

Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM



Jahresbericht 2021

#### Materialien sind ein Teil der Natur: Veränderlich, unvollkommen, vergänglich.

Seit 50 Jahren wächst unser Know-how über das Verhalten von Werkstoffen bei ihrer Herstellung und ihrer Anwendung. Auf diesem Hintergrund erfassen und begreifen wir Materialien als veränderliche Systeme. Indem wir ihre innere Struktur, die darin ablaufenden dynamischen Prozesse und das spezifische Verhalten von Materialien beschreibbar machen, bewerten, vorhersagen und in Modellen einstellen, können wir Einfluss nehmen auf die Eigenschaften und das Verhalten von Bauteilen und Systemen. So ermöglichen wir neue Funktionen und gewährleisten bestmögliche Zuverlässigkeit und Sicherheit.

Moderne Werkstoffe spielen eine Schlüsselrolle bei der Bewältigung industrieller und gesellschaftlicher Herausforderungen. Sie sind Grundlage für eine nachhaltige Energiewirtschaft, emissionsame Mobilität und ressourcenschonende Produktion. Mit ihrer inneren Struktur, ihren Eigenschaften und ihrem Verhalten stehen Werkstoffe unter komplexen und oft extremen Bedingungen in Wechselwirkung mit ihrer Umgebung. Ob als Kugel in einem Kugellager, als Schaufel in einer Turbine oder als Kompressor für Wasserstoff – Werkstoffe sind die Träger von Funktionen, Informationen und Innovationen.

Mit unseren Lösungen können unsere Kundinnen und Kunden für ihre spezifische Anforderung die bestmögliche Zuverlässigkeit, Sicherheit und Funktionalität ihrer Werkstoffe und Bauteile vorhersagen und einstellen.

## Jahresbericht 2021

#### Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM

Wöhlerstraße 11 79108 Freiburg Telefon +49 761 5142-0 info@iwm.fraunhofer.de www.iwm.fraunhofer.de



#### Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM

Das Fraunhofer IWM arbeitet nach einem Qualitätsmanagementsystem, das nach ISO 9001 zertifiziert ist. Zertifikatsnummer DE07/3361



Die Institutsleitung des Fraunhofer IWM: (v.l.n.r.): Dr. Rainer Kübler, Elke Schubert, Prof. Dr. Peter Gumbsch, Prof. Dr. Chris Eberl

#### Liebe Leserinnen und Leser,

ich darf mit Ihnen voller Freude auf 50 Jahre Fraunhofer IWM blicken, die wir im vergangenen Jahr mit einem Festkolloquium gewürdigt haben. 50 Jahre, in denen wir in enger Zusammenarbeit mit Menschen aus Forschung und Industrie Werkstoff-Know-how vom makroskopischen bis zum atomaren Bereich aufgebaut haben. 50 Jahre prallvoll mit intelligenten Werkstoff-Lösungen für unsere Kundinnen und Kunden. Ein wichtiges Fundament für all dies bilden unsere bruchmechanischen Ansätze und Forschungsmethoden, denen dieser Jahresbericht gewidmet ist.

Im zweiten Jahr der Corona-Pandemie haben wir unsere wissenschaftliche Zusammenarbeit weiter angepasst und sind dadurch noch effektiver geworden. Mobiles Arbeiten, digitale Kommunikation und hybride Veranstaltungen sind heute selbstverständlich. Die dynamische und teilweise angespannte Lage der Industrie ist für uns der Motor, neben unseren Lösungen für aktuelle Herausforderungen verstärkt Forschung für zukünftig maßgebliche Themen unserer Gesellschaft voranzutreiben. Unser Jubiläumsjahr haben wir darum genutzt, in einem Strategiedialog mit unseren Kuratorinnen und Kuratoren und im intensiven Austausch mit unseren

Stakeholdern die Entwicklungsthemen Deutschlands und Europas in für uns relevante Fragestellungen zu übersetzen. Unser Fokus liegt auf folgenden drei Themenbereichen:

Mit dem Blick auf »What's next?« entwickeln wir Multiskalensimulationen, um auch quantentechnologische Prozesse zu beschreiben. Mit Unterstützung des Landes Baden-Württemberg arbeiten wir im Bereich Quantencomputing und erarbeiten Simulationen für hochintegrierte, bildgebende Quantensensorik.

Als zweiten Fokus treiben wir die Digitalisierung in der Werkstofftechnik voran und entwickeln Demonstratoren für deren Nutzung in industrieller Produktion sowie im eigenen Forschungsbetrieb. Mit der Community diskutieren wir auf unseren Workshops »MaterialDigital« aktuelle Ergebnisse. Seit 2021 wird die Nationale Forschungsdateninfrastruktur NFDI MatWerk gefördert, um für Materialwissenschaft und Werkstofftechnik in Deutschland eine Materialdaten-Infrastruktur aufzubauen. Sie wird von Prof. Dr. Chris Eberl vom Fraunhofer IWM aus koordiniert. Im BMBF-Verbundprojekt »Innovations-

Plattform MaterialDigital« treiben wir die Systematisierung des Umgangs mit Werkstoffdaten weiter voran und für die Fraunhofer Zukunftsforschung DMD4Future entwickeln wir digitalisierte Material- und Datenwertschöpfungsketten.

Für unseren dritten Fokus und Zukunftsmarkt der Werkstoffmechanik, dem regenerativen Energieträger Wasserstoff, generieren wir Wissen über Werkstoffe von Speicher- und Transportsystemen. Dazu betreiben wir unser Wasserstofflabor, das die Bereiche der Tribologie, der Mikromechanik, der Schadensanalytik, der Hochdruckversuche und der Simulationen abdeckt. Im BMBF Leitprojekt TransHyDE entwickeln wir Methoden zur Bewertung von Komponenten einer Wasserstoff-Infrastruktur. Im Fraunhofer-Leitprojekt H<sub>2</sub>Mare evaluieren wir für die Offshore-Wasserstoff-Produktion Materialien für Wasserstoff-Röhrenspeicher.

Wir sind überzeugt: Moderne Werkstoffe spielen bei der Bewältigung industrieller und gesellschaftlicher Herausforderungen eine Schlüsselrolle. Das unterstreichen unsere vielfältigen Projekte für den Klimaschutz, beispielsweise zu kohlenstoffbasierten Materialien im Schienenverkehr, zur ressourcenschonenden Defossilisierung des Straßengüterverkehrs, zu klimaneutralen Bundesgebäuden oder zu Materialien in der Bioökonomie. Als idealen Rahmen dafür erhielten wir ein Geburtstagsgeschenk von Land und Bund: Unsere Erweiterungsbauten und unsere »neue Mitte« auf rund 4300 m², die wir im September gemeinsam mit der Ministerin für Wirtschaft, Arbeit und Tourismus des Landes Baden-Württemberg, Dr. Nicole Hoffmeister-Kraut, und weiteren hochrangigen Gästen einweihen durften.

Ich freue mich auf viele weitere Jahre Forschung und Entwicklung mit unseren Kundinnen und Kunden – für eine Gesellschaft, die nach einer effizienten und nachhaltigen Nutzung von Energie und Ressourcen strebt.

Ihr

Prof. Dr. Peter Gumbsch

## Inhalt

#### Institutsprofil

	Themenschwerpunkt 2021: Bruchmechanische Analysen für die intelligente Nutzung von Materialeigenschaften Das Jubiläumsjahr im Rückblick Das Kuratorium des Fraunhofer IWM Zusammenarbeit: maßgeschneidert auf Ihren Bedarf Fraunhofer IWM – What's next? Das Institut in Zahlen Instituts-Kooperationen innerhalb der Fraunhofer-Gesellschaft	8 10 11 12 16
Αı	usgewählte Forschungsergebnisse	
Ge	eschäftsfeld Fertigungsprozesse: Highlights 2021	22
	Einbetten von SiC-Halbleiterbauelementen in Mehrlagenkeramik	24
	praxisorientiert vorhersagen	26
	Die Entwicklung der multifunktionalen Online-Plattform	28
	»Materials Modelling MarketPlace«	30
Ge	eschäftsfeld Tribologie: Highlights 2021 3	32
	Modellierung kritischer nichtlinearer Belastungen von Keramikfedern zur Vorhersage der Bauteilzuverlässigkeit	36 38

Ge	eschäftsfeld Bauteilsicherheit und Leichtbau: Highlights 2021	42
	Ermüdungs- und bruchmechanisches Verhalten von höchstfesten Stählen verstehen Einfluss erhöhter Belastungsraten bei der bruchmechanischen Bewertung	46
Ge	eschäftsfeld Werkstoffbewertung und Lebensdauerkonzepte: Highlights 2021	50
	Abnahme der Risszähigkeit durch Wasserstoffversprödung verstehen Lebensdauermodell für Kriechermüdung von konventionellen Kraftwerken	54
Αı	nhang	
	Organisation des Fraunhofer IWM	

 $oldsymbol{\mathsf{L}}$ 

## Themenschwerpunkt 2021

# Bruchmechanische Analysen für die intelligente Nutzung von Materialeigenschaften

Eine oberflächlich betrachtet simple Methode ist über 50 Jahre hinweg zu einem hocheffizienten Werkzeug geworden, um unseren Kundinnen und Kunden Lösungen für die Einsatzsicherung ihrer Bauteile und für ressourceneffiziente Fertigungsprozesse zu bieten. Die Methode besteht darin, die Veränderungen im Werkstoff an einer künstlich eingebrachten Rissspitze zu erfassen, während verschiedenste Belastungen auf die Werkstoffprobe einwirken. Von solcherart bruchmechanischen Versuchen ausgehend erarbeiten wir anhand modernster Analysemethoden Konzepte und Methoden, die die Zuverlässigkeit, Sicherheit, Lebensdauer und Funktionalität von Bauteilen und Systemen verbessern. Denn Defekte in Werkstoffen und Bauteilen sind immer vorhanden.

#### Werkstoffe sind unvollkommen und veränderlich

Wir erfassen und begreifen Materialien als veränderliche Systeme. Indem wir die Struktur, die dynamischen Prozesse im Inneren und das spezifische Verhalten von Werkstoffen beschreibbar machen, können wir Einfluss auf ihre Eigenschaften und ihr Verhalten nehmen. Wir beschreiben das bei anwendungsnahen Belastungen erfasste Werkstoffverhalten auf der Makroskala aber auch bis »hinunter« zu atomaren Effekten. Wir bewerten die Erkenntnisse, treffen Vorhersagen und können so Materialverhalten einstellen. Damit ermöglichen wir neue Funktionen und gewährleisten bestmögliche Zuverlässigkeit und Sicherheit.

#### **Bruchmechanische Methoden im Mikrobereich**

Wir bewerten, unter welchen Bedingungen im Material vorhandene mikrostrukturelle Defekte zur Rissinitiierung und zum anschließenden Risswachstum neigen. Wir konnten zeigen, dass bruchmechanische Konzepte auch auf kleinste Prüfquerschnitte

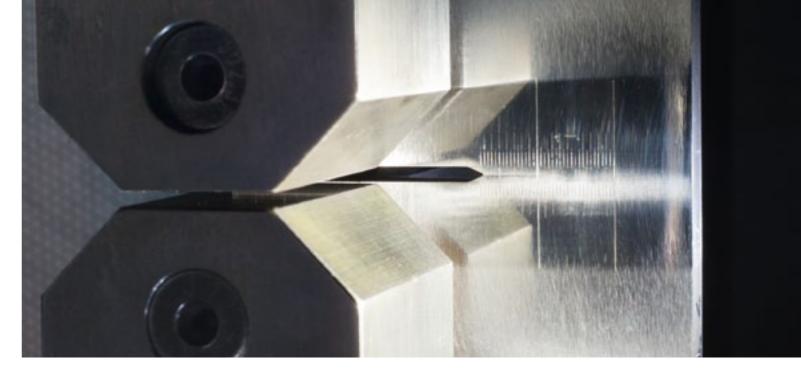
im Submillimeterbereich anwendbar sind: dass beispielsweise die Schwingfestigkeit makroskopischer Strukturen von der Rissinitiierung an nichtmetallischen Einschlüssen abhängt und sich unerwünschte Effekte darauf zurückführen lassen (Artikel auf Seite 44). Dies liefert neue Erkenntnisse für die Lebensdauerbewertung hochfester Stähle und randschichtgehärteter Bauteile.

Die mikrostrukturelle Charakterisierung nichtmetallischer Einschlüsse und deren Auswirkung auf das umgebende Matrixmaterial untersuchten wir an Proben bei unterschiedlich weit fortgeschrittener Umformung (Artikel auf Seite 26). Vor allem das Schädigungsverhalten an den besonders häufigen Mangansulfiden ist äußerst vielfältig und technisch besonders relevant, da sie zur besseren Zerspanbarkeit gezielt zulegiert werden.

## Ermüdungsrisse unter Hochtemperatur und Versagen bei Wasserstoffdruck

Für Hochtemperaturanwendungen führen wir detaillierte anwendungsnahe Untersuchungen zur Rissinitiierung und dem Kurzrisswachstum durch. Für additiv gefertigte und gegossene Aluminiumlegierungen konnten wir beispielsweise systematisch Anfangsdefekte auf Bruchflächen auswerten. Durch deren Berücksichtigung können wir das Streuband bei der Lebensdauerbewertung deutlich verringern. Mit Konzepten der Extremwertstatistik können wir volumenabhängige Defektgrößen vorhersagen.

Bei Wasserstoffversprödung kann eine oberflächennahe Schädigung zu einem spröden Bruch ohne feststellbare plastische Verformung führen (Artikel auf Seite 52). Daher ist das Wissen über die statischen Grenzlasten der Werkstoffe



Rissfortschritts-Versuch an einer C(T)-Probe (rechts) in einer Resonanzprüfmaschine.

für die zukünftige Wasserstoffinfrastruktur von immenser Bedeutung, um einen sicheren und zuverlässigen Betrieb zu gewährleisten. Für Wasserstoffanwendungen sollte deshalb neben der üblichen Auslegung gegen dynamische Lasten geklärt werden, ob die Bauteile ausreichend gegen statische Lasten dimensioniert sind, denn viele Baugruppen wie Tanks und Rohrleitungen werden bei normaler Nutzung oftmals überwiegend statisch belastet.

## Risszähigkeit bestimmt Zuverlässigkeit medizinischer Anwendungen

Knochenzemente auf Basis von Akrylaten werden zur Verankerung orthopädischer Implantate wie Hüft-, Knie- oder Schulterprothesen eingesetzt. Unsere Untersuchungen zur Risszähigkeit bei Knochenzementen geben Einblicke in die Mechanismen der Rissausbreitung, wichtige Hinweise zur mechanischen Zuverlässigkeit und zeigen Optimierungspotenziale medizinischer Knochenzemente auf (Artikel auf Seite 36).

#### Klassische bruchmechanische Methoden

Die Bruchkräfte oder Bruchspannungen fallen beim spröden Material Glas bei gleichen Umgebungsbedingungen durchaus sehr unterschiedlich aus. Die Ursache: Art, Verteilung und Tiefe von Fehlern in den Glasoberflächen bestimmen die Festigkeit signifikant und werden primär von den Herstellungsprozessen beeinflusst. Bei Verbundsicherheitsglas bestimmten wir die Größe der statisch anliegenden wirksamen Spannung, die zum Brucheintritt nach kurzer Nutzungsdauer beigetragen hat. Diese Erkenntnisse unterstützen unsere Kundinnen und Kunden bei der Verbesserung der mechanischen Auslegung von Glaskomponenten, sowie bei der Optimierung und Fehlersuche in ihren Herstellungsprozessen (Artikel auf Seite 28).

## Wir betreiben intelligente Wertschöpfung mit

Unsere Erklärungsmodelle und unsere Wissensbasis kombinieren wir zu intelligenten Lösungen, mit denen unsere Kunden die Eigenschaften und das Verhalten ihrer Werkstoffe und Bauteile für bestmögliche Sicherheit, Zuverlässigkeit, Lebensdauer und Funktionalität einstellen können – Lösungen für die wirtschaftliche Erzeugung und Umwandlung von Energie, die ressourcenschonende Produktion, die nachhaltige Mobilität oder die digitalisierte Wertschöpfung.

## Das Jubiläumsjahr im Rückblick



Mit einem festlichen Akt feierte das Fraunhofer IWM seinen 50sten Geburtstag im Konzerthaus Freiburg. Hier spricht der Institutsleiter des Fraunhofer IEG, Prof. Dr. Mario Ragwitz, über innovative Wasserstoffwirtschaft.

## Festkolloquium zu 50 Jahre Fraunhofer IWM im Konzerthaus Freiburg

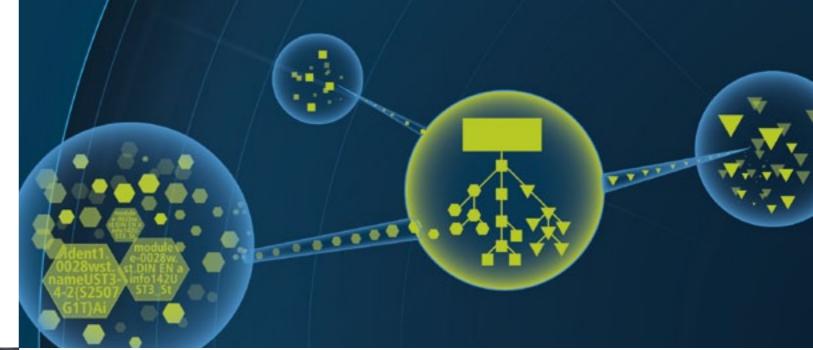
Das Jubiläum wollte gefeiert werden – und zwar am 25. Oktober 2021 im Konzerthaus Freiburg. Neben feierlichen Grußworten hochrangiger Vertreterinnen und Vertreter der Fraunhofer-Gesellschaft sowie aus Politik, Wirtschaft und Wissenschaft richteten drei Festvorträge Aufmerksamkeit auf die Themen Wasserstoffwirtschaft, Simulation und Quantencomputing. Sechs Demonstratoren spiegelten bei-spielhaft Themen des Fraunhofer IWM: »Das virtuelle Labor«, »Vorhersage eines Prozessergebnisses bei variierenden Parametern in Echtzeit durch maschinelles Lernen«, »Digitalisierter Glasbiegeprozess«, »Vorhersage der Wasserstoffbeladung von Metallen«, »elektrisch schaltbare Reibeigenschaften« und »Aufklärung lokaler Wasserstoffschädigungsprozesse«. Für Musik sorgte das befreundete »Mike Schweizer Jazz Trio« und die »Black Forest Tigers Bigband«, in der Fraunhofer IWM Mitarbeiter mitspielen. Eindrücke und Infos gibt es unter: www.iwm.fraunhofer.de/50Jahre.

Das Fraunhofer IWM eröffnet seine »neue Mitte«: (v.l.n.r.)

Dr. Markus Hermle (Mercedes-Benz AG und Kuratorium Fraunhofer IWM), Hanna Böhme (Geschäftsführerin Freiburg Wirtschaft Touristik und Messe GmbH & Co. KG), Prof. Dr. Peter Gumbsch (Institutsleiter), Elke Schubert (Verwaltungsleiterin), Dr. Rainer Kübler (stellv. Institutsleiter), Prof. Dr. Chris Eberl (stellv. Institutsleiter).

#### Vernetzen – Verknüpfen – Integrieren: Neue Räume für die Werkstoffmechanik-Forschung

Nach dreijähriger Bauzeit nahm das Fraunhofer IWM seinen Erweiterungsbau am 15. September 2021 mit einer hybriden Veranstaltung in Betrieb. Die Ministerin für Wirtschaft, Arbeit und Tourismus des Landes Baden-Württemberg, Dr. Nicole Hoffmeister-Kraut, sprach ein Grußwort und betonte die Wichtigkeit eines kreativen Arbeitsumfelds, um innovativ zu sein und zu bleiben. Damit die auf 345 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter gewachsene Belegschaft genügend Raum für Forschung und als Gedankenschmiede hat, finanzierten Bund und Land mit 14,4 Mio. € gemeinsam das Bauvorhaben. Das Ergebnis steht unter dem Motto »Vernetzen – Verknüpfen – Integrieren«, da der moderne, lichtdurchflutete Eingangs-bereich den alten und neuen Bestand zu einem Ganzen verbindet. In den neuen Gebäuden befinden sich auf insgesamt 4300 m² Büroarbeitsplätze, ein Großproben-Prüflabor, ressourcenschonende Heiztechnik und eine neue Werkstatt mit mehr Platz für die Versuchsaufbau- und Probenfertigung.



#### Workshopreihe »MaterialDigital«

Unter dem Titel »Werkstoffdaten in Beziehung setzen: Datenstrukturen konzipieren, Dateninseln integrieren« stellte das Fraunhofer IWM das datentechnische und datenorganisatorische Fundament in den Mittelpunkt seines ersten Online-Workshops Material Digital im März 2021. Wie können Werkstoffdaten und -informationen aus unterschiedlichen Quellen und in unterschiedlicher Beschaffenheit und Qualität zueinander in Beziehung gesetzt werden? Welche Hürden müssen dabei genommen werden? Wie kann die Integration von Daten zu einem Mehrwert-bringenden Prozess werden? Im Oktober schloss sich der zweite Online-Workshop an mit dem Thema »Vom digitalisierten Werkstoff zum erfolgreichen Business Case – Fallstricke bei der Entwicklung digitaler Werkstofflösungen vermeiden«. Namhafte Expertinnen und Experten präsentierten strategische, juristische und unternehmerische Überlegungen, die für eine Wertschöpfung im Zusammenhang mit digitalisierten Werkstoffprozessen erfolgskritisch sind. Diese Überlegungen sind gleichermaßen innerorganisatorisch wie unternehmensübergreifend relevant.

#### KI in der Werstoffforschung

Zum Thema »Künstliche Intelligenz, Digitalisierung und Werkstoffmodellierung für bessere Lebensdauervorhersagen« tauschen sich ebenfalls im Online-Format Expertinnen und Experten im November 2021 aus. Der englischsprachige Workshop adressierte das neue Forschungsfeld der künstlichen Intelligenz (KI) in der Werkstoff- und Bauteilforschung. Durch die Kombination von KI-Methoden und neuen Formen der Wissensrepräsentation nimmt das datenbasierte Management von Produktlebenszyklen neue Qualitäten an – die Prozesse der Materialentwicklung, der Materialverarbeitung, der Lebensdauervorhersage und der Materialcharakterisierung werden sich deutlich verändern.

# Das Kuratorium des Fraunhofer IWM

#### **Dr. Markus Hermle**

Kuratoriumsvorsitzender, Mercedes-Benz AG, Sindelfingen

Dr. Nikolaus Blaes, Saarschmiede GmbH, Völklingen

Alexander Essig, Rosswag GmbH, Pfinztal

Prof. Dr. Jörg Eßlinger, MTU Aero Engines AG, München

Dr. Jürgen Groß, Robert Bosch GmbH, Renningen

Prof. Dr. André Haufe, DYNAmore GmbH, Stuttgart

Dr. Roland Herzog, MAN Energy Solutions SE, Oberhausen

Bernhard Hötger, HEGLA GmbH & Co. KG, Beverungen

**Prof. Dr. Oliver Kraft**, Karlsruher Institut für Technologie KIT, Karlsruhe

Dr. Katrin Mädler, DB Systemtechnik GmbH, Brandenburg

Dr. Juliane Mentz, Salzgitter Mannesmann Forschung GmbH, Duisburg

Bruno Posset, Märkisches Werk GmbH, Halver

Dr. Christian Renz, Ministerium für Wirtschaft, Arbeit und Tourismus BW, Stuttgart

Dr. Heike Riel, IBM Research, Zürich

**Prof. Dr. Katja Schenke-Layland**, Naturwissenschaftliches und medizinisches Institut an der Universität Tübingen, Reutlingen

Dr. Dietmar Völkle, Diehl Aviation Laupheim GmbH, Laupheim

Dr. Silke Wagener, Freudenberg Technology Innovation SE & Co. KG, Weinheim

## Zusammenarbeit: maßgeschneidert auf Ihren Bedarf

Unser Ziel ist, nachhaltige Lösungen zu erarbeiten, mit denen Sie das Optimum aus Ihren Werkstoffen und Bauteilen herausholen können. Dafür bieten wir Ihnen Kooperationsformen an, die wir individuell an Ihre Anforderungen anpassen.

