

潤滑油添加剤の吸着力と拡散性の解析

大阪大学大学院 工学研究科 NTN次世代協働研究所 関谷 暢

目的

金属/潤滑油界面での潤滑油添加剤の吸着力と拡散性を調査する。
これらの物性に対する汎用機械学習ポテンシャルの精度を評価する。

内容

Quantum ESPRESSOを利用した第一原理計算により、潤滑油添加剤の金属界面への吸着力を計算した。LAMMPSを利用した分子動力学シミュレーションにより、潤滑油添加剤の拡散性を計算した。汎用機械学習ポテンシャルを用いて潤滑油添加剤の吸着力と拡散性を求め、計算値と比較した。

結果

様々な分子構造を持つ潤滑油添加剤の吸着力と拡散性に関する知見を得た。汎用機械学習ポテンシャルにより求めた物性値の計算値との誤差は最大20%程度であった。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード（ノード時間 6407時間）
 SQUID GPUノード（ノード時間 61時間）