

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 28 年 5 月 21 日現在

機関番号：51101

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2013～2015

課題番号：25560092

研究課題名(和文) 分子軌道法と分子動力学法を活用した新たな教材と教育法の開発

研究課題名(英文) Development of New Teaching Material and Method Using Molecular Orbital Method and Molecular Dynamics Method

研究代表者

松橋 信明 (MATSUHASHI, Nobuaki)

八戸工業高等専門学校・その他部局等・教授

研究者番号：40199831

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：高専電子工学系専門教育において、分子軌道法と分子動力学法を活用した新たな教材と教育法の開発を行った。卒業研究テーマとして取り組み、様々な電子材料に適用して、有用な成果をあげることができた。また、フリーソフトウェアを活用して、汎用性が高く、多人数授業においても利用可能な教材と教育法の開発を行った。

それらは、カラフルで美しく視覚に訴え、直感的な理解を実現でき、学生の興味を誘発する電子材料教材である。そして、深く広く自学自習でき、創造性を育むアクティブラーニング教育法である。

研究成果の概要(英文)：In professional education of electronics system in college of technology, it has been developed the new teaching materials and method of education that was applied by the molecular orbital method and the molecular dynamics method. Also efforts as a graduation research theme, meanwhile applied to various electronic materials, it has been possible to obtain a useful result. In addition, utilizing the license free and no fee software, also highly rsatility, it has been developed the available teaching materials and moreover teaching methods among in many people as multi-user class-room. On top of that, they have been appealed as beautiful and colorful pictorial situations. It can be realized intuitive understanding, which the electronic material and teaching one is causing the interest for the students. In conclusion, it comes by teaching self-study widely and deeply, which is active learning teaching methods to bring up creativity.

研究分野：電子材料物性

キーワード：分子軌道法 分子動力学法 新教材開発 新教育法開発

### 1. 研究開始当初の背景

高専において、電子系専門教育は3学年次頃から導入し、電子の性質を理解することは非常に重要であるが、学齡的に量子力学や量子化学を踏まえた理論的な内容を理解させるのは困難である。また、電子物性や電子材料に関する授業においても、イメージを捉え難く、また分子構造等の化学に関する学際的な知識が必要である。

そこで、上記問題を解決するために、分子軌道法と分子動力学法を活用した新たな教材と教育法の開発を着想した。

### 2. 研究の目的

本研究は、学齡的に理論的な理解が難しい高専電子系専門教育において、分子軌道計算法と分子動力学法を活用して、学生の興味を誘発しながら視覚的に電子材料の構造や物性を理解し、創造性を育む新たな教材と教育法の開発を目的とする。

以下に具体的な研究目的を示す。

- (1) 市販ソフトを用いて高専電子系専門教育への適用を検討し、新教材の開発を行う。
- (2) 新電子材料開発を目指した創造性を育む新教育法の開発を行う。
- (3) 高専電子系専門教育に最適なオリジナルソフトの開発を行う。

### 3. 研究の方法

最初に市販の分子軌道法及び分子動力学法のソフトを活用して、電子工学や電子材料に関する科目への導入を検討し、教材及び教育法を開発する。そして実際の授業で活用し、学習効果を確認しながら、改善を行う。さらに開発した新しい教材及び教育法を活用してコンピュータシミュレーションにより新たな機能性電子材料の分子集合体を設計する創造的教育に取り組む。そして、得られた研究成果を実際の授業に適用するべく、多数の学生を対象に安価で最適なオリジナルソフトの開発を目指す。

本研究目的を達成するために、函館高専で電子系科目を担当し、分子動力学法に詳しい山田氏と研究組織を構成し、積極的に研究を推進して行く。

### 4. 研究成果

高専電子系専門教育において、分子軌道法と分子動力学法を活用した新たな教材と教育法の開発を行った。卒業研究テーマとして取り組み、様々な電子材料に適用して、有用な成果をあげることができた。また、フリーソフトウェアを活用して、汎用性が高く、多人数授業においても利用可能な教材と教育法の開発を行った。

それらは、カラフルで美しく視覚に訴え、直感的な理解を実現でき、学生の興味を誘発する電子材料教材である。そして、深く広く自学自習でき、創造性を育むアクティブラーニング教育法である。

