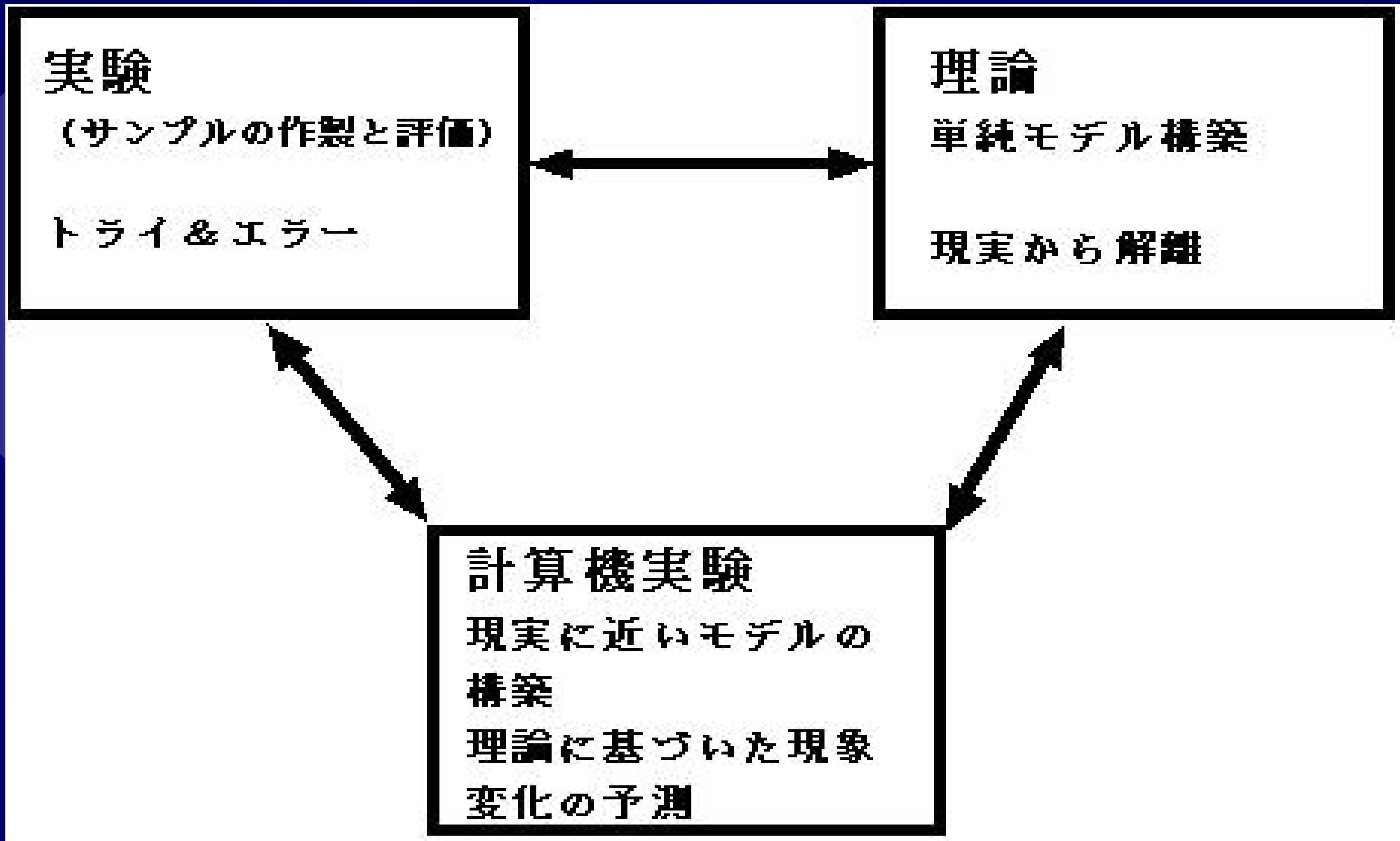
計算機実験について

篠嶋 妥(ささじま　やすし)
茨城大学工学部
マテリアル工学科　助教授

1. はじめに
2. 計算機実験の手法
   - ・分子動力学法・モンテカルロ法
   - ・偏微分方程式の 数値解法
3. 計算機実験の応用例
   - ・超微粒子, ナノ結晶
   - ・ナノインデンテーション, スクラッチ
   - ・準結晶, アモルファス氷
   - ・結晶成長過程
4. おわりに

