

『パソコンによる材料設計』

平尾一之・河村雄行著（裳華房 1994 年刊行）

岡山大学工学部

尾坂 明義

Akiyoshi Osaka

Faculty of Engineering, Okayama University

コンピュータの発達は日進月歩というが、筆者の利用しているシステムでは、8年前 24 MHz の CPU と 30 Mb のハードディスク及び 8 Mb のメモリであったものが、現在では、300 MHz の CPU と 5 Gb のハードディスク及び 128 Mb のメモリを擁している。無論、ハードディスクはごみファイルだらけで、何年もの間の仕事のアカがたまっていることになる。ハードウェアの進歩は同時に、大型計算機センター設置のマシンでなければ叶わなかった計算を卓上のパーソナルコンピュータで可能にした。たとえば分子軌道の計算もパッケージとして市販されており、同時に別のソフトを立ち上げると原子配列などがすぐさまディスプレイに写し出される。この間には、DV-X α 法のように、特定の個人の努力によってその適用クラスターサイズや原子範囲を拡大し、計算手法の洗練が行なわれ、初心者でもある程度利用が可能となることも多かったであろう。その他、データベースの構築とエキスパートシステムを利用する

材料設計は日常のものとなっている。ガラスの分野では、INTERGLAD が当ニューガラスフォーラムより発売され、全世界で利用されてきている。それに至る間は、安井先生等を中心とする多くの方々の努力に依るところが大きいと伺っている。この INTERGLAD は、毎年の改訂とデータの追加が行なわれてきたが、現在は工業技術院標準部の補助金を得た「知的基盤整備事業—ニューガラスの設計に関するデータベース構築」プロジェクトによって、曾我・牧島・安井先生を中心に大幅な整備が進められている。

今回紹介する「パソコンによる材料設計」（以下「この本」）は、分子動力学法をいわゆるガラス関連系のシミュレーションに応用するための入門書である。分子動力学（Molecular Dynamics, 略して MD 法と呼ばれる）は、仮定した原子間ポテンシャル関数によって、数百～数千程度の粒子間に働く力を計算し、ニュートン方程式を一つ一つの粒子について解いて、ある微小時間後の各粒子の位置と運動量を求めていくものである。温度・圧力・体積の条件は、可変となっている。このようなシミュレーションによる材料の研究は、モンテ・カルロ法など

と共に 1960 年代から盛んとなっている。今秋の日本セラミックス協会秋季シンポジウムでも多くの研究発表が予定されている。現在では、分子軌道計算と分子動力学的のコンビネーションを同時に進めるなどの手法もある。このシミュレーションモデルを中心に据えた研究には二通りのやり方がある。分子動力学法はあくまでポテンシャル関数が命であるから、実際の物質の構造転移（変態）温度等を確実に再現できるように改訂を重ね、正確な物性の再現と予測に努めるのが一つである。この本の中にもちょっと出てくるが、岡山大学地球内部センター松井義人先生等の進め方がこれである。著者の一人・河村先生とも共同研究なさったかも知れない。極限的高温・高圧下での各種結晶の状態変化をシミュレーションするのであるから、実験可能な条件下での変化は再現してくれないと困る。おそらく、ほとんどのはこのやり方であろう。よって、残念ながらシリカは結晶やガラスとしてはやや常軌を逸している点もあるが、シリカのような単純な化合物から複雑な系へとポテンシャルを順に定めていく必要がある。しかし、ある原子・イオンの性質をちょっと変えたら物質全体としてはどうなるかと、単なる道具の一つとしていいかげんに考えるのもいいのではない。したがってポテンシャルを極めるのでなく程々にしておいて、例えば、フッ化物系に塩化物イオンや酸化物イオンを添加したらどうなるか、などと遊んで見るのである。これには多くの適用の可能対象がある。つまり現実の物質

の変化方向を、計算機の中に構築した仮想的物質の変化方向で近似しようというのである。もちろん、各粒子の軌跡を解析して得られるラマンスペクトルを実測スペクトルと比較するなどして、近似の程度を認識しておくことは大切である。

この本は、第 1 章で分子動力学法概念を述べ、第 2 章では原子間ポテンシャルについて、完全イオン性・部分イオン性、あるいは多体ポテンシャルなどの性質が例示してある。第 3 章はガラス関連物質についての計算実例であり、第 4 章では計算機支援材料設計の現状と将来が述べてある。最後の第 5 章では、付属のフロッピーディスクに入っている MXDORTO 分子動力学法シミュレーションのプログラムの使い方が、懇切に説明してある。この MXDORTO は、JCPE（日本化学プログラム交換機構）にも登録され頒布を受けることができる。各時刻毎の原子配置スナップショットの表示、2 体相関関数、積算配位数、原子運動の軌跡の表示等、必要なことは一通りすべて説明があるため、初歩的な化学の知識があれば、書いてあるとおりに順を追って進めていくと、自然に分子動力学シミュレーションが自分で利用できるようになっている。ソースコードも公開されているので、パソコン得意の向きは、自分なりにいじることでもできる。コンピュータでなにかやってみよう・遊んで見ようと考えているものには打ってつけの本である。