

ラットリングの計算機シミュレーション

高倉隼人（新潟県立高田高等学校2年）

大野義章、柳瀬陽一、奥西巧一

◇研究の目的・意義

「ラットリング (rattling)」と呼ばれる物質がある。これは大きな原子で構成される分子の籠の中を小さな陽イオンが動き回っている物質の総称である。この陽イオンは周囲の原子からのファンデルワールス力に強く影響され、通常の原子とは異なる非調和的な運動を見せる。これによりラットリングは低温中でも大きな振幅で運動を続けるため、比熱や電気伝導の性質において特徴的な性質を持つ。

ラットリングは電気伝導性が高い反面、熱伝導率は極めて低いことで知られ、その特性は熱電効果による温度差発電を行う上で極めて有効な熱電材料になると期待されている。また、近年の研究ではラットリングが超伝導を誘起することも明らかになった。しかしながら、その特性についてはまだ解明されていない部分が多々あり、今後の社会で実用的な材料として用いるためには、どのようなラットリングが有効であるのかわからない。

そこで、私の研究では様々な非調和振動（ラットリングの運動）の条件を仮定し、コンピュータシミュレーションにより、仮定した条件での物質の特性を求めている。こうして物質の特性を可視化することで、実用的な材料として使用できる特性を持つ物質がどのような物質であるか予測できる。これにより、ラットリングの特性を生かした実用材料の実現に向けて貢献できると考える。

例えば、より電気伝導性に優れ熱伝導率が低い条件を調べることで、思いがけない物質が温度差発電に有効であるとわかり、新たな電力資源が発掘できる可能性がある。また、常温でも超伝導状態になる特性を導き、その条件にあてはまる物質を探せば、現在送電により無駄になっている大量の電力を使用できるようになる可能性もある。

このような理想的な成果を出すのは困難であるにせよ、様々な条件による物質の特性を明らかにすることで、社会における材料開発に役立ちたいと思い、この研究を進めている。

◇研究の方法・プロセス

代表的なコンピュータ言語であるC言語を用いてプログラムを記述し、以下のように計算を行う。

ニュートンの運動方程式 $F = m \cdot \frac{d^2x}{dt^2}$ において、条件として粒子に加わる力 $F = -kx + bx^2 + cx^3 \dots$ を与える。これを4次のルンゲ=クッタ法と呼ばれる手法で計算すると、粒子の変位と運動量が得られる。これを平面上にグラフ化したものが位相空間で、グラフ作成ソフトを用いると、位相空間に現れる軌道（曲線）の形から粒子の運動状態がわかる。例えばラットリングではない通常の物質（調和振動子）の理論値を求めると、グラフは完全な円になる。

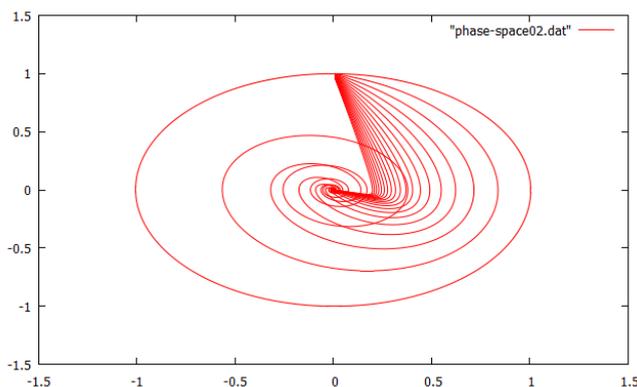


図1：様々な条件を仮定した位相空間の例
一番外側が調和振動子で、その他は調和振動子の運動に一定の減衰を与えたもの。
ラットリングでは、この円が歪む。

また、この運動量 p と変位 q から、原子のエネルギー E は $E = \frac{1}{2}(p^2 + q^2 + \frac{1}{2}bq^4)$ などのように表される。これを E で2階積分すると状態密度 $\Omega(E)$ が求まり、その対数とボルツマン定数の積がエントロピー $k_B \log_e \Omega(E)$ である。このエントロピーを計算すると、比熱や低温下での温度特性など、様々な特性が求められる。例えば比熱を計算するには、エントロピーをエネルギーで微分し温度を求め、それをエネルギーで微分して逆数を取ればよい。

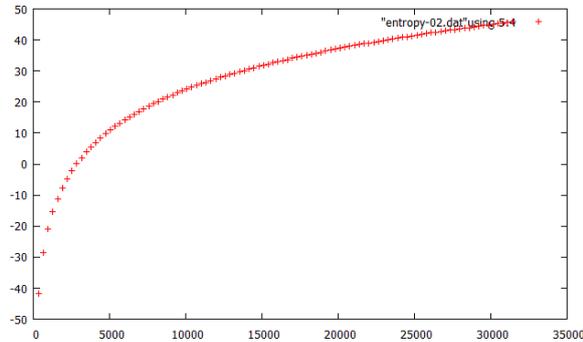


図2：調和振動子20個のエントロピー
横軸がエネルギー、縦軸がエントロピー

なお、この研究では高校で履修しない数学やコンピュータの知識が要求されるため、担当の先生と新潟大学の大学院生から計算方法などを教えていただく等、多大な協力をいただいた。

◇結果と考察

この研究はまだ始まって日が浅く、これまではずっと計算演習を繰り返してきた。ようやく非調和振動のエントロピーを算出できる段階にたどり着いたので、本格的な非調和振動子の計算はちょうどこれから始めるところである。従ってまだ何も成果と呼べるものは出ていないが、全国受講生発表会ではその途中経過を発表させていただきたい。

あえて成果を挙げるならば、コンピュータを用いた計算方法を習得し、大学院の雰囲気を知り、研究者を目指す際の将来像が具体化されたことが大きな成果である。

◇今後の展望

前述の通り、本格的な研究はこれからであるため、今後の研究内容は得られた結果により多少左右される可能性がある。現段階では、まずはきちんとした統計を取り研究の目的における結果を求めると同時に、さらに高度な計算に挑戦していきたい。例えば、現段階では計算を簡素化するために古典力学の運動方程式による計算を行っているが、将来的には量子力学の考えを取り入れ、ラットリングの特性をシュレーディンガー方程式からアプローチすることなどにチャレンジしてみたい。

◇主要参考文献

- <http://www.jps.or.jp/books/jpsjselectframe/2009/files/2009-06-1.pdf>
「がらがら」と鳴る超伝導
日本物理学会（情報提供：平井善二・山浦淳一（東大物性研））
- http://www.spring8.or.jp/ja/news_publications/press_release/2012/120420
かご構造の中の原子の運動「ラットリング」と熱電特性との関連性を可視化 —原子の運動を利用する発電材料の開発に新たな道—
公益財団法人 高輝度光科学研究センター／独立行政法人 理化学研究所／国立大学法人 東北大学 WPI-AIMR／国立大学法人 島根大学

<講座担当教員のコメント>

高倉君は非常に学習意欲が高く、積極的な姿勢で研究に取り組んでいます。現状ではまだラットリングを取り扱う段階に達していませんが、それに必要な予備的計算がほぼ終了しつつあります。高倉君であれば、今後ラットリングの興味深い性質を自ら発見することができると思います。