



BiKoSim

Eine Einführung in die Schmelze fokussierte
Datenerfassung für die Spritzgießsimulation

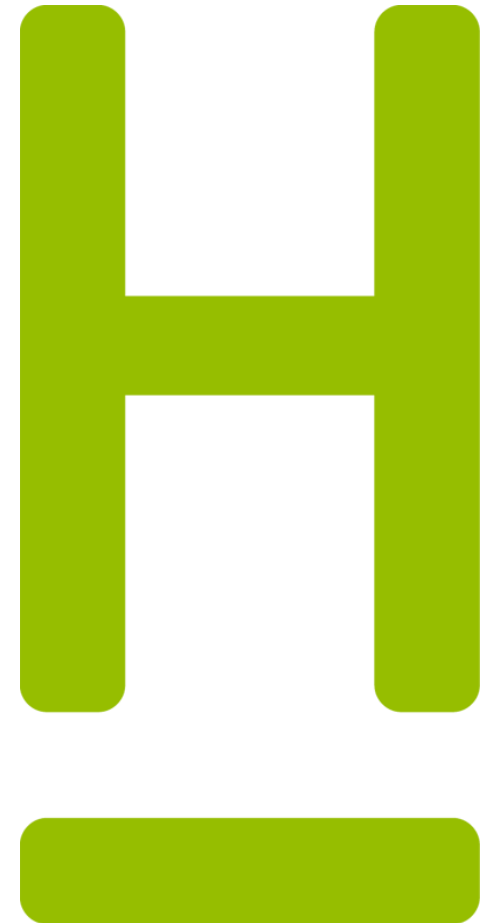
aus der IfBB-Webinarreihe: „Biowerkstoffe im Fokus!“
unter der Leitung von Prof. Dr.-Ing. Andrea Siebert-Raths
Moderation: Dr. Lisa Mundzeck

Anna Dörgens

25.05.2023



© IfBB/Russo



Ablauf

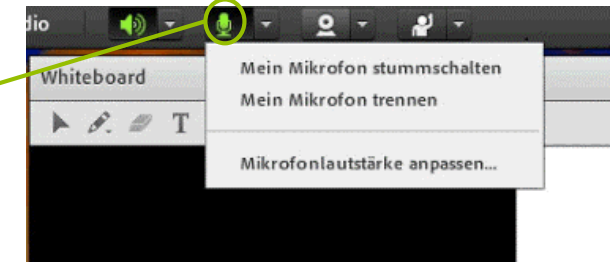


IfBB

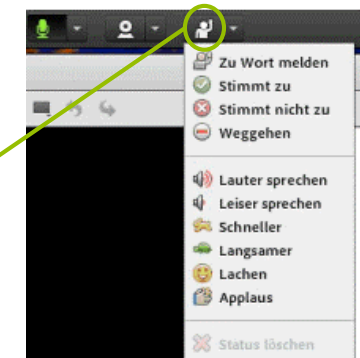
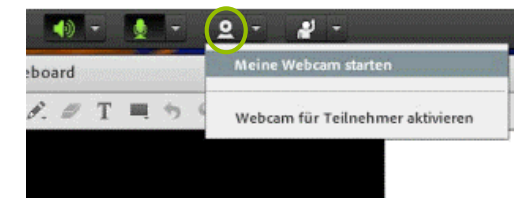
Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe

- Dauer ca. 25 Minuten
- Webinar wird aufgezeichnet
- Fragen nach dem Vortrag:
Module „Chat“ oder
„Mikrofon“
- Fragen werden am Ende des
Vortrags beantwortet
- Diskussionsteilnahme mittels
Headset oder Telefon
(Anleitung rechts)

Zum Sprechen
Mikrofon
aktivieren.
(ggf. seitens Moderation
abgeschaltet.)



Wort- und
Rückmeldungen
für Referenten
mittels
Feedbackwerk-
zeugen





BiKoSim

Eine Einführung in die Schmelze fokussierte
Datenerfassung für die Spritzgießsimulation

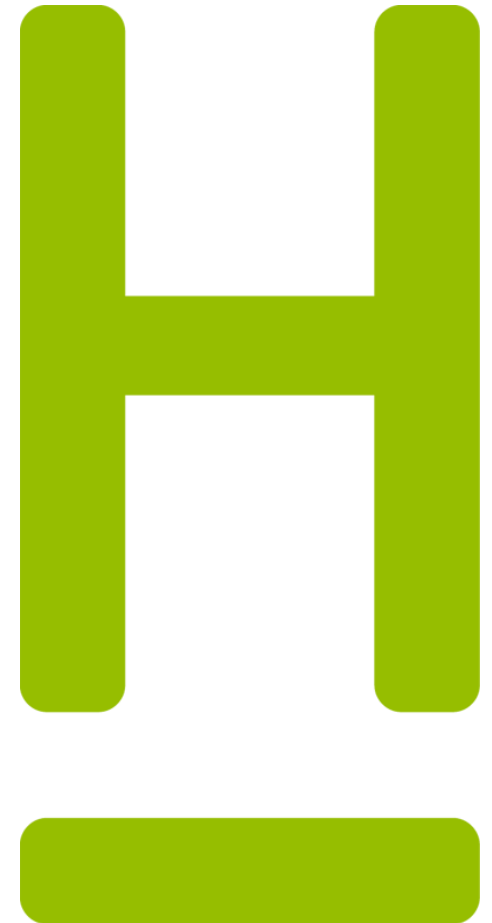
aus der IfBB-Webinarreihe: „Biowerkstoffe im Fokus!“
unter der Leitung von Prof. Dr.-Ing. Andrea Siebert-Raths
Moderation: Dr. Lisa Mundzeck

Anna Dörgens

25.05.2023



© IfBB/Russo





- **PROJEKT- UND SIMULATIONSBEZUG**
- **MFR vs. VISKOSITÄT**
- **FESTSTOFF-/SCHMELZEDICHTE vs. PVT**



Biokunststoffe gekoppelt simulieren

Vorhaben/Thema:	Ermittlung von Materialkennwerten und Durchführung von gekoppelten Prozess- und Festigkeitssimulationen für Biokunststoffe im Spritzgießen
Förderkennzeichen:	2219NR121
Projektleiterin:	Prof. Dr.-Ing. Andrea Siebert-Raths
Ausführende Stelle:	Hochschule Hannover - Fakultät II - Maschinenbau und Bioverfahrenstechnik IfBB - Institut für Biokunststoffe und Bioverbundwerkstoffe
Finanzierung:	Bundesministeriums für Ernährung und Landwirtschaft (BMEL)
Trägerschaft:	Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe e. V. (FNR)

Gefördert durch:



Bundesministerium
für Ernährung
und Landwirtschaft



Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe e.V.

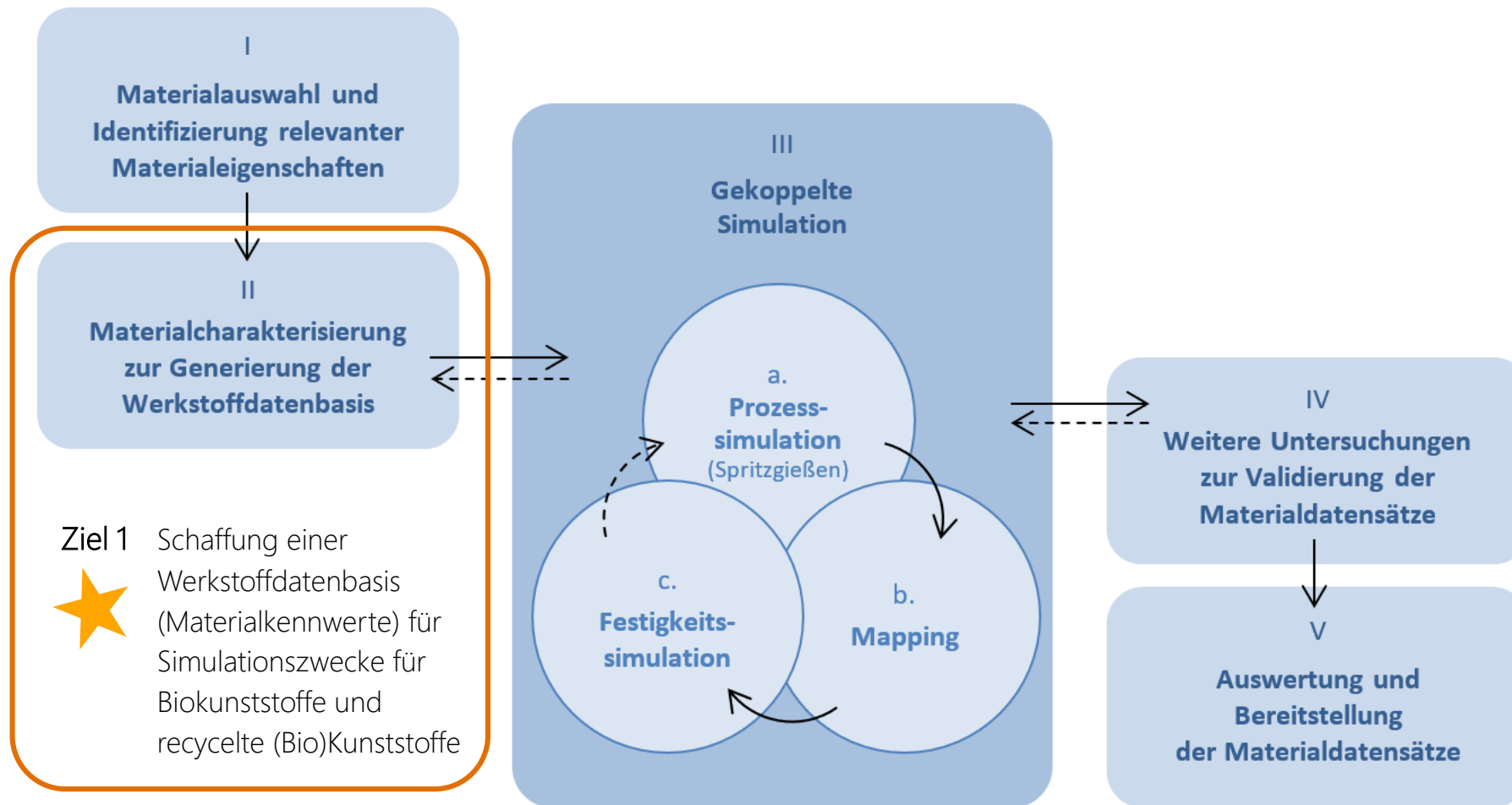
aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages

Forschungs- und Entwicklungszyklus zur gekoppelten Simulation



IfBB

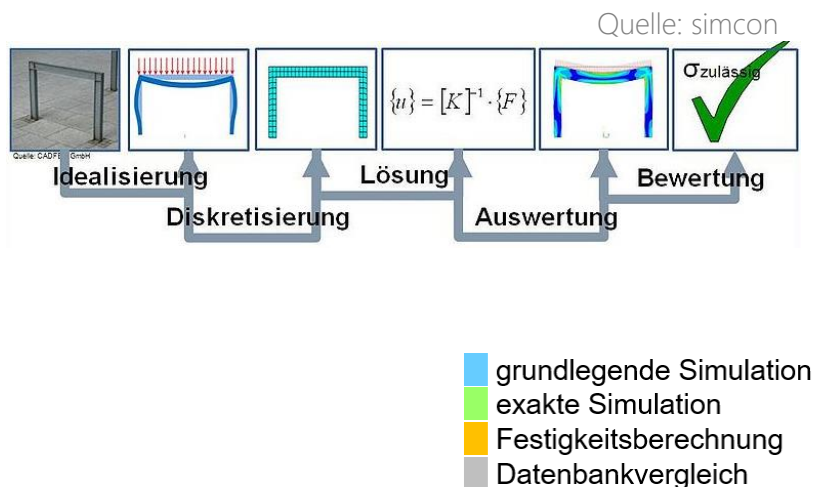
Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe



Materialdaten für die Simulation

Autodesk Moldflow®

- über 11.000 Datensätze
- davon weniger als 1 % Biokunststoffe
- ca. ¼ aller Datensätze erstklassig vermessen (aus rheologischer Sicht)
 - notwendig für Prozesssimulation, wie z. B. im Spritzgießprozess



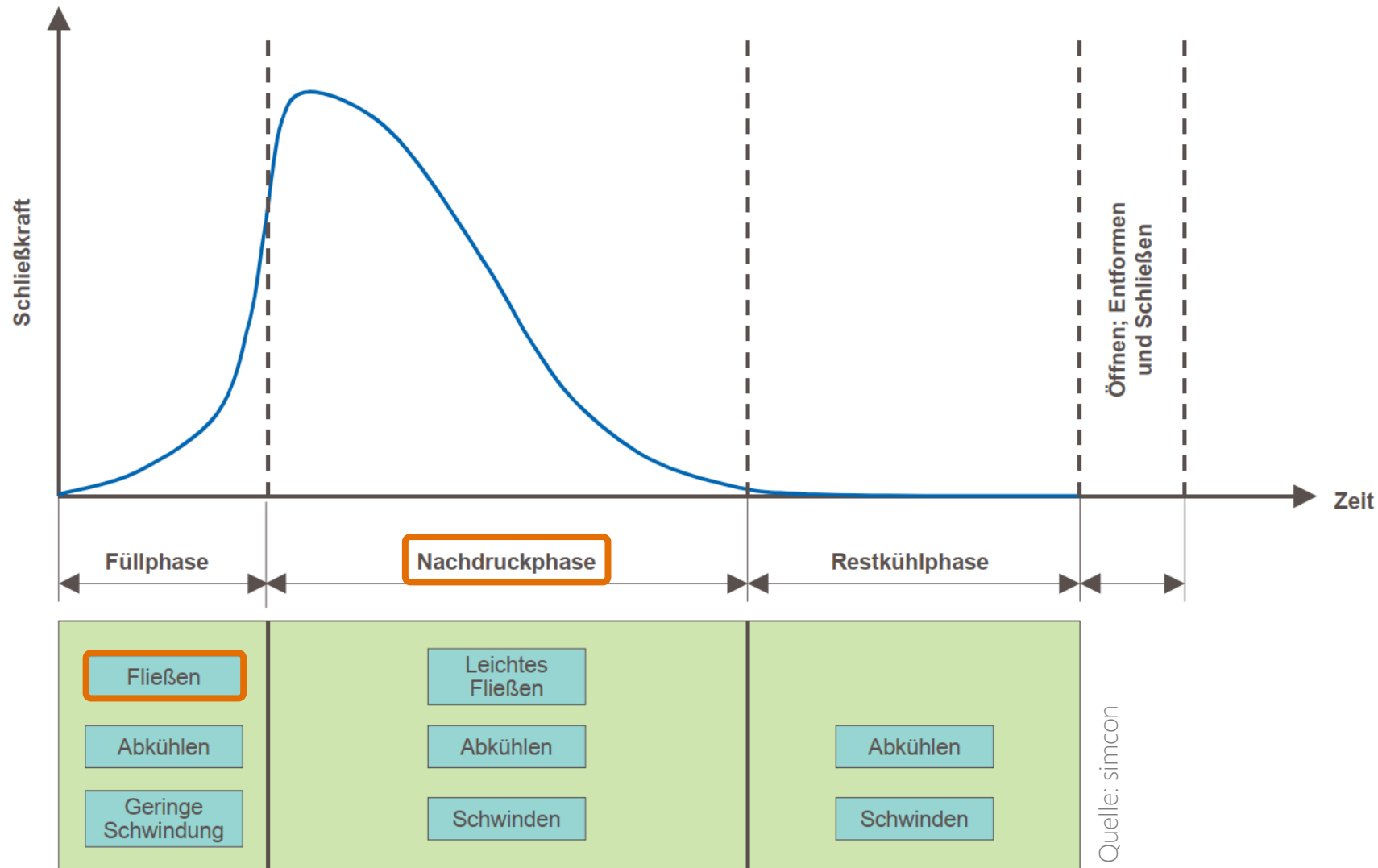
Material-eigenschaften	Materialkennwerte	Zweck
rheologische Eigenschaften	Viskositätskurve (Fließkurve)	Füllung / Nachdruck
	Koeffizienten für die Methode des Druckverlusts an Verbindung (c1, c2)	
	Erstarrungstemperatur	
	Schmelzmassefließrate (MFR)	
thermische Eigenschaften	spezif. Wärmekapazität (cp): Einpunkt, Mehrpunkt	Füllung / Nachdruck
	Wärmeleitfähigkeit: Einpunkt, Mehrpunkt	
pvT Eigenschaften	Dichte	Füllung / Nachdruck
	pvT Diagramm (mit Tait pvT Modellkoeffizienten)	
mechanische Eigenschaften	Schmelzedichte	Schwindung / Verzug
	linearer Wärmeausdehnungskoeffizient (α_1/α_2)	
	Querkontraktionszahl (Poissonzahl) (ν_{12}/ν_{23})	
	Schubmodul	
	Zug-E-Modul (0°/90°)	
	Bindenahtfestigkeit (WLSC1, WLSC2, Phi critical)	
	Spannungs-Dehnungs Werte (Zug)	
Schwindungseigenschaften	Spannungs-Dehnungs Werte (Druck)	Schwindung / Verzug
	Schwindungsdaten (z.B. CRIMS mit Modellkoeffizienten)	
	gemessene Schwindung/nominale Schwindung	

Spritzgießprozess



IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe





MFR vs. VISKOSITÄT

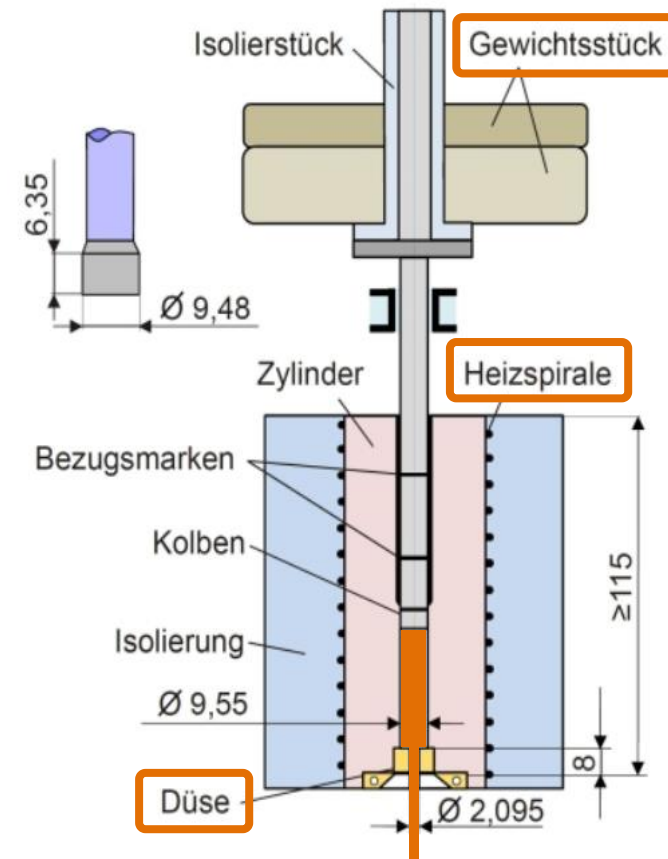
Schmelze-Massefließrate (MFR)



IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe

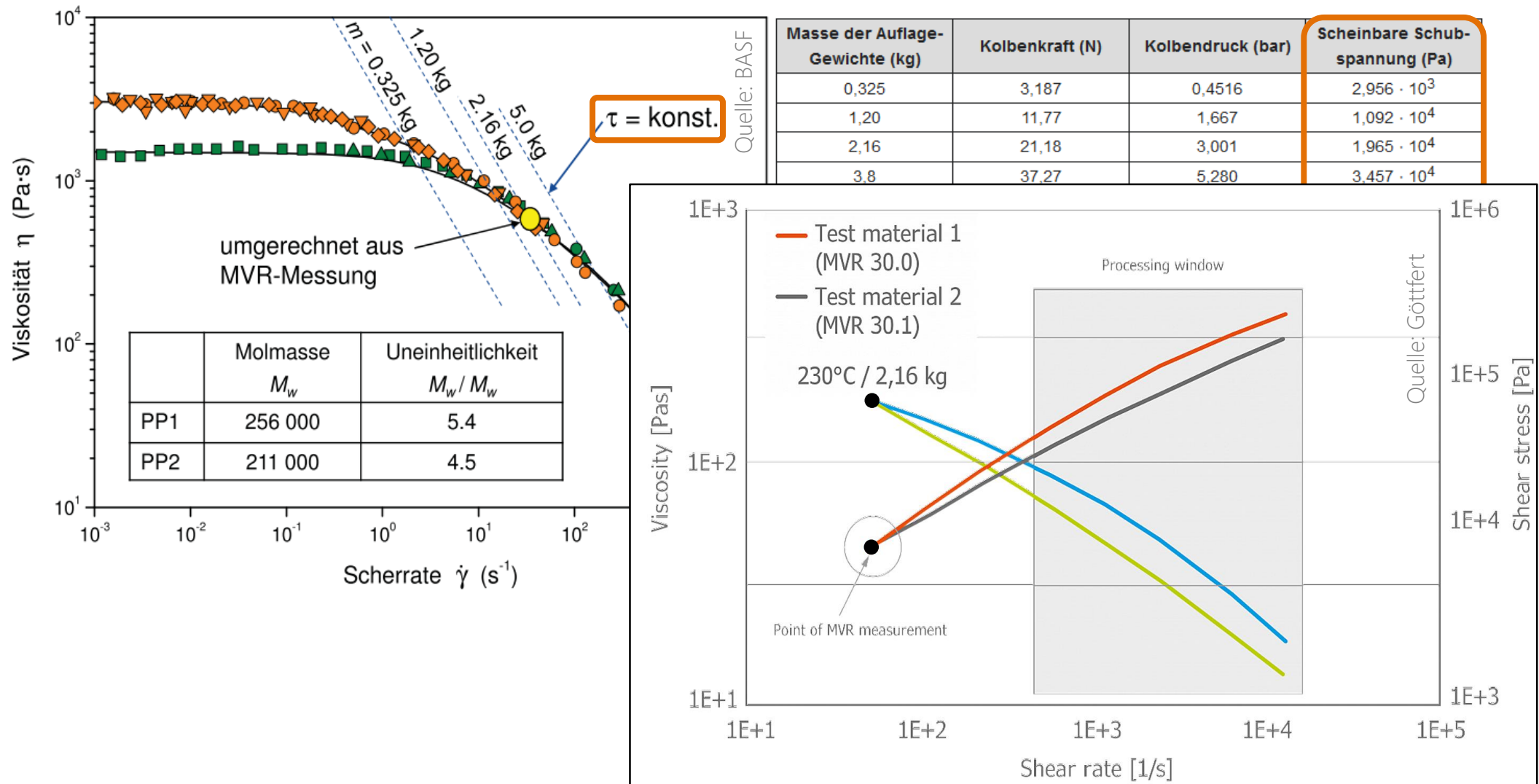
- „Menge einer aufgeschmolzenen Substanz, die innerhalb einer definierten Zeit, unter Einfluss einer definierten Kraft und Temperatur aus einer Düse tritt“
 - Angabe in g/10min
 - Hoher Wert = fließt schnell (geringer Viskosität)
 - Niedriger Wert = fließt langsam (hohe Viskosität)
- häufig auf technischen Datenblättern enthalten
 - erster Eindruck von Fließfähigkeit eines Materials
- Messung erfolgt nach DIN ISO 1133
 - Angabe der Prüfbedingungen nötig:
Temperatur (°C) und Belastung (kg)



