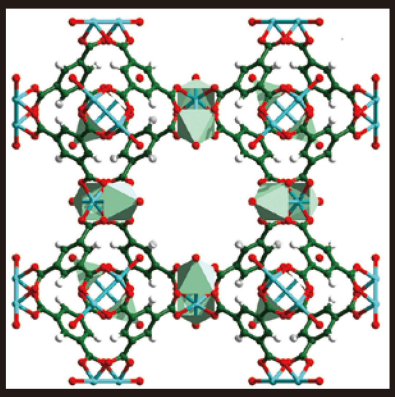
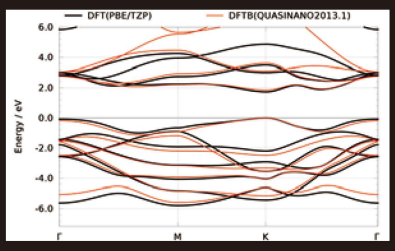
MOLSIS

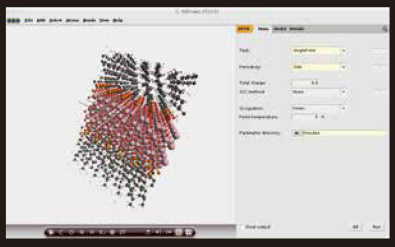
SCM
Scientific
Computing &
Modelling

DFTB

量子化学計算ソフトウェア







密度汎関数法に基づくタイトバインディング計算

DFTB (Density Functional based Tight-Binding) は、密度汎関数法に基づくタイトバインディング計算プログラムです。DFTBでは、電子間相互作用の積分計算をパラメータ化することで高速かつ精度の高い計算が実現されており、通常の密度汎関数法計算では取り扱えない大規模な系にも適用することが可能です。DFTBパラメータは、Quasinano*プロジェクトによって開発されたパラメータを利用可能で、周期律表のほとんどの元素をサポートしています。
DFTBのハミルトニアンでは、荷電系の正確な取り扱いを可能にするためのSelf-consistent charge (SCC-DFTB) 法の搭載や、長距離相互作用を記述するための分散力補正などがなされています。

＊Quasinanoプロジェクトは、独Jacobs大学と蘭SCM社の共同研究による取り組みで、軽元素だけでなく遷移金属も含むナノサイズの系（10万原子程度）を高速かつ精確に扱える手法の開発を目指したプロジェクトです。

大規模計算を手元の計算機で

DFTBを利用することで、大規模な系に対しても長時間のシミュレーションがパソコンレベルの計算機で実現できます。DFTBは周期系だけでなく孤立分子系にも対応しています。より高精度な計算（密度汎関数法など）を実行する前の簡易構造最適化計算プログラムとしてDFTBを利用することもできます。SCM社製ソフトウェアでは密度汎関数法プログラムとしてADFやBANDが利用可能で、これらのプログラムと連携した取り扱いが可能です。

SCM
Scientific
Computing &
Modelling

量子化学計算ソフトウェア

DFTB

●計算方法

・Self-consistent charge (SCC-DFTB)法
・third-order self-consistent charge (DFTB3)法: DFTB.orgパラメータのみ対応
・分散力補正(D3-BJ, D2, ULG, UFF)
・スピン分極計算
・非平衡グリーン関数(NEGF)法
・TD-DFTB: 分子系の励起状態計算に対応

●DFTBパラメータ

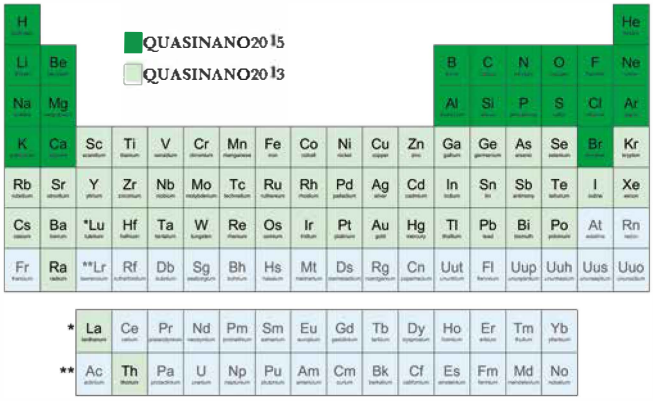
・QUASINANO 2013 [1], 2015 [2] (周期律表の多くの元素に対応: 下図参照)
・Dresden set (Al-O-P-C-H, Al-Si-O-H等)
・DFTB.org (H-C-N-O-S-P, Si-F-O-N-C-H等): 非営利団体のみ無償利用可

●機能

・分子系と周期系(1～3次元)に対応
・構造最適化計算、遷移状態探索、数値振動計算
・分子動力学: Berendsen法またはスケーリング法による温度制御

●プロパティ計算

・状態密度とバンド構造
・フォノン分散スペクトル
・BaderのAIM解析、Mayerの結合次数解析
・分子系のIRスペクトル、紫外・可視吸収スペクトル、Franck-Condon因子



1) M. Wahiduzzaman et al. J. Chem. Theory Comput. 9, 4006 (2013); QUASINANO2013では、斥力ポテンシャルは含まれていないため、力の計算を要する構造最適化や分子動力学計算には利用できません。
2) A. F. Oliveira et al. J. Chem. Theory Comput. 11, 5209 (2015); パラメータに斥力ポテンシャルも含まれます。

グラフィカルユーザインターフェース

DFTB-GUI

●構造構築機能

・環構造・グループなどのフラグメントを用いた分子構造の構築
・ブラベー格子の指定による結晶構造の構築
・ミラー面の指定による表面構造の構築

●表示機能

・バンド構造図・状態密度図の表示、ブリルアンゾーンの3次元表示、フォノン分散図の表示
・アニメーション表示: 構造最適化計算、分子動力学計算、基準振動解析

●計算設定・ジョブ管理機能

・計算方法、DFTBパラメータなどの計算設定
・計算ジョブの投入・管理機能

●サポートプラットフォーム

・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/