

ESTIMATIVA DO TAMANHO DA TRINCA EM CORPO DE PROVA COM LINHA DE SOLDA SIMULAÇÃO X RESULTADO EXPERIMENTAL¹

Ricardo Pedro Bom²
Flávio Alexandre Kalnin³

Resumo

Este trabalho tem por objetivo apresentar os resultados obtidos por simulação numérica realizada com o aplicativo desenvolvido neste laboratório, o qual permite prever o tamanho da trinca em corpo de prova com linha de solda. Os resultados da simulação serão comparados com os resultados experimentais obtidos a partir de corpos de prova moldados pelo processo de injeção, em diferentes temperaturas e caracterizados a partir de ensaio de tração. O aumento do tamanho da trinca em produtos moldados pelo processo de injeção pode provocar a diminuição da tensão de ruptura efetiva na região de sua existência devido à diminuição da área de contato ou de interpenetração, este problema pode ser de grande importância em peças estruturais. A partir de equações que descrevem: o resfriamento de polímeros, a reologia de polímeros, a difusão e a interpenetração molecular e tomando-se como base o modelo de reptação descrito por De Gennes, determinou-se o perfil da difusão molecular na interface de junção dos fluxos e a interpenetração ao longo da espessura, bem como se determinou a interpenetração crítica utilizando-se o valor da trinca. Por fim, com a diminuição da temperatura de injeção, o corpo de prova solidifica mais rapidamente, diminuindo a difusão e a interpenetração molecular na interface da linha de junção. Com o aumento da interpenetração molecular, aumenta-se a tensão máxima de ruptura do polímero termoplástico Polystyrol 158 K da Basf. Determinou-se uma dependência entre a interpenetração máxima no centro do corpo de provas e a interpenetração crítica correspondente à trinca obtida por ensaios de tração, em função da variação da temperatura. Assim, foi desenvolvido um aplicativo que descreve com muita coerência a dimensão da trinca.

Palavras-chave: Difusão molecular; Tempo de resfriamento; Linha de solda; Interpenetração molecular.

PREDICTION OF THE SIZE OF THE TRINE IN BODY OF WITH OF WELD LINE, SIMULATION X EXPERIMENTAL RESULT

Abstract

This paper presents the results from numeric simulation performed by program developed in this research center, which become possible to determine the crack length in sample with weld line. The simulations results will be compared with experimental results come from samples molded by injection process in several melt temperatures e characterized by tensile tests. Large crack length in injected articles means low fracture tensile, and this can be explained by the contact area reduction or low interpenetration. So this defect is relevant for structural parts. Using appropriated equations to describe the polymer cooling and rheology, the molecular inter-diffusion and interpenetration, and the De Gennes's reptation model as the base it was possible to determine the inter-diffusion profile in the weld line interface and the interpenetration along the thickness. The critical interpenetration was determined by crack length value. Finally reducing the melt temperature the sample solidified faster, and the molecular inter-diffusion and interpenetration in the weld line interface will be reduced too. The lower the interpenetration the lower the fracture tensile for thermoplastic polymer Polystyrol 158K by Basf. It was determined a relation, as a melt temperature function, between the total interpenetration in the sample thickness center and the critical interpenetration related to crack from tensile tests. So a program become possible to determined the crack length with good accuracy.

Key-words: Molecular diffusion; Cooling time; Weld line; Molecular interpenetration.

¹ *Contribuição técnica ao 62º Congresso Anual da ABM – Internacional, 23 a 27 de julho de 2007, Vitória – ES, Brasil.*

² *Prof. Dr. dem2rpb@joinville.udesc.br, UDESC-CCT / Joinville.*

³ *Ms.C. Eng. Materiais, flaviokalnin@expresso.com.br, UDESC-CCT / Joinville.*

1 INTRODUÇÃO

No processamento de polímeros, o termo linha de solda é usado para designar a interface criada quando dois fluxos de polímeros se encontram dentro da cavidade do molde e tal fenômeno é consequência direta da geometria do produto.^(1,2) Segundo Dói et al.⁽³⁾ a reconstituição da interface criada pela linha de solda pode ser descrita pelo modelo do tubo aplicado a polímeros lineares. Modelo este que teve seu início com os estudos de Rouse, que desprezando a interação intermolecular, contribuiu de maneira relevante para o entendimento da dinâmica molecular e seus parâmetros estatísticos. Outro pesquisador importante nesta área foi Zimm que aplicou os conceitos de Rouse em soluções poliméricas levando em consideração a interação solvente/polímero. De Gennes⁽⁴⁾ é o nome mais conhecido porque foi dele a conclusão que a interação intermolecular cria um tubo imaginário que limita o caminho da molécula dentro da massa polimérica, estava criado o modelo do tubo.

