

#### FRAUNHOFER-INSTITUT FÜR WERKSTOFFMECHANIK IWM





Mit der mikromechanischen Kriechapparatur können Kriecheigenschaften von Proben in der Größenordnung von Millimetern vermessen werden – hier ein langfaserverstärktes Thermoplast LFT.

#### Die Fraunhofer-Gesellschaft

Forschen für die Praxis ist die zentrale Aufgabe der Fraunhofer-Gesellschaft. Die 1949 gegründete Forschungsorganisation betreibt anwendungsorientierte Forschung zum Nutzen der Wirtschaft und zum Vorteil der Gesellschaft. Vertragspartner und Auftraggeber sind Industrie- und Dienstleistungsunternehmen sowie die öffentliche Hand.

Die Fraunhofer-Gesellschaft betreibt in Deutschland derzeit 69 Institute und Forschungseinrichtungen. 24 500 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, überwiegend mit natur- oder ingenieurwissenschaftlicher Ausbildung, erarbeiten das jährliche Forschungsvolumen von 2,1 Milliarden Euro. Davon fallen 1,9 Milliarden Euro auf den Leistungsbereich Vertragsforschung. Mehr als 70 Prozent dieses Leistungsbereichs erwirtschaftet die Fraunhofer-Gesellschaft mit Aufträgen aus der Industrie und mit öffentlich finanzierten Forschungsprojekten. Knapp 30 Prozent werden von Bund und Ländern als Grundfinanzierung beigesteuert, damit die Institute Problemlösungen entwickeln können, die erst in fünf oder zehn Jahren für Wirtschaft und Gesellschaft aktuell werden.

Internationale Kooperationen mit exzellenten Forschungspartnern und innovativen Unternehmen weltweit sorgen für einen direkten Zugang zu den wichtigsten gegenwärtigen und zukünftigen Wissenschafts- und Wirtschaftsräumen. Mit ihrer klaren Ausrichtung auf die angewandte Forschung und ihrer Fokussierung auf zukunftsrelevante Schlüsseltechnologien spielt die Fraunhofer-Gesellschaft eine zentrale Rolle im Innovationsprozess Deutschlands und Europas. Die Wirkung der angewandten Forschung geht über den direkten Nutzen für die Kunden hinaus: Mit ihrer Forschungs- und Entwicklungsarbeit tragen die Fraunhofer-Institute zur Wettbewerbsfähigkeit der Region, Deutschlands und Europas bei. Sie fördern Innovationen, stärken die technologische Leistungsfähigkeit, verbessern die Akzeptanz moderner Technik und sorgen für Aus- und Weiterbildung des dringend benötigten wissenschaftlich-technischen Nachwuchses.

Ihren Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern bietet die Fraunhofer-Gesellschaft die Möglichkeit zur fachlichen und persönlichen Entwicklung für anspruchsvolle Positionen in ihren Instituten, an Hochschulen, in Wirtschaft und Gesellschaft. Studierenden eröffnen sich aufgrund der praxisnahen Ausbildung und Erfahrung an Fraunhofer-Instituten 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.

www.fraunhofer.de

# **JAHRESBERICHT 2016**

#### -----

## Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM

Fraunhofer IWM Freiburg Wöhlerstraße 11 79108 Freiburg Telefon +49 761 5142-0

info@iwm.fraunhofer.de www.iwm.fraunhofer.de



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

## VORWORT

#### Sehr geehrte Leserinnen und Leser,

die Digitalisierung beeinflusst verschiedenste Industriebereiche und steht für datenbasierte technologische und wirtschaftliche Entwicklungen. Sie verspricht Wettbewerbsvorteile durch Vernetzung, Integration und neue Dienstleistungen auf der Basis von Informationsströmen und großen Datenmengen. Die in diesem Kontext viel zitierten digitalen Repräsentationen oder virtuellen Abbilder von Produkten sind seit jeher fester Bestandteil der Werkstoffmechanik-Forschung. Ohne präzise Werkstoffmodelle und virtuelle Prozessketten wären keine Vorhersagen zur Zuverlässigkeit und Lebensdauer oder zur Steigerung der Fertigungsausbeute möglich.

Gleichwohl beschert die Digitalisierung der Werkstoffmechanik viele neue Möglichkeiten zur Verfeinerung und Integration unserer Methoden. In der Prozesssimulation beziehen wir verstärkt Aspekte der Prozesssteuerung und der Prozesskontrolle ein, Methoden des maschinellen Lernens erweitern das Materialscreening mit Hochdurchsatzmethoden und die Vereinheitlichung von Datenformaten erlauben die Zusammenführung der Ergebnisse unterschiedlicher Messtechnik. Aktuell erweitern wir unsere Rechen- und Speicherkapazitäten, um die anfallenden großen Datenmengen effektiver und effizienter prozessieren zu können (mehr auf Seite 14).

Viele Aspekte der digitalisierten Werkstofftechnik stehen noch am Anfang und werden erst in den nächsten Jahren Früchte tragen. Deutlich konkreter sind unsere Aktivitäten zur Errichtung eines Wasserstofflabors, das wir im Frühjahr 2017 in Betrieb nehmen wollen. Dort werden unter Hochdruckatmosphäre Werkstoffe hinsichtlich Wasserstoffversprödung untersucht oder Oberflächen auf ihre Wasserstoffadsorption bewertet. Unser Anspruch ist, anwendungsrelevante Schädigungsmechanismen aufzuklären. Ergänzt wird unser experimentelles Leistungsangebot durch die rechnerische Lebensdauervorhersage für Bauteile unter Wasserstoffeinfluss.

Am 23. November 2016 konnten wir in Karlsruhe im Beisein der Wissenschaftsministerin des Landes Baden-Württemberg, Theresia Bauer, das neue Gebäude des MikroTribologie Centrums µTC übernehmen. Mit Mitteln des Landes Baden-Württemberg und des Bundesforschungsministeriums BMBF entstanden in unmittelbarer Nachbarschaft des Materialwissenschaftlichen Zentrums MZE des KIT 40 Büroarbeitsplätze sowie Labor- und Technikumsräume. Die erfolgreiche Verknüpfung der grundlagenorientierten Forschung des KIT und der anwendungsnahen Forschung und Entwicklung bei Fraunhofer wird mit dem neuen Gebäude im Herzen des KIT-Campus in idealer Weise gefestigt. Ebenfalls im Herbst 2016 haben wir am Campus Ost des KIT ein weiteres Technikumsgebäude des MikroTribologie Centrums bezogen. Dort ist schwerpunktmäßig die Online- Verschleißmesstechnik beheimatet.

In unserem Jahresbericht finden Sie einen kleinen Auszug der Themen, die uns im abgelaufenen Jahr beschäftigt haben. Lassen Sie sich davon inspirieren!

Ful

Prof. Dr. Peter Gumbsch



## INHALT

#### INSTITUTSPROFIL

- 6 Profil des Fraunhofer IWM
- 8 Organisation und Ansprechpartner
- 10 Das Institut in Zahlen
- 12 Kuratorium
- 13 Investitionen in Zukunftsthemen
- 14 Materials Data Space

#### AUSGEWÄHLTE FORSCHUNGSERGEBNISSE

#### 16 Geschäftsfeld Materialdesign

- 18 Nitridausscheidungen und Wasserstoffatome in Stählen beherrschen
- 20 Erforschung MAX-Phasen-basierter Schichtmaterialien für korrosionsstabile SOFC
- 21 Quantitative Bestimmung der Haftung dünner Schichten per Mikro-Vierpunktbiegung

#### 22 Geschäftsfeld Fertigungsprozesse

- 24 Vorhersage der Plättchen-Adhäsion in Blutströmungen
- 26 Charakterisierung und Simulation von Presshärteprozessen
- 28 Neuartiges Biegen von Flachglas mit lokaler Erwärmung

#### 30 Geschäftsfeld Tribologie

- 32 Maßgeschneiderte Tribologische Untersuchung von Hartlegierungen an Ventilen von Großgasmotoren
- 34 Warum David Goliath schlägt: Oxide verschleißen Diamant
- 36 DLC-Schichten: »Dritter Körper« sorgt für gutes Reibverhalten
- 38 Abriebmechanismen von Elastomeren aufklären
- 39 Reibung auf Eis- und Schneeuntergründen messen

#### 40 Geschäftsfeld Bauteilsicherheit und Leichtbau

- 42 Neue Mikrostrukturbasierte Beschreibung: Entstehung von Rissen in Schweißverbindungen
- 44 Modellierung von hybridgefügten Verbindungen für die Crashsimulation
- 46 Design von Lasteinleitungselementen für großserienfähige Sandwich-Bauteile
- 48 Charakterisierung und Modellierung des Bruchverhaltens von Aluminiumfelgen
- 49 Adiabatische Erwärmung bei dynamischer Rissbeanspruchung

#### 50 Geschäftsfeld Werkstoffbewertung, Lebensdauerkonzepte

- 52 Schädigungsmechanismen eines geschweißten Baustahls mit Mikrozugproben aufgedeckt
- 54 Lebensdauerbewertung von Kraftwerkskomponenten unter flexibler Fahrweise

#### VERNETZUNG SOWIE KERNKOMPETENZEN UND TECHNISCHE MÖGLICHKEITEN

- 56 Vernetzung des Fraunhofer IWM in der Fraunhofer-Gesellschaft
- 60 Kernkompetenz Werkstoff- und Bauteilcharakterisierung
- 62 Kernkompetenz Werkstoffmodellierung und Simulation
- 64 Kernkompetenz Tribologie und Oberflächendesign

#### ANHANG

- 66 Personen, Ausbildung, Ereignisse
- 68 Veröffentlichungen
- 73 Impressum

## **PROFIL DES FRAUNHOFER IWM**

#### Unsere Mission: Werkstoffe intelligent nutzen

Der intelligente Einsatz von Werkstoffen ist Schlüssel zum Erfolg und Investition in die Zukunft: Unsere Forschungsarbeiten ermöglichen innovative und zuverlässige Produkte bei unseren Kunden. Wir tragen zu einer Gesellschaft bei, die nach einer effizienten und nachhaltigen Nutzung von Energie und Ressourcen strebt.

- Wir machen Mechanismen und Prozesse in Werkstoffen und Materialsystemen beherrschbar, indem wir sie bewerten und modellhaft beschreiben. Dadurch erschließen wir Reserven bei der Leistungsfähigkeit und Effizienz von technischen Systemen.
- Wir erfassen Werkstoffe bis in atomare Strukturen und nehmen Einfluss auf Wechselwirkungen. Damit können wir Werkstoffeigenschaften für geforderte und neue Funktionalitäten einstellen.
- Wir durchdringen Materialsysteme und Fertigungsprozesse grundlegend und überführen sie in zuverlässige Produkte und Technologien. So verwirklichen wir gemeinsam mit Partnern aus Wissenschaft und Wirtschaft wettbewerbsentscheidende Innovationen.

#### Lösungen für den Produktlebenszyklus

Wir bieten Forschungs- und Entwicklungsleistungen für den gesamten Produktlebenszyklus an – vom Materialdesign über die Fertigung bis zur Bauteillebensdauer. Unser Anspruch dabei ist, mit Lösungen zur optimierten Nutzung von Werkstoffeigenschaften und für neue Werkstofffunktionen innovative und zuverlässige technische Bauteile und Fertigungsverfahren bei unseren Auftraggebern zu ermöglichen.

# Sie benötigen einen Funktionswerkstoff mit einem definierten Eigenschaftsprofil?

Wir designen Werkstoffe für multifunktionale Aufgaben.

#### Sie möchten Ihre Fertigungsprozesse für konturgenaue Bauteile aus komplexen Werkstoffen anpassen oder die Fertigungsausbeute erhöhen?

Wir optimieren Prozessketten für die spezifischen Anforderungen des zu verarbeitenden Werkstoffs und entwickeln ressourceneffiziente Fertigungsschritte.

# Sie suchen nach Lösungen, um Reibung und Verschleiß zu mindern?

Wir klären Reibungs- und Verschleißmechanismen experimentell und simulatorisch auf und leiten Maßnahmen zur Reibleistungsreduzierung ab.

#### Sie wollen einen Werkstoff in eine bestimmte neue Anwendung bringen oder eine neue Anwendung erschließen?

Wir qualifizieren und bewerten Werkstoffe und Bauteile für Mobilität, Energie, Maschinen- und Anlagenbau.

#### Sie möchten die Leistungsgrenzen oder die Lebensdauer Ihres Bauteils absichern oder verlängern?

Wir erarbeiten Konzepte zur Vorhersage der Lebensdauer und zur Verbesserung der Zuverlässigkeit.

#### Sie haben einen Schadensfall oder ein unerwünschtes Bauteilverhalten und möchten diese aufgeklärt haben und nachhaltig vermeiden?

Wir führen Schadens- und Mikrostrukturanalysen durch und erarbeiten Maßnahmen zur Einsatzsicherung von Werkstoffen und Bauteilen.



#### Menschen mit Expertise

Die Menschen, die im Fraunhofer IWM arbeiten, haben sich der anwendungsorientierten Forschung verschrieben. Sie sind Überzeugungstäter, die ihr Wissen zu Mechanismen in Werkstoffen, Bauteilen und Prozessen für nachgefragte FuE-Leistungen bei ihren Kunden nutzen möchten. Indem wir die Kompetenzen von rund 250 wissenschaftlichen und technischen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern mit vielfältigen fachlichen Hintergründen zusammenbringen, können wir innovative Lösungsansätze erarbeiten und so Wettbewerbsvorteile für uns und unsere Kunden erschließen.

#### Hervorragendes Know-how

Um innovative, umsetzbare Lösungen anbieten zu können, durchdringen wir werkstoffmechanische Aufgabenstellungen grundlegend mit fundierter wissenschaftlicher Tiefe und qualifizierter technischer Expertise. Dabei orientieren wir uns an den jeweils neuesten Erkenntnissen aus Materialwissenschaften und Werkstofftechnik. Bei über die Werkstoffmechanik hinausgehenden umfangreichen Projekten greifen wir auf Forschungspartner aus unserem Netzwerk zurück.

#### Vorsprung im Wettbewerb

Die Forschungsaktivität des Fraunhofer IWM geht über die reine Auftragsabwicklung hinaus. Öffentlich gefördert oder grundfinanziert betreiben wir auftragsunabhängig Vorlaufforschung in Technologiebereichen mit hoher Zukunftsrelevanz und in strategisch wichtigen Kompetenzfeldern. Die hierbei erworbenen Kenntnisse bringt das Fraunhofer IWM in die Kooperation mit der Wirtschaft ein, beispielsweise um neue Anwendungsfelder oder neue Märkte zu erschließen.

#### Wissenschaftliche Exzellenz

Ausgezeichnete Forschung ist die Grundlage für innovative Lösungen. Das Fraunhofer IWM übersetzt Know-how zu Mechanismen in Werkstoffen, Bauteilen und Prozessen projektspezifisch in FuE-Leistungen für industrielle und öffentliche Auftraggeber. Das Wissen dafür basiert auf der hervorragenden wissenschaftlichen Arbeit seiner Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter. Damit ist das Fraunhofer IWM nicht nur attraktiver Problemlöser für praxisnahe Fragestellungen, sondern auch exzellenter Forschungs- und Entwicklungspartner für Zukunftsthemen. Von seiner wissenschaftlichen Exzellenz profitieren kleine und mittelständische Unternehmen ebenso wie Forschungsinstitutionen oder öffentliche Auftraggeber.

#### Zertifizierte Qualität

Projekte sind unser Geschäft. Viele hundert erfolgreiche Forschungs- und Entwicklungsprojekte jährlich sowie ein zertifiziertes Qualitätsmanagementsystem zeugen für eine an die Rahmenbedingungen der Industrie angepasste zuverlässige Projektbearbeitung. Die durch Umfragen bestätigte hohe Kundenzufriedenheit zeigt, dass das Fraunhofer IWM einen ausgezeichneten Ruf genießt.

#### Kernkompetenzen

- Werkstoff- und Bauteilcharakterisierung (mehr auf Seite 60)
- Werkstoffmodellierung und Simulation (mehr auf Seite 62)
- Tribologie und Oberflächendesign (mehr auf Seite 64)

## ORGANISATION UND ANSPRECHPARTNER 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
Material design	Prof. Dr. Christian Elsässer	+49 761 5142-286	christian.elsaesser@iwm.fraunhofer.de
Funktionale Schichtmaterialien	Dr. Frank Burmeister	+49 761 5142-244	frank.burmeister@iwm.fraunhofer.de
Meso- und Mikromechanik	Prof. Dr. Chris Eberl	+49 761 5142-495	chris.eberl@iwm.fraunhofer.de
Materialmodellierung	Prof. Dr. Christian Elsässer	+49 761 5142-286	christian.elsaesser@iwm.fraunhofer.de
Fertigungsprozesse	Dr. Dirk Helm	+49 761 5142-158	dirk.helm@iwm.fraunhofer.de
Pulvertechnologie, Fluiddynamik	Dr. Torsten Kraft	+49 761 5142-248	torsten.kraft@iwm.fraunhofer.de
Umformprozesse	Dr. Dirk Helm	+49 761 5142-158	dirk.helm@iwm.fraunhofer.de
Bearbeitungsverfahren, Glasformgebung	Dr. Rainer Kübler	+49 761 5142-213	rainer.kuebler@iwm.fraunhofer.de
Tribologie	Prof. Dr. Matthias Scherge	+49 761 5142-206	matthias.scherge@iwm.fraunhofer.de
Verschleißschutz, 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 Schichtsysteme	Bernhard Blug	+49 761 5142-180	bernhard.blug@iwm.fraunhofer.de
Angewandte Nanotribologie	Prof. Dr. Martin Dienwiebel	+49 721 204327-77	martin.dienwiebel@iwm.fraunhofer.de

Bauteilsicherheit und LeichtbauErmüdungsverhalten, BruchmechanikCrashsicherheit, SchädigungsmechanikCrashdynamikFügeverbindungen	Dr. Michael Luke Dr. Michael Luke Dr. Dong-Zhi Sun Frank Huberth Dr. Silke Sommer	+49 761 5142-338 +49 761 5142-338 +49 761 5142-193 +49 761 5142-472 +49 761 5142-266	michael.luke@iwm.fraunhofer.de michael.luke@iwm.fraunhofer.de dong-zhi.sun@iwm.fraunhofer.de frank.huberth@iwm.fraunhofer.de silke.sommer@iwm.fraunhofer.de				
				Verbundwerkstoffe	Dr. Jörg Hohe	+49 761 5142-340	joerg.hohe@iwm.fraunhofer.de
				Werkstoffbewertung, Lebensdauerkonzepte	Dr. Wulf Pfeiffer	+49 761 5142-166	wulf.pfeiffer@iwm.fraunhofer.de
				Mikrostruktur, Eigenspannungen	Dr. Wulf Pfeiffer	+49 761 5142-166	wulf.pfeiffer@iwm.fraunhofer.de
				Lebensdauerkonzepte, Thermomechanik	Dr. Christoph Schweizer	+49 761 5142-382	christoph.schweizer@iwm.fraunhofer.de
Infrastruktur	Michael Schmid	+49 761 5142-111	michael.schmid@iwm.fraunhofer.de				
Projektadministration, Einkauf	Nina Halaczinsky	+49 761 5142-487	nina.halaczinsky@iwm.fraunhofer.de				
Mechanische Werkstatt	Stefan Frei	+49 761 5142-345	stefan.frei@iwm.fraunhofer.de				
Technische Dienste TD	Roland Guth	+49 761 5142-230	roland.guth@iwm.fraunhofer.de				
Informationstechnik IT	Klaus Merkel	+49 761 5142-217	klaus.merkel@iwm.fraunhofer.de				
Qualitäts- und Besuchermanagement	Elke Schubert	+49 761 5142-124	elke.schubert@iwm.fraunhofer.de				
Personal und Dienstreisen	Kerstin A. Drüsedau	+49 761 5142-140	kerstin.druesedau@iwm.fraunhofer.de				
Leitungsbereich	Prof. Dr. Peter Gumbsch	+49 761 5142-100	peter.gumbsch@iwm.fraunhofer.de				
Unternehmensstrategie und Kommunikation	Thomas Götz	+49 761 5142-153	thomas.goetz@iwm.fraunhofer.de				
Stab IL	Prof. Dr. Peter Gumbsch	+49 761 5142-100	peter.gumbsch@iwm.fraunhofer.de				
Arbeitssicherheit	Dr. Rainer Kübler	+49 761 5142-213	rainer.kuebler@iwm.fraunhofer.de				

## DAS INSTITUT IN ZAHLEN

#### **Finanzielle Entwicklung**

Der Haushalt des Fraunhofer IWM setzt sich zusammen aus einem Betriebshaushalt und einem Investitionshaushalt. Der Betriebshaushalt des Fraunhofer IWM ist leicht gesunken gegenüber dem Vorjahr und beläuft sich auf 19,3 Millionen Euro. 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 2016 liegt bei 44 Prozent. Ohne Baumaßnahmen beträgt der Investitionshaushalt 2016 1,9 Millionen Euro.





#### Personalentwicklung

Ende 2016 sind am Fraunhofer IWM insgesamt 293 Personen beschäftigt, davon zählen 230 Mitarbeitende zum Stammpersonal und 63 Mitarbeitende als Hilfspersonal (Hilfskräfte, Praktika, Abschlussarbeiten).



3 Personal am Fraunhofer IWM Ende 2016 nach Bereichen.

Das Stammpersonal setzt sich zusammen aus 122 wissenschaftlichen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern, 42 technischen Beschäftigten, 67 Angestellten in Verwaltung und Institutsleitungs-Stab sowie 9 Auszubildenden.





4 Personal am Fraunhofer IWM Ende 2016.

5 Personalentwicklung der Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler.

#### Wissenschaftlicher Output

Die Fraunhofer-Institute betreiben anwendungsorientierte Forschung zum unmittelbaren Nutzen für die Wirtschaft und zum Vorteil der Gesellschaft. Dabei ist neben dem wirtschaftlichen Erfolg die wissenschaftliche Exzellenz ein notwendiges Kriterium, um die Mission eines Instituts erfolgreich zu erfüllen. Die Fraunhofer-Gesellschaft richtet ihr Augenmerk hierbei auf drei Aspekte:

- die Qualifikation von wissenschaftlichem Nachwuchs,
- den wissenschaftlichen Output in Patenten und Veröffentlichungen,
- die wissenschaftliche Anerkennung und Vernetzung.



1 Publikationsleistung des Fraunhofer IWM.



2 Akademische Qualifizierung am Fraunhofer IWM.



3 Anzahl Zitationen von Veröffentlichungen des Fraunhofer IWM.

## **KURATORIUM**

#### Das Kuratorium des Fraunhofer IWM 2016

Dem Kuratorium gehören Persönlichkeiten aus Politik, Wirtschaft und Wissenschaft an, die dem Fraunhofer IWM fachlich nahestehen. Gemeinsam mit dem Vorstand der Fraunhofer-Gesellschaft beraten und unterstützen sie das Institut mit ihrer Expertise bei strategischen Themen, Weichenstellungen im Institut und der Entwicklung von Zukunftsperspektiven.

- Dr. Jürgen Kirschner, Kuratoriumsvorsitzender, Geschäftsleiter Zentralbereich Forschung und Vorausentwicklung (CR/EA), Robert Bosch GmbH, Renningen
- Prof. Dr. Lorenz Sigl, Stellvertretender
  Kuratoriumsvorsitzender, Head of Innovation Services,
  Plansee SE, Reutte, Österreich
- Dr. Markus Baur, BMW Group, München
- Dr. Jörg Eßlinger, Director Materials Engineering (TEW), MTU Aero Engines AG, München
- Dr. Thomas Fink, Vice President, iwis motorsysteme GmbH & Co.KG, München
- Dipl.-Ing. Siegfried Glaser, Gesellschafter und Geschäftsführer, Glaser FMB GmbH & Co. KG, Beverungen
- Dr. Markus Hermle, Senior Manager-CAE, Durability, Safety Interior, Mercedes-Benz Cars Development X271-RD/KSB, Daimler AG, Sindelfingen
- Bernhard Hötger, Geschäftsführer, HEGLA GmbH & Co. KG, Beverungen
- Prof. Dr. Oliver Kraft, Vizepräsident für Forschung, Karlsruher Institut für Technologie KIT, Karlsruhe
- Dr. Roland Langfeld, Vice President, Corporate Research & Technology Deveopment, Schott AG, Mainz
- Prof. Dr. Rolf Mülhaupt, Geschäftsführender Direktor des Freiburger Materialforschungszentrums, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

- Dr. Heike Riel, Manager
  Materials Integration & Nanoscale Devices,
  IBM Research, Zürich, Schweiz
- Dr. Alexander Sagel, Geschäftsführung, KS Kolbenschmidt GmbH, Neckarsulm
- MinRat Dr. Joachim Wekerle, Leiter des Referats 75
  »Gesundheitsindustrie, Chemie und Werkstoffe«, Ministerium für Wirtschaft, Arbeit und Wohnungsbau, Baden-Württemberg, Stuttgart
- Dipl.-Ing. Jens Wemhöner, Geschäftsführer, Cerobear GmbH, Herzogenrath



Probeneinführung zur thermischen Desorptions-Spektroskopie im Wasserstofflabor.

#### Investitionen in Zukunftsthemen

#### Neubau für das MikroTribologie Centrum in Karlsruhe

Der Neubau des Fraunhofer IWM MikroTribologie Centrums  $\mu$ TC in Karlsruhe Süd wurde fertiggestellt und kann nun bezogen werden. Bund und Land investierten dafür insgesamt 6,55 Millionen Euro zu je gleichen Teilen. Die Mittel hatte das Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg in einem Wettbewerb zur Etablierung materialwissenschaftlicher Forschungsbauten in Baden-Württemberg ausgelobt. Das Gebäude des  $\mu$ TC stellt rund 600 Quadratmeter Bürofläche und 400 Quadratmeter für Laborräume zur Verfügung.

Zeitgleich entstand in unmittelbarer Nachbarschaft das Materialwissenschaftliche Zentrum für Energiesysteme MZE des Karlsruher Instituts für Technologie KIT. Mit dem benachbarten MZE wird das µTC in verschiedenen Forschungsbereichen eng zusammenarbeiten, insbesondere bei der Modellierung und Simulation von mikrotribologischen Fragestellungen. Die Verminderung von Reibung und Verschleiß ist ein volkswirtschaftlich und industriell hoch relevantes Thema. Das Fraunhofer IWM erarbeitet intelligente Lösungen, die in diesem Bereich erhebliche Kosten einsparen können.

#### Labor »Wasserstoffversprödung« ausgebaut

Das Fraunhofer IWM hat seine Möglichkeiten, die gewünschten und unerwünschten Wirkungen von Wasserstoff in Metallen und anderen Werkstoffen zu charakterisieren, weiter ausgebaut. Das Landesministerium für Finanzen und Wirtschaft förderte mit 550 000 Euro unter anderem den Aufbau einer Prüfmaschine mit integriertem Wasserstoffautoklaven. Die neuen Anlagen ermöglichen Festigkeitsuntersuchungen auch unter extremen Wasserstoffdrücken und werden erlauben, die sogenannte Wasserstoffversprödung der Metalle besser zu verstehen. Im Rahmen eines Projekts des Programms Zwanzig20 förderte das Bundesforschungsministerium das Fraunhofer IWM mit einer Million Euro, um den Einfluss von Wasserstoff auf die Sicherheit von Erdgasrohrleitungen zu erforschen, wenn diese wasserstoffhaltige Gase führen.

Um den Energieträger Wasserstoff für den Verkehrs- und Energiebereich zukunftsfähig zu machen, muss die Wasserstoffversprödung beherrschbar sein, denn Wasserstoff reduziert die Duktilität und Lebensdauer vieler metallischer Werkstoffe. Die Entwicklung neuer Technologien zur Herstellung, Verteilung und zum Einsatz von Wasserstoff als Energielieferant erfordert die Qualifizierung vorhandener und neu zu entwickelnder Werkstoffe.

Die experimentellen Einrichtungen zur gezielten Beladung von Werkstoffen mit Wasserstoff bei gleichzeitiger Belastung, zur Bestimmung des Wasserstoffgehalts und des Diffusionsverhaltens, zur Charakterisierung der Mikrostruktur und zur Ermittlung festigkeitsrelevanter Eigenschaften sind am Fraunhofer IWM vorhanden. Mit seiner langjährigen Erfahrung in der Aufklärung der Mechanismen der Wasserstoffversprödung sowie in der Simulation der zugrunde liegenden Diffusionsvorgänge unterstützt das Fraunhofer IWM seine Auftraggeber in der Auswahl, Optimierung und Qualifizierung von Werkstoffen und Fertigungsverfahren. Zudem liefert es Abschätzungen der Lebensdauer und, im Schadensfall, die Identifikation der Ursachen des Bauteilversagens.

## **MATERIALS DATA SPACE**

#### Digitalisierung in werkstoffintensiven Wertschöpfungsketten

Mit zunehmender Digitalisierung von Industrieprozessen, die unter dem Oberbegriff Industrie 4.0 zusammengefasst sind, werden Daten zunehmend zum Rohstoff für Wertschöpfung und Innovation. Die vernetzte Fertigung eröffnet neue Möglichkeiten für Produktivitätssteigerungen. Digitale Engineering-Prozesse führen zu neuen Dienstleistungen und Geschäftsmodellen im gesamten Produktlebenszyklus.

