



56

Materialien für die Energie-
wende: Für Anlagen, in denen
Wasserstoff erzeugt wird
wie hier bei der Linde AG
in Leuna, aber auch für die
Speicherung und den
Transport dieses Energie-
trägers werden neue Werk-
stoffe gebraucht.

FOTO: PICTURE ALLIANCE / IMAGEBROKER | ROLF SCHULTEN

KI GIBT STOFF

TEXT: TIM SCHRÖDER

57

Mit dem Trend zu mehr Nachhaltigkeit müssen auch Stahl und andere Materialien immer mehr Ansprüchen genügen: Sie sollen ungiftig sein, sich mit wenig Abfällen erzeugen und vollständig recyceln lassen. Außerdem will man bei Rohstoffen unabhängig von Nationen wie China werden. Das macht es recht knifflig, neue Materialien und Herstellungsprozesse zu entwickeln. Jörg Neugebauer und Dierk Raabe vom Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialien setzen dabei jetzt auf künstliche Intelligenz.

Als die „Generalkonferenz für Maß und Gewicht“ am 26. September 1889 in Sèvres bei Paris ihren neuen Urmeter vorstellte, atmeten die Experten der Eichinstitute weltweit auf. Nach fast hundert Jahren hatte die Fachwelt endlich einen Urmeter gefunden, der allen Ansprüchen an Genauigkeit ge-

nügte: einen Stab aus einer Mischung, einer „Legierung“, von 90 Prozent Platin und 10 Prozent Iridium. Der Stab hatte eine feine Skala, an der man einen Meter ganz exakt ablesen konnte. Entscheidend aber war, dass Platin-Iridium-Legierungen fast unempfindlich gegenüber den Temperaturschwankungen sind, die in mittleren Breiten auftreten. Andere Metalle dehnen sich bei Hitze merklich aus und schrumpfen bei Kälte. Nicht so die Platin-Iridium-Legierung: Der Urmeter ist unter hiesigen Bedingungen stets so gut wie gleich lang.

Das Internationale Büro für Maß und Gewicht (IBMG) in Sèvres verschickte dreißig Kopien des Urmeters

an die Eichinstitute verschiedener Länder. Bis den Experten aufging, dass das auf Dauer recht kostspielig würde, denn das Edelmetall Platin war schon damals ausgesprochen teuer. Und so beauftragte das IBMG den hauseigenen Physiker Charles Édouard Guillaume damit, sich auf die Suche nach einer preisgünstigen Alternative für die Platin-Iridium-Legierung zu machen. In den folgenden Monaten und Jahren testete Guillaume etliche Materialkombinationen durch. Bis er 1896 schließlich auf die perfekte Mischung stieß – eine Legierung aus 64 Prozent Eisen und 36 Prozent Nickel, die so wie Platin-Iridium kaum auf Temperaturschwankungen reagiert. Der →

Forscher hatte damit einen Volltreffer gelandet. Denn die Legierung bot sich als alternatives Material nicht nur für den Urmeter an, sondern auch für andere Mess- und Präzisionsinstrumente, zum Beispiel für die Zahnräder in Taschen- und Armbanduhren. Auch die müssen unempfindlich gegenüber Temperaturschwankungen sein, damit das Uhrwerk nicht blockiert, wenn es wärmer wird. „Invar“ taufte Guillaume seine Legierung – im Sinn von invariabel, unveränderlich. Im Jahr 1920 erhielt er dafür den Nobelpreis.

Invar-Legierungen für Wasserstoff

Heutzutage gibt es eine Fülle von Invar-Legierungen, deren Volumen jeweils in einem bestimmten Temperaturfenster stabil bleibt. So gibt es Legierungen für Kühltanks, in denen man Flüssiggas, Liquefied Natural Gas (LNG), bei minus 160 Grad Celsius lagert. Würde sich die Legierung bei Kälte zusammenziehen, könnten sich Risse bilden, Verschraubungen lösen, Ventile leckschlagen. „Die Industrie ist für neue Einsatzgebiete ständig auf der Suche nach neuen Invar-Legierungen, die über einen größeren Temperaturbereich weder schrumpfen noch sich ausdehnen“, sagt Dierk Raabe, Werkstoffwissenschaftler und Direktor am Düsseldorfer Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialien; zum Beispiel sucht man nach Legierungen für Wasserstofftanks und -pipelines und die ganze Wasserstoffinfrastruktur, die in den nächsten Jahren weltweit entstehen wird.

