



**MONTAN  
UNIVERSITÄT**  
WWW.UNILEOBEN.AC.AT

Montanuniversität Leoben



AVL List GmbH Graz

# Entwicklung eines Delaminierungsmodells einer SOFC

---

Diplomarbeit zum Erlangen des akademischen Grades

**Diplom – Ingenieur**

Montanuniversität Leoben

Institut für Mechanik

**Betreuer:**

Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr. mont. Thomas Antretter (Montanuniversität Leoben)

DI (FH) Mario Brunner (AVL List GmbH Graz)

Michael Toifl

Juni 2013



## **Vorwort**

Die vorliegende Diplomarbeit wurde in Zusammenarbeit mit der Firma AVL List GmbH in Graz durchgeführt. Dabei gebührt mein Dank Herrn DI (FH) Mario Brunner für die Ermöglichung und Förderung dieser Arbeit und der Bereitstellung der Ressourcen. Einen besonders großen Dank möchte ich an Herrn Dipl.- Ing. Matej Smolnikar, meinem Mentor in der AVL, richten, der mich stets mit zahlreichen Ratschlägen und vielfältigen technischen Diskussionen unterstützte und motivierte. Besonders unter dem Umstand des stressigen Projektalltages fand er immer Zeit, um meine Fragen und Problemstellungen zu behandeln.

Von Seiten der Montanuniversität Leoben möchte ich mich im Besonderen bei Herrn. Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.mont. Thomas Antretter bedanken, der die Betreuung und Beurteilung meiner Diplomarbeit übernahm. Mit seinem Expertenwissen und seiner umfangreichen Erfahrung auf dem Gebiet der Finite Elemente Rechnung konnte er wertvolle Inputs liefern und war eine wichtige Stütze für die erfolgreiche Durchführung dieser Arbeit.

Bei meinen Kollegen in der Abteilung DAM in der AVL List GmbH möchte ich mich ebenfalls für die wertvolle Unterstützung bei technischen Problemen und Fragen bedanken. An dieser Stelle gebührt mein Dank auch meinen Studienkollegen und Freunden an der Montanuniversität Leoben für die Unterstützung und Begleitung im Studium. Des Weiteren möchte ich mich besonders bei Herrn Ing. Benedikt Bauer, Herrn Thomas Rockenbauer, Frau Christina Toifl und Herrn Markus Wögler, BSc für das Korrekturlesen dieser Arbeit bedanken.

Ein besonders herzliches Dankeschön möchte ich an meine Freundin Frau Victoria la Garde für die emotionale Unterstützung und das aufgebrachte Verständnis richten. Des Weiteren gebührt ein sehr großer Dank meinen Eltern und Großeltern für die finanzielle und soziale Unterstützung während meines Studiums. Ohne sie wäre diese Art der tertiären Ausbildung nicht möglich gewesen.

Vielen Dank!

Michael Toifl, 15.04.2013

## **Eidesstattliche Erklärung**

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel nicht benutzt und mich auch sonst keiner unerlaubten Hilfsmittel bedient habe.

## **Affidavit**

I declare in lieu of oath, that I wrote this thesis and performed the associated research myself, using only literature cited in this volume.

Leoben, am .....

.....

Michael Toifl

## Kurzbeschreibung

Die vorliegende Diplomarbeit leitet einen numerischen Modellansatz zur Bewertung von möglichen Delaminierungen (Grenzflächenrisse) in einer SOFC während des Betriebes ab. Im Speziellen wird das bruchmechanische Verhalten der Kontaktflächen auf Basis der thermischen Spannungen während der Aufheiz-, Abkühl- und Betriebsphase mit Hilfe des *Kohäsivelemente*- Ansatzes (engl. cohesive element) mit dem FEM Programm Abaqus/CAE bewertet und sowohl die Rissinitiierung als auch das Risswachstum quantifiziert. Das dafür notwendige zeitlich und örtlich veränderliche Spannungsfeld wurde in einer Diplomarbeit [1], die dieser Arbeit vorangestellt ist, auf Basis eines transienten Temperaturfelds [2] und mechanischen Randbedingungen bestimmt.

Das Ziel dieser Arbeit ist die Ableitung eines Simulationsprozesses zur Bewertung von lokalen Delaminierungen auf Ebene der einzelnen Zelle. Dabei sind die gewonnenen Berechnungsergebnisse nicht als absolute Werte zu klassifizieren, da sowohl Materialidentifikationen als auch Modellvalidierungen in einem späteren Schritt erfolgen. Vielmehr sollen die abgeleiteten Ergebnisse für die Standardisierung eines Simulationsprozesses für zukünftige SOFC Projekte dienen.

Die gewonnene Methodik leitet, ausgehend von den globalen Spannungen des ganzen Brennstoffzellenstacks, über die Verwendung einer Vergleichsschädigung die für Delaminierung gefährdetsten Zellen ab und stellt in weiterer Folge für diese ein Detailmodell mit *Kohäsivelementen* auf. Mit Hilfe von diesem Submodell können die Rissinitiierung und der Rissfortschritt bewertet werden und Optimierungen erfolgen. Die für die Bestimmung der notwendigen bruchmechanischen Werkstoffparameter benötigten Materialtests werden in dieser Arbeit zusammengefasst. Für die Verwendung des passenden Prozesszonenansatzes für die Beschreibung der *Kohäsivelemente* und Auswahl eines effizienten Diskretisierungsgrades wurde eine Parameteranalyse durchgeführt.

Die gewonnenen Ergebnisse dieser Arbeit beweisen, dass ausgehend von einem globalen Spannungsmodell, über eine globale Vergleichsschädigung und einem *Kohäsivelemente* Detailmodell die lokale Delaminierungsschädigung abgebildet werden kann. Für die Definition der *Kohäsivelemente* in Abhängigkeit der Netzfeinheit wurde für das vorliegende Modell, durch bruchmechanisch korrekte Abbildung der Prozesszone, der Ansatz von *Barenblatt* als passend identifiziert.

**Schlüsselwörter:** *Kohäsivelemente*, Delaminierung, Grenzflächenrisse, Prozesszone, SOFC Schädigung

## Abstract

This thesis deals with the derivation of a numerical approach to assess potential delamination in a SOFC during operation. Therefore, the fracture mechanical behavior of the interfaces is investigated by the *cohesive element* approach in the FEM program Abaqus / CAE, which allows a quantification of crack initiation as well as crack propagation. The numerical analysis is based on the thermal stresses during the heating, cool-down and operating phase. The required time and space dependent stress field was obtained by a previous thesis [1], which is based on a transient temperature field [2] and mechanical boundary conditions.

The aim of this work is to determine a simulation workflow in order to assess the local delamination of a single cell. Since the material identification and model validation will be investigated in further work packages, the gained results should not be treated as absolute values. In fact, the output of the calculations should be used for the standardization of the simulation process for further SOFC projects.

The chosen methodology identifies the most critical cells for delamination based on the global stress field through calculation of an equivalent damage parameter. For further investigations a submodel of the critical cells including the *cohesive elements* is built up. By means of this detail model, it is feasible to assess the crack initiation and propagation of the interfaces and perform optimization loops. The necessary identification of the *cohesive element* material parameters are summarized in this thesis. A parameter analysis is conducted to determine the most appropriate process zone approach and the most efficient discretization of the cell.

The final outcome of this thesis proves that the local delamination of a single cell can be assessed by analyzing the global stress field, applying an equivalent damage parameter and a delamination submodel of the most severe cells including *cohesive elements*. The *Barenblatt* model is identified as the most promising process zone approach for this SOFC design. This statement is confirmed by comparing the approaches with a model with perfect fracture mechanic mapping of the process zone.

**Keyword:** *cohesive element*, delamination, process zone, SOFC damage

## Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung.....	1
1.1	Problemstellung .....	1
1.2	Aufbau der Arbeit.....	2
2	Brennstoffzelle .....	4
2.1	Einführung .....	4
2.2	Funktionsprinzip .....	5
2.3	Arten von Zellen .....	7
2.4	SOFC .....	9
2.4.1	Funktionsweise SOFC .....	10
2.4.2	Bauarten .....	11
2.4.3	Mögliche Zellschädigungen .....	14
3	Delaminierung.....	17
3.1	Einführung Delaminierung .....	17
3.2	Betrachtung verschiedener Berechnungsansätze.....	17
3.3	<i>Kohäsivelemente</i> .....	18
3.3.1	Einführung <i>Kohäsivelemente</i> .....	18
3.3.2	Theorie <i>Kohäsivelemente</i> .....	19
3.3.3	Elementtyp .....	31
3.3.4	Konvergenzverhalten .....	32
3.3.5	Materialparameter .....	34
3.3.6	Materialtests .....	34
3.3.7	Prozesszone .....	40
3.3.8	Abschätzung der Anfangssteifigkeit .....	42
3.3.9	Abschätzung der kritischen Grenzflächenspannung und Anfangssteifigkeit bei unbekanntem Materialparameter .....	43
4	Erläuterung der verwendeten Bauteile.....	44
4.1	Globaler Brennstoffzellenstack .....	44
4.2	Wiederholende Einheit.....	46
4.3	Zelle .....	47
5	Vorarbeiten für diese Arbeit .....	50
5.1	Temperaturfeld .....	50
5.1.1	Modellierung .....	50
5.1.2	Ergebnisse.....	52
5.2	Spannungsfeld .....	54

5.2.1	Modellierung .....	54
5.2.2	Ergebnisse.....	55
6	Berechnungsmethodik .....	59
7	Bildung der Vergleichsschädigung.....	63
7.1	Definition Vergleichsschädigung .....	63
7.2	Ergebnis Vergleichsschädigung .....	64
8	Delaminierungssubmodell.....	70
8.1	Modellaufbau und Randbedingungen Delaminierungssubmodell .....	70
8.2	Berechnung der Anfangssteifigkeiten der <i>Kohäsivelemente</i> .....	70
8.3	Abschätzung der Prozesszone .....	71
8.4	Parameteranalyse verschiedener Prozesszonen und Netzdichten .....	72
8.4.1	Verwendete Zelle und Randbedingungen .....	72
8.4.2	Versuchsplan .....	73
8.4.3	Ergebnisse Parameteranalyse .....	76
8.4.4	Auswertung .....	101
8.5	Modell mit Netzfeinheit am Rand laut Prozesszone .....	106
8.5.1	Modellaufbau .....	106
8.5.2	Ergebnisse.....	107
8.5.3	Auswertung .....	113
9	Gegenüberstellung globale Vergleichsschädigung – Delaminierungssubmodelle.....	116
9.1	Submodelle von unterschiedlich angeordneten Zellen.....	116
9.1.1	Wahl der verschiedenen Zellen .....	116
9.1.2	Ergebnisse Detailmodelle auf verschiedenen Positionen .....	116
9.2	Vergleich mit globaler Vergleichsschädigung.....	119
10	Zusammenfassung.....	122
10.1	Vergleichsschädigung .....	122
10.2	Delaminierungssubmodell.....	123
11	Ausblick.....	125
11.1	Materialdaten und Herstellung .....	125
11.2	Optimierung des Modellaufbaus.....	125
11.3	Validierung .....	126
11.4	Optimierung .....	126
	Abkürzungen .....	127
	Formelzeichen .....	128
	Lateinische Buchstaben .....	128

Griechische Buchstaben .....	129
Indizes.....	130
Hochstellungen.....	130
Operatoren .....	131
Abbildungsverzeichnis.....	132
Tabellenverzeichnis .....	135
Literaturverzeichnis.....	136
Anhang .....	144
Definition der <i>Kohäsivelemente</i> .....	144



# 1 Einleitung

Die Herausforderungen des steigenden Energiebedarfs, der Reduktion von treibhausrelevanten Emissionen und die Verringerung der Abhängigkeit von fossilen Brennstoffen stehen im Mittelpunkt dieses Jahrzehnts. In diesem Zusammenhang wird die Brennstoffzellentechnik in verschiedenen nationalen und internationalen Forschungseinrichtungen seit einigen Jahren intensiv weiterentwickelt, um diese Herausforderungen meistern zu können. Besonders der hohe theoretische Wirkungsgrad der Brennstoffzelle und die geringe Schadstoff- und Geräuschemission machen diese Technologie für die Zukunft interessant. Ein Einsatz ist sowohl in der stationären Energieversorgung (zum Beispiel als dezentrales Blockheizkraftwerk) als auch für mobile Anwendungen denkbar. Dabei ist die Brennstoffzelle nicht nur auf Wasserstoff als Brenngas beschränkt, sondern speziell in SOFC's können alternativ auch kohlenwasserstoffbasierende Brennstoffe wie Erdgas, Heizöl und Methanol eingesetzt werden [3].

Die aktuellen Forschungsarbeiten auf dem Gebiet der Brennstoffzellen verfolgen die Reduktion der Systemkosten und die Erhöhung der Lebensdauer. Das Unternehmen AVL List GmbH ist an einigen Forschungsprojekten für die Optimierung der Lebensdauer beteiligt. Im Besonderen intensiviert die Firma dabei die Forschung von SOFC (Solid Oxide Fuel Cells), da diese Zellen über ein besonders breites Anwendungsprofil und einen einfachen Aufbau verfügen. Ein entscheidender, lebensdauerbeschränkender Einflussfaktor bei SOFCs ist die hohe Betriebstemperatur von 700°C bis 1000°C. Da dieser Brennstoffzellentyp aus einem festen keramischen Elektrolyt besteht, welcher erst ab einer bestimmten Temperatur ausreichend leitend für Sauerstoff- Ionen wird, muss der gesamte Stack mit heißer Luft beheizt werden, bis die Betriebstemperatur erreicht wird und die chemischen Reaktionen ablaufen können [7]. Durch diese Aufheiz- und Abkühlphasen (zum Beispiel bei Wartungen) treten Temperaturgradienten in den einzelnen Zellen auf, die zu Schädigungen und Delaminierungen führen können. Neben den Temperaturgradienten erzeugen auch noch unterschiedliche thermische Ausdehnungsgradienten Spannungen, die beim stationären Betrieb wirken.

Um auf Ebene der Einzelzellen die Möglichkeit für Delaminierungen quantifizieren zu können, muss ein globales Spannungsfeld zu Verfügung stehen. Dies ist notwendig, da die einzelnen Zellen sehr stark miteinander gekoppelt sind, und zusätzlich die globalen Randbedingungen und lokalen Effekte großen Einfluss auf die lokale Schädigung der Einzelzelle haben.

## 1.1 Problemstellung

Ziel dieser Arbeit ist die Analyse und Quantifizierung von Delaminierungen auf einzelnen Zellen aufgrund von thermischen Spannungen während eines Belastungszyklus. Entscheidend ist die Definition der Methode sowie der verwendeten Werkzeuge und Ansätze, um künftige Berechnungen von Brennstoffzellenlebensdauern und deren Optimierung in standardisierter Form durchführen zu können.

Als Grundlage für diese Arbeit dient ein globales Spannungsfeld, welches auf Basis eines transienten Temperaturfeldes während der Aufheiz- und Abkühlphase in Vorarbeiten [1], [2] ermittelt wurde. Dabei wurden ausschließlich thermische Spannungen mit mechanischen Spannungen ausgehend von den Randbedingungen überlagert, allerdings wurden keine elektrochemischen Vorgänge berücksichtigt. Die abgeleitete Methode dieser Diplomarbeit erlaubt allerdings für zukünftige

Projekte auch die Berücksichtigung solcher lokalen Belastungen in der Schädigungsanalyse der Einzelzellen.

Um die Delaminierungen quantifizieren zu können, muss ausgehend vom globalen Spannungsfeld ein bruchmechanisches Submodell der kritischsten Zelle erstellt werden. Für diesen Schritt wird ein Schädigungsparameter identifiziert. Ebenfalls müssen Materialtests definiert werden, um die notwendigen bruchmechanischen Kennwerte der einzelnen Kontaktflächen der verschiedenen Zellenmaterialien ermitteln zu können. In einem weiteren Schritt sollen geeignete Ansätze identifiziert werden, um das gleiche bruchmechanische Verhalten für verschiedene Netzdichten sicherstellen zu können.

## 1.2 Aufbau der Arbeit

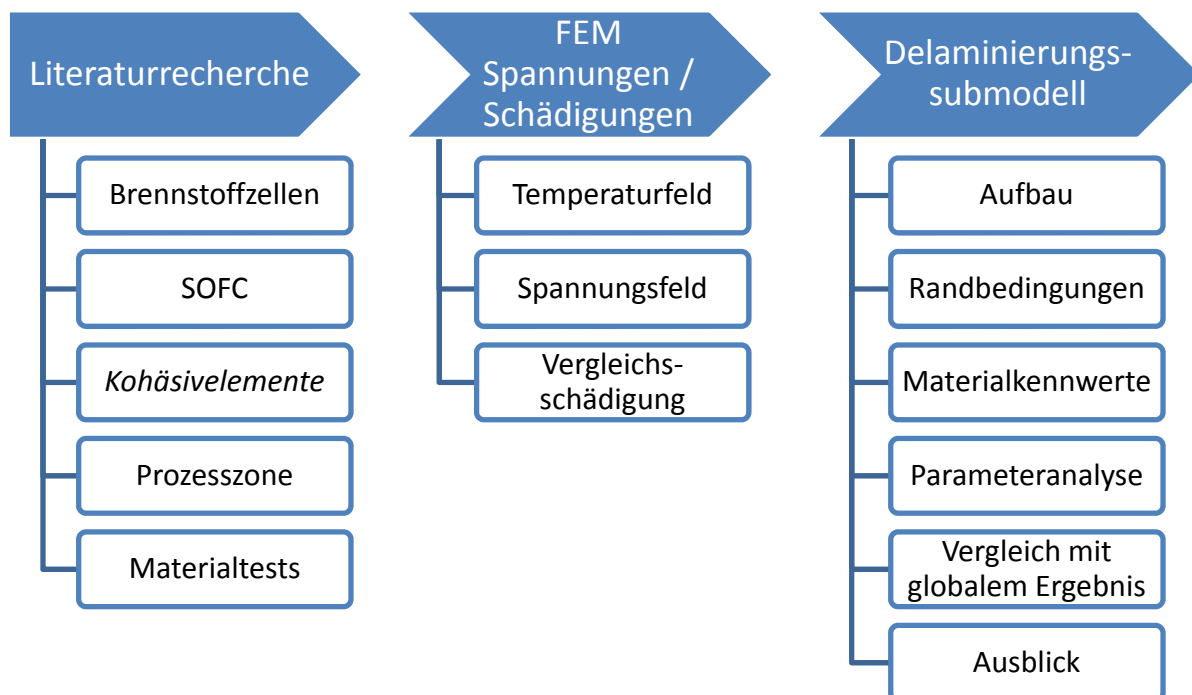


Abbildung 1-1: Gliederung der Arbeit

Abbildung 1-1 visualisiert die systematische Gliederung der vorliegenden Diplomarbeit. Am Anfang der Arbeit ist es notwendig, die Theorie der Brennstoffzelle und der SOFC im Speziellen zu erarbeiten, um ein Verständnis für die Funktionsweise und die möglichen Schädigungsmechanismen ableiten zu können. Im Weiteren wird ausführlich das numerische Konzept der *Kohäsivelemente* erläutert und die physikalische Äquivalenz über die Definition der Prozesszone auf Basis von verschiedenen Autoren beschrieben. Während der Literaturrecherche werden ebenfalls bruchmechanische Materialtests für Brennstoffzellenmaterialien zusammengefasst, um die Grenzschichteigenschaften bestimmen zu können.

Die Beschreibung der Bildung des globalen Spannungsfelds auf Basis von Vorarbeiten mit den entsprechenden Anfangs- und Randbedingungen erfolgt im praktischen Teil der Arbeit. Ausgehend von diesen Spannungen wird die globale Vergleichsschädigung durch Adaption eines Rissinitiierungskriteriums aus der *Kohäsivelemente* Theorie visualisiert.

Der Hauptfokus der Arbeit wird auf das Delaminierungssubmodell mit *Kohäsivelementen* gelegt. Dabei werden sowohl der Aufbau, als auch die verwendeten Randbedingungen und Materialdaten

**Kapitel 1: Einleitung**

---

beziehungsweise Annahmen definiert. In weiterer Folge wird sehr ausführlich der Einfluss der verschiedenen Prozesszonendefinitionen in Abhängigkeit der Netzfeinheit abgeleitet. Dabei wird auf die möglichst effizienteste Wahl des Diskretisierungsgrades eingegangen. In weiterer Folge wird ein Vergleich zwischen der globalen Vergleichsschädigung und den lokalen Rissinitiierungsparametern der Submodelle vorgenommen. Am Schluss wird ein Ausblick auf mögliche weitere Simulationstätigkeiten gegeben.

## 2 Brennstoffzelle

### 2.1 Einführung

Mit Hilfe von Brennstoffzellen können Wasserstoff sowie Erdgas und andere Kohlenwasserstoffe (zum Beispiel Benzin, Methanol) oder Biogas elektrochemisch direkt in elektrische Energie umgewandelt werden. Durch die direkte Umwandlung entfällt der Zwischenschritt über die Erzeugung von mechanischer Arbeit aus der Verbrennungswärme. Dadurch wird der Wirkungsgrad nicht durch den *Carnot* Prozess beschränkt [4], [5].

Die Entdeckung der Brennstoffzelle als Energieumwandlungssystem geht zurück bis in die Mitte des 19. Jahrhunderts. Die Erfindung der Brennstoffzelle wird Sir William Grove zugeschrieben, wobei bereits früher Christian Friedrich Schönbein [6] das Prinzip erkannte. Er war Professor an der Universität Basel und war im engen Kontakt zu Sir Grove. Somit stellt die Brennstoffzelle eines der ältesten elektrischen Energieumwandlungssysteme dar [7]. Allerdings konnte sich die Brennstoffzelle in der damaligen Zeit nicht gegen die gleichzeitig entwickelten Dynamomaschinen zur Stromerzeugung durchsetzen. In jüngerer Zeit werden große Anstrengungen unternommen, um die Brennstoffzelle für den großflächigen Einsatz weiterzuentwickeln [8]. Folgende Vor- und Nachteile müssen bei der Entwicklung in Betracht gezogen werden:

**Vorteile** der Brennstoffzelle als Energiewandler sind:

- Direkte Umwandlung von chemisch gebundener Energie in elektrische Energie [8]
- Das Potenzial höherer Wirkungsgrade bei niedrigen Temperaturniveaus, da die Brennstoffzelle nicht an den *Carnot* Prozess gebunden ist [8]
- Es treten keine Emissionen von Schadstoffen oder Lärm auf, bei Wasserstoff als Brennstoff auch keine CO<sub>2</sub> Emissionen [8]
- Die Brennstoffzelle arbeitet ohne bewegte Bauteile [8]

**Nachteile** der Brennstoffzelle beim derzeitigen Stand der Technik sind:

- Die Brennstoffzelle weist hohe Herstellungskosten auf [8]
- Das hohe Wirkungsgradpotenzial konnte in der Praxis noch nicht ausreichend demonstriert werden [8]
- Das Langzeitverhalten und die Lebensdauer von Brennstoffzellen sind vor allem bei instationärem Betrieb noch nicht zufriedenstellend [8]
- Einige Brennstoffzellentypen benötigen hochreinen Wasserstoff [8]
- Die Erzeugung, Verteilung und Speicherung des Brennstoffs Wasserstoff ist teuer [8]

Einer der größten Vorteile der Brennstoffzelle ist, dass für die Leistungserzeugung nicht der Umweg über die Produktion von Wärme notwendig ist, und der Wirkungsgrad somit nicht vom *Carnot* Zyklus begrenzt ist. Dadurch weisen sie einen größeren theoretischen Wirkungsgrad als Verbrennungsmotoren auf. Durch den Entfall von großen Drücken und hohen Temperaturen in der Verbrennungskammer sowie der Separierung des Treibstoffes in der Brennstoffzelle werden geringe Emissionen (zum Beispiel Stickoxide, Feinstaub) erzeugt. Durch den hohen Wirkungsgrad bei gleichzeitig geringen Emissionen wird die Entwicklung der Brennstoffzelle für viele Einsatzgebiete vorangetrieben [9]. Gebiete, in denen die Brennstoffzellen eingesetzt werden können, sind zum

Beispiel: Batterieladesysteme [10], [11], [12], Blockheizkraftwerke [13], [14], [15], dezentrale stationäre Stromversorgungsanlagen [9] und der Transportsektor [9].

## 2.2 Funktionsprinzip

Die Brennstoffzelle stellt einen elektrochemischen Energiewandler dar, der aus Anode, Kathode und Elektrolyt besteht, wobei die Reaktanten für die Umwandlung kontinuierlich zugeführt werden müssen. Im Betrieb findet eine Redoxreaktion statt, und durch die räumliche Trennung des Brenngases vom Oxidationsmittel müssen die Elektronen über den Elektrolyten und den damit verbundenen Stromkreis fließen und leisten somit elektrische Arbeit. Die Bildung der Elektronen aus den reagierenden Gasen findet allerdings nur statt, wenn eine Phasengrenze zwischen den elektronenleitenden Elektroden und dem ionenleitenden Elektrolyten vorhanden ist. Für die Reaktion muss die Anode mit Brenngas (zum Beispiel: Wasserstoff, Methanol oder Erdgas) und die Kathode von Luft oder Sauerstoff umströmt werden. Der Elektrolyt ist lediglich ionenleitend und muss sicherstellen, dass keine unmittelbare Verbindung zwischen Brennstoff und Sauerstoff stattfinden kann (Abbildung 2-1) [16].

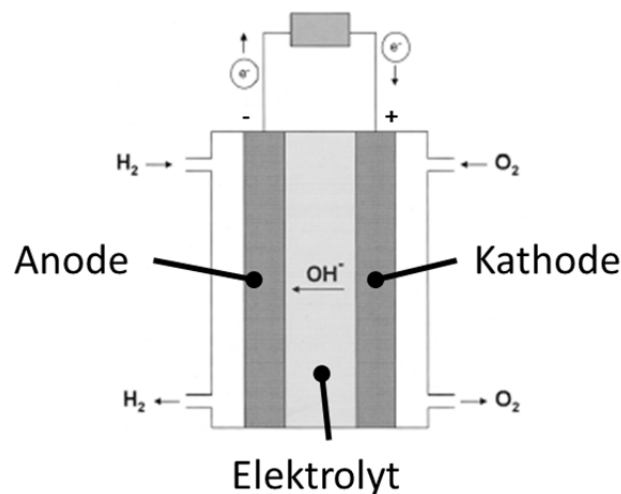
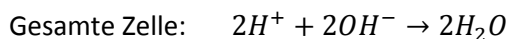
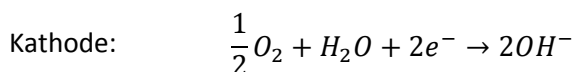


Abbildung 2-1: Funktionsprinzip Brennstoffzelle [16]

Folgende **Reaktionen** finden während der Energieumwandlung statt: [16]



Da die Reaktionspartner getrennt sind und die Ladungsträger direkt erzeugt werden, ist es in einer Brennstoffzelle möglich, theoretisch die gesamte freie Gibbsche Reaktionsenthalpie  $\Delta G$  der Oxidationsreaktion als elektrische Arbeit zu gewinnen. Aus diesem Grund ist der theoretische Wirkungsgrad (Formel (2-1)) außerordentlich hoch und liegt nahe bei eins [16].

$$\eta_{\text{th}} = \frac{\Delta G}{\Delta H} \quad (2-1)$$

In Formel (2-1) beschreibt  $\Delta G$  die freie Enthalpie (nutzbare stoffgebundene Energie) und  $\Delta H$  die Reaktionsenthalpie (gesamte stoffgebundene Energie). Diese beiden Größen unterscheiden sich um die Energieänderung, die während der Reaktion eintritt (Formel (2-2)) [16].

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (2-2)$$

Der Anteil  $T\Delta S$  nimmt bei 20°C bei vielen Reaktionen nur einen kleinen Teil vom gesamten Energieumsatz ein (ungefähr 10%), und aus diesem Grund liegt der theoretische Wirkungsgrad nur knapp unter, oder im Fall positiven Vorzeichens der Entropieänderung sogar über 100%. Wenn der Wirkungsgrad größer als 100% wird, muss die zusätzlich gewonnene elektrische Energie durch isotherme Wärmezufuhr gedeckt werden. Durch Einsetzen der Formel (2-2) in Gleichung (2-1) kann der theoretische Wirkungsgrad ermittelt werden (Formel (2-3)) [16].

$$\eta_{th} = \frac{\Delta G}{\Delta H} = 1 - \frac{T\Delta S}{\Delta H} \quad (2-3)$$

Durch Anwendung von Formel (2-1) und (2-3) können die theoretischen Wirkungsgrade für verschiedene Brennstoffe berechnet werden (Tabelle 1). In Tabelle 1 sind außerdem die Anzahl der an der Reaktion beteiligten Elektronen  $n_{el}$  (= Ladungszahl), die auf 1 mol Brennstoff bezogene Enthalpiedifferenz  $\Delta H^0$ , die molare freie Reaktionsenthalpie  $\Delta G_m^0$  und das Standardpotential  $E^0$  angeführt [8].

**Tabelle 1: Kenngrößen der unterschiedlichen Brennstoffe [17]**

Brennstoff	Gesamtreaktion	$n_{el}$	$\Delta H^0$ [kJ/mol]	$\Delta G_m^0$ [kJ/mol]	$E^0$ [V]	$\eta_{th}$ [%]
Wasserstoff	$H_2 + 1/2O_2 \rightarrow H_2O$	2	-285,0	-237,3	1,23	83,0
Methan	$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$	8	-890,8	-818,4	1,06	91,9
Methanol	$CH_3OH + 3/2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$	6	-726,6	-702,5	1,21	96,7
Kohlenstoff	$C + O_2 \rightarrow CO_2$	4	-393,7	-394,6	1,02	100,2

Die sehr hohen theoretischen Wirkungsgrade können in der Praxis nicht erreicht werden, da eine Reihe von Verlusten auftreten und dabei die Zellspannung mindern. Im Vergleich zum theoretischen Wirkungsgrad der Brennstoffzelle kann der *Carnot* Wirkungsgrad berechnet werden (Formel (2-4)). Dieser beschreibt den theoretisch maximal möglichen Wirkungsgrad bei Umwandlung von Wärme in mechanische Energie [8].

$$\eta_{th} = 1 - \frac{T_u}{T_o} \quad (2-4)$$

Die Variable  $T_o$  in Formel (2-4) definiert die obere Temperatur in Kelvin, die durch die mechanische und thermische Belastbarkeit des Bauteils beschränkt ist, und  $T_u$  beschreibt die untere Temperatur in Kelvin, die durch die Umgebungstemperatur vorgegeben ist [8].

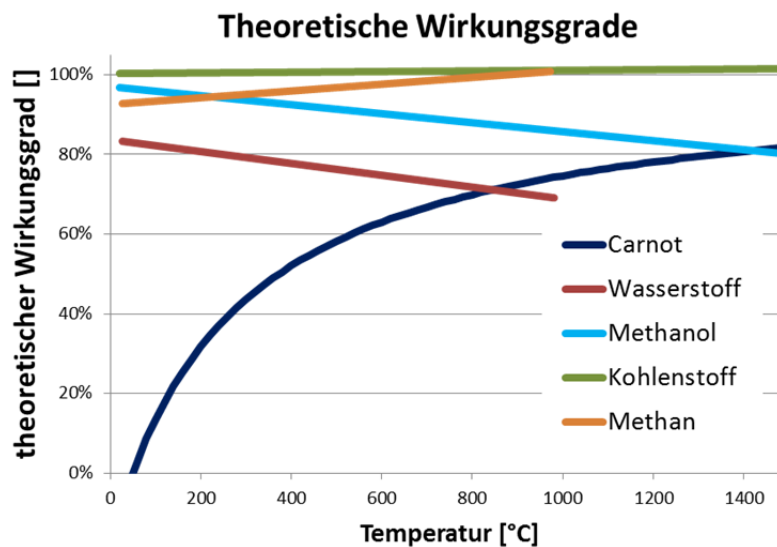


Abbildung 2-2: Theoretische Wirkungsgrade [5], [8], [9]

In Abbildung 2-2 ist eine Gegenüberstellung des *Carnot* Wirkungsgrads mit den theoretischen Wirkungsgraden verschiedener Brennstoffzellen, die mit unterschiedlichen Medien betrieben werden, über der Temperatur visualisiert. Aus dem Diagramm (Abbildung 2-2) ist ersichtlich, dass bis ungefähr 900°C der Wirkungsgrad der Brennstoffzellen, unabhängig vom verwendeten Medium, höher ist als bei einem *Carnot* Kreisprozess. Ebenfalls fällt auf, dass der Wirkungsgrad bei niedrigen Temperaturen signifikant größer ist, als bei einer Wärmekraftmaschine [8]. Aus diesem Grund könnte angenommen werden, dass die meisten Brennstoffzellen bei sehr niedriger Temperatur betrieben werden. Diese Aussage trifft allerdings nicht zu, da bei niedrigen Temperaturen die Spannungsverluste sehr hoch sind. Aufgrund dessen werden die Zellen bei höheren Temperaturen betrieben [17].

Da es sich bei den berechneten Wirkungsgraden nur um theoretische Werte handelt, muss im Betrieb einer Verbrennungskraftmaschine beziehungsweise einer Brennstoffzelle mit deutlich geringerer Effizienz gerechnet werden. Der hohe theoretische Brennstoffzellenwirkungsgrad wird in realen Systemen durch ohmsche Verluste, wie auch Energieverluste in Folge von belastungsabhängigen Widerständen reduziert. Im Allgemeinen hängt der Wirkungsgrad einer Brennstoffzelle von der Arbeitstemperatur, der Qualität und Menge der eingesetzten Katalysatoren und der elektrischen Leitfähigkeit der Zellkomponenten (vor allem der Elektrolyten) ab und sinkt mit steigender Belastung [16].

Tendenziell kann die Aussage getroffen werden, dass bei niedrigen Lasten Brennstoffzellen höhere Wirkungsgrade als Verbrennungskraftmotoren aufweisen [8]. Bei einem europäischen Stadtfahrzyklus (European Driving Cycle, EDC) kann für ein Brennstoffzellenfahrzeug ein Wirkungsgrad von 36% angegeben werden, wobei im Vergleich ein baugleiches Dieselauto nur 22% erreicht [18].

### 2.3 Arten von Zellen

Brennstoffzellen werden üblicherweise nach dem verwendeten Elektrolyten klassifiziert. Daneben ist auch eine Einteilung nach ihrer Betriebstemperatur in Niedertemperaturbrennstoffzellen und ab 600°C in Hochtemperaturbrennstoffzellen üblich. Tabelle 2 stellt eine Übersicht über die verschiedenen Brennstoffzellen dar [7], [8].

Kapitel2: Brennstoffzelle

Tabelle 2: Übersicht über verschiedene Brennstoffzellen [7], [8]

	AFC (Alkalische Zelle)	PEMFC (Protonen- austauschmembran- Zelle)	DMFC (Direktmethanol- Zelle)	PAFC (Phosphorsäure- Zelle)	MCFC (Schmelzkarbonat- Zelle)	SOFC (Festoxid Zelle)
Zellenart	Niedertemperaturbrennstoffzelle				Hochtemperaturbrennstoffzelle	
Einsatztemperatur	<100°C	60-120 °C	60-120°C	160-220°C	600-800°C	800-1000°C (niedrige Temperaturen 500- 600°C möglich)
Reaktion an der Anode	$H_2 + 2OH^- \rightarrow 2H_2O + 2e^-$	$H_2 \rightarrow 2H^+ + 2e^-$	$CH_3OH + H_2O \rightarrow CO_2 + 6H^+ + 6e^-$	$H_2 \rightarrow 2H^+ + 2e^-$	$H_2 + CO_3^{2-} \rightarrow H_2O + CO_2 + 2e^-$	$H_2 + O^{2-} \rightarrow H_2O + 2e^-$
Reaktion an der Kathode	$\frac{1}{2}O_2 + H_2O + 2e^- \rightarrow 2OH^-$	$\frac{1}{2}O_2 + 2H^+ + 2e^- \rightarrow H_2O$	$\frac{3}{2}O_2 + 6H^+ + 6e^- \rightarrow 3H_2O$	$\frac{1}{2}O_2 + 2H^+ + 2e^- \rightarrow H_2O$	$\frac{1}{2}O_2 + CO_2 + 2e^- \rightarrow CO_3^{2-}$	$\frac{1}{2}O_2 + 2e^- \rightarrow O^{2-}$
Anwendungsgebiete	Transport, Weltraum, Militär, Energiespeicherung			Kombinierte Wärme und Stromerzeugung für dezentrale stationäre Stromversorgungs- anlagen	Kombinierte Wärme und Stromerzeugung für dezentrale stationäre Stromversorgungsanlagen und Transport (zum Beispiel Züge, Boote)	
Realistische Leistung	Kleine Anlagen 5-150 kW Modular	Kleine Anlagen 5-250 kW Modular	Kleine Anlagen 5 kW	Klein und mittelgroße Anlagen 50 kW – 11 MW	Kleine Kraftwerke 100 kW – 2 MW	Kleine Kraftwerke 100 kW – 250 kW
Ladungsträgertransport im Elektrolyt	$OH^-$	$H^+$	$H^+$	$H^+$	$CO_3^{2-}$	$O^{2-}$



Besonders anschaulich wird in Tabelle 2 das breite Spektrum an Arbeitstemperaturen und realisierbaren Leistungen visualisiert. Ebenfalls ist ersichtlich, dass die einzelnen Zellentypen auf unterschiedlichen chemischen Vorgängen beruhen und dementsprechend für verschiedene Anwendungen eingesetzt werden. Die Bandbreite, mit der bestimmte Einsatzgebiete durch die Brennstoffzellen abgedeckt werden, ist in Tabelle 3 veranschaulicht.

Tabelle 3: Einsatzgebiete der Brennstoffzellen [17]

<b>Typische Anwendungen</b>	Tragbares elektronisches Equipment			Autos, Boote, Haushalts-Blockkraftwerk			Dezentrale Energieerzeugung, auch Busse	
<b>Leistung [W]</b>	1	10	100	1k	10k	100k	1M	10M
<b>Hauptvorteile</b>	Höhere Energiedichte als Batterien, schnelleres Nachladen			Potenzial für null Emission, höherer Wirkungsgrad			Höherer Wirkungsgrad, geringere Verschmutzung, leise	
<b>Bereich der Anwendung der verschiedenen Brennstoffzellen</b>								

Bei der Analyse von Tabelle 3 kann abgeleitet werden, dass speziell die SOFC als auch die PEMFC in sehr unterschiedlichen Anwendungen und Leistungsbereichen eingesetzt werden können. Die Leistungsspanne einer PEMFC umfasst rund fünf Dekaden und die der SOFC über vier Dekaden. Im nächsten Kapitel wird die SOFC näher ausgeführt.

## 2.4 SOFC

Die SOFC (Solid Oxide Fuel Cell) ist ausschließlich aus Festkörpern aufgebaut und ist somit das einfachste Konzept der Brennstoffzelle und dadurch auch die stabilste Bauart. Da im Gegensatz zu anderen Designs kein flüssiger Elektrolyt eingesetzt wird, entfällt bei dieser Zelle die Problematik der Abdichtung, des Wassermanagements und der langsamen Sauerstoffreduktionskinetik. Das SOFC Konzept ist sehr flexibel bezüglich der Herstellung und Größe und kann aus diesem Grund für verschiedene Anwendungen in Betracht gezogen werden. Außerdem ist das Konzept sehr anpassungsfähig bezüglich der eingesetzten Materialien und der Betriebstemperatur (600°C bis 1000°C). Allerdings muss festgehalten werden, dass die Auswahl der Materialien durch die geforderte thermische und mechanische Stabilität bei hohen Temperaturen beschränkt ist [7], [17].

Aufgrund der hohen Betriebstemperaturen der SOFC, welche weit über 500°C liegen, kann der flüssige Brennstoff direkt im System reformiert werden. Dazu müssen auf der Anodenseite Katalysatormetalle wie Ruthenium und Cer angebracht werden, um den Brennstoff in Kohlenmonoxid und Wasserstoff zu reformieren. Für den Start der Brennstoffzelle wird eine externe Heizung benötigt, die die Zelle auf die erforderliche Temperatur erwärmt [8]. Aufgrund der hohen Leistungsdichte der SOFC ist ein kompaktes Design möglich. Da die Zellen bei sehr hohen

Temperaturen betrieben werden und somit die Abgase sehr heiß sind, erscheint eine Kombination mit anderen Energieerzeugungssystemen (zum Beispiel Gasturbinen) sinnvoll, um den Gesamtwirkungsgrad zu steigern [7].

### 2.4.1 Funktionsweise SOFC

Das Funktionsprinzip einer SOFC beruht auf Sauerstoffionentransport (Abbildung 2-3) durch den festen Elektrolyten bei Temperaturen über 800°C. Im Allgemeinen wird der Elektrolyt aus einem yttriumdotierten Zirkoniumdioxid (YSZ) gefertigt. YSZ besitzt die Eigenschaft, dass es bei höheren Temperaturen für Sauerstoff- Ionen leitend wird, allerdings nicht für Elektronen. Die Kathode besteht aus einem sowohl Ionen als auch Elektronen leitfähigen porösen Material (zum Beispiel Lanthan-Strontium-Manganoxid, LSM) (Abbildung 2-4). Die Anode ist ebenfalls schaumartig (Abbildung 2-4) und für Ionen und Elektronen leitend und wird üblicherweise aus einem keramisch-metallischen Cermet- Werkstoff hergestellt [8], [16], [17].

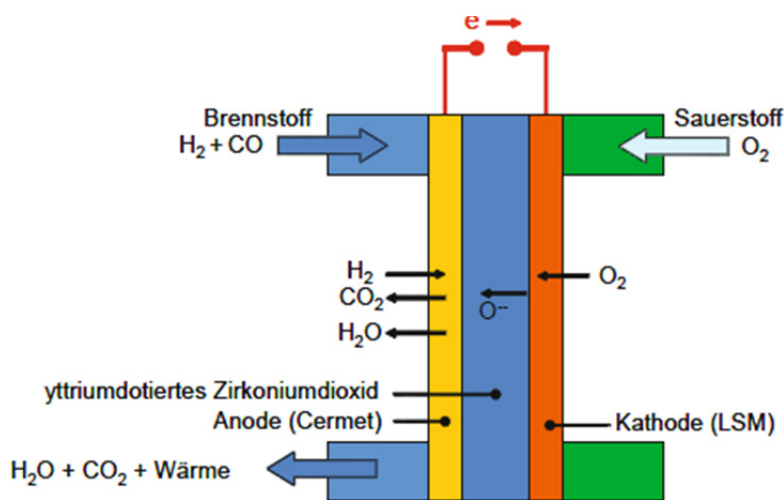


Abbildung 2-3: Funktionsprinzip SOFC [8]

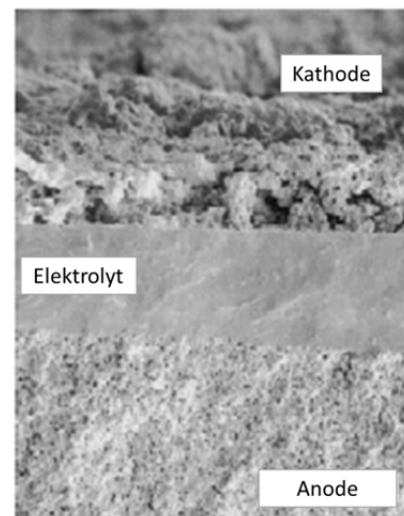
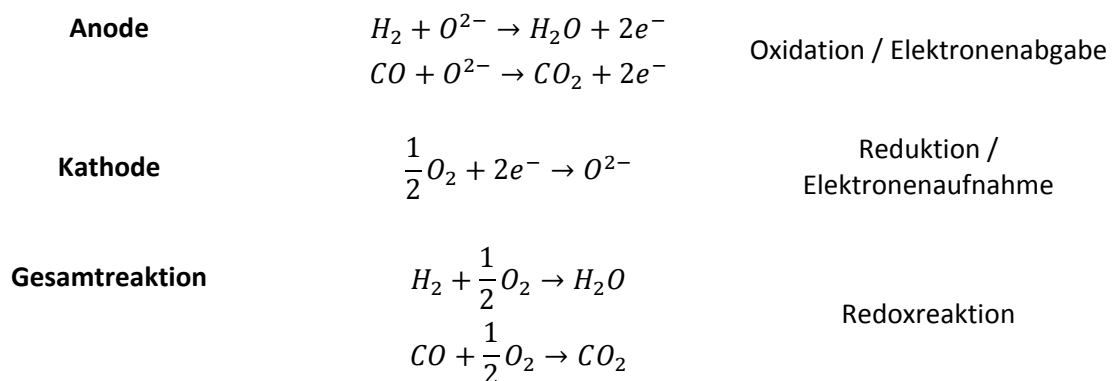


Abbildung 2-4: Mikrostruktur Zelle [19]

Das Brenngas (Wasserstoff und verschiedene Kohlenwasserstoffe) wird an der porösen Anode zugeführt und dort oxidiert. Dabei entstehen Elektronen, welche durch Schließen eines Stromkreises eine Spannung hervorrufen. Die für die Oxidation benötigten  $O_2^-$  Ionen werden auf der Kathode, durch Reduktion des Sauerstoffs, erzeugt und gelangen durch den ionenleitenden Elektrolyten zur Anode. An der Anode wird neben der Bildung von Elektronen auch noch Wasser beziehungsweise Kohlendioxid erzeugt [8].

#### Reaktionen [8]:



### 2.4.2 Bauarten

Die verschiedenen Bauarten einer SOFC lassen sich in zwei Gruppen einteilen: das planare und das tubuläre Design. Beide Bauarten bestehen aus einem gasdichten Elektrolyten, einer porösen Kathode und Anode und einem Interkonnektor. Die Hauptaufgabe des Interkonnektors (Bipolare Platte) ist die Herstellung einer elektrisch leitenden Verbindung zwischen den einzelnen Zellen [7], [9].

Beim **planaren Design** sind die erwähnten Bauteile eben ausgeführt und übereinander gestapelt (Abbildung 2-5). In den Interkonnektoren sind Gaskanäle eingelassen, um die Elektroden mit dem nötigen Brenngas, beziehungsweise mit Luft, versorgen zu können. Da eine hohe elektrische Leitfähigkeit und eine thermische Stabilität erforderlich sind, werden für den Interkonnektor  $\text{LaCrO}_3$ , rostfreier Stahl und Metall/Keramik Cermets eingesetzt [9]. Bei niedrigeren Temperaturen zeigten Untersuchungen, dass rostfreie Stähle die beste Performance aufweisen, während bei hohen Temperaturen  $\text{LaCrO}_3$  und Metall/Keramik Cermets eingesetzt werden [20]. Die Zelle (Anode, Kathode, Elektrode) bildet gemeinsam mit dem Interkonnektor eine sich periodisch wiederholende Einheit, die fortlaufend übereinander gestapelt wird. Durch diese elektronische Serienschaltung wird die Spannung und die Leistung des Systems erhöht [9].

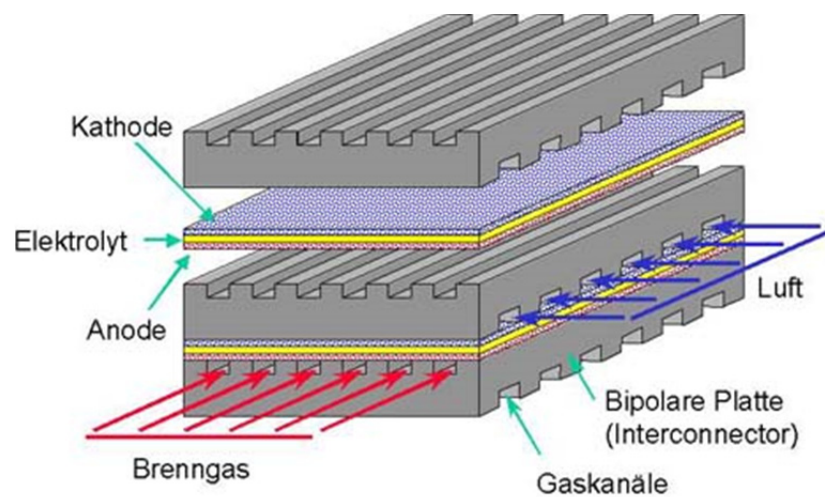


Abbildung 2-5: Planare SOFC [21]

Das planare SOFC Design ist aufgrund der kürzeren Stromwege effizienter und durch den einfachen Zusammenbau billiger als der tubuläre Aufbau. Allerdings ist die thermisch stabile Abdichtung der Zellen sehr aufwendig und die Materialwahl für die Dichtungen und die Interkonnektoren sehr schwierig [7].

Die Zelle wird beim **tubulären** Aufbau rohrförmig geformt, wobei das innere Rohr die Kathode bildet (Abbildung 2-6). Die Luft strömt im Inneren der Röhre und der Brennstoff wird am äußeren Rohrmantel bereitgestellt. Sowohl beim Elektrolyt als auch bei der Anode wird ein Kreissegment durch einen Interkonnektor ersetzt, um die einzelnen tubulären Einheiten übereinander stapeln zu können (Abbildung 2-7). In Abbildung 2-7 ist erkennbar, dass bei diesem Design der Strom einen längeren Weg als beim planaren Design zurücklegen muss [7], [17].

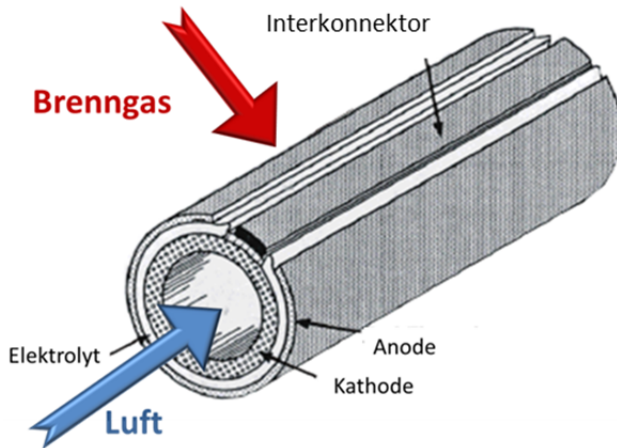


Abbildung 2-6: Aufbau tubuläre SOFC [7]

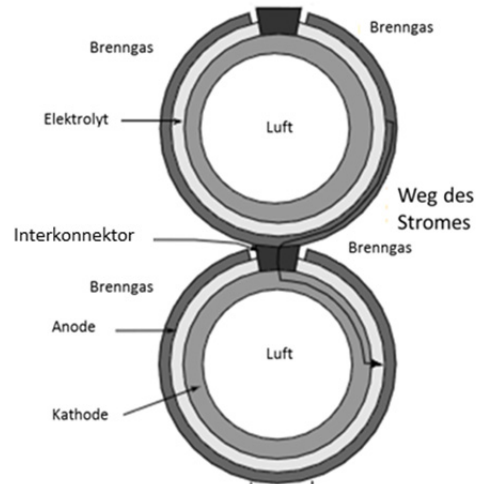


Abbildung 2-7: Zusammenbau tubuläre SOFC [17]

Der große Vorteil des tubulären SOFC Designs ist die selbstdichtende Struktur und die damit verbundene höhere thermische Stabilität [7]. Allerdings ist bei diesem Aufbau durch den längeren zurückzulegenden Weg des Stroms und somit höheren ohmschen Verlusten mit einer geringeren Leistungsdichte als bei der planaren Bauart zu rechnen (Abbildung 2-7). Des Weiteren sind die Kosten für eine tubuläre SOFC höher, da bei der Fertigung dieser Brennstoffzelle auf die Methode der chemischen Gasphasenabscheidung (engl. **C**hemical **V**apour **D**eposition, CVD) zurückgegriffen werden muss und hierfür ein Vakuum erforderlich ist [17].

#### 2.4.2.1 Einteilung der planaren SOFC Bauarten

Grundsätzlich werden die Bauarten der planaren Zellen nach folgenden Kriterien unterschieden: Gasstromführung im Interkonnektor und Stützschiicht [22], [23].

##### Gasstromführung im Interkonnektor:

Der Gasstrom von Luft und Brenngas im Interkonnektor kann entweder gleich-, gegen- oder kreuzstromgeführt ausgebildet sein (Abbildung 2-8).

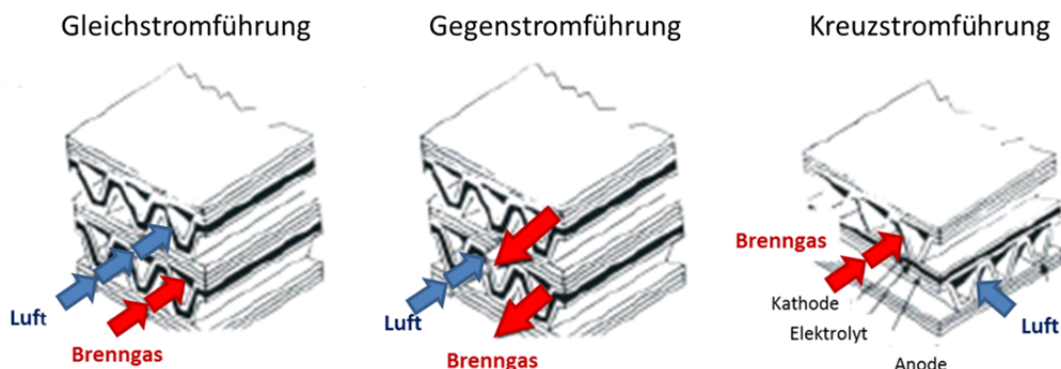


Abbildung 2-8: Gasstromführung im Interkonnektor [7]

Bei Vergleich der drei Durchströmungsarten weist die Gleichstromführung die geringste Temperaturinhomogenität auf und die Kreuzstromführung die höchste. Im Allgemeinen ist der elektrische Wirkungsgrad der Gegenstromführung am höchsten. Neben diesen Überlegungen bei der Wahl des Durchströmungskonzeptes muss auch Rücksicht auf die geeigneten Schnittstellen zu den Gaszuführungen und anderen Systemelementen genommen werden [22].

**Stützschrift:**

Generell kann die Konfiguration der Zelle in **selbsttragende** und **nicht selbsttragende** Struktur unterteilt werden. In der selbsttragenden Konfiguration übernimmt eine der drei Zellkomponenten die mechanische Tragwirkung. Somit sind anoden-, kathoden-, und elektrolytgestützte selbsttragende Bauweisen möglich (Abbildung 2-9). Bei der nicht selbsttragenden Struktur ist die Zelle dünn ausgeführt und der Interkonnektor, beziehungsweise ein poröses Substrat, übernimmt die Stützfunktion (Abbildung 2-9) [23].

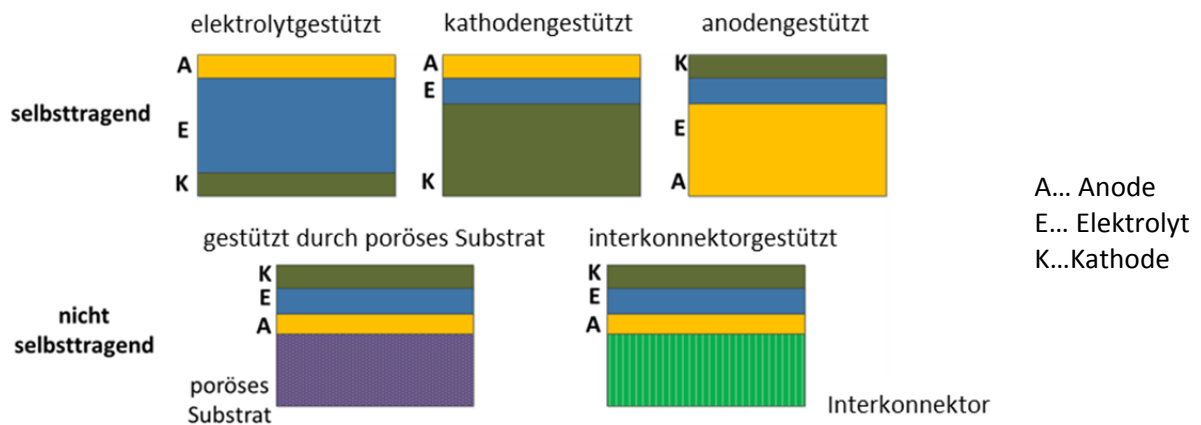


Abbildung 2-9: Stützschriftkonfigurationen [23]

Die verschiedenen Designs werden für unterschiedliche Anwendungen verwendet. Die einzelnen Vor- und Nachteile sind in Tabelle 4 zusammengefasst [23].

Tabelle 4: Vor- und Nachteile unterschiedlicher Stützschtichtkonfigurationen [24]

Zellkonfiguration	Vorteil	Nachteil
elektrolytgestützt	Relativ starke Strukturstützwirkung durch den dichten Elektrolyten, weniger anfällig für Versagen durch Reoxidation der Anode und Reduktion der Kathode	Höherer elektrischer Widerstand und dadurch höhere Temperaturen erforderlich um die ohmschen Verluste zu reduzieren
anodengestützt	Gut leitfähige Anode, geringere Betriebstemperaturen aufgrund der geringen Elektrolytdicke	Möglichkeit der Reoxidation der Anode, Massenströmung durch dicke Anode beschränkt
kathodengestützt	Keine Gefahr der Oxidation, geringere Betriebstemperaturen aufgrund der geringen Elektrolytdicke	Geringere Leitfähigkeit, Kathode beschränkt
interkonnektorgestützt	Dünne Zellkomponenten und somit geringere Betriebstemperaturen, steifere Struktur durch metallischen Interkonnektor	Interkonnektor Oxidation, Strömungsdesign im Interkonnektor aufgrund der Stützaufgabe limitiert
gestützt durch poröses Substrat	Dünne Zellkomponenten und somit geringere Betriebstemperaturen, Möglichkeit der Verwendung von Materialien, die nicht in der Zelle vorhanden sind um die Eigenschaften zu verbessern	Höhere Komplexität aufgrund eines zusätzlichen Bauteils, Möglichkeit des Auftretens von elektrischen Kurzschlüssen aufgrund der unebenen porösen Fläche

Die in dieser Diplomarbeit verwendete Brennstoffzelle ist kreuzstromgeführt und elektrolytgestützt. In weiterer Folge wird detaillierter auf diese Brennstoffzellenkonfiguration eingegangen.

### 2.4.3 Mögliche Zellschädigungen

Eine SOFC erfährt im Betrieb einige lebensdauerbeschränkende Belastungen. Besonders stark treten thermische Spannungen während des Betriebes auf. Diese beruhen einerseits auf den zeit- und ortsabhängigen Temperaturgradienten während der Aufheiz- und Abkühlphase und andererseits auf den unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten der Zellkomponenten. Wie in Abbildung 2-10 ersichtlich ist, können die Unterschiede in den thermischen Dehnungen signifikant werden und somit auch bei einem stationären und homogenen Temperaturfeld zu beträchtlichen Spannungen führen.

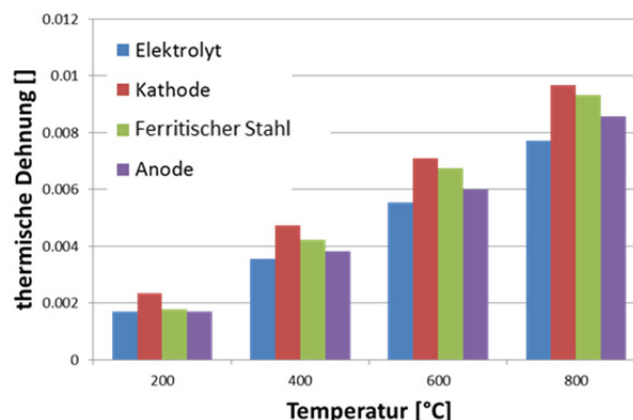


Abbildung 2-10: Thermische Dehnung typischer Zellkomponenten (Ni-YSZ Elektrolyt, LSM Kathode und ferritischer Stahl-Interkonnektor) [24]

Die thermischen Spannungen werden durch mechanische Spannungen überlagert, welche aufgrund des Einbaus und durch lokale Effekte (wie zum Beispiel Materialinhomogenitäten, Korrosion, Verunreinigungen) hervorgerufen werden. Die erwähnten unterschiedlichen lokalen Spannungen in den einzelnen Zellen beeinflussen wiederum das globale Spannungsfeld. Eine Zusammenfassung der möglichen Schädigungen sind in Abbildung 2-11 visualisiert.

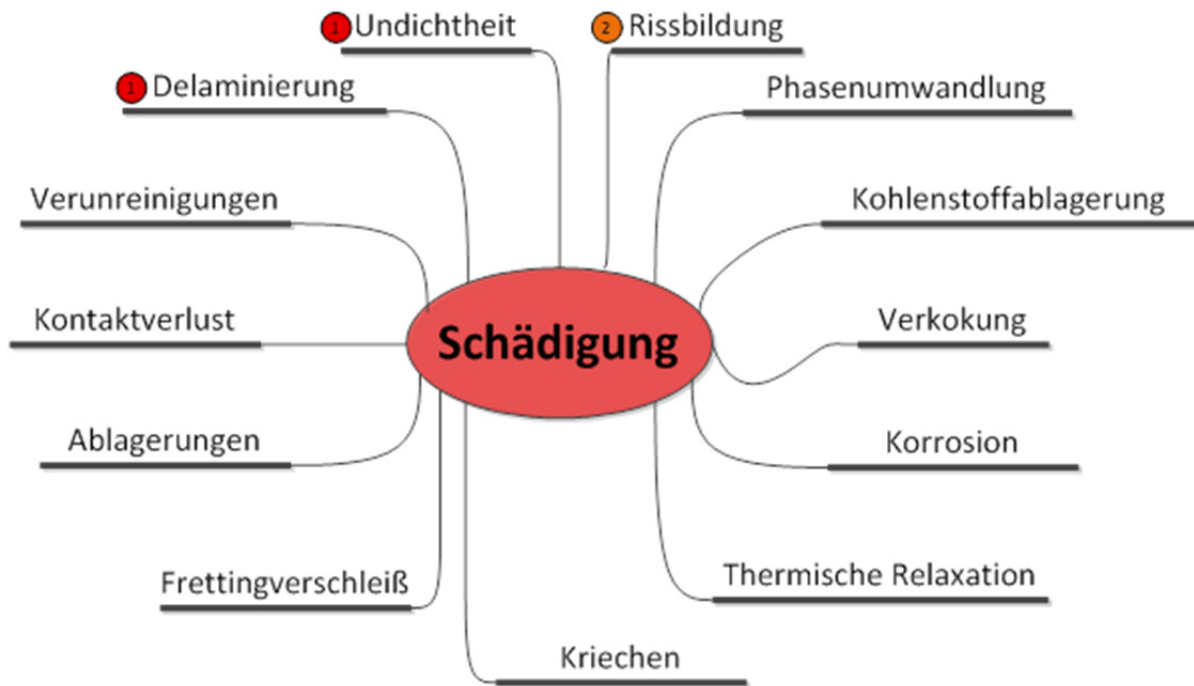


Abbildung 2-11: Mögliche Schädigungen [25]

Die Hauptschädigungsart einer SOFC ist das Auftreten von Delaminierungen an den Grenzflächen. Diese Grenzflächenrisse können fortschreiten und schließlich zu Undichtheit und Bruch führen. Alle anderen Einflüsse in Abbildung 2-11 beeinflussen direkt oder indirekt die Bildung und das Wachstum von Rissen [25]. Eine Übersicht über die verschiedenen Rissarten einer elektrolytgestützten SOFC ist in Abbildung 2-12 dargestellt.

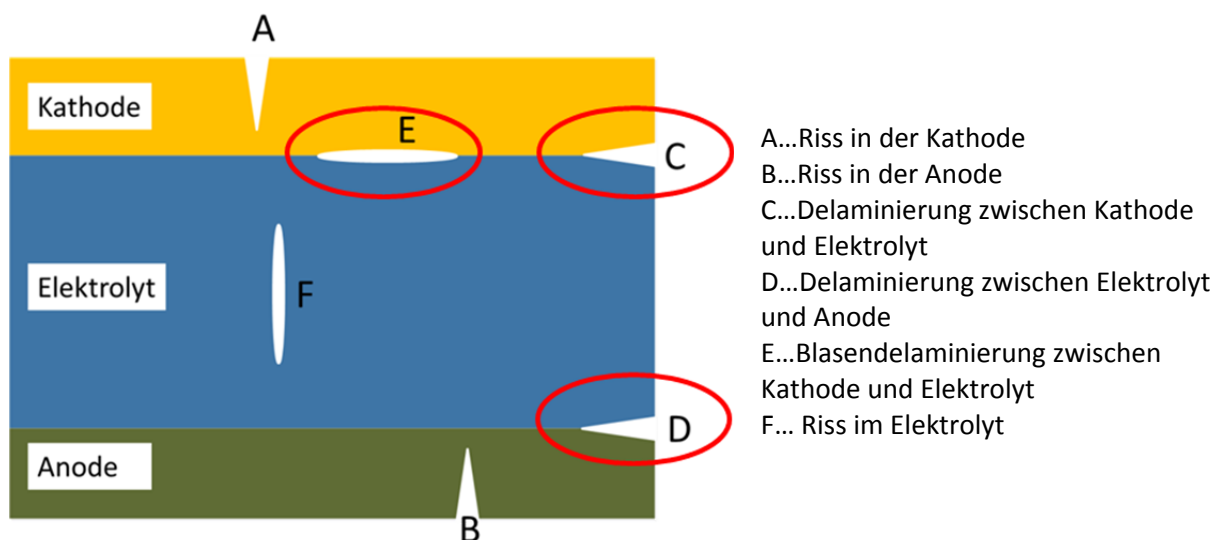


Abbildung 2-12: Mögliche Rissarten in einer SOFC [26]

Als besonders häufige Rissart wurden Delaminierungen zwischen Kathode- Elektrolyt und Anode-Elektrolyt identifiziert. Dieser Umstand beruht auf der Tatsache, dass im Kontakt zwischen den zwei Materialien ein großer Unterschied in den thermischen Dehnungen besteht. Risse innerhalb der Kathode und der Anode sind weniger kritisch, da die beiden Elektroden eine hohe Porosität aufweisen, und die Poren als Rissstopper dienen [25].

Ein typischer Delaminierungsrisse nach einigen thermischen Zyklen kann in Abbildung 2-13 beobachtet werden. Es ist deutlich ersichtlich, dass der Riss nur in der Grenzfläche fortgeschritten ist.

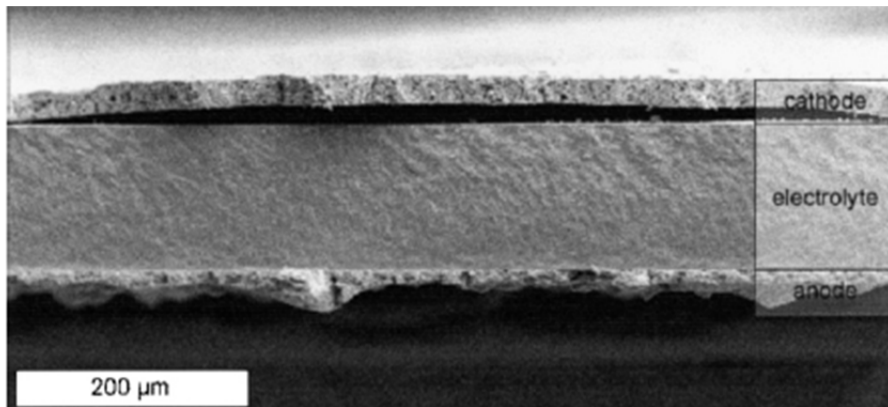


Abbildung 2-13: Delaminierung nach thermischen Zyklen [27]

Da die Delaminierungen einen häufigen Versagensmechanismus darstellen (Abbildung 2-12, Riss C, D und weniger häufig E) der letztlich zum totalen Versagen der Brennstoffzelle führen kann, wird in dieser Diplomarbeit ein numerisches Modell aufgebaut, um diese Rissarten untersuchen zu können.



## 3 Delaminierung

### 3.1 Einführung Delaminierung

In Lagen- Verbundwerkstoffen (Sandwichstrukturen) werden häufig Delaminierungen zwischen den einzelnen Schichten beobachtet, welche zu einem Versagen des Bauteils führen können. Ausgehend von Fehlstellen, die durch die Herstellung eingebracht wurden, kann ein Grenzflächenriss infolge der Betriebsbelastung weiterwachsen und zu einer signifikanten Reduktion der Bauteilfestigkeit führen [28]. Wenn die Sandwichstruktur zusätzlich mit Druckspannungen in horizontaler Richtung beaufschlagt ist, kann es zu lokalem Knicken kommen [29]. Auch ohne anfänglichen Bauteilvorschädigungen kann durch hohe Zug- und Schubspannungen eine Delaminierung initiiert werden [28].

Für die Quantifizierung der Delaminierung müssen zwei Schädigungsmechanismen betrachtet werden: die Rissinitiierung und der Rissfortschritt, wenn ein wachstumsfähiger Riss bereits vorhanden ist [28]. Üblicherweise werden für die Initiierung eine kritische interlaminare Spannungsanalyse und für das Wachstum bruchmechanische Untersuchungen durchgeführt [28].

### 3.2 Betrachtung verschiedener Berechnungsansätze

Mit der Annahme eines homogenen Materials ohne jeglichen Phasengrenzen und Vernachlässigung anderer Materialnichtlinearitäten, kann das Risswachstum mit Methoden abgebildet werden, die sich von der *linear elastischen Bruchmechanik* (LEBM) ableiten [29]. Allerdings kann die *linear elastische Bruchmechanik* nur angewendet werden, wenn bereits ein Anriss in der Struktur vorhanden ist. Mithilfe einer gekoppelten Spannungsanalyse mit einer charakteristischen Länge können in einigen Anwendungsfällen Aussagen über den Beginn der Rissinitiierung getroffen werden [30], [31]. Nach dem Delaminierungsbeginn wird die *linear elastische Bruchmechanik* für die Berechnung des Rissfortschrittes angewendet [32], [33]. Abgeleitet von der LEBM können auch weitere Techniken für die Beschreibung des Rissfortschrittes verwendet werden: *J-Integral* Methode [34], *Virtuelle Rissaufweitung* (engl. virtual crack extension) [35], *Steifigkeitsableitung* (engl. stiffness derivative) [36]. Diese angeführten Methoden können lediglich für die Berechnung der unterschiedlichen Komponenten der Energiefreisetzungsrate in einem homogenen Material verwendet werden, allerdings nicht für Grenzflächenrisse, wie sie bei einer Delaminierungsanalyse untersucht werden. Wenn die Vergleichsenergiefreisetzungsrate die kritische Energiefreisetzungsrate überschreitet, kommt es zum Risswachstum [37].

Die Implementierung der erwähnten Methoden in ein FEM Programm bringt einige essenzielle Probleme mit sich. Damit die Energiefreisetzungsraten berechnet werden können, müssen Knotenvariablen von den Knoten vor und nach der Rissfront betrachtet werden. Diese Berechnungsart stellt einen erheblichen numerischen Aufwand, speziell bei einem instationären Risswachstum, dar [29]. Aus diesem Grund werden bei der bruchmechanischen Berechnung mit der **Finite Elemente Methode** (FEM) entweder die *virtuelle Riss-schließ- Technik* (engl. virtual crack closure technique VCCT) [38] oder der *Kohäsivelemente* Ansatz (engl. cohesive elements) verwendet [29].

Die VCCT Methode basiert auf der Annahme, dass die freiwerdende Energie während des Risswachstums der Arbeit entspricht, welche verrichtet werden muss, um den Riss wieder in die ursprüngliche geschlossene Position zurückzubringen. Basierend auf dieser Annahme kann die Energiefreisetzungsrate aus den Knotenkräften und relativen Knotenverschiebungen berechnet werden [38]. Risswachstum wird detektiert, wenn die Vergleichsenergiefreisetzungsrate einen

kritischen Wert erreicht. Allerdings hat die *virtuelle Riss-schließ-Technik* den Nachteil, dass eine topologische Information von den Knoten vor und nach der Rissfront erforderlich ist. Diese Berechnungen sind sehr aufwendig und bedürfen einer Neuvernetzung bei Risswachstum. Des Weiteren kann die VCCT Methode nicht für Delaminierungsanalysen verwendet werden, da diese Technik nur für Risse in einem Kontinuum und nicht für Grenzflächenrisse zwischen zwei verschiedenen Materialien anwendbar ist [39].

Die Verwendung von *Kohäsivelementen* kann einige dieser erwähnten konzeptuellen Probleme umgehen und bedarf weniger Rechenaufwand als die VCCT- Methode [39], [40]. Der *Kohäsivelemente*- Ansatz nimmt eine Proportionalität zwischen Relativverschiebung und Spannung in der Rissprozesszone an [29]. Dabei bilden die Elemente sowohl die Rissinitiierung als auch den Rissfortschritt ab und können bei Delaminierungsanalysen verwendet werden [39].

### 3.3 Kohäsivelemente

#### 3.3.1 Einführung Kohäsivelemente

Die Ursprünge von *Kohäsivelemente* Rissmodellen gehen zurück auf *Dugdale* [41], welcher den Ansatz einführte, dass die Spannungen im Bauteil von der Fließgrenze begrenzt sind und sich somit eine plastische Zone um die Rissspitze ausbilden muss. *Barenblatt* [42] betrachtete kohäsive Kräfte auf molekularer Ebene, um das Gleichgewichtsproblem eines rissbehafteten elastischen Kontinuums zu lösen. Ein ähnliches Modell wie *Barenblatt* schlugen *Hillerborg et al.* [43] vor, allerdings berücksichtigt diese Arbeit auch die Streckgrenze. Die von *Hillerborg et al.* formulierte Sichtweise erlaubt die Analyse des Wachstums, sowie auch der Bildung von neuen Rissen [29].

*Kohäsivelemente* verknüpfen an Risszonen wirkende Relativverschiebungen mit Spannungen. Dabei beschreibt die kritische Grenzflächenspannung des *kohäsiv- Elements* den Rissbeginn. Das Wachstum des Risses wird über die Energiefreisetzungsrate definiert. Nach Überschreitung eines kritischen Grenzwertes (Materialparameter) versagt das Element, und es wird eine neue Rissfläche gebildet [29].

Der Vorteil des *Kohäsivelemente*- Ansatzes ist die Einfachheit in der Anwendung und die Verallgemeinerung von Rissinitiierung und Risswachstum in einer Elementdefinition. Ebenfalls vorteilig ist zu erwähnen, dass der Ansatz einfach in Finite- Elemente- Codes implementierbar ist und viele konventionelle FEM-Programme bereits standardmäßig über *Kohäsivelemente* verfügen [29].

Als Nachteil muss angeführt werden, dass die Elemente eine schwierige numerische Handhabbarkeit aufweisen [39]. Des Weiteren müssen einige bruchmechanische Materialdaten bekannt sein, beziehungsweise bedürfen einer Abschätzung.

### 3.3.2 Theorie Kohäsivelemente

#### 3.3.2.1 Randwertproblem

Für die Ableitung der Gleichgewichtsbedingung wird ein Körper  $\Omega$  mit einem Riss  $\Gamma_c$  betrachtet (Abbildung 3-1).

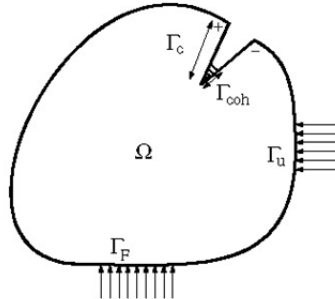


Abbildung 3-1: Körper  $\Omega$  mit einem Riss  $\Gamma_c$  im undeformierten Zustand [29]

Der Bereich, in dem ein *Kohäsivelement* aktiv ist, wird mit  $\Gamma_{coh}$  definiert und wird als Rissprozesszone (RPZ) bezeichnet. Auf dem Rand  $\Gamma_F$  greifen Spannungen  $\tau_i$  an. Auf  $\Gamma_u$  wirkt eine Verschiebungsverteilung. Das Spannungsfeld im Körper  $\Omega$ ,  $\sigma_{ij}$ , ergibt sich aus den externen Lasten und den Riss-schließspannungsvektoren  $t_j^+$ ,  $t_j^-$  ( $j = 1 \dots 3$ ) in dem *Kohäsivelemente* Bereich auf Basis der Gleichgewichtsbedingungen (Formeln (3-1), (3-2), (3-3)) [29].

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad \text{in } \Omega \quad i, j = 1 \dots 3 \quad (3-1)$$

$$\sigma_{ij} n_j = \tau_i \quad \text{auf } \Gamma_F \quad (3-2)$$

$$\sigma_{ij} n_j^+ = t_i^+ = -t_i^- = \sigma_{ij} n_j^- \quad \text{auf } \Gamma_{coh} \quad (3-3)$$

Die Tensoren in den Formeln (3-1) bis (3-3) sind in einsteinscher Summenkonvention angeschrieben, wobei  $\sigma_{ij,j}$  der Definition  $\sigma_{ij,j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}$  folgt. Die Hochstellungen in Formel (3-3) referenzieren auf das positive und negative Rissufer.

#### 3.3.2.2 Kinematik der Grenzfläche

Um die notwendigen kinematischen Beziehungen ableiten zu können, wird der Riss  $\Gamma_c$  als Teil der Materialinhomogenität  $\Gamma_d$  modelliert, welche den Körper  $\Omega$  in zwei Teilbereiche,  $\Omega_+$  und  $\Omega_-$  (Abbildung 3-2), unterteilt.

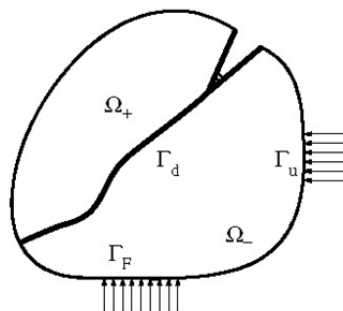


Abbildung 3-2: Durch Materialinhomogenität  $\Gamma_d$  unterteilter Körper  $\Omega$  [29]

Die Relativverschiebung  $[[u_i]]$  im globalen Koordinatensystem entlang der Materialinhomogenität  $\Gamma_d$  wird durch Formel (3-4) definiert [29].

$$[[u_i]] = u_i^+ - u_i^- \quad (3-4)$$

Dabei beschreibt  $u_i^\pm$  die Verschiebung der Punkte auf der Oberfläche der Materialinhomogenität  $\Gamma_d$  auf dem Teilbereich  $\Omega_\pm$ . Das grundsätzliche Problem, welches sich durch die Einführung der internen Oberfläche  $\Gamma_d$  ergibt, ist die Beschreibung der Relativverschiebung in der deformierten Konfiguration als Funktion der Verschiebungen  $u_i^\pm$  der Grenzfläche [29].

Betrachtet wird ein Punkt in einem raumfixierten kartesischen Koordinatensystem mit den Koordinaten  $X_i$ ,  $i=1,2,3$  (Abbildung 3-3). Die kartesische Koordinate  $x_i^\pm$  definiert die Positionen dieses Punktes ( $P_+, P_-$ ) auf der unteren und oberen Fläche  $\Gamma_{d^\pm}$  im deformierten Körper [29].

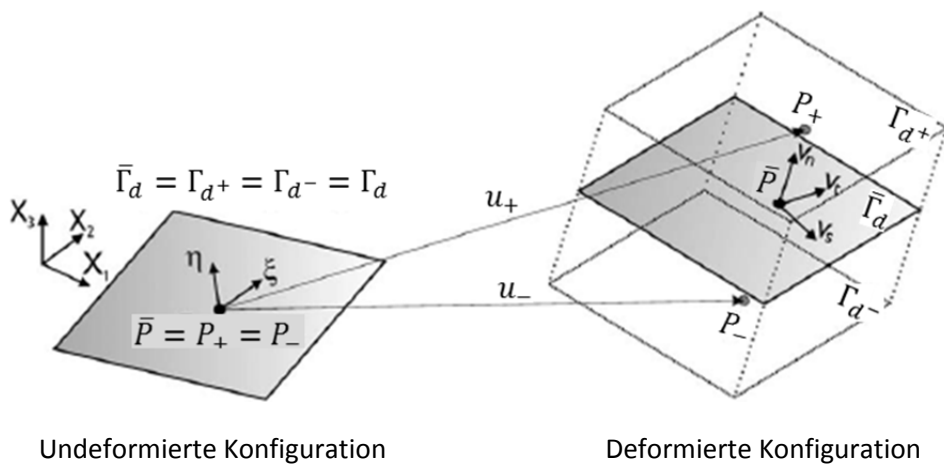


Abbildung 3-3: Grenzflächendefinition [29]

Die Koordinaten eines beliebigen Materialpunkts auf der Oberfläche  $\Gamma_{d^\pm}$  kann von der undeformierten Konfiguration in die deformierte unter Anwendung von Formel (3-5) umgerechnet werden [29].

$$x_i^\pm = X_i + u_i^\pm \quad (3-5)$$

Die Variable  $u_i^\pm$  beschreibt die Verschiebung eines Punktes in einem raumfixierten kartesischen Koordinatensystem. Die Koordinate  $\bar{x}_i$  definieren die mittlere deformierte Fläche  $\bar{\Gamma}_d$  gemäß Formel (3-6) beschrieben werden [44].

$$\bar{x}_i = X_i + \frac{1}{2}(u_i^+ + u_i^-) \quad (3-6)$$

Die Komponenten des Relativverschiebungsvektors werden auf die Mittelfläche  $\bar{\Gamma}_d$  bezogen, welche deckungsgleich mit der Originalfläche der undeformierten Konfiguration ist (Abbildung 3-3). Die Gradienten der Mittelflächenkoordinaten definieren die Komponenten der beiden Vektoren  $v_{\eta i}$  und  $v_{\xi i}$ , welche die Tangentialebene an  $\bar{\Gamma}_d$  in einem bestimmten Punkt  $\bar{P}$  beschreiben (Formel (3-7), (3-8)) [29].

$$v_{\eta i} = \bar{x}_{i,\eta} = \frac{\partial \bar{x}_i}{\partial \eta} \quad (3-7)$$

$$v_{\xi i} = \bar{x}_{i,\xi} = \frac{\partial \bar{x}_i}{\partial \xi} \quad (3-8)$$

Dabei beschreiben  $\eta$  und  $\xi$  krummlinige Koordinaten auf der Fläche  $\bar{\Gamma}_d$ . Ihr Vektorprodukt definiert eine Flächennormale obwohl  $v_{\eta i}$  und  $v_{\xi i}$  im Allgemeinen nicht orthogonal aufeinander stehen. Der lokale Normalvektor ergibt sich aus Formel (3-9) [29].

$$\underline{v}_n = \underline{v}_\xi \times \underline{v}_\eta \left\| \underline{v}_\xi \times \underline{v}_\eta \right\|^{-1} \quad (3-9)$$

In Formel (3-9) symbolisiert  $\| \quad \|$  die Norm eines Vektors welche nach  $\| \underline{x} \| = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$  definiert ist. Anschließend kann aus den gewonnenen Ausdrücken eine orthogonale Basis abgeleitet werden (Formel (3-10), (3-11)) [29].

$$\underline{v}_s = \underline{v}_\xi \left\| \underline{v}_\xi \right\|^{-1} \quad (3-10)$$

$$\underline{v}_t = \underline{v}_n \times \underline{v}_s \quad (3-11)$$

Die Komponenten von  $\underline{v}_s$ ,  $\underline{v}_n$  und  $\underline{v}_t$  repräsentieren die Basisvektoren des lokalen Koordinatensystems mit dem Ursprung im Punkt  $\bar{P} \in \bar{\Gamma}_d$ . Sie definieren den Transformationstensor  $\underline{\Theta}$ , welcher das lokale Koordinatensystem mit dem globalen in Beziehung setzt. Durch Verwendung des Tensors  $\underline{\Theta}$  kann der lokale Relativverschiebungsvektor  $\underline{\delta}$  aus dem in globalen Koordinaten definierte Verschiebungsfeld  $\llbracket u_i \rrbracket$  berechnet werden (Formel (3-12)) [29].

$$\delta_j = \Theta_{ij} \llbracket u_i \rrbracket \quad i, j = 1 \dots 3 \quad (3-12)$$

In Formel (3-12) beschreibt  $\Theta_{ij}$  die Komponenten von  $\underline{\Theta}$  und  $\delta_j$  jene von  $\underline{\delta}$ .

### 3.3.2.3 Materialgesetz

Für die Modellierung der *Kohäsivelemente* muss ein Materialgesetz definiert werden, welches die Relativverschiebungen mit Spannungen an der Rissprozesszone verknüpft (Formel (3-13)) [29].

$$t_j = t(\delta_i) \quad i = 1 \dots 3 \quad \begin{array}{l} 1,2 \dots \text{in Tangentialeben} = s, t \\ 3 \dots \text{Normalrichtung} = n \end{array} \quad (3-13)$$

Es existieren einige grundsätzliche Typen von Materialgesetzen für *Kohäsivelemente*: *Tvergaard* und *Hutchinson* [45] schlagen ein trapezförmiges Gesetz vor, *Cui* und *Wisnom* [46] eine perfekt plastische Regel, *Needleman* [47] einen polynominalen Ansatz und *Xu* und *Needleman* [48] ein exponentiales Gesetz. *Goyal et al.* [49] adaptierten *Needleman's* Exponentialgesetz um auch Lastumkehr ohne Wiederherstellung des *kohäsiven* Zustandes abbilden zu können. In dieser Arbeit wird ein bilineares Materialgesetz verwendet, welches über zwei lineare Beziehungen die Relativverschiebungen mit Spannungen verknüpft (Abbildung 3-4) [29].

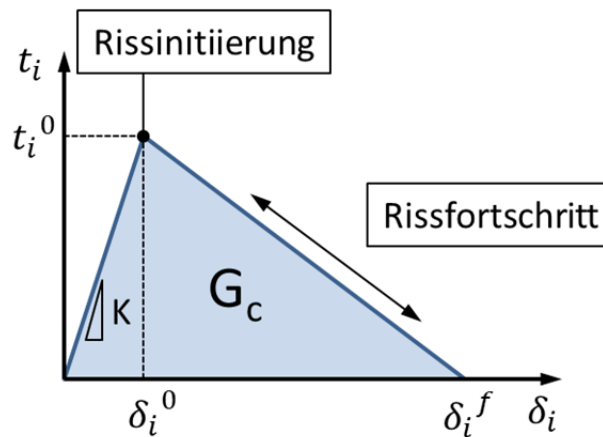


Abbildung 3-4: Bilineares Materialgesetz der Kohäsivzone [39]

Die Steigung  $K$  der Geraden vor der Rissinitiierung beschreibt die Anfangssteifigkeit der *Kohäsivzone* [39]. Wenn im einachsigen Belastungsfall die Relativverschiebung den Wert  $\delta_i^0$  erreicht, wird ein Riss initiiert (Schadensinitiierung) und die Steifigkeit des Elements wird auf Basis des Schädigungsfortschrittskriteriums reduziert. Bei einer Relativverschiebung von  $\delta_i^f$  nimmt die Elementsteifigkeit einen Wert von Null an und das Element wird inaktiv. Die Fläche unter dem Spannungs- Relativverschiebungsdiagramm ist bezogen auf die erzeugte Oberfläche äquivalent zur kritischen Energiefreisetzungsrate  $G_c$  des Werkstoffes [29].

Das bilineare Materialgesetz wurde aufgrund seiner Simplizität für diese Arbeit verwendet [29]. Außerdem ist es standardmäßig in vielen FEM Programme integriert (wie auch in Abaqus). Ein Nachteil dieses Materialgesetzes ist die abrupte Änderung der Spannungs- Relativverschiebungs-Beziehung im Bereich der maximalen Spannung  $t_i^0$  [29].

Die Ableitung des bilinearen Materialgesetzes geht zurück auf *Simo und Ju* [50], und *Mazars* [51]. Die freie Energie je Einheit neuer Oberfläche wird definiert nach Formel (3-14) [29].

$$\psi(\underline{\delta}, d) = (1 - d)\psi^0(\underline{\delta}) \quad (3-14)$$

Dabei beschreibt  $d$  eine skalare Schädigungsvariable, und  $\psi^0$  ist eine konvexe Funktion, welche abhängig von der Relativverschiebung  $\delta$  ist (Formel (3-15)) [29].

$$\psi^0(\underline{\delta}) = \frac{1}{2} \delta_i D_{ij}^0 \delta_j \quad i, j = 1 \dots 3 \quad (3-15)$$

Die Matrix  $D_{ij}^0$  repräsentiert die Anfangssteifigkeit der *Kohäsivzone*. Negative Werte von  $\delta_3$  haben keine physikalische Bedeutung, da dies ein Eindringen in den Gegenkörper bedeuten würde und des Weiteren Stauchen keinen Rissfortschritt verursachen kann. Aus diesem Grund wird die Formel (3-15) modifiziert, um ein Oberflächendurchdringen der beiden Kontaktpartner zu verhindern. Der Ausdruck der freien Energie ändert sich nach (Formel (3-16)) [29].

$$\psi(\underline{\delta}, d) = (1 - d)\psi^0(\delta_i) - d\psi^0(\bar{\delta}_{3i} \langle -\delta_3 \rangle) \quad (3-16)$$

In Formel (3-16) beschreiben  $\langle \cdot \rangle$  die *Föppl* Klammern, welche der Definition  $\langle x \rangle = \frac{1}{2}(x + |x|)$  folgen. Die Variable  $\bar{\delta}_{ij}$  stellt das Kronecker-Delta dar. Durch Differentiation der freien Energie nach der Relativverschiebung wird das Materialgesetz abgeleitet (Formel (3-17)) [29].

$$t_i = \frac{\partial \psi}{\partial \delta_i} = (1-d)D_{ij}^0 \delta_j - dD_{ij}^0 \bar{\delta}_{3j} \langle -\delta_3 \rangle \quad (3-17)$$

Die Anfangssteifigkeitsmatrix im ungeschädigten Zustand  $D_{ij}^0$  ist nach Formel (3-18) definiert [29].

$$D_{ij}^0 = \bar{\delta}_{ij} K \quad (3-18)$$

Die skalare Variable  $K$  in Formel (3-18) beschreibt die Anfangssteifigkeit der *Kohäsivzone*. Das abgeleitete Materialgesetz kann folgendermaßen angeschrieben werden (Formel (3-19)) [29].

$$t = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix} = (1-d)K \begin{pmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \\ \delta_3 \end{pmatrix} - dK \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \langle -\delta_3 \rangle \end{pmatrix} \quad (3-19)$$

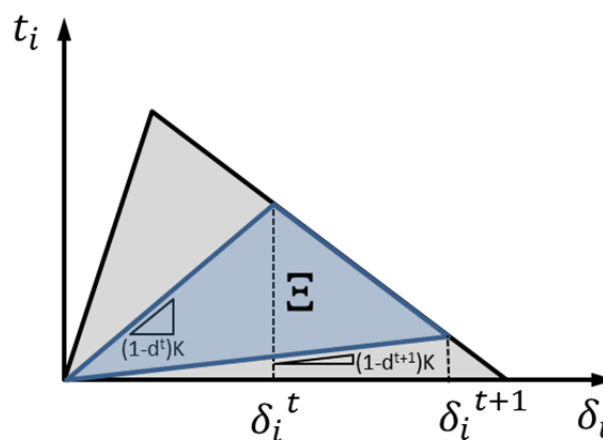


Abbildung 3-5: Energiedissipation durch Rissfortschritt [29]

Die Energie  $\Xi$  die durch den Rissfortschritt dissipiert wird (Fläche zwischen zwei Risslängen, Abbildung 3-5), ist in Formel (3-20) ersichtlich [29].

$$\Xi = -\frac{\partial \psi}{\partial d}, \quad \dot{d} \geq 0 \quad (3-20)$$

Das Materialmodell für *Kohäsivelemente* (Formel (3-19)) ist vollständig definiert, wenn der Wert des Schädigungsparameters  $d$  zu jedem Zeitpunkt des Delaminierungsprozesses bestimmt wird. Aus diesem Grund ist es notwendig, die Norm des Relativverschiebungstensors, ein Schädigungskriterium und ein Schädigungsfortschrittgesetz zu definieren [29].

### 3.3.2.4 Norm des Relativverschiebungsvektors

Die Norm des Relativverschiebungsvektors wird mit  $\delta$  bezeichnet und beschreibt die Vergleichsrelativverschiebung. Sie wird verwendet, um die verschiedenen Stadien der unterschiedlichen Relativverschiebungen vergleichbar zu machen und somit die Begriffe „belasten“, „entlasten“ und „wiederbelasten“ definieren zu können. Die Vergleichsrelativverschiebung ist eine nichtnegative kontinuierliche Funktion und wird in Formel (3-21) definiert [29].

$$\delta = \sqrt{\langle \delta_3 \rangle^2 + (\delta_{shear})^2} \quad (3-21)$$

Die Relativverschiebung wird im Belastungsmodus I mit  $\delta_3$  bezeichnet und  $\delta_{shear}$  ist die euklidische Norm der Relativverschiebung in der Ebene der Kohäsivzone (Formel (3-22) ) [29], [52].

$$\delta_{shear} = \sqrt{(\delta_1)^2 + (\delta_2)^2} \quad (3-22)$$

### 3.3.2.5 Schädigungskriterium

Das Schädigungskriterium wird im  $s, t, n$  - Raum als Schädigungsfunktion definiert (Formel (3-23)) [29].

$$F(\delta^t, r^t) := \delta^t - r^t \leq 0 \quad \forall t \geq 0 \quad (3-23)$$

Die Variable  $t$  beschreibt die Zeit und  $r^t$  ist der Schädigungsgrenzwert zur aktuellen Zeit. Wenn  $r^0$  den Ausgangsschädigungsgrenzwert beschreibt, dann gilt  $r^t \geq r^0$  zu jedem Zeitpunkt. Schadensinitiierung findet statt, wenn die Vergleichsrelativverschiebung  $\delta$  den Materialparameter  $r^0$  überschreitet [29].

Eine für eine algorithmische Implementierung geeignete Formulierung der Formel (3-23), wird durch Formel (3-24) definiert [53].

$$\bar{F}(\delta^t, r^t) := D(\delta^t) - D(r^t) \leq 0 \quad \forall t \geq 0 \quad (3-24)$$

Darin beschreibt  $D(\cdot)$  eine passende monotone skalare Funktion in einem Wertebereich von 0 bis 1.  $D(\cdot)$  definiert dabei die Entwicklung der Schädigungsvariable und wird in den folgenden Kapiteln präsentiert [29].

### 3.3.2.6 Schädigungsfortschrittsgesetz

Das Fortschrittsgesetz für den Schädigungsgrenzwert und der Schädigungsvariable muss im Schädigungsmodell definiert sein. Diese Gesetze werden durch die Ableitungen der Schädigungsgrenzwerte definiert (Formeln (3-25), (3-26) ) [29].

$$\dot{r} = \dot{\mu} \quad (3-25)$$

$$\dot{d} = \dot{\mu} \frac{\partial \bar{F}(\delta, r)}{\partial \delta} = \dot{\mu} \frac{\partial D(\delta)}{\partial \delta} \quad (3-26)$$

Die Variable  $\dot{\mu}$  ist ein *Lagrange* Multiplikator, welcher verwendet wird, um die Belastungs-Entlastungs Bedingungen nach *Kuhn-Tucker* in kompakter Form anschreiben zu können (Formel (3-27)) [29].

$$\dot{\mu} \geq 0; \quad \bar{F}(\delta^t, r^t) \leq 0; \quad \dot{\mu} \bar{F}(\delta^t, r^t) = 0 \quad (3-27)$$

Damit ist garantiert, dass nur bei Gleichheit in Formel (3-24) eine Schädigungsentwicklung geben kann. Die interne Variable  $r^t$  kann explizit integriert werden (Formeln (3-28), (3-29)) [50].

$$r^t = \max \left\{ r^0, \max_s \delta^s \right\} \quad 0 \leq s \leq t \quad (3-28)$$

$$d^t = D(r^t) \quad (3-29)$$

Mit den Formeln (3-28) und (3-29) kann die Entwicklung der internen Variable für jede Belastungs-, Entlastungs- und Wiederbelastungssituation beschrieben werden. Für ein definiertes Verhältnis  $\beta$



(Formel (3-38)) zwischen den verschiedenen Lastmoden, kann die Funktion  $D(\cdot)$  nach Formel (3-30) definiert werden [29].

$$D(\delta) = \frac{\delta^f (\delta - \delta^0)}{\delta (\delta^f - \delta^0)} \quad D \in [0,1] \quad (3-30)$$

Formel (3-30) definiert den Schädigungsfortschritt mit der Annahme eines bilinearen Materialgesetzes (Abbildung 3-6). Der Parameter  $\delta^0$  in Abbildung 3-6 definiert den anfänglichen Schädigungsgrenzwert, bei dem ein Riss initiiert wird, und  $\delta^f$  ist die Norm der Relativverschiebung am Ende des Rissfortschrittes bei dem das komplette Element versagt [29].

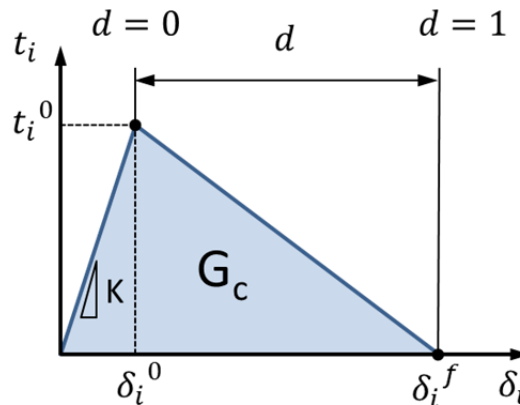


Abbildung 3-6: Bilineares Materialgesetz für Kohäsivelemente [29]

Das bilineare Materialgesetz unter Zug- und Scherbeanspruchung ist in Abbildung 3-7 dargestellt. Dabei werden jeweils an der Rissfront *Kohäsivelemente* verwendet.

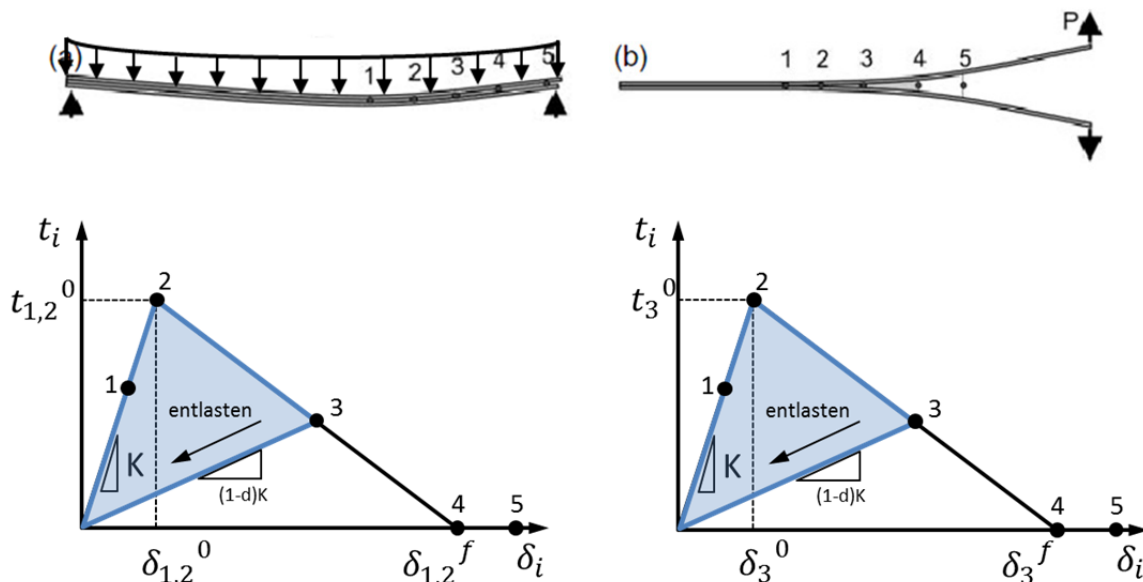


Abbildung 3-7: Verhalten des bilinearen Materialgesetzes unter a) Mode II oder Mode III; b) Mode I Beanspruchung [54]

Bei Belastung der *Kohäsivelemente* wird zunächst linear (Punkt 1 in Abbildung 3-7), mit der Steigung  $K$ , die Spannung bei steigender Relativverschiebung größer bis die kritische Grenzflächenspannung  $t_i^0$  (Punkt 2 in Abbildung 3-7) erreicht wird und die Struktur zu delaminieren beginnt. Mit steigender Relativverschiebung wird die Steifigkeit der *Kohäsivelemente* graduell reduziert, bis sie Null erreicht und das Element inaktiv wird (Punkt 4 und 5 in Abbildung 3-7) [54].

Die Relativverschiebung bei Rissinitiierung kann für alle drei Raumrichtungen mit Hilfe der kritischen Grenzflächenspannung  $t_1^0, t_2^0, t_3^0$  und der Steifigkeit  $K$  bestimmt werden (Formel (3-31)) [54].

$$\delta_i^0 = \frac{t_i^0}{K} \quad i = 1 \dots 3 \quad (3-31)$$

Es kann bewiesen werden, dass der *Kohäsivelemente*- Ansatz äquivalent zu *Griffith's* Ansatz ist, welcher besagt, dass ein Riss instabil wächst, wenn die Energiefreisetzungsrate (Fläche unter dem Spannungs- Relativverschiebungsdiagramm) gleich der kritischen Energiefreisetzungsrate  $G_C$  ist (Abbildung 3-6, Formeln (3-32), (3-33), (3-34)) [34].

$$\int_0^{\delta_3^f} t_3 d\delta_3 = G_{IC} \quad (3-32)$$

$$\int_0^{\delta_2^f} t_2 d\delta_2 = G_{IIC} \quad (3-33)$$

$$\int_0^{\delta_1^f} t_1 d\delta_1 = G_{IIIC} \quad (3-34)$$

*Alfano* und *Crisfield* [55] zeigten, dass bei Zusammenfall der Relativverschiebung  $\delta_3^0$  und  $\delta_3^f$  (Abbildung 3-7) ein perfekt sprödes Werkstoffverhalten abgebildet werden kann. Allerdings bereitet dieses Vorgehen numerische Schwierigkeiten [54].

Unter Verwendung der Bruchzähigkeit ( $G_{IC}, G_{IIC}$  und  $G_{IIIC}$ ) für die entsprechenden Last- Modi (Mode I, II oder III) kann die Relativverschiebung bei Versagen des Elements ( $\delta_3^f, \delta_2^f$  und  $\delta_1^f$ ) aus den Formeln (3-32), (3-33), (3-34) abgeleitet werden (Formeln (3-35), (3-36), (3-37) ) [52], [54].

$$\delta_3^f = \frac{2G_{IC}}{t_3^0} \quad (3-35)$$

$$\delta_2^f = \frac{2G_{IIC}}{t_2^0} \quad (3-36)$$

$$\delta_1^f = \frac{2G_{IIIC}}{t_1^0} \quad (3-37)$$

Für ein gegebenes mixed- Mode- Verhältnis  $\beta$  (Formel (3-38)) wird das Materialgesetz durch die Anfangssteifigkeit  $K$ , die Schädigungsvariable  $d$ , die Relativverschiebung bei Schädigungsinitiierung  $\delta_i^0$  und bei vollständiger Dekohäsion  $\delta_i^f$  definiert [29].

$$\beta = \frac{\delta_{shear}}{\delta_{shear} + \langle \delta_3 \rangle} \quad (3-38)$$

Das FEM Programm Abaqus benötigt allerdings die Eingabe der kritischen Energiefreisetzungsraten in den drei Belastungsmoden ( $G_{IC}, G_{IIC}, G_{IIIC}$ ), die kritischen Grenzflächenspannungen ( $t_1^0, t_2^0, t_3^0$ ) und die Anfangssteifigkeiten ( $K, G_1, G_2$ ). Durch die Formeln (3-35), (3-36), (3-37) kann zwischen den verschiedenen Parametern umgerechnet werden.

Die Variablen  $\delta_i^0$  und  $\delta_i^f$  werden durch die Rissinitiierungs- und Risswachstumskriterien abgeleitet, welche die Interaktion zwischen den einzelnen Belastungsmoden berücksichtigen und vom Verhältnis  $\beta$  (Formel (3-38)) abhängen. Die Anfangssteifigkeit  $K$  stellt sicher, dass eine steife Verbindung zwischen den zwei interagierenden Lagen vor dem Delaminierungsbeginn vorhanden ist [29]. Der Parameter  $K$  sollte einerseits groß genug sein, um eine angemessene Struktursteifigkeit zu gewährleisten und andererseits auch klein genug sein, um numerische Probleme, wie *spurious traction* (dt. unechte Spannungen), zu verhindern [56].

### 3.3.2.7 Kriterium für den Schädigungsbeginn

Bei reiner Mode I, II oder III Belastung kann der Schädigungsbeginn, entsprechend der Mikrokavitäts-Keimbildung [57], durch Vergleich der Spannungskomponenten  $(t_1, t_2, t_3)$  mit den entsprechenden kritischen Grenzflächenspannungen  $(t_1^0, t_2^0, t_3^0)$  vorhergesagt werden. Bei multiaxialer Belastung kann allerdings die Rissinitiierung und daraus resultierende Degradierung der Steifigkeit bereits beginnen, bevor eine einzelne Spannungskomponente den jeweiligen Grenzwert erreicht hat [54]. Cui et al. [58] haben die Wichtigkeit der Berücksichtigung der gegenseitigen Beeinflussung der unterschiedlichen Spannungen auf die Schadensinitiierung gezeigt.

In den meisten FEM Programmen (wie auch in Abaqus) werden vier Rissinitiierungskriterien bereitgestellt:

- *Quadratisches Nennspannungskriterium* (engl. quadratic nominal stress criterion) [28], [58], [59], [60]
- *Maximales Nennspannungskriterium* (engl. maximum nominal stress criterion) [28], [60]
- *Quadratisches Nenndehnungskriterium* (engl. quadratic nominal strain criterion) [28], [60]
- *Maximales Nenndehnungskriterium* (engl. maximum nominal strain criterion) [28], [60]

#### 3.3.2.7.1 Quadratisches Nennspannungskriterium

Der Ansatz des *quadratischen Nennspannungskriteriums* basiert auf dem Ye's Kriterium [59], welches die Schadensinitiierung mit einem quadratischen Fehlerkriterium beschreibt. Der Anriss findet statt, wenn als Ergebnis der Formel (3-39) ein Wert von Eins erreicht wird [28], [58], [59], [60].

$$\left(\frac{\langle t_3 \rangle}{t_3^0}\right)^2 + \left(\frac{t_2}{t_2^0}\right)^2 + \left(\frac{t_1}{t_1^0}\right)^2 = 1 \quad (3-39)$$

Durch die *Föppl* Klammern  $\langle . \rangle$  werden in senkrechter Richtung zur Kontaktfläche nur die Zugspannungen für das Rissinitiierungskriterium herangezogen, da reine Druckspannungen keine Risse hervorrufen können [28], [60].

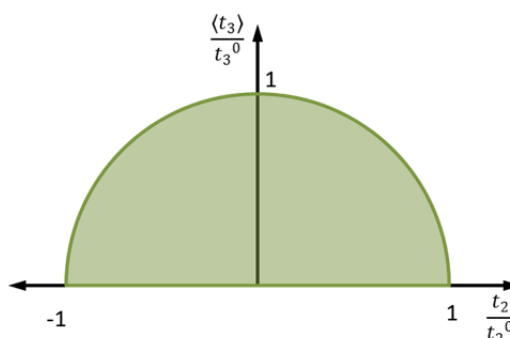


Abbildung 3-8: Quadratisches Nennspannungskriterium, zweiachsige Belastung

Für das bessere Verständnis des *quadratischen Nennspannungskriteriums* wird in Abbildung 3-8 ein zweiachsiger Spannungszustand ( $t_2, t_3$ ) visualisiert. Alle Spannungszustände, die nicht innerhalb des Halbkreises liegen, führen zu Rissinitiierungen. Da die Druckspannungen in vertikaler Richtung zur Rissfläche keine Schädigungsbeiträge liefern, ist lediglich die Hälfte eines Kreises ersichtlich.

Die Vergleichsrelativverschiebung bei Rissinitiierung  $\delta^0$  kann exemplarisch unter der Annahme, dass die kritischen Grenzflächenspannungen  $t_2^0$  und  $t_1^0$  gleich sind, mit Formel (3-21) abgeleitet werden. Des Weiteren wird eine gleiche Anfangssteifigkeit für die drei Moden I, II und III angenommen und die Spannungen bestimmt (Formel (3-40)) [54].

$$t_i = K\delta_i, \quad i = 1,2,3 \quad (3-40)$$

Mit der Annahme, dass  $t_2^0 = t_1^0$  ist, ergibt sich die einachsige Relativverschiebung am Beginn der Schädigung nach den Formeln (3-41), (3-42) [54].

$$\delta_3^0 = \frac{t_3^0}{K} \quad (3-41)$$

$$\delta_1^0 = \delta_2^0 = \delta_{shear}^0 = \frac{t_2^0}{K} \quad (3-42)$$

Für eine Relativverschiebung  $\delta_3$  größer als Null ergibt sich das mixed- Mode- Verhältnis  $\beta$  durch die Formel (3-43) [54].

$$\beta = \frac{\delta_{shear}}{\delta_3} \quad (3-43)$$

Die Vergleichsverschiebung bei Beginn der Delaminierung  $\delta^0$ , wird durch Einsetzen der Gleichungen (3-21), (3-40) - (3-43) in Formel (3-39) abgeleitet (Formel (3-44)) [54].

$$\delta^0 = \begin{cases} \delta_3^0 \delta_1^0 \sqrt{\frac{1 + \beta^2}{(\delta_1^0)^2 + (\beta \delta_3^0)^2}}, & \delta_3 > 0 \\ \delta_{shear}^0, & \delta_3 \leq 0 \end{cases} \quad (3-44)$$

### 3.3.2.7.2 Maximales Nennspannungskriterium

Beim *maximalen Nennspannungskriterium* (engl. maximum nominal stress criterion) wird angenommen, dass die Schadensinitiierung beginnt, wenn das maximale Nennspannungsverhältnis einen Wert von Eins erreicht. Die mathematische Definition wird in Formel (3-45) beschrieben [28], [60]

$$\max \left\{ \frac{\langle t_3 \rangle}{t_{3^0}}, \frac{t_2}{t_{2^0}}, \frac{t_1}{t_{1^0}} \right\} = 1 \quad (3-45)$$

Analog zum *quadratischen Nennspannungskriterium* (engl. quadratic nominal stress criterion) werden in Formel (3-45) in Vertikalrichtung ausschließlich Zugspannungen für die Schädigung berücksichtigt.

### 3.3.2.7.3 Quadratisches Nenndehnungskriterium

Beim *quadratischen Nenndehnungskriterium* (engl. quadratic nominal strain criterion) werden die Dehnungen für den Schädigungsbeginn beurteilt und in einem quadratischen Ansatz in Beziehung gesetzt (Formel (3-46)) [28], [60].

$$\left( \frac{\langle \varepsilon_3 \rangle}{\varepsilon_{3^0}} \right)^2 + \left( \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_{2^0}} \right)^2 + \left( \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_{1^0}} \right)^2 = 1 \quad (3-46)$$

Für die Beurteilung der Dehnungen senkrecht zur Rissfläche wird nur Strecken nicht aber Stauchen berücksichtigt.

### 3.3.2.7.4 Maximales Nenndehnungskriterium

Die Delaminierungsbedingung des *maximalen Nenndehnungskriteriums* (engl. maximum nominal strain criterion) ist äquivalent zur Formel (3-45), nach Austauschen der Spannungen durch Dehnungen (Formel (3-47)) [28], [60].

$$\max \left\{ \frac{\langle \varepsilon_3 \rangle}{\varepsilon_{3^0}}, \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_{2^0}}, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_{1^0}} \right\} = 1 \quad (3-47)$$

In dieser Arbeit wird das *quadratische Nennspannungskriterium* (engl. quadratic nominal stress criterion) verwendet, da es bereits in einigen Arbeiten erfolgreich für die Vorhersage der Rissinitiierung angewandt wurde [28], [29], [30], [31], [61].

### 3.3.2.8 Schädigungsfortschrittskriterium

Die Kriterien für Delaminierungsfortschritt unter mixed- Mode- Belastung werden im Allgemeinen von den Energiefreisetzungsraten und Bruchzähigkeiten abgeleitet. Es wird angenommen, dass die Delaminierung wächst, wenn die Energiefreisetzungsrate  $G$  die kritische Energiefreisetzungsrate  $G_C$  überschreitet [29].

### 3.3.2.8.1 Potenzgesetzkriterium

Ein Schädigungsfortschrittskriterium für multiaxiales Risswachstum stellt das *Potenzgesetz* dar [29]. Dieses wird meistens durch lineare oder quadratische Beziehungen zwischen den einzelnen Energiefreisetzungsraten angeschrieben (Formel (3-48)) [28], [60], [62].

$$\left\{\frac{G_I}{G_{IC}}\right\}^\alpha + \left\{\frac{G_{II}}{G_{IIC}}\right\}^\alpha + \left\{\frac{G_{III}}{G_{IIIC}}\right\}^\alpha = 1 \quad (3-48)$$

Der Exponent  $\alpha$  im *Potenzgesetzkriterium* (Formel (3-48)) wird üblicherweise eins oder zwei gesetzt [28].

### 3.3.2.8.2 Benzeggagh und Kenane Gesetz

*Camanho et al.* [54] zeigten, dass die Beziehung, die von *Benzeggagh* und *Kenane* [63] für die kritische Energiefreisetzungsrates vorgeschlagen wurde, besser den Rissfortschritt in Epoxid und PEEK (Polyetheretherketon) Verbundwerkstoffen beschreibt. Der von *Benzeggagh* und *Kenane* bestimmte Ausdruck für die kritische Energiefreisetzungsrates  $G_C$  wird in Formel (3-49) definiert [63].

$$G_C = G_{IC} + (G_{IIC} - G_{IC}) \left(\frac{G_{shear}}{G_T}\right)^\eta \quad (3-49)$$

Der Exponent  $\eta$  stellt einen Materialkennwert dar. *Li* und *Sen* [64] und *Li* [65] definieren die Scherenergiefreisetzungsrates  $G_{shear}$  nach Formel (3-50).

$$G_{shear} = G_{II} + G_{III} \quad (3-50)$$

Der Faktor  $G_T$  in Gleichung (3-49) ist in Formel (3-51) definiert [54].

$$G_T = G_I + G_{II} \quad (3-51)$$

Die totale Energiefreisetzungsrates  $G$  unter multiaxialer Belastung ist nach Formel (3-52) definiert [29].

$$G = G_I + G_{shear} \quad (3-52)$$

Wenn die totale Energiefreisetzungsrates  $G$  größer oder gleich einem kritischen Wert  $G_C$  ist, kommt es zum Delaminierungsfortschritt (Formel (3-53)) [29].

$$G \geq G_C \quad (3-53)$$

Das *Benzeggagh- Kenane* Rissfortschrittskriterium kann in die Definition der *Kohäsivelemente* implementiert werden. Zunächst muss die Energiefreisetzungsrates, die bei vollständiger Dekohäsion des Elements vorliegt, bestimmt werden (Formeln (3-54), (3-55)) [54].

$$G_I = \frac{K \delta_3^f \delta_3^0}{2} \quad (3-54)$$

$$G_{shear} = \frac{K \delta_{shear}^f \delta_{shear}^0}{2} \quad (3-55)$$

Die Variablen  $\delta_3^0$  und  $\delta_{shear}^0$  in den Formeln (3-54), (3-55) beschreiben die jeweiligen Normal- und Scherrelativverschiebungen bei Rissinitiierung unter multiaxialer Belastung.  $\delta_3^f$  und  $\delta_{shear}^f$  sind die

entsprechenden Komponenten bei vollständiger Dekohäsion. Die erwähnten Verschiebungen können ausgehend von den Formeln (3-21) und (3-38) abgeleitet werden (Formeln (3-56), (3-57)) [54].

$$\delta_3^0 = \frac{\delta^0}{\sqrt{1 + \beta^2}}; \quad \delta_3^f = \frac{\delta^f}{\sqrt{1 + \beta^2}} \quad (3-56)$$

$$\delta_{shear}^0 = \frac{\beta \delta^0}{\sqrt{1 + \beta^2}}; \quad \delta_{shear}^f = \frac{\beta \delta^f}{\sqrt{1 + \beta^2}} \quad (3-57)$$

Mit Hilfe der Formeln (3-56) und (3-57) in (3-54) und (3-55) werden die Energiefreisetzungsraten als Funktion von  $\delta^f$ ,  $\delta^0$  und  $\beta$  ausgedrückt. Bei Übernahme dieser Ausdrücke in das *Benzeggagh-Kenane* Rissfortschrittskriterium (Formel (3-49)), kann die Verschiebung bei vollständigem Elementversagen unter multiaxialer Belastung bestimmt werden (Formel (3-58)) [54].

$$\delta^f = \begin{cases} \frac{2}{K \delta^0} \left[ G_{IC} + (G_{IIC} - G_{IC}) \left( \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} \right)^\eta \right], & \delta_3 > 0 \\ \sqrt{(\delta_1^f)^2 + (\delta_2^f)^2}, & \delta_3 \leq 0 \end{cases} \quad (3-58)$$

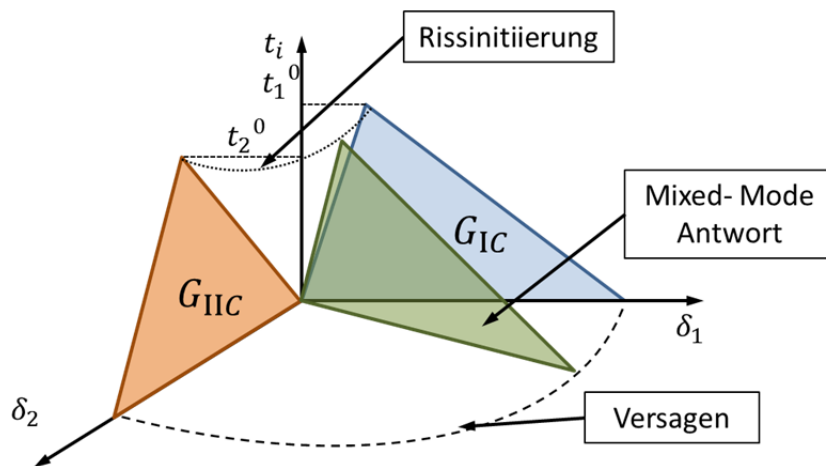


Abbildung 3-9: Bilineares Materialgesetz unter mixed- Mode Belastung [66]

Der Zusammenhang zwischen der Ermittlung der mixed- Mode Rissinitiierung und Risswachstum auf Basis der einzelnen Belastungskomponenten wird in Abbildung 3-9 dargestellt. Dabei ist deutlich ersichtlich, dass für die mixed- Mode Ebene einerseits der Delaminierungsbeginn als auch der Delaminierungsfortschritt umgerechnet werden muss [66].

### 3.3.3 Elementtyp

Für eine 3D FEM Analyse werden *Kohäsivelemente* vom Typ COH3D8 in Abaqus verwendet. Diese Elementtypen besitzen acht Knoten und vier Integrationspunkte, wie in Abbildung 3-10 gezeigt ist [67].

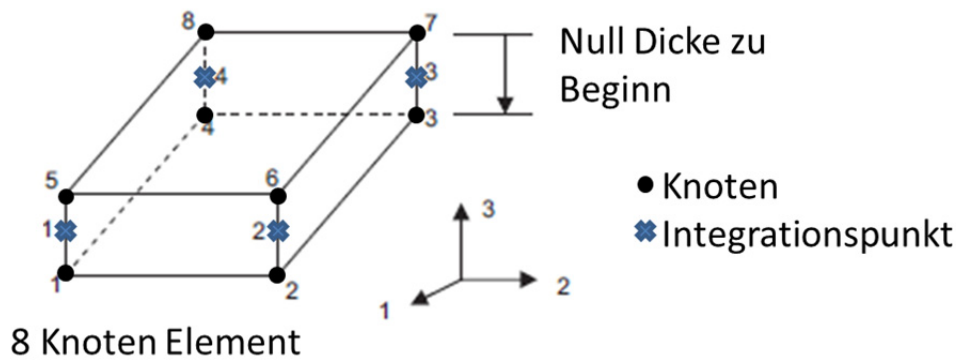


Abbildung 3-10: COH3D8 kohäsiv- Element [67]

Üblicherweise werden entlang der möglichen Rissausbreitungsfront (Grenzfläche zwischen zwei Materialien) *Kohäsivelemente* mit einer Höhe von Null definiert. Bei Beaufschlagung der Struktur mit einer Belastung wird sich die obere von der unteren Fläche des COH3D8 Elements trennen und der Rissinitiierungsparameter wird innerhalb des Elements quantifiziert. Wenn dieser einen Wert von eins aufweist, wird die Steifigkeit des Elements laut Rissfortschrittsgesetz degradiert bis die kritische Relativverschiebung  $\delta^f$  erreicht ist und die Steifigkeit auf null gesetzt wird [67].

### 3.3.4 Konvergenzverhalten

Materialmodelle mit Entfestigungsverhalten und Steifigkeitsdegradierung führen oft zu beträchtlichen Konvergenzproblemen in einer impliziten FEM Analyse [67]. Bei Modellen mit *Kohäsivelementen* wirkt sich neben dem Steifigkeitsverlust in Folge von Risswachstum auch noch die Änderung der Monotonie des bilinearen Materialgesetzes negativ auf die Konvergenz aus. Speziell im Bereich der Rissinitiierung (Abbildung 3-11) ist mit Schwierigkeiten im Konvergenzverhalten zu rechnen.

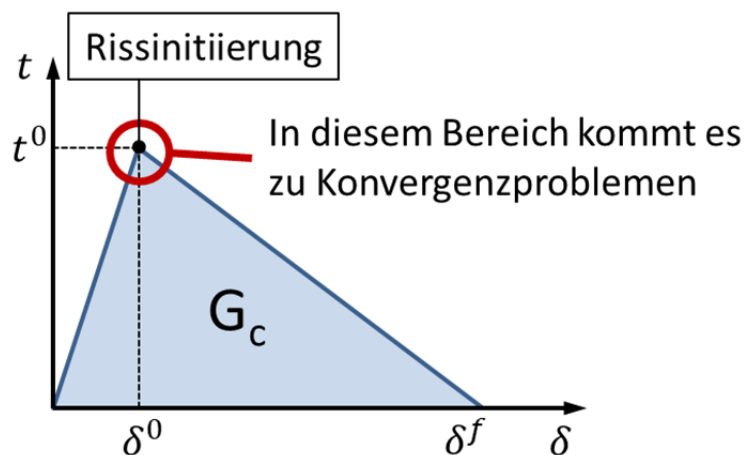


Abbildung 3-11: Bilineares Materialmodell mit Konvergenzerklärung [29]

Für die Überwindung dieser Konvergenzprobleme stellt die FEM- Software Abaqus einige Lösungsalgorithmen zu Verfügung:

- *Viskose Regularisierung* (engl. viscous regularization) [67], [68], [69], [70], [60]
- *Automatische Stabilisierung* (engl. automatic stabilization) [68], [60]
- *Adaptive Stabilisierung* (engl. adaptive stabilization) [68], [60]



### 3.3.4.1 Viskose Regularisierung

Eine weit verbreitete Technik um die Konvergenz bei *Kohäsivelementen* zu erhöhen, ist die *viskose Regularisierung* (engl. viscous regularization) des Materialgesetzes. Diese bewirkt, dass die tangential Steifigkeitsmatrix des entfestigenden Materials für ausreichend kleine Zeitinkremente positiv ist [60]. Dieses Schema ist eine Generalisierung des *Duvaut* und *Lions* [71] Regularisierungsmodells [69].

Das Spannungs- Relativverschiebungsgesetz kann unter Verwendung der Viskosität reguliert werden, in dem verhindert wird, dass die Spannungen die Limits des bilinearen Materialgesetzes überschreiten. Der Regulierungsprozess verwendet eine viskose Steifigkeitsdegradierungsvariable  $D_v$ , welche durch die Gleichung (3-59) definiert ist [67].

$$\dot{D}_v = \frac{dD_v}{dt} = \frac{1}{\mu} (D - D_v) \quad (3-59)$$

Die Variable  $\mu$  in Formel (3-59) definiert den Viskositätsparameter, welcher die Relaxationszeit des viskosen Systems repräsentiert, und  $D$  ist die Schädigungsvariable, die im *Kohäsivelemente* Modell evaluiert wird [67]. Bei Verwendung der *viskosen Regularisierung* muss die Schädigungsvariable im Materialgesetz (Formel (3-19)) durch die viskose Steifigkeitsdegradierungsvariable  $D_v$  substituiert werden. Mit einem kleinen Wert des Viskositätsparameters kann die Konvergenzrate erhöht werden ohne die Ergebnisse zu beeinflussen. Üblicherweise wird ein Wert von  $\mu = 10^{-5}$  verwendet, allerdings muss der optimale Viskositätsparameter für jedes Modell manuell ermittelt werden [67]. Die Basisidee ist, dass sich die Lösung des viskosen Systems dem nichtviskosen Fall annähert [69]. Es muss allerdings am Ende einer Analyse kontrolliert werden, ob die Energie die für die Dämpfung verwendet wurde, klein genug im Vergleich zur totalen Dehnungsenergie ist [68].

Die *viskose Regularisierung* zur Konvergenzsteigerung ist bei *Kohäsivelemente* Analysen die erfolgversprechendste Maßnahme [67], [68], [69], [70]. Aus diesem Grund wird sie in dieser Arbeit bei den Berechnungen verwendet.

### 3.3.4.2 Automatische Stabilisierung

Eine *automatische Stabilisierung* (engl. automatic stabilization) kann in jeder nichtlinearen Analyse in Abaqus implementiert werden. Dabei kann eine Verbesserung der Konvergenz durch einen volumenproportionalen Dämpfungsfaktor erreicht werden. Bei Verwendung der *automatischen Stabilisierung* muss kontrolliert werden, ob die dissipierte Energie klein genug ist, im Vergleich zur totalen Dehnungsenergie. Um einen optimalen Wert für den Dämpfungsfaktor zu finden, sodass die Konvergenz hoch und die dissipierte Energie durch die Dämpfung gering ist, müssen üblicherweise einige Vergleichsrechnungen durchgeführt werden [60], [68].

### 3.3.4.3 Adaptive Stabilisierung

Eine *adaptive Stabilisierung* (engl. adaptive stabilization) ist ebenfalls im FEM- Programm Abaqus verfügbar, wobei bei diesem Algorithmus der Dämpfungsfaktor vom Konvergenzverlauf und dem Verhältnis von dissipierter Energie zur totalen Dehnungsenergie abhängt. Der Vorteil dieses Ansatzes ist die automatische Bestimmung des Dämpfungsfaktors. Am Ende der Analyse muss trotzdem ein Vergleich von dissipierter Energie zu totaler Dehnungsenergie durchgeführt werden [60], [68].

Neben den erwähnten Algorithmen zur Erhöhung der Konvergenz ist auch eine feinere Vernetzung des Bauteils von Vorteil. Ebenfalls hilfreich kann eine Erhöhung der Toleranz bei der Festlegung des Rissinitiierungskriteriums bei der Materialdefinition der *Kohäsivelemente* sein [60].

### 3.3.5 Materialparameter

Für die Definition der *Kohäsivelemente*-Eigenschaften in einem FEM Programm sind einige Materialparameter erforderlich. Die in dieser Arbeit verwendeten Rissinitiierungs- (*quadratisches Nennspannungskriterium*) und Rissfortschrittskriterien (*Benzeggagh-Kenane*) führen auf zehn zu definierende Materialparametern (Abbildung 3-12, Abbildung 3-13) [60].

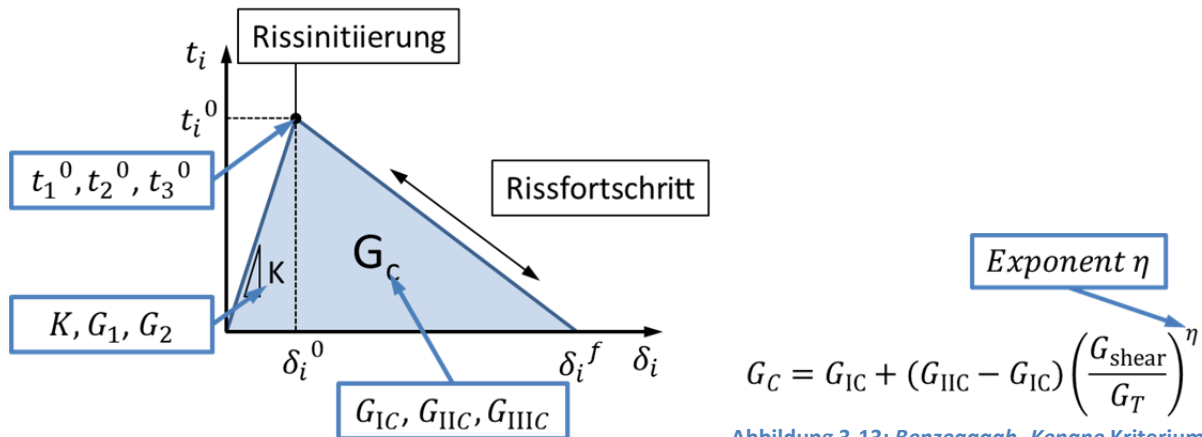


Abbildung 3-12: Bilineares Materialgesetz, Materialparameter [29]

Exponent  $\eta$

$$G_C = G_{IC} + (G_{IIC} - G_{IC}) \left( \frac{G_{shear}}{G_T} \right)^\eta$$

Abbildung 3-13: Benzeggagh-Kenane Kriterium, Materialparameter [63]

Im anisotropen Fall müssen die kritischen Grenzflächenspannungen ( $t_1^0, t_2^0, t_3^0$ ) und die kritischen Energiefreisetzungsraten ( $G_{IC}, G_{IIC}, G_{IIIC}$ ) in allen drei Raumrichtungen definiert werden (Abbildung 3-12). Zusätzlich muss für das *Benzeggagh-Kenane* Schädigungsfortschrittskriterium der Exponent  $\eta$  angegeben werden. Abaqus bietet die Möglichkeit auch die Anfangssteifigkeiten ( $K, G_1, G_2$ ) unterschiedlich zu definieren. Allerdings ist dies für Delaminierungsanalysen nicht sinnvoll, da die Anfangssteifigkeit einen numerischen Parameter darstellt und einer Abschätzung bedarf [60].

Mit der Annahme von isotropen Materialverhalten können die notwendigen Eingaben auf drei Parameter reduziert werden: die kritische Grenzflächenspannung  $t^0$ , die kritische Energiefreisetzungsrate  $G_C$  und die Anfangssteifigkeit  $K$ . Der Faktor  $\eta$  in dem *Benzeggagh-Kenane* Kriterium wird im isotropen Fall eins [60]. Da in dieser Arbeit eine Struktur mit Materialien verwendet wird, die noch nicht bruchmechanisch identifiziert wurden, müssen Materialtests definiert werden, welche die notwendigen Materialmerkmale bestimmen.

### 3.3.6 Materialtests

In diesem Kapitel werden Materialtests vorgestellt, um eine Delaminierungsanalyse mit dem *Kohäsivelemente* Ansatz durchführen zu können. Bei der Auswahl der Materialprüfungen wird die sehr kleine Bauteildicke (<200  $\mu\text{m}$ ) der einzelnen Materiallagen berücksichtigt. Viele der beschriebenen Tests dienen der exakten Bestimmung der kritischen Energiefreisetzungsrates der Verbindungsschicht zwischen zwei Lagen, da diese den empfindlichsten Parameter darstellt. Für diese Arbeit wurden nur Methoden unter Annahme isotroper Eigenschaften verwendet. Die Hypothese eines isotropen Materialverhaltens der Keramischichten wurde durch Voruntersuchungen (Mikroskopie) bestätigt.

### 3.3.6.1 Vickers- Eindrücktest

Für die Charakterisierung der Bruchzähigkeit der *Kohäsivzone* zweier Werkstoffe kann der *Vickers-Eindrücktest* verwendet werden. Dabei werden mit einer Vickerspyramide Risse in die Grenzfläche initiiert und vorangetrieben. Es gibt dafür grundsätzlich zwei Methoden: Die Pyramide kann direkt in die Kontaktfläche eingedrückt werden oder in das Substrat in der Nähe der Kontaktfläche [72].

#### Eindrücken der Vickerspyramide (engl. interfacial indentation test) direkt in die Grenzfläche

Dieser Test wird an der Querschnittsfläche des Bauteils direkt an der Grenzfläche zwischen den zwei Materialien durchgeführt (Abbildung 3-14). Dabei wird eine Serie von Punkten mit der Vickerspyramide (eine Diagonale muss auf der Grenzfläche liegen) mit steigender Belastung beaufschlagt, um Risse an den Ecken der Pyramide in die Kontaktfläche zu initiieren [73].

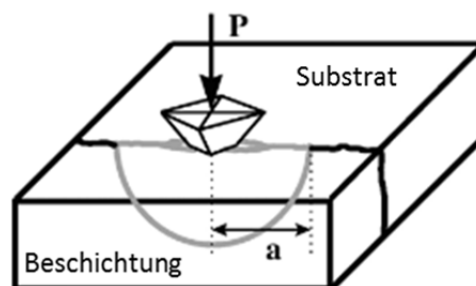


Abbildung 3-14: Kontaktfläche Eindrücktest [72]

Der Riss, der in die Kontaktfläche durch den Test initiiert wird, besitzt eine halbrunde Form [74]. Für die Berechnung der Grenzflächenbruchzähigkeit verwendet *Démarécaux, Chicot* und *Lesage* [72] den Zusammenhang zwischen  $P_c$  und  $a_c$  (Formel (3-60)). Dabei ist  $P_c$  die aufgebrachte kritische Last auf die Vickerspyramide und  $a_c$  die kritische Kontaktflächenrisslänge. Die Formel (3-60) berücksichtigt neben dem erwähnten Zusammenhang auch noch die mechanischen Eigenschaften der beiden Werkstoffe [72].

$$K_{IC} = 0.015 \frac{P_c}{a_c^{3/2}} \cdot \left(\frac{E}{H}\right)_I^{1/2} \quad (3-60)$$

$$\left(\frac{E}{H}\right)_I^{1/2} = \frac{\left(\frac{E}{H}\right)_S^{1/2}}{1 + \left(\frac{H_S}{H_C}\right)} + \frac{\left(\frac{E}{H}\right)_C^{1/2}}{1 + \left(\frac{H_C}{H_S}\right)} \quad (3-61)$$

In Formel (3-61) ist  $E$  der Elastizitätsmodul und  $H$  die Vickershärte. Die Indizes  $I, S$  und  $C$  stehen für die Grenzfläche ( $I$ ), das Substrat ( $S$ ) und die Beschichtung ( $C$ ) [72].

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass der *Vickers- Eindrücktest in der Kontaktfläche* leicht durchzuführen ist, allerdings einer sorgfältigen Präparation der Querschnittsfläche bedarf. Die Anzahl der möglichen Eindrücke an der Oberfläche ist abhängig von der Breite und der Belastungshöhe. Die Messung der Risslänge kann sich ebenfalls als schwierig gestalten, da sich der Riss nicht zwangsläufig entlang der Kontaktfläche ausbreiten muss und Oxide und andere Fremdstoffe die optische Beobachtung der Grenzfläche verhindern können. Die Hauptlimitierung besteht in der Dicke der Beschichtung, welche größer als 100  $\mu\text{m}$ - 150  $\mu\text{m}$  sein sollte, um einen Riss in der Beschichtung anstatt in der Grenzschicht verhindern zu können [75].

### Eindrücken der Vickerspyramide in der Nähe der Kontaktfläche (engl. vickers indentation cracking test)

Die Methode des direkten Eindrückens der Vickerspyramide in die Grenzschicht besitzt den Nachteil, dass die Dicke der dünneren Schicht (=Beschichtung) die Anwendung dieses Testverfahrens limitiert. Wenn das Verhältnis des halben Durchmessers der eingedrückten Pyramide zu der Dicke der Beschichtung gegen Eins geht, wird dieses Prüfverfahren unbrauchbar. Für diese Fälle kann als Alternative ein Vickers Eindrücktest in der dickeren Schicht (Substrat) mit einem gewissen Abstand von der Grenzfläche im Querschnitt durchgeführt werden (Abbildung 3-15) [76].

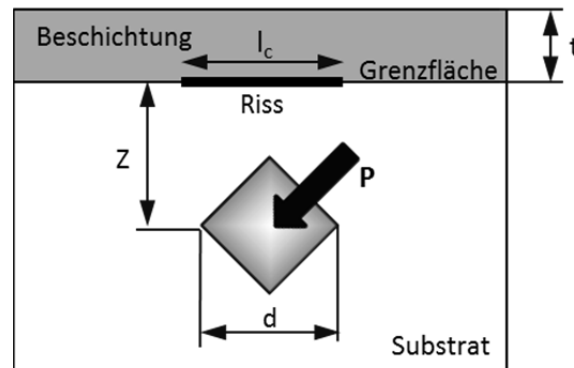


Abbildung 3-15: Schema Vickers Eindrücktest in Nähe der Kontaktfläche [76]

Während des Eindrückens der Vickerspyramide in das Substrat wird eine plastische Zone gebildet, die sich ausweitet und zu einem Riss in der Kontaktfläche führt. Die Risslänge hängt von der aufgetragenen Last  $P$  und der Distanz  $z$  zwischen dem Ort des Eindrückens der Pyramide und der Grenzfläche ab [76].

#### 3.3.6.2 Zugversuch

Mit Hilfe des Zugversuchs (engl. tensile adhesive test) kann einerseits die Grenzflächenfestigkeit festgestellt werden und durch Modifikation des Standardzugversuchs auch dessen Bruchzähigkeit. Der Zugversuch ist weit verbreitet und in der EN 582 (gleichwertig zu ISO 14916) und in der ASTM C 633 standardisiert. Für die Bestimmung der Haftfestigkeit zwischen zwei Schichten, wird aus dem einen Material ein normierter Zylinder gefertigt und mit dem zweiten Werkstoff beschichtet. Die Beschichtung wird anschließend mit einem Epoxidharz an einem identischen Zylinder geklebt, welcher das Gegenstück bildet. Nach dem Aushärten werden die zwei Zylinder in die Zugmaschine eingespannt und belastet, bis ein Riss zwischen dem Basismaterial und der Beschichtung entsteht und die Struktur versagt. Die für das Delaminieren notwendige Kraft wird durch die Querschnittsfläche dividiert und bildet somit die kritische Grenzflächenspannung [75].

Für die Messung der Bruchzähigkeit der Haftschrift wird ein Umfangsriss am Zylinder in der Grenzschicht erzeugt. Dieser kann einerseits mit einem Laser oder mit einem Fremdkörper (Kreisring) während des Beschichtungsprozesses hergestellt werden (Abbildung 3-16) [77].

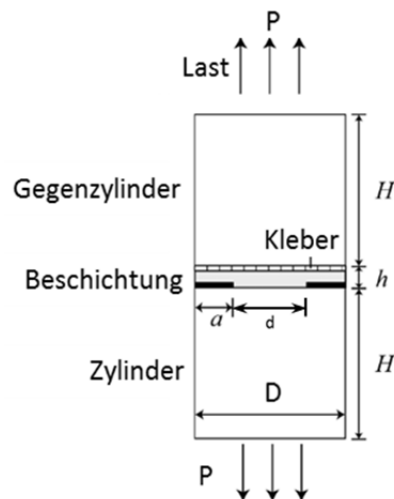


Abbildung 3-16: Testaufbau für Bruchzähigkeitsbestimmung mittels Zugversuch [77]

Die Struktur wird bis zum Bruch belastet und die Bruchzähigkeit kann über die Geometrie und dem Ausgangsriss ermittelt werden. In der Literatur werden hierfür verschiedene Formeln vorgeschlagen, wie zum Beispiel Formel (3-62), die von *Bueckner* abgeleitet wurde [78].

$$K_{IC} = P_C \left( -1.27 + 1.72 \left( \frac{D}{d} \right) \right) D^{-3/2} \quad (3-62)$$

Für die Verwendung von Formel (3-62) sollte  $0.4 \leq d/D \leq 0.9$  erfüllt sein. Die Variable  $P_C$  in Formel (3-62) definiert die Bruchkraft,  $D$  den äußeren Durchmesser des Zylinders und  $d$  den inneren Durchmesser des Risses [78].

Die **Hauptlimitierungen** dieses Tests sind:

- Kosten für die Probenherstellung und der Verklebung [75]
- Vorbereitungszeit (Kleben, Aushärten) [75]
- Zugfestigkeit des Epoxidharzklebers (muss höher als die Haftfestigkeit der Beschichtung sein) [79]
- Porosität der Beschichtung (da bei hoher Porosität der Kleber eindiffundiert) [79]

### 3.3.6.3 Scherversuch

Mit dem Scherversuch kann die kritische Grenzflächenspannung zwischen der Beschichtung und dem Substrat bestimmt werden (Norm: EN 15430). Die Prüfung kann direkt ohne Klebung und Vorbereitung erfolgen und spiegelt die Lastverhältnisse, die meistens in den Anwendungen vorliegen, besser als der Zugversuch wider [75], [80].

Das Substrat wird fix in eine Vorrichtung eingespannt, und eine Scherplatte aus Hartmetall drückt mit einer definierten Kraft parallel zur Kontaktfläche auf die Beschichtung (Abbildung 3-17). Die Last wird erhöht bis die Probe bricht [75].

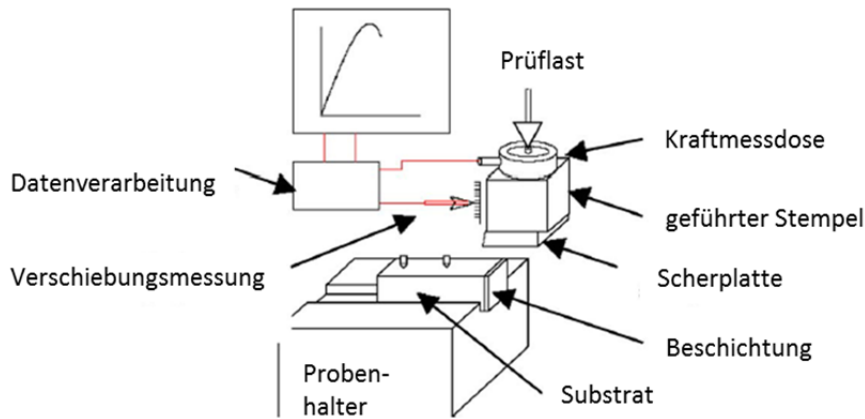


Abbildung 3-17: Prinzip des Schertests [80]

Neben dem Vorteil der geringen Testvorbereitung ist die Möglichkeit des Aufzeichnens von Last-Verschiebungskurven und der daraus resultierenden Informationen über die mikrostrukturellen Effekte in der Probe positiv zu erwähnen. Auf Basis der Last-Verschiebungskurven können durch Integration, Aussagen über die Energieabsorptionsmöglichkeit der Struktur getroffen werden. Ein Nachteil ist, dass nur dann die Haftfestigkeit gemessen werden kann, wenn die Kohäsion der Beschichtung signifikant größer als die Adhäsion zwischen Beschichtung und Substrat ist [80].

### 3.3.6.4 Kratztest

Der Kratztest ist einer der einfachsten Prüfverfahren zur Bestimmung der Bruchzähigkeit der Kontaktfläche. Für die Testdurchführung wird eine Diamantspitze über die Beschichtung geführt, um eine Kratzspur an der Oberfläche zu erzeugen (Abbildung 3-18). Die Last auf der Diamantspitze wird linear erhöht um Scherspannungen in das Material einzubringen. Am Übergang zum Substrat besteht ein Sprung in den mechanischen Eigenschaften, und somit ist die Scherspannung lokal diskontinuierlich. Wenn die Last groß genug ist, um einen kritischen Spannungswert zu erzeugen, kommt es zum Delaminieren [81].

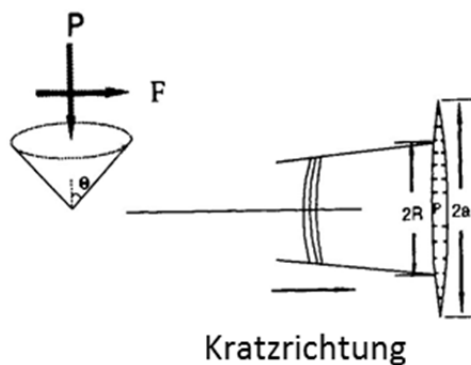


Abbildung 3-18: Schematische Darstellung des Kratztests [82]

Für die Berechnung der Bruchzähigkeit der Kontaktschicht kann Formel (3-63) herangezogen werden [82].

$$K_{IC} = \frac{2P f_g}{R^2 \cot \theta} \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/2} \sin^{-1} \frac{R}{a} \quad (3-63)$$

In Formel (3-63) beschreibt  $P$  die Normalkraft, die für die Delaminierungsiniiierung notwendig ist,  $R$  ist der Radius des Eindringkegels in die Kerbe,  $2a$  ist die absolute Risslänge und  $f_g$  ist der Reibungsbeiwert der Kerbe. Dieser hängt von dem Kegelwinkel  $2\theta$  ab und kann durch das Verhältnis

von Tangentialkraft ( $F$ ) und Normalkraft ( $P$ ) berechnet werden (Abbildung 3-18). Als Nachteil ist hier zu erwähnen, dass bei sehr spröden, dünnen Beschichtungen Mikrorisse in der Schicht entstehen bevor es zur Delaminierung kommen kann [82].

### 3.3.6.5 Lasergestützte Grenzflächenidentifikation

Mit Hilfe der Verwendung eines Laserpulses (engl. laser generated stress pulses measurement) können sowohl die kritische Grenzflächenspannung, als auch die Bruchzähigkeit der Haftschrift ermittelt werden. Dabei wird mit einem YAG Laser (Yttrium-Aluminium-Granat Laser) ein Impuls auf die Rückseite des Substrats abgefeuert. Der Laserimpuls trifft allerdings nicht direkt auf die Substratoberfläche auf, sondern muss zuerst eine Wasserglas- und Aluminiumschicht passieren (Abbildung 3-19). Die durch das Aufschmelzen eingeleitete Expansion der Aluminiumschicht führt zu einem Druckspannungspuls durch das Substrat bis zur freien Beschichtungsfläche. Dort wird der Puls reflektiert und bildet eine Zugspannungswelle aus, welche bei ausreichender Energie zum Versagen der Kontaktschicht führt [83].

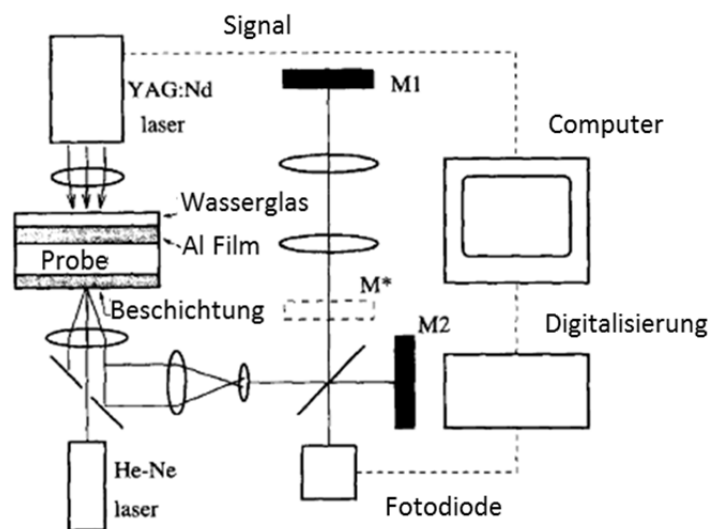


Abbildung 3-19: Aufbau lasergestützte Grenzflächenidentifikation [83]

Die Haftfestigkeit wird durch Messung der transienten Geschwindigkeit der freien Beschichtungsfläche, durch die Verwendung eines optischen Interferometers (Abbildung 3-19) mit Hilfe von Formel (3-64) bestimmt [83].

$$t^0 = \rho c \left( v \left( t + \frac{h}{c} \right) - v \left( t - \frac{h}{c} \right) \right) \quad (3-64)$$

Die Variable  $\rho$  in Formel (3-64) stellt die Dichte der Beschichtung,  $v(t)$  die gemessene transiente Geschwindigkeit,  $h$  die Beschichtungsdicke und  $c$  die longitudinale Wellengeschwindigkeit im Film dar. Für die Bestimmung der Bruchzähigkeit der Grenzschicht wird die Geschwindigkeit der freien Beschichtungsfläche bei Delaminierungsinisierung gemessen. Dafür wird die Laserenergie stetig erhöht, bis eine Rissinitiation erfolgt. Für die Bestimmung der Bruchzähigkeit auf Basis der kritischen Geschwindigkeit muss ein numerisches Modell aufgebaut werden, oder es werden Näherungsformeln herangezogen [83].

### 3.3.7 Prozesszone

Die Länge der Prozesszone ist definiert als der Abstand zwischen der Risspitze und dem Punkt, in dem die maximale *Kohäsivelemente* Spannung auftritt und ist eine Materialeigenschaft. Die Bestimmung dieser Länge ist entscheidend für die adäquate *Kohäsivelemente* Rechnung, da von diesem Wert die notwendige Diskretisierungsfeinheit abhängt. Da allerdings oft zur Senkung der Rechenzeit ein gröberes Netz verwendet werden soll, kann die Prozesszone bei gleicher kritischer Energiefreisetzungsrate künstlich verlängert werden, um ein ähnliches bruchmechanisches Verhalten gewährleisten zu können (Abbildung 3-20). Somit wird durch diese Methode die kritische Grenzflächenspannung an das jeweilige Netz angepasst [39].

In der Literatur werden verschiedene Modelle für die Berechnung der Prozesszone vorgeschlagen. Die meisten Abschätzungen für die Prozesszone bauen auf Überlegung zur Bestimmung der plastischen Zone vor der Rissfront auf [42]. Das Modell von *Falk et al.* [84] und *Rice* [85] leitet die Länge der Prozesszone basierend auf der Rissgeschwindigkeit ab. Die meisten Modelle resultieren im gleichen analytischen Ansatz um die Prozesszone zu beschreiben (Formel (3-65)) [39].

$$l_{pz} = ME \frac{G_c}{(t^0)^2} \quad (3-65)$$

In Formel (3-65) beschreibt  $l_{pz}$  die Länge der Prozesszone,  $E$  den Elastizitätsmodul,  $G_c$  die kritische Energiefreisetzungsrate,  $t^0$  die kritische Grenzflächenspannung, und  $M$  ist ein Parameter, der von der gewählten Methode zur Prozesslängenabschätzung abhängt. An dieser Stelle muss erwähnt werden, dass eine Abschätzung der Prozesszone mit diesen Modellen nur möglich ist, wenn die kritische Energiefreisetzungsrate und die Haftfestigkeit der Kontaktschicht bekannt sind. Die verschiedenen Ausdrücke für  $M$  sind in Tabelle 5 zusammengefasst [39].

**Tabelle 5: Wert für Koeffizient M**

Autor	M
<b>Barenblatt</b> [42]	$\frac{\pi}{8}$
<b>Rice</b> [85], <b>Falk et al.</b> [84]	$\frac{9\pi}{32}$
<b>Hillerborg et al.</b> [43]	1

Die Abschätzung nach *Barenblatt* [42] referenziert ein eher sprödes Materialverhalten. Die Modellvorstellungen von *Rice* [85], *Falk et al.* [84] und *Hillerborg et al.* [43] werden ebenfalls in Tabelle 5 angeführt, da diese sehr häufig in der Literatur für allgemeine Anwendungen verwendet werden [39].

Damit akkurate Ergebnisse mit einer FEM- Rechnung erzielt werden können, muss die Diskretisierung der *Kohäsivelemente* an die Prozesszonenlänge angepasst werden. Als Parameter für die Beurteilung der ausreichenden Netzfeinheit wird die Anzahl der Elemente  $N_e$  innerhalb einer Prozesszone definiert (Formel (3-66)) [39].

$$N_e = \frac{l_{pz}}{l_e} \quad (3-66)$$



Die Variable  $l_e$  in Formel (3-66) bezeichnet den Knotenabstand in Richtung des Rissfortschrittes. Wenn zu wenige Elemente in der Prozesszone vorhanden sind, können die Spannungen im Bereich der Risspitze nicht angemessen dargestellt werden. Aus diesem Grund ist es notwendig, eine Mindestanzahl von Elementen  $N_e$  in der Prozesszone zu definieren. Dieser Grenzwert wird in der Literatur nicht explizit definiert [39].

Moes und Belytschko [86] schlagen basierend auf der Arbeit von Carpinteri et al. [87] die Verwendung von mehr als zehn Elementen in der Prozesszone vor. Falk et al. [84] wiederum verwenden zwei bis fünf Elemente für ihre Modelle. In der Parameterstudie von Dávila und Camanho et al. [88] ergeben sich drei Elemente als angemessen. In dieser Arbeit wird ebenfalls ein Ansatz mit drei Elementen in der Prozesszone verwendet.

Ein Nachteil bei der Verwendung von Kohäsivelementen ist die Erfordernis eines sehr feinen Netzes um der Anforderung nach einer bestimmten Elementanzahl in der Prozesszone gerecht zu werden. Dabei kann die erforderliche Netzfeinheit zu sehr langen Rechenzeiten führen. Um trotz kleiner Prozesszonen ein relativ grobes Netz verwenden zu können, gibt es die Möglichkeit der Adaptierung der kritischen Grenzflächenspannung bei unveränderter kritischer Energiefreisetzungsrate und Steifigkeit. Dabei wird durch die Minderung der Grenzflächenspannung die Prozesszonenlänge künstlich vergrößert und somit an die größeren Knotenabstände angepasst (Abbildung 3-20) [39].

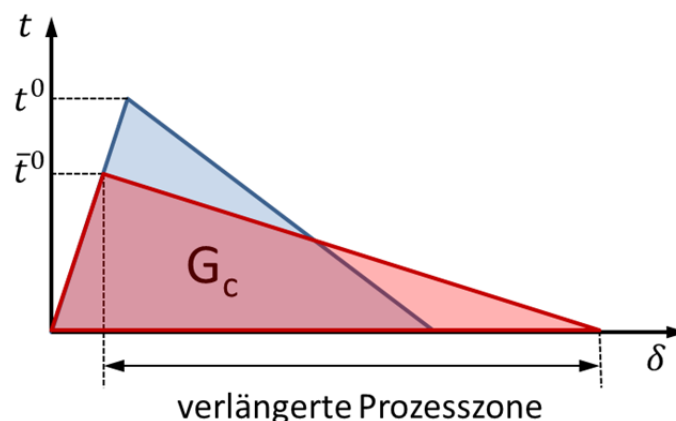


Abbildung 3-20: Prinzip der Anpassung der kritischen Grenzflächenspannung

In Abbildung 3-20 ist deutlich ersichtlich, dass durch die Anpassung der kritischen Grenzflächenspannung (roter Verlauf) nicht die Steifigkeit oder kritische Energiefreisetzungsrate (Fläche unter der Kurve) geändert wird. Die Ableitung der adaptierten kritischen Grenzflächenspannung  $\bar{t}^0$  aus Formel (3-65) auf Basis der gewünschten Anzahl der Elemente in der Prozesszone  $N_e^*$  wird mit Formel (3-67) durchgeführt [39].

$$\bar{t}^0 = \sqrt{\frac{MEG_c}{N_e^* l_e}} \quad (3-67)$$

Die im FEM Programm gewählte kritische Grenzflächenspannung  $\tilde{t}^0$  ergibt sich aus Formel (3-68) [39].

$$\tilde{t}^0 = \min\{t^0, \bar{t}^0\} \quad (3-68)$$

### 3.3.8 Abschätzung der Anfangssteifigkeit

Idealerweise sollten die *Kohäsivelemente* unendliche Anfangssteifigkeit aufweisen, um nicht das globale Verhalten der Struktur vor dem Schädigungsbeginn zu beeinflussen. Allerdings müssen in einer FEM Analyse endliche Werte verwendet und die Steifigkeiten nicht zu hoch gewählt werden, um nicht die Konvergenz des Modells nachteilig zu beeinflussen. Eine Ableitung der geeigneten Steifigkeit kann mit einer 2D Betrachtung eines Lagenverbundwerkstoffes durchgeführt werden (Abbildung 3-21) [39].

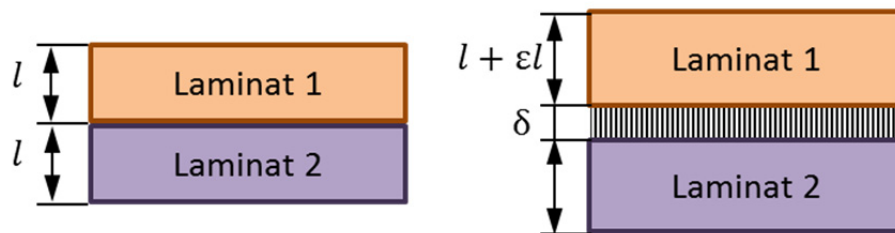


Abbildung 3-21: Modell zur Ableitung der Anfangssteifigkeit [39]

Das betrachtete System ist im Gleichgewicht, wenn Formel (3-69) erfüllt ist [39].

$$\sigma = E\varepsilon = K\delta \quad (3-69)$$

In Formel (3-69) bezeichnet  $\sigma$  die Spannung der Grenzfläche,  $\varepsilon = \frac{\Delta l}{l}$  die Querdehnung des Laminats,  $K$  die interlaminare Steifigkeit,  $\delta$  die Relativverschiebung der Kontaktschicht und  $E$  den Elastizitätsmodul der als isotrop angenommenen Struktur. Die effektive Dehnung, die auf die Gesamtstruktur wirkt, kann durch Formel (3-70) berechnet werden [39].

$$\varepsilon_{eff} = \frac{\Delta l}{l} + \frac{\delta}{l} = \varepsilon + \frac{\delta}{l} \quad (3-70)$$

Durch Verwendung der Gleichungen (3-69) und (3-70) kann der effektive Elastizitätsmodul nach Formel (3-71) angeschrieben werden [39].

$$E_{eff} = E \left( \frac{1}{1 + \frac{E}{Kl}} \right) \quad (3-71)$$

Wie in Gleichung (3-71) ersichtlich ist, wird der effektive Elastizitätsmodul der Struktur nicht durch die Kontaktsschicht beeinflusst, wenn  $E \ll Kl$  ist. Aus dieser Bedingung ergibt sich Formel (3-72) [39].

$$K = \frac{\alpha E}{l} \quad (3-72)$$

Der Parameter  $\alpha$  in Gleichung (3-72) sollte um einiges größer als Eins sein. Für Werte von  $\alpha$  größer als 50 ist der Verlust der Steifigkeit der Gesamtstruktur durch Vorhandensein der *Kohäsivelemente* Schicht weniger als 2% [39]. Aus diesem Grund wird üblicherweise, wie auch in dieser Arbeit,  $\alpha$  auf einen Wert von 50 gesetzt.

### 3.3.9 Abschätzung der kritischen Grenzflächenspannung und Anfangssteifigkeit bei unbekanntem Materialparameter

Für viele Materialsysteme ist es schwierig, Haftfestigkeiten für die spezielle Materialkombination in der Literatur zu finden, beziehungsweise sind entsprechende Materialtests zu aufwendig. In solchen Situationen kann die kritische Grenzflächenspannung als Variable angesehen werden, wie von *Diehl* [89] vorgeschlagen wurde. Für ein bilineares Materialgesetz wird die Grenzspannung als Funktion der kritischen Energiefreisetzungsrates und der Relativverschiebung bei vollständigem Versagen des Elements  $\delta^f$  beschrieben (Formel (3-73)) [89].

$$t^0 = \frac{2G_c}{\delta^f} \quad (3-73)$$

*Diehl* schlägt basierend auf der klassischen Bruchmechanik einen sehr kleinen Wert für  $\delta^f$  vor. Allerdings sollte dieser noch groß genug sein, um keine numerischen Probleme zu verursachen. Für elastische Materialien hat *Diehl* einen Wert für  $\delta^f$  von 5% des *kohäsiv-Element*-Knotenabstandes vorgeschlagen. Diese Abschätzung kann als Basis für eine Parameteranalyse für das zu berechnende Bauteil verwendet werden [89].

Neben der kritischen Grenzflächenspannung muss ebenfalls die Anfangssteifigkeit abgeschätzt werden, da *Diehl* auch den Elastizitätsmodul als unbekannt ansieht. Hierfür wird ein Parameter  $\delta_{ratio}$  eingeführt, der durch Formel (3-74) definiert ist. Mit der Annahme, dass dieses Verhältnis bekannt ist, kann die Anfangssteifigkeit mit Formel (3-75) ermittelt werden [89].

$$\delta_{ratio} = \frac{\delta^0}{\delta^f} \quad (3-74)$$

$$K = \frac{2G_c}{\delta_{ratio}(\delta^f)^2} \quad (3-75)$$

Für das Verhältnis  $\delta_{ratio}$  hat *Diehl* in einer Parameteranalyse 0,5 als angemessenen Wert abgeleitet. Bei diesem Zahlenwert liegt die Relativverschiebung bei Rissinitiierung exakt bei der Hälfte der Verschiebung bei totalem Versagen des Elements [89].

Mit der Abschätzung nach *Diehl* ist somit die Bestimmung der Grenzflächenfestigkeit und der Anfangssteifigkeit bei ausschließlicher Kenntnis der kritischen Energiefreisetzungsrates möglich. Allerdings sind somit beide Parameter durch die Schätzung von  $\delta^f$  abhängig von der Netzdichte.

## 4 Erläuterung der verwendeten Bauteile

In diesem Kapitel werden die verwendete Geometrie und die jeweiligen Materialien für die Berechnungen des Temperatur- und Spannungsfelds, sowie der Delaminierung beschrieben und visualisiert. Neben der Geometrie wird ebenfalls das verwendete FEM Netz für die thermische und mechanische Rechnung abgebildet. Dafür werden sowohl der globale Stack, eine wiederholende Einheit und die Zelle betrachtet.

### 4.1 Globaler Brennstoffzellenstack

Als globaler Stack wird die komplette Brennstoffzelleneinheit verstanden, die im konkreten Fall aus 30 Einzelzellen besteht, die über Interkonnektoren elektrisch in Serie geschaltet sind. In Abbildung 4-1 ist der Stack sowie eine vernetzte Detailansicht visualisiert. In dieser isometrischen Ansicht sind nur die End- und Grundplatte, die Interkonnektoren und die Dichtungen ersichtlich, da die anderen Komponenten im Inneren verborgen sind.

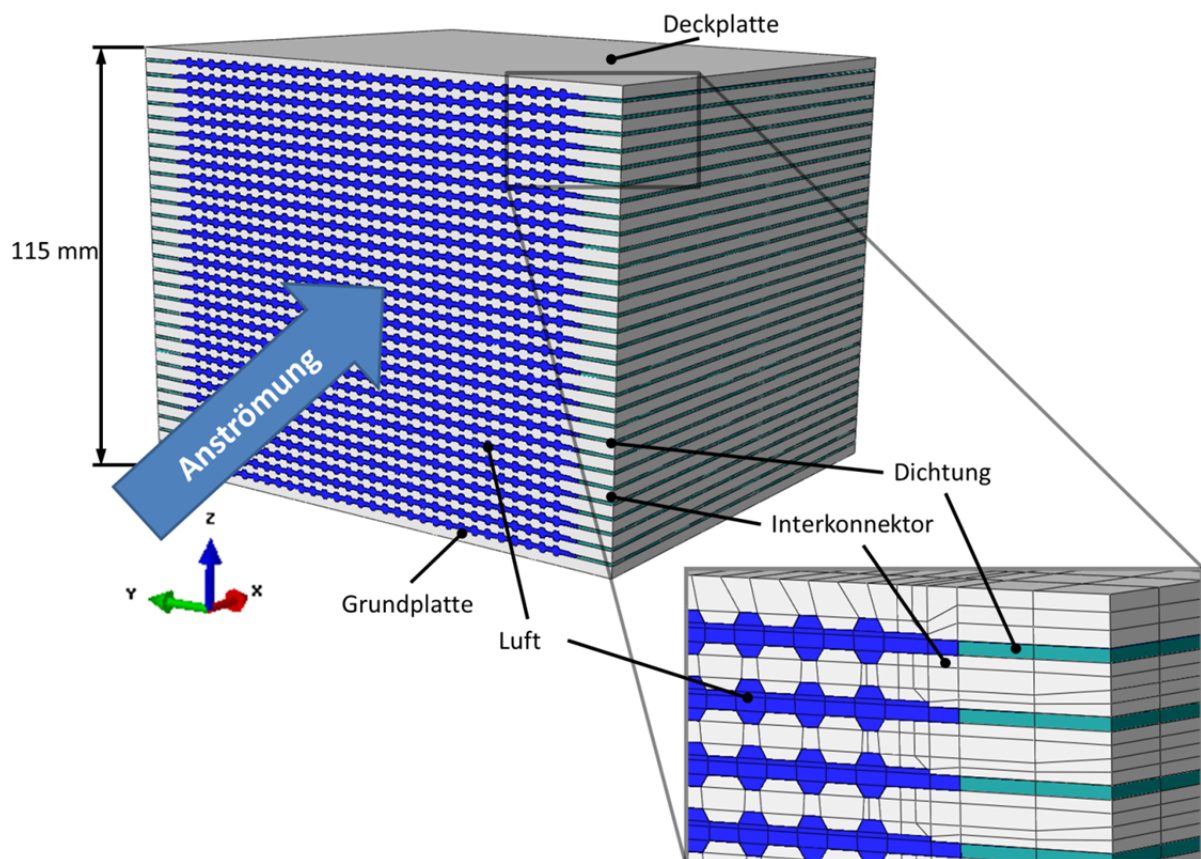


Abbildung 4-1: Brennstoffzellenstack mit vernetzter Detailansicht [1]

Der gesamte Stack wird mit Luft in positiver X-Richtung durchströmt, wobei die blauen Elemente in Abbildung 4-1 schematisch die Luft in den Kanälen visualisieren. Die Zufuhr der Luft erfolgt über einen Verteilungskanal im Gehäuse in Vertikalrichtungen. Untersuchungen ergaben, dass die Anströmgeschwindigkeiten in horizontaler Richtung, ausgehend von einem Massenstrom in vertikaler Richtung, konstant über die Fläche anzunehmen sind [2].

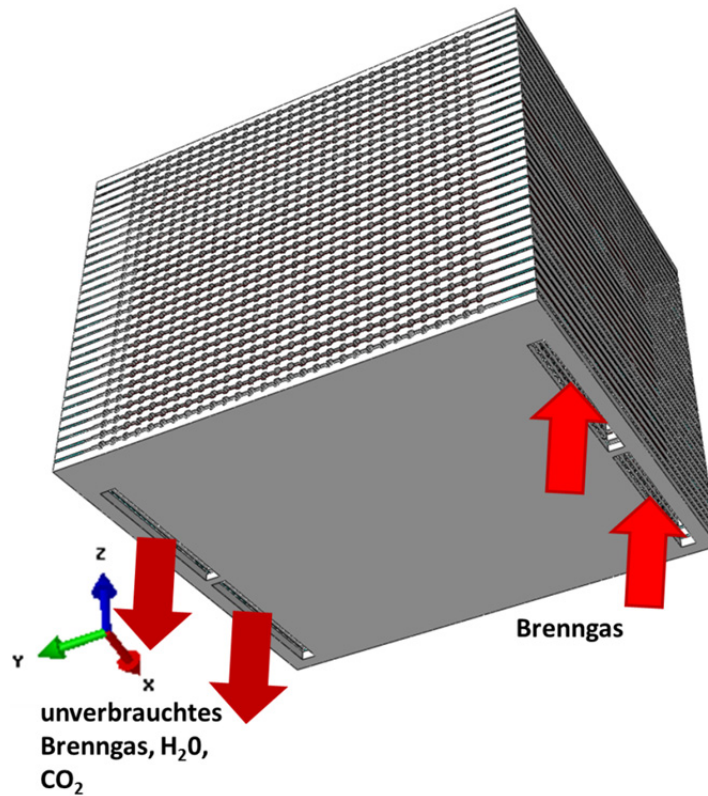


Abbildung 4-2: Brennstoffzellenstack mit Brenngaskanälen [1]

Die Brennstoffzufuhr zu den einzelnen Anoden erfolgt über Längsschlitze in den Interkonnektoren (Abbildung 4-2). Der überschüssige Brennstoff wird auf der gegenüberliegenden Seite aufgefangen und teilweise wieder in das System rückgeführt. Durch eine schematische Explosionsansicht der Bauteile eines Stacks mit zwei Zellen kann die Erläuterung der Verteilung des Brenngases auf die Zelle und der weiteren Einzelteile erfolgen (Abbildung 4-3).

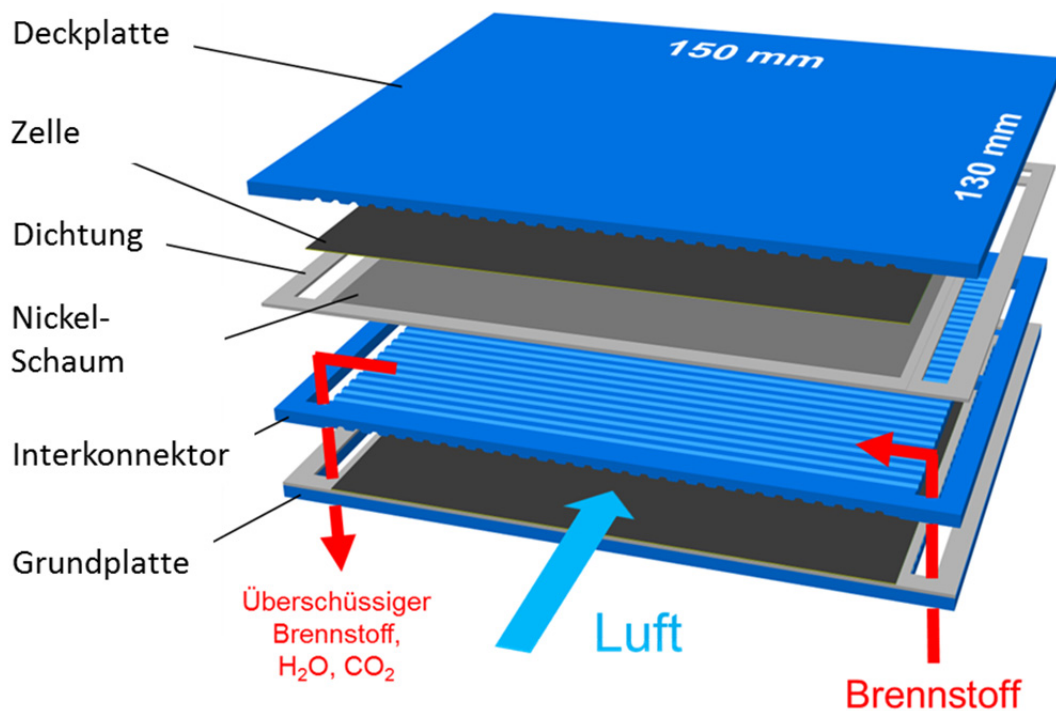


Abbildung 4-3: Explosionsansicht des Brennstoffzellenstacks [2]

In Abbildung 4-3 ist ersichtlich, dass der Brennstoff über die horizontalen Nuten zu den einzelnen Zellen strömt. Ein Nickel- Schaum sorgt für die gleichmäßige Verteilung des Brenngases an der Anodenoberfläche. Da die Zuführung von Brennstoff und Luft in unterschiedlichen Achsen, die in der gleichen Ebene liegen, erfolgt, kann das Interkonnektordesign als kreuzstromgeführt identifiziert werden. Um jeglichen Austritt des Brenngases zu vermeiden, werden zwischen den einzelnen Interkonnektoren Dichtungen aufgeschmolzen.

Die **Dichtungen** bestehen aus einem teilkristallinen Glas, welches besonders beständig gegen aggressive Medien ist. Da das Glas aufgeschmolzen wird, werden die Interkonnektoren stoffschlüssig miteinander verbunden, und somit kann eine erhöhte thermische Stabilität erreicht werden.

Die **Interkonnektoren**, wie auch die Grund- und Deckplatte, werden aus dem ferritischen Edelstahl Crofer<sup>®</sup> 22APU hergestellt. Diese Hochtemperaturlegierung wurde speziell für Brennstoffzellen entwickelt und weist einen geringen linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten (vergleichbar mit dem keramischer Bauteile), eine gute Hochtemperaturbeständigkeit und eine gute elektrische Leitfähigkeit auf [90].

## 4.2 Wiederholende Einheit

Im Wesentlichen ist die komplette Brennstoffzelle aus 30 wiederholenden Einheiten aufgebaut. Eine Einheit besteht aus Interkonnektor, Nickel- Schaum, Dichtung und Zelle (und für die thermische Rechnung: Luft). In Abbildung 4-4 ist eine wiederholende Einheit mit der in den Kanälen vorhandenen Luft visualisiert.

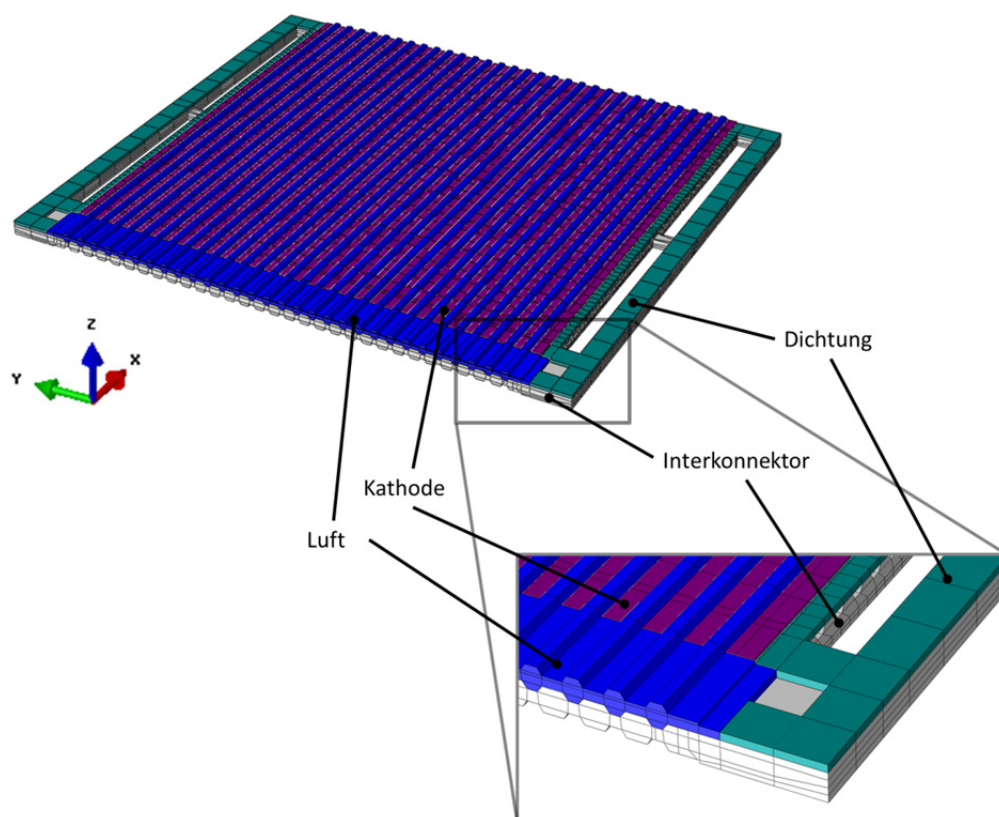


Abbildung 4-4: Wiederholende Einheit mit Luft [1]

Beim Zusammenbau einer wiederholenden Einheit wird auf den Interkonnektor der Nickel- Schaum und die Dichtung aufgebracht (Abbildung 4-4). Die Zelle wird mit der Anodenseite nach unten auf den Nickel- Schaum eingelegt. Die in Abbildung 4-4 visualisierte Luft, welche durch den nächsten Interkonnektor (Bauteil in Abbildung 4-4 nicht vorhanden) an die Kathode gefördert wird, wird für die transiente Temperaturrechnung benötigt.

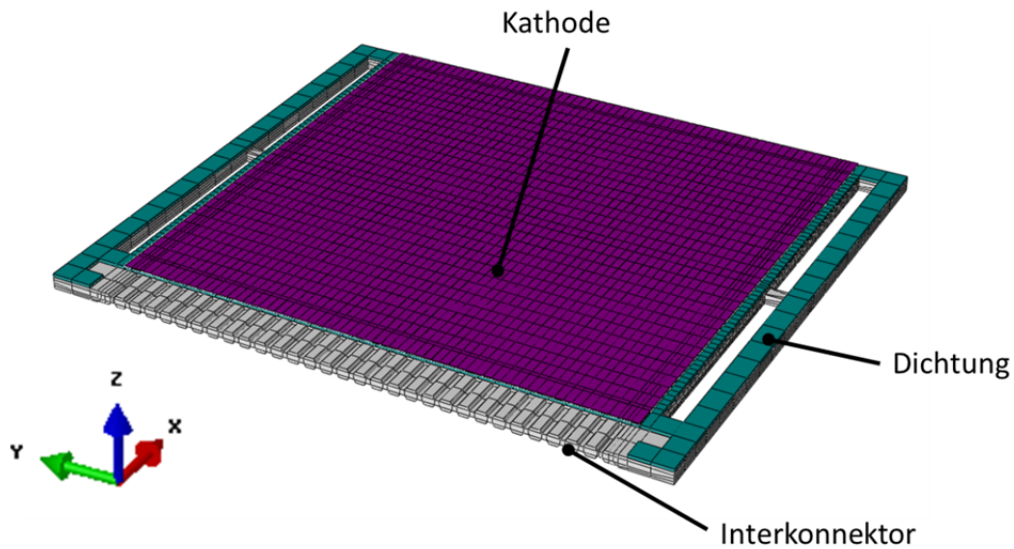


Abbildung 4-5: Wiederholende Einheit ohne Luft [1]

Bei Betrachtung der wiederholenden Einheit ohne Luft (Abbildung 4-5) ist ersichtlich, dass die Zelle in die Dichtung eingelegt wird, um die Luft (Kathodenseite) von dem Brenngas (Anodenseite) zu trennen. Aufgrund der anfänglichen Luftführung durch beide Interkonnektoren ist die gesamte Zelle in positive X- Richtung versetzt montiert.

### 4.3 Zelle

Die Zelle besteht aus einem gasdichten, Sauerstoff- Ionenleitenden und elektrisch nicht leitfähigen Elektrolyten und einer porösen, elektrisch- sowie Ionenleitenden Kathode und Anode. Die drei Zellenbestandteile werden bei der Herstellung stoffschlüssig miteinander verbunden. In Abbildung 4-6 ist ersichtlich, dass die Anode etwas kleiner ist, da der freie Bereich des Elektrolyten als Anschlagfläche für die Dichtung dient.

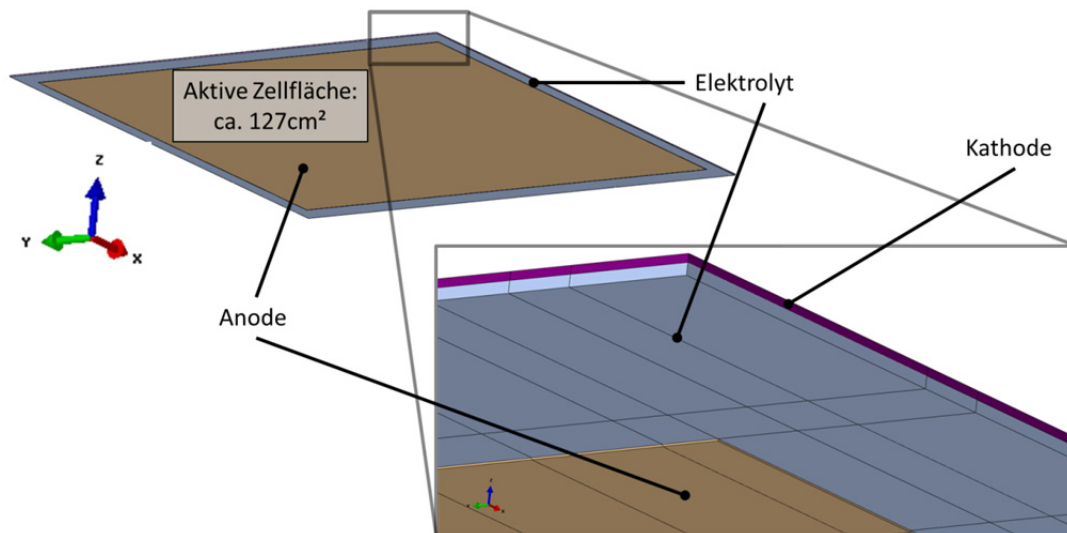


Abbildung 4-6: Brennstoffzellenaufbau [1]

Die Vernetzung der Zelle für die thermische und mechanische Simulation wurde so gewählt, dass an den Kontaktflächen vom Interkonnektor zur Dichtung ein koinzidentes Netz vorliegt. Die ganze Zelle wurde in Abaqus als ein Bauteil definiert und mit drei unterschiedlichen Materialesektionen versehen.

Durch Betrachtung der Proportionen der Zelle im Vergleich zum Interkonnektor (Abbildung 4-7) wird deutlich, dass die Zelle signifikant dünner als die übrigen Bauteile ist. Des Weiteren sind in Abbildung 4-7 die einzelnen Zellenbauteile schematisch in Relation zu ihren Dicken gestellt. Dabei kann aufgrund der überproportionalen Dicke des Elektrolyten abgeleitet werden, dass ein elektrolytgestütztes Zellendesign vorliegt.

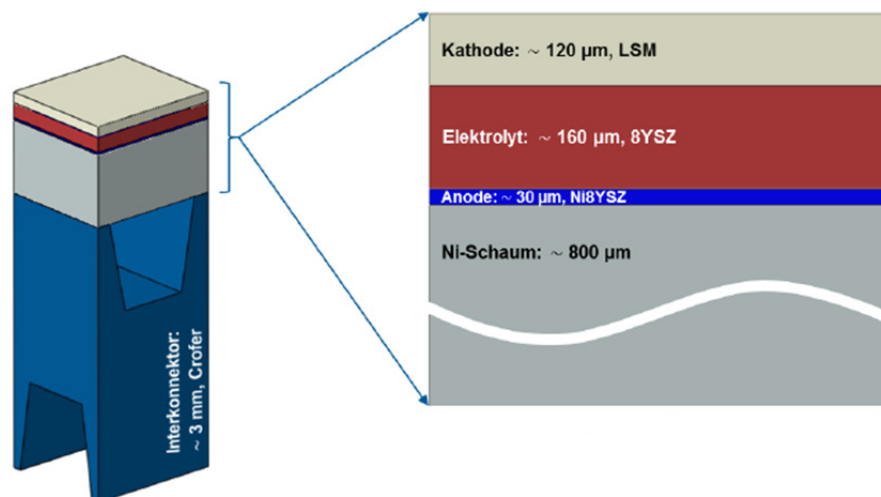


Abbildung 4-7: Zellenproportionen [1]

In Abbildung 4-7 sind ebenfalls die in dieser Arbeit verwendeten Materialien der Zelle spezifiziert. Als **Elektrolyt**material wird ein Yttrium ( $Y_2O_3$ ) stabilisiertes Zirkoniumdioxid ( $ZrO_2$ ) verwendet (8YSZ). Dieses Material zeichnet sich besonders durch die hohe Leerstellenkonzentration im Kristallgitter und dadurch vorherrschender hoher Ionenleitfähigkeit aus [3]. Außerdem ist die elektrische Leitfähigkeit von YSZ sehr gering, da die Elektronen fix im Gitter lokalisiert sind [91]. Aufgrund der 8 Molprozent Yttrium ist das YSZ voll stabilisiert und liegt auch bei Raumtemperatur im kubischen Zustand vor. In der unstabilierten Konfiguration würde eine martensitische Phasenumwandlung bei  $1170^\circ C$  von der kubischen in die tetragonale Phase mit gleichzeitiger Volumenzunahme von 4% stattfinden. Damit



würde die Keramik schon bei der Fertigung hohe Spannungen erfahren, die auch zum Bruch führen können [92]. Aufgrund der ausgezeichneten mechanischen Eigenschaften des voll stabilisierten YSZ eignet sich dieses Elektrolytmaterial bestens für ein elektrolytgestütztes Zellendesign [3].

Die **Kathode** wird aus Lanthan- Strontium- Manganoxid ( $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_{3+\delta}$ ) hergestellt (kurz LSM). Dieses Material weist eine Perowskit-Kristallstruktur ( $\text{ABO}_3$ ) auf, welche eine hohe Ionenmobilität im Kristall erlaubt und ein sehr guter Katalysator für die Sauerstoffreduktion ist [7]. Der thermische Ausdehnungskoeffizient von LSM verhält sich größenordnungsmäßig ähnlich zu YSZ. LSM besitzt darüber hinaus noch ein gutes elektrochemisches Verhalten bei Temperaturen über 800°C [93].

Als **Anodenmaterial** wird in dieser Arbeit Ni8YSZ verwendet, welches aus einem Cermet von Nickel (Ni) und Yttrium stabilisiertes Zirkoniumdioxid (8YSZ) besteht. Der Verbundwerkstoff wird aus Partikeln von 8YSZ und NiO hergestellt. Vor dem Betrieb der SOFC müssen die gesinterten Nickel Oxid- Partikel zu Nickel reduziert werden, wobei aufgrund des geringeren Volumens von Nickelpartikel die Porosität ansteigt. Die Volumens- Differenz zwischen NiO und Ni beträgt ungefähr 42% von NiO. Aus diesem Grund ist eine Oxidation des Nickels während des Betriebes unerwünscht, da nicht genug Poren vorhanden sind um die Volumensvergrößerung ausgleichen zu können. Eine solche unerwünschte Oxidation von Nickel im Betrieb kann zum Beispiel bei einer plötzlichen Unterbrechung der Brennstoffzufuhr bei hohen Temperaturen erfolgen [94].

## 5 Vorarbeiten für diese Arbeit

Dieser Abschnitt dient zur kurzen Vorstellung der Vorarbeiten zu dieser Diplomarbeit von *Kiesling* [2] und *Hassler* [1], um ein Verständnis für die abgeleiteten Schädigungen bekommen zu können. Hierfür ist es notwendig, die Temperaturfeldrechnung und die Spannungsrechnung vorzustellen.

### 5.1 Temperaturfeld

In diesem Kapitel wird die Berechnung des Temperaturfelds erläutert, da dieses den Haupteinfluss auf die lokale Schädigung der Einzelzelle darstellt. Wie bereits einführend erwähnt wurde, erfolgte die Ableitung der nötigen Simulationssystematik von *Kiesling* [2] und die Temperaturfeldrechnung für das konkrete Design wurde von *Hassler* [1] durchgeführt.

Für die transiente Temperaturfeldrechnung wird der Stack mittels heißer Luft, die über einen Brenner mit einem bestimmten Temperaturverlauf erzeugt wird, beheizt und nach Erreichen der Betriebstemperatur über das Ausschalten des Brenners auf Umgebungstemperatur abgekühlt. Die Eingabedaten (Temperaturverlauf, Massenstromverlauf) wurden am Prüfstand bestimmt und anschließend die thermischen Simulationsergebnisse verifiziert [1].

#### 5.1.1 Modellierung

Für die thermische Modellierung muss auch die Luft in den Kanälen vernetzt werden um einen Massenstrom in Abaqus definieren zu können. Des Weiteren erfolgt über diese Elemente die Konvektion und der Wärmeübergang zu den angrenzenden Bauteilen (thermische Randbedingungen sind rot in Abbildung 5-1 markiert) [1].

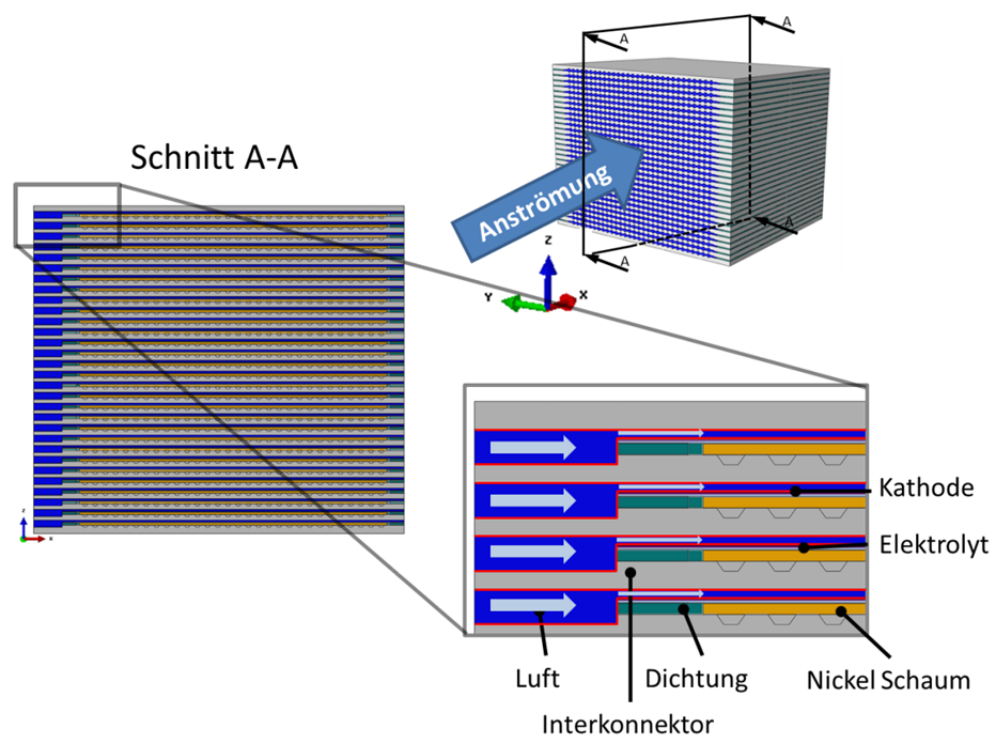


Abbildung 5-1: Randbedingungen thermische Rechnung [1]

Die heiße Luft wird an der Stirnfläche in positive X- Richtung angeblasen (Abbildung 5-1) und der Temperaturverlauf (Abbildung 5-2) und Massenstromverlauf (Abbildung 5-3) laut Prüfstandmessungen vorgegeben. Für die Definition der einzelnen Verläufe im Modell werden die

markierten Punkte als Stützpunkte definiert und dazwischen wird linear interpoliert (Abbildung 5-2, Abbildung 5-3) [1].

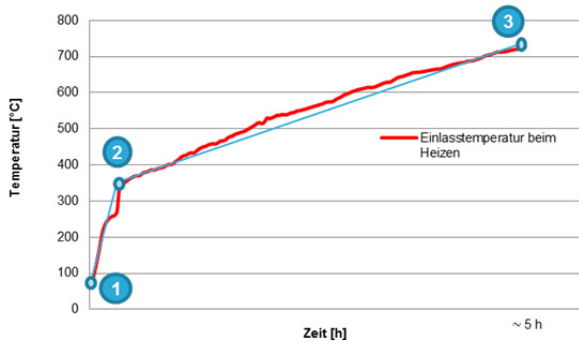


Abbildung 5-2: Einlasstemperaturverlauf der Luft beim Heizen [1]

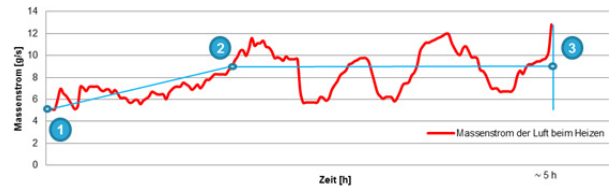


Abbildung 5-3: Massenstromverlauf der Luft beim Heizen [1]

Das gleiche Vorgehen wird für die Definition der Einlasstemperatur und des Massenstroms beim Abkühlen des Stacks gewählt. Hierfür wurden ebenfalls Messungen durchgeführt und die Ergebnisse über Stützpunkte in der Simulation definiert. Da die Verläufe eine geringere Linearität als in der Aufheizphase aufweisen, werden mehrere Stützpunkte gewählt (Abbildung 5-4 und Abbildung 5-5) [1].

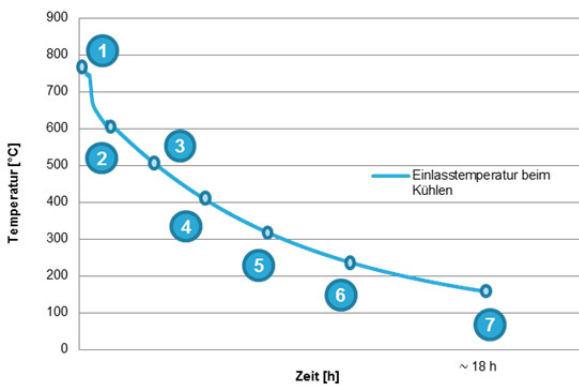


Abbildung 5-4: Einlasstemperaturverlauf der Luft beim Kühlen [1]

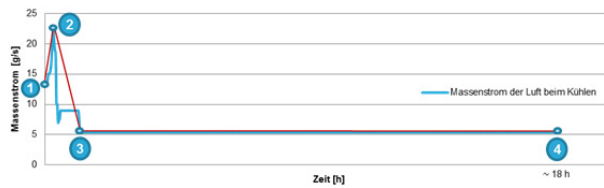


Abbildung 5-5: Massenstromverlauf der Luft beim Kühlen [1]

Folgende **Randbedingungen** werden bei der thermischen Simulation verwendet:

- An den Übergängen zwischen der Luft in den Kanälen und den verschiedenen Bauteilen (rote Linien in Abbildung 5-1, rotes Trapez in Abbildung 5-6) wird ein räumlich und zeitlich gemittelter Wärmeübergangskoeffizient ( $\alpha = 200 \text{ W/m}^2\text{K}$ ) definiert [1].

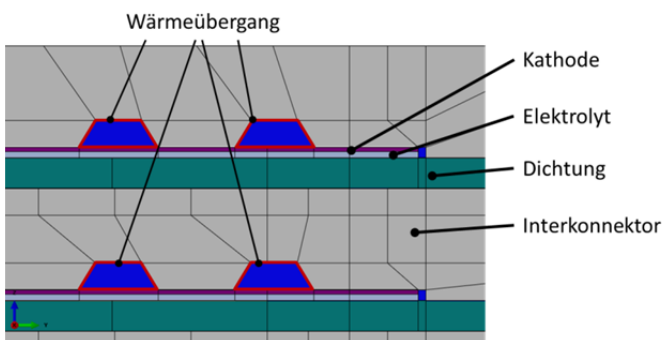


Abbildung 5-6: Wärmeübergangsdefinition [1]

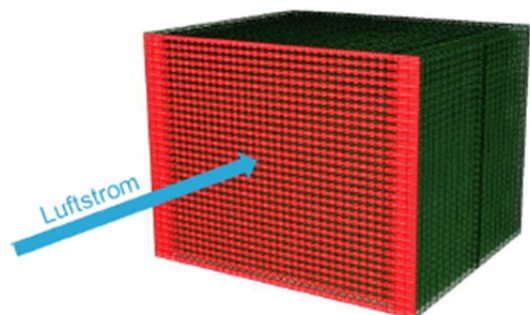


Abbildung 5-7: Wärmeübergang Stirnfläche [1]

- Kontaktbedingungen für dünne Oberflächenschichten werden für die Stirnwand in Anströmrichtung (rote Fläche in Abbildung 5-7) vergeben ( $\alpha = 15 \text{ W/m}^2\text{K}$ ) [1].
- Alle sonstigen Außenflächen des Stacks werden adiabatisch angenommen, da in der Realität der Stack mit einer 6 cm dicken Wärmedämmschicht isoliert ist [1].
- Es wird kein Wärmeübergang zwischen Brennstoff und Bauteilen während des Aufheizens und Kühlens angenommen, da die Brennstoffkanäle nicht durchströmt werden [1].
- Die Materialien werden als Festkörper ohne Porosität modelliert [1].
- Die Luft wird mit DCC3D8D Elemente vernetzt wodurch die Definition eines Massenstroms auf dem Netz möglich wird [1].

### 5.1.2 Ergebnisse

Durch Verwendung des zuvor beschriebenen Modells mit den thermischen Randbedingungen wird das transiente Temperaturfeld über den vollständigen thermischen Zyklus berechnet. Zunächst wird für drei verschiedene Zeitpunkte das Temperaturfeld am gesamten Stack visualisiert (Abbildung 5-8, Abbildung 5-9, Abbildung 5-10). Für die bessere Orientierung ist jeweils rechts des Contourplots des Temperaturfeldes der Temperaturverlauf eines charakteristischen Punktes an der Anströmseite des mittleren Interkonnektors abgebildet. Die Zeit wird für alle Darstellungen auf den Zeitpunkt maximaler Temperatur (Ende Aufheizvorgang) normiert [1].

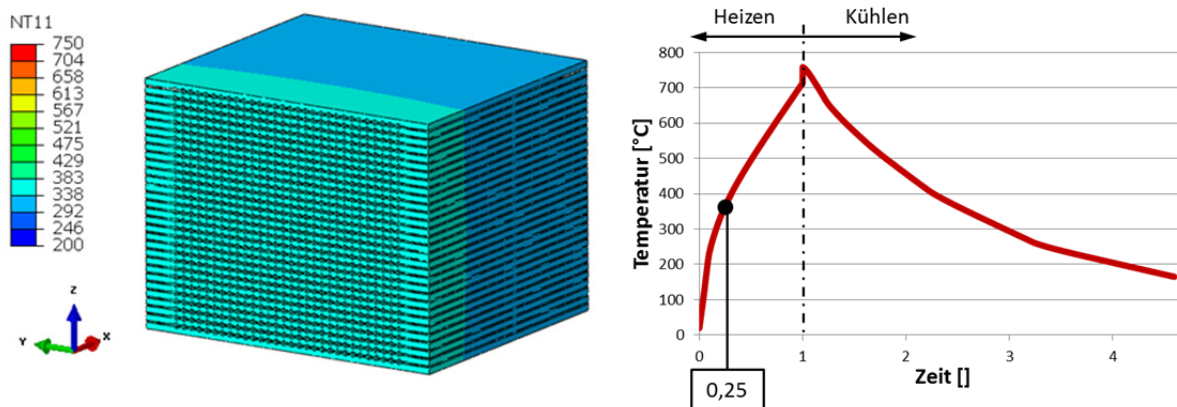


Abbildung 5-8: Temperaturfeld des Stacks bei 25% der Aufheizzeit [1]

Bei Betrachtung von Abbildung 5-8 kann ein signifikanter Temperaturgradient zwischen Lufteinlassseite (ungefähr  $380^\circ\text{C}$ ) und Auslassseite (ungefähr  $300^\circ\text{C}$ ) bei 25% der Aufheizzeit konstatiert werden. Die Verteilung der Temperatur in den Vertikalebene ist sehr homogen. Anhand des Temperaturverlaufs eines Punktes an der Lufteinlassseite (rechte Seite in Abbildung 5-8) kann ein sehr großer zeitlicher Temperaturgradient am Anfang der Aufheizphase erkannt werden. Zwischen Heizen und Kühlen kann ein Temperatursprung auf  $750^\circ\text{C}$  festgestellt werden. Dies beruht auf dem Umstand, dass es in der Realität ausreicht wenn die Stirnwand die notwendige Temperatur für die chemische Reaktion erreicht. Dadurch wird anschließend der gesamte Stack auf eine homogene Temperatur von ungefähr  $750^\circ\text{C}$  gebracht. Um dies in der Simulation für die Berechnung der Abkühlphase berücksichtigen zu können, wird in einem Zwischenschritt die Temperatur auf  $750^\circ\text{C}$  homogenisiert [1].

