

Vom Bit zum Atom zum System: Das Dresden Center for Computational Materials Science (DCMS)

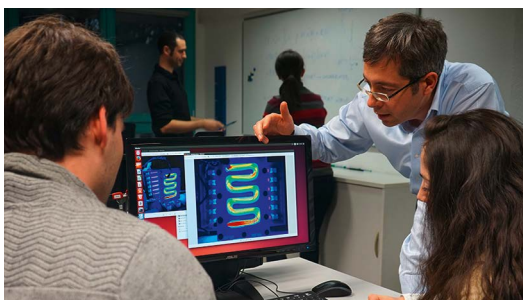
Industrie 4.0 durch Materialien 4.0: Smarte Werkstoffe aus dem „Labor im Computer“

Die „vierte industrielle Revolution“ ist in vollem Gange: Intelligente Fabriken einer zukünftigen Industrie 4.0 werden zukünftig dank Informationstechnik und Vernetzung viel flexibler und effizienter produzieren. Die verwendeten Materialien müssen hierbei Schritt halten: Während des gesamten Entwicklungs- und Produktionsprozesses werden diese als „Materialien 4.0“ digital erfasst und vernetzt. Das DCMS liefert einen wichtigen Beitrag hierzu.



Digitale Produktionsprozesse

Industrie 4.0 beruht auf einer durchgängigen Digitalisierung von Entwicklungs-, Fertigungs- und Produktionsschritten und auf deren intelligenter Verzahnung durch vernetzte Systeme. Der gesamte Zyklus eines Produkts, von Entwicklung, Fertigung, Nutzung und Wartung bis hin zum Recycling, soll digital verbunden werden. Informationen über einzelne Abschnitte im Lebenszyklus werden zu den nächsten Schritten weiterpropagiert und sind dort verfügbar. Digitale Prozesse wie der 3D-Druck von Kunststoffen, Keramik oder Metallen erlauben eine hohe Kontrolle einzelner Fertigungsschritte und eine hochgradige Individualisierung und Dezentralisierung der Produktion. Materialien spielen hierbei eine zentrale Rolle. Grundlegende Charakteristika und Funktionalitäten von Materialien und Werkstoffen sowie deren „Geschichte“ während der gesamten Prozesskette müssen entlang der gesamten Wertschöpfungskette digital verfügbar sein.



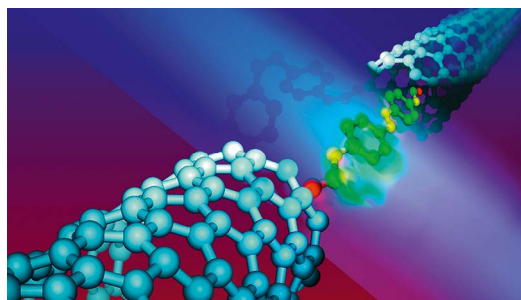
Prof. G. Cuniberti diskutiert mit Wissenschaftlern und Studierenden ein Anwendungsbeispiel

Foto: T. Lehmann, TUD

Digitale Materialforschung

Die Digitalisierung erfasst nicht nur die in Produkten verwendeten Materialien, sondern revolutioniert auch die Entwicklung neuer Materialien. Das „digitale Labor im Computer“ gewinnt hier als „Dritte Säule“ neben Experiment und modellbasierter Theorie zunehmend an Bedeutung. Dies wird ermöglicht durch enorme wissenschaftliche Fortschritte in den Simulationsmethoden und durch den stetigen Ausbau der verfügbaren Hochleistungsrechner. Zusätzlich verlangt voll digitalisierte

Industrie 4.0 nach zuverlässigen Simulationsmethoden für Materialien und komplexe Werkstoffe. Aktuelle Forschungsschwerpunkte wie das Design von Materialien für elektronische, photovoltaische, thermoelektrische oder katalytische Anwendungen, die Berechnung von thermodynamischen und mechanischen Eigenschaften von Verbundmaterialien und Legierungen oder die Entwicklung anwendungsgerechter Materialien und Prozesse für Leichtbau, Energieumwandlung und -speicherung zeigen: Ohne Simulationen sind heute keine neuen Materialien mehr vorstellbar.



