

## 宇宙地球フロンティア実地研修 報告書

## Report for Onsite Training in Earth-Space Frontier Science

氏名/Name	小長谷 莉未 Rimi Konagaya		
所属部局/ Affiliation	理学系研究科 地球惑星科学専攻 Department of Earth and Planetary Science, Graduate School of Science		
研究機関・企業名 /Hosting Institution	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 Japan Atomic Energy Agency		
期間/Period	2022年 9月 12日 9/12/2022	～ 2022年 9月 27日 9/27/2022	*西暦で記入 mm/dd/yyyy

私の研究テーマである、粘土鉱物の吸着に伴うルビジウム (Rb) の同位体分別を量子化学計算によって評価する基礎を学ぶために、国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 (JAEA) 令和 4 年度夏期休暇実習に約 2 週間参加した。システム計算科学センターにて、奥村雅彦先生ご指導の下、計算に必要なプログラミング言語である python と第一原理計算の基礎を学び、コマンドの練習も行った。今後実習で使うスーパーコンピューターの設定も行い、その操作方法である Vim の練習もした。さらに、VESTA を用いていくつかの粘土鉱物の原子モデルの可視化を行った。具体的には、American Mineralogist Crystal Structure Database から粘土鉱物を検索し、論文中の cif ファイルをダウンロードし、VESTA でダウンロードした cif ファイルを開いて構造を確認した。その後、同型置換や水素の追加などを行うため、cif ファイルを書き換えて、python スクリプトを作成し、いろいろな粘土鉱物の構造を作成した。そのような粘土鉱物の構造を、スーパーコンピューターを用いて、最も安定な電子状態にする構造最適化を行い、計算結果を可視化することで層間距離を示す c 軸の長さなどの比較を行った。その結果、イオン半径の大きい元素に置換した際は、c 軸の長さが長くなっており、層間が開いていることが分かった。標準状態でのそれぞれの原子のエネルギーを計算し、様々な粘土鉱物の生成自由エネルギーを計算した。さらに、吸着反応における自由エネルギーを計算し、比較することで、一般的な環境下では、Rb は K に比べて吸着しにくく、Rb が吸着しているものは風化過程などかなり珍しい環境で生成したことが分かった。今後、粘土鉱物の計算コストが高く、スーパーコンピューターを利用する必要があるため、東大-JAEA の共同研究契約を結び、さらに第一原理計算のやり方について学んで、量子力学の基礎を引き続き勉強していく予定である。



I participated in the summer vacation training program of the Japan Atomic Energy Agency (JAEA) in 2022 for about two weeks to learn the basics of evaluating isotope fractionation of rubidium (Rb) in clay minerals by quantum chemical calculations, which is my research theme. Under the guidance of Dr. Masahiko Okumura at the Center for Computational Science and e-Systems, I learned the basics of python, a programming language necessary for calculations, and first-principles calculations, and also practiced using commands. I also set up the supercomputer and practiced Vim, a method of operating the supercomputer. In addition, I used VESTA to visualize atomic models of several clay minerals. I searched for clay minerals from the American Mineralogist Crystal Structure Database, downloaded cif files of articles, and opened the downloaded cif files with VESTA to confirm the structures. Then, we rewrote the cif files to add isomorphous substitutions and hydrogen, and created python scripts to create the structures of various clay minerals. The structures of such clay minerals were structurally optimized to the most stable electronic state using a supercomputer. The results of the calculations were visualized to compare the length of the c axis, which indicates the interlayer distance. As a result, it was found that the length of the c-axis is longer and the interlayer space is more open when the element is replaced by an element with a larger ionic radius. The energies of each atom in the standard state were calculated and the free energies of formation for various clay minerals were calculated. Furthermore, by calculating and comparing the free energies in adsorption reactions, it was found that Rb is less adsorbed than K in common environments, and that clay minerals with Rb adsorbed were formed in rather unusual environments such as weathering processes. In the future, because of the high computational cost of clay minerals and the need to use supercomputers, I plan to sign a joint research agreement between the University of Tokyo and JAEA to learn more about how to do first-principles calculations and continue studying the basics of quantum mechanics.