

ten Modellen und Umgebungsbedingungen wie Druck und Temperatur.

Unterschied zu anderen Methoden

Die Methode basiert auf den physikalisch-chemischen Kenntnissen über Atome, funktionielle Gruppen und Moleküle. Sie arbeitet Bottom-up, das heisst, von Grund auf werden bausteinartig aus den Atomen und chemischen Bindungen die Moleküle und schliesslich die ganzen Systeme aufgebaut. Dabei fliesst viel experimentelles, theoretisches und praktisches Wissen mit ein.

Es gibt bereits eine beachtliche Anzahl Bausteine für biologische, organische und anorganische Chemie sowie verbreitete Lösungsmittel - und laufend kommen neue hinzu. Der Auftraggeber muss sich nicht darum kümmern, der Dienstleister nimmt ihm mit seiner Erfahrung diese Knochenarbeit ab, so dass sich die Entwicklung auf die wirklichen Herausforderungen fokussieren kann.

Ein Vorteil der Methode besteht darin, dass sie sich bereits vor der Herstellung der Materialien einsetzen lässt. So können Ideen und Vorstellungen überprüft und bewertet werden, Einblick und Wissen gewonnen werden, und nachfolgende Experimente starten bereits auf einer höheren, Erfolg versprechenden Wissensstufe. Dies verspricht eine schnellere und kostengünstigere Entwicklung.

Erfolg durch frühe Optimierung

Aus den beabsichtigten Komponenten und den Umgebungsbedingungen kann das Computerlabor die physikalischen Eigenschaften der Mixtur vorhersagen und auf molekularer Einsicht begründen. In mehreren virtuellen Versuchen lassen sich die besten Kandidaten für eine bestimmte Aufgabe finden, ebenso können untaugliche eliminiert werden. So trägt das Computerlabor dazu bei, dass unnötige Versuche im Nasslabor entfallen, die Motivation beim Personal höher liegt und die Produktentwicklung rascher voranschreitet (Bild 1).

Die Methode ist besonders geeignet für organische Stoffe, Polymere und Lösungsmittel in beinahe beliebiger Zusammensetzung, Mischungen, Komposite

	Struktur	Bewegung, Entwicklung, Änderung
		Löslichkeit, Verteilung
		Grenzschicht
	Knäuel	Interaktionen, Haufenbildung
	Haftung	Bsp. Klebstoff, Lacke
	Struktur	Bsp. Oberflächenbeschichtung
	Kräfte	Bsp. Sensor
		Bsp. Benetzung, Abstossung
	Diffusion Durchdringung	Lösung, Schmelzen
		Festkörper (z.B. Membran)
		Gemischt (z.B. Gel), Abgabe
		Gase, Ionen, Ladungen, Felder

Bild 2: Schematische Darstellung der berechenbaren Vielfalt physikalischer Phänomene.

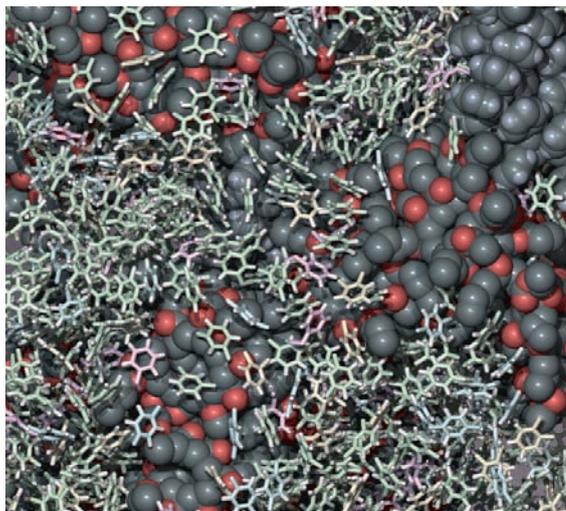


Bild 3: Das Lösungsmittel (technisches Xylol) formt die Poren in Polyacrylester und Polystyrol. Man erkennt, dass das Lösungsmittel (Sechsecke) nicht gleichmässig verteilt ist, sondern zur Kanal- und Schichtbildung neigt.

und Grenzflächen zwischen festen, flüssigen, viskosen und gasförmigen Phasen. Man kann damit Strukturen sowie ihre Dynamik, Entwicklung und Änderung beurteilen, das Verhalten von Aggregaten und Agglomeraten, Haftung, Diffusion, Adsorption, Permeation oder Benetzung untersuchen. Farben und Lacke sind mit ihrer typischen Zusammensetzung ein gutes Einsatzbeispiel (Bild 2).

Eigenschaften von Mischungen

Zur Steuerung der Verarbeitung, der Haftung und der Dispersion sind Kenntnisse der Einflüsse der Komponenten auf Viskosität, Adhäsion und Diffusion hilfreich. Für die Eigenschaften von Mischungen besteht ein spezielles Angebot: xirus.ch/matters, wo man online gezielt Werte nachfragen kann. Neben den derzeit unmittelbar erhältlichen Eigenschaften Dichte, Viskosität, Wärmekapazität, Wärmeleitfähigkeit, Diffusionskoeffizient und Elastizität sind weitere Eigenschaften auf Anfrage bestimmbar.

