

塑料注射成型结晶过程三维数值模拟*

严波² 李阳^{1**} 孔啸² 赵朋¹ 李德群¹

(¹ 华中科技大学材料成形与模具技术国家重点实验室 武汉 430074)

(² 上海交通大学模具CAD国家工程研究中心 上海 200030)

摘要 采用 GLS (Galerkin/least-squares)、SUPG (Streamline upwind/Petrov-Galerkin)、GGLS (Galerkin gradient least-squares) 等方法对塑料注射成型过程进行三维数值模拟以获取速度、压力与温度场, 基于剪切应力引起分子链取向并导致平衡熔点升高的假设推导了非等温剪切诱导结晶动力学模型, 引入了注射成型过程与结晶相互作用的计算模型, 建立了三维流场中结晶过程的稳定有限元计算模型. 不同成型工艺条件下的数值算例表明, 充模过程中一般注射时间较短, 熔体温度较高, 塑料结晶量很小, 可以忽略不计; 工艺条件决定最终制品的结晶分布, 可以通过改变工艺条件获得所需要的结晶形态分布, 结晶过程释放的潜热对充模后冷却过程中的温度场具有重要影响.

关键词 注射成型, 剪切诱导, 结晶动力学, 结晶分布, 潜热

研究聚合物在加工过程中的结晶行为, 探讨晶体微结构与制品宏观性能及加工工艺的关系具有重要理论意义和应用价值^[1,2].

Hieber 等^[3]在结晶动力学中采用微分形式的 Nakamura 方程, 引入了特征时间变量计算相对结晶度, 特征时间依赖于温度、压力和流动剪切应力, 在零剪切黏度和材料的 PVT 模型中考虑结晶的影响. Guo 等^[4,5]对二维注射成型过程进行了模拟, 研究了剪切诱导结晶模型, 其剪切诱导机理认为应力引起分子链取向从而导致塑料平衡熔点升高和过冷度增大. Guo 等^[6,7]认为分子取向因子决定诱导时间, 剪切场诱导形核, 增加形核速度, 但是不影响结晶速度. Pantani 等^[8]对半结晶型聚合物注射成型工艺中形态演化作了比较详细地综述, 认为目前很难建立微结构与加工工艺条件之间的普适理论模型, 主要原因是加工工艺条件通常包含很快的冷却速率、复杂的压力场以及很大的剪切应变速率. 申长雨等^[9]基于 Hele-Shaw 简化假设的黏性流动对注射成型过程进行了模拟, 在结晶模型中通过耗散能考虑剪切作用对结晶速率的影响, 没有考虑剪切诱导时间.

目前关于聚合物结晶过程的研究主要涉及结晶动力学研究^[10], 或者基于 Hele-Shaw 简化假设的中面流与双面流基础上的数值模拟, 不能对

制品的厚度方向上、厚度发生变化处、结构交叉处等的注射成型过程中的结晶分布及演化进行较全面、准确地研究. 本文在三维充模流动模拟的基础上, 对成型过程中的结晶现象进行了模拟.

1 注射成型过程计算模型

1.1 充模流动数学模型

注射成型充模过程中, 通常假设熔体为不可压缩流体, 惯性力和质量力忽略不计, 则由 Navier-Stokes 方程可简化得到塑料熔体流动的质量守恒、动量守恒以及能量守恒方程为:

$$u_{i,i} = 0 \quad (1)$$

$$2\eta\dot{\epsilon}_{ij,j} - p_i\delta_{ij} = 0 \quad (2)$$

$$\rho C_v(T_{,t} + u_i T_{,i}) = \Phi + K T_{,ii} + H \quad (3)$$

式中“,”表示求偏导; u_i 、 p 、 T 分别为第 i 个速度分量、压力、温度; η 、 ρ 、 C_v 、 K 分别为熔体的动力学黏度、密度、比热容、热传导系数; Φ 为黏性剪切耗散功; $i, j = 1, 2, 3$ 为空间坐标分量; $\dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i})$ 为剪切应变速率, δ_{ij} 为 Kronecker 函数; H 为单位时间内由于结晶引起的能量变化, $H = \rho H_c \dot{\chi}_\infty$, H_c 为结晶熔化热; $\dot{\chi}_\infty$ 为单位时间内的相对结晶度的变化量, χ_∞ 为聚合物的最大绝对结晶度.

