

## 金属加工油の性能に対する基油組成の影響

### Influence of Base Oil Composition on Metalworking Fluid Performance

ENEOS 株式会社（正）\*柴田 潤一（正）山岸 純也（正）小野寺 拓（正）置塩 直史

Junichi Shibata, Junya Yamagishi, Tasuku Onodera, Tadashi Oshio

ENEOS Corporation

#### 1. 緒言

アルミニウム冷間圧延油に使用される低芳香族基油は低臭気，低皮膚刺激性といった特性により作業環境を大幅に改善することができる．さらに，軽質留分の基油を用いるアルミニウム圧延油では芳香族成分の大気への放出を削減できる利点もある．しかし，特定の圧延条件下および材料を用いて圧延を行うと，低芳香族基油は従来の含芳香族基油に比べ圧延潤滑性が低下する，摩耗粉発生量が増加するなどといった問題点が以前より知られていた<sup>1)</sup>．これまでの検討では圧延油中の油性剤の吸着挙動が基油組成により異なることが示されていたが，基油組成と油性剤の吸着特性の関係についての詳細なメカニズム解明には至っていない．

一方，山岸らはアルミニウムの塑性加工において，ノルマルパラフィン，イソパラフィン，アルキルナフテンの単体を各々基油とした際の油性剤の吸着時間を分子シミュレーションにより算出し，平板摺動試験結果との相関を得ている<sup>2)</sup>．そこで本研究では，圧延評価による各種基油における油性剤の効能評価およびニューラルネットワークポテンシャル（NNP）<sup>3,4)</sup>に基づく分子シミュレーションによる吸着特性の評価を実施し両者の比較を行い，組成の異なる各基油中での油性剤の吸着メカニズムを検討した．

#### 2. 評価方法

##### 2.1 加工試験の条件

圧延試験は Z-high 型試験圧延機を用い，Table 1 に示す条件でアルミニウム材（JIS A-1050）の圧延加工を行った．圧延油としては，Table 2 に示す低芳香族タイプ，および従来タイプの含芳香族基油各々に油性剤として 1-ドデカノールを 2.0mass% 添加したものをを用い所定の圧下率を得るのに要する圧延荷重を測定した．ここで用いた低芳香族基油は従来タイプに約 20% 程度含有する芳香族成分を水素添加により分解しナフテンとしたもので，いずれの基油共にノルマルパラフィンは含有せず，イソパラフィンの量はほぼ同等である．なお，圧延油の供給は圧延材の入り側のみからスプレーにより行った．

Table 1 Experimental rolling conditions

Rolling speed		50 m/min
Reduction rate		45% ～
Work roll	Material	JIS SKD-11 steel
	Diameter	51 mm
	Surface roughness	0.05 $\mu$ m Ra
Aluminum	Material	JIS A-1050
	Initial thickness	0.1 mm

Table 2 Composition and viscosity of base oils

	Normal paraffin, mass%	Isoparaffin, mass%	Naphthene, mass%	Aromatics, mass%	Viscosity, mm <sup>2</sup> /s @ 40°C
Nonaromatic type base oil	0	34	66	0	1.53
Conventional type base oil	0	36	46	18	1.55

##### 2.2 分子シミュレーション

油性剤の拡散・吸着挙動を明らかにするため，汎用原子レベルシミュレータ Matlantis<sup>TM3)</sup>を用いて分子動力学（MD）計算を行った．Matlantis<sup>TM</sup>は，第一原理計算の結果を機械学習した NNP に基づき，高精度かつ超高速に表面・界面の現象を追跡できる<sup>3,4)</sup>．計算モデルを Fig. 2 に示す．2 枚のアルミニウム板の間に基油層をはさみ，上側から真実接触を模した面圧を与えた．基油の中央付近に，油性剤として 1-ドデカノールを 1 分子配置した．圧延評価に用いた基油成分と類似した炭素数 12 の基油 2 種（ナフテン，アルキルベンゼン）を検討した．温度 60°C，面圧 0.5 GPa，積分時間 1 fs とし，最大で  $5 \times 10^6$  ステップの MD 計算を行った．なお，分子配置・速度を変更し，各基油を含むモデルそれぞれについて 3 パターンの MD 計算を行った．

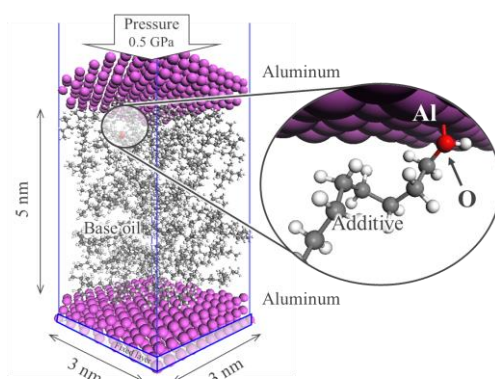


Fig.2 MD simulation model.

