



铝材轧制油摩擦学性能的 分子动力学模拟与实验研究

韩 钊¹, 孙建林¹, 唐华杰¹, 黄 瑛¹, 曹士宏²

(1. 北京科技大学 材料科学与工程学院, 北京 100083;

2. 沧州华海炼油化工有限责任公司, 沧州 061000)

摘要: 结合分子动力学模拟与摩擦学实验, 从微观与宏观尺度分别对含亚磷酸二正丁酯(T304)、硫代磷酸复酯铵(T307)以及二烷基二硫代磷酸酯(DDE)的铝材轧制油的摩擦学性能进行研究。基于分子动力学模拟研究铝材轧制油的分子吸附能与限制剪切摩擦因数; 利用四球摩擦磨损实验研究轧制油的极压性能; 利用万能摩擦磨损实验研究轧制油的减摩性能; 进行轧制实验并通过EDS对铝板的轧后表面进行分析。结果表明: 上述三种添加剂均可以使铝材轧制油获得优异的极压性能与减摩性能, 其中, 添加T304后轧制油性能最佳。在基础油中添加1%(质量分数)T304时, 获得的铝材轧制油油膜强度达到1117 N, 相比于基础油, 其油膜强度提高235%, 摩擦因数减小41%, 轧后铝板表面质量大幅度提升。基于分子动力学模拟, 可预测铝材轧制油的极压、减摩等使用性能, 并在微观尺度分析其作用机理, 且模拟数据准确可靠, 满足高效制备优异性能的铝材轧制油需求。

关键词: 铝材轧制油; 添加剂; 分子动力学模拟; 摩擦学性能; 限制剪切

文章编号: 1004-0609(2022)-05-1342-09

中图分类号: TG335.12

文献标志码: A

引文格式: 韩 钊, 孙建林, 唐华杰, 等. 铝材轧制油摩擦学性能的分子动力学模拟与实验研究[J]. 中国有色金属学报, 2022, 32(5): 1342-1350. DOI: 10.11817/j.ysxb.1004.0609.2022-40125

HAN Zhao, SUN Jian-lin, TANG Hua-jie, et al. Molecular dynamics simulation and tribological experiments of tribological properties of aluminum rolling oil[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2022, 32(5): 1342-1350. DOI: 10.11817/j.ysxb.1004.0609.2022-40125

铝产业是国内材料产业的重要组成部分, 其规模及消费需求呈持续增长的发展趋势。铝加工产业的结构不断优化, 创新能力不断增强, 取得了丰富的科技成果^[1]。随着国内铝加工技术的发展, 铝板带生产工艺及装备国产化程度得到了大幅提高^[2], 为了满足铝板带宽幅、高速轧制及更高的轧后表面质量需求, 铝材轧制油的润滑性能需要进一步增强。添加剂是影响轧制油润滑性能的主要因素^[3-4], 为满足对铝材轧制油性能日益增长的润滑需求, 迫

切需要高效地筛选出性能优异的添加剂。筛选添加剂时, 传统的试错实验或凭借经验的方法无法对添加剂性能进行准确预测, 具有效率低、实验量大、准确率低等缺点。此外, 传统的实验类方法很难对分子或原子层面对添加剂在摩擦过程中的作用机理进行解释。

近年来, 随着量子力学理论的逐步完善、经验力场的不断开发以及计算机的普及和计算速度和容量的不断提升, 分子动力学模拟的理论和方法得到

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51474025)

收稿日期: 2021-04-07; 修订日期: 2021-06-18

通信作者: 孙建林, 教授, 博士; 电话: 010-62333768; E-mail: sjl@ustb.edu.cn

了快速的发展^[5]。分子动力学模拟可从原子及分子水平上模拟材料的宏观性质, 从而揭示材料在不同条件下变化的微观细节^[6]。通过分子动力学, TA等^[7]模拟三嵌段共聚物在铁表面的物理吸附, 研究了负载压力和共聚物浓度对添加剂分子摩擦学性能的影响; SHI等^[8]模拟有机摩擦改性剂在羟基化SiO₂表面的物理吸附, 研究了分子极性和温度对添加剂分子解吸能力的影响; 潘伶等^[9]模拟了环己烷和环二十四烷的限制剪切润滑过程, 研究了润滑剂的承载能力与含碳量的关系; 李源才等^[10]结合分子动力学研究了单晶/多晶镍复合体的剪切性能, 并分析了剪切速率与温度对剪切模量的影响; BAI等^[11]模拟类金刚石薄膜与金刚石尖端之间的摩擦和磨损, 研究了粗糙度对磨损形式以及磨损率的影响; 钱相飞等^[12]结合分子动力学与实验研究了不同浇铸温度和浇铸时间对Cu/Al多层膜连接过程界面扩散的影响, 从微观层面揭示了原子结构对金属薄膜力学性能的影响; AHN等^[13]模拟了玻璃中各元素对划痕过程中表面变形的影响, 并给出了弹性变形量对摩擦因数的影响; 张海峰等^[14]利用分子动力学研究Cu/Ti复合体在单轴拉伸过程中的微观力学行为, 在拉伸载荷作用下, 分析位错优先形核的位置及其运动轨迹, 当应变速率达到 $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 时, 模型在变形过程中会出现非晶化, 且随着应变增加表现出应变硬化现象; 刘晓波等^[15]采用分子动力学方法研究Al₂Cu的拉伸变形行为, 分析了温度和应变速率对体系拉伸变形行为的影响; 丁军等^[16]采用分子动力学方法研究了NiTi合金相变行为的微观机理, 模拟晶粒尺寸和冷却速率对NiTi相变温度的影响, 并分析了以上因素对NiTi合金相变过程中马氏体相和奥氏体相微观生长机制的影响; 刘欢等^[17]指出分子动力学模拟方法可以实现金属材料纳米加工时的“实时在线”观察, 从而更好地理解其加工机理。

