

Klebstoff am PC entwickeln

Mit Computersimulationen beschleunigen Fraunhofer-Forscher in einem interdisziplinären Team gemeinsam mit Henkel die Erforschung neuer Klebstoffe.

Das stäbchenförmige Molekül auf dem Bildschirm dreht und wendet sich, als würde es sich auf dem Laufsteg präsentieren. Es ist ein Haftvermittler – ein Molekül, das dabei hilft, dass sich ein Klebstoff in eine Oberfläche „festkrallen“ kann. Dann springt das Bild auf dem Monitor am Fraunhofer-Institut für Fertigungstechnik und Angewandte Materialforschung IFAM in Bremen um: Statt eines einzigen Moleküls erscheinen hunderte auf dem Monitor, zusammengesetzt zu einem engmaschigen Netz. Langsam nähert sich das Netz einem virtuellen Werkstück. Nach und nach docken die Haftvermittler an der Oberfläche an – erst vereinzelt, dann überall.

Per Mausklick haben die IFAM-Forscher gemeinsam mit den Simulationsexperten des Düsseldorfer Henkel-Konzerns den Haftvermittler mit dem Werkstück verbunden – rein virtuell versteht sich. »In Wirklichkeit dauert dieser Prozess nur einige Nanosekunden«, sagt Dr. Ekaterina Ryjkina, Leiterin der Abteilung Scientific Computing in der Zentralen Forschung bei Henkel. »Wir sehen den Prozess hier quasi in Superzeitlupe.«

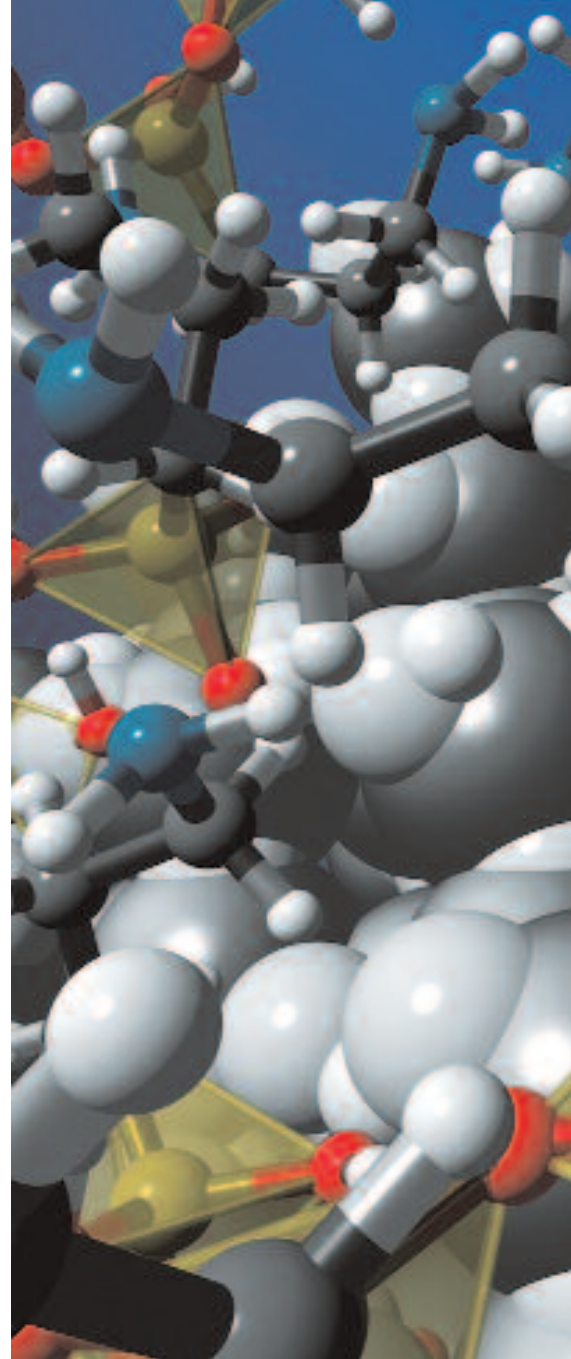
Vom Klebestift bis zu Hightech-Anwendungen in Elektronik, Fahrzeugbau und erneuerbaren Energien: Die Spannweite der industriellen Klebtechnik ist riesig. Moderne Verbundmaterialien und Werkstücke werden nicht verschweißt, vernietet oder verschraubt, sondern per Klebstoff verbunden. In einem modernen Automobil kommen über hundert Meter an Klebnähten zusammen. Die Vorteile: »Kleben ist zerstörungsfrei, man muss weder Löcher bohren noch das Material erhitzen und damit schädigen«, erklärt Dr. Reimar Heucher, der bei Henkel für die globale Produktentwicklung im Bereich Oberflächenbehandlung, Kleben und Dichten von industriellen Konsumgü-

