

Polymer- und Kolloidphysik in der BASF

Jens Rieger und Rüdiger Iden

Shampoos, Plastiktüten, Waschmittel, Vitamine, Klebstreifen, Styropor, Beton, Anstrichfarbe, Meerwasserentsalzung. Diese kleine Aufstellung, die sich fast beliebig fortsetzen ließe, soll einen Eindruck davon vermitteln, womit sich Physiker in der industriellen Polymerforschung beschäftigen. Welche Rolle sie dabei spielen, soll dieser Beitrag zeigen. Dazu muss man auch auf die Philosophie in der industriellen Forschung eingehen, die sich deutlich von der Denkweise an den Universitäten unterscheidet. Und schließlich möchten wir noch darauf aufmerksam machen, dass es Fragen gibt, die aus unserer Sicht intensiverer physikalischer Grundlagenforschung bedürfen.

Die nachfolgenden Ausführungen beziehen sich auf die BASF – spezieller noch: auf polymer- und kolloidphysikalische Fragen. Polymere spielen im Produktportfolio der BASF eine bedeutende Rolle. Polymere Werkstoffe, wie beispielsweise Polystyrol und Polyamid, kennt man aus dem täglichen Umgang. Weniger bekannt ist, dass Polymere auch in nicht sichtbarer Form als so genannte Effektstoffe einen wesentlichen Beitrag zur Lebensqualität liefern, zum Beispiel in Kosmetika, Pharmazeutika und Waschmitteln. Sowohl bei den polymeren Werk- als auch den Effektstoffen bestimmen supramolekulare Strukturen im Bereich von Nano- bis zu Mikrometern die physikalischen Eigenschaften und damit auch ihre Verarbeitungs- und Prozesseigenschaften. Aus diesem Grund ist das Verständnis von Struktur-Eigenschaftsbeziehungen Voraussetzung für Innovation und in vielen Fällen notwendig für die Sicherung bestehender Geschäftsfelder.

Polymerphysik in der BASF

Die Polymerphysik der BASF Aktiengesellschaft mit 170 Mitarbeitern, von denen die 30 Laborleiter (Physiker und Physikochemiker) promoviert sind, versteht sich als

Physikkompetenzzentrum, das in Zusammenarbeit mit seinen Kunden Struktur-Eigenschaftsbeziehungen aufklärt. Grundvoraussetzung hierfür ist einerseits ein fundiertes Verständnis für die Physik der „weichen Materie“ und andererseits ein leistungsfähiger Verbund von physikalischen Untersuchungsmethoden; die Bandbreite reicht von spektroskopischen über mikroskopische und diffraktive bis hin zu mechanischen, rheologischen und kolloidphysikalischen Methoden – einschließlich dem Molecular Modeling –, die den Anforderungen entsprechend immer auf dem neuesten Stand gehalten werden. In den Labors experimentieren und messen Laboranten und Techniker. Die Laborleiter bewerten die Ergebnisse gemäß dem aktuellen Stand der wissenschaftlichen Erkenntnis, sie werten die Daten weiter aus und diskutieren sie mit den Kunden – innerhalb und außerhalb der BASF. Laborleiter erarbeiten Problemlösungen im Team mit Kollegen der BASF Gruppe weltweit; sie besitzen eine fundierte Kenntnis des Forschungsstandes im jeweiligen Gebiet und können innovative Ansätze frühzeitig aufgreifen („Radarfunktion“); sie bauen Kontakte zu externen Forschungseinrichtungen auf und unterstützen die Geschäftsaktivitäten durch Dokumentation der wissenschaftlichen Kompetenz.