本文作者结合分子动力学模拟与摩擦学实验, 从微观与宏观尺度研究了含不同添加剂的铝材轧制油的摩擦学性能, 通过理论计算与实验研究的相互印证, 表明利用分子动力学模拟摩擦磨损过程具有准确性与可靠性, 进而为高效研制新型铝材轧制油提供理论指导。

1 计算与实验方法

1.1 理论计算

1.1.1 吸附能计算

采用分子动力学模拟(MD)方法, 运用MedeA-LAMMPS软件包中的Forcite模块, 对亚磷酸二正丁酯(T304)、硫代磷酸复酯铵(T307)和二烷基二硫代磷酸酯(Dialkyl Dithiophosphate, DDE)分子进行几何优化, 并在添加剂分子与铝表面体系中选取Dynamics功能, 获得分子在铝表面的分子动力学运动轨迹, 计算轨迹各位置的吸附能^[18], 其中T304、T307、DDE的分子结构如图1所示。

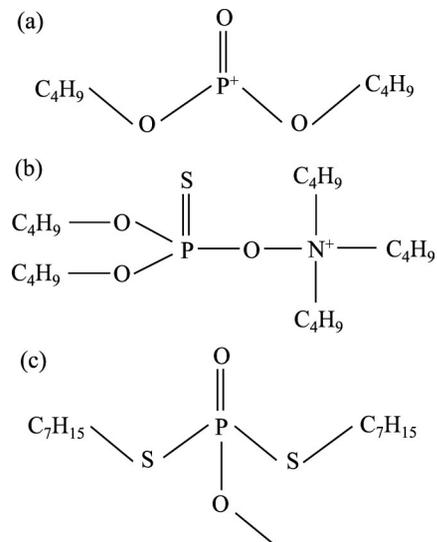


图1 T304、T307、DDE的分子结构示意图

Fig. 1 Schematic diagrams of molecular structures of T304(a), T307(b) and DDE(c)

1.1.2 限制剪切过程模拟及摩擦因数计算

运用Build layer构建钢-流体-铝体系, 为提高计算效率, 选用十三烷(W1-130)作为基础油分子, 并保持添加剂在混合分子体系中具有相同的质量分数。流体层中十三烷、T304、T307和DDE的分子数量分别为15、10、5和6, 最终体系大小为 $2.006 \text{ nm} \times 2.006 \text{ nm} \times 4.168 \text{ nm}$; 在初始压力0.5 GPa下对体系进行结构优化, 在NPT等温等压系综下, 取室温298 K为参考温度, 上下表面的速度大小相等, 方向沿水平相反, 速度取 0.01 \AA/ps (1 m/s), 运用Confined Shear进行限制剪切, 计算剪切过程中接触表面的正压力与摩擦力, 从而获得摩擦因数。

1.2 实验方法

1.2.1 实验材料

基础油为W1-130轻质矿物油；添加剂为亚磷酸二正丁酯T304、硫代磷酸复酯铵T307和二烷基二硫代磷酸酯DDE，分析纯；板材为1100系列纯铝板。基础油W1-130的理化性能如表1所示。

表1 基础油W1-130的理化性能

Table 1 Physicochemical properties of W1-130

Index	Value	Standard
Initial boiling point/°C	≥275	
Dry point/°C	≤315	GB/T 6536
Total distillate point/%	≥98	
Flash point/°C	≥130	GB/T 261
Viscosity at 40 °C/(mm ² ·s ⁻¹)	3.3–4.5	GB/T 265
Aromatics mass fraction/%	≤0.5	SH/T 0409
Sulfur mass fraction/(mg·kg ⁻¹)	≤2	SH/T 0253
Water soluble acid base	None	GB/T 259

1.2.2 实验仪器

MS-10A四球摩擦试验机；MM-W1A立式万能摩擦磨损试验机； d 95 mm×200 mm×200 mm四辊冷轧实验轧机；扫描电子显微镜。

1.2.3 四球摩擦学性能测试

在MS-10A四球摩擦磨损试验机上，参照GB/T 3142—2019标准，取室温298 K，时间10 s，转速1450 r/min，测试不同轧制油的油膜强度，实验用钢球为GCr15标准钢球，轧制油配方如表2所示。

表2 铝材轧制油配方

Table 2 Recipes of aluminum rolling oil

Oil No.	Mass fraction/%			
	T304	T307	DDE	W1-130
1	0	0	0	100
2	0.25	0	0	99.75
3	0.5	0	0	99.5
4	1	0	0	99
5	0	0.25	0	99.75
6	0	0.5	0	99.5
7	0	1	0	99
8	0	0	0.25	99.75
9	0	0	0.5	99.5
10	0	0	1	99

1.2.4 钢-铝摩擦副磨损性能测试

使用立式万能磨损试验机，在销-盘磨损形式下，自动采集不同轧制油润滑条件下的摩擦因数，测试条件：接触压力200 N，室温298 K，时间30 min，转速300 r/min，试样销为直径4.8 mm的45钢，磨盘为直径31.7 mm的铝盘。

1.2.5 铝板轧后表面分析

在不同润滑条件下，使用 d 95 mm×200 mm×200 mm的四辊轧机对铝板进行7个道次的轧制，前5道次压下分配系数分别为33%、27%、21%、12%、7%，轧辊压靠后，继续进行2个道次的轧制，以得到该润滑条件下的最小可轧厚度，并选取终轧后的铝板，通过EDS分析其轧后表面。

2 结果与分析

2.1 吸附构型及吸附能分析

吸附能可用来判断添加剂分子与铝表面的相互作用强度，吸附能越强，添加剂吸附在金属表面也越稳定。各添加剂分子在铝表面的运动轨迹中，吸附能最大值所对应的位置即为该添加剂分子在铝表面的稳定吸附构型。3种添加剂单分子在铝表面的吸附能与稳定吸附构型如图2所示。

从图2可以看出，各添加剂的吸附能均为负值，这是由于吸附过程为放热过程，伴随着体系能量的降低，体系更加稳定^[19]，且3种添加剂的吸附能数值均大于40 kJ/mol，这说明在吸附过程中各体系倾向于生成新的化学键^[20]，从而有助于形成更稳定的润滑薄膜。根据吸附能，添加剂的吸附强度大小顺序为T304>T307>DDE，这说明3种添加剂形成吸附膜的稳定性由高到低为T304>T307>DDE。分析添加剂在铝表面的吸附构型可知，3种添加剂分子稳定吸附时均平行与铝表面，这可用吸附机理解释，添加剂分子中的非极性的基团如碳链会被“牵引”以平行或倾斜的方式分布，从而有助于致密润滑膜的形成^[21]。

2.2 限制剪切的摩擦力与摩擦因数计算

限制剪切实验可模拟摩擦副表面在润滑条件下的摩擦磨损过程，获得剪切过程中分子的运动特点

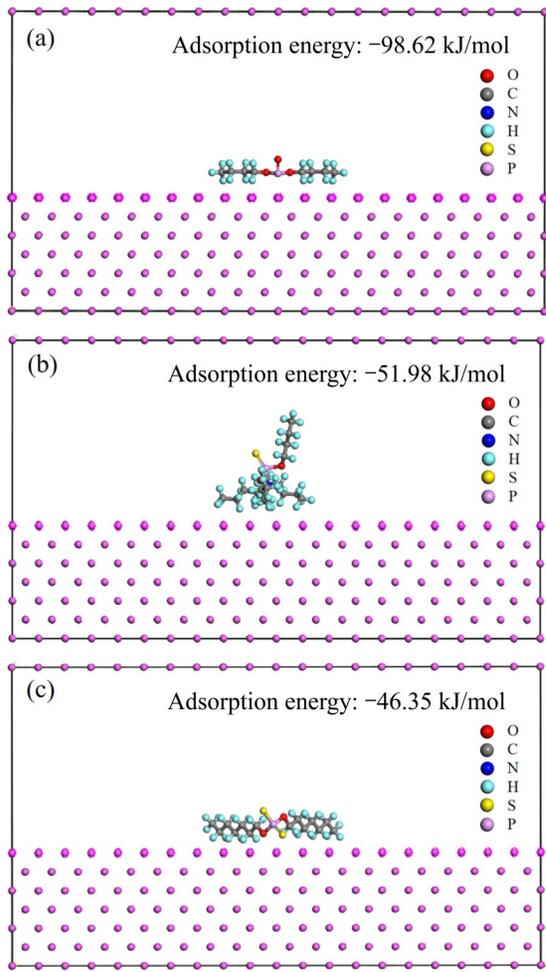


图2 T304、T307、DDE 的吸附能和稳定吸附构型
 Fig. 2 Adsorption energy and stable adsorption models of T304(a), T307(b) and DDE(c)

以及摩擦力, 可为预测和分析添加剂分子的使用性能提供理论指导。不同轧制油润滑体系的限制剪切过程如图3所示, 其中各原子代表颜色见图2标注。限制剪切过程中不同润滑体系下的摩擦力变化如图4所示。

从图3中可以看出, 各体系在剪切过程中, 分子都会向金属表面作吸附运动, 从而形成润滑膜起到极压与减摩作用。分析图4可知, 在相同的模拟条件下, 使用T304添加剂限制剪切时的平均剪切摩擦力最小, 仅为纯基础油剪切摩擦力的47.36%, 从理论上说明T304拥有优异的减摩性能; T307与DDE限制剪切的平均剪切摩擦力接近, 相较于纯基础油降低了15.1%, 说明T307与DDE两种添加剂同样拥有良好的减摩性能。剪切过程中, 4个润滑体系在剪切过程中的接触表面正压力几乎相同, 平均值为0.808 GPa。结合体系的正压力与摩擦力受力面积, 可计算出4个体系的限制剪切摩擦因数, 结果如表3所示。

