



No. 12 | 2019 **New S**

Research Insights and Information

Liebe Leser.

in unserem Newsletter geht es diesmal um die Zusammenarbeit zwischen den MaterialwissenschaftlerInnen der Ruhr-Universität Bochum (RUB) und der Industrie in unserem Umfeld. Kolleginnen und Kollegen aus der Industrie mögen beim Begriff Material Research Department (MRD) vielleicht einen kühlen Hauch von Spezialistentum verspüren. Das wäre schade, denn wir wollen gerade das Gegenteil erreichen. An unserer Universität leistet das MRD einen Beitrag zur Überbrückung der Spezialdisziplinen Festkörperphysik, Material-Werkstoffwissenschaft chemie. und -technik. Werkstoffe der Elektrotechnik. Geomaterialien

und Baustoffe. Das MRD will die natur- und ingenieurwissenschaftlichen Flügel unseres breiten Fachgebietes zusammenführen und dabei neue Entwicklungen wie die skalenübergreifende Materialmodellierung nutzen. Nach außen wollen wir aber auch unsere Kontakte mit den F&E-Labors der umliegenden Industrie stärken. Uns ist dabei wohl bewusst, dass die Industrie wertvolle Impulse liefert, von denen wir in der Werkstoff-, Festkörper- und Grenzflächenforschung profitieren. Gleichzeitig verfügen wir über experimentelle Möglichkeiten, die von KollegInnen aus der Industrie genutzt werden können. Hierum soll es in unserem 12. MRD-Newsletter gehen.

Wir berichten über aktuelle Entwicklungen in der Materialforschung an der RUB und stellen einige interessante Projekte aus Zusammenarbeiten zwischen den MaterialwissenschaftlerInnen der RUB und Industrieunternehmen vor. Außerdem wird über die experimentellen Möglichkeiten des MRD sowie über die Einrichtung des neuen Studiengangs Materialwissenschaft berichtet.

Wir wünschen viel Spaß beim Lesen.

P. Aleithe, R. Drautz, G. Eggeler, A. Marquardt

Zusammenarbeit zwischen Industrie und RUB-Fachkompetenzen

Die Research Departments (RD) sind ein Strukturelement der RUB. Sie führen die Expertisen aus verschieden Disziplinen zusammen und bieten Forscher-Innen aus verschiedenen Fakultäten eine gemeinsame Basis zur Kooperation. Das MRD ist derzeit das mitgliederstärkste RD, dem ForscherInnen aus folgenden Fakultäten und Forschungseinrichder RUB angehören: tungen Fakultät für Bau- und Umweltingenieurwissenschaften (CE), Fakultät für Chemie und Biochemie (CHE), Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik (ET), Fakultät

Geowissenschaften (GEO), Fakultät für Geschichtswissenschaft (HIST), Fakultät für Maschinenbau (MB), Fakultät Mathematik (MATH), Fakultät für Physik und Astronomie (PHY), Interdisciplinary Centre for Advan-Materials ced Simulation (ICAMS), Medizinische Fakultät (MED) und Zentrum für Grenzflächendominierte Höchstleistungswerkstoffe (ZGH). Unserem MRD gehören auch externe Partner an, die mit uns über externe Professuren verbunden sind. Dazu gehören: Das Deutsche Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), das Forschungszentrum Jülich(FZJ), das Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH (MPIE) und das Max-Planck-Institut für Kohlenforschung (MPI-KoFo). Unsere materialwissenschaftlichen Aktivitäten tragen alle direkt oder indirekt zur Lösung der gesellschaftlichen Aufgaben bei, die sich uns heute stellen und die man den Bereichen Energie, Verkehr, Transport, Gesundheit und Umwelt zuordnen kann (engl. Abkürzung: Grand Challenges).

Dieser 12. Newsletter soll interessierten Lesern einen Einblick in

die Aktivitäten des MRD an der RUB geben. RUB-intern haben wir vier Fokusfelder definiert, die unsere Forschungsfelder zusammenfassen und die von MRD-Mitgliedern koordiniert werden (Namen der Koordinatoren in Klammern): Mikrostruktur und mechanische Eigenschaften (G. Eggeler, MB), Dünne Schichten, Mikro- und Nanosysteme (A. Ludwig, MB), Thermodynamik und Kinetik von Werkstoffen (R. Drautz, PHY/ICAMS) und Grenzflächendominierte Materialeigenschaften und Prozesse (W. Schuhmann, CHE). Diese Struktur hilft uns bei der Organisation unserer Materialwissenschaftlichen Tage, die sich immer größerer Beliebtheit erfreuen und

bei denen diese vier Felder in etwa gleichgewichtig vertreten sein sollen. Es hat sich aber herausgestellt, dass sich diese Struktur weniger gut eignet, um unsere materialwissenschaftlichen Kompetenzen, an denen Externe Interesse haben könnten, auszuflaggen. Deshalb haben wir zehn Kompetenzfelder definiert, die speziell designed wurden, um KollegInnen aus der Industrie eine Kontaktaufnahme zu erleichtern. Diese sind auf unserer Internetseite beschrieben (http://mrd.rub.de/expertise). Es handelt sich um zehn Kompetenzfelder: Additive Fertigung, Elektrische, magnetische und optische Materialeigenschaften, Elektrochemie und Korrosion, Materialcharakterisierung und Schadens-

analyse, Materialmodellierung und Simulation, Mechanische Eigenschaften, Schmelz- und Pulvermetallurgie, Mikro- und Nanotechnologie, Oberflächenchemie, Beschichtung und Biokompatibilität und Thermische Eigenschaften. Unter diesen Oberbegriffen stellen sich RUB-Einheiten vor, die in diesen Feldern aktiv sind. Wer an einem dieser zehn Kompetenzfelder interessiert ist, findet über unsere Internetseite schnell eine/n AnsprechpartnerIn. Seitdem wir diese Informationen bereitgestellt haben, sind bereits neuer Kontakte zwischen der RUB und unserer umliegenden Industrie entstanden. Über weitere neue Kontakte freuen wir uns sehr!