Die Kooperation mit Unternehmen, zu einem Großteil KMU, ist das tägliche Brot der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter bei Fraunhofer. Sie schöpfen ihr Selbstverständnis daraus, dass ihre Arbeit stets die Anwendung zum Ziel hat.

Der Umgang mit vielen unterschiedlichen Auftraggeberinen und Auftraggebern sorgt auch dafür, dass man bei Fraunhofer umfassende Erfahrung mit der Denk- und Arbeitsweise von Unternehmen hat. Viele Fraunhofer-Mitarbeiterinnen und -Mitarbeiter haben selbst schon in der Industrie gearbeitet. Die intensive Kooperation mit der Industrie führt zu einer ständigen Anpassung der Fraunhofer-Forschung an die wachsenden Anforderungen der Unternehmen. Die hohe Kundenzufriedenheit – bestätigt durch Umfragen – zeigt, dass das Fraunhofer IWM als Partner für Unternehmen einen exzellenten Ruf genießt.

#### Auftragsforschung

Sie stellen sich einer werkstofftechnischen Herausforderung und benötigen zeitnah konkrete Lösungen? Wir unterstützen Sie bei der Lösungsfindung und Umsetzung. Auftragsforschungsprojekte zeichnen sich durch klar definierte Ziele, Arbeitspakete und Meilensteine aus und liefern Ihnen direkt umsetzbare Ergebnisse für Ihr Unternehmen.

Manche Aufgabenstellungen sind so komplex, dass mehrere Partner die Lösung gemeinsam entwickeln müssen. Für solche Fälle steht Ihnen das Know-how aller Fraunhofer-Institute zur Verfügung, die inhaltlich nahezu alle denkbaren Themen



abdecken. Wir haben Erfahrung mit der effizienten und fairen Abwicklung großer Projekte mit mehreren Fraunhofer-Instituten. Und wir wissen, welche Fördermöglichkeiten dafür infrage kommen.

#### Öffentlich geförderte Verbundprojekte

Mit öffentlich – von Land, Bund oder EU – geförderten Forschungsprojekten erschließen Industrieunternehmen gemeinsam mit Forschungseinrichtungen neue Themen. Für ein Verbundvorhaben beantragen In-

dustriepartner und Forschungseinrichtungen gemeinsam Fördermittel. Das Ergebnis solcher Projekte sind vorwettbewerbliche Erkenntnisse und breit anwendbare Methoden. Diese können beispielsweise im Rahmen der Auftragsforschung auf konkrete Fragestellungen übertragen und an unternehmensspezifische Anforderungen angepasst werden.

#### **Strategische Partnerschaften**

Das Fraunhofer IWM wirkt als Beschleuniger in Entwicklungsund Innovationsprozessen. Mit einer strategischen Partnerschaft haben Sie einen geregelten Zugriff auf unser stetig wachsendes Know-how und auf unsere technischen Möglichkeiten. Damit bekommen Sie Planungssicherheit für Ihre Forschungs- und Innovationsvorhaben.

#### **Strategische Vorlaufforschung**

Unsere öffentlich geförderte Grundlagenforschung orientiert sich an Themen, die erst in einigen Jahren industriell relevant werden. Dazu beteiligt sich das Fraunhofer IWM beispielsweise an Grundlagenforschungsprojekten und Sonderforschungsbereichen der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und erschließt Zukunftsthemen im Rahmen marktorientierter strategische Vorlaufforschungsprojekte der Fraunhofer-Gesellschaft.

## Fraunhofer IWM – What's next?

## Vorlaufforschung für industrielle Anwendungen

Das Fraunhofer IWM gestaltet Zukunft mit seinen nachhaltigen Lösungen für eine optimierte Nutzung von Materialeigenschaften und neue Materialfunktionen. Um für Kunden und Gesellschaft den größtmöglichen Nutzen zu erzielen, richten sich unsere Themenschwerpunkte nach aktuellen und zukünftigen industriellen und gesellschaftlichen Bedarfen. Die Hinweise darauf erhalten wir aus intensiven Dialogen mit der Industrie, der Wissenschaft und der deutschen Politik. Fraunhofer-interne Programme unterstützen institutsübergreifende, anspruchsvolle Vorlaufforschung zur Vorbereitung neuer Geschäftsfelder.

#### Fraunhofer-Leitprojekt Evolutionäre Selbstanpassung von komplexen Produktionsprozessen und Prozessen – EVOLOPRO

Evolutionsbiologische Mechanismen werden zur Erzeugung einer neuen Generation von Produktionssystemen genutzt: Diese sogenannten »Biological Manufacturing Systems (BMS)« sollen sich analog biologischer Organismen selbstständig und in kurzer Zeit an neue Anforderungen und Umgebungsbedingungen anpassen können. Das Fraunhofer IWM beteiligt sich an der digitalen Repräsentation von Werkstoffen und an der Prozess- und Bauteiloptimierung.

Laufzeit: Jan. 2019 - Dez. 2022 | Dr. Dirk Helm

## MAVO Hoch(warm)feste Aluminiumlegierungen für das Urformen im Leichtbau – HAlUr

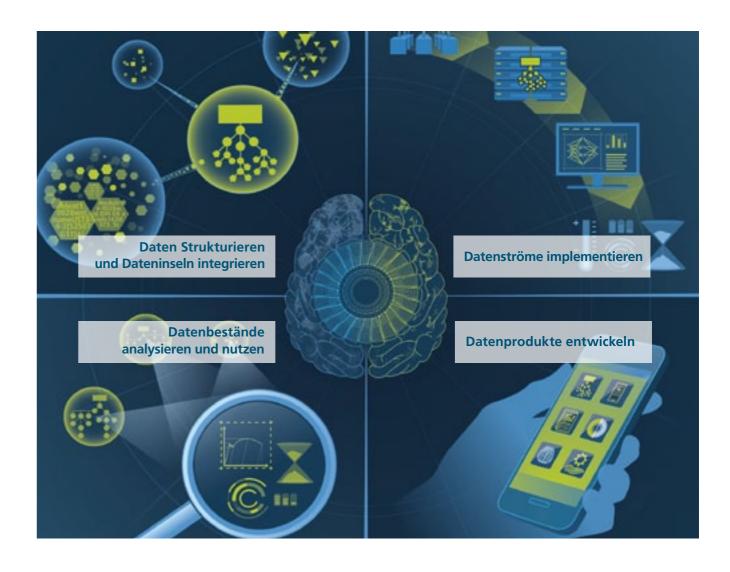
Um neue Leichtbauweisen zu ermöglichen, werden hochfeste Aluminiumlegierungen entwickelt, die mittels Guss und additiver Fertigungsverfahren herstellbar sind. Zur Berechnung von Mikrostruktur und Eigenschaften neuer Legierungen werden thermodynamische und atomistische Methoden angewendet. Der Fertigungsprozess wird mithilfe partikelbasierter Simulationen optimiert. Zudem werden Bauteildemonstratoren mechanisch validiert.

Laufzeit: März 2019 – Febr. 2022 | Dr. Johannes Preußner

## MAVO Mehrlagenkeramische Einbettung von SiC-Halbleiterbauelementen – MESiC

Ziel ist eine vollkeramische Aufbau- und Verbindungstechnik im Miniaturformat, die hohe Leistungen, hohe Schaltgeschwindigkeiten und gesteigerte Zuverlässigkeit miteinander vereint. Das Fraunhofer IWM entwickelt mithilfe von Simulationsmodellen den optimalen Prozess, der Sinterverzug und Defekte vermeidet. Zudem optimiert es die Grenzflächeneigenschaften und erfasst Input für die Bauteilsimulation, beispielsweise Diffusivitäten oder Grenzflächeneigenschaften.

Laufzeit: März 2019 – Febr. 2022 | Dr. Torsten Kraft



#### MAVO Unternehmensspezifische Werkstoffdatenräume zur beschleunigten Produktentwicklung – UrWerk

Ein Framework für maßgeschneiderte Werkstoffdatenräume wird entwickelt, das die komplexe Historie von Werkstoffen oder Werkstoffsystemen abbildet. Kern ist eine exemplarische ontologiebasierte Beschreibung, die bei Bedarf anwendungsund unternehmensspezifisch erweitert werden kann. Im Ergebnis werden so durch datengetriebene Analyse-Werkzeuge wie Machine Learning aus der strukturierten Datenablage und Dokumentation zusätzliche Informationen zu verschiedenen Werkstoff- und Werkstoffsystemzuständen zugänglich.

Laufzeit: März 2019 – Okt. 2022 | Dr. Michael Luke

## Fraunhofer-Leitprojekt Quantenmagnetometer für industrielle Applikationen – QMag

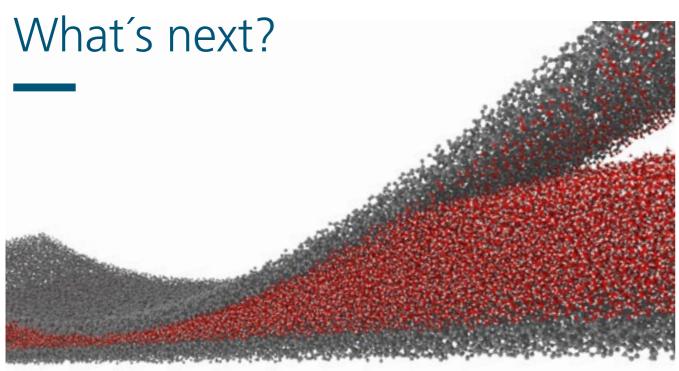
Die Quantenmagnetometrie wird aus dem universitären Forschungsumfeld in konkrete industrielle Anwendungen überführt. Das Forschungsteam entwickelt hochintegrierte, bildgebende Quantenmagnetometer mit höchster Ortsauflösung und Sensorsignalempfindlichkeit. Für das Fraunhofer IWM entstehen neuartige Möglichkeiten der experimentellen Werkstoffprüfung zur frühzeitigen Detektion von mikrostrukturellen Veränderungen in mechanisch belasteten Werkstoffproben.

#### Fraunhofer-Leitprojekt Materialien für Tandemsolarzellen mit höchster Umwandlungseffizienz – MaNiTu

Nachhaltige, höchsteffiziente und kostengünstige Tandemsolarzellen werden auf Basis neuer Absorbermaterialien entwickelt. MaNiTu soll die PV-Produktionsindustrie Europas stärken, indem kritische, giftige Materialien vermieden, Ressourcenverbrauch gesenkt, Anwendungen erweitert und Stromentstehungskosten sowie Flächenverbrauch gesenkt werden. Mit theoretischen Methoden der Materialmodellierung werden vom Fraunhofer IWM elektronische und optische Eigenschaften von neuartigen Perovskitverbindungen für Absorberschichten und deren Grenzflächen zu Kontaktschichten berechnet und bewertet.

Laufzeit: Dez. 2019 – Dez. 2023 | Prof. Dr. Christian Elsässer

Laufzeit: April 2019 – Dez. 2024 | Prof. Dr. Christian Elsässer



Mit virtuellen Methoden machen wir Unsichtbares sichtbar und betrachten aufs Atom genau die Vorgänge in einem Reibspalt. Hier bei einer mit Diamant (grau) beschichteten Gleitringdichtung, die einen hauchdünnen Wasserfilm (rot-weiß) als Schmierstoff nutzt.

#### PREPARE FingerKit – Remobilisierung von Fingergelenken durch KI-basierte Rekonstruktion und Generierung patientenindividueller Keramikimplantate

Im Projekt FingerKIt wird eine erstmals durchgängig automatisierte Prozesskette zur Herstellung patientenindividueller Implantate entwickelt. Das Fraunhofer IWM berechnet die Versagenswahrscheinlichkeit der Implantatbelastung, führt die Evaluation der mechanischen Eigenschaften der Materialien und Strukturen aus und entwickelt das Prüfkonzept für Kleingelenke über statische und dynamische Prüfung.

Laufzeit: Febr. 2020 – Jan. 2023 | Dr. Andreas Kailer

## SME Materialkarten für FVK-Werkstoffe auf Basis von realen und virtuellen Mikro-Zugversuchen - REVIT

Die Modellierung von wirrfaserverstärkten Kunststoffen basiert derzeit auf sehr aufwändigen experimentellen Untersuchungen und benötigt eine Vielzahl an Parametern. Hier wurde eine Methode entwickelt, mit der gezielt präparierte Mikroproben mittels CT digitalisiert und direkt in ein mikromechanisches Modell überführt werden. Kennwerte, ermittelt in experimentellen Untersuchungen nach dem CT-Scan, dienen der Mikromodellierung zur Parametrisierung und Validierung. Basierend auf der Mikromodellierung werden dann Parameter für makroskopische Materialkarten abgeleitet.

Das Fraunhofer IWM klärt Einsatzverhalten auf, bewertet es und kann so Vorhersagen treffen. Ein weiterer Schwerpunkt ist die Digitale Repräsentation von Werkstoffen.

Laufzeit: Juli 2020 – Dez. 2022 | Dr. Jörg Lienhard

## PREPARE Supragleitlager für maximale Energieeffizienz und Präzision - SupraSlide

Um eine neue Generation von Gleitlagersystemen zu ermöglichen, soll die sogenannte Supraschmierung in technische Anwendungen überführt werden: Das Ziel ist, eine 90 prozentige Energieeinsparung im Vergleich zu konventionellen Gleitlagern mit hohen Reibverlusten zu ermöglichen. Dies könnte einen erheblichen Beitrag zur Energiewende leisten. Die beteiligten Institute nutzen dazu ihre Expertise der Bereiche Tribologie, Werkstoffe, Multiskalensimulation, Systementwicklung und Evaluierung, um robuste Lösungen für Mobilität, Anlagentechnik, Mechatronik und Robotik zu realisieren und das Anwendungspotenzial von Supragleitlagern dazustellen. Das Fraunhofer IWM trägt mithilfe experimenteller Grundlagen als auch Simulationen zum übergreifenden Verständnis der Supraschmierung bei und entwickelt anwendungsorientierte Kohlenstoffbeschichtungen für Reibsysteme.

Laufzeit: Jan. 2021 – Dez. 2023 | Prof. Michael Moseler

#### Traceability digitaler Assets durch vernetzte Ökosysteme in der additiven Fertigung – ADAM

Im Rahmen des Fraunhofer KMU-akut Projekts ADAM wird ein erstes Datenökosystem für die Additive Fertigung initiiert und durch Validierungsprojekte bzw. Machbarkeitsstudien begleitet. Grundlage für die Validierungsprojekte und Machbarkeitsstudien ist eine systematische Bedarfserhebung mit beteiligten KMU. Im Validierungsprojekt QualiNet zeigt das Fraunhofer IWM den Nutzen von vernetzten Daten in der Werkstoffgualifizierung auf.

Laufzeit: März 2021 – Febr. 2022 | Dr. Christoph Schweizer

#### SME Ultraharte und schnellwachsende ta-C:H Schichten mit 60 GPa im PECVD Verfahren – UltraHart

Bisher liegt weltweit die Grenze für DLC Schichten im PE-CVD Verfahren bei ca. 30 GPa. Am Fraunhofer IWM wurde nun ein Verfarhen entwickelt, um bis zu 60 GPa harte DLC Sc hichten zu erzeugen. Neben der großen Härte sind vor allem die ex-

trem hohen Abscheideraten von bis zu 16 um/h weltweit einmalig. In diesem Projekt sollen die Schichten zur Serienreife weiter entwickelt werden und dann entsprechend umgesetzt werden. Der Beitrag des Fraunhofer IWM liegt hier vor allem in der Prozess- und Bauteiloptimierung und der Entwicklung multifunktionaler Werkstoffe.

Laufzeit: Aug. 2021 – Juli 2023 | Bernhard Blug

## 2021 abgeschlossene Vorlaufforschungsprojekte

## Fraunhofer-Leitprojekt Machine Learning for Production –ML4P

Maschinelle Lernverfahren haben für die optimale Gestaltung von Fertigungsprozessen ein großes Potenzial. Dafür soll ein toolgestütztes Vorgehensmodell entwickelt und an drei Anwendungs-Demonstratoren getestet werden.

Das Fraunhofer IWM wird das toolgestützte Vorgehensmodell anwenden, um eine kognitive Glasbiegemaschine zu entwickeln.

Laufzeit: Febr. 2015 – Jan. 2021 | Dr. Dirk Helm

#### MAVO Akustisches Design von Kunststoff-Bauteilen – PolymerAkustik

Aufgrund ihres geringen spezifischen Gewichts ist das akustische Verhalten von Bauteilen aus unverstärkten und faserverstärkten Kunststoffen oftmals problematisch. Es werden numerische Methoden entwickelt, die das gezielte Design der Mikrostruktur solcher Materialien im Hinblick auf die Optimierung ihrer akustischen Eigenschaften zulassen.

Laufzeit: April 2018 - Dez. 2021 | Dr. Jörg Hohe

### Eine Wasserstoffwirtschaft für Deutschland –

Deutschland plant den Aufbau einer Wasserstoffwirtschaft. Um diesen Prozess nachhaltig, sicher und international zu gestalten, werden Pfade zur künftigen Nutzung der Wasserstofftechnologien für Politik und Industrie aufgezeigt, speziell in den Bereichen Digitalisierung der Wasserstoffwirtschaft, Elektrolyseur-Komponenten und Sicherheitsaspekte. Das Fraunhofer IWM bearbeitete das Thema Werkstoffe für die sichere Infrastruktur. Das Projekt entstand aus dem »Fraunhofer Innovationsprogramm 2020« und wurde um ein weiteres Jahr verlängert.

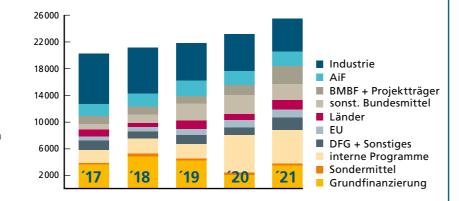
Laufzeit: Feb. 2021 – Dez. 2021 | Dr. Thorsten Michler

## Das Institut in Zahlen

#### Betriebshaushalt

Der Betriebshaushalt des Fraunhofer IWM ist gegenüber dem Vorjahr gestiegen. Im Betriebshaushalt sind alle Personal- und Sachaufwendungen enthalten.

Er wird finanziert durch externe Erträge aus Industrie und öffentlicher Hand sowie durch die institutionelle Förderung (Grundfinanzierung). Der Anteil der Industrieerträge am Betriebshaushalt 2021 liegt bei 27,8 Prozent.

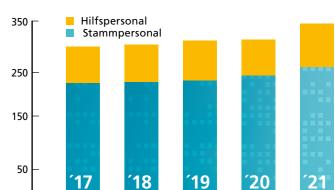


**25,4 Mio. Euro** 

4,4 Mio. Euro investiert.

#### Personalentwicklung am Fraunhofer IWM







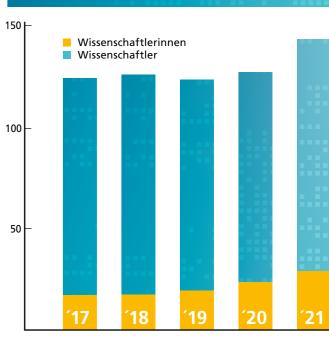


## Wissenschaftlerinnen am Fraunhofer IWM

Das Fraunhofer IWM will den Anteil der Wissenschaftlerinnen am Institut erhöhen und hat sich darum im Rahmen des Pakts für Forschung und Innovation eine jährliche Ein-

stellungsquote von 29 Prozent zum Ziel gesetzt. 2021 hat das Institut bei den wissenschaftlichen Stellen 30 Prozent Wissenschaftlerinnen eingestellt.

**PROZENT** 



Stand Ende 2021

## Das Institut in Zahlen

Magazin

Magazin

BEITRÄGE
IN REFERIERTEN ZEITSCHRIFTEN

#### Wissenschaftliche Exzellenz

Das Fraunhofer IWM übersetzt Know-how zu Mechanismen in Werkstoffen, Bauteilen und Prozessen projektspezifisch in FuE-Leistungen. Das Wissen dafür basiert auf der hervorragenden wissenschaftlichen Arbeit unserer Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter. Von unserer wissenschaftlichen Exzellenz profitieren kleine und mittelständische Unternehmen ebenso wie Forschungsinstitutionen oder die öffentliche Hand. Die hier aufgeführten Zahlen sollen einen Hinweis auf die Qualität und Quantität unserer wissenschaftlichen Arbeit geben.

Sie finden Sie die Publikationen unserer Gruppen auf deren Webseiten. Zudem könen sie unter folgendem Link oder über den QR-Code unsere Publikationen online einsehen:

www.iwm.fraunhofer.de/publikationen

PREISE UND EHRUNGEN

Werkstoffmechanik-Preis 2021 des
Fraunhofer IWM für Tobias Rosenstingl
für seine Masterarbeit zum Thema
»Viskositätsschaltbare Silikonöle«
27.05.2021
Poster Award MaterialsWeek 2021 der

Deutschen Gesellschaft für Materialkunde an Fabien Ebling für »Investigation of Hydrogen Embrittlement at RT and 77 K using the Tubular Specimen Technique« 09.09.2021



4035 ZITATIONEN

#### BESTEHENDE PATENTE

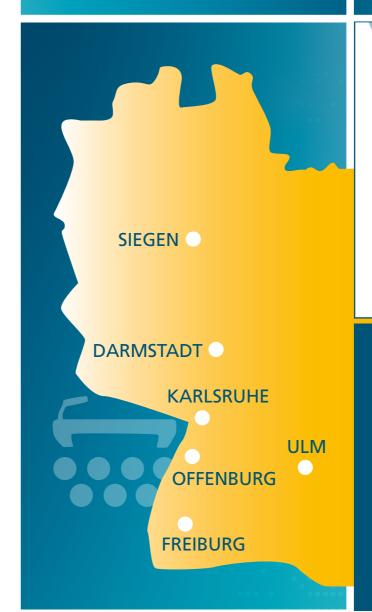
davon wurden 2021 3 für verschiedene Länder neu erteilt aus den Bereichen »Trennen von Verbundglas«, »Umformen von Glas oder Glaskeramik« sowie »Herstellung einer mikromechanischen Komponente«. Akademische Qualifizierung am Fraunhofer IWM

BACHELOR

davon 7 am Karlsruher
Institut für Technologie
(KIT) und jeweils einer an
der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, der
Hochschule Konstanz
Technik, Wirtschaft
und Gestaltung (HTWG
Konstanz), der Hochschule
Offenburg und der German University of Cairo

29<sub>MASTER</sub>

davon 10 am Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 5 an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, jeweils 2 an der Technischen Universität Bergakademie Freiberg, der Ruhr-Universität Bochum und der Hochschule Offenburg und jeweils einer an der Hochschule Esslingen und Aalen, der Jade Hochschule Wilhelmshaven, der Université de Strasbourg, der Universität Duisburg-Essen, der Technischen Universität Darmstadt, der University of South Wales, der Technischen Universität Dortmund und der Hochschule Kaiserslautern





# VORLESUNGEN und VORLESUNGSREIHEN

Themen unter anderem:

Verbundwerkstoffe, (Angewandte) Werkstoffsimulation, Wissenschaftliches Programmieren,
Werkstoffkunde, Versagensverhalten von
Konstruktionswerkstoffen, (Nano-) Tribologie,
Computational Physics, Kontinuumsmechanik,
Superconductivity, Quantum Transport, Numerische Methoden der Biomechanik, Werkstofftechnik,
Schadenskunde, Applied Materials Simulation,
Atomistische Simulation und Molekulardynamik,
Arbeitstechniken im Maschinenbau

Stand Ende 2021

# Instituts-Kooperationen innerhalb der Fraunhofer-Gesellschaft





Der Fraunhofer-Verbund Werkstoffe, Bauteile – MATERIALS nutzt seine Expertise von den materialwissenschaftlichen Grundlagen bis zu werkstofftechnischen Systemlösungen, um Innovationen für die Märkte seiner Kunden und Partner zu schaffen. Die Basis hierfür ist seine skalenübergreifende Materialkompetenz entlang industrieller Wertschöpfungsketten. Materialwissenschaft und Werkstofftechnik umfassen bei Fraunhofer die gesamte Wertschöpfungskette, von der Entwicklung neuer und der Verbesserung beziehungsweise einsatzspezifischen Anpassung bestehender Materialien und Werkstoffe über die passenden Fertigungsverfahren im quasi-industriellen Maßstab, die Charakterisierung der Eigenschaften bis hin zur Bewertung des Einsatzverhaltens. Dies gilt auch für die aus den Werkstoffen hergestellten Bauteile und Produkte und deren Systemverhalten in den jeweiligen Anwendungen.