Quelle: Polymer Service GmbH Merseburg
<https://wiki.polymerservice-merseburg.de/index.php/Schmelze-Massefließrate>

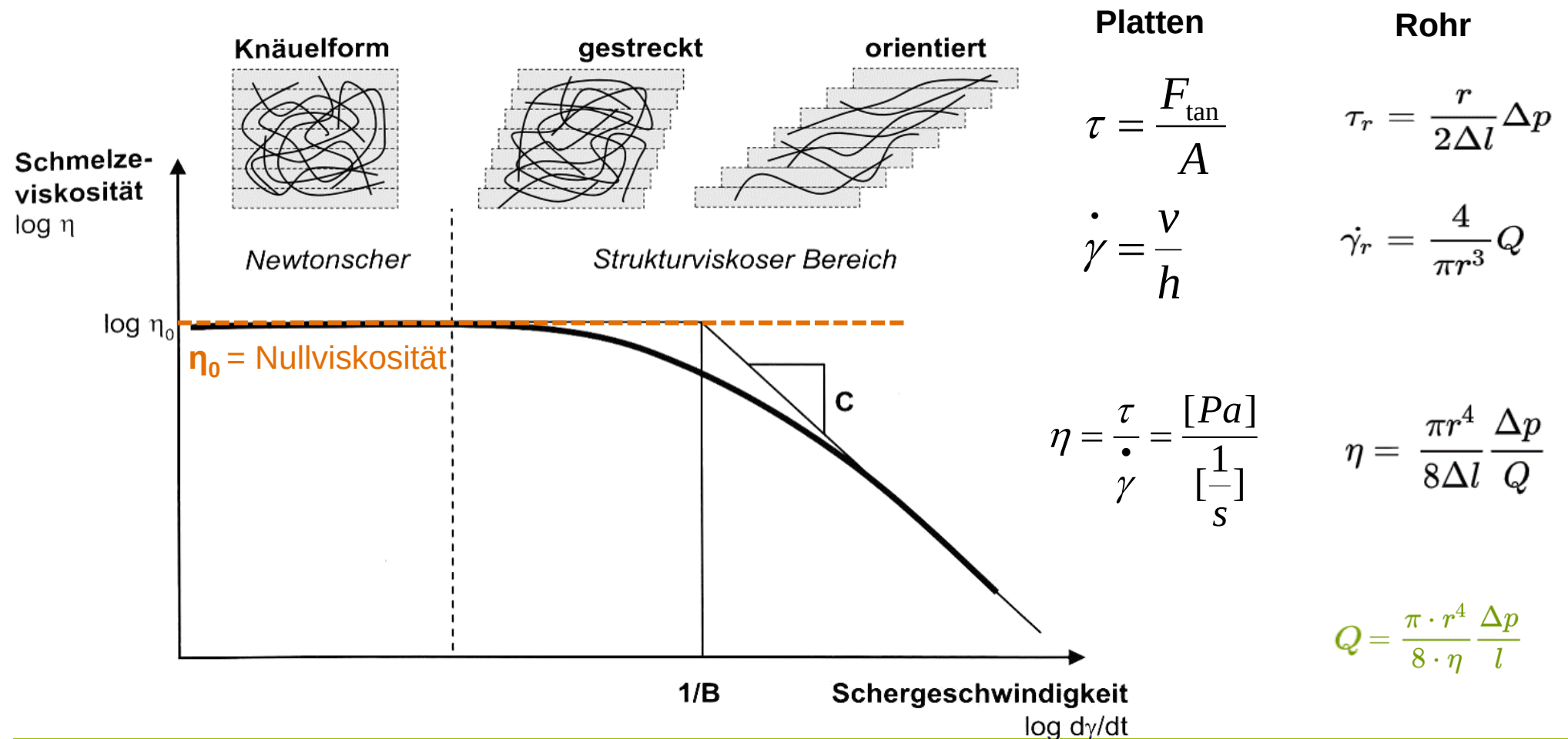


MFR vs. Viskositätsmessung



Modellvorstellung Viskosität

Viskosität = Maß der Zähflüssigkeit von Fluiden (Widerstand eines Fluids ggü Scherung)



Kapillarrheometer



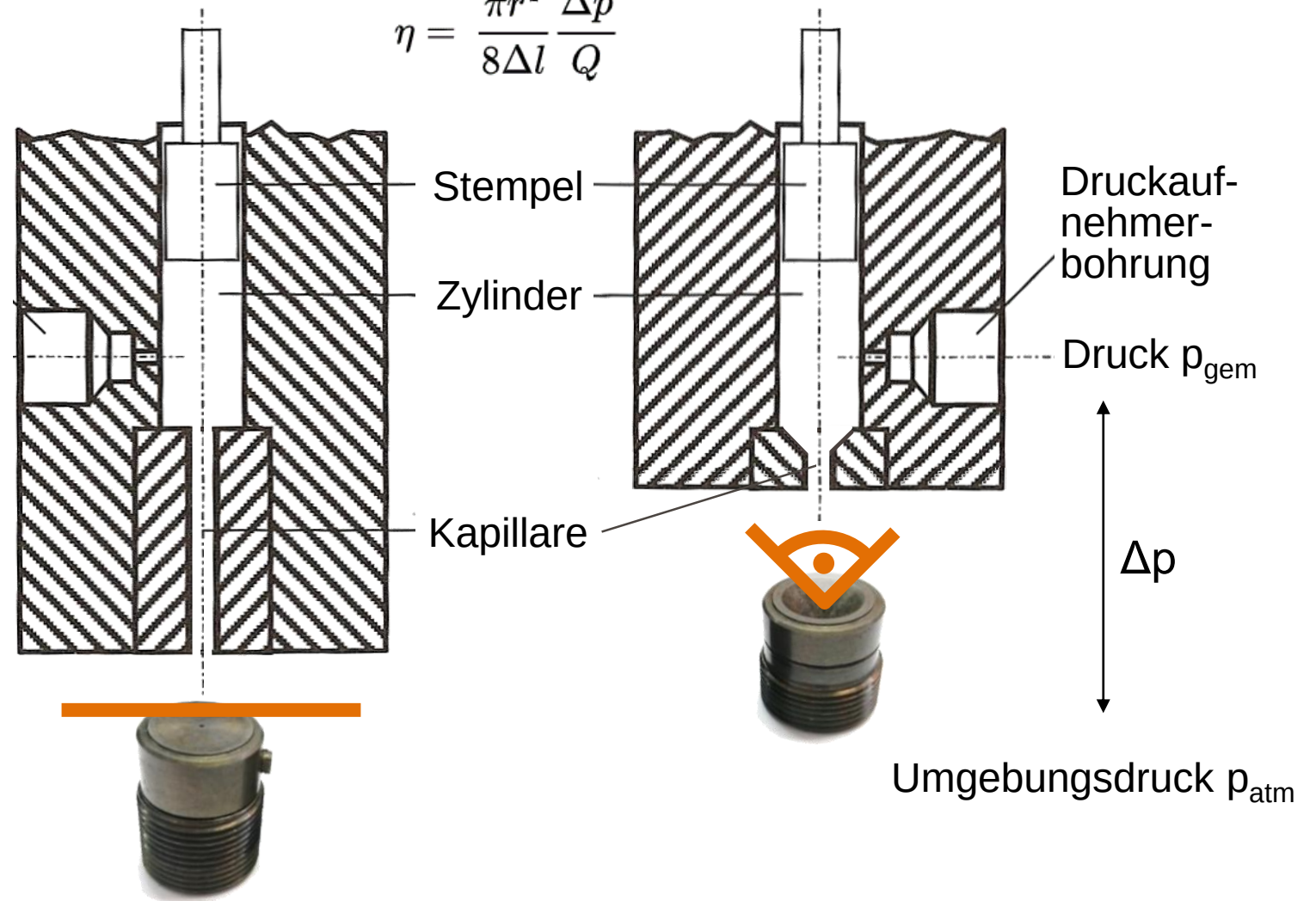
IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe

$$\eta = \frac{\pi r^4}{8 \Delta l} \frac{\Delta p}{Q}$$



Rheograph 25
der Firma Göttert

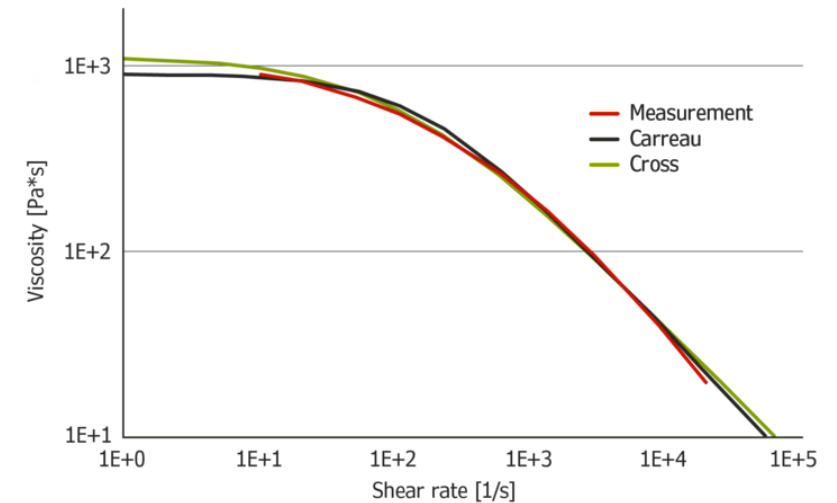
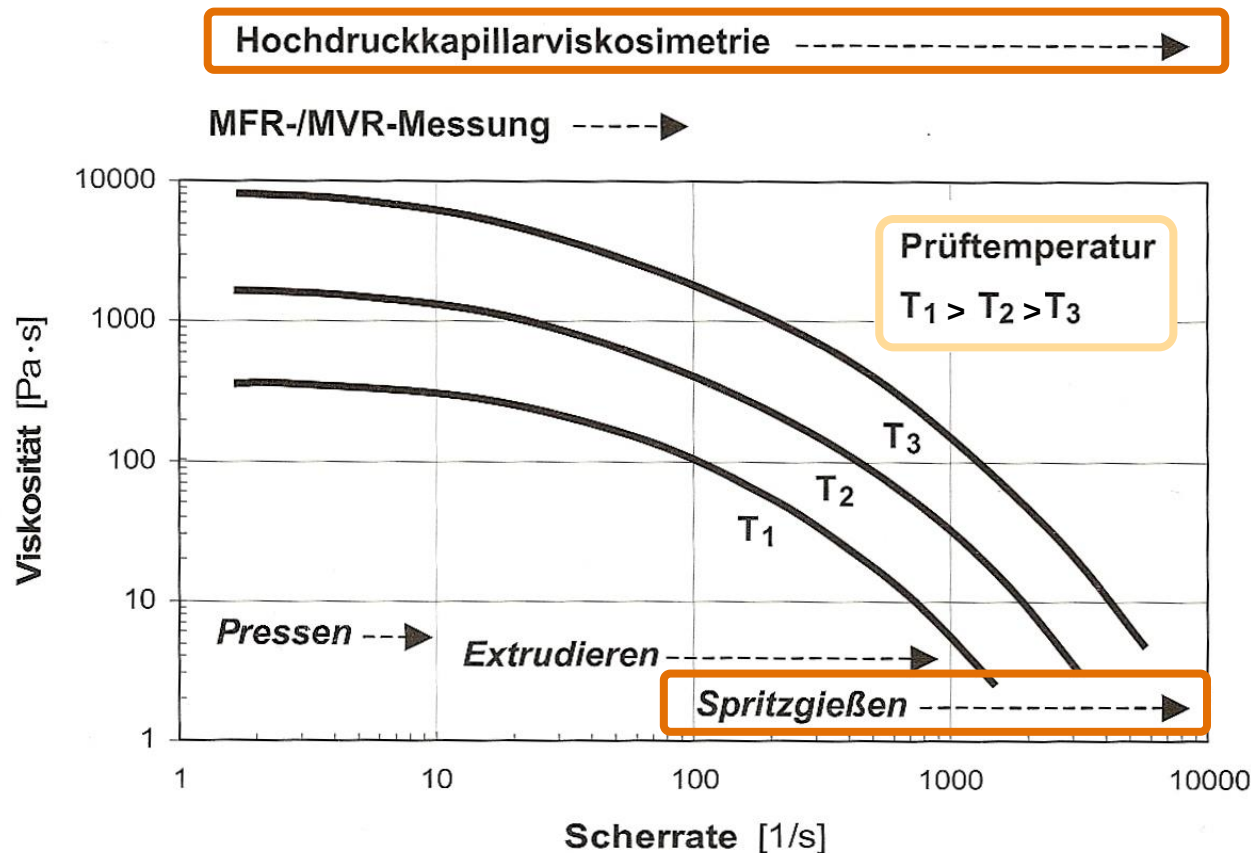


