

# ReaxFF の材料科学分野における 大規模化学反応系への応用

大阪大学大学院 基礎工学研究科 衝撃科学共同研究講座 牧野有都

**目的** ReaxFF<sup>1)</sup> を活用して、材料科学分野における複雑な化学反応が関与する現象の理解を進めたいと考えている。まずは ReaxFF の基本的な使い方を知ると共に、計算精度と速い計算速度の確認を目的に様々な先行文献<sup>2-5)</sup>の追試を行うこととした。

**内容** Strachan 等によって報告された<sup>2)</sup>、広く知られた高エネルギー物質である RDX ( $[\text{cyclic-}[\text{CH}_2\text{N}(\text{NO}_2)]_3$ ) の熱分解挙動に関する研究を再現計算した。

**結果** 各反応条件における二酸化炭素や水などの低分子生成量の時間挙動は、先行文献と良い一致を示した。よって、基本的な使用法を修得すると共に、ReaxFF の反応ポテンシャルの精密さ、および高速計算に対応していることを再確認した。

## 利用した計算機

ノード時間  
使用メモリ  
並列化

## OCTOPUS

1000時間  
384GB  
4並列

## 参考文献

- 1) <https://www.scm.com/product/reaxff>
- 2) Strachan, A. et al., J. Chem. Phys. 2005, 122, 054502.
- 3) Ashraf, C. et al., J. Chem. Phys. 2017, 121,1051.
- 4) Senftle, T. P. et al., NPJ Comput. Mater. 2016, 2 15011.
- 5) Vashisth, A. et al., J. Phys. Chem. A 2018, 122, 6633.