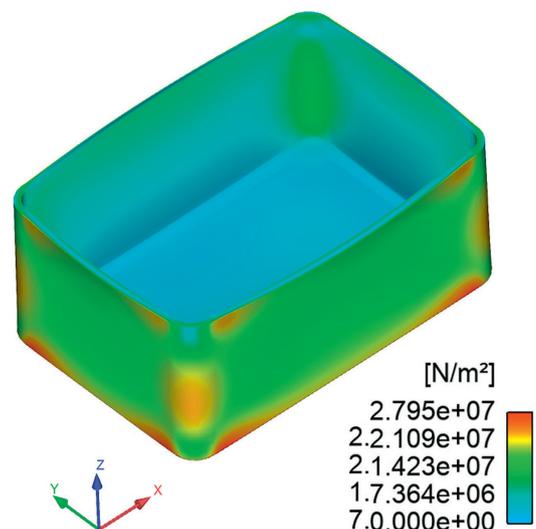


Wasseraufnahme von Kunststoffformteilen

Numerische Simulationen helfen Diffusionsvorgänge zu beschreiben und zu verstehen

Was hat die Simulation eines Diffusionsvorgangs mit einer Temperaturfeldsimulation zu tun? Sie teilen sich, vereinfacht gesagt, die gleiche Differentialgleichung. Diese Eigenschaft kann genutzt werden, um Diffusionsvorgänge mit Finite-Elemente-Programmen zu simulieren. Die numerische Simulation zeigt anschaulich, wie derartige Vorgänge ablaufen und welchen Einfluss eine Wasseraufnahme auf die Bemessung von Formteilen aus Kunststoff haben kann.



Versuchsaufbau und Simulation: Wie verhält sich ein Bauteil bei andauernder Wasseraufnahme nach drei Jahren? Eine Simulation liefert innerhalb kurzer Zeit Aufschluss z. B. über Wassersättigung, Verformung und (im Bild rechts) die Von-Mises-Vergleichsspannungen. Quelle: Merkle; Grafik: © Hanser

Ein Körper dehnt sich infolge einer Temperaturerhöhung aus. Dies ist ein allseits bekanntes Phänomen. Weit weniger bekannt ist, dass sich Körper auch durch eine Medienaufnahme, zum Beispiel in Form von Wasser, ausdehnen (quellen) und dadurch ihre mechanischen Eigenschaften ändern können. An der Kunststoffgruppe der Polyamide kann dies sehr gut beobachtet werden. Polyamid 6 und 66 nehmen bei Raumtemperatur und 50% relativer Feuchte etwa 2,5 Masse-% Wasser auf. Die Wassersätti-

gung beträgt etwa 8 Masse-% beim Einsatz dieser Polyamidwerkstoffe im Wasser. Die Werkstoffkennwerte verändern sich stark in Abhängigkeit der Wasseraufnahme. Der Grad der Wasseraufnahme wird häufig auch als Konditionierungszustand beschrieben.

Veränderung von mechanischen Eigenschaften

Durch die Wasseraufnahme kommt es zu einem Quellen der Formteile, zur Ver-

ringerung der Erweichungstemperatur (Glasübergangstemperatur), zur Reduzierung der Werkstoffsteifigkeit (Elastizitätsmodul) sowie zum Absinken der Festigkeitswerte. Dehnfähigkeit und Schlagzähigkeit des Werkstoffs nehmen zu. Auch kann es bei Diffusionsvorgängen zu inneren Zwängen kommen, beispielsweise durch Konzentrationsunterschiede im Bauteil. Da Polyamide unter den technischen Kunststoffen die größte Gruppe bilden, finden sich zahlreiche Anwendungsbeispiele, etwa im Automobilbereich, bei

Mauerwerksdurchführungen im Bauwesen [1] oder auch in der Elektrotechnik-industrie.

Die Aufnahme von Wasser kann als Diffusionsvorgang beschrieben werden. Ein geeignetes Mittel zur Berechnung und Bemessung von Kunststoffformteilen sind Finite-Elemente-Programme, die Verformungen und Spannungen für beliebige Geometrien und Belastungszustände berechnen können. Da viele Finite-Elemente-Programme Diffusionsvorgänge nicht abbilden, lässt sich die Analogie zum Wärmetransportvorgang (siehe **Kasten**) nutzen, die in einer klassischen Temperaturfeldberechnung angewandt wird. Somit ist es möglich den Diffusionsvorgang mit einfachen Mitteln zu beschreiben und in der Bauteilauslegung zu berücksichtigen.

In diesem Beitrag wird diese Vorgehensweise von der Bereitstellung der Werkstoffkennwerte über die numerische Simulation bis hin zur Bewertung dargelegt.

Normen und Richtlinien

Für die experimentelle Bestimmung des Diffusionskoeffizienten und des Sättigungswertes (Grad der Wasseraufnahme) kann die DIN EN ISO 62 [2] verwendet werden. Das grundsätzliche Verfahren wird hier beschrieben. Allerdings gibt es sehr viel Freiheit bei der Wahl der Probengeometrie. Der Diffusionskoeffizient und die Sättigung sind als Materialkennwert weitgehend unabhängig von der Probengeometrie.

Der zeitliche Verlauf der Wasseraufnahme ist jedoch geometrieabhängig (**Bild 1**). Somit ist bei der zeitabhängigen Angabe der Wasseraufnahme die Probengeometrie im Werkstoffdatenblatt mit an-

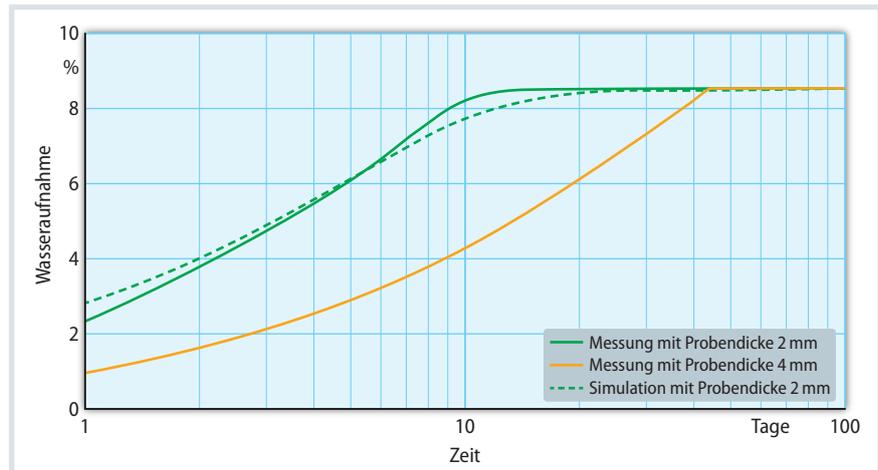


Bild 1. Wasseraufnahme von Polyamid 66 über die Zeit bei Lagerung in 40°C warmem Wasser nach [3]: Der zeitliche Verlauf der Wasseraufnahme unterscheidet sich je nach Probendicke, der Sättigungswert ist jedoch gleich. Eine Simulation mit Probendicke 2 mm zeigt eine gute Übereinstimmung zur Messkurve Quelle: Merkle; Grafik: © Hanser

zugeben, was in der Praxis eher selten geschieht.

Um den Diffusionskoeffizienten nach DIN EN ISO 62 bestimmen zu können, werden mindestens zwei experimentell ermittelte Wasseraufnahmewerte über die Zeit benötigt. Idealerweise ist die Wasseraufnahme bei 90% des Sättigungswertes und bei 70% des Sättigungswertes bekannt.