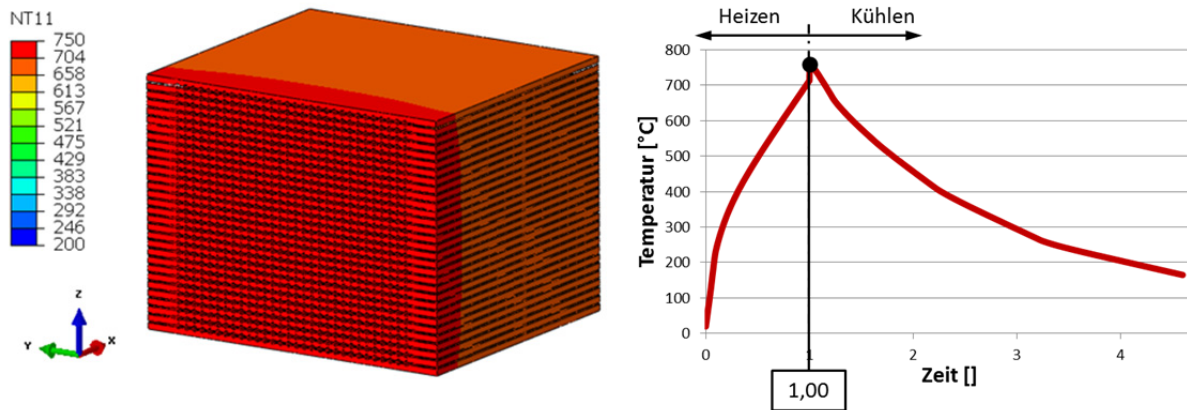


Abbildung 5-9: Temperaturfeld des Stacks am Ende des Aufheizzyklus [1]

Am Ende des Aufheizvorganges (Abbildung 5-9) hat die Lufteinlassseite die Betriebstemperatur von 750°C erreicht, wobei an der Rückseite noch deutlich geringere Temperaturen (ungefähr 700°C) vorherrschen. In der Realität wird an diesem Punkt die Heizung gestoppt, da durch Erreichen der Betriebstemperatur in einem Bereich des Stacks die chemische Reaktion starten kann und durch die resultierende Wärmeentwicklung die Temperatur im gesamten Stack homogenisiert wird. Da in diesem Modell keine chemischen Reaktionen simuliert werden, muss der gesamte Stack in einem Zwischenschritt auf 750°C homogenisiert werden, bevor der Abkühlvorgang beginnen kann [1].

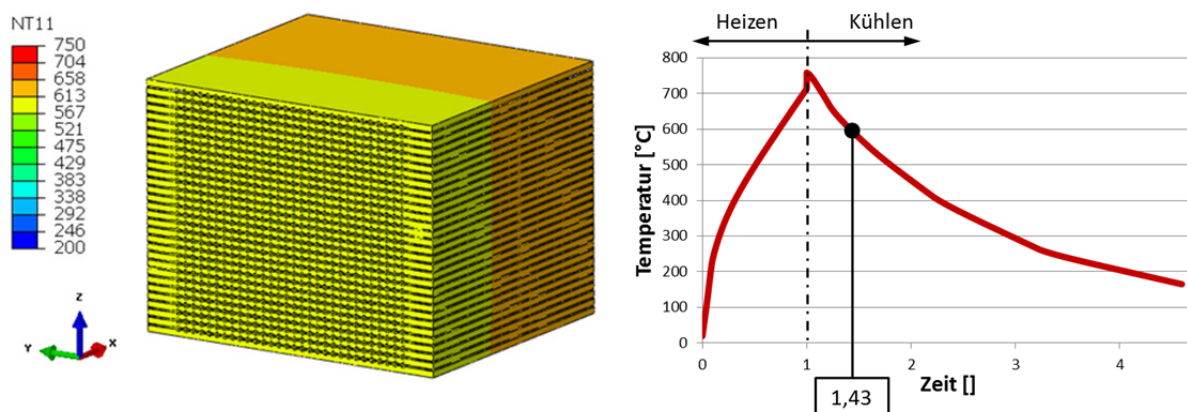


Abbildung 5-10: Temperaturfeld des Stacks bei 143% der Aufheizzeit [1]

Auch in der Abkühlphase (Abbildung 5-10) werden besonders am Beginn signifikante Temperaturgradienten festgestellt. Um den Einfluss der Temperatur auf die Schädigung der Einzelzellen ableiten zu können, werden diese für zwei verschiedenen Zeitpunkte (Abbildung 5-11, Abbildung 5-12) abgebildet.

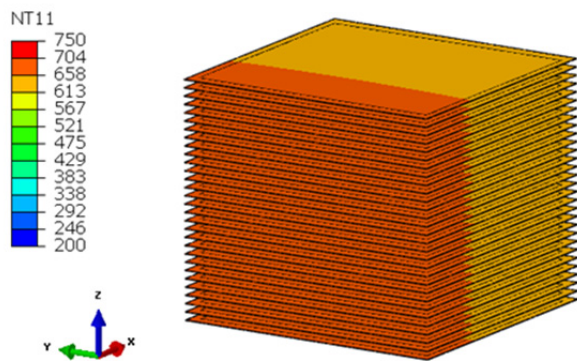


Abbildung 5-11: Temperaturfeld der Zellen bei 92% der Aufheizzeit [1]

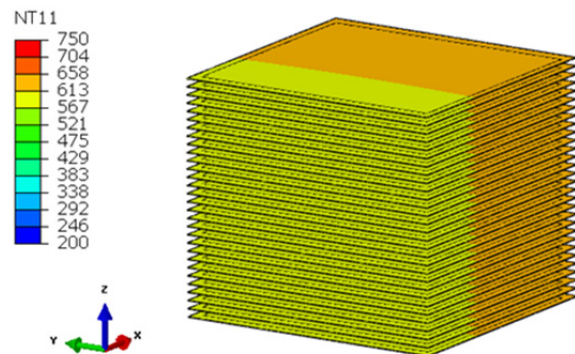


Abbildung 5-12: Temperaturfeld der Zellen bei 159% der Aufheizzeit [1]

Die Temperaturfelder der Zellen bei 92% und 159% der Aufheizzeit sind in Abbildung 5-11 und Abbildung 5-12 visualisiert. In der Darstellung der Temperaturfelder in der Aufheiz- und Abkühlphase können beträchtliche Temperaturgradienten festgestellt werden, welche erheblichen Einfluss auf die Schädigung haben [1].

## 5.2 Spannungsfeld

Nachdem das Temperaturfeld über einen thermischen Zyklus bestimmt wurde, kann auf Basis dessen die Berechnung der Spannungen erfolgen. Für die Spannungsermittlung wurde die Simulationssystematik sowie die Berechnung des konkreten Designs in der Diplomarbeit von Herrn Hassler Paul [1] abgeleitet.

### 5.2.1 Modellierung

Für die Spannungsberechnung wird dasselbe Netz wie für die Temperaturfeldberechnung verwendet, mit Ausnahme der Luft, welche aufgrund verschwindender Steifigkeit nicht mitmodelliert wird. Lediglich der Elementtyp der Zellen wird auf SC8R geändert. Dabei handelt es sich um *Kontinuum-Schalen-Elemente*, welche aufgrund der sehr dünnen und flächigen Zellen verwendet werden. Der Vorteil dieser Elemente ist, dass trotz der einzelnen zweidimensionalen Schalen ein Ergebnisbeitrag der Schubkomponenten in Richtung der Zellendicke vorhanden ist [1].

Folgende **Randbedingungen** werden bei der mechanischen Analyse verwendet:

- Der gesamte Stack wird zwischen zwei starren Platten fix eingespannt (Abbildung 5-13). Die untere Platte wird in allen Freiheitsgraden fixiert, und die obere Platte ist in vertikaler Richtung beweglich (Z- Richtung). Eine Einspannkraft  $F$  zwischen 450N – 600N wird an der oberen starren Platte aufgebracht (Abbildung 5-13) [1].

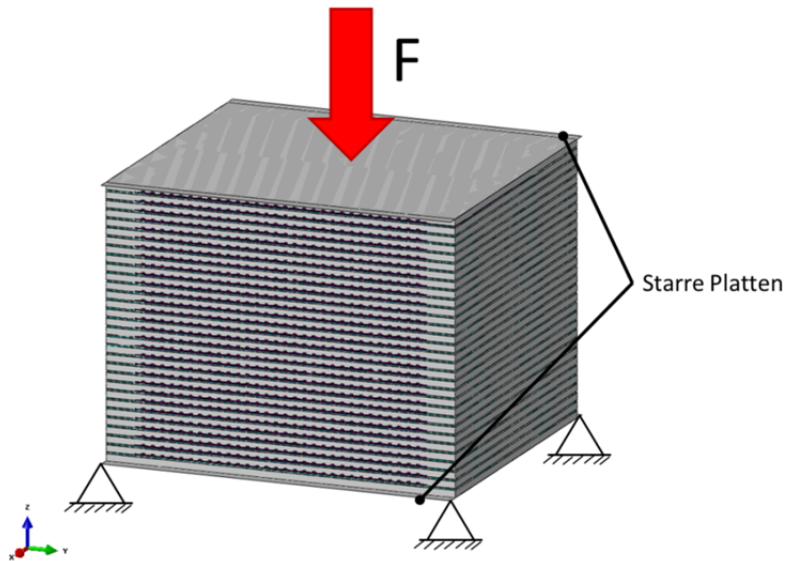


Abbildung 5-13: Fixierung des Stacks [1]

- Zwischen den beiden starren Platten und dem Stack wird Reibung mit einem Koeffizienten von  $\mu = 0,5$  angenommen [1].
- Als Belastung wird das in 5.1 berechnete dreidimensionale Temperaturfeld aufgebracht [1].
- Für die Simulation wird keine Bauteilporosität berücksichtigt [1].

### 5.2.2 Ergebnisse

Für die Darstellung des globalen Spannungsfeldes wird zunächst ein charakteristischer Knoten an der Lufteinströmseite des Interkonnektors gewählt (roter Punkt in Abbildung 5-14) und dort der Verlauf der Mises-, größten Hauptnormal- und kleinsten Hauptnormalspannung über die auf den Zeitpunkt größter Temperatur bezogene Zeit dargestellt. Das in Abbildung 5-14 links befindliche Spannungsfeld, wurde für den Zeitpunkt maximaler Mises- Spannung im Knoten am Interkonnektor bei 9% der Aufheizzeit erstellt [1].

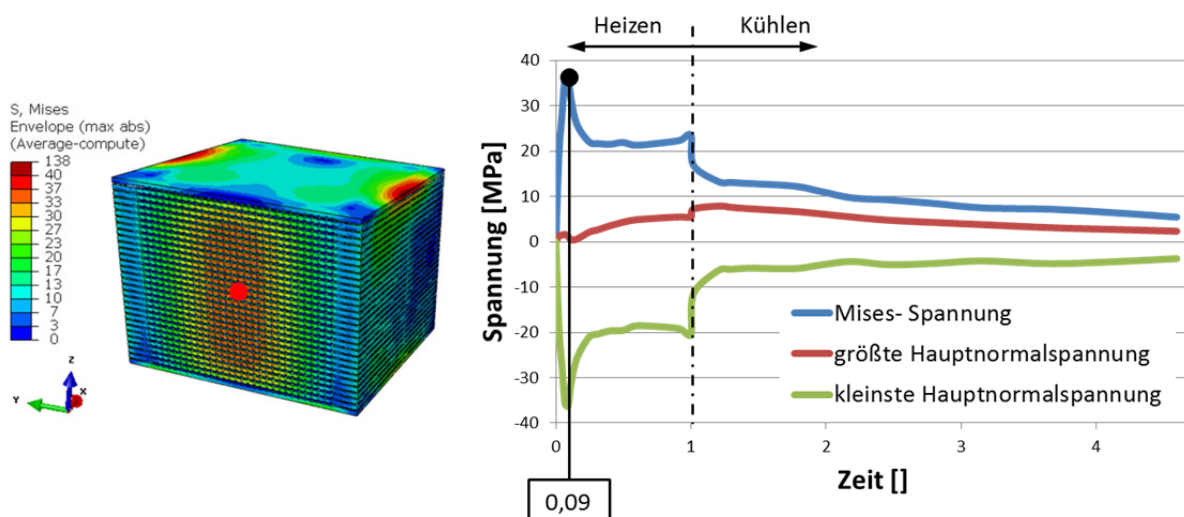


Abbildung 5-14: Spannungsfeld bei 9% der Aufheizzeit und Spannungsverlauf in einem ausgewählten Knoten [1]

Die Mises- Spannung in Abbildung 5-14 weist ein lokales Maximum am Anfang des Aufheizprozesses und im Bereich höchster Temperatur auf. Kurz nach dem Beginn der Abkühlphase wird die größte Hauptnormalspannung erreicht [1].

Für die lokale Delaminierungsschädigung der Einzelzellen ist die Schubspannung wesentlich entscheidend. Die Spannungen S13 und S23 sind bei Verwendung der *Kontinuum- Schalen- Elemente* durch CTSHR12 und CTSHR23 ersetzt, da diese durch Simpson- Integration der verschiedenen Schalen in Dickenrichtung gewonnen werden. Zunächst wird die Querschubspannung CTSHR12 über alle Zellen zum Zeitpunkt der maximal vorherrschenden Schubspannung visualisiert (Abbildung 5-15) [1].

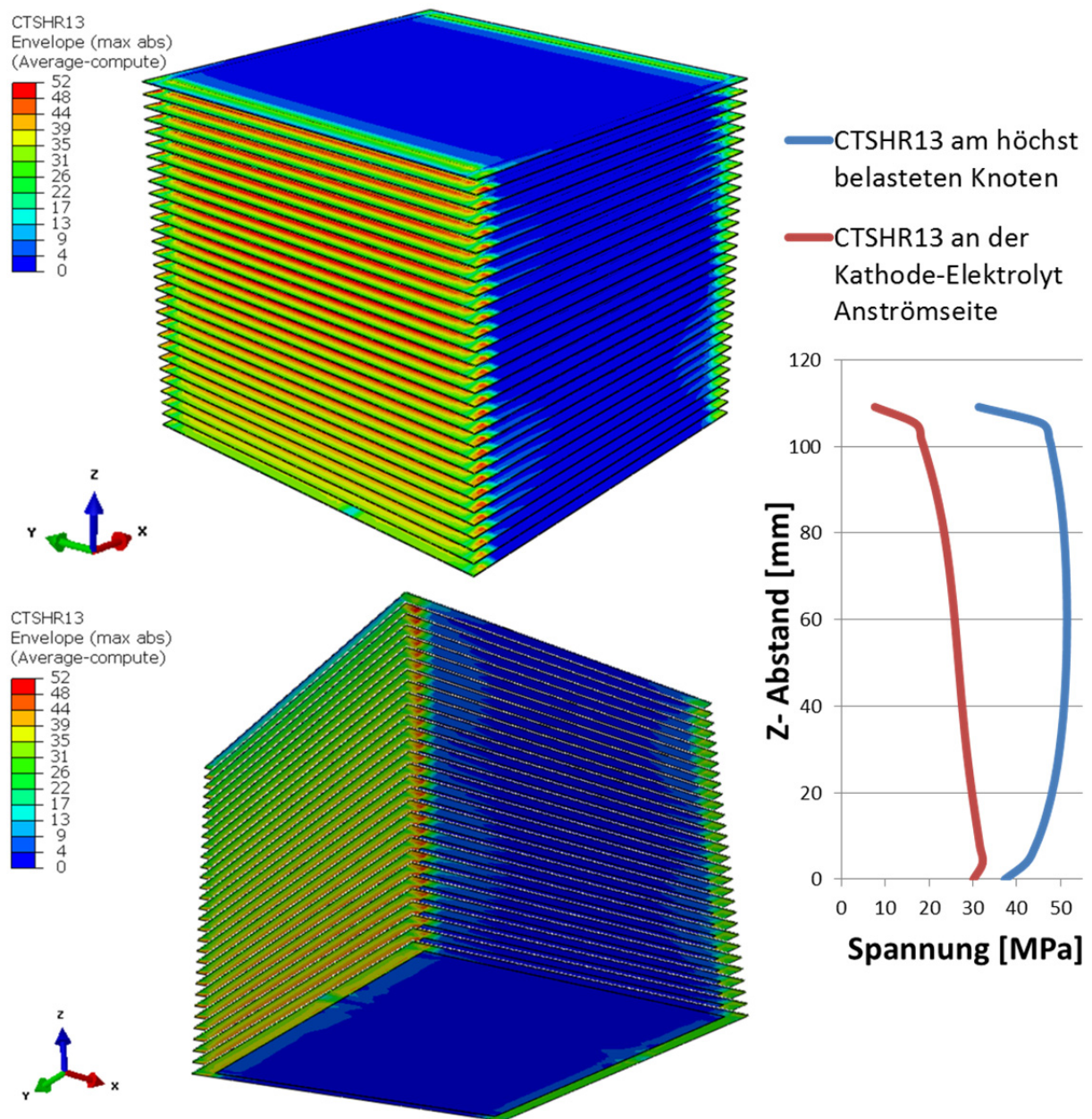


Abbildung 5-15: Querschubspannungen in XZ- Richtung über alle Zellen bei 102% der Aufheizzeit [1]

Die maximalen Querschubspannungen treten kurz nach Beginn der Abkühlphase (102% der Aufheizzeit) auf. An der Einlassseite der Luft können die größten Querschubspannungen in XZ-Richtung festgestellt werden (Abbildung 5-15). Auf der rechten Seite der Abbildung 5-15 sind die Schubspannungsverläufe zweier Knoten über die Höhe des Stacks abgebildet. Ein Punkt wurde an der Stelle maximaler Querschubspannung definiert und der andere Knoten ist am Rand der Kontaktfläche zwischen Kathode und Elektrolyt spezifiziert, da dieser wesentlichen Einfluss auf die lokale Delaminierung der Haftschrift hat [1].



Die größte maximale Querschubspannung in XZ- Richtung wird in der mittleren Zelle identifiziert, und die Spannungen nehmen bis zum Rand ab und erreichen an der letzten oberen und unteren Zelle des Stacks ein Minimum. Dieser Umstand kann durch das spezielle Design der Deck- und Bodenplatte begründet werden. Diese besitzen im Gegensatz zu den Interkonnektoren keine länglichen Nuten für die Brennstoffführung und weisen somit eine höhere Steifigkeit auf. Ein weiterer Grund für die geringeren Spannungen an der ersten und letzten Zelle ist der Umstand, dass die Deck- und Bodenplatte über eine Reibungskontaktbedingung mit der steifen Platte verbunden sind und sich diese, im Gegensatz zu der fix verschmolzenen Interkonnektorverbindung, gegeneinander bewegen können. Diese Bewegung bewirkt ebenfalls geringere Querschubspannungen [1].

Bei Betrachtung des Verlaufs der Kante der Grenzfläche zwischen Kathode und Elektrolyt wird ersichtlich, dass die größten Rand- Querschubspannungen in XZ- Richtung an der zweiten Zelle (auf positive Z- Richtung bezogen, Abbildung 5-15) auftritt. Die Querschubspannungen in YZ- Richtung sind in Abbildung 5-16 visualisiert [1].

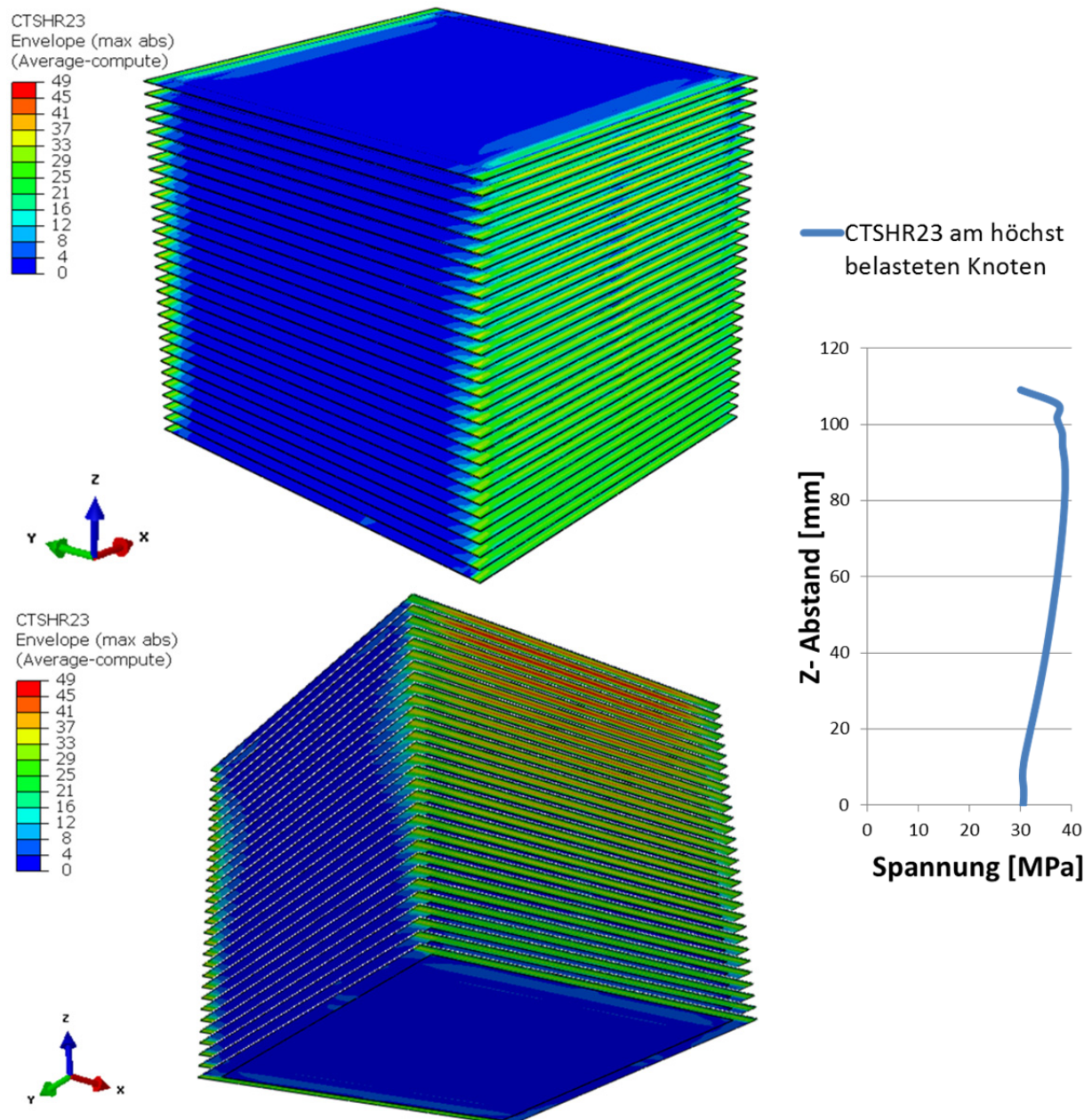


Abbildung 5-16: Querschubspannungen in YZ- Richtung über alle Zellen bei 102% der Aufheizzeit [1]

Im Gegensatz zur Querschubspannung in XZ- Richtung (Abbildung 5-15) werden die größten Schubspannungen in YZ- Richtung am Rand der zwei Kanten parallel zur X- Achse konstatiert (Abbildung 5-16). Bezogen auf die Stackhöhe (rechtes Diagramm in Abbildung 5-16) können die maximalen Querschubspannungen in YZ- Richtung im oberen Zellendrittel identifiziert werden. Aus selbigem Grund, wie in der Erläuterung der Schubspannungen in XZ, bilden die oberste und die unterste Zelle Minima der Querschubspannung in YZ- Richtung. Die asymmetrische Verteilung der Querschubspannungen über die Vertikalachse lässt sich mit der asymmetrischen Anordnung der Zellenkomponenten erklären, da immer an einer Zelle in positiver Z- Richtung das Schema Anode- Elektrolyt- Kathode vorherrscht und die nächste Zelle ebenfalls mit Anode- Elektrolyt- Kathode fortgesetzt wird. Somit wird der Stack an der obersten Zelle mit der Kathode und an der untersten Zelle mit einer Anode abgeschlossen.

## 6 Berechnungsmethodik

Ein wesentlicher Bestandteil dieser Diplomarbeit ist die Ableitung einer Berechnungsmethodik, mit deren Hilfe zukünftige Delaminierungssimulationen von verschiedenen Brennstoffzellen standardisiert durchgeführt werden können. In Abbildung 6-1 ist das Flussdiagramm für die Delaminierungsanalyse abgebildet. Neben der graphischen Prozessdarstellung wird zusätzlich auf die zugehörigen Kapitel in dieser Arbeit verwiesen (Abbildung 6-1).

In der Prozessablaufdarstellung (Abbildung 6-1) beschreiben die grün gefüllten Ovale den Start-, beziehungsweise Endpunkt des Prozesses. Grau hinterlegte Rechtecke bilden Tätigkeiten ab, blaue Parallelogramme Daten, die für die Durchführung von Tätigkeiten gebraucht werden, grüne Rechtecke mit vertikalen Doppellinien Teilprozesse, blaue abgeschnittene Rechtecke Dokumente und lachsfarbene Zylinder Programme. Die gelben Rauten beschreiben ein Entscheidungsfeld.

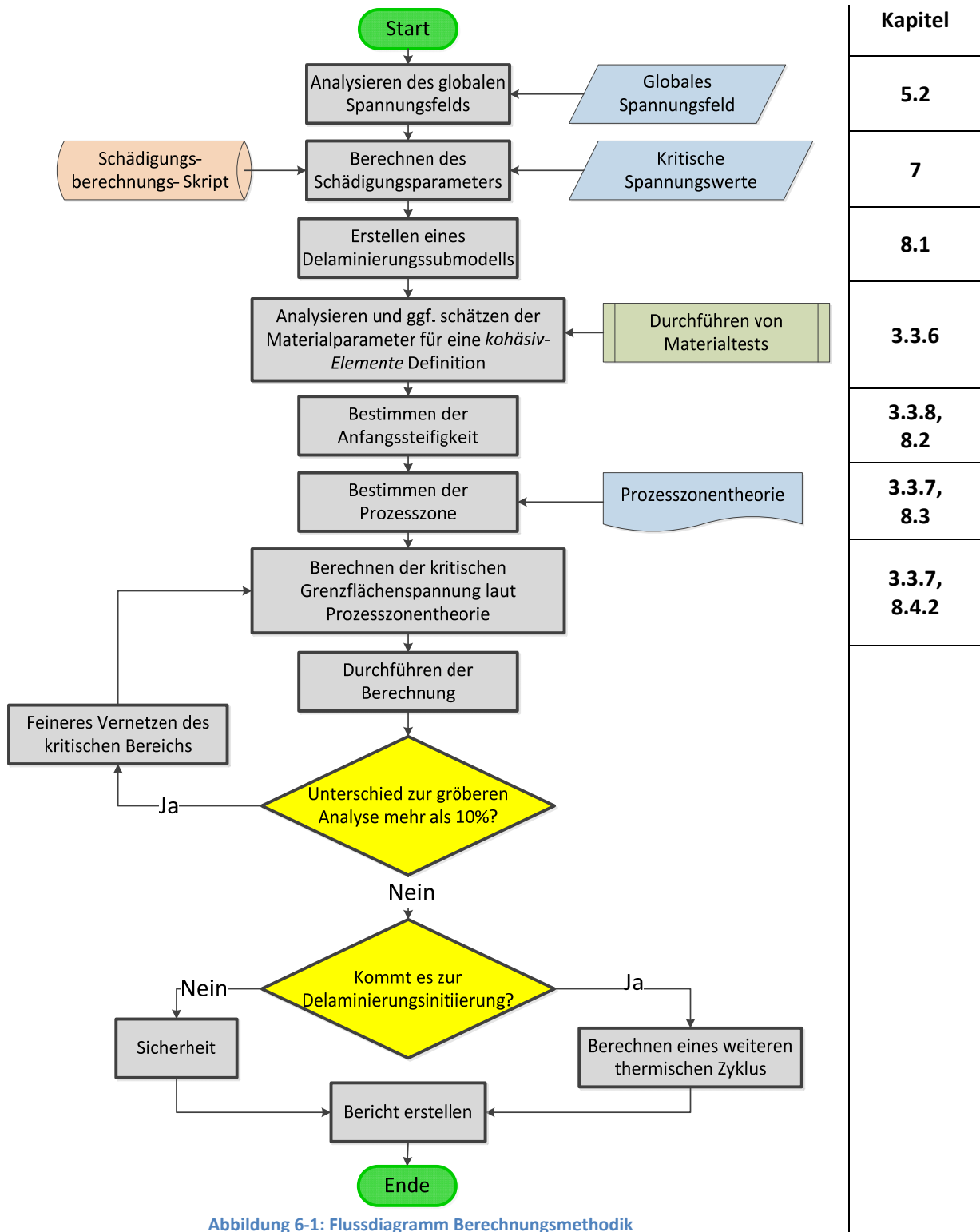


Abbildung 6-1: Flussdiagramm Berechnungsmethodik

Die Berechnungsmethodik (Abbildung 6-1) beginnt mit dem Startsymbol, bei dem als Input das globale Spannungsfeld inklusive Knotentemperaturen übergeben werden muss. Somit bedarf dieser abgeleitete Prozessablauf der Ankopplung mit dem Workflow zur Spannungsermittlung von Hassler [1].

Zu Beginn des Arbeitsprozesses muss das globale Spannungsfeld [1] analysiert und dessen Plausibilität geprüft werden. Anschließend wird ein Skript ausgeführt, welches auf jedem Elementknoten die maximale Vergleichsschädigung, basierend auf dem *quadratischen*

*Nennspannungskriterium*, berechnet. Hierfür ist die Eingabe der Grenzflächenfestigkeiten (kritischen Grenzflächenspannungen) erforderlich. Diese Werte können durchaus aus Erfahrung oder Schätzungen gewonnen werden, da bei der globalen Schädigungsbetrachtung nicht die absoluten Schädigungswerte ermittelt werden können, sondern als Ergebnis die Zellen mit der größten Wahrscheinlichkeit für Delaminierung identifiziert werden.

Ausgehend von der globalen Spannungsverteilung werden die Zellen mit der höchsten Vergleichsschädigung an der Kathode- Elektrolyt und Anode- Elektrolyt Grenzschicht als kritischste Zellen identifiziert und von diesen jeweils ein Submodell gebildet. Diese Detailmodelle enthalten *Kohäsivelemente* zwischen den zwei Kontaktschichten (Anode-Elektrolyte, Kathode-Elektrolyt) und werden durch die Submodellrandbedingungen von den Verschiebungen des globalen Modells belastet (Kapitel 8.1). Für die Definition der *Kohäsivelemente* werden Materialtests benötigt. Die verschiedenen Testmöglichkeiten für speziell sehr dünne Schichtverbundwerkstoffe werden in Kapitel 3.3.6 näher ausgeführt.

Neben der exakten Bestimmung der Materialparameter ist eine Schätzung der Anfangssteifigkeit der *Kohäsivelemente* notwendig. Die benötigten Annahmen und die entsprechende Formel werden in Kapitel 3.3.8 beschrieben.

Des Weiteren ist eine Abschätzung der Länge der Prozesszone vor dem Riss für die Genauigkeit der Berechnung von entscheidender Bedeutung. Hierfür muss zunächst eine Prozesszonentheorie gewählt werden, welche in einer Parameteranalyse (Kapitel 8.4) genauer beleuchtet wird. Aus dieser Berechnung resultiert als Ergebnis ein durchschnittlicher Knotenabstand, welcher für die adäquate Darstellung des bruchmechanischen Verhaltens des jeweiligen Werkstoffs notwendig ist. Da in einer SOFC hauptsächlich spröde Materialien verwendet werden, wird ein sehr geringer Netzabstand benötigt, welcher wiederum zu exzessiven Rechenzeiten führt. Somit wird zunächst das Submodell mit einem größeren Netz diskretisiert, wobei auf einen möglichst gleichmäßigen Netzabstand in jeder möglichen Rissausbreitungsrichtung zu achten ist.

Im nächsten Schritt wird die kritische Grenzflächenspannung auf die jeweilige Netzfeinheit über die entsprechende Prozesszonenzlänge angepasst (Kapitel 3.3.7 und 8.4.2). Anschließend wird das *Kohäsivelemente*- Modell in Abaqus definiert und die Berechnung durchgeführt. Nach Auswertung des *quadratischen Nennspannungskriteriums* (QUADSCRT (**q**uadratic **n**ominal **s**tress **c**riterion)) in Abaqus, siehe Kapitel 3.3.2.7.1) wird die höchstgeschädigte Region der Zelle bestimmt. Dieser Teil kann optional durch erneute Submodellbildung mit größerer Netzdichte genauer untersucht werden. Die kritische Grenzflächenspannung wird auf die neue Diskretisierungsdichte angepasst und die Berechnung durchgeführt.

Um eine quantitative Änderung des Delaminierungsverhaltens zwischen Zellenmodell und optionalem Zellendetailmodell feststellen zu können, werden die skalaren QUADSCRT- Werte von Knoten gleichen Ortes der beiden Simulationen verglichen. Beträgt der Unterschied weniger als 10%, kann die Berechnung als gültig angesehen werden. Ist dies nicht der Fall, muss das Detailmodell des Zellenausschnittes feiner vernetzt und die Methodik wiederholt werden.

Im folgenden Schritt wird das Berechnungsergebnis ausgewertet und durch Anwendung des *quadratischen Nennspannungskriteriums* bestimmt, ob es zu einer Delaminierungsiniiierung kommt. Erreicht der QUADSCRT- Parameter einen Wert von eins, kommt es zur Rissiniiierung und es kann durch Visualisierung des SDEG- Wertes (**S**teifigkeits**d**egradierungs- **P**arameter welcher äquivalent mit

der skalaren Schädigungsvariable  $d$  in Kapitel 3.3.2.3 ist) der Rissfortschritt betrachtet werden. Die kritische Risslänge, welche zu einem totalen Versagen der Struktur führt, kann durch Berechnung eines zusätzlichen thermischen Zyklus ermittelt werden.

Im Falle, dass keine Delaminierungsinitiierung stattfindet, kann durch Reziprokwertbildung des QUADSCRT- Parameters die Sicherheit der Grenzschicht gegen Rissinitiierung berechnet werden. Abschließend werden die Ergebnisse dokumentiert und ein Bericht erstellt.

## 7 Bildung der Vergleichsschädigung

Für die globale qualitative Bewertung der Möglichkeit einer Rissinitiierung während eines thermischen Zyklus muss eine Vergleichsschädigung aus dem Spannungstensor errechnet werden. Die globale Rissinitiierungsbetrachtung dient primär der Vergleichbarkeit der einzelnen Zellen zur Bestimmung der kritischsten Einzelzellen. Eine exakte Rissinitiierungsbestimmung kann aufgrund des unregelmäßigen globalen Netzes und der fehlenden Berücksichtigung der bruchmechanischen Materialparameter (kritische Energiefreisetzungsrate) nicht erfolgen.

### 7.1 Definition Vergleichsschädigung

Damit die Bestimmung der kritischsten Zellen möglich ist, muss basierend auf dem Spannungstensor für jeden Knoten eine Vergleichsschädigung errechnet werden. Mit dieser Schädigung wird ein Kriterium verstanden, welches die Möglichkeit der Rissinitiierung von verschiedenen Knoten gleicher Kontaktfläche in Relation setzt. Da dieser Parameter lediglich aus Spannungskomponenten gebildet wird und nicht die kritische Energiefreisetzungsrate berücksichtigt, ist ein Vergleich von Knoten unterschiedlicher Kontaktflächen nicht zulässig.

Die Berechnung der Vergleichsschädigung wird vom *quadratischen Nennspannungskriterium* (Formel (3-39)) für die Bewertung der Rissinitiierung bei multiaxialer Belastung des *kohäsiv-Element* Ansatzes, abgeleitet. Da die Zellen aus *Kontinuum- Schalen- Elementen* (SC8R) aufgebaut sind, sind keine Schubspannungskomponenten S13 und S12 im Spannungstensor vorhanden, und diese Werte müssen durch CTSHR13 und CTSHR23 ersetzt werden, welche unter Annahme einer quadratischen Änderung der Schubspannungen in Dickenrichtung vom Solver bestimmt werden [60]. Für jeden Knoten der einzelnen Zellen wird mit Formel (7-1) die Schädigung in einem Zeitinkrement berechnet, wobei immer nur die untere Schale (bezogen auf die positive Z- Richtung) jedes *Kontinuum- Schalen- Elementes* (SC8R, SNEG fraction -1 in Abaqus) betrachtet wird. Diese Vorgehensweise wurde gewählt, da die Spannungen in den ersten Schalen genau jene in der Grenzfläche repräsentieren. Die Berechnung erfolgt für das letzte Inkrement von jedem globalen Step, wobei für jeden Knoten immer nur der maximale Vergleichsschädigungswert gespeichert wird.

$$\text{Schädigung} = \max \left( \left( \frac{\langle S_{33,i} \rangle}{\tilde{t}_3^0} \right)^2 + \left( \frac{CTSHR_{13,i}}{\tilde{t}_2^0} \right)^2 + \left( \frac{CTSHR_{23,i}}{\tilde{t}_1^0} \right)^2 \right) \quad (7-1)$$

Bei  $\tilde{t}_3^0, \tilde{t}_2^0, \tilde{t}_1^0$  handelt es sich um Tilden um formal zu deklarieren, dass es sich bei diesen Werten um Schätzwerte aus der Erfahrung handelt. Eine direkte Verwendung und Anpassung der Haftfestigkeiten aus der *Kohäsivelemente* Theorie ist nicht sinnvoll, da das globale Netz nicht regelmäßig ist und das unterschiedliche bruchmechanische Verhalten der zwei Schichten nicht berücksichtigt werden kann. Vielmehr soll die Vergleichsschädigung einen Parameter zum Vergleich der Rissinitiierungswahrscheinlichkeit der Einzelzellen liefern. Aus diesem Grund ist eine Aussage, dass bei einem Schädigungswert von eins definitiv ein Riss initiiert wird, nicht zulässig.

Die drei kritischen Grenzflächenspannungen  $\tilde{t}_3^0, \tilde{t}_2^0, \tilde{t}_1^0$  (Formel (7-1)) können so gewählt werden, dass eine Gewichtung zwischen Zugspannungen und Schubspannungen möglich ist. Allerdings sollten  $\tilde{t}_1^0$  und  $\tilde{t}_2^0$  immer gleich sein, da sie gemeinsam die Scherspannung charakterisieren. Im konkreten Fall werden die Werte für  $\tilde{t}_3^0, \tilde{t}_2^0, \tilde{t}_1^0$  gleichgesetzt. Bei höherer oder geringerer Gewichtung der Zugfestigkeit in Z- Richtung  $\tilde{t}_3^0$  würde das Ergebnis des vorliegenden Modells beinahe gleich zu

jenem mit identischen Werten für  $\tilde{\epsilon}_3^0, \tilde{\epsilon}_2^0, \tilde{\epsilon}_1^0$  sein (Kapitel 7.2), da die Zugspannungen um einiges kleiner als die Querschubspannungen sind.

## 7.2 Ergebnis Vergleichsschädigung

Mit Hilfe eines Python- Skripts, welches direkt im Abaqus- Viewer bei geöffnetem globalem Spannungsfeld ausgeführt wird, können die Vergleichsschädigungen durch die beschriebene Methodik ermittelt werden. Dabei ist das Skript so konzipiert, dass die Vergleichsschädigungen berechnet und in eine neue Ausgabedatei geschrieben werden.

Für das globale Spannungsfeld, welches in Kapitel 5.2 analysiert wurde, wird die Vergleichsschädigung in Abbildung 7-1 und Abbildung 7-2 dargestellt. Dabei werden die drei kritischen Grenzflächenspannungen auf jeweils 50 MPa gesetzt.

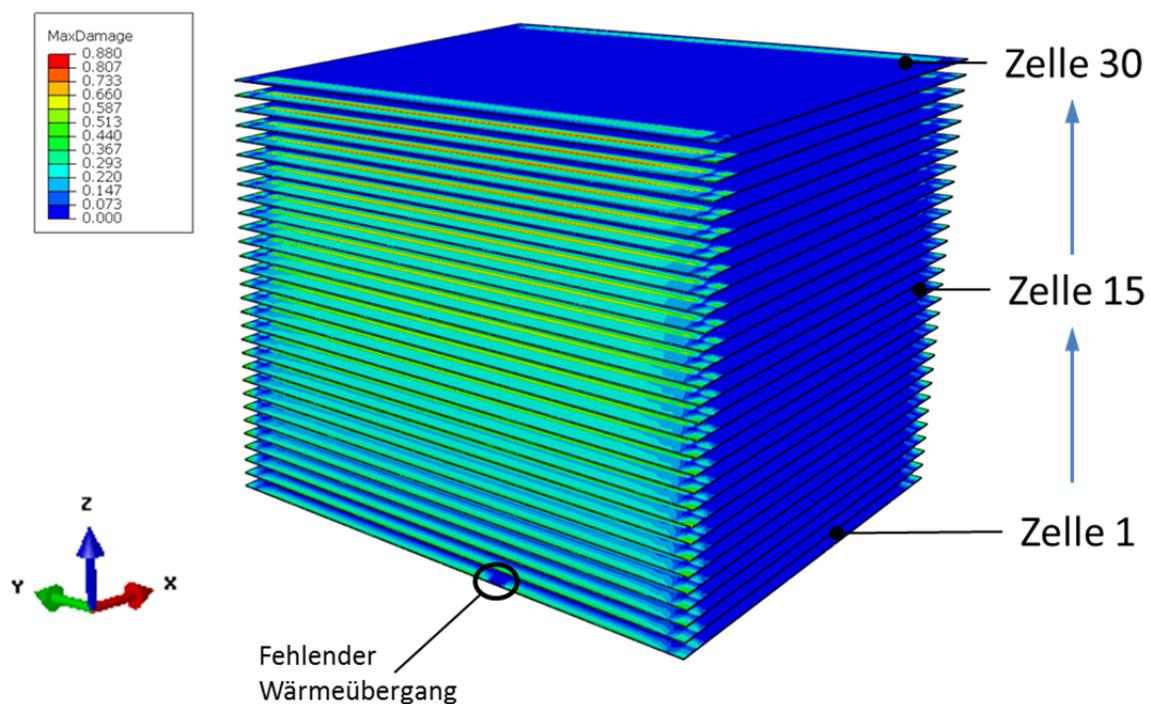


Abbildung 7-1: Vergleichsschädigung, Anströmseite

In Abbildung 7-1 wird die maximale Vergleichsschädigung (=MaxDamage) aller Zellen des Stacks über den gesamten Temperaturzyklus visualisiert. Die abgebildete Ansicht ist in Richtung der Anströmung der heißen Luft (positive X- Richtung) ausgerichtet. Auf der rechten Seite wurde zusätzlich die aufsteigende Zellenummerierung dargestellt, um in den weiteren Abbildungen diese Zellen referenzieren zu können.

Es ist in Abbildung 7-1 ersichtlich, dass die größte Wahrscheinlichkeit für Rissinitiation an den Anströmflächen der heißen Luft vorliegt und die Vergleichsschädigung in der Mitte der Zellen fast null ist. Ausgenommen davon ist die Zelle Eins, bei der ein Element keine Schädigung aufweist (Abbildung 7-1 und Abbildung 7-2). Als Grund für diese Unregelmäßigkeit konnte eine fehlende Wärmeübergangskontaktbedingung in einem Kanal zwischen Luft und Bauteil im thermischen Modell identifiziert werden.

Bei globaler Betrachtung fällt zunächst kein signifikanter Unterschied zwischen den Einzelzellen auf. Zwar sind bei den Zellen im oberen Drittel (Zelle 20 – 30) etwas höhere Werte erkennbar, allerdings



bedarf es für eine genauere Aussage eine Detailbetrachtung der Zellen. Zunächst werden alle Zellen von der gegenüberliegenden Seite betrachtet (Luft- Ausströmseite, Abbildung 7-2) um qualitativ eine Abschätzung geben zu können, ob die Einlass- oder Auslasseite kritischer ist.

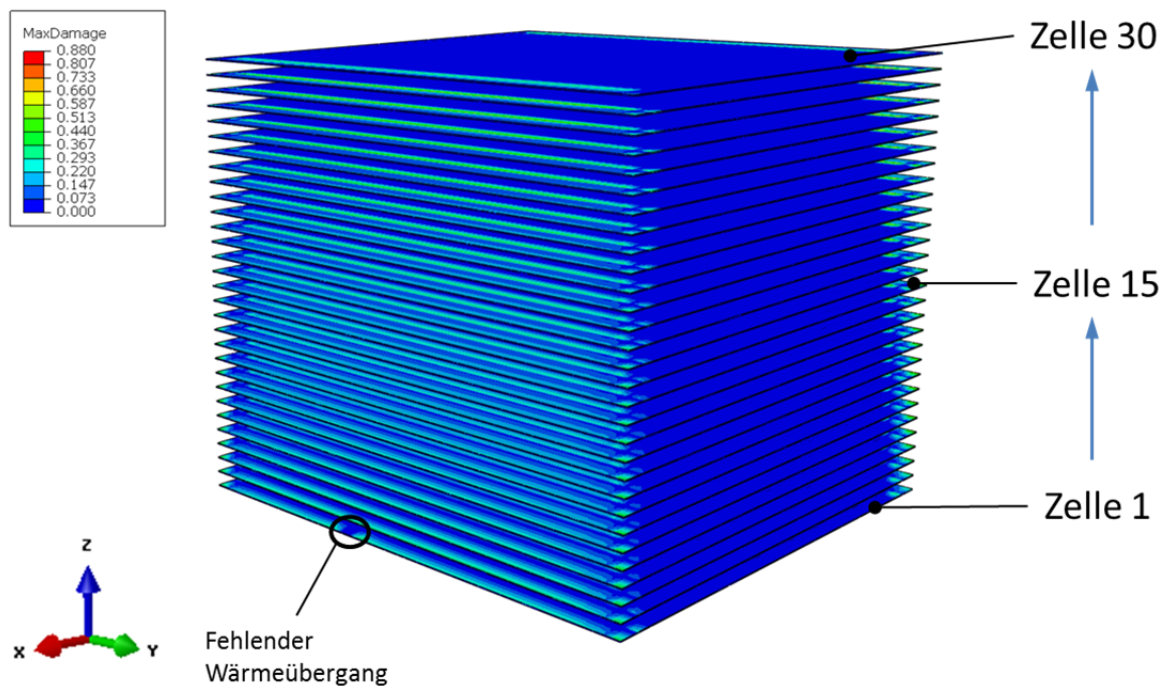


Abbildung 7-2: Vergleichsschädigung, Ausströmseite

Die Vergleichsschädigung auf der Ausströmseite (Abbildung 7-2) ist, bis auf ein Element in der ersten Zelle, sehr homogen verteilt. Bei rein qualitativer Betrachtung ist eine größere Wahrscheinlichkeit für Rissinitiierung an der Anströmseite der heißen Luft ableitbar. Dieser Umstand ist mit den größeren thermischen Gradienten während des Zyklus zu erklären. Für eine exakte Untersuchung bedarf es allerdings einer Detailbetrachtung der Einzelzellen. In weiterer Folge wurden vier Zellen exemplarisch ausgewählt (Abbildung 7-3).

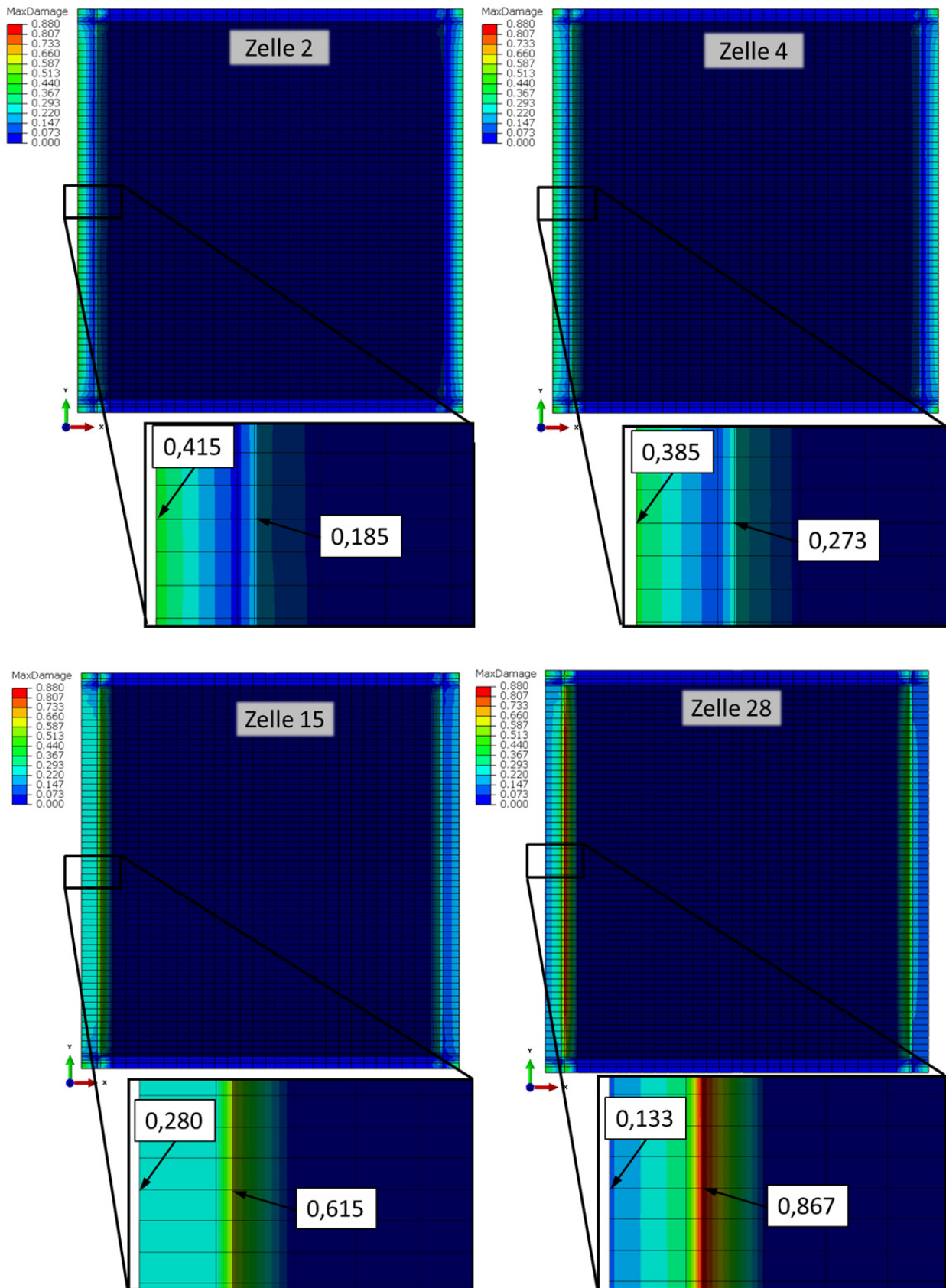


Abbildung 7-3: Vergleichsschädigung in den Einzelzellen

In Abbildung 7-3 ist die Vergleichsschädigung von vier Einzelzellen visualisiert. Neben der vollständigen Zellenansicht des Schädigungsparameters ist für jede Zelle eine Detailansicht des Randbereichs der Anströmseite mit zwei Knotenwerten abgebildet. Aus Gründen der

Übersichtlichkeit wurde die Luft- Ausströmseite nicht dargestellt, da die Vergleichsschädigungen unter jener der Anströmseite liegen (Abbildung 7-5 und Abbildung 7-6). Die Zellenansicht enthält einen schwarz- transparenten Bereich in der Mitte, welcher die Anode darstellt. Somit beschreiben die zwei Knotenwerte in der Detailansicht die Schädigung an der Kathoden- Elektrolyt Kontaktfläche (jeweils linker Wert in Abbildung 7-3) und jene an der Anode- Elektrolyt Grenzfläche (jeweils rechter Wert in Abbildung 7-3).

In Zelle 2 weist die Vergleichsschädigung zwischen Kathode- Elektrolyt Kontaktfläche den größten Wert auf und in Zelle 28 ist der größte Betrag an der Anode- Elektrolyt Grenzfläche feststellbar (Abbildung 7-3). Die restlichen dargestellten Zellen liegen in einem Bereich zwischen diesen beiden Extrema. Um den Verlauf der Vergleichsschädigung über alle Zellen darstellen und somit auch die globalen Extremwerte identifizieren zu können, wurde an verschiedenen Stellen der Zelle ein Pfad über den ganzen Stack definiert (Abbildung 7-4).

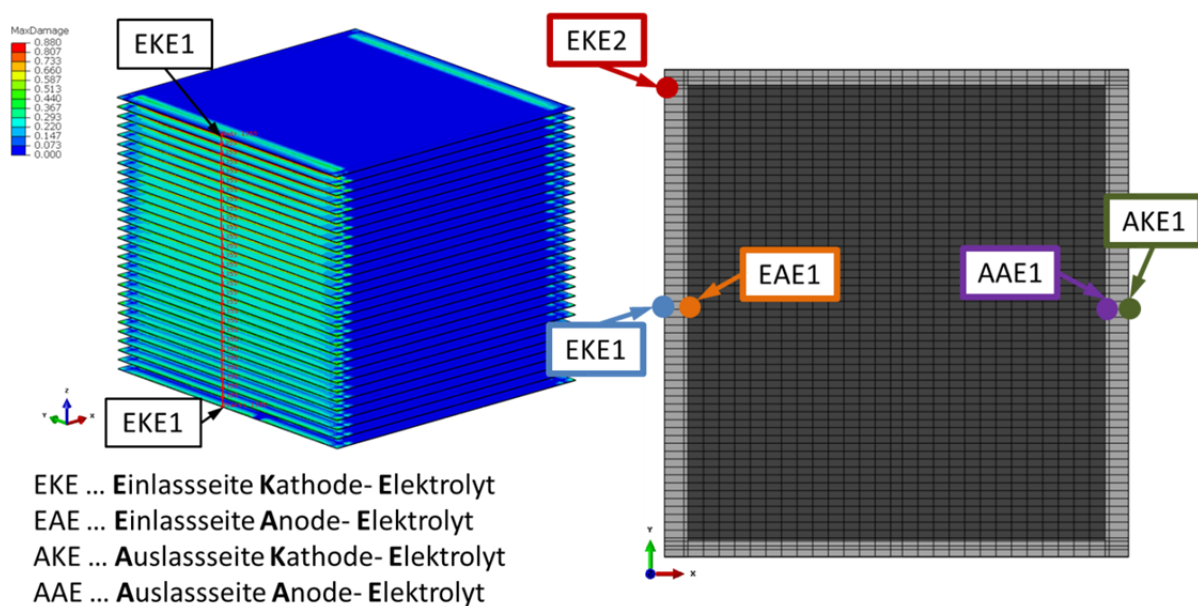


Abbildung 7-4: Definition der Pfade zur Schädigungsverlauf-Darstellung

Es wurden fünf Pfade über alle Zellen definiert, wobei sich jeweils drei auf der Anströmseite und zwei auf der Ausströmseite der Luft befinden (Abbildung 7-4). Auf der Lufteinlasseite wurde ein Punkt mehr (EAE2, Abbildung 7-4) als auf der Luftauslasseite definiert, um ein Maß für die Gleichverteilung der Schädigung auf der kritischeren Seite bekommen zu können. Die Schädigungsverläufe wurden für die zwei Kontaktflächen separat ausgewertet (Abbildung 7-5 und Abbildung 7-6).

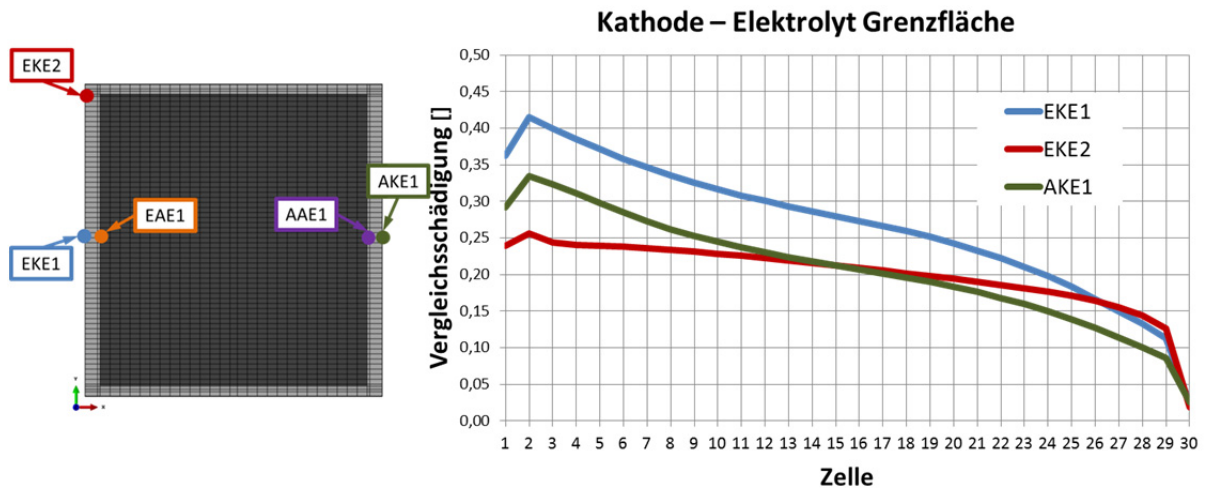


Abbildung 7-5: Vergleichsschädigung Kathode- Elektrolyt Grenzfläche

Die größte Vergleichsschädigung an der Kathode- Elektrolyt Grenzfläche und somit die höchste Wahrscheinlichkeit für Delaminierungsinitiierung wird in Zelle 2 an der Luftanströmungsseite konstatiert (Abbildung 7-5). Die Schädigung an der Luftausströmungsseite ist signifikant geringer als an der Einlassseite. Die Schädigung zwischen den Zellen 2 und 30 beschreiben eine monoton fallende Funktion (Abbildung 7-5).

Des Weiteren wird der Schädigungsverlauf in Abhängigkeit der Zellenlage für die Anode- Elektrolyt Kontaktschicht visualisiert (Abbildung 7-6). Da die Materialeigenschaften und die Randbedingungen signifikant von jenen der Kathode- Elektrolytschicht abweichen, kann nicht mit einem ähnlichen Verlauf gerechnet werden.

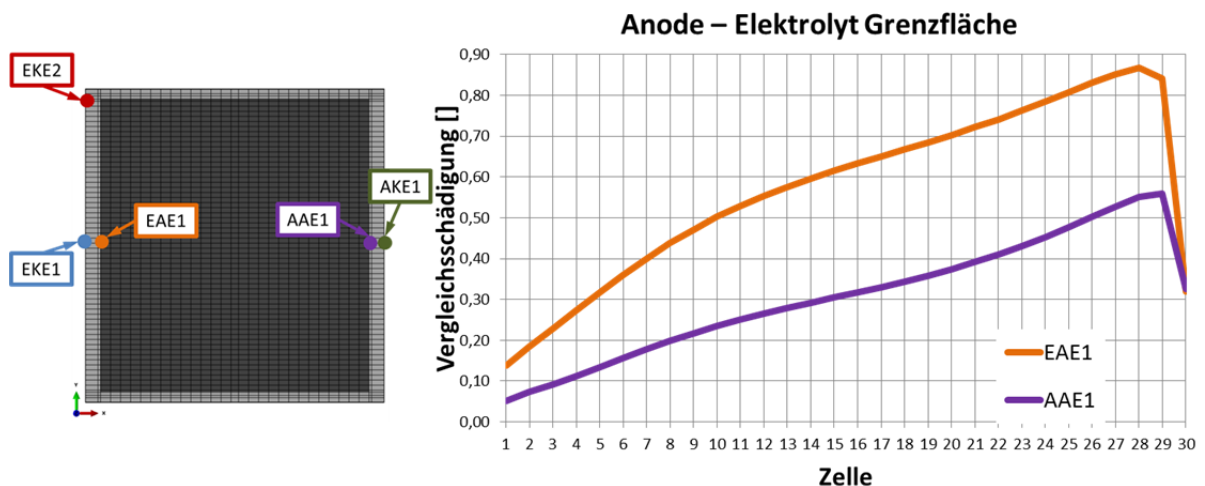


Abbildung 7-6: Vergleichsschädigungsverlauf Anode- Elektrolyt Grenzfläche

In der Anode- Elektrolyt Kontaktschicht wird der höchste Vergleichsschädigungswert in Zelle 28 auf Seite der Luftanströmung identifiziert (Abbildung 7-6). Wie bereits bei der Kathode- Elektrolyt Grenzschicht festgestellt wurde, ist auch hier die Einlassseite der Luft signifikant kritischer als die Auslassseite.

Bei beiden Verläufen (Abbildung 7-5, Abbildung 7-6) fällt auf, dass das Maximum bei den Zellen kurz vor der jeweiligen Stackbegrenzung liegt. Wie bereits bei der Analyse des Spannungsfelds (Kapitel 5.2.2) festgehalten wurde, ist die Begründung dafür der Umstand, dass die Boden- beziehungsweise

Deckplatte über Reibung mit der starren Platte verbunden ist. Dadurch können sich diese bewegen, im Gegensatz zu den anderen Interkonnektoren, die fix mit einer Glasdichtung verschmolzen sind. Außerdem ist die Steifigkeit der Boden- und Deckplatte aufgrund von fehlenden Brenngas- Nuten, höher als jene der Interkonnektoren. Daher sind die Scherspannungen an den letzten Zellen geringer.

Zusammenfassend können durch die Vergleichsschädigungsbetrachtung Zelle 2 als kritischste Brennstoffzelle für Delaminierungsinitiierung an der Kathode- Elektrolyt Grenzschicht und Zelle 28 als kritischste für Rissinitiierung zwischen der Anoden- Elektrolyt Kontaktschicht identifiziert werden. Auf diese Tendenz wird in Kapitel 9 durch einen Vergleich mit den verschiedenen Delaminierungssubmodellen noch einmal eingegangen.

## 8 Delaminierungssubmodell

In diesem Kapitel werden der Aufbau und die Materialparameter des *Kohäsivelemente*-Detailmodells beschrieben. Der Hauptfokus wird auf eine Parameteranalyse gelegt, welche verschiedene Prozesszonendefinitionen und Netzfeinheiten untersucht.

### 8.1 Modellaufbau und Randbedingungen Delaminierungssubmodell

Das Delaminierungssubmodell einer Brennstoffzelle wird ausgehend von dem Globalmodell durch Entfernen aller anderen Zellen erstellt. Die Vernetzung der Zelle muss neu durchgeführt werden, um ein regelmäßiges Netz in alle möglichen Rissausbreitungsrichtungen sicherzustellen. Der Elementtyp der Zellenmaterialien wird auf SC8R belassen. Da die Zelle aus nur einem Bauteil besteht und die Anode, Kathode und Elektrolyte über eine regionale Zuweisung der Eigenschaften definiert sind, muss für die Anknüpfung der *Kohäsivelemente* an den zwei Grenzschichten (Abbildung 8-1) eine spezielle Methodik verwendet werden (siehe Anhang, Definition der *Kohäsivelemente*). Aus diesem Grund weisen die *Kohäsivelemente* koinzidente Knoten zu den drei Einzelbauteilen auf.

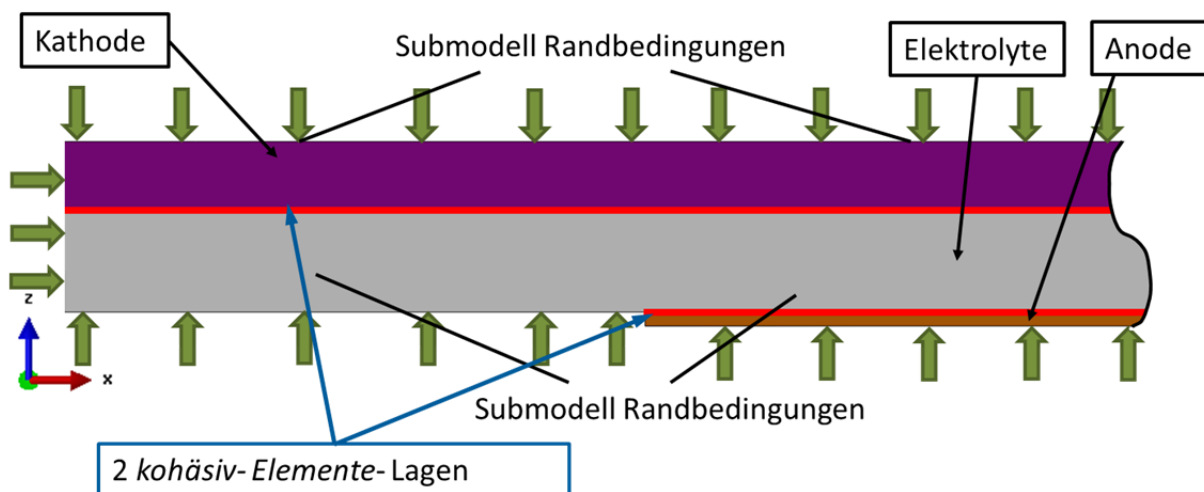


Abbildung 8-1: Delaminierungssubmodell

Auf das ganze Delaminierungssubmodell der Einzelzelle werden die Temperaturen des thermischen Zyklus aufgebracht. Alle Ränder der Zelle werden mit den Verschiebungen des globalen Modells an den Modellgrenzen beaufschlagt (Abbildung 8-1).

### 8.2 Berechnung der Anfangssteifigkeiten der *Kohäsivelemente*

Am Beginn der Simulation müssen basierend auf den Materialparametern die Anfangssteifigkeiten der zwei Grenzschichten berechnet werden, da diese einen numerischen Parameter darstellen. Wie in Kapitel 3.3.8 angeführt wurde, muss die Anfangssteifigkeit einerseits große Werte einnehmen, um die Gesamtsteifigkeit der Struktur nicht zu beeinflussen und andererseits klein genug sein, um ausreichende numerische Stabilität garantieren zu können. Die Berechnung der Anfangssteifigkeit beruht auf *Turon et. al* [39] (Kapitel 3.3.8). Durch Verwendung von Formel (3-72) kann für die zwei Grenzschichten die Steifigkeit bestimmt werden (Tabelle 6).

**Tabelle 6: Berechnung der Anfangssteifigkeit [39]**

**Materialparameter Kathode - Elektrolyt**

$l_{min}$  0,115 mm  
 $E$  119250 MPa

**Materialparameter Anode - Elektrolyt**

$l_{min}$  0,025 mm  
 $E$  140850 MPa

Anfangssteifigkeit [39]		
	$\alpha$	$K$ [N/mm <sup>3</sup> ]
Kathode - Elektrolyt	50	<b>5,18E+07</b>
Anode - Elektrolyt	50	<b>2,82E+08</b>
		$K = \frac{\alpha E}{l_{min}}$

Auf der linken Seite in Tabelle 6 sind die Eingaben für die Berechnung der Anfangssteifigkeit für die jeweilige Kontaktfläche angeführt. Die Elastizitätsmoduli werden als arithmetische Mittelwerte der Moduli der in Kontakt befindlichen Materialien berechnet. Die Variable  $l_{min}$  beschreibt die Dicke der dünnsten angrenzenden Lage an die jeweilige Grenzschicht. Der Koeffizient  $\alpha$  wurde wie in der Arbeit von *Turon et. al* [39] mit 50 angenommen.

