

Sachbericht zum Verwendungsnachweis

zum Teilvorhaben

Simulation des Laminierprozesses und Multilayerfertigung

im Verbundprojekt

Keramische Multilayer-Entwicklung durch Neugestaltung Ontologie-basierter Wissenssysteme (KNOW-NOW)

Zuwendungsempfänger: Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)

Förderkennzeichen: 13XP5123A

Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2021 bis 31.08.2024

Teil I: Kurzbericht

1. Ursprüngliche Aufgabenstellung sowie wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

Die (keramische) Multilayertechnik ist aufgrund der Kompaktheit und Robustheit von Multilayerkomponenten eine Schlüsseltechnologie in verschiedenen Anwendungsbereichen, unter anderem keramische Vielschichtkondensatoren (MLCC) in der Mikroelektronik, planare Festoxidbrennstoff/elektrolysezellen (SOFC/SOEC) für power-to-gas-Anlagen, sowie Steuergeräte in der Automobilindustrie und Schaltungsträger für Hochfrequenzanwendungen (Antennen, Filter, etc.) in der Telekommunikation. Die zugrundeliegende Entwicklungsarbeit ist aufgrund der mehrschrittigen Technologie sehr komplex und bisher nur bedingt auf Produktinnovationen übertragbar. Gleichzeitig werden im akademischen Bereich kontinuierlich neue Werkstoffvarianten vorgestellt, die jedoch nur selten den Übergang vom Labor zur industriellen Verwertung schaffen.

Das Projekt KNOW-NOW verfolgt das übergeordnete Ziel, digitale Werkzeuge zu implementieren, die experimentelle Daten aus der Werkstoffentwicklung und Multilayertechnik zusammenführen und für die industrielle Anwendung schneller nutzbar machen. Dieses Ziel wird erreicht durch die Entwicklung einer Ontologie und die darauf basierende Verknüpfung realer technologischer Daten und Werkstoffeigenschaften mit Simulationsmodellen. Die entwickelte Ontologie vereinheitlicht darüber hinaus die vorhandenen Daten und macht diese anhand Ihrer Metadaten und Semantik für Dritte transparent und ermöglicht grundsätzlich eine Weiternutzung für die Entwicklung und Produktion keramischer Produkte in Forschung und Industrie. Die Entwicklung der digitalen Werkzeuge erfolgt parallel zur experimentellen Entwicklung von Bauteil-Demonstratoren für zwei Anwendungsfälle: 1) Mehrlagensubstrate mit hohem Metallisierungsanteil und 2) Multilayer-Induktivitäten mit integrierten Ferrit-Lagen.

Das erste Kernziel dieses Teilvorhabens ist die Bereitstellung einer Laminiersimulation mittels eines Diskrete Elemente Modells (DEM). Diese soll die Gründichteverteilung und die Dicke von Einzellagen in einem Multilayer-Laminat nach der Thermokompression eines Folienstapels berechnen können. Simulationen des Laminierprozesses sind in der wissenschaftlichen Literatur selten beschrieben. In den wenigen Arbeiten zu diesem Thema wird die keramische Grünfolie häufig als Kontinuum beschrieben, um makroskopische Phänomene wie das Einsinken vergrabener Kanäle mittels FEM zu berechnen. DEM-Simulationen keramischer Grünfolien sind nicht bekannt.

Das zweite Kernziel ist die Fertigung der für die Demonstration der Anwendungsfälle benötigten keramischen Multilayer. Die Fertigung mehrlagiger Schaltungsträger in LTCC-Technologie (low temperature co-fired ceramics) ist hochentwickelt und wird erfolgreich für Serienproduktionen genutzt. Die Realisierung verschiedener Schaltungen bzw. Produkte erfolgt üblicherweise im Rahmen empirisch abgesicherter Designrichtlinien. Wenn diese Richtlinien nicht eingehalten werden können, insbesondere wenn verschiedene keramische Werkstoffe in einem Bauteil kombiniert werden sollen, sind aktuell aufwändige experimentelle Studien und Vorversuche erforderlich.

2. Ablauf des Vorhabens

Das ursprünglich geplante Konzept der Laminiersimulation wurde im Projektverlauf in Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer IKTS überarbeitet. Anstelle einer separaten Berechnung und anschließenden Übergabe der Gründichteverteilung wurde der Laminierschritt in die Sintersimulation beim IKTS integriert. Mittels DEM und der Softwarebibliothek LIGGGTHS wurde eine Presssimulation zur Identifikation der Materialparameter erarbeitet. Dazu wurde zunächst die Erzeugung zweiphasiger Mikrostrukturen aus weichen Polymerkugeln (Binder) und größenverteilten, harten Keramikpartikeln entwickelt. Weiterhin wurde die Berechnung von Spannungs-Kompressionskurven im einachsigen Pressversuch an diesen Mikrostrukturen implementiert. Zur vereinfachten Anwendung der skriptbasierten LIGGGTHS-Simulationen wurden WaNos (workflow active nodes) für die Workflow-Umgebung SimStack realisiert, in denen die wesentlichen Parameter der Simulation (Partikelgrößen, Pressdruck, usw.) und der Auswertung sehr einfach durch den Nutzer gesetzt werden können. Mit diesen WaNos wurde die Implementierung des Script-Job-Konzepts und die Konstruktion einfacher und komplexer DEM-Simulationsworkflows im SimStack-Client demonstriert.

Für die Fertigung von zwei Demonstratoren-Varianten wurden zunächst die im Verbund abgestimmten Entwürfe für 1) Multilayer mit unterschiedlichem Metallisierungsanteil und 2) Multilayer-Induktivitäten durch Kombination aus Ferrit und dielektrischem Basismaterial in technologische Ablaufpläne überführt. Dies beinhaltete die Erzeugung der Konstruktionsdatensätze der Einzellagen mit Stanzlayout und Siebdrucklayout, die Beschaffung entsprechender Via-Fill-Schablonen und Drucksiebe, sowie die Bestückung der Stanze. Anschließend wurden am Fraunhofer IKTS gegossene Folien den Entwürfen entsprechend gestanzt, gefüllt und bedruckt. Die so vorbereiteten Einzelfolien wurden gemäß den Entwürfen gestapelt und laminiert. Die Auswahl kompatibler Metallpasten, der Laminier- und Brennparameter erfolgte in umfangreichen Versuchsreihen. Schließlich wurden 1) Demonstratoren mit drei unterschiedlichen Metallgehalten und 2) insgesamt 64 Multilayer-Induktivitäten aus fünf verschiedenen Ferrit-Varianten und mit drei unterschiedlichen Spulen-Designs aufgebaut, gebrannt und zur Charakterisierung an die Partner verteilt.

3. Wesentliche Ergebnisse sowie ggfs. Zusammenarbeit mit anderen Forschungseinrichtungen

Die SimStack-WaNos wurden als Best Practice Beispiele zur Implementierung des Script-Job-Konzepts auf GitHub und im Workflow Store der Plattform MaterialDigital veröffentlicht. Eine praxisnahe Erläuterung des Konzepts, der Implementierung und Anwendungsbeispiele wurden als wissenschaftlicher Aufsatz open access in *Advanced Engineering Materials* publiziert (DOI: 10.1002/adem.202400872).

Anhand der gefertigten Multilayer-Demonstratoren mit variiertem Metallisierungsgehalt wurde der erwartete Einfluss auf die Verformung bestätigt. In Zusammenarbeit mit dem IKTS wurde erfolgreich die zerstörungsfreie Prüfung innenliegender Metallstrukturen stark welliger Mehrlagensubstrate mittels Röntgenlaminographie demonstriert. Hinsichtlich der Sintersimulationen konnte gezeigt werden, dass eine zuverlässige Vorhersage der Verformung beim Brand anwendungsrelevanter Designs mit den aktuell verfügbaren Modellen nicht möglich ist.

