

Zeitschrift Kunststofftechnik

Journal of Plastics Technology

archivierte, rezensierte Internetzeitschrift des Wissenschaftlichen Arbeitskreises Kunststofftechnik (WAK)
archival, reviewed online Journal of the Scientific Alliance of Polymer Technology

www.kunststofftech.com; www.plasticseng.com

eingereicht/handed in: 23.08.2006
angenommen/accepted: 02.11.2006

**Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. Walter Michaeli, Dipl.-Ing. Markus Brinkmann,
Dipl.-Ing. Martin Bussmann, Dipl.-Math. Bernhard Renner
Institut für Kunststoffverarbeitung (IKV), RWTH Aachen**

**Prof. Dr.-Ing. Ernst Schmachtenberg,
Lehrstuhl für Kunststofftechnik, Universität Erlangen-Nürnberg**

Integrative Simulation: Vorhersage des Verformungsverhaltens teilkristalliner Thermoplastbauteile mittels einer durchgängigen Simulationskette

Die durch die Fertigungsbedingungen bestimmten inneren Eigenschaften von spritzgegossenen Bauteilen aus teilkristallinen Thermoplasten haben einen starken Einfluss auf das mechanische Bauteilverhalten. Eine Vorhersage der inneren Eigenschaften und deren Einbeziehung in ein geeignetes Materialmodell erlaubt eine werkstoffgerechte und Material einsparende Auslegung. Dies wird erstmals am Beispiel einer Rohrmuffe aus Polypropylen durchgeführt, für die erste Berechnungsergebnisse in dieser Veröffentlichung vorgestellt und diskutiert werden.

Prediction of the Deformation Behaviour of Semicrystalline Thermoplastic Parts using a Continuous Simulation Chain

Inner properties of injection-moulded thermoplastic parts resulting from the manufacturing conditions have a strong influence on their mechanical behaviour. A prediction of the inner properties and their integration into a plastics-oriented material model leads to a suitable and therefore material saving design. Initial results for a polypropylene plastic pipe fitting were obtained and are discussed in this paper.

Autor/author

Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. Walter Michaeli,
Dipl.-Ing. Markus Brinkmann, Dipl.-Ing. Martin Busmann,
Dipl.-Math. Bernhard Renner
RWTH Aachen
Institut für Kunststoffverarbeitung
Pontstraße 49
52056 Aachen

E-Mail-Adresse: Brinkmann@ikv.rwth-aachen.de
Webseite: www.ikv-aachen.de
Tel.: +49(0)241 / 80 28 357
Fax: +49(0) 241 / 80 22 316

Integrative Simulation: Vorhersage des Verformungsverhaltens teilkristalliner Thermoplastbauteile mittels einer durchgängigen Simulationskette

W. Michaeli, M. Brinkmann, M. Bussmann, B. Renner,
Institut für Kunststoffverarbeitung, RWTH Aachen

E. Schmachtenberg,
Lehrstuhl für Kunststofftechnik, Universität Erlangen-Nürnberg

Die durch die Fertigungsbedingungen bestimmten inneren Eigenschaften von spritzgegossenen Bauteilen aus teilkristallinen Thermoplasten haben einen starken Einfluss auf das mechanische Bauteilverhalten. Eine Vorhersage der inneren Eigenschaften und deren Einbeziehung in ein geeignetes Materialmodell erlaubt eine werkstoffgerechte und Material einsparende Auslegung. Dies wird erstmals am Beispiel einer Rohrmuffe aus Polypropylen durchgeführt, für die erste Berechnungsergebnisse in dieser Veröffentlichung vorgestellt und diskutiert werden.

Inner properties of injection-moulded thermoplastic parts resulting from the manufacturing conditions have a strong influence on their mechanical behaviour. A prediction of the inner properties and their integration into a plastics-oriented material model leads to a suitable and therefore material saving design. Initial results for a polypropylene plastic pipe fitting were obtained and are discussed in this paper.

1 EINLEITUNG

Eine gezielte Ausnutzung des vollen Potenzials eines Werkstoffs ist allgemein abhängig von der Kenntnis der mechanischen Eigenschaften dieses Werkstoffs. Erschwert wird eine sichere und dennoch Material sparende Auslegung von Bauteilen, wenn die mechanischen Kennwerte eines Werkstoffs vom Herstellprozess des Bauteils abhängig und innerhalb des Bauteils inhomogen sind. Allerdings besteht auch die Möglichkeit, derartige Inhomogenitäten bei der Auslegung gezielt auszunutzen. Dazu ist jedoch eine Vorhersage der lokal vorliegenden mechanischen Eigenschaften erforderlich.

Im Spritzgießprozess hergestellte Thermoplastbauteile weisen sowohl über dem Bauteilquerschnitt als auch in Abhängigkeit vom Fließweg inhomogene innere Eigenschaften auf. Diese inneren Eigenschaften resultieren aus den Herstellungsbedingungen und haben einen direkten Einfluss auf die lokalen mechanischen Eigenschaften und damit auf die globalen Bauteileigenschaften [1]. Besonders ausgeprägt ist diese Abhängigkeit bei kurzglasfaserverstärkten Thermoplasten [2, 3]. Aber auch unverstärkte teilkristalline Thermoplaste weisen lokal inhomogene innere Eigenschaften auf, die Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften haben [4 - 10]. Dieser Einfluss ist je nach Material unterschiedlich stark ausgeprägt. Die inneren Eigenschaften werden aber stets durch die lokalen rheologischen und thermischen Verhältnisse während der Formfüllung und der Abkühlung der Schmelze bestimmt. Die Schichtung der einzelnen Strukturen und ihre Breite haben einen erheblichen Einfluss auf das lokale mechanische Verhalten.

Um das Ziel der genaueren und Material einsparenden Auslegung von Bauteilen zu erreichen ist es somit notwendig die Berechnung innerer Eigenschaften und deren Einbindung in entsprechende Materialmodelle zu realisieren. Diese ungelöste Problemstellung war die Motivation des Sonderforschungsbereichs (SFB) 370 an der RWTH Aachen, der verschiedenste Werkstoffe und Verarbeitungsverfahren berücksichtigte. Der gemeinsame Leitgedanke war dabei stets die Einbindung simulierter innerer Eigenschaften in die Strukturanalyse.

Im Rahmen des SFB 370 wurde zur Lösung dieser Fragestellung eine neuartige Simulationskette durch eine Reihenschaltung zweier Simulationstools realisiert. Zum einen wurde eine Software entwickelt, mit der prozessparameter-, geometrie- und materialabhängig lokal innere Bauteileigenschaften vorhergesagt werden können. Die Daten dieser Simulation werden anschließend auf das Finite-Elemente-Netz eines Struktursimulationsprogramms übertragen. Mittels entwickelter Subroutinen können dem Simulationsmodell schließlich mechanische Materialeigenschaften in Abhängigkeit von Dehnung und Dehnrate lokal aufgelöst zugewiesen werden.

