

DFG-Projekt Schm 746/88-1

Numerische Optimierung von bioinspirierten keramischen Werkstoffsystemen

Beginn des Projekts: 01.12.2009

Ende des Projekts: 31.08.2013

Zusammenfassung:

Um einen besseren Einblick und Verständnis der mechanischen Eigenschaften von bioinspirierten Materialien aus oxidierten Keramiken (Titandioxid, TiO_2) und organischen Schichten (Polyelektrolyt, PE) zu gewinnen, werden numerische und analytische Methoden und Modelle im mikroskopischen Bereich angewendet. Die Untersuchungen konzentrieren sich auf die elastischen Eigenschaften der keramischen Phase, dem viskosem Verhalten der organischen Phase und die Eigenschaften der Zwischenschichten und deren Einfluss auf die Elastizität, Festigkeit und Duktilität der bioinspirierten Struktur. Finite Elemente Simulationen der Nanoindentation und Zugversuche des geschichteten Nanoverbundwerkstoffs (Abb. 1 rechts) wurden durchgeführt um die mechanischen Eigenschaften des Verbundwerkstoffs und dessen Komponenten zu bestimmen. In Abbildung 2 ist ein Beispiel für eine Simulation der Nanoindentation einer Probe mit einer PE-Schichtdicke von 10 nm gezeigt. Der Einfluss der Schichtdickenverhältnisse der organischen Phasen auf die Härte und den E-Modul im Verbundwerkstoff wurden analysiert.

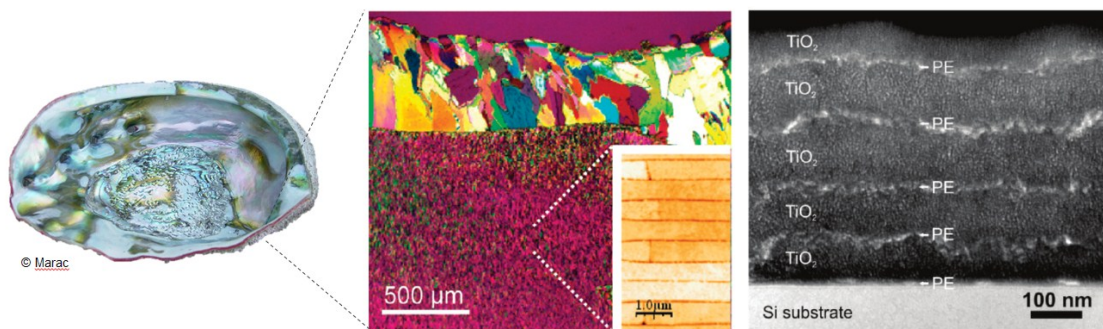


Abb. 1: Die Schale einer Seeohrmuschel und hoch aufgelöste Einblicke ins Innere der Schale. Perlmutt, das aus Protein und Aragonit besteht, ist in der gelb gefärbten Abbildung. Auf der rechten Seite die Struktur und der Aufbau des künstlichen Perlmutt Materials dargestellt.^[1]

^[1]Burghard, Z.; Zini, L.; Srot, V.; Bellina, P.; van Aken, P.A.; Bill J., *Toughening through nature-adapted nanoscale design*, *Nano letters* 2009 American Chemical Society, 9(12), 4103 8.

