

# Digitale Katalyse

## Autoren

Trunschke, Annette; Draxl, Claudia; Schlögl, Robert; Scheffler, Matthias

## Abteilungen

Anorganische Chemie und NOMAD Laboratory

## Zusammenfassung

In der Katalyse und bei der Erforschung anderer Funktionsmaterialien werden große Datenmengen erzeugt. Die interdisziplinäre Nutzung aller dieser Daten unter Anwendung von Methoden der Informatik und künstlichen Intelligenz wird zu neuen Erkenntnissen in den Materialwissenschaften führen. Sie stellt jedoch hohe Anforderungen an die Qualität der Daten. Wir erarbeiten standardisierte Verfahren zur Erzeugung von (Meta-) Daten komplexer, dynamischer Systeme und tragen somit zu einer FAIRen Nutzung von Forschungsdaten als Grundlage für die Entwicklung neuer, zukunftssichernder Technologien bei.

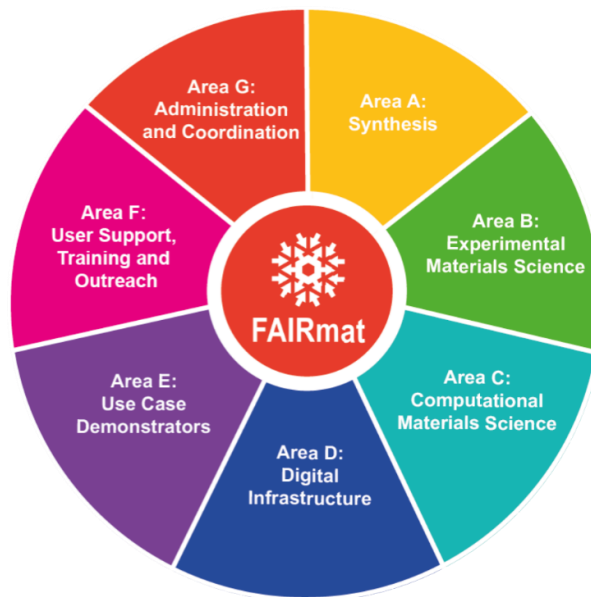
Die Forschung am Fritz-Haber-Institut zielt auf das Verständnis grundlegender physikalisch-chemischer Zusammenhänge, welche die Transformation von Stoffen und Energie an Grenzflächen beschreiben. Heterogene Katalyse spielt hierbei eine große Rolle. In welcher Weise komplexe Reaktionsnetzwerke [1] vom Katalysator beeinflusst werden, hängt empfindlich von den Prozessbedingungen ab, unter denen die Messdaten erhoben werden. Zudem besteht eine Interaktion zwischen der Festkörper- und Oberflächenchemie des Katalysators und der Chemie des reagierenden Mediums. Ein Katalysator [2] ist somit ein dynamisches, adaptives System, das unter Arbeitsbedingungen fortlaufend Änderungen seiner physikalisch-chemischen Oberflächeneigenschaften unterliegt.

Wissenschaftlich fundierte Voraussagen zur Wirkungsweise von Katalysatoren sind deshalb äußerst schwierig. Da keine einfachen linearen Korrelationen zu erwarten sind, ist die Anwendung von Methoden der künstlichen Intelligenz zur Aufdeckung verborgener Zusammenhänge [3, 4] ein vielversprechender Ansatz. Das gilt nicht nur für die Katalyse, sondern trifft in ähnlicher Weise auch auf die Forschung an anderen Funktionsmaterialien, wie Batterien, Implantaten und Materialien mit spezifischen magnetischen oder optoelektronischen Eigenschaften zu. Daher ist es wichtig, Daten aus verschiedenen Gebieten der Chemie und Physik der kondensierten Materie und den Materialwissenschaften zusammenzuführen.

