

Gruppe

**MULTISKALENMODELLIERUNG UND TRIBOSIMULATION**

Prof. Dr. Michael Moseler | Telefon +49 761 5142-332 | michael.moseler@iwm.fraunhofer.de

## HERVORRAGENDE TRIBOSYSTEME UNTER HOHER LAST: GESCHMIERTE W-DIAMANT-KONTAKTE

Metall-Diamant-Systeme finden aufgrund ihrer guten tribologischen Eigenschaften beispielsweise in Kolbenringen für Dieselmotoren Anwendung. Allerdings sind die Mechanismen, die für wenig Reibung und Verschleiß sorgen, bisher nur wenig verstanden. Zudem ist die Rolle von Schmierstoffen für die weitere Optimierung von besonderem Interesse. Am Fraunhofer IWM wurde das Thema mithilfe atomistischer Simulationsmethoden, tribologischer Experimente und Oberflächenanalytik angegangen. Als Modellsystem diente ein mit Hexadekan geschmiertes Wolfram-Diamant-Tribopaar. Reaktive klassische Molekulardynamiksimulationen (MD-Simulationen) zeigten unter hohem Kontaktdruck die Bildung von Alkanradikalen an der Metalloberfläche. Die Radikale wiederum vermochten an der chemisch sehr stabilen Diamantoberfläche anzubinden und einen Tribofilm zu erzeugen. Damit einhergehend zeigten sich stark verminderte Reibwerte im Bereich von 0,05. Die MD-Simulationen wurden mit quantenchemischen Dichtefunktionaltheorierechnungen (DFT-Rechnungen) überprüft und bestätigt.

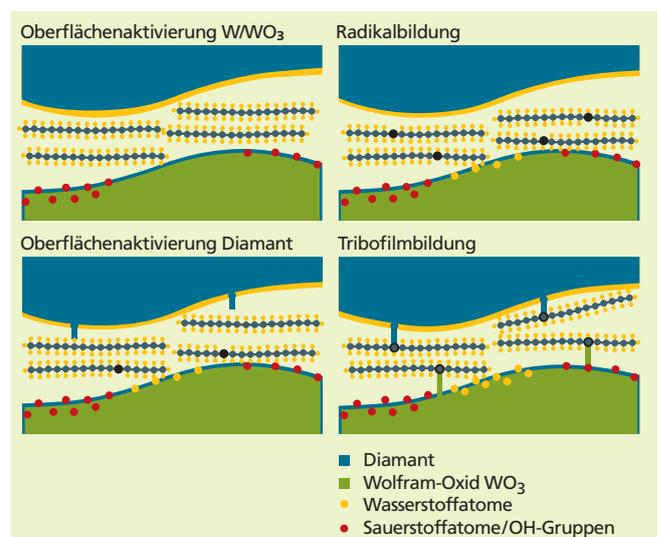
### Druckabhängige atomare Vorgänge im Reibspalt

Neben metallischen Oberflächen spielen in der Anwendung oxidierte Oberflächen eine entscheidende Rolle. Da die Modellierung der Oxide mit klassischen MD-Simulationen unzureichend ist, kamen zur Untersuchung von Alkanen auf der Wolfram-Oxidoberfläche DFT-Rechnungen zum Einsatz. Es wurde eine druckinduzierte Radikalbildung festgestellt. Zusätzlich sagten die DFT-Simulationen Additionsreaktionen sauerstoffhaltiger funktioneller Gruppen und eine chemische Anbindung der degradierten Moleküle an der Oxidoberfläche voraus. Die Befunde aus den Simulationen wurden in den Triboexperimenten erhärtet. So wurde auch experimentell

ein Reibwert im Bereich von 0,04 gemessen, und sowohl auf der Diamant- als auch auf der oxidierten Wolframoberfläche wurde die Bildung eines kohlenstoffreichen, sauerstoffhaltigen Tribofilms oberflächenanalytisch nachgewiesen.

Unsere Untersuchung zeigt, dass die Bildung eines Passivierungsfilms, der aus degradierten Schmierstoffmolekülen besteht, die Metalloberfläche von der Diamantoberfläche äußerst effektiv chemisch trennt. Dadurch werden das sogenannte Kaltverschweißen und die hohen Reibwerte, die damit einhergehen, unterbunden. Weitere Details zur Arbeit können der Veröffentlichung *Front. Mech. Eng.* 5, 6 (2019) entnommen werden.

Dr. Leonhard Mayrhofer



1 *Passivierung des Wolfram-Diamant-Kontakts durch tribochemische Prozesse, aus Front. Mech. Eng.* 5, 6 (2019).