

# Analyse de la méthode PAW appliquée à un modèle simplifié

Mi-Song DUPUY, Université Paris Diderot, Laboratoire J.-L. Lions

**Xavier BLANC**, Université Paris Diderot, Laboratoire J.-L. Lions

**Eric CANCÈS**, CERMICS - Ecole des Ponts et Inria Paris

Les calculs de structure électronique des solides nécessitent la résolution d'équations de type Schrödinger non linéaires en géométrie périodique. L'approche naturelle est une décomposition en ondes planes (ou en série de Fourier). Une difficulté importante vient du fait que les fonctions d'ondes calculées sont singulières au voisinage des noyaux atomiques. Ces singularités impliquent une décroissance lente des coefficients de Fourier de ces fonctions d'ondes.

La méthode PAW (projector augmented-wave) [2] vise à contourner cette difficulté en remplaçant, via une transformation inversible, le problème aux valeurs propres initial par un autre ayant les mêmes valeurs propres mais des vecteurs propres plus réguliers. Elle est devenue une méthode de choix dans le calcul de propriétés des solides et a été implémentée dans différents codes moléculaires d'ondes planes de premier plan (ABINIT [4], VASP [3]).

Cette méthode repose sur l'observation suivante : les fonctions d'onde de l'hamiltonien moléculaire ont, près des noyaux, un comportement similaire aux fonctions d'onde atomiques. Or ces dernières peuvent être connues très précisément par un calcul au préalable et tabulées une fois pour toute. La transformation PAW associe à ces fonctions propres atomiques des fonctions régulières. Ainsi, s'il existe une bonne approximation de la fonction propre moléculaire par des fonctions propres atomiques, la fonction propre PAW sera plus régulière que la fonction propre initiale.

Nous proposons et analysons une implémentation légèrement différente de cette méthode, baptisée VPAW (variational PAW) [1] dans un cadre théorique simplifié où nous mettons en évidence ce comportement. Celle-ci permet d'avoir une meilleure convergence théorique en nombre d'ondes planes. Quelques résultats numériques confirment son efficacité.

## Références

- [1] X. BLANC, E. CANCÈS, M.-S. DUPUY, in preparation.
- [2] P. E. BLOCHL, *Projector augmented-wave method*, Phys. Rev. B, Vol. 50, 24, pp 17953-17979, 1994.
- [3] G. KRESSE, D. JOUBERT, *From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method*, Phys. Rev. B, Vol. 59, 3, pp 1758-1775, 1999.
- [4] M. TORRENT F. JOLLET, F. BOTTIN, G. ZÉRAH, X. GONZE, *Implementation of the projector augmented-wave method in the ABINIT code: Application to the study of iron under pressure*, Comp. Mat. Sci., Vol. 42, 2, pp 337-351, 2008.

**Mi-Song DUPUY**, Univ. Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, Laboratoire J.-L. Lions, UMR 7598, UPMC, CNRS, F-75205 Paris, France

`dupuy@math.univ-paris-diderot.fr`

**Xavier BLANC**, Univ. Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, Laboratoire J.-L. Lions, UMR 7598, UPMC, CNRS, F-75205 Paris, France

`blanc@ann.jussieu.fr`

**Eric CANCÈS**, CERMICS - Ecole des Ponts et Inria Paris, 6 & 8 avenue Blaise Pascal, 77455 Marne la Vallée, France

`cances@cermics.enpc.fr`