* 2010-02-01 收稿, 2010-04-23 修稿; 国家自然科学基金(基金号 50675080、50875095)资助项目; ** 通讯联系人, E-mail:

liyanghust@sina.com

doi:10.3724/SP.J.1105.2011.09432

在三维充模流动的数值模拟中,熔体前沿所受外力及压力为 0;熔体在模壁上无滑移;入口处熔体温度 T_0 及模壁温度 T_w 恒定.假设塑料熔体为广义牛顿黏性流体,其黏度模型采用 7 参数 WLF-Cross 模型:

$$\eta(T, \dot{\gamma}) = \frac{\eta_0(T, P)}{1 + \left(\frac{\eta_0 \dot{\gamma}}{\tau} \right)^{1-\tilde{n}}} \quad (4)$$

式中, $\tilde{n}$ 为非牛顿指数, $\dot{\gamma}$ 为剪切应变速率, τ 为材料剪切常数, η_0 为零剪切黏度:

$$\eta_0 = D_1 \exp \left(\frac{-A_1 (T - (D_2 + D_3 P))}{A_2 + T - D_2} \right) \quad (5)$$

式中, A_1, A_2, D_1, D_2, D_3 为材料参数.

1.2 充模流动的有限元模拟

在三维充模流动的有限元数值模拟中,速度、压力的插值函数搭配以及温度场方程中对流项、小热传导系数的存在会导致三维模拟中数值求解不稳定的问题.为此,在三维充模流动模拟中,方程(1)、(2)中速度与压力的求解采用 Hughes 等^[11]提出的 GLS 方法,即在传统 Galerkin 法的基础上引入单元内控制方程残差的平方,此时速度与压力任意阶插值组合,均能得到稳定精确数值解.而对于能量方程(3),由于对流占优,故采用 SUPG 法克服其引起的数值振荡,同时考虑到塑料的热传导系数一般比较小,还需要采用 GGLS 法^[12],即在传统 Galerkin 法的基础上加上单元内控制方程残差梯度的平方项,以获得温度场的稳定精确数值解.此外,三维充模过程中还需要准确模拟流动前沿的演化.三维充模流动的有限元模拟的具体实现可参见文献[3,14].

2 剪切诱导结晶计算模型

2.1 剪切诱导结晶动力学

基于等动力学, Nakamura 等在 Avrami 模型基础上提出了在非等温过程中的 Nakamura 模型:

$$\theta(t) = \frac{\chi(t)}{\chi_\infty} = 1 - \exp \left[- \left(\int_0^t K(T) dt \right)^n \right] \quad (6)$$

式中, $\theta(t)$ 为相对结晶度, $\chi(t)$ 为 t 时刻绝对结晶度, n 为 Avrami 指数, $K(T)$ 为材料的非等温结晶速率常数:

$$K(T) = [k(T)]^{\frac{1}{n}} = \ln(2)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{1}{t_{1/2}} \right) \quad (7)$$

式中, $t_{1/2}$ 为半结晶时间.当假设晶核数量与温度

无关并且同时激活时, Hoffman 等提出了结晶速率与温度之间的关系式:

$$\left(\frac{1}{t_{1/2}} \right) = \left(\frac{1}{t_{1/2}^0} \right) \exp \left(- \frac{U'/R}{T - T_\infty} \right) \exp \left(- \frac{K_g}{T \cdot \Delta T \cdot f} \right) \quad (8)$$

式中, R 为普适气体常量; $\Delta T = T_m^0 - T$ 为结晶过冷度; $f = 2T/(T + T_m^0)$ 为考虑到温度降低而导致熔化潜热减少的矫正因子; U' 为穿过液固相界面到达结晶表面所需的活化能; T_∞ 为结晶停止温度; K_g 为球晶生长速度.对于大多数聚合物而言, U' 和 T_∞ 可以看作“普适”常量,并且 $U' = 6284$ J/mol, $T_\infty = T_g - 30$ K, T_g 为玻璃化转变温度,指前因子 $\left(\frac{1}{t_{1/2}^0} \right)$ 包含了所有与温度无关的因素.

结晶诱导时间是指产生结晶行为的起始时间, Godovsky 等提出了诱导时间 t_i 与结晶温度 T 之间的经验公式:

$$t_i = t_m (T_m^0 - T)^{-\alpha} \quad (9)$$

式中, t_m, α 为材料常数; t_i 温度 T 时的诱导时间; T_m^0 为平衡熔点.

将非等温过程看作无数微小时间段内的等温过程组成,假设在温度 T 时某个微小时间段对诱导结晶的贡献为该段时间对该温度下对应的等温诱导结晶时间 $t_i(T)$ 的比值,则时间 t_1 内这种贡献的累积结果为 $\bar{t}$:

$$\bar{t} = \int_0^t \frac{dt}{t_i(T)} \quad (10)$$

式中, $\bar{t}$ 称为诱导时间指数,当 $\bar{t}$ 达到 1 时,诱导期结束,晶核形成并开始生长.

目前大多数剪切诱导结晶的动力学模型基于 Nakamura 的等动力学模型,将应变、应力对结晶的影响通过各种方式引入到该模型中^[8].聚合物熔体分子在剪切作用下,分子链拉长,减少了熔体构形的种类,即降低了熔体的熵,却同时提高了平衡熔点温度和过冷度.在熔点处,晶体的 Gibbs 自由能等于熔体的自由能,因此熔点可以表示为:

$$T_m^0 = \frac{\Delta H_f}{\Delta S_f} = \frac{H_m - H_c}{S_m - S_c} \quad (11)$$

式中, ΔH_f 为熔化热; ΔS_f 为熔化熵; H_m, H_c 分别为熔体和晶体的焓; S_m, S_c 分别为熔体和晶体的熵.

将剪切流动状态下的聚合物熔体与晶体看作两个独立相的系统,两者 Gibbs 自由能相等.假设晶体相的自由能与剪切应变无关,则当聚合物熔

体发生变形时,一部分能量在黏性流动中耗散掉,余下的能量以弹性能量保存下来,设应力、应变之间满足 Hooke 定律,即 $\tau = G\gamma$ (G 为弹性剪切模量),则新的熔点为:

$$T_m = \frac{T_m^0}{\Delta H_f} \left[\frac{\tau^2}{2G} \right] + T_m^0 \quad (12)$$

式中, γ 为弹性或者可恢复性剪切应变. 上式右边第一项可以看作平衡熔点的增量,即:

$$T_{\text{shift}} = T_m - T_m^0 = \frac{T_m^0}{\Delta H_f} \left[\frac{\tau^2}{2G} \right] \quad (13)$$

假设应力对结晶动力学的影响是提高了平衡熔点,即增加过冷度,则将式(8)、(9)中的 T_m^0 用式(13)中的 T_m 替换, $\Delta T = T_m - T$, $T_m = T_m^0 + T_{\text{shift}}$, $f = \frac{2T}{T + T_m}$.

将式(10)、(6)的两边对时间求导数,可分别得到诱导时间指数与相对结晶度的输运形式的微分方程:

$$\frac{\partial \bar{t}}{\partial t} + v_j \frac{\partial \bar{t}}{\partial x_j} = \frac{1}{t_i(T, \tau)} \quad (14)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + v_j \frac{\partial \theta}{\partial x_j} = nK(T)(1 - \theta)[- \ln(1 - \theta)]^{(n-1)/n} \quad (15)$$

2.2 剪切诱导结晶稳定有限元计算模型

由于诱导时间指数方程(12)及相对结晶度方程(13)中均包含了对流项,因此采用有限元法计算时采用 SUPG 法进行求解. 在诱导时间指数及相对结晶度的计算中,采用线性四面体单元,单元内任意点的诱导时间指数与相对结晶度为:

$$\bar{t} = N_\beta \bar{t}_\beta, \theta = N_\beta \theta_\beta$$

式中, N_β 为单元节点的形函数, $\beta = 1, 2, 3, 4$ 为单元内节点局部序号.