Aus der Hochschulforschung in die industrielle Anwendung: die Firma Ingpuls - eine Erfolgsgeschichte

Autoren: B. Maaß , G. Eggeler

In den Jahren 2000 bis 2011 war das Institut für Werkstoffe der RUB Zentrum des Sonderforschungsbereichs Formgedächtnistechnik (SFB 459), in welchem es um grundlegende und angewandte Aspekte der Formgedächtnislegierungen (FGL) auf Nickel-Titan-Basis ging. Schon kurz nach Beginn des SFB 459 stellte sich heraus, dass man beim Arbeiten mit kommerziellen Materialien starke Streuungen in den funktionellen Materialeigenschaften in Kauf nehmen muss. Zum Beispiel waren die Umwandlungstemperaturen (eine der Schlüsseleigenschaften von FGL) an einem Ende einer Stange um 20 Grad höher als am anderen. Deshalb wurde am Institut für Werkstoffe ein Verfahren entwickelt, mit dessen Hilfe homogene Legierungen mit konstanten und reproduzierbaren Eigenschaften hergestellt werden konnten. Parallel zu diesen Processing-Aktivitäten wurde im SFB 459 die funktionelle Ermüdung von Formgedächtnislegierungen untersucht. Diese Eigenschaft ist für den Einsatz als Aktuator dieser faszinierenden Materialklasse von entscheidender Bedeutung, und auch hier konnte der SFB 459 entscheidende Fortschritte im Verständnis

der Ursachen funktioneller Ermüdung erzielen.

In der Laufzeit des SFB 459 studierten Christian Großmann, Burkhard Maaß und André Kortmann an der RUB Maschinenbau, mit der Vertiefungsrichtung Werkstoffe. Im Jahr 2006 führten zwei von ihnen am Institut für

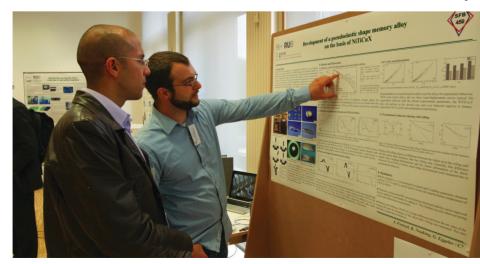


Bild 1: Burkhard Maaß präsentiert die Ergebnisse seiner Doktorarbeit auf dem Abschluss-Seminar des SFB 459.

Werkstoffe eine Projektarbeit durch, in welcher sie ein Verfahren zur Herstellung von Formgedächtnisdrähten verbesserten. Dabei mussten eigene Legierungen erschmolzen und thermomechanisch nachbehandelt werden. Jan Frenzel vom Institut für Werkstoffe hatte zu diesem Zeitpunkt bereits seine Cladding-Technik entwickelt, mit deren Hilfe auch in Graphittiegeln kohlenstoffarme Legierungen erschmoltzen werden können. Burkhard Maaß führte seine Doktorarbeit in der Gruppe von Jan Frenzel durch. Auf dem Foto (Bild 1) ist Burkhard Maaß auf vor einem Poster zu sehen, das er beim Abschlusskolloquium des SFB 459 im Jahr 2011 präsentierte.

Zum Ende des SFB 459 hatten Christian Großmann, Burkhard Maaß und André Kortmann bereits ihre Firma Ingpuls gegründet. Sie fingen klein an und gingen dabei sehr systematisch vor. Bereits in den Jahren 2009 und 2010 erhielten sie in Gründerwettbewerben Preise, den 3. Platz im RUBinternen Wettbwerb ruhr@venture und den ersten Platz im bundesweiten Wettbewerb Senkrechtstarter. Trotzdem konnte damals noch niemand absehen, dass sich Ingpuls so erfolgreich entwickeln würde. Das Unternehmen ist mittlerweile auf über 50 Mitarbeiter-Innen angewachsen und fertigt Aktuatoren auch für die Automobilindustrie.

In diesem Sommer hatten die Ingpuls-Gründer gleich doppelten Grund zum Feiern: Im Juni durften sie sich über die Auszeichnung "Top 100 Innovator" freuen. Das Unternehmen wurde in der Größenkategorie A (weniger als 50 Mitarbeiter) mit dem ersten Platz in diesem sehr renommierten Wettbewerb ausgezeichnet. Die Auszeichnung "Top 100 Innovator" ist ein bundesweiter Wettbewerb, der seit über 25 Jahren an die innovativsten Unternehmen des deut-



Bild 2: Die Ingpuls-Gründer erhalten von Ranga Yogeshwar den Preis "TOP 100 Innovator".

schen Mittelstands verliehen wird. 2019 hatten sich 398 Unternehmen für den Preis beworben. Die Jury setzt sich aus bekannten Persönlichkeiten aus Politik und Wirtschaft zusammen. Ingpuls konnte die Juroren direkt bei der ersten Teilnahme überzeugen und wurde mit dem ersten Platz geehrt. Bei der Preisverleihung in der Jahrhunderthalle in Frankfurt erhielten die drei Geschäftsführer den begehrten Preis vom bekannten TV-Moderator und Wissenschaftsjournalisten Ranga Yogeshwar.

Im Juli folgte dann das 10-jährige Firmenjubiläum, was mit einem großen Fest in der neuen Produktionshalle in Bochum-Werne gefeiert wurde. Als Ingpuls 2009 gegründet wurde, starteten die Geschäftsführer als Berater im Bereich der Formgedächtnistechnik. Heute ist Ingpuls deutschlandweit der einzige Hersteller für Formgedächtnislegierungen, der die gesamte Wertschöpfungskette von der Schmelze bis zur fertigen Komponente unter einem Dach vereint. Seit 2016 ist das Unternehmen ISO9001:2015-zertifiziert und produziert in Großserie u. a. für die deutsche Automobilindustrie. Die Technologie findet in der Industrie immer mehr Anwendungen, so dass die Zeichen bei Ingpuls auf Wachstum stehen. Im Vergleich zu 2016 wurde die Belegschaft bis 2019 nahezu verdreifacht. Ein zweiter Produktionsstandort befindet sich im Aufbau. Am neuen Standort, der sich direkt am Fuße des Förderturms



Bild 3: Oberbürgermeister Thomas Eiskirch bei der 10-Jahresfeier von Ingpuls.

Arnoldschacht der Zeche Robert Müser befindet, entsteht auf einem 20.000 m² großen Grundstück eine neue Produktionslinie auf fast 5000 m². Außerdem sind auf dem Gelände über 1000 m² Büro- und Laborflächen für Forschung und Entwicklung sowie Verwaltung vorgesehen. Vor dem Start der Umbauarbeiten wurde die neue Halle letztmalig zweckentfremdet und diente als Location für die 10-Jahresfeier, auf der neben Mitar-

beitern mit Familien viele Wegbegleiter eingeladen waren. Vor über 200 geladenen Gästen eröffnete Bochums Oberbürgermeister Thomas Eiskirch die Feier mit einer Festrede.

