

Zusammenfassung zur Promotionsschrift

Stress Distribution in Buried Defective PE Pipes and Crack Propagation in Nanosheets

zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

an der Fakultät Bauingenieurwesen
der Bauhaus-Universität Weimar

vorgelegt von

Reza Khademi Zahedi

(interner Doktorand)

geboren am 08. Juli 1981

in Izeh, Iran

Mentor:

Prof. Dr.-Ing. Timon Rabczuk

Weimar, 05. März 2020

Problemstellung und Zielsetzung der Arbeit

1. Von Ingenieurstrukturen wird erwartet, den mechanischen Belastungen während der gesamten Lebensdauer standzuhalten. Die Auswahl geeigneter Materialien spielt dabei eine entscheidende Rolle. Das Verständnis der Bruchmechanik spielt eine wichtige Rolle beim Design neuer Materialien. Die vorliegende Dissertation widmet sich der numerischen Modellierung und Simulation fehlerhafter Strukturen. Die Schwerpunkte liegen dabei sowohl im makro- als auch nanoskaligen Bereich.
2. Oberirdische und unterirdische Gasverteilungsnetze bestehen zumeist aus Polyethylen (PE) - Rohren mittlerer bis hoher Dichte. Bei im Erdreich verlegten PE-Gasleitungen können gleichzeitig Auswirkung von Bodendrücken, Auflasten, Innendrücken und Temperaturschwankungen auftreten.
3. Trotz der hervorragenden Materialeigenschaften und ausgereiften Installationstechniken für die Verlegung von PE-Gasleitungen im Erdreich können eine Vielzahl von Mängeln während des Aufbaus, der Installation oder im Betrieb niemals ganz ausgeschlossen werden.
4. Derzeit gibt es kaum geeignete Methoden zur Bewertung von Belastungen infolge von solchen Defekten in erdverlegten PE-Rohren in Gasverteilungssystemen. Maßgebliche Ziele der vorliegenden Dissertation sind die Bewertung des mechanischen Verhaltens von PE-Rohren und die Analyse der Auswirkungen von Perforationsdefekten. Ein weiterer Schwerpunkt ist, die Wirksamkeit von Reparaturpflastern aus Polyethylen (PE) zu untersuchen, die auf die Polymerrohre galvanisch aufgeschmolzen sind. Die Ermittlung der Belastungsgrößen erfolgt dabei unter Verwendung der Finite-Elemente-Methode (FEM).
5. In letzter Zeit haben experimentell hergestellte zweidimensionale (2D) Materialien die Aufmerksamkeit von Forschern und Ingenieuren geweckt. In diesen zweidimensionalen Materialien bilden sich aufgrund der Herstellungsverfahren immer Defekte wie Nano-Risse und Nano-Kerben aus. Im Rahmen dieser Arbeit soll daher die Rissausbreitung und das Bruchverhalten solcher Materialien untersucht werden.

Stand der Wissenschaft

6. Im Rahmen der Forschung werden verschiedene experimentelle und analytische Methoden propagiert, um die Durchbiegungen und Spannungen unterirdisch verlegter Polyethylenrohre zu berechnen, die infolge der einwirkenden Lasten entstehen. Aufgrund der Komplexität der Rohr-Erdreich-Wechselwirkungen und der Unzugänglichkeit der im Boden befindlichen Gasleitungen liefern jedoch die experimentellen und analytischen Methoden keine ausreichend genauen Ergebnisse. Am zielführendsten scheinen numerische Methoden wie die Finite-Elemente-Methode (FEM), für solche Problemstellungen zu sein.
7. Die tatsächlichen 3D-Spannungsverteilungen im Bereich von Defekten können sehr komplex sein und können die Streckgrenze des Materials in der unmittelbaren Umgebung der Schadstellen rasch überschreiten.
8. Die Untersuchung des mechanischen Verhaltens geschädigter PE-Rohrleitungen für Erdgasverteilungsnetze ist von großer Bedeutung, um mögliche Sicherheitsprobleme während des Rohrleitungsbetriebs einschätzen zu können.

