

TSUBAME 共同利用 令和 6 年度 学術利用 成果報告書

第一原理計算による惑星物質データベースの構築
Development of a Planetary Materials Database Using First-Principles Calculations利用課題責任者 小松 勇
Yu Komatsu茨城大学
Ibaraki University
<https://www.eng.ibaraki.ac.jp/>

邦文抄録(300 字程度)

氷惑星や氷衛星の内部構造を理論的に解明するには、Warm Dense Matter (WDM) 状態にある揮発性分子の熱力学的性質を評価することが重要である。なかでも硫化水素(H_2S)は、氷惑星のマントルに含まれる成分の一つとされる。本研究では、第一原理分子動力学法と深層学習による機械学習ポテンシャル作成を統合したハイブリッド手法を構築し、500~10,000 K、1~5 g/cm^3 の条件下での熱力学的特性を高精度に解析した。得られたデータは、WDM 領域の包括的データベースの整備に有用であり、惑星の重力モーメントと内部構造モデルの整合性検証にも貢献する可能性が示唆された。

英文抄録(100 words 程度)

Understanding the thermodynamic properties of volatile components in the Warm Dense Matter (WDM) regime is essential for modeling the interior structures of icy planets and satellites. In this study, we developed a hybrid approach combining *ab initio* molecular dynamics (AIMD) and deep learning-based interatomic potentials to investigate hydrogen sulfide (H_2S) over a wide range of temperatures (500–10,000 K) and densities (1–5 g/cm^3). The results reveal temperature- and density-dependent structural transitions and suggest that the constructed dataset can serve as a theoretical WDM database. Our findings also imply a potential impact of H_2S on the gravitational moments of icy planets.

Keywords: 惑星内部構造、硫化水素、Warm Dense Matter、機械学習ポテンシャル、データベース

背景と目的

氷惑星や氷衛星の形成・進化を理解するには、内部に存在する揮発性分子の熱力学的性質を広範囲の温度・圧力条件で解明する必要がある。なかでも硫化水素(H_2S)は、天王星や海王星の大気で検出され、氷マントルにも含まれるものと考えられる。しかし、 H_2S の高温高圧下における相図や構造、拡散などの性質は実験・理論ともに十分なデータが得られていないのが現状である。

本プロジェクトでは、AIMDによって得られた高精度なデータを活用し、深層学習により原子間ポテンシャルを構築することで、広範な条件下での H_2S の物性データを効率的に取得する方法論を確立した。これにより、高精度かつ高速なシミュレーションによって、惑星内部構造モデルの構築に資する基盤データベースの整備を目指した。

概要

本研究では、温度 500~10,000 K、密度 1~5 g/cm^3 の条件下で、 H_2S の圧力、動径分布関数、拡散係数などを AIMD により計算し、そこから得たデータをもとに深層学習ポテンシャルを構築した。学習済みポテンシャルを用いたシミュレーションにより、AIMD 程度の精度を保ちつつ、100 倍以上の時間スケールおよび数百原子規模の系に拡張した分子動力学計算が可能となった。

結果および考察

図1は AIMD によって得られた密度・圧力関係である。また、図2は AIMD、機械学習ポテンシャルをそれぞれ用いて推定した動径分布関数を示しており、これらで良い一致を示している。温度上昇に伴う分子結合の解離や、高密度条件下での局所的な硫黄ネットワーク構造の形成などが確認された。低温・低密度で分子性

が維持される一方、高温になると動径分布関数のピークが消失し、流体的な構造へと移行する様子が示された。

さらに、機械学習ポテンシャルを用いて追跡することで、AIMD では困難であった長時間スケールにおける動的性質も調べることができるようになり、信頼性のより高い拡散係数を得ることができた(図3)。さらに、 H_2S が氷マントルに含まれることで、惑星全体の密度が約0.7~0.8%増加し、重力モーメントの観測値と一致する内部構造モデルの提示にもつながる。

まとめ、今後の課題

本研究では、第一原理計算と深層学習を統合した手法により、 H_2S の WDM 領域を含む熱力学的特性を広範に調査した。これにより、氷天体内部の構造解析や観測値との整合性の検証に向けた理論的基盤が整備された。

今後は、本手法を H_2O や NH_3 など他の揮発性成分に拡張し、多成分系における協調的効果の解明を目指し、包括的な WDM 理論データベースの構築を進める予定である。

なお、本研究の推進には九州大学、物性研究所、名古屋大学、国立天文台のスパコンも用いた。

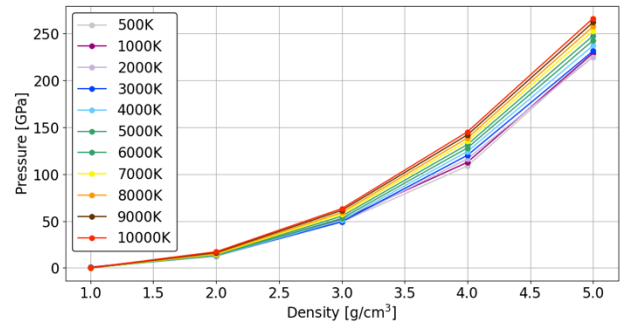


図 1 AIMD によって得られた密度-圧力関係を温度毎に示した。

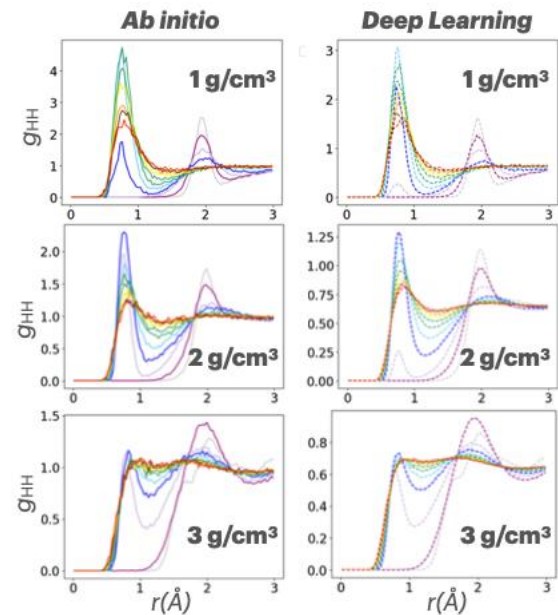


図 2 AIMD、深層学習を用いて動径分布関数 $g(r)$ を算出し、比較した。線の配色は図1と同じ。

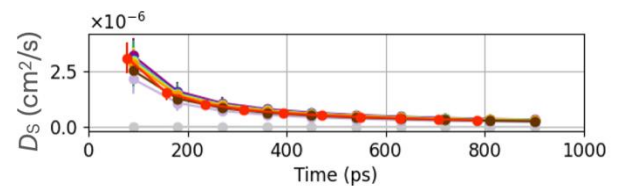


図 3 5 g/cm^3 における拡散係数を、シミュレーション時間に対してプロットした。線の配色は図1と同じ。