Überhaupt sind derzeit viele neue Legierungen gefragt, weil die nachhaltige Transformation der Wirtschaft auch an Materialien viele Anforderungen stellt. „Das geht weit über das Beispiel Invar hinaus“, sagt Dierk Raabe. So will sich die Europäische Union mit dem „Gesetz zu kritischen Rohstoffen“ ab 2030 bei der Rohstoffversorgung unabhängiger machen von einzelnen Staaten – beispielsweise bei den Metallen der Seltenen Erden, die

heute zum allergrößten Teil aus China stammen. Eine Lösung wäre es, für eine Legierung chemische Elemente zu wählen, die sich beim Recycling leicht wiedergewinnen lassen. So würde man den Bedarf an Importen verringern. Alternativ könnte die Metallindustrie von kritischen Stoffen wie den Metallen der Seltenen Erden auf solche umsteigen, bei denen man nicht von einzelnen dominanten Lieferanten abhängt. Darüber hinaus sollen chemische Elemente aus Legierungen verschwinden, welche die Umwelt schädigen oder Menschen krank machen können. „Die Herausforderung besteht darin, dass man Elemente in Legierungen nicht so einfach durch andere ersetzen kann, weil sich dadurch die Eigenschaften eines Materials meist fundamental verändern“, ergänzt Jörg Neugebauer, Physiker und ebenfalls Direktor am Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialien.

AUF DEN PUNKT GEBRACHT

Künstliche Intelligenz, genauer gesagt maschinelles Lernen, kann in großen Datenmengen Zusammenhänge erkennen, die Menschen verborgen bleiben. Die Fähigkeit kann man nutzen, um unter vielen Legierungen solche mit gewünschten Eigenschaften zu identifizieren.

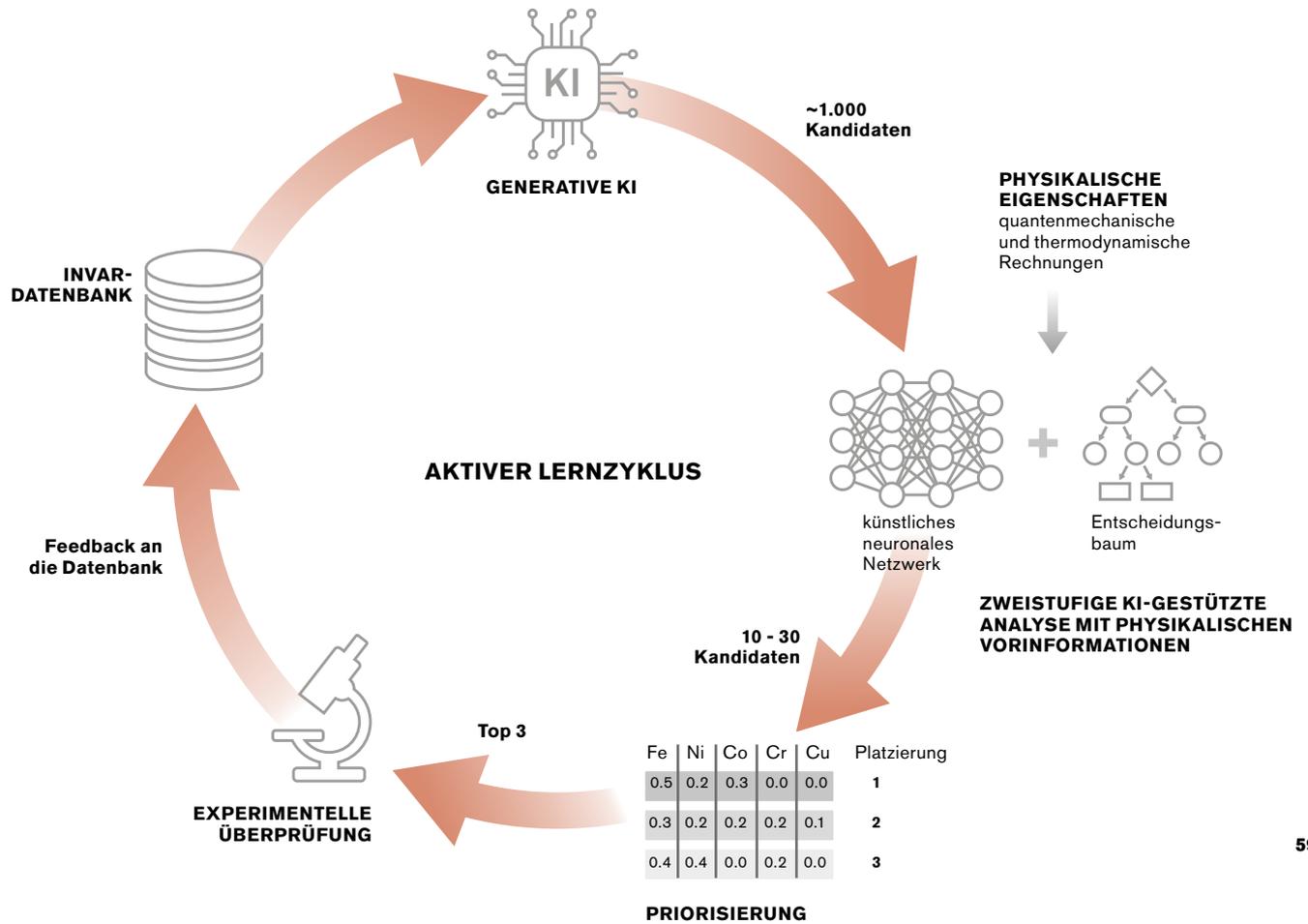
Ein Team des Max-Planck-Instituts für Nachhaltige Materialien kombiniert maschinelles Lernen mit Datenbank-Informationen, physikalischen Rechnungen und mit Experimenten, um neue Legierungen zu entwickeln.