Für das Jahr 2020 steht neben dem Aufbau des neuen Standorts die Erschließung weiterer Märkte auf der Agenda. Obwohl das Thermomanagement im Automotive-Sektor weiterhin signifikantes Wachstum erwarten lässt, bereitet Ingpuls aktuell den Markteintritt in die Hausgeräteindustrie sowie den heute immer noch wichtigsten Absatzmarkt für FGL-Produkte, die Medizintechnik, vor.

NbC-Nanoteilchen in neuen Stählen für Grobbleche

Autoren: H. Wang, G. Eggeler

Grobbleche sind Stahlbleche mit einer Dicke, die typischerweise von 6 bis weit über 200 mm reicht. Diese finden zum Beispiel im Stahl- und Brückenbau, für Offshorebauwerke wie Windkraftanlagen oder für den Bau von Druckbehältern Verwendung. Die Herstellung von Grobblechen erfolgt durch Walzen von sogenannten Brammen in vielen Stichen auf ihre Enddicke. Für bestimmte Stahlgüten erfolgt das Walzen dabei so, dass neben der Geometrie auch bestimmte mechanische Eigenschaften eingestellt werden. Je nach Stahlgüte, werden die Grobbleche nach dem Walzen unter definierten Bedingungen abgekühlt und teilweise noch wärmebehandelt. Durchlaufen der Prozesskette finden, in den für Grobbleche verwendeten, oft mit Niob (Nb) mikrolegierten Stählen, Ausscheidungsvorgänge statt. Diese können zur Bildung kleinster Karbide führen. Die Anwesenheit dieser Karbide wirkt sich stark auf die mechanischen Eigenschaften aus. Ziel ist es, ein Grobblech zu erzeugen, das sowohl eine hohe Festigkeit aufweist als auch gute Zähigkeitseigenschaften besitzt. Eine

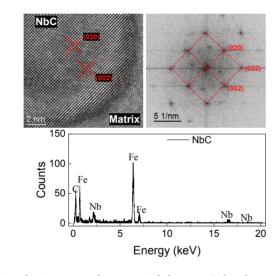


Bild 4: TEM-Ergebnisse zu Nb-Nanoteilchen. (*Links oben*) Hochauflösende TEM-Aufnahme von Nb-Nanoteilchen. (*Rechts oben*) TEM-Beugungsdiagramm, mit dessen Hilfe NbC-Teilchen kristallographisch identifiziert werden können. (*Unten*) Energiespektrum, das charakteristische Röntgenpeaks aufweist. Insbesondere ist der Nb-Peak klar zu erkennen.

Änderung der Prozessparameter führt zu einer Änderung der Karbidteilchenpopulation, was wiederum die mechanischen Eigenschaften verändert. Vor diesem Hintergrund ist es wichtig zu wissen, welche Ausscheidungsteilchen sich bilden. Diese Teilchen sind in der Regel kleiner als 50 nm und können nur mit Hilfe hochauflösender Verfahren wie der Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) oder Atom-

sonden-Tomographie (APT) sichtbar gemacht werden. Zu diesem Themenbereich arbeitet der Lehrstuhl Werkstoffwissenschaft der Ruhr-Universität Bochum mit der AG der Dillinger Hüttenwerke, einem führenden Grobblechhersteller, zusammen. Um für ihre Kunden Grobbleche höchster Qualität herstellen zu können, ist es für die AG der Dillinger Hüttenwerke entscheidend, die Mikrostrukturen, die sich im Verlauf der

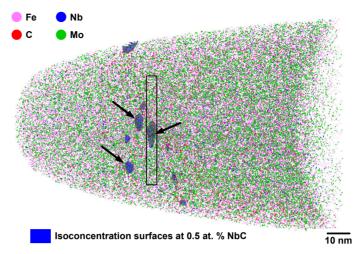


Bild 5: NbC-Nanoteilchen erscheinen in der 3D-Atomsondenrekonstruktion in Blau.

Stahlherstellung einstellen, genau zu kennen. In diesem Zusammenhang ist interessant, dass die Zugabe kleiner Mengen Nb sowohl die Zähigkeit als auch die Festigkeit verbessern kann. Forschungsarbeiten Lehrstuhl am Werkstoffwissenschaft der RUB konnten zeigen, dass überall im Volumen Nb-Nanokarbide (NbC) entstehen. Mit thermodynamischen Rechnungen ließ sich nachweisen, dass die Triebkraft für die Bildung von NbC so hoch ist, dass sie überall im Volumen sofort entstehen und keine Keimbildung an Korngrenzen notwendig ist. Die

NbC-Teilchen wirken in den untersuchten molybdänhaltigen Stählen ihrerseits als Keimstellen für Karbide vom Typ MoC. Dadurch verringern sie die Tendenz dieser MoC-Teilchen, sich an inneren Grenzflächen auszuscheiden und dort die Ausbreitung von Mikrorissen zu begünstigen. Diese Ergebnisse wurden gemeinsam mit unseren Partnern 2019 im Journal of Material Science publiziert. Hier sind zwei Beispiele aus dieser Arbeit gezeigt. Bild 4 zeigt TEM-Ergebnisse: Links oben ist ein Nb-Teilchen in Hochauflösung sehen. Im Beugungsbild (oben rechts) kann dieses Teilchen kristallographisch als NbC identifizieren werden. Mit Hilfe der energiedispersiven Röntgenanalyse im TEM kann der Nb-Gehalt dieses Teilchens qualitativ nachgewiesen werden (Energiespektrum unten).

Das Bild 5 zeigt NbC-Nanoteilchen, die mit Hilfe der Atomsonden-Tomographie (APT) abgebildet wurden. Auf die APT kann im neuen RUB-Zentrum ZGH zugegriffen werden. Die Nb-reichen Teilchen erscheinen in der im Bild gewählten Farbkodierung in Blau.