$$\text{令 } I = \frac{1}{t_i(T, \tau)}, \Delta \bar{t} = \bar{t}^n - \bar{t}^{n-1}, \text{ 根据 SUPG}$$

法,可得式(14)的稳定有限元计算格式:

$$\int_{\Omega} w \left(\frac{\Delta \bar{t}}{\Delta t} + u_j \bar{t}_{\beta,j}^n \right) d\Omega + \sum_e \int_{\Omega^e} \tau_{\text{SUPG}} u_j w_{\beta,j} \left(\frac{\Delta \bar{t}}{\Delta t} + u_j \bar{t}_{\beta,j}^n - I \right) d\Omega = \int_{\Omega} w I d\Omega \quad (16)$$

式中,上标 n 表示当前时刻, $n-1$ 表示前一个时刻; $\tau_{\text{SUPG}} = \frac{h}{2 \|u\|}$ 为单元内的 SUPG 稳定因子.

取 $w = N_\alpha$, $\alpha = 1, 2, 3, 4$, 令 $\tilde{N}_\alpha = N_\alpha + \tau_{\text{SUPG}} u_j N_{\alpha,j}$, 代入式(16), 整理可得诱导时间指数

方程的有限元离散格式:

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \tilde{N}_\alpha \left(\frac{N_\beta}{\Delta t} + u_j N_{\beta,j} \right) \bar{t}_\beta^n d\Omega = \sum_e \int_{\Omega^e} \tilde{N}_\alpha \frac{N_\beta}{\Delta t} \bar{t}_\beta^{n-1} d\Omega + \sum_e \int_{\Omega^e} \tilde{N}_\alpha N_\beta I_\beta d\Omega \quad (17)$$

同理,令 $\Theta = nK(T)(1 - \theta)[- \ln(1 - \theta)]^{\frac{(n-1)}{n}}$, 可得相对结晶度方程的稳定有限元离散格式:

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \tilde{N}_\alpha \left(\frac{N_\beta}{\Delta t} + u_j N_{\beta,j} \right) \theta_\beta^n d\Omega = \sum_e \int_{\Omega^e} \tilde{N}_\alpha \frac{N_\beta}{\Delta t} \theta_\beta^{n-1} d\Omega + \sum_e \int_{\Omega^e} \tilde{N}_\alpha N_\beta \Theta_\beta d\Omega \quad (18)$$

2.3 结晶对成型过程的影响及模型参数获取

结晶对聚合物材料黏度的影响,采用 Titomanlio 等^[15]提出的经验模型,在黏度模型中引入结晶对黏度系数的影响:

$$\eta_\chi = \frac{\eta(T, \dot{\gamma}, \chi)}{\eta(T, \dot{\gamma}, \chi = 0)} = 1 + f \exp(-h/\chi^m) \quad (19)$$

式中, η_χ 为黏度变化因子; $\eta(T, \dot{\gamma}, \chi = 0)$ 为不考虑结晶时的黏度; f 、 h 、 m 为材料参数.

当应力较小时,聚合物分子没有足够的能量拉伸分子链以改变分子取向,同时,如果应力太大,聚合物分子已经得到足够拉伸,继续增加应力不再改变分子取向,因此剪切应力 τ 与等效熔点变化之间的关系,式(13)可采用以下关系式简化代替^[6]:

$$T_{\text{shift}} = C_1 e^{\frac{C_2}{\tau}} \quad (20)$$

式中, C_1 、 C_2 为材料参数.

3 注射成型过程中的结晶模拟

为研究注射成型过程中的结晶行为,选用尺寸为 80 mm × 10 mm × 4 mm 的长条样品,材料为 PP 6523,其主要的诱导时间与相对结晶度参数见表 1^[6]. 当注射速率为 3.2 cm³/s 时,填充时间为 1 s,取厚度方向上的中心截面,浇口坐标为 $x = 80$ mm, $y = 5$ mm,得到如图 1 所示的充模结束时的剪切诱导时间指数分布,其中注射温度为 260℃,模具温度分别为 20℃, 60℃,浇口位于制品的左端面中心处. 充填 0.5 s 时的流动前沿如图 1 所示,由图可见三维数值模拟中流动前沿特有的“喷泉”效应,即沿厚度方向,中心处的熔体流动速度较靠近模壁处要快. 充模结束后,假设熔体停止流动,逐步冷却凝固.