Messmethoden vs. Verarbeitungsverfahren



IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe



Carreau-Winter

$$\eta = \frac{\eta_0}{(1 + \lambda \dot{\gamma})^{m_c}}$$

Cross

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + \left(\frac{\eta_0 \dot{\gamma}}{\tau^*} \right)^{[1-n]}}$$

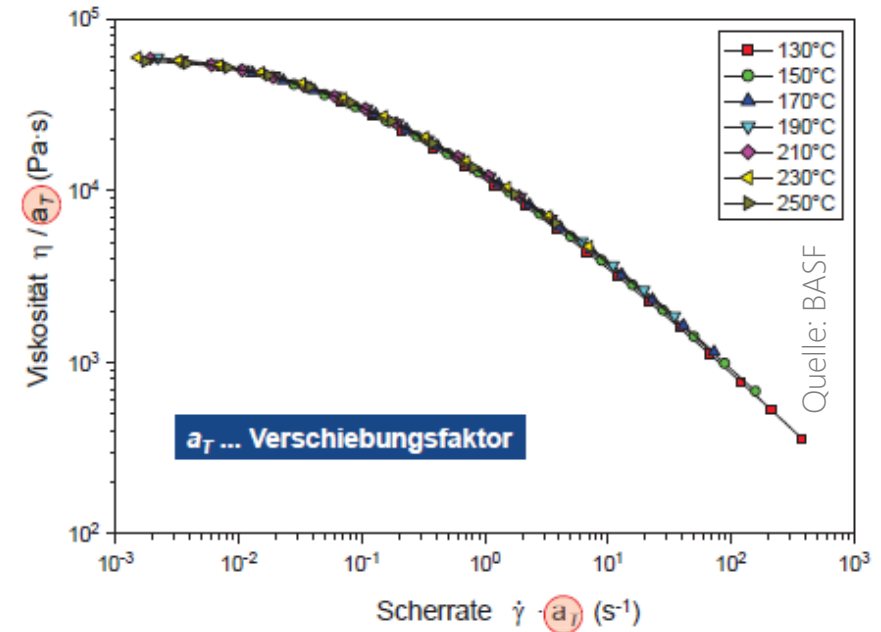
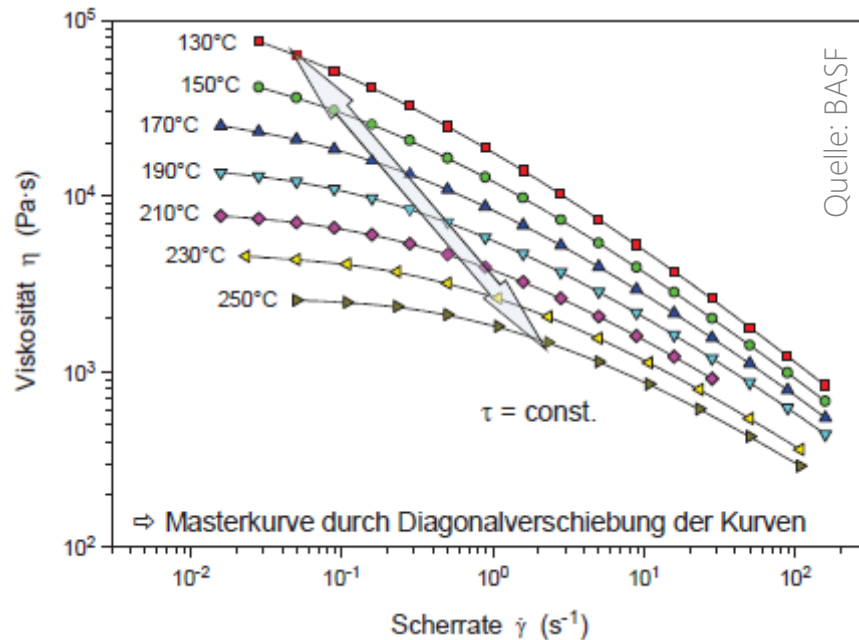
Hinweis: Im Foliensatz des Webinars ist bei Prüftemperatur fälschlicherweise $T_1 < T_2 < T_3$ notiert. Richtig ist die umgekehrte Relation, siehe hier: $T_1 > T_2 > T_3$

Zeit-Temperatur-Superposition → Masterkurven



IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe



teilkristalline Polymere bei $T \gg T_g$ (Glastemperatur)

(z. B. PE, PP, PA, POM)

Arrhenius-Beziehung:

$$a_T = \exp \left[\frac{E_0}{R} \left(\frac{1}{T_{abs}} - \frac{1}{T_{abs,ref}} \right) \right]$$

1 Parameter E_0

E_0 ... Aktivierungsenergie
 R ... Gaskonstante ($R = 8.314 \cdot 10^{-3}$ kJ/mol·K)
 $T_{abs,ref}$... Referenztemperatur [Kelvin]

amorphe Polymere bei $T > T_g$

(z. B. PS, PIB, PMMA, SAN, PESU)

WLF-Beziehung:

$$a_T = \exp \left[\frac{-c_1(T - T_{ref})}{c_2 + (T - T_{ref})} \right]$$

2 Parameter c_1, c_2
abhängig von T_{ref}

Projektbezug BiKoSim



IfBB

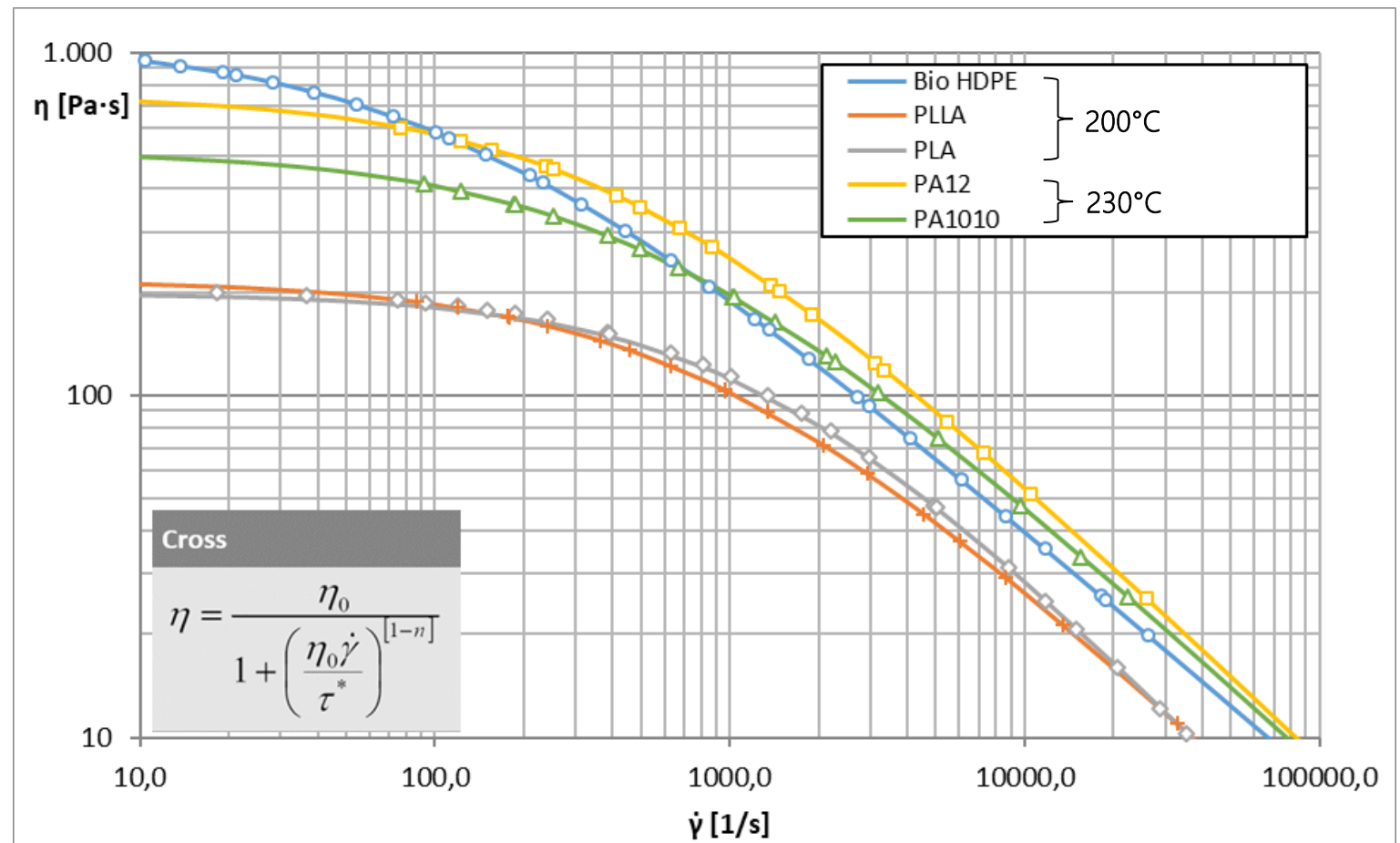
Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe

Datenpunkte =
Messpunkte (von 3
Temperaturen inkl.
Verschiebung)