Digitalisierung durchdringt dabei auch die Materialentwicklung, Materialherstellung und Materialverarbeitung. Aus einem »Mehr« an Wissen über Werkstoffe, ihre Eigenschaften und ihr Verhalten werden neue Wettbewerbsvorteile entstehen. Die Grenzen zwischen Materialforschung und Informatik, Datenbankentwicklung, Herstellung von Geräten und digitalen Devices werden verschwimmen.

Der Schlüssel zum Erfolg wird ein multidisziplinärer Ansatz sein, in dem Bausteine anwendungsspezifisch zusammengeführt werden, die in den Teildisziplinen der Materialanalytik, Werkstoffsimulation, Prozesssimulation oder Sensorik teilweise schon vorhanden sind.

Möglich wird die Implementierung von Industrie 4.0 in der Werkstoffentwicklung und -herstellung sowie in der werkstoffintensiven Fertigung dadurch, dass materialrelevante Entwicklungs- und Herstellungsprozesse durchgängig mit Materialwissen durchdrungen werden und die materialwissenschaftliche Bewertung als Zielgröße Eingang in die Produktion findet. Die durchgängige Verfügbarkeit von Informationen zu Werkstoffeigenschaften, die sich von der Herstellung bis zum Lebensende eines Bauteils verändern, schafft völlig neue Gestaltungsmöglichkeiten bei der technischen Performance oder bei der Energieund Ressourceneffizienz von Bauteilen und Systemen. Bislang unerschlossene Potenziale in Werkstoffen können für mehr Zuverlässigkeit, Funktionalität und Produktivität genutzt werden.

#### Der Nutzen

Die Durchgängigkeit von Materialdatenflüssen in Wertschöpfungsketten erlaubt, die Zieleigenschaften und -funktionen von Werkstoffen effektiver in die dazu erforderliche Materialmikrostruktur zu übersetzen und diese wirtschaftlicher zu realisieren.

Indem Fertigungsschritte und deren Auswirkungen auf das Verhalten von Bauteilen im Einsatz digital verknüpft werden, lassen sich Bauteilfunktionen und die Bauteillebensdauer verbessern.

Die Digitalisierung von Materialien erzeugt einen zusätzlichen Mehrwert, indem nicht nur der Werkstoff selbst, sondern auch seine digitale Repräsentation (beispielsweise Werkstoffzustand, -eigenschaften und -modelle) Gegenstand von Geschäftsmodellen wird.



Der Fraunhofer-Verbund MATERIALS, in dem das Fraunhofer IWM organisiert ist, hat 2016 die Initiative Materials Data Space ins Leben gerufen: Auf einer Plattform sollen digitale Daten zu Werkstoffen entlang des gesamten Bauteillebenszyklus bereitgestellt werden. Das Ziel ist, bei jedem Schritt der Wertschöpfungskette in Echtzeit Materialdaten zu erfassen, um eine ideale Grundlage zur Verbesserung der Materialeigenschaften nach Kriterien wie Funktionalität und Effizienz zu erhalten. Die informationstechnische Basis dafür ist der Fraunhofer Industrial Data Space, der sowohl bei der Industrie als auch beim BMBF und BMWi auf großes Interesse stößt.

Auch in der Deutschen Forschungsgemeinschaft DFG ist das Fraunhofer IWM an einer Initiative zur Standardisierung von Werkstoffdaten aktiv beteiligt. Zudem ist das Fraunhofer IWM in einem neu gegründeten Fachausschuss des VDI federführend aktiv, der sich mit der digitalen Transformation der Werkstofftechnik befasst. Das Fraunhofer IWM konnte EU-Projekte gewinnen, die zentrale Kompetenzbausteine der Digitalisierung zum Gegenstand haben, wie die Integration von Materialmodellen und -daten zur Entscheidungsunterstützung bei der Materialund Produktentwicklung in Unternehmen oder der Entwicklung eines Marktplatzes für Materialdaten.

Aus der Notwendigkeit, Werkstoffe in digitaler Form in das Gesamtkonzept von Industrie 4.0 zu integrieren und der Industrie die Nutzung der entsprechenden Chancen zu eröffnen, ergeben sich Forschungs- und Entwicklungsbedarfe auf verschiedenen Ebenen. Die Simulation des Material-, Werkstoff- und Bauteilverhaltens ist etablierter Forschungsgegenstand am Fraunhofer IWM. Auch um die Potenziale bei der Durchgängigkeit des Engineering, der Vorhersagegenauigkeit oder dem Lebenszyklusmanagement zu heben, arbeiten wir an vielen weiteren Themen.

#### Digitale Dienstleistungen und Geschäftsmodelle

- Virtuelle Produktentwicklung, virtuelles Testen
- Digitalisierung von Werkstoffen
- Optimierung von Fertigungsketten
- Lebenszyklusmanagement

#### Verarbeiten von Daten in Software-Plattformen

- Prozesskettensimulation
- Maschinelles Lernen
- Hochdurchsatz-Screening

## Geschäftsfeld MATERIALDESIGN





#### FUNKTIONALE SCHICHTMATERIALIEN

Für industrielle Anwendungen in Optik und Mikrosystemtechnik entwickeln wir neue Schichtmaterialien. Um Werkzeuge und Komponenten zu schützen, erforschen wir moderne Schichtmaterialien mit hoher Schutzwirkung gegen korrosive Spezies.

Dr. Frank Burmeister | frank.burmeister@iwm.fraunhofer.de

## MESO- UND MIKROMECHANIK

Wir untersuchen mechanische Eigenschaften und Zuverlässigkeit kleinvolumiger Proben. Zudem entwickeln wir die experimentelle Mechanik zur Untersuchung mechanischer Materialeigenschaften in kleinen Dimensionen kontinuierlich weiter.

Prof. Dr. Chris Eberl | chris.eberl@iwm.fraunhofer.de

#### MATERIALMODELLIERUNG

Mit physikalischen Modellen und numerischen Methoden simulieren wir das Verhalten von Werkstoffen, sagen Struktur-Eigenschaft-Prozess-Beziehungen voraus und leisten Beiträge zur Funktionsoptimierung und Materialsubstitution.

Prof. Dr. Christian Elsässer | christian.elsaesser@iwm.fraunhofer.de





#### GESCHÄFTSFELDLEITER

Prof. Dr. Christian Elsässer Telefon +49 761 5142-286 christian.elsaesser@iwm.fraunhofer.de

## FOKUS

Mit experimentellen und simulatorischen Methoden, basierend auf der Werkstoffmechanik, Beschichtungstechnologie und Festkörperphysik, klären wir Werkstoffverhalten auf und sagen Materialeigenschaften vorher. Dadurch können wir Materialstrukturen für gewünschte Funktionen gestalten. Wir decken die Einflüsse von Kristalldefekt- und Mikrostruktureigenschaften auf das Materialverhalten »im Großen« auf. Diese Erkenntnisse nutzen wir, um in gezielter Weise Werkstoffe ressourcen- und energieeffizient zu kombinieren und dadurch technische Systeme nachhaltig zu verbessern.

Unsere drei Gruppen unterstützen und ergänzen sich mit ihren recht unterschiedlichen Expertisen: Wir stellen Materialsysteme mit physikalischen und chemischen Beschichtungsverfahren her, charakterisieren sie mit mikromechanischen Messtechniken und simulieren sie mit Methoden für Multiskalen-Material-Modellierung und High-Throughput-Screening.

#### **BEMERKENSWERTES AUS 2016**

Im vergangenen Jahr haben wir erfolgreich Projekte zum Materialdesign von Metallen, Karbiden und Nitriden bearbeitet. Wir konnten mehrkomponentige Schichten mit anisotropen Kristallstrukturen gezielt abscheiden, mikromechanische Eigenschaften dünner Schichten und innerer Grenzflächen charakterisieren sowie die Thermodynamik und Kinetik von Fremdstoffen in Werkstoffen modellieren. Ergebnisse dazu sind auf den folgenden Seiten zu finden.

Darüber hinaus entwickelten wir für die Verpackungsindustrie eine Siegelschiene mit integriertem Dünnschicht-Temperatursensor, die eine Inline-Überwachung des Verpackungsprozesses erlaubt: Statt Stichproben kann jede einzelne Verpackung überprüft werden.

Uns ist es gelungen, mit einem selbst entwickelten High-Throughput-Screening-Simulationsverfahren vielversprechende Materialien für neue Dauermagnete zu identifizieren, die gute hartmagnetische Eigenschaften aufweisen und in denen Seltene Erden durch Elemente ersetzt sind, die günstiger und zuverlässiger verfügbar sind.

Wir arbeiteten weiter an der Herstellung künstlicher Meta-Materialien mit einstellbaren Eigenschaften. Mit mikromechanischen Experimenten bearbeiteten wir unter anderem Problemstellungen aus anderen Geschäftsfeldern wie Zugversuche an Proben langfaserverstärkter Thermoplaste LFT oder zyklische Versuche an sehr kleinen Materialproben aus Schweißverbindungen, um lokale mechanische Eigenschaften in Gefügen zu bestimmen. »Durch wissensbasiertes und zielorientiertes Materialdesign schlagen wir unseren Kunden neuartige Substitutionsmaterialien mit gewünschten Funktionseigenschaften vor, mit denen sie ihre Produkte ressourceneffizienter und versorgungssicherer herstellen können.«

#### Gruppe MATERIALMODELLIERUNG

Prof. Dr. Christian Elsässer | Telefon +49 761 5142-286 | christian.elsaesser@iwm.fraunhofer.de

## NITRIDAUSSCHEIDUNGEN UND WASSERSTOFFATOME IN STÄHLEN BEHERRSCHEN

Um zukünftig noch energie- und ressourceneffizientere Produkte an den Markt bringen zu können, sind Unternehmen auf neue Konstruktionswerkstoffe mit ausreichenden Stabilitätsreserven hinsichtlich steigender thermo- und chemomechanischer Belastungen angewiesen. Wir stellen uns die materialwissenschaftliche Aufgabe, durch Computersimulationen mit quantentheoretischen Berechnungsmethoden (Dichtefunktionaltheorie) die Wanderung von Fremdatomen und die Bildung von Fremdphasen in Stahlwerkstoffen sowie deren Einflüsse auf die Werkstoffeigenschaften aufzuklären. Damit unterstützen wir unsere Kunden, Werkstoffe hinsichtlich gewünschter Eigenschaften zielgerichtet zu optimieren und Vorhersagen für alternative Materialsysteme mit guten Zieleigenschaften zu machen.

#### Z-Phasen und kriechfeste Stähle für Hochtemperatur-Kraftwerke

Um die Energieeffizienz konventioneller Stromkraftwerke zu maximieren und den Verbrauch an fossilen Brennstoffen zu minimieren, bedarf es einer möglichst hohen Dampftemperatur. Dies stellt sehr hohe Anforderungen an die für Rohrleitungen verwendeten Stähle hinsichtlich ihrer Langzeitstabilität und Korrosionsfestigkeit. Um die Betriebstemperatur von bisher 610 °C auf zukünftig 670 °C steigern zu können, sind ferritisch-martensitische Stähle mit einem Chromgehalt von etwa 12 Prozent vorgesehen, deren Kriechfestigkeit auf kleinen, in der Eisenmatrix fein verteilten Metallnitridpartikeln beruht. Ein bisher ungelöstes Problem dabei sind große Ausscheidungsteilchen der sogenannten Z-Phasen, die sich im Langzeitbetrieb bei hohen Temperaturen aus den Metallnitridpartikeln und Chrom im Stahlgefüge bilden. Diese setzen die Kriechfestigkeit des Stahls herab und führen schließlich zum Versagen sicherheitsrelevanter Bauteile.



1 Bildungsenergie unterschiedlicher Folgen aus Vanadiumnitridund Chrom-Schichten (oben), die Bildungsschritte der Z-Phasen aufzeigen (unten).





Ein grundlegendes Verständnis der atomaren Prozesse der Z-Phasen-Entstehung und eine detaillierte Kenntnis der strukturellen, thermodynamischen und kinetischen Eigenschaften aller daran beteiligten Elemente und Phasen sind notwendig, um durch Anpassen der Legierungszusammensetzung und Wärmebehandlungsmethoden die Mikrostruktur gezielt beeinflussen zu können. Dies ermöglicht, die Z-Phasen ebenfalls als kleine, im Gefüge fein verteilte Partikel zu nutzen, um den neuentwickelten Stahl bei höheren Temperaturen nicht nur korrosionsfester, sondern auch kriechfester zu machen. Wir untersuchen die Mechanismen der Z-Phasen-Bildung auf atomarer Skala mithilfe der Simulationsmethoden der Dichtefunktionaltheorie. Strukturmodelle der Ausgangs-, Zwischen- und Endphasen (Abbildung oben rechts) werden benutzt, um die Diffusionsprozesse bei der Z-Phasen-Bildung zu modellieren und zu analysieren.

Unsere Resultate unterstützen ein Z-Phasen-Ausscheidungsszenario, in welchem zunächst einzelne Cr-Atome über Metallleerstellen aus der Eisenmatrix in die Nitridpartikel hinein diffundieren und darin kleine schichtförmige Cluster bilden. Diese wirken als Keime für das Wachstum ausgedehnter Chromschichten, welche die Umwandlung der Metallnitridpartikel in Z-Phasen-Partikel über Zwischenschritte unterschiedlicher Schichtfolgen vorantreiben (Abbildung 1).

Unsere im Rahmen des EU-Projekts »Z-ultra« entwickelten Vorstellungen und erzielten Ergebnisse fließen in die industrielle Entwicklung eines neuartigen, Z-Phasen-gefestigten Stahls mit 12 Prozent Chromgehalt ein, der es ermöglichen soll, Hochtemperatur-Kraftwerke zukünftig sowohl energie- und ressourceneffizienter als auch hochtemperaturstabiler zu betreiben (www.z-ultra.eu). Bildung der Z-Phasen-Ausscheidungen: Einzelne Cr-Atome aus der Fe-Matrix diffundieren in Metallnitridpartikel hinein (links), bilden flache Cluster (Mitte) und diese wachsen zu periodischen Schichten (rechts).

#### Wasserstoff und bruchfeste Stähle für Automobile

Um moderne, effiziente Automobile mit geringerem Gewicht zu konstruieren, werden für viele Bauteile hochfeste Stähle verwendet, die mit deutlich geringeren Blechdicken mechanisch genauso stabil bleiben wie konventionelle Stahlwerkstoffe. Sowohl bei der Herstellung der dünnen, hochfesten Stahlbleche als auch im Einsatz des Fahrzeugs ergibt sich das Problem, dass Wasserstoff aus der Umgebung durch die Oberfläche in das Metall eindringen und im Innern recht schnell diffundieren kann. Dieser atomare Wasserstoff bewirkt hohe lokale mechanische Spannungen und führt damit zu verschiedenartigen Schädigungsprozessen, die für hochfeste Stähle wegen der geringeren Blechdicken viel kritischer als für konventionelle Stähle werden können. Im Rahmen des EU-Projekts »MultiHy« (www.multihy.eu) haben wir die Diffusion und Reaktion von Wasserstoff in Eisen und Nickel sowie an Korngrenzen und Ausscheidungen auf mikroskopischer Skala untersucht. Abbildung 2 zeigt einen Vergleich der Diffusion von Wasserstoff in kubisch-raumzentriertem Eisen (Ferrit) und kubisch-flächenzentriertem Nickel (Austenit): Für H in Ni ist eine klassische Beschreibung der Diffusion als thermisch aktivierter Prozess eine gute Näherung. Für H in Fe dagegen ist der Diffusionsprozess komplizierter und eine Berücksichtigung guantenmechanischer Effekte wichtig. Mit unseren Materialmodellen und Simulationsmethoden können wir Firmen helfen, mechanische Eigenschaften von Stählen auch hinsichtlich der Empfindlichkeit gegenüber Wasserstoff zu verbessern sowie neuartige Werkstoffe zu entwickeln.

Dr. Daniel Urban, Prof. Dr. Christian Elsässer

## Gruppe FUNKTIONALE SCHICHTMATERIALIEN

Dr. Frank Burmeister | Telefon +49 761 5142-244 | frank.burmeister@iwm.fraunhofer.de

## ERFORSCHUNG MAX-PHASEN-BASIERTER SCHICHTMATERIALIEN FÜR KORROSIONSSTABILE SOFC

Festkörperoxid-Brennstoffzellen (Solid-Oxide Fuel-Cell, SOFC) werden bei sehr hohen Temperaturen (bis zu 900 °C) betrieben, benötigen zur Stromerzeugung nur Wasser- und Sauerstoff und bieten durch ihre Umweltfreundlichkeit ein großes Zukunftspotenzial. In einer SOFC werden Anode und Kathode mit sogenannten Interkonnektoren, die meist aus Chrom-legierten Stählen bestehen, leitfähig miteinander verbunden. Im Betrieb kommt es jedoch zum Abdampfen von Chromhydroxiden und zur Ablagerung derselben an der Kathode. Dies führt zu einer Chromvergiftung der Kathode und zur Degradation und Leistungsminderung der SOFC.

Gegenstand unseres Forschungsprojekts ist zu untersuchen, ob sich ausgewählte MAX-Phasen-Materialien zur Beschichtung der Interkonnektoren und zum Schutz der Kathode gegen Chromvergiftung eignen. MAX-Phasen lassen sich als nanolaminare Materialien mit der chemischen Komposition  $Mn_{+1}$  AXn mit n = 1, 2 oder 3 beschreiben. Hierbei ist M ein Übergangsmetallelement, A ein Element aus den Hauptgruppen IIIA oder IVA und X Kohlenstoff und/oder Stickstoff. Aufgrund ihres Aufbaus besitzen MAX-Phasen gute thermische und elektrische Leitfähigkeiten sowie eine hohe Oxidationsbeständigkeit und Schadenstoleranz. Damit verfügen sie über die wesentlichen Voraussetzungen, um den extrem hohen Belastungen, denen die Interkonnektoren im Betrieb ausgesetzt sind, standzuhalten.

#### **Gezielte Auswahl von MAX-Phasen**

Um den Umfang experimenteller Untersuchungen im Vorfeld auf geeignete Materialkombinationen zu begrenzen, treffen wir aus der großen Zahl möglicher MAX-Phasen mithilfe von High-Throughput-Screening-Simulationen eine Vorauswahl. Für die Materialien [Ti,V]x [Si,Al]x [C,N] werden Ab-initio-Simulationen durchgeführt, um die Defektbildungsenergien und Diffusionseigenschaften von Sauerstoff-, Wasserstoff- und Chrom-Fremdatomen in MAX-Phasen zu bestimmen. Damit wurde bereits Ti2AIN als Material mit potentiell geeigneten Barriereeigenschaften für die Wasserstoffdiffusion identifiziert. Weiterhin ist es gelungen, das Material in einem PVD-Prozess zu synthetisieren und für Diffusionsmessungen auf für Interkonnektoren gängigen Stählen abzuscheiden.

Durch diese einzigartige Kombination von Simulation und Experiment werden Ergebnisse schneller abgeglichen, Diffusionsvorgänge in nanolaminaren Schichtmaterialien besser verstanden und neue Materialien zügig und zielgerichtet entwickelt. Neben der Beschichtung von Interkonnektoren sind darüber hinaus vielfältige Anwendungen im Bereich Hochtemperatur-Korrosionsschutz für MAX-Phasen-Schichtmaterialien vorstellbar.

Lukas Gröner, Dr. Francesco Colonna



1 Schematischer Aufbau und Funktionsweise einer SOFC (links); Diffusion von H in Ti<sub>2</sub>AIN: Die Pfeile markieren die schnelle Diffusion zwischen Lagen aus Ti-Atomen (rote Kugeln) und Al-Atomen (blaue Kugeln); graue Kugeln: N-Atome.

#### Gruppe MESO- UND MIKROMECHANIK

Prof. Dr. Chris Eberl | Telefon +49 761 5142-495 | chris.eberl@iwm.fraunhofer.de

## QUANTITATIVE BESTIMMUNG DER HAFTUNG DÜNNER SCHICHTEN PER MIKRO-VIERPUNKTBIEGUNG

Funktionale Schichten sind in modernen Produkten unerlässlich: Beispielsweise können Flugzeugturbinen durch thermische Schutzschichten bei immer höheren Temperaturen effizienter betrieben werden. Auch in Elektronikkomponenten, zum Beispiel für Automobile oder Mobiltelefone, werden Schlüsselfunktionen wie Touchscreens, elektrische Verbindungen, mechanischer Schutz und optische Eigenschaften unter Nutzung zahlloser Schichtsysteme umgesetzt. Diese Schichten sind häufig nur einige Nanometer bis wenige hundert Mikrometer dick, ihr Versagen kann jedoch zum Ausfall des gesamten Produkts führen. Ein typisches Versagensbild ist die Schichtablösung. Sowohl für die Entwicklung der Schichten als auch für die Überwachung der Produktion sind daher qualitative und quantitative Methoden zur Messung der Schichthaftung von essenzieller Bedeutung.

Wir untersuchten beispielsweise die Haftung von Chrom und Titan auf Silizium. Mittels Scratchtest und Nanoindentierung ermittelten wir qualitative Haftungsunterschiede in verschiedenen Waverbereichen. Eine quantitative Aussage zu den Haftungsunterschieden konnten wir mittels Mikro-Vierpunktbiegung treffen.

#### **Probenherstellung und -belastung**

Aus 100 bis 600 µm dicken Siliziumsubstraten mit Metallbeschichtungen von 100 bis 2 000 nm Dicke präparierten wir Biegebalken mit einer Kantenlänge von 5 mal 15 mm. Auf die Seite mit der Metallisierung wurde ein zweites Substrat gleicher Abmessung geklebt und eine Kerbe als definierter Anriss eingebracht.

Wird die Probe wie in Abbildung 1 oben links belastet, läuft der Anriss bis zur Grenzfläche zwischen Substrat und Schicht. Sobald der Riss die schwächste Grenzfläche erreicht hat, ändert er seine Richtung und läuft entlang dieser weiter (Abbildung 1). Die hierzu benötigte Kraft kann verwendet werden, um die Risszähigkeit der Grenzfläche zu bestimmen, die als Maß für die Haftung der Schicht dient.

Der Vorteil dieser Methode: Der Anteil einer plastischen Verformung an der Risszähigkeit ist im Vergleich zu anderen Methoden sehr gering. Zudem wird die Risszähigkeit über die Tiefe der Probe gemittelt, wodurch das Ergebnis nicht von sehr lokalen Effekten dominiert wird und auch die Haftung von Schichten auf rauen Oberflächen gemessen werden kann.

Dr. Tobias Kennerknecht, Felix Schiebel



1 Schematische Seitenansicht auf eine Vierpunkt-Biegeprobe (oben links): Der Anriss lief durch das Siliziumsubstrat (weiß) zur Grenzfläche und führte ab dort zur Ablösung der Metallschicht (blau); Lastverlauf bei konstant zunehmendem Verfahrweg (Grafik).

## Geschäftsfeld FERTIGUNGSPROZESSE







## GRUPPEN

#### PULVERTECHNOLOGIE, FLUIDDYNAMIK

Wir simulieren und optimieren pulvertechnologische Prozesse und fluidische Systeme mit dem Ziel einer effizienten Fertigung. Damit verbessern wir Produkte und Prozesse, verkürzen Entwicklungszeiten und helfen unseren Kunden, Kosten zu sparen.

Dr. Torsten Kraft | torsten.kraft@iwm.fraunhofer.de

#### UMFORMPROZESSE

Wir nutzen, entwickeln und erweitern Simulationsmethoden zur effizienten Auslegung von Umformprozessen und wenden sie auf industrielle Prozesse an. Wir bestimmen die Werkstoff- und Prozessparameter mittels Experimenten sowie virtuell durch den Einsatz von Werkstoffmodellen.

Dr. Dirk Helm | dirk.helm@iwm.fraunhofer.de

#### **BEARBEITUNGSVERFAHREN, GLASFORMGEBUNG**

Schwerpunkte sind Bearbeitungs- und Trennverfahren für Glas, Keramik und Silizium sowie Löttechniken für Vakuumisolierverglasungen. Durch bruchmechanische Methoden entwickeln wir Lösungen zur Einsatzsicherung und Schadensvermeidung.

Dr. Rainer Kübler | rainer.kuebler@iwm.fraunhofer.de

#### GESCHÄFTSFELDLEITER

Dr. Dirk Helm Telefon +49 761 5142-158 dirk.helm@iwm.fraunhofer.de



## FOKUS

Mit maßgeschneiderten Modellen und Simulationstechniken sowie fundierten Prozessanalysen tragen wir zur Gestaltung von effizienten, sicheren Fertigungsprozessen bei. Unsere Leistungen beinhalten Untersuchungen zum Verhalten von Werkstoffen in der Fertigung sowie die Analyse und technologische Entwicklung von Fertigungsprozessen zur Herstellung von Halbzeugen und Bauteilen mit funktionalen Eigenschaften. Im Vordergrund stehen pulvertechnologische Prozesse inklusive komplexer partikelbasierter Fluidsysteme bis hin zur Mikrofluidik, das Umformen und Bearbeiten von duktilen Werkstoffen sowie Bearbeitungsverfahren für spröde Werkstoffe und die Glasformgebung.

#### **BEMERKENSWERTES AUS 2016**

Einer unserer Schwerpunkte war die Verbesserung von Simulationsmethoden für additive Fertigungsprozesse. Auch die Prozess- und Bauteilsimulation von Steckkontakten und Crimp-Verbindungen haben wir vorangetrieben. Wir verbesserten die Prozesssimulationen von Füllsystemen und entwickelten eine Partikelsimulation zum magnetorheologischen Schleifen. Unsere Software SimPARTIX® zur Berechnung komplexer Fluide und Suspensionen haben wir erfolgreich auf Blutgefäße anwendet: Wir simulierten das Adhäsionsverhalten von Thrombozyten.

Für das Presshärten haben wir ein neues Werkstoffmodell entwickelt und seine Anwendbarkeit mittels Prozesssimulation nachgewiesen. Gemeinsam mit der TU Freiberg begannen wir ein Projekt zur Prozesssimulation zum Glühen auf kugeligem Zementit. Zur effizienten Berechnung von Materialeigenschaften haben wir darüber hinaus die Standardisierung des virtuellen Labors vorangetrieben und somit unsere Kompetenzen im Bereich des Integrated Computational Materials Engineering ICME ausgebaut. Dies wurde unter anderem zur virtuellen Eigenschaftsberechnung von Blechwerkstoffen sowie zur Bestimmung der temperaturabhängigen Werkstoffeigenschaften von additiv gefertigten Mikrostrukturen angewendet. Ein weiterer wichtiger Aspekt waren Schadensanalysen, beispielsweise an Automobil-Frontscheiben. Zudem startete ein Projekt, in dem eine Perowskit-Solarzelle realisiert werden soll.

Auf der Messe Glasstec sorgten unsere Glasbearbeitungsverfahren für große Aufmerksamkeit: Das Lasertrennverfahren für Verbundsicherheitsglas präsentierte die Firma Hegla an einer serientauglichen Glasschneidemaschine. Wir zeigten Demonstratoren zu unserer neuen laserunterstützten Glasformgebungsmethode ohne Formen sowie zum Prägen von Flachglas. »Indem wir simulationsgestützt Fertigungsprozesse bewerten, entwickeln wir anwendungsnahe Verbesserungsvorschläge für Prozesse und erhalten mehr Wissen darüber, wie Fertigungsprozesse die Materialeigenschaften des Produkts maßgeblich beeinflussen.«

#### Gruppe PULVERTECHNOLOGIE, FLUIDDYNAMIK

Dr. Torsten Kraft | Telefon +49 761 5142-248 | torsten.kraft@iwm.fraunhofer.de

## **VORHERSAGE DER PLÄTTCHEN-ADHÄSION IN BLUTSTRÖMUNGEN**

Die Anlagerung von Thrombozyten an den Gefäßwänden ist der erste Schritt zur Bildung atherosklerotischer Verengungen. Die daraus resultierenden Veränderungen des Blutflusses sind die häufigste Todesursache in den westlichen Industrienationen. Die mikroskopischen Mechanismen sind zwar weitestgehend verstanden, dennoch fehlen bisher Ansätze für ein frühzeitiges Screening beziehungsweise ein patientenspezifisches Vorhersagemodell. Durch interdisziplinäres Vorgehen werden die bestehenden Erfahrungen aus der Materialmodellierung komplexer Fluide mit den Möglichkeiten der experimentellen Beobachtung verknüpft. In diesem Fall konnte auf ein internationales Netzwerk von Partnern zurückgegriffen werden, um Experimente an der biologischen Suspension durchzuführen.

