

Haftmoment im Partikel-Wand Kontakt
Simulation und Messung des Haftmomentes in gasförmiger
Umgebung

Dissertation zur Erlangung eines Doktorgrades

in der
Fakultät für Maschinenbau und Sicherheitstechnik
der
Bergischen Universität Wuppertal

vorgelegt von
Diplom-Ingenieur Alexander Haarmann
aus Velbert (geb. in Gelsenkirchen)

Wuppertal 2016

Wuppertaler Reihe zur Umweltsicherheit

Alexander Haarmann

Haftmoment im Partikel-Wand Kontakt

Simulation und Messung des Haftmomentes
in gasförmiger Umgebung

Shaker Verlag
Aachen 2016

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Wuppertal, Univ., Diss., 2016

Copyright Shaker Verlag 2016

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-4880-3

ISSN 1861-1001

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • E-Mail: info@shaker.de

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter im Fachgebiet Sicherheitstechnik/Umweltschutz an der Bergischen Universität Wuppertal in den Jahren 2010 bis 2016.

Ich möchte Herrn Professor Dr.-Ing. habil. Eberhard Schmidt für die Bereitstellung des Themas, viele konstruktive Gespräche, die Schaffung eines von Freiheit und Zusammenhalt geprägten Arbeitsklimas und das in mich gesetzte Vertrauen aufrichtig danken.

Weiter danke ich Ihm, Herrn Professor Dr. rer. nat. Joachim Marzinkowski, Frau Professorin Dr.-Ing. habil. Anke Kahl und Herrn PD Dr.-Ing. habil. Achim Dittler für die Bildung der Prüfungskommission.

Ein besonderer Dank gebührt meinen Kollegen für das immer freundliche und kooperative Miteinander, das ich erleben durfte. Ich möchte Frau Heike Kloke-Affeld für all den Beistand bei Beschaffungen, Dienstreisen und dem alltäglichen Kampf mit dem Verwaltungsapparat danken.

Für die Korrektur meines Manuskriptes möchte ich Herrn Tim Londershausen, Herrn Matthias Kaul und Frau Marzinkowski ganz herzlich danken.

Besonderer Dank gebührt auch Herrn Kolja Wizent, der sich immer wieder zuverlässig um allerhand „Kleinigkeiten“ gekümmert hat, seien es linkshändige Designerkoordinatensysteme gewesen, oder umfangreiche Versuche am ESEM, in dessen Bedienung er nun wahrlich geübt ist.

Der größte Dank aber gebührt meiner Familie, meiner Frau Nadine, meinem Sohn Fabian und auch unserem Tytus, die vor allem in der Schlussphase der Arbeiten viel zu oft auf den Ehemann, den Papa und das Herrchen verzichten mussten. Sie haben mich immer unterstützt, alles mit Geduld ertragen und für mich dem Tun einen Sinn gegeben. Danke!

Velbert, im Oktober 2016

Alexander Haarmann

Zusammenfassung

Das Verhalten von Partikeln und Partikelkollektiven ist in vielerlei Hinsicht von Interesse. Sei es von Seiten der Industrie, die sich mit der Verarbeitung, der Handhabung und dem Transport von pulverförmigen Stoffen beschäftigt, oder von Seiten des Arbeits- und Umweltschutzes, wo die Wirkungen von nanoskaligen Partikeln auf Menschen und Umwelt erforscht werden. Um das Verhalten von Partikeln und Partikelkollektiven zu verstehen und auch in Simulationen voraussagen zu können, ist ein umfassendes Verständnis der Wechselwirkungen zwischen Partikeln und Partikeln und ihrer Umgebung unverzichtbar.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich vor diesem Hintergrund mit dem Kontakt zwischen einer Partikel und einer Wand in gasförmiger Umgebung. Die Partikel kann dabei glatt oder mit einer Rauheit ausgestattet sein. Um die Wechselwirkungen bei diesem Kontaktfall zu untersuchen, wurde eine Simulation erstellt. Sie berechnet zunächst die Haftkraft zwischen der Partikel und der Wand. Die Haftkraft beruht dabei auf den van der Waals-Wechselwirkungen der Atome der Kontaktpartner. Die berechneten Haftkraftwerte werden mit Werten aus der Literatur verglichen.

Es ist möglich, die Partikel in der Simulation abzuflachen. Das dient dazu, die Auswirkung der Vergrößerung des Kontaktradius zu betrachten. Abflachungen können an Partikeln durch mechanische Beanspruchung oder durch die Kräfte im Kontaktfall auftreten.

Mit der berechneten Haftkraft und dem Kontaktradius wird ein Moment berechnet. Dieses Moment wirkt einer angreifenden externen Kraft entgegen und wird Haftmoment genannt. Die Ausweichbewegung des Rollens sollte in den meisten Fällen die geringste Kraft erfordern. Aus diesem Grund ist das Haftmoment von Interesse. Die simulierten Werte werden mit Werten aus der Literatur verglichen.

