

## Teilprojekt B04

### 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 B04 in der zweiten Phase des Sonderforschungsbereichs ist die präzise Berechnung des Verzugs eines Bauteils auf Basis der simulierten Gefüge eines Bauteils durch Kopplung der bestehenden integrativen Mehrskalensimulationskette mit Spritzgießsimulationstools. Um dieses Ziel zu erreichen, wird die am IKV entwickelten Gefügesimulationssoftware SphäroSim erweitert und deren Kopplung mit Spritzgießsimulationen implementiert. 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.

Die Ermittlung des  $p_vT$ - und des Kristallisationsverhaltens von teilkristallinen Kunststoffen bei hohen Abkühlraten ist für die präzise Bestimmung der Gefügestruktur wichtig, da die während des Spritzgießens auftretenden Abkühlraten die Gefügestruktur maßgeblich beeinflussen. Für die präzise Vorhersage von Schwindung und Verzug ist es daher von großer Bedeutung, dass das  $p_vT$ -Verhalten bei spritzgießrelevanten Drücken und Abkühlraten modelliert wird, um daraus eine Vorhersage über die lokale Schwindung berechnen zu können. Damit können über die Gefügestruktursimulationssoftware SphäroSim und die Homogenisierung HOMAT aus TP B07 die thermischen und mechanischen Eigenschaften präziser vorhergesagt werden. Die mechanischen Eigenschaften werden in einer strukturmechanischen Simulation

in die lokale Schwindung und den Verzug umgerechnet. Da sich die thermischen und mechanischen Eigenschaften von amorphem und kristallisiertem Kunststoff stark unterscheiden, ist ebenfalls der Anteil der kristallinen Phase an einer Gefügestruktur entscheidend für die berechneten Eigenschaften. Dazu muss SphäroSim in der Lage sein, lokale Kristallisationsgrade bestimmen zu können, sodass der Kristallisationsgrad in der Homogenisierung berücksichtigt werden kann. Aus diesem Grund wurde in SphäroSim ein Kristallisationskinetikmodell für sowohl geringe als auch hohe Kühlraten implementiert, um die Gefügeeinstellung zu beschreiben.

Des Weiteren wird die Verzugsberechnung aus der Gefügestruktur betrachtet. Dabei sollen über die lokalen mechanischen Eigenschaften, welche in der Homogenisierung der Gefügestruktur (TP B07) berechnet werden, und die lokale Schwindung, welche aus der Füllsimulation resultiert, Eigenspannungen im Bauteil bestimmt werden. Durch eine strukturmechanische Simulation kann so der Verzug präzise berechnet werden.

### Vorgehensweise

Die Mehrskalensimulationskette wird in Zusammenarbeit mit TP B07 entwickelt und soll die Berechnung der Erstarrung von Polymerschmelzen auf der Makroskala (Füllsimulation), auf der Mikroskala (Gefügestruktursimulation) und Nanoskala durch die Homogenisierung mechanischer und thermischer Eigenschaften ermöglichen. Im Berichtszeitraum wurde die Mehrskalensimulationskette um die Verzugssimulation mittels der thermomechanischen Simulationssoftware ABAQUS, Dassault Systèmes Simulia Corp, Johnston, Rhode Island, USA erweitert, um eine präzise Verzugsvorhersage des Bauteils auf Basis der Gefügestruktur berechnen zu können (Abbildung 1).

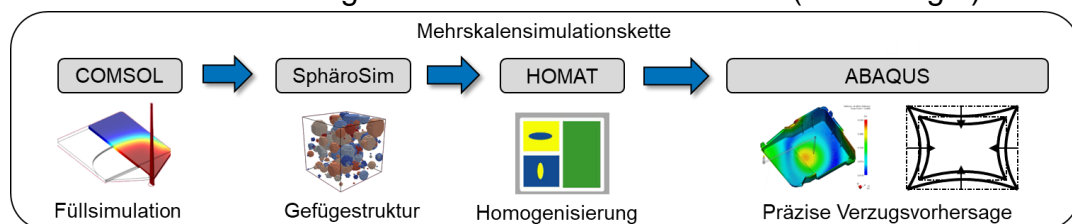


Abbildung 1: Ablaufschema der Mehrskalensimulationskette inklusive der Erweiterung um die Verzugsvorhersage mittels ABAQUS.

