

# Our next Topmodel

Gemeinsam können Theorie und Praxis viel erreichen. Auf der Basis geeigneter Experimente sind Experten heute etwa in der Lage, bestimmte Eigenschaften einer Substanz vorherzusagen, ehe es die Substanz überhaupt gibt. Das wiederum hilft der Praxis

**C**hemiker sind Menschen, die man sich eigentlich nicht ohne Labor vorstellen kann. Chemie ist schließlich die Wissenschaft von der Veränderung der Stoffe. Wo sollte die stattfinden, wenn nicht im Labor?

Dr. Christian Diedrich ist Chemiker. Mit Kittel und Schutzbrille im Labor hat ihn allerdings schon lange niemand mehr gesehen. Zuletzt waren das seine Kommilitonen in Münster, damals vor dem Diplom. Seither kennt Diedrich Glaskolben, Bunsenbrenner und Pipetten nur noch aus der Ferne.

**Christian Diedrich ist ein theoretischer Chemiker.** Schon während seiner Promotion ging er nur noch selten ins Labor. Denn im Rahmen seiner Doktorarbeit beschäftigte er sich mit sogenannten Quanten-Monte-Carlo-Methoden. Mit statistischen Verfahren also, um die Schrödinger-Gleichung zu lösen. Eine reine Kopf-, Rechen- und damit auch Computerarbeit.

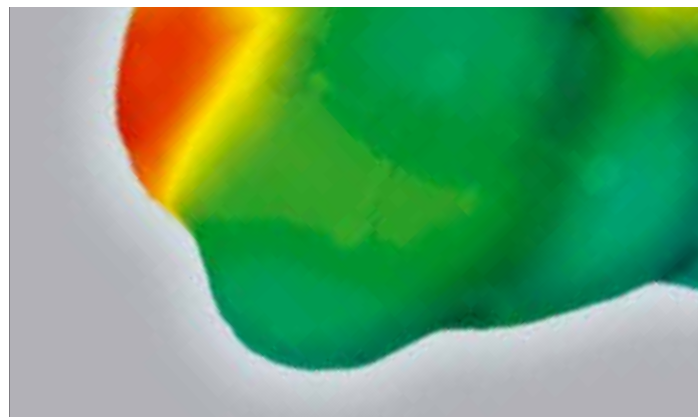
Seit drei Jahren arbeitet Diedrich nun bei Bayer Technology Services in der Gruppe „Complex Systems Modeling“. Molekulares Modellieren heißt das, was er dort macht. Und erneut genügt dafür der Computer. Aber anders als in seiner Promotion haben Diedrichs Modellierungen nun einen starken Anwendungsbezug. Mit Hilfe geeigneter Computer-Modelle gelingt es ihm nämlich, auf ganz bestimmte Eigenschaften von Substanzen zu schließen. So etwa, Licht welcher Wellenlänge sie gut absorbieren. Oder wie viel Energie die Reaktion mit einer bestimmten anderen Substanz erfordert. Es ist vielleicht so, als ob ein Biologe schon beim Anblick der Basenfolge in einer pflanzlichen DNA sehen könnte, wie groß die Blätter werden oder welche Farbe die Blüten haben.