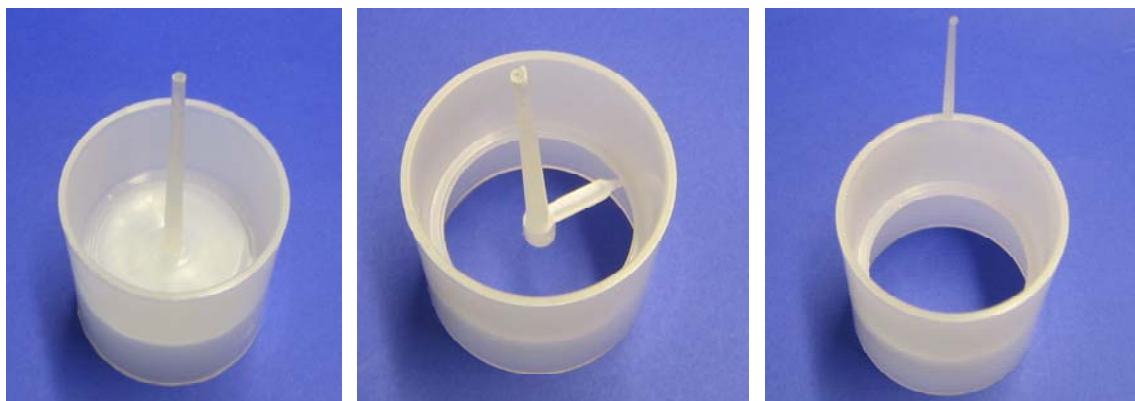
Die Umsetzung der integrativen Simulation und Berechnungsergebnisse für eine spritzgegossene Rohrmuffe aus Polypropylen werden im Folgenden vorgestellt.

2 INTEGRATIVE SIMULATION

Der Sonderforschungsbereich 370 "Integrative Werkstoffmodellierung" an der RWTH-Aachen hat es sich allgemein zur Aufgabe gemacht, für verschiedene Werkstoffe (Stahl, Aluminium, Kunststoff) und Herstell- oder Verarbeitungsverfahren (Gießen, Schweißen, Spritzgießen) die Ausbildung der inneren Eigenschaften zu untersuchen und deren Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften zu untersuchen. Das Ziel dieser Untersuchungen ist es, durch eine

Prozesssimulation die Verteilung der inneren Eigenschaften vorherzusagen und sie als Eingabegröße für die Materialbeschreibung einer Struktursimulation zur Verfügung zu stellen. Daraus ergeben sich eine deutlich genauere Nachbildung des Bauteilverhaltens und eine werkstoffgerechtere Bauteilauslegung.

Um den Einfluss der Herstellbedingungen auf die inneren und mechanischen Eigenschaften bei Thermoplasten exemplarisch zu untersuchen, wurden in diesem Forschungsvorhaben ein Material und ein Bauteil ausgewählt. Das ausgewählte Material ist ein Polypropylen der Firma Sabic, Typ Sabc PP 505 P. Als Beispielbauteil dient eine Rohrmuffe, die im Spritzgießverfahren über verschiedene Angussarten angespritzt werden kann. Die Rohrmuffe mit den Angussvarianten Schirm-, Radial- und Axialanguss ist in Bild 1 dargestellt. Über Werkzeugeinsätze ist es weiterhin möglich, Rohrmuffen mit drei verschiedenen Wanddicken herzustellen. Schließlich kann das sich einstellende Gefüge über die Prozessparameter und damit über die rheologischen und thermischen Randbedingungen beeinflusst werden. Zu den wichtigsten Herstellungsparametern zählen hier die Einspritzgeschwindigkeit, die Masse- und die Werkzeugwandtemperatur. Es ergibt sich aus dieser Vielzahl an Parametern die Möglichkeit zu einer weiten Variation des sich ausbildenden Gefüges. Der Einfluss dieser Variationen auf das reale Bauteilverhalten wird mittels Versuchen auf einer Standard-Zugprüfmaschine untersucht.



Schirmanguss

Radialanguss

Axialanguss

Bild 1: Unterschiedliche Anspritzmöglichkeiten am Beispielbauteil

Um diese Effekte auch simulativ abzubilden und damit der Bauteilauslegung zugänglich zu machen, ist eine vollständig integrative Betrachtung des Herstellprozesses erforderlich. Um dies zu erreichen, wurde das in Bild 2 dargestellte Vorgehen gewählt. Hierzu wird zunächst eine Prozesssimulation des Bauteils durchgeführt, welche lokale Kristallisations- und Molekülorientierungsdaten für eine Bauteilgeometrie berechnet. Diese Werte werden über eine Schnittstelle auf das Finite-Elemente-Netz der Strukturanalyse übertragen. Die Schnittstelle ermöglicht es, die Netze von Prozesssimulation und Strukturanalyse getrennt voneinander zu variieren und entsprechend der jeweiligen Anforderungen zu optimieren. Aus den Werten der inneren Eigenschaften wird dann auf die lokal vorliegenden mechanischen Eigenschaften geschlossen.

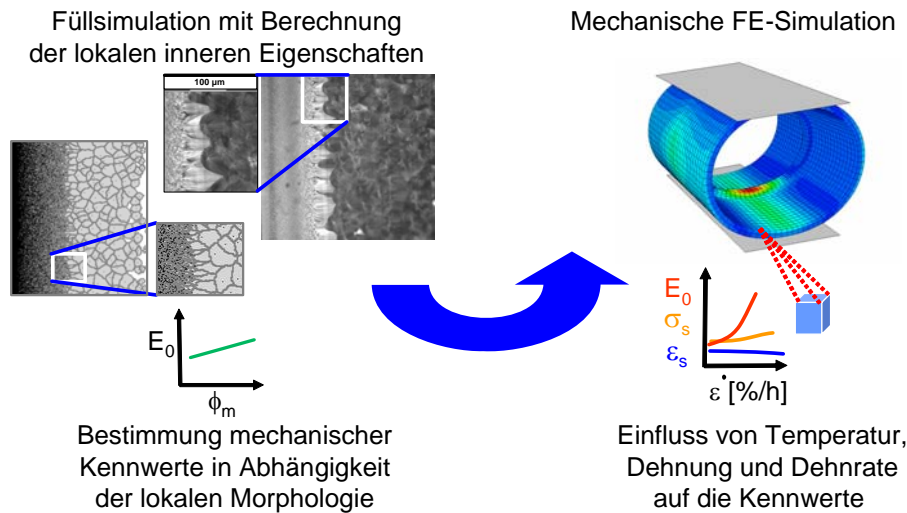


Bild 2: Ablauf der integrativen Simulation

3 ERWEITERTE PROZESSSIMULATION

Nur einige Spritzgießsimulationsprogramme können derzeit real ablaufende Vorgänge der Entstehung innerer Bauteileigenschaften teilkristalliner Thermoplaste zufrieden stellend nachbilden [11, 12]. Diese in Realität lokal über dem Bauteil wie auch über der Wanddicke verteilten und zum Teil anisotropen Eigenschaften werden in der Regel jedoch nur als integrale Größen über dem Bauteilquerschnitt oder als Gesamtinformation für ein Bauteil ausgegeben.

Aus diesem Grund wurde ein Simulationsprogramm zur durchgängigen Prozesssimulation entwickelt und erweitert, das die Entstehung innerer Bauteileigenschaften unter Spritzgießbedingungen simuliert [13, 14].