### (1) 分子軌道法による新教材開発

#### ① ダイヤモンド構造

分子軌道計算により、共有結合を有する4価元素である炭素 C、シリコン Si、ゲルマニウム Ge のダイヤモンド構造について研究した。構造最適化を行い、原子間隔及び結合角を求めた結果、表 1 のようになり、いずれも公表されている値とほぼ同じ値になった。

表 1 原子間隔及び結合角

結晶	原子間隔[Å]		結合角[°]	
	測定値	公表値	測定値	正四面体角
C	1.541	1.54	109.5	109.5
Si	2.206	2.35	109.7	
Ge	2.460	2.43	109.6	

原子間隔は  $C \ll Si < Ge$  となり、公表値と大小関係が一致したのみならず、公表値とかなり近い値となったことから、構造最適化の計算精度の高さが評価できる。また、Si と Ge の原子間隔は近い値となっているが、C は Si や Ge と比較して原子間隔が狭く、原子間の結合が強いことが予想され、エネルギーギャップが大きいことが予想される。実際に公表されているダイヤモンド構造結晶のエネルギーギャップは、C が 5.3[eV] と大きく、Si と Ge がそれぞれ 1.12[eV]、0.76[eV] と小さくなっている。結合角は、結晶が理想的な正四面体を構成していれば 109.5[°] となり、いずれもかなり近い値となっているが、Si と Ge については構造最適化の結果 0.1~0.2[°] のわずかなずれを生じ、完全な正四面体構造となっていないことがわかる。

他に、双極子モーメント、結合次数、最高被占有軌道などの電子物性に関する重要なパラメータを計算することができた。また、電子密度分布や分子軌道をグラフィック表示することができた。

分子軌道法を導入することによって、それぞれの分子構造や様々な物性パラメータを定量的に比較することにより、具体的な特性の違いから電気伝導性の違いを理解することができた。

#### ② GaAs のバンドギャップの推定

太陽光発電の電子材料として注目されているガリウムヒ素 GaAs に着目し、そのバンドギャップを分子軌道法により推定する研究に取り組んだ。GaAs は閃亜鉛鉱型の結晶構造をとる化合物で、III-V 族半導体である。図 1 に分子軌道法を用いて再現した閃亜鉛鉱型 GaAs の分子モデルを示す。

バンド構造における電子に占有された最も高いエネルギーバンド(価電子帯)の頂上(HOMO)から、最も低い空のバンド(伝導帯)の底(LUMO)までの間のエネルギー差がバン

ドギャップである。約 50 通りのパラメータの組み合わせで様々な計算を実行した結果、HOMO が  $-7.344$  [eV]、LUMO が  $-4.431$  [eV] で、バンドギャップとして  $2.903$  [eV] が得られた。

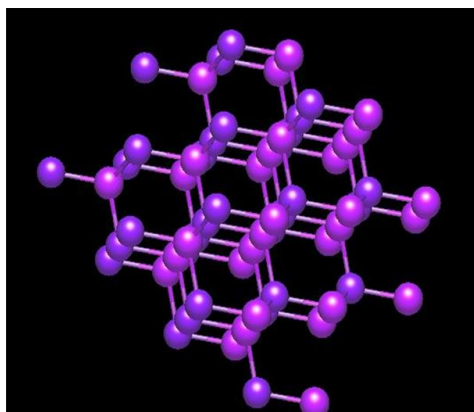


図 1 閃亜鉛鉱型 GaAs の分子モデル

GaAs のバンドギャップの推定はできたが、GaAs の理想バンドギャップである  $1.43$  [eV] とかなりの差を生じる結果となり、計算手法が原因と考えられる。経験的手法は計算時間は比較的短い、使用するパラメータに大きく左右される上、計算を多く省いているため信頼性が問題となる。一方、第一原理計算は信頼性は高いが、膨大な量の計算を実行するため時間がかかる。そして厳密な計算を実行できるが、実際に生じる化学反応について再現性に疑問が残る。いずれの手法を用いても、電子状態を計算によって求める場合は、ある程度の誤差が生じてしまう。

電子物性や電子材料の分野において、バンドギャップは頻繁に使われる重要なキーワードであるが、その値を推定することは通常の授業では困難である。そのようなことから、分子軌道計算によるバンドギャップの推定は教育的効果が大きく、教材として有効である。

