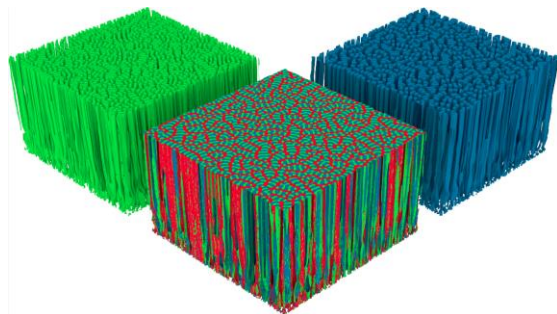


Forschungsschwerpunkte – Professor Britta Nestler

Die Forschungsschwerpunkte von Britta Nestler am Institut für Angewandte Materialien des Karlsruher Instituts für Technologie und in Doppelfunktion am Institute of Materials and Processes der Hochschule Karlsruhe liegen im Bereich der computergestützten Materialforschung mit der speziellen Ausrichtung der Mikrostruktursimulation. Die Kernkompetenzen liegen in der Formulierung von Phasenfeldmodellen für die Beschreibung von Mikrostrukturausbildungen und Phasenumwandlungen in mehrkomponentigen und mehrphasigen Materialien und in der Umsetzung hochperformanter paralleler Simulationssoftware zur Berechnung von Mikrostrukturen mit hoher Detailauflösung in großskaligen 3-D-Gebieten unter Einsatz aktueller Höchstleistungsrechner.

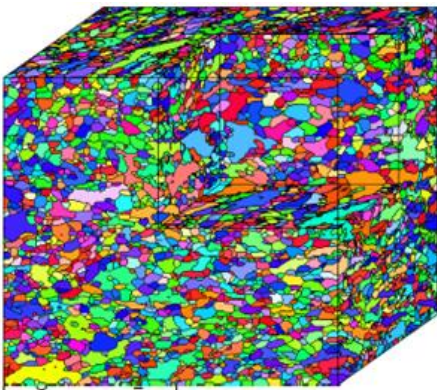
Besondere Herausforderungen bei der Entwicklung dieser neuen Materialmodelle sind die Einbindung multiphysikalischer Felder und der Transfer von Informationen über Multiskalen. Die Berücksichtigung verschiedener physikalischer Einflüsse erfolgt über die Formulierung gekoppelter Energie- oder Entropiefunktionale und über die anschließende numerische Lösung der daraus abgeleiteten gekoppelten partiellen Differenzialgleichungssysteme. In Simulationen wird die Entwicklung dreidimensionaler Mikrostrukturen als digitale Zwillinge der Realität berechnet und der multiphysikalische Einfluss von Wärme- und Stofftransport, Strömung in den Fluidphasen, Mechanik (Elastoplastizität), Magnetismus und Elektrochemie. Für die Multiskalensimulation stellt die Werkstoffsimulation die Querschnittstechnologie zwischen atomistischen und makroskopischen Berechnungsverfahren dar. In statistisch repräsentativen Volumina werden Materialgrößen und Eigenschaften auf der jeweils feineren Skala simuliert, homogenisiert und effektive Parameter bzw. Parametertensoren hergeleitet, die in die Berechnungen auf der nächst größeren Skala als Eingabegrößen einfließen.



High-Performance-Phasenfeldsimulation der Erstarrung eines dreiphasigen ternären Eutektikums

Die konsequente Implementierung der Materialmodelle durch parallele, effiziente und skalierbare Algorithmen hat in den vergangenen fünf Jahren durch Einsatz der deutschlandweit

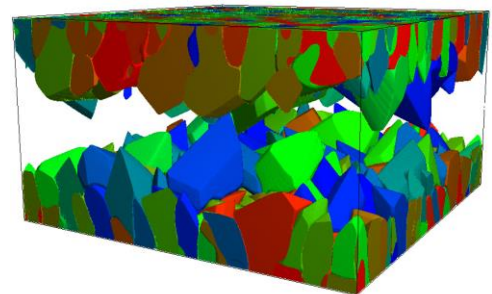
größten Höchstleistungsrechner in München und Stuttgart zu wegweisenden Ergebnissen bei extrem skaligen Simulationen von 3-D-Mikrostrukturen mit der Phasenfeldmethode geführt. *High Performance Materials Computing* liefert Daten über Mikrostrukturcharakteristika in Ensembleausschnitten, die quantitative, automatisierte Datenanalysen im Vergleich mit experimentellen 3-D-Synchrotonaufnahmen ermöglichen. Auf Basis dieser Daten können belastbare Wirkzusammenhänge zwischen Mikrostruktur- und Materialeigenschaften und Morphologiediagramme hergeleitet werden.