1. はじめに

材料開発のアプローチに新しいツールが加わる

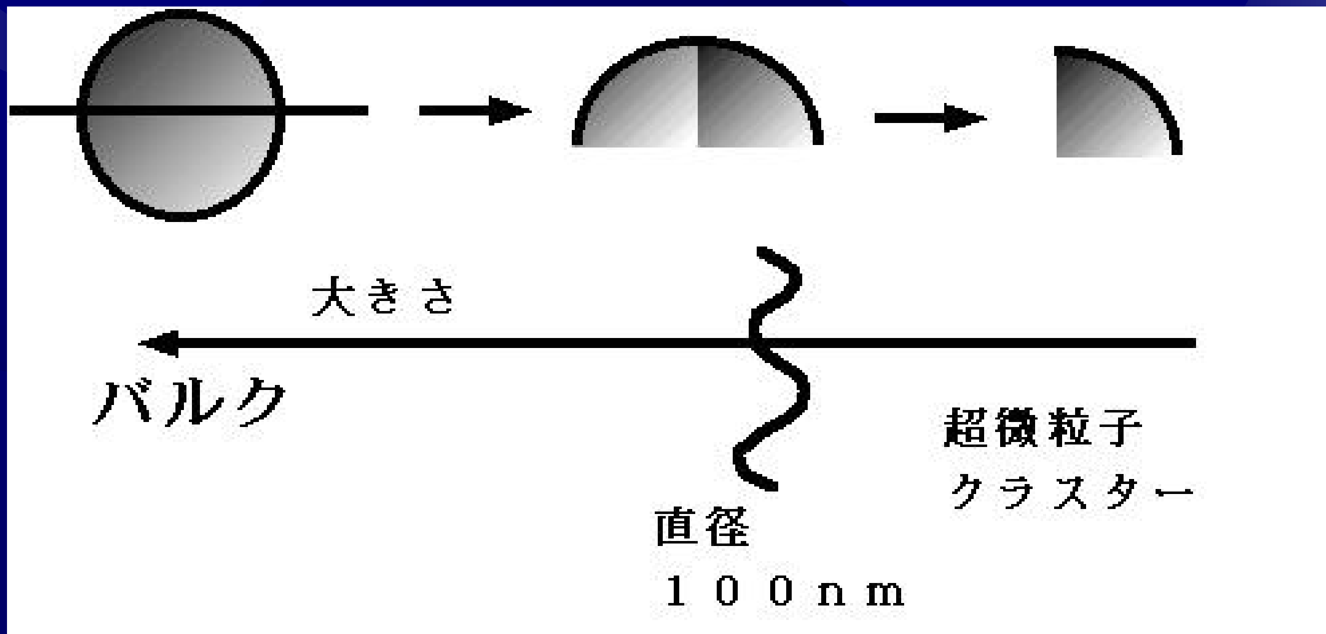


・材料は原子でできている（原子の集合体）
・材料中の原子の並び方が、材料の性質を決めている
・普通でない原子構造を持つ人造物質が、
これまでにない機能を持つ材料となる

（例）超微粒子、アモルファス、フラーレン、カーボンナノチューブ

超微粒子の構造変化

固体分割を繰り返すと、ある大きさより小さくなると、普通の結晶とは違った構造になる。



2．計算機実験の手法
2−1．分子動力学法
　個々の原子(分子)を古典力学の運動方程式に従う粒子とみなして、数値的に運動方程式を解くことによって、
個々の原子(分子)の位置座標の時間変化を求める方法。

運動方程式：

$$\boxed{F = ma}$$

Fは力、mは質量、aは加速度

$$\boxed{a = \frac{F}{m}}$$

物体に力を加えると、加速度（運動の変化）を生じる。

質量が小さいほど（軽いほど）、加速しやすい。

加速度＝速度の変化率，速度＝位置の変化率

$$a = \frac{\Delta V}{\Delta t} = \frac{V(t+\Delta t) - V(t)}{\Delta t} = \frac{F(t)}{m}$$