Einige Punkte sind hervorzuheben, die die Polymerphysik der BASF von ähnlichen Einheiten anderer Unternehmen unterscheiden: Die Aktivitäten sind primär projektbezogen ausgerichtet – das heißt, die Physiker agieren als Mitforscher und nicht als Dienstleister zur Generierung von Messergebnissen (wenngleich in begründeten Fällen die etablierten Methoden auch zu Servicemessungen herangezogen werden); um diese Aufgabe zu erfüllen ist im Allgemeinen eine große Vertrautheit mit den bearbeiteten Systemen notwendig. Da in der BASF eine Vielzahl unterschiedlichster Produkte hergestellt werden, ist jeder Wissenschaftler in der Abteilung Polymerphysik ein

Spezialist nicht nur für seine physikalische Methode, sondern auch für eine Reihe von Anwendungsfeldern, was im Fall eines der Autoren zu so interessanten Kombinationen wie Meerwasserentsalzung / Nanopartikel / Polymerfasern führt. Weiterhin ist zu betonen, dass die Polymerphysik keine Forschungseinheit „auf der grünen Wiese“ ist, sondern stark von den Interessen und Her-



ausforderungen der produzierenden und chemisch forschenden Einheiten bestimmt ist. Die Finanzierung erfolgt einerseits direkt durch Unternehmensbereiche und andererseits durch vom Vorstand getragene exploratorische Projekte, die unter anderem der Erschließung neuer Geschäftsfelder und -möglichkeiten dienen.

Obwohl bei der Forschung in der Industrie und an den Universitäten die gleichen Geräte eingesetzt werden (Diffraktometer, Spektrometer, Mikroskope, etc.), gibt es doch – trotz aller Gemeinsamkeiten bezüglich methodischer Ansätze – grundsätzliche Unterschiede, sowohl was die Arbeitsweise als auch was die Behandlung der Daten betrifft. Diese Unterschiede lassen sich pointiert in einem Imperativ zusammenfassen, den ein Wissenschaftler bei erfolgreicher Arbeit in der Industrie berücksichtigen muss: *Forsche so fundamental wie nötig und so anwendungsnah wie möglich.* Das heißt beispielsweise, dass in vielen Fällen ein fundamentales Verständnis von Struktur-Eigenschaftsbeziehungen auf der molekularen Ebene angestrebt wird, dass die strukturellen Zusammenhänge aber selten „auf die dritte Stelle

Stammsitz der BASF in Ludwigshafen und auch Sitz der zentralen Forschungsbereiche.

Dr. Jens Rieger, Dr. Rüdiger Iden, BASF Aktiengesellschaft, Polymerphysik 67056 Ludwigshafen

hinter dem Komma“ quantifiziert werden müssen.

Grundlagenforschung gehört in unserem Verständnis grundsätzlich an die Universitäten, da sie qua definitionem im präkompetitiven Bereich angesiedelt ist. Entscheidende Aufgabe eines Industrieforschers ist es in diesem Zusammenhang, früh-

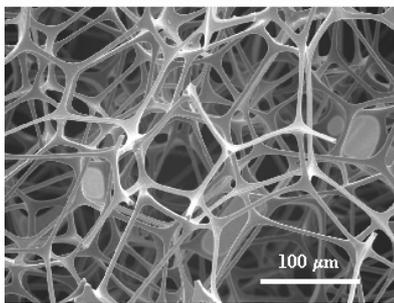
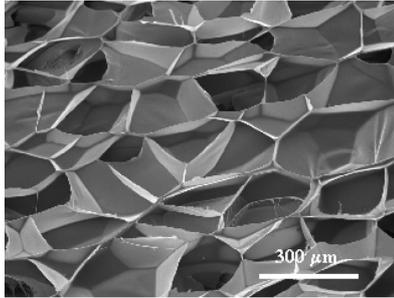


Abb. 1:
Beispiele für
geschlossen-
(oben) und offen-
zellige Polymer-
schäume (unten).

zeitig zu erkennen, welche Ansätze der Grundlagenforschung möglicherweise in Produkte oder Prozesse überführt werden können. Zu diesem Zweck unterhält die BASF allein im Bereich der Polymerforschung mehr als 100 Kooperationen mit akademischen Institutionen rund um die Welt.