3.1 Entwickelte Software

Seit vielen Jahren gibt es unterschiedliche Bestrebungen am Institut für Kunststoffverarbeitung (IKV), die in verschiedenen Verarbeitungsprozessen während der Abkühlung entstehenden Morphologien und Bauteileigenschaften unterschiedlicher Materialien simulativ mit eigen entwickelten Softwaretools nachzustellen [15, 16, 17]. Dazu zählen die Molekül- und Faserorientierung genauso wie die Nachbildung des Kristallisationsverhaltens teilkristalliner Thermoplaste.

Zum Erreichen des Zieles einer integrativen Werkstoffsimulation wurde 2002 erstmals das Programm SphäroSim von Hoffmann et al. vorgestellt, mit dem es möglich ist, das Aufwachsen von morphologischen Strukturen in Echtzeit nach-

zustellen [18, 19, 20]. Dieses Simulationsprogramm nutzt die Methode der Zellulären Automaten, um das Aufwachsen in ruhenden kristallisierenden Polymer-schmelzen während der Abkühlung in einem zweidimensionalen Formteilquer-schnitt berechnen zu können [21]. Durch die Weiterentwicklung der Software kann jetzt auch die Dynamik des Spritzgießprozesses und des damit verbunde-nen Werkstoffverhaltens realitätsnah nachbildet werden [22]. Zu einem besse-ren Verständnis des Berechnungsablaufs nach Bild 2 wird das Programm im Folgenden mit seinen Untergruppen erläutert und jeweils ausgewählte Ergeb-nisse dargestellt.

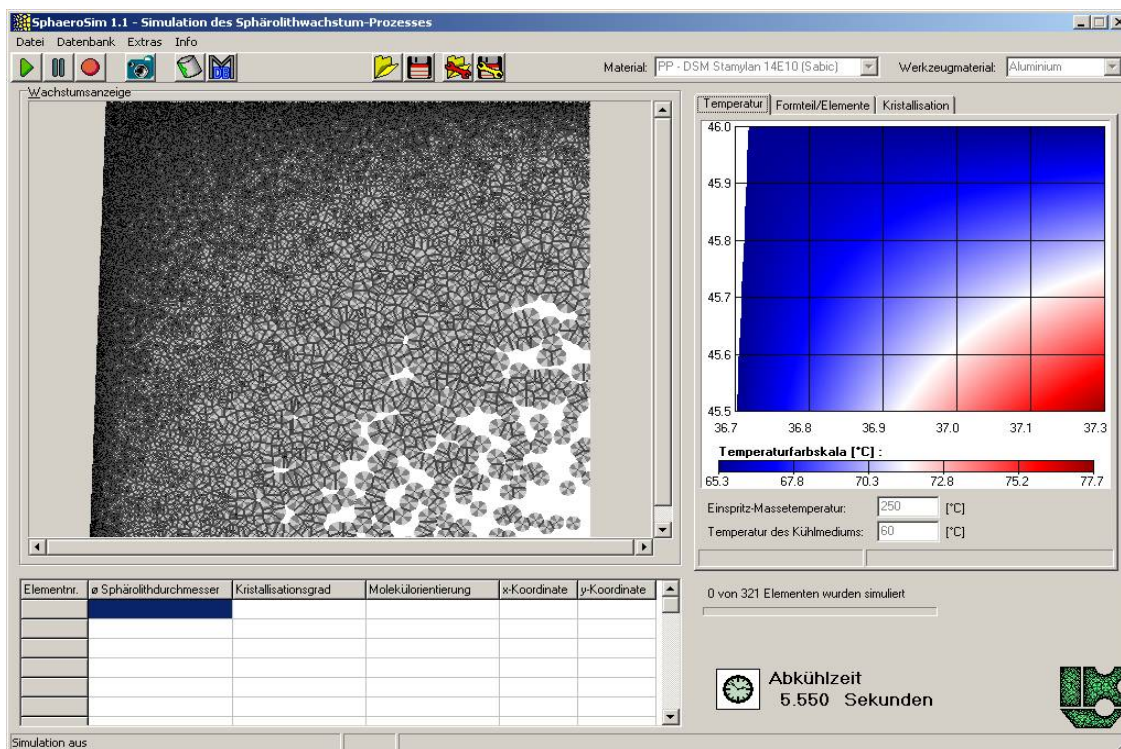


Bild 3: Benutzeroberfläche der Software SphäroSim

Bild 3 zeigt die Benutzeroberfläche der Software. Gut zu erkennen ist die Ein-gabemöglichkeit der Herstellungsbedingungen, die online Visualisierung der Temperatur- und Mikrostrukturberechnungen für das derzeit simulierte Bauteil-segment sowie unten die bisher berechneten Wertetripel Sphärolithdurchmes-ser, Kristallisationsgrad und Molekülorientierung.

3.2 Temperaturfeldberechnung

Aufgrund meist begrenzter Rechnerleistung ist die Software darauf beschränkt, Formteilquerschnitte zu berechnen. Die Berechnung eines solchen Querschnitts erfolgt dabei zweidimensional mit direkter Visualisierung der Berechnungs-ergebnisse. Ein reales Spritzgießbauteil verfügt im Querschnitt jedoch nicht nur über planparallele Wände, sondern besteht vielmehr aus unterschiedlichen Ge-

ometriesegmenten. Dazu zählen Ecken, zulaufende Kavitätswände entlang des Fließwegs, Rundungen oder Kombinationen aus diesen.

Um reale Bauteile berechnen zu können, wurde die dem Abkühl- und Kristallisationsprozess zu Grunde liegende Temperaturfeldberechnung an diese Anforderungen angepasst. Durch die lokale Temperaturverteilung und die Abkühlverhältnisse wird letztendlich die lokale Nukleierung im Bauteil bestimmt und die Wachstumsprozesse maßgeblich beeinflusst. Um nun eine exakte Berechnung basierend auf temperatur- und druckabhängigen Stoffwerten mit hoher lokaler Auflösung zu erhalten, wurde eine eigenentwickelte Temperaturfeldberechnung in die Software implementiert, welche neben der Berücksichtigung temperatur- und druckabhängiger Stoffwerte fast jegliche Art von geometrischen Randbedingungen berücksichtigen kann [22]. Mit ihr kann eine Berechnung lokaler Temperaturen und Abkühlprozesse für jeden Simulationszeitschritt jeder Zelle durchgeführt werden.

Die zur Berechnung notwendigen Stoffwerte, wie beispielsweise die Wärmeleitfähigkeit, wurden für den Werkstoff Sabic PP 505 P des Herstellers Sabic experimentell bestimmt und in Form einer Stoffdatenbank hinterlegt [18, 23].

3.3 Berechnung der inneren Eigenschaften

Der Sphärolithwachstumsprozess wird hauptsächlich durch die lokal vorliegende Abkühlgeschwindigkeit bestimmt. Durch sie wird nicht nur die thermische Nukleierung lokal beeinflusst, sondern auch die Sphärolithwachstumsgeschwindigkeit [21, 24]. Der Wachstumsprozess wird mit Hilfe der Temperaturberechnung simuliert, welche die Dynamik des Spritzgießprozesses erfasst.

Um dies in die Software umsetzen zu können, wurden zwei Versuche durchgeführt. Zum einen wurde mit Hilfe einer neu entwickelten high-speed Differential Scanning Calorimetry Anlage (DSC) das Kristallisationsintervall des Materials bei der Firma DSM Research in Geleen, NL ermittelt, wie in Bild 4 dargestellt.

Aus diesem Diagramm ist klar zu erkennen, dass sich mit steigender Abkühlgeschwindigkeit die Kristallisationsanfangs- und die Kristallisationsendtemperatur zu niedrigen Werten hin verschieben. Weiterhin ist jedoch auch festzustellen, dass das Kristallisationsintervall allgemein breiter wird. Im Gegensatz zu diesen exakten Messwerten bietet eine Standard-DSC hier nur qualitative Aussagen [18].

Parallel hierzu wurden mit Hilfe eines Mettler Toledo Heiztisches Typ FP800HT unter einem polarisierten Durchlichtmikroskop experimentell Sphärolithwachstumsgeschwindigkeiten bei unterschiedlichen Abkühlgeschwindigkeiten ermittelt [18, 22], Bild 5.

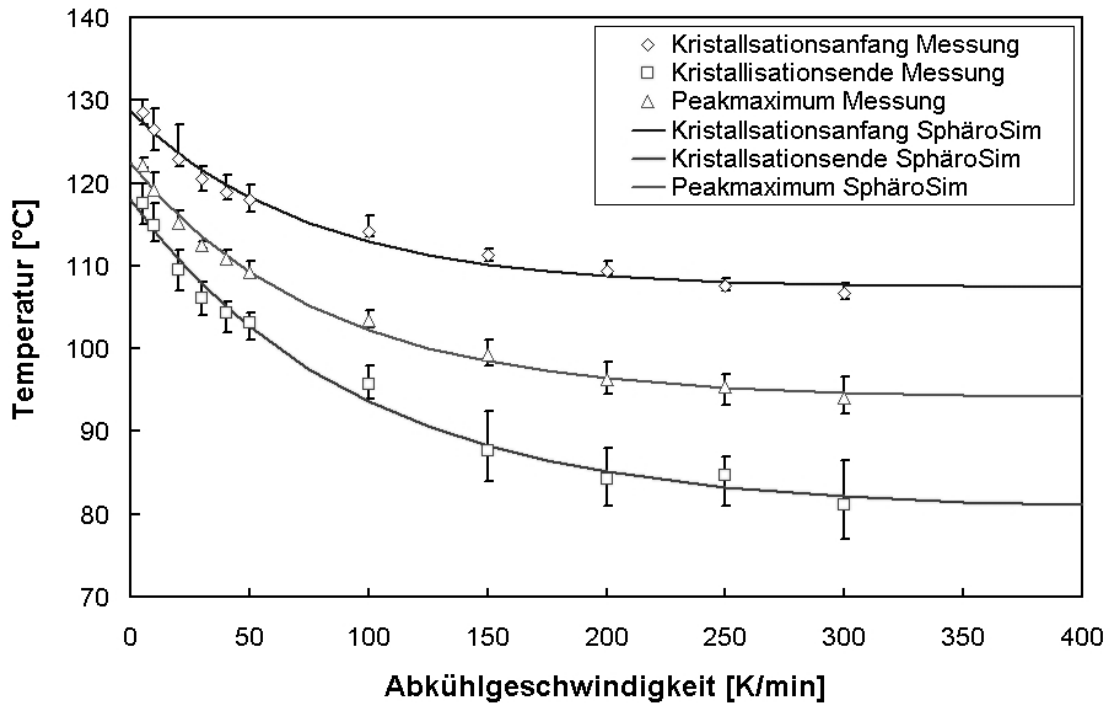


Bild 4: Abkühlgeschwindigkeitsabhängiges Kristallisationsintervall

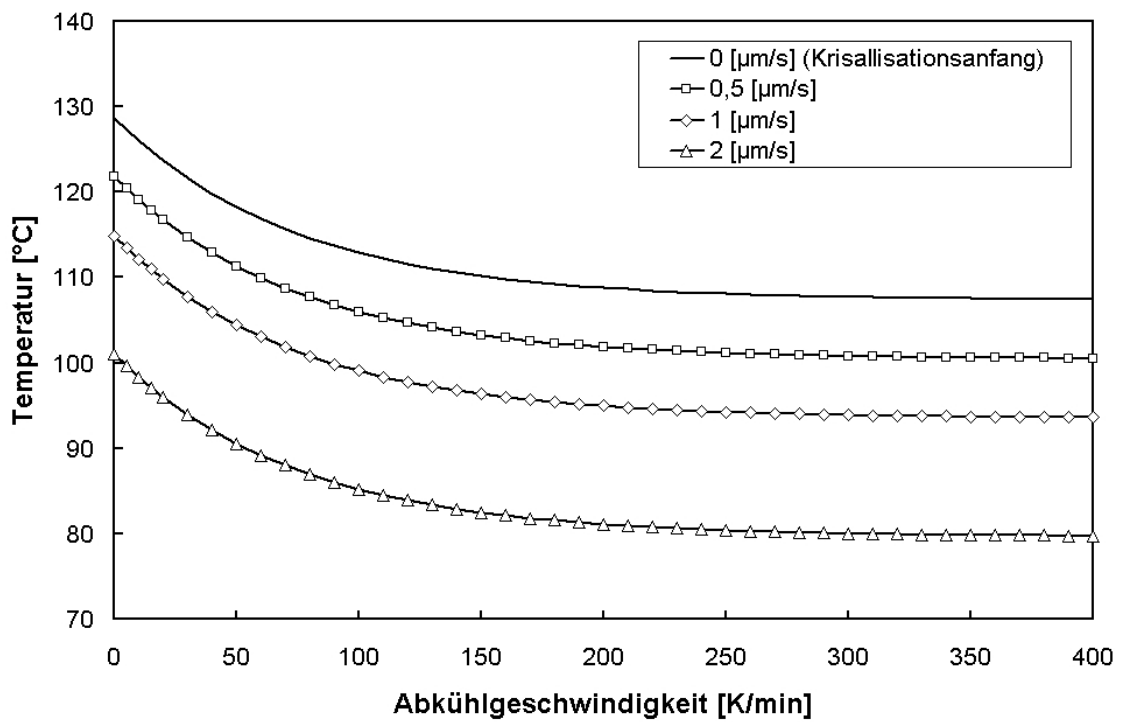


Bild 5: Sphärolithwachstum in Abhängigkeit von unterschiedlichen Abkühlgeschwindigkeiten (PP)

Durch eine Extrapolation dieser Messwerte der Wachstumsgeschwindigkeit und der Verknüpfung mit dem gemessenen Kristallisationsintervall konnte so eine temperatur- und abkühlgeschwindigkeitsabhängige Kristallisationsintervallmodellierung erfolgen und eine gute Abbildung der Kristallisationsvorgänge erzielt werden. Bild 6 zeigt, dass gerade bei geringer thermischer Nukleierung im Übergangsbereich deformierte Sphärolithe entstehen, welche in Richtung des Temperaturgradienten aufwachsen.

