

**Verbundprojekt: Digitalisierung einer Prozesskette zur Herstellung,  
Charakterisierung und prototypischen Anwendung magnetokalorischer  
Legierungen (DiProMag) - Teilvorhaben: Magnetokalorische  
Heuslerverbindungen und Ontologieentwicklung**

**FKZ 13XP5120A**

**Laufzeit des Vorhabens:**

**01.02.2021 - 31.05.2024**

**Teil I, Kurzbericht:**

Das Projekt *DiProMag* ist initiiert worden, um den Herausforderungen der modernen Klimatechnik und den Anforderungen zukünftiger Schlüsseltechnologien wie Künstlicher Intelligenz und Quantencomputern zu begegnen – Technologien, die ohne effiziente Heiz- und vor allem Kühlsysteme unvorstellbar sind. Unser Ziel ist es, mit den im Projekt untersuchten „magnetokalorischen“ Materialien technologische Innovationen zu ermöglichen, die eine energieeffiziente und umweltfreundliche Kühlung vorantreiben können. Die zugrunde liegende Idee basiert auf der durch ein Magnetfeld gesteuerten Umwandlung der Kristallstruktur dieser Materialien, bei der Energie freigesetzt oder gespeichert wird. Dieser Prozess bietet eine nachhaltige Alternative zur klassischen Kühltechnologie, die auf Kompression und Expansion setzt und oft noch umweltschädliche Kältemittel erfordert.

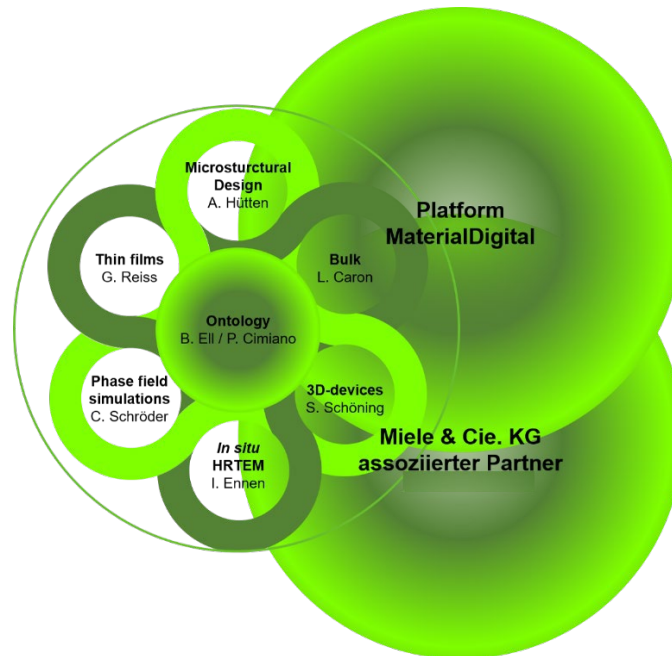
Unser Team aus kooperierenden Partnern der Hochschule und Universität Bielefeld verfolgt in Zusammenarbeit mit unserem Industriepartner Miele das ambitionierte Ziel, die gesamte Prozesskette – von der experimentellen Herstellung und Charakterisierung der magnetokalorischen Materialien über ihre theoretische Modellierung bis hin zur Entwicklung eines Demonstrators – vollständig zu digitalisieren. Dies erfolgt durch die Einführung eines neuen Ansatzes zur skalierbaren Entwicklung umfassender Ontologien, die alle Prozessdaten und Absichten digital abbilden. Auf Basis dieser strukturierten und unstrukturierten Daten wird ein spezielles Verfahren eingesetzt, um einen hochdimensionalen Datenraum zu trainieren, der es ermöglicht, durch Analogieschlüsse digital neues Wissen über die materialphysikalischen Zusammenhänge zu gewinnen.

Langfristig verfolgen wir die Vision, eine digitale Datenbank für magnetokalorische Materialien zu schaffen, die die Entdeckung und Weiterentwicklung besserer Materialeigenschaften beschleunigen und optimieren soll. Mit dieser Datenbank wollen wir einen Beitrag dazu leisten, Fortschritte auf diesem Gebiet künftig schneller, effektiver und kostengünstiger zu erzielen.

Das Verbundprojekt startete am 01.02.2021 mit einer breit angelegten Zusammenarbeit, siehe Abbildung 1, auf mehreren Ebenen. Am Campus Bielefeld kooperierten die interdisziplinär arbeitenden Partner der Hochschule Bielefeld (HSBI) – die Arbeitsgruppen Schöning, Schröder und der Universität Bielefeld – die Arbeitsgruppen Caron, Cimiano/Ell, Hütten und Reiss – intensiv miteinander. Zudem gab es enge Verbindungen zwischen den Akteuren am Campus Bielefeld und der Plattform MaterialDigital (PMD) sowie eine partnerschaftliche Zusammenarbeit mit dem Industriepartner Miele & Cie. KG.

Im Fokus des Projekts DiProMag an der Hochschule Bielefeld wurde im Teilvorhaben Multiskalen-Simulationen in enger Zusammenarbeit mit der Plattform MaterialDigital (PMD) ein pyiron-basierter Workflow zur Automatisierung der gesamten Simulationskette, ausgehend von der Beschreibung der in der AGs Hütten und Caron hergestellten Heuslerverbindungen (Materialparameter, Struktur, etc.) hin zur Bestimmung der Entropieänderung als Kennzahl für den Magnetokalorischen Effekt, entwickelt. Um die im Projekt DiProMag entwickelten technischen Methoden für die Projektpartner und auch die materialwissenschaftliche Community nachhaltig langfristig nutzbar und wiederverwendbar zu machen,

wurde eine „Pipeline“ entwickelt, um alle vorher genannten Entwicklungen der AG Schröder (Simulationsworkflow und Integration verschiedener Simulations- und Berechnungstools in pyiron), sowie die Ontologieentwicklung der AG Cimiano/ELL im täglichen Arbeitsablauf durch die tatsächlichen Anwender (AG Hütten, AG Reiss, AG Caron, AG Schöning) des Projekts DiProMag im Speziellen, aber potenziell übertragbar auf die wissenschaftliche Community im Allgemeinen besser gebrauchsfähig zu machen.



**Abbildung 1:** Ebenen der Kooperationen aller interdisziplinären Partner von DiProMag

Mittels 3D-Hybrid-Druck wurde ein innovatives prototypisches Device entwickelt für den Wärmeaustausch zwischen einem Fluid und dem magnetokalorischen Material. In Zusammenarbeit mit der Universität Bielefeld wurde gezeigt, dass es möglich ist, magnetokalorisches Material mittels Sputterdeposition auf ein gedrucktes Substrat unter Erhaltung des nicht-spannungsinduzierten Phasenübergangs aufzubringen (AG Reiss) und ebenso ultradünne, freistehende Filme des magnetokalorischen Materials einzudrucken (AG Hütten). Darüber hinaus wurden umfangreiche Untersuchungen zu den Eigenschaften des gedruckten, leitfähigen Materials durchgeführt und verschiedene Einflussgrößen auf die elektrische Leitfähigkeit identifiziert sowie Ursachen für deren Anisotropie.

Die Zusammenarbeit aller Partner am Campus Bielefeld war äußerst inspirierend und hat zahlreiche wissenschaftliche Fragestellungen aufgezeigt, die weit über die ursprünglichen Projektziele hinausreichen. Alle Meilensteine wurden erreicht, und einige führten zu noch besseren Lösungsansätzen als ursprünglich vorgesehen.

Ein bedeutendes Ergebnis dieser erfolgreichen Kooperation aller Partner am Campus Bielefeld ist die Veröffentlichung der finalen Ontologie, die unter <https://gitlab.ub.uni-bielefeld.de/semantic-computing/dipromagontology> öffentlich zugänglich ist. Die T-Box steht als Turtle-Datei zur Verfügung, ebenso wie alle Templates und Beispiel-Template-Instanzen. Die automatisch aus der OTTR-Template-Bibliothek generierte Dokumentation der Templates ist unter [https://www.dipromag.de/dipromag\\_onto/index.html](https://www.dipromag.de/dipromag_onto/index.html) abrufbar. Darüber hinaus sind sämtliche Daten auf Zenodo unter der DOI: 10.5281/zenodo.10606363 veröffentlicht.

**Verbundprojekt: Digitalisierung einer Prozesskette zur Herstellung,  
Charakterisierung und prototypischen Anwendung magnetokalorischer  
Legierungen (DiProMag) - Teilvorhaben: Magnetokalorische  
Heuslerverbindungen und Ontologieentwicklung**

**FKZ 13XP5120A**

**Laufzeit des Vorhabens:**

**01.02.2021 - 31.05.2024**

**Teil II, Darstellung der durchgeführten Arbeiten:**

**Darstellung der durchgeführten Arbeiten im Teilprojekt Multiskalen-Simulationen (AG Schröder):**

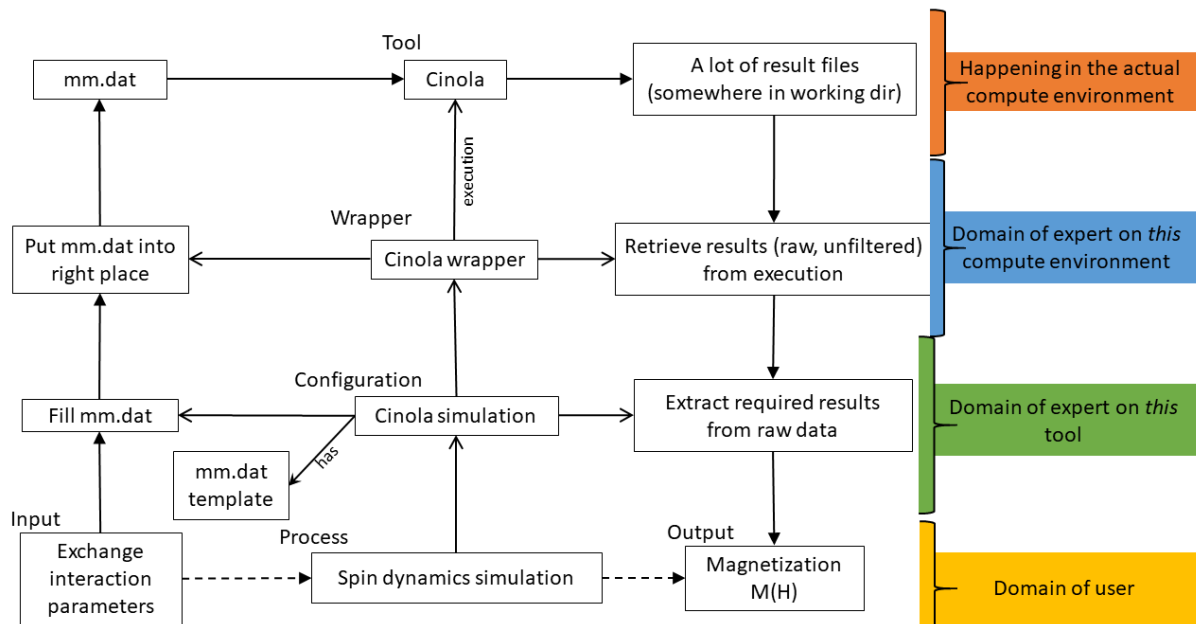
In AP6.1 konnte zu Beginn des Projekts wie geplant die Kooperation mit der Plattform MaterialDigital (PMD) erfolgreich etabliert. Die AG Schröder war in der AG Workflows der PMD aktiv und beteiligte sich an den regelmäßigen Jour fixe. Im Rahmen der AG Workflows wurde in Zusammenarbeit mit den Satellitenprojekten der PMD eine Anforderungsbeschreibung und Roadmap für den innerhalb der PMD aufzubauenden Workflowstore entwickelt. Ziel des Workflowstores ist es Workflows (Prozess-, Simulations- und Datenverarbeitungsketten), die in den verschiedenen Satellitenprojekten entwickelt werden, allgemein verfügbar zu machen, sodass die Weiterverwendung und Weiterentwicklung durch andere Satellitenprojekte und in Zukunft andere Nutzer der PMD ermöglicht wird. Dazu ist es notwendig einen allgemeinen Rahmen (Framework) zu schaffen, in dem die Workflows der Satellitenprojekte eingebettet werden. Im Rahmen der PMD werden hierzu die bestehenden Workflowframeworks pyiron<sup>1</sup> und Simstack<sup>2</sup> eingesetzt. Das Projekt DiProMag beteiligte sich an der Weiterentwicklung des Frameworks pyiron in zweierlei Hinsicht. Zum einen war die AG Schröder durch die AG Workflows der PMD an der konzeptionellen Entwicklung der Workflowframeworks beteiligt. Hierzu wurde im Rahmen der Jour fixe der AG Workflows durch die AG Schröder ein Vorschlag zur allgemeinen (unabhängig vom Projekt oder des konkret zu implementierenden Workflows) Strukturierung von Workflows und deren Bestandteilen eingebracht (Abbildung 2). Der Vorschlag teilt die Bestandteile eines Workflows bzw. eines Workflowschrittes (bspw. einer bestimmten Berechnung oder Simulation) in separate Zuständigkeitsbereiche. Dabei wird zwischen der Ebene des Endanwenders, der Ebene des Experten für ein spezifisches Simulationstool und der Ebene des Experten für die compute environment<sup>3</sup> unterschieden. Diese Separation ermöglicht die Wiederverwendung der Einzelschritte, die jeweils durch die einzelnen Expertisen implementiert werden. Somit wird es möglich bspw. für eine durch den Endanwender gewünschte Berechnung (z.B. Magnetisierung vs. Temperatur und Magnetfeld für ein atomistisches Modell einer Heuslerverbindung zur Bestimmung der Entropieänderung) zwischen verschiedenen Simulationstools zu wechseln. Da

---

<sup>1</sup> <https://pyiron.org/>

<sup>2</sup> <https://www.simstack.de/>

<sup>3</sup> Als „compute environment“ wird hier die Hardware- und Softwareinfrastruktur bezeichnet, die zur Ausführung der Simulationstools genutzt wird. Dies betrifft insbesondere High Performance Computing Cluster, deren Gesamtumgebung sich aus den genutzten Betriebs- und Dateisystemen, der Netzwerkinfrastruktur und dem Scheduling System zusammensetzt.



**Abbildung 2:** Die vier Ebenen eines Workflows am Beispiel des Spin-Dynamik-Simulationstools Cinola der AG Schröder. Mit Cinola können über die Berechnung der Magnetisierung Entropieänderungen für die experimentell untersuchten Heuslerverbindungen durchgeführt werden. mm.dat bezeichnet die Cinola-spezifische Konfigurationsdatei. Die Abbildung dient der Darstellung einer allgemeingültigen Aufteilung in Workflowebenen: Cinola, mm.dat, sowie In-/Output und die vom Benutzer gewünschte Simulation können durch andere anwendungsspezifische Beispiele ersetzt werden. Ausgefüllte Pfeile markieren den Fluss von Daten, offene den Kontrollfluss. Unterbrochene Pfeile markieren den Datenfluss aus Nutzersicht; alle weiteren sind für den Nutzer nicht von Interesse.

