

# Eigenschaften von Stoffsystemen und Produktentwicklung

## *Folien zur Vorlesung*

NUR ZUM PERSÖNLICHEN GEBRAUCH!

PD Dr.-Ing. habil. Frank Babick, 1. April 2021

# 8. Eigenschaften von Stoffsystemen

# Lernziele zu Kapitel 8

- Wissen:
  - Unterscheidung zwischen physiko-chemischen Eigenschaften der Stoffe und den anwendungsbezogenen Eigenschaften der Produkte  
→ *Produktzustand* und *Produktqualität*
  - Unterscheidung zwischen Primär- und Sekundärfunktionen
  - Unterscheidung zwischen Wirk-, Hilfs- und Zuschlagstoffen
  - Gruppierung der Stoff- und Produkteigenschaften

# 8. Eigenschaften von Stoffsystemen

– *Stoffeigenschaften und Produktqualität* –

# Stoffsysteme und Produkte

- Unterscheidung nach REACH
  - Stoffe (reine Chemikalien und Mehrkomponentensysteme)  
→ i.d.R. nicht unmittelbar nutzbar, Stoffeigenschaften bestimmen Anwendung
  - Gemische (definiert hergestellte Stoffmischungen)
  - Erzeugnisse (Zwischen- und Endprodukte)  
→ Funktion wird nicht allein durch stoffliche Eigenschaften bestimmt
- Beispiele
  - Tragetasche aus PE:
    - Wasserbeständigkeit, Festigkeit ← Stoff
    - Behältnisfunktion ← Formgebung
  - Zuckerwürfel
    - Süße ← Stoff
    - Dosierbarkeit ← Formgebung
  - Anstrichfarbe
    - Farbe & Korrosionsschutz ← Pigmente,
    - Streichfähigkeit und glatte OF ← Lösemittel, Bindemittel und rheologische Additive



# Produkte werden wegen ihrer Funktionen gekauft

- oftmals: multifunktionale Produkte
- Primärfunktionen (*performance*) & Sekundärfunktionen (*convenience*)

## Beispiele:

- Produkt: weiße Wandfarbe
  - Primärfunktion: weiße Abdeckung  $\leftarrow$   $\text{TiO}_2$ -Weißpigmente
  - Sekundärfunktionen: z.B. Streichfähigkeit, Lagerstabilität  $\leftarrow$  Additive
- Produkt: photokatalytische Paneele
  - Primärfunktion: Photokatalyse an Partikelschichten  $\leftarrow$  Schichten aus nano- $\text{TiO}_2$
  - Sekundärfunktionen: z.B. mechanische Robustheit  $\leftarrow$  Substrate, Gehäuse
- Produkt: UV-absorbierende Sonnenmilch
  - Primärfunktion: UV-Schutz  $\leftarrow$   $\text{TiO}_2$ -Pigmente
  - Sekundärfunktionen: Hautverträglichk., Verteilbar.  $\leftarrow$  Basislotion, Pigmenthülle
- Produkt: verzierte Pralinen
  - Primärfunktion: **Geschmacksexplosion**  $\leftarrow$  Schokolade & mehr
  - Sekundärfunktionen: Dosierbarkeit, Ansehnlichkeit  $\leftarrow$  z.B.  $\text{TiO}_2$ -Weißpigmente



# Stoffliche Zusammensetzung von Produkten

- Wirkstoffe
  - bestimmen die Primärfunktionen
  - z.B. Pigmente in Farben, Tenside in Waschmitteln, Milchfett im Sahne
- Hilfsstoffe
  - Zusätze in geringen Mengen zur Einstellung der Sekundärfunktionen
  - z.B. Verdickungsmittel, Lösemittel, Bindemittel, pH-Puffer, Weichmacher, Flammschutz, Konservierungsmittel
- Zuschlagstoffe
  - preiswerte Zusätze in relativ hohen Mengen mit signifikanten Einfluss auf Primär- und Sekundärfunktionen
  - z.B. mineralische Füllstoffe in Anstrichfarben, Kunststoffen, Papieren; Salze in Waschmitteln

# Beispiele (1)

- Lacke und Farben

- Wirkstoffe: Farb- oder Glanzpigmente
- Hilfsstoffe: Lösemittel, Bindemittel, ...
- Zuschlagst.: Füllstoffe wie  $\text{CaCO}_3$  oder  $\text{SiO}_2$



- Zahnpasta

- Wirkstoffe: Putzkörper & Schaumbildner (*abrasiv & Schmutz aufnehmend*)
- Hilfsstoffe: Binde- und Feuchthaltemittel, Aromen, Farbstoffe, Wirkstoffe zur Kariesprophylaxe, Bakterizide, ...



