

1. インプットファイル

- デフォルトのファイル名は dftb. inp (. inp より前の部分は任意に指定可能)

=====

ROOT セクション

空行

タイトル (1 行あたり最大 128 文字、100 行まで入力可能)

空行

原子の種類の数

原子 1 の名前 原子 1 の周期 (@)

原子 1-原子 1 のパラメータ 原子 1-原子 2 のパラメータ ...

原子 2 の名前 原子 2 の周期 (@)

原子 2-原子 1 のパラメータ 原子 2-原子 2 のパラメータ ...

(...以下繰り返し...)

空行

原子数 電荷 多重度

原子 1 の座標 (整数表記は不可) (@@)

(...以下繰り返し...)

(@@@)

空行

原子 1 の部分系番号 原子 2 の部分系番号 ...

(...原子数分だけ繰り返し...)

=====

原子の周期: 原子価軌道が s 軌道なら 1、p 軌道なら 2、d 軌道なら 3

部分系の数や部分系番号の指定は SUBTYPE=SPECIFY または SUBTYPE=SEMIAUTO で必要

(@) SCG ハミルトニアンに対する 3 次補正用の Hubbard derivative パラメータ

原子の Slater-Kirkwood dispersion 用のパラメータ (dispsk)

Lennard-Jones dispersion 用のパラメータを手動指定する場合 (displj)

原子の spin-polarized DFTB 用パラメータ (wll)

Orbitally resolved DFTB3 の場合: Hubbard derivative パラメータは d, p, s の順に指定

Hubbard derivative とパスを両方設定する場合: Hubbard derivative パラメータを先に指定

両方のパスを設定する場合: Dispersion 用のパスを先に指定

(@@) OPT と MD における原子座標固定 (*)

制約つき最適化における x, y, z 成分の constraint (0.0 または 1.0)

FREQ の熱化学解析における同位体質量の変更 (ISO=)

(@@@) PBC 計算の場合: 格子ベクトルを 3 つ指定 (TV)

外部静電場を含めた計算の場合：電場ベクトルを1つ指定 (EF)

点電荷を含めた計算の場合：座標と点電荷の値を点電荷の数だけ指定 (PC)

TV、EF、PC はアルファベット大文字を使用

1.1. ROOT セクション (✓ : Serial/OpenMP/MPI 共通、● : Serial/OpenMP version のみ、■ : MPI version のみ)

➤ キーワード・オプションの区切りは半角スペース (タブは不可)

1.1.1 ✓SCG [TRUE] : SCG 計算 (Mulliken 電荷を自己無撞着に決定)

オプション [デフォルト値]

✓MAXITER [200] : SCG サイクルの最大数

✓BORYITER/MAXBROYDEN [70] : Broyden 法による電荷密度混合の最大数

✓ENERGYCONV/ECONV [1.0e-09] : エネルギー変化の収束条件 (atomic unit)

✓DENSITYCONV/DCONV [1.0e-06] : 密度変化の収束条件 (atomic unit)

✓READCHARGE [NONE] : 電荷密度ファイルの読み込み

ファイルが見つからない場合：価電子数から電荷密度を設定

設定値が電子数と一致しない場合：価電子数から電荷密度を設定

✓NONE : 読み込みなし (価電子数から電荷密度を設定)

✓BINARY : 計算時に生成される chrgfile ファイルの利用

✓ASCII : charge.dat ファイルによる手動指定

例：原子1が酸素、原子2,3が水素からなる水分子の場合

charge.dat ファイル1行目：手動指定の方法

●ALLATOM : 2行目から (原子数+1) 行1列まで正味電荷の値を記入

空行の挿入は不可

ALLATOM

-0.6 : 酸素原子 (原子1) の Mulliken 電荷...6.6 (通常 6.0)

0.3 : 水素原子 (原子2) の Mulliken 電荷...0.7 (通常 1.0)

0.3 : 水素原子 (原子3) の Mulliken 電荷...0.7 (通常 1.0)

●ATOMSPECIES : 2行目から1列目に元素記号、2列目に正味電荷の値を記入

空行を検出すると読み込み終了

ATOMSPECIES

O -0.6 : 酸素原子 (原子1) の Mulliken 電荷...6.6 (通常 6.0)

H 0.3 : 水素原子 (原子2, 3) の Mulliken 電荷...0.7 (通常 1.0)

■ALLSHELL : 2行目から (原子価軌道数+1) 行1列まで正味電荷の値を記入

空行の挿入は不可

ALLSHELL

0.2 : 酸素原子 (原子1) s 軌道の Mulliken 電荷...1.8 (通常 2.0)

-0.8 : 酸素原子 (原子1) p 軌道の Mulliken 電荷...4.8 (通常 4.0)

0.3 : 水素原子 (原子2) の Mulliken 電荷...0.7 (通常 1.0)

0.3 : 水素原子 (原子 3) の Mulliken 電荷...0.7 (通常 1.0)

■ SHELLSPECIES : 2 行目から 1 列目に元素記号、2 列目に原子価軌道 (s/p/d)、
3 列目に正味電荷の値、開殻系の場合は 4 列目に対応するスピン (a/b) を記入
空行を検出すると読み込み終了

SHELLSPECIES

0 s 0.2 : 酸素原子 (原子 1) s 軌道の Mulliken 電荷...1.8 (通常 2.0)

0 p -0.8 : 酸素原子 (原子 1) p 軌道の Mulliken 電荷...4.8 (通常 4.0)

H s 0.3 : 水素原子 (原子 2, 3) の Mulliken 電荷...0.7 (通常 1.0)

✓ DAMPXH [FALSE] : X-H ペアに対する SCC 相互作用の短距離でのダンピング

✓ DAMPXZETA [4.0e+00] : DAMPXH でのダンピング関数を制御するパラメータ

✓ THIRDDIAG [FALSE] : SCC ハミルトニアンに対する 3 次補正 (対角成分のみ)

