

Moderne Materialien

16. Modellierungstag Rhein-Neckar

IN ZUSAMMENARBEIT MIT DER STADT HEIDELBERG

Programm & Vorträge

24. JANUAR 2019 · MARSILIUS KOLLEG

16. Modellierungstag Rhein-Neckar

Moderne Materialien

Moderne Materialien zählen zu den zentralen Zukunftsthemen in der angewandten Forschung. Die Verwendung hochmoderner Planungsprozesse in den Materialwissenschaften und bahnbrechende Entdeckungen in der Nanoforschung, in der organischen Elektronik und in der computergestützten theoretischen Chemie haben zu einer Revolution geführt. Als eine der Schlüsseltechnologien für das 21. Jahrhundert erlauben die Modernen Materialien einen zielgerichteten Einsatz in zahlreichen Anwendungsgebieten. Durch die Kombination von mehreren Eigenschaften werden immer effektivere Werkstoffe ermöglicht. So können zum Beispiel Stoffe entwickelt werden, die gleichzeitig extrem leicht aber dennoch stabil sind oder wesentlich effizienteren Energietransport erlauben.

Was ist von der Materialforschung in der nächsten Dekade an Entwicklungen noch zu erwarten? Wie wirken hier die unterschiedlichen Forschungsrichtungen zusammen? Und welche Rolle spielt die computergestützte Simulationstechnik bei diesem Paradigmenwechsel von der experimentellen Entwicklung neuer Materialien zur gezielten Planung von Materialeigenschaften am Computer? Mit diesen Fragen beschäftigt sich der 16. Modellierungstag. Wir haben Experten aus Universitäten, Forschung und Produktion eingeladen, um in Impulsvorträgen und praxisnahen Diskussionen die zentralen Fragestellungen aus diesem interdisziplinären Feld zu erörtern.

Der Modellierungstag Rhein-Neckar eröffnet Praktikern und Wissenschaftlern die Gelegenheit, Innovationen zur Diskussion zu stellen, Gemeinsamkeiten und Unterschiede der verwendeten Modellierungsansätze herauszuarbeiten und den gegenseitigen Erfahrungsaustausch zu pflegen.

Moderne Materialien

16. Modellierungstag Rhein-Neckar

24. Januar 2019 · 14 Uhr

Marsilius Kolleg · Im Neuenheimer Feld 130.1 · 69120 Heidelberg

PROGRAMM

14:00 **Begrüßung & Einführung**

Dr. Michael J. Winckler

(Geschäftsführer HGS MathComp & IWR, Universität Heidelberg)

14:15 **Anwendung von computergestützten Methoden zur Digitalisierung**

Dr. Philipp Harbach

(Head of In Silico Research, Merck KGaA)

14:45 **Rationales computergestütztes Design funktionaler Moleküle**

Prof. Andreas Dreuw

(Geschäftsführender Direktor IWR, Universität Heidelberg)

15:15 **Gedruckte Elektronik: Printing The Future**

Dipl.-Wirtsch.-Ing. Luat Nguyen

(Geschäftsführer InnovationLab GmbH, Heidelberg)

15:45 Kaffeepause

16:15 **Smart Polymers in mischbaren Lösungsmitteln**

Prof. Kurt Kremer

(Geschäftsführender Direktor Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz)

16:45 **Multi-Skalen Verfahren zur Simulation von Elektronen- und Exzitontransfer in biologischen und organischen Materialien**

Prof. Marcus Elstner

(Abteilung für Theoretische Chemische Biologie, KIT)

17:15 **Virtuelles Materialdesign am KIT**

Dr. Tobias Schlöder

(Forschungsgruppe „Nanoscale and Biomolecular Simulation“, KIT)

17:45 **Abschlussworte**

18:00 **Networking & Imbiss**

ZUSAMMENFASSUNG VORTRÄGE & SPRECHER

Dr. Philipp Harbach

Head of In Silico Research, Merck KGaA

Dr. Philipp Harbach beschäftigt sich als Head of In Silico Research in der globalen Digitalisierungseinheit (Chief Digital Organization) der Merck KGaA mit der Digitalisierung von Entwicklungs- sowie Produktionsprozessen. Zuvor etablierte er die Computerchemie im Bereich der organischen Leuchtdioden innerhalb von Performance Materials. 2013 promovierte er auf dem Gebiet der theoretischen Chemie am Interdisziplinären Zentrum für wissenschaftliches Rechnen (IWR) der Universität Heidelberg. Dort entwickelte er quantenchemische Methoden zur Beschreibung von photochemischen Prozessen molekularer Systeme.