Struktur-Eigenschafts- beziehungen

Eine Vision der industriellen Forschung ist es, grundlegend zu verstehen, welche Strukturen von der atomaren bis zur makroskopischen Längenskala welche Wirkung in der Anwendung erzielen. Der Begriff Anwendung bezieht sich hier nicht nur auf klassische Aspekte wie Festigkeit oder Transparenz, sondern auch auf Punkte wie Fließfähigkeit von kolloidalen Systemen, Verarbeitbarkeit, Adsorptionsneigung, Anfärbbarkeit, Bioverfügbarkeit, usw. In allen Fällen gilt es zu verstehen, wie sich diese Eigenschaften aus strukturellen Zusammenhängen auf der molekularen und mesoskopischen Ebenen ergeben. Eine besondere Bedeutung kommt hierbei der Frage zu, wie sich die Strukturen während der Herstellung/Anwendung des entsprechenden Systems bilden und

insbesondere wie sich die Struktur-
bildung steuern lässt. Auf der
Grundlage dieses Verständnisses
lassen sich Marktanforderungen
oder direkte Kundenwünsche in
physikalische Fragestellungen und
Lösungsvorschläge umsetzen.

Um einen Eindruck von typischen physikalischen Problemstellungen in der chemischen Industrie zu vermitteln, wird im Folgenden an Hand von Beispielen gezeigt, wo die Physik hinter einigen der eingangs aufgeführten Schlagwörter steckt. Bei Dämmmaterialien aus geschäumten Polymeren wird beispielsweise zur größtmöglichen Wärmedämmung eine bestimmte Hohlraumgrößenverteilung angestrebt. Der Schlüssel für diese Optimierung liegt im Verständnis und in der Kontrolle des Schäumprozesses, in dem sich gelöstes Gas und die geschmolzene polymere Matrix binodal oder spinodal entmischen. Auch die gezielte Herstellung offen- oder geschlossenzelliger Schäume (Abb. 1) basiert auf einem physikalischen Verständnis der involvierten Nukleierungs- und Fließvorgänge.

Ein weiteres Beispiel sind Gebäudeanstriche: Wie muss eine Streichfarbe beschaffen sein, damit sie sich gut streichen lässt, lange hält, eine ausreichende Wasserdampfpermeabilität aufweist und zudem gut aussieht? Neben vielen spezifisch chemischen Fragen bezüglich der Zusammensetzung der Anstrichfarben aus polymeren Nanopartikeln und Pigmenten reduziert sich das Problemfeld für den Physiker unter anderem auf die Frage, wie sich aus ca. 100 nm großen Polymerkügelchen ein homogener Film bildet. Interessante Einsichten

Die BASF

Die BASF ist ein transnationales, weltweit führendes Unternehmen der chemischen Industrie mit einem Umsatz von 35,9 Mrd. € und 100 000 Mitarbeitern im Jahr 2000. Das Sortiment umfasst hochveredelte Chemikalien, Kunststoffe, Farbstoffe und Pigmente, Dispersionen, Fahrzeug- und Industrielacke, Pflanzenschutzmittel sowie Feinchemikalien und erstreckt sich bis hin zu Erdöl und Erdgas.

Die Forschungsausgaben beliefen sich im Jahr 2000 auf 1526 Mio. € für die gesamte BASF-Gruppe. Die zentralen Forschungslaboratorien in Ludwigshafen fungieren als Kompetenz-Zentren für Wirkstoffe, Werkstoffe, Effektstoffe, Chemikalien und Verfahrensentwicklung.

erhielten wir durch Experimente mit der Neutronenkleinwinkelstreuung – durchgeführt am Forschungsreaktor des Instituts Laue Langevin in Grenoble. Es zeigte sich, dass sich die Polymerkügelchen in einer kristallinen Überstruktur anordnen, ein Effekt, der sich auch mit elektronenmikroskopischen Methoden erfassen lässt (Abb. 2) – und der im Zusammenhang mit der Entwicklung von optischen Schaltelementen („photonic crystals“) von aktuellem Interesse ist. Darüber hinaus gelang es zu zeigen, auf welchen Längenskalen die Polymere, aus denen die Nanopartikel bestehen, interdiffundieren und dem Film damit Stabilität verleihen. Weiterhin kann man den Streudaten entnehmen, wie sich Wasser in feuchten Filmen einerseits in Zwickeln zwischen den gepackten Kügelchen und andererseits in Gitterfehlstellen einlagert. Diese Mechanismen zu kennen, erleichtert wiederum, Wasser- und Wasserdampfdurchlässigkeit zu optimieren.

