

第一原理電子状態計算プログラム PHASE による

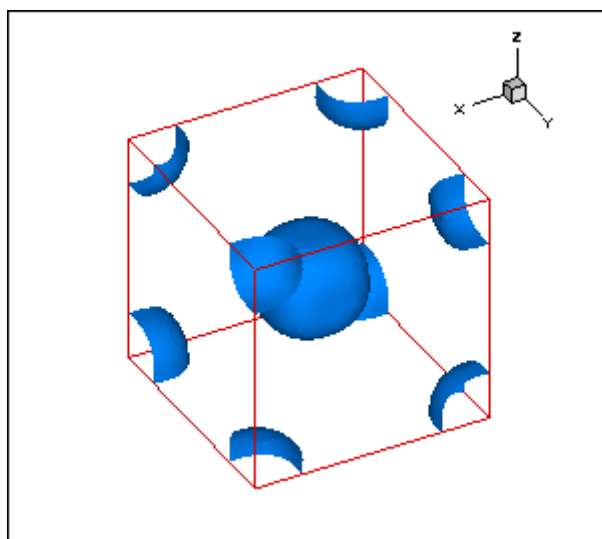
PAW 法と非局所擬ポテンシャルの実空間積分の計算例

高速化された PAW 法による計算結果のいくつかと、非局所擬ポテンシャルの実空間積分による計算結果のいくつかを紹介する。

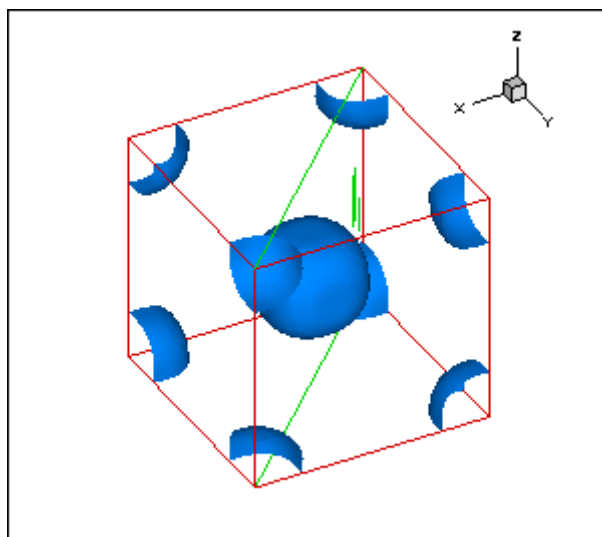
Cr クロム

PAW の SCF 計算の結果得られた電子状態密度の等値面。

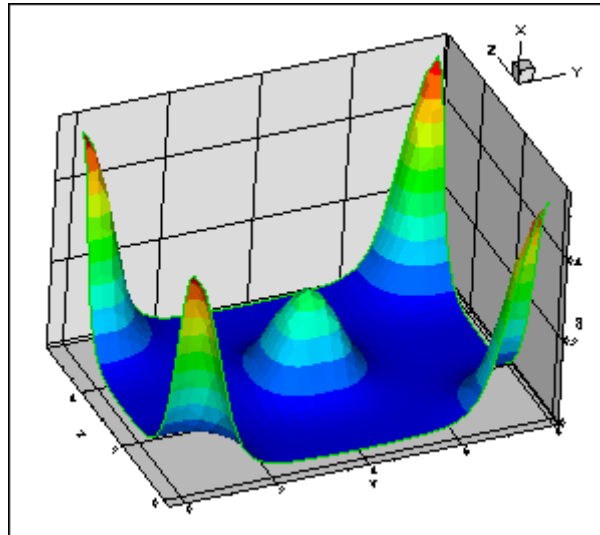
bcc Bravais lattice



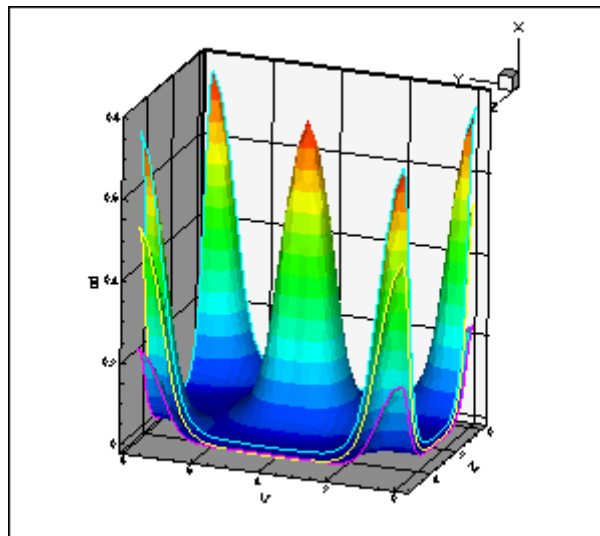
Bravais lattice における切断面



切断面における up-spin の電荷密度



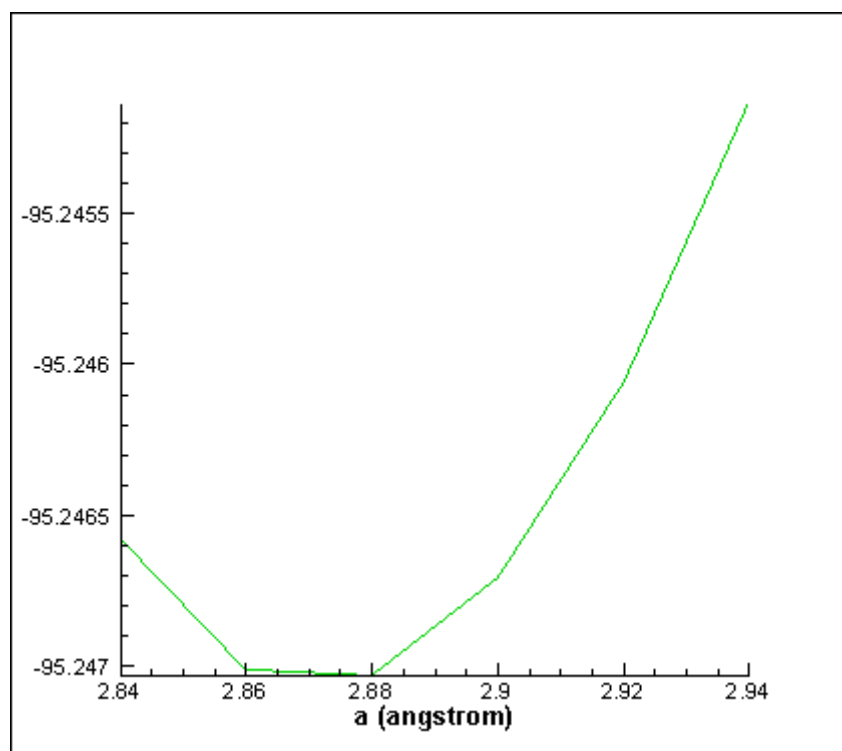
切断面における up-spin,down-spin,および total の電荷密度