Um die Präzision der einzelnen Simulationsglieder der Mehrskalensimulationskette zu erhöhen, werden Materialmodelle, wie das pvT-Modell in der Füllsimulation, das Kristallisationskinetikmodell und das Wärmetransportmodell in der Gefügestruktursimulation erweitert. Durch die Berücksichtigung der Kühlrate im kontinuierlichen zwei-Domänen pvT-Modell (KZD), welches

in Zusammenarbeit mit B01 und B03 entwickelt wurde, konnte ein Bestimmtheitsmaß von 0,993 für Kühlraten bis 100 °C/s und bis hin zu einem Druck von 2200 bar erreicht werden.

Die beschaffte Flash-DSC 2+, Mettler-Toledo, USA bietet zusätzlich die Möglichkeit den Erstarrungsprozess bei hohen Abkühlraten unter nicht-isothermen Bedingungen zu messen. Durch den Verlauf der Kristallisation können die Modelle von Avrami und Hoffman-Lauritzen kalibriert werden, welche zusammen das Kristallisationskinetikmodell in der Gefügestruktursimulation ergeben und die Erstarrung auf der Mikroebene berechnet. Dieses Modell wird in SphäroSim implementiert, um die Kristallisation bei hohen Kühlraten und unter nicht-isothermen Bedingungen präzise beschreiben zu können.

Während der Gefügestrukturberechnung wird zum Zeitpunkt der lokalen Erstarrung über die aktuell anliegende Kühlrate der lokale Kristallisationsgrad bestimmt, da der Kristallisationsgrad einen maßgeblichen Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften hat. Der lokale Kristallisationsgrad kann bereits in der Homogenisierung HOMAT von B07 verwendet werden. Die lokalen mechanischen Eigenschaften werden mit der berechneten Schwindung aus der Füllsimulation mittels des KZD kombiniert, um die Verzugsvorhersage in ABAQUS zu berechnen.

### Ergebnisse

Ein kombinierter Kristallisationsgrad aus  $\alpha$ - und meso-Phase wurde aus den Flash-DSC-Messungen bei spritzgießrelevanten Kühlraten ermittelt. Um daraus auf die mechanischen und thermischen Eigenschaften zu schließen, wurde in Zusammenarbeit mit TP B07 eine teilkristalline Einheitszelle zur Homogenisierung entwickelt, die durch die Anpassung der Geometrie einen angepassten Kristallisationsgrad abbildet. Damit wurden die mechanischen Eigenschaften einer Stufenplatte homogenisiert mit der Annahme, dass der simulierte Kristallisationsgrad vollständig in der  $\alpha$ -Phase vorliegt. Dennoch konnte gezeigt werden, dass die mechanischen Eigenschaften wie erwartet zum Rand des Bauteils abnehmen, da ebenfalls der Kristallisationsgrad zum Rand hin abnimmt (Abbildung 2, links FixCrys). Im Vergleich dazu ist der homogenisierte E-Modul der Vorversion der Einheitszelle mit konstantem Kristallisationsgrad dargestellt (Abbildung 2, rechts StraightCrys). Dabei ist erkennbar, dass der Trend der Richtungsabhängigkeit der mechanischen Eigenschaften erhalten geblieben ist. Allerdings sind die vorhergesagten mechanischen Eigenschaften mit dem FixCrys-Modell deutlich anisotroper über die Bauteilhöhe.

