + \delta \tau) = \left\langle e^{-J(\mathbf{R})} \frac{\Phi_n^*(\mathbf{R})}{\Psi_T^*(\mathbf{R}, \tau)} \right\rangle_{f(\mathbf{R}, \tau)}$$

- Iterative updates of $\{\lambda_n\}$ (with increasing $\delta \tau$) lead to
 - maximization of $\langle \Psi_T | \Psi_0 \rangle$
 - minimization of E_{DMC} and variance of $E_L(\mathbf{R})$
- **Exact if** size of $\{\Phi_n\}$ basis set $\to \infty$
- Excited states and magnetic fields [Fernando's talk]

イロト イ押ト イヨト イヨト

- Assuming: $\Psi_T(\mathbf{R}, \tau) = e^{J(\mathbf{R})} \sum_n \lambda_n(\tau) \Phi_n(\mathbf{R})$
- and evaluating in DMC

$$\lambda_n(\tau + \delta \tau) = \left\langle e^{-J(\mathbf{R})} \frac{\Phi_n^*(\mathbf{R})}{\Psi_T^*(\mathbf{R}, \tau)} \right\rangle_{f(\mathbf{R}, \tau)}$$

- Iterative updates of $\{\lambda_n\}$ (with increasing $\delta \tau$) lead to
 - maximization of $\langle \Psi_T | \Psi_0 \rangle$
 - minimization of E_{DMC} and variance of $E_L(\mathbf{R})$
- **Exact if** size of $\{\Phi_n\}$ basis set $\to \infty$
- Excited states and magnetic fields [Fernando's talk]
- First application to atoms and molecules [Bajdich, Tiago, Hood, Kent, and Reboredo, PRL (2010)]

< 口 > < 同 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < 回 > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ >

Oxygen Atom: SH-DMC is equivalent to CI (if no Jastrow is used)



M. Bajdich bajdichm@ornl.gov (ORNL)

N₂ Dimer: SH-DMC as good as the State of the Art



N₂ Dimer: SH-DMC as good as the State of the Art



M. Bajdich bajdichm@ornl.gov (ORNL)

C⁺²₂₀ **fullerene: Proof of Principle in Larger Systems** (694 excitations subject to *D*_{2*h*} and *I* symmetries)



M. Bajdich bajdichm@ornl.gov (ORNL)

July 25, 2010 11 / 14

Studies of Hydrogen Storage in Nanostructures

 Alkaline-earth metals on C₆₀ (PW92 GGA) [M. Yoon, Z. Zhang et. al., PRL (2008)]



Studies of Hydrogen Storage in Nanostructures

 Alkaline-earth metals on C₆₀ (PW92 GGA) [M. Yoon, Z. Zhang et. al., PRL (2008)]



 Ca-adsorbed coronene (binds in PBE GGA but not in MP2) [J. Cha, et. al., PRL (2009)]



QMC Benchmark Study of the Ca⁺¹ + 4H₂ [Bajdich, F.A. Reboredo, P.R.C. Kent, submitted to PRB (2010)]



QMC Benchmark Study of the Ca⁺¹ + 4H₂ [Bajdich, F.A. Reboredo, P.R.C. Kent, submitted to PRB (2010)]





Spherical Jellium with Impurity

- important benchmark study aimed at correlated materials



Spherical Jellium with Impurity

- important benchmark study aimed at correlated materials

Self-healing quantum Monte Carlo

- versatile and accurate technique suitable for larger systems



Spherical Jellium with Impurity

- important benchmark study aimed at correlated materials

Self-healing quantum Monte Carlo

- versatile and accurate technique suitable for larger systems

Thanks to my collaborators



Fernando Reboredo MSTD ORNL



Paul Kent CNMS ORNL



Malcolm Stocks MSTD ORNL



Jeongnim Kim NCSA UIUC



Randy Hood CMMD LLNL

and many others ...











M. Bajdich bajdichm@ornl.gov (ORNL)

Workshop in Apuan Alps

July 25, 2010

14/14