



ADVANCED MATERIALS SCIENCE

Fields of Expertise TU Graz

Die Berechnung von Materialeigenschaften kann sehr computerintensiv sein. Als Beispiel soll die Austrittsarbeit eines Materials betrachtet werden. Die Austrittsarbeit ist die Energie, die benötigt wird, um ein Elektron von einer Oberfläche zu extrahieren. Diese Austrittsarbeit kann modifiziert werden, indem organische Moleküle auf die Oberfläche gesetzt werden. Wenn man 100 Moleküle auf eine Oberfläche setzen würde und jedes Molekül fünf stabile Orientierungen besitzt, erhält man $5^{100} = 7 \times 10^{69}$ mögliche Anordnungen, die jeweils unterschiedliche Austrittsarbeiten ergeben. Die Berechnung aller dieser Möglichkeiten bzw. Austrittsarbeiten ist nicht möglich, da die hierzu benötigten Computerressourcen nicht vorliegen.



© Lunghammer – TU Graz

Peter Hadley, Leitungsteam FoE
„Advanced Materials Science“
Peter Hadley, executive team FoE
Advanced Materials Science

Oliver Hofmann vom Institut für Festkörperphysik und sein Team widmen sich der Lösung solcher Probleme, wie der Berechnung der minimalen Austrittsarbeit durch maschinelles Lernen. Sie trainieren einen Computer, um die relevantesten Konfigurationen zu erkennen und diese dann zu berechnen. Hofmann wurden gemeinsam mit Kolleg/innen der Carnegie Mellon University, der Duke University, des Argonne National Laboratory, der Universität Potsdam, der TU München und der Aalto University insgesamt 160 Millionen Computerstunden auf einem IBM Blue Gene/Q Supercomputer am Argonne National Laboratory zuerkannt.

Dieses Projekt ist Teil des Programms „Innovative and Novel Computational Impact on Theory and Experiment (INCITE)“ an der Argonne Leadership Computing Facility (ALCF). Ziel des Projekts ist die Optimierung der Ladungsübertragung in Solarzellen. Es werden nicht nur die optimalen Materialien bestimmt, sondern es wird ein Produktionsprozess definiert, der die besten Materialien für diese Anwendung schafft. Eine detaillierte Projektbeschreibung kann in einem Artikel auf „Planet Research“ nachgelesen werden: www.tugraz.at/go/planet-research

Calculating properties of materials can be computationally intensive. Consider the calculation of the work function of a material. The work function is the amount of energy needed to extract an electron from a surface. The work function can be modified by putting organic molecules on the surface. If you put 100 molecules on a surface and each molecule has 5 stable orientations, there are $5^{100} = 7 \times 10^{69}$ arrangements each of which will give a different value for the work function. A brute force approach where you try out all possibilities will fail because the required computer facilities are not available.

Oliver Hofmann of the Institute of Solid State Physics and his team attack problems such as finding the minimum work function using machine learning. They train a computer to recognize the most relevant configurations and then calculate those. Together with colleagues from Carnegie Mellon University, Duke University, Argonne National Laboratory, the University of Potsdam, TU Munich, and Aalto University, Hofmann was granted a total of 160 million hours of computing time on the IBM Blue Gene/Q supercomputer at Argonne National Laboratory in 2018. This project is part of the program Innovative and Novel Computational Impact on Theory and Experiment (INCITE) at the Argonne Leadership Computing Facility (ALCF).

The goal of the project is to optimize charge transfer in solar cells. They not only find the optimal materials, but they also predict a fabrication process that will produce the best material for this application. This project is described in more detail in the Planet Research article: www.tugraz.at/go/planet-research-en