

Neue Entwicklungen in der Materialforschung: Forschungsdateninfrastrukturen, Digitalisierung und virtuelle Zwillinge

Christof Wöll

Institut für Funktionelle Grenzflächen (IFG), Karlsruher Institut für Technologie (KIT)



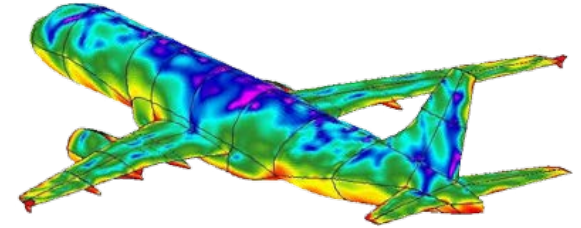
Forschungsbereich
Schlüsseltechnologien
Helmholtz- Gemeinschaft
Deutscher Forschungszentren

Motivation:

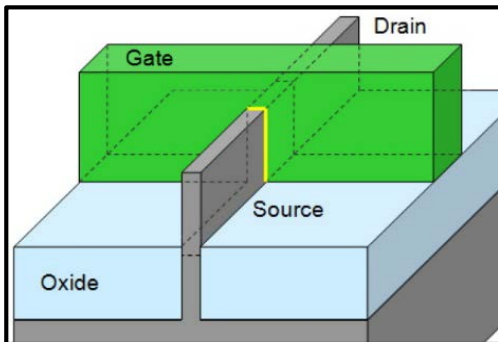
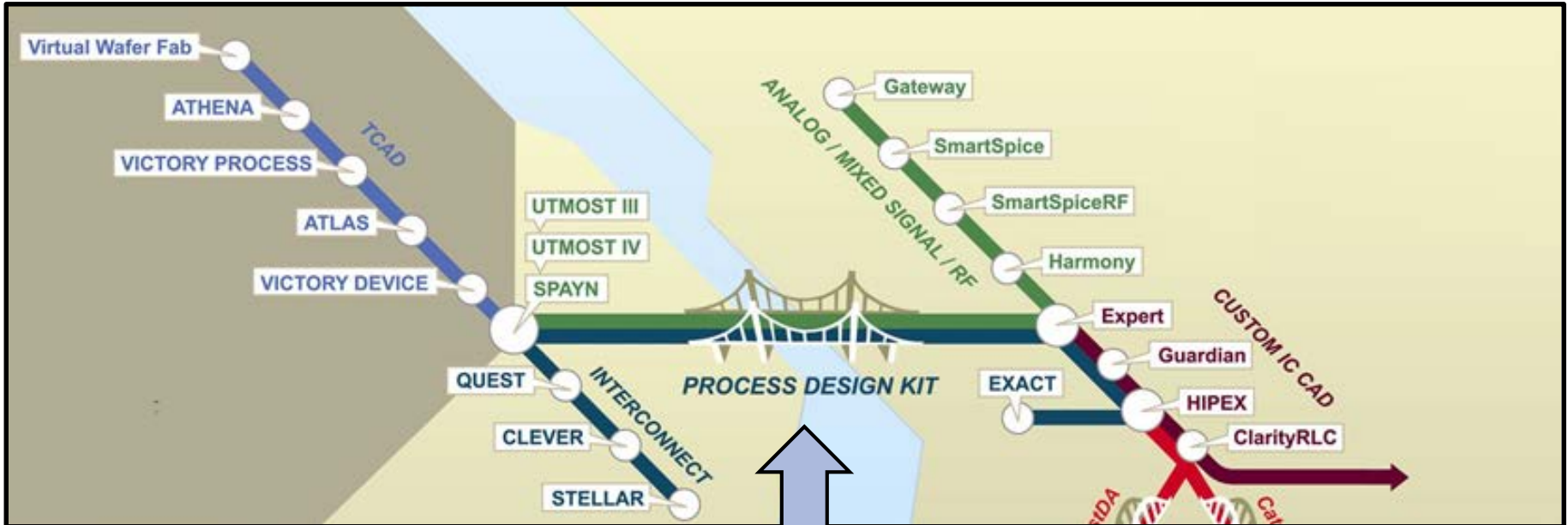
Materialforschung besitzt kritische Bedeutung für moderne Industrienationen:

- Die überwiegende Mehrzahl technischer Innovationen basiert auf neuen Materialien
- Anteil von Materialkosten bei der betrieblichen Produktion bis zu 85 % - die Hebelwirkung der Materialeffizienz ist bis zu 10x größer als Einsparungen im Energieverbrauch
- Nachhaltigkeit durch neue Materialien und geschlossene Materialkreisläufe

Simulation im industriellen R&D-Bereich

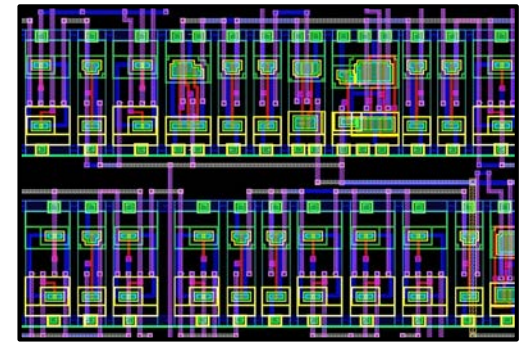


Bauteil-Simulation in der Halbleiter-Industrie



Transistor

“Process Design Kits”
 erlauben den Einsatz neuer
 Transistor-Architekturen
 in integrierten Schaltkreisen



Integrierter Schaltkreis

Aufgaben für die Zukunft

🌐 **Motivation:**

Materialforschung besitzt kritische Bedeutung für moderne Industrienationen:

- Die überwiegende Mehrzahl technischer Innovationen basiert auf neuen Materialien
- Anteil von Materialkosten bei der betrieblichen Produktion bis zu 85 % - die Hebelwirkung der Materialeffizienz ist bis zu 10x größer als Einsparungen im Energieverbrauch
- Nachhaltigkeit durch neue Materialien und geschlossene Materialkreisläufe.

