

Verbesserte Zähigkeit/Steifigkeits-Balance nanopartikelgefüllter Polyamid-Composite – simulationsgestützte Eigenschaften /Morphologie-Korrelation

Projektbeginn: 01.12.2008

Projektende: 30.11.2011

Ziele

Es wird am Beispiel eines mehrphasigen Polyamids ein Konzept zur Verbesserung der Zähigkeit/Steifigkeits-Balance durch Auffinden geeigneter Morphologien wie Phasengröße, -anteil und -orientierung, Strukturierung, Matrix/Phasen-Kopplung, Grenzflächenmorphologie und Mikro-Hohlräume in Matrix unter Anwendung einer hierarchischen Modellierung entwickelt (Abb. 1). Von Bedeutung ist der Einsatz einer Polyether-Weichphase sowie eines nanoskaligen Schichtsilikats (Montmorillonit) zur Erhöhung der Zähigkeit (Izod-Schlagzähigkeit) bzw. Steifigkeit (E-Modul). Im Mittelpunkt der Modellierung steht der Aufbau von heterogenen Finite-Elemente (FE)-Modellen, die die teilkristalline Polyamid-Matrix berücksichtigen und die dispergierten Weichphasen sowie Nanopartikel in die Berechnungen einbeziehen.

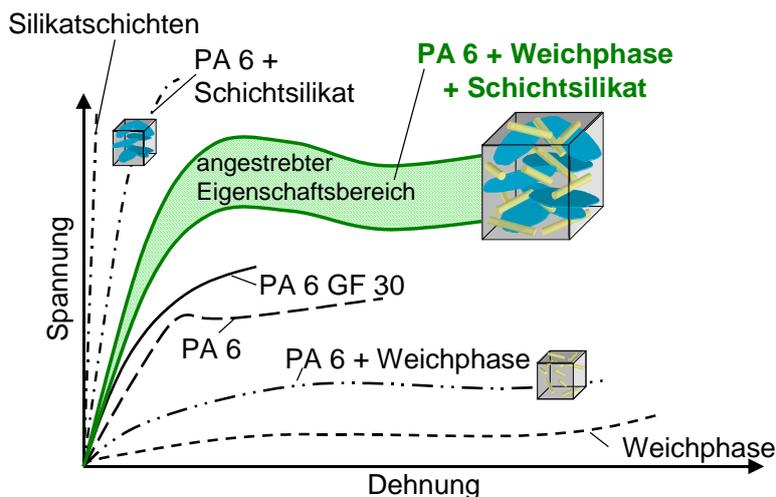


Abb. 1: Schematische Übersicht der angestrebten Materialeigenschaften durch simulationsgestützte Korrelation von Eigenschaften und Morphologie.

Vorgehensweise

Das Arbeitsprogramm gliedert sich in zwei Projektabschnitte. In Abschnitt I sollen auf Basis experimenteller Untersuchungen die realen Mikrostrukturen zum Einfluss von Weichphase und Schichtsilikat zunächst getrennt und dann gemeinsam modelliert werden. In Abschnitt II werden virtuelle, hinsichtlich Zähigkeit und Steifigkeit verbesserte Mikrostrukturen simuliert, konzipiert und letztlich experimentell verwirklicht. Die Charakterisierung von Morphologie und mechanischen Eigenschaften liefert die Inputdaten für die entsprechende mikrostrukturbasierte Eigenschaftssimulation. Daraus werden virtuelle Morphologien mit einer freien Variation von Form, Größe und Verteilung der dispergierten Phasen erzeugt und hinsichtlich des modellierten mechanischen Verhaltens verbessert. Dieses mittels FE-Simulationen

bestimmte Mikrostruktur-Modell wird anschließend mit Experimenten nachgestellt und in seiner Anwendbarkeit verifiziert. Die Erkenntnisse aus den Simulationsrechnungen fließen in die Konzeption und Herstellung realer Werkstoff-Morphologien mit verbesserten Eigenschaften ein.

Aktualisierte Ergebnisse:

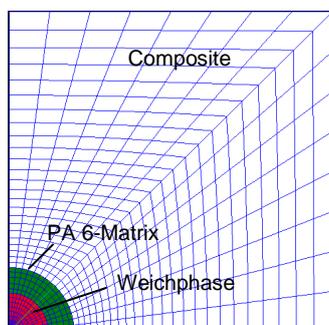
Homogenisierung der teilkristallinen PA6-Matrix

Unter Berücksichtigung einer isotropen Lamellenorientierung in einem Spherolith erfolgte mittels eines 2,5D-selbstkonsistenten Modells die inverse Modellierung des E-Moduls der kristallinen PA 6-Phase zu $E = 51,5 \text{ GPa}$ [1]. Die Polymorphie der PA 6-Matrix weist zwei stabile Kristallmodifikationen auf. In der Literatur werden die E-Modulwerte für die monokline α -Form sowie die pseudo-hexagonale γ -Form von $E_\alpha = 165 \text{ GPa}$ bzw. $E_\gamma = 27 \text{ GPa}$ angegeben [1]. Da gewöhnlich beide Modifikationen ohne eine scharfe Phasengrenze parallel auftreten, kann der berechnete Wert als plausibel betrachtet werden. Basierend auf den gemessenen Werten der Nanoindenter-Messungen der amorphen und den mittels inverser Modellierung berechneten Werten der kristallinen Phase erfolgte die Simulation des E-Moduls der teilkristalline PA 6-Matrix mit verschiedenen Kristallinitätsgraden [1]. Die Zunahme des Kristallinitätsgrades resultierte hierbei in einem fast linearen Anstieg der E-Modulwerte.

