

情報科学から見た計算材料科学

西谷滋人[†]

† 関西学院大学工学部情報科学科 〒669-1337 兵庫県三田市学園 2-1

E-mail: nishitani@kwansei.ac.jp

1. 計算科学・計算材料科学の意義

材料開発においては実験による試行錯誤は不可欠です。しかし、考えられる全てのパラメータを確かめるのはあまりに無駄が多すぎます。計算あるいは理論によって提供される視点は、研究方向を絞り込むのに非常に有効です。特にエネルギーは実験での直接測定が難しかったので、化学ポテンシャル、歪み、化学結合といった概念で議論されてきました。ごく最近になって第一原理計算法の進歩によって高精度で計算可能となり、直接エネルギーを使って定量的な議論ができるようになってきました。ただ信頼できる結果を得るには系のサイズや計算精度を適切に扱わねばならず、莫大な計算資源が必要となる場合があります。

2. 主として用いている計算科学・計算材料科学の手法

我々のグループでは、材料開発で不可欠な状態図の基礎となる有限温度の自由エネルギーをターゲットにしています。この計算には、第一原理計算コードによるエネルギー値やフォノン状態密度と、統計熱力学に基づく擬調和振動子近似とを組み合わせておこなっています。これまでに、金属中の析出の活性化エネルギー[1]や半導体 SiC の相安定性[2]などで有意義な計算結果を提供してきました。

3. 計算材料科学の教育実態と問題点

著者の専門とするマルチスケールシミュレーションでは研究分野を

物理⇄化学⇄材料⇄電気、機械

の階層構造と捉えられます(図1)。階層構造を計算材料科学にあてはめると、

数値計算学⇄計算材料学⇄材料学

となるでしょう。これはメーカーでのサプライチェーン
素材⇄部品⇄製品

において、一般消費者から見て製品メーカーだけが目立つ構造と同様です。一方で初学者が基礎から応用に至るのも学問の王道で、少なからず期待できます。

計算材料科学の基礎となる数値計算学においては、材料、数学、情報といった入り口によってそれぞれ異なった知識が要求されます。教育によってどのような人材を養成するかのターゲットに依存して、その学習内容は多岐に及びます。従って学習期間の制約から、全てを完全に制覇するのではなく、限られた時間で効率

よく学習できる最低限の知識を提供する必要があります。著者は材料学につながる計算材料学として今までに、

材料(=物理)	「固体物理の基礎」による量子力学と熱統計力学[3]
数学	数式処理ソフト Maple による数値計算[4]
情報(=計算)	スクリプト言語 Ruby による計算ソフトの制御[5]

という教材を開発してきました。

これらは、スキル向上には寄与しますが、それだけではだめです。著者が所属する学科は情報科学科で、さらに、将来研究者として独り立ちしようという学生は希少です。ゼミ生の計算材料学に対する内発的動機は極めて低調です。内発的な動機を高め効率的な学習を促すために、計算結果の視覚化を工夫しています。その例として Monte Carlo simulations (図2) や結晶成長(図3)があります。でも、情報の学生さんにはもっとおいしい分野があり、外発的動機を工夫しなければ優秀な人材を集めるのはとても難しいでしょう。

内発的な動機を重視するなら、反対からのアプローチとして材料研究者に数値計算を教えるほうが楽そうです。これは社会人教育や企業技術者の研修会にあたります。このような教育においても、適切な視覚化や材料のモデリングが知識のキーとなりそうです。

参考文献

- [1] 西谷滋人, あたりあ, 46 (2007), pp.216-219.
- [2] S. R. Nishitani and T. Kaneko, J. Crystal Growth, 310 (2008), pp 1815-1818.
- [3] 西谷滋人, "固体物理の基礎 材料がわかる量子力学と熱統計力学", 森北出版 2006.
- [4] S. R. Nishitani, <http://ist.ksc.kwansei.ac.jp/~nishitani/Lectures/Maple/BottomLine0.html>.
- [5] S. R. Nishitani, <http://ist.ksc.kwansei.ac.jp/~nishitani/?LinuxEx>.

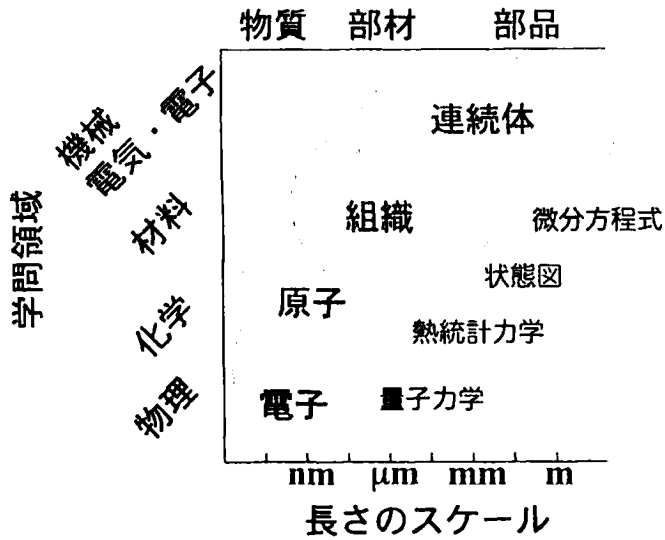


図1 マルチスケールシミュレーションの階層構造.

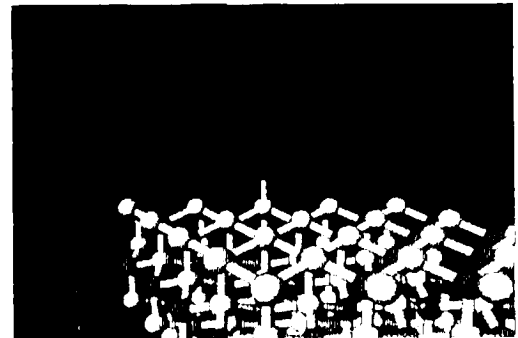
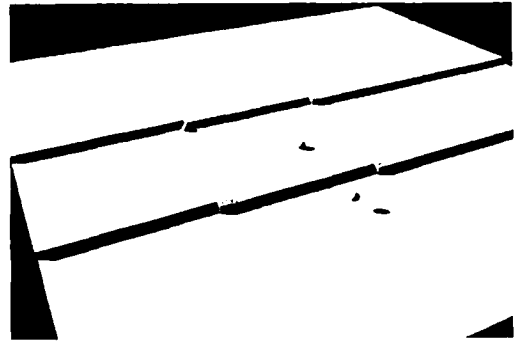


図3 結晶成長の視覚化.

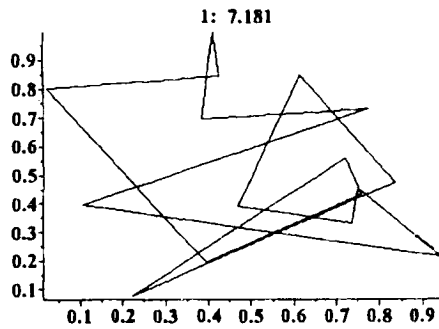
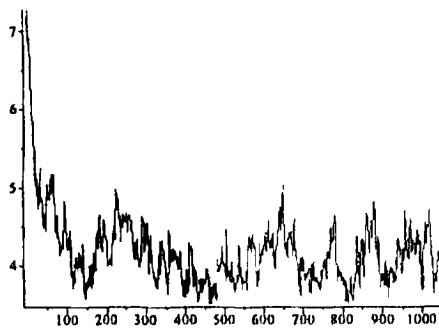


図2 視覚化したセールスマン問題の Monte Carlo simulations(あるいは simulated annealing).