

## Molekulardynamische Simulation als Ansatz zur Optimierung der additiven Qualität

# Prozessmodellierung in der additiven Fertigung

S. Müller, D. Klein, F. Öhlschläger, J. Roth, E. Westkämper

Die Einsatzmöglichkeiten der additiven Technologie wachsen und verändern die Art und Weise wie wir produzieren. Gleichzeitig steigen die Anforderungen an die Qualität und Reproduzierbarkeit der noch jungen Technologie. Eine Möglichkeit zur Optimierung der Qualität durch Prozessmodellierung stellen Simulationen dar. Dieser Beitrag zeigt einen Ansatz zur Modellierung des additiven Prozesses mit metallischen Werkstoffen auf der Ebene eines einzelnen Pulverpartikels mittels der Molekulardynamik.

### STICHWÖRTER

Additive Fertigung, Simulation, Qualität

## Molecular Dynamics Simulations for Improving Additive Manufactured Quality

Additive applications are rising and are changing the way we will manufacture in the future. At the same time demands for quality and reproducibility are growing. A possibility for improving quality lies in the simulation of the process. This article presents an approach for modelling the additive process on the scale of a single powder particle using molecular dynamics.

## 1 Überblick

Das selektive Laserschmelzen (englisch: powder bed fusion oder selective laser melting, SLM) ist ein additives Verfahren, bei dem pulverbasierte Werkstoffe mittels Laser geschmolzen werden. Dabei werden wenige  $\mu\text{m}$  große Partikel miteinander verbunden. Durch eine Schichtung des geschmolzenen und wieder erstarrten Materials entstehen komplexe mehrdimensionale Strukturen. Die zentralen Vorzüge der Technologie, wie die Integration von Funktionen, Individualisierungen und freie Gestaltbarkeit, werden durch einen erhöhten Bedarf an Nacharbeit und mangelnde Reproduzierbarkeit begrenzt. [1, 2]

Die Anforderungen an die Qualität des Bauteils sind weitestgehend mit Bauteilen gleichzusetzen, welche mittels etablierten, subtraktiven Verfahren hergestellt wurden und betreffen vornehmlich die Oberfläche, Dichte sowie die Homogenität des Werkstoffs. Qualitative Mängel der additiv gefertigten Teile lassen sich im Vollkörper häufig in Form von Poren und Einschlüssen nachweisen. [3–5]

Der Vorgang des Optimierens der Qualität und damit zusammenhängend auch des Prozesses führt zu einem tieferen Prozessverständnis. Neben physischen Experimenten können dabei Simulationen und die Prozessmodellierung behilflich sein. Die Prozessmodellierung und Simulation des Prozesses ermöglichen dabei komplexe Untersuchungen auf verschiedenen Ebenen, ohne beispielsweise Rohstoffe zu verbrauchen und ermöglichen es, langwierige Schadensuntersuchungen zu umgehen.

In dieser Arbeit wird der additive Prozess des selektiven Laserschmelzens für den Werkstoff Aluminium mithilfe der molekulardynamischen Simulation modelliert. Dabei soll vorerst

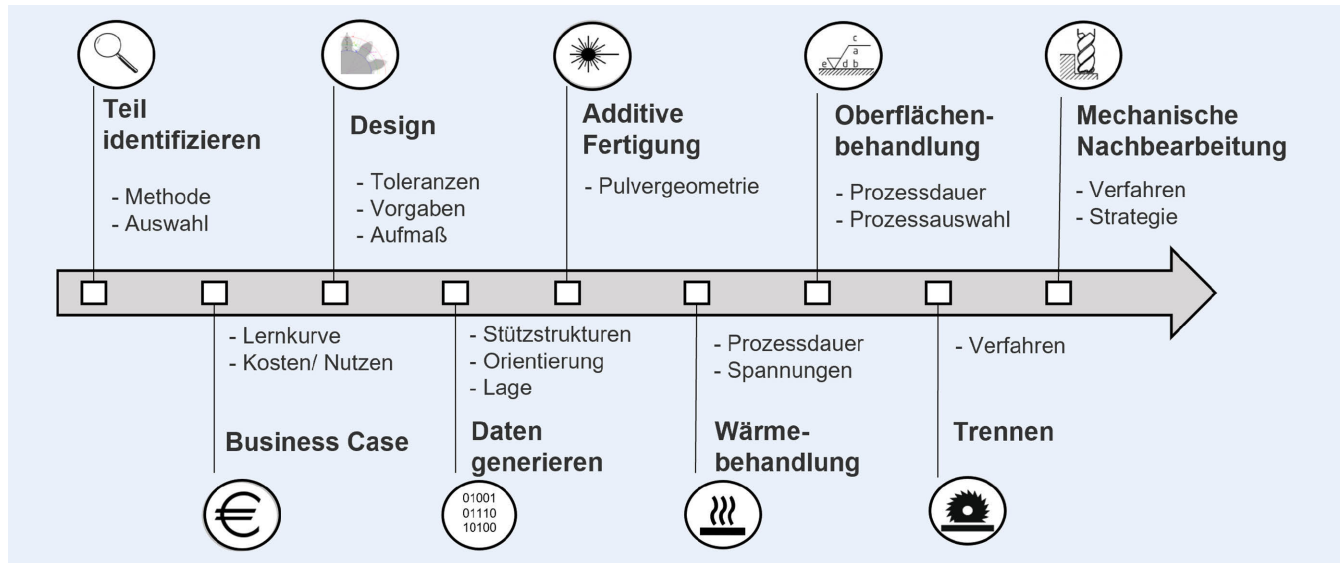
ein einzelner Partikel abgebildet werden, welcher nach dem Kontakt mit dem Laserstrahl von einer festen zu einer flüssigen Phase übergeht und aufgrund der Schwerkraft fließt. Die Machbarkeit der Simulation des Phasenübergangs sowie das anschließende Fließen liefern dabei erste Ansatzpunkte für eine zukünftige Detaillierung des Prozessmodells der additiven Fertigung mit metallischen Werkstoffen. Als Werkstoff wird reines Aluminium gewählt aufgrund seiner vielfältigen Einsatzmöglichkeiten beispielsweise im Leichtbau, der simulierbaren Materialeigenschaften sowie der häufigen Verwendung als Legierungselement.

