

文章编号: 1004 - 0609(2005)08 - 1305 - 06

## 二烷基二硫代磷酸锌润滑添加剂的抗磨机理<sup>①</sup>

文小红, 王学业, 刘万强, 谭援强  
(湘潭大学 化学学院, 湘潭 411105)

**摘要:** 用量子化学方法计算了 4 种二烷基二硫代磷酸锌(ZDDP)与铁原子簇的化学吸附作用能,并探讨了此种作用能与抗磨性能的关系。用前线电子密度和原子净电荷作为判据分析了 4 种添加剂分子与铁原子间键合的强弱和反应性的大小。计算表明二烷基二硫代磷酸锌的活性元素为 6 位和 7 位硫原子,其与铁发生摩擦化学反应时,最可能的断键位置是 6 位和 7 位硫原子的双键。反应生成由多磷酸盐和铁硫化物组成的反应膜,该膜具有较好的抗磨作用,仲烷基 ZDDP 比伯烷基 ZDDP 的抗磨性好,而伯烷基 ZDDP 的抗磨性优于芳香基 ZDDP 的。在伯烷基上吸电子基团能增强硫原子与铁原子之间的化学吸附作用力。量子化学的计算预测结果与摩擦学实验结果相符。

**关键词:** 二烷基二硫代磷酸锌; 润滑机理; 量子化学计算

中图分类号: O 641

文献标识码: A

## Anti-wear property of zinc dialkyldithiophosphate

WEN Xiao-hong, WANG Xue-ye, LIU Wan-qiang, TAN Yuan-qiang  
(College of Chemistry, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)

**Abstract:** The chemical adsorption between four kinds of zinc dialkyldithiophosphates and Fe clusters were investigated by chemical quantum method, and the relationship between adsorption energy and anti-wear property was discussed by frontier molecular orbital theory. The bond energy of the interaction between zinc dialkyldithiophosphate molecules and Fe atoms were analyzed by frontier electron densities and net atomic charge of them. The results show that the S<sub>6</sub> and S<sub>7</sub> atoms are the most likely points of attack during the surface reaction. The attack causes the cleavage of P-S double bonds, then the decomposition products reacting with the surface of Fe metal lead to the formation of the anti-wear and anti-friction film largely composed of polyphosphates and sulphides. As anti-wear agents, the *n*-hexyl ZDDP is found to be more effective than the *n*-hexyl ZDDP, and the *n*-hexyl ZDDP is superior to the phenyl ZDDP. The electron withdrawing group (F) being introduced into the alkyl groups of the *n*-hexyl ZDDP is able to strengthen chemical adsorption between ZDDP and Fe atoms. The prediction mechanism of the film formation is in good agreement with experimental results.

**Key words:** zinc dialkyldithiophosphate; lubrication mechanism; quantum chemistry calculations

二烷基二硫代磷酸锌(ZDDP)是一种重要的润滑油添加剂,具有优良的抗磨性能,被广泛地应用于发动机油、液压油及齿轮油中。有关 ZDDP 性能测试和应用的研究报道较多<sup>[1-8]</sup>,而理论研究相对较少。近年来,润滑添加剂结构-性能相关性研究引起了人们广泛兴趣<sup>[9-10]</sup>,并取得了一些成果。

Beltzer 等<sup>[11]</sup>从理论和实验两方面讨论了添加剂分子结构对其减摩性能的影响以及影响碳链间色散力作用的因素。谭援强等<sup>[12]</sup>用分子轨道指数讨论了羧基、羟基和甲脂基等极性基团与铝的相互作用,并解释了醇脂的协同减摩效应。饶文琦等<sup>[13]</sup>讨论了六元含氮杂环化合物的分子结构对其抗磨性的影

① 基金项目: 湖南省自然科学基金资助项目(02JJY2019); 湖南省中青年科技基金资助项目(01JZY2099)