2.3 铝材轧制油摩擦学性能分析

油膜强度、摩擦因数与磨斑直径是表征轧制油摩擦学性能的主要参数, 通过四球摩擦磨损实验, 不同浓度添加剂轧制油的油膜强度如图5所示。由图5可以看出, 添加T307、T304、DDE后, 轧制

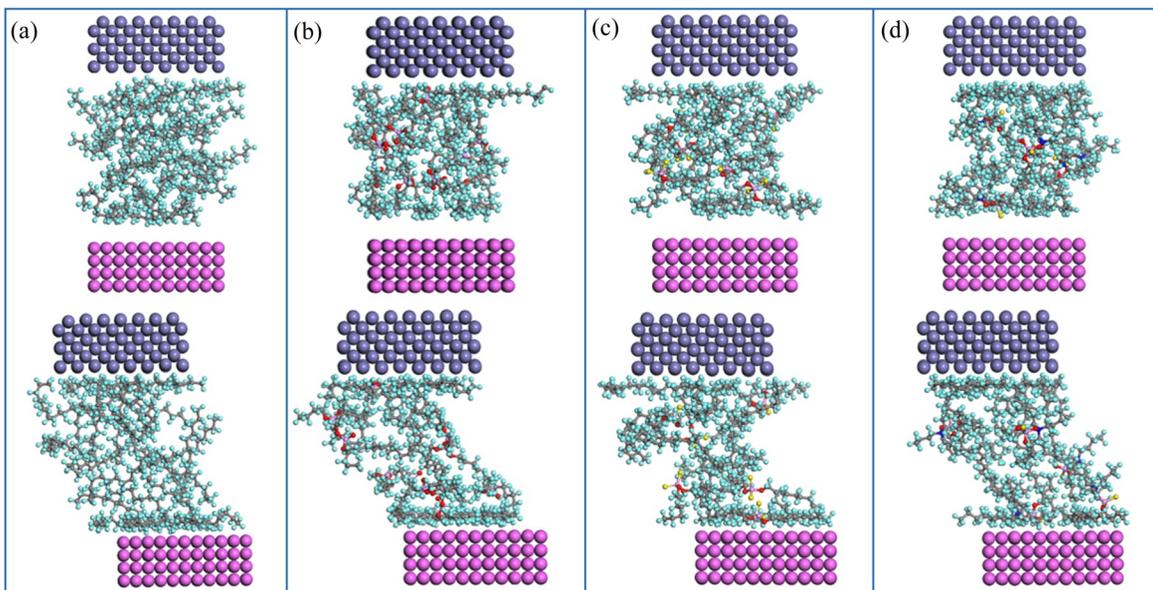


图3 四种体系的限制剪切过程
 Fig. 3 Confined shear processes of four systems: (a) W1-130; (b) W1-130+T304; (c) W1-130+T307; (d) W1-130+DDE

