



ZUSAMMENFASSUNG

Schlüsselwörter: Tribologie, Schmierungstechnik, Molekulardynamik, Wandschlupf, Multi-Skala-Simulationen, Zusammenbrechen des Schmierfilmes

Die heutigen Trends in der tribologischen Entwicklung führen zu einer Reduzierung der Ölmenge in geschmierten Mechanismen. Folglich nimmt die Schmierfilmdicke zwischen Festkörpern stark ab und erreicht oftmals Größenordnungen weniger Nanometer. In diesem Fall werden die Oberflächen nur von wenigen Ölmolekülen getrennt.

Atomistische Simulationen mit der Molekulardynamik-Methode wurden zur Charakterisierung des lokalen Verhaltens in nanometer-dünnen Schmierfilmen verwendet. Insbesondere wurde Wandschlupf an der Wand-Fluid-Grenzfläche untersucht. Ein Vorhersagemodell und analytische Gesetze wurden entwickelt, um dieses Phänomen in Abhängigkeit von der Oberflächen-Schmiermittel-Paarung und den lokalen Betriebsbedingungen zu quantifizieren.

Durch diese modellhaften Beschreibungen wurden atomistische Simulationen mit makroskopischen Modellen für elastohydrodynamische (EHD) Kontakte gekoppelt. Insbesondere wurde die klassische EHD-Theorie verändert, um auch das durch Molekulardynamik charakterisierte Wandgleiten zu berücksichtigen. Anhand dieses Nano-EHD-Modells konnte ein Kontakt mit einer Schmierfilmdicke im Nanometerbereich untersucht werden. Hierbei zeigte sich, dass das Auftreten des Wandschlupfes in der Mitte des Kontaktes eine Veränderung der Spalthöhe und Reibung verursachen kann.

Schließlich wurde eine extreme Verminderung der Ölmenge bis hin zum lokalen Zusammenbrechen des Schmierfilms und dem direkten Festkörperkontakt untersucht. Durch Molekulardynamik-Simulationen konnte der Zusammenhang zwischen der Anordnung der letzten Molekülschichten im Kontaktbereich, das lokale Scherverhalten des Schmiermittels und Reibung festgestellt werden.