

Dr.-Ing. Martin Diehl absolvierte sein Diplomstudium des Maschinenwesens mit den Vertiefungsrichtungen Werkstofftechnik und numerische Mechanik an der TU München von 2005 bis 2010. Im Anschluss daran arbeitete er als Doktorand am Max-Planck-Institut für Eisenforschung (MPIE) in Düsseldorf in der Gruppe von PD. Dr. Franz Roters (Abteilung Mikrostrukturphysik und Legierungsdesign, Prof. Dierk Raabe). Im Jahre 2015 wurde er mit der Arbeit "High-Resolution Crystal Plasticity Simulations" an der RWTH Aachen mit summa cum laude promoviert. Als PostDoc (2015–2019) und Gruppenleiter für Integrated Computational Materials Engineering (2019–2020) blieb er zunächst – unterbrochen von Auslandsaufenthalten am National Institute for Materials Science (Tsukuba, Japan 2017) und an der University of California, Los Angeles (2019) – am MPIE. Seit Oktober ist er Professor für Computational Materials Science an der Katholieke Universiteit Leuven in Belgien.

Ziel von Herrn Diehls Forschung ist es, das mechanische Verhalten von metallischen Werkstoffen zu verstehen und zu modellieren. Dies erfordert die Betrachtung der internen Mikrostruktur und ihrer Evolution bei mechanischer oder thermischer Belastung. Mikrostrukturbasierte Simulationen sind daher das Hauptthema seiner wissenschaftlichen Arbeit. Diese Simulationen führt er in enger Zusammenarbeit mit experimentell arbeitenden Kollegen durch. Der kritische Vergleich von experimentellen Ergebnissen mit berechneten Vorhersagen dient dabei als Benchmark um die Vorhersagekraft einer Theorie oder eines Modells zu beurteilen. Experimente dienen auch dazu die für die Simulation notwendigen Parameter zu bestimmen. Teilweise werden ‚reale‘ Experimente auch durch ‚virtuelle‘ Experimente, d.h. Simulationen auf kleineren Längenskalen ergänzt oder ersetzt. So können physikalisch motivierte Kontinuumsmodelle entwickelt und parametrisiert werden. Beispielsweise hat Martin Diehl an der Entwicklung eines Kristallplastizitätsmodells für Wolfram basierend auf Ergebnissen von Simulationen auf atomistischer Längenskala mitgearbeitet [1]. Kristallplastizitätsmodelle sind insbesondere geeignet um die Charakteristika plastischer Verformung in Metallen – elastische und plastische Anisotropie, Kaltverfestigung, Dehnraten- und Temperaturabhängigkeit – in der Kontinuumsmechanik abzubilden.

Während seiner Promotion beschäftigte sich Martin Diehl schwerpunktmäßig mit Dualphasenstählen [2]. Diese Stähle bestehen aus einer vergleichsweise duktilen Matrix aus Ferrit die mit festem, aber sprödem Martensit verstärkt ist. Das mechanische Verhalten eines Dualphasenstahls hängt daher sowohl von den anisotropen Eigenschaften der beiden Phasen als auch dem Volumenanteil und Verteilung des Martensits ab. Um die komplexe Mikrostruktur von industriell eingesetzten Dualphasenstählen simulieren zu können, wurde zunächst ein schnelles numerisches Lösungsverfahren weiterentwickelt und auf für die Verwendung in kristallplastischen konstitutiven Gesetzen angepasst [3,4]. Basierend auf diesen Vorarbeiten wurde

STECKBRIEF



dann das mikromechanische Verhalten verschiedener Mikrostrukturen – entweder experimentell ermittelt [5] oder künstlich erzeugt – untersucht. Ziel dieser Simulationen war es, geeignete Mikrostrukturen zu identifizieren um zielgerichtet Werkstoffe für bestimmte Anforderungen zu entwickeln. Die zur Promotion entwickelten Arbeiten werden am MPIE bis heute verwendet und aktuell durch die Anwendung von maschinellem Lernen erweitert. Dies erlaubt den zielgerichteten Einsatz von Simulationen für die Berechnung von Mikrostrukturen mit vorteilhaften Eigenschaften.

