

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人：方俊副研究员

(北京应用物理与计算数学研究所)

报告题目：

电子结构计算的 PAW 方法

邀请人：黄记祖博士

报告时间：2017 年 11 月 7 日 (周二)

下午 14:30-16:30

报告地点：数学院科技综合楼

三层 301 报告厅

报告摘要：

PAW (projector augmented-wave) 方法是一种重要的电子结构计算方法, 被视为传统全势方法

的“高置信”和赝势方法的“高效能”之间的一种很好的平衡。该方法通过引入所谓 PAW 变换，将真实的价电子波函数与一个平滑的辅助波函数联系起来。在 PAW 变换基础上，以辅助波函数为变分量，一致推导出总能泛函、Kohn-Sham 方程和原子受力表达式。自 1994 年提出至今，PAW 方法已经发展成为使用最广泛的电子结构计算方法之一。特别地，在流行的第一原理模拟软件 VASP 中，首选的电子结构计算方法便是 PAW 方法。本报告介绍 PAW 方法的理论框架，以及我们在平面波离散下的实现方案，并给出部分数值结果。

欢迎大家参加！