Weltweit wurden bis heute große Mengen an Materialdaten gesammelt. Allerdings ist die Nutzung des „Rohstoffs“ Materialdaten bislang noch nicht effizient möglich. Das liegt an einer fehlenden oder unzureichenden Dateninfrastruktur. Forschungsdaten werden im Allgemeinen lokal gespeichert und sind daher nicht oder nur sehr eingeschränkt zugänglich, etwa in wissenschaftlichen Journalen. Außerdem mangelt es vielfach an einer präzisen Beschreibung (Fehlen von Metadaten). Für Außenstehende ist es oft nicht nachvollziehbar,

wie die Daten gewonnen wurden. Zudem werden Daten im Zusammenhang mit konkreten Projekten veröffentlicht. Die umfangreichen Untersuchungen, die nicht zur Beantwortung der jeweiligen primären Fragestellung führen, werden jedoch nicht publiziert, obwohl sie für andere Fragestellungen große Bedeutung haben können.

Ein öffentlich zugängliches Portal soll solche Forschungsdaten zusammenführen und nutzbar machen. Unser Institut hat gemeinsam mit Kolleginnen und Kollegen der Humboldt-Universität zu Berlin die Initiative FAIR-DI (FAIR Data Infrastructure e.V.) gestartet. Beteiligt daran sind weitere Forschungsinstitute aus Deutschland, den Niederlanden und Belgien (Abbildung 1).



**Abb. 1:** Übersicht über die materialwissenschaftlichen Arbeits- und Forschungsgebiete, die von FAIR-DI abgedeckt werden (FAIRmat: FAIR Data Infrastructure for Materials Science).

Das Portal sowie die darunterliegende Infrastruktur folgen den FAIR-Prinzipien: Daten müssen folgende Bedingungen erfüllen:

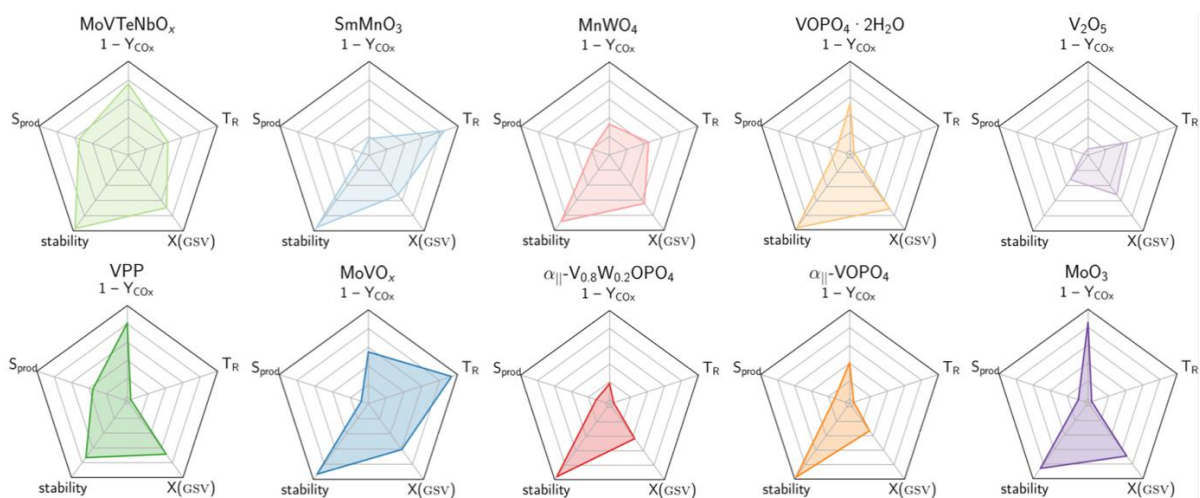
- Findable (auffindbar)
- Accessible (zugänglich)
- Interoperable (zwischen Datenbanken und unter Nutzern austauschbar) und
- Re-purposable (nicht nur für den ursprünglichen Zweck verwendbar)

Auf dem Weg dorthin werden derzeit Metadaten-Standards und Ontologien entwickelt und eine von Wissenschaftlern aus unterschiedlichen Fachgebieten einfach zu nutzende Plattform (FAIRmat Portal) aufgebaut. Sie ermöglicht einen barrierefreien, zentralen Zugang zu den verteilt lagernden Daten, den internationalen Austausch und die Auswertung der Daten. Dabei wird auf einen aktiven Beitrag der Community zur Verbesserung der Dateninfrastruktur gesetzt. Außerdem sollen Beratung und Training angeboten werden. Beim Aufbau der FAIR-DI greifen wir auf die Erfahrung mit der weltweit größten Datenbank und Infrastruktur in der computergetriebenen Materialwissenschaft, dem NOMAD Laboratory, [5] zurück.