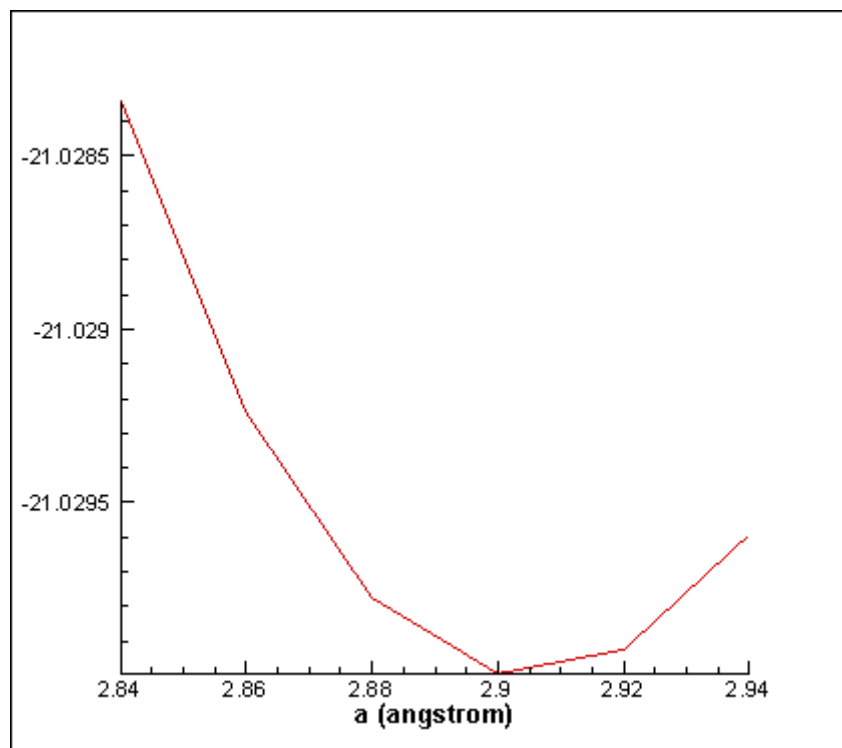
- 黄色 up-spin
- 桃色 down-spin
- 水色 total-spin

