

**Pressemeldung vom 21.4.2021:**

**Weniger Vorgaben sollen Künstliche Intelligenz zu neuen Materialien führen**

## **Mit aktivem maschinellen Lernen zu neuen Solarzellen**

**Ein Forschungsteam der Technischen Universität München (TUM) und des Fritz-Haber-Instituts in Berlin nutzen künstliche Intelligenz bei der Suche nach geeigneten molekularen Materialien für neue organische Halbleiter, die Basis für organische Feldeffekt-Transistoren (OFETs), Licht emittierende Dioden (OLEDs) und organische Solarzellen (OPVs) sind. Um mit der endlosen Vielfalt möglicher Materialien zurechtzukommen, bestimmt die Maschine selbst, welche Daten sie braucht.**

Wie kann man sich auf etwas vorbereiten, ohne zu wissen, was es sein wird? Ein Forschungsteam der TU München und des Berliner Fritz-Haber-Institutes hat sich dieser geradezu philosophischen Frage im Kontext des maschinellen Lernens gewidmet.

Lernen ist eigentlich nichts anderes als aus gemachten Erfahrungen neue Schlüsse zu ziehen. Um mit einer neuen Situation in dieser Weise umgehen zu können, muss man vorher halbwegs ähnliche Situationen erlebt haben.

Beim maschinellen Lernen bedeutet dies, dass man dem Lernalgorithmus entsprechend viele Daten zur Verfügung stellt. Was aber, wenn es so unendlich viele Möglichkeiten gibt, dass es schlicht unmöglich ist, für alles ähnliche Daten zu generieren? Genau dieses Problem ergibt sich sehr oft bei der schier endlosen Vielzahl von möglichen Molekülen.

### **Moleküle für tragbare Solarzellen oder zusammenrollbare Bildschirme**

Organische Halbleiter bilden die Grundlage für so zukunftssträchtige Anwendungen wie tragbare Solarzellen oder zusammenrollbare Bildschirme. Hierfür müssen aber noch bessere organische Moleküle gefunden werden, aus denen sich diese Materialien zusammensetzen.

Für solche Suchaufgaben werden zunehmend Verfahren des maschinellen Lernens eingesetzt, die entweder mit gerechneten oder gemessenen Daten trainiert werden.

Allerdings wird die Anzahl grundsätzlich möglicher organischer Moleküle auf ungefähr  $10^{33}$  geschätzt – eine so große Zahl, dass es unmöglich wäre, einfach so Daten zu erzeugen, die diese riesige Vielfalt halbwegs abdecken. Zumal die allermeisten Möglichkeiten komplett unbrauchbar für organische Halbleiter sind und es sprichwörtlich gilt, die Nadel im Heuhaufen zu finden.

### **Aktiver Lernalgorithmus entscheidet selbst, welche Daten er braucht**

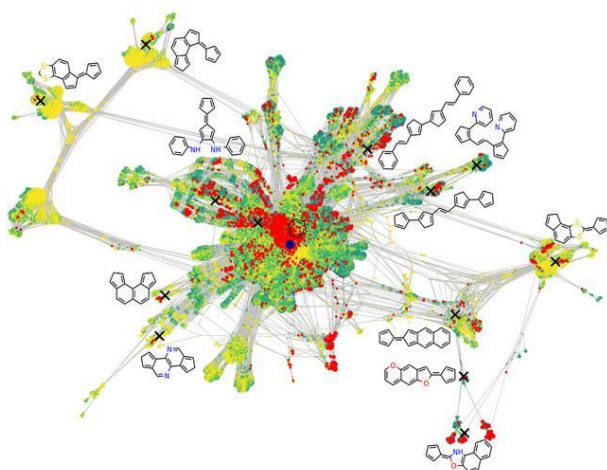
Das Team um Prof. Karsten Reuter, Direktor der Abteilung Theorie am Fritz-Haber-Institut und Dr. Harald Oberhofer, Heisenberg-Stipendiat am Lehrstuhl für Theoretische Chemie der TU München, geht dieses Problem mit sogenanntem aktivem Lernen an. Anstatt mit

vorhandenen Daten zu lernen, bestimmt dieser Lernalgorithmus sukzessive selbst, welche Daten er braucht.

So berechnen die Wissenschaftler mit aufwändigen Computersimulationen erst einmal für eine Anzahl kleinerer Moleküle elektrische Leitfähigkeitsdaten, die eine Eignung in organischen Halbleitern und Solarzellen andeuten.

Basierend auf diesen Daten prüft der Algorithmus, ob kleinere Modifikationen der Moleküle entweder zu sehr guten Eigenschaften führen oder ob er sich unsicher über diese Eigenschaften ist, weil ihm ähnliche Daten fehlen. In beiden Fällen fordert er automatisch neue Simulationen an, verbessert sich anhand der so generierten Daten, überlegt sich neue Moleküle – und so geht dies kontinuierlich weiter.

In ihrer Arbeit zeigen die Wissenschaftler, dass dieser Ansatz deutlich effizienter ist als alternative Suchalgorithmen und auf diese Weise neue vielversprechende Moleküle gefunden werden, während sich der Algorithmus immer weiter durch die Weiten des molekularen Raums bewegt. Jede Woche schlägt er neue Moleküle vor, die die nächste Generation von Solarzellen einläuten könnten, und er wird immer besser.



**Bildunterschrift:**

Selbst lernend bewegt sich der Algorithmus immer weiter durch die unendlichen Weiten des molekularen Raums und schlägt immer wieder neue Moleküle vor, die die Basis für die nächste Generation von Solarzellen sein könnten. (Bild: C. Kunkel / TUM)

**Publikation:**

Active discovery of organic semiconductors

Nature Communications volume 12, Article number: 2422 (2021) – DOI: 10.1038/s41467-021-22611-4

<https://doi.org/10.1038/s41467-021-22611-4>

**Mehr Informationen:**

Die Arbeiten wurden gefördert durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) im Rahmen der TUM International Graduate School of Science and Engineering (IGSSE) und durch die Bayerische Staatsregierung im Rahmen der Initiative Solar Technologies Go Hybrid. Simulationsrechnungen wurden im Leibniz Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften durchgeführt.

**Kontakt:**

PD Dr. Harald Oberhofer

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Lichtenbergstr. 4, 85748 Garching

Tel.: +49 89 289 54320 – E-Mail: [harald.oberhofer@tum.de](mailto:harald.oberhofer@tum.de)

Web: <http://www.th4.ch.tum.de/oberhofer/>

---