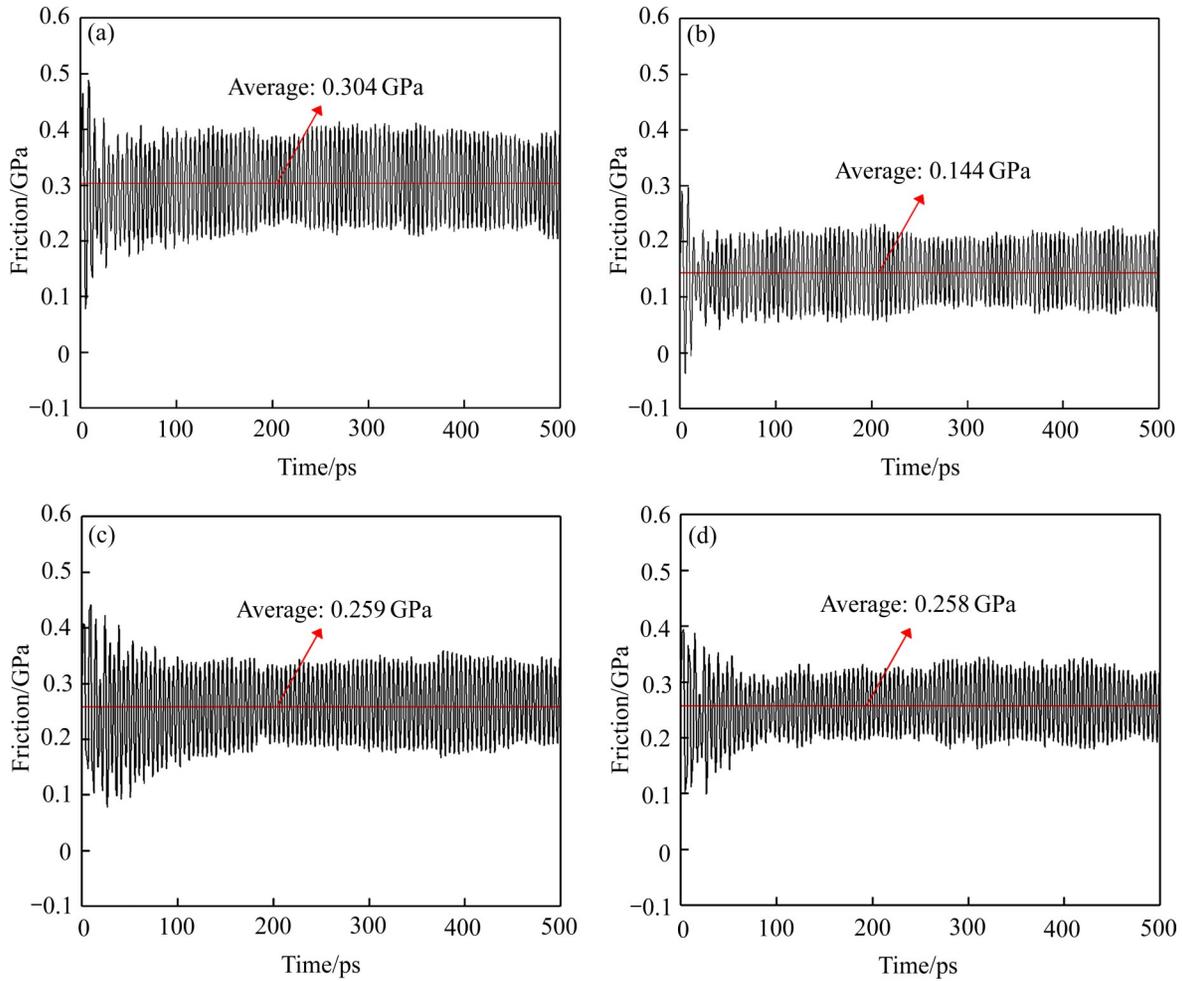


图4 四种体系的限制剪切摩擦力

Fig. 4 Confined shear friction of four systems: (a) W1-130; (b) W1-130+T304; (c) W1-130+T307; (d) W1-130+DDE

表3 4种体系的限制剪切摩擦因数

Table 3 Confined shear friction coefficient of four systems

System	Friction coefficient
W1-130	0.161
W1-130+T304	0.076
W1-130+T307	0.137
W1-130+DDE	0.136

油的油膜强度均得到显著提高，且随着各添加剂浓度的增大而增大；之后随着添加剂浓度较大而接近饱和吸附，油膜强度增势趋于缓和。T304相较于其他两种添加剂极压性能最佳，在添加量为1%时油膜强度达到了1117 N，比基础油提高了235%。三种添加剂的油膜强度由大到小的顺序为T304>T307>DDE，与吸附强度顺序吻合，说明可以通

过分子动力学吸附模拟，预测铝材轧制油的极压性能。

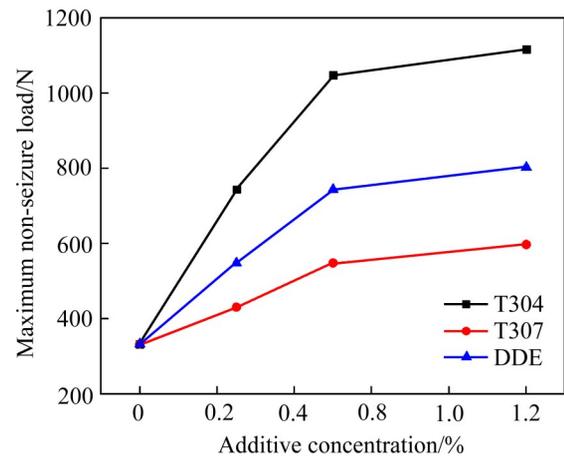


图5 不同浓度添加剂轧制油的油膜强度

Fig. 5 Maximum non-seizure load of rolling oil with different additive concentration

2.4 钢-铝摩擦副摩擦因数分析

取轧制油 1、4、7、10, 通过万能摩擦磨损实验, 自动采集不同润滑条件下钢-铝摩擦副表面的摩擦因数, 结果如图 6 所示。

由图 6 可以看出, 在相同实验条件下, 不同轧制油万能摩擦磨损的摩擦因数由大到小的顺序为 W1-130>T307>DDE>T304, 这表明三种添加剂可以提升轧制油的润滑性能, 进而有效降低摩擦因数, 其中含 T304 的轧制油减摩性能最佳, 添加 1 %

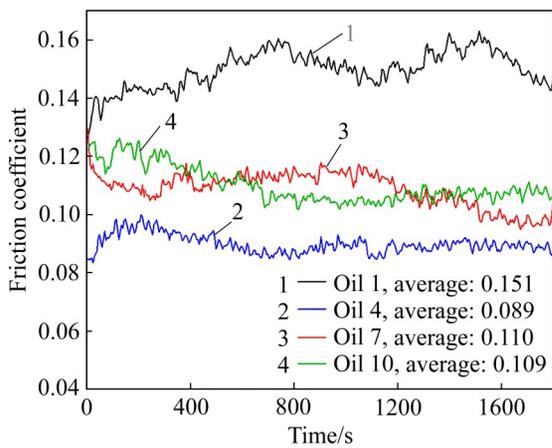


图 6 含 1% 不同添加剂的轧制油的摩擦因数
Fig. 6 Friction coefficient of different rolling oil with 1% additive