✓ THIRDFULL [FALSE] : SCC ハミルトニアンに対する 3 次補正

例 : DFTB3 モデル...SCC=(DAMPXH=TRUE THIRDFULL=TRUE)

✓ SPIN [FALSE] : スピン分極の考慮 (sDFTB)
n 行 1 列 spin constants ファイル (wll) を (@) の位置に指定
原子価軌道が s, p, d の時、n はそれぞれ 1, 4, 9
例えば炭素の場合、1 行目から ss, sp, ps, pp の順で値が並ぶ
値は DFTB+ のマニュアルを参照

✓ ALMIX [0.2e+00] : 電荷密度混合割合

✓ MIXER [1] : 電荷密度混合法 (Coupled perturbed DFTB では Broyden 法を使用)

✓ 1 : Modified Broyden

✓ 2 : Simple mixing

✓ 3 : Modified Anderson

✓ 4 : DIIS

✓ NGEN [4] : Anderson, DIIS 法を開始するサイクル数
NGEN に到達するまでは Simple mixing を使用

✓ SOLVER [1] : Hamiltonian 行列に対する固有値と固有ベクトルの計算 (対角化) 法

✓ 1 : DSYGVD

✓ 2 : DSYGV

✓ 3 : DM_VGEVPH

✓ EFIELD [FALSE] : 外部静電場の導入 (クラスターモデルのみ)
電場ベクトルは原子座標の後に EF から始まる行で設定
FREQ 計算と POLAR 計算では無効化

✓ POLAR [FALSE] : 外部静電場を用いた双極子モーメントと静的分極率計算
(クラスターモデルのみ)

✓ POLEFSTR [2.0e-03] : POLAR オプションにおける外部静電場の強さ

✓ POINTCHARGE [FALSE] : 点電荷の導入 (エネルギーとグラジエント)
点電荷の座標と値は原子座標の後に PC から始まる行で設定

✓NUMPC	[0]	: 点電荷の導入数
✓MAYER	[FALSE]	: Mayer 結合次数解析
✓CM3	[FALSE]	: CM3 電荷の計算 (Mayer 結合次数解析が必要)
✓ORBITALPOP/ORBPOP	[FALSE]	: Mulliken 密度解析の結果を各原子 minimal basis ごとに出力
✓ZEROCHARGE	[FALSE]	: SCG 計算の初期電荷を常に中性原子の値に指定
✓PSEUDODIAG/PDIAG	[FALSE]	: 擬対角化 SCG 収束後に通常の対角化を一度実行
✓PDIAGTHRESH	[1. 0e-02]	: 擬対角化を開始する密度変化の閾値
✓PDIAGKAPPA	[4. 0e-02]	: 擬対角化におけるパラメータ
✓GAMMASPLINE	[FALSE]	: 3 次スプライン補間を用いた SCG 相互作用の短距離項の計算
✓GAMMASPLINEGRID	[4. 0e-02]	: GAMMASPLINE=TRUE におけるグリッド点の間隔 (atomic unit)
✓UNPAIREDLEEC	[0. 0e+00]	: 不対電子数 (正の実数で指定可) 正の値の場合は指定されたスピン多重度を棄却
✓SPINRELAX	[FALSE]	: スピン分極における全スピンの最適化 Serial/OpenMP version では部分系の数が 1 の場合のみ
✓NELECTHRESH	[1. 0e-06]	: SPINRELAX=TRUE における全電子数保存の閾値
✓RESTRICT	[FALSE]	: 制限開殻アプローチによる二重項の計算 (デフォルトは非制限アプローチによる計算)
✓UDERIVGAUSS	[FALSE]	: THIRDDIAG=TRUE におけるガウス関数による Hubbard derivative への電荷依存項の導入
✓UDERIVGAUSSDO	[-9. 0e-02]	: UDERIVGAUSS=TRUE におけるガウス関数中のパラメータ (高さ)
✓UDERIVGAUSSGO	[1. 61e+01]	: UDERIVGAUSS=TRUE におけるガウス関数中のパラメータ (幅)
✓UDERIVGAUSSQO	[7. 5e-01]	: UDERIVGAUSS=TRUE におけるガウス関数中のパラメータ (中心位置)
■RUNTYPE	[ATOM]	: DFTB 計算の解き方のベース Serial/OpenMP version は RUNTYPE=ATOM に相当
■SHELLO : 価電子軌道 (THIRDFULL, THIRDDIAG オプションの指定不可)		
■SHELL : 価電子軌道 (THIRDDIAG オプションの指定不可)		
■ATOM : 原子 (ORSCC オプションの指定不可)		
■ORSCC	[FALSE]	: 異なる軌道角運動量に対して異なる Hubbard パラメータを使用 RUNTYPE=SHELL のみ指定可
■GSDOMAIN	[FALSE]	: 連結リストを用いた 3 次スプライン補間による SCG 相互作用の短距離項の計算
■GSDOMAINBLOCKXYZ/GSDOMAINBLOCK	[5]	: GSDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の x, y, z 方向のブロック数
■GSDOMAINBLOCKX	[5]	: GSDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の x 方向のブロック数
■GSDOMAINBLOCKY	[5]	: GSDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の y 方向のブロック数
■GSDOMAINBLOCKZ	[5]	: GSDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の z 方向のブロック数
■GSDOMAINNEIGHBOR	[1]	: GSDOMAIN=TRUE でリンクするセルの隣接参照数

■MIXERSAVEMEMORY [FALSE] : RUNTYPE=ATOM かつ閉殻系の計算において電荷密度混合計算時のメモリ使用量を削減

1.1.2 ✓DC [TRUE] : 分割統治電子状態計算
オプション [デフォルト値]

✓BETA [8.0e+02] : Fermi 関数における温度の逆数のパラメータ (atomic unit)

✓BUFRAD/BUFFERRADIUS [5.0e+00] : 球状バッファ領域の半径 (Å)