## 2 Grundlagen

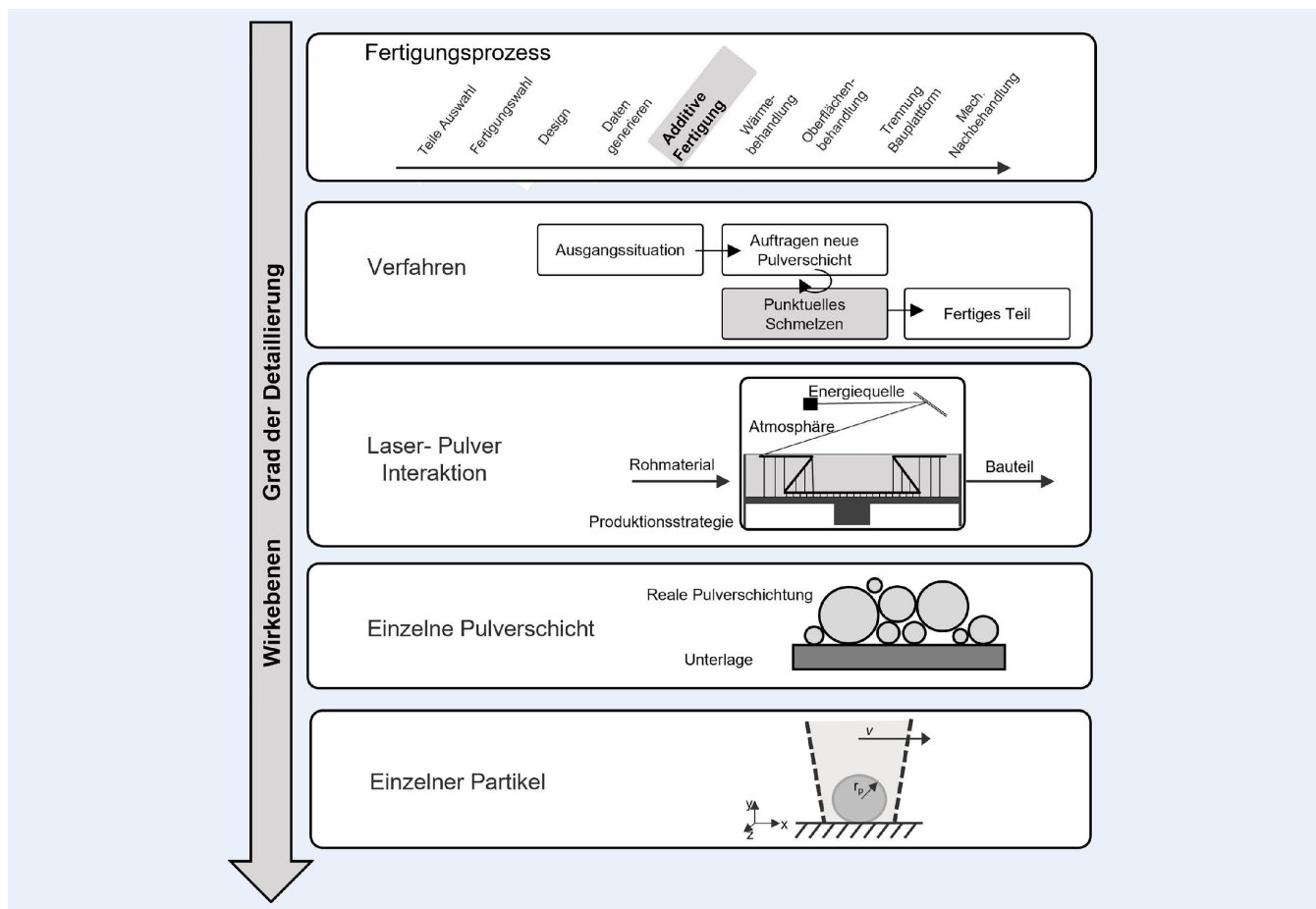
Um die Erkenntnisse, welche im Rahmen einer Simulation erlangt werden, anzuwenden, müssen die Zusammenhänge zwischen der Simulationsebene und des gesamten Prozesses strukturiert werden. Dazu wird der Prozess modularisiert, um die kleinste zu untersuchende Wirkungsebene zu bestimmen und um den Prozessabschnitt mit höher gelegenen Ebenen in Zusammenhang zu stellen. Als kleinste Wirkungsebene wird im Rahmen dieser Arbeit die Größenordnung eines einzelnen Partikels angenommen.