tern zuständig ist. »Außerdem ermöglicht es ganz neue Materialkombinationen für innovative Anwendungsfelder.« Die Chips auf einer Elektronikarte sind heute ebenso verklebt wie die selbsttragenden Konstruktionen für LKW-Aufbauten, die Kohlefasern im Verbundwerkstoff oder die Linse auf der Spitze eines Endoskops.

Speziell angepasste Klebstoffe

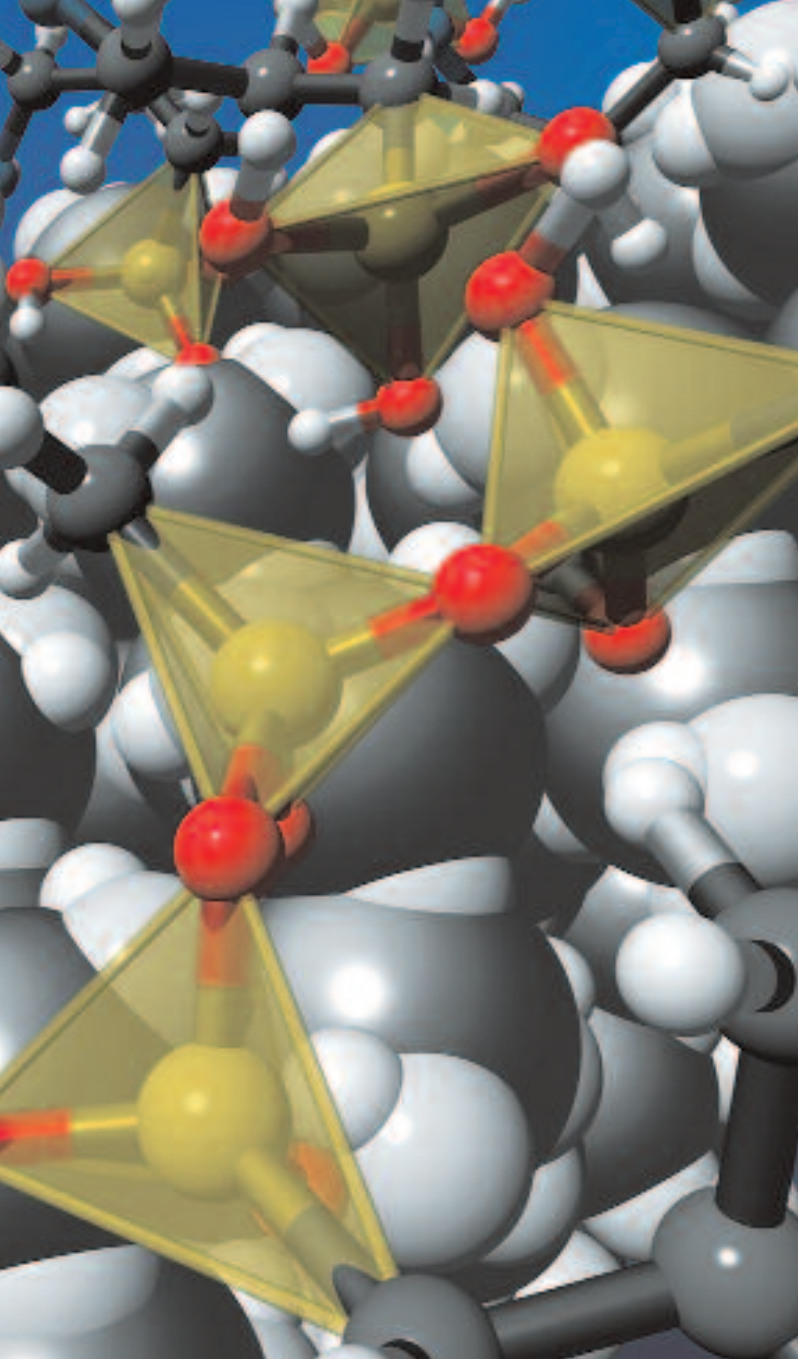
Aber: Die Vielzahl an modernen Werkstoffen – von Keramiken über Kunststoffe bis hin zu speziellen Legierungen – erfordert speziell angepasste Klebstoffe. Die Produktentwickler suchen für jede neue Anwendung, jede neue Materialkombination einen optimalen, maßgeschneiderten Klebstoff. Dabei können chemische Eigenschaften künftiger Klebstoffe mit Computersimulationen virtuell untersucht werden, lange bevor aufwendige Experimente nötig sind.