✓SUBTYPE [AUTO] : 部分系の作り方

✓SYSTEM : 全原子

✓ATOM : 1 原子

✓SPECIFY : 原子座標の後で手動設定

✓AUTO : 格子状空間に分割し自動決定 (原子座標後の指定不要)

✓SEMIAUTO : AUTO と SPECIFY のハイブリッド (自動決定したい原子の部分系番号を 0 に指定)

✓AUTOXH : AUTO で自動決定する部分系の水素原子を含む共有結合を切断しないように調整

✓SEMIAUTOXH : SEMIAUTO で自動決定する部分系の水素原子を含む共有結合を切断しないように調整

✓DELTARXYZ/DELTAR [5.0e+00] : SUBTYPE=AUTO で系を立方体空間に分割する際のグリッド (Å)

✓DELTARX [5.0e+00] : SUBTYPE=AUTO で系を格子状空間に分割する際の x 成分 (Å)

✓DELTARY [5.0e+00] : SUBTYPE=AUTO で系を格子状空間に分割する際の y 成分 (Å)

✓DELTARZ [5.0e+00] : SUBTYPE=AUTO で系を格子状空間に分割する際の z 成分 (Å)

✓NOFERMI [FALSE] : 共通の Fermi 準位を決定しない

✓TRANSCoord [TRUE] : SUBTYPE=AUTO で系を自動分割する際に座標系を標準配向に変換

例 : 水分子を構成する各原子を部分系とする場合

DC=(SUBTYPE=SPECIFY)

...

3 0 1

O 0.06275391 0.06275391 0.00000000

H 1.01910555 -0.08185946 0.00000000

H -0.08185946 1.01910555 0.00000000

1 2 3 : 複数行にまたがった指定も可能

✓SUBXHSscale [1.1e+00] : SUBTYPE=AUTOXH で水素原子を含む共有結合を判定する際の共有結合半径の和のスケーリングファクター

■FERMITYPE [PARALLEL] : Fermi 準位計算の方法

■PARALLEL : CRI (compute-reduce-interpolate) algorithm

■SERIAL : GSS (gather-sort-solve) algorithm

■DOMAIN [FALSE] : 連結リストを用いた部分系の局在化領域への割り当て

■DOMAINBLOCKXYZ/DOMAINBLOCK [5] : DOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の x, y, z 方向のブロック数

■DOMAINBLOCKX [5] : DOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の x 方向のブロック数

- DOMAINBLOCKY [5] : DOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の y 方向のブロック数
- DOMAINBLOCKZ [5] : DOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の z 方向のブロック数
- DOMAININDEXTYPE [SUBSYSTEM] : DOMAIN=TRUE でリンクする粒子の定義
 - SUBSYSTEM : 部分系の全構成原子が一つの領域に存在する時にインデックスを付与
 - ATOM : 全原子についてインデックスを付与
- DOMAINNEIGHBOR [1] : DOMAIN=TRUE でリンクするセルの隣接参照数
- SINGLEPREC [FALSE] : 局在化領域決定における単精度浮動小数点の使用
- XHDOMAIN [FALSE] : SUBTYPE=AUTOXH で水素原子を含む共有結合の判定に連結リストを使用
- XHDOMAINBLOCKXYZ/XHDOMAINBLOCK [5] : XHDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の x, y, z 方向のブロック数
- XHDOMAINBLOCKX [5] : XHDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の x 方向のブロック数
- XHDOMAINBLOCKY [5] : XHDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の y 方向のブロック数
- XHDOMAINBLOCKZ [5] : XHDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の z 方向のブロック数
- XHDOMAINNEIGHBOR [1] : XHDOMAIN=TRUE でリンクするセルの隣接参照数

- 1.1.3 ✓OPT [FALSE] : 構造最適化計算
 オプション [デフォルト値]
- ✓ MAXITER [50] : 構造最適化サイクルの最大数
 - ✓ GRADCONV/GCONV [1.0e-04] : グラジエント変化の収束条件 (atomic unit)
 - ✓ OPTTYPE [1] : 構造最適化の方法
 - 1 : BFGS
 - 2 : Steepest descent
 - 3 : Conjugate gradient
 - ✓ STEPSIZE [1.0e+02] : Steepest descent における変位を制御するパラメータ (atomic unit)
 - ✓ CONSTRAINT [FALSE] : x, y, z 成分に対する制約つき構造最適化
 設定したい原子の座標後 (@@) の位置に 0.0 または 1.0 を 3 つ指定

例 : 酸素原子 (原子 1) の x, y 成分は固定され、z 成分のみ変化
 水素原子 (原子 2) は*の指定により座標位置の更新なし
 水素原子 (原子 3) は最適化中全ての成分が変化

OPT=(CONSTRAINT=TRUE)

...

3 0 1

O	0.06275391	0.06275391	0.00000000	0.0	0.0	1.0
H	1.01910555	-0.08185946	0.00000000	*		
H	-0.08185946	1.01910555	0.00000000			

