

doi:10.3969/j.issn.1672-4348.2014.03.012

聚苯乙烯注塑成型制品双折射行为模拟分析

司军辉, 刘琼, 王乾廷, 崔志香

(福建工程学院 材料科学与工程学院, 福建 福州 350108)

摘要: 建立了模拟聚合物注塑成型过程中流动应力的数学模型。利用 Leonov 黏弹性模型对聚苯乙烯熔体在非等温幂率稳态剪切流下的流动行为进行模拟分析。并研究了聚苯乙烯在注塑成型填充过程中, 由于流动而产生的剪切和拉伸作用以及模腔内聚合物熔体的温度变化对制品双折射行为的影响, 得到了与实验相符的结果, 证明了本研究中模拟方法的可行性。

关键词: 聚苯乙烯; 注塑成型; 双折射行为

中图分类号: TQ316

文献标志码: A

文章编号: 1672-4348(2014)03-0258-05

Simulation on birefringence of polystyrene injection-moulded parts

Si Junhui, Liu Qiong, Wang Qianting, Cui Zhixiang

(School of Materials Science and Engineering, Fujian University of Technology, Fuzhou 350118, China)

Abstract: A mathematical model was established to simulate the flow stress of polymer melt in injection moulding process. The flow behaviour of polystyrene power-law fluid was investigated via the Leonov viscoelastic model under the condition of non-isothermal steady shear. In addition, the effects of shear and elongation formed when polymer melt flows in the cavity of the mould and the melt temperature changes along the cavity of the mould on the birefringence behaviour were studied at the polystyrene filling stage of the injection moulding process. The simulation results were consistent with the experimental data, indicating the feasibility of the simulation method.

Keywords: polystyrene; injection moulding; birefringence behaviour

注塑成型是聚合物成型加工的重要手段之一。由于其可以大规模高精度的加工复杂三维制件, 目前得到了越来越多研究者的关注。然而注塑成型过程是一个相当复杂的物理过程。聚合物熔体在填充过程中会发生分子取向, 产生残余应力从而使制品具有双折射行为^[1]。特别是对于光学元件来说, 双折射是其制品面临的主要成型问题, 它会使透过光学元件的光线产生相位差, 在成像时出现双重影像, 从而对成像效果产生不良

的影响^[2]。因此, 研究聚合物制品的双折射行为有着非常重要的意义。

本研究主要目的是建立模拟注塑成型流动应力的数学模型, 并联合采用其数学模型和 Leonov 黏弹性模型对非等温幂率稳态剪切流下的聚合物熔体的注塑填充过程进行流动模拟分析。本文主要研究聚苯乙烯在注塑成型填充过程中, 由于流动而产生的剪切和拉伸作用和模腔内聚合物熔体的温度变化对制品双折射行为的影响。

收稿日期: 2014-03-06

基金项目: 国家自然科学基金(51303027); 福建工程学院科研启动基金(GY-Z13028); 福建省企业技术创新专项资金项目(2011-702-04)

第一作者简介: 司军辉(1982-), 男(汉), 讲师, 在职博士研究生, 研究方向: 高分子加工数值模拟, 高分子生物材料。

1 模型与数学公式

以如图1所示的平板模型进行填充模拟分析。平板的长 $L = 30$ cm, 宽 $W = 7.5$ cm, 厚 $2b = 0.2$ cm。分别对位置 A、B、C 进行分析研究。其中位置 A、B 和 C 距离浇口分别为 5 cm、10 cm 和 15 cm。

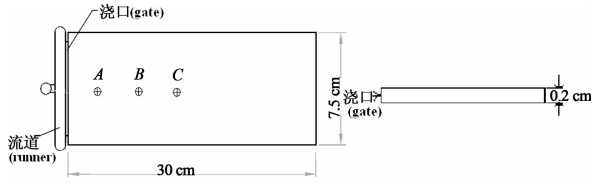


图1 模具尺寸图

Fig. 1 Geometry and dimensions of mould

为简化分析,将模具型腔内的熔体热对流与热传导看成是一维流动,并做出如下假设:(1)填充时熔体的温度为聚合物的熔融温度 T_m ; (2)模壁温度恒定为 T_w ; (3)熔体为幂率流体; (4)熔体在填充开始就伴随着黏弹性应力松弛。

通过求解一维热传导方程得到平板中熔体的温度分布,其热传导方程和边界条件可简化为:

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \\ T(y, 0) = T_m \\ T(2b, t) = T_w \\ T(0, t) = T_w \end{cases} \quad (1)$$

式(1)中, y 为平板宽度方向; α 为热扩散系数; t 为充填时间。通过求解方程(1),得到平板中熔体的温度分布:

$$T(y, t) = T_w + \sum_{n=1,3,5,\dots} \frac{4}{n\pi} (T_m - T_w) e^{-\frac{\alpha n^2 \pi^2 t}{(2b)^2}} \sin \frac{n\pi y}{2b} \quad (2)$$

对于幂率流体,其剪切速率可以表示为:

$$|\dot{\gamma}| = \frac{Qb(2n+1)}{2wn(b-\delta)^3} \left(\frac{y}{b-\delta} \right)^{1/n} \quad (3)$$

式(3)中, δ 为模壁附近聚合物冷凝层厚度; n 为幂率指数。从方程(3)中可以看出,聚合物冷凝层厚度 δ 的增加,将使模壁处的剪切速率增加。这是由于冷凝层厚度的增加,导致有效的流动浇口减小,从而使模壁处的剪切应力增加。根据 Janeschitz-Krieg 和 Dietz, Whit 所述,求解 δ 的方法如下:

$$\delta = \sqrt{\alpha t_c} \quad (4)$$

其中, α 为热扩散系数; t_c 为填充阶段聚合物熔体与模壁的接触时间。

$$t_c = \frac{2bw(L-x)}{Q} \quad (5)$$

式(5)中, Q 为注射速率; x 为某点距离浇口的长度; $2b$ 为模具型腔的厚度; w 为模具型腔的宽度。

对于幂率流体,其剪切应力可表示为:

$$\tau_{12} = \eta(T)r \quad (6)$$

式(6)中,

$$\eta(T) = A' \exp\left(\frac{B}{T}\right) \dot{\gamma}^{n-1} \quad (7)$$

A', B 为材料常数; n 为幂率指数。则

$$\tau_{12} = A' \exp\left(\frac{B}{T}\right) \dot{\gamma}^n \quad (8)$$

选择 Leonov 黏弹性模型来表述流动应力场,并且认为流动为稳态的剪切流动,那么第一、第二法向应力差可以表征为:

$$\begin{aligned} N_1 &= \tau_{11} - \tau_{12} = \sqrt{2} \sum_{k=1}^N \frac{\eta_k}{\theta_k} \frac{(q_k - 1)}{(1 + q_k)^{1/2}} \\ N_2 &= \tau_{22} - \tau_{33} = \sum_{k=1}^N \frac{\eta_k}{\theta_k} \left(\frac{\sqrt{2}}{(1 + q_k)^{1/2}} - 1 \right) \end{aligned} \quad (9)$$

式(9)中,

$$q_k \equiv \sqrt{1 + 4r\theta_k^2} \quad (10)$$

N 为 Leonov 黏弹性模型中的模数,一般 N 为 1 或 2,本文 N 取 2; k 为松弛模型数,本文 k 取 1 和 2; η_k 为第 k 个松弛模型中的黏度; θ_k 为第 k 个松弛模型中的松弛时间; r 为剪切速率。

对于 θ_k 来说,它的大小决定于 W. L. F 温度转移因子,即

$$\theta_k(T) = \theta_k(T_0) \frac{\alpha_T}{\alpha_{T_0}} \quad (11)$$

式(11)中,

$$\alpha_T = \begin{cases} \alpha_{T_g}, & T \leq T_g \\ \exp\left[-\frac{C_1(T - T_{ref})}{C_2 + T - T_{ref}}\right], & T > T_g \end{cases} \quad (12)$$

式(12)中, $C_1 = 8.86$; $C_2 = 101.6$; T_0 为熔体熔融温度; T_{ref} 聚合物熔体的参考温度,与材料有关。

利用应力-光学定律,制品内部的双折射采用如下方程来描述:

$$\Delta n \equiv n_{11} - n_{22} = C(N_1^2 + 4\tau_{12}^2)^{1/2} \quad (13)$$

$$n_{22}(y,t) - n_{33}(y,t) = CN_2(y,t) \quad (14)$$
式(13)、(14)中,下标 1,2 和 3 分别为流动方向、厚度方向和宽度方向、 C 为 PS 在熔融态下的应力光学系数,为一常数。

