



RÉSUMÉ

Mots-clés : tribologie, lubrification, Dynamique Moléculaire, glissement aux parois, simulations multi-échelle, rupture du film de lubrifiant

Les tendances actuelles en lubrification visent à réduire la quantité d'huile dans les mécanismes. En conséquence l'épaisseur de film dans les zones de contact est réduite à l'échelle du nanomètre, et peu de molécules de lubrifiant assurent la séparation des surfaces.

Des simulations basées sur la méthode de la Dynamique Moléculaire sont utilisées pour étudier le comportement de ces films sévèrement confinés à l'échelle des atomes. Une attention particulière est portée sur le phénomène de glissement aux parois : des lois analytiques sont formulées pour quantifier et prédire cet effet en fonction du couple surface-fluide ou des conditions opératoires locales dans un contact.

Ensuite, un couplage entre les modèles moléculaires et macroscopiques est effectué. Les équations classiques de la lubrification sont modifiées pour inclure les effets de glissement quantifiés précédemment. Il est montré que l'épaisseur de film au centre d'un contact et le frottement sont modifiés de façon significative.

Enfin, la problématique de réduction de la quantité de lubrifiant est poussée à ses limites jusqu'à atteindre la rupture du film et le contact direct entre solides. Une analyse à l'échelle moléculaire de ce processus permet de faire le lien entre la disposition des dernières molécules séparant les surfaces et le comportement tribologique local.