

Datum 01.06.2010 - 31.05.2012

**Titel Einsatz numerischer Strömungssimulation (CFD) für
Doppelschneckenextruder zur Optimierung thermoplastischer
Werkstoffe**

Zusammenfassung

IGF-Vorhaben-Nr.: 35 EN

Im Rahmen des CORNET-Projektes: "Optimized Compounds" wurde ein teilvernetztes thermoplastisches Elastomerblend (TPE-V) entwickelt. Das TPE-V-Blend basiert auf Polypropylen (PP) als thermoplastische Matrix und einem Polyolefinelastomer (POE) als Elastomerphase. Bei den verwendeten Polyolefinelastomeren handelt es sich um lineare Polyethylene-Copolymere, welche über Ihre Seitenketten (α -olefine) definiert sind. Die Teilvernetzung der Elastomerphase wurde durch Zugabe von unterschiedlichen Peroxiden (Zerfall in freie Radikale) initiiert. Als unerwünschte Nebenreaktion findet, durch Anwesenheit der freien Radikale, jedoch auch ein Abbau der Polypropylenmatrix statt. Die Herstellung des Blendsystems durch reaktive Extrusion, unter Verwendung eines gleichläufigen Doppelschneckenextruders, erfordert daher ein tiefes Verständnis der Vernetzungskinetik der Elastomerphase und der Abbaukinetik der Polypropylenmatrix. Um die Vorgänge innerhalb der Verfahrenszonen gleichläufiger Doppelschneckenextruders besser zu verstehen, wurde im Rahmen dieses Projektes das Werkzeug der numerischen Strömungssimulation, hinsichtlich seiner Eignung zur Prozessoptimierung untersucht. Die sehr hohe Komplexität der Simulation machte an dieser Stelle die enge Zusammenarbeit mit einem Projektpartner mit ausgewiesener Expertise im Bereich CFD, die Universität Ljubljana, notwendig. Aufgaben des Deutschen Kunststoff-Instituts waren in diesem Gemeinschaftsprojekt die Bereitstellung der Stoffdaten und der Geometriedaten für die Simulation, die systematische experimentelle Validierung der Simulationsergebnisse und die bereits voranstehend beschriebene, experimentell basierte Materialentwicklung.

Die Validierung der an der Universität Ljubljana implementierten numerischen Modelle erfolgte am Deutschen Kunststoff-Institut unter anderem an einem Rotationsrheometer. Die Ergebnisse der Simulation zeigten dabei eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentell erzielten Ergebnissen. Die Abbildung viskoelastischer Phänomene war möglich. Eine weitere Validierung der numerischen Modelle für die Simulation nicht-newtonscher Fluide mit freien Oberflächen erfolgte durch die Abbildung eines Batch-Mixers mit zylindrischen Rotationskörpern. Die visuelle Validierung des Strömungsverhaltens der zwei-Phasen-Strömung (Vergleich Experiment mit Simulation) zeigte dabei ebenfalls eine gute Übereinstimmung. Als Testfluid kam in diesem Fall „Viscoplex 8-450“ zum Einsatz. Das Fluid ist bereits bei Raumtemperatur fließfähig, so dass die Versuche bei 23°C durchgeführt werden konnten und so die instationären Einlaufbedingungen abgebildet werden konnten.

Parallel zu den Validierungsversuchen wurden grundsätzliche Untersuchungen bezüglich der TPE-V Entwicklung durchgeführt. Um die einzelnen Reaktionskinetiken für die reaktive Aufbereitung besser zu verstehen wurden Vorversuche in einem Labor-Knetter durchgeführt. Dabei wurde das Vernetzungsverhalten der Elastomerphase und das Abbauverhalten der PP-Matrix für verschiedene Peroxide,

**Fraunhofer-Institut für Betriebsfestigkeit
und Systemzuverlässigkeit LBF, Bereich
Kunststoffe**

Schlossgartenstr. 6

Phone: +49 6151 705-0
Fax: +49 6151 705-214
www.lbf.fraunhofer.de
info@lbf.fraunhofer.de

Die ungekürzte oder auszugsweise Wiedergabe dieses Prüfberichts sowie seine Verwendung zu Werbezwecken bedarf der schriftlichen Genehmigung der Institutsleitung. © 2012 Fraunhofer-Institut für Betriebsfestigkeit und Systemzuverlässigkeit LBF

Reprints of this report or parts of it or its use for promotion purposes require the prior written permission of the director of the Fraunhofer Institute.

