

## オーダーN交換汎関数の開発

### Order-N orbital-dependent exchange functional

\*豊田雅之, 尾崎泰助

\*Masayuki Toyoda and Taisuke Ozaki

北陸先端科学技術大学院大学 先端融合領域研究院

*Research Center for Integrated Science, Japan Advanced Institute of Science and  
Technology, Nomi, Ishikawa 923-1291*

密度汎関数理論にもとづく第一原理電子状態計算では、電子間の交換相関項に対する局所密度近似を超える理論として、非局所な交換相互作用を用いるハイブリッド汎関数法が注目されている。ハイブリッド汎関数法は半導体のバンド・ギャップや格子定数などの物性値を正しく予測できる利点がある一方、従来の汎関数よりも多くの計算量を必要とし、とくに系のサイズ（たとえば単位胞あたりの基底関数の数）の増加に対する計算量の増加のスケールリング性が悪いという難点を持つ。近年では大規模並列化による高速な計算環境が開発され、機能性高分子や表面・界面などの多数の原子を扱う問題に対しても第一原理計算による物性予測が試みられており、このような大規模系に対してハイブリッド汎関数法を適用するには、非局所な交換エネルギーの計算におけるスケールリング性能の向上が重要な課題となる。

我々は、交換エネルギーの計算において基底関数の増加に対する計算量の増加が比例するオーダーNの近似手法を開発した[1]。これは、クーロン相互作用に遮蔽を導入して近接原子間の二電子積分だけから交換ホールを計算した後に、遮蔽で失われた長距離成分を局所関数を使って補うというものである。局所関数には、水素型原子の厳密解を用いる。交換ホールの総和則を満たすように条件を課すことにより、局所関数の係数を自己無撞着に決定することが可能である。希ガス原子で交換エネルギーや交換ポテンシャルを計算し、実用的な精度以下に誤差を抑えられることを確認した。本発表では、遮蔽の度合と誤差の程度の関係について詳しく紹介する。

[1] M. Toyoda and T. Ozaki, Phys. Rev. A 83, 032515 (2011).