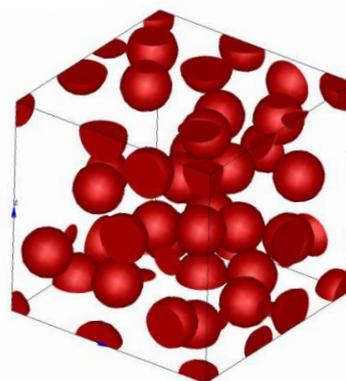
[1] J. Huang, U. Weber, S. Schmauder and S. Geier Micromechanical modelling of young's modulus of semi-crystalline polyamide 6 (PA 6) and elastomer particle-modified PA 6, Computational Materials Science xxx (2010) xxx–xxx (in press)

Simulation des elastisch-plastischen Verhaltens der PA 6-Matrix und der Weichphase

Die Simulation des elastisch-plastischen Verhaltens erfolgte durch ein 3D-selbstkonsistentes Modell und ein 3D-RVE Modell (Abb.2). Basierend auf den morphologischen Analysen wurde die nanoskalig dispergierte Weichphase hierbei als sphärische Partikel mit einer guten Anbindung an die PA 6-Matrix angenommen.



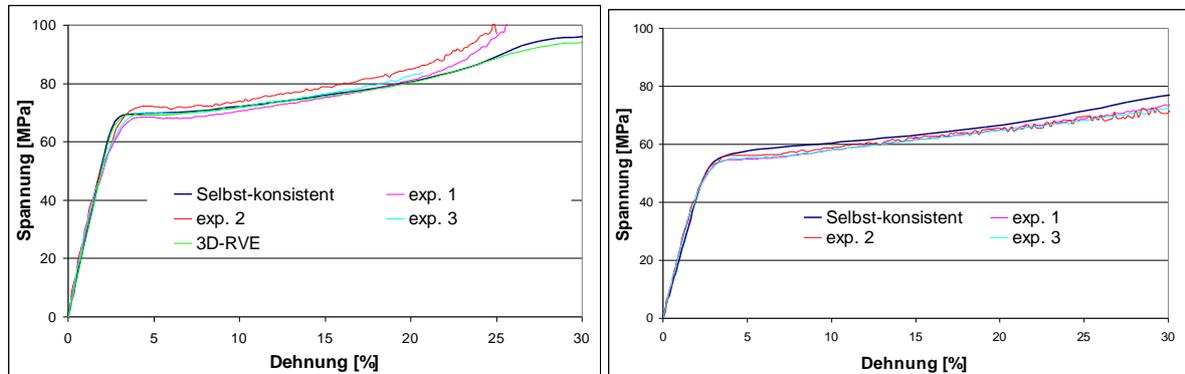
a)



b)

Abb. 2: a) 2,5 D-selbstkonsistentes Modell; b) 3D-RVE Modell.

Mittels lokaler Dehnungsmessung während des Zugversuchs (ARAMIS) erfolgte hierfür die Bestimmung des wahren Spannungs-Dehnungs-Verhaltens der Materialsysteme. Die Kennwerte der PA 6-Matrix als auch der N3000-Weichphase dienten als Input-Daten für die Modellierung. Die experimentellen Werte konnten mit sehr guter Übereinstimmung berechnet werden (Abb. 3).



a)

b)

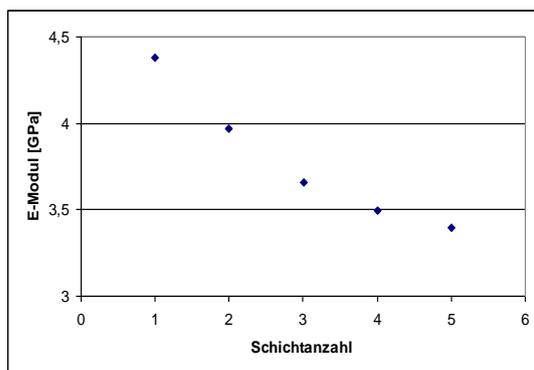
Abb. 3: berechnete elastisch-plastische Verhalten von a) 8,3 Gew.% Weichphase verstärktes PA 6 und b) 33,3 Gew.-% Weichphase verstärktes PA 6.