- ✓ LATTICEOPT [FALSE] : 格子ベクトルの最適化
 制約つき構造最適化との組み合わせ不可

		点電荷の使用不可
		OPTTYPE=1 (BFGS) では Conjugate gradient のルーチンを使用
✓EXTPRESSURE	[0. 0e+00]	: 格子ベクトル最適化時の外圧 (atomic unit) 0 以外の場合…系のエンタルピー (E + pV) を出力
✓ISOSCALING	[FALSE]	: 等方的なセルサイズ変化による格子ベクトル最適化 FIXANGLE と同時設定不可
✓FIXANGLE	[FALSE]	: セルの角度を固定した状態での格子ベクトル最適化 ISOSCALING と同時設定不可
✓FIXLENGTH1	[FALSE]	: FIXANGLE=TRUE において 1 番目の格子ベクトルを固定
✓FIXLENGTH2	[FALSE]	: FIXANGLE=TRUE において 2 番目の格子ベクトルを固定
✓FIXLENGTH3	[FALSE]	: FIXANGLE=TRUE において 3 番目の格子ベクトルを固定
✓LATTICEONLY	[FALSE]	: 原子座標は固定し格子ベクトルのみ最適化 全ての原子座標後に (*) を指定することでも設定可能
✓STEPGRATOM	[1. 0e-01]	: Conjugate gradient における原子位置の変位を制御するパラメータ (atomic unit)
✓STEPGRRLATTICE	[1. 0e-01]	: Conjugate gradient における格子ベクトルの変位を制御する パラメータ (atomic unit)
✓BFGSSOLVER	[1]	: BFGS 法の Hessian 行列に対する固有値と固有ベクトルの計算 (対角化) 法
✓1 : DSYEVD		
✓2 : DSYEV		
✓PRINTCOORD	[TRUE]	: 各ステップの原子座標を出力
✓PRINTGRAD	[TRUE]	: 各ステップのエネルギ勾配を出力
1. 1. 4 ✓MD	[FALSE]	: 分子動力学計算
オプション	[デフォルト値]	
✓NSTEP/MAXSTEP	[10000]	: ステップ数
✓DELTAT/DELTASTEP	[1. 0e-15]	: 時間刻み (s)
✓BATHTEMP/TEMPERATURE	[2. 9815e+02]	: NVT および NPT アンサンブルを利用するときの熱浴温度 (K)
✓NVE	[TRUE]	: NVE アンサンブル計算 (FALSE の場合 : NVT アンサンブル)
✓NVT	[FALSE]	: NVT アンサンブル計算 (FALSE の場合 : NVE アンサンブル)
✓NVTTYPE	[3]	: 熱浴の設定
✓1 : Velocity scaling		
✓2 : Nosé-Hoover		
✓3 : Nosé-Hoover Chain		
✓4 : Berendsen		
✓5 : Andersen		
✓RESTART	[FALSE]	: リスタートファイル (restart) を読み込んでリスタート

- ✓SOFTPOT/SOFT [FALSE] : ソフトポテンシャルの利用
- ✓SOFRANGE [1.0e+01] : ソフトポテンシャルの半径 (Å/fs)
- ✓SOFTK [1.5e+00] : ソフトポテンシャルの硬さ (kcal/(mol·Å²))
- ✓INITTEMP [2.9815e+02] : 初期温度 (K)
- ✓SCALESTEP [20] : Velocity scaling の頻度
- ✓ERRORTEMP [1.0e+02] : BATHTEMP/TEMPERATURE からの温度の許容振れ幅 (K)
振れ幅を超えると速度スケーリングを実行
- ✓READVELOCITY [FALSE] : 初期速度ファイルの読み込み
 - ✓TRUE : veloc.dat ファイル (Å/fs) による手動設定
ファイル形式は (原子数) 行 3 列 (左から x, y, z 成分)
 - ✓FALSE : 読み込みなし
- ✓NOSECLEAN [FALSE] : リスタート時 Nosé-Hoover, Nosé-Hoover Chain での熱浴パラメータの初期化
- ✓PRINT [1] : シミュレーション中の座標等のファイルへの出力頻度
- ✓NBATH [3] : Nosé-Hoover Chain での熱浴の数
- ✓COUPLINGSTR [1.5e+03] : Nosé-Hoover Chain でのカップリングの強さ (cm⁻¹)
- ✓SEEDTYPE [1] : 初期乱数の設定
 - ✓1 : 初期構造に依存した乱数
 - ✓2 : 現在時刻から乱数を作成
 - ✓3 : RANDOMSEED オプションにより任意の乱数を作成
- ✓RANDOMSEED [0] : SEEDTYPE=3 における乱数作成のための番号 (正の整数)
- ✓TAUTEMP [1.0e-13] : Berendsen(thermostat) での緩和時間 (s)
- ✓COLLISIONFREQ [1.0e-02] : Anersen での仮想熱浴との衝突頻度 (fs⁻¹)
- ✓MASSIVE [FALSE] : TRUE…Anersen で各原子の速度をある確率で同時にスケーリング
FALSE…Anersen で原子ごとに速度をある確率でスケーリング
- ✓LIMULLIKEN [FALSE] : Lagrange 補間による Mulliken 電荷初期値の予測
- ✓LIDEGREE [0] : Lagrange 補間多項式の次数
0 の場合…前ステップの値のみから予測
- ✓LIMINDEG [FALSE] : Lagrange 補間多項式の次数を毎ステップ最適化
探索範囲は $0 \leq \text{LIMINDEG} \leq \text{LIDEGREE}$
N ステップ目における全原子に対する収束した電荷と予測した電荷の絶対誤差が最小となる次数を N+1 ステップ目に使用
- ✓RMROTATION [FALSE] : 重心の回転運動を除去 (クラスターモデルのみ可能)
- ✓RMSTEP [10000] : NVTTYPE=1-4 について重心の並進 (回転) 運動を除去する頻度
- ✓RATTLE [NONE] : 原子間距離に対する拘束動力学
 - ✓NONE : 拘束条件なし
 - ✓COVALENTXH : X-H ペアの原子間距離を共有結合半径の和に拘束
 - ✓INITGEOMXH : X-H ペアの原子間距離を初期構造の値に拘束

✓SPECIFY : rattle.dat ファイルによる手動指定

例：原子 1 が酸素、原子 2, 3 が水素からなる水分子の場合

1 2 C : ラベル 1-2 の OH 結合距離を共有結合半径の和に拘束 (C...COVALENTXH)

2 3 I : ラベル 2-3 の HH 結合距離を初期構造の値に拘束 (I...INITGEOMXH)

1 3 S 0.95 : ラベル 1-3 の OH 結合距離を 0.95 Å に拘束 (S...SPECIFY)

4 列目に値の指定を忘れた場合、共有結合半径の和に拘束

✓RATTLEXH [1.2e+00] : RATTLE での X-H ペアに対する共有結合の判定基準 (Å)

✓RATTLEITER [100] : RATTLE での拘束のための反復サイクルの最大回数

✓RATTLECONV [1.0e-06] : RATTLE での拘束に対する収束条件 (atomic unit)

