

Materialentwicklung damals, heute und morgen

Von der Werkstoffkunde zur Materialwissenschaft

Well before any computers were around to simulate materials, humankind was capable of generating useful products from a variety of materials. Even the major eras in human history like the stone-age, the bronze-age, or the iron-age are named after materials. The present article is a time-travel journey through the history of materials development. A major milestone in this history is the advent of computers and powerful simulation software, which for the first time provided the basis to turn empirical trial and error methods into predictive simulations and improved understanding of materials, their properties and their processing. Nowadays a variety of simulation tools has reached a high degree of maturity. No individual standalone tool, however, allows tackling the complex simulation tasks required to design modern materials and products and to meet all requirements of the producing industry as highlighted in the present article. A modular, configurable combination of different tools into workflows eventually being performed on an open simulation platform is the approach of

the “Aachen (“Aix”) Virtual Platform for Materials Processing” (AixViPMaP®). Based on decades of continuous development of ICME (“Integrated Computational Materials Engineering”) at RWTH Aachen University, the AixViPMaP® is currently being developed in the frame of ICMEaix – a collaborative research effort of a number of RWTH and associated institutes. In future, the design of new materials and components will essentially proceed based on such simulation workflows. They will be optimized towards a desired functionality and performance while at the same time obeying constraints given by manufacturing processes, by ecological footprint and by economic impact. The prediction of materials and component properties will be possible along the entire production and service-life-cycle. Simulations will bridge interfaces between inorganic, organic and biological materials, and even encompass human tissue. In an ultimate vision even the morphogenesis in complex biological systems can be addressed by simulations.

Steinzeit, Eisenzeit, Bronzezeit, Siliziumzeitalter – Materialien stehen seit jeher im Zentrum des Interesses und ihre Eigenschaften prägten ganze Zeitalter. Das bessere Material führte zum besseren Produkt und sicherte oftmals die Existenz. Werkstoffe wurden schon immer entwickelt, jedoch ermöglicht der rasante Anstieg der Simulations- und Charakterisierungsmöglichkeiten erstaunliche Beschleunigungen der Werkstoffentwicklung und -qualifikation. Werkstoffe werden zunehmend für spezielle Anwendungsfälle maßgeschneidert, und mehr als 50 Prozent der heutigen Stähle wurden erst in den letzten 20 Jahren entwickelt. Damaszenerstahl kann als ein tausend Jahre altes Nanomaterial angesehen werden, obwohl zu dieser Zeit noch niemand den Begriff „Nano“ kannte. Das Wissen über die Rezepturen für die wiederholte und definierte Anwendung zahlreicher einzelner Umform- und Wärmebehandlungsschritte, die schließlich zu den überlegenen Eigenschaften von Damaszenerstahl führten, entwickelte sich über Generationen auf der Basis unzähliger Versuche und Irrtümer.



Bild 1: Werkstoffcharakterisierung mit moderner Elektronenmikroskopie und die Simulation von Gefügen nähern sich immer mehr an. Der Austausch komplexer Informationen zwischen realer und virtueller Welt wird zunehmend einfacher.

Foto: Peter Winandy

Noch bevor irgendeine Art von Simulation verfügbar war, konnten Menschen auf Basis experimenteller Erkenntnisse bereits Flugzeuge und Automobile bauen. Ein besseres Verständnis und Wissen über Materialien, ihre Eigenschaften und ihre Verarbeitung eröffnete immer wieder neue Wege zu neuen Designs, zu leichteren Bauweisen, zu neuen Werkstoffen und zu neuen Produkten wie beispielsweise Computern. Erste Computer sind seit Mitte der 1950er Jahre verfügbar. In der Werkstofftechnik werden Computer seit etwa Anfang der 1980er Jahre genutzt. Werkstoffe wurden Ende des letzten Jahrtausends oft durch Lichtmikroskopie charakterisiert. Ihre Mikrostrukturen beziehungsweise ihre Gefüge wurden auf Schwarz-Weiß-Bildern dokumentiert und in Gefüge-Atlanten gesammelt. Erste Personal Computer mit 80286-Prozessoren und Windows 3.1-Betriebssystem eroberten die Forschungspraxis von Nicht-Computer-Experten. Disketten hatten eine Speicherkapazität von einigen Hundert KB und eine 10 MB-Festplatte wurde als fortgeschrittene Ausrüstung betrachtet. Das Internet war in seiner frühen Entstehung. Die

