



アドバンスソフト技術セミナー 原子力における流体解析の現状と当社の取組み

中性子による物質の構造解析

アドバンスソフト株式会社
技術第4部 主事研究員
森田 秀利

5.

背景

- 規則構造をもつ物質

結晶

- 複雑構造

不規則構造

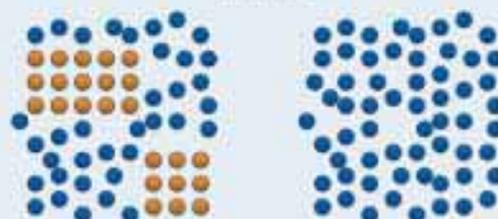
- アモルファス

規則構造と不規則構造の混在

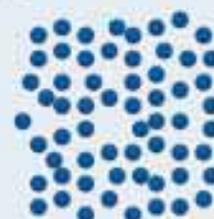
ミクロの構造を知ることによって材料開発に応用



(規則構造)



(規則構造と不規則構造の混在)



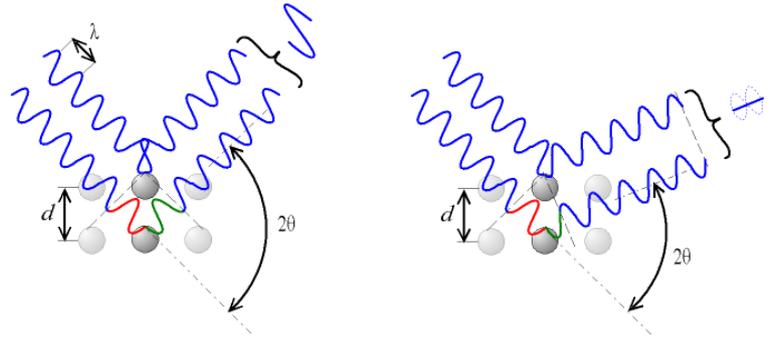
(不規則構造)



