

# BIOVIA MATERIALS STUDIO GULP

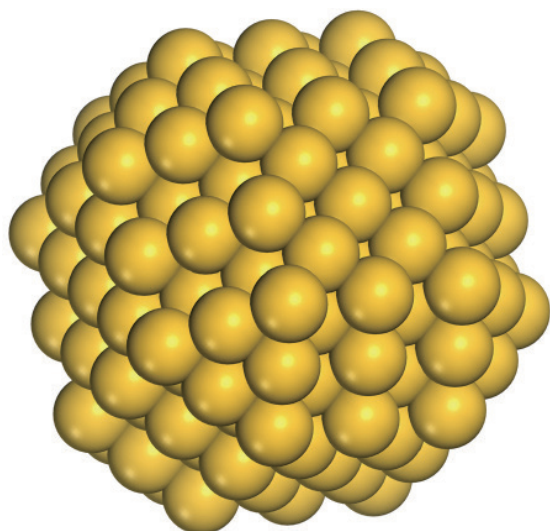
## データシート

BIOVIA Materials Studio GULP (The General Utility Lattice Program) は、オーストラリアのCurtin大学のJulian Gale教授によって開発された、結晶、表面、気相のクラスター、結晶中の欠陥などの幅広い計算に対応した古典力学シミュレーションのプログラムです。とくに、GULPには、イオン性材料のシミュレーション向けのシェルモデルなど、様々な材料向けの力場が搭載されています。

### GULPの概要

BIOVIA Materials Studio GULPは、分子、クラスター、表面、結晶などに対して、有機および無機材料向けの様々なポテンシャルを使用した構造最適化および分子動力学計算に対応しています。ポテンシャルには、シェルモデル、金属向けの原子埋め込み法、結合次数ポテンシャル、反応性力場などが含まれます。幅広いポテンシャルが利用可能ですので、半導体基板上でのゼオライトや金属薄膜などの性質の異なる系にも対応可能です。

GULPは、幅広いポテンシャルに対して、パラメータフィッティングを行って、新しい力場を開発する機能も搭載しています。また、ポテンシャルの2階および3階の解析的な微分を使用した精度の高い振動解析などの幅広い材料の特性の解析も可能です。



金のナノクラスターなどのクラスターの安定性を研究するために、GULPによる構造最適化計算や分子動力学計算を行うことができます。

### BIOVIA MATERIALS STUDIOのメリット

GULPはBIOVIA Materials Studio®のソフトウェア環境の一部です。BIOVIA Materials Studioは使い勝手の良いインタフェースを提供し、Windows®規格に準拠しています。Materials VisualizerはBIOVIA Materials Studioの中核製品で、モデルの作成と表示を行う幅広いツールを提供します。結晶構造の構築、結晶表面の切り出し、クラスターやナノチューブの構築などの作業をMaterials Studio Visualizerのツールを使って簡単に作成できます。

構造が作成できたら、GULPのインターフェースを使用して、エネルギー計算、構造最適化、分子動力学計算などのタスクを選択し、次に使用するポテンシャルを選択して実行できます。必要なファイルがすべて計算サーバーに転送され、計算が終了すると結果がクライアントに返されます。

Materials Studioとの統合により、Materials Studio Forciteの解析ツールを使用したり、量子力学シミュレーションモジュールなどを使用してその他の物性を予測したりできます。

### GULPの有用性

GULPは、触媒、燃料電池、ガラス、粘土などの様々な材料の構造や特性を、簡単な操作で、短時間かつ高精度に予測することができます。また、拡散性などの動的な特性やヤング率などの静的な特性などを研究できます。その他の特性については以下の一覧を参照してください。

### GULPの機能

#### 計算可能なモデル

- クラスター、分子、欠陥 (0次元)
- 表面、スラブ、結晶粒界 (2次元)
- バルク材料 (3次元)
- COSMO法を使用した溶媒効果の考慮
- 非周期系への電場の適用

#### 構造最適化

- 圧力一定および体積一定
- 空間群および点群対称性の利用
- 内部座標および格子定数の拘束
- ニュートン・ラフソン法、共役勾配法
- DFPもしくはBFGS法を用いたヘシアン行列の更新

#### 分子動力学計算

- NVE、NVT、NPT、NPHアンサンブル
- シェルモデルの利用
- 断熱近似を用いたシェル位置の更新
- バルクから表面を切り出すために必要な表面エネルギーの計算
- 表面上に、化学量論比を保つように薄膜を付着させるときに放出されるエネルギー

## ポテンシャル ライブラリ

- 有機物 (Dreiding)
- ゼオライト・ケイ酸塩 (Catlow)
- シリカ (Vashishta、FFSiOH)
- 炭酸塩 (Carbonates)
- 金属酸化物 (Bush、Lewis、Streitz-Mintmire)
- ガラス (Garofalini)
- 金属 (埋め込み原子法ポテンシャル)
- 半導体 (Tersoff)
- ウラン酸化物 (Tiwary)
- 結合次数ポテンシャル (Brenner、VBO)
- 反応力場 (ReaxFF)

## 結晶物性

- 弾性定数
- 体積弾性率
- ヤング率
- ポアソン比
- せん断弾性率
- 圧電定数
- フォノン振動数
- LO-TO分裂
- フォノン状態密度
- ゼロ点振動エネルギー
- エントロピー (体積一定)
- 定積熱容量
- 静電ポテンシャル
- 電場勾配
- ボルン有効電荷
- 振動数に依存する誘電率テンソル
- 光学特性 (反射率、屈折率、誘電定数)

## 構造解析

- 結合長、結合角、二面角
- 密度、体積
- トラジェクトリ解析
  - 結合長、結合角、二面角の時間変化および分布
  - 密度プロファイル
  - 動径分布関数
  - 回転半径
  - X線散乱
  - 空間配向相関関数
  - 双極子自己相関関数
  - 平均二乗変位
  - 回転、空間-時間、応力、速度自己相関関数

## 力場のフィッティングと編集

- 弾性定数、体積弾性率、静的および動的誘電率、格子エネルギー、圧電定数、力、振動数、格子定数、内部座標などに対する経験的なフィッティング
- シェル座標および平衡半径に対しても同時にフィッティング
- フィッティング中に構造最適化を行い、力ではなく変位に対してフィッティングします。また、フィッティングの対象となる物性値も構造最適化された構造に対して計算されます。
- 複数の構造に対して同時にフィッティング
- コアとシェルの電荷を任意に分配
- 幅広いシェルモデル、二体、三体、四体、多体ポテンシャルが利用可能

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。



3DEXPERIENCE®