(质量分数)的 T304 可以使铝轧制基础油摩擦因数降低 41%。结合限制剪切模拟, 实验与模拟结果规律吻合, 这充分说明了可以通过限制剪切模拟, 预测铝材轧制油的减摩性能。

2.5 铝板冷轧轧后表面分析

采用扫描电镜观察轧制油 1、4、7 与 10 冷轧后铝板的表面形貌, 如图 7 所示。其中油 1(纯基础油)与油 10(基础油+DDE)润滑状态下, 铝板表面出现较多的大颗粒磨损粒子, 有严重的黏着磨损现象, 且表面犁削沟较深。犁削沟较深说明轧辊表面凸起直接压入到铝板表面, 在相对运动下使犁削明显^[22], 严重的犁削会导致大颗粒铝粉脱落, 影响铝板表面质量。纯基础油与基础油+DDE 由于油膜强度较低, 在较高的轧制压力中易出现油膜破损现象, 导致出现各种表面缺陷。添加 T304 与 T307 的轧制油油膜强度较高, 形成的润滑薄膜比较稳定, 大幅度减少了轧辊与金属表面的直接接触, 导致轧后表面的犁削沟较浅且磨损粒子尺寸较小, 轧后表面质量得到提高。

利用 EDS 对轧后铝板进行面扫描, 得到各润滑条件下轧后铝板的表面元素分布, 如图 8 所示。



图 7 不同轧制油轧后铝板表面形貌
Fig. 7 Surface morphologies of aluminum rolled with different rolling oil: (a) Oil 1; (b) Oil 4; (c) Oil 7; (d) Oil 10

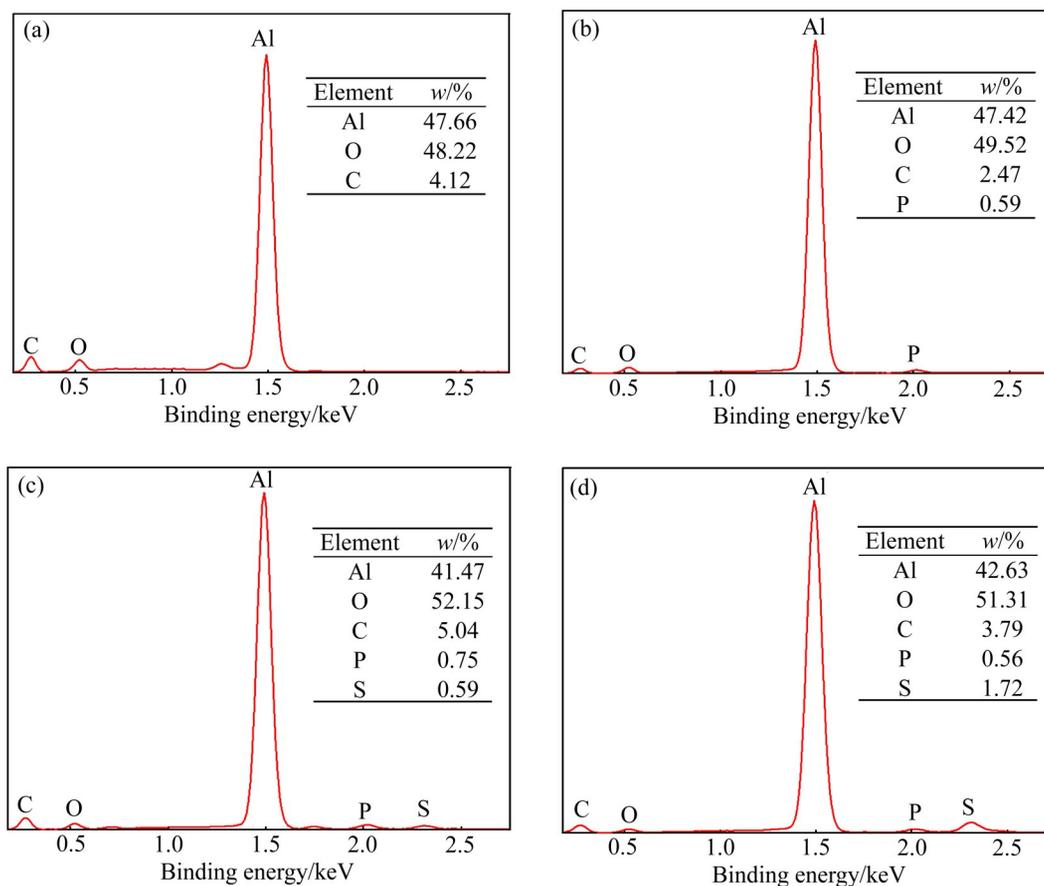


图8 各润滑条件下轧后铝板的表面元素分布

Fig. 8 Surface element distribution after rolling with different rolling oil: (a) Oil 1; (b) Oil 4; (c) Oil 7; (d) Oil 10

由图8可以看出,相比于基础油, T304的轧后表面含P元素, T307与DDE轧后表面含P和S元素,这符合添加剂分子在铝表面的吸附效应,且T304、T307和DDE在铝表面的吸附能均大于40 kJ/mol,进一步验证了活性元素P、S通过化学反应吸附在铝表面。

