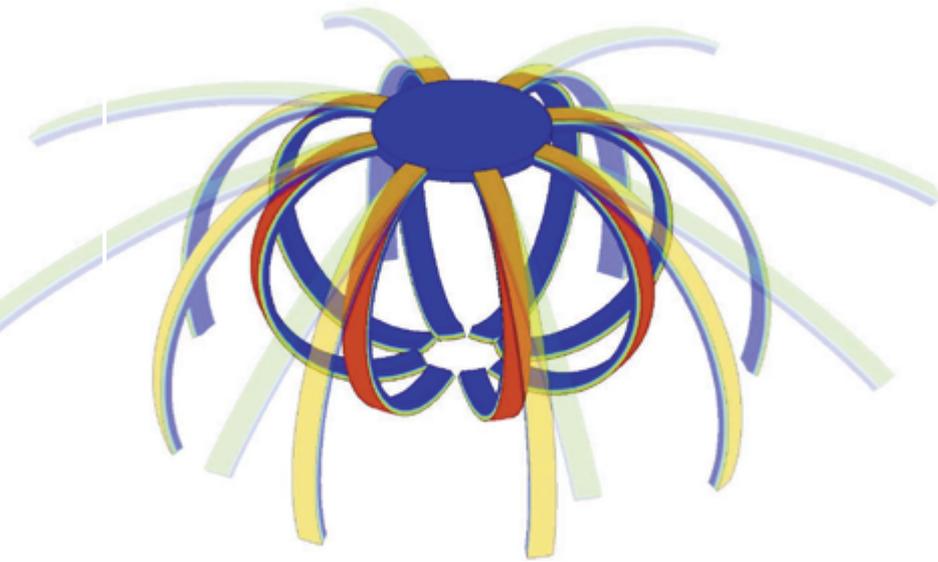


# Computergestütztes Design komplexer Materialsysteme



Unter den Errungenschaften des technischen Fortschritts in den letzten Jahrzehnten lassen sich zahlreiche Entwicklungen und Konzepte erkennen, die mit der Entwicklung neuartiger Materialien eng verwoben sind. Keramiken, Polymere, Legierungen sowie biokompatible und hybride Materialien haben in einem breiten Spektrum wissenschaftlicher Disziplinen Einzug gehalten und Innovationen vorangetrieben, wie z. B. in medizinischen oder informationstechnologischen Anwendungen. Die

systematische, computergestützte Entwicklung hoch komplexer Materialien und intelligenter Werkstoffsysteme wird – motiviert durch Herausforderungen wie Nachhaltigkeit, Energieeffizienz, Robustheit oder Kostenreduktion – eine Schlüsselrolle in Forschung und Entwicklung der nächsten Dekaden spielen.

## 1. Computergestütztes Design neuartiger Materialien

Viele wegweisende Fortschritte der Materialwissenschaften sind durch Ausprobieren oder glückliche Zufälle erzielt worden. Wenn auch die Trial-and-Error Methodik aus der Wissenschaft nicht wegzudenken ist, begrenzen diese empirischen Ansätze die Vielfalt möglicher neuer Materialien auf die Auswahl an Werkstoffen, deren Eigenschaften und Verhalten a priori bekannt sind oder zumindest abgeschätzt werden können. Eine der größten interdisziplinären wissenschaftlichen Herausforderungen des 21. Jahrhunderts stellt

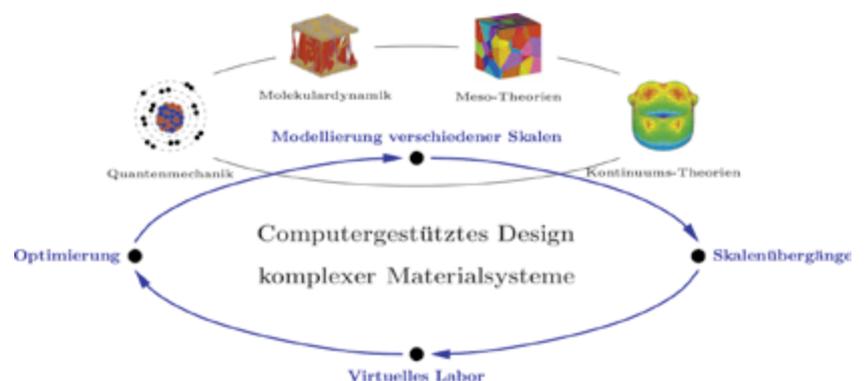
daher die Erforschung des immensen Potenzials noch unbekannter Materialsysteme dar. Das gezielte, computergestützte Design neuer Materialien sowie deren Optimierung hinsichtlich Funktionalität und Beständigkeit sind also entscheidende Faktoren auf dem Weg zu maßgeschneiderten und nachhaltigen Werkstoffsystemen. Um der Vielfalt theoretisch möglicher Materialien mit erforderlichen Eigenschaften sowie deren Konfigurationen, Zusammensetzungen und Verhalten unter verschiedenster Belastung Herr zu werden, ist die computergestützte Simulationstechnologie unverzichtbar und nimmt eine zentrale Rolle ein.

Eine Klasse an Materialien, die in diesem Kontext als Prototyp herangezogen werden kann, sind multifunktionale Materialien oder intelligente Werkstoffsysteme. Getreu dem Motto „Das Ganze ist mehr als die Summe seiner Teile“ weisen multifunktionale Materialien häufig integrierte elektrische, magnetische, optische oder Energie erzeugende Funktionalitäten auf, die erst im Zusammenspiel innovative Einsatzmöglichkeiten eröffnen, während die einzelnen Komponenten des Systems die Anwendbarkeit einschränken. Bekannte Beispiele multifunktionaler Materialien sind Formgedächtnislegierungen, piezoelektrische und magnetostruktive Materialien, die Anwendung als Aktoren und Sensoren finden. Multifunktionale Materialsysteme wie Lithium-Ionen-Batterien sind herausragende Beispiele der Energiespeichertechnik, deren Potenzial noch bei weitem nicht ausgeschöpft ist und die in naher Zukunft Personen- und Gütertransport revolutionieren werden. Wenn die Funktionalitäten solcher Materialien systematisch simulationsgestützt entworfen und bei voller Berücksichtigung der Kopplung von Effekten optimiert werden können, eröffnet sich hier ein außergewöhnliches Potenzial. Maßgeschneiderte Systeme ebnen den Weg für kurzzeitige, fortschrittliche Innovationszyklen und wegweisende Reduktion von Gewicht, Größe, Kosten oder Energieverbrauch bei gleichzeitiger Verbesserung der Sicherheit, Effizienz und Einsatzflexibilität. Grundlage solcher Entwicklungen ist die in vollem Umfang gekoppelte Simulation funktionaler Materialien.