### ③ その他の分子軌道法による新教材開発

上記の他に、高専本科 5 年生の卒業研究において以下の 3 つの研究テーマを組み込み、分子軌道法による教材開発を行い、研究成果をあげることができた。

有機 EL に着目し、電子輸送材料における窒素の役割やいくつかの低分子電子輸送材料におけるエネルギーギャップを計算して構造評価を行った。そして、炭素原子数を変えたフラレンを構築し、バンドギャップや原子間距離について検討した。また、液晶が有する誘電率異方性や屈折率異方性に着目し、特に強誘電性液晶において分極率や双極子モーメントから異方性を求める取り組みを行った。

## (2) 分子動力学法による新教材開発

### ① アモルファス構造

分子動力学計算により、Si のアモルファス

構造を作成し、構造や物性について研究した。液体急冷法を用い、アモルファス状態を再現することができた。

図 2 に、シミュレーションによって得られた距離  $r$  における動径分布関数  $g(r)$  を示す。第 2 ピークと第 3 ピークが統合され、中距離の秩序がなくなり、不規則な構造を有するアモルファス構造の特性が顕著に表れている。

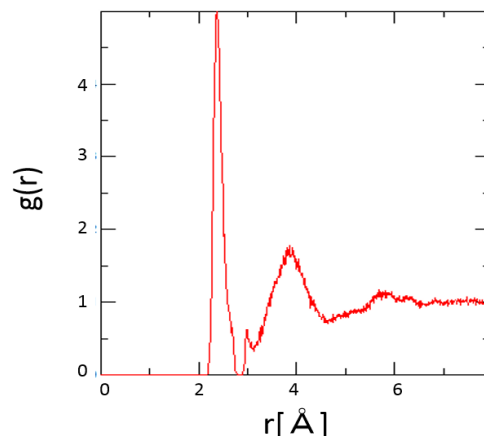


図 2 アモルファス Si の動径分布関数

分子動力学シミュレーションにより、非常に簡単に短時間でアモルファス構造を再現でき、状態変化の様子をアニメーションで再現することによって材料を用いた実験では得られない情報を獲得できた。

### ② Ar のクラスター形成

材料加工の分野において注目されているクラスターに着目し、分子動力学法によりアルゴン Ar のクラスター形成を行い、構造や物性について研究した。液体急冷法を用い、クラスターを形成することができた。

図 3 に初期状態とシミュレーション後の分子状態を示す。原子どうしが結合し合い、クラスターが形成され、いくつかの塊ができているのが確認できる。

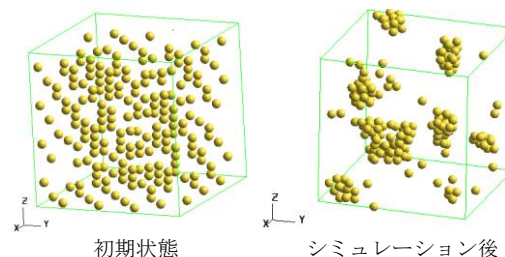


図 3 Ar のクラスター形成

動径分布関数は距離が 0 に近いところでは中心となった原子が存在するのでそれ以上周囲の原子は近づけず、排除体積効果により 0 となり、中心の原子に隣り合った原子は中心の原子の引力を受けるため原子の存在確率は高くなり、およそ  $3.7$  [Å] でピークが現れた。

中心原子から遠ざかるに連れて構造の乱れが影響するため密度の変化が見られなくなり、動径分布関数は一定の値に近づくものと考えられる。アモルファス構造と同じような特性が得られたが、アモルファスは非結晶で非常に密な構造で結合が強いのに対し、Ar クラスタは正 20 面体のある程度規則的な構造で、結合はアモルファスほど強くないと考えられる。

分子動力学シミュレーションにより、容易にクラスターを形成することができ、その時間変化に伴う様々な特性や構造の変化を理解することができた。

### ③ その他の分子動力学法による新教材開発

上記の他に、高専本科 5 年生の卒業研究において以下の 3 つの研究テーマを組み込み、分子動力学法による教材開発を行い、研究成果をあげることができた。

Ni, Al, Ni-Al 合金のアモルファス構造に着目し、動径分布関数や多面体解析により 3 種類の金属の構造解析を行った。そして、太陽電池の材料として注目されている水素化アモルファスシリコンに着目し、水素を含まないアモルファスシリコンと物性について比較・検討した。また、バイオエレクトロニクス分野における生体材料に着目し、両界面が水の脂質二分子膜を構築して温度変化に対する構造変化を検討した。