2 算例

模拟工艺参数设置为:模壁温度 $T_w = 323\text{ K}$,熔体温度 $T_m = 503\text{ K}$,熔体流速 $Q = 12\text{ cm/s}$,玻璃化转变温度 $T_g = 373\text{ K}$,熔体参考温度 $T_{\text{ref}} = 407\text{ K}$ 。模拟所选材料为 PS(styron 678),其各流变性质常数如表 1 所示。

表 1 PS 流变性能参数常数

Tab.1 Constant of PS rheological parameters

A'	B/K	$C/(\text{cm}^2 \cdot \text{N}^{-1})$	n	$\alpha/(\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$
20.1	2 750	4.8×10^{-5}	0.32	6.2×10^{-4}

当 Leonov 黏弹性模型中的模数 $N = 2$ 时,聚合物熔体温度在 463 K 下 PS 流变性能常数为

$$\begin{cases} \theta_1 = 0.8 & \eta_1 = 5.44 \times 10^4 \text{ g/cm} \cdot \text{s} \\ \theta_1 = 0.027 & \eta_2 = 1.5 \times 10^4 \text{ g/cm} \cdot \text{s} \end{cases}$$

将 θ_1 、 θ_2 、 η_1 、 η_2 代入方程(11)、(12),可求得任意温度场下的 $\theta_1(T)$ 和 $\theta_2(T)$,并将所得结果代入方程(9)和(10),即可获得第一、第二法向应力差 $N_1(T)$ 和 $N_2(T)$;将第二法向应力差($N_2(T)$)与方程(14)联合即可得到聚合物制品双折射分量 $n_{22}(y,t) - n_{33}(y,t)$ 。另外,通过方程(4)、(5)、(3)和(2)的一系列计算可以求解方程(8),最后通过联合方程(8)和上述所获得的第一法向应力差 $N_1(T)$ 即可获得聚合物制品双折射分量 Δn 。本文采用双折射分量 $n_{22}(y,t) - n_{33}(y,t)$ 和 Δn 分析讨论制品内部的双折射行为。

分别取距离浇口位置 5,10 和 15 cm 处进行分析研究。

3 结果与讨论

图 2 给出了不同位置处和填充时间下双折射分量 Δn 随制品厚度方向的分布。

从图 2 可以看出,双折射分量值在模壁附近出现一个局部极大值和局部极小值,前者主要是法向应力占主导地位作用的结果,而后者是剪切应力占主导地位作用的结果。对于模壁附近出现的局部极小值可以从剪切应力和温度两方面来进

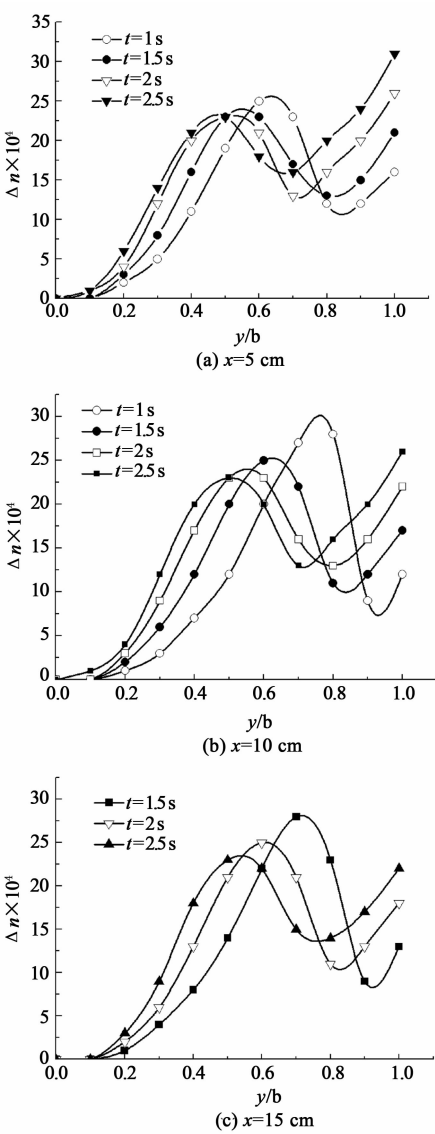


图 2 不同填充时间、不同位置处双折射分量 Δn 在制品厚度方向上的分布

Fig. 2 The birefringence Δn profiles along the parts thickness side at different filling time and distance from gate