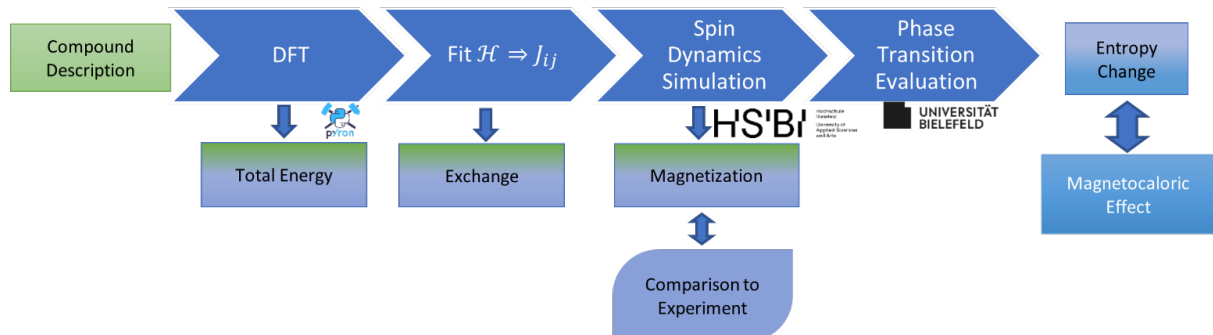
verschiedene Nutzer der PMD verschiedene Simulationstools in ihrer jeweiligen Umgebung verwenden, etwa aus Lizenz-, Kosten- oder Managementgründen, liegt der Vorteil dieses Vorgehens darin, dass verschiedene Nutzer den gleichen, allgemein formulierten Workflow nutzen können, ohne an spezifische Simulationstools gebunden zu sein. Es ist für einen Nutzer so nur notwendig *ein* Simulationstool zur Verfügung zu haben, welches die notwendigen Berechnungen durchführen kann, um das im Workflow eingebrachte Wissen des Workflowentwicklers mittels der PMD nutzen zu können, auch wenn bei der ursprünglichen Entwicklung des Workflows ein anderes Simulationstool für diese Berechnung genutzt wurde.

Darüber hinaus hat sich die AG Schröder aktiv in der PMD und der Weiterentwicklung des Workflowframeworks pyiron eingebracht, indem die Simulationen des Projekts DiProMag in pyiron umgesetzt werden. Zur Umsetzung des AP 6.1 wurde ein Workflow entwickelt, um die gesamte Simulationskette, ausgehend von der Beschreibung (Materialparameter, Struktur, etc.) der in der AGs Hütten und Caron hergestellten Heuslerverbindungen hin zur Bestimmung der Entropieänderung als Kennzahl für den Magnetokalorischen Effekt, abzubilden (Abbildung 3).

Der entwickelte Workflow besteht aus vier Abschnitten:

1. Berechnung der elektronischen Struktur einer ausgewählten Heuslerverbindung mittels DFT.
2. Berechnung der für die Spin-Dynamik Simulationen notwendigen Wechselwirkungsparameter aus der elektronischen Struktur.
3. Simulation der Magnetisierung als Funktion von externem Magnetfeld und Temperatur mittels Monte Carlo Spin-Dynamik Simulationen.
4. Berechnung der Entropieänderung.

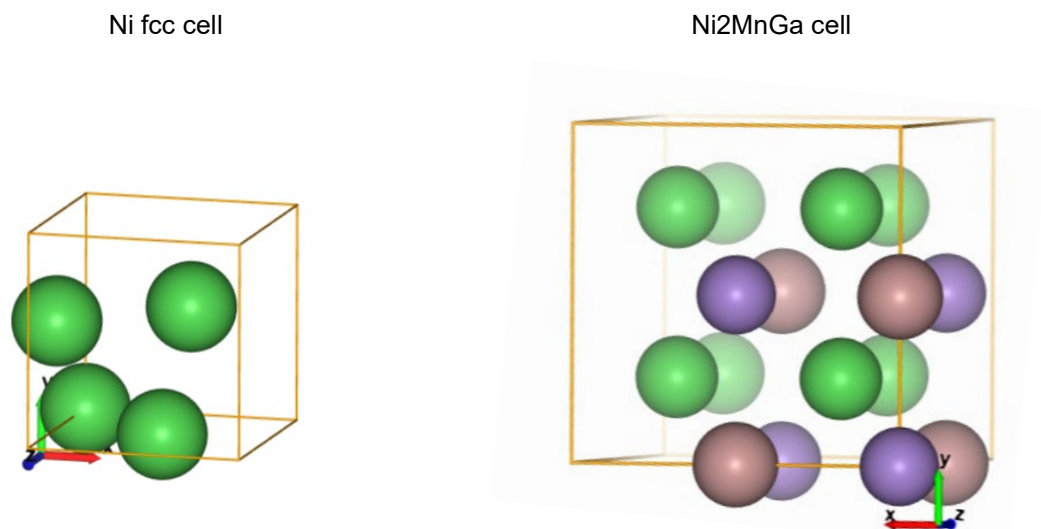
Implementiert wurde der Workflow in enger Kooperation mit der AG von Dr. Tilmann Hickel von der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) in der von der PMD vorgeschlagenen Workflowumgebung pyiron.



**Abbildung 3:** Schematischer Überblick über den Workflow für die notwendigen Berechnungen und Simulationen des AP 6.1.

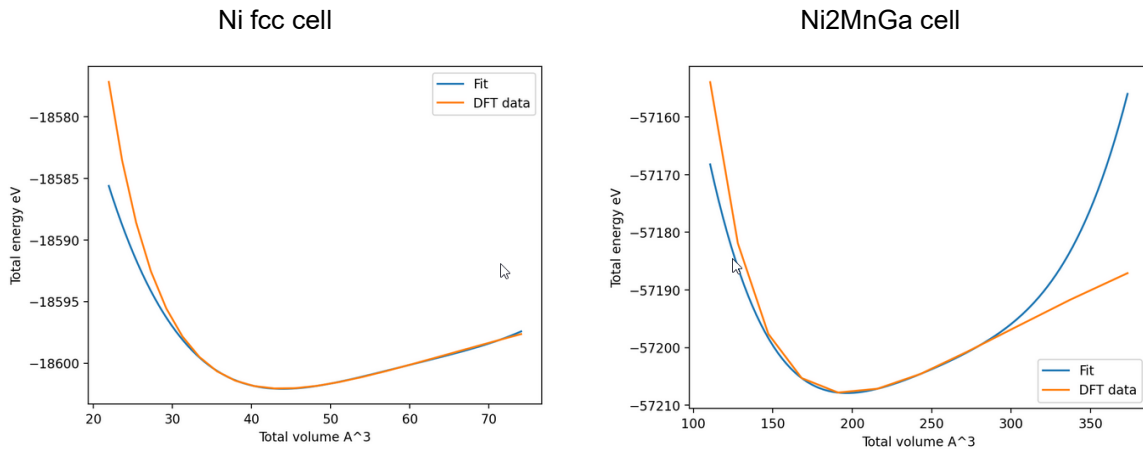
### 1. Berechnung der elektronischen Struktur einer ausgewählten Heuslerverbindung mittels DFT

Die DFT-Berechnungen wurden mithilfe der pyiron-IDE durchgeführt. Die pyiron-Umgebung ist besonders praktisch aufgrund der Vielzahl integrierter Simulationstools und der einfachen Übertragung der erforderlichen Parameter zwischen denen. In Abbildung 4 sind die Kristallstrukturen dargestellt, die mithilfe des Atomistic Simulation Environment-Paket (ASE), das in pyiron integriert ist, erstellt wurden. Die Zelle einer Heuslerlegierung enthält mehr Atome und erfordert zur Berechnung HPC-Ressourcen. Die Tests wurden zunächst an einem einfacheren kubischen Ni durchgeführt, das auch praktischerweise die erste bekannte ferromagnetische Wirkung des Magnetokalorischen Effekts aufweist.



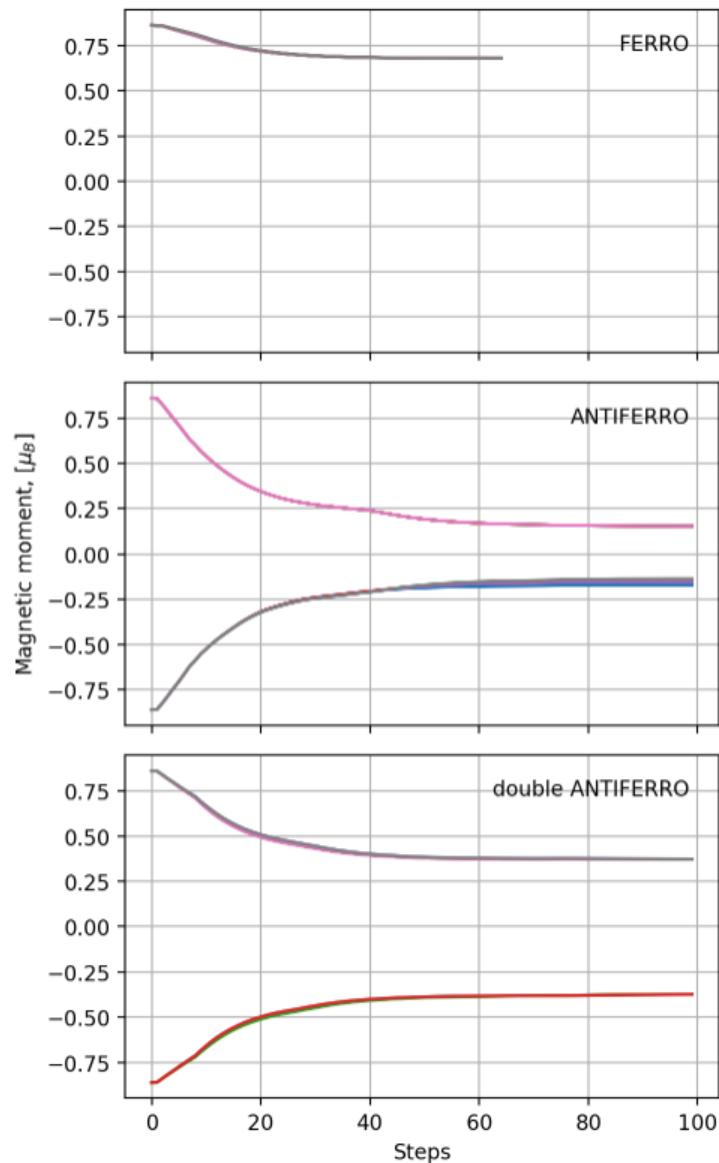
**Abbildung 4:** Zwei beispielhafte kubische Zellen der Strukturen, die in den Berechnungen verwendet wurden: elementares Ni und eine Heuslerlegierung Ni<sub>2</sub>MnGa.

Die DFT-Berechnungen wurden unter Verwendung des SPHInX-Codes mit ebenen Wellen als Basisfunktionen (eigene Entwicklung des MPIE, Open Source) und dem PBE-GGA-Funktional durchgeführt. Die Geometrieoptimierung für beide kubischen Strukturen ist in Abbildung 5 dargestellt, das Minimum entspricht dem Gleichgewichtsvolumen der Zelle.



**Abbildung 5:** Abhängigkeit der Gesamtenergie vom Volumen der Gitterzellen: Die Minima entsprechen dem Gleichgewichtsvolumen.

Darüber hinaus wurden Berechnungen für drei verschiedene magnetische Konfigurationen (ferro-, antiferro- und doppelantiferro-) durchgeführt, deren Gesamtenergien für die Berechnung der



**Abbildung 6:** Magnetische Momente, die für drei magnetische Konfigurationen von Ni-Superzellen erhalten wurden.

Austauschparameter erforderlich sind. Bei der Heuslerlegierung erhöht sich die Rechenzeit aufgrund der größeren Zelle und der entsprechenden großen Superzellen erheblich und erfordert HPC-Ressourcen. Die Ergebnisse der Berechnungen mit einem K-Mesh-Spacing von 12x12x12 und einer Energieschnittstelle von 1300 eV (Parameter, die in einem Konvergenztest vor den Berechnungen ausgewählt wurden) für die magnetischen Momenten von Ni sind in Abbildung 6 dargestellt.

## 2. Berechnung der für die Spin-Dynamik Simulationen notwendigen Wechselwirkungsparameter aus der elektronischen Struktur.

Im Folgenden werden die Austauschkopplungskoeffizienten  $J_{ij}$  durch eine lineare Regression der DFT-Ergebnisse für ein effektives Heisenberg-Modell bestimmt:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} m_i m_j$$

Hier sind  $m_i$  und  $m_j$  die mit einander wechselwirkenden magnetischen Zentren. Dieser Teil ist kein vorhandenes pyiron-Tool, die Flexibilität von pyiron und die Verwendung von JupyterLab ermöglichen aber eine bequeme Änderung und Anpassung des Workflows und die Erstellung weiterer Codes und Tools für die Auswertung, wobei pyiron-Datenstrukturen ohne die Notwendigkeit weiterer Übersetzungen zwischen den Tools wiederverwendet werden können. Diese Auswertung wurde gemeinsam mit der AG Hickel entwickelt.

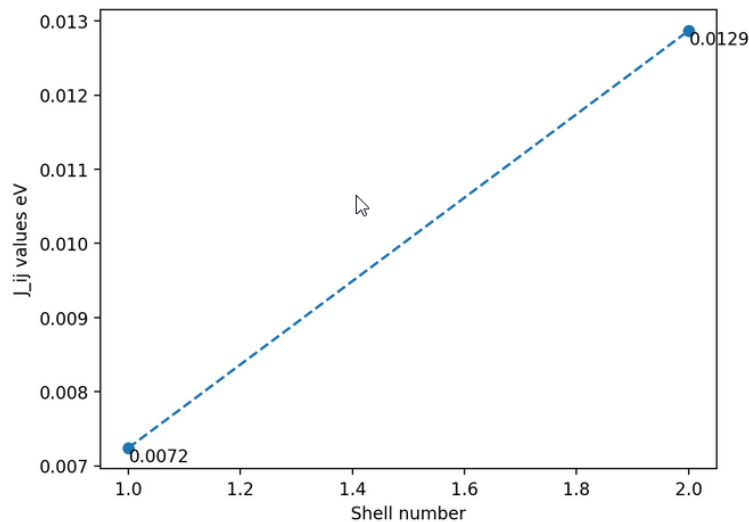
Die obige Gleichung kann für die Verwendung von Wechselwirkungsschalen umgeschrieben werden zu:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_s J_s \sum_{ij} D_{s,ij} m_i m_j$$

wobei  $J_s$  der Heisenberg-Parameter für die Schale  $s$  und die Schalenmatrix  $D_{s,ij}$  wie folgt definiert ist:

$$D_{s,ij} = \begin{cases} 1, & \text{falls } i \text{ und } j \text{ in der Schale } s \text{ benachbart sind} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

Die Schalenmatrizen  $D_{s,ij}$  können mithilfe von pyiron-Tools extrahiert werden. Die erhaltenen Werte der Austauschkopplungsparameter  $J_{ij}$  (siehe Abbildung 7) werden anschließend für die Monte-Carlo-Simulationen verwendet.