Erfahrungen auf dem Gebiet der experimentellen Materialwissenschaften liegen noch nicht vor. Daher erarbeiten wir gegenwärtig Standards für die Ermittlung kinetischer Daten in komplexen heterogen katalysierten Reaktionen. An dem Modellprojekt sind die Abteilungen Anorganische Chemie und Theorie des Fritz-Haber-Instituts und das BasCat Joint Lab beteiligt. Letzteres ist eine Kooperation von BASF SE, Technischer Universität Berlin, dem Cluster of Excellence UniSysCat (Unifying Systems in Catalysis) und dem FHI.

Als Beispiel haben wir die selektive Oxidation der kurzketten Kohlenwasserstoffe Ethan, Propan und *n*-Butan zu wertvollen Produkten, wie Olefinen, ungesättigten Aldehyden und Säuren, unter Vermeidung der Bildung von CO<sub>2</sub> ausgewählt. Dabei unterziehen wir eine Gruppe unterschiedlicher Katalysatoren gemäß eines im Vorfeld erarbeiteten Handbuchs kinetischen Untersuchungen und einer umfassenden physikalisch-chemischen Charakterisierung. Im Zuge dieser Studien werden die Handhabbarkeit von Messvorschriften in der Katalyseforschung überprüft, Hard- und Softwarelösungen für die Erfassung von Metadaten bei katalytischen Tests erarbeitet und Methoden zur Datenreduktion entwickelt.

Abbildung 2 zeigt den Vergleich von Katalysatoren in der Propanoxidation. Die Größe der farbig markierten Fläche erlaubt die direkte Ermittlung einer Rangfolge verschiedener Katalysatoren hinsichtlich wesentlicher Leistungskriterien. Je größer die Fläche, desto aktiver, selektiver, stabiler und somit leistungsfähiger ist der Katalysator.



**Abb. 2:** Vergleich von Katalysatoren in der Propanoxidation. Die Spitzen bedeuten von oben im Uhrzeigersinn: Ausbeute an Wertprodukten, Grad der Beschleunigung der Reaktion (Aktivität), Güte der Messung (im Hinblick auf die Verfälschung durch Transporteeffekte), Stabilität des Katalysators und Anteil des gewünschten Hauptproduktes im Produktgemisch (Selektivität).

Mit diesen Arbeiten leisten wir einen Beitrag zur globalen Etablierung von Dateninfrastrukturen, die den FAIR-Prinzipien genügen. Die Aufbauphase wurde von dem Jahresspendenprojekt 2015 der Fördernden Mitglieder der MPG sowie der Einstein-Stiftung Berlin unterstützt.

## Literaturhinweise

- 1. Kube, P.; Frank, B.; Schlögl, R.; Trunschke, A.,**  
Isotope Studies in Oxidation of Propane over Vanadium Oxide  
ChemCatChem 9, 3446 – 3455 (2017)  
<http://dx.doi.org/10.1002/cctc.201700847>
- 2. Schlögl, R.**  
Heterogeneous Catalysis  
Angewandte Chemie International Edition 54, 3465-3520 (2015)  
<http://dx.doi.org/10.1002/anie.201410738>
- 3. Andersen, M.; Levchenko, S. V.; Scheffler, M.; Reuter, K.**  
Beyond Scaling Relations for the Description of Catalytic Materials  
ACS Catalysis 9, 2752-2759 (2019)  
<https://doi.org/10.1021/acscatal.8b04478>
- 4. Ghiringhelli, L. M.; Vybiral, J.; Levchenko, S. V.; Draxl, C.; Scheffler, M.**  
Big Data of Materials Science: Critical Role of the Descriptor  
Physical Review Letters 114 , 105503 (2015)  
<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.105503>
- 5. Draxl, C.; Scheffler, M.**  
NOMAD: The FAIR concept for big data-driven materials science  
MRS Bulletin 43, 676-682 (2018)  
<https://doi.org/10.1557/mrs.2018.208>