Simulation eines Azobenzol-Moleküls als elektrischer Schalter zwischen Nanokontakten

Abbildung: Prof. G. Cuniberti, TUD

Kompetenznetzwerk in der „Hauptstadt der Materialforschung“

Der Standort Dresden mit der TU Dresden im Zentrum stellt ein deutschland- und weltweit führendes Zentrum der Materialforschung dar. Das jüngst veröffentlichte QS World University Subject Ranking 2017, in dem die TU Dresden im Bereich Materials Science einen hervorragenden Platz in den Top 100 weltweit einnimmt und unter den fünf besten Einrichtungen Deutschlands in diesem Wissenschaftsfeld rangiert, belegt diese Spitzenstellung. Das Dresden Center for Computational Materials Science (DCMS) wurde 2013 an der TU Dresden gegründet, um eine moderne Säule der Materialforschung nachhaltig zu stärken. Als Verbund von mehr als 70 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern der TU Dresden, der TU Chemnitz, der TU Bergakademie Freiberg, der Universität Leipzig und von mehr als 10 außeruniversitären Einrichtungen in Dresden und in der Region schafft das DCMS ein agiles und interaktives Netzwerk, das sich gleichermaßen an Studierende, Wissenschaftler und Unternehmen wendet.

Forschung und Lehre für die Zukunft

„Wir bilden heute die Ingenieure und Wissenschaftler für die nächsten 50 Jahre aus. Diese müssen fit und flexibel sein für kommende Entwicklungen.“, so Prof. Gianaurelio Cuniberti (Institut für Werkstoffwissenschaft und Geschäftsführender Direktor des DCMS). „Materialien werden schon heute immer mehr abseits von Reagenzglas und Werkbank entwickelt. Und zwar durch Simulationen: das ‚Labor im Computer!‘“ so Cuniberti weiter.

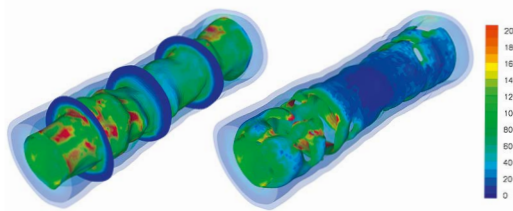
Breit gefächerte Anwendungsbereiche und Interdisziplinarität

Die wissenschaftlichen Arbeitsbereiche des DCMS liefern wichtige Impulse in den Fokusfeldern Gesundheitswissenschaften, Biomedizin und Bioengineering, Informationstechnologien und Mikroelektronik, Intelligente Werkstoffe und Strukturen sowie Energie und Umwelt. Die bei den Partnern im Zentrum vorhandenen Kompetenzen decken den Bereich von der Nano- bis zur Makroskala ab und erstrecken sich über unterschiedliche Komplexitätsbereiche und erlauben so die durchgängige Simulation von Materialeigenschaften. Moderne Forschung auf hochaktuellen Gebieten geht zudem über traditionelle Fachbereichsgrenzen hinaus und erfordert interdisziplinäre Ansätze und Strukturen. Durch das DCMS wird genau dies forciert: Werkstoffwissenschaftler, Informatiker, Maschinenbauer, Mathematiker, Physiker, Bauingenieure, Biologen und Chemiker gehen gemeinsam der Frage nach, wie durch Computersimulationen Materialien anwendungsgerecht, ressourcenschonend und effizient entwickelt werden können.