Wie jede Fertigungstechnologie lässt sich die additive Fertigung nur mit vor- und nachgelagerten Prozessen in die Produktionsumgebung integrieren. Von der fertigungsgerechten Konstruktion bis hin zur Nachbearbeitung lässt sich die additive Prozesskette entsprechend **Bild 1** abbilden.

Ausgehend von der Prozesskette lässt sich der Prozessschritt der additiven Fertigung wiederum nach Wirkungsebenen gliedern (**Bild 2**). Das SLM-Verfahren besteht dabei vereinfacht aus zwei



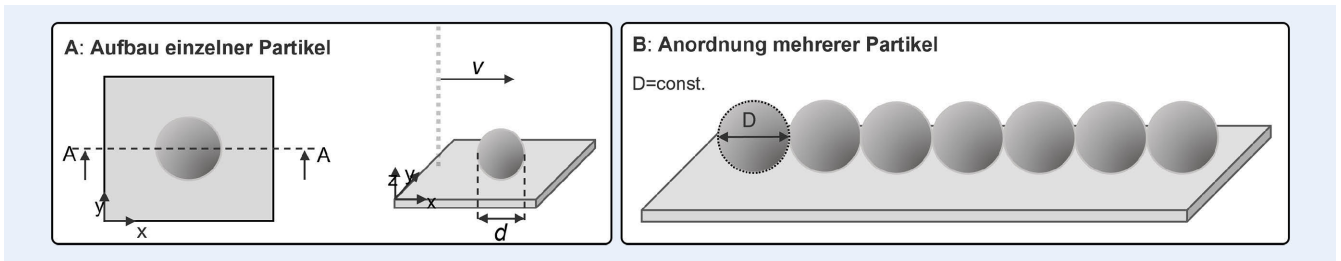
**Bild 1.** Additive Prozesskette, ausgehend von der Identifikation des zu fertigenden Teils.  
Grafik: Eigene Darstellung



**Bild 2.** Wirkebenen in der additiven Fertigung mittels SLM-Verfahren. Grafik: Eigene Darstellung

Teilschritte, welche wiederholt werden, bis das Bauteil fertiggestellt ist: eine neue Pulverschicht wird aufgetragen und anschließend punktuell geschmolzen, um eine Verbindung herzustellen. Von Bedeutung für diese Arbeit ist dabei die Interaktion zwischen dem Laser und der Pulverschicht. Aus dieser Annahme

resultiert, dass die nächsten Modulierungsstufen aus einer einzelnen Pulverschicht, mehreren Partikeln auf festem Grund und in der kleinsten Detaillierung aus einem einzelnen Partikel auf festem Grund bestehen.



**Bild 3.** Aufbau der zu betrachtenden Einheit; zur Verdeutlichung Schnittebene A-A. *Grafik: GSaME*

```

## Pseudo code of a simple MD simulation

initiate_simulation()      # Initialize

t = 0

while ( t < tend ):      # MD main loop
  calculate_forces()      # Calculate forces acting on each atom
  move_atoms()           # Integrate Newton's equation of motion
  calculate_properties()  # Calculate desired and/or needed properties
  t = t + dt             # Increment time
end

```

**Bild 4.** Vereinfachtes Stück Code einer MD-Simulation. *Grafik: GSaME*

Bisherige Simulationen bilden häufig das gesamte Pulverbett als Kontinuum ab [6, 7] oder befassen sich mit dem Ausbilden des Materialgefüges [8]. Weitere Arbeiten betrachten einzelne Partikel, welche geschmolzen werden, allerdings werden diese im Kollektiv betrachtet und die darunterliegende, bereits verfestigte Schicht wird in dem Modell erneut angeschmolzen.