Weiter wurde das Haftmoment von Partikeln mithilfe der Daten aus Versuchen in einem Environmental Scanning Electron Microscope (ESEM) berechnet. Hierzu wurde die Widerstandskraft des Kontaktes gegen seitliche Beanspruchung und die Kontaktfläche zwischen Partikel und Wand gemessen. Aus diesen Werten, Kraft und Hebelarm, lässt sich dann das Haftmoment für die Partikel berechnen. Der verwendete Aufbau, die Vorgehensweise und die Analysesoftware zur Kraftmessung werden vorgestellt. Die experimentellen Werte werden mit den simulierten Werten verglichen und ein Resümee gezogen.

Abstract

The behavior of particles and particle collectives is interesting in many ways. The industry wants to process, handle and transport powdery bulk solids work safety and environmental protection wants to know how nanoscale particles effect people and environment and does research in this field. To understand the behavior of particles and particle collectives and predict it through simulations one has to have a comprehensive understanding of the interactions between particles themselves and particles and their surroundings.

On that background this present work deals with the contact between a particle and a wall in gaseous environment. The particle can be smooth or equipped with a roughness. To investigate the interactions in such a contact case a simulation has been developed. It calculates the adhesion force between particle and wall. The adhesion force is depending on the van der Waals-interaction. The calculated values are compared to data from literature.

It is possible to flatten the particle in the simulation to investigate the effect of an increase of the contact radius. A flattening can occur because of mechanical stress or just because of the forces acting in the contact case.

With the calculated adhesion force and the contact radius it is possible to calculate a momentum. This momentum opposes an external force and is called adhesion momentum. The elusive motion of rolling should require least energy in most cases. Because of that the adhesion momentum is interesting. The calculated values are compared to literature data.

Further the adhesion momentum of several particles was calculated using data achieved through experiments with an Environmental Scanning Electron Microscope (ESEM). The resisting force of the contact against a lateral stress and the contact area between particle and wall are measured. From this data, the force and the lever arm, the adhesion momentum can be calculated. The used setup, the method and the analysis software for the force measurement is presented. The measured values are compared to the simulated ones and a resume is drawn.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Simulation	4
2.1	Grundlegende Funktionen	4
2.1.1	Abflachung	4
2.1.2	Abtastroutinen	6
2.1.3	Kugelkalottenstumpf	13
2.1.4	Porosität	17
2.1.5	Rauheit	19
2.1.6	Dichtenormierung	23
2.2	Haftkraft	28
2.2.1	Verwendeter Haftmechanismus beim Partikel-Wand Kontakt	28
2.2.2	Simulationsergebnisse Haftkraft	33
2.2.3	Vergleich mit ausgewählten Berechnungsergebnissen	39
2.2.4	Vergleich mit ausgewählten Experimenten	46
2.3	Haftmoment	51
2.3.1	Grundlagen	51
2.3.2	Simulationsergebnisse Haftmoment	57
2.3.3	Vergleich mit Werten aus der Literatur	61
2.4	Diskussion der Simulation	64
3	Experimente	68
3.1	Messtechnik	68
3.1.1	Das Environmental Scanning Electron Microscope (ESEM)	68
3.1.2	Verwendete Sensoren	73
3.1.3	Mikromanipulatoren	74

3.1.4 Kraftmesssystem	75
3.2 Ergebnisse	82
3.2.1 Erste Versuche und Erfahrungen	82
3.2.2 Arbeitsweise der Messsoftware	85
3.2.3 Polymethylmethacrylat	92
3.2.4 Bronze	104
3.2.5 Partikeln in Mulden	106
3.3 Vergleich zwischen Simulation und Experiment	111
3.3.1 PMMA Partikeln mit Abflachung	111
3.3.2 Partikeln in Mulden	117
3.4 Diskussion der experimentellen Untersuchungen und Ergebnisse	119
4 Zusammenfassung und Ausblick	122
Literaturverzeichnis	126
Formelzeichen	130
Anhang	132
Lebenslauf	148

Abbildungsverzeichnis

Abschnitt 2.1:

2.1	Darstellung des Abflachungsfaktors	5
2.2	Die drei Abtastroutinen	7
2.3	Zur Erklärung des kubisch-raumzentrierten Aufbaus	10
2.4	Zur Erklärung des kubisch-flächenzentrierten Aufbaus	12
2.5	Unterschied zwischen den Variablentypen <i>float</i> und <i>double</i>	14
2.6	Einfluss des Wandabstandes auf die Haftkraft des betrachteten Atoms	16
2.7	Einsatzmöglichkeiten der Porosität	18
2.8	Zur Lage des Rauheitsmittelpunktes auf der Partikeloberfläche	20
2.9	Zur Problematik des Haftkraftverlustes bei der Rauheit bei maximaler Abflachung	22
2.10	Problemlösung des Haftkraftverlustes und Beispielbild der Rauheit	23
2.11	Ergebnisse der Dichtenormierung	25