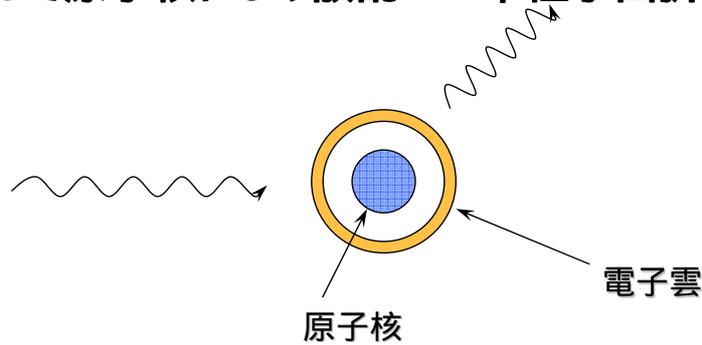
X線回折、中性子回折法による構造解析

■ ブラッグの回折条件

$$2d\sin\theta = n$$



- X線を入射して電子により散乱： X線回折
- 中性子を入射して原子核により散乱： 中性子回折



実験施設

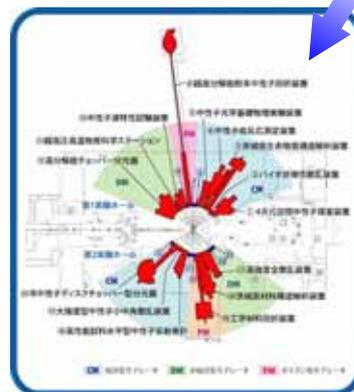
- X線回折実験
Spring-8
兵庫県播磨

<http://www.spring8.or.jp/>

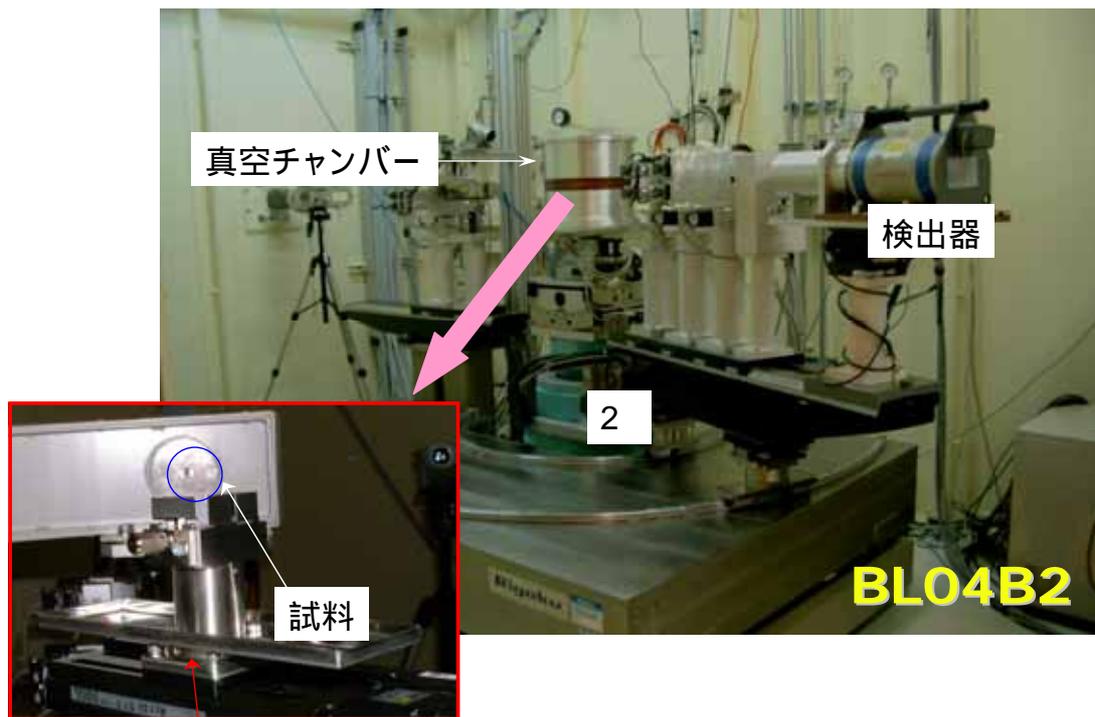


- 中性子回折実験
J-PARC
茨城県東海

<http://j-parc.jp/>



Spring8実験装置[1]

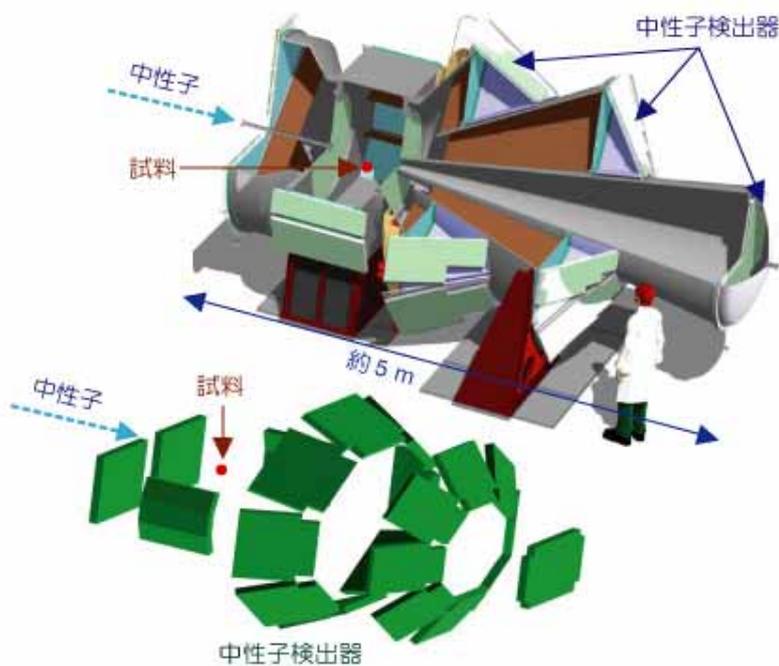


試料ホルダー

[1] S. Kohara et al., *Nucl. Instr. and Meth. A* **467-468**, 1030 (2002).;
S. Kohara et al., *J. Phys.: Cond. Matter* **19**, 506101 (2007).

