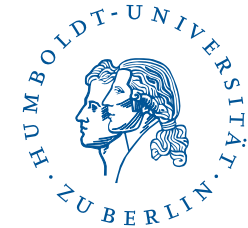


Integrative Research Institute for the Sciences (IRIS Adlershof)

Computational Materials Design



IRIS ADLERSHOF

PROF. DR. DR. H.C.
CLAUDIA DRAXL

Funktionelle Materialien sind aus kaum einem Bereich unserer Gesellschaft wegzudenken. Führen wir uns Steinzeit, Eisenzeit oder Bronzezeit vor Augen, so kommt uns deren historische Bedeutung umso mehr zu Bewusstsein. Während unsere derzeitige Welt von der Silizium-Technologie dominiert wird, ist es an der Zeit, an zukünftige Epochen zu denken.

Ob Silizium, Teflon, Katalyse – die Zeit von der (Er-)Findung eines Materials, eines Prozesses oder einer Funktion bis zur großtechnischen Anwendung nimmt zwei oder gar drei Jahrzehnte in Anspruch. Der traditionelle Weg, Materialien zu synthetisieren, charakterisieren und im Hinblick auf mögliche Eigenschaften zu testen und optimieren, stellt einen langwierigen Prozess dar. Können wir diesen effizienter gestalten?

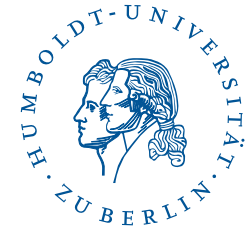
Die Physik, herkömmlich in Experiment und Theorie unterteilt, hat mehr Facetten zu bieten. Die computerorientierte Materialwissenschaft erlaubt auf Basis der Quantenphysik die genaue Berechnung und Vorhersage verschiedenster Materialeigenschaften und ermöglicht somit Einblicke in physikalische Prozesse, die experimentell kaum oder gar nicht zugänglich sind. Weltweite Aktivitäten zum Aufbau digitaler Materialdatenbanken sind auf dem Weg, einen neuen Zweig der Materialentwicklung zu definieren. Sie nähren die Hoffnung, schneller als bisher zu optimalen Werkstoffen und deren wirtschaftlichen Anwendungen zu kommen.

Um solche ehrgeizigen Ziele zu realisieren, bedarf es jedoch intensiver Forschung auf allen Ebenen. Dies umso mehr, als neuartige Materialien durch komplexen Aufbau (z.B. Hybridmaterialien, Nanostrukturen) und komplizierte Wechselwirkungen bestimmt sind. Es gilt also, physikalisch-mathematische Konzepte zu entwickeln und diese in Computerprogramme umzusetzen, die uns mittels moderner Hochleistungscomputer erlauben, Materialien für eine bestimmte Anwendung zu optimieren.



Integrative Research Institute for the Sciences (IRIS Adlershof)

Materialdatenbank



IRIS ADLERSHOF

FÖRDERSUMME

Gesamt 80.000 €

Hardware 40.000 €

Personal 40.000 €

- 1/2 Doktorand_in (Datenerzeugung)
- 1/2 Doktorand_in (Datenanalyse)

Die Arbeitsgruppe der Theoretischen Festkörperphysik der Humboldt-Universität zu Berlin baut derzeit eine neuartige Materialdatenbank auf.

Dabei geht es nicht nur um Hardware. Viele Köpfe und Hände sind involviert, um die Eigenschaften von unterschiedlichsten Materialien auf höchstem Niveau zu berechnen. Diese umfassen anorganische wie organische Substanzen genauso wie Hybridmaterialien, die das Beste aus den beiden Welten kombinieren sollen.

Diese Fülle von Daten dient nicht nur der Suche nach Materialien für besonders relevante Anwendungsgebiete für Energie und Umwelt: Solarzellen und optoelektronische Bauelemente, Katalyse, Thermoelektrik, etc. Vielmehr sollen neue Analysewerkzeuge entwickelt werden, um die sehr heterogenen Datenstrukturen nach kausalen Korrelationen zu untersuchen.

Der hochgradig interdisziplinäre Charakter dieser neuartigen Forschungs- und Entwicklungsrichtung erfordert enge Zusammenarbeit in den Gebieten Physik und Chemie, Materialwissenschaften, Angewandte Mathematik, Informatik und Maschinelles Lernen.

AUSSTATTUNG

Wissenschaftliches Personal

- je sechs Monate Doktorand_in zur Erzeugung von Daten zu einem ausgesuchten (oben angeführten) Thema
- sechs Monate Doktorand_in zur Entwicklung von Datenanalysewerkzeugen

Hardware

- Computerknoten mit erhöhtem Arbeitsspeicher zur Berechnung komplexer Materialien
- Erweiterung des Filesystems zur effizienten Berechnung und Speicherung von großen Datensätzen