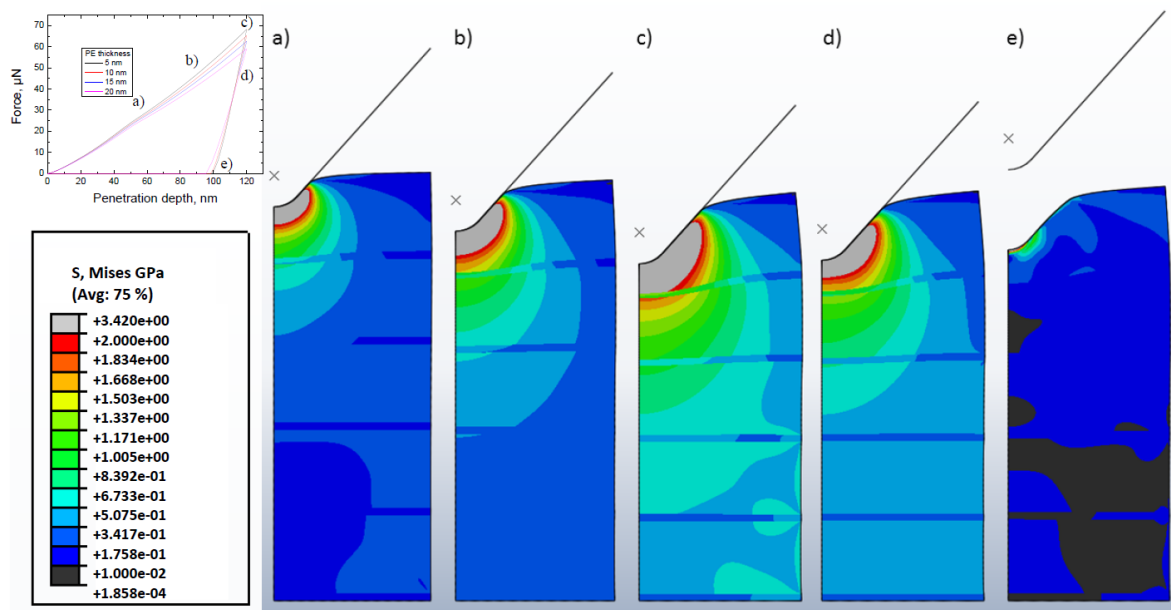


Abb. 2: Die von Mises-Stress Verteilung an bestimmten Stellen im Verlauf der Nanoindentationssimulation eines TiO_2/PE -Verbundwerkstoffes, die Schichtdicke von TiO_2 beträgt 100 nm und die Schichtdicke von PE 5 nm. a) und b) zeigen zwei Momentaufnahmen am Beginn des Nanoindentationsprozesses, c) zeigt den Punkt der maximalen Eindringtiefe des Indenters und d) und e) zwei Momentaufnahmen der Entspannung des Materials nach Beendigung der Belastung. Die Abbildung in der linken oberen Ecke zeigt die Punkte a) bis e) der Simulation auf der Kraft/Eindringkurve.

Die Modellierung der Materialeigenschaften eines Verbundwerkstoffes basiert generell auf einem Modell der Eigenschaften seiner Komponenten. In diesem Fall werden die Spannungs/Belastungs-Kurven der beiden Phasen (der TiO_2 - und PE-Schicht) benötigt.

Dafür wurde eigens eine Methode entwickelt, die durch eine Kombination der Ergebnisse der Nanoindentation mit der Finite Element Methode die charakteristischen mechanischen Eigenschaften der TiO_2 - und PE-Schichten beschreibt. Ein Beispiel für die Ergebnisse einer Parameterstudie im Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen ist in Abbildung 3 gezeigt. Basierend auf den Ergebnissen der Parameterstudie konnten die Simulationen des Nanoverbundwerkstoffes durchgeführt werden. Im Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen zeigt sich ein Unterschied im Elastizitätsmodul. Durch die Berücksichtigung des Konzepts der mineralischen Brücken, (das sind Strukturen in natürlicher Perlmutter, die zwei Schichten aus Aragonit verbinden) konnten die resultierenden Kraft/Eindringkurven des Nanoindentation Experiment erklärt und simuliert werden. Die Ergebnisse der Simulationen und des analytischen Modells mit mineralischen Brücken sind in Abbildung 3b gezeigt.

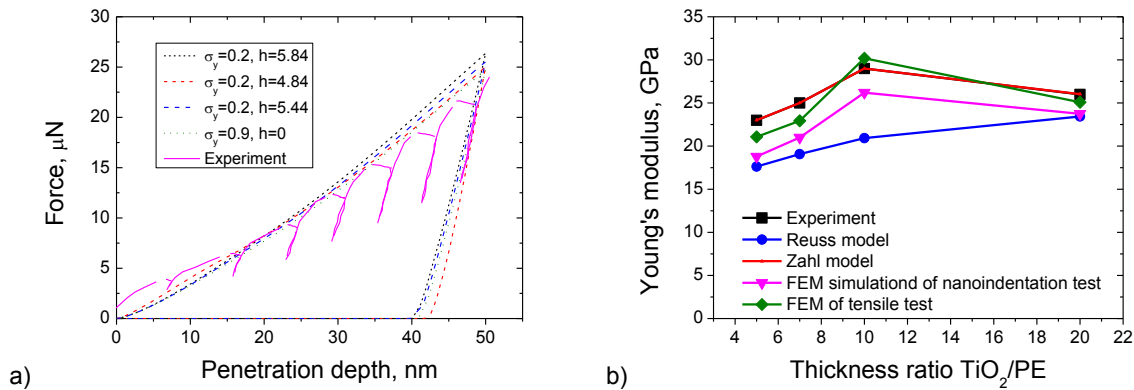


Fig. 3: Parameterstudien der mechanischen Eigenschaften der Komponenten des Nanoverbundwerkstoffes a) Ein Vergleich der Kraft/Eindring-Kurven aus Nanoindentationsexperimenten und FE-Simulationen mit einer Variation der folgenden Parameter: E-Modul $E = 27 \text{ GPa}$ und Streckgrenze $\sigma_y = 0.2 \text{ GPa}$ und Variation des Kaltverfestigungswertes: $h = 5.84, 4.84$ und 5.44 GPa ; b) Die Abhängigkeit des Elastizitätsmoduls des geschichteten TiO_2/PE -Nanoverbundwerkstoffes vom Schichtdickenverhältnis seiner Komponenten. Alle Modelle enthalten mineralische Brücken mit einem sehr hohen E-Modul von 282 GPa (die experimentelle Kurve und die Kurve die nach dem Modell nach Zahl et al. berechnet wurde, überlappen).

