idw - Informationsdienst Wissenschaft
Nachrichten, Termine, Experten

Pressemitteilung

Technische Universität Wien
Dr. Florian Aigner

12.10.2020
http://idw-online.de/de/news755697

Forschungsergebnisse, Wissenschaftliche Publikationen
Physik / Astronomie
überregional

# Wenn Mensch und Maschine dieselbe Idee haben

**Über Iridiumoxid muss man völlig anders nachdenken als bisher – zu diesem Ergebnis kam nun sowohl ein menschliches Forschungsteam als auch ein Machine Learning Algorithmus.**

Ein Iridiumoxidkristall ist ein unscheinbareres, fast schwarzes Ding, das für die Elektrochemie eine wichtige Rolle spielt. Das Material ist ein hervorragender Katalysator und kann etwa für die Herstellung von Energieträgern wie Wasserstoff verwendet werden. Wie sich nun herausstellt, wurde die Forschung an Iridiumoxid bisher aber unter einer völlig falschen Grundannahme betrieben: Die Ausrichtung der Atome auf der Oberfläche ist in Wahrheit eine ganz andere als man bisher angenommen hat.

Die Art, wie das festgestellt wurde, könnte ein erster Blick in einen neuen Forschungsalltag der Zukunft sein: Es handelte sich um eine Gemeinschaftsarbeit aus menschlicher Forschung und künstlicher Intelligenz. An der TU Wien und der TU München kam man gleichzeitig zum selben Ergebnis, das nun im Fachjournal „Physical Review Letters“ publiziert wurde.

Gerade oder schräg?

„Ein Kristall kann verschiedene Oberflächen mit ganz unterschiedlichen Eigenschaften haben“, sagt Florian Kraushofer aus der Forschungsgruppe von Prof. Ulrike Diebold (Institut für Angewandte Physik, TU Wien). „Stellen wir uns vor, wir haben einen Kristall, der aus würfelförmigen Zellen aufgebaut ist. Wenn wir ihn durchschneiden, entstehen ganz unterschiedliche Schnittflächen, je nachdem, in welcher Richtung wir schneiden.“
Wenn man genau in der Richtung der Würfel-Zellen schneidet, besteht die Schnittfläche aus lauter Quadraten. Man kann die Würfelzellen aber auch diagonal schneiden – dann entsteht ebenfalls eine regelmäßige Fläche, allerdings mit einer anderen Geometrie.

„Wenn ein Kristall langsam wächst, dann bildet er normalerweise eine Oberfläche aus, die energetisch besonders günstig ist“, sagt Kraushofer. Nicht alle möglichen Atom-Anordnungen sind stabil. In manchen Fällen verschieben sich die Atome an der Oberfläche oder ordnen sich um. „Man braucht oft sehr aufwändige Simulationsrechnungen auf Supercomputern, um zu ermitteln, welche geometrische Konfiguration die stabilste ist“, erklärt Kraushofer. „Bei Iridiumoxid dachte man, das sei das die sogenannte 110-Richtung – das hatten die Rechnungen so ergeben. Doch überraschenderweise kamen wir bei unseren Messungen zu einem ganz anderen Ergebnis.“

Maschinen, die Quantenphysik lernen

Bei einer Konferenz knapp vor dem Corona-Lockdown traf Ulrike Diebold auf Karsten Reuter von der TU München, der sich ebenfalls mit Iridiumoxid beschäftigt. Sein Team verwendet Machine Learning – also Techniken aus dem Bereich der künstlichen Intelligenz – um Materialeigenschaften besser berechnen zu können. Und dabei hatte man genau dieselbe Überraschung erlebt wie in Wien: „Genau wie das Experiment hatten auch die Machine-Learning Algorithmen

ergeben, dass die stabile Richtung der Iridiumoxid-Oberfläche eine andere ist als bisher gedacht“, sagt Reuter. „Wir beschlossen daher, uns die Sache gemeinsam noch näher anzusehen.

Weitere Untersuchungen wurden daher durchgeführt – unter anderem noch aufwändigere Computersimulationen als jene, die früher augenscheinlich das falsche Ergebnis geliefert hatten. Und bei diesen Berechnungen zeigte sich, dass die experimentellen Daten und die Machine-Learning-Algorithmen tatsächlich richtig gelegen waren.

Mensch und Maschine: Ein Blick in die Zukunft

„Man muss also alle bisherigen Ergebnisse über Iridiumdioxid völlig neu überdenken“, sagt Ulrike Diebold. „Die Orientierung der Oberfläche spielt nämlich auch für das chemische und physikalische Verhalten des Materials eine entscheidende Rolle.“

Für Diebold ist das Ergebnis auch ein wichtiger Beweis dafür, dass neue Forschungsmethoden aus dem Bereich Machine Learning für die Wissenschaft höchst wertvoll sein können: „Gerade wenn es darum geht, auf Basis der Quantenphysik neue Materialien zu entwickeln, sind Computersimulationen seit Jahren unverzichtbar – aber sie sind oft extrem aufwändig, teuer und zeitraubend“, sagt Ulrike Diebold. „Wenn es gelingt, Machine Learning auf intelligente Weise für solche komplizierten Fragen einzusetzen, kann daraus ein großartiges neues Werkzeug entstehen, das die Materialforschung einen großen Schritt nach vorne bringt. Damit das möglich wird, brauchen wir natürlich gleichzeitig auch möglichst gute experimentelle Messungen.“