**Abbildung 7:** Beispiel zweier Austauschkopplungen  $J_{ij}$  für zwei Schalen von kubischem Ni.

### 3. Simulation der Magnetisierung als Funktion von externem Magnetfeld und Temperatur mittels Monte Carlo Spin-Dynamik Simulationen.

Schritt 3 erfordert die Einbindung des in der AG Schröder entwickelten Spin-Dynamik-Simulationstools Cinola in das Workflowframework pyiron. Die Integration wurde in Kooperation mit den pyiron-Entwicklern durchgeführt, um einen möglichst sinnvollen Beitrag zur Entwicklung von pyiron und der PMD beizutragen. Hierzu wurde eine Schnittstelle entwickelt, um die Beschreibung der atomistischen Struktur und Wechselwirkungsszenarien aus Cinola auszulagern und durch die in pyiron bereits vorhandenen Methoden zu ersetzen. Damit wird die Stärke von pyiron bei der Strukturbeschreibung und die Stärke von Cinola in der Spin-Dynamik-Simulation jeweils bestmöglich genutzt.

Nach den Verifikationstests an einfachen magnetischen Systemen wie z.B. BCC-Eisen und Bulk Gadolinium (ein magnetokalorisches Benchmark-Material bei Raumtemperatur) durchgeführt. Die Ergebnisse stimmen im Rahmen der zu erwartenden statistischen Abweichungen überein. Aus dem Bulk Gadolinium-Testfall wurde ein in sich geschlossener Workflow im Sinne eines pyiron Workflows entwickelt und im Workflow Store der PMD veröffentlicht.

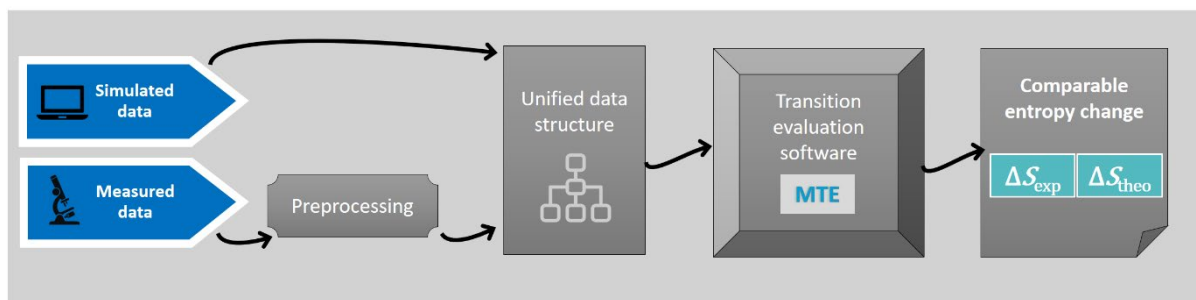
Die Schnittstelle, sowie der gesamte Workflow, startend von Schritt 1 mit der Strukturbeschreibung bis zur Spin-Dynamik Simulation in Schritt 3, wurden an einem Nickel-System getestet, um einen Vergleich mit experimentellen Magnetisierungsmessungen aus der AG Caron durchführen zu können. Die Simulation des Nickel-Systems ermöglicht zudem den Test der erweiterten Funktionalität der Cinola-pyiron Schnittstelle: Bisher war es mit der entwickelten Schnittstelle nur möglich magnetische Systeme zu simulieren, deren Nachbarschaftsschalen eine identische Anzahl von Nachbaratomen enthielt. Durch eine Weiterentwicklung ist es nun auch möglich, Systeme zu simulieren, die unterschiedlich viele Nachbarn je Nachbarschaftsschale aufweisen.

### 4. Berechnung der Entropieänderung

Die Änderung der magnetischen Entropie ( $\Delta S_M$ ) ist der Schlüsselparameter für den Vergleich von MCE-Materialien, da er den Grad der Veränderung der Unordnung in der magnetischen Struktur des Materials bei verschiedenen Magnetfeldern quantifiziert. Diese Entropieänderung korreliert direkt mit der Effizienz und Effektivität der Kühlleistung des Materials. Materialien mit größeren  $\Delta S_M$  können unter einem gegebenen Magnetfeld größere Temperaturänderungen erreichen. Die Entropieänderung kann über die folgende Gleichung berechnet werden:

$$\Delta S_M = \int_{H_i}^{H_f} \left( \frac{\partial M}{\partial T} \right) dH,$$

hierbei sind  $H_i$  und  $H_f$  das initiale bzw. das finale Magnetfeld,  $M$  ist die Magnetisierung und  $T$  die Temperatur. Diese Gleichung beschreibt, wie sich die Magnetisierung unter einem angelegten Magnetfeld mit der Temperatur ändert und spiegelt die Fähigkeit des Materials wider, Wärme durch Änderungen der magnetischen Ordnung aufzunehmen oder abzugeben. Die Berechnung von  $\Delta S_M$  erfolgt über eine numerische Auswertung des Integrals. Im Rahmen des Projekts wurde hierzu ein in der AG Caron entwickeltes Open-Source-Programm (MTE) in den pyiron Workflow integriert (Abbildung 8). Der Vorteil diese Integration ist, dass die Software sowohl die experimentellen als auch die simulierten Daten verarbeiten kann, wobei die experimentellen Daten zunächst vorverarbeitet werden zu müssen, um sie vergleichbar mit den Simulationsdaten zu machen. Auf diese Weise gelingt ein direkter Vergleich zwischen experimentellen und simulierten Daten in einem Workflow.



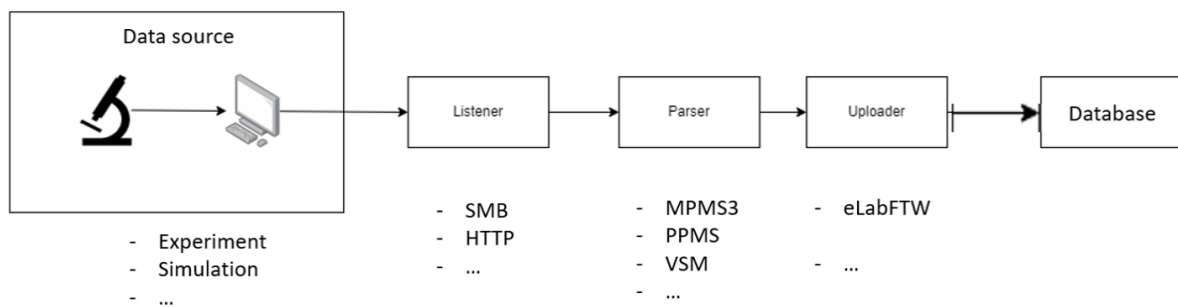
**Abbildung 8:** Teilworkflow zur Berechnung der Entropieänderung aus experimentellen und simulierten Daten.

## Pipeline

Um die im Projekt DiProMag entwickelten technischen Methoden für die Projektpartner und auch die materialwissenschaftliche Community nachhaltig langfristig nutzbar und wiederverwendbar zu machen, wurde im Rahmen von AP 6.1 eine „Pipeline“ entwickelt, um alle vorher genannten Entwicklungen der AG Schröder (Simulationsworkflow und Integration verschiedener Simulations- und Berechnungstools in pyiron), sowie die Ontologieentwicklung der AG Cimiano/Ell im täglichen Arbeitsablauf durch die tatsächlichen Anwender (Physiker\*innen und Ingenieure des Projekts DiProMag im Speziellen, aber potenziell übertragbar auf die wissenschaftliche Community im Allgemeinen) besser gebrauchsfähig zu machen. Dafür sollen die bisher noch manuell notwendigen technischen Detailschritte in der tatsächlichen Nutzung automatisiert und dem Anwender abgenommen werden, indem nicht nur der materialwissenschaftliche Teil der Prozesskette zur Herstellung und Charakterisierung von magnetokalorischen Heuslerlegierungen digitalisiert wird, sondern auch der daten- und informationstechnische Anteil der Prozesskette. Würde dies nicht erfolgen, bestünde auf Anwenderseite (Physiker\*innen und Ingenieure, etc.) eine starke Hürde zum Einstieg in die Nutzung der entwickelten Werkzeuge, da diese bisher den „täglichen Arbeitsablauf“ bspw. im Labor verkomplizieren. Dies sind zu erwartende Hürden, die bei Einführung eines neuen Systems (wie sie durch PMD und NFDI angestrebt werden) auftreten und zu erwarten sind, da zunächst bspw. die *user experience* dieser neuen Systeme nicht ausgereift ist, sowie neue Vorgehensweisen in den Alltag bspw. im Labor integriert werden müssen. Ohne Berücksichtigung dieser praktischen Hürden, würden im Projekt DiProMag, aber auch auf höherer Ebene bspw. der PMD / NFDI technische Lösungen entwickelt werden („Entwicklerseite“), deren Anwendung in der (material-)wissenschaftlichen Community bzw. auf der Anwenderseite aber ggf. nur schwer Verbreitung finden – die ursprünglichen Entwicklungsbemühungen wären evtl. umsonst. Um diese Hürden zu minimieren, wird im Rahmen der „Pipeline“ der gesamte Prozess betrachtet, der zur Nutzung der neuentwickelten Workflows und Ontologien notwendig ist. Die nachfolgenden Arbeiten

wurde unter anderem im Rahmen von zwei Bachelorarbeiten<sup>4</sup> durchgeführt.

Die automatisierte Übertragung der erfassten Daten in das Gesamtsystem wurde für ein relevantes Messgerät (VSM magnetometer, QD MPMS) exemplarisch abgeschlossen. Die hierzu entwickelte Lösung erlaubt eine modularisierte Anpassung verschiedener Aspekte der Automatisierung (siehe Abbildung 9): (i.) Die Lösung ist grundsätzlich unabhängig davon, ob die automatisch zu erfassenden Daten experimentellen Ursprungs sind oder aus datenverarbeitenden Verfahren, bspw. auch Simulationen stammen. (ii.) Es können verschiedene Methoden genutzt werden, um die automatisierte Aufnahme und Verarbeitung von Daten durch das System zu initiieren. Im umgesetzten Beispielfall werden die zu verarbeitenden Daten automatisiert von einem SMB-Netzwerkshare heruntergeladen, sobald diese dort nach Abschluss des Messvorgangs vom Benutzer platziert werden, wie es im bisherigen Laborprozess der AG Caron üblich ist. Dieser Initialpunkt kann durch andere Methoden ausgetauscht werden, wie durch, durch die Datenquelle angesprochene, HTTP-Endpoints. (iii.) Die Parser, die zur Verarbeitung und Übersetzung der Rohdatenformate in das ontologisch angelehnte Format notwendig sind, können in der entwickelten Lösung ausgetauscht werden, sodass die technisch



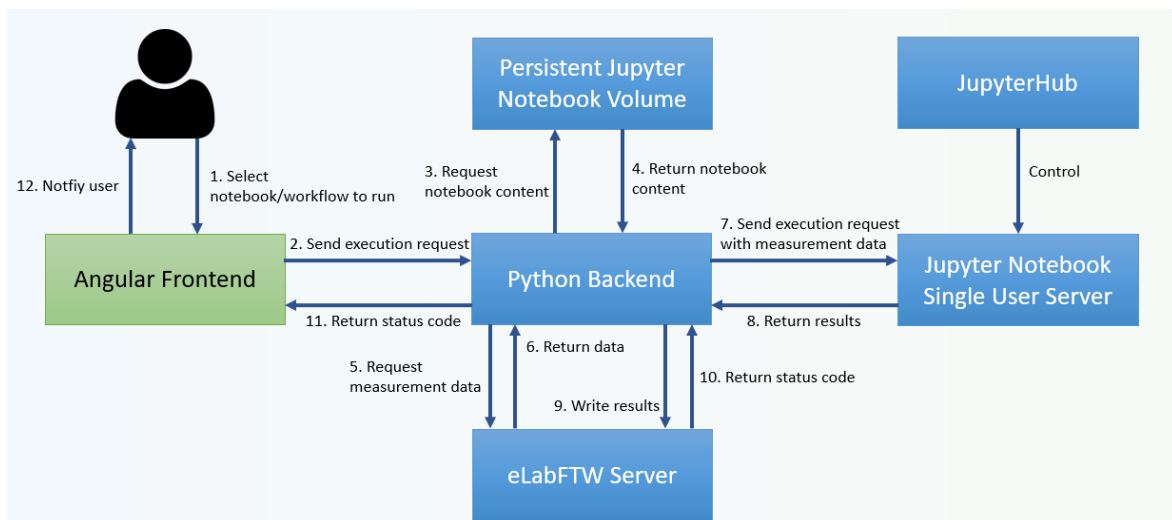
**Abbildung 9:** Überblick zu den verschiedenen Komponenten und zum Ablauf der Kommunikation zur automatisierten Ausführung eines Workflows mit Daten eines eLabFTW Experimenteintrags

zugrundeliegenden Anteile der Lösung nicht nur für das exemplarisch eingebundene Messgerät genutzt werden können, sondern auch für weitere, insofern entsprechende Parser für diese implementiert werden. (iv.) Das Ziel der automatisierten Datenverarbeitung kann angepasst werden. Im entwickelten Fall werden die verarbeiteten Daten in das elektronische Laborbuch eLabFTW hochgeladen. Insofern die durch die Pipeline genutzten grundlegenden Funktionen einer geeigneten Datensinke vorliegen, wie sie am Beispiel von eLabFTW angesprochen werden, können die entsprechenden Komponenten ausgetauscht werden, sodass bspw. andere elektronische Laborbücher oder gänzlich andere Datensinken als Ziel des automatisierten Prozesses genutzt werden können.

---

<sup>4</sup> Sascha Nickel: Entwicklung eines durchgängigen Workflows zur automatischen Integration von magnetokalorischen Messdaten in das digitale Laborbuch eLabFTW; Onur-Can Yaman: Entwicklung eines Workflows zur automatisierten Auswertung magnetokalorischer Messdaten für ein digitales Laborbuch mittels Jupyter-Notebook-Templates.

