

# Simulation thermischer Eigenschaften von Diamant-SiC-Kompositen

Dr. Björn Matthey, Dipl.-Phys. Jakob Schöne,  
Dr. Wieland Beckert, Dr. Mathias Herrmann

Diamant zeichnet sich sowohl durch die höchste Härte als auch die höchste Wärmeleitfähigkeit unter allen Werkstoffe aus. Werkstoffe mit hohen Diamantanteilen haben daher ein hohes Anwendungspotenzial für Komponenten zur Kühlung von Leistungselektroniken, Lasern oder zur Prozesskühlung. Der am Fraunhofer IKTS entwickelte Siliciumcarbid gebundene Diamantwerkstoff vereint die exzellenten thermischen Eigenschaften mit der Möglichkeit, komplexe Komponenten herzustellen. Da der Werkstoff in seinem Gefüge insbesondere in Hinsicht auf die Korngrößenverteilung der Diamantphase sehr variabel zusammengesetzt werden kann, sind bisher vor allem Zusammenhänge zwischen den maximalen Diamantkorngrößen und der Wärmeleitfähigkeit bekannt [1]. Um die optimale Kornzusammensetzung und damit die gewünschten Eigenschaften zu realisieren, sind jedoch viele aufwändige und kostenintensive Prozessschritte erforderlich. Neue Methoden für ein virtuelles Werkstoff-Design mittels gezielter Gefügesimulation sollen diesen Prozess vereinfachen.

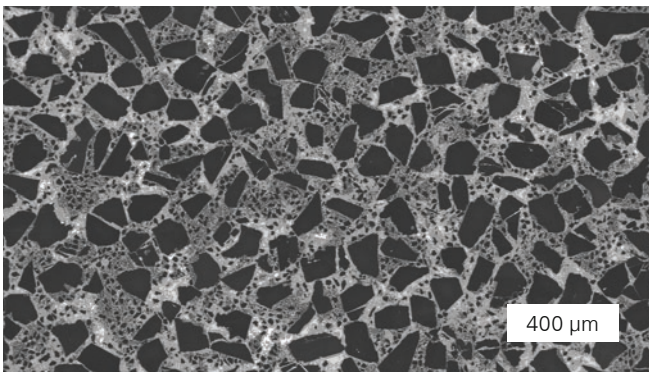


Bild 1: Gefüge eines hochwärmeleitfähigen Diamant-SiC-Kompositwerkstoffs.

## Virtuelles Werkstoff-Design

Zur künstlichen Generierung von Diamant-Si-SiC-Strukturen wurde ein Workflow entwickelt, der sowohl kommerzielle Software als auch Open-Source-Software kombiniert. Die synthetisch erstellten geometrischen Grundstrukturmodelle können über eigene Import-/Export-Filter zur weiteren Verarbeitung

und physikalischen Analyse flexibel in ein breites Spektrum weiterer Modelltools exportiert werden. Der etablierte Workflow erlaubt die Erzeugung synthetischer Strukturmodelle mit einer realistischen Morphologie und variabel einstellbaren Volumenanteilen von Diamant, Si und SiC. Die vorhergesagte Wärmeleitfähigkeit zeigt eine gute Übereinstimmung mit den vermessenen Strukturen [1].



Bild 2: Künstlich generiertes 3D-Gefüge eines Diamant-SiC-Komposits als Grundlage für die Simulation der thermischen Eigenschaften.

Auf Basis dieser Arbeiten für Diamant-SiC können weiterführende 3D-Strukturmodelle und -analysen für eine Vielzahl anderer Werkstoffe durchgeführt werden, etwa für Hartmetalle und andere konventionelle keramische Werkstoffe. Neben den thermischen Eigenschaften können auch weitere physikalische Kennwerte, wie elastische und elektrische Eigenschaften simuliert werden. Perspektivisch besteht das Ziel, mittels synthetischer Struktur-Analyse-Verfahren simulationsbasiert entsprechend vorgegebener Eigenschaftsspezifikation maßgeschneiderte Materialstrukturen abzuleiten.

## Leistungs- und Kooperationsangebot

- Analyse der Mikrostruktur von keramischen Gefügen
- Erzeugung von synthetischen Modellgefügen mit einer realistischen Morphologie
- Messung, Simulation und Korrelation einer Vielzahl physikalischer Eigenschaften

## Literatur

[1] Matthey, B., Kunze, S., Kaiser, A., & Herrmann, M. (2023). Thermal properties of SiC-bonded diamond materials produced by liquid silicon infiltration. *Open Ceramics*, 100386.