

高温プラズマとイオン性物質の理工学

田中基彦 (Dec. 2004)

計算機シミュレーション法を用いた高温プラズマとイオン性（凝縮）物質に関する、最近 10 年の基礎科学の研究を、以下 3 テーマに分類する。このうち、(1)は単独研究、(2)はアメリカ (MIT、ミネソタ大学)、ドイツ（マックスプランク研究所・高分子研究所）との共同研究、(3)はセンター客員（善甫康成、河野裕彦先生）との共同研究である。詳細はホームページ <http://dphysique.isc.chubu.ac.jp/> を参照。

1. 高温プラズマ基礎：磁気リコネクション現象発生起源の解明

これは 1960 年代末以来、世界のプラズマ磁気流体と宇宙物理学界を悩ませてきた大きな謎である（なぜ「散逸」がない現実のプラズマ中で、MHD 理論での散逸現象である磁力線の再結合が発生するのか？）。この問題は田中（基）やアメリカの研究者が 1980 年初頭に異常電気抵抗として研究したが、未解決の問題として残されていた。その後、田中はみずから開発した「マクロ粒子コード」による計算機シミュレーション法で、磁気リコネクション現象が、非MHD的な電子慣性（運動）により生起することを世界で初めて証明した。

2. 強い静電気力によるイオン性物質の構造形成：古典的および第一原理分子動力学法

この「イオン性物質」とは、電解質液体、荷電高分子、イオン液体、そしてグラファイトなどの固体を指す。

(a) クーロン強結合系としての荷電高分子：

先駆的な分子動力学法（MD）による研究で、静電気力による構造形成（強いクーロン力による特異な現象）、高分子体積変化でヒステリシスの発生、超低温での bcc 結晶化、塩による電場遮蔽による荷電高分子の 2 面性を示した。

(b) 超ディバイ遮蔽現象である電荷反転現象：

これはマクロイオンが多価対イオンの存在下で、強い静電気力により逆符号に帯電する「異常な」現象（室温の電解質水溶液で起きる）であり、細胞への遺伝子送達（治療）の応用がある。この現象を、電気泳動 MD 法を開発し、動的な系について初めて証明した。また、DNA が多価高分子塩の存在下でのみ電荷反転することを示した（図 1）。

(c) グラファイト表面の水素による破壊と炭化水素分子の生成（図 2）、およびイオン液体中でのプロ

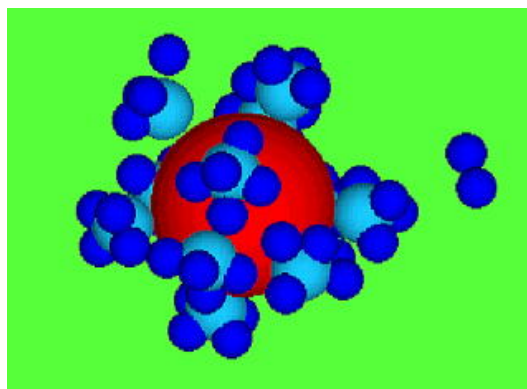


図 1：強い静電相互作用により生じる、超ディバイ遮蔽過程であるマクロイオンの電荷反転現象。生体への応用として遺伝子送達が挙げられる。

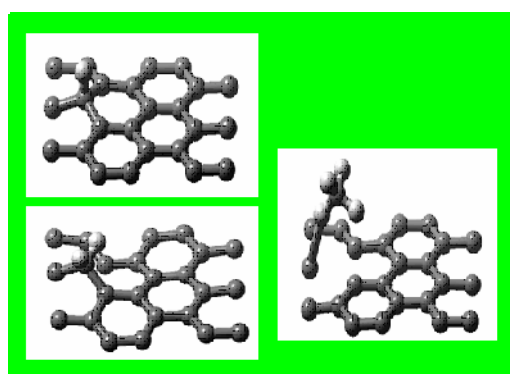


図 2：量子力学的分子動力学コードによる、グラファイト表面の破壊と炭化水素分子の生成・脱離過程の計算機シミュレーション。図は水素原子を 1 個ずつ付加したときの様子で、左上から右下へ続く。

トン伝導の問題を、密度汎関数・第一原理分子動力学法を用いて研究している。

3. 第一原理（量子力学的）分子動力学コード整備と高速通信による PC クラスタ計算機の製作

複数の Pentium プロセッサとリナックス OS を用いたクラスタ（並列）計算機を製作し、そこで動作する MPI を用いた並列計算プログラムを開発、第一原理分子動力学コードの整備を行った。

次に、非 TCP/IP の高速通信ソフトウェアを導入し通信待ち時間を事実上ゼロに削減、さらに市販の高速 C/Fortran コンパイラと組み合わせ、PC クラスタ計算機の演算能力を同プロセッサ数の RISC ワークステーションクラスタ（価格で 10 倍以上）と同等性能に改良した。これは量子系計算コードではスーパーコンピュータに劣らない性能を示し、このことは計算科学において画期的なことである。

（日本物理学会誌「話題」2004 年 12 月）