## Screening-Verfahren zur Früherkennung von Arteriosklerose

Beobachtungen zeigen, dass schadhafte Veränderungen der Gefäßwand in Bereichen stattfinden, in denen die Wandschubspannung inhomogen verteilt ist. Der Grund dafür liegt in der schubspannungsabhängigen Adhäsivität der Thrombozyten, die bei Unterschreitung eines Grenzwertes von einem Pascal zunimmt. Überwiegend kommt das in Verzweigungen, den sogenannten Bifurkationen, vor. Dabei ist aber nicht jede Verzweigung Ausgangsort einer Arteriosklerose, sodass eine gewisse schadhafte Veränderung zur Initiierung einer Erkrankung vorausgegangen sein muss. Es existieren folglich geometrische Bereiche, denen gesunde Bifurkationen zugeordnet werden können. In dem nachfolgend beschriebenen Screeningverfahren werden Bifurkationsgeometrien vereinfacht erfasst. Das Asymmetrie-Verhältnis der ausgehenden Tochterzweige sowie der Verzweigungswinkel sind die beobachtbaren Parameter, die das strömungsbedingte Scherfeld bestimmen. Durch Variation dieser geometrischen Größen wird mittels Strömungssimulation die Wandschub-



1 Zusammenhang der Verzweigungsgeometrie mit der minimal auftretenden Wandschubspannung WSS. Vergleich der Simulationsergebnisse (rot) mit experimentell gefundenen Verzweigungsgeometrien (türkis; Quelle Cassot et al. [2010]).



2 Abhängigkeit der Oberflächenbedeckung von der Scherrate: Vergleich zwischen Experiment und Simulation.



Modell der partikelbasierten Simulation von Blutströmungen mittels SimPARTIX<sup>®</sup>.

spannung berechnet. Diese wird in Bereichen, in denen die Strömung sich ungewollt ablöst, besonders klein. Mittels Methoden der Fluid-Struktur-Kopplung werden Bifurkationen verschiedener Gestalt simuliert, um die Wandschubspannung in der Ablösung zu ermitteln.

Abbildung 1 zeigt exemplarisch berechnete Wandschubspannungen für unterschiedliche geometrische Konstellationen. Aus der kritischen Konturlinie bei 1 Pa können geometrische Spezifikationen ableitet werden. Verglichen mit experimentellen Beobachtungen zeigt das Diagramm, dass es sich hierbei fast deckungsgleich um die Konfiguration physiologischer Bifurkationen handelt. Die experimentellen Mittelwerte liegen innerhalb der 1,5-Pa-Linie, welche als besonders schützend gilt. Mit diesen Ergebnissen ist es möglich, frühzeitig schadhafte Veränderungen der Gefäßstruktur aufzudecken.

Der Stand der Technik zur Diagnose von Arteriosklerose sieht die Messung des Blutflusses vor, wobei eine Reduktion auf eine Gefäßverengung hinweist. Der Mehrwert dieser neuartigen Screeningmethodik, die auch zum Patent angemeldet wurde, liegt in der Früherkennung zu einem Zeitpunkt, an dem eine Verengung noch nicht erfolgt ist. Die Vision dabei ist die Entwicklung eines Geräts, welches bildgebende Verfahren nutzt, um die lokale Erkrankungswahrscheinlichkeit zu visualisieren.

#### Berechenbare Adhäsionsdynamik

Die partikelbasierte Simulation der Suspension erlaubt einen tieferen Einblick in das Adhäsionsverhalten einzelner Thrombozyten. Dazu nutzen wir unsere Software SimPARTIX<sup>®</sup>, die sich besonders zur Berechnung komplexer Fluide und Suspensionen eignet. Ziel ist die Entwicklung eines Materialmodells, das die Anlagerung abhängig von den Strömungsbedingungen beschreibt. Zunächst wurde das Adsorptionsverhalten in Blutströmungen experimentell untersucht. In einem Kanal werden dazu definierte Scherraten eingestellt. Nach Ablauf des Experiments bleiben Agglomerate auf der an der Unterseite des Kanals aufgebrachten Kollagenschicht zurück. Die Oberflächenbedeckung wird für verschiedene Scherraten gemessen und ist in Abbildung 2 dargestellt. In dieser Abbildung ist auch das Ergebnis von Simulationen einer Suspension mit idealisierten Thrombozyten gegenübergestellt. Hierbei sind die Strömungseigenschaften durch das Experiment vorgegeben, wobei das Adhäsionsverhalten aus dem experimentellen Ergebnis abgeschätzt wird. Die Simulation ist dadurch in der Lage, die Mechanismen der Thrombozytenadhäsion wirklichkeitsgetreu abzubilden. Die Bildung von Agglomeraten durch Kohäsion, die dadurch induzierte Rollbewegung sowie das Anhaften und Ablösen werden durch das Modell berechenbar. Darüber hinaus sind quantitative Vergleiche möglich: Abbildung 2 zeigt einen Vergleich der Oberflächenbedeckung im Experiment und in der Simulation

Mit diesen Entwicklungen ist es gelungen, den biologischen Prozess der Adsorption berechenbar zu machen. Das analytische Modell kann auf komplexe Gefäßstrukturen übertragen werden. Hier zeigt sich, dass die Adhäsionsdynamik und die Form der Agglomerate stark von den Strömungsbedingungen abhängig sind. Diese Entwicklung kann zukünftig die Risikobewertung von Gefäßverengungen mittels Screening verbessern.

Jamel Khamassi, Dr. Claas Bierwisch

#### Gruppe **U M F O R M P R O Z E S S E**

Dr. Dirk Helm | Telefon +49 761 5142-158 | dirk.helm@iwm.fraunhofer.de

## CHARAKTERISIERUNG UND SIMULATION VON PRESSHÄRTE-PROZESSEN

Presshärten ist ein Fertigungsprozess, mit dem auf effiziente Weise hochfeste, crashsichere Automobilkomponenten hergestellt werden können. Bei diesem Blechumformverfahren tritt, im Gegensatz zur Kaltumformung von anderen hochfesten Blechwerkstoffen, nahezu keine Rückfederung auf.

Beim Presshärten wird der Werkstoff – beispielsweise 22MnB5, der im Ausgangszustand eine ferritisch-perlitische Mikrostruktur aufweist – in einem Ofen erwärmt, bis er vollständig austenitisiert ist, und dann zur Presse transportiert. Beim direkten Presshärten wird das Werkstück anschließend in der Presse umgeformt und abgeschreckt, um beispielsweise eine vollständig martensitische Mikrostruktur zu erhalten.

Durch eine kontrollierte Abkühlrate im Werkzeug können mit dem Prozess aber auch Mikrostrukturen mit unterschiedlichen Phasenanteilen von Bainit, Ferrit und Martensit erzeugt werden, die entsprechend modifizierte Eigenschaften aufweisen. So können beispielsweise für eine Automobil-B-Säule durch eine geeignete Prozessführung lokal unterschiedliche Mikrostrukturen mit verschiedenen mechanischen Eigenschaften eingestellt werden, wodurch sich das gesamte Bauteil im Crashfall günstiger verhält.

#### Mikrostrukturentwicklung während des Presshärtens

Presshärten kann als Abfolge von verschiedenen Prozessschritten betrachtet werden, in denen sich die Mikrostruktur durch plastische Deformation und Phasenumwandlungsprozesse stark ändert. Der Mehrwert bei der Betrachtung des gesamten Presshärteprozesses liegt in der Möglichkeit, die Historie der Mikrostruktur des Materials mit den finalen Bauteileigenschaften zu verknüpfen. Dies ist von Vorteil, da beispielsweise die Aufheizrate im Ofen und die plastische Deformation im Umformprozess die Austenitkorngröße beeinflussen, die sich



1 Versuchsaufbau am Gleeble 3150 Messsystem zur Aufnahme von Fließkurven bei Temperaturen bis 1000 °C mit gekühltem Extensometer.



2 Simulationsergebnisse einer B-Säule für den Martensit-Volumenanteil in Prozent zu einem Zeitpunkt im Prozess (links) und die Blechdickenverteilung nach dem Umformen in mm (rechts).



Schliffbild einer martensitischen Mikrostruktur nach dem Presshärten.

wiederum direkt auf die Phasenbildungsprozesse und damit auf die finalen Bauteileigenschaften auswirkt.

Wird die Mikrostrukturentwicklung in der Simulation berücksichtigt, ist nicht nur das Materialverhalten im Prozess besser zu beschreiben. Damit wird auch die Möglichkeit geschaffen, die Einflüsse einzelner Prozessparameter auf den kompletten Presshärteprozess zu untersuchen. Daraus ergibt sich die Chance, einzelne Prozessschritte gezielt zu modifizieren um die gewünschten finalen Bauteileigenschaften einzustellen.

#### **Experimentelle Charakterisierung und Simulationsansatz**

Um die komplette Prozesskette des Presshärteprozesses simulativ abzubilden, ist zunächst ein Versuchsprogramm notwendig, mit dem die Mikrostruktur und die mechanischen Eigenschaften des Werkstoffs zu verschiedenen Zeitpunkten im Presshärteprozess untersucht werden.

Zu diesem Zweck werden am Fraunhofer IWM thermomechanische Versuche an einem Gleeble 3150 Prüfsystem durchgeführt, um das Fließverhalten, das Wärmeausdehnungsverhalten sowie die Phasenumwandlung des Materials zu ermitteln. Abbildung 1 zeigt den Versuchsaufbau zur Bestimmung von temperaturabhängigen Spannungs-Dehnungskurven.

Neben diesen experimentellen Untersuchungen ist ein Modell notwendig, das in der Lage ist, die beobachtete Mikrostrukturentwicklung während des Prozesses abzubilden und die Verteilung der Blechdicke, der Eigenspannungen sowie insbesondere der Mikrostruktur richtig vorherzusagen und das dadurch eine zuverlässige Aussage über die mechanischen Eigenschaften im finalen Bauteil erlaubt. Die experimentellen Daten bilden die Grundlage, um die Modellparameter zu bestimmen. Im Gegensatz zu existierenden Modellen aus der Literatur basiert das am Fraunhofer IWM entwickelte Modell auf einem thermodynamisch konsistenten Ansatz und berücksichtigt die Historie der Mikrostruktur entlang der Prozessschritte in Form von repräsentativen Zustandsvariablen auf der Makroskala. Dabei werden insbesondere die Einflüsse von vorangegangenen Spannungs- beziehungsweise Dehnungszuständen und der Austenitkorngröße auf die Phasenumwandlung berücksichtigt. Ein derartiges, gekoppeltes Konstitutivmodell ist in der Lage, die numerischen Vorhersagen zu verbessern. Als Beispiel für die Simulation des Presshärteprozesses zeigt Abbildung 2 die Blechdicken- und die Martensitvolumenverteilung einer B-Säule nach der Umformung und dem Abschrecken.

Rohith Uppaluri, Dr. Alexander Butz

## Gruppe BEARBEITUNGSVERFAHREN, GLASFORMGEBUNG

Dr. Rainer Kübler | Telefon +49 761 5142-213 | rainer.kuebler@iwm.fraunhofer.de

## **NEUARTIGES BIEGEN VON FLACHGLAS MIT LOKALER ERWÄRMUNG**

Seitdem Smartphones und Tablets weit verbreitet sind, hat der Werkstoff Glas an Popularität in neuen Produkten zugenommen. Vorwiegend werden in den elektronischen Endgeräten noch ebene Scheiben eingesetzt, da sie leicht herstellbar sind. Neue Herstellverfahren und der Wunsch von Designern und Anwendern haben dazu geführt, dass inzwischen speziell geformte Glasteile immer häufiger den Weg in Produkte wie gebogene Fernsehbildschirme und Smartphones mit gebogenen Rändern finden.

#### **Dreidimensional geformte Glasteile**

Dreidimensional geformte Glasteile sind deutlich aufwendiger herzustellen als flache, da neben dem Zuschnitt zusätzlich ein Formgebungsprozess erforderlich ist. Aufwand und Kosten für die Herstellung dreidimensional geformter Glasteile hängen stark von der Geometrie und den Anforderungen an die geometrische Genauigkeit, Oberflächenqualität und Stückzahl ab. Nur bei großen Stückzahlen lohnen sich Investitionen in kostspielige Formen. Für die Herstellung kleinerer Losgrößen mit raschem Wechsel zwischen unterschiedlichen Produktgeometrien besteht Bedarf an einer wirtschaftlichen prozesstechnischen Lösung.

#### Weltweit einzigartige Glasbiegeanlage mit lokaler Erwärmung durch Laserstrahlung

Am Fraunhofer IWM steht im eigens dafür errichteten Forschungstechnikum eine weltweit einzigartige Glasbiegeanlage zur Verfügung. Damit führen wir prozesstechnische Entwicklungen an Gläsern mit Abmessungen bis zu 1x1 Metern durch. Je nach Anwendungsfall werden für den Biege-prozess unterschiedliche Technologien zur Aufbringung von Biegekräften und der Erwärmung des Glases eingesetzt. Mittels einer während des Prozesses verstellbaren Form lassen sich



1 Simulierte Temperaturentwicklung an laserbestrahltem Ring und vertikale Verschiebung im Kreismittelpunkt in normierten, dimensionslosen Einheiten.



2 Simulationsmodell nach einer Laser-induzierten Deformation unter Schwerkraft, die Farbskalierung entspricht der Materialdehnung (oben), und reelles Ergebnis einer solcherart Form-frei hergestellten Geometrie (unten).



Schematischer Prozessablauf mit lokaler Erwärmung und flächiger Temperaturmessung in der Biegeanlage im Industriemaßstab.

effektiv Oberflächenabdrücke im erweichten, geformten Glas reduzieren. Verschiedene Wärmequellen erhitzen das Glas gezielt lokal, zum Beispiel ein Hochleistungs-CO<sub>2</sub>-Laser mit Strahlführung über ein Scannersystem. Dieses System wird genutzt, um bei speziellen Biegeprozessen die Formgebung über die Temperaturführung des Glases zu steuern. Außerdem ist in die Anlage eine flächige Inline-Temperaturmessung der Glasoberfläche integriert. Zur Darstellung industrienaher Serienprozesse mit hoher Reproduzierbarkeit lassen sich die einzelnen Prozesschritte wie Einfahren, Erwärmen, lokale Erwärmung, Formverstellung oder Kühlen über eine einheitliche Steuerung automatisieren.

## Mit Simulationsmethoden und Laborexperimenten entwickeln wir Industrieprozesse

Die Glasformgebung findet durch das Zusammenspiel von Glaswerkstoff, Temperatur (diese bestimmt die Glasviskosität), Schwerkraft und Zeit statt. Die Wechselwirkungen der Prozessparameter untersuchen wir in Simulationsmodellen und lassen diese Ergebnisse in die Prozessentwicklung einfließen. In einem speziell entwickelten Verfahren wird Flachglas Form-frei in verschiedenste Formen gebogen. Im Simulationsmodell wird der Wärmeeintrag durch die Laserstrahlung modelliert und die zeitliche Entwicklung des Temperaturfeldes in lateraler Richtung und über die Glasdicke berechnet. Im Diagramm in Abbildung 1 sind durch die Simulation berechnete Kurvenverläufe von der Temperaturentwicklung im laserbestrahlten Ringmittelpunkt und die zeitlich korrespondierende Verschiebung im Kreismittelpunkt dargestellt. Wie im realen Versuch senkt sich die vom erwärmten Ring eingeschlossene Kreisfläche unter Schwerkraft-Einwirkung ab. Es entsteht eine »tellerartige« Geometrie (Abbildung 2). Durch eine exakte Lasersteuerung wird die Glastemperatur im Umformbereich kontrolliert. Nach Abschalten des Lasers, im Beispiel in Ab-

bildung 1 bei Systemzeit 0,5, senkt sich das Glas noch einige Sekunden ab (Verschiebung in Richtung nach unten nimmt zu, blaue Kurve), ehe die Temperatur so weit erniedrigt ist, dass keine viskose Verformung mehr stattfindet. Beim weiteren Abkühlen werden die Verformung des Glases und damit auch die Verschiebung des Kreismittelpunktes durch die thermische Längenausdehnung des Glases dominiert. Im Beispiel hebt sich der Tellerboden um wenige Zehntelmillimeter an (blaue Kurve wird niedriger ab der Systemzeit 0,55). Die Aufheizphase für das Glas sowie der Laser- und Umformprozess sind nach wenigen Minuten abgeschlossen: bei 4 mm dickem Glas nach etwa 10 Minuten. Für das anschließende Kühlen wird mit den am Fraunhofer IWM vorhandenen Einrichtungen deutlich mehr Zeit (einige Stunden) aufgewendet. Bei einer industriellen Umsetzung lassen sich die Kühlzeiten jedoch durch eine entsprechende Anlagentechnik, beispielsweise mit einer Kühlkaskade, drastisch reduzieren.

Mit den erarbeiteten Simulationstools und versuchstechnischen Einrichtungen, die mit umfassenden Prozessdatenerfassungen ausgestattet sind, unterstützen wir unsere Kunden bei der Entwicklung komplexer Biegeprozesse und bei Prozessoptimierungen, insbesondere zur Umsetzung von Prozessverkürzungen, Steigerung der Qualität und Kostensenkungen. Zudem erarbeiten wir Lösungen zur Realisierung von Formenvielfalt und erbringen Machbarkeitsnachweise.

Tobias Rist, Dr. Rainer Kübler

## Geschäftsfeld TRIBOLOGIE











## GRUPPEN

#### VERSCHLEISSSCHUTZ, TECHNISCHE KERAMIK

Wir prüfen, bewerten und simulieren die Wirkung von Veränderungen in tribologischen Kontakten. Forschungsschwerpunkte sind trockenlaufende und wassergeschmierte Systeme sowie ultraniedrige Reibung (Flüssigkristalle, Graphen).

Dr. Andreas Kailer | andreas.kailer@iwm.fraunhofer.de

#### MULTISKALENMODELLIERUNG UND TRIBOSIMULATION

Mit skalenübergreifender numerischer Simulation beziehen wir makroskopische Materialeigenschaften auf Mechanismen der Mikroskala. Dies ermöglicht Optimierungen industrieller Materialsyntheserouten und Prozessführungen sowie des Designs von Nanomaterialien und Suspensionen.

Prof. Dr. Michael Moseler | michael.moseler@iwm.fraunhofer.de

#### POLYMERTRIBOLOGIE UND BIOMEDIZINISCHE MATERIALIEN

Wir bewerten mit Experimenten und Simulationen die Zuverlässigkeit und das Einsatzverhalten biomedizinischer Materialien und Implantate, generativ gefertigte Komponenten sowie die Tribologie von Thermoplasten, Elastomeren und Hydrogelen.

Dr. Raimund Jaeger | raimund.jaeger@iwm.fraunhofer.de

#### TRIBOLOGISCHE SCHICHTSYSTEME

Wir entwickeln maßgeschneiderte PECVD-Beschichtungslösungen und -verfahren: Wir bewerten und produzieren glatte und strukturierte diamantähnliche Kohlenstoffbeschichtungen (DLC) für hohe Gleit- und Wälzbelastungen und entwickeln kristalline Diamantschichten für Sonderanwendungen. Bernhard Blug | bernhard.blug@iwm.fraunhofer.de

#### ANGEWANDTE NANOTRIBOLOGIE

Tribologische Fragestellungen lösen wir durch Kombination von mikrostrukturellen und energetischen Ansätzen mit kontinuierlichen hochauflösenden Reibungs- und Verschleißmessungen sowie mit modernsten Methoden der Oberflächenanalytik.

Dr. Martin Dienwiebel | martin.dienwiebel@iwm.fraunhofer.de



#### GESCHÄFTSFELDLEITER

Prof. Dr. Matthias Scherge Telefon +49 761 5142-206 matthias.scherge@iwm.fraunhofer.de

## FOKUS

Reibung und Verschleiß sollen nach Wunsch einstellbar sein: Wir unterstützen dabei, die zugrunde liegenden Mechanismen zu verstehen und Komponenten ideal einzustellen. Auf der Grundlage anwendungsnaher Versuche und Simulationsmodelle entwickeln wir Lösungen für Reibungsminderung und Verschleißschutz bei technischer Keramik, tribologischen Schichtsystemen, Polymeren und Elastomeren sowie mit neuartigen Schmierstoffen oder fertigungstechnisch konditionierten Tribowerkstoffen. Wir klären Einlaufvorgänge auf und entschlüsseln die Tribochemie von Wälz- und Gleitlagern, Schneid- und Umformwerkzeugen oder Motor- und Getriebeelementen.

#### **BEMERKENSWERTES AUS 2016**

Unsere neuen Gebäude in Karlsruhe sind eröffnet: Das MikroTribologie Centrum µTC auf dem Campus Süd sowie das Gebäude auf dem Campus Ost für große Prüfstände und Radionuklid-Technik. Hier entsteht unsere neue Tribometerfarm, mit der wir über lange Zeiträume Messdaten aufzeichnen, um tribologische Fluktuationen zu charakterisieren.

In unserem neuen Projekt »CS<sup>3</sup>« realisieren wir wartungsarme, langlebige Komponenten für Meerestiefen bis zu 6 km. Wir entwickeln Verbindungstechniken sowie Herstell- und Simulationsmethoden zu neuen Diamant-Keramiken, die extrem abrasions- und korrosionsbeständig sind und hohen Temperaturen und Drücken standhalten. Für höchst beanspruchte Komponenten in Windkraftanlagen arbeiten wir an neuen elektrisch leitfähigen Schmierstoffen in Kombination mit neuen Werkstoffkonzepten. Wir entwickelten für große Hartmetall- und Keramikwerkzeuge effiziente Diamantabscheideprozesse. Zudem legten wir generisch gefertigte Bauteile und ihre inneren Strukturen aus, beispielsweise medizinische Schuhsohlen aus thermoplastischem Polyurethan TPU.

In der Gruppe Multiskalenmodellierung und Tribosimulation bildeten wir zwei Teams: Das Team Funktionale Grenzflächen beschäftigt sich mit der Chemie und Physik von Grenzflächen, das Team Strukturentwicklung in tribologischen Systemen untersucht die Mechanik und Fluidik an Oberflächen auf atomarer Skala. Zudem entwickelten wir eine Multiskalensimulationsmethode, um das Benetzungsverhalten von Flüssigkeiten auf Oberflächen vorherzusagen und sie damit gezielt einstellen zu können.

Am µTC hat Prof. Dr. Martin Dienwiebel eine Heisenberg-Professur für Angewandte Nanotribologie angetreten. Für seine Dissertation zur Tribologie zwischen Skibelag und Schnee hat Dr. Roman Böttcher einen Preis der Stiftung Industrieforschung erhalten. »Tribologische Verbesserungen greifen in der gesamten Wertschöpfungskette: von Werkstoffentwicklung und -bearbeitung über Oberflächenbehandlung bis zum Einsatz. Wir arbeiten sehr erfolgreich daran, das Zusammenspiel von Chemie, Physik und Mechanik von Grund auf zu verstehen und zielgerichtet einzustellen.«

## Gruppe VERSCHLEISSSCHUTZ, TECHNISCHE KERAMIK

Dr. Andreas Kailer | Telefon +49 761 5142 247 | andreas.kailer@iwm.fraunhofer.de

## MASSGESCHNEIDERTE TRIBOLOGISCHE UNTERSUCHUNG VON HARTLEGIERUNGEN AN VENTILEN VON GROSSGASMOTOREN

In Deutschland unterliegt die Nutzung von Erdgas als Primärenergieträger einem stetig steigenden Trend: Aktuell steht die Energieerzeugung mit Erdgas an zweiter Stelle nach Mineralöl. Für die Stromerzeugung mit Erdgas, aber auch in der Kraft-Wärme-Kopplung (KWK), werden Großgasmotoren oftmals als stationäre Motoren eingesetzt. Um die Effizienz dieser Motoren zu steigern und gleichzeitig weniger Ressourcen zu verbrennen, werden die Betriebsbedingungen immer weiter verschärft: Höhere Temperaturen und häufigere Lastwechsel führen dabei zu steigendem Verschleiß der bewegten Komponenten im Brennraum. Aus diesem Grund hat sich der Hersteller von Komponenten und Zylinderkopfsystemen für große Verbrennungsmotoren, Märkisches Werk GmbH, zum Ziel gesetzt, seine Ventile weiterzuentwickeln und dies in Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer IWM voranzutreiben. Die Herangehensweise an das Thema Ventilverschleiß in Großgasmotoren in dieser Art und diesem Umfang ist bisher einzigartig: In dem Projekt wurde am Fraunhofer IWM ein Prüfstand entwickelt und aufgebaut, der eine Ventilprüfung unter realen Umgebungsbedingungen ermöglicht.

#### Ventilprüfung unter realen Bedingungen

Das Ziel der Untersuchungen am Fraunhofer IWM ist herauszufinden, wie sich verschiedene Werkstoffe unter den auftretenden Belastungen am Ventilsitz verhalten. Darüber hinaus sollen auch quantitative Zusammenhänge zwischen Belastungsparametern wie Temperatur, Atmosphäre, Aufschlaggeschwindigkeit sowie Verbrennungsdruck und dem Ventilverschleiß ermittelt werden. Bei Prüftemperaturen von Raumtemperatur bis zu 450 °C haben wir Untersuchungen in unterschiedlichen Umgebungsatmosphären durchgeführt. Die hydraulisch gesteuerten Schließgeschwindigkeiten können im Versuch bis zu 1,2 m/s betragen. Auf dem Bild oben rechts ist der neu entwickelte Prüfaufbau für Ventile mit einem



1 Verschleißentwicklung am Ventilsitz mit zunehmender Versuchsdauer (links) und Ventilverschleißraten bei unterschiedlichen Temperaturen und Schließgeschwindigkeiten (rechts).



2 An der Kontaktfläche zwischen Ventil und Sitzring entstehen eine tribologisch gebildete Randschicht sowie Mikrorissbildung in der Hartphase des Ventilsitzes.



Maßgeschneiderter Versuchsstand zur Verschleißmessung an großen Ventilen unter definierten Belastungen (links), Ventil im Versuchsstand (rechts).

Durchmesser von 70 bis 100 mm zu sehen. Abbildung 2 links zeigt die Ergebnisse von Profilmessungen zur Bestimmung des Verschleißfortschritts am Ventilsitz gegenüber der Belastungsdauer.

Aus diesen Messungen ergibt sich eine vergleichsweise gleichmäßig beziehungsweise lineare Zunahme des Verschleißes mit der Versuchsdauer. Somit ist es möglich, abhängig von den Belastungsparametern, Verschleißraten des Ventils zu bestimmen und diese zu vergleichen. Wir können eindeutig ermitteln, welche Belastungseinflüsse den stärksten Einfluss auf den Verschleiß haben, wo die Belastungsgrenzen der Ventile sind und welche Werkstoffe den vergleichsweise größten Verschleißwiderstand zeigen.

#### Stresstest zeigt die Grenzen der Belastbarkeit des Materials

Um ein Ventil extremer Belastung in einem Stresstest zu unterziehen, führten wir über einen Zeitraum von 500 Stunden einen Langzeitversuch durch: bei einer Temperatur von 450 °C und einer Schließgeschwindigkeit von 1,2 m/s. Der Stresstest zeigt die Grenzen der Belastbarkeit der Materialkombination zwischen Sitzring und Ventilstahl. Bei der Betrachtung der Verschleißraten (Abbildung 2 rechts) wird deutlich, welche Auswirkung die beiden Parameter Temperatur und Schließgeschwindigkeit auf den Ventilverschleiß haben.

#### Verschleißmechanismen erkennen

Sowohl um Werkstoffe für solche Ventile gezielt zu entwickeln als auch um die Betriebsbedingungen optimal einzustellen, ist ein gutes Verständnis der Verschleißvorgänge unbedingte Voraussetzung. Verschleißanalysen, wie in Abbildung 2 beispielhaft dargestellt, ergeben hier ein klares Bild der Verschleißmechanismen: Sie zeigen, wie durch einen Materialübertrag von dem Sitzring auf den Ventilsitz sowie die Zertrümmerung der Hartphasen im Gefüge als auch tribochemische Vorgänge tribologische Randschichten entstehen, die letztlich das Reibungs- und Verschleißverhalten und damit das Einsatzverhalten des Ventils bestimmen. Hieraus können wir wertvolle Hinweise zur gezielten Einstellung der Werkstoffe und der Betriebsbelastungen gewinnen.

Die am Fraunhofer IWM entwickelte Prüfmethode trägt mit ihren Ergebnissen dazu bei, die Belastbarkeit von Ventilen zu verbessern oder zumindest ihre Lebensdauer realistisch einzuschätzen. Diese Ergebnisse unterstützen Hersteller von Großmotor-Komponenten, Gasmotoren zu entwickeln, die durch ideal an die Werkstoffe angepasste Betriebsparameter wesentlich höhere Leistungen und Effizienzwerte bringen.

Jan Speck, Dr. Dominik Kürten

## Gruppe MULTISKALENMODELLIERUNG UND TRIBOSIMULATION

Prof. Dr. Michael Moseler | Telefon +49 761 5142-332 | michael.moseler@iwm.fraunhofer.de

## WARUM DAVID GOLIATH SCHLÄGT: OXIDE VERSCHLEISSEN DIAMANT

Diamant ist der härteste Stoff auf unserem Planeten. Dennoch sind diamantbeschichtete Schneidwerkzeuge von Verschleiß betroffen, vor allem wenn sie Gesteine oder Ingenieurkeramiken schneiden, die reich an Oxiden wie Siliziumoxid oder Aluminiumoxid sind. Dieser Nachteil kann jedoch auch nutzbar gemacht werden: Wissenschaftler aus Cardiff haben kürzlich experimentell gezeigt, dass Oxide zum Diamantpolieren eingesetzt werden können, wobei Oberflächenrauigkeiten von 1 Nanometer erreicht werden (chemisch-mechanisches Polieren, CMP). Dieser Befund ist erstaunlich, wenn man bedenkt, dass Oxide sehr viel weicher als Diamant sind! Dank dieser Technik können Diamantschichten in mikroelektronischen Geräten eingesetzt werden.