Table 1 Crystalline parameters

Parameter	Value	Parameter	Value
H_c (J/kg)	2.09×10^5	C_1 ($^{\circ}\text{C}$)	10.0
χ_{∞}	0.5	C_2 (Pa)	5.5×10^3
n	3.0	K_g (K^2)	2.99×10^5
t_m ($\text{s} \cdot \text{K}^a$)	5.99×10^{18}	$\left(\frac{1}{t_{1/2}}\right)_0$ (s^{-1})	2.07×10^6
a	10.0	f	1.0×10^4
T_m^0 ($^{\circ}\text{C}$)	172.0	h	1.5
T_g ($^{\circ}\text{C}$)	-10	m	0.4

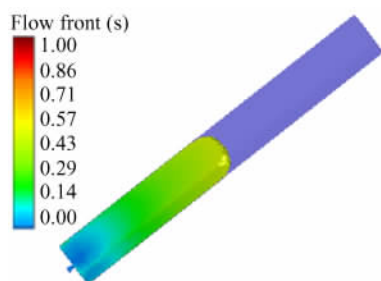


Fig. 1 Flow front at time 0.5 s

从图 2 中可以看出,在靠近模壁附近,诱导时间指数有一定的分布,这是由于模具温度比较低,在靠近模壁的位置剪切作用比较强,所以在靠近模壁附近很容易产生较大的诱导时间指数.而型腔内其它区域,虽然有剪切作用,结晶的等效熔点有所提高,但是熔体温度较高,不容易发生诱导形核.同时,充模结束时的相对结晶度很低.本文中充模结束时最高相对结晶度不超过 10^{-3} ,这是由于充模时间比较短,熔体温度比较高,只有在靠近浇口的制品角落区域有极其微弱的结晶,相关图在此省略.这些现象与文献 [4] 中模拟所得到的结论比较一致.

图 3 为充模结束后冷却 50 s 时的相对结晶度分布,当模具温度比较低时,制品中心结晶比较完全,边缘由于温度太低,结晶很难进行,而当模具温度比较高时,制品边缘冷却下来并且结晶,而制品中心部位由于温度仍然比较高,相对结晶度比较低,但由于温度较高,随着时间的推移,中心部位能继续冷却、结晶.当模具温度较低时,容易形成常见的半结晶型塑料制品厚度方向上的三层微结构,表层由于温度低,结晶度较低,靠近模壁内侧,结晶度较高,但由于充模过程中的强剪切作用,冷却过程中没有完全解取向,导致结晶具有很高的取向,而在制品的芯层,温度较高,剪切作用较弱,形成球晶结构.