Publikation:

Effect of Nb on improving the impact toughness of Mo-containing low-alloyed steels,

Wang, H. C., Somsen C., Li, Y.J. et al. J. Mater Sci (2019) 54

DOI: 10.1007/s10853-019-03374-2



Neues Labor für 2D-Elektronik in Bochum spannt die Brücke zwischen Grundlagenforschung und industrieller Anwendung

Autoren: C. Bock, J. Schulze, P. Awakowicz, A. Devi, M. Hoffmann,

Seit der Entdeckung von Graphen sind 2D-Materialien, die aus nur einer oder wenigen Atomlagen aufgebaut sind, in den Fokus der Forschung gerückt. Dabei sind die Eigenschaften der 2D-Materialien u. a. eng verknüpft mit ihrer Kristallstruktur, der Anzahl an Atomlagen, der Morphologie, der Orientierung, den Grenzflächen und der Dotierung. Maßgeschneiderte 2D-Materialien sind damit

vielfältig konfigurierbar hinsichtlich ihrer mechanischen, elektrischen und optischen Eigenschaften und schaffen ungeahnte Möglichkeiten für die Entwicklung von Bauelementen und Systemen.

Allerdings besitzt die Technologie für dieses hochaktuelle Feld der Mikroelektronik - basierend auf 2D-Materialien - noch nicht den für industrielle Massenanwendungen notwendigen Reifegrad. Das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) fördert das an der Ruhr-Universität Bochum beheimatete Forschungslabor Mikroelektronik Bochum für 2D-Elektronik (ForLab PICT2DES, Koordinator: Prof. Dr. Martin Hoffmann, LS Mikrosystemtechnik), um eine Infrastruktur zu schaffen, die es erlaubt, forschungsbasiert den Bogen vom La-

4

bor- hin zum industriellen Maßstab zu schlagen. Zugrunde liegt eine interdisziplinäre Kooperation zwischen Prof. Dr. Anjana Devi (AG Chemie Anorganischer Materialien), die eine ausgewiesene Expertin auf dem Gebiet der Präkursorsynthese und der Filmdeposition via chemical vapor deposition (CVD) und atomic layer deposition (ALD) ist, Prof. Dr. Peter Awakowicz und Dr. Julian Schulze (beide LS Allgemeine Elektrotechnik und Plasmatechnik), die mit Hilfe einer umfangreichen Plasmadiagnostik wissensbasierte schädigungsarme Ätzprozesse entwickeln, sowie Prof. Dr. Martin Hoffmann und Dr.-Ing. Claudia Bock (beide LS Mikrosystemtechnik), die die Ergebnisse der Materialforschung nutzen, um neue mikroelektronische Bauelemente und Systeme zu erforschen und auf großflächigen Substraten zu etablieren. Das neue Zentrum Grenzflächendominierte Höchstleistungswerkstoffe (ZGH, Prof. Dr. Alfred Ludwig, Jun.-Prof. Dr. T. Li) mit seinen höchstauflösenden Anlaysetechniken bis hinab in den atomaren Bereich ergänzt passgenau das neue 2D-Elektronik-Labor im späteren Forschungsbetrieb. Es ist eines von 12 ForLabs in Deutschland und wird mit fast vier Mio. Euro vom BMBF gefördert. Das Labor soll im Herbst 2020 im sanierten state-ofthe-art Reinraumbereich Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik im Gebäude ID in Betrieb gehen. Es wird ein Prozessintegrierendes Cluster-Tool etabliert, das der Erforschung neuer Materialien und Prozesse ebenso dient wie deren Integration in Systeme. Dabei können Wafer und flexible Substrate bis zu einer Größe von 200 mm bearbeitet werden, um eine Kooperation mit der Forschungsfabrik Mikroelektronik Deutschland (FMD) sicherzustellen. Es sind vier Vakuumkammern

rund um einen Zentralhandler angeordnet. Eine Kammer dient der monolagengenauen Deposition der Materialien (engl.: plasma enhanced atomic layer deposition, PEALD), die zweite dem monolagengenauen Abtrag (engl.: atomic layer etching, ALE), die dritte erlaubt die Abscheidung dicker Filme beispielsweise zur Kapselung der 2D-Schichten (engl.: plasma enhanced chemical vapour deposition, PECVD) und die vierte dem schädigungsarmen Abtrag der dickeren Filme (engl.: reactive ion etching, RIE). So können vollständige Prozesssequenzen für die Umwelteinflüssen gegenüber hochsensiblen 2D-Materialien in

Materialien öffnen vollständig neue Marktsegmente wie Wearable Technology zur Gesundheitsüberwachung, intelligente Verpackungen, radio-frequency identifications (RFIDs) und intelligente Umweltinformationssysteme.

Im Rahmen des vom BMBF geförderten ForMikro-Projekts "Erforschung neuartiger, flexibler Sensorsysteme auf Basis zweidimensionaler Materialsysteme" (FlexTMDSense, Koordinatorin: Dr.-Ing. C. Bock) wird ein Konsortium aus vier Gruppen der RUB (Mikrosystemtechnik, Chemie Anorganischer Materialien, Allgemeine Elektrotechnik und Plasma-

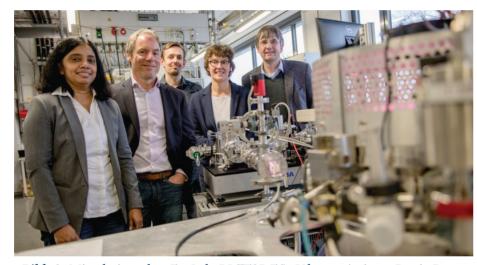


Bild 6: Mitarbeiter des ForLab PICT2DES. V.l.n.r.: Anjana Devi, Peter Awakowicz, Julian Schulze, Claudia Bock und Martin Hoffmann.

einem Vakuumprozess etabliert werden für die Demonstrator-Fertigung von Systemen. Da im Forschungslabor unterschiedlichste Materialklassen (Sulfide, Oxide, Metalle, ...) im Fokus der Untersuchungen stehen, wird eine weitere ALD-Anlage beschafft, die einerseits Kreuzkontaminationen ausschließt und ebenfalls an die Clusteranlage angeschlossen werden kann. Erweitert um neuartige Plasmatechnik und Analytik, wird das Cluster die Material-, Prozessund Systemforschung wesentlich voranbringen. Die Leichtbauweise, Transparenz, Tragbarkeit (wearability) und Integrierbarkeit der 2D-

technik, Laseranwendungstechnik) und dem Fraunhofer Institut Mikroelektronische Schaltungen (IMS) Duisburg gebildet. Das Projekt wird von sechs Industriepartnern flankiert. Ziel ist es, auf Basis der 2D-Elektronik flexible Sensorsysteme (Gassensoren ebenso wie pH-Sensorsysteme) herzustellen, um - beginnend bei den Erkenntnissen der Grundlagenforschung erste 200 mm-Wafern als Funktionsmuster zu fertigen, um diese später in Kleinserien z. B. an einem Fraunhofer Institut zu fertigen und effizient eine Markteinführung vorzubereiten. Gleichzeitig können 2D-Materialien bei

der Herstellung modernster mikroelektronischer Systeme den Ressourcenverbrauch, das Gewicht und den Energieverbrauch bei gleicher Leistungsfähigkeit redu-

