Bundesministerium
Innovation, Mobilität
und Infrastruktur

Artificial Intelligence zur Unterstützung der Entwicklung grüner Materialien

Impressum

Medieninhaber, Verleger und Herausgeber:
Bundesministerium für Innovation, Mobilität und Infrastruktur,
Radetzkystraße 2, 1030 Wien
Autorinnen und Autoren: Dr. Jürgen Spitaler, Dr.in Natalia Bedoya-Martinez, Dr. Manfred Mücke und Dr. Sven Eck (Materials Center Leoben Forschung GmbH); Dr. Bernhard Geiger (Know Center Research GmbH); Prof.in Dr.in Nina Eisenmenger, Dr.in Gudrun Obersteiner und DI Nadine Brunnhuber (Universität für Bodenkultur, Wien); Mag. Boris Kandov, Dr.in Iana Kazeeva und Dr.in Eva Korenjak Lalovič (Wissenschaftliche Mitarbeiter:innen am Institut für Innovation und Digitalisierung im Recht, Universität Wien)
Gesamtumsetzung: Dr. Jürgen Spitaler, Materials Center Leoben Forschung GmbH
Fotonachweis Umschlag: Bild von IStock von Parradee Kietsirikul
Wien, 2025. Stand: 13. August 2025

Disclaimer:
Es wird darauf verwiesen, dass alle Angaben in dieser Publikation trotz sorgfältiger Bearbeitung ohne Gewähr erfolgen und eine Haftung der Autorinnen und Autoren ausgeschlossen ist. Rechtausführungen stellen die unverbindliche Meinung der Autorin/des Autors dar und können der Rechtssprechung der unabhängigen Gerichte keinesfalls vorgreifen.

Inhalt

1 Motivation 6
Herausforderungen für grüne Materialentwicklung 6
Ansatzpunkte für AI-gestützte Entwicklung grüner Materialien 8
Abgrenzung zu benachbarten Themen 9

2 Methoden 10
Beiträge zur vorliegenden Studie (Institutionen) 10
Literaturrecherche 12
Literaturdatenbanken - Abfragemethodik 12
Länderspezifische Auswertung der Literatur 13
Kategorisierung von AI-Methoden 15
Screening der Literatur hinsichtlich verwendeter Methoden der künstlichen Intelligenz 18
Roadmaps, Strategien, Initiativen 20
Bewertung des Umwelteinflusses von Materialien 22
Materialflussrechnung und -analyse (MFA) 24
Lebenszyklusanalyse (LCA) / Ökobilanz 25
Fragebögen 25
Methodik der Umfrage 26
Inhalt / Fragenkatalog 26
Expert:innen-Interviews 26
Auswahlkriterien für Teinehmer:innen 26
Inhalt / Fragenkatalog 28
Auswertung der Interviews 29
Fokusgruppenworkshop und Fachgespräch 29
Auswahlkriterien für Teilnehmer:innen 29
Inhalt 31
Auswertung 31
Relevante rechtliche Rahmenbedingungen 32

3 Erhebung und Bewertung des IST-Zustands 33
Key player für Materialentwicklung 33
Datenverfügbarkeit 34
Potentiell passende AI Methoden 41
Generalisierbarkeit und Übertragbarkeit der AI Methoden 47
Aktuelle Trends im Bereich der AI-Methoden mit möglicher Relevanz für die Materialentwicklung 49

Vielversprechende Materialklassen 55
Vielversprechende Materialien zur Ermöglichung neuer Technologien 56
Branchenspezifischer Materialverbrauch und Auswirkungen der Verwendung spezifischer Materialien auf den Klimawandel 58
Kritische Rohstoffe 62
Anwendungsfälle 63
Materialentwicklung 63
Prozessoptimierung 65
Umweltverträglichkeit 65
Rechtlicher Rahmen 66
Regelungen zur Künstlichen Intelligenz auf nationaler (Österreich) und EU-Ebene 66
Trainingsdaten und Datenschutz: Überblick über den einschlägigen Rechtsrahmen in der EU 67
Künstliche Intelligenz und geistiges Eigentum bei der Entwicklung grüner Materialien 68
Quellen und Verweise zum rechtlichen Rahmen 70
4 Schlussfolgerungen – Entwicklungsbedarf 72
AI-Methoden 72
Potential von beschleunigter Entwicklung grüner Materialien nach Branchen und Materialklassen 76
Branchen 76
Materialklassen 77
Rechtlicher Rahmen 79
AI-Gesetze (AIA und PH-RL) 79
Datenschutz 79
Geistige Eigentumsrechte 80
Infrastruktur 81
Hardware 82
Software 82
Datenstruktur 82
Dringlichste Forschungsfragen 84
Zu entwickelnde Kompetenzen 87
Technologische und wissenschaftliche Kompetenzen: 87
Fachkompetenzen im Bereich nachhaltiger Materialien: 88
Schaffung eines integrativen und nachhaltigen Forschungs- und Innovationsökosystems: 89
Hauptschlussfolgerungen und abschließende Empfehlungen 89

Förderung multidisziplinärer Projekte unter Einbindung von Materialforschung, AI, Data Sciences und Nachhaltigkeit 89
Ausbau der Stellung Österreichs und internationale Vernetzung bei der AI-basierten Entwicklung von grünen Schlüsselmaterialien 90
Aufbau von Materials Acceleration Platforms und Self-Driving Labs 90
Materialsimulation: Weiterer Ausbau bestehender Stärkefelder und weitere Integration von AI 91
Schaffung der passenden Rahmenbedingungen 91

5 Anhänge /Begleitdokumente 93

Tabellenverzeichnis 94

Abbildungsverzeichnis 95

Literaturverzeichnis 96

1 Motivation

Herausforderungen für grüne Materialentwicklung

Die Verminderung des CO_2-Fußabdruck und der Schutz unserer Umwelt zählen zu den großen und dringlichen Herausforderungen unserer Gesellschaft und sind ein wichtiger Teil der nachhaltigen Entwicklungsziele (Sustainable Development Goals, SDG) der Vereinten Nationen (United Nations, 2025). Dabei geht es um leistbare und saubere Energie (SDG 7), nachhaltige und innovative Industrie (SDG 9), nachhaltige Produktion (SDG 12) und Vermeidung von Treibhausgasemissionen (SDG 13) ebenso wie um den Erhalt von Naturräumen und Ökosystemen (SDG 14 und 15).

Materialien spielen in diesem Kontext aus zwei unterschiedlichen Gründen eine wichtige Rolle: Zum einen sind neue Materialien von zentraler Bedeutung für die Erschließung neuer, umweltfreundlicher Technologien (Karlsruher Institut für Technologie, 2022) (European Commission, 2024a), zum anderen haben bestehende Materialien erhebliche Umwelt-auswirkungen und sind für einen beträchtlichen Teil des CO_2-Fußabdruckes verantwortlich (US Department of Energy, 2022). Gleichzeitig erleben Methoden aus dem Bereich der Künstlichen Intelligenz (Artificial Intelligence, AI) eine rasante Entwicklung und führen zu bahnbrechenden Neuerungen in vielen technischen Bereichen. Deshalb ist es ein Gebot der Stunde, AI zur Lösung von Problemstellungen im Bereich der Materialien für grüne Anwendungen bestmöglich einzusetzen. Im Fokus steht dabei die beschleunigte Entwicklung von Materialien, welche die Anforderungen aus Industrie und Wirtschaft erfüllen und dabei modernen Nachhaltigkeitsanforderungen im Sinne von „inhärent sicheren und nachhaltigen“ (safe and sustainable by design) Materialien entsprechen (European Commission, 2022a). Wenn in diesem Bericht über Materialien geschrieben wird, sind vordringlich fortschrittliche Materialien und Werkstoffe im Sinne der OECD-Definition von „Advanced Materials“ (OECD, 2022) gemeint.

Bezüglich der Erschließung neuer Technologien spielen Materialien in einer Vielzahl von Anwendungsbereichen eine wichtige Rolle, wie zum Beispiel bei der Gewinnung, der Speicherung und dem Transport von Energie, der Mobilität, im Bausektor oder in der Elektronikindustrie.

Bezüglich der Umweltauswirkungen von Materialien sind alle Stufen der Wertschöpfungskette zu beachten, angefangen vom Rohstoffabbau (Verbrauch von Energie und Wasser, Landnutzung, …) über den Transport und die Werkstoffproduktion (Energie- und Materialverbrauch, Ausstoß von CO_2 und anderen Schadstoffen) bis hin zum Einsatz im Produkt (Einfluss auf Funktionalität und Langlebigkeit) und zum Lebensende (Ausstoß von CO_2 beim Verbrennen, Verrotten oder Wiederaufbereiten).

Der Schwerpunkt der vorliegenden Studie liegt auf dem Einsatz von AI zur Entwicklung „grüner Materialien“ im Sinne von Materialien, die einen Beitrag zur Bewältigung der ökologischen Herausforderungen leisten.

Dazu werden folgende Fragestellungen behandelt:

- Erfassung des IST Zustandes: Was ist der Status quo beim Einsatz von AI für Materialentwicklung und welche Materialien werden als vielversprechend für grüne Anwendungen gehandelt? Welche AI-Methoden sind für einen breiten Einsatz zur Materialentwicklung notwendig; welche existieren bereits und welche müssen entwickelt werden? Wer sind die österreichischen Key-Player in der Materialforschung und -entwicklung, und wie etabliert sind AI-Methoden in der Materialentwicklung?
- Welche standardisierten internationalen Materialdatenräume bestehen bereits?
- Welche AI-Methoden sind so weit generalisierbar, dass sie in unterschiedlichen Forschungsbereichen eingesetzt werden können (Stichwort General-Purpose-Tool); oder müssen spezifische AI-Methoden für jeden einzelnen Anwendungsfall entwickelt werden? Inwieweit lassen sich AI-Methoden auf andere Bereiche oder von anderen Bereichen wie etwa Pharmazie, Chemie, Lebensmittel übertragen?
- Für welche Branchen hat die beschleunigte Materialentwicklung das größte Potential in Österreich (Energie, Mobilität, Bauwirtschaft, Landwirtschaft, Medizintechnik, etc.)?
- Welche rechtlichen Rahmenbedingungen sind zu berücksichtigen (Zulassung, Rechte am geistigen Eigentum, Reproduzierbarkeit, etc.)? Inwieweit sind rechtliche Rahmenbedingungen für einen Einsatz neuartiger Materialien zu adaptieren?
- Welche Anforderungen gibt es an die Infrastruktur (z.B. Hochleistungsrechner)?
- Was sind die dringlichsten Forschungsfragen? Welche Kompetenzen müssen aufgebaut werden, um im internationalen Vergleich wettbewerbsfähig zu sein?

Zur Beantwortung dieser Fragen wurde die Expertise des Materials Center Leoben im Bereich der computergestützten Materialentwicklung durch die Einbindung von Vertreter:innen aus führenden österreichischen Organisationen in den Bereichen AI

(Know-Center Research GmbH), Nachhaltigkeit (Universität für Bodenkultur, Wien) und digitales Recht (Expert:innen-Team der Universität Wien) ergänzt.

Ansatzpunkte für AI-gestützte Entwicklung grüner Materialien

Bei der Erforschung und Entwicklung von grünen Materialien gibt es eine Reihe von Ansatzpunkten, bei denen die Verwendung von AI ins Spiel kommt.

Der erste Ansatzpunkt ist die Beschleunigung der Materialentwicklung selbst: Hier können AI-Methoden zum Beispiel bei der Auswertung und Zusammenführung von Literaturdaten, bei der Beschleunigung von Simulationsschritten, bei der beschleunigten Optimierung von chemischer Zusammensetzung und Prozessbedingungen bekannter Materialien und bei der Entdeckung völlig neuer Materialien helfen.

Der zweite Ansatzpunkt ist die Verbesserung der Nachhaltigkeit der Materialerzeugung: Hier können Werkzeuge der AI helfen, Prozessbedingungen zu analysieren und zu optimieren.

Der dritte Ansatzpunkt liegt bei der Verbesserung der Nachhaltigkeit von Materialien im Einsatz: Hier kommt AI zum Zug, um etwa den Materialverbrauch zu verringern und die Einsatzdauer zu verlängern.

Beim vierten Ansatzpunkt geht es schließlich darum, Materialien nach dem Gebrauch wieder in den Materialkreislauf zurückführen zu können: Hier kann AI helfen, den Einsatz von Sekundärrohstoffen aus Recycling bei gleichbleibender Qualität des hergestellten Materials zu ermöglichen oder die Zusammensetzung des Materials selbst sowie die Materialkombination in Produkten so zu gestalten, dass seine Kreislauffähigkeit verbessert wird.

Abgrenzung zu benachbarten Themen

Der Begriff „Material“ ist sehr weit und es gibt keine allgemein anerkannte, scharfe Definition. Bei der vorliegenden Studie sind folgende Materialien nicht berücksichtigt worden:

- Pharmazeutische Materialien
- Textilien
- Materialien im Sinne von natürlichen Bestandteilen lebender Organismen

Ebenso ist der Begriff der „Artificial Ingelligence“ weit und die Abgrenzung zu benachbarten Bereichen zum Teil diffus. In diesem Sinne wurde die Robotik nur insofern berücksichtigt, als sie ein zentraler Bestandteil von AI-Workflows darstellt (wie z.B. im Rahmen von Laboren, die vollautomatisiert Versuchsreihen durchführen können, den sogenannten „Self-driving labs“). Darüberhinausgehend war es nicht Ziel der Studie, das Potential von Robotik für die Entwicklung grüner Materialien zu ermitteln.

2 Methoden

Für die vorliegende Studie wurden Informationen mit folgenden Methoden gewonnen und ausgewertet:

- Recherche in Literaturdatenbanken und in Projektdatenbanken öffentlich geförderter Projekte
- Materialflussanalyse und Lebenszyklusanalyse zur Identifikation von Materialien und Branchen mit großem Hebel in Bezug auf die Nachhaltigkeit
- Umfrage mittels Online-Fragebogen
- Fokusgruppenworkshop, Fachgespräch und Interviews mit Expert:innen
- Juristische Studie zum rechtlichen Rahmen der Nutzung von AI

Beiträge zur vorliegenden Studie (Institutionen)

Zusätzlich zum Projektteam trugen Mitglieder von insgesamt 22 Institutionen aktiv zur vorliegenden Studie bei, wobei die Beiträge im Rahmen der Online-Umfrage, des Fokusgruppenworkshops, der Interviews bzw. des Fachgesprächs geleistet wurden (Tabelle 1).

Diese Institutionen bilden die Kernkompetenzen im Bereich der Nutzung von künstlicher Intelligenz für nachhaltige Materialentwicklung in Österreich ab und wurden durch entsprechende europäische bzw. internationale Institutionen ergänzt.

Tabelle 1: Beiträge der beteiligten Institutionen zur Studie (W…Workshop, E…Expert:innen-Interview, F…Fachgespräch, P…Partner bei der Erstellung der Studie). Abkürzungen für die „Art der Institution“: Entsch. … politischer Entscheidungsträger, Forsch. … Außeruniversitäre Forschungseinrichtung, Uni. … Universität, Indust. … Industrieunternehmen.

Name der Institution	Art der Institution	Land	Beitrag
Bundesministerium Finanzen (BMF, 2025)	Entsch.	AT	F
Austrian Institute of Technology (AIT, 2025)	Forsch.	AT	E
Austrian Society for Artificial Intelligence (ASAI, 2025)	Forsch.	AT	E
European Materials Modelling Council (EMMC, 2025)	Forsch.	BE	E
Goldbeck Consulting (GC, 2025)	Forsch.	UK	E
KAI Kompetenzzentrum Automobil- und Industrieelektronik GmbH (KAI, 2025)	Forsch.	AT	W
Know-Center Research GmbH (KNOW, 2025)	Forsch.	AT	W, E, P
Materials Center Leoben Forschung GmbH (MCL, 2025)	Forsch.	AT	W, E, P
National Institute of Standards and Technology (NIST, 2025a)	Forsch.	USA	E
Plattform Material Digital (Karlsruher Institut für Technologie, 2022)	Forsch.	DE	E
Polymer Competence Center Leoben (PCCL, 2025)	Forsch.	AT	W
Software Competence Center Hagenberg (SCCH, 2025)	Forsch.	AT	E
Wood K plus – Kompetenzzentrum Holz GmbH (WOOD KPLUS, 2025)	Forsch.	AT	E
Humboldt-Universität zu Berlin (HUB, 2025)	Uni.	DE	E
Joanneum Research – Institut für Klima, Energiesysteme und Gesellschaft (JR-LIFE, 2025)	Uni.	AT	E
Karlsruher Institut für Technologie (KIT, 2025)	Uni.	DE	E
Montanuniversität Leoben (MUL, 2025)	Uni.	AT	W
Paris Lodron Universität Salzburg (PLUS, 2025)	Uni.	AT	W
Technische Universität Clausthal (TU-Clausthal, 2025)	Uni.	DE	E
Technische Universität Wien (TU Wien, 2025)	Uni.	AT	E
Universität Bayreuth (Uni-Bayreuth, 2025)	Uni.	DE	F
Universität für Bodenkultur Wien (BOKU University, 2025)	Uni.	AT	E, P
Universität für Weiterbildung Krems (UWK, 2025)	Uni.	AT	W
AMAG Austria Metall GmbH (AMAG, 2025)	Indust.	AT	W
AVL List GmbH (AVL, 2025)	Indust.	AT	W

Name der Institution	Art der Institution	Land	Beitrag
Mondi Group (Mondi plc, 2025)	Indust.	AT	E
Plansee SE (Plansee SE, 2025)	Indust.	AT	W
RHI Magnesita GmbH (RHI, 2025)	Indust.	AT	W
voestalpine Stahl GmbH (voestalpine, 2025b)	Indust.	AT	W

Literaturrecherche

Literaturdatenbanken - Abfragemethodik

Für den vorliegenden Bericht wurde mittels der anerkannten qualitätsgesicherten wissenschaftlichen Literaturdatenbank Elsevier Scopus (Elsevier B.V., 2025) nach Fachliteratur mit spezifischen Schlüsselwörtern gesucht, und die Trefferzahlen wurden analysiert.

Die Literaturrecherche basierte auf der der Suche nach Begriffen in Titeln, Kurzfassungen und Schlüsselwörtern der Publikationen in der Datenbank. Da die Begriffe „Artificial Intelligence“ und „Machine Learning“ in den Publikationen oft gleichwertig, aber nicht gleichzeitig verwendet werden, wurde eine Kombinationen der beiden Suchbegriffe verwendet.

Tabelle 2 zeigt die verwendeten Suchbegriffe in einer Kaskade, in welcher die Verknüpfung der Suchbegriffe mit der Booleschen Operation „AND“ zu einer schrittweisen Eingrenzung der Treffer führt. Die weiteren Sucheinschränkungen auf Nachhaltigkeit (sustainable), Publikationen der letzten fünf Jahre (2019-2024) in englischer Sprache, Beschränkung auf naturwissenschaftliche/technische Disziplinen und Eingrenzung des Publikationstyps auf Artikel bzw. Review-Artikel führen zu weiterer Reduktion der Trefferzahlen.

Tabelle 2: Beispiel einer Suchkaskade. Verwendetes Literatur-Suche-Tool: https://www.scopus.com. Suchdatum: 19.02.2025.

Suchbegriff	Sucheingabe	Treffer
"machine learning" oder "artificial intelligence"	"machine learning" OR "artificial intelligence"	5.594.107
dazu "material development" oder "material design" oder "material engineerng"	((material w/3 development) OR (material w/3 design) OR (material w/3 engineering)) AND ("machine learning" OR "artificial intelligence")	203 866
dazu "sustainable"	((material w/3 development) OR (material w/3 design) OR (material w/3 engineering)) AND ("machine learning" OR "artificial intelligence") AND sustainable	59.699
2019 bis 2024	… AND PUBYEAR > 2018 AND PUBYEAR < 2025	53.261
Weitere Einschränkungen (Material, Methode, …)	…. AND ….	-

Länderspezifische Auswertung der Literatur

Die Anzahl der Autor:innen in der Projektdatenbank Scopus gibt einen Abschätzung des wissenschaftlichen Aktivität in den unterschiedlichen Ländern und dem Kerngebiet der Studie.

Um einen Einblick zu erhalten, aus welchen Ländern die Autor:innen der relevanten Publikationen stammen, wurde die Suchkaskade wie oben beschrieben weiter ausgewertet. Hierzu wurden die 53.261 Literaturstellen der letzten 5 Jahre nach den Herkunftsländern der Autor:innen der entsprechenden Artikel analysiert.

Hierbei ist zu beachten, dass bei wissenschaftlichen Artikeln üblicherweise mehrere Autor:innen beteiligt sind, daher ist Summe der Autor:innen größer als die Summe der Artikel.

Abbildung 1a zeigt, dass in den vergangenen fünf Jahren China die meisten Autor:innen für wissenschaftliche Artikel zur Verbindung von AI-Methoden mit grüner Materialentwicklung lieferte, gefolgt von Europa, Indien und den USA. Innerhalb der Europäischen Union (Abbildung 1b) führt Italien knapp vor Deutschland. In diesem Zusammenhang sind jedoch folgende Punkte zu beachten:

- Große Länder schneiden in dieser Betrachtung aufgrund ihrer höheren Zahl an Forscher:innen am besten ab, was das eigentliche Bild verzerrt.
- Weiters hängt der tatsächliche Etablierungsgrad von AI-basierter Materialentwicklung auch von der Gesamtheit der Materialforschung in einem Land ab.
- Um eine bessere Einordnung der Positionierung von Österreich in diesem Zusammenhang zu erzielen, wurde daher die Trefferzahl für (i) Materialentwicklung allein (Suchbegriffe materials AND (development OR engineering OR design)) mit (ii) jener in Zusammenhang mit AI (zusätzlich Suchbegriffe machine learning OR artificial intelligence) ermittelt. Dabei wurden Trefferzahlen nach der Einwohner:innenzahl des jeweiligen Landes gewichtetet, woraus sich die Platzierung ergab.
- Bei Materialentwicklung liegt Österreich mit Rang 6 im Vorderfeld des EU-weiten Vergleichs. Im Zusammenhang mit AI liegt Österreich mit dem 11. Platz weiter zurück und es zeigt sich dabei für die österreichische Forschungslandschaft ein heterogenes Entwicklungsbild. Österreich ist in einer sehr guten Ausgangsposition, um bei der grünen Materialentwicklung international vorne mit dabei zu sein, das Themenfeld braucht jedoch unterstützende Maßnahmen für eine schnellere und breitere Entwicklung.

Abbildung 1a: Grafische Darstellung der Herkunftsländer der Autor:innen der Artikel aus der Suchkaskade: Top 5 der Trefferzahlen weltweit mit Europa als Überbegriff für die Länder der Europäischen Union.

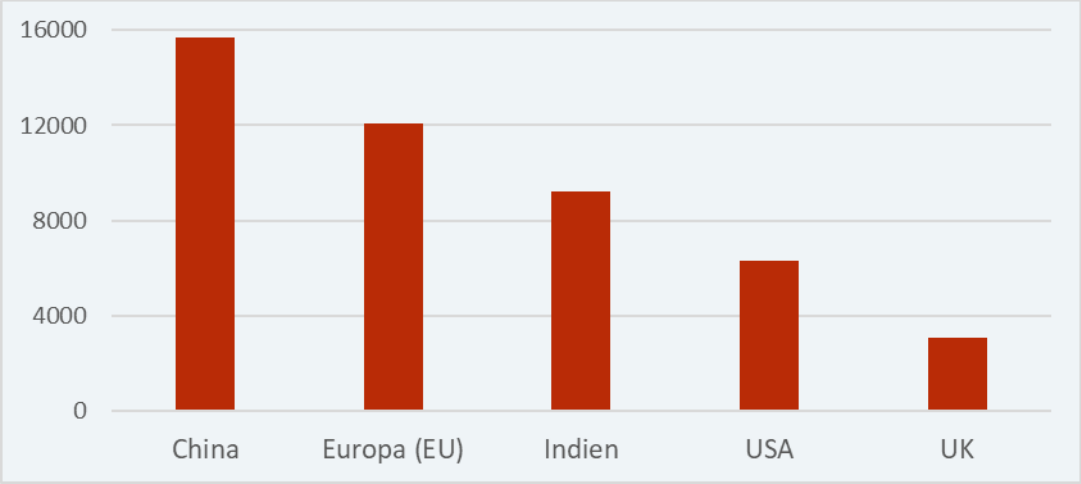
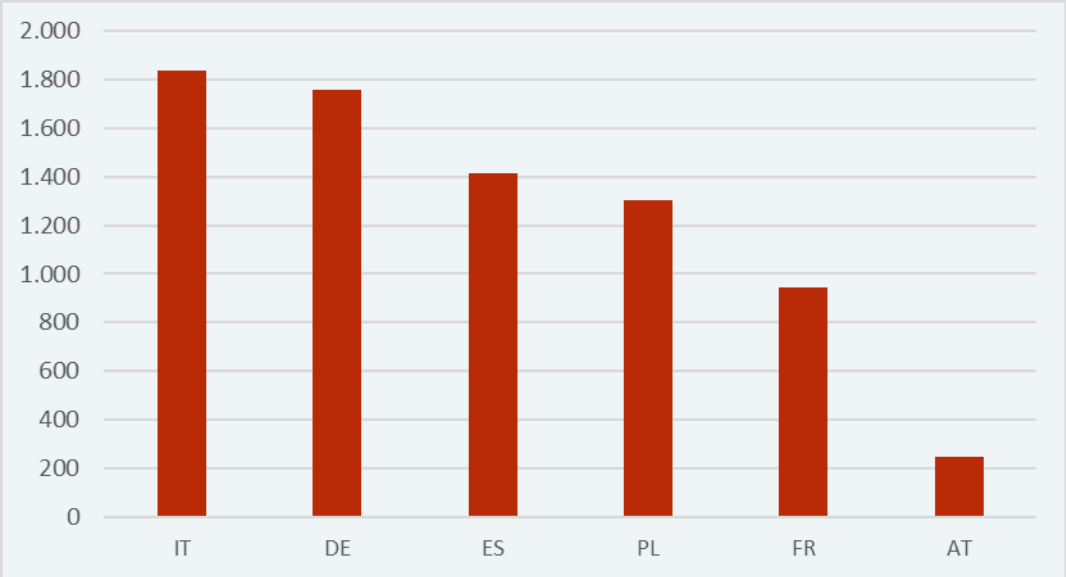


Abbildung 1b: Grafische Darstellung der Herkunftsländer der Autor:innen der Artikel aus der Suchkaskade: Top 5 der Länder innerhalb der Europäischen Union.