Linie =
abgeleitetes
Materialmodell inkl.
Koeffizienten

Moldflow: Cross-WLF

Cadmould: Carreau-WLF





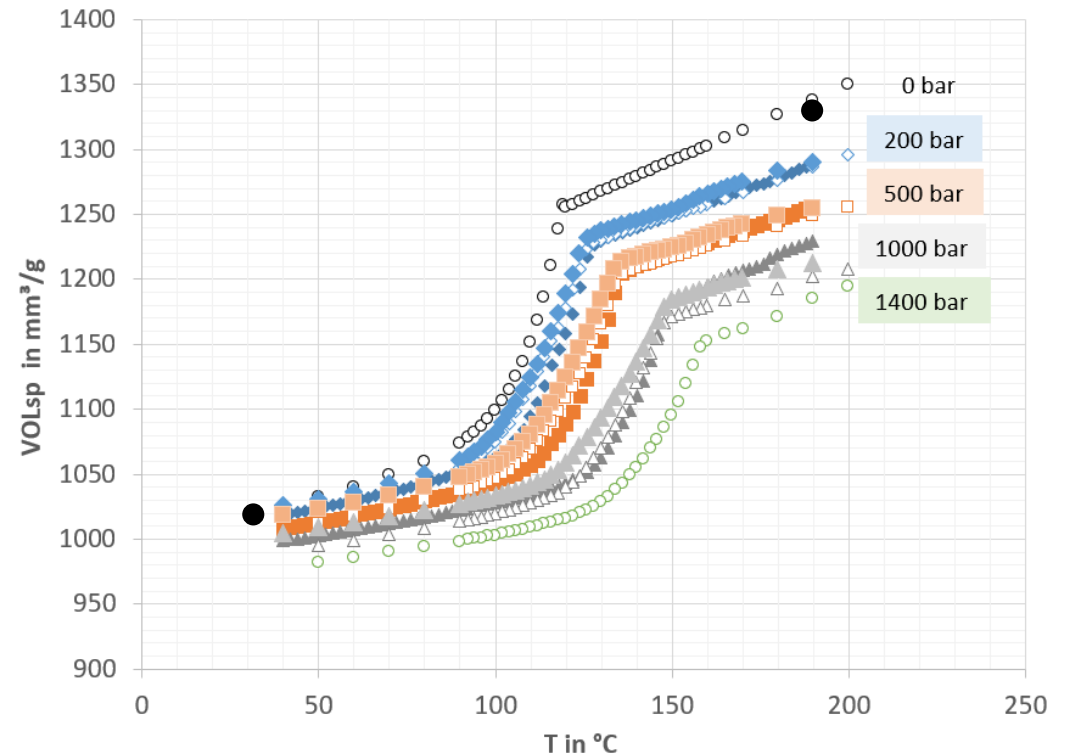
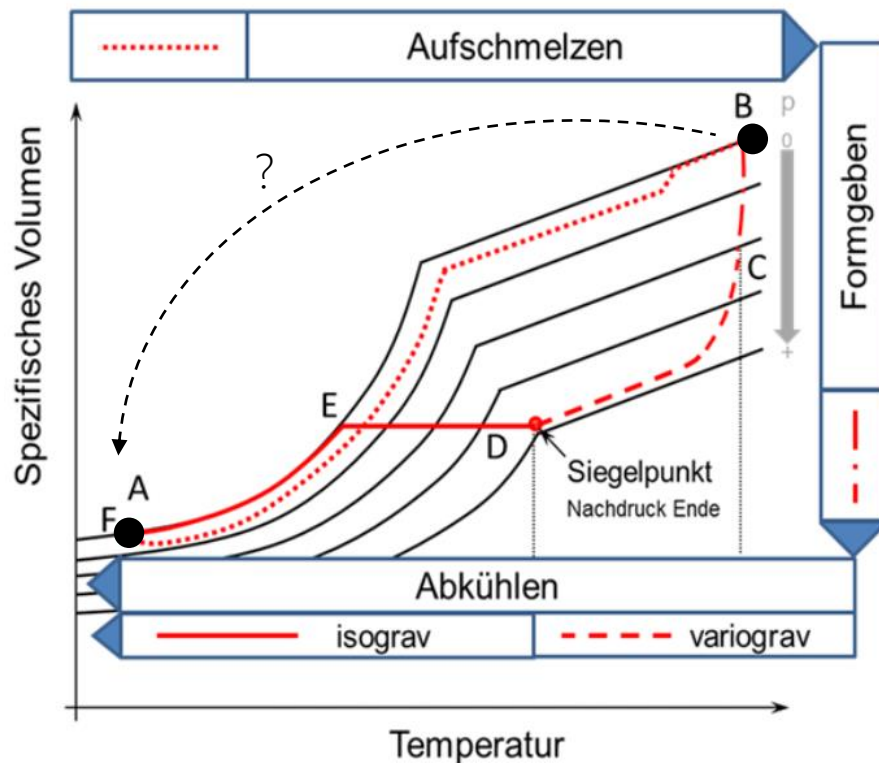
- **FESTSTOFF-/
SCHMELZEDICHTE vs. PVT**

Druckverlauf im Spritzgussprozess



IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe



A-B: Aufschmelzen unter Volumenzunahme

B-C: Füllung der Kavität, Druck steigt (spezif. Volumen sinkt)

C-D: Kühlprozess = Temperatur sinkt

D-E: isograde Kühlphase, Druck wird abgebaut bei gleichem spezif. Volumen

E-F: weiteres isobare Abkühlen mit Schwindung

} variograde Abkühlvorgang,
Material noch fließfähig



(Isobare) PVT Messung

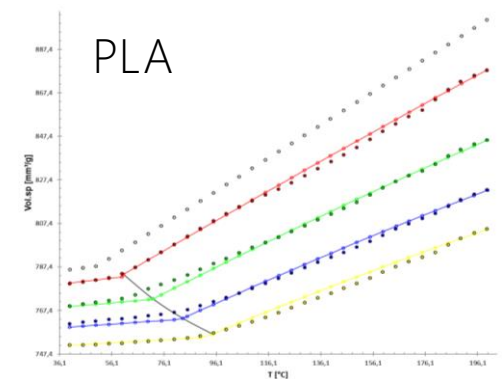
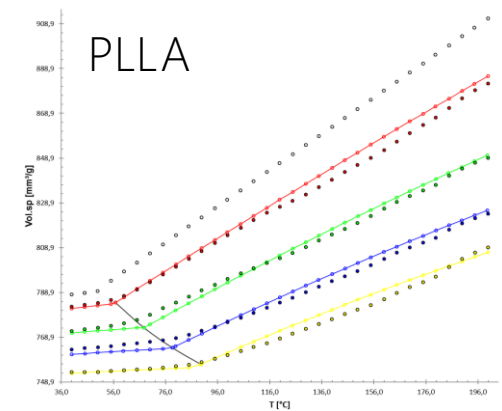
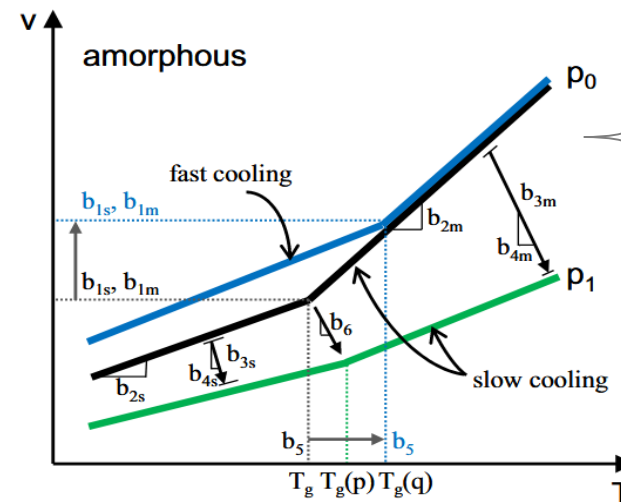
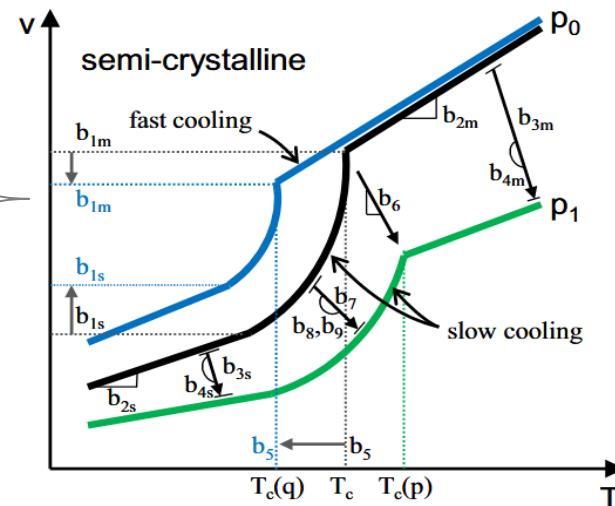
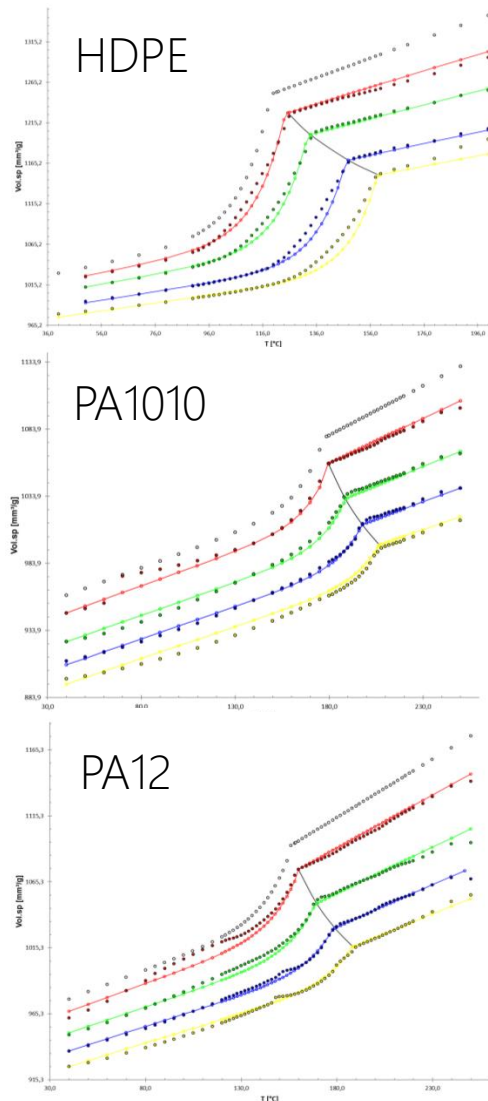
- **P = Druck, V = Volumen, T = Temperatur**
- **Isobare PVT-Messungen werden bei konstantem Druck und stufenweise geänderter Temperatur durchgeführt, zur Ermittlung des materialspezifischen Volumens als Funktion von Temperatur und Druck.**
 - Die isobare PVT-Messung simuliert das Abkühlverhalten, welches für die Simulation des Spritzgießprozess von Bedeutung ist.
- **Messung erfolgt nach DIN ISO 17744**
- **Beschreibung des PVT-Verhaltens per Tait-Modell**

Projektbezug BiKoSim



IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe



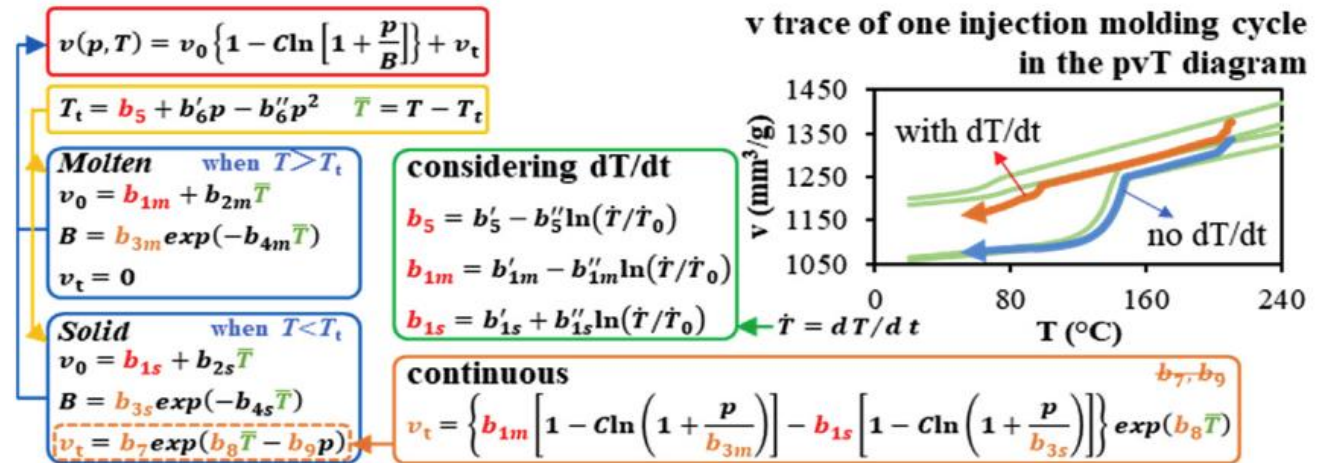
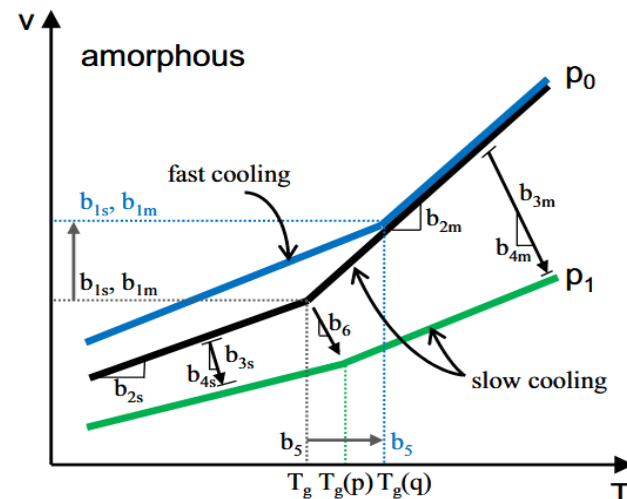
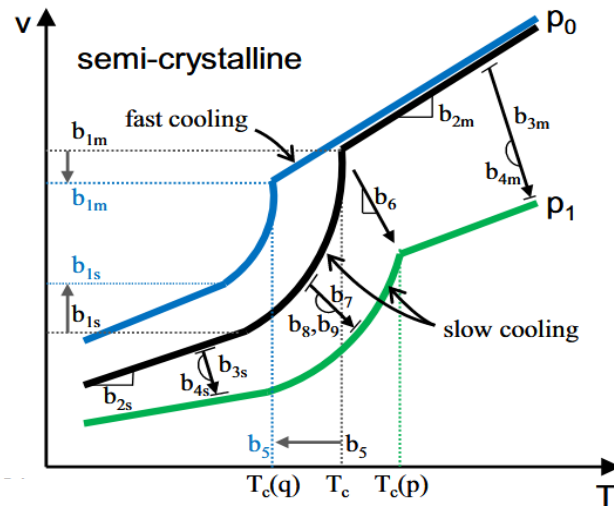
Quelle: <https://d-nb.info/1217416390/34>