Die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in den Verbundinstituten setzen ihr Know-how und ihre Expertise vor allem in den Bereichen Mobilität, Gesundheit, Maschinen- und Anlagenbau, Bauen und Wohnen, Mikrosystemtechnik, Sicherheit sowie Energie und Umwelt ein. Sie sind national und international gut vernetzt und tragen in einer großen Spannweite zu werkstoffrelevanten Innovationen und Innovationsprozessen bei. Neben experimentellen Untersuchungen in Labors, Technika und Pilotanlagen werden gleichrangig Verfahren der numerischen Simulation und Modellierung eingesetzt; dies über alle Skalen, vom Molekül über das Bauteil bis hin zum komplexen System und zur Prozesssimulation. Der Fraunhofer-Verbund Werkstoffe, Bauteile – MATERIALS deckt stofflich den gesamten Bereich der metallischen, anorganisch-nichtmetallischen, polymeren und aus nachwachsenden Rohstoffen erzeugten Werkstoffe sowie Halbleitermaterialien ab. Eine große Bedeutung haben hybride Materialien und Verbundwerkstoffe gewonnen.

Verbundvorsitzender Prof. Dr. Peter Gumbsch www.materials.fraunhofer.de

#### **Allianz Batterien**

Die Allianz entwickelt für elektrochemische Energiespeicher wie Batterien und Superkondensatoren technische und konzeptionelle Lösungen. Die Kompetenzen der Fraunhofer-Allianz Batterien umfassen dabei die Themen Material, Zellproduktion, System, Simulation und Testung.

Dr. Leonhard Mayrhofer www.batterien.fraunhofer.de

#### Fraunhofer-Forschungsfeld Leichtbau

Die Qualität einer Leichtbaustruktur ist wesentlich bestimmt durch ihre Werkstoffeigenschaften, die konstruktive Formgebung, ihre Bauweise und den Herstellungsprozess. Das Fraunhofer-Forschungsfeld Leichtbau mit den 15 beteiligten Fraunhofer-Institute betrachtet die gesamte Entwicklungskette von Werkstoff- und Produktentwicklung über Serienfertigung und Zulassung bis hin zum Produkteinsatz.

Dr. Michael Luke www.leichtbau.fraunhofer.de

#### Fraunhofer-Kompetenzfeld Additive Fertigung

Additive Fertigungstechniken sind konventionellen Techniken bei der Herstellung maßgeschneiderter, komplexer Bauteile und Kleinserien in Flexibilität, Arbeits- und Materialaufwand überlegen. Das Kompetenzfeld widmet sich der Entwicklung, Anwendung und Umsetzung additiver Fertigungsverfahren und Prozesse sowie der dazugehörigen Materialien.

Dr. Raimund Jaeger www.additiv.fraunhofer.de



#### Fraunhofer-Netzwerk Numerische Simulation von Produkten, Prozessen

Das Fraunhofer-Netzwerk bearbeitet institutsübergreifende Aufgaben zur Entwicklung und Verbesserung von Simulationsverfahren. Es bündelt zudem Kompetenzen aus dem Bereich Informations- und Kommunikationstechnologie, das Werkstoff- und Bauteil-Know-how sowie Wissen aus der Oberflächen- und Produktionstechnik.

Dr. Claas Bierwisch www.simulation.fraunhofer.de

#### Leistungszentrum Nachhaltigkeit Freiburg

Die fünf Freiburger Fraunhofer-Institute und die Albert-Ludwigs-Universität beantworten zusammen mit Industriepartnern die fachübergreifenden Forschungsfragen für eine nachhaltige Entwicklung von Wirtschaft und Gesellschaft und setzen sie in konkrete Innovationen um. Mit Projekten, Veröffentlichungen und Patenten, durch Existenzgründung mit Industriepartnern und mit umfassender Lehre und Weiterbildung am Institut für Nachhaltige Technische Systeme (INATECH) erschließt das Leistungszentrum die gemeinsamen Potenziale zu Themen der Nachhaltigkeit.

Prof. Dr. Chris Eberl www.leistungszentrum-nachhaltigkeit.de

#### Leistungszentrum Profilregion Mobilitätssysteme Karlsruhe

Vier Fraunhofer-Institute sowie die Fraunhofer-Projektgruppe »Neue Antriebssysteme (NAS)« erforschen mit dem Karlsruher Institut für Technologie KIT, der Hochschule Karlsruhe Technik und Wirtschaft (HsKA) und dem FZI Forschungszentrum Informatik Themen zu effizienter, intelligenter und integrierter Mobilität. Das Leistungszentrum vernetzt wichtige Akteure aus Wissenschaft, angewandter Forschung und Industrie. Die Zukunftsthemen reichen von Mobilitätsanforderungen durch Überalterung oder Urbanisierung über veränderte städtische Infrastruktur, automatisierte und autonome Mobilität bis hin zu Leichtbau sowie (hybrid-)elektrischen und verbrennungsmotorischen Antrieben zur Effizienzsteigerung und CO<sub>2</sub>-Ausstoßminderung.

Prof. Dr. Martin Dienwiebel www.profilregion-ka.de

## Fraunhofer-Cluster of Excellence Programmierbare Materialien CPM

Das Exzellenzcluster entwickelt Programmierbare Materialien exemplarisch in sechs Themenschwerpunkten, die sich auf Transporteigenschaften, mechanische Materialeigenschaften, Produktentwicklung und Fertigung fokussieren. Das Fraunhofer IWM nimmt im Exzellenzcluster eine zentrale Rolle ein: Es stellt die Geschäftsstelle und steht für zwei der sechs Themenschwerpunkte: »Programmierbare Reibung« sowie »Programmierbare Formänderung und Mechanik«.

Prof. Dr. Chris Eberl www.cpm.fraunhofer.de

## Geschäftsfeld Fertigungsprozesse

## Optimale Fertigungsprozesse für Bauteile mit maßgeschneiderten Eigenschaften

Werkstoffe werden in Fertigungsprozessen oftmals an ihrer Belastungsgrenze verarbeitet. Wir untersuchen, welche Stellschrauben den Fertigungsprozess so beeinflussen können, dass Qualität und Form trotzdem stimmen. Gleichzeitig müssen prozessinduzierte Werkstoffschädigungen vermieden oder beherrschbar werden. Unsere Expertinnen und Experten beschäftigen sich mit derartigen Fragestel-

**>>** 

Mit interdisziplinärem Wissen und digitalen Methoden gestalten wir Fertigungsprozesse und steigern somit Nachhaltigkeit und Resilienz.

lungen auf den Gebieten Pulvertechnologie, additive Fertigung, Umformtechnik und Glasformgebung. Durch die Kombination von interdisziplinärem Know-how zu Werkstoffverhalten, ausgefeilten Simulationen und einer Versuchstechnik, mit der wir möglichst realitätsnah Werkstoffbeanspruchungen in Fertigungsprozessen nachstellen, kann

das Forschungsteam Prozesse umfassend bewerten und entsprechende Optimierungsvorschläge erarbeiten.

Zu unseren Kernkompetenzen zählt die Fähigkeit, das Verhalten von Werkstoffen während des Fertigungsprozesses im Detail und auf verschiedenen Skalen - von der Mikrostruktur bis zum Bauteil – analysieren, verstehen und optimieren zu können. Besonders hilfreich ist unsere Simulationskompetenz, die wir auch im vergangenen Jahr im Geschäftsfeld weiter ausgebaut haben. Neben vielen branchenüblichen Simulationstools bieten unsere modernen, umfangreichen Materialmodelle die Grundlage, im Computer das Verhalten eines Werkstoffs realitätsnah abzubilden. Dieses Wissen ist die Voraussetzung für die Weiterentwicklung von Fertigungsprozessen in Zusammenarbeit mit unseren Industriepartnern.

## Schädigung in Fertigungsprozessen und Bauteilen

Die Belastungsgrenzen von Werkstoffen spielen in der industriellen Fertigung eine große Rolle. Die fertigungsinduzierten Schädigungsprozesse verändern die Mikrostruktur der Werkstoffe und haben einen essenziellen Einfluss auf die Produkteigenschaften. Zu diesem Kernthema des Geschäftsfeldes haben wir auch 2021 neues Wissen erarbeitet.



## Beherrschung der Umformgrenzen in der Kaltmassivumformung

In der Kaltmassivumformung ist es wichtig, den metallischen Werkstoff so umzuformen, dass die Belastungsgrenzen nicht erreicht werden. Die sichere digitale Auslegung von Umformprozessen auf Basis der Umformsimulation bezüglich Machbarkeit, Prozessfolge und so weiter ist dabei ein zentrales Element in der industriellen Auslegung. Aufgrund der Komplexität ist die Verbesserung der Vorhersagefähigkeit der Umformsimulation weiterhin ein wichtiges Forschungsgebiet. Auf Basis experimenteller Untersuchungen haben wir ein Mikrostrukturmodell entwickelt, um die Schädigung an Einschlussteilchen zu beschreiben. Kombiniert mit der klassischen Umformsimulation kann so die Bewertung für kritische Bereiche verbessert werden.

## Risse bei der Einbettung von SiC-Halbleiterelementen vermeiden

Nicht nur die mechanischen Belastungsgrenzen sind in Fertigungsprozessen von Relevanz, sondern auch Schädigungen durch thermomechanische Belastungen wie beispielsweise der Einbettung von SiC-Halbleiterbauelementen in Mehrlagenkeramik. Hier kommt es zu Rissen aufgrund von Schwindungsbehinderung. Mit unseren verbesserten Modellen können wir auch hier die virtuelle Auslegung verbessern.

#### Bruchmechanik für Glas

Ein wichtiger Werkstoff, der uns im Alltag an vielen Stellen aufgrund seiner außergewöhnlichen Eigenschaften begleitet, ist Glas. Bauteile und andere Produkte aus Glas sind auch nach der Herstellung komplexen Lasten ausgesetzt. Hier setzen wir fortschrittliche bruchmechanische Methoden als Hilfsmittel zur Auslegung von Glasbauteilen wie Automobilverglasungen ein.

#### Digitalisierung

Die digitale Transformation in den Materialwissenschaften und die Anwendung des Maschinellen Lernens auf werkstoffwissenschaftliche Daten haben wir 2021 weiter vorangetrieben. Unsere Forschungsarbeiten fokussieren sich auf die Entwicklung von Ontologien, Tools für die Interoperabilität, Datenräume und Plattformen. Mit zwei europäischen Projekten stehen zwei Plattformen kurz davor, allgemein zugänglich zu werden: zum einen das »Open Innovation Environment« des EU-Projekts Oyster und zum anderen der »MarketPlace« als One-Stop Shop für die Materialmodellierung.

Dr. Dirk Helm

Geschäftsfeldleiter Telefon +49 761 5142-158 dirk.helm@ iwm.fraunhofer.de

# Einbetten von SiC-Halbleiterbauelementen in Mehrlagenkeramik

Halbleiter aus Siliziumkarbid (SiC) ermöglichen das Schalten sehr hoher Ströme und Spannungen in kompakten Systemen bei hoher Temperaturbelastbarkeit. Das macht sie sehr interessant für die Leistungselektronik. Im Fraunhofer-Verbundprojekt »Mehrlagenkeramische Einbettung von SiC-Halbleiterbauelementen – MESiC« entwickeln die beteiligten Fraunhofer-Institute IISB, IKTS, IMWS und IWM ein neuartiges, thermisch extrem stabiles Modulkonzept für SiC-Bauelemente. Im Gegensatz zu bisherigen Technologien basiert der Ansatz auf dem Einsintern von SiC-Halbleiterchips in mehrlagige keramische Substrate, die die Funktion von Gehäusen übernehmen. Gleichzeitig erzeugen wir durch den Sinterprozess temperaturstabile Anschlusskontaktierungen und wärmeabführende Kühlpfade. Die so entstehende neue Plattform-Technologie für Leistungsmodule zeichnet sich durch eine hohe thermische Robustheit aus und erlaubt damit die Ausnutzung der intrinsischen Vorteile von SiC-Halbleitern.

Das Fraunhofer IWM beschäftigt sich im Rahmen des Projekts unter anderem mit der Simulation des Einschwindens eines mehrlagigen, strukturierten Substrats aus Low-TemperatureCofired-Ceramics (LTCC) auf den fertigen SiC-Halbleiter (Abbildung 1: Variante mit Release-Tape und axialer Auflast zur horizontalen Schwindungsunterdrückung). Dabei müssen wir zum einen Schädigungen wie Risse aufgrund einer Schwindungsbehinderung vermeiden, andererseits aber auch einen ausreichenden Kontaktdruck an den Kontaktierungs- flächen erreichen. Je nach LTCC-Technologie, zum Beispiel Zero-Shrinkage oder Constrained Sintering, ist ein maßgeschneidertes Einschwinden der LTCC auf die SiC-Bauelemente notwendig.

#### Mit Sintersimulation den Prozess präzisieren

Am Fraunhofer IWM untersuchen und vergleichen wir die unterschiedlichen Technologien mithilfe der Sintersimulation. Die Simulation soll dabei in Abhängigkeit der Form des SiC-Halbleiters sowohl die Geometrie der Kavität in der Keramik (notwendige Spaltmaße) als auch die Entwicklung angepasster Silberpasten für die elektrische Kontaktierung und den Wärmeabtransport (thermische Vias) unterstützen. Dabei ist die präzise Schwindungssteuerung ein Schlüssel zum Erfolg für die zuverlässige SiC-Integration.

Die detaillierte Simulation von Sinterprozessen auf Bauteilebene für LTCCs ist sehr komplex – insbesondere wenn es um quantitative Vorhersagen geht. Darum ist sie in kommerziellen Simulationsprogrammen nicht enthalten. Am Fraunhofer IWM wurden in der Vergangenheit verschiedene für die Simulation von Sinterprozessen geeignete Materialmodelle entwickelt, die jeweils als spezifische Userroutinen für das Finite-Elemente-Programm »Abagus« implementiert wurden. Im Rahmen des Projekts MESiC verwenden wir Routinen sowohl für das Flüssig- als auch für das Festphasen-Sintern. Diese sind erweitert worden, um spezielle Prozess-Effekte wie das orthotrope Schwindungsverhalten und die Kristallisation in der Glasphase der LTCC-Folie oder das Schwellen der Silberpaste beim Sintern zu modellieren. Abbildung 1b zeigt die Änderung der Schwindungsrate während des Sinterns. Hier zeigt sich mit zunehmender äußerer Belastung ein erneuter Anstieg der Fluidität durch die einsetzende Kristallisation zum Ende der Sinterung.

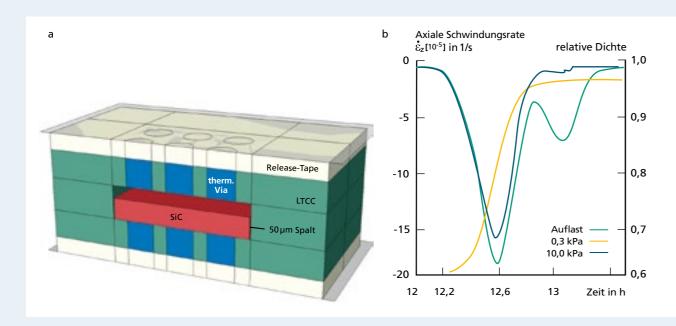
#### Bestimmung der Modellparameter

Die Bauteilsimulationen benötigen jeweils individuelle Materialparameter für die einzelnen Komponenten (LTCC, Silberpaste, SiC), deren experimentelle Bestimmung teilweise aufwändig ist. Für die sinternden Komponenten LTCC und Silberpaste bestimmen wir diese mittels Lastdilatometrie in einer Thermomechanischen Analyse (TMA). Dabei werden zylinderförmige Proben axial belastet und die auftretenden Schwindungen während des Sinterns gemessen. Abbildung 2a zeigt einen gestapelten Aufbau von acht LTCC-Grünfolien. Das Temperaturprofil entspricht dabei dem Ofenprofil beim Brand der Bauteile.

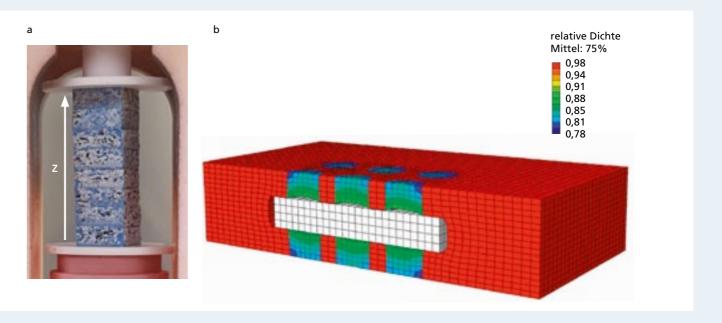
#### **Simulation des Einsinterns**

Bei der Simulation des Einsinterns treten mehrere Effekte auf, die für die Optimierung von Kavität und Silberpaste wichtig sind. Da für die LTCC-Folie kommerzielle Folien verwendet werden, ist der Variationsspielraum hier begrenzt. In der Simulation muss neben der frei wählbaren Auflast und der Spaltmaße auch der Effekt der eingeschlossenen Luft berücksichtigt werden. Diese kann ab Porenabschluss bei etwa 90 Prozent Dichte nicht mehr entweichen und baut beim weiteren Schwinden einen zunehmenden Innendruck auf. Abbildung 2b zeigt beispielhaft die berechnete Dichteverteilung nach dem Brand für ein Sintern mit einer Auflast von 40 kPa, die bei der reinen LTCC-Folie die laterale Schwindung gerade kompensiert. Bei eingelegtem SiC und großen thermischen Vias sind die Spannungsverhältnisse komplexer, sodass in diesem Fall an den Seiten, unter anderem durch den Gasdruck, größere Spalten entstehen. Dies könnte zum Beispiel mit einer angepassten Auflast durch isochores Fließen kompensiert werden. Die Ablösungen der Vias vom SiC zeigen, dass die Schwindung der verwendeten Silberpaste ebenfalls noch etwas zu groß ist, was durch Anpassung der Korngröße der Silberpartikel und damit des Sinterverhaltens optimiert werden kann. Neben den Vorgängen bei Sintertemperatur können mit der Simulation auch die entstehenden kritischen Spannungsbereiche beim Abkühlen aufgrund der unterschiedlichen Wärmeausdehnungen berechnet werden, um zum Beispiel mittels konstruktiver Änderungen die Lebensdauer bei zyklischer Belastung zu verbessern.

Dr. Ingo Schmidt, Dr. Torsten Kraft



1 Eingebetteter SiC-Halbleiter in einem mehrlagigen LTCC-Aufbau mit thermischen Vias und Release-Tape vor dem Sintern (a); Entwicklung von Schwindungsrate (grün, blau) und relativer Dichte (gelb) während des Sinterns für die LTCC-Folie für zwei Auflasten (b).



2 LTCC-Folienstapel in der thermomechanischen Analyse zur lastabhängigen Schwindungsmessung (a); Dichteverteilung und Spaltbildung im gesinterten Bauteil (b).

 $oldsymbol{2}$ 

## Schäden bei Massivumformung von Stählen mit nichtmetallischen Einschlüssen praxisorientiert vorhersagen

In der Massivumformung werden Herstellungsprozesse aus wirtschaftlichen Gründen hinsichtlich des Werkstoffs, des Werkstoffzustands und der technologischen Prozesse zunehmend ausgereizt. In Bezug auf den Werkstoff sind dabei dessen verarbeitungsrelevante Eigenschaften im Ausgangszustand von besonderer Bedeutung. Aufgrund der steigenden Materialanforderungen rücken daher nichtmetallische Einschlüsse (NE) als Innenfehler im Stahl in den Fokus. Kenntnisse über NE und deren Verhalten unter diversen Anwendungsbedingungen (wie Lebensdauer oder Dauerfestigkeit) sind zum Teil sehr fortgeschritten. Hingegen ist der Einfluss von Umformparametern in den einzelnen Prozessschritten der Bauteilfertigung im Sinne der Schädigungsentwicklung um die NE noch nicht geklärt. In einem Forschungsprojekt haben wir daher eine Methode entwickelt, die den Einfluss komplexer Belastungen auf NE bewertbar macht. Ziel ist es, bei einem immer gegebenen minimalen Anteil an NE im Stahl sowohl kritische als auch günstige Beanspruchungszustände in Bezug

auf die Schadenstoleranz zu quantifizieren. Ingenieurinnen und Ingenieure können diese dann bei der Auslegung von Umformprozessen berücksichtigen.

## Mikrostrukturelle Charakterisierung des Schädigungsverhaltens

Die mikrostrukturelle Charakterisierung der NE und deren Auswirkung auf das umgebende Matrixmaterial ist einer der zentralen Arbeitspunkte des Forschungsvorhabens. Für praxisrelevante Belastungsarten und Belastungsrichtungen untersuchten wir mittels Licht- und Rasterelektronenmikroskopie die Schädigungsinitiierung und -entwicklung an den NE nach unterschiedlich weit fortgeschrittener Umformung aus den Zug-, Druck-, Torsions- und kombinierten Zug-Torsions-Versuchen. Dabei analysierten wir die jeweiligen typischen Schädigungsmechanismen abhängig von der Belastungsart, Belastungsrichtung und dem Belastungsfortschritt (Abbildung 1).

Insbesondere das Schädigungsverhalten an Mangansulfiden (MnS) ist äußerst vielfältig und zudem technisch besonders relevant. MnS werden zur besseren Zerspanbarkeit gezielt zulegiert und sind daher in der Regel in verhältnismäßig großer Anzahl vorhanden. MnS werden aufgrund ihrer mit steigender Temperatur zunehmenden Duktilität oft entlang der Warmumformungsrichtung bei der Halbzeugherstellung gestreckt. Im Gegensatz zu den nicht verformbaren oxidischen NE spielt während der Umformung bei MnS zudem die Belastungsrichtung eine wichtige Rolle. Ein umfassendes Verständnis dieses komplexen Schädigungsverhaltens basierend auf den experimentellen Ergebnissen ist die Grundlage für dessen simulative Abbildung.

