



AC2T

Austrian Center of Competence for Tribology

Hauptstandort

Wiener Neustadt

Thematische Schwerpunkte

Tribology

Success Story Kurzversion

„Shake-hands“ zwischen atomistischer und makroskopischer Betrachtung von Mischreibung

Eine große Herausforderung in der Simulation von tribologischen Prozessen besteht in deren Vielskaligkeit, d.h. tribologische Phänomene sind auf einer einzigen Längen- und Zeitskala nicht zu beschreiben und verstehen. Aus diesem Grund besteht weltweit in der Community das Bestreben, diese Skalen und die ihnen zugeordneten Simulationsmethoden zu verknüpfen.

Im Rahmen einer im April 2011 publizierten Arbeit ist es Forschern der Area 4 gelungen, moleküldynamische Simulationen von Mischreibungsprozessen (solche, bei denen der Schmierstoff die Reibpartner nur noch teilweise trennt und daher direkter Festkörperkontakt auftritt) mittels der „Smooth Particle Methode“ kontinuierlich darzustellen und auszuwerten.

Die dadurch zugänglich gemachten Kenngrößen erlauben den Ansatz eines neuen Reibgesetzes für Mischreibungssysteme auf der Nanoskala.

Success Story Langversion

Moleküldynamische (MD) Betrachtungen von Reibsystemen sind dann notwendig, wenn die Schmierpalthe so gering wird, dass der Schmierstoff nicht mehr durch seine Viskosität beschrieben werden kann, oder aber wenn die atomare Festkörperstruktur eine bedeutende Rolle spielt. Solche Simulationen beschränken sich dann im Allgemeinen auf den Nanometer- und Nanosekundenbereich. Außerdem ist es schwierig mit Hilfe von MD kontinuumsmechanische Kenngrößen zu erarbeiten.

In der nebenstehenden Abbildung 1 ist ein Schnitt durch ein derartiges Reibsystem dargestellt. Lässt man die beiden Reibpartner nun horizontal gegeneinander gleiten, kommt es insbesondere bei höheren Lasten zu Festkörperkontakt zwischen den beiden Rauheitsspitzen. Das Ausmaß dieses Kontaktes lässt sich, wie bereits erwähnt, im Rahmen der auf einzelnen Atomen beruhenden „klassischen“ MD allerdings nur sehr schwer quantifizieren.

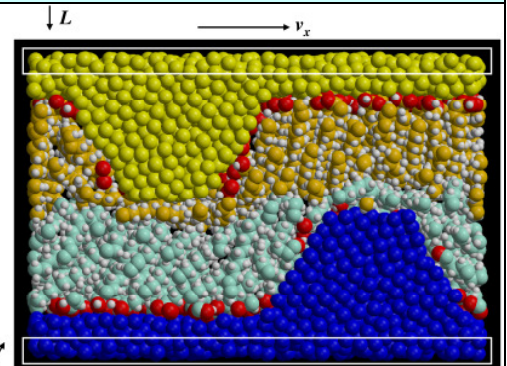


Abbildung 1: Moleküldarstellung an nanorauen Oberflächen: Reibpartner aus Eisen (gelb und blau), Schmierstoff aus Fettsäuremolekülen - typische Additive zur Reibungsreduktion in einem modernen Schmierstoff (orange und hellblau)

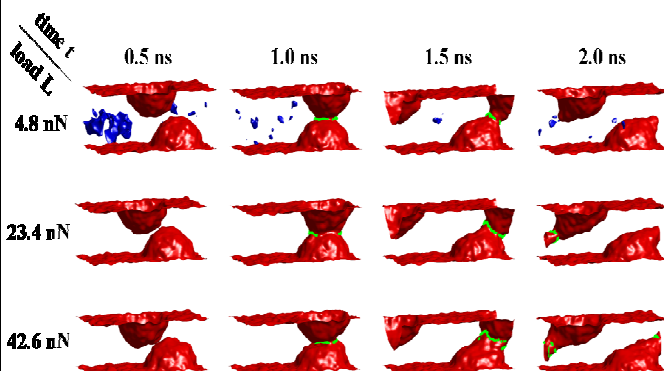


Abbildung 2: Nanoskopischer Festkörperkontakt im zeitlichen Verlauf; Festkörperoberflächen (rot), Kavitäten im Schmierfilm (blau); Ränder des Festkörperkontaktes (grüne „Perlschnüre“)