Links zu den Pressemitteilungen der RUB, die weitere interessante Informationen zum ForLab PICT2DES bereitstellen, sind in den beiden nebenstehenden QR-Codes enthalten:





Bauteile aus dem 3D-Drucker Eigenschaften additiv gefertigter Werkstoffe

Autoren: L. Heep, M. Prasad, A. Hartmaier

Industriekooperationen sind ein wichtiger Bestandteil der Materialforschung an der RUB. Durch die enge Zusammenarbeit mit einem Industrieunternehmen wird ein bedeutender Beitrag zum Wissenstransfer von der akademischen Forschung in die technologische Umsetzung geleistet. Weiterhin ermöglicht eine solche Zusammenarbeit dem akademischen Partner, einen Finger an den Puls der neuesten technologischen Entwicklungen zu legen und damit ein Technologiemonitoring aus erster Hand zu betreiben. Für den Industriepartner ist es ein Nutzen, an den neuesten methodischen Entwicklungen der Grundlagenforschung zu partizipieren. Am Interdisciplinary Centre for Advanced Materials Simulation (ICAMS) der RUB besteht derzeit eine solche Kooperation mit der Siemens AG, bei der die mechanischen Eigenschaften von additiv gefertigten Bauteilen mit mikrostrukturbasierten Simulationsmethoden modelliert und verbessert werden sollen. Bei der in diesem Projekt betrachteten additiven Fertigung handelt es sich um eine recht neue Technologie, bei der aus einem Metallpulver ein Bauteil mit komplexer Geometrie direkt in der Endkontur gefertigt werden kann. Dazu wird das Metallpulver zu einem Pulverbett aufgeschichtet und an den zum späteren Bauteil

gehörenden Stellen mit Hilfe eines Laser- oder Elektronenstrahls aufgeschmolzen. Dadurch entsteht nach der Erstarrung eine Lage des zu fertigenden Bauteils, die dann wieder durch eine Lage Metallpulver abgedeckt wird. Dieser Schritt wird vielfach wiederholt Ein Hindernis, das sich derzeit der schnelleren Verbreitung der additiven Fertigung entgegenstellt, ist die Vielzahl der Prozessparameter, die bei der Herstellung optimal eingestellt werden müssen. Diese Parameter beziehen sich auf Strahlleistung, Pfad und



Bild 7: Larissa Heep, Doktorandin am Lehrstuhl für Werkstoffwissenschaft, und Mahesh Prasad, Doktorand am ICAMS, bei der Arbeit im Labor zur Bestimmung der Eigenschaften additiv gefertigter Werkstoffe.

und das Bauteil somit Lage für Lage aufgebaut. In dem bestehenden Forschungsprojekt liegt der Fokus auf Bauteilen aus einer temperaturbeständigen Legierung. Die Methode der additiven Fertigung, manchmal auch als 3D-Druck bezeichnet, umfasst aber generell noch andere Verfahren als die Pulverbettmethode und kann auch für Bauteile aus Polymeren oder anderen Werkstoffen genutzt werden.

Geschwindigkeit, mit der der Laser- oder Elektronenstrahl durch das Pulverbett geführt wird. Je nachdem, wie diese Parameter gewählt werden, kommt es zu einem mehr oder weniger starken lokalen Energieeintrag in das Pulverbett, was große Auswirkungen auf die Mikrostruktur und damit auch die Eigenschaften des gefertigten Bauteils hat. Alle hierbei möglichen Parametervariationen experimentell durchzuspielen, wäre mit

einem enorm hohen Zeit- und Ressourceneinsatz verbunden. An dieser Stelle kommt die numerische Simulation als hilfreiches Werkzeug ins Spiel, das es erlaubt, bestimmte Trends in den Mikrostruktur-Eigenschaftsbeziehungen aufzudecken und die Verformungsmechanismen bestimmter Mikrostrukturen zu verstehen.

Zu diesem Zweck wurden vom Industriepartner Werkstoffproben, die additiv mit verschiedenen Parameterkombinationen hergestellt wurden, zur Verfügung ge-



Bild 8: Mikrostruktur des additiv gefertigten Werkstoffs in Form elektronenmikroskopischen Aufnahme, die die kristallografischen Orientierungen und die Form der Körner in dem Gefüge sichtbar macht.

stellt. Deren Mikrostruktur wurde am Lehrstuhl für Werkstoffwissenschaft eingehend untersucht (Bild 8), und auch das mechanische Verhalten bei hohen Temperaturen wurde charakterisiert (Bild 10). Basierend auf den experimentell gefundenen Mikrostrukturen, wurde am ICAMS ein numerisches Werkzeug erstellt, das es erlaubt, die Geometrie der Mikrostruktur in sogenannten repräsentativen Volumenelementen realitätsgetreu abzubilden. Dazu werden aus der realen Mikrostruktur zunächst statistische Größen wie Korngrößenverteilung, Kornform und kristallografische

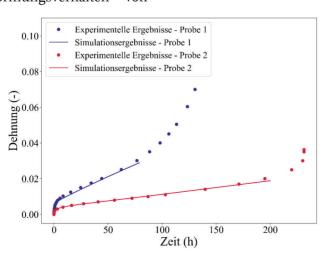
Textur quantifiziert. Auf dieser Basis werden dann synthetische Mikrostrukturen berechnet, die die gleichen statistischen Merkmale haben wie die realen.



Bild 9: Synthetische, dreidimensionale Mikrostruktur mit statistisch ähnlichen Kornformen und -orientierungen.