Mit seinem Fokus auf der interdisziplinären Weiterentwicklung neuer Methoden der Simulationstechnologie bündelt der Exzellenzcluster Simulation Technology (SimTech) Kapazitäten und Bestrebungen, um diese Herausforderungen anzunehmen und die bisher vorhandene Limitierung qualitativer Vorhersagen komplexer Materialsysteme zu durchbrechen. Forscherinnen und Forscher aus verschiedensten Feldern wie Physik, Mathematik, Materialwissenschaft, Kontinuumsmechanik und Informatik tragen spezifische interdisziplinäre Kompetenzen bei, um die Vision des computergestützten Designs innovativer Materialsysteme voran zu bringen. Dies umfasst die Kopplung folgender methodischer Komponenten (01):

#### SUMMARY

The article addresses aspects related to the SimTech vision “Towards Computational Material Design”. It provides a descriptive overview about fundamental tasks in this area of research, such as complex multi-field modeling approaches of coupled problems on different scales, the construction of scale bridging and homogenization tools for computational multi-scale models, high performance simulations of virtual test laboratories as well as ingredients of optimal material design. The aspects considered focus on continuum-physical top down descriptions, with an emphasis on high-performance functional materials. Three model problems are sketched: First, the construction of innovative continuum models for material micro-structures with size effects, induced by grain boundaries or domain walls. Next, ingredients of hybrid multi-scale and multi-field simulations are considered, with application to electro-magneto-mechanical coupling in smart materials. Finally, the design of innovative phase field models for complex fracture phenomena in coupled multi-scale and multi-field problems is addressed, applied to transport processes in lithium ion battery storage systems, ceramics and soils.

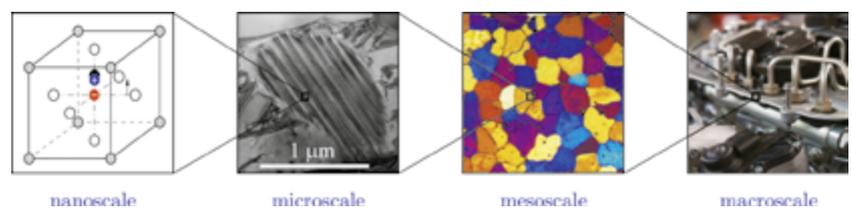


01

#### • Mehrfeldmodellierung auf unterschiedlichen Skalen:

Die *physikalischen Phänomene*, die das Gesamtverhalten von Materialien bestimmen, finden auf einem breiten Spektrum von *Zeit- und Längenskalen* statt. Das Verständnis

*Interdisziplinäre Elemente des computergestützten Designs neuartiger Materialsysteme. Die Entwicklung komplexer Mehrskalen-Mehrfeld-Simulationswerkzeuge zur prädiktiven Materialmodellbildung und gezielten Optimierung ist eine Kernvision des SimTech Clusters.*



02

solcher Mehrfeldphänomene auf den einzelnen Skalen ist daher die Grundvoraussetzung für die Mehrskalenmodellierung von komplexen Materialverhalten mit thermo-chemo-elektro-magneto-mechanischen Kopplungen. Beispiele sind die

*Hierarchische Mehrskalen-Mehrfeldprobleme. Die prädiktive Beschreibung und Optimierung einer komplexen Materialstruktur, z.B. für elektromechanisch aktive Keramiken, erfordert Ansätze zur Modellbildung, die Nano- bis Makroskalen durch modellintrinsic Skalenübergänge koppeln.*

Clusterbildung von Leerstellen, die Nukleation von Versetzungen, Phasentransformationen, die Reorientierung von Polymernetzwerken sowie das Wachstum von Rissen. SimTech erarbeitet *Simulationswerkzeuge* für die verschiedenen Zeit- und Längenskalen. Diese reichen von Methoden der Dichte-Funktional-Theorie zur Berechnung von Elektronenstrukturen über molekulardynamische Methoden für atomistische Simulationen bis hin zu Finite-Element-Methoden für makroskopische Kontinuumsprobleme.

- **Skalenübergänge und Homogenisierung:**

Um das Gesamtverhalten eines Materialsystems vorherzusagen, muss das Zusammenspiel der Phänomene auf den *unterschiedlichen Skalen* verstanden werden. Dies wird durch eine Vielzahl hochkomplexer Methoden für *Skalenübergänge* ermöglicht. Längen- und Zeitskalen werden dabei durch innovative Simulationstechniken basierend auf Konzepten der Multiskalen-Materialmodellierung gekoppelt, sogenannte *Top-Down-* und *Bottom-Up-Zugänge*. Gewöhnlich modellieren Ingenieure Materialien auf der Kontinuumskala und berücksichtigen dabei Informationen von kleineren Skalen, während Chemiker und Physiker meist den umgekehrten Zugang wählen. Indem sie gemeinsam ihre Zugänge kombinieren und Längen- und Zeitskalen überbrücken, tragen die verschiedenen SimTech-Wissenschaftler dieser traditionell getrennten Gebiete zum Ziel unserer Vision bei, komplexe Materialien computergestützt zu designen.

- **Hochleistungsrechner für virtuelle Labore:**

Mit Hilfe von gekoppelten Mehrfeld-Multiskalen-Simulationsmodellen kann nicht nur das Gesamtverhalten existierender Materialien mit bereits bekannter Mikrostruktur vorhergesagt werden. Darüber hinaus können auch *neue Materialien* mit virtueller Mikrostruktur auf atomistischer, mikroskopischer oder mesoskopischer Skala untersucht werden. Die Konstruktion solcher „virtuellen Labore“ ermöglicht *virtuelle Experimente* mit gänzlich neuen Materialien und Molekülen, deren Simulation enorme Rechenleistung erfordert. Hochleistungsfunktionsmaterialien mit bisher unbekanntem Eigenschaften können dann durch systematische Mikrostrukturmodifikationen im Rahmen von

Multiskalen- und Mehrfeldproblemen mit thermo-elektro-chemo-mechanischer Kopplung erforscht werden.

