

分子動力学法及び量子力学の理解のための Excel を用いた教材開発

○成島 和男¹、岩武 澄²、川上 侑作¹

¹宇部工業高等専門学校電気工学科 (〒755-8555 山口県宇部市常盤台 2-14-1)

²宇部工業高等専門学校専攻科生産システム専攻 (〒755-8555 山口県宇部市常盤台 2-14-1)

【緒言】

最近の電気産業界の進歩は、そのほとんど大半を材料の発展に負っているといっても過言ではない。スマートフォンや、それと比べると地味ではあるが電力ケーブルなど、材料の発展によって電器産業は、みごとに発展し、人々の生活を豊かにしてきた。

電気電子工学系の技術者は、材料の知識や技術、技術を開発する力が、今後、ますます必要となってきた。ところで、世にコンピュータが発達する前の社会における材料の開発は、実験が主体であった。乱暴な言い方をすると、材料を作り、その後破壊試験をする、といったプロセスを繰り返した開発が主体である。しかし、この方法は、経費がかかってしまう。従って、最近では、コンピュータによる分子シミュレーションを駆使した開発が盛んにおこなわれている。

以上のような理由で、電気電子工学系の高専の学生にも分子シミュレーションの知識が必要であると著者は強く感じている。著者は、現在、高専の電気工学科に所属し、将来の電気電子工学系の技術者になる学生を、教育する仕事についており、分子シミュレーションのごく初歩を授業で教えることが可能である。本稿ではその取り組みについて述べる。

【授業の概要・実践】

「光物性基礎論」という講義の中に、分子シミュレーションのごく初歩の話を組み込んだ。平成 26 年度は、前期に一コマ 90 分で 15 回の講義となる。この講義は、本校の専攻科生産システム専攻の学生が対象である。生産システム専攻は、本校本科の電気工学科、機械工学科等を卒業した学生が所属している。

「光物性基礎論」は、光と物質の相互作用を講義するための科目である。光には、電磁波と光子、2 個の側面があるが、光子と物質との相互作用には、光電効果、コンプトン効果、ルミネセンスがあげられる。このうち、光電効果とルミネセンスには、光電管や LED など、既に実用化されている素子が多数あり、講義にもこれらの構造や動作原理を詳しく話すことが可能である。しかし、コンプトン効果を実用化した素子は、これまでなく、どうしても講義内容が貧弱になってしまう。

コンプトン効果の講義内容を補うためにも、光子にオリゴマーに照射させ、コンプトン効果による相互作用と、光子照射後のオリゴマーの挙動を分子動力学法を用いて計算する授業（以下、分子動力学法とコンプトン効果に関する授業と呼ぶ）を作成した。この授業は、5 回程度行う。このうち、2 回程度は、コンプトン効果と分子シミュレーションに関する座学、残りの 3 回は、コンプトン効果と分子動力学法の計算を、実習形式で行った。この授業により、1) コンプトン効果の理解を学生に促し、さらに、[緒言] で述べたような、2) 分子シミュレーション、特に分子動力学法の初歩を学生に理解できる、といった効果が見込まれる。なお、光電効果、ルミネセンスと、光の波動としての性質は、他の 10 回程度で講義している。

分子動力学法とコンプトン効果に関する授業の受講対象は、先に述べたように電気系または機械系出身の学生であり、分子シミュレーション、分子動力学法という言葉は、これらの学生にとって、初めて聞く言葉である。そこで、この授業では、学生にとって、なじみがあり、平易で、かつ、分子動力学法のような繰り返し計算に適している、excel を用いて行った。この excel を用いて、物理現象、化学現象を説明するための書籍や授業における試みは、既に存在している [1][2]。

分子動力学法とコンプトン効果に関する授業で用いた物理モデルは、図 1 に示したとおりである。図 1 中の白丸と黒線は、オリゴマーを示している。白丸は、 CH_2 からなる原子団を表しており、線は、原子団同士の結合を表す。黒丸は、光子を表し、この光子を一番左側の原子団に当てる。コンプトン効果により、一番左側の原子団は、光子衝突直後に移動する。その後のオリゴマーの動きを分子動力学法を用いて追跡していくこととなる。