Die gefertigten Multilayer-Induktivitäten wurden umfangreich röntgenografisch und elektrisch charakterisiert. Das Konzept co-gesinterter Induktivitäten mit integriertem Ferrit wurde erfolgreich am Bauteil demonstriert. Die Induktivität der Spulen mit integrierten Ferrit-Lagen ist signifikant höher als die der Referenzen ohne Ferrit. Die Messwerte stimmen sehr gut mit den an der EAH Jena berechneten Werten überein. Dabei zeigte sich, dass eine zuverlässige Vorhersage der Bauteileigenschaften nur durch Auswahl der korrekten Materialparameter, insbesondere für den Ferrit, möglich ist. Die maßgebliche Eigenschaft ist die magnetische Permeabilität des Ferrits, die deutlich von der Fertigungstechnologie abhängt. Anhand eines umfassenden Datensatzes der Eigenschaftsprofile verschieden gefertigter Ferritproben (trockengepresst, foliengegossen, co-laminiert) und dessen semantischer Verknüpfung mittels der Domänen-Ontologie (TU Berlin) wurde diese Erkenntnis datenbasiert abgebildet. Die werkstofftechnischen Ergebnisse, die Implementierung der Ontologie und ein prototypischer Anwendungsfall zur Nutzung der semantisch verknüpften Daten zur Beschleunigung einer Bauteilentwicklung wurden ebenfalls als wissenschaftlicher Aufsatz in *Advanced Engineering Materials* frei zugänglich publiziert (DOI: 10.1002/adem.202401042).

Sachbericht zum Verwendungsnachweis

zum Teilvorhaben

Simulation des Laminierprozesses und Multilayerfertigung

im Verbundprojekt

Keramische Multilayer-Entwicklung durch Neugestaltung Ontologie-basierter Wissenssysteme (KNOW-NOW)

Zuwendungsempfänger: Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)

Förderkennzeichen: 13XP5123A

Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2021 bis 31.08.2024

Teil II: Eingehende Darstellung

1. Darstellung der Verwendung der Zuwendung sowie der erzielten Ergebnisse

AP Laminiersimulation (S2)

Das im Antrag formulierte Ziel dieses Arbeitspakets wurde im Laufe des Projekts angepasst. Ursprünglich war eine unabhängige Simulation der Gründichteentwicklung bei der Thermokompression von Grünfolien mittels Diskrete Elemente Methode (DEM) mit der Simulationsbibliothek LIGGGHTS geplant. Die berechnete Gründichteverteilung sollte dann als Ausgangspunkt für eine Finite Elemente Methode (FEM) Simulation der Sinterung bzw. Schwindung von Grünfolienlaminaten automatisiert übergeben werden. Dieser Ansatz wurde in Zusammenarbeit mit dem Projektpartner IKTS überarbeitet. Gleichzeitig verzögerte sich die Bearbeitung des APs aufgrund von Schwierigkeiten bei der Personalgewinnung um fünf Monate. In der Folge wurde der mit dem AP verbundene Meilenstein inhaltlich und zeitlich angepasst: „Demonstration der DEM-basierten Materialparameteridentifikation für die integrierte Laminiersimulation in deal.II“. Als Materialparameter sollten Spannungs-Kompressionskurven beim Pressen von Grünfolien berechnet werden.

Hierzu wurde eine DEM-fähige Repräsentation des Grünfoliengefüges erarbeitet. Dabei werden neben den keramischen Partikeln die organischen Bestandteile (Binder, Weichmacher, usw.) als zweiter Partikeltyp mit entsprechenden Eigenschaften modelliert. Die Herausforderung war hierbei, eine gleichmäßige Verteilung beider Partikelarten sowie einen hohen Füllungsgrad mit Keramikpartikeln im simulierten Volumen zu erzeugen. Die Besonderheit von DEM bzw. der genutzten Software LIGGGHTS ist, dass, anders als bei FEM, keine fertig konstruierte Geometrie als Modell in die Simulation geladen werden kann, sondern für jede neue Berechnung der Simulationsraum definiert mit Partikeln befüllt werden muss. Zunächst wurde eine mehrschrittige Befüllung des Volumens programmiert. Da dieser Ansatz schwieriger zu parametrisieren ist, wurde die schrittweise Befüllung des Simulationsraums durch eine paketweise Einbringung der größenverteilten Partikelmischung ersetzt.

Als Materialparameter für die FEM Simulation mit deal.II sollte das Verformungsverhalten der modellierten Mikrostruktur unter Druck in Form einer Spannungs-Dehnungs-Kurve (bzw. Spannungs-Kompressions-Kurve) mittels LIGGGHTS berechnet werden. In einer ersten Studie wurde eine Kompression durch Stauchen der Simulationsbox realisiert. Mit diesem Ansatz wurden verschiedene in LIGGGHTS auswählbare Kontaktmodelle zur Berechnung der Partikelinteraktionen getestet (Abbildung 1a). Durch Vergleich mit vorliegenden experimentellen Daten zum Kompressionsverhalten verschiedener Grünfolien wurde das Hertz Kontaktmodell unter Berücksichtigung der Kohäsion mittels vereinfachtem Johnson-Kendall-Roberts-Modell (Hertz SJKR) als am besten passend ausgewählt (Abbildung 1b). Die experimentellen Kompressionskurven zeigen eine breite Verteilung des Verformungsverhaltens. Berechnungen mittels Hertz SJKR geben das Verformungsverhalten phänomenologisch hinreichend gut wieder. Aufgrund der mit DEM verbundenen Vereinfachungen der Mikrostruktur (sphärische Partikel, Darstellung einer Partikelgrößenverteilung mit diskreten Partikelradien, Modellierung des Binders als Partikel anstatt langkettiger Makromoleküle, etc.) ist eine

prädiktive Berechnung der Kompression realer Folien nicht leistbar. Daher wurde im Projekt der Schwerpunkt auf die Demonstration eines prototypischen DEM-Simulationsworkflows gesetzt.

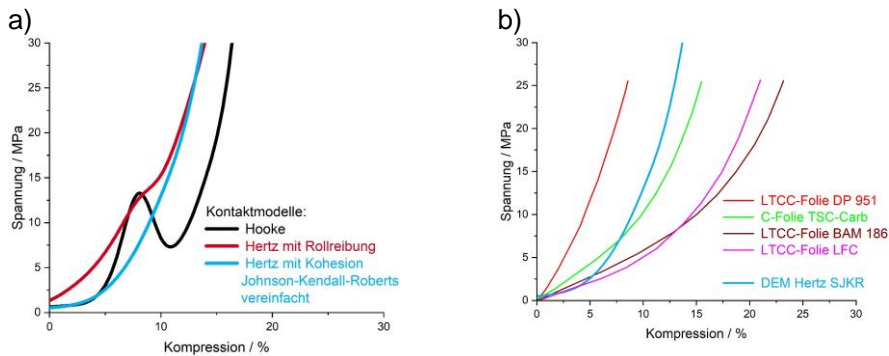


Abbildung 1: a) Vergleich verschiedener Kontaktmodelle, b) simulierte Spannungs-Kompressionskurve im Vergleich zu experimentellen Werten

Da die Durchführung einer Simulation mit LIGGGHTS, einschließlich Vorbereitung des Scripts, Transfer des Rechenjobs auf den Rechencluster, Überwachung des Rechenfortschritts, Transfer der Ergebnisse vom Cluster zur Workstation und anschließende Auswertung sehr zeitaufwendig ist, wurde in Zusammenarbeit mit dem KIT an einem nutzerfreundlichen SimStack-Workflow gearbeitet. Damit werden alle Arbeitsschritte nach Erstellung des Scripts automatisiert und der Nutzer kann fokussierter an der Weiterentwicklung des Scripts arbeiten. Als Vorarbeit wurde der SimStack-Client auf einer BAM Workstation installiert und mit dem KIT-Rechencluster verbunden, sowie die Installation von LIGGGHTS und aller Abhängigkeiten auf dem KIT-Cluster vorgenommen.

