Mit Simulation zu neuen Materialien

Schnell optimale Prozessparameter für 3D-Druck-Werkstoffe ermitteln

Für additive Fertigungsverfahren bestehen noch Einschränkungen durch das Angebot an druckbaren Materialsystemen. Für die Weiterentwicklung ist u.a. ein umfassenderes Prozessverständnis unabdingbar. Systematische Untersuchungen sowie numerische Simulationen für das Fused Layer Modeling veranschaulichen die Vorgänge beim Aufschmelzen von Filamenten. Die Ergebnisse unterstützen bei der Auslegung des Prozesses und erleichtern die Beurteilung, wie gut sich neue Materialien additiv verarbeiten lassen.

esignfreiheit, serielle Maßanfertigungen, Abfallminimierung und die Möglichkeit der Herstellung komplexer Strukturen sind nur einige Vorteile der additiven Fertigung (engl. Additive Manufacturing, AM) [1]. Wegen ihrer großen Flexibilität und der Möglichkeit zur Produktanpassung wurde sie ursprünglich für die Herstellung von Prototypen eingesetzt. Inzwischen haben sich AM-Verfahren in einigen Bereichen auch für die vollständige Produktion von Bauteilen etabliert. Die Bauteile werden jedoch immer noch hauptsächlich für Anwendungen eingesetzt, die kein hohes Maß an Teilefunktionalität und -leistung erfordern [1, 2].

Die Vorteile additiver Fertigungsverfahren kommen vor allem in der biomedizinischen Industrie, der Medizintechnik und der Luft-, Raumfahrt-, Bau- und Automobilindustrie zum Tragen. In diesen Bereichen steigt die Nachfrage nach möglichst leichten, funktionellen und kostengünstigen Materialsystemen, die zudem die Anforderungen an Nachhaltigkeit und Leistung erfüllen können. Viele Forschungsarbeiten zielen deshalb darauf, AM-Prozesse für neue technische Materialsysteme weiterzuentwickeln, um so deren Nutzung in der industriellen Produktion auszuweiten [2].

Hotend-Design entscheidend

Unter den verschiedenen AM-Verfahren ist das Fused Layer Modelling (FLM) eine der am häufigsten verwendeten Techniken. Das Extrusionsverfahren wird auch als Fused Filament Fabrication (FFF) be-



Blick in den Bauraum eines FLM-Druckers: Mithilfe von Strömungssimulationen soll der 3D-Druckprozess besser verstanden und vorhergesagt werden © SKZ

zeichnet und ist unter der Abkürzung FDM bekannt, als eingetragene Marke für Fused Deposition Modeling. Bei dieser Technik werden thermoplastische Kunststoffe mithilfe einer beheizten Düse im sogenannten Hotend teilweise aufgeschmolzen, extrudiert und nach einem vorab festgelegten Schichtmodell strangförmig abgelegt [3]. Für eine gute Produktqualität ist u.a. das verwendete Hotend-Design entscheidend (**Bild 1**).

Anders als bei der konventionellen Schneckenextrusion, bei der eine erhebliche Wärmemenge durch viskose Erwärmung erzeugt wird, hat der Kunststoff im FLM-Verfahren eine kurze Verweilzeit. Die Wärme wird dabei größtenteils durch die vom Heizblock beheizte Wand weitergegeben. Die Strömung der Kunststoffschmelze wird vor allem durch den Druck des festen Filaments erzeugt, welches als Kolben fungiert. Das erzeugt einen kontinuierlichen Prozess, der sich deutlich von konventionellen Extrusionsprozessen unterscheidet. Daher sind spezifische Berechnungsmodelle und systematische experimentelle Untersuchungen nötig, um die Vorgänge in der Düse beim FLM-Verfahren materialabhängig zu verstehen und vorhersagen zu können [4].



Bild 1. Schematischer Aufbau eines Hotends für das FLM-Drucken: Das Hotend-Design beeinflusst maßgeblich die Qualität des Druckerzeugnisses Quelle: SKZ; Grafik: © Hanser

Zur Beschreibung des statischen Extrusionsprozesses in der Filamentdüse bildet die sogenannte Boussinesq-Näherung die Grundlage für die numerische Modellierung des nicht-isothermen Verfahrens [5]. Diese enthält neben der bekannten Navier-Stokes-Gleichung einen zusätzlichen Term, der die Temperaturabhängigkeit der Dichte eines Materials berücksichtigt. Zur Simulation der scherratenabhängigen Viskosität n kommt das für die Kunststoffverarbeitung übliche Carreau-Modell [6] zum Einsatz. Um die Temperaturabhängigkeit der Viskosität darzustellen, wird die ebenfalls häufig eingesetzte WLF-Funktion verwendet [7]. Diese Verschiebung ist allerdings nur für den flüssigen, aufgeschmolzenen Zustand gültig. Da angenommen wird, dass in der FLM-Düse ein Phasenübergang von festem Filament zu flüssiger Schmelze vorliegt, muss das berücksichtigt werden. Zur Lösung dieses Problems wird das unaufgeschmolzene Material als Flüssigkeit mit sehr hoher Viskosität, von bis zu 10⁶ Pa·s, definiert. Der Phasenübergang ist mittels einer kontinuierlichen Jump-Funktion darstellbar, die sich wie folgt beschreiben lässt:

$$\begin{split} \eta(\dot{\gamma},T) &= \frac{A}{\left(1 + \dot{\gamma} \cdot B\right)^c} \cdot a(T) \cdot \left[a_1 + a_2 \tanh\left(a_3\left(T_{m/g} - T\right)\right)\right] \\ \text{A, B, C: Carreau-Modellparameter} \\ a_1, a_2, a_3; \text{Modellparameter} \\ \dot{\gamma} &: \text{Schergeschwindigkeit} \\ \text{T} &: \text{Temperatur} \\ \text{T}_{m'g} &: \text{Schmelz-/Glasübergangstemperatur} \end{split}$$

Ein geeignetes Hilfsmittel zur Vorhersage der Fließvorgänge ist die Simulation der numerischen Strömungsmechanik (engl. Computational Fluid Dynamics, CFD). Durch die Wahl der richtigen Randbedingungen ist eine Berechnung von Druck, Temperatur und Fließgeschwindigkeit des Filaments möglich (Bild 2). Zur Modellierung der Wärmeübertragung kann für langsame Einzugsgeschwindigkeiten von einem perfekten Kontakt zwischen beheizter Düsenwand und Filament ausgegangen werden. Bei zunehmend höheren Geschwindigkeiten werden dagegen Wandgleitbedingungen festgelegt, über deren Länge keine Wärmeübertragung zwischen Düsenwand und Filament angenommen wird. Die Wandgleitlängen werden bei der Simulation unter Variation der Prozessparameter basierend auf den experimentellen Daten festgelegt und mit den Beobachtungen aus den Aufschmelzuntersuchungen verglichen.

CFD-Simulationen experimentell bestätigen

Um die Eignung der CFD-Simulation für die Vorhersage der Fließvorgänge zu bestätigen, wurden am SKZ – Das Kunststoffzentrum und der TU Dortmund entsprechende Untersuchungen durchgeführt. Die Validierung der numerischen Berechnungsergebnisse erfolgte durch experimentelle Daten aus Druckversu-



Bild 2. Schematische Darstellung der verwendeten Randbedingungen für die Simulation: Werden diese passend ausgewählt, lassen sich der Druck, die Temperatur und die Fließgeschwindigkeit des Filaments bestimmen Ouelle: SKZ: Grafik: © Hanser chen. Dafür wurde eigens ein Stativaufbau mit einem V6-Hotend und der Düse V6–175-Nozzle-400 des Unternehmens E3D-Online entwickelt. Der Aufbau umfasst außerdem eine Plattformwägezelle, die die Messung der benötigten Vorschubkraft beim Extrusionsprozess in Abhängigkeit der Druckparameter er-

Die Autoren

M. Sc. Arooj Fatima ist seit 2015 wissenschaftliche Angestellte am Lehrstuhl für Angewandte Mathematik und Numerik der TU Dortmund.

Dr. Hogenrich Damanik ist seit 2010 wissenschaftlicher Angestellter am Lehrstuhl für Angewandte Mathematik und Numerik.

Prof. Stefan Turek ist seit 1999 Leiter des Lehrstuhls für Angewandte Mathematik und Numerik.

M. Sc. Rebecca Wolff ist seit 2019 wissenschaftliche Mitarbeiterin in der Gruppe Compoundieren und Extrudieren am Kunststoff-Zentrum (SKZ).

Dipl.-Ing. Johannes Rudloff leitet seit 2016 die Gruppe Compoundieren und Extrudieren.

Dr. Marieluise Lang leitet seit 2015 den Bereich Materialien, Compoundieren, Extrudieren am SKZ.

Dr. Thomas Hochrein ist seit 2017 Geschäftsführer der Forschung und Bildung des SKZ.

Prof. Martin Bastian ist seit 2006 Institutsdirektor des SKZ.

Dank

Das IGF-Vorhaben 18650 N der Forschungsvereinigung FSKZ e. V. wird über die AiF im Rahmen des Programms zur Förderung der industriellen Gemeinschaftsforschung und -entwicklung (IGF) vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestags gefördert. Die Autoren bedanken sich für die finanzielle Unterstützung.

