

Computerbasiertes Hochdurchsatz-Screening von Werkstoffen

Für die Lösung vieler Zukunftsaufgaben und die Entwicklung neuer Produkte und Technologien ist es enorm wichtig, neue Werkstoffe zu entwickeln oder bereits bekannte kontinuierlich weiter zu verbessern. Obwohl der Mensch sich letztlich schon seit Jahrtausenden damit befasst, Werkstoffe wie Stein, Bronze oder Eisen nach seinen Vorstellungen zu modifizieren, benötigt man auch heutzutage noch zwischen 15 und 20 Jahren Entwicklungszeit, bis ein neuer Werkstoff am Markt erfolgreich ist. Ein neuer Ansatz könnte diesen Prozess erheblich beschleunigen. Das sogenannte computerbasierte Hochdurchsatz-Screening verknüpft effiziente quantenmechanische Simulationsverfahren mit Methoden des Data Mining und sollte es in den nächsten Jahren erlauben, neue Werkstoffe am Computer zu entwerfen. Der Prozess der Werkstoffentwicklung wird damit schneller und preisgünstiger werden.

Bislang baut dieser nämlich sehr stark auf Versuch und Irrtum auf: Bereits bekannte Verbindungen, welche eine gewünschte Materialeigenschaft aufweisen, werden geringfügig verändert und anschließend aufwändig im Labor charakterisiert. Stellt sich dabei heraus, dass einer dieser neuen Werkstoffe bessere Eigenschaften besitzt, so dient dieser als Ausgangspunkt für die weitere Suche. Dieses Vorgehen ist recht umständlich, weil es sehr zeitaufwändig sein kann, neue Werkstoffe zu synthetisieren und anschließend deren Eigenschaften zu bestimmen. Dies schränkt die Suche meist auf einen relativ eng begrenzten Bereich aller möglichen Verbindungen ein. Infolgedessen können vielversprechende Kandidaten übersehen werden.

Die Grundidee des computerbasierten Hochdurchsatz-Screenings besteht darin, die beiden besonders aufwändigen Prozessschritte – die Synthese und die Charakterisierung eines Werkstoffs – in den Computer zu verlagern, sie sozusagen in-silico durchzuführen.

Ausgangspunkt hierfür bilden Datenbanken, welche die Kristallstrukturen von einigen 10.000 Festkörpern enthalten. Im ersten Schritt wird aus diesen ein Satz an

Strukturen erzeugt, die im weiteren Verlauf der Untersuchung behandelt werden sollen. Diese Auswahl an Startstrukturen kann sich beispielsweise auf Legierungen eines bestimmten Typs beschränken. Oder sie entstehen, indem spezifische Elemente in bestimmten Verbindungen systematisch durch andere ersetzt werden. Der so erzeugte Satz an Startstrukturen enthält üblicherweise immer noch einige tausend Verbindungen.

Im nächsten Schritt müssen die physikalischen Eigenschaften der ausgewählten Werkstoffe bestimmt werden. Hierfür greift man auf die sogenannte Dichte-Funktional-Theorie (DFT) zurück. Dies ist ein Simulationsverfahren, welches es erlaubt, die physikalischen und chemischen Eigenschaften beispielsweise eines Festkörpers zu berechnen. Dabei berücksichtigt man einzig und allein die atomistische Struktur der Materie und die Wechselwirkung der Atome untereinander, ohne auf experimentell bestimmte Parameter zurückzugreifen. DFT-Verfahren sind die derzeit wichtigsten Methoden im Bereich der computerbasierten Werkstoffentwicklung, da sie zwei wichtige Aspekte vereinen. Zum einen erlauben sie es, die diversen Eigenschaften eines Werkstoffs mit hinreichender Exaktheit zu berechnen. Zum anderen ist die benötigte Rechenleistung relativ gering, sodass es möglich ist, eine große Anzahl von Rechnungen in akzeptabler Zeit durchzuführen. Bei deren Durchführung existieren heute noch zwei technische Herausforderungen. Zum einen können die Genauigkeit und die Geschwindigkeit von DFT-Rechnungen nach wie vor weiter verbessert werden. Zum anderen geht es darum, diesen Prozess soweit zu automatisieren, dass notwendige Eingriffe durch den Nutzer auf ein Minimum beschränkt werden.

Die im vorhergehenden Schritt erzeugten Daten müssen nun für die weitere Verarbeitung gespeichert und aufbereitet werden. In dieser Phase geht es vor allem darum, aus den gewonnenen großen Datenmengen neues Wissen über die untersuchten Werkstoffe zu generieren. Dieser Schritt hängt sehr stark von den konkreten Fragestellungen ab und ist zentraler Gegenstand der Forschung auf dem Gebiet des

Hochdurchsatz-Screenings. Hier kommen Methoden aus dem Bereich des Data Mining und des Maschinellen Lernens zum Einsatz. Im Kern geht es darum, die makroskopischen Eigenschaften eines Werkstoffs mit dessen atomarer und elektronischer Struktur zu verknüpfen, die mittels DFT-Methoden berechnet werden kann. Man spricht daher von Struktur-Eigenschaft-Beziehungen, die mittels statistischer Verfahren bestimmt werden.

Am Ende dieses Prozesses steht eine Liste mit etwa einer Handvoll interessanter Werkstoffe, die dann mittels experimenteller Methoden weiter untersucht werden, um sie schließlich für konkrete Anwendungen einsetzen zu können. Weil neue Werkstoffe von zentraler Bedeutung für eine Vielzahl industrieller Anwendungen sind, konzentriert sich die Nutzung dieses Verfahrens vor allem auf Materialeigenschaften, die von technologischer Relevanz sind, oft im Rahmen einer Kooperation zwischen universitären Forschungseinrichtungen und industriellen Auftraggebern. Einen Schwerpunkt bildet hierbei bislang die Entwicklung neuer Werkstoffe für die Energieerzeugung und Energiespeicherung.

Eine der ersten bereits erfolgreichen Anwendungen des computerbasierten Hochdurchsatz-Screenings von Werkstoffen betraf die Entwicklung neuer Materialien für Lithium-Ionen-Akkus oder spezieller Metalloxide für sogenannte photoelektrochemische Zellen. In diesem Fall wurden insgesamt 5.400 verschiedene Perowskit-Kristallstrukturen mittels des Hochdurchsatz-Screenings untersucht. Dabei konnten 15 verschiedene Verbindungen identifiziert werden, die sich besonders für die Herstellung von Wasserstoff mittels dieser Zellen eignen.

Auch wenn die Entwicklung des computerbasierten Hochdurchsatz-Screenings derzeit noch am Anfang steht, so kann heute schon eine ganze Reihe von Werkstoffen untersucht werden, die von großer technologischer Relevanz sind. Für die Zukunft verspricht die Methode eine signifikante Beschleunigung des Innovationsprozesses im Bereich der Werkstoffentwicklung.

Dr. Marcus John