### 3 Ansatz und Vorgehensweise bei der Prozessmodellierung

Auf der zu betrachtenden Wirkebene besteht die im Folgenden zu betrachtende Einheit (**Bild 3**) im ersten Fall aus einem idealisierten, sphärischen Partikel, dem Laserstrahl als Energiequelle sowie einer nicht schmelzbaren Unterlage (A). Anschließend werden mehrere Partikel des gleichen Durchmessers im Verbund betrachtet (B).

Im Idealfall passiert der Laserstrahl den Partikel und eine ausreichende Menge an Energie wird übertragen, um den Pulverpartikel vollständig zu schmelzen. Die Menge an Energie sollte jedoch nicht so hoch sein, dass es zu einem Verdampfen und dem damit einhergehenden Masseverlust kommt. Aufgrund der Schwerkraft kommt es zu einer Verformung der schmelzflüssigen Kugel und die idealerweise vollständige Benetzung der Unterlage tritt ein. Dieser Prozess, beginnend mit dem Passieren der Energiequelle bis zum Schmelzen und der Verformung der Schmelze, soll mittels der Molekulardynamik simuliert werden.

Das Alleinstellungsmerkmal der Molekulardynamik ist die intrinsische Inklusion des Phasenverhaltens. Das Phasenverhalten muss daher nicht als Inputparameter in die Simulation einfließen, sondern wird aus der atomistischen Materialdynamik über interatomare Wechselwirkungspotentiale berechnet. Das heißt, im Gegensatz zu gängigen Finite Differenzen, Finite Elemente oder numerische Strömungsmechanik Simulationen (CFD Computational Fluid Dynamics), muss keine Annahme über das lokale thermodynamische Equilibrium oder Verhalten bei Phasenübergängen getroffen werden. Das Partikel durchläuft durch seine

inhomogene Laserabsorption an verschiedenen Stellen ultraschnelle Schmelz-, Verdampfungs- und Sublimierungsprozesse. Diese sind wiederum gepaart mit Schockwellen, die die lokale Dichte des Materials und damit Temperatur und Phasenübergangsgrenzen beeinflussen. Mithilfe des molekulardynamischen Ansatzes können all diese Prozesse und ihre Wechselwirkung untereinander, sowie die resultierende hochkomplexe nicht-lineare Materialdynamik in atomarer Auflösung abgebildet werden. Die besagte atomare Auflösung ist nicht nur die zweite charakteristische Stärke der verwendeten Methode, sondern liefert auch nützliche Einblicke in die mikroskopische Struktur des entstehenden Bauteils und bildet die Entstehung von Versetzungsfehlern und Mikrorissen im Bauteil ab.

Die Grundidee des Molekulardynamikansatzes ist die iterative Berechnung der Trajektorien jedes einzelnen Atoms  $i$  durch Integration der Newtonschen Bewegungsgleichungen für einen finiten Zeitschritt  $\Delta t_{MD}$ . Ein Block pseudo Code ist in **Bild 4** dargestellt. Um die Bewegungsgleichungen zu integrieren, verwenden wir den Leapfrog-Algorithmus. Während dieser Integrator durch seine Einfachheit an Recheneffizienz gewinnt, zeigt er aufgrund seiner symplektischen Natur ein sehr robustes Stabilitätsverhalten in Langzeit-MD-Simulationen [9]. Dies macht den Leapfrog-Algorithmus zu einem der bevorzugten Integratoren für MD-Simulationen. Aus Sicht der statistischen Mechanik ist ein System, dessen Dynamik die zeitunggekehrte Varianz widerspiegelt, inhärent konservierend für die Anzahl der Teilchen  $N$ , das Volumen  $V$  der Simulationsbox und die Gesamtenergie  $E$  des Systems. Mit anderen Worten: Der Leapfrog-Algorithmus reproduziert das mikrokanonische Ensemble.

Während thermodynamische Randbedingungen durch die Wahl des Integrationsverfahrens in die Simulation einfließen, werden alle Materialeigenschaften durch die Wahl des effektiven interatomaren Potentials  $U(\{\mathbf{r}\})$  und der Teilchenmasse  $m_i$  aufgeprägt. Aus dieser Wahl folgt die deterministische Dynamik des Systems, aus der sich alle makroskopischen Materialeigenschaften wie Phasenverhalten oder elastische Konstanten ergeben. Dies

Tabelle. Prozessparameter

Parameter	Symbol	Einheit	Wert
Laser Leistung	$P$	W	400
Fokus Durchmesser	$w_0$	$\mu\text{m}$	80
Geschwindigkeit	$v_0$	m/s	1
Wellenlänge	$\lambda$	nm	1070
Partikeldurchmesser	$d$	$\mu\text{m}$	20

macht die Wahl von  $U(\{\mathbf{r}\})$  entscheidend für das Ergebnis der Simulation.