### (3) 3D OpenGL ライブラリによる新教材開発

#### ① 3D OpenGL の活用

OpenGL コンピュータライブラリーは、様々なコンピュータシステムに無料で提供されている。このグラフィックライブラリは材料分野の教材開発に最適であり、ユーザがマウス等で描画中の映像を直接操作できる仕組みが備わっている。この無料でありながら強力な操作性を有する特徴を用いて、3D のデータを本研究で採用し、教材として発展させた。具体的には、電子材料のペロブスカイト構造のチタン酸バリウム材料が強誘電体であることを、3D のデータを時間と共に変化させ、かつ視点位置と拡大率を自由に変化させることができる 4D 型データとして作成した。このデータは MGF と呼ばれるもので、無料で公開されている 3D AVS PLAYER をビューアとして展開することでデータを 4D 形式で閲覧できる。

図 4 (a)~(c)にチタン酸バリウム材料の 3D OpenGL 画像を、常誘電体、強誘電体、および Ti 原子位置付近の拡大比較図として示す。視点位置と拡大率を自由に変化させ、常誘電体と強誘電体のそれぞれの原子位置の違いを、視覚的に確認することが可能になる新教材を開発することができた。

#### ② 3D AVS PLAYRE の活用

教材として作成したデータは MGF 形式の 3D の静止画のみならず、それらを連続させて動画の情報映を映画のコマ送り方式で盛り込むこ

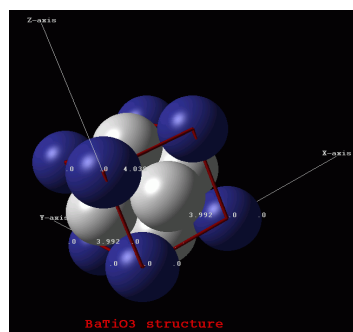


図 4 (a) チタン酸バリウムの常誘電体構造

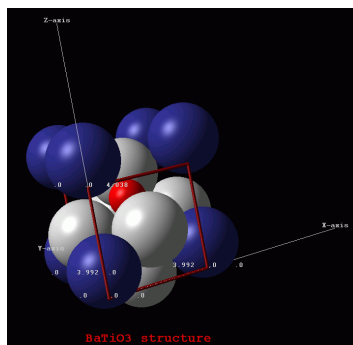


図 4 (b) チタン酸バリウムの強誘電体構造

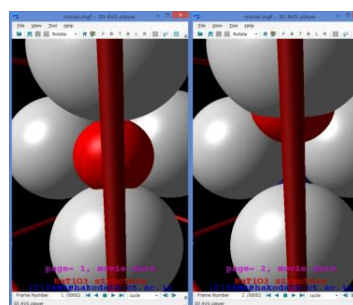


図 4 (c) チタン酸バリウムの Ti 原子位置付近を拡大した比較図

とができる。今回、視点位置と拡大率を自由に变化させながら、常誘電体と強誘電体の違いを、自動再生動画形式でユーザに情報提供できることに成功した。

この 3D のデータを時間と共に変化させ、かつ視点位置と拡大率を自由に変化させることができる 4D 型データ作成には、独自に開発したプログラミング手法により短時間で合成できるスクリプト言語を採用した。これらの技法を組み合わせ、ユーザの環境に合わせた教材を提供できることを確認した。

### (4) Java 数値計算出力ツールの周辺開発

#### ① CSV ファイル形式への出力

21 年の歴史を有する JAVA 言語は、通常は数値計算に用いられることは少ないが、開発しやすい言語仕様、およびセキュリティ定義を調整することで、数値計算向けの CSV ファイル形式への出力も可能になる。何よりも、JAVA 言語内部に備わったグラフィック関数に

よって高速な 3D 描画機能を活かし、計算途中の材料の構造を確認しながら CSV ファイルとしても出力が可能であり、後述する他のアプリケーション等と強力な連携が取れることが最大の利点である。また JAVA 言語は無料で配布されている点も見逃せない。

図 5 に Java 数値計算出力ツールによって計算した人工格子・多層膜の構造画像を示す。視覚的に訴えるツール（例えば前述の 3D AVS PLAYER や後述の GP.exe）に Java 数値計算結果を展開することで新教材システム群をこのたび開発することができた。

