

MOLEKULARE SIMULATION DES MEHRKOMONENTEN-SYSTEMS PVC-WEICHMACHER FÜR DIE ENTWICKLUNG NACHHALTIGER, LANGLEBIGER UND GESUNDHEITLICH UNBEDENKLICHER (VERBUND-) MATERIALIEN

BMWK IGF 22362 BR | Laufzeit: 07.2022 – 12.2024 | Susanne Fritz, Maren Lehmann, FILK Freiberg
Kategorien: Technische Textilien/Composite Werkstoffcharakterisierung

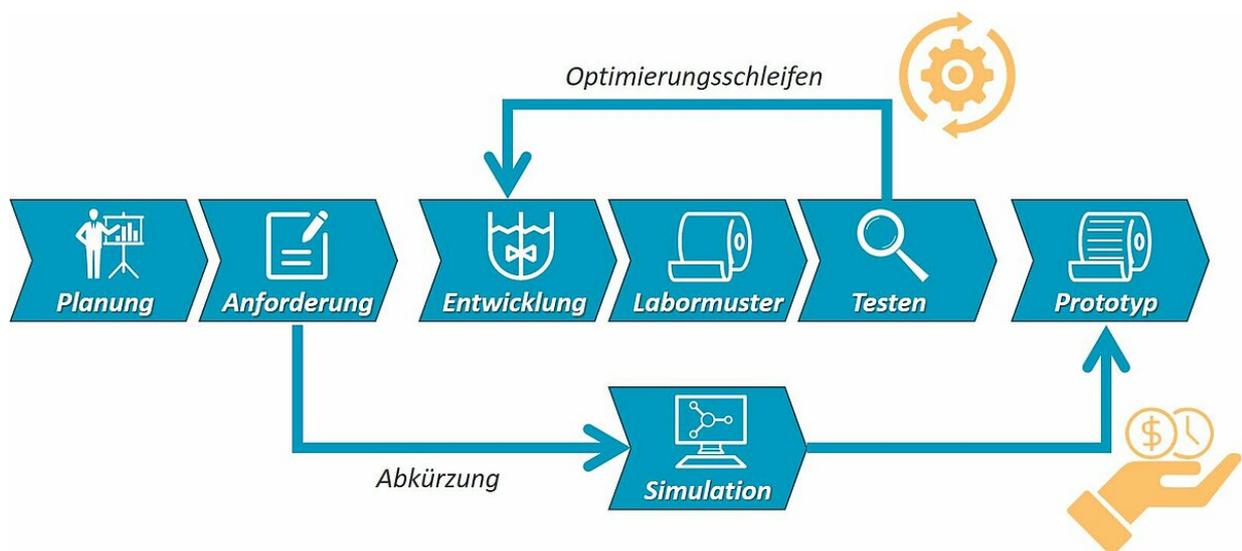


Abb.: Geplanter Nutzen von Computersimulationen zur Unterstützung des Entwicklungsprozesses von Weich-PVC-Produkten



AUFGABENSTELLUNG

Die für die Herstellung weicher PVC-Produkte benötigten Weichmacher entweichen durch Migrationsprozesse mit der Zeit aus dem Produkt, was nicht nur mit der Verschlechterung von Produkteigenschaften,

sondern auch mit Risiken für Gesundheit und Umwelt verbunden sein kann. Der Ersatz klassischer Phthalat-Weichmacher durch neue, unbedenkliche Weichmacher ist dabei eine aktuelle Herausforderung, die mit hohem Aufwand entlang der gesamten Wertschöpfungskette für Forschung, Entwicklung und Prüfung verbunden ist und lange Markteinführungszeiten verursacht.

PROJEKTZIEL | ARBEITSHYPOTHESE

Ziel des Projektes ist es, molekulardynamische Simulationen für die Vorhersage der Eigenschaften von PVC-Weichmacher-Mischungen nutzbar zu machen, um den Entwicklungsprozess nachhaltiger, langlebiger und gesundheitlich unbedenklicher Weich-PVC-Produkte zu unterstützen.

NUTZEN | AUSBLICK

Mit Hilfe der Simulationen könnten potentielle Weichmacherkandidaten zunächst ohne aufwändige und langwierige Laborversuche auf ihre prinzipielle Eignung getestet werden. Die Simulationen ermöglichen es dabei, die Wirkungsweise auf atomarer Ebene sowie das Zusammenspiel aus PVC und Weichmacher direkt zu verfolgen. Die mechanischen und thermischen Eigenschaften sowie thermodynamische und Verteilungsgrößen könnten für gegebene Zusammensetzungen rein theoretisch berechnet werden, was der Rezepturoptimierung zu Gute kommt und die Zahl notwendiger Laborversuche und -prüfungen verringert. Auf diese Weise könnten die Zeit und die Kosten bei der Entwicklung neuer Weich-PVC-Produkte deutlich reduziert werden.

FORMALE ANGABEN

Programm: IGF

Förderkennzeichen: 22362 BR

Projektbeginn: 07.2022

Laufzeit: 30 Monate

PROJEKTLEITER FILK

Dr. Susanne Fritz

Dr. Maren Lehmann

PROJEKTPARTNER

keine

Gefördert durch:



aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages