

IN DER SCHALTZENTRALE DER CHEMIE

Mittwoch, 31.01.2018, 17:00 Uhr, Hörsaal B, Fachbereich Chemie, Martin-Luther-King-Platz 6

Hochdurchsatz-Screening, Genetische Algorithmen, Künstliche Intelligenz – Moderne Methoden in der Synthese- und Materialoptimierung

Dr. Marek Chechinski

Creative Quantum, Quantenmechanische Simulationen

E-Mail: kontakt@creative-quantum.eu

CreativeQuantum hat sich als unabhängiges Unternehmen seit 2008 auf die Durchführung von Quantenchemie-basierter Forschung und Entwicklung für die chemische und pharmazeutische Industrie spezialisiert. Mit seinem interdisziplinären Team aus Chemikern, Physikern und Quantenchemikern bietet es umfangreiche modernste quantenchemische Untersuchungen als Dienstleistung an.



Damit lassen sich beliebige chemische und physikalische Eigenschaften von Substanzen und Materialien bestimmen und chemische Prozesse im Detail aufklären. Von besonderem Interesse ist das virtuelle Screening von Materialeigenschaften, die eine Vorhersage einer Vielfalt an physikalischen und chemischen Materialeigenschaften erlaubt, z.B. Redoxpotentiale oder optische Eigenschaften (Farbe), die wichtige Kenngrößen für die Suche nach neuen Photovoltaik-Materialien oder photoelektrochemischen Zellen sind.

Mittels „in silico high“ throughput screening lassen sich heutzutage neue Katalysatoren für chemische Prozesse bereits im Computer *ohne* Experimente „entdecken“. Dabei kommt sogenannten genetischen Algorithmen eine besondere Bedeutung zu. Wie bei der Evolution wird hierbei ein System *zufällig* verändert und die neue Eigenschaft je nach Erfolg an weitere Generationen des Systems übergeben. Damit ist eine Vielzahl an Variationen möglich und die Optimierung passiert durch natürliche Auslese innerhalb von wenigen Generationen.

Neben einer kurzen Einführung in die Methoden werden insbesondere Beispiele vorgestellt.