Die Produkthanforderungen geben die Richtung der Entwicklung vor: »Im Bereich der Telekom-Kabelindustrie müssen Alterungstests bei Temperaturen von -40 °C bis +70 °C durchgeführt werden«, nennt Heucher ein Beispiel. Ein Klebstoff muss diesen Bedingungen natürlich trotzen können. Bei der virtuellen Klebstoffentwicklung arbeiten Dr. Marc Hamm und Dr. Philipp Spuhler aus der Abteilung Scientific Computing sowie Dr. Marc Amkreutz und Dr. Peter Schiffels aus der Arbeitsgruppe Applied Computational Chemistry des IFAM eng zusammen. Gemeinsam gehen die Experten der Frage nach, wie sich die Langzeitbeständigkeit von Klebverbindungen verbessern lässt, die extremen Bedingungen zu widerstehen haben. Eine Möglichkeit ist der Einsatz von Haftvermittlern. Das sind Moleküle, die sich zwischen der Klebstoffschicht und dem Substrat anlagern und dabei die Klebkraft verstärken.



Allerdings kann nicht jedes Molekül, das die Klebkraft an der Grenzschicht potenziell verstärkt, dem Klebstoff direkt als Haftvermittler zugesetzt werden. Die Probleme: Möglicherweise werden durch das Einrühren des Haftvermittlers die Eigenschaften des Klebstoffs negativ verändert. Oder die Haftvermittler schaffen es während des Auftragens und anschließenden Aushärtens des Klebstoffs nicht, dorthin zu wandern, wo sie gebraucht werden – in die direkte Grenzschicht des Klebstoffs.

Deshalb suchen die Forscher nach neuen, beweglichen Wirkstoffen, die sich aus dem Klebstoff in Minutenschnelle an der Grenzfläche anreichern und dort die Haftung verstärken. Nur: Mit Experimenten ist dieser Anreicherungsprozess schwer zu analysie-