✓ANNEAL [FALSE] : Simulated annealing 法の使用

温度のスケジュールは anneal.dat ファイルで指定 (最大 99 個)

例：

C 1 300.0 : 最初のステップを 300.0 K に指定 (C...CONSTANT)

INITTEMP の値は上書きされる

L 1000 1000.0 : 1000 ステップかけて 300.0 K から 1000.0 K に線形上昇 (L...LINEAR)

C 1000 1000.0 : 1000 ステップ 1000.0 K を維持 (C...CONSTANT)

E 1000 500.0 3.0 : 1000 ステップかけて 1000.0 K から 500.0 K へ指数関数減少 (E...EXPONENTIAL)、

4 列目の値は指数関数の変化の度合い (省略時 5.0)

C 1000 500.0 : 1000 ステップ 500.0 K を維持 (C...CONSTANT)

S 1000 300.0 2.0 : 1000 ステップかけて 500.0 K から 300.0 K へシグモイド減少 (S...SIGMOID)、

4 列目の値はシグモイド関数の変化の度合い (省略時 3.0)

✓SOFTCENTERTYPE [ATOM] : ソフトポテンシャルの中心位置の設定

✓ATOM : 特定の原子 (原子ラベルを SOFTATOMNO で指定)

✓SPECIFY : 特定の位置 (座標を SOFTPOINT (XYZ), SOFTPOINTX, SOFTPOINTY, SOFTPOINTZ で指定)

✓COC : 座標中心

✓COM : 重心

✓SOFTATOMNO [1] : SOFTCENTERTYPE=ATOM におけるソフトポテンシャルの中心となる原子ラベル

✓SOFTPOINTXYZ/SOFTPOINT [0.0e+00] : SOFTCENTERTYPE=SPECIFY におけるソフトポテンシャルの中心となる点の xyz 座標 ($x = y = z$) を指定 (Å)

✓SOFTPOINTX [0.0e+00] : SOFTCENTERTYPE=SPECIFY におけるソフトポテンシャルの中心となる点の x 座標を指定 (Å)

✓SOFTPOINTY [0.0e+00] : SOFTCENTERTYPE=SPECIFY におけるソフトポテンシャルの中心となる点の y 座標を指定 (Å)

✓SOFTPOINTZ [0.0e+00] : SOFTCENTERTYPE=SPECIFY におけるソフトポテンシャルの中心となる点の z 座標を指定 (Å)

- ✓SOFTSHAPETYPE [SPHERE] : ソフトポテンシャルの形状の設定
 - ✓SPHERE : 球 (半径を SOFTRANGE で指定)
 - ✓SQUARE : 立方体/直方体 (グリッドを SOFTSIDE (XYZ), SOFTSIDEX, SOFTSIDEY, SOFTSIDEZ で指定)
 - ✓ELLIPSOID : 楕円 (各軸の半分の長さを SOFTSEMIAXISX, SOFTSEMIAXISY, SOFTSEMIAXISZ で指定)
 - ✓SOFTSIDEXYZ/SOFTSIDE [1. 0e+01] : SOFTSHAPETYPE=SQUARE におけるソフトポテンシャルのグリッドサイズ (x = y = z) を指定 (Å)
 - ✓SOFTSIDEX [1. 0e+01] : SOFTSHAPETYPE=SQUARE におけるソフトポテンシャルの x 成分を指定 (Å)
 - ✓SOFTSIDEY [1. 0e+01] : SOFTSHAPETYPE=SQUARE におけるソフトポテンシャルの y 成分を指定 (Å)
 - ✓SOFTSIDEZ [1. 0e+01] : SOFTSHAPETYPE=SQUARE におけるソフトポテンシャルの z 成分を指定 (Å)
 - ✓SOFTSEMIAXISX [1. 0e+01] : SOFTSHAPETYPE=ELLIPSOID でのソフトポテンシャルの x 成分を指定 (Å)
 - ✓SOFTSEMIAXISY [1. 0e+01] : SOFTSHAPETYPE=ELLIPSOID でのソフトポテンシャルの y 成分を指定 (Å)
 - ✓SOFTSEMIAXISZ [1. 0e+01] : SOFTSHAPETYPE=ELLIPSOID でのソフトポテンシャルの z 成分を指定 (Å)
 - ✓NPH [FALSE] : NPH アンサンブル計算 (FALSE の場合 : NVE アンサンブル)
 - ✓NPT [FALSE] : NPT アンサンブル計算 (FALSE の場合 : NVE アンサンブル)
 - ✓NPHTYPE [1] : 圧力制御法の設定
 - ✓1 : Berendsen
 - ✓NPPTYPE [1] : (等方的) NPT アンサンブル計算法の設定
 - ✓1 : Hoover-Andersen
 - ✓EXTPRESSURE [1. 01325e+05] : NPH および NPT アンサンブルにおける設定圧力 (Pa)
 - ✓TAUPRESS [2. 0e-12] : Berendsen (barostat) での緩和時間 (s)
 - ✓ISOSCALING [FALSE] : 等方的なセルサイズ変化による NPH および NPT アンサンブル計算
 - ✓CALCPRESSURE [FALSE] : NVE および NVT アンサンブルにおける圧力計算
周期境界条件のみ可能
 - ✓COUPLINGSTRLAT [1. 5e+01] : Hoover-Andersen NPT アンサンブル計算での熱浴のカップリングの強さ (cm⁻¹)
 - ✓CHECKPOINT [100] : 第 2 リスタートファイル (restart_chk) の出力頻度
 - ✓RANDTYPE [1] : 乱数生成方法
 - ✓1 : Fortran 組み込み手続き (random_number)
 - ✓2 : プログラム中に実装された乱数生成手続き
1. 1. 5 ✓NCC [FALSE] : NCC-DFTB 計算
SCC=FALSE による指定も可能

場合…ISO=を後に指定

例：重水分子 (D2O) の調和振動解析

FREQ=(READISOTOPE=TRUE)

...

