

# BIOVIA MATERIALS STUDIO

## DFTB<sup>+</sup>

### データシート

BIOVIA Materials Studio DFTB<sup>+</sup>は、物質中の電子特性を研究するための量子シミュレーションソフトウェアであり、従来のタイトバインディング法を改良し、密度汎関数理論をもとに定式化した手法が実装されています。DFTB<sup>+</sup>は密度汎関数理論に基づく第一原理計算に匹敵する精度と半経験的手法に迫るスピードを両立することができ、多数の原子を含む系を研究、分析する際に他に類を見ないほどの性能を発揮します。半導体の欠陥や有機／無機界面の相互作用など、これまでは時間やコンピュータの計算能力の面で大部分の研究者が対応できなかった問題も、DFTB<sup>+</sup>を使うことで研究が可能になります。こうした問題は、触媒、電子、化学などのさまざまな分野に共通して見られるものです。

#### DFTB<sup>+</sup>の概要

BIOVIA Materials Studio DFTB<sup>+</sup>を使用することで、構造の最適化や動的な物性の研究において、第一原理計算に匹敵する精度の計算を今までにないほど短時間で実行できます。例えば、構造を最適化した後、分子動力学を使ってその構造の経時変化を追跡することが可能です。また、バンド構造、分子軌道やフェルミ面を計算し可視化すれば、物質の電子構造を深く理解できます。原子電荷の解析や電子密度分布の可視化により、電荷分布に関する知見を得ることが可能です。DFTB<sup>+</sup>はSlater-Kosterファイルと呼ばれる元素間の相互作用をまとめたパラメータライブラリを使用します。元素がパラメータ化されていない場合、DFTB<sup>+</sup>では系や目的に応じたパラメータ作成を可能にするタスクを追加で実行できます。それによりオリジナルのパラメータを作成し、新しい系への拡張を可能にします。

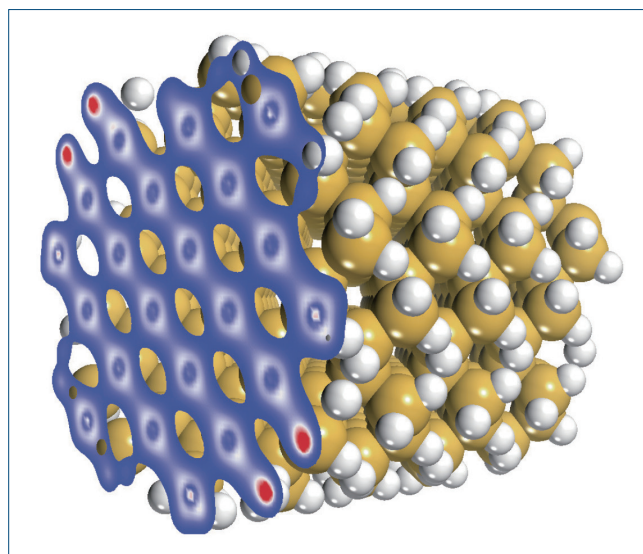
#### DFTB<sup>+</sup>の主要な用途

##### 半導体

数千の原子を含む系をモデル化することで、半導体を扱う研究者は、1%以下という微量の欠陥が系に及ぼす影響を研究することができます。

##### 表面に吸着した分子層

分子層と表面の相互作用、および分子層間の相互作用、この両方を考慮した計算を行うためには、電子状態を正確に記述するだけでなく、大量の原子を扱うことができる手法が必要です。DFTB<sup>+</sup>はこの要件を満たしており、第一原理計算では計算コストがかかりすぎる場合や、古典力場計算では必要な精度や物性が得られない場合にも有効です。



#### 表面での結晶構造の成長

ダイヤモンド表面上の窒化ホウ素など、無機結晶の成長を考察する際には、化学結合の生成と切断を電子状態の変化として取り扱い、しかも大規模な系においてこの計算を行う必要があります。DFTB<sup>+</sup>の電子状態計算は正確で、かつ大規模な系でも実行可能です。そのためより現実的な結晶成長のシミュレーションが可能です。

#### BIOVIA MATERIALS STUDIOのメリット

DFTB<sup>+</sup>は BIOVIA Materials Studio® 環境から操作が可能です。BIOVIA Materials Studioには、使いやすく、操作を習得しやすい統合ユーザーインターフェースが提供されています。特にBIOVIA Materials Studio製品の核となるMaterials Visualizerには、各種のモデル構築/可視化ツールが用意されています。これを活用することで、対象とする系のモデル化、DFTB<sup>+</sup>の計算、結果の分析を迅速に実行することができます。さらに、BIOVIA Materials Studioとの統合には次のような利点があります。密度汎関数理論に基づく第一原理計算モジュールであるDMol<sup>3</sup>とシームレスに連携し、DFTB<sup>+</sup>で使用する新たなパラメータを作成することができます。