🌐 **Ziele in neu zu schaffenden Forschungsbereich „Information“ der HGF:**

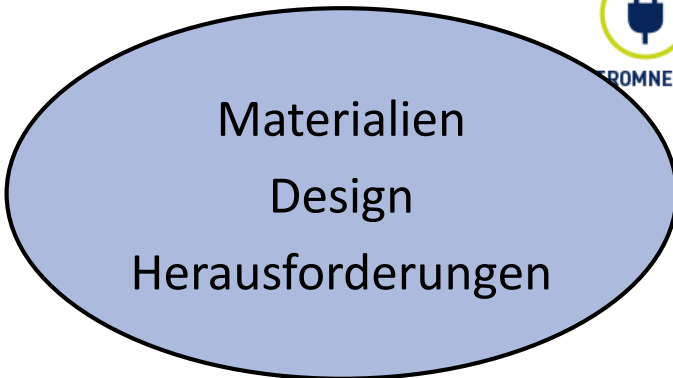
Aufbau einer Plattform „Virtuelle Materialentwicklung“

- Maßgeschneiderte Materialien „nach Bedarf“ mittels „Inverse Engineering“
- Multiskalen-Simulationsmethoden bilden die Basis
- Erste Phase: Bereitstellung experimentell validierter Simulations-Ergebnisse für derzeit intensiv untersuchte Materialklassen
- Bereitstellung Digitaler Zwillinge

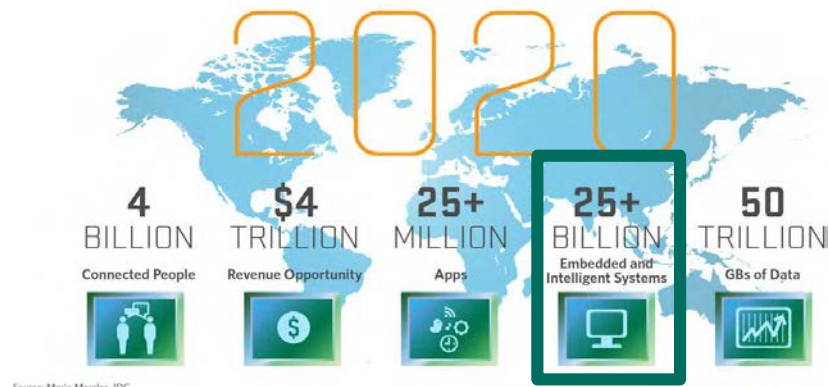
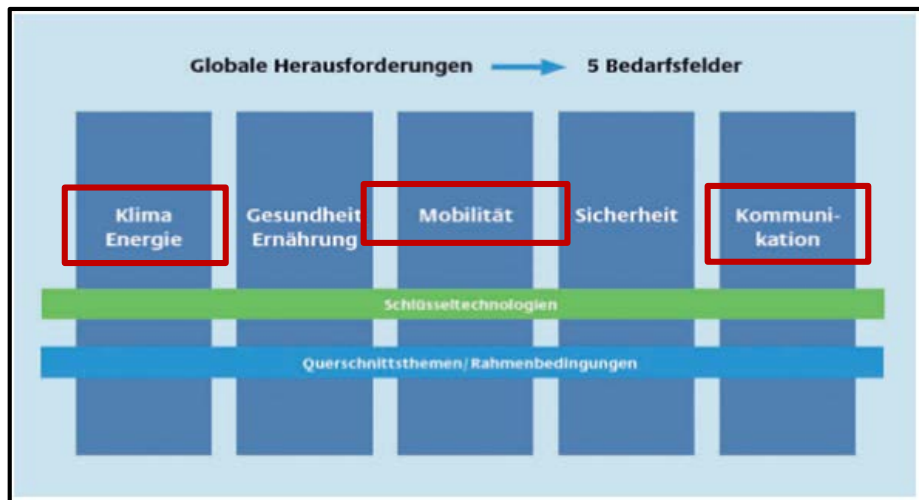
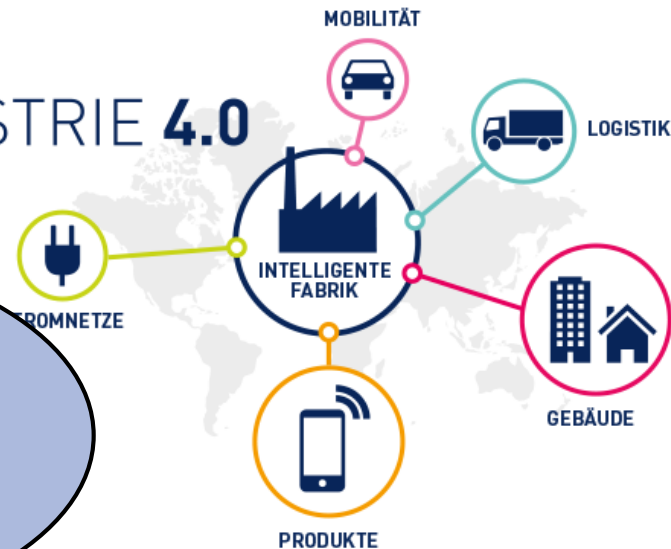
Herausforderungen bei der Materialentwicklung

