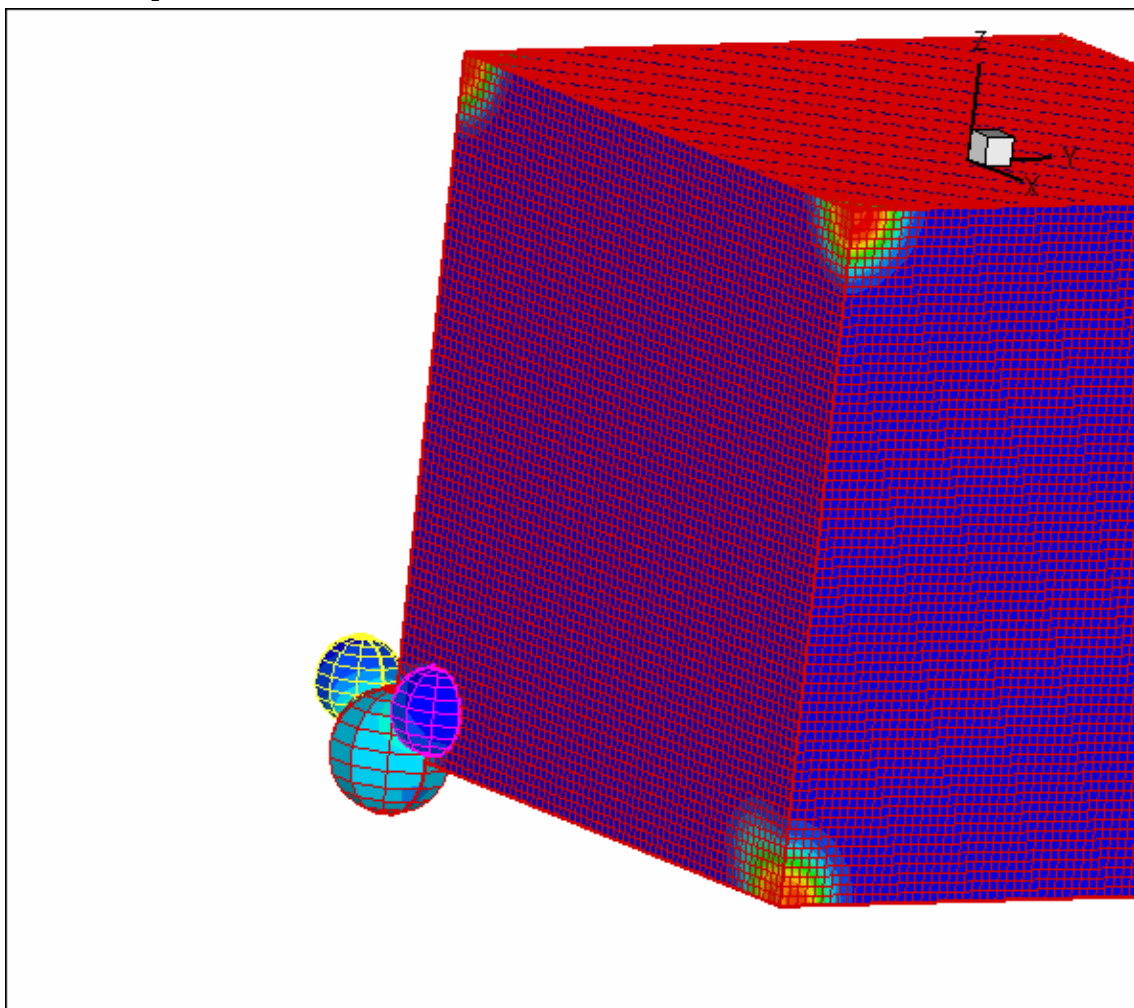
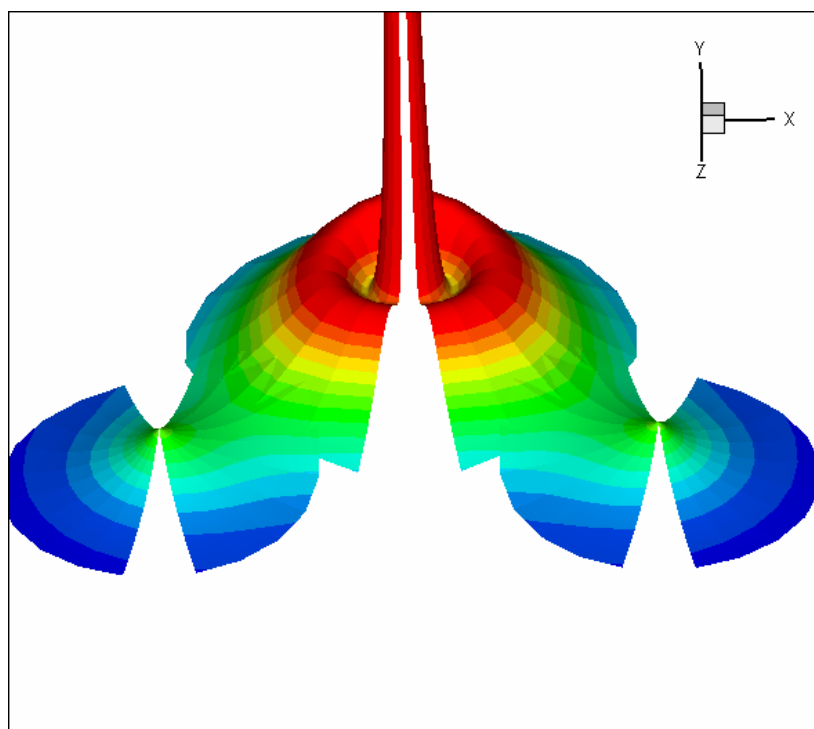