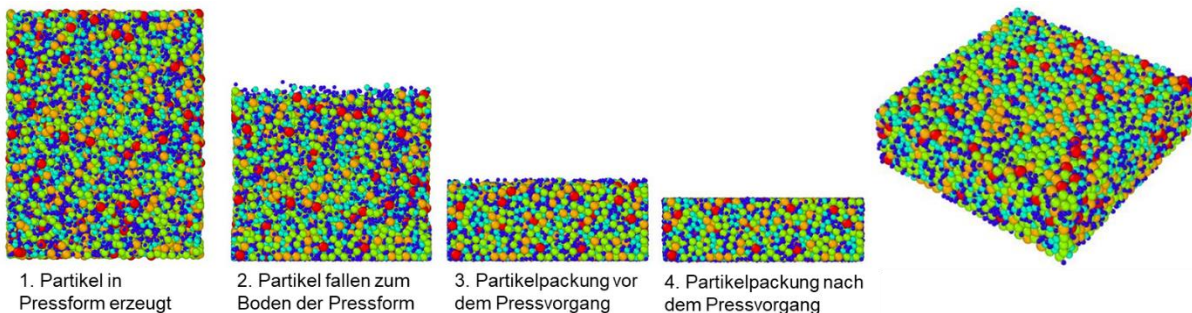


Abbildung 2: Die vier wesentlichen Phasen der DEM-Simulation und eine perspektivische Ansicht der Pulverpackung nach dem Pressvorgang, Partikelgröße farbcodiert.

Im Ergebnis wurden zwei SimStack-WaNos (workflow active nodes) implementiert. Der LIGGGHTS WaNo erzeugt input-Skripte unter Verwendung der vom Anwender gewählten Parameter wie beispielsweise Partikelgröße und -anzahl, oder Zeitauflösung der Ergebnisse (dumprate). Die änderbaren Parameter werden in eine Scriptvorlage eingesetzt, die den grundsätzlichen Simulationsjob beschreibt und der LIGGGHTS-Syntax entspricht. Der damit beschriebene Simulationsjob wird durch den SimStack-Client an einen verbundenen HPC-cluster geschickt und dort ausgelöst. Verlauf der Position jedes Partikels und die Kräfte auf die Pressstempel werden berechnet und als csv-Datei ausgegeben. In Abbildung 2 ist der Ablauf der Simulation beispielhaft illustriert (Presstempel und -form sind ausgeblendet). Zur Weiterverarbeitung der csv-Ergebnisdatei wurde der DataDive-WaNo implementiert. Dieser kann die csv-Rohdaten lesen und daraus eine Kompressionskurve (Spannungs-Dehnungs-Kurve) erzeugen. Als Parameter kann hier der Schwellwert des Pressdrucks angegeben werden, ab dem Kontakt zwischen Pressstempel und Pulveroberfläche angenommen wird. Die Trennung von Berechnung und Auswertung hat den Vorteil, dass durch Verschaltung der WaNos in SimStack unterschiedliche Workflows realisiert werden können. Abbildung 3 zeigt beispielhaft einen Workflow zur

systematischen Testung verschiedener Pressdruck-schwellwerte für die Auswertung. Die eigentliche Simulation muss dazu nur einmal ausgeführt werden. Zusätzlich werden im Beispiel Mult-It und DB-Generator genutzt. Dies sind WaNos aus dem Workflow-Store zum Erzeugen systematischer Eingangsdaten (hier *contact pressure*) bzw. Zusammenfassen von Ergebnissen. Weitere Beispielsworkflows wurden implementiert, wobei die mittels DB-Generator zusammengefassten Ergebnisse direkt in ein individuell definierbares GitHub-Repository hochgeladen werden können. Zur Verarbeitung der Daten wurde ein Google-Colab-Notebook geschrieben, welches die Ergebnisse von Simulationsreihen direkt aus dem Repository lädt und graphisch aufbereitet. Damit ist ein DEM/ LIGGGHTS/ SimStack-Workflow für automatisierte und verteilte Nutzung der Simulationsdaten demonstriert.

Die WaNos sind auf GitHub und im PMD Workflow Store verfügbar. Ein Artikel über das Konzept, die Implementierung und die Nutzung der WaNos erschien als Beitrag zur PMD Spezialausgabe von *Advanced Engineering Materials* (DOI: [10.1002/adem.202400872](https://doi.org/10.1002/adem.202400872)).

Eine Zusammenfassung der WaNos ist als Abschnitt in das Manuskript der PMD Arbeitsgruppe Workflows für die Spezialausgabe eingearbeitet.

Mit Hilfe der entwickelten WaNos können Spannungs-Dehnungs-Kurven (bzw. Spannungs-Kompressions-Kurven) mittels LIGGGHTS komfortabel berechnet werden. Die Ergebnisse werden unter anderem als einfache Textdatei ausgegeben, die problemlos in deal.II als Materialparameter eingelesen und verwendet werden kann.

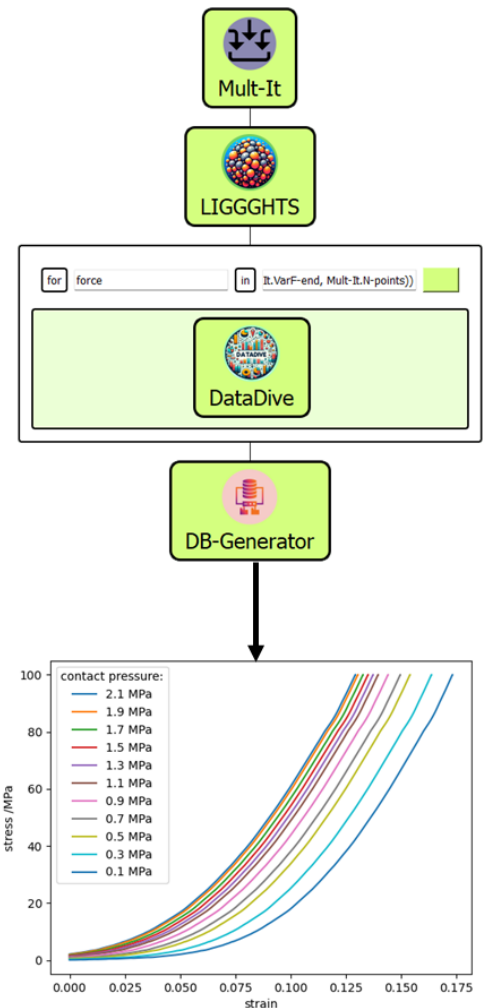


Abbildung 3: SimStack workflow mit LIGGGHTS und DataDive

Arbeitspaket Laminataufbau und Co-Sinterung (T3)

Im Arbeitspaket T3 wurden Bauteil-Demonstratoren für zwei Anwendungsbeispiele hergestellt: 1) Multilayer mit unterschiedlichem Metallisierungsanteil und 2) Multilayer-Induktivitäten durch Kombination aus Ferrit und dielektrischem Basismaterial. Zur Vorbereitung wurden in umfangreichen Vorversuchsreihen in enger Abstimmung mit den Partnern EAH Jena und Fraunhofer IKTS zunächst das Temperaturprofil für den Brand der Bauteile ermittelt, das für die Metallisierung zu verwendende Pastensystem ausgewählt und die Prozessbedingungen zum Laminieren der Grünfolien bestimmt. Das Temperaturprofil wurde in Kreuzversuchen mit der EAH ermittelt. Dadurch wurde sichergestellt, dass die an der EAH im Rahmen der Werkstoffentwicklung genutzten Parameter auch bei Nutzung der Aggregate an der BAM die gleichen Ergebnisse liefern. Laminierparameter (Temperatur und Druck) wurden parallel am IKTS und an der BAM getestet, wobei isostatische (IKTS) und uniaxiale (BAM) Druckbeaufschlagung verglichen wurde. Zur Auswahl bzw. Qualifizierung der Pasten wurden am IKTS Teststrukturen auf Grünfolien gedruckt und damit innenliegende und äußere Metallisierung im reinen Basismaterial- und im Kombinationslaminat realisiert. Diese Bauteile wurden an der BAM gebrannt. Abbildung 4 zeigt exemplarisch die vom Pastensystem abhängige Verformung an der Oberfläche der gebrannten Proben. Licht- und elektronenmikroskopische Untersuchungen der Mikrostruktur bei EAH, IKTS und BAM zeigten, dass reine Silberpasten (Ag) im Vergleich zu Silber-Palladium (Ag/Pd) tiefer in das dielektrische Basismaterial (LTCC) diffundieren und dadurch ein größeres Volumen hinsichtlich Verdichtung und Verformung beeinflussen. Die schließlich gewählten Parameter sind in Tabelle 1 zusammengefasst.

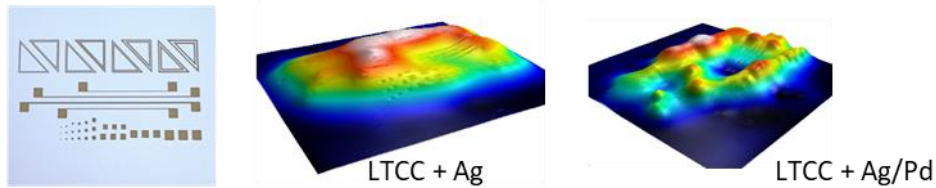


Abbildung 4: Teststruktur zur Qualifizierung der Metallpaste (links) (optische Profilometrie mit chromatischem Weißlichtsensor) und resultierende Topografie der Oberfläche nach dem Brand, Verformung künstlich überhöht, Höhe farblich codiert.

Tabelle 1: Gewählte Parameter für die Multilayer-Fertigung

Prozessschritt	ermittelte Parameter
Metallisierung	Pastensystem Ag/Pd
Laminieren	24 MPa bei 80 °C uniaxial
Brand (Co-Sintern)	0,5 K/min bis 500 °C 4,0 K/min bis 900 °C 4 h Haltezeit

Für den Anwendungsfall 1) wurden verschiedene gängige Teststrukturen zum Test der Auflösung von Druck- und bildgebenden Verfahren entsprechend der an der BAM realisierbaren Designrichtlinien im Multilayer-Entwurf auf einer Lage angeordnet. Zur Variierung des Metallisierungsgehalts wurden auf einer zweiten Lage korrespondierende Metallflächen angeordnet (Abbildung 5a). Beide Entwürfe weisen drei freie Flächen auf. Dies sind Messstellen zur Bestimmung der dielektrischen Eigenschaften des Basismaterials (rel. Permittivität und dielektrischer Verlust). Entsprechend dieser Entwürfe wurden Drucksiebe beschafft und Grünfolien (gegossen und bereitgestellt vom IKTS) vorbereitet. Einzelfolien wurden bedruckt (Abbildung 5b), zu vierlagigen Laminaten mit unterschiedlichem Metallisierungsgehalt kombiniert (Abbildung 5c) und gebrannt.

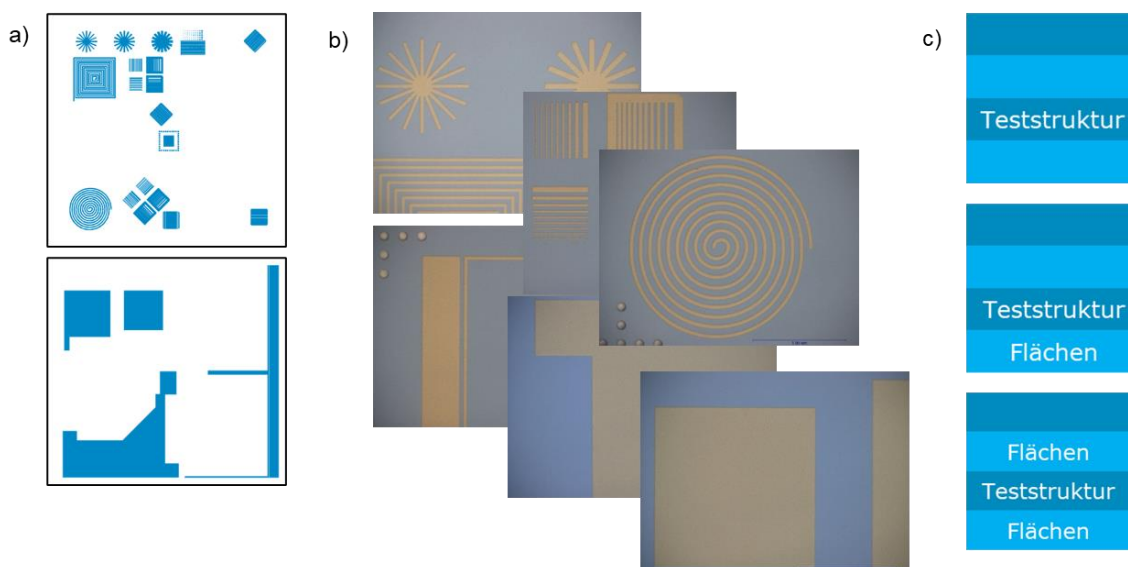


Abbildung 5: a) Entwürfe der Einzellagen für Anwendungsfall 1), b) Beispielaufnahmen siebgedruckter Strukturen, c) Schema der aufgebauten Multilayer

Zur Untersuchung der für die keramische Multilayer-Technologie typischen Durchkontaktierung der Lagen mittels VIAs (*vertical interconnect access*) wurde eine Teststruktur aus über verschiedenen Lagen verketteten Leiterbahnen (*daisy chain*) entworfen (Abbildung 6) und gefertigt (Abbildung 7). Das Layout ist so gestaltet, dass die daisy chain mit den Einzellagen aus Abbildung 5a kombiniert werden kann und Leitfähigkeitsmessungen der einzelnen Reihen durchgeführt werden können, um den Einfluss der Lagenwechsel bzw. der Anzahl der Durchkontaktierungen bei gleicher Leiterbahnlänge auf den elektrischen Widerstand zu ermitteln.

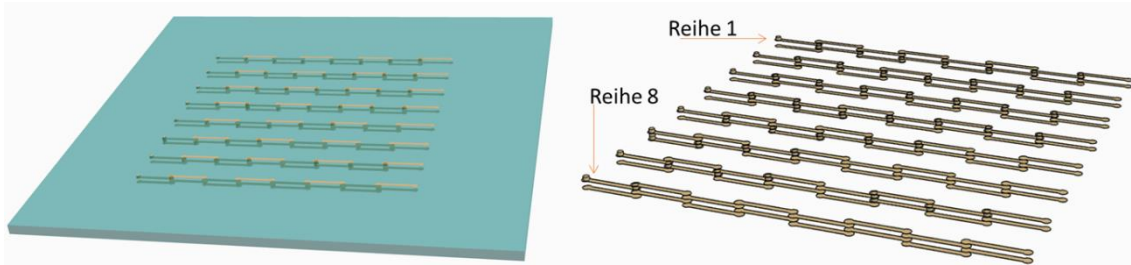


Abbildung 6: CAD-Entwurf der *daisy chain* zur Untersuchung vertikaler Durchkontaktierungen.