Cr 最適化計算 PAW と US の比較

a-Energy Sphex

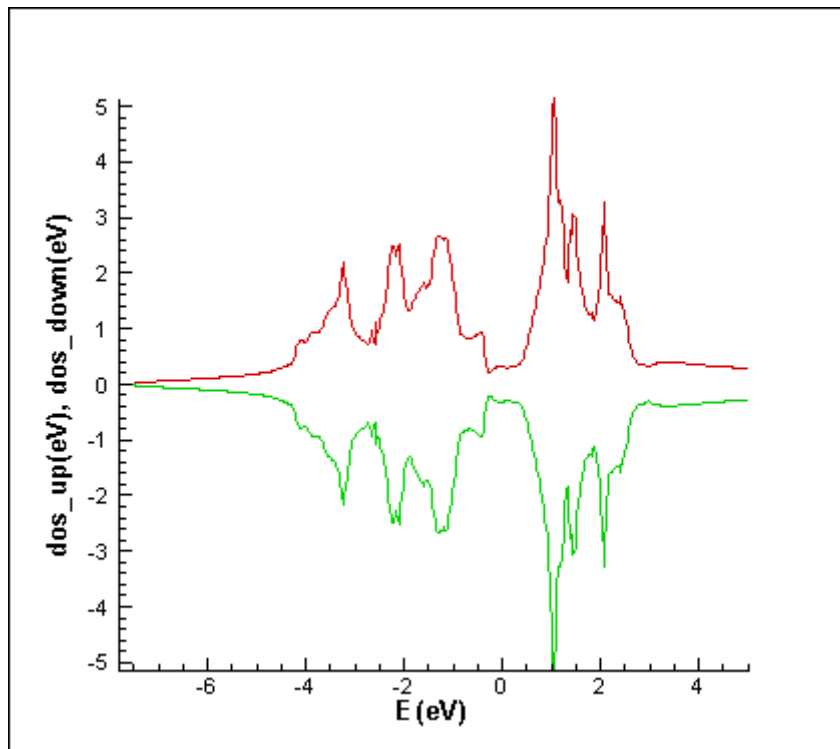


a-Energy US

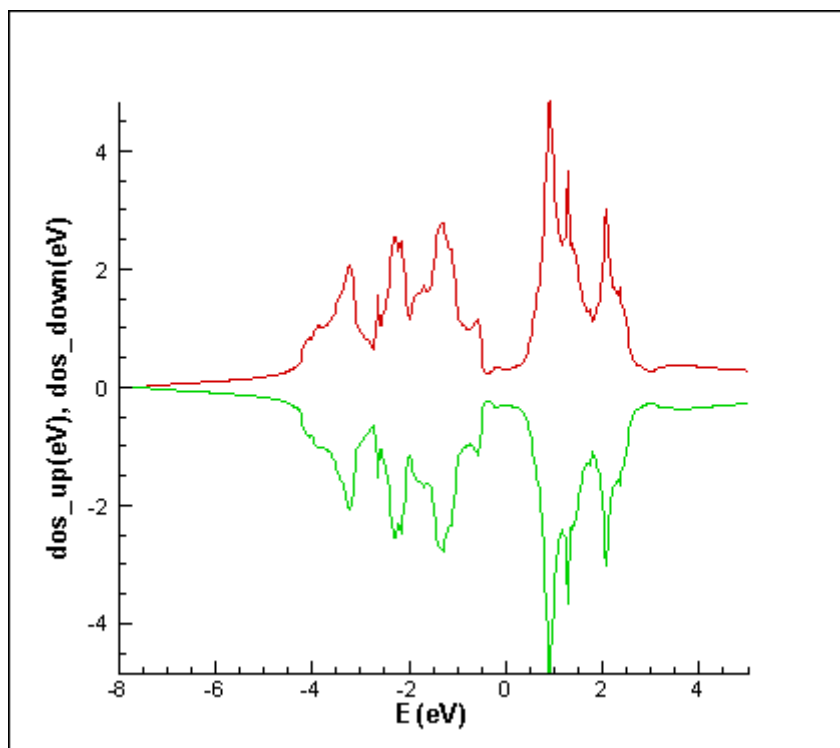


Cr 電子状態密度 PAW と US の比較

Cr の電子状態密度 by PAW

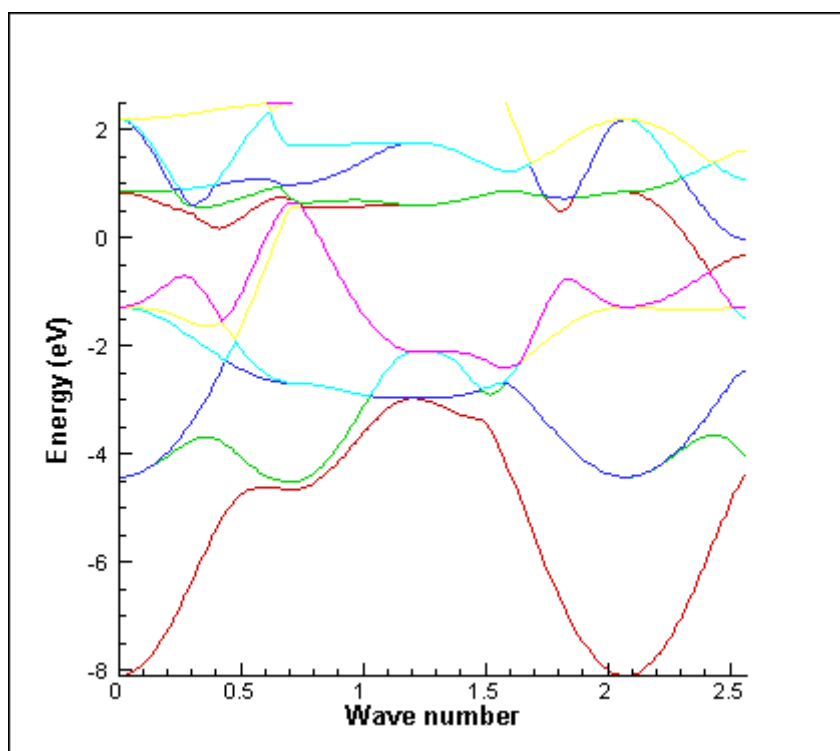


Cr の電子状態密度 by US