WING
Werkstoffinnovationen
für Industrie und Gesellschaft

**DIE NEUE
HIGHTECH
STRATEGIE**
Innovationen für Deutschland



INDUSTRIE 4.0



Source: Mario Morales, IDC

Internet of Things

Herausforderungen bei der informationsbasierten Entwicklung von komplexen und von Hybrid-Materialien

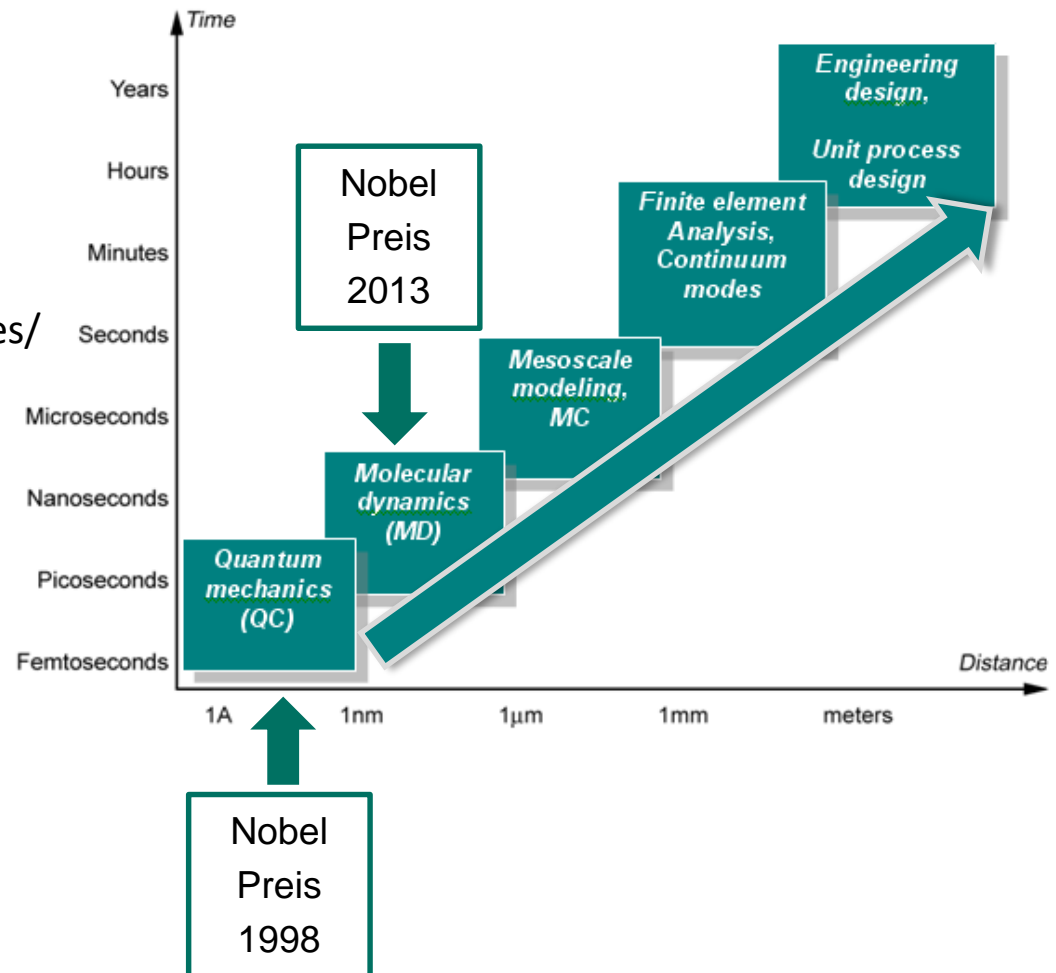
Momentan Marktdurchdringung in der Industrie gering

■ Gründe:

- Kosten
- Multiskalen-Problem
- Keine allgemeingültiges physikalisches/ chemisches / biologisches Modell
- Keine universell anwendbare mathematische Methode
- „Zoo“ von Partial-Lösungen

