ZUSAMMENFASSUNG ZUR DISSERTATION

Crack Identification using Dynamic Extended Finite Element Method and Thermal Conductivity Engineering for Nanomaterials

DISSERTATION

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktor-Ingenieur

an der Fakultät Bauingenieurwesen

der Bauhaus-Universität Weimar

vorgelegt von

M. Eng. Chao Zhang

aus China

Status des Doktoranden: intern

Mentor: Prof. Dr.-Ing. Timon Rabczuk

Weimar, Januar 2018

Problemstellung und Zielsetzung

1 Die Arbeit setzt sich aus vier unterschiedlichen Beiträgen zusammen, deren Problemstellungen und Zielsetzung nachgehend zusammengefaßt sind. Die erste Problemstellung befaßt sich mit der Identifizierung von Rissen und Fehlstellen mit Hilfe von effizienten und robusten numerischen Verfahren. Die anderen drei Beiträge befassen sich mit der Bestimmung von mechanischen und thermischen Werkstoffeigenschaften für Verbundwerkstoffe, wobei in diesem Zusammenhang insbesondere das thermische Verhalten spezieller Verstärkungen untersucht werden sollte. Dies ist beispielsweise wesentlich für das thermische Management von Batterien.

2 Die Identifizierung von Schwachstellen in Strukturen spielt eine wesentliche Rolle bei der Instandhaltung und Qualitätssicherung von Ingenieurtragwerken. Zerstörungsfreie Werkstoffprüfungen werden zu diesem Zweck eingesetzt. Allerdings sind diese Verfahren oft nicht in der Lage, detaillierte Informationen über Größe und Lage der Fehlstellen zu liefern. Daher werden häufig komplementär numerische Rechenverfahren verwendet. Allerdings ist aufgrund der Schlechtgestelltheit des zugrunde liegenden Randwertproblems/Anfangsrandwertproblems das Detektieren von Fehlstellen und Einschlüssen nicht unproblematisch. Dies führt beispielsweise auf den Verlust der Eindeutigkeit der Lösung. Im Rahmen dieser Arbeit soll daher ein zuverlässiges Verfahren zur Identifizierung von Rissen und Fehlstellen entwickelt werden. Zur Lösung des Vorwärtsproblemes soll die sog. 'Extended Finite Element Method' (XFEM) verwendet werden, welche es ermöglichst feinste Risse mit hoher Genauigkeit abzubilden.

3 Faserverbundwerkstoffe, insbesondere Nano-Faserverbundwerkstoffe, finden aufgrund ihrer guten mechanischen und thermischen Eigenschaften zahlreiche Anwendungen im Ingenieurwesen. Eine Nanofaser bzw. ein Nanodraht besitzt einen Durchmesser von wenigen Nanometern und ein Längen-zu-Breiten-Verhältnis von mindestens 1000. Aus Untersuchungen ist bekannt, daß das Grenzflächenverhalten die mechanischen (und thermischen) Eigenschaften in hohem Maße beeinflussen kann. Aufgrund der hohen Komplexität sind Experimente leider nicht in der Lage, dieses Verhalten zu quantifizieren. Daher wurden in der Vergangenheit aufwändige numerische Untersuchungen mit Hilfe von Dichtefunktionaltheorie (DFT)- und Molekulardynamik- Simulation durchgeführt, welche sich auf extrem kleine Strukturen beschränken. Im Rahmen dieser Arbeit soll basiert auf einem quasi-Kontinuumsansatz eine analytische Formulierung für Nano-Faserverbundwerkstoffe unter Berücksichtigung des Grenzflächenverhaltens hergeleitet und verifiziert werden. Diese Formulierung soll eine schnelle Abschätzung von mechanischen Werkstoffeigenschaften dieser Materialien ermöglichen.