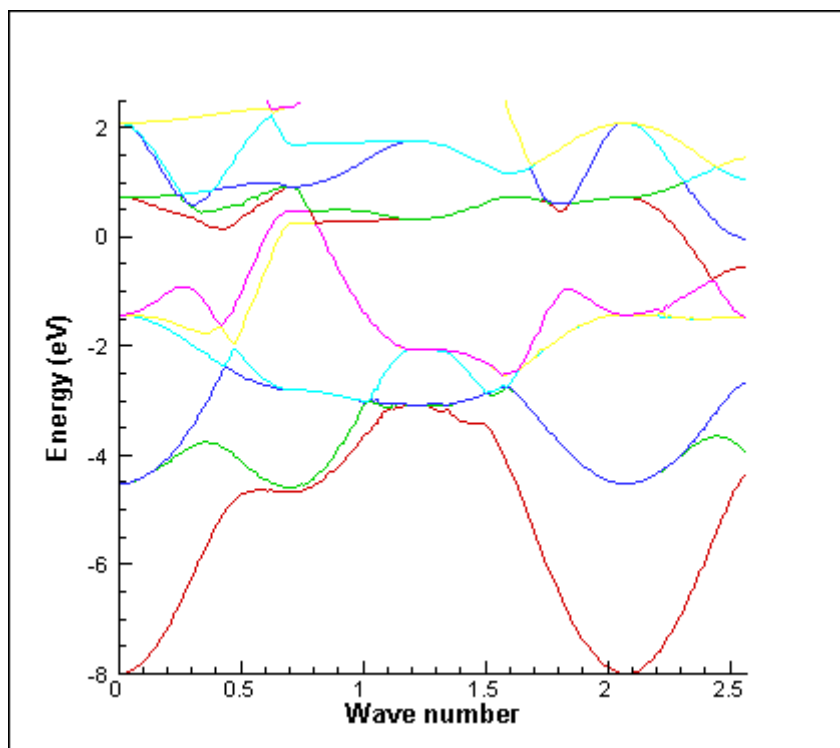


Cr バンド計算 PAW と US の比較

Cr のバンド計算 by PAW(GL)



Cr のバンド計算 by US



Cr 1 cycle あたりの計算時間 PAW と US の比較

あるシステムにおける例

Solver = MATRIXDIAGON

US 7.71800 (sec.)

PAW 7.92200 (sec.)