收稿日期: 2005 - 01 - 07; 修订日期: 2005 - 05 - 09

作者简介: 文小红(1968 -),女,硕士研究生。

通讯作者: 王学业,教授;电话: 0732 - 8292206; E-mail: wxueye@xtu.edu.cn

响。Hirano 等<sup>[14]</sup>运用表面化学理论对润滑剂分子间的链长匹配效应进行了深入研究。用量子化学方法对润滑剂的结构-性能关系进行定性或定量研究,具有重要理论意义和实用价值。本文作者根据量子化学理论计算得到的量子化学参数,讨论了不同烷基和芳基的 ZDDP 与金属铁原子簇的作用能力,以及烷基上引入吸电子基团后对 ZDDP 抗磨性能的影响,可为判别抗磨性能的优劣及设计性能更好的抗磨添加剂分子提供理论依据和方法。

### 1 计算模型和方法

依据抗磨添加剂的结构特征,选取了 4 种代表性化合物二正己基二硫代磷酸锌(I)、二仲己基二硫代磷酸锌(II)、二苯基二硫代磷酸锌(III)和二(6,6,6-三氟代己基)二硫代磷酸锌(IV)进行计算研究(见图 1)。根据化学吸附成膜理论,抗磨添加剂分子与金属发生化学吸附,并在金属表面形成致密油膜,以隔离两摩擦表面的直接接触,起到润滑和抗磨作用。从宏观上看,这种油膜是由单个抗磨添加剂分子在金属表面定向排列所组成<sup>[15]</sup>。从微观的分子水平和电子结构层上考察,单个分子与金属表面的化学吸附作用过程实质上是分子中带孤对电子的原子与铁原子的 d 轨道相互作用形成配位键。因此,可以用量子化学方法计算单个分子与铁原子簇的化学吸附作用能来考察油膜的牢固程度,以推测其润滑抗磨性能。图 1 所示为二烷基二硫代磷(ZDDP)化合物的计算模型。图 2 所示为二烷基二硫代磷(ZDDP)与铁原子簇(Fe<sub>5</sub>)的吸附模型。

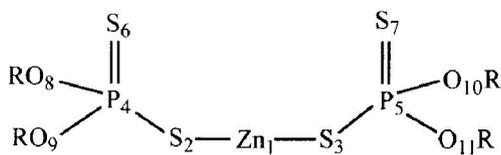


图 1 ZDDP 的计算模型

Fig. 1 Calculated model of ZDDP

用 Gaussian98 量子化学程序包,采用从头算 HF 方法,以 STO-3G 基组对化合物 I ~ IV 进行全优化计算,得到 4 种化合物的平衡几何构型及分子轨道指数,然后以 Lan12mb 基组对上述 4 种添加剂分子进行全优化计算,在优化平衡几何构型基础上计算其与 Fe<sub>5</sub> 的吸附作用能。由于 Fe 具有体心立方晶体结构,添加剂分子与体心金属原子作用的几率比与顶角金属原子的大得多<sup>[16]</sup>,因此,本文作者

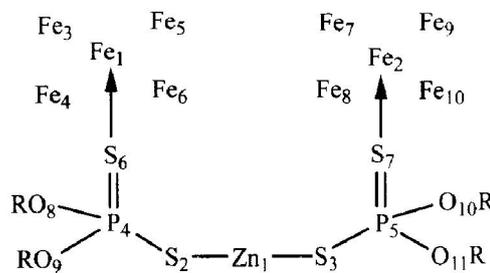


图 2 ZDDP 与 Fe<sub>5</sub> 簇的吸附模型

Fig. 2 Adsorbing model of ZDDP and Fe<sub>5</sub>

(R= *n*-C<sub>6</sub>H<sub>13</sub>)