Digitalisierung der Gefügebilder war damals der erste Schritt zur automatischen Bildverarbeitung und zur anschließenden, automatisierten statistischen Auswertung von Mikrostrukturen. Die ersten Grundlagen für „Computational Thermodynamics“^[1] zur Vorhersage von Gleichgewichtsphasenanteilen und thermodynamischen Eigenschaften von Werkstoffen wurden gelegt. Die Herstellung und Verarbeitung von Werkstoffen konnten jedoch auch zu dieser Zeit noch eher als eine empirisch basierte „Kunde“ oder als eine „Kunst“ angesehen werden. Die Entwicklung der Computerleistung und der Simulationsmethoden hat in den letzten Jahrzehnten enorme Fortschritte gebracht. Simulationsmodelle beschreiben heute Phänomene auf allen Zeit- und Längenskalen, und eine Vielzahl von Simulationswerkzeugen ist verfügbar^[2]. Selbst komplexe Simulationen können oftmals auf einem Standard-Laptop ausgeführt werden. Eine Datenspeicherung im Terabyte-Bereich ist auch im privaten Gebrauch üblich. Mikrostrukturmerkmale von Werkstoffen werden zunehmend in digitalem Format in 3D und manchmal sogar in 4D

aufgenommen. Die „Computational Thermodynamics“ haben sich auf der Basis des Phasenfeldkonzepts^[3] zu einer orts aufgelösten Beschreibung von Phasenumwandlungen weiterentwickelt, die heute die Simulation der Mikrostrukturentwicklung auch in komplexen technischen Legierungssystemen ermöglicht^[4], siehe Bild 2. Die Werkstofftechnik hat damit den Sprung von der beschreibenden „Werkstoffkunde“ zur vorhersagenden „Materialwissenschaft“ vollzogen. Gegenwärtig haben zahlreiche Softwarelösungen in ihrem jeweiligen Bereich ein Niveau erreicht, das wertvolle Beiträge zu modernen Konstruktionsaufgaben in wissensbasierten Produktionsmodellen ermöglicht. Das komplexe Zusammenspiel von atomistischen Prozessen, Thermodynamik, Prozessbedingungen, Mikrostrukturentwicklung, Material- und Bauteileigenschaften wird jedoch erst durch die Kombination verschiedener Simulationstools im Rahmen eines „Integrated Computational Materials Engineering“-Ansatzes (ICME)^[5] beschreibbar.

