

課題名 (タイトル) :

The development of new long-range DFT functional利用者氏名 : **SONG, Jong-Won**

理研での所属研究室名 : 計算科学研究機構 平尾計算化学研究ユニット

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
個体物質のバンドの予想は新材料開発で重要である。個体のバンド計算にもっとも良く用いられているのは密度汎関数である。現在使われている密度汎関数法は実験値より過小評価する問題があり、特に小さいバンドを持っている個体に対して適用が混乱な状態である。最近、誤差関数オペレーターを用いてハートレー・フォック (HF) 交換項を内包している混成汎関数法 HSE が開発され、注目されている。しかし、この汎関数は実際に適用されるに HF 交換積分の高い計算コストがボトルネックになっている。この問題に対して、本プロジェクトで HF 交換の積分をより簡単に計算ができるような方法として、Gauss 関数を HF オペレーターにしてバンド計算に適した Gau-PBE 密度汎関数を開発した。ガウス基底のソフトである Gaussian09 に実装して、様々なバンド計算に適用し、また、平面波基底のソフトである Quantum Espresso に Gau-PBE 密度汎関数を実装し、様々な個体系のバンド計算を行った。
2. 具体的な利用内容、計算方法
Gaussian09 と Quantum Espresso を用いた様々な半導体のバンド計算や汎関数のパラメータのフィッティング
3. 結果
Gauss 関数を用いた Gau-PBE 汎関数は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出来ており、HSE で出来なかった反応障壁も高精度で再現することが出来た。それに、Gau-PBE 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。Quantum Espresso に実装された Gau-PBE 汎関数を用いてバンド計算を行った結果、Gau-PBE が個体バンド計算に非常に良い適用性を持っていることを確認した。
4. まとめ
5. 今後の計画・展望
Gau-PBE 汎関数は特にガウス基底のソフトでは Gaussian オペレーターに適した Screening を用いるときに計算コストを非常に削減できることが予想されている。今の Gau-PBE より早い計算ができるアルゴリズムや理論を実装しようとしている。また、Gau-PBE より良い原子化エネルギー計算が出来る Gau- ω PBE を開発している。平面波基底の Quantum Espresso を用いて、巨大系への適用計算や表面上の反応障壁計算を計画している。また、超並列化に向いている計算化学ソフトに Gau-PBE を最適化し、京コンピュータなどで大きい系で実用的に活用できるように改善する。
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
Gau-PBE 汎関数を大規模系に適用計算して実用性を検討する。また、新しい汎関数を開発し、その汎関数に使うパラメータをフィッティングする。開発した汎関数を色んな物性計算に適用して検討する。
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 23 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】

1. “Communication: A new hybrid exchange correlation functional for band-gap calculations using a short-range Gaussian attenuation (Gaussian-Perdue–Burke–Ernzerhof)” J.-W. Song, K. Yamashita, and K. Hirao, *J. Chem. Phys.* 135, 071103 (2011).
2. “A semiempirical long-range corrected exchange correlation functional including a short-range Gaussian attenuation (LCgau-B97)” J.-W. Song, D. Peng, and K. Hirao, *J. Comp. Chem.* 32, 3269 (2011).
3. “An examination of density functional theories on isomerization energy calculations of organic molecules” J.-W. Song, T. Tsuneda, T. Sato, and K. Hirao, *Theor. Chem. Acc.* 130, 851 (2011).

【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】

1. “周期系に向けたガウス関数遮蔽ハイブリッド汎関数法(Gau-PBE)の開発” J.-W. Song, K. Yamashita, and K. Hirao, The 5th Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science (2011), Sapporo, Japan.
2. “A new hybrid DFT functional using a Gaussian attenuating exchange for band gap calculations” J.-W. Song, K. Yamashita, and K. Hirao, The 5th Asian Pacific Conference of Theoretical & Computational Chemistry (2011), Rotorua, New Zealand.

【その他】