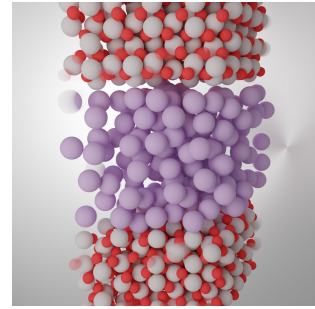


# Training von "Machine-Learned Potentials" für Phasenwechselmaterialien

Die Gruppe von Prof. Salinga am Institut für Materialphysik konzentriert sich auf die Untersuchung von Materialien für neuartige neuromorphe Computerhardware. Sogenannte Phasenwechselmaterialien (PCMs) bieten einen großen elektrischen und optischen Kontrast zwischen einem kristallinen und einem amorphen Zustand, was sowohl für elektronische als auch photonische Speicher- und Rechenanwendungen von Interesse ist.

Seit Jahrzehnten haben Simulationen auf atomarer Ebene wesentlich zu unserem Verständnis der Struktur und der Eigenschaften dieser Materialien beigetragen. Berechnungen der atomaren Dynamik auf Grundlage der Dichtefunktionaltheorie (DFT) bieten zwar eine sehr hohe Genauigkeit, sind aber auf Systeme mit weniger als 1000 Atomen und Zeitspannen von weniger als einer Nanosekunde beschränkt.



"Machine-Learned Potentials" (MLPs) stellen heutzutage eine attraktive Kombination aus der Genauigkeit von DFT-Simulationen und der Effizienz klassischer Potenziale dar. Genaue Simulationen der atomaren Dynamik für Systeme mit vielen Tausend Atomen über Zeiträume von vielen Nanosekunden sind dadurch möglich. Das Training der MLPs basierend auf DFT-Rechnungen für möglichst viele und unterschiedliche Atomkonfigurationen stellt nach wie vor eine anspruchsvolle Aufgabe dar, insbesondere für Mehrkomponenten- oder Grenzflächensysteme.

*Ausschnitt aus der Simulation einer Dünnschichtstruktur: Antimon (violett) zwischen isolierendem Oxid (grau/rot). Konfigurationen wie diese sind Grundlage für das Training von MLPs.*

Unsere Gruppe sucht nun hochmotivierte und engagierte Studierende, die als

### **Studentische Hilfskraft (5-10h/Woche)**

auf Grundlage eines großen Satzes bereits vorhandener Strukturdaten das Training und die Nutzung solcher MLPs in unserer Gruppe vorantreiben.

#### **Wir erwarten...**

- Interesse an Machine Learning und atomistischen Simulationen
- Interesse an der Arbeit mit einem Supercomputer
- Eigeninitiative und hohe Motivation

#### **Ihre Vorteile**

- Einführung in moderne computergestützte Methoden in der Materialwissenschaft
- Einführung in die Arbeit in einer Hochleistungsrechenumgebung mit möglichen Anwendungen in allen Bereichen von Wissenschaft und Technik
- Zusammenarbeit in einem jungen, dynamischen Team

**Haben wir Ihr Interesse geweckt?**

**Dann kontaktieren Sie Prof. Salinga ([martin.salinga@uni-muenster.de](mailto:martin.salinga@uni-muenster.de)).**