2-domain Tait model



IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe



Var.	Feststoff	Var.	Schmelze
b1s	Absolute Höhe	b1m	Absolute Höhe
b2s	Neigungswinkel	b2m	Neigungswinkel
b3s	Parallele Spreizung	b3m	Parallele Spreizung
b4s	Spreizung der Neigung	b4m	Spreizung der Neigung

Var.	Übergangsbereich
b5	Ende des Übergangsbereichs
b6	Neigungswinkel vom Ende des Übergangsbereichs
b7	Gradient Übergangsbereich, Parallelverschiebung
b8	Spreizung der Neigung im Übergangsbereich
b9	Horizontale Spreizung im Übergangsbereich

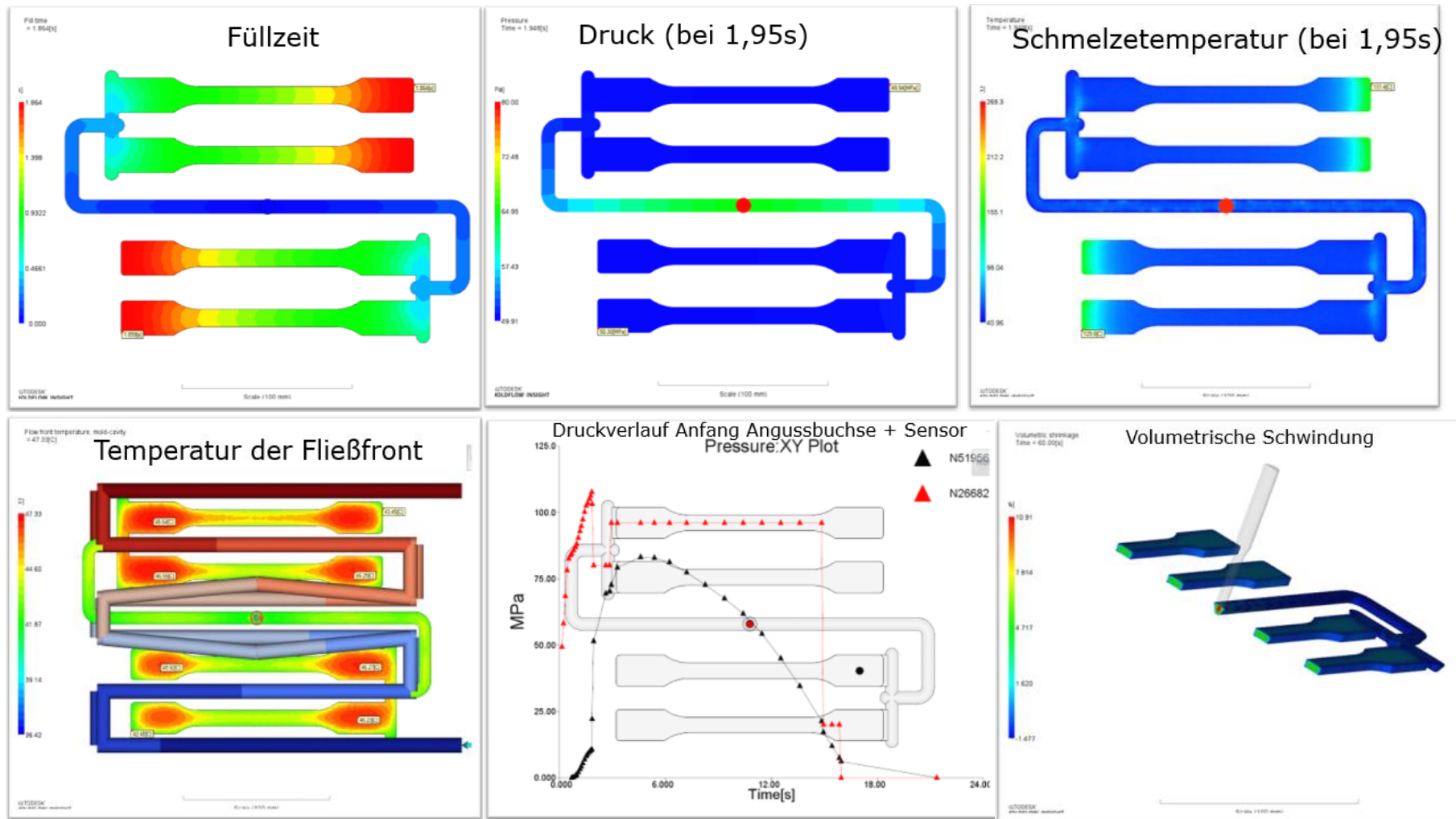
Quelle: <https://d-nb.info/1217416390/34>

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!



IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe



PA12



IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe



© IfBB/Russo

Kontakt

Anna Dörgens

Hochschule Hannover

IfBB – Institut für Biokunststoffe und
Bioverbundwerkstoffe

Heisterbergallee 10A

30453 Hannover

Tel. 0511-9296-8302

E-Mail: anna.doergens@hs-hannover.de

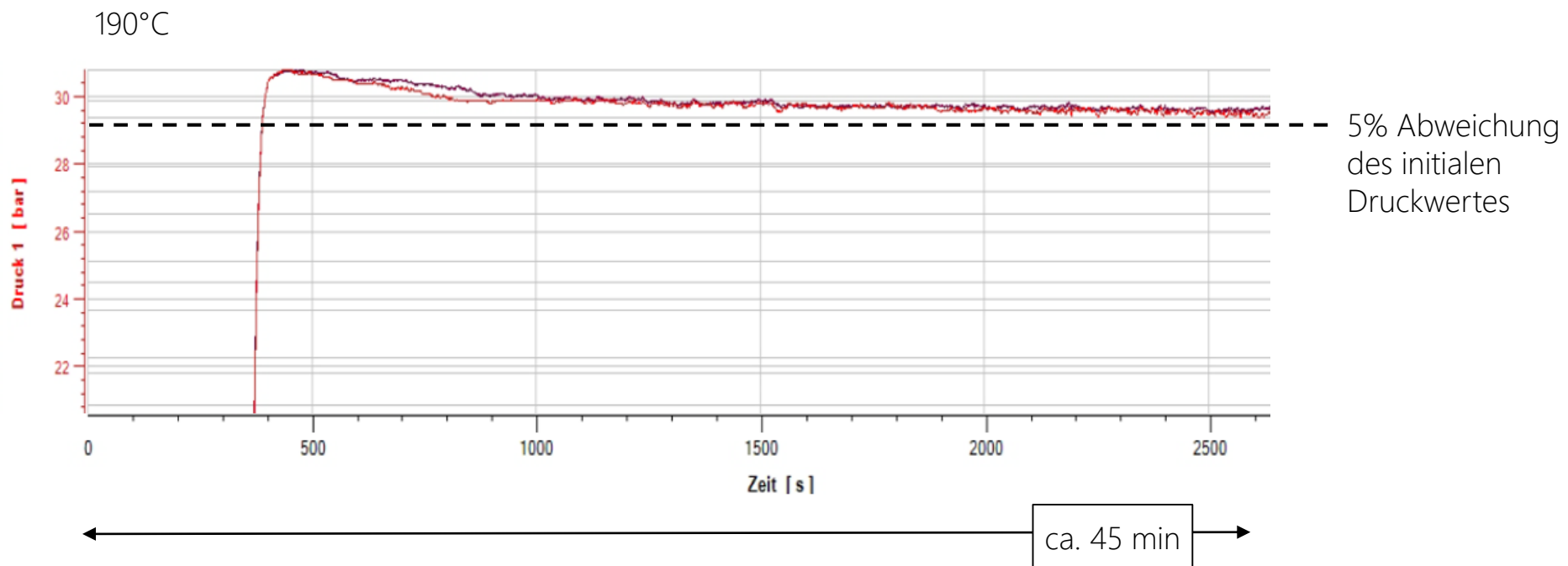
www.ifbb-hannover.de



THERMISCHE STABILITÄT

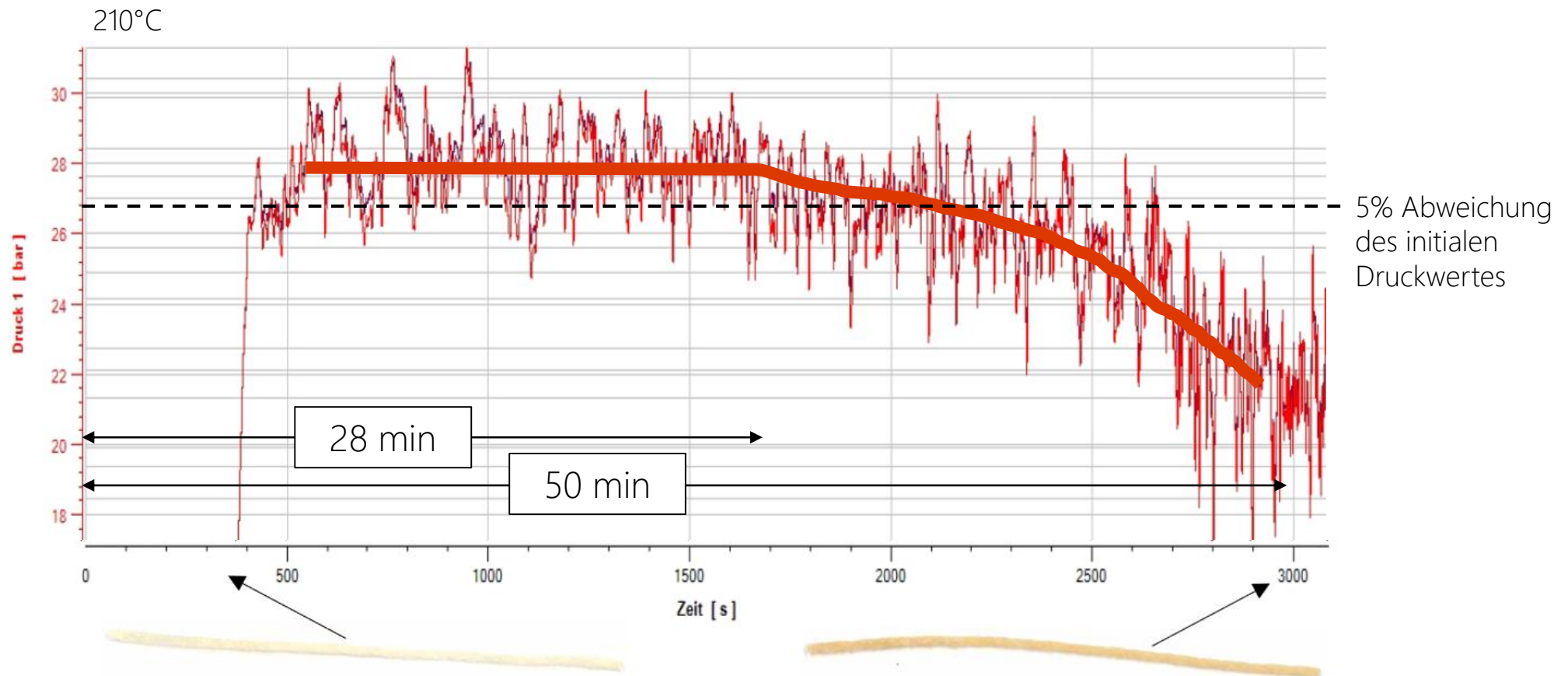
Thermische Stabilität rPP

- Granulat in Kapillarrheometer einfüllen und aufschmelzen lassen
- Schmelze mit konstanter Geschwindigkeit durch Kapillare herausdrücken
- Druck vor Kapillare wird gemessen



Thermische Stabilität Compound

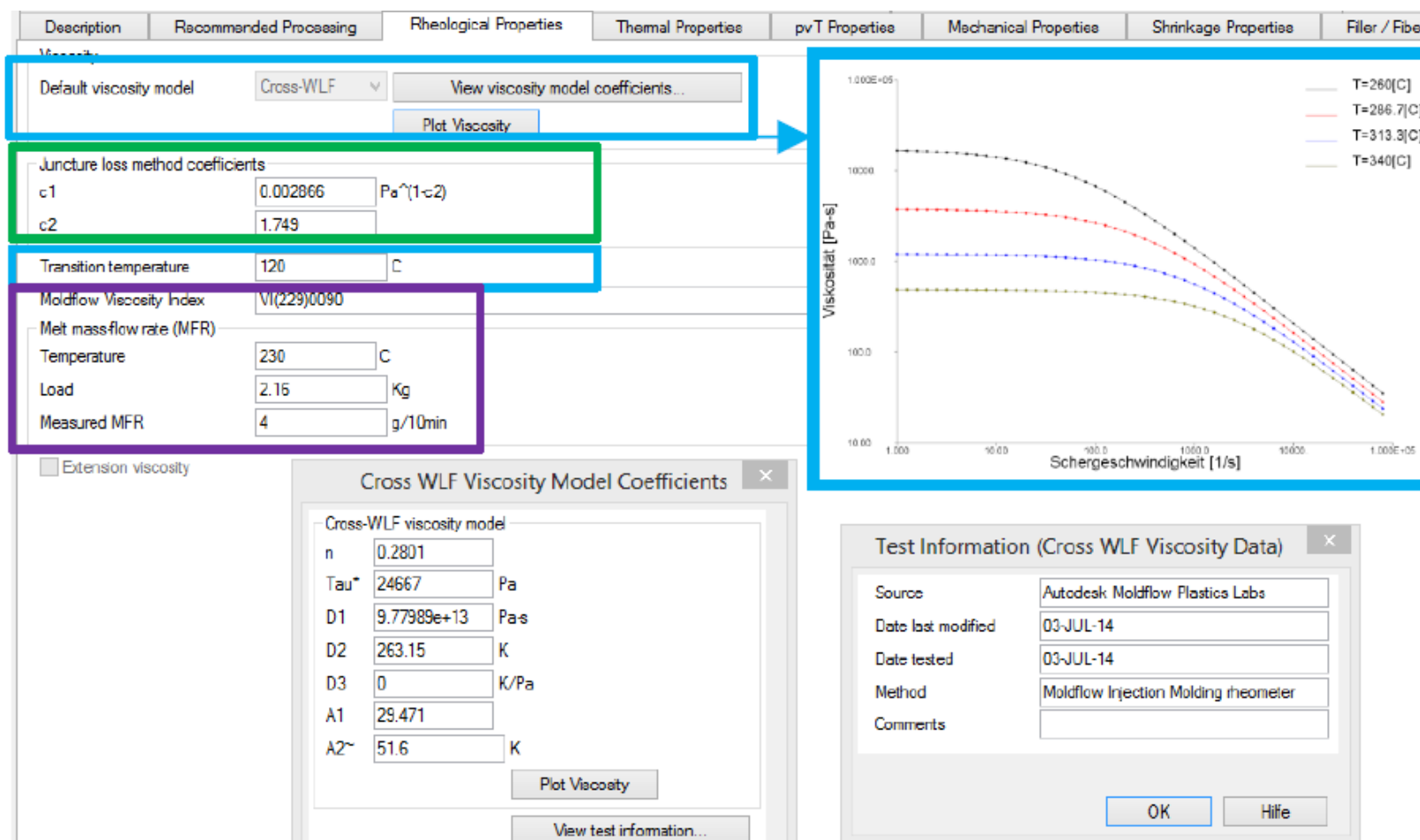
- Druckschwankungen aufgrund der Fasern, die 1 mm-Kapillare passieren müssen
- im Anbetracht der Prozesszyklen/-zeiten ist die Stabilität ausreichend





IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe





Häufig benutzte Formeln in der Kapillarrheometrie

Arrhenius formula have been proven for partially crystalline polymers:

$$a_T(T) = \exp \left[\frac{E_A}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right]$$

The WLF formula is used for amorphous polymers

$$a_T(T) = \exp \left(\frac{-d_1(T - T_0)}{d_2 + T - T_0} \right)$$

Flow Laws:

$$\tau = k \cdot \dot{\gamma}^n$$

$$\dot{\gamma} = \Phi \tau^m$$

$$\tau = A \dot{\gamma}^{B+1}$$

$$\tau = \frac{\eta_0 \dot{\gamma}}{(1 + \lambda \dot{\gamma})^{m_e}}$$

power formulas applied occasionally

Conversions:

$$m = \frac{1}{n} \quad ; \quad A = k = \left(\frac{1}{\Phi} \right)^{\frac{1}{m}} \quad ; \quad B = \frac{1}{m} - 1 = n - 1 \quad ; \quad \Phi = A^{-m} = k^{-m}$$

Carreau-Winter-Law

Viscosity Functions:

$$\eta = k \dot{\gamma}^{n-1}$$

Ostwald de - Waele -Law

$$\eta = \left(\frac{1}{\Phi} \right)^{\frac{1}{m}} \cdot \dot{\gamma}^{\left(\frac{1}{m} - 1 \right)}$$

$$\eta = A \dot{\gamma}^B$$

$$\eta = A_0 + A_1 \log \dot{\gamma} + A_2 (\log \dot{\gamma})^2 + A_3 (\log \dot{\gamma})^3 + A_4 (\log \dot{\gamma})^4 \quad \text{Münstedt-Law}$$



IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe

Arrhenius

- Genügend weit oberhalb der Glasstemperatur (etwa 100 K und darüber) kann die Temperaturabhängigkeit der (Null-)Viskosität mit Hilfe der Arrhenius-Beziehung beschrieben werden:

$$\eta(T_{abs}) = \eta(T_{abs,ref}) \cdot \exp \left[\frac{E_0}{R} \left(\frac{1}{T_{abs}} - \frac{1}{T_{abs,ref}} \right) \right]$$

- Die Arrhenius-Beziehung hat nur einen freien Parameter, die sog. **Aktivierungsenergie** E_0 .
- Die Arrhenius-Beziehung gilt insbesondere für teilkristalline Polymere, deren Verarbeitungsfenster weit oberhalb der Glasstemperatur liegt.
- Zu beachten ist, dass die absolute Temperaturskala (Kelvin-Skala) verwendet wird. Es gilt $T_{abs}(K) = T(^{\circ}C) + 273.16 K$.
- Die Arrhenius-Beziehung ergibt sich dann, wenn ausreichend freies Volumen zur Verfügung steht und die Bewegung der Makromoleküle im wesentlichen durch eine thermisch aktivierte Überwindung von Energiebarrieren, z. B. Rotationspotentiale der Molekülsegmente, bestimmt wird.

WLF

- für **amorphe Polymere**, deren schmelzflüssiger Zustand bereits wenige Grade oberhalb der Glasstemperatur beginnt, ergibt die **WLF-Gleichung** nach Williams, Landel und Ferry eine bessere Beschreibung als die Arrhenius-Gleichung:

$$a_T = \exp \left[\frac{-c_1(T - T_{ref})}{c_2 + (T - T_{ref})} \right]$$

- Die WLF-Gleichung hat **2 materialspezifische Parameter** c_1 und c_2 , deren Werte - im Gegensatz zur Aktivierungsenergie bei den teilkristallinen Polymeren - von der gewählten Referenztemperatur T_{ref} abhängen.
- Die Ableitung der WLF Gleichung beruht auf der Annahme, dass die Segmentbeweglichkeit von Polymeren in der Nähe der Glasstemperatur vorwiegend durch das freie Volumen bestimmt wird, das etwa linear mit dem Abstand zur Glasstemperatur zunimmt.



Vorteil: Einpunkt vs Merhpunktdaten

- **Erforderlich: homogene, blasenfreie Schmelze**
- **Temperatur während der Messung sollte unter der Zersetzungstemperatur liegen**
- **Messdauer darf nicht zu lange sein, sonst:
Abbau des Polymers**
- **Bei Naturfaser-Compounds (oder z.B. auch PA):
Sorgfältige Trocknung des Materials**
- **Nur Messungen bei gleicher Temperatur vergleichbar!**
- **Beachten, ob korrigierte oder scheinbare Werte vorliegen!**



IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe

Eine isobare PVT Messung ist nach ISO 17744, für Geräte welche mit einem Prüfstempel ausgestattet sind standardisiert. Isobare PVT-Messungen werden bei konstantem Druck und stufenweis geänderte Temperatur durchgeführt. So kann das materialspezifische Volumen als Funktion der Temperatur und des Druckes ermittelt werden. Insbesondere wird bei einer isobaren PVT-Messung das Abkühlverhalten simuliert, welches für die Simulation des Spritzgießprozess von Bedeutung ist.

Beim isobaren Verfahren wird ein konstanter Druck auf das Prüfmaterial gegeben und anschließend das Material mit einer konstanten Abkühlrate abgekühlt.

