

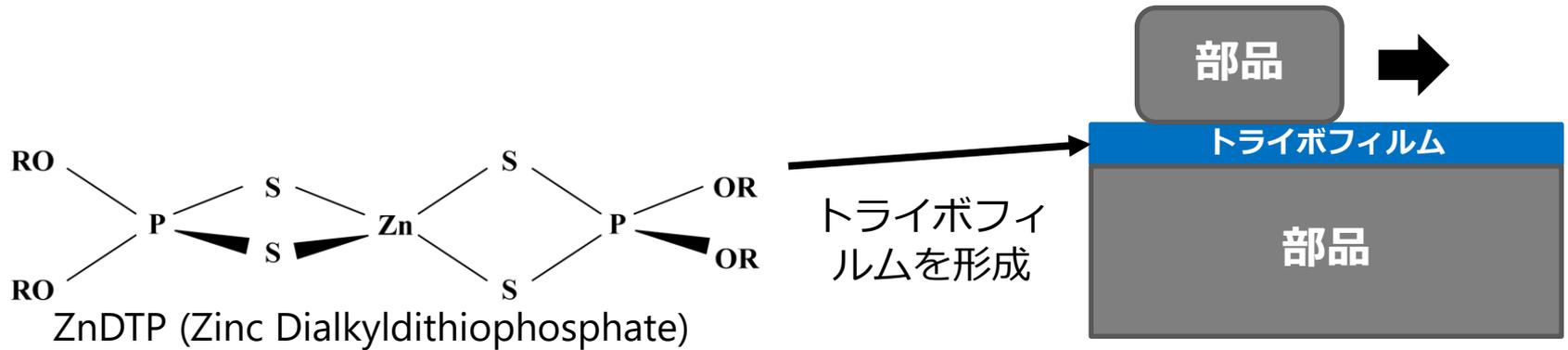
深層学習原子間ポテンシャルを用いた 固体潤滑の分子動力学シミュレーション

(マツダ株式会社との共同研究)



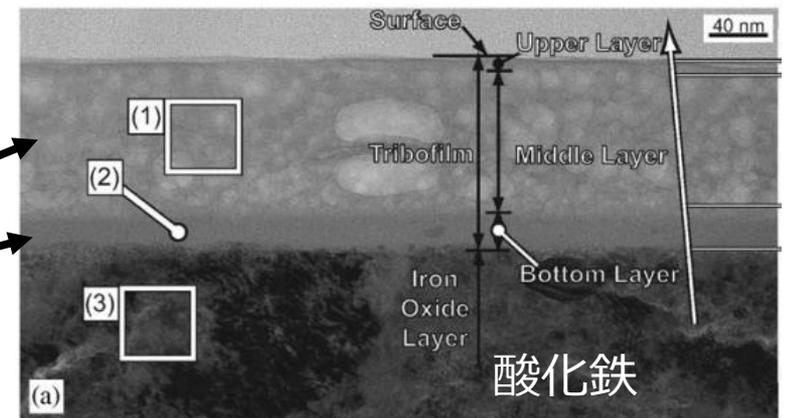
背景

- 自動車エンジン等の摩擦部品の潤滑油添加剤としてZnDTPが用いられる
- 表面にトライボフィルムと呼ばれる耐摩耗保護膜を形成



▶ トライボフィルムの多層構造

- ▶ バルク (Middle Layer) :
長鎖メタリン酸亜鉛 ($\text{Zn}(\text{PO}_3)_2$)
- ▶ 界面 (Bottom Layer) :
Fe/Zn混合リン酸塩層



先行研究/組成

- ▶ トライボフィルムの形成過程や耐摩耗効果発現の機序は実験に基づく推測に留まる
- ▶ 多数の原子の挙動を解析可能である分子動力学解析 (MD)を用いた解析により現象の解明を目指す

▶ 原子間ポテンシャルの課題

▶ 共有結合とイオン結合を同時に扱う

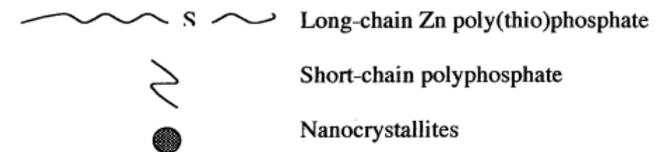
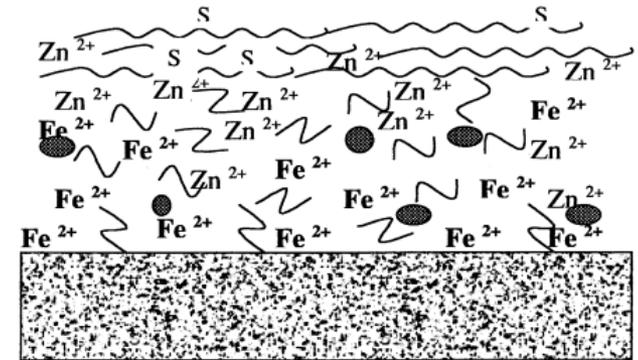
- ▶ リン酸亜鉛膜：共有結合性
- ▶ 酸化鉄基板：イオン結合性

