

FAIRe Dateninfrastruktur für die Materialwissenschaften und verwandte Forschungsgebiete

FAIRmat

Claudia Draxl, Carsten Baldauf, Matthias Scheffler

HU Berlin, U Leipzig, FHI Berlin



SHARED METADATA AND DATA FORMATS FOR BIG-DATA DRIVEN MATERIALS SCIENCE: A NOMAD-FAIRDI WORKSHOP

IRIS Adlershof, Berlin, Germany, July 2019

<https://th.fhi-berlin.mpg.de/meetings/meta2019>

FAIRDI e.V.

Dateninfrastruktur für computergestützte und experimentelle Materialwissenschaften und darüber hinaus



Mitglieder

- HU Berlin (DE)
- KIT Karlsruhe (DE)
- Fritz-Haber-Institut Berlin (DE)
- MPI für Polymerforschung Mainz (DE)
- Astron (NL)
- Radboud U Nijmegen (NL)
- U Twente (NL)
- MPCDF Garching (DE)

... wachsend



The NOMAD European Centre of Excellence

your gateway to materials science data



NOMAD beherbergt das weltweit größte
Repository in den **computergestützten**
Materialwissenschaften.

50,236,539 Open-access total energy calculation

>40 Supported codes

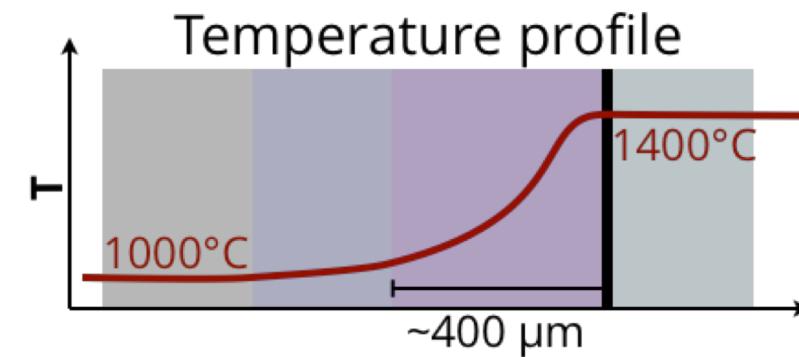
180 Contributors

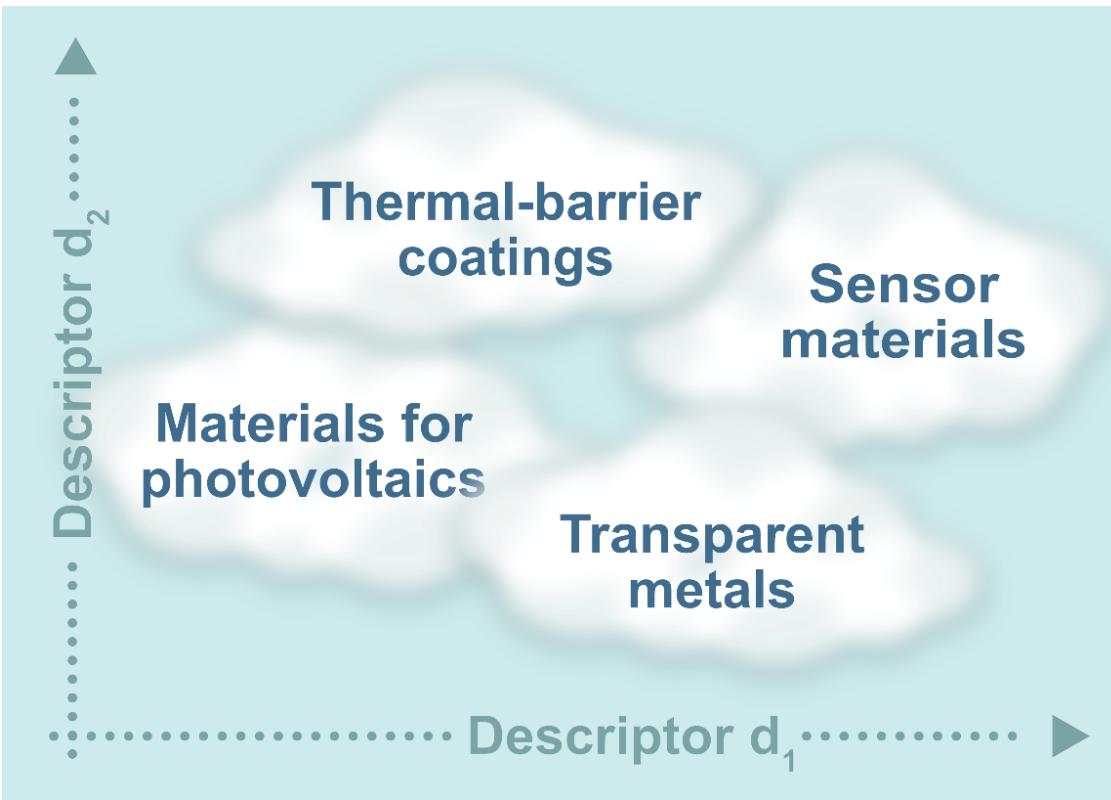
>300 Users

The NOMAD European Centre of Excellence

your gateway to materials science data

Die Effizienz von Flugzeugturbinen steigt mit der Betriebstemperatur.







1st PARADIGM Empirical Science

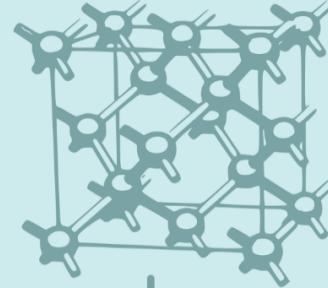
Experiments

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$$

2nd PARADIGM Theoretical Science

Laws of classical
mechanics,
electrodynamics,
etc.

3rd PARADIGM Computational Science, Simulations



4th PARADIGM Big-Data- Driven Science



..... 1600 1950 2010

Das FAIRmat NFDI Konsortium

Fritz-Haber-Institut
der Max-Planck-
Gesellschaft



Fritz-Haber-Institut
der
Max-Planck-
Gesellschaft

Max Planck Computing
& Data Facility (MPCDF)



Max-Planck-Gesellschaft,
Netzwerk zu *Big-Data-
Driven Materials Science*



Technische Universität
München



BasCat – UniCat BASF
Joint Lab, Technische
Universität Berlin



Paul-Drude-Institut für
Festkörperelektronik



Dresden Center for
Computational Materials
Science



Friedrich-Schiller-
Universität Jena



Max-Planck-Institut