Service

Literatur & Digitalversion

 Das Literaturverzeichnis und ein PDF des Artikels finden Sie unter www.kunststoffe.de/onlinearchiv

Kunststoffe 9/2021 www.kunststoffe.de



Bild 3. Skizze des Druckerversuchsstands: Mithilfe der Thermografiekamera kann die Extrudattemperatur nach der Düse erfasst werden Quelle: SKZ; Grafik: © Hanser

möglicht. Diese Erhebung der Kraftmesswerte im FLM-Verfahren wurde schon einige Male angewandt [8, 9]. Bei den Untersuchungen erfolgte erstmals zusätzlich die Aufzeichnung der Extrudattemperatur nach der Düse durch Implemen tierung einer Thermografiekamera (Typ: VarioCAM hr, Hersteller: InfraTec GmbH) in den Aufbau (**Bild 3**).

Für die Betriebspunkte wurden die Düsentemperatur und Einzugsgeschwindigkeit variiert und deren Einflüsse auf die nötige Vorschubkraft und Extrudattemperatur anhand von zwei Acrylnitril-Butadien-Styrolen (ABS) unterschiedlicher Viskosität untersucht. **Bild 4** zeigt die aufgezeichnete Kraft F in Abhängigkeit der Einzugsgeschwindigkeit und Heizblocktemperatur T beim Verdrucken des Materials Novodur H605 (MVR=25 cm³/10 min) von Ineos Styrolution. Dabei zeigte sich eine Erhöhung der benötigten Vorschubkraft mit steigender Einzugsgeschwindigkeit. Eine Erhöhung der Düsen- bzw. Heizblocktemperatur führte dagegen zu niedrigeren Vorschubkräften, hervorgerufen von der niedrigeren Viskosität bei höheren Temperaturen.

Vorgänge in der Düse bestimmen

Ab einer bestimmten Einzugsgeschwindigkeit lässt sich eine Zunahme der Steigung der Messkurven beobachten. Wird dieser Übergang durch eine zweiseitige lineare Regression ermittelt [8], kann der Schnittpunkt beider Regressionsgeraden als Maß für den Beginn des instabilen Extrusionsbereichs angenommen werden (Bild 4). Ab diesem Punkt fluktuierten die Kraftmessungen stark, was vermutlich auf unzureichend aufgeschmolzenes Material zurückzuführen ist. Das zweite untersuchte Material Novodur P2H-AT (MVR= 37 cm³/10 min) von Ineos Styrolution wies aufgrund der niedrigeren Viskosität um bis zu 17 % höhere Einzugsgeschwindigkeiten am Übergang zum instabilen Extrusionsbereich auf, bei zwischen 15-20 % verringertem Kraftverbrauch gegenüber Novodur H605.

Für ein besseres Verständnis dieser Vorgänge in der Druckerdüse muss eine Untersuchung des Aufschmelzverhaltens erfolgen. Das beinhaltet vor allem die Ermittlung des Anteils an festem Filament sowie dessen Position in der Düse in Abhängigkeit der Druckparameter. Aber auch der Rückstau von Schmelze in Richtung des Düseneingangs durch die beschriebene Stempelwirkung ist von Bedeutung für die Beschreibung der Wärmevorgänge.

Dementsprechend wurden Dead-Stop-Versuche [10, 11] mittels zweifarbiger Filamente an ausgewählten Betriebspunkten durchgeführt. Bei diesen wurden zunächst die noch nicht aufgeschmolzenen Anteile der Stränge sowie die daran haftende zurückgestaute Schmelze betrachtet (Bild 5). Die so bestimmten Positionen des Feststoffanteils in der Düse sowie die Rückstaulängen der Schmelze können später genutzt werden, um die entwickelten Modelle zu prüfen. Bei der Erstellung der CAD-Modelle wurde auf die frei zugänglichen technischen Zeichnungen von E3D-Online zurückgeariffen.

Die Aufzeichnung der Extrudattemperatur zeigt eine Abnahme der Temperatur mit steigenden Einzugsgeschwin-



Bild 4. Verlauf der Vorschubkraft und Extrudattemperatur in Abhängigkeit von Heizblocktemperatur und Einzugsgeschwindigkeit: Die benötigte Vorschubkraft erhöht sich mit steigender Einzugsgeschwindigkeit Quelle: SKZ; Grafik: © Hanser



Bild 5. Verlauf der Extrudattemperatur in Abhängigkeit von Heizblocktemperatur und Einzugsgeschwindigkeit: Die Abweichungen zwischen den angenommenen und den experimentell bestimmten Werten betragen größtenteils nur ±15 % Quelle: SKZ; Grafik: © Hanser

digkeiten (Bild 4). Das lässt vermuten, dass der Wärmeübergang zwischen Filament und Düsenwand unzureichend für die Schmelze ist, um die eingestellte Heizblocktemperatur zu erreichen.