Abschnitt 2.2:

2.12	Ergebnisse der Simulation einer Partikel mit 100 nm Durchmesser	35
2.13	Einfluss der Variation der Eingangsgrößen auf die Haftkraftberechnung	37
2.14	Vergleich mit den berechneten Haftkraftwerten nach Sonnenberg	41
2.15	Vergleich mit den experimentellen Haftkraftwerten der Universität Magdeburg	47
2.16	Vergleich mit den experimentellen Haftkraftwerten des KIT	50

Abschnitt 2.3:

2.17	Schematische Darstellung des Haftmomentes	52
2.18	Ergebnisse der Haftmomentsimulation für eine 100 nm Gold Partikel	53
2.19	Schematische Darstellung der drei signifikanten Stellen in der Haftmomentkurve	54
2.20	Zur Berechnung des Hebelarms des Haftmomentes	55
2.21	Einfluss der Abflachung und der Rauheit auf das Haftmoment	58
2.22	Anzahlverteilungssumme des Haftmomentes bei variierenden Abflachungen	60

Abschnitt 2.4:

2.23	Verteilung mehrerer Rauheitsmittelpunkte auf der Partikel	67
------	---	----

Abschnitt 3.1:

3.1	Schematischer Aufbau eines Rasterelektronenmikroskops	70
3.2	Aufstellung einiger durch den Elektronenstrahl erzeugten Signale	71
3.3	Aufbau zur Kraftmessung – Draufsicht	75
3.4	Aufbau zur Kraftmessung – seitliche Ansicht	76
3.5	ESEM Bild aus der laufenden Kraftmessung	77
3.6	Übersicht über die Ausgabewerte der Kraftmesssoftware	81

Abschnitt 3.2:

3.7	ESEM Aufnahmen einiger untersuchter Partikeln	83
3.8	Aufnahme eines PMMA Rollversuches (Versuch 1)	86
3.9	Ergebnisse Versuch 1, drei gleiche Auswertungen	87
3.10	Ergebnisse Versuch 1, drei unterschiedliche Größen der Kontrollfläche	88
3.11	Ergebnisse Versuch 1, drei unterschiedliche Positionen der Kontrollfläche	89
3.12	Ergebnisse Versuch 1, variierende Größe und Positionen der Kontrollfläche	90
3.13	Ergebnisse Versuch 1, Kurvenglättung durch die Messsoftware	91
3.14	Darstellung der Abflachungen	95
3.15	Aufnahmen eines PMMA Rollversuches (Versuch 2)	98
3.16	Messkurve und Glättung Versuch 2	99
3.17	Aufnahmen eines PMMA Rollversuches (Versuch 3)	100
3.18	Ergebnisse Versuch 3	101
3.19	Aufnahmen eines PMMA Rollversuches (Versuch 4)	102
3.20	Ergebnisse Versuch 4	103
3.21	Aufnahmen eines Bronze Rollversuches (Versuch 5)	104
3.22	Ergebnisse Versuch 5	105
3.23	Schematische Darstellung einer Partikel in einer Mulde	107
3.24	Aufnahmen PMMA Partikel in einer Mulde (Versuch 6)	108
3.25	Ergebnisse Versuche 6 und 7	109
3.26	Ergebnisse Glas- und Bronzepartikel in Mulde	110

Abschnitt 3.3:

3.27	Zur Vermessung der abgeflachten Partikeln im ESEM	112
3.28	Vergleich zwischen gemessenen und simulierten Haftmomenten für PMMA	116

Tabellenverzeichnis

2-1	Ergebnisse der Dichtenormierung	26
2-2	Abhängigkeit der Haftkraft vom Kontaktabstand in Theorie und Simulation	37
2-3	Vergleich zwischen Rauheits- und Partikelhaftkraft	38
2-4	Vergleich mit den berechneten Haftkraftwerten nach Sonnenberg	39
2-5	Vergleich mit den experimentellen Haftkraftwerten nach Krupp und Böhme	42
2-6	Vergleich mit den experimentellen Werten nach Sitti	64
3-1	Erwartete Haftmomente bei 41,1 µm Durchmesser	78
3-2	Darstellung der gemessenen Abflachungen	94
3-3	Vergleich von gemessenen und simulierten Haftmomenten für PMMA	113
3-4	Vergleich von gemessenen und simulierten Haftmomenten für Partikeln in Mulden	118