- Waschmittel

- Wirkstoffe: Tensid (*waschaktiv, Schmutz solubilisierend*)
- Hilfsstoffe: Enzyme, Bleichmittel, Entschäumer, Waschalkalien, Wasserenthärter, Duftstoffe, ...
- Füllstoffe: z.B. Glaubersalz (für Rieselfähigkeit, ...)



# Beispiele (2)

- Papiere:

- Wirkstoffe: Zellulosefasern, Holzfasern
- Hilfsstoffe: Leimungsstoffe; Flockungsmittel, Dispergierhilfsmittel, Entschäumer
- Zuschlagst.: Kaolin,  $\text{CaCO}_3$  oder  $\text{TiO}_2$  (*Opazität, Farbe und Festigkeit*)



- Schokolade

- Wirkstoffe: Kakaomasse und Zucker
- Hilfsstoffe: Milchpulver, Gewürze, Lecithin (*rheologisch wirksam*)
- „Füllstoffe“: Haselnüsse, Mandeln, ...



- Klemmbausteine

- Wirkstoff: ABS (Acrylnitril-Butadien-Styrol-Copolymer)
- Hilfsstoffe: Farbpigmente, Antioxidanzien

*Funktionalität resultiert wesentlich aus Formgebung*



# ZH zw. Stoffeigenschaften und Produktqualität

- Produktqualität
  - anwendungsbezogene & verarbeitungstechnische Eigenschaften
  - *anwendungsbez.:*
    - Nährwert, Geschmack; Glanz und Farbe; Leitfähigkeit, Permittivität
    - Lagerstabilität, Adhäsion
    - pharmakolog. Wirkung, Freisetzungsverhalten von Wirkstoffen
    - toxikolog. Wirkung
  - oft beides:
    - Rieselähigkeit, Fließverhalten, Dosierbarkeit, Staubung, Entflammbarkeit, Bruchfestigkeit ...
- Produktzustand (= physiko-chemischen Eigenschaften)
  - chem. Zusammensetzung, Ionenstärke
  - Dichte, Viskositätsfunktion, Ladungsnullpunkt
  - volumenspezif. Oberfläche, Partikelgrößenverteilung, Partikelform
- Produktmodell (*Eigenschaftsfunktion* n. Rumpf):  
$$\text{Produktqualität} = \text{funct.}(\text{Produktzustand})$$

# Trends in der Produktentwicklung

- **Funktionalisierung** von Stoffen
  - Modifikation (der Grenzflächen) selektive Eigenschaftsänderung
  - z.B. Hydrophobisierung von mineralischen Pulvern
- **Personalisierung** von Produkten
  - Anpassung an die jeweilige Kundin / den jeweiligen Kunden
  - preiswerte Lösungen durch Digitalisierung & neue Technologien (z.B. 3D-Druck)
  - z.B. persönliche Medikamentenzubereitung, individuelles Schuhdesign
- **„Intelligente“** Werkstoffe und Produkte
  - milieu-sensitive Funktionalisierung
  - z.B. Wirkstofffreisetzung nur bei Regenwetter

# 8. Eigenschaften von Stoffsystemen

## – *Kategorien* –

# Stoffeigenschaften

(Versuch einer Kategorisierung)