Im Allgemeinen lässt sich jedes klassische Wechselwirkungspotenzial als eine Reihe von  $n$ -Körper-Wechselwirkungspotenzialen  $U_n$  formulieren. Daraus folgt die klassische Kraft

$$F_i = -\nabla_{r_i} U(\{\mathbf{r}\}) = -\nabla_{r_i} \left[ U_1(r_i) + \sum_{i \neq j} U_2(r_i, r_j) + \sum_{i \neq j} \sum_{i, j \neq k} U_3(r_i, r_j, r_k) + \dots \right] \quad (1)$$

$\equiv U(\{\mathbf{r}\})$

welche auf Teilchen  $i$  wirkt, durch eine Superposition. Bei einer naiven Implementierung skaliert der Rechenaufwand für  $N$  Teilchen mit  $N_n$ . Dies macht Potenziale höherer Ordnung für die Simulation makroskopischer Proben unbrauchbar und führt zu dem Bedarf nach einfachen Anpassungspotenzialen, welche die gewünschte Materialeigenschaft abbilden. Solche Potenziale sind oft phänomenologische Potenziale niedriger Ordnung, die mit verschiedenen Parametern an experimentelle Daten angepasst werden, um die gewünschten makroskopischen Eigenschaften zu reproduzieren. Der Bedarf an einer effizienteren Parametrisierung von  $U$  führt zu einer Entwicklung, bei der interatomare Potenziale so angepasst werden, dass ausgewählte Materialeigenschaften besser abgebildet werden, während die Rechenkosten möglichst geringgehalten werden, indem nur die wichtigsten dominantesten Merkmale berücksichtigt werden. Im vorliegenden Fall wird für den Werkstoff Aluminium das bewährte EAM Potenzial zur Modellierung des interatomaren Potentials verwendet.

Um der schlechten Skalierbarkeit der Rechenkosten entgegenzuwirken indem mit weniger Teilchen gerechnet wird, werden alle Atome in Cluster zusammengefasst, die den kleinsten experimentell beobachtbaren Tröpfchen entsprechen. Weiter werden die Bewegungsgleichungen sowie Wechselwirkungspotenziale in Ort und Zeit konsistent auf kleinere Größenskalen transformiert, um diese kleinsten Tröpfchen wie Atome behandeln zu können. Wie Beispielrechnungen zeigen [10], lassen sich auf diese Weise selbst hochgradig nichtlineare Materialdynamiken korrekt abbilden und die makroskopische Materialdynamik bleibt dabei qualitativ erhalten.

## 4 Ergebnisse

Die verwendeten unskalierten Prozessparameter sind in der **Tabelle** dargestellt. Zur visuellen Auswertung der Simulation wird der Partikel mittig entlang der Schnittebene A-A geschnitten

(siehe Bild 3). Die Gesamtdauer der Simulation beträgt 210 ps, wobei der Laserstrahl den Partikel nach 10 ps vollständig passiert hat.