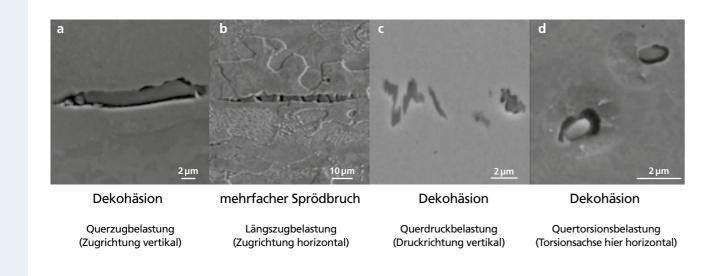
#### Entwicklung eines plattformübergreifenden Postprozessors zur Schädigungsbewertung an Einschlüssen

Basierend auf den mikrostrukturellen Beobachtungen entwickelten wir ein Bewertungstool, welches Zellmodelle verschiedener NE mit realen kritischen Lastpfaden der Bauteilherstellung beansprucht und dann die Schädigung bewertet. Dazu verwenden wir ausschließlich freie Software: Das Bewertungstool besteht aus einem Framework von Python-Skripten, die eine Serie von Zellmodellen mit dem nichtkommerziellen FE-Solver CalculiX CCX starten und anschließend deren Ergebnisse auswerten und hinsichtlich Schädigung bewerten. Verschiedenste in der Mikrostruktur anzutreffende Größen, Formen, Orientierungen und Gruppierungen der NE können die Skripte weitgehend automatisiert erzeugen. Die Material- und Schädigungsparameter haben wir an die experimentellen Beobachtungen angepasst. Den besonders relevanten Mechanismus der Dekohäsion bildeten wir mithilfe einer Zwischenschicht erfolgreich ab und validierten dessen Verhalten durch Vergleich zwischen Simulation und Experiment. In der Simulation bilden wir sowohl die Dekohäsion plausibel ab, als auch die plastische Verformung des MnS unter Druck, wobei unter Zug keine ausreichend hohen Spannungen für Verformung innerhalb des NE entstehen (Abbildung 2).

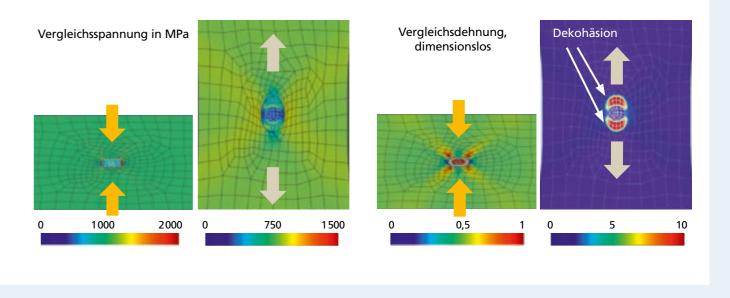
#### **Praktische Anwendung**

Mit dem plattformübergreifenden Postprozessor bringen wir Belastungspfade ausgewählter Finite-Elemente aus makroskopischen Umformsimulationen auf verschiedene Zellmodelle auf. Anschließend bewerten wir die resultierende Schädigung an den unterschiedlich gearteten Einschlüssen. Industriell relevante Fragestellungen sind dabei zum Beispiel: »Welche Abmessungen darf ein MnS im Randbereich des Umformrohlings maximal haben, damit es bei der Bauteilherstellung nicht zur Schädigung kommt?«, »Wie kann der Umformprozess optimiert werden, um bestimmte kritische Belastungen zu verringern?« oder »Kann ein Weichglühen des Materials die Umformeigenschaften soweit verbessern, dass das Bauteil auch mit größeren NE-Clustern schadensfrei gefertigt werden kann?« Mithilfe des entwickelten Bewertungstools können wir solche und ähnliche Fragestellungen simulativ beantworten, unabhängig von der für die Bauteilsimulation verwendeten FE-Software.

Eva Augenstein, Dr. Maksim Zapara



<sup>1</sup> REM-Aufnahmen typischen Schädigungsverhaltens an Mangansulfiden (MnS) in Stahl: Dekohäsion (a), mehrfacher Sprödbruch (b), starke duktile Verformung mit teilweise lokaler Dekohäsion (c) und Verzerrung in Bildnormalenrichtung aus ursprünglich horizontaler Lage mit allseitiger Dekohäsion (d).



2 Gegenüberstellung der Vergleichsspannung und -dehnung bei FE-Simulationen eines runden Mangansulfids unter Druck und unter Zug.

## Bruchmechanische Methoden und Materialanalysen als Hilfsmittel bei Entwicklungen von Automobilverglasungen

Moderne Automobilverglasungen müssen eine Vielzahl von Funktionen erfüllen. Die Frontscheibe der Kabine trennt nicht nur den Innenraum von der Umgebung und erlaubt dabei den Blick nach außen. Sie trägt mittlerweile auch wesentlich zur Stabilität des Fahrzeugs bei. Front- und Heckscheiben, aber auch feste Dachverglasungen wie Panoramadächer sorgen mit dem Rest der Karosserie für die hohen Verwindungssteifigkeiten und damit für Sicherheit. Daneben werden in Fahrzeugverglasungen immer mehr zusätzliche Funktionen wie Heizungen, Antennen oder weitere schaltbare Schichten integriert.

Bei der Auslegung solcher Bauteile müssen konkurrierende Faktoren berücksichtigt werden. Die Scheiben sollen leicht sein, damit der Energieverbrauch des Fahrzeugs möglichst minimal ist. Sie müssen außerdem einerseits so stabil sein, dass sich ein ausgelöster Airbag bei einem Unfall mit Kollision an ihnen abstützen kann. Andererseits sollen sich die Scheiben bei größeren Verformungen energieabsorbierend verhalten,

um dem passiven Fußgängerschutz Rechnung zu tragen. Selbstverständlich müssen die integrierten Funktionen über die vielen Einsatzjahre des Fahrzeugs gewährleistet werden. Nicht zuletzt sollen die Scheiben die im Alltag auftretenden thermischen Lasten sowie Umwelteinflüsse (beispielsweise Hagel) unbeschadet aushalten und die vorgeschriebenen Tests für die Zulassung bestehen. Um bei der Entwicklung von Glaskomponenten mit Hinblick auf die erwarteten Belastungen den besonderen Eigenschaften des Werkstoffs Glas angemessen zu begegnen, setzen wir unterschiedliche Werkzeuge ein.

#### Verzögerte Bruchantwort beim Werkstoff Glas

Silicatgläser verhalten sich grundlegend anders als metallische Werkstoffe: Charakteristisch ist die sprödbrechende Eigenschaft. Das heißt, Gläser weisen anders als Metalle keine ausgewiesene Streckgrenze und Plastizität auf, sondern brechen nach einer elastischen Antwort auf Zugbelastungen spontan.

Die Bruchkräfte oder Bruchspannungen fallen dabei bei gleichem Werkstoff und Umgebungsbedingungen durchaus sehr unterschiedlich aus. Denn Art, Verteilung und Tiefe von Fehlern in den Glasoberflächen bestimmen die Festigkeit signifikant und sind primär von den Herstellungsprozessen beeinflusst.

Dass Gläser nach Stoßeinwirkung mit harten Materialien sehr leicht spontan zerbrechen können, ist allgemein bekannt. Weniger bekannt ist, dass auch geringe statische Belastungen, die zunächst ohne Brucheintritt ausgehalten werden, nach entsprechenden Zeiträumen zu einer Vergrößerung der Fehlertiefe und einem zeitlich verzögerten Bruchereignis führen können. Es liegt in der Natur des Werkstoffes, dass seine Homogenität, zusammen mit den hohen kovalenten Bindungskräften im Innersten, zu enormen Spannungskonzentrationen im Nahbereich von kleinen mechanischen Defekten führen kann. Ein Defekt in der Oberfläche kann sich dann sogar bei mäßiger Beanspruchung mit der Zeit vergrößern und schließlich zu einem verzögerten Versagen führen.

Die klassische Bruchmechanik entstand, um solche Festigkeitsprobleme von spröden Materialien wie Glas zu beschreiben. Hierbei analysieren wir aufgetretene Schäden und stellen Belastungen am Werkstoff bis zum Bruch im Kontext der jeweiligen Fragestellung nach. Wir identifizieren Materialmerkmale, die den Bruchhergang bis hin zum Ursprungsort und den dort wirksamen Bedingungen beschreiben. Wir setzen das bruchmechanische Konzept ein, um Fragen nach wirksamen Spannungen und der Lebensdauer zu beantworten.

#### Anwendung bei gebrochener Fahrzeugverglasung

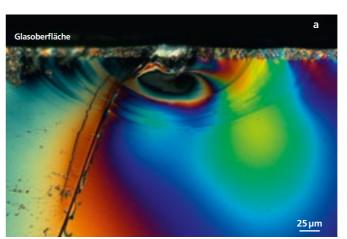
Bei der beispielhaften Untersuchung einer gebrochenen Fahrzeugverglasung aus Verbundsicherheitsglas grenzten wir die Initialstelle zunächst anhand der vorgefundenen Bruchverläufe ein. Nach anschließenden Präparationsarbeiten entfernten wir die Fragmente, welche die Bruchinitialstelle tragen, vorsichtig vom restlichen zersplitterten Bauteil. Dies erst ermöglichte die Untersuchung der vom Riss erzeugten Bruchflächen, die zuvor unzugänglich im Inneren lagen. Abbildung 2a zeigt den Initialbereich des Bruchs auf einer dieser Bruchflächen.

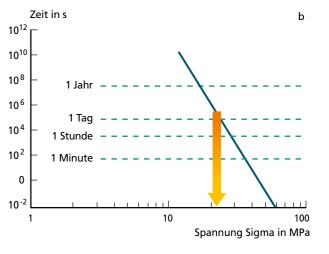
Analysen der topographischen Merkmale an dieser Oberfläche lassen Rückschlüsse auf die Bruchdynamik zu. Im dargestellten Fall weisen sie auf eine vom Anfangsdefekt ausgehende langsame Bruchausbreitung bei relativ geringer Lasteinwirkung hin. Aufgrund von Form und Dimension der im Initialbereich vorgefundenen Schädigung, sowie bekannter Zeit zwischen Fahrzeugauslieferung und Schadenseintritt, bestimmten wir mithilfe des bruchmechanischen Konzepts die Größe der statisch anliegenden wirksamen Spannung, die zum Brucheintritt beigetragen hat. Nach dem bruchmechanischen Modell führt wie in Abbildung 2b dargestellt eine konstante Spannung von rund 22 MPa (Pfeil) an der Bruchinitialstelle bei einer wirksamen Dauer von nur wenigen Wochen zum katastrophalen Bruch. Erkenntnisse über solche Belastungsbedingungen unterstützen unsere Kundinnen und Kunden bei der Verbesserung der mechanischen Auslegung von Glaskomponenten, sowie bei der Optimierung und Fehlersuche in Herstellungsprozessen.

Martin Krappitz, Tobias Rist



1 Beispiel eines modernen Fahrzeugdesigns mit vielfältigen Außenverglasungs-Elementen.





2 Ansicht auf freigelegte Bruchfläche mit Bruchinitialstelle an einer Fahrzeugverglasung (a); Zusammenhang zwischen Lebensdauer und konstant anliegender Spannung für eine Anfangsrisslänge von 60 μm (b).

## Die Entwicklung der multifunktionalen Online-Plattform »Materials Modelling MarketPlace«

Die Modellierung der Eigenschaften von Werkstoffen und die Simulation während der Fertigung und im Einsatz ist zweifellos weit fortgeschritten und von großem industriellem Nutzen. Verschiedene Hürden erschweren jedoch die Nutzung von materialwissenschaftlichem Wissen zur Modellbildung und Simulation in der Wissenschaft und Industrie: Exemplarisch genannt seien mangelndes Expertenwissen, eingeschränkte Verfügbarkeit von Simulationssoftware sowie vorkonfigurierter Workflows zur Arbeitserleichterung. Die Übersetzung eines technischen Problems über die Modellierung in eine Simulationsfragestellung ist daher eher Expertinnen und Experten vorenthalten.

## One-Stop-Bereich für die Materialmodellierung und -simulation

Das EU-Projekt »Materials Modeling MarketPlace for Increased Industrial Innovation«, gefördert durch das EU-Programm

Horizon 2020, hat zum Ziel, eine Infrastruktur bis hin zur maßgeschneiderten Plattform für Materialmodellierung und Simulation zu entwickeln. Im Sinn eines One-Stop-Shops soll der MarketPlace alles Wesentliche bieten, was für die Entwicklung innovativer Materialien benötigt wird. Somit soll der MarketPlace die Hemmschwelle der Nutzung von Materialmodellierung und -simulation reduzieren, damit mehr Materialien und Herstel- lungsprozesse mittels Modellbildung und Simulation verbessert werden können. Das MarketPlace-Konsortium besteht aus 18 Partnern, darunter Universitäten. Forschungseinrichtungen und Industrieunternehmen, und erarbeitet eine webbasierte Plattform für die gesamte Materialmodellierungs-Community, die über das Projektende hinaus gepflegt und weiterentwickelt werden wird. Sie soll sowohl relevante Funktionalitäten zu Modellierung und Software zur Verfügung stellen als auch integrierte offene Simulationsplattformen, Datenbanken und Übersetzungs- sowie Wissensdienste bereitstellen. Nutzerinnen und Nutzer können zukünftig in

Datenbanken zu Materialmodellen und Materialdaten, Softwaretools, Benchmarks sowie Validierungsdaten recherchieren (explore). Sie sollen schnelle Beratungen, Schulungen oder Expertengespräche sowie Übersetzungsdienste nutzen können (interact). Mittels integrierter Workflow-Builder und offenen Simulationstools sollen sie recht einfach dazu in der Lage sein, Simulationen zu erstellen und auszuführen (create & execute).

## Bereits eingearbeitete Applikationen und Workflows

Ausgehend von den Marktbedürfnissen sind verschiedene Services entstanden (Abbildung 1). Sie basieren auf semantischen Technologien: Neben Domänenontologien, die größtenteils auf der European Materials Modelling Ontology EMMO (beziehungsweise der Elementary Multiperspective Material Ontology) basieren, steht Expertise über Software, Materialmodellierung oder Fertigungsprozesse zur Verfügung. Die am Fraunhofer IWM entwickelten Tools SimPhoNy und OSP-core kommen ebenfalls zum Einsatz. Mithilfe dieser semantischen Technologien wurde im MarketPlace-Projekt beispielsweise der sogenannte Knowledge Service aufgebaut (Abbildung 2a). Er ermöglicht einen ontologiebasierten Zugriff auf Informationen aber auch die Erzeugung neuen Wissens zu relevanten Themen der Materialmodellierung und -simulation.

Neben den Anwenderinnen und Anwendern der oben genannten Services agieren auch Expertinnen und Experten als sogenannte Translators. Sie analysieren industrielle Probleme und

identifizieren die Fragestellungen, die durch Materialmodellierungs-Simulationen wirtschaftlich und effizient gelöst werden können. Unterstützt wird dieser Prozess durch den Translator Service, der zwischen der Problemstellung und den potenziellen Translators vermittelt. Ein sehr zentrales Element des MarketPlace ist der create & execute Bereich (Abbildung 2b): Hier können neue Applikationen registriert und im Sinne von »Software as a Service« genutzt werden. Zudem können sowohl vorgefertigte Workflows abgearbeitet als auch neue Workflows kreiert werden. Im Rahmen des Projekts wird in diesem Zusammenhang an insgesamt sechs Anwendungen gearbeitet, beispielsweise an der Berechnung von Mikrostruktur-Eigenschaftsbeziehungen mithilfe einer multiskalen Prozesskettensimulation der additiven Fertigung metallischer Werkstoffe.

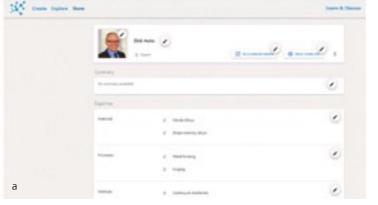
#### Tests der MarketPlace-Plattform laufen

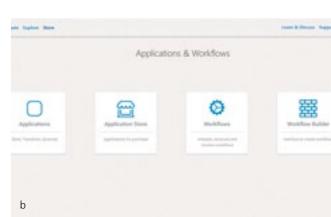
Das MarketPlace-Projekt ist aufgrund der Verknüpfung von Informationstechnik mit der Materialwissenschaft eine überaus große interdisziplinäre Herausforderung. Das Ziel ist, auch über das Projekt hinaus eine nachhaltige Nutzung und Weiterentwicklung der MarketPlace-Plattform zu ermöglichen. Unserer agilen Entwicklungsmethodik folgend wurde 2021 die MarktPlace-Plattform dem MarketPlace-Konsortium zum Testen geöffnet, 2022 ist der öffentliche Zugang geplant. Über die aktuellen Entwicklungen sowie die Konsortiums-Partner informiert die Seite www.the-marketplace-project.eu.

Dr. Dirk Helm, Yoav Nahshon

## Materials Modelling MarketPlace







1 Grundfunktionen der MarketPlace-Plattform.

2 Oberfläche des Knowledge Service (a) und des MarketPlace Store (b).

## Geschäftsfeld Tribologie

## Tribologie berechenbar machen

Wir bedienen verstärkt unsere strategischen Märkte wie Mobilität, Wasserstoffwirtschaft, Windenergieerzeugung sowie Nachhaltigkeit und Kreislaufwirtschaft.



Auf der Plattform »Tribo-Innovation« diskutieren und priorisieren wir mit strategischen Industriepartnern zukunftsrelevante Forschungsthemen.

Gemeinsam mit strategischen Partnern iniführung sowie unseren Investitionen.

#### Neue Forschungsfelder Umformtribologie und Supraschmiereffekte

Mit unserer neuen Investition, einer Blechprüfmaschine, und unserer institutsinternen Vernetzung bieten wir zur Umformtribologie neue Angebote vom Experiment, über die Entwicklung von Materialmodellen bis hin zur Prozesssimulation.

Als strategisch bedeutsames Projekt startete 2021 »SUPRASLIDE«, bei dem es um Supraschmiereffekte geht: Mit extrem kleinen Reibwerten (weniger als 0,01) sollen Reibungsverluste in Gleitlagern um bis zu 90 Prozent verringert werden. In enger Zusammenarbeit mit den Fraunhofer-Instituten IKTS, IPA und IWS arbeiten wir an verschiedenen supraschmierenden Systemen, die Werkstoffoberflächen aus Diamant, Graphen, Keramik oder diamantähnlichen Kohlenstoffschichten mit nachhaltigen Schmierstoffen kombinieren. Diese ideal aufeinander abgestimmten Material-Schmierstoff-Paarungen könnten zukünftig als Supragleitlager im Transport- und Energiesektor, beispielweise in Antriebs- und Positioniersystemen oder Pumpen, eingesetzt werden und dort erhebliche Energieeinsparun-

Unsere Forschung zum Diamantartigen Kohlenstoff (DLC) wurde mit der Annahme eines Artikels in der Zeitschrift Nature Communications belohnt. DLC verringert Reibung und Verschleiß in Reibkontakten. Die in Lagern und Motoren verwendeten Schmierstoffe enthalten meist den Zusatzstoff Zinkdialkyldithiophosphat (ZDDP), der wiederum Stahloberflächen vor Verschleiß schützt. Leider

kann es die DLC-Schicht angreifen und zu einem vorzeitigen Ausfall führen. Wir konnten herausfinden, wie die antagonistische Wechselwirkung zwischen den beiden Substanzen zustande kommt. Es konnte erklärt werden, warum DLC-Schichten auch in Kombination mit ZDDP zu hart sein können. Darüber hinaus gratulieren wir Tobias Rosenstingl, der aufgrund seiner Masterarbeit zu viskositätsschaltbaren Silikonölen den Werkstoffmechanikpreis 2021 des Fraunhofer IWM erhalten hat.

#### **Vernetzung in der Tribo-Community**

Wir freuen uns, dass Prof. Martin Dienwiebel auf die Professur »Angewandte Nanotribologie« am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) IAM-CMS berufen wurde und uns somit im Rahmen des MikroTribologie Centrums μTC erhalten bleibt. Er beschäftigt sich mit der Erforschung elementarer Reibungs- und Verschleißprozesse in anwendungsnahen mechanischen Systemen und Werkstoffen. Zu diesen Prozessen gehören dynamische Veränderungen der Topographie, tribochemische Reaktionen von Additiven und Schmierstoffen mit reibungsbeanspruchten Oberflächen, die molekularen Mechanismen der Fettschmierung und die Bildung dritter Körper unter Gleitreibung und in Frettingkontakten. Neben in situ-Messungen von Reibung und Verschleiß an einem Holographietribometer, werden auch Mikrotribometer und Vakuumtribometer eingesetzt. Außerdem

nutzen wir zahlreiche oberflächenanalytische Methoden, wie Röntgenphotoelektronen- und Augerelektronenspektroskopie, Rasterkraftmikroskopie, Messungen per Quartzkristallmikrowaage sowie Nanoindentation.

Trotz aller Einschränkungen waren wir 2021 bei nationalen und internationalen Konferenzen sehr aktiv. So waren wir auf dem European Symposium on Friction, Wear and Wear Protection mit 3 Vorträgen und einem Plenary Talk vertreten. Prof. Michael Moseler war für seinen Vortrag »Digitale Zwillinge in der Tribologie« auf dem Flagship-Workshop der Ecole polytechnique fédérale de Lausanne, CECAM. Darüber hinaus hielten wir 10 Vorträge aus verschiedenen Fachrichtungen des MikroTribologie Centrums µTC auf der 62. Fachtagung für Tribologie der Gesellschaft für Tribologie e. V.

Unsere 2021 neu gestartete LinkedIn-Seite informiert mittlerweile mehr als 500 Interessierte zu unseren aktuellen Forschungsarbeiten, zu Konferenzen oder zu neuer Messtechnik. An unseren Webinaren »Keramische Werkstoffe in tribologischen Anwendungen« und »Polymerund Elastomertribologie« nahmen 2021 mehr als 30 Teilnehmerinnen und Teilnehmer teil.

Prof. Dr. Matthias Scherge

Geschäftsfeldleiter Telefon +49 761 5142-206 matthias.scherge@ iwm.fraunhofer.de

tiieren wir bi- oder multilaterale Pilot- oder Vertiefungsprojekte auf unserer »Plattform Tribo-Innovation«. Die Partner haben Mitgen ermöglichen. sprache bei der Projektauswahl und profitieren von schneller Projektanbahnung und -durch-

## Modellierung kritischer nichtlinearer Belastungen von Keramikfedern zur Vorhersage der Bauteilzuverlässigkeit

Federn aus Hochleistungskeramiken wie Siliziumnitrid oder Zirkoniumoxid-Aluminiumoxid-Mischkeramik haben im Vergleich zu herkömmlichen Stahlfedern den Vorteil, dass sie in korrosiver Umgebung oder auch bei 1000 °C einsetzbar sind. Federn aus Siliziumnitrid sind weniger als halb so schwer wie Stahlfedern. Zudem können diese nichtleitenden Keramiken als Isolator störungsfrei in Anwendungen mit elektrischen und magnetischen Feldern eingesetzt werden. Im Rahmen einer bundesfinanzierten, industriellen Gemeinschaftsforschung mit dem Fraunhofer IKTS und Firmen aus den Branchen Keramikherstellung und Federn haben wir keramische Schrauben- und Tellerfedern entwickelt, hergestellt und experimentell hinsichtlich ihres Federverhaltens, ihrer Belastbarkeit und Zuverlässigkeit untersucht.

