

ニューラルネットワーク分子動力学法を用いた酸化セリウムの熱特性の解析

A neural network molecular dynamics study of the thermal properties of CeO₂伊藤忠テクノソリューションズ¹, 東北大金研² [○]加藤 信彦¹, 森 一樹¹, 齋藤 方大¹, 小無 健司²CTC.¹, IMR Tohoku Univ.², [○]Nobuhiko Kato¹, Kazuki Mori¹, Masahiro Saito¹, Kenji Konashi²

E-mail: nobuhiko.kato@ctc-g.co.jp

【緒言】酸化セリウム (CeO₂) は UO₂ や PuO₂ などの核燃料体の模擬試験材料として利用されているが、高温時の熱物性の理解が不十分となっている。一方で、高温時の材料物性の詳細を調べる方法として、第一原理計算や古典分子動力学 (MD) 計算などの原子レベルのシミュレーションが有効であるが、第一原理計算では計算コストがかかり、MD 計算では原子間ポテンシャルの精度が不十分であるため、CeO₂ に対して十分な計算は行われていない。そこで本研究では第一原理計算よりも高速で既存の MD 計算よりも高精度なニューラルネットワーク MD (NNMD) を用いて CeO₂ の熱物性の評価を行った。

【計算条件】蛍石型の CeO₂ のユニットセルを 2×2×2 に拡張したスーパーセルにて、第一原理 MD を用いて温度 100K~16000K、圧力-50K~400K の条件下の計算を行い、80000 個の学習モデルを作成して NN ポテンシャルを学習した。第一原理計算には VASP、NN ポテンシャル学習には DeepMD-kit、NNMD には Lammmps-DeepMD を用いた。Exabyte.io 上の Azure クラウド計算機を 80 ノード使用し、約 20 時間で NN ポテンシャルを作成した。

【結果】図 1、図 2 に熱膨張率および比熱の計算結果を示す。300K~1800K 間の実測結果^[1]と計算結果はよく一致した。また、MD シミュレーション時間内では完全にランダムな配置にならなかったが、実測の融点に近い 2700K~2800K 近傍に熱膨張率と比熱のピークが表れた。図 3 に酸素原子の平均二乗変位 (MSD) の時間変化を示す。2000K 以上で MSD が増大し始めており、蛍石型構造特有の酸素拡散に伴う転移の存在が示唆された。

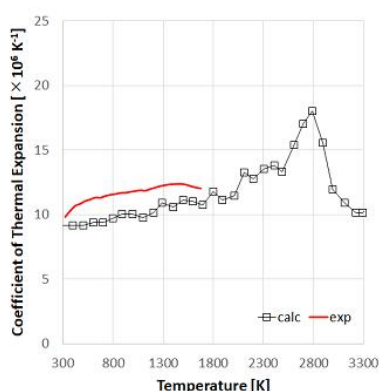


図 1 熱膨張率

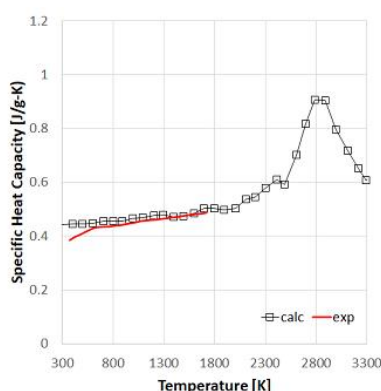


図 2 比熱

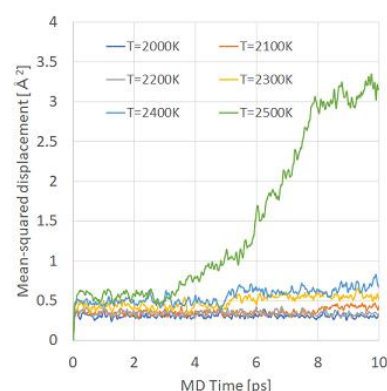


図 3 酸素原子の MSD

本研究発表は、令和 2 年度文科省原子力システム研究開発事業「人工知能 (AI) 技術を取り入れた核燃料開発研究の加速」の成果を含んでいる。

[1]Andrew T. Nelson, et.al., *J. Am. Ceram. Soc.*, 97[11], 3652-3659 (2014)