Solver = SD, MSD

US 2.84400 (sec.)

PAW 2.98400 (sec.)

Solver = ImSD, ImMSD, ImCG, ImeazyCG

US 4.64050 (sec.)

PAW 4.97967 (sec.)

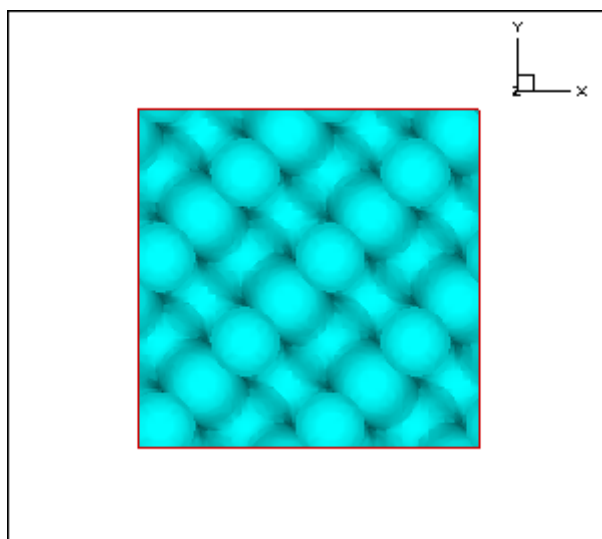
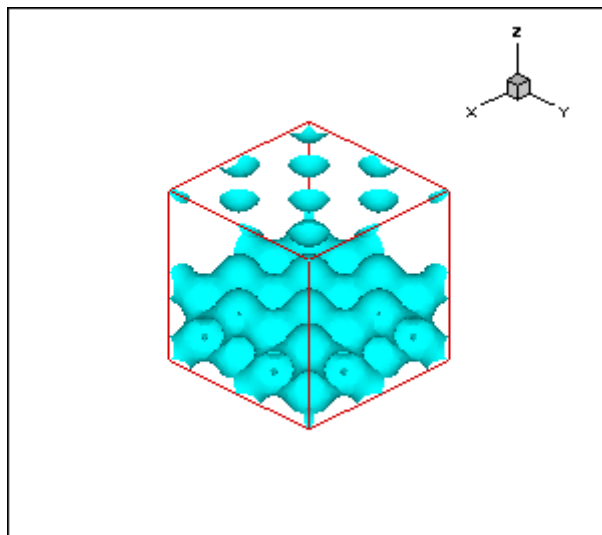
Solver = RMM, RMM2, RMM2P