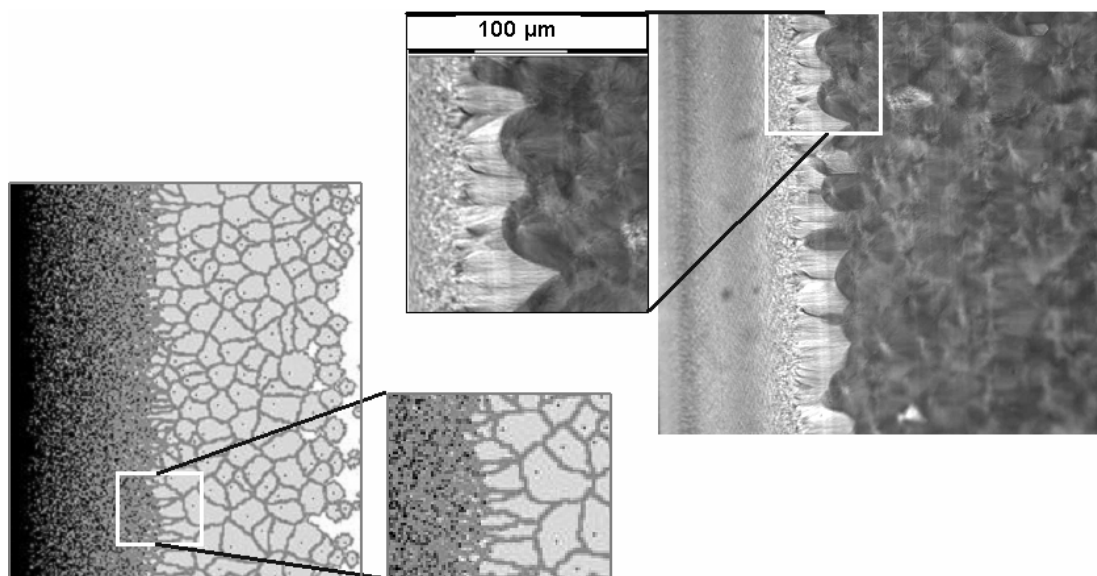


Bild 6: Deformiert aufwachsende Sphärolithe im Randbereich eines Querschnitts

In der Übergangsschicht zwischen der feinsphärolithischen Randschicht und der grobsphärolithischen Kernschicht eines Bauteilquerschnitts, welche in ihrer Lage und Breite fließweglängen- und prozessparameterabhängig ist, wachsen je nach Höhe und Dauer der rheologischen Belastung der Schmelze Reihenkeime auf. Auf diesen Keimen selbst wiederum wachsen sphärische Aufwachsungen auf, welche dann zu den so genannten Shish-Kebab-Strukturen führen [25, 26]. Die Entstehungswahrscheinlichkeit strömungsinduzierter Kristallstrukturen ist allein abhängig von der molekularen Architektur des verwendeten Polymers.

Der eingeschlagene Lösungsweg in der simulativen Nachstellung besteht in der Charakterisierung des Relaxationsverhaltens und der Ausbildung der scherinduzierten Kristallisation an praxisnahen Bauteilen. Des Weiteren wurden aus ausgewählten Materialien am IKV Bauteile hergestellt, mittels eines Scherprüfstands geprüft und licht-mikroskopisch sowie kalorimetrisch analysiert. Die Untersuchungen ergaben, dass sich analog zu den Beobachtungen von [25] scherinduzierte Bereiche je nach Höhe und Dauer der Schereinwirkung ausbilden. Die simulative Nachstellung des Aufwachsens von Reihenkeimen erfolgt daher auf Basis röntgentopographischer Untersuchungen [27, 28].

Neben dem Sphärolithdurchmesser ist der Kristallisationsgrad eine wichtige Größe zur Charakterisierung eines polymeren teilkristallinen Gefüges. Da eine direkte, auf molekular-dynamischen Modellen basierende Berechnung des sich einstellenden Kristallisationsgrades ungenau und umständlich ist, wurde hierfür ein halbempirischer Ansatz in der Software umgesetzt. Dieser Ansatz basiert auf einem Zusammenhang zwischen dem experimentell ermittelten, lokal vorliegenden Sphärolithdurchmesser und dem damit verbundenen lokalen Kristallisationsgrad. Diese direkte Verknüpfung basiert auf umfangreichen experimentellen Untersuchungen für Polypropylen und ist in [29] dargestellt. Eine Generalisierung dieses Ansatzes auch für andere Materialien wird noch geprüft. In der Vorausberechnung der Kristallisation wird zudem die Abkühlendynamik des Prozesses berücksichtigt. Es ist dadurch möglich, mit relativ geringem Rechenaufwand parallel zur morphologischen Information des lokalen Sphärolithdurchmessers den Kristallisationsgrad realitätsnah zu berechnen.

Neben den eingangs erwähnten inneren Eigenschaften Kristallisationsgrad und Sphärolithdurchmesser hat ebenfalls die sich lokal einstellende Orientierung der polymeren Makromoleküle einen maßgeblichen Einfluss auf die lokalen und auch globalen Bauteileigenschaften [29]. Im Gegensatz zur Vorhersage der Molekülorientierung amorpher Thermoplaste ist diese für teilkristalline Thermoplaste erheblich schwieriger. Durch die fehlende Transparenz der Materialien und das Vorhandensein zweier Phasen wird die übliche Auswertung mittels Makroskop oder Lichtmikroskop verkompliziert und somit sowohl die Kennwertermittlung als auch die spätere Validierung der Simulationsergebnisse erschwert.

Eine Vorhersage der Molekülorientierungen wird möglich durch die Einführung eines Zusammenhangs zwischen lokaler Schergeschwindigkeit und sich einstellender Molekülorientierung jeder morphologischen Schicht, gekennzeichnet durch das Herrmann'sche Orientierungsniveau O_r [30, 31]. Die Validierung erfolgt anhand von Fourier-Transformations-Infrarot-Messungen (FTIR) spritzgegossener Proben für den gewählten Polymertyp.

3.4 Simulationsablauf zur Berechnung innerer Eigenschaften

Um die beschriebenen Eigenschaftswerte für ein reales Bauteil einer sich anschließenden Struktursimulation übergeben zu können, wird die Bauteilgeometrie segmentiert. Abhängig von der Angusslage werden ein oder mehrere Querschnitte des Bauteils an unterschiedlichen Positionen über dem Umfang, respektive Fließweglängenabschnitten der Rohrmuffe simuliert. Jedes Segment wird in Zellen unterteilt, anhand derer das Sphärolithwachstum mit Hilfe der Methode der Zellulären Automaten berechnet wird.

Für jedes Segment werden numerisch das lokal vorliegende Temperaturfeld, die Morphologieentstehung und der resultierende Kristallisationsgrad berechnet sowie die Ergebnisse dargestellt. Abschließend werden die so ermittelten Werte als für das jeweilige Berechnungselement gemittelte innere Eigenschaftswerte in einer Übergabedatei abgelegt. Der Struktursimulation wird so als Input eine Datei zur Verfügung gestellt, welche als Information die Bezeichnung jedes E-

lementes des Bauteils und dessen Wertetripel der inneren Eigenschaften Sphärolithdurchmesser, Kristallisationsgrad und Höhe der molekularen Orientierung enthält.

