

1	EINLEITUNG UND ZIELSETZUNG.....	1
2	PERMEATION BEI KUNSTSTOFFEN.....	6
2.1	Sorption	7
2.2	Diffusion	10
2.3	Permeation durch Kunststoffe	10
2.4	Permeation durch porenbehaftete Beschichtungen	12
2.4.1	Diffusionsmechanismen durch Poren	16
3	PLASMAGESTÜTZTE CHEMISCHE GASPHASENABSCHIEDUNG.....	23
3.1	Plasma	23
3.2	Plasmapolymerisation von Hexamethyldisiloxan	25
3.3	Prozesse der Schichtbildung	26
4	ANLAGENTECHNIK UND VERWENDETE MATERIALIEN	30
4.1	Reaktor zur großflächigen Beschichtung	30
4.2	Die Kunststoffsubstrate PET und PDMS	31
5	METHODEN ZUR OBERFLÄCHEN- UND SCHICHTANALYTIK	33
5.1	Bestimmung Sauerstoff- und Wasserdampftransmissionsraten	33
5.2	Permeationsmessstand zur Einzelgasmessung	35
5.3	Methoden zur Bestimmung der Schichtporosität	37
5.3.1	Cyclovoltammetrie (CV)	37
5.3.2	Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy (PALS) ..	39
5.3.3	Sauerstoffätzverfahren mit konsekutiver elektronenmikroskopischer Analyse im FESEM	41
5.3.4	Automatisierte Auswertung der elektronenmikroskopischen Aufnahmen	43
5.3.4.1	Abschätzung des Fehlerpotentials aufgrund der digitalen Bildverarbeitung	46
5.3.4.2	Vermessung der Poren	50
5.4	Messung der Schichtdicke mithilfe der Ellipsometrie	51
5.5	Substitution der Barrierschicht durch mikrogebohrte Edelstahlfolie	53
5.5.1	Herstellung der Mikrobohrungen mittels Ultrakurzpulslaser	53
6	MODELLIERUNG DES STOFFTRANSPORTS DURCH KUNSTSTOFFE	60
6.1	Allgemeiner Aufbau der Modellierung	60
6.2	Numerische Verfahren	61
6.3	Numerische Simulation der Permeation durch den Kunststoff	68
6.3.1	Dirichlet und Neumann-Randbedingungen	68
6.3.2	Einfluss der Gittergröße und Zeitschritte auf den Stofftransport	69
6.3.3	Abbruchkriterium und Randeffekte	72
6.3.4	Zwischenfazit zur numerischen Simulation der Permeation	74
7	MODELLIERUNG DES STOFFTRANSPORTS AM BEISPIEL VON PET	75
7.1	Einfluss der Porengröße auf den Stofftransport	75
7.2	Einfluss des Porenabstandes auf den Stofftransport	77

7.2.1	Porenpaare von 2, 3 und 4 Poren	78
7.2.2	Porencluster von bis zu 10.000 Poren	80
7.2.3	Korrelation der modellierten Porencluster mit mikrogebohrten Edelstahlfolien	82
7.3	Vergleich der Modellierung des Stofftransports von PET und PP	85
7.4	Zwischenfazit zur Modellierung des Stofftransports durch PET	88
8	EXPERIMENTELLE UNTERSUCHUNG DER POROSITÄT UND	
	PERMEATIONSMECHANISMEN	89
8.1	Herstellung der Beschichtungen	89
8.1.1	Untersuchung des Schichtwachstums	90
8.1.2	Einfluss der Schichtdicke auf die Barrierewirkung	93
8.2	Untersuchung der Schichtporosität und Korrelation mit der Barrierewirkung	95
8.3	Untersuchung der Schichtporosität mit dem Verfahren des Sauerstoffätzens	96
8.4	Untersuchung der Schichtporosität mithilfe der Cyclovoltammetrie	99
8.5	Untersuchung der Schichtporosität mithilfe der PALS	101
8.6	Abzuleitende dominierende Diffusionsmechanismen	106
8.7	Zwischenfazit	110
9	KORRELATION DER MODELLIERUNG MIT EXPERIMENTELLEN	
	SAUERSTOFFTRANSMISSIONSRATEN	112
10	MODELLIERUNG DES STOFFTRANSPORTS AM BEISPIEL VON PDMS	117
10.1	Einfluss der Gittergröße und Zeitschritte auf den Stofftransport	117
10.2	Korrelation der Modellierung mit Einzelgasmessungen	118
10.3	Fazit zur Modellierung des Stofftransports durch PDMS	120
11	ZUSAMMENFASSUNG	122
12	SUMMARY	123
13	ABKÜRZUNGEN UND FORMELZEICHEN	124
13.1	Abkürzungen	124
13.2	Formelzeichen	125
14	ANHANG	129
14.1	Sensitivitätsanalyse der Porenvermessung	129
14.2	MATLAB Tool zur automatisieren Auswertung der Poren	132
14.3	Daten der Porenauswertung mithilfe des Sauerstoffätzverfahrens	135
15	LITERATURVERZEICHNIS	138