für Polymerforschung



MAX-PLANCK-INSTITUT
FÜR POLYMERFORSCHUNG
MAX PLANCK INSTITUTE
FOR POLYMER RESEARCH

Max-Planck-Institut
für Chemische
Physik fester Stoffe



MAX-PLANCK-INSTITUT
FÜR CHEMISCHE PHYSIK FESTER STOFFE

Humboldt-Universität
zu Berlin



Karlsruher Institut
für Technologie



Max-Planck-Institut für
Plasmaphysik (IPP)



Deutsche Gesellschaft für
Katalyse



Universität Leipzig



Max-Planck-Institut für
Festkörperforschung



Max-Planck-Institut
für Festkörperforschung



Die vier V in der Daten-getriebenen Forschung

Volume Menge, was ist “big data”?

Variety Heterogenität in Bedeutung und Form der Daten

Velocity Geschwindigkeit mit der Daten eintreffen oder sich ändern

Veracity Unsicherheit in der Qualität der Daten

Forschungsgebiete und Methoden in FAIRmat

- Research in materials science, including:
 - Solid-state physics
 - Physics of metals and semiconductors
 - Chemical physics of solids
 - Surface science
 - Catalysis
 - Soft-matter physics
 - Biophysics
 - Computational chemistry
 - [...]
- Data-intensive methods:
 - Materials simulations:
 - Electronic-structure theory
 - Empirical potentials
 - Coarse graining
 - Electron microscopy
 - Atom probe tomography
 - Spectroscopies
 - Beamline/synchrotron science
 - [...]

Grundlegende Leitsätze für FAIRmat:

- Niedrige Einstiegsschwellen für neue Partner
- Unbürokratisches und inklusives Arbeiten
- Domänen-spezifische Repositorien
- Sammeln von Rohdaten (auch proprietär),
dann Konvertierung und Normalisierung
- Wrapper und Parser statt Standards
- Klares Bekenntnis zu den FAIR Prinzipien

Working groups are forming

Computational Materials Science

C. Draxl (HUB), M. Scheffler (FHI Berlin), S. Botti (FSU Jena), *et al.*

Electronic-structure theory, (*ab initio*) molecular dynamics, Green-function methods, wave-function based methods, quantum chemistry, *etc.*

Experimental Materials Science

C. Wöll (KIT), C. Koch (HUB), C. Felser (MPI-CPfS), D. Raabe (MPI-E), *et al.*

Electron microscopy, atom-probe tomography, STM, AFM, various spectroscopic methods (incl. synchrotrons), *etc.*