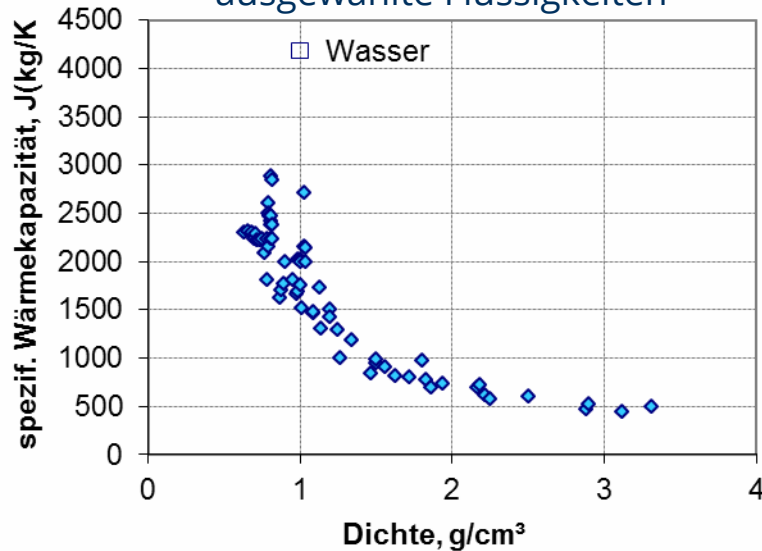
- inhärente Materialeigenschaften
  - physiko-chemische Eigenschaften, die unabhängig von Anwendung nur von thermodynamischen Zustandsgrößen bestimmt sind
  - z.B. Dichte, dielektrische Funktion, Elastizitätsmodul, Schmelztemperatur
- milieubestimmtes Materialverhalten
  - physiko-chem. Eigenschaften, die vom Milieu abhängen, in dem der Stoff eingebettet ist oder an dem er angrenzt
  - z.B. Löslichkeit; Streuvermögen, Reflektivität
- Grenzflächeneigenschaften
  - physiko-chem. Eigenschaften der Grenzfläche, abh. von der Materialpaarung
  - z.B. Oberflächen- bzw. Grenzflächenenergie, Lyophilie, isoelektrischer Punkt
- Reaktion der Umwelt auf das Material
  - toxikologische, ökotoxikologische, sensorische Eigenschaften
- anwendungsbezogene Stoffeigenschaften
  - Stabilität, Explosionsgrenzen

# Physikalische Stoffeigenschaften

- elektrisch (Leitfähigkeit, Permittivität, dielektrische Funktion)
- optische Eigenschaften
  - mikroskopisch (Brechungsindex, ...)
  - phänomenologisch (Transparenz, Opazität, Reflektionsgrad, Farbe)
- magnetisch (Suszeptibilität; para-/ferro-/dia-/... -magnetisch)
- mechanisch (Elastizität, Plastizität, Duktilität)
- rheologisch (Viskosität, Thixotropie, Schergrenze, Viskoelastizität)
- inertial (Dichte, Volumenexpansionskoeffizient)
- Oberflächenenergie (Oberflächenspannung)
- thermisch (Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität)
- Aggregatzustand ( $T_{\text{schm}}$ ,  $T_{\text{sied}}$ ,  $T_{\text{krit}}$ ,  $T_{\text{triple}}$ ; Schmelzwärme, ...)
- Besonderheiten der Messung
  - standardisierte bzw. etablierte Messmethoden verfügbar
  - z.T. branchenspezif. Lösungen

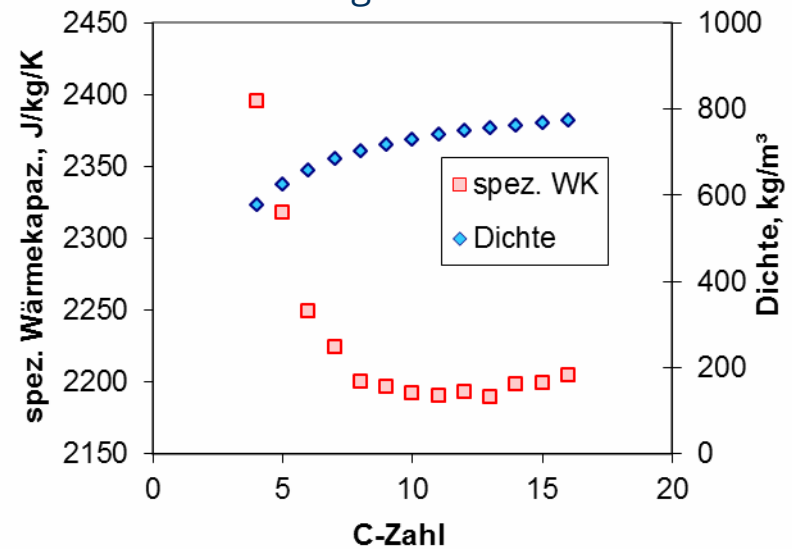
# Korrelation zwischen physikal. Stoffeigenschaften