Bei einer keramikgerechten Auslegung erreichen Keramikfedern trotz ihrer scheinbaren Sprödigkeit nahezu gleichwertige Federwege und -kräfte wie Federn aus Stahl. Die Herausforde-

rung ist dabei allerdings, die Zuverlässigkeit der Federn zu maximieren. Trotz ihrer höheren Komplexität und gegebenenfalls unterschiedlichen Herstellungsparametern können wir die Zuverlässigkeit vorhersagen. Wir nutzen dazu im ersten Schritt Modellprüfungen, beispielsweise an Biegestäbchen, und erstellen im zweiten Schritt numerische Simulationen. Auf dieser Grundlage wurde für Anwender keramischer Federn ein Designtool erstellt, das den jeweiligen Kenntnisstand über das Versagensverhalten der Keramik berücksichtigt. Nach Wahl der Designparameter werden Funktionsgrößen wie Federkraft und -weg berechnet und die Versagenswahrscheinlichkeit ausgegeben.

#### Belastung von Schraubendruck- und Tellerfedern

Schraubendruckfedern müssen über die elastische Deformation aller Windungen »verstanden« werden. Bei Belastung der Feder wird eine Torsion der Windungen induziert, die sich mit einer Biegebelastung entlang des Umfangs überlagert. Die zu betrachtenden kritischen Belastungen sind für verschiedene Bereiche der Feder möglich. Bei ihrer Herstellung ist die Endbearbeitung eine besondere Herausforderung: Die Bearbeitungsqualität muss sehr hoch sein, um eine hohe Belastbarkeit der Feder zu erreichen, ohne dabei Federbrüche zu riskieren. Der Bearbeitungseinfluss auf die Oberflächenqualität und damit die Festigkeit muss daher genau betrachtet werden.

Bei der Beanspruchung von Tellerfedern sind die mechanischen Spannungen in den Ecken ihres Querschnitts am höchsten. Federkraft und -weg sind bei Tellerfedern nicht mehr linear gekoppelt. Dadurch wachsen auch die mechanischen Spannungen und das Volumen hochbelasteter Bereiche im Bauteil nicht proportional zur Federkraft.

#### Volumen- und flächenbezogene Festigkeit

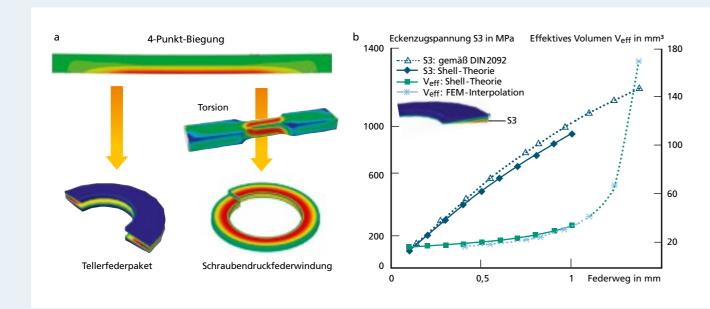
Für die Festigkeitsbetrachtung keramischer Bauteile ist davon auszugehen, dass im Bauteilvolumen beziehungsweise an ihrer Oberfläche kleine Defekte vorhanden sind. Ihre Größe und ihre Häufigkeit bestimmen die Festigkeit des Bauteils. Werden größere Volumina belastet, steigt die Wahrscheinlichkeit des Vorliegens größerer Defekte, und die Festigkeit sinkt. Für die Herstellung einer Schraubendruckfeder aus Keramik ist somit die Bearbeitung der unterschiedlichen Flächen die besondere Herausforderung, um Oberflächen mit möglichst kleinen, unkritischen Defekten zu realisieren. Wenn jedoch Modellrechnungen auf der Basis von Standardfestigkeitswerten durchgeführt werden, beruhen diese auf einem vorgegebenen

Bearbeitungszustand, der sich vom Bearbeitungszustand der Federn unterscheidet. Für die Auslegung der Federn müssen Einflüsse wie die der Bearbeitung eingeschätzt werden. Unter anderem muss beachtet werden, dass das Festigkeitsverhalten unter Torsionsbeanspruchung sich wesentlich vom dem einer reinen Biege- beziehungsweise Zugbeanspruchung unterscheidet. Zudem verändert sich dieses Verhalten in korrosiver Umgebung oder bei erhöhten Temperaturen. Insgesamt ist es also aufgrund der vielen Einflüsse sehr schwierig, präzisere Vorrausagen zur Versagenswahrscheinlichkeit oder Lebensdauer zu machen. Entsprechende experimentelle Untersuchungen an Werkstoffen und Bauteilen sind daher unerlässlich, um diese Einflüsse zu bewerten und die berechneten Vorhersagen der Modelle zu überprüfen.

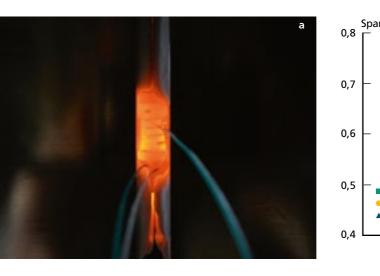
#### Volumenbezogene Lebensdauervorhersage

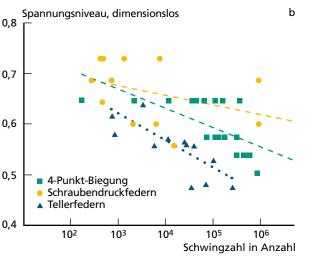
Unser Designtool berechnet aus geometrischen Angaben und Werkstoffdaten die innere Verspannung, das Federverhalten und das effektiv belastete Volumen keramischer Teller- und Schraubendruckfedern – und mittels Modellprüfungsergebnissen zudem die Versagenswahrscheinlichkeit und die wahrscheinliche Lebensdauer (Abbildung 1b).

Dr. Christof Koplin, Dr. Andreas Kailer



<sup>1</sup> Volumenbezogene Belastungsbewertungen: Von der FE-Modellierung über die Modellprüfung bis hin zur Bauteilbelastung (a). Das Designtool berechnet aus geometrischen Angaben und Werkstoffdaten die innere Verspannung, das Federverhalten und das effektiv belastete Volumen; Shell-Theorie nach V. Kobelev 2016 (b).





<sup>2</sup> Hochtemperaturprüfung von Schraubendruckfedern (bis 1000 °C) zur zyklischen Festigkeitsprüfung bei überlagerter thermischer und mechanischer Belastung (a). Das Spannungsniveau beschreibt die Höhe der aufgebrachten zyklischen Belastung relativ zur charakteristischen Festigkeit (b).

# Risszähigkeit von Knochenzementen ermitteln

Knochenzemente auf Basis von Akrylaten werden seit einem halben Jahrhundert zur Verankerung von orthopädischen Implantaten wie Hüft-, Knie- oder Schulterprothesen eingesetzt. Der langfristige Erfolg dieser Behandlungen hängt auch von der mechanischen Zuverlässigkeit des Knochenzements ab. Daher werden unter anderem die Festigkeit, das Ermüdungsverhalten und die Kriechbeständigkeit des Knochenzements untersucht, bevor dieser implantiert werden darf. Eine mechanische Kenngröße, die insbesondere für die realistische klinische Situation eines Knochenzements relevant ist, ist die Risszähigkeit. Die Risszähigkeit beschreibt, wie empfindlich ein Werkstoff auf Defekte reagiert: Führt ein kleiner Riss früh zum Versagen, wenn der Knochenzementköcher mechanisch beansprucht wird, oder kann ein Knochenzement der kritischen Rissausbreitung bis zu höheren Belastungen widerstehen?

Im Operationssaal mischt medizinisches Personal den Knochenzement an und bringt ihn in einem noch viskosen Zustand in eine Kavität im Knochen ein. Danach setzen sie das Implantat in die Kavität ein, der Knochenzement härtet aus und fixiert das Implantat im Knochen. Diese Vorgehensweise führt dazu,

dass der Knochenzementköcher mit Defekten durchsetzt ist: In den Knochenzement werden Poren und gegebenenfalls Knochensplitter eingebracht, die Verankerung des Knochenzements in der Spongiosa des Knochens führt zu einer zerklüfteten, eingekerbten Oberfläche. Es ist daher wichtig zu wissen, inwieweit diese Defekte die Zuverlässigkeit des Knochenzements beeinträchtigen.

#### Rissfortschritt und R-Kurvenverhalten

Für die Messung der Risszähigkeit eines Knochenzements bringen wir in ein Biegestäbchen einen definierten Riss ein. Wir belasten das Biegestäbchen in einer 4-Punkt-Biegevorrichtung schrittweise mechanisch immer stärker, bis der Riss anfängt zu wachsen. Hierbei beobachten wir die Rissspitze mit einem Mikroskop – somit bestimmen wir einerseits über die Position der Rissspitze die Risslänge und detektieren andererseits das Einsetzen des Risswachstums. Aus der Risslänge und der bei der Rissausbreitung angelegten Kraft ermitteln wir die Risszähigkeit (K<sub>Ic</sub>). Die mikroskopische Beobachtung des Risses ermöglicht es, eine eventuelle Abhängigkeit der Risszähigkeit

von der Risslänge – das sogenannte »R-Kurvenverhalten« – zu beobachten. Weiterhin ermöglicht die Beobachtung der Umgebung der Rissspitze Rückschlüsse auf die Mechanismen der Rissausbreitung: Wegen der komplexen Kompositstruktur von Knochenzementen bildet sich um die Rissspitze eine »ausgedehnte Schädigungszone« aus, die die Rissausbreitung beeinflusst.

#### Messungen an verschiedenen klinisch eingesetzten Knochenzementen

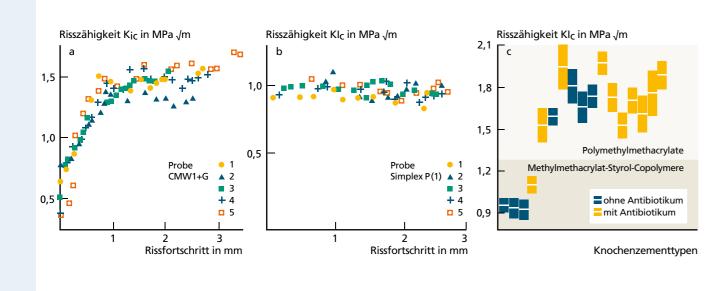
In einer Studie haben wir die Risszähigkeit von elf klinisch eingesetzten Knochenzementen untersucht. Manche Knochenzemente zeigten ein ausgeprägtes R-Kurvenverhalten (Abbildung 1a), bei anderen Zementen zeigte sich keine Abhängigkeit der Risszähigkeit von der Risslänge (Abbildung 1b). Die Plateauwerte der K<sub>Ic</sub> variieren für verschiedene Knochenzemente: Knochenzemente auf Basis eines Methylmethacrylat-Styrol Copolymers (Abbildung 1c, vier Werte auf der linken Seite) erreichten eine geringere Risszähigkeit als Zemente, die rein auf Poly(methylmethacrylat) basieren (übrige Symbole in Abbildung 1c). Die in der Orthopädie etablierte Zugabe von Antibiotika zu den Knochenzementen hat vergleichsweise nur einen geringen Einfluss auf die K<sub>Ic</sub>.

Bei der Beobachtung mit dem Lichtmikroskop identifizierten wir unterschiedliche Muster des Rissfortschritts. Der Riss im Knochenzement mit dem ausgeprägten R-Kurvenverhalten (Abbildung 2a) folgt einem gewundenen Pfad und zeigt Rissverzweigungen. Diese unregelmäßige Struktur kann dazu

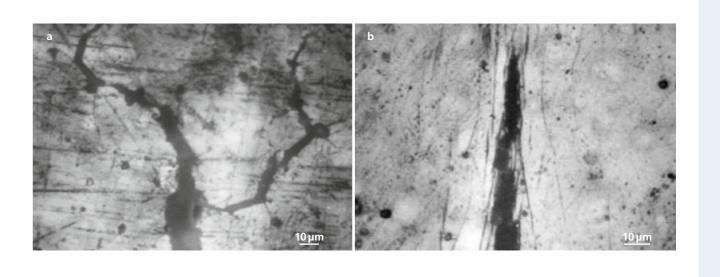
führen, dass sich die Bruchflächen verkanten und die Rissspitze von der angelegten mechanischen Spannung abschirmen, sodass die Risszähigkeit erhöht wird. Dies erklärt den anfänglichen Anstieg der Risszähigkeit mit fortschreitender Risslänge. Der Plateauwert der K<sub>ic</sub> wird erreicht, wenn die Aufweitung des Risses am Kerbgrund die Bruchflächen vollständig voneinander trennt. Ein nahezu geradliniger Rissverlauf (Abbildung 2b) führt hingegen zu einer von der Risslänge unabhängigen Risszähigkeit (Abbildung 1b). In Abbildung 2a wird zudem die Schädigungszone sichtbar: Vor der Rissspitze bildet sich ein Feld von Mikrorissen aus, von denen einige zu dem Hauptriss zusammenwachsen.

Die Untersuchungen zur Risszähigkeit geben somit den Herstellern und Anwendern von Knochenzementen wichtige Hinweise zur mechanischen Zuverlässigkeit und Einblicke in die Mechanismen der Rissausbreitung, die zur Optimierung des mechanischen Einsatzverhaltens genutzt werden können.

Dr. Raimund Jaeger



<sup>1</sup> Risszähigkeit eines Knochenzements mit (a) und ohne (b) R-Kurvenverhalten. Plateauwerte der Risszähigkeit für verschiedene Knochenzemente (c).



2 Rissverlauf bei einem Knochenzement mit (a) und ohne (b) R-Kurvenverhalten.

## Temperaturvariable Eigenspannungsmessung an Schichten zur Bestimmung mechanischer und thermischer Eigenschaften

In vielen Anwendungen führen mechanische Spannungen in funktionalen Beschichtungen im Extremfall zu spannungsinduzierten Schichtrissen, Haftungsproblemen und Bauteilverzug. Hochpräzise Spiegel müssen zum Beispiel für die geforderte optische Funktion vergütet werden, die Beschichtung darf jedoch nicht zu Konturänderungen des Spiegels führen und so dessen Reflektionseigenschaften beeinträchtigen. Ein anderes Beispiel sind hochpräzise Dichtungen für Gase und Flüssigkeiten mit Verschleißschutzbeschichtungen wie Titannitrid (TiN) oder Diamantähnlichem Kohlenstoff (DLC). Auch hier dürfen sich die Dichtflächen nicht verziehen, um die Dichtheit weiterhin gewährleisten zu können. Für Gasdichtungen werden nur maximale Bauteilverzüge im 1 µm-Bereich toleriert. Auf die Größenverhältnisse umgerechnet hieße das, dass ein Fußballfeld auf der gesamten Spielfeldlänge maximal eine Neigung von 0.5 mm haben dürfte!

#### Ursache von Schichtspannungen

Spannungen in Schichten setzen sich summarisch aus mehreren Komponenten zusammen. Der Anteil der intrinsischen Schichtspannungen korreliert in der Regel mit der Schichtmikrostruktur und Abweichungen vom idealen Kristallgitter. So führen ionenstrahlgestützte Abscheideprozesse oder die Anwendung eines Substratbias meist zu kompaktierten Schichtaufbauten und stark druckverspannten Schichten. Nanoporöse Schichten, wie sie für Elektronenstrahlverdampfungsprozesse nicht unüblich sind, weisen hingegen oft Zugspannungen auf. Gitterfehlanpassungen, typisch für heteroepitaktisches Schichtwachstum, können auch zu teils erheblichen Spannungen, im Laufe des Schichtwachstums sogar zu Schichtablösungen führen. Ein anderer, oft vernachlässigter Beitrag der Schichtspannungen sind thermische

Spannungen, die aus thermischen Dehnungen (CTE) der beteiligten Materialien herrühren und durch die Tatsache verursacht werden, dass sich Depositionstemperatur und Einsatztemperatur der beschichteten Komponente um mehrere hundert Grad Celsius unterscheiden können.

#### **Messprinzip und Ergebnisse**

Die Standardmethode zur Messung von Schichtspannungen ist die sogenannte »wafer-curvature«-Methode, bei der die Verwölbung zum Beispiel eines Si-Wafers vor und nach Beschichtung gemessen und nach der Stoney-Formel die Schichtspannung berechnet wird. Sie erlaubt jedoch keine Differenzierung verschiedener Spannungsbeiträge. Einen deutlichen Mehrwert an Informationen gewinnt man bei der Verwendung von mindestens zwei verschiedenen Wafer-Materialien und durch Variation der Messtemperatur. Diese bekannte und einfache Methode ist bisher nur wenig verbreitet.

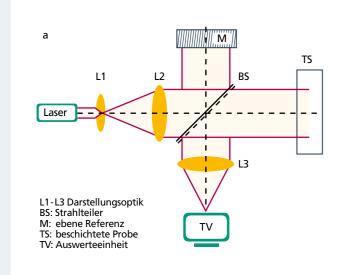
Zunächst werden zwei Substratmaterialien mit unterschiedlichem CTE auf ihre Kontur hin vermessen und beschichtet. Nun eine erneute Messung, diesmal jedoch bei mindestens fünf verschiedenen Temperaturen zwischen Raumtemperatur und zirka 300 °C. Drei Wiederholungen schließen Effekte wie Ausgasungen von Feuchte oder Sputtergasen, Spannungsrelaxationen oder ähnliches aus. Man erhält einen linearen Spannungs-Temperaturverlauf, dessen Steigung von der Differenz der CTEs von Substrat und Schicht bestimmt werden. Am Kreuzungspunkt der Geraden (Abbildung 2) lässt sich sowohl die effektive Beschichtungstemperatur ablesen (dort ist die

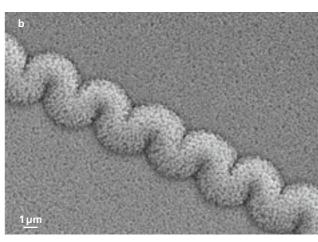
thermisch induzierte Schichtspannung null) als auch die wahre intrinsische Schichtspannung. Auch eventuell vorhandene Änderungen des CTE der Schicht mit der Temperatur lassen sich so sichtbar machen.

#### Besonderheiten und weitere Schritte

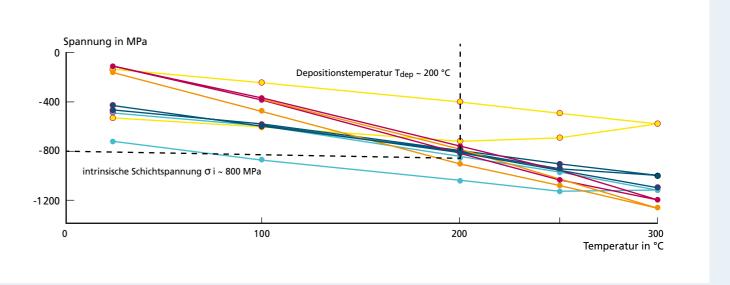
Durch die Verwendung zweier Substratmaterialien wird sowohl die Bestimmung des thermischen Dehnungskoeffizienten als auch des reduzierten E-Moduls der Schicht möglich. In einem konkreten Anwendungsfall wurde für ein Molybdän-Silizium-Multilagenschichtstapel ein CTE von 3 x 10-6 bestimmt, zwischen dem von bulk-Si  $(2.5 \times 10^{-6})$  und Mo  $(4.8 \times 10^{-6})$ . Dieser Wert ist mit anderen Methoden nur sehr viel aufwändiger zu bestimmen. Unter Verwendung von drei Substratmaterialien kann man statt dem reduzierten E-Modul, in dem noch die Querkontraktionszahl  $\nu$  eingeht, das wahre E-Modul und die Querkontraktionszahl separieren. Auf diese Weise erhält man eine nahezu vollständige Schichtcharakterisierung und alle für FE-Simulationen des Verhaltens beschichteter Komponenten wichtigen Eingangsparameter. Dank unseres umfangreichen Wissens zu Strukturbildungsphänomenen bei Schichten sowie der atomistischen Simulation des Schichtwachstums können wir Kundinnen und Kunden ein sehr umfangreiches Schichtcharakterisierungspaket anbieten und sie auch bei eigener Schichtentwicklung unterstützen.

Dr. Frank Burmeister, Marco Wirth





<sup>1</sup> Schematischer Messaufbau Sigma(T), (a). Typische »Druckspannungswürmer« oder »telephone cord buckling« auf einer TiAl/TiAlN-Schicht (b).



2 Typisches Messergebnis an einer nitridischen Hartstoffschicht; jeweils 3 Messzyklen auf Quarzglas (gelb-orange Kurven) und Silizium (blaue Kurven).

# Mikrofretting an elektrischen Kontakten beherrschen

Elektrische Kontakte können Schwingungen ausgesetzt sein, die eine tribologische Beanspruchung verursachen. Solche Schwingungen entstehen beim Öffnen und Schließen des Kontakts oder beim Einsatz in bewegten oder vibrierenden Anwendungen wie Autos. Die Oberflächenveränderung der Kontaktflächen ist stark durch die Randbedingungen der Kontakte wie Schwingweiten, Normalkräfte, Werkstoffe und Beschichtungen bestimmt. Da das Verhalten im Kontakt sehr systemspezifisch ist, bringt eine möglichst bauteilnahe Testung Vorteile für das Verständnis der Vorgänge im Kontakt.

#### Nachstellung eines Tastaturkontakts im Nanoindenter

In Computertastaturen werden durch das Betätigen der einzelnen Tasten kleine Kräfte von wenigen hundert Millinewton auf die elektrischen Kontakte aufgebracht. Bei Betätigung der Taste berühren sich zwei Kontaktelemente und erlauben den Stromfluss zur Signalerzeugung. Abhängig von Randbedingungen wie Normalkraft und Amplitude verschieben sich die Kontakte bei Berührung gegeneinander und beeinflussen so den Kontaktwiderstand. Im Auftrag der Firma Cherry stellten

wir die Kontaktbeanspruchung im Kraftbereich der realen Anwendung in einem Nanoindenter nach. Diesen ergänzten wir mit einem piezogetriebenen Positionierer (Abbildung 1). Das Einbinden der Lateralbewegung in die Datenerfassung des Nanoindenters ermöglicht zusammen mit der externen Echtzeiterfassung des Normalkraftsignals die Nutzung des Geräts als Mikrofrettingtester. Dieser erlaubt lastkontrollierte Versuche im Kraftbereich von 10 Millinewton bis zu mehreren Newton. Das ist auch der Messbereich für die Lateralkräfte, sodass in diesem Kraftbereich Frettingversuche für unterschiedlichste Anwendungen möglich sind. Die Messung des Kontaktwiderstands ist nicht nur für elektrische Kontakte interessant, sondern kann auch in anderen leitfähigen Kontakten Aufschluss über Veränderungen geben. So ist bei gekreuzten Stahl-Stahl-Zylindern keine Änderung im Lateralkraftsignal über eine bestimmte Versuchsdauer sichtbar. Der Kontaktwiderstand jedoch ändert sich deutlich und zeigt so die Entstehung eines dritten Körpers aus oxidiertem Stahl an.