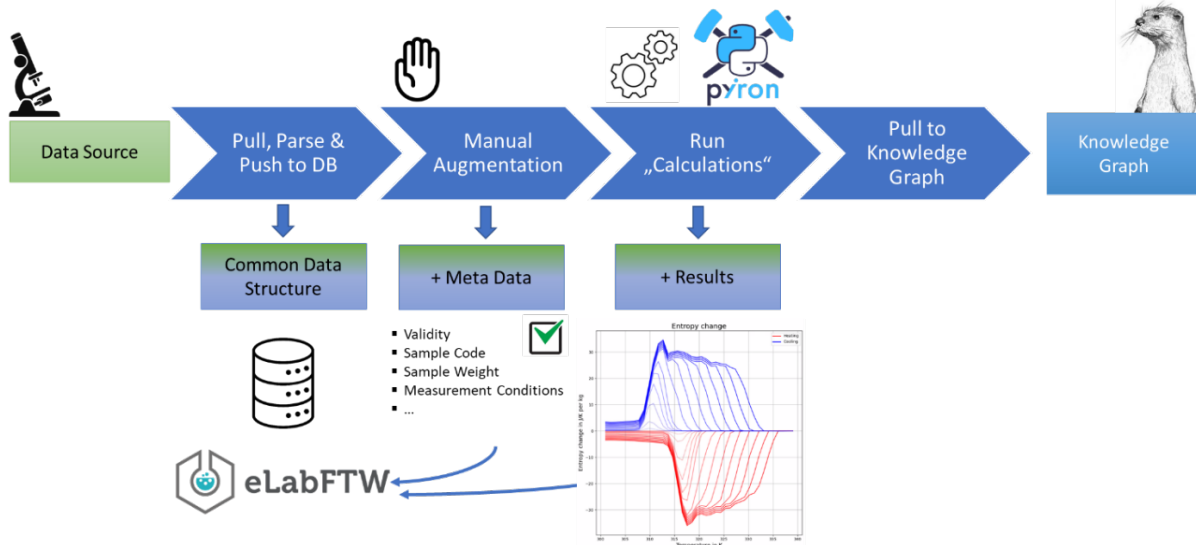
Zudem wurde eine prototypische Lösung entwickelt, die eine Übersicht verfügbarer Workflows zur Weiterverarbeitung, und die zuvor genutzte Datensenke eLabFTW mit einer automatisierten Verarbeitung kombiniert. Hiermit können durch ein Webbasiertes Userinterface ein durchzuführender Workflow, im Sinne eines Jupyter Notebooks bzw. eines pyiron Workflows, sowie ein eLabFTW Experimenteintrag ausgewählt werden. Vom System werden dann die relevanten Daten des eLabFTW Experiments heruntergeladen und an den entsprechenden Stellen in den Workflow eingefügt sowie dieser anschließend automatisch ausgeführt. Ausgewählte Ergebnisstrukturen von Workflows können von dem entwickelten System anschließend automatisiert in das eLabFTW Experiment zurück hochgeladen werden, um den Ausgangsdatensatz des Experiments um die neuen Ergebnisse des Workflows zu ergänzen. Ein genauerer Überblick zu den Komponenten dieses Systems und dem Ablauf ist Abbildung 10 zu entnehmen.



**Abbildung 10:** Überblick zu den verschiedenen Komponenten und zum Ablauf der Kommunikation zur automatisierten Ausführung eines Workflows mit Daten eines eLabFTW Experimenteintrags.

Alle vorangegangenen Schritte ermöglichen abschließend eine direkte Übertragung der Daten in einen Knowledge Graph, der das Ziel der Ontologie in AG Cimiano/EII ist. Auch dieser Schritt ist auf Grundlage der Arbeiten der vorherigen Schritte automatisierbar. Zu diesem Schritt wurde ein Verfahren konzipiert, das auf einfachen technischen Methoden basiert, dieses wurde aber noch nicht implementiert. Ein Gesamtüberblick über das Pipeline-Konzept ist in Abbildung 11 zu sehen.

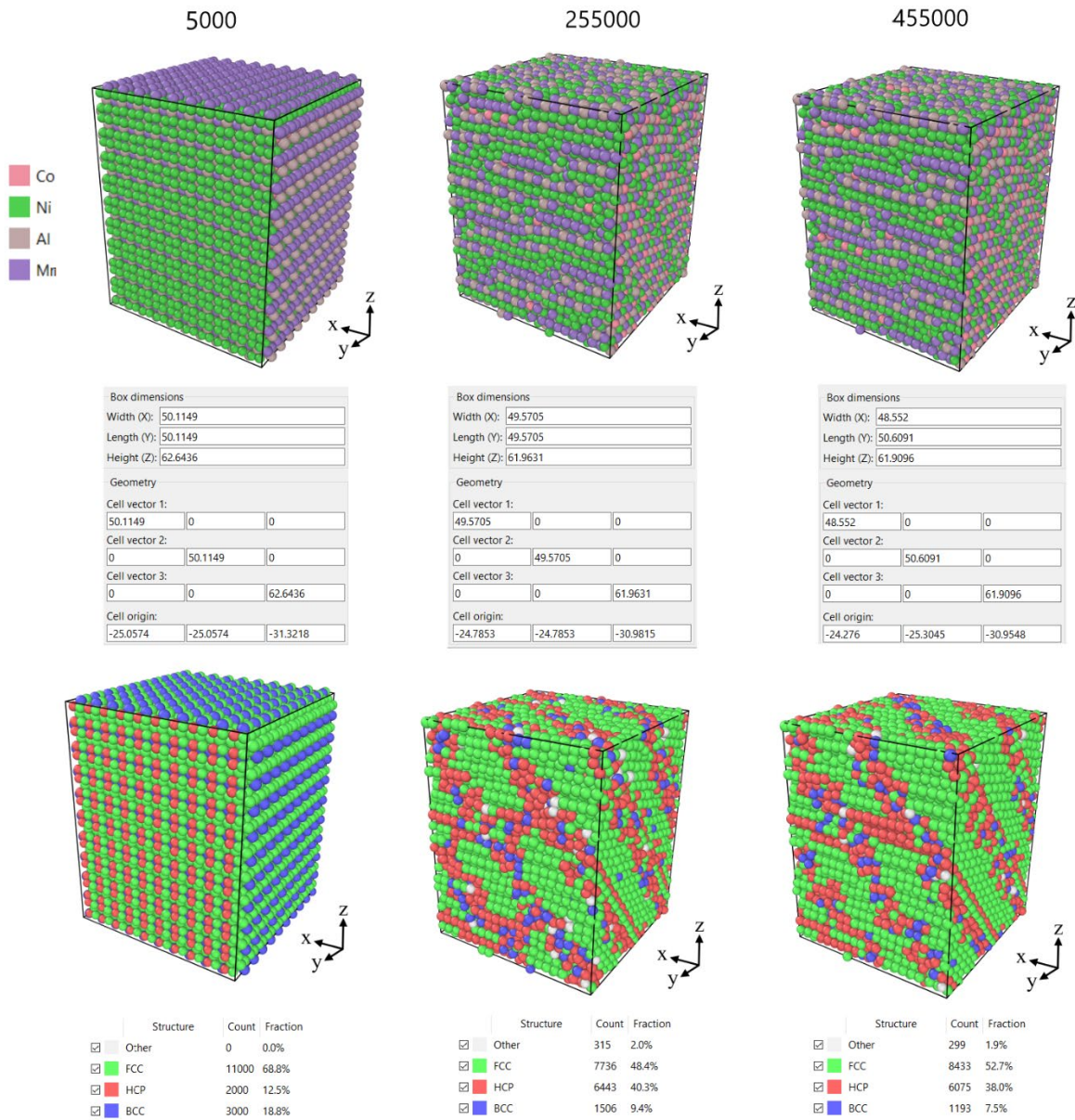
Aufgrund der Komplexität des Dünnschichtsystems hat sich die direkte Durchführung von *phase field* Simulationen in AP 6.2 als nicht zielführend erwiesen, da eine Vielzahl von unbekanntem Parametern existieren, die die Aussagekraft der Simulationsergebnisse sehr in Frage stellen. Um einen Zugang zu diesen Parametern zu erhalten, wurden daher zunächst atomistische Simulationen in Form von Molekulardynamiksimulationen (MD) und Dichtefunktionaltheorie-Simulationen (DFT) durchgeführt, um die martensitische Transformation sowohl in bulk-Einkristallen zu analysieren als auch in lamellenförmigen Strukturen, in denen Schichten aus Austenit und Martensit abwechselnd übereinander liegen.



**Abbildung 11:** Schematischer Überblick über das entwickelte Pipeline Konzept

Zur präzisen kristallographischen Beschreibung wurden DFT-Berechnungen mit Quantum ESPRESSO durchgeführt. Die resultierende Einheitszelle wurde mit dem Softwarepaket AtomsK in eine Superzelle umgewandelt. Die endgültige Struktur wurde zur Durchführung von MD-Simulationen in LAMMPS importiert. Da für unser System bislang kein interatomares Potenzial existiert, haben wir ein neues hybrides interatomares Potenzial entwickelt, das auf unser spezifisches Legierungssystem zugeschnitten ist. Im Einzelnen konnten folgende Analysen durchgeführt werden: Auswirkungen der Punktdefektdichte auf die martensitische Umwandlung, die Gesamtverschiebung jedes Atomtyps während der Umwandlung, Analyse der Auswirkungen der durch die martensitische Umwandlung induzierten mechanischen Belastungen innerhalb eines Abschnitts der lamellenförmigen Struktur auf die angrenzenden Schichten der martensitischen Umwandlung (siehe beispielhaft Abbildung 12).

Aufgrund der stark verspäteten Besetzung der zweiten 50%-Stelle in der AG Schröder wurden die FEM-Simulationen von AP 6.3 von der AG Schöning im Teilvorhaben Hybrid-3D-Druck übernommen und werden im folgenden Abschnitt beschrieben.

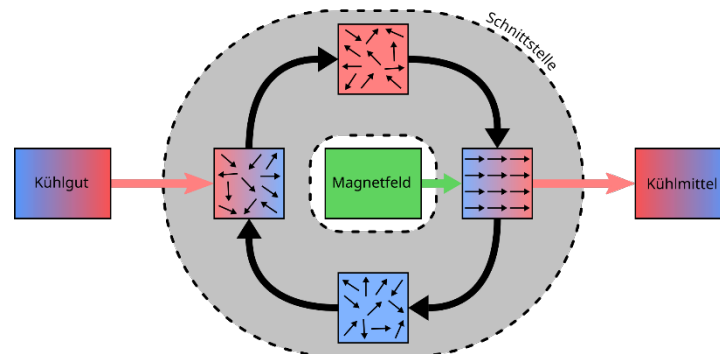


**Abbildung 12:** MD-Simulationsergebnisse zur martensitischen Transformation in einem Austenit-bulk-System nach verschiedenen Simulationszeitschritten (von links nach rechts).

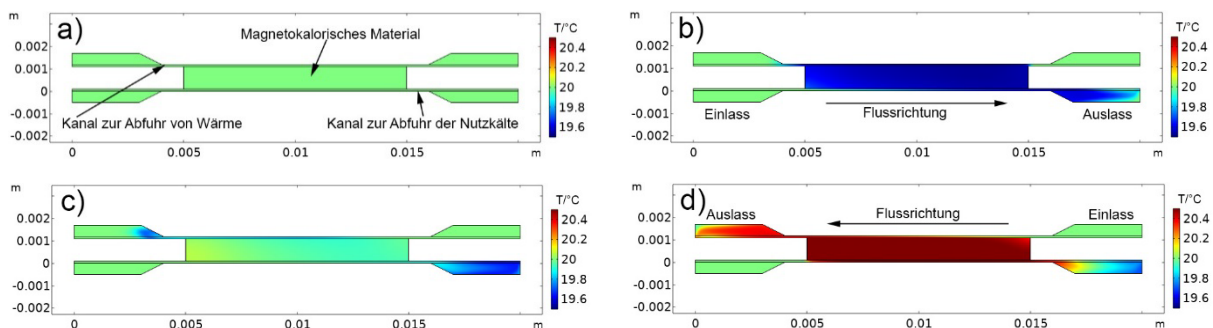
## Darstellung der durchgeführten Arbeiten im Teilprojekt 3D-gedruckte Topologien (AG Schöning):

### 1. Der magnetokalorische Kühlprozess

Konventionelle Kältemaschinen besitzen räumlich voneinander getrennte heiße und kalte Seiten. Bei Kältekompansionsanlagen wird auf der kalten Seite ein Fluid expandiert und hierdurch Wärme aus dem zu kühlenden Volumen aufgenommen. Auf der warmen Seite erwärmt sich das Fluid bei der Kompression und die Wärme wird an die Umgebung abgegeben. Bei einem magnetokalorischen Kühlprozess durchläuft das magnetokalorische Material (MK-Material) zyklisch einen „heißen“ oder „kalten“ Zustand (Abbildung 13): Bei Anlegen eines magnetischen Feldes und der daraus resultierenden Ausrichtung der magnetischen Momente steigt die Temperatur im MK-Material, da die Gesamtentropie erhalten bleibt muss während die magnetische Ordnung zunimmt. Beim Entfernen des externen magnetischen Feldes sinkt die magnetische Ordnung, wodurch sich bei gleicher Gesamtentropie eine Reduktion der Temperatur ergibt. Bei einem magnetokalorischen Kühlprozess müssen Wärme und Nutzkälte zyklisch zum MK-Material hin- und von ihm abgeführt werden. Dies kann beispielsweise über ein mit dem magnetischen Feld synchronisiertes Anströmen mit einem Kühlmittel umgesetzt werden, wie in Abbildung 14 veranschaulicht. Hinsichtlich der technischen Realisierung eines magnetokalorischen Kühlprozesses besteht die Herausforderung darin, dass das MK-Material sowohl thermisch als auch magnetisch optimal angebunden und insbesondere vor Korrosionseinflüssen und Materialabtrag geschützt wird. Ausgehend von diesen Anforderungen wurden prototypische Devices mittels 3D-Hybrid-Druck entwickelt, die zudem eine direkte Einbringung der in der Universität Bielefeld realisierten MK-Materialien mittels *back-end* Prozess in die gedruckten prototypischen Devices ermöglichen.



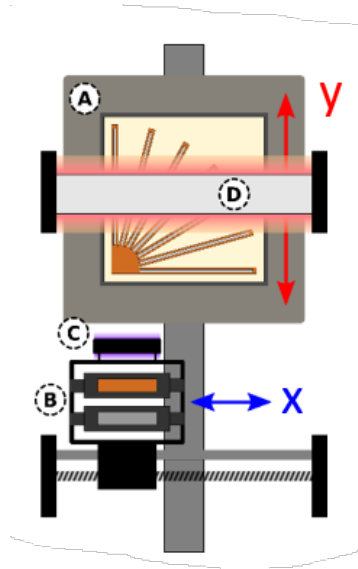
**Abbildung 13:** Schematische Darstellung des magnetokalorischen (MK) Kühlprozesses: Der grau hinterlegte Bereich zeigt einen magnetisch-thermischen Zyklus des MK-Materials. Die Schnittstelle des MK-Materials sowohl zu einem wechselnden Magnetfeld als auch zur Wärmez- und -abfuhr ist in ihrer technischen Umsetzung herausfordernd.



**Abbildung 14:** (a) Isothermer Ausgangszustand der magnetokalorischen Kältemaschine. (b) Deaktivieren des magnetischen Feldes führt zu einer Reduktion der Temperatur im MK-Material. Im unteren Kanal wird das abgekühlte Fluid nach rechts abgeführt. (c) Das MK-Material ist abgekühlt und die Kälte abtransportiert. (d) Aktivieren des magnetischen Feldes führt zu einer Erhöhung der Temperatur. Die Wärme wird mittels Fluidfluss im oberen Kanal abgeführt. Nach Abfuhr der Wärme beginnt der Kreislauf wieder bei (a).