4 Graphene findet aufgrund seiner ausgezeichneten thermischen und mechanischen Werkstoffeigenschaften zahlreiche Anwendungen im Ingenieurwesen, beispielsweise als Verstärkung in Verbundwerkstoffen. Graphene-Nanoribbons (GNRs) haben sich als ideal für Anwendungen des thermischen Managements herauskristallisiert. Eine aktuelle Anwendungen ist das thermische Management von Batterien in der Mikro- und Nanoelektronik sowie in der Elektromobilität. Molekulardynamik -Simulation haben allerdings gezeigt, daß mechanische Spannungen die thermische Leitfähigkeit von GNRs wesentlich beeinflussen können. Allerdings beschränkten sich die Untersuchungen auf einachsiale Beanspruchungen. Ebenso blieben Längenskaleneffekte sowie der Einfluß von Defekten, welche unvermeidlich sind, unberücksichtigt. Im Rahmen dieser Arbeit sollen daher umfangreiche Untersuchungen durchgeführt werden, um den Einfluß des mechanischen Verhaltens auf die thermische Leitfähigkeit von GNRs zu quantifizieren. In diesem Zusammenhang sollen auch Alternativen zu GNRs wie dünne Membranstrukturen unter Berücksichtigung der Faltenbildung unter mechanischer Beanspruchung untersucht werden.

5 Ein weiteres Material, welches sich für das thermische Management eignet ist Molybdändisulfid (MoS_2). Im Gegensatz zu Graphene besitzt MoS_2 eine Bandlücke (band gap), was für Anwendungen in der Elektronik zu bevorzugen ist. In der halbleitenden 1H-Phase ist Molybdändisulfid (1H-MoS_2) stabil, während das metallische 1T-Phase Molybdändisulfid (1T-MoS_2) bei Umgebungsbedingungen instabil ist. Während 1H-MoS_2 für seine hervorragenden optischen Eigenschaften bekannt ist, gibt es aufgrund der Instabilität von 1T-MoS_2 relativ wenige Untersuchungen. Allerdings wurde kürzlich eine negative Querdehnzahl bei 1T-Typ-Monolayer-Kristallen von Übergangsmetall-Chalkogenide, z.B. MoS_2, nachgewiesen. Ebenso wurde eine langfristige (> 3 Monate) Luftstabilität von 1T-MoS_2 durch die Verwendung von Donor-Lithiumhydriden erreicht. Dies legt zeitgleich auch eine gute Wärmeleitfähigkeit von 1T-MoS_2 nahe. Allerdings gibt es noch keine derartigen Studien, welche im Rahmen dieser Dissertation durchzuführen sind.

Stand der Wissenschaft und Technik

6 Numerische Verfahren zur Fehlstellen/Rissidentifizierung benötigen zwei wesentliche Bestandteile: 1. Einen effizienten Optimierungsalgorithmus und 2. ein effizientes numerisches Verfahren zur Abbildung von Rissen und Fehlstellen. Bei dieser sog. inversen Analyse sind demnach zahlreiche Vorwärtsprobleme zu lösen bis der Optimierungsalgorithmus die Zielfunktion minimiert hat, so daß eine gewisse Fehlertoleranz zwischen experimentellen und numerische Daten unterschritten wird. In der Praxis werden oft 'dynamische' Untersuchungen durchgeführt und es stehen zeitabhängige experimentelle Daten zur Verfügung während der Großteil der 'inversen Rechenverfahren' sich auf statische Methoden konzentrieren. Daher soll im Rahmen dieser

Arbeit ein auf der Dynamik basiertes inverses Rechenverfahren entwickelt werden. Zur Lösung des Vorwärtsproblemes soll die XFEM verwendet werden, welches es ermöglicht unterschiedliche Arten von Unstetigkeiten (Fehlstellen, Einschlüsse, Risse) innerhalb eines einzelnen 'Frameworks' abzubilden. Darüber hinaus garantiert XFEM optimale Konvergenzraten des Vorwärtsproblemes. Es vermeidet den Aufbau der kompletten Steifigkeitsmatrix während der Iterationen. Es müssen lediglich die Elemente in die neue Steifigkeits/Massen/Dämpfungsmatrix assembliert werden, welche von der Unstetigkeitsstelle beeinflußt sind, was insbesondere in der Dynamik eine drastische Rechenzeiteinsparung ermöglicht. Während es einige dynamische XFEM Formulierungen gibt, beschränken sich diese ausschließlich auf Vorwärtsprobleme. Außerdem gibt es -- trotz des allgemeinen 'Frameworks' -- kaum XFEM Formulierungen, welche zeitgleich Fehlstellen, Einschlüsse und Risse berücksichtigen.