Nachwuchsförderung und Internationalisierung

Die Graduiertenförderung stellt ein zentrales Handlungselement des DCMS dar. Mit der als Pilotprojekt seit 2015 aus Mitteln der Europäischen Union und des Freistaates Sachsen finanzierten ESF-Nachwuchsforschergruppe CoSiMa (Computersimulationen für das Materialdesign) wird dieses Ziel nachhaltig und strukturbildend unterstützt. Ein weiteres eng mit dem DCMS verbundenes Projekt stärkt zudem die weltweite Vernetzung der Dresdner Materialforschung. In der aus Mitteln des Zukunftskonzeptes der TU Dresden geförderten „International Excellence Graduate School on Emerging Materials and Processes“, kurz iEGSEMP, arbeiten auf deutscher Seite sieben Nachwuchsforscher im engen wissenschaftlichen Austausch mit ebenso vielen Kollegen in Südkorea gemeinsam an aktuellen Fragen der Materialwissenschaft. Die

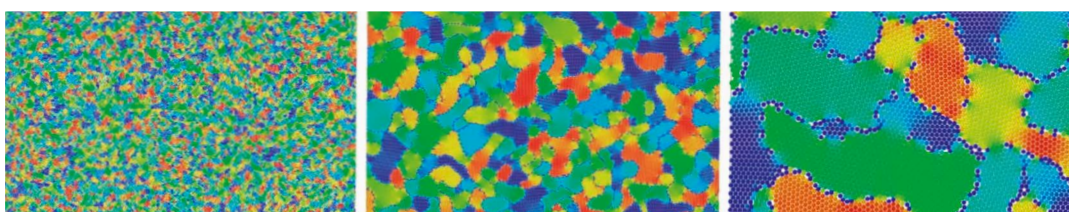
Themengebiete der Nachwuchswissenschaftler in beiden Gruppen spiegeln den multi- und interdisziplinären Gedanken des DCMS wider und geben die Richtung für die kommenden Jahre vor: Materialforschung für Anwendungen in Elektronik, Biologie und Lebenswissenschaften, Energietechnik, Verfahrenstechnik und Automobilbau leistet wichtige Beiträge zum wissenschaftlichen und wirtschaftlichen Fortschritt in Dresden und im Freistaat Sachsen und fördert die praxisorientierte Forschung und die Gewinnung ökologisch und ökonomisch nachhaltiger Forschungsergebnisse.



Simulation von atherosklerotischen Arterienwänden
Foto: Prof. D. Balzani, TUD.

Zukunft der Materialforschung

Künstliche Intelligenz wird zukünftig eine noch stärkere Rolle bei der Suche nach neuen Materialien spielen. Aus den vielen Tausend wissenschaftlichen Publikationen, die tagtäglich erscheinen, können intelligente Algorithmen die für Forscher und Nutzer relevanten Daten extrahieren und individualisiert zur Verfügung stellen. Als ultimative Vision übernehmen Maschinen ganz die Suche nach neuen Materialien, durch sogenannte „unsupervised discoveries“. Benötigt man im Jahr 2050 für ein Produkt einen Werkstoff mit hochspezifischen Eigenschaften, die kein bekanntes Material besitzt, macht sich der Computer ans Werk: Er prüft eine große Anzahl an chemischen Zusammensetzungen, schließt dabei automatisch in die Irre führende Wege aus, simuliert die grundlegenden Charakteristika vieler Materialien sowie deren Integration in Produktion und Nutzung und liefert nach wenigen Minuten das passende Material, zusammen mit einer genauen Anleitung, wie es herzustellen und zu verarbeiten ist, um sich ideal in das Produkt zu integrieren. Damit baut man die oben schon erwähnte durchgängige Kette noch weiter aus. Der digitale 3D-Druck wird um die digitale 3D-Synthese erweitert und man betrachtet das Material im gesamten Kontext: vom Bit zum Atom zum System. ■



Kornwachstumssimulation in nanokristallinen dünnen Schichten mittels eines Phasenfeldkristall-Modells
Abbildung: Prof. A. Voigt, TUD

Kontakt

Dresden Center for Computational Materials Science (DCMS)

Vorstand des DCMS:
Prof. Dr. Gianaurelio Cuniberti (Geschäftsführender Direktor)
Prof. Dr. Wolfgang E. Nagel
Prof. Dr. Gotthard Seifert

Wissenschaftlicher Koordinator:
Dipl.-Phys. Florian Pump

TU Dresden
01069 Dresden
Tel.: +49 351 463 31409
Fax: +49 351 463 31422

dcms@tu-dresden.de
http://dcms.tu-dresden.de/
http://facebook.com/tud.dcms/