Auf diese Weise hat die Gruppe mithilfe von KI unter anderem Invar-Legierungen und Weichmagnete entwickelt. Sie nutzt aber auch Sprachmodelle für die wissenschaftliche Recherche.

Die Materialforschung steht derzeit also vor der Aufgabe, innerhalb weniger Jahre eine Fülle neuer Legierungen zu entwickeln. Mit Erfahrung, wissenschaftlicher Intuition und Experimenten im Labor allein sei das nicht zu schaffen, sagt Dierk Raabe. Deshalb setzen die Düsseldorfer Forscherinnen und Forscher seit einiger Zeit auf künstliche Intelligenz, genauer gesagt: auf maschinelles Lernen. Die Algorithmen helfen ihnen, schneller neue Legierungen für den Alltagseinsatz zu finden.

Maschinelle Lernverfahren setzen oft auf sogenannte neuronale Netze. Diese werden zunächst darauf trainiert, ein bestimmtes Muster zu identifizieren. Neuronale Netze heißen so, weil sie, wie die Nervenzellen im Gehirn, die Neuronen, Information in mehreren Schichten analysieren. Ein einfaches neuronales Netz reicht aber für die Materialforschung nicht aus.

Dierk Raabe hat deshalb zusammen mit seinen Kolleginnen und Kollegen eine Art von KI-Methodencocktail entwickelt. Damit kann das Team in einem Kreislaufprozess vielversprechende neue Legierungen finden – etwa für Invar-Stähle. Der Prozess startet mit einer Aufgabe wie zum Beispiel: „Finde eine Invar-Legierung für einen Temperaturbereich x, die billiger ist als die herkömmlichen.“ Im ersten Schritt generiert nun ein KI-System aus Tausenden von Legierungsdaten, die in Datenbanken gespeichert sind, rund tausend Vorschläge für neue Invar-Legierungen. Im nächsten Schritt wählen weitere KI-Modelle, darunter künstliche neuronale Netze, zwanzig bis dreißig Kandidaten aus. Dabei werden die Vorschläge auch durch physikalische Berechnungen abgeklopft – etwa durch Rechnungen der sogenannten Dichtefunktionaltheorie. „Die innere Struktur und die Eigenschaften von Materialien hängen von verschiedenen quantenmechanischen Eigenschaften ab – zum Beispiel von den Energien zwischen den Atomen oder dem Magnetismus“, sagt Jörg Neugebauer. „Die Berechnungen berücksichtigen alle diese Parameter und



In einem aktiven Lernzyklus zu neuen Invar-Werkstoffen: Anhand von Legierungseigenschaften, die in Datenbanken gespeichert sind, schlägt ein generatives KI-Modell zunächst mögliche neue Zusammensetzungen vor. Aus diesen etwa tausend Vorschlägen wählen weitere KI-Modelle, darunter künstliche neuronale Netze, bis zu dreißig Kandidaten aus. Dabei berücksichtigen sie auch Ergebnisse physikalischer Rechnungen. Die drei Kandidaten mit den kleinsten thermischen Ausdehnungskoeffizienten werden experimentell überprüft und in die Datenbank aufgenommen.

