

Arbeitspferd FEM braucht neues Futter

Seite 2

Wasserstoff lässt biegsame Metalle brechen

Seite 3

Fachkolloquium Werkstoffsimulation

Seite 4

2 • 2009



Sehr geehrte Leserinnen und Leser,

das Ziel, die Materialien noch besser zu verstehen, aus denen wir Produkte fertigen oder mit denen wir Produkte bearbeiten, treibt die Werkstoffmechanik an. Je tiefer unser Materialverständnis geht, umso weiter öffnen sich die Möglichkeiten, Werkstoffe sicher und zuverlässig einzusetzen.

Dieser IWM Report schaut vor allem auf den aktuellen Stand in der Simulation, also die rechnerische Beschreibung der Werkstoffe. Hierbei rücken zunehmend das Werkstoffverhalten im Verlauf der Herstellung und die Prozesskettensimulation in den Fokus. Außerdem stellen wir Ihnen ein neues Labor im Institut vor, das sich speziell den Chancen und Gefahren von Wasserstoff widmet. Was wir bei der Elektromobilität und besonders in der Leistungselektronik vorgenommen haben, erfahren Sie auf Seite 4.

Ich wünsche Ihnen eine interessante Lektüre.

Prof. Dr. Peter Gumbsch
Geschäftsführender Institutsleiter

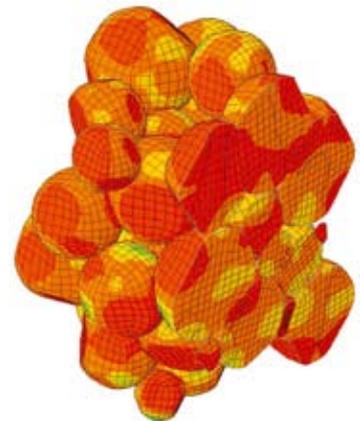
Komplexe Werkstoffe und enge Belastungsgrenzen fordern Vorhersage

Sie spart Zeit und Geld, sie bringt Sicherheit und Qualität: Die Simulation klingt wie die Wunderwaffe der Prototypen- und Prozessentwicklung. Die rechnerische Vorhersage des Materialverhaltens »ist ein unverzichtbares Ingenieurwerkzeug« geworden, meint Prof. Dr. Hermann Riedel, der seit über zwei Jahrzehnten diese Kompetenz am Fraunhofer IWM stetig ausbaut. Die Zahlen für Simulationssoftware-Lizenzen weltweit bestätigen ihn, sie gehen längst in die Millionen.

Und es bleibt keine Zeit, die Hände in den Schoß zu legen: Wettbewerbs- und Kostendruck, verkürzte Produktzyklen und ressourcensparende Effizienzsteigerungen haben die errungenen Vorteile der Simulation bereits wieder eingeholt. »Der aktuelle Entwicklungsbedarf ist riesig«, betont der Institutsleiter des Fraunhofer IWM, Prof. Dr. Peter Gumbsch.

Die Ansprüche an Simulationswerkzeuge wachsen. Ein Grund ist, dass neue Werkstoffe, wie die dünnen, aber hochfesten TRIP-Stähle für Autos oder die warmfesten Stähle zur Effizienzsteigerung in Kraftwerken, ihre besonderen Eigenschaften nur erreichen, weil sie im Aufbau sehr viel komplexer sind. Zum anderen werden die Belastungsgrenzen immer enger, Aussagen über die Lebensdauer von Bauteilen immer wichtiger. »Wer will ein mikroelektronisches Bauelement fürs Auto, ein Flugzeugbauteil oder ein Kraftwerkselement erst 30 Jahre testen? Das lässt sich nur rechnerisch lösen«, betont Riedel. Doch dafür muss ein Werkstoff manchmal bis in die Tiefe

des atomaren Aufbaus erkundet werden. Institutsleiter Gumbsch hatte bei seinem Einstieg ins Fraunhofer IWM 2001 den Begriff der »Multiskalensimulation« geprägt. Ein mittlerweile auf mehr als 30 Mitarbeiter angewachsenes Team arbeitet seitdem an der physikalischen Modellierung von Materialien. Dahinter verbirgt sich das mathematische Beschreiben dessen, was bis hinunter zur atomaren Ebene innerhalb eines Materials geschieht.