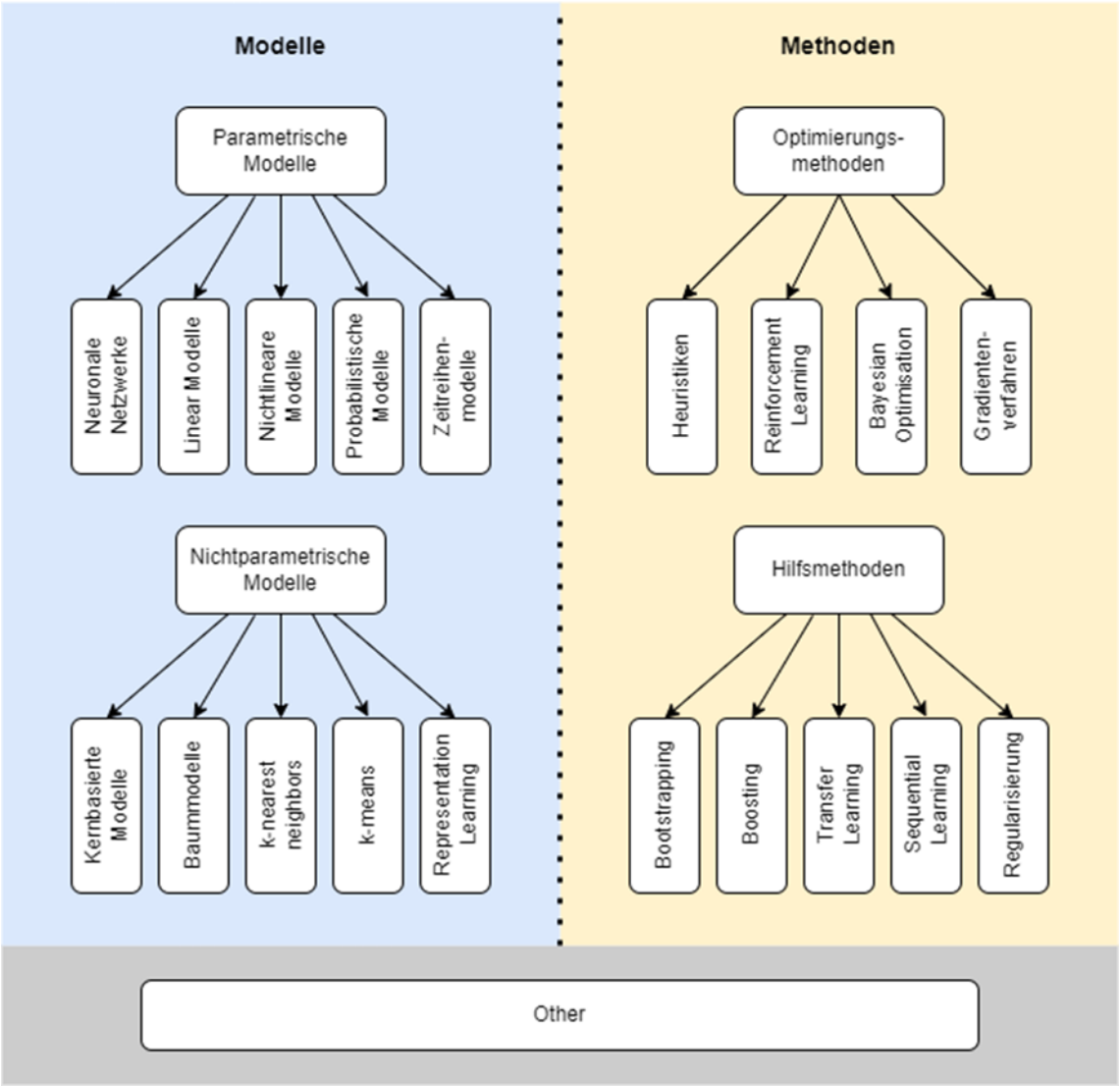


Kategorisierung von AI-Methoden

Existierende Kategorisierungen unterteilen AI-Methoden z.B. hinsichtlich Datenmodalität (Bilddaten, (Sensor-)Zeitreihendaten, tabulare Daten, Graphdaten, etc.), Lernverfahren (supervised, unsupervised, semi-supervised, etc.), bzw. hinsichtlich der prinzipiellen

Unterscheidung zwischen neuronalen und klassischen Methoden. Entgegen diesen existierenden Kategorisierungen wurde in dieser Arbeit versucht, die Kategorisierung möglichst spezifisch an die in der Recherche gefundenen Begriffe anzupassen (siehe Abbildung 2).

Abbildung 2: Kategorisierung der in der Recherche gefundenen Begriffe.



Die im Zuge der Literaturrecherche identifizierten Begriffe können größtenteils in die beiden zentralen Klassen Modell (also einer mathematischen Beschreibung eines Ausschnitts der beobachtbaren Welt) und Methode (Vorgehensweise zur Festlegung der Modellstruktur und Ermittlung der konkreten Parameterwerte) unterteilt werden (wissend, dass im Bereich der AI die begriffliche Trennung zwischen Modell und Methode oft unscharf ist, d.h. ein Begriff für Modell und Methode benutzt wird). Innerhalb der

Klasse der Modelle wurden ferner die Kategorien der parametrischen und der nichtparametrischen Modelle unterschieden. Bei der Suche wurden insgesamt knapp 80 verschiedene AI Methoden und Modelle identifiziert, die bereits in der Materialentwicklung zum Einsatz kommen. Für jede von ihnen wurde nochmals ermittelt, wie oft sie im Zusammenhang mit Material Development, Material Design oder Material Engineering eingesetzt wurde, was zu insgesamt 589.344 Treffern führte.

Parametrische Modelle sind solche, in denen der zu modellierende Zusammenhang durch parametrisierte Funktionen oder Verteilungen dargestellt wird, wobei die Aufgabe des Lernens genau die Bestimmung dieser Parameter ist. Zu den parametrischen Modellen gehören neben den bekannten linearen Modellen auch die große Gruppe der neuronalen Netzwerke und gewisse Zeitreihenmodelle wie Markov-Ketten. Bei nichtparametrischen Modellen wird zwar eine prinzipielle Modellstruktur vorgegeben, aber diese kann abhängig von den Daten wachsen, d.h. die finale Modellstruktur ist datenabhängig. Beispiele dieser Kategorie sind Baummodelle und Kernelmodelle (Support Vector Machine, Gaußprozesse).

Innerhalb der Klasse der Methoden fanden sich Begriffe, die als Optimierungsmethoden kategorisiert werden konnten (wie z.B. Bayesian Optimisation und genetische Algorithmen) und solche, die als Hilfsmethoden kategorisiert werden konnten (wie z.B. Boosting, Bagging oder Transfer Learning). Während also die erste Kategorie Methoden liefert, ein Optimierungsproblem (z.B. die Parameterfindung für parametrische Modelle) zu lösen, liefert die zweite Kategorie Methoden, mit denen die Modellgenauigkeit verbessert werden kann (z.B. Transfer Learning, um ein Modell an neue Gegebenheiten anzupassen).

Eine letzte Kategorie mit dem Titel Other fasst zur Vollständigkeit Begriffe zusammen, die den anderen Kategorien nicht zugeordnet werden konnten. Dazu gehört neben den Aufgaben Natural Language Processing und Optimal Design auch das Konzept der Wissensgraphen sowie die Überbegriffe Machine Learning und Supervised Machine Learning.

Wie immer in solchen Kategorisierungen ist die Zuordnung eines Begriffs nicht immer eindeutig. So liefert Ridge Regression ein lineares Modell, welches allerdings auf Bayes‘sche Weise regularisiert ist. Der Begriff Ridge Regression impliziert hier also die Kombination eines linearen Models (welches in die Klasse der parametrischen Modelle fällt) mit Bayes‘scher Regularisierung (welche den Hilfsmethoden zugeordnet werden

kann). Ähnlich verhält es sich mit der nichtparametrischen Methode Random Forest, die eine Kombination aus Baummodellen und Ensemble(-hilfs-)methoden sind. In dieser Hinsicht muss die Zuordnung subjektiv bleiben und kann keinen Anspruch auf Allgemeingültigkeit erheben. Für die in dieser Arbeit vorgenommenen Analysen darf sie jedoch als adäquat angesehen werden.

Screening der Literatur hinsichtlich verwendeter Methoden der künstlichen Intelligenz

Um den Impact der AI-Methoden aus dem Abschnitt„Kategorisierung von AI-Methoden“ in der Literatur darzustellen, wurde in Scopus nach Literaturstellen zu Material Development, Material Design oder Material Engineering (mit den Suchbegriffen aus Tabelle 2) in Zusammenhang mit einer spezifischen Methode gesucht und die Treffer aufgelistet.

Abbildung 3 stellt die entsprechenden Treffer für die spezifischen Methoden in einem Balkendiagramm dar. Es zeigt sich, dass neuronale Netzwerke bei weitem am häufigsten in Zusammenhang mit Materialentwicklung in der Literatur genannt werden. Abbildung 4 basiert auf denselben Abfragen, wobei die Methoden zu den in Abschnitt „Kategorisierung von AI-Methoden“ eingeführten Kategorien zusammengefasst wurden. Die Darstellung zeigt, dass gemessen an der Anzahl an Literaturstellen in Scopus parametrische Modelle (zu denen u.a. neuronale Netzwerke zählen) die häufigste AI-Methode in Zusammenhang mit Materialentwicklung darstellen.

Abbildung 3: Literaturstellen zu Materialentwicklung (wie in Tabelle 2) in Zusammenhang mit spezifischen AI-Modelle bzw. Methoden (siehe Abbildung 2).

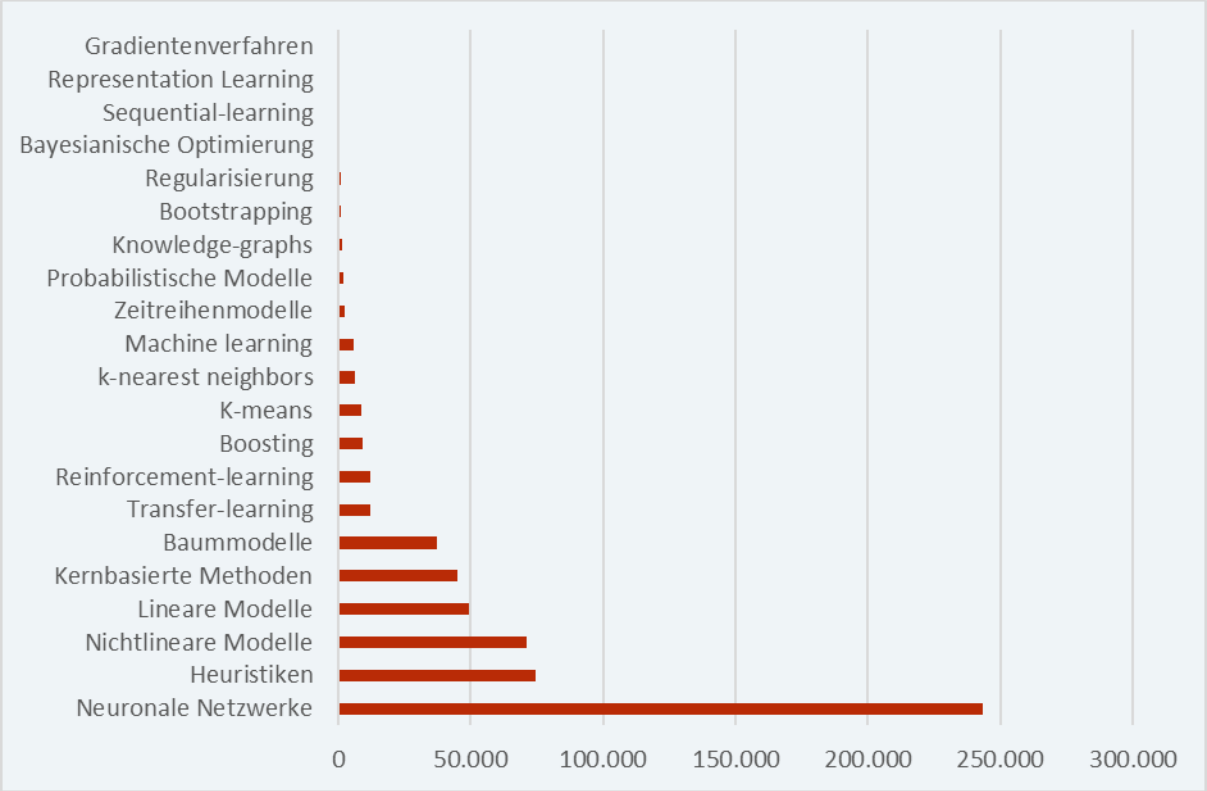
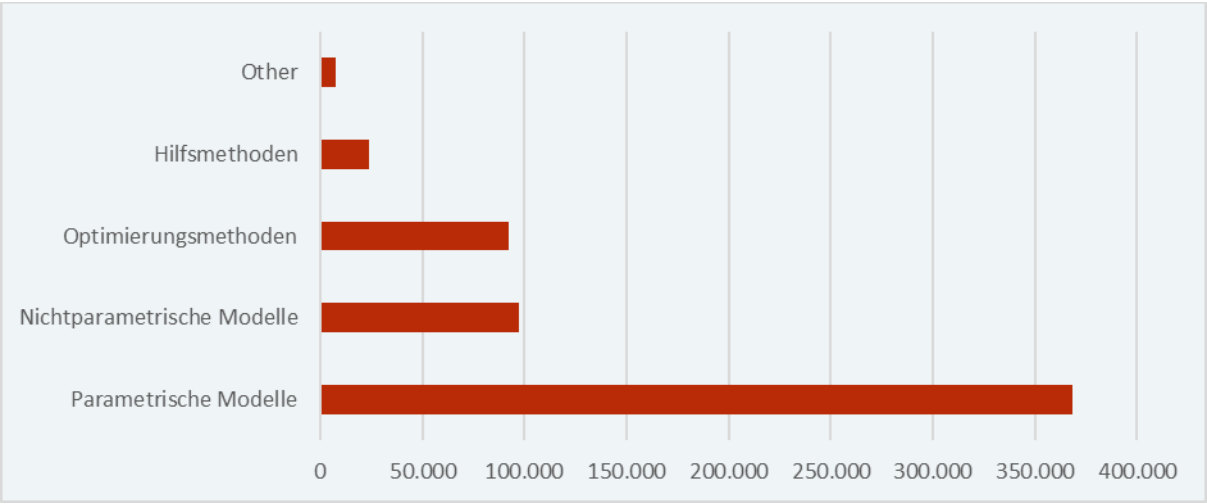


Abbildung 4: Literaturstellen zu Materialentwicklung in Zusammenhang mit einer spezifischen AI Methode, wobei die Methoden aus Abbildung 2 in die im Abschnitt „Kategorisierung von AI-Methoden“ eingeführten Kategorien unterteilt wurden.



Roadmaps, Strategien, Initiativen

Für die Identifizierung der wichtigsten Roadmaps, Strategien, Initiativen und Förderprogramme wurden folgende Methoden verwendet:

- Suche in behördlichen Dokumenten und Projektausschreibungen auf österreichischer und EU-Ebene.
- Nennungen bei Interviews im Rahmen der Studie, bei Fachtagungen ((CIMTEC, 2024), (Deutsche Gesellschaft für Materialkunde e.V, 2024), (FAIRmat, 2024)) und bei Fachgruppenmeetings im Bereich Materialien, AI und Kreislaufwirtschaft wie z.B. Meetings und Mitgliederversammlungen der Innovative Advanced Materials Initiative (IAMI, 2025) und des European Materials Modelling Council (EMMC, 2025)
- Suche per Internet-Suchmaschine nach den Begriffen Artifical intelligence materials sustainable zusammen mit einem der Begriffe „roadmap“, „strategy“ bzw. „initiative“.

Tabelle 3 fasst die wichtigsten Dokumente zusammen, die sich direkt mit dem Einsatz von AI für die Entwicklung grüner Materialien beschäftigen. Es zeigt sich, dass AI seit mehreren Jahren ein starkes Thema bei Roadmaps, Strategiepapieren, Förderprogrammen und Initiativen ist. Insbesondere ist bei der beschleunigten Entwicklung von Materialien zum Erreichen von Nachhaltigkeitszielen der Einsatz von AI ein großes Thema. Ein Beispiel ist die Materials 2030 Roadmap der europäischen Advanced Materials Initiative (AMi2030, 2025), die hervorhebt, dass digitale Technologien unter Einbindung von Datenmanagement, AI, Simulation und experimenteller Charakterisierung gerade die Materialforschung und -entwicklung revolutionieren und AI bei der Entwicklung neuer Materialien eine zentrale Rolle spielt. Ein weiteres Beispiel ist das Mission Innovation 2018 Goal #2 (Mission Innovation, 2018): Mission Innovation ist eine globale Initiative von 22 Ländern (darunter USA, UK und Japan) und der EU mit dem Ziel, die Innovation für saubere Energien zu beschleunigen. Dafür hat sie eine Reihe von Zielen definiert, wobei das zweite Ziel die Schaffung von Materialbeschleunigungsplattformen (Materials Acceleration Platforms, MAP) darstellt, die durch Integration von AI den Entwicklungsprozess stark beschleunigen sollen.

Tabelle 3: Dokumente mit direktem Bezug zur AI basierten Entwicklung grüner Materialien, alphabetisch sortiert nach Ländern.

Bezeichnung	Datum	Land/ Region
Förderprogramm “Material Digital” (Karlsruher Institut für Technologie, 2022)	Feb 22	DE
EC Communication “Advanced Materials for Industrial Leadership” (European Commission, 2024a)	Feb 24	EU
BATTERY 2030+ Manifesto (EU Initiative Battery2030, 2019)	Jan 19	EU
BATTERY 2030+ Roadmap (EU Initiative Battery2030, 2022)	Feb 22	EU
Horizon Europe, Work Programme 2025 "7. Digital, Industry and Space" (Horizon Europe, 2024)	Dez 24	EU
Materials 2030 Manifesto (Advanced Materials Initiative AMi2030, 2022)	Feb 22	EU
Strategic Research and Innovation Agenda “Clean Steel Partnership” (ESTEP, 2021)	Okt 21	EU
Materials 2030 Roadmap (AMi2030, 2025)	Dez 22	EU
Förderprogramm “DIADEM”	Jul 22	FR
Mission Innovation 2018 Goal #2: Artificial Intelligence for Materials (Mission Innovation, 2018)	Jan 18	International
MaRDA communication “The 2024 Materials Genome Initiative (MGI) Challenges” (Materials Genome Initiative, 2024)	Jul 24	USA
Materials Genome Initiative Strategic Plan (NIST Materials Genome Initiative, 2021)	Nov 21	USA

Tabelle 4 listet die wichtigsten Dokumente, bei denen AI-basierte Entwicklung grüner Materialien zwar nicht das Hauptthema ist, aber trotzdem eine wichtige Rolle einnimmt. Es zeigt sich, dass die AI-basierte Materialentwicklung für sehr viele Materialklassen eine bedeutende Rolle spielt, angefangen von Batterie-Materialien über Stähle bis hin zu Halbleitermaterialien.

Tabelle 4: Dokumente mit indirektem Bezug zur AI-basierten Entwicklung grüner Materialien, alphabetisch sortiert nach Ländern.

Bezeichnung	Datum	Land/ Region
2030 Digital Compass: The European Way for the Digital Decade (European Commission, 2021)	Mrz 21	EU
Strategic Research and Innovation Agenda "Electronic Components and Systems" (ECSSRIA, 2022)	Nov 22	EU
Study "KET (Key Enabling Technologies) for Europe's technological sovereignty" (European Parliament, 2021)	Dez 21	EU
Processes4Planet - Strategic Research and Innovation Agenda (Processes4Planet co-programmed Partnership, 2022)	Jun 22	EU
JRC SCIENCE FOR POLICY REPORT "Towards a Green and Digital Future - Key requirements for successful twin transitions in the European Union" (European Commission, 2022c)	Jan 22	EU
A 20-Year Community Roadmap for Artificial Intelligence Research in the US (Computing Research Association CRA, 2019)	Aug 19	USA
Decadal Plan for Semiconductors (Semiconductor Research Corporation SRC, 2021)	Jan 21	USA
Industrial Decarbonization Roadmap (US Department of Energy, 2022)	Sep 22	USA
Vision 2040: A Roadmap for Integrated, Multiscale Modeling and Simulation of Materials and Systems (NASA, 2021)	Mrz 18	USA

Bewertung des Umwelteinflusses von Materialien

Zur Identifizierung der vielversprechendsten Materialien, deren Entwicklung durch AI unterstützt werden soll, wurde an der Universität für Bodenkultur (BOKU University, 2025) eine Studie zum Umwelteinfluss verschiedener Materialien in Österreich durchgeführt. Zu diesem Zweck wurde einerseits eine Materialflussanalyse durchgeführt, um zu bestimmen, welche Materialklassen aufgrund ihres Einsatzes in Österreich am bedeutendsten sind. Andererseits wurde mithilfe einer Lebenszyklusanalyse der CO_2-Fußabdruck der verschiedenen Materialien bestimmt. Zusätzlich wurde noch berücksichtigt, welche Materialien kritische Rohstoffe beinhalten.

Die gesamte Studie zur Nachhaltigkeit von Materialien inklusive aller Referenzen ist im Anhang „Materialflussanalyse und Lebenszyklusanalyse" beigelegt. In diesem Abschnitt werden die Erkenntnisse dieser Studie stark gekürzt zusammengefasst.

Der Lebensstil der industrialisierten Welt ist nicht nachhaltig und überschreitet die planetaren Grenzen. Umweltkrisen wie die Klimakrise und der Verlust der Biodiversität sind direkte Folgen des Ressourcenverbrauchs und erfordern dringende Gegenmaßnahmen. Studien zeigen jedoch derzeit kaum Beispiele für eine absolute Reduktion, da Umweltauswirkungen eng mit wirtschaftlichen Aktivitäten und Konsum verknüpft sind.

Eine **systemische Betrachtung entlang von Produktionsketten und Produktlebenszyklen** ist notwendig, um Substitutionsprozesse und Problemverlagerungen zu vermeiden. Umweltbelastungen entstehen sowohl durch die Menge als auch die Art der genutzten Materialien. Eine **Kombination aus Materialflussrechnung und Lebenszyklusanalyse** ermöglicht es, Umweltauswirkungen besser zu bewerten und Reduktionspotenziale zu identifizieren.

Kritische Rohstoffe spielen eine strategische Rolle, insbesondere in Zukunftstechnologien. Ihre Verfügbarkeit ist jedoch durch geopolitische Krisen und Handelsabhängigkeiten gefährdet. Die EU hat deshalb eine Liste kritischer Rohstoffe erstellt und mit dem Critical Raw Materials Act Maßnahmen zur Sicherung der Versorgung beschlossen. Diese umfassen unter anderem **effizienteren Rohstoffeinsatz, höhere Recyclingraten und die Diversifikation von Lieferketten.**

Die **Kreislaufwirtschaft** bietet Ansätze, Ressourcen nachhaltiger zu nutzen. Neben Recycling gewinnen Strategien zur Reduktion des Primärmaterialeinsatzes sowie zur Verlängerung der Produktlebensdauer an Bedeutung. Diese umfassen etwa die Reparatur und Wiederaufbereitung von Produkten. Langfristig haben Strategien zur Vermeidung und Verlangsamung des Ressourcenverbrauchs das größte Potenzial zur Ressourcenschonung und sollten prioritär verfolgt werden.

Fazit:

- Komplexe Zusammenhänge brauchen eine systemische Betrachtung, aber gleichzeitig eine Detailanalyse entlang von Produktlebenszyklen.
- Umweltprobleme entstehen durch Quantität und Qualität der Materialien, die in und durch die gesellschaftliche Verwendung fließen.
- Besonderes Augenmerk ist auf kritische Rohstoffe von strategischer Bedeutung und hohem Versorgungsrisiko zu legen.

- Kreislaufführung soll Materialien länger in Verwendung halten und so primäre Ressourcen schonen und Abfälle verringern.

Materialflussrechnung und -analyse (MFA)

Die Materialflussrechnung und -analyse (MFA) dient der **Analyse und Überwachung von Materialflüssen in und durch Produktions- und Konsumsysteme**. Sie betrachtet sozioökonomische Systeme, oft Nationalstaaten, und erfasst Materialflüsse, die zwei Systemgrenzen überschreiten:

- **Inputseite:** Materialien aus der Natur sowie Importe.
- **Outputseite:** Abfälle, Emissionen und Exporte.