これを変形して

$$V(t+\Delta t) = V(t) + \frac{F(t)}{m}\Delta t$$

粒子の今の速度*V(t)*,　今受けている力*F(t)*から、未来の速度が出せる

未来の速度がわかれば、未来の位置がわかる。

$$\overline{V} = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t}$$

$$x(t+\Delta t) = x(t) + \overline{V} \cdot \Delta t$$

力の導出について
相互作用を表すポテンシャル　Ψ(x(t))　の傾きにマイナスをつければ、力が求められる。
(そうなるように、ポテンシャルが決められる。)

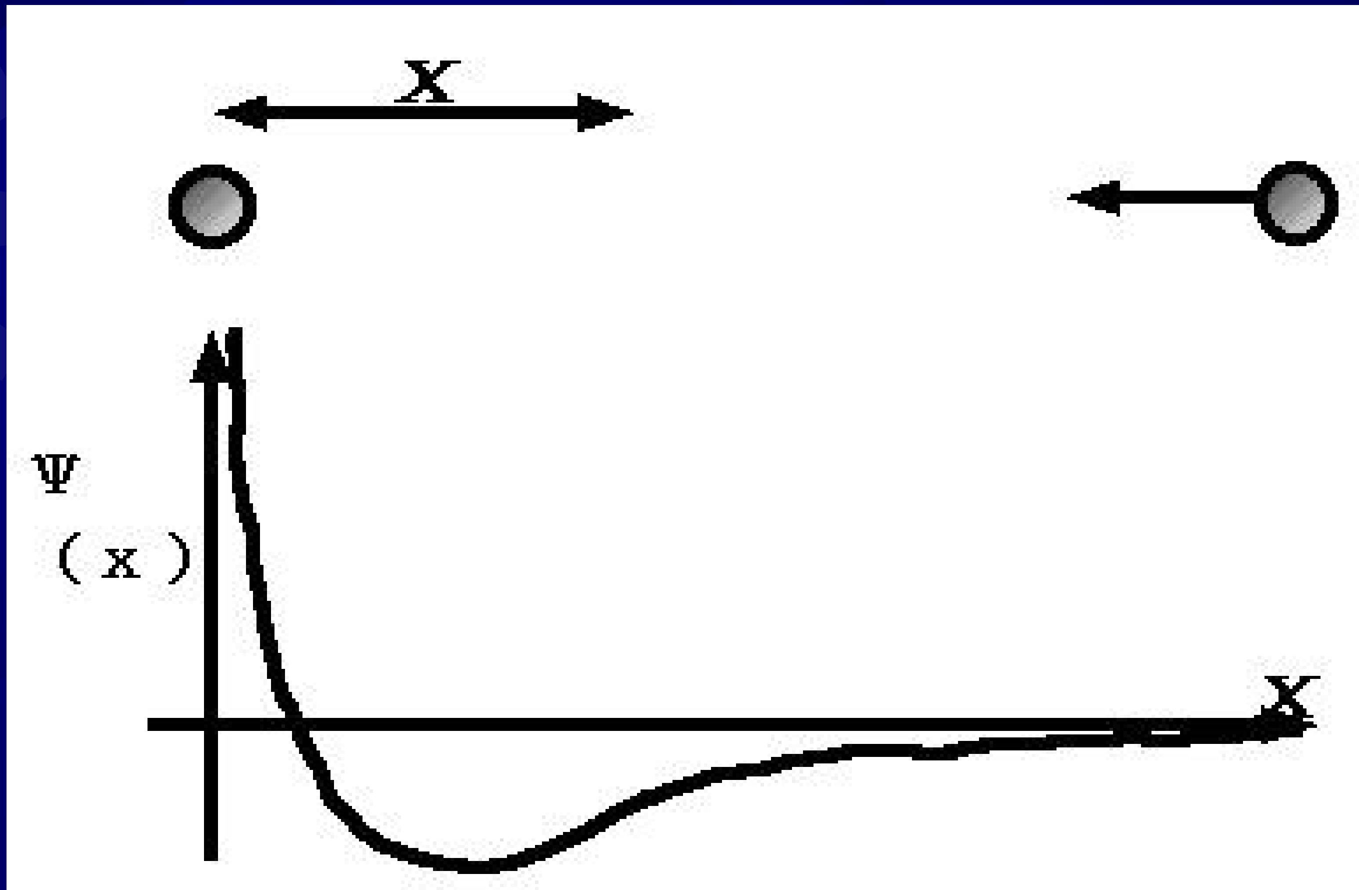
（例）　ばねにつながれた粒子
　バネ定数k，平衡位置からの変位をxとすると、

$$\Psi(x) = \frac{1}{2} k\, x^2$$

$$F_x(x(t)) = -\frac{d\Psi(x)}{d\,x} = -k \cdot x$$

ポテンシャル　Ψ(x)は、粒子をある基準位置(この場合、バネのつり合いの位置)からxという場所に移動させるのに必要な仕事量＝(力・移動距離)