US 6.17200 (sec.)

PAW 6.37500 (sec.)

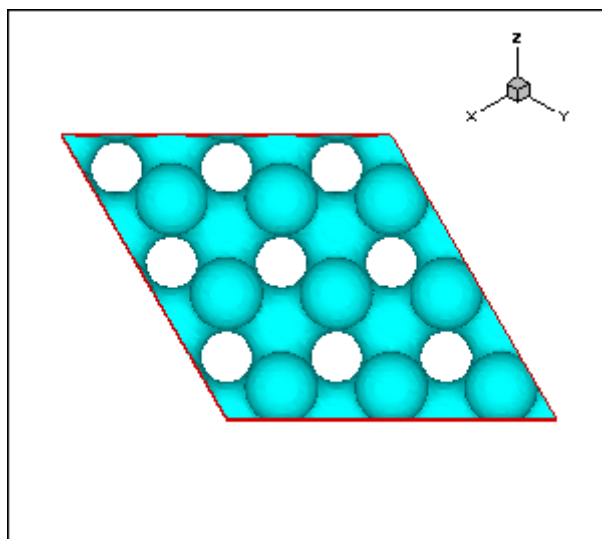
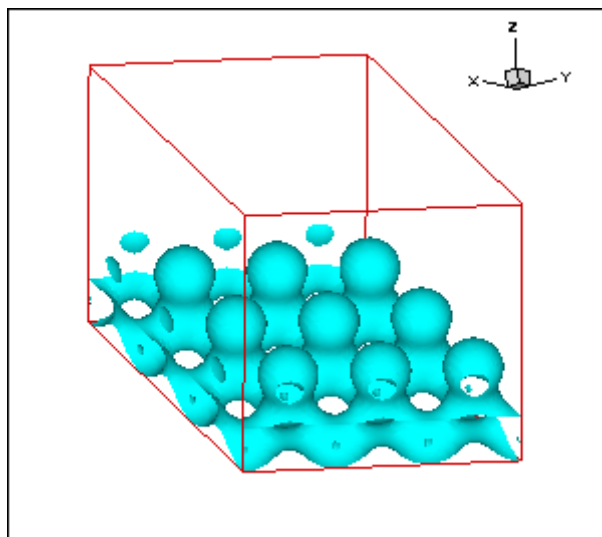
非局所擬ポテンシャルの実空間積分により計算時間が短縮できる計算例

Si(100)スラブの例



力の非局所擬ポテンシャルに関する部分の計算時間	
逆空間の計算時間	86.98400(sec.)
実空間の計算結果	11.21800(sec.)

Si(111)スラブの例



力の非局所擬ポテンシャルに関する部分の計算時間	
逆空間の計算時間	39.90600 (sec.)
実空間の計算結果	4.90700 (sec.)