# Article information:

XTBDFT: Automated workflow for conformer searching of minima and transition states powered by extended tight binding and density functional theory - ScienceDirect  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352711022001601>

# Article summary:

1. 本文介绍了一种名为XTBDFT的自动化工作流程，可以快速进行分子构象搜索和转换态搜索，使用了扩展紧束缚理论（XTB）和密度泛函理论（DFT）等多种计算方法。

2. XTB和CREST与NWChem相结合，形成了XTBDFT的自动化工作流程，可以在Linux/Unix计算集群上自由使用。

3. 该软件已经成功应用于有机金属配合物的构象搜索，并且可以通过添加键约束实现过渡态的定位和构象搜索。

# Article rating:

Appears moderately imbalanced: The article provides some useful information, but is missing several important points or pieces of evidence that would be required to present the discussed topics in a balanced and reliable way. You are encouraged to seek a more balanced perspective on the presented issues by exploring the provided research topics and looking at different information sources.

# Article analysis:

由于本文是一篇科学论文，其内容主要涉及计算化学领域的技术和方法，因此不存在明显的偏见或宣传内容。然而，在文章中可能存在一些片面报道或缺失的考虑点。

首先，文章强调了GFN2-xTB和CREST在生成分子构象方面的优势，并将其与传统力场驱动的构象搜索进行了比较。然而，文章没有提到其他常用的构象搜索方法，如分子动力学模拟、Monte Carlo模拟等。这些方法也可以用于大分子构象搜索，并且在某些情况下可能比GFN2-xTB和CREST更有效。

其次，文章介绍了XTBDFT自动化工作流程，并声称其使用NWChem作为DFT引擎具有广泛分布和可定制性等优势。然而，文章没有探讨使用NWChem可能带来的风险或限制。例如，NWChem可能不适用于某些特殊类型的化合物或反应机理，并且由于其教育社区许可证限制，可能无法在商业环境中使用。

最后，文章提到了作者们使用XTBDFT筛选出新型二膦胺配体并发现新型催化剂的案例。然而，文章没有提供足够的证据来支持这一主张，例如新型催化剂的性能数据或与其他已知催化剂的比较。此外，文章没有探讨可能存在的其他因素，如反应条件、反应机理等对催化剂性能的影响。

综上所述，虽然本文是一篇科学论文，但仍存在一些片面报道和缺失考虑点。读者需要谨慎评估文章中提出的技术和方法，并结合其他相关研究进行综合分析。

# Topics for further research:

* Other conformational search methods
* Limitations and risks of using NWChem
* Performance data and comparison with known catalysts
* Other factors affecting catalyst performance
* Monte Carlo simulation for conformational search
* Molecular dynamics simulation for conformational search

# Report location:

<https://www.fullpicture.app/item/f0a6e2f25ad68c43c6161b525ec09a3c>