3 结论

1) 分子动力学模拟表明, T304、T307、DDE在铝表面的吸附能由大到小的顺序为T304、T307、DDE,且均大于40 kJ/mol,说明3种添加剂化学吸附在铝表面;限制剪切模拟表明,不同体系的限制剪切摩擦因数由大到小的顺序为纯基础油、T307、DDE、T304,其中使用T304添加剂限制剪切时的摩擦因数最小,仅为纯基础油剪切摩擦因数的47%。

2) 四球摩擦磨损实验表明,添加T304、T307、DDE均可有效提升基础油油膜强度,且极压性能由大到小的顺序为T304、T307、DDE,添加1% T304可使基础油油膜强度提升235%;通过万能摩擦磨损实验,添加T304、T307、DDE均可有效降低摩擦副表面摩擦因数,且减摩性能由大到小的顺序为T304、DDE、T307,添加1% T304可使基础油摩擦因数降低41%。

3) 分子动力学模拟的吸附强度符合四球摩擦磨损实验的极压性能测量值;限制剪切过程的体系剪切摩擦因数符合钢-铝摩擦副摩擦磨损实验测量值;轧后表面EDS分析进一步验证了3种添加剂在铝表面的化学吸附。分子动力学模拟可预测铝材轧制油的极压、减摩等使用性能,以及在微观尺度分析其作用机理,且模拟数据准确可靠,可提高添加剂筛选效率,以满足铝板带宽幅、高速以及高表面质量的轧制需求。

REFERENCES

- [1] 余欣未, 蒋显全, 谭小东, 等. 中国铝产业的发展现状及展望[J]. 中国有色金属学报, 2020, 30(4): 709–718.
SHE Xin-wei, JIANG Xian-quan, TAN Xiao-dong, et al. Status and prospect for aluminum industrial development in China[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2020, 30(4): 709–718.
- [2] 薛春江. 国产宽幅大规格高精铝板带轧制生产线特点[J]. 轻合金加工技术, 2017, 45(5): 30–33.
XUE Chun-jiang. Characteristics of domestic wide-large-sized and high-precision aluminum plate and sheet rolling line[J]. Light Alloy Fabrication Technology, 2017, 45(5): 30–33.
- [3] CASTRO W, WELLER D E, CHEENKACHORN K, et al. The effect of chemical structure of basefluids on antiwear effectiveness of additives[J]. Tribology International, 2005, 38(3): 321–326.
- [4] NICHOLLS M A, DO T, NORTON P R, et al. Review of the lubrication of metallic surfaces by zinc dialkyl-dithiophosphates[J]. Tribology International, 2005, 38(1): 15–39.
- [5] EWEN J P, HEYES D M, DINI D. Advances in nonequilibrium molecular dynamics simulations of lubricants and additives[J]. Friction, 2018, 6(4): 349–386.
- [6] DONG Y L, LI Q Y, MARTINI A. Molecular dynamics simulation of atomic friction: A review and guide[J]. Journal of Vacuum Science & Technology A, 2013, 31(3): 030801.
- [7] TA T D, TIEU A K, ZHU H, et al. Tribological behavior of aqueous copolymer lubricant in mixed lubrication regime[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2016, 8(8): 5641–5652.
- [8] SHI J Q, ZHOU Q, SUN K, et al. Understanding adsorption behaviors of organic friction modifiers on hydroxylated SiO₂ (001) surfaces: effects of molecular polarity and temperature[J]. Langmuir, 2020, 36(29): 8543–8553.
- [9] 潘 伶, 鲁石平, 陈有宏, 等. 分子动力学模拟环烷烃含碳量对边界润滑的影响[J]. 机械工程学报, 2020, 56(1): 110–118.
PAN Ling, LU Shi-ping, CHEN You-hong, et al. Molecular dynamics simulation on boundary lubrication: the effect of cycloalkane carbon content[J]. Journal of Mechanical Engineering, 2020, 56(1): 110–118.
- [10] 李源才, 江五贵, 周 宇. 单晶/多晶镍复合体剪切过程分子动力学模拟[J]. 中国有色金属学报, 2020, 30(8): 1837–1845.
LI Yuan-cai, JIANG Wu-gui, ZHOU Yu. Molecular dynamics simulation on shear mechanical properties of single crystal/polycrystalline Ni composites[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2020, 30(8): 1837–1845.
- [11] BAI L C, SRIKANTH N, KORZNIKOVA E A, et al. Wear and friction between smooth or rough diamond-like carbon films and diamond tips[J]. Wear, 2017, 372/373: 12–20.
- [12] 钱相飞, 郭巧能, 杨仕娥, 等. Cu/Al 浇铸界面连接及拉伸性能分子动力学模拟[J]. 中国有色金属学报, 2020, 30(12): 2886–2900.
QIAN Xiang-fei, GUO Qiao-neng, YANG Shi-e, et al. Molecular dynamics simulation of interface bonding and tensile properties of Cu/Al casting[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2020, 30(12): 2886–2900.
- [13] AHN Y N, HARRIS J T. The effect of individual elements of alkali aluminosilicate glass on scratch characteristics: a molecular dynamics study[J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 2020, 536: 119840.
- [14] 张海峰, 闫海乐, 贾 楠, 等. Cu/Ti 纳米层状复合体塑性变形机制的分子动力学模拟研究[J]. 金属学报, 2018, 54(9): 1333–1342.
ZHANG Hai-feng, YAN Hai-le, JIA Nan, et al. Exploring plastic deformation mechanism of multilayered Cu/Ti composites by using molecular dynamics modeling[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2018, 54(9): 1333–1342.
- [15] 刘晓波, 熊 震, 方 洲, 等. Al₂Cu 拉伸变形的分子动力学模拟[J]. 中国有色金属学报, 2018, 28(9): 1746–1754.
LIU Xiao-bo, XIONG Zhen, FANG Zhou, et al. Molecular dynamics simulation of tensile deformation of Al₂Cu[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2018, 28(9): 1746–1754.
- [16] 丁 军, 赵昊男, 黄 霞, 等. 微观尺度下晶粒尺寸和冷却速率对多晶 NiTi 合金相变温度的影响[J]. 中国有色金属学报, 2019, 29(3): 569–578.
DING Jun, ZHAO Hao-nan, HUANG Xia, et al. Microscopic investigation to influence of grain size and cooling rate on phase transformation temperature for polycrystalline NiTi alloy[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2019, 29(3): 569–578.
- [17] 刘 欢, 郭永博, 赵鹏越, 等. 基于分子动力学模拟的金属材料纳米加工机理研究进展[J]. 中国有色金属学报, 2019, 29(8): 1640–1653.
LIU Huan, GUO Yong-bo, ZHAO Peng-yue, et al. Research progress on nano-machining mechanism of metallic materials based on molecular dynamics simulation[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2019, 29(8): 1640–1653.
- [18] NIU R J, ZHENG Q C, ZHANG J L, et al. Molecular