Die Erhöhung der Lebensdauer von Diamantwerkzeugen und die Optimierung des CMP-Prozesses (zum Beispiel mittels Dotierstoffen beziehungsweise Additiven) sind darum von großem wirtschaftlichem Interesse. Um kostenintensive »Trial-and-Error«-Prozesse zu vermeiden, ist ein detailliertes Verständnis der mikroskopischen Verschleißmechanismen nötig. Bislang gibt es dazu jedoch nur wenige fundamentale Kenntnisse. Da der Diamantverschleiß nicht durch die Härte des Oxids erklärt werden kann, bleibt nur die Möglichkeit, dass es sich um einen tribochemischen Verschleißprozess handelt. In diesem Fall wären mechano-chemische Bindungsbrüche für den Verschleiß verantwortlich. Da während des CMP-Prozesses keine mikroskopischen Verschleißpartikel gefunden werden, lässt sich vermuten, dass einzelne Kohlenstoffatome nacheinander aus der Diamantoberfläche herausgebrochen werden.

#### Quantenmechanische Simulationen

In einem Projekt mit einem Diamantwerkzeughersteller galt es diesen Prozess zu verstehen (A. Peguiron et al., Activation and mechanochemical breaking of C-C bonds initiate wear of dia-



1 Molekulardynamiksimulationen von tribologischen Grenzflächen: Diamant-Siliziumoxid (a, b), Diamant-Silizium (c).



2 Atomare Maximalkräfte für den Bindungsbruch an verschiedenen Grenzflächen.


Quantenmechanische Simulation der chemischen Aktivierung von C-C Bindungen an der Siliziumoxid/Diamant Grenzfläche. Das höchste besetzte Orbital der nicht aktivierten (links) und aktivierten (rechts) Grenzfläche ist dargestellt.

mond (110) surfaces in contact with silica, Carbon 98, 2016). Hierzu führten wir Molekulardynamiksimulationen durch, die die Bewegung der Atome an den Grenzflächen zwischen amorphem Siliziumoxid und der Diamant (110)-Oberfläche sichtbar machten (Abbildung 1a, b). Da tribologische Kontakte generell nicht direkt experimentell zugänglich sind, stellen Molekulardynamiksimulationen mit quantenmechanischen Kraftfeldern die effektivste Methode dar, um chemische Grenzflächen-Prozesse zu beobachten. Um zu verstehen, ob Verschleißprozesse nur aufgrund der besonderen chemischen Wechselwirkung zwischen Kohlenstoff und dem Sauerstoff des Oxids stattfinden, studierten wir zusätzlich das Verhalten von Diamant in Kontakt mit amorphem Silizium (Abbildung 1c). Amorphes Silizium ist mechanisch ähnlich zu Siliziumoxid, enthält jedoch keinen Sauerstoff.

Tight-Binding-Molekulardynamiksimulationen zeigten, dass es in der Tat möglich ist, einzelne Kohlenstoffatome aus der Diamantoberfläche herauszuziehen. Damit dies stattfinden kann, müssen starke kovalente Bindungen zwischen den obersten C-Atomen und der Diamantoberfläche aufbrechen. Der Bindungsbruch geschieht nur für spezielle C-C-Bindungen und nur, wenn Diamant mit Siliziumoxid in Kontakt ist (Abbildung 1a, b). Bei Silizium als Gegenkörper konnten wir keinen C-C-Bindungsbruch beobachten.

### Starke und schwache Grenzflächenbindungen

An der tribologisch belasteten Siliziumoxid-Diamant-Grenzfläche können C-C-Bindungen nur dann aufbrechen, wenn sie schwächer sind als die C-Si- oder C-O-Bindungen, die an den C-Oberflächenatomen ziehen. Mittels Dichtefunktionaltheorie konnten wir die Stärke der Bindungen berechnen und erzielten unvorhergesehene Ergebnisse. In erster Linie sind diamantähnliche C-C-Bindungen etwas stärker als C-O- und C-Si-Bindungen. Gleichzeitig sind die C-Si-Bindungen an der Siliziumoxid-Diamant-Grenzfläche wesentlich stärker als an der Silizium-Diamant-Grenzfläche. Wir konnten zeigen, dass die Polarisierung von Siliziumoxid für die Stärke der C-Si-Bindungen verantwortlich ist. Zudem traten gelegentlich schwache C-C-Bindungen an der Siliziumoxid-Diamant-Grenzfläche auf und versagten, wenn ein Si- oder ein O-Atom an ihnen zog (Abbildung 2). Derart schwache C-C-Bindungen konnten wir an der Silizium-Diamant-Grenzfläche nicht beobachten.

#### Aktivierung von chemischen Bindungen in Diamant

Mittels einer detaillierten Analyse der elektronischen Struktur der Grenzfläche konnten wir erklären, wie oberflächennahe C-C-Bindungen in Diamant von Siliziumoxid geschwächt werden können. Die Diamant-(110)-Oberfläche ist durch eine aromatische Struktur charakterisiert (ähnlich Graphit). In Kontakt mit Siliziumoxid bilden sich nur wenige C-O- und C-Si-Bindungen, die die aromatische chemische Struktur leicht stören und damit die Verlängerung einiger C-C-Bindungen verursachen. Diese verlängerten Bindungen sind chemisch aktiviert (das heißt schwächer als in Diamant) und können daher leicht aufbrechen (Abbildung 2). Ist die Diamantoberfläche in Kontakt mit Silizium, geschieht diese Aktivierung hingegen nicht. In letzterem Fall ist die Anzahl der Grenzflächenbindungen viel größer als an der Siliziumoxid-Diamant-Grenzfläche. Demzufolge verliert die Diamantoberfläche ihren aromatischen Charakter und wird diamantähnlich, das heißt alle C-C-Bindungen bleiben stark.

Dr. Gianpietro Moras, Prof. Dr. Michael Moseler

### Gruppe TRIBOLOGISCHE SCHICHTSYSTEME

Bernhard Blug | Telefon +49 761 5142-180 | bernhard.blug@iwm.fraunhofer.de

## DLC-SCHICHTEN: »DRITTER KÖRPER« SORGT FÜR GUTES REIBVERHALTEN

Die Analyse fester Verschleißpartikel und Reaktionsprodukte im tribologischen Kontakt (mit RNT, Raman- oder IR-Spektroskopie) hilft nur bedingt bei der Aufklärung aller relevanten tribochemischen Mechanismen, die bestimmend sind für Reibwert, Verschleiß, Schmierstoffwechselwirkungen und das Einlaufverhalten von Tribosystemen. Zusätzlich spielen die unter Last entstehenden gasförmigen Reaktionsprodukte eine entscheidende Rolle, durch deren Detektion eine exaktere Beschreibung des tribologischen Verhaltens beispielsweise von Beschichtungen und Schmierstoffen möglich ist. Am Fraunhofer IWM steht eine Methode zur Verfügung, bei der gasförmige Reaktionsprodukte aus dem Reibkontakt mittels Massenspektrometrie im Vakuumtribometer untersucht und quantifiziert werden können (Abbildung 1). Dabei ist es möglich, im trockenen und geschmierten Zustand sowie mit verschiedenen Atmosphärenzuständen zu arbeiten, indem beliebige Gase mit definiertem Fluss zugeführt werden.

Zur Anwendung kam dieser Messaufbau im DFG-Projekt »CO-Schicht«. Das Ziel des Projekts war, die mikrostrukturelle Schädigung von DLC-Schichtsystemen (a-C:H) auf unterschiedlichen Substratzuständen zu untersuchen. Dabei haben wir die Oberflächen vor der Beschichtung unterschiedlich stark aufgeraut und die Schichten anschließend mechanisch und tribologisch charakterisiert. Die Veränderung der Tribochemie durch die Oberflächenstrukturierung konnten wir mit dem beschriebenen Vakuumtribometer untersuchen.

### Gasförmige Reaktionsprodukte aus dem Reibkontakt Stahl auf DLC

Im Fokus stand dabei die Detektion der Reaktionsprodukte aus der Schicht, die hauptsächlich aus Wasserstoff, aber zum Teil auch aus kurzkettigen Kohlenwasserstoffen (CH<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>) bestehen. Im Reibkontakt bilden sich durch die Pressung zwischen



1 Prinzipskizze des Vakuumtribometers, ausgestattet mit einem Quadrupol Massenspektrometer und separater Gaszuführung.





2 Reibwert der mit DLC beschichteten Substrate als Funktion der Zeit für verschiedene Oberflächenzustände bei einer Last von 15 N und einer Geschwindigkeit von 1 m/s im ungeschmierten Kontakt (Kugel auf Scheibe, oben); integriertes Messsignal des Massenspektrometers (Partialdruck) für die detektierte Verbindung H<sub>2</sub><sup>+</sup>(unten).



Aufnahmen der drei untersuchten DLC-Schichten mit dem Rasterkraftmikroskop.

den Kontaktpartnern und die lokal sehr hohen Temperaturen reaktive Bindungen, sogenannte »dangling bonds«, die im Vakuum nicht so schnell abgesättigt werden können wie unter Normaldruck. Dadurch kommt es insbesondere bei niedrigen Lasten zu einer hohen adhäsiven Anbindung zum Gegenkörper, die unter der Reibbewegung zum Lösen des in der Schicht gebundenen Wasserstoffs führt. Dabei kann ein verstärktes Ausgasen von Wasserstoff aus der Schicht beobachtet werden, schon bevor messbarer Verschleiß von Partikeln auftritt.

# Zusammenhang gasförmiger Reaktionsprodukte mit dem Reibwert

Im ersten Schritt konnten wir zeigen, dass das Einlaufverhalten der untersuchten Schichten durch die Strukturierung deutlich verändert werden kann (Abbildung 2 oben). Die rauen Oberflächen besitzen zu Beginn der tribologischen Belastung einen im Vergleich zur polierten Probe ( $Ra = 0,01 \mu m$ ) hohen Reibwert. Allerdings konnten wir hier ein Einlaufverhalten beobachten, nach dem der Reibwert deutlich unter dem der polierten Probe lag. Der Grund dafür ist, dass die Kontaktfläche mit steigender Rauheit sinkt und somit die Spannungen im Kontakt, besonders an Asperiten, deutlich erhöht sind. Das führt zu Verschleiß am Gegenkörper und zum Abbrechen der Rauheitsspitzen, also zu Partikelverschleiß. Dieser führt unter verstärkter Ausgasung von Wasserstoff (beziehungsweise CH<sub>2</sub> und CH<sub>4</sub>) im Einlaufbereich (Abbildung 2 unten) zu einem Schichtübertrag auf den Gegenkörper. Sobald dieser erfolgt ist, sinken der Reibwert und der Gehalt an ausgasendem Wasserstoff deutlich. Im Gegensatz dazu konnten auf der polierten Oberfläche kein Verschleiß der Schicht und nur ein geringer Verschleiß des Gegenkörpers gemessen werden, während die Menge an ausgasendem Wasserstoff konstant hoch lag und zum Ende des Versuchs größer war als bei den strukturierten Proben. Untersuchungen mittels Ramanspektroskopie

ergaben, dass dies mit einer oberflächennahen Änderung der Schichtstruktur einhergeht, die allein nicht zu einer Änderung des Reibwerts führt, wie Abbildung 2 zeigt.

Das lässt die Schlussfolgerung zu, dass nicht die strukturelle Umwandlung der DLC-Schichten unter tribologischer Belastung für das außerordentlich gute Reibverhalten verantwortlich ist, sondern die Ausbildung einer graphitischen Zwischenschicht, die als sogenannter »dritter Körper« verstanden werden kann.

### Verwertbarkeit der Ergebnisse

Die große Stärke der Gruppe »Tribologische Schichtsysteme« ist dabei, dass neben der Beschichtungstechnik (Anlagenbau, Prozessanalytik, Schichteigenschaften) auch die Substratvorbereitung (Oberflächenstrukturierung) und die mechanische sowie tribologische Charakterisierung (Schichtanalytik) zum Portfolio gehören, sodass die Bearbeitungshistorie von Bauteilen in jedem Einzelschritt bekannt ist. So lassen sich akkurate Analysen durchführen und grundlegende Zusammenhänge finden.

Matthias Kachel

# Gruppe POLYMERTRIBOLOGIE UND BIOMEDIZINISCHE MATERIALIEN

Dr. Raimund Jaeger | Telefon +49 761 5142-284 | raimund.jaeger@iwm.fraunhofer.de

## ABRIEBMECHANISMEN VON ELASTOMEREN AUFKLÄREN

Die Lebensdauer von Elastomerbauteilen wird häufig durch deren Abriebbeständigkeit bestimmt: So müssen Reifen gewechselt werden, wenn das Profil abgefahren ist, und Transportbänder verschleißen im Kontakt mit Führungen oder Abstreifern. Eine abschließende Beurteilung der Abriebbeständigkeit eines Bauteils kann häufig nur durch aufwendige Praxistests erbracht werden, beispielsweise indem man neu entwickelte Reifen auf der Straße testet. Während der Materialentwicklung ist es jedoch wünschenswert, erste Aussagen zum Abriebverhalten anhand von kleinen Proben und beschleunigten Messverfahren zu gewinnen.

### Verschleiß von Elastomeren durch Ermüdungsrisswachstum

Im Rahmen eines Projekts zur Entwicklung eines Synthesekautschuks, der durch Zugabe geeigneter Biomoleküle ähnliche Eigenschaften wie Naturkautschuk erreichen soll, haben Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des Fraunhofer IWM einen Abriebprüfstand entwickelt, mit dem auch kleine Elastomermuster untersucht werden können. Die Versuchsanordnung ist eine Weiterentwicklung des Klingenabrasionstests, der als Methode zur Untersuchung des Elastomerabriebs etabliert ist.

Im Klingenabrasionstest überstreicht eine scharfe Klinge eine Elastomeroberfläche. Hierdurch entstehen auf der Oberfläche Riefen, die senkrecht zur Bewegungsrichtung der Klinge verlaufen. Durch das wiederholte Überstreichen dieser Strukturen mit der Klinge erfährt die Riefenstruktur eine Ermüdungsbelastung, die zur Ausbildung von Ermüdungsrissen und Ablösung von Partikeln führt, also einen Verschleiß der Oberfläche zur Folge hat. Wir haben die Klinge durch eine Stahlkugel ersetzt, die auf der Elastomeroberfläche gleitet. Diese Belastungsanordnung erzeugt ebenfalls eine Riefenstruktur und Materialabrieb durch Ermüdungsrisse. Die Spannungssituation, die durch den Kontakt mit der Kugel in der Elastomerprobe entsteht, lässt sich jedoch definierter einstellen und besser durch Finite-Elemente-Simulationen analysieren. Mit dieser Methode konnten verschiedene Modifikationen eines Elastomercompounds hinsichtlich ihrer Abrasionsbeständigkeit differenziert werden. Abbildung 1 zeigt den kumulativen Abrieb in Abhängigkeit von der Anzahl der Überstreichungen: Er steigt im Wesentlichen linear an; der Einfluss der Modifikationen auf das Abriebverhalten wird deutlich sichtbar.

#### Dr. Raimund Jaeger, Stefan Stiller



1 Höhenprofil nach Kugelabrasionsversuch eines Gummis (oben), kumulativer Abrieb in Abhängigkeit von der Anzahl der Überstreichungen für vier Variationen eines Elastomercompounds.

# Gruppe ANGEWANDTE NANOTRIBOLOGIE

Prof. Dr. Martin Dienwiebel | Telefon +49 721 204327-77 | martin.dienwiebel@iwm.fraunhofer.de

## **REIBUNG AUF EIS- UND SCHNEEUNTERGRÜNDEN MESSEN**

Moderne Skibeläge bestehen aus ultrahochmolekularem Polyethylen UHMWPE. Sie werden einer Vielzahl von erfahrungsgegründeten Schleif- und Wachsbehandlungen unterzogen, um den Ski bestmöglich an den Untergrund anzupassen und höhere Geschwindigkeiten zu erzielen. Doch was genau zwischen dem Skibelag und der Schneeoberfläche geschieht, ist bislang wenig verstanden.

### Messung der Ski-Schnee-Reibung

Um im Projekt »Snowstorm« diese tribologischen Zusammenhänge zu untersuchen, führten wir Messreihen an speziellen Tribometern bei Temperaturen von -20 °C bis zum Schmelzpunkt durch. Der Fokus der Forschung lag dabei auf dem Einfluss der Belagsstruktur und der einhergehenden Kontaktsituation auf den Reibungsprozess. Zur Variation dieser Einflüsse kamen verschiedene Steinschliffe sowie eigens entwickelte Oberflächenprägungen verschiedener Geometrie zum Einsatz. Der Gegenkörper bestand in unterschiedlichen Schneearten und Eis.

### Modellbildung und Optimierungsmöglichkeiten

Zur analytischen Beschreibung der tribologischen Vorgänge nutzten wir das aktuellste Reibungsmodell, das die Bildung von Reibungswärme und deren Umsetzung zu einem reibungssenkenden Wasserfilm enthält. Durch die Anpassung und Integration eines Kontaktmodells konnte die bislang unbekannte Rolle der realen Kontaktfläche auf den Reibungsvorgang gezeigt werden.

Der Vergleich zwischen den berechneten und den gemessenen Reibwerten zeigte einen linearen Zusammenhang und bestätigte die angenommenen Zusammenhänge (Abbildung 1). Die Erkenntnisse bieten ein großes Potenzial zur Optimierung des tribologischen Kontakts. Beim Gleiten des Ski über die Schneeoberfläche bringt die entstehende Reibungswärme die Schneekristalle in einer winzigen Schicht zum Schmelzen. Dieser Wasserfilm »schmiert« den Kontakt – damit ist die Temperatur auf dieser Mikro-Ebene wichtig für den Gleitvorgang. Zudem fanden wir heraus, dass die mikroskopisch kleinen Erhebungen, die das Schleifen auf dem Skibelag »stehen lässt«, eine möglichst geringe Anzahl haben sollten. Wobei jede der Erhebungen eine möglichst große Fläche aufweisen sollte. Auch bestimmte Füllstoffe, die den Skibelag härter und weniger leitfähig für Wärme machen, verringern die Reibung.

Dr. Roman Böttcher



 Vergleich der gemessenen und berechneten Reibungskoeffizienten μ von geprägten Skibelägen auf Eis bei der Geschwindigkeit von 1 m/s und einer Anpresskraft von 40, 60 und 80 N.

## Geschäftsfeld BAUTEILSICHERHEIT UND LEICHTBAU











## GRUPPEN

### **ERMÜDUNGSVERHALTEN, BRUCHMECHANIK**

Mit experimentellen und numerischen Methoden weisen wir die Strukturintegrität metallischer Bauteile und Schweißkonstruktionen unter statischer und zyklischer Belastung nach. Wir analysieren Schadensfälle, ermitteln Werkstoffkennwerte und validieren über Bauteilversuche schädigungs- und bruchmechanische Bewertungsmodelle. Dr. Michael Luke | michael.luke@iwm.fraunhofer.de

### **CRASHSICHERHEIT, SCHÄDIGUNGSMECHANIK**

Für die Crashsimulation entwickeln und implementieren wir Material- und Versagensmodelle für alle relevanten Werkstoffe und validieren diese durch geeignete Bauteilprüfungen. Dabei berücksichtigen wir relevante Einflüsse aus dem Fertigungsprozess auf das Materialverhalten.

Dr. Dong-Zhi Sun | dong-zhi.sun@iwm.fraunhofer.de

### CRASHDYNAMIK

Für CAE-unterstützte Entwicklungen, insbesondere für die Crashsicherheit von Leichtbaukomponenten, bestimmen wir mit innovativen Hochgeschwindigkeits-Prüf- und Messverfahren den Einfluss der Belastungsgeschwindigkeit auf das Verformungs- und Versagensverhalten.

Frank Huberth | frank.huberth@iwm.fraunhofer.de

### FÜGEVERBINDUNGEN

Wir charakterisieren die mechanischen Eigenschaften von mechanisch, thermisch und adhäsiv gefügten Werkstoffverbindungen, bewerten ihr Verformungs- und Versagensverhalten und entwickeln aussagekräftige Ersatzmodellierung für die Crashsimulation. Aus Mikrostrukturanalysen und Prozesssimulationen gewinnen wir wichtige Informationen aus dem Herstellungsprozess. Dr. Silke Sommer | silke.sommer@iwm.fraunhofer.de

### VERBUNDWERKSTOFFE

Wir charakterisieren und modellieren das Einsatz- und Versagensverhalten von Verbundwerkstoffen und Werkstoffverbunden. Unsere Prüfkonzepte berücksichtigen Mikrostruktur und Richtungsabhängigkeit dieser Werkstoffe. Auf numerischem Weg leiten wir experimentell schwer zugängliche Eigenschaften ab und ermitteln Belastungsgrenzen für Bauteile. *Dr. Jörg Hohe* | *joerg.hohe@iwm.fraunhofer.de* 



## GESCHÄFTSFELDLEITER

Dr. Michael Luke Telefon +49 761 5142-338 michael.luke@iwm.fraunhofer.de

## FOKUS

Die Bewertung der Sicherheit und der Gebrauchseignung von Bauteilen sowie die Qualifizierung neuer Leichtbauwerkstoffe stehen im Mittelpunkt unseres Aufgabenspektrums: von hochfesten Stählen über Aluminiumlegierungen bis zu Verbundwerkstoffen. Wir charakterisieren Werkstoffverhalten bei hohen Belastungsgeschwindigkeiten und erstellen Materialkarten. Für moderne Hybridbauweisen bieten wir die Charakterisierung, Simulation und Bewertung von Werkstoffverbunden und Fügeverbindungen an.

Die Anwendungen umfassen die Weiterentwicklung von Konzepten zur Bewertung der Ermüdungsfestigkeit von Komponenten aus dem Fahrzeug-, Anlagen- und Maschinenbau, die Crashbewertung von Fahrzeugkomponenten sowie Sicherheitsnachweise hoch beanspruchter Bauteile, beispielsweise in der Energietechnik und der Raumfahrt.

### **BEMERKENSWERTES AUS 2016**

Dr. Michael Luke leitet seit Januar 2016 das Geschäftsfeld. Der Experte für Festigkeit von metallischen und faserverstärkten Bauteilen hat vielbeachtete Arbeiten zur bruchmechanischen Bewertung von Radsatzwellen für Schienenfahrzeuge durchgeführt. Der vorherige Geschäftsfeldleiter Dr. Dieter Siegele ist nun Stellvertreter und hat bei einem viermonatigen Forschungsaufenthalt in den USA an der Lehigh-University in Bethlehem, Pennsylvania, seine Kompetenz zur Simulation von Schweißverbindungen vertieft, die er seitdem nutzbringend für unsere Kunden einbringt.

2016 bewerteten wir speziell das Langzeitverhalten polymerer Verbundwerkstoffe, ihre Kriechdeformation sowie Ermüdung unter mechanischer Belastung. Besonderes Augenmerk lag auf der Ableitung experimentell schwer zugänglicher Daten über geeignete Simulationen, beispielsweise von langfaserverstärkten Thermoplasten LFT. Wir arbeiteten an Simulationen zur Auslegung und Vorentwicklung von Leichtbaustrukturen. Im Leistungszentrum Nachhaltigkeit Freiburg qualifizieren wir innovative faserverstärkte Kunststoffe für den Leichtbau, beispielsweise der Automobilbranche.

Wir forschen verstärkt zu Defekten aufgrund von Herstellungsprozessen für Komponenten der Windenergie sowie der chemischen, Pipeline- und Offshore-Industrie und haben unsere bruchmechanische Bewertungs-Software VERB im Bereich Kriechermüdung weiter optimiert. Um die Crashsicherheit von Automobil-Komponenten noch detaillierter als bisher bewerten zu können, entwickelten wir Methoden zur Durchführung und Auswertung von Scher- und Torsionsversuchen bei hohen Belastungsgeschwindigkeiten.

»Uns ist es wichtig, die Eigenschaftsbeziehungen zwischen der Mikrostruktur und dem Materialverhalten für die Bewertung von Strukturbauteilen zu quantifizieren – im Betriebsoder Crashfall, beim Fügen und Schweißen oder nach Oberflächenbehandlung wie Kugelstrahlen, Hämmern oder Festwalzen.«

## Gruppe ERMÜDUNGSVERHALTEN, BRUCHMECHANIK

Dr. Michael Luke | Telefon +49 761 5142-338 | michael.luke@iwm.fraunhofer.de

## NEUE MIKROSTRUKTURBASIERTE BESCHREIBUNG: ENTSTEHUNG VON RISSEN IN SCHWEISSVERBINDUNGEN

Für die Auslegung geschweißter Bauteile sind Untersuchungen und Bewertungskonzepte, die sich mit dem Verhalten unter zyklischer Belastung befassen, von großer Bedeutung. Während etablierte bruchmechanische Verfahren, ausgehend von einem postulierten Anfangsriss, das weitere Kurz- und Langrisswachstum zwar zuverlässig beschreiben, die Rissentstehungsphase aber nicht berücksichtigen, wird am Fraunhofer IWM ein experimentell-numerischer Ansatz zur mikrostrukturbasierten Beschreibung der Rissentstehungsphase in Schweißverbindungen verfolgt. Durch Einbeziehung der Rissinitiierungsphase können verbesserte und weniger konservative Lebensdauerabschätzungen vorgenommen werden. Im Folgenden wird exemplarisch das im Übergang vom Grundwerkstoff zum Schweißgut (in der Wärmeeinflusszone) durch Spannungskonzentrationen an der Oberfläche induzierte Risswachstum betrachtet (Bild oben rechts), da dies in vielen Bauteilen versagenskritisch ist.

### **Probabilistischer Ansatz**

Im Bereich der Wärmeeinflusszone (WEZ) breiten sich Risse in polykristallinen Gefügezuständen entlang von Gleitebenen aus. Daher ist von einer mikrostrukturbedingten Streuung in den Zyklenzahlen bis zum Erreichen einer vordefinierten Anrisstiefe auszugehen. Dem wird durch eine ausreichende Anzahl zufallsgesteuert generierter Finite-Elemente-Modelle mit variierender Kornstruktur und -orientierung (Bild oben rechts) und einer anschließenden probabilistischen Bewertung Rechnung getragen. So ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Gleitband aktiviert wird, abhängig von der jeweiligen Kornorientierung und dem Belastungszustand. Unter uniaxialer, zyklischer Belastung sind vor allem Gleitebenen, die 45° zur Belastungsrichtung geneigt sind, aufgrund der auftretenden maximalen Schubspannungen versagenskritisch. Für die Finite-Elemente-Analyse bedeutet dies, dass für jedes Korn



Berechnetes Risswachstum bei Spannungsamplituden von 100,
 und 300 MPa und einem Spannungsverhältnis von R = 0,1.



2 Mit dem probabilistischen Ansatz ermittelte Anrisszyklenzahlverteilungen für Anrisstiefen von 25 µm beziehungsweise 50 µm.



Geschweißter Stumpfstoß mit Rissinitiierung im Bereich der Wärmeeinflusszone (links) und Rissausbreitungsmodell (rechts).

mit seiner zufälligen kristallographischen Orientierung bezüglich der Belastungsrichtung das Gleitsystem zu bestimmen ist, welches diese Forderung mit der geringsten Winkelabweichung  $\alpha$  erfüllt. Im Folgenden wird eine polykristalline kubisch-raumzentrierte Kristallstruktur unter uniaxialer, zyklischer Belastung betrachtet. Unter Berücksichtigung ihrer zwölf Gleitsysteme lassen sich die Auftrittswahrscheinlichkeiten für Rissausbreitungsebenen, die um den Winkel  $\alpha$  von der versagenskritischen 45°-Richtung unter uniaxialer Belastung abweichen, durch Drehung dieser Kristallstruktur im Raum ermitteln.

### Numerische Simulation der Rissentstehungsphase

Das zyklenabhängige Risswachstum wird im dugdaleschen Sinn durch eine vollständige Projektion der Schädigung im Modell in eine vordefinierte Rissausbreitungsebene, die sich im größten oberflächennahen Korn befindet und zufällig im Raum orientiert ist, berechnet. Zur Validierung des Modells haben wir Ermüdungsversuche an Mikroproben herangezogen, deren Prüfquerschnitt mit 450 × 200 µm den Maßen der Finite-Elemente-Modelle (Bild oben rechts) entspricht. Die sich aus den Rechnungen mit den verschiedenen Finite-Elemente-Modellen ergebenden Risstiefenverläufe sind in Abbildung 1 für drei verschiedene uniaxiale Belastungen bei einem Spannungsverhältnis von R = 0,1 dargestellt. Da in den einzelnen Finite-Elemente-Modellen Rissausbreitungsebenen auftreten, die hinsichtlich Rissinitiierung und Risswachstum besonders günstig oder auch ungünstig sind, ist eine sehr große Streuung in den ermittelten Zyklenzahlen zu erkennen.