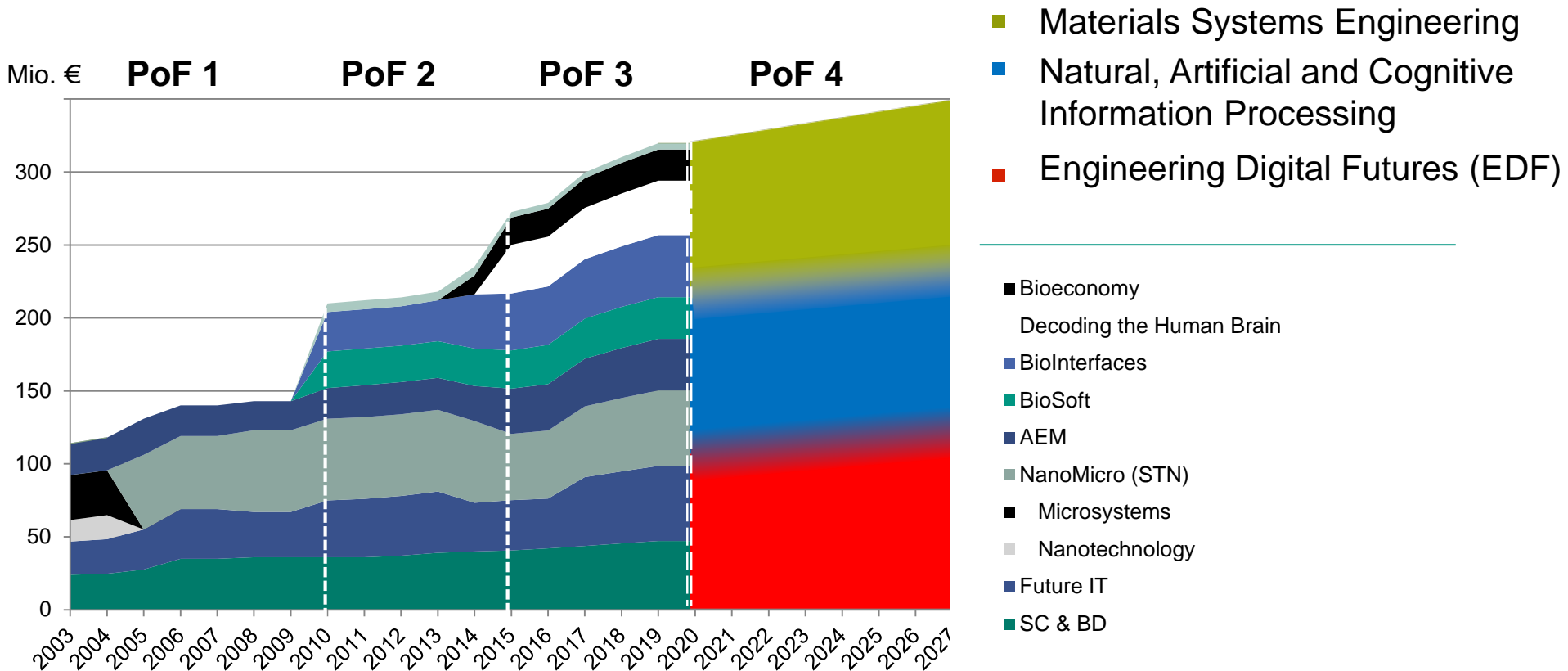
■ Konzept: Workflow-Engineering

- Kombination von Partial-Lösungen führt zu validierten Modellen für einzelne Problem-Aspekte
- Integration der Partial-Lösungen in zunehmend komplexere Modelle
- Reduzierung von Kosten



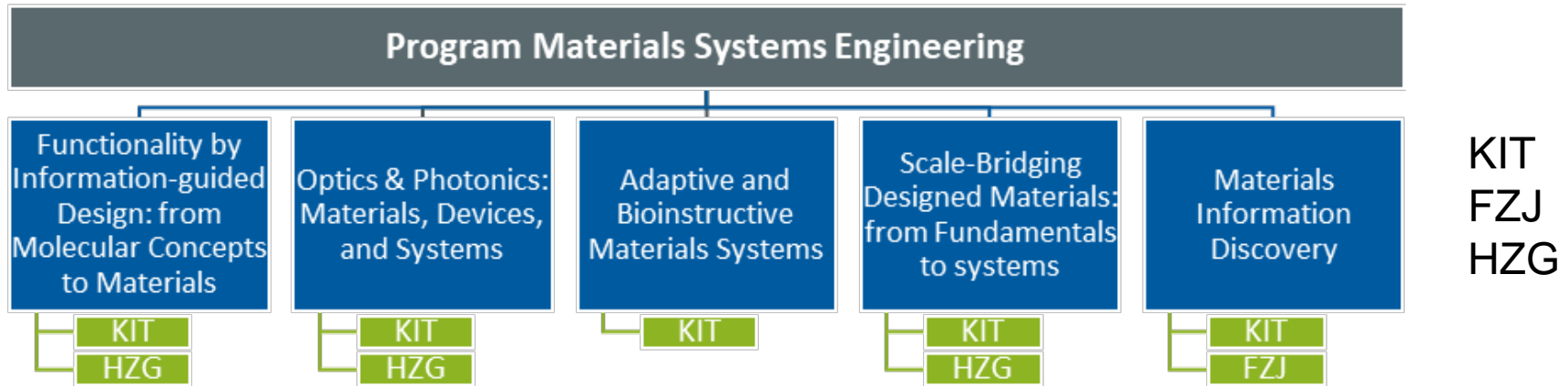
HGF Forschungsbereich Schlüsseltechnologie/**Information (ab '21)**

Eine neue Strategie: Digitalisierung der Materialforschung



P3: Materials Systems Engineering (MSE) (~ 650 FTE)

Sprecher: Ch. Wöll, KIT



Virtuelle und datengetriebene Materialforschung auf Basis von experimentellen und theoretischen Arbeiten zur

- **Digitalisierung** und **Biologisierung** der Materialwissenschaften und Werkstofftechnik durch Erzeugung digitaler Abbilder der Materialien, der relevanten Prozesse und Anwendungen
- Erforschung und Simulation **multifunktionaler Materialsysteme** über die gesamte **Prozesskette** bis zur Translation

Ziel: inverse Materialentwicklung, d.h. eine rationale Ableitung von Materialeigenschaften, für die Informationsverarbeitungstechnik