### 3. 結果と考察

#### 3.1 加工試験の結果

圧延試験により得られた圧下率に対する圧延荷重の結果を Fig.3 に示す。なお、図中の黒塗りプロットは焼き付きによる表面損傷を示している。ここでは等しい圧下率を得るための荷重が低い方が、またより高い圧下率まで表面損傷なしで加工できる方が優れた潤滑性を有することになる。低圧下率時には低芳香族基油、含芳香族基油ともに大きな差は認められないが、低芳香族基油では圧下率が 55%を超えたあたりで表面損傷が生じ、圧延荷重の著しい上昇が認められた。油性剤として 1-ドデカノールを同一濃度で添加しているにもかかわらず、基油の組成によって加工性能が異なる結果となった。既報と同様<sup>2)</sup>、基油の組成により潤滑挙動が大きく異なる結果が得られた。

#### 3.2 油性剤の拡散・吸着シミュレーション

今回評価した 2 種の基油は動粘度とパラフィン含有量はほぼ同等であり、異なる点は芳香族の有無とナフテン量である。そこでナフテン、芳香族中での MD 計算を行って、各基油中における油性剤である 1-ドデカノールのアルミニウム表面への吸着挙動を検討した。

時間経過に伴い、油性剤は基油分子の間を泳動し、やがて上下どちらかのアルミニウム板表面に Fig. 2 中の丸枠内に示した図のように、油性剤の水酸基酸素原子とアルミニウム原子との間の化学結合によって吸着した。油性剤の吸着にかかった時間を Fig. 4 に示す。吸着時間は分子配置・速度の異なる MD 計算 3 回分の平均である。芳香族環を有するアルキルベンゼンに比べてナフテン中では 1-ドデカノールの吸着時間が長くなった。この結果は Fig.3 で示した芳香族を含まずナフテン量の多い低芳香族基油に比べて、芳香族を含みナフテン量の少ない低芳香族基油の加工性が優れる事象と一致する。油性剤が即座に加工対象物の表面に吸着できることが、加工性に影響しているものと推察される。

#### 3.3 油性剤の吸着メカニズム

基油の分子構造が油性剤の吸着時間に影響するメカニズムについて考察した。芳香族に比べてナフテンは密な配向を生じ、そのため基油中で油性剤であるアルコールが動き難くなるものと考ええる。一方、基油層が疎であれば、油性剤の通り道ができ、容易に加工対象物の表面へ辿り着くことができる。以上の考察から、一定量の芳香族環を有するアルキルベンゼンを含有することにより、ナフテンなどによる密な配向層を崩し油性剤がより吸着しやすい状態をつくり出したため、より高い加工性能を発揮したものと考ええる。

つまりナフテンのような基油層を密とするような分子は一定量以上あれば十分に効果を及ぼすものと推測しており、今後は基油中のナフテン量による影響や基油の最適構造の検討を実際の加工性評価と MD 計算によって明らかにしていきたいと考える。

### 4. 結言

- (1) 低芳香族基油と従来の含芳香族基油を圧延試験により比較したところ、含芳香族基油がより高い圧下率まで加工可能であった。このことは従来から実生産の現場にて言われていたものと一致する。
- (2) NNP に基づく MD 計算を行い、ナフテン、アルキルベンゼン中における油性剤の拡散・吸着挙動を解析した。基油構造の違いは油性剤の吸着時間に大きく影響し、ナフテンよりも芳香族の方が吸着時間が短い結果となった。
- (3) 油性剤の吸着時間は基油の配向による粗密の度合いが影響するものと推測できる。ナフテンは芳香族と比較して、密な基油配向層を形成するため、油性剤の吸着速度が低下し加工性能に影響を及ぼしたものと推測する。

### 文献

- 1) J. Shibata, T. Wakabayashi & S. Mori : Tribology International, 40 (2007) 748-753.
- 2) 山岸, 小野寺, 置塩, 眞名井, 柴田, 八木下 : トライボロジー会議 2022 春 東京 予稿集, 226-228
- 3) S. Takamoto et al.: Towards universal neural network potential for material discovery applicable to arbitrary combination of 45 elements Nat. Commun., 13, 2991 (2022).
- 4) 小野寺, 入口, 矢山, 渡邊, 高本, 品川 : ニューラルネットワークポテンシャルに基づく汎用原子レベルシミュレータの開発と表面・界面系材料探索への応用, フロンティア, 3 (2021) 161-170.

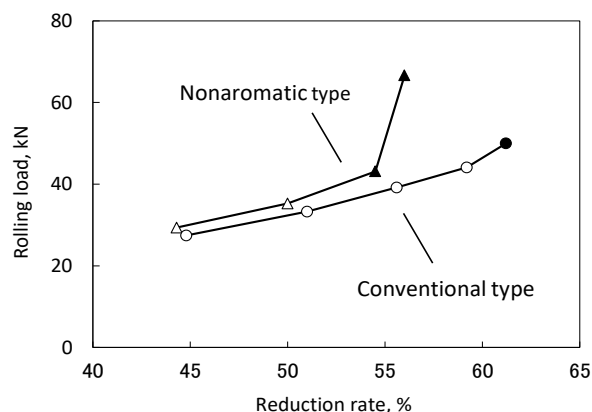


Fig.3 Relationship between reduction rate and rolling load with nonaromatic and conventional base oils

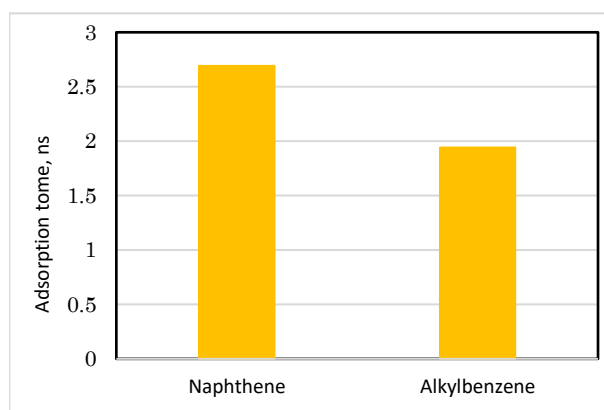


Fig.4 Average adsorption time of 1-dodecanol additive in naphthene and alkylbenzene oil phases