4 STRUKTURANALYSE AUF BASIS INNERER EIGENSCHAFTEN

Aufbauend auf das oben dargestellte Wertetripel der in der Übergabedatei abgelegten lokalen inneren Eigenschaften wird auf die lokal vorliegenden mechanischen Eigenschaften geschlossen. Dazu wurden umfangreiche Untersuchungen an Probekörpern mit verschiedenen inneren Eigenschaften durchgeführt und Zusammenhänge zwischen Kristallisationsgrad, Sphärolithdurchmesser und Orientierungen einerseits und Ursprungselastizitätsmodul E_0 , Streckspannung σ_s und Streckdehnung ε_s andererseits abgeleitet [32]. Die Eigenschaften der Molekülorientierung wurden dabei zwar messtechnisch erfasst, bisher aber noch nicht anisotrop in die Materialmodellierung eingebracht. Aus inneren Eigenschaften kann dann eine modifizierte Form des 3-Parameter-Ansatzes gewonnen werden, der eingesetzt in eine Subroutine die Basis für die Materialbeschreibung in der Simulation darstellt [33]:

$$\sigma = \varepsilon \frac{\sigma_s}{\varepsilon_s} \frac{E_0 \varepsilon_s^2 - \sigma_s \varepsilon}{\sigma_s \varepsilon_s + (E_0 \varepsilon_s - 2\sigma_s) \varepsilon} \quad (1)$$

Die Werte für E_0 , σ_s und ε_s sind konstant, aber entsprechend der lokal vorliegenden inneren Eigenschaften für jedes Element verschieden. Es ergibt sich daher für jedes Element eine andere Dehnungsabhängigkeit des Zusammenhangs zwischen Spannung und Dehnung, aus dem die aktuelle und lokale Elementsteifigkeit ermittelt wird.

Neben der über den 3-Parameter-Ansatz erhaltenen Dehnungsabhängigkeit der lokalen Steifigkeit wird auch eine Dehnratenabhängigkeit eingebracht. Dazu wird die aktuell in einem Element vorliegende Dehnratenrate aus Dehnungs- und Zeitinkrement bestimmt und dem Element die entsprechenden, aus Kalibrierungsmessungen erhaltenen Werte für E_0 , σ_s und ε_s zugewiesen. Die Temperaturabhängigkeit des Werkstoffverhaltens wird mit der Dehnratenabhängigkeit über das Zeit/Temperatur-Verschiebungsprinzip verrechnet:

$$\log\left(\frac{\dot{\varepsilon}_{ref}}{\dot{\varepsilon}}\right) = k\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right) \quad (2)$$

Es ergibt sich schließlich ein Tangentenmodul, der temperaturabhängig ist und von den in dem jeweiligen finiten Element vorliegenden inneren Eigenschaften und den dort herrschenden Dehnungen und Dehnraten abhängt [32]:

$$E_T = E(T, \varepsilon, \dot{\varepsilon}, Or, K, Sph) \quad (3)$$

Um die Übergabe der inneren Eigenschaften und die daraus resultierenden Materialkennwerte nachvollziehbar vorzunehmen, werden diese abgespeichert und können visualisiert werden [34]. Die Zuweisung der inneren Eigenschaften auf eine mittels Punktanguss mittig an dem zentralen Steg angespritzten Rohrmuffe ist in Bild 7, die daraus resultierenden Steifigkeiten und Spannungen sind in Bild 8 dargestellt. Bei dieser Berechnung wurde aus Symmetriegründen nur eine Hälfte der Muffe berechnet. In Bild 7 sind der lokal aufgelöste Sphärolithdurchmesser, der Kristallisationsgrad und der Umfang der Molekülorientierung in Form des Hermann'schen Orientierungswertes angegeben. Man erkennt die starke Zunahme des Sphärolithdurchmessers über der Wanddicke vom Bauteilrand zum Inneren hin. Ebenso ist gut sichtbar, dass der für das Material und den Spritzgießprozess typische lokale Kristallisationsgrad zwischen 45 und 50 % liegt. Im Inneren des Bauteils liegen keine Orientierungen vor, dagegen kommt es in den stark gescherten und schnell abgekühlten Randbereichen zu hohen Orientierungswerten. Links und mittig in Bild 8 ist für ein Zusammendrücken der Rohrmuffe in radialer Richtung mittels zwei ideal steifer, unendlich ausgedehnter Platten (in den Bildern durch Linien repräsentiert) für zwei unterschiedliche Zeitpunkte der Tangentenmodul dargestellt. Dieser wird entsprechend der lokal vorliegenden Dehnung aus dem Ursprungsmodul generiert, der wiederum eine Funktion der lokalen inneren Eigenschaften und der Dehnrates ist. Rechts im Bild schließlich erkennt man die sich bei der herrschenden Belastung einstellende Spannungsverteilung in Form der Vergleichsspannung nach von Mises.