Bei allen Volumenanteilverhältnissen der Schichten zeigen die Ergebnisse qualitativ gute Übereinstimmung mit den experimentell gewonnenen Ergebnissen außer bei den Ergebnissen der Nanoindentation-Simulation. Dort sind die Werte des E-Moduls niedriger wie in den experimentell aber auch wie in den analytisch (mit Berücksichtigung der Mineralbrücken) bestimmten Werten. Dies kann auf komplexe Spannungszustände während der Erniedrigung des Indenters aber auch auf die anisotrope Natur des geschichteten Materials zurück zu führen sein. Zur Überprüfung der Ergebnisse der FE-Simulationen der Nanoindentation wurden auch Zugversuche mit der gleichen Volumenanteil von mineralischen Brücken simuliert. Zukünftige Arbeiten werden sich auf den Einfluss der Schichtdickenverhältnisse auf die Rissausbreitung und Rissvermeidung konzentrieren.

Projektpartner:

- Biologisches Institut, Abt. Zoologie
- Biologisches Institut, Abt. Molekulabiologie und Virologie der Pflanzen
- Institut für Technische Biochemie
- Institut für Materialwissenschaft

Für weitere Informationen besuchen sie bitte die Projekt-Homepage: <http://www.bionik.uni-stuttgart.de/>

Veröffentlichungen:

1. Galina Lasko, Zaklina Burghard, Immanuel Schäfer, Siegfried Schmauder, Ulrich Weber and Dieter Galler, Definition of stress-strain behavior of bio-inspired layered TiO₂/PE-nanocomposite by inverse modeling based on FE-simulations of nanoindentation test, Molecular & Cellular Biomechanics special issue (2012), accepted (in Press).
2. Galina Lasko, Zaklina Burghard, Joachim Bill, Immanuel Schäfer, Siegfried Schmauder, Ulrich Weber, Simulation of mechanical properties of bio-inspired TiO₂/PE nanocomposites, Advanced Engineering Materials, (2012), accepted (in Press).
3. Immanuel Schäfer, Galina Lasko, Tuan Anh Do, Jürgen Pleiß, Ulrich Weber, Siegfried Schmauder, Peptide - Zinc oxide interaction: Finite Element Simulation with cohesive elements based on molecular dynamics simulation, (2013), Work in Progress.

Konferenz Präsentationen:

1. Simulations of mechanical properties of bio-inspired TiO₂/PE-nanocomposites, International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences (ICCES) 2012, 30 April- 4 May 2012, Crete, Greece

Poster Präsentationen:

1. Numerical optimization of bioinspired ceramics material systems at the international one-day Workshop "Prospects of Bionics for functional Materials Science and Engineering", 22 September, 2010, Leoben, Austria
2. Numerical optimization of bioinspired ceramics material systems at the international symposium "Molecular Bionics-From biomineralization to functional materials" 3-6 October 2010, Schloss Ringberg, Rottach-Egern, Germany
3. FEM-Simulation der mechanischen Eigenschaften bionisch inspirierter TiO₂/PE Nano-Verbundwerkstoffe anlässlich der Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Biomaterialien 2011, 10-12 November 2011, Gießen, Germany
4. Simulation der mechanischen Eigenschaften von bio-inspirierten TiO₂/PE Nanoverbundmaterial anlässlich des 6. Bionikkongress „Patente der Natur“ 26-27 October 2012, Bremen.

Danksagung:

Wir danken der DFG für die Unterstützung im Rahmen des Projektes „Biologische Erzeugung von Oxidkeramiken“ (SCHM 746/88-1).

Kontakt:

Immanuel Schäfer

Tel:+49/711 685 62734 / E-mail: Immanuel.Schaefer@imwf.uni-stuttgart.de

Dr. Galina Lasko

Tel:+49/711 685 62559 / E-mail: Galina.Lasko@imwf.uni-stuttgart.de

Dr.-Ing. Ulrich Weber

Tel:+49/711 685 63055 / E-mail: Ulrich.Weber@imwf.uni-stuttgart.de