▶ 反応に伴う電荷移動を考慮

- ▶ 酸素を伴う反応において重要

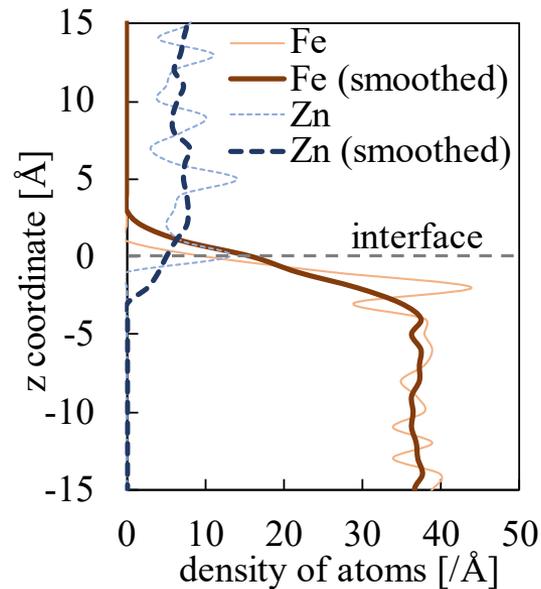
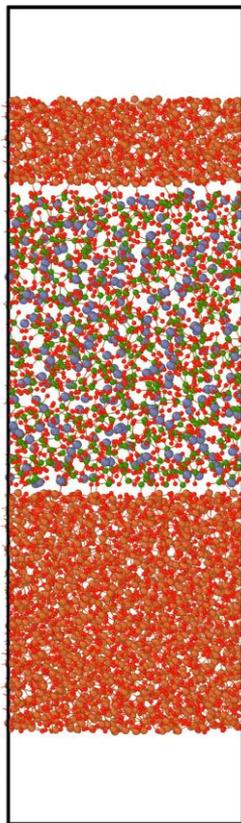
▶ 反応に関わる元素数が多い

- ▶ Fe, O, P, Zn, S

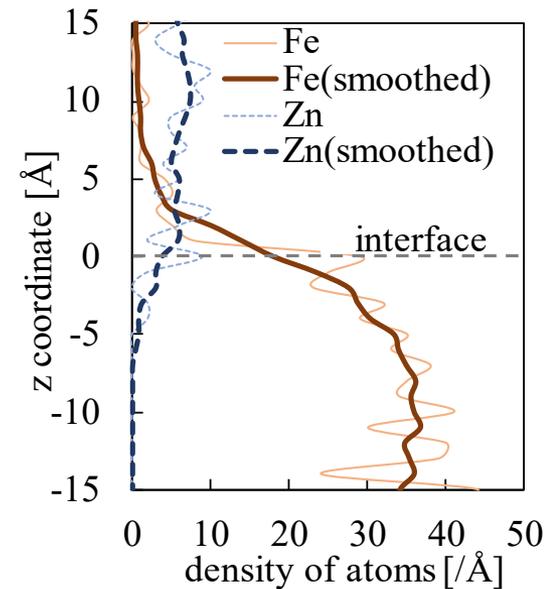


先行研究①（昨年度修論）

- 電荷移動型関数を用いてZnDTPトライボフィルムとの摩擦現象に適用可能なO-Fe-P-Zn間の原子間ポテンシャルを開発



摺動前



3 ns摺動後

課題

- 先行研究ではO-Fe-P-Znの開発に留まっており、界面に偏析する硫黄の効果にまで迫っていない
- O-Fe-P-Zn-S系ポテンシャルの開発は（できないとは言わないが）とても大変

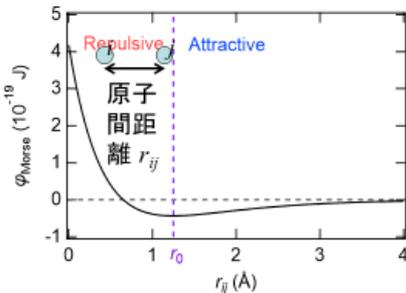


- すでに開発されている機械学習ポテンシャルを使ってみる

原子間ポテンシャル

- ▶ 原子間の相互作用は原子間ポテンシャルで決まる
- ▶ 信頼できるシミュレーションのためには、適切な関数形とポテンシャルパラメータが必要。なければ自分で作る！
- ▶ 研究室では長年、古典的な関数系を用いた原子間ポテンシャルの作成を行ってきた
- ▶ ポテンシャル作成のニーズは多くあり、作成の方法論自体も研究対象

原子間の二体ポテンシャル



Lennard-Jonesポテンシャル

$$\phi_{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

斥力項 引力項

Morseポテンシャル

$$\phi_{Morse}(r_{ij}) = \epsilon \left[e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)} \right]$$

本演習で使用

力の計算
$$F_i = - \sum_{j \neq i} \text{grad} \phi(r_{ij}) = - \sum_{j \neq i} \frac{\partial \phi}{\partial r_{ij}} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}}$$