Dentre os estudos sobre linha de solda podem ser citados Koster⁽⁵⁾ e Chang et al.⁽⁶⁾ que analisaram as variáveis de maior relevância na reconstituição de uma interface de linha de solda como velocidade de injeção, temperatura de injeção e do molde, tempo e pressão de recalque, pressão de injeção, contra-pressão e viscosidade.

Wool et al.⁽⁷⁾ e Pecorini⁽⁸⁾ também se utilizaram da difusão molecular em uma interface de linha de solda proposta por Dói para estudar sua reconstituição.

O'Brien-Soucy et al.⁽⁹⁾ analisaram a perda de resistência em amostras com linha de solda em função da trinca produzida e Shaoyun et al.⁽¹⁰⁾ também empreenderam esforços similares.

A linha de solda e as variações que esta produz nas propriedades do material têm solapado o desenvolvimento de muitos materiais com excelentes propriedades em função disto, tal fenômeno, que pode vir a ser um defeito dependendo do material, do processo e da geometria, tem se tornado o calcanhar de Aquiles para muitos materiais.

2 TEORIA APLICATIVO E RESULTADOS

A solução analítica da Equação 1, pode ser encontrada em trabalhos recentes. Esta equação trata sobre o resfriamento de uma placa de material plástico a uma determinada temperatura no instante $t=0$, a qual é aproximada por duas placas metálicas com temperatura constante e menor que a temperatura da placa plástica. No decorrer do tempo a placa de material plástico vai resfriando e após um determinado tempo " t " a placa plástica passará a ter a mesma temperatura das placas metálicas. Dividindo a metade da espessura da placa plástica em várias camadas e considerando o centro da placa como $y=0$, pode-se determinar analiticamente a partir da Equação 1 o perfil da temperatura em função da variação da espessura das camadas e do tempo de resfriamento.⁽¹¹⁾ Por semelhança, esta equação é utilizada com boa aproximação, para determinar o tempo de resfriamento, solidificação e desmoldagem de peças produzidas pelo processo de moldagem por injeção.

$$\frac{T_{\text{mol}} - T(y,t)}{T_{\text{mol}} - T_{\text{inj}}} = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\left(n + \frac{1}{2}\right)\pi} \exp \left[-\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \pi^2 \frac{\alpha t}{e^2} \right] \cos \left[\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\pi y}{e} \right] \quad (1)$$

O tempo total de resfriamento é o tempo necessário para que as paredes do produto possam atingir a temperatura do molde. O tempo de solidificação é o tempo no qual o material atinge a T_g ou T_m . Tempo de desmoldagem é o tempo necessário para abrir o molde e realizar a extração do produto sem que aja distorção geométrica da peça. Em todos estes casos o tempo foi determinado para o centro das paredes ($y=0$). Em um trabalho experimental de moldagem por injeção, foi realizada a variação da pressão e do tempo de recalque para duas cavidades com forma de corpo de prova ASTM D 638. Cada cavidade tinha um canal de ataque próprio, um com 1,1 mm e outro com 2,2 mm. Determinou-se o aumento da massa dos corpos de prova e dos canais de distribuição. No instante em que os canais de ataque solidificaram as massas dos corpos de prova estabilizaram. O tempo de recalque em que ocorreu isto é coerente com o tempo de solidificação do canal de ataque determinado por diversas equações inclusive pela Equação 1.^(12,13) Kalnin (2) avaliou o resultado analítico da Equação 1, no que diz respeito à variação da temperatura em função do tempo, com o resultado obtido com um simulador de fluxo, as diferenças dos valores foram inferiores a 1,8%.