BIOVIA Materials Studioでは柔軟なクライアント/サーバーアーキテクチャを採用しています。そのため、計算をネットワーク内にある別のサーバー上で行い、その結果だけをユーザーのPCに返して、必要に応じて表示、解析することができます。BIOVIA Materials Studioを使えば、電子密度分布といった様々な3次元グリッド情報を高品質な画像にすることも簡単にできます。さらに、DFTB<sup>+</sup>の出力から生成された構造、グラフ、ビデオクリップなどのデータは、そのまま他のアプリケーションで取り扱うことができます。

## DFTB<sup>+</sup>の仕組み

DFTB<sup>+</sup>は密度汎関数理論 (DFT) に基づいた手法です。その上で経験的近似を導入することにより、精度を維持しながら、計算速度の向上を達成しています。DFTB<sup>+</sup>で主に使用される近似は、DFTの厳密な多体ハミルトニアンを、パラメータ化されたハミルトニアンで置き換えるというものです。DFTB<sup>+</sup>では、Slater型軌道と球面調和関数を用いて記述された擬原子軌道関数によって電子密度がモデル化されます。原子軌道基底は各元素について孤立原子のKohn-Sham方程式を解いて得られたものであり、その原子軌道底を使ってハミルトニアン行列要素と重なり行列要素が計算されます。また、DFTに基づいて記述された全エネルギーをMulliken電荷とスピンのゆらぎの二次まで展開するという近似を行います。

こうして得られた行列要素は系の全エネルギーを完全には表現していないため、残りの部分は短距離反発項として含められます。この短距離反発項は各元素間で適切に設定された2体ポテンシャルとして記述されます。このポテンシャルはDMol<sup>3</sup>の計算結果へのフィッティングにより決定されます。

DFTB<sup>+</sup>では、原子ペア間の電荷が釣り合っている系の場合、結合の表現精度を向上するため、自己無撞着電荷法 (SCC-DFTB) を使用します。計算を簡素化する目的で、SCC計算は、ポテンシャルや電荷密度ではなくMulliken電荷について行われます。

通常の電子項と短距離反発項に加え、最終的な全エネルギーには、電荷ゆらぎによるクーロン相互作用が含められます。距離が離れている場合は、二つの点電荷の間の長距離静電気力となり、電荷同士が同じ原子内にある場合は、その原子における自己相互作用の寄与が近似的に含められます。DFTB<sup>+</sup>はSCC法の実装により、従来のタイトバインディング法では適切な解が得られないような問題に対しても十分に適用することができます。

## DFTB<sup>+</sup>の機能

### 計算タスク

- エネルギー計算
- 構造最適化 (格子定数の最適化、および任意の分子を剛体とみなして構造最適化が実行できます。)
- NVE、NVT、NPH、NPTアンサンブルを使った分子動力学計算
- 新しいSlater-Kosterライブラリを作成するためのパラメータ作成タスク (DFTに基づくDMol<sup>3</sup>と連携して、LDA/PWC、GGA/PBE汎関数を使用してフィッティングできます。)
- 力学的特性の計算
- 電子輸送特性の計算 (透過関数、I-V曲線)
- 非周期系と周期系に適用可能です。
- Universal力場に基づく分散力補正が利用できます。
- スピン分極を考慮した計算が可能です。

- SCFの収束性を改善するために、スメアリングや電子ミキシングが利用できます。

## Slater-Kosterライブラリ

- CH: 炭化水素
- CHNO: 炭素、水素、窒素、酸素を含む分子
- SiGeH: シリコン、ゲルマニウム、水素を含む半導体
- 3ob: 3次SCC法による生体および有機分子
- AuOrg: 有機物と金元素を含む系
- borg: ホウ素およびホウ素化合物
- chalc: カルコゲン化合物
- halorg: ハロゲン元素を含む有機分子
- hyb: 有機・無機の混合物
- magsil: クリソタイルナノチューブ
- matsci: 有機物・金属酸化物・ゼオライトなどの系
- mio: 生体および有機分子
- pbc: 固体および表面
- rare: GaN中のEu不純物の計算用
- siband: シリコンおよびシリカの電子状態計算用
- tiorg: チタン単金属、TiO<sub>2</sub>結晶および表面と有機分子
- trans3d: 有機物中に遷移金属を含む系
- znorg: 亜鉛単金属、ZnO<sub>2</sub>結晶および表面と有機分子

## 物性

- バンド構造
- 状態密度
- 電子、スピン、差電子密度
- フェルミ面
- 振動数
- 波動関数
- Mulliken電荷

ダッソー・システムズの3Dエクスペリエンス・プラットフォームでは、12の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、3Dエクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、[www.3ds.com](http://www.3ds.com) (英語)、[www.3ds.com/ja](http://www.3ds.com/ja) (日本語) をご参照ください。

