

國立交通大學

應用數學系

碩 士 論 文

介紹在 CPMD 中使用 DIIS 方法作 Wavefunction
Optimization 運算

The Wavefunction Optimization with DIIS in CPMD

研 究 生：余文彥

指 導 教 授：葉立明 教授

中 華 民 國 九 十 六 年 七 月