

Numerische Simulationen: Entwicklung und Optimierung von neuen Materialien und Technologien am Computer

D.V. Berkov

General Numerics Research Lab e.V., Jena

www.general-numerics-rl.de

Do you think it is expensive to hire a professional?
Wait till you hire an amateur!

Paul Neal "Red" Adair, an American oil well firefighter



Vorteile und Nutzen von numerischen Simulationen

Simulationen bieten tiefe Einsichte in:

- Eigenschaften und Verhalten der Werksoffe
- Kommerzielle Fertigungsprozesse
- physikalische Prozesse in Materialien und Geräten

Simulationen ergänzen Experimente:

- durch gezielte Planung, wobei zeit- und kosteneintensive Versuche erparst werden
- Kosten für die Testausrüstung werden minimiert
- Interpretation wird erleichtert bzw. nur durch die Simulationen ermöglicht

Theorie



Praxis

Simulationen helfen bei dem Design von Prototypen:

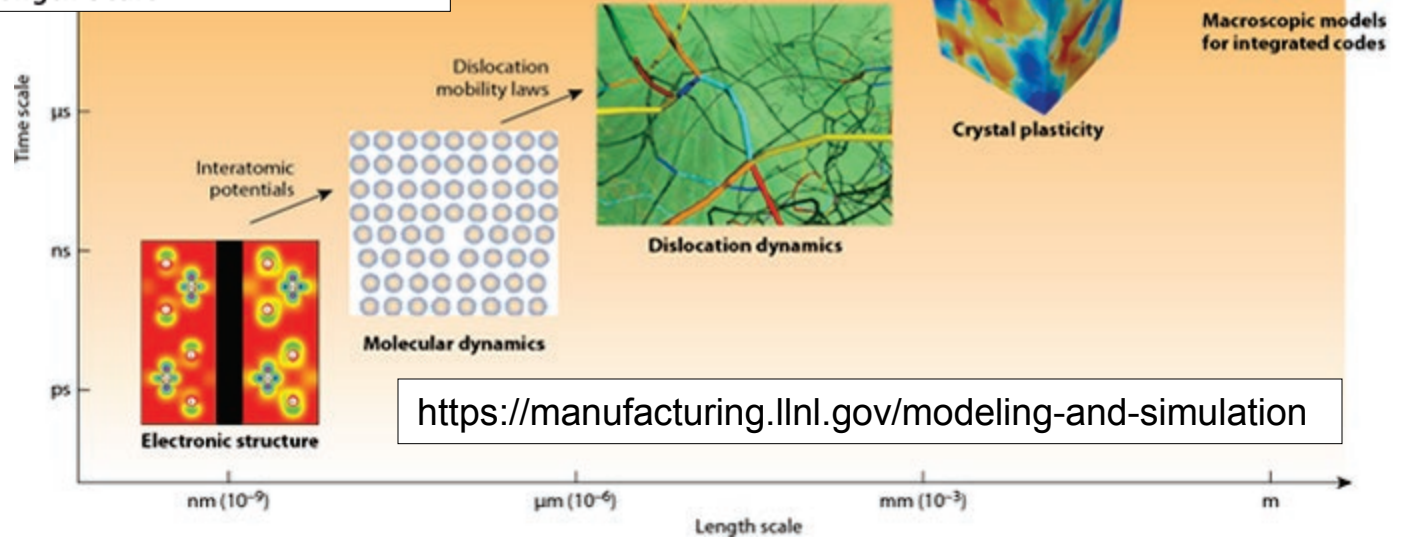
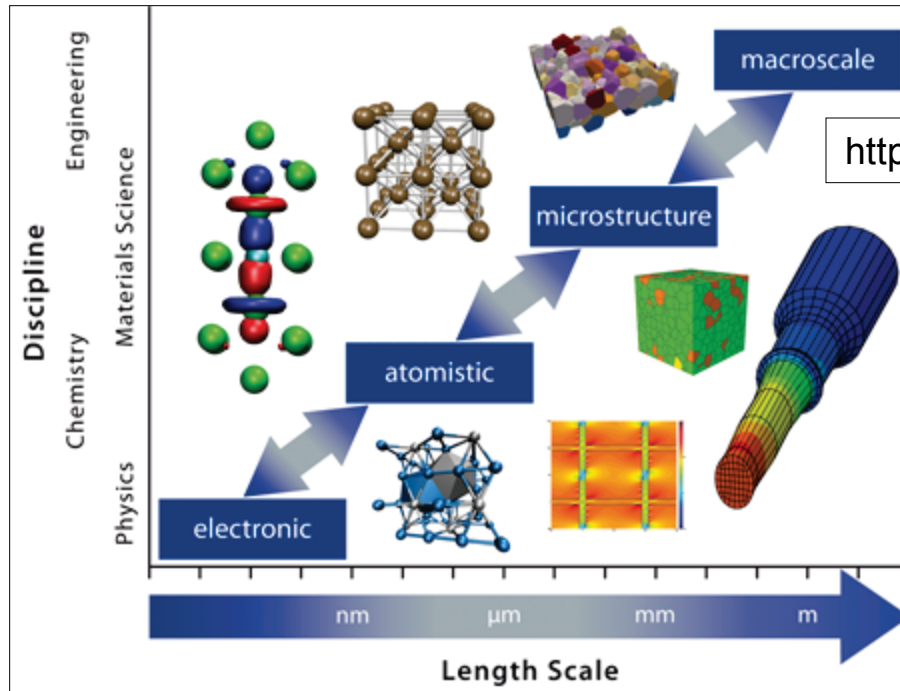
- Testen von möglichen Design
- Vorhersage der Eigenschaften und Leistungsföhigekiet der Enderzeugnisse
- Berechnung, ob ein Gerät funktionieren wird, ohne es bauen zu müssen
- Optimierung der Produktionsprozessev