3 0 1

O 0.06275391 0.06275391 0.00000000

H 1.01910555 -0.08185946 0.00000000 ISO=2.014

H -0.08185946 1.01910555 0.00000000 ISO=2.014

- ✓PROJECTION [TRUE] : 並進・回転モードを振動解析から分離して計算
FALSE の場合…得られた Hessian をそのまま対角化
- ✓GPCONV [1.0e-06] : Coupled-perturbed DFTB 方程式の収束条件 (atomic unit)
- ✓EFSTR [2.0e-03] : IR, Raman 強度計算における外部静電場の強さ
- ✓INTERRUPTCP [FALSE] : Coupled-perturbed DFTB 計算の中断
部分的に構築された Hessian は hess.dat に出力
- ✓CPSTART [1] : INTERRUPTCP=TRUE での部分的な Hessian 構築開始位置
(原子のインデックス)
- ✓CPEND [1] : INTERRUPTCP=TRUE での部分的な Hessian 構築終了位置
(原子のインデックス)
- ✓HESSSOLVER [1] : Hessian 行列に対する固有値と固有ベクトルの計算 (対角化) 法
✓1 : DSYEVD
✓2 : DSYEV
- SAVEMEMORYANA [FALSE] : SCC 計算で Analytical Hessian 行列作成時のメモリ使用量を削減
(ただし計算コストは増加)

1.1.7 ✓DISP/DISPERSION [FALSE] : 経験的分散力補正

オプション [デフォルト値]

- ✓DISPTYPE [1] : 分散力補正の種類
- ✓1 : Grimme の DFT-D2 : 必要なパラメータはソースコード中に記述
- ✓2 : Slater-Kirkwood : 必要なパラメータファイル (dispsk) を (@) の位置に指定
ファイル形式は 1 行 9 列、1-4 列は polarizability (\AA^3)、
5-8 列は cutoff (\AA)、9 列は charge をそれぞれ指定
値は DFTB+のマニュアルを参照
- ✓3 : Lennard-Jones : 必要なパラメータはソースコード中に記述 (または手動指定)
- ✓4 : Grimme の DFT-D3 : 必要なパラメータはソースコード中に記述 (一部インプット指定)
- ✓5 : Grimme の DFT-D3 (BJ) : 必要なパラメータはソースコード中に記述 (一部インプット指定)
- ✓6 : Rezac の D3H4 : 必要なパラメータはソースコード中に記述 (一部インプット指定)
- ✓7 : DFT-ulg : 必要なパラメータはソースコード中に記述 (一部インプット指定)
- ✓8 : dDMC : 必要なパラメータはソースコード中に記述 (一部インプット指定)

✓9	: Rezac の D3H5	: 必要なパラメータはソースコード中に記述 (一部インプット指定)
✓10	: Kubi llus の D3X	: 必要なパラメータはソースコード中に記述 (一部インプット指定)
✓UPDATESKPARAMS	[FALSE]	: TRUE…Slater-Kirkwood 分散力パラメータを DFTB 計算ごとに更新 FALSE…初期構造のから得られる値を常に使用
✓READUFF	[FALSE]	: TRUE…Lennard-Jones 非結合性相互作用パラメータを手動指定 パラメータファイル (displj) を (@) の位置に指定 ファイル形式は 1 行 2 列、1 列は distance (Å)、 2 列は energy (kcal/mol) をそれぞれ指定 FALSE…UFF 力場の値を使用
✓S6	[1. 0e+00]	: Grimme の DFT-D2 におけるスケーリングファクター
✓ZEROS8	[6. 73e-01]	: Grimme の DFT-D3 における r^{-8} 項のスケーリングファクター
✓ZERORS6	[1. 235e+00]	: Grimme の DFT-D3 における減衰関数中のパラメータ
✓BJS8	[5. 883e-01]	: Grimme の DFT-D3 (BJ) における r^{-8} 項のスケーリングファクター
✓BJA1	[5. 719e-01]	: Grimme の DFT-D3 (BJ) におけるパラメータ
✓BJA2	[3. 6017e+00]	: Grimme の DFT-D3 (BJ) におけるパラメータ
✓THREEBODY	[FALSE]	: Grimme の DFT-D3/DFT-D3 (BJ) における 3 体補正項の取り込み
✓D3H4S6	[1. 0e+00]	: Rezac の D3H4 における r^{-6} 項のスケーリングファクター
✓D3H4RS6	[1. 215e+00]	: Rezac の D3H4 における減衰関数中のパラメータ
✓D3H4ALPHA	[3. 0e+01]	: Rezac の D3H4 における減衰関数中のパラメータ
✓D3H4SHH	[3. 0e-01]	: Rezac の D3H4 における H-H repulsion に対するパラメータ
✓D3H4EHH	[1. 431e+01]	: Rezac の D3H4 における H-H repulsion に対するパラメータ
✓D3H4ROHH	[2. 35e+00]	: Rezac の D3H4 における H-H repulsion に対するパラメータ
✓D3H4CNN	[2. 01e+00]	: Rezac の D3H4 におけるパラメータ
✓D3H4CNO	[8. 0e-01]	: Rezac の D3H4 におけるパラメータ
✓D3H4CON	[2. 58e+00]	: Rezac の D3H4 におけるパラメータ
✓D3H4C00	[1. 11e+00]	: Rezac の D3H4 におけるパラメータ
✓D3H4CWAT	[1. 32e+00]	: Rezac の D3H4 におけるパラメータ
✓D3H4CSNHR3	[2. 33e+00]	: Rezac の D3H4 におけるパラメータ
✓D3H4CSC00	[1. 22e+00]	: Rezac の D3H4 におけるパラメータ
✓ULGS	[7. 012e-01]	: DFT-ulg におけるパラメータ
✓ULGB	[6. 966e-01]	: DFT-ulg におけるパラメータ
✓DDMCA	[1. 018e+00]	: dDMC におけるパラメータ
✓DDMCB0	[1. 857e+00]	: dDMC におけるパラメータ
✓DDMCS	[4. 6e+01]	: dDMC におけるパラメータ
✓D3H5S6	[1. 0e+00]	: Rezac の D3H5 における r^{-6} 項のスケーリングファクター
✓D3H5S8	[4. 9e-01]	: Rezac の D3H5 における r^{-8} 項のスケーリングファクター
✓D3H5RS6	[1. 25e+00]	: Rezac の D3H5 における減衰関数中のパラメータ
✓D3H5ALPHA	[2. 961e+01]	: Rezac の D3H5 における減衰関数中のパラメータ