粒子に作用する力は、二体間相互作用の足し合わせで表現

3

深層学習型原子間ポテンシャル

- 近年では原子間ポテンシャルとして、深層学習ネットワークを活用する動きが盛ん
- 古典ポテンシャルと性質（計算負荷や精度）が異なるため、使い方の検討が必要



ここに深層学習型を使うか、古典ポテンシャルを使うかの違い

MATLANTIS HPより



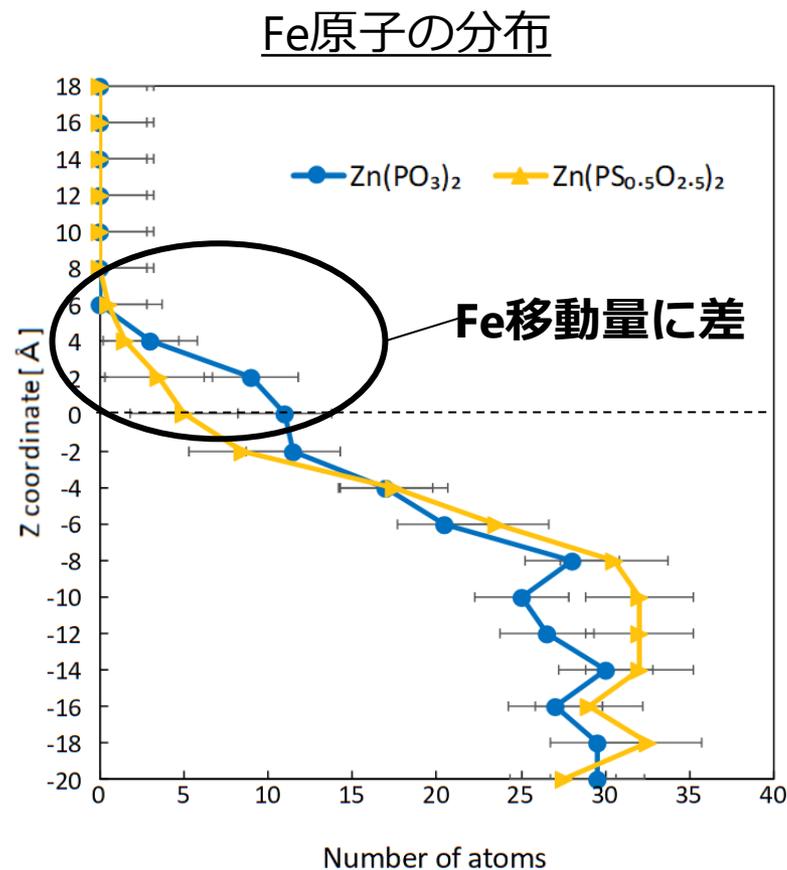
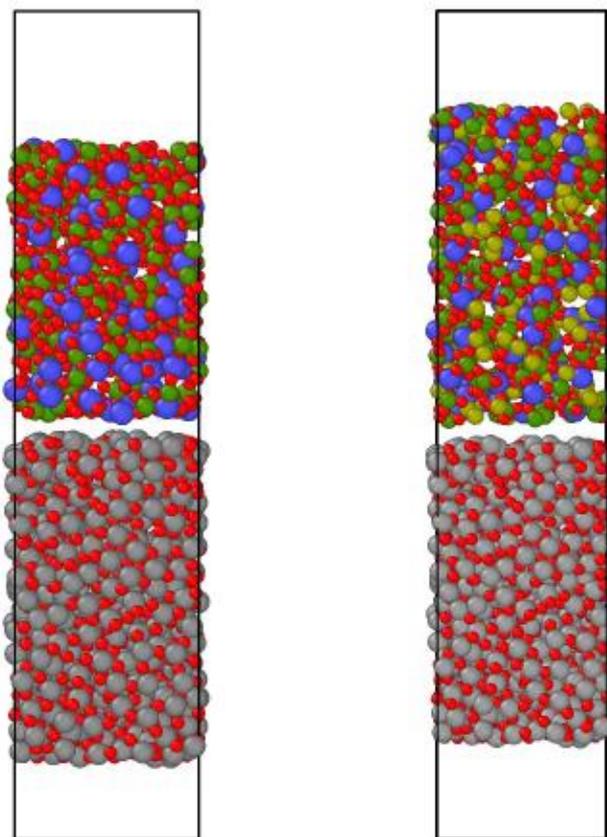
(<https://matlantis.com/ja/product>)



先行研究②（昨年度卒論）

- 深層学習ポテンシャルを用いた分子動力学法により，界面に偏析する硫黄の効果を議論

硫黄なしモデル 硫黄ありモデル



今後の課題

- 硫黄の効果に関する議論はまだまだ検証途中

他の検討課題も沢山

- 圧縮、摺動によるトライボフィルムの構造変化の検証
- 基板（今は酸化鉄）が異なる場合に何が起きるか？
- 他の添加剤との混合
- （電動化へ向けて）他の材料、現象への展開

