

核変換ターゲット開発に向けた 機械学習分子動力学計算による BeF₂-CsF の物性評価

Evaluation of physical properties of Be₂-CsF

using machine learning molecular dynamics simulations for developing nuclear transmutation targets

*軒 天太¹, 宍戸 博紀¹, 橋爪 秀利¹

¹東北大学

本研究では、核変換ターゲットの開発に向けた物性値評価手法として、機械学習を用いた分子動力学(MD)法の適用可能性について検討する。対象となる熔融塩に対して機械学習 MD 計算を行い、従来の古典 MD 計算との比較を行った。

キーワード：高レベル放射性廃棄物、分離変換、長寿命核分裂生成物、熔融塩、密度汎関数理論

1. 背景

長寿命核分裂生成物(LLFP)を含む高レベル放射性廃棄物を核融合炉熔融塩ブランケットへ添加する核変換システムが提案されている。ブランケット全体の中で極めて限られた領域に LLFP を大量に含有する核変換ターゲットを配置することを検討してきた。先行研究では核変換ターゲットに対して古典 MD 計算をもちいて物性値の評価を行ったが、核変換により核種が変化し原子間の相互作用ポテンシャルが関数化されていない原子の組み合わせが生じることで従来の古典 MD 計算では物性値の評価が困難となる。本研究では、対象となる系に対して第一原理 MD 計算を行い、得られた結果を用いて機械学習を行い相互作用ポテンシャルの代替となるものを作成し、機械学習ポテンシャルを用いた古典 MD 計算を行うことで対象となる熔融塩の物性値を評価した。

2. 数値解析手法

計算対象となる系は BeF₂72 原子とし、第一原理計算プログラム Quantum ESPRESSO^[1]を使用した。平面波のカットオフエネルギーは 50 Ry、電荷カットオフは 200 Ry、サンプル k 点メッシュは 1×1×1、SCF 計算の収束条件は 10⁻⁶ Ry とした。その後、第一原理 MD 計算から得られたデータから DeePMD-kit^[2]により機械学習を行い、機械学習ポテンシャルを用いた古典 MD 計算により密度値を評価した。機械学習 MD 計算では BeF₂576 原子に対して計算を行った。

3. 結果

結果を表に示す。第一原理 MD 計算より得られた密度値は文献値に近いものであったが、第一原理 MD 計算の結果を機械学習して行った MD 計算では差異のある密度値が得られた。これは機械学習に用いるデータ数が少なく、学習用と検証用のデータに分ける際にデータの偏りが生じてしまっていたことが要因として考えられる。

表. 1100 K における BeF₂ の密度(g/cm³)

文献値 ^[3]	第一原理 MD	機械学習 MD
1.96	1.97	2.09

参考文献

[1] P. Giannozzi et al., J. Phys.: Condens.Matter 21, 395502 (2009)

[2] Han Wang et al., Computer Physics Communications 228 (2018):178-184

[3] Vincent Sarou-Kanian et al., Physical Chemistry Chemical Physics, Issue 48 (2009)

*Tenta Noki¹, Hiroki Shishido¹ and Hidetoshi Hashizume¹

¹Tohoku Univ.