✓D3H5SHH	[3. 0e-01]	: Rezac の D3H5 における H-H repulsion に対するパラメータ
✓D3H5EHH	[1. 431e+01]	: Rezac の D3H5 における H-H repulsion に対するパラメータ
✓D3H5R0HH	[2. 35e+00]	: Rezac の D3H5 における H-H repulsion に対するパラメータ
✓D3H5SR	[7. 14e-01]	: Rezac の D3H5 における H5 補正のパラメータ
✓D3H5SW	[2. 5e-01]	: Rezac の D3H5 における H5 補正のパラメータ
✓D3H5KNH	[1. 8e-01]	: Rezac の D3H5 における H5 補正のパラメータ
✓D3H5K0H	[6. 0e-02]	: Rezac の D3H5 における H5 補正のパラメータ
✓D3H5KSH	[2. 1e-01]	: Rezac の D3H5 における H5 補正のパラメータ
✓D3XS8	[3. 209e+00]	: Kubillus の D3X における r^{-8} 項のスケーリングファクター
✓D3XA1	[7. 46e-01]	: Kubillus の D3X におけるパラメータ
✓D3XA2	[4. 191e+00]	: Kubillus の D3X におけるパラメータ
✓D3XC1	[7. 761e+00]	: Kubillus の D3X における X 補正のパラメータ
✓D3XC2	[5. 0e-02]	: Kubillus の D3X における X 補正のパラメータ
✓D3XC3	[4. 518e+00]	: Kubillus の D3X における X 補正のパラメータ
✓D3XNCL	[1. 526e+00]	: Kubillus の D3X における X 補正のパラメータ
✓D3XNBR	[1. 349e+00]	: Kubillus の D3X における X 補正のパラメータ
✓D3XNI	[1. 521e+00]	: Kubillus の D3X における X 補正のパラメータ
✓D3XOCL	[1. 237e+00]	: Kubillus の D3X における X 補正のパラメータ
✓D3XOBR	[1. 099e+00]	: Kubillus の D3X における X 補正のパラメータ
✓D3XOI	[1. 313e+00]	: Kubillus の D3X における X 補正のパラメータ
■H4IDOMAIN	[FALSE]	: 水素原子の索引に連結リストを用いた Rezac の D3H4 の計算
■H4IDOMAINBLOCKXYZ/H4IDOMAINBLOCK	[5]	: H4IDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の x, y, z 方向のブロック数
■H4IDOMAINBLOCKX	[5]	: H4IDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の x 方向のブロック数
■H4IDOMAINBLOCKY	[5]	: H4IDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の y 方向のブロック数
■H4IDOMAINBLOCKZ	[5]	: H4IDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の z 方向のブロック数
■H4IDOMAINNEIGHBOR	[1]	: H4IDOMAIN=TRUE でリンクするセルの隣接参照数
■H4VDOMAIN	[FALSE]	: 原子価の計算に連結リストを用いた Rezac の D3H4 の計算
■H4VDOMAINBLOCKXYZ/H4VDOMAINBLOCK	[5]	: H4VDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の x, y, z 方向のブロック数
■H4VDOMAINBLOCKX	[5]	: H4VDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の x 方向のブロック数
■H4VDOMAINBLOCKY	[5]	: H4VDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の y 方向のブロック数
■H4VDOMAINBLOCKZ	[5]	: H4VDOMAIN=TRUE で系をセル分割する際の z 方向のブロック数
■H4VDOMAINNEIGHBOR	[1]	: H4VDOMAIN=TRUE でリンクするセルの隣接参照数
1.1.8 ✓PBC	[FALSE]	: 周期境界条件
✓STRESS	[FALSE]	: 応力テンソルと格子ベクトルの微分計算
✓COULOMBTYPE	[1]	: クーロン相互作用の計算法

✓1 : Ewald 法		
✓2 : 多重極展開		: 応力テンソル計算、点電荷ありの計算、全エネルギーの原子分割解析、 価電子軌道ベースの計算 (MPI version) は不可 立方体セルのみテスト
✓EWALDALPHA	[0. 0e+00]	: Ewald 法における実空間と逆格子空間の計算割合 0 < alpha < 1 の場合…設定した値を使用 (一点計算のみ) それ以外…自動決定 (デフォルトかつ推奨)
✓MAXGAMMA	[7]	: Ewald 法におけるユニットセルの繰り返し回数
✓FMMP	[8]	: 多重極展開における展開次数
✓FMMN	[3]	: 多重極展開におけるグループ化されるセル数
✓FMMK	[5]	: 多重極展開における階層数
■EWALDSAVEMEMORY	[FALSE]	: Ewald 法逆格子空間計算時のメモリ使用量を削減 (ただし計算コストは増加)
■EWALDMEMGB	[8. 0e+00]	: Ewald 法逆格子空間計算時に使用する一時配列の最大メモリ使用量 指定した値以上のメモリ量が見込まれる場合は EWALDSAVEMEMORY の 指定によらずメモリ使用量を削減するアプローチで計算を実行
■FMMSAVEMEMORY	[FALSE]	: 多重極展開体球調和関数計算時のメモリ使用量を削減 (ただし計算コストは増加)
1. 1. 9 ✓MISC	[FALSE]	: その他の設定
✓PRINTFORCE/FORCE	[FALSE]	: エネルギーと力の計算 点電荷を含む系では点電荷の力も出力 STRESS=TRUE では応力テンソル、格子ベクトルの微分、体積、圧力も 出力
✓PRINTRESOLVEDFORCE	[FALSE]	: 全力に対する各成分の寄与を出力 STRESS=TRUE では全応力テンソルに対する各成分の寄与も出力 全力の出力先はアウトプット、各成分の寄与の出力先はデータファイ ル
✓PRINTMO	[FALSE]	: 分子軌道係数を出力 (部分系の数が 1 の場合のみ)
✓PRINTATOME	[FALSE]	: 全エネルギーに対する各原子からの寄与を出力 Direct SCC 計算で SCC 相互作用項をメモリに格納しない場合は使用不 可
✓PRINTHS	[FALSE]	: ゼロ次ハミルトニアン、重なり行列の出力 (部分系の数が 1 の場合のみ) 出力先はアウトプット 出力後は直ちにプログラムが終了
✓PRINTDENSITY	[FALSE]	: 密度行列の出力
✓PRINTLOCALREGION	[FALSE]	: 局在化領域の部分系、原子、基底関数の数の出力