Diese Materialflüsse werden in metrischen Tonnen pro Jahr erfasst und in vier Hauptgruppen (Biomasse, fossile Energieträger, Erze und nicht-metallische Mineralstoffe) unterteilt. Die Stärke der MFA liegt in der Bilanzierung, da alle Inputs den Outputs entsprechen müssen.

Zwei Hauptindikatoren sind etabliert:

- **Inlandsmaterialverbrauch (DMC):** Gesamter Materialverbrauch innerhalb eines Landes.
- **Materialfußabdruck (MF):** Rohmaterialbedarf des Endkonsums, unabhängig vom Entnahmeort.

MFA-Daten sind in der EU seit 2011 Teil der verpflichtenden Berichterstattung und dienen als Leitindikatoren für nachhaltige Ressourcennutzung, etwa in **den UN-Nachhaltigkeitszielen** (SDG 8 und 12) und der österreichischen Kreislaufwirtschaftsstrategie.

In den letzten Jahren hat sich der Fokus von Materialinputs auf materielle Outputs und Bestandsveränderungen erweitert. Dies ermöglicht eine umfassendere Analyse der Kreislaufwirtschaft und unterstützt politische Programme zur Förderung nachhaltiger Ressourcenstrategien.

Lebenszyklusanalyse (LCA) / Ökobilanz

Die Lebenszyklusanalyse (Life Cycle Assessment, LCA) oder Ökobilanz **bewertet die Umweltwirkungen von Unternehmen, Produkten oder Dienstleistungen über deren gesamten Lebenszyklus hinweg.** Dazu gehören Entscheidungen zu geographischem und zeitlichem Rahmen, Wirkungskategorien und methodischen Aspekten, die das Ergebnis beeinflussen. Diese Flexibilität ermöglicht Anpassungen, erschwert jedoch die Vergleichbarkeit.

Um Einheitlichkeit und Qualität zu verbessern, hat die EU die Environmental Footprint (EF) Methode eingeführt, bestehend aus dem **Product Environmental Footprint (PEF)** und **Organisation Environmental Footprint (OEF).** Diese Methode baut auf internationalen Standards (z. B. ISO 14040) auf und hilft, Umweltauswirkungen über die gesamte Wertschöpfungskette hinweg zu reduzieren.

Eine LCA-Studie umfasst vier Phasen:

- **Festlegung von Ziel und Untersuchungsrahmen:** Definition des Analyseumfangs.
- **Sachbilanz:** Sammlung aller relevanten Daten.
- **Wirkungsabschätzung:** Bewertung der Umweltbelastungen.
- **Auswertung:** Interpretation der Ergebnisse.

Empfohlene Wirkungskategorien umfassen unter anderem Klimawandel, Ozonabbau, Ressourcenverbrauch und Landnutzung. Diese Kategorien und die entsprechenden Charakterisierungsmodelle variieren regional und werden kontinuierlich aktualisiert.

Die PEF- und OEF-Methodik soll sicherstellen, dass Umweltauswirkungen transparent und vergleichbar bewertet werden, um die Nachhaltigkeit in Produktion und Konsum zu verbessern.

Fragebögen

Um Informationen zum Status Quo der AI in Österreich und Europa zu sammeln, wurde eine Umfrage mithilfe eines Online-Fragebogens durchgeführt.

Methodik der Umfrage

Die Umfrage wurde über EUSurvey, das Online-Umfragemanagementtool der Europäischen Kommission, erstellt und verteilt (European Commission, 2024e). Der Zeitraum der Datenerhebung: war August bis Dezember 2024. Insgesamt haben 62 Teilnehmer:innen die Umfrage ausgefüllt.

Folgende Zielgruppen waren in der Umfrage vertreten:

- Organisationen mit einem Branchenfokus auf Energie, Mobilität, Bauwesen, Elektronik, Medizintechnik, Informations- und Kommunikationstechnologie.
- Akademische Einrichtungen und Forschungseinrichtungen in den Bereichen Materialforschung und -technik, AI und Nachhaltigkeit.
- Anbieter:innen von AI-Technologie bzw. Schlüsselakteure im Bereich AI.
- Interessenvertreter:innen in nichtstaatlichen Umweltorganisationen (NGOs) und zivilgesellschaftlichen Organisationen.

Die Befragten arbeiten in außeruniversitären Forschungseinrichtungen (55%), Universitäten (28%) oder Industrieunternehmen (17%). Die Branchenzugehörigkeit (Mehrfachnennung möglich) war bei 48% der Befragten Elektronik, 47% Energie, 39% Mobilität und 23% Bauwesen.

Inhalt / Fragenkatalog

Die Umfrage umfasste 32 Fragen in englischer Sprache, darunter Freitext-, Single- und Multiple-Choice-, Ranglisten- und Zahlenschieberfragen. Die vollständigen Fragen und Antworten sind in Anhang „Umfrageergebnis“ zu finden.

Expert:innen-Interviews

Auswahlkriterien für Teinehmer:innen

Es wurden halbstrukturierte Interviews (die eine offene Diskussion ermöglichten) mit ausgewiesenen Interessensvertreter:innen und Expert:innen durchgeführt, um Einblicke in den aktuellen Status und das Potenzial von AI-Methoden für beschleunigtes Design nachhaltiger Materialien zu gewinnen. Die Auswahl der Interviewpartner:innen erfolgte nach folgenden Kriterien:

- Berücksichtigung verschiedener Branchen und Materialklassen (metallische Materialien, Energiematerialien, Biomaterialien, Materialien für die Mikroelektronik, etc.).
- Abdeckung verschiedener Stufen bei der Materialentwicklung (Design, Charakterisierung, Simulation).
- Einbindung von Expertise aus Materialforschung, AI und Nachhaltigkeit.
- Langjährige Erfahrung in der Forschung, Entwicklung und bei strategischen Aspekten der Interviewten in ihrem Fachgebiet.
- Internationale Abdeckung: Einbeziehung von Schlüsselexpert:innen aus Österreich, Europa und den USA.

Insgesamt wurden die folgenden 15 Personen interviewt (siehe Tabelle 5).

Tabelle 5: Namen und Positionen der interviewten Expert:innen

Name	Organisation	Position
Dr. Martin Riegler	Wood K plus, Österreich	Teamleiter, Bereich Holzwerkstofftechnologien
Prof.in Claudia Draxl	Humboldt-Universität zu Berlin (HUB) und FAIR-DI, Deutschland	Leiterin der Gruppe für Festkörpertheorie an der HUB, Leiterin des FAIRmat-Projektes und Vorsitzende der FAIR-DI Initiative
Priv.-Doz. Dr. Bernhard Moser	Software Competence Center Hagenberg (SCCH) und Austrian Society for Artificial Intelligence (ASAI), Österreich	Forschungsdirektor am SCCH und Präsident der ASI
Dr.in Elisabeth Schwarz-Funder	Institut für Klima, Energiesysteme und Gesellschaft - Joanneum Research (LIFE-JR), Österreich	Expertin für Ökobilanzierung neuartiger Materialien und Prozesse in der Elektronikindustrie und für „safe and sustainable by design“
DI Ladislaus Lang-Hogrefe	Institut für Klima, Energiesysteme und Gesellschaft - Joanneum Research (LIFE-JR), Österreich	Mitarbeiter der Forschungsgruppe Klimaneutrale Energiesysteme und Lebensstile
Dr. James Warren	National Institute of Standards and Technology (NIST), USA	Direktor des Materials Genome Program am NIST
Prof. Paul Mayrhofer	Technische Universität Wien (TU Wien), Österreich	Leiter des Forschungsbereichs Werkstoff-wissenschaft der TU-Wien und Kurato-riumsmitlglied des FWF für den Bereich Materialwissenschaften.

Name	Organisation	Position
Prof. Wolfgang Wenzel	Karlsruher Institut für Technologie (KIT) und Plattform Material Digital (PMD), Deutschland	Leiter der Gruppe „Multiskalige Material-modellierung und virtuelles Design“ am KIT und stellvertretender Sprecher der PMD
Dr. Gerhard Goldbeck	Goldbeck Consulting (GC), UK, und European Materials Modeling Council (EMMC), Belgien	Geschäftsführer von GC und Executive Secretary des EMMC
Dr. Stephan Strommer	Austrian Insitute of Technology (AIT), Österreich	Leitender Forschungsingenieur
Prof. Uwe Wolfram	Technische Universität Clausthal (TUC), Deutschland	Professur für Digitalisierung in der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik
Dr. Oleg Peil	Materials Center Leoben Forschung GmbH (MCL)	Leitender Wissenschaftler für Computergestütztes Materialdesign
Dr. Roland Brunner	Materials Center Leoben Forschung GmbH (MCL), Österreich	Gruppenleiter Werkstoff- und Schadensanalytik in der Mikroelektronik
Dr.in Nicole Unger	Mondi Group, Österreich	Expertin für Ökobilanzen
Prof. Benjamin Kromoser	Universität für Bodenkultur Wien, Österreich	Leiter des Instituts für Hochbau, Holzbau und kreislaufgerechtes Bauen (IHB)

Um die Interviews konsistent durchführen und auswerten zu können, war die Sprache Englisch. Die Interviews wurden nach Einholung der Zustimmung der Interviewpartner in Übereinstimmung mit der europäischen Datenschutz-Grundverordnung (GDPR) im Rahmen von Online-Meetings in Microsoft Teams durchgeführt und mit der Software „OBS Studio“ aufgezeichnet.

Inhalt / Fragenkatalog

Der Interviewrahmen bestand aus acht Abschnitten, die darauf abzielten, Informationen zu den folgenden Themen zu sammeln:

- Hintergrund der Interviewpartner
- Bewusstsein und Verständnis von AI
- Aktueller Einsatz von AI in der Materialentwicklung
- Wichtige Forschungsbereiche, vielversprechende Materialien, Datenverfügbarkeit, wichtige Akteure
- Herausforderungen und Hindernisse
- Ethische und rechtliche Überlegungen

- Vorteile und Chancen
- Zukunftsaussichten und Empfehlungen

Auswertung der Interviews

Die Interviews wurden mit dem Tool aTrain (University of Graz Business Analytics and Data Science-Center, 2024) transkribiert. aTrain transkribiert Sprachaufzeichnungen mithilfe fortschrittlicher Modelle des maschinellen Lernens automatisch, ohne Daten ins Internet hochzuladen, wodurch der Datenschutz gewährleistet wird.

Jede Transkription wurde gründlich analysiert und mit den Aufzeichnungen manuell abgeglichen, um relevante Informationen für diese Studie zu extrahieren. Das AI-Tool Perplexity (Srinivas, 2024) half bei der Analyse der Transkriptionen. Bei Perplexity handelt es sich um eine Such- und Antwortmaschine, die ein großes Sprachmodell (Large Language Model, LLM) verwendet, um Fragen zu beantworten und Informationen basierend auf dem bereitgestellten Text zu finden.

Fokusgruppenworkshop und Fachgespräch

Auswahlkriterien für Teilnehmer:innen

Im Rahmen der Studie wurden zwei Veranstaltungen mit ausgewählten Fach-Expert:innen abgehalten: ein Fokusgruppenworkshop mit Expert:innen aus dem Bereich Materialentwicklung und AI sowie ein Fachgespräch mit Schlüsselpersonen aus dem Bereich Nachhaltigkeit.

Auswahlkriterien für die Teilnahme an beiden Veranstaltungen waren langjährige Erfahrung und ausgewiesene Expertise im Fachgebiet sowie ein guter strategischer Überblick im Bereich der Materialentwicklung. Für den Fokusgruppenworkshop waren außerdem folgende Kriterien entscheidend:

- Berücksichtigung verschiedener Organisationstypen (Universitäten, Forschungsinstitute und Industrie).
- Abdeckung wichtiger Materialklassen und materialbasierter Branchen in Österreich.
- Berücksichtigung verschiedener Materialentwicklungsstufen (Forschung, Entwicklung, Herstellung, Verarbeitung, Verwendung im Produkt).

Um eine konstruktive Arbeit und gemeinsame Diskussion aller Teilnehmer:innen zu gewährleisten, wurde der Workshop in Präsenz abgehalten. Die folgenden Expert:innen waren daran beteiligt (Tabelle 6):

Tabelle 6: Namen und Positionen der Teilnehmer:innen des Fokusgruppenworkshops

Name	Organisation	Position
Prof. Helmut Antrekowitsch	Montanuniversität Leoben	Leiter des Lehrstuhls für Nichteisenmetallurgie und Forschungsrektor
Dr. Márton Bredács	Polymer Competence Center Leoben	Staff Scienist des Bereichs Circularity of Polymers and Pipes
Prof.in Nicola Hüsing	Paris Lodron Universität Salzburg	Professorin für Materialchemie und wirkliches Mitglied der Österreichischen Akademie der Wissenschaften und der European Academy of Sciences
Dr. Michael Nelhiebel	KAI Kompetenzzentrum Automobil- und Industrieelektronik GmbH	Leitender Ingenieur
Dr.in Simone Neuhold	RHI Magnesita GmbH	Wissenschaftliche Mitarbeiterin in der Abteilung Pioneer Research
Dr. Arno Plankensteiner	Plansee SE	Forschungsleiter
Prof. Lorenz Romaner	Montanuniversität Leoben	Professor für Computational Materials Science
Prof. Thomas Schrefl	Universität für Weiterbildung Krems	Leiter des Zentrums für Modellierung und Simulation.
Dr.in Manuela Schreyer	AMAG Austria Metall GmbH	Data Analyst
Dr. Markus Sonnleitner	voestalpine Stahl GmbH	Leitender Mitarbeiter aus dem Bereich F&E
Dr. Kambiz Mehrabi	AVL List GmbH	Leitender Ingenieur und Verantwortlicher für den Themenbereich Materials Technology

Beim Fachgespräch zum Thema Nachhaltigkeit von Materialien lag das Augenmerk auf ergänzender Expertise im Bereich Nachhaltigkeit. Dazu wurden Christof Helbig, Spezialist für Ökologische Ressourcentechnologie (Universität Bayreuth, Deutschland) und Magdalena Pupp, Expertin für mineralische Rohstoffe und verantwortungsvolles Beschaffungsmanagement (Bundesministerium für Finanzen) zur Teilnahme in Form eines Online-Meetings gewonnen.

Inhalt

Im Fokusgruppenworkshop wurden den Teilnehmer:innen die Ergebnisse von Literatur- und Datenbankrecherche sowie die Auswertung der Online-Umfrage vorgestellt und anschließend in den folgenden drei inhaltlichen Blöcken vertieft bearbeitet:

- Materialien, AI-Methoden, Datenbanken und Anwendungsfälle.
- Key-Player und das branchenspezifische Potential.
- Dringlichste Forschungsfragen, Infrastrukturbedarf, Rahmenbedingungen.

Auch im Fachgespräch wurde zuerst in einer Einführung die Studie im Überblick vorgestellt und in der Folge in 3 Blöcken verschiedene Aspekte der Studie bearbeitet, und zwar:

- Vielversprechendste Materialien für grüne Anwendungen und branchenspezifisches Potential von AI-basierter Entwicklung grüner Materialien.
- Verfügbare Datenräume in Bezug auf Nachhaltigkeit und Kreislaufwirtschaft von Materialien.
- Dringlichste Fragestellungen für AI-basierte Entwicklung grüner Materialien

In jedem Block wurden zuerst wieder die relevanten Zwischenergebnisse der Studie vorgestellt, die dann gemeinsam abgeglichen und diskutiert und dann am Ende des Blocks zusammengefasst wurden. Den Schluss bildeten eine allgemeine Zusammenfassung und abschließende Diskussion.

Auswertung

Die Ergebnisse des Fokusgruppenworkshops wurden in der Folge vom MCL zusammengeführt. In einer Iteration konnten die Teilnehmenden noch Verbesserungsvorschläge und Ergänzungen schicken, die schließlich in das Endergebnis einflossen.

Das Ergebnis des Fachgesprächs wurde anhand eines Ergebnisprotokolls dokumentiert, das auch wieder mit den Teilnehmer:innen iteriert wurde. Die dabei eingeholten Verbesserungsvorschläge und Ergänzungen wurden schließlich in der finalen Version zusammengeführt.

Relevante rechtliche Rahmenbedingungen

Die Methodik zur Festlegung des rechtlichen Rahmens für dieses Projekt umfasste eine Kombination aus Sekundärforschung, rechtlicher Analyse und Zusammenarbeit mit den Projektpartnern. Die Sekundärforschung beinhaltete die Durchsicht einschlägiger Rechtsinstrumente, wissenschaftlicher Literatur und offizieller Veröffentlichungen, um die wichtigsten für das Projekt relevanten Bestimmungen zu ermitteln. Besonderes Augenmerk wurde auf EU-Verordnungen und -Richtlinien gelegt, wobei es sich bei ersteren um verbindliche Rechtsakte handelt, die in allen EU-Mitgliedstaaten direkt anwendbar und durchsetzbar sind, und bei zweiteren um Rechtsakte, die ein Ziel vorgeben, das die EU-Mitgliedstaaten erreichen müssen (und dazu von ihnen in nationales Recht umgesetzt werden). Weitere Details sind im Anhang „Juristische Studie“ enthalten.

3 Erhebung und Bewertung des IST-Zustands

Key player für Materialentwicklung

Bei der Identifikation der Key-Player für Materialentwicklung in Österreich wurde zwischen den Kategorien Universität, Forschungsorganisation und Industrie unterschieden. Die Bewertung bei den Universitäten und Forschungsorganisationen erfolge aufgrund von zwei Aspekten, die gleich stark gewichtet wurden: Der erste Aspekt war die Anzahl der veröffentlichten Fachartikel im Bereich Materialentwicklung, der zweite Aspekt die Summe der Erwähnungen bei Fokusgruppe, Expert:innen-Interviews und Umfrage und der dritte Aspekt FWF-Projekte mit Start ab 2020 mit Filter „Materials“.

Bei den Industrieunternehmen wurde ebenfalls der zweite Aspekt (Summe der Erwähnungen) berücksichtigt. Zusätzlich wurde die Beteiligung an aktuellen Christian-Doppler-Laboratorien im Bereich Materialforschung und die Ergebnisse einer kürzlich erschienenen Studie zu „Schlüsseltechnologien – Position und Potenzial Österreichs“ (Österreichisches Institut für Wirtschaftsforschung, 2024) berücksichtigt. Daraus ergab sich für jede Kategorie ein klares Spitzenfeld und insgesamt folgendes Bild:

- Bei den **Universitäten** sind die Technische Universität Graz, die Technische Universität Wien, die Montanuniversität Leoben und die Universität Wien führend.
- Bei den **Forschungseinrichtungen** sind die Key Player das Erich-Schmid-Institut (ESI) der Österreichischen Akademie der Wissenschaften, das Materials Center Leoben (MCL), das Austrian Institute of Technology (AIT), das Polymer Competence Center Leoben (PCCL) und das Kompetenzzentrum Holz (Wood-kplus).
- Bei den **Industrieunternehmen** bilden voestalpine AG (voestalpine, 2025a) und Infineon Technologies Austria AG (Infineon, 2025) zusammen mit Borealis AG (Borealis AG, 2025), Plansee SE (Plansee SE, 2025), RHI Magnesita (RHI, 2025) und Mondi AG (Mondi plc, 2025) das Spitzenfeld. Daneben haben auch AMAG Austria Metall AG (AMAG, 2025), Lenzing AG (Lenzing AG, 20205), TDK Electronics AG (TDK Electronics AG, 2025) und MIBA AG (MIBA AG, 2025) bedeutende Aktivitäten im Bereich der Materialforschung und -entwicklung. Außerdem sind die Anlagenbauer Andritz AG (Andritz AG, 2025), Engel Austria GmbH (Engel Austria GmbH, 2025), Primetals

Technologies Austria GmbH (Primetals Technologies Austria GmbH, 2025) und EV Group (EVG) (EV Group, 2025) durch ihre Innovationen im Anlagenbereich wichtige Player auf diesem Gebiet.

Im Unternehmensbereich gibt es neben den großen Playern auch eine Reihe von innovativen KMUs auf dem Gebiet der Materialentwicklung. Hier war aber eine Reihung der Unternehmen und Identifizierung der Top Player aufgrund von objektiven Kriterien nicht möglich, weil kein ausreichendes und angemessenes Datenmaterial als Entscheidungsgrundlage verfügbar ist.

Schließlich ist zu erwähnen, dass auch das Bundesministerium für Klimaschutz, Umwelt, Energie, Mobilität, Innovation und Technologie (BMK, 2024) eine wichtige Rolle bei der Materialforschung und -entwicklung in Österreich einnimmt. Es ist wesentlich dafür, durch gezielte Förderung Initiativen und Programme zu unterstützen, welche die Wettbewerbsfähigkeit der österreichischen Forschung und Industrie in diesem Bereich stärken.

Datenverfügbarkeit

Dieser Abschnitt gibt einen Überblick über die wichtigsten digitalen Datenbanken in den Bereichen Materialeigenschaften und Nachhaltigkeit (Lebenszyklusanalyse, Rohstoffabbau und Materialflüsse) sowie zu den wichtigsten digitalen Services im Bereich der Datenräume und des Datenmanagement für Materialdaten. Grundlage für diesen Überblick sind die Erhebungen im Rahmen des Fokusgruppenworkshops, des Fachgesprächs zu Nachhaltigkeitsaspekten, der Interviews und der Fragebögen, die durch eine Webrecherche ergänzt wurden.

Im Bereich der Materialeigenschaften (Tabelle 7) unterscheiden sich die Datenbanken hinsichtlich der abgedeckten Materialklassen und Materialeigenschaften sowie hinsichtlich der Herkunft der Daten. In Bezug auf **Materialklassen** gibt es etwa Datenbanken zu Stählen, Polymeren, holzbasierten Materialien, Keramiken oder Halbleitern. In Bezug auf die **Materialeigenschaften** gibt es einerseits Datenbanken, die sehr viele physikalische Eigenschaften einer bestimmten Materialklasse abdecken (z.B.: MatWeb (MatWeb, 2025), dataholz (Verein Holzforschung Austria – Österreichische Gesellschaft für Holzforschung, 2024), NIMS database (Tsukuba : National Institute for Materials Science (NIMS), 2024)), andererseits Datenbanken für Eigenschaften, die im

Zusammenhang mit einer speziellen Anwendung wichtig sind (z.B. CALPHAD für thermodynamisches Verhalten (CALPHAD, 2025), die Novamag Datenbank für magnetische Eigenschaften (ADMIRABLE Group, 2018), die ICSD für atomare Struktur (FIZ Karlsruhe - Leibnitz Institute for Information Infrastructure, 2024b) und die Photocharging database für Eigenschaften von Photohalbleitern (Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, 2022).

In Bezug auf die Herkunft der Daten sind traditionell experimentelle Messungen die Hauptmethode zur Bestimmung der Daten. In den letzten 10 bis 15 Jahren spielen zunehmend auch Daten aus hochwertigen physikalischen Simulationen, insbesondere aus Ab-initio Rechnungen, eine immer größere Rolle (z.B. materialsproject und NoMaD). Außerdem werden die Datenbanken immer mehr in Richtung komplette Web-Services ausgebaut, die es erlauben, die Daten auch zu analysieren und andere Eigenschaften daraus zu berechnen.

Tabelle 7: Digitale Datenbanken zu Materialeigenschaften

Name	Beschreibung
Calphad	Datenbank thermodynamischer Daten zur Vorhersage thermodynamischer und kinetischer Eigenschaften (Phasendiagramme etc.). (CALPHAD, 2025)
CCDC	Cambridge Crystallographic Data Center hauptsächlich für organische, metallorganische und anorganische Verbindungen (FIZ Karlsruhe - Leibnitz Institute for Information Infrastructure, 2024a).
Granta Materials Selector	Vielfältiger Katalog mit Materialreferenzdaten (ANSYS, 2024).
dataholz	Von akkreditierten Prüfinstituten herausgegebener Katalog von Daten zu Holz und Holzwerkstoffen, Baustoffen, Bauteilen und Bauteilverbindungen für den Holzbau mit den thermischen, akustischen, brandschutztechnischen und ökologischen Kennwerten. (Verein Holzforschung Austria – Österreichische Gesellschaft für Holzforschung 2024)
Datenbank Stahlwissen	Daten zur Wärmebehandlung von Stahl (Dr. Sommer Werkstofftechnik GmbH, 2024).
Fairmat	Offene Dateninfrastruktur für die Festkörperphysik. (Humboldt-Universität zu Berlin 2025)
ICSD	Größte Datenbank für vollständig identifizierte anorganische Kristallstrukturen (FIZ Karlsruhe - Leibnitz Institute for Information Infrastructure, 2024b).
JMAT Pro	Software zur Vorhersage von Materialeigenschaften (hauptsächlich Metalle und Legierungen), die eine integrierte Datenbank für Materialeigenschaften enthält (JMatPro, 2024).
Materialscloud	Offene Wissenschaftsplattform für die nahtlose gemeinsame Nutzung von Ressourcen in der computergestützten Materialwissenschaft (Materialscloud, 2015)
The materials project	Open-Access-Datenbank mit Materialeigenschaften aus Ab-initio Rechnungen. (The Materials Project 2024)
materiom	Open-Access-Datenbank mit Rezepten für Biomaterialien – woraus sie bestehen, wie sie hergestellt werden und welche Materialeigenschaften sie haben (materiom, 2025).
MatWeb	Datenbank mit Materialeigenschaften; umfasst Datenblätter zu thermoplastischen und duroplastischen Polymeren, Metallen, Keramiken, Halbleitern, Fasern und anderen technischen Materialien. (MatWeb 2025)
MatDat	Datenbank verschiedener Materialeigenschaften (Matdat d.o.o., 2025).
NIMS database	Datenbank des japanischen Nationalinstituts für Materialwissenschaften. Es umfasst Polymere, anorganische Materialien, metallische Materialien und rechnergestützte elektronische Strukturdaten. Bietet auch Anwendungen wie das Composite Design & Property Prediction System.(Tsukuba : National Institute for Materials Science (NIMS) 2024)
NIST database	Materialdaten aus mehreren Bereich der wissenschaftlichen, technischen und technologischen Forschung des US-amerikanischen National Institute of Standards and Technology (NIST, 2025b).