Anwendung von computergestützten Methoden zur Digitalisierung

Industrielle, chemische Forschung und Entwicklung ist geprägt vom heuristischen Ansatz des Versuchs und Irrtums, um wissenschaftliche Fragen zu beantworten (eng. trial and error). Meist existieren z. B. in der chemischen Synthese oder Materialforschung mehrere Referenzexperimente, aus denen sich anhand der Versuchsergebnisse empirische Rückschlüsse ergeben. Dieser Kreislauf ist ein durchaus valider Ansatz, aber mit einem erheblichen Zeitaufwand und hohen Kosten verbunden. Die Digitalisierung bietet hier eine Möglichkeit, mit Hilfe von theoretischen Methoden die Lücke zwischen Vorhersage und Beschreibung von chemischen und physikalischen Eigenschaften zu verkleinern. Zum Beispiel können Experimente durch eine digitale Nachbildung in den Computer verlagert werden. In diesem Vortrag möchte ich anhand eines Beispiels aus der Materialforschung zeigen, wie wichtig diese Methoden bei der Optimierung von Eigenschaften sein können. Sie bringen nicht nur eine große Zeitersparnis mit sich, sondern können auch zu einer fokussierteren Entwicklung und kürzeren Vorlaufzeiten beitragen. Je nach Komplexität des Problems und verfügbarer Datenlage kann auch ein besseres physikalisches Verständnis erreicht werden, was aber keinesfalls eine Notwendigkeit darstellt.

.....

Prof. Andreas Dreuw**Geschäftsführender Direktor IWR, Universität Heidelberg**

Andreas Dreuw received his Ph.D. in theoretical chemistry from Heidelberg University in 2001. After a two-year postdoc at the University of California Berkeley, he joined the Goethe University of Frankfurt first as an Emmy-Noether fellow and then as a Heisenberg Professor for Theoretical Chemistry. Since 2011, Andreas Dreuw has held the chair for Theoretical and Computational Chemistry at the Interdisciplinary Center for Scientific Computing, Heidelberg University. His research interests comprise the development of electronic structure methods and their application in photochemistry, mechanochemistry, biophysics, and materials science.

Rationales computergestütztes Design funktionaler Moleküle

Functional organic materials are composed of functional molecules with molecular properties that determine the properties and functionalities of the material. For the optimization of desired molecular properties and the detailed understanding of underlying molecular mechanisms, theoretical and computational methods are particularly well suited. In this talk, quantum chemical methods for the prediction of optical and electronic properties of individual molecules and oligomers will be presented. In general, the perspective of individual molecules embedded in a molecular environment will be taken.

.....

Dipl.-Wirtsch.-Ing. Luat Nguyen

Geschäftsführer InnovationLab GmbH, Heidelberg

Seit dem 1. April 2017 ist Luat Nguyen Geschäftsführer der InnovationLab GmbH. Das Management des InnovationLab profitiert von seiner langjährigen Expertise in den Bereichen Business Strategy und New Business Development. Nach seinem Abschluss in Wirtschaftsingenieurwesen an der Technischen Universität Darmstadt war Luat Nguyen CEO von Viet Trade Center LTD. in Frankfurt und der ROWI Präzisionstechnik GmbH in Pforzheim. Er ist Mitbegründer der Asian Social & Business Community e.V.

InnovationLab (iL) ist eine einzigartige Forschungs- und Entwicklungsplattform zur Förderung von interdisziplinärer Forschung und Innovation an der Schnittstelle von Wissenschaft und Industrie. Zentrales Feld ist die Zukunftstechnologie der gedruckten und organischen Elektronik. Das Ziel von iL ist es, Partnern zu ermöglichen, interdisziplinär und entlang der gesamten Wertschöpfungskette („from lab to fab“) unter einem Dach zusammenzuarbeiten.