出力後は直ちにプログラムが終了

- ✓PRINTLAPTIME [FALSE] : DFTB 計算の各手続きとプログラム実行にかかった経過時間の出力
- ✓WRITEDAT [APPEND] : データファイルの書き込み
 - ✓NONE : 書き込みなし
 - ✓APPEND : 各 DFTB ステップの情報をデータファイルに追加書き込み
 - ✓REPLACE : 各 DFTB ステップの情報をデータファイルに新規書き込み
- ✓WRITECHRGFILE [TRUE] : READCHARGE=BINARY で用いられる chrgfile ファイルの書き込み
- USESCRATCH [TRUE] : 中間データに対するディスク I/O の使用
USESCRATCH=FALSE の場合、全中間データをメモリに格納

2. 計算の実行

- ① インットファイルと必要なファイル（パラメータなど）を適切なディレクトリに配置
（インットファイルでパラメータファイル名のみを指定した場合、インットファイルのあるディレクトリにパラメータファイルをコピー）
- ② バイナリファイルの実行
 - Serial version: <DCDFTBMD のインストールパス>/dftb_serial.00.x
 - OpenMP version: <DCDFTBMD のインストールパス>/dftb_openmp.00.x
 - MPI version: mpiexec -np (MPI プロセス数) <DCDFTBMD のインストールパス>/dftb_mpiomp.00.x
 - インットファイル名がデフォルト以外の場合：バイナリファイルの後に.inpより前の部分を引数で指定
例：Serial version でインットファイル名 file.inp を入力とする場合
<DCDFTBMD のインストールパス>/dftb_serial.00.x file
 - OpenMP/MPI version では実行前に環境変数 OMP_NUM_THREADS より1プロセスのスレッド数を設定
bash の場合：export OMP_NUM_THREADS=(スレッド数)
csh, tcsh の場合：setenv OMP_NUM_THREADS (スレッド数)
 - 大規模系の計算が止まる場合：stack size を確認し、値が小さい場合は大きな値を設定
OpenMP/MPI version では環境変数 OMP_STACKSIZE の値も設定
bash の場合：ulimit -s unlimited; export OMP_STACKSIZE=(スタックサイズ)
csh, tcsh の場合：unlimit; setenv OMP_STACKSIZE (スタックサイズ)
 - Serial/OpenMP version では、系の基底関数の数に上限(16384)あり

3. アウトプットファイル

3.1 必ず出力されるファイル

- ✓dftb.out: 標準出力（計算条件の要約、DC-DFTB 計算から得られたエネルギーなど）
- ✓dftb.dat: 詳細出力（部分系の情報、Mulliken 電荷など）
 - インットファイル名がデフォルト以外の場合：.out および.datより前の部分は.inpより前の部分に準拠

3.2 計算オプションに依存して出力されるファイル

- ✓ `chrgfile` (SCG=TRUE) : SCG 計算が収束した時あるいは SCG サイクルが最大数に到達した時の Mulliken 電荷 (バイナリ形式)
READCHARGE=BINARY で使用
- ✓ `restart` (MD=TRUE) : 直近の MD ステップの計算に関する情報 (バイナリ形式)
RESTART=TRUE で使用
- ✓ `restart_chk` (MD=TRUE) : MD ステップが直近の CHECKPOINT で設定した頻度に到達した時の計算に関する情報 (バイナリ形式)
RESTART=TRUE で使用
- ✓ `traject` (MD=TRUE) : MD における各原子の座標の時系列変化 (xyz ファイル形式)
- ✓ `velocity` (MD=TRUE) : MD における各原子の速度の時系列変化 (xyz ファイル形式、単位は Å/fs)
- ✓ `mulliken` (MD=TRUE) : MD における各原子の Mulliken 電荷の時系列変化
Serial/OpenMP version: 以下の情報を連続して出力
第 1 行: 原子数
第 2 行: コメント (シミュレーション時間と MD ステップ)
第 3 行-(原子数+2) 行: 原子ラベル (第 1 列)、元素記号 (第 2 列)、原子の電荷 (第 3 列)
MPI version: 以下の情報を連続して出力
第 1 行: 原子価軌道数 (第 1 列)、原子数 (第 2 列)
第 2 行: コメント (シミュレーション時間と MD ステップ)
第 3 行-(原子価軌道+2) 行: 原子ラベル (第 1 列)、元素記号 (第 2 列)、原子価軌道ラベル (第 3 列)、原子価軌道の電荷 (第 4 列)
- ✓ `dftb_vib.out` (FREQ=TRUE) : 振動数計算結果 (Gaussian 出力形式)
- ✓ `restart_hess` (PRINTHESS=TRUE) : 振動数計算における Hessian 行列 (バイナリ形式)
RESTARTHESS=BINARY で使用
- ✓ `hess.dat` (INTERRUPTCP=TRUE) : 振動数計算における部分的な Hessian 行列
RESTARTHESS=ASCII で使用