选取以 Fe 体心原子组成的 Fe<sub>5</sub> (110) 面为计算模型,计算添加剂分子与体心 Fe 原子之间的吸附。首先,以二正己基二硫代磷酸锌作为模型将体心 Fe 原子分别吸附于 2 位和 3 位的 S 原子上;然后依次将体心 Fe 原子分别吸附在 4 位和 5 位的 P 原子,6 位和 7 位的 S 原子及 8 位和 10 位(或 9 位和 11 位)的 O 原子上逐一进行计算,得出最稳定的吸附模型及确定优先与铁吸附的原子;最后,根据上述计算得出的最稳定吸附模型对化合物 I, II, III 和 IV 与铁的吸附进行计算。

### 2 结果及讨论

#### 2.1 平衡几何构型

表 1 所列为 4 个化合物的平衡几何构型参数,键长和键角中的标号见图 1。由于 ZDDP 具有一定对称性,相应的原子处于对称一致位置,在处理数据时,取半个 ZDDP 分子进行讨论。从表 1 可见,化合物 I ~ IV 的部分结构彼此相近,计算得到的 Zn<sub>1</sub>-S<sub>2</sub>, S<sub>2</sub>-P<sub>4</sub> 和 P<sub>4</sub>-O<sub>8</sub> 键分别为 0.211, 0.214 和 0.197 nm 左右,呈单键性质,而 P<sub>4</sub>-S<sub>6</sub> 键长为 0.169 nm 左右,具有双键性质。二面角 D(1, 2, 4, 6) 和 D(1, 3, 5, 7) 均为 0,可知 1 号 Zn 原子至 7 号 S 原子这 7 个原子处于同一平面内。

#### 2.2 分子轨道指数

对 ZDDP 分子轨道进行成分分析,用参与组合的各类原子轨道系数的平方和的百分数来表示该部分在某个分子轨道中的贡献。表 2 所列为分子轨道指数计算结果。由表 2 可知,4 个化合物的 HOMO 轨道均由 S<sub>2</sub> 和 S<sub>3</sub> 的 3p<sub>z</sub> 轨道及 S<sub>6</sub> 和 S<sub>7</sub> 的 3p<sub>z</sub> 轨道所组成。其中化合物 I, II 和 IV 的 S<sub>2</sub> 和 S<sub>3</sub> 对轨道的贡献各占 4.6% 左右, S<sub>6</sub> 和 S<sub>7</sub> 各占 45.4% 左右;化合物 III 的轨道系数略有变化, S<sub>2</sub> 和 S<sub>3</sub> 的 3p<sub>z</sub>

轨道系数稍微减少, 而  $S_6$  和  $S_7$  的  $3p_z$  轨道系数略微增大, 即  $S_2$  (或  $S_3$ ) 成分减少为 2.7% 左右, 而  $S_6$  (或  $S_7$ ) 所占百分比上升为 47.3% 左右。LUMO 轨道的电子云主要集中在 Zn,  $S_2$  和  $S_3$  原子上, 其中 Zn 占 81.5%~85.9%, 而  $S_2$  和  $S_3$  各只占 7.1%~9.3%。上述结果表明, HOMO 轨道上的活性原子主要是 6 位和 7 位的 S 原子, 能为亲电试剂提供电子, 是亲电试剂进攻的主要位置, 而 Zn 原子是 LUMO 轨道上的主要活性原子, 能接受亲核试剂提供的电子, 是亲核试剂的主要进攻点。

根据前线分子轨道理论, 一个亲核试剂与亲电试剂之间的反应, 优先起作用的是最高占有轨道 (HOMO) 和最低空轨道 (LUMO)。亲核试剂的最高占有轨道能级 ( $E_{\text{HOMO}}$ ) 与亲电试剂的最低空轨道能级 ( $E_{\text{LUMO}}$ ) 越接近, 其相互作用就越强。比较 ZDDP 的 HOMO 与  $\text{Fe}_5$  的 LUMO 之间的能级差  $\Delta E_1$  ( $\Delta E_1$  为 4.25~5.46 eV) 和  $\text{Fe}_5$  的 HOMO 与 ZDDP