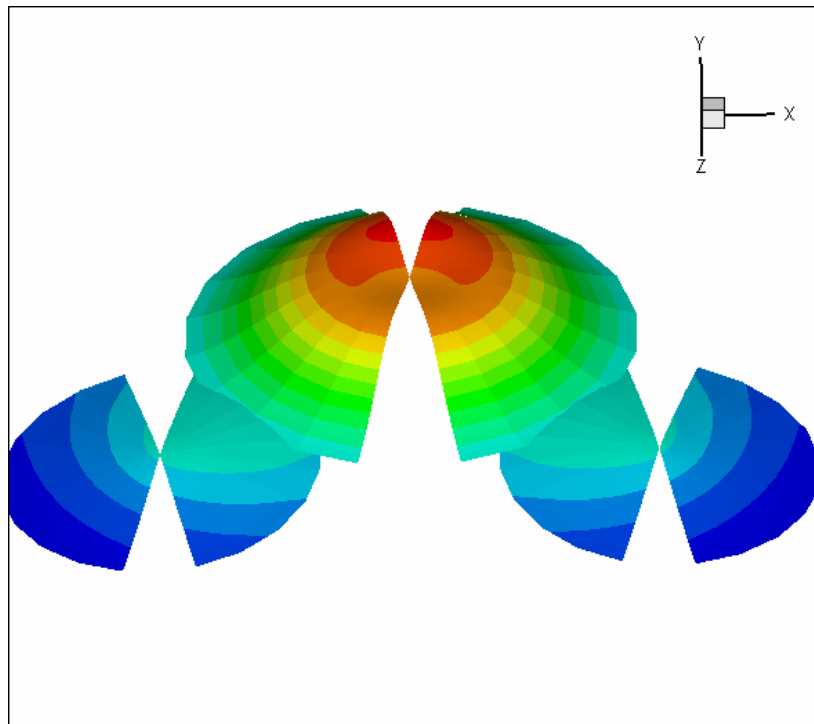