## 2. Entwurf eines Prototypischen Devices

Im Sinne der praktischen Anwendung des magnetokalorischen Kühlprozesses wurde ein prototypisches Device auf Basis eines innovativen 3D-Hybrid-Druckverfahrens entwickelt, das eine für den Wärmeaustausch geeignete Topologie aufweist (AP 5.2 und AP 5.3). Der InkJet-Drucker *DragonFly® LDM* (Nano Dimension®) kann 3D-Objekte aus UV-härtendem Kunststoff und IR-gesintertem, leitfähigem Silber in einem geschlossenen Prozess herstellen. Abbildung 15 zeigt den schematischen Aufbau des Druckers.

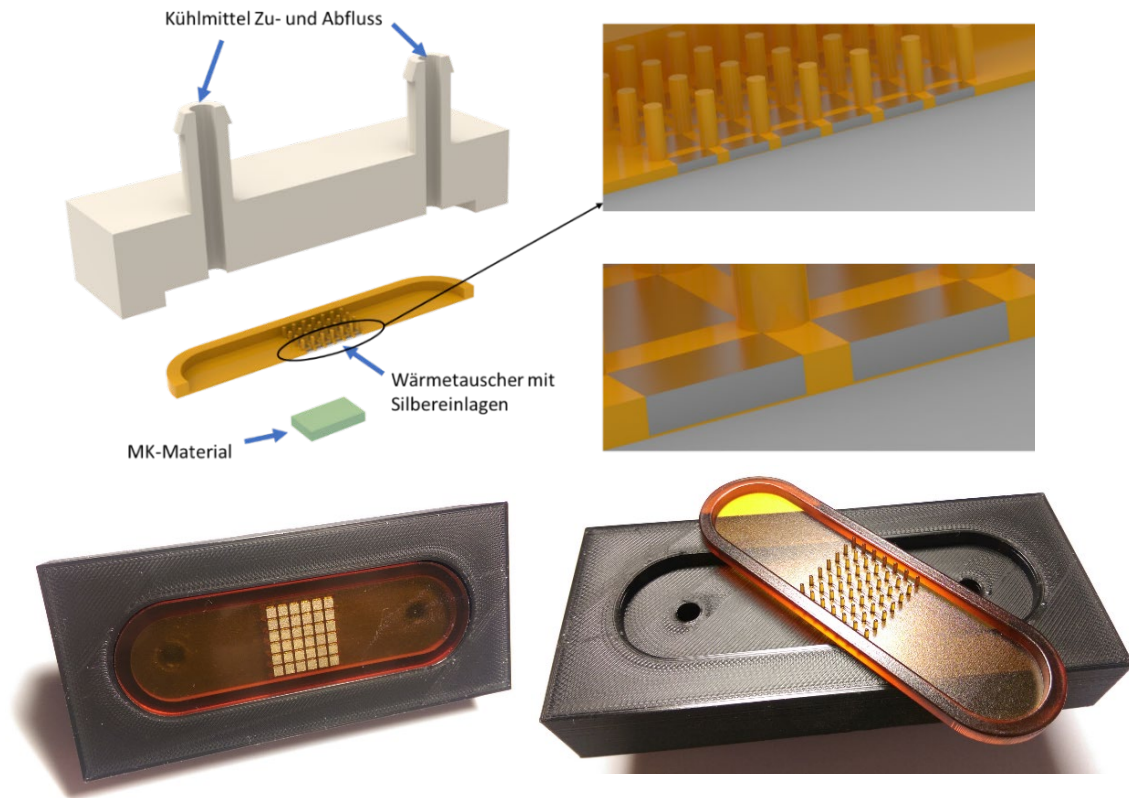


**Abbildung 15:** Schematischer Aufbau des Druckers in der Draufsicht. Das Druckbett (A) bewegt sich entlang der Y-Achse unter den Druckköpfen (B), UV-Lampe (C) und Infrarotlampe (D) hin und her. Die Druckköpfe werden in Richtung der X-Achse bewegt. Die effektive Druckauflösung beträgt in X- und in Y-Richtung etwa 35  $\mu\text{m}$ . Die Düsen in beiden Druckköpfen haben in Richtung der X-Achse einen Abstand von 70  $\mu\text{m}$ . Um dennoch eine Auflösung von 35  $\mu\text{m}$  erreichen zu können, erfolgt der Druck in zwei Zügen. Mit jeder Bewegung des Druckbettes werden in einem ersten Schritt Linien im Abstand von 35  $\mu\text{m}$  in Richtung der Y-Achse gedruckt. In einem zweiten Schritt wird der Druckkopf um 35  $\mu\text{m}$  versetzt und erneut Linien gedruckt um die parallelen Linien zu einer Fläche zu verbinden. Zwischen beiden Schritten werden die Materialien UV-gehärtet bzw. gesintert.

Die Entwicklung des Devices wird im Folgenden in drei der Logik folgenden Schritten erläutert:

1) Design und Fertigung eines Wärmetauschers für die Zu- und Abfuhr des Kühlmittels an das MK-Material: Das Kernelement des prototypischen Devices stellt der additiv gefertigte Wärmetauscher dar (siehe Abbildung 16): Der zweiteilige Aufbau besteht aus einem mittels Fused-Deposition-Modeling (FDM) gedruckten Gehäuse mit Anschlusselementen für das Kühlmittel und einem im InkJet-Verfahren hergestellten Einsatz, der 3D-gedruckten Topologie. Die gedruckten Elemente aus leitfähigem Silber verbessern den Wärmetransport zwischen MK-Material und Kühlmittel, während die Kunststoffzapfen die mechanische Stabilität erhöhen und zudem den Wärmeübergang zwischen Kühlmittel bzw. Wärmeträger erhöhen. Das MK-Material wird zwischen zwei hybridgedruckte Elemente im Bereich der Silberblöcke eingebracht. Dieser Aufbau ermöglicht die Integration von MK-Material, welches in einem *back-end* Prozess entweder aufgesputtert oder in Form von freigestellten MK-Filmen eingebracht wird, wie im nächsten Schritt beschrieben. Die Anbindung von Bulk-Materialien ist nach Anpassung der Topologie in Abhängigkeit der Gestalt des MK-Materials ebenfalls problemlos möglich (siehe dritter Schritt).

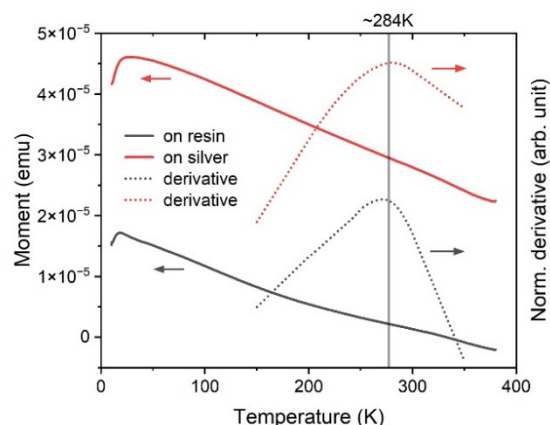
2) Anbindung und Einbettung von Bulk- und Dünnschicht-MK-Materialien an bzw. in die 3D-gedruckte Topologie: In Kooperation mit den Partnern der Universität Bielefeld wurden die 3D-gedruckten Topologien mit einem ausgewählten Materialsystem für erste prototypische Anwendungen kombiniert. Nach der Entwicklung und Herstellung geeigneter 3D-gedruckter Substrate konnten diese in der AG Reiss mit magnetokalorischem Material direkt besputtert werden. Obwohl der Sputterprozess nicht wie üblich bei etwa 500  $^{\circ}\text{C}$ , sondern bei Raumtemperatur durchgeführt wurde, gelang es, eine CoCrAl-



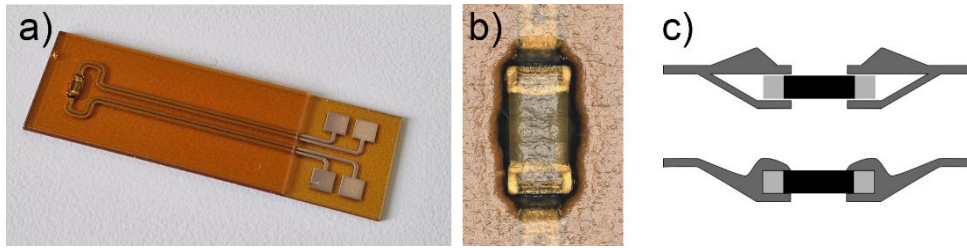
**Abbildung 16:** Oben: CAD-Modell des entwickelten Wärmetauschers. Der weiße Teil wird mit einem konventionellen FDM-3D-Drucker gedruckt. Für den übrigen Teil wird der DragonFly LDM verwendet. Unten: gedruckter und zusammengefügter Wärmetauscher.

Legierung mit einen Phasenübergang bei etwa 284 K, in dessen Nähe der MK-Effekt maximal wird, auf dem Substrat abzuscheiden (Abbildung 17). Ebenfalls erfolgreich getestet wurde das Eindringen von dünnen Folien in den Inkjekt-Druckprozess. Somit können die in der AG Hütten freigestellten Dünnschicht-Filme aus MK-Material in den Wärmetauscher eingebracht werden, was eine weitere vielversprechende Realisierungsvariante darstellt.

3) Messtechnische Erfassung des MK-Effekts während des Betriebs für die Prozessregelung: Im dritten Schritt wurde ein MK-Material in Bulk-Form in einem zyklisch variierenden Magnetfeld untersucht. Hier stand die Erfassung des Effekts im Wärmetauscher im Fokus: Für die Überwachung und Regelung des Prozesses ist die Temperatur in der Nähe des MK-Materials zu erfassen und somit ein geeigneter Sensor in den Hybriddruckprozess einzubringen inklusive elektrischer Kontaktierung. Abbildung 18



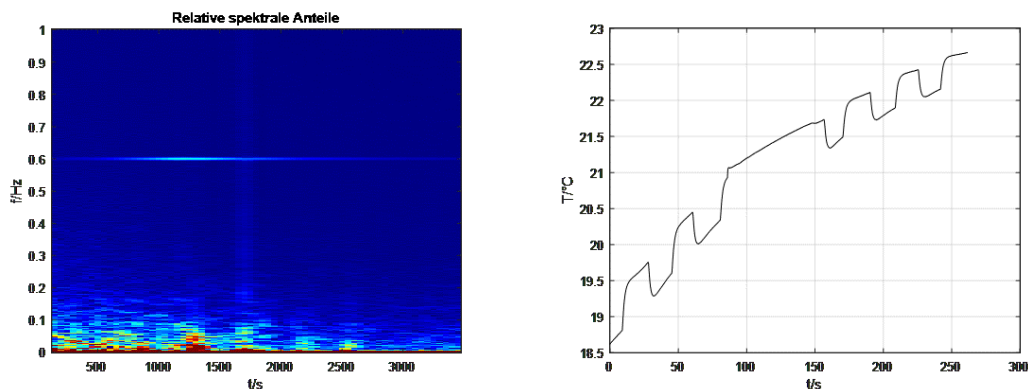
**Abbildung 17:** Magnetisches Moment einer auf gedrucktes Substrat gesputterten CoCrAl-Legierung und die Ableitung des Moments über der Temperatur. Bei 284 K zeigt sich ein Phasenübergang (Abb. M.Wortmann, Uni Bielefeld).



**Abbildung 18:** (a) und (b) zeigen ein Foto und eine Mikroskopaufnahme eines eingedruckten Temperatursensors mit Anschlüssen für die 4-Leiter-Widerstandsmessung. (c) zeigt die Kontaktierung des eingedruckten SMD-Widerstands mit Hilfe des gedruckten Silbermaterials einmal im CAD-Modell (oben) und einmal schematisch nach dem Druckprozess (unten).

zeigt einen im InkJet-Verfahren eingedruckten Temperatursensor. SMD-Dickschichtwiderstände der Größe 1206 (metrisch 3216) wurden integriert und erfolgreich kontaktiert durch Überdrucken der Kontaktflächen mit Silber. Auf diese Weise ist kein zusätzlicher Löt- oder Klebeprozess erforderlich, denn die elektrische Verbindung erfolgt durch den im Drucker durchgeführten Sinterprozess. Damit dies gelingt, ist ein spezielles Design des dem Druck zu Grunde liegenden CAD-Modells erforderlich: Für den Temperatursensor ist zunächst eine Aussparung im Druckobjekt vorzusehen, in welche er während einer kurzen Unterbrechung des Drucks manuell eingesetzt wird. Für eine zuverlässige Kontaktierung ist jedoch das Auffüllen der Hohlräume nach dem Einsetzen zu berücksichtigen. Hier wurde die Eigenschaft des InkJet-Druckverfahrens ausgenutzt, dass Hohlräume während des schichtweisen Aufbaus des Objekts durch später gedrucktes Material aufgefüllt werden. Abbildung 18 (c) zeigt oben die Kontaktierung im CAD-Modell und unten das Resultat nach dem Einfallen des Materials im gedruckten Objekt. Zur Erzeugung der magnetischen Felder für die messtechnische Erfassung des MK-Effekts wurden verschiedene Ansätze mit Permanent- und Elektromagneten evaluiert. In dem als MK-Material für diese Tests verwendeten Gadolinium wurden Flussdichten bis zu  $10 \text{ mT}$  erreicht, wobei eine Spule mit etwa 36 Windungen und einem Ferritkern bei einem maximalen Strom von  $40 \text{ A}$  zum Einsatz kam. Bei Verwendung von Permanentmagneten (Neodym-Eisen-Bohr) ergeben sich Flussdichten von bis zu  $0,4 \text{ T}$  im Gadolinium.

Der MK-Effekt wird im Bereich der Curietemperatur maximal und verschwindet bei deutlich höheren und niedrigeren Temperaturen. Zur Temperierung des Gadoliniums wird der Ferritkern zunächst separat auf deutlich unter  $0 \text{ }^\circ\text{C}$  abgekühlt. Nach dem Aufbau des Versuchs kühlt der deutlich größere Ferritkern den Gadoliniumwürfel ab. Während sich der gesamte Aufbau langsam auf Raumtemperatur erwärmt, wird mit Hilfe der Spule das magnetische Wechselfeld mit  $f = 0,3 \text{ Hz}$  angelegt und das Signal des Temperatursensors aufgezeichnet. Abbildung 19 (a) zeigt die spektralen Anteile des Signals in der Kurzzeitfouriertransformation in dieser Phase. Es ist gut zu erkennen, dass zwischenzeitlich bei  $f = 0,6 \text{ Hz}$  ein Frequenzanteil auftritt: Das MK-Material wird in jeder Periode zwei Mal magnetisiert, woraus die Temperaturänderung am MK-Material mit der doppelten Anregungsfrequenz resultiert.



