

Käyttöohje: elektronirakenteen optimointi  
atomiorbitaalittomaan tiheysfunktionaaliteorian  
avulla

Markus KAUKONEN

15. kesäkuuta 2014

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

# 1 Käyttöohje

Ohjelmaa vaatii toimiakseen pythonin, uudehkon scipy: ja numpy:n sekä matplotlibin (<http://www.scipy.org/>).

Testiversion voi käynnistää komennolla `test_mc.py`, joka on hakemistossa: `TiraLabra/Tiralabra/src`

Ohjelma lukee syötteet tiedostosta `alkuarvot.txt`:

```
16          # laskenta gridipisteiden lkm x suunnassa
16          # laskenta gridipisteiden lkm y suunnassa
0           # laskenta gridipisteiden lkm z suunnassa (0==2d)
2.0         # elektronien kokonaismaara (> 0)
2           # atomiydinten lukumaara
3 3 0 1.0   # ytimen 1 paikka gridissa (x,y,z), varaus (> 0)
8 2 0 1.0   # ytimen 2 paikka gridissa (x,y,z), varaus (> 0)
```

Ohjelma tuottaa päivittyvän matplotlib kuvan elektronitiheydestä. Päivitys etenee kun painat kuvan deletointia (eli 'x' kohtaa kuvan yläreunasta).