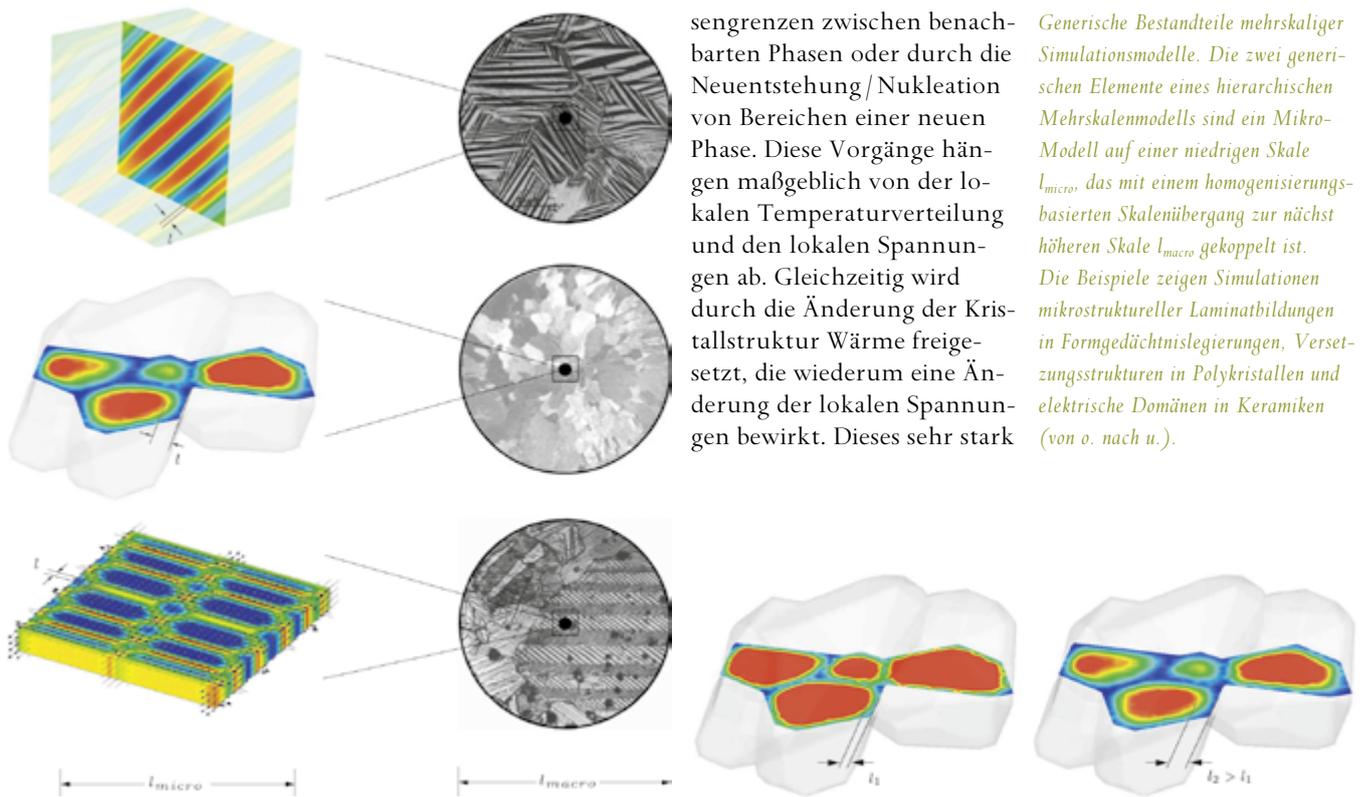
- **Optimierung und Materialdesign:**

Der letzte Schritt zur Vision des computergestützten Materialdesigns ist die *Optimierung* der Mikrostruktur von Materialien mit Blick auf gewünschte Eigenschaften und Funktionalitäten. Die Lösung dieses inversen Problems mit Hilfe virtueller Experimente und einer stetig wachsenden Datenbank erlaubt schließlich das Design neuer, „maßgeschneiderter Materialien und Moleküle“. Das Gesamtverhalten neu entwickelter hybrider Materialsysteme kann nun kontrolliert und optimiert werden.

Der Weg zum integrativen Design von Materialsystemen ist vielschichtig. Unsere Arbeitsgruppe fokussiert sich auf *kontinuumsphysikalische* Formulierungen mehrskaliger Top-Down-Modelle für Materialien im Mehrfeld-Kontext, sowie deren robuster und numerisch effizienter Implementierung. Kernkompetenzen umfassen die *makroskopische Materialtheorie* und deren numerische Durchdringung, die in hohem Maße mit Konzepten der mathematischen Analysis und Numerik gekoppelt ist. Ein übergeordneter methodischer Aspekt ist die Entwicklung *kanonischer Variationsprinzipien für Materialklassen*, die umfassende mathematische Analysen ermöglichen und einen intrinsischen Zugang zur Konstruktion numerischer Algorithmen bieten. Wir zeigen im folgenden, welche Anwendungen für einige funktionale Materialien denkbar sind, wo die physikalischen Ursprünge des Materialverhaltens liegen sowie die innovativen Aspekte der Modellbildung und Simulation, die alle auf Grundlage von Variationsprinzipien entwickelt wurden.

## 2. Komplexe Modelle für Mikrostrukturen mit Größeneffekten

Von besonderem Interesse in Hinblick auf Optimierung und Design sind Materialien, deren makroskopisches Verhalten sehr eng mit ihrer – sich möglicherweise zeitlich entwickelnden – Mikrostruktur verbunden ist. Ein faszinierendes Beispiel sind in diesem Zusammenhang Formgedächtnislegierungen wie NITINOL oder CuAlNi. Diese Materialien haben außerordentliche thermomechanische Eigenschaften und zeigen besonderes makroskopisches Ver-



sengrenzen zwischen benachbarten Phasen oder durch die Neuentstehung/Nukleation von Bereichen einer neuen Phase. Diese Vorgänge hängen maßgeblich von der lokalen Temperaturverteilung und den lokalen Spannungen ab. Gleichzeitig wird durch die Änderung der Kristallstruktur Wärme freigesetzt, die wiederum eine Änderung der lokalen Spannungen bewirkt. Dieses sehr stark

Generische Bestandteile mehrskaliger Simulationsmodelle. Die zwei generischen Elemente eines hierarchischen Mehrskaligen Modells sind ein Mikro-Modell auf einer niedrigen Skala  $l_{\text{micro}}$ , das mit einem homogenisierungs-basierten Skalenübergang zur nächst höheren Skala  $l_{\text{macro}}$  gekoppelt ist. Die Beispiele zeigen Simulationen mikrostruktureller Laminatbildungen in Formgedächtnislegierungen, Versetzungsstrukturen in Polykristallen und elektrische Domänen in Keramiken (von o. nach u.).

03

04

halten wie Superelastizität oder den Formgedächtniseffekt, die ihre Bezeichnung als „intelligent“ oder „funktionale“ Materialien rechtfertigen. Aufgrund ihres Verhaltens finden sie unter anderem Anwendung im Bereich der Aktuatorik oder im biomedizinischen Bereich, z.B. für Stents.

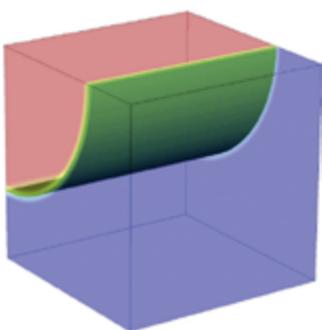
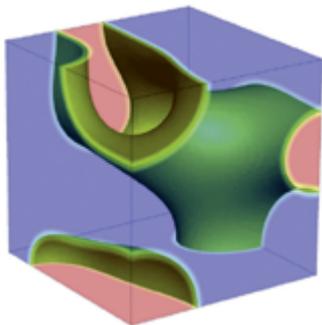
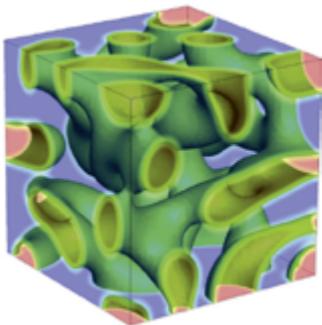
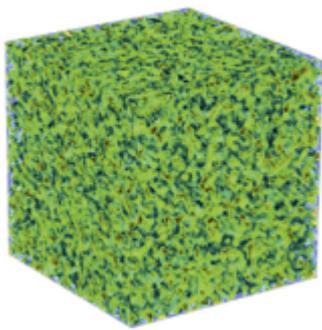
Um das ungewöhnliche Verhalten von Formgedächtnislegierungen zu verstehen, muss man ihre Kristallstruktur betrachten: Je nach Temperatur bilden unbelastete Einkristalle entweder Austenit (bei höheren Temperaturen und mit höherer Symmetrie) oder Varianten von Martensit (bei niedrigeren Temperaturen und mit niedrigerer Symmetrie). Abhängig von der thermischen und mechanischen Belastung bilden sich charakteristische Mikrostrukturen wie Laminare oder geschachtelte Laminare. Polykristalline Formgedächtnislegierungen können damit aus vielen unterschiedlich orientierten Kristallkörnern mit einer Vielfalt an komplexen Mikrostrukturen bestehen.

