

Gruppe

**MATERIALMODELLIERUNG**

Dr. Daniel Urban | Telefon +49 761 5142-378 | daniel.urban@iwm.fraunhofer.de

## MIT KOMBINATORIK UND INFORMATIK ZU NEUEN MATERIALIEN

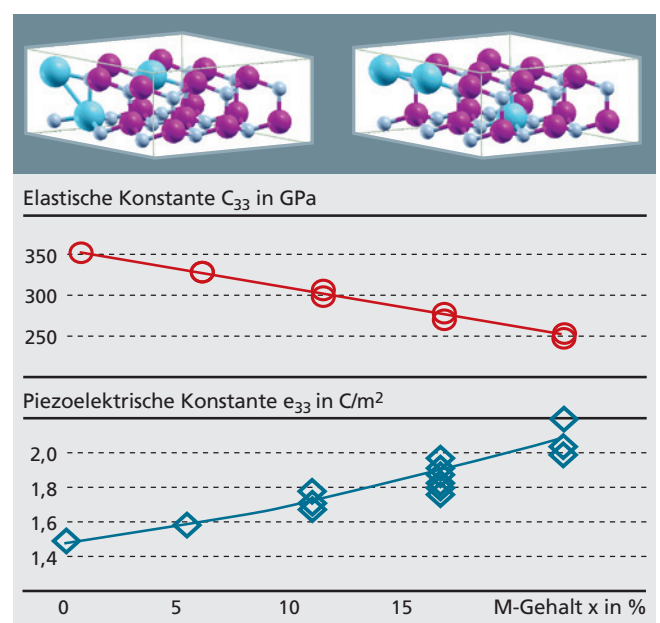
Moderne, funktionale Werkstoffe müssen zum einen spezifische physikalische Eigenschaften aufweisen und sind zum anderen einer Reihe von äußeren Randbedingungen unterworfen, wie dem Preis, der Versorgungssicherheit der elementaren Bestandteile, der Umweltverträglichkeit oder der Kompatibilität zu anderen Materialsystemen. Der Parameterraum der Variationsmöglichkeiten ist im Allgemeinen riesig, sodass in den letzten Jahren vermehrt Simulationsmethoden eingesetzt werden, um entweder bekannte Materialsysteme gezielt zu verbessern oder den Anforderungen entsprechend neue Materialien zu entdecken und vorherzusagen. Mit neuen Ansätzen der Materialinformatik können wir große Datenmengen auswerten und nach versteckten Korrelationen und Gesetzmäßigkeiten suchen. Die permanent wachsende Leistung moderner Computer ermöglicht auch zunehmend umfassende kombinatorische Ansätze, um Parameterräume systematisch zu untersuchen.

### Aluminiumnitrid-basierte Dünnschichtkeramiken für hocheffiziente Frequenzfilter

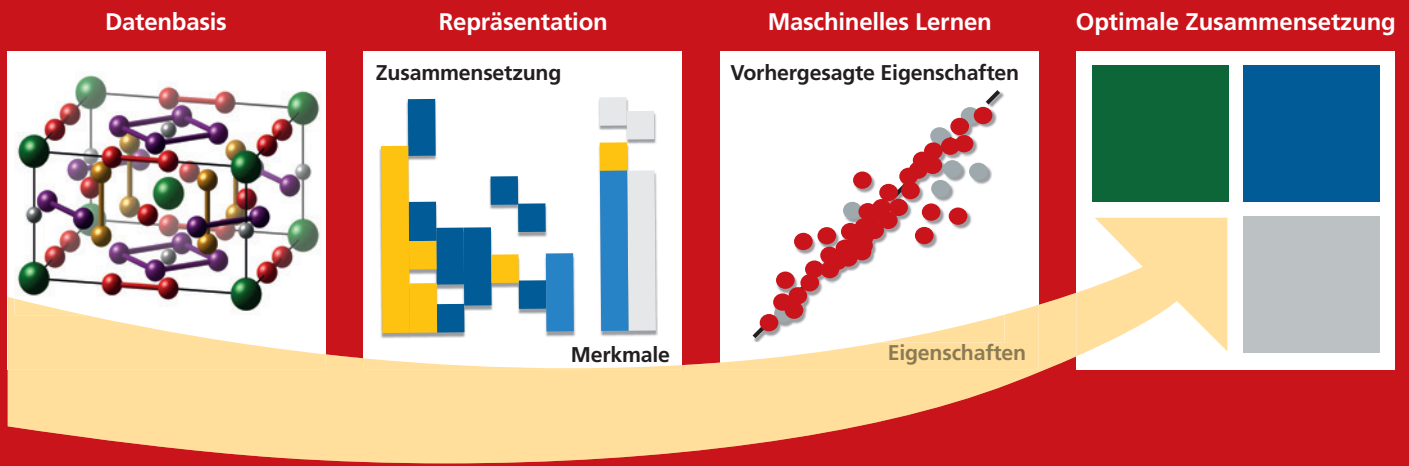
Die Weiterentwicklung der Mobilfunk- und Kommunikationstechnologie benötigt Bandpassfilter, die im Frequenzbereich 6 GHz operieren. Um diese hohen Frequenzen und eine ausreichende Energieeffizienz realisieren zu können, bedarf es neuer piezoelektrisch aktiver Funktionsmaterialien mit hoher Steifigkeit. Vielversprechend ist die Verwendung von Aluminiumnitrid mit Wurtzit-Kristallstruktur, dem weitere Übergangsmetalle (M) beigemischt werden. Durch ausgeklügelte Sputterverfahren lassen sich metastabile (Al,M)N-Verbindungen auf geeignete Substrate aufbringen und so stabilisieren. Der zur Verfügung stehende Parameterraum ist vieldimensional und mit experimentellen Methoden allein nicht effizient zu bearbeiten. Zudem sind die elastischen und piezoelektrischen Eigenschaften bei Wurtzit-Verbindungen stark richtungsab-

hängig, sodass fünf elastische und drei piezoelektrische Tensorkomponenten, die experimentell nicht alle direkt zugänglich sind, das Materialverhalten charakterisieren.