的 LUMO 之间的能级差  $\Delta E_2$  ( $\Delta E_2$  为 8.36~9.21 eV) 可知,  $\Delta E_1 < \Delta E_2$ , 且  $\Delta E_1 < 6$  eV, 说明添加剂供出电子与铁原子簇作用的趋势要大于接受电子与铁原子簇作用的趋势, 即添加剂与铁原子簇的反应将优先在添加剂的 HOMO 轨道与铁原子簇的 LUMO 之间进行。添加剂分子作为电子给予体, 铁原子簇为电子接受体。

根据轨道能量近似原则, ZDDP 的 HOMO 能级与铁原子簇的 LUMO 能级越接近, 二者之间的作用越强, 其抗磨性越好。由表 2 可知, I, II 和 III 的  $\Delta E_1$  呈增大趋势, 说明二仲己基二硫代磷酸锌与铁原子簇的作用最强, 抗磨性最好, 而二正己基二硫代磷酸锌次之, 二苯基二硫代磷酸锌的抗磨性最差, 计算结果与摩擦学实验结果一致<sup>[17]</sup>。

按照普遍化微扰理论, 添加剂与金属原子之间的相互作用取决于静电和共价作用的加和结果。由于添加剂分子是电子给与体, 故净电荷负值较大的

表 1 ZDDP 分子的键长、键角及二面角

Table 1 Bond length, bond angle and dihedral angle of ZDDP

Compound	Bond length/nm				Bond angle/(°)			Dihedral angle/(°)	
	Zn <sub>1</sub> —S <sub>2</sub>	S <sub>2</sub> —P <sub>4</sub>	P <sub>4</sub> =S <sub>6</sub>	P <sub>4</sub> —O <sub>8</sub>	A(1, 2, 4)	A(2, 4, 6)	A(6, 4, 8)	D(1, 2, 4, 6)	D(1, 3, 5, 7)
I	0.212	0.214	0.198	0.168	129.7	122.2	110.4	0	0
II	0.211	0.214	0.197	0.169	129.6	122.8	109.7	0	0
III	0.212	0.215	0.197	0.168	129.5	122.8	103.7	0	0
IV	0.218	0.210	0.197	0.179	113.8	112.2	110.5	0	0

表 2 分子轨道指数计算结果

Table 2 Calculation results of molecular orbital index\*

Compound	$\Delta E_1$ /eV	$\Delta E_2$ /eV	Orbital	$E$ /eV	Molecular orbital components/%					
					S <sub>2</sub>		S <sub>6</sub>		Zn	
					3p <sub>z</sub>	3p <sub>z</sub>	3p <sub>x</sub>	4p <sub>x</sub>	3p <sub>x</sub>	
$\text{Fe}_5$	-	-	HOMO	-4.475490	-	-	-	-	-	
			LUMO	1.085199	-	-	-	-	-	
I	5.26517	9.30229	HOMO	-4.179970	4.7	45.5	-	-	-	
			LUMO	4.826794	-	-	6.5	75.2	9.2	
II	5.30463	9.33929	HOMO	-4.219430	4.6	45.4	-	-	-	
			LUMO	4.863801	-	-	6.5	75.0	9.3	
III	5.33429	9.35317	HOMO	-4.249090	2.7	47.3	-	-	-	
			LUMO	4.877679	-	-	16.5	69.4	7.1	
IV	4.62815	8.31859	HOMO	-3.565260	4.4	45.8	-	-	-	
			LUMO	3.843094	-	-	6.6	75.2	9.2	

\*  $-\Delta E_1$  refers to the orbital energy gap between the LUMO of iron and HOMO of ZDDP;  $\Delta E_2$  refers to the orbital energy gap between the LUMO of ZDDP and HOMO of iron.