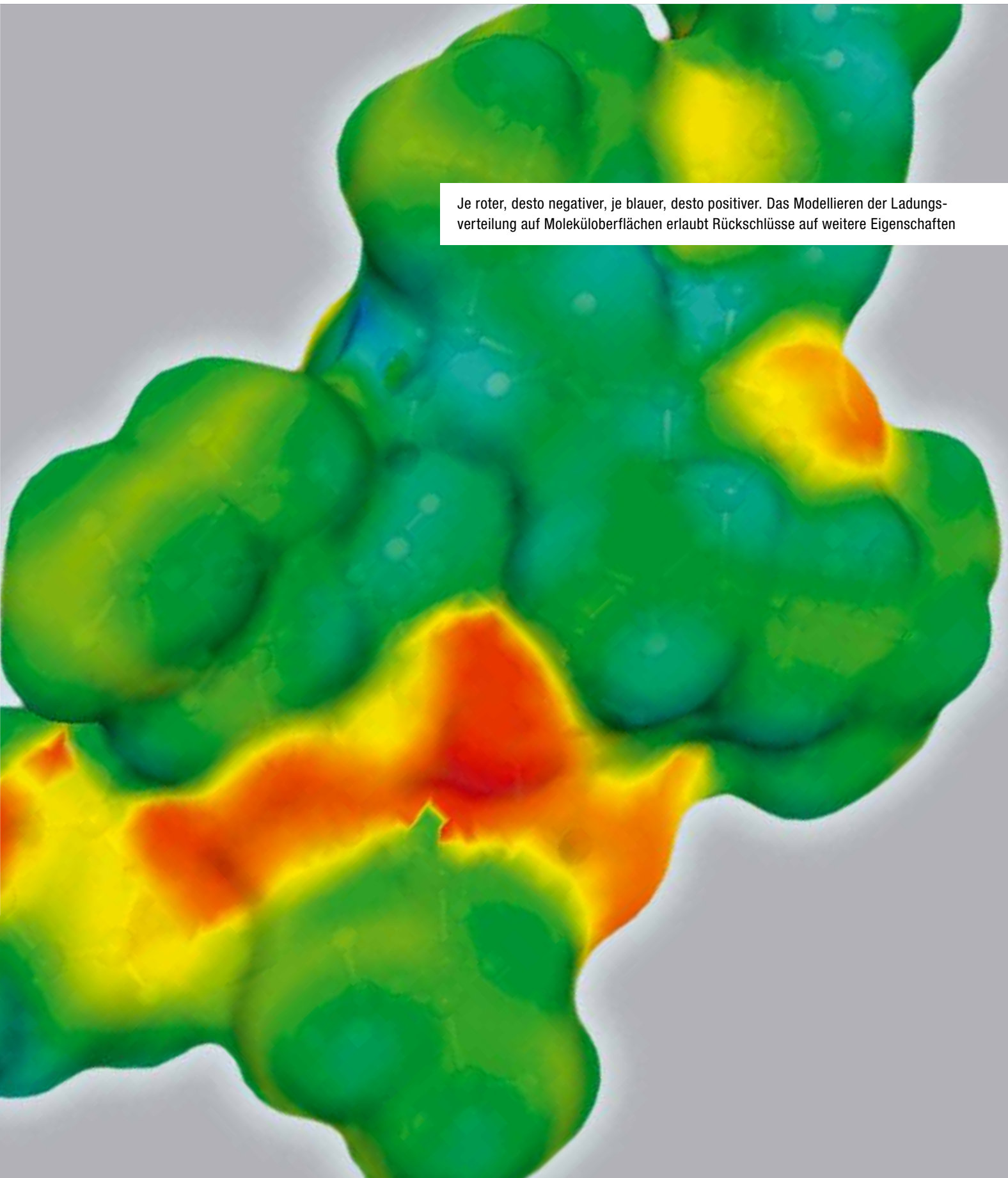
**Warum ist das interessant?** Gehen Chemiker mit ihren Substanzen nicht ohnehin ins Labor und bestimmen dort die Eigenschaften? „Manchmal geht das nicht“, erklärt Diedrich. „Gerade in der Forschungsphase gibt es häufig Situationen, in der eine Idee zunächst nur auf dem Papier steht und die eigentliche Realisierung sehr aufwendig ist. Manchmal ist es dann einfach praktisch, vorher schon zu wissen, ob das Ergebnis die gewünschten Eigenschaften haben würde.“ Um dies vorherzusagen

zu können, stehen Diedrich eine Reihe von Modelliermethoden zur Verfügung. Die Art der Aufgabe bestimmt dabei, ob der Chemiker ganze Partikel oder nur kleine Materieausschnitte mit wenigen Molekülen betrachtet. Häufig bemüht er auch die Quantenmechanik. Sie beschreibt einzelne Moleküle oder gar nur die Elementarteilchen innerhalb der Atome eines Moleküls, also etwa die Elektronen. Gerade die Anordnung dieser winzigen negativen Ladungsträger verrät viel über die Eigenschaften einer Substanz im Großen. So etwa über ihr Verhalten gegenüber anderen Stoffen, etwa, was Mischbarkeit oder Reaktivität betrifft. Und auch viele optische Eigenschaften, beispielsweise hinsichtlich der Absorption von Licht, gehen auf die Elektronenanordnung in den einzelnen Molekülen zurück.