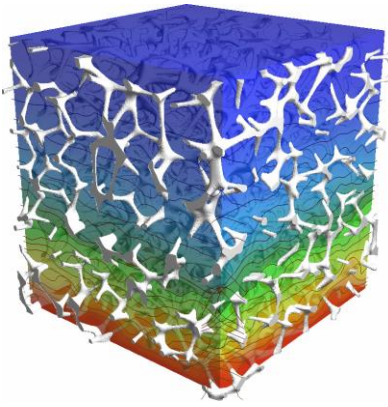
Simulation der Kornvergrößerung

In der Methoden- und Skalenkopplung liegt eine der Zielsetzungen der Forschungsarbeiten im Bereich der Zukunftstechnologie *ICME – Integrated Computational Materials Engineering*. Durch Programmierschnittstellen werden Funktionen aus thermodynamischer Materialmodellierung (CALPHAD-Datensätzen) effizient aufbereitet und in die Phasenfeldmodellierung integriert. Mit den neuen Methoden wurden Gefügesimulationen in zahlreichen Materialien wie Nickel-, Aluminium-, Eisen-Legierungen, Hochtemperaturstählen, metallischen Glasbildnern, keramischen Werkstoffen, geologischen, biomimetischen Systemen und Hochtemperatursupraleitern eingesetzt. Weitreichendes Potenzial besteht in der Behandlung von polykristallinen Korngefügen wie in der Herleitung von Kornwachstumsgesetzen, Korngrenzendiffusion, Größen- und Formverteilungen. Durch Anwendung der materialwissenschaftlichen Modellierungsmethoden auf geologische Gesteinsklüfte konnte erstmalig ein Verständnis über die Mechanismen der 3-D-Kornstrukturausbildung und Rissversiegelung in Gesteinen gewonnen werden. In diesem Bereich liefern die Mikrostruktursimulationen Einblicke in Zeitabläufe der erdgeschichtlichen Vergangenheit und geben eine Vorhersage der Durchströmungseigenschaften bei einer sich ändernden Apertur.

Zelluläre Strukturen wie Schäume und poröse Membranen haben in einer Vielzahl von Anwendungen zunehmend an Bedeutung gewonnen. Mit den Fortschritten in der diffusen Grenzflächenmodellierung konnten Porenstrukturen von mit Phasenwechselmaterialien gefüllten Metallschäumen am Computer designed werden, die optimierte Wärmetransporteigen-



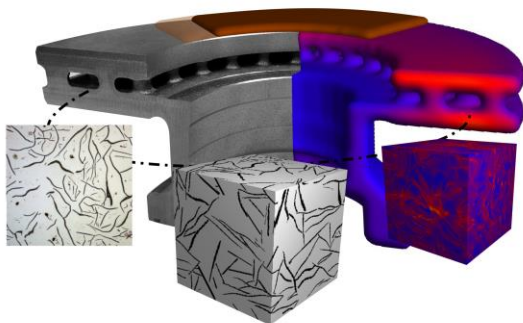
Polykristalline Kornstrukturausbildung in einer Gesteinsklüfte



Temperaturverteilung in einem von der Bodenplatte erwärmten Metallschaum

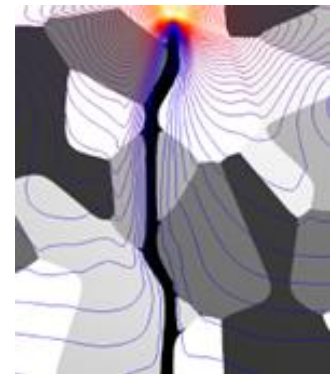
Strömung auf diffusive Vorgänge, auf die Strukturbildungsmechanismen und Wachstumsmorphologien untersucht. Weiterhin wurden die Verfahren zur Charakterisierung der Wechselwirkung von Partikeln untereinander und mit anderen Grenzflächen sowie zur Analyse des Auftretens von Partikel-Agglomerationen eingesetzt.

Um die Auswirkung von Druck- und Zugspannungen auf Mikrostrukturen in Belastungs- und Festigkeitsversuchen und rheologische Prozesse beschreiben zu können, wurde die Phasenfeldmodellierung um elasto-plastische Modelle für kleine und große Deformationen erweitert. Es wurde die Rissbildung in mehrphasigen polykristallinen Materialien unter Berücksichtigung phasen- und ortsabhängiger sowie anisotroper Risswiderstände sowie diffusiver Vorgänge berechnet. Aktuelle Arbeiten behandeln gekoppelt thermo- und chemo-mechanische Vorgänge in faserverstärkten Kom-



Multiskalensimulation der thermo-mechanischen Beanspruchung in einer Bremsscheibe

positen, in Lithium-Ionen und Brennstoffzellen.



Riss- und Spannungsausbreitung in einer Kornstruktur

Beim Transfer der wissenschaftlichen Methoden in die Praxis werden thermo-mechanische Simulationen auf der Meso- und Makroskala genutzt, um die mikrostrukturellen Eigenschaften des Grundwerkstoffs Gusseisen in Brems-scheiben zu verbessern und damit die Le-

bensdauer der Bremsscheiben zu erhöhen. Die zukünftige Forschung am Institut wird das 3-D-Material- und Strukturdesign, die Multiskalen- und Multiphysikmodellierung und die Visionen der Zukunftstechnologie ICME ausbauen.