## Wärmekapazität vs. Dichte ausgewählte Flüssigkeiten



Anson & Chivers, *J. Acoust. Soc. Am.*,  
85(2): 535-540, **1989**

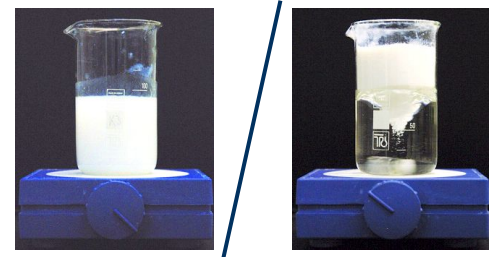
## Wärmekapazität & Dichte vs. Kettenlänge von Alkanen



Blanke, *Thermophysikalische Stoffgrößen*.  
Springer, Berlin, **1989**

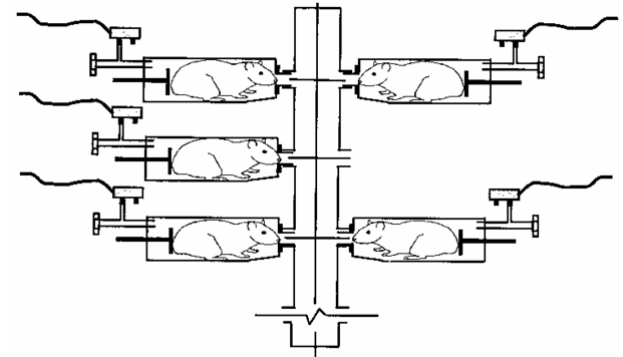
# Chemische Stoffeigenschaften

- pH-Wert beim Suspendieren
- Ladungsnullpunkt (*pristine point of zero charge*)
- isoelektrischer Punkt
- Säure-/Base-Eigenschaften
- polar/unpolar
- hydrophil/hydrophob
- katalytische Eigenschaften
- Besonderheiten der Messung
  - standardisierte bzw. etablierte Messmethoden verfügbar
  - z. T. branchenspezif. Lösungen



# Toxikologische Eigenschaften

- Mensch, Tiere, Umwelt
- unmittelbare physiologische Wirkung
  - auf Haut, Schleimhäute, Atemtrakt, Verdauungssystem, innere Organe
  - bei akuter / chronischer Belastung
  - reizend / entzündend / giftig
- besondere Gefährungen
  - mutagen, kanzerogen, reprotoxisch
  - Störung des Hormonhaushaltes
  - bio-akkumulierend
- Besonderheiten der Messung
  - sehr breites Spektrum an toxikologischen Kenngrößen
  - standardisierte Methoden an Zellkulturen wie auch an lebenden Organismen
  - statistische Datenaufbereitung