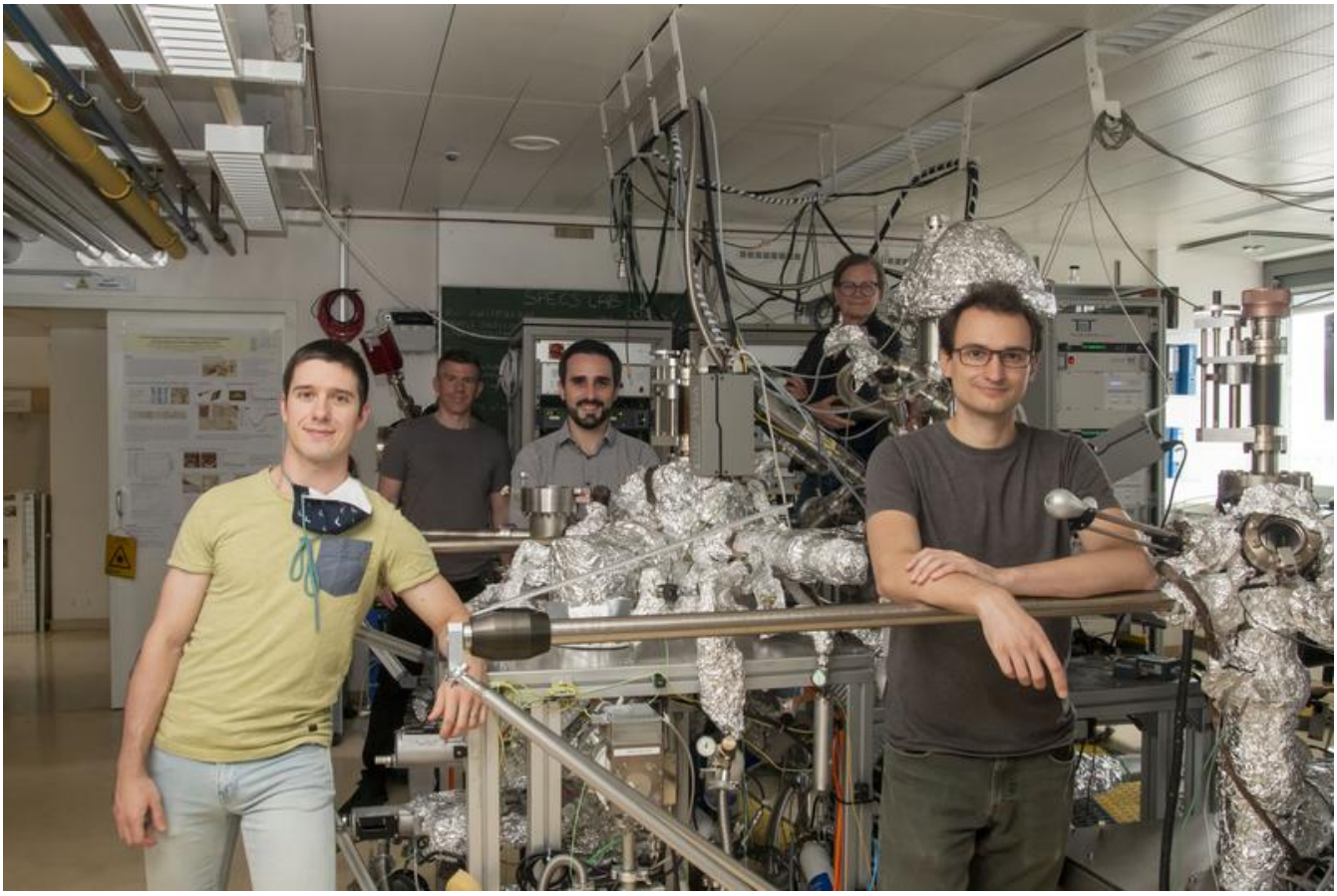
„Menschliche Intelligenz wird sich dadurch nicht ersetzen lassen – genauso wenig, wie sie bisher durch Computersimulationen ersetzt werden konnte“, ist Diebold überzeugt. „Aber Machine Learning Algorithmen werden uns helfen, auf gute Ideen zu kommen, die uns selbst nicht unbedingt eingefallen wären.“

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Prof. Ulrike Diebold
Institut für Angewandte Physik
TU Wien
Wiedner Hauptstraße 8
+43 1 58801 13425
ulrike.diebold@tuwien.ac.at

Originalpublikation:

J. Timmermann et al., IrO2 Surface Complexions Identified Through Machine Learning and Surface Investigations, akzeptiert in: Physical Review Letters (2020). Frei zugängliche Version: https://arxiv.org/abs/2009.11569



Mit Sicherheitsabstand im Labor: Nikolaus Resch, Gareth Parkinson, Michele Riva, Ulrike Diebold und Florian Kraushofer (von links)
TU Wien
TU Wien