Wenn Formgedächtnismaterialien einer thermischen und/oder mechanischen Belastung ausgesetzt werden, führt dies zu lokalen Änderungen der Kristallstruktur, entweder durch die Bewegung von Pha-

gekoppelte Verhalten aus mechanischer Verformung, Wärmeleitung und Phasenumwandlung ist verantwortlich für das „intelligente“ Verhalten auf der Makroebene. Es überrascht nicht, dass das Verständnis, die Modellierung und die Simulation dieses diffizilen Verhaltens seit geraumer Zeit ein sehr aktives Forschungsgebiet in der Mathematik, der Materialwissenschaft, der Physik und der Kontinuumsmechanik ist. Dies hat zur Entwicklung einer Vielzahl von Modellen für ganz unterschiedliche Aspekte des Materialverhaltens geführt, die grob in „einskalige“ und „mehrskalige“ Ansätze eingeteilt werden können, je nachdem, ob sie das Materialverhalten nur auf einer Skala betrachten, oder verschiedene Skalen verbinden.

Ein Beispiel für einen einskaligen Ansatz sind molekulardynamische Modelle, die die Bewegung der einzelnen Atome vorausbestimmen, und damit die Vorhersage von mechanischem Verhalten, thermischen Prozessen und Phasentransformationen erlauben. Leider lassen diese Simulationen nur die Vorhersage extrem kleiner Längen- und Zeitskalen zu und eignen sich daher nicht für technische Anwendungen.

Beschreibung von Größeneffekten in Mehrskaligen Modellen. Die Versetzungsbewegungen in plastisch deformierten Mikrostrukturen metallischer Polykristalle werden durch komplexe Mehrfeld-Kontinuumsmodelle beschrieben, die z.B. Größeneffekte an Korngrenzen der Mikrostruktur beschreiben.



05

*High-Performance Simulation der Entstehung optimaler Mikrostrukturen. Zeitliche Entwicklung der Phasenseparation eines homogen vermengten binären Gemischs, umgesetzt durch innovative Finite-Elemente Implementierung der Cahn-Hilliard Gleichung.*

Am anderen Ende der Riege einkaliger Ansätze finden sich makroskopische Modelle, die oft auf den Strukturen der Plastizität basieren und rein phänomenologisch das Materialverhalten beschreiben. Diese Modelle können teils nur vereinzelte Aspekte des Materialverhaltens vorhersagen, für die ihre Parameter zuvor angepasst wurden und lassen oft eine tiefe physikalische Motivation vermissen.

Vom physikalischen Standpunkt betrachtet, sind daher die Modelle besser motiviert, die die mehrskalige Struktur von Formgedächtnislegierungen berücksichtigen. Je nachdem, welche Phänomene auf welcher Skala berücksichtigt werden und inwieweit deren Kopplung betrachtet wird, ergeben sich hier die verschiedensten Möglichkeiten. Sehr interessant und vielversprechend sind dabei sogenannte Relaxierungsansätze. Diese verwenden Konvexitätsbetrachtungen aus der modernen Mathematik, um die Uneindeutigkeit der Existenz verschiedener Phasen makroskopisch aufzulösen. Dabei erlauben sie die für Formgedächtnislegierungen charakteristischen, laminatartigen Mikrostrukturen.

Diese Ansätze vernachlässigen jedoch die dissipativen Mechanismen der Phasentransformation ebenso wie Energien an den Schnittstellen der Phasengrenzen. Diese Phänomene können mit sogenannten *Phasenfeldmodellen* berücksichtigt werden, die in der Lage sind, Größeneffekte abzubilden. In Phasenfeldmodellen werden Ordnungsparameter als zusätzliche Felder eingeführt, die lokal der Beschreibung von Kristallstrukturen dienen. Im Rahmen der hier vorliegenden Formulierung entsprechen die Phasengrenzen Diskontinuitäten des Phasenfelds. Um diese Diskontinuitäten zu vermeiden, werden die Phasengrenzflächen durch geglättete Ansätze approximiert, wodurch zusätzliche Gradiententerme in die Energie Einzug halten. Letztere sind verantwortlich für die daraus folgende klassische Ginzburg-Landau Struktur der Problemstellung.

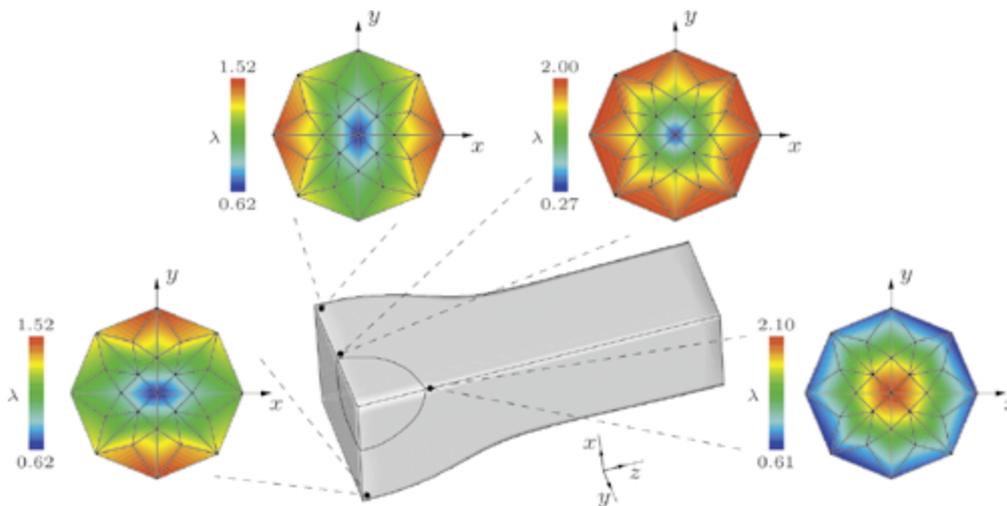
Unsere Forschungsaktivitäten im Bereich der Phasentransformationen konzentrieren sich in letzter Zeit auf die Verbesserung der Modellbildung und Entwicklung konsistenter Variationsprinzipien für Phasenfeldmodelle. Wir konnten ein Phasenfeldmodell für martensitische Formgedächtnislegierungen entwickeln, das die Kohärenzabhängigkeit der Grenzflächen-

energie berücksichtigt und somit eine präzise Trennung von Grenzflächen- und Festkörperenergie ermöglicht. Mit diesem Modell lassen sich die energetischen Zustände von Laminat-Mikrostrukturen im Detail untersuchen und die damit verbundenen Größeneffekte voraussagen. Von den Strukturen der Ginzburg-Landau Gleichung inspiriert, entwickelten wir einen neuen variationellen Zugang zur Cahn-Hilliard Theorie diffusiver Phasentrennung (05). Beide Modelle gehören zur Klasse der standard-dissipativen Materialien mit erweiterten Gradiententermen, für die wir Variationsprinzipien entwickelt haben. Diese können auch zur Beschreibung von Gradientenplastizität verwendet werden. (03) und (04) zeigen Simulationen plastischer Deformationen von Polykristallen mit Größeneffekten.

