

人工知能融合超高速化量子分子動力学法の開発と  
トライボプロセスへの応用

The Development of Artificial Intelligence Integrated Ultra Accelerated Quantum  
Chemical Molecular Dynamics and Its Application for Tribology Process

○小原 幸子<sup>1</sup>、佐藤 愛美<sup>1</sup>、佐藤 絵美<sup>1</sup>、稲葉 賢二<sup>1</sup>、石澤 由紀江<sup>1</sup>、宮野 正之<sup>1</sup>、  
三浦 隆治<sup>1</sup>、鈴木 愛<sup>1</sup>、宮本 直人<sup>1</sup>、畠山 望<sup>1</sup>、宮本 明<sup>1</sup> (1. 東北大学)

○Yukiko Obara<sup>1</sup>, Manami Sato<sup>1</sup>, Emi Sato<sup>1</sup>, Kenji Inaba<sup>1</sup>, Yukie Ishizawa<sup>1</sup>, Masayuki Miyano<sup>1</sup>,  
Ryuji Miura<sup>1</sup>, Ai Suzuki<sup>1</sup>, Naoto Miyamoto<sup>1</sup>, Nozomu Hatakeyama<sup>1</sup>, Akira Miyamoto<sup>1</sup>

(1.Tohoku Univ)

E-mail: obara@aki.niche.tohoku.ac.jp

摩擦・摩耗・潤滑などの力学現象を原子・分子レベルで研究することを目的として、分子動力学シミュレーションが様々な形で行われている。トライボロジーのシミュレーションとしては古典分子動力学計算法がよく用いられており、この場合には原子間や分子間の相互作用が主に Lennard-Jones ポテンシャル、Morse ポテンシャルや静電ポテンシャルによって計算される。これらの値は2原子間の距離に応じて変化するが、ある一定のポテンシャルカーブ上で変化するのみで分子の位置や構造が変化しても与えたポテンシャルカーブ自体は変化しない。実際には、せん断によって温度や圧力が変化するのにもなって化学反応がおき、原子間に結合が生じたり結合が切れることがある。そこで、化学反応を考慮したトライボシミュレーションを目的として、量子計算を行い、変化した相互作用や電荷を新たなポテンシャルとして入力できる超高速化量子分子動力学法を開発した。用いた量子計算は、原子軌道の形状とイオン化ポテンシャルをパラメータすることによって従来の密度汎関数法 (DFT) よりも大規模な系をより高速に計算できるように独自に開発したもので、さらに、適切な時間間隔ごとに量子計算を行ってポテンシャル関数を変化させていくことで動力学計算全体の高速化も図っている。その結果トライボフィルム生成 (Fig.1) や、各種添加剤の基板への化学吸着などを考慮したせん断シミュレーションが行えるようになってきている。今回はこの第一原理パラメータの決定を人工知能を用いて自動化および高精度最適化を図ることができた例を報告する。

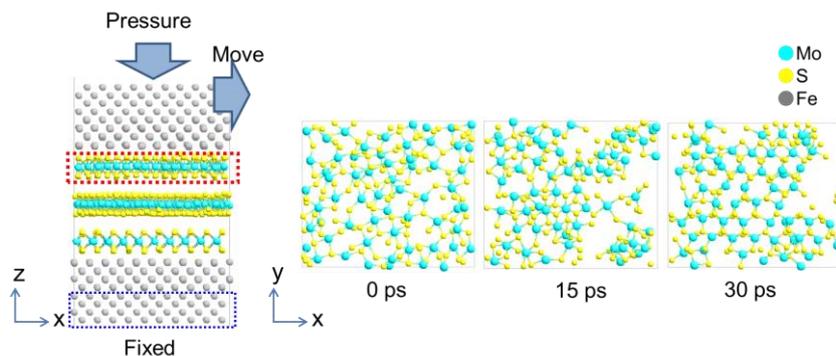


Fig.1 Shear simulation in consideration of chemical reaction