

Teilprojekt 5: Evidenzbasiertes Design neuer I-FRCs mit Bottom-up-Methoden

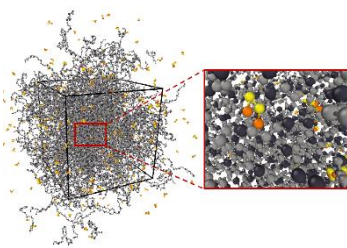
C. BREITKOPF in Kooperation mit S. WIEßNER;
extern: V. VINŠ (Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik / CZ)

Motivation

Ziel ist die multiskalige Vorhersage des thermomechanischen Verhaltens von Faserverbundwerkstoffen (*fibre rubber composites* I-FRC) und die Beschreibung der Wechselwirkung einzelner I-FRC-Komponenten auf der molekularen Skala durch theoretische Simulationen und begleitende validierende experimentelle Untersuchungen, um Daten für die Modellierung auf der Meso- und Makroebene zu generieren, damit evidenzbasierte Modelle für neue Materialien abgeleitet werden können.

Stand der Forschung und eigene Vorarbeiten

In den vorangegangenen Projektphasen wurden Wärmeleitfähigkeiten für verschiedene un- vernetzte oder vernetzte Polymere/Elastomere mit Hilfe von Molekulardynamiksimulationen (MD) nach der Green-Kubo-Methode berechnet. Darüber hinaus wurden Wärmekapazitäten, Glasübergangstemperaturen und Vernetzungsarten und -grade [1-8] simuliert und z. B. durch kalorimetrische Untersuchungen und Messungen mit der Wärmeflussmethode validiert. Darüber hinaus wurden mechanische Eigenschaften verschiedener Modellspezies wie das Spannungs-Dehnungs-Verhalten sowie der Elastizitätsmodul mittels MD simuliert.



Wissenschaftliche Fragestellung und Projektziele

Auf der Grundlage experimentell gewonnener und simulierter Daten aus den Kohorten I und II soll mit Hilfe eines KI-Algorithmus ein Screening möglicher Stoffe (z.B. Polymere/Elastomere für Matrix) durchgeführt und eine Vorhersage von Stoffeigenschaften getroffen werden. Hierfür sollen bestehende KI-Algorithmen erweitert und verbessert werden.

Ein weiterer Schwerpunkt ist die Untersuchung der Temperaturstabilität und des Stofftransfers innerhalb der neuen Materialien (z.B. Gasdiffusionsstabilität) zur Abschätzung möglicher Anwendungen, so dass z.B. Vorhersagen über die Materialalterung sowie thermische und mechanische Stabilität unter Dauerbelastung getroffen werden können.

Die Simulationen innerhalb des Teilprojekts sollen sowohl auf molekularer Ebene (z.B. ab initio MD) als auch mittels FEM durchgeführt werden, was letztlich realistische Materialdatenmodelle z.B. für Polymer/Elastomer-Netzwerke liefern soll.

Die Arbeiten in diesem Teilprojekt kooperieren in erster Linie mit TP 2 (thermische und mechanische Eigenschaften der Fasern), TP 3 (thermische und mechanische Eigenschaften der Polymermatrix) und TP 6 (Übertragung von Materialdaten für meso- und makroskopische Modelle).

Literatur

- [1] Vasilev, A.; Lorenz, T; Breitkopf, C.: Thermal Conductivity of Polyisoprene and Polybutadiene from Molecular Dynamics Simulations and Transient Measurements. *Polymers* 2020, 12(5): 1081, DOI: 10.3390/polym12051081.

- [2] Vasilev, A.; Lorenz, T; Breitkopf, C.: Thermal Conductivities of Crosslinked Polyisoprene and Polybutadiene from Molecular Dynamics Simulations. *Polymers* 2021, 13(3): 315, DOI: 10.3390/polym13030315.
- [3] Vasilev, A.; Lorenz, T; Kamble, V.K.; Wiessner, S.; Breitkopf, C.: Thermal Conductivity of Polybutadiene Rubber from Molecular Dynamics Simulations and Measurements by the Heat Flow Meter Method. *Materials*, 2021, 14 24): 7737, DOI: 10.3390/ma14247737.
- [4] Kanan; A.; Vasilev, A.; Breitkopf, C.; Kaliske, M.: Thermo-Electro-Mechanical Simulation of Electro-Active Composites. *Materials*, 2022, 15(3): 783, DOI: 10.3390/ma15030783.
- [5] Vasilev, A.; Lorenz, T; Breitkopf, C.: Prediction of Thermal Conductivities of Rubbers by MD Simulations - New Insights. *Polymers*, 2022, 14(10): 2046, DOI: 10.3390/polym14102046.
- [6] Alamfard, T.; Lorenz, T; Breitkopf, C.: Thermal Conductivities of Uniform and Random Sulfur Crosslinking in Polybutadiene by Molecular Dynamic Simulation. *Polymers* 2023, 15(9): 2058, DOI: 10.3390/polym15092058.
- [7] Alamfard, T.; Lorenz, T; Breitkopf, C.: Glass Transition Temperatures and Thermal Conductivities of Polybutadiene Crosslinked with Randomly Distributed Sulfur Chains Using Molecular Dynamic Simulation. *Polymers*, 2024, 16(3): 384, DOI: 10.3390/polym16030384.
- [8] Breitkopf, C.: Theoretical Characterization of Thermal Conductivities for Polymers - A Review. *Thermo*, 2024, 4(1): 31-47, DOI: 10.3390/thermo4010004.