### 3. Hierarchische Mehrskalensmodelle für Mehrfeldprobleme

Die zunehmende Miniaturisierung von Alltagsgegenständen führt zu einer erhöhten Nachfrage von fortschrittlichen und robusten Materialien, die einer Verwendung innerhalb der Informationstechnologie oder des Chemie- und Bioingenieurwesens gewachsen sind. Dabei orientiert man sich vermehrt an biologischen Systemen und deren optimaler struktureller Anpassung an ihre Funktion, um neue Materialklassen mit aktiven Eigenschaften zu entwickeln. Ein typisches Merkmal natürlicher Strukturen und Systeme ist die Auswertung von Stimuli mit unmittelbarer systemimmanenter Reaktion, wie sie etwa bei belastungsinduziertem Knochenwachstum vorkommen. Die Übertragung dieser Funktions- und Verhaltensweise in die Technik entspricht dem gezielten Design und Einsatz von Aktoren und Sensoren.

Beispiele für diese sogenannten intelligenten oder funktionalen Werkstoffe sind u. a. elektrostriktive und magnetostriktive Materialien, Piezoelektrika sowie Piezomagnetika oder Formgedächtnislegierungen. Industrielle Anwendungen finden sich in vielen Bereichen, etwa in der Luft- und Raumfahrt oder in der Automobilindustrie. Hier sind bereits intelligente Materialien im Einsatz, jedoch besteht großes Potenzial für Verbesserungen. So rücken hochflexible funktionale Materialien wie elektroaktive Polymere (EAPs) und

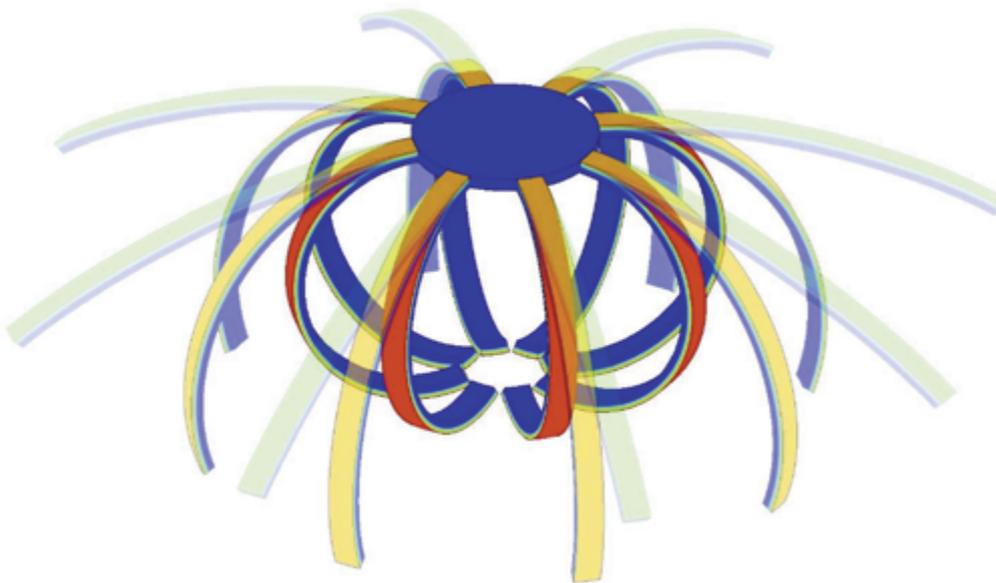


06

magnetorheologische Elastomere (MREs) in vielen Bereichen in den Fokus. Der grundlegende Mechanismus solcher Materialien liegt in der Erzeugung elektrischer Ladungen und magnetischer Dipole als Folge einer mechanischen Beanspruchung – der inverse Effekt ist gleichfalls möglich. Solche Materialien maßgeschneidert und in optimierter Form neu oder weiterzuentwickeln, ist Kernanliegen unserer Arbeit. Die in spezifischen Funktionalitäten ver-

die Konstruktion *hierarchischer Mehrskalensmodelle*, welche charakteristische mikrostrukturelle Mechanismen beinhalten. Dies erfordert die Entwicklung numerischer Homogenisierungskonzepte für gekoppelte Mehrfeldprobleme und deren numerische Durchdringung durch beispielsweise FEM<sup>2</sup> Methoden. Wie erwähnt stellen solche numerischen Mehrskalensmodelle wegen ihrer hohen Dimensionalität enorme Anforderungen an die Rechenleistung.

*Mehrskalensimulation magnetorheologischer Elastomere (MREs): Das makroskopische Materialverhalten wird durch Reorientierungen von Polymerketten in einer Mikrostruktur bestimmt. Dargestellt ist die mechanische Deformation infolge eines externen Magnetfeldes.*



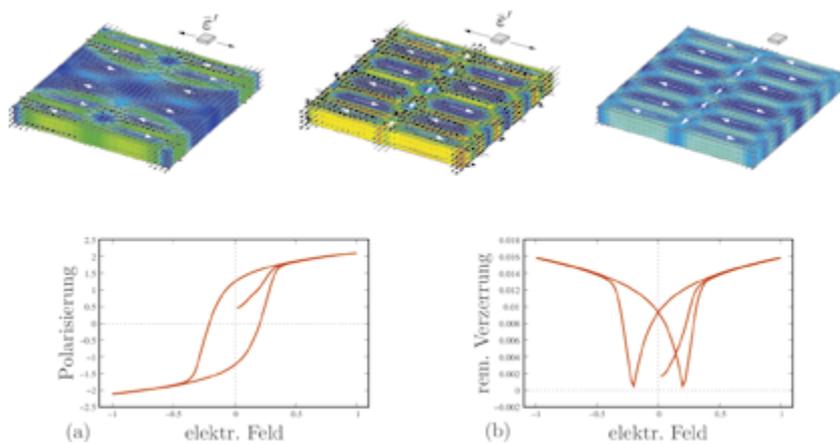
07

besserten Materialien lassen sich so in die diversen Einsatzbereiche bestmöglich einpassen.