Existe um parâmetro intrínseco do material que é a difusividade térmica (α), que pode ser determinada a partir da Equação 2, apesar de ser considerado constante na equação acima a difusividade também depende da variação da temperatura.

$$\alpha = \frac{k}{\rho C_p} \quad (2)$$

Foi desenvolvido neste laboratório, um aplicativo denominado CrackDim em linguagem de programação *Visual Basic*, que resolve as Equações 1 e 2. O formato da janela de entrada de dados, assim como suas respectivas unidades estão indicadas na Figura 1. Os dados de entrada correspondem a parâmetros de processo assim como propriedades intrínsecas do polímero termoplástico de estrutura amorfa, designado comercialmente por Polystyrol 158 K, produzido pela Basf.

ENTRADA DE DADOS		
Tinj (°C)	Tmol (°C)	Tref (s)
230	51	21.3
Tg (°C)	ESP. (mm)	
100	3.35	
k (W / m°C)	Cp (J/kg°C)	ρ (g/cm3)
0.155	1975	0.955
Ajustar Gráfico (T × y)		
T(y,0)	T(y,t)	T(y1,t1)
Ajustar Gráfico (T × t)		
T(0,t)	T(y,t)	T(y1,t1)

Figura 1- Janela de entrada de dados para solução da Equação 1.

Na Figura 2 está sendo apresentada a solução das Equações 1 e 2, realizada pelo aplicativo. Nesta figura está representada a variação da temperatura em função do tempo de resfriamento. Estão indicadas nas Figuras 1 e 2, a temperatura de injeção (T_{inj}), a temperatura de transição vítrea (T_g) e a temperatura do molde (T_{mol}). A condutividade térmica (k), calor específico (C_p) e massa específica (ρ) e a espessura do corpo de provas (ESP.). T_{ref} (s), é o tempo de resfriamento o qual se deseja observar na figura, estes são os parâmetros configurados na janela de entrada de dados indicados na Figura 1. Seis curvas com tempos definidos indicam a variação da temperatura para cada posição do centro ($y=0$) até a face externa do

corpo de provas ($y=1,675$ mm). Como pode ser visto nesta figura, para o instante $t=0$, a superfície que está encostada no molde metálico resfria rapidamente, convergindo à temperatura do molde. À medida que o tempo vai passando as linhas isócronas descrevem o comportamento da temperatura para cada camada. Raciocínio semelhante está representado na Figura 3, entretanto, está indicada na figura a variação da temperatura em função do tempo de resfriamento.

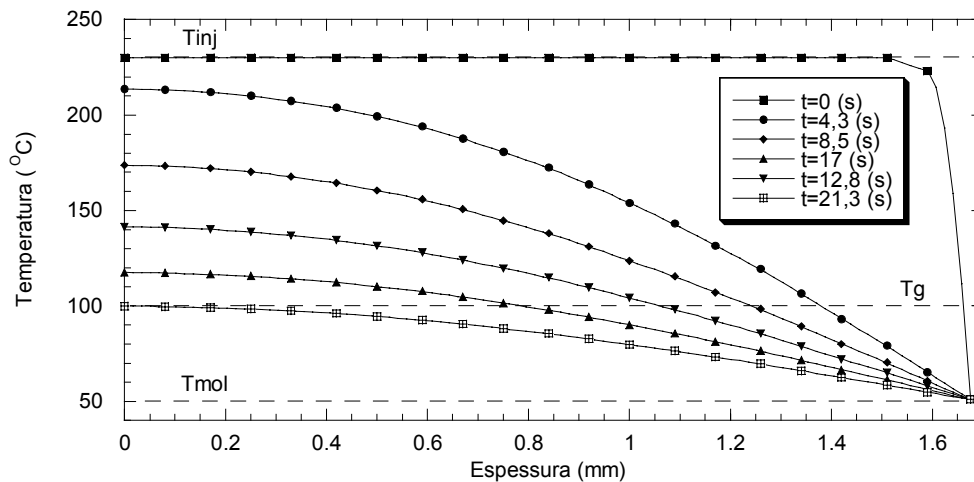


Figura 2 - Variação da temperatura em função da espessura do corpo de provas para diversos tempos de resfriamento.

