

課題名 (タイトル) :

The development of new long-range DFT functional利用者氏名 : **SONG Jong-Won**所属 : **和光研究所 基幹研究所 次世代分子理論特別ユニット**

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係
Alkane の異性化エネルギーや有機分子の異性化エネルギーは現在の密度汎関数にとっては接近不可能に思われている。本ユニットで開発された汎関数である短距離と長距離を補正した密度汎関数法 (LCgau 法) と C_6/R^6 で技術している弱い相互作用項 (Local Response Dispersion : LRD 法) を取り組んで様々な異性化エネルギーの計算に適応した。また、新材料開発で重要であるバンド計算に現在の密度汎関数は実験値より過小評価する問題がある。最近、ハートレー・フォック (HF) 交換項を誤差関数を用いて内包している混成汎関数 HSE が開発されているが、計算コストが高いため、実際に適応されるに難しいという問題がある。この問題に対して、本プロジェクトでハートレー・フォック (HF) 交換の積分をより簡単に計算ができる Gauss 関数を用いて、バンド計算に適した Gau-DFT を開発し、様々なバンド計算に適応してみた。
2. 具体的な利用内容、計算方法
様々な有機分子の異性化エネルギーの計算や様々な半導体のバンド計算
3. 結果
有機化合物の異性化エネルギーに長距離補正だけでなく、短距離補正によって高精度で実験値の結果を得ることができることが明らかになった。また、Gauss 関数を用いて既存の混成汎関数である HSE と同程度のバンド計算の再現ができたが、HSE で出来なかった反応障壁も高精度で再現することができた。それに、Gau-DFT は HSE より低い計算コストで計算ができることを確認した。
4. まとめ
LCgau+LRD 法は有機化合物の異性化エネルギー計算で他のどの汎関数よりも高精度の結果を得ることが出来た。また、Gaussian 関数を用いる Gau-DFT を成功的に開発した。
5. 今後の計画・展望
LCgau+LRD 法を用いてもっと大きい分子系の異性化エネルギーに適応し、現在まだ解決されていない Ring system の異性化エネルギーに適応して、密度汎関数で大きい問題である異性化エネルギー計算の問題を解決する。また、バンド計算に適した Gau-DFT は Gaussian09 に実装されているが、Gauss 関数で表現されている HF 交換項の積分をより速く計算ができるアルゴリズムを開発する。また、Gaussian09 以外の並列化に向いている計算ソフトに Gau-DFT を実装する。
6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容
並列化に向いているバンド計算ソフトに Gau-DFT を入れて高性能で計算ができるように研究に使う。また、LCgau+LRD 法を大きい系の有機化合物の計算に適応する。
7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由
8. 利用研究成果が無かった場合の理由

平成 21 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

Jong-Won Song, Takao Tsuneda, Satoshi Suzuki, and Kimihiko Hirao, “On Koopmans’ theorem in density functional theory”, J. Chem. Phys. 133, 174101 (2010).

Jong-Won Song, Daoling Peng, and Kimihiko Hirao, “A semi-empirical long-range corrected functional including a short-range Gaussian attenuation (LCgau-B97)”, in preparation.

Jong-Won Song, Kimihiko Hirao, and Koichi Yamashita, “Hybrid exchange correlation functional on band gap using a Gaussian function (SHY-PBE)”, in preparation.

Jong-Won Song, Takao Tsuneda, and Kimihiko Hirao, “Isomerization energy calculations of organic molecules using long-range corrected density functional theory including a short-range Gaussian attenuation”, in preparation.

【国際会議などの予稿集、proceeding】

無

【国際会議、学会などでの口頭発表】

宋 鍾元, 佐藤 健, 常田 貴夫, 平尾 公彦, “Alkane energy calculations using long-range corrected DFT combined with intramolecular van der Waals correlation”, 第 13 回理論化学討論会 (札幌)

【その他】

宋 鍾元, Singh Raman, 佐藤 健, 常田 貴夫, 平尾 公彦, “長距離補正密度汎関数法 (LC と LCgau 法) の異性化エネルギー計算への適用”, 第 4 回分子科学討論会 2010 大阪