行解释。在模壁最边缘,充填过程中该处剪切速率最大,所以存在一个极大值,同时因为模腔壁上温度低,该处首先降到玻璃化温度以下,从而使分子取向固定下来。模壁附近的局部极小值点对应聚合物熔体瞬间冷却层的位置,该处剪切作用比最边缘处小,因而有一个极小值。同时还可以看到,随着填充时间的增加,制品的同一位置处中心层区域的双折射分量值逐渐增加,这主要是由于聚合物熔体经历了越来越长时间的剪切历史,并且随着温度的降低,使取向松弛时间增加,以及由

于温度降低而产生的冷凝作用,使流动管道越来越窄,从而导致剪切应力和法向应力增加的结果。另外,随着填充时间的增加,双折射分量的局部极小值与局部极大值向中心层移动,这是由于冷却效应使冷凝层的厚度增加,从而使法向应力的最大值向中心层移动的结果。

图3给出了在相同填充时间下制品不同位置处的双折射分量值在制品厚度方向的分布。从图3可以看出,在距离浇口5、10和15 cm位置处,沿制品厚度方向上双折射分量 Δn 表现出相同的趋势,即在芯层双折射分量近似为零,以及双折射分量最大值并非出现在模壁上,而是出现在距离模壁的一定距离处。

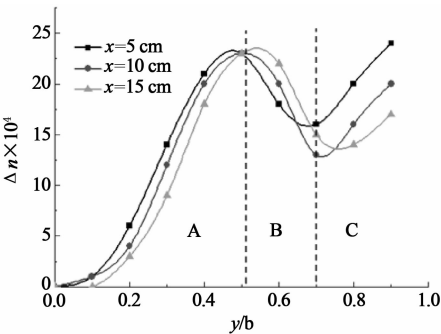
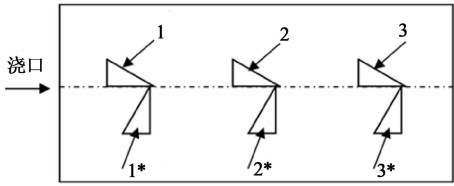


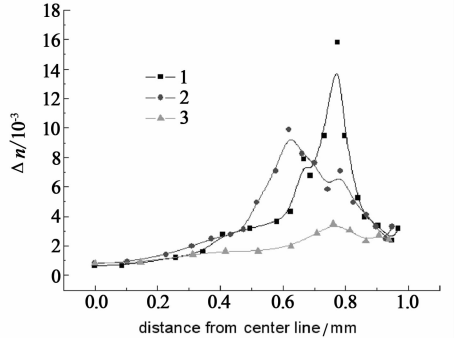
图3 制品不同位置处双折射分量 Δn 在制品厚度方向上的分布 (填充时间 $t = 2.5$ s)

Fig. 3 The birefringence Δn profiles along the parts thickness side at different distance from gate (filling time $t = 2.5$ s)

另外,从图3还可以看出,在厚度方向上,从制品中心层到冷凝层的区域(A段),距离浇口越远的位置,其双折射分量值越小,这主要是由于距离浇口较远的位置处聚合物熔体在填充的过程中经历了较短的流动剪切历史,并且熔体温度较高,使流动剪切而形成的分子取向得到了较好的松弛;在冷凝层区域(B段),由于聚合物熔体的快速冷却,使法向应力占主导地位,从而导致离浇口越远双折射分量值反而越大;在模壁附近(C段),剪切应力占主导地位,离浇口越远冷凝层越薄,剪切应力越小,因此双折射分量 Δn 值越小。另外,为了对比模拟与实验结果,图4给出了王艳芳等^[3]通过实验测试得出的制品不同位置处 Δn 在厚度方向上分布的实验结果。对比图3和图4可以看出,本研究中对制品不同位置处的双折射分量 Δn 的模拟结果与王艳芳等研究者的实验结



(a) 平板制品取样示意图



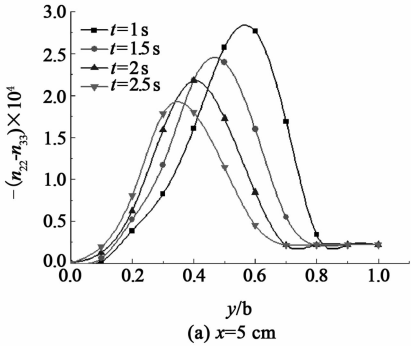
(b) 制品不同位置处 Δn 在厚度方向上的分布^[3]