Phase PAW 提案

平面波展開した波動関数を原子周りの擬波動関数へキャストすることで、全電子計算により近い結果を得ることが期待されている。

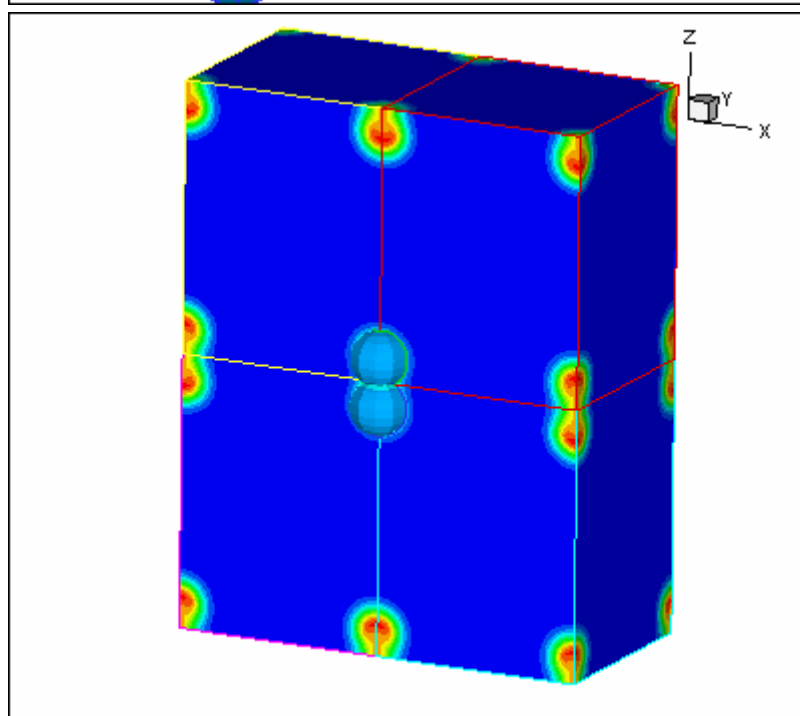
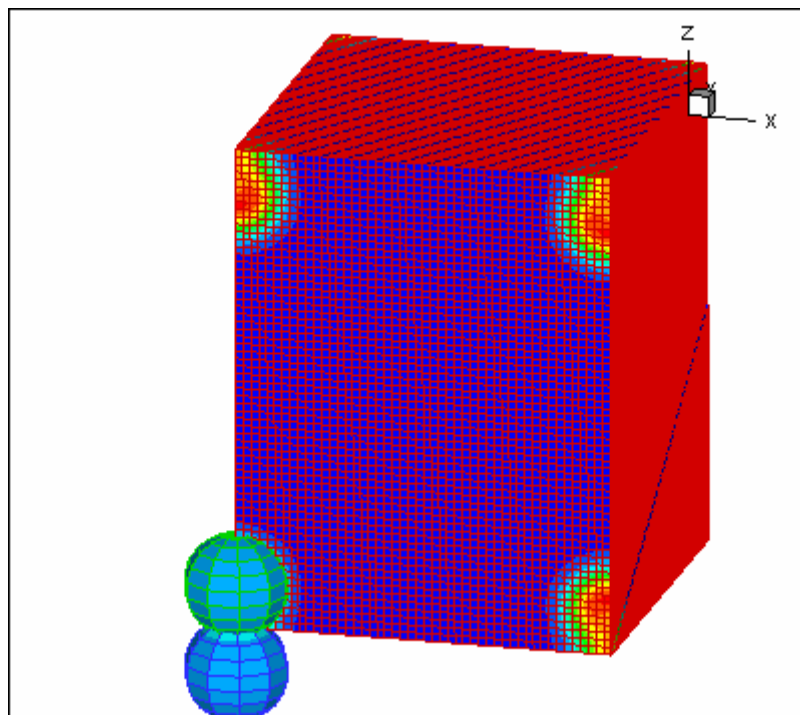
水分子 H_2O

