



Institut für Numerische Simulation  
Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn



## Einladung zu einem Vortrag

### Professor Dr. Martin Jansen

Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart

spricht zum Thema

### Die globale Erkundung chemischer Energielandschaften als Instrument zur Syntheseplanung in der Materialchemie

**Zeit:** Freitag, den 03. Februar 2012, 14:00 Uhr bis 15:00 Uhr

**Ort:** Institut für Numerische Simulation, Wegelerstrasse 6, 53115 Bonn  
Seminarraum 5.002, 5. Etage

gez. Prof. Dr. Michael Griebel, Dr. Jan Hamaekers

Nahezu jede technische Innovation greift auf neue oder zumindest modifizierte Werkstoffe zurück, die Verfügbarkeit neuer Werkstoffe ist also eine wichtige Voraussetzung für Konkurrenzfähigkeit im technologischen Wettbewerb. Die klassische Aufgabe der Chemie im Rahmen der Materialforschung besteht in der Bereitstellung neuer Feststoffe mit immer besseren Leistungsdaten. Trotz aller Erfahrung ist man hier häufig noch auf Zufallsentdeckungen angewiesen, die Vorgehensweise ist "explorativ".

Es wird ein in sich geschlossenes Konzept für eine rationale Syntheseplanung in der Festkörper- und Materialchemie vorgestellt. Dieses beruht auf einer Repräsentation der gesamten materiellen Welt, d.h. aller bekannten und unbekanntem Verbindungen, als (lokale) Minima auf einer Energielandschaft

Eine voraussetzungsfreie Vorhersage von lohnenden Synthesezielen erfordert die globale Erkundung dieser Multi-Minima-Landschaft mit theoretischen Methoden. Die Struktur dieser Landschaft (und damit Existenzfähigkeit und Eigenschaften chemischer Stoffe) ist naturgesetzlich festgelegt und

damit grundsätzlich deduktiv erschließbar. Allerdings resultiert aus der überwältigenden kombinatorischen Vielfalt chemischer Konfigurationen und der großen Anzahl erforderlicher Gesamtenergieberechnungen ein numerischer Aufwand, der an die Grenzen des gegenwärtig Machbaren geht.

Die als (meta)stabil identifizierten Kandidaten werden mit erhöhter Genauigkeit nachoptimiert. Bei endlichen Temperaturen werden die thermodynamischen Zustandfunktionen berechnet, auf deren Grundlage Phasendiagramme ohne Verwendung von experimentellen Vorinformationen abgeleitet werden können.

M. Jansen: Ein Konzept zur Syntheseplanung in der Festkörperchemie, *Angew. Chem.* 114 (2002) 3746 - 3766

M. Jansen, K. Doll, J. C. Schön: Addressing chemical diversity by employing the energy landscape concept, *Acta Cryst.* A66 (2010) 518 - 534

J. C. Schön, K. Doll, M. Jansen: Predicting solid compounds via global exploration of the energy landscape of solids on the ab initio level without recourse to experimental information, *Phys. Status Solidi B* 247 (2010) 23 - 39