（例）分子間力
２つの分子のうち一つを原点において、
もう一つの粒子を基準位置（無限遠）から、位置xまで移動させるのに必要な　仕事量として、
分子間相互作用（ポテンシャル）を定義する。



ニュートンの運動方程式を、コンピューターに解ける形に変形して、短い時間Δtごとに位置と速度を求めていく。

$$\begin{Bmatrix} V_x(0) = V_{x_0} \\ x(0) = x_0 \end{Bmatrix} \Rightarrow \begin{Bmatrix} V_x(\Delta t) \\ x(\Delta t) \end{Bmatrix} \Rightarrow \begin{Bmatrix} V_x(2\Delta t) \\ x(2\Delta t) \end{Bmatrix} \Rightarrow \begin{Bmatrix} V_x(3\Delta t) \\ x(3\Delta t) \end{Bmatrix} \bullet\bullet\bullet$$

初期条件を与えれば、粒子の動きが計算できる。

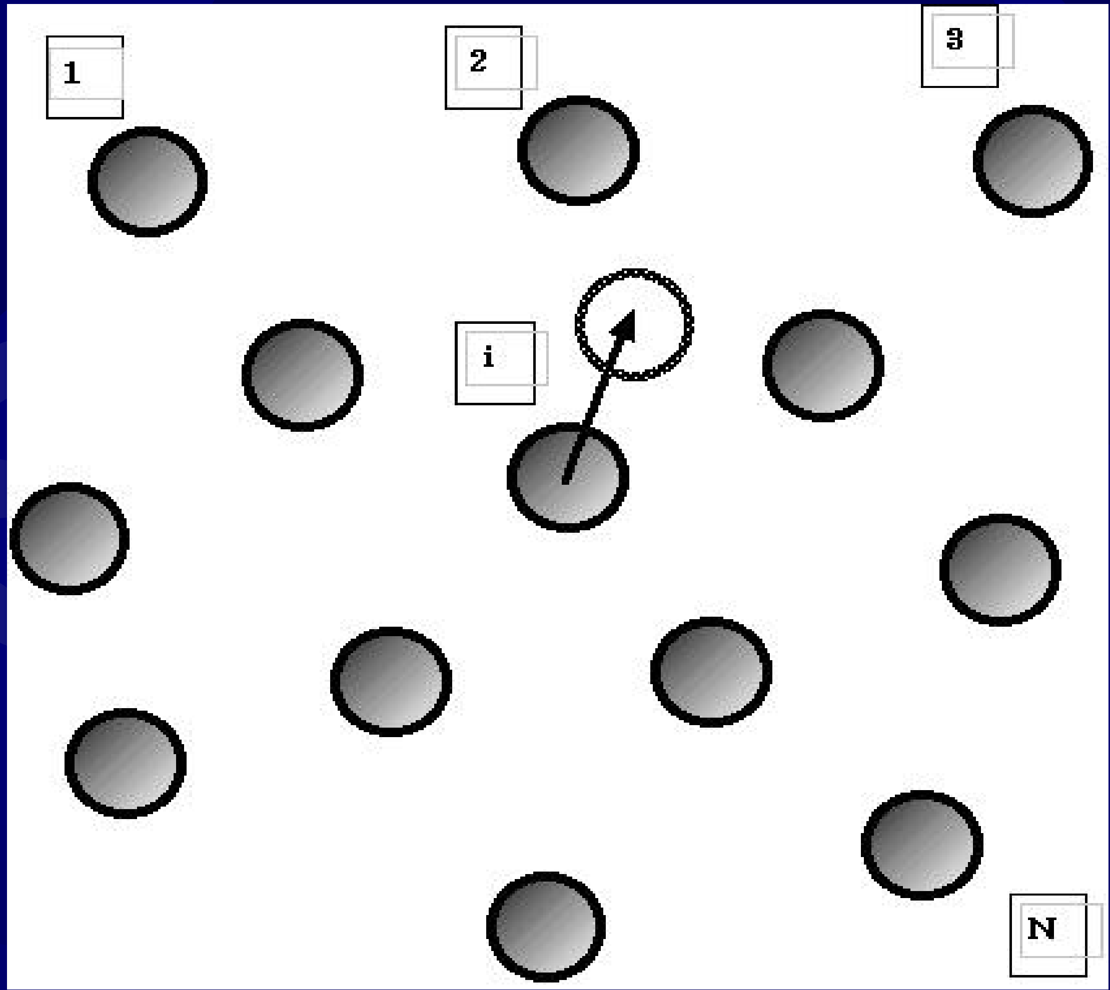
2−2. 確率論的手法(モンテカルロ法)

