量子化学計算ソフトウェア

ADF2017リリース

ADF2017の分子系では、通常の密度汎関数法(DFT)では記述の難しいd→dやf→d遷移の計算を可能にするLigand Field DFT法の搭載や、TDDFT法による第二超分極率の計算、特に二光子吸収の計算ができるようになりました。また、周期系では非平衡グリーン関数(NEGF)法の搭載により、二つの電極にはさまれた単一分子のバリスティック伝導の計算に対応しました。さらに、今回より新製品としてリリースする、平面波バンド計算プログラム"Quantum ESPRESSO"のインターフェース『QE-GUI』のほか、ReaxFFやDFTBなどの大規模系に対応可能な計算モジュールについて計算パフォーマンスの向上やGUIの描画速度の大幅な改善がなされています。

分子系ADFと周期系BANDの新機能

分子系ADFの主な新機能

- Ligand Field DFT法によるd→d遷移、f→d遷移の計算
- 非線形光学プロパティの計算: TDDFT法による第二超分極率の計算からSHG, THG, TPA等を算出可能(図1)
- Constrained DFT法の機能拡張: スピンと励起状態の拘束に対応
- Constricted Variational DFT法による三重項励起状態の計算
- ゼロ磁場分裂 (ZFS)の計算におけるスピン—スピン項の考慮
- X2CおよびRA-X2C法による厳密な2成分変換に基づく相対論計算
- SCAN, MVS, MN15-Lなどのmeta GGA汎関数を含むlibxc 3.0による最新の交換相関汎関数への対応

周期系BANDの主な新機能

- 非平衡グリーン関数 (NEGF)法によるバリスティック伝導の計算: ゲート・バイアス電圧下やスピン分極条件下での透過係数、電流計算に対応(図2)
- Time-Dependent Current DFT法に基づく応答計算の新実装: これまでよりも高速かつ安定した応答計算が可能で、薄膜半導体の誘電関数の計算など、2次元周期境界条件下での計算に対応
- 外部磁場を課した計算に対応
- 交換相関汎関数: OPE汎関数に対応

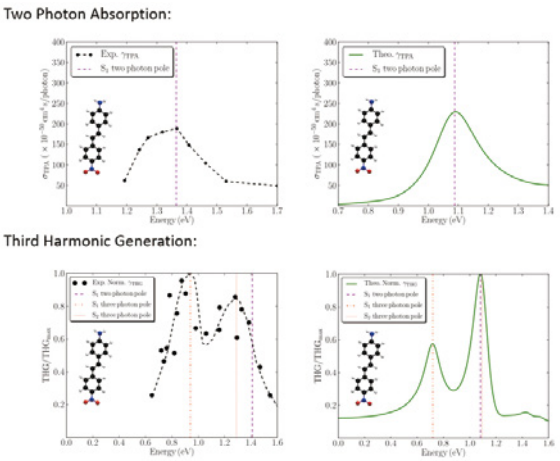

図1. 4-ジメチルアミノ-4'-ニトロスチルベンのTPAとTHGのスペクトル計算 [Hu et al., JCTC, 2016, 12, 1294.]

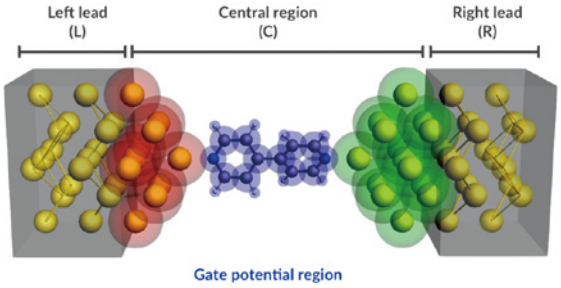

図2. 金電極に挟まれた4,4'-ビピリジン分子のNEGF計算に用いられる開放系

ReaxFF(反応分子動力学)の新機能

ReaxFFは、既存の古典分子動力学計算プログラムとは異なり、結合の生成と解裂を記述することができる反応力場を搭載しています。新バージョンではさらに、電子やホールを付加的な粒子として取り扱うeReaxFFという方法を搭載することで、リチウムイオン電池におけるエチレンカーボネート(EC)の還元分解反応(図3)など、電子やホールの移動が直接関与する化学反応への応用が可能になりました。

Quantum ESPRESSO用GUIのリリース

新製品として、平面波基底を採用するバンド計算プログラムとして有名なQuantum ESPRESSO (QE)のグラフィカル・ユーザ・インターフェース『QE-GUI』をリリースしました。QEのバンド構造は、BANDやDFTBと同様に、ブラベー格子に応じたブリルアンゾーン内部の対称点が自動選択され、その対称点に沿って描画されます。その他にも、(P)DOSの描画や構造最適化計算のアニメーション表示などに対応しています。

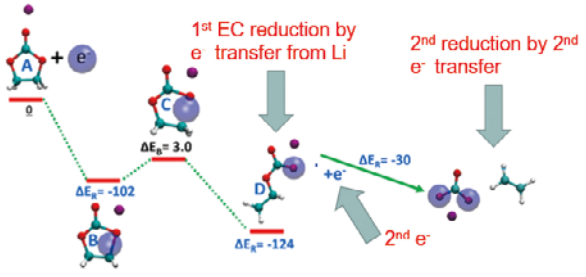

図3. ECの還元分解反応のシミュレーション。ECの開環によりEC⁻とLi⁺ラジカルが生成された後、ラジカル終端反応が起こる [Islam *et al.*, *JPCC*, **2016**, *120*, 27128.]