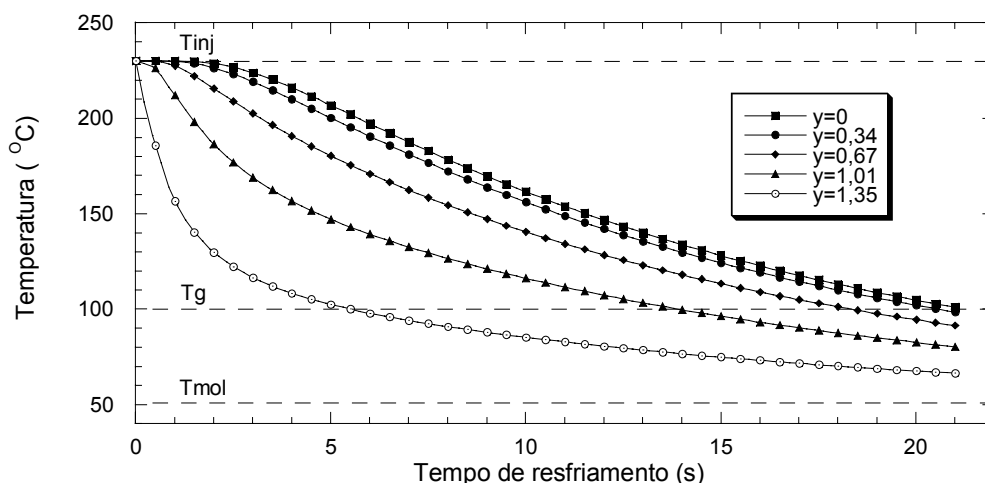


Figura 3 - Variação da temperatura em função do tempo de resfriamento, para varias camadas da espessura.

Nesta figura fica clara a identificação dos tempos de solidificação, pois, a interseção entre a reta da T_g com as demais curvas permite determinar qual o tempo de solidificação de cada camada. Deve-se levar em conta que a superfície da peça atinge instantaneamente a temperatura do molde, então para $y=1,675$ mm e $t=0$ s, $T=T_{mol}$. A camada central terá um tempo maior de resfriamento do que as demais.

Conhecendo a temperatura, o tempo de solidificação e o número de camadas, pode-se calcular a difusão molecular na interface de linha de junção dos fluxos a partir da Equação 3. Segundo Wool et al.,⁽⁷⁾ é preciso haver primeiro: rearranjo das superfícies, aproximação, molhabilidade, a difusão e a randomização das macromoléculas, para se obter uma boa reconstituição da interface.

$$D_G = \left(\frac{\rho RT}{270} \right) \left(\frac{M_C}{M} \right)^2 \left(\frac{R_g^2}{M} \right) \left(\frac{M}{M_C} \right)^{3,4} \left(\frac{1}{\eta_0(M)} \right) \quad (3)$$

Os termos da Equação 3 são os seguintes: a massa específica (ρ), a constante universal dos gases (R), a temperatura (T), a massa molar (M), a massa molar crítica (M_C), o raio de giração (R_g) e a viscosidade a taxa de cisalhamento nula em função da massa molar e da temperatura ($\eta_0(M)$). Este último termo da Equação 3, pode ser descrito pela Equação 4 de William Landel Ferry,⁽⁷⁾ os parâmetros desta equação podem ser obtidos na literatura e nas bibliotecas dos simuladores de fluxo.

$$\eta_0(T) = D_1 \exp \left[\frac{-A_1(T - \dot{T})}{A_2 + (T - \dot{T})} \right] \quad (4)$$

As constantes da equação acima são: $D_1=2,25 \cdot 10^{12}$; $A_1=28,3$; $A_2=51,6$, fonte C-MOLD.⁽¹⁴⁾ Inserindo a Equação 4 na Equação 3, resulta na equação geral do coeficiente de difusão dado pela Equação 5. As temperaturas utilizadas nesta equação deverão ser as mesmas da solução da Equação 1, assim fica condicionado o respectivo tempo de resfriamento à temperatura e ao coeficiente de difusão.

$$D_G = \left(\frac{\rho RT}{270} \right) \left(\frac{M_C}{M} \right)^2 \left(\frac{R_g^2}{M} \right) \left(\frac{M}{M_C} \right)^{3,4} \left(\frac{1}{2,25 \cdot 10^{12} \exp \left[\frac{-28,3(T - 373,15)}{51,6 + (T - 373,15)} \right]} \right) \quad (5)$$