Die prädiktive Simulation sowie die simulationsbasierte Optimierung von magneto- und elektro-mechanischen Kopplungseffekten in Funktionsmaterialien erfordern

Simulationen hierarchischer Mehrskalensmodellen sind in (06) und (07) skizziert. Ein typischer Bestandteil einer solchen Modellbildung mit intrinsischen Skalensübergängen für die Analyse dissipativer Ferroelektrika ist ein *Phasenfeldmodell*, das die Entwicklung von Domänen gleicher

*Mehrskalensimulation elektroaktiver Polymere (EAPs): Das makroskopische Materialverhalten, hier eine zweischichtige Polymerstruktur als „starfish gripper“, wird durch Reorientierungen von Polymerketten in einer Mikrostruktur bestimmt.*



08

Mehrskalen-Mehrfeld-Simulation ferroelektrischer Keramiken. Mechanisch induzierte Evolution von Domänen elektrischer Polarisierung auf der Mikroebene, modelliert durch ein innovatives Phasenfeldmodell. Das homogenisierte mikroskopische Verhalten der Domänenevolution des elektro-mechanisch gekoppelten Modells zeigt auf der Makroebene a) dielektrische und b) Schmetterlings-Hysteresen.

elektrischer Polung auf der Mikroskala beschreibt. Dieses berücksichtigt u.a. charakteristische Größeneffekte wie die Dicke der Domänenwände im Rahmen einer komplexen mathematischen Modellstruktur. Mechanisch induzierte, elektrische Polarisierungszustände sind in (08) dargestellt. Diese mikroskopische Evolution der elektrisch polarisierten Domänen verursacht auf der Makroskala typische Hystereseeffekte, welche sich durch den intrinsischen Homogenisierungsansatz des Mehrskalensmodells ergeben (typische Kennkurven: s. (08)). Durch Struktur-Design auf der Mikroskala kann eine Optimierung dieser makroskopischen Effekte erzielt werden, z.B. in Hinblick auf eine Minimierung der Hysteresese, die durch simulationsbasierte virtuelle Tests auf Grundlage des skizzierten Mehrskalens-Mehrfeld-Modells ermöglicht wird.

### 3. Hierarchische Mehrskalensmodelle für Mehrfeldprobleme

Die Kopplung von Mehrskalens-Mehrfeld-Modellen für Funktionsmaterialien mit der Beschreibung mannigfaltiger Versagensmechanismen kann am Beispiel von Lithium-Ionen-Akkumulatoren dargestellt werden. Die Industrie hat großes Interesse an der Weiterentwicklung wiederaufladbarer Batterien mit *höherer Energiekapazität und verlängerter Lebensdauer* für Elektroautos, tragbare elektrische Geräte sowie medizinische Implantate. Wir haben ein chemo-mechanisches Mehrfeldmodell für die Li-Ionen-Diffusion mit einem innovativen Phasenfeldmodell für komplizierte Mikrobruchphänomene kombiniert.

Ein typischer Lithium-Ionen-Akkumulator besteht aus Anode, Kathode, Trennschicht und Stromabnehmer (s. Prinzipskizze in (09)). Die Anode besteht aus Graphit, Silizium oder Kohlenstoff, wobei letzteres in der Regel von einem polymeren Bindemittel gebunden wird. Als Kathode wird eine Oxid-Verbindung in einer polymeren Matrix verwendet, welches den Elektronentransfer zum Stromabnehmer ermöglicht. Die Trennschicht setzt sich aus Elektrolyt, wie zum Beispiel Lithiumsalz, und einem porösen Polymer zusammen. Während des Ladevorgangs werden Lithium-Ionen von der positiven Elektrode durch Oxidation gelöst, welche dann von der Kathode zur Anode durch die Trennschicht wandern und sich an der Anode zusammen mit den durch die Aufladung einströmenden Elektronen einlagern. Diese Reaktion kehrt sich während des Entladevorganges um. Von großem Interesse ist die Analyse des Zusammenspiels zwischen Lade- und Entladezyklen und den sich daraus entwickelnden mechanischen Deformationen, die zu Mikrorissen führen und eine verminderte Leistungsfähigkeit und Lebensdauer der Batterie bewirken. Das Problem ist die Interaktion zwischen chemischem, elektrischem, thermischem sowie mechanischem Verhalten. Besonders hervorzuheben sind die Wechselwirkungen der chemischen Diffusion mit der Mechanik. Sie führen zu Kontraktion und Expansion der Elektroden an Anode und Kathode. Eine entscheidende Rolle für die Spannungsentwicklung, die zu einem mechanischen und elektrochemischen Abbau aufgrund von Mikrorissen in Elektrode und Bindemittel führt, nehmen die Partikelform der Elektrode sowie die Lade- und Entladeraten ein.

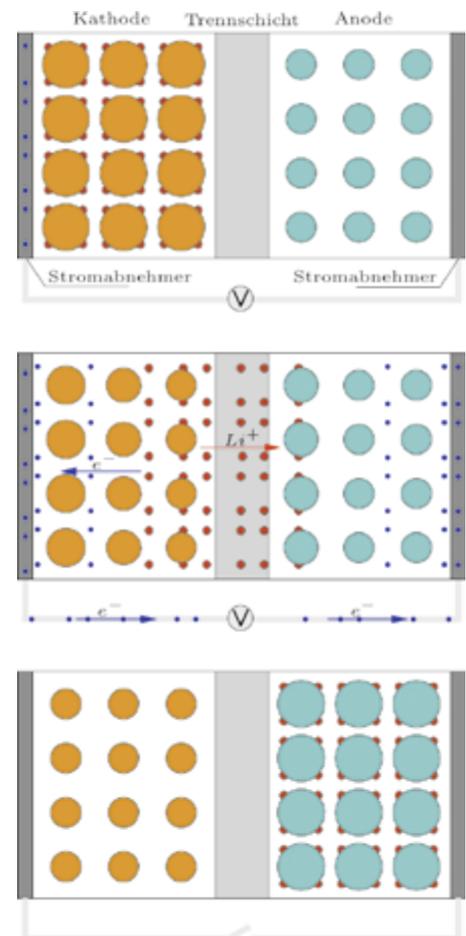
Das simulationsbasierte Design einer optimalen Mikrostruktur der Batterie auf der Nanoskala ist eine besondere Herausforderung der aktuellen Forschung mit dem Ziel, die Anzahl der Mikrorisse zu verringern. Hier hat sich Silizium, dank seines, im Vergleich zu konventionellen Materialien, hohen Leistungsvermögen, als wichtiger Kandidat für die Anode herauskristallisiert. Jedoch existieren bisher keine kommerziellen Lithium-Silizium-Anoden auf dem Markt. Der hohen Speicherkapazität des Siliziums steht das stark ausgeprägte Quellen und Schwinden des Materials gegenüber. Die derzeitige Forschung fokussiert sich auf ein optimales topo-