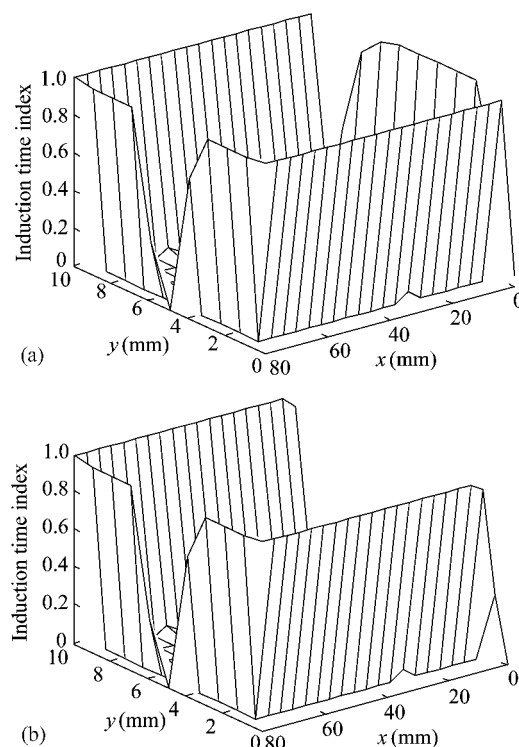


Fig. 2 Induction time index distribution at end of filling stage

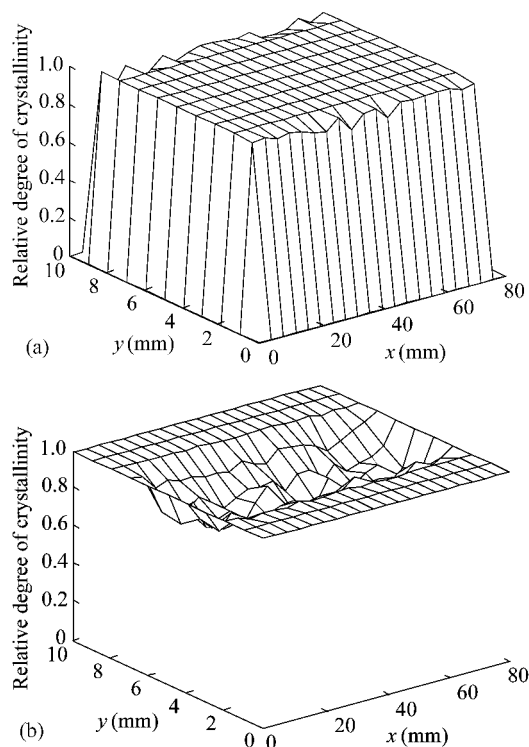
a) Injection temperature 260 $^{\circ}\text{C}$, mold temperature 20 $^{\circ}\text{C}$;b) Injection temperature 260 $^{\circ}\text{C}$, mold temperature 60 $^{\circ}\text{C}$ 

Fig. 3 Distribution of relative degree of crystallinity when cooled for 50 s after filling

a) Injection temperature 260 $^{\circ}\text{C}$, mold temperature 20 $^{\circ}\text{C}$;b) Injection temperature 260 $^{\circ}\text{C}$, mold temperature 60 $^{\circ}\text{C}$

图 4 为注射温度为 260°C , 模具温度为 20°C 时, 冷却过程中不同时刻的相对结晶度分布. 由于模壁附近温度太低, 制品中心温度太高, 都不容易结晶, 因此位于两者之间的过渡区域首先发生结晶, 过渡区域的相对结晶度高于中心和模壁, 如图 4(a) 所示. 中心区域随着温度的降低也逐渐结晶, 当冷却到 40 s 时, 结晶基本上已结束, 如图 4(b) 所示. 最后除了模壁附近外, 其它区域的相对结晶度都达到 1. 将模具的温度由 20°C 提高到 45°C 时, 得到如图 5 所示冷却 50 s 的相对结晶度分布, 相对于 20°C 的模具温度, 此时模壁处结晶度比较高, 接近于 1, 相对于 60°C 的模具温度, 此时中心区域结晶度也较高, 接近于 1. 由此可见, 通过选择合理的模具温度可以获得所需的制品结晶度分布.

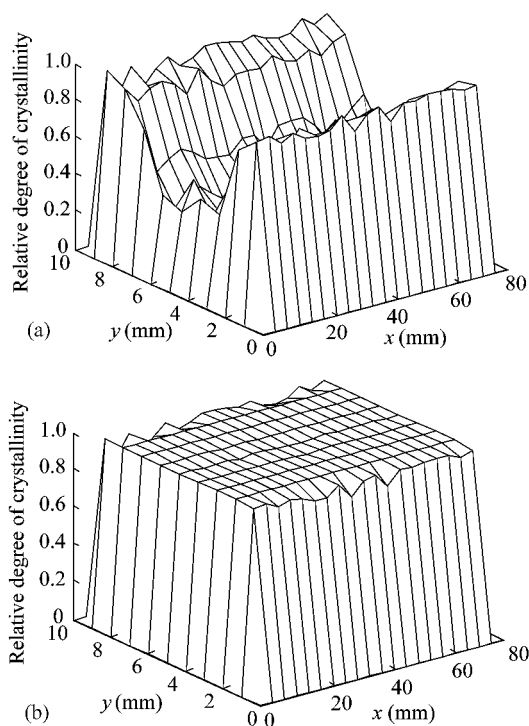


Fig. 4 Distribution of relative degree of crystallinity at different times during cooling
a) Cooled for 30 s; b) Cooled for 40 s