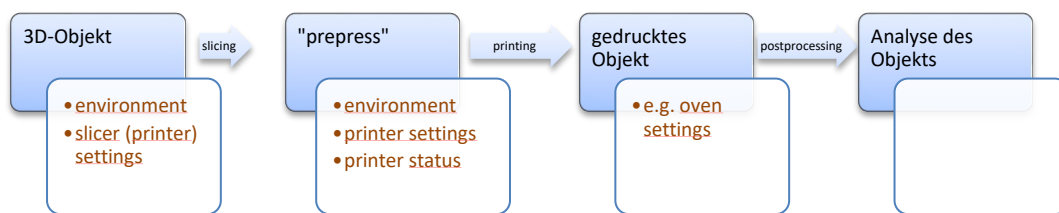
**Abbildung 19:** (a) Spektrale Anteile in der Kurzzeitfouriertransformation des Signals des Temperatursensors am Gadoliniumwürfel während sich der gesamte Versuchsaufbau erwärmt und mittels eines Elektromagneten ein magnetisches Wechselfeld angelegt wird. (b) Temperatur des Gadoliniumwürfels bei Anlegen und Entfernen eines starken Magnetfeldes unter Einsatz eines Permanentmagneten.

Berechnungen der Temperaturänderung aus dem Spannungssignal ergeben Werte im Bereich von 1 mK bis 2 mK.

Als zweite Variante für die Erzeugung größerer magnetischer Flussdichten wurden Neodym-Eisen-Bohr-Magnete eingesetzt. In Abbildung 19 (b) ist die Temperaturänderung bei Änderung des Magnetfeldes gezeigt. Auch hier wurde das Gadolinium zuvor abgekühlt und erwärmt sich während des Versuchs langsam. Beim Magnetisieren steigt die Temperatur im Gadolinium, beim Entfernen sinkt die Temperatur, wobei sich Temperaturänderungen im Bereich von 0,5 K ergeben.

### 3. Digitale Abbildung des Druckprozesses

Im Rahmen von AP 5.1 und 5.2 wurden in Zusammenarbeit mit der AG Ciminano/Ell Workflows und OTTR-Templates zur Weiterverarbeitung sämtlicher Daten entwickelt, welche für die Erstellung und Durchführung des Druckauftrags entstehen (Abbildung 20). Bestandteil dieser Workflows sind unter



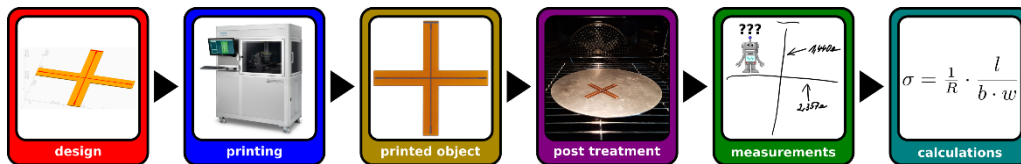
**Abbildung 20:** Prozessschritte mit den anfallenden Daten zur digitalen Abbildung des Druckprozesses

anderem Python Skripte, die die teilweise in proprietären Formaten und an verschiedenen Speicherorten anfallenden Konfigurations-, Prozess- und Messdaten in ein einheitliches Format bringen und zwecks Integration in das ontologisch angelehnte Format zusammenführen. Für die Zwischenspeicherung der Daten wurde das verbreitete JSON-Format verwendet. Ein Beispiel für die entstehenden Prozessdaten ist in Abbildung 21 zu sehen. Zusätzlich werden während des gesamten Prozesses vom 3D-Design in einem CAD-Modell, der druckerspezifischen Aufbereitung der CAD-Daten, des Drucks, der Nachbehandlung sowie der messtechnischen Analyse der gedruckten Objekte Informationen verschiedenster Art generiert. Diese müssen zusammen mit den Prozessdaten mit Hilfe von geeigneten OTTR-Templates in einer Ontologie erfasst werden.



**Abbildung 21:** Beispiel für die Konfigurationsdaten des Druckers u.a. für die Aktivierung bzw. den Status der einzelnen Düsen der Druckköpfe

Abbildung 22 zeigt exemplarisch den Prozess von dem Design eines Objektes über den Druck und die Nachbearbeitung bis hin zu seiner Analyse. Der hier skizzierte Ablauf startet mit dem Ziel, die richtungsabhängige Leitfähigkeit zu bestimmen. Daraus folgt ein 3D-Design mit zwei gekreuzten, senkrecht zueinander verlaufenden Leiterbahnen auf einem ebenfalls kreuzförmigen, gedruckten Kunststoffuntergrund. Das Objekt wird im 3D-Hybriddrucker gedruckt und im Umluftofen nachbehandelt. Danach werden die Widerstände der Leiterbahnen sowie die Abmessungen am gedruckten Objekt bestimmt und notiert. Aus den Messdaten können weitere Messgrößen wie die elektrische Leitfähigkeit

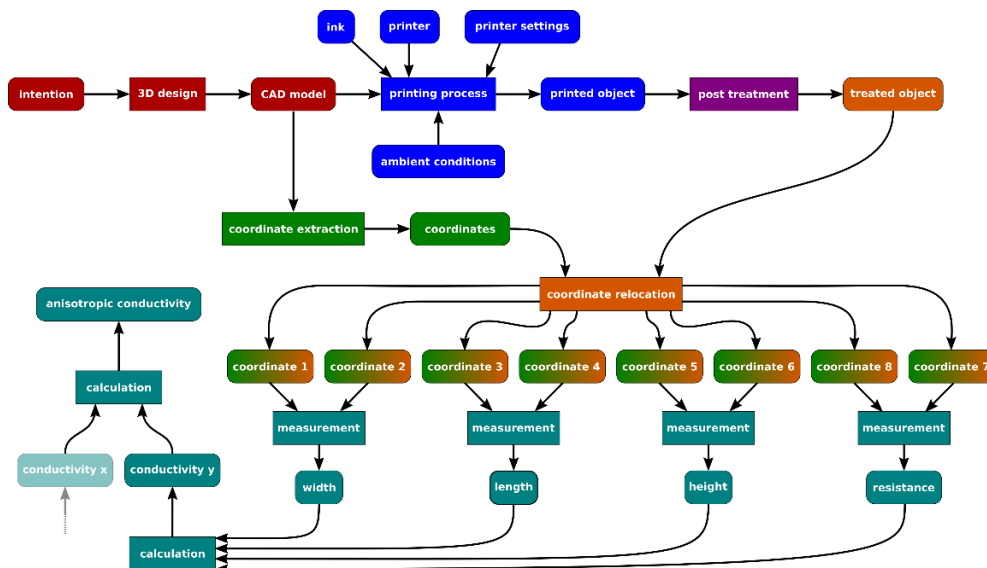


**Abbildung 22:** Exemplarischer Ablauf von Idee, Fertigung und Analyse

berechnet und als numerische Messdaten direkt maschinell verarbeitbar gespeichert werden.

Hierbei ist die Herausforderung zu bestimmen, zwischen welchen Punkten genau beispielsweise der Widerstand gemessen wurde: Genau am Ende der Leiterbahn oder mit einem kleinen Abstand zum Rand? Diese Informationen sind für eine genaue Bewertung des Ergebnisses relevant. Im klassischen Laborbuch würde hierzu eine Skizze angefertigt oder eine Notiz verfasst. Beides ist nur schwer maschinell und automatisiert verarbeitbar. Für eine automatisierte, maschinelle Verarbeitung sind Darstellungen in Form von Koordinaten zweckmäßig. Dementsprechend wurden die entwickelten OTTR-Templates (Abbildung 23) darauf ausgelegt, Messungen mit geeigneten Koordinaten abzubilden, entweder als Wert zwischen zwei geometrischen Positionen (Widerstand, Länge usw.) oder als Wert an einer Position (z.B. Temperatur).

Zwar existiert für den 3D-Druck ein CAD-Modell, welches für die Beschreibung von Positionen genutzt werden kann, die Messungen selbst werden jedoch am gedruckten Objekt durchgeführt. Die gewählte Vorgehensweise sei nun beispielhaft erläutert: Für die Messung des Widerstandes werden zunächst die Punkte, zwischen denen gemessen werden soll, im CAD-Modell ausgewählt und die Modellkoordinaten (X,Y,Z) im CAD-Modell gespeichert. Anschließend werden die Punkte am gedruckten Modell identifiziert und an diesen die Messung durchgeführt. Der Widerstandswert, seine Unsicherheit, die Modell- und Seriennummern der verwendeten Messgeräte, weitere Daten über das Objekt, Datum und Uhrzeit und



**Abbildung 23:** Struktur der Prozessschritte und der zugehörigen OTTR-Templates am Beispiel der anisotropen Leitfähigkeit.

die Modellkoordinaten werden im ontologisch angelehnten Format gespeichert. Gemäß dieser Vorgehensweise werden auch Längenmessungen am gedruckten Objekt durchgeführt und die Längen nicht aus dem CAD-Modell extrahiert. Eine Extraktion von Abmessungen aus dem CAD-Modell würde vernachlässigen, dass gedrucktes Objekt und CAD-Modell aus verschiedenen Gründen voneinander abweichen können. Das hier gewählte Vorgehen erlaubt es, auch komplexe Messungen maschinell verarbeitbar zu beschreiben und Größen wie zum Beispiel die anisotrope Leitfähigkeit zu bestimmen.

## 4. Untersuchung der elektrischen und thermischen Leitfähigkeit

Im Rahmen von AP 5.1 und 5.2 wurden Untersuchungen zur Bereitstellung von Daten sowie zur Charakterisierung des Materials und des Druckprozesses durchgeführt. Da mittels 3D-Hybriddruck ein innovativer Wärmetauscher realisiert wurde, war die thermische Leitfähigkeit von besonderem Interesse. Das bei dem Hybriddruck zum Einsatz kommende Inkjet-Verfahren ermöglicht den Druck von elektrisch leitfähigen Strukturen auf Basis von Silberpartikeln. Die elektrische Leitfähigkeit der gedruckten und nachbehandelten Strukturen wurde eingehend untersucht und aufgrund der besseren Messbarkeit stellvertretend für die thermische Leitfähigkeit betrachtet, da beide gemäß dem Gesetz von Wiedemann und Franz korrelieren.

### 4.1 Abhängigkeit von der Nachbehandlung

Die nachfolgenden Arbeiten wurden zum Teil im Rahmen einer Studienarbeit<sup>5</sup> durchgeführt. Die beobachtete elektrische Leitfähigkeit der gedruckten Strukturen auf Basis von Silberpartikeln (ohne Sinterprozess) betrug direkt nach dem Druck  $\sigma \approx 0,15 \text{ MS/m}$  und ist damit deutlich niedriger als die (Bulk-)Leitfähigkeiten von Materialien wie Kupfer ( $\sigma \approx 58 \text{ MS/m}$ ), Aluminium ( $\sigma \approx 37 \text{ MS/m}$ ) oder Eisen ( $\sigma \approx 10 \text{ MS/m}$ ), die üblicherweise als elektrische Leiter genutzt werden. Um das Material als elektrischen Leiter nutzen zu können, wird eine thermische Nachbehandlung durchgeführt. Diese kann bereits im Drucker mit Hilfe von Infrarotstrahlung und temperiertem Druckbett erfolgen, jedoch wurde aufgrund der besseren Steuerbarkeit für die folgenden Untersuchungen ein externer Heizofen verwendet.

Die Einflüsse von Nachbehandlungsdauer und -temperatur wurden mittels jeweils dreier Leiterbahnen ermittelt, welche in Richtung der X- und Y-Achse gedruckt und mit unterschiedlichen Temperaturen und Zeiten nachbehandelt wurden. Aus den gemessenen Widerständen wird der Mittelwert gebildet und zusammen mit den Abmessungen der Leiterbahn die elektrische Leitfähigkeit berechnet.

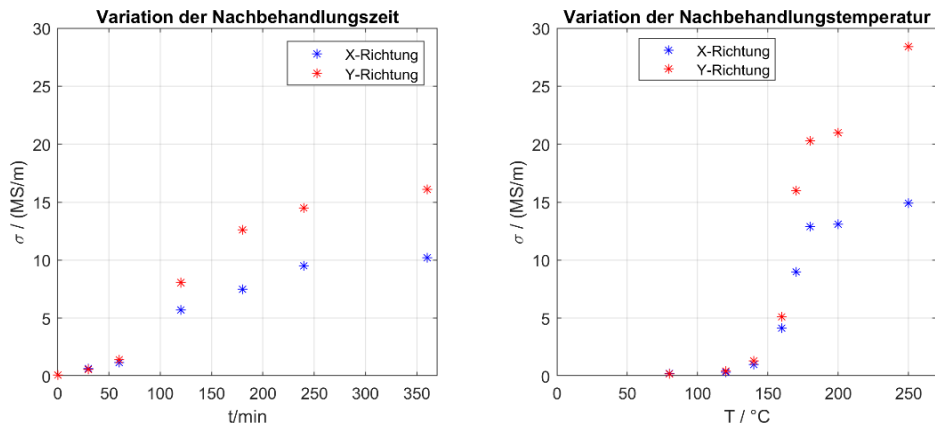
Abbildung 24 zeigt links eine Variation der Nachbehandlungszeit bei einer konstanten Temperatur von  $160 \text{ }^\circ\text{C}$ , welche dem Standardnachbehandlungsprozess im Drucker mit Infrarot und aufgeheiztem Druckbett entspricht. Es ist ein Anstieg der elektrischen Leitfähigkeit mit der Nachbehandlungszeit zu beobachten, der ab rund  $240 \text{ min}$  deutlich abnimmt. Die größte Änderung findet zwischen  $60 \text{ min}$  und  $240 \text{ min}$  statt. Eine mögliche Erklärung für den schwächeren Anstieg zu Beginn könnte die Verdampfung von Flussmittelresten sein. Die Leitfähigkeit ist in Y-Richtung höher als in X-Richtung. Dies wird in Abschnitt 4.5 unten genauer betrachtet. Abbildung 24 zeigt rechts eine Variation der Temperatur bei gleicher Nachbehandlungszeit von  $120 \text{ min}$ . Es ist gut erkennbar, dass sich höhere Temperaturen positiv auf die elektrische Leitfähigkeit auswirken und es sinnvoll ist, das Material auf über  $180 \text{ }^\circ\text{C}$  zu erhitzen. Deutlich höhere Temperaturen wie  $250 \text{ }^\circ\text{C}$  jedoch führen bei dieser Nachbehandlungszeit zur Verfärbung und Verformung des Materials. Um dies zu vermeiden, wurde ein zweistufiger Nachbehandlungsprozess entwickelt, bei dem das Material zunächst  $120 \text{ min}$  bei  $160 \text{ }^\circ\text{C}$  und anschließend  $15 \text{ min}$  bei  $250 \text{ }^\circ\text{C}$  erhitzt wird. Die Verfärbung und Verformung des Materials können durch die kurze Zeit bei  $250 \text{ }^\circ\text{C}$  weitgehend vermieden werden. Außerdem werden mit  $\sigma_{x,max} = 16 \text{ MS/m}$  in X- und  $\sigma_{y,max} = 32 \text{ MS/m}$  in Y-Richtung höhere Leitfähigkeiten erreicht, als bei dem Prozess  $120 \text{ min}$  bei  $250 \text{ }^\circ\text{C}$ .