Dieser Artikel beleuchtet Aspekte der SimTech-Vision „Towards Computational Material Design“. Er gibt einen qualitativen Überblick über grundlegende Aufgaben in diesem Forschungsbereich, wie z.B. Mehrfeld-Modellierungsansätze gekoppelter Probleme auf verschiedenen Skalen, die Konstruktion von Skalenübergängen und Homogenisierungsmethoden für numerische Mehrskalen-Modelle, High Performance Simulationen virtueller Testumgebungen sowie Aspekte optimalen Materialdesigns. Die Darstellung fokussiert auf kontinuums-physikalische top-down Modellbildungen für komplexes Verhalten von Funktionsmaterialien. Drei Modellprobleme werden skizziert: Zunächst wird auf die Konstruktion innovativer Kontinuumsmodelle für Mikrostrukturen mit Größeneffekten eingegangen. Anschließend werden Elemente hybrider Mehrskalen- und Mehrfeldsimulationen mit einem Fokus auf elektro-magneto-mechanischer Kopplung in intelligenten Werkstoffsystemen aufgezeigt. Schließlich wird das Design von Phasenfeldmodellen für komplexe Bruchprozesse in gekoppelten Mehrfeld- und Mehrskalen-Problemen beleuchtet, angewandt auf Transportprozesse in Lithium-Ionen-Akkumulatoren, Keramiken und Böden.

logisches Design der Mikrostrukturen, die auch bei großer Volumenänderung keine Rissbildung aufzeigen und nicht fragmentieren.

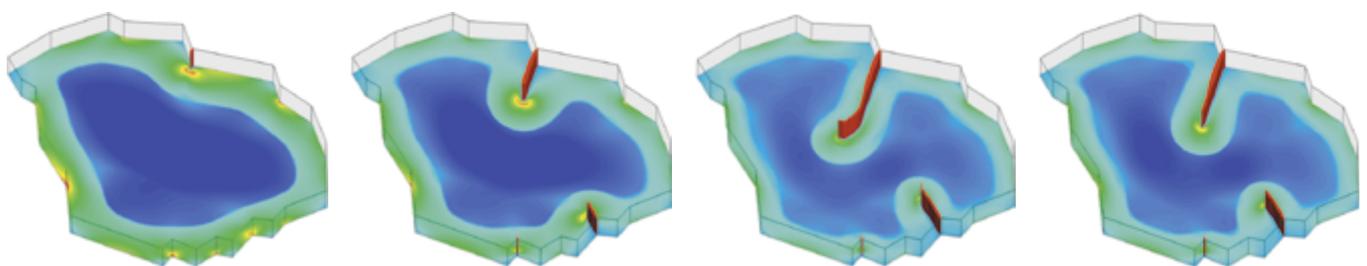
Silizium besitzt die höchste bekannte theoretische Ladekapazität. Obwohl diese viel höher als bei jedem anderen herkömmlichen Anodenmaterial (Graphit, Metalloxid) ist, kann die volle Kapazität des Siliziums aufgrund der Problematik des Bruchversagens nicht ausgenutzt werden. So zeigt eine Siliziumanode während des Aufladens eine Volumenexpansion von rund 300 Prozent sowie hohe punktuelle Spannungen, welche Mikrorisse bewirken und maßgeblich verantwortlich für den Verlust der elektrischen Leitfähigkeit und Batteriekapazität sind. Um dieses Problem zu beheben, wird weltweit an optimalem Design für Nanostrukturen geforscht, welche die negativen Einflüsse der Ladevorgänge von Siliziumanoden mindern.

Das Simulationsmodell zur Kopplung eines chemomechanischen Deformations-Transport-Modells mit den in der Arbeitsgruppe entwickelten innovativen Phasenfeldmodellen der Bruchmechanik beschreibt erstmals die durch diffusions-induzierte Spannungsspitzen entstehende Rissbildung. Dabei werden Riss-Diskontinuitäten durch ein Phasenfeld approximiert. Dieser Ansatz ist sehr vorteilhaft gegenüber konventionellen numerischen Techniken zur Beschreibung des Rissfortschritts, da er auch hochkomplexe Rissmuster mit Verzweigungen beschrei-



Ladevorgang einer Lithium-Ionen-Batterie

09



10

Nanostrukturen aus dünnen Filmen, Nanodrähte und hohle Nanosphären wurden bereits erfolgreich entwickelt und zeigen verbesserte Ermüdungseigenschaften bezüglich zyklischer Belastungen.

ben kann. Die Rissbildung und Ausbreitung in einer realistischen Lithium-Mangan-Oxid (LMO) Kathode unter schneller elektrischer Aufladung ist in (10) dargestellt. Ähnliche Konzepte zur

High-Performance Mehrskalen-Mehrfeld-Simulation von Lithium Ionen Batterien. Evolution von Mikrorissen in Partikeln der Elektrode bei fortschreitendem Ladeprozess, modelliert mit einem innovativen Phasenfeldmodell für Bruchfortschritt.

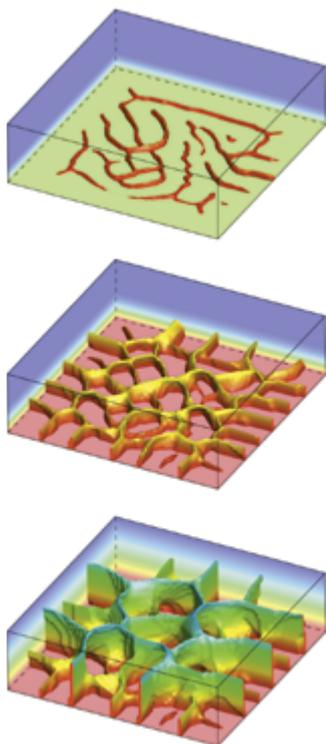
Rissausbreitung und Verzweigung sind in (11) zu sehen. Hier lassen sich die Schwindrissbildungen in abkühlenden Keramiken und austrocknenden Böden erkennen.

Die entwickelten numerischen Simulationen eröffnen neue Wege für computerorientiertes Design und Optimierung

von Batterie-Mikrostrukturen mit verbesserter Haltbarkeit und geringeren Materialkosten. Sie sind von entscheidender Bedeutung im Hinblick auf eine Steigerung der Attraktivität dieser Technologie und stehen im Mittelpunkt zukünftiger Forschungsarbeiten des SimTech Clusters.

