

Projektskizze: Numerische Untersuchung zur elektrischen Leitfähigkeit extrinsisch leitfähiger Polymere

Prof. Dr. rer. nat. Dr. h. c. Siegfried Schmauder

Kurzfassung des Projekts und der Ziele in 3-4 Sätzen.

In diesem Projekt soll der Einfluss der Morphologie unterschiedlichster denkbarer Füllstoffe auf die elektrische Leitfähigkeit von Polymeren numerisch untersucht werden. Damit sollen potentiell geeignete Füllstoffe aufgrund von Morphologie und Geometrie identifiziert werden. Dies soll die Basis bilden, um in Zukunft zielgerichtet an der Entwicklung entsprechender Füll- und Werkstoffe zu forschen.

Kurzbeschreibung aktueller Stand der Forschung und Technik, eventuelle eigene Vorarbeiten sowie Relevanz des Themas auf dem Gebiet der Umwelttechnik bzw. des Umweltschutzes

Elektrisch leitfähige Kunststoffe versprechen vielfältige Einsatzmöglichkeiten in verschiedenen Anwendungsbereichen, z.B. im weitreichenden Feld E-Mobility für E-Motoren, in Batterien, in Brennstoffzellen (Elektrolytkondensationsprozesse) aber auch in der Kontaktierung von Leiterplatten, in der Sensorik oder als Verpackungsfolie. Hier bieten Kunststoffe markante Vorteile insbesondere im Hinblick auf Gewicht und Formbarkeit und können dadurch einen wertvollen Beitrag zum ressourcenschonenden Betrieb beitragen.

Dies führt auf interessante Szenarien bei z.B. Brennstoffzellen. Brennstoffzellen werden in der Zukunft im Bereich der Energieversorgung mobiler und stationärer Anlagen einen wichtigen Beitrag zum Umweltschutz leisten. Brennstoffzellen basieren auf der Oxidation eines Brennstoffes. Hierfür werden Oxidationsmittel (z.B. Luftsauerstoff) und Brennstoff (z.B. Wasserstoff) über Elektroden/Bipolarplatten ionisiert, über einen Elektrolyt zusammengeführt und zur Reaktion gebracht. Ein Austausch des Basismaterials für die Bipolarplatten durch Kunststoff würde einerseits zu einer Gewichtsreduktion führen, was in mobilen Anwendungen einen verminderten Energiebedarf bedeutet. Weiterhin kann der Einsatz von Kunststoff eine gestalterische Freiheit ermöglichen, die einerseits zur Modularisierung und andererseits zu weiteren Innovationen z.B. im Bereich von Brennstoffzellen-Stapeln führen.

Im Bereich der elektrisch leitenden Kunststoffe muss zwischen selbstleitenden (intrinsisch leitfähigen) Kunststoffen und extrinsisch leitfähigen Kunststoffen unterschieden werden. Intrinsisch leitfähige Kunststoffe sind vergleichbar mit Metallen und leiten elektrischen Strom ohne weitere Zusätze. Extrinsische leitende Kunststoffe sind von sich aus nicht leitfähig, sondern werden über elektrisch leitende Füllstoffe leitfähig gemacht. Im Fall von Bipolarplatten für Brennstoffzellen bieten letztere nach Ansicht des Antragsstellers das höhere Potential, da über den Kunststoff die Interaktion mit Oxidationsmittel und Brennstoff eingestellt werden könnte und über den Füllstoff zusätzlich die elektrische Leitfähigkeit.

In [1] werden verschiedene Methoden zur Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit verglichen und die „General effective media“ Methode als universellste Methode identifiziert. Letztlich liefert das „Fiber contact“-Modell die beste Übereinstimmung mit experimentellen Werten (faserverstärktes Polypropylen).

Huang et al. untersuchen in [2] die Perkulationsgrenze verschiedener Kunststoffmaterialsysteme mit ein- und zweiphasigem Füllstoff. So kommen u.a. Kohlenstoffnanoröhrchen, Graphen, Grafit aber auch Metalle zum Einsatz. Huang et al. zeigen auf, dass Dispersion und Verteilung durch Oberflächenmodifikation und Prozessbedingungen beeinflusst werden können, die Perkulationsgrenze kann herabgesetzt werden wenn sich Füllstoff an den Grenzen von kontinuierlichen Phasen des Polymers befindet oder der Füllstoff Netzwerke bildet. Weiterhin können sich in Kompositen mit unterschiedlichen Füllstoffen (Dimension, Seitenverhältnis und Eigenschaften) diese Füllstoffe in unterschiedlichen Phasen des Kunststoffs befinden. Park et al. untersuchen in [3] mit Hilfe der Perkulationstheorie numerisch den Einfluss des Radius von sphärischen Silikafüllern als Zweitphase auf ein Polymer mit Kohlenstoffnanoröhrchen und auf die elektrische Leitfähigkeit. Dies ist nur eine kleine Auswahl, insgesamt zeigt sich aber, dass zumeist spezifische Materialsysteme mit einem spezifischen Füllstoff und spezifischen Orientierungen untersucht wurden.

Detaillierte Beschreibung der Projektziele und der geplanten Arbeitsschritte, inklusive einer übersichtlichen Darstellung der geplanten Zeiträume und Meilensteine.