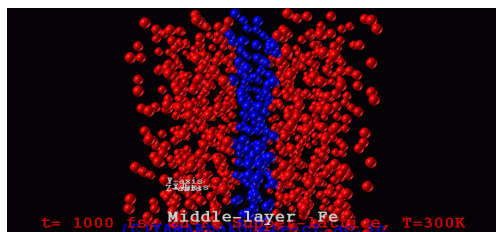


図 5 チタン酸バリウム中の Ti 原子位置付近を拡大した比較図

## ② MS-DOS エミュレータの活用

通常、MS-Windows、MacOS 及び Android では、高速に動作し、無料で配布されていた数値処理アプリケーションの MS-DOS 型実行ファイルは動作できない。しかし、最新のエミュレータ技術を使うことで、前述ほぼ全ての OS で MS-DOS アプリケーションを動作することが可能になり、本研究では一連の教材開発にともない、最高精細度のポストスクリプト・PDF ファイルの画像作成環境を提供する GP.exe を教材環境に組み込むことができた。

図 6 (a) に GP.exe を Android 上で動作させ材料固有の物理定数である自己拡散係数のビックデータを数値計算出力として描画した画像及び図 6 (b) にその結果をポストスクリプト・PDF ファイルとした最精細な描画ツールとして使用した結果を示す。このように無料で展開できる GP.exe を新教材システム群に取り入れることができ、他の OS でもほぼ同様の操作が可能であり、教材環境に柔軟に対応できる特徴を有する。

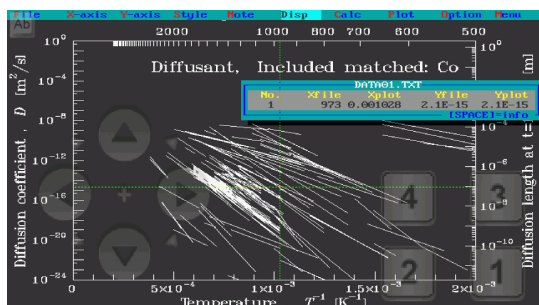


図 6 (a) 例として Android 上で自己拡散係数のビックデータを数値計算出力として描画したツールの描画画像

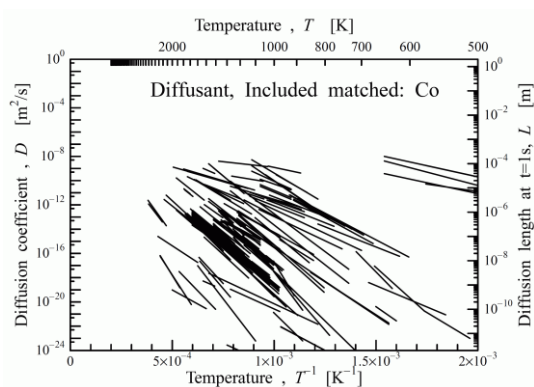


図 6 (b) 自己拡散係数のビックデータを PDF 出力した高精細度画像の例

## (5) まとめ

本研究により、高専電子系専門教育に量子力学や量子化学の高等で学際的な予備知識を導入することなく、パソコンを用いて視覚的に電子材料の構造や物性を理解させることができる。さらには、新機能性電子材料開発等の創造性の育成や、高専電子系専門教育に最適なオリジナルソフトの開発を実現した。したがって本研究は、専門教育の学際的な問題や学際的な問題を気にせずに、容易な方法で、しかも学生の興味を誘起できることから、非常に高い学習効果が期待できる。また、新機能性電子材料開発を目指した創造教育を実現できる。以上のことから、本研究の意義は多大である。

今後は、本研究を一層推進し、3Dプリンタによる分子計算のマテリアライゼーション（物質化）を行い、学生の興味を誘起しながら視覚的に電子材料の構造や物性を理解し、創造性を育む新たな教材と教育法の開発を行う予定である。なお、平成 28~32 年度の 5 年間、科学研究費助成事業（研究種目：基盤研究 (C) (一般)、研究番号：16K00981、研究課題名：3Dプリンタによる分子計算のマテリアライゼーション—新教材・教育法の開発—）の助成を受けることが決定しており、上記助成を受けながら積極的に研究を推進して行く予定である。

## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 8 件)

- ① 松橋 信明、櫻庭 正将、大島 悠太、川村 徳幸、堀内 翔太、山田 一雅、分子軌道法と分子動力学法を活用した新たな教材と教育法の開発 (3) 様々な電子材料への適用一、八戸工業高等専門学校紀要、査読無、第 50 号、2016、pp. 79-85.  
URL: <http://ci.nii.ac.jp/naid/110010016610>
- ② Kazu-masa YAMADA, Nobuaki MATSUHASHI, Asset revaluation for scientific supersonic-like technique, The 2<sup>nd</sup> International Conference on the

