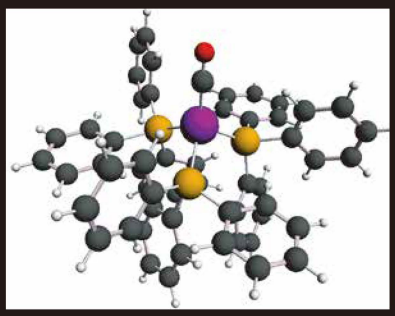
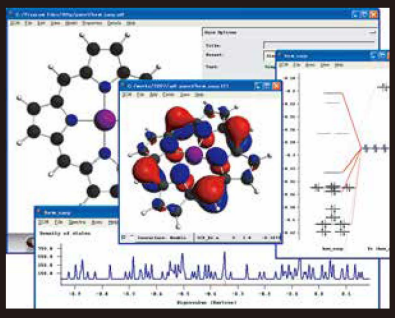
MOLSIS

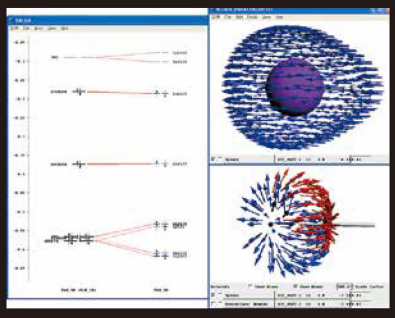
SCM Scientific Computing & Modelling

ADF

量子化学計算ソフトウェア







様々な系に適用可能な密度汎関数法ソフトウェア

Amsterdam Density Functional Package (ADF)は、密度汎関数法(DFT)に基づく量子化学計算ソフトウェアで、均一系・不均一系触媒から無機化学、重元素化学、生化学、各種分光学まで幅広い分野の研究に利用されています。
DFTは、1990年代初頭から広く使われるようになった方法で、電子相関を含んでいる点でHartree-Fock法よりも高精度です。また、post Hartree-Fock法(MP2, CI, CCなど)では取り扱いが困難なサイズである数百原子からなる化合物についても高速に計算することができます。
ADFは遷移金属を含んだ系でもSCF計算の収束がよく、重元素系で重要な相対論の効果を含めることができます。さらに、周期表の全元素に対応した全電子計算用の基底関数(Slater型)を完備していることは、ADFの大きな特長の一つです。

豊富なプロパティ計算機能

ADFは種々の分子物性を高精度に計算することができます。時間依存密度汎関数法(TD-DFT)により、紫外・可視吸収スペクトル(振動子強度と一重項・三重項励起エネルギー)や、周波数依存分極率、ラマン強度、ファン・デル・ワールス分散係数などを計算します。また、IRの振動数や強度、多重極子モーメントと同様に、NMRの化学シフトやスピン-スピンカップリング、ESR(EPR)gテンソル、磁気的・電気的超微細構造テンソル、核四重極子カップリング定数の計算が可能です。ほとんどの物性計算に対して相対論の効果を考慮した計算を行うことができます。

量子化学計算ソフトウェア

●計算方法

●構造予測・反応解析

●プロパティ計算

●解析機能

●精度・効率

グラフィカルユーザインターフェース

●構造構築機能

●表示機能

●計算設定・ジョブ管理機能

●サポートプラットフォーム

ADF

・Hartree-Fock法: RHF, UHF
・密度汎関数法: LDA, GGA(BP, PW91, BLYP, PBE, HTBS, etc.),GGA-D(D, D3, D3(BJ), dDsC, MBD@rsSC, dUFF), Meta-GGA(M06L, TPSS, etc.), Hybrid(B3LYP, PBE0, O3LYP, BHandH, B1PW91, etc.),Hybrid-Meta-GGA(M06, TPSSH, etc.), Range-Separated-Hybrid (CAM-B3LYP, ωB97X, etc.), model (LB94,SAOP), LibXCへのインターフェース (MVS, N12, ωB97X-V, etc.)
・相対論効果: Pauli, ZORA, X2C, RA-X2C
・Constrained DFT: 電荷、スピンまたは励起状態に拘束を課す密度汎関数法
・励起状態計算: (simplified) TDA, (simplified) TD-DFT, TD-DFT+TB, CV(n)-DFT
・溶媒効果: COSMO, SM12, DRF, SCRF, 3D-RISM, FDE
・外場の設定: 点電荷、静電場, DIM/QM法, non-self-consistent Green's function計算
・QM/MM: IMOMM/ADF, AddRemove, QUILD
・分子動力学計算: マルチスケールMD, Biased MD(メタダイナミクス、アンブレラサンプリングなど)

・構造最適化計算: quasi-Newton
・遷移状態探索: EF,NEB
・最小エネルギー交点探索
・反応経路: Linear Transit,IRC

・熱力学物性: エントロピー、モル比熱など
・IRスペクトル、(共鳴)ラマンスペクトル、振動ラマン光学活性(VROA)、Franck-Condon因子
・紫外・可視吸収スペクトル、X線吸収スペクトル
・円二色性スペクトル(VCD,ECD)、旋光分散スペクトル(ORD)
・磁気円二色性スペクトル(MCD)、Verdet定数、Faraday A, B項
・NMR: (常磁性)化学シフト、スピン-スピンカップリング
・ESR: (回転)gテンソル、Aテンソル、ZFS、NQCC(EFG)、Qテンソル
・メスバウアースペクトル、NRVSスペクトル
・電気的多重極子モーメント、(周波数依存)分極率・超分極率、(動的)磁化率
・原子電荷: Mulliken,Hirshfeld,Voronoi,AIM
・輸送特性: charge transfer integral
・励起状態間のスピン軌道相互作用行列要素(SOCME)

・フラグメント軌道による相互作用解析: フラグメントはユーザ定義が可能
・結合エネルギー解析、ETS-NOCV
・結合次数解析: Mayer,Nalewajski-Mrozek

・Slater型の原子基底関数: 周期表の全元素に対応した全電子基底関数および Frozen Core基底関数を完備
・電子密度フィッティングによるクーロン相互作用の高速化
・基底関数のカットオフ: O(N)

ADF-GUI

・環構造・グループなどのフラグメントを用いた構造構築
・分子力場・外部プログラム(UFF, MOPAC, DFTB)を使用した簡易構造最適化
・フラグメントライブラリのカスタマイズ

・エネルギー準位図、軌道相関図の表示
・3次元データの等値面・等高線表示: 分子軌道、電荷密度、静電ポテンシャルなど
・各種スペクトルのグラフ表示: IR、ラマン、UV/Vis、CD、NMRなど
・アニメーション表示: 構造最適化計算、基準振動解析、IRC計算

・計算方法、基底関数、プロパティなどの計算設定
・計算ジョブの投入・管理機能
・複数ジョブの作成・解析機能
・RDKit-UFFを用いた配座探索

・Windows/Linux/Mac

●記載の商品名は各社の商標または登録商標です。
●本カタログの記載内容は予告なく変更される場合があります。
(2018.06)

Scientific Computing & Modelling社 日本代理店
株式会社モルシス
〒104-0032 東京都中央区八丁堀3-19-9 ジオ八丁堀
Tel: 03-3553-8030 Fax: 03-3553-8031
E-mail: sales@molsis.co.jp https://www.molsis.co.jp/