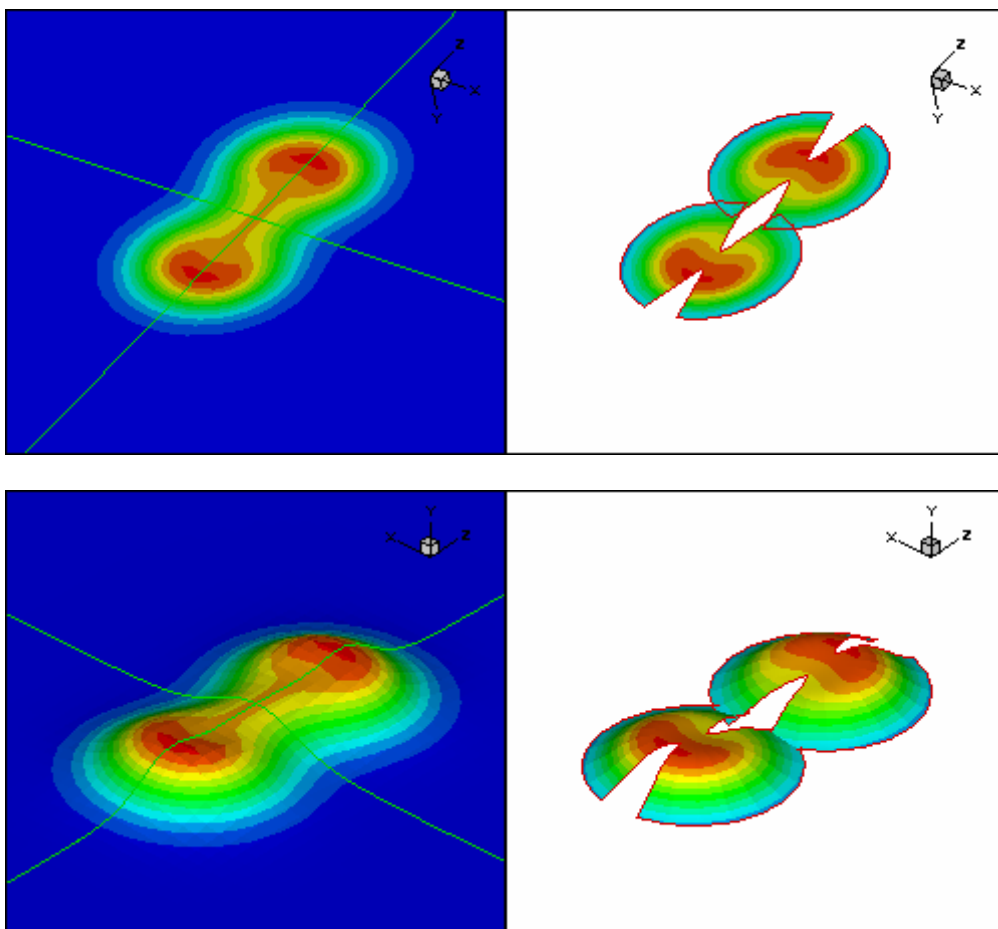




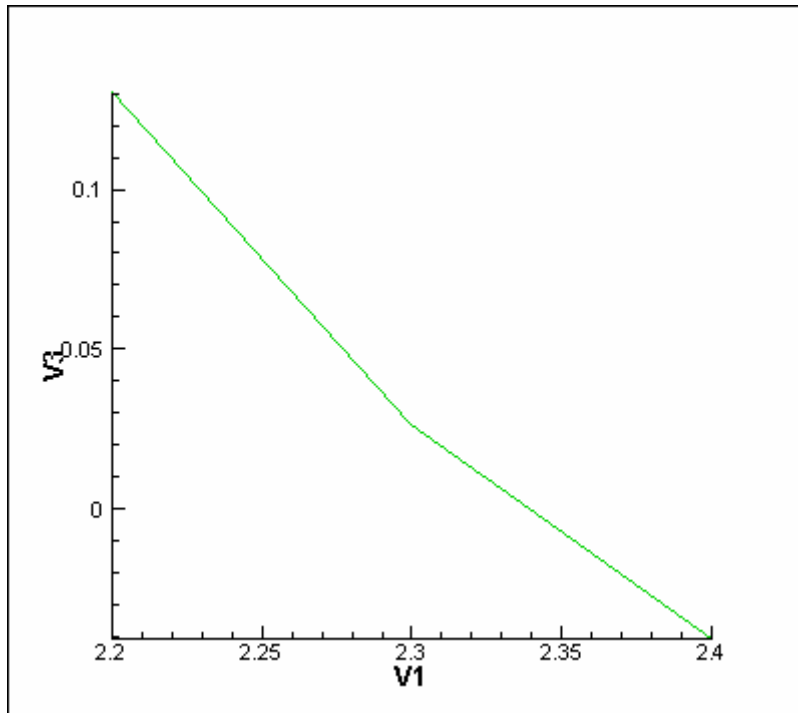
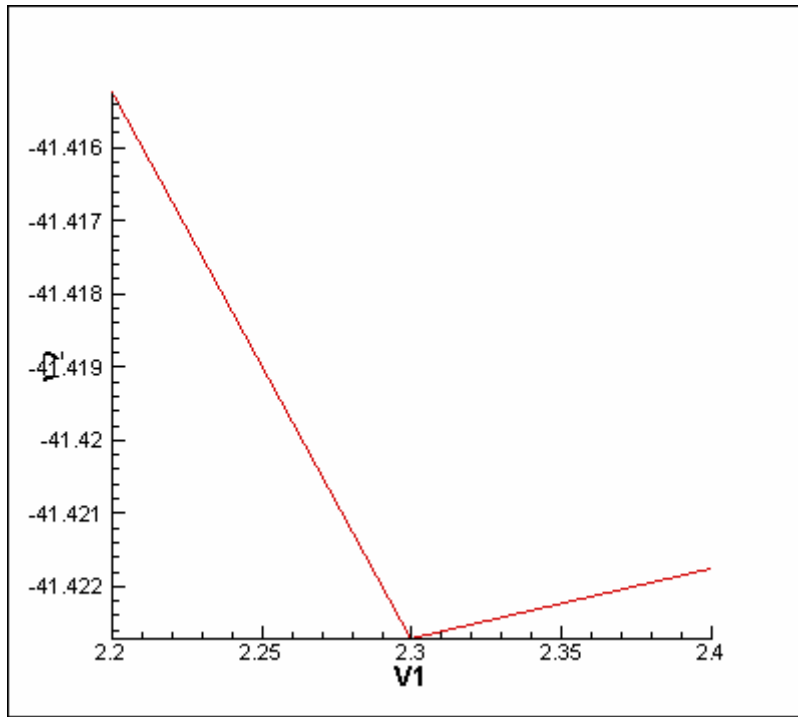
H-O bond length 1.8472593 Bohr = 0.977527 \AA (0.9584)
 H-O-H angle 1.8127570 Rad = 103.8633 deg (104.45)

