

Calcul direct en structure électronique par une méthode de récursion

Stéphane LE ROUX, CEA-DAM Ile de France

Gilles ZERAH, CEA-DAM Ile de France

La densité de charge électronique, élément central de la théorie des fonctionnelles de la densité en calcul de structure électronique, peut s'exprimer comme l'élément diagonal de la matrice densité [1]. Cet élément diagonal peut se calculer par une méthode de récursion basée sur la formule de Trotter [2]. Ceci permet la réalisation de calculs sans orbitales, par une méthode dont la complexité numérique croît linéairement avec la taille du système (ordre N). Par ailleurs, la récursion étant réalisée indépendamment en chaque point de l'espace avec un nombre relativement faible de communications, la méthode se prête bien à une utilisation des machines massivement parallèles.

L'exposé expliquera la méthode, puis en montrera les différents avantages à la fois en théorie et en pratique, par comparaison avec des résultats exacts ou des calculs de structure électronique utilisant la méthode classique des ondes planes. Nous présentons par ailleurs, une analyse numérique et théorique de ses propriétés de convergence, tant dans le cas d'un gaz d'électrons que pour un plasma d'Helium.

Références

- [1] S. BARONI, P. GIANNOZZI, *Towards Very Large-Scale Electronic-Structure Calculations*, .Europhys. Lett. 17 (1992) 547.
- [2] E. LORIN, G. ZÉRAH, *Recursion method for electronic structure calculations*, Computer Physics Communications 158 (2004) 39-46.

Stéphane LE ROUX – stephane.leroux@cea.fr

Département de physique théorique et appliquée, CEA-DAM Ile de France, 91680 Bruyères-le-Châtel

Gilles ZERAH – gilles.zerah@cea.fr

Département de physique théorique et appliquée, CEA-DAM Ile de France, 91680 Bruyères-le-Châtel