Para se calcular a interpenetração (χ) para cada camada, conforme Equação 6, é necessário calcular a área abaixo da curva de $2 \cdot D_G \times t$ e extrair a raiz quadrada. A Figura 4 apresenta a variação do coeficiente de difusão em função do tempo de difusão para $y=0$ e para uma temperatura de injeção de 230°C , deve-se notar que o tempo de difusão é o mesmo que o tempo de solidificação. Este procedimento deve ser realizado para todas as camadas e em todas as temperaturas de injeção. O resultado da interpenetração em função da espessura está indicado na Figura 5.

$$\chi^2 = 2D_G \cdot t \quad (6)$$

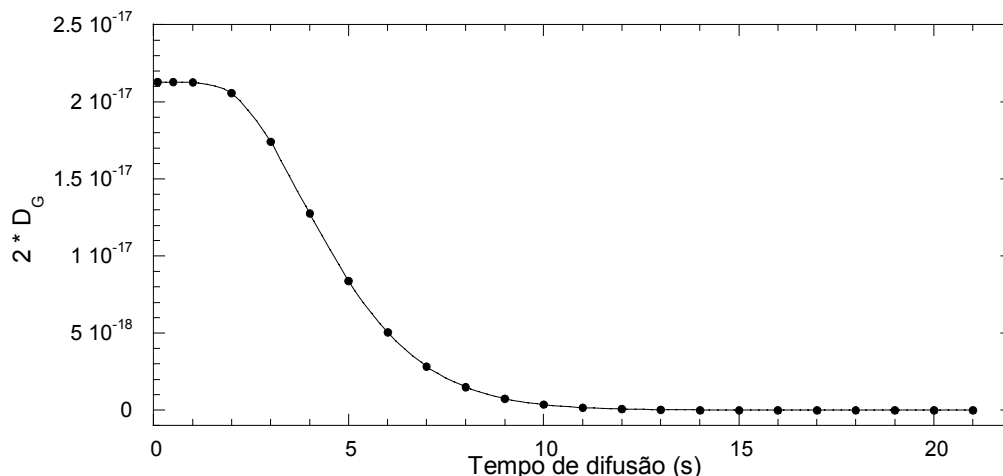


Figura 4- Variação do coeficiente de difusão em função do tempo, $T=230^\circ\text{C}$, $y=0$.

Pode-se observar que no centro do corpo de provas a interpenetração é máxima e designada (χ_{∞}), na região próxima a parede do molde onde a temperatura da superfície do corpo de prova resfria rapidamente a interpenetração é nula. É interessante determinar um Δt adequado para evitar a formação de um ombro na curva próximo a 0,2 mm da parede.

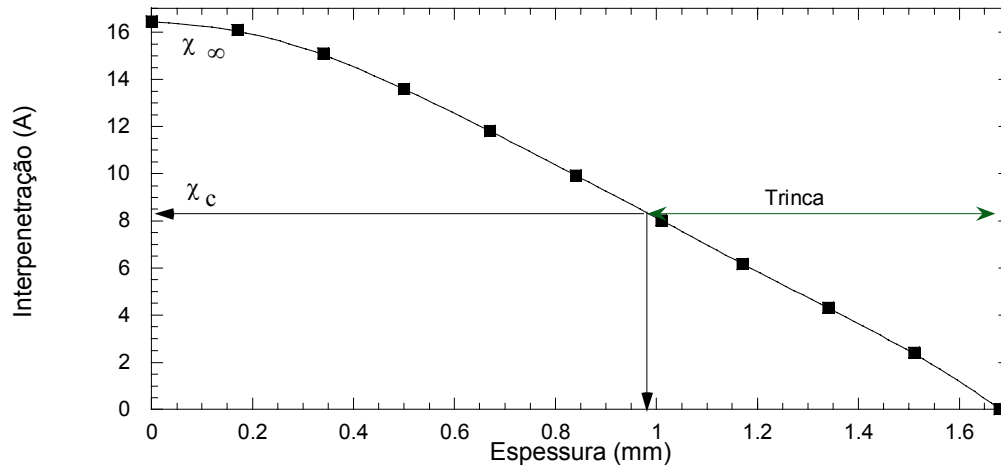


Figura 5- Variação da interpenetração em função da espessura, para $T=230^{\circ}\text{C}$.