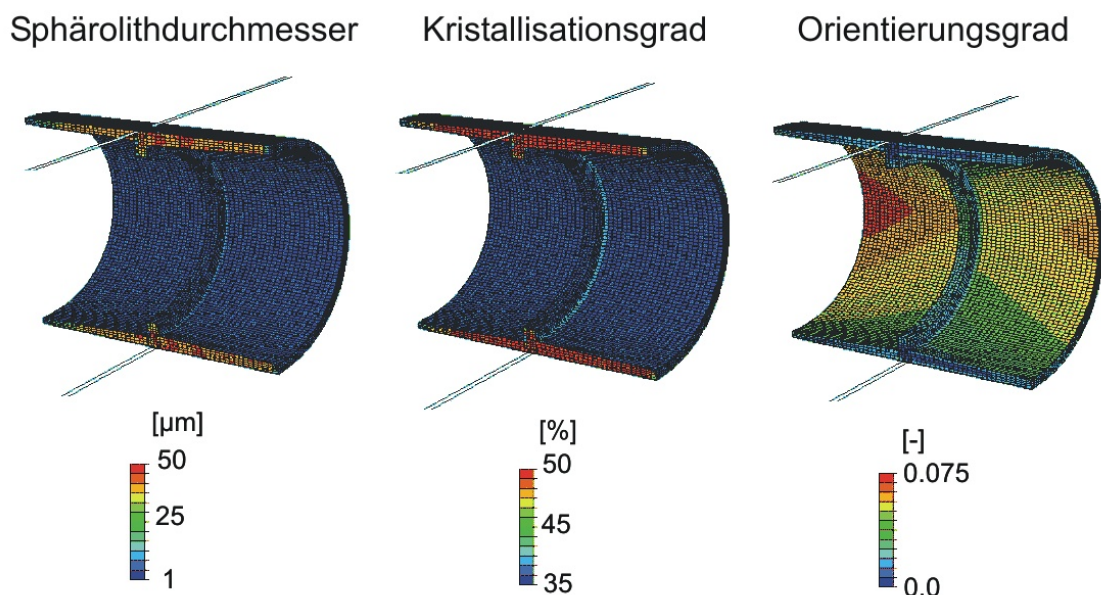


Bild 7: Visualisierung der inneren Eigenschaften in der Strukturanalyse

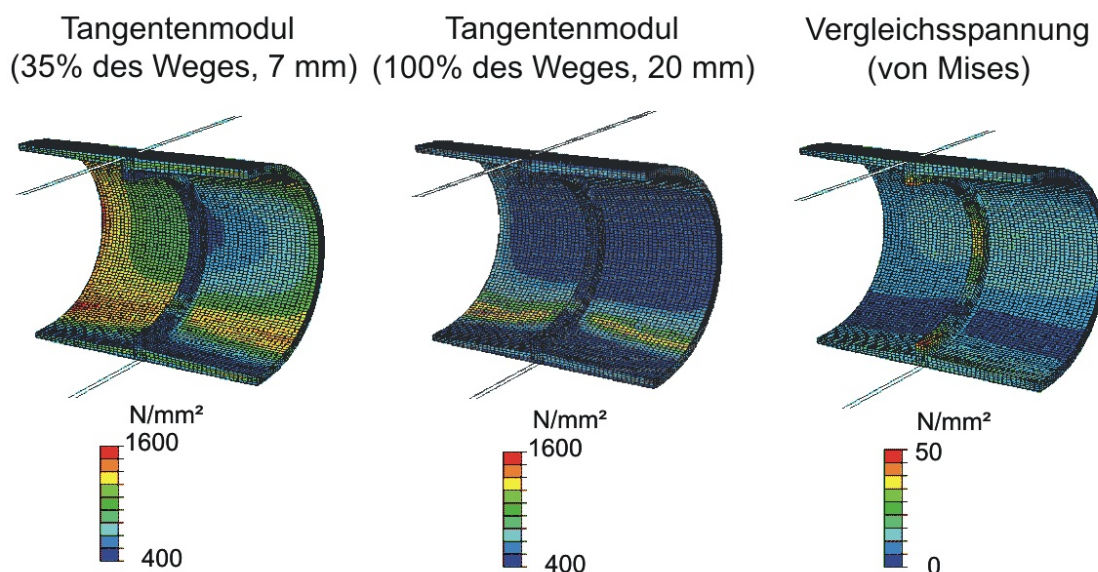


Bild 8: Darstellung der lokalen Steifigkeiten und Spannungen

5 ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

Es ist möglich, die inneren Eigenschaften teilkristalliner Thermoplaste über eine erweiterte Prozesssimulation zu ermitteln, daraus über geeignete Kalibrierungsmessungen mechanische Kennwerte zu generieren und diese als Basis für eine Materialbeschreibung einzusetzen.

Einem Einsatz der integrativen Simulation steht bisher der dafür benötigte erhöhte Aufwand im Wege. Auf Seiten der Prozesssimulation kommt es gegenüber einer einfachen Füllsimulation zu deutlich höheren Rechenzeiten. Zusätzlich zu Füllsimulation und mechanischer FEM muss derzeit mit der Kristallwachstumssimulation ein dritter Simulationsschritt durchgeführt werden. Schließlich ist die Ermittlung des Zusammenhangs zwischen inneren und mechanischen Eigenschaften mit einem ganz erheblichen Mess- und Prüfaufwand verbunden.

Mit zunehmendem Interesse an der immer genaueren Auslegung von Kunststoffbauteilen werden voraussichtlich mittelfristig die erforderlichen Materialdaten verfügbar werden. Der erhöhte Rechenaufwand wird sich in Zukunft einerseits durch verbesserte Algorithmen und andererseits durch höhere Rechnerleistungen kompensieren lassen. Der zusätzlich erforderliche dritte Schritt der Kristallwachstumssimulation schließlich kann durch eine direkte Einbindung der Simulation innerer Eigenschaften in die Spritzgießsimulation vermieden werden, was die Handhabbarkeit des gesamten Verfahrens deutlich verbessern wird.

6 DANKSAGUNG

Die Untersuchungen wurden durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 370 finanziell gefördert.

7 LITERATUR

- [1] Ehrenstein, G. W. Mit Kunststoffen konstruieren – Eine Einführung
Carl Hanser Verlag München, 1995
- [2] Tucker III, C. L.;
Liang, E. Stiffness predictions for unidirectional short-fiber
composites: Review and evaluation
In: Composite Science and Technology 59 (1999),
S. 655 – 671
- [3] Brinkmann, M. Durchgängige Auslegung von Spritzgussbauteilen
aus kurzfaserverstärkten Thermoplasten
Institut für Kunststoffverarbeitung, RWTH Aachen,
unveröffentlichte Diplomarbeit, 2004
- [4] Michler, G. H. Kunststoffmikromechanik – Morphologie,
Deformations- und Bruchmechanismen
Carl Hanser Verlag München, 1992
- [5] Michler, G. H. Relations between Molecular Structure,
Morphology and Mechanical Properties of
Heterogeneous Polymer Systems
Polymer Science 35 (1993) 11, S. 1559-1568
- [6] Menges, G.;
Haberstroh, E.;
Michaeli, W.;
Schmachtenberg, E. Werkstoffkunde Kunststoffe
Carl Hanser Verlag, 2002
- [7] Tartari, D.;
Bramuzzo, M. PP-Eigenschaften als Funktion von Molekular-
gewicht und Struktur
Kunststoffe 83 (1993), S. 460-464
- [8] Yoshida, T.;
Okumra, H.;
Ishiaka, U. S.;
Leong, Y. W.;
Hamada, H. The effect of molecular weight on the interfacial
properties of GF/PP injection molded composite
Tagungsunterlagen der Annual Technical
Conference (ANTEC) der Society of Plastics
Engineers, Boston (MA), USA, 2005
- [9] Yu, Y.;
White, J. L. Structure Development in Injection Molding of
isotactic Polypropylene, its Blends, Compounds
and Dynamic Vulcanizates
Intern. Polymer Processing XVIII (2003) 4,
S. 388-397