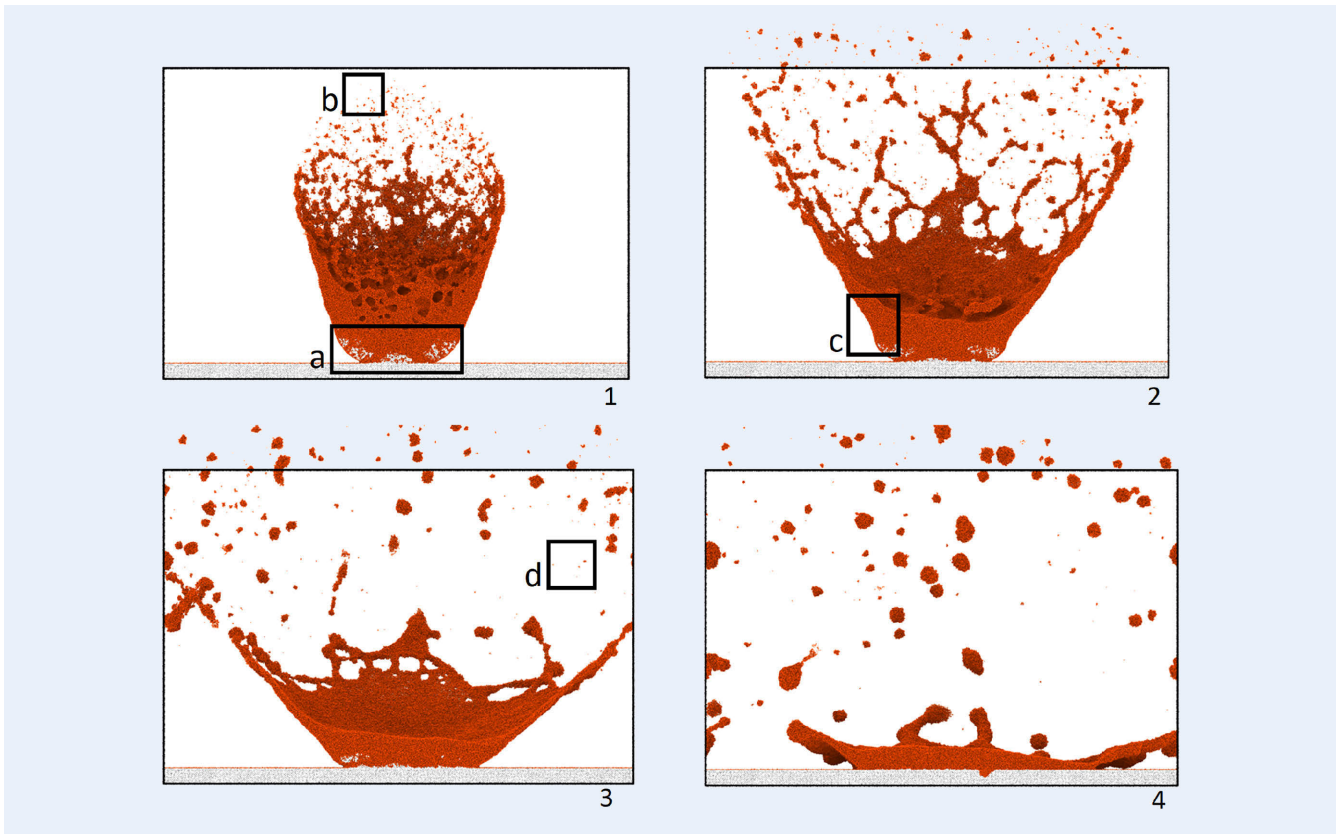
Bei dem einzelnen Partikel sind die Atome, welche bereits Teil der Schmelze sind, rot dargestellt, während noch im Gitter gebundene Atome grau dargestellt sind. Der Laserstrahl hat in **Bild 5** (1) den Partikel bereits vollständig passiert und es ist im Bereich (a) zu erkennen, dass zu Beginn noch gebundene Atome im weiteren Verlauf der Simulation in den flüssigen Zustand übergehen. Das feste Material behindert das Flüssige bei der explosionsartigen Ausbreitung (c), wodurch eine beidseitige Einschnürung zu beobachten ist. Einzelne beziehungsweise kleine Ansammlungen von Atomen (b und d) können als mögliche Verdampfung interpretiert werden. Auffällig ist neben der raschen Ausbreitung der Tropfen auch der Durchmesser des Bereichs, in dem die Tropfen auf den Untergrund treffen (engl. splash zone). Diese splash zone ist wesentlich größer als der Partikeldurchmesser und passt zu den experimentellen Beobachtungen, bei denen Spritzer weit außerhalb der Schmelzbahn zu finden sind. Zudem lässt sich die Möglichkeit eines Gaseinschlusses beobachten (e). Dieses Gaseinschlüsse führen zu Schwachstellen im Material und bedingen zum Teil die mangelnde Qualität (beispielsweise Auftreten von Poren).

In der Simulation mit mehreren Partikeln (**Bild 6**) ist der Materialzustand nicht anhand der Einfärbung zu unterscheiden. Vielmehr werden die Atome der einzelnen Partikel farblich differenziert. Im ersten der vier Ausschnitte ist wiederum zu erkennen, dass der obere Bereich der Kugel beziehungsweise des Partikels schlagartig angeschmolzen ist, während der untere Bereich noch fest ist. Ebenso ist die explosionsartige Ausdehnung sowie die Bildung von Tropfen unterschiedlichen Durchmessers zu beobachten. Im zweiten Abschnitt ist der Umklappmechanismus aufgrund der Oberflächenspannung erkennbar, welcher zum Einschluss des Umgebungsmediums (meist Gas beispielsweise  $N_2$ ) und zur Ausbildung von Fehlstellen führen kann. Dieser Mechanismus verstärkt sich, wenn zwei sphärische Partikel aneinandergrenzen (h und i).