### Nutzen der stochastischen Analyse für den Anwender

Für bruchmechanische Berechnungskonzepte ist insbesondere die Ausweisung der Streuung in den Zyklenzahlen für eine

angenommene Anrisstiefe von großem Interesse. Exemplarisch ist in Abbildung 2 eine Auswertung für eine Risstiefe von 25 µm beziehungsweise 50 µm dargestellt, wobei die Ergebnisse der einzelnen Finite-Elemente-Modelle gemäß den Auftrittswahrscheinlichkeiten ihrer Rissausbreitungsebenen gewichtet wurden. Im Gegensatz zu reinen Monte-Carlo-Analysen, bei denen alle Ergebnisse gleich gewichtet werden, kann somit unter deutlich reduziertem Rechenaufwand die Streuung auf Mikrostrukturebene bei der Ermittlung der Anrisszyklenzahlverteilung berücksichtigt werden. Ein effizientes probabilistisches Berechnungskonzept ist von großem Interesse, weil streuende Mikrostruktureigenschaften große Auswirkungen auf die Lebensdauer von Bauteilkomponenten haben, da bei einer Ermüdung lokale Spannungskonzentrationen, wie sie an Defekten, aber auch an Korngrenzen auftreten, rissinitiierend sind. Im Unterschied zu rein deterministischen Bewertungskonzepten bieten stochastische Finite-Elemente-Analysen den essentiellen Vorteil, die aus der Mikrostruktur resultierende Streuung auf die Bauteileigenschaften, wie die Lebensdauer, ermitteln und durch Verteilungsfunktionen ausweisen zu können.

Dr. Carla Beckmann, Dr. Michael Luke

### Gruppe FÜGEVERBINDUNGEN

Dr. Silke Sommer | Telefon +49 761 5142-266 | silke.sommer@iwm.fraunhofer.de

## MODELLIERUNG VON HYBRIDGEFÜGTEN VERBINDUNGEN FÜR DIE CRASHSIMULATION

Zur Realisierung der Anforderungen an Funktionalität und Gewicht werden im Automobilbau unterschiedliche Leichtbaustrategien eingesetzt. Eine davon ist die Multimaterialbauweise, die anforderungsabhängig Bauteile aus unterschiedlichen Werkstoffklassen kombiniert. Um die Eigenschaften der Werkstoffe optimal auszureizen, kommen Kombinationen etablierter Fügeverfahren zum Einsatz, die vorteilhaft für die jeweilige Anwendung sind. Eine solche Fügetechnikkombination, bezeichnet als Hybridfügen, ist das Stanznietkleben. Für einen effektiven Bauteil-Entwicklungsprozess ist eine frühzeitige Optimierung der gesamten Struktur hinsichtlich ihrer Crashsicherheit notwendig. Dazu sind genaue Kenntnisse über das Verbindungsverhalten unter Crashbelastung vonnöten. Diese können dann mit einer geeigneten Modellierungstechnik in den FEM-Simulationsmodellen abgebildet werden.

### Untersuchung des Fügeprozesses

Die Grundlage für ein Verständnis des Verbindungsverhaltens unter Crashbelastung ist die Kenntnis der werkstoffmechanischen Auswirkungen während der Herstellung der Verbindung im Fügeprozess. Die detaillierten numerischen Untersuchungen ermöglichen einen Einblick in das Deformationsverhalten des Nietelements. Auch kann eine Aussage über das Verdrängungsverhalten des Klebstoffs während der Fügung getroffen werden.

Hierzu wurde der Fügeprozess einer beispielhaften Stanznietklebverbindung in einem Simulationsmodell abgebildet. Durch die Gegenüberstellung mit Schliffbildern eines Stufensetzversuchs konnte gezeigt werden, dass das Simulationsmodell das reale Verhalten gut wiedergibt. Weiterführende Untersuchungen an Stanznietklebverbindungen basieren auf der endgültigen Ausprägung der Verbindung: Dabei werden in einem Detailmodell die Geometrie, die eingebrachten Span-



1 Kraftübertragung durch die Klebschicht unter Scherbeanspruchung in einer elementaren Klebverbindung und einer Stanznietklebverbindung im Detailmodell im Vergleich mit einer Ersatzmodellierung.



2 Berechnete Kraft-Verschiebungsverläufe unter Scherzugbeanspruchung einer Stanznietklebverbindung im Detail- und Ersatzmodell.



Schritte während des Fügeprozesses einer Stanznietklebverbindung in Simulation und Experiment (blau: Klebschicht).

nungen, die Vorverfestigungen oder auch weitere interessante Größen, beispielsweise die Vorschädigung, aus der Prozesssimulation durch ein Mapping-Verfahren berücksichtigt.

### Beurteilung des Verbindungsverhaltens

Das Verbindungsverhalten einer Hybridverbindung kann sich gegenüber den elementaren Fügeverfahren in zwei Punkten unterscheiden. Zum einen kann der kombinierte Einsatz von Fügeverfahren zu einer Beeinflussung des Fügeprozesses führen. Zum anderen ist eine Interaktion der Fügeverfahren unter Belastung möglich, die zu einem geänderten Verbindungsverhalten führt. Für die Wahl einer geeigneten Ersatzmodellierung ist vor allem die Kenntnis über die Interaktion der Fügeverfahren notwendig. Um die Interaktion zu untersuchen, werden Detailmodelle der Verbindung erstellt und anschließend unter crashrelevanten Belastungen simuliert. Detailmodelle können das globale Verhalten der Verbindung in die jeweiligen Beiträge der Kleb- und Niet-Verbindung unterteilen.

Der Vergleich dieser Komponenten mit dem Verhalten der elementaren Fügeverbindungen gibt Aufschlüsse über die gegenseitige Beeinflussung der Fügeverfahren unter einer Belastung. Zudem können einfache Variationen der Modelle erzeugt werden, wie das Entfernen des Niets oder der Klebschicht, die experimentell nicht umzusetzen wären. Auf der Basis der Simulationsergebnisse konnten Rückschlüsse über das Verhalten in der Verbindung gezogen werden: Beispielsweise konnten in der Simulation durch den Vergleich der Modelle unter Scherbeanspruchung gezeigt werden, dass nach Beginn des Klebschichtversagens eine Kraftumlagerung auf das Nietelement stattfindet. Diese hat eine Verlangsamung des Versagensfortschritts der Klebschicht zur Folge. Weitere Beeinflussungen der Verbindungen konnten nicht beobachtet werden. Dies erlaubt für die Crashsimulation die Abbildung der Verbindungskomponenten einer Stanznietklebverbindung durch die Kombination der Modelle der elementaren Fügeverfahren.

### Rückschlüsse für die Crashsimulation

Auf Basis von Untersuchungen des Verbindungsverhaltens an detaillierten Modellen konnte festgestellt werden, dass eine gesonderte Entwicklung eines Modells für Hybridverbindungen nicht notwendig ist. Die Kombination der etablierten Ersatzmodelle für die Kleb- und Nietverbindung ist als Modellierungstechnik ausreichend. Die Simulation der Probenversuche mit dem Ersatzmodell bestätigt, dass das im Detailmodell beobachtete Verbindungsverhalten auf diese Weise wiedergegeben werden kann (siehe Abbildung 1 und 2). So tritt auch im Ersatzmodell eine Belastungsumlagerung und eine damit verbundene Verlangsamung des Versagensfortschritts der Klebschicht auf.

Durch das beschriebene Vorgehen haben wir eine Vorgehensweise zur Modellierung von Stanznietklebverbindungen in der Gesamtfahrzeug-Crashsimulation abgeleitet. Somit steht nun ein Werkzeug zur Verfügung, das einen effektiven Entwicklungsprozess für Bauteile mit Stanznietklebverbindungen ermöglicht.

Dr. Silke Sommer, Matthias Bier

### Gruppe VERBUNDWERKSTOFFE

Dr. Jörg Hohe | Telefon +49 761 5142-340 | joerg.hohe@iwm.fraunhofer.de

## DESIGN VON LASTEINLEITUNGSELEMENTEN FÜR GROSSSERIEN-FÄHIGE SANDWICH-BAUTEILE

Um die Energieeffizienz von Fahrzeugkomponenten im Sinne einer nachhaltigen Mobilität weiter zu steigern, gewinnt der Leichtbau zunehmend an Bedeutung. Für flächige Strukturen, beispielsweise dem Fahrzeug-Unterboden, ist die Sandwichbauweise prädestiniert, weil sie eine besonders gute gewichtsbezogene Biegesteifigkeit aufweist. Eine typische Sandwichstruktur besteht aus zwei dünnen, aber steifen und festen Deckschichten als wesentliche lasttragende Elemente, die mit einem vergleichsweise dicken, aus einem leichten und nachgiebigen Material bestehenden Kern (zum Beispiel aus Kunststoffschaum) zu einem dreischichtigen Verbund gefügt sind. Für die Einleitung punktueller Lasten wie Anschraubungspunkte von Sitzen und Gurten sind allerdings spezialisierte Lösungen erforderlich, um eine Delamination der Deckschichten oder eine Beschädigung des empfindlichen Schaumkerns wirksam zu verhindern. Im Rahmen des BMBF-Verbundprojekts »SMiLE« wurden am Fraunhofer IWM verschiedene Konzepte zur Lasteinleitung auf ihre Tauglichkeit überprüft mit dem Ergebnis, dass die mechanische Festigkeit durch maßgeschneiderte Konzepte enorm gesteigert werden kann.

### Großserienfertigung in Thermoplastbauweise

Um eine großserienfähige Fertigung im Automobilbereich zu ermöglichen, wurde ein thermoplastisches Materialsystem für die Sandwichaufbauten ausgewählt, das effizient im Spritzguss- oder Fließpressverfahren verarbeitet werden kann. Für die Deckschichten wurden Lagenaufbauten unidirektionaler Kohlefasertapes auf Polyamidbasis berücksichtigt. Die Lasteinleitungselemente basieren auf einem diskontinuierlich langfaserverstärkten Thermoplast (LFT). Da thermoplastbasierte Verbundwerkstoffe bereits bei Raumtemperatur zum Kriechen neigen, wurde neben der statischen Festigkeit auch das zeitabhängige mechanische Verhalten berechnet, um die Strukturen für die jeweilige Anwendung abzusichern.



1 Referenzvariante (oben): Simulierte Kraft-Weg-Kurve und Einsetzen der verschiedenen Schadenskriterien (unten). Die Simulationen zeigen die Vergleichsspannung, auf Basis derer die Strukturen bewertet wurden (rot = Versagenskriterium erreicht).



2 Simulation der drei Varianten mit dem höchsten Leichtbaupotenzial: Schnitt durch das Element, der Schaumkern ist jeweils ausgeblendet. Die Farben zeigen die Vergleichsspannung, auf Basis derer die Strukturen bewertet wurden (rot = hoher Wert).





Mehrstufige Vorgehensweise ausgehend von der Skizze (links unten) über ein niedrig detailliertes Modell (links oben) bis hin zur finalen Geometrie (rechts).

#### **Mehrstufiges numerisches Screening**

Zur Ermittlung des optimalen Designs wurde ein mehrstufiges numerisches Konzept definiert und eingesetzt. Zunächst wurde eine Vielzahl möglicher, Erfolg versprechender Varianten identifiziert und hinsichtlich ihres Leichtbaupotenzials vergleichend bewertet. Dabei wurden verschiedene Konzepte betrachtet, die die Last nur in eine Deckschicht oder gleichzeitig in beide Deckschichten einleiten. Vergleichsweise simple Geometrien wie ein angeformter Dom oder angeklebte Bleche wurden ebenso wie ausgestaltete Elemente mit komplexer Geometrie untersucht. Die insgesamt zehn Ausgangsvarianten wurden in einer ersten Stufe vereinfacht abgebildet (Abbildung oben) und hinsichtlich ihres Leichtbaupotenzials bewertet. Dabei wurden in den Simulationen eine Last senkrecht zur Sandwichebene aufgeprägt und verschiedene Schadenskriterien ausgewertet. Diese waren das Versagen der Verrippung des Lasteinleitungselementes, des Schaumkerns und der Deckschichten sowie der Grenzschicht zwischen Lasteinleitungselement und Decklagen. In Abbildung 1 ist eine exemplarische Kraft-Weg-Kurve der Referenzvariante gezeigt, bei der die Last in die obere Deckschicht eingeleitet wird.

#### Varianten mit höchstem Leichtbaupotenzial

Die zehn Ausgangsvarianten wurden bezüglich ihrer gewichtsbezogenen Steifigkeiten und Festigkeiten bewertet und die drei besten Varianten identifiziert. Für diese erfolgte in der zweiten Stufe eine detaillierte Studie, bei der die Geometrie der Elemente weiter verfeinert und optimiert wurde. Verschiedene Arten der Verrippung wurden untersucht mit dem Ziel, die Steifigkeit des Elements auf die des Sandwichaufbaus anzupassen, um eine schonende und gleichmäßige Krafteinleitung in den dreischichtigen Verbund aus Kern und Deckschichten zu ermöglichen. Starke Steifigkeitssprünge, die ein Grenzflächenversagen zwischen Lasteinleitungselement und den Sandwich-Decklagen zur Folge hätten, werden somit vermieden. Als optimal stellten sich die Lasteinleitungselemente heraus, die im Innern des Sandwichs liegen und die Last großflächig in beide Deckschichten einleiten. Sie stützen somit im Bereich der Lasteinleitung den empfindlichen Kern und unterbinden ein Delaminieren der Deckschichten. Gegenüber der Referenzvariante (Abbildung 1), bei der die Kraft nur in eine Deckschicht eingeleitet wird, konnte eine erhebliche Steigerung der massebezogenen Festigkeit um bis zu 115 Prozent erreicht werden. Die in den Simulationen berechneten Spannungsverteilungen der drei besten Konzepte sind in Abbildung 2 dargestellt. Auf der Basis dieser Ergebnisse wurde das favorisierte Design in einem dritten Schritt optimiert. Mit diesem Design ist eine gleichmäßige Lasteinleitung in die Sandwichstruktur unter weitgehender Vermeidung unnötiger Spannungsspitzen möglich. Das verfolgte numerische Konzept leistet dabei einen erheblichen Beitrag zur Vermeidung kostenintensiver Trial-and-Error-Strategien und lässt sich somit in der Anwendung effizient zur Konstruktion auch komplizierter Lasteinleitungsstellen einsetzen.

Dr. Sascha Fliegener, Dr. Jörg Hohe

## Gruppe CRASHSICHERHEIT, SCHÄDIGUNGSMECHANIK

Dr. Dong-Zhi Sun | Telefon +49 761 5142-193 | dong-zhi.sun@iwm.fraunhofer.de

## CHARAKTERISIERUNG UND MODELLIERUNG DES BRUCHVERHAL-TENS VON ALUMINIUMFELGEN

Im Automobil-Leichtbau werden Aluminiumfelgen eingesetzt, die in einem Guss- oder Schmiedeverfahren mit anschließendem Flowforming-Prozess hergestellt wurden. Da das Versagensverhalten der Felgen auf die Radkinematik wirkt und dadurch das Crashverhalten des Gesamtfahrzeugs beeinflussen kann, ist die Versagensmodellierung von Aluminiumfelgen für die Prognose der gesamten Wirkkette des Systems von großer Bedeutung. Bei der Versagensmodellierung müssen sowohl die Einflüsse des Spannungszustands und der Dehnrate als auch die Inhomogenität der Materialeigenschaften, verursacht durch unterschiedliche Porosität und Verformungsgrade, berücksichtigt werden. Zur Validierung von verwendeten Werkstoff- und FE-Modellen sind aussagefähige Komponentenversuche an Felgen erforderlich.

### Versagenscharakterisierung und -modellierung

Zur Charakterisierung der Abhängigkeit des Versagensverhaltens vom Spannungszustand wurden verschiedene Probenversuche mit Messungen von Kräften, Verschiebungen und lokalen Dehnungen durchgeführt. Dabei wurde sowohl der Scher- als auch der Wabenbruch charakterisiert. Zusätzlich wurde die Ortsabhängigkeit der mechanischen Eigenschaften bestimmt. Durch inverse Simulationen der Probenversuche wurde eine Versagensfläche ermittelt (Bruchdehnung als Funktion der Mehrachsigkeit und des Lode-Parameters) und für die Komponentensimulationen zur Verfügung gestellt.

### Komponentenversuche und -simulation

Zur Validierung des verwendeten Versagensmodells wurden die Ergebnisse zweier Typen von Stauchversuchen an Felgen mit den entsprechenden Ergebnissen aus Simulationen verglichen. Bei dem ersten Versuchstyp wurde eine Felge zwischen zwei parallelen Platten mit 100 Prozent Überdeckung bis zum Versagen unter Druck belastet. Beim zweiten Versuchstyp wurde eine Felge zunächst mit 50 Prozent Überdeckung bis zu einer bestimmten Verschiebung und Versagen des Felgenbetts belastet und darüber hinaus mit 100 Prozent Überdeckung bis zum Versagen der Felgenspeichen. Dadurch wurde das Versagensverhalten einzelner Bereiche der Felge, beispielsweise Felgenbett, -horn und -speiche, unter einer komplexen Belastung charakterisiert. Als Beispiel zeigt Abbildung 1, dass sowohl das globale als auch das lokale Verformungs- und Bruchverhalten einer Aluminiumfelge unter Druckbelastung bei 100 Prozent Überdeckung mit den ermittelten Versagensparametern in der Komponentensimulation gut vorhergesagt werden kann.

### Dr. Dong-Zhi Sun, Dr. Dieter Memhard



#### Kraft in relativen Einheiten

<sup>1</sup> Kraft-Verschiebungskurven sowie Versagensbilder aus Experiment und Simulation (aus FE-Programm LS\_DYNA).

### Gruppe CRASHDYNAMIK

Frank Huberth | Telefon +49 761 5142-472 | frank.huberth@iwm.fraunhofer.de

## ADIABATISCHE ERWÄRMUNG BEI DYNAMISCHER RISSBEANSPRU-CHUNG

Der Sicherheitsnachweis bei Bauteilen aus ferritischen Stählen mithilfe des Masterkurven-Konzepts wurde am Fraunhofer IWM in zwei vom BMWi geförderten Projekten auch bei höheren Belastungsgeschwindigkeiten untersucht. Üblicherweise erfolgt dieser Sicherheitsnachweis für Kernkraftwerkskomponenten aus ferritischen Stählen bei quasistatischer Belastung. Die angewandte Masterkurve beschreibt dabei im spröd-duktilen Übergangsbereich die statistische Verteilung und Temperaturabhängigkeit von Rissinitiierungskennwerten. Bei zunehmender Rissbeanspruchungsrate, also schnellerer Belastung, verhält sich das Material zunehmend spröder, was eine Verschiebung der Masterkurve mit sich bringt.

Um diesen Effekt der Versprödung zu quantifizieren, wurde eine Vielzahl von dynamischen Rissinitiierungskennwerten bei unterschiedlichen Prüftemperaturen und Rissbeanspruchungsraten bestimmt. Es zeigt sich, dass auch die Form der aus den Kennwerten bestimmten Masterkurve bei dynamischer Belastung von der quasistatisch bestimmten Kurve abweicht und bei hohen Temperaturen steiler verläuft.

Ein Erklärungsansatz ist die bisher nicht berücksichtigte adiabatische Erwärmung der plastischen Zone in Rissspitzennähe bei dynamischer Belastung. Bei den sehr kurzen Versuchszeiten von unter einer Millisekunde kann die Wärme aus der Verformungsarbeit nicht abgeleitet werden, was die Materialeigenschaften lokal verändert.

### Simulation der dynamischen Bruchmechanikversuche

Dieser Effekt wurde durch einen kombinierten Ansatz aus Experiment, Fraktographie und Simulation näher untersucht. Das Temperaturfeld in der Nähe der Rissspitze wurde mithilfe einer Hochgeschwindigkeits-Infrarot-Kamera bei einer dynamischen Versuchsserie gemessen. Unter Berücksichtigung der Wärmeentwicklung und -leitung und des dehnratenabhängigen Verformungsverhaltens wurden die Versuche simuliert. Die sehr gute Übereinstimmung der gemessenen und berechneten Temperaturfelder bei Rissinitiierung ist in Abbildung 1 erkennbar.

Die ausführliche Quantifizierung dieses Effekts dient zur Weiterentwicklung eines lokalen Spaltbruchmodells zur Beschreibung des Rissverhaltens bei dynamischer Belastung. Darüber hinaus ist geplant, die Ergebnisse in einer Erweiterung der international angewandten ASTM-Norm E1921 zukünftig zu berücksichtigen.

Dr. Thomas Reichert, Johannes Tlatlik



1 Versuchsaufbau (links) und per Hochgeschwindigkeits-IR-Kamera gemessene Erwärmung der Rissspitze auf der Probenoberfläche unmittelbar vor Rissinitiierung und Ergebnis der Simulation des dynamischen Versuchs mit Berücksichtigung duktiler Schädigung (rechts).

## Geschäftsfeld WERKSTOFFBEWERTUNG, LEBENSDAUERKONZEPTE

## GRUPPEN



### MIKROSTRUKTUR, EIGENSPANNUNGEN

Wir untersuchen den Einfluss von Herstellungsverfahren und Betriebsbedingungen auf Mikrostruktur, Eigenspannungszustand und Integrität von Werkstoffen und Bauteilen und unterstützen bei der Werkstoffauswahl und der Optimierung von Werkstoffen.

Dr. Wulf Pfeiffer | wulf.pfeiffer@iwm.fraunhofer.de



### LEBENSDAUERKONZEPTE, THERMOMECHANIK

Durch mechanismenbasierte Werkstoff- und Lebensdauermodelle für die thermomechanische Ermüdungsbelastung ermöglichen wir verlässliche Vorhersagen in Bauteilsimulationen, sodass unsere Kunden Entwicklungskosten und -zeit sparen können.

Dr. Christoph Schweizer | christoph.schweizer@iwm.fraunhofer.de

### GESCHÄFTSFELDLEITER

Dr. Wulf Pfeiffer Telefon +49 761 5142-166 wulf.pfeiffer@iwm.fraunhofer.de



## FOKUS

Wir bewerten den Einfluss von Mikrostruktur, Eigenspannungen und Schädigung auf Funktionalität und Lebensdauer von Bauteilen. Besonderen Wert legen wir auf die Verknüpfung von Experimenten unter einsatznahen Belastungsbedingungen mit fortschrittlicher Werkstoffmodellierung. Hierbei spielt das Verständnis für die Anforderungen unserer Kunden an die Bauteile eine zentrale Rolle, beispielsweise für die Energieumwandlung und -speicherung oder bei der Werkstoffqualifizierung für die Verbrennungskraftmaschinen und die Kraftwerkstechnik.

Schwerpunkte unserer Arbeiten sind die Modellierung zyklischer thermomechanischer Beanspruchungen und die Aufklärung von Degradationsmechanismen der Korrosion, Spannungsrisskorrosion, Hochtemperaturkorrosion und Wasserstoffversprödung zur Lebensdauervorhersage und -optimierung. Bei akuten Schadensfällen unterstützen wir unsere Kunden durch Gutachten. »Wir leisten einen enormen Beitrag zur regenerativen Energieversorgung: Mit hoch spezialisierter Werkstoffcharakterisierung und präziser Werkstoffsimulation klären wir die Effekte auf, die auf der Mikrostruktur-Skala in Werkstoffen wirken, und erarbeiten daraus Lebensdauerkonzepte für Anlagenkomponenten.«

### **BEMERKENSWERTES AUS 2016**

Mit der Unterstützung des Landes Baden-Württemberg bauen wir unser Wasserstofflabor weiter aus und damit unsere experimentellen Bewertungsmöglichkeiten zum Einfluss von Wasserstoff auf Werkstoff-Festigkeitseigenschaften. Im Konsortium HYPOS starteten wir ein vom BMBF mit einer knappen Million Euro gefördertes Projekt: Mit H2-PIMS erforschen wir den Einfluss von Wasserstoff auf die Sicherheit von bestehenden Erdgasrohrleitungen, wenn diese wasserstoffhaltige Gase führen. Zudem begann unser EU-Projekt RAISELIFE zur Steigerung der Lebensdauer solarthermischer Kraftwerke, in denen korrosive Solarsalzschmelzen als Energiespeicher und Wärmetransferflüssigkeit zum Einsatz kommen: Wir untersuchen Schlüsselmaterialien unter betriebsnahen Bedingungen und erarbeiten Empfehlungen für Verbesserungen. Wir konnten darüber hinaus das EU-Projekt Z-Ultra erfolgreich abschließen, in dem betriebstaugliche 12%-Chromstähle mit fein verteilten, stabilisierenden Z-Phasen entwickelt wurden. Unsere neue Simulations-Toolbox unterstützt Stahl-Entwickler, neue Legierungen zielgerichtet zu entwickeln.

## Gruppe MIKROSTRUKTUR, EIGENSPANNUNGEN

Dr. Wulf Pfeiffer | Telefon +49 761 5142-166 | wulf.pfeiffer@iwm.fraunhofer.de

## SCHÄDIGUNGSMECHANISMEN EINES GESCHWEISSTEN BAUSTAHLS MIT MIKROZUGPROBEN AUFGEDECKT

Die Rissentstehungsphase ist für eine Bauteilbewertung besonders wichtig. Diese ist insbesondere für Schweißverbindungen schwierig zu ermitteln, da hier, durch den Wärmeeintrag im Schweißprozess verursacht, verschiedene Gefügezonen (Grundwerkstoff, Wärmeeinflusszone, Schweißnaht) nebeneinander vorliegen, die stark unterschiedliche mechanische Eigenschaften besitzen. Für eine Bewertung sind genaue Kenntnisse über die Entstehung von Rissen vonnöten, da das bruchmechanische Konzept von einem vorhandenen Riss einer vorgegebenen Tiefe und Breite ausgeht. Dabei wird angenommen, dass die Ermüdungsrissausbreitung im Anfangsstadium entlang der Gleitebenen der einzelnen Körner erfolgt und auf der Basis der umgesetzten Arbeit bei mikroplastischer Wechselverformung beschreibbar ist. Diese Schädigungsmechanismen haben wir anhand intensiver Untersuchungen an einem typischen Feinkornbaustahl (S355NL) nachgewiesen.

### Herstellung und Tests von Mikroproben

Um die mechanischen Eigenschaften der einzelnen Gefügezonen zu untersuchen, stellten wir Mikrozugproben aus der Schweißnaht her. Die Vorgehensweise ist in Abbildung 1 dargestellt: Aus einer Schweißnaht wurden Probenscheiben getrennt und deren Dicken anschließend durch Schleifen und Polieren auf zirka 200 µm reduziert. Aus diesen Plättchen wurden durch Laserschneiden Mikrozugproben entnommen. Diese können anschließend im statischen Zugversuch oder auch zyklisch getestet werden. Wir haben dafür eine selbst entwickelte Apparatur verwendet: Die Verschiebung wird über einen Piezoaktor eingeleitet, der auf einem Linearmotor sitzt; die Kraft wird über eine Kraftmesszelle gemessen. Mithilfe eines angeschlossenen Mikroskops wurde über Bildkorrelation (Digital Image Correlation, DIC) die Dehnung der Probe berechnet. Es wurden Zugversuche mit konstanter



1 Einer Schweißnaht (oben) werden Mikrozugproben aus verschiedenen Gefügebereichen entnommen (Mitte) und in einer Miniaturzugprüfeinrichtung getestet (unten).



2 Ergebnisse aus Zugversuchen mit einer Dehnrate von 2x10<sup>-4</sup> 1/s (links), Bilder von Ermüdungstests (rechts): auf der Bruchfläche (oben) sind unterschiedliche Rissebenen je Korn sichtbar, die Rissinitiierung erfolgt transkristallin (EBSD, unten).



Lichtmikroskopische Aufnahme der unterschiedlichen Gefügezonen einer Schweißverbindung.

Abzugsgeschwindigkeit bis zum Bruch und zyklische Versuche bis zu einem signifikanten Abfall der Probensteifigkeit (erste Rissbildung) durchgeführt.

#### Ergebnisse aus mechanischen Tests an Mikroproben

In Mikrozugversuchen von Proben, die aus unterschiedlichen Wärmeeinflusszonen entnommen wurden, werden die stark unterschiedlichen mechanischen Eigenschaften der verschiedenen Gefügezonen sichtbar (siehe exemplarische Zugversuchskurven in Abbildung 2). Die Probe der schweißgutnahen Wärmeeinflusszone (Grobkorn-WEZ) weist eine vergleichsweise hohe Festigkeit und geringere Duktilität auf. Proben aus der eher feinkörnigen Wärmeeinflusszone (grundwerkstoffnahe WEZ) zeigen eine ausgeprägte Streckgrenze in Form einer Lüdersdehnung. Im Vergleich dazu weist eine Probe aus dem angrenzenden Grundwerkstoff keine Lüdersdehnung auf und hat die niedrigsten Werte bezüglich Streckgrenze und Zugfestigkeit. In zyklischen Versuchen wurden diese Mikroproben jeweils auf ihre Rissentstehung hin getestet und analysiert. Nach den mechanischen Tests wurden dazu die Bruchflächen der Proben im Rasterelektronenmikroskop (REM) und die Oberflächen der Proben zusätzlich mittels Elektronenrückstreubeugung (Electron Backscatter Diffraction – EBSD) untersucht. Dabei haben wir festgestellt, dass der Riss stets transkristallin startet. Danach wächst der Riss in den ersten Zyklen auch transkristallin weiter, wechselt dabei aber die Rissebene im nächsten, angrenzenden Korn.