Die resultierenden Anfangssteifigkeiten der beiden Grenzflächen unterscheiden sich grob um eine Dekade (Tabelle 6). Für die Eingabe in Abaqus ist zu beachten, dass die Dicke der Schicht bei der Materialdefinition mit eins anzugeben ist, da sich auf diesen Wert die errechneten Steifigkeiten beziehen.

### 8.3 Abschätzung der Prozesszone

Ausgehend von den Materialparametern der Grenzschicht kann die Länge der Prozesszone in Abhängigkeit des nach Kapitel 3.3.7 verwendeten Ansatzes, berechnet werden. In Tabelle 7 werden die Prozesslängen (Formel (3-65)) und die daraus resultierenden Knotenabstände (Formel (3-66)), unter der Annahme, dass drei Elemente die Prozesszone ausreichend abbilden, berechnet.

**Tabelle 7: Berechnung der Länge der Prozesszone [42], [43], [83], [84]**

**Grenzfläche zwischen Kathode und Elektrolyt**

		Länge der Prozesszone					
		<b>Barenblatt [42]</b>		<b>Rice [85] / Falk [84]</b>		<b>Hillerborg [43]</b>	
$E$	119250 MPa	$l_{pz}$ [mm]	$l_e$ [mm]	$l_{pz}$ [mm]	$l_e$ [mm]	$l_{pz}$ [mm]	$l_e$ [mm]
$G_c$	0,0435 N/mm						
$t_0$	75 MPa	0,362	<b>0,121</b>	0,815	<b>0,272</b>	2,897	<b>0,966</b>
		$l_{pz} = \frac{\pi \times E \times G_c}{8 \times t_0^2}$		$l_{pz} = \frac{9\pi \times E \times G_c}{32 \times t_0^2}$		$l_{pz} = \frac{E \times G_c}{t_0^2}$	

**Grenzfläche zwischen Anode und Elektrolyt**

		Länge der Prozesszone					
		<b>Barenblatt [42]</b>		<b>Rice [85] / Falk [84]</b>		<b>Hillerborg [43]</b>	
$E$	140850 MPa	$l_{pz}$ [mm]	$l_e$ [mm]	$l_{pz}$ [mm]	$l_e$ [mm]	$l_{pz}$ [mm]	$l_e$ [mm]
$G_c$	0,0639 N/mm						
$t_0$	75 MPa	0,628	<b>0,209</b>	1,414	<b>0,471</b>	5,027	<b>1,676</b>
		$l_{pz} = \frac{\pi \times E \times G_c}{8 \times t_0^2}$		$l_{pz} = \frac{9\pi \times E \times G_c}{32 \times t_0^2}$		$l_{pz} = \frac{E \times G_c}{t_0^2}$	

Auf der linken Seite der Tabelle 7 sind die Angaben für die Berechnung der Länge der Prozesszone für beide Grenzflächen angeführt (Kathode- Elektrolyt, Anode- Elektrolyt). Die Werte für den Elastizitätsmodul und die kritische Energiefreisetzungsrate werden durch arithmetische Mittelwertbildung aus den Werten der jeweiligen an die Kontaktfläche angrenzenden Materialien errechnet. Nach Diskussionen mit Fachleuten aus der betrieblichen Praxis wurde ein plausibler Wert für die Haftfestigkeit der Grenzschicht abgeschätzt.

In Tabelle 7 fällt signifikant auf, dass die Kontaktfläche zwischen Anode und Elektrolyt längere Prozesszonen als jene der Kathode- Elektrolyt Grenzschicht ergeben. Dieser Umstand kann durch die höheren Zähigkeitswerte erklärt werden. Somit kann bei erster Betrachtung der Materialparameter abgeleitet werden, dass die Schicht zwischen Kathode und Elektrolyt deutlich spröder und somit vermutlich anfälliger für Delaminierungen ist.

Die Ergebnisse in Tabelle 7 schließen auf einen minimalen Knotenabstand von 0,12 mm. Würde die komplette Zelle mit diesem Abstand vernetzt werden, würde dies in mehr als neun Millionen Freiheitsgraden resultieren. Dies würde die maximal sinnvolle Rechenleistung (wird in der AVL mit drei Million Freiheitsgraden angegeben) deutlich überschreiten. Aus diesem Grund und der Forderung nach ausgewogener Rechenzeit verglichen mit der Genauigkeit der Rechenergebnisse wird in weiterer Folge eine Parameteranalyse in Abhängigkeit der Netzfeinheit und des Prozesszonenansatzes durchgeführt.

## 8.4 Parameteranalyse verschiedener Prozesszonen und Netzdichten

In dieser Parameteranalyse wird der Einfluss von drei verschiedenen Netzdichten und der verwendeten Prozesszonentheorie, zum Anpassen der kritischen Grenzflächenspannungen, untersucht. Ziel dieser Analyse ist die Bestimmung der für das verwendete Modell passenden Prozesszonentheorie und Evaluierung des Einflusses der unterschiedlichen Netzdichten.

### 8.4.1 Verwendete Zelle und Randbedingungen

Für die Parameteranalyse wird für die Erstellung des Delaminierungssubmodells (siehe Kapitel 8.1) Zelle 15, welche in der Mitte des Stacks liegt (Abbildung 8-2), verwendet. Diese Brennstoffzelle wird aufgrund der geringen Beeinflussung durch die mechanischen Randbedingungen von Boden- und Deckplatte gewählt.

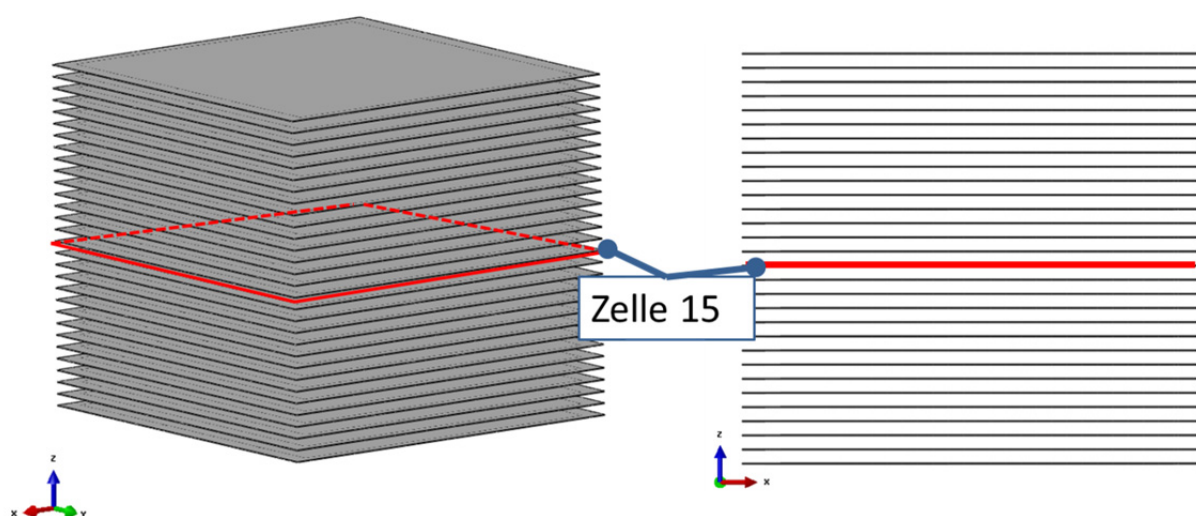


Abbildung 8-2: Zelle für Parameteranalyse



Alle sonstigen Submodellrandbedingungen sind äquivalent zu der Beschreibung in Kapitel 8.1. Für die Vergleichbarkeit der gewonnenen Ergebnisse wird für jede Berechnung dieselbe viskose Regularisierung ( $\mu=1e-5$ , Kapitel 3.3.4.1) verwendet.

### 8.4.2 Versuchsplan

Die Durchführung der Parameteranalyse erfolgt auf Basis eines Versuchsplans, in dem anschließend in der Auswertung der Analyse die Ergebnisse für die jeweiligen Zeitpunkte eingetragen werden. Bevor der Plan visualisiert werden kann, müssen die drei verwendeten Netzdichten spezifiziert werden (Abbildung 8-3).

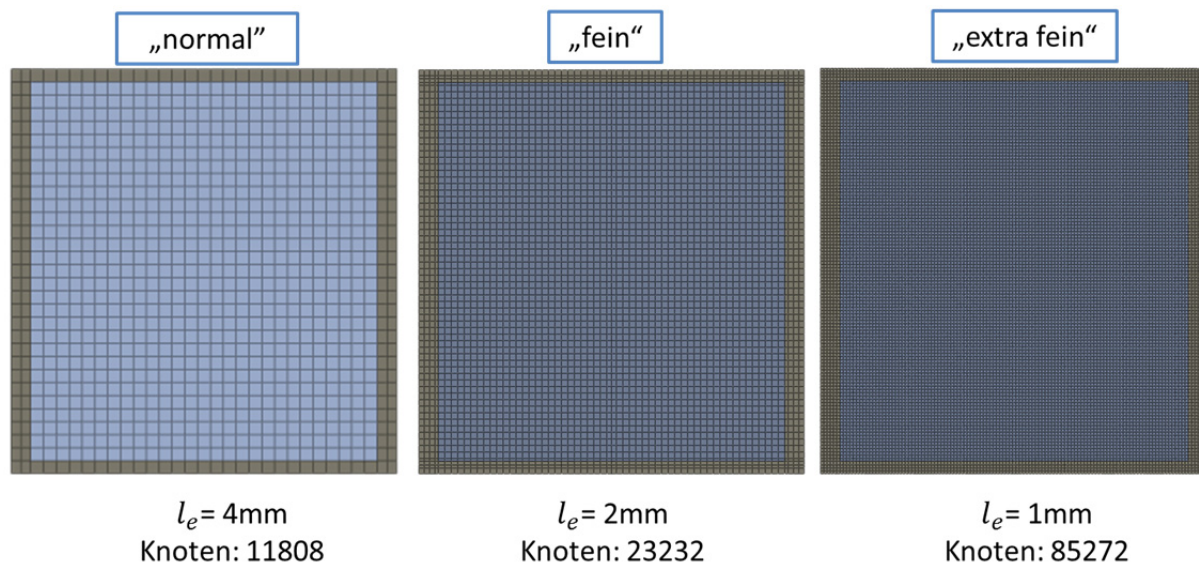


Abbildung 8-3: Spezifikation der Netzdichte

Die verschiedenen Netzdichten mit den durchschnittlichen Knotenabständen ( $l_e$ ) und der Anzahl der Knoten sind in Abbildung 8-3 visualisiert. Die Vernetzung wurde mit hexagonalen Elementen vorgenommen um eine einfache Kompatibilität mit der *Kohäsivelement*-Lage erreichen zu können. Das „normale“ Netz besitzt dieselbe Netzdichte wie jenes vom Globalmodell der Zelle, mit dem Unterschied, dass die Bedingung der gleichen Knoten in der Kontaktzone mit anderen Bauteilen entfernt wurde, um ein gleichmäßiges Netz zu erhalten. Da die Submodellrandbedingungen interpoliert werden, ist dieses Vorgehen zulässig. An dieser Stelle ist zu erwähnen, dass ein gleicher Knotenabstand in jede mögliche Delaminierungs-Richtung entscheidend für die Adäquatheit des Simulationsergebnisses ist. Ein Versuch, bei dem dasselbe Netz wie für die globale Analyse verwendet wurde, resultierte aufgrund der unterschiedlichen Knotenabstände in X- und Y-Richtung (Differenz 3,2 mm), zu einem unterschiedlichen Ort der Rissinitiierung als bei einer Vergleichsberechnungen mit regelmäßigem Netz.

Da beim „extra feinen“ Netz die Knotenanzahl mehr als das Siebenfache der „normalen“ Diskretisierung beträgt (Abbildung 8-3), ist die Rechenzeit um ein Vielfaches höher. Mit der Parameteranalyse soll festgestellt werden, inwieweit die Rechenzeit (und somit Netzdichte) bei gleichzeitigem Beibehalten des Delaminierungsverhaltens verringert werden kann.

Neben der Netzdichte wurde auch die angewandte Prozesszonentheorie als Einflussfaktor berücksichtigt. Dabei wurden vier verschiedene Ansätze auf ihre Anwendbarkeit untersucht: *Barenblatt* [42], *Rice* [85] / *Falk* [84], *Hillerborg* [43] und *Diehl* [89]. Die durchzuführenden

Simulationen mit den jeweiligen berechneten kritischen Grenzflächenspannungen sind in Tabelle 8 und Tabelle 9 für die Kontaktfläche zwischen Kathode- Elektrolyt und Anode- Elektrolyt abgebildet.

**Tabelle 8: Versuchsplan mit kritischen Grenzflächenspannungen für Kathode- Elektrolyt Kontaktschicht**

Prozesszonenansatz	Netzdichte		
	normal	fein	extra fein
<i>Barenblatt [42]</i> Formel (3-65)	13,03 MPa	18,43 MPa	26,06 MPa
<i>Rice [85] / Falk [84]</i> Formel (3-65)	19,54 MPa	27,64 MPa	39,09 MPa
<i>Hillerborg [43]</i> Formel (3-65)	36,85 MPa	52,12 MPa	73,70 MPa
<i>Diehl [89]</i> Formel (3-73)	0,44 MPa	0,87 MPa	1,74 MPa
<i>Diehl 0,1 [89]</i> Formel (3-73)	21,75 MPa	43,50 MPa	87 MPa

Aus Tabelle 8 geht hervor, dass insgesamt 15 Simulationen durchzuführen sind, um die Einflüsse der zwei Eingangsgrößen (Netzdichte, Prozesszone) bestimmen zu können. Die kritischen Grenzflächenspannungen für die Kathode- Elektrolyt Kontaktschicht werden für jeden Versuch in Tabelle 8 eingetragen. Der Prozesszonenansatz nach *Diehl [89]* wird durch eine etwas dickere Linie von den anderen Ansätzen abgetrennt, da bei diesem Ansatz angenommen wird, dass die kritischen Grenzflächenspannungen und Anfangssteifigkeiten nicht bekannt sind und erst nach Festlegung des Netzabstandes und der kritischen Energiefreisetzungsrates berechnet werden. Für den Prozesszonenansatz nach *Diehl* werden die Parameter, die in der Arbeit von *Diehl [89]* für duktile Werkstoffe abgeleitet wurden, verwendet (Kapitel 3.3.9). In der Zeile *Diehl0,1* wurde eine Abänderung des  $\delta^f$  Werts (siehe Formel (3-73)) auf 0,1 Prozent des Knotenabstandes vorgenommen.

Die Berechnung der restlichen kritischen Grenzflächenspannungen (*Barenblatt [42]*, *Rice [85] / Falk [84]*, *Hillerborg [43]*) erfolgt durch Einsetzen der Angaben aus Tabelle 7 und Abbildung 8-3 in die Formeln (3-67) und (3-68). Diese Vorgehensweise muss auch für die Anode- Elektrolyt Grenzschicht durchgeführt werden (Tabelle 9).

Tabelle 9: Versuchsplan mit kritischen Grenzflächenspannungen für Anode- Elektrolyt Kontaktschicht

Prozesszonenansatz	Netzdichte		
	normal	fein	extra fein
<i>Barenblatt</i> [42] Formel (3-65)	17,16 MPa	24,27 MPa	34,32 MPa
<i>Rice</i> [85] / <i>Falk</i> [84] Formel (3-65)	25,74 MPa	36,41 MPa	51,49 MPa
<i>Hillerborg</i> [43] Formel (3-65)	48,54 MPa	68,65 MPa	75 MPa
<i>Diehl</i> [89] Formel (3-73)	0,64 MPa	1,28 MPa	2,56 MPa
<i>Diehl 0,1</i> [89] Formel (3-73)	31,95 MPa	63,90 MPa	127,80 MPa

In Tabelle 9 sind die angepassten kritischen Grenzflächenspannungen der Anode- Elektrolyt Kontaktschicht dargestellt. Im Vergleich zur Kathode- Elektrolyt Grenzschicht fällt auf, dass die angepassten Grenzflächenfestigkeiten aufgrund der längeren Prozesszonen (Kapitel 8.3) höher sind. Somit ist bei gleicher Belastung die Kontaktfläche zwischen Kathode und Elektrolyt anfälliger für Delaminierungen. Aus Tabelle 8 und Tabelle 9 kann abgeleitet werden, dass der Ansatz nach *Barenblatt* durch die geringen kritischen Grenzflächenspannungen den konservativsten darstellt. Die größte Abhängigkeit der Haftfestigkeit von der Netzdichte wird beim Ansatz von *Diehl* beobachtet.

Für die Prozesszonentheorie nach *Diehl* können aufgrund der Annahme der unbekanntenen Elastizitätsmoduli, nicht die in Kapitel 8.2 errechneten Anfangssteifigkeiten verwendet werden. Für diesen Ansatz muss die Steifigkeit nach Formel (3-75) in Abhängigkeit des verwendeten Netzes, berechnet werden (Tabelle 10). Der Parameter  $\delta_{ratio}$  in Formel (3-73) wurde mit 0,5 angenommen (Kapitel 3.3.9).

Tabelle 10: Anfangssteifigkeiten nach *Diehl* [89]

Grenzfläche	Netzdichte	<i>Diehl</i>	<i>Diehl0,1</i>
Kathode- Elektrolyt	normal	4 N/mm <sup>3</sup>	10875 N/mm <sup>3</sup>
	fein	17 N/mm <sup>3</sup>	43500 N/mm <sup>3</sup>
	extra fein	70 N/mm <sup>3</sup>	174000 N/mm <sup>3</sup>
Anode- Elektrolyt	normal	6 N/mm <sup>3</sup>	15975 N/mm <sup>3</sup>
	fein	26 N/mm <sup>3</sup>	63900 N/mm <sup>3</sup>
	extra fein	102 N/mm <sup>3</sup>	255600 N/mm <sup>3</sup>

Im Gegensatz zu den anderen Ansätzen sind bei *Diehl* sowohl die kritischen Grenzflächenspannungen als auch die Anfangssteifigkeiten abhängig von der Netzdichte. Des Weiteren sind die Steifigkeiten der *Diehl*- Abschätzung signifikant kleiner als jene der Berechnung nach *Turon et. al* [39], bei dem die Elastizitätsmoduli bekannt sind (Tabelle 6).

### 8.4.3 Ergebnisse Parameteranalyse

Nach erfolgreicher Beendigung jeder Simulation muss kontrolliert werden, ob das Temperatur- und Spannungsfeld quantitativ mit jenem des globalen Modells übereinstimmt. Danach werden für beide Kontaktflächen das Rissinitiierungskriterium (QUADSRT in Abaqus) und die Steifigkeitsdegradierung in Folge des Rissfortschrittes (SDEG in Abaqus) abgebildet. Schlussendlich muss kontrolliert werden, ob die dissipierte Energie durch die *viskose Regularisierung* (ALLCD in Abaqus) klein genug im Vergleich zur gesamten Dehnungsenergie (ALLSE in Abaqus) ist.

Die Darstellung der Ergebnisse wird zunächst für beide Grenzflächen je Prozesszone, für den letzten Zeitpunkt der Berechnung durchgeführt. Der Zeitpunkt, bei dem die Rechnung abgebrochen wird, stellt einen wichtigen Parameter dar, da er beschreibt, wie früh die Schädigung überkritisch wird. Zusätzlich dazu werden zu bestimmten Zeiten Vergleiche des Rissinitiierungsparameters in Abhängigkeit der Netzdichte visualisiert. Am Schluss des Kapitels wird eine Gegenüberstellung der verschiedenen Ansätze zu einem bestimmten Zeitpunkt und mit einer definierten Netzdichte abgebildet.

#### 8.4.3.1 Ergebnisse Barenblatt

##### „Normale“ Netzdichte (Knotenabstand 4 mm)

Bevor die Ergebnisse der Delaminierungsrechnung visualisiert werden können, muss überprüft werden, ob das Spannungsfeld des Submodells jenem des globalen Modells entspricht. Zu diesem Zweck wurden die Mises-Spannungen bei 25% der Aufheizzeit, welche den Zeitpunkt des Abbruchs der Rechnung durch den Solver entspricht, verglichen (Abbildung 8-4).

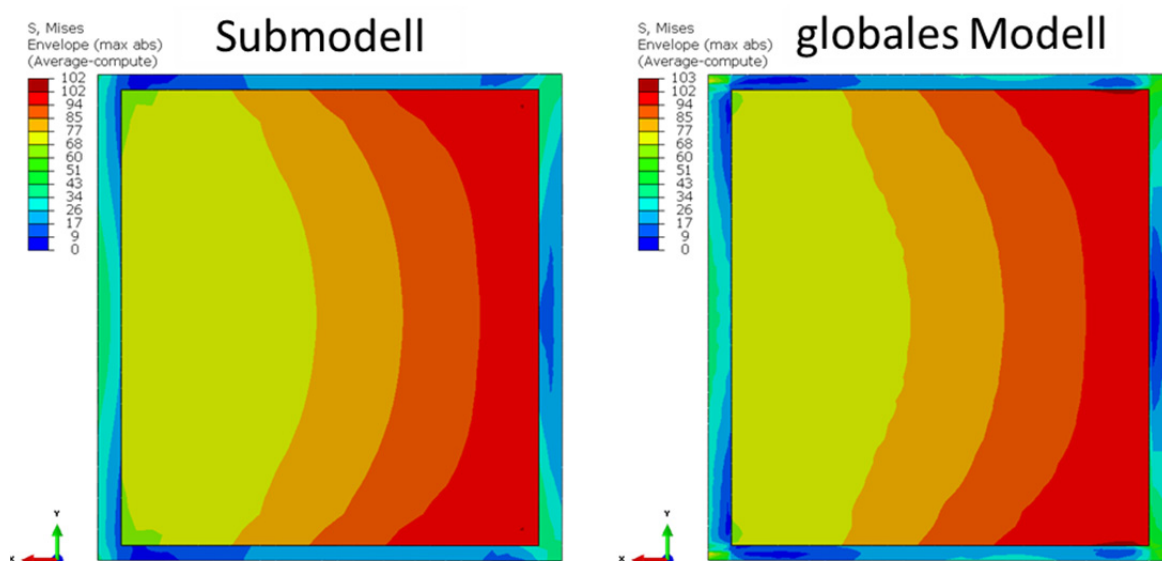
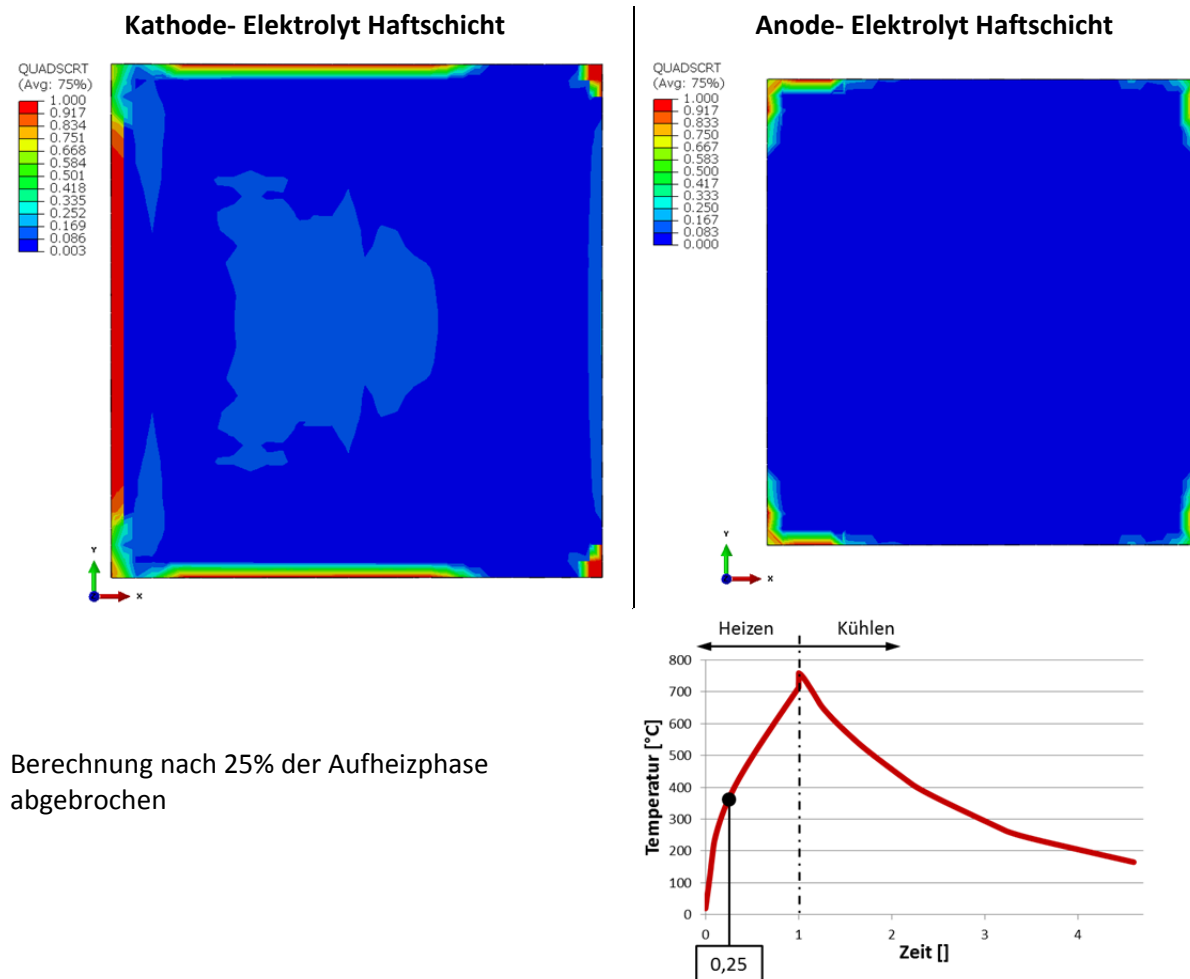


Abbildung 8-4: Spannungvergleich zwischen Submodell und globales Modell bei 25% der Aufheizzeit, Barenblatt „normale“ Netzdichte

Bei Betrachtung der beiden Spannungsfelder (Abbildung 8-4) können nur marginale Unterschiede im Randbereich der Zelle festgestellt werden. Somit kann das Submodell für die Beurteilung der Delaminierungsinitiierung herangezogen werden (Abbildung 8-5 und Abbildung 8-6).



Berechnung nach 25% der Aufheizphase  
 abgebrochen

Abbildung 8-5: Rissinitiierungsparameter Barenblatt Ansatz mit „normaler“ Netzdichte

In Abbildung 8-5 sind die Rissinitiierungsparameter (QUADSCRT) der beiden Haftsichten und der Zeitpunkt des Abbruchs der Rechnung dargestellt. Die Schädigung hat kurz nach dem größten Temperaturgradienten in der Anfangsphase der Aufheizung einen kritischen Wert erreicht und aufgrund der geringen Dämpfung begann die Rechnung zu divergieren und hat abgebrochen.

Durch Analyse von Abbildung 8-5 kann abgeleitet werden, dass die Delaminierung sehr stark an der Kathode- Elektrolyt Schicht im Bereich der Anströmung (erste Kante in positiver X-Richtung) ist. Dieser Umstand kann mit dem größten Temperaturgradienten am Anfang der Aufheizphase, welcher in diesem Bereich vorhanden ist und den damit hervorgerufenen Querschubspannungen in XZ-Richtung begründet werden. Des Weiteren werden im Bereich der Ecken der Luftauslassseite starke Rissinitiierungen beobachtet.

Im Vergleich dazu ist die Delaminierungsinitiierung an der Anode- Elektrolyt Grenzschicht signifikant geringer (QUADSCRT in Abbildung 8-5). Um den zeitlichen Verlauf der Delaminierung abbilden zu können, werden die Grenzschichten in Kapitel 8.4.3.6 zu gleichen Zeitpunkten visualisiert.

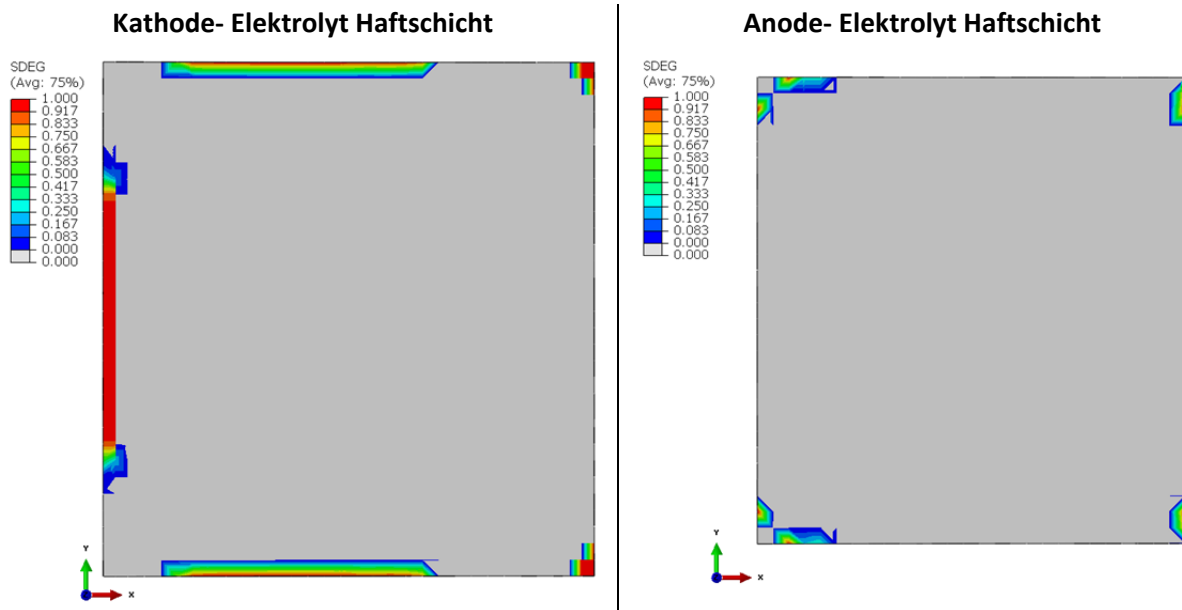


Abbildung 8-6: Rissfortschrittsparameter *Barenblatt* Ansatz mit „normaler“ Netzdichte

Für die erste Auswertung wurde exemplarisch neben dem Rissinitiierungsparameter (Abbildung 8-5) auch die Steifigkeitsdegradierung (SDEG, Abbildung 8-6) in Folge von Risswachstum, bei Überschreiten eines QUADSCRT- Wert von eins, visualisiert. Bei Betrachtung von Abbildung 8-6 ist ein deutlich größerer Rissfortschritt an der Kathode- Elektrolyt Haftschrift feststellbar. Da das Stadium des Risswachstums bei den verwendeten spröden Materialien sehr kurz ist, und die Rechnungen bei größerem Fortschritt wegen der geringen Dämpfung abbrechen, sind die Bilder von Rissinitiierung und Rissfortschritt sehr ähnlich. Aus diesem Grund wird für die folgenden Auswertungen die Steifigkeitsdegradierung nicht abgebildet.

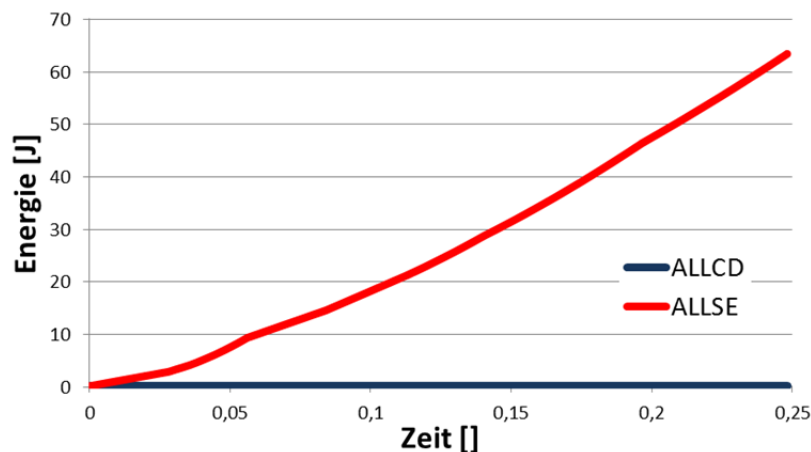


Abbildung 8-7: Vergleich der Energiebeiträge, *Barenblatt* mit „normaler“ Netzdichte

Ebenfalls exemplarisch für die erste Auswertung wurde der dissipierte Energiebeitrag (ALLCD) mit der totalen Dehnungsenergie (ALLSE) verglichen (Abbildung 8-7). In Abbildung 8-7 wird konstatiert, dass die Energie, die für die *viskose Regularisierung* gebraucht wird (ALLCD), deutlich kleiner als die totale Energie ist (maximal 0.0012% ALLCD von ALLSE). Bei den weiteren Auswertungen wurde dieses Diagramm nicht abgebildet, da bei jeder Simulation die dissipierte Energie deutlich unter 1% der gesamten Dehnungsenergie liegt.

**„Feine“ Netzdichte (Knotenabstand 2 mm)**

Beim *Barenblatt* Modell mit „feiner“ Netzdichte wird der Mises- Spannungsvergleich zwischen dem Submodell (Knotenabstand 2mm) und dem globalen Modell (durchschnittlicher Knotenabstand 4mm) visualisiert (Abbildung 8-8). Neben den bereits in Abbildung 8-4 festgestellten marginalen Abweichungen am Rand der Zelle, kommt es zu Fluktuationen des Spannungswerts innerhalb der Zelle. Dies kann durch die *Kontinuum- Schalen-Elemente* erklärt werden, die des Öffneren zu solchen Spannungsschwankungen in Submodellen führen. Je größer die Differenz zwischen dem durchschnittlichen Knotenabstand im Submodell zum globalen Modell wird, desto größer werden die Spannungsfuktuationen.

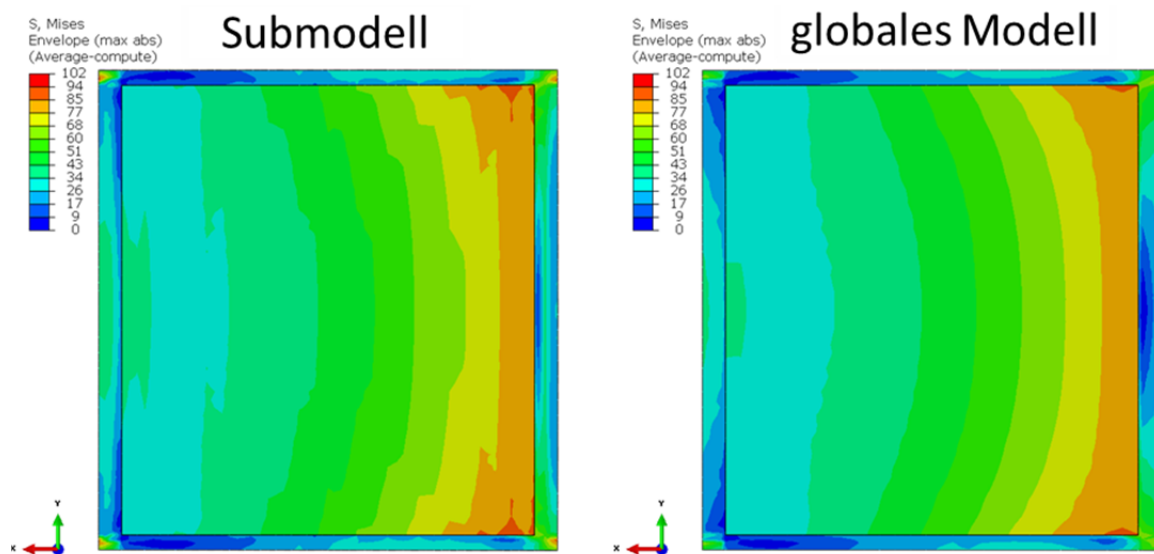
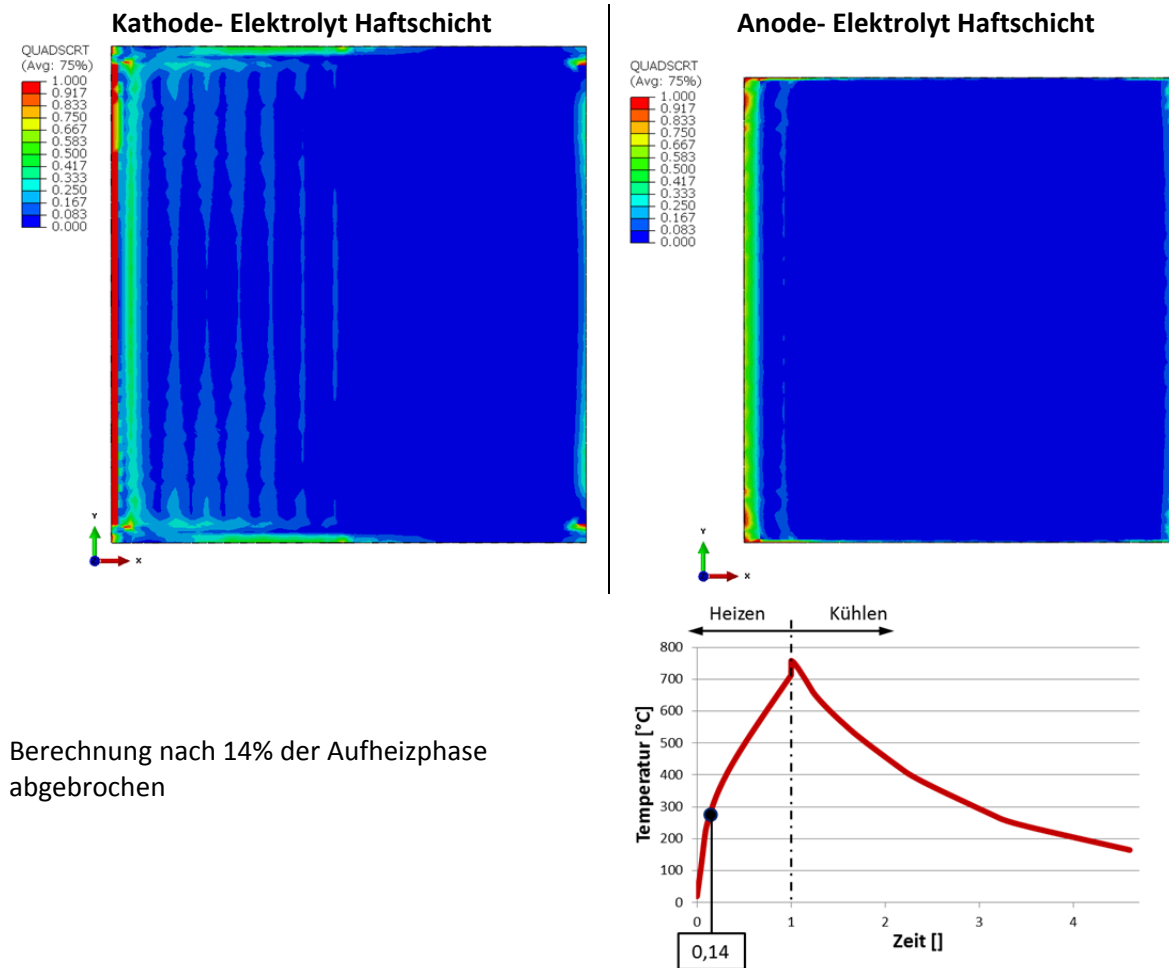


Abbildung 8-8: Spannungsvergleich zwischen Submodell und globalem Modell bei 14% der Aufheizzeit, *Barenblatt* „feine“ Netzdichte



Berechnung nach 14% der Aufheizphase  
 abgebrochen

Abbildung 8-9: Rissinitierungsparameter Barenblatt Ansatz mit „feiner“ Netzdicke

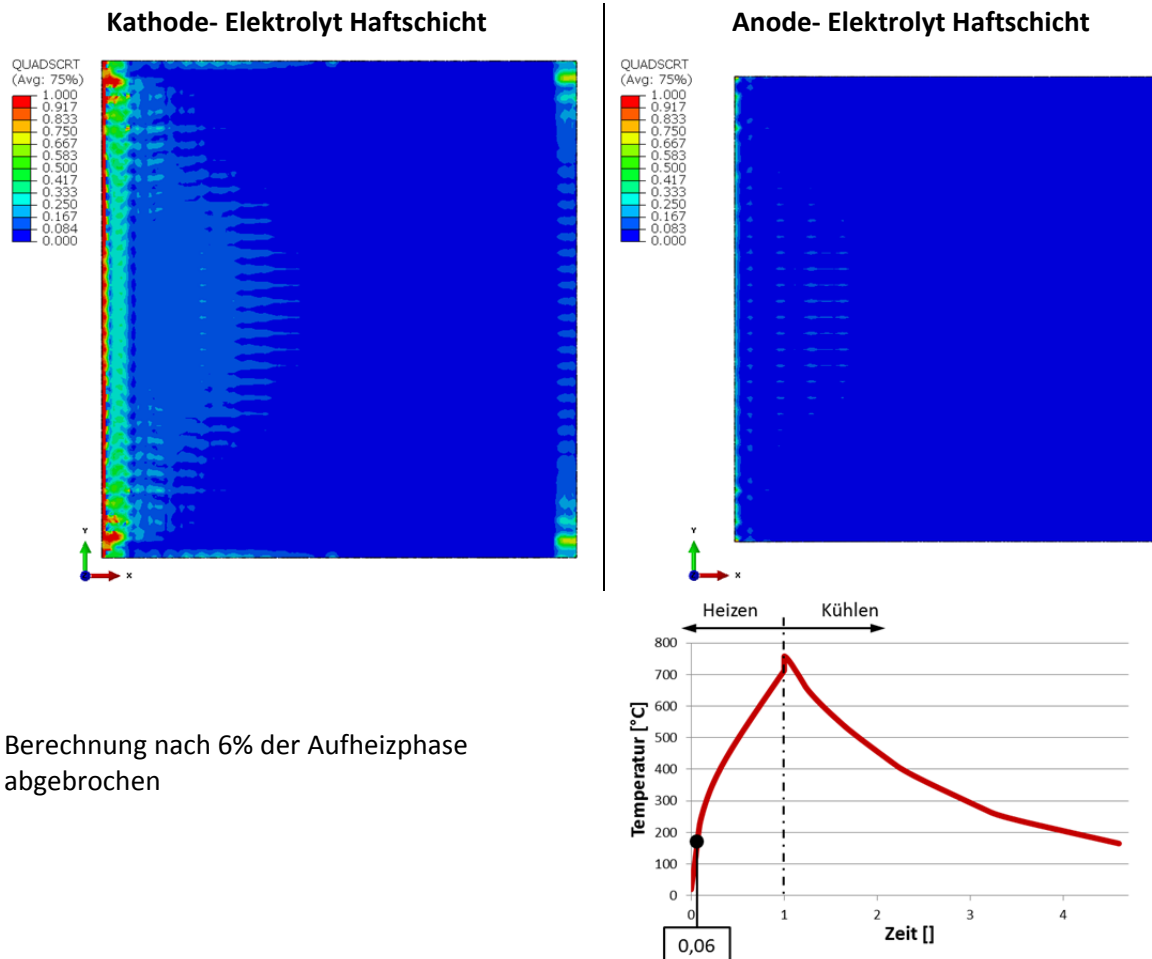
Bei Betrachtung von Abbildung 8-9 wird konstatiert, dass die Berechnung sehr früh (14% der Aufheizzeit) abgebrochen hat. Dies kann durch die feinere Vernetzung hervorgerufene schnellere kritische Schädigung von Einzelementen erklärt werden. Aus der Visualisierung des Rissinitierungsparameters an der Kathode- Elektrolyt Haftschrift kann der Beginn der Delaminierung an der Luftanströmungsseite beobachtet werden. Im Gegensatz zum „normalen“ Netz (Abbildung 8-5) weisen die horizontalen Kanten sehr geringe Wahrscheinlichkeiten für Rissinitierung auf, und die Delaminierungen in den Ecken der Rückseite beginnen deutlich lokaler.

An der Anoden- Elektrolyt Grenzschicht (Abbildung 8-9) wird eine etwas andere Rissinitierung als beim „normalen“ Netz (Abbildung 8-5) vorhergesagt. Dieser Umstand lässt sich aus der starken Abhängigkeit der Rissinitierung der Anoden- Elektrolyt Schicht von dem Rissfortschritt der Kathoden- Elektrolyt Haftschrift ableiten. Da offensichtlich die Kathode- Elektrolyt Grenzschicht zuerst geschädigt wird, kommt es zu einer Steifigkeitsdegradation der geschädigten Bereiche, die zu einer Spannungsumlagerung führen. Diese ist beim „normalen“ Netz stärker, da die Elemente größer sind.



**„Extra feine“ Netzdichte (Knotenabstand 1 mm)**

Bei dieser und den folgenden Auswertungen wird auf den Spannungsvergleich verzichtet, da die Ergebnisse sehr ähnlich jener der „feinen“ Netzdichte sind. Somit wurde lediglich der Rissinitiierungsparameter (QUADSCRT) beim Abbruch der Rechnung visualisiert (Abbildung 8-10).



Berechnung nach 6% der Aufheizphase abgebrochen

Abbildung 8-10: Rissinitiierungsparameter *Barenblatt* Ansatz mit „extra feiner“ Netzdichte

Die Berechnung hat beim *Barenblatt* Ansatz mit „extra feiner“ Netzdichte bereits nach 6% der Aufheizzeit, aufgrund der fortgeschrittenen Steifigkeitsdegradation durch Risswachstum von einigen Elementen, abgebrochen (Abbildung 8-10). Die Schädigung ist wie bei den zwei anderen *Barenblatt* Ansätzen an der Kathode- Elektrolyt Haftschicht im Bereich des Lufteinlasses am größten. An der Anoden- Elektrolyt Haftschicht kann zu diesem Zeitpunkt des thermischen Zyklus noch keine Delaminierung festgestellt werden.

Für die bessere Vergleichbarkeit zwischen den verschiedenen Netzdichten beim Ansatz nach *Barenblatt* werden die Rissinitiierungsparameter der zwei Haftschichten für einen gemeinsamen Zeitpunkt (6% der Aufheizzeit) visualisiert (Abbildung 8-11).

Vergleich bei 6% der Aufheizphase

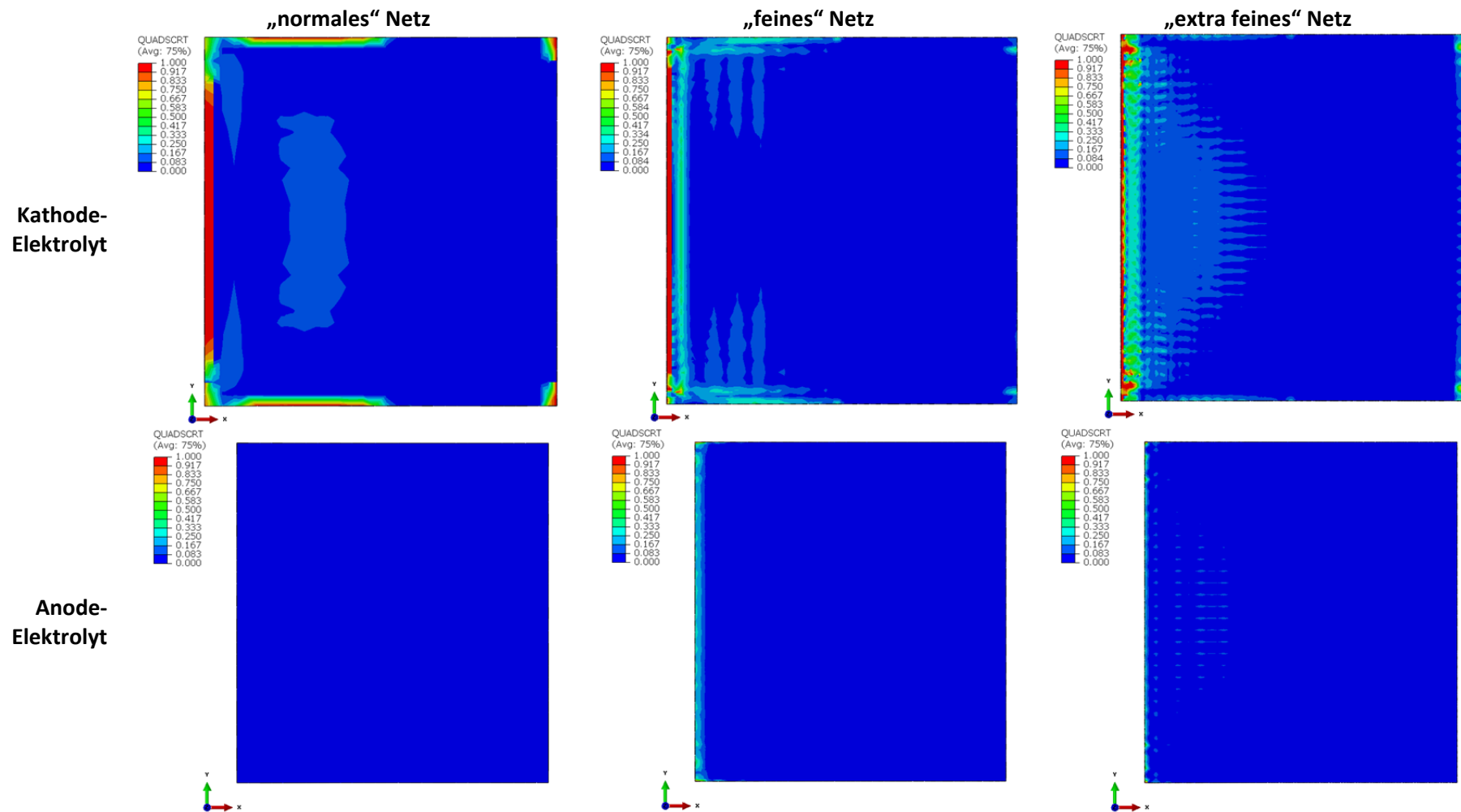


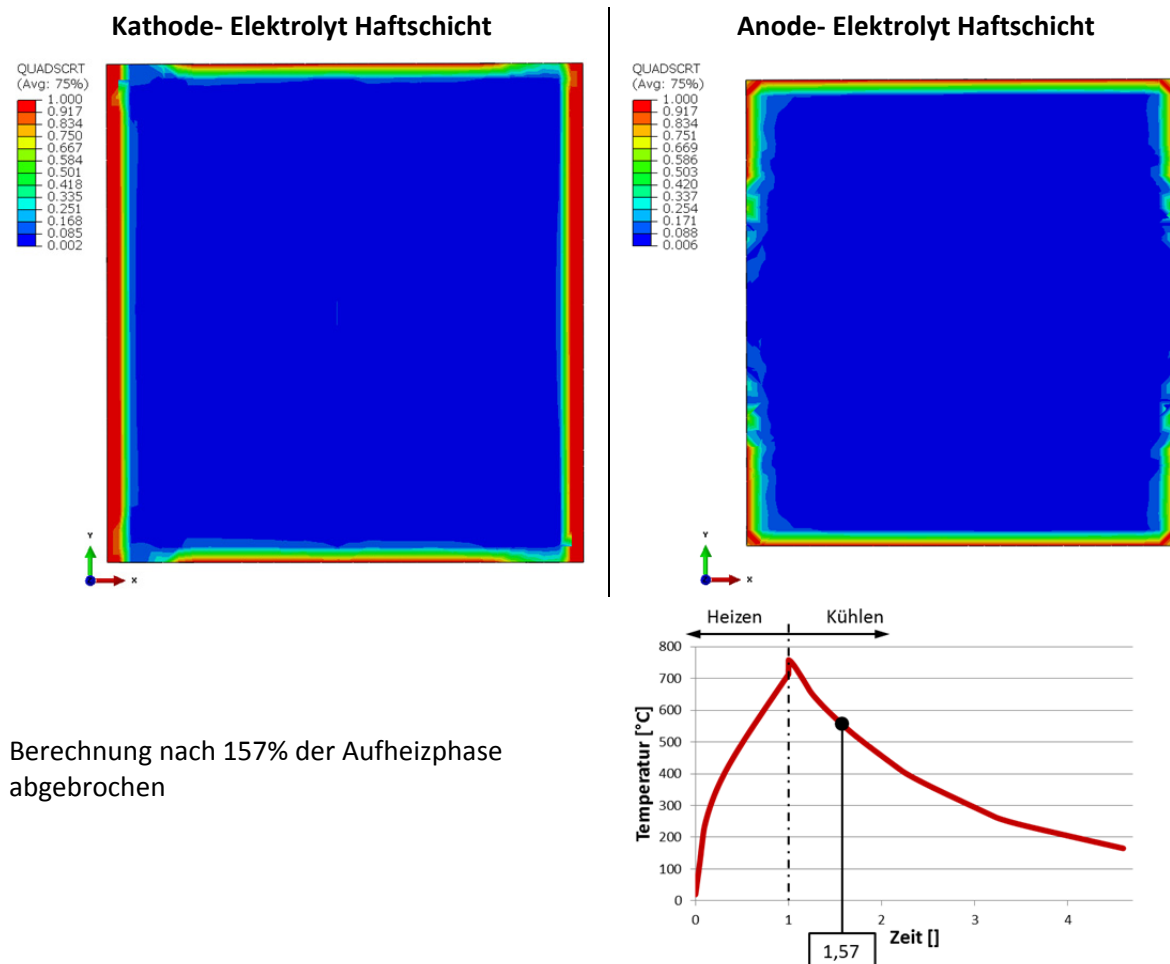
Abbildung 8-11: Vergleich der verschiedenen Netzdichten, *Barenblatt*, 6% der Aufheizzeit

In Abbildung 8-11 ist ein Vergleich der verschiedenen Netzdichten bei Verwendung des Ansatzes nach *Barenblatt* bei 6% der Aufheizzeit ersichtlich. An der Kathode- Elektrolyt Schicht können sehr ähnliche Delaminierungsvorgänge identifiziert werden. Lediglich die Berechnung mit „normaler“ Netzdichte weist auf den horizontalen Kanten und an den Ecken der Rückseite höhere Rissinitiierungswerte auf, welche durch das deutlich größere Netz zu begründen sind.

An den Anode- Elektrolyt Grenzschicht des „feinen“ und „extra feinen“ Netzes werden etwas höhere Rissinitiierungswahrscheinlichkeiten evaluiert (Abbildung 8-11). Dieses Verhalten kann durch die größere Spannungsumlagerung beim „normalen“ Ansatz, aufgrund des größeren Delaminierungsbereichs, bedingt durch die Tatsache, dass die Elemente deutlich größer sind, erklärt werden.

### 8.4.3.2 Ergebnisse Rice / Falk

#### „Normale“ Netzdichte (Knotenabstand 4 mm)



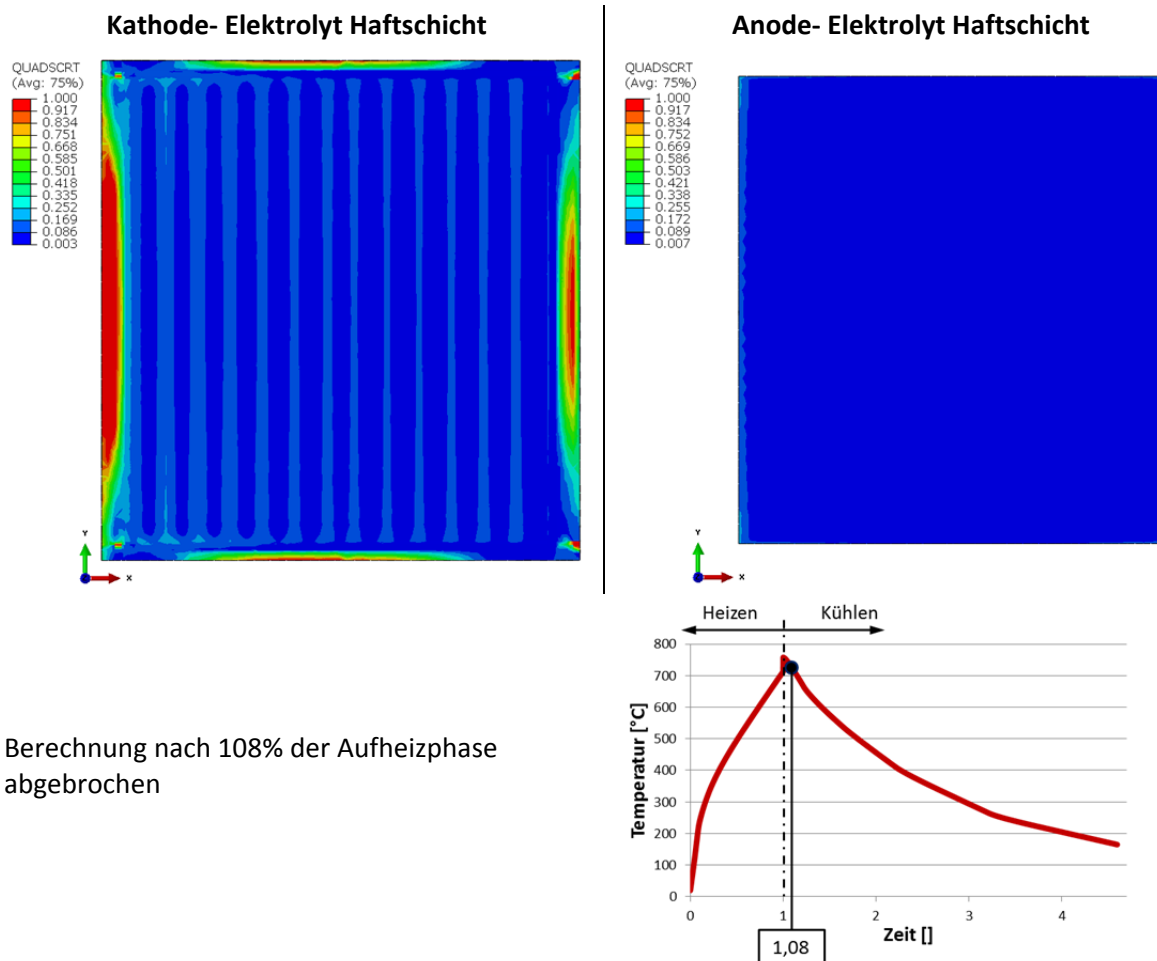
Berechnung nach 157% der Aufheizphase abgebrochen

Abbildung 8-12: Rissinitiierungsparameter Rice/Falk Ansatz mit „normaler“ Netzdichte

Die Berechnung mit „normaler“ Netzdichte und dem Ansatz nach *Rice/Falk* wird erst nach dem größten Temperaturgradienten der Abkühlphase (157% der Aufheizzeit) abgebrochen (Abbildung 8-12). An der Kathode- Elektrolyt Haftschicht wird am kompletten Rand eine Delaminierung vorhergesagt. Aufgrund dieses großen Rissfortschritts ist ebenfalls die Anode- Elektrolyt Grenzschicht signifikant geschädigt. Ein direkter Vergleich der Abbildung 8-12 mit dem Ansatz nach *Barenblatt* ist nicht möglich, da diese Rechnung erst deutlich später im thermischen Zyklus abgebrochen wurde.

Eine detaillierte Gegenüberstellung aller Ansätze zum selben Zeitpunkt und für verschiedene Netzdichten wird in Kapitel 8.4.3.6 abgebildet.

**„Feine“ Netzdichte (Knotenabstand 2 mm)**

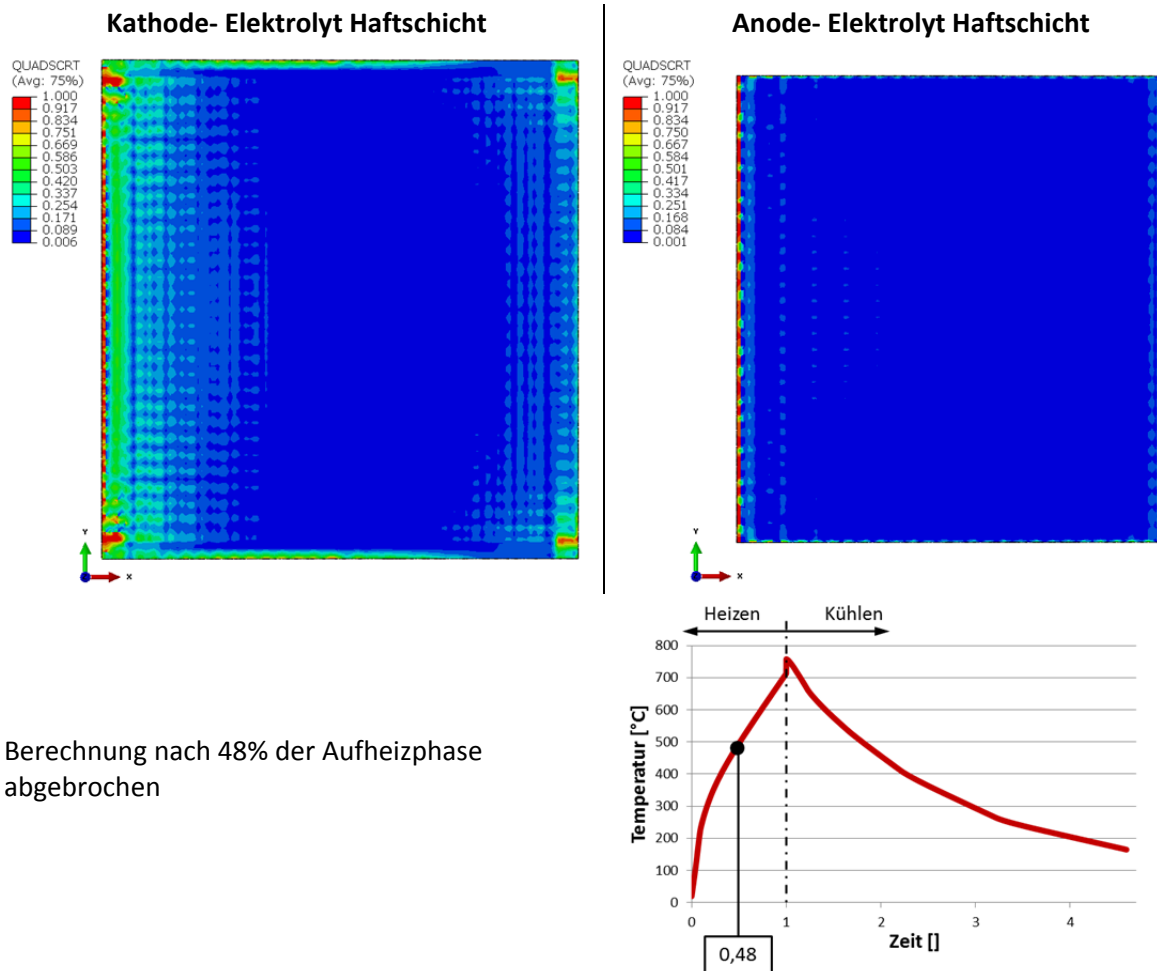


Berechnung nach 108% der Aufheizphase abgebrochen

Abbildung 8-13: Rissinitierungsparameter Rice/Falk Ansatz mit „feiner“ Netzdichte

Wie bereits beim *Barenblatt* Ansatz beobachtet wurde, kann auch beim *Rice/Falk* Modell erkannt werden, dass mit geringerem Knotenabstand und somit stärkerer Einzelschädigung von Elementen, die Rechnung früher abgebrochen hat. In Abbildung 8-13 wird abermals die größte Delaminierung an der Kathode- Elektrolyt Grenzschicht festgestellt. Die streifenförmige Änderung des Rissinitierungsparameters im Inneren der Haftschrift geht auf die lokale Biegung der Zelle aufgrund des Interkonnektors zurück.

**„Extra feine“ Netzdichte (Knotenabstand 1 mm)**



Berechnung nach 48% der Aufheizphase abgebrochen

Abbildung 8-14: Rissinitiiierungsparameter Rice/Falk Ansatz mit „extra feiner“ Netzdichte

In Abbildung 8-14 ist eine Delaminierung an der Kathode- Elektrolyt Haftschrift an der Lufteinlassseite und im Eckbereich der Ausströmseite erkennbar. An der Anode- Elektrolyt Grenzschicht findet ebenfalls bereits an der Anströmrichtung eine Rissinitiiierung statt. Im Inneren der Kathode- Elektrolyt Schicht können Fluktuationen des Rissinitiiierungsparameters durch die Spannungsschwankung der *Kontinuum- Schalen- Elemente* beobachtet werden.

Wie bereits beim Ansatz nach *Barenblatt* angewendet, werden auch nach diesen Simulationen die Ergebnisse der verschiedenen Rechnungen bei 6% der Aufheizzeit verglichen (Abbildung 8-15).