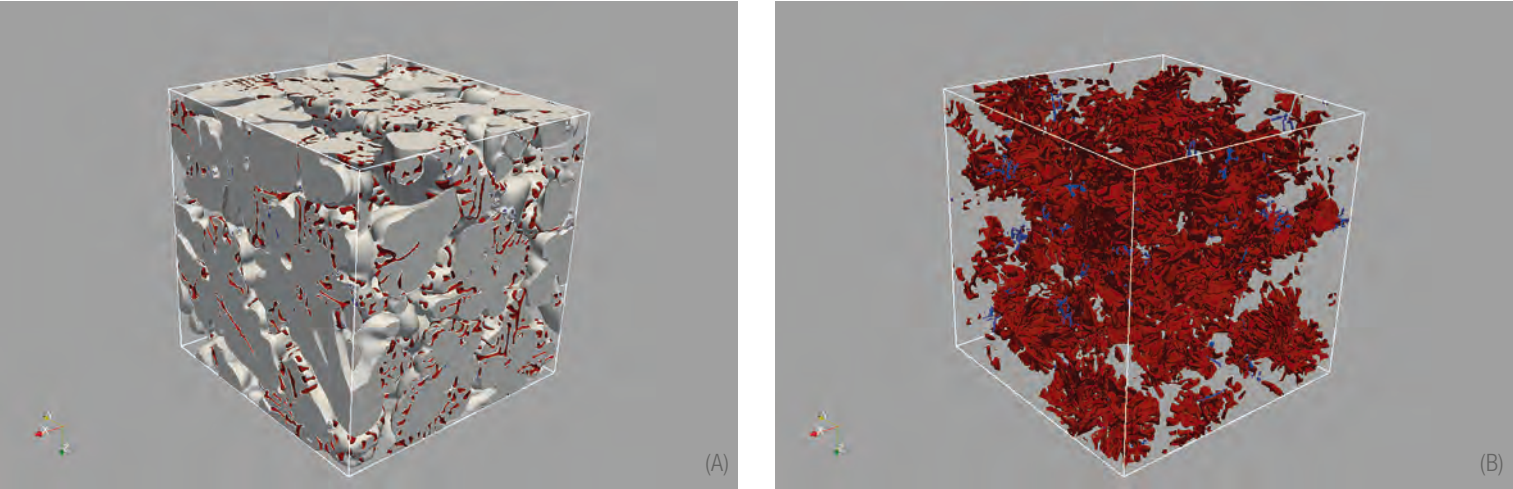


Bild 2: (A) Simuliertes Erstarrungsgefüge in einer technischen Aluminiumlegierung bei 535 °C mit 30 Prozent Restschmelze (nicht dargestellt), fcc-Aluminium (grau), Magnesiumsilizid (rot), Silizium (blau). Kantenlänge 150 µm³. (B) Separate Darstellung der Magnesiumsilizid- und der Silizium-Phasen. Morphologie und Verteilung der Phasen beeinflussen die mechanischen Eigenschaften des Werkstoffs.

Industrielle Anforderungen an Werkstoffsimulation

Industrielle Anwender sind daran interessiert, neue Materialien und Produktionsprozesse für innovative Bauteile und Systeme mit maßgeschneiderter Leistung zu entwickeln sowie Lösungen für Probleme in bestehenden Produktionsprozessen zu erhalten. Ihr Produkt soll so effizient wie möglich gestaltet und hergestellt werden. Die Notwendigkeit, Materialien detaillierter und mit höherer Auflösung zu beschreiben und entlang ihres gesamten Lebenszyklus zu simulieren, ist aus der industriellen Anwenderperspektive eindeutig formuliert. Obwohl die Vorteile moderner Materialsimulationen weitgehend erkannt sind, ist die Anwendung des ICME-Ansatzes in industriellen Umgebungen immer noch eine Herausforderung. Eine spezielle Anforderung ist die modular konfigurierbare Kombination verschiedener Tools unterschiedlicher Anbieter anstelle monolithischer Lösungen:

Folgerung 1

Günstige, schnelle, leicht verfügbare, zuverlässige und insbesondere modular konfigurierbare Lösungen werden benötigt, um komplexe Themen von technischem Interesse anzugehen. Typische Anwender im Bereich metallischer Werkstoffe sind die Luft- und Raumfahrtindustrie, die Stahlindustrie, die Energieversorger, die Automobilindustrie und die Elektronikindustrie. Jede technische Legierung umfasst im Allgemeinen eine große Anzahl von Legierungselementen, von denen jedes in einer genau definierten Menge hinzugefügt wird, um eine spezifische Funktionalität zu erfüllen, siehe Bild 3. Selbst kleinste Änderungen in der chemischen Zusammensetzung und/oder in den Herstellungsparametern können zu drastischen Änderungen des Bauteilverhaltens führen. Die genaue Ermittlung geeigneter und vorteilhafter Mengen an einzelnen Legierungselementen ist somit eine langwierige, zeit- und kostenintensive Aufgabe. Die Ent-

wicklung und Qualifizierung neuer Materialien dauerte aus diesem Grund bisher Jahre bis Jahrzehnte. Diese Entwicklungszyklen werden durch aktuelle Ansätze bereits drastisch verkürzt:

Folgerung 2

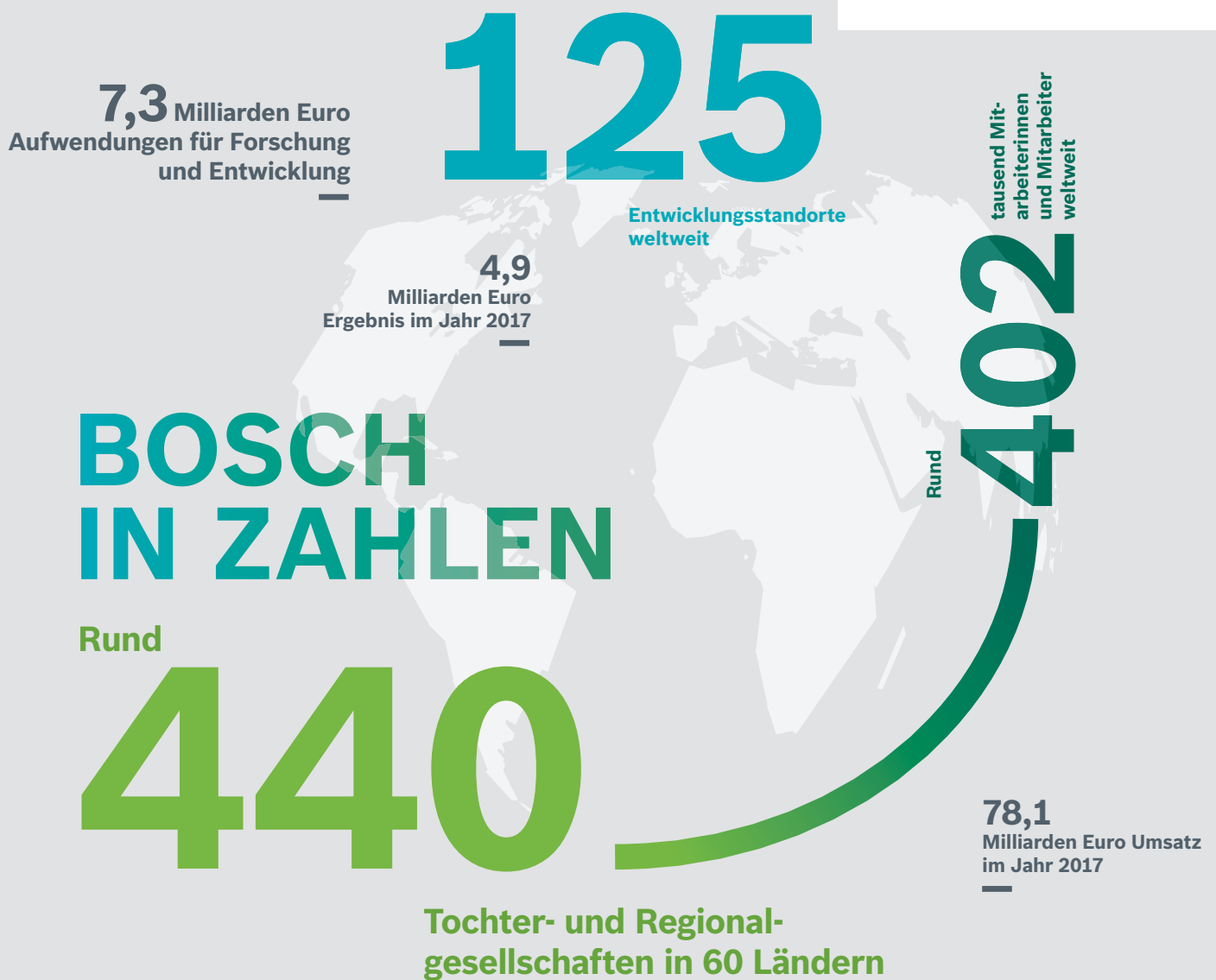
Modelle und Simulationswerkzeuge werden benötigt zur Beschreibung der Herstellung und Eigenschaften komplexer, mehrkomponentiger und mehrphasiger Materialien. Es geht jedoch nicht nur um die Legierungszusammensetzung. Die Verarbeitungshistorie spielt eine entscheidende Rolle beim Erreichen der gewünschten Eigenschaften. Während der Produktion durchläuft das Material verschiedene Prozessschritte wie Gießen und Erstarren, Warm- oder Kaltumformen, Glühen, Bearbeiten, Fügen oder Beschichten. Jeder Prozessschritt beeinflusst die Mikrostruktur, die Verteilung der Legierungselemente und damit die Eigenschaften des Materials. Auch der Herstellungsprozess selbst wird oft von den Materialeigenschaften beeinflusst:

Fe	C	Mn	Si	P	Cr	Ni
Grundmaterial, bestimmt unter anderem die Einsatztemperatur	Bearbeitbarkeit, Härte, Verschleiß, ...	Bindet Schwefel, Härte, Kaltverformbarkeit, Zerspanbarkeit, ...	Elektromagnetische Eigenschaften, Oberflächeneigenschaften, Härte ,...	Härte, Warmverformbarkeit, ...	Korrosionseigenschaften, Verschleiß, thermische Stabilität,...	Zähigkeit, Verformbarkeit, Anpassung thermischer Ausdehnungskoeffizienten,...
> 50 wt. %	0.003 – 2 wt. %	0.02 – 27 wt. %	0.01 – 6 wt. %	0.01 – 0.6 wt. %	0.01 – 13 wt. %	0.01 – 12 wt. %

Bild 3: Technische Stähle bestehen aus zahlreichen Legierungselementen mit unterschiedlicher Menge (in Gewichtsprozent wt.%) und jeweils spezifischem Beitrag zu den konkreten Eigenschaften und der Verarbeitbarkeit des Werkstoffs.

**BOSCH**

Technik fürs Leben



Lieber bewegen statt stillstehen? Willkommen bei Bosch.

Die Bosch-Gruppe gehört zu den Global Playern im Technologie- und Dienstleistungsbereich: Wir setzen pro Jahr rund 78 Milliarden Euro um – mit insgesamt über 402.000 Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern weltweit. Wo wir aktiv sind: in den vier Unternehmensbereichen Mobility Solutions, Industrial Technology, Consumer Goods sowie Energy and Building Technology. Wie wir agieren: mit rund 440 Tochter- und Regionalgesellschaften in rund 60 Ländern. Was uns antreibt: Lösungen für das vernetzte Leben zu entwickeln und so weltweit die Lebensqualität der Menschen zu verbessern – mit innovativen und begeisternden Produkten und Dienstleistungen. Was Sie bei Bosch erwartet: die Möglichkeit, wirklich Großes zu bewegen und gemeinsam mit uns aktiv die Zukunft zu gestalten. Als Teil eines Teams, das mit sinnstiftenden Produkten neue Impulse setzt.

Starten auch Sie etwas Großes.

Für mehr Informationen zu Ihren
Karrieremöglichkeiten bei Bosch:

www.bosch-career.de

Let's be remarkable.



