

Teilprojekt B 4

Titel

Analyse der thermischen Kopplung von Schmelze, Gefüge und Werkzeug zur präzisen Vorhersage von Schwindung und Verzug im Spritzgießprozess

Projektleitung

Hopmann, Christian, Univ.-Prof. Dr.-Ing.
Lehrstuhl für Kunststoffverarbeitung
Seffenter Weg 201, 52074 Aachen

Projektbearbeitung

Jonathan Alms, M. Sc.
Lehrstuhl für Kunststoffverarbeitung
Seffenter Weg 201, 52074 Aachen

Aufgabenstellung

Das übergeordnete Ziel des Teilprojekts B4 in der zweiten Phase des Sonderforschungsbereichs ist die präzise Berechnung des Verzugs eines Bauteils auf Basis der simulierten Gefüge durch Kopplung der bestehenden integrativen Simulationskette (Multiskalensimulation) mit Spritzgießsimulationstools. Um dieses Ziel zu erreichen, wird die am IKV entwickelte Gefügesimulationssoftware SphäroSim erweitert. Dies beinhaltet eine präzise Beschreibung des Wärmetransports während des Spritzgießens, die Berücksichtigung von Prozesseinflüssen wie hohe Abkühlraten und der Einfluss der Kristallisationswärme auf das Gefüge. Eine anschließende Kopplung zu Spritzgießsimulationen soll zu einer präzisen Vorhersage des Verzugs führen.

Für den Berichtszeitraum des Jahres 2019 lassen sich Aufgabenstellungen ableiten.

Die Ermittlung des pvT-Verhaltens eines Kunststoffes bei hohen Abkühlraten ist für die präzise Bestimmung der Gefügestruktur wichtig, da die auftretenden Abkühlraten während des Spritzgießens die Gefügestruktur maßgeblich beeinflussen. Daraus ergibt sich die Aufgabenstellung, das pvT-Verhalten bei spritzgießrelevanten Drücken und Abkühlraten präzise modellieren zu können, um daraus eine Vorhersage über den Verzug berechnen zu können. Das modellierte pvT-Verhalten wird in der Füllsimulation verwendet, welche die Randbedingungen für die Gefügestruktursimulation liefert. Durch eine höhere Genauigkeit der Modelle kann eine präzisere Berechnung der Gefügestruktur erfolgen. Allerdings wird in SphaeroSim selbst kein thermischer

Transport berechnet und der entstehende Kristallisationsgrad nicht berücksichtigt. Daher ergibt sich die Aufgabe, unter Berücksichtigung der freiwerdenden Kristallisationswärme eine thermische Simulation in SphaeroSim zu implementieren, um auf lokale Temperaturerhöhungen auf der Mikroskala reagieren zu können.

Die Berechnung der Temperaturverteilung und der Kristallisationswärme auf der Mikroskala kann mit den Berechnungen der Temperaturfelder und der Kristallisationswärme in der Füllsimulation verglichen werden. Durch eine Kopplung der beider Simulation wird eine selbstkonsistente Mehrskalensimulation erreicht. Hierbei wird die Präzision der Gefügestruktursimulation dazu genutzt, die Füllsimulation an verschiedenen Stellen des Bauteils zu validieren. Auftretende Abweichungen werden durch die Anpassung der Füllsimulation reduziert. Da die Füllsimulation die Randbedingungen für die Gefügestruktursimulation liefert, muss das Gefüge neu berechnet werden. Dies führt zu einer Schleife, in der die Füllsimulation solange angepasst wird, bis beide Simulationen (Makro- und Mikroskala) in der thermischen Vorhersage übereinstimmen. Auf diese Weise wird eine selbstkonsistente Mehrskalensimulation aufgebaut.

Beim Kontakt der Schmelze mit dem Werkzeug entsteht aufgrund des Temperaturgradienten ein Wärmetransport von der Schmelze in das Werkzeug. Hierbei entstehen hohe Kühlraten direkt an der Kontaktfläche. Um die Kühlwirkung im gesamten Bauteil zu beschreiben, ist es unerlässlich die Randbedingungen (Wärmetransport an der Werkzeugwand) korrekt abzubilden. Daher stellt sich in diesem Teil die Aufgabe der Bestimmung des Wärmeübergangskoeffizienten und daraus eine Ermittlung des Wärmetransportes an der Grenzschicht zwischen Werkzeug und Kunststoff unter prozessbedingten Einflüssen (Druck, Kontaktfläche, Schwindung).