**Vergleich bei 6% der Aufheizphase**

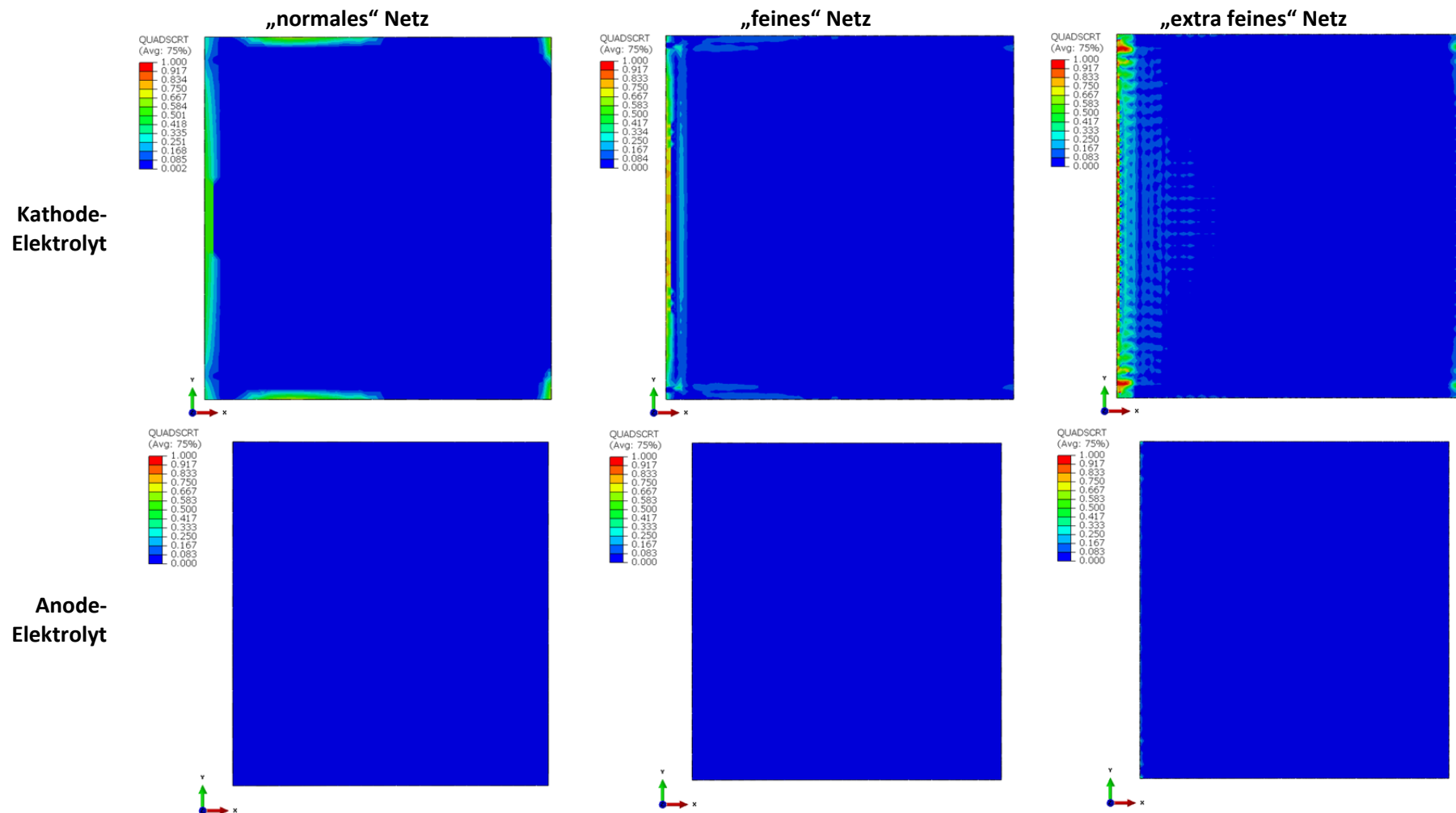
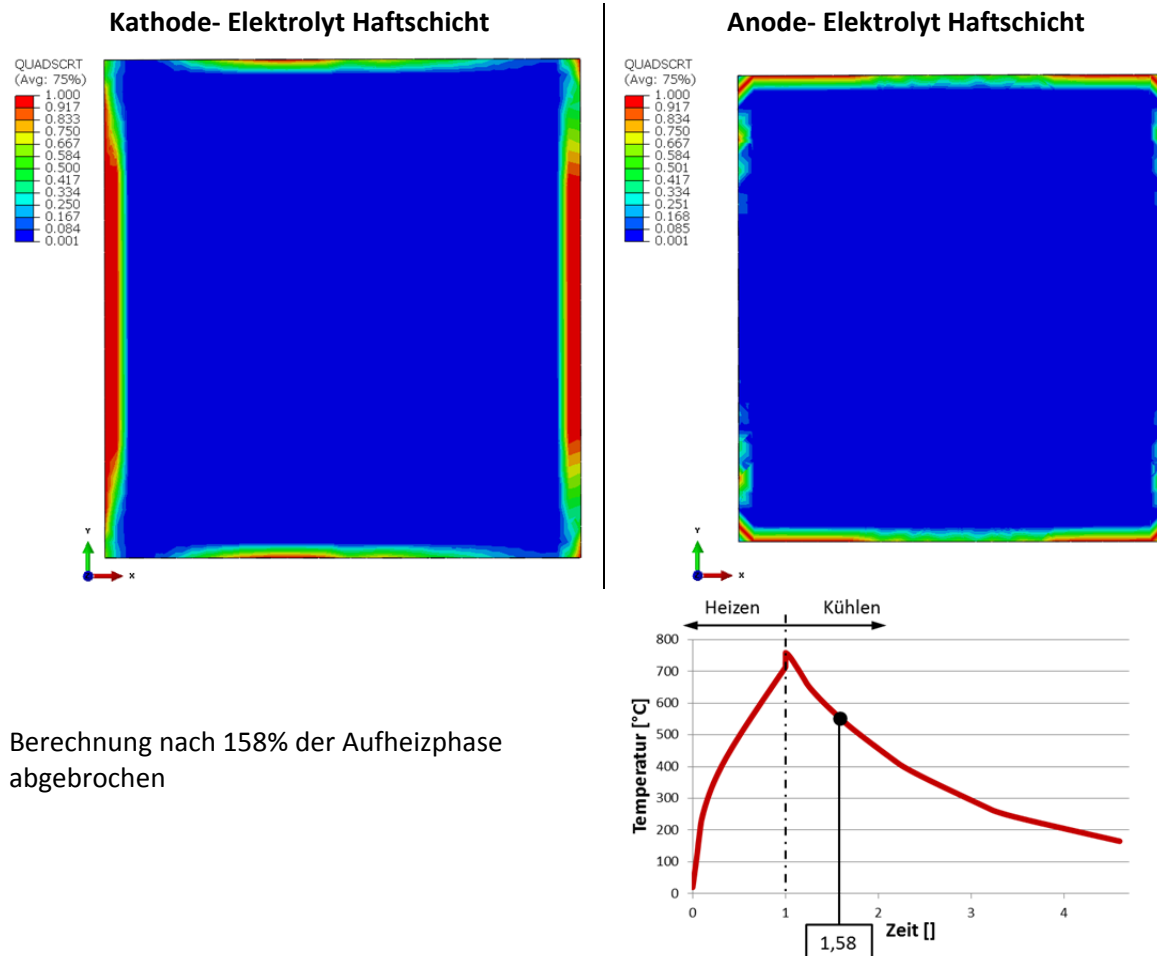


Abbildung 8-15: Vergleich der verschiedenen Netzdichten, Rice/Falk, 6% der Aufheizzeit

Durch Vergleich der verschiedenen Netzdichten im Ansatz nach *Rice/Falk* (Abbildung 8-15) wird eine signifikante Schwankung zwischen den Rissinitiierungswerten der Kathode- Elektrolyt Haftschrift des „normalen“ und „extra feinen“ Netzes abgeleitet. Während an der Anströmseite der „normalen“ Netzdichte der Rissinitiierungsparameter QUADSCRT nur ungefähr 0,5 beträgt, ist bei einer „extra feinen“ Netzdichte mit einem Wert von eins bereits ein Riss vorhanden. An der Anoden- Elektrolyt Grenzschicht sind keine wesentlichen Unterschiede erkennbar (Abbildung 8-15).

### 8.4.3.3 Ergebnisse Hillerborg

#### „Normale“ Netzdichte (Knotenabstand 4 mm)



Berechnung nach 158% der Aufheizphase abgebrochen

Abbildung 8-16: Rissinitiierungsparameter Hillerborg Ansatz mit „normaler“ Netzdichte

In Abbildung 8-16 ist eine Delaminierung bei 158% der Aufheizzeit an der Kathode- Elektrolyt Haftschrift im Bereich der Lufteinlass- und Auslasseite erkennbar. Des Weiteren sind erhöhte Rissinitiierungswerte entlang der horizontalen Kanten ableitbar. An der Anode- Elektrolyt Grenzschicht werden ebenfalls an den Kanten parallel zur X- Richtung Rissinitiierungen festgestellt (Abbildung 8-16).

**„Feine“ Netzdicke (Knotenabstand 2 mm)**

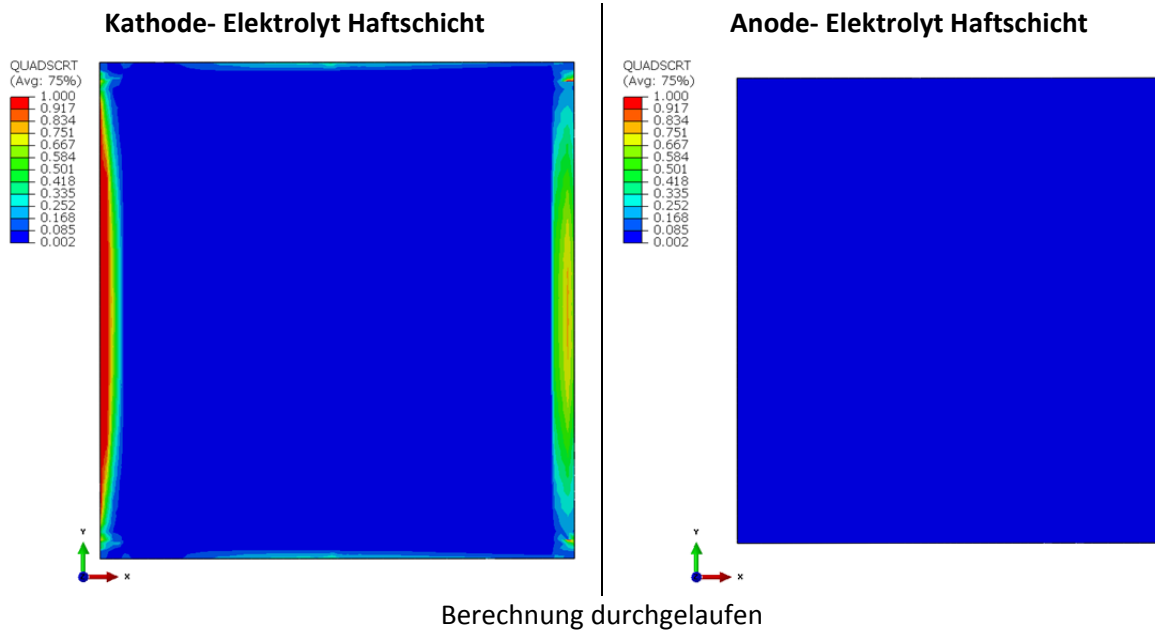


Abbildung 8-17: Rissinitiationsparameter *Hillerborg* Ansatz mit „feiner“ Netzdicke

Das Modell mit „feiner“ Netzdicke und Ansatz nach *Hillerborg* konnte als erstes für den kompletten thermischen Zyklus ohne Abbruch durch das Programm berechnet werden. Im Gegensatz zu den zwei zuvor abgebildeten Ansätzen wird bei diesem Modell ebenfalls erstmalig festgestellt, dass die Berechnung mit feinerem Netz numerisch stabiler ist als jene mit gröberer Diskretisierung. In Abbildung 8-17 kann lediglich an der Lufteinlassseite der Kathode- Elektrolyt Haftschrift eine Delaminierung festgestellt werden.

**„Extra feine“ Netzdicke (Knotenabstand 1 mm)**

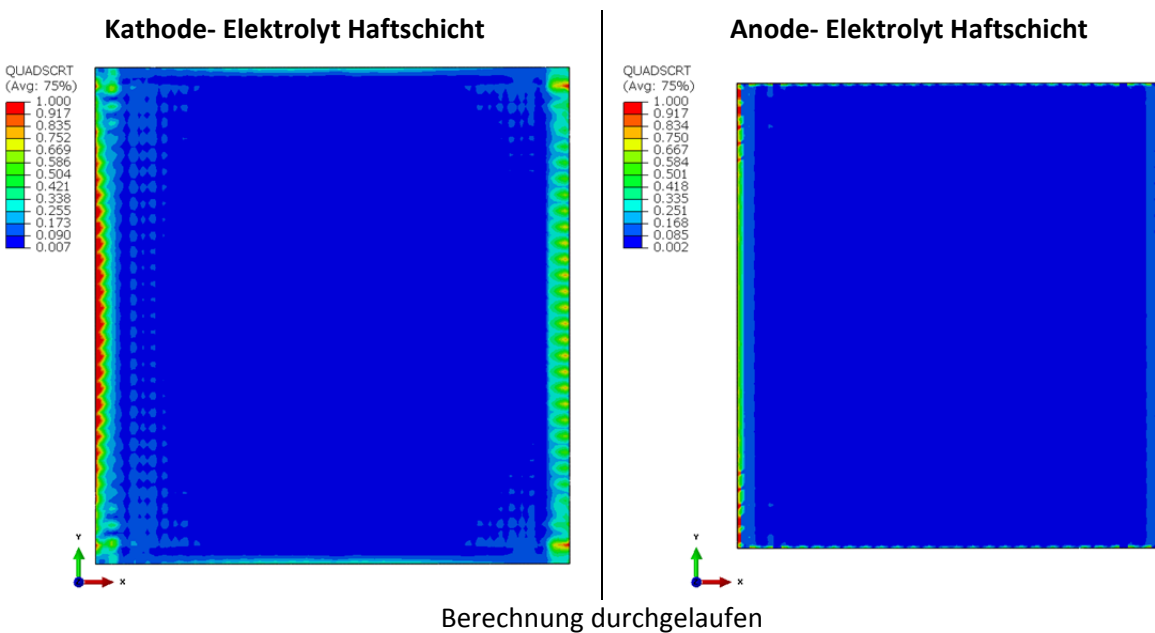


Abbildung 8-18: Rissinitiationsparameter *Hillerborg*- Ansatz mit „extra feiner“ Netzdicke



Die Abbildung 8-18 zeigt nur sehr lokal, in der Mitte der Anströmseite der Kathode- Elektrolyt Grenzschicht und im Bereich der Ecken der gegenüberliegenden Seite, eine Delaminierung. Leichte Rissinitiierungen sind ebenfalls an der Anode- Elektrolyt Haftschrift feststellbar. Die Berechnung konnte für den gesamten thermischen Zyklus durchgeführt werden. In weiterer Folge der Auswertung werden, wie bei den vorhergehenden Ansätzen, wiederum die Ergebnisse der verschiedenen Netzdichten bei 6% der Aufheizzeit visualisiert (Abbildung 8-19).

Vergleich bei 6% der Aufheizphase

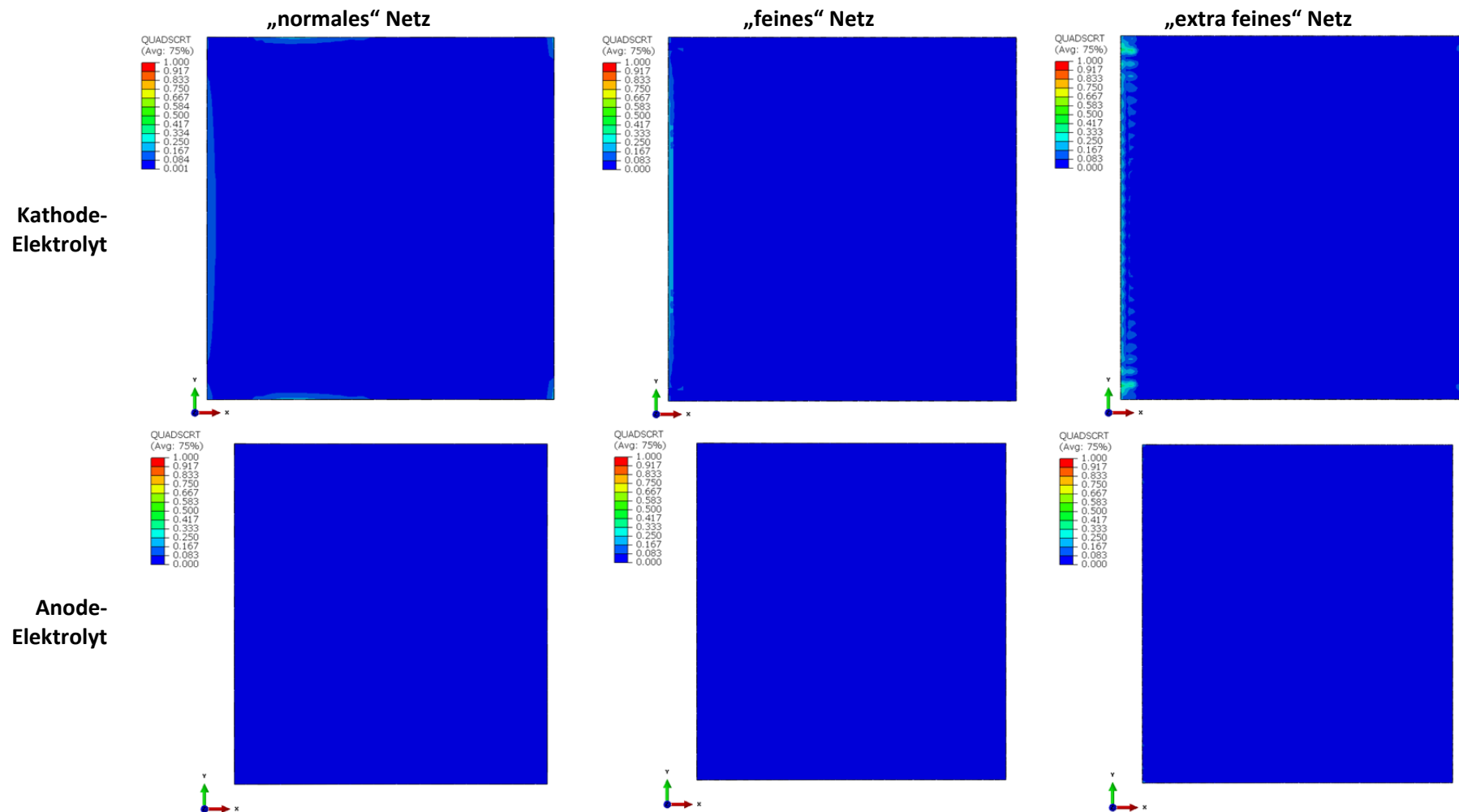


Abbildung 8-19: Vergleich der verschiedenen Netzdichten, Hillerborg, 6% der Aufheizzeit

In Abbildung 8-19 sind nur sehr geringe Rissinitiierungswerte bei 6% der Aufheizzeit ersichtlich. Allerdings ist die Streuung zwischen „normalem“ (QUADSCRT ungefähr 0,08) und „extra feinem“ (QUADSCRT ungefähr 0,25) Netz an der Kathode- Elektrolyt Haftschrift auffallend. An der Anode- Elektrolyt Grenzschicht, in Abbildung 8-19, können zu dem gewählten Zeitpunkt keinerlei Rissinitiierungswerte ungleich Null festgestellt werden.

#### 8.4.3.4 Ergebnisse Diehl

Beim Ansatz von *Diehl* wird angenommen, dass lediglich die kritische Grenzflächenspannung als Materialparameter für die *Kohäsivelemente* bekannt ist. Alle anderen Parameter werden unter Verwendung des Knotenabstands berechnet.

#### „Normale“ Netzdicke (Knotenabstand 4 mm)

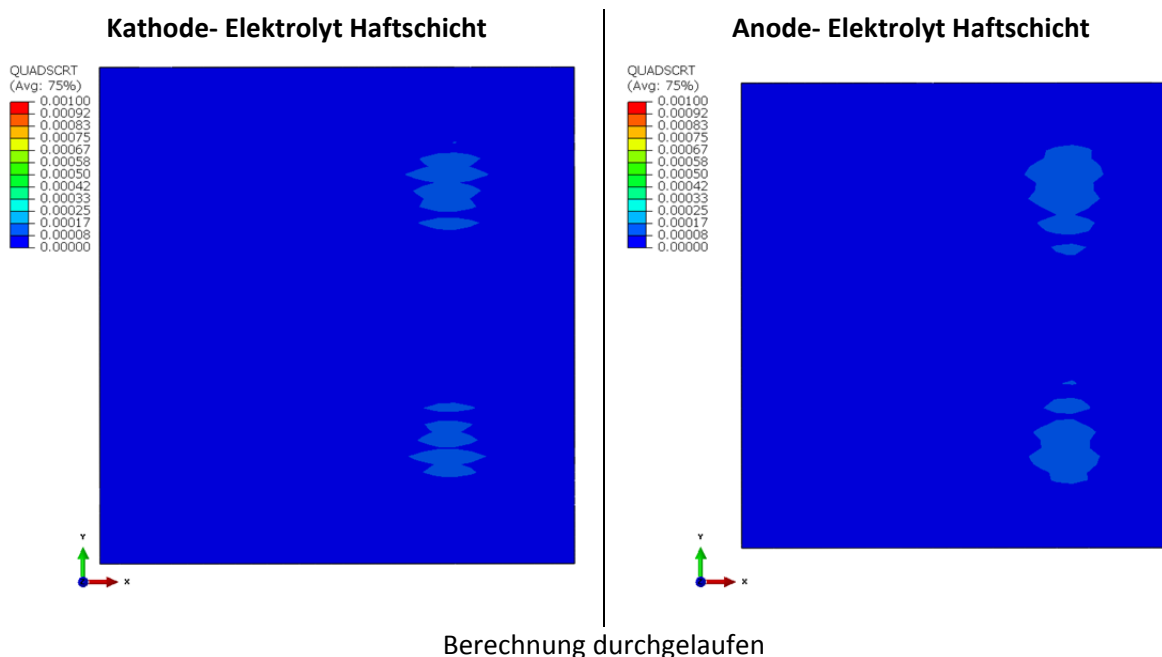
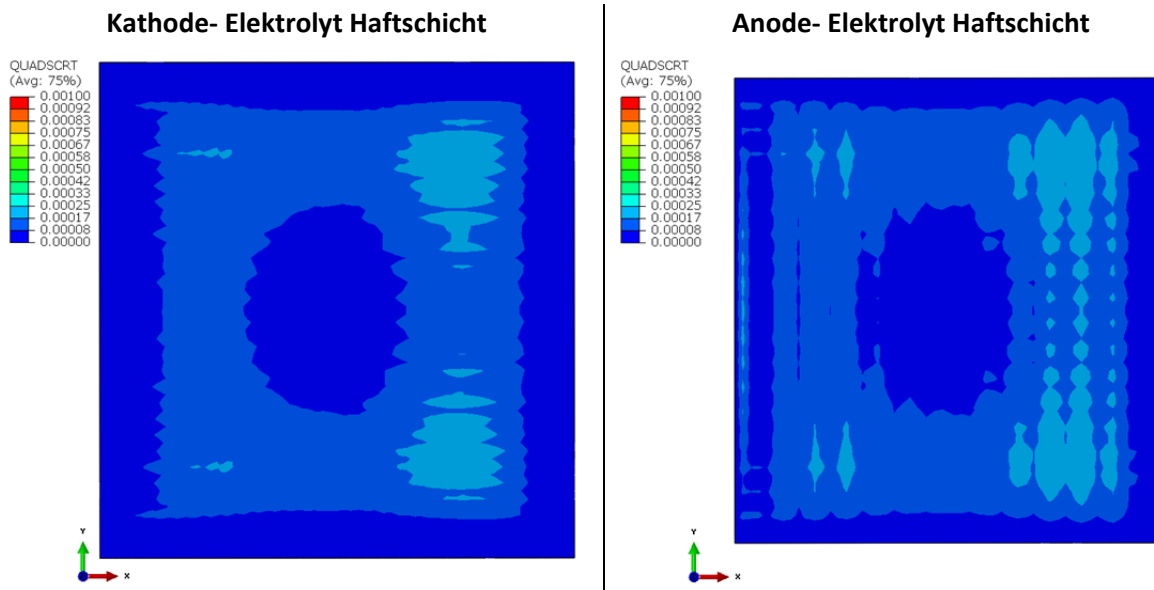


Abbildung 8-20: Rissinitiierungsparameter *Diehl* Ansatz mit „normaler“ Netzdicke

In Abbildung 8-20 ist der Rissinitiierungsparameter der beiden Haftschriften bei Verwendung des Ansatzes nach *Diehl* und „normaler“ Netzdicke visualisiert. Während des gesamten thermischen Zyklus können keinerlei Delaminierungen festgestellt werden. Die Werte des Rissinitiierungsparameters sind lediglich im Inneren der beiden Grenzschichten marginal höher (QUADSCRT = 0,17‰) als im Rest der Schicht (QUADSCRT = 0). Die geringfügig erhöhten Bereiche lassen sich durch die leichten Spannungsschwankungen zwischen den Elementen ableiten. Bei dieser Simulation wird erstmalig, im Gegensatz zu den vorherigen Modellen, der höchste Rissinitiierungsparameter nicht am Rand der Grenzschicht vorhergesagt. Bei Betrachtung der Querschubspannungen (Abbildung 5-15 und Abbildung 5-16) kann dieses Ergebnis als physikalisch nicht sinnvoll erachtet werden. Der Grund für dieses Modellverhalten ist in den, im Vergleich zu den anderen Modellen, extrem unterschiedlichen Werkstoffparametern und der doppelten Abhängigkeit von der Netzdicke (sowohl Anfangssteifigkeit, als auch kritische Grenzflächenspannung) zu finden (Tabelle 7 bis Tabelle 10).

**„Feine“ Netzdichte (Knotenabstand 2 mm)**

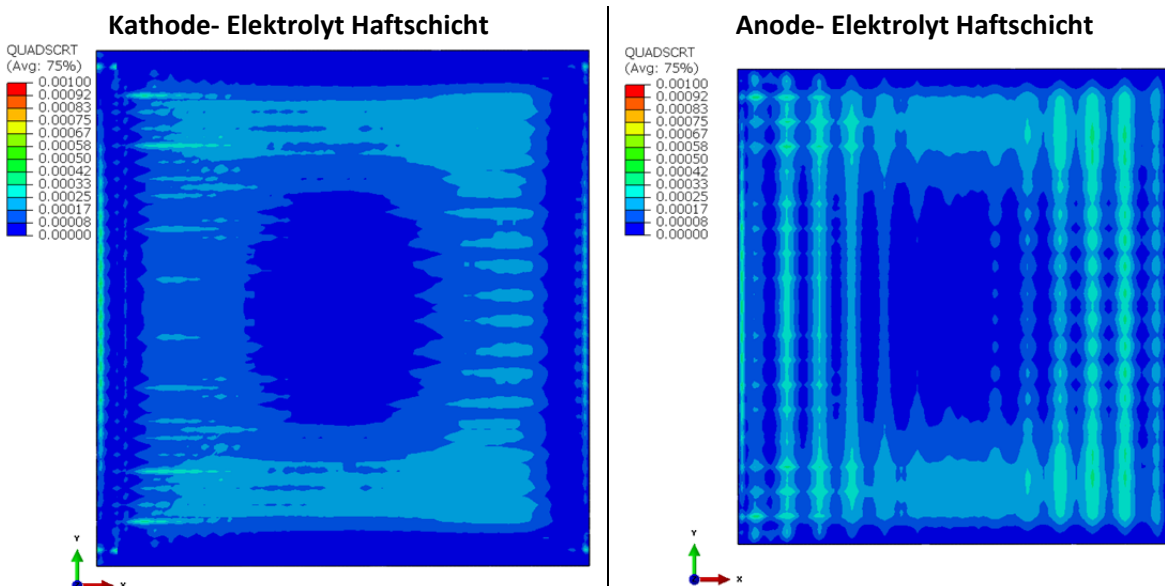


Berechnung durchgelaufen

Abbildung 8-21: Rissinitiiierungsparameter *Diehl* Ansatz mit „feiner“ Netzdichte

Im Modell mit „feiner“ Netzdichte und *Diehl* Ansatz (Abbildung 8-21) kann ein ähnliches Verhalten wie in Abbildung 8-20 abgeleitet werden. Die höchsten QUADSCRT- Werte befinden sich ebenfalls im Inneren der Schicht, und der Rand weist konstant einen Wert von Null auf. Lediglich die absoluten Werte des Rissinitiiierungsparameters sind, aufgrund der höheren Spannungsfluktuationen, in Abbildung 8-21 höher als in Abbildung 8-20.

**„Extra feine“ Netzdichte (Knotenabstand 1 mm)**



Berechnung durchgelaufen

Abbildung 8-22: Rissinitiiierungsparameter *Diehl* Ansatz mit „extra feiner“ Netzdichte

In Abbildung 8-22 können erstmalig beim *Diehl* Ansatz auch leicht erhöhte Rissinitiiierungsparameterwerte an den Zellenkanten festgestellt werden. Da für alle *Diehl* Simulationen der gleiche Maßstab verwendet wurde, können bei Vergleich der Abbildungen deutlich höhere Wahrscheinlichkeiten für Rissinitiiierung in Abbildung 8-22 abgeleitet werden. Generell

werden die Modelle mit den Materialparametern nach *Diehl* (Abbildung 8-20 bis Abbildung 8-22) als physikalisch unbrauchbar eingestuft. Die Gründe dafür sind die sehr niedrigen QUADSCRT- Werte am Rand der Grenzschicht und die große Schwankung der Rissinitiierungsparameter zwischen den verschiedenen Netzdichten. Diese Schwankung wird in Kapitel 8.4.4 noch genauer spezifiziert.

Da die Parameter des *Diehl* Ansatzes mit einem  $\delta^f$  Wert (siehe Formel (3-73)) von 5% des Knotenabstands berechnet und die Ergebnisse als nicht zufriedenstellend identifiziert wurden, wird beim Ansatz von *Diehl*<sub>0,1</sub> ein  $\delta^f$  Wert (siehe Formel (3-73)) von 0,1% des Netzabstandes verwendet.

### 8.4.3.5 Ergebnisse Diehl 0,1

#### „Normale“ Netzdichte (Knotenabstand 4 mm)

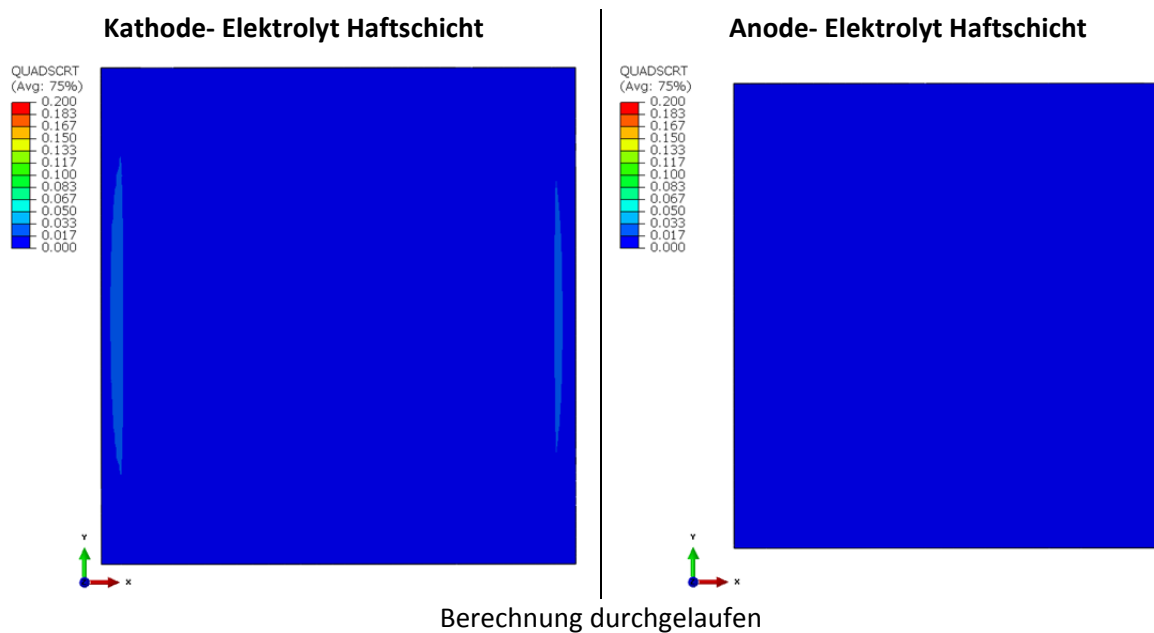


Abbildung 8-23: Rissinitiierungsparameter *Diehl*<sub>0,1</sub> Ansatz mit „normaler“ Netzdichte

In Abbildung 8-23 werden etwas innerhalb der Luftanström- und Luftausström- Kante sehr geringe Wahrscheinlichkeiten für Rissinitiierung an der Kathode- Elektrolyt Haftschrift vorhergesagt. An der Anode- Elektrolyt Grenzschicht ist kein Wert des Rissinitiierungsparameters ungleich Null erkennbar.

**„Feine“ Netzdichte (Knotenabstand 2 mm)**

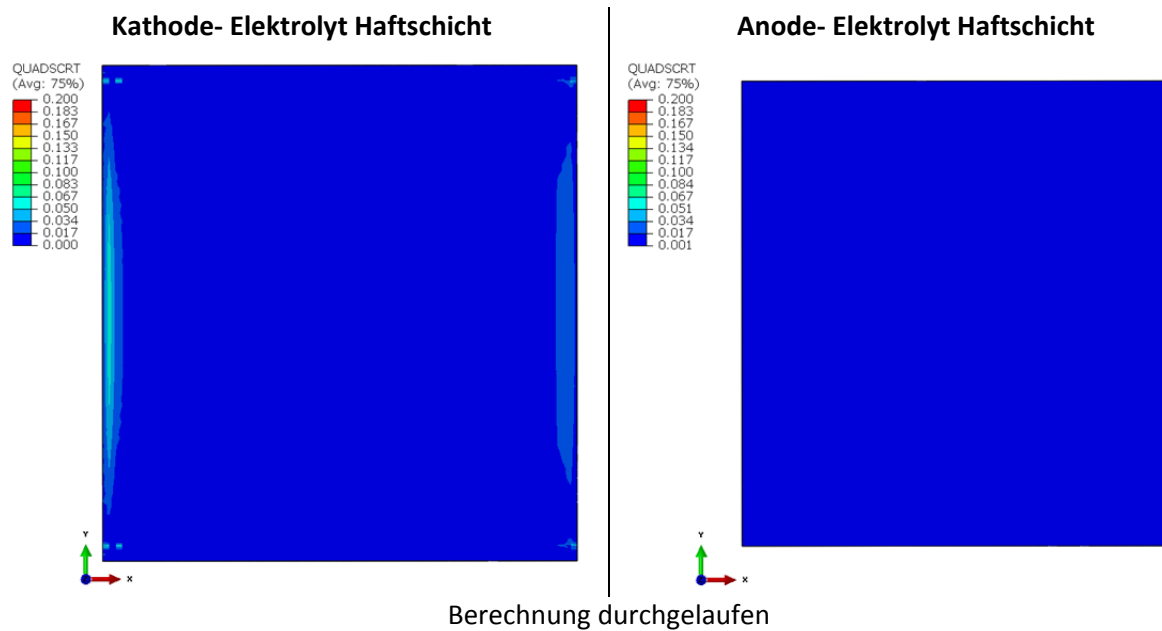


Abbildung 8-24: Rissinitiationsparameter *Diehl*<sub>0,1</sub> Ansatz mit „feiner“ Netzdichte

Bei Verwendung eines „feinen“ Netzes und dem *Diehl*<sub>0,1</sub> Ansatz (Abbildung 8-24) können an der Kathode- Elektrolyt Haftschnitt höhere Werte des Rissinitiationsparameters als beim Modell mit „normalen“ Netz (Abbildung 8-23) festgestellt werden. Die Bereiche der erhöhten Werte sind sehr ähnlich zum „normalen“ Netz (Abbildung 8-23).

**„Extra feine“ Netzdichte (Knotenabstand 1 mm)**

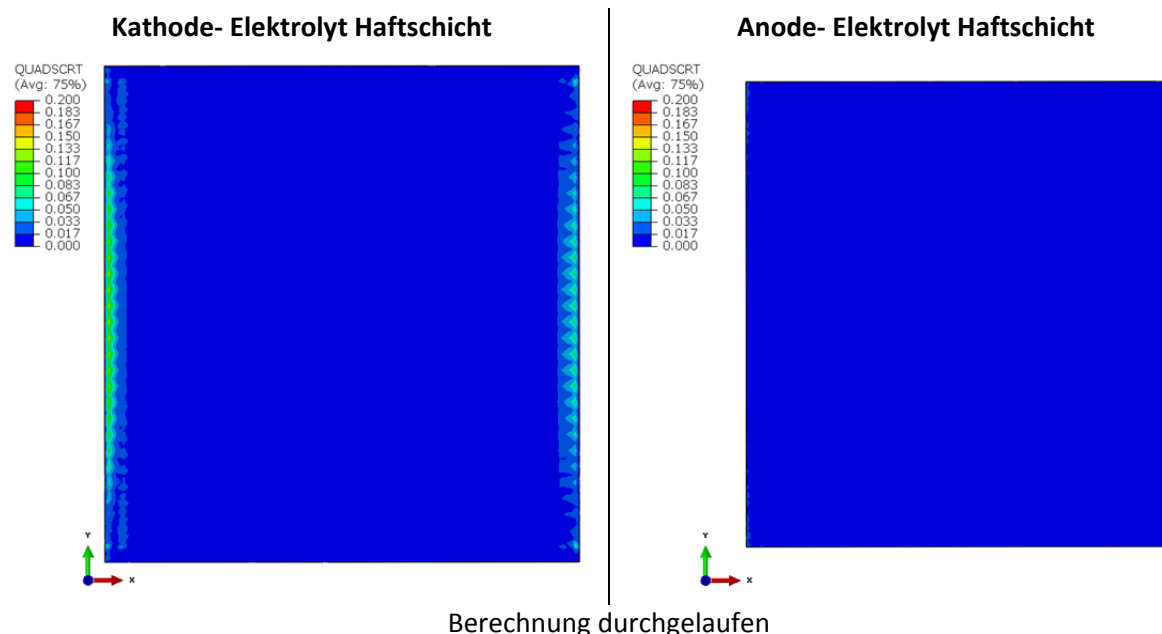


Abbildung 8-25: Rissinitiationsparameter *Diehl*<sub>0,1</sub> Ansatz mit „extra feiner“ Netzdichte

In Abbildung 8-25 können auch direkt an der Kante der Lufteinlass- und Auslassseite erhöhte Rissinitiationsparameterwerte konstatiert werden. Die Bereiche mit erhöhten Wahrscheinlichkeiten der Delaminierung weisen signifikant unterschiedliche QUADSCRT- Werte zu den zwei anderen *Diehl*<sub>0,1</sub> Ansätzen (Abbildung 8-23 und Abbildung 8-24) auf. Somit kann bereits qualitativ eine große

Streuung zwischen den Netzdichten des *Diehl*<sub>0,1</sub> Ansatzes festgestellt werden (genauere Untersuchung in Kapitel 8.4.4.).

Nach der Einzelauswertung jeder Berechnung des Simulationsplans wird eine Gegenüberstellung der verschiedenen Ansätze für die verschiedenen Netzdichten und bei 6% der Aufheizzeit visualisiert (Abbildung 8-26 bis Abbildung 8-28). Da die Ansätze nach *Diehl* und *Diehl*<sub>0,1</sub> in sehr kleine Rissinitiierungsparameter resultieren und diese im Vergleich zu den anderen Modellen bei 6% der Aufheizzeit nicht sichtbar sind, werden diese Simulationen von dem visuellen Vergleich ausgenommen.

### 8.4.3.6 Vergleich über alle Ansätze

#### Vergleich bei 6% der Aufheizphase

#### Kathode- Elektrolyt Haftschnitt

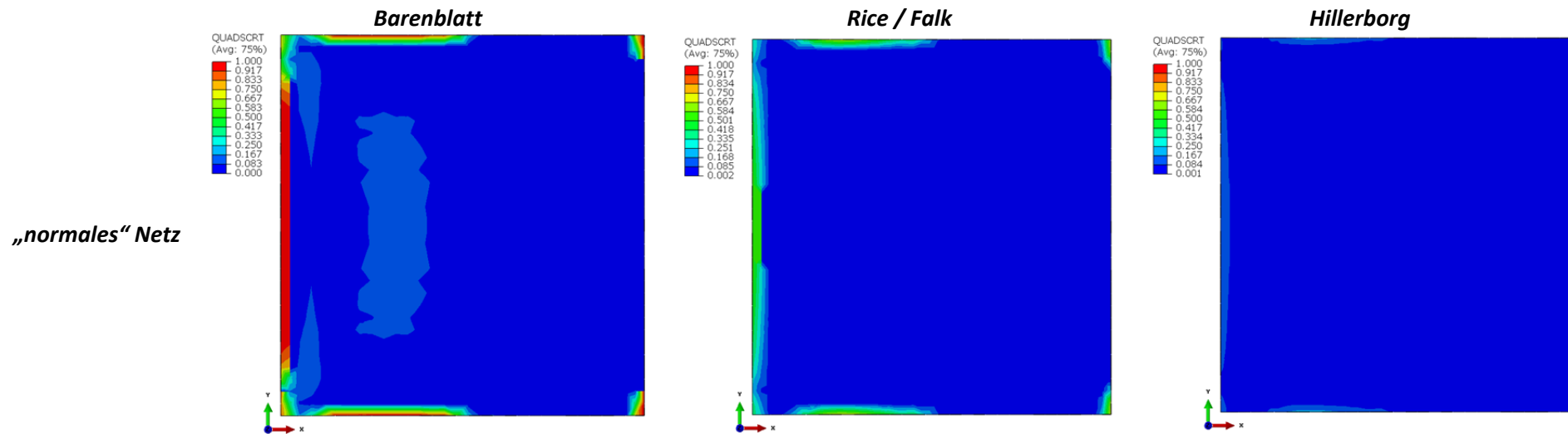
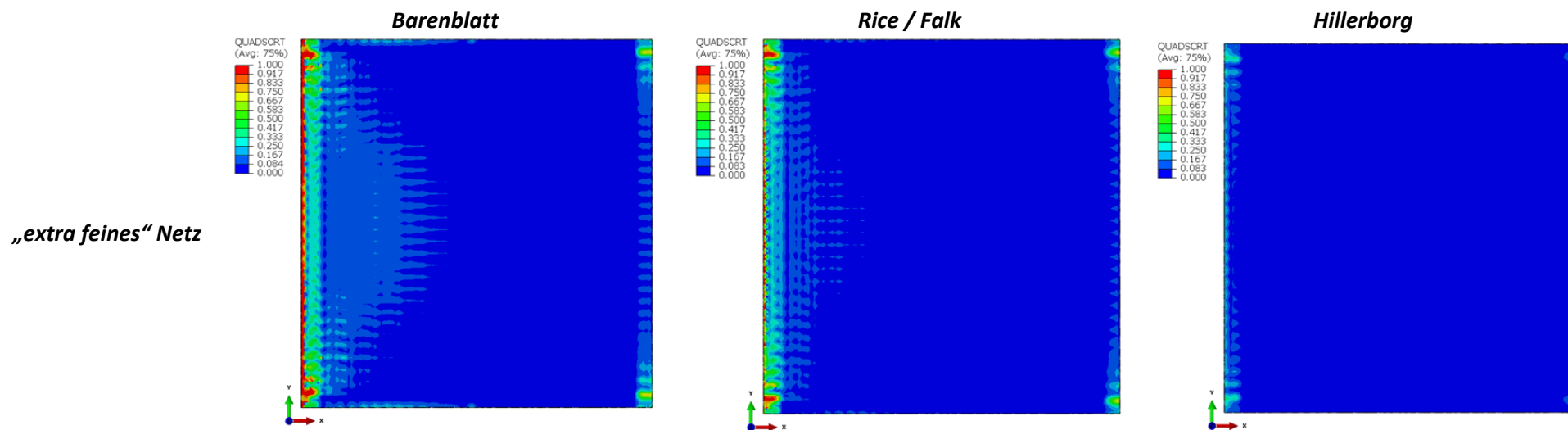
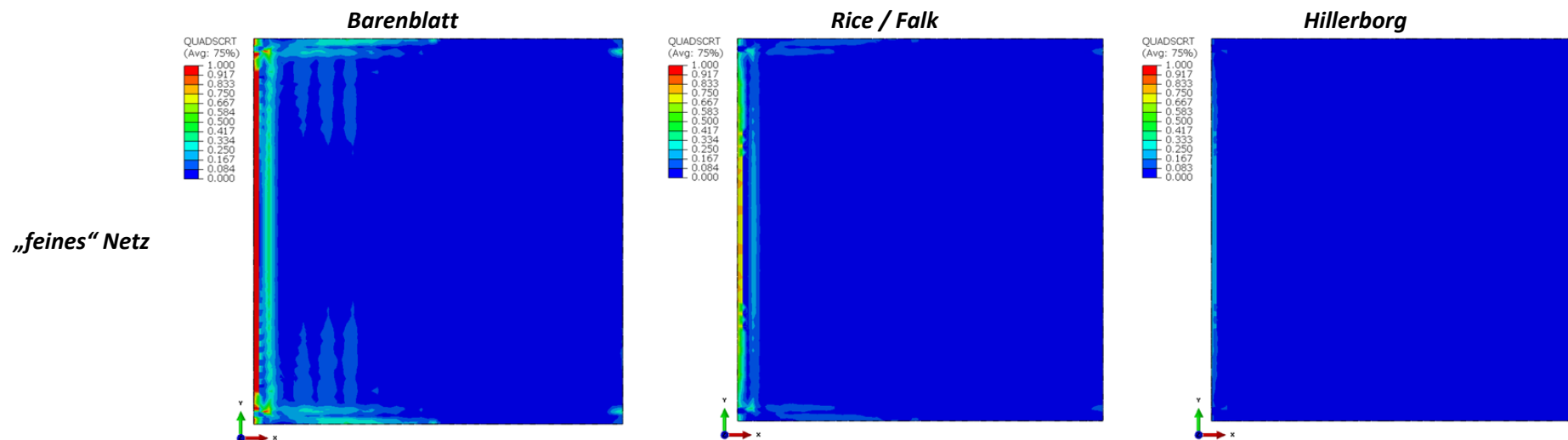


Abbildung 8-26: Vergleich der verschiedenen Ansätze bei 6% der Aufheizzeit und „normales“ Netz, Kathode- Elektrolyt Haftschnitt





Bei Vergleich der verschiedenen Ansätze an der Kathode- Elektrolyt Haftschrift (Abbildung 8-26 bis Abbildung 8-28) kann abgeleitet werden, dass der Ansatz nach *Barenblatt* den konservativsten darstellt. Diese Aussage wurde bereits bei der Analyse der kritischen Grenzflächenspannungen getroffen (Kapitel 8.4.2) und durch die Abbildung 8-26 bis Abbildung 8-28 bestätigt. Bereits bei 6% der Aufheizzeit kommt es bei diesem Modell zu Delaminierungen an der Kante der Luft- Anströmseite.

Bei allen Gegenüberstellungen der Kathode- Elektrolyt Grenzschicht können die gleichen Bereiche erhöhter Rissinitiierungsparameterwerte bei einer bestimmten Netzdicke beobachtet werden. Lediglich die Höhe der Wahrscheinlichkeit der Delaminierung schwankt zwischen diesen drei Modellen. Im Gegensatz dazu weisen die Ansätze nach *Diehl*, *Diehl0,1* und besonders *Diehl* komplett unterschiedliche kritische Bereiche auf. Aufgrund der Tatsache, dass die Modelle nach *Barenblatt*, *Rice/Falk* und *Hillerborg* die gleichen kritischen Regionen identifizieren und diese auch bei Vergleich mit den Querschubspannungen in Abbildung 5-15 und Abbildung 5-16 plausibel erscheinen, werden die Ansätze nach *Diehl* und *Diehl0,1* als nicht anwendbar für diese Problemstellung identifiziert. Diese Aussage wird im folgenden Kapitel 8.4.4 erhärtet.

Der Vergleich der verschiedenen Ansätze bei 6% der Aufheizzeit wird auch für die Anode- Elektrolyt Haftschrift durchgeführt (Abbildung 8-29 bis Abbildung 8-31). In den Visualisierungen kann ebenfalls abgeleitet werden, dass der Ansatz nach *Barenblatt* am kritischsten für Delaminierungsinitiierungen ist. Im Vergleich zur Gegenüberstellung der Kathode- Elektrolyt Grenzschicht (Abbildung 8-26 bis Abbildung 8-28) sind deutlich geringere Rissinitiierungsparameterwerte erkennbar. Somit kann an dieser Stelle konstatiert werden, dass die Kathode- Elektrolyt Haftschrift deutlich kritischer als die Anode- Elektrolyt Schicht ist. Dieser Umstand kann durch die deutlich höhere kritische Energiefreisetzungsrates an der Anode- Elektrolyt Grenzschicht und somit zäherem Werkstoffverhalten als an der Kathode- Elektrolyt Schicht begründet werden.

**Anode- Elektrolyt**

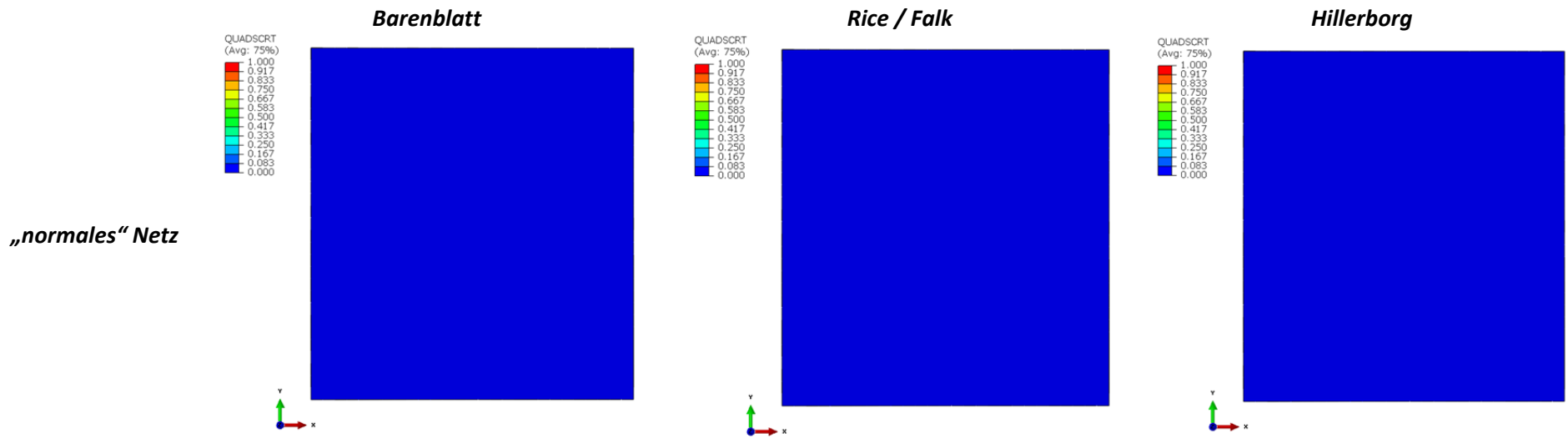


Abbildung 8-29: Vergleich der verschiedenen Ansätze bei 6% der Aufheizzeit und „normales“ Netz, Anode- Elektrolyt Haftschicht

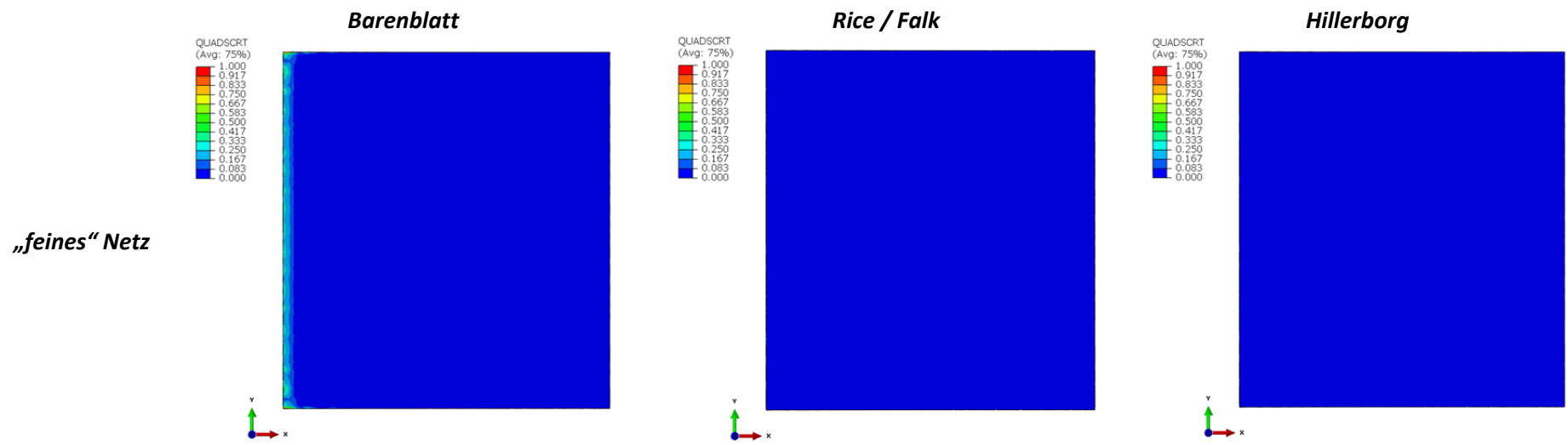


Abbildung 8-30: Vergleich der verschiedenen Ansätze bei 6% der Aufheizzeit und „feines“ Netz, Anode- Elektrolyt Haftschicht

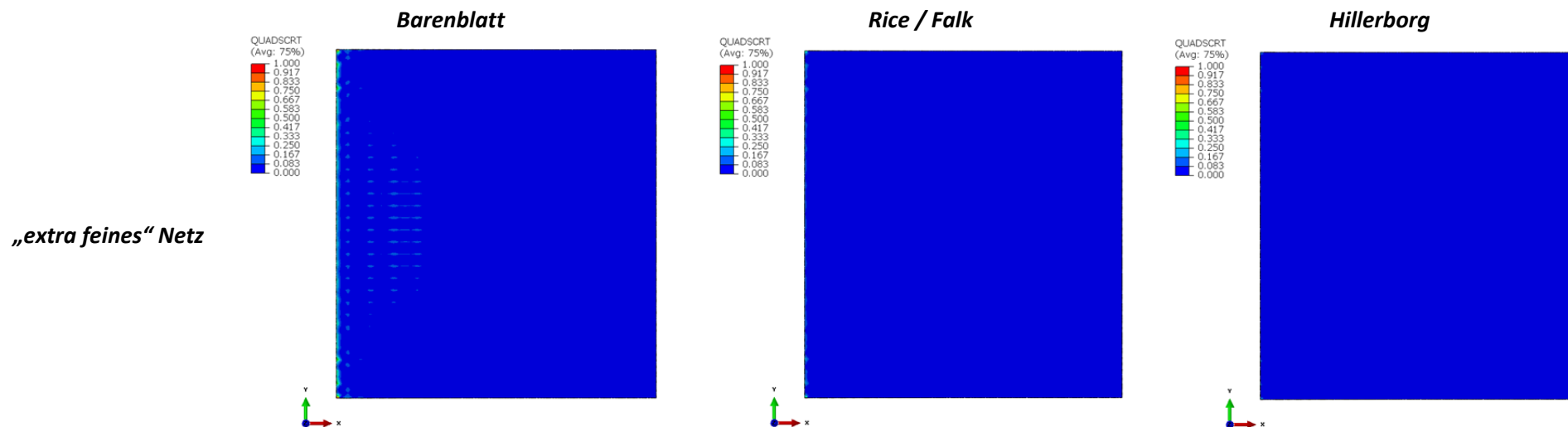


Abbildung 8-31: Vergleich der verschiedenen Ansätze bei 6% der Aufheizzeit und „extra feines“ Netz, Anode- Elektrolyt Haftschicht

### 8.4.4 Auswertung

Für die Auswertung der in Kapitel 8.4.3 abgebildeten Ergebnisse werden zwei lufteinlassseitige Knoten ausgewählt, wobei sich einer an der Kathode- Elektrolyt und der andere an der Anode-Elektrolyt Grenzschicht befindet (Abbildung 8-32). Es werden lediglich Knoten an der Lufteinlassseite gewählt, da diese Kante deutlich anfälliger für Delaminierungen als die der gegenüberliegenden Seite ist.

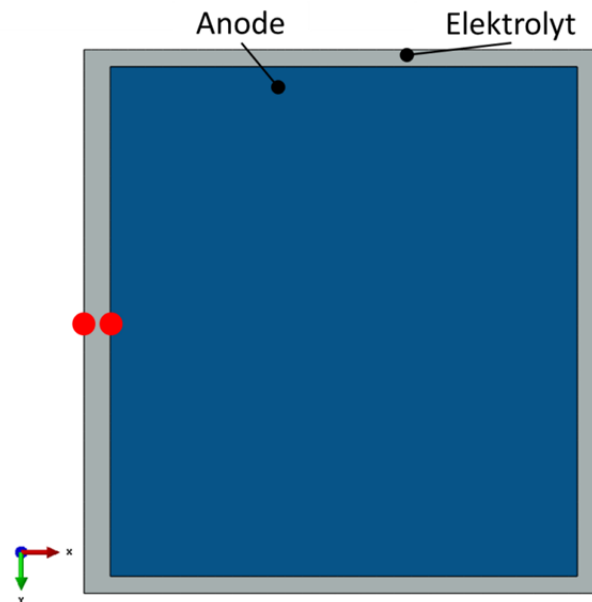


Abbildung 8-32: Knotendefinition für Auswertung

Die Werte des Delaminierungsinitiierungsparameters (QUADSCRT) bei 3% der Aufheizzeit werden für die zwei Punkte in die Versuchspläne eingetragen. Für die Darstellung der Ergebnisse wird ein Zeitpunkt (3% der Aufheizzeit) gewählt bei dem noch kein Punkt delaminiert ist um eine bessere Vergleichbarkeit zu gewährleisten (bei 6% wären bereits einige Knoten geschädigt). Damit die Übersichtlichkeit erhalten bleibt, werden die Ergebnisse für die Kontaktschichten Kathode- Elektrolyt und Anode- Elektrolyt getrennt dargestellt (Tabelle 11 und Tabelle 12).

Tabelle 11: Rissinitiierungskriterium QUADSCRT bei 3% der Aufheizzeit an Kathode- Elektrolyt Grenzschicht

Prozesszonenansatz	Netzdichte		
	normal	fein	extra fein
Barenblatt [42]	0,498	0,620	0,591
Rice [85] / Falk [84]	0,221	0,273	0,263
Hillerborg [43]	0,062	0,077	0,074
Diehl [89]	4,73E-9	5,21E-6	2,79E-5
Diehl <sub>0,1</sub> [89]	2,65E-5	0,0065	0,0084

Aus Tabelle 11 ist eine deutlich höhere Streuung des Rissinitiierungsparameters bei den Ansätzen von Diehl erkennbar. Diese große Diskrepanz zwischen den einzelnen Netzdichten wird vermutlich durch die zweifache Abhängigkeit des Ergebnisses von dem Knotenabstand (kritische

Grenzflächenspannung und Anfangssteifigkeit) hervorgerufen. Die anderen Prozesszonenansätze resultieren in einer relativ geringen Streuung der Rissinitiierungen in Abhängigkeit der Netzdichte.

**Tabelle 12: Rissinitiierungskriterium QUADSCRT bei 3% der Aufheizzeit an Anode- Elektrolyt Grenzschicht**

Prozesszonenansatz	Netzdichte		
	normal	fein	extra fein
<i>Barenblatt [42]</i>	0,001	0,066	0,071
<i>Rice [85] / Falk [84]</i>	0,0004	0,004	0,032
<i>Hillerborg [43]</i>	0,0001	0,001	0,015
<i>Diehl [89]</i>	7,41E-7	5,21E-6	1,35E-6
<i>Diehl 0,1 [89]</i>	2,71E-5	3,74E-4	5,39E-4

Bezüglich der Streuungen der Einzelwerte kann in Tabelle 12 derselbe Trend, wie bei der Kathode-Elektrolyt Schicht abgeleitet werden. Bei Vergleich der Tabelle 12 mit Tabelle 11 fällt, wie bereits in Kapitel 8.4.3 erwähnt wurde, auf, dass die Kathode- Elektrolyt Grenzfläche deutlich kritischer ist.

Da die Kathode- Elektrolyt Fläche deutlich kritischer für Delaminierungen ist, wird diese für die weiteren Auswertungen herangezogen. Zur Analyse der Unterschiede zwischen den verschiedenen Ansätzen wird für das „feine“ Netz (Knotenabstand 2 mm) der Rissinitiierungsparameter (QUADSCRT) über den ganzen thermischen Zyklus für den Knoten an der Kathode- Elektrolyt Haftschrift im Vergleich zum Temperaturverlauf visualisiert (Abbildung 8-33).

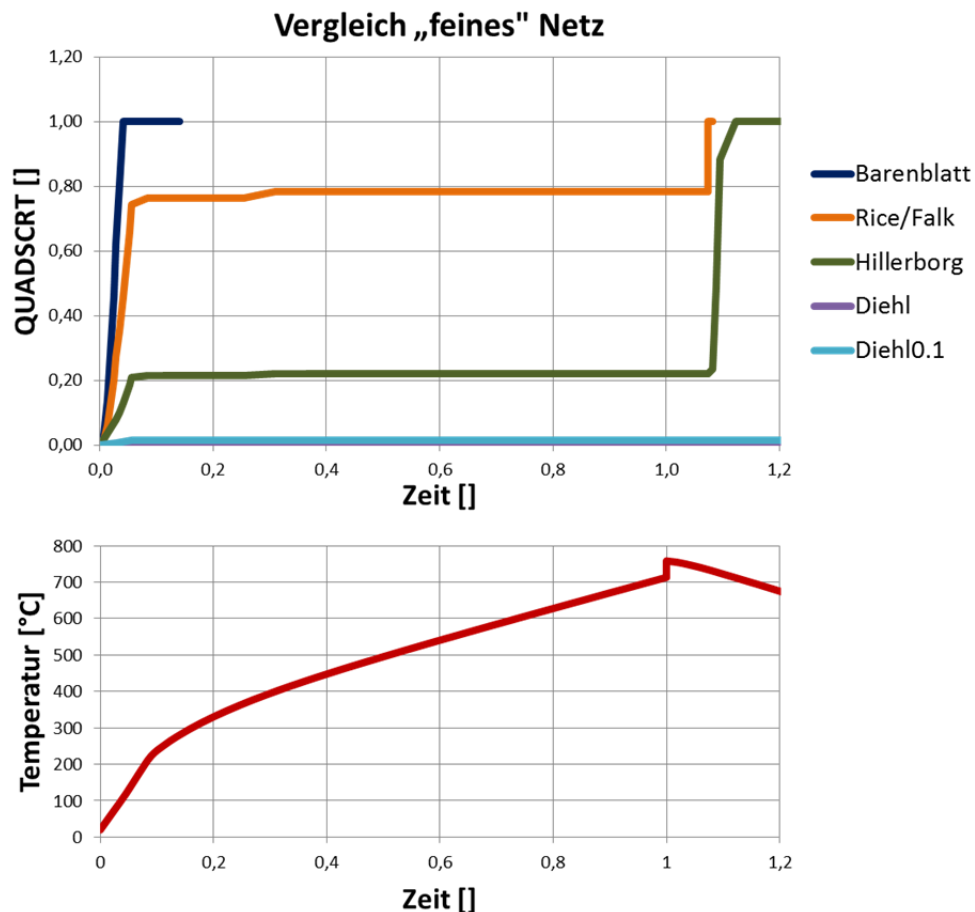


Abbildung 8-33: Vergleich der verschiedenen Ansätze im „feinem“ Netz für Kathode- Elektrolyt Schicht

Die Zeit in Abbildung 8-33 ist auf den Endzeitpunkt der Aufheizphase bezogen. Aus der Detailbetrachtung des unmittelbaren Bereichs um die Aufheizphase kann abgeleitet werden, dass die Rissinitiiierungsparameterwerte bei den starken Temperaturgradienten am Anfang der Aufheiz- und Abkühlphase am höchsten sind (Abbildung 8-33). Beim Prozesszonenansatz nach *Barenblatt*, welcher für eher spröde Materialien abgeleitet wurde, treten bereits in der Anfangsphase des Aufheizprozesses Delaminierungen auf. Im Gegensatz dazu wird mit dem Ansatz nach *Diehl* nahezu keine Wahrscheinlichkeit für Rissinitiiierung vorhergesagt.

Im nächsten Schritt werden die Streuungen zwischen den verschiedenen Netzdichten innerhalb eines Ansatzes untersucht. Diese sollten möglichst gering sein, da die Anpassung der kritischen Grenzflächenspannungen das Ziel verfolgt, gleiches bruchmechanisches Verhalten für verschiedene Netzdichten zu gewährleisten. Hierfür wurde der gesamte thermische Zyklus abgebildet, wobei die Zeit für alle Diagramme auf den Zeitpunkt höchster Temperatur bezogen wird, um die größte Streubreite bestimmen zu können (Abbildung 8-34).

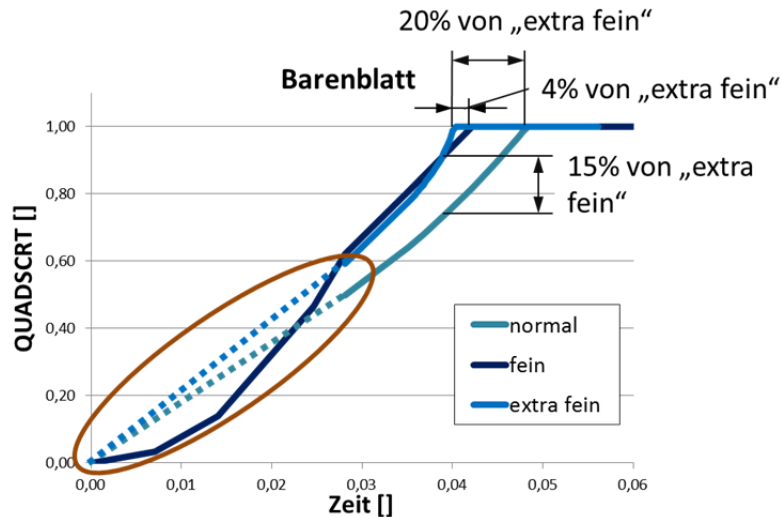


Abbildung 8-34: Streuung innerhalb des Ansatzes von Barenblatt

In Abbildung 8-34 kann erkannt werden, dass die Streuung zwischen den verschiedenen Netzdichten beim Prozesszonenansatz nach *Barenblatt* sehr gering ist. Am Anfang der Simulation ist die Streuung des Rissinitiierungsparameters größer (orangene Ellipse in Abbildung 8-34) da beim „normalen“ und „extrem feinen“ Netz in der Zeit zwischen 0 und 0,028, im Gegensatz zum „feinen“ Netz, keine Berechnungsschritte in Abaqus ausgewiesen werden und dadurch dieser Bereich linearisiert wird. Im Bereich des Delaminierungsbeginns kann eine Streuung der Zeitpunkte der Rissinitiierungen zwischen dem „extrem feinen“ und „normalen“ Netz, bezogen auf das „extrem feine“, von 20% errechnet werden. Der maximale Unterschied des QUADSCRT- Parameters während des thermischen Zyklus zwischen den zwei Netzdichten beträgt 15%. Besonders signifikant fällt auf, dass die Streuung zwischen „extrem feinem“ und „feinem“ Netz verschwindend klein (4% Unterschied zum Zeitpunkt der Rissinitiierung bezogen auf „extra fein“) wird.