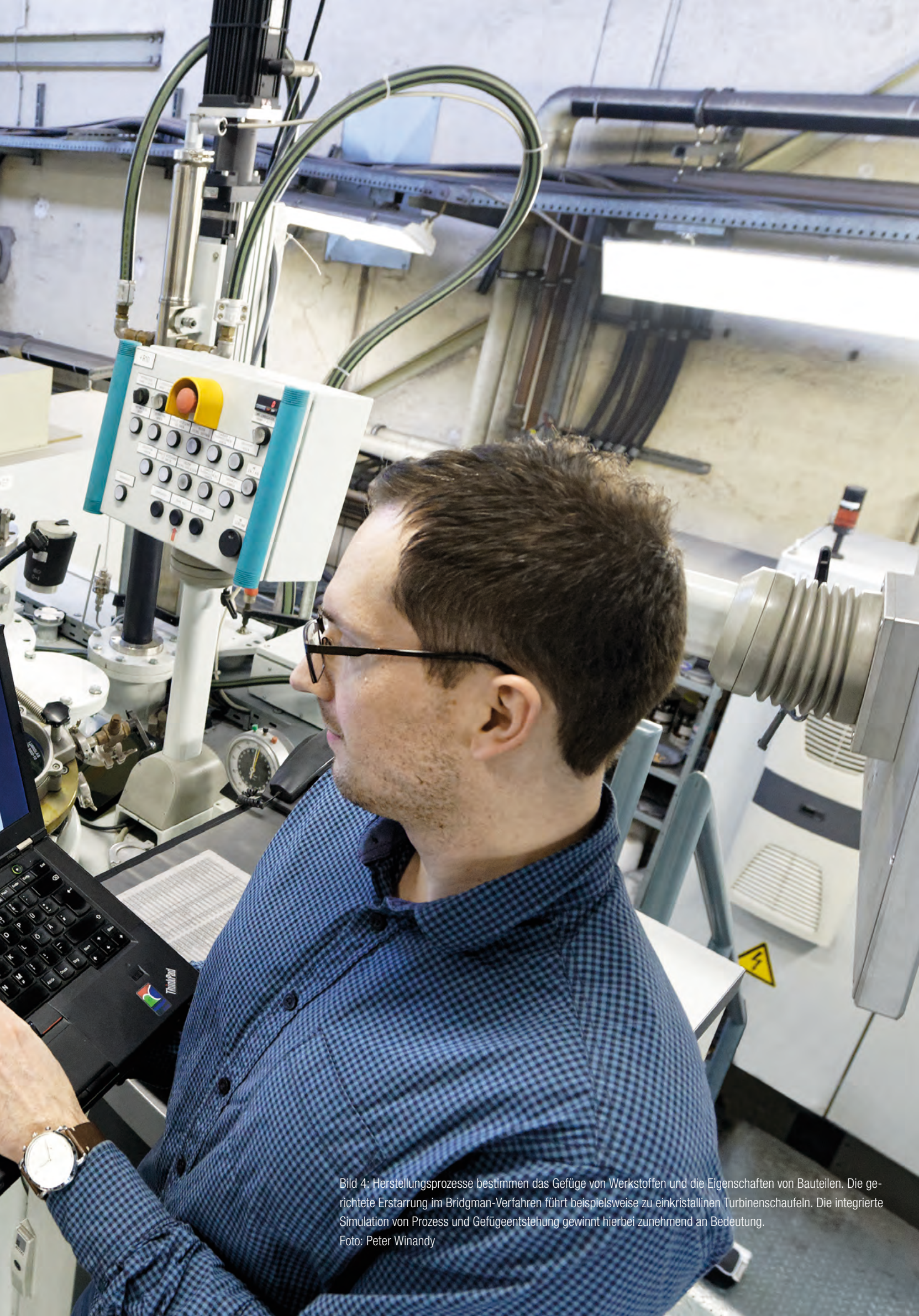


Bild 4: Herstellungsprozesse bestimmen das Gefüge von Werkstoffen und die Eigenschaften von Bauteilen. Die ge-
richtete Erstarrung im Bridgman-Verfahren führt beispielsweise zu einkristallinen Turbinenschaufeln. Die integrierte
Simulation von Prozess und Gefügeentstehung gewinnt hierbei zunehmend an Bedeutung.
Foto: Peter Winandy

Folgerung 3

Modelle werden benötigt, die die Entwicklung von Materialien und Komponenten während ihres gesamten Produktions- und Servicelebenszyklus beschreiben und vorhersagen können.

