

Zusammenfassung der Promotionsschrift

Computational Modeling of the Mechanical Behavior of Two-Dimensional Materials and Polymeric Composites

Modellierung des mechanischen Verhaltens zweidimensionaler Materialien und polymerer Verbundwerkstoffe

DISSERTATION

**Zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktor-Ingenieur**

**an der Fakultät Bauingenieurwesen
der Bauhaus-Universität Weimar**

vorgelegt von

**M.Sc. Hamidreza Nouri
(interner Doktorand)**

geboren am 21. März 1978
in Baft, Iran

Mentor: Prof. Dr.-Ing. Timon Rabczuk

Status des Doktoranden: Intern

Weimar, Oktober 2021

Problemstellung und Zielsetzung der Arbeit

1. Das mechanische Verhalten von zweidimensionalen Nanomaterialien unter Stoßbelastung spielt insbesondere eine Rolle bei Verbundwerkstoffen und deren Anwendungen.
2. Die experimentelle Bestimmung mechanischer Eigenschaften dieser Nanomaterialien ist kompliziert und zeitaufwändig.
3. Aufgrund ihrer hohen Oberflächenvolumenverhältnisse besitzen Nanostrukturen einzigartige mechanische Eigenschaften. Diese hängen insbesondere auch von ihrer Form und Struktur ab.
4. Mit einer Zugfestigkeit von 130 GPa und einem Elastizitätsmodul von 1 TPa gehört Graphen zu den Werkstoffen mit den besten mechanischen Eigenschaften. Eine interessante Anwendung ist die Verwendung von Graphen als Bewehrung in kugelsicheren Westen. Ein wesentlicher Aspekt dieser Westen ist die Energieabsorptionskapazität während des Aufpralls eines Geschosses. Graphenbewehrte polymere Verbundwerkstoffe können die Energieabsorption verbessern und eignen sich somit zur Verwendung in kugelsicheren Westen. Neben Graphen wäre auch der Einsatz anderer zweidimensionaler Werkstoffe wie Molybdändisulfid (MoS_2) denkbar.
5. Die Dissertation hat folgende drei Zielstellungen: Erstens soll mit Hilfe von molekulardynamischen (MD) Simulationen das Energieabsorptionsverhalten zweidimensionaler Werkstoffe wie Graphen und Molybdändisulfid (MoS_2) untersucht werden. Neben der Festigkeit und Bruchzähigkeit soll auch die Anordnung der Atome zur Verbesserung des Energieabsorptionsverhaltens quantifiziert werden. Zweitens soll der Einsatz zweidimensionaler Materialien in polymeren Verbundwerkstoffen numerisch untersucht werden. Das Verhalten der Materialien unter dynamischer Stoßbelastung, insbesondere das Energieabsorptionsverhalten während des Aufpralls, ist von besonderem Interesse. Drittens soll basierend auf einer nicht-lokalen Kontinuumstheorie das mechanische Verhalten von Membranen untersucht werden. Die Verwendung der Kontinuumsmechanik erlaubt die Simulation von größeren Strukturen.

Stand der Wissenschaft

6. Kugelsicherheit bedeutet, dass ein Werkstoff in der Lage ist, eine Kugel oder ähnliche Hochgeschwindigkeitsprojekte vollständig abzuwehren. Der Begriff Durchschussfestigkeit wird häufig bevorzugt, da nur wenige Materialien einen vollständigen Schutz gegen sämtliche Geschosse bieten. Es gibt bereits eine Vielzahl von Studien, bei denen die ballistische Bruchzähigkeit von Polymerverbindungen unter Impaktbelastung untersucht wurde. Allerdings konzentrieren sich die Untersuchungen auf makroskopische Betrachtungen, bei denen die detaillierte Mikro-/Nanostruktur des Werkstoffes stark vereinfacht modelliert wurde.

7. Die meisten anti-ballistischen Materialien, die in kugelsicheren Westen verwendet werden, bestehen aus Kevlar-, Twaron- oder Dyneema-Fasern, die verhindern, dass Kugeln in die Oberfläche eindringen, indem sie den Aufprall der Kugelkraft verteilen und absorbieren. Diese Produkte waren ein bedeutender Fortschritt, führen jedoch häufig zu schweren Blutergüssen oder einer Schädigung lebenswichtiger Organe. Dies liegt an der teilweise nicht unbeträchtlichen Kraftübertragung der Kugel, selbst wenn diese gestoppt wird. Kürzlich haben Forscher mithilfe von Hochgeschwindigkeitskameras gezeigt, dass Graphen wie eine dehnbare Membran wirkt und die Energie der Kugeln über einen großen Bereich verteilt wird, was auf die zweidimensionale Struktur zurückgeführt werden kann. Der Beitrag der atomaren Anordnung von Materialien zur Durchschussfestigkeit wurde jedoch noch nie zuvor quantifiziert. In dieser Arbeit wird die Auswirkung der atomaren Anordnung auf das Stoßverhalten und die Energieabsorption von 2D-Materialien quantifiziert, und zwar von MoS₂ und Graphen.

