



# 密度汎関数法とは

---

常田貴夫

東京大学工学系研究科システム量子工学専攻

2005年12月26, 27日

---

第1回計算分子科学集中セミナー

@IMS



# 0章

---

**なぜ今、密度汎関数法が重要なのか？**

---

# 次世代化学理論

精密な化学計算により、新しい分子システムを創り出す

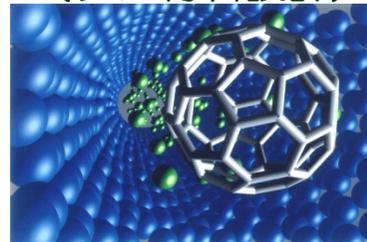
理論化学計算  
の主要問題

複雑な大分子へ

ライフサイエンス  
(プロテインデザイン)



ナノテクノロジー  
(ナノ材料設計)



環境、エネルギー化学  
(触媒設計)



理論化学の問題点＝計算時間がかかりすぎる

ムーアの法則 「コンピュータの処理能力はおよそ18ヶ月ごとに2倍」によると...

計算オーダー (Nは原子数)	計算方法	システムが10倍 になったら (倍)	20年後に計算可能 なシステム (倍)
$N^7$	CCSD(T)	10,000,000	≒3.7
$N^6$	CCSD, MRMP	1,000,000	≒4.7
$N^4$	MP2	100,000	≒10
$N^3$	HF, <b>DFT</b>	1,000	≒22
$N^1$	None	10	≒10,000

計算オーダーの  
低い理論が  
圧倒的に使われる

# 次世代化学理論に必要な条件

精密な分子構造決定が可能

結合距離を $0.1 \text{ \AA}$ 以内、結合エネルギーを $1 \text{ kcal/mol}$ 程度の誤差で算出できる理論→  
電子相関 **MO**、**密度汎関数法**

高速な計算アルゴリズムを実現

アルゴリズムの線形スケーリング化や並列化が行なえる理論→**密度汎関数法**

さまざまな物性値計算への適用可能性

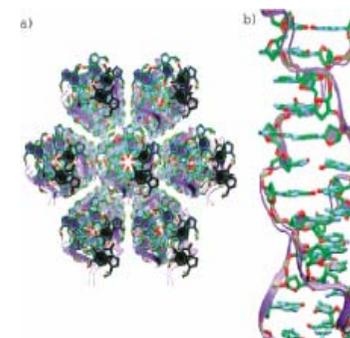
多種多様な化学物性値を高精度に算出できる理論→電子相関 **MO**、**密度汎関数法**

システムに対する計算精度の等価性

分子の大きさや原子の種類に大きく依存しない計算精度を持つ理論→**密度汎関数法**



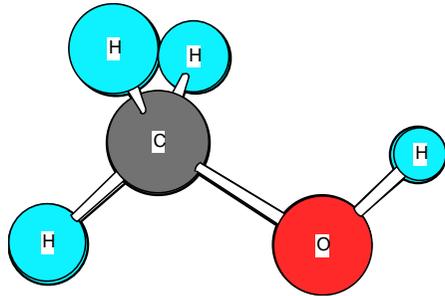
現時点では、**密度汎関数法 (DFT)** が  
複雑な分子システムの精密計算に最適