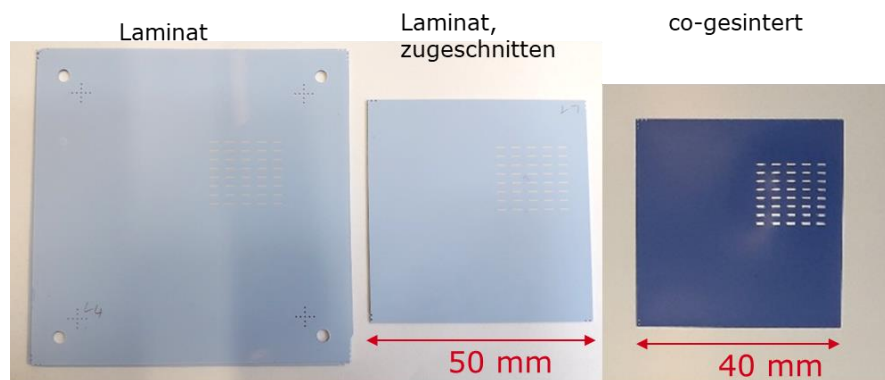


Abbildung 7: Fertigungsstadien der *daisy chain*-Testmuster

Nach dem Brand wurde jedoch eine deutliche Verformung der Struktur beobachtet (Abbildung 8). Die geplanten Messungen waren dadurch nicht durchführbar. In weiteren Versuchsreihen wurden einzelne Reihen bzw. mehrere benachbarte Reihen der Struktur vor dem Brand aus dem Laminat ausgeschnitten und separat gebrannt. Hier zeigte sich, dass die finale Verformung je nach Zuschnitt der Probe unterschiedlich ist. Ein Trend bzw. eine Systematik war nicht ableitbar. Basierend auf diesen Beobachtungen wurde eingeschätzt, dass die Komplexität der Verformung dieser Teststruktur zu hoch ist, um mittels FEM Sintersimulation und den verfügbaren Modellen vorausgesagt werden zu können. Da der Fertigungsaufwand, insbesondere das Füllen der vertikalen Durchkontaktierungen, vergleichsweise hoch ist, wurde diese Teststruktur in diesem Projekt nicht weiterverfolgt. Nicht verwendete Lamine wurden an ein anderes Forschungsprojekt an der BAM übergeben, in dem im Rahmen einer Promotionsarbeit die Verformung in-situ mittels Hochtemperatur-Synchrotron-Röntgentomographie untersucht wird. Die Ergebnisse liegen zum Berichtstermin noch nicht vor.

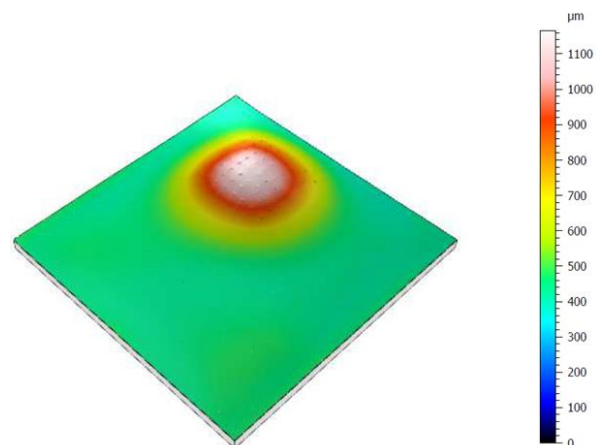


Abbildung 8: Oberflächenscan eines gebrannten *daisy chain* Testmusters (optische Profilometrie mit chromatischem Weißlichtsensor)

Zur Untersuchung des Einflusses der Fertigungstechnologie auf die Eigenschaften der an der EAH Jena vorbereiteten Ferrite wurden zahlreiche Sinterexperimente mit trockenengepressten, foliengegossenen, sowie co-laminierten Prüfkörpern (Ringkerne zur Messung der magnetischen Permeabilität) durchgeführt (Abbildung 9). In den Versuchsreihen wurden fünf Ferritvarianten untersucht, die sich durch die Partikelgrößenverteilung des Pulvers unterschieden. Seitens IKTS wurden fünf Ferritfolien, gekennzeichnet durch mittlere Partikelgrößen von 0,5 μm bis 0,9 μm , bereitgestellt.

Der Einfluss der Laminierbedingungen (isostatisch am IKTS bzw. uniaxial an der BAM) wurde ebenfalls untersucht. Ringkerne aus entsprechenden Laminaten wurden in Jena vorbereitet und an der BAM gesintert (Abbildung 9 b-c).

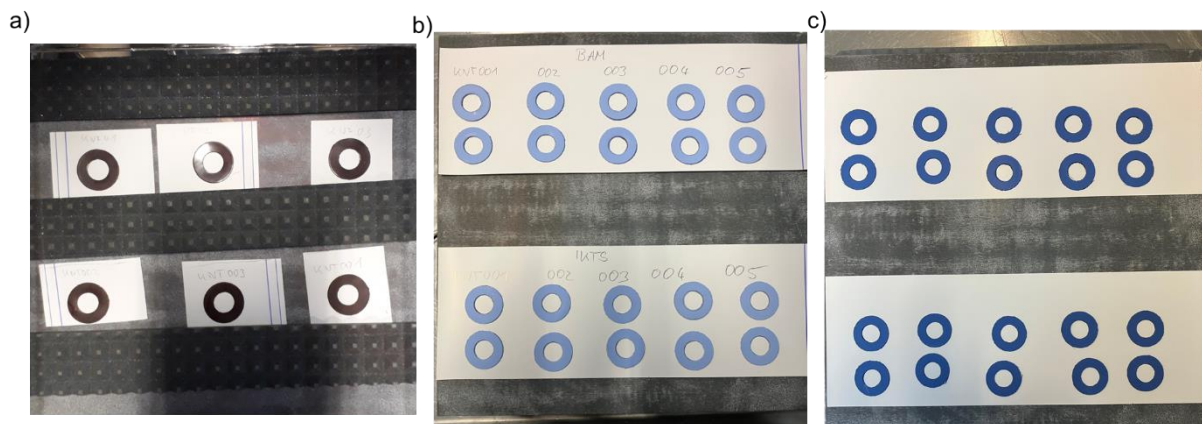


Abbildung 9: Sinterexperimente a) Ringkerne aus foliengegossenem Ferrit vor dem Brand, b) Ringkerne aus co-laminiertem Ferrit vor dem Brand und c) nach dem Brand

Für Anwendungsfall 2) wurde eine vierlagige Multilayer-Induktivität entworfen (Abbildung 10). Auf der obersten Lage sind Messkontakte zur Bestimmung der Induktivität des gebrannten Teils vorgesehen. Vertikale Durchkontaktierung durch die erste und zweite Lage verbinden die Kontakte mit einer Spulenstruktur auf der dritten Lage. Die vierte, unterste Lage ist nicht metallisiert. Drei verschiedene Spulenvarianten mit unterschiedlichen Windungsanzahlen wurden jeweils dreimal auf einem 2"-Nutzen angeordnet (Abbildung 11 a).

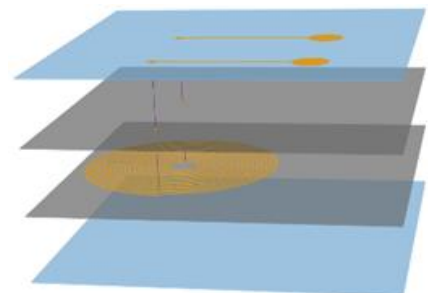


Abbildung 10: CAD-Entwurf einer Multilayer-Induktivität (Abstand der Lagen vergrößert zur übersichtlichen Darstellung)

Gemäß dieses Entwurfs wurden Lamine mit fünf verschiedenen Ferritfolien für die Innenlagen aufgebaut. Als Referenz wurden Lamine mit Innenlagen aus dielektrischem Basismaterial (LTCC) aufgebaut. Die Arbeiten beinhalteten Stanzen der Grünfolien, Füllen der Durchkontaktierungen, Drucken der Metallstrukturen, uniaxiales Laminieren der Folienstapel, Zuschnitt der Lamine (Abtrennen der Stapellöcher). Die Lamine wurden dann wie in Tabelle 1 beschrieben co-gesintert. Offenporige SiC-Platten wurden aufgelegt, um eine Verwölbung der Bauteile zu verhindern.