Die eingesetzten Methoden

8. MD-Methoden werden zur Simulation auf der feinskaligen beziehungsweise molekularen Ebene verwendet. In dieser Arbeit wird der Open-Source Code 'Large-Scale Atomic / Molecular Massively Parallel Simulator' (LAMMPS) verwendet. Die Ergebnisse wurden mit der Open-Source-Software von OVITO und VMD visualisiert.
9. Die Zeitintegration im Rahmen der MD-Simulationen erfolgt mit Hilfe des Verlet-Algorithmus, einem expliziten Zeitintegrationsverfahren mit Genauigkeit zweiter Ordnung.
10. Die Wechselwirkungen zwischen Atomen können durch ein Kraftfeld beschrieben werden. Die Erweiterung des Kraftfeldes der Molekulardynamik auf ein Kontinuum wurde dabei mit einem neuen Modellierungsansatz durchgeführt.
11. Ein Kontinuumsmechanikansatz wird verwendet, um das mechanische Verhalten von dünnen Membranen im atomaren Maßstab zu untersuchen. Um Größeneffekte zu berücksichtigen, werden die partiellen Differentialgleichungen mit Hilfe der nichtlinearen Föppl-Membrantheorie hergeleitet. Die Lösung des zugrundeliegenden Randwertproblems/Anfangsrandwertproblems erfolgt mit einer Galerkin-Methode.

Die im Wesentlichen erzielten Ergebnisse

12. Umfangreiche molekulardynamische Simulationen wurden durchgeführt, um das mechanische Verhalten von kugelsicheren Materialien aus Graphen und Polydimethylsiloxan (PDMS) zu untersuchen. Um verschiedene Nano-Verbundwerkstoffe vergleichend zu untersuchen, wurden PDMS-Polymere mit drei verschiedenen Dicken konstruiert. Zusätzlich wurden ein- und zweischichtige Graphen-Nanoblätter entweder auf der Oberfläche oder in der Mitte der PDMS-Polymere positioniert. Diese Proben wurden anschließend durch einen kugelförmigen Körper aus Diamant mit unterschiedlichen Anfangsgeschwindigkeiten stoßartig

belastet. Die kinetischen Energie- sowie Verschiebungs-Zeit-Verläufe der Projektile wurden aufgezeichnet und entsprechend verglichen. Die Ergebnisse zeigen, dass der Widerstand gegen das Eindringen des Geschosses zunimmt, wenn die Graphenschichten in das PDMS eingebettet werden. Im Allgemeinen wird gezeigt, dass die Dicke des PDMS, die Anzahl der Graphenschichten und ihre Position innerhalb des PDMS zu einer zunehmenden Durchschussfestigkeit/-sicherheit führen.

13. Zusätzlich wurden MD-Simulationen durchgeführt, um das Stoßverhalten von einschichtigen 1T- und 2H-Molybdändisulfid (MoS_2) -Phasen zu analysieren. Es wurden unterschiedliche Faktoren quantifiziert, welche die Perforationseigenschaften beeinflussen. Dafür wurden die kinetische Energie und die Verschiebungs-Zeit-Verläufe des Projektils sowie die Perforationsbeständigkeit des Projektils untersucht. Obwohl das Elastizitätsmodul und die Zugfestigkeit von Graphen fast fünfmal größer sind im Vergleich zu MoS_2 , zeigen die Ergebnisse, dass die 1T- und 2H- der MoS_2 -Phasen widerstandsfähiger gegenüber Stoßbelastungen sind und die Perforation erst bei höheren Projektilgeschwindigkeiten auftritt. Die Simulationen zeigen, dass ein höherer Perforationswiderstand von MoS_2 -Phasen im Vergleich zu Graphen auf die Topologie und atomare Anordnung der MoS_2 -Phasen zurückzuführen ist. Darüber hinaus wurde im Fall von MoS_2 festgestellt, dass die 2H-Phase gegenüber Stoßbelastungen widerstandsfähiger ist als die 1T-Phase. Dies zeigt auch, dass die Perforation stark von den atomaren Anordnungen zweidimensionaler (2D) Materialien abhängt. Zusätzlich zeigen die Ergebnisse, dass unterschiedliche atomare Anordnungen eine unterschiedliche Wellenausbreitung und folglich eine unterschiedliche Energieabsorption verursachen.
14. Ein Kontinuumsansatz wurde entwickelt, um das mechanische Verhalten von ein- und zweischichtigen MoS_2 -Filmen zu beschreiben. Die nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen wurden mit Hilfe der Föppl-Membrantheorie hergeleitet. Zu deren Lösung wurde die Galerkin-Methode angewendet. Die Validierung erfolgt anhand ausgewählter Experimente.