Validierungsbeispiel einer Platte

Ein einfacher Probekörper in Form einer Platte (20 mm x 40 mm x 2 mm) aus einem unverstärkten Polyamid PA66 (Konditionierungszustand trocken) wird in Wasser mit einer Temperatur von 40°C eingelagert. Zu bestimmen ist der zeitliche Verlauf der Wassersättigung. Die ideale Messkurve und auch das erwartete Ergebnis werden für den Werkstoff PA66

aus [3] entnommen. Im ersten Schritt wird über ein Iterationsverfahren nach DIN EN ISO 62 Anhang A.1 der Diffusionskoeffizient zu $1,02 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ bestimmt. Im Vergleich dazu wird in [3] ein Diffusionskoeffizient von $0,9 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ angegeben. Der Wert ist nicht exakt, liegt jedoch in der gleichen Größenordnung und ist hinreichend genau. Für eine transiente Diffusionsanalyse werden noch die Dichte und die Wasseraufnahme bei Sättigung benötigt. Die benötigten Werkstoffkennwerte für eine Diffusionsberechnung sind in **Tabelle 2** exemplarisch angegeben. »

Die Autoren

Dr.-Ing. Maik Brehm ist Bereichsleiter für Strukturmechanik der Merkle und Partner GbR in Heidenheim; m.brehm@merkle-partner.de

Prof. Dr.-Ing. Achim Frick ist Professor an der Hochschule Aalen und Leiter des Institute of Polymer Science and Processing iPSP in Aalen.

Service

Literatur & Digitalversion

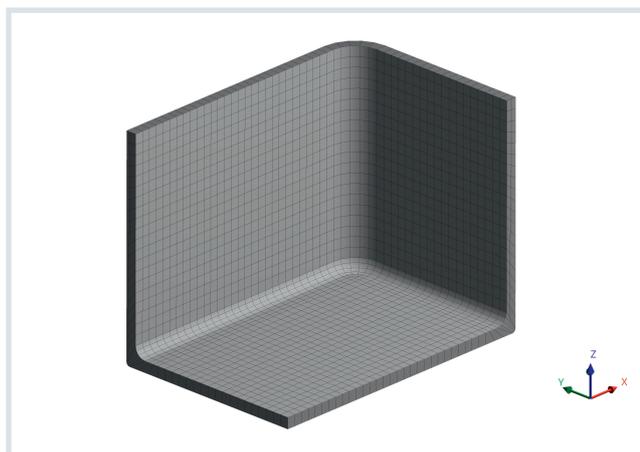
» Das Literaturverzeichnis und ein PDF des Artikels finden Sie unter www.kunststoffe.de/2020-09

English Version

» Read the English version of the article in our magazine *Kunststoffe international* or at www.kunststoffe-international.com

Bild 2. FE-Modell des Demonstrators: Die Vernetzung wurde mit zehn Hexaeder-Elementen über die Wanddicke vorgenommen. Die Berechnungen erfolgten an einem Viertelmodell mit Symmetriestandbedingungen

© Merkle



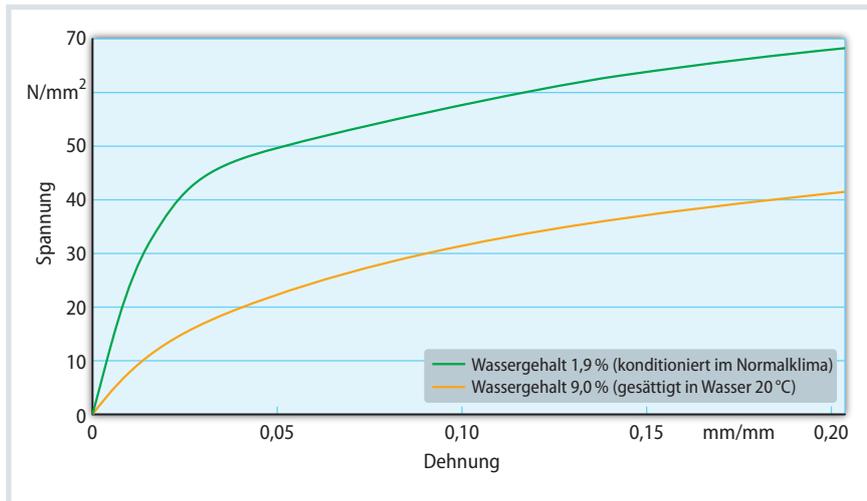


Bild 3. Wahre Spannungs-Dehnungs-Kurven für PA 66 bei 20°C: Mit zunehmendem Wassergehalt sinken Steifigkeit und Festigkeit des Werkstoffs Quelle: Merkle; Grafik: © Hanser

