

重元素化合物の計算化学研究

大阪大学大学院理学研究科 金子 政志、益田 遼太郎、橋場 奏、笠松 良崇

目的 アクチノイドの低エネルギー核異性体の半減期と化学効果の相関について、量子化学計算を用いて明らかにする。

内容 ORCAやDIRACなどの量子化学計算プログラムを用いて、ハロゲン化 UO_2^{2+} 化合物のモデル化及び電子状態解析を行った。

結果 Uの電子状態は、結晶や結合するハロゲンの種類によって変化し、その 6p, 6d電子数変化と $^{235\text{m}}\text{U}$ の半減期変化を相関づけることに成功した。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	1,900 時間
使用メモリ	100 GB
並列化	1ノード 並列

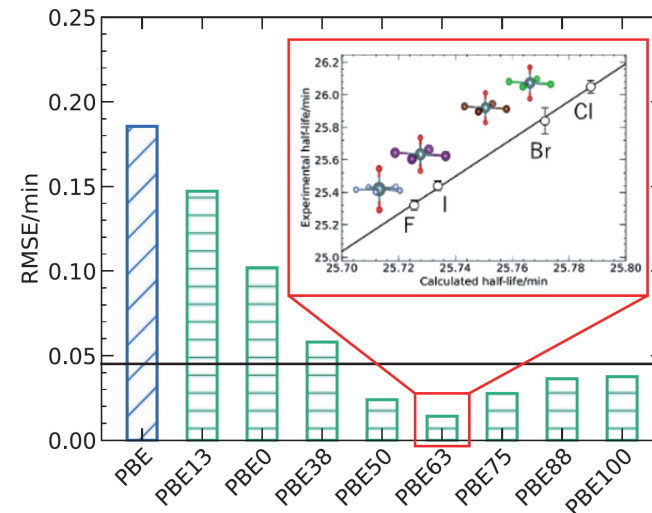


図 電子状態解析に基づく $^{235\text{m}}\text{U}$ 半減期予測の計算手法依存性