A partir de corpos de provas ASTM D 638 moldados pelo processo de injeção e caracterizados por ensaio mecânico de tração conforme trabalho desenvolvido por Kalnin⁽²⁾ cujos resultados estão descritos na Tabela 1, foi possível, com ajuda da Equação 7, determinar as dimensões das trincas efetivas e os seus respectivos desvios padrão.

$$4a^2 - 32,7a + 43,55 \left(1 - \frac{\sigma_w}{43,6} \right) = 0 \quad (7)$$

Medindo a trinca da parede externa do corpo de prova sentido centro, a interseção com a curva de interpenetração, como indicado na Figura 5, permite determinar o parâmetro de interpenetração crítica (χ_c), sendo que a interpenetração máxima ocorre no centro da placa. Os valores assim determinados para a interpenetração máxima e crítica para todas as temperaturas de ensaio estão indicados na Tabela 1.

Tabela 1: Valores da temperatura de injeção, σ_w , σ_0 , trinca e respectivos desvios padrão

Temperatura de injeção (°C)	σ_w (MPa)	Desvio Padrão (MPa)	Trinca (mm)	Desvio Padrão (mm)	χ_c (Å)	χ_{∞} (Å)
180,0	22,56	2,37	0,703	0,086	8,17	16,49
204,0	26,74	0,74	0,552	0,026	16,24	41,02
215,0	28,82	1,32	0,479	0,045	19,87	57,27
230,0	31,77	1,06	0,378	0,036	23,59	84,84
245,0	34,57	1,25	0,285	0,041	24,94	118,75
260,0	37,04	1,74	0,205	0,056	24,19	158,91
280,0	38,65	1,33	0,154	0,042	23,16	221,81
Sem linha de solda	$\sigma_0 =$ 43,60	1,04	0,000			

A Figura 6 representa a relação entre o parâmetro de interação crítico e máximo em função da variação da temperatura de injeção.

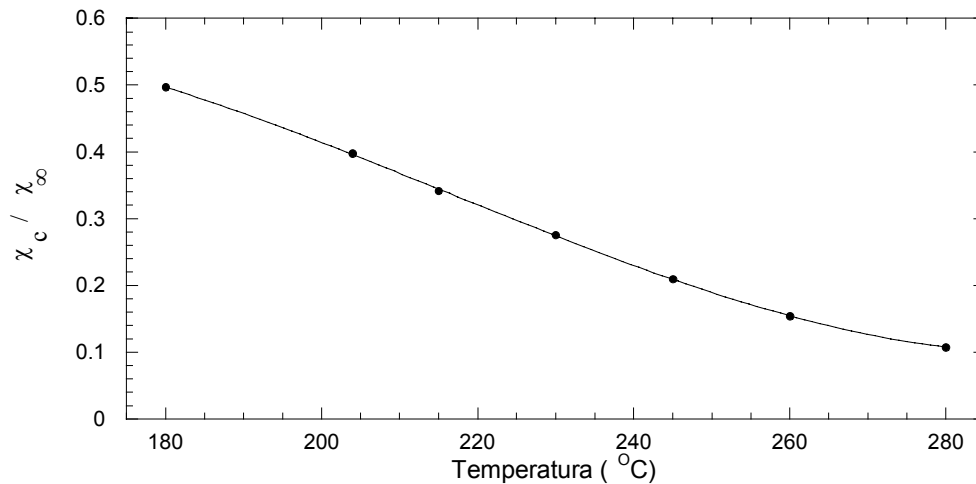


Figura 6- Relação entre o parâmetro de interação crítico e máximo em função da temperatura de injeção.