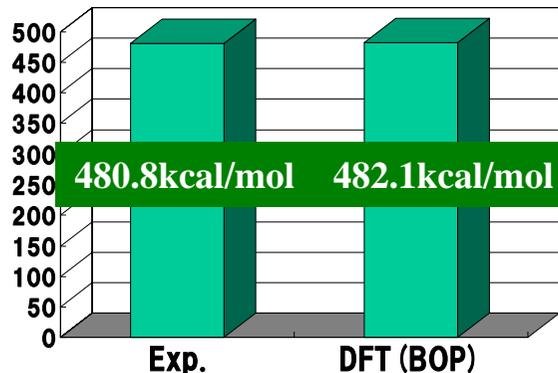
# 密度汎関数法による小分子の化学計算の精度

密度汎関数法は小分子の化学プロパティをきわめて精密に再現

実験値とDFT(BOP)計算値の比較

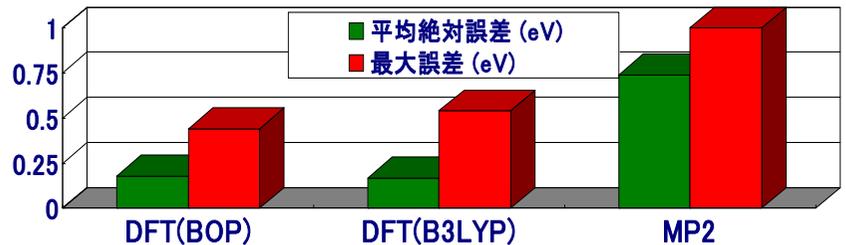
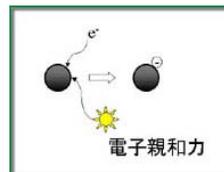
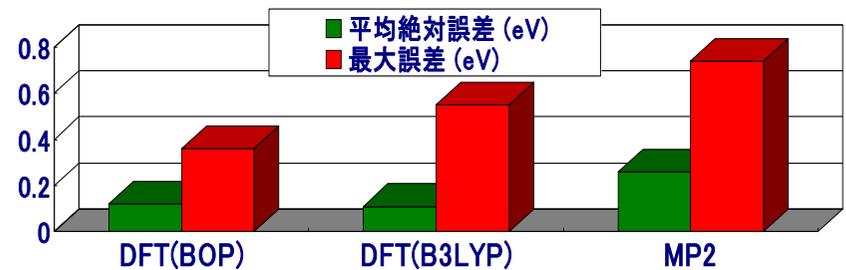
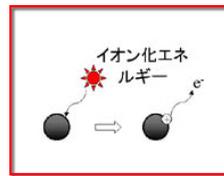
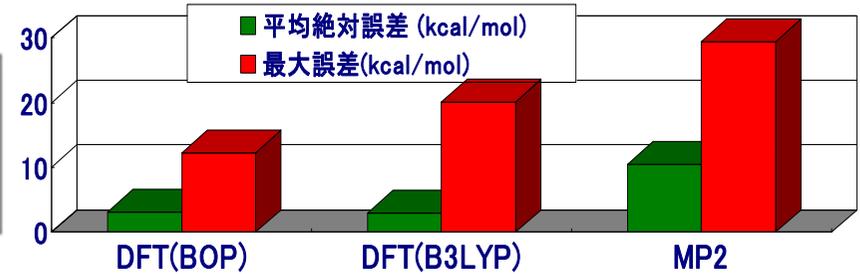
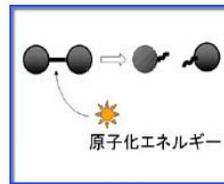
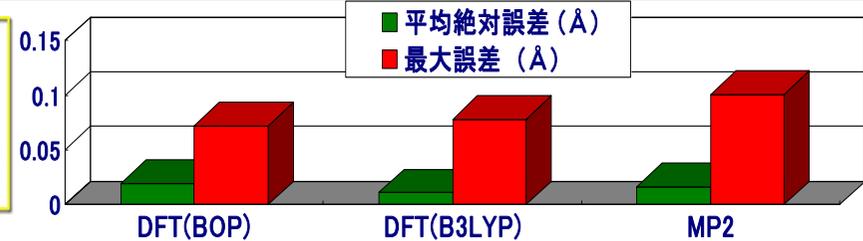
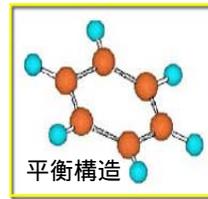


メタノールの平衡構造



メタノールの原子化エネルギー

数十種類の分子からなるG2-1ベンチマークセットの化学プロパティ計算値の誤差



# Contents

- 1章 **密度汎関数法(DFT)の基礎**
  - 1.1. 基礎理論と定式
  - 1.2. 直接的なポテンシャル決定
- 2章 **交換相関汎関数**
  - 2.1. 交換相関汎関数の分類
  - 2.2. 基本的物理条件とその意味
  - 2.3. 自己相互作用誤差と補正法
- 3章 **密度汎関数法にもとづく最新の化学理論**
  - 3.1. 長距離補正(LC)法
  - 3.2. 最適化有効ポテンシャル(OEP)法
  - 3.3. 厳密交換法
  - 3.4. Van der Waals結合計算法
- 4章 **密度汎関数法計算の線形スケーリング法**
  - 4.1. Coulomb積分計算の高速化
  - 4.2. 行列対角化計算の高速化
  - 4.3. 交換相関汎関数数値積分計算の効率化
- 5章 **時間依存密度汎関数法**
  - 5.1. 基礎理論と定式
  - 5.2. 線形・非線形応答物性