Wir berechnen das elastische und piezoelektrische Materialverhalten der (Al,M)N-Schichten mithilfe atomistischer Simulationsmethoden der Dichtefunktionaltheorie (DFT). Dabei variieren wir systematisch das Al:M-Verhältnis und untersuchen den Einfluss der stochastischen Verteilung der Atome auf dem Metalluntergitter auf atomarem Maßstab. Unsere Strukturmodelle werden gezielt deformiert, wodurch die elastischen und piezoelektrischen Kopplungsparameter extrahiert werden können. Unsere Ergebnisse werden mit experimentellen Erkenntnissen unserer Projektpartner kalibriert und kombiniert, so wird ein gründliches Verständnis des Materialsystems entwickelt.



1 Elastische und piezoelektrische Konstanten,  $C_{33}$  und  $e_{33}$ , von  $Al_{1-x}M_xN$ . Bei gleichem M-Gehalt führen verschiedene Verteilungen der M-Atome zu kleinen Streuungen der Daten.



3 Prinzipieller Ablauf der datenbasierten Suche nach Zusammensetzungs-Eigenschafts-Beziehungen mittels Maschinellen Lernens (ML).

### Mit Maschinellem Lernen neue Materialien entdecken

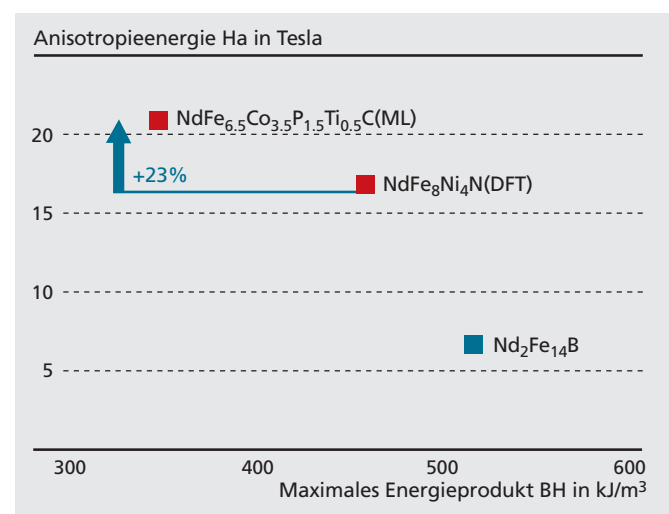
Seit einigen Jahren revolutionieren die Methoden des Maschinellen Lernens (ML) unseren Alltag, beispielsweise bei der Bildersuche im Internet und der Sprachsteuerung von Smartphones. Wir nutzen diese Methoden der Dateninformatik zur Lösung materialwissenschaftlicher Problemstellungen sowie für die Entdeckung und Entwicklung neuer Werkstoffe. Die für das ML nötigen Eingangsinformationen werden hierbei aus Simulationen oder Experimenten extrahiert. Nach einer umfassenden Optimierungs- und Validierungsphase sind die trainierten ML-Modelle in der Lage, die Eigenschaften von neuen, unbekanntem Materialien quantitativ vorherzusagen.

### Neue Hartmagnetmaterialien für grüne Energietechnologien

Wir nutzen das ML bei der Suche nach intermetallischen Verbindungen mit guten hartmagnetischen Eigenschaften, die geringere Konzentrationen der versorgungskritischen Seltenerdelemente aufweisen als die aktuell besten auf dem Markt verfügbaren Materialien  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  und  $\text{SmCo}_5$ . Unsere Ergebnisse sind insbesondere für die Zukunftsbranchen Elektromobilität und Erneuerbare Energien von großer Relevanz, da hier eine große Nachfrage nach neuen, leistungsstarken und zugleich kostengünstigen Permanentmagneten besteht. Als Eingangsdaten stehen die von uns mit einem DFT-Hochdurchsatz-Screening berechneten Materialkennwerten binärer Verbindungen zur Verfügung. Um nun Maxima der magnetischen Eigenschaften im gesamten Zustandsraum zu identifizieren, werden Beziehungen zwischen Zusammensetzung und Eigenschaften mittels ML gelernt und hinsichtlich maximaler magnetokristalliner Anisotropieenergie optimiert. Die vorhergesagten Eigenschaften der bezüglich

dieser wichtigen hartmagnetischen Kenngröße optimierten Zusammensetzungen liegen signifikant über denen der besten Kandidaten im zugrundeliegenden Datensatz. Sie liegen sogar signifikant über den Eigenschaften der aktuell besten verfügbaren  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ -Hochleistungsmagnete – bei deutlich reduziertem Anteil an Seltenerdmetallen. Gleichzeitig sinkt jedoch erwartungsgemäß das maximale Energieprodukt. Es liegt aber immer noch im technologisch relevanten Bereich von über  $300 \text{ kJ/m}^3$ . Bemerkenswert ist die Vorhersagekraft des ML-Modells, das selbst für quaternäre Kombinationen von Übergangsmetallen nur um wenige Prozent von den mittels Dichtefunktionaltheorie nachgerechneten Werten abweicht.

Dr. Daniel Urban, Dr. Johannes Möller



2 Die mittels ML optimierte Zusammensetzung hat, im Vergleich zur bisher besten mittels DFT gefundenen Verbindung und zu  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ , eine deutlich höhere Anisotropieenergie  $H_a$ .