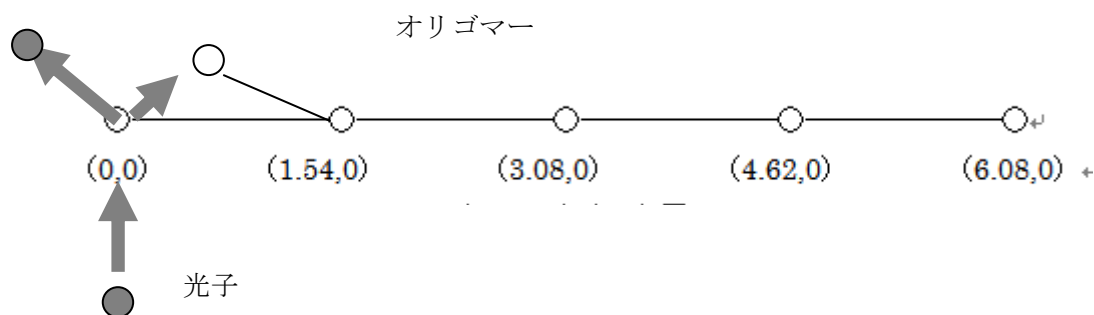


図1 分子動力学法とコンプトン効果に関する授業で用いたモデル図

電気材料に限っていえば、半導体や金属が、従来、重要な材料であった。しかし、近年、盛んに研究されている有機半導体太陽電池では導電性高分子が用いられているものもあり[3]、高分子材料が注目されている。また、光照射を用いた新たな素子としてフォトクロミック素子があるが、これも高分子を用いている[4]。このように高分子材料は、金属や半導体に並び、重要な材料になりつつある。高分子は分子量が多いため、図1のようなモデルでは都合が悪い。そこで、分子数が少なく、かつ、ほぼ同等の特性を持つ、オリゴマーを本授業では用いた。

この授業で用いるためのテキストも、著者と共同研究者の岩武が作成した。作成したテキストは、27 ページにわたるものであり、excel を用いた計算方法を中心に詳細に記述されている。分子動力学法とコンプトン効果に関する授業では、3回の excel を用いた実習が行われるが、それぞれ、授業内容の理解を促すために、レポートを課している。

【今後と課題と発展】

平成 26 年度は、分子動力学法とコンプトン効果に関する授業を実践した初めての年度であった。授業後に学生に感想を求めたところ、

- ・抽象的な内容であるコンプトン効果が、実習を行うことでよく理解できた
- ・シミュレーションの意義がよくわかった。

といった、意見があり、この授業で見込まれる効果（授業の目的）はある程度、達成できたものと思われる。しかし、一方で以下のような助言が、受講した学生からあった。

- ・計算結果を視覚に訴えたほうがよい。
- ・プログラミングをした方がよい。

プログラミングに関しては、講義時間と、講義全体のバランスにから、現在、早急に改善するのは難しい。「計算結果を視覚に訴えたほうがよい」という、助言については、今後、計算結果を動画にして、受講する学生に再生することを考えている。今年度中にこの動画は開発する予定である。今回、オリゴマー中の原子団の数は、5 個と少ないが、動画を再生することで、100 個程度の原子団の計算結果を再生できると思われる。

これまで、古典物理学であるニュートン力学をもちいた分子動力学法における授業展開を述べてきたが、これは量子力学にも応用可能であり、これまで、取り組んできた。これは確立微分方程式を用いた方法であり、自由粒子の運動は、確立微分法方程式は、分子動力学法で用いるニュートン力学に量子揺らぎを加えたものとなっている。このため、excel で容易に計算できる。さらに、トンネル効果についても計算できることがわかった。トンネル効果は、高専生、大学の学部生にも理解しにくいものであるが、excel を用いれば、容易に理解できる可能性があり、今後もテキストを開発する予定である。

参考文献

- [1] 吉村忠与志 監修、吉村 三智頼 著、「Excel で電磁気学の解法がわかる本」秀和システム、2009 年
- [2] 吉村季織 他、日本コンピュータ化学会 2011 春季年会 講演予稿集、p.39
- [3] 高分子学会 編、「有機薄膜太陽電池」、エヌ。ティー・エス、2010 年
- [4] 日本化学会 編、「光が活躍する」大日本図書、1998 年