Vorgehensweise

Die Multiskalensimulation wird in Zusammenarbeit mit Teilprojekt B7 entwickelt und soll die Berechnung der Erstarrung von Polymerschmelzen auf unterschiedlichen Skalen ermöglichen: Füllsimulation (Makroskala), Gefügestruktursimulation (Mikroskala) und Homogenisierung mechanischer und thermischer Eigenschaften (Nanoskala).

Von einem besseren Verständnis des pVT-Verhaltens von Kunststoffen bei hohen Kühlraten profitieren die Füll- und Gefügestruktursimulation. Dazu wurde eine Flash-DSC 2+, Mettler-Toledo, Columbus, USA beschafft und DSC-Untersuchungen an kleinsten Proben (~25 ng) mit hohen Abkühlraten

bis zu 10.000 K/s im Labor durchgeführt. Mit diesen Daten wurde ein empirisches pvT-Modell, welches in Anlehnung an das Tait-Modell entwickelt wurde, erweitert und die Gültigkeit für hohe Abkühlraten untersucht.

Die Flash-DSC-Messungen bieten zusätzlich die Möglichkeit den Erstarrungsprozess bei hohen Abkühlraten unter nicht-isothermen Bedingungen zu messen, wie es im Spritzgießprozess der Fall ist. Der Verlauf der Erstarrung wurde durch Modelle von Avrami und der Hoffman-Lauritzen Theorie beschrieben. Diese Funktion wurde in SphaeroSim implementiert, um die entstehende Kristallisationswärme auf der Mikroskala zu berechnen und deren Einfluss auf den Erstarrungsprozess zu abbilden. Um den Wärmetransport innerhalb SphaeroSim zu berechnen, wurde eine thermische Diffusion implementiert, welche Abhängigkeiten von vorliegenden Kristallisationsgrad und Zustand des Materials (fest, flüssig) berücksichtigt.

Zur Bestimmung des Wärmeübergangskoeffizienten (WÜK) wurde ein Spritzgießwerkzeugeinsatz beschafft. Dieser besitzt neben drei Thermoelementen im Werkzeug fünf Thermoelemente, welche in die plattenförmige Kavität hineinragen und die Schmelzetemperatur messen. Basierend auf den Messungen lässt sich das Temperaturprofil und damit der Wärmeübergangskoeffizient berechnen. Allerdings erlaubte die Herstellung des Werkzeugeinsatzes nur eine Positionierung der Thermoelemente im Randbereich des Bauteils. Dadurch ist die primäre Wärmeabfuhr entlang der Thermoelemente nicht gegeben und eine Wärmeabfuhr quer zur Thermoelementeanordnung muss berücksichtigt werden. Dies macht eine Beschreibung des WÜK über einen linearen Zusammenhang unmöglich. Daher wurde eine inverse Simulation durch die Simulationssoftware Moldflow verwendet, um über die gemessenen Temperaturverläufe an den 8 verschiedenen Positionen den Wärmeübergangskoeffizienten indirekt zu bestimmen.

Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde in Zusammenarbeit mit den Teilprojekten B1, B3 und Herrn Prof. J. Wang das kontinuierliche zwei-Domänen pvT-Modell (KZD) entwickelt. Das KZD ist eine Weiterentwicklung des Tait-Modells, um eine bessere Fitgenauigkeit an experimentelle Daten zu erlangen. Um die Validität des Modells bei niedrigen Drücken zu testen, wurden die Messungen der pvT-Messzelle mit DSC- und Flash-DSC-Messungen bei Atmosphärendruck ergänzt. Das KZD zeigt sowohl bei niedrigen Drücken als auch bei hohen Abkühlraten eine hohe Abbildungsgenauigkeit, obwohl es für hohe Drücke und niedrige Abkühlraten ausgelegt worden ist. Durch die Ergänzung der Messungen mit Kühlraten bis 100 K/s konnte ein Bestimmtheitsmaß von 0.993 auf die Vorhersage der Übergangstemperatur von flüssig zu fest erreicht werden. Kühlraten ab 1000 K/s zeigen keinen signifikanten Kristallisationsprozess und konnten deshalb nicht berücksichtigt werden.

In der physikalischen Modellierung des Erstarrungsprozess durch die Modelle von Avrami und der Hoffman-Lauritzen-Theorie konnte gezeigt werden, dass diese Modelle eine Diskrepanz in der Vorhersage der Übergangstemperatur für hohe Kühlraten zeigen. Dies wird darauf zurückgeführt, dass diese für isotherme Prozesse entwickelten Modellen den abnehmenden Kristallisationsgrad bei hohen Kühlraten nur mit unzureichender Präzision beschreiben. Da die Modelle immer von einer Kristallisation ausgehen, können diese keine Aussage über eine Übergangstemperatur bei Abkühlraten treffen, bei denen das Material vollständig amorph erstarrt.