Ergänzend wurden Untersuchungen durchgeführt, bei denen die Probe elektrisch durch einen kurzzeitigen hohen Strom („Elektrosintern“) sowie alternativ mit Infrarotstrahlung in einer „Rapid-Thermal-Annealing (RTA)“-Anlage kurzzeitig auf Temperaturen von mehreren hundert Grad erhitzt wird. Die RTA-Anlage der Universität Bielefeld wird normalerweise zur thermischen Nachbehandlung von Dünnschichtsystemen auf Siliziumwafern genutzt. Beide Prozesse sind schwer steuerbar und aktuell

---

<sup>5</sup> Michel Kornelsen, Thore Jording: Einfluss der thermischen Nachbehandlung auf die elektrische Leitfähigkeit im 3D-Hybrid-Druck gedruckter leitfähiger Materialien. Studienarbeit, HSBI, Bielefeld 2023.

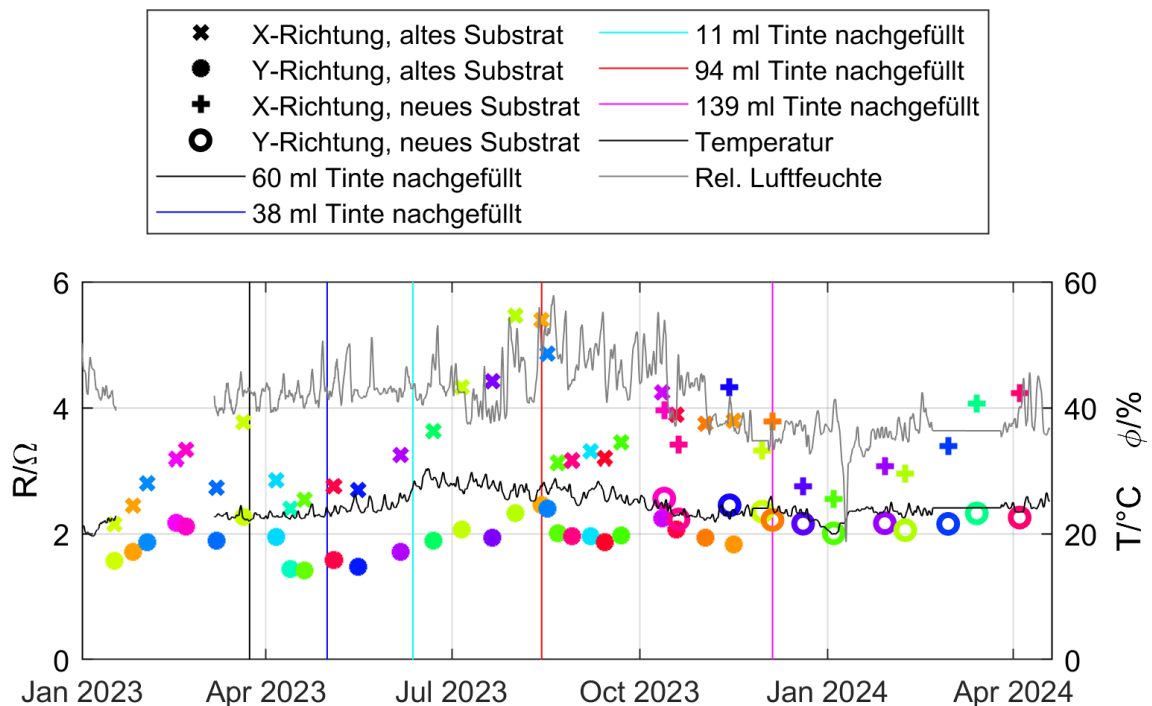
nicht praxistauglich. Es konnten jedoch mit dem Elektrosintern höhere Leitfähigkeiten erreicht werden als bei der Nachbehandlung im Heizofen oder Drucker. Die Leitfähigkeiten, die mit dem RTA erreicht wurden waren niedriger als bei Nachbehandlung im Heizofen oder mittels Elektrosintern.



**Abbildung 24:** Links: Leitfähigkeit in Abhängigkeit von der Nachbehandlungszeit bei  $T = 160^\circ\text{C}$ . Rechts: Leitfähigkeit in Abhängigkeit von der Temperatur bei einer Nachbehandlungszeit  $t = 120$  min.

#### 4.2 Abhängigkeit vom Alter der Tinte und den Umgebungsbedingungen

Um die Reproduzierbarkeit des Drucks und eine mögliche Abhängigkeit von Umgebungsbedingungen zu untersuchen, wurde in einem Langzeitversuch wiederholt ein Kreuz aus zwei Leiterbahnen in X- und Y-Richtung gedruckt, im Drucker nachbehandelt und die Widerstände in X- und Y-Richtung direkt nach dem Druck gemessen. Außerdem wurden Luftfeuchtigkeit und Temperatur im Druckerraum aufgezeichnet. Abbildung 25 zeigt die gemessenen Widerstände mit den Umgebungsbedingungen Luftfeuchtigkeit und Temperatur. Es ist gut zu erkennen, dass die Widerstandswerte und damit die elektrische Leitfähigkeit variieren, wobei die Änderungen in X-Richtung größer sind als in Y-Richtung. Eine systematische Abhängigkeit von der Temperatur oder Luftfeuchtigkeit im Druckerraum ist nicht zu



**Abbildung 25:** Gemessene Widerstandswerte der Leiterbahnen in X- und Y-Richtung direkt nach Fertigstellung des Drucks sowie Logdaten der Temperatur und relativen Luftfeuchtigkeit im Druckerraum in einem Langzeitversuch zur Reproduzierbarkeit.

erkennen. Auffällig ist jedoch, dass die Widerstände einige Tage nach dem Einfüllen von neuer Tinte sinken. Diese Beobachtung lässt sich womöglich damit erklären, dass sich eine vollständige Durchmischung von neuer mit vorhandener Tinte im Kreislauf des Druckers zeitlich verzögert einstellt. Auf einen Alterungseffekt der Tinte im Drucker lässt sich auch aus der Beobachtung schließen, dass stets kurz nach dem Auffüllen ein häufigerer Filterwechsel im Tintenkreislauf erforderlich ist, als wenn sich die Tinte einige Wochen im Drucker befindet. Ein weiterer Aspekt der Untersuchungen war der Einfluss des Substrats für den Druck, welcher im nächsten Abschnitt betrachtet wird.

#### **4.3 Abhängigkeit vom Drucksubstrat und Position auf dem Druckbett**

Es konnte gezeigt werden, dass die elektrische Leitfähigkeit der gedruckten Strukturen vom Untergrund abhängig ist, auf den sie gedruckt werden. Zu Testzwecken wurde leitfähiges Material direkt auf ein Glassubstrat und nicht wie üblich auf dielektrisches Material gedruckt. Das auf Glas gedruckte Material zeigt eine höhere elektrische Leitfähigkeit als leitfähiges Material, das auf dielektrisches Material gedruckt wird.

Während des im vorherigen Abschnitt beschriebenen und in Abbildung 25 gezeigten Langzeitversuchs wurde seitens des Druckerherstellers das Drucksubstrat geändert. Auswertungen des Verhältnisses von Leitfähigkeit in X- und Y-Richtung geben Hinweise darauf, dass sich das Substrat auch auf die elektrische Leitfähigkeit auswirkt, wenn leitfähiges auf dielektrisches Material gedruckt wird.

Außerdem konnte gezeigt werden, dass die elektrische Leitfähigkeit des Silbers abhängig von der Position auf dem Druckbett ist. Eine mögliche Ursache ist eine inhomogene Erwärmung des Druckbetts, die mit einer Wärmebildkamera erkennbar ist.

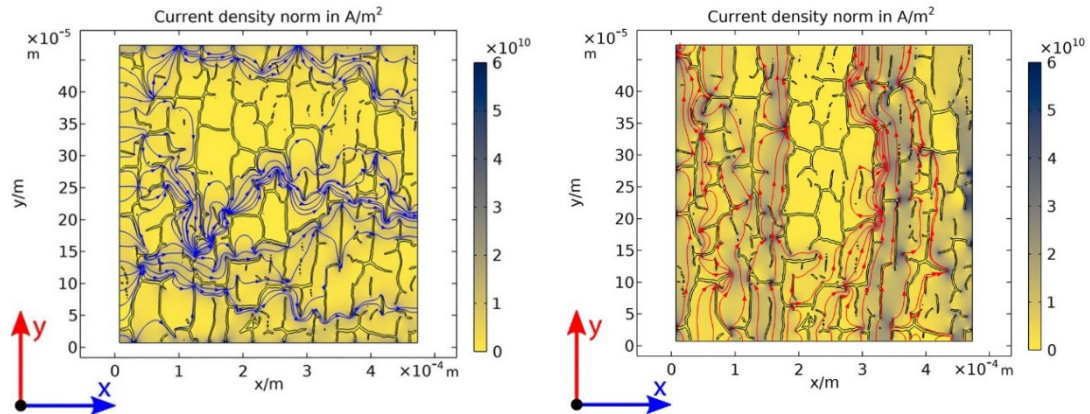
#### **4.4 Einfluss der Tropfenverteilung des Materials**

Das gesamte Druckerzeugnis wird aus einzelnen Tropfen aufgebaut (siehe Abbildung 15). Die einzelnen Tropfen bilden ein Widerstandsnetzwerk, das den Strom leitet. Erst mit hinreichender Breite ( $b \approx 0,5 \text{ mm}$ ) und Dicke (etwa 30 Schichten bzw.  $d \approx 12 \text{ }\mu\text{m}$ ) existieren ausreichend Pfade, damit die elektrische Leitfähigkeit des gedruckten Materials, wie in homogenen Materialien, unabhängig von den geometrischen Abmessungen ist. Hierdurch ergibt sich, dass bei schmalen und/oder dünnen Strukturen die Leitfähigkeit abhängig von Dicke und Breite ist. Der Effekt konnte sowohl experimentell als auch in FEM-Simulationen gezeigt werden.

#### **4.5 Ursachen der anisotropen Leitfähigkeit**

In verschiedenen Versuchen wurde beobachtet, dass die Leitfähigkeit mit einer Vorzugsrichtung entlang der Y-Achse anisotrop ist. Eine Ursache ergibt sich direkt aus dem Druckprozess. Flächen werden in zwei Schritten aufgebaut (siehe Abbildung 15). Durch den Aufbau von Flächen in zwei Schritten ergibt sich, dass sich die Tintentropfen in Richtung der Y-Achse „nass in nass“ und in Richtung der X-Achse „nass in trocken“ verbinden. Es konnte durch eine Manipulation des Druckprozesses gezeigt werden, dass die „nass in trocken“-Verbindungen die Leitfähigkeit reduzieren. Ein anderer Einfluss ergibt sich aus der Rissstruktur des leitfähigen Materials. In Zusammenarbeit mit der Universität Bielefeld wurden Bilder mit einem Rasterelektronenmikroskop der Oberfläche angefertigt. Diese Bilder wurden in Geometrien für COMSOL Multiphysics umgewandelt, um den Strom durch die Rissstruktur zu simulieren. Abbildung 26 zeigt eine 2D-Simulation des Stromes in X- und Y-Richtung. In der Vorzugsrichtung existieren mehr Strompfade durch die Rissstruktur was eine höhere elektrische Leitfähigkeit bedingt. Hierzu wurden noch weitere Untersuchungen mit unterschiedlichen Risstiefen durchgeführt, die das Ergebnis bestätigen, dass die Rissstruktur eine anisotrope Leitfähigkeit bedingt.

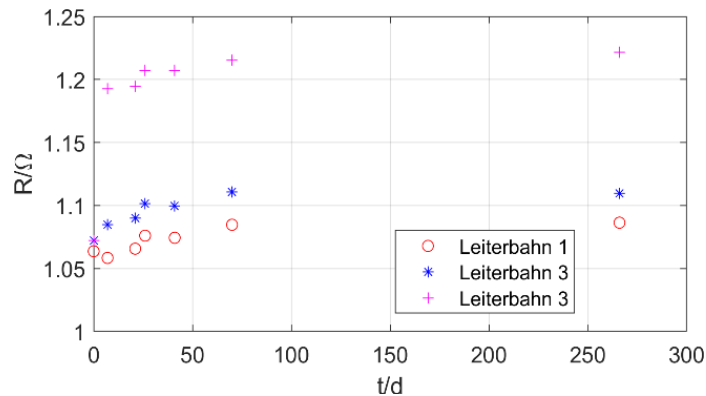
Zur Untersuchung des Einflusses der Struktur der Oberfläche wurden mit einem Laserscanningmikroskop Oberflächenprofile angefertigt und hieraus Geometrien für COMSOL Multiphysics erzeugt. Hier zeigt sich jedoch, dass die Oberflächenstruktur wahrscheinlich keinen Einfluss auf die Anisotropie der elektrischen Leitfähigkeit hat.



**Abbildung 26:** Stromdichteverteilungen mit Strompfaden für einen Stromfluss in X- (links) und Y-Richtung (rechts) durch die Rissstruktur.

#### 4.6 Alterung

Abbildung 27 zeigt die zeitliche Entwicklung der Widerstände von drei identischen Leiterbahnen bezogen auf die Zeitdauer seit der Druckerstellung. Die Proben wurden im Heizofen bei  $160\text{ }^{\circ}\text{C}$  für  $90\text{ min}$  nachbehandelt. Es ist gut zu erkennen, dass der Widerstand kurz nach der Druckerstellung steigt und dann nahezu konstant bleibt. Es kommt somit in den ersten Wochen nach der Druckerstellung noch zu Veränderungen im Material.