**Um sie genau ermitteln zu können,** muss man die Schrödinger-Gleichung bemühen, eine recht komplexe Gleichung, die den Zustand eines Systems beschreibt. Dank moderner Computer lässt sich diese Gleichung inzwischen auch auf komplexere Moleküle als das einfache Wasserstoffmolekül anwenden.

In der pharmazeutischen Wirkstoffforschung ist das Modellieren am Computer schon länger ein bewährtes Werkzeug. Das







## „Je komplexer Substanzkompositionen sind, desto interessanter werden theoretische Vorhersagen von Eigenschaften“

Dr. Christian Diedrich, Senior Expert, Bayer Technology Services

virtuelle Simulieren der Interaktion möglicher Wirkstoffmoleküle mit relevanten Zielstrukturen im Organismus hilft dabei, die Zahl der Experimente einzugrenzen.

Dasselbe gilt zunehmend auch für die Forschung in den Materialwissenschaften. „Je komplexer dort die Substanzkompositionen sind, desto interessanter werden theoretische Vorhersagen von Eigenschaften“, so Diedrich. So können sich die Entwickler manch aufwendige Synthese sparen, die am Ende doch überflüssig wäre, einfach weil die Eigenschaften nicht die gewünschten sind.

Der Bereich Functional Films von Bayer MaterialScience arbeitet an derlei komplexen Materialkompositionen. Anders als herkömmliche Folien sind funktionale Folien oft Gemische aus vielen Substanzen. In ihrem Zusammenspiel sorgen sie in der Regel erst für die beabsichtigte Funktion, etwa eine besondere optische oder mechanische Eigenschaft.

Mit solchen Vielstoffrezepturen beschäftigt man sich auch im Competence Center Holographics des Bereichs Functional Films. Geeignete Funktionschemikalien sorgen dabei dafür, dass aus Folien holographische Folien werden. Schon heute finden diese vielfältige Verwendung. So etwa bei der Gestaltung von Identitätskarten, Ausweisen und Reisepässen. Das Einarbeiten kleiner Hologramme ist inzwischen ein gängiger Weg, um solche Karten und Ausweise fälschungssicherer zu machen. Die Visionen für solche Folien reichen bis zum Einsatz als lichtlenkende Bauteile in Bildschirmen.

**Auch bei Bayer MaterialScience entwickelt man holographische Folien** für weitere Anwendungen. Einer, der diese Forschung vorantreibt, ist Dr. Thomas Rölle. „Head of Chemistry & Photoactives“ steht unter seinem Namen auf der Visitenkarte. Photoactives – lichtaktive Substanzen also – spielen für die holographischen Folien eine große Rolle. In der Regel wirken dabei mehrere Funktionschemikalien auf komplexe Weise zusammen, damit aus einer technischen eine „funktionelle“ Folie entsteht. Ein Bestandteil der Rezeptur hat die Aufgabe, Lichtenergie zu absorbieren, diese dann an andere Moleküle zu



Nicht immer ist es möglich, Stoffeigenschaften im Labor zu ermitteln. Schön, wenn theoretische Modelle helfen können

## Praktische Sache

Theoretische Betrachtungen helfen der Praxis auf vielfältige Weise – nicht nur, wenn Forscher geeignete Substanzen für holographische Folien suchen. Die Modellierer von Bayer Technology Services bieten darüber hinaus viele weitere praxisrelevante Vorhersagen. Das Modellieren der räumlichen Struktur einzelner Moleküle sowie der Ladungsverteilung darin ermöglicht ihnen nämlich auch, ganz konkrete Stoffdaten her-zuleiten.