Simulation des elastisches Verhaltens der PA 6-Matrix und Schichtsilikaten

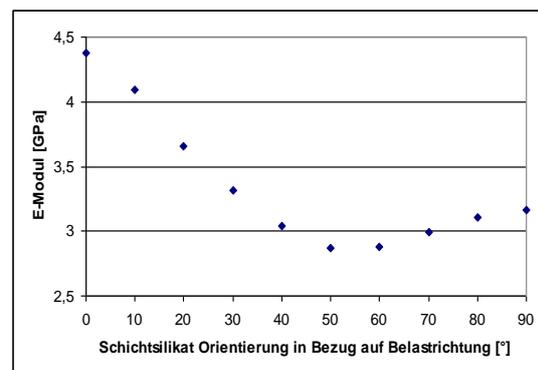
Basierend auf experimentellen Untersuchung (IKT: Institute für Kunststofftechnologie) wurde vom IMWF ein 2D-selbstkonsistentes FE-Modell entwickelt, welches den Schlankheitsgrad des Schichtsilikats, die Schichtanzahl pro Silikatstapel sowie die Schichtsilikatorientierung abbilden kann. Eine Parameterstudie zum elastischen Verhalten eines mit 5 Gew.-% (Gewicht%) Silikat gefüllten Composites (Abb. 4 a-c) zeigt die gleichen Tendenzen wie unter Verwendung der analytischen Composite-Modelle. Eine bestmöglich verstärkende Wirkung kann erzielt werden durch:

- eine möglichst hohen Exfolierungsgrad des Schichtsilikates
- eine möglichst perfekt Schichtsilikatorientierung in Belastungsrichtung
- einem möglichst hohem Schlankheitsgrad des Schichtsilikates.

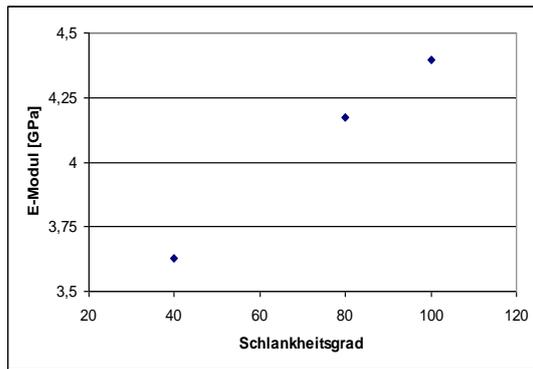
Unter Berücksichtigung der oben aufgezeigten Erkenntnisse wurden zwei weitere Systeme mit 3,1 Gew.-% und 6,8 Gew.-% Silikat durch das IKT hergestellt und charakterisiert. Der Vergleich mit den numerischen Vorhersagen in Abb. 4d zeigt eine sehr gute Übereinstimmung.



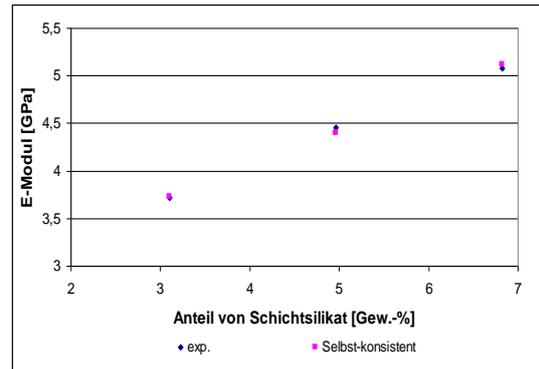
a)



b)



c)



d)

Abb. 4: Parameter Studie von E-Modulus von 5 Gew.-% gefülltem PA 6 in Bezug auf a) Schichtanzahl in einem Stapel; b) Schichtsilikat-Orientierung in Bezug auf Belastungsrichtung und c) Schichtsilikat-Schlankheitsgrad. d) Vergleich mit dem numerischen Vorhersagen von den Systeme mit 3,1 Gew.-% und 6,8 Gew.-% Silikat.

Partner

Dieses Projekt wird gemeinsam mit dem Institut für Kunststofftechnik (IKT), Stuttgart, durchgeführt. Am IKT erfolgen die experimentellen Untersuchungen zur Morphologie sowie den mechanischen Eigenschaften und die Herstellungen realer Werkstoffmorphologien mit verbesserten Eigenschaften.

Danksagung

Die Untersuchungen werden von der Deutschen Forschungsgemeinschaft unter Schm 746/74-1 gefördert. Für die finanzielle Unterstützung wird gedankt.

Ansprechpartner

Dipl.-Ing. Jing Huang
 Tel.: +49 / 711 685-67674
 Fax: +49 / 711 685-62635
 E-Mail: jing.huang@mpa.uni-stuttgart.de
 Dipl.-Ing. Simon Geier
 Tel.: +49 / 711 685-62661
 Fax: +49 / 711 685-62066
 E-Mail: simon.geier@ikt.uni-stuttgart.de