Mit solchen synthetischen Mikrostrukturen werden dann numerische Simulationen des mechanischen Verhaltens mit der Finite-Elemente-Methode (FEM) durchgeführt. In Bild 10 ist zu sehen, dass die numerische Simulation eine sehr gute Übereinstimmung zu experimentellen Ergebnissen aufweist und somit auch zur Vorhersage von mechanischen Eigenschaften bei nicht experimentell getesteten Mikrostrukturen verwendet werden kann. Dazu wird das Verformungsverhalten von

Einkristallen des betreffenden Werkstoffs mit Hilfe eines Kristallplastizitätsmodells beschrieben. Da jedes einzelne Korn in der Mikrostruktur einem Einkristall entspricht, können auf dieser Basis die mechanischen Eigenschaften von verschiedenen vielkristallinen Mikrostrukturen werden. Dadurch ist es möglich, am Computer eine Vielzahl verschiedener Mikrostrukturen in einer deutlich kürzeren Zeit und mit weniger Ressourcen zu simulieren, als es mit einer experimentellen Charakterisierung möglich wäre. Diese Art der mikromechanischen Modellierung erlaubt somit, eine große Vielfalt verschiedener Mikrostrukturen auf der Suche nach der Mikrostruktur mit optimalen Eigenschaften durchzuspielen. Dadurch können dann wiederum nützliche Informationen über die Fertigungsparameter gewonnen werden, die dabei helfen, verschiedene Prozesspfade von vornherein auszuschließen und nur die erfolgversprechendsten Varianten auch experimentell



zu realisieren.

Bild 10: Ergebnisse zum Hochtemperatur-Kriechverhalten zweier additiv gefertigter Proben mit verschiedenen Mikrostrukturen: Vergleich zwischen Experiment und numerischer Simulation.

Ein neuer Studiengang an der Ruhr-Universität Bochum

Autor: A. Hartmaier, G. Eggeler

zu etwa 50 % bewährte Elemente

Materialwissenschaft und Werkstofftechnik sind in NRW und speziell in unserem direkten Umfeld, dem mittleren Ruhrgebiet, langjährige und feste Elemente in Forvorhergesagt schung und Entwicklung. Die Materialwissenschaft ist naturwissenschaftlich geprägt und beschäftigt sich sowohl mit der Erforschung von neuartigen Materialien als auch mit der Charakterisierung von Struktur und Eigenschaften und der skalenübergreifenden Modellierung von Ingenieurwerkstoffen. In der Werkstofftechnik geht es um technische Herstellungsverfahren, um Verarbeitungsverfahren und um das Betriebsverhalten von Bauteilen im Einsatz. Beide Teilgebiete umfassen Forschungsaktivitäten der verschiedensten Materialklassen und Werkstoffentwicklungsketten.

> Ein wesentliches Merkmal des Gebiets ist die Berücksichtigung des strukturellen Aufbaus der Werkstoffe und der davon abhängigen biologischen, chemischen, mechanischen und physikalischen Eigenschaften. Dies umfasst die Herstellung und Verarbeitung, Charakterisierung, Simulation und Weiterentwicklung von Konstruktionswerkstoffen und Funktionsmaterialien. Das Fachgebiet setzt sich aus der erkenntnisorientierten Grundlagenforschung zu Materialien und der ingenieurwissenschaftlichen Werkstoffentwicklung mit Anwendungsbezug zusammen. Es entfaltet dabei eine starke Hebelwirkung im Sinne einer Umsetzung von Forschungsergebnissen in marktrelevante Innovationen. Gleichzeitig Materialwissenschaft und Werkstofftechnik als interdisziplinäre Wissenschaft eine weitreichende fachliche Integrationswirkung, indem sie Erkenntnisse aus be

nachbarten Fachgebieten aufgreift und mit ihnen in wechselseitiger Beziehung steht. Für die Materialwissenschaft sind hier insbesondere die Verknüpfungen mit der Chemie, der Physik und den Lebenswissenschaften zu nennen, während für die Werkstofftechnik die Gebiete Mechanik, Konstruktionstechnik, Produktionstechnik und Verfahrenstechnik relevant sind.

Heute sind materialwissenschaftliche und werkstofftechnische Themen integraler Bestandteil des Studiums in praktisch allen ingenieurwissenschaftlichen chen, vorwiegend im Maschinenbau und in der Elektrotechnik, aber auch in der Physik, der Chemie, den Geowissenschaften und zunehmend auch in der Medizin. Inzwischen hat sich die Materialwissenschaft und Werkstofftechnik als eigenständige Disziplin nicht nur in der Forschung, sondern auch in der universitären Lehre fest etabliert. Es gibt einen gemeinsamen Studientag Materialwissenschaft und Werkstofftechnik, der zum Ziel hat "ein deutschlandweit anerkanntes integratives Ausbildungskonzept für die Fach-disziplin Materialwissenschaft und Werkstofftechnik zu sichern." (https://stmw.de/stmw/)

Vor diesem Hintergrund haben das Institut für Werkstoffe und das ICAMS, eng vernetzte materialwissenschaftliche Forschungsgruppen der RUB, gemeinsam die Einrichtung eines neuen Bachelorstudiengangs Materialwisseschaft vorgeschlagen, der im WS 2021/22 seine Arbeit aufnehmen soll. Die Vorbereitungen zu diesem Studiengang, der an der Fakultät für Maschinenbau angebunden sein soll, sind in vollem Gange. Er soll aus dem Curriculum des Maschinenbaus enthalten und zu etwa 50 % neue Elemente aufweisen. Bei den neuen Elementen geht es um den Aufbau fester Stoffe (Elemente der Festkörperphysik, Kristallographie und die physikalische Chemie fester Stoffe mit einer Einführung in die Quantenmechanik), um die Methodik von Charakterisierungsverfahren (Lichtmikroskopie, Elektronenmikroskopie und Beugungsverfahren) und um die Entwicklung, die Erzeugung und die Be- und Verarbeitung von Werkstoffen. Außerdem lernen die Studierenden in dem neuen Studiengang auch die Grundlagen der physikalischen Modellbildung und numerischen Simulation im Hinblick auf die Entwicklung von Werkstoffen und werden in die modernen Methoden des datenorientierten Arbeitens eingeführt. Die dabei erworbenen Kenntnisse und Fertigkeiten zielen nicht nur auf die materialwissenschaftliche Forschung der RUB ab, sie werden auch mehr und mehr aus der Industrie nachgefragt, wo neue mikroskopische Methoden oder die skalenübergreifende Materialmodellierung Einzug in das Tagesgeschäft der Werkstofflabore halten. Es ist vorgesehen, dass besonders qualifizierte Absolventen des neuen Bachelorstudiengangs ein Masterstudium entweder in der Vertiefungsrichtung Werkstoffund Microengineering des Masterstudiengangs Maschinenbau oder im englischsprachigen Masterstudiengang Materials Science and Simulation fortsetzen können.