9. Reparaturpflaster können in zahlreichen Fällen verwendet werden, um strukturelle Komponenten zu verstärken oder Schadstellen zu reparieren, indem die Festigkeit und Steifigkeit defekter Komponenten wiederhergestellt wird. Während es zahlreiche Studien zur Modellierung von ‚perfekten‘ und ‚imperfekten‘ PE-Rohrleitungen gibt, findet man nur eine begrenzte Anzahl von Beiträgen, von ‚reparierten‘ PE-Rohrleitungen.
10. Graphene ist eines der populärsten zweidimensionalen (2D) Materialien. Die Verwendung von Graphene und grapheneähnlichen Materialien wurde in unterschiedlichen Bereichen der Optik, nanoelektronischen Hochleistungsgeräten und Energiespeichersysteme intensiv studiert. Daher konzentrierten sich viele Forschungsarbeiten auf die Untersuchung der mechanischen Eigenschaften einschliesslich des Bruchverhaltens dieser Nanomaterialien.
11. Aufgrund der Struktur von Graphene wurden einige ähnliche Materialien synthetisiert, um sie in verschiedenen industriellen Anwendungen einzusetzen. Graphene hat als Halbmetall eine Bandlücke von Null. Darum ist es schwierig Graphen in elektronischen Schaltungen als Transistor zu verwenden. Es wurden Materialien wie Borcarbid (BC_3) und Molybdändisulfid (MoS_2) experimentell hergestellt, mit dem Ziel die Mängel von Graphene bei spezifischen Anwendungen zu beheben. Der maßgebliche Vorteil von BC_3 und MoS_2 im Vergleich zum Graphene ist, dass es sich um Halbleiter mit direkter Bandlücke handelt.
12. Einschichtiges MoS_2 kann in Abhängigkeit von der Anordnung der S-Atome gegensätzliche elektrische Eigenschaften von halbleitenden (2H) bis metallischen (1T) Zuständen aufweisen. Ergebnisse experimenteller Untersuchungen zeigen, dass es möglich ist, heterogene einschichtige MoS_2 -Strukturen herzustellen, die aus 2H- und 1T-Phasen bestehen.

Eingesetzte Methoden

13. Für die Untersuchung des ersten Forschungsschwerpunktes wurden numerische Simulationen unter Verwendung einer umfassenden dreidimensionalen (3D) elastischen Finite-Elemente-Analyse (FEA) durchgeführt, um die Auswirkung kreisförmiger Löcher mit unterschiedlichen Lochdurchmessern bei variierenden Defekttiefen zu analysieren. Der Einfluss von Reparaturpflastern bei maximaler Beanspruchung des Schädigungsbereiches war ebenfalls Bestandteil der Untersuchungen.
14. Die numerischen Simulationen für eine linear-elastische Analyse wurden mit ANSYS 16/2 APDL durchgeführt, einer kommerziell verfügbar Finite-Elemente-Software. Es wurden dafür drei-dimensionale Kontinuumselemente verwendet.
15. Die mechanischen Reaktionen von 2D-Materialien wurden anhand von Molekulardynamik (MD) Simulationen studiert. Dafür wurde der Open-Source-Code LAMMPS (Large Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) verwendet.
16. Die Wechselwirkung zwischen Atomen in 2D-Materialien aus BC_3 und allen Heterostrukturen von Molybdändisulfid (MoS_2) wurden unter Verwendung der modifizierten Tersoff und ReaxFF-Potentialfelder definiert.
17. Die Zugfestigkeit von 2D-Materialien wurde für die unberührten Nanoblätter sowie für die Nanoblätter mit den Defekten einschließlic Riss und Kerbe mit unterschiedlichen

Geometrien kalkuliert. Zunächst wurde der computerbasierte Körper mit dem Nose-Hoover Barostat und Thermostat (NPT) – Ansatz aufgelöst. Daraufhin wurde eine konstante Dehnungsrate verwendet und ein konstant kleiner Zeitabschnitt für alle Berechnungen in den MD-Simulationen übernommen. Die mechanischen Eigenschaften der defekten Nanoblätter wurden auch für unterschiedliche Temperaturen studiert.