Schließlich müssen die Simulationsergebnisse anhand von Messungen und vorhandenen Daten validiert werden. Diese Validierung beinhaltet Informationen über die Qualität der berechneten Ergebnisse einschließlich der zu erwartenden Unsicherheiten aufgrund der Verwendung nicht genauer Eingabeparameter und/oder aufgrund der Grenzen der Modelle:

Folgerung 4

Es ist eine Validierung erforderlich, die einen verbesserten Informationsaustausch zwischen der Simulation und dem Experiment erfordert.

Die Verbesserung des Wissens über Prozesse und Materialien ist jedoch nicht das Endziel eines industriellen ICME-Anwenders. Simulationen sollen den industriellen Anwendern bei seinen unternehmerischen Entscheidungen und bei der Optimierung seiner Produkte unterstützen:

Folgerung 5

Eine Multi-Kriterien-Optimierung des Simulationsszenarios einschließlich wirtschaftlicher Aspekte ist erforderlich, um die gesamte Wertschöpfung zu optimieren.

Integrated Computational Materials Engineering

Integrated Computational Materials Engineering, kurz ICME, bietet einen ganzheitlichen Simulationsansatz, der Prozessketten für technische Bauteile betrachtet. ICME adressiert dabei neben dem Bauteil und seinem Herstellungsprozess insbesondere auch die lokalen Materialeigenschaften innerhalb des Bauteils im mikroskopischen Maßstab^[5]. Nicht nur der aktuelle Materialzustand zu einem bestimmten Zeitpunkt, sondern auch die Entwicklung lokaler Materialeigenschaften entlang des gesamten Herstellungsprozesses und schließlich sogar während der Anwendungslebensdauer sind zentrale Themen. An der RWTH Aachen begann die Geschichte von ICME bereits um 1990 mit der Beantragung des Sonderforschungsbereichs „Integrative Werkstoffmodellierung“ (SFB370) und entwickelte sich kontinuierlich im Rahmen der Exzellenzinitiative sowie vieler nationaler und internationaler Projekte weiter, siehe Bild 5. Die Kombination von Modellen erfordert derzeit noch einen erheblichen manuellen Aufwand für die Datenkonvertierung an den Schnittstellen zwischen verschiedenen Softwaretools. Eine „Plug & Play“-Architektur zur Kombination verschiedener Tools in Workflows auf offenen Simulationsplattformen ist daher die Schlüsselvision für zukünftiges ICME, die an der RWTH mit der „Aachen („Aix“) Virtual Platform for Materials Processing“

(AixViPMaP[®]) realisiert wird. Mit AixViPMaP[®] baut das ICMEaix eine Infrastruktur auf, die Rechnerleistung und Simulationssoftware für Forschung, Lehre, Entwicklung und auch als Dienstleistungsangebot der RWTH-Institute bereitstellt.

Das ICMEaix^[9] ist die Dachstruktur für die Modellierungs- und Simulationsaktivitäten im Bereich der Strukturwerkstoffe und kooperiert mit Forschungszentren in der Region. Ziele sind die Bündelung der Simulationsaktivitäten der einzelnen Lehrstühle, die strukturelle Vernetzung aller Beteiligten und die Bearbeitung wissenschaftlicher Projekte und technischer Fragestellungen, die über die Einzelexpertise der beteiligten Akteure hinaus gehen.

Ein Blick in die Zukunft

Alle Softwaretools und Laborgeräte im ICME-Bereich haben einen gemeinsamen Kommunikationsstandard, ähnlich dem heutigen JPG-Format für Bilder. 3D- und 4D-Simulationsergebnisse mit höchster räumlicher Auflösung können leicht ausgetauscht werden. Metadaten sammeln alle Informationen über Ursprung, Präzision, Validierung und viele andere Aspekte der Daten, welche in der Cloud oder auf leistungsstarken lokalen Exabyte¹-Geräten gespeichert werden. Die 2018 über Wochen laufenden Simulationen benötigen nur Stunden oder gar Minuten/ Sekunden. Modelle werden zur Verfügung



Bild 5: Entwicklung der Werkstoffsimulation an der RWTH Aachen vom Sonderforschungsbereich „Integrative Werkstoffmodellierung“ (SFB370)^[6] über die beiden Förderperioden der Exzellenzinitiative „Integrative Produktionstechnik für Hochlohnländer“^{[7],[2]} hin zur aktuellen Entwicklung der AixViPMaP[®][8].