- dynamics simulations studies and free energy analysis on inhibitors of MDM2-p53 interaction[J]. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 2013, 46: 132–139.
- [19] 范荣玉, 郑细鸣. 铅(II)离子印迹复合膜对重金属离子的吸附热力学与吸附动力学[J]. *化工学报*, 2013, 64(5): 1651–1659.
- FAN Rong-yu, ZHENG Xi-ming. Thermodynamics and dynamics for adsorption of heavy metal ions on Pb(II) ion-imprinted composite membrane[J]. *CIESC Journal*, 2013, 64(5): 1651–1659.
- [20] BASERI J R, PALANISAMY P N, SIVAKUMAR P. Application of polyaniline nano composite for the adsorption of acid dye from aqueous solutions[J]. *E-Journal of Chemistry*, 2012, 9: 415234.
- [21] 严旭东, 孙建林, 熊 桑. 铜轧制油中磷酸酯的吸附特性与润滑性能[J]. *中国有色金属学报*, 2018, 28(6): 1168–1175.
- YAN Xu-dong, SUN Jian-lin, XIONG Sang. Adsorption characterization and lubrication properties of phosphate ester in copper rolling oil[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2018, 28(6): 1168–1175.
- [22] 束俊洲, 孙建林, 曹士宏, 等. 铝板带轧制油润滑性能与腐蚀性能相关性研究[J]. *轻合金加工技术*, 2019, 47(1): 29–36.
- SHU Jun-zhou, SUN Jian-lin, CAO Shi-hong, et al. Research on relevance between lubricating property and corrosion property of rolling oil for aluminum strip[J]. *Light Alloy Fabrication Technology*, 2019, 47(1): 29–36.

Molecular dynamics simulation and tribological experiments of tribological properties of aluminum rolling oil

HAN Zhao¹, SUN Jian-lin¹, TANG Hua-jie¹, HUANG Ying¹, CAO Shi-hong²

(1. School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China;

2. Huahai Refinery and Petrochemical Co., Ltd., Cangzhou 061000, China)

Abstract: The tribological properties of aluminum rolling oil added with dibutyl phosphite(T304), ammonium diphosphate(T307) and dialkyl dithiophosphate(DDE) were studied by molecular dynamics simulation and tribological experiments. The molecular adsorption energy and the confined shear friction coefficient of the rolling oil were studied by molecular dynamics simulation. The extreme pressure performance of the rolling oil was studied by four-ball wear tester. The antifriction performance of the rolling oil was studied by steel-aluminum friction pairs. And the rolled surface morphology of aluminum strip was also studied by EDS. The results show that all aluminum rolling oil has excellent extreme pressure and friction reduction properties after adding additives, among which T304 is the best. When 1% (mass fraction) T304 is added to the base oil, the maximum non-seizure load reaches 1117 N. The friction coefficient decreases by 41%. And the rolled surface morphology of aluminum strip is the optimal. Based on the molecular dynamics simulation, the extreme pressure and antifriction performance of aluminum rolling oil can be predicted in micro scale. And the mechanism was also analyzed in micro scale. The simulation data are accurate and reliable, which can meet the demand of high-efficiency preparation of aluminum rolling oil with excellent performance.

Key words: aluminum rolling oil; additive; molecular dynamics simulation; tribological property; confined shear

Foundation item: Project(51474025) supported by the National Natural Science Foundation of China

Received date: 2021-04-07; **Accepted date:** 2021-06-18

Corresponding author: SUN Jian-lin; Tel: +86-10-62333768; E-mail: sjl@ustb.edu.cn

(编辑 龙怀中)