können die im ersten Schritt vorgeschlagenen Legierungen daraufhin testen, ob sie auch tatsächlich die gewünschten Eigenschaften haben.“

Von den bis zu dreißig verbleibenden Kandidaten werden diejenigen, für die die Modelle die niedrigsten thermischen Ausdehnungskoeffizienten vorhergesagt haben, im Labor hergestellt und getestet. Die Ergebnisse fließen zurück in die Legierungsdatenbank, womit sich der Kreislauf schließt und von vorne beginnen kann. Da das System somit aus seiner eigenen Analyse lernt, sprechen Jörg

Neugebauer und Dierk Raabe von aktivem Lernen. Auf diese Weise hat ihr Team etwa zwei neue Invar-Legierungen für Wasserstoff- und Erdgastanks entwickelt, die ihr Volumen bei Temperaturschwankungen noch weniger verändern als herkömmliche Legierungen. Dierk Raabe erklärt, warum die Entwicklung solcher Materialien eine so knifflige Sache ist: Das fertige Material müsse eine ganze Reihe von Anforderungen erfüllen. Eine Aluminiumlegierung für ein Elektrofahrzeug zum Beispiel müsse fest und steif sein – zugleich aber auch korrosionsbeständig und recycelbar.

Hinzu kommt, dass sich das Material gut verarbeiten lassen müsse, beispielsweise beim Gießen, Schweißen oder beim Umformen, wobei jeder einzelne Prozess nachhaltiger, das heißt vor allem energieeffizienter werden sollte.

Und dann gibt es noch eine weitere Herausforderung. Seit einigen Jahren werden in Legierungen sehr viel mehr chemische Elemente vermischt als früher. Charles Édouard Guillaume brauchte für den ersten Invar-Stahl nur Eisen und Nickel. Moderne Legierungen – etwa für die Turbi- →



nen von Flugzeugen – enthalten mitunter mehr als zehn verschiedene chemische Elemente. Fachleute sprechen bisweilen auch von Hochentropie-Legierungen. Diese haben den Vorteil, dass man damit mehrere, zuweilen sogar gegensätzliche Eigenschaften in einem Material vereinen kann. Am Düsseldorfer Max-Planck-Institut wurden bereits vor einigen Jahren Hochentropie-Stähle entwickelt, die sehr fest sind, sich aber leicht verformen, wenn sie extrem stark belastet werden – der ideale Stahl für die Knautschzone von Autos. Die Stähle verformen sich bei einem Unfall um bis zu 35 Prozent und schlucken dabei Energie des Aufpralls.

Bei der Entwicklung der Hochentropie-Legierungen besteht das Problem da-

rin, dass sich die Anzahl möglicher Varianten mit der Zahl der chemischen Elemente vervielfacht. Selbst wenn man nur die am häufigsten für Legierungen genutzten Elemente in Betracht zieht, ergeben sich 10^{50} mögliche Varianten. Zwar verfügt das Düsseldorfer Institut über sogenannte Sputteranlagen, mit denen sich in kurzer Zeit mehrere Zehntausend Legierungen in hauchdünnen Schichten erzeugen lassen. „Aber daran kann man nicht überprüfen, wie sich ein Stahl, der später im 1000-Tonnen-Maßstab hergestellt wird, im fertigen Bauteil verhalten wird“, sagt Jörg Neugebauer. „Man würde wohl kaum in ein Flugzeug steigen, dessen Werkstoffe nur als Nanolage untersucht wurden.“ Ohne die Hilfe der KI müsste man für Hochentropie-Legierungen Millio-

nen größerer Proben herstellen, um deren Eigenschaften zu testen. Das ist illusorisch und macht KI inzwischen unverzichtbar.

Robuste Magnete für Windräder

Unlängst ist es dem Team am Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialien auch gelungen, mithilfe von KI eine neue Hochentropie-Legierung für Weichmagnete herzustellen. Diese werden schon durch relativ schwache Magnetfelder magnetisiert und umgepolt. Der Markt für solche Weichmagnete wächst, weil sie unter anderem für Generatoren und praktisch alle Elektromotoren benötigt werden, die in Windrädern und Was-

Lag die künstliche Intelligenz richtig? Hongyu Chen (links) und Liuliu Han analysieren die Eigenschaften von weichmagnetischen Legierungen, für die Algorithmen eine hohe mechanische Stabilität vorausgesagt haben.



serkraftwerken Strom erzeugen und elektrische Fahrzeuge antreiben. Herkömmliche Weichmagnete sind dafür nicht unbedingt robust genug, weil sie unter starker mechanischer Beanspruchung beschädigt werden können oder korrodieren. Bislang gab es kaum mechanisch widerstandsfähige Weichmagnete, weil Robustheit und Weichmagnetismus bei den bisherigen Materialien einander entgegenstehen. Die neuen Hochentropie-Legierungen aus Eisen, Nickel, Kobalt, Tantal und Aluminium vereinen beide Eigenschaften: Sie sind mechanisch hart, behalten aber ihre „weiche“ Magnetisierung. Außerdem sind sie länger haltbar als herkömmliche magnetische Werkstoffe.