Die Methode der sogenannten „Smooth Particles“ (SPM) erlaubt die Darstellung solcher diskreter Systeme in kontinuierlicher Form und weitergehend die Berechnung ortsabhängiger Materialdichten. Dies ermöglicht die Darstellung von Grenzflächen, also z.B. Festkörperoberflächen, Kavitäten im Schmierstoff oder Phasengrenzen. In Abbildung 2 ist der zeitliche Verlauf eines Reibexperiments bei drei verschiedenen Lasten L in der Kontinuumsdarstellung skizziert. Die Kenntnis der Position der grünen „Perlen“ gestattet nun die exakte Definition und Berechnung der Kontaktfläche im Kontinuum sowie deren zeitlichen Verlauf. Diese Kontaktfläche ist jedoch lediglich ein Beispiel unter den vielen kontinuumsmechanisch zugänglichen und tribologisch relevanten Größen ist, die mit SPM aus der MD gewonnen werden können.

Bei Variation der Lasten (Normalkräfte) desselben nanotribologischen Systems kann mittels MD die Reibkraft F über einen Zeitraum von mehreren Nanosekunden gemittelt und gegen die entsprechende Last aufgetragen werden (Abbildung 3). Errechnet man zusätzlich mit SPM für jede Last die durchschnittliche Kontaktfläche, kann aus dem Verlauf des Wertetripels (Last – Reibkraft – Kontaktfläche) ein Reibgesetz mit drei Systemparametern abgeleitet werden. Einer davon ist die aus der makroskopischen Tribologie bekannte Reibzahl, die jedoch unter nanotribologischen Bedingungen nur einen Teilaspekt des Systems charakterisiert. Der zweite Parameter des Reibgesetzes ist der durch Adhäsion (auch bei Normalkraft Null) verursachte, lastunabhängige Anteil der Reibkraft. Die Scherfestigkeit der Festkörperkontakte geht über die Kontaktfläche in die Reibkraft ein, was den dritten Parameter bildet. Hier zeigt sich eine verblüffende Übereinstimmung der „gemessenen“ Werte mit jenen, die das Reibgesetz mit den errechneten Systemparametern ergibt.

Das aufgestellte Reibgesetz für Nano-Mischreibungssysteme ermöglicht die Aufspaltung der Reibkraft in einen lastabhängigen, einen lastunabhängigen und einen kontaktabhängigen Anteil. Die vorgestellte Methode erlaubt die kontinuumsmechanische Auswertung molekulardynamischer Simulationen und stellt daher einen wichtigen Schritt in Richtung Multiskalensimulation und damit der rechnerischen Beherrschung realer Reibsysteme dar.

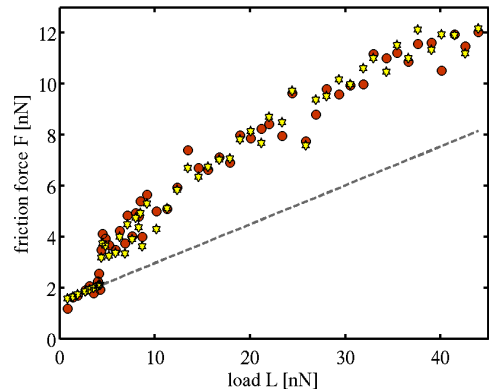


Abbildung 3: Verlauf der gemittelten Reibkraft über der Normalkraft. Strichliert: Normalkraftproportionale Reibkraft mit Adhäsionsanteil („Offset“); Abweichungen von der Proportionalität zufolge Abscherens der Festkörper“brücken“ (gelbe Markierungen) und im Vergleich aus MD-Berechnung (rot)

Diese Forschungsergebnisse wurden im April 2011 im Journal of Physics: Condensed Matter veröffentlicht.

S. Eder, A. Vernes, G. Vorlauffer, G. Betz: *Molecular dynamics simulations of mixed lubrication with smooth particle post-processing*, J. Phys.: Condens. Matter 23, 175004 (2011).

Kontakt:

AC²T research GmbH
 Dipl.-Ing. Stefan Eder
 Viktor-Kaplan-Strasse 2, 2700 Wiener Neustadt
 Tel. +43 2622 816 00 210
office@ac2t.at, www.ac2t.at