

## **Analyse der tribologischen Eigenschaften für die Entwicklung von synthetischen Biokraftstoffen**

Die Entwicklung eines neuen, optimierten Kraftstoffs ist ein Prozess in dem verschiedene Stoffeigenschaften zu berücksichtigen sind. Zur Evaluation noch nicht synthetisierter Moleküle, sind Vorhersagemodelle notwendig, die auf molekularer Struktur basieren. Dies gilt für alle Kraftstoffeigenschaften die im Zusammenhang mit Verbrennungsqualität und Emissionen stehen. Zu den wichtigen Aspekten gehören die tribologischen Eigenschaften, da die Lebensdauer der meisten Hochdruck-Einspritzpumpen von diesen Eigenschaften beeinflusst wird. Der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit liegt auf der Untersuchung der Schmierfähigkeit und Viskosität von Kraftstoffen. Die Schmierfähigkeit schützt die Oberflächen im Falle eines unzureichenden hydrodynamischen Schmierfilms während die Viskosität eine hydrodynamische Trennung der Kontaktflächen gewährleistet.

Nach einer Einleitung in das Prinzip maßgeschneiderter Biokraftstoffe, gibt diese Arbeit einen Überblick über die Komplexität diverser Phänomene und Mechanismen bei der Tribologie kraftstoffgeschmierter Systeme. Anschließend werden die experimentellen Methoden zur Bewertung und Untersuchung von Schmierfähigkeit diskutiert. Im darauf folgenden Kapitel werden anhand der vorgestellten Methoden, die Schmierfähigkeit von Reinsubstanzen und binäre Mischungen der neuen Biokraftstoffe vorgestellt. Anschließend wird die Korrelation zwischen Schmierfähigkeit und Benetzungseigenschaften von Reinsubstanzen untersucht. Dies geschieht anhand einer Kontaktwinkelanalyse und unter Zuhilfenahme der Adsorptionstheorie. Darauf folgend wird es eine quantitative Struktur-Wirkung-Beziehung (QSPR) zur Vorhersage der Schmierfähigkeit von Reinsubstanzen vorgestellt (basierend auf COSMO-RS). Dieses Modell kann als Werkzeug zur Vorauswahl von Kraftstoffen nach ihrer Schmierfähigkeit verwendet werden. Abschließend werden chemische und oberflächenanalytischen Techniken angewendet, um zugrundeliegende Mechanismen der Schmierfähigkeit von der Lävulinsäure Estern im Vergleich zu ähnlichen Verbindungen zu beschreiben.

## **Analysis of Tribological Properties for the Design of Synthetic Biofuels**

The development of a new, optimised fuel is a process in which diverse necessary fuel properties have to be taken into consideration. For an inclusion of candidates not synthesised yet into the design process, a

fully predictive model relying on nothing but the molecular structure is mandatory for each relevant property. One of the important aspects for the design of a new fuel is its tribological properties. This is because the majority of high-pressure injection systems are fuel-lubricated and rely on the tribological properties of the fuel itself. The work attempts to answer this question:

These properties can be reduced to viscosity and lubricity. The former provides a hydrodynamic film for separation of contacting surfaces, and the latter protects the surface in case of an insufficient hydrodynamic film.

At first, this work aims to give an overview of complexity and diversity of different phenomena present in the boundary lubrication of fuel-lubricated systems ranging from nano scale to macro scale. Multidisciplinary and multi physics nature of this problem will be considered in an engineering way by aim of laboratory-scale experimentations. Subsequently this work gives attempts to bridge macro scale wear to wetting properties via contact angle analysis. This follows by a quantitative structure property relationship (QSPR) based on COSMO-RS.