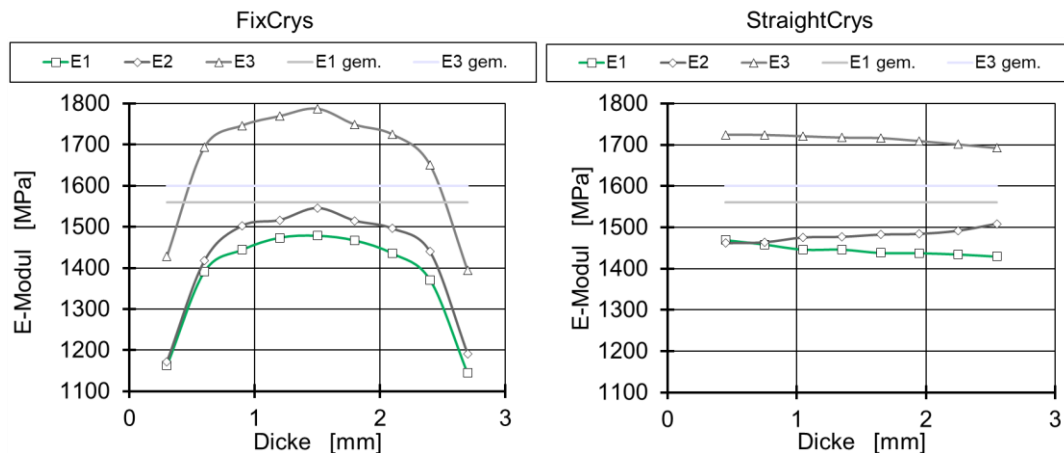


Abbildung 2: Berechnung der kristallisationsgradabhängigen effektiven mechanischen Eigenschaften einer 3 mm Stufenplatte in die drei Raumrichtungen E1-3 sowie die gemessenen E-Moduln (E1 gem., E3 gem.) (links, FixCrys) und die effektiven mechanischen Eigenschaften mit konstantem Kristallisationsgrad (rechts, StraightCrys).

Dies zeigt sich auch in der Berechnung des Verzuges auf Basis der homogenisierten mechanischen Eigenschaften. Dazu wurde ein Simulationsmodell mit den Abmessungen  $3 \times 45 \text{ mm}^2$  des Querschnittes einer Stufenplatte erstellt. Da die Homogenisierung in den Randbereichen sehr rechenintensiv ist ( $\sim 20$  Tage), in der erwartungsgemäß überdurchschnittlich kleine Gefügestrukturen berechnet werden, werden die mechanischen Eigenschaften interpoliert. Die Verzugsberechnung mittels ABAQUS, wie in Abbildung 3 dargestellt, demonstriert die Möglichkeit der Verzugsberechnung auf der Basis der Gefügestrukturberechnung und zeigt gleichzeitig den starken Einfluss der Berücksichtigung des Kristallisationsgrades.

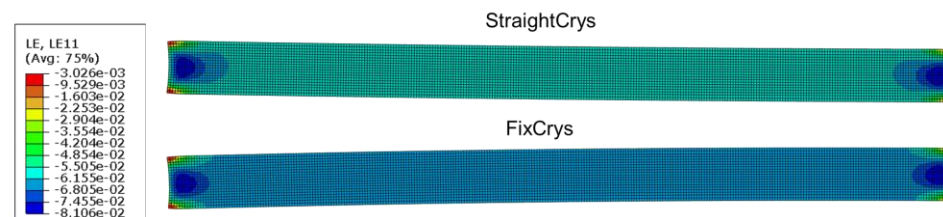


Abbildung 3: Darstellung der logarithmischen Dehnungskomponente in Längsrichtung eines Querschnittes der Stufenplatte. Oben dargestellt der Vezug und die logarithmische Dehnungskomponente auf Basis der Eigenschaftsbestimmung mit der Einheitszelle StraightCrys. Unten mit der Einheitszelle FixCrys.

In der Verzugsberechnung des Querschnittes der Stufenplatte wurde in beiden Fällen die Schwindung auf der Basis der Temperaturverteilung zum Anfang der Kühlphase berechnet. Denn ab dieser Zeit kann kein Kunststoff

mehr in die Kavität nachfließen, um der Schwindung entgegenzuwirken. Das heißt, dass für beide Verzugssimulationen ein identisches Schwindungsprofil vorliegt. Allerdings zeichnet sich durch die Berücksichtigung des lokalen Kristallisationsgrads zur Berechnung der mechanischen Eigenschaften eine Umkehrung der Verzugsrichtung ab. Dieses Ergebnis ist vor dem Hintergrund einer homogenen Randtemperatur während der Kühlphase und der hohen Anisotropie der simulierten mechanischen Eigenschaften vertretbar, muss allerdings in einer Validierung überprüft werden. Durch einen höheren Spannungszustand in der Verzugssimulation mit StraightCrys ist eine geringere Dehnung über die Querschnittsfläche zu erkennen. Dies ist vor allem auf die Steifigkeit im Randbereich zurückzuführen. An dieser Stelle kann das Bauteil in der Verzugssimulation mit FixCrys die Spannungen im Verzug abbauen und führt darüber hinaus zu einer höheren Dehnung.