原子是静电作用最可靠位置。表 3 所列为 ZDDP 的前线电子密度与原子净电荷。从表 3 可知, 4 种添加剂静电作用最可靠位置均为 O 和 S 原子。O 和 S 原子的孤对电子既可与金属原子的空 d 轨道配位, 也可与金属表面的正电荷位结合形成较稳定的吸附保护膜。由于添加剂分子中静电作用位置多达 8 个, 说明添加剂与金属表面的静电吸附作用较强, 能形成牢固的物理吸附表面膜而起抗磨作用。

ZDDP 分子为电子给予体, 铁原子簇为电子接受体, 因此 ZDDP 分子与铁摩擦副表面之间的反应可视为亲电反应。以前线电子密度作为判别添加剂与金属原子反应性大小的判据时, 可主要考虑添加剂的 HOMO 轨道的电子密度, 即  $f_{occ}$  大小,  $f_{occ}$  大的位置即为发生反应的位置。从表 3 可知, 4 种添加剂分子中发生反应的位置均为 6 位和 7 位的 S 原子, 即发生表面化学反应时, 最可能的断键位置是 6 位和 7 位硫原子双键, 硫及分解产物继续与铁摩擦副表面反应, 生成由多磷酸盐和铁硫化物组成的反应膜, 该膜具有较大承载能力及低的剪切强度, 从而起到减摩抗磨的作用。

### 2.3 添加剂与铁的吸附作用

以 Lan12mb 基组对上述 4 种添加剂分子进行全优化计算, 在优化平衡几何构型基础上计算其与

Fe<sub>s</sub> 的吸附作用能。先以二正己基二硫代磷酸锌作为模型将体心 Fe 原子分别吸附在 2 位和 3 位的 S 原子上, 然后依次将体心 Fe 原子分别吸附在 4 位和 5 位的 P 原子, 6 位和 7 位的 S 原子及 8 位和 10 位(或 9 位和 11 位)的 O 原子上逐一进行计算(化合物 II<sub>S<sub>2</sub></sub>, II<sub>P</sub>, II<sub>S<sub>6</sub></sub> 和 II<sub>O</sub> 分别代表 Fe 原子吸附在二正己基二硫代磷酸锌 2 位和 3 位的 S 原子, 4 位和 5 位的 P 原子, 6 位和 7 位的 S 原子及 8 位和 10 位上的复合体系), 得出每个复合体系的能量最低值( $E_{OM}$ )和相应的两吸附原子之间的配位键长。比较这些复合体系的  $E_{OM}$  值, 其  $E_{OM}$  值最小的复合体系即为最稳定的吸附模型(即能量最低的吸附模型), 此模型确定了优先与铁吸附的原子。最后, 根据上述最稳定吸附模型对化合物 I, II, III 和 IV 与铁的吸附进行计算。计算过程采用部分优化方法, 即二烷基二硫代磷酸锌的结构参数进行优化, 二烷基二硫代磷酸锌与金属铁原子的吸附距离不优化, 取吸附距离从小于 1/2 倍范德华半径之和逐渐变为大于 1 倍范德华半径之和, 也就是使 2 个相互作用的原子从化学吸附距离变到 2 个原子之间不存在作用力。对以上模型逐个逐点进行计算, 得出的计算结果列于表 4。代表性化合物 II 与铁的化学吸附作用曲线如图 3 所示。

由表 4 数据可见, 二正己基二硫代磷酸锌 6 位

表 3 ZDDP 的前线电子密度与原子净电荷

Table 3 Frontier electron density and net atomic charge of ZDDP

Compound	$f_{occ}(Zn)$	$f_{occ}(S_2)$	$f_{occ}(P)$	$f_{occ}(S_6)$	$f_{occ}(O)$	$Q_{S_2}$	$Q_{S_6}$	$Q_O$
I	0.005 85	0.065 37	0.065 10	1.119 79	0.022 97	- 0.243 1	- 0.314 3	- 0.370 3
II	0.008 45	0.113 82	0.023 53	1.027 48	0.012 77	- 0.244 6	- 0.311 8	- 0.361 1
III	0.008 47	0.113 94	0.023 54	1.027 27	0.012 77	- 0.188 6	- 0.348 9	- 0.324 1
IV	0.003 63	0.067 45	0.033 42	1.092 48	0.024 02	- 0.209 0	- 0.354 8	- 0.298 5