Simulationen verkürzen die Entwicklungszeit:

- verkürzen die Anlaufphase
- entdecken mögliche Engpässe
- verkürzen die Zeitspanne bis zur Marktreife



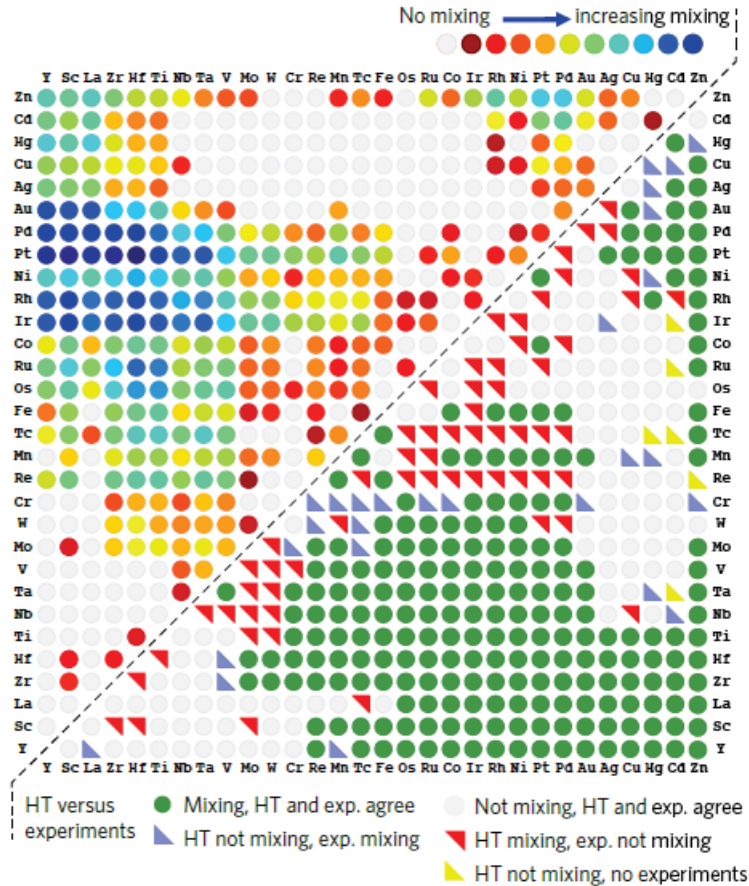
Zauberbegriff (Trend) 1: Multiscaling





Zauberbegriff 2: High-throughput computing (intelligent material design)