7 Kohlenstoff-Nanoröhrchen basierte Verbundwerkstoffe weisen sich durch eine hohe Steifigkeit, Zugfestigkeit und Bruchdehnung aus. Allerdings bestimmt der Herstellungsprozeß und das damit verbundene Grenzflächenverhalten maßgebend die mechanischen Eigenschaften. Somit konnten die theoretisch vorhergesagten Werte in der Praxis nie erreicht werden. Durch Untersuchungen mit Hilfe von Dichtefunktionaltheorie- und Molekulardynamik- Simulationen konnten in der Vergangenheit einige wesentliche Einflüsse wie beispielsweise das Auftreten von Defekten oder das Fehlen von kovalenten Verbindungen diese Diskrepanz erklären. Allerdings beschränkten sich die Untersuchungen auf einzelne Kohlenstoff-Nanoröhrchen während für die Auswahl von Verbundwerkstoffen das makroskopische Verhalten von Interesse ist. Dafür werden gewöhnlich Homogenisierungsansätze verwendet. Homogenisierungsansätze lassen sich in numerische und analytische Ansätze kategorisieren. In numerischen Ansätzen kann auf Kosten der (Rechen-) Effizienz das Material sehr detailliert abgebildet werden. In diesem Zusammenhang gibt es auch für ausgewählte Materialkombinationen Modelle, welche das Grenzflächenverhalten abbilden können. Allerdings gibt es kaum analytischen Homogenizsierungsansätze für Kohlenstoff-Nanoröhrchen-basierte Verbundwerkstoffe, welche mit ausreichender Genauigkeit das Grenzflächenverhalten modellieren können.

8 Der Einfluß von mechanischen Spannungen auf die Wärmeleitfähigkeit zweidimensionalen und eindimensionalen Materialien wurde seit mindestens zwei Jahrzehnten intensiv untersucht. Beispielsweise wurde in Silizium- und Diamant-Nanodrähten und Dünnenschichten festgestellt, dass die Wärmeleitfähigkeit unter Druckbelastung zu Zugspannung kontinuierlich abnimmt. Ähnliche Beobachtungen wurden auch für GNRs unter Zugbeanspruchungen gemacht. Wie generelle Spannungszustände die Wärmeleitfähigkeit von GNRs beeinflussen, ist unbekannt.

9 In den vergangenen Jahren wurde das thermische, optische und mechanische Werkstoffverhalten von 1H-MoS_2 durch Experimente und Molekulardynamik-Simulationen umgehend erforscht. Zu diesem Zweck wurden verschiedene Kraftfeldmodelle und Potentiale entwickelt, welche die interatomaren Wechselwirkungen beschreiben. Beispielsweise konnte mit dem Stillinger-Weber-Potential die Wärmeleitfähigkeit von einschichtigem 1H-MoS_2 präzise vorhergesagt werden. Wahrscheinlich aufgrund des instabilen Verhaltens blieb 1T-MoS_2 kaum untersucht. Allerdings konnte man Stabilität und exzellente mechanische Kennwerte von 1T-MoS_2 kürzlich nachweisen. Ebenso wurde vor kurzem eine Parametrisierung des Stillinger-Weber-Potenzials entwickelt, um die interatomaren Wechselwirkungen von 1T-MoS_2 zu beschreiben. Allerdings gibt es noch keine Untersuchungen zur Wärmeleitfähigkeit von 1T-MoS_2.

Methodik

10 Die XFEM soll zur Modellierung von Unstetigkeiten im Verschiebungs- und Dehnungs/Spannungsfeld verwendet werden. Neben rein mechanischen Problemstellungen in der Dynamik sind auch noch gekoppelte elektro-mechanische XFEM Ansätze zu implementieren. In diesem Zusammenhang sind unterschiedliche Anreicherungsfunktionen zu entwickeln, implementieren und zu testen.