酸素分子 O_2

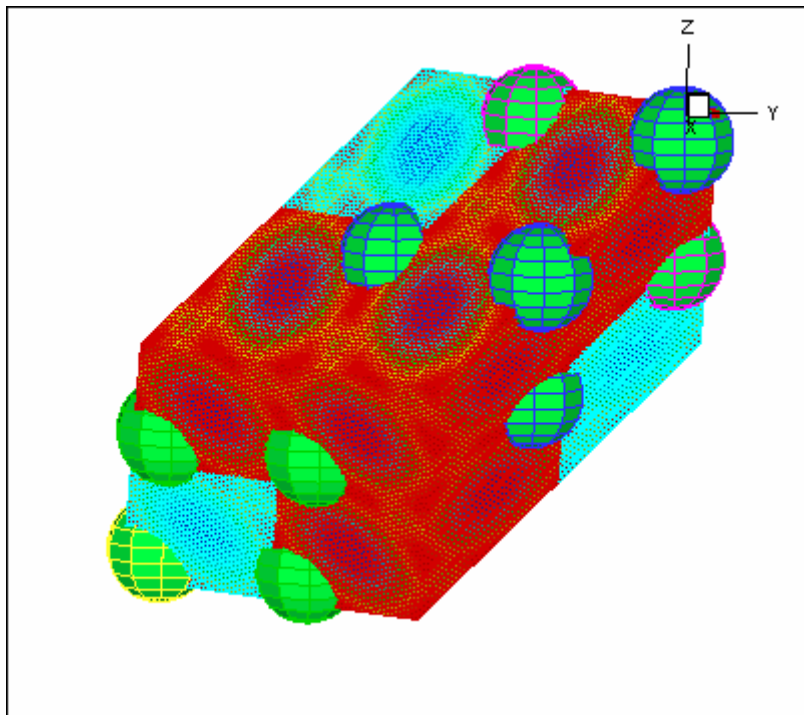
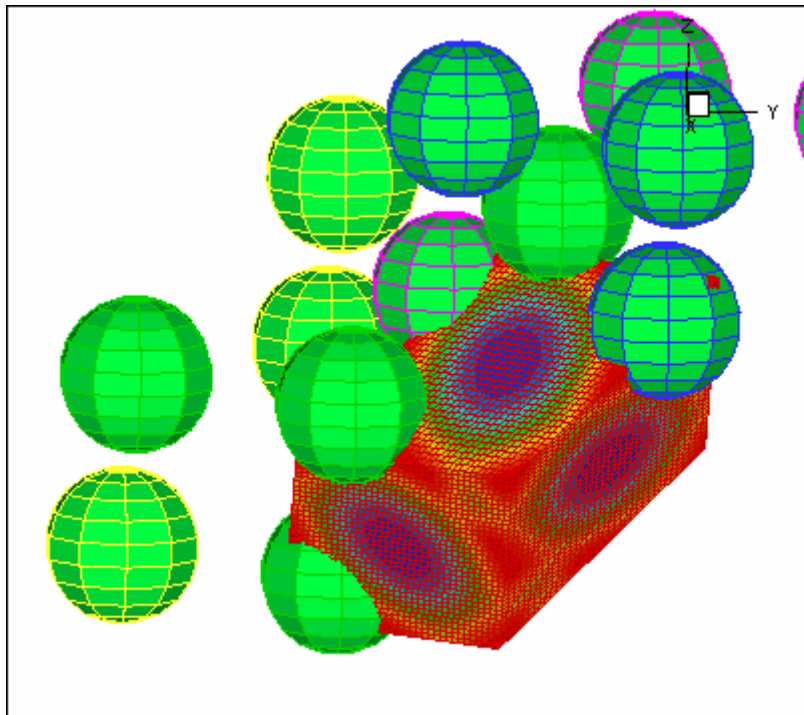