Name	Beschreibung
NoMaD	Datenbank von Materialeigenschaften aus Ab-initio-Rechnungen und Infrastruktur zum Organisieren, Analysieren, Teilen und Veröffentlichen materialwissenschaftlicher Daten (NOMAD, 2025).
Novamag	Datenbank zu den physikalischen Eigenschaften neuartiger magnetischer Materialien für die Entwicklung von Hochleistungs-Permanentmagneten. (ADMIRABLE Group 2018)
Open Materials database	Offene Materialdatenbank für Informationen zu den Eigenschaften von Materialien aus dem Bereich des computergestützten Materialdesign (Database, 2025).
Photocharging_database	Datenbank zu Photohalbleitern. (Max Planck Institute of Colloids and Interfaces 2022)
polySCOUT	Hochwertige Polymerdatenbank(TNO innovation for life, 2025)
Spectroscopy data base	Datenbank mit Lumineszenzemissionslinien sowie Lumineszenzspektren einer Reihe von Materialien, darunter Mineralien und synthetische Verbindungen (Commonwealth Scientific and Industrial Research Organisation, 2025).
Stahlschlüssel	Stahldatenbank zum Entschlüsseln von Stahlbezeichnungen und Auffinden äquivalenter Werkstoffe (Verlag Stahlschlüssel Wegst GmbH, 2025).
The Harvard Clean Energy Project Database	Referenzdatenbank für organische Halbleiter mit besonderem Schwerpunkt auf Photovoltaikanwendungen. Speichert und bietet Zugriff auf Daten aus rechnergestützten und experimentellen Studien zu bekannten und virtuellen chemischen Verbindungen (Harvard University, 2025).
TPSX database	NASA-Datenbank mit Materialeigenschaften für Materialien im Luft- und Raumfahrtbereich(NASA, 2025).
WECOBIS	Ökologisches Baustoffinformationssystem, mit Baustoffinformationen zu Umwelt- und Gesundheitsaspekten (Bundesministerium für Wohnen, Stadtentwicklung und Bauwesen, 2025)

Die Datenbanken für die Lebenszyklusanalyse (Tabelle 8) unterscheiden sich in Hinblick auf die Materialklassen und Branchen (z.B. International energy agency LCA databases für Energie) und auf die betrachteten Größen (z.B. Fokus auf CO_2-Fußabdruck bei CCalc, Berücksichtigung von Luftschadstoffemissionen bei GEMIS).

Tabelle 8: Digitale Datenbanken für die Lebenszyklusanalyse

Name	Beschreibung
ecoinvent	Life cycle inventory Datenbank: stellt hochwertige, weltweite Umweltdaten zur Unterstützung fundierter Nachhaltigkeitsentscheidungen bereit (ecoinvent, 2025).
International energy agency: LCA databases	Konsistente, genaue und aktuelle Energiedaten und -statistiken (International Energy Agency, 2025).
GaBi	LCA-Datenbank zu den Themen Land- und Forstwirtschaft & erneuerbare Energien, Bauwesen, Chemikalien & Werkstoffe, Konsumgüter, Elektronik & Elektrotechnik & IKT, Energie & Versorgung, Lebensmittel & Getränke, Gesundheitswesen & Biowissenschaften, Industrieprodukte & Maschinen, Metalle & Mineralien & Bergbau, Kunststoffe, Dienstleistungssektor, Textilien, Transport und Lagerung, Recycling & Energierückgewinnung & Deponierung am End of Life (Sphera Solutions, 2025).
PEF	LCA-Datenbank zu den Themen Chemikalien, Futtermittel, erneuerbare Energien, Agrofood, Glasrecycling (European Commission, 2025).
Globales Emissions-Modell integrierter Systeme (GEMIS)	LCA-Datenbank zu den Themen Nutzungsgrad, Leistung, Auslastung, Lebensdauer;direkte Luftschadstoffemissionen: SO2, NOx, Staub, CO, NMVOC; Treibhausgas-Emissionen: CO_2, CH_4, N_2O, alle wichtigen FCKW/FKW; Klärschlamm, Produktionsabfall; flüssige Reststoffe: z.B. anorganische Salze; Flächenbedarf und kumulierter Energieeinsatz (KEA) (Umweltbundesamt, 2025).
Carbon Calculations over the Life Cycle of Industrial Activities (CCaLC	LCA-Datenbank zu den Themen Materialien, Energie, Transport, Verpackung, Abfall nur carbon footprint) (The University of Manchester, 2025)
ESU	LCA-Datenbank mit aktuellen Daten für Erdölförderung, Erdgasförderung, Ferntransport, Verarbeitung, Distribution und Nutzung von Heizölen. Integriert wurden auch neuere Daten zu Plastik-Rohstoffen von PlasticsEurope (ESU-services Ltd., 2025).
EPD Library	Chemikalien, Bauwesen, Möbel, Nahrungsmittel, Elektrizität, Dampf und Brennstoffe, Infrastruktur und Gebäude, Metall-, Mineral- und Glasproduktion, Kunststoffproduktion, Papierproduktion, Fahrzeuge, Maschinen, Textilien (International EPD System, 2025).

Bezüglich Daten zu Rohstoffabbau und Materialflüssen (Tabelle 9) gibt es Datenbanken zu Importen und Exporten (z.B. Daten der Außenhandelsstatistik der Statistik Austria) und zur Rohstoffproduktion (z.B. USGS- und WMD-Datenbank). Für den Bereich der kritischen Rohstoffe deckt die CRM-Datenbank die Wertschöpfungskette einschließlich Versorgungsrisiken und Zirkularität ab.

Tabelle 9: Digitale Datenbanken zu Rohstoffabbau und Materialflüssen

Name	Beschreibung
Außenhandelsstatistik der Statistik Austria	Importe und Exporte von Gütern in monetären Einheiten € und physischen Einheiten (in 100 kg) nach unterschiedlichen Handelspartnern (Statistik Austria, 2025)
SCRREEN factsheets – CRMS 2023	Datenblätter (pdf-Format) zu den Punkten Märkte, Handel, Preise; Nachfrage; Angebot (EU supply chains); andere Überlegungen, z.B. Gesundheit, Sicherheit, Umweltthemen, sozioökonomische Belange, etc. (SCRREEN, 2025)
British Geological Survey (BGS)	Jährliche Daten zur britischen, europäischen und weltweiten Produktion von Erzen/Metallen und Mineralstoffen. Die Jahrbücher sind nach Materialien geordnet und beinhalten jeweils Daten für 3-5 Jahre. (British Geological Survey, 2025)
CRM critical materials	Liste kritischer Rohstoffe und zugehörige Informationen (Verwendung, Hersteller, globaler Markt, Probleme, Anwendungen) (CRM Alliance, 2025).
Raw Materials Information System	Deckt die gesamte Wertschöpfungskette von Rohstoffen (hauptsächlich Metalle und Mineralien aus primären und sekundären Quellen) ab. Es enthält Daten über Rohstoffe und zugehörige Wertschöpfungsketten im Kontext der Nachhaltigkeit, einschließlich Versorgungsrisiken und Zirkularität (RMIS – Raw Materials Information System, 2025).
UN Industrial Commodity Production Statistics Database (UNICPS)	Daten über Bergbau (Kohle, Erdöl und Erdgas; Metallerze; nichtmetallische Mineralien und Düngemittel), aber auch Daten zur Produktion von abgeleiteten Produkten (Zement, Bitumen, Ziegel usw. (United Nations Statistics Division, 2025)).
United States Geological Survey (USGS)	Datenblätter über Bergbau und Industrie der mineralischen Rohstoffe der meisten Länder mit Informationen zur Produktion von Industriemineralen, Erzen, Baumineralen und fossilen Rohstoffen (U.S. Geological Survey, 2025).
World Mining Data (WMD)	Daten aus den World Mining Data umfassen die Produktion, Import und Export von 65 Mineralstoffen (inkl. fossile Energieträger) (Bundesministerium für Finanzen, 2025)

Ein wichtiger Punkt im Zusammenhang mit AI-basierter Materialforschung und der digitalen Industrie sind **Services und Initiativen im Bereich der Datenräume und des Datenmanagement** (Tabelle 10). Hier gibt es einerseits kommerzielle Produkte (wie Citrine speziell für Materialdaten oder Dataloop als Infrastruktur für Datenmanagement, die Datenpipelines und AI-Lösungen unterstützt). In Bezug auf Datenräume im engeren Sinne, das heißt dezentralisierte, offene Infrastrukturen für den souveränen Datenaustausch, befinden sich Lösungen im Aufbau, die für bestimmte Branchen (z.B. Manufacturing-X für die produzierende Industrie) zugeschnitten sind. Darüber hinaus spielen für **Forschungsdaten** allgemein der etablierte Online-Speicherdienst Zenodo und die European Open Science Cloud (EOSC) eine wichtige Rolle. Außerdem werden **Plattformen für die beschleunigte Materialentwicklung** (z.B. die österreichische Plattform ALPmat oder die Plattform Material Digital) ein immer wichtigeres Werkzeug für die AI-

basierte Materialentwicklung, indem sie Datenbanken mit semantischen Datenmodellen und Werkzeugen für das Datenmanagement und für die Implementierung von AI-Workflows kombinieren. Der gesamte Bereich ist momentan sehr stark im Wachsen begriffen und dementsprechend dynamisch. Im Bereich der AI-getriebenen Forschung ist es generell ein wichtiger Aspekt, inwieweit Daten FAIR vorliegen, wobei FAIR hier für „Findable, Accessible, Interoperable, Reusable“ steht (Wilkinson et al., 2016). Deshalb ist ein wichtiges Ziel der angeführten Services und Initiativen, Materialdaten auf FAIRe Weise zur Verfügung zu stellen.

Tabelle 10: Services und Initiativen im Bereich der Datenräume und des Datenmanagement für Materialdaten

Name	Beschreibung
ALPmat	Im Aufbau befindliche Plattform für Datenmanagement und die AI-basierte beschleunigte Entwicklung von Materialien (Materials Acceleration Platform (MAP)) (Materials Center Leoben Forschung GmbH, 2024)
CAPeX	Dänisches Pioneer Center für die beschleunigte Entdeckung von Materialien für die Energieumwandlung (CAPeX, 2025)
Citrine	Skalierbares Datenmanagement-Tool für Chemikalien, Materialien, Inhaltsstoffe und Produkte (Citrine Informatics, 2024).
Coscine	Plattform für das Management von Forschungsdaten (Coscine, 2024)
Dataloop	Infrastruktur für Datenmanagement, die Datenpipelines und AI-Lösungen unterstützt (dataloop, 2024).
DIADEM	Im Aufbau befindliches französisches Schwerpunkt¬forschungsprogramm bzw. Schwerpunktausstattung für die Entwicklung innovativer Werkstoffe mittels künstlicher Intelligenz (CNRS – Centre national de la recherche scientifique, 2025)
Eclipse Dataspace Components	Die Eclipse Dataspace Components (EDC) sind ein quelloffenes, umfassendes Framework (Konzept, Architektur, Code, Beispiele), für die Implementierung von Datenräumen der Eclipse Foundation. EDC werden z.B. in Gaia-X und Catena-X verwendet (Eclipse Contributors, 2021).
European Open Science Cloud (EOSC)	Im Aufbau befindliche europäische Daten-Cloud für wissenschaftliche Daten and Services auf Basis der FAIR (findable, accessible, interoperable, reusable) Standards. EOSC ist eine multidisziplinäre Umgebung, in der Forscher:innnen Daten, Tools und Dienste veröffentlichen, finden und wiederverwenden können, um ihre Arbeit besser durchführen zu können (European Open Science Cloud, 2024).
Gaia-X	Initiative zur Schaffung einer föderierten und sicheren Dateninfrastruktur (Gaia-x, 2024) mit einer Reihe von verwandten Initiativen (s. Folgezeilen)
Catena-X	Im Aufbau befindliches kollaboratives und offenes Datenökosystem für die Automobilindustrie (Catena-X Automotive Network e.V., 2025)

Name	Beschreibung
Factory-X	Im Aufbau befindliches kollaboratives und offenes Datenökosystem für Fabrikausrüster und -betreiber (Open Industry 4.0 Alliance Implementation GmbH, 2025)
Manufacturing-X	Im Aufbau befindliche Initiative zur Digitalisierung der Lieferketten in der Industrie (Manufacturing-X, 2024).
NIST Configurable Data Curation System (CDCS)	Initiative und Plattform des NIST, um Daten FAIR abzulegen und auszutauschen. Die Plattform erlaubt es, unstrukturierte Daten zu erfassen, freizugeben und in ein strukturiertes Format zu transformieren (NIST, 2018).
Plattform Industrie 4.0	Im Aufbau befindliche digitale Infrastruktur für die Fertigung (Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz, 2024).
Plattform Material Digital	Deutsche Initiative zur Digitalisierung der Materialien (Karlsruher Institut für Technologie, 2022).
Zenodo	Ein offener Online-Speicherdienst speziell für wissenschaftliche Daten (CERN & European Organization for Nuclear Research, 2024).

Potentiell passende AI Methoden

Die Etablierung von AI in der Materialwissenschaft wird durch über 300 Hauptpublikationen zu diesem Thema belegt, aus denen die verwendeten Modelle und Methoden manuell extrahiert wurden. Die dabei identifizierten Begriffe sind in Tabelle 11, Tabelle 12 und Tabelle 13 aufgelistet und entsprechend der in Abschnitt „Kategorisierung von AI-Methoden“ entwickelten Kategorien zusammengefasst.

Tabelle 11: Kategorisierung der in der Literaturrecherche identifizierten MODELLE entsprechend der in Abschnitt „Kategorisierung von AI-Methoden“ erklärten Systematik. Zu den Unterkategorien sind in der jeweiligen Zeile repräsentative Einführungsarbeiten (Lehrbücher, Tutorials, Übersichtsarbeiten) angeführt.

Kategorie des Modells	Unterkategorie	Namen der Modelle
Parametrisch	Neural Networks (Bishop, 2007)	Neural Network Regression, Multilayer Perceptron, Convolutional Neural Network, Fully-Convolutional Networks, Long-Short-Term-Memory, Generative Adversarial Network, Graph
Parametrisch	Linear Models (Bishop 2007)	Linear Regression/Linear Multiple Regression/Ridge Regression/Elastic Net Regression, Logistic Regression, Partial Least-Squares Regression, Principal Component Analysis
Parametrisch	Nonlinear Models	Polynomial Regression/Response Surface Methodology
Parametrisch	Probabilistic Models (Bishop 2007)	Naive Bayesian Model, Gaussian Mixture Model
Parametrisch	Time Series Models (Bishop 2007)	Hidden Markov Model
Nicht-parametrisch	Kernel Methods (Bishop 2007)	Support Vector Machine/Support Vector Regression/Robust Ensemble Support Vector Machine/Transductive Bagging Support Vector Machine, Kernel Ridge Regression, Gaussian Process Model/Gaussian Process Regression/Gaussian Approximation Potential
Nicht-parametrisch	Tree-Based Methods (Bishop 2007)	Decision Tree/Regression Tree Model, Random Forest/Random Forest Classifier/Random Forest Regression, Gradient Boosting Decision Tree, Extremely Randomized Trees, Tree-based Ensemble Models
Nicht-parametrisch	K-nearest-neighbor/Radius-neighbors	-
Nicht-parametrisch	K-means (Simeone, 2022)	-
Nicht-parametrisch	Representation Learning (Simeone, 2022)	Word Embedding Model

Tabelle 12: Kategorisierung der in der Literaturrecherche identifizierten METHODEN (letzte Spalte) entsprechend der in Abschnitt „Kategorisierung von AI-Methoden“ erklärten Systematik. Zu den Unterkategorien sind in der jeweiligen Zeile repräsentative Einführungsarbeiten (Lehrbücher, Tutorials, Übersichtsarbeiten) angeführt.

Kategorie der Methode	Unterkategorie	Name der Methoden
Optimierungs-methode	Heuristics (Whitley, 1994)	Genetic Algorithm, Genetic Programming
Optimierungs-methode	Reinforcement Learning (Sutton & Barto, 2018)	-
Optimierungs-methode	Bayesian Optimization (Gramacy, 2020)	-
Optimierungs-methode	Stochastic Gradient Descent Classifier/Root-mean-square-prop (Simeone, 2022)	-
Hilfsmethode	Bootstrapping (Wehrens et al., 2000)	-
Hilfsmethode	Boosting (Bishop, 2007)	Ada-boosting, Gradient Boosting/Gradient Boosting Classifier, Extreme Gradient Boosting, Light Gradient Boosting Machine, Categorical Boosting
Hilfsmethode	Transfer Learning (Simeone, 2022)	-
Hilfsmethode	Sequential Learning	-
Hilfsmethode	Regularization (Bishop, 2007)	Bayesian Regularization/Bayesian Ridge

Tabelle 13: Andere in der Literaturrecherche identifizierte Begriffe aus dem Bereich AI.

Begriff
Natural Language Processing
Optimal Design/Design-of-experiments/Experimental Design Paradigm
Knowledge Graphs

Die in Abschnitt „Literaturrecherche“ beschriebene Literaturrecherche hat gezeigt, dass AI-Methoden und -Modelle in der Materialentwicklung bereits breit eingesetzt werden. In Summe konnte eine Literaturrecherche am im Jänner 2025 589.344 Publikationen in Zusammenhang mit dem Begriff Materialentwicklung (d.h. dem Suchbegriff ((material w/3 development) OR (material w/3 design) OR (material w/3 engineering)) identifizieren, die AI Methoden nutzen bzw. erwähnen.

Tabelle 14: Anzahl der Literaturstellen zu den in der Kategorisierung verwendeten Methoden und Modelle. (Stand 22.11.2024)

Kategorie	Anzahl der Erwähnungen in der Literatur
Parametrische Modelle	368.500
Nichtparametrische Modelle	97.177
Optimierungsmethoden	92.507
Hilfsmethoden	23.690
Other	7.470
Summe	589.344

Die quantitativen Ergebnisse unserer Recherche sind in Tabelle 14 dargestellt. Hier sieht man, dass parametrische Modelle den breitesten Einsatz finden, was sich auf die Kategorie der neuronalen Netzwerke zurückführen lässt (dazu später mehr). Nichtparametrische Modelle und Optimierung spielen ebenfalls große Rollen, während die Hilfsmethoden in nur wenigen Publikationen angewandt wurden.

Die deutlich größte Kategorie innerhalb der Klasse der parametrischen Modelle sind **neuronale Netzwerke** (243.164 Publikationen; einschließlich Deep Learning). Die große Zahl ist teilweise darauf zurückzuführen, dass in manchen Publikationen mehrere Unterkategorien vorkommen und diese Publikationen damit mehrfach gezählt werden. Auch wenn diese Eigenheiten unserer Suchanfrage berücksichtigt werden und die Zahlen konservativ bereinigt werden, bleibt trotzdem die Kategorie der neuronalen Netzwerke die am meisten eingesetzte AI-Technologie. Dies ist an sich wenig überraschend: durch die enormen Erfolge von Deep Learning in vielen Anwendungsfällen – Bilderkennung, automatische Spracherkennung, Textgenerierung, etc. – wurden neuronale Netzwerke von unterschiedlichsten wissenschaftlichen Disziplinen aufgegriffen, um Modellierungsaufgaben zu übernehmen. Dass diese in vielen Fällen mit neuronalen

Netzwerken erfolgreicher als mit anderen Modellen gelöst werden können, ist – bei geeigneter Auswahl der Modellarchitektur – auf die Tatsache zurückzuführen, dass ein neuronales Netzwerk beliebige Funktionen beliebig genau approximieren kann (Universal Approximation Theorems). Während die ersten dieser Theoreme für flache Netzwerke mit vielen Neuronen bewiesen wurden (Hornik et al., 1989), konnte in jüngerer Vergangenheit gezeigt werden, dass tiefe Netzwerke ebenso erfolgreich approximieren, aber einfacher trainierbar sind (vgl. Deep Learning).

Die Analyse zeigt aber auch aus Sicht der Informatik überraschende Ergebnisse. Hier ist einerseits das parametrische Modell der Response Surface Methodology zu nennen. Dabei handelt es sich um ein Verfahren, welches den Zusammenhang zwischen Variablen zu modellieren sucht. Dabei werden die unabhängigen Variablen gezielt verändert, um deren Einfluss auf die abhängigen Variablen zu messen und diesen mit (meist linearen oder niedrig-polynomiellen) Regressionsmodellen abzubilden. In den Naturwissenschaften ist dieses Verfahren weit verbreitet, was das häufige Auftreten des Begriffs im Zusammenhang mit Materialentwicklung (Erwähnung in 69.648 Publikationen) erklärt. Der Fokus der Response Surface Methodology auf lineare oder polynomielle Modelle erklärt schlüssig die Häufigkeit der jeweiligen Begriffe in der Literaturrecherche (z.B. Linear Regression mit 17.523 Erwähnungen).

Ein weiteres überraschendes Ergebnis ist die enorme Verbreitung von Heuristiken wie Genetic Algorithms. Während diese mitunter nicht nur der AI, sondern auch der Computational Intelligence zugeordnet werden, fanden sie als AI Methode in über 74.711 Publikationen Anwendung. Diese Algorithmen dienen dazu, stark nicht-konvexe Optimierungsprobleme zu lösen, die mit herkömmlichen Gradientenverfahren nicht zu beherrschen sind. Beispiele dafür sind inverse Probleme, wie z.B. die Suche nach geeigneten Material- oder Prozessparametern, um gewisse Materialeigenschaften zu erreichen. Als solche sind genetische Algorithmen in der Materialentwicklung sicher relevant, wodurch sich ihre auf den ersten Blick überproportionale Verbreitung erklären lässt.

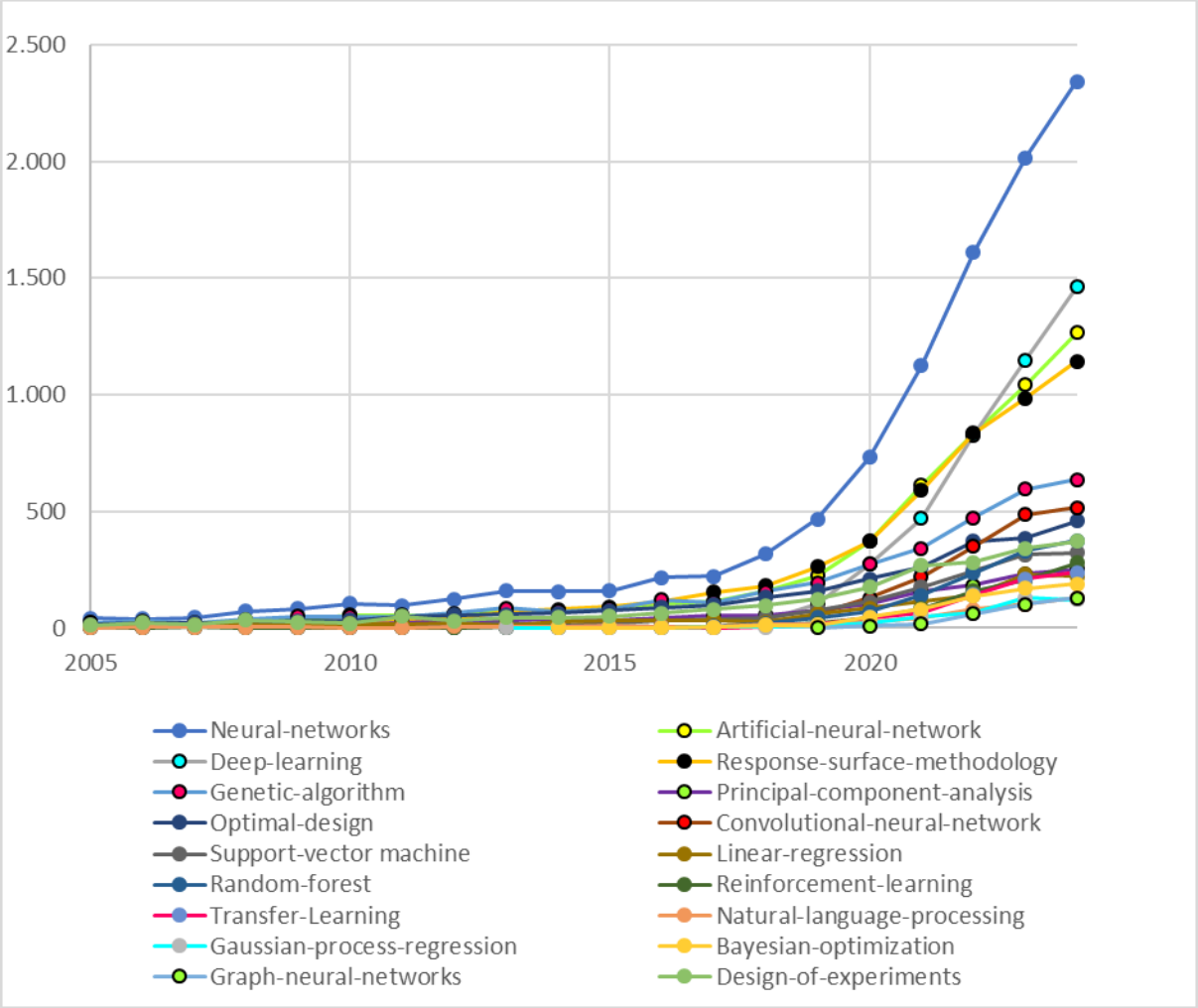
Während der Attention-Mechanismus (3.529 Erwähnungen) und die dazugehörige Transformer-Architektur (Vaswani et al., 2017) im Bereich Natural Language Processing inzwischen nicht mehr wegzudenken sind, ist dieser Begriff im Bereich der Materialentwicklung eher ungewöhnlich. Inwieweit in der Materialwissenschaft mit Textdaten operiert wird, ist unklar und bietet sich als Gegenstand einer weiterführenden Studie an. Erklärungen für die Häufigkeit dieser Begriffe könnten einerseits die

Verwendung in generischen Aussagen zu Deep Learning in der Einleitung, andererseits die Anwendung auf textuelle Darstellungen von Molekülen (wie z.B. der SMILES-Darstellung) sein. Schließlich ist der Attention-Mechanismus auch in der Bildverarbeitung (vision transformers, (Khan et al., 2021) und auf Graphen (graph attention, (Vrahatis et al., 2024)) anwendbar.