Weitere Informationen auf www.innovationlab.de

Gedruckte Elektronik: Printing The Future

Gedruckte und organische Elektronik – eine vielversprechende Zukunftstechnologie, die innovativen Applikationen in nahezu allen denkbaren Branchen die Türen öffnet. Genau in diesem Bereich ist das InnovationLab unterwegs. Das einzigartige Konzept einer gemeinsamen anwendungsorientierten Forschungs- und Transferplattform an der Schnittstelle von Wissenschaft und Wirtschaft stellt optimale Bedingungen her, um einer solchen Zukunftstechnologie Rechnung zu tragen. Die Kombination von eigener und spezifischer Expertise verschiedener Partner ermöglicht es dem InnovationLab, den gesamten Prozess eines Produktes „from Lab to Fab“ zu begleiten.

In diesem Vortrag wird Luat Nguyen einen Einblick in das Wirken von InnovationLab geben und erläutern, wie der Transfer von Erfindungen in marktfähige Produkte möglich ist. „Printing the Future“ – dieser Anspruch ist nur durch eine umfangreiche Infrastruktur und das Know-how aller Partner möglich.

.....

Prof. Kurt Kremer

Geschäftsführender Direktor Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz

Kurt Kremer trat im September 1995 in das Max-Planck-Institut für Polymerforschung ein und übernahm die Leitung der neu eingerichteten Theoriegruppe.

Nach dem Physikstudium promovierte er 1983 unter der Leitung von Prof. Binder in Köln. Darauf folgte eine Postdoktorandenzeit bei Exxon Research and Engineering Co., USA. Dort arbeitete er mit Drs. Grest, Pincus und anderen an Polymeren und an ladungsstabilisierten Kolloiden. Zurück in Deutschland habilitierte er 1988 an der Universität Mainz und war anschliessend wissenschaftlicher Mitarbeiter am IFF der KFA Jülich. Kurt Kremer verbrachte mehrere längere Aufenthalte als Gastprofessor/ Wissenschaftler bei Exxon Research, UC Santa Barbara, University of Minnesota und New York University. Er erhielt mehrere Auszeichnungen und Anerkennungen und ist Mitglied der Deutschen Akademie der Wissenschaften, Leopoldina.

Smart Polymers in mischbaren Lösungsmitteln

Auf Stimuli ansprechende Polymere stellen technologische und wissenschaftliche Herausforderungen dar. Dabei ist das Verhalten in Lösungsmittelgemischen von besonderem Interesse. Polymere in perfekt mischbaren guten Lösungsmitteln können segregieren, während sie sich in gemischten schlechten Lösungsmitteln leicht ausdehnen können. Um spezifische Zusammenhänge zwischen chemischer Struktur, Architektur, Molekulargewicht und Materialeigenschaften besser zu verstehen, spielen Simulationen eine wichtige Rolle. Beispiele sind PNIPAM und PMMA in Wasser-Alkohol-Gemischen. Die Ergebnisse deuten auf ein allgemeines Designkonzept von „Smart Stimulus Response Polymers“ hin.

D. Mukherji, M. Wagner, M. D. Watson, S. Winzen, T. E. de Oliveira, C. M. Marques, K. Kremer, *Soft Matter* 12, 7995-8003 (2016)

D. Mukherji, C. M. Marques, T. Stuehn, K. Kremer, *Nat. Comm.* 8, 1374 (2017)

.....

Prof. Marcus Elstner

Institut für Physikalische Chemie, Abteilung für Theoretische Chemische Biologie, KIT

<i>since 2009</i>	<i>Professor of Theoretical Chemical Biology, Karlsruhe Institute of Technology</i>
<i>2006 – 2009</i>	<i>Professor of Theoretical Chemistry, TU Braunschweig</i>
<i>2003 – 2005</i>	<i>Juniorprofessor at Paderborn University (Physics), Germany</i>
<i>2003</i>	<i>Habilitation for Physics, Paderborn University</i>
<i>2001 – 2003</i>	<i>PostDoc at Paderborn University (Physics), Germany</i>
<i>1999 – 2000</i>	<i>PostDoc at Harvard University (Physics), Boston, MA, USA</i>
<i>1993 – 1998</i>	<i>PhD at the German Cancer Research Center, Heidelberg and University of Paderborn (Physics: Dr. rer. nat. 1998)</i>
<i>1985 – 1993</i>	<i>Undergraduate studies in Physics and Philosophy at TU Munich and TU Berlin (Diplome in Physics 1993)</i>

Research fields

Development of efficient algorithms for modelling of biological structures (Proteins, DNA), description of catalytic processes in biology with special emphasis on proton transfer reactions in both, electronic ground and excited states. Study of ultrafast photobiological processes with newly developed excited states dynamics methods, which are based on Density Functional Theory. Electron transfer in biological (DNA) and organic molecules.