由于结晶过程伴随能量的变化, 结晶会释放能量. 在前面的关于结晶的算例中, 均考虑了结晶放热对制品温度的影响, 以注射温度为 220°C 、模具温度为 60°C 为例, 图 6 所示为充模结束后冷却 50 s 的温度场分布, 当不考虑结晶放热时, 制品的最高温度为 67°C , 当考虑结晶释放的热量时, 制品的最高温度为 96°C , 由此可见, 结晶过程中释

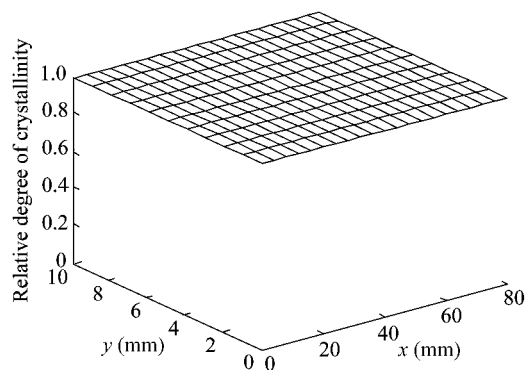


Fig. 5 Distribution of relative degree of crystallinity when cooled for 50 s with mould temperature 45°C

放的热量对结晶过程乃至注射成型过程具有重要的影响.

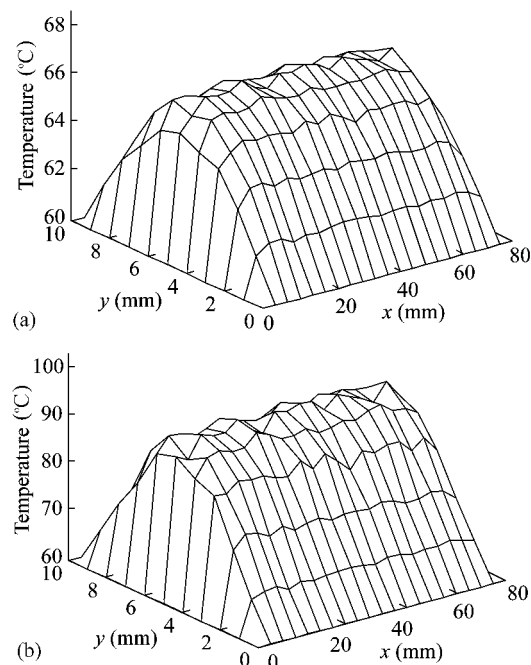


Fig. 6 Effect of latent heat due to crystallization on temperature field of part during cooling
a) Taking no account of crystallization; b) Taking account of crystallization

在以上的模拟中, 如果注射速度提高一倍, 即为 $6.4 \text{ cm}^3/\text{s}$ 时, 此时虽然平衡熔点升高, 但是注射时间缩短, 充模结束时及继续冷却过程中, 诱导时间指数分布与相对结晶度分布与 $3.2 \text{ cm}^3/\text{s}$ 时基本一致. 同时, 当注射温度由 260°C 降低为 220°C 时得到的分布规律也基本相似.

4 结论

基于剪切应力导致平衡熔点升高的假设的动

态非平衡结晶动力学,本文对注射成型过程中的结晶行为进行了三维模拟,模拟和研究了不同注射温度、模具温度、注射速率和冷却时间下的诱导时间指数、相对结晶度分布。模拟得到的规律与文献中所观察到的现象基本一致。

由于注射时间比较短,并且模具温度低于等效熔点时,充模结束后的诱导时间指数只是分布在靠近模壁附近较薄层的区域,充模过程中基本不发生结晶行为,可以忽略不计;当模具温度较低时,模壁附近很难结晶,适当提高模具温度能提高该区域的结晶度;制品中心处由于温度较高,冷却