5

中性子回折実験装置(NOVA) [2]



NOVAの構造概念と中性子検出器の立体配置 (最大約14m²)

[2] 水素貯蔵材料先端基盤研究事業 HYDRO STAR NEWS Vol.2 2008. 秋



6

X線回折と中性子回折の特徴

■ X線回折

散乱振幅は原子番号に比例

H, Li, C, Oなどの軽元素は重元素との測定

■ 中性子回折

電氣的に中性なのでクーロン力を受けない

原子番号とは無関係

H, Li, C, Oなどの軽元素も測定可能

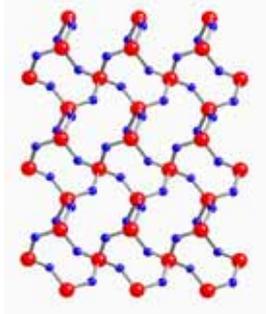


水素吸蔵合金中の水素の配置を研究に有利

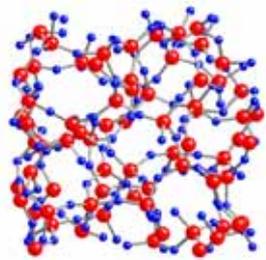


7

非晶質物質の乱れた構造

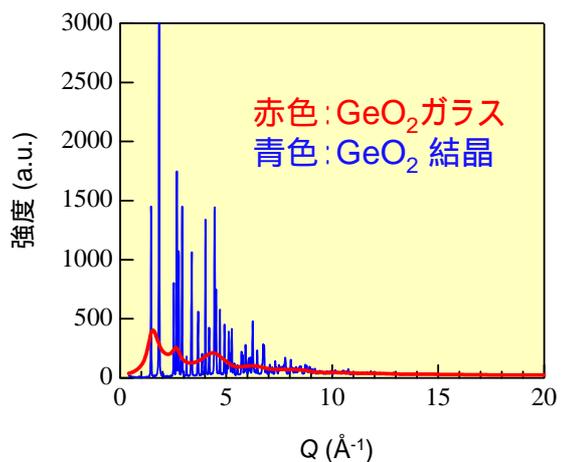


原子が規則正しく
配列している



原子の配置は無秩序!?

X線回折パターン



$$Q = \frac{4\pi \sin\theta}{\lambda}$$

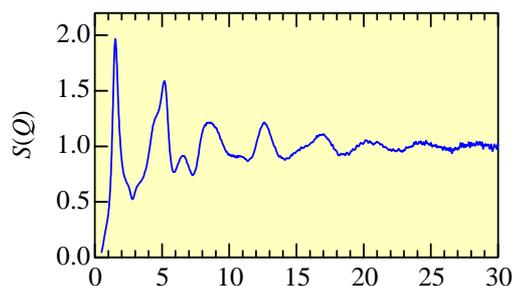
Q: 波数ベクトル
2θ: 回折角
λ: X線の波長



8

データ解析

実験データから構造因子 $S(Q)$ を求める



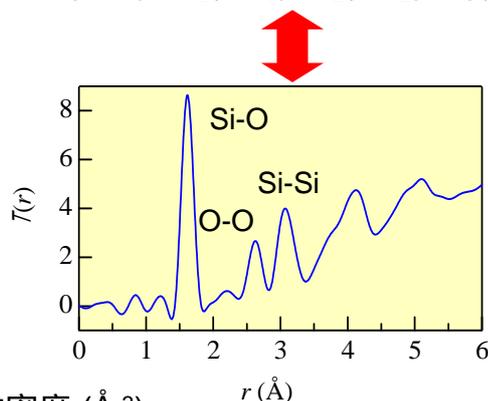
構造因子 $S(Q)$ をフーリエ変換することにより
全相関関数 $T(r)$ が得られる

$$T(r) = 4\pi\rho r + \frac{2}{\pi} \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} Q[S(Q) - 1] \sin(Qr) dQ$$