Bemerkenswert ist die geringe Zahl der Erwähnungen von Gaußprozessen (siehe (Bishop, 2007) in dem Abschnitt für experimentelles Design und die Lösung von inversen Problemen) und Graph Neural Networks (für Regressions- oder Klassifikationsprobleme mit Graphstruktur, wie z.B. bei Kristallen). Außerhalb der Materiawissenschaften werden diese Methoden intensiv genutzt. Mit 4856 und 3608 Erwähnungen lagen diese Methoden unter den Erwartungen.

Von Interesse ist auch die zeitliche Entwicklung ausgewählter AI-Modelle und Methoden in der Materialentwicklung (Abbildung 5). Man sieht hier deutlich neben vorsichtigen ersten Versuchen ab 2005 ein stetiges Wachstum, das sich ab 2015 massiv beschleunigt. Während das zum Teil sicherlich auf die generell zunehmende Publikationstätigkeit zurückführen lässt, ist speziell ab 2017-2018 ein starker Anstieg im Bereich Deep Learning und neuronalen Netzwerken zu sehen. Dieser Anstieg lässt sich durch den Beginn des AI-Booms 2012 erklären, der durch den Sieg eines Convolutional Neural Networks im ImageNet-Bildklassifikationswettbewerb (Krizhevsky et al., 2017) ausgelöst wurde. Zugleich sieht man auch, dass sich die Publikationstätigkeit bei bestimmten Methoden und Modellen reduziert bzw. das Wachstum zurückgeht, z.B. bei genetischen Algorithmen und Convolutional Neural Networks. Dies wird auch deutlich, wenn man die zeitliche Ableitung der jährlichen Anzahl an Publikationen betrachtet, die zeigt, ob das Wachstum stärker wird oder abnimmt. Neben dem Rückgang des Wachstums bei genetischen Algorithmen und Convolutional Neural Networks ist erkennbar, dass seit 2021 Artificial Neural Networks langsamer wächst als Deep Learning, was aber nur auf eine Veränderung der Terminologie zurückzuführen ist.

Abbildung 5: Zeitlicher Verlauf der Erwähnungen von AI Methoden und Modellen in der Materialentwicklung (Abfrage mit „material w/3 development“ am 22.11.2024)



Generalisierbarkeit und Übertragbarkeit der AI Methoden

Eine Analyse der in der Literaturrecherche gefundenen Modelle und Methoden (siehe Abschnitt „Potentiell passende AI Methoden“) hat ergeben, dass die meisten breit einsetzbar erscheinen, das heißt wenig spezifisch für Materialentwicklung sind. Um zu belegen, dass die identifizierten Methoden auch in anderen Domänen Anwendung finden, wurde die Literaturrecherche exemplarisch für ausgewählte Begriffe (neural networks, response-surface methodology, genetic algorithms, random forest, gaussian process regression, graph neural network) und ausgewählte Domänen (pharma, agriculture, chemistry, manufacturing) wiederholt.

Die Ergebnisse in Tabelle 15 sind wenig überraschend. Sämtliche ausgewählte Begriffe wurden mit allen betrachteten Domänenbezeichnungen in einem ähnlichen Ausmaß gefunden, was nahelegt, dass diese AI-Methoden und Modelle in diesen anderen Domänen in einem ähnlichen Ausmaß verwendet werden. Kleinere Abweichungen – z.B. eine geringere Erwähnung von Response Surface Methodology und Graph Neural Networks im Gebiet Landwirtschaft bzw. eine stärkere Verwendung von genetischen Algorithmen in der Produktion – sind auf Eigenheiten der einzelnen Domänen bzw. den darin üblichen Methodenkorpus zurückzuführen.

Tabelle 15: Literaturstellen für ausgewählte AI-Methoden und Modelle in anderen Branchen. Die Ergebnisse für Materialentwicklung sind in der letzten Zeile gegenübergestellt. (Stand 16.01.2025).

Branche	Neural-networks	Response-surface-metho-dology	Genetic-algorithm	Random-forest	Gaussian-process-regression	Graph-neural-net-works
Pharmazeutische Industrie	6.531	2.734	1.893	1.577	52	248
Landwirtschaft	10.664	573	1.326	3.936	121	60
Chemie	11.549	6.852	3.983	3.698	202	519
Produktion	14.507	2.160	9.205	1.239	273	213
Materialentwicklung	10.367	5.053	3.553	1.251	412	325

Trotz der vielen allgemein einsetzbaren Methoden und Modelle finden sich innerhalb der Materialentwicklung sehr spezifische Anpassungen für konkrete Problemstellungen. So sind z.B. das Crystal Hamiltonian Graph Neural Network (CHGNet, (Deng et al., 2023)) und das M3GNet (Chen & Ong, 2022) auf Graph Neural Networks basierende Modelle, die speziell darauf ausgerichtet sind, die interatomaren Potentiale von Kristallstrukturen zu berechnen. Ähnlich spezialisierte Architekturen für diverse weitere Struktur-Eigenschafts-Beziehungen sind als zentraler Trend in der Materialentwicklung zu erwarten.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass die heute im Bereich der Materialentwicklung eingesetzten AI-Methoden großteils auch in anderen Bereichen eingesetzt werden können bzw. mit geringer Anpassung aus anderen Bereichen übernommen wurden. Allerdings ist eine Spezialisierung allgemeiner Methoden für spezielle Struktur-Eigenschafts-Beziehungen unter Nutzung **domänenspezifischen Fachwissens** bereits jetzt feststellbar und für die nahe Zukunft verstärkt zu erwarten.

Aktuelle Trends im Bereich der AI-Methoden mit möglicher Relevanz für die Materialentwicklung

In diesem Abschnitt werden vielversprechende AI-Ansätze identifiziert, die in der Analyse der Übersichtsarbeiten nicht erwähnt wurden, aber starke Trends in der Informatik darstellen (siehe Abbildung 6)[1]. Zu diesen Ansätzen gehören Physics-Informed Machine Learning (mit Physics-Informed Neural Networks als wichtiger Instanz), Causal Machine Learning, Hybrid Modelling und generative AI.

Die Idee, Methoden des maschinellen Lernens mit bekannten physikalischen Gesetzmäßigkeiten zu kombinieren, ist unter den Begriffen Theory-Guided Data Science (Karpatne et al., 2017) oder auch kurz Scientific Machine Learning (SciML) bekannt. Physics-Informed Machine Learning ist ein Teilbereich davon und Physics-Informed Neural Networks ein Beispiel einer entsprechenden Methode. Scientific Machine Learning ist für die Materialentwicklung von besonderer Bedeutung, weil es darauf abzielt, bekannte Zusammenhänge in das Gesamtmodell zu integrieren und unphysikalischen Modellergebnissen vorzubeugen.

Physics-Informed Machine Learning zielt darauf ab, physikalisches Vorwissen in existierende ML-Modelle einzubringen (Karniadakis et al., 2021). Dies kann rein datenbasiert geschehen (observational bias in der Kategorisierung von (Karniadakis et al. 2021)), durch geeignete Auswahl der Modellparametrisierung (inductive bias) oder durch entsprechende Kostenfunktionen im Training (learning bias). Aufsehen erregt hat in diesem Zusammenhang vor kurzem die Vorhersage von mehr als 2 Millionen neuer, stabiler Materialien durch Mitarbeiter:innen von Google DeepMind und Google Research, die dafür ein Graph Neural Network auf einer Datenbank von Ab-initio Rechnungen

[1] Hier ist zu erwähnen, dass diese Auswahl an Trends durch die Erfahrung und Arbeitsgebiete der an der Studie beteiligten Forscher:innen beeinflusst ist.

trainierten und dabei physikalisches Wissen mit einfließen ließen (Merchant et al., 2023). Breiter gedacht kann physikalisches Vorwissen auch bei der Modellauswahl bzw. der Auswahl oder Vorverarbeitung von Features oder Deskriptoren helfen (Hoffer et al., 2022). Physics-Informed ML hat das Potential, auch mit wenigen Daten gute Modelle zu erzeugen, da relevante Information über existierende physikalische Modelle verfügbar ist und genutzt werden kann. Auf diese Art können Lernaufwand, Modellgröße und Anforderungen an die Daten bei gleichbleibender Genauigkeit reduziert werden. Physics-Informed ML ist, in unserer Kategorisierung, weder Methoden noch Modellen zuzuordnen, sondern ein Denkansatz, der die Entwicklung neuartiger Methoden und Modelle für jeweilige Anwendungsfälle nahelegt. Physics-Informed Machine Learning ist für die Materialentwicklung von besonderer Bedeutung, weil es helfen kann, die Menge an notwendigen Trainingsdaten – die meistens nur spärlich vorhanden sind – zu reduzieren.

Physics-Informed Neural Networks (PINNs, (Raissi et al., 2019)) sind eines der aktuell populärsten Beispiele von Physics-Informed ML. Es handelt sich dabei um neuronale Netzwerke, die explizites physikalisches Vorwissen in Form von Systemen von Differentialgleichungen berücksichtigen können. Konkret lernt das neuronale Netzwerk die Lösung der Differentialgleichung, liefert also eine Abbildung von Zeit- und eventuell Raumkoordinaten in relevante Größen (Druck, Geschwindigkeit, etc.). Das Vorwissen über das Differentialgleichungssystem wird hierbei in einem Regularisierungsterm berücksichtigt. PINNs lassen sich sowohl für Vorwärtsprobleme als auch für inverse Probleme einsetzen. In ersterem Fall lernt das PINN die Lösung des Differential-gleichungssystems, die mit gegebenen Rand- und Anfangswerten korrespondiert. In letzterem Fall lernt das PINN die Parametrisierung von Differentialgleichungssystemen aus gegebenen Mess- oder Simulationsdaten. Schließlich erlauben PINNs auch die Inferenz von nicht beobachtbaren Größen. So konnten in (Raissi et al., 2020) Druckverläufe aus beobachtbaren Strömungsfeldern (z.B. aus Windtunneln) ermittelt werden, indem die geltenden Navier-Stokes-Gleichungen beim Training des PINN berücksichtigt wurden. Daneben wurden PINNs auch in vielen anderen Anwendungsgebieten bereits erfolgreich eingesetzt, so z.B. in der Strukturmechanik (Haghighat et al., 2021) und im Wärmetransport (Cai et al., 2021). Ein Vorteil von PINNs ist, dass physikalisches Wissen zwar vorgegeben wird, die konkrete Integration des Wissens aber über den Trainingsprozess des neuronalen Netzwerkes umgesetzt wird. Ein fundamentaler Kritikpunkt an PINNs ist, dass sie zwar Vorwissen beachten, aber unphysikalische Lösungen möglich bleiben.

Hybrid Modelling beschreibt ein weiteres Paradigma, welches komplementär zu Physics-Informed ML ist. Hybride Modelle sind eine (blockbasierte) Verschaltung von rein datengetriebenen Modellblöcken mit mechanistischen Modellblöcken (siehe (Sansana et al., 2021)). Grundsätzlich können Blöcke parallel oder sequentiell verschaltet werden. In einer Parallelschaltung kann ein ML-Block z.B. den Ausgang eines physikalischen Grundmodells ergänzen, um speziellen Umständen Rechnung zu tragen, die im Grundmodell nicht beachtet werden. ML-Blöcke können auch dazu dienen, mechanistische Modelle situationsabhängig zu parametrisieren.

Surrogate Modelling ist eine in den Ingenieurswissenschaften weit verbreitete Methodik, die sich mit dem Ersetzen rechenintensiver detaillierter Modelle durch einfach auswertbare Approximationen beschäftigt. Typischerweise sind Surrogate Models als Black-Box Modelle zu bezeichnen (d.h. die innere Funktionsweise ist unwichtig bzw. nicht offengelegt). Damit überlappt das Anforderungsprofil von Surrogate Models stark mit Eigenschaften von Machine Learning Modellen. Dementsprechend werden viele Methoden des Maschinellen Lernens für das Erstellen von Surrogate Models genutzt. Ein großer Mehrwert dieser Verbindung ist, dass die Komplexität und Genauigkeit vieler ML-Modelle über die Variation Ihrer Hyperparameter veränderbar sind, wodurch das Abwägen von Genauigkeit und Rechenkosten über eine Parameterstudie abgebildet werden kann. Für die Materialentwicklung haben skalierbare Surrogate Models eine überragende Bedeutung im Bereich der Multiskalensimulation. Durch die Integration von ML-Verfahren in das Erstellen von Surrogate Models wie oben beschrieben können zwei bekannte Arbeitsmethoden effizient fusioniert werden. Surrogate Models können weiters in größeren Gesamtmodellen entsprechend der Methodik hybrider Modelle zur selektiven Beschleunigung von Simulationen auf Kosten der Genauigkeit genutzt werden, wobei die Entscheidung für die ideale Blockwahl (entsprechend einer bestimmten Genauigkeit und Rechenaufwandes) dynamisch durch einen Steuerblock ermittelt werden kann (z.B. Wahl verschiedener datengetriebener Turbulenzmodelle in Strömungssimulationen).

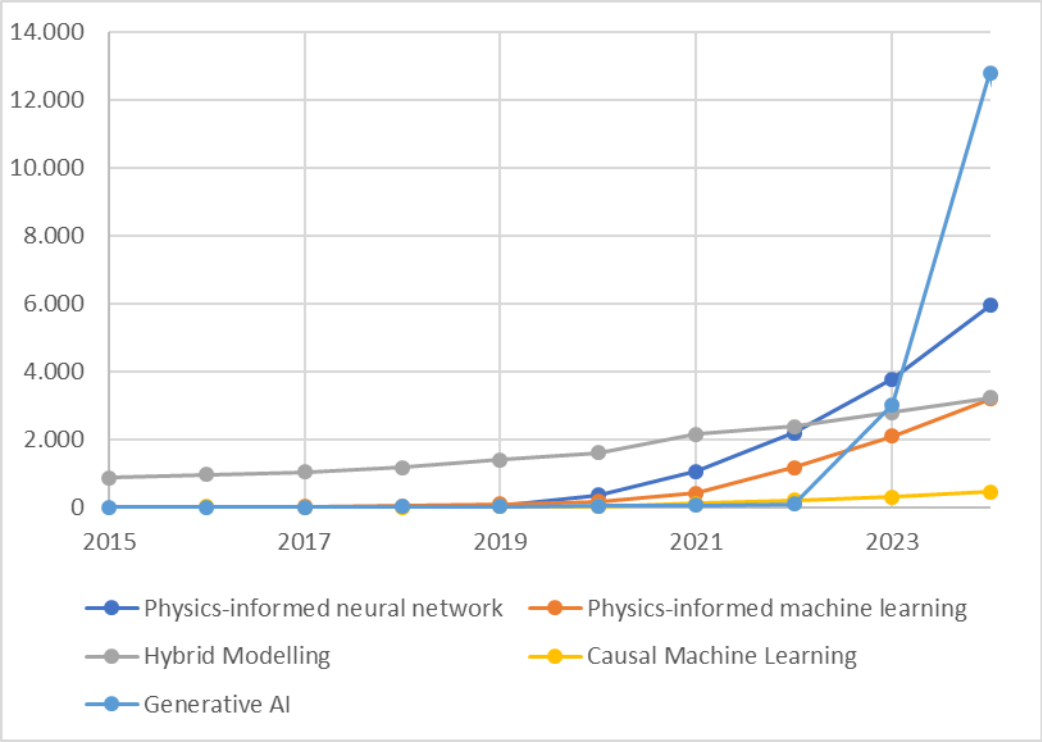
Hybrid AI: Hybride AI bezeichnet eine integrierte Anwendung sowohl der symbolischen als auch der subsymbolischen AI. Symbolic AI beschäftigt sich mit der kategorischen Darstellung von Wissen und dem Aufstellen darauf anwendbarer Regeln, um zu neuen Erkenntnissen zu kommen (z.B. Expertensysteme). Subsymbolic AI beschäftigt sich mit der technischen Nachbildung biologischer Systeme (abgebildet durch numerische Verfahren), um kognitive Aufgaben zu lösen (z.B. Neuronale Netze).

Causal Machine Learning ist als Paradigma mit Physics-Informed ML verwandt. Während Physics-Informed ML häufig davon ausgeht, dass Vorwissen in Form von algebraischen oder Differenzialgleichungen vorliegt, ist die zentrale Idee von Causal ML die Berücksichtigung von bekannten Ursache-Wirkungs-Beziehungen in den Daten. So konnte zum Beispiel gezeigt werden, dass die kausale Richtung in den Daten dafür Ausschlag gibt, ob nicht-annotierte Daten in Semi-Supervised Learning nützlich sind (Schoelkopf et al., 2012). Causal ML liefert allerdings auch Verfahren, mit denen AI-Modelle robust gegenüber Veränderungen in der Verteilung der Daten gemacht werden können (Kaddour et al., 2022). So können Klassifikatoren und Regressoren trainiert werden, die weniger stark auf Scheinkorrelationen (spurious correlations) basieren als klassisch trainierte Modelle und daher besser auf andere Datenverteilungen generalisieren.

Generative AI wurde vor allem durch ChatGPT in der breiten Öffentlichkeit bekannt. Neben diesem und einer Vielzahl anderer großer Sprachmodelle (Large Language Models, LLM) gibt es generative Modelle für Bilddaten (z.B. DALL-E), Musik (z.B. Riffusion), Podcasts (z.B. NotebookLM) und Videos (z.B. Moonvalley). Generative AI ist aktuell im Begriff, unser tägliches Leben, Unternehmensprozesse und die wissenschaftliche Methodik zu transformieren. Aktuell werden weltweit generische Grundlagenmodelle (Foundation Models, siehe (Stanford University, 2025)) mittels extrem großer Datensätze und sehr großem Energieaufwand trainiert. Foundation Models können in Folge mit vertretbarem Aufwand für verschiedene Applikationen angepasst werden. Beispiele für kürzlich vorgestellte Foundation Models sind Med-PaLM M im biomedizinischen Bereich (Tu et al., 2023) und GenSLMs für Genomik (Zvyagin et al., 2023). Ein Beispiel für generative AI im Bereich der Materialentwicklung ist MatterGen (Zeni et al., 2025), ein AI-Modell, welches anorganische Kristallstrukturen für gewünschte Zusammensetzungen, Symmetrien oder Materialeigenschaften erzeugt. MatterGen basiert, ähnlich wie AI-Modelle zur Bilderzeugung, auf Diffusionsprozessen. Die Möglichkeit, mit MatterGen in kurzer Zeit eine große Zahl von Materialkandidaten zu generieren, wird dadurch attraktiv, dass mittels MatterSim (Yang et al., 2024) ein Gegenspieler vorhanden ist, der diese Materialkandidaten hinsichtlich ihrer Eigenschaften bewertet. Die Kombination aus MatterGen und MatterSim liefert somit ein System von AI-Modellen, das für die beschleunigte Entwicklung von anorganischen Kristallen eingesetzt werden kann (Microsoft, 2025). Dieses Beispiel von **Agentic AI** – also der Zusammenschaltung von AI-Modellen, die miteinander interagieren, um vorgegebene Aufgaben zu erfüllen – ist ein weiterer mit generativer AI verwandter Trend, welcher großes Potential für die Materialentwicklung hat und in vielen anderen Bereichen bereits Beeindruckendes leistet. Durch das Zusammenspiel mehrerer AI-Agenten lösen diese Systeme Problemstellungen,

die durch konkrete Zielgrößen definiert sind, das Ausführen von Aktionen erfordern und damit weit über die Generierung von Text oder Bildern hinausgehen. Anwendungen für Agentic AI finden sich aktuell im Kundenservice, der Produktionsoptimierung und im Gesundheitswesen (Harvard Business Review, 2025). Die Verwendung von LLMs hält in der jüngsten Literatur eindrucksvoll bewiesen, dass sie auch auf dem Gebiet der Materialwissenschaften wirksam eingesetzt werden kann. So wurde vor kurzem ein LLM einzig auf Texten einer großen Zahl von Veröffentlichungen aus der Fachliteratur trainiert und war dann in der Lage, die Zusammensetzung und Prozessführung neuer Stähle mit verbesserten mechanischen Eigenschaften vorherzusagen (Tian et al., 2025).

Abbildung 6: Ausgewählte Trends im Bereich AI, dargestellt durch Anzahl der Erwähnungen in der Literatur. (Abfrage mit „material w/3 development“, Stand 12.12.2024)



Wie in Abbildung 6 zu sehen ist, erfuhren die eben diskutierten Themen in den letzten Jahren ein starkes und stark beschleunigtes Wachstum und es ist zu erwarten, dass sich dieses Wachstum in den nächsten Jahren fortsetzen und auf eine Vielzahl von Anwendungsgebieten übertragen wird. Tatsächlich haben diese Trends bereits Einfluss auf die Materialentwicklung Besonders Physics-Informed ML und PINNs scheinen bereits stärker Fuß gefasst zu haben. Für eine weitere Fortsetzung dieser Trends sind allerdings

Rahmenbedingungen zu schaffen, auf die in Abschnitt „AI-Methoden“ eingegangen werden soll.

Neben den oben erwähnten direkt für die Materialentwicklung relevanten Trends sind zwei weitere Forschungsfelder zu nennen, die zumindest indirekt für die Materialentwicklung (und andere verwandte Anwendungsfelder) von Bedeutung sind: Energieeffizienz und Vertrauenswürdigkeit von AI.

Energieeffiziente AI: Aktuell konsumieren Rechenzentren ca. 1,5% des weltweiten Energiebedarfs (EU: 3%, US: 4.4%; (Newsweek, 2025)). Ein weiterer Anstieg wird erwartet, getrieben vor allem von AI. Der Entwurf von Algorithmen, Hardware und Anwendungen unter Beachtung des resultierenden Energieverbrauchs wird daher in Zukunft eine immer größere Rolle spielen. Die EU hat Rechenzentren mit der Energy Efficiency Directive 2024 bereits dazu verpflichtet, jährlich Ihre Kennzahlen betreffend Energieeffizienz zu berichten (European Commission, 2024b). Ein Bereich, in dem diese Optimierung immer schon stattfindet, ist das Rechnen auf eingebetteten Computern (Embedded Computing), wo besonders in tragbaren Geräten der minimale Energieverbrauch ein zentrales Entwurfsziel ist. Zugleich wird der Rechenaufwand von AI-Anwendungen in Disziplinen wie der Materialwissenschaft bisher noch großteils vernachlässigt. Vor allem hinsichtlich des Einsatzes generativer AI gibt es hier also die Notwendigkeit, AI-Methoden und Modelle ressourcenschonend zu entwerfen und einzusetzen.

Trustworthy AI: Mit der zunehmenden Integration von AI- Modellen in größere Prozesse gewinnt die Vertrauenswürdigkeit von Modellergebnissen an Bedeutung. Ein Aspekt von Vertrauenswürdigkeit ist die Nachvollziehbarkeit eines Ergebnisses in Abhängigkeit von den Inputs (explainable AI, xAI). Ein weiterer Aspekt ist die Quantifizierung der Unsicherheit einer Modellaussage (uncertainty quantification). Technisch gesehen sind all diese Aspekte besonders dann wichtig, wenn entweder Entscheidungen mit weitreichenden Konsequenzen getroffen werden oder Modellergebnisse als Eingang für Folgemodelle dienen, d.h. Modelle miteinander zu einer Kette verschaltet werden. (Letzteres ist in der Materialentwicklung bei der Darstellung von Struktur-Eigenschaftsbeziehungen der Fall, weshalb besonders den maschinell auswertbaren Methoden wie uncertainty quantification im Kontext der Materialentwicklung ein hoher Stellenwert zugemessen wird.) Aus Anwender:innenperspektive betrachtet ist die Vertrauenswürdigkeit eine Grundvoraussetzung für den Einsatz von AI. Trustworthy AI ist also ein Forschungsfeld, dass neben technischen auch menschenzentrierte (Fairness, AI Literacy, etc.) und rechtliche Fragestellungen umfasst.

Vielversprechende Materialklassen

Bei der Erhebung des Status Quo in Bezug auf vielversprechende Materialien spielen **drei Kategorien** eine Rolle. Die erste Kategorie umfasst Materialien zur **Ermöglichung neuer Technologien**, die bestehende Technologien mit hohem ökologischem Fußabdruck ersetzen können. Die zweite Kategorie betrifft den **Materialverbrauch und die Auswirkungen der Verwendung spezifischer Materialien auf die Umwelt** aufgrund der Ausgangsstoffe, des Herstellprozesses und der großen Mengen. Unter diese Kategorie fällt die Entwicklung von Materialien, die dadurch vielversprechend sind, dass Ausgangsstoffe mit geringerem Fußabdruck verwendet werden oder der Herstellungsprozess in Hinblick auf den ökologischen Fußabdruck verbessert wird, ohne dabei die Funktionalität zu mindern. Die dritte Kategorie schließlich betrifft die **kritischen Rohstoffe** von großer **wirtschaftlicher Bedeutung, die einem Versorgungsrisiko** aufgrund von geopolitischen Krisen und Handelsabhängigkeiten unterliegen. Zu dieser Kategorie gehören vielversprechende Materialien, die unter Verminderung oder Vermeidung von kritischen Rohstoffen entwickelt werden, um bestehende Materialien mit einem hohen Anteil kritischer Rohstoffe zu ersetzen.

In Bezug auf die erste Kategorie, die **Ermöglichung neuer, umweltfreundlicher Technologien**, spielen alle Materialien eine wichtige Rolle, die bei der Erzeugung und Verteilung von Elektrizität aus nachhaltigen Quellen zum Einsatz kommen. Konkret gehören dazu Halbleiter- und Photoabsorber-Materialien für die Photovoltaik, Permanentmagnete für die Generatoren in Windkraftanalgen, Isolatormaterialien und Elektrobleche für Anschlusspunkte und Transformatoren im Stromnetz sowie Materialien für Bauteile aus der Leistungselektronik wie Dielektrika mit hoher Energiedichte. Thermoelektrische Materialien können helfen, die Energiebilanz von energieintensiven Prozessen zu verbessern, indem sie aus Abwärme Strom erzeugen. Im Bereich der Mobilität spielen alle Batteriematerialien eine wichtige Rolle (Aktivmaterialien für Kathoden und Anoden; Elektrolyte; Separatoren). Unterstützt wird die Umweltfreundlichkeit der Mobilität auch von Leichtbaumaterialien.

In der zweiten Kategorie, bei der es um **die Verminderung des Fußabdrucks bestehender Materialien** geht, stehen Massenmaterialien wie Stahl und Zement im Vordergrund. In diese Klasse fallen auch Glas, Dämm- und Feuerfestmaterialien sowie Silizium und Aluminium.

In der dritten Kategorie, bei der **Vermeidung kritischer Rohstoffe**, spielen Materialien aus der Elektronik-, Energie- und Transportindustrie eine zentrale Rolle, aber auch Stähle, die kritische Rohstoffe als Legierungselement enthalten.

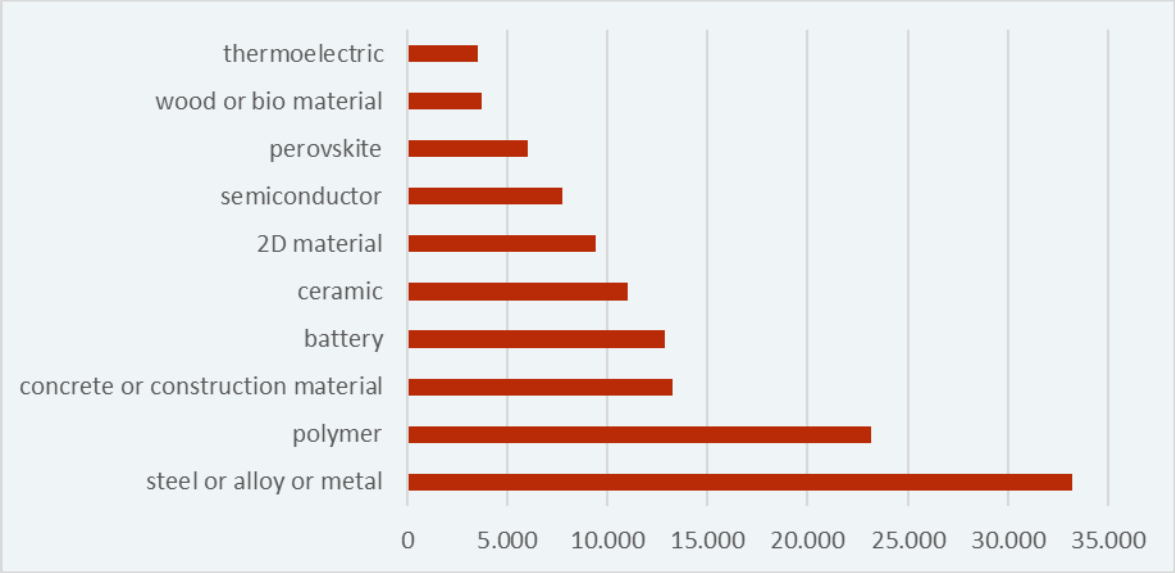
Vielversprechende Materialien zur Ermöglichung neuer Technologien

Bei den vielversprechendsten Materialien zur Ermöglichung neuer Technologien spielen die sogenannten „Innovative Advanced Materials“ (IAM) eine zentrale Rolle. Für die IAM gibt es zwei Schlüsseldokumente der EU: Das „MATERIALS 2030 MANIFESTO“ (Advanced Materials Initiative AMi2030, 2022) zusammen mit der dazugehörigen ”Materials 2030 Roadmap” der Advanced Materials Initiative AMI (AMi2030, 2025). Diese Roadmap stammt von den wichtigsten Key-Playern in Europa aus den Bereichen Industrie (STmicroelectronics, Umicore, Energy Materials Industrial Initiative - EMIRI) und Forschung (University of Oxford/UK, Fraunhofer/Deutschland, CEA/Frankreich, Iberian Nanotechnology Laboratory/Spanien, sowie den European Technology Platforms EUMAT, SUSCHEM und MANUFUTURE). In dieser Roadmap werden neun sogenannte Materials Innovation Markets (MIMs) definiert und für jeden dieser Märkte die wichtigsten Materialklassen angeführt:

- **MIM-1 - Gesundheit/Medizin:** Fortschrittliche Oberflächen, additive Fertigung, funktionale Materialien.
- **MIM-2 - Nachhaltiges Bauen:** Energieeffizienz, Nachhaltigkeit, geringere CO_2-Bilanz, neue Funktionen.
- **MIM-3 - Neue Energien:** Erneuerbare Energien, Energiespeicherung, nachhaltige industrielle Prozesse.
- **MIM-4 - Nachhaltiger Transport:** Null-Emissions-Fahrzeuge (Batterien, Brennstoffzellen, E-Motoren), Leichtbaumaterialien, Leistungselektronik.
- **MIM-5 - Haus/Körperpflege:** Natürliche Inhaltsstoffe, Kreislaufwirtschaft, erneuerbare Materialien, multifunktionale Oberflächen.
- **MIM-6 - Nachhaltige Verpackung:** Erneuerbare/recycelbare Materialien, biologisch abbaubare Stoffe, smarte Lösungen, Ersatz für CMR/SVHC-Stoffe.
- **MIM-7 - Nachhaltige Landwirtschaft:** Sensoren, nachhaltige Polymere, Oberflächen/Filter für Wasser/Luftreinigung.
- **MIM-8 - Nachhaltige Textilien:** Biobasierte Fasern, multifunktionale Oberflächen, smarte E-Textilien.
- **MIM-9 - Elektronik:** Multifunktionale Materialien (Umweltschutz, Wärmeableitung), Beschichtungen/Substrate, CRM-Vermeidung, Wiederverwendung.

Im MATERIALS 2030 MANIFESTO (Advanced Materials Initiative AMi2030, 2022) wird für jeden der MIMs nochmals aufgezeigt, auf welche Weise er zu Nachhaltigkeit und Sicherheit beiträgt sowie den vier Kategorien „circularity of materials“, „zero pollution and non-harmful“, „transparency“ und „traceability and climate contribution“ zuzuordnen ist.

Abbildung 7: Darstellung der häufigsten Materialien, die in der Literatur im Zusammenhang mit AI-gestützter Materialentwicklung genannt wurden.



Ein weiterer wichtiger Aspekt für die Identifikation der vielversprechendsten Materialien ist der Status Quo in der Literatur (entsprechend der Suchanfrage inklusive „sustainable“ in Tabelle 2). Bei der Verwendung von AI für die Entwicklung von grünen Materialien nach Materialklassen ergibt sich dabei folgendes Bild (Abbildung 7): In allen Materialklassen werden bereits AI-Methoden für die Materialentwicklung mit zur Verbesserung der Nachhaltigkeit eingesetzt. Klar führend sind Metalle und metallische Legierungen inklusive Stähle. Ihnen folgen zuerst die Polymere und weiter hinten Baumaterialien (inklusive Zement) und Batterie-Materialien.

Branchenspezifischer Materialverbrauch und Auswirkungen der Verwendung spezifischer Materialien auf den Klimawandel

Um den branchenspezifischen Hebel der Entwicklung von Materialien in Bezug auf ihre Nachhaltigkeit in Österreich zu klären, wurde in einem ersten Schritt der Materialverbrauch einzelner Branchen im Rahmen einer Materialflussanalyse (MFA) untersucht. Bei der Zuordnung der Daten in diesem Forschungsbereich stellt die Abgrenzung der Begriffe und die Bildung der Kategorien eine bekannte Herausforderung dar und unterscheidet sich teilweise deutlich von den Begriffen und Kategorien in der Materialforschung. Insbesondere umfasst der Begriff Material hier sowohl Rohstoffe als auch Güter und geht deshalb weit über die IAM hinaus.

Abbildung 8: Inländischer Materialverbrauch (DMC) und Materialfußabdruck (MF) Österreich 2020. Quelle: (Statistik Austria 2024). „Nicht zuordenbar“ umfasst gehandelte Güter, die wegen einer unbekannten Materialzusammensetzung bzw. aus Gründen der Geheimhaltung keiner der anderen Gruppen zugeordnet werden können. DMC umfasst all jene Materialien, die innerhalb der Österreichischen Grenzen in Produktion und Konsum verbraucht wurden. MF umfasst alle Rohstoffe, die weltweit entnommen und für den inländischen Endkonsum verbraucht wurden.

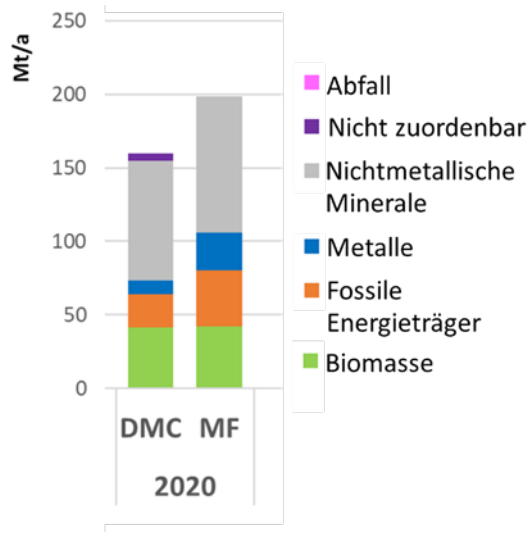


Abbildung 8 stellt den inländischen Materialverbrauch (DMC) u. Materialfußabdruck (MF) in Österreich dar. Im Jahr 2022 lag der DMC in Österreich bei 154 Millionen Tonnen (Mt), wobei **nicht-metallische Mineralstoffe** den größten Anteil ausmachten (83 Mt, 54% des DMC). **Biomasse** folgte mit 39 Mt (25%), und **fossile Energieträger** und **Metalle** kommen auf 21 Mt bzw. 10 Mt. Zwischen 2000 und 2022 stieg der Verbrauch von Metallen (+49%)

und Biomasse (+15%), während der Verbrauch an nicht-metallischen Mineralstoffen (-7%) und fossilen Energieträgern (-11%) sank. Aufschlussreich ist es, den DMC mit dem MF zu vergleichen, der alle Rohstoffe berücksichtigt, die weltweit entnommen und für den inländischen Endkonsum verbraucht wurden: Dieser ist bei Metallen fast 3 Mal so groß mit ca. 27 Mt/a (Statistik Austria, 2024).

Der Großteil der Materialien wird aus österreichischen Ressourcen entnommen. Zugleich spielt der Außenhandel eine wichtige Rolle. Während Österreich im Jahr 2000 etwa 67 Mt an Materialien importierte, stieg diese Zahl bis 2022 auf 92 Mt (74% der Inlandsentnahme). Die Exporte erhöhten sich im gleichen Zeitraum von 40 Mt auf 63 Mt (+55%). **Die Exporte wachsen somit schneller als die Importe, bleiben jedoch mengenmäßig um etwa ein Drittel geringer.**

Eine Analyse des Materialfußabdrucks der ökonomischen Sektoren Österreichs zeigte den **größten Materialfußabdruck** für folgende Sektoren: Bauwirtschaft, Bergbau, Nahrungsmittelproduktion (Landwirtschaft und Nahrungsmittelindustrie) und Gesundheitssektor. Bei der Auswertung der **CO_2-Emissionen** liegen der Energiesektor und die Bauwirtschaft vorne. Dahinter folgen der Gesundheitsbereich, die Herstellung und Aufbereitung von Kohle und Erdöl, die Lebensmittelproduktion und die Fahrzeugproduktion.

Während der Nahrungsmittelsektor hauptsächlich Biomasse verbraucht, sind es beim Bergbau und in der Bauwirtschaft vor allem nicht-metallische Mineralstoffe**. Die verarbeitende Industrie verbraucht den größten Teil der Metalle**, sowie auch deutliche Anteile der anderen drei Materialgruppen.

Studien zur Kreislaufwirtschaft zeigen, dass etwa **ein Viertel der Materialinputs in Österreich für die Energiebereitstellung** (Nahrungs- und Futtermittel und fossile Energie) verwendet werden, wobei diese Materialien größtenteils in Emissionen (vorwiegend CO_2) umgewandelt und derzeit nicht rückführbar sind. **Drei Viertel der Materialinputs** werden stofflich genutzt, davon 64 % für **den Aufbau und die Sanierung von Beständen wie Gebäude und Infrastruktur**, die für Jahrzehnte akkumuliert bleiben.

Nur etwa ein Viertel der Materialien, die in Bestände eingehen, wird später durch Abbrüche freigesetzt. **Rund 30 % der Abfälle fließen ins Recycling, was jedoch nur 9 % der gesamten Materialinputs ausmacht** (Zirkularitätsrate).

Die **gebaute Infrastruktur** stellt mit 91 % den **größten Anteil der Bestandsmaterialien** dar, darunter Gebäude, Straßen und Energieinfrastruktur. Weitere Kategorien sind Transportfahrzeuge (3 %), nicht-technische Produkte wie Möbel (3 %) sowie technische Geräte (2 %).

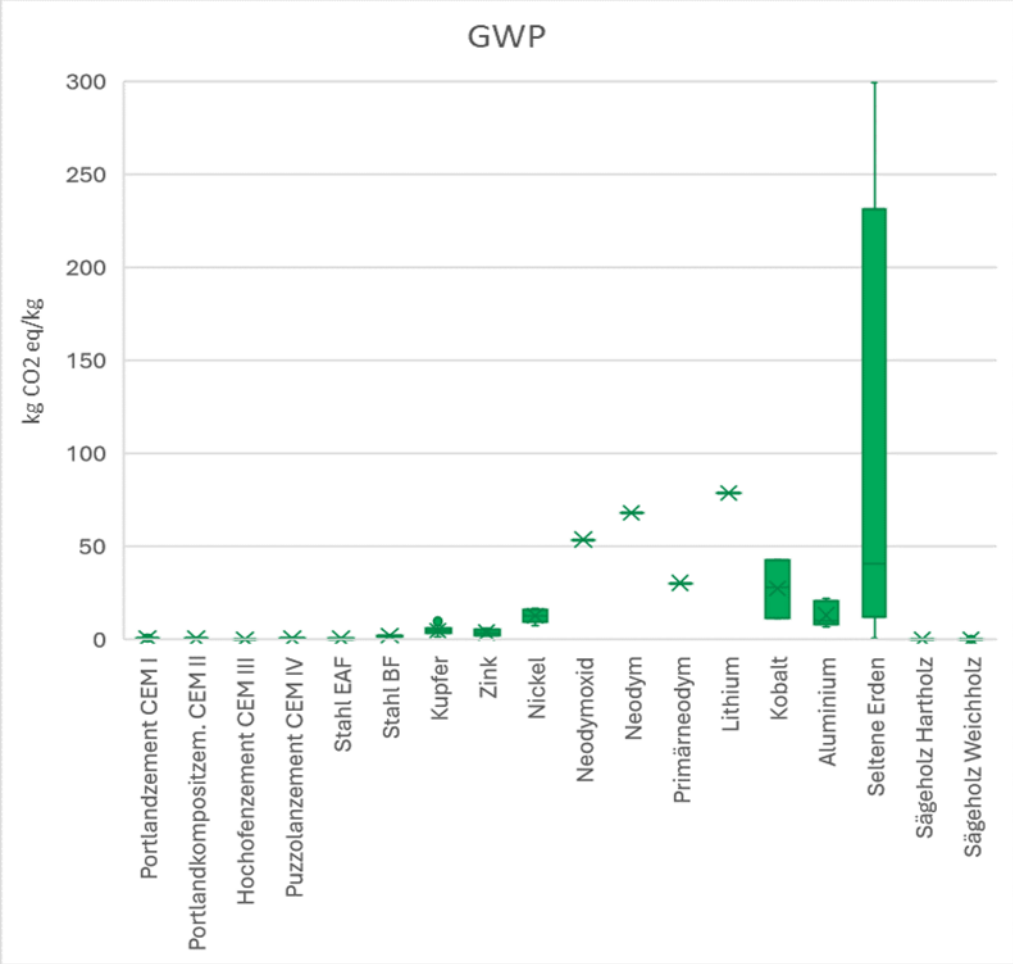
Bestände verursachen auch langfristig hohe Materialflüsse**. Etwa die Hälfte der Materialinputs dient der Erhaltung bestehender Strukturen**. Zudem benötigen Bestände zusätzliche materielle Produkte (z. B. Möbel und Elektrogeräte) sowie Energie, um Geräte und Maschinen zu betreiben.

Diese Faktoren verdeutlichen die zentrale Rolle der Bestände für eine nachhaltige Ressourcennutzung und den Übergang zu einer funktionierenden Kreislaufwirtschaft.

Zur Einschätzung der Umweltauswirkungen der ausgewählten Materialien wurden die Climate Change-Werte aus den LCA-Datenbanken Ecoinvent und Sphera verwendet. Die Wirkungsabschätzung wurde mit der **Environmental Footprint Methode** durchgeführt. Zusätzlich wurden auch LCA-Ergebnisse aus einschlägigen wissenschaftlichen Publikationen verwendet.

Die LCA-Analyse hinsichtlich der Auswirkung auf den Klimawandel ist in Abbildung 9 dargestellt.

Abbildung 9: Klimawirkung (Global warming potential (GWP)) von ausgewählten Materialien in kg CO2 eq /kg.

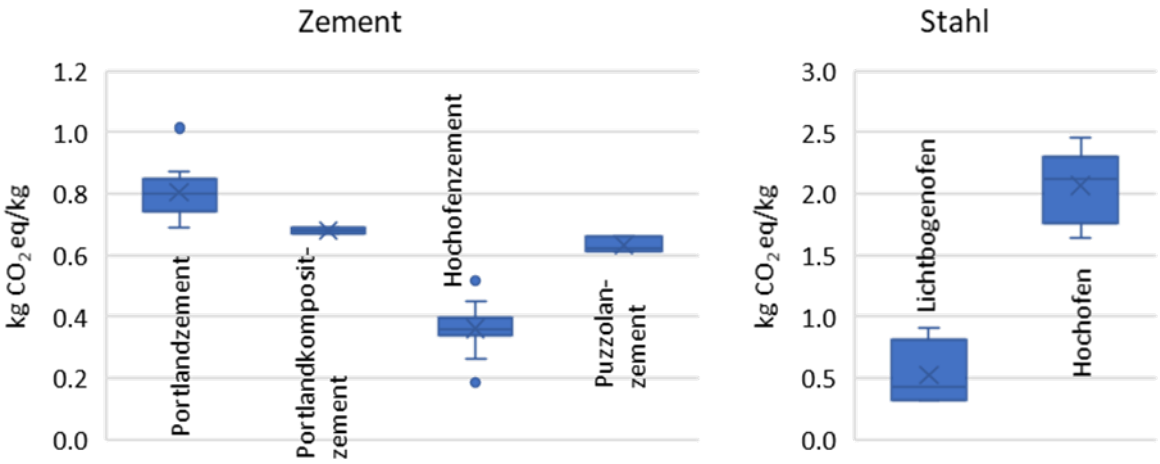


Die Materialien mit der größten spezifischen Auswirkung auf den Klimawandel sind:

- die Gruppe der seltenen Erden (21-4900 kg CO_2 eq/kg),
- Lithium (79 kg CO_2 eq/kg),
- Neodym (54-68 kg CO_2 eq/kg),
- Kobalt (12-43 kg CO_2 eq/kg),
- Aluminium (7-23 kg CO_2 eq/kg),
- Nickel (8-17 kg CO_2 eq/kg).

Im Vergleich dazu liegt die Klimawirkung von Stahl je nach Produktionswese bei 0.4-0.8 kg CO_2 eq/kg (Lichtbogenofen) und zwischen 1.7 - 2.3 kg CO_2 eq/kg (Hochofen). Bei Zement liegt die Klimawirkung je nach Typ zwischen 0.2 und 1.0 kg CO_2 eq/kg (Abbildung 10).

Abbildung 10: Bandbreite der Climate Change-Ergebnisse [kg CO2 eq/kg] für Zement (links) und Stahl (rechts).



Ausschlaggebend für den Hebel eines Materials bzw. einer Branche in Bezug auf die österreichische CO_2 Bilanz ist letztendlich die Verbindung von Materialverbrauch mit der spezifischen Klimawirkung. Betrachtet man hier die neuesten verfügbaren Daten aus 2022, zeigt sich, dass die **Stahl- und Eisenproduktion** mit 12.3 Mio. t. CO_2 Äquivalent ganz klar vor der Zementproduktion (1.8 Mio. t) liegt und **knapp 40%** der Gesamt-CO_2-Emission des Sektors Energie- und Industrie ausmachen (Umweltbundesamt, 2024).

Kritische Rohstoffe

In der EU Liste der kritischen Rohstoffe von 2023 sind 34 Rohstoffe als kritisch klassifiziert (CRM Alliance, 2025)(SCRREEN, 2025). Darunter finden sich Graphit und einige Metalle, z.B. Bauxite, Kupfer, Nickel, Kobalt, die seltenen Erden, Platinmetalle oder Lithium. Mit der Industrialisierung und dem Ausbau der Infrastruktur in Schwellenländern sowie der Energiewende in industrialisierten Ländern wird eine **stark steigende Nachfrage** nach diesen Rohstoffen erwartet, insbesondere bei **Lithium, Kupfer, Graphit und Nickel**. Die gesamtwirtschaftliche Materialflussrechnung fokussiert auf große Materialflüsse, wobei **Metalle** mit nur 7% zum DMC beitragen. Ihre Nutzung hat derzeit erhebliche negative Auswirkungen auf Umwelt und Gesundheit, gleichzeitig sind sie **für die Wirtschaftsentwicklung und Industrieproduktion von strategischer Bedeutung**. Unter den Metallen fallen die Stähle besonders ins Gewicht: Sie umfassen 85% des DMC von

Metallen und enthalten kritische Rohstoffe wie Kobalt oder Nickel als Legierungselemente. Unter den Nichteisenmetallen wiederum spielt Bauxit/Aluminium eine wesentliche Rolle, das selbst zu den strategischen Rohstoffen zählt, die in der EU als kritisch gelten. Unter den Materialien für die Elektronik sind beispielsweise Metalle wie Indium, Gallium und Seltene Erden für die Herstellung von Displays, Halbleitern und Solarzellen unerlässlich. Der Energiebereich benötigt kritische Rohstoffe wie Lithium, Kobalt und Nickel für Batterien und andere Energiespeichertechnologien, während die Transportindustrie auf diese Rohstoffe für Elektrofahrzeuge (z.B. bei Permanentmagneten), andere innovative Antriebssysteme und Leichtbau angewiesen ist.

Die genannten Materialklassen und Branchen sind dadurch vielversprechend, dass durch die Entwicklung und Einsatz neuer Materialien mit einem geringeren Anteil kritischer Rohstoffe die Versorgungssicherheit verbessert und der ökologische Fußabdruck verringert werden kann.

Anwendungsfälle

In diesem Abschnitt wird auf derzeitige und künftige Anwendungen von AI in der Entwicklung nachhaltiger Materialien eingegangen. Dazu wurden die im Abschnitt „Literaturrecherche“ genannten Quellen (Literatur, Umfrage, Fokusgruppenworkshop und Expert:innen-Interviews) herangezogen, hinsichtlich der Anwendungen analysiert und die gefundenen Anwendungsfälle in die Kategorien Materialdesign, Prozessoptimierung und Lebenszyklusanalyse unterteilt.

Materialentwicklung

Wie in anderen Forschungsdisziplinen kann AI ganz generell das Arbeiten in Forschung und Entwicklung erleichtern, z.B. durch automatisierte Literaturrecherchen, Unterstützung beim Verfassen von Berichten oder automatische Strukturierung, Annotierung und Austausch von (Mess-) daten. Im speziellen Kontext der Materialentwicklung können AI-Algorithmen genutzt werden, um neue Werkstoffe zu entwerfen, die sowohl die gewünschten Eigenschaften (z.B. Festigkeit, Leitfähigkeit) als auch Nachhaltigkeitskriterien (z.B. Recyclingfähigkeit, Bioabbaubarkeit) erfüllen.

Beispiele hierfür sind:

- **Vorhersage von Materialeigenschaften:** AI-Algorithmen können riesige Datensätze analysieren, um Beziehungen zwischen der Zusammensetzung, Verarbeitung und den resultierenden Eigenschaften (also die Struktur-Eigenschafts-Beziehungen) von Metalllegierungen zu erkennen. Dies kann z.B. dazu eingesetzt werden, die Auswirkung erhöhter Anteile unerwünschter Begleitelemente (aufgrund erhöhten Rezyklatanteils) auf die Werkstoffeigenschaften zu prognostizieren, aber auch zur zielgerichteten
- **Optimierung der Zusammensetzung:** AI kann die optimale Zusammensetzung einer Legierung bestimmen, um maßgeschneiderte Eigenschaften wie z.B. hohe Festigkeit, Zähigkeit, Korrosionsbeständigkeit oder spezifische magnetische Eigenschaften zu erzielen. Dies ist besonders nützlich bei der Entwicklung von Materialien für extreme Umgebungen oder spezielle Anwendungen. Dies geschieht zuerst durch
- **Virtuelles Screening:** AI-Modelle können verwendet werden, um eine große Anzahl potenzieller Legierungen virtuell zu screenen, wodurch die Anzahl der erforderlichen experimentellen Versuche reduziert wird. Dies beschleunigt den Entwicklungsprozess erheblich und spart Kosten.
- **Materials Acceleration Platform** (MAP): Um die AI nahtlos in das Materialdesign einzubinden, braucht es Plattformen für beschleunigte Materialentwicklung (MAPs). Auf einer MAP werden die Dateneinspeisung und das Datenmanagement in eine Infrastruktur für Simulation und AI-basierte Modellierung integriert. Dadurch können automatisierte Workflows umgesetzt werden, bei denen Daten aus Literatur und Experiment mit Simulationen verknüpft werden und auf automatisierte Weise in Workflows für AI-basierte Materialentwicklung eingebunden werden.
- **Self-driving Labs:** Die nächste Stufe der Einbindung von AI stellen Self-driving Labs dar. Dabei wird eine MAP mit einem Roboter-basierten Labor verbunden. Auf diese Weise kann das vorhergesagte neue Material direkt hergestellt und charakterisiert werden. In weitere Folge kann die AI Methoden des Active Learning verwenden, um in einem iterativen Prozess die Ergebnisse des Labors für eine nächste Stufe der Material- und Prozessoptimierung zu verwenden: durch Vergleich des Vorhergesagten mit dem tatsächlichen Ergebnis kann sich das AI-Modell selbst verbessern und damit sehr effizient das optimale „echte“ Material entwickeln.
- **Materialcharakterisierung:** Erstellung und Rekonstruktion von Mikrostrukturen durch AI-gestützte Bildverarbeitung als wichtiger Arbeitsschritt für die Ermittlung von Struktur-Eigenschafts-Beziehungen.

Prozessoptimierung

AI kann helfen, Produktionsprozesse effizienter und ressourcenschonender zu gestalten, indem sie beispielsweise den Energieverbrauch minimiert oder Abfall reduziert.

Beispiele hierfür sind:

- **Prozesssteuerung:** Mittels AI können Modelle abgeleitet werden, mittels derer die Prozessparameter während der Werkstoffverarbeitung in Echtzeit angepasst werden können. Dadurch können z.B. Schwankungen in der Zusammensetzung des Vormaterials, welche insbesondere in Verbindung mit der Kreislaufwirtschaft stark im Zunehmen sind, oder Abweichungen in früheren Prozessschritten (z.B. stärkere Auskühlung durch längere Transferzeiten zwischen Einzelprozessen) kompensiert werden. Dies führt zu gleichmäßigerer Qualität und geringeren Ausschussraten aufgrund der gleichbleibenden Mikrostruktur und Werkstoffeigenschaften. Damit werden Prozesse effizienter und ressourcenschonender.
- **Fehlererkennung und Zustandsüberwachung von Prozessen und Produkten:** Durch die Analyse von Sensordaten und Bildern über automatisierte Mustererkennung bzw. Erkennung von Abweichungen können AI-Systeme Fehler in Produktionsprozessen erkennen, wie z.B. Risse, Porosität oder Bildung unerwünschter Phasen. Im Idealfall können Fehlerfälle klassifiziert und spezifischen Ursachen zugeordnet werden, wodurch zielgerichtete Abhilfemaßnahmen eingeleitet werden können.
- **Auswertung von Messungen:** insbesondere Bildanalyse und -segmentierung in der Materialcharakterisierung.
- **Entdeckung neuer bzw. alternativer Synthesewege und Prozessrouten** für Materialien zur Erreichung der gewünschten Eigenschaften.
- **AI-basiertes Sortieren** verschiedener Bestandteile im Abfall, um Wertstoffe zu trennen und deren Wiederverwendung bei der Produktion neuer Materialien zu ermöglichen.

Umweltverträglichkeit

Um bei der AI-basierten Materialentwicklung die Umweltauswirkungen direkt zu berücksichtigen, können umweltspezifische Daten direkt in den Entwicklungsprozess mit eingebunden werden. AI-Modelle können mithilfe von LCA-Daten den gesamten Lebenszyklus eines Werkstoffs analysieren, von der Rohstoffgewinnung über die Verarbeitung bis hin zur Entsorgung oder dem Recycling. Dadurch können die Umweltauswirkungen bewertet und nachhaltigere Materialauswahlentscheidungen

getroffen werden. Auf diese Weise kann mithilfe der AI ein Material z.B. direkt in Bezug auf den CO_2-Fußabdruck optimiert werden.

Rechtlicher Rahmen

Dieser Abschnitt gibt einen Überblick über die wichtigsten rechtlichen Rahmenbedingungen bei der AI-basierten Entwicklung grüner Materialien. Die vollständige juristische Studie einschließlich Quellenangaben befindet sich im Anhang „Juristische Studie“.

Regelungen zur Künstlichen Intelligenz auf nationaler (Österreich) und EU-Ebene

Der EU Artificial Intelligence Act (AIA) und seine Auswirkungen auf die AI-gestützte Materialentwicklung

Der EU Artificial Intelligence Act (AIA) (European Commission, 2024h) ist eine Verordnung, die einen Rahmen für die Regulierung von AI-Systemen in der EU schafft. Er gilt seit August 2024 und wird in den kommenden Jahren vollständig umgesetzt. Der AIA zielt darauf ab, alle Arten von AI in verschiedenen Sektoren abzudecken, einschließlich der Entwicklung neuer Materialien.

Ausnahmen und risikobasierter Ansatz

Der AIA sieht Ausnahmen für bestimmte Bereiche vor, wie z.B. militärische und sicherheitsrelevante Zwecke, wissenschaftliche Forschung und Entwicklung sowie die persönliche Nutzung von AI-Systemen.

Der AIA verfolgt einen risikobasierten Ansatz, der vier Risikostufen vorsieht:

- **Unannehmbares Risiko:** AI-Systeme, die als inakzeptabel riskant eingestuft werden, sind verboten. Dazu gehören Systeme, die das menschliche Verhalten manipulieren oder täuschen.
- **Hohes Risiko:** AI-Systeme, die in sicherheitskritischen Bereichen eingesetzt werden oder als solche gelten, unterliegen strengen Auflagen. Dazu gehören

Risikobewertungen, hochwertige Datensätze, Protokollierung von Aktivitäten und menschliche Aufsicht.
- **Begrenztes Risiko:** Für AI-Systeme mit begrenztem Risiko gelten weniger Verpflichtungen, insbesondere im Hinblick auf die Transparenz.
- **Minimales oder kein Risiko:** AI-Systeme mit minimalen Auswirkungen unterliegen kaum oder gar keinen spezifischen Vorschriften des AIA.

Produkthaftungsrichtlinie (PH-RL)

Die neue PH-RL (European Commission, 2024g), die im Oktober 2024 verabschiedet wurde, ist relevant für die AI-basierte Materialentwicklung. Sie gilt für Produkte, die nach dem 9. Dezember 2026 in Verkehr gebracht werden, und umfasst auch Software, einschließlich AI-Systeme. Auf nationaler Ebene ist Eine Umsetzung im Produkthaftungsgesetz zu erwarten.

Trainingsdaten und Datenschutz: Überblick über den einschlägigen Rechtsrahmen in der EU

Die Verwendung von AI in der Materialentwicklung erfordert den Zugang zu großen Datensätzen, die oft personenbezogene Daten enthalten. Daher ist der rechtliche und ethische Umgang mit Daten von entscheidender Bedeutung.

Die wichtigsten relevanten Rechtsinstrumente sind:

- **DSGVO:** Die Datenschutzgrundverordnung regelt die Verarbeitung personenbezogener Daten in der EU und legt strenge Regeln für Datenerhebung, Einwilligung und Verarbeitung fest (European Commission, 2024d).
- **ePrivacy-Richtlinie:** Diese Richtlinie regelt den Schutz der Privatsphäre in der elektronischen Kommunikation und ist relevant für AI-Systeme, die Daten über Online-Kommunikation sammeln (European Commission, 2002).
- **Data Governance Act (DGA):** Der DGA fördert den ethischen Austausch und die Wiederverwendung von Daten in der EU (European Commission, 2022b).
- **Data Act (DA):** Der DA konzentriert sich auf den fairen Zugang und die faire Nutzung von Daten in der gesamten EU (European Commission, 2024c).
- **Ethikleitlinien für vertrauenswürdige AI:** Diese Leitlinien skizzieren einen Rahmen für vertrauenswürdige AI, der auf ethischen Grundsätzen wie Fairness, Transparenz und Rechenschaftspflicht basiert (European Commission, 2019).

Künstliche Intelligenz und geistiges Eigentum bei der Entwicklung grüner Materialien

Im Bereich des geistigen Eigentums (Intellectual Property, IP) sind bei der AI-gestützten Entwicklung grüner Materialien zwei Hauptaspekte zu berücksichtigen:

- **IP-Rechte an den Trainingsdaten:** Wie können die Daten geschützt werden, die zum Trainieren der AI-Systeme verwendet werden?
- **IP-Schutz für AI-generierte Ergebnisse:** Wer hat die Rechte an den Ergebnissen, die von der AI erzeugt werden?

Trainingsdaten und geistiges Eigentum

In der EU können Trainingsdaten durch verschiedene IP-Rechte geschützt sein:

- **Urheberrecht:** Schützt kreative Werke, wie z. B. Texte, Bilder oder Musik.
- **Verwandte Schutzrechte:** Schützen die Interessen von Personen, die zur Veröffentlichung oder Herstellung von Werken beitragen (z. B. ausübende Künstler, Tonträgerhersteller).
- **Datenbankrecht sui generis:** Schützt Datenbanken, in die erheblich investiert wurde.
- **Marken:** Schützen Markennamen und Logos.
- **Geschmacksmuster:** Schützen das äußere Erscheinungsbild eines Produkts.
- **Patente:** Schützen technische Erfindungen.
- **Geschäftsgeheimnisse:** Schützen vertrauliche Geschäftsinformationen.

EU-Rechtsakte zum Schutz von Trainingsdaten

Mehrere EU-Rechtsakte sind relevant für den Schutz von Trainingsdaten:

- **Richtlinie über die Informationsgesellschaft:** Harmonisiert die wichtigsten Aspekte des Urheberrechts.
- **Datenbankrichtlinie:** Schützt Datenbanken, die eine erhebliche Investition darstellen.
- **Richtlinie über den digitalen Binnenmarkt (DSM-RL):** Enthält Ausnahmen für Text- und Data-Mining zu Forschungszwecken.
- **Künstliche Intelligenz Verordnung (AIA):** Verpflichtungen zur Einhaltung des Urheberrechts bei AI-Modellen mit allgemeinem Verwendungszweck.

Schutz des geistigen Eigentums für AI-generierte Ergebnisse

Die Frage, wie AI-generierte Ergebnisse geschützt werden können, ist komplex und noch nicht abschließend geklärt. Einige potenzielle Schutzmechanismen sind:

- **Urheberrecht:** Aufgrund der Anforderungen an menschliche Urheberschaft und Originalität ist es jedoch fraglich, ob AI-generierte Ergebnisse urheberrechtlich geschützt werden können.
- **Patente:** Die Patentierung von AI-Erfindungen ist ebenfalls schwierig, da die Erfindungen neu, erfinderisch und gewerblich anwendbar sein müssen.
- **Verwandte Schutzrechte:** Diese könnten für bestimmte Arten von AI-generierten Inhalten relevant sein, wie z. B. Audio- und Videoaufnahmen.
- **Datenbankrecht sui generis:** Dieses Recht könnte relevant sein, wenn die AI-generierten Ergebnisse als Datenbank eingestuft werden können.

Herausforderungen und mögliche Lösungen

Die bestehenden IP-Rechte sind nicht immer ideal auf AI-generierte Ergebnisse zugeschnitten. Daher wird die Einführung eines speziellen Schutzrechts sui generis für AI-Outputs diskutiert. Ein solches Recht könnte Investitionen in AI-Systeme schützen und Anreize für Innovationen schaffen.

Quellen und Verweise zum rechtlichen Rahmen

Tabelle 16: Tabelle der erwähnten Rechtsakte:

Rechtsquelle	Abkürzung	Langname
Artificial Intelligence Act	AIA	Verordnung (EU) 2024/1689 des Europäischen Parlaments und des Europäischen Rates vom 13. Juni 2024zur Festlegung harmonisierter Vorschriften für künstliche Intelligenz und zur Änderung der Verordnungen (EG) Nr. 300/2008, (EU) Nr. 167/2013, (EU) Nr. 168/2013, (EU) 2018/858, (EU) 2018/1139 und (EU) 2019/2144 sowie der Richtlinien 2014/90/EU, (EU) 2016/797 und (EU) 2020/1828 (Verordnung über künstliche Intelligenz)
Produkthaftungsrichtlinie	PH-RL	Richtlinie (EU) 2024/2853 des Europäischen Parlaments und des Europäischen Rates vom 23. Oktober 2024 über die Haftung für fehlerhafte Produkte und zur Aufhebung der Richtlinie 85/374/EWG des Rates
Produkthaftungsgesetz	PHG	Bundesgesetz vom 21. Jänner 1988 über die Haftung für ein fehlerhaftes Produkt (Produkthaftungsgesetz)
Datenschutzgrundverordnung	DSGVO	Verordnung (EU) 2016/679 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 27. April 2016 zum Schutz natürlicher Personen bei der Verarbeitung personenbezogener Daten, zum freien Datenverkehr und zur Aufhebung der Richtlinie 95/46/EG (Datenschutz-Grundverordnung)
ePrivacy-Richtlinie	“Cookie-Richtlinie”	Richtlinie 2002/58/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 12. Juli 2002 über die Verarbeitung personenbezogener Daten und den Schutz der Privatsphäre in der elektronischen Kommunikation (Datenschutzrichtlinie für elektronische Kommunikation)
Data Governance Act	DGA	Verordnung (EU) 2022/868 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 30. Mai 2022 über europäische Daten-Governance und zur Änderung der Verordnung (EU) 2018/1724 (Daten-Governance-Rechtsakt)
Data Act	DA	Verordnung (EU) 2023/2854 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 13. Dezember 2023 über harmonisierte Vorschriften für einen fairen Datenzugang und eine faire Datennutzung sowie zur Änderung der Verordnung (EU) 2017/2394 und der Richtlinie (EU) 2020/1828 (Datenverordnung)
Richtlinie über die Informationsgesellschaft	-	Richtlinie 2001/29/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 22. Mai 2001 zur Harmonisierung bestimmter Aspekte des Urheberrechts und der verwandten Schutzrechte in der Informationsgesellschaft
Richtlinie 2006/116/EG	-	Richtlinie 2006/116/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 12. Dezember 2006 über die Schutzdauer des Urheberrechts und bestimmter verwandter Schutzrechte
Richtlinie 96/9/EG	“Datenbank-Richtlinie”	Richtlinie 96/9/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 11. März 1996 über den rechtlichen Schutz von Datenbanken

Rechtsquelle	Abkürzung	Langname
Urheberrechtsgesetz	UrhG	Bundesgesetz über das Urheberrecht an Werken der Literatur und der Kunst und über verwandte Schutzrechte (Urheberrechtsgesetz)
Richtlinie (EU) 2015/2436	-	Richtlinie (EU) 2015/2436 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 16. Dezember 2015 zur Angleichung der Rechtsvorschriften der Mitgliedstaaten über die Marken
Richtlinie 98/71/EG	-	Richtlinie 98/71/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 13. Oktober 1998 über den rechtlichen Schutz von Mustern und Modellen
Verordnung (EU) 2017/1001	-	Verordnung (EU) 2017/1001 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 14. Juni 2017 über die Unionsmarke
Verordnung (EG) Nr. 6/2002	-	Verordnung (EG) Nr. 6/2002 des Rates vom 12. Dezember 2001 über das Gemeinschaftsgeschmacksmuster
Markenschutz-gesetz	MSchG	Markenschutzgesetz 1970
Musterschutz-gesetz	MuSchG	Bundesgesetz vom 7. Juni 1990 über den Schutz von Mustern (Musterschutzgesetz 1990 - MuSchG)
Patentgesetz	PatG	Patentgesetz 1970
Europäisches Patentüberein-kommen	EPÜ	Übereinkommen über die Erteilung europäischer Patente (Europäisches Patentübereinkommen) vom 5. Oktober 1973 in der Fassung der Akte zur Revision von Artikel 63 EPÜ vom 17. Dezember 1991 und der Akte zur Revision des EPÜ vom 29. November 2000
Richtlinie (EU) 2016/943	-	Richtlinie (EU) 2016/943 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 8. Juni 2016 über den Schutz vertraulichen Know-hows und vertraulicher Geschäftsinformationen (Geschäftsgeheimnisse) vor rechtswidrigem Erwerb sowie rechtswidriger Nutzung und Offenlegung
Richtlinie (EU) 2019/790	DSM-RL	Richtlinie (EU) 2019/790 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 17. April 2019 über das Urheberrecht und die verwandten Schutzrechte im digitalen Binnenmarkt und zur Änderung der Richtlinien 96/9/EG und 2001/29/EG

4 Schlussfolgerungen – Entwicklungsbedarf

AI-Methoden

AI wird, wie in dieser Studie gezeigt wird, im internationalen Kontext bereits breit in der Materialentwicklung eingesetzt und es ist nicht zu erwarten, dass sich dieser Trend verlangsamt oder endet. An dieser Stelle sollen mögliche zukünftige Entwicklungen in diesem Bereich antizipiert und auf den dafür notwendigen Entwicklungsbedarf hingewiesen werden.

Betrachtet man den Status Quo (Abschnitt „Potentiell passende AI Methode“), sieht man deutlich, dass neuronale Netzwerke am stärksten vertreten sind und am stärksten wachsen. Dieser Trend ist sicherlich noch nicht zu Ende, und es sind weitere Entwicklung auf Basis dieser Technologie zu erwarten. Insbesondere ist zu vermuten, dass Reinforcement Learning (Sutton & Barto, 2018) einen stärkeren Einsatz finden wird. Reinforcement Learning ist vor allem dann von Nutzen, wenn der Zusammenhang zwischen den zu bestimmenden Stell- und den zu erreichenden Zielgrößen nicht explizit bekannt ist, aber recheneffizient simuliert (oder zumindest über ein Ersatzmodell approximiert) werden kann. Reinforcement Learning ist besonders geeignet für die Optimierung von Prozessen, kann aber auch bei der Suche nach neuen Materialien eingesetzt werden (Mills et al., 2022). Das derzeitige starke Wachstum des Reinforcement Learning legt nahe, dass auch dessen Einsatz in Anwendungsgebieten wie der Materialentwicklung noch weiter steigen wird. Wie in Abschnitt „Generalisierbarkeit und Übertragbarkeit der AI Methoden“ erwähnt, gibt es in der Materialentwicklung eine Vielzahl von für die jeweiligen Aufgaben maßgeschneiderten Anpassungen generischer Modellstrukturen wie z.B. Graph Neural Networks (M3GNet und CHGNet). Inwieweit Reinforcement Learning solche maßgeschneiderten Anpassungen erfordert, ist eine offene Forschungsfrage.

Besondere Aufmerksamkeit sollte den in Abschnitt „Aktuelle Trends im Bereich der AI-Methoden mit möglicher Relevanz für die Materialentwicklung“ identifizierten Trends beigemessen werden. Tatsächlich besitzen jene ausgewählten Trends (Physics-Informed ML, Physics-Informed Neural Networks, Causal ML, Hybrid ML und generative AI) ein

großes Potential für die Materialentwicklung, deren Simulationsaufgaben mitunter sehr komplex oder rechenaufwändig sind (z.B. Molekulardynamik-Simulationen, automatisierte Erstellung analytischer Modelle, Beschleunigung rechenintensiver und komplexer Simulationsteile bei FEM- und CFD-Simulationen). Simulationen mittels AI direkt oder indirekt zu beschleunigen hat folglich eine hohe Priorität. Den Simulationsaufwand direkt zu reduzieren kann mittels Ersatzmodellen innerhalb des Hybrid-Modelling-Ansatzes geschehen, worin einzelne Teile eines komplexen mechanistischen Modells durch datengetriebene Modelle ersetzt werden. Indirekt lässt sich der Simulationsaufwand reduzieren, indem man die Anzahl der nötigen Simulationen reduziert, z.B. durch effiziente Entwicklungszyklen in Materials Discovery, also der Entdeckung völlig neuer Materialien. Die datengetriebenen Modelle selbst können PINNs umfassen, aber auch mittels Physics-Informed ML (für bessere Extrapolationseigenschaften und physikalische Konsistenz) oder Causal ML (für bessere Generalisierbarkeit und die effektive Nutzung von öffentlichen Datensätzen mit unterschiedlichen Verteilungen; Stichwort Transfer Learning) erzeugt werden.

Damit sich diese Potentiale entfalten können, sind eine Reihe von Fragen zu beantworten und Hürden zu überwinden. Zum einen erfordern die Ansätze des Physics-Informed ML, Causal ML und Hybrid Modelling Fachwissen aus der Materialforschung, um im Bereich der Materialentwicklung eingesetzt werden zu können. Dabei ist zu erwarten, dass die Methoden auf den jeweiligen Anwendungsfall maßgeschneidert werden müssen. Hier sollten Förderprogramme unterstützen, die eine Verwendung dieser Ansätze im Bereich Materialentwicklung durch Verknüpfung von Materialwissen und AI-Expertise ermöglichen und die ein möglichst breites Spektrum von Anwendungen in diesem Gebiet abdecken. Besonderes Potenzial haben hier von Materialien mit hoher Komplexität in Bezug auf die chemische Zusammensetzung (z.B. Vielkomponentenlegierungen), Mikrostruktur (z.B. Stähle) oder Herstellungsroute (z.B. Halbleiter).

Neben der Lösung von Problemen in den jeweiligen Anwendungen gibt es auch grundlagenwissenschaftliche Fragestellungen zu beantworten: Konkret ist bei PINNs bekannt, dass ihre Anwendung auf Vorwärtsprobleme mit großen Trainingsschwierigkeiten einhergeht (Rohrhofer et al., 2022) (Lu & Wang, 2021) (Krishnapriyan et al., 2021) (Daw et al., 2022). Inwieweit diese in Problemen in der Materialentwicklung auftreten und durch die existierenden Lösungen umgangen werden können bzw. die Entwicklung neuer Lösungen erfordern, muss in separaten Studien erforscht werden. Da diese Studien an der Grenze zwischen angewandter und

Grundlagenforschung liegen, sind dafür spezielle Förderschienen mit hoher Förderquote und einer starken thematischen Ausrichtung zu empfehlen.

Schließlich ist im Bereich der generativen AI ein Skalierungsproblem zu überwinden. Tatsächlich existieren bereits sehr erfolgreiche Basismodelle (Foundation Models) für Materialphysik: Orb (Neumann et al., 2024), ein Modell für interatomare Potentiale, belegt z.B. auf der Matbench Discovery Benchmark (Matcench Discovery, 2023) den zweiten Platz. Das Training solcher Foundation Models bedarf nicht nur großer Mengen an Daten, sondern auch einer Vielzahl an Trainingsstrategien. Es ist zu erwarten, dass andere Aufgabenstellungen in der Materialentwicklung grundsätzlich unterschiedliche Foundation Models benötigen, welche von Grund auf trainiert und evaluiert werden müssen. Dasselbe gilt auch für Systeme von AI-Agenten (Agentic AI) bzw. für die Anpassung von existierenden Foundation Models wie Orb oder MatterGen für konkrete Anwendungsfälle. Da die resultierenden Modelle durchaus als immaterielle Infrastruktur betrachtet werden können, erscheint es zielführend, die sehr aufwendige und kostenintensive Erstellung von Basismodellen zu unterstützen.

Ein ganz aktueller Trend sind Large Language Models (LLMs), die auf Basis von Texten aus Veröffentlichungen trainiert werden können und dann in der Lage sind, die Eigenschaften neuer Materialien in Abhängigkeit von Zusammensetzung und Produktionsprozess vorherzusagen. Aufgrund der starken Dynamik ist zu erwarten, dass dieser Bereich in naher Zukunft rasch an Bedeutung gewinnt.

Damit AI-Methoden für die Materialentwicklung zur Geltung kommen können, sind Managementsysteme für Forschungsdaten und Plattformen für beschleunigte Materialentwicklung (Materials Accelerator Platforms, MAP) essenziell. Diese Plattformen ermöglichen einerseits die Einspeisung, das Management und die Analyse von Daten auf FAIRe Weise (findable, accessible, interoperative, reusable). Andererseits erlauben sie es, AI-Programme auf die Daten anzuwenden und mit bestehenden Simulationsmethoden im Rahmen von Workflows zur Materialentwicklung zu verknüpfen. Außerdem ermöglichen sie die nahtlose Zusammenarbeit von Fachleuten der verschiedenen Disziplinen bei der Materialentwicklung (Software-Entwicklung, Simulation, Materialherstellung, Charakterisierung) und die Realisierung von Self-driving Labs, also die Verbindung von AI-Methoden mit Datenbanken und automatisierten Laboren für die Materialsynthese und -charakterisierung. Der Entwicklung von MAPs wird in Strategien und Roadmaps für beschleunigte Entwicklung nachhaltiger Materialien weltweit ein hoher Stellenwert zugewiesen.

Beispiele für MAPs sind das A-Lab (Szymanski et al., 2023) und die Autonomous Materials and Device Application Platform (AMANDA) (Wagner et al., 2021).

Zum Abschluss sollen noch zwei Handlungsfelder angesprochen werden, die in den Expert:innen-Interviews als besonders wichtig identifiziert wurden: Datenqualität und Vertrauen in AI.

Für die Erstellung von AI-Modellen sind Trainingsdaten erforderlich. Die Qualität der Modelle hängt stark von der Qualität der Daten ab. Während ungenügende Datenqualität zum Teil durch hybride oder physikinformierte Ansätze kompensiert werden kann, ist die Quantifizierung der Datenqualität allgemein (d.h. nicht nur im Bereich Materialwissenschaften) ein relevantes Problem. Für eine Verbesserung der Situation braucht es Metriken zur Quantifizierung der Datenqualität. Weiters sollten Verfahrensabläufe (Best Practices) für reale und in-silico (simulationsbasierte) Experimente entwickelt werden, die Problemen bei der Verwendung der generierten Daten für das Training von AI-Modellen vorbeugen.

Hinreichendes Vertrauen von Anwendungsexpert:innen in AI ist eng mit der Datenqualität verknüpft, geht aber darüber hinaus. Ein breiter Einsatz von AI in der Materialentwicklung außerhalb des akademischen Umfelds ist nur dann zu erwarten, wenn neben den wirtschaftlichen Vorteilen auch eine ausreichende Vertrauensbasis in die Gültigkeit und Qualität der AI-Modelle und Methoden geschaffen werden kann. Vertrauenswürdige AI kann durch folgende Punkte erreicht werden:

- Für den Menschen interpretierbare Modelle.
- Im Falle von nicht durch den Menschen direkt interpretierbare Modelle: durch vertrauenssichernde Maßnahmen wie Quantifizierung der Ergebnisunsicherheit (engl. uncertainty quantification), Regeln für die Zertifizierung von Modellen, Vergleich mit anderen Modellen (Benchmarking) und automatisiert abgeleitete erklärbare Teilmodelle (explainable AI).
- Schulung von Anwendungsexpert:innen hinsichtlich der Fähigkeiten und Grenzen von AI im Allgemeinen und der eingesetzten Modelle im Besonderen (Aufbau von AI-Kompetenz, AI literacy).

Das Sicherstellen von Vertrauen in AI-Modelle wird daher als begleitende Maßnahme dringend empfohlen (z.B. durch Förderung entsprechender technischer Methoden, aber auch breitenwirksamer Living Labs).

Potential von beschleunigter Entwicklung grüner Materialien nach Branchen und Materialklassen

Branchen

Basierend auf den Ergebnissen der Literatursuche, der Umfrage, des Fachgesprächs zum Thema Nachhaltigkeit und der Interviews sowie auf dem sektoralen Materialverbrauch und dem CO_2-Fußabdruck (Abschnitt „Vielversprechende Materialklassen)“, wurden folgende Branchen mit hohem Potential für AI-gestützte Entwicklung neuer nachhaltiger Materialien identifiziert:

- **Metallerzeugende und -verarbeitende Industrie:** Die Metallerzeugende Industrie hat einen hohen Anteil an der CO_2 Bilanz. So liegt der Anteil der Stahl- und Eisenproduktion bei knapp 40% der Gesamt-CO_2-Emission des Sektors Energie- und Industrie in Österreich. AI kann in dieser Branche dazu beitragen, den Energieverbrauch zu senken und durch Erhöhung des Anteils von rezyklierten Ausgangsstoffen bei gleichbleibender Materialqualität den Material- und CO_2-Fußabdruck verringern. In diesem Zusammenhang ist auch die die Verwendung von AI für eine bessere Sortierung von Rezyklaten ein wichtiger Hebel, um bei Verwendung von Recyclingmaterial die Qualität des erzeugten Materials zu verbessern und somit einen höheren Rezyklatanteil zu ermöglichen. Zudem kann durch Verbesserung von Eigenschaften wie höherer Festigkeit die Materialmenge von Bauteilen verringert und der Energieverbrauch im Einsatz verbessert werden. Parallel dazu kann bessere Korrosionsbeständigkeit die Lebensdauer verlängern und dadurch zu einer Verringerung des Material- und CO_2-Fußabdrucks beitragen. Dies ist besonders wichtig für Anwendungen in der Luft- und Raumfahrt, der Automobilindustrie und anderen Bereichen, in denen leichte und langlebige Materialien benötigt werden.
- **Energie:** AI kann eingesetzt werden bei der Entwicklung von Solarzellen, Batterien und anderen Energiespeichermaterialien mit höherer Effizienz und unter Vermeidung von kritischen Rohstoffen. Außerdem kann sie die Substitution bzw. Einsparung fossiler Brennstoffe (Öl, Gas) und die Verbesserung der Effizienz von Stromnetzten und alternativen Energiequellen (Windkraft, …) unterstützen.
- **Bauwesen:** AI kann bei der Entwicklung von nachhaltigen Betonmischungen, Dämmstoffen und Baumaterialien helfen, die aus Sekundärstoffen hergestellt, recyclingfähig oder biologisch abbaubar sind.
- **Verpackung:** AI kann zur Entwicklung von biologisch abbaubaren Kunststoffen oder Verpackungsmaterialien aus nachwachsenden Rohstoffen eingesetzt werden.

- **Automobilindustrie:** AI kann zur Entwicklung von leichteren und widerstandsfähigeren Materialien für Fahrzeuge beitragen, die den Energieverbrauch senken und die Lebensdauer verlängern. Auch der Umstieg auf effiziente nachhaltige Antriebssysteme bedarf neuer Materialien, deren Entwicklung mittels AI beschleunigt werden kann.
- **Medizintechnik:** In der Medizintechnik kann AI bei der Entwicklung von biokompatiblen und abbaubaren Materialien für Implantate, Prothesen und medizinische Geräte helfen.
- **Mikroelektronik:** AI kann für die Entwicklung von verbesserten funktionalen Materialien für die Elektronik verwendet werden, wie z. B. Halbleitermaterialien mit großer Bandlücke und dielektrische Materialien mit hoher Energiedichte zur Verbesserung der Effizienz und Minimierung von Energieverlusten.

Materialklassen

Die Schlussfolgerungen in Bezug auf die Materialklassen sind in zwei Teile aufgeteilt: Zuerst werden Schlussfolgerungen aufgrund der Ergebnisse der Literatursuche sowie der Umfrage, des Fachgesprächs zum Thema Nachhaltigkeit und der Interviews gezogen. Dann werden Nachhaltigkeitsanalyse (Materialflussanalyse und der Lebenszyklusanalyse) für weitere Schlussfolgerungen herangezogen. Grund dafür diese Aufteilung sind die bereits in Abschnitt „Branchenspezifischer Materialverbrauch und Auswirkungen der Verwendung spezifischer Materialien auf den Klimawandel“ angesprochenen Unterschiede zwischen der Materialforschung und der Nachhaltigkeitsforschung in Bezug auf die Abgrenzung der Begriffe und die Bildung der Kategorien.

Die Literatursuche, die Umfrage, das Fachgespräch und die Interviews ergeben folgendes Bild: Metalle und metallische Legierungen (insbesondere Stähle), Batteriematerialien und Baumaterialien (insbesondere Zement) bilden die wichtigsten Materialklassen. Dahinter folgen Polymere, keramische Materialien und breitbandige Halbleiter (etwa für die Hochleistungselektronik).

Die wichtigsten Materialklassen aufgrund der österreich-spezifischen Materialfluss- und Lebenszyklusanalyse (s. Literaturarbeit in Anhang „Materialflussanalyse und Lebenszyklusanalyse“) sind in Tabelle 17 dargestellt. Ihre Wirksamkeit ist dabei anhand der 5 Bereiche „Massenmineral bzw. -rohstoff“, „Kritischer/strategischer Rohstoff“, „Einsatz in Zukunftstechnologien“, „Spezifischer Beitrag zum Klimawandel“ und „Gesamtbeitrag zum Klimawandel“ noch genauer dargestellt.

Tabelle 17: Bewertung relevanter Materialien nach verschiedenen Nachhaltigkeitskriterien

Material	Sektoren der vorwiegenden Verwendung	Kritischer / strategischer Rohstoff	Einsatz in Zukunfts-technologien	Massenmineral bzw. Massenrohstoff	Großer spezifischer Beitrag zum Klimawandel	Großer Gesamtbeitrag zum Klimawandel
Holz	Bauwesen, Energie, Verpackung; außerdem relevant, weil erneuerbarer Rohstoff.	Nein	Nein	Ja	Nein	Nein
Zement / Kalkstein, Sand / Schotter	Bauwesen	Nein	Nein	Ja	Nein	Ja
Stahl / Eisen	Bauwesen, Energie und Transport	Nein	Nein	Ja	Nein	Ja
Kupfer	Bauwesen, Elektro- und Elektronik-Industrie	Ja	Nein	Ja	Nein	Nein
Aluminium	Sektoren Bauwesen, Transport, Verpackung	Ja	Nein	Ja	Ja	Ja
Nickel	Bauwesen, Transport, chem. Industrie	Ja	Nein	Ja	Ja	Ja
Zink	Bauwesen (Korrosionsschutz), Energie und Transport (Batterien)	Nein	Ja	Ja	Nein	Nein
Kobalt	Energie (Batterien) und Transport (Batterien, Katalysatoren)	Ja	Ja	Nein	Ja	Nein
Lithium	Energie (Batterien) und Transport (Batterien)	Ja	Ja	Nein	Ja	Nein
Neodym und andere seltene Erden	Energie (Batterien, Magnete für Generatoren), Transport (Antriebstechnik), Elektro- und Elektronik-Industrie (Leuchtmittel)	Ja	Ja	Nein	Ja	Nein

Rechtlicher Rahmen

Die wichtigsten Rechtsthemen der AI-basierten Materialforschung wurden im Abschnitt „Rechtlicher Rahmen“ behandelt:

- AI-Gesetze mit Fokus auf EU Artificial Intelligence Act (AIA) und Produkthaftungsrichtlinie (PH-RL),
- EU-Rechtsrahmen für Trainingsdaten,
- Datenschutz und
- die Beziehung zwischen AI und geistigen Eigentumsrechten bei der Entwicklung grüner Materialien.

Im Folgenden werden abschließende Schlussfolgerungen gezogen und Vorschläge zur sachgerechten Berücksichtigung im Rahmen der AI-gestützten Werkstoffentwicklung sowie weiterführend zur Entwicklung robuster rechtlicher Rahmenbedingungen für AI-gestützte Innovationen gemacht.

AI-Gesetze (AIA und PH-RL)

Der AIA gilt EU-weit und führt einen risikobasierten Ansatz für die AI-Regulierung ein. AI-Systeme werden in Risikostufen eingeteilt, wobei für hohe Risiken strengere Anforderungen gelten. Die PH-RL ergänzt den AIA, indem sie die Produkthaftung auf AI-Software und vernetzte Systeme ausweitet. Entwickler müssen prüfen, ob ihre AI-Systeme unter den AIA und die PH-RL fallen und entsprechende Maßnahmen ergreifen.

Datenschutz

Die Verwendung personenbezogener Daten beim AI-Training erfordert die Einhaltung der EU-Datenschutzvorschriften (hauptsächlich DSGVO, Datenschutzrichtlinie für elektronische Kommunikation, Gesetz über die Datenverwaltung, Datengesetz). Diese Gesetze gewährleisten den Schutz personenbezogener Daten und der Privatsphäre beim Training von AI-Modellen.

Geistige Eigentumsrechte

Bei der AI-gestützten Entwicklung grüner Materialien sind die Rechte an den für das AI-Training verwendeten Daten und an den von AI-Systemen erzeugten Ergebnissen zu berücksichtigen. AI-Trainingsdaten können durch verschiedene Formen des geistigen Eigentums geschützt sein, wobei die DSM-RL Ausnahmen für die wissenschaftliche Forschung vorsieht. AI-generierte Ergebnisse könnten potenziell durch Urheberrecht, Patente oder andere Schutzrechte geschützt werden, wobei noch kein Konsens über die am besten geeignete Schutzform erzielt wurde.

Auf der Grundlage der obigen Untersuchung können die folgenden **legislativen Vorschläge** gemacht werden:

AIA und PH-RL:

- Klare Leitlinien für die Anwendung der Ausnahmeregelungen des AIA, insbesondere für Forschungs- und Entwicklungstätigkeiten.
- Kohärente und harmonisierte Umsetzung der PH-RL in nationales Recht.
- Unterstützungsmechanismen für KMU und Start-ups bei der Einhaltung der Vorschriften.
- Integration ethischer Standards in umfassendere Forschungsfinanzierungs- und Innovationsprogramme.
- Einrichtung robuster Überwachungs- und Feedback-Mechanismen nach der Implementierung.
- Der AIA sieht die Einrichtung von sogenannten „AI sandboxes“ vor. Das ist wichtig, um ein innovatives AI-System zu entwickeln, zu trainieren, zu validieren und — gegebenenfalls unter Realbedingungen — zu testen.

AI und Datenschutz:

- Neue Rechtsinstrumente oder spezifische, auf die AI zugeschnittene Leitlinien zur Klärung der Datenschutzanforderungen für AI-Systeme.
- Spezifizierung der Anforderungen an den "eingebauten Datenschutz" und den "standardmäßig eingebauten Datenschutz" für AI.
- Klarere Leitlinien für die Einholung und Verwaltung von Einwilligungen für AI-Schulungen.

Geistige Eigentumsrechte:

- Einführung eines speziellen (sui generis) geistigen Eigentumsrechts für AI-generierte Ergebnisse, das Investitionen in AI-Systeme schützt und eine Mindestschwelle für solche Investitionen enthält.

Durch die Berücksichtigung dieser Aspekte kann der Gesetzgeber ein Gleichgewicht zwischen der Förderung von Innovationen in der AI-basierten Materialentwicklung und dem Schutz des öffentlichen Vertrauens, der Sicherheit und der Verantwortlichkeit herstellen.

Ausführlichere Darlegungen der Empfehlungen zu den rechtlichen Rahmenbedingungen finden sich in Anhang „Juristische Studie“.

Infrastruktur

Um Österreich im Bereich der AI-basierten Entwicklung grüner Materialien im internationalen Vergleich wettbewerbsfähig zu machen, ist einerseits eine Erweiterung der Hardware-Infrastruktur für die Datenspeicherung und -verarbeitung notwendig und andererseits eine solide Dateninfrastruktur im Sinne von Datenbanken und Einhaltung von Standards für die Ablage von Daten. Für die Erweiterung der Hardwareinfrastruktur sind finanzielle Ressourcen für die Erweiterung der bestehenden High-Performance Computing Infrastruktur (z.B. Vienna Scientific Cluster) entsprechend den Anforderungen der AI nötig, wie unten angeführt. Außerdem kann die Finanzierung von lokaler Hardware-Infrastruktur im Rahmen von Forschungsprojekten sinnvoll sein. Was die Dateninfrastruktur betrifft, so ist die gezielte Förderung des Aufbaus von Datenbanken und die Forderung nach Ablage von Daten unter Einhaltung der FAIR-Prinzipien im Rahmen von Forschungsprojekten wichtig. Um auch die Infrastruktur (Daten, Software und Hardware) für AI-basierte Materialentwicklung nachhaltig verfügbar zu machen, sind neue Fördermodelle notwendig, die das Betreiben der Infrastruktur langfristig ermöglichen.

Im Folgenden wird etwas genauer ausgeführt, wie die Anforderungen an die Infrastruktur in Bezug auf Hardware, Software und Datenstruktur aussehen.

Hardware

AI-gestützte Materialentwicklung und Prozessoptimierung erfordert leistungsstarke Computer, Server und Netzwerke (z.B. Hochleistungsrechner, Edge-Computing-Geräte oder Cloud-Plattformen für flexible Rechenleistung und Speicherung) für

- **Datenerfassung:** AI gestützte Prozessoptimierung erfordert hochwertige Sensoren, IoT-Plattformen und Data Pipelines zur Erfassung und Übertragung von Sensordaten (z. B. auf Basis MQTT als Netzwerkprotokoll für Machine-to-Machine-Kommunikation).
- **Datenverarbeitung:** Ermöglichung eines niederschwelligen Zugangs zu leistungsstarken, AI-gerechten Rechenclustern wie MUSICA (Österreich), Leonardo (IT) und Mare Nostrum (Spanien); Erprobung zukünftiger Technologien wie Quantencomputern.
- **Datenspeicherung:** Skalierbare Speicheroptionen wie Cloud-Speicher (z. B. AWS, Azure), Extract-Transform-Load-Prozesse für Datenbereinigung, um Daten aus mehreren, gegebenenfalls unterschiedlich strukturierten Datenquellen zu transformieren und in vereinheitlichter Weise zu speichern.

Software

Neben der Hardware ist auch die richtige Software entscheidend. Dazu gehören spezielle Programme für die Datenerfassung, -verarbeitung und -analyse, sowie AI-Frameworks und Bibliotheken, die für die Entwicklung und Anwendung von AI-Modellen unerlässlich sind. Beispiele dafür sind:

- **Datenbanken:** Relationale Datenbanken für strukturierte Daten (z.B. Produktionsparameter oder Produkt-Qualitätsdaten), NoSQL-Datenbanken für unstrukturierte Daten wie z.B. Bilder oder Textdaten (z.B. iRODS).
- **Analyseplattformen:** Werkzeuge zur Analyse von Materialdaten und für deren Umwandlung in verwertbare Erkenntnisse, ML-Plattformen und AI Dienste.
- **Sicherheit und Governance:** Software zur Datenverschlüsselung und für das Zugriffsmanagement.

Datenstruktur

Die Datenstruktur ist ebenso wichtig wie die Infrastruktur selbst. Sie bestimmt, wie die Daten organisiert, gespeichert und abgerufen werden. Ein wesentliches Ziel für die Ermöglichung von AI-basierter Entwicklung grüner Materialien ist es deshalb, die **FAIR-**

Prinzipien für Materialdaten umzusetzen. Erst dadurch sind AI-Algorithmen in der Lage, Daten in ihrem Kontext zu interpretieren und Muster und Beziehungen zu erkennen, was für die Entwicklung neuer Materialien von entscheidender Bedeutung ist. Die FAIR-Datenprinzipien (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) wurden entwickelt, um die Auffindbarkeit, Zugänglichkeit, Interoperabilität und Wiederverwendbarkeit von Forschungsdaten zu verbessern (Wilkinson et al., 2016). Sie sind ein wichtiger Standard für das Datenmanagement und tragen dazu bei, die Qualität und Effizienz der Forschung zu steigern. Voraussetzung für einen FAIRen Umgang mit Materialdaten ist die Schaffung einer **Infrastruktur für wirksames Forschungsdatenmanagement**.

AI-Algorithmen, insbesondere Deep-Learning-Modelle, brauchen **große Datenmengen**, um effektiv lernen und zuverlässige Vorhersagen treffen zu können. Je mehr hochwertige Daten zur Verfügung stehen, desto besser können die AI-Modelle Muster und Beziehungen in den Daten erkennen, die für die Entwicklung neuer Materialien von entscheidender Bedeutung sein können. In diesem Zusammenhang ist es wichtig, dass möglichst viele **Materialdaten offen** sind und ein breites Spektrum von Materialien, Eigenschaften und Anwendungen abdecken. Dabei bedeutet „offen“, dass eine Lizenz beiliegt, die den Zugriff auf die Daten sowie deren Nutzung und Weitergabe für kommerzielle und nichtkommerzielle Zwecke ermöglicht (European Commission, 2024f). Die Vielfalt von offenen Daten ist wichtig, um robuste und generalisierbare AI-Modelle zu entwickeln, die in der Lage sind, mit neuen und unbekannten Materialien umzugehen.

Die **Qualität der Daten** spielt ebenso wie die **Menge der Datenpunkte** eine entscheidende Rolle. Je hochwertiger und zuverlässiger Daten sind, desto aussagekräftiger sind die Ergebnisse. Daher ist es wichtig, sicherzustellen, dass die Daten korrekt erfasst, bereinigt und validiert werden.

AI-Tools können auch dabei unterstützen, die **Zuverlässigkeit von datengetriebenen Vorhersagen** darzustellen, besonders an Stellen, wo die verfügbaren (Mess-) Daten fehlen oder nur schlecht bzw. in geringer Menge vorhanden sind. In diesem Zusammenhang spielt die **Unsicherheitsquantifizierung** eine wichtige Rolle.

Standards sind definierte Regeln und Richtlinien, die sicherstellen, dass Daten konsistent, vergleichbar und interoperabel sind. Sie tragen dazu bei, die Qualität der Daten in verschiedenen Dimensionen zu verbessern, wie z. B. Genauigkeit, Vollständigkeit, Konsistenz, Interoperabilität und Nachvollziehbarkeit.

Im Bereich der Materialentwicklung gibt es bereits eine Vielzahl von Standards, die zur Verbesserung der Datenqualität beitragen. Dazu gehören:

- **Datenformate:** Standards wie XML, JSON oder RDF definieren, wie Materialdaten strukturiert und gespeichert werden sollen, um die Interoperabilität zu verbessern.
- **Metadatenstandards:** Standards wie Dublin Core oder ISO 19115 legen fest, welche Informationen über die Daten erfasst werden müssen (z. B. Materialzusammensetzung, Eigenschaften, Messmethoden), um die Auffindbarkeit und Wiederverwendbarkeit der Daten zu verbessern.
- **Ontologien:** Ontologien sind formale Darstellungen von Wissen, die Beziehungen zwischen Begriffen und Konzepten definieren. Sie helfen, die semantische Interoperabilität von Materialdaten zu verbessern und die Entwicklung von AI-Modellen zu erleichtern. Laufende Aktivitäten beschäftigen sich einerseits mit der Entwicklung von allgemeinen Ontologien, die alle Arten von Materialien und Eigenschaften abdecken sollen (wie z.B. die Elementary Multiperspective Material Ontology (EMMO)). Die Entwicklung von allgemeinen Ontologien für Materialien ist derzeit jedoch noch sehr dynamisch und noch nicht konsolidiert. Deshalb werden parallel dazu spezialisierte Ontologien für Daten aus konkreten Messungen oder Simulationen entwickelt, bei denen schon nach kurzer Entwicklungszeit praktisch anwendbare Ergebnisse erzielt werden können. In diesem Fall wiederum braucht es zusätzliche Schritte, um die spezialisierten Ontologien zusammenzuführen und interoperabel zu machen.
- **Nomenklaturstandards:** Standards für die Benennung von Materialien und Eigenschaften sind wichtig, um Daten sowohl für Menschen als auch Computer eindeutig interpretierbar zu machen.

Dringlichste Forschungsfragen

Auf Ebene der **Materialforschung** umfassen die wichtigsten Forschungsfragen im Bereich der AI-getriebenen Entwicklung von grünen Materialien (i) neuartige Materialien zur Ermöglichung neuer, umweltfreundlicher Technologien, (ii) Verbesserung des ökologischen Fußabdrucks von Massenmaterialien und Material-Umweltschädlichkeit durch die verwendeten Rohstoffe und den Produktionsprozess und (iii) Ersatz von kritischen Rohstoffe in derzeit verwendeten Materialien.

Im Zusammenhang mit der ersten Kategorie der **neuartigen Materialien zur Ermöglichung umweltfreundlicher Technologien** sind die dringlichsten Forschungsfragen, wie man etwa Halbleiter- und Photoabsorber-Materialien für die Photovoltaik noch leistungsfähiger machen kann, verbesserte und leistungsfähigere Permanentmagnete für Windkraft und Antriebstechnik, effizientere Isolatormaterialien und Elektrobleche für Anschlusspunkte und Transformatoren im Stromnetz sowie leistungsfähigere Materialien für Bauteile aus der Leistungselektronik, um die Effizienz zu verbessern und Energieverluste zu minimieren. Außerdem ist die Weiterentwicklung thermoelektrischer Materialien noch ein wichtiges Forschungsthema. Im Bereich der Mobilität spielt nach wie vor die Weiterentwicklung von Batteriematerialien sowie Leichtbaumaterialien eine wichtige Rolle. Auch wasserstoffbezogene Forschung ist wichtig, um die Herausforderungen bei der Wasserstoffspeicherung zu lösen.

In der zweiten Kategorie, der **Verminderung des Fußabdrucks bestehender Materialien**, geht es darum, wie man den bei Massenmaterialien den CO_2-Fußabdruck erheblich senken kann. Die wichtigsten Massenmaterialien sind dabei Stahl und Zement, aber auch Glas, Dämm- und Feuerfestmaterialien sowie Silizium und Aluminium. Die zwei dringlichsten Forschungsfragen sind dabei, wie man einerseits den Anteil von Recyclingmaterialien bei der Produktion erheblich steigern kann, ohne dass die