**Abbildung 27:** Änderung des Widerstands der drei Leiterbahnen nach dem Druck durch Alterung.

## **Die wichtigsten Positionen des zahlenmäßigen Nachweises**

Das Teilvorhaben der Hochschule Bielefeld – Multiskalen-Simulationen und 3D-Hybrid-Druck (FKZ 13XP5120A) wurde im Rahmen des Verbundprojektes - Digitalisierung einer Prozesskette zur Herstellung, Charakterisierung und prototypischen Anwendung magnetokalorischer Legierungen (DiProMag) von den Kooperationspartnern AG Schöning (AP5) und AG Schröder (AP6) über die Laufzeit des Vorhabens vom 01.02.2021 bis zum 31.05.2024 durchgeführt. Von den für die AG Schröder beantragten Personalmitteln konnte mit Projektbeginn ein vorhandener fachlich ausgewiesener wissenschaftlicher Mitarbeiter zu 50% beschäftigt werden. Die Besetzung der zweiten 50%-Stelle erwies sich als schwierig und gelang erst zum 15.08.2022. Als Folge davon wurde in Absprache mit der AG Schöning die Arbeiten in AP6.3 vom Mitarbeiter der AG Schöning übernommen. Aufgrund dieser Gesamtsituation wurden die Arbeiten am AP 6.1 über die ursprünglich veranschlagten Projektinhalte ausgedehnt, um optimal auf das Ziel der PMD eingehen und mit dieser zusammenarbeiten zu können: Der Output des Forschungsprojekts ist im Wesentlichen als Prototyp für die Zielsetzungen der PMD (damit auch der NFDI und NFDI MatWerk) zu sehen. Dieses Vorgehen unterstützte die PMD, wurde aber auch die Projektpartner von DiProMag unterstützt, da nachhaltig wiederverwendbare Workflows und Mechanismen geschaffen wurden, um die Projektergebnisse nach Projektende im Sinne weiterer Förderungen weiter zu nutzen. Da ein Projektmitarbeiter zum 01.01.2024 das Projekt verlies, konnte für den Zeitraum 01.01.2024 bis 31.05.2024 ein weiterer Mitarbeiter eingestellt werden, der das AP 6.2 bearbeitete.

Von den für die AG Schöning beantragten Personalmitteln konnte mit Projektbeginn ein in der 3D-Hybriddrucktechnik erfahrener wissenschaftlicher Mitarbeiter zu 50% und ein in der Multiphysik-Simulation erfahrener wissenschaftlicher Mitarbeiter mit zunächst 30% beschäftigt werden. Die letztgenannte Stelle wurde zum 01.05.2021 auf eine 50%-ige Beschäftigung aufgestockt. Für die Arbeiten in AP5 wurde ein in der AG Schöning vorhandener innovativer 3D-Hybriddrucker eingesetzt. Der Betrieb des Druckers erfordert regelmäßige Wartungseingriffe und ggf. Instandsetzungsmaßnahmen des Herstellers, deren Erbringung auf Grundlage eines Wartungsvertrages erfolgt. Die Wartungsverträge wurden über die Projektlaufzeit planmäßig abgeschlossen und seitens Auftragnehmer erfüllt. So konnte der Betrieb des Druckers und eine verlässliche hohe Qualität der Druckerzeugnisse gewährleistet werden, was für dieses Projekt von besonderer Bedeutung war: Mittels 3D-Hybriddruck konnte eine innovative Topologie in einem Wärmetauscher für magnetokalorische Kühlanwendungen realisiert werden. Die umfangreiche Charakterisierung der gedruckten, insbesondere der elektrisch leitfähigen Strukturen und die Analyse der Beobachtungen haben zu grundlegenden und wichtigen Erkenntnissen für den Einsatz und die Reproduzierbarkeit dieser Technologie geführt. Nicht zuletzt war das Gerät prädestiniert für die Arbeiten zur Digitalisierung der Prozesskette, weil es sich um ein professionelles Gerät für den industriellen Einsatz handelt mit entsprechenden definierten und reproduzierbaren Prozessabläufen.

## **Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten**

Die im Rahmen dieses Projekts in Zusammenarbeit durchgeführten Arbeiten der Arbeitsgruppen Schöning und Schröder sowie die daraus erzielten Ergebnisse waren entscheidend für das Erreichen der Meilensteine und den intensiven Austausch mit der PMD und somit wesentlich für den Erfolg des Projekts.

## **Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere die Verwertbarkeit des Ergebnisses - auch konkrete Planungen für die nähere Zukunft - im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplans**

Einer der wissenschaftlichen Erfolge unseres Projektes ist die ontologische Abbildung sowohl des experimentellen als auch des theoretischen Workflows und deren Interaktion im Hinblick auf die Entwicklung magnetokalorischer Heuslerlegierungen entlang der Herstellungsprozesse von Bulk- zu

Dünnschichtsystemen und umgekehrt von Dünnschicht- zu Bulksystemen. Diese interagierenden Workflowketten können sofort auf andere Materialsysteme übertragen werden. Das um weitere Industriepartner erweiterte DiProMag-Konsortium hat im Rahmen der zweiten und dritten Ausschreiberunde von MaterialDigital Projektanträge eingereicht, die eine Weiterentwicklung der in DiProMag gewonnenen Ergebnisse und Erkenntnisse ermöglicht hätte. Leider wurde jedoch keiner dieser Anträge bewilligt.

Über die Teilnahme an Konferenzen und über gemeinsame Publikationen hat dieses Projekt die nationale und internationale Reputation der beteiligten Wissenschaftler\*innen deutlich erhöht. Für Centrum für interdisziplinäre Materialforschung und Technologieentwicklung (CiMT) von Universität und Hochschule Bielefeld führt das Projekt zu einem umfangreichen Kompetenzzugewinn sowohl im Bereich Digitalisierung der Materialforschung als auch in der Materialforschung selbst, da magnetokalorische Materialien dort bislang nicht Gegenstand der Forschung sind. Die enge Kooperation von Physik, Ingenieurwissenschaften und Informatik soll weiter ausgebaut werden, um das Thema Digitalisierung der Materialforschung in Bielefeld zu einem wissenschaftlichen Schwerpunkt im bundesweiten Netzwerk MaterialDigital zu entwickeln. Wir erwarten, dass die gemeinsam mit der PMD entwickelten Ontologien und Workflows für magnetokalorische Materialien auch auf andere Materialsysteme und übertragen werden kann. Dies geschieht aktuell im vom BMBF geförderten Projekt PolyCycle (Laufzeit: 01.04.2024 – 31.03.2027, FKZ 13FH068KA2) im Rahmen der Förderlinie FH Kooperativ. Ziel des Projekts ist die Aufklärung des Degradationsverhaltens in Polypropylen-Modellrezepturen anhand einer korrelativen experimentell-theoretischen Untersuchungsmethodik zur Entwicklung nachhaltiger Kunststoff-Rezyklate. Ein besonderer Mehrwert ist dabei die Konservierung aller Vorgehensweisen, Entscheidungen und Erkenntnisse im Rahmen der Untersuchungsmethodik in einem digitalen Workflow. Damit werden einerseits entscheidende Voraussetzungen für einen weiteren systematischen und effizienten Knowhow-Aufbau geschaffen, andererseits wird damit ein wichtiger Beitrag zur Digitalisierung der Materialforschung im Rahmen der BMBF-Initiative MaterialDigital geleistet.

Unser Firmenspartner Miele Cie. & KG hat großes Interesse an der Entwicklung von Material-Ontologien. Immer öfter werden Alternativen zu bestehenden Materialien gesucht. Die Motivationen sind hierbei vielfältig. Die Identifizierung von Rezyklaten, alternativer umweltfreundlicher Kältemittel, umweltschonender Reinigungsmittel und eben neuer Materialien, die industriellen Leistungszielen in Sachen Nachhaltigkeit, Performance und Kosten genügen oder zu disruptiven Innovationen führen können. Die industrielle Anwendung der Magnetokalorik in den Kältekreisläufen würde einen Quantensprung bedeuten und den Energiebedarf privater Haushalte deutlich senken.

An die Entwicklung der innovativen Topologie eines im 3D-Hybriddruck gefertigten Wärmetauschers lässt sich in mehrfacher Hinsicht direkt anschließen: Da das Auf- und Einbringen von magnetokalorischem Material verschiedener Gestalt (Bulk- oder Dünnschichtmaterial, gesputtert oder freigestellt) in einem *back-end* Prozess gelingt, kann dieser in künftigen magnetokalorische Kühlanwendungen zum Einsatz kommen. Der hier gewählte Ansatz, die leitfähigen Strukturen des Hybriddrucks gezielt für den optimierten Wärmetransport auszulegen und nutzbar zu machen, kann jedoch in vielen weiteren Anwendungen – insbesondere auch rein elektronischen bzw. leistungselektronischen – zum Einsatz kommen. Der Bedarf an effizienten Kühltechnologien ist hier von enormer Bedeutung, u.a. aufgrund des enormen Zuwachses an Rechenleistung durch den Einsatz der künstlichen Intelligenz, der Elektrifizierung des Transportsektors sowie der Energiewende. Die in diesem Projekt erarbeiteten Prozessketten für die Digitalisierung des 3D-Hybriddrucks sind zudem von großer Bedeutung für die Weiterentwicklung der Technologie sowie für deren Einsatz. 3D-Druckverfahren bedingen andere Produkteigenschaften und eine andere Herangehensweise im Produktdesign als nicht-additive Verfahren. Auf der anderen Seite bieten sich neue Möglichkeiten im Design sowie in der Kombination von Materialien. Das hier gewonnene Verständnis für die Materialeigenschaften und deren Einflussparameter sowie insbesondere der Schritt zu der Abbildung eines digitalen Zwillings des Druckobjekts findet unmittelbar Eingang in die Beantragung neuer Forschungsprojekte wie in der Förderlinie Forschungsimpulse der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG).

## **Während der Durchführung des Vorhabens dem Zuwendungsempfänger bekannt gewordener Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen**

Die Entwicklung von Workflows und Ontologien mit Bezug zu magnetokalorischen Materialien, insbesondere Heusler-Legierungen, stellt ein Alleinstellungsmerkmal des Konsortiums am Campus Bielefeld dar. Fortschritte auf diesem Gebiet an anderen Stellen sind uns nicht bekannt.

Der Einsatz der Hybrid-3D-Drucktechnologie für die Entwicklung eines Wärmetauschers für magnetokalorische Kühlanwendungen ist eine Innovation, die uns von anderer Stelle nicht bekannt ist. Die Untersuchungen zur Anisotropie der elektrischen Leitfähigkeit sowie die Herangehensweise und Ergebnisse ihrer Erklärung auf Basis der entstehenden Rissstrukturen sind nach unserer Kenntnis ebenfalls neu.

## **Erfolge oder geplante Veröffentlichungen des Ergebnisses**

Im Verlauf des Projekts wurden in der AG Schröder der AG Schöning 14 Konferenzbeiträge veröffentlicht. In der Fertigstellung befindet sich darüber hinaus eine von allen AGs verfasste Journalveröffentlichung in *Advanced Engineering Materials: Special Issue on "Digitalization in Materials Science and Engineering"*, deren Einreichung für Anfang 2025 geplant ist. In Planung ist darüber hinaus eine Arbeit zu den Ergebnissen in AP6.2 gemeinsam mit der AG Hütten von der Universität Bielefeld

### **Liste der Veröffentlichungen**

#### **AG Schöning, Arbeitspaket 5**

1. L. Schwan, M. Feige., A. Hütten, S. Schöning. (18.03.2024). Investigation of the Anisotropic Conductivity in Printed Nanosilver, DPG-Frühjahrstagung, Berlin, Poster.
2. M. Feige., L. Schwan, S. Schöning. (18.03.2024). Usability and Performance Analysis of 3D-Ink-Jet-Printed Load Cells with Resistive and Capacitive Strain Gauges, DPG-Frühjahrstagung, Berlin, Poster.
3. Bekemeier, S., Blum, M., Caron, L., Chirkova, A., Cimiano, P., Ell, B., Ennen, I., Feige, M., Hilbig, T., Hütten, A., Reiss, G., Samanta, T., Schöning, S., Schröder, C., Schwan, L., Wortmann, M. (18.03.2024). Implementation of Experimental Results in an Ontology of Magnetocaloric Materials Research, DPG-Frühjahrstagung, Berlin, Poster.
4. Bekemeier, S., Blum, M., Caron, L., Chirkova, A., Cimiano, P., Ell, B., Ennen, I., Feige, M., Hilbig, T., Hütten, A., Reiss, G., Samanta, T., Schöning, S., Schröder, C., Schwan, L., Wortmann, M. (20.09.2023). Implementation of Experimental Results in an Ontology of Magnetocaloric Materials Research, PMD general assembly, Karlsruhe, Poster.
5. L. Schwan, M. Feige., A. Hütten, S. Schöning. (27.03.2023). Ontology-Template-Based Description of Anisotropic Conductivity Measurements, DPG-Frühjahrstagung, Dresden, Poster.
6. Bekemeier, S., Blum, M., Caron, L., Cimiano, P., Ell, B., Ennen, I., Feige, M., Hilbig, T., Hütten, A., Reiss, G., Samanta, T., Schöning, S., Schröder, C., Schwan, L., Wortmann, M. (06.03.2023). An Ontology of Magnetocaloric Materials Research, DPG-Frühjahrstagung, Dresden, Poster.
7. L. Schwan, A. Hütten, S. Schöning. (28.09.2021). Simulation Based Conductivity Tensor Determination of Sintered Nanosilver, DPG-Frühjahrstagung, online, Poster.
8. M. Feige, L. Schwan, S. Schöning. (28.09.2021). Influence of processing parameters on the electrical conductivity of 3D printed silver structures, DPG-Frühjahrstagung, online, Poster.

#### **AG Schröder, Arbeitspaket 6**

9. Bekemeier, S., Blum, M., Caron, L., Chirkova, A., Cimiano, P., Ell, B., Ennen, I., Feige, M., Hilbig, T., Hütten, A., Reiss, G., Samanta, T., Schöning, S., Schröder, C., Schwan, L., Wortmann, M. (18.03.2024). Implementation of Experimental Results in an Ontology of Magnetocaloric Materials Research, DPG-

Frühjahrstagung, Berlin, Poster.

10. Bekemeier, S., Blum, M., Caron, L., Chirkova, A., Cimiano, P., Ell, B., Ennen, I., Feige, M., Hilbig, T., Hütten, A., Reiss, G., Samanta, T., Schöning, S., Schröder, C., Schwan, L., Wortmann, M. (20.09.2023). Implementation of Experimental Results in an Ontology of Magnetocaloric Materials Research, PMD general assembly, Karlsruhe, Poster.
11. Bekemeier, S., Blum, M., Caron, L., Cimiano, P., Ell, B., Ennen, I., Feige, M., Hilbig, T., Hütten, A., Reiss, G., Samanta, T., Schöning, S., Schröder, C., Schwan, L., Wortmann, M. (27.03.2023). An Ontology of Magnetocaloric Materials Research, DPG-Frühjahrstagung, Dresden/Deutschland, Poster.
12. Bekemeier, S., Hilbig, T., Nickel, S., Yaman, O., & Schröder, C. (2023). Accelerating Knowledge Generation and Materials Discovery through Automated Digitalization Workflows. FEMS EUROMAT 2023, Frankfurt am Main, Poster.
13. Bekemeier, S., Chirkova, A., & Schröder, C. (2023). A high-level workflow-based approach towards the exploration of magnetocaloric Heusler alloys by automated high-throughput simulations. DPG-Frühjahrstagung, Dresden/Deutschland, Poster.
14. Bekemeier, S., Blum, M., Caron, L., Cimiano, P., Ell, B., Ennen, I., Feige, M., Hilbig, T., Hütten, A., Reiss, G., Samanta, T., Schöning, S., Schröder, C., Schwan, L., Wortmann, M. (27.09.2022). Digitization of a process chain for the production, characterization and prototypical application of magnetocaloric alloys (DiProMag), MSE Congress, Darmstadt, Poster.