Das zugrundeliegende FE-Modell (Finite-Elemente-Modell) wurde mit 40 Hexaeder-Elementen über die Plattendicke definiert, um eine möglichst exakte räumliche Auflösung über die Dicke und Zeit zu erhalten. Insbesondere zu Beginn der Einlagerung stellt sich ein großer Sättigungsgradient über die Dicke der Platte ein, da die wasserberührenden Oberflächen das Wasser zuerst aufnehmen und im Inneren noch ein fast trockener Zustand herrscht. Je weiter die Sättigung fortschreitet, desto geringer wird der Gra-

dient. Bei vollständiger Sättigung haben alle Elemente den gleichen Sättigungsgrad.

Zur Auswertung wird ein mittlerer Sättigungsgrad in der Platte zu jedem Zeitpunkt bestimmt. Somit sind die numerisch ermittelten Ergebnisse auch mit den experimentellen Ergebnissen vergleichbar (Bild 1) und liefern eine sehr gute Übereinstimmung.

Dieses Validierungsbeispiel zeigt in beeindruckender Weise, dass es möglich ist, mit den Mitteln einer thermischen FE-Ana-

lyse eine Diffusionsberechnung durchzuführen.

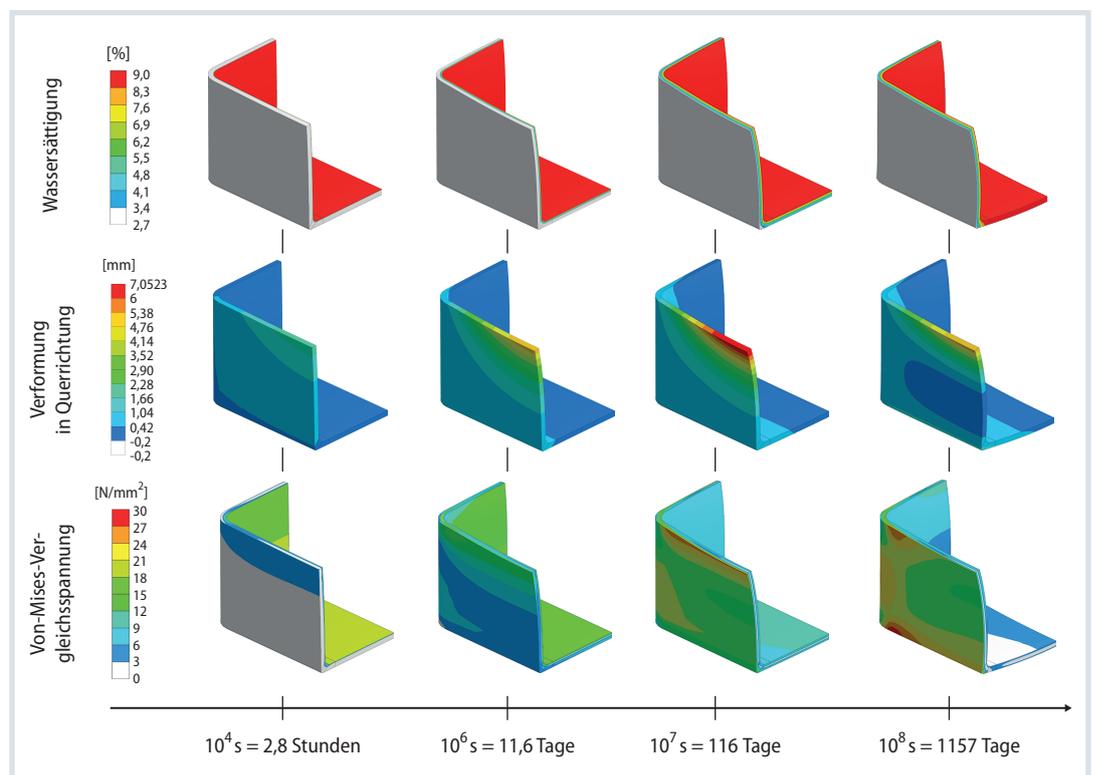
Ein offenes Gehäuse als Untersuchungsdemonstrator