Mit diesem Ansatz wurden 18 verschiedene Varianten einer Multilayer-Induktivität realisiert (sechs Materialkombinationen mit drei verschiedenen Spulenvarianten). Insgesamt wurden über 100 Multilayer-Induktivitäten aufgebaut. Alle Varianten wurden drucklos an Luft (konventionell) gebrannt. Zusätzlich wurden ausgewählte Lamine (gröbster und feinsten Ferrit) druckunterstützt mit 0,5 MPa (PAS, *pressure-assisted sintering*) bzw. drucklos unter reduziertem Sauerstoffgehalt (1 % O₂ in N₂) gebrannt.

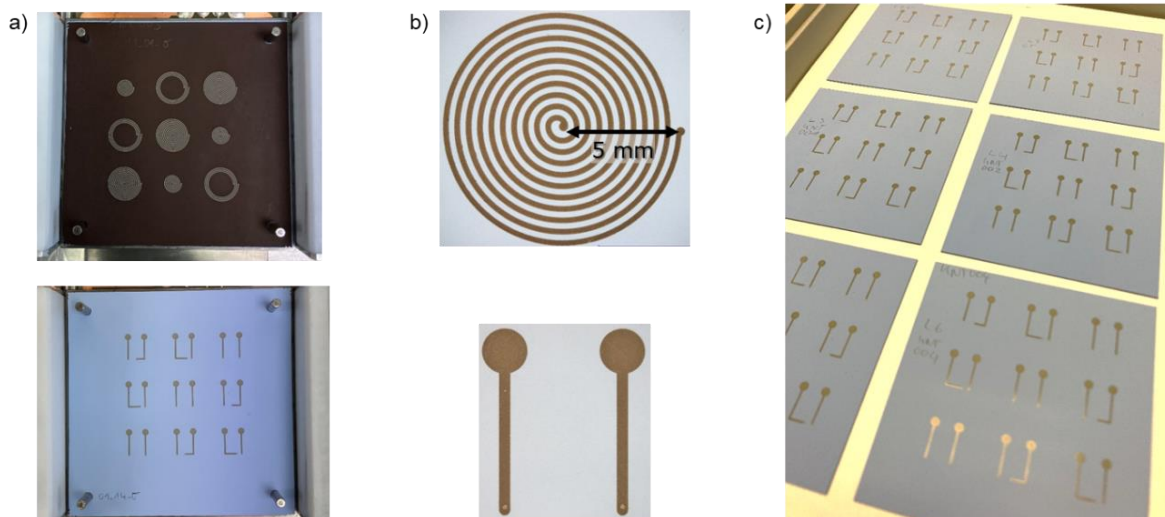


Abbildung 11: Fertigung der Multilayer-Induktivitäten, a) bedruckte Einzelfolien im Laminierwerkzeug, oben: Ferrit-Folie mit Spulen, unten LTCC-Folie mit Messkontakten, b) digitalmikroskopische Aufnahmen siebgedruckter Strukturen, oben: Spule mit 10 Windungen, unten Messkontakte, c) Lamine nach dem Zuschnitt und vor dem Brand

Arbeitspaket Bauteilcharakterisierung (T4)

Im Rahmen des AP T4 wurden kontinuierlich über den Projektverlauf zahlreiche keramographische Querschliffe präpariert, d.h. getrennt, in Epoxidharz eingebettet, geschliffen und poliert. Die Herstellung der Proben und Prüfkörper erfolgte teilweise an der EAH Jena, teilweise an der BAM. An den Querschliffen wurden unter anderem von sechs Ferrit-Varianten mit unterschiedlicher Partikelgrößenverteilung die gesinterte Mikrostruktur von trockenepressten, foliengegossenen, sowie mit dielektrischem Basismaterial co-gesinterten Proben elektronenmikroskopisch an der EAH Jena bewertet. Weiterhin wurde die Integrität innenliegender Metallisierungen zur Auswahl der Paste analysiert (Abbildung 12). Zur Bestimmung der Dicke der Ferritlagen in den verschiedenen Multilayer-Induktivitäten wurden ebenfalls von jeder Variante Querschliffe präpariert. Die elektronenmikroskopische Bildgebung und Vermessung erfolgte an der EAH Jena.

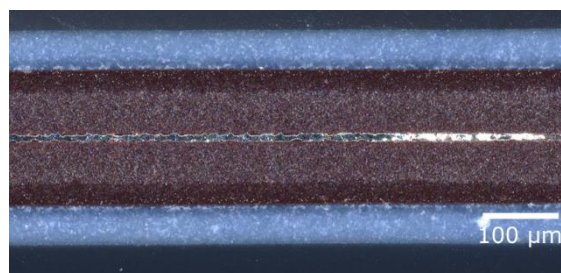


Abbildung 12: Keramographischer Querschliff einer co-gesinterten Probe mit innenliegender Metallisierung (lichtmikroskopische Abbildung)

Die Demonstratoren für den Anwendungsfall 1) wurden zunächst an der BAM mittels optischer Profilometrie charakterisiert. Die Topographie-Karten in Abbildung 13 zeigen deutliche Verformungen der Bauteile, wobei sich die Form der Verformung mit der Lagenarchitektur qualitativ verändert und der Grad der Verformung (hier als Höhenunterschied der Oberfläche betrachtet) mit zunehmendem Metallgehalt quantitativ zunimmt. Aufgrund der unerwartet starken Verformung konnten keine dielektrischen Messungen an diesen Proben durchgeführt werden. Von einer Kombination dieses Entwurfs mit der daisy chain Struktur wurde abgesehen, da mit beiden Entwürfen einzeln bereits keine messbaren Prüfkörper realisiert werden konnten. Eine bildgebende Untersuchung der innenliegenden Strukturen mittels Rasterultraschallmikroskopie war, ebenfalls aufgrund der Verformung, nicht möglich. Die Demonstratoren wurden an das IKTS weitergegeben. Dort wurden die inneren Strukturen mittels Röntgenlaminographie abgebildet. Mit diesem Verfahren können, trotz der Verformung, innenliegende Metallstrukturen lagenweise getrennt und gleichzeitig großflächig dargestellt und bewertet werden. Anhand dieses Anwendungsbeispiels wurden die technischen Möglichkeiten und Vorteile der Röntgenlaminographie für die Multilayerentwicklung klar demonstriert.

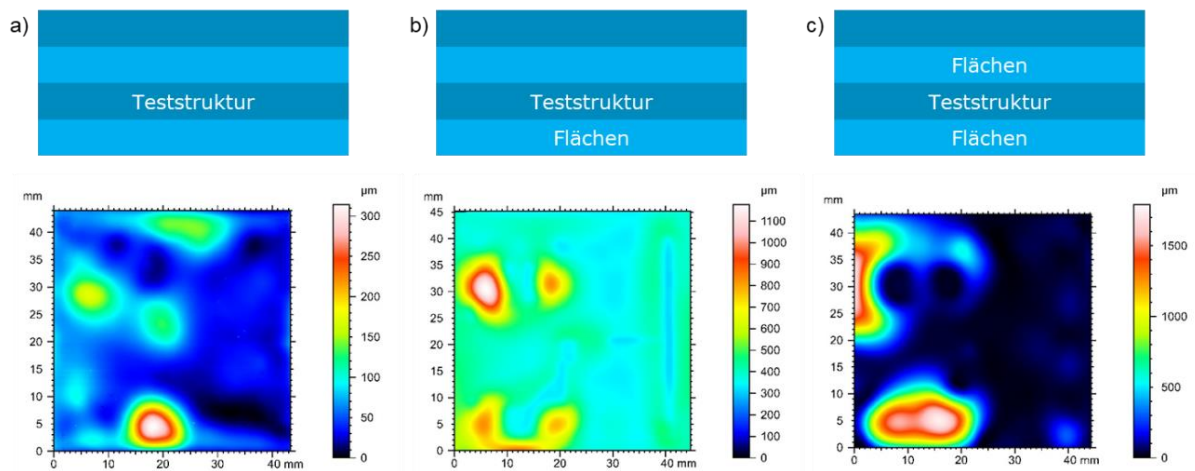


Abbildung 13: Oberflächenscans (Topographie-Karten) der Demonstratoren für Anwendungsfall 1

Im Ergebnis wurden an den Demonstratoren für Anwendungsfall 1) keine elektrischen bzw. dielektrischen Messungen durchgeführt, sowie keine bauteilbezogenen Sintersimulationen realisiert. Die Komplexität des Entwurfs muss als zu hoch bewertet werden. Für eine Demonstration der im Projekt erarbeiteten digitalen Werkzeuge wurde im weiteren Verlauf des Projektes auf Anwendungsfall 2) fokussiert.