11 Die Nelder-Mead-Methode ist eine häufig verwendete nichtlineare Optimierungstechnik. Sie eignet sich für Problemstellungen, bei denen die Ableitungen entweder nicht bekannt oder schwer zu berechnen sind. Quasi-Newton-Methoden sind Methoden, die verwendet werden, um entweder Nullstellen oder lokale Maxima und Minima von Funktionen zu finden. Bei Quasi-Newton-Methoden wird die Hessische Matrix mit Hilfe von Rank-One-Updates, die durch Gradientenauswertungen (oder ungefähre Gradientenauswertungen) spezifiziert werden, angenähert.

12 Die mehrstufige Koordinatensuche ist eine Zwischenstufe zwischen rein heuristischen Methoden und Methoden, die eine Bewertung der Qualität des erhaltenen Minimums ermöglichen. Es wird zusätzlich sichergestellt, dass die mehrstufige Koordinatensuche konvergiert, wenn die Zielfunktion in der Nähe eines globalen Minimierers stetig ist. Die mehrstufige Koordinatensuche führt zu einer schnellen Konvergenz, sobald der globale Teil des Algorithmus die Regionen im Bereich der lokalen Suche angegeben hat.

13 Molekulardynamik Simulationen werden zur Simulation atomistischer Systeme verwendet. Bei Molekulardynamik-Simulationen werden die Newtonschen Bewegungsgleichungen mit Hilfe einer expliziten Zeitintegration (bspw. finite Differenzen Verfahren) gelöst. Die Interaktion zwischen den Atomen wird durch interatomare Potentiale abgebildet. Die 'Reverse nonequilibrium

molecular dynamics' (RNEMD), die auf zeitreversiblen Bewegungsgleichungen basiert, wird verwendet, um die Wärmeleitfähigkeit von zweidimensionalen Materialien zu untersuchen.

14 Die 'adaptive intermolecular reactive empirical bond-order' (AIREBO)-Potentialfunktion wird verwendet, um die Wechselwirkung zwischen Kohlenstoffatomen in Graphene zu berechnen. Dies beinhaltet sowohl kovalente Bindungen (Streckung, Biegung, Drehung) als auch van-der-Waals-Wechselwirkungen zwischen Atomen mit größerem Abstand. Das Stillinger-Weber-Potential ist eines der einfachsten Potentialmodelle mit nichtlinearen Effekten. Es wird angewendet, um die interatomaren Wechselwirkungen innerhalb von 1H-MoS_2 und 1T-MoS_2 zu beschreiben. Der Vorteil des Stillinger-Weber-Potentials gegenüber dem AIREBO-Potential liegt in der deutlich niedrigeren Rechenzeit.

Wesentliche Ergebnisse

15 Es wird eine lokale zerstörungsfreie Werkstoffprüfung entwickelt, die XFEM mit dynamischer Belastung kombiniert, um Risse in den Strukturen schnell und genau identifizieren zu können. Das Newmark-ß-Zeitintegrationsverfahren mit Rayleigh-Dämpfung wird für die Zeitintegration verwendet. Es wurde das Nelder-Mead- und Quasi-Newton-Methoden verwendet, um Rissse zu identifizieren. Dabei wird das inverse Problem iterativ gelöst, indem XFEM zur Lösung des Vorwärtsproblems bei jeder Wiederholung verwendet wird. Ein wesentliches Ergebnis ist demnach die Entwicklung eines neues Verfahrens zur Identifizierung von Fehlstellen und Einschlüssen in piezoelektrischen Materialien. Des weiteren sind folgende wesentliche Ergebnisse zusammenzufassen:

a. Die dynamische XFEM-basierte inverse Analyse identifiziert Risse mit höherer Zuverlässigkeit als eine rein statisches inverse Analyse-Verfahren.
b. Die XFEM-Nelder-Mead-Methode prognostiziert alle statischen, dynamischen und harmonischen Belastungen korrekt. Die XFEM-Quasi-Newton-Methode nähert sich nur der richtigen Lösung in allen getesteten Fällen an.
c. Harmonische Belastung sind für die inverse Analyse zu bevorzugen. Es ergibt sich eine Erhöhung der CPU-Zeit für die Quasi-Newton-Methode um einen Faktor von ~2 und für die Nelder-Mead-Methode um einen Faktor von ~4 im Vergleich zur statischen Belastung.