Beispiel : Design von komplexen Hybridmaterialien



- Anwendungen: Sensoren (SHM), Aktoren (“1V-Piezo”), Photo-Katalyse, Intelligente Implantate, ...
- Materialien: Volumen-Skalierbarkeit ($\text{mm}^3\text{-cm}^3$)
Beschichtung großer Oberflächen (m^2)
- Komplexes Hybrid-Material eines bi-kontinuierlichen Netzwerks:
Nanoporöses Metall + Porenraum
- Ziel:
 - Anwendungsgetriebenes Materialdesign
 - Effizienzoptimierung
 - Experimentelle Machbarkeitsstudien

Weissmüller & Sieradzki, *MRS Bulletin* (2018)

Special Issue: *Dealloyed nanoporous materials with interface-controlled behavior*

Freiheitsgrade

Struktur des 3D-Metallnetzwerks

- 10^{12} Funktionelle Einheiten
- Ligamentdurchmesser (nm- μm)
- Topologie, Hierarchie

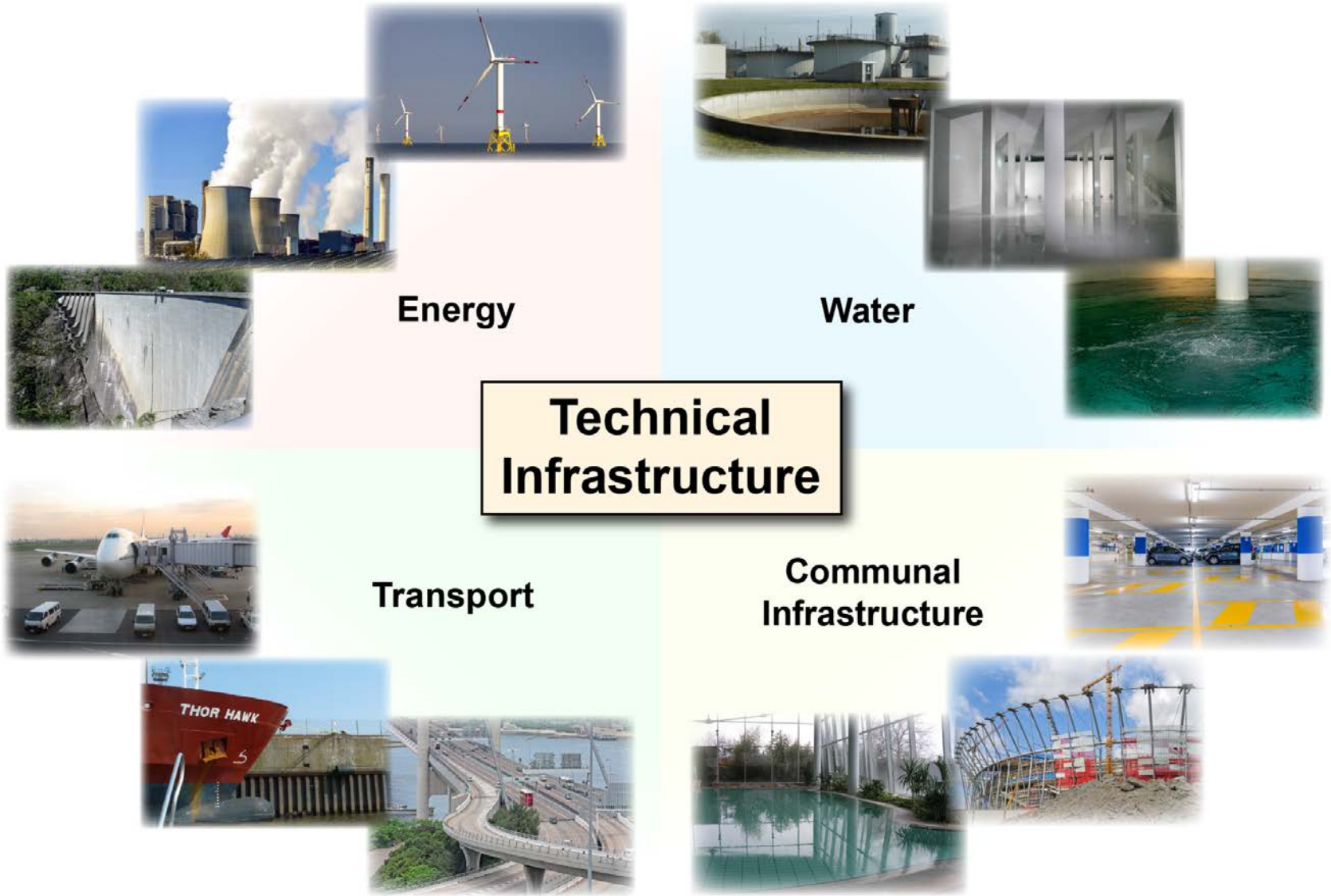
Materialkombinationen

- Metalle (Au, Ti, Ni, ...)
- Beschichtungen (ALD, PPY, ...)
- Porenraum (flüssig/fest)

Kopplungen

- Oberflächen- & Größeneffekte
- Elektromechanisch
- Elektromagnetisch

Technische Infrastruktur – Divers und unverzichtbar



Infrastruktur und Nachhaltigkeit – Herausforderungen für das 21. Jahrhundert



„Megacities“



Globalization



Ressources



Climate Change

challenges & chances

Reasons for the bad current state

- Insufficient quality of construction materials
- Inadequate planning and execution
- Shift in usage
- Change of environmental impact