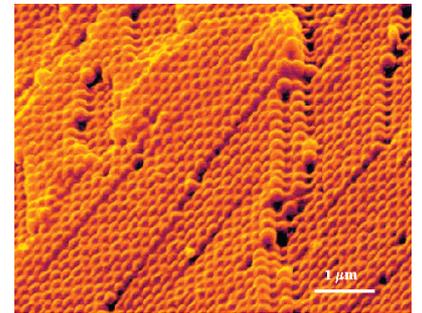


Abb. 2:
Kristalline Packung von Polymerkügel-
chen nach Eintrocknen einer Polymer-
dispersion

Im folgenden Beispiel sind die Polymere als Effektstoffe nicht sichtbar, sodass die Physik bei den entsprechenden Anwendungen nicht augenfällig ist. Eine Frage bei der Entwicklung von polymeren Additiven für Shampoos lautet beispielsweise: Wie lässt sich durch Einsatz geeigneter Tenside und Polymere eine gute Kämmbarkeit und ein schöner Glanz zu erzielen? Oberflächenrheologie, Röntgenkleinwinkelstreuung, AFM, Reflektometrie und andere Methoden werden eingesetzt, um zu klären, wie die molekularen Wechselwirkungen zwischen den Shampoo-komponenten und der Haaroberfläche aussehen, welche Komplexe sich bilden und welche selektiven Adsorptionserscheinungen auftreten. Die Untersuchung der Phänomene wird dadurch kompliziert,

dass Strukturbildungsprozesse auf mehreren Zeitskalen von der Shampooflasche bis zum Spülen der Haare erfasst werden müssen.

chemischen Forschung seit langem – wenn auch unter profanerem Überschriften – bearbeitet werden.

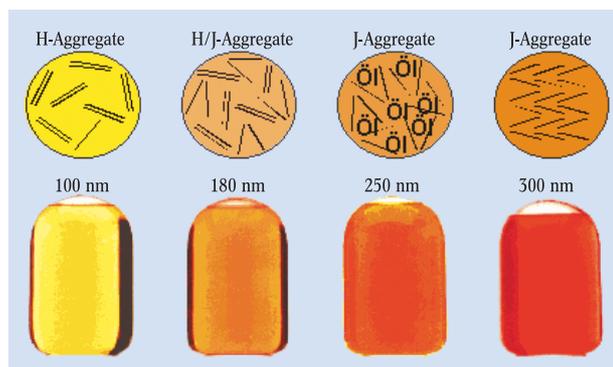


Abb. 3: Steuerung der Farbe von wässrigen β -Carotinformulierungen durch Kontrolle der supramolekularen Struktur der Nanopartikel. Angegeben sind der Typ der Molekülanordnung und die Größe der Partikel im Hydrosol.

Vitamine fallen in der Produktion oft in Form grober, schlecht wasserlöslicher Kristalle an. Um die Vitamine in eine sinnvolle Darreichungsform zu überführen, muss geklärt sein, wie sich eine maximale Bioverfügbarkeit der Wirkstoffe erzielen lässt. Die Antwort lautet: Man stellt diese Vitamine in Form von Nanopartikeln als Hydrosol her – möglichst in amorpher Form. Ein entsprechender Prozess wurde in der BASF für β -Carotin, als Vorform des Vitamins A, durch spezielle Fällverfahren entwickelt. Hierbei kam die Physik einerseits durch Entwicklung von Methoden zum Tragen, mit denen sich die Teilchengrößen während der Partikelbildung in konzentrierten Suspensionen bestimmen lassen. Die entwickelte Methodik, basierend auf Lichtstreuung unter Zuhilfenahme von Lichtleitfasern, wurde als Lizenz an Gerätehersteller abgegeben. Andererseits erlaubte das Wissen um Teilchenbildungsprozesse eine gezielte Prozessentwicklung. Bei Kenntnis der physikochemischen Vorgänge bei der Teilchenbildung (Nukleierung, Aggregation, Kristallisation, Wachstum) kann man Hydrosole herstellen, die auf Grund ihrer unterschiedlichen Farben (Abb. 3) für verschiedene Anwendungen, zum Beispiel im Bereich der Lebensmittelfärbung, nützlich sind. Festgehalten werden soll an dieser Stelle aber auch, dass der Prozess der Teilchenbildung – auch in der Grundlagenforschung – nach wie vor nicht vollständig verstanden ist.