(1)計算機により一様乱数Rを生成する
　　　(擬似乱数)　$0 < R < 1$
(2)系の状態(系を構成する原子の位置など)を仮に変化させて、それが起こりうる確率pを計算する。
(3)$R < p$ならば、その変化を実際に起こさせる。
(1)〜(3)を何度も繰り返す。

温度がTで一定の系の場合、系の状態変化に伴うエネルギー変化が　ΔEとすると、

$$p = \exp(-\Delta E / k_B T)$$

例：与えられた条件下で平衡状態にある、多粒子系の原子配置



粒子iを任意の場所に動かしたとき、
その移動前後のエネルギー差を
ポテンシャルの総和の差から計算する。

2−3. 偏微分方程式の数値解法

・自然は物理法則に従う

・物理法則は微分方程式で与えられる

微分＝ある量の変化率

（例）速度　＝位置の時間変化率

加速度＝速度の時間変化率

ニュートンの運動方程式＝

加速度の原因は、力である

ある場所の温度を知りたい $T(x, t)$
温度差があると、熱の流れが生じる

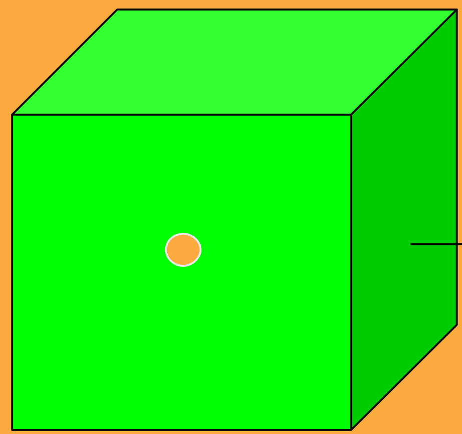
x 方向の熱の流れ

（単位時間,

単位面積あたり）

$$q_x = -\kappa \frac{T(x+\Delta x) - T(x)}{\Delta x} = -\kappa \frac{\Delta T}{\Delta x}$$

$$+q_x(x - \frac{\Delta x}{2})$$



$$-q_x(x + \frac{\Delta x}{2})$$

$$\Delta x$$

箱の中にたまる熱量

箱の中の温度変化に必要な熱量

$$-q_x(x+\frac{\Delta x}{2}) + q_x(x-\frac{\Delta x}{2}) = -\frac{\Delta q_x}{\Delta x}\Delta x = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\Delta x$$

$$=$$

$$\rho c \frac{\Delta T}{\Delta t} \Delta x$$

温度変化を記述する方程式

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right)$$

この方程式を計算機に解ける形に変形して、
プログラムを作り、計算する。
→　複雑な形をした物体の中の温度変化がわかる

・固体中の元素濃度

・液体の流れ

・固体中の力のかかり方

・固体中の電子の動き　　・・・・

偏微分方程式を計算機で解くことでわかる