Bild 6: Der „Digitale Werkstoff-Zwilling“ ermöglicht den Blick in das Bauteil entlang seines Lebenszyklus von der Herstellung bis zur Anwendung. Schnellere und vereinfachte Modelle, sogenannte „Digitale Schatten“, ermöglichen zukünftig die Steuerung optimierter Produktionsprozesse.

Foto: Peter Winandy

stehen, um alle bekannten Phänomene, die die Eigenschaften eines Materials beeinflussen, gleichzeitig zu beschreiben. Schnelle, validierte Modelle unterstützen bei Geschäftsentscheidungen.

Die Vorhersage von Materialien und Bauteileigenschaften wird über den gesamten Produktions- und Lebensdauerzyklus hinweg möglich sein und das Design neuer Werkstoffe und Bauteile im Wesentlichen auf Simulationen basieren. Werkstoffe werden für eine gewünschte Funktionalität und Leistung optimiert, wobei sich Einschränkungen aufgrund ihrer Herstellungsprozesse überwinden lassen. Beispielsweise sind der ökologische Fußabdruck und wirtschaftlicher Erfolg konkurrierende und zu optimierende Zielgrößen. Werkstoffsimulationen werden die Grenzen zwischen anorganischen, organischen und

biologischen Materialien überbrücken und sogar menschliches Gewebe umfassen. Die Morphogenese² in komplexen biologischen Systemen kann durch Simulationen beschrieben werden. Sicherlich dauert dies noch 20 bis 25 Jahre.

Der vorliegende Artikel basiert auf Arbeiten des von der Europäischen Kommission geförderten European Materials Modelling Council (EMMC; Grant #: H2020-NMBP-CSA-2016 NMBP-24-206), des europäischen Vorhabens „MarketPlace“ (Grant #: H2020-NMBP-25-2017 760173) sowie auf Aktivitäten im Rahmen des Exzellenzclusters „Integrative Produktionstechnik für Hochlohnländer“ und des ICMEaix, die beide durch Mittel der Exzellenzinitiative des Bundes und der Länder gefördert wurden.

Literatur

- [1] Lukas, H. L., Fries, S.G., Sundman, B., Computational Thermodynamics - The Calphad Method. Cambridge University Press, 2007.
- [2] Schmitz, G. J., Prahl U. (eds), Handbook of Software Solutions for ICME, Wiley VCH, Weinheim, 2016.
- [3] Provatas, N., Elder, K., Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering, Wiley-VCH 2010, Weinheim, Germany.
- [4] Schmitz, G. J., Böttger, B., Eiken, J., Apel, M., Viardin, A., Carré, A., Laschet, G., Phase-field based simulation of microstructure evolution in technical alloy grades, Int J Adv Eng Sci Appl Math 2 4 (2010) 126 DOI 10.1007/s12572-011-0026-y Springer 2010.
- [5] National Research Council, Integrated Computational Materials Engineering, A Transformational Discipline for Improved Competitiveness and National Security, National Academic Press, Washington, D. C. 2008.
- [6] Gottstein, G. (ed), Integral Materials modelling, Wiley-VCH, Weinheim 2007.
- [7] Schmitz, G. J., Prahl, U. (eds), Integrative Computational Materials Engineering- Concepts and applications of a modular simulation platform Wiley VCH, Weinheim, 2012.
- [8] www.aixvipmap.de
- [9] www.icme.rwth-aachen.de

Autor

Dr. rer. nat. Georg J. Schmitz ist wissenschaftlicher Mitarbeiter bei ACCESS e.V., einem An-Institut der RWTH Aachen.

¹Einheit für sehr große Speicherkapazitäten; 10¹⁸ Byte

²Bezeichnung für die Gestalt- und Formbildung im Bereich lebender Strukturen wie Pflanzen, Tiere, Viren etc.