

材料工学スキルアッププロジェクト

コンピュータシミュレーションによる結晶構造解析

工学部マテリアル工学科 安藤新二

1. 緒言

従来 実験 を中心としたマテリアル工学分野において、現在では、計算機シミュレーションによる結晶構造の解析手法は一般的なものになっている。このような状況から、「材料科学実験2」では、分子動力学法(MD)を用いたシミュレーションの演習を取り入れてきた。しかしながら学科には計算機演習を行うためのコンピュータ設備が乏しく、実際は、学生が個人で所有しているパソコンを持ち込んで演習をさせているのが現状である。したがって、コンピュータの処理能力が低いいため、次のような問題点がある。

- ・数十原子の小さな結晶しか扱えない。
- ・3次元の結晶を扱うことが困難。

この計算演習では連続的に計算機を使用するため、本学の演習室を利用して難しい。そこで本プロジェクトに申請し、計算用サーバーを導入した。これにより、

- ・学生のパソコンに頼ることなく演習ができる。
- ・同時に多数の学生を演習させられるので、教員の負担を増やすことなく、従来1回(2コマ)の演習であったものを2回(4コマ)行うことができる。
- ・実際の金属結晶と同じ3次元の計算を行うことができ、立体的な結晶構造の理解が深まる。

なおこの演習を行うことで、1年次の情報教育(プログラミング演習)を応用して、専門科目である「格子欠陥学」、「結晶塑性学」をより深く理解することが出来ると考えられる。

2. 施概要

「材料科学実験2」は前期科目であるため、申請時にはすでに終了している。そこで次年度に実施するための準備として、大学院の授業科目の一部として実施し、実験内容の検討を行うこととした。その内容として以下のプログラム(各1コマ、計4コマ)を考えた。

1. シミュレーションの原理の講義
2. シミュレーションプログラムの作成と理解
3. ネットワークを利用した計算サーバーの利用

4. 計算結果の3次元表示による可視化

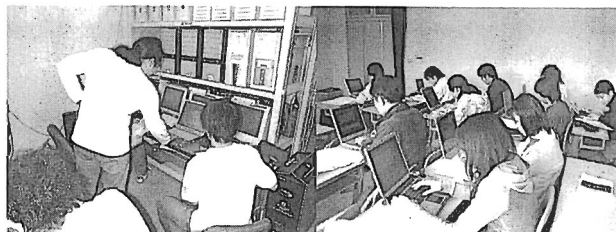


図2 (左) 3年次「材料創造実習」を利用し大学院生と3年生によりLinuxサーバーの設定を行った。

図3 (右) 大学院の講義を利用し、パソコンから計算サーバーへ接続して計算を実行させた。

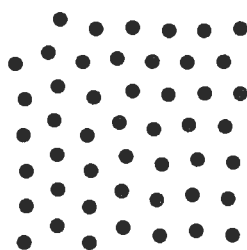


図1 従来の演習結果
(2次元 36原子)

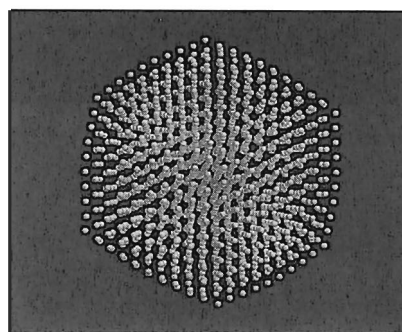


図4 約2000原子からなる金属結晶(鉄)の構造シミュレーションの結果。表示にはRasMolを利用した。

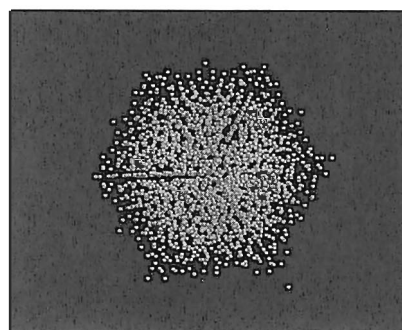


図5 結晶が融解する過程のシミュレーション。

3. 施結果

最も基礎的なプログラムとしたため、上記の結果を得るには2-4日かかることがわかった。2日の実験で終了するためにはプログラムの高速化が必要である。条件の設定およびプログラムについて講義内容の更なる検討が必要である。