表 4 ZDDP 在金属铁表面上的化学吸附作用能

Table 4 Interaction energy of chemical adsorption between ZDDP and Fe atoms

Compound	$E_M/eV$	$E_O/eV$	$E_{OM}/eV$	$E_{ADS}/eV$	$R_{S-Fe}/nm$
II <sub>S<sub>2</sub></sub>	- 33 299.770 15	- 364 16.985 148 3	- 69 718.821 216 6	- 2.065 918 3	0.230 5
II <sub>P</sub>	- 33 299.770 15	- 36 416.985 148 3	- 69 716.756 190 9	- 0.000 892 5	0.281 0
II <sub>S<sub>6</sub></sub>	- 33 299.770 15	- 36 416.985 148 3	- 69 721.214 708 2	- 4.459 409 8	0.186 2
II <sub>O</sub>	- 33 299.770 15	- 36 416.985 148 3	- 69 717.196 461 0	- 0.441 162 6	0.253 2
I	- 33 299.770 15	- 36 396.186 704 7	- 69 700.523 951 8	- 4.567 097 0	0.183 6
II	- 33 299.770 15	- 36 416.985 148 3	- 69 721.214 708 2	- 4.459 409 8	0.186 2
III	- 33 299.770 15	- 37 293.159 344 8	- 70 597.186 281 7	- 4.256 786 8	0.207 6
IV	- 33 299.770 15	- 66 376.667 010 1	- 99 681.067 722 7	- 4.630 562 6	0.182 0