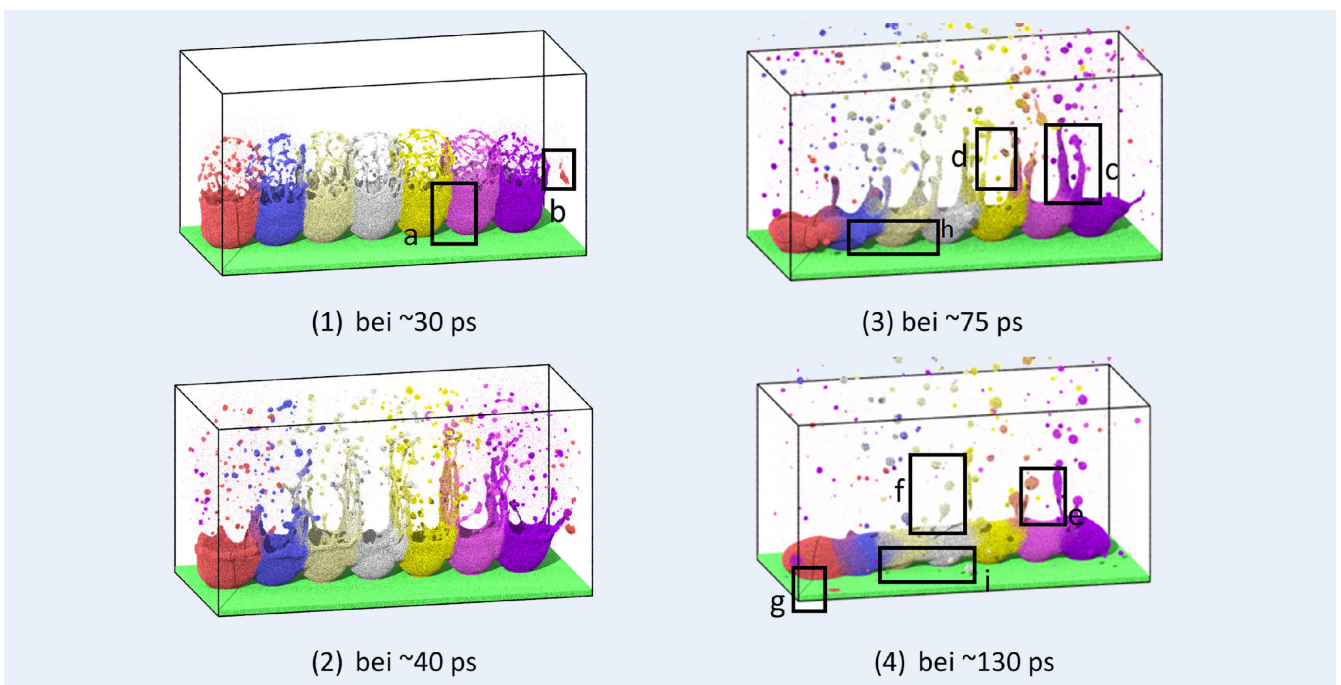
Die Vermischung der Schmelzen der einzelnen Partikel lässt sich bereits früh (a) beobachten. Die roten Atome (b) sind zu vernachlässigen, da es sich um einen Effekt bedingt durch die periodischen Randbedingungen handelt. In (2) ist eine starke vertikale Ausdehnung der Tröpfchen zu erkennen. Im Verlauf der Simulation schließen sich kleinere Tröpfchen zusammen und bilden Größere. Ebenso ist zu beobachten, wie sich längliche, fadenförmige Gebilde formen, an deren Ende eine Einschnürung entsteht, siehe (3), (c) und (d). Die Einschnürungen verjüngen sich weiter und es entstehen einzelne Tropfen wie in (4), (e) und (f). Der Tropfen, welcher sich im Verlauf von (c) zu (e) ausbildet, besteht dabei aus der Schmelze von zwei unterschiedlichen Partikeln, hier gelb und pink. Es lassen sich in (4) beispielsweise im Bereich (g) einzelne Tropfen beziehungsweise Spritzer erkennen, welche bereits wieder die Grundplatte erreicht haben. Auch Tropfen auf dem Schmelzbett lassen sich identifizieren, welche die Erklärung von Einschlüssen untermauern.

## 5 Fazit und Ausblick

In dieser Arbeit wurden die starken und weitreichenden Auswirkungen der Bildung von Tropfen und Spritzern deutlich. Sowohl große wie auch kleine Tropfen weisen Effekte auf unter-



**Bild 5.** Verhalten des Partikels zu unterschiedlichen Zeitpunkten; Reihenfolge (1)-(4). Grafik: GSaME



**Bild 6.** Verhalten mehrerer Partikel mit gleichem Durchmesser zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Grafik: GSaME

schiedlichen Ebenen auf. Die Tropfenbildung vollständig zu unterdrücken ist mittels Anpassung der Prozessparameter nur schwer zu erreichen und aufgrund der betriebswirtschaftlichen Auswirkungen und dem Ziel heraus, die additive Fertigung

konkurrenzfähig zu halten, nicht möglich. Während sich die Auswirkungen von größeren Tropfen ausschließlich auf das direkte Umfeld des Schmelzbereichs beschränken, zeigen kleine, weitflie-

gende Tropfen Auswirkungen in einem größeren räumlichen Bereich.

