

## **Werkstoffe: Entwicklung mit Simulation - Entdeckung durch Simulation**

### **Prof. Dr.-Ing. Dierk Raabe**

Abteilung Mikrostrukturphysik und Legierungsdesign, Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH, Düsseldorf

Komplexe Ingenieurwerkstoffe müssen heute möglichst über die gesamte Prozesskette und Weiterverarbeitung durch Simulationen beschreibbar sein. Je nach Prozess und Werkstoff spielen dabei unterschiedliche Aspekte eine hervorgehobene Rolle. Beispiele im Falle von typischen Konstruktionswerkstoffen sind umformtechnische Kenngrößen wie etwa die Fließgrenze, die Umformbarkeit oder die Zugfestigkeit.

Von zunehmend großer Bedeutung ist aber auch die prozessbegleitende Vorhersage von mikrostrukturellen, inneren Variablen wie etwa der Versetzungsdichte, der Korngröße, des rekristallisierten Volumenanteils, der kristallographischen Textur oder des daraus resultierenden Fließortes. Von besonderer Bedeutung ist bei solchen Simulationen auch eine Vorhersagemöglichkeit der Schädigung und ihrer Akkumulation im Verlauf der Fertigung und Weiterverarbeitung.

In diesem Beitrag wird ein kurzer Überblick über den Stand der Technik zu diesen Fragestellungen am Beispiel der Umformprozesse gegeben wobei insbesondere das frei verfügbare Simulationspaket DAMASK vorgestellt wird (<https://damask.mpie.de/>). Abschließend werden auch noch Beispiele gegeben, wie etwa mit Hilfe quantenmechanischer Simulationsmethoden auch gänzlich neue Werkstoffklassen entwickelt werden können.