较慢,通常能获得比较高的结晶度;通过调整注射温度与模具温度可以获得所需要的制品的结晶度分布;结晶过程中释放的热量能显著提高制品的温度,从而影响制品的注射成型过程。对于半结晶型材料 PP 的注射成型制品,模具温度和注射温度对制品最终结晶度分布的影响较大。

此外,充模结束时,熔体内流动残余应力会很快松弛,但决定了制品内的分子取向,对结晶过程也有一定的影响,黏弹性流动残余应力对取向和结晶的影响,将作为本文后续的研究工作。

REFERENCES

- 1 Chen Qing(陈青),Fan Yurun(范毓润),Zheng Qiang(郑强). Acta Polymerica Sinica(高分子学报),2007,(5):467~471
- 2 Mo Zhishen(莫志深). Acta Polymerica Sinica(高分子学报),2008,(7):656~661
- 3 Hieber C A. Polym Eng Sci,2002,42(7):1387~1409
- 4 Guo J X,Narh K A. Polym Eng Sci,2001,41(11):1996~2012
- 5 Guo J X,Narh K A. Adv Polym Technol,2002,21(3):214~222
- 6 Guo X,Isayev A I,Guo L. Polym Eng Sci,1999,39(10):2096~2114
- 7 Guo X,Isayev A I,Demiray M. Polym Eng Sci,1999,39(11):2132~2149
- 8 Pantani R,Coccorullo I,Speranza V,Titomanlio G. Prog Polym Sci,2005,30:1185~1222
- 9 Shen Changyu(申长雨),Zhou Yingguo(周应国),Chen Jingbo(陈静波). Acta Polymerica Sinica(高分子学报),2008,(8):771~777
- 10 Wen Huiying(温慧颖),Meng Yanfeng(蒙延峰),Jiang Shichun(蒋世春),An Lijia(安立佳). Acta Polymerica Sinica(高分子学报),2008,(2):107~115
- 11 Hughes T J R,Franca L P. Comput Methods Appl Mech Engrg,1987,65:85~96
- 12 Ilinca F,Hetu J F. Comput Methods Appl Mech Engrg,2002,191:3073~3097
- 13 Yan Bo(严波),Zhou Huamin(周华民),Li Dequn(李德群). J Huazhong Univ of Sci & Tech (Natural Science Edition)(华中科技大学学报(自然科学版)),2008,36(12):83~86
- 14 Yan B,Zhou H,Li D. J Eng Manufacture,2007,221(B10):1573~1577
- 15 Titomanlio G,Speranza V,Brucato V. Int Polym Proc,1997,12(1):45~53

THREE DIMENSIONAL NUMERICAL SIMULATION OF POLYMER CRYSTALLIZATION DURING PLASTIC INJECTION MOLDING

YAN Bo², LI Yang¹, KONG Xiao², ZHAO Peng¹, LI Dequn¹

(¹ State Key Laboratory of Material Processing and Die & Mould Technology,
Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074)

(² National Engineering Research Center of Die & Mold CAD, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200030)

Abstract The crystallinity distribution of polymers has a significant dependence on injection processing and determines the part properties. Speed, pressure and temperature fields are obtained from 3D numerical simulation by employing GLS (Galerkin/least-squares), SUPG (Streamline upwind/Petrov-Galerkin) and GGLS (Galerkin gradient least-squares) methods. The non-isothermal shear stress-induced crystallization kinetics models are proposed based on the hypothesis that shear stress induced orientation of polymer chains increases the equilibrium melting temperature. The relationship between crystallinity and injection processing is modeled. SUPG method is used for the stabilized finite element formulation of crystallinity evolution in flow. Simulations for polypropylene were carried out under different processing conditions such as different injection speeds and mold temperatures, melt temperatures, and the results show that crystallinity is very low and can be neglected when the filling stage is over because of short injection time and high melt temperature. Crystallinity distribution in the final part is determined by processing parameters which can be varied to bring on the special crystallinity distribution. Latent heat due to crystallization may often affect the temperature field very much during the cooling stage.

Keywords Injection molding, Shear stress-induced, Crystallization kinetics, Crystallinity distribution, Latent heat