# den Kontaktwiderstand. Im Adrirag der Firma Cherry steilten

1 Versuchsaufbau mit Positionierer (unten) und der Belastungseinheit am Nanoindenter (oben).

#### Erzeugen des Tragbilds durch kleinste laterale Bewegungen

Das Kontaktaussehen aus der realen Anwendung können wir im Versuchsaufbau mit realistischer Normalkraft und kleinsten lateralen Bewegungen im Mikrometerbereich reproduzieren. Der Vorteil des Messaufbaus besteht neben der Messung des Kontaktwiderstands in der Zugänglichkeit von Lateralkräften. Die Verläufe dieser Lateralkräfte sowohl über den Weg als auch über viele Millionen Zyklen geben Aufschluss über die Vorgänge und Veränderungen im Kontakt. So zeigt zum Beispiel eine Änderung des Kraftverlaufs (Abbildung 2) den Übergang vom Haften zum Gleiten der beiden Kontakte gegeneinander an. Der Übergang ist an der Änderung der Steigung des Lateralkraftsignals über den Weg zu erkennen. Die Lateralkraft bleibt beim Gleiten näherungsweise konstant, während sie im Haftbereich zur Auslenkung proportional ist. Mit diesen Maßnahmen erarbeiten wir ein Verständnis der Mechanismen als ersten Schritt zur Verbesserung der Lebensdauer. Darüber hinaus ist in unserem Versuchsaufbau die Belastungsfrequenz höher als in der Gesamtbauteilprüfung. So können Kontaktvariationen schneller auf ihre Langzeitstabilität über viele Millionen Zyklen getestet werden.

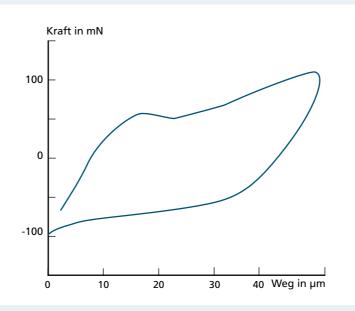
#### Quantitative Analyse von Einflussgrößen

Neben der Durchführung der Reibungsversuche und der Messung der Kräfte im Nanoindenter untersuchen wir mit analytischen Methoden wie lonenfeinstrahltechnologie, Rasterelektronenmikroskopie und klassischer Nanoindentation verschiedene Ausgangszustände und belastete Kontakte.

Am Versuchsaufbau erfolgt die Analyse von Einflussgrößen wie Schichthärte, Kontaktmaterial und -aufbau auf die Ausbildung des sogenannten »dritten Körpers«. Der oben beschriebene Übergang vom Haften zum Gleiten eines Frettingkontakts und auch der Kontaktwiderstand sind durch die Entstehung dieses dritten Körpers beeinflusst. Dabei spielen mechanische und chemische Aspekte, aber auch die Materialflüsse aus und in den Kontakt eine Rolle. Die Verknüpfung tribologischer Experimente in Kombination mit der Analyse dieser tribologischen Kontakte ermöglicht gezielte Maßnahmen zur Erhöhung von Lebensdauer und Zuverlässigkeit elektrischer Kontakte.

Tribologisches Verhalten ist immer systemabhängig. Eine direkte Übertragung der Ergebnisse auf andere Schalteranwendungen und -systeme ist daher nicht möglich. Dennoch können Einflüsse von Amplituden, Normalkräften und Variationen im Fertigungsprozess mit den beschriebenen Methoden und der aufgebauten Erfahrung beschrieben werden. Gleiches gilt für die Kontamination von Kontakten, etwa durch Schmierstoffe bei elektrischen Steckkontakten. Mit dem neu entwickelten Versuchsaufbau können einer linearen Bewegung auch Schwingungen überlagert und so deren Einfluss auf das Tribosystem charakterisiert werden. Am Standort Karlsruhe steht ein weiterer Frettingtester mit Amplituden bis 12,5 Millimeter, einem Frequenzbereich von 1 Hertz bis 500 Hertz und einem höheren Normalkraftbereich bis 500 Newton zur Verfügung, sodass ein sehr großes Parameterfeld für verschiedenste Fragestellungen abgedeckt wird.

Dr. Dominic Linsler



2 Beispielhafte Lateralkrafthysterese über einen Weg von 50 μm.



# Geschäftsfeld Bauteilsicherheit und Leichtbau

## Nachweis der Sicherheit und der Einsatzeignung von mechanisch und thermisch belasteten Strukturbauteilen

Das Geschäftsjahr 2021 war wie das Jahr zuvor von besonderen Umständen geprägt. Nach einem Jahr Pandemie sind neue Formen der Zusammenarbeit und Arbeitsorganisation bekannt und erprobt. Besonders erfreulich ist, dass wir beim Zusammenwirken von Experiment und Simulation wieder zu vielen Themen Erfolge erzielen konnten.



Unsere Philosophie ist, Material bedarfsgerecht so gut wie nötig und so nachhaltig wie möglich einzusetzen.

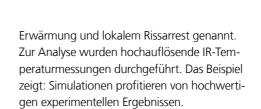
Die Anwendung und die Weiterentwicklung bruchmechanischer Methoden zur Einsatzbewertung von Strukturbauteilen stellt seit jeher eine Kernkompetenz des Geschäftsfelds dar. Vielfach steht die Bewertung mikrostruktureller Defekte im Zentrum und die Frage, unter welchen Bedingungen diese zur Rissinitiierung und zum anschließenden Risswachstum neigen. In einem 2021 abgeschlossenen Projekt konnten wir erstmals zeigen, dass bruchmechanische Konzepte auch auf kleinste Prüfquerschnitte im Submillimeterbereich anwendbar

sind und dass sich die Schwingfestigkeit makroskopischer Strukturen auf die Rissintiierung an nichtmetallischen Einschlüssen zurückführen lässt. Dies liefert neue Erkenntnisse für die Lebensdauerbewertung von hochfesten Stählen und randschichtgehärteten Bauteilen.

## Punktschweißverbindungen quantifizieren

Auch bei der Untersuchung von Bruchvorgängen an Punktschweißverbindungen in hochfesten Stählen setzen wir bruchmechanische Methoden ein. Um deren Unterschiede in der Festigkeit unter Zug- und Scherbelastung, die sogenannte Kopfzugempfindlichkeit, zu untersuchen, werden Kreuzzugversuche an punktgeschweißten Proben mit Potentialsondenmessungen durchgeführt. Damit kann die Kraft des ersten Anrisses in der Fügeebene bestimmt und mithilfe bruchmechanischer Modelle die Bruchzähigkeit des Schweißlinsengefüges berechnet werden. Die Methode erlaubt, neue Stahlentwicklungen in dieser Hinsicht vergleichend zu quantifizieren.

Schließlich wurden bei der Bewertung der Bruchzähigkeit eines Reaktordruckbehälterstahls unter erhöhten Belastungsraten, wie sie zum Beispiel bei Impaktvorgängen auftreten, Fortschritte erzielt. Als bestimmender Mechanismus sei das Zusammenwirken von adiabatischer



## Nachhaltigkeit in die Bauteilbewertung integrieren

In vielen Industriezweigen muss heute zusätzlich zu Nachweisen der Festigkeit, der Lebensdauer und Sicherheit der CO<sub>3</sub>-Fußabdruck der Produkte über den ganzen Lebenszyklus bestimmt werden. In einem vom Deutschen Zentrum für Schienenverkehrsforschung geförderten Projekt untersuchen wir mit Projektpartnern Materialien der Bahninfrastruktur auf ihr Potenzial, langfristig große Mengen CO, zu speichern. Hierzu entwickeln wir Konzepte mit Entscheidungsbäumen zur Materialauswahl und Bewertung, die sowohl die werkstoffmechanischen Eigenschaften als auch CO<sub>3</sub>-Bilanzen der Materialien einbeziehen. Umfassende Literaturstudien und Datensammlung zur Ökobilanzierung beziehungsweise LCA (Life Cycle Assessment) bilden die Basis und den Ausgangspunkt für neue Materialkonzepte. Bespiele sind die Kombination von Beton mit Pflanzenkohle als CO<sub>3</sub>-Senke und Carbon-bewehrte, schlanke, betonsparende Bauweisen. In einem Projekt des Freiburger Leistungszentrums Nachhaltigkeit kombinieren wir in Kooperation mit finnischen Partnern

die Waldbestandsbewertung mit effizienter Holznutzung. Drohnen-basierte multispektrale LiDAR-Messungen durch das Fraunhofer IPM erfassen den Bestand. Die Resilienz bezüglich Risiken wie Stürmen werden am Fraunhofer EMI durch simulationsunterstützte Modelle bewertet. Das Fraunhofer IWM schafft durch optische Bewertung der Holzstrukturen, deren Klassifizierung und Modellierung die Grundlage für die effiziente Nutzung des nachwachsenden und CO<sub>3</sub>-speichernden Werkstoffs Holz.

## Material-Digitalisierung und datengetriebene Methoden

Wir beschäftigten uns 2021 intensiv mit der Analyse strukturierter Material-Datensätze durch datengetriebene Methoden. Im Fokus waren Bauteil-Festigkeitsprognosen, die auf Einflussgrößen wie Eigenspannungen als auch mikrostrukturellen Gefügebestandteilen oder Defekten basierten. Eigenspannungsverteilungen und Mikrostrukturbilder wurden systematisch beschrieben und analysiert. Weiterführende Arbeiten zielen darauf ab, für die genannten Einflussgrößen Prozessdaten aus der Herstellung zu ergänzen. Wir wollen klären, wie gut künftig aus solchen Daten Festigkeitseigenschaften abgeleitet werden können.

Dr. Michael Luke

Geschäftsfeldleiter Telefon +49 761 5142-338 michael.luke@ iwm.fraunhofer.de

**Dr. Silke Sommer** 

Geschäftsfeldleiterin Telefon +49 761 5142-266 silke.sommer@ iwm.fraunhofer.de

## Ermüdungs- und bruchmechanisches Verhalten von höchstfesten Stählen verstehen

Bei den sogenannten höchstfesten Stählen handelt es sich um Hochleistungswerkstoffe mit einer Zugfestigkeit von über 1400 MPa. Solche Werkstoffe werden für besonders hoch beanspruchte Komponenten von Energie- und petrochemischen Anlagen, Antriebstechnik, Fahrwerken oder auch im Werkzeugbau eingesetzt. Als Beispiele sind Wälzlager, Ringe, Getriebeteile, Schrauben, Warmarbeitswerkzeuge, verschleißund temperaturbeanspruchte Bauteile zu nennen. Die Bemessung von Bauteilen aus höchstfesten Stählen gegen Ermüdung ist bisher nicht in Regelwerken verankert und stellt daher eine Herausforderung für die Industrie dar. Dies ist zum einen auf eine vergleichsweise geringe experimentelle Datenmenge mit in der Regel stark streuenden Kennwerten und zum anderen auf viele Einflussfaktoren zurückzuführen, die das Festigkeitsverhalten dieser Stähle beeinflussen. Zu nennen sind die Oberflächenrauheit, Anisotropie, Eigenspannungen und der Reinheitsgrad. Insbesondere die vorhandenen mikrostruktu-

rellen Defekte können zur Entstehung von Mikrorissen und zu

führen. Daher spielen bei deren Auslegung neben den üblichen

einem frühen Ausfall von Bauteilen aus höchstfesten Stählen

Festigkeitskonzepten auch bruchmechanische Betrachtungen

eine wichtige Rolle.

#### Praktische Versuche bilden die Grundlage

In einem vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) geförderten und im Fachkreis Bauteilfestigkeit des Forschungskuratoriums Maschinenbau e. V. durchgeführten Projekt haben wir das Ermüdungs- und Versagensverhalten von den vier höchstfesten Stählen X3CrNiMoAl 13-8-2 (1.4534), 100Cr6 (1.3505), 16MnCr5 (1.7131) und X40CrMoV5-1 (1.2344) untersucht. Der besondere Fokus lag dabei auf der Aufklärung und quantitativen Beschreibung der Entstehung von Mikrorissen und deren Ausbreitung in mikroskopischen Volumina, was durch den Einsatz von neuartigen Mikroprüftechniken und entsprechenden Mikroproben gelang. Mit der in Abbildung 1a gezeigten Probengeometrie führten wir Schwingfestigkeitsversuche unter Zug-Schwellbeanspruchung durch und ermittelten Bruch-Wöhlerlinien im Kurz- bis hin zum Langzeitfestigkeitsbereich. Als versagensauslösende Ursachen stellten sich dabei kleinste Rauheitsspuren an der Probenoberfläche sowie nichtmetallische Einschlüsse im Probeninneren heraus. Um die Lebensdauer von der Rissentstehung bis zum Bruch zu quantifizieren, machten wir zusätzlich Rissfortschrittsversuche. In Abbildung 1b ist die verwendete

Biegeresonanzprobe dargestellt. Darin ist ein mittels Focused Ion Beam eingebrachter Starterriss mit einer Tiefe von ca. 20 µm zu erkennen. Die anschließende bruchmechanische Prüfung erfolgte in einer Biegeresonanzvorrichtung mit einer zunehmenden Spannungsamplitude bei einer gleichzeitigen Überwachung der Eigenfrequenz. Dadurch konnten wir den Beginn des Risswachstums und den entsprechenden Schwellenwert hinsichtlich der Ermüdungsrissausbreitung bestimmen.

#### Ein zuverlässiges Lebensdauermodell erstellen

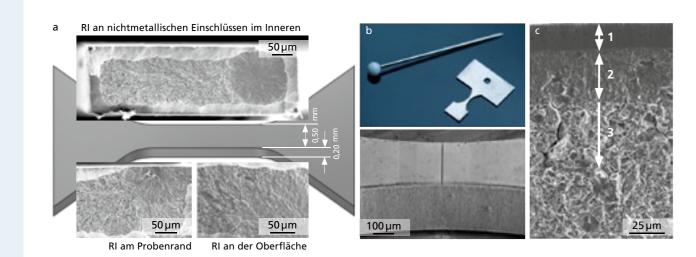
Die in den Wöhler- und Bruchmechanikversuchen experimentell ermittelten Kennwerte überführten wir in ein Lebensdauermodell, das eine getrennte Abschätzung der Anriss- und der Risswachstumsphase ermöglicht. Das Berechnungsmodell greift auf konventionelle bruchmechanische Modelle für Oberflächen- und Innenrisse zurück, wodurch wir die Rissausbreitung infolge verschiedener Mechanismen beschreiben können. Die Kalibrierung des Modells erfolgte zunächst basierend auf den Mikroprobenversuchen. Abbildung 2a zeigt den Vergleich zwischen den experimentell und rechnerisch bestimmten Lebensdauern für alle vier Werkstoffe. Dabei ordnen sich nahezu alle berechneten Lebensdauern in einem schmalen, 4-fachen Streuband ein, was eine hohe Treffsicherheit des Berechnungsmodells bestätigt. Anschließend validierten wir das Berechnungsmodell an mehreren Versuchsreihen mit makroskopischen Proben.

Abbildung 2b zeigt beispielhaft die Anwendung des entwickelten Berechnungskonzeptes zur Beschreibung von bauteilähnlichen Ermüdungsversuchen an Segmenten von Wälzlagerringen

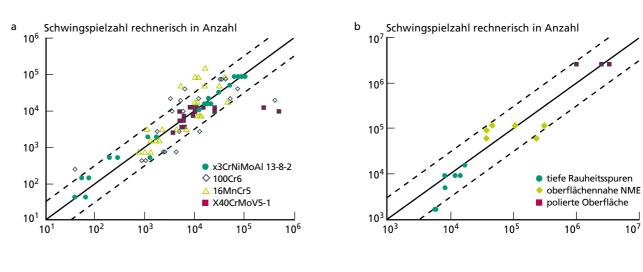
aus dem Werkstoff 100Cr6. Es ergibt sich eine gute Vorhersage der Bauteillebensdauer mit dem Berechnungsmodell. Bei den Berechnungen wird zwischen verschiedenen möglichen Arten von rissauslösenden Defekten unterschieden. Demnach tritt ein frühes Versagen bei Vorliegen von tiefen Rauheitsspuren mit zirka Rz16 ein. Längere Lebensdauern ergeben sich bei der Rissinitiierung durch oberflächennahe nichtmetallische Einschlüsse (NME). Bei einer polierten Probe mit einer entsprechend hohen Oberflächengüte, die keine der oben genannten Defektarten aufweist, wird eine deutlich längere Lebensdauer mit der Rissinitiierung an der Oberfläche erreicht.

Das entwickelte Berechnungsmodell sowie die hierfür erforderlichen Werkstoffkennwerte überführten wir in eine richtlinienkonforme Form und können sie somit potenziellen Anwenderinnen und Anwendern zur Verfügung stellen.

Dr. Igor Varfolomeev, Dr. Thomas Straub, Dr. Michael Luke



<sup>1</sup> Mikroprobe für Wöhlerversuche mit charakteristischen Bruchflächenmerkmalen bei unterschiedlichen Rissinitiierungen (a). Mikroprobe für Rissfortschrittversuche (b). 1: FIB-Anriss, 2: Ermüdungsrisswachstum, 3: Restbruch (c).



<sup>2</sup> Experimentell und rechnerisch ermittelte Lebensdauern der Mikroproben (a). In gleicher Weise ermittelte Lebensdauern von Lagerring-Segmenten ordnen sich in drei Bereiche entsprechend der Art rissauslösender Defekte ein (b).

## Einfluss erhöhter Belastungsraten bei der bruchmechanischen Bewertung

Bei kerntechnischen Anlagen müssen Ingenieurinnen und Ingenieure die Bewertung auslegungsüberschreitender Ereignisse wie Flugzeugabstürze oder Erdbeben im Hinblick auf ein sprödes Versagen verstärkt berücksichtigen. Nach dem Reaktorunfall in Fukushima und den Anschlägen auf das World Trade Center am 11. September 2001 liegt hier ein besonderer Fokus zur Vermeidung von Katastrophen. Ereignisse dieser Art verursachen erhöhte Belastungsgeschwindigkeiten beziehungsweise Rissbeanspruchungsraten im Werkstoff von Bauteilen. Grundsätzlich wird bei der bruchmechanischen Bewertung dieser sicherheitsrelevanten Komponenten derzeit unter anderem das Master Curve Konzept (ASTM E1921) für guasistatische Belastungen eingesetzt. Dieses muss für die Anwendung bei erhöhten Belastungsraten überprüft werden. Dieses beschreibt dabei im spröd-duktilen Übergangsbereich die statistische Verteilung und Temperaturabhängigkeit von Bruchzähigkeitskennwerten (Abbildung 1). Dabei beschreibt der Parameter T<sub>0</sub> die korrespondierende Temperatur der 50 Prozent-Fraktilen bei 100 MPa√m.

#### **Dynamische Master Curve**

Am Fraunhofer IWM untersuchten wir in vier vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) geförderten Projekten den Reaktordruckbehälterstahl 22 NiMoCr3-7. Wir prüften den Werkstoff mit Hochgeschwindigkeitsmesstechnik hinsichtlich der Master Curve, insbesondere bei höheren Belastungsraten. Grundsätzlich verhält sich das Material wie erwartet bei steigender Rissbeanspruchungsrate zunehmend spröder. Dies hat eine Verschiebung der Master Curve zu höheren Temperaturen zur Folge. Die Untersuchungen am Fraunhofer IWM zeigten jedoch, dass sich darüber hinaus die Form der Master Curve und zum Teil die Verteilungsfunktion der Kennwerte deutlich von den in der Norm (ASTM E1921) angenommenen Parametern unterscheiden (Abbildung 1). Dies wurde auch bei relativ geringen Rissbeanspruchungsraten von zirka 100 MPa√m/s beobachtet. Eine pauschale Anpassung der Steigung der Master Curve von p =  $0.019 \, / \, ^{\circ}$ C auf p =  $0.03 \, / \, ^{\circ}$ C bewirkt eine bessere Übereinstimmung mit den Experimenten. Die unteren Ausfallwahrscheinlichkeiten bleiben jedoch mit steigenden Prüftemperaturen weiter unbesetzt. Als Ursache

hierfür identifizierten und quantifizierten wir die adiabatische Erwärmung im Rissspitzenbereich und lokalen Rissarrest. Beide haben einen positiven Einfluss auf die Bruchzähigkeit.

#### Adiabatische Erwärmung

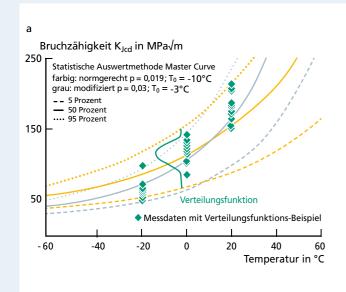
Bei erhöhten Belastungsraten sind die Versuchszeiten sehr kurz, sodass die Wärme aus der Verformungsarbeit nicht vollständig abgeleitet werden kann. Die Materialeigenschaften werden dadurch lokal verändert. Diesen Effekt haben wir durch einen kombinierten Ansatz aus Experiment und Simulation näher untersucht. Das Temperaturfeld in der Nähe der Rissspitze konnten wir mithilfe einer Hochgeschwindigkeits-Infrarot-Kamera (IR) messen (Abbildung 2a). Unter Berücksichtigung der Wärmeentwicklung und -leitung und des dehnratenabhängigen Verformungsverhaltens simulierten wir die Versuche zudem numerisch. Messung und Simulation zeigten eine sehr gute Übereinstimmung hinsichtlich der Temperaturfelder.

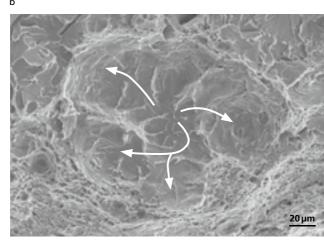
Weiter konnten wir zeigen, dass eine höhere Rissbeanspruchungsrate nicht pauschal höhere Temperaturen im Rissspitzenbereich bewirkt (Abbildung 2b). Bei sprödem Versagen findet die Rissinitiierung lokal und stochastisch beeinflusst vor der Rissspitze statt. Daher kann die lokale Temperatur bei langsamen Rissbeanspruchungsraten in bestimmten Bereichen aufgrund des flacheren Gradienten durchaus höher sein. Dieses Phänomen erklärt, warum die oben beschriebenen Unzulänglichkeiten der Master Curve auch bei geringen Rissbeanspruchungsraten zu beobachten sind.

#### **Lokaler Rissarrest**

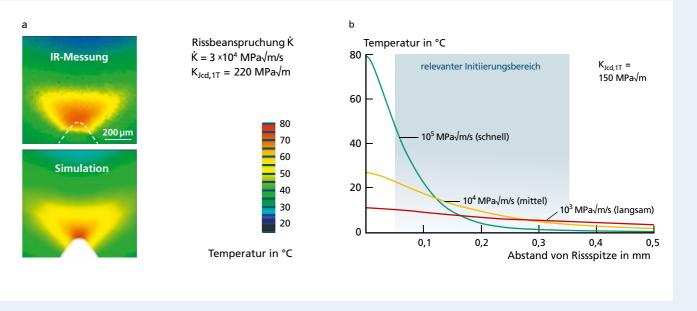
Sprödes Versagen bei ferritischen Stählen ist bei quasistatischer Belastung üblicherweise auf eine einzelne Spaltbruchinitiierung zurückzuführen. Diese führt zum Versagen der Gesamtstruktur. Im Rahmen der Untersuchungen am Fraunhofer IWM konnten wir ausführlich zeigen, dass diese Annahme bei dynamischen Bedingungen nicht zutrifft. Der Riss kann unter bestimmten Bedingungen lokal arretieren und abstumpfen, sodass eine erneute Initiierung an einem anderen Ort bei höherer Belastung erfolgen muss, um zu einem globalen Versagen zu führen. Solche Ereignisse können wir auf der Bruchfläche in Form von Spaltbruchinseln identifizieren (Abbildung 1b). Die Wahrscheinlichkeit für einen lokalen Rissarrest ist stark abhängig von der lokal herrschenden Temperatur, sodass der Effekt aufgrund der adiabatischen Erwärmung grundsätzlich nur bei dynamischen Bedingungen auftritt. Entscheidend ist aber auch, dass bei erhöhten Belastungsraten der spröd-duktile Übergangsbereich zu höheren Temperaturen hin verschoben ist und so bereits höhere Ausgangstemperaturen herrschen. Für eine bruchmechanische Bewertung bei dynamischen Bedingungen ist es deshalb empfehlenswert, nahe oder unterhalb T<sub>0</sub> zu prüfen, um den zusätzlichen Einfluss dieser Mechanismen zu minimieren. Die ausführliche Quantifizierung dieser Mechanismen diente zur Weiterentwicklung eines lokalen numerischen Spaltbruchmodells bei dynamischer Belastung. Darüber hinaus ist geplant, die Ergebnisse in einer Erweiterung der international angewandten ASTM-Norm E1921 zukünftig zu berücksichtigen.

