



XTriology

AC²T – Österreichisches Kompetenzzentrum für Tribologie

Hauptstandort Wiener Neustadt (Niederösterreich)

Weitere Standorte -

Thematische Schwerpunkte Tribologie

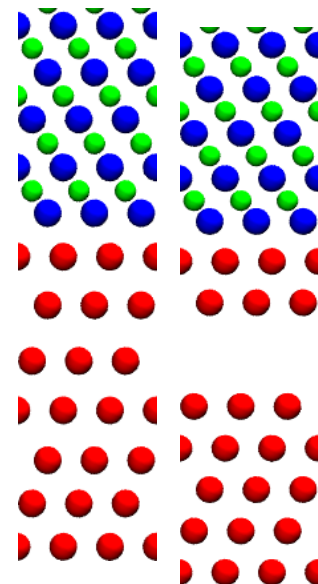
Success Story Kurzversion

Verschleiß – auf dem Weg zu einem Verständnis grundlegender Prozesse auf atomarer Ebene

Die Untersuchung von Grenzflächen auf atomarer Ebene verspricht ein besseres tribologisches Verständnis von Verschleißvorgängen. Berechnungen im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie erlauben die quantenmechanische Beschreibung solcher Grenzflächen und werden zur Bestimmung der Eigenschaften von Grenzflächen verwendet.

Success Story Langversion

Verschleiß begrenzt die Lebensdauer von Produkten und ist daher von großer technologischer wie auch wirtschaftlicher Bedeutung. Die intensive Erforschung von Verschleiß führte zu vielen Verschleißmodellen und Verschleißformeln. Jedoch ist keine dieser Formeln allgemein anwendbar. Darüber hinaus versagen die Modelle oft im Nanobereich. Deshalb ist es unser Ziel, neue Erkenntnisse über Verschleiß durch atomistische Computersimulationen ab-initio zu erhalten. Diese werden im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie (DFT) durchgeführt. Als erster Schritt zu Simulationen von komplexeren Verschleißprozessen wird der Werkstoffübertrag an atomaren Grenzflächen, z.B. Aluminium (Al) und Titanitrid (TiN) als typisches weich-hartes, metallisch-keramisches Modellsystem, behandelt. Mit DFT-Berechnung werden die Annäherung, der Kontakt und die Trennung der Reibflächen der Werkstoffe von Grund- und Gegenkörper im Tribokontakt untersucht. Um dies zu modellieren, wird simulationstechnisch einer der Körper in kleinsten Schritten bewegt. Dabei wird dem System nach jedem Schritt erlaubt, elektronisch und atomar wieder einen Gleichgewichtszustand einzunehmen. Ein Beispiel für einen Trennungsprozess ist in der Abbildung dargestellt. Um unterschiedliche Konfigurationen untersuchen zu können, wurden verschiedene relative Anordnungen der Oberflächen zueinander für jede der drei Oberflächenorientierungen gebildet. Dies erlaubte die genaue Bestimmung der Einflüsse dieser Aspekte auf die Kontakteigenschaften der Oberflächen, wie zum Beispiel der Adhäsionsenergie, sowie eines möglichen Werkstoffübertrags zwischen den Oberflächen. Die untersuchten Konfigurationen sind Grenzfälle eines realistischen Systems, bei denen das gleichzeitige Auftreten dieser Konfigurationen erwartet wird.



Werkstoffübertrag bei der Trennung einer Al Schicht (rot) von einer TiN (Ti – blau, N – grün); rechts: Oberflächen getrennt.

Wirkungen und Effekte

Mittels Anwendung der Dichtefunktionaltheorie als leistungsfähiges Werkzeug zum Studium des Werkstoffübertrags zwischen zweier atomarer Grenzflächen und im Bereich der Nanotribologie wurde gezeigt, dass die Grenzflächeneigenschaften aufgrund unterschiedlicher Bindungsverhältnisse empfindlich von der geometrischen Konfiguration abhängen. Ein Werkstoffübertrag wurde beobachtet, wenn der Absolutbetrag der Adhäsionsenergie bei einer Konfiguration größer ist, als der Aufwand atomare Schichten sich von einem der untersuchten Materialien zu entfernen. Das Verständnis des Atom-für-Atom-Verschleißes wird die tribo-dynamische Fertigung von funktionellen Oberflächen mit gewünschten physikalischen und chemischen Eigenschaften, z.B. für die Werkzeugzeugindustrie, ermöglichen.

Kontakt: AC²T research GmbH - Österreichisches Kompetenzzentrum für Tribologie
Privatdozent Dr. András VERNES
Viktor-Kaplan-Straße 2/C, 2700 Wiener Neustadt
Tel. +43 2622 81600, office@ac2t.at; www.ac2t.at