

分子動力学シミュレーションによる潤滑油中添加剤の吸着エネルギーの算出
Calculation of absorbed energy of additives in lubricant by molecular dynamics simulation

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 平山 朋子

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。本研究では、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、酸化鉄と潤滑油の固液界面モデルを構築した後、MD 計算によって、異なる添加剤の吸着エネルギーを得た。吸着エネルギーを添加剤の吸着やすさの評価指標として使った。

Fig.1 は Material Studio による構築した固液界面モデルの一例を示している。潤滑油として、基油にヘキサシデカン、添加剤には鎖長の異なる脂肪酸、ヘキサ酸 (C6)、カプリン酸 (C10)、ミリスチン酸 (C14)、ステアリン酸 (C18) を用いた。

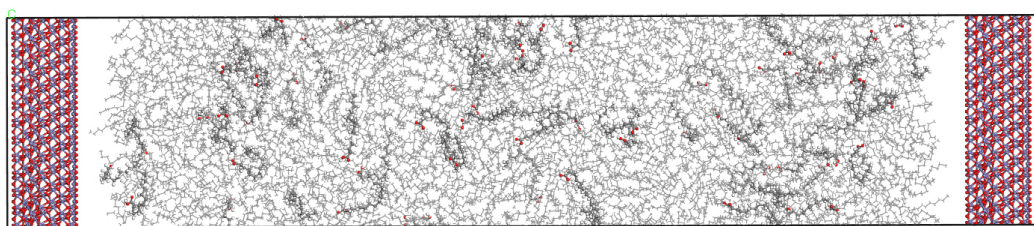


Fig.1 Material Studio による固液界面モデルの構築

シミュレーション過程として、固液界面モデルを構築した後、Smart 法で構造最適化を行い、250ps のアニーリングを行った。その後、500ps の MD 計算を行った。その間、2.5ps ごとに吸着エネルギーを計算することによって、吸着エネルギーの時間変化曲線を得た。Fig.2 は吸着エネルギーの計算結果を示している。結果により、脂肪酸添加剤の鎖長の増加に伴い、吸着エネルギーの絶対値が増加することが分かった。すなわち、脂肪酸添加剤が長ければ長いほど、酸化鉄表面に吸着しやすくなることを示唆している。

本研究は、添加剤の溶解構造と表面への吸着の関係を調査することを目指す。今後は、X 線小角散乱法や動的光散乱法等によって添加剤分子の基油内での構造を調べるとともに、添加剤の自己凝集のしやすさについて引き続いて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 を用いた定量的な評価を行っていく予定である。

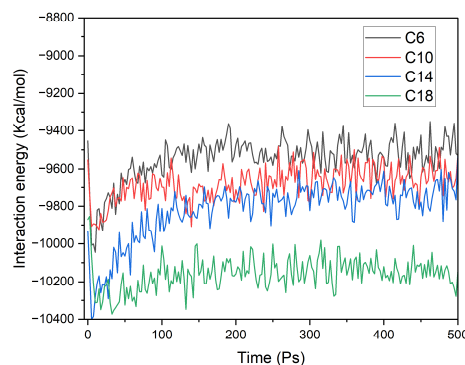


Fig.2 Material Studio による吸着エネルギーの算出