Multi-Skalen Verfahren zur Simulation von Elektronen- und Exzitontransfer in biologischen und organischen Materialien

In den letzten Jahren haben wir eine Methode zur Simulation von Ladungstransferprozessen in komplexen Systemen entwickelt. Aufgrund der großen Systemgröße, die eine quantenmechanische Beschreibung verlangt, haben wir eine ‚coarse-grained‘ QM/MM Methode entwickelt die es ermöglicht, die Dynamik des elektronischen Systems gekoppelt mit der Dynamik der Umgebung zu beschreiben. Die Parameter für den Ladungstransfer (CT) werden unter Verwendung eines Fragmentorbitalansatzes mit Hilfe des approximativen Dichtefunktionalverfahrens SCC-DFTB berechnet. Umgebungseffekte werden mit einem kombinierten Kopplungsschema aus Quantenmechanik und Molekularmechanik (QM/MM) erfasst und dynamische Effekte durch Auswertung dieser CT-Parameter entlang umfangreicher klassischer Moleküldynamik-Simulationen (MD) einbezogen. Die Photoaktivierung der E. coli Photolyase beinhaltet

nach der Photoanregung des Chromophors und der Energieübertragung auf FAD einen Ladungstransfer entlang einer Kette von Trp-Resten. Da dieser Prozess nicht mit der Marcus-Theorie modelliert werden konnte, verwendeten wir vollständig gekoppelte nicht-adiabatische (Ehrenfest/Surface Hopping) Quantenmechanik/Molekularmechanik (QM/MM). Weitere Anwendungen des Formalismus betreffen den Ladungs- und Energietransfer in organischen Materialien.

.....

Dr. Tobias Schlöder

Forschungsgruppe „Nanoscale and Biomolecular Simulation“, KIT

seit 07/2018 Wissenschaftlicher Mitarbeiter Karlsruher Institut für Technologie
2016 – 2017 Wissenschaftlicher Mitarbeiter Justus Liebig Universität Gießen
2013 – 2014 Wissenschaftlicher Mitarbeiter Freie Universität Berlin
2010 – 2013 Doktorarbeit, Wissenschaftlicher Mitarbeiter
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
2009 Diplomarbeit (Chemie) Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Virtuelles Materialdesign am KIT

Immer kürzere Produktzyklen erfordern ständig neue Materialien und stellen somit die Materialforschung vor die Aufgabe, dieser Nachfrage durch eine beschleunigte Materialentwicklung zu begegnen. Dabei spielen die computergestützte Produktentwicklung, digitale Zwillinge und inverses Design in der Forschungs- und Entwicklungsarbeit vieler Industriezweige eine immer größere Rolle. In der VirtMat-Initiative arbeiten am KIT etwa 100 Forscher aus den Helmholtz- Programmen STN und BIFTM in zwölf Projekten interdisziplinär an virtuellem Materialdesign, wobei durch einen informationsgesteuerten Ansatz skalenübergreifende Rechenmethoden zur Vorhersage neuer Materialien mit maßgeschneiderten Eigenschaften entwickelt werden. Die Simulationsergebnisse werden schließlich durch experimentelle Arbeiten ergänzt und validiert. Dieser Vortrag gibt einen Überblick über die Aktivitäten der VirtMat-Initiative am KIT und stellt einige der Projekte beispielhaft genauer vor.



HGS **MathComp**

**Heidelberger Graduiertenschule
der mathematischen und computergestützten
Methoden für die Wissenschaften (HGS MathComp)**

Sprecher: Prof. Dr. Peter Bastian

Geschäftsführer: Dr. Michael J. Winckler

Mathematikon · Im Neuenheimer Feld 205 · Raum 5.214
69120 Heidelberg

E-Mail: hgs@iwr.uni-heidelberg.de

Web: www.mathcomp.uni-heidelberg.de

THEMENBETREUUNG

Prof. Dieter W. Heermann

Dr. Michael J. Winckler

KOOPERATIONSPARTNER

 **Heidelberg**

Amt für Wirtschaftsförderung und Wissenschaft



Industrie- und Handelskammer Rhein-Neckar