

Press release**Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft****Dr. Jelena Tomovic**

03/06/2025

<http://idw-online.de/en/news848541>

Research results, Transfer of Science or Research
Chemistry, Electrical engineering, Energy, Information technology, Physics / astronomy
transregional, national

**Erforschung versteckter atomarer Bewegungen durch maschinelles Lernen**

Forschende am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft haben den Automatic Process Explorer (APE) entwickelt, einen Ansatz, der unser Verständnis atomarer und molekularer Prozesse verbessert. Durch die dynamische Verfeinerung von Simulationen hat APE unerwartete Komplexitäten in der Oxidation von Palladium (Pd)-Oberflächen aufgedeckt und bietet neue Einblicke in das Verhalten von Katalysatoren.

Wichtige Aspekte

- **Innovativer Ansatz:** APE verfeinert traditionelle kinetische Monte-Carlo (kMC) Simulationen durch dynamische Aktualisierung der Prozesslisten, reduziert Verzerrungen und deckt übersehene atomare Bewegungen auf.
- **Bedeutende Erkenntnisse:** Die Anwendung von APE auf Pd-Oberflächen enthüllte nahezu 3.000 Prozesse und hob komplexe atomare Bewegungen hervor, die zuvor unentdeckt blieben.
- **Reale Auswirkungen:** Erkenntnisse aus APE können zur Entwicklung effizienterer Katalysatoren führen, die für Energieproduktion und Abgasreinigung entscheidend sind.
- **Integration von maschinellem Lernen:** APE nutzt maschinelles gelerntes interatomare Potenziale (MLIPs), um atomare Wechselwirkungen vorherzusagen und die Genauigkeit von Simulationen zu verbessern.

Verständnis der kinetischen Monte-Carlo-Simulationen

Kinetische Monte-Carlo (kMC) Simulationen sind entscheidend für das Studium der Langzeitentwicklung atomarer und molekularer Prozesse. Sie werden häufig in Bereichen wie der Oberflächenkatalyse eingesetzt, wo Reaktionen auf Materialoberflächen entscheidend für die Entwicklung effizienter Katalysatoren sind, die Reaktionen in der Energieproduktion und Abgasreinigung beschleunigen. Traditionelle kMC-Simulationen basieren auf voreingestellten Eingaben, die ihre Fähigkeit einschränken können, komplexe atomare Bewegungen zu erfassen. Hier kommt der Automatic Process Explorer (APE) ins Spiel.

Der APE-Ansatz

Entwickelt von der Theorie-Abteilung des Fritz-Haber-Instituts, überwindet APE Verzerrungen in traditionellen kMC-Simulationen, indem die Prozessliste dynamisch basierend auf dem aktuellen Systemzustand aktualisiert wird. Dieser Ansatz fördert die Erforschung neuer Strukturen und ermöglicht eine effiziente strukturelle Exploration. APE trennt den Prozess der Exploration von den kMC-Simulationen und nutzt eine unscharfe maschinelle Lernklassifikation, um unterschiedliche atomare Umgebungen zu identifizieren. Dies ermöglicht eine breitere Erforschung potenzieller atomarer Bewegungen.

Neue Einblicke in die Pd-Oxidation

Durch die Integration von APE mit maschinell gelernten interatomaren Potenzialen (MLIPs) wurde es auf die Frühphase der Oxidation von Palladium (Pd)-Oberflächen angewendet, einem wichtigen System in der Abgasreinigung. APE deckte nahezu 3.000 Prozesse auf, weit über den Möglichkeiten traditioneller kMC-Simulationen. Diese Erkenntnisse zeigen komplexe atomare Bewegungen und Umstrukturierungsprozesse, die auf Zeitskalen ähnlich wie molekulare Prozesse in der Katalyse auftreten.

Zusammenfassung

Die APE-Methodologie bietet ein detailliertes Verständnis der Umstrukturierung von Pd-Oberflächen während der Oxidation und offenbart bisher unerkannte Komplexitäten. Diese Forschung verbessert unser Wissen über die Entwicklung von Nanostrukturen und deren Rolle in der Oberflächenkatalyse. Durch die Verbesserung der Effizienz von Katalysatoren haben diese Erkenntnisse das Potenzial, die Energieproduktion und den Umweltschutz erheblich zu beeinflussen, indem sie zu saubereren Technologien und nachhaltigeren industriellen Prozessen beitragen.

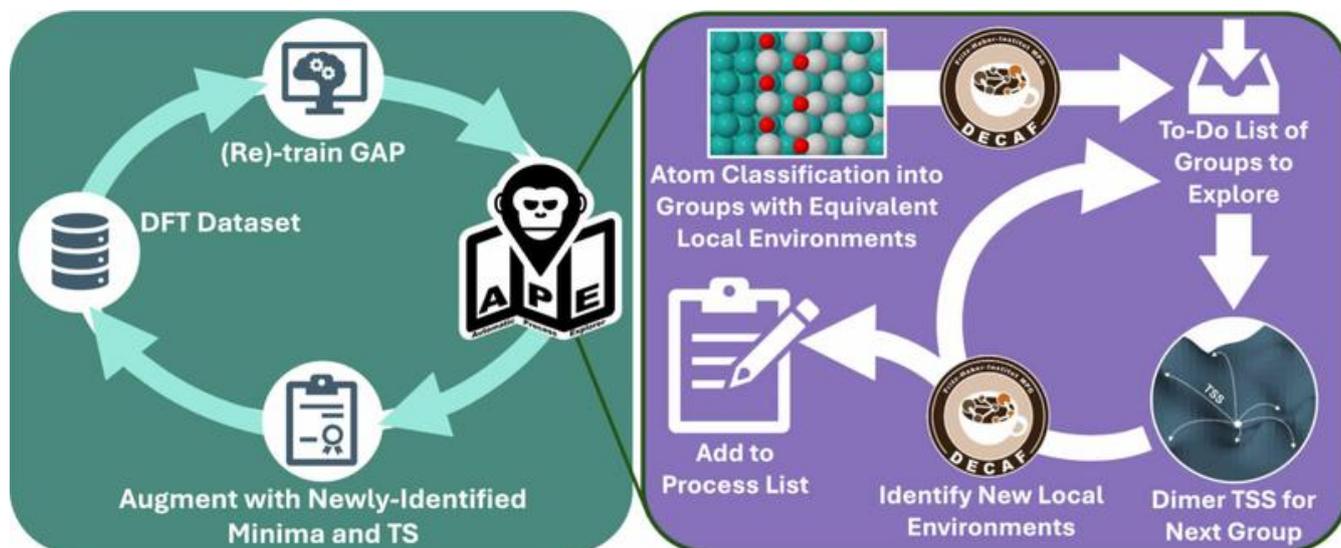
contact for scientific information:

Dr. Sebastian Matera, matera@fhi-berlin.mpg.de

Original publication:

<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.134.096201>

URL for press release: https://www.fhi.mpg.de/1732464/2025-03-04_APE_MLIP



Schematischer Ablauf der MLIP-APE-Methode.

© ACS Catal. 2025, 15, 1, 514-522