

# DESIGN AM COMPUTER

## COMPUTER-BASED DESIGN

### Multiskalen-Simulation von CMC-Materialeigenschaften

Am Fraunhofer-Zentrum für Hochtemperatur-Leichtbau HTL werden die Materialeigenschaften von CMC-Werkstoffen aus deren Mikrostruktur heraus mit Computermodellen vorhergesagt. Die Multiskalen-Simulationen dienen der gezielten Entwicklung eines SiC/SiC-Werkstoffes, der künftig zum Beispiel in Gasturbinen eingesetzt werden kann.

CMC-Werkstoffe wie SiC/SiC sollen möglichst bald in Turbinen für die Antriebstechnik und Energieerzeugung zumindest teilweise die Nickelbasislegierungen ersetzen, um höhere Verbrennungstemperaturen und damit höhere Wirkungsgrade zu ermöglichen. Um zügig einen in der Praxis einsetzbaren Werkstoff zu entwickeln, helfen heute Computermodelle dabei, Konzepte zu erarbeiten, wie man dem Material gezielt die benötigten Eigenschaften geben kann. Diese Simulationen müssen dabei alle relevanten Längenskalen von der Korngröße der Matrix bis zur Geometrie der Faserbündel oder -lagen im Bauteil abdecken.

#### Multiskalen-Simulation

Für die Multiskalen-Simulation von CMC-Eigenschaften setzt das Fraunhofer-Zentrum HTL auf eine Kombination von selbst entwickelten Programmen und externer Software. Mit den In-house-Lösungen werden realistische Gefügestrukturen entwickelt, auf deren Basis anschließend die zu erwartenden Werkstoffeigenschaften durch Finite-Elemente-Berechnungen vorhergesagt werden. Eingangsgrößen für die Simulationen sind jeweils gemessene Kennwerte der Komponenten oder die aus den Modellen der nächstkleineren Längenskala gewonnenen Materialeigenschaften.

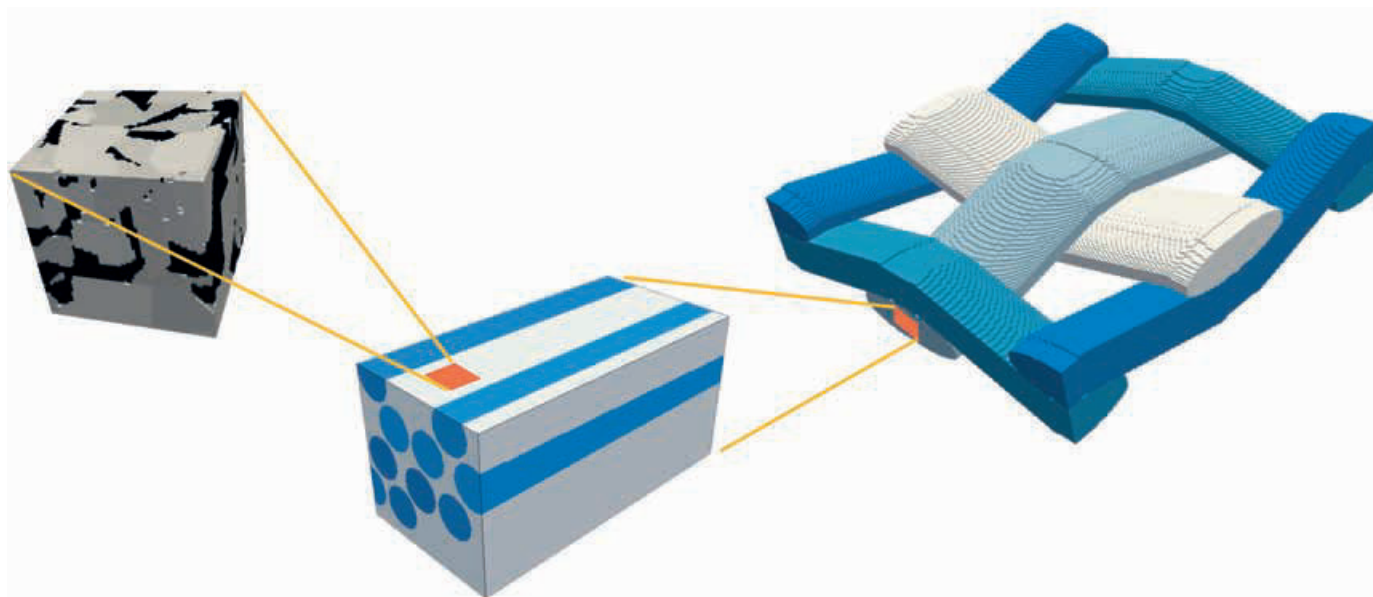
### Multiscale simulation of CMC material properties

At Fraunhofer-Center for High Temperature Materials and Design HTL, material properties of CMC components are predicted by their microstructure using computer models. Such multiscale simulation is used for a selective development of a SiC/SiC material, which can be used, e.g., in future gas turbines.

