



Materialdesign mit quantenmechanischen Simulationen

Der Materialwissenschaftler Prof. Blazej Grabowski an der Universität Stuttgart erhält zweiten ERC-Grant

Bereits zum zweiten Mal verleiht der Europäische Forschungsrat (European Research Council, ERC) einen der renommierten ERC-Grants an Prof. Blazej Grabowski, Leiter der Abteilung Materialdesign am Institut für Materialwissenschaft der Universität Stuttgart. Mit dem aktuellen ERC Consolidator Grant „Materials 4.0“, dotiert mit 2 Millionen Euro, möchte Grabowski durch neuartige Simulationsmethoden einen Quantensprung beim Design neuer Materialien erzielen.



Prof. Blazej Grabowski. Foto: Jan Will

Grabowski hatte bereits im Jahr 2015 (damals noch am Max-Planck-Institut für Eisenforschung in Düsseldorf) einen ERC Starting Grant zur Entwicklung neuartiger Methoden für atomistische Simulationen

Hochschulkommunikation

Leiter Hochschulkommunikation
und Pressesprecher
Dr. Hans-Herwig Geyer

Kontakt
T 0711 685-82555

Ansprechpartnerin
Andrea Mayer-Grenu

Kontakt
T 0711 685-82176
F 0711 685-82291
hkom@uni-stuttgart.de
www.uni-stuttgart.de



erhalten. Seit seiner Berufung nach Stuttgart im März 2019 wird dieser ERC Starting Grant am Institut für Materialwissenschaft der Universität Stuttgart erfolgreich weitergeführt. Das Forschungsprojekt „Materials 4.0“ knüpft an die bisherigen Arbeiten Grabowskis zur Entwicklung und Anwendung von quantenmechanisch-fundierten Simulationsmethoden an, die es erlauben, Materialeigenschaften ohne experimentellen Input mit hoher Genauigkeit zu berechnen. Die mit dem ERC-Projekt angestrebten Ziele stehen im Einklang mit den Visionen des Exzellenzclusters „Daten-integrierte Simulationswissenschaft“ (SimTech) der Universität Stuttgart.

ERC Consolidator Grant „Materials 4.0“

Das Akronym „Materials 4.0“ ist angelehnt an das Konzept „Industrie 4.0“, mit dem eine neue, durch Datenaustausch vernetzte Ära von industriellen Prozessen bezeichnet wird. So soll auch „Materials 4.0“ eine neue Ära des Materialdesigns einläuten, in der quantenmechanische Simulationen eine qualitativ deutlich verbesserte Vorhersage von thermodynamischen und kinetischen Materialeigenschaften erlauben. Insbesondere sollen hochgenaue Phasendiagramme berechnet werden, welche als fundamentales Werkzeug im Materialdesign gelten.

Schon seit einiger Zeit werden diese sogenannten „ab initio“-Methoden innerhalb der Materialwissenschaft eingesetzt. Bisher waren die Methoden und Anwendungen jedoch stark limitiert, da in den meisten Berechnungen unrealistische Umgebungsbedingungen angenommen werden mussten, insbesondere sehr tiefe Temperaturen im Bereich vom absoluten Nullpunkt (-273°C). Innerhalb des ersten ERC Grants konnte Grabowski zeigen, dass verbesserte Methoden, gestützt mit Konzepten aus dem Maschinellen Lernen, eine effiziente und dennoch hochgenaue Berechnung der Materialeigenschaften bei relevanten Umgebungsbedingungen erlauben. Diese Methoden sollen innerhalb von „Materials 4.0“ weiterentwickelt und benutzt werden, um hochwertige Datenbanken von Materialeigenschaften für das zukünftige Materialdesign bereitzustellen.



Vita

Prof. Blazej Grabowski studierte Physik an der Universität Paderborn und promovierte 2009 am Max-Planck-Institut für Eisenforschung in Düsseldorf. Für ein weiteres Projekt wurde er mit einem Stipendium der Nachwuchsakademie der Deutschen Forschungsgemeinschaft ausgezeichnet. Von 2011 bis 2012 arbeitete Prof. Grabowski am Lawrence Livermore National Lab in den USA. 2012 kehrte er an das Max-Planck-Institut für Eisenforschung in Düsseldorf zurück, wo er bis zu seiner Berufung an die Universität Stuttgart 2019 als Gruppenleiter tätig war.

Fachlicher Kontakt:

Prof. Dr. Blazej Grabowski, Universität Stuttgart, Institut für Materialwissenschaft, Abteilung für Materialdesign, Tel. +49 711 685-61555, E-Mail [blazej.grabowski \(at\) imw.uni-stuttgart.de](mailto:blazej.grabowski@imw.uni-stuttgart.de)

Medienkontakt:

Andrea Mayer-Grenu, Universität Stuttgart, Hochschulkommunikation, Tel.: +49 (0)711/685 82176, E-Mail: [andrea.mayer-grenu \(at\) hkom.uni-stuttgart.de](mailto:andrea.mayer-grenu@hkom.uni-stuttgart.de)