So etwa den sogenannten Reindampfdruck, der ein Maß für die Flüchtigkeit einer Substanz ist. Dieser ist zum Beispiel für Unternehmen wichtig, die eine neue Chemikalie auf den Markt bringen wollen, denn je nach Flüchtigkeit müssen sie bestimmte toxi-kologische Studien beibringen. Oft liegt die Substanz im Labor aber nicht rein genug vor, um ihren Reindampfdruck messen zu können. Dann helfen Modellierungen. Auch für die Planung von Trennprozessen wie Destillationen oder Extraktionen sind Kenntnisse über Flüchtigkeit sowie die Löslichkeit in unterschiedlichen Flüssigkeiten entscheidend.

Auch die Viskosität können die Modellierer herleiten. In chemischen Prozessen bestimmt diese Größe maßgeblich, wie Rohre und Pumpen ausgelegt sein müssen. Oft möchte man die Viskosität eines Gemisches mit einer ganz bestimmten Zusammensetzung deshalb schon wissen, bevor man eine konkrete Anlage baut. Auch dabei helfen die theoretischen Vorhersagen. Mitunter hängt davon ab, ob ein bestimmtes Verfahren überhaupt zum Einsatz kommt.



## „Wir haben hohe Anforderungen an eine rasche und kosteneffiziente Materialentwicklung, und da hat uns die Modellier-Expertise von Bayer Technology Services sehr geholfen“

Dr. Karsten Danielmeier, Vice President Industrial Marketing-Functional Films-Research & Development, Bayer MaterialScience

übertragen und so deren Polymerisation auszulösen. Per Lichtstrahl schreibt man so das eigentliche Hologramm in die Folie.

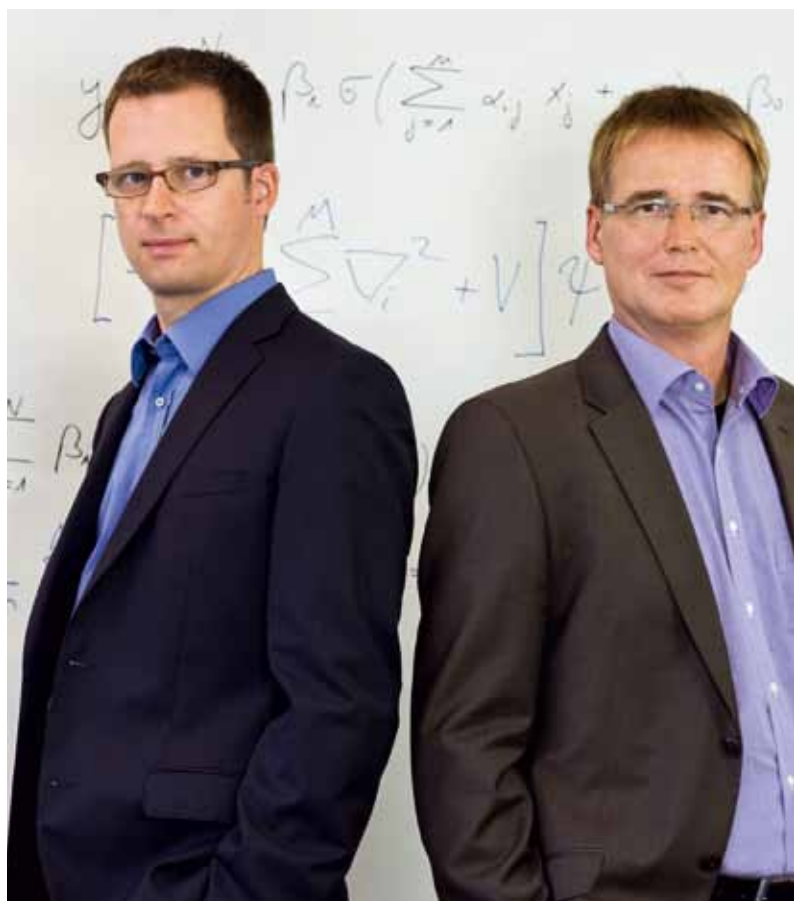
Derzeit arbeitet Rölle mit seinem Team an neuen Rezepturen. Aktuelle Entwicklungen konzentrieren sich dabei etwa auf Folien, die einfallendes Licht umlenken oder daraus sichtbare Bilder formen können. Ein entscheidendes Element für den Erfolg ist das Zusammenspiel aller beteiligten Funktionschemikalien in der Folienmatrix. Dabei haben die Substanzen eine ganze Reihe von Voraussetzungen zu erfüllen. Der Lichtfänger muss ein bestimmtes Absorptionsverhalten mitbringen, der Polymerbildner über eine gewisse Beweglichkeit in der Matrix verfügen und sich zu einem stabilen Polymer vernetzen lassen können.