Die Zahl der Studierenden, die sich für den neuen Bachelorstudiengang einschreiben, wird auf ca. 30 bis 50 geschätzt. Bereits heute können wir vermelden, dass

das Interesse an diesem neuen Studiengang, gerade bei Schülerinnen und Schülern aus dem Ruhrgebiet, groß ist. Unsere Erfolge aus den letzten Jahren (u. a. die Einwerbung des international sichtbaren Modellierungsinstituts ICAMS, die Sonderforschungsbereiche zur Formgedächtnistechnik und zu einkristallinen Superlegierungen, die erfolgreiche Bewerbung um das Forschungszentrum für Grenzflächendominierte Höchstleistungswerkstoffe (ZGH) und nicht zuletzt auch der erste Preis der Firma

Ingpuls, unseres materialwissenschaftlichen RUB-Spin-Offs beim Innovationswettbewerb TOP 100 haben hier den Boden bereitet. Bei Interesse an weiterführenden Informationen freuen wir uns auf Ihre Kontaktaufnahme.

Von Enzymen zu komplexen nanoskaligen Materialien für katalytische Kaskadenreaktionen

Autoren: P. B. O'Mara, P. Wilde, T. M. Benedetti, C. Andronescu, S. Cheong, J. J. Gooding, R. D. Tilley, W. Schuhmann

Die hervorragende Aktivität und Selektivität von Enzymen als Katalysatoren inspirieren Forscher seit Langem. Enzyme weisen als wesentliches strukturelles Merkmal eine katalytisch aktive Stelle am Ende eines Substratkanals auf. Wenn mehr als ein aktives Zentrum in dem Substratkanal lokalisiert ist, werden Kaskadenreaktionen möglich, bei denen das Produkt einer ersten Reaktion an einem nahegelegenen aktiven Zentrum weiter reagieren kann. Aufgrund der Nanokavitäten können lokal hohe Konzentrationen des ersten Reaktionsproduktes erhalten werden, so dass die Selektivität der Folgereaktion moduliert werden kann. Es stellt sich somit die Frage, ob Materialien entwickelt werden können, die die Merkmale der Enzyme nachahmen.

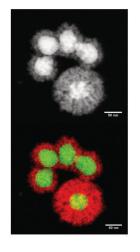
Wir haben kürzlich das Nanozymkonzept entwickelt, bei dem Nanopartikel die dreidimensionale Architektur von Enzymen mit einer aktiven Stelle in einem Substratkanal nachahmen. konnten zeigen, dass die Kontrolle über die Lösungsumgebung innerhalb dieses Substratkanals zu einer wesentlichen Verbesserung der elektrokatalytischen Aktivität eines PtNi-Nanopartikels für die Sauerstoffreduktionsreaktion führte. Wir haben dieses Konzept auf Kaskadenreaktionen erweitert, bei denen mehrere aktive Stellen mit unterschiedlichen katalytischen Eigenschaften in unmittelbarer Nähe innerhalb eines nanogeschränkten Substratkanals liegen. Die elektrokatalytische CO₂-Reduktionsreaktion (CO2RR) wurde als Modellreaktion gewählt, bei der die mehrstufige Umwandlung von CO₂ in höhere organische Moleküle durch sequentielle protonengekoppelte Elektronenübertragungsreaktionen erreicht wurde.

Die CO2RR-Reaktion (CO2RRR) zu höheren Produkten kann in zwei Hauptprozesse unterteilt werden: die Elektroreduktion von CO, zu CO und die Elektroreduktion von CO zu höheren organischen Molekülen. Die letztgenannte Reaktion hängt von der Art des Katalysators, dem lokale pH-Wert, dem Elektrolyt, der Temperatur und der CO.- und CO-Konzentration ab. Während Ag eine hohe katalytische Aktivität zur Umwandlung von CO, in CO mit hoher Selektivität bereits bei einem Potenzial von -0,60 V vs. RHE aufweist, ist es für die Folgereaktionen inaktiv. Cu ist in der Lage, den zweiten Schritt der Kaskadenreaktion, die Reduktion von CO zu C≥2-Produkten, bei kathodischen Potentialen von nur -0,25 Vs. vs. RHE zu katalysieren. Bei -0,60 V vs. RHE weist Cu eine vernachlässigbare Aktivität für die Bildung von CO aus CO₂ auf. Die vorgeschlagene Nanozymarchitektur unterstützt einen kaskadenartigen Reaktionsmechanismus, der letztendlich die Produktverteilung auf C≥2-Produkte wie n-Propanol und Propionaldehyd bei geringen Überpotentialen verlagert.

Ein Nanozym mit aktiven Zentren

aus Ag und Cu für die CO2RR muss zwei strukturelle Anforderungen erfüllen, um eine enzymähnliche Kaskadenreaktion zu ermöglichen (Bild 11). Zum einen muss die Zugänglichkeit für Reaktanden zum ersten aktiven Zentrum und zum anderen die Diffusion des primären Reaktionsproduktes zum zweiten aktiven Zentrum innerhalb des nanoskaligen Volumens gewährleistet sein. Für die Kaskadenreaktion umfasst das Nanozym einen Ag-Kern, der als primäres aktives Zentrum für die Reduktion von CO, zu CO fungiert, der in die mesoporöse Cu-Schale diffundiert, die sowohl als sekundäres aktives Zentrum als auch als Substratkanal dient. Sobald CO, am Ag-Kern effizient in CO umgewandelt wird, leitet die räumliche Struktur das CO zu den aktiven Cu-Stellen um, an denen über C-C-Kopplungsreaktionen höhere organische Moleküle aus CO gebildet werden. Die

Bildung von C,H,O sowie C,H,O erfolgt bei den Potentialen zwischen -0,60 und -0,65 V vs. RHE. Gemäß dem in Bild 11 dargestellten Kaskadenmechanismus gehen wir davon aus, dass die Bildung von C,H,O ein Ergebnis der Nanozymarchitektur ist. Zusammenfassend haben wir uns von architektonischen Merkmalen inspirieren lassen, die es Enzymen ermöglichen, Kaskadenreaktionen durchzuführen und diese in ein elektrokatalytisches Nanopartikelsystem für die CO2RRR umgesetzt. Das Konzept ist weit über CO2RRR hinaus relevant. Die vorgestellten Ergebnisse ermutigen die Ausweitung des Nanozym-Paradigmas auf andere katalytische Mehrstufenreaktionen, um die Fähigkeiten verschiedener katalytisch aktiver Zentren voll auszuschöpfen.