Diese Beispiele zeigen, dass *Buzz-Words* wie „Nanopartikel, Nanostrukturierung, confined geometries, supramolekulare Strukturen, selbstorganisierte Strukturbildung, self-assembly, usw.“ in der physiko-

Herausforderungen

Abschließend kommen wir zu der Frage, welche physikalischen Themen aus unserer Sicht intensiver Forschungsaktivitäten bedürfen. Die im Folgenden genannten Probleme lassen sich zwar von Fall zu Fall durch experimentelles Screening im relevanten Parameterraum lösen. Grundsätzlich handelt es sich aber um – im physikalischen Sinn – ungelöste Fragen (ohne Anspruch auf Vollständigkeit): Computersimulation von Strukturbildungsprozessen auf allen Längenskalen – von der atomistischen über die mesoskopische bis zur makroskopischen Ebene, turbulente Mischprozesse, Kristallisation von Polymeren, Bildung und Struktur von Schäumen, Bildungsmechanismen von (organischen) Nanopartikeln in Wasser, Optimierung von Oberflächen (Kratzfestigkeit, Klebrigkeit), kombinatorische Materialforschung (incl. high throughput screening) mit adaptierten physikalische Methoden – und schließlich „Formulierungen“. Formulierungen sind Systeme mit zwei und mehr Komponenten, wie sie vom Konsumenten in Form von Shampoos, Medikamenten, Farbanstrichen, Kosmetika, Reinigungsmitteln aber auch in additiven Kunststoffen (Pigmente, Glasfasern) genutzt werden. Diese Produkte sind fast ausnahmslos empirisch entwickelt worden („Optimieren durch Probieren“). Zur gezielten Entwicklung neuer Produkte bzw. zur Weiterentwicklung bestehender Produkte ist es offensichtlich notwendig, das Zusammenwirken der Komponenten im physikalischen Sinn zu verstehen.

Obwohl in den hier beschriebenen Anwendungsfeldern enorme Umsätze getätigt werden und ob-

wohl sich faszinierende physikalische Fragen quasi von selbst ergeben, ist doch der Anteil der Physiker, die sich in Deutschland mit polymerphysikalischen Fragen beschäftigen, vergleichsweise gering. In diesem Zusammenhang ist auch mit Sorge zu verfolgen, dass die klassische Polymerphysik an immer weniger Lehrstühlen beforscht und gelehrt wird.

Chancen für Studenten und Absolventen

Auch in wirtschaftlich schwierigen Zeiten bewahrt die BASF ihre Kontinuität bei der Einstellung von Hochschulabsolventen – nicht zuletzt im Bereich der Polymerphysik. Wohingegen früher auch Atomphysiker oder – im Fall eines der Autoren – Theoretiker eingestellt wurden, ist man gegenwärtig bemüht, die während der Promotion erworbenen Fähigkeiten möglichst schnell zu nutzen, sei es im methodischen sei es im thematischen Bereich, das heißt „vorgeprägte“ Bewerber werden bevorzugt. Insgesamt arbeiten in der BASF derzeit ca. 150 Physiker.

Über die Anforderungen an Hochschulabsolventen und den Einstieg in die BASF findet sich mehr unter www.basf.de/de/human/nawi/. Darüber hinaus besteht die Möglichkeit, Ferienpraktika in physikalischen Labors zu absolvieren (www.basf.de/de/human/praktikanten/). Und schließlich werden Postdoc-Stellen angeboten, die vorzugsweise ausländischen Forschern vorbehalten sind.

*

Wir danken unseren Kollegen, insbesondere Dr. André, Dr. Auweter, Dr. Heckmann, Dr. Laun, Dr. Nörenberg und Dr. Wassner, für Beiträge zu diesem Artikel und für ihre kritischen Anmerkungen.