**ファン・デル・ワールス密度汎関数とその応用**

**阪大工　濱田幾太郎**

**E-mail: ihamada@prec.eng.osaka-u.ac.jp**

経験的パラメータを含まない第一原理電子状態計算手法は、実験的に観測された構造、電子状態、ダイナミクスを詳細に理解するためのツールとして表面科学の分野でも幅広く用いられている。局所密度近似や一般化勾配近似、いわゆるセミローカル近似を用いた密度汎関数理論 (DFT) が、その計算精度とコストのバランスから、今日の第一原理計算の主流となっている。しかしながら、セミローカル近似のもとでのDFTは静的かつ局所電子密度にのみ依存した近似であるため、非局所かつ動的電子相関に由来する分散力を精度良く記述できないことがよく知られている。分散力は分子間における最も基礎的な相互作用の一つであり、分子吸着、特に物理吸着を高精度に記述するためには必要不可欠な相互作用である。分散力は波動関数理論や多体摂動論を用いて高精度に記述することが可能であるが、これらの手法は計算コストが極めて高く、複雑な表面・界面への適用は難しい。そのため、DFTの枠内で分散力を記述するための計算手法が数多く開発されている。その中でもLangrethとLundqvistらによって開発されたファン・デル・ワールス密度汎関数 (vdW-DF) [1,2]は経験的パラメータに依存しない、系の電子密度にのみ依存する汎関数であり、複雑・大規模系をセミローカル近似と同程度の計算コストで取り扱うことが可能である。我々はvdW-DFを実装し、表面吸着系を中心に適用計算を行ってきた。さらには高精度なvdW-DF汎関数[3]の開発にも成功し、表面・界面を中心に幅広い物質群の記述を大きく改善してきた。講演ではvdW-DFの概要とその表面系を中心とした適用例[3,4,5]を紹介し、今後の展望を議論したい。

参考文献

[1] M. Dion, H. Rydberg, E. Schroder, D. C. Langreth, and B. I. Lundqvist,

Phys. Rev. Lett **92**, 246401 (2004).

[2] K. Berland, V. R. Cooper, K. Lee, E. Schroder, T. Thonhauser, P. Hyldgaard, and

B. I. Lundqvist, Rep. Prog. Phys. **78**, 066501 (2015).

[3] I. Hamada, Phys. Rev. B **89**, 121103 (2014).

[4] I. Hamada, Y. Hamamoto, Y. Morikawa, J. Chem. Phys. **147**, 044708 (2017).

[5] S. A. Wella, H. Sawada, N. Kawaguchi, F. Muttaqien, K. Inagaki, I. Hamada,

Y. Moriakwa, Y. Hamamoto, Phys. Rev. Materials 1, 061001(R) (2017).