

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 : 計算科学研究機構 平尾計算化学研究ユニット

- |   |   |
|---|---|
| <p>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</p> <p>個体物質のバンドの予測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系に対して適用が混乱な状態である。最近、私たちは Gauss 関数をハートレー・フォック (HF) オペレーターにして周期境界条件での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、既存の HSE 汎関数より短い時間で高精度のバンド計算が出来ることを確認した。本課題の研究で、ガウス基底のソフトに実装された Gau-PBE 汎関数を平面波基底のソフトである Quantum ESPRESSO に実装し、様々な個体系のバンド計算に適応する。また、Gau-PBE 汎関数より改善された Gau-<math>\omega</math>PBE 汎関数を開発する。また、我らが開発して今よく用いられている長距離補正した密度汎関数 LC-BOP の汎関数の OP 関連汎関数部分の関連パラメータを再フィティングし、既存より最適化された LC-BOP 汎関数を提案する。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>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</p> <p>3. 結果</p> <p>本課題の研究で、我らは既存の Gau-PBE 汎関数より改善された Gau-<math>\omega</math>PBE 汎関数を開発した。また、既存の Gau-PBE を平面波基底のソフトである Quantum ESPRESSO に実装し、Down Sampling の計算と様々な個体系のバンド計算を通して Gau-PBE 汎関数が平面波基底でも優れた</p> | <p>収束性を持つことを確認した。また、既存の我らが開発して使っていた LC-BOP の汎関数の関連汎関数の部分である OP 関連汎関数のパラメータを再フィティングし、既存より最適化された LC-BOP12 と LCgau-BOP12 を開発した。</p> <p>4. まとめ</p> <p>Gau-PBE 汎関数を平面波基底の Quantum ESPRESSO に実装し、既存の Gau-PBE 汎関数より改善された Gau-<math>\omega</math>PBE 汎関数を開発した。また、既存の LC-BOP より関連項が改善さ荒れた LC-BOP12 と LCgau-BOP12 を開発した。</p> <p>5. 今後の計画・展望</p> <p>Quantum ESPRESSO に実装された Gau-PBE を用いて、色んな個体材料の開発計算に適用する。また、Gau-PBE より改善された汎関数である Gau-<math>\omega</math>PBE を Quantum ESPRESSO に実装する。ガウス基底の Gau-PBE は既存の HSE 汎関数より早いですが、Gau-PBE に適したスクリーニング方法によりもっと低いコストのバンド計算が出来るようになる。その新しいスクリーニング手法を作ることを図っている。また、我らが開発した高精度で分子系の計算が出来る LCgau-B97 に弱い相互作用のポテンシャルを加えて最適化した LCgau-B97+LRD を開発する。</p> |
|---|---|

平成 24 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. “Gaussian attenuation hybrid scheme applied to Ernzerhof-Perdew exchange hole model (Gau-PBEh)” J.-W. Song, K. Yamashita, and K. Hirao, *J. Chem. Phys.* 137, 244105 (2012).
2. “Long-range corrected functionals satisfy Koopmans’ theorem: calculation of correlation and relaxation energies” R. Kar, J.-W. Song, and K. Hirao, *J. Comput. Chem.* (2013) in press, (doi: 10.1002/jcc.23222).
3. “Long-range corrected density functional theory with optimized one parameter progressive correlation functional (LC-BOP and LCgau-BOP)” J.-W. Song and K. Hirao, *Chem. Phys. Lett.* (2013) in press, (<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2013.01.064>).

**【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. “Which is Better: An Error Function or Gaussian Attenuation in Hybrid Density Functional Theory for Solid State Calculations?” J.-W. Song and K. Hirao, The 14th International Congress of Quantum Chemistry (2012), Boulder, Colorado, USA.

**【その他】**

無