- [10] Pantani, R.; Speranza, V.; Titomanlio, G. Relevance of Crystallisation Kinetics in the Simulation of the Injection Molding Process Intern. Polymer Processing XVI (2001) 1, S. 61-71
- [11] N.N. URL: www.sigmasoft.de, Sigma Engineering GmbH, 11.07.2005
- [12] N.N. Schwindung verschwunden – Anspruchsvolle Spritzgießteile in der Simulation Kunststoff Magazin 11/2005, S. 10-12
- [13] Michaeli, W.; Bussmann, M. Innovative Entwicklungen im Bereich der Mikrostruktursimulation teilkristalliner Thermoplaste Internationales Kunststofftechnisches Kolloquium des IKV 2004 – Block 5, Aachen (2004), S. 8-16
- [14] Michaeli, W.; Bussmann, M. Developments in the field of microstructure simulation semi-crystalline thermoplastics Journal of Polymer Engineering, Vol. 26 (2-4) 2006, S. 275-290
- [15] Hoffmann, S. Berechnung von Kristallisationsvorgängen in Kunststoffformteilen RWTH Aachen, Dissertation, ISBN 3-89654-999-X, 2002
- [16] N.N. Integrative Werkstoffmodellierung Arbeits- und Ergebnisbericht zum SFB 370 an der RWTH Aachen, 2002
- [17] Zachert, J. Analyse und Simulation dreidimensionaler Strömungsvorgänge beim Spritzgießen RWTH Aachen, Dissertation, 1998
- [18] Michaeli, W.; Bussmann, M.; Renner, B. Initial steps for a simulative prediction of shear-induced crystallisation phenomena in injection moulded parts Tagungsunterlagen der PPS-21, Leipzig, 2005
- [19] Michaeli, W.; Hoffmann, S. Analysis of Internal Structure of Injection Molded Parts based on a Three-Dimensional Simulation Software Tagungsunterlagen der Annual Technical Conference (ANTEC) der Society of Plastics Engineers, Dallas (TX), USA, 2001
- [20] Michaeli, W.; Hoffmann, S. Analysis and Modeling of Microstructure Development Tagungsunterlagen der PPS-17, Montreal, Kanada, CD-ROM, 2001

- [21] Cramer, A. Modellierung des Sphärolithwachstumsprozesses beim Erstarren von thermoplastischen Kunststoffschmelzen
Institut für Kunststoffverarbeitung, RWTH Aachen, unveröffentlichte Studienarbeit, 2002
- [22] Michaeli, W.; Bussmann, M.; Renner, B. Shear-induced Morphology Prediction in Injection Moulded Semi-Crystalline Thermoplastics
Tagungsunterlagen der Annual Technical Conference (ANTEC) der Soc. Of Plastics Engineers, Boston (MA), USA, 2005
- [23] Wang, X. Bestimmung des temperatur- und druckabhängigen Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Werkzeug und Formteil
Institut für Kunststoffverarbeitung, RWTH Aachen, unveröffentlichte Diplomarbeit, 2005
- [24] Michaeli, W.; Bussmann, M.; Renner, B. Microstructure simulations of over-moulded micro-sized metal needles
4M 2005 – First International Conference on Multi-Material Micro Manufacture, Book of Abstracts, Poster Presentation, Elsevier Verlag, 2005, S. 17, ISBN: 0-080-44729-5
- [25] Janeschitz-Kriegl, H. Polymer solidification by crystallisation under heat transfer and flow conditions
Process in Colloid & Polymer Science 87: 117-127 (1993)
- [26] Vleeshouwers, S, Meijer, H. A rheological study of shear induced crystallization
Rheological Acta 35 (1996) S. 391-399
- [27] Baranowski, T. Entwicklung eines Versuchskonzepts zur Ermittlung von kristallisationsspezifischen Materialdaten in ruhenden und bewegten abkühlenden Thermoplastschmelzen
Institut für Kunststoffverarbeitung, RWTH Aachen, unveröffentlichte Studienarbeit, 2004
- [28] Somani, R. H.; Yang, L.; Hsiao, B. S.; Agarwal, P. K.; Fruiwala, H. A.; Tsou, A. H. Shear-induced Precursor Structures in Isotactic Polypropylene Melt by in-Situ Rheo-SAX and Rheo-WAXD Studies
Macromolecules 2002, 35, S. 9096-9104
- [29] N.N. Korrelation von Fertigung und Bauteileigenschaften bei Kunststoffen
Abschlussbericht, SFB 106 an der RWTH Aachen, 1988

- [30] Nguyen-Chung, T.; Mennig, G. Non-isothermal transient flow and molecular orientation during injection mould filling
Rheol. Acta., 40, 2001, S. 67-73
- [31] Zhang, Y. Entwicklung und Bewertung eines Berechnungsalgorithmus zur Vorhersage von Molekülorientierungen in teilkristallinen Spritzgussbauteilen
Institut für Kunststoffverarbeitung, RWTH Aachen, unveröffentlichte Diplomarbeit, 2005
- [32] Grunewald, D. Simulation des Werkstoffverhaltens von spritzgegossenen, teilkristallinen Thermoplasten unter Berücksichtigung der inneren Eigenschaften mit Hilfe der FEM
Institut für Kunststoffverarbeitung, RWTH Aachen, unveröffentlichte Diplomarbeit, 2001
- [33] Gutberlet, D. Ansätze zur verbesserten Werkstoffbeschreibung für die Dimensionierung von thermoplastischen Kunststoffen
Institut für Kunststoffverarbeitung, RWTH Aachen, Dissertation, 2000
- [34] Weinhold, G. Berücksichtigung der inneren Eigenschaften bei der FE-Simulation von spritzgegossenen, teilkristallinen Thermoplasten
Institut für Kunststoffverarbeitung, RWTH Aachen, Studienarbeit, 2005

Stichworte:

deutsch:

Materialmodellierung, Integrative Simulation, Materialdatenermittlung, Prozesssimulation, Strukturanalyse, innere Bauteileigenschaften, Simulationskette, Morphologie, Zelluläre Automaten, Kristallisation, Molekülorientierung, Sonderforschungsbereich, online Berechnung

englisch:

material modelling, integrative simulation, material data determination, process simulation, structural analysis, inner properties, simulation chain, morphology, cellular automata method, crystallisation, molecular orientation, Sonderforschungsbereich, online calculation

Kontakt:

Autoren: Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. Walter Michaeli,
Prof. Dr.-Ing. Ernst Schmachtenberg,
Dipl.-Ing. Markus Brinkmann,
Dipl.-Ing. Martin Bussmann,
Dipl.-Math. Bernhard Renner

Herausgeber: Prof. em. Dr.-Ing. Dr. h.c. Gottfried W. Ehrenstein,
Prof. Dr. Tim Osswald

Erscheinungsdatum: Januar/Februar 2007

Herausgeber/Editor:

Europa/Europe
Prof. Dr.-Ing. Dr. h.c. G. W. Ehrenstein, verantwortlich
Lehrstuhl für Kunststofftechnik
Universität Erlangen-Nürnberg
Am Weichselgarten 9
91058 Erlangen
Deutschland
Phone: +49/(0)9131/85 - 29703
Fax.: +49/(0)9131/85 - 29709
E-Mail-Adresse: ehrenstein@lkt.uni-erlangen.de

Amerika/The Americas
Prof. Dr. Tim A. Osswald, responsible
Polymer Engineering Center, Director
University of Wisconsin-Madison
1513 University Avenue
Madison, WI 53706
USA
Phone: +1/608 263 9538
Fax.: +1/608 265 2316
E-Mail-Adresse: osswald@engr.wisc.edu

Verlag/Publisher:

Carl-Hanser-Verlag
Jürgen Harth
Ltg. Online-Services & E-Commerce,
Fachbuchanzeigen und Elektronische Lizenzen
Kolbergerstrasse 22
81679 Muenchen
Tel.: 089/99 830 - 300
Fax: 089/99 830 - 156
E-mail: harth@hanser.de

Beirat/Editorial Board:

Professoren des Wissenschaftlichen Arbeitskreises Kunststofftechnik/
Professors of the Scientific Alliance of Polymer Technology