图4 制品不同位置处双折射分量 Δn 在制品厚度方向上分布实验值

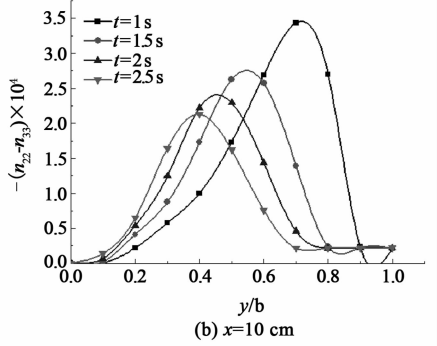
Fig. 4 The experimental results of the birefringence Δn profiles along the parts thickness side at different distance from gate

果相符,具有相同的变化趋势,证明了本研究中模拟方法的可行性。

图5分别给出了距离浇口5、10和15 cm位置处在不同填充时间下双折射分量 $n_{22} - n_{33}$ 在制品



(a) $x = 5$ cm



(b) $x = 10$ cm

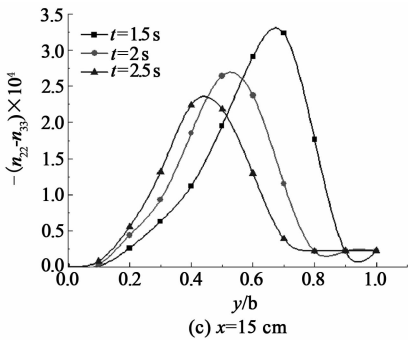


图 5 不同填充时间、不同位置处双折射分量 $n_{22} - n_{33}$ 在制品厚度方向上的分布

Fig. 5 The birefringence $n_{22} - n_{33}$ profiles along the parts thickness side at different filling time and distance from gate

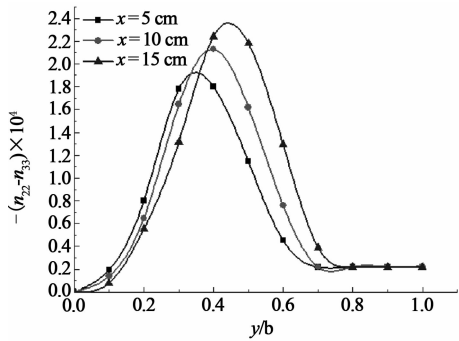


图 6 制品不同位置处双折射分量 $n_{22} - n_{33}$ 在制品厚度方向上的分布 (填充时间 $t = 2.5$ s)

Fig. 6 The birefringence $n_{22} - n_{33}$ profiles along the parts thickness side at different distance from gate (filling time $t = 2.5$ s)

厚度方向上的分布。从图 5 可以看到,在模壁附近 2-3 方向的双折射分量 $n_{22} - n_{33}$ 随着填充时间的增加而明显降低。这主要是由于聚合物熔体在流动开始阶段存在熔体熔接而引起 2-3 方向的剪切应力增加,但随着熔体填充时间的增加,熔体熔接现象消失,其几乎完全沿充填方向流动,使剪切应力主要作用在 1-2 方向上,从而导致 2-3 方向上双折射分量值降低。

图 6 给出了在填充结束时距离浇口不同位置处双折射分量 $n_{22} - n_{33}$ 在厚度方向上的分布。从图 6 可以发现,在制品的中心层区域,位置距离浇口越近,其 2-3 方向双折射分量值越大,这主要是由于在填充的开始阶段出现熔体熔接现象所导致;而在冷凝层区域,位置距离浇口越远,其 2-3

方向双折射分量值越大,这主要是由于熔体温度的快速冷却,导致高分子链来不及松弛而被‘冷冻’所致。

4 结论

通过采用 Leonov 黏弹性模型,并基于从流动开始就伴随着应力松弛的假设,推测出了模拟注塑成型过程中流动应力的数学公式。并研究了聚苯乙烯在注塑成型过程中其流动应力对制件双折射行为的影响,实验结果表明:在填充过程中聚苯乙烯制品厚度方向上双折射分量 Δn 最大值并非出现在模壁上,而是出现在距离模壁的一定距离处。本文对双折射行为的模拟得到了与实验结果相符的模拟结果,证明了本文模拟方法的可行性。

参考文献:

[1] 陈智勇. Moldflow 6.1 注塑成型从入门到精通[M]. 北京:电子工业出版社,2009.
[2] 朱俊杰. 基于 CAE 技术的塑料光学元件双折射行为研究[J]. 计算机辅助技术,2014, 42(1):98-100.
[3] 王艳芳. 聚苯乙烯注塑制品双折射行为研究[D]. 郑州:郑州大学,2007.

(责任编辑: 陈雯)