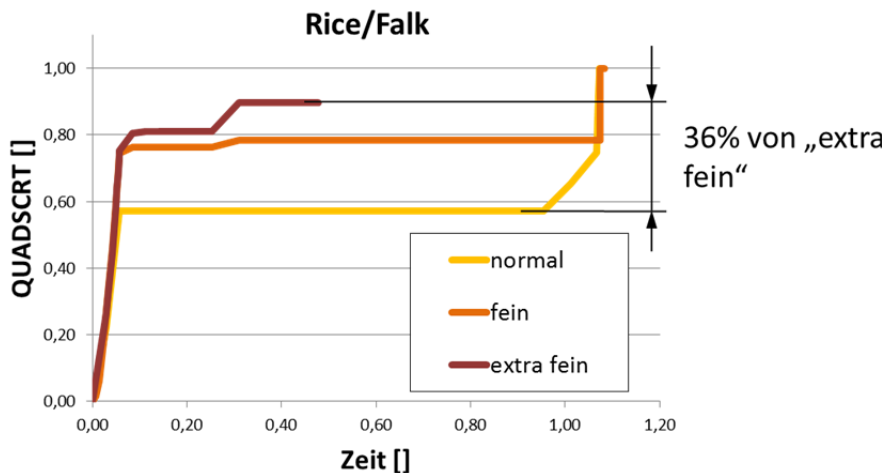


Abbildung 8-35: Streuung innerhalb des Ansatzes von Rice / Falk

Die Streuung beim Ansatz nach *Rice/Falk* (Abbildung 8-35) ist mit 36% bezogen auf das Modell mit „extra feinem“ Netz deutlich höher als beim Ansatz nach *Barenblatt* (Abbildung 8-34). Besonders auffällig ist, dass am Anfang der Aufheizphase die drei Verläufe ident sind und erst im weiteren Verlauf stark streuen.



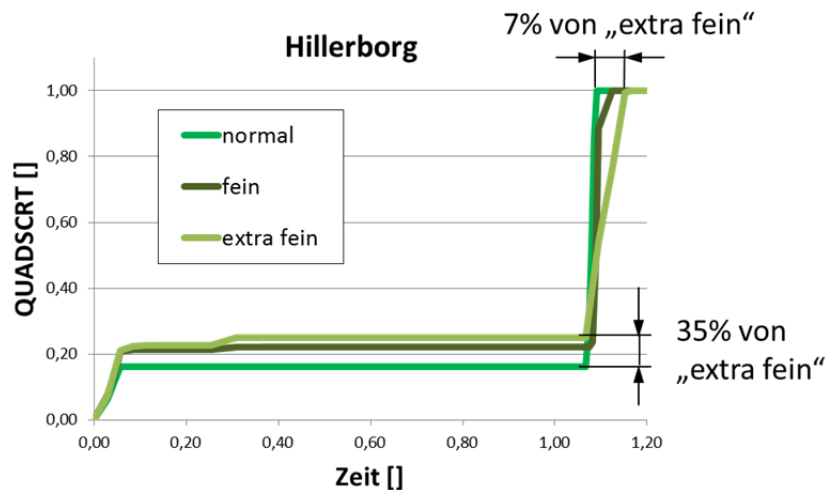


Abbildung 8-36: Streuung innerhalb des Ansatzes von Hillerborg

Der Unterschied zwischen den Netzdichten ist beim Modell nach *Hillerborg* im Bereich der Rissinitiierung sehr gering (7% bezogen auf „extra feines“ Modell, Abbildung 8-36). In der Zeit vor der Rissentstehung ist die Streuung mit 35% des „extra feinen“ Netzes signifikant höher.

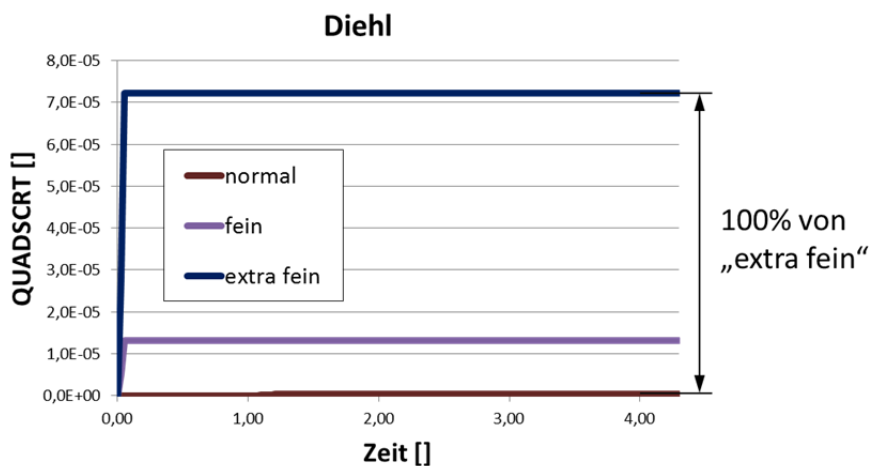


Abbildung 8-37: Streuung innerhalb des Ansatzes von Diehl

Eine extrem starke Streuung der Ergebnisse kann beim Ansatz von *Diehl* konstatiert werden (100% von „extra feinem“ Netz, Abbildung 8-37). Eine mögliche Ursache für diesen großen Unterschied stellt die Abhängigkeit sowohl der Haftfestigkeit als auch der Anfangssteifigkeit der Grenzschicht von der Netzdichte dar.

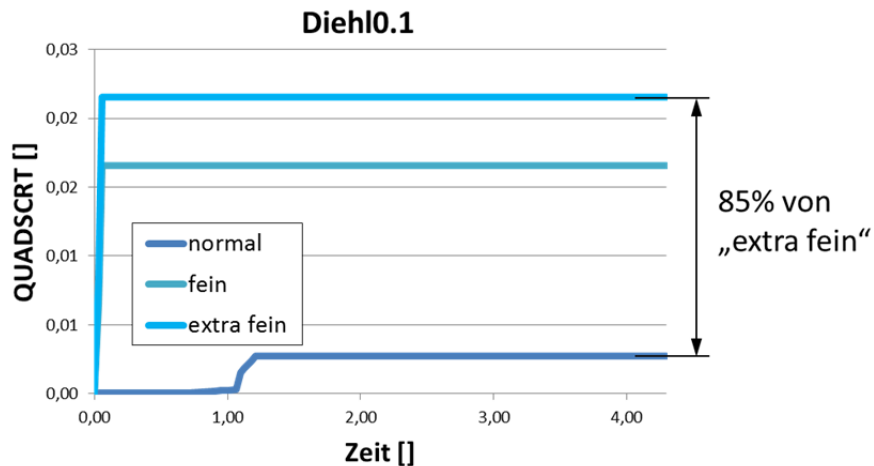


Abbildung 8-38: Streuung innerhalb des Ansatzes von Diehl0,1

Bei Adaption des Ansatzes nach Diehl zu Diehl0,1 kann eine etwas kleinere Streuung festgestellt werden (85% bezogen auf „extra fein“, Abbildung 8-38). Zusammenfassend kann der Ansatz nach Barenblatt über den gesamten thermischen Zyklus als am wenigsten streuend (Abbildung 8-34) festgehalten werden.

## 8.5 Modell mit Netzfeinheit am Rand laut Prozesszone

Für die Bewertung, welcher Prozesszonenansatz die korrekten Positionen und Werte für Delaminierungsiniziation voraussagt, wird ein Modell aufgebaut, bei dem der Rand der Brennstoffzelle mit einem Knotenabstand vernetzt wird, welcher der Abbildung der kleinsten Prozesszone (Kapitel 8.3) entspricht. Diese Modellvorstellung ist gültig, da nach Betrachtung der Querschubspannungen (Abbildung 5-15 und Abbildung 5-16) und der Ergebnisse in Kapitel 8.4 abgeleitet werden kann, dass die Delaminierungen am Rand der Zelle beginnen werden. Ziel ist es, eine Empfehlung für die Verwendung eines Ansatzes geben zu können.

### 8.5.1 Modellaufbau

Für dieses Modell wurde die mittlere Brennstoffzelle des Stacks (Zelle 15, Kapitel 8.1) mit einem Knotenabstand von 0,12 mm im Bereich des Randes der Kathode- Elektrolyt und Anode- Elektrolyt Haftschrift vernetzt. Diese Knotendichte entspricht der Abbildung der kleinsten Prozesszone (Kapitel 8.3) mit mindestens drei Elementen. Alle größeren Prozesszonenlängen sind ebenfalls bruchmechanisch richtig abgebildet, da sie mehr als drei Elemente in der Prozesszone aufweisen.

In den restlichen Bereichen wurde das Netz kontinuierlich auf einen Abstand von 2 mm (entspricht „feines“ Netz) geändert (siehe Abbildung 8-39), da im Inneren keine Delaminierungen bei der vorliegenden Belastung erwartet werden. Diese Vergrößerung wurde notwendig, um die Anzahl der Knoten in einem Bereich von einer Million zu limitieren (im aktuellen Modell 1,2 Millionen Knoten).

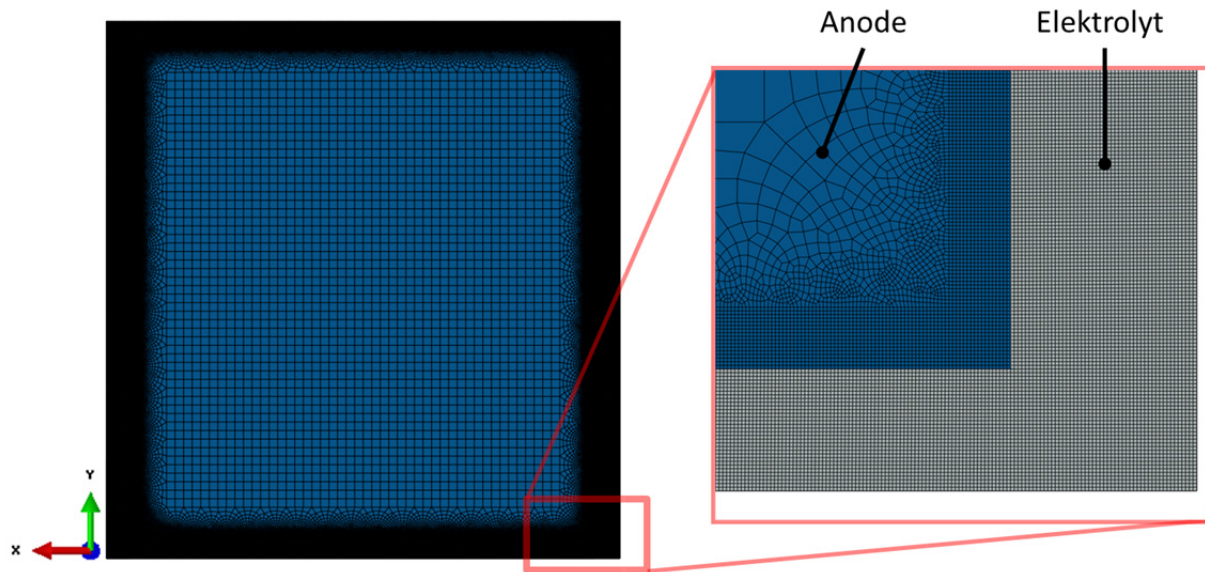
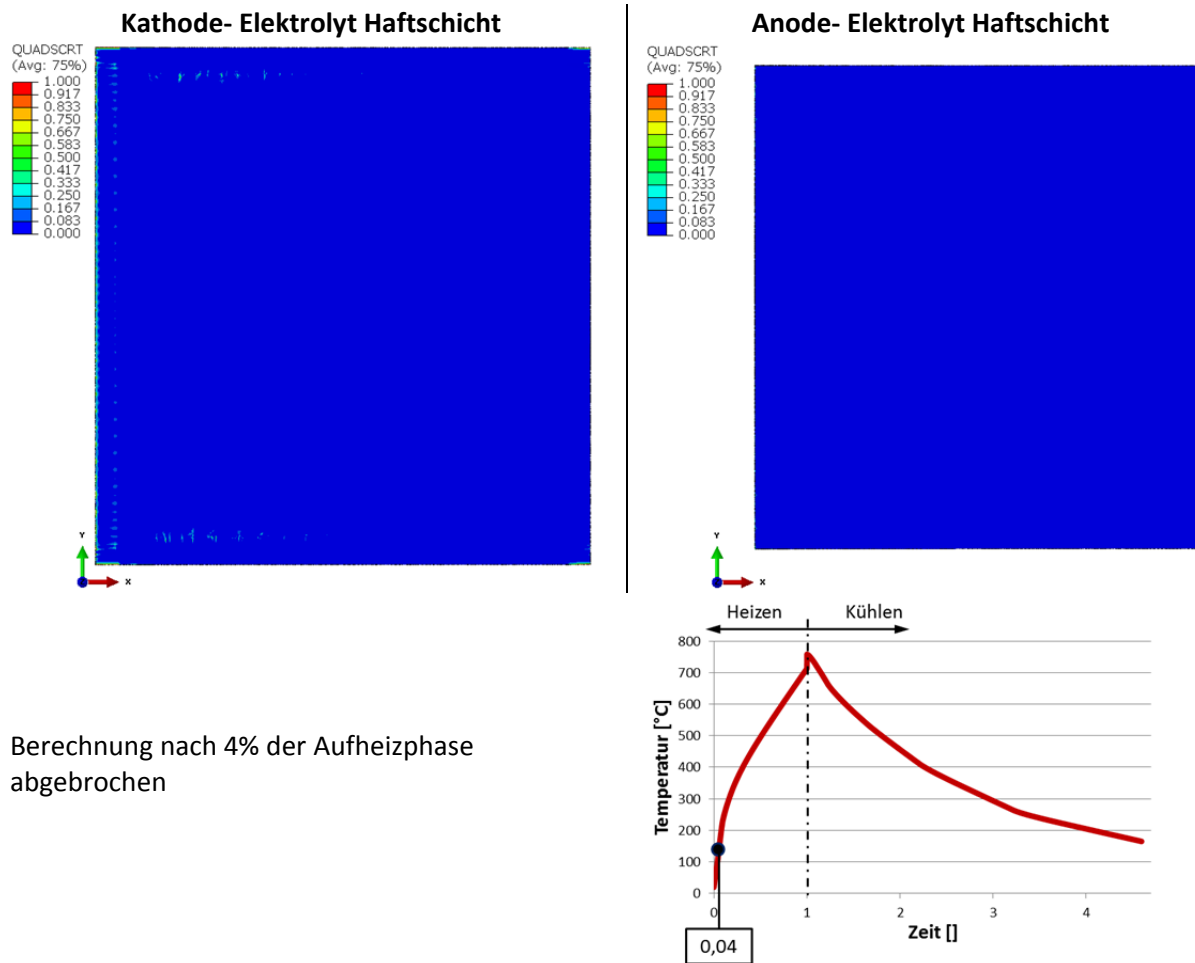


Abbildung 8-39: Vernetzung laut korrekter Prozesszone

Da mit diesem Modell (Abbildung 8-39) die Prozesszonen am Bauteilrand adäquat abgebildet sind, können die Ausgangshaftfestigkeiten ( $t_0=75$  MPa, siehe Tabelle 7) als Werkstoffparameter für die *Kohäsivelemente* verwendet werden. Alle anderen Parameter und Randbedingungen sind gleich der Delaminierungssubmodell- Definition in Kapitel 8.1.

### 8.5.2 Ergebnisse

Die Simulation wurde aufgrund der sehr langen Rechenzeit bei 4% der Aufheizzeit durch den Benutzer abgebrochen. Bereits zu diesem Zeitpunkt können Delaminierungen beobachtet (Abbildung 8-40 bis Abbildung 8-42) und mit den anderen Ansätzen verglichen (Abbildung 8-43 bis Abbildung 8-46) werden.



Berechnung nach 4% der Aufheizphase  
 abgebrochen

Abbildung 8-40: Rissinitiiierungsparameter bei Modell mit korrekt abgebildeter Prozesszone

Aufgrund des sehr feinen Netzes sind bei einer globalen Ansicht, wie in Abbildung 8-40, nur geringfügige Delaminierungen erkennbar. Aus diesem Grund müssen Detailbilder der Randschichtbereiche erstellt werden (Abbildung 8-41 bis Abbildung 8-42).

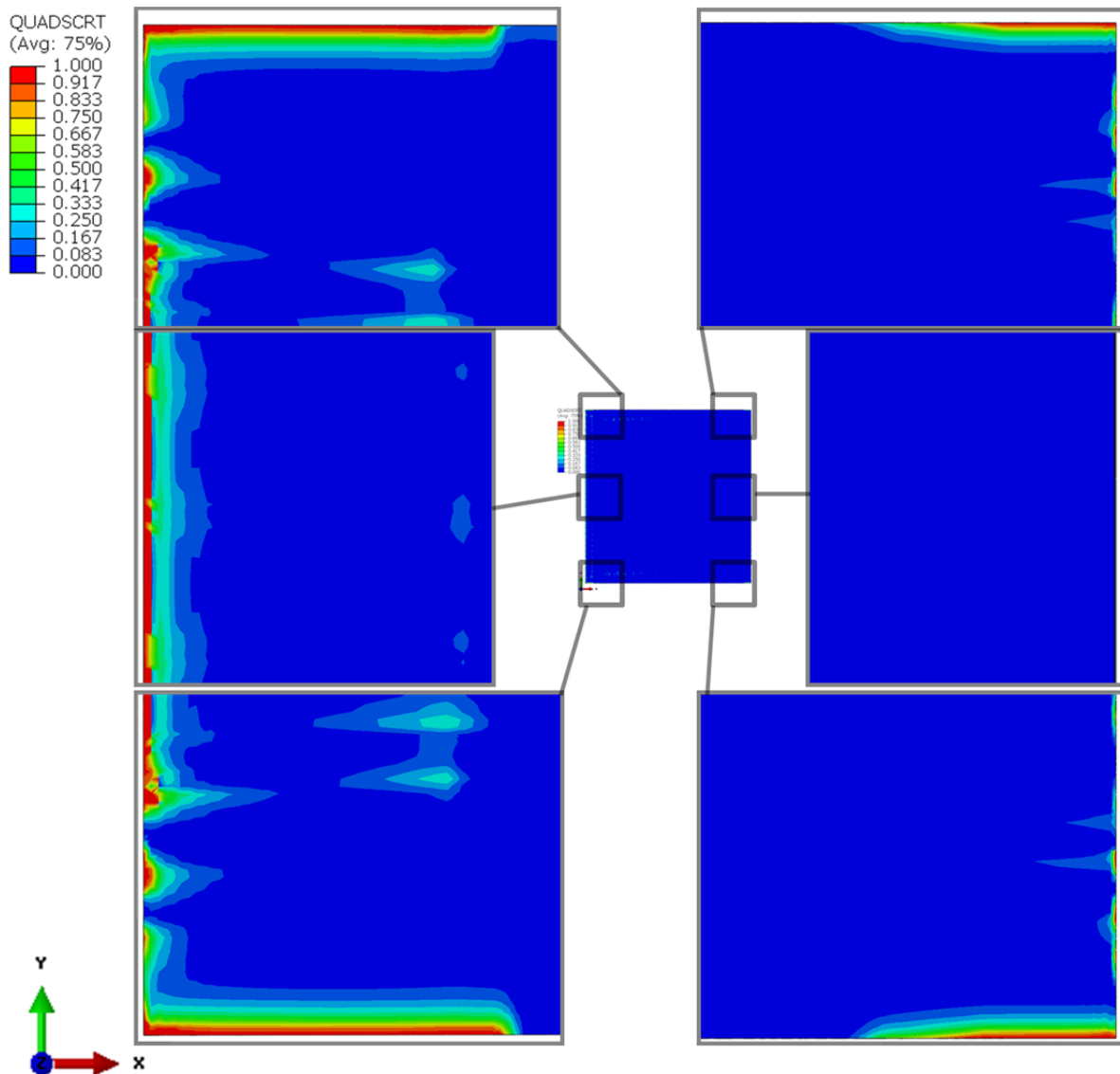


Abbildung 8-41: Detailsicht der korrekten Prozesszonenabbildung, Kathode- Elektrolyt Grenzschicht

Aus Abbildung 8-41 kann abgeleitet werden, dass die Delaminierung an der Kathode- Elektrolyt Haftschrift im Bereich der Luftanströmung beginnt. Ebenfalls können die Bereiche um die Ecken als kritisch für die Delaminierungsinitiierung erachtet werden, wobei wiederum die Anströmseite kritischer ist. An der Seite der Ausströmung der Luft, sowie der Ober- und Unterseite wird bei 4% der Aufheizphase keine Delaminierung beobachtet.

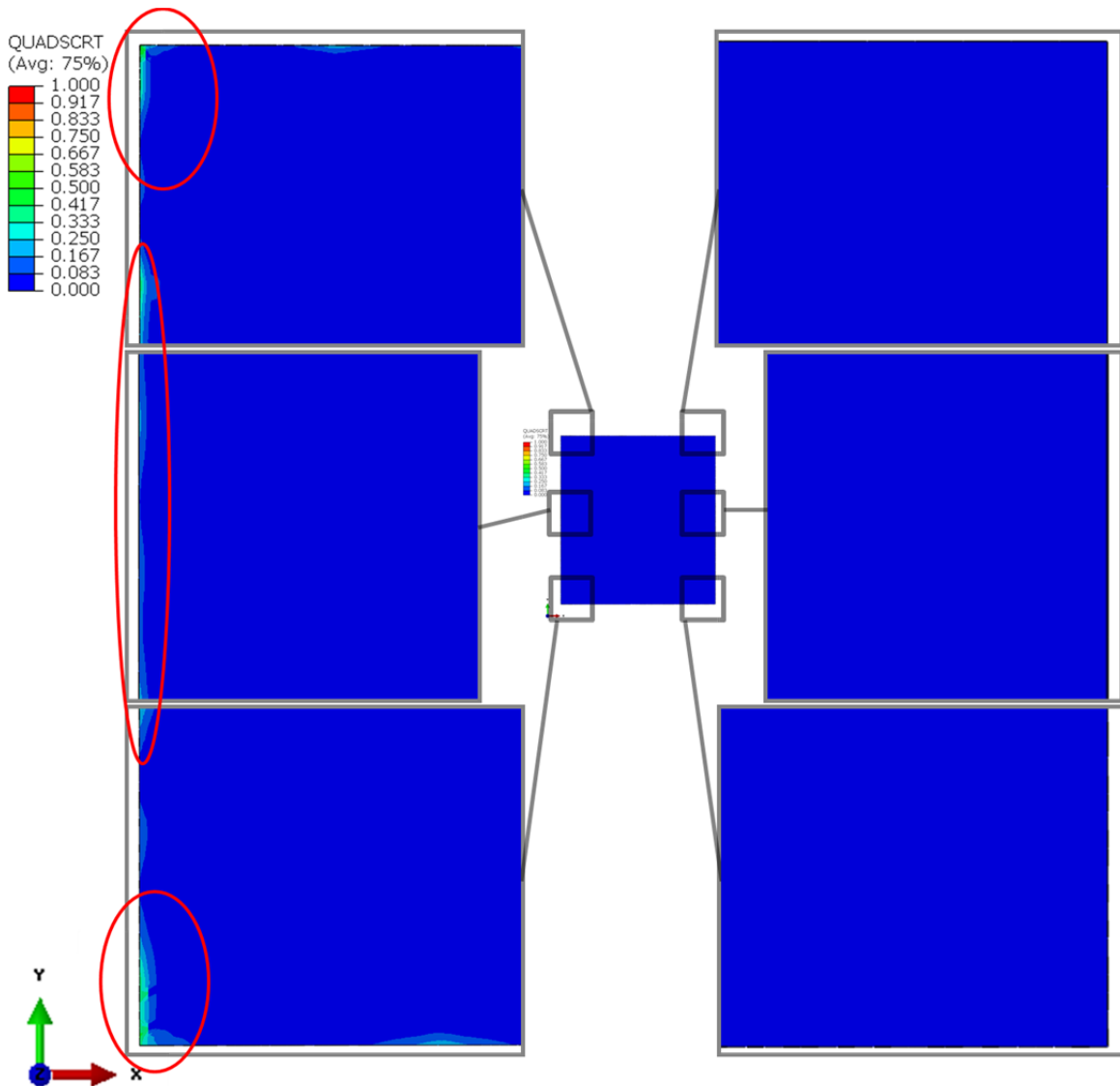


Abbildung 8-42: Detailansicht der korrekten Prozesszonenabbildung, Anode- Elektrolyt Grenzschicht

Durch den Vergleich von Abbildung 8-41 mit Abbildung 8-42 kann qualitativ bewiesen werden, dass die Kathode- Elektrolyt Grenzschicht im konkreten Modell deutlich anfälliger für Delaminierungen als die Anode- Elektrolyt Schicht ist. Lediglich sehr geringe Wahrscheinlichkeiten für Delaminierungsinitiierungen sind an der Lufteingangsseite der Anode- Elektrolyt Grenzschicht feststellbar (rote Ellipsen in Abbildung 8-42).

Durch Vergleich des Modells mit korrekt abgebildeter Prozesszone und den verschiedenen Ansätzen in Kapitel 8.4.3 bei 4% der Aufheizzeit ist ableitbar, dass nur der Ansatz nach *Barenblatt* bereits zu diesem Zeitpunkt Delaminierungen aufweist. Die Richtigkeit dieser Aussage wird in Abbildung 8-43 und Abbildung 8-44 durch Vergleich des Rissinitiierungsparameters beim *Barenblatt* Ansatz mit dem als „korrekt“ bezeichneten Referenzmodell bei 4% der Aufheizzeit bestätigt.

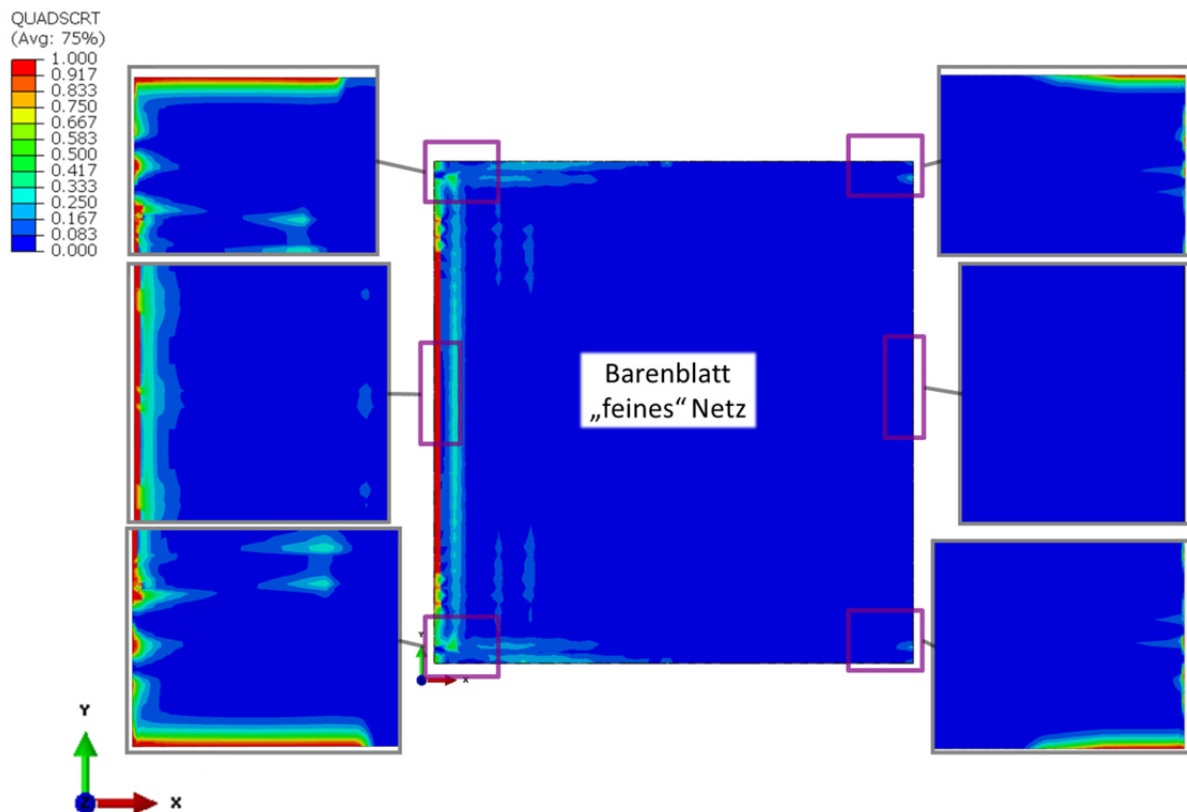


Abbildung 8-43: Vergleich Modell mit korrekter Prozesszonenabbildung (außen angeordnete Detailbilder) mit *Barenblatt* „feines“ Netz (mittiges Übersichtsbild), Kathode- Elektrolyt Grenzschicht

Jeweils auf der rechten und linken Seite in Abbildung 8-43 und Abbildung 8-44 sind die Ergebnisse der korrekten Prozesszonenabbildung visualisiert und die grauen Rahmen zeigen den zu vergleichenden Bereich am *Barenblatt* Modell an. Der Ansatz nach *Barenblatt* mit „feiner“ Vernetzung (Abbildung 8-43) weist Unterschiede in den Bereichen um die Ecken der Kathode-Elektrolyt Schicht auf (bis zu 30% vom Modell mit exakter Prozesszonenabbildung). Allerdings wird die stärkste und früheste Delaminierungsinitiierung im Bereich der Lufteinströmung richtig vorhergesagt. An der Anode- Elektrolyt Haftschrift sagen die beiden Modelle sehr ähnliche Rissinitiierungsparameter voraus.

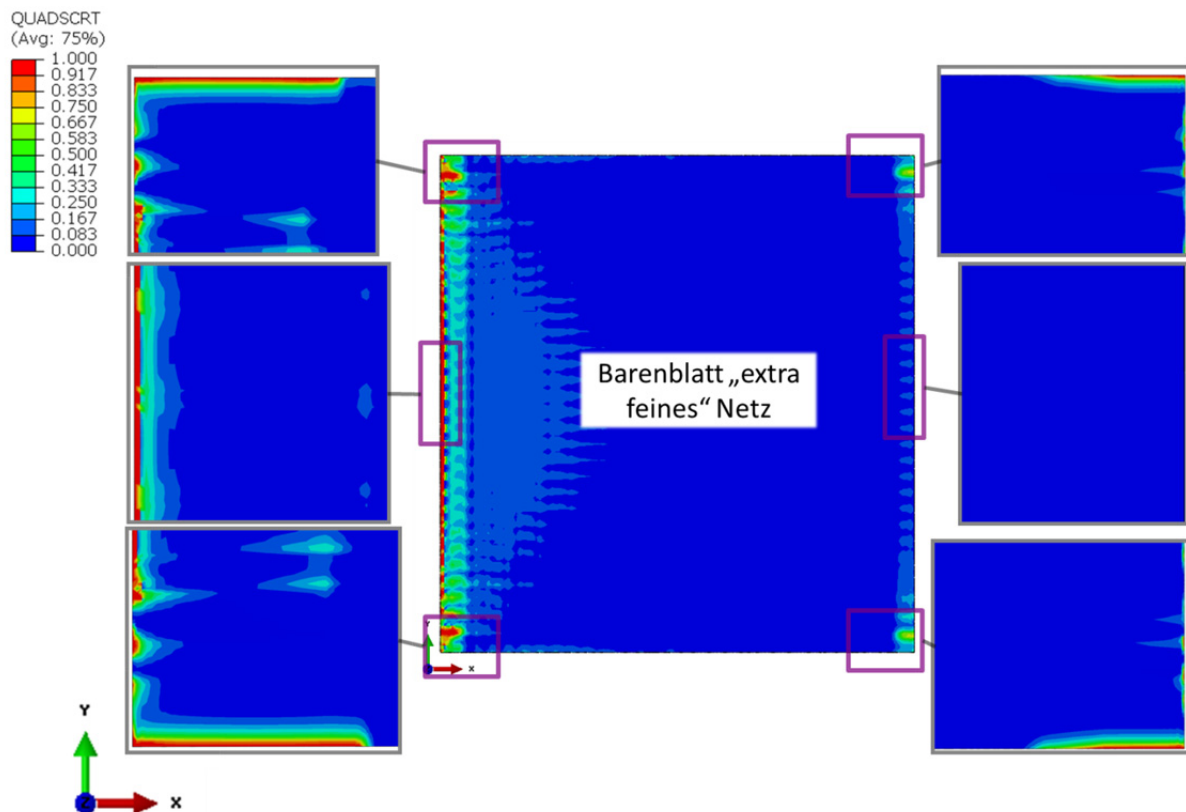


Abbildung 8-44: Vergleich Modell mit korrekter Prozesszonenabbildung mit *Barenblatt* „extra feines“ Netz, Kathode-Elektrolyt Grenzschicht

Beim Vergleich des Modells mit korrekt abgebildeter Prozesszone und dem *Barenblatt* Ansatz mit „extra feinem“ Netz, sind an der Kathode- Elektrolyt Haftschrift (Abbildung 8-44) nur marginale Abweichungen erkennbar. Lediglich die Ecken sind nicht komplett identisch, da diese 0-dimensionale Spannungszustände darstellen und durch mehrere Elemente besser abgebildet werden. Dennoch werden in den Elementen um den Bereich der Ecken ähnliche Schädigungswerte erreicht. Die Rissinitiierungsparameter an der Anode- Elektrolyt Grenzschicht sind ebenfalls nahezu identisch.

Zusammenfassend kann konstatiert werden, dass der Ansatz nach *Barenblatt* mit „extra feinem“ Netz das Modell mit korrekt abgebildeter Prozesszone, welche das bruchmechanische Verhalten genau beschreibt, am besten annähert. Für den Beweis dieser Aussage werden neben dem qualitativen Vergleich in den Abbildung 8-43 bis Abbildung 8-44 auch quantitativ die Rissinitiierungsverläufe verglichen (Kapitel 8.5.3).



### 8.5.3 Auswertung

Die Auswertung des Rissinitiierungsparameters des Modells mit korrekter Abbildung der Prozesszone über den thermischen Zyklus, wird für einen Punkt an der Lufteinlassseite der Kathode- Elektrolyt Grenzschicht dargestellt. Die Anode- Elektrolyt Haftschrift wurde aufgrund der geringen Schädigung nicht weiter ausgewertet.

Der Rissinitiierungsparameterverlauf des Modells mit korrekt abgebildeter Prozesszone wird jenen der anderen Ansätze gegenübergestellt (Abbildung 8-45). Dabei wurden zunächst nur die „feinen“ Netzdichten betrachtet.

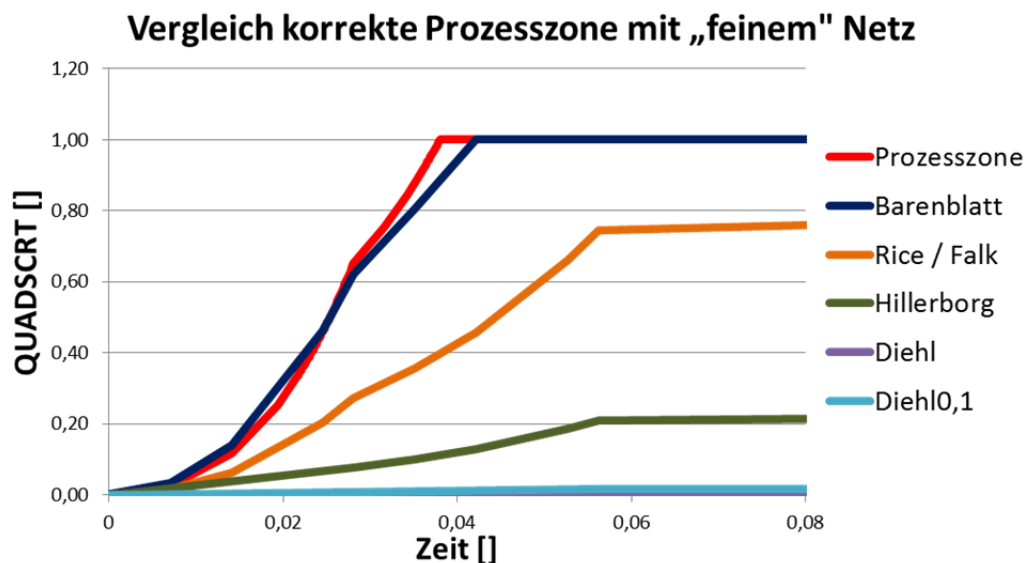


Abbildung 8-45: Vergleich des Modells mit korrekter Prozesszonenabbildung mit verschiedenen Ansätzen bei „feinem“ Netz, Kathode- Elektrolyt Grenzschicht

In Abbildung 8-45 wird deutlich, dass nur der Ansatz nach *Barenblatt* das Verhalten des bruchmechanisch korrekten Modells richtig abbildet. Alle anderen Berechnungsmethoden unterschätzen die Delaminierungsinisierung deutlich. Um die Unterschiede zwischen den verschiedenen Netzdichten des *Barenblatt* Ansatzes und dem Modell mit der korrekt abgebildeten Prozesszone identifizieren zu können, wurden die Verläufe in einem Diagramm visualisiert (Abbildung 8-46).

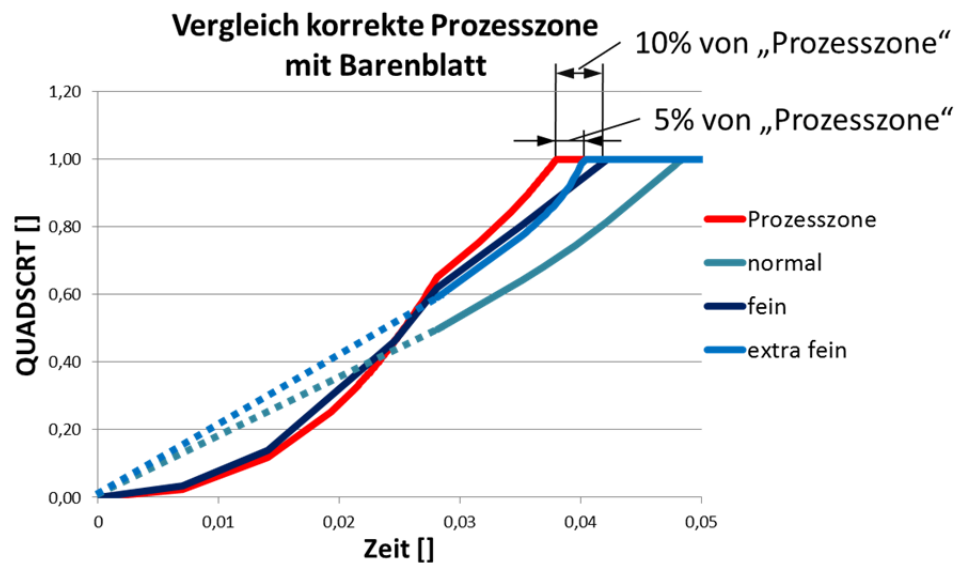


Abbildung 8-46: Vergleich Modell mit korrekter Prozesszonenabbildung mit *Barenblatt*- Ansätzen, Kathode- Elektrolyt Grenzschicht

In Abbildung 8-46 ist ersichtlich, dass bis zu einem Rissinitiierungswert (QUADSCRT) von 0,6 die „feine“ Netzdichte das Ergebnis des Modells mit korrekt abgebildeter Prozesszone beinahe exakt nachbildet. Wie bereits in Kapitel 8.4.4 erwähnt, sind die Abweichungen im unteren Bereich der Schädigung vom „normalen“ und „extra feinen“ Netz mit dem Fehlen von Ausgabepunkten im Abaqus Output zu erklären.

Im Bereich der Delaminierungsinitiierung ist die Differenz der „extra feinen“ Netzdichte von dem korrekt abgebildeten Modell am geringsten (Abbildung 8-46). Es kann lediglich eine Differenz von 5% vom Modell mit exakter Prozesszone festgestellt werden. Bei Betrachtung des „feinen“ Netzes ist eine leicht erhöhte Abweichung von 10% zu beobachten. Bei einem noch größeren Netz wird eine Abweichung von über 25% identifiziert (Abbildung 8-46).

Für die Bewertung der Effizienz der drei Netzdichten des *Barenblatt* Ansatzes müssen neben der Abweichung vom Modell mit einem exakten bruchmechanischen Verhalten auch die Rechenzeiten begutachtet werden (Abbildung 8-47). Die Rechenzeit in Abbildung 8-47 ergibt sich bei Verwendung von acht Prozessoren und 30 GB Arbeitsspeicher. Bei Betrachtung des Balkendiagramms in Abbildung 8-47 kann eine deutlich höhere Rechenzeit des „extra feinen“ Netzes (255816 Freiheitsgrade) abgeleitet werden. Die beiden anderen Netze unterscheiden sich nur geringfügig in ihrer Rechenzeit. Dies kann durch die lediglich rund 34000 Freiheitsgrade mehr im Modell „fein“ (69696 Freiheitsgrade) verglichen mit der „feinen“ Netzdichte (35424 Freiheitsgrade) begründet werden.

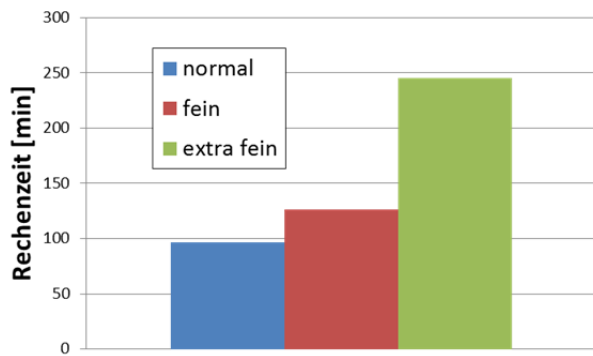


Abbildung 8-47: Rechenzeit der Ansätze nach *Barenblatt*

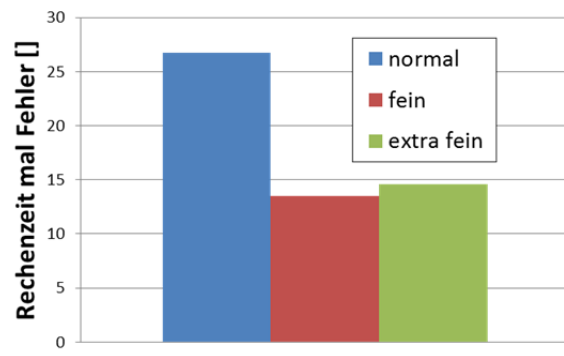


Abbildung 8-48: Rechenzeit multipliziert mit Fehler, *Barenblatt*

Als Parameter für die Bewertung der Effizienz wird die Rechenzeit mit dem Fehler des Modells, im Vergleich zur bruchmechanisch korrekten Abbildung, multipliziert (Abbildung 8-48). Diese Variable muss minimiert werden, um eine optimale Effizienz der FEM Rechnung zu erreichen. Aus Abbildung 8-48 ist ableitbar, dass der *Barenblatt* Ansatz mit „feinem“ Netz den besten Kompromiss aus Rechenzeit und Berechnungsfehler markiert. Aus diesem Grund wird vorgeschlagen, die Delaminierungsberechnung der kritischen Zelle zukünftig zuerst mit einem *Barenblatt* Modell mit „feinem“ Netz durchzuführen und bei Interesse von Detailbereichen ein Submodell mit „extra feiner“ Diskretisierung zu erstellen.

## 9 Gegenüberstellung globale Vergleichsschädigung – Delaminierungssubmodelle

Um die Anwendbarkeit der globalen Vergleichsschädigung (Kapitel 7) validieren zu können, werden verschieden angeordnete Zellen gewählt und diese mit einem Delaminierungssubmodell untersucht. Die Ergebnisse werden qualitativ jenen der globalen Vergleichsschädigung gegenübergestellt.

### 9.1 Submodelle von unterschiedlich angeordneten Zellen

Für die Submodellbildung wurden Einzelzellen mit „feiner“ Netzdichte und *Barenblatt* Ansatz verwendet. Diese Einstellungen wurden für die Gegenüberstellung gewählt, da in Kapitel 8.5.3 bewiesen wurde, dass diese Annahmen die exakte Lösung ausreichend approximiert und gleichzeitig die höchste Effizienz aufweist. Die anderen Submodelldefinitionen und Randbedingungen entsprechen der Definition in Kapitel 8.1.

#### 9.1.1 Wahl der verschiedenen Zellen

Für den Vergleich müssen einige Detailmodelle der Brennstoffzelle aus dem globalen Stack gewählt werden. Diese werden im Bereich der Maxima der Vergleichsschädigung gewählt und in den sonstigen Bereichen gleichmäßig über die Höhe verteilt (Abbildung 9-1).

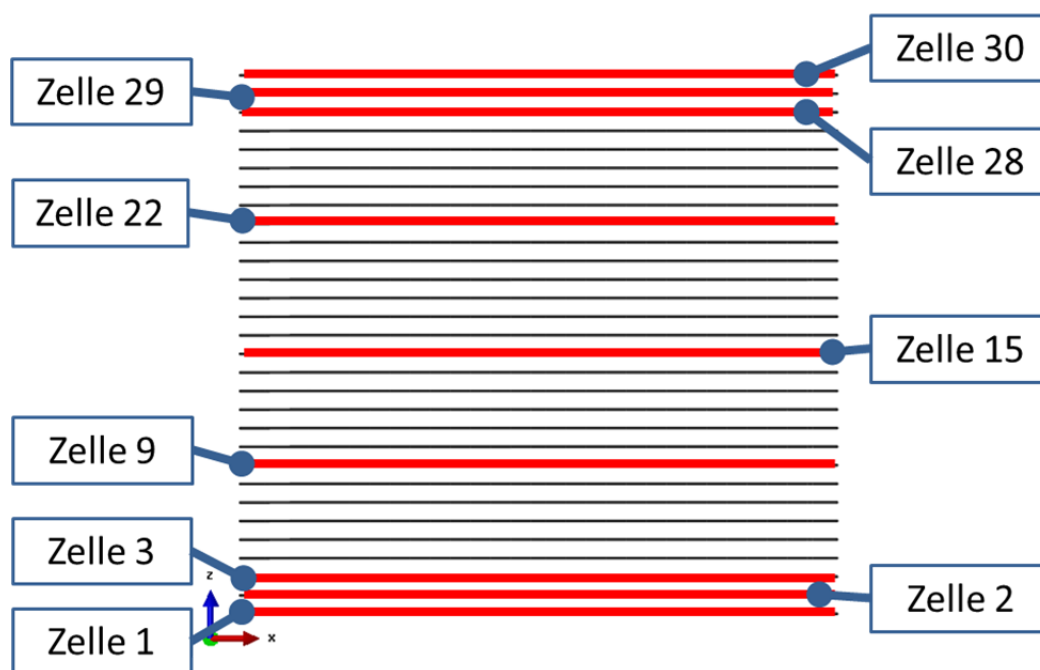


Abbildung 9-1: Definition der Zellen für die Submodelluntersuchungen

#### 9.1.2 Ergebnisse Detailmodelle auf verschiedenen Positionen

Um die Übersichtlichkeit zu gewährleisten werden die Ergebnisse für die Detailmodelle nur für sechs verschiedene Brennstoffzellen für jede Grenzschicht visualisiert (Abbildung 9-2 und Abbildung 9-3). Die Ergebnisse aller übrigen Detailmodelle fließen aber auch in den zu Kapitel 9.2 gehörenden Diagrammen ein. Da an der Kathode- Elektrolyt Grenzschicht bei ausschließlicher Betrachtung des maximalen Rissinitiierungsparameters über den gesamten thermischen Zyklus an der Luft-Anströmseite bei allen Zellen ein Wert von eins auftritt und daher kein sinnvoller Vergleich möglich ist, wird die Visualisierung (Abbildung 9-2, Abbildung 9-3) für 4% der Aufheizzeit dargestellt.

Kathode- Elektrolyt Grenzfläche bei 4% der Aufheizzeit

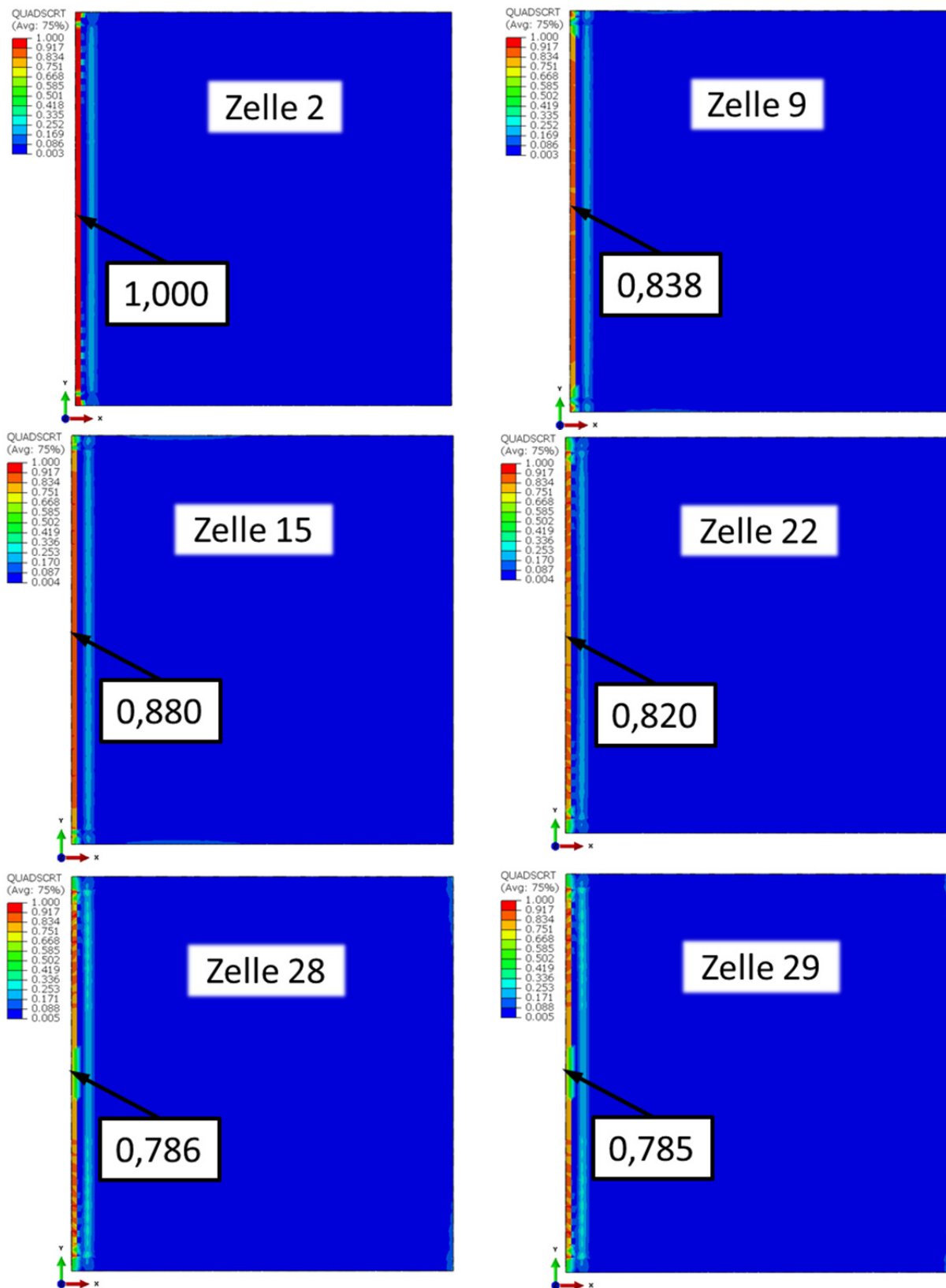


Abbildung 9-2: Rissinitierungsparameter, Submodelle bei 4% der Aufheizzeit, Kathode- Elektrolyt Haftschicht

Anode- Elektrolyt Grenzfläche bei 4% der Aufheizzeit

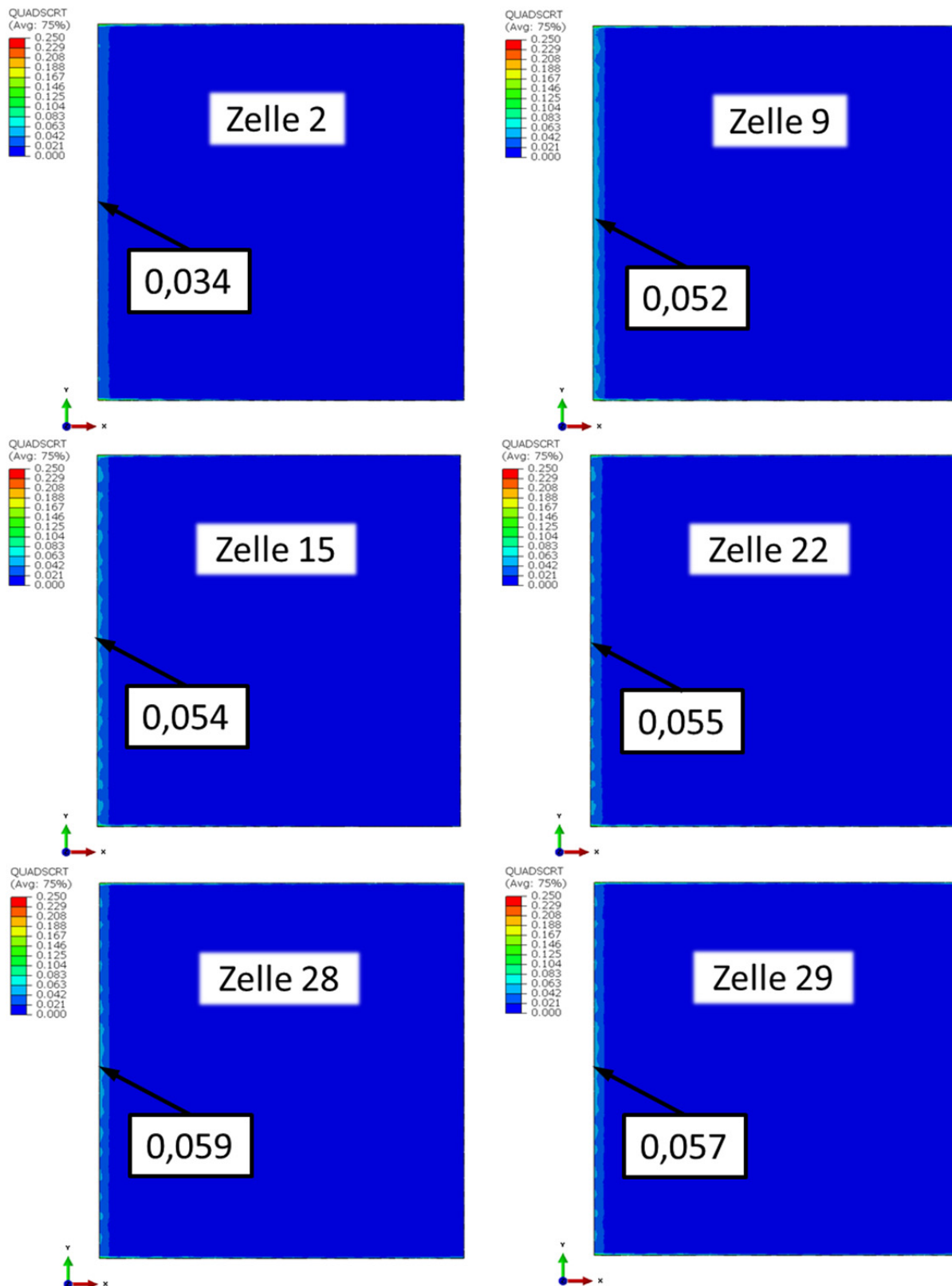


Abbildung 9-3: Rissinitiiierungsparameter, Submodelle bei 4% der Aufheizzeit, Anode- Elektrolyt Haftschrift

Durch Betrachtung von Abbildung 9-2 kann die Zelle 2 als deutlich kritischste verglichen mit den anderen Zellen und bezogen auf die Delaminierungsinitiierung der Kathode- Elektrolyt Haftschrift identifiziert werden. Rein qualitativ kann aus Abbildung 9-2 abgeleitet werden, dass der Rissinitiiierungsparameter an der Kathode- Elektrolyt Grenzschicht von Zelle 2 bis Zelle 29 abnimmt.

An der Anode- Elektrolyt Haftschrift (Abbildung 9-3) wird ein unterschiedliches Verhalten festgestellt. Dabei werden qualitativ die Zellen mit höherer Nummerierung als kritischer erkannt. Im Allgemeinen können allerdings bei 4% der Aufheizzeit keine signifikanten Unterschiede an den Rissinitiierungsparametern der Anode- Elektrolyt Grenzschicht zwischen Zelle 9 und 29 konstatiert werden. Aus diesem Grund werden in der folgenden Auswertung an dieser Kontaktschicht lediglich die Maximalwerte über den thermischen Zyklus bewertet. Für den quantitativen Beweis wird in Kapitel 9.2 abermals ein Punkt an der jeweiligen Haftschrift gewählt und über alle berechneten Zellen ausgewertet.

## 9.2 Vergleich mit globaler Vergleichsschädigung

Für den Vergleich der Rissinitiierungsparameter der Submodelle mit der Vergleichsschädigung des Gesamtmodells wird auf jede Grenzschicht ein Knoten an der Anströmseite definiert (gleiche Punkte wie in Abbildung 8-32). Für die Kathode- Elektrolyt Grenzschicht wird zunächst der QUADSCRT Parameter bei 2% und 4% der Aufheizzeit dargestellt (Abbildung 9-4).

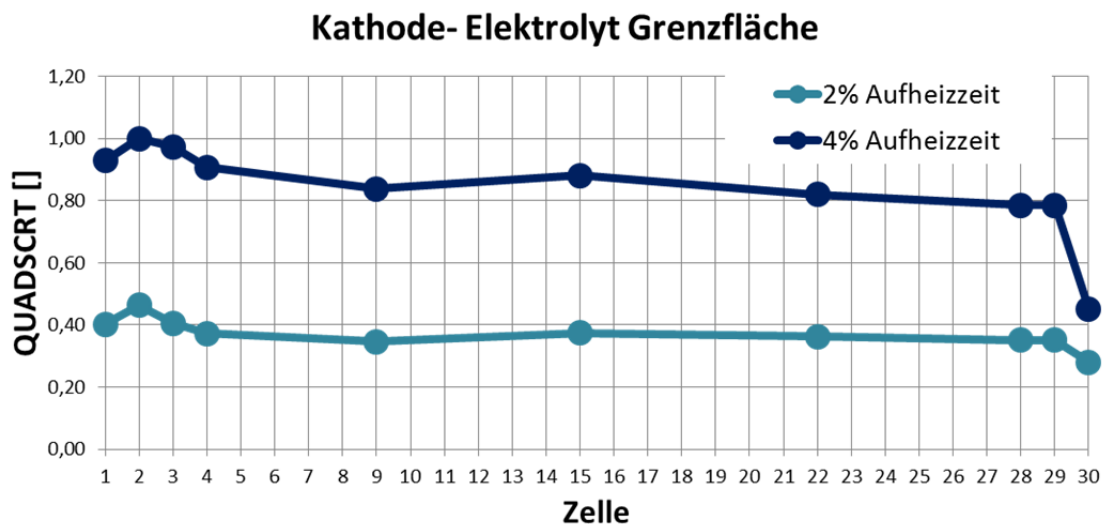


Abbildung 9-4: Rissinitiierungsparameter in Abhängigkeit der Zelle, Kathode- Elektrolyt Grenzschicht

Die Datenpunkte in Abbildung 9-4 repräsentieren die tatsächlichen Werte der berechneten Zellen, und zwischen diesen wurde eine lineare Interpolation durchgeführt. Die Verläufe beweisen die bereits nach Abbildung 9-2 konstatierte Aussage, dass die Zelle 2 die kritischste Zelle für die Delaminierung an der Kathode- Elektrolyt Haftschrift ist. In Richtung Zelle 30 nimmt der Rissinitiierungsparameter kontinuierlich ab, wobei allerdings Zelle 15 einen Ausreißer markiert. Dabei ist es durchaus möglich, dass sich zufällig an diesem Knoten in Zelle 15 ein Spannungsmaximum befindet. Da der Verlauf der Kurve bei 2% der Aufheizzeit jener bei 4% sehr ähnlich ist (Abbildung 9-4), wird die Kurve bei 4% für den Vergleich mit der globalen Schädigung herangezogen.

Für die Darstellung des Rissinitiierungsparameters an der Anode- Elektrolyt Haftschrift werden, aufgrund der geringen Schädigung und Fluktuation der Rissinitiierungswerte bei 4% der Aufheizzeit, jeweils die Maximalwerte über den kompletten thermischen Zyklus dargestellt (Abbildung 9-5).

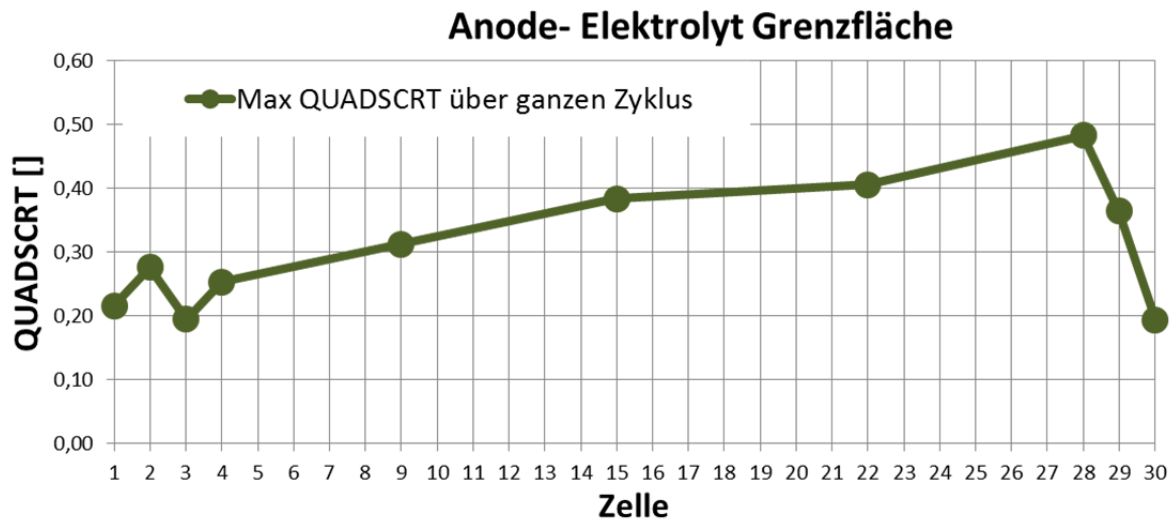


Abbildung 9-5: Maximaler Rissinitiierungsparameter in Abhängigkeit der Zelle, Anode- Elektrolyt Grenzschicht

In Abbildung 9-5 ist ersichtlich, dass der maximale Rissinitiierungsparameter der Anode- Elektrolyt Haftschrift in Zelle 28 erreicht wird. Alle anderen Zellen weisen deutlich geringere Werte auf.

Um die zwei Diagramme (Abbildung 9-4, Abbildung 9-5) mit dem globalen Vergleichsschädigungsverlauf (siehe Kapitel 7.2) vergleichen zu können, werden diese zwei Größen in einem Diagramm vereint. Dieses Vorgehensweise wird sowohl für die Kathode- Elektrolyt als auch für die Anode- Elektrolyt Grenzschicht durchgeführt (Abbildung 9-6, Abbildung 9-7).

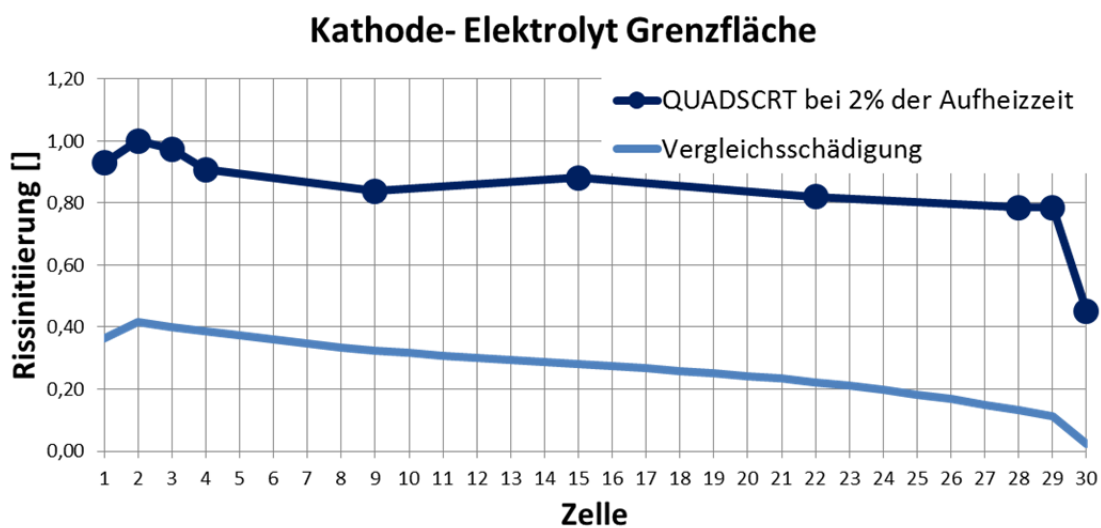


Abbildung 9-6: Vergleichsschädigung verglichen mit Rissinitiierungsparameter, Kathode- Elektrolyt Grenzschicht

In Abbildung 9-6 kann eine gute Korrelation des Verlaufes des Rissinitiierungsparameters der Submodelle mit jenen der globalen Vergleichsschädigung an der Kathode- Elektrolyt Haftschrift festgestellt werden. Die absoluten Werte sind nicht ident, da die Berechnung der Vergleichsschädigung lediglich Spannungskomponenten verwendet und keinerlei bruchmechanische Parameter berücksichtigt, wie dies beim Detailmodell mit *Kohäsivelemente* der Fall ist. Allerdings ist der Verlauf der beiden Kurven, bis auf Zelle 15 der Submodellrechnung, sehr ähnlich, und es kann tatsächlich mit der globalen Vergleichsschädigung eine richtige Relation bezüglich des Rissinitiierungsparameters zwischen den verschiedenen Zellen hergestellt werden. Besonders die Zellen mit höchster Wahrscheinlichkeit von Delaminierung der Kathode- Elektrolyt Grenzschicht, werden in der globalen Vergleichsschädigungsbetrachtung richtig vorhergesagt.



