Lukas Schöller

MULTISCALE MODELING OF CURING AND CRACK PROPAGATION IN FIBER-REINFORCED THERMOSETS

SCHRIFTENREIHE DES INSTITUTS
FÜR ANGEWANDTE MATERIALIEN

BAND 117

KIT Scientific Publishing

Lukas Schöller

Multiscale Modeling of Curing and Crack Propagation in Fiber-Reinforced Thermosets

Schriftenreihe
des Instituts für Angewandte Materialien
Band 117

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Institut für Angewandte Materialien (IAM)

Eine Übersicht aller bisher in dieser Schriftenreihe erschienenen Bände finden Sie am Ende des Buches.

Multiscale Modeling of Curing and Crack Propagation in Fiber-Reinforced Thermosets

by
Lukas Schöller

KIT Scientific Publishing

Karlsruher Institut für Technologie
Institut für Angewandte Materialien

Multiscale Modeling of Curing and Crack Propagation in Fiber-Reinforced Thermosets

Zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktor-Ingenieurs von der KIT-Fakultät für Maschinenbau des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) genehmigte Dissertation

von Lukas Schöller, M.Sc.

Tag der mündlichen Prüfung: 30. November 2023
Referent: Prof. Dr. rer. nat. Britta Nestler
Korreferent: Prof. Dr. Colin Denniston

Impressum

Scientific Publishing

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
KIT Scientific Publishing
Straße am Forum 2
D-76131 Karlsruhe

KIT Scientific Publishing is a registered trademark of Karlsruhe Institute of Technology.
Reprint using the book cover is not allowed.

www.ksp.kit.edu

This document – excluding parts marked otherwise, the cover, pictures and graphs – is licensed under a Creative Commons Attribution-Share Alike 4.0 International License (CC BY-SA 4.0): https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.en

The cover page is licensed under a Creative Commons Attribution-No Derivatives 4.0 International License (CC BY-ND 4.0): https://creativecommons.org/licenses/by-nd/4.0/deed.en

Print on Demand 2024 – Gedruckt auf FSC-zertifiziertem Papier

ISSN 2192-9963
ISBN 978-3-7315-1340-7
DOI 10.5445/KSP/1000167720

Kurzfassung

Aufgrund ihres Leichtbaupotenzials bei relativ geringen Kosten gewinnen glasfaserverstärkte Polymere in industriellen Anwendungen zunehmend an Bedeutung. Sie verbinden die hohe Festigkeit von Glasfasern mit der Beständigkeit von z.B. duroplastischen Harzen. Bei der Verarbeitung von faserverstärkten Duroplasten kommt es zu einer chemischen Reaktion des Harzes. Die chemische Reaktion geht mit einer chemischen Schrumpfung einher. In Verbindung mit der thermischen Ausdehnung kann das Material bereits beim Herstellungsprozess beschädigt werden. Auch wenn das Komposit nicht vollständig versagt, kann es zu Mikrorissbildung kommen. Diese Schäden können die Blastbarkeit des Bauteils und damit seine Lebensdauer beeinträchtigen. Faserverstärkte Duroplaste enthalten Strukturen auf verschiedenen Längenskalen, die das Verhalten des Gesamtbauteils beeinflussen und daher für eine genaue Vorhersage der Rissbildung berücksichtigt werden müssen. Das Verständnis der Mechanismen der Rissbildung auf den verschiedenen Längenskalen ist daher von großem Interesse. Auf der Grundlage von Molekulardynamiksimulationen wird ein Harzsystem zusammen mit einer Faseroberfläche und einer Schlichte auf der Nanoskala betrachtet und ein systematisches Verfahren für die Entwicklung eines ausgehärteten Systems vorgestellt. Eine zweistufige Reaktion, eine Polyurethanreaktion und eine radikale Polymerisation, wird auf der Grundlage eines etablierten Ansatzes modelliert. Anhand des fertig ausgehärteten Systems werden Auswertungen über gemittelte Größen und entlang der Normalenrichtung der Faseroberfläche durchgeführt, was eine räumliche Analyse der Faser-Schlichtharz-Grenzfläche erlaubt. Auf der Mikrolängenskala werden die einzelnen Fasern räumlich aufgelöst. Mit Hilfe der Kontinuumsmechanik und der Phasenfeldmethode wird das Versagen während des Aushärtungsprozesses

auf dieser Längenskala untersucht. In der Materialwissenschaft wird die Phasenfeldmethode häufig zur Modellierung der Rissausbreitung verwendet. Sie ist in der Lage, das komplexe Bruchverhalten zu beschreiben und zeigt eine gute Übereinstimmung mit analytischen Lösungen. Dennoch sind die meisten Modelle auf homogene Systeme beschränkt, und nur wenige Ansätze für heterogene Systeme existieren. Es werden bestehende Modelle diskutiert und ein neues Modell für heterogene Systeme abgeleitet, das auf einem etablierten Phasenfeldansatz zur Rissausbreitung basiert. Das neue Modell mit mehreren Rissordnungsparametern ist in der Lage, quantitatives Risswachstum vorherzusagen, wo die etablierten Modelle eine analytische Lösung nicht reproduzieren können. Darüber hinaus wird ein verbessertes Homogenisierungsschema, das auf der mechanischen Sprungbedingung basiert, auf das neuartige Modell angewandt, was zu einer Verbesserung der Rissvorhersage selbst bei unterschiedlichen Steifigkeiten und Risswiderständen der betrachteten Materialien führt. Zudem wird zur Erzeugung digitaler Mikrostrukturen, die für Aushärtungssimulationen im Mikrobereich verwendet werden, ein Generator für gekrümmte Faserstrukturen eingeführt. Anschließend wird die Verteilung mechanischer und thermischer Größen für verschiedene Abstraktionsebenen der realen Mikrostruktur sowie für verschiedene Faservolumenanteile verglichen. Schließlich wird das neue Rissausbreitungsmodell mit dem Aushärtungsmodell kombiniert, was die Vorhersage der Mikrorissbildung während des Aushärtungsprozesses von glasfaserverstärktem UPPH-Harz ermöglicht.