➔ **Disruptive Innovations** are essential for a **Sustainable Infrastructure**

Das Problem:
Keine Konzepte zur
Vorhersage der Lebensdauer



**Genua,
August 2018**

KIT Innovation HUB
 Prävention im Bauwesen
 Prof. Dr. A. Gerdes

Institut für Funktionelle Grenzflächen (IFG)
 Direktor: Prof. Dr. C. Wöll
 Co-Direktor: Prof. Dr. J. Lahann
 Stellv. Direktor: Prof. Dr. M. Franzreb

Institutsmanagement
 Dr. A. Weiss

Sekretariat
 A. Biedermann
 S. Sellheim-Ret

Chemie oxydischer und organischer Grenzflächen
 Dr. P. Weidler
 Dr. H. Gliemann

Bioprozesstechnik und Biosysteme
 Prof. Dr. M. Franzreb
 Prof. Dr. J. Hubbuch

Mineralische Grenzflächen
 Prof. Dr. A. Gerdes

Neue Polymere und Biomaterialien
 Prof. Dr. J. Lahann

Mikrobiologie/ Molekularbiologie
 Prof. Dr. T. Schwartz

Membrane-Technology
 Prof. Dr. A. Schäfer

Oberflächenfunktionalisierung und -strukturierung
 Dr. H. Gliemann

Diffraction
 Dr. P. Weidler

Prozessentwicklung gedruckter Systeme
 Prof. Dr. M. Franzreb

Chemie mineralischer Grenzflächen
 Dr. M. Schwotzer

Materialsynthese
 Dr. D. Varadharajan

Biofilme
 Prof. Dr. T. Schwartz

Neue Membranmaterialien
 Prof. Dr. A. Schäfer

Dynam. Prozesse in porösen Filmen
 PD Dr. L. Heinke

Röntgen- und Elektronenspektroskopie
 Dr. A. Nefedov

Druckverfahren in der Biotechnologie
 Prof. Dr. J. Hubbuch

Physik mineralischer Grenzflächen
 Dipl.-Math. A. Lehardt

Funktionalisierte Beschichtungen
 Dr. M. König

Microbielle Metagenome
 Prof. Dr. T. Schwartz

Rückhalt- und Foulingmechanismen
 Prof. Dr. A. Schäfer

SURCOFs und SURGELS
 Dr. M. Tsotsalas

ToF-SIMS
 Dr. A. Welle

3D-Zellkultur Systeme
 Prof. Dr. E. Gottwald

Biologie mineralischer Grenzflächen
 Dr. M. Schwotzer

Biofunktionalisierte Beschichtungen
 Prof. Dr. M. Bastmeyer

Antibiotika-Resistenz
 Prof. Dr. T. Schwartz

Systementwicklung
 Prof. Dr. A. Schäfer

SURMOFs/CCNCs Technologie und Geräte
 Dr. E. Redel

Schwingungsspektroskopie
 S. Heissler

Prozess- und Sensortechnologie, 3D Druck
 Dipl.-Ing. J. Wohlgemuth

Modellsubstrate für mineralischer Grenzflächen
 Dr. P. Thissen

Modellierung mineralischer Grenzflächen
 Prof. Dr. A. Gerdes

SURMOF-basierte Optoelektronik
 Dr. R. Haldar

Oberflächenkatalyse
 Dr. Y. Wang

Analytische Biochemie
 Dr. G. Brenner-Weiß

Chemische Biologie
 Prof. Dr. U. Schepers

Sicherheitsbeauftragter: Dr. C. Natzeck
Betriebsbeauftragter: M. Füsler
Biol. Sicherheitsbeauftragter: Prof. Dr. T. Schwartz,
SSB RöV: Dr. P. Weidler, Dr. M. Schwotzer
Laserschutzbeauftragter: S. Heißler
Brandschutzbeauftragter: Dr. P. Weidler, M. Füsler
Chemieabfallbeauftragter: Dr. G. Brenner-Weiß
IT-Beauftragter: Dipl.-Ing. B. Kühl

Mineral Interfaces

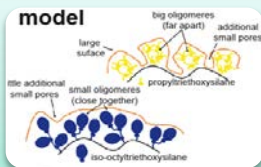


Prof. Andreas Gerdes



Chemistry of mineral interfaces

- Durability of mineral materials
- Material modeling
- Surface functionalization