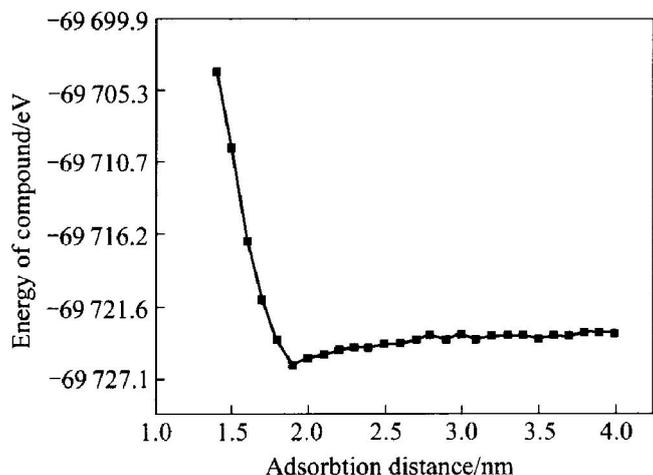


图 3 二正己基二硫代磷酸锌吸附时复合体系的能量随距离的变化关系

**Fig. 3** Relationship between energy and adsorption distance of  $[(C_6H_{13}O)_2S_2P]_2Zn$  compound

和 7 位的 S 原子与 Fe 原子吸附时, 吸附复合体系 ( $II S_6$ ) 的能量 ( $E_{OM}$ ) 最低, 其值为  $-69 721. 214 71$  eV, S 原子与 Fe 原子的配位键长 ( $R_{S-Fe}$ ) 为  $0. 186 2$  nm。根据二烷基二硫代磷酸锌单体能量  $E_0$  和金属铁原子簇 ( $Fe_5$ ) 的能量  $E_M$  以及吸附复合体系能量  $E_{OM}$ , 二烷基二硫代磷酸锌在金属表面的化学吸附作用能  $E_{ADS} = E_{OM} - (E_0 + E_M)$ , 因此, 得到二正己基二硫代磷酸锌与金属铁原子的化学吸附作用能  $E_{ADS} = -4. 459 41$  eV。这说明二烷基二硫代磷酸锌是通过 6 位和 7 位的 S 原子吸附在铁金属表面上, 并且形成了稳定的吸附态, 且化合物 I ~ IV 的 S 原子与 Fe 原子的配位键长分别为  $0. 183 6$ ,  $0. 186 2$ ,  $0. 207 6$  和  $0. 182 0$  nm。这个距离正好是在硫原子和铁原子的共价半径之和范围内, 表明添加剂的硫原子给出的电子与铁原子形成了牢固的配位键和化学吸附态。形成吸附态后, 体系的能量有很大下降, 吸附作用能为  $-4. 256 79 \sim -4. 630 56$  eV。比较化合物 I ~ IV 与铁的配位键长及化学吸附作用能可知, 6 位和 7 位硫原子与铁原子的配位键长随 III, II, I 和 IV 的顺序依次减少, 而化学吸附作用能逐渐增大。这表明 4 种化合物按 III, II, I 和 IV 的顺序与金属铁表面的化学吸附作用越来越强, 形成的化学吸附膜越来越牢固, 抗磨性越好, 因此 4 种添加剂抗磨效果大小顺序为 IV > I > II > III。

#### 2.4 取代基对添加剂性能的影响

$E_{gap}$  是二烷基二硫代磷酸锌分子内反应难易程

度的判据,  $\Delta E_1$  用于判断金属铁原子与二烷基二硫代磷酸锌之间的反应性大小。由表 2 可知, 吸电子基(氟)引入正己基上使 HOMO 能量升高, 使 LUMO 能量降低, 总的结果与二正己基二硫代磷酸锌相比, 能级差  $E_{gap}$  (最低空轨道与最高占有轨道能的差值) 变小,  $\Delta E_1$  (添加剂的 HOMO 与 Fe 的 LUMO 之间的能级差) 也变小, 说明吸电子基的引入使添加剂分子与铁金属表面的反应更容易进行。以化合物二正己基二硫代磷酸锌为参比, 化合物 IV 的硫原子与铁原子的配位键长变短, 而化学吸附作用能增大。这表明在烷链上引入吸电子基团特别是氟基, 可增强添加剂与 Fe 原子的作用力, 预测也可增强其抗磨性。此结果可为设计合成更好的抗磨添加剂提供有用的信息。由计算得到的 4 种添加剂的化学吸附作用能可推测这些添加剂的抗磨效果的大小顺序为 IV > I > II > III。

### 3 结论

二烷基二硫代磷酸锌添加剂的抗磨机理是添加剂分子首先通过静电作用吸附于金属铁表面, 然后添加剂的 HOMO 轨道与金属铁原子的 LUMO 轨道相互作用, 给出电子与金属的 d 轨道作用形成配位键和化学吸附膜, 此膜有一定的抗磨作用。在其后发生的表面化学反应中, 二烷基二硫代磷酸锌 6 位和 7 位的硫原子双键断裂, 生成多磷酸盐和铁的硫化物等物质, 在金属表面形成低剪切强度的反应膜, 该膜起主要抗磨作用。依据计算得到的化学吸附作用能和配位键长, 推测化合物 I ~ IV 的抗磨效果的大小顺序为化合物 IV > I > II > III。

### REFERENCES

- [1] Coy R C, Jones R B. The thermal degradation and EP performance of Zinc dialkydithiophosphate additives in white oil[J]. ASLE Transaction, 1979, 24(1): 77 - 90.
- [2] Spedding H, Watkins R C. The antiwear mechanisms of ZDDPs-Part I [J]. Tribology International, 1982, 15(1): 9 - 12.
- [3] Fuller M, Yin Z, Kasrai M, et al. Chemical characterization of tribochemical and thermal films generated from neutral and basic ZDDPs using X-ray absorption spectroscopy [J]. Tribology International, 1997, 30(4): 305 - 315.
- [4] Watkins R C. The antiwear mechanism of ZDDPs-Part