Dr. Johannes Tlatlik





<sup>1</sup> Dynamische Bruchzähigkeit als Funktion der Prüftemperatur T mit der Master Curve; Auswertung für 3 × 10⁵ MPa√m/s (a). Lokaler Rissarrest in Form einer Spaltbruchinsel im Rissspitzenbereich (b).



<sup>2</sup> Vergleich der gemessenen und simulierten Temperatur im Rissspitzenbereich (a). Simulierte Temperaturgradienten für verschiedene Rissbeanspruchungsraten (b).

## Integrität gewickelter CFK-Wasserstoffdruckbehälter bewerten

Für die Entwicklung einer grünen Wasserstoffwirtschaft werden Lager- und Transporttanks sowie Treibstoffbehälter verschiedener Größe benötigt. Aufgrund des geringen gewichtsspezifischen Energieinhalts des gasförmigen Wasserstoffs muss dieser entweder unter hohem Druck komprimiert oder verflüssigt im tiefkalten, kryogenen Zustand gespeichert werden. Bei der Werkstoffauswahl für derartige Anwendungen spielen neben den hohen Festigkeitsanforderungen bei Drücken von 700 bar und mehr beziehungsweise tiefen Temperaturen im Bereich von -253 °C auch der Einfluss des Mediums Wasserstoff eine wichtige Rolle. Bei diesen Anwendungsbedingungen haben sich Tanks aus gewickeltem kohlenstofffaserverstärktem Kunststoff (CFK) und einem innenliegenden metallischen oder aus einem dichten Kunststoff bestehenden Liner bewährt. Dieser schließt das Medium ein und dient als Wickelkern. Die CFK-Ummantelung übernimmt die drucktragende Funktion und stellt die mechanische Integrität her. Der Werkstoff CFK erweist sich hierbei aufgrund seiner hohen Festigkeit und seiner Unempfindlichkeit bei Kontakt mit Wasserstoff als vorteilhaft.

#### Integritätsbewertung im kryogenen Bereich

Beim Einsatz des Verbundes im kryogenen Bereich stellt die starke thermisch induzierte Verspannung zwischen Faser und Matrix ein wesentliches Problem dar. Diese Verspannung ergibt sich aus der nahezu verschwindenden Thermaldehnung der Kohlenstofffasern bei gleichzeitig deutlicher thermischer Kontraktion der meisten polymeren Matrixsysteme bei Abkühlung in den tiefkalten Bereich. In manchen Fällen reichen die auf der mikroskopischen Ebene des Faser-Matrix-Verbunds im kryogenen Bereich auftretenden, thermisch induzierten Spannungen bereits aus, um zu ersten Zwischenfaserbrüchen zu führen (Abbildung 1). Der Rissbildung entgegen wirkt jedoch die im kryogenen Bereich stark ansteigende Festigkeit vieler polymerer Werkstoffe. Der Effekt kann somit starke Auswirkungen auf die Festigkeit des Gesamtverbunds haben, hängt jedoch maßgeblich von den Eigenschaften der verwendeten Werkstoffe ab.

In einem umfangreichen Verbund-Forschungsprojekt wurde daher das Festigkeitsverhalten von CFK-Werkstoffen bei Raumtemperatur und im kryogenen Bereich untersucht. Dabei erfolgte eine mechanische Materialcharakterisierung bei Raumtemperatur am Fraunhofer IWM, während ein Projektpartner die kryogenen Versuche durchführte. Neben den isothermen Versuchen wurden Versuche an rein thermisch vorbelasteten Proben durchgeführt, die lastfrei auf 4,2 K abgekühlt, wieder erwärmt und dann bei Raumtemperatur geprüft wurden. Dabei wurden thermisch induzierte Risse bei langsamer Abkühlung nur in seltenen Fällen beobachtet. Deren Bildung ist in vielen Fällen durch einen Thermoschock bei schneller Abkühlung, beispielsweise durch Eintauchen in eine kryogene Flüssigkeit mit entsprechender inhomogener Temperaturverteilung in der Probe bedingt.

Im Hinblick auf die Festigkeitsbewertung wurden vergleichend verschiedene Verbundwerkstoff-Festigkeitskriterien betrachtet. Dabei erwies sich das Puck-Kriterium als dasjenige mit der höchsten Flexibilität bei der Anpassung und der besten Prognosegüte. Die Bewertung mit dem Versagenskriterium nach Puck stimmte mit den Versuchen gut überein. Beides zeigte: Die Festigkeit steigt im kryogenen Bereich im Vergleich zur Festigkeit bei Raumtemperatur im Zwischenfaserbereich stark an (Abbildung 1b). Zur weitergehenden Validierung des Festigkeitskriteriums wurden Proben mit Taillierungen und Löchern als Initiierungspunkte für Spannungskonzentrationen aus [±α]-Winkelverbunden geprüft. Wiederum erfolgten Versuche bei Raumtemperatur am Fraunhofer IWM und bei 4,2 K beim Projektpartner. Zum Abgleich erfolgten

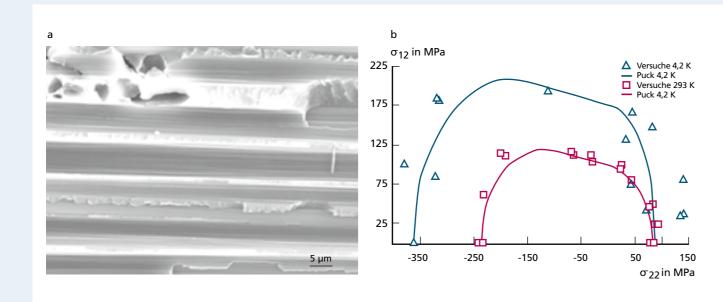
Finite-Elemente-Simulationen der Versuche. Dabei konnte gezeigt werden, dass sowohl der Ort als auch der Zeitpunkt des ersten Schichtversagens mit guter Genauigkeit vorhergesagt werden kann (Abbildung 2). Die Bewertungsprozedur wurde als allgemein einsetzbares numerisches Tool umgesetzt.

## Schädigungsmodell für die erweiterte Integritätsbewertung

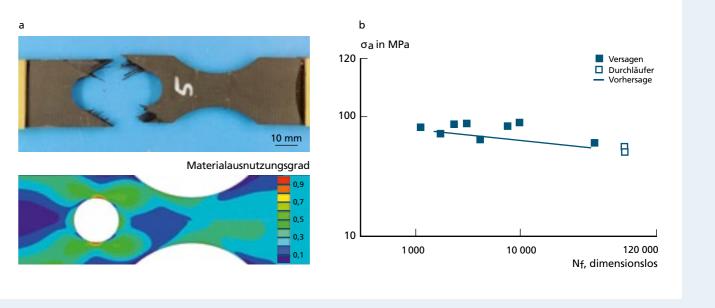
Zur weitergehenden Integritätsbewertung unter komplexeren, insbesondere zyklischen Belastungssituationen wurde ein Schädigungsmaterialmodell entwickelt und als benutzerdefiniertes Materialmodell in ein kommerzielles Finite-Elemente-Programm implementiert. Das Modell basiert auf der Annahme einer Ermüdungsschädigung aufgrund mikroplastischer Vorgänge. Hieraus lässt sich mit der Ramberg-Osgood-Annahme eine rein spannungs- oder dehnungskontrollierte Schädigungsevolution ableiten. Durch eine dehnungsbasierte Formulierung und die damit verbundene Möglichkeit zur expliziten Zeitintegration konnte ein numerisch effizient einsetzbares Simulationsmodell definiert werden. Ein Vergleich zur Vorhersage mit gemessenen Ermüdungskennwerten an einem epoxidharzbasierten CFK-Werkstoff zeigt eine gute Übereinstimmung.

Mit den erarbeiteten Methoden steht eine umfassende Simulations-Toolbox für die Bewertung gewickelter CFK-Wasserstofftanks unter einer Vielzahl von Belastungszuständen bei Raumtemperatur bis in den kryogenen Bereich bereit.

Dr. Michael Schober, Dr. Jörg Hohe



<sup>1</sup> Thermisch induzierte Poren auf der Bruchfläche eines bei 4,2 K geprüften CFK mit M46J-Hochmodulfasern und Epoxidmatrix (a) und Versagensgrenze des Puckkriteriums (b).



<sup>2</sup> Versagensbild und FE-Simulation einer gekerbten IM7/8552 CFK-Probe bei 4,2K (a), mit Spannungskonzentrationsstellen (rot) und Validierung der Vorhersage-Simulation (b).

## Geschäftsfeld Werkstoffbewertung und Lebensdauerkonzepte

Zuverlässiger Werkstoffeinsatz für die Energiewirtschaft, Luft- und Raumfahrt sowie die Mobilität von morgen

> Wir entwickeln unter anderem Lebensdauerkonzepte für den Werkstoffeinsatz unter harschen Umgebungsbedingungen wie Hochtemperatur und (Druck-)Wasserstoff. Mit Blick auf den wachsenden Bedarf an zuverlässigen Bewertungskonzepten und Materialdaten für Komponenten einer Wasserstoffinfrastruktur, haben wir im Jahr 2021 den Beschluss gefasst, zu diesem Thema eine eigene Gruppe zu gründen.



Wasserstoff ist eines unserer Zukunftsthemen.Mit der neuen Gruppe tragen wir dazu bei, hier aktiv Zukunft zu gestalten.

Gemäß der typischen Fraunhofer IWM-Philosophie vereint die Gruppe »Lebensdauerkonzepte für Wasserstoffanwendungen« experimentelle Kompetenzen in der Werkstoffcharakterisierung mit Simulationskompetenz. Bei der Zusammenstellung der Gruppe konnten wir ausschließlich auf eigene Mitarbeiter zurückgreifen.

Geleitet wird die Gruppe von Dr. Thorsten Michler und Dr. Frank Schweizer.

#### Lebensdauerbewertung auf Basis bruchmechanischer Methoden

In der Gruppe »Lebensdauerkonzepte und Thermomechanik« beschäftigen wir uns intensiv mit dem Wachstum kurzer Ermüdungsrisse unter Hochtemperatur und thermomechanischer Beanspruchung. Hierbei führen wir detaillierte experimentelle Untersuchungen zur Initiierung und dem Kurzrisswachstum durch. Zur Aufklärung der Rissinitiierungsmechanismen und deren Bewertung nutzen wir die räumliche Nähe zu unserer Mikrostruktur- und Schadensanalytik der Gruppe »Mikrostruktur und Eigenspannungen«. Für additiv gefertigte und gegossene Aluminiumlegierungen können wir systematisch Anfangsdefekte auf Bruchflächen auswerten. Hierbei nutzen wir automatisierbare Mikroskopie zur Erzeugung von hochaufgelösten und großflächigen Bruchflächenaufnahmen und Schliffbildern. Die Auswertung der Defektgrößen erfolgt aktuell überwiegend manuell, soll perspektivisch aber durch neueste Methoden der digitalen Bildsegmentierung ersetzt werden.

lässt sich durch eine Berücksichtigung der individuellen Anfangsdefektgrößen deutlich verringern. Für die Berücksichtigung des

statistischen Größeneinflusses haben wir begonnen, mit Konzepten der Extremwertstatistik zu arbeiten, wodurch volumenabhängige Defektgrößen vorhergesagt werden können. Als Eingangsgrößen dienen hierbei zum Beispiel Schliffbilder und die aus diesen Bildern extrahierten Größenverteilungen von Poren beziehungsweise nichtmetallischen Einschlüssen. Im Rahmen einer Dissertation konnten wir unter anderem aufklären, wie sich die temperaturabhängige Versprödung in einem Eisengusswerkstoff auf die Beschleunigung des Kurzrisswachstums auswirkt.

Die Ermittlung von Schwellenwerten unter Hochvakuum ist Teil eines laufenden AiF-Vorhabens und ermöglicht die zuverlässige Bewertung von innenliegenden Defekten im Dauerfestigkeitsbereich. Begleitet werden die komplexen Versuche mit Modellentwicklungen, die den Anstieg des Schwellenwertes vom Risslängeninkrement berücksichtigen und so neben der bruchmechanischen Bewertung der Ermüdungswachstumsfähigkeit auch die Vorhersage des Kitagawa-Takahashi Diagramms erlauben. Die Bruchmechanik erlaubt generell eine Übertragung von mittels Proben gewonnenen Kennwerten und Risswachstumskurven auf Bauteile, sofern eine Vergleichbarkeit der jeweiligen Materialzustände gewährleistet ist. Gerade bei gegossenen oder additiv gefertigten Bauteilen ist dies jedoch nicht immer der Fall, da die

Erstarrungsbedingungen und die thermomechanische Vorgeschichte lokal variieren können. Um dennoch aussagekräftige Versuchsdaten erheben zu können, entnehmen wir Proben aus dünnwandigen und teilweise gekrümmten Bauteilen wie Turbinenschaufeln und Brennkammerkomponenten, was hohe Anforderungen an die Probenfertigung, Versuchstechnik und Bewertung stellt. Unsere Kundinnen und Kunden schätzen bei diesen bauteilnahen Versuchen die hohe Aussagekraft und Zuverlässigkeit der Kennwerte. Überraschungen sind keine Seltenheit.

#### **Atomistische Simulationen** erlauben Einblicke in Versprödungsmechanismen

Die Gruppe »Materialmodellierung« nähert sich der Fragestellung des Materialversagens von der atomaren Skala her. Mit atomistischen Simulationsmethoden können wir zum Beispiel die Segregationsneigung von chemischen Elementen auf Kristalldefekten guantifizieren und die damit einhergehende Schwächung oder auch Stärkung der Grenzflächenhaftung im virtuellen Zugversuch untersuchen. In Bezug auf das Verhalten von Wasserstoff im Gefüge stehen die Aufklärung des Versprödungsmechanismus und die Entwicklung von Wasserstoffbarriereschichten im Fokus.

Dr. Christoph Schweizer

Geschäftsfeldleiter Telefon +49 761 5142-382 christoph.schweizer@ iwm.fraunhofer.de

Das Streuband bei der Lebensdauerbewertung

## Abnahme der Risszähigkeit durch Wasserstoffversprödung verstehen

Wasserstoff als Energieträger ist aktuell in vielen Bereichen des Maschinenbaus ein wichtiges Thema: zum Beispiel als Speichermedium für eine Dunkelflaute, als Transportmedium in Fernrohrleitungen von Wind- und Solarstrom oder als Treibstoff für Lastwagen, Schiffe oder Flugzeuge. Um wasserstoffführende Bauteile konstruieren und sicher verwenden zu können, müssen wir verstehen, welche Veränderungen der Werkstoffeigenschaften der Kontakt mit Wasserstoff verursacht und zu welchen Schäden er führen kann. Bei Wasserstoffversprödung kann Materialversagen nicht nur als Folge dynamischer Belastung eintreten, sondern auch bei statischer Belastung. Bei Vorliegen eines Startrisses, zum Beispiel in Form oberflächennaher Schädigungen, können bereits Belastungen unterhalb der Streckgrenze zu einem spröden Bruch ohne feststellbare plastische Verformung führen. Daher ist das Wissen über die statischen Grenzlasten der Werkstoffe für die zukünftige Wasserstoffinfrastruktur von immenser Bedeutung, um einen sicheren und zuverlässigen Betrieb zu gewährleisten. Für Wasserstoffanwendungen sollte deshalb zusätzlich zur Auslegung gegen dynamische Lasten geklärt werden, ob die Bauteile

ausreichend gegen statische Lasten dimensioniert sind. Dies ist besonders wichtig, da zu erwarten ist, dass viele Baugruppen, wie Tanks und Rohrleitungen, bei normaler Nutzung oftmals überwiegend statisch belastet werden.

#### Belastungsgrenzen im Versuch messen

Wir haben standardkonforme Single Edge Bend-Biegeproben der Abmessung 10 × 10 × 55 mm aus der Nickelbasislegierung IN718 gefertigt. Diese haben wir bis zur Probenmitte durch Anschwingen mit einem Startriss versehen. Zur Berücksichtigung der Wasserstoffversprödung haben wir die Proben vorab für eine Woche bei 450 °C bei 150 bar in Wasserstoff 6.0 vorbeladen. Dadurch ergibt sich eine für die meisten Anwendungen konservative Wasserstoffsättigung des Materials. In diesem Ausmaß kann sie zum Beispiel bei Raumtemperatur in Hochdrucktanks für mobile Anwendungen bei über 800 bar auftreten. Anschließend testeten wir die Proben bei Raumtemperatur im stufenförmigen Laststeigerungsversuch ohne in situ-Beladung. Die Belastung wurde alle 20 Minuten um

1 MPa/m erhöht. Wir steigerten die Belastung so lange, bis die Proben versagten. Die Referenzversuche erfolgten auf gleiche Weise an unbeladenen Proben. Die Kraftzeitkurven in Abbildung 1 zeigen für die Referenzproben eine ertragbare Last von 5,7 kN und für die vorbeladenen Proben von 1,8 kN. Dies entspricht beim Bruch mit Berücksichtigung der eingebrachten Risslänge einer Spannungsintensität von 58,9 MPa/m beziehungsweise 18,9 MPa/m.

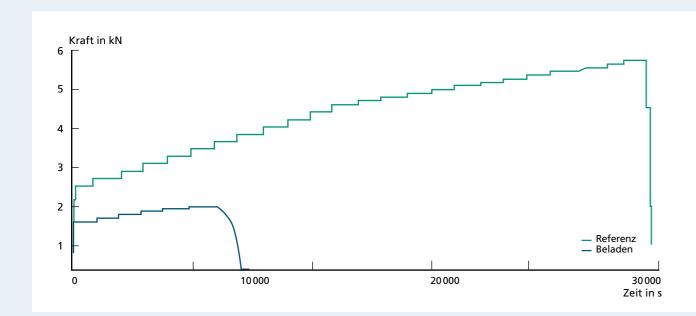
Die veränderte Bruchmorphologie untermauert diese Ergebnisse: Während für die Referenzproben eine Wabenstruktur zu erkennen ist, die ein duktiles, zähes Versagen belegt, zeigen die mit Wasserstoff vorbeladenen Proben eine interkristalline Bruchfläche, die ein verformungsfreies, sprödes Versagen bestätigt. Zudem brechen die mit Wasserstoff beladenen Proben während der statischen Belastungsphase, die wasserstofffreien Proben während einer Laststeigerung. Dies zeigt, dass durch Wasserstoffversprödung ein Bruch unvermittelt bei konstanter Beanspruchung auftreten kann. Bei einer Belastung an der Luft ist der Schaden immer mit Zunahme der Kraft oder einer Veränderung der Kraft verbunden. Eine mögliche Erklärung liefert der »Hydrogen-Enhanced Decohesion«-Schädigungsmechanismus (kurz HEDE genannt): Die lokale Wasserstofflöslichkeit nimmt mit der Zugspannung im Gefüge zu. Bei einer Laststeigerung beginnt somit eine Umverteilung des vorhandenen Wasserstoffs und es wird neuer Wasserstoff aus der Umgebung aufgenommen. Wasserstoff und Zugspannungen bewirken somit eine symbiotische Schädigung.

#### Bauteilbewertung

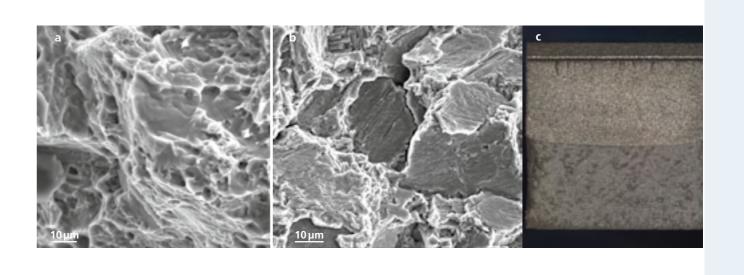
Die Ergebnisse zeigen eine sehr deutliche Abnahme der ertragbaren Last durch die Wasserstoffversprödung an rissbehafteten Bauteilen aus IN718. Die Werkstoffeigenschaften sollten daher unter anwendungsrelevanten Bedingungen gemessen werden. Eine konservative Ableitung der Werkstoffeigenschaften für Wasserstoffanwendungen aus Versuchen ohne Wasserstoffversprödung ist insbesondere für sicherheitsrelevante Bauteile nicht empfehlenswert.

An Rissen kann auch bei statischer Last durch die vergleichsweise langsame Wasserstoffdiffusion in die relevanten Bauteilbereiche ein zeitversetztes Versagen eintreten. Die Versuche müssen daher ausreichend langsam erfolgen. Es ist anzunehmen, dass dieses Schädigungsverhalten auch an fertigungsbedingten Ungänzen, wie Poren, Schweißnahtfehlern oder Bindungsfehlen, auftreten kann. Für statisch belastete Bauteile für Wasserstoffanwendungen wie Ventile, Ferngasleitungen oder auch Drucksensoren, sollte dieses Versagensverhalten bei der Auslegung geprüft und entsprechend berücksichtigt werden.

Dr. Ken Wackermann, Dr. Thorsten Michler



<sup>1</sup> Treppenstufenversuche in Dreipunktbiegung an mit Wasserstoff beladenen Proben (blau) und unbeladenen Referenzproben (grün).



**2** REM-Bilder der Referenzprobe (a), der mit Wasserstoff beladenen Probe (b) und das Lichtbild der verformungsfreien Bruchfläche der mit Wasserstoff beladenen Probe (c).

# Lebensdauermodell für Kriechermüdung von konventionellen Kraftwerken

Kohle- und Gaskraftwerke müssen mindestens so lange sicher und wirtschaftlich arbeiten, bis regenerative Quellen den Bedarf an elektrischer Energie vollständig decken. Die Übergangszeit stellt besondere Anforderungen an die Kraftwerke. Obwohl die Anlagen ursprünglich auf Grundlastbetrieb mit nur wenigen Lastwechseln ausgelegt sind, müssen sie nun die Schwankungen des Angebots aus Sonne und Wind kompensieren. Die häufigen Lastwechsel durch das An- und Abfahren der Kraftwerke führt zur Materialermüdung, einem Schädigungsmechanismus, der bisher in den Kraftwerken kaum eine Rolle gespielt hat. Während sich das Material im Grundlastbetrieb langsam verformt (Kriechen) und innerhalb langer Zeiträume Poren auf Korngrenzen entwickelt (Abbildung 1a), führt wechselnde Belastung (Ermüdung) zur Bildung von Mikrorissen, die mit der Zahl der Belastungszyklen wachsen (Abbildung 1b).

#### **Stand der Regelwerke**

Die derzeitigen Normen geben der Kraftwerksindustrie kaum verlässliche Richtlinien zur Bewertung der neuen Gegebenheiten. Abbildung 2 zeigt, wie unterschiedlich verschiedene Normen das Zusammenwirken von Kriechen und Ermüdung bewerten. Die Europäische Norm EN 12952 schlägt die im Bild dargestellte gerade Linie vor. Das bedeutet zum Beispiel: 10 Prozent Ermüdungsschädigung reduzieren die Kriech-Lebensdauer ebenfalls um (meist akzeptable) 10 Prozent. Der amerikanische ASME Code hingegen würde für den Stahl P91 voraussagen, dass sich die Kriech-Lebensdauer um mehr als 90 Prozent reduziert bei 10 Prozent überlagerter Ermüdungsschädigung. Solche Diskrepanzen stellen einen unhaltbaren Zustand dar zu Zeiten, da die Kriechermüdungs-Wechselwirkung immer wichtiger wird.