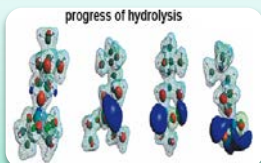
Physics of mineral interfaces

- Diffusion processes in porous materials
- FEM modeling



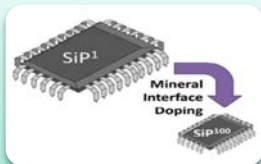
Biology of mineral interfaces

- Biofilm formation on mineral materials
- Strategies for damage prevention



Modeling of mineral interfaces

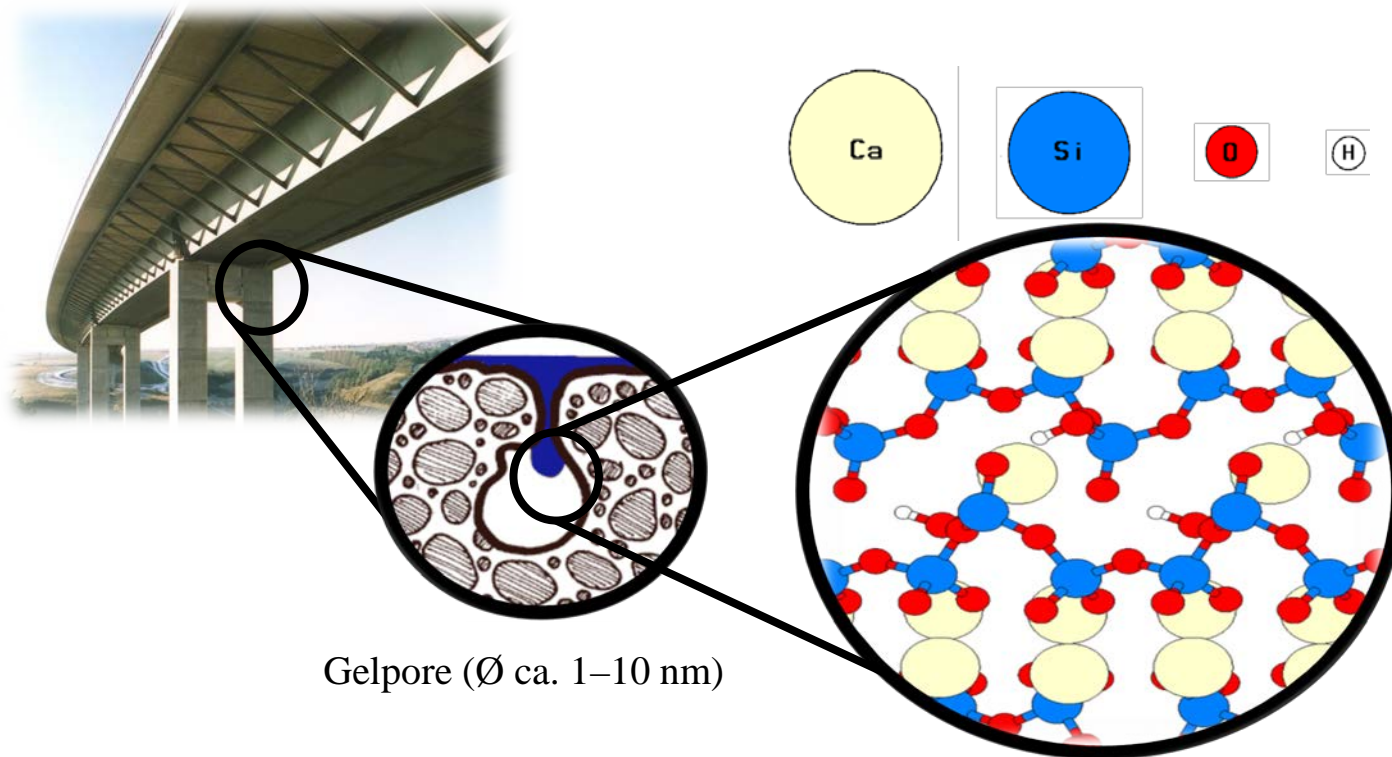
- Chemical equilibria at mineral interfaces
- Aging processes



Model substrates for mineral interfaces

- Sensors
- Semiconductor development
- Bio-active interfaces

Materials Systems Engineering am IFG: Das VIBUMA Konzept

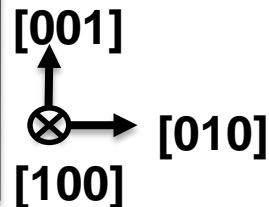
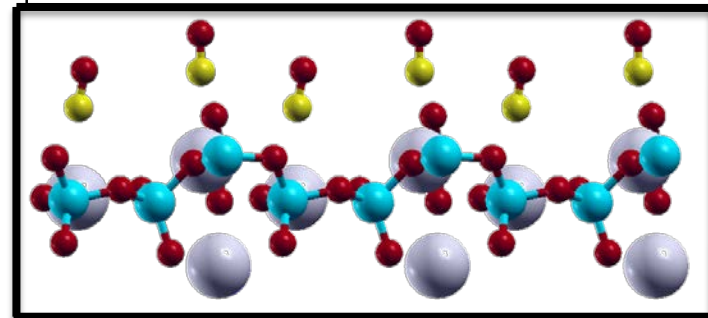
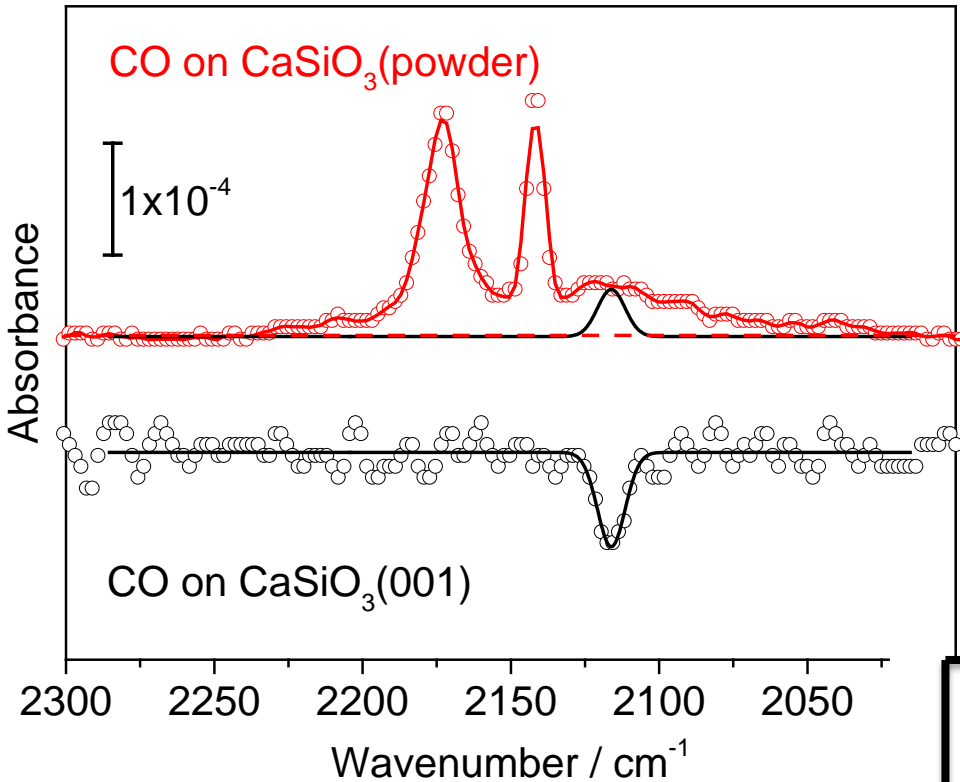


