

1. Record Nr.	UNINA9910706744603321
Autore	Mullin Jonathan
Titolo	Trace conserving purification for linear scaling [O(N)] methods: a first enhancement to CP2K // Jonathan Mullin
Pubbl/distr/stampa	Aberdeen Proving Ground, MD : , : Army Research Laboratory, , September 2014
Descrizione fisica	1 online resource (20 unnumbered pages) : illustrations
Soggetti	Molecular orbitals Density functionals Nonmonotonic reasoning Polynomials
Lingua di pubblicazione	Inglese
Formato	Materiale a stampa
Livello bibliografico	Monografia
Note generali	"September 2014." "ARL-CR-0746."
Nota di bibliografia	Includes bibliographical references (page 6).