

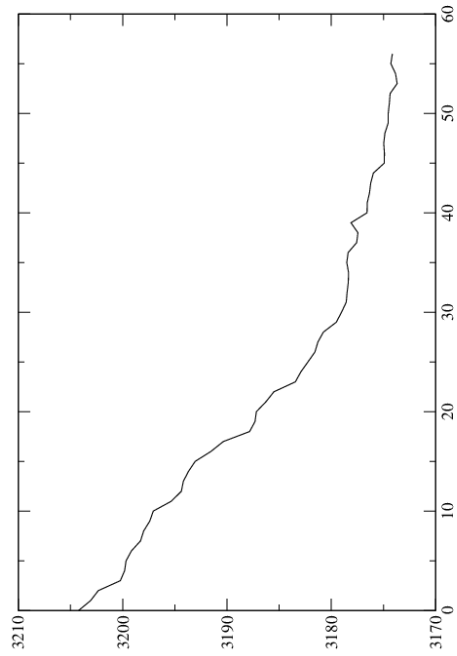
Toteutusdokumentti: elektronirakenteen
optimointi atomiorbitaalittomaan
tiheysfunktionaaliteorian avulla

Markus KAUKONEN

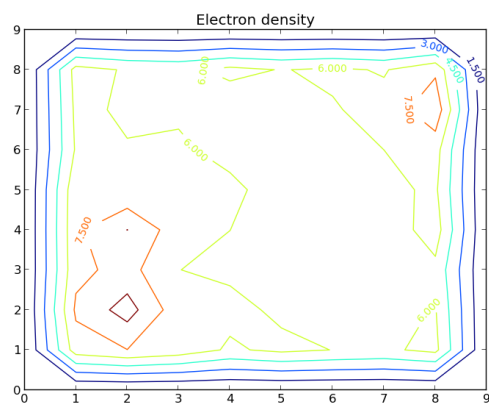
15. kesäkuuta 2014

email: markus.kaukonen@iki.fi, opiskelijanumero: 010974524

1 Johdanto



Kuva 1: Kokonaisenergian konvergoiminen iteraatioaskelten funktiona. Input file oli 'alkuarvot.txt_10x10x0'.



Kuva 2: Monte Carlo menetelmällä laskettu elektronitiheys.