$$Q = \frac{4\pi \sin\theta}{\lambda}$$

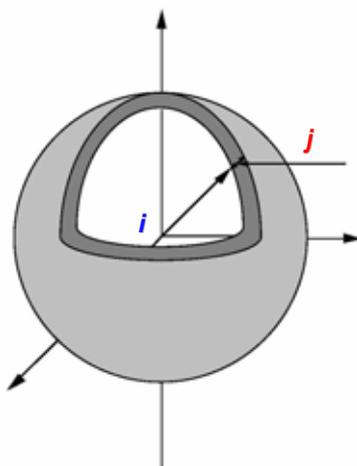
Q: 波数ベクトル
2 θ : 回折角
 λ : X線の波長

ρ : 原子数密度 (\AA^{-3})



2体分布関数 $g(r)$

- 2体分布関数 $g(r)$ は、あるひとつの原子が原点にあるときに、距離 r だけ離れたところにもうひとつの原子を見いだす確率

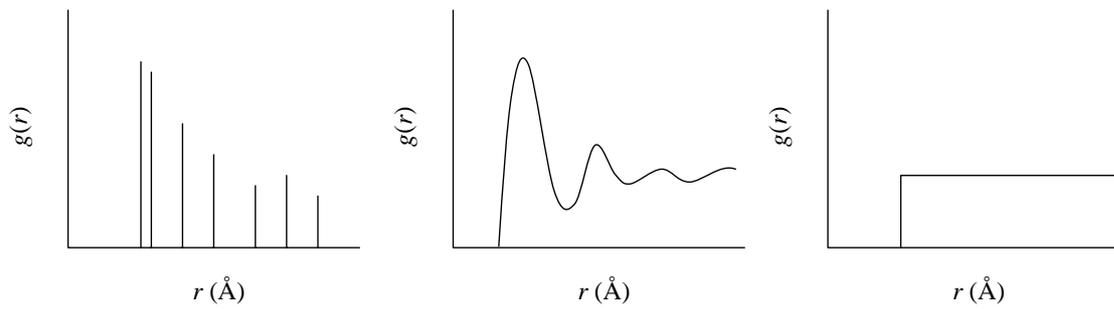


全相関関数 $T(r) = 4\pi\rho r g(r)$

ρ : 原子数密度



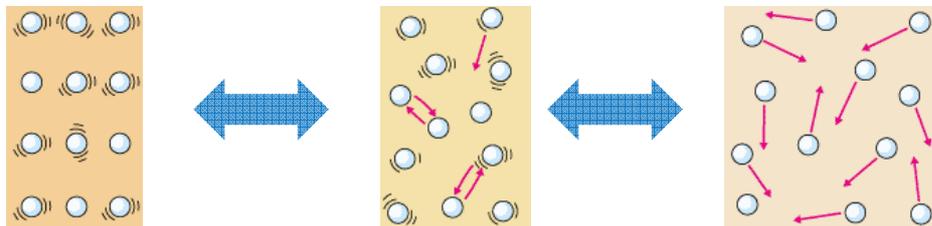
構造変化による2体分布関数 $g(r)$



