

Polymerhybride

Atomistische Modellierung der Phasengrenze zwischen Thermoplasten und Duromeren

M. Laurien, M. Delle Piane, L. Colombi Ciacchi,
Hybrid Materials Interfaces, Fachbereich Produktionstechnik, Bremen Center of Computational Materials Science, Universität of Bremen

Kurzgefasst

- Atomistische Modelle eines thermoplastischen (PVDF) und eines duromeren (Epoxy) Systems
- Molekulardynamische Simulation der Grenzphase zwischen PVDF und Epoxy
- Berechnung der mechanischen Festigkeit der Grenzphase unter Druck und Zug.

Leichtbau ist insbesondere im Luftfahrtbereich ein bestimmendes Thema. Zunehmend wird der Hauptwerkstoff Aluminium durch leichtere neu entwickelte Hochleistungswerkstoffe ersetzt. Zu diesen Hochleistungswerkstoffen zählen auch Faserverbundkunststoffe (FVK), die sich durch die Kombination extrem steifer und hochfester Fasern mit einer leichten Kunststoffmatrix auszeichnen. Die bisher für die metallischen Komponenten der Flugzeuge eingesetzte Füge-technologie des Nietens wirkt sich jedoch verheerend auf FVK aus. Die für die Nietverbindung erforderliche Bohrung unterbricht den Faserverlauf und damit die Kraftübertragung im Bauteil.

Das Thema dieses Vorhabens ist motiviert durch die Notwendigkeit, neuartige hybriden Füge-techniken für FVK zu entwickeln. In FVK werden als Matrixmaterialien wahlweise Thermoplaste oder Duromere verwendet. Beide Matrixsysteme besitzen sehr verschiedene Eigenschaften, weswegen sich sowohl die Verarbeitung als auch die späteren Bauteileigenschaften stark voneinander unterscheiden. Im Luftfahrtbereich werden bisher zumeist duromere Matrices eingesetzt, da diese eine höhere chemische und thermische Beständigkeit aufweisen. Für thermoplastische Werkstoffe gibt es ein Fügeverfahren, das als thermisches Schweißen bezeichnet wird. Um duromere FVK-Bauteile in ähnlicher Weise fügen zu können, ist das Aufbringen thermoplastischer Schichten notwendig, da nur Thermoplaste unter der thermischen Einwirkung im Schweißverfahren erweichen.

Dabei ist es jedoch notwendig, eine sehr gute Verbindung/Haftung der duromeren und thermoplastischen Phasen zu gewährleisten. Der Prozess zum Verbinden von duromeren und thermoplastischen Polymeren, auch als Co-Curing oder Hybridfügen

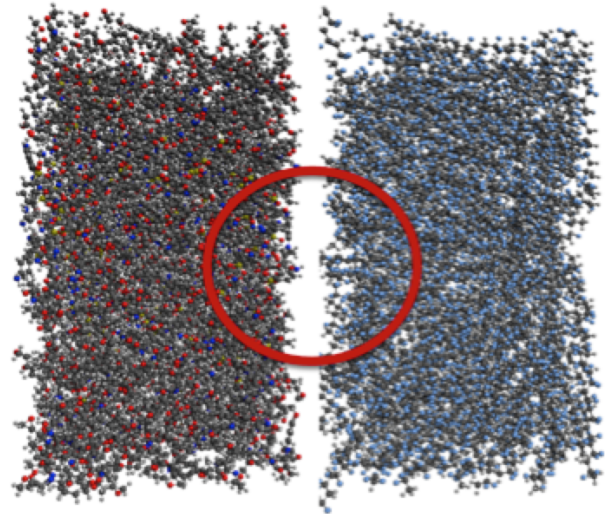


Abbildung 1: Schematische Abbildung der unbekannten Phasengrenze zwischen PVDF und TGDDM/DDS.

bezeichnet [1], stellt eine besondere Herausforderung dar. Insbesondere ist bisher vollkommen unklar, ob sich kovalente chemische Bindungen an der hybriden Grenzfläche bilden, oder ob die Adhäsion der beiden Komponenten (Abb. 1) lediglich durch Interdiffusion der beiden Polymere und Entanglement-Effekte zustande kommt [2]. Die Anwesenheit von möglichen kovalenten Bindungen aufgrund von chemischen Reaktionen zwischen den unterschiedlichen Phasen kann mithilfe atomistischer Simulationen nachgewiesen werden. Dafür ist eine Kombination von klassischen molekulardynamischen (MD) Simulationen und ab-initio-Berechnungen geplant.

In dem ersten geplanten Zeitraum von 4 Quartalen werden zunächst klassische MD-Simulationen mithilfe des LAMMPS Package durchgeführt. LAMMPS ist sehr variabel in der Einstellung der Kraftfeld-Parameter und ist Standard für die Simulation von technischen Polymeren. Bei unserem thermoplastischen System handelt es sich um das Material Polyvinylidenfluorid (PVDF), das Epoxy-System ist hauptsächlich aus dem Harz Tetraglycidyl 4,4'-diaminodiphenylmethan (TGDDM) und der Härterkomponente 4,4'-diaminodiphenylsulfone (DDS) zusammengesetzt. Für beide Systeme werden die Parameter des DREIDING-Kraftfelds verwendet. Die Ladungen werden mithilfe der Charge-Equilibration-Methode (QeQ) ermittelt.

Das Vorhaben sieht vier Arbeitspakete vor: (1) Bauen, Equilibrieren und Validieren des thermoplastischen Systems (PVDF); (2) Bauen, Equilibrieren und Validieren des duromeren Systems

(TGDDM/DDS); (3) Bauen variierender Grenzflächenmodelle; (4) Mechanisches Testen der Grenzflächenmodelle.

Atomistische Simulationen der Grenzflächen zwischen Thermoplasten und Duroplasten wurden bisher kaum durchgeführt. Coarse-Grained Modellierungsansätze wurden zum Beispiel angewandt, um nicht mischbare Polymergrenzflächen zu charakterisieren [3]. Die präzise molekulare Anordnung der zwei Komponenten an der Phasengrenze lässt sich aber nur anhand von atomistischer Modellierung aufweisen [4]. Unser Vorhaben soll daher einen wichtigen Beitrag zum fundamentalen Verständnis von Adhäsionsphänomenen an hybriden Polymergrenzflächen liefern, welche in zahlreichen praktischen Anwendungen, insbesondere in der Luftfahrttechnik, eingesetzt werden.

WWW

<http://www.hmi.uni-bremen.de>

Weitere Informationen

- [1] Xie L, Liu H, Wu W, Abliz D, Duan Y, Li D. Fusion bonding of thermosets composite structures with thermoplastic binder co-cure and prepreg interlayer in electrical resistance welding. *Materials Design* **98**, 143-149 (2016).
- [2] Ge T, Grest GS, Robbins MO. Tensile Fracture of Welded Polymer Interfaces: Miscibility, Entanglements, and Crazing. *Macromolecules* **47**, 6982-6989 (2014).
- [3] Yokomizo K, Banno Y, Kotaki M. Molecular dynamics study on the effect of molecular orientation on polymer welding. *Polymer* **53**, 4280-4286 (2012)
- [4] Demir BR, Walsh TA. Robust and reproducible procedure for cross-linking thermoset polymers using molecular simulation. *Soft Matter* **12**, 453-464 (2016).