Es wurde ein Formteil aus unverstärktem PA 66 mit den Abmaßen von etwa 150 mm x 105 mm x 60 mm (einseitig offen) mit 3 mm Wanddicke numerisch untersucht. Dieses Gehäuse (Bild 2) wird innen komplett mit Wasser gefüllt. An den Außenwänden liegt Luft im Normalklima (20°C und 50% relative Feuchte) an. An der bodenberührenden Seite erfolgt kein Austausch mit der Umgebung. Über eine thermische FE-Analyse wird das Verhalten des Formteils infolge der Diffusion des Wassers in den Kunststoff im zeitlichen Verlauf analysiert.

Die strukturmechanische Berechnung wird mit einem konzentrationsabhängigen, multilinear plastischen Materialgesetz durchgeführt. Es wird dabei die wahre Spannungs-Dehnungs-Kurve in Kombination mit geometrischer Nichtlinearität gewählt, d.h. große Verformungen werden berücksichtigt. Die Lagerungsbedingungen werden so gewählt, dass keine zusätzlichen Zwänge entstehen können. Als Belastung wird vereinfachend nur der Einfluss der Wasseraufnahme berücksichtigt. Dies bedeutet, das Eigenge-

Bild 4. Wassersättigungen, Verformungen und Spannungen im zeitlichen Verlauf (Darstellung als Viertelmodell): Die maximale Verformung stellt sich nach 116 Tagen ein, die maximale Spannung tritt erst im stationären Zustand nach 1157 Tagen auf

Quelle: Merkle; Grafik: © Hanser



wicht der Struktur und der hydrostatische Druck der Flüssigkeit werden bei der Simulation vernachlässigt.

Das mechanische Verhalten des Werkstoffs wird in Abhängigkeit des Sättigungsgrads definiert. Dazu wurden von der Hochschule Aalen für zwei verschiedene Sättigungsgrade eines Polyamid 66 (PA66) Spannungs-Dehnungs-Kurven an Zugproben ermittelt (Bild 3). Die Sättigungswerte und der Diffusionskoeffizient wurden bei 20°C bestimmt.

Im FE-Modell wurden zehn Hexaederelemente über die Wanddicke gewählt, was sich in ergänzenden numerischen Untersuchungen als hinreichend genau erwiesen hat. Es wird von einem bei Normalklima bis zur Sättigung konditionierten Werkstoff mit einem Wassergehalt von 2,7 Masse-% ausgegangen.

Rechnerisch stellt sich ein stationärer Gleichgewichtszustand der Wasseraufnahme nach ca. drei Jahren ein, was ca. 100 Millionen Sekunden entspricht. Die Wassersättigungen, Verformungen und die resultierenden Spannungen im zeitlichen Verlauf sind in Bild 4 dargestellt. Es ist zu sehen, dass sich die maximale Verformung von etwa 7 mm bereits nach etwa 116 Tagen einstellt. Dies kann mit bloßem Auge beobachtet werden.

Die maximalen Spannungen stellen sich dagegen erst nach drei Jahren ein. Die Spannungen im Formteil infolge des Quellens erreichen eine Größe, die plastische Dehnungen und somit bleibende Verformungen verursachen. Dieser Effekt sollte bei der Auslegung eines Formteils mit vergleichbaren Einsatzbedingungen berücksichtigt werden.