Für die Qualität des Bauteils gravierender einstuft lassen sich die Ausbildung von Hohlräumen und Poren. Als Ursache für die Ausbildung größerer Einschlüsse lässt sich im Rahmen dieser Arbeit der Umklappmechanismus bei hohen Geschwindigkeiten sowie das nur teilweise Anschmelzen der Partikel identifizieren. Diese Fehlstellen erhöhen umgehend die betriebliche Ausschussquote, führen zu einem Nichterreichen der Qualitätsanforderungen und setzen die Konkurrenz- und Einsatzfähigkeit der additiven Fertigung herab. Eine Reduktion des Umklappmechanismus und damit dem in dieser Arbeit identifizierten Hauptursprungs von (größeren) Einschlüssen, ist nur mit einer Parameteranpassung zulasten der betriebswirtschaftlichen Prozessbetrachtung möglich. Zukünftiger Forschungsbedarf besteht in der Untersuchung der Ausbildung von Hohlräumen bei unterschiedlicher Laserleistung und -geschwindigkeit sowie die simulationstechnische Anwendung der Ergebnisse auf reale Schichtungen von Partikeln. Zudem würde sich unter der Einbindung eines Umgebungsmediums die Aussagekraft der Simulationsergebnisse stark erhöhen. Auf diese Art und Weise könnten Einschlüsse nachgewiesen und deren Bildung näher untersucht werden.

## DANKSAGUNG

Die Autoren bedankt sich bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) für die finanzielle Unterstützung der Graduate School of Excellence advanced Manufacturing Engineering.

## Literatur

- [1] Dowling, L.; Kennedy, J.; O'Shaughnessy, S. et al.: A review of critical repeatability and reproducibility issues in powder bed fusion. *Materials & Design* 186 (2020), S. 108346
- [2] Gebhardt, A.: *Additive Fertigungsverfahren. Additive Manufacturing und 3D-Drucken für Prototyping – Tooling – Produktion.* München: Hanser 2016
- [3] Galy, C.; Le Guen, E.; Lacoste, E. et al.: Main defects observed in aluminum alloy parts produced by SLM: From causes to consequences. *Additive Manufacturing* 22 (2018), S. 165–175
- [4] Koutiri, I.; Pessard, E.; Peyre, P. et al.: Influence of SLM process parameters on the surface finish, porosity rate and fatigue behavior of as-built Inconel 625 parts. *Journal of Materials Processing Technology* 255 (2018), S. 536–546
- [5] Di Wang; Mai, S.; Xiao, D. et al.: Surface quality of the curved overhanging structure manufactured from 316-L stainless steel by SLM. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology* 86 (2016) 1–4, S. 781–792
- [6] Cook, P. S.; Murphy, A. B.: Simulation of melt pool behaviour during additive manufacturing: Underlying physics and progress. *Additive Manufacturing* 31 (2020), S. 100909
- [7] Francois, M. M.; Sun, A.; King, W. E. et al.: Modeling of additive manufacturing processes for metals: Challenges and opportunities. *Current Opinion in Solid State and Materials Science* 21 (2017) 4, S. 198–206
- [8] Rodgers, T. M.; Madison, J. D.; Tikare, V.: Simulation of metal additive manufacturing microstructures using kinetic Monte Carlo. *Computational Materials Science* 135 (2017), S. 78–89
- [9] Hairer, E.; Lubich, C.; Wanner, G.: Geometric numerical integration illustrated by the Störmer–Verlet method. *Acta Numerica* 12 (2003), S. 399–450
- [10] Glosli, J. N.; Richards, D. F.; Caspersen, K. J. et al.: Extending stability beyond CPU millennium. SC '07: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, Reno Nevada, 2007, pp. 1–11



Dipl.-Ing. **Sarah Müller**

Foto: Lea Schwarz

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Prof. E.h. Dr.-Ing. E.h. Dr. h.c. mult.  
**Engelbert Westkämper**

Graduate School of Excellence advanced  
Manufacturing Engineering (GSaME)  
Nobelstr. 12, 70569 Stuttgart  
sarah.mueller@gsame.uni-stuttgart.de  
www.gsame.uni-stuttgart.de

Dr. **Dominic Klein**

**Fabio Öhlschläger**, B. Sc.

Prof. Dr. **Johannes Roth**

Institut für Funktionelle Materie  
und Quantentechnologien FMQ  
Pfaffenwaldring 57, 70550 Stuttgart  
dominic.klein@fmq.uni-stuttgart.de  
www.fmq.uni-stuttgart.de/en/r-group

## LIZENZ



Dieser Fachaufsatz steht unter der Lizenz Creative Commons  
Namensnennung 4.0 International (CC BY 4.0)