

xTB



- [Opis](#)
- [Verzije](#)
- [Službena dokumentacija](#)
- [Primjeri](#)

Opis

xTB (engl. *extended Tight-Binding*) je aplikacija za računalnu kemiju koja omogućava relativno brze izračune molekulskih struktura i svojstava. Temelji se na tzv. "tight-binding" aproksimaciji elektronske strukture molekula, koja pruža dobru ravnotežu između točnosti i brzine izračuna.

Neki od primjena su izračuni optimalne geometrije molekule, vibracijskih frekvencija, dipolnih momenata, simulacija kemijskih reakcija izračunavanjem reakcijskog puta i energetskih barijera između različitih prijelaznih stanja molekule itd.

xTB je aplikacija otvorenog koda, a podržava **OpenMP** paralelizaciju što znači da radi s **dijeljenom memorijom** te se ne može širiti van jednog računalnog čvora.

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Paralelizacija	Supek	Padobran
6.4.0	scientific/xtb/6.4.0-gnu	CPU	OpenMP	✓	✓
6.5.1	scientific/xtb/6.5.1-gnu	CPU	OpenMP	✓	✗
6.6.0	scientific/xtb/6.6.0-gnu	CPU	OpenMP	✓	✗

Službena dokumentacija

- <https://xtb-docs.readthedocs.io/en/latest/contents.html>

Primjeri



Kad u zaglavlju PBS skripte definirate vrijednost varijable **ncpus**, u okolinu se automatski doprema ista vrijednost **OMP_NUM_THREADS** varijable.

U primjeru niže, aplikacija će se pokrenuti s 32 OpenMP threada.

Bash skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l ncpus=32

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/xtb/6.6.0-gnu

xtb C2H4BrCl.xyz --chrg 0 --uhf 0 --opt vtight --alpb chcl3
```