Die Multilayer-Induktivitäten wurden zunächst an der BAM und anschließend am IKTS elektrisch vermessen. An der BAM wurden einfache Induktivitätsmessungen mit händisch positionierten Messspitzen auf den Kontaktflächen bei 100 kHz und 1 V durchgeführt. Am IKTS wurde ein Probenhalter realisiert und ein breiter Frequenzbereich analysiert. Abbildung 14a zeigt die Ergebnisse der BAM für die Induktivitäten der verschiedenen Spulenvarianten in Abhängigkeit vom Werkstoff der Innenlagen. Eine Steigerung der Induktivität durch Integration von Ferrit ist deutlich erkennbar. Für die Spule mit 10 Windungen (N10) ist zusätzlich ein Einfluss der Partikelgröße des eingesetzten Ferritpulvers zu beobachten. Diese Ergebnisse wurden durch die Messungen am IKTS bestätigt. Im rechten Bildbereich sind die Geometrien der gebrannten Spulen dargestellt. Die Röntgenaufnahmen wurden am IKTS durchgeführt. Anhand der damit vorliegenden tatsächlichen Spulengeometrie, den an Querschliffen bestimmten Schichtdicken und den an den verschiedenen Ringkernen gemessenen magnetischen Permeabilität der Ferritvarianten wurden die Induktivitäten der verschiedenen Multilayer an der EAH Jena berechnet (Finite Elemente Methode, COMSOL Multiphysics). Der Vergleich zeigt, dass die tatsächlichen Induktivitäten geringer sind als die berechneten. Die Analyse der Mikrostrukturen an den Querschliffen (EAH Jena) zeigt geringere Sinterdichte des Ferrits und Ausbildung einer Grenzschicht zum dielektrischen Basismaterial, wenn Metallisierung im Multilayer vorliegt. Dadurch ist die magnetische Permeabilität des Ferrits im co-gesinterten Bauteil geringer als in den co-gesinterten Ringkernen ohne Metall. Man überschätzt demnach die Permeabilität des Ferrits im Bauteil und dadurch die Induktivität des Bauteils.

Ein Brand unter uniaxialem Druck (PAS) führt gegenüber konventioneller Sinterung nicht zu einer Steigerung der Induktivität (Abbildung 14 b) für die untersuchten Ferritvarianten. Die Reduzierung des Sauerstoffpartialdrucks beim Brand auf 1 % verbessert die Verdichtung des Ferrits und führt zu einer signifikanten Steigerung der Induktivität des Multilayers gegenüber konventioneller Sinterung von 2,1 μH auf 3,1 μH (Partikelgröße 0,5 μm , N10, 1kHz).

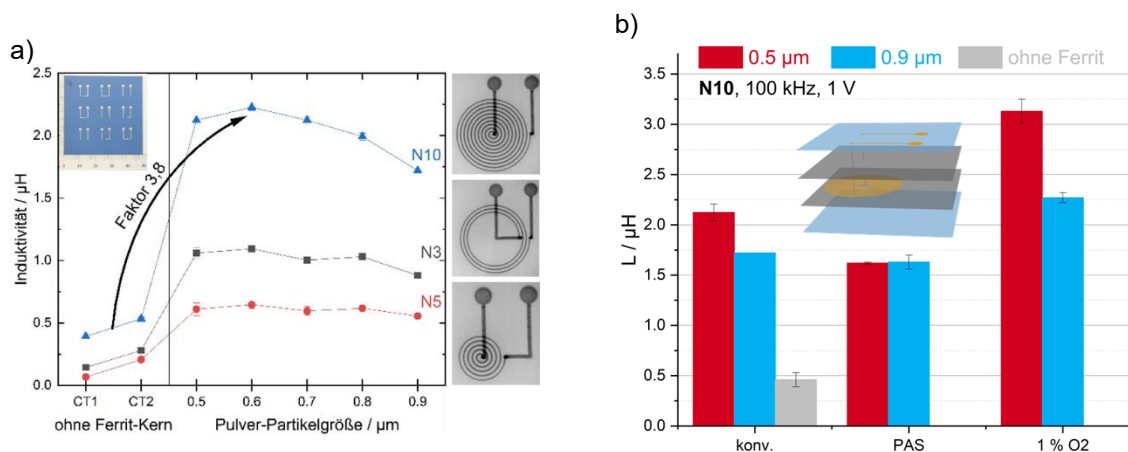


Abbildung 14: Induktivitäten der Multilayer-Demonstratoren, a) Messung bei 100 kHz, alle konventionell gesintert (Tabelle 1), Foto gesinterteter Nutzen mit 9 Spulen oben links, Radiographien der innenliegenden Spulenstruktur der drei Varianten rechts, b) Vergleich der Induktivitäten konventionell gesintert mit druckunterstützter Sinterung (PAS) und Brand unter reduziertem Sauerstoffpartialdruck

Unterstützung anderer APs und Zusammenfassung

Neben den oben beschriebenen Arbeiten in den drei, für dieses Teilvorhaben maßgeblichen Arbeitspaketen, wurde das Gesamtprojekt maßgeblich durch Koordination und Zuarbeiten zu anderen Arbeitspaketen unterstützt. Das Ziel des Gesamtvorhabens war die Abbildung und Verfügbarmachung von domänenspezifischem Fachwissen, hier Entwicklung und Fertigung keramischer Multilayer, über ein ontologie-basiertes Wissenssystem. Im ersten Projektjahr, insbesondere nach der ersten Vollversammlung der Plattform MaterialDigital (PMD), wurde klar, dass eine vollständige Erfassung und Verknüpfung aller erhobenen Daten in einem Wissenssystem im Rahmen des Projektes nicht darstellbar war. Der Empfehlung der PMD folgend, wurde eine enger begrenzte Anwendungsfall gestaltet, um die Konzepte der PMD zu testen und zu demonstrieren. Unter Berücksichtigung der vorliegenden Ergebnisse und Koordination der BAM wurde Anwendungsfall 2) zur Basis der Demonstration des Wissenssystems. Dies beinhaltet:

- Auswahl und Vorbereitung der Rohdaten für die automatisierte Data Pipeline
- Abstimmung der Konzepte und Verknüpfung der Ontologie hinsichtlich der Zusammenhänge Partikelgröße-Formgebungsverfahren-Permeabilität-Dichte
- Koordination der durchzuführenden Simulationen (EAH Jena)
- Koordination der durchzuführenden Messungen und Analysen zur Bestimmung der Eingangswerte für die Simulationen (insbesondere Schichtdicken und Permeabilität)
- Erarbeitung von Postern, Vorträgen und eines Manuskripts zur Vorstellung der Data Pipeline, des werkstofftechnischen Zusammenhangs aus keramischer Formgebung-Permeabilität-experimenteller Induktivität-simulierter Induktivität

Das Manuskript „Ontology-Based Data Acquisition, Refinement, and Utilization in the Development of a Multilayer Ferrite Inductor“ erschien in *Advanced Engineering Materials* als Beitrag im Special Issue zur Initiative MaterialDigital ([DOI: 10.1002/adem.202401042](https://doi.org/10.1002/adem.202401042)).

2. Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Die Zuwendung wurde hauptsächlich für Personalmittel zur Bearbeitung des AP S2 verausgabt. Die mit 36 PM geplante Stelle war aufgrund von vorzeitigem Ausscheiden eines Projektmitarbeiters und anschließend einreisebedingt verzögerter Wiederbesetzung nur 28 PM besetzt.

Verbrauchsmittel wurden wie geplant für die Beschaffung von Sieben, Füllschablonen und Pasten zur Fertigung der Demonstratoren ausgegeben. Dabei wurden statt 17 Siebe und 8 Schablonen nur 8 bzw. 4 Stück beschafft.

Reisemittel wurden in Folge der Corona-Pandemie weniger als geplant verausgabt.

3. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeit

Alle durchgeführten Arbeiten bzw. entstandenen Aufwände dienten zur Erreichung der Vorhabenziele. Die Finanzierung einer Stelle zur Implementierung eines exemplarischen Simulationsworkflows durch Kombination des script-job Konzepts mit der von der Plattform MaterialDigital empfohlenen Workflow-Umgebung SimStack war erforderlich, da diese Arbeiten nicht durch Stammpersonal durchführbar gewesen wären. Sämtliche experimentellen Arbeiten zur Herstellung und Charakterisierung von Proben und Bauteilen wurden durch Stammpersonal geleistet. Die Fertigung der Multilayer-Induktivitäten wäre ohne die beschafften Siebe, Schablonen und Pasten technisch nicht möglich gewesen.

4. Voraussichtlicher Nutzen und Fortschreibung des Verwertungsplans

Die werkstofftechnischen Ergebnisse des Vorhabens zeigen, dass die Herstellung von integrierten, miniaturisierten Induktivitäten durch eine Kombination aus magnetischer Funktionskeramik (Ferrit) und dielektrischem Basismaterial (LTCC) in Multilayer-Technologie technologisch möglich ist. Anhand der erarbeiteten und veröffentlichten Forschungsdaten wird der Einfluss der Fertigungstechnologie auf die Funktionseigenschaft der Multilayerinduktivität deutlich. Es ist gezeigt, welche Prüfkörper (co-gesinterte Ringkerne aus Folienlaminaten) erforderlich sind, um Eingangsdaten für prädiktive Bauteilsimulationen zu erhalten. Damit sind die notwendigen Voraussetzungen für eine gezielte Bauteil- bzw. Produktentwicklung erarbeitet. Diese können ggf. direkt in Anschlussprojekten der dritten Förderphase (MaterialDigital 3) genutzt werden.

Die erarbeitete Datapipeline zur automatisierten Weiterverarbeitung der Rohdaten zu nachhaltigen Forschungsdaten gemäß FAIR-Prinzipien und deren semantische Verknüpfung mittels einer Domänenontologie wurde für keramische Werkstoffe und Technologien in dieser Form zum ersten Mal demonstriert. Für die beteiligten Forschungspartner stellt dies einen Kompetenzgewinn dar, der in allen zukünftigen Forschungsvorhaben weitergenutzt werden kann. Gleichzeitig stehen damit ein zugängliches Demonstrationsbeispiel sowie eine weiterverwendbare Arbeitsvorlage für die keramische Community zur Verfügung. Die Ontologie und der Code der Datapipeline sind in frei zugänglichen Repositorien veröffentlicht und über die open access Veröffentlichung zum Multilayer auffindbar.

Ebenso bietet die Veröffentlichung der SimStack-WaNos eine praktische Arbeitsvorlage zur Anwendung des Workflow-Konzepts für script-basierte Simulationsaufgaben bzw. sogar für Workflows zur Verarbeitung experimenteller Daten. Da die DEM-Simulationsaufgabe nicht mit Hilfe einer dezidierten Schnittstelle implementiert wurde, sondern durch nutzerfreundliches Parametrisieren eines Script-Templates, kann dieses Konzept auf vielfältige andere Workflow-Szenarien übertragen werden.

Für die Plattform MaterialDigital steht mit den Projektergebnissen (Domänenontologie, Datapipeline, Simstack-WaNos) zusätzliches Material zur Demonstration der empfohlenen Konzepte zur Verfügung.

5. Darstellung des während der Durchführung des Vorhabens dem Zuwendungsempfänger bekannt gewordenen Fortschritts auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Die Initiative MaterialDigital verfolgt einen Community-Ansatz. Während der Durchführung des Vorhabens haben verschiedene Arbeitsgruppen und das PMD-Kernteam an der Implementierung bzw. Weiterentwicklung von Digitalisierungskonzepten gearbeitet. Einige Fortschritte, beispielsweise die Überarbeitung der PMD core ontology und neue Funktionen es SimStack-Clients wurden im Vorhaben aufgegriffen und direkt genutzt. Aus den Arbeiten anderer Satellitenprojekte entstanden keine negativen Einflüsse auf dieses Vorhaben. Die rasante Entwicklung und bessere Verfügbarkeit im Bereich künstlicher Intelligenz (KI), insbesondere Large Language Models (LLMs) zur Verarbeitung großer

Datenmengen in den letzten Jahren eröffnet praktische Möglichkeiten zur Analyse großer und verteilter Datenmengen, die bei Antragstellung in dieser Form noch nicht zur Verfügung standen. Die Notwendigkeit von Ontologien zur semantischen Verknüpfung von Forschungs- bzw. Materialdaten ist dadurch für einige Anwendungsszenarien zukünftig wahrscheinlich nicht mehr erforderlich. Die im Vorhaben erarbeiteten Grundlagen zur Aufbereitung von Rohdaten (Datapipeline) sind jedoch auch zukünftig wichtige Instrumente zur Digitalisierung der Werkstoffforschung, Implementierung von FAIR-Prinzipien und einem nachhaltigen Forschungsdatenmanagement. In diesem Sinne stellt die Verfügbarkeit von KI-Werkzeugen und LLMs keinen negativen Einfluss, sondern eher eine zusätzliche Motivation zur Verwertung bzw. weiteren Verwendung der im Vorhaben erarbeiteten Methoden dar. Darüber hinaus stellen LLMs ein nützliches Werkzeug dar, um die Nutzung semantisch verknüpfter Daten, insbesondere über SPARQL, mittels natural language processing zu vereinfachen.

Hinsichtlich der Entwicklung von Multilayerinduktivitäten sind keine Fortschritte Dritter bekannt, die eine Verwertung der Ergebnisse negativ beeinflussen könnten.

6. Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen des Ergebnisses

Artikel in Fachzeitschriften:

- Mieller, B., Hassine, S.B., Töpfer, J., Priese, C., Bochmann, A., Capraro, B., Stark, S., Partsch, U. and Fresemann, C. (2025), Ontology-Based Data Acquisition, Refinement, and Utilization in the Development of a Multilayer Ferrite Inductor. Adv. Eng. Mater. 2401042. <https://doi.org/10.1002/adem.202401042>
- Mieller, B., Valavi, M. and Caldeira Rêgo, C.R. (2025), An Automated Simulation Workflow for Powder Pressing Simulations Using SimStack. Adv. Eng. Mater. 2400872. <https://doi.org/10.1002/adem.202400872>
- Bekemeier, S. et al. (2025), Advancing Digital Transformation in Material Science: The Role of Workflows within the MaterialDigital Initiative, accepted for publication in Adv. Eng. Mater.

Daten:

- SimStack-WaNos zur Erstellung von Workflows für Presssimulationen (<https://workflows.material-digital.de/workflow/91> bzw. <https://github.com/KIT-Workflows/KNOW-NOW>)

Webseite:

- <https://www.bam.de/Content/DE/Projekte/laufend/KNOW-NOW/know-now.html>

Konferenzbeitrag:

- Mieller, B., (2024) Ontologies and data pipelines - a field report from the development of multilayer ferrite inductors, CERAMICS 2024 / 99th DKG Annual Meeting, 09.09.-11.09.2024, Höhr-Grenzhausen, Germany

Messeauftritte:

- digitale Projektübersichten für die Messestände des VDI/BMBF auf der ACHEMA 2022 und 2024