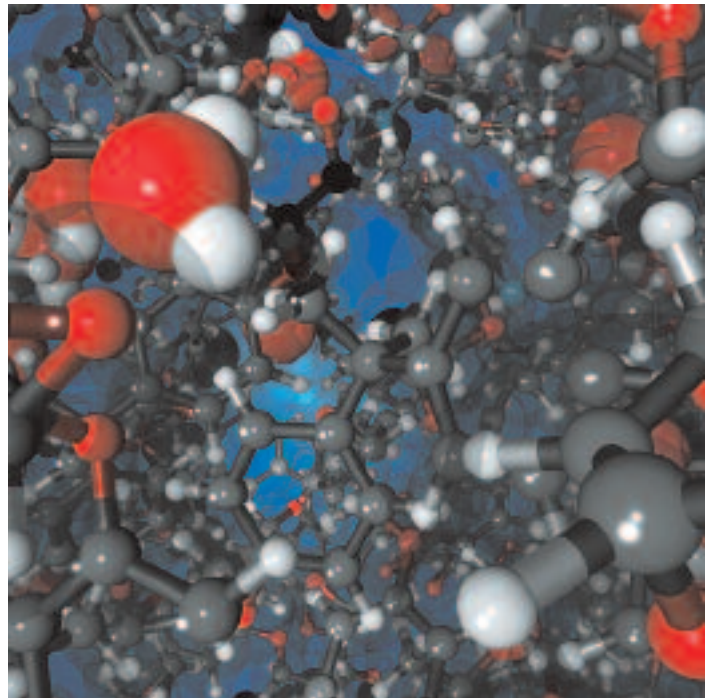
Im Computer werden komplexe Vorgänge modelliert wie etwa der Vernetzung einer oberflächenaktiven Substanz (links) oder der Transport von Wasser (unten).

© Fraunhofer IFAM

durch die Simulation häufig eine Vorauswahl treffen und uns bei den realen Experimenten auf vielversprechende Kandidaten konzentrieren. Das verkürzt den Produktentwicklungsaufwand enorm«. Den gesamten Klebprozess können die Forscher allerdings nicht nachempfinden, dazu ist er schlicht viel zu komplex. »Bei unseren Simulationen gehen wir immer nur einer gezielten Fragestellung nach, die für unsere industriellen Partner von praktischer Bedeutung ist«, sagt Marc Amkreutz vom IFAM.

Im Rechner werden immer komplexere Systeme simuliert

Aber: Die Rechner werden von Jahr zu Jahr schneller, die Methoden ausgefeilter. Deshalb streben die Experten danach, immer komplexere Systeme zu simulieren. So gilt es Klebungen für viele Anwendungen zu



ren, nicht zuletzt wegen der winzigen Dimensionen – die Klebeschicht misst nur Mikrometer. Die Simulationsexperten suchen daher zunächst mit Hilfe ihrer Rechner nach Molekülen mit passenden Haftungseigenschaften. Anschließend prüfen sie mit einem speziell entwickelten Computerprogramm, ob es die Haftvermittler bis an die Klebfläche schaffen.

Peter Schiffels vom IFAM zeigt auf den Monitor. Zu sehen ist ein Diagramm mit einer simplen, waagerechten Linie. Während der Simulation ändert sich das Bild. Im Zeitraffer beult sich der linke Linienrand nach unten aus. »Am Anfang, wenn man den Klebstoff aufträgt, ist der Haftvermittler noch gleichmäßig darin verteilt«, erläutert Schiffels. »Dann sieht man, wie der Haftvermitt-

ler zur Oberfläche wandert und sich dort anreichert. Das bedeutet: »Es ist ein durchaus viel versprechender Kandidat, den man näher untersuchen sollte«, sagt der Wissenschaftler.

Auf diese Weise haben die Forscher einige Kandidaten für verbesserte Haftvermittler ermittelt. Diese müssen sich nun im Labor bewähren. »Mit der Computersimulationen können und wollen wir das Experiment nicht ersetzen«, betont Dr. Ryjkina. »Aber vor allem bei Fragestellungen, die im Labor nur schwer zugänglich sind, können wir

optimieren, etwa bei Klebungen von Blechen und Glasscheiben im Karosseriebau, bei Leichtbauweisen im Flugzeug-, Schienenfahrzeug- und Containerbau, in der Mikroelektronik und bei Verpackungsmaterialien. »Klebungen müssen zum Beispiel in Solar- und Windanlagen 20 bis 30 Jahre lang halten und sind dabei extremen klimatischen Bedingungen ausgesetzt: Feuchtigkeit, Hitze, Strahlung und aggressiven Medien«, sagt Reimar Heucher. »Da wird es noch einigen Entwicklungsbedarf geben – auch in punkto Klebstoffe.«

Frank Grotelüschen