Fazit

In diesem Beitrag wurden die Möglichkeiten der numerischen Simulation von Diffusionsvorgängen in Kunststoffen gezeigt. Durch die Anwendung der Analogie zu Wärmetransportvorgängen in thermischen Simulationen sind Diffusionsvorgänge in einer breiten Zahl von Finite-Elemente-Programmen abbildbar. Zu beachten ist dabei, dass die Werkstoffkennwerte in geeigneter Form vorliegen müssen. Die DIN EN ISO 62 gibt hier für die experimentelle Bestimmung gute Anhaltswerte.

Am untersuchten Demonstrator eines offenen Gehäuses konnte gezeigt werden, dass durch eine Wasseraufnahme

Analogie zwischen Diffusion und Wärmetransport

Grundsätzlich sind sich Diffusionsvorgänge (auch Stofftransportvorgänge) und Wärmetransportvorgänge sehr ähnlich. Wie die Tabelle 1 zeigt, sind die entsprechenden Differentialgleichungen identisch. Für eine Betrachtung eines Diffusionsvorganges werden folgende Materialkennwerte benötigt:

- die Matrix der Diffusionskoeffizienten D in $\frac{m^2}{s}$,
- der Diffusionsexpansionskoeffizient β infolge einer Massenaufnahme in $\frac{m^3}{kg}$ und
- der Sättigungswert C_s in $\frac{kg}{m^3}$.

Die wesentlichen Ergebnisgrößen sind

- die Massenkonzentration C in $\frac{kg}{m^3}$ sowie

- das Quellverhalten in Form der Dehnung ϵ^d in Abhängigkeit der Massenkonzentrationsdifferenz ΔC in $\frac{kg}{m^3}$.

Analog werden für die Wärmetransportberechnungen die folgenden Materialkennwerte benötigt:

- die Matrix der Wärmeleitkoeffizienten λ in $\frac{W}{m \cdot K}$,
- die Dichte ρ in $\frac{kg}{m^3}$ und
- die spezifische Wärmekapazität c in $\frac{J}{kg \cdot K}$ und der Temperaturexpansionskoeffizient α in $\frac{1}{K}$ infolge einer Temperaturänderung ΔT in K .

Die Ergebnisgrößen sind in diesem Fall

- die Temperatur T in K und
- die Ausdehnung ϵ infolge Temperaturänderung ΔT in K .

	Diffusionsvorgang	Wärmetransportvorgang
Stationäre Betrachtung	$J = -D\nabla C$	$q = -\lambda\nabla T$
Transiente Betrachtung	$\frac{\partial C}{\partial t} = D\nabla^2 C$	$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{1}{\rho c} \lambda \nabla^2 T$
Ausdehnung	$\epsilon^d = \beta \Delta C$	$\epsilon = \alpha \Delta T$

Tabelle 1. Gegenüberstellung der Gleichungen für Diffusion und Wärmetransport Quelle: Merkle

nicht zu vernachlässigende Quellspannungen entstehen können, die bei der Bemessung von Kunststoffbauteilen in jedem Fall beachtet werden sollten. ■

	Formelzeichen	Einheit	Wert	Quelle
Dichte	ρ	$\frac{kg}{m^3}$	1130	[4]
Diffusionskoeffizient	D	$\frac{m^2}{s}$	$1,016421 \cdot 10^{-12}$	ermittelt aus [3]
Wasseraufnahme bei Sättigung	C'_s	%	8,53	[3]
Wasseraufnahme bei Sättigung	C_s	$\frac{kg}{m^3}$	96,389	$= \rho C'_s$
Diffusionsexpansionskoeffizient	β'	-	0,2906	[5]
Diffusionsexpansionskoeffizient	β	$\frac{m^3}{kg}$	$2,57168 \cdot 10^{-4}$	$= \beta' \frac{C'_s}{C_s}$

Tabelle 2. Materialkennwerte für PA66 bei einer Lagerung in Wasser bei 40°C: Diese Kennwerte werden für eine Diffusionsberechnung benötigt Quelle: Merkle