

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

これまで開発された長距離補正した B97 汎関数は基底状態に限っていた。今度の研究で励起状態や電化移動計算にも良い精度で計算が出来る汎関数を開発する。また、これまで密度汎関数で再現が出来なかった色んな系 (たとえば、異性化エネルギー計算) に長距離補正法を使った密度汎関数を適応する。

2. 具体的な利用内容、計算方法

新しい汎関数のパラメータのフィッティングと開発された汎関数を用いた応用計算 (長い炭化水素のエネルギーの再現)

3. 結果

これまでの汎関数と違って、基底状態の精度だけでなく、電化移動や励起状態の計算にも高い精度が同時に計算できるような汎関数 (LCgau-B97) の開発が出来た。また、これまで密度汎関数では全然再現できなかった長い炭化水素のエネルギー計算が長距離補正法で出来ることを確認した。

4. まとめ

基底状態や励起状態にも同時に高精度に計算が出来る LCgau-B97 汎関数の開発と炭化水素のエネルギーの再現計算が密度汎関数で初めて成功的に出来た。

5. 今後の計画・展望

今回は原子化エネルギー、イオン化エネルギー、電子親和度、反応障壁などの化学的な物性の精度に中心にした汎関数の開発まで出来たが、今後は密度汎関数が使われるのに最も大切である弱い相互作用の計算にも効くような汎関数の開発をする。また、他の方法で固体のバンド計算にも用

いられる汎関数の開発を図る。応用計算で、現在密度汎関数で再現できないと思われる炭化水素分子の異性化の再現計算もするつもり。

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

研究計画での計画通りに新しい汎関数の開発はできたが、バンド計算はまだ行われていない。バンド計算は計算コストが高いため開発したプログラムを効果的な速度で計算する必要がある。また、開発した汎関数の色んな物性の再現計算に使うつもり。

7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

実は開発した汎関数の応用計算で励起エネルギーや固体計算をしたかったが、いじったプログラムで並列化計算すると上手く出来なかったので RICC のマシンを使わなかったが、これからの計算では必ず並列化計算を使わなければならないので、情報基盤センターの方との緊密なコミュニケーションでいじった Gaussian を使って並列化計算をするつもり。その時は、すぐ CPU 時間が足りなくなるかも知れない。

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, Takeshi Sato, and Kimihiko Hirao, “Calculations of Alkane Energies Using Long-range Corrected DFT Combined with Intramolecular van der Waals Correlation”, *Organic Letters*, 2010, in press (3 月中出版予定)

【国際会議、学会などでの口頭発表】

宋 鍾元, 彭 導靈, 平尾 公彦, “短距離と長距離を補正した密度汎関数法 (LCgau-DFT) の開発とその応用”, 第 3 回分子科学討論会, 2009 年 9 月, 名古屋

【その他】

Poster presentation and Best Poster Award

Jong-Won Song, Daoling Peng, and Kimihiko Hirao, “Systematic optimization of long-range corrected hybrid exchange-correlation functionals including a short-range Gaussian attenuation (LCgau-B97)”, The Fourth Asian Pacific Conference of Theoretical & Computational Chemistry, Dec. 2009, Port Dickson in Malaysia