Im Anschluss an seine Promotion, als PostDoc und Gruppenleiter, ergänzte Herr Diehl sein wissenschaftliches Portfolio und untersuchte weitere physikalische Phänomene wie Rekristallisation [6,7] und Schädigung [8]. Bei

dieser Arbeit stand insbesondere die Kopplung mehrerer Modelle im Vordergrund die es im Sinnes des Integrated Computational Materials Engineering (ICME) ermöglicht die Zusammenhänge von Prozess-Struktur-Eigenschaft ganzheitlich zu betrachten [8]. Mikrostruktur-basierte Multiphysik-Simulationen sind in vielerlei Hinsicht herausfordernder als reine Kristallplastizitäts-Simulationen: Durch die starken Wechselwirkungen der verschiedenen Phänomene, ist einerseits die numerische Lösung oftmals deutlich erschwert und andererseits führen falsche Modellannahmen durch die nichtlineare Kopplung der einzelnen Modelle viel leichter zu fehlerhaften Vorhersagen. Das genaue Verständnis der physikalischen Mechanismen auf atomarer Ebenen und robuste numerische Löser sind daher für Multiphysik-Simulationen nochmals wichtiger als für ‚einfache‘ Kristallplastizitäts-Simulationen.

Ein durchgängiger Fokus von Herrn Diehls Tätigkeit war die Entwicklung von DAMASK [10], dem Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit. DAMASK enthält numerische Löser, konstitutive Gesetze und Werkzeuge zur Vorbereitung und Auswertung von Simulationen. DAMASK wurde für die Untersuchung unterschiedlicher Fragestellungen aus den Bereichen Blechumformung, Mikromechanik und Legierungsdesign verwendet [11]. Als Open Source Soft-

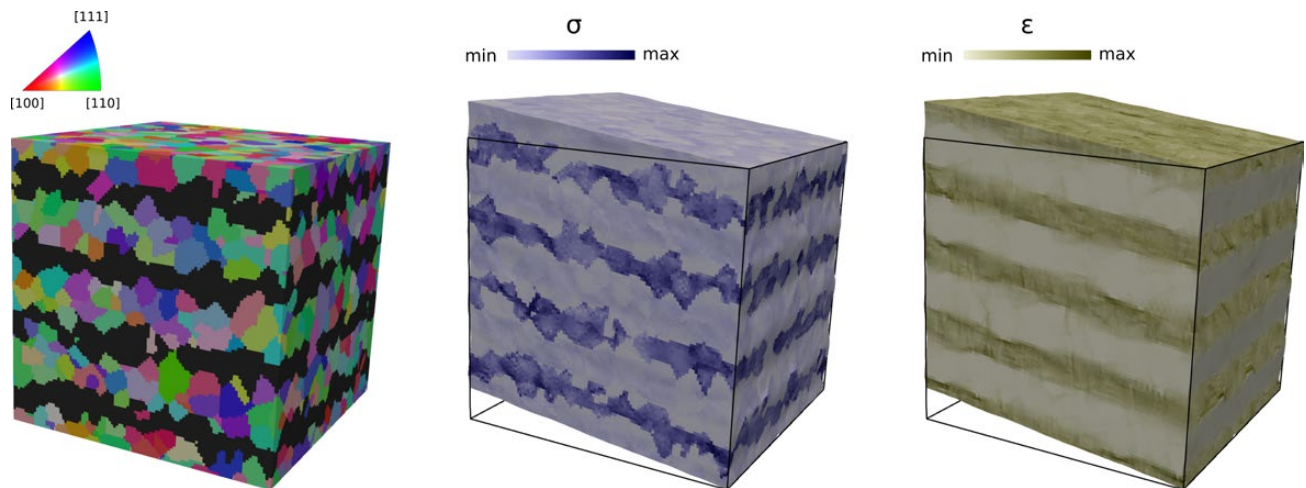


Abb. 1: Kristallplastizitäts-Simulation eines Dualphasenstahl: Links: Undeformierte Mikrostruktur, die ferritischen Körner sind nach ihrer kristallographischen Orientierung (inverse Polfigur, IPF) eingefärbt und die martensitische Phase ist in schwarz dargestellt. Mitte: Vergleichsspannung bei ca. 10% Scherverformung. Rechts: Vergleichsdehnung bei ca. 10% Scherverformung.