Como pode ser observado a medida em que a temperatura aumenta a relação entre χ_c/χ_∞ decresce, isto significa que o parâmetro de interpenetração crítico se aproxima do valor máximo, ou seja, melhora a interpenetração da interface. É interessante este comportamento visto que pode ser descrito por um polinômio do terceiro grau e em função da temperatura de injeção, conforme indicado pela Equação 8. Desta forma pode-se obter o valor da interpenetração crítica para temperaturas de processamento intermediárias.

$$\frac{\chi_c}{\chi_\infty} = -1,861 + 0,039513T - 0,00020225T^2 + 3,0803 \cdot 10^{-7} T^3 \quad (8)$$

As Equações 5, 6 e 8 estão inseridas no aplicativo CrackDim a continuação da Figura 1 é a Figura 7. Os valores utilizados estão indicados na figura: a massa molar (M), a massa do monômero (m_0), a massa crítica (M_c) e o raio de giração (R_G) este último calculado pela Equação 9.

$$R_G^2 = \frac{N \cdot b^2}{6} \quad (9)$$

Onde “N” é o grau de polimerização e igual a $N=M/m_0$, valores indicados na Figura 7 e “b” é o comprimento do mero, $b=2,45 \text{ \AA}$.

Figura 7- Janela de entrada de dados para cálculo do tamanho da trinca.

O resultado final da simulação realizada com o aplicativo CrackDim, está representado na Figura 8, onde os pontos experimentais estão indicados com seus respectivos desvios padrão. Os demais pontos e a curva *spline* fazem parte do resultado apresentado pelo aplicativo. Como pôde ser visto o programa descreve e prevê coerentemente o tamanho da trinca para temperaturas de processamento compreendidas entre 180 e 280°C. Variando-se a temperatura do molde para mais até 70°C ou para menos até 20°C, surgirão duas curvas, uma abaixo e outra acima da curva estabelecida para 51°C. Entretanto, estas curvas estão muito próximas entre si e dentro do desvio padrão dos valores experimentais, variação máxima de $\pm 0,012$ mm. Seria interessante realizar ensaios com corpos de prova com espessuras diferentes para estabelecer a relação entre os principais parâmetros como: temperatura de injeção e do molde com o tamanho da trinca, esta última, obtida a partir de ensaios de tração. Segundo Kalnin,⁽²⁾ o percentual de perda de tensão de ruptura foi de 11,35% para a temperatura de 280°C e de 48,26% para a temperatura de 180°C.⁽²⁾

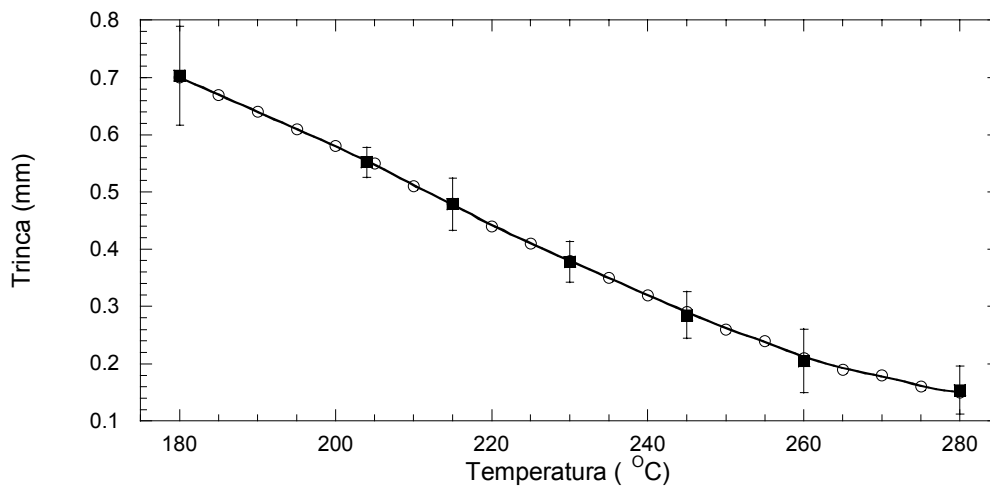


Figura 8- Comparação entre resultados experimentais e simulados, predição do tamanho da trinca em função da variação da temperatura.