In diesem Projekt soll der umgekehrte Weg gegangen werden, d.h. die elektrische Leitfähigkeit eines Kunststoffs wird in Abhängigkeit der Morphologie (Volumenanteil, Größe und Form, Seitenlängenverhältnis, Orientierung, Phasenverteilung) numerisch untersucht. Demgegenüber soll die Leitfähigkeit des Füllstoffes sowie des Matrixmaterials bei der Parametervariation der oben genannten Einflussfaktoren konstant gehalten bzw. als Eingangsparameter festgelegt werden. Eine Visualisierung einzelner Einflüsse kann z.B. über Ashby-Maps erfolgen.

Im 1. Arbeitspaket (AP) wird eine Literaturrecherche durchgeführt und einer **Bewertung** der etablierten Methoden hinsichtlich ihrer generellen Anwendbarkeit bei der Bestimmung der el. Leitfähigkeit für unterschiedliche Füllstoff-Geometrien vorgenommen. Weiterhin erfolgt im 2. AP ein Review der in den Publikationen

vorhandenen Simulationscodes (falls zugänglich). Andernfalls ist eine Neuentwicklung in z.B. Matlab oder Python vorstellbar. Dies würde eine anschließende Distribution bzw. Bereitstellung vereinfachen. Andererseits sollte die Verwendung bereits bestehender Codebasen berücksichtigt werden. So könnte z.B. das open source verfügbare Molekulardynamikprogramm LAMMPS bzw. dessen Derivat LIGGGHTS einige grundlegende Funktionen bereits zur Verfügung stellen (Erstellen von Nachbarschaftslisten, Kontaktbedingungen, etc.). Mit diesen gesammelten Informationen muss ein Programmkonzept erarbeitet werden, das einerseits die Auswertung explizit definierter Strukturen und deren Netzwerke mit den oben beschriebenen Eigenschaften (Volumenanteil, Größe und Form, Seitenlängenverhältnis, Orientierung, Verteilung) auswerten kann. Andererseits muss es möglich sein, diese repräsentativen Strukturen mit definierten Eigenschaften mehrfach, mit unterschiedlicher räumlicher Verteilung aber äquivalenter Morphologie zu erstellen, um einen statistischen Einfluss auf die el. Leitfähigkeit auszuschließen. Ziel dieses Arbeitspakets ist also ein **Programmdesign** in z.B. UML, das Rücksicht auf das ggf. ausgewählte Programm nimmt, zuvor definierte Anforderungen im Hinblick auf Programmschnittstellen, Workflow und Numerik erfüllt und dadurch mögliche Fehlentwicklungen vermeidet. Im 3. Arbeitspaket soll schließlich die Programmierung umgesetzt werden, so dass die nötigen Programmierarbeiten entsprechend des geplanten Designs durchgeführt werden. Die **Verifikation** anhand von Literaturdaten für verschiedene Materialsysteme erfolgt im 4. Arbeitspaket. Nach erfolgreichem Abschluss von AP4 kann schließlich in AP5 die eigentliche Parameterstudie durchgeführt werden: **Einfluss von Volumenanteil, Größe und Form, Seitenlängenverhältnis, und Orientierung des Füllstoffs sowie dessen Verteilung auf die elektrische Leitfähigkeit**. Die elektrische Leitfähigkeit der Matrix und des Füllstoffs wird dabei über die gesamte Parameterstudie konstant gehalten.

	Q1	Q2	Q3	Q4	Q5	Q6	Q7	Q8
1. Literatur & Bewertung	■	■						
2.1 Workflow		■						
2.2 Programmdesign		■	■	■				
3. Programmierung								
Volumenanteil			■	■	■			
Form				■	■	■	■	
Orientierung						■	■	
4. Verifikation			■			■	■	
5. Parameterstudie								
Volumenanteil							■	■
Form							■	■
Orientierung							■	■
6. Bericht/Veröffentlichung					■			■

Tabelle 1: Projektablaufplanplan. Der zeitliche Verlauf ist in Blau dargestellt. Milestones sind im Text fett und in der Tabelle mit einer Schattierung markiert.

Ziel ist eine Parameterstudie der oben genannten Einflussfaktoren. Dies soll in eine Datenbank münden, die es ermöglicht, eine der Anwendung entsprechende ideale Morphologie zu bestimmen und damit eine „component-off-the-shelf“-Lösung bzgl. der Morphologie bieten.

Mit Hilfe dieses Ansatzes soll es abschließend möglich sein, grundsätzliche Entscheidungen zu treffen, welche Füllstoffe aus Sicht der elektrischen Leitfähigkeit am attraktivsten sind und damit der Materialentwicklung von Füllstoffen sowie den Herstellungsprozessen neue Impulse liefern.

Literaturverzeichnis

- [1] N. A. [R. a. A. B. S. a. J. Sahari, „A review of electrical conductivity models for conductive polymer composite,“ *International Journal of Hydrogen Energy*, Bd. 42, Nr. 14, pp. 9262 - 9273, 2016.
- [2] Y. Huang, C. Ellingford, C. Bowen, T. McNally und D. Wu, „Tailoring the electrical and thermal conductivity of multi-component and multi-phase polymer composites,“ *International Materials Reviews*, Bd. 65, Nr. 3, pp. 129-163, 2019.
- [3] S.-H. Park, J. Hwang, G.-S. Park, J.-H. Ha, M. Zhang, D. Kim, D.-J. Yun, S. Lee und S. Lee, „Modeling the electrical resistivity of polymer composites with segregated structures,“ *Nature Communications*, Bd. 10, Nr. 2537, 2019.