

分子動力学シミュレーションによる潤滑油中添加剂の溶解性と
潤滑効果の関係性に関する研究

Molecular dynamics simulation study on the relationship between solubility of additives in
lubricating oil and lubrication effect

京都大学 大学院工学研究科 機械理工学専攻 機械機能要素工学研究室 谷 海洋

研究成果概要

有機摩擦調整剤は、表面に吸着することで境界潤滑層を形成し、しゅう動面を保護することによって境界潤滑下における摩擦低減効果を発揮する。潤滑油に添加される有機摩擦調整剤 (OFM) の摩擦低減効果は、その溶解性や吸着特性に影響を受ける。本研究では、セチルアルコールをモデル添加剂として用い、基油中の溶解性と摩擦低減効果の関係を解明することを目的とした。

京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの Materials Studio を用いて、各基油中のセチルアルコールの溶媒和自由エネルギーを計算した。Fig.1 は Material Studio による構築したモデルの一例を示している。COMPASS III 力場を使用し、100 分子の基油と 1 分子の添加剂を含むモデルでシミュレーションを実施した。

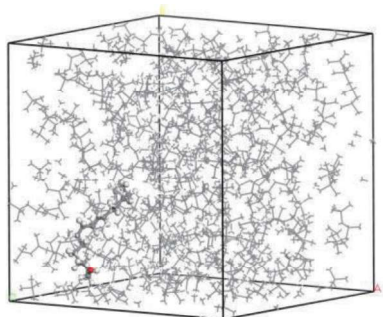


Fig.1 Material Studio による
モデルの構築

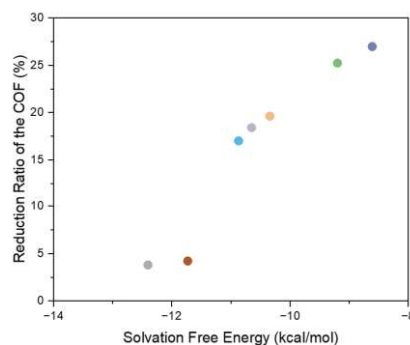


Fig.2 溶媒和自由エネルギーと
摩擦低減率の相関

Fig.2 は溶媒和自由エネルギーと摩擦低減率の相関を示している。AFM による摩擦測定の結果、セチルアルコールの摩擦低減効果は基油の種類によって大きく異なることが分かった。また、溶媒和自由エネルギーが大きいほど摩擦低減効果が高くなることが確認され、溶解性の低い基油中では、セチルアルコールがより強く基板に吸着し、摩擦を効果的に低減することが示唆された。

発表論文 (謝辞あり)

Gu H, Hirayama T, Yamashita N, et al. Relationship between friction reduction effect and solubility in base oil of organic friction modifier. Tribology International, 2025, 202: 110304.