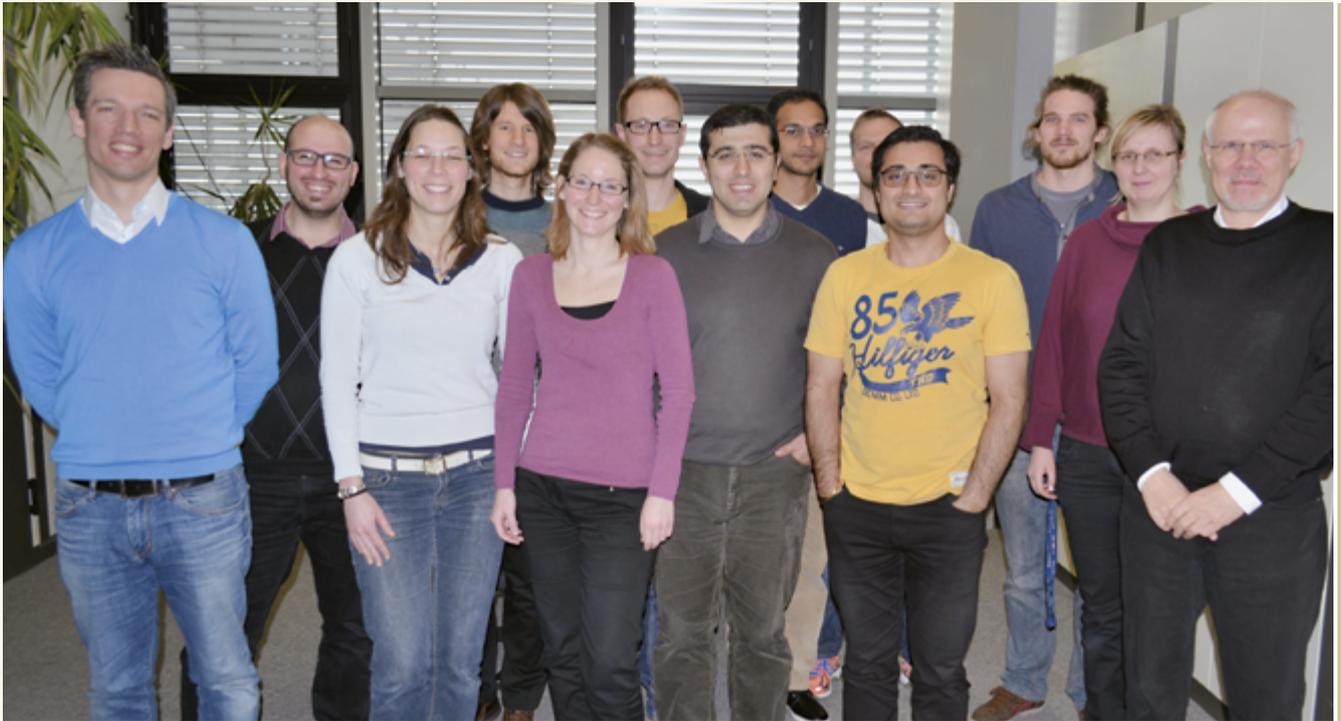
• Christian Miehe et al.

## Literatur



- BHATTACHARYA, K. AND JAMES, R.D. [2005]: *The Material is the Machine*. *Science*, 307: 53–54.
- EHRENSTEIN, W., MATHUR, N.D. AND SCOTT, J.F. [2006]: *Multiferroic and Magneto-electric Materials*. *Nature*, 442: 759–765
- JAMES, R. D. [2000]: *New materials from theory: Trends in the Development of Active Materials*. *International Journal of Solids and Structures*, 37: 239–250.
- MIEHE, C., ALDAKHEEL, F. AND MAUTHE, S. [2013]: *Mixed Variational Principles and Robust Finite Element Implementations of Gradient Plasticity at Small Strains*. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 94: 1037–1074.
- HILDEBRAND, F.E. AND MIEHE, C. [2012]: *A Phase Field Model for the Formation and Evolution of Martensitic Laminate Microstructure at Finite Strains*. *Philosophical Magazine*, 92: 4250–4290.
- MIEHE, C. [2011]: *A Multi-Field Incremental Variational Framework for Gradient-Extended Standard Dissipative Solids*. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59: 898–923.
- MIEHE, C., ROSATO, D. AND KIEFER, B. [2011]: *Variational Principles in Dissipative Electro-Magneto-Mechanics: A Framework for the Macro-modeling of Functional Materials*. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 86: 1225–1276.
- MIEHE, C., WELSCHINGER, F. AND HOFACKER, M. [2010]: *Thermodynamically Consistent Phase-field Models of Fracture: Variational Principles and Multi-field FE Implementations*. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 83: 1273–1311.
- MIEHE, C., ZÄH, D. AND ROSATO, D. [2012]: *Variational-based Modeling of a Micro-electro-elasticity with Electric Field-driven and Stress-driven Domain Evolutions*. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 91, 115–141.
- ROSATO, D. AND MIEHE, C. [2014]: *Dissipative Ferroelectricity at Finite Strains*. *Variational Principles, Constitutive Assumptions and Algorithms*. *International Journal of Engineering Science*, 74: 162–189.
- ZÄH, D. AND MIEHE, C. [2013]: *Computational Homogenization in Dissipative Electro-Mechanics of Functional Materials*. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 267: 487–510.

## DIE AUTOREN UND MITARBEITER



**DIE ARBEITSGRUPPE VON PROF. MIEHE** entwickelt Simulationsmethoden für ingenieurwissenschaftliche Problemstellungen mit komplexem Materialverhalten von Festkörpern. Ansporn und Leitgedanke ist die Konzeption prädiktiver Analysen und die Optimierung makroskopischen Materialverhaltens unter mechanischen und nicht-mechanischen Einflüssen, d.h. bei Berücksichtigung thermo-chemo-elektro-magneto-mechanischer Kopplungseffekte.

Methodisch umfasst dies die rigorose mathematische Formulierung theoretischer und algorithmischer Modelle mit einem Fokus auf die in die Kontinuumsphysik eingebettete Materialtheorie. Von großer Bedeutung ist dabei die Berücksichtigung der Evolution von Mikrostrukturen und die Überbrückung von Längenskalen mit modernen Homogenisierungstechniken und Mehrskalenmodellen. Dieser Prämisse folgend werden Mehrskalenkonzepte für mikro-mechanisch basierte Materialmodelle entwickelt. Ein Schwerpunkt der Arbeitsgruppe ist die Formulierung variationeller Methoden für diese Problemstellungen, die tiefgreifende mathematische Analysen sowie robuste und effiziente Implementierung ermöglichen.

Die Gruppe koordiniert den internationalen Masterstudiengang „Computational Mechanics of Materials and Structures (COMMAS)“ und das Erasmus Mundus Masterprogramm „Computational Mechanics“ in Zusammenarbeit mit der Universität Politècnica de Catalunya, Swansea University, Ecole Centrale Nantes und Tsinghua Universität Peking.

*Hinten von links nach rechts:*  
M.Sc. Fadi Aldakheel, M.Sc. Daniel Vallicotti, Dipl.-Ing. Steffen Mauthe, M.Sc. Gautam Ethiraj, Dipl.-Ing. Dominic Züh, Dipl.-Ing. Lukas Böger;

*vorne von links nach rechts:*  
Jun. Prof. Dr.-Ing. Marc-André Keip, Dipl.-Ing. Lisa Schünzel, Dipl.-Ing. Heike Ulmer, Dr.-Ing. Hüsnü Dal, M.Sc. Arun Raina, Prof. Dr.-Ing. habil. Christian Mieke

### Kontakt

Universität Stuttgart  
Institut für Mechanik (Bauwesen)  
Lehrstuhl I – Prof. Dr.-Ing. habil. Christian Mieke  
Pfaffenwaldring 7, D-70569 Stuttgart  
Tel. +49 (0) 0711/685-66378  
Fax +49 (0) 0711/685-66347  
Email: christian.mieke@mechbau.uni-stuttgart.de  
Internet: www.mechbau.uni-stuttgart.de/lsl