16 Die effektivste Methodik zur Identifizierung von Rissen in piezoelektrischen Strukturen ist die mehrstufige Koordinatensuche (unter dynamischer Belastung). Das Newmark-β-Verfahren wird für die Zeitintegration eingesetzt und bei jedem Durchgang wird das vorangegangene Problem durch XFEM für verschiedene Risse gelöst. Die objektive Funktion wird durch die Verwendung eines globalen Suchalgorithmus minimiert.

17 Es wurde ein geschlossener Ausdruck der Grenzflächenstärke zwischen Faser und Matrix unter Verwendung eines Quasi-Kontinuumsansatzes und Berücksichtigung von van-der-Waals-Kräften entwickelt. Basierend auf dem interatomaren Potential wurde danach ein neues nichtlineares Stoffgesetz entwickelt, um das Delaminationsverhalten von Verbundwerkstoffen vorauszusagen. Das analytische Modell wurde anhand von Molekulardynamik-Simulationen verifiziert. Anschließend wurde mit Hilfe des analytischen Modell gezeigt, dass das Delaminierungsverhalten stark von der Interphasendicke, dem Faserradius, dem Elastizitätsmodul und der Querdehnzahl der Faser und der Matrix (in dieser Reihenfolge) abhängt.

18 Mit Hilfe von Molekulardynamik-Simulationen wurde die Wärmeleitfähigkeit von Graphene unter mechanischer Beanspruchung systematisch untersucht. Die Ergebnisse zeigen, dass im Gegensatz zu der dramatischen Abnahme der Wärmeleitfähigkeit von Graphene unter einaxialer Zugbeanspruchung die Wärmeleitfähigkeit von Graphene unempfindlich gegenüber Schubverformungen ist. Es wurde in diesem Fall eine Abnahme der Wärmeleitfähigkeit von 12–16% festgestellt. Ebenso wurde eine Faltenbildung beobachtet, wenn die Schubdehnung etwa 5–10% beträgt. Die Wärmeleitfähigkeit ändert sich jedoch kaum.

19 Die Wärmeleitfähigkeiten von einlagigem 1H-MoS_2 (1H-$SLMoS_2$) und einlagigem 1T-MoS_2 (1T-$SLMoS_2$) mit unterschiedlichen Probengrößen, Temperaturen und Dehnraten wurden systematisch untersucht. Folgende Erkenntnisse lassen sich zusammenfassen:

a. Die Wärmeleitfähigkeit von 1H-$SLMoS_2$ und 1T-$SLMoS_2$ nimmt mit ansteigender Probenlänge zu. Die zunehmende Breite der Probe hat einen geringen Effekt auf die Wärmeleitung dieser beiden Strukturen. Die Wärmeleitfähigkeit von 1H-$SLMoS_2$ ist sowohl in 'armchair'- als auch in 'Zickzack'-Richtungen unter Berücksichtigung von Größeneffekten kleiner als die von 1T-$SLMoS_2$.
b. Die Wärmeleitfähigkeit von 1H-$SLMoS_2$ und 1T-$SLMoS_2$ nimmt mit zunehmender Temperatur ab. Die Wärmeleitfähigkeiten von 1H-$SLMoS_2$ und 1T-$SLMoS_2$ sind unter entsprechenden gleichen Temperaturen ($\leq$ 500 K) nahezu gleich (Differenz <6%).
c. Die Belastungseffekte auf die Wärmeleitfähigkeit von 1H-$SLMoS_2$ und 1T-$SLMoS_2$ sind unterschiedlich. Bei 1T-$SLMoS_2$ nimmt die Wärmeleitfähigkeit mit zunehmender Zugdehnungsrate ab. Die Wärmeleitfähigkeit von 1H-$SLMoS_2$ schwankt jedoch mit wachsender Belastung.