

機械学習分子動力学法による粘土鉱物-水分子相互作用の解析

Analysis of Clay Mineral-Water Molecule Interactions Using Machine Learning Molecular Dynamics

*奥村 雅彦¹, 山口 瑛子¹, 小林 恵太¹

¹JAEA

粘土鉱物は高レベル放射性廃棄物地層処分における放射性核種の人工バリアとして重要な物質であり、粘土鉱物と放射性核種の相互作用は周囲の水分子に強く影響されることがわかっている。本研究では、これまで調べられていなかった機械学習分子動力学法による粘土鉱物-水分子相互作用について調べ、高圧状態まで実験と整合的な結果が得られた。

キーワード：機械学習、分子動力学法、粘土鉱物、水分子

1. 緒言

これまで、粘土鉱物と水分子の相互作用は主に(1)低計算コスト低精度な古典分子動力学法と(2)高計算コスト高精度な第一原理分子動力学法が用いられてきた。近年、(2)の結果を人工ニューラルネットワーク等で学習し、高精度かつ低計算コストを実現する「機械学習分子動力学法」が提案され、講演者らはこの手法が最も単純な構造を持つ粘土鉱物の一種であるカオリナイトの物性を正確に再現することを示した[1]。しかし、この手法を粘土鉱物-水分子系に適用した例はない。一方、実験により、カオリナイトは高圧下で層間に水分子が入り込んだ「超水和カオリナイト」になることがわかっている[2]。超水和カオリナイトが発現するよりもさらに高圧にすると、水分子が動かなくなり、擬似的な氷状態になることが観測された[3]。このような高圧状態において、シミュレーションによって実験結果を再現するためには、シミュレーション手法に高い精度が要求される。

2. 機械学習分子動力学法による粘土鉱物-水分子相互作用評価

上記の背景を鑑み、講演者らは、このような高圧状態において、機械学習分子動力学法シミュレーションを実施し、7.5 GPa において擬似的な氷状態が実現することを示した（図1）。

これは実験結果[3]と整合する結果であり、7.5 GPa という高圧においても機械学習分子動力学法が高い精度を示すことがわかった。

2. 結論

本研究により、機械学習分子動力学法が様々な状況下において粘土鉱物-水分子相互作用を正確に記述することがわかった。今後は、多くの水分子との相互作用や、粘土鉱物表面における水の膜や氷の生成などの高精度シミュレーションへの応用が期待される。

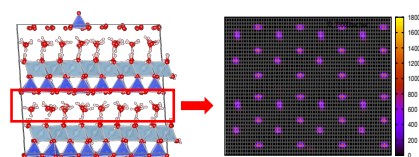


図1. 7.5GPa において擬似的な氷配置を形成するカオリナイトの層間水の配置

参考文献

- [1] K. Kobayashi *et al.*, Appl. Clay Sci. **228**, 106596 (2022).
- [2] H. Hwang *et al.*, Nat. Geosci. **10**, 947 (2017).
- [3] H. Hwang *et al.*, ACS Earth Space Chem. **4**, 183 (2020).

*Masahiko Okumura¹, Akiko Yamaguchi¹, Keita Kobayashi¹

¹JAEA