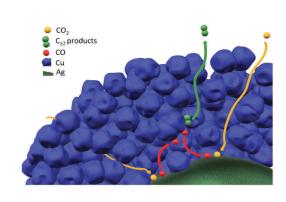
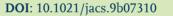


Bild 11: (*Links*) TEM- und TEM-EDX-Messungen einzelner Nanozympartikel mit Ag-Kern und poröser Cu-Hülle. (*Rechts*) Schematische Darstellung der Kaskadenreaktion in einem Nanozym. Das Kohlenstoffdioxid wird ausschließlich am Ag-Kern zu CO reduziert und diffundiert zu den aktiven Zentren am Kupfer, wo es weiter unter C-C-Bindungsknüpfung zu höheren Alkoholen weiter reagiert.

Publikation:

Cascade reactions in nanozymes: Spatial confinement in Ag-Cu bimetallic nanoparticles for carbon dioxide reduction, J. Am. Chem. Soc. **141** (2019) 14093-14097





ZGH - Zentrum für Grenzflächendominierte Höchstleistungswerkstoffe

Autoren: A. Ludwig, J. Pfetzing-Micklich

Das Zentrum für Grenzflächendominierte Höchstleistungswerkstoffe (ZGH) bietet MaterialforschernInnen an der RUB eine leistungsstarke Infrastruktur, insbesondere für die skalenübergreifende Forschung im Bereich von Grenzflächen von der atomaren Skala bis zum Bauteil.

Im Forschungsbau (Bild 12) können ca. 80 WissenschaftlerInnen forschen. Die ZGH-Großgeräte sind in vier "Core Facilities" organisiert. Geräte in der Core Fa-



Bild 12: Eingang zum Zentrum für Grenzflächendominierte Höchstleistungswerkstoffe der Ruhr-Universität Bochum.

cility I ermöglichen die höchstauflösende tomografische Materialcharakterisierung. Dazu gehören eine Anlage zur dreidimensiona-Atomsondentomographie (APT), ein aberrationskorrigiertes Transmissionselektronenmikroskop (TEM), eine Ionenstrahlanlage (FIB) und ein Rasterelektronenmikroskop mit umfassender Analytik, ein Hochdurchsatz-Röntgendiffraktometer mit Flächendetektor und ein 3D-Röntgentomograph. Zur Core Facility II gehören ein Scanning Probe Mikroskop und ein Hochtemperatur-Nanoindenter zur Oberflächencharakterisierung. Core Facility III umfasst einen Reinraum mit Trocken- (Reactive Ion Beam Etching - RIBE, Reactive Ion Etching - RIE, Advanced Silicon Etching - ASE) und Nassätzbereichen, Beschichtung (Plasma-

11

enhanced Chemical Vapour Deposition - PECVD), sowie Photolithographie. Die Core Facility IV ist ein Computercluster für anspruchsvolle Simulationen im Bereich der Grenzflächen. Bei der Nutzung aller ZGH-Core Facilities werden ForscherInnen durch ein kompetentes Team unterstützt (Bild 13). Die Core Facilities können auf zwei Arten genutzt werden: Es besteht für WissenschaftlerInnen Möglichkeit, Einweisungen und umfassende Schulungen an den Geräten zu erhalten und anschließend die Geräte selbstständig zu nutzen. Des Weiteren kann man auch den vollen Support vom ZGH-Team erhalten, um die leistungsstarke Infrastruktur für eigene Forschungsarbeiten zu verwenden. So wird auch Gruppen der Zugang zu anspruchsvollen Geräten, Messmethoden und Analysetechniken ermöglicht, deren Kernkompetenzen eigentlich in anderen Bereichen liegen und diese spezialisierten Untersuchungsund Charakterisierungsmethoden sonst für

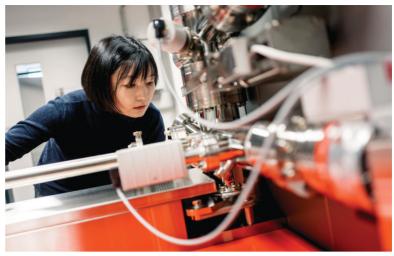


Bild 13: Tong Li arbeitet an der Atomprobe des ZGH.

Innen oder ZGH-Infrastruktur maßgeblich beteiligt waren. Im ZGH sind zurzeit zwei Nachwuchsforschungsgruppen angesiedelt. In der Gruppe von Jun.-Prof. Dr. Tong Li werden Materialien auf atomarer Ebene mittels APT und Elektronenmikroskopie charakterisiert (Bild 13). Der Fokus liegt in der Untersuchung von Katalysatormaterialien, aber auch von Titan-Legierungen für Luftund Raumfahrtanwendungen. Die Gruppe um Jun.-Prof. Dr. Guillaume Laplanche beschäftigt sich mit genannter Hochentropielegierungen.

Neben der Zugangsmöglichkeit für RUB-ForscherInnen, besteht auch die Möglichkeit für Externe auf die moderne ZGH-Infrastruktur zuzugreifen. Es gelten dabei besondere Regelungen. Für weitere Informationen oder für Anfragen wenden Sie sich bitte per E-Mail an Frau Dr. J. Pfetzing-Micklich (zgh@rub.de).



Bild 13: (V.l.n.r.) Janine Pfetzing-Micklich, Aleksander Kostka, Marvin Hildebrandt, Yujiao Li.

eigene Forschung nicht nutzen könnten.

Seit Inbetriebnahme der ZGH-Forschungsgeräte im Jahr 2017 sind 29 Publikationen entstanden, an denen ZGH-Wissenschaftlerder Beziehung von der Mikrostruktur, den mechanischen Eigenschaften und dem Einfluss von Prozessparametern. Einen Forschungsschwerpunkt legt Jun.-Prof. Dr. Laplanche auf die Herstellung und Optimierung so-

Imprint

Publisher:

Materials Research Department Ruhr-Universität Bochum

Contact:

Ruhr-Universität Bochum Materials Research Department Universtiätsstraße 150 D-44801 Bochum

E-Mail: mrd@rub.de
Web: http://mrd.rub.de