in Abhängigkeit der Peroxidkonzentration und der Temperatur untersucht. Der Vernetzungsgrad der hergestellten POE-Proben wurde mit Hilfe der Soxhlet-Extraktion (Gel-Gehaltsbestimmung) bestimmt. Mit Hilfe der Gel-Permeations-Chromatographie wurde die Molmasse der abgebauten PP-Proben untersucht. Die Ergebnisse zeigen, dass das POE Exact 5062 (Exxon mobile) in Kombination mit dem Peroxid BIB-I (Pergan GmbH), bei sonst gleich bleibenden Bedingungen den höchsten Vernetzungsgrad erreicht. Ebenfalls ergab sich der höchste Abbau des PP durch das Peroxid BIB-I bei der Temperatur von 190 °C. Die zeitabhängige PP-Abbauversuche haben gezeigt, dass die Peroxidradikale das PP innerhalb der ersten Reaktionsminute abbauen. Diese Erkenntnisse waren für die Gestaltung des Prozesses am Extruder von Bedeutung.

Nach den Vorversuchen am Laborkneter wurde die Materialentwicklung am Doppelschneckenextruder fortgesetzt. Die Rahmenbedingungen für den Extruder und für die Prozessdurchführung wurden anhand der Ergebnisse der Vorversuche und erster Ergebnisse aus der Simulation festgelegt. Wie die Ergebnisse der Vorversuche zeigten, sollte der Kontakt zwischen den Peroxidradikalen und dem PP möglichst vermieden werden um so den Abbau des PP zu minimieren. So wurde der Extruder mit einer Seitendosierung ausgestattet, mittels welcher das PP erst nach dem Vernetzen der Elastomerphase (POE-Phase) dem Prozess zu dosiert wurde. Die Schneckenkonfiguration wurde entsprechend angepasst. In der Einzugszone wurde das POE mit dem Peroxid zu dosiert, um eine Teilvernetzung der POE-Phase zu erreichen. Nach der Teilvernetzung der POE-Phase wurde dieses wie beschrieben mit dem PP geblendet. Die TPE-V Proben wurde bei unterschiedlichen Prozessbedingungen und bei unterschiedlicher Komponentenzusammensetzung und Peroxidkonzentrationen hergestellt. Die Charakterisierung erfolgte hinsichtlich der mechanischen Eigenschaften mit Zugprüfungen, der Kerbschlagzähigkeit nach Charpy und der Morphologie des Blends mittels Rasterelektronenmikroskopie (REM).

Die Ergebnisse der Kerbschlagzähigkeit bei Raumtemperatur zeigen, dass die Vernetzung der POE-Phase zu einer Verbesserung der Kerbschlagzähigkeit im Vergleich zu den nicht vernetzten Proben geführt hat. Die Untersuchungen der Morphologie zeigte auch, dass diese hinsichtlich der Kerbschlagzähigkeit eine entscheidende Rolle spielt. Die Vernetzung der Elastomerphase bei einer Peroxidkonzentration von 0,3 Gew. % führte zu einer deutlichen Verbesserung der Kerbschlagzähigkeit. Die Blendmorphologie war in diesem Fall geprägt durch fein verteilte Elastomerdomänen innerhalb der Polypropylenmatrix. Eine Erhöhung der Peroxidkonzentration auf 0,5 Gew. % führte zu einer groberen und nicht homogenen Morphologie. Dies hat einen stark negativen Einfluss auf die Kerbschlagzähigkeit. Die Kerbschlagzähigkeit ist in diesem Fall sogar schlechter als die des unvernetzten Blends.

Kontakt: Shilpa Khare, Tel.: +49 6151 705-8739; shilpa.khare@lbf.fraunhofer.de

Danksagung und Bestellhinweis

Das IGF-Vorhaben 35 N der Forschungsvereinigung Forschungsgesellschaft Kunststoffe e.V. (FGK, Schlossgartenstraße 6, 64289 Darmstadt) zum Thema

Einsatz numerischer Strömungssimulation (CFD) für Doppelschneckenextruder zur Optimierung thermoplastischer Werkstoffe

wurde über die AiF im Rahmen des Programms zur Förderung der industriellen Gemeinschaftsforschung und -entwicklung (IGF) vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert.

Gefördert durch:



aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages

Für diese Förderung sei gedankt.

Ebenfalls gedankt sei für die Unterstützung durch die Forschungsgesellschaft Kunststoffe e.V.

Gleichfalls danken wir den im projektbegleitenden Ausschuss vertretenen Unternehmen für ihre fachliche Unterstützung, die Bereitstellung von Probenmaterial sowie die leihweise Überlassung von Messapparaturen.

Die gesamten Forschungsergebnisse können einem umfangreichen Forschungsbericht entnommen werden, der zum Selbstkostenpreis beim Fraunhofer LBF bestellt werden kann. Die Rechnung wird mit dem Bericht zugeschickt.