ware wird es von zahlreichen Wissenschaftlern sowohl in Deutschland, z.B. an der TU München (Lehrstuhl für Werkstoffkunde und Werkstoffmechanik), an der Universität Kassel (Institut für Werkstofftechnik, Qualität und Zuverlässigkeit) und der RWTH Aachen (Institut für Bildsame Formgebung, Institut für Eisenhüttenkunde) als auch weltweit (z.B. Australian Nuclear Science and Technology Organisation, Australien; Paul Scherrer Institut, Schweiz; Michigan State University, USA; und Imperial College, England) benutzt und teilweise auch weiterentwickelt. Die nachhaltige Entwicklung von Software im Bereich Werkstoffmechanik und Werkstoffkunde wird auch ein Schwerpunkt von seiner Tätigkeit an der Katholieke Universiteit Leuven (KU Leuven) sein. Ziel seiner Arbeit in Belgien ist es, nicht nur neue Modelle und Methoden im Bereich der computergestützten Materialwissenschaft zu entwickeln, sondern sie auch für Anwender aus dem akademischen Bereich und der Industrie nutzbar zu machen.

Literatur

1. D. Cereceda, M. Diehl, F. Roters, D. Raabe, J.M. Perlado, and J. Marian. Unraveling the temperature dependence of the yield strength in single-crystal tungsten using atomistically-informed crystal plasticity calculations. *International Journal of Plasticity*, 78:242–265, 2016.
2. C. C. Tasan, M. Diehl, D. Yan, M. Bechtold, F. Roters, L. Schemmann, C. Zheng, N. Peranio, D. Ponge, M. Koyama, K. Tsuzaki, and D. Raabe. An overview of dual-phase steels: Advances in microstructure-oriented processing and micromechanically guided design. *Annual Review of Materials Research*, 45:391–431, 2015.
3. P. Eisenlohr, M. Diehl, R. A. Lebensohn, and F. Roters. A spectral method solution to crystal elasto-viscoplasticity at finite strains. *International Journal of Plasticity*, 46:37–53, 2013.
4. P. Shanthraj, M. Diehl, P. Eisenlohr, F. Roters, and D. Raabe. Spectral Solvers for Crystal Plasticity and Multi-physics Simulations. In C-H Hsueh, S. Schmauder, C-S Chen, K. K. Chawla, N. Chawla, W. Chen, and Y. Kagawa, editors, *Handbook of Mechanics of Materials*, pages 1347–1372. Springer, Singapore, 2019.
5. M. Diehl, D. An, P. Shanthraj, S. Zaeferrer, F. Roters, and D. Raabe. Crystal Plasticity Study on Stress and Strain Partitioning in a Measured 3D Dual Phase Steel Microstructure. *Physical Mesomechanics*, 20(3):311–323, 2017.
6. M. Diehl, L. Kertsch, K. Traka, D. Helm, and D. Raabe. Site-specific quasi in situ investigation of primary static recrystallization in a low carbon steel. *Materials Science and Engineering: A*, 755:295–306, 2019.
7. M. Diehl and M. Kühbach. Coupled Experimental-Computational Analysis of Primary Static Recrystallization in Low Carbon Steel. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 28:014001, 2020.
8. M. Diehl, M. Wicke, P. Shanthraj, F. Roters, A. Brueckner-Foit, and D. Raabe. Coupled Crystal Plasticity-Phase Field Fracture Simulation Study on Damage Evolution Around a Void: Pore Shape Versus Crystallographic Orientation. *JOM*, 69(5):872–878, 2017.
9. M. Diehl. Review and outlook: mechanical, thermodynamic, and kinetic continuum modeling of metallic materials at the grain scale. *MRS Communications*, 7(4):735–746, 2017.
10. F. Roters, M. Diehl, P. Shanthraj, P. Eisenlohr, C. Reuber, S. L. Wong, T. Maiti, A. Ebrahimi, T. Hochrainer, H-O Fabritius, S. Nikolov, M. Friak, N. Fujita, N. Grilli, K. G. F. Janssens, N. Jia, P. J. J. Kok, D. Ma, F. Meier, E. Werner, M. Stricker, D. Weygand, and D. Raabe. DAMASK – The Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit for Modelling Multi-Physics Crystal Plasticity, Damage, and Thermal Phenomena from the Single Crystal up to the Component Scale. *Computational Materials Science*, 158:420–478, 2019.
11. M. Diehl, D. Wang, C. Liu, J. Rezaei Mianroodi, F. Han, D. Ma, P. J. J. Kok, F. Roters, and P. Shanthraj. Solving material mechanics and multiphysics problems of metals with complex microstructures using DAMASK – The Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit. *Advanced Engineering Materials*, 22(3):1901044, 2020.

Kontakt:

Martin Diehl
 NUMA Research Unit
 Department of Computer Science
 Celestijnenlaan 200A, box 2402
 B-3001 Leuven, Belgium