4.1.3.2 Erforderliche Fließgrenze

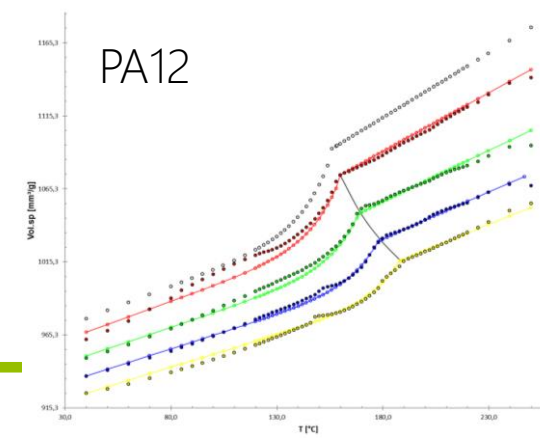
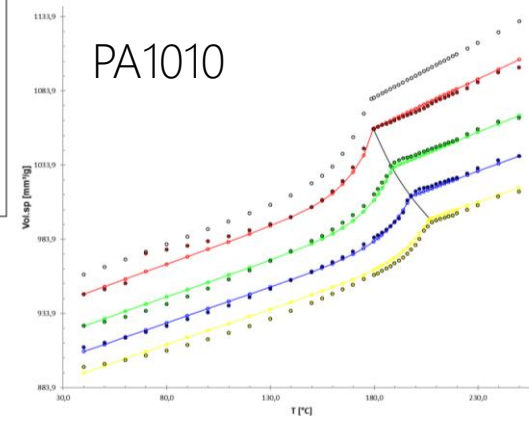
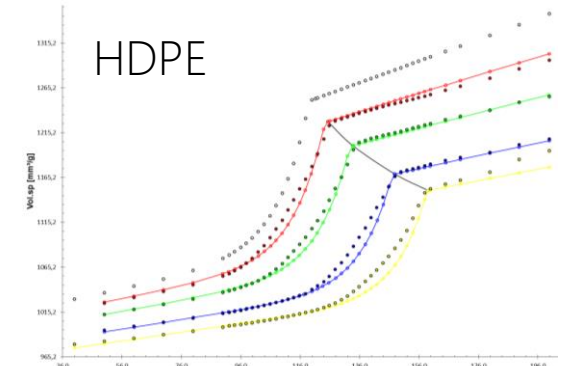
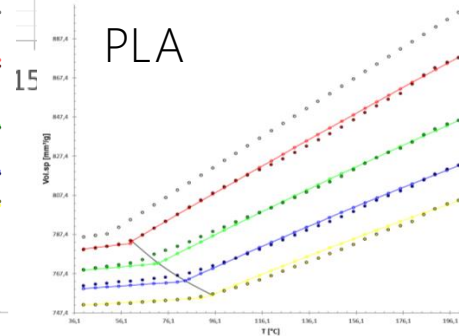
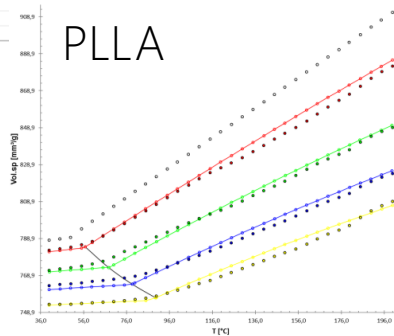
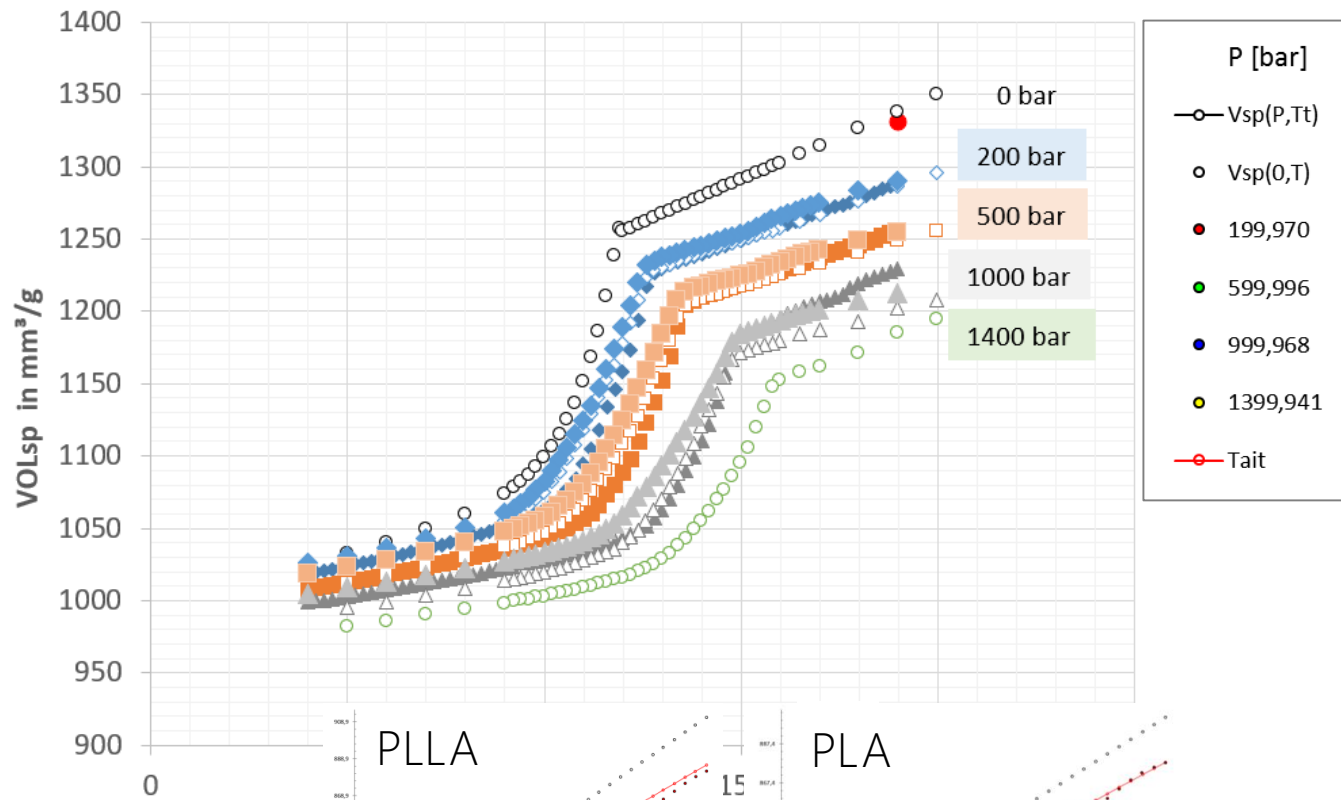
Während des Abkühlvorganges wird das Material soweit abkühlen bis das Material nicht mehr fließfähig ist. Die Temperatur bei der dies geschieht wird als Fließgrenz- oder auch No-Flow-Temperatur bezeichnet. Diese Temperatur wird in Cadmould benötigt, um bei der Berechnung die noch am Fließprozess teilnehmenden Formteilbereiche zu definieren. In der Praxis wird das Material bei dieser Temperatur nicht schlagartig erstarren. Das Erstarren findet über einen Temperaturbereich statt. Für die Berechnungen wird jedoch nur eine Temperatur angegeben.

Die No-Flow-Temperatur liegt bei teilkristallinen Kunststoffen im Bereich des Knickpunkts zwischen Schmelze- und Festzustand im p_vT -Diagramm (Siehe Bild 4-4); bei amorphen Kunststoffen ca. 20° darüber. Weiter muß diese Temperatur im Bereich von dem starken Abfall der Schubmodulkurve liegen, denn beim Übergang von dem Fest- in den Erweichungszustand findet einen Abfall der mechanischen Festigkeit statt.



IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe

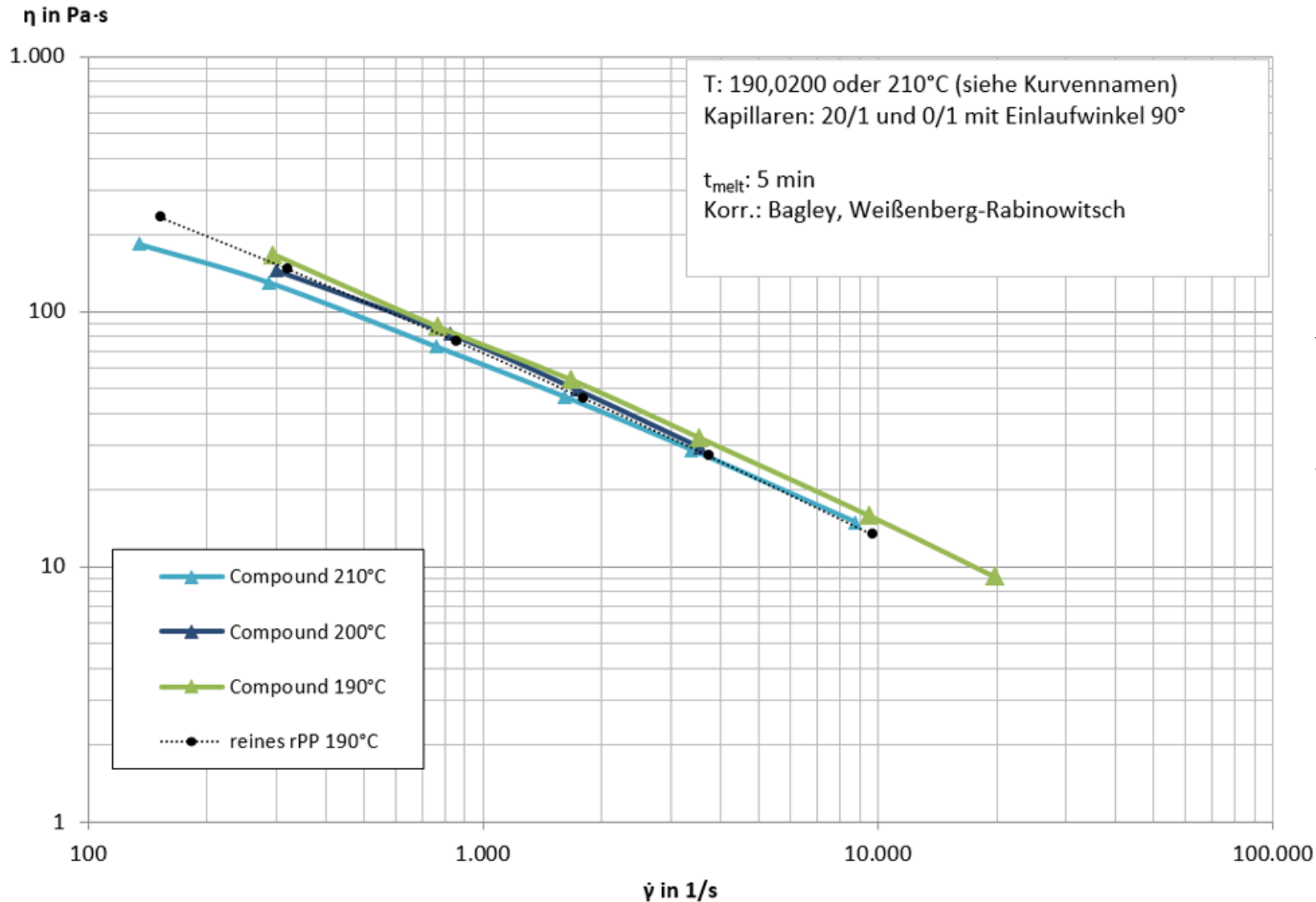


Viskositätskurven



IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe



weitere simulations-
relevante Messungen
sind erfolgt, u.a.
Wärmeleitfähigkeit
und pvT-Kurven



IfBB

Institut für Biokunststoffe
und Bioverbundwerkstoffe

Arrhenius – Ansatz:

$$a_T(T) = \exp \left[\frac{E_A}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right]$$

WLF – Ansatz:

$$\log a_T(T) = \frac{-d_1(T - T_0)}{d_2 + T - T_0}$$

Temperatur-Viskositäts-Funktionen:

$$a_T(T) = \frac{\eta(\dot{\gamma}, T)}{\eta[a_T(T, T_0) \cdot \dot{\gamma}, T_0]}$$

$$\log a_T(T, T_0) = - \frac{d_1(T - T_0)}{d_2 + T - T_0}$$

$$\log a_T(T, T_0) = \frac{0,43 \cdot E_A}{R} \left[\frac{T - T_0}{T_0} \right]$$

Verschiebungsgesetz für die
Viskositätsfunktion

WLF-Gleichung

Arrhenius-Ansatz