Wesentliche Ergebnisse

18. Sowohl in oberirdischen als auch in unterirdischen Polyethylenrohren nehmen die Spannungskonzentrationsfaktoren, d.h. die ersten maximalen Hauptspannungen und die maximalen Mises-Spannungen, generell in unmittelbarer Nähe der Schadstelle mit steigendem Lochdurchmesser und zunehmender Schädigungstiefe zu. Dieser Effekt ist bei größeren Defekten starker ausgeprägt. Beispielsweise werden bei kreisförmigen Defekten mit 30 mm Durchmesser und einem von Tiefe-Dicke-Verhältnis von 83% Spannungskonzentrationsfaktoren von 5,5 und 8 für unterirdische bzw. oberirdische Rohre erreicht. Zusätzliche Temperaturänderungen zeigen einen direkten und signifikanten Einfluss auf die im geschädigten Rohr erzeugten thermischen Spannungen.
19. Bei Defekttiefenverhältnissen unter 8 % und Lochdurchmessern bis zu 30 mm liegen die maximalen Spannungen nahe am ungeschädigten Rohr und werden durch den Schaden selbst nicht wesentlich beeinflusst. Daher können diese Defekte als nicht intensiv angesehen werden. Die Ergebnisse der FE-Modellierung zeigen, dass die Reparaturpflaster den defekten Rohrabschnitt verstärken und die aufbrachten Hauptspannungen und von Mises-Spannungen erheblich reduzieren. Für ein defektes unterirdisch verlegtes Rohr mit 4 Zoll Durchmesser und einem Innendruck von 4 bar, auf das das Gewicht des überstehenden Erdreiches, Verkehrsbelastungen und starke Temperaturänderungen von 22 °C einwirken kann ein 3 Zoll langes Sattelfusions-HDPE-Pflaster mit einer Dicke von 4,76 mm erfolgreich zur Reparatur kreisförmiger Defekte mit bis zu 20 mm Durchmesser angewendet werden.
20. Die Zugfestigkeit von 2D-Nanoschichten aus BC_3 nimmt durch Nanorissen und Nano-Kerben drastisch ab. Beispielsweise zeigen Zugbelastungstests bei 300 K an einem graphenähnlichem BC_3 -Nanosheet mit einer Kerbe der Länge $L/2$ (L ist die Länge des Nanosheets), dass die maximale Zugspannung in Bezug auf eine äquivalente, unbelastete Probe um etwa 60% abnimmt. Zusätzlich hält die Nanoschicht bei höheren Temperaturen weniger Belastungen stand, weil die interatomaren Bindungen bei hohen Temperaturen schwächer werden. Beispielsweise betragen die maximalen Zugspannungen für einen fehlerfreien BC_3 -Monolayer 139,3 GPa bei 200 K und 75,6 GPa bei 600 K. Mit anderen Worten, der oben erwähnte Temperaturanstieg führt zu einer Verringerung der Zugfestigkeit der Nanosheets um 46%.
21. Die ReaxFF-Simulation der Molekulardynamik zeigen, dass die 2H-Phase von MoS_2 -Filmen für alle untersuchten Rissgrößen eine größere Festigkeit aufweist. Die Zugfestigkeit von 1T/2H- MoS_2 -Nanosheet sind höher als die der äquivalenten 1T-Phase. Beispielsweise hat ein MoS_2 -Nanosheet, das einen Riss der Länge $L/2$ aufweist, bei Raumtemperatur eine Zugfestigkeit von 7,30 GPa für eine 2H/1T-Verbundstruktur, was dem doppelten Wert entspricht, der für eine äquivalente 1T-Phase eines MoS_2 -Nanosheet erreicht wird.