- Bisherige Ansätze „**trial and error**“ - basiert
- VIBUMA basiert auf Multi-Skalen-Ansatz – von der atomaren Ebene bis zur Brücke
- Studien (experimentell und theoretisch)

Validierung der theoretischen Studien (DFT)

Experimente an Modellsystemen, Sondenmoleküle

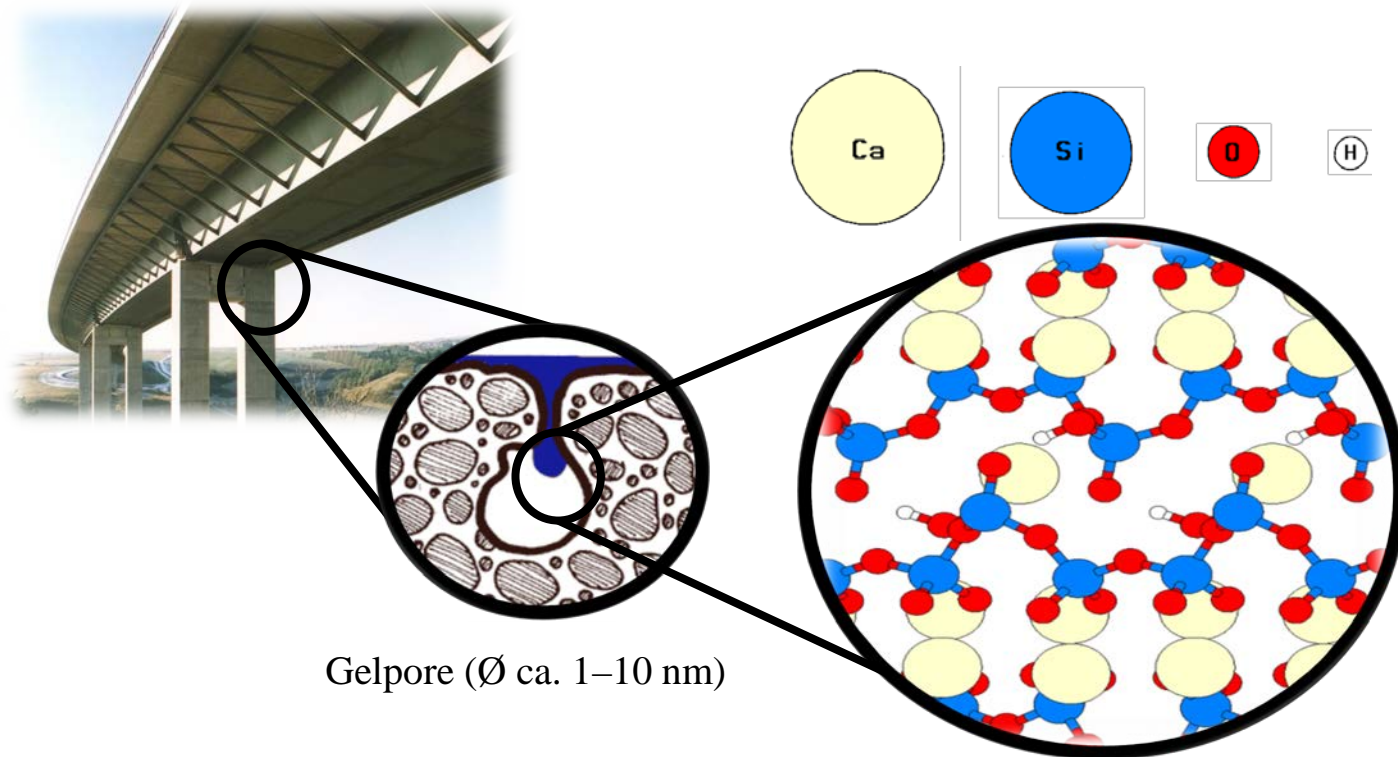
p-polarization



Hydration of Concrete: The first steps

P. Thissen, C. Natzeck, N. Giraudo, P. G. Weidler, C. Wöll, Chem. Eur. J., 24, 8603, (2018)

Materials Systems Engineering am IFG: Das VIBUMA Konzept



- Bisherige Ansätze „**trial and error**“ - basiert
- VIBUMA basiert auf Multi-Skalen-Ansatz – von der atomaren Ebene bis zur Brücke
- Studien (experimentell und theoretisch)