Der Unterschied zwischen der Düsenund Extrudattemperatur betrug dabei bis zu 90 °C. Die Messungen zeigten zu Beginn jeder Kurve eine Zunahme der Temperatur mit der Einzugsgeschwindigkeit, was vermutlich auf die Abkühlung der Stränge bis zum Erreichen der Messlinie der Thermokamera bei langsamen Extrusionsgeschwindigkeiten zurückzuführen ist. Das wird auch durch die beobachtete Zunahme dieses Effekts bei höheren Heizblocktemperaturen bestätigt. In dem Geschwindigkeitsbereich der instabilen Extrusion erreicht zunehmend festes Filament die Verjüngung der Druckerdüse, was wie oben beschrieben zu erhöhten Normalkräften im Hotend und zu erhöhter Scherung führt. Die dabei entstehende Wärmedissipation könnte dabei der Grund für die erhöhten Extrudattemperaturen sein, die in diesem Bereich beobachtet wurden.

Bewertung der Berechnungsmodelle

Die in den bisherigen Arbeiten wichtigsten Ergebnisse der numerischen Berechnungsmodelle werden im Folgenden vorgestellt. Dabei liegt ein besonderer Fokus auf der Darstellung der modellierten Vorschubkraft und der Viskositätsverteilung in der Düsengeometrie im Vergleich zu den oben beschriebenen experimentellen Daten. Durch die bisher getroffenen Annahmen kann der Kurvenverlauf der benötigten Kraft F in Abhängigkeit der Einzugsgeschwindigkeit v gut dargestellt werden (**Bild s**). Die Abweichungen lagen größtenteils innerhalb von ± 15 %. Das Modell erfasst die Änderung der Kurvensteigungen, die den Übergang von der stabilen zur instabilen Extrusion markiert. Damit können die benötigten Kräfte und somit die realisierbaren Extrusionsgeschwindigkeiten abgeschätzt werden.

Für die Viskosität des festen Filaments wurde eine Viskosität von 10⁶ Pa·s angenommen. Die Simulationen ergeben ebenfalls ein zunehmendes Wandern von festem Filament in Richtung Düsenausgang bei steigenden Einzugsgeschwindigkeiten. Das steht qualitativ in Übereinstimmung mit den Beobachtungen aus den zuvor durchgeführten Dead-Stop-Versuchen.

Die passende Kombination von Prozess und Material

Die durchgeführten systematischen Untersuchungen und die numerischen Modellierungen des FLM-Druckprozesses tragen dazu bei, die bisherigen Erkenntnisse zu den Prozessvorgängen des additiven Fertigungsverfahrens zu vertiefen. Mit der dargestellten CFD-Simulation zur Beschreibung der Fließvorgänge von ABS in einer FLM-Düse können durch die Annahme von temperatur- und geschwindigkeitsabhängigen Wandgleitbedingungen die Vorschubkräfte beim Druckprozess gut reproduziert werden. Trotz der vereinfachten Betrachtung einer rein strukturviskosen Strömung, ohne dabei viskoelastische Effekte zur berücksichtigen, ermöglichen die Simulationen die materialabhängige Abschätzung eines stabilen Extrusionsbereichs für ABS. Auch im Vergleich zu den Aufschmelzuntersuchungen zeigen die Berechnungen entsprechende Tendenzen, die den experimentellen Daten entsprechen. In weiterführenden Arbeiten müssen die Modellierung an die Ergebnisse der Aufschmelzversuche angepasst und basierend darauf geeignete Parameter für die Simulation identifiziert werden.

Ausgehend davon ist es nun möglich, an numerischen Studien zu untersuchen, welche Kombinationen von Prozessparametern und Materialeigenschaften gewählt werden sollten, um den Druckprozess optimal auszulegen. Gemeint ist damit die Verschiebung der Position des unaufgeschmolzenen Filamentkegels in Richtung Düseneingang, um dadurch die Normalkräfte gering und das stabile Prozessfenster für den Druck groß zu halten.

Da bei den bisherigen Modellierungen lediglich die Düsengeometrie selbst betrachtet wurde, ist die Erweiterung der Simulationsumgebung der nächste anstehende Schritt. Auf diese Weise lässt sich sowohl das Aufschmelzen bis zur Heatbreak-Sektion als auch die Extrudattemperatur am Düsenauslass darstellen. Zudem steht die Betrachtung teilkristalliner Materialien im weitergehenden Fokus. Diese unterscheiden sich beim Phasenübergang hinsichtlich ihres Erweichungsund Aufschmelzverhaltens und ihrer Wärmekapazität gänzlich von dem bisher untersuchten amorphen ABS.