

Detaillierte Modellierung der Porenbildung bei der Herstellung von porösen Polymermembranen

*Manuel Hopp-Hirschler, Institut für Chemische Verfahrenstechnik,
Universität Stuttgart*

Für die Stofftrennung mittels poröser Polymermembranen ist die Morphologie der Membran entscheidend. Poröse Polymermembranen können durch den Phaseninversionsprozess hergestellt werden. Dabei wird eine stabile Polymerlösung auf einem Träger in ein wässriges Fällungsbad eingetaucht. Bei Kontakt von Polymerlösung und Fällungsbad diffundiert Lösungsmittel aus der Polymerlösung ins Fällungsbad und Wasser aus dem Fällungsbad in die Polymerlösung. Bei Erreichen der Mischungslücke zerfällt die Polymerlösung in eine polymerreiche, feste und eine polymerarme, flüssige Phase. Eine gewünschte Morphologie wird bislang ausschließlich experimentell und auf Basis eines umfangreichen Erfahrungswissens entwickelt.

Ziel der Arbeit ist die Weiterentwicklung eines neuartigen Modellierungsansatzes, mit dem der komplexe Prozess der Strukturbildung im Fällungsprozess simuliert werden kann. Der auf „first principles“ basierende Modellierungsansatz zur Vorhersage der Porenstrukturen im Phaseninversionsprozess beruht auf dem Cahn-Hilliard Modell [1] und beschreibt den Phasenzерfall hinter einer bewegten Fällungsfront [2].

Es wird eine Weiterentwicklung für Mehrkomponentensysteme vorgestellt, die die Betrachtung von vollständigen, ternären Stoffsystemen zur Untersuchung relevanter Morphologien ermöglicht. Durch die Berücksichtigung von thermischen Fluktuationen, die zum Bruch mathematischer Symmetrie führt, konnte die Entstehung realer Porenstrukturen simuliert werden. Damit wurde die Voraussetzung zur weiteren Untersuchung von realen Polymersystemen während des Phaseninversionsprozesses geschaffen.

Danksagung

Diese Arbeit wurde im Rahmen des Forschungsstipendiums MBFSt 3675 von der Max Buchner Stiftung gefördert.

Literatur

[1] J. W. Cahn and J. E. Hilliard. Free energy of a nonuniform system. i. interfacial free energy. *Journal of Chemical Physics*, 28 (2):258–267, 1958.

[2] Manuel Hopp-Hirschler and Ulrich Nicken. Modeling of pore formation in phase inversion processes: Model and numerical results. *Journal of Membrane Science*, 564:820 – 831, 2018.