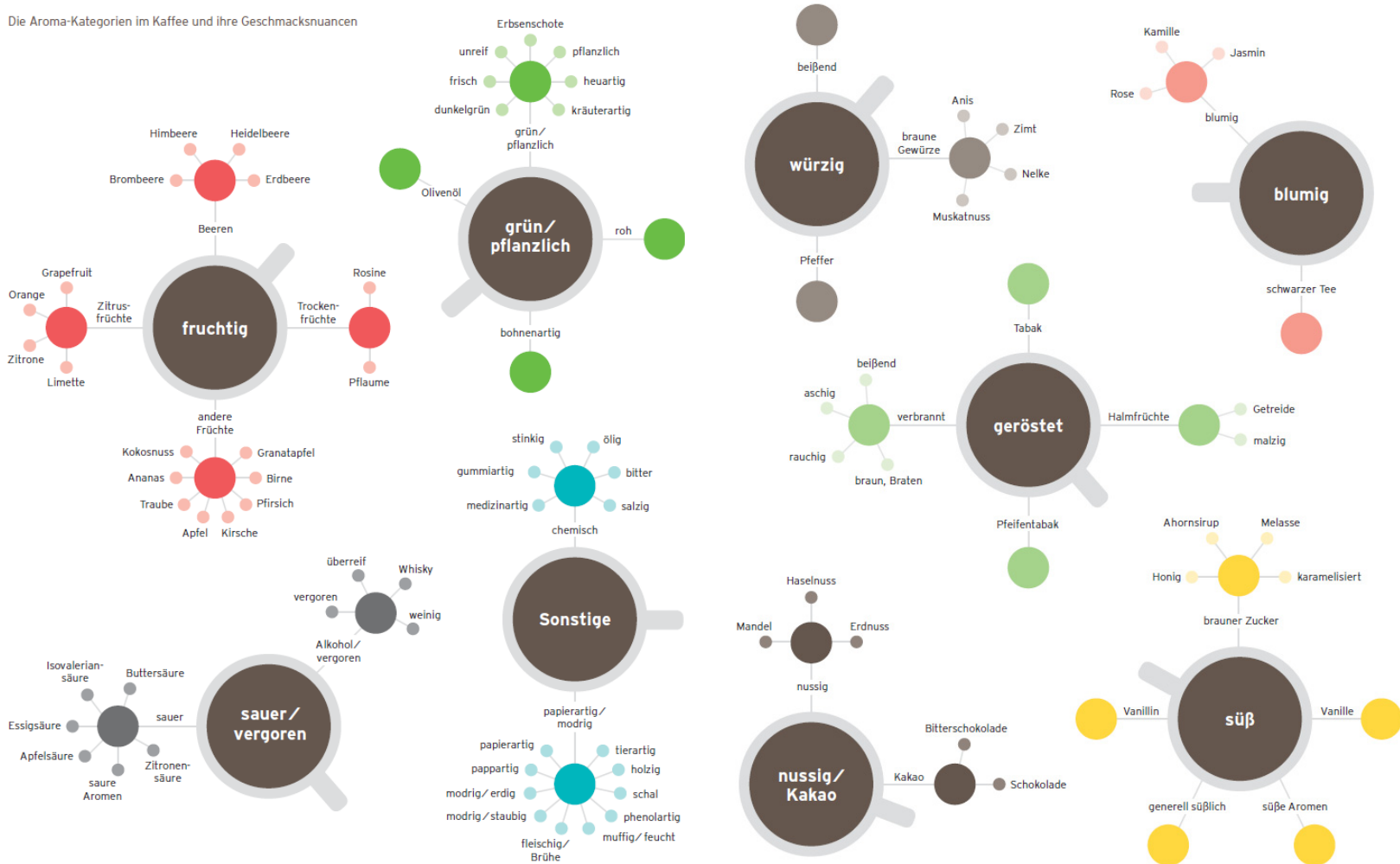
Inhalationsstation für Nagetiere  
Asgharian et al., *Toxikol. Sci.*, 71:104–111, 2003.

# Sensorische Eigenschaften

- Geruch
- Geschmack
- Mundgefühl
- taktile Eigenschaften
- Besonderheiten der Messung
  - mit lebenden, geschulten Probanden
  - individuell verschiedene Reizschwellen,
  - subjektive Wahrnehmung und Quantifizierung
  - Gewährleistung von Wiederholbarkeit

# Beispiel: Geschmacksnuancen bei Kaffee

Die Aroma-Kategorien im Kaffee und ihre Geschmacksnuancen



# Anwendungsbezogene Stoffeigenschaften

- Stabilität (bzgl. Entmischung, Agglomeration, Oxidation, Schimmel, ...)
- Stresstoleranz (bzgl. dynamischer Belastung, Wechsel der Umgebungsbedingungen)
- Dispergierbarkeit
- Dosierbarkeit, Rieselfähigkeit, Wandhaftung
- Staubung und Partikelfreisetzung
- Schalldämmung
- Deckkraft und Farbton
- Homogenität (einer Beschichtung, Suspension, Pulvermischung, ...)
- Besonderheiten der Messung
  - i.d.R. physiko-chemische Kenngrößen
  - anwendungs- bzw. produktspezif. Anforderungen und Toleranzen
  - mehrdeutige bzw. mehrdimensionale Begriffe (z.B. Stabilität, Dispergierbarkeit; auch Frequenzabh. der Schalldämmung)
  - standardisierte Methoden nicht immer verfügbar



# Relevanz im Kontext der Produktentwicklung

- eine umfassende Charakterisierung unserer Produkte und eingesetzten Materialien ist nicht bezahlbar
- Eingrenzung notwendig
  - Identifizierung der qualitäts- und verarbeitungstechnisch relevanten Eigenschaften (ausgehend von Spezifikation und Herstellungsprozess)
  - Identifizierung der von Behördenseite geforderten Materialdaten
  - Recherche zu vorhandenen Daten (Lieferanten, Datenbanken, wissenschaftliche Literatur) und Identifizierung der Wissenslücken
- ggf. Analyse an externe Dienstleister vergeben