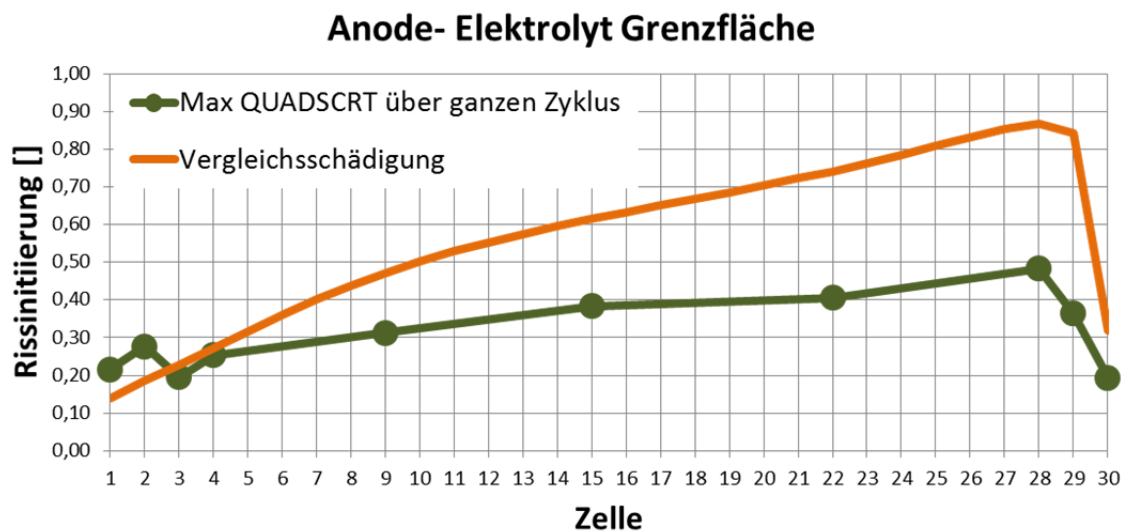


Abbildung 9-7: Vergleichsschädigung verglichen mit Rissinitiierungsparameter, Anode- Elektrolyt Grenzschicht

In Abbildung 9-7 kann bei Betrachtung der Rissinitiierung an der Anode- Elektrolyt Haftschrift eine gute Korrelation der Verläufe von globaler Vergleichsschädigung und maximalen Rissinitiierungsparameter der Submodelle festgestellt werden. Der Abfall der Vergleichsschädigung von Zelle 28 zu Zelle 1 im globalen Modell wird lediglich etwas überschätzt. Bei Untersuchung des maximalen Rissinitiierungsparameters der Submodelle fällt auf, dass Zelle 2 und 3 nicht dem Trend der globalen Vergleichsschädigung entsprechen. Ein Grund dafür kann sein, dass die Rissinitiierungsverteilung am Rand der Submodelle (Abbildung 9-3) Halbkreisen entsprechen und durch leicht veränderter Lage dieser Bereich zwischen den verschiedenen Zellen zu Unterschieden führt.

Auf jeden Fall konnte mit der Abbildung 9-6 und Abbildung 9-7 bewiesen werden, dass durch Analyse der Vergleichsschädigung des globalen Modells die kritischsten Zellen richtig identifiziert werden können. Dadurch wird auch die Anwendbarkeit der Berechnungsmethodik (Kapitel 6) bewiesen.

## 10 Zusammenfassung

Das erklärte Ziel dieser Diplomarbeit war die Definition einer Berechnungsmethodik die ausgehend von einem globalen Spannungsfeld die lokale Delaminierung bewerten kann. Diese Methodik wurde in Kapitel 6 definiert und mit den Ergebnissen aus Kapitel 7, 8 und 9 als anwendbar bewiesen. Zusätzlich wurde für die Delaminierungssubmodelle in einer umfangreichen Parameterstudie eine Empfehlung über den zu verwendenden Ansatz und die Netzdichte abgegeben.

Zu Beginn der Arbeit wurden das in der Vorarbeit von *Hassler* ermittelte Spannungsfeld und das dafür zugrunde liegende Temperaturfeld analysiert. Dadurch konnte basierend auf der Schubspannungsverteilung der Einzelzellen bereits eine Abschätzung der lokalen Schädigungen getroffen werden.

### 10.1 Vergleichsschädigung

Ein wesentlicher Teil dieser Arbeit bestand in der Ausarbeitung einer Vergleichsschädigung zur Beurteilung der kritischsten Brennstoffzellen auf Ebene des globalen Spannungsfeldes. Ausgehend von einzelnen Komponenten des Spannungstensors ist durch Adaption des Rissinitiierungskonzepts des *quadratischen Nennspannungskriteriums* die Berechnung einer Vergleichsschädigung möglich (Kapitel 7). Ein dafür erarbeitetes Python- Skript wurde für die Erstellung einer neuen Ergebnisdatei mit den visualisierten Vergleichsschädigungen verwendet. Basierend auf der globalen Vergleichsschädigung kann für beide Haftsichten die kritische Zelle für die Delaminierung gewählt werden. Eine qualitative Aussage über die absolute Höhe des Wertes der Rissinitiierung oder ein Vergleich zwischen den beiden Grenzschichten ist unzulässig, da lediglich Spannungskomponenten ermittelt aber keine bruchmechanischen Werkstoffparameter betrachtet wurden.

Durch Vergleich verschiedener Zellen- Submodelle konnte die richtige Auswahl der kritischen Zellen bewiesen werden (Kapitel 9). Dabei wurde zunächst ein qualitativer, visueller Beweis durch Vergleich der Ergebnisse der Rissinitiierungsparameter der verschiedenen Submodelle durchgeführt. Anschließend wurde jeweils ein Punkt an der Luftanströmseite der zwei Haftsichten gewählt und die Wahrscheinlichkeit der Rissinitiierung über die berechneten Zellen aufgetragen. Der quantitative Beweis für die korrekte Vorhersage der kritischen Zellen durch Analyse der globalen Vergleichsschädigung konnte durch Korrelation der Verläufe der globalen Schädigung mit dem Ergebnis der Submodelle geliefert werden. Um allerdings überhaupt den gewonnenen Rissinitiierungswerten der Delaminierungssubmodelle vertrauen zu können, wurde am Ende der Parameterstudie noch die Gültigkeit des verwendeten Diskretisierungsgrades und des Prozesszonenansatzes des Submodells nachgewiesen (Kapitel 8.5).

Als kritischste Zelle für Delaminierung zwischen der Kathode- Elektrolyt Haftsicht konnte Zelle 2 und für die Anode- Elektrolyt Grenzschicht Zelle 28 identifiziert werden. Das Schädigungsverhalten der beiden Haftsichten wurde gegenläufig über die Stackhöhe vorhergesagt. Dieses Verhalten wird bereits bei Betrachtung der Schubspannungen des globalen Spannungsfelds deutlich (Kapitel 5.2). Da die Zellen 2 und 28 die höchsten Vergleichsschädigungswerte der jeweiligen Grenzschicht aufweisen, müssen diese zwei Zellen in Delaminierungssubmodellen genauer untersucht werden (dies wurde in dieser Arbeit bei der Gegenüberstellung von Detailmodell und Vergleichsschädigung durchgeführt, Kapitel 9). Bereits bei 4% der Aufheizzeit weist die Kathode- Elektrolyt- Haftsicht an der Luftanströmungsseite Delaminierungen auf. Im Gegensatz dazu ist die Anode- Elektrolyt Schicht deutlich unkritischer. Dieser Umstand kann mit den deutlich geringeren kritischen

Energiefreisetzungsraten der Kathode- Elektrolyt Grenzschicht und dem damit verbundenen spröden Materialverhalten erklärt werden.

Obwohl dieses Brennstoffzellendesign erst in der Entwicklungsphase ist und jegliche mechanische Versuche dazu fehlen, muss die großflächige Delaminierung bei bereits 4% der Aufheizzeit in Zelle 2 kritisch hinterfragt werden. Zunächst ist das berechnete globale Spannungsfeld nur eine Approximation, da wesentliche Materialparameter und deren Veränderungen über die Zeit für die verwendeten Materialien fehlen und nur abgeschätzt wurden. Diese Daten müssen durch Materialtest bei unterschiedlichen Temperaturen erst erhoben werden. Ebenfalls werden Eigenspannungen und deren Kopplung mit dem Temperaturfeld nicht berücksichtigt. Bei den Delaminierungssubmodellen sind ebenfalls keine bruchmechanischen Kennwerte für die Materialkombinationen in der Literatur zu finden und wurden durch Interpolation von gefundenen und angenommenen Werten der angrenzenden Materialien errechnet. Da diese Werte nur für Raumtemperatur ermittelt und geschätzt wurden, ist die Abschätzung deutlich konservativ, da die meisten Materialien bei höheren Temperaturen deutlich zäher werden.

## 10.2 Delaminierungssubmodell

Mit Hilfe des Delaminierungssubmodells ist es unter Verwendung der *Kohäsivelemente* in den Kontaktschichten zweier Materialien möglich, das Delaminierungsverhalten der Einzelzelle zu untersuchen. Der Aufbau des Submodells inklusive Randbedingungen wurde in Kapitel 8.1 beschrieben. Des Weiteren wurde ausführlich auf die Definition der *Kohäsivelemente* in Abaqus (Kapitel 8.1) eingegangen. Im Theorieteil der Arbeit (Kapitel 3.3) sind die *Kohäsivelemente* sehr ausführlich beschrieben und die Erkenntnisse verschiedener Autoren zusammengefasst. Da bei Verwendung von *Kohäsivelementen* die Netzdichte entscheidenden Einfluss auf die bruchmechanisch korrekte Abbildung der Realität hat, wurde eine ausführliche Parameteranalyse über verschiedene Ansätze und Netzdichten durchgeführt.

Neben den jeweiligen Materialdefinitionen der unterschiedlichen Simulationen wurden die Rissinitiierungsparameter für jeden Ansatz visualisiert und am Ende des Kapitels 8.4.3 über alle Berechnungen zu gleichen Zeitpunkten verglichen. Zusätzlich wurden die Rissinitiierungsparameterverläufe von einem Punkt an der Kathode- Elektrolyt Haftschrift dargestellt und eine Berechnung der Streuung durchgeführt. Aufgrund der Anpassung der Werkstoffparameter sollten die Abweichungen innerhalb der verschiedenen Ansätze sehr klein sein. Die geringste Streuung über den gesamten thermischen Zyklus konnte beim Ansatz nach *Barenblatt* festgestellt werden.

Zur Beantwortung der Frage, welcher dieser Ansätze das korrekte bruchmechanische Verhalten am besten wiedergibt, wurde ein Modell mit einem der minimalen Prozesslänge (Kapitel 8.3) entsprechenden feinen Netzabstand am Rand der Zelle erstellt. Somit stellt dieses Modell das exakte bruchmechanische Verhalten der realen Brennstoffzelle dar.

Die verschiedenen Ansätze wurden sowohl visuell, als auch durch Gegenüberstellung der Rissinitiierungsparameterverläufe von einem Punkt an der Kathode- Elektrolyt Haftschrift mit dem bruchmechanisch korrekten Modell verglichen. Als Ergebnis konnte der Ansatz nach *Barenblatt* als realistischste Abschätzung identifiziert werden. Da allerdings mit größerem Netz der Fehler zwischen dem *Barenblatt* Ansatz und dem bruchmechanisch korrekten Modell größer wird, wurde eine Effizienz- Analyse der FEM Berechnungen durchgeführt. Dabei konnte festgestellt werden, dass das

Modell nach *Barenblatt* mit „feinem“ Netz die höchste Effizienz, bezogen auf Rechenzeit und Fehler, aufweist.

Aus diesen Gründen wird an dieser Stelle empfohlen, bei Brennstoffzellen mit ähnlichen Randbedingungen Delaminierungssubmodelle nach dem Ansatz nach *Barenblatt* und „feinem“ Netz (2mm Knotenabstand) aufzubauen. Für die Detailuntersuchung von Bereichen höherer Rissinitiierungsparameter kann anschließend eine Analyse mit höherer Netzauflösung durchgeführt werden.

## 11 Ausblick

### 11.1 Materialdaten und Herstellung

Entscheidend für die realitätsnahe Berechnung der Delaminierung der Brennstoffzelle ist eine umfassende Kenntnis der Materialdaten und deren Abhängigkeit von der Temperatur. Dieser Punkt wird für zukünftige Simulationen als prioritär erachtet, da für die verwendeten Materialien keinerlei Erfahrungswerte in der Literatur vorhanden sind. Die Materialparameter sollten für die Temperatur- und Spannungsberechnung sehr genau vorliegen, da auf diesen Ergebnissen wiederum die Bewertung der Delaminierung aufbaut. Da die SOFC während der Aufheiz- und Abkühlphase einige Größenordnungen an Temperaturen überschreitet und die Materialparameter auf diese großen Temperaturänderungen sehr empfindlich sind, ist eine temperaturabhängige Parameterbestimmung unumgänglich.

Für die Delaminierungssubmodelle ist eine genaue Kenntnis der kritischen Energiefreisetzungsrate und der kritischen Grenzflächenspannung wichtig. Die Verfahren, die für die Bestimmung dieser Parameter bei sehr dünnen Bauteilen in Frage kommen, wurden in Kapitel 3.3.6 beleuchtet. Idealerweise sollten diese zwei bruchmechanischen Kennwerte in allen drei Hauptkoordinatenrichtungen bestimmt werden. Allerdings ist für eine erste Abschätzung sicherlich die Annahme isotropen Werkstoffverhaltens ausreichend. Entscheidend ist die Bestimmung der Temperaturabhängigkeit der kritischen Energiefreisetzungsrate, da sehr viele Werkstoffe unterschiedliches bruchmechanisches Verhalten bei höheren Temperaturen aufweisen.

Die zu bestimmenden mechanischen Werkstoffeigenschaften sind sehr stark von der Herstellung abhängig. Aus diesem Grund müssen das Verfahren und die Herstellungsparameter (zum Beispiel die Sintertemperatur) berücksichtigt werden. In einem weiteren Schritt ist es notwendig, die herstellungsbedingten Eigenspannungen und deren Änderung während der Aufheizphase (Spannungsrelaxation bei Annäherung der Sintertemperatur) in der Simulation zu berücksichtigen.

In einer detaillierten Analyse der Delaminierung müssen neue Materialmodelle für Anode, Kathode und Elektrolyt definiert werden, um das Verhalten der Perovskit Kristallstruktur und die möglichen Phasenumwandlungen im Betrieb adäquat simulieren zu können. Des Weiteren muss die Anisotropie und der Dichtegradient der Anode und der Kathode infolge der Herstellung in einer weiterführenden Berechnung mitmodelliert werden. Ebenfalls erforderlich wären Materialdaten für das Kriechverhalten der metallischen Werkstoffe und dessen Berücksichtigung im Modell. In einem weiteren Schritt müssen auch bestimmte kritische Betriebszustände, wie zum Beispiel die Oxidation von Nickel zu NiO und die damit verbundenen induzierten Spannungen, berücksichtigt werden.

### 11.2 Optimierung des Modellaufbaus

Die Annahme eines konstanten Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Luft und Interkonnektor ist für eine einfache Geometrie, wie sie im Stack vorliegt, ausreichend. Bei einer komplexeren Geometrie ist allerdings eine Temperaturfeldrechnung mittels eines CFD Verfahrens zu bevorzugen.

Da während des Betriebes mit konstanter Temperatur auch Delaminierungen durch elektrochemische Effekte vorkommen können, wird eine elektrochemische Simulation von verschiedenen Betriebszuständen empfohlen. Diese elektrochemischen Vorgänge haben einen signifikanten Einfluss auf das Temperaturfeld und können lokale Temperaturgradienten hervorrufen, welche wiederum Delaminierungen zur Folge haben können.

Bei der Kopplung der mechanischen mit der elektrochemischen Simulation und CFD muss untersucht werden, ob die Symmetrien des Modells stärker ausgenutzt werden können. Als alternativer Ansatz zur Delaminierungsanalyse mit den *Kohäsivelementen* kann der Ansatz des *Konzepts der Konfigurationskräfte* (engl. configurational force concept) verwendet werden. Dieser ist allerdings zum jetzigen Zeitpunkt in keinem FEM Programm standardmäßig vorhanden und müsste in einem FEM Code programmiert werden.

### 11.3 Validierung

Die Ergebnisse der Delaminierungs- Rechnung müssen einer experimentellen Validierung unterzogen werden. Hierfür könnte am Prüfstand der ganze Stack mit einem thermischen Zyklus belastet werden und anschließend die Einzelzelle auf Delaminierungen überprüft werden. Für die Detektion der Delaminierung kommen jegliche optische Verfahren, wie Beobachtungen mit dem freien Auge, Licht- und Elektronenstrahlmikroskopie, sowie wellenbasierende Verfahren wie Ultraschall [95] in Frage. Eine weitere Möglichkeit besteht in der Infrarotthermographie [96], bei der das Bauteil aufgeheizt und die Infrarotstrahlung durch eine Kamera detektiert wird. Dadurch lassen sich Delaminierungen abbilden. Diese Methoden müssen allerdings auf ihre Anwendbarkeit auf Keramiken mit erhöhter Porosität, wie sie für die Anode und die Kathode verwendet werden, untersucht werden.

### 11.4 Optimierung

Nach erfolgreicher Validierung des bruchmechanischen Modells können Optimierungsmaßnahmen durchgeführt werden, um die Delaminierung der Zellen verhindern oder reduzieren zu können. Dazu bedarf vor allem der Temperaturverlauf während der Aufheiz- und Abkühlphase einer Optimierung innerhalb der technologischen und elektrochemischen Randbedingungen. Des Weiteren können auch Optimierungspotentiale im Stackdesign identifiziert werden. Vor allem die Lagerung der einzelnen Zellen und das Interkonnektordesign haben großen Einfluss auf die lokale Delaminierung.

Aus meiner Sicht haben SOFCs das Potential einen wesentlichen Beitrag zur Reduktion der Treibhausgas Emissionen leisten zu können. Somit hoffe ich, dass ich mit dieser Arbeit einen Gedankenanstoß für zukünftige Forschungsprojekte auf diesem Gebiet gebe, um die mechanische Stabilität und Dauerfestigkeit erhöhen zu können. Wenn die Limitierung der Lebensdauer aufgrund von bruchmechanischen Versagen beseitigt, beziehungsweise reduziert wird und eine Kostenreduktion im Bereich der Materialien und deren Herstellung geschafft wird, sehe ich keine Hürde für den großflächigen Einsatz von SOFCs.

## Abkürzungen

AAE	(Luft-) Auslasseite Anode- Elektrolyt Grenzschicht
ABO <sub>3</sub>	Perowskit-Kristallstruktur
AFC	Alkaline Fuel Cell (dt. alkalische Brennstoffzelle)
AKE	(Luft-) Auslasseite Kathode- Elektrolyt Grenzschicht
ALLCD	Energy dissipated by viscoelasticity (dt. durch Viskoelastizität dissipierte Energie)
ALLSE	Strain energy for whole model (dt. Dehnungsenergie des Gesamtmodells )
AVL	Anstalt für Verbrennungskraftmaschinen List
CAE	Computer Aided Engineering (dt. rechnerunterstützte Entwicklung)
CFD	Computational Fluid Dynamics (dt. numerische Strömungsmechanik)
CVD	Chemical Vapour Deposition (dt. chemische Gasphasenabscheidung)
DMFC	Direct Methanol Fuel Cell (dt. Direktmethanol- Brennstoffzelle)
EAE	(Luft-) Einlasseite Anode- Elektrolyt Grenzschicht
EDC	European Driving Cycle (dt. europäischer Fahrzyklus)
EKE	(Luft-) Einlasseite Kathode- Elektrolyt Grenzschicht
FEM	Finite-Elemente-Methode
LEBM	Linear- elastische Bruchmechanik
LSM	Lanthan-Strontium-Manganoxid
MCFC	Molten Carbonat Fuel Cell (dt. Schmelzkarbonat- Brennstoffzelle)
Ni <sub>8</sub> YSZ	Cermet aus Nickel (Ni) und Yttrium stabilisiertes Zirkoniumdioxid (8YSZ)
NiO	Nickeloxid
PAFC	Phosphor Acid Fuel Cell (dt. Phosphorsäure- Brennstoffzelle)
PEEK	Polyetheretherketon
PEMFC	Proton Exchange Membrane Fuel Cell (dt. Protonenaustauschmembran- Brennstoffzelle)
RPZ	Rissprozesszone
SOFC	Solid oxide fuel cell (dt. Festoxid-Brennstoffzelle)
VCCT	Virtual crack closure technique (dt. virtuelle RisschlieÙe Technik)
YAG	Yttrium-Aluminium-Granat
YSZ	Yttriumdotiertes Zirkoniumdioxid

## Formelzeichen

### Lateinische Buchstaben

$a$	halbe Risslänge [m]
$a_c$	Kontaktflächenrisslänge [m]
$c$	longitudinale Wellengeschwindigkeit [m/s]
$CTSHR$	Schubspannung in Abaqus [MPa]
$D$	Schädigungsfunktion []; äußerer Durchmesser [m]
$D^0$	Steifigkeitsmatrix im ungeschädigten Zustand [N/m <sup>3</sup> ]
$d$	skalare Schädigungsvariable []; innerer Durchmesser [m]
$E$	elektrisches Potential [V]; Elastizitätsmodul [MPa]
$F$	Schadensinitiierungsfunktion []; Tangentialkraft [N]
$f_g$	Reibungsbeiwert []
$G$	frei Gibb'sche Reaktionsenthalpie [J]; Energiefreisetzungsrate [J/m <sup>2</sup> ]; Schubsteifigkeit [N/m <sup>3</sup> ]
$H$	Reaktionsenthalpie [J]; Vickershärte [MPa]
$h$	Beschichtungsdicke [m]
$K$	Anfangssteifigkeit [N/m <sup>3</sup> ]
$K_{IC}$	Bruchzähigkeit bei Mode I Belastung [MPa·m <sup>1/2</sup> ]
$l$	Laminatdicke [m]
$l_e$	Knotenabstand [m]
$l_{pz}$	Länge der Prozesszone [m]
$M$	Faktor abhängig von Prozesszonenansatz []
$MaxDamage$	maximale Vergleichsschädigung []
$NT$	nodal temperature (dt. Knotentemperatur) [°C]
$N_e$	Anzahl der Elemente innerhalb der Prozesszone []
$n$	Normalvektor []
$n_{el}$	Anzahl der an der Reaktion beteiligte Elektronen []
$P$	Normalkraft [N]
$QUADSCRT$	quadratic nominal stress criterion (dt. quadratisches Nennspannungskriterium) []
$R$	Radius [m]
$r$	Schadensinitiierungsgrenzwert [m]
$S$	Entropie [J/K]
$SDEG$	stiffness degradation (dt. Steifigkeitsdegradation) []
$T$	Temperatur [°K]
$t$	Spannung an den Rissflanken [MPa], Zeit [s]
$\bar{t}$	angepasste Grenzflächenspannung [MPa]



$\tilde{\epsilon}$	in Abaqus definierte Grenzflächenspannung [MPa]
$\tilde{t}_3^0, \tilde{t}_2^0, \tilde{t}_1^0$	geschätzte kritische Grenzflächenspannung [MPa]
$u$	Relativverschiebung im globalen Koordinatensystem [m]
$v$	Geschwindigkeit [m/s]
$X_1, X_2, X_3$	kartesische Koordinaten in der undeformierten Konfiguration [m]
$x_1, x_2, x_3$	kartesische Koordinaten in der deformierten Konfiguration [m]
$\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3$	kartesische Koordinaten der mittleren deformierten Konfiguration [m]

### Griechische Buchstaben

$\alpha$	Exponent des Potenzgesetz []; Koeffizient in Anfangssteifigkeits- Berechnung []; Wärmeübergangskoeffizient [W/m <sup>2</sup> K]
$\beta$	Mixed- Mode Verhältnis
$\delta$	Relativverschiebungstensor im lokalen Koordinatensystem [m]
$\bar{\delta}_{ij}$	Kronecker-Delta
$\epsilon$	technische Dehnung []
$\eta$	krummlinige Koordinaten [m], Exponent im <i>Benzeggagh- Kenane</i> Kriterium []
$\eta_{th}$	thermodynamischer Wirkungsgrad []
$\Theta$	Transformationstensor []
$\theta$	Kegelwinkel [°]
$\mu$	schädigungskonsistenter Parameter []; Viskositätsparameter []; Reibungskoeffizient []
$\Xi$	dissipierte Energie durch Rissfortschritt [J/m <sup>2</sup> ]
$\xi$	krummlinige Koordinaten [m]
$\sigma$	Spannung [MPa]
$v$	Vektor []
$\psi$	frei Energie je neuer Oberfläche [J/m <sup>2</sup> ]
$\psi$	frei Energie je neuer Oberfläche im ungeschädigten Zustand [J/m <sup>2</sup> ]

## Indizes

I, II, III	Mode- Belastung (Bruchmechanik)
<i>C</i>	coating (dt. Beschichtung)
<i>c</i>	kritisch
<i>eff</i>	effektiv
<i>I</i>	interface (dt. Kontaktfläche)
<i>i</i>	Laufvariable
<i>j</i>	Laufvariable
<i>m</i>	molar
<i>min</i>	mindest-
<i>n</i>	Normalkomponente
<i>o</i>	obere
<i>ratio</i>	Verhältnis
<i>S</i>	substrat (dt. Substrat)
<i>s</i>	Tangentialkomponente
<i>shear</i>	euklidische Norm in Modus II und Modus III
<i>T</i>	total
<i>t</i>	Tangentialkomponente
<i>u</i>	untere
<i>v</i>	viskos

## Hochstellungen

0	Standardbedingungen, Rissinitiierung
+	positive Schnittfläche
-	negative Schnittfläche
<i>f</i>	Versagen des Elements
<i>t</i>	Zeitpunkt
*	vorgegeben

## Operatoren

$\langle \cdot \rangle$	Föppl Klammern, definiert als: $\langle x \rangle = \frac{1}{2}(x +  x )$
$\partial$	partielle Differentiation
$\cdot$	Ableitung nach der Zeit
$\  \cdot \ $	Norm eines Vektors, definiert als $\  \underline{x} \  = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$
$d$	totale Differentiation
$\Delta$	Differenz zweier Größen
$\sigma_{ij,j}$	einsteinsche Summenkonvention, definiert als $\sigma_{ij,j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}$

## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1: Gliederung der Arbeit .....	2
Abbildung 2-1: Funktionsprinzip Brennstoffzelle [16] .....	5
Abbildung 2-2: Theoretische Wirkungsgrade [5], [8], [9].....	7
Abbildung 2-3: Funktionsprinzip SOFC [8].....	10
Abbildung 2-4: Mikrostruktur Zelle [19].....	10
Abbildung 2-5: Planare SOFC [21].....	11
Abbildung 2-6: Aufbau tubuläre SOFC [7].....	12
Abbildung 2-7: Zusammenbau tubuläre SOFC [17].....	12
Abbildung 2-8: Gasstromführung im Interkonnektor [7].....	12
Abbildung 2-9: Stützschtichtkonfigurationen [23].....	13
Abbildung 2-10: Thermische Dehnung typischer Zellkomponenten (Ni-YSZ Anode, YSZ Elektrolyt, LSM Kathode und ferritischer Stahl-Interkonnektor) [24].....	14
Abbildung 2-11: Mögliche Schädigungen [25].....	15
Abbildung 2-12: Mögliche Rissarten in einer SOFC [26].....	15
Abbildung 2-13: Delaminierung nach thermischen Zyklen [27].....	16
Abbildung 3-1: Körper $\Omega$ mit einem Riss $\Gamma_c$ im undeformierten Zustand [29].....	19
Abbildung 3-2: Durch Materialinhomogenität $\Gamma_d$ unterteilter Körper $\Omega$ [29].....	19
Abbildung 3-3: Grenzflächendefinition [29].....	20
Abbildung 3-4: Bilineares Materialgesetz der Kohäsivzone [39].....	22
Abbildung 3-5: Energiedissipation durch Rissfortschritt [29].....	23
Abbildung 3-6: Bilineares Materialgesetz für Kohäsivelemente [29].....	25
Abbildung 3-7: Verhalten des bilinearen Materialgesetzes unter a) Mode II oder Mode III; b) Mode I Beanspruchung [54].....	25
Abbildung 3-8: Quadratisches Nennspannungskriterium, zweiachsige Belastung .....	27
Abbildung 3-9: Bilineares Materialgesetz unter mixed- Mode Belastung [66].....	31
Abbildung 3-10: COH3D8 kohäsiv- Element [67].....	32
Abbildung 3-11: Bilineares Materialmodell mit Konvergenzerklärung [29].....	32
Abbildung 3-12: Bilineares Materialgesetz, Materialparameter [29].....	34
Abbildung 3-13: Benzeggagh- Kenane Kriterium, Materialparameter [63].....	34
Abbildung 3-14: Kontaktfläche Eindrückttest [72] .....	35
Abbildung 3-15: Schema Vickers Eindrückttest in Nähe der Kontaktfläche [76].....	36
Abbildung 3-16: Testaufbau für Bruchzähigkeitsbestimmung mittels Zugversuch [77].....	37
Abbildung 3-17: Prinzip des Schertests [80].....	38
Abbildung 3-18: Schematische Darstellung des Kratztests [82].....	38
Abbildung 3-19: Aufbau lasergestützte Grenzflächenidentifikation [83].....	39
Abbildung 3-20: Prinzip der Anpassung der kritischen Grenzflächenspannung.....	41
Abbildung 3-21: Modell zur Ableitung der Anfangssteifigkeit [39].....	42
Abbildung 4-1: Brennstoffzellenstack mit vernetzter Detailansicht [1].....	44
Abbildung 4-2: Brennstoffzellenstack mit Brenngaskanälen [1].....	45
Abbildung 4-3: Explosionsansicht des Brennstoffzellenstacks [2].....	45
Abbildung 4-4: Wiederholende Einheit mit Luft [1].....	46
Abbildung 4-5: Wiederholende Einheit ohne Luft [1].....	47
Abbildung 4-6: Brennstoffzellenaufbau [1].....	48
Abbildung 4-7: Zellenproportionen [1].....	48
Abbildung 5-1: Randbedingungen thermische Rechnung [1].....	50
Abbildung 5-2: Einlasstemperaturverlauf der Luft beim Heizen [1].....	51
Abbildung 5-3: Massenstromverlauf der Luft beim Heizen [1].....	51
Abbildung 5-4: Einlasstemperaturverlauf der Luft beim Kühlen [1].....	51
Abbildung 5-5: Massenstromverlauf der Luft beim Kühlen [1].....	51

Abbildung 5-6: Wärmeübergangsdefinition [1] .....	51
Abbildung 5-7: Wärmeübergang Stirnfläche [1] .....	51
Abbildung 5-8: Temperaturfeld des Stacks bei 25% der Aufheizzeit [1] .....	52
Abbildung 5-9: Temperaturfeld des Stacks am Ende des Aufheizzyklus [1] .....	53
Abbildung 5-10: Temperaturfeld des Stacks bei 143% der Aufheizzeit [1] .....	53
Abbildung 5-11: Temperaturfeld der Zellen bei 92% der Aufheizzeit [1] .....	54
Abbildung 5-12: Temperaturfeld der Zellen bei 159% der Aufheizzeit [1] .....	54
Abbildung 5-13: Fixierung des Stacks [1] .....	55
Abbildung 5-14: Spannungsfeld bei 9% der Aufheizzeit und Spannungsverlauf in einem ausgewählten Knoten [1] .....	55
Abbildung 5-15: Querschubspannungen in XZ- Richtung über alle Zellen bei 102% der Aufheizzeit [1] .....	56
Abbildung 5-16: Querschubspannungen in YZ- Richtung über alle Zellen bei 102% der Aufheizzeit [1] .....	57
Abbildung 6-1: Flussdiagramm Berechnungsmethodik .....	60
Abbildung 7-1: Vergleichsschädigung, Anströmseite .....	64
Abbildung 7-2: Vergleichsschädigung, Ausströmseite .....	65
Abbildung 7-3: Vergleichsschädigung in den Einzelzellen .....	66
Abbildung 7-4: Definition der Pfade zur Schädigungsverlauf-Darstellung .....	67
Abbildung 7-5: Vergleichsschädigung Kathode- Elektrolyt Grenzfläche .....	68
Abbildung 7-6: Vergleichsschädigungsverlauf Anode- Elektrolyt Grenzfläche .....	68
Abbildung 8-1: Delaminierungssubmodell .....	70
Abbildung 8-2: Zelle für Parameteranalyse .....	72
Abbildung 8-3: Spezifikation der Netzdichte .....	73
Abbildung 8-4: Spannungsvergleich zwischen Submodell und globales Modell bei 25% der Aufheizzeit, Barenblatt „normale“ Netzdichte .....	76
Abbildung 8-5: Rissinitiierungsparameter Barenblatt Ansatz mit „normaler“ Netzdichte .....	77
Abbildung 8-6: Rissfortschrittsparameter Barenblatt Ansatz mit „normaler“ Netzdichte .....	78
Abbildung 8-7: Vergleich der Energiebeiträge, Barenblatt mit „normaler“ Netzdichte .....	78
Abbildung 8-8: Spannungsvergleich zwischen Submodell und globalem Modell bei 14% der Aufheizzeit, Barenblatt „feine“ Netzdichte .....	79
Abbildung 8-9: Rissinitiierungsparameter Barenblatt Ansatz mit „feiner“ Netzdichte .....	80
Abbildung 8-10: Rissinitiierungsparameter Barenblatt Ansatz mit „extra feiner“ Netzdichte .....	81
Abbildung 8-11: Vergleich der verschiedenen Netzdichten, Barenblatt, 6% der Aufheizzeit .....	82
Abbildung 8-12: Rissinitiierungsparameter Rice/Falk Ansatz mit „normaler“ Netzdichte .....	83
Abbildung 8-13: Rissinitiierungsparameter Rice/Falk Ansatz mit „feiner“ Netzdichte .....	84
Abbildung 8-14: Rissinitiierungsparameter Rice/Falk Ansatz mit „extra feiner“ Netzdichte .....	85
Abbildung 8-15: Vergleich der verschiedenen Netzdichten, Rice/Falk, 6% der Aufheizzeit .....	86
Abbildung 8-16: Rissinitiierungsparameter Hillerborg Ansatz mit „normaler“ Netzdichte .....	87
Abbildung 8-17: Rissinitiierungsparameter Hillerborg Ansatz mit „feiner“ Netzdichte .....	88
Abbildung 8-18: Rissinitiierungsparameter Hillerborg- Ansatz mit „extra feiner“ Netzdichte .....	88
Abbildung 8-19: Vergleich der verschiedenen Netzdichten, Hillerborg, 6% der Aufheizzeit .....	90
Abbildung 8-20: Rissinitiierungsparameter Diehl Ansatz mit „normaler“ Netzdichte .....	91
Abbildung 8-21: Rissinitiierungsparameter Diehl Ansatz mit „feiner“ Netzdichte .....	92
Abbildung 8-22: Rissinitiierungsparameter Diehl Ansatz mit „extra feiner“ Netzdichte .....	92
Abbildung 8-23: Rissinitiierungsparameter Diehl0,1 Ansatz mit „normaler“ Netzdichte .....	93
Abbildung 8-24: Rissinitiierungsparameter Diehl0,1 Ansatz mit „feiner“ Netzdichte .....	94
Abbildung 8-25: Rissinitiierungsparameter Diehl0,1 Ansatz mit „extra feiner“ Netzdichte .....	94
Abbildung 8-26: Vergleich der verschiedenen Ansätze bei 6% der Aufheizzeit und „normales“ Netz, Kathode- Elektrolyt Haftschicht .....	96
Abbildung 8-27: Vergleich der verschiedenen Ansätze bei 6% der Aufheizzeit und „feines“ Netz, Kathode- Elektrolyt Haftschicht .....	97

Abbildung 8-28: Vergleich der verschiedenen Ansätze bei 6% der Aufheizzeit und „extra feines“ Netz, Kathode-Elektrolyt Haftschrift .....	97
Abbildung 8-29: Vergleich der verschiedenen Ansätze bei 6% der Aufheizzeit und „normales“ Netz, Anode-Elektrolyt Haftschrift .....	99
Abbildung 8-30: Vergleich der verschiedenen Ansätze bei 6% der Aufheizzeit und „feines“ Netz, Anode- Elektrolyt Haftschrift .....	99
Abbildung 8-31: Vergleich der verschiedenen Ansätze bei 6% der Aufheizzeit und „extra feines“ Netz, Anode-Elektrolyt Haftschrift .....	100
Abbildung 8-32: Knotendefinition für Auswertung .....	101
Abbildung 8-33: Vergleich der verschiedenen Ansätze im „feinem“ Netz für Kathode- Elektrolyt Schicht .....	103
Abbildung 8-34: Streuung innerhalb des Ansatzes von Barenblatt .....	104
Abbildung 8-35: Streuung innerhalb des Ansatzes von Rice / Falk .....	104
Abbildung 8-36: Streuung innerhalb des Ansatzes von Hillerborg .....	105
Abbildung 8-37: Streuung innerhalb des Ansatzes von Diehl .....	105
Abbildung 8-38: Streuung innerhalb des Ansatzes von Diehl <sub>0,1</sub> .....	106
Abbildung 8-39: Vernetzung laut korrekter Prozesszone .....	107
Abbildung 8-40: Rissinitiierungsparameter bei Modell mit korrekt abgebildeter Prozesszone .....	108
Abbildung 8-41: Detailansicht der korrekten Prozesszonenabbildung, Kathode- Elektrolyt Grenzschicht .....	109
Abbildung 8-42: Detailansicht der korrekten Prozesszonenabbildung, Anode- Elektrolyt Grenzschicht .....	110
Abbildung 8-43: Vergleich Modell mit korrekter Prozesszonenabbildung (außen angeordnete Detailbilder) mit Barenblatt „feines“ Netz (mittiges Übersichtsbild), Kathode- Elektrolyt Grenzschicht .....	111
Abbildung 8-44: Vergleich Modell mit korrekter Prozesszonenabbildung mit Barenblatt „extra feines“ Netz, Kathode- Elektrolyt Grenzschicht .....	112
Abbildung 8-45: Vergleich des Modells mit korrekter Prozesszonenabbildung mit verschiedenen Ansätzen bei „feinem“ Netz, Kathode- Elektrolyt Grenzschicht .....	113
Abbildung 8-46: Vergleich Modell mit korrekter Prozesszonenabbildung mit Barenblatt- Ansätzen, Kathode- Elektrolyt Grenzschicht .....	114
Abbildung 8-47: Rechenzeit der Ansätze nach Barenblatt .....	115
Abbildung 8-48: Rechenzeit multipliziert mit Fehler, Barenblatt .....	115
Abbildung 9-1: Definition der Zellen für die Submodelluntersuchungen .....	116
Abbildung 9-2: Rissinitiierungsparameter, Submodelle bei 4% der Aufheizzeit, Kathode- Elektrolyt Haftschrift .....	117
Abbildung 9-3: Rissinitiierungsparameter, Submodelle bei 4% der Aufheizzeit, Anode- Elektrolyt Haftschrift .....	118
Abbildung 9-4: Rissinitiierungsparameter in Abhängigkeit der Zelle, Kathode- Elektrolyt Grenzschicht .....	119
Abbildung 9-5: Maximaler Rissinitiierungsparameter in Abhängigkeit der Zelle, Anode- Elektrolyt Grenzschicht .....	120
Abbildung 9-6: Vergleichsschädigung verglichen mit Rissinitiierungsparameter, Kathode- Elektrolyt Grenzschicht .....	120
Abbildung 9-7: Vergleichsschädigung verglichen mit Rissinitiierungsparameter, Anode- Elektrolyt Grenzschicht .....	121
Abbildung 0-1: Erstellung der Kohäsivelemente .....	144
Abbildung 0-2: Materialdefinition der Kohäsivelemente .....	145

## Tabellenverzeichnis

<i>Tabelle 1: Kenngrößen der unterschiedlichen Brennstoffe [17] .....</i>	<i>6</i>
<i>Tabelle 2: Übersicht über verschiedene Brennstoffzellen [7], [8] .....</i>	<i>8</i>
<i>Tabelle 3: Einsatzgebiete der Brennstoffzellen [17] .....</i>	<i>9</i>
<i>Tabelle 4: Vor- und Nachteile unterschiedlicher Stützsichtkonfigurationen [24] .....</i>	<i>14</i>
<i>Tabelle 5: Wert für Koeffizient M .....</i>	<i>40</i>
<i>Tabelle 6: Berechnung der Anfangssteifigkeit [39] .....</i>	<i>71</i>
<i>Tabelle 7: Berechnung der Länge der Prozesszone [42], [43], [83], [84] .....</i>	<i>71</i>
<i>Tabelle 8: Versuchsplan mit kritischen Grenzflächenspannungen für Kathode- Elektrolyt Kontaktschicht .....</i>	<i>74</i>
<i>Tabelle 9: Versuchsplan mit kritischen Grenzflächenspannungen für Anode- Elektrolyt Kontaktschicht .....</i>	<i>75</i>
<i>Tabelle 10: Anfangssteifigkeiten nach Diehl [89] .....</i>	<i>75</i>
<i>Tabelle 11: Rissinitiierungskriterium QUADSCRT bei 3% der Aufheizzeit an Kathode- Elektrolyt Grenzschicht..</i>	<i>101</i>
<i>Tabelle 12: Rissinitiierungskriterium QUADSCRT bei 3% der Aufheizzeit an Anode- Elektrolyt Grenzschicht .....</i>	<i>102</i>

## Literaturverzeichnis

- [1] Paul Hassler, "Thermo-mechanische FE-Analyse des Aufheizprozesses einer SOFC," *Diplomarbeit*, Seiten 117, 2013.
- [2] Constantin Kiesling, "Aufwärmprozess einer Brennstoffzelle," *Diplomarbeit*, Seiten 121, Feb. 2012.
- [3] Dipl.Phys. Axel Müller, *Mehrschicht-Anode für die Hochtemperatur-Brennstoffzelle (SOFC)*, Dissertation, Ed. Karlsruhe, 2004.
- [4] W. Wiese, E. Riensche U. Stimming, "Brennstoffzellen," in *35. ÖGE-Fachtagung (Fachtagung der Energietechnischen Gesellschaften des ÖVE, SEV und VDE)*, Wien, 1997, Seiten 564-567.
- [5] Valentin Crastan, *Elektrische Energieversorgung 2*, dritte Ed. Berlin Heidelberg: Springer, 2012, Bd. 2.
- [6] U. Bossel, "The birth of the Fuel Cell," in *European Fuel Cell Forum*, Oberrohrdorf, 2000.
- [7] K. A. Friedrich, U. Stimming L. Carrette, "Fuel Cells – Fundamentals and Applications," *Fuel Cells*, Bd. 1, Ausg. 1, Seiten 5-39, Juni 2001.
- [8] Manfred Klell Helmut Eichlseder, *Wasserstoff in der Fahrzeugtechnik*, erste Ed. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag, 2008, Bd. 1.
- [9] S.P.S. Badwal, A. Kulkarni, C. Munnings S. Giddey, "A comprehensive review of direct carbon fuel cell technology," *Progress in Energy and Combustion Science*, Bd. 38, Ausg. 3, Seiten 360-399, Juni 2012.
- [10] Horizon Fuel Cell Technologies. [Online]. HYPERLINK "<http://www.horizonfuelcell.com>"  
<http://www.horizonfuelcell.com>
- [11] Toshiba Corporation. (2009) Toshiba launches direct methanol fuel cell in Japan as external power for mobile electronic devices. [Online]. HYPERLINK "[http://www.toshiba.com/taec/news/press\\_releases/2009/dmfc\\_09\\_580.jsp](http://www.toshiba.com/taec/news/press_releases/2009/dmfc_09_580.jsp)"  
[http://www.toshiba.com/taec/news/press\\_releases/2009/dmfc\\_09\\_580.jsp](http://www.toshiba.com/taec/news/press_releases/2009/dmfc_09_580.jsp)
- [12] SFC Energy. [Online]. HYPERLINK "<http://www.sfc.com/en>" <http://www.sfc.com/en>
- [13] H. Aki, "The Penetration of Micro CHP in Residential Dwellings in Japan," in *Power Engineering Society General Meeting*, 2007.
- [14] Ceres Power Ltd. [Online]. HYPERLINK "<http://www.cerespower.com/>"  
<http://www.cerespower.com/>
- [15] Ceramic Fuel Cells Limited. [Online]. HYPERLINK "<http://www.cfcl.com.au/>"  
<http://www.cfcl.com.au/>



- [16] K. Gruber H. Kronberger, "Brennstoffzellen -Stand der Entwicklung," *e & i Elektrotechnik und Informationstechnik*, Bd. 11, Seiten 374-377, Nov. 2005.
- [17] Andrew Dicks James Larminie, *Fuel Cell Systems Explained*, zweite Ed. London: John Wiley & Sons Ltd, 2003.
- [18] Ulrich Eberle Rittmar von Helholt, "Fuel cell vehicles: Status 2007," *Journal of Power Sources*, Bd. 165, Ausg. 2, Seiten 833-843, März 2007.
- [19] Steven J. Visco, Lutgard C. De Jonghe Selmar de Souza, "Thin-film solid oxide fuel cell with high performance at low temperature," *Solid State Ionics*, Bd. 98, Ausg. 1-2, Seiten 57-61, Juni 1997.
- [20] J. D. Wright, K. Krist T. P. Chen, "Proceedings of the 5th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells (SOFC-V)," , Bd. 69, 1997, Seiten 69.
- [21] Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Werkstoffe der Elektrotechnik. [Online].  
HYPERLINK "[http://www.iwe.kit.edu/img/content/03\\_forschung/sofc/SOFC-Planar-Stack\\_1.jpg](http://www.iwe.kit.edu/img/content/03_forschung/sofc/SOFC-Planar-Stack_1.jpg)"  
[http://www.iwe.kit.edu/img/content/03\\_forschung/sofc/SOFC-Planar-Stack\\_1.jpg](http://www.iwe.kit.edu/img/content/03_forschung/sofc/SOFC-Planar-Stack_1.jpg)
- [22] Nguyen-Xuan Thinh, "Optimierung eines Leichtbaudesigns für ein SOFC-Brennstoffzellenstack," *Reihe Energie und Umwelt*, Bd. 118, 2011.
- [23] Nguyen Q. Minh, "Solid oxide fuel cell technology—features and applications," *Solid State Ionics*, Bd. 174, Ausg. 1-4, Seiten 271-277, Okt. 2004.
- [24] EG&G, "Fuel Cell Handbook," *U.S. Department of Energy, Office of Fossil Energy*, Ausg. 7, 2004.
- [25] Gunther Weirum Vincent Lawlor, "METSAPP reliability and durability WP 4, Tasks 4.5 & 4.7 update," , Graz, 2012.
- [26] Andrei Fedorov,Comas Haynes Jianmin Qu, "An integrated approach to modeling and mitigating SOFC failure," in *Georgia Tech*, Atlanta, USA, 2006, Seiten 176.
- [27] André Weber, Dirk Herbstritt Ellen Ivers-Tiffée, "Materials and technologies for SOFC-components," *Journal of the European Ceramic Society*, Bd. 21, Ausg. 10-11, Seiten 1805-1811, 2001.
- [28] Agostino Cerioni, *Simulation of delamination in composite materials under static and fatigue loading by cohesive zone elements.*: Università degli Studi di Cagliari, 2008.
- [29] P.P. Camanho, J. Costa, C.G. Dávila A. Turon, "A damage model for the simulation of delamination in advanced composites under variable-mode loading," *Mechanics of Materials*, Bd. 38, Seiten 1072 -1089, 2006.
- [30] F. L. Matthews P. P. Camanho, "Delamination Onset Prediction in Mechanically Fastened Joints in Composite Laminates," *Journal of Composite Materials*, Bd. 33, Ausg. 10, Seiten 906-927, Mai 1999.

- [31] Eric R. Johnson Carlos G. Davila, "Analysis of Delamination Initiation in Postbuckled Dropped-Ply Laminates," *AIAA Journal*, Bd. 31, Ausg. 4, Seiten 721-727, Apr. 1993.
- [32] Liu Sheng, "Quasi-impact damage initiation and growth of thick-section and toughened composite materials," *International Journal of Solids and Structures*, Bd. 31, Ausg. 22, Seiten 3079-3098, Nov. 1994.
- [33] S. R. Reid, S. Li, P. D. Soden Z. Zou, "Modelling Interlaminar and Intralaminar Damage in Filament-Wound Pipes under Quasi-Static Indentation," *Journal of Composite Materials*, Bd. 36, Ausg. 4, Seiten 477-499, Feb. 2002.
- [34] J. R. Rice, "A Path Independent Integral and the Approximate Analysis of Strain Concentration by Notches and Cracks," *Journal of Applied Mechanics*, Bd. 35, Ausg. 2, Seiten 379-386, Juni 1968.
- [35] T. K. Hellen, "On the method of virtual crack extensions," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Bd. 9, Ausg. 1, Seiten 187-207, 1975.
- [36] D. M. Parks, "A stiffness derivative finite element technique for determination of crack tip stress intensity factors," *International Journal of Fracture*, Bd. 10, Ausg. 4, Seiten 487-502, Dez. 1974.
- [37] A. A. Griffith, "The Phenomena of Rupture and Flow in Solids," *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character*, Bd. 221, Seiten 163-198, 1921.
- [38] Ronald Krueger, "Virtual crack closure technique: History, approach, and applications," *Applied Mechanics Reviews*, Bd. 57, Ausg. 2, Apr. 2004.
- [39] C.G. Dávila, P.P. Camanho, J. Costa A. Turon, "An engineering solution for mesh size effects in the simulation of delamination using cohesive zone models," *Engineering Fracture Mechanics*, Bd. 74, Ausg. 10, Seiten 1665-1682, Juli 2007.
- [40] N. Benseddiq S. Guessasma, "Cohesive bonding interface model for the effective properties of randomly," *Computational Materials Science*, Bd. 47, Ausg. 1, Seiten 186-192, Nov. 2009.
- [41] D.S. Dugdale, "Yielding of steel sheets containing slits," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Bd. 8, Ausg. 2, Seiten 100-104, Mai 1960.
- [42] G.I. Barenblatt, "The Mathematical Theory of Equilibrium Cracks in Brittle Fracture," *Advances in Applied Mechanics*, Bd. 7, Seiten 55-129, 1962.
- [43] M. Modéer, P.-E. Petersson A. Hillerborg, "Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements," *Cement and Concrete Research*, Bd. 6, Ausg. 6, Seiten 773-781, Nov. 1976.
- [44] A.Pandolfi M.Ortiz, "Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack-propagation analysis," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Bd. 44, Ausg. 9, Seiten 1267-1282, März 1999.

- [45] J. Hutchinson V. Tvergaard, "The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Bd. 40, Ausg. 6, Seiten 1377-1397, Aug. 1992.
- [46] M.R. Wisnom Weicheng Cui, "A combined stress-based and fracture-mechanics-based model for predicting delamination in composites," *Composites*, Bd. 24, Ausg. 6, Seiten 467-474, Sep. 1993.
- [47] A. Needleman, "A Continuum Model for Void Nucleation by Inclusion Debonding," *Journal of Applied Mechanics*, Bd. 54, Ausg. 3, Seiten 525, Sep. 1987.
- [48] A. Needleman X-P. Xu, "Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Bd. 42, Ausg. 9, Seiten 1397-1434, Sep. 1994.
- [49] Eric R. Johnson, Carlos G. Dávila Vinay K. Goyal, "Irreversible constitutive law for modeling the delamination process using interfacial surface discontinuities," *Composite Structures*, Bd. 65, Ausg. 3-4, Seiten 289-305, Sep. 2004.
- [50] J.W. Ju J.C. Simo, "Strain- and stress-based continuum damage models—I. Formulation," *International Journal of Solids and Structures*, Bd. 23, Ausg. 7, Seiten 821-840, 1987.
- [51] J. Mazars, "Mechanical damage and fracture of concrete," *Advances in Fracture Research (Fracture 81)*, Bd. 4, Seiten 1499-1506, 1982.
- [52] Thomas Seelig Dietmar Gross, *Bruchmechanik: Mit einer Einführung in die Mikromechanik*, vierte Ed.: Springer, 2006.
- [53] M. Cervera, S. Oller, J. Lubliner J. Oliver, "Isotropic damage models and smeared crack analysis of concrete.," *Second International Conference on Computer Aided Analysis and Design of Concrete Structures.*, Bd. 2, Seiten 945-958, 1990.
- [54] C.G. Dávila, M. F. De Moura P. P. Camanho, "Numerical Simulation of Mixed-Mode Progressive Delamination in Composite Materials," *Journal of Composite Materials* , Bd. 37, Ausg. 16, Seiten 1415-1438, Aug. 2003.
- [55] M. A. Crisfield G. Alfano, "Finite element interface models for the delamination analysis of laminated composites: mechanical and computational issues," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Bd. 50, Ausg. 7, Seiten 1701-1736, März 2001.
- [56] J.C.J. Schellekens, "A non-linear finite element approach for the analysis of mode-I free edge delamination in composites," *International Journal of Solids and Structures*, Bd. 30, Ausg. 9, Seiten 1239-1253, 1993.
- [57] G.U. Fonseka D. Krajcinovic, "The Continuous Damage Theory of Brittle Materials," *Journal of Applied Mechanics* , Bd. 48, Ausg. 4, Seiten 809-815, Dez. 1981.

- [58] M.R. Wisnom, M. Jones W.C. Cui, "A comparison of failure criteria to predict delamination of unidirectional glass/epoxy specimens waisted through the thickness," *Composites*, Bd. 23, Ausg. 3, Seiten 158-166, Mai 1992.
- [59] Lin Ye, "Role of matrix resin in delamination onset and growth in composite laminates," *Composites Science and Technology*, Bd. 33, Ausg. 4, Seiten 257-277, 1988.
- [60] Abaqus, *6.12 Abaqus Analysis user's manuel*. 2012: Dassault Systèmes Simulia.
- [61] D.R.J. Owen, D. Peric S. Mohammadi, "A combined finite/discrete element algorithm for delamination analysis of composites," *Finite Elements in Analysis and Design*, Bd. 28, Ausg. 4, Seiten 321-336, März 1998.
- [62] R.C. Reuter Jr. E.M. Wu, "Crack extension in fiberglass reinforced plastics," *T&AM Report*, Bd. 275, 1965.
- [63] M. Kenan M.L. Benzeggagh, "Measurement of mixed-mode delamination fracture toughness of unidirectional glass/epoxy composites with mixed-mode bending apparatus," *Composites Science and Technology*, Bd. 56, Ausg. 4, Seiten 439-449, 1996.
- [64] J.K. Sen J. Li, "Analysis of frame-to-skin joint pull-off tests and prediction of the delamination failure," in *42nd AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics and Materials Conference*, Seattle, 2000.
- [65] J. Li, "Three-dimensional effects in the prediction of flange delamination in composite skin-stringer pull-off specimens.," in *15th Conference of the American Society for Composites*, Texas, 2000.
- [66] A.D. Crocombe, K.B. Katnam, I.A. Ashcroft H. Khoramishad, "Predicting fatigue damage in adhesively bonded joints using a cohesive zone model," *International Journal of Fatigue*, Bd. 32, Ausg. 7, Seiten 1146-1158, Juli 2010.
- [67] Xiaosheng Gao, T.S. Srivatsan Haodan Jiang, "Predicting the influence of overload and loading mode on fatigue crack growth: A numerical approach using irreversible cohesive elements," *Finite Elements in Analysis and Design*, Bd. 45, Ausg. 10, Seiten 675-685, Aug. 2009.
- [68] Vipul Ranatunga, "Finite Element Modeling of Delamination Crack Propagation in Laminated Composites," in *World Congress on Engineering*, London, 2011, Seiten 6.
- [69] Juan A. Hurtado Ireneusz Lapczyk, "Progressive damage modeling in fiber-reinforced materials," *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, Bd. 38, Ausg. 11, Seiten 2333-2341, Nov. 2007.
- [70] Pedro P. Camanho, Albert Turon Carlos G. Dávila, "Cohesive Elements for Shells," National Aeronautics and Space Administration, Hampton, VA 23681, NASA/TP-2007-214869, 2007.
- [71] J.L. Lions G. Duvaut, *Inequalities in mechanics and physics*. Berlin: Springer, 1976.

- [72] P. Démarécaux, J. Lesage D. Chicot, "Apparent interface toughness of substrate and coating couples from indentation tests," *Thin Solid Films*, Bd. 283, Ausg. 1-2, Seiten 151-157, Sep. 1996.
- [73] A. Mouftiez, J. Lesage, S. Panier G. Liu, "A numerical fracture analysis of a stationary semi-circular interface crack during interfacial indentation test," *Surface and Coatings Technology*, Bd. 201, Ausg. 5, Seiten 2086-2091, Okt. 2006.
- [74] R. McPherson P. Ostoic, "Indentation toughness testing of plasma sprayed coatings," *Materials forum*, Bd. 10, Ausg. 4, Seiten 247-255, 1987.
- [75] J. Lesage, Ph. Démarécaux, M. Hadad, St. Siegmann, M.H. Staia G. Marot, "Interfacial indentation and shear tests to determine the adhesion of thermal spray coatings," *Surface and Coatings Technology*, Bd. 201, Ausg. 5, Seiten 2080-2085, Okt. 2006.
- [76] D. Chicot, X. Decoopman, I.C. Gruescu, E. Meillot, A. Vardelle, G. Mariaux R. Vert, "Adhesive and cohesive properties of nanostructured ZrO<sub>2</sub> coatings by the original Vickers Indentation Cracking technique," *Thin Solid Films*, Bd. 519, Ausg. 22, Seiten 7789-7795, Sep. 2011.
- [77] S. Kuroda, K. Yokoyama, T. Inoue, Y. Gotoh M. Watanabe, "Modified tensile adhesion test for evaluation of interfacial toughness of HVOF sprayed coatings," *Surface and Coatings Technology*, Bd. 202, Ausg. 9, Seiten 1746-1752, Feb. 2008.
- [78] H.F. Bueckner, "Fracture Toughness Testing and Its Applications," *American Society for Testing and materials*, Seiten 85, 1965.
- [79] Jaroslav Menčík, *Mechanics of components with treated or coated surfaces.*: Kluwer Academic Publishers, 1996.
- [80] M. Dvorak, H. Grützner, K. Nassenstein, A. Walter S. Siegmann, "Shear testing for characterizing the adhesive and cohesive coating strength without the need of adhesives," *ITSC 2005 Thermal Spray connects: Explore its surfacing potential!* (, Seiten 823-829, 2005.
- [81] Deen Sun, Yongqing Fu, Hejun Du Sam Zhang, "Toughness measurement of thin films: a critical review," *Surface and Coatings Technology*, Bd. 198, Ausg. 1-3, Seiten 74-84, Aug. 2005.
- [82] S.K. Venkataraman, H. Huang, W.W. Gerberich J.W. Hoehn, "Micromechanical toughness test applied to NiAl," *Materials Science and Engineering: A*, Bd. 192-193, Seiten 301-308, Feb. 1995.
- [83] V. Gupta A.N. Pronin, "Measurement of thin film interface toughness by using laser-generated stress pulses," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Bd. 46, Ausg. 3, Seiten 389-410, März 1998.
- [84] Alan Needleman, James R. Rice Michael L. Falk, "A critical evaluation of dynamic fracture simulations using cohesive surfaces," *Journal de Physique IV*, 2001.
- [85] J.R. Rice, "The mechanics of earthquake rupture.," *Dziewonski AM, Boschi E, editors. Physics of the Earth's interior*, Seiten 555-649, 1979.

- [86] Ted Belytschko Nicolas Moës, "Extended finite element method for cohesive crack growth," *Engineering Fracture Mechanics*, Bd. 69, Ausg. 7, Seiten 813-833, Mai 2002.
- [87] P. Cornetti, F. Barpi, S. Valente A. Carpinteri, "Cohesive crack model description of ductile to brittle size-scale transition: dimensional analysis vs. renormalization group theory," *Engineering Fracture Mechanics*, Bd. 70, Ausg. 14, Seiten 1809-1839, Sep. 2003.
- [88] Pedro P. Camanho, Marcelo F. de Moura Carlos G. Davila, "Mixed-Mode Decohesion Elements for Analyses of Progressive Delamination," in *Proceedings of the 42nd AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics and Materials Conference*, Seattle, Washington, 2001.
- [89] Ted Diehl, "On using a penalty-based cohesive-zone finite element approach, Part I: Elastic solution benchmarks," *International Journal of Adhesion and Adhesives*, Bd. 28, Ausg. 4-5, Seiten 237-255, Juni 2008.
- [90] ThyssenKrupp VDM GmbH, "Crofer 22 APU," *Werkstoffdatenblatt Nr. 4146*, Jan. 2010.
- [91] Aleksey A. Yaremchenko, Evgeny N. Naumovich, Fernando M.B. Marques Vladislav V. Kharton, "Research on the electrochemistry of oxygen ion conductors in the former Soviet Union," *Journal of Solid State Electrochemistry*, Bd. 4, Ausg. 5, Seiten 243-266, Mai 2000.
- [92] S.P.S. Badwal, "Zirconia-based solid electrolytes: microstructure, stability and ionic conductivity," *Solid State Ionics*, Bd. 52, Ausg. 1-3, Seiten 23-32, Mai 1992.
- [93] Sulzer Metco, "Lanthanum Strontium Manganite (LSM) Powder," *Material Product Data Sheet*.
- [94] V. Roche, C. Jaboutian, I. Kieffer, J. Mouglin, M.C. Steil J. Laurencin, "Ni-8YSZ cermet re-oxidation of anode supported solid oxide fuel cell: From kinetics measurements to mechanical damage prediction," *International Journal of Hydrogen Energy*, Bd. 37, Ausg. 17, Seiten 12557-12573, Sep. 2012.
- [95] Philipp James Ludwig Walter, "Detektion und Evaluation von Inhomogenitäten im Volumen und an inneren Grenzflächen in polymeren Isoliersystemen mittels Ultraschall," *Dissertation*, 2006.
- [96] B. Heinz, J. Leufen F. Deuerler, "Zerstörungsfreie Werkstoffprüfung für keramische Hochtemperaturbauteile," *Fachbereich D – Abt. Sicherheitstechnik, Fachgebiet Sicherheitstechnik / Materialkunde*.
- [97] Toshiba Corporation. (2009) Toshiba launches direct methanol fuel cell in Japan as external power for mobile electronic devices. [Online]. HYPERLINK  
"http://www.toshiba.com/taec/news/press\_releases/2009/dmfc\_09\_580.jsp"  
[http://www.toshiba.com/taec/news/press\\_releases/2009/dmfc\\_09\\_580.jsp](http://www.toshiba.com/taec/news/press_releases/2009/dmfc_09_580.jsp)
- [98] G. Simader K. Kordesch, *Fuel cells and Their Applications*. Weinheim: Verlag Wiley-VCH, 1996.

- [99] F-P. Nagel, "Electricity from wood through the combination of gasification and solid oxide fuel cells," *Dissertation (ETH Zürich, Nr. 17856)*, 2008.

## Anhang

### Definition der *Kohäsivelemente*

Um die *Kohäsivelemente* definieren zu können, muss zunächst sichergestellt werden, ob die Elemente der Zelle alle in positive vertikale Richtung ausgerichtet sind. Dies kann über die „Mesh stack orientation“ im Untermenü „Query“ im Modul „Mesh“ erfolgen. Wenn dies nicht der Fall ist, kann im Modul „Mesh“ mit der Funktion „Edit Mesh → Element → Orient stack direction“ die Elementorientierung geändert werden. Anschließend kann das kollabierte Netz der *Kohäsivelemente* mit der Funktion „Edit Mesh → Mesh → Offset (create solid layers)“ erstellt werden. Hierfür müssen die Knoten, die auf der jeweiligen Grenzfläche (Anode-Elektrolyte, Kathode-Elektrolyte) liegen mit dem Auswahlwerkzeug „Select from interior entities“ ausgewählt werden. Die totale Dicke der Lage wird auf Null gesetzt und die Option für die Erstellung eines „element set“ ausgewählt (Abbildung 0-1).

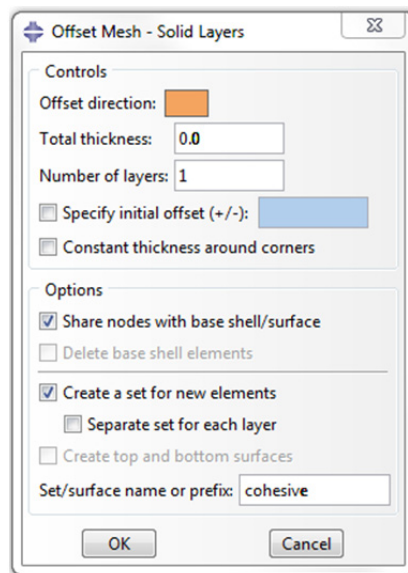


Abbildung 0-1: Erstellung der *Kohäsivelemente*

Mit Hilfe des definierten „Sets“ kann der Elementtyp der *Kohäsivelemente* (COH3D8) gewählt werden und der Viskositätsparameter für die viskose Regularisierung (Kapitel 3.3.4.1) eingestellt werden. Nach der Definition des Netzes müssen die Materialparameter der *Kohäsivelemente* in Abaqus eingegeben werden. In allen Analysen wurde ein *quadratisches Nennspannungskriterium* (Kapitel 3.3.2.7.1) für die Rissinitiierung und das *Benzeggagh und Kenane* Gesetz (Kapitel 3.3.2.8) für den Rissfortschritt gewählt. Ebenfalls muss in der Materialdefinition die Anfangssteifigkeit der *Kohäsivelemente* definiert werden. Dies erfolgt durch Wahl der „Elastic“- Funktion und der Einstellung von „Traction“ beim Typ der Elastizität (Abbildung 0-2).



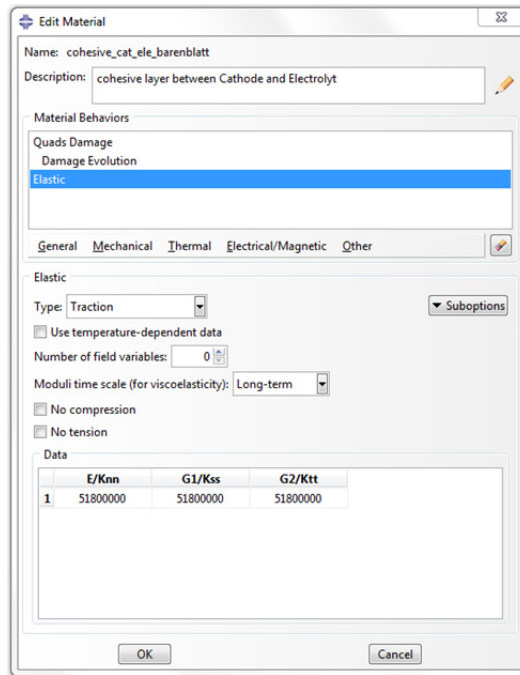


Abbildung 0-2: Materialdefinition der Kohäsivelemente

Schlussendlich muss für die erfolgreiche Definition der *Kohäsivelemente* die Sektion als „cohesive“ und „Traction Separation“ definiert und zugewiesen werden. Bei der Definition der Sektion muss die Anfangsdicke auf Eins gesetzt werden, da darauf die Anfangssteifigkeiten referenziert werden.

Für die anschließende Darstellung der Ergebnisse ist es wichtig die Variablen „QUADSCRT“ und „SDEG“ ausgeben zu lassen.