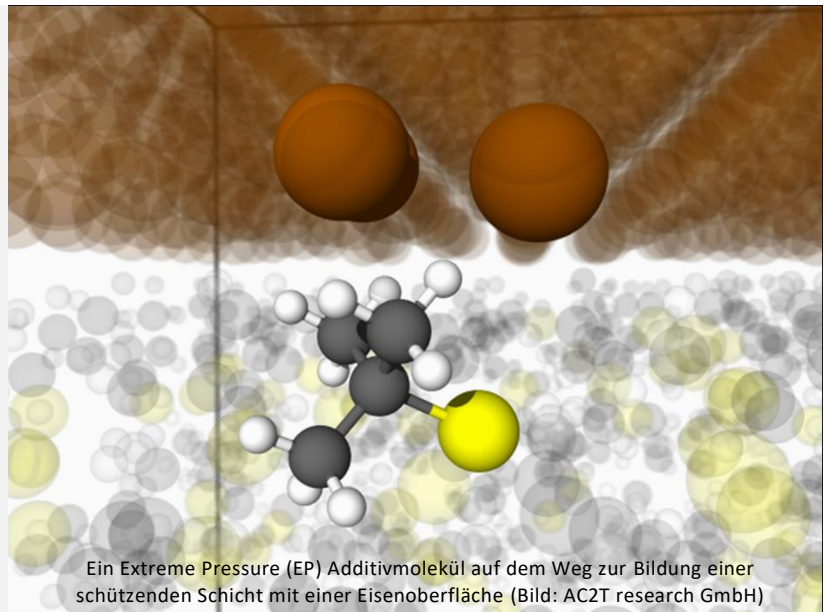


**XTribology**  
**Excellence Centre of Tribology**

Programm: COMET – Competence Centers for Excellent Technologies

Förderlinie: COMET-Zentrum (K2)

Projekttyp:  
Computational Tribochemistry  
04/2015 – 03/2020  
strategisch



## WIE SCHMIERSTOFFE ARBEITEN – BEOBACHTUNG AUF DER NANOSKALA

### EINBLICKE IN TRIBOCHEMISCHE PROZESSE DURCH SIMULATIONEN MIT REAKTIVER MOLEKÜLDYNAMIK.

Additive werden einem Schmierstoff, beispielsweise einem Motoren- oder Getriebeöl, zur Verbesserung der Schmierfähigkeit, der Stabilität, der Notlaufeigenschaften, etc. zugegeben. Aber wie funktionieren diese Additive eigentlich genau? Ist es möglich, ihre Funktionalität gezielt zu beeinflussen, um damit die Betriebssicherheit, die Energieeffizienz sowie die Einsatzdauer von Maschinen zu erhöhen?

Diesen und ähnlichen Fragen sind Forscher der AC2T research GmbH im Rahmen einer Forschungs-kooperation mit der University of California, Merced, nachgegangen. In einem Pilotprojekt wurde der Prozess der Bildung einer schützenden Schicht durch ein sogenanntes Extreme Pressure (EP) Additiv unter die „Nano-Lupe“ genommen. EP-Additive verhindern

unter hohen Belastungen das Verschweißen von zwei gegeneinander bewegten Oberflächen, wie dies z.B. in einem Getriebe der Fall ist.

Mittels der Simulationemethode der reaktiven Moleküldynamik (rMD) ist es möglich, den chemischen Vorgängen in einem Schmierpalt auf atomarer Ebene zuzusehen, und zwar inklusive „Stoptaste, Zoom- und Rückspulfunktion“. Bis vor kurzem musste man sich bei den verfügbaren verwandten Methoden entscheiden, ob man die reinen chemischen Prozesse oder aber ausschließlich mechanische Prozesse beobachten will. Mit überschaubarem Aufwand kann man nun mit rMD beobachten, wie Temperatur, Druck und Gleitgeschwindigkeit den Ablauf

## SUCCESS STORY

chemischer Reaktionen beeinflussen, also die Schmierung steuern.

Das in Abbildung 1 gezeigte Tribosystem bildet einen winzigen Ausschnitt aus einem Getriebe ab, genau

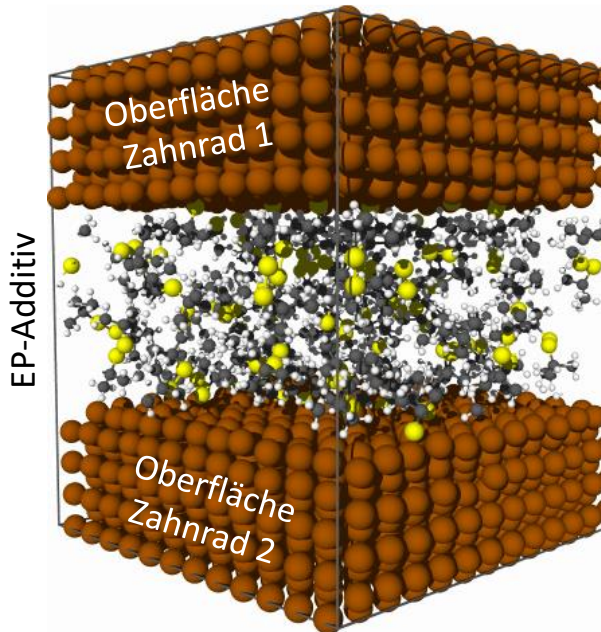


Abbildung 1: Modellsystem zur Untersuchung der Additivchemie in einem nanometrischen Gleitkontakt  
(Bild: AC2T research GmbH)

dort wo die Zähne zweier Zahnräder ineinandergreifen. Die rMD erlaubt es nun, den Reaktionspfad zu ermitteln, über den das EP-Additiv die schützenden Schichten aus Eisensulfid auf den Zahnrad-Oberflächen bildet. Durch Variation der Temperatur, des Drucks und der Gleitgeschwindigkeit kann weiters unterschieden werden, bei welchen Betriebsbedingungen eines Getriebes nun die vorherrschende Temperatur oder aber die Gleitbewegung die treibende Kraft hinter dem Wachstum der schützenden Schicht ist.

### Wirkungen und Effekte

Der entwickelte Simulations- und Auswertungsablauf kann auf eine Vielzahl von Molekülklassen und Oberflächen angewendet werden. In nicht allzu ferner Zukunft wird es also möglich sein, Schmierstoff- und Additivherstellern quasi „auf Knopfdruck“ Empfehlungen für den Einsatzbereich und die optimierte Kombination bestehender Komponenten sowie Vorschläge für eine neuartige Additivchemie zu liefern.

### Projektkoordination (Story)

Dr. Stefan J. EDER  
Key Scientist  
AC2T research GmbH

T +43 2622 81600  
stefan.eder@ac2t.at

### K2-Zentrum XTribology

AC2T research GmbH  
Viktor-Kaplan-Straße 2/C  
2700 Wiener Neustadt  
T +43 (0) 2622 81600  
office@ac2t.at  
www.ac2t.at

### Projektpartner

- University of California, Merced, USA
- TU Wien, Institut für Konstruktionswissenschaften und Produktentwicklung, Österreich
- AC2T research GmbH, Österreich

Diese Success Story wurde von AC2T research GmbH und den genannten Projektpartnern zur Veröffentlichung auf der FFG Website freigegeben. Das COMET K2-Zentrum XTribology wird im Rahmen von COMET – Competence Centers for Excellent Technologies durch BMK, BMDW und die Länder Niederösterreich, Wien und Vorarlberg gefördert. Das Programm COMET wird durch die FFG abgewickelt. Weitere Informationen zu COMET: [www.ffg.at/comet](http://www.ffg.at/comet)