Vorgänge beim Abbinden

Um die Verarbeitungszeit und die Entstehung von Schichten zu beurteilen und zu steuern, lassen sich das Verdunsten von Lösemittel, die chemischen Strukturen, die bei einer Polymerisation entstehen und Trocknungsvorgänge näher untersuchen.

Produkt-Performance im Endanstrich

Um die Qualität des Endprodukts beurteilen zu können, liegt die Beurteilung der Oberfläche nahe, zum Beispiel, ob sie genügend wasser- oder ölabweisend wird oder wie sich die Durchlässigkeit von Dampf, Luft oder Öl verhält. Die Berechnung der Steifigkeit oder Härte dient zur Optimierung der Schichteigenschaften.

Anwendungsbeispiele

Der Trend weg von organischen Lösemitteln hin zu wässrigen Systemen ist ungebrochen. Dies ist aus

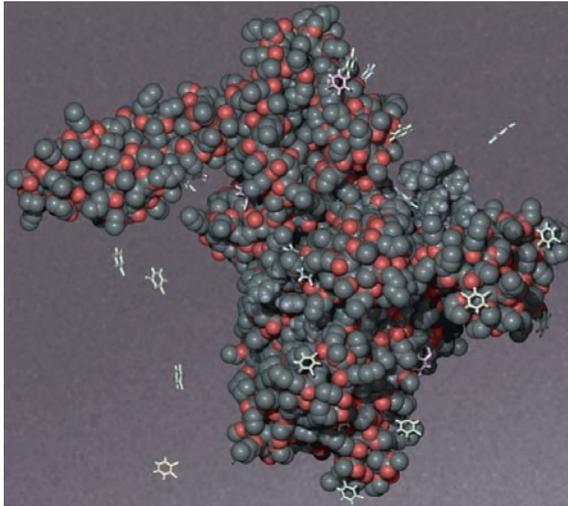


Bild 4: Dieselben Polymere in wässriger Lösung mit 2 Vol-% technischem Xylol bieten ein komplett anderes Bild. Das Polymer verklumpt beinahe vollständig, es sind kaum mehr Poren auszumachen und das wenige organische Lösungsmittel bleibt weitgehend in der Nähe der Polymeroberfläche. Das Wasser wurde nicht dargestellt, damit man die Struktur besser sieht.

Umweltanforderungen notwendig, verursacht aber technische Probleme, weil die Lösemittelleigenschaften von Wasser und organischen Stoffen völlig verschieden sind. Der in Bild 3 und 4 dargestellte Vergleich zeigt anschaulich, wie sich die gleichen Polymerfasern in unterschiedlichen Lösungsmitteln anders strukturieren.

Das Beispiel einer solchen Mischung zeigt die molekularen, nanoskaligen Gründe für eine experimentell beobachtete Verschlechterung der Filmbildung. Es legt nahe, mit welchen Additiven dieser Erscheinung entgegengetreten werden kann, und ent-

sprechende Vorschläge lassen sich auf ihre Eignung überprüfen. Man braucht danach nur die vielversprechenden Kandidaten zu beschaffen oder herzustellen und weiterzuerfolgen. Die Methode taugt für jedes erdenkliche, noch nie getestete, oder noch nicht einmal synthetisierte Gemisch, um erste Hinweise zu den zu erwartenden Eigenschaften und Kenngrößen zu erhalten. Dies ist die Stärke der molekularen Qualität des Modells und der innewohnenden Dynamik, die in diesem Massstab experimentell äusserst schwierig zu erfassen wäre.

Folgerung

Der sinnvolle Einsatz der moleküldynamischen Simulation für Oberflächentechnik besteht derzeit in der individuellen Dienstleistung und Beratung für Technologie- und Produktentwicklung im Frühstadium oder bei unerwarteten Herausforderungen in Verarbeitungsprozessen, bei der Materialauswahl und beim Moleküldesign, sagen die Entwickler. Sie ermitteln Antworten auf gezielte Fragen: sei es, wie beschichtete Nanoteilchen haften, wie Additive auf die Viskosität bei 250 °C wirken oder wie eine Oberfläche Öl aufsaugt.

Die Anwendung von Nanotechnologie, ob im Farben- und Lackbereich oder anderswo, kann mit dieser Methode gut untersucht, deren Komplexität verständlich gemacht und deren Einsatz erfolgreich begleitet werden. Dabei ist es für die Auftraggeber nicht nötig, sich in die Vielzahl der Modelle, deren Kompatibilität, die akademischen Quellen oder die praktischen Stolpersteine der Anwendung einzuarbeiten. Die Probleme und Herausforderungen können direkt und fokussiert angegangen und machbare Lösungen aufgezeigt werden. Die Zufriedenheit der so Beratern spricht für sich. ■

OBERFLÄCHEN POLYSURFACES