Beispiel 1: „Binäre“ Legierungen



High-throughput analysis for binary intermetallic alloys

Beispiel 2: Umweltfreundlichkeit von Li-Batterien

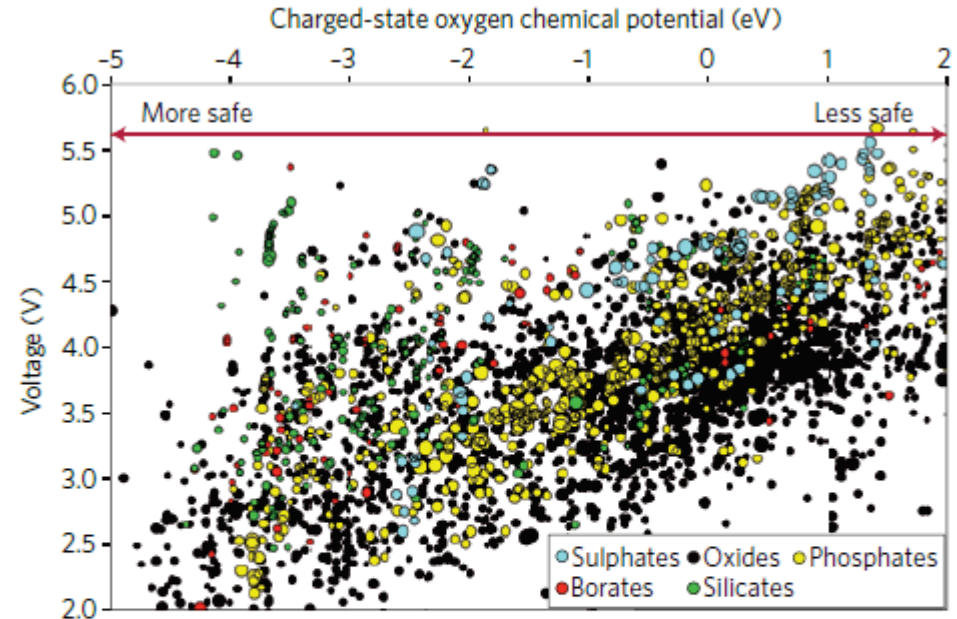


Figure 6 | High-throughput study of safety versus voltage in lithium batteries. Shown are the oxygen chemical potentials at which the charged state decomposes versus their Li intercalation voltage. The more negative the chemical potential, the higher the material resilience to a reducing environment (safety). Figure adapted with permission from ref. 28, © 2010 Cambridge Univ. Press.

From: S.Curtarolo et al., The high-throughput highway to computational materials design



Vorschlag für die Einrichtung von Schwerpunkten für die zukünftige Werkstoffentwicklung in Thüringen

Thüringer Netzwerk „Computersimulationen für die Werkstoffentwicklung“

Aufgabe 1: Optimierung der schon existierenden Technologien

- **Ermittlung des Bedarfs** bei Thüringer Firmen für die Optimierung von schon existierenden Hochtechnologien und/oder Erzeugnissen
- **Bestimmung der Möglichkeiten** für die entsprechende Optimierung mittels numerischen Simulationen
- **Aussuchen einer Forschungseinrichtung** mit der Kompetenz in Simulationen auf diesem Gebiet
- **Hilfe** bei der Projektbeantragung bzw. bei der Auftragserteilung seitens der interessierten Firma

Industrie  Forschungseinrichtungen



Vorschlag für die Einrichtung von Schwerpunkten für die zukünftige Werkstoffentwicklung in Thüringen

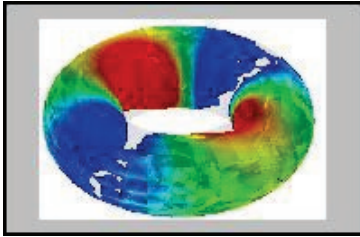
Thüringer Netzwerk „Computersimulationen für die Werkstoffentwicklung“

Aufgabe 2: Computerbasierte Entwicklung von neuen Werkstoffen und Technologien (Intelligent Material Design)

- Ermittlung der Möglichkeiten und Kompetenzen von Thüringer Forschungseinrichtungen (FE) bezüglich der Modellierung von neuen Werkstoffen
- Bestimmung des Bedarfs von regionalen und überregionalen Wirtschaft an den entsprechenden Werkstoffen und/oder Produkten
- Bestimmung der notwendigen Mittel für die Forschung (FE) und Implementation der Forschungsergebnisse durch die interessierte Firmen
- Hilfe bei der Projektbeantragung in Kooperation von FE und interessierten Firmen

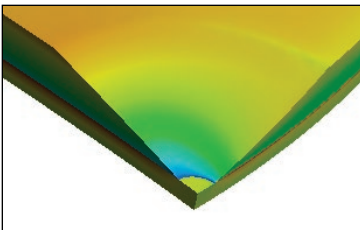
Forschungseinrichtungen  **Industrie**

Unser Beitrag (Kompetenzen in angewandten Lösungen):



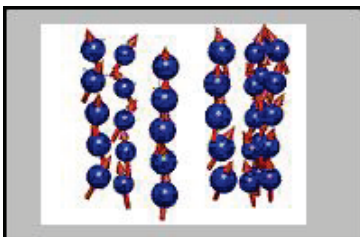
Makroskopische Simulationen von elektrischen Strömen und Magnetfeldern

- Berechnung von Stromverteilung in leitenden Körpern
- Simulation von Magnetfeldern generiert bei Stromkreisen und Permanentmagneten



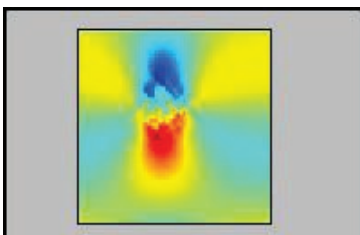
Makroskopische Simulationen von elastischen Spannungen

- Berechnung von elastischen Spannungen in komplizierten Systemen aufgrund der äußeren Kräfte
- Ermittlung von elastischen Spannungen aufgrund von thermischen Gradienten



Simulationen von kolloidalen Lösungen und Ferrofluiden

- Diffusion von kolloidalen Teilchen unter Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen den Teilchen (kollektive Diffusion)
- Magnetisierungskurven von Ferrofluiden
- Aggregationsprozesse in kolloidalen Lösungen und Ferrofluiden
- Verhalten von kolloidalen Lösungen und Ferrofluiden in Wechselfeldern



Mesoskopische Simulationen von Defekten in Kristallen

- Diffusion der Punktdefektendefekte in Polykristallen
- Berechnung von versetzungsinduzierten Spannungen
- Versetzungsdynamik