Der Methodenscocktail für aktives Lernen leistet den Forscherinnen und Forschern um Dierk Raabe und Jörg

Neugebauer also bereits gute Dienste. „Allerdings ist KI noch nicht so weit, dass sie uns in eine bestimmte Richtung schubst – nach dem Motto: Schaut euch mal die oder die Legierung an“, sagt Jörg Neugebauer. „Noch müssen wir die Richtung vorgeben und sie für die Suche nach neuen Legierungen mit Daten füttern, zum Beispiel den quantenmechanischen.“ Doch künstliche Intelligenz ist gut darin, Zusammenhänge zwischen vielen Parametern zu finden und Muster zu erkennen, die für den Menschen zu komplex sind. „Wer weiß, vielleicht reicht es zukünftig, wenige Parameter vorzugeben, die die Eigenschaften einer neuen Legierung beschreiben – und den Rest macht die KI“, sagt Jörg Neugebauer.

Sprachmodelle für die Datenrecherche

Inzwischen setzen Dierk Raabe und Jörg Neugebauer auch auf eine KI-Technik, die durch ChatGPT populär geworden ist – die Large Language Models (LLM), die großen Sprachmodelle. Diese werden mit Unmengen von Texten gefüttert und lernen so, welche Buchstaben und Wortkombinationen mit hoher Wahrscheinlichkeit gemeinsam auftreten. Das befähigt sie dazu, Texte zu schreiben. Am Düsseldorfer Max-Planck-Institut sucht ein LLM etwa korrosionsbeständige Legierungen. In dem Projekt kommt zum einen die KI-gestützte Methodik mit all dem quantenmechanischen Wissen und den Informationen aus den Datenbanken zum Einsatz. Die Erforschung von Korrosion lebt aber vor allem auch von Laborberichten und Testprotokollen, die das Korrosionsverhalten von Materialien in normaler Sprache beschreiben. Diese Schriften füttern die Düsseldorfer in ein Large Language Model – um so schneller die Erkenntnisse zu verarbeiten. „Natürlich wissen LLM zunächst nichts über physikalische Zusammenhänge“, sagt Dierk Raabe. „Da kommt Mumpitz raus. Doch sie können uns enorm unterstützen.“ Sie eignen sich hervor-

ragend, um Teilaufgaben zu lösen, wie etwa die Analyse der Laborberichte. „LLM tragen Informationen zusammen, was uns die Suche nach Legierungen erleichtert. Wir Forscher werden mehr und mehr zu Dirigenten, die diesen Prozess nur noch steuern müssen.“

Vor einiger Zeit hat Dierk Raabe mit einem LLM die größten Schrotthandelsplätze der Welt gesucht und nach den Reststoffen, die dort gehandelt werden. Denn mit dem Trend hin zur Kreislaufwirtschaft wird die Menge an Schrott, die wiederverwertet werden muss, stark steigen. Dann wird man viele verschiedene Schrottarten – vor allem auch gemischten, also kontaminierten Schrott von schlechter Qualität – nutzen müssen. Es wäre großartig, wenn die KI den Materialforschern verraten würde, wie sich daraus hochwertige Legierungen und Produkte herstellen lassen. „Allein die Suche nach dem weltweiten Schrottangebot war schon faszinierend“, sagt Dierk Raabe. „Die Software hat mir das in einem halben Tag geliefert“, sagt er. Ohne KI wäre das wesentlich aufwendiger gewesen. „Das Ganze ist extrem aufregend. Ich bin sehr gespannt, wohin uns KI noch führen wird.“ ←

61

GLOSSAR

INVAR-LEGIERUNG heißt ein Material, das sich bei Temperaturschwankungen im Volumen fast nicht verändert.

WEICHMAGNETISCH ist ein Werkstoff, wenn er sich durch ein relativ schwaches Magnetfeld magnetisieren beziehungsweise umpolen lässt. Solche Materialien werden unter anderem in Stromgeneratoren und in Elektromotoren eingesetzt.