3 CONCLUSÕES

No desenvolvimento deste trabalho foi possível reproduzir e mesmo estimar a dimensão da trinca para toda e qualquer temperatura de injeção compreendida entre 180 e 280°C. Foram utilizadas equações que tratam do resfriamento de placas, que descrevem o coeficiente de difusão e a interpenetração molecular. Os resultados obtidos com o aplicativo CrackDim foram coerentes com os resultados experimentais, o aplicativo também permitiu calcular o tamanho da trinca para diferentes temperaturas do molde, ao aumentar a temperatura reduziu-se à dimensão da trinca, diminuindo-se a temperatura aumenta a trinca. Os desvios padrão calculados para as trincas experimentais foram muito importantes e as estimativas do tamanho das trincas em função da variação da temperatura do molde são muito próximas. Foi possível graças à relação entre a interpenetração máxima e crítica em função da variação da temperatura estabelecer uma relação entre a teoria da reptação e a trinca em corpos de prova que possibilitou descrever o resultado experimental. A equação foi obtida a partir de resultados experimentais de ensaios de tração aplicados apropriadamente nos gráficos de interpenetração. Uma das principais contribuições deste trabalho foi a sua aplicação em problemas práticos. Os resultados que foram apresentados permitirão aos profissionais que atuam na

área de projetos de produtos ou que atuam na área de cálculo estrutural ou simulação de fluxo, estimar e quantificar a dimensão da trinca bem como a tensão de ruptura do material na região da linha de solda a partir de parâmetros de processo e do produto.

REFERÊNCIAS

- 1 PINTO, M. A. G.; BOM, R. P. Aspectos estéticos e estruturais de termoplásticos injetados: linhas de junção e de solda fria, **Plástico Industrial**, Ed. Aranda, p. 146, 153, setembro de 2001.
- 2 KALNIN, F. A. Análise da perda de resistência a tração em amostras com linha de solda, Dissertação de Mestrado, Ciência e Engenharia de Materiais, Universidade do Estado de Santa Catarina, Centro de Ciências Tecnológicas, p.160, Joinville, 2006.
- 3 DOI, M.; EDWARDS, S. F.; **The theory of polymer dynamics**, 1^a. ed., New York, Oxford University Press, 1986.
- 4 DE GENNES, P. G.; **Scaling concepts in polymers physics**, 1a. ed., New York, Cornell University Press, 1979.
- 5 KOSTER, R. P.; Importance of injection molding parameters for mechanical performance of cold flow weld line, Delft University, 1999.
- 6 CHANG, T.; FAISON, E.; Optimization of weld line in injection molding via an experimental design approach, Iowa State University, 1998.
- 7 WOOL, R. P.; O'CONNOR, K. M.; A Theory of Crack Healing in Polymers, *Journal Applied Physics* 52(10), p. 5951, october 1981.
- 8 PECORINI, T. J.; A fracture mechanics approach to weld line fracture in a amorphous cellulose acetate propionate, *Polymer Engineering and Science*, 37, No. 2, 1997.
- 9 O'BRIEN-SOUCY, A. K.; BARRY, C. M. F.; STACER R. G.; The development of weld line strength in injection molded PMMA, University of Massachusetts, 1999
- 10 SHAOYUN, G.; AIT-KADI, A.; BOUSMINA, M. A.; A modified model predictions and experimental results of weld line strength in injection molded PS/PMMA blends, Elsevier, 2004.
- 11 AGASSANT, J.F., AVENAS, P., SERGENT, J.P., VICENT, M., **La Mise em Forme des Matières Plastiques**, 3 ed., Paris: Ed. Tec & Doc Lavoisier, 1996, p.137-147.
- 12 DA CRUZ, A.C., Determinação do Tempo de Solidificação de Peças Termoplásticas Moldadas pelo Processo de Injeção, Dissertação de Mestrado, Ciência e Engenharia de Materiais, Centro de Ciências Tecnológicas, Universidade do Estado de Santa Catarina, UDESC, p. 21 e 69, julho 2005.
- 13 BOM, R. P.; Efeito da Pressão e do Tempo de Recalque no Empacotamento de Peças Injetadas, Monografia, Ciência e Engenharia de Materiais, Centro de Ciências Tecnológicas, Universidade do Estado de Santa Catarina, UDESC, p. 22-27, junho 2002.
- 14 **C-MOLD Design Guide**: A Resource for Plastics Engineers, Advanced CAE technology, Inc, Ithaca, NY, 1998.