Für so eine Aufgabe sind zunächst unzählige Substanzen denkbar. Tausende von Versuchen wären nötig, um die optimalen Funktionschemikalien zu finden. Eine Sisyphosarbeit. Viele Kandidaten müsste man vor dem eigentlichen Test in der Folie erst noch synthetisieren – auch das ist aufwendig und teuer.

Zum Glück weiß man bei Bayer MaterialScience von der Modellierkompetenz bei Bayer Technology Services. So kam Christian Diedrich ins Spiel. Mit seinen Modellen ist er in der Lage, verlässliche Aussagen über genau die Eigenschaften zu machen, die für Rölle und sein Team so interessant sind. Etwa über die Lichtabsorption, über die Beweglichkeit in der Folie, über die Reaktionsfreudigkeit bei der Polymerisation – und über die optischen Eigenschaften des resultierenden Hologramms.

**Für diese letzte Angabe zog Diedrich noch seinen Kollegen** Dr. Thomas Mrziglod hinzu. Der Mathematiker ist Experte für künstliche neuronale Netze. Dabei stellen Computer-Programme ihre Berechnungen nicht nach vorgegebenen Gleichungen an, sondern sie lernen aus vorhandenem Datenmaterial so dazu, dass sie weitere Daten geeignet interpretieren können. Das ist dort hilfreich, wo viele Variablen eingehen und man keine exakten Formelzusammenhänge kennt.

„Wir hatten für etliche Rezepturen experimentelle Daten, und damit konnten wir unser neuronales Netz trainieren“, erklärt Mrziglod. Anschließend genügte es dann, die Daten aus Diedrichs Modellierungen einzuspeisen. Das trainierte neuronale Netz war nun in der Lage, Abschätzungen über die jeweiligen Eigenschaften des fertigen Hologramms zu machen. Auf die Art rechnete Bayer Technology Services eine Vielzahl der experimentell zugänglichen Rezepturen durch. „Binnen weniger Tage konnten wir mit diesem virtuellen Screening eingrenzen, welche Substanzen wirklich aussichtsreich für den praktischen Einsatz in der Folie sind“, erklärt Diedrich. Dabei sieht er es als großen Vorteil, die zusätzlich benötigte Neuronale-Netze-Expertise mit Thomas Mrziglod direkt im eigenen Haus zu haben.



Haben keine Angst vor komplexen Gleichungen: die Modellierer Dr. Christian Diedrich und Dr. Thomas Mrziglod (v.l.)

Und auch der Kunde ist zufrieden. „Wir haben hohe Anforderungen an eine rasche und kosteneffiziente Materialentwicklung, und da hat uns die Modellier-Expertise von Bayer Technology Services sehr geholfen“, erklärt Dr. Karsten Danielmeier, der die Forschung und Entwicklung im Bereich Functional Films von Bayer MaterialScience leitet. Und sein Mitarbeiter Thomas Rölle freute sich, dass ihm die „konstruktive Zusammenarbeit“ aussichtsreiche Substanzen geliefert hat. „Die Labortests haben bestätigt, dass ausgewählte Kandidaten tatsächlich geeignet sind“, so der Chemiker. Es wäre nicht das erste Mal, dass Diedrich an einer erfolgreichen Produktentwicklung beteiligt ist. Schon bei der bereits am Markt befindlichen holographischen Folie Bayfol HX hatte er mit Modellierungen geholfen. Und schon dabei hatte sich gezeigt, was Theorie und Praxis erreichen können, wenn sie Hand in Hand gehen.