Catalysis

K. Reuter (TU Munich), R. Gläser (U Leipzig), F. Rosowski (BasCat), S. Schunk (hte), *et al.*

Kinetic and spectroscopic experiments, structure and composition studies, multiscale modeling, *etc.*

Soft-Matter Science

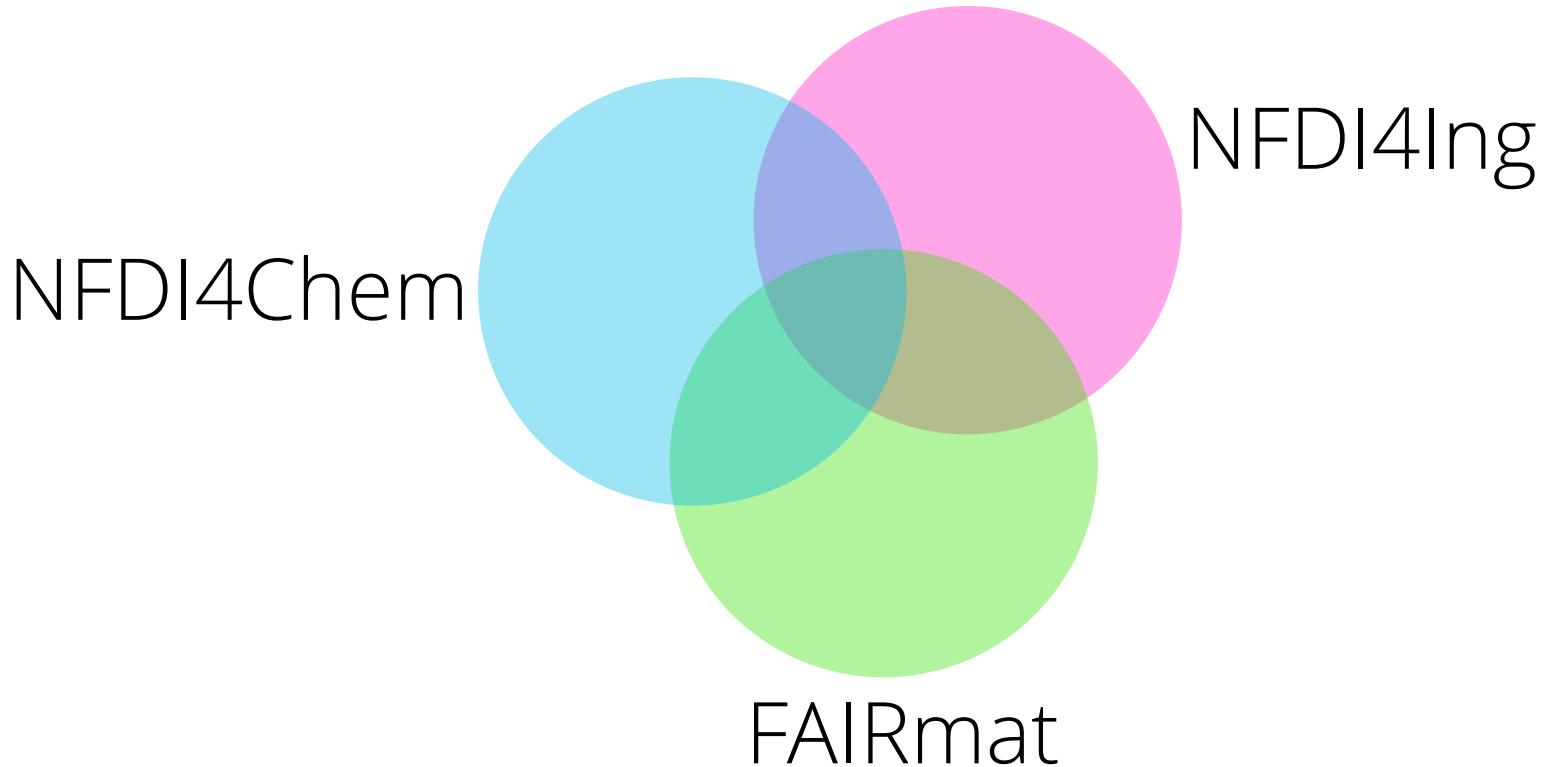
K. Kremer, T. Bereau (MPI-P), C. Baldauf, J. Käs (U Leipzig), *et al.*

Computational studies (EST, FF, CG), experimental studies using microscopies, optical manipulators, atomic-force microscopy, *etc.*

[...]

Digital Infrastructure

Computational Chemistry



Interessiert? Registrierung:
<https://fairdi.eu/fairmat>