

原子力関連吸着プロセスのための人工知能融合吸着シミュレーション手法の開発

Development of Artificial Intelligence Integrated Adsorption Simulation Method for Nuclear-Related Adsorption Process.

*宮野 正之¹, 小原 幸子¹, 佐藤 愛美¹, ボノー パトリック¹, 三浦 隆治¹, 鈴木 愛¹,
宮本 直人¹, 畠山 望¹, 宮本 明¹

¹東北大学

第一原理計算, 量子化学計算, 分子動力学法, 量子分子動力学法, 人工知能等のシミュレーション手法を統合した, 多孔質吸着材への放射性物質吸着シミュレーション手法を開発し, 吸着メカニズムの解析を行った.

キーワード: 計算化学, 超高速化量子分子動力学法

1. 緒言

超高速化量子分子動力学(UA-QCMD)法による計算化学手法を, 多孔質への放射性物質吸着過程へ適用した. 量子論に基づいたミクロレベルでのダイナミクス計算により, 多孔質内への吸着について理論的に検討した.

2. 計算手法

UA-QCMD 法は, パラメータ化によって, 従来手法に対して約 1000 万倍の高速化を達成している. 量子化学計算について, 密度汎関数理論(DFT)による第一原理計算結果や実測に基づく熱力学データをよく再現するように, 独自の **Tight-Binding** 近似に用いるパラメータを適切に構築することにより, 高速かつ高精度な電子状態計算を可能としている.

3. 結論

各原子各軌道毎に必要なパラメータについて, 新たに人工知能を用いた自動フィッティング機能を組み込むことにより, DFT 計算結果や熱力学データを十分に再現するパラメータを自動的に決定する事が可能となった. これにより, 高速で信頼性の高いシミュレーションが実現され, 元素種が多い大規模系に応用できる. 本手法を, 放射性物質の多孔質への吸着過程解析に適用した. 放射性物質の吸着材として, 多孔質のゼオライトが使用されている (図 1). ゼオライト中では, イオン (カチオン) 交換により, 放射性物質が吸着される. 本研究では, UA-QCMD により交換カチオンである Na^+ (図 2) と放射性物質 Sr^{2+} (図 3) のゼオライトへの吸着過程を解析し, Sr^{2+} がより安定して吸着することが明らかになった.

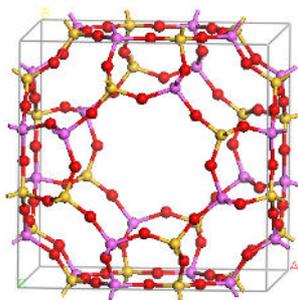


図 1 LTA 型ゼオライト

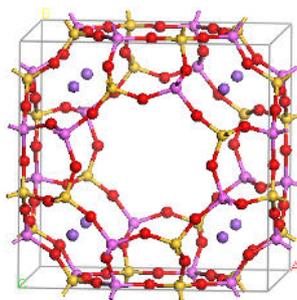


図 2 Na 吸着構造

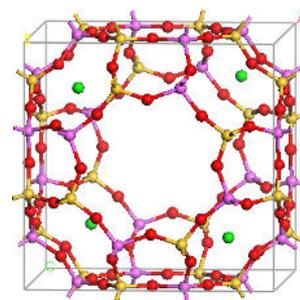


図 3 Sr 吸着構造

*Masayuki Miyano¹, Yukiko Obara¹, Manami Sato¹, Patrick Alain Bonnaud¹, Ryuji Miura¹, Ai Suzuki¹, Naoto Miyamoto¹, Nozomu Hatakeyama¹, and Akira Miyamoto¹

¹Tohoku University