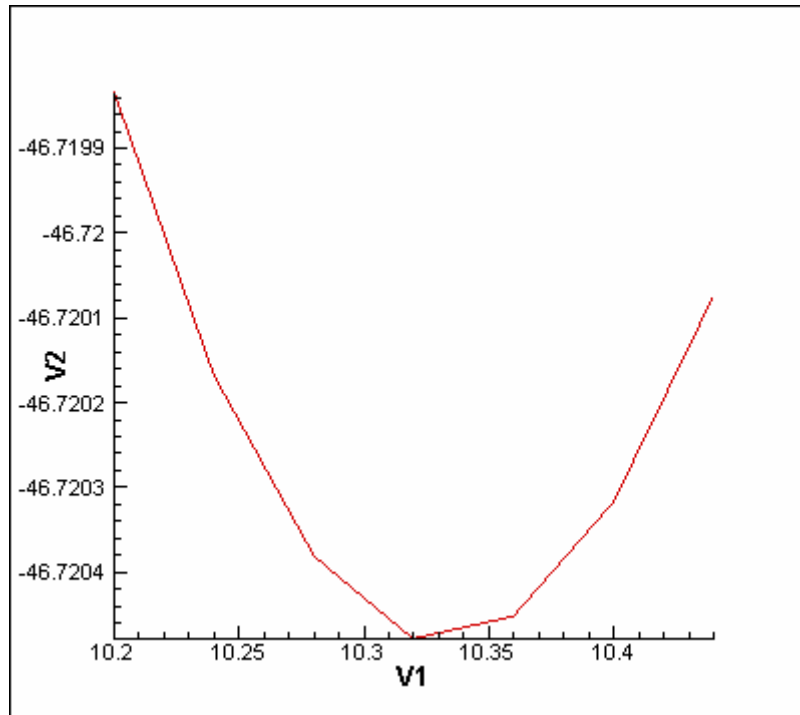
O-O bond length(Bohr)	Energy(Hartree)	Force	
2.2	-41.4152322391	0.13058771	-0.13058770
2.3	-41.4227097927	0.02651787	-0.02651787
2.4	-41.4217621969	-0.04058502	0.04058562