Die Berechnung des Verzuges aus der Gefügestruktursimulation bildet das finale Glied der Mehrskalensimulationskette welches in der zweiten Förderperiode des SFB1120 im Teilprojekt B04 erreicht werden soll und legt bereits den Grundstein für die dritte Förderperiode, in der die Verzugsberechnung der Mehrskalensimulationskette genutzt wird, um den finalen Bauteilverzug zu optimieren, indem Gefügestrukturen optimiert werden, sodass diese verzugsmindernd wirken.

### **Zusammenfassung und Ausblick**

Zusammenfassend konnte im Berichtszeitraum die Mehrskalensimulationskette um das letzte Kettenglied der Verzugsberechnung erweitert werden. Dafür wurde eine Stufenplatte mit der Füllsimulation berechnet, anschließend eine Berechnung der Gefügestruktur durchgeführt und die mechanischen Eigenschaften unter Berücksichtigung des lokalen Kristallisationsgrades homogenisiert. In der Verzugssimulation in ABAQUS wurde die berechnete Schwindung aus der Füllsimulation erstmals mit den mechanischen Eigenschaften aus der Homogenisierung verknüpft und ein Verzug berechnet. Damit ist die Methodik der Mehrskalensimulationskette und der in dieser Förderperiode entwickelten Materialmodelle demonstriert.

Um die Gefügestruktursimulation und die daraus resultierende Verzugsberechnung zu validieren, soll die Plattengeometrie von TP B03 verwendet werden. Der Verzug kann durch eine einfache Abweichung aus der planen Ebene gemessen werden. Darüber hinaus bietet das Werkzeug von TP B03 die Eigenschaft, durch integrierte Heiz- und Kühlvorrichtungen die Randbedingungen flexibel ändern zu können. Dadurch kann die die Verzugsberechnung aus der Gefügestruktur bei definierten Randbedingungen im realen Prozess validiert werden.



## Veröffentlichungen

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.

HOPMANN, CH.; KECH, A.; HOHLWECK, T.; GERADS, J.; ALMS, J.: Increasing precision in injection moulding by controlled solidification. In Hopmann, Ch. (Hrsg.): *30<sup>th</sup> International Colloquium Plastics Technology*. Düren: Shaker Verlag, 2020

WANG, J.; HOPMANN, CH.; KAHVE, C.; HOHLWECK, T.; ALMS, J.: *Measurement of specific volume of polymers under simulated injection molding processes by using a testing device*. *Materials & Design*, 2020, 196. Jg., S. 109136.

ALMS, J.; HOPMANN, CH.; WANG, J.; HOHLWECK, T.: *Non-isothermal crystallisation kinetics of polypropylene at high cooling rates and comparison to the continuous two-domain pvT-model*. *Polymers*, 2020, 12. Jg., Nr. 7, S. 1515.

WANG, J.; HOPMANN, CH.; RÖBIG, M.; HOHLWECK, T.; ALMS, J.: *Modeling of pressure-specific volume-temperature behavior of polymers considering the dependence of cooling and heating processes*. *Materials & Design*, 2020, 196. Jg., S. 109110

BERGER, R.; APEL, M.; LASCHET, G.; JESSEN, W.; SCHRÖDER, W.; WIPPERFÜRTH, J.; AUSTERMANN, J.; HOPMANN, CH.: *Permeability measurements of 3D microstructures generated by phase field simulation of the solidification of an Al-Si alloy during chill casting*. *Metals*, 2021. (Akzeptiert)

ALMS, J.; HOPMANN, CH.; LASCHET, G.: Evaluation and transport of the crystallization heat in an iterative self-consistent multi-scale simulation of semi-crystalline thermoplastics. In: *Enhanced Material, Parts Optimization and Process Intensification: Proceedings of the First International Joint Conference on Enhanced Material and Part Optimization and Process Intensification, EM-POrIA 2020, May 19-20, 2020, Aachen, Germany*. Springer International Publishing, 2021.