Heute kommen auch dafür die Auftraggeber überwiegend aus der Industrie. Das Fraunhofer IWM ist führend mit seiner Kompetenz, die Ergebnisse aus den unteren Skalen, von den Atomen über einzelne Kristalle bis zur Makrostruktur, in die Finite-Elemente-Berechnung (FEM) zu integrieren. »Der Hersteller, der uns anspricht, will vom einfachen Modell weg, weil zu viele Fragezeichen bleiben oder er zu viele Fehlversuche hat«, erläutert Simulationsfachmann Riedel. »Wir ändern das.«

Prozesskettensimulation

Bauteil-Biographie für exakte Vorhersage

Bei Menschen ist es bekannt: Prägende Erlebnisse im Kindesalter können fest-schreiben, wie jemand als Erwachsener reagiert. Auch bei technischen Bauteilen ist deren Herstellungsbiographie entscheidend dafür, wie sie im Einsatz auf Belastungen reagieren. Nur wer von Anfang an jeden einzelnen Prozessschritt in der Herstellung eines Bauteils berücksichtigt, wird also am Ende exakt vorhersagen können, wie sich das fertige Bauteil verhält. Diese Exaktheit kann extrem wichtig sein – etwa für die Sicherheit von Autoinsassen bei einem Unfall oder für die Lebensdauer einer kleinen Komponente, deren Versagen ein ganzes Werkzeug, einen Motor oder eine wichtige Verbindung lahm legen könnte.

Für eine Prozesskettensimulation müssen zunächst alle Einzelschritte beschrieben werden. Danach werden diese Informationen rechnerisch verknüpft. Ein Karosserieblech, zum Beispiel, wird beim Umformen mehrfach abwechselnd unter Zug und Druck belastet. Beim Crash kommt die Belastung meist nur aus einer Richtung. Die Rechenmodelle für beide Ereignisse sind also verschieden. Die Verformung und Schädigung des Blechs in der Presse muss aber berücksichtigt werden. »Sonst würde die Kraft eines hochfesten Stahls bei der Faltenbildung im Crash um rund 20 Prozent unterschätzt«, erläutert Dr. Dong-Zhi Sun.

Unverzichtbar ist das Verknüpfen der Herstellungsschritte auch in der Pulvertechnologie. »Inhomogene Dichte beim Befüllen kann dazu führen, dass sich ein Sinterbauteil verzieht. Beim Sintern selbst sind Schrumpfungen von 20 Prozent möglich«, erläutert Dr. Torsten Kraft. In seiner Gruppe wird deshalb alles erfasst und verknüpft: das Befüllen der Matrize mit losem Pulver, das Verdichten des Pulvers in der Presse, die thermische Zersetzung der organischen Additive und schließlich das Sintern bei teils über 2000 Grad.

Die Prozesskettensimulation ermöglicht Fertigungsabläufe zu optimieren.
torsten.kraft@iwm.fraunhofer.de,
dong-zhi.sun@iwm.fraunhofer.de

Arbeitspferd FEM braucht neues Futter

Im Gespräch: Prof. Hermann Riedel, Mitglied der Institutsleitung und verantwortlich für die Simulationsaktivitäten, über neue Herausforderungen für die Werkstoffsimulation und darüber, wie die Industrie bereits profitiert



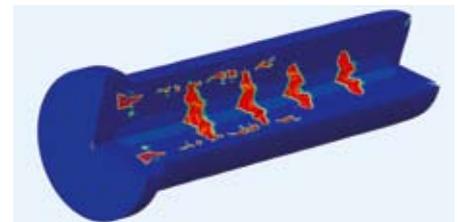
■ **Der Markt scheint heute übersät mit Simulationsmodellen. Jeder will sich aufwändige Tests ersparen. Wofür braucht man das Fraunhofer IWM in diesem Umfeld?** Das Arbeitspferd unter den Simulationsmethoden ist heute die Finite-Element-Methode (FEM), die in vielen Firmen regelmäßig eingesetzt wird. Wir kommen als Ansprechpartner aus zwei Gründen ins Spiel. Erstens, wenn ein Kunde schnell und gezielt zu einer Lösung kommen will, deren Komplexität vielleicht auf den ersten Blick gar nicht augenscheinlich ist. Mit unserer Erfahrung und Flexibilität können wir hier insbesondere kleineren Firmen häufig helfen. Noch wichtiger ist aber zweitens unsere Kompetenz in der mathematischen Modellierung von Materialverhalten.

■ **Ein Beispiel?** Ein griffiges Beispiel ist das Sintern (das Fachwort für das Brennen) keramischer Waschbecken. Beim Sintern verziehen sich die Waschbecken. Ein Hersteller hochwertiger Waschbecken fragte bei uns an, ob man den Verzug nicht vorweg durch Simulation ermitteln und in der Form kompensieren könne, um das monatelange, kostspielige Verfahren durch Versuch und Irrtum abzukürzen. Ich denke, wir waren weltweit so ziemlich die Einzigen, die guten Gewissens zusagen konnten, und es kam zu einer jahrelangen, erfolgreichen Zusammenarbeit.

■ **Worin genau bestand Ihr Vorsprung?** Wir hatten uns die physikalischen Vorgänge genau angesehen, die beim Sintern zwischen den einzelnen Keramikeilchen im Mikrometerbereich ablaufen. Wichtig

ist, daraus mathematische Gleichungen abzuleiten, die das makroskopische Verhalten beschreiben. Diese Gleichungen können dann in ein Finite-Element-Programm eingebaut werden. Das bringt Flexibilität: Jetzt lässt sich das Verhalten beliebig kompliziert geformter Teile im Rechner statt im Sinterofen studieren. Unverzichtbar ist dafür übrigens eine angemessene Versuchstechnik, denn die Modelle enthalten Parameter, deren Zahlenwerte für jeden Werkstoff ermittelt werden müssen.

■ **Rund 70 Mitarbeiter am IWM arbeiten an Simulationsmodellen – an welchen Themen?** Nun, sehr erfolgreich läuft seit einigen Jahren das Thema thermomechanische Ermüdung TMF, das steht für Thermo-Mechanical Fatigue. Dieses Phänomen tritt in Bauteilen auf, die häufigen starken Temperaturwechseln unterworfen sind, zum Beispiel Turbolader oder Abgaskrümmer. Die thermische Dehnung der Werkstoffe führt zu Spannungen, und es entstehen zunächst sehr kleine Risse, die aber mit jedem Temperaturzyklus wachsen, bis das Bauteil versagt. Eines Tages fragte ein Automobilhersteller bei uns an, ob wir nicht Modelle für TMF hätten. Das Thema widersetzte sich hartnäckig einer themellmäßigen Beschreibung - mit kostspieligen Folgen. Zahlreiche teure und langwierige Prüfstands- und Feldversuche waren erforderlich. Auch diese Frage traf auf ein ziemlich exklusives Kompetenzspektrum am



IWM. Heute bieten wir der Industrie ein Komplettpaket aus Modellen, Software, Versuchen und Support an, das nicht nur von den Autofirmen, sondern auch von Turbinenherstellern, der Kraftwerksindustrie und Herstellern solarthermischer Anlagen genutzt wird.

■ **Was sind die großen Zukunftsaufgaben?** Mich faszinieren die heutigen Möglichkeiten, grundlegende Eigenschaften von Materialien aus der Quantenmechanik heraus ‚ab initio‘ zu berechnen. Da sehe ich eine Parallele zum Genomprojekt der Biologie. Das anspruchsvolle Handwerks-



Wasserstoff lässt biegsame Metalle brechen

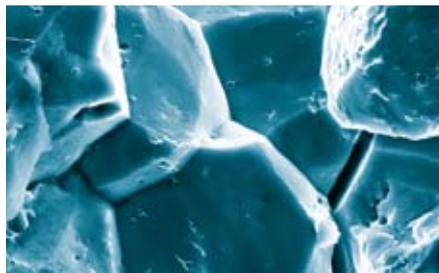
Wasserstoff ist zur vielversprechenden Alternative für fossile Energie geworden. Doch für Metalle, die gerade in der Fahrzeug- und Energietechnik häufig verwendet werden, ist Wasserstoff nicht unbedenklich. Er kann die Metalle spröde machen. Dieser Wirkung ist das Fraunhofer IWM jetzt mit einem Speziallabor und neuen Modellen auf der Spur. Die Erkenntnisse tragen dazu bei, Wasserstoff-geeignete Werkstoffe und Fertigungsverfahren zu finden.

Korrosion an einer Metalloberfläche ist meist gut zu erkennen: Durch Wasser verändern sich Farbe und Konsistenz des Materials. Doch der Wasserstoff, der dabei entsteht, wirkt teilweise auch im Verborgenen, er dringt auch ins Metall ein. Und das eben nicht nur bei Korrosion: Auch beim Walzen und Pressen kann Wasserstoff ins Metall eindringen, und das verändert die Materialeigenschaften manchmal grundlegend.

Aus biegsamem, verformbarem Stahl kann Wasserstoff ein sprödes Material machen, das eher bricht als »duktil« zu reagieren. »Duktilität« bezeichnet die Eigenschaft eines Materials, sich möglichst dem Druck oder Zug anzupassen, in dem es dünner oder länger wird, bevor es – sozusagen mit Vorwarnung – reißt oder bricht.

Die Wasserstoffversprödung nimmt das Fraunhofer IWM nun noch genauer unter die Lupe. Im Freiburger Speziallabor lässt die Industrie nicht nur unter verschiedenen elektrochemischen Bedingungen untersuchen, wie und mit welcher Schnelligkeit Wasserstoff durch ein Metall oder eine Legierung hindurchwandert. »Wir können auch die so genannten Trapplätze, das sind Wasserstoff-Fallen ermitteln. Das heißt, wir erkennen, an welchen Punkten im Material sich Wasserstoff ansammelt und wo nicht«, erläutert Nicholas Winzer, wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fraunhofer IWM in Freiburg und Leiter des Wasserstofflabors. Die experimentell gewonnenen Erkenntnisse speist das Team

auch in die Modellierung ein, also die rechnerische Beschreibung der Wasserstoffdiffusion in Metallen. »In unserem Team machen wir alles – von der quantenmechanischen Beschreibung der grundlegenden Mechanismen von Wasserstoffversprödung bis zur Analyse von Schadensfällen und dem Ermitteln der Ursachen von Rissen und Brüchen«, betont Winzer. Die Rasterelektronenmikroskopie trägt entscheidend zu dieser Analyse bei.



Eine weitere Besonderheit des neuen Labors ist, dass Materialien hier gleichzeitig auf Wasserstoffversprödung und mechanische Belastungen durch Zug, Druck oder Temperatur getestet werden können. »In der Industrie müssen die Bauteile genau dieser kombinierten Belastung standhalten«, betont Nicholas Winzer die Bedeutung dieser Simultantests. Noch gebe es in der Wasserstoffversprödung viele Unbekannte. Eines Tages aber sollen sie kommen, die Wasserstoffpipelines durch Europa und die Wasserstoffantriebe für Dynamik ohne fossile Energien. Für mehr Informationen:

nicholas.winzer@iwm.fraunhofer.de



»KGB« hatte es Bianca Böttge angetan: So wird der Studiengang »Keramik-, Glas-, und Baustofftechnik« der TU Freiberg abgekürzt,

wo sie ihr Diplom machte. Seit Januar 2007 arbeitet die Wissenschaftlerin im Fraunhofer IWM in Halle daran, Schäden und Fehlermechanismen von Mikrosystemen zu analysieren und zu bewerten. Zuvor war sie sechs Jahre als Hilfskraft und Diplomandin am Institut. Ihre Promotion soll jetzt dazu beitragen, ein neues Bondverfahren für die Mikrosystemtechnik zu etablieren: Beim reaktiven Bonden wird die Wärme, die für den Verbindungsprozess benötigt wird, über eine Reaktion direkt im Fügespalt erzeugt. Die zu verbindenden Substrate müssen nicht erhitzt werden. Ihre Laborarbeit gleicht die 27-jährige mit Klettern, Skifahren – »viel Sport« – aus.

bianca.boettge@iwm.fraunhofer.de



Mit sprödem Glas und Silizium hat Tobias Rist erst seit Mai 2009 zu tun. Seit seinem Ingenieurstudium der Materialwissenschaften an

der Uni Bayreuth hatte er sich mit plastisch umformbaren Metallen befasst. Seine Diplomarbeit bei der EADS in München widmete sich dem Schweißen von Aluminiumwerkstoffen. »Zurück« ans Fraunhofer IWM kam der gebürtige Freiburger Anfang 2006 als wissenschaftlicher Mitarbeiter für die Simulation von Umformprozessen. Seine Tätigkeit jetzt im Geschäftsfeld Fertigungstechnologien ist breiter: Um etwa die Grenzflächen für Vakuumfensterglas oder Solarzellen zu optimieren, arbeitet der 31-jährige Projektleiter nun auch im Labor. Beim Auswerten hilft es, dass er stets »begleitend nachrechnen kann«.

tobias.rist@iwm.fraunhofer.de

>> zeug hat einen guten Entwicklungsstand erreicht: in der Biologie die Methoden der DNA-Sequenzierung und in der Physik die Näherungen und numerischen Programme zur Lösung der Schrödinger-Gleichung. Damit versteht man schon einiges, aber längst nicht alles. In der Biologie schließt sich jetzt die Frage an, wie sich aus der statischen Erbinformation mit Hilfe von Proteinen die dynamischen Lebensprozesse entwickeln. Dem entspricht bei uns, auch wenn der Vergleich leicht hinkt, die Mehr-

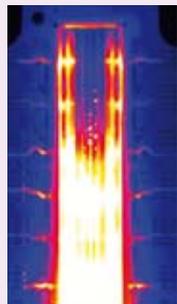
skalensimulation, die in mehreren Etappen aus der atomaren Struktur die makroskopischen, praktisch wichtigen Eigenschaften ableitet.

■ **Ist die Industrie an solch langfristiger Forschung interessiert?** Eindeutig ja. Bei der Entwicklung von Lithiumionenbatterien für die Elektromobilität, zum Beispiel, sind ab-initio-Rechnungen bereits sehr wertvoll. Mit Technologiefirmen wie Bosch und Siemens arbeiten wir heute schon an

Fragen, wie sich das atomare Gefüge auf das Materialverhalten auswirkt, und können manche davon relativ schnell beantworten. Langfristig möchten wir auch so komplexe Werkstoffe wie Stahl beschreiben können. Wenn es zum Beispiel gelingt vorherzusagen, ob das Gefüge eines warmfesten Stahls über die geplante Betriebsdauer eines Kraftwerks von 30 Jahren stabil bleibt, so ist ein solches Modell unschlagbar.

Leistungselektronik: Material verbessern

Kräne, Elektrolots und Hybridautos, Fahrstühle, Netzteile für Computer, Unterhaltungselektronik und Industrietechnik – alle haben eines gemeinsam: Sie benötigen schnell sehr viel elektrische Energie. Windräder und Solarstrom-Module, etwa, wollen umgekehrt schnell viel Strom abgeben. Für beides sorgt die Leistungselektronik. Sie richtet die Ströme um, passt Frequenzen an und verteilt Energie intelligent je nach Bedarf. Doch ihre Lebensdauer bietet noch viel Spielraum. Doch dazu muss man die Alterungsprozesse in den eingesetzten



Werkstoffen noch besser verstehen, angepasste Diagnostikverfahren und -geräte entwickeln. Daran arbeitet das Fraunhofer IWM in Halle. Ziel ist es, die

Entwicklung leistungsfähigerer Verbindungen aus Sintermaterialien oder reaktiven Multischichtsystemen mit neuen Loten zu beschleunigen und das Einsatzverhalten der Bauelemente bereits im Frühstadium der Prozessentwicklung zu optimieren.

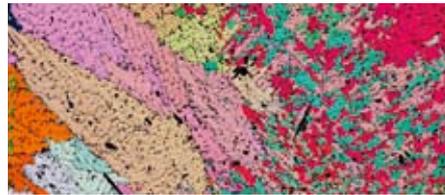
matthias.petzold@iwmh.fraunhofer.de

Sicherheit fürs Elektromobil

Wenn Strom aus erneuerbaren Quellen auch den Verkehr speiste, wäre der Klimaneutral. Die Bundesregierung investiert deshalb 30 Millionen Euro in Fraunhofer-Forschung. Im Sommer 2011 soll ein fahrbereites Elektroauto viele Fragen beantworten. Im Fraunhofer IWM in Freiburg und Halle lauten sie zum Beispiel: Wie sehen Konstruktion, Fügeverbindungen und Materialien einer Leichtbaukarosserie aus, die energieeffizient und dennoch unfallsicher ist, die also die Insassen und eine 400 Kilo schwere, bei Kurzschlüssen brandgefährliche Batterie schützt? Wie werden die Lithiumionenbatterien selbst crashtsicher, wie optimiert man Elektroden und Elektrolyte für schnelle Ladevorgänge? Dafür werden unter anderem Alterung, Elektronen- und Ionenaustausch sowie Temperaturwechsel am Rechner simuliert. Rechenmodelle sollen auch helfen, einen Radnabenmotor mit Fraunhofer-Komponenten zu entwickeln. Projektleiter des IWM-Teams ist Dr. Thomas Hollstein.

thomas.hollstein@iwmh.fraunhofer.de

Zuverlässigkeitsfragen stellen Mikroelektronik schwierige Aufgaben



Ohne Lotwerkstoffe für die Verbindungstechnik ist die Mikroelektronik nicht vorstellbar. Dass bleihaltige Lote vor einigen Jahren von bleifreien Materialien abgelöst wurden, brachte viele neue Fragen zum Einsatzverhalten mit sich. Gleichzeitig steigen die Anforderungen an die Zuverlässigkeit, getrieben z.B. durch die Kommunikations-, Automobil- und Leistungselektronik - also eine doppelte Herausforderung. Um die Lebensdauer von Weichlotverbindungen beschreiben zu können, braucht man auch Informationen über die Mikrostruktur, z.B. über die Größe und die Verteilung einzelner Körner im Materialgefüge und deren Kristallorientierung. Denn sie bestimmen mit, wie, wo und unter welcher Beanspruchung sich Risse im Material bilden und ausbreiten können. Genau diese Informationen liefert die EBSD-Analyse. EBSD steht dabei für die automatische Detektion, Analyse und grafische Darstellung der gewünschten Werkstoffdaten aus den Beugungsmustern rückgestreuter Elektronen im Rasterelektronenmikroskop.

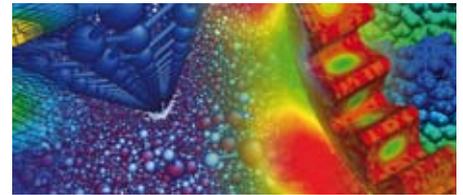
Neben der Datenanalyse war bislang vor allem die Präparation ein Engpass, schließlich ist es nötig, die obersten Nanometer der Probenoberfläche durch Schleifen und Polieren nahezu defektfrei herzustellen, und das ist in der Tat nicht einfach. Das Fraunhofer IWM in Halle hat nun geeignete Präparations- und Auswerteroutinen für Weichlote entwickelt, die die EBSD-Analyse von Weichloten ermöglicht. Damit ist der Weg frei für tiefere und aufschlussreichere Einblicke in den Werkstoff und für Antworten auf drängende Fragen der Zuverlässigkeit mikroelektronischer Bauelemente.

michael.krause@iwmh.fraunhofer.de

Fraunhofer IWM

Das Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM charakterisiert, simuliert und bewertet das Verhalten von Werkstoffen, Bauteilen und Systemen unter dem Einfluss äußerer Kräfte in unterschiedlichen Umgebungen. Für Unternehmen und öffentliche Auftraggeber erarbeitet das Fraunhofer IWM Lösungen, die die Sicherheit, Zuverlässigkeit, Lebensdauer und Funktionalität von technischen Bauteilen und Systemen verbessern.

Werkstoffsimulation: Prozessketten und Multiskalenmodellierung



Fachkolloquium zum 65. Geburtstag von Prof. Dr. Hermann Riedel
Donnerstag, 21. Januar 2010, Freiburg

Die Entwicklung neuer Werkstoffe und Bauteile lässt immer weniger Versuch-Irrtum-Schleifen zu. Effizientere und leistungsfähigere Systeme müssen näher an ihren Belastungsgrenzen betrieben werden. Um den immer höheren Anforderungen gerecht zu werden, sind Prozesskettensimulation und Multiskalenmodellierung gefragt. Sie erlauben aufeinanderfolgende Herstellungsschritte virtuell miteinander zu verzahnen und Funktionen und Eigenschaften von Werkstoffen auf der Nano-, Mikro- und Makroskala zu berechnen und gezielt einzustellen. Unter dem Motto »leichter, leistungsfähiger, effizienter« informiert das Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM in einem Kolloquium am 21. Januar 2010 über den aktuellen Entwicklungsstand und neueste Ergebnisse. Anlass ist der 65. Geburtstag von Prof. Dr. Hermann Riedel.

Im Kolloquium zeigen namhafte Referenten aus Industrie und Wissenschaft, wie die neuesten Erkenntnisse zur Multiskalenmodellierung und zur Prozesskettensimulation industriell umgesetzt und gewinnbringend eingesetzt werden können.

Das Fachkolloquium richtet sich an Entwickler und Entscheider aus Unternehmen, die komplexe Werkstoffe einsetzen und verarbeiten und Entwicklungs- und Fertigungsprozesse effizienter gestalten möchten.

Anmeldung und Informationen bei
thomas.goetz@iwmh.fraunhofer.de
www.iwm.fraunhofer.de/veranstaltungen

Impressum

Text: Doris Banzhaf, Grafik: Emanuela Pesché,
Fotos: Michael Spiegelhalter,
Fraunhofer IWM
Verantwortlich: Thomas Götz
thomas.goetz@iwmh.fraunhofer.de
© Fraunhofer IWM, www.iwm.fraunhofer.de

Institut Freiburg

Wöhlerstraße 11, 79108 Freiburg
Telefon 0761 5142-0

Institut Halle

Walter-Hülse-Straße 1, 06120 Halle
Telefon 0345 5589-0