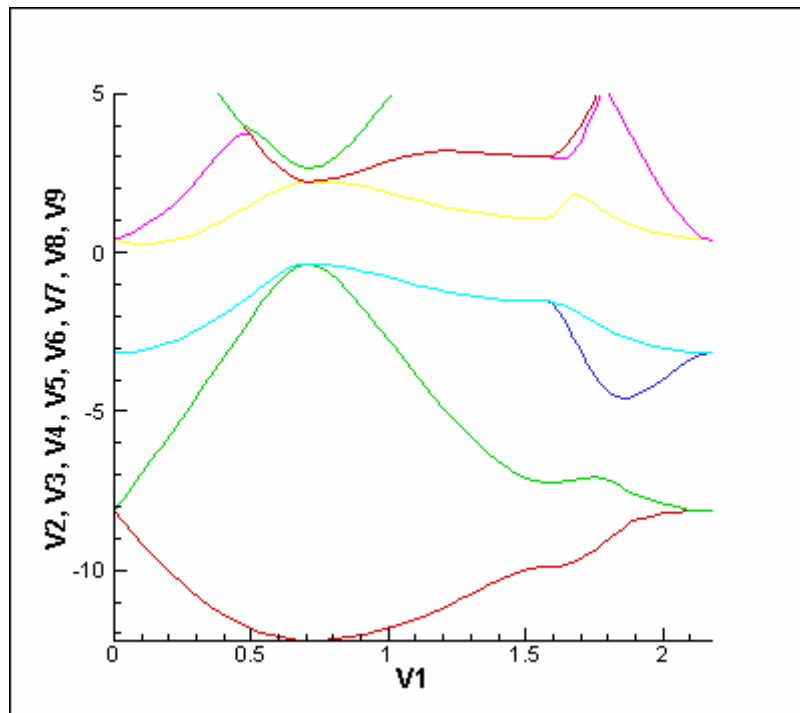
シリコン結晶 Si2



最適化計算

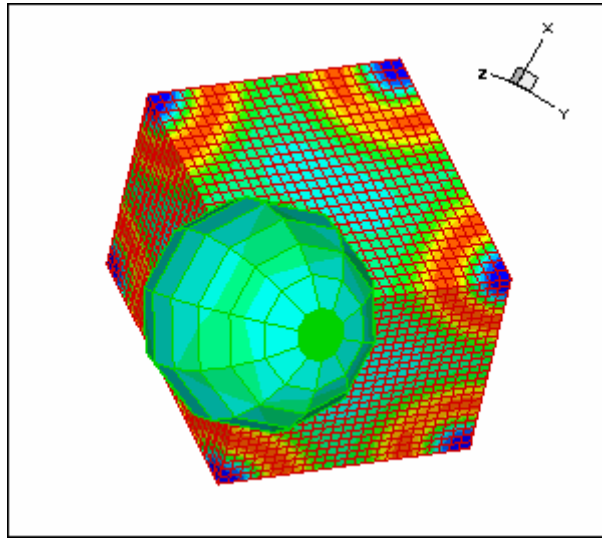


バンド計算

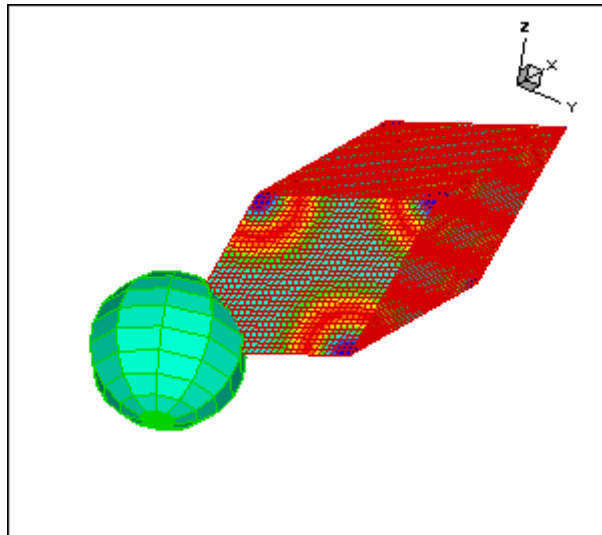


Fe bcc

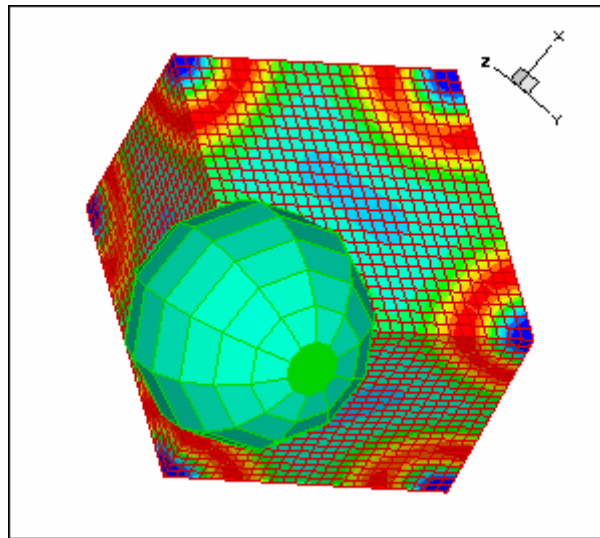
α



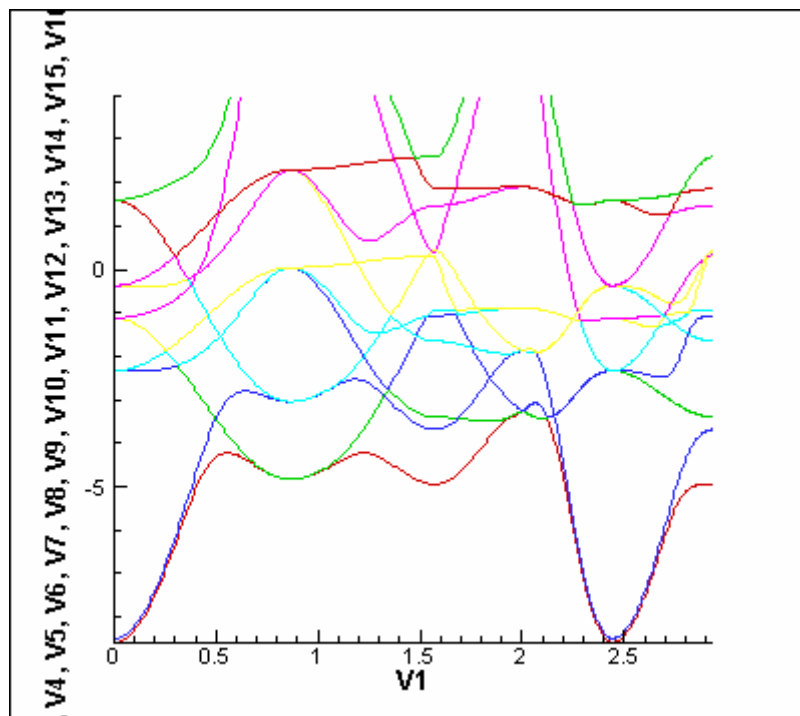
γ



δ

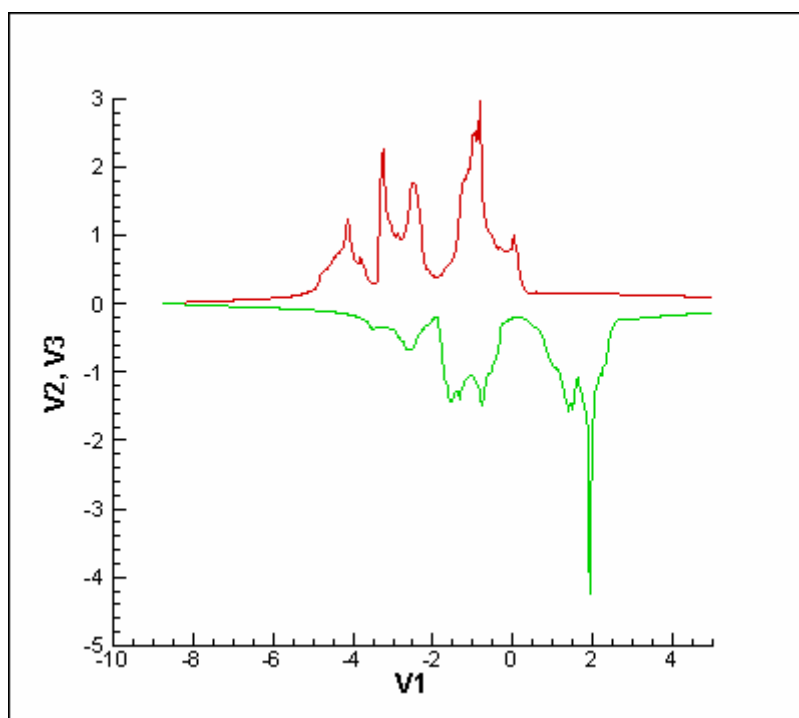


バンド計算 α



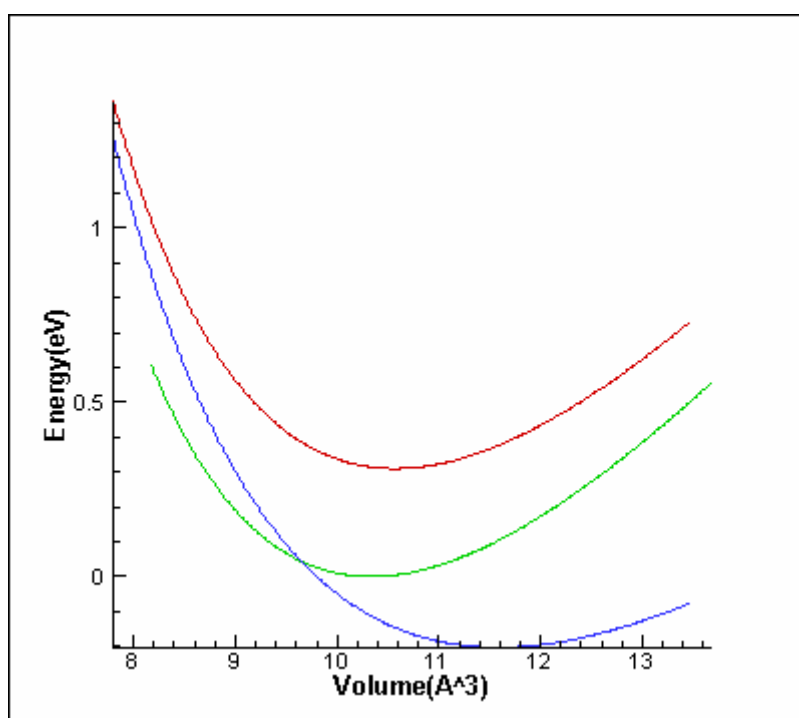
!NEW total charge (UP, DOWN, SUM) = 5.09535993 (+) 2.90464007 (=) 8.00000000
スピン分極は 0.27384

状態密度計算 α



最適化計算鉄全エネルギーの体積依存性、 γ 鉄の最安定構造のエネルギーを原点としている。

Murnaghan の固体状態方程式によりフィッティングした。



各鉄相の格子定数 a 、体積弾性率 B 、および γ 相に対する相対エネルギー ΔE

	a(Å)	B(GPa)	ΔE (eV)
α	2.8526	172.8	-0.2031
γ	3.4598	270.4	0.0
δ	2.7667	257.6	0.3095