

GULP

力場ベースの格子計算プログラム GULP は、各種周期境界条件の下、種々の材料の静的構造や構造変化の遷移状態の最適化計算、分極率の予測、分子動力学計算を格子ダイナミックスの手法により実行する事が出来るユニーク、かつ多様な機能を有する固体材料シミュレーションソフトウェアです。オーストラリア Curtin 工科大学 Nanochemistry 研究所の Julian Gale 教授によって開発された GULP は、分子固体やイオン性材料の両者をShell Model によって扱うことができます。初期のバージョンでは、固体、クラスター、Embedded(埋め込み)欠陥の計算に焦点が当てられましたが、最新のバージョンでは、表面や界面、ポリマーなどを扱うことが出来るように発展しています。

GULP で何ができるのか？

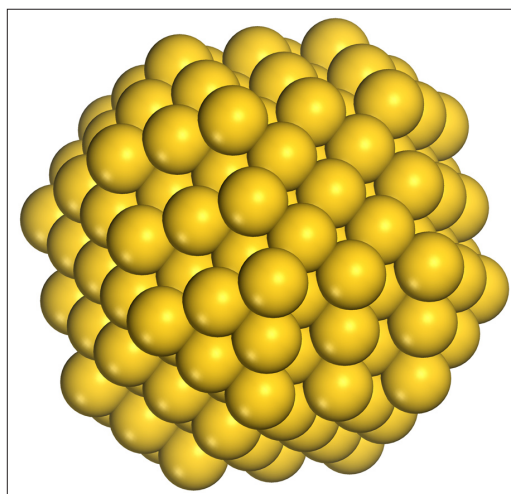
Shell model はイオンペアポテンシャルの一種で、調和バネで連結された、プラスコアと無質量のマイナス電荷シェルからなる点電荷のペアでイオンを表現するもので、これによりイオンの分極性を良く再現することが出来ます。また、有機系に対しての分子力場、金属系でのEmbedded atom モデル、炭化水素系での結合次数ポテンシャル(ver. 3.0)など、30 種近いポテンシャルモデルを内蔵します。

GULP の重要な特徴として、点欠陥の計算が可能なことが挙げられます。GULP では空配座や層間挿入、不純物を欠陥周辺の格子緩和の取り扱いに有効な 2 領域系 Mott-Littleton 近似で扱います。結晶は 2 つの領域に分けられ、欠陥周辺の内部領域はあらわに処理されますが、結晶の他の部分は擬連続体モデルで緩和されます。

GULP で計算できる物性には：

- Properties of oxides
- Point defects, impurities & interstitials
- Surface properties
- Migration of ions
- Reactivity and Structures of zeolites and other microporous materials
- Ions intercalated in clays
- Properties of ceramics
- Disordered structures

などがありますが、詳しくは次ページの機能一覧をご覧ください。



金原子ナノクラスター GULP による構造最適化計算や分子動力学計算を上図のような原子クラスターの安定性を調べる研究に応用することができます。

GULP 活用分野：

- 酸化物表面での不均一触媒系
- 燃料電池
- 核廃棄物処理プロセス
- 水蒸気電気分解
- ガスセンサー
- 自動車排ガス触媒
- 石油化学
- ガラス

機能一覧

Clusters/System types

- Clusters, molecules and defects (0-D)
- Surfaces, slabs and grain boundaries (2-D)
- Bulk materials (3-D)
- Solvent effects can be included using the COSMO model
- An external electric field can be applied to nonperiodic systems

Energy minimization

- Constant pressure / volume
- Symmetry adapted relaxation
- Unrestrained relaxation
- Constraining of internal and cell coordinates
- Newton/Raphson, conjugate gradients
- DFP or BFGS updating of the Hessian

Molecular dynamics

- NVE, NVT & NPT ensembles
- Shell model MD allowed
- Extrapolation of shells for adiabatic algorithm

Surface and attachment energies

- Calculate thermodynamic penalty for cleaving a surface from the bulk
- Calculate energy to add a stoichiometric layer of material to the surface

LIBRARIES OF POTENTIALS

Wide range of forcefield supported including:

- Organics (Dreiding)
- Zeolites and silicates (Catlow)
- Silica (Vashishta, FFSiOH)
- Carbonates
- Metal oxides (Bush, Lewis, Streitz-Mintmire)
- Glasses
- Metals (Various Embedded Atom Model libraries)

- Semiconductors (Tersoff)
- Glasses (Garofalini)
- Uranium oxide
- Valence Bond Order potential
- Reactive systems (Brenner, ReaxFF)

Crystal properties

- Elastic constants
- Bulk moduli
- Young's modulus
- Poisson's ratios
- Shear moduli
- Piezoelectric constants
- Phonon frequencies
- Non-analytic correction for gamma point modes
- Phonon densities of states
- Projected phonon densities of states
- Zero point vibrational energies
- Entropy (constant volume)
- Heat capacity (constant volume)
- Electrostatic potential
- Electric field
- Electric field gradients
- Born effective charges
- Frequency dependent dielectric constant tensor
- Optical properties (reflectivity, refractive index, dielectric constant, dielectric constant tensor)

Structure analysis

- Bond lengths, distances, angles, and torsions
- Density and cell volume
- Trajectory analysis with Forcite (license required) includes:
 - Length, angle, and dihedral analysis
 - Concentration profiles
 - Radial distribution function
 - Radius of gyration

- X-ray scattering
- Spatial orientation correlation function
- Dipole autocorrelation function
- Mean squared displacement
- Rotational, space-time, stress, and velocity autocorrelation functions

Fitting and editing of forcefields

- Empirical fitting to elastic constants, bulk moduli, static and high frequency dielectric constants, lattice energy, piezoelectric constants, gradients, frequencies, electrostatic potential, and structure
- Simultaneous relaxation of shell positions and radii during fitting
- Relax fitting - fit to displacements rather than to gradients; this also means that the properties of the relax structures are fitted
- Fit to multiple structures simultaneously
- Vary core/shell charge split
- Vary all charges
- Wide variety of shell model, two-body, three-body, four-body, and many-body potentials available

Materials Studioに関する詳細については、下記URLを参照してください。

<http://accelrys.co.jp/products/materials-studio/>