

ADF2009.01 リリース

Scientific Computing & Modelling社製 ADF (Amsterdam Density Functional Software)の新バージョンADF2009.01がリリースされました。新バージョンでは、磁気円二色性スペクトルや励起寿命を考慮した共鳴ラマンスペクトルなどスペクトル計算機能がさらに強化されたことに加え、Hybrid汎関数を使用したプロパティ計算の機能拡張がなされています。GUIにおいても、QUILDプログラムのマルチレイヤーの設定 (図1) や、空間群の指定による結晶構造の構築、より多くのプロパティ (部分状態密度、ELF、STM、etc.) に対応した表示機能 (図2) など、数多くの機能追加・改良がなされています。

ADF (孤立系) の主な新機能

- ◆スペクトル計算に関連する機能
 - ・励起状態の寿命を考慮した共鳴ラマンスペクトル
 - ・磁気円二色性スペクトル (MCD)
 - ・Verdet定数とFaraday B項
 - ・メスバウアースペクトル
 - ・スピン軌道相互作用を摂動的に取り込んだ励起エネルギーの計算
 - ・TDDFT法におけるCOSMO計算
 - ・NRVSスペクトル
- ◆交換相関汎関数の対応
 - ・Hybrid汎関数によるエネルギーの解析的1次微分と数値的2次微分の計算
 - ・Hybrid汎関数による励起エネルギーとNMR化学シフトの計算。PBE0汎関数はNMRスピン-スピンカップリング定数の計算にも対応。
 - ・meta-GGA 汎関数 (M06-L, TPSS) と meta-Hybrid汎関数 (M06, TPSSH) によるSCF計算と構造最適化計算
 - ・OEP (exact exchange optimized effective potential)法
 - ・Cs-Rnまでの重元素に対する分散力補正汎関数

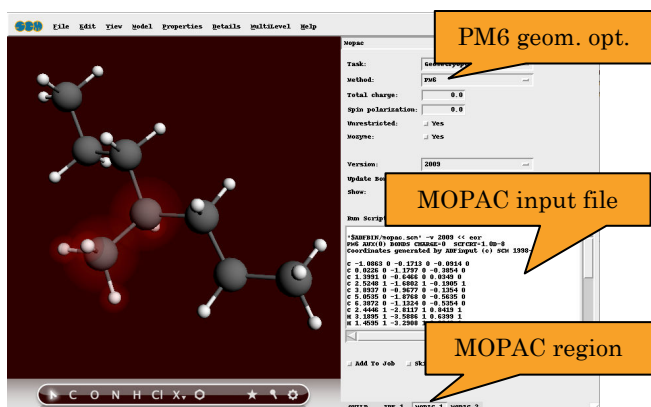


図1 QUILDプログラムのマルチレイヤーの設定画面
設定例ではMOPAC2009を使用。

BAND (周期系) の主な新機能

- ・グリッドベースの高速なBaderのAtoms-In-Molecules (AIM)法の実装。周期系のBader原子電荷を算出するのに使用できます。
- ・分散力補正汎関数の実装。有機結晶、ゼオライト、分子-表面間における弱い相互作用を正確に記述する汎関数として使用できます。
- ・結晶のElectric Field Gradient (EFG)の計算

新機能を利用した最新の適用事例

ADFでは、Dirac方程式の近似理論であるZeroth-Order Regular Approximation (ZORA)法を採用することで、相対論 (スピン軌道相互作用を含む) を考慮した各種プロパティの計算が可能です。表1は、有機ELデバイスに使用されるRGB3色の典型的なイリジウム錯体の発光物性 (輻射速度) を、Hybrid 汎関数を使用したZORA-TDDFT計算で得たものです。計算値は実測値の傾向を再現し、発光性遷移金属錯体の発光効率の予測に有用であることがわかります。

表1 輻射速度定数 (k_r) の計算値と実測値の比較

Compounds	k_r (10^5 s^{-1})	
	Calc.	Exp.
Ir(ppy)_3	5.6	6.4
FIrpic	2.5	5.2
$\text{Ir(btpp)}_2(\text{acac})$	1.2	0.6

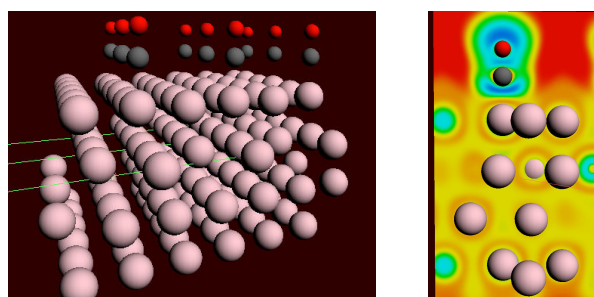


図2 銅 (100) 表面上のCO吸着 (左) と Electron Localization Function (ELF) の表示 (右)