結晶

液体

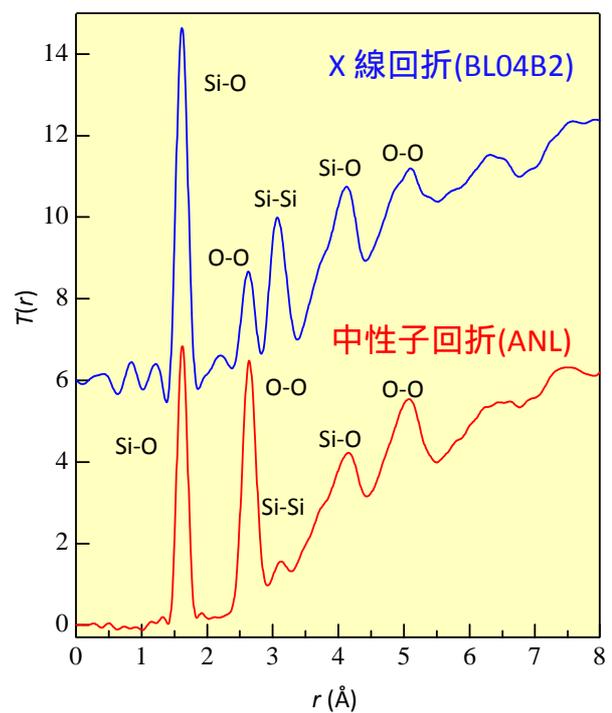
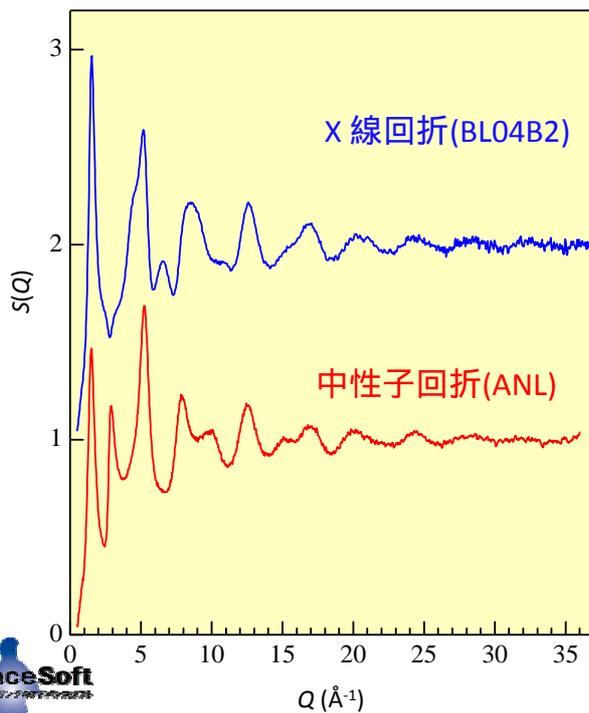
気体



石英ガラス(SiO_2)の構造因子、全相関関数

構造因子 $S(Q)$

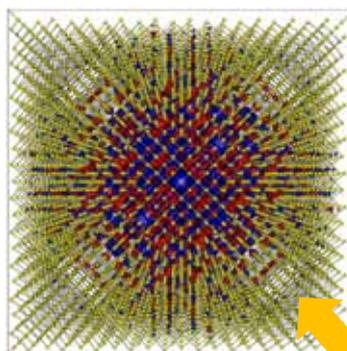
全相関関数 $T(r)$



コンピュータシミュレーション

- **結晶構造、アモルファス**

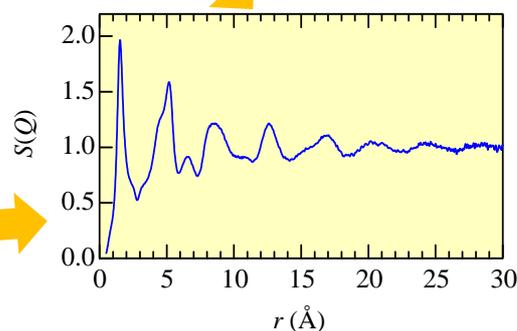
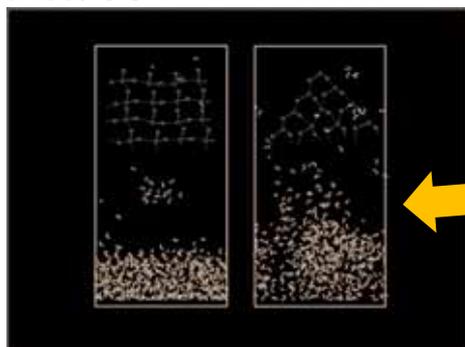
第一原理計算
Advance/PHASE



ヒ素をドーブしたシリコン結晶(Si₇₉₉₉As)
(地球シミュレータによる計算)