### Einfluss der lokalen mikromechanischen Werkstoffeigenschaften auf die makroskopischen Eigenschaften

Die Ergebnisse erlauben es uns nun, eine detaillierte mechanismenbasierte Berechnung der Rissinitiierungsphase zu erstellen. Basierend auf den Erkenntnissen wurde eine detaillierte numerische Berechnungsprozedur erarbeitet, die das Kurzrisswachstum durch die polykristalline Mikrostruktur des Schweißgefüges auf mikromechanischer Ebene beschreibt. Die oben genannten experimentellen Analysen erlauben es zudem, die lokal unterschiedlichen Werkstoffeigenschaften getrennt von der Schweißnahtgeometrie beziehungsweise der Kerbwirkung des Schweißnahtübergangs zu analysieren und zu bewerten. Im Zuge dessen ist es möglich, den Einfluss der lokalen Werkstoffeigenschaften auf die makroskopischen Eigenschaften der gesamten Schweißnaht zu übertragen.

Dr. Johannes Preußner, Dr. Tobias Kennerknecht

### Gruppe LEBENSDAUERKONZEPTE, THERMOMECHANIK

Dr. Christoph Schweizer | Telefon +49 761 5142-382 | christoph.schweizer@iwm.fraunhofer.de

## LEBENSDAUERBEWERTUNG VON KRAFTWERKSKOMPONENTEN UNTER FLEXIBLER FAHRWEISE

Um die Schwankungen der Stromerzeugung aus regenerativen Quellen ausgleichen zu können, müssen konventionelle Kraftwerke häufiger und schneller an- und abfahren. Dadurch werden dickwandige Hochtemperaturkomponenten neben der herkömmlichen Kriechbelastung zusätzlich einer Wechselbeanspruchung ausgesetzt. Folglich müssen die heute verfügbaren Methoden zur Auslegung neuer und zur Restlebensdauerbewertung bestehender Komponenten hinsichtlich ihrer Eignung zur adäguaten Beschreibung der resultierenden Kriechermüdungsbeanspruchung überprüft und gegebenenfalls verbessert werden. In kürzlich abgeschlossenen FuE-Projekten wurde am Fraunhofer IWM ein fortschrittliches Konzept zur (Rest-)Lebensdauerbewertung von Kraftwerkskomponenten unter flexibler Fahrweise entwickelt und anhand von Bauteilversuchen validiert. Das Konzept besteht aus klassischen und betriebsähnlichen Laborversuchen, fortschrittlichen Modellen zur Beschreibung des Werkstoffverhaltens unter Kriechermüdung und aus Berechnungsroutinen zur effizienten Lebensdauerbewertung von Komponenten mit der Finite-Elemente-Methode. Das Konzept wurde bereits an einigen herkömmlichen und neuartigen Kraftwerkswerkstoffen erfolgreich erprobt.

### Betriebsähnliche Laborversuche

Zur Materialcharakterisierung haben wir einachsige Laborversuche an direkt aus Kraftwerkskomponenten entnommenen Proben durchgeführt. Dazu zählen neben isothermen und anisothermen Ermüdungsversuchen auch Experimente mit Haltezeiten oder langsamen Dehnraten, in denen gezielt zeitabhängige Effekte aktiviert werden. Außerdem kamen neuartige Versuche mit betriebsähnlichen Lastverläufen und Zyklenzeiten zum Einsatz. Der Lastverlauf in Abbildung 1 wurde beispielsweise der Belastung an der Innenseite einer dickwandigen Kraftwerkskomponente unter flexibler Fahrweise nachempfunden. Zum besseren Verständnis der Schädigungsentwicklung



1 Lastverlauf (oben) sowie Werkstoff- und Modellantwort (unten) eines Zyklus in einem betriebsähnlichen Kriechermüdungsversuch am Kraftwerksstahl P92 bei 600 °C.





2 Bleibende Dehnung in Umfangsrichtung (T > 550 °C, p > 50 bar): In der thermozyklischen Simulation beschleunigt sich das Kriechen gegenüber der statischen Simulation und stimmt mit den Messdaten gut überein.



Berechnete Verformung des MACPLUS Prüfkörpers (links), Schliffbild (Mitte) und Schädigungsvorhersage (rechts) im Bereich des unteren Radius.

haben wir klassische und betriebsähnliche Lasten auch in Risswachstumsversuchen auf sogenannte Corner-Crack-Proben aufgebracht. Die betriebsähnlichen Versuche unter anisothermen Bedingungen wurden zusätzlich zur Validierung der eingesetzten Modelle verwendet.

### Material berechenbar machen

Das Verformungs- und Schädigungsverhalten der untersuchten Werkstoffe modellierten wir anhand der gewonnenen Labordaten. Ein modifiziertes Modell vom Typ Chaboche konnte die Wechselverformung ebenso gut beschreiben wie das in den Versuchen zu beobachtende, zyklische Ver- und Entfestigen der Kraftwerkswerkstoffe. Des Weiteren ist eine Beschreibung der zeitabhängigen Effekte wie Relaxation und Kriechen möglich. Im Modell sind die Terme für Wechselplastizität und zeitabhängiges Verhalten außerdem gekoppelt, sodass eine Beschreibung der in den Kriechermüdungsversuchen gemessenen Verformung möglich ist (Abbildung 1 unten).

Für die Schädigungsmodellierung haben wir ein auf Risswachstum basiertes Lebensdauermodell benutzt. Dieses ist in der Lage, zeit- und temperaturabhängige Effekte auf den Rissfortschritt abzubilden. Zur Validierung des Lebensdauermodells wurden die Ergebnisse aus den Risswachstumsversuchen herangezogen. In der Regel konnten wir damit alle Ermüdungsversuche eines Werkstoffs unabhängig von Temperatur, Dehnraten oder Haltezeiten sowie die betriebsähnlichen Kriechermüdungsversuche einheitlich innerhalb eines Streubands mit Faktor zwei beschreiben.

#### **Bauteilverhalten simulieren**

Die eingesetzten Modelle sind in Routinen zur Anwendung in Finite-Elemente-Programmen implementiert. Dies ermöglicht Vorhersagen über die zu erwartenden Spannungen und Dehnungen sowie die Lebensdauer von Komponenten und deren Versagensorte. Damit lassen sich vergleichsweise einfach Lasten wie das Anfahren oder das Komponentendesign optimieren. Liegen Betriebsdaten vor, lassen sich Berechnungen zum bisherigen Lebensdauerverbrauch der Komponente durchführen.

So wurde zum Beispiel im Rahmen des EU-finanzierten MACPLUS Projekts ein Rohrprüfkörper aus P91 unter zyklischem Innendruck und starken Temperaturwechseln getestet, wobei wir das Bauteildesign sowie den Lastzyklus durch Vorausrechnungen gezielt festlegten. Außerdem wurde der Prüfkörper mit zahlreichen Dehnungs- und Temperaturmessstellen versehen, sodass eine Nachrechnung der Verformung und Schädigung infolge der aufgebrachten Kriechermüdungsbelastung möglich war. Abbildung 2 zeigt Ergebnisse dieser Nachrechnungen unter der Annahme einer rein statischen Belastung und überlagerter Kriechermüdungsbelastung. Die eingesetzten Modelle sind in der Lage, die Beschleunigung des Kriechens durch die Wechselbelastung sowie den Schadensort und die Zyklenzahl bis zum Versagen korrekt wiederzugeben.

Mit der beschriebenen Methode ließ sich außerdem für die Hochtemperatur-Werkstoff-Teststrecke II (HWT-II) im Großkraftwerk Mannheim der Lastzyklus für den zyklischen Teststreckenabschnitt von anfänglich 6 Stunden auf 105 Minuten optimieren. Der gewählte Lastzyklus führte wie vorhergesagt innerhalb der Betriebszeit zu deutlich sichtbaren (aber unkritischen) Rissnetzwerken an den Rohrinnenseiten.

Dr. Gerhard Maier, Heiner Oesterlin

## VERNETZUNG DES FRAUNHOFER IWM IN DER FRAUNHOFER-GESELLSCHAFT

#### Fraunhofer-Verbund MATERIALS

Der Fraunhofer-Verbund Werkstoffe, Bauteile – MATERIALS bündelt die Kompetenzen der materialwissenschaftlich orientierten Institute der Fraunhofer-Gesellschaft. Er ist einer von sieben Fraunhofer-Forschungsverbünden, in denen sich fachlich verwandte Institute organisieren.

Materialwissenschaft und Werkstofftechnik umfasst bei Fraunhofer die gesamte Wertschöpfungskette von der Entwicklung neuer und der Verbesserung bestehender Materialien über die Fertigungsverfahren im quasi-industriellen Maßstab, die Charakterisierung der Eigenschaften bis hin zur Bewertung des Einsatzverhaltens. Entsprechendes gilt für die aus den Materialien hergestellten Bauteile und deren Verhalten in Systemen.

In all diesen Feldern werden neben den experimentellen Untersuchungen in Labors und Technika gleichrangig die Verfahren der numerischen Simulation und Modellierung eingesetzt, dies über alle Skalen, vom Molekül bis zum Bauteil und zur Prozesssimulation. Stofflich deckt der Fraunhofer-Verbund MATERIALS den gesamten Bereich der metallischen, anorganisch-nichtmetallischen, polymeren und aus nachwachsenden Rohstoffen erzeugten Werkstoffe sowie Halbleitermaterialien ab.

Der Verbund setzt sein Know-how vor allem in den Geschäftsfeldern Energie und Umwelt, Mobilität, Gesundheit, Maschinenund Anlagenbau, Bauen und Wohnen, Mikrosystemtechnik und Sicherheit ein. Über maßgeschneiderte Werkstoff- und Bauteilentwicklungen sowie die Bewertung des kundenspezifischen Einsatzverhaltens werden Systeminnovationen realisiert. Mit strategischen Vorschauen unterstützt der Verbund die Entwicklung von Materialen und Technologien für die Zukunft. *Prof. Dr. Peter Gumbsch www.materials.fraunhofer.de* 

### Fraunhofer-Allianzen Allianz AdvanCer

Das Spektrum reicht von der Modellierung und Simulation über die anwendungsorientierte Entwicklung von keramischen Werkstoffen, Fertigungsprozessen und Bearbeitungstechnologien bis hin zur Bauteilcharakterisierung, Bewertung und zerstörungsfreien Prüfung unter Einsatzbedingungen. *Dr. Andreas Kailer* 

www.advancer.fraunhofer.de

### Allianz Batterien

Die Allianz entwickelt für elektrochemische Energiespeicher (Batterien, Superkondensatoren) technische und konzeptionelle Lösungen mit den Kompetenzfeldern Material, System, Simulation und Testung. *Dr. Leonhard Mayrhofer* 

www.batterien.fraunhofer.de

### Allianz Generative Fertigung

Generative Fertigungstechniken sind konventionellen Techniken bei der Herstellung maßgeschneiderter, komplexer Bauteile und Kleinserien in Flexibilität, Arbeits- und Materialaufwand überlegen. Die Allianz widmet sich der Entwicklung, Anwendung und Umsetzung generativer Fertigungsverfahren und Prozesse. Dr. Raimund Jaeger www.generativ.fraunhofer.de

### Allianz Leichtbau

Die Qualität einer Leichtbaustruktur ist wesentlich bestimmt durch ihre Werkstoffeigenschaften, die konstruktive Formgebung, ihre Bauweise und den Herstellungsprozess. Durch die Allianz wird die gesamte Entwicklungskette von der Werkstoffund Produktentwicklung über Serienfertigung und Zulassung bis hin zum Produkteinsatz betrachtet. *Dr. Michael Luke* 

www.fraunhofer.de/de/institute-einrichtungen/ verbuendeallianzen/Leichtbau.html



#### Allianz Nanotechnologie

Von der anwendungsorientierten Forschung bis zur industriellen Umsetzung werden beispielsweise multifunktionale Schichten für optische Anwendungen, den Automobilbau und die Elektroindustrie entwickelt. Metallische und oxidische Nanopartikel, Kohlenstoff-Nanoröhren und Nanokomposite werden in Aktuatoren, strukturellen Werkstoffen und biomedizinischen Anwendungen eingesetzt. Darüber hinaus beschäftigen wir uns mit Fragen der Toxizität und des sicheren Umgangs mit Nanopartikeln.

Prof. Dr. Michael Moseler www.nano.fraunhofer.de

### Allianz Numerische Simulation von Produkten, Prozessen

Die Fraunhofer-Allianz bearbeitet institutsübergreifende Aufgaben zur Entwicklung und Verbesserung von Simulationsverfahren. Sie bündelt zudem Kompetenzen aus dem luK-Bereich, das Werkstoff- und Bauteil-Know-how sowie Wissen aus der Oberflächen- und Produktionstechnik.

Dr. Claas Bierwisch www.nusim.fraunhofer.de

### Fraunhofer-Innovationscluster

### Innovationscluster Regional Eco Mobility 2030

Vier Fraunhofer-Institute erarbeiten und bewerten Konzepte für Individualmobilität gemeinsam mit dem Karlsruher Institut für Technologie KIT und zahlreichen Partnern aus der Wirtschaft. Schwerpunkte sind der lokal emissionsfreie Betrieb von Pkw, effiziente Antriebstechnik, Leichtbauweise, energieeffiziente Nutzung sowie energiewirtschaftliche Einbindung der Elektromobilität. Neben den technologischen Themen werden neue Mobilitätskonzepte und Geschäftsmodelle unter Berücksichtigung demografischer und soziologischer Aspekte entwickelt. *Dr. Michael Luke www.rem2030.de* 

## Fraunhofer-Leistungszentren

### 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 Institut für Technologie der Hochschule Karlsruhe 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. Peter Gumbsch www.profilregion-ka.de* 

## VERNETZUNG DES FRAUNHOFER IWM IN DER FRAUNHOFER-GESELLSCHAFT

### Fraunhofer-Projektgruppe NAS – Neue Antriebssysteme

Zwei Fraunhofer-Institute arbeiten an der Entwicklung von neuen, effizienteren Antriebskonzepten für mobile und stationäre Anwendungen. Forschungsbereiche sind hybride Antriebe und Elektromobilität sowie konventionelle Antriebe. Schwerpunkte sind die Entwicklung von Lösungen zur dezentralen stationären Energieversorgung für Antriebe und Wärmenutzung sowie der Leichtbau im Antriebsstrang, um die Effizienz zu steigern. Das Fraunhofer IWM entwickelt in diesem Zusammenhang verbesserte tribologische Konzepte für Antriebssysteme. *Prof. Dr. Matthias Scherge www.ict.fraunhofer.de/de/komp/nas.html* 

### Kooperation zwischen Max-Planck und Fraunhofer HEUSLER

Die Fraunhofer-Institute IMWS und IWM erforschen gemeinsam mit zwei Max-Planck-Instituten in Dresden und Halle, welche strukturellen und chemischen Möglichkeiten es gibt, um auf der Basis von intermetallischen Heusler-Phasen neuartige Materialien zu erzeugen, die gute hartmagnetische Eigenschaften haben, aber keine Seltenerd-Elemente enthalten. *Prof. Dr. Christian Elsässer* 

### Fraunhofer Vorlaufforschungsprojekte

### Fraunhofer-Discover FormGlas

Interaktionsflächen von mobilen Endgeräten oder Bedienelementen mit den üblichen glatten Glasoberflächen stoßen an Grenzen, da die Schalt- und Bediensektoren allein mit dem Auge erfasst werden müssen. Das Fraunhofer IWM erarbeitet die wissenschaftlich-technologischen Prozessgrundlagen für die Herstellung von Glasoberflächen mit haptischen Strukturen für innovative Touchscreens und realisiert Formteil-Prototypen. *Dr. Rainer Kübler* 

### Marktorientierte strategische Vorlaufforschung – MAVO Biomimetischer Synthesekautschuk in innovativen Elastomerkompositen – BISYKA

Fünf Fraunhofer-Institute verbessern synthetischen Kautschuk, um ihn leistungsfähig wie Naturkautschuk zu machen Untersucht wird, wie die natürlichen Proteine und Lipide für bestimmte Eigenschaften sorgen und wie sie im synthetischen Kautschuk genutzt oder ersetzt werden können. Das Fraunhofer IWM arbeitet dabei an experimentellen Verfahren zur Untersuchung der Abriebbeständigkeit der Elastomerkomposite. *Dr. Raimund Jaeger* 

### Ceramic Subsea Systems – CS<sup>3</sup>

Im Projekt »CS<sup>3</sup>« realisieren vier Fraunhofer-Institute Systemlösungen und Prüfverfahren für wartungsarme, langlebige Komponenten von Subsea-Anwendungen. Mit neuen Diamant-Keramik- und Hartmetall-Werkstoffen sollen Bauteileigenschaften erreicht werden, die einen sicheren Betrieb in bis zu 6000 m Tiefe ermöglichen. Das Fraunhofer IWM entwickelt Verbindungstechniken sowie Herstell- und Simulationsmethoden zu extrem korrosionsbeständigen Diamant-Keramiken, die hohen Temperaturen und Drücken standhalten. *Dr. Andreas Kailer* 



Rheometer mit drei Proben eines Kunststoffs.

### Skalierbare Perowskit-Technologie – Perotec

Drei Fraunhofer-Institute schaffen die technologischen Voraussetzungen für neuartige, photovoltaisch aktive Perowskit-Materialien für Anwendungen im Quadratmeter-Maßstab. Dazu müssen die Perowskit-Materialien großflächig geschützt vor Wasser, Sauerstoff und Ionendrift im Bauteil integriert und elektrisch kontaktiert werden, um eine neuartige lokal produzierbare Solarzelle zu demonstrieren. *Dr. Rainer Kübler* 

## Wirtschaftsorientierte Vorlaufforschung – WISA Laser-Mehrlagen-Engstspaltschweißen für Schlüsselkom-

ponenten zukünftiger energieeffizienter und ressourcensparender Hochtemperatur-Prozesse

Drei Fraunhofer-Institute entwickeln und qualifizieren das Laser-Mehrlagen-Engstspaltschweißen für dickwandige Hochtemperaturkomponenten aus Nickelbasiswerkstoffen. Das Fraunhofer IWM charakterisiert dabei das mechanische Verhalten von hergestellten Schweißverbindungen unter praxisrelevanten Beanspruchungen und entwickelt ein Lebensdauer-Prognose-Tool, mit dem sowohl der Zeitpunkt der Rissinitiierung als auch das Risswachstum in geschweißten Bauteilen unter flexibler Fahrweise vorhergesagt werden kann.

Dr. Gerhard Maier

### Fraunhofer-Leitprojekt

### Kritikalität Seltener Erden

Sieben Fraunhofer-Institute entwickeln effizientere Herstellungsprozesse für Hochleistungsmagnete, optimieren deren Bauteilauslegung und erforschen Recyclingmöglichkeiten. Ziel ist es, den Primärbedarf an schweren Seltenerd-Elementen bei zwei Demonstrator-Permanentmagneten zu halbieren. Das Fraunhofer IWM sucht Substitutionsmagnetmaterialien möglichst ohne Seltenerd-Elemente mit elektronentheoretischer Materialsimulation und elektronenmikroskopischer Materialcharakterisierung.

Prof. Dr. Christian Elsässer www.seltene-erden.fraunhofer.de

### Projekt der Fraunhofer-Zukunftsstiftung

### Diamant für Hochleistungsanwendungen der Zukunft Die Expertise der Fraunhofer-Gesellschaft zu künstlichen Diamanten soll für die Leistungselektronik eingesetzt und ausgebaut werden. Das Fraunhofer IWM entwickelt die Technologie zur Abscheidung von präzise orientierten kristallinen Metallschichten auf Substratoberflächen, auf denen dann bei

Projektpartnern einkristalline Diamantschichten abgeschieden werden können.

Dr. Frank Burmeister

### Projekt im zwanzig20 Verbundvorhaben Hydrogen Power Storage & Solutions East Germany – HYPOS

### Themenfeld »Transport-Speicherung«

HYPOS hat zum Ziel, die partielle Grundlastfähigkeit von Windund Photovoltaikstrom durch Speicherung und Verteilung von elektrochemisch erzeugtem Wasserstoff zu erreichen. Im Themenfeld »Transport, Speicherung« legt das Fraunhofer IWM die Strategie zur Umnutzung von Ferngasleitungen und Salzkavernenspeichern für den Betrieb mit wasserstoffhaltigen Gasen fest und bewertet und koordiniert die dazu vorgelegten Forschungsanträge.

Dr. Wulf Pfeiffer www.hypos-eastgermany.de

## **KERNKOMPETENZ**

### WERKSTOFF- UND BAUTEILCHARAKTERISIERUNG

Dr. Michael Luke | Telefon +49 761 5142-338 | michael.luke@iwm.fraunhofer.de

### Werkstoffe in ihrer inneren Struktur und ihrem globalen Verhalten erfassen

Die Voraussetzung, um Lösungen zur Verbesserung der Zuverlässigkeit und Lebensdauer von Werkstoffen und Bauteilen zu finden, ist, Werkstoffe in ihrer inneren Struktur zu erfassen. Das Fraunhofer IWM untersucht die Reaktion von Werkstoffen und Bauteilen auf mechanische, thermo- und chemomechanische sowie tribologische Belastungen und klärt Verformungs- und Versagensmechanismen auf. Die benötigten Werkstoffkennwerte erfasst und bewertet es in Korrelation zur Mikrostruktur und zu strukturverändernden Prozessen auf allen Größenskalen. Auf dieser Basis betreibt das Fraunhofer IWM Materialentwicklung sowie Prozess- und Verfahrensentwicklungen.

Die Kernkompetenz Werkstoff- und Bauteilcharakterisierung bezieht ihre Stärke aus der Fähigkeit, komplexe, über standardisierte Verfahren hinausgehende Prüf- und Analysemethoden zu entwickeln und anzuwenden und so den Anforderungen verschiedenster Simulationsansätze an Art und Güte der Versuchsdaten zu genügen. Die Grundlage dazu ist zum einen die Verfügbarkeit mechanischer Prüftechniken für ein sehr breites Spektrum an Temperatur-, Umgebungs- und Kraftbereichen sowie Belastungsgeschwindigkeiten und zum anderen die Expertise sowohl bei der Auswahl werkstoff- und einsatzgerechter Methoden der Charakterisierung als auch bei der Bewertung von Schädigungsentwicklungen. Die Bauteilprüfung berücksichtigt lokal unterschiedliche Werkstoffeigenschaften. Zudem werden bruchmechanische Fehlerbewertungen und Schadensanalysen durchgeführt.

Im Leistungsspektrum hervorzuheben sind die Erfassung und Bewertung mehrachsiger Beanspruchungszustände, die lokale Kennwertermittlung durch Mikroprüftechniken und Gefügeanalytik sowie die Expertise zur Rissausbreitung, die beispielsweise für die Entwicklung innovativer Trennverfahren genutzt wird. Das Portfolio ist ergänzt durch verschiedene hochauflösende Eigenspannungsanalysetechniken und die thermophysikalische und thermomechanische Charakterisierung.

### Mess- und Analysemöglichkeiten

Das Fraunhofer IWM arbeitet mit der modernsten am Markt verfügbaren Geräteausstattung und entwickelt spezifische Versuchsstände für individuelle Kundenanfragen.

### Statische und zyklische Werkstoff- und Bauteilcharakterisierung

- Statische Festigkeit, Mehrachsigkeitsparameter, Schwingfestigkeit, Bruchzähigkeit, Rissfortschritt und Torsionsfestigkeit mit servohydraulischen, elektrodynamischen und elektromechanischen Prüfmaschinen
- Fretting Fatigue mit Modul mit kombinierter Aufbringung geregelter Längs- und Querkräfte

- Bauteilfestigkeit mit einem Spannfeld mit servohydraulischen Zylindern und Torsionszylinder
- E-Modul, Speichermodul und Verlustmodul mit dynamischer mechanischer Analyse
- Eigenfrequenzen, Modalanalyse, Vibrationsprüfung und Schocktests mit klimatisierter Shakeranlage
- Dehnratenabhängigkeit mit Schnellzerreißmaschinen, Fallwerken und Kerbschlagbiegeversuchsständen
- Kriechverhalten mit temperierten und klimatisierten Prüfständen



### Thermomechanische Werkstoff- und Bauteilcharakterisierung

• Ermüdungslebensdauer, Fließgrenze, Zugfestigkeit, E-Modul und Rissfortschritt mit mechanischen beziehungsweise servohydraulischen Prüfmaschinen

### Mikromechanische Werkstoff- und Bauteilcharakterisierung

- E-Modul, Schwingfestigkeit und Probeneigenfrequenz, die sich mit dem Ermüdungsfortschritt ändert, mit Mikrozugapparaturen
- Position, Verschiebung und Dehnung mit Kameras, Mikroskopen, Rasterelektronenmikroskopen und digitaler Bildkorrelation

### Thermophysikalische Werkstoffeigenschaften

- Spezifische Wärmekapazität und quantitative Bestimmung von exothermen und endothermen Reaktionen mit Dynamischer Differenzkalorimetrie DSC
- Thermische Längenänderung und Bestimmung von Längenausdehnungskoeffizienten, Phasenumwandlungen und Umwandlungstemperaturen sowie temperaturabhängiger Dichteänderung mit Thermomechanischem Analysator
- Temperaturleitfähigkeit mit Laser-Flash-Apparatur LFA mit verschiedenen Gasatmosphären und Vakuum
- Thermomechanische Eigenschaften von Metallen mit »Gleeble 3150« in Gasatmosphären und im Hochvakuum
- Bauteilgeometrie mit 3D-Laserscanner zum optischen Scannen und berührenden Abtasten von Bauteilen, Auswertesoftware vergleicht direkt zwischen Scan und CAD-Teil

### Chemomechanische Werkstoff- und Bauteilcharakterisierung Hochvakuum

- Wasserstoffgehalt, Sauerstoffgehalt mit Wasserstoffbeziehungsweise Sauerstoffanalysator
- Wasserstoffgehalt, Bindungsenergien von Wasserstoff-Fallen, Unterscheidung von unterschiedlich stark getrapptem Wasserstoff mit Heißextraktions-Analysator für diffusiblen Wasserstoff / Thermische Desorptionsspektroskopie
- Diffusionskoeffizienten, Kinetische Konstanten der Wasserstoff-Fallen (Trap- und Release-Rate) mit Permeationsprüfstand

 Mechanische Eigenschaften bei Wasserstoffversprödung: Zug-, Kerbzug-, Ermüdungs-, Rissausbreitungsversuche sowie mechanisches Verhalten beschichteter Proben mit Servomechanischen Prüfmaschinen

### Metallographie (Mikrostrukturaufklärung)

- Chemische Zusammensetzung mit Tiefenprofilspektrometer GDOES
- Härte mit diversen Härtemessgeräten, Verfahren nach Vickers, Brinell, Knoop, Rockwell, Shore A; Nanohärte mit Nanoindenter (Vickers oder Kugeleindruck)
- Lokale chemische Zusammensetzung mit EDX, EDAX an definierten Punkten, entlang Linien oder mittels Elementmapping
- Partikel- und Porenanalyse (Volumenanteil, Größenverteilungen, Formfaktoren) mit Lichtmikroskopen mit Bildverarbeitungssystemen
- Kristall- und Kornorientierung, Textur, Korndeformation, Darstellung von Orientierungskarten mit EBSD

### Röntgenografische Eigenspannungsmessungen

- Eigenspannung, Textur, Phasenanalyse (speziell Restaustenit) und Tiefenverläufe mit stationären Röntgendiffraktometern für Metalle, Keramiken und unterschiedliche Phasen
- Eigenspannung mit mobilen Röntgendiffraktometern für Metalle, Keramiken und unterschiedliche Phasen
- Eigenspannungs-Mapping auf Messspuren bei komplizierter Oberflächengeometrie mit Roboter-Diffraktometer
- Eigenspannungstiefenverläufe mit Bohrlochgeräten und Ringkerngerät

### Pulvertechnologische Werkstoffbewertung

- Fließverhalten mit Trichterausflussversuch
- Schüttwinkel mit Schüttwinkelmesser
- Füllgrad mit Füllversuch
- Verdichtungsverhalten, Wandreibung mit Instrumentierter Matrize
- Sinterschwindung mit Lastdilatometer

## **KERNKOMPETENZ**

### WERKSTOFFMODELLIERUNG UND SIMULATION

Dr. Dirk Helm | Telefon +49 761 5142-158 | dirk.helm@iwm.fraunhofer.de

#### Werkstoffeigenschaften in Modelle umsetzen

Werkstoffmodelle und Simulationswerkzeuge sind notwendig, um Versuch-und-Irrtum-Schleifen in der Entwicklung von Werkstoffen, Bauteilen und Fertigungsverfahren zu vermeiden, komplexe Belastungsszenarien abzubilden oder zuverlässige Voraussagen zum Einsatzverhalten von bestehenden und in der Entwicklung befindlichen Werkstoffen und Bauteilen zu treffen.

Die relevanten Werkstoffeigenschaften ermittelt das Fraunhofer IWM meist experimentell, bestimmt die zugehörigen Modellparameter und entwickelt Methoden und Algorithmen. In virtuellen Testlabors werden die Eigenschaften von Werkstoffen sowie die Sicherheit und Lebensdauer von Bauteilen vorhergesagt. Mit der Prozesssimulation werden Fertigungsparameter und Werkzeuge für optimale Bauteileigenschaften angepasst. Das Fraunhofer IWM beschreibt entsprechendes Verformungs-, Schädigungs-, Bruch- und Funktionsverhalten von Werkstoffen und modelliert Mechanismen auf der Makro-, Mikro-, Meso- und Nanoskala bei Belastung von Bauteilen oder Materialsystemen wie Festkörpern, Flüssigkeiten, Pulvern oder Verbundwerkstoffen.

Das Kompetenzspektrum des Fraunhofer IWM reicht von der Quantenmechanik, Molekulardynamik bis zu Computational Physics, von Homogenisierungsmethoden bis zu Kontinuumsmodellen. Im Rahmen der Kontinuumsmechanik, der Materialtheorie, der Bruchmechanik und der Thermodynamik beschreiben wir das Verhalten von Werkstoffen auf makroskopischer Skala bis hin zu Fertigungsprozessen und Bauteilverhalten. Darin eingeschlossen sind Fragestellungen, die zu den Mehrfeldproblemen zählen: Exemplarisch seien hier Werkstoffe unter thermomechanisch oder -elektrisch gekoppelten Belastungszuständen genannt. Entscheidend für signifikante Verbesserungen und Innovationen bei Funktionalität, Zuverlässigkeit, Lebensdauer oder Wirtschaftlichkeit ist die integrale Betrachtungsweise beziehungsweise die Kopplung von Informationen aus verschiedenen Skalen und das Verfolgen der Veränderung von Werkstoffeigenschaften über mehrere Prozessschritte hinweg. Integrated Computational Materials Engineering ICME oder Integrierte Computergestützte Materialentwicklung ist das Werkzeug zur guantitativen Beschreibung der Zusammenhänge zwischen Prozessschritten, Materialmikrostruktur, Materialeigenschaften und Bauteilverhalten. Mit ICME kann die Veränderung der Werkstoffeigenschaften während des gesamten Bauteilentstehungsprozesses und während des Betriebs verfolgt und numerisch beschrieben werden. Auf dieser Basis kann das Fraunhofer IWM Schwachstellen in der Prozesskette und während der Lebensdauer ermitteln und beseitigen.

Beispielhafte Fragestellungen, die mit ICME gelöst werden können, sind:

- das Design von Werkstoffen
- die Berechnung der Mikrostrukturentwicklung
- die virtuelle Ermittlung von Materialdaten und die Entwicklung geeigneter Materialmodelle
- die virtuelle Vorhersage und reale Voreinstellung von Bauteileigenschaften wie Rissfreiheit, Konturgenauigkeit, Lebensdauer oder Crashfestigkeit
- die Optimierung von Werkzeugen und Prozessschritten zur Steigerung der Fertigungsausbeute



### Methoden

Für die Simulation nutzen wir einerseits kommerzielle und andererseits eigenentwickelte Software. Bei der Lösung der Simulationsaufgaben arbeiten wir mit:

- numerischen Methoden wie derjenigen der Finite Elemente-, der Finite-Differenzen- und Finite-Volumen-Methode
- netzfreien Methoden wie der Diskrete-Elemente-Methode
- Parameteridentifikation
- Maschinellem Lernen
- Thermokinetischen Simulationen
- Hochdurchsatzmethoden, High Troughput Screening

Insgesamt stehen Werkstoffmodelle für Metalle, Keramiken, Gläser, Verbundwerkstoffe, Halbleiter und biologische Materialien zur Verfügung. Hierzu zählen mikromechanische Modelle zur Vorhersage der duktilen Schädigung in Metallen, Modelle zur Darstellung des Verhaltens von Metallen und Kunststoffen sowohl bei hohen Verformungsgeschwindigkeiten als auch unter Kriechbeanspruchung sowie Sprödbruchmodelle für hochfeste Stähle, Gusswerkstoffe, Keramiken, Gläser, Silizium und Verbindungshalbleiter. Wir beschreiben Mechanismen auf atomarer, mikrostruktureller oder makroskopischer Skala: Verformung, Verschleiß, Verfestigung, Ermüdung, Crash, Kriechen, Alterung, Schädigung, Versagen, Piezoeffekte, Diffusion, Migration, Phasenbildung und Gefügeentwicklung. Mit High-Throughput-Methoden finden wir effizient neue Materialien.

Für unsere Simulation steht ein High Performance Computing (Cluster) zur Verfügung.

### Simulationen zu Werkstoffeigenschaften und Werkstoffentwicklung

- Quantenmechanische Berechnungen und atomistische Simulationen von Werkstoffeigenschaften
- Mikrostruktur-Eigenschaftsbeziehungen
- Probabilistische Werkstoffsimulation
- Simulation von Verbundwerkstoffen
- Werkstoffverhalten unter Hochtemperatur
- Reibungs- und Verschleißprozesse

### Simulation des Bauteilverhaltens

- Probabilistische Bauteilsimulation
- Bruchmechanische Simulation rissbehafteter Bauteile
- Bauteilverhalten unter Hochtemperatur
- Verhalten von Schweißverbindungen
- Verhalten von Fügeverbindungen
- Crashsimulation metallischer Werkstoffe, Verbundwerkstoffe und Klebstoffe
- Vorhersage der Sicherheit und Lebensdauer von Bauteilen

### Fertigungs- und Prozesssimulation

- Mikrostrukturentwicklung
- Gefügeausbildung
- Wärmebehandlung
- Werkstoffdegradation
- Umformsimulation und Simulation umformtechnischer
   Prozessketten
- Schweißsimulation
- Simulation von Fügeprozessen
- Schichtwachstumssimulation
- Partikel- und Strömungssimulation
- Simulation pulvertechnolgischer Fertigungsschritte (Pulverschütten, Matrizenpressen, Sintern, Foliengießen)

## **KERNKOMPETENZ**

### TRIBOLOGIE UND OBERFLÄCHENDESIGN

Dr. Frank Burmeister | Telefon +49 761 5142-244 | frank.burmeister@iwm.fraunhofer.de

#### Oberflächen für mehr Funktionalität und Leistungsfähigkeit

Beanspruchungen in Fertigungsprozessen oder im Einsatz greifen häufig an den Oberflächen von Bauteilen an. Zudem können Oberflächen die Funktionalität eines technischen Systems bestimmen. Das Fraunhofer IWM verfügt über fundiertes Know-how sowie Methoden und Verfahren, um die Oberflächen von Bauteilen und Komponenten hinsichtlich der jeweils geforderten Eigenschaften einzustellen, beispielsweise für einen niedrigen Reibwert, eine bestimmte Oberflächenenergie oder eine gewünschte optische Anmutung.

Am Anfang einer kundenspezifischen Entwicklung steht meist die Aufklärung oberflächenbedingter Versagensmechanismen mithilfe moderner Versuchsstände oder der Aufbau völlig neuer Analysemethoden zur Oberflächencharakterisierung. Die Anwendung spezieller Simulationsverfahren unterstützt bei der Interpretation der experimentellen Beobachtungen, der Bewertung von Schadensfällen und verkürzt so die Zeiten für nachfolgende Schicht- und Verfahrensentwicklungen. Diese beinhalten leistungsfähige Beschichtungstechnologien sowie gezielte Randschichtmodifikationen und neue Bearbeitungsverfahren.

Das Fraunhofer IWM untersucht unterschiedlichste Fragestellungen, beispielsweise aus dem Bereich der Lagerherstellung, um möglichst schnell stabile Reibungsverhältnisse zu erreichen, Notlaufeigenschaften sicherzustellen oder eine möglichst lange Lebensdauer zu erreichen. Im Anlagen- und Maschinenbau beantwortet das Fraunhofer IWM Fragen nach Korrosionsmechanismen, Wirkungsgradverbesserungen sowie der Möglichkeit von Materialpaarungen. Für die Spritzguss- und Optikherstellung werden Verfahren zur schadensfreien Entformung entwickelt, online-Temperaturmessungen für Formwerkzeuge oder Oberflächen für Formgebungswerkzeuge, die gewünschte Bauteiloberflächeneigenschaften realisieren können. Neben der Qualifizierung von Schichten entwickelt das Fraunhofer IWM Beschichtungsmethoden zur gezielten Einstellung gewünschter Schichteigenschaften wie Oberflächentopografie und Mikrostruktur.

#### Mess- und Analysemöglichkeiten

Das Fraunhofer IWM arbeitet mit der modernsten am Markt verfügbaren Geräteausstattung und entwickelt spezifische Versuchsstände für individuelle Kundenanfragen.

Oberflächenfunktionalisierungen: Charakterisierung und Steuerung von Verschleiß, Benetzungsverhalten, optischer Anmutung, Glanzgrad oder Haptik von Bauteiloberflächen • Kontur- und Oberflächentopografie mit Rasterkraftmikroskop (AFM), Rasterelektronenmikroskop (REM), Profilometer und Rauheitsmesseinrichtung, Lichtmikroskop, Konfokal-Laserscanningmikroskop (CLSM), Weißlichtinterferometer (WLI), Interferometer mit Phasenschieber

- Oberflächenleitfähigkeit und wellenlängenabhängige Messung von Reflexion, Transmission und Farbe mit Hochohm-Widerstandsmessgerät, 4-Punkt-Widerstandsmessung, Glasfaserspektrometer und Wellenfrontmessplatz
- Beschichtung und Plasmabehandlung von Oberflächen mit reaktivem Magnetron-Sputter (HF, DC, Puls-DC), Ionenstrahltechniken, Elektronenstrahlverdampfer, PECVD-Anlagen und Plasmaätzer



Chemisch-mechanische Eigenschaften: Bewertung, Anpassung und Optimierung der Korrosionsstabilität, Adhäsion, Katalyse, Materialverträglichkeit, Diffusivität von Bauteiloberflächen

- Chemisch-strukturelle Zusammensetzung von Komponentenoberflächen und Schichten, ortsaufgelöst, tiefenabhängig sowie Phasenanalyse mit konfokalem Raman-Mikroskop, FTIR-Spektrometer, ICP-OES Optisches Emissionsspektroskop, Glimmentladungsspektrometer GDOES, Energiedispersives Röntgenspektroskop EDX, Röntgenphotoelektronenspektroskop XPS und Quadropolmassenspektrometer
- Messung von Oberflächenenergien und Kontaktverhalten mit Prüfständen für Glas- und Kunststoffkontakt sowie Kontaktwinkelmessgerät mit Temperaturmesszelle
- Korrosionsverhalten mit Atlas-Zellen-Prüfstand (cold wall effect), Hochspannungsporenprüfgerät Elcometer 266, Prüfstand für elektrochemisches Rauschen, Elektrolysezelle zur Messung der Wasserstoffdiffusion und Prüfstand zur Korrosion in heißen Salzschmelzen
- Anwendungsspezifisch angepasste Oberflächenkonditionierung mit Beschichtungen, Strahlprozessen (Metalle, Keramiken) und Wärmebehandlungsverfahren

### Mechanische Eigenschaften: Optimierung von Tribopaarungen, Bestimmung von Reibwert, Verschleißbeständigkeit, Notlaufeigenschaften, Schmierstoffstabilität, Frettingverhalten von Bauteilen im Einsatz

 Tribologisches Verhalten mit anwendungsspezifisch angepassten Tribo-Prüfständen: Kolbenring-Liner Simulator mit RNT (Radionuklid-Technologie), Stift-Scheibe-Tribometer mit RN-T Technologie, Gleitlager- und Komponentenprüfstand mit RN-T, Stift-Scheibe-, Wälzverschleiß und Kugellagerprüfstand, Oszillierende Gleitverschleißprüfeinrichtung, Mikrotribometer, Tribokorrosionsprüfstand, Hysitron Triboindenter TI 950, Oberflächentester Tetra BASALT MUST, BASALT HOMAT, selbstentwickelte UHV Mikrotribometer und Multiskalentribometer, Eistribometer, Rheometer, Motorenprüfstand

 Mechanische Eigenschaften von Randschichten und Beschichtungen wie Schichtdicke, Härte, Haftung, Eigenspannungen und E-Modul mit Schichtdickenmessung (Wirbelstrom, Magnetinduktiv), ScanningScratchTest SST, Abreißtest, Nanoindenter, Rockwell-Eindruck, Scratch, Kugeleindruck, Zygo-Interferometer zur Verwölbungsmes sung, Kugelschlag-Test und Mikromechanik-Prüfstand

### Beschichtung und Konditionierung von Oberflächen

 Erarbeitung und Aufbringung anwendungsspezifisch angepasster Beschichtungen, ggf. in Kombination mit geeigneter Oberflächenkonditionierung mit reaktiven Magnetron-Sputtern (HF, DC, Puls-DC) mit HF-Substratbiasing, Ionenstrahltechniken, Elektronenstrahlverdampfer, PECVD-Anlage, Plasma-CVD-Beschichtungsanlage CCP/ICP, Mehrkammerbeschichtungsanlage für Multilagenbeschichtungen und Hybridschichten, Plasmaätzanlage, Nasschemische Beschichtungsanlage (Spin-Coating, Rakelbeschichtung, Tauchbeschichtung), Ionenätzanlage zur Probenpräparation und Oberflächenbearbeitung, Ultra-Präzisionsdreh-, -schleif und -fräsmaschine zur Diamantbearbeitung von Formgebungswerkzeugen, Kugelstrahlanlage zur Verfestigung und Strukturierung von Oberflächen

#### **Preise und Ehrungen**

Werkstoffmechanikpreis 2016 der KSPG Automotive an Dr. Sascha Fliegener für seine Dissertation »Mikromechanische Modellierung von langfaserverstärkten Thermoplasten - Micromechanical finite element modeling of long fiber reinforced thermoplastics« 10.06.16, Freiburg

Preis der Stiftung Industrieforschung an Dr. Roman Böttcher für seine Dissertation »Zur Tribologie von strukturierten Skibelägen auf Eis und Schneenutzung « 23.06.16, Essen

#### Dissertationen

#### Maria Baiker

Karlsruher Institut für Technologie KIT Mikrostruktursimulationen zur Ermittlung von Materialeigenschaften für Blechwerkstoffe und Anwendung in der Umformsimulation

#### Sebastian Burget

Karlsruher Institut für Technologie KIT Modellierung des Verformungs- und Versagensverhaltens punktgeschweißter Mischverbindungen zwischen mikrolegierten und pressgehärteten Stählen

#### Davide Di Stefano

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg First-principles investigation of hydrogen interaction with metals

#### Fabian Lemke\*

Karlsruher Institut für Technologie KIT Untersuchung des Sinterverhaltens von SrTiO<sub>3</sub> unter Berücksichtigung der Defektchemie

#### Dominic Linsler

Karlsruher Institut für Technologie KIT Einlaufverhalten einer untereutektischen AlSi-Legierung unter Berücksichtigung des Randzonengefüges

#### Mario Metzger

Karlsruher Institut für Technologie KIT Mikrostruktur- und mechanismusbasierte Werkstoffmodelle zur Beschreibung des Deformationsund Lebensdauerverhaltens von thermomechanisch beanspruchten Grauqusswerkstoffen

#### Pit Polfer

Karlsruher Institut für Technologie KIT Entwicklung und Anwendung von SPH-Simulationsverfahren zur Untersuchung der Anisotropieentstehung beim Foliengießen

#### Frank Schweizer

Karlsruher Institut für Technologie KIT Simulation von Laserschweißprozessen zur Bewertung der wasserstoffbeeinflussten Kaltrissneigung hochfester Stähle Stefan Andreas Slaby Karlsruher Institut für Technologie KIT und Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Charakterisierung und Bewertung der Zug- und Ermüdungseigenschaften von Mikrobauteilen aus 17-4PH Edelstahl - Ein Vergleich von mikropulverspritzgegossenem und konventionell hergestelltem Material

#### Thomas Straub

Karlsruher Institut für Technologie KIT Experimental Investigation of Crack Initiation in Face-Centered Cubic Materials in the High and Very High Cycle Fatigue Regime

#### Katrin Unterhofer\*

Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg Charakterisierung von makro- und mikroskaligen thermomechanischen Materialeigenschaften dünner Polymerfilme

## Robert-Alexander Benedikt-Vincent Ziebarth

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg Interactions between metallic impurities and extended defects in silicon from first-principles

#### (\*) vom Fraunhofer IWM betreute Arbeit, Autorin/Autor jedoch nicht am Fraunhofer IWM

#### Studentische Arbeiten Bachelor (B), Master (M), Diplom (D)

#### Misagh Amirzadeh\*

Karlsruher Institut für Technologie KIT Lokale Aluminium-Laserbehandlung (LAL)-Kurzzeitlösungsglühen (M)

#### Carsten Baars

Hochschule Offenburg Bestimmung der Werkstoffeigenschaften von Eiskristallen auf Basis von Mikro-Identationsversuchen (M)

#### Philipp Bähr

Hochschule Offenburg Ersatzmodellierungen von Fügeverfahren mit einseitiger Zugänglichkeit für die Gesamtfahrzeug Crashsimulation (B)

#### Erik Blaner

Karlsruher Institut für Technologie KIT Zum Einfluss des Flächeninhalts auf die Mischreibung von Polyethylen. The influence of area ratio to the mixed friction of polyethylene (M)

#### Marc Bühler

Hochschule Offenburg Rechnerische und experimentelle Untersuchung zu Schädigungsmechanismen von austenitischen Stahlgusswerkstoffen unter thermomechanischer Ermüdungsbelastung (M)

#### Tim A. Butcher

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg DFT-Examination of the Magnetic Properties of Intermetallic R-TM Phases with ThMn12 Structure (B)

#### Marius Dickele

Hochschule Offenburg und Pädagogischen Hochschule Freiburg Einfluss mechanischer Beanspruchung durch das Schleifen bei anschließender Kugelstrahlbehandlung auf den Eigenspannungszustand der Nickelbasislegierung Inconel 718 und den Vergütungsstrahl 25CrMo4 (M)

#### Christian Dorn\*

Karlsruher Institut für Technologie KIT Numerische Untersuchung der Versetzungsinteraktion zwischen zwei Gleitsystemen in einem Kontinuumsmodell (B)

#### Lukas Englert\* Karlsruher Institut für Technologie KIT Numerische Untersuchung zum Einfluss von Plastizität auf das Effektivverhalten instabiler Mikrostrukturen (B)

#### Markus Fäßler\*

Karlsruher Institut für Technologie KIT Ansätze zur Reibungsoptimierung und Verschleißreduktion des tribologischen Systems Radialwellendichtring / Rotorwelle (M)

#### Irina Feistritzer Technische Hochschule Nürnberg

Georg Simon Ohm Untersuchung des Einflusses des Ausgangszustands des Werkstoffes 42CrMo4 auf die Werkstoffeigenschaften nach einer induktiven Randschichthärtung (M)

#### Jan Föhrenbach

Hochschule Offenburg Fatigue life prediction of High Frequency Mechanical Impact (HFMI) treated Welded Joints by Numerical Simulation and Damage Mechanics Approaches (M)

#### Hannes Lukas Gauch Karlsruher Institut für Technologie KIT Implementierung und Validierung eines Ermüdungs-Degradationsmodells für kohlefaserverstärkte Kunststoffe (M)

Jhina Maritza Hernández Márquez Martin Luther Universität Halle-Wittenberg, Halle, und Anhalt University of Applied Sciences, Köthen Qualification of laser-sintered TPU for orthopedic insoles and shoe soles (M)

#### Eugen Hildebrandt\* Karlsruher Institut für Technologie KIT In Situ REM Studien von Graphen und hBN (M)

Hannes Holey\* Karlsruher Institut für Technologie KIT Untersuchung des Aufstauverhaltens von Versetzungsringen mit Hilfe eines Kontinuumsmodells (B)

#### Nicola Hüholt

Karlsruher Institut für Technologie KIT Reibungsverhalten von Polyetheretherketon gegen Stahl im geschmierten System. Tribological behaviour of Polyetheretherketone against steel in a lubricated system (B)

### Daniel Ilk

Hochschule Offenburg Charakterisierung von Diamantähnlichen Kohlenstoffschichten für die Anwendung im Hochtemperaturbereich (B)

#### Hemanth Janathanam

Universität Duisburg Essen Simulation of ductile damage using Ponte-Castaneda micro-mechanical model (M)

#### Ben Manaa Jihed\*

Karlsruher Institut für Technologie KIT Tribologische Charakterisierung von PVD-Hartstoffschichten aus den metastabilen Systemen VAIN und VAINC (D)

#### Daniel Kühn

Karlsruher Institut für Technologie KIT Reibungsverhalten von gefülltem Polyetheretherketon (PEEK) im geschmierten Kontakt mit 100Cr6 (M)

#### Daniel Kümmel

Karlsruher Institut für Technologie KIT Einlaufverhalten thermisch gespritzter Stahlschichten (M)

#### Bin Lin\*

Karlsruher Institut für Technologie KIT A study of the evolution of stress and facture of electrodes in lithiumion batteries during lithiation with finite element method (D)

#### Amadeus-Libero Linsler

Karlsruher Institut für Technologie KIT Einfluss von Amplitude und Normalkraft auf das Frettingverhalten einer AlMg-Legierung (B)

#### Julian Maier

Hochschule Mannheim Mikromechanische Verformungsmechanismen in austenitischem Stahlguss (M)

#### Patric Matz\*

Karlsruher Institut für Technologie KIT Bio-inspirierte Lasertexturierung und ihre tribologischen Eigenschaften (B)

#### Tobias Moser

Hochschule Offenburg Tribologische Erprobung und Bewertung von hochtemperaturbeständigen Werkzeugbeschichtungen (B)

#### Natalie Oberle

Hochschule Offenburg Tribologische Untersuchung ionischer Flüssigkeiten mit und ohne Graphene als Additivsystem in Schmierstoffen (B)

### PERSONEN, AUSBILDUNG, EREIGNISSE AM FRAUNHOFER IWM

Georg Ochs Karlsruher Institut für Technologie KIT Online Topographieentwicklung einer laserstrukturierten Oberfläche (B)

Philip Oedi

Karlsruher Institut für Technologie KIT DATA Mining von DFT-Berechnungen: Untersuchung und Modellierung von Zusammenhängen in Kristallstrukturen (B)

Simon Rebholz\*

Karlsruher Institut für Technologie KIT Tribologische Charakterisierung von Ticla-C-Nanokompositschichten für Anwendungen bei Temperaturen bis 300 Grad (B)

#### Philip Rochel

Karlsruher Institut für Technologie KIT Numerische Untersuchung prozessbedingter Einflussfaktoren auf das Tragverhalten von Stanznietverbindungen im Crashlastfall (M)

#### Sophie Schackert\*

Karlsruher Institut für Technologie KIT Einfluss der Kerbgeometrie auf das Ermüdungsverhalten der Nickelgusslegierung IN 100 (M)

#### Marius Schmidt

Hochschule Offenburg Paramentrisierte Methode zur automatischen Generierung eines CAD-Radialverdichterrades in Turboladern (B)

#### Stefan Schneider\*

Karlsruher Institut für Technologie KIT Tribologisches Verhalten von lasertexturiertem Alpha-Messing (M)

#### Amogh Sharma\*

Karlsruher Institut für Technologie KIT Tribologische Charakterisierung von TiC/crN Hartstoffschichten im Hinblick auf deren Einsatz in der Holzzerspanung (B)

#### Gunnar Steinberg\*

Karlsruher Institut für Technologie KIT Analyse eines elastisch-plastischen Materialmodells für spritzgegossene langfaserverstärkte Thermoplaste (M)

#### Florian Steinhart\*

Karlsruher Institut für Technologie KIT Charakterisierung des Einflusses verschiedener Laserparameter bei der Oberflächentexturierung von SiC- und Si3N4-Keramiken (B)

#### Stefan Stiller

Hochschule Rhein-Waal, Kleve Development of a laboratory test methodology to study the abrasion characteristics and mechanisms of tire tread compounds (B)

(\*) vom Fraunhofer IWM betreute Arbeit, Autorin/Autor jedoch nicht am Fraunhofer IWM

#### Gastwissenschaftlerinnen und Gastwissenschaftler

Dr. Adrianus Indrat Aria University of Cambridge, England

01.01. - 29.02.16

Steven Brid University of Southern California, CA, USA 10.06. - 30.06.16

Balwant-Singh Chauhan Indian Institute of Technology, Delhi, Indien 26.10. – 31.12.16

Fei Gao

Najing University, China 01.10. – 31.12.16

Nathan Heckman University of Southern California, CA, USA 10.06. - 12.08.16

Dr. Praveen Kumar Indian Institute of Science, Bangalore, Indien 10.05. - 09.07.16

Kai Meng Chinesische Akademie für Wissenschaften, Shenyang, China

01.01. - 14.10.16

Dr. Byeunggun Nam Hyundai MotorCompany, Korea 01.07. – 31.12.16

Prof. Dr. Jisen Qiao Lanzhou University of Technology, China 01.03. - 30.09.16

Dr. Hongwu Song Chinesische Akademie für Wissenschaften Shenyang, China 01.01. - 28.02.16

Dr. Jiri Svoboda Czech Academy of Science, Brünn, Tschechoslowakei 11.07. - 22.07.16

Kazuhito Yoshida Denso Corporation, Japan 13.06. - 17.06.16

#### Vorlesungen WS 2015/2016

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Electronic Structure of Condensed Matter I Prof. Dr. Christian Elsässer Karlsruher Institut für Technologie KIT

Tribologie Prof. Dr. Martin Dienwiebel, Prof. Dr. Matthias Scherge

Schweißtechnik Dr. Majid Farajian

Versagensverhalten von Konstruktionswerkstoffen: Verformung und Bruch Prof. Dr. Peter Gumbsch

Prozesssimulation in der Umformtechnik Dr. Dirk Helm

Kontaktmechanik Dr. Lars Pastewka

#### Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Größeneffekte in mikro- und nanostrukturierten Materialien Prof. Dr. Martin Dienwiebel, Prof. Dr. Peter Gumbsch

#### Universität Siegen

Composites I - Verbundwerkstoffe Dr. Jörg Hohe

#### Vorlesungen SS 2016

#### Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Mechanische Eigenschaften und Degradationsmechanismen / Mechanical Properties and Degradation Mechanisms Prof. Dr. Chris Eberl

Werkstofftechnologie Prof. Dr. Chris Eberl

Electronic Structure of Condensed Matter II Prof. Dr. Christian Elsässer

Computational Materials Physics I - Density Functional Theory Prof. Dr. Michael Moseler

Quantum Transport Dr. Michael Walter

Duale Hochschule Baden-Württemberg DHBW Karlsruhe

Numerische Methoden-FEM Frank Huberth

Hochschule Offenburg (FH) Schadenskunde Rolf Zeller

Karlsruher Institut für Technologie KIT

Atomistische Simulation und Molekulardynamik Prof. Dr. Peter Gumbsch, Dr. Lars Pastewka Mechanik heterogener Festkörper Dr. Ingo Schmidt

#### Universität Siegen

Composites II - Werkstoffverbunde Dr. Jörg Hohe

#### Vom Fraunhofer IWM organisierte Fachveranstaltungen

Workshop »Partikelsimulation für die industrielle Anwendung« 26. - 27.01.16, Freiburg

Kick-Off-Meeting »The European Materials Modelling Council EMMC-CSA« 26.09.16, Freiburg

Trend-Workshop »Skalenüberbrückende Simulation – Werkstoff Prozess Bauteil« 08.11.16, Bochum

#### Weitere öffentlichkeitswirksame Veranstaltungen

Girls' Day 2016 28.04.16, Freiburg

#### Messen mit Fraunhofer IWM-Beteiligung

glasstec 2016 - International trade fair for glass production processing products Fraunhofer Gemeinschaftsstand 20. - 23.09.16, Düsseldorf

#### **Erteilte Patente 2015**

Hagen, J.; Faber, T.; Kübler, R.; Kleer, G. Verfahren zum dauerhaften Verbinden zweier Komponenten durch Löten mit Glas- oder Metalllot Patent-Nr. EP2176185B1

Kraft, T.; Ziegler, T.; Schäfer, R.; Grzesiak, A.; Weking geb. Graf, C.; Visotschnig, R.; Refle, O.; Richter, H.-J.; Heinritz geb. Haderk, K. Verfahren zur Herstellung eines keramischen Formkörpers Patent-Nr. DE102011117005B4

#### Meier, S.

Verfahren zur Herstellung eines kohlenstoffhaltigen Schichtsystems sowie Vorrichtung zur Durchführung des Verfahrens Patent-Nr. DE102011009347B4

### VERÖFFENTLICHUNGEN IN REFERIERTEN ZEITSCHRIFTEN UND REFERIERTE VERÖFFENTLICHUNGEN AM FRAUNHOFER IWM

Adler, J.; Adler, O.; Kreif, M.; Cohen, O.; Grosso, B.; Hashibon, A.; Cooper, V.R. **Mini-review of electron density visualization** Physics Proceedia, Proceedings of the 28th Workshop on Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics (CSP2015) 68 (2015) 2-6

Amann, T.; Kailer, A.; Beyer-Faiß, S.; Stehr, W.; Metzger, B. Development of sintered bearings with minimal friction losses and maximum life time using infiltrated liquid crystalline lubricants Tribology International 98 (2016) 282-291

Amann, T.; Dold, C.; Kailer, A. **Potential controlled tribological behavior of water-based ionic liquids** Key Engineering Materials 674 (2016) 250-256

Beckmann, C.; Farajian, M.; Siegele, D.; Hohe, J. **Modelling and simulation of fatigue crack initiation in metallic joints based on crystal plasticity** Letters in Applied NanoBioScience 5/2 (2016) 354-357

Beckmann, C.; Hohe, J. A probabilistic constitutive model for closed-cell foams Mechanics of Materials 96 (2016) 96-105

Bedoya-Martínez, O.N.; Hashibon, A.; Elsässer, C. Influence of point defects on the phonon thermal conductivity and phonon density of states of Bi2Te3 Physica Status Solidi A 213/3 (2016) 684–693

Breinlinger, T.; Kraft, T. Coupled discrete element and smoothed particle hydrodynamics simulations of the die filling process Computational Particle Mechanics 3/4 (2016) 505-511

Bremerstein, T.; Potthoff, A.; Michaelis, A.; Schmiedel, C.; Uhlmann, E.; Blug, B.; Amann, T. Wear of abrasive media and its effect on abrasive flow machining results Wear 342-343 (2015) 44-51

Brink, A.; Lichtenberg, K.; Scherge, M. The influence of the initial near-surface microstructure and imposed

stress level on the running-in characteristics of lubricated steel contacts Wear 360-361 (2016) 114-120

Butz, A.; Pagenkopf, J.; Baiker, M.; Helm, D.

The concept of virtual material testing and its application to sheet metal forming simulations

Journal of Physics: Conference Series (JPCS), NUMISHEET 2016: 10th International Conference and Workshop on Numerical Simulation of 3D Sheet Metal Forming Processes 734/Part B (2016) 032107 1-4

Caccamo, L.; Cocco, G.; Martín, G.; Zhou, H.; Fundling, S.; Gad, A.; Mohajerani, M.S.; Abdelfatah, M.; Estradé, S.; Peiró, F.; Dziony, W.; Bremers, H.; Hangleiter, A.; Mayrhofer, L.; Lilienkamp, G.; Moseler, M.; Daum, W.; Waag, A.

Insights into interfacial changes and photoelectrochemical stability of InxGa1-xN (0001) photoanode surfaces in liquid environments ACS Applied Materials & Interfaces 8/12 (2016) 8232–8238

Di Stefano, D.; Mrovec, M.; Elsässer, C. First-principles investigation of quantum mechanical effects on the diffusion of hydrogen in iron and nickel Physical Review B 92/22 (2015) 224301 1-8

Di Stefano, D.; Nazarov, R.; Hickel, T.; Neugebauer, J.; Mrovec, M.; Elsässer, C. **First-principles investigation of hydrogen interaction with TiC precipitates in**  $\alpha$ -Fe Physical Review B 93 (2016) 184108 1- 4

Echlin, M.P.; Titus, M.; Lenthe, W.C.; Straw, M.; Gumbsch, P.; Pollock, T.M. Femtosecond laser damage in metals and semiconductors during TriBeam tomography Microscopy and Microanalysis 22/3 (2016) 148-149

Fischer, C.; Schweizer, C.; Seifert, T. A crack opening stress equation for in-phase and out-of-phase thermomechanical fatigue loading International Journal of Fatigue 88 (2016) 178-184 Fliegener, S.; Hohe, J.; Gumbsch, P. **The creep behavior of long fiber reinforced thermoplastics examined by microstructural simulations** Composites Science and Technology 131 (2016) 1-11

Frenzel, T.; Findeisen, C.; Kadic, M.; Gumbsch, P.; Wegener, M. Tailored buckling microlattices as reusable light-weight shock absorbers Advanced Materials 28/28 (2016) 5865-5870

Gagel, J.; Weygand, D.; Gumbsch, P. Formation of extended prismatic dislocation structures under indentation Acta Materialia 111/3 (2016) 399–406

Gänser, H.-P.; Maierhofer, J.; Tichy, R.; Zivkovic, I.; Pippan, R.; Luke, M.; Varfolomeev, I. Damage tolerance of railway axles - The issue of transferability revisited International Journal of Fatigue 86 (2016) 52-57

Greiner, C.; Liu, Z.; Strassberger, L.; Gumbsch, P. Sequence of Stages in the Microstructure Evolution in Copper under Mild Reciprocating Tribological Loading ACS Applied Materials & Interfaces 8/24 (2016) 15809-15819

Grosso, B.; Cooper, V.R.; Pine, P.; Hashibon, A.; Yaish, Y.; Adler, J. Visualization of electronic density Computer Physics Communications 195 (2015) 1-13

Hashibon, A.; Breinlinger, T.; Schubert, R.; Kraft, T. A DEM contact-model for history-dependent powder flows Computational Particle Mechanics 3/4 (2016) 437-448

Hirel, P.; Mark, A.F.; Castillo-Rodriguez, M.; Sigle, W.; Mrovec, M.; Elsässer, C. Theoretical and experimental study of the core structure and mobility of dislocations and their influence on the ferroelectric polarization in perovskite KNbO3 Physical Review B 92/21 (2015) 214101 1-12

Hirte, T.; Feuerfeil, R.; Perez-Solorzano, V.; Wagner, T. A.; Scherge, M. Influence of composition on the wear properties of boron carbonitride (BCN) coatings deposited by high power impulse magnetron sputtering Surface and Coatings Technology, The 42nd International Conference on Metallurgical Coatings and Thin Films 284 (2015) 94-100

Hohe, J.; Fliegener, S.; Findeisen, C.; Reiser, J.; Widak, V.; Rieth, M. Numerical exploration into the potential of tungsten reinforced CuCrZr matrix composites Journal of Nuclear Materials 470 (2016) 13-29

Hüggenberg, D.; Speicher, M.; Klenk, A.; Zickler, S.; Schwienheer, M.; Wang, Y.; Schmitt, P.; Oesterlin, H.; Maier, G.; Nieweg, B. Hochtemperatur-Werkstoff-Teststrecke II (HWT II) – Begleitende experimentelle und numerische Untersuchungen an Werkstoffen und Komponenten VGB PowerTech Journal 8 (2015) 52-62

Jamin, C.; Rasp, T.; Kraft, T.; Guillon, O. Constrained sintering of alumina stripes on rigid substrates: Effect of substrate roughness and coating Journal of the American Ceramic Society 98/12 (2015) 3988-3995

Kabel, M.; Fliegener, S.; Schneider, M. **Mixed boundary conditions for FFT-based homogenization at finite strains** Computational Mechanics 57/2 (2016) 193-210

Kailer, A.; Stephan, M.

On the feasibility of the Chevron Notch Beam method to measure fracture toughness of fine-grained zirconia ceramics Dental Materials 32/10 (2016) 1256–1262

Kertsch, L.; Helm, D. **Modelling grain growth in the framework of Rational Extended Thermodynamics** Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering MSMSE 24/4 (2016) 45001-45017

### VERÖFFENTLICHUNGEN IN REFERIERTEN ZEITSCHRIFTEN UND REFERIERTE VERÖFFENTLICHUNGEN AM FRAUNHOFER IWM

Khamassi, J.; Bierwisch, C.; Pelz, P. Geometry optimization of branchings in vascular networks Physical Review E 93/6 (2016) 062408 1-10

Klitschke, S.; Böhme, W. Deformation and damage behavior of lightweight steels at high rate multiaxial loading Materials Testing 58/3 (2016) 173-181

Kohal, R. J.; Bachle, M.; Renz, A.; Butz, F. Evaluation of alumina toughened zirconia implants with a sintered, moderately rough surface: An experiment in the rat Dental Materials 32/1 (2016) 65-72

Körner, W.; Krugel, G.; Elsässer, C. **Theoretical screening of intermetallic ThMn12-type phases for new hard-magnetic compounds with low rare earth content** Scientific Reports 6 (2016) 24686 1-9

Kozinsky, B.; Akhade, S.A.; Hirel, P.; Hashibon, A.; Elsässer, C.; Mehta, P.; Logeat, A.; Eisele, U. Effects of sublattice symmetry and frustration on ionic transport in garnet solid electrolytes Physical Review Letters 116/5 (2016) 055901 1-5

Kürten, D.; Winzer, N.; Kailer, A.; Pfeiffer, W.; Spallek, R.; Scherge, M. In-situ detection of hydrogen evolution in a lubricated sliding pin on disk test under high vacuum Tribology International 93/Part A (2016) 324–331

Lienhard, J.; Böhme, W. Characterisation of resin transfer moulded composite laminates under high rate tension, compression and shear loading Engineering Fracture Mechanics 149 (2015) 338-350

Luke, M.; Burdack, M.; Moroz, S.; Varfolomeev, I. Experimental and numerical study on crack initiation under fretting fatigue loading International Journal of Fatigue 86 (2016) 24-33

Malfait, W.J.; Klemencic, R.; Lang, B.; Rist, T.; Klucka, M.; Zajacz, Z.; Koebel, M.M.

Optimized solder alloy for glass-to-metal joints by simultaneoussoldering and anodic bonding Journal of Materials Processing Technology 236 (2016) 176–182

Mayrhofer, L.; Moras, G.; Mulakaluri, N.; Rajagopalan, S.; Stevens, P. A.; Moseler M.

Fluorine-terminated diamond surfaces as dense dipole lattices: The electrostatic origin of polar hydrophobicity Journal of the American Chemical Society 138/12 (2016) 4018–4028

Medvedev, A.E.; Molotnikov, A.; Lapovok, R.; Zeller, R.; Berner, S.; Habersetzer, P.; Dalla Torre, F.

Microstructure and mechanical properties of Ti–15Zr alloy used as dental implant material

Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials 62 (2016) 384–398

Mehta, M.; Kodan, N.; Kumar, S.; Kaushal, A.; Mayrhofer, L.; Walter, M.; Moseler, M.; Dey, A.

Hydrogen treated anatase TiO2: a new experimental approach and further insights from theory

Journal of Materials Chemistry A 4/7 (2016) 2670-2681

Mettenboerger, A.; Gonullu, Y.; Fischer, T.; Heisig, T.; Sasinska, A.; Maccato, C.; Carraro, G.; Sada, C.; Barreca, D.; Mayrhofer, L.; Moseler, M.; Held, A.; Mathur, S.

Interfacial insight in multi-junction metal oxide photoanodes for water splitting applications Nano Energy 19 (2016) 415-427

#### Metzger, M.; Seifert, T.

Computational assessment of the microstructure-dependent plasticity of lamellar gray cast-iron-Part III: A new yield function derived from microstructure-based models

International Journal of Solids and Structures 87 (2016) 102-109

Olsson, P. A.T.; Mrovec, M.; Kroon, M. First principles characterisation of brittle transgranular fracture of titanium hydrides Acta Materialia 118 (2016) 362-373

Othmani, Y.; Böhlke, T.; Lube, T.; Fellmeth, A.; Chlup, Z.; Colonna, F.; Hashibon, A. Analysis of the effective thermoelastic properties and stress fields in silicon nitride based on EBSD data Journal of the European Ceramic Society 36/5 (2016) 1109-1125

Pagenkopf, J.; Butz, A.; Wenk, M.; Helm, D. Virtual testing of dual-phase steels: Effect of martensite morphology on plastic flow behavior Materials Science and Engineering: A 674 (2016) 672-686

Pastewka, L.; Robbins, M.O. Contact area of rough spheres: Large scale simulations and simple scaling laws Applied Physics Letters 108/22 (2016) 22160 1-5

Peguiron, A.; Moras, G.; Walter, M.; Uetsuka, H.; Pastewka, L.; Moseler, M. Activation and mechanochemical breaking of C-C bonds initiate wear of diamond (110) surfaces in contact with silica Carbon 98 (2016) 474-483

Peranio, N.; Eibl, O.; Bäßler, S.; Nielsch, K.; Klobes, B.; Hermann, R. P.; Daniel, M.; Albrecht, M.; Görlitz, H.; Pacheco, V.; Bedoya-Martinez, N.; Hashibon, A.; Elsässer, C. From thermoelectric bulk to nanomaterials: Current progress for Bi2Te3 and CoSb3

Physica Status Solidi A 213/3 (2016) 739-749

Polfer, P.; Fu, Z.; Breinlinger, T.; Roosen, A.; Kraft, T. Influence of the doctor blade shape on tape casting - Comparison between analytical, numerical and experimental results Journal of the American Ceramic Society 99/10 (2016) 3233–3240

#### Polfer, P.; Kraft, T.; Bierwisch, C.

Suspension modeling using smoothed particle hydrodynamics: accuracity of the viscosity furmulation and the suspended body dynamics Applied Mathematical Modelling 40/4 (2016) 2606-2618

Primc, D.; Zeng, G. B.; Leute, R.; Walter, M.; Mayrhofer, L.; Niederberger, M. Chemical substitution - Alignment of the surface potentials for efficient charge transport in nanocrystalline TiO2 photocatalysts Chemistry of Materials 28/12 (2016) 4223-4230

Raga, R.; Khader, I.; Chlup, Z; Kailer, A. Damage initiation and evolution in silicon nitride under non-conforming lubricated hybrid rolling contact Wear 360-361 (2016) 147–159

Renz, A.; Khader, I.; Kailer, A.

Tribochemical wear of cutting-tool ceramics in sliding contact against a nickel-base alloy Journal of the European Ceramic Society 36/3 (2016) 705-717

Riedel, H.; Svoboda, J. A model for strain hardening, recovery, recrystallization and grain growth with applications to forming processes of nickel base alloys Materials Science and Engineering: A 665 (2016) 175–183

Salje, E.K.H.; Li, S.; Stengel, M.; Gumbsch, P.; Ding, X. **Flexoelectricity and the polarity of complex ferroelastic twin patterns** Physical Review B 94/2 (2016) 024114 1-11

Savio, D.; Pastewka, L.; Gumbsch, P. Boundary lubrication of heterogeneous surfaces and the onset of cavitation in frictional contacts Science Advances 2/3 (2016) e1501585 1-5

Scherge, M.; Böttcher, R.; Kürten, D.; Linsler, D. **Multi-phase friction and wear reduction by copper nanoparticles** Lubricants 4/36 (2016) 14 Seiten Scherge, M.; Brink, A.; Linsler, D.

### VERÖFFENTLICHUNGEN IN REFERIERTEN ZEITSCHRIFTEN UND REFERIERTE VERÖFFENTLICHUNGEN AM FRAUNHOFER IWM

Tribofilms forming in oil-lubricated contacts

Lubricants, Special Issue: Tribofilms and Solid Lubrication 4/27 (2016) 9 Seiten

Schmitt, S.; Gumbsch, P.; Schulz, K. Internal stresses in a homogenized representation of dislocation microstructures

Journal of the Mechanics and Physics of Solids 84 (2015) 528-544

#### Schweizer, C.

Evolution equations for the C(t)-integral and the crack-tip opening displacement CTOD for elastic–viscoplastic material behavior and temperature dependent material properties Engineering Fracture Mechanics 157 (2016) 125-140

Slaby, S.A.; Kraft, O. Eberl, C.

Fatigue properties of conventionally manufactured and micro-powder-injection-moulded 17-4PH micro-components Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures 39/6 (2016) 780-789

Steier, V.F.; Ashiuchi, E.S.; Reißig, L.; Araújo, J.A. Effect of a deep cryogenic treatment on wear and microstructure of a 6101 aluminum alloy Advances in Materials Science and Engineering (2016) 1582490 1-12

Stoffers, A.; Ziebarth, B.; Barthel, J.; Cojocaru-Mirédin, O.; Elsässer, C.; Raabe, D.

Complex nanotwin substructure of an asymmetric 29 tilt grain boundary in a silicon polycrystal Physical Review Letters 115/23 (2015) 235502 1-5

Stoyanov, P.; Shockley, J.M.; Dienwiebel, M.; Chromik, R.R. Combining in situ and online approaches to monitor interfacial processes in lubricated sliding contacts MRS Communications 6/3 (2016) 301-308

Stricker, M.; Gagel, J.; Schmitt, S.; Schulz, K.; Weygand, D.; Gumbsch, P. On slip transmission and grain boundary yielding Meccanica 51/2 (2016) 271-278

Svoboda, J.; Fischer, F.D.; Riedel, H.; Kozeschnik, E. **Precipitate growth in multi-component systems with stress relaxation by diffusion and creep** International Journal of Plasticity 82 (2016) 112-126

Traupe, M.; Jenne, S.; Lütkepohl, K.; Varfolomeev, I. Experimental validation of inspection intervals for railway axles accompanying the engineering process International Journal of Fatigue 86 (2016) 44-51

Uppaluri, R.; Helm, D. Thermomechanical characterization of 22MnB5 steels with special emphasis on stress relaxation and creep behavior Materials Science and Engineering: A 658 (2016) 301-308

Urban, D.; Körner, W.; Elsässer, C. Mechanisms for p-type behavior of ZnO, Zn1–xMgxO, and related oxide semiconductors Physical Review B 94 (2016) 075140 1-7

von Lautz, J.; Pastewka, L.; Gumbsch, P.; Moseler, M. Molecular dynamic simulation of collision-induced third-body formation in hydrogen-free diamond-like carbon asperities Tribology Letters 63/2 (2016) 9 Seiten

Winzer, N.; Rott, O.; Thiessen, R.; Thomas, I.; Mraczek, K.; Höche, T.; Wright, L.; Mrovec. M. Hydrogen diffusion and trapping in Ti-modified advanced high strength steels Materials and Design 92 (2016) 450–461

Yi-Shen, L.; Mrovec, M.; Vitek, V. Bond-order potential for magnetic body-centered-cubic iron and its transferability Physical Review B 93/21 (2016) 214107 1-11 Yi-Shen, L.; Mrovec, M.; Vitek, V. Importance of inclusion of the effect of s electrons into bond-order

potentials for transition bcc metals with d-band mediated bonding Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering MSMSE 24/8 (2016) 085001 1-22

Zellmer, S.; Garnweitner, G.; Breinlinger, T.; Kraft, T.; Schilde, C. Hierarchical structure formation of nanoparticulate spray-dried composite aggregates ACS Nano 9/11 (2015) 10749–10757

Ziebarth, B.; Mrovec, M.; Elsässer, C.; Gumbsch, P. Interstitial iron impurities at cores of dissociated dislocations in silicon Physical Review B 92/19 (2015) 195308 1-7
## VERÖFFENTLICHUNGEN IN ZEITSCHRIFTEN UND BÜCHERN, VERÖFFENTLICHTE KONFERENZBEITRÄGE AM FRAUNHOFER IWM

### ZEITSCHRIFTEN

Fliegener, S.; Hohe, J. Optimierte Gestaltung von Lasteinleitungselementen für thermoplastische Sandwichbauteile Konstruktion 11-12 (2016) IW4-IW6

Fromm, A.; Gurr, M.; Wendt, G.; Jänchen, R. Neue Sensortechnik für Verpackungsprozesse Konstruktion Mai 5 (2016) 75-77

Scherge, M.; Rombach, R. Mit Handicap in den Schnee MedicalSportsNetwork 1 (2016) 32-37

Wackermann, K.; Pfeiffer, W. Wasserstoffversprödung und Testmethoden - Eigenarten der Wasserstoffversprödung und standardisierte Testmethoden Konstruktion September 9 (2016) IW14 - IW15

Zapara, M.; Augestein, E.; Helm, D.

Mechanismenbasierte Materialmodelle zur besseren Vorhersage der Schädigung und des Versagens in der Kaltmassivumformung massivUMFORMUNG September 2016 (2016) 44-49

### **BÜCHER, BUCHBEITRÄGE**

Gurr, M.; Mülhaupt, R.

### Rapid Prototyping

Reference Module in Materials Science and Materials Engineering; Hashmi, S. (Ed.); Elsevier B.V., Amsterdam, NL (2016) 77-99

### Varfolomeev, I.; Luke, M.

# Consideration of fatigue crack growth aspects in the design and assessment of railway axles

Recent Trends in Fracture and Damage Mechanics; Hütter, G.; Zybell, L. (Hrsg.); Springer International Publishing AG, Cham, Schweiz (2016) 103-124

### VERÖFFENTLICHTE KONFERENZBEITRÄGE

Beckmann, C.; Farajian, M.; Hohe, J.; Kennerknecht, T.; Luke, M.; Preußner, J. Numerische und experimentelle Untersuchung der Rissinitiierungsphase in der Wärmeeinflusszone von Schweißverbindungen in Tagungsband 48. Tagung des DVM Arbeitskreises Bruchmechanik und Bauteilsicherheit »Bruchmechanische Werkstoff- und Bauteilbewertung: Beanspruchungsanalyse, Prüfmethoden und Anwendungen«; Hübner, P. (Hrsg.); Deutscher Verband für Materialforschung und -prüfung e.V., Berlin (2016) 225-234

### Bier, M.; Sommer, S.; Giese, P.; Hein, D.

### Charakterisierung und Modellierung von mechanischen Fügeverbindungen mit einseitiger Zugänglichkeit für den profilintensiven Leichtbau unter Crashbelastung

in Tagungsband 5. Fügetechnisches Gemeinschaftskolloquium »Gemeinsame Forschung in der Mechanischen Fügetechnik«; Europäische Forschungsgesellschaft für Blechverarbeitung e.V. EFB (Hrsg.); Europäische Forschungsgesellschaft für Blechverarbeitung e.V. EFB, Hannover (2015) 1-6

### Butz, A.; Baiker, M.; Pagenkopf, J.; Helm, D.;

Virtual material testing of sheet metals

in Proc. of 9th Forming Technology Forum 2016; Volk, W. (Hrsg.); Technische Universität München, Garching (2016) 13-16

### Dittmann, F.; Schuster, L.; Varfolomeev, I.

# Vergleich der analytischen Methoden zur Berücksichtigung thermischer Spannungen im Rahmen des FAD-Konzepts

in Tagungsband 48. Tagung des DVM Arbeitskreises Bruchmechanik und Bauteilsicherheit »Bruchmechanische Werkstoff- und Bauteilbewertung: Beanspruchungsanalyse, Prüfmethoden und Anwendungen«; Hübner, P. (Hrsg.); Deutscher Verband für Materialforschung und -prüfung e.V., Berlin (2016) 285-294

## Fliegener, S.; Kennerknecht, T.; Kabel, M.

# Simulation of the damage mechanisms of glass fiber reinforced polypropylene based on micro specimens and 1:1 models of their microstructure

in Proc. of 17th European Conference on Composite Materials - ECCM17; ESCM -European Society for Composite Materials (Ed.); ESCM -European Society for Composite Materials, Sevilla, Spanien (2016) 8 Seiten Hashibon, A.; Breinlinger, T.; Schubert, R.; Kraft, T. A new DEM contact-model for simulating die filling for powders with complex rheology in Proc. of World PM2016; European Powder Metallurgy Association;

European Powder Metallurgy Association, Shrewsbury, UK (2016) 1-6

Hübsch, O.; Maier, G.; Riedel, H.; Klöwer, J.; Maas, P Untersuchungen zur Kriechermüdungswechselwirkung in der hochwarmfesten Legierung Alloy 800H

in Tagungsband 38. Vortragsveranstaltung »Langzeitverhalten warmfester Stähle und Hochtemperaturwerkstoffe«; Stahlinstitut VDEh; Stahlinstitut VDEh, Düsseldorf (2015) Beitrag 12, 14 Seiten

# Kailer, A.; Dold, C.; Schubert, T.; Ahrens, M.; Altman, P.; Grundei, S.; Enekes, C.

Elektrisch leitfähige Schmierstoffe für adaptive Tribosysteme - Teil I: Motivation und Synthese von leitfähigen Schmierstoffen in Tagungsband 56. Tribologie-Fachtagung GFT 2015; GFT Gesellschaft für Tribologie e.V. (Hrsg.); GFT Gesellschaft für Tribologie e.V., Aachen (2015)

## Kertsch, L.; Helm, D.

44 1-10

# Modelling grain coarsening in the framework of rational extended thermodynamics

PAMM; Special Issue: Joint 87th Annual Meeting of the International Association of Applied Mathematics and Mechanics (GAMM) and Deutsche Mathematiker-Vereinigung; 16/1; Bach, V.; Fassbender, H. (Eds.); Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim (2016) 453–454

Kranz, A.; Mohrmann, R.; Lüdenbach, G.; Maier, G.; Oesterlin, H. Novel high temperature component testing methods with respect to flexible operation and advanced materials in Proc. of Power-Gen Europe 2015; PennWell Corporation (Ed.); PennWell Corporation, Tulsa, OK, USA (2015) 14 Seiten

### Maier, G.; Hübsch, O.; Oesterlin, H.; Riedel, H.; Lüdenbach, G.; Mohrmann, R. Bewertung der Restlebensdauer kritischer Komponenten von Bestandskraftwerken bei flexibler Fahrweise

in Tagungsband 38. Vortragsveranstaltung »Langzeitverhalten warmfester Stähle und Hochtemperaturwerkstoffe«; Stahlinstitut VDEh (Hrsg.); Stahlinstitut VDEh, Düsseldorf (2015) Beitrag 10, 14 Seiten

# Oesterlin, H.; Quintus, C.; Günther, P.; Kranz, A.; Mohrmann, R.; Maier, G. Creep fatigue assessment revisited - Lessons from the MACPLUS test component

in Tagungsband 41st MPA-Seminar; MPA Universität Stuttgart; MPA Universität Stuttgart, Stuttgart (2015) Presentation 32, 10 Seiten

Preußner, J.; Peiffer, W.; Piedra, E.; Oeser, s.; Tandler, M.; von Hartrot, P.; Maier, G.

### Long-term material tests in liquid molten salts

in Proc. of 8th International Conference on Advances in Materials Technology for Fossil Power Plants 2016; Parker, J.; Shingledecker, J.; Siefert, J. (Eds.); ASM International, Materials Park, OH, USA (2016) 1128-1139

### Reichert, T.; Böhme, W.; Tlatlik, J.

# Zur Modifikation von Masterkurven für die Bruchzähigkeit bei erhöhten Belastungsraten

in Tagungsband 48. Tagung des DVM Arbeitskreises Bruchmechanik und Bauteilsicherheit »Bruchmechanische Werkstoff- und Bauteilbewertung: Beanspruchungsanalyse, Prüfmethoden und Anwendungen«; Hübner, P. (Hrsg.); Deutscher Verband für Materialforschung und -prüfung e.V., Berlin (2016) 141-150

#### Schweizer, F.

## Berechnung der Wasserstoffdiffusion in laserstrahlgeschweißten hochfesten Stählen

in Tagungsband Simulationsforum Schweißen und Wärmebehandlung 2016; Heldbrand, J.; Loose, T.; Reich, M. (Hrsg.); Verein zur Förderung der numerischen Analyse der Wärmebehandlungs-und Schweißprozesse eV, Weimar (2016) 198-207

Speicher, M.; Klenk, A.; Oesterlin, H.; Maier, G.; Schwienherr, M.; Wang, Y.; Scholz, A.; Oechsner, M.

## Experimental investigations and numerical simulation accompanying the HWT test loop operation

in Proc. of 8th International Conference on Advances in Materials Technology for Fossil Power Plants 2016; Parker, J.; Shingledecker, J.; Siefert, J. (Eds.); ASM International, Materials Park, OH, USA (2016) 247-259

#### Sun, D.-Z.; Andrieux, F.; Ma, Y.

Charakterisierung und Modellierung des Versagensverhaltens eines Aluminiumgusswerkstoffs mit Berücksichtigung inhomogener Porositätsverteilung

in Tagungsband 48. Tagung des DVM Arbeitskreises Bruchmechanik und Bauteilsicherheit »Bruchmechanische Werkstoff- und Bauteilbewertung: Beanspruchungsanalyse, Prüfmethoden und Anwendungen«; Hübner, P. (Hrsg.); Deutscher Verband für Materialforschung und -prüfung e.V., Berlin (2016) 161-170

Zapara, M.; Augenstein, E.; Helm, D.

# A mechanism-based model for prediction of damage and failure in cold forging processes

in Proc. of 49th Plenary Meeting of International Cold Forging Group ICFG; Liewald, M. (Ed.); MBA, Stuttgart (2016) 99-102

Ziegler, T.; Hernandez Marquez, J.; Jaeger, R.

# Direct digital manufacturing of orthopedic insoles from thermoplastic polyurethane

in Proc. of Fraunhofer Direct Digital Manufacturing Conference DDMC 2016; Fraunhofer Additive Manufacturing Alliance, Müller B. (Hrsg.); Fraunhofer Verlag, Stuttgart, Deutschland (2016) 4 Seiten

## Impressum

## **Redaktion** Katharina Hien Thomas Götz

## Bildquellen

Seite 3:

-----

\_\_\_\_\_

Titelbild, Seiten 7, 13, 61, 65: © Achim Käflein, Freiburg

**Gestaltung und Produktion** Marianne Förderer Erika Hellstab

## Anschrift der Redaktion

Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM Unternehmensstrategie und Kommunikation Wöhlerstraße 11 79108 Freiburg Telefon +49 761 5142-154 Fax +49 761 5142-510

info@iwm.fraunhofer.de www.iwm.fraunhofer.de

Alle Rechte vorbehalten. Bei Abdruck ist die Einwilligung der Redaktion erforderlich. Seiten 16, 17, 22, 23, 30, 31, 40, 41, 50, 51, 57, 59: © Stock-Müller, Freiburg

© Margrit Müller, Freiburg

Seite 29: © Gebhard Uhl, Freiburg

Seite 33: © Christian Rokasch, Freiburg

Alle übrigen Abbildungen: © Fraunhofer IWM

## ISSN 1616-3591