- II [J]. Tribology International, 1982, 15(1): 13 - 15.
- [5] Wan Y, Cao L, Xue Q. Friction and wear characteristics of ZDDP in the sliding of steel against aluminium alloy [J]. Tribology International, 1998, 30(10): 767 - 772.
- [6] Rhodes K L, Stair P C. The surface chemistry of zinc dialkydithiophosphate, an antiwear additive, on oxidized iron and steel foils [J]. Journal Vacuum Science Technology, 1988, A6: 971 - 976.
- [7] Hosonuma K, Yoshida K, Matsunaga A. The decomposition products of zinc dialkydithiophosphate in an engine and their interaction with diesel soot [J]. Wear, 1985, 103: 297 - 309.
- [8] YIN Z F, Kasrai M, Bancroft G M, et al. Chemical characterization of antiwear films generated on steel by zinc dialkyldithiophosphate using X-ray absorption spectroscopy [J]. Tribology International, 1993, 26(6): 383 - 387.
- [9] 宋 隹, 王学业, 谭援强. 醇胺类油性剂在金属铝表面上吸附机理的研究 [J]. 湘潭大学自然科学学报, 2002, 24(2): 43 - 45.  
SONG Huang, WANG Xue-ye, TAN Yuan-qiang. Studies on the mechanism of absorption for alcohol and amine on the surface of aluminium [J]. Natural Science Journal of Xiangtan University, 2002, 24(2): 43 - 45.
- [10] 周亚军, 毛大恒, 曹远锋, 等. 铝材轧制润滑剂的热分析研究 [J]. 湘潭大学自然科学学报, 2001, 23(3): 69 - 72.  
ZHOU Ya-jun, MAO Da-heng, CAO Yuan-feng, et al. Thermal analysis of aluminum rolling lubricant [J]. Natural Science Journal of Xiangtan University, 2001, 23(3): 69 - 72.
- [11] Beltzer M, Jahanmir S. Role of dispersion interactions between hydrocarbon chains in boundary lubrication [J]. ASME Transaction, 1987, 1: 47 - 54.
- [12] 谭援强, 王学业, 黄伟九, 等. 润滑剂作用能力的分子轨道指数判据 [J]. 摩擦学学报, 2000, 20(4): 280 - 284.  
TAN Yuan-qiang, WANG Xue-ye, HUANG Wei-jiu, et al. Molecular orbital index criteria for lubricant properties [J]. Tribology, 2000, 20(4): 280 - 284.
- [13] 饶文琦, 任天辉, 李九盛, 等. 六元含氮杂环化合物的分子结构对其抗磨性能的影响 [J]. 摩擦学学报, 2001, 21(2): 18 - 21.  
RAO Wen-qi, REN Tian-hui, LI Jiur-sheng, et al. The effect of molecular structure of six-element N-containing heterocyclic compounds on their wear properties [J]. Tribology, 2001, 21(2): 18 - 21.
- [14] Hirano F, Ohno N. Chain matching between hydrocarbon and fatty acid as interfacial phenomena [J]. Tribology International, 1987, 4: 186 - 204.
- [15] 徐亚伯. 表面物理导论 [M]. 杭州: 浙江大学出版社, 1992. 5 - 20.  
XU Ya-bo. Introduction to Surface Physics [M]. Hangzhou: Zhejiang University Press, 1992. 5 - 20.
- [16] 王淀佐, 林 强, 蒋玉仁. 选矿与冶金药剂分子设计 [M]. 长沙: 中南工业大学出版社, 1996. 88 - 109.  
WANG Dian-zuo, LIN Qiang, JIANG Yu-ren. Molecular Design of Reagents for Mineral and Metallurgical Processing [M]. Changsha: Central South University of Technology Press, 1996. 88 - 109.
- [17] 张景河. 现代润滑油与燃料添加剂 [M]. 北京: 中国石化出版社, 1991. 202 - 205.  
ZHANG Jing-he. Modern Lubricant Oil and Fuel Additives [M]. Beijing: China Petrochemistry Press, 1991. 202 - 205.

(编辑 李艳红)