- **有機分子**

分子動力学法
Advance/OCTA



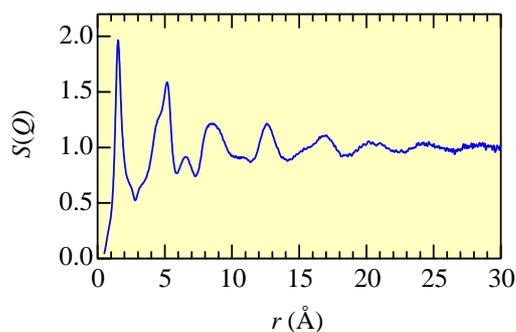
13

コンピュータシミュレーション(2)

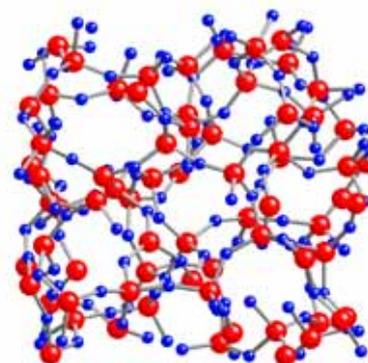
- **実験結果から3次元構造を再現**



- **逆モンテカルロ法(RMC: Reverse Monte Carlo)**



RMC
←
MD
FPMD



実験データを再現するように原子数密度を満たしたシミュレーションボックス内の粒子を乱数で動かす

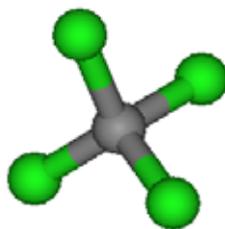


14

RMC法

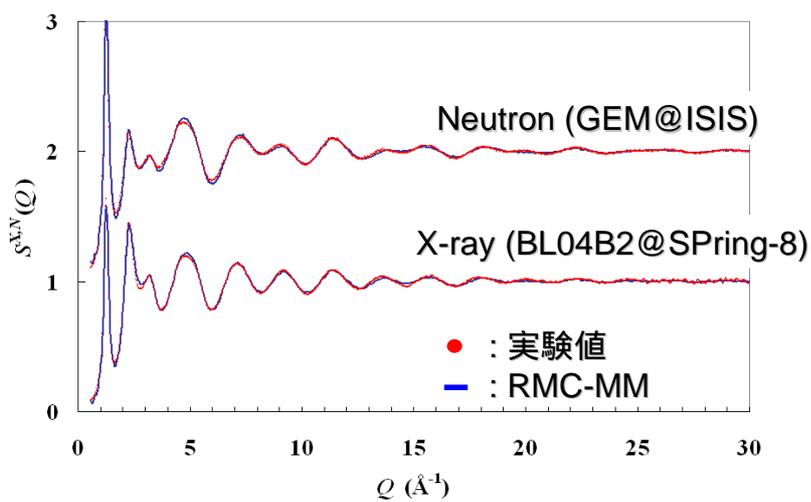
- RMCA Original Program
 - 角度
 - 配位数
 - RMC++
 - RMC-MM
- 分子にも対応できるように改良

四塩化炭素

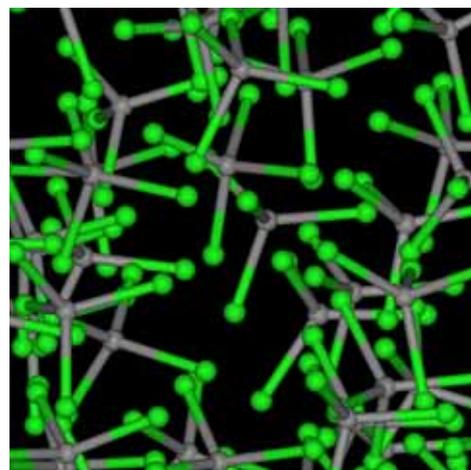


15

計算結果



スナップショット



16

まとめ

- 水素吸蔵合金、Liイオン電池などこれからのエネルギーに関与する材料を解析可能。
- シミュレーションを組み合わせることでさらに材料開発が進歩する。



17

AdvanceSoft

「デジタルエンジニアリングのアドバンスソフト」



18