Zur Implementierung der thermischen Diffusion in SphaeroSim wurde ein Fundamentallösungsansatz des zweiten Fick'schen Gesetzes gewählt. Im Gegensatz zur Finiten-Differenzen-Methode, die auf die Betrachtung der nächsten Nachbarn im Simulationsgebiet beschränkt ist, erlaubt es dieser Ansatz den Einflussbereich der Temperaturerhöhung durch Kristallisationswärme frei zu wählen. Dadurch wird ein größerer Zeitschritt zwischen den Berechnungen der thermischen Diffusion ermöglicht. Dies hat einen hohen Einfluss auf die Rechendauer, da im Vergleich zur Erstarrungssimulation etwa nichtsdestotrotz 200-mal mehr Berechnungsschritte durchgeführt werden müssen, um numerische Instabilitäten zu vermeiden. Die Berechnung der Temperaturverteilung mit 200-mal kleineren Zeitschritten verlangsamt zwar die Simulation, allerdings ist nur in dieser Form die Berücksichtigung der lokalen Kristallisationswärme in der Simulation möglich.

Um den WÜK im Spritzgießprozess unter realen Anwendungsbedingungen zu untersuchen, wurde der beschaffte Werkzeugeinsatz verwendet. Hier hat sich allerdings gezeigt, dass die eingesetzten Thermolemente von der einströmenden Schmelzefront umgebogen werden und an die Werkzeugwand gedrückt werden. Dadurch konnte nur eine Mischtemperatur der Werkzeugwand und der Schmelze gemessen werden. Außerdem war es durch das Umknicken nicht möglich, die exakte Position der Thermolemente zu beschreiben, daher ist derzeit keine inverse Simulation möglich. An dieser Stelle wird der Werkzeugeinsatz mit den Erfahrungen aus der Messung des WÜK in B8 nachbearbeitet.

Zusammenfassung und Ausblick

Zusammenfassend konnte im Berichtszeitraum ein pVT-Modell (KDZ) entwickelt werden, dass eine hohe Vorhersagegenauigkeit der Übergangstemperatur bei hohen Abkühlraten in nicht-isothermen Prozessen erreicht. Allerdings ist es derzeit nicht möglich Messungen der Übergangstemperatur bei gleichzeitig hohen Drücken und hohen Abkühlraten durchzuführen und das Modell in diesem Bereich zu validieren. Dies ist über die Kombination des KZD mit einem Kristallisationskinetikmodell möglich, wie es von Avrami und

der Hoffman-Lauritzen Theorie beschrieben wird. Die Kristallisationskinetikmodelle zeigen derzeit eine schlechte Abbildungsgenauigkeit des Kristallisationsprozesses bei hohen Abkühlraten, da keine Beschreibung der amorphen Erstarrung möglich ist. An dieser Stelle sollen die Modelle durch die Berücksichtigung eines kühlratenabhängigen Kristallisationsgrades und einer Beschreibung der amorphen Erstarrung erweitert werden. Eine präzise Beschreibung des Kristallisationsgrades in Abhängigkeit der Kühlrate wird zusätzlich in SphaeroSim übernommen, um die Kristallisationswärme und deren Transport im Material genauer simulieren zu können.

In SphaeroSim steht im nächsten Jahr die Implementierung der iterativen selbstkonsistenten Multiskalensimulation an. Hierzu wurde bereits der Grundstein über die Implementierung der thermischen Diffusion gelegt und die methodische Beschreibung des Vorgangs erarbeitet.

Zur Messung des Wärmeübergangskoeffizienten wird der Werkzeugeinsatz mit den Erfahrungen von TP_B8 modifiziert, um ein Eintauchen der Thermoelemente in die Schmelze zu garantieren.

Veröffentlichungen

HOPMANN, CH.; WIPPERFÜRTH J.: *A concept of an injection compression mould for non-invasive ultrasound tomographic temperature measurements*. AIP Conference Proceedings, 2019.

WANG J.; HOPMANN CH.; RÖBIG M.; HOHLWECK T.; KAHVE C.; ALMS J.: *Continuous Two-Domain Equations of State for the Description of the Pressure-Specific Volume- Temperature Behavior of Polymers*. Polymers, 2020, 12. Jg., Nr. 2, S. 409.