

# MATERIALMODELLIERUNG

GESCHÄFTSFELD MATERIALDESIGN

THEMEN FÜR BACHELOR- UND  
MASTERARBEITEN FÜR STUDIERENDE

## **Einleitung:**

Eine häufig wiederkehrende Fragestellung der theoretischen Materialmodellierung ist die nach der Bewegung einzelner Atome in einem Kristallgitter (Diffusion). Diese Bewegung wird bestimmt durch Sprünge zwischen verschiedenen Positionen im Kristall, die lokalen Energieminima entsprechen. Jeder Sprung kann durch eine Energiebarriere charakterisiert werden. Die dafür notwendige Energie beziehen die diffundierenden Atome von thermischen Schwingungen des Kristallgitters (Phononen).

In den Themen 1 – 4 geht es um verschiedene Diffusionsprobleme. Das Thema 5 behandelt elastische Eigenschaften.

### **(1) Sauerstoffionenleitung in Festkörperoxid-Brennstoffzellen**

**Anwendung:** In Brennstoffzellen wird Energie aus der kontrollierten Reaktion von Sauerstoff und Wasserstoff zu H<sub>2</sub>O gewonnen. Eine gute Ionenleitfähigkeit der verwendeten Materialien ist Voraussetzung, um bei geringen Verlusten eine ausreichende Energiemenge umzusetzen (z.B. Automobil).

**Aufgabe:** Es soll ein mikroskopisches Modell für die Diffusion von Sauerstoffionen über einen Leerstellen-Mechanismus in Metalloxiden aufgestellt werden. Die Sprungraten dafür sollen mit Hilfe von atomistischen Simulationen im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie berechnet werden. Die atomaren Sprungpfade und Sprungraten sollen in ein makroskopisches Modell für die Diffusivität einfließen.

### **(2) Lithium-Diffusion in Materialien für "all solid state" Lithiumionenbatterien**

**Anwendung:** Li-Ionenbatterien sind als Energieträger seit vielen Jahren am Markt etabliert. Dennoch stellen die verwendeten flüssigen Elektrolyte ein Brandrisiko dar (Handys, Laptops, Automobil,...). Die Entwicklung reiner Festkörperbatterien verspricht hier Abhilfe zu schaffen.

**Aufgabe:** Die Li-Diffusion soll für einen bestimmten Festkörperelektrolyt-Typen („NZP“) untersucht werden. Dazu soll ein makroskopisches Diffusionsmodell, basierend auf atomaren Sprungpfaden und Sprungraten zwischen verschiedenen Zwischengitterpositionen im Material aufgestellt werden. Die Modellparameter sollen mit Hilfe von atomistischen Simulationen im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie berechnet werden.

### (3) Wasserstoffdiffusion in Austenitstahl

**Anwendung:** Wasserstoff beeinflusst in hohem Maße die mechanischen Eigenschaften von Metallen und ist eine wichtige Ursache für die Materialalterung (Wasserstoffversprödung).

**Aufgabe:** Ein makroskopisches Diffusionsmodell, basierend auf einem Diffusionsnetzwerk und Sprungraten soll für fcc Eisen (Austenit) aufgestellt werden. Hierzu soll ein bestehendes Modell für bcc Eisen (Ferrit) erweitert werden. Die Modellparameter sollen mit Hilfe von atomistischen Simulationen im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie berechnet werden.

### (4) Berechnung von Anlauffrequenzen für die Diffusion von Wasserstoff in kubischen Metallen

**Anwendung:** Um die Diffusion im Kristallgitter genauer berechnen zu können, braucht man neben der Energiebarriere auch die sogenannte Anlauffrequenz. Anschaulich ist dies die Anzahl der Versuche pro Sekunde des diffundierenden Teilchens, die Barriere mithilfe thermischer Anregung (Energie) zu überwinden.

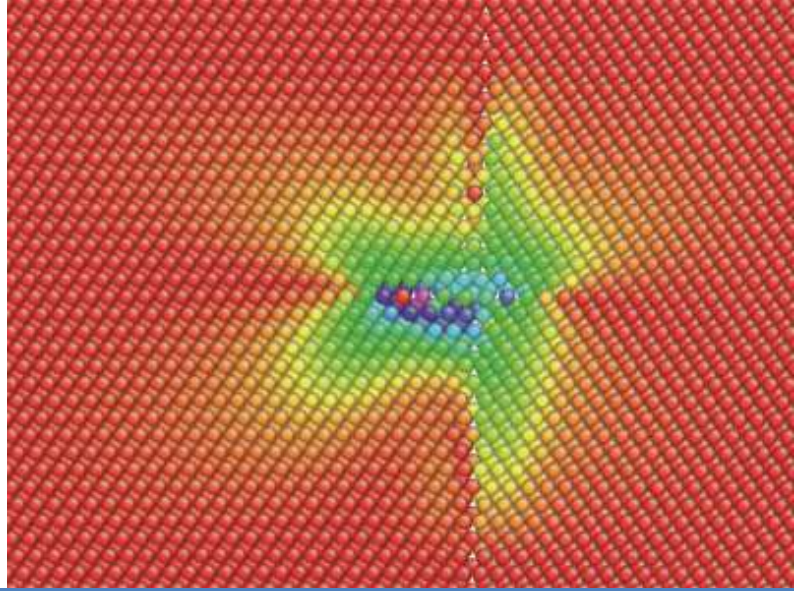
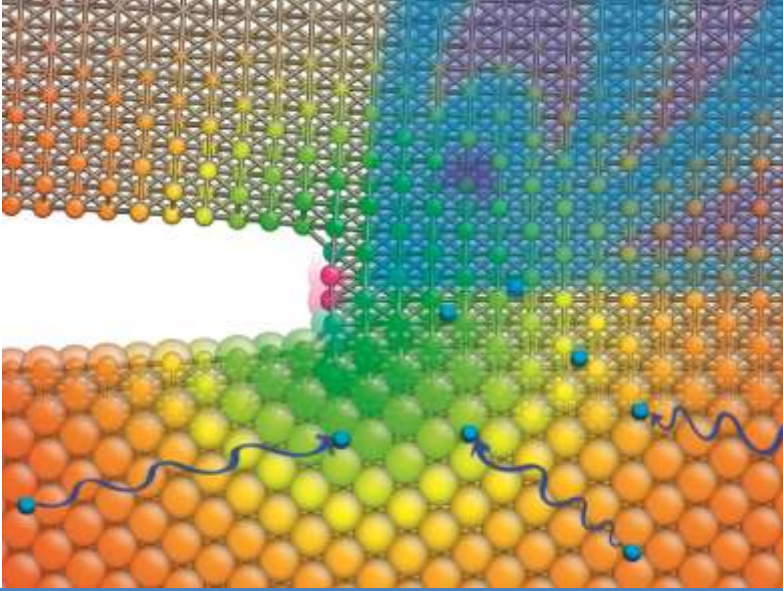
**Aufgabe:** Es soll ein quantenmechanisches Modell eines anharmonischen

Oszillators mit Hilfe von atomistischen Simulationen im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie parametrisiert und ausgewertet werden. Die Ergebnisse fließen in die Berechnung von Diffusivitäten für Wasserstoff in Metallen ein.

### (5) Untersuchung des Einflusses des Ladungszustandes auf elastische Eigenschaften von Elektrodenmaterialien für Lithiumionenbatterien

**Anwendung:** Die mechanische Stabilität von Lithiumionenbatterien bei einem Unfall ist entscheidend für ihre Verwendbarkeit im Mobilitätssektor. Interessanterweise ändern sich die mechanischen Materialeigenschaften abhängig vom Ladungszustand deutlich, was bei der Auslegung der Batterie berücksichtigt werden muss.

**Aufgabe:** Die Änderungen der elastischen Eigenschaften eines Kathoden- oder Anodenmaterials bei Ein- und Auslagerung von Lithiumionen soll untersucht werden. Für die auf der atomaren Skala gewonnenen Informationen sollen durch geeignete makroskopische Mittelung Eigenschaften eines pulverförmigen Elektrodenmaterials ermittelt werden.



# FRAUNHOFER-INSTITUT FÜR WERKSTOFFMECHANIK IWM, FREIBURG

Anwendungsorientierte Auftragsforschung

Für Unternehmen oder öffentliche Institution bearbeiten wir werkstofftechnische Forschungs- und Entwicklungsaufgaben in anwendungsorientierten Projekten – von Schadensanalysen über Prozessentwicklungen bis zu Werkstoffinnovationen.

Wir erarbeiten Lösungen zur optimierten Nutzung von Werkstoffeigenschaften, um die Zuverlässigkeit, Lebensdauer und Sicherheit von Bauteilen zu verbessern. Wir entwickeln neue Werkstoffe sowie ressourceneffiziente Fertigungsverfahren.

Wir erforschen Werkstoffveränderungen in Prozessen und Bauteilen. Dazu entwickeln wir Werkstoffmodelle, Charakterisierungs- und Simulationsmethoden.

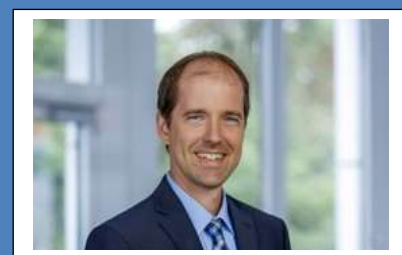
## Ansprechpartner:

**Dr. Daniel Urban | Ansprechpartner Materialmodellierung**

**Telefon: +49 761 5142-378 | [daniel.urban@iwm.fraunhofer.de](mailto:daniel.urban@iwm.fraunhofer.de)**

**Prof. Dr. Christian Elsässer | Geschäftsfeldleiter Materialdesign**

**Telefon: +49 761 5142-286 | [christian.elsaesser@iwm.fraunhofer.de](mailto:christian.elsaesser@iwm.fraunhofer.de)**



**Fraunhofer Institut für  
Werkstoffmechanik IWM**

Wöhlerstraße 11

79108 Freiburg

Telefon: +49 761 5142-0

[info@iwm.fraunhofer.de](mailto:info@iwm.fraunhofer.de)

[www.iwm.fraunhofer.de](http://www.iwm.fraunhofer.de)

**Institutsleiter**

Prof. Dr. Peter Gumbsch

Stellvertretende Institutsleiter

Prof. Dr. Chris Eberl

Dr. Rainer Kübler