Dialogue between Science and Theology (DIALOGO-CONF 2015), 査読有, 2015, pp. 255~263.  
DOI:10.18638/dialogo.2015.2.1.28

- ③ 山田 一雅, 松橋 信明, ペロブスカイト型構造を理解するための3次元 e-TextBook 開発, 論文集「高専教育」、査読有、第38号、2015、pp.300-305.  
DOI・URL : なし
- ④ 松橋 信明, 宮田 直人, 釜谷 諒悟, 山田 一雅, 分子軌道法と分子動力学法を活用した新たな教材と教育法の開発(2) —ダイヤモンド構造とアモルファス構造への適用—, 八戸工業高等専門学校紀要、査読無、第49号、2014、pp.27-32.  
URL:http://ci.nii.ac.jp/naid/110009877315
- ⑤ Kazu-masa YAMADA, Nobuaki MATSUHASHI, Extended 4-Dimensional OpenGL e-book associated with electric material, International Journal of Advanced Computer Science and Applications (IJACSA), 査読有, 2014, pp.114-123.  
DOI:10.14569/SpecialIssue.2014.040313
- ⑥ Kazu-masa YAMADA, Nobuaki MATSUHASHI, OpenGL assisted dynamically 4-Dimensional animation e-textbook associated with Perovskit dielectrics, Proceedings of IEEE Technically Co-Sponsored Science and Information Conference 2014 (SAI2014), 査読有, 2014, pp.912-920.  
DOI:10.1109/SAI.2014.6918295
- ⑦ Kazu-masa YAMADA, Nobuaki MATSUHASHI, Java based numerical extractable molecular dynamics calculation Proceedings of 2014 International Conference on Mechanical Design, Manufacture and Automation Engineering (MDMAE2014), 査読有, 2014, pp. 502-507.  
URL:https://books.google.co.jp/books?id=n-ORAwAAQBAJ&pg=PA502&lpg=PA502&dq=Java+based+numerical+extractable+molecular+dynamics+calculation&source=bl&ots=0xDwY2ju7y&sig=zN2ticPA8bG0X44PZL tjjwI078A&hl=ja&sa=X&ved=0ahUKEwjrpOH6ePMAhWCUqYKHXPEAcoQ6AEIIjAA#v=onepage&q=Java%20based%20numerical%20extractable%20molecular%20dynamics%20calculation&f=false
- ⑧ 松橋 信明, 山田 一雅, 分子軌道法と分子

動力学法を活用した新たな教材と教育法の開発(1) —液晶自己保持膜の物性研究における分子軌道法と分子動力学法の適用—, 八戸工業高等専門学校紀要、査読無、第48号、2013、pp.85-90.  
URL:http://ci.nii.ac.jp/naid/110009768120

[学会発表] (計2件)

- ① Kazu-masa YAMADA, Nobuaki MATSUHASHI, OpenGL assisted dynamically 4-Dimensional animation e-textbook associated with Perovskit dielectrics, IEEE Technically Co-Sponsored Science and Information Conference 2014 (SAI2014), 2014.8/27-29, London (UK).  
DOI:http://saiconference.com/Conferences/SAIConference2014
- ② Kazu-masa YAMADA, Nobuaki MATSUHASHI, Java based numerical extractable molecular dynamics calculation, 2014 International Conference on Mechanical Design, Manufacture and Automation Engineering (MDMAE2014), 2014.1/11-12, Phuket (Thailand).  
DOI:http://www.atlantispress.com/php/pub.php?publication=cs-e-13

[図書] (計1件)

- ① Kazu-masa YAMADA, Nobuaki MATSUHASHI, InTech Europe, New Trends in Alloy Development, Characterization and Application, Chapter3:Self-diffusion in alloys, 2015, 266(63-94).  
DOI:10.5772/59221

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

松橋 信明 (MATSUHASHI, Nobuaki)  
八戸工業高等専門学校・産業システム工学  
科電気情報工学コース・教授  
研究者番号 : 4 0 1 9 9 8 3 1

### (2) 研究分担者

山田 一雅 (YAMADA, Kazumasa)  
函館工業高等専門学校・生産システム工学  
科・教授  
研究者番号 : 4 0 2 7 0 1 7 8