#### Modellentwicklung

Um diesem Missstand abzuhelfen, haben wir in einem Verbundprojekt mit Unterstützung des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) ein Lebensdauer-Modell für Kriech-Ermüdung entwickelt. Dabei spielen moderne bruchmechanische Methoden eine zentrale Rolle. Gegenstand der Bruchmechanik ist das Verhalten von Rissen unter unterschiedlichen Bedingungen. Mikrorisse entstehen früh in der Lebensdauer von Bauteilen, wenn die Belastungsamplitude hoch ist. Diese Situation, die als low-cycle fatigue (LCF) bezeichnet wird, können wir für den Kraftwerksbetrieb mit harten An- und Abfahrzyklen unterstellen. Maßgeblich für die Lebensdauer ist dann das Risswachstum.

Seit Langem ist bekannt, dass sich ein Ermüdungsriss in jedem Lastzyklus ungefähr um so viel verlängert, wie sich die Rissspitze bei Belastung öffnet und bei Entlastung wieder schließt. Die bruchmechanische Aufgabe ist also die Berechnung der zyklischen Rissspitzenöffnung, ΔCOD (crack opening displacement) unter kombinierter Kriech-Ermüdungsbeanspruchung. Da das Problem bisher zu kompliziert für eine exakte Berechnung ist, besteht die Kunst darin, zwischen soliden Eckpunkten mit werkstoffwissenschaftlichem Know-how zu interpolieren. Solche vier Eckpunkte sind der Spannungsintensitätsfaktor für linear elastisches Material, das J-Integral für nichtlineares Material, das Z-Integral für zyklische Belastung von plastischem Material und das C\*-Integral für Kriechen. Aus der so berechneten zyklischen Rissöffnung ergibt sich die Rissverlängerung pro Zyklus und daraus die Lebensdauer, definiert als Zahl der Zyklen bis zum Erreichen einer kritischen Risslänge.

Hinzu kommt im Kraftwerksbetrieb die Kriechschädigung, zum Beispiel in Form von Poren auf Korngrenzen. Auch dafür existieren am Fraunhofer IWM Modelle, die nun mit der Ermüdungsschädigung kombiniert werden. Das Ergebnis für die Lebensdauer N<sub>f</sub> lässt sich dann mithilfe des Schädigungsparameters D<sub>FC</sub> (»Damage parameter Fatigue Creep«) mit den anpassbaren Parametern A und H folgendermaßen darstellen.

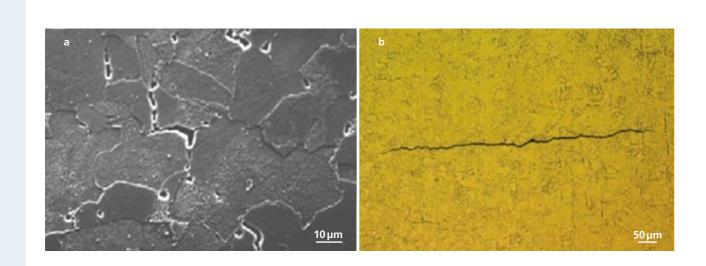
$$N_f = \frac{A}{(D_{FC})^H}$$

Der Schädigungsparameter D<sub>FC</sub> wird materialspezifisch für beliebige Zyklen von Spannung und Temperatur numerisch berechnet.

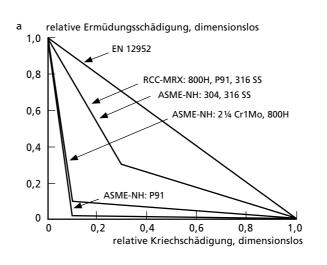
#### Ergebnisse für den Stahl P92

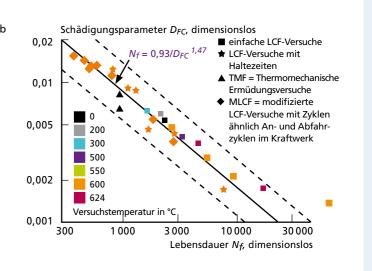
Im Projekt wurden zahlreiche Kriechermüdungs- und TMF-Versuche (TMF = thermo-mechanical fatigue) am Stahl P92 durchgeführt, um das Modell zu testen. Die Versuchstemperaturen lagen im Bereich 20 °C bis 625 °C, die Zyklusdauern zwischen 8 Sekunden und 3 Stunden bei ganz unterschiedlichen Zyklusformen. Gemessene Spannungen, Dehnungen und Temperaturen dienten als Input für das Lebensdauermodell. Abbildung 2b zeigt die gemessenen Lebensdauern, aufgetragen gegen die berechneten D<sub>FC</sub> -Werte. Alle Datenpunkte liegen in einem Streuband mit Faktor 2 um die Mittelwertlinie, welche durch obige Gleichung gegeben ist. Der Faktor 2 gilt angesichts der üblichen Streuung von Ermüdungsdaten als Validierung eines Modells. Mit dem Modell hat die Kraftwerksindustrie nun ein Hilfsmittel, um die Lebensdauer ihrer Anlagenteile zu berechnen, Inspektionsintervalle zu planen und insbesondere verschiedene Fahrweisen beim An- und Abfahren zu bewerten. In Bezug auf Abbildung 2 besagt das Modell, dass der von ASME vorgeschlagene Linienzug für den Stahl P91 auch in etwa für den P92 zutrifft, dass aber der Verlauf nicht nur vom Material, sondern auch von der Belastungshöhe und der Zyklusform abhängt.

Prof. Dr. Hermann Riedel, Dr. Gerhard Maier, Heiner Oesterlin



<sup>1</sup> Poren auf Korngrenzen nach lang dauernder konstanter Belastung (a). Mikroriss nach zyklischer Belastung (b).





<sup>2</sup> Vorgaben verschiedener Normen zur Bewertung der Kriechermüdung (a); berechnete Schädigungsparameter für Kriechermüdung gegen gemessene Lebensdauern (b)

## Quantencomputer für innovative Materialsimulation nutzen

Seit Anfang dieses Jahres betreibt IBM in Ehningen bei Stuttgart für die Fraunhofer-Gesellschaft einen der weltweit leistungsfähigsten Quantencomputer. Das Ministerium für Wirtschaft, Arbeit und Tourismus Baden-Württemberg fördert im Rahmen des Kompetenzzentrums »Quantencomputing Baden-Württemberg« derzeit sechs Verbundprojekte mit dem Ziel, Quantumcomputing für die Anwendung nutzbar zu machen. An zwei Projekten ist die Gruppe »Materialmodellierung« des Fraunhofer IWM beteiligt.

## Kopplung klassischer Computer mit Quantum Hardware

Im Prinzip bietet ein Quantencomputer aufgrund seiner Funktionsweise ideale Voraussetzungen, um quantenchemische Vorgänge in komplexen Funktionsmaterialien abzubilden. Die aktuell verfügbare Hardware weist gegenüber dem mathematisch idealen Verhalten eines Quantenregisters jedoch noch Unvollkommenheiten auf. So ist insbesondere die Dekohärenz des Systems, das heißt der Verlust von Quanteneigenschaften durch Störungseinflüsse während der Berechnungszeit, ein ernstes Problem. Dies schränkt die universelle Einsetzbarkeit

eines Quantencomputers derzeit noch stark ein. Die Technologie entwickelt sich jedoch zügig weiter, sodass voraussichtlich in wenigen Jahren weitaus leistungsfähigere und fehlertolerantere Systeme zur Verfügung stehen werden.

Wir forschen daran, die heute verfügbare Quantum Hardware bestmöglich für Fragestellungen der Materialmodellierung zu nutzen, und bauen dafür gezielt Know-how für hybride Simulationsmethoden auf. In diesen hybriden Verfahren werden jene Aspekte, die sich zuverlässig auf konventionellen Computern berechnen lassen, mit etablierten Methoden der Dichtefunktionaltheorie behandelt. Ein Anteil der Problemstellung, für den dies aufgrund dessen quantenmechanisch hoher Komplexität nur mit großem numerischen Aufwand möglich wäre, wird in einem effektiven Modell abgebildet, welches mithilfe des Quantencomputers berechnet wird. Eine Iterationsschleife zwischen beiden Computersystemen liefert dann die Gesamtlösung (Abbildung 1). Das Ziel unserer Forschungsarbeit ist es, effektive Modelle zu entwickeln, die sich auf der heutigen Quantum Hardware zufriedenstellend rechnen lassen. Unsere Erkenntnisse bilden eine Grundlage für künftige Software mit übertragbaren Quantenalgorithmen.

## Materialsimulation für Batterien und Brennstoffzellen

Für den erfolgreichen Ausbau der Elektromobilität werden kleine und leichte Energiespeicher mit hohen Energiedichten und Leistungen sowie effiziente Energiewandler benötigt. Dabei bestimmen Material und Struktur der Elektroden die elektrische Funktion von Batterien und Brennstoffzellen und letztendlich auch deren Lebensdauer.

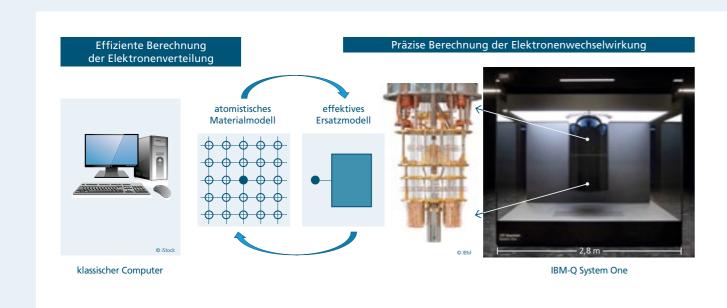
Im Verbundprojekt »Quantencomputer Materialdesign für elektrochemische Energiespeicher und -wandler mit innovativen Simulationstechniken« (QuESt) erproben wir gemeinsam mit Projektpartnern am Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) neue Wege des Materialdesigns. Unter Nutzung des IBM-Quantencomputers untersuchen wir, welche Wechselwirkungen auftreten zwischen Atomen und Elektronen von Batterie-Elektroden sowie in Katalysatoren von Brennstoffzellen. Solche Funktionsmaterialien enthalten in der Regel chemische Elemente mit stark korrelierten Elektronen, insbesondere Übergangsmetalle. Deren physikalisch richtige Beschreibung erfordert numerisch aufwändige Verfahren. Sie bieten sich somit an, um die oben beschriebenen hybriden Simulationsmethoden zu erproben und weiterzuentwickeln. Im Rahmen von QuESt untersuchen wir insbesondere Phasen-, Defekt- und Reaktionseigenschaften von Oxidverbindungen von Mangan, Eisen, Cobalt und Nickel mit Perowskit-Kristallstrukturtypen.

#### Alternative Technologie für Quantenregister

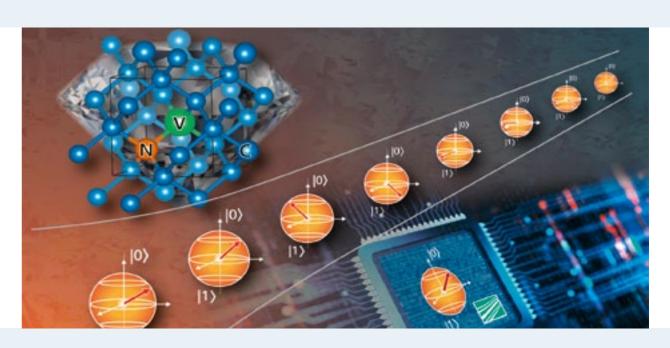
Die IBM-Quantencomputer verwenden supraleiterbasierte Schaltkreise als elementare Qubits. Diese so gut wie möglich gegen äußere Störungen abzuschirmen, erfordert einen großen technologischen Aufwand. So wird der Quantenprozessorchip auf Temperaturen nahe dem absoluten Nullpunkt gekühlt und gegen elektrische und magnetische Felder abgeschirmt. Ein alternativer, technologisch jedoch erst am Anfang stehender Ansatz zur Realisierung von Qubits sieht die Verwendung bestimmter isolierter Kristalldefekte in Festkörpern vor. Der meistversprechende Kandidat hierfür ist das Stickstoff-Vakanz-Zentrum (NV-Zentrum) im Diamantkristall, welches seine Quanteneigenschaften selbst bei Raumtemperatur für erstaunlich lange Zeit aufrechterhält.

Im Verbundprojekt »Modellierung und **Si**mulation von **Qu**bit-**Re**gistern aus Ketten von NV-Zentren auf Versetzungen in Diamant« (SiQuRe) beschäftigen wir uns gemeinsam mit Partnern an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg und der Universität Ulm mit der Modellierung und Simulation von festkörperdefektbasierten Qubit-Registern. Das Forschungsvorhaben behandelt mit Modellen und Computersimulationsmethoden der theoretischen Quantenphysik die Frage, inwieweit sich als Qubits adressierbare NV-Zentren in Diamant entlang linearer Strukturdefekte periodisch anordnen und für den Aufbau zukünftiger Quantencomputer nutzen lassen.

Dr. Daniel Urban, Prof. Dr. Christian Elsässer



<sup>1</sup> Hybrider Simulationsansatz für Materialien, die Übergangsmetalle mit stark korrelierten Elektronen enthalten. Foto rechts: der Quantencomputer »IBM-Q System One« in Ehningen – im Zentrum der Helium-Kryostat zur Kühlung.



2 Schematische Darstellung des Aufbaus eines Quantenregisters aus NV-Defektzentren im Diamantkristall.

## Organisation des Fraunhofer IWM

Institutsleiter	Prof. Dr. Peter Gumbsch	+49 761 5142-100	peter.gumbsch@iwm.fraunhofer.de
Stellvertretende Institutsleiter	Prof. Dr. Chris Eberl	+49 761 5142-495	chris.eberl@iwm.fraunhofer.de
	Dr. Rainer Kübler	+49 761 5142-213	rainer.kuebler@iwm.fraunhofer.de
Verwaltungsleitung	Elke Schubert	+49 761 5142-124	verwaltungsleitung@iwm.fraunhofer.de
Stab	Thomas Götz	+49 761 5142-153	thomas.goetz@iwm.fraunhofer.de
	Prof. Dr. Christian Elsässer	+49 761 5142-286	christian.elsaesser@iwm.fraunhofer.de
Administrative Infrastruktur	Elke Schubert	+49 761 5142-124	elke.schubert@iwm.fraunhofer.de
Finanzen und Verträge	Nina Halaczinsky	+49 761 5142-487	nina.halaczinsky@iwm.fraunhofer.de
Personal- und Reisemanagement	Kerstin A. Drüsedau	+49 761 5142-140	kerstin.druesedau@iwm.fraunhofer.de
Öffentlichkeitsarbeit und Besuchsmanagement	Katharina Hien	+49 761 5142-154	katharina.hien@iwm.fraunhofer.de
Technische Infrastruktur	Dr. Rainer Kübler	+49 761 5142-213	rainer.kuebler@iwm.fraunhofer.de
Werkstatt, Technik und Logistik	Stefan Frei	+49 761 5142-345	stefan.frei@iwm.fraunhofer.de
IT Services	Klaus Merkel	+49 761 5142-217	klaus.merkel@iwm.fraunhofer.de
Scientific IT	Dr. Heiko Hafok	+49 761 5142-311	heiko.hafok@iwm.fraunhofer.de
Arbeitssicherheit	Dr. Rainer Kübler	+49 761 5142-213	rainer.kuebler@iwm.fraunhofer.de

#### Wissenschaftliche Geschäftsfelder und ihre Gruppen

Fertigungsprozesse	Dr. Dirk Helm	+49 761 5142-158	dirk.helm@iwm.fraunhofer.de
Pulvertechnologie und Fluiddynamik	Dr. Torsten Kraft	+49 761 5142-248	torsten.kraft@iwm.fraunhofer.de
Umformprozesse	Dr. Alexander Butz	+49 761 5142-369	alexander.butz@iwm.fraunhofer.de
Glasformgebung und -bearbeitung	Tobias Rist	+49 761 5142-430	tobias.rist@iwm.fraunhofer.de
Tribologie	Prof. Dr. Matthias Scherge	+49 761 5142-206	matthias.scherge@iwm.fraunhofer.de
Verschleißschutz und Technische Keramik	Dr. Andreas Kailer	+49 761 5142-247	andreas.kailer@iwm.fraunhofer.de
Multiskalenmodellierung und Tribosimulation	Prof. Dr. Michael Moseler	+49 761 5142-332	michael.moseler@iwm.fraunhofer.de
Polymertribologie und biomedizinische Materialien	Dr. Raimund Jaeger	+49 761 5142-284	raimund.jaeger@iwm.fraunhofer.de
Tribologische und funktionale Schichtsysteme	Bernhard Blug	+49 761 5142-180	bernhard.blug@iwm.fraunhofer.de
Tribokonditionierung und -analytik	Dr. Dominic Linsler	+49 721 204327-18	dominic.linsler@iwm.fraunhofer.de
Bauteilsicherheit und Leichtbau	Dr. Michael Luke und Dr. Silke Sommer	+49 761 5142-338 +49 761 5142-266	michael.luke@iwm.fraunhofer.de silke.sommer@iwm.fraunhofer.de
Ermüdungsverhalten und Bruchmechanik	Dr. Michael Luke Dr. Igor Varfolomeev	+49 761 5142-338 +49 761 5142-210	michael.luke@iwm.fraunhofer.de igor.varfolomeev@iwm.fraunhofer.de
Crashsicherheit und Schädigungsmechanik	Dr. Silke Sommer Frank Huberth	+49 761 5142-266 +49 761 5142-472	silke.sommer@iwm.fraunhofer.de frank.huberth@iwm.fraunhofer.de
Verbundwerkstoffe	Dr. Jörg Hohe	+49 761 5142-340	joerg.hohe@iwm.fraunhofer.de
Meso- und Mikromechanik	Dr. Thomas Straub	+49 761 5142-537	thomas.straub@iwm.fraunhofer.de
Werkstoffbewertung und Lebensdauerkonzepte	Dr. Christoph Schweizer	+49 761 5142-382	christoph.schweizer@iwm.fraunhofer.de
Mikrostruktur und Eigenspannungen	Dr. Johannes Preußner	+49 761 5142-101	johannes.preussner@iwm.fraunhofer.de
Lebensdauerkonzepte und Thermomechanik	Dr. Christoph Schweizer	+49 761 5142-382	christoph.schweizer@iwm.fraunhofer.de
Material model lierung	Dr. Daniel Urban	+49 761 5142-378	daniel.urban@iwm.fraunhofer.de
Lebensdauerkonzepte für Wasserstoffanwendungen	Dr. Thorsten Michler Dr. Frank Schweizer	+49 761 5142-475 +49 761 5142-122	thorsten.michler@iwm.fraunhofer.de frank.schweizer@iwm.fraunhofer.de

## **Impressum**

#### Redaktion

Katharina Hien (verantw.) Julia Dannehl

#### **Gestaltung und Produktion**

Marianne Förderer Erika Hellstab

#### Anschrift der Redaktion

Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM Wöhlerstraße 11 79108 Freiburg Telefon +49 761 5142-154 Fax +49 761 5142-510 info@iwm.fraunhofer.de

#### Besuchen Sie uns im Internet

Website: www.iwm.fraunhofer.de Twitter: Fraunhofer\_IWM LinkedIn: fraunhofer-iwm-freiburg Youtube: FraunhoferIWM

#### Bildquellen

Titel, Seite 13: Gebhard | Uhl, Freiburg / Bearbeitung Fraunhofer IWM Seiten 1, 2, 8: Kai-Uwe Wudtke, March Seiten 9, 11, 21: Gebhard | Uhl, Freiburg Seiten 23, 33, 43, 51: Stock-Müller, Freiburg Seiten 28, 41 rechts, 56 links: iStock Seite 56 rechts: IBM Alle Abbildungen: © Fraunhofer IWM

#### ISSN 1616-3591

Alle Rechte vorbehalten. Bei Abdruck ist die Einwilligung der Redaktion erforderlich.

## Die Fraunhofer-Gesellschaft

Die Fraunhofer-Gesellschaft mit Sitz in Deutschland ist die weltweit führende Organisation für anwendungsorientierte Forschung. Mit ihrer Fokussierung auf zukunftsrelevante Schlüsseltechnologien sowie auf die Verwertung der Ergebnisse in Wirtschaft und Industrie spielt sie eine zentrale Rolle im Innovationsprozess. Sie ist Wegweiser und Impulsgeber für innovative Entwicklungen und wissenschaftliche Exzellenz. Mit inspirierenden Ideen und nachhaltigen wissenschaftlich-technologischen Lösungen fördert die Fraunhofer-Gesellschaft Wissenschaft und Wirtschaft und wirkt mit an der Gestaltung unserer Gesellschaft und unserer Zukunft.

Interdisziplinäre Forschungsteams der Fraunhofer-Gesellschaft setzen gemeinsam mit Vertragspartnern aus Wirtschaft und öffentlicher Hand originäre Ideen in Innovationen um, koordinieren und realisieren systemrelevante, forschungspolitische Schlüsselprojekte und stärken mit werteorientierter Wertschöpfung die deutsche und europäische Wirtschaft. Internationale Kooperationen mit exzellenten Forschungspartnern und Unternehmen weltweit sorgen für einen direkten Austausch mit den einflussreichsten Wissenschaftsund Wirtschaftsräumen.

Die 1949 gegründete Organisation betreibt in Deutschland derzeit 76 Institute und Forschungseinrichtungen. Mehr als 30 000 Mitarbeitende, überwiegend mit natur- oder ingenieurwissenschaftlicher Ausbildung, erarbeiten das jährliche Forschungsvolumen von 2,9 Milliarden Euro. Davon fallen 2,5 Milliarden Euro auf den Bereich Vertragsforschung. Rund zwei Drittel davon erwirtschaftet Fraunhofer mit Aufträgen aus der Industrie und mit öffentlich finanzierten

Forschungsprojekten. Rund ein Drittel steuern Bund und Länder als Grundfinanzierung bei, damit die Institute schon heute Problemlösungen entwickeln können, die in einigen Jahren für Wirtschaft und Gesellschaft entscheidend wichtig werden.

Die Wirkung der angewandten Forschung geht weit über den direkten Nutzen für die Auftraggeber hinaus: Fraunhofer-Institute stärken die Leistungsfähigkeit der Unternehmen, verbessern die Akzeptanz moderner Technik in der Gesellschaft und sorgen für die Aus- und Weiterbildung des dringend benötigten wissenschaftlich-technischen Nachwuchses.

Hochmotivierte Mitarbeitende auf dem Stand der aktuellen Spitzenforschung stellen für uns als Wissenschaftsorganisation den wichtigsten Erfolgsfaktor dar. Fraunhofer bietet daher die Möglichkeit zum selbstständigen, gestaltenden und zugleich zielorientierten Arbeiten und somit zur fachlichen und persönlichen Entwicklung, die zu anspruchsvollen Positionen in den Instituten, an Hochschulen, in Wirtschaft und Gesellschaft befähigt. Studierenden eröffnen sich aufgrund der praxisnahen Ausbildung und des frühzeitigen Kontakts mit Auftraggebern hervorragende Einstiegsund Entwicklungschancen in Unternehmen.

Namensgeber der als gemeinnützig anerkannten Fraunhofer-Gesellschaft ist der Münchner Gelehrte Joseph von Fraunhofer (1787–1826). Er war als Forscher, Erfinder und Unternehmer gleichermaßen erfolgreich.

Stand der Zahlen: Januar 2022