CMC components such as SiC/SiC are to replace nickel-based alloys in turbines used in propulsion technology and power generation as soon as possible, because CMC components are more resistant to high combustion temperatures and therefore enable higher efficiencies. Today, in order to quickly develop materials deployable for practical applications, computer models help to elaborate concepts for obtaining the requested material properties. These simulations need to cover all relevant length scales from the grain size of the matrix to the geometry of the fiber bundles and the fiber layers in the component.

#### Multiscale simulation

For the multiscale simulation of CMC-properties, Fraunhofer-Center HTL uses a combination of specially developed in-house solutions and external software. The In-house solutions are used to develop realistic microstructures. Those microstructures are then used to predict the expected material properties using Finite-Elements (FE) methods. Input parameters used for the simulations are measured material properties of the components or the respective values obtained from the models of the next smaller length scale.



Schematische Darstellung repräsentativer CMC-Gefüge von Mikro- bis Makroskala (v.l.n.r.: Matrix; Faserbündel mit Matrix; Gewebeausschnitt)  
Schematic view of representative CMC structures from micro- to macroscale (from left to right: matrix; fiber bundle with matrix; detail of textile)

---

## Materialdesign

---

Sobald die Simulationen auf allen Größenskalen durch Vergleichsmessungen an einem realen Werkstoff validiert sind, steht ein flexibles Instrumentarium für ein gezieltes Materialdesign am Computer zur Verfügung. Dieses Design kann in einem Bottom-up-Ansatz erfolgen, etwa um maximal mögliche Steifigkeit oder Wärmeleitfähigkeit einer Materialkomposition zu ermitteln. Ebenso kann auch top-down geprüft werden, welche Mikrostruktur etwa einer im Einsatz vorgesehenen Belastung am besten standhält.

---

## Schadenstoleranz

---

Besonderes Augenmerk liegt bei CMC-Werkstoffen auf der Schadenstoleranz. Hierzu muss in der Simulation das Reibungsverhalten einzelner gebrochener Fasern gegenüber der Matrix betrachtet werden. Die Höhe der Gleitreibung an der Faser-Matrix-Grenzfläche bestimmt die makroskopische Duktilität des Materials. Daher wird mit den Multiskalenmodellen unter anderem simuliert, wie sich die Verteilung von Faser-Festigkeits- oder Reibungskoeffizienten zwischen Faser-Beschichtung und Matrix auf die Bruchdehnung auswirken.

Die Methodik wird derzeit im Rahmen eines vom Bayerischen Wirtschaftsministerium geförderten Projektes für die Entwicklung eines über Si-Schmelzinfiltration hergestellten SiC/SiC-Werkstoffes eingesetzt und weiterentwickelt.

---

## Material design

---

As soon as the simulations have been validated on all size scales by comparative measurements using real material, a very flexible set of tools is available for selective computer-based material design. The design can follow a bottom-up approach, e.g., to identify the maximal possible stiffness or thermal conductivity of a material composition. Alternatively a top-down approach can be used for instance to examine which microstructure is most resistant to expected loads in the application.

---

## Damage tolerance

---

The damage tolerance of CMC components is of special interest. For this purpose, the friction behavior of broken fibers against the matrix needs to be examined. The magnitude of dynamic friction at the fiber-matrix interface governs the macroscopic ductility of the material. Therefore, the multiscale models amongst others are used to simulate how the distribution of fiber strengths or friction coefficients between fiber coating and matrix affect the elongation at fracture.

The method is currently used and developed further in the framework of a research project supported by the Bavarian ministry of economics. Within the project, the simulation technique is utilized for the development of a SiC/SiC material produced via silicon melt infiltration.

---

### Weitere Informationen/Further information:

**Dr. Gerhard Seifert**, Fraunhofer-Zentrum für Hochtemperatur-Leichtbau HTL/Center for High Temperature Materials and Design HTL, Bayreuth, +49 (0) 921 / 785 10-350, gerhard.seifert@isc.fraunhofer.de, www.htl.fraunhofer.de