

マルチスケール・マルチフィジックス計算化学手法の開発と 原子力関連技術への応用

Development of Multiscale, Multiphysics Computational Chemistry Methods for the Application to
Atomic Energy Technologies

*宮本 明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

¹東北大学

発表者の研究グループでは、マルチスケール・マルチフィジックス計算化学手法の原子力関連技術への応用を目指しているが、本発表では、それらの手法を構成する様々な手法、特に既存の第一原理分子動力学法に比べ1000万倍の高速計算が可能な超高速化量子分子動力学法について紹介する。

キーワード：計算化学、シミュレーション、腐食、電極反応、触媒反応、量子分子動力学法

1. 緒言

発表者のグループでは、量子化学、分子動力学、量子分子動力学法、モンテカルロ法、流体力学、有限要素法、人工知能など様々なシミュレーション手法を統合したマルチスケール、マルチフィジックス計算化学を開発し、様々な応用分野に活用している。本発表では、原子力関連技術への応用に有効な方法論を中心に紹介する。

2. 方法

マルチスケール・マルチフィジックス計算化学手法を構成する様々な手法の詳細については、他の論文、総説等に記載した[1-6]。

3. 結果と考察

原子力技術分野についても、量子・原子レベル・メソレベル・マクロレベルを融合したマルチスケール手法が有効であることが示されているが[3-6]、その中でも超高速化量子分子動力学法が有効であった。本手法は、密度汎関数法計算をベースに Tight-Binding 量子化学計算を行うとともに、その結果から原子間ポテンシャルを求めることにより、既存の第一原子分子動力学法に比べて1000万倍の高速化が実現されるが、本発表では、それらが多様な化合物の計算に対して高い計算精度をもつことも実証した。さらに、この手法に基づく電気伝導、熱伝導、摩擦・機械強度、化学反応、電気化学反応、光化学反応、プラズマ反応などマルチフィジックス解析の有効性も示した。

参考文献

- [1] 宮本 明ら、応用物理、83、116 (2014).
- [2] Md. K. Alam et al., J. Phys. Chem. C., 113, 7233 (2009).
- [3] 畠山 望ら、日本原子力学会春の年会、K44 (2010).
- [4] N. Hatakeyama et al., NPC 2014-10277, Sapporo, Japan, 2014.
- [5] T. Ito et al., J. Nucl. Sci. Tech. (2015), online first.
- [6] A. Suzuki et al., ICON E23-1005, Chiba, Japan, 2015.

*Akira Miyamoto¹, Patrick Bonnaud¹, Ryuji Miura¹, Ai Suzuki¹,

Naoto Miyamoto¹, Nozomu Hatakeyama¹

¹Tohoku Univ.

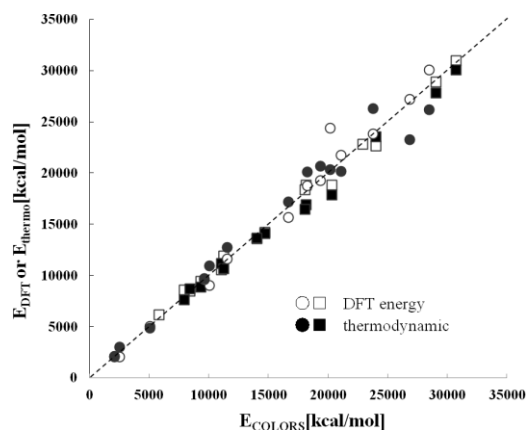


図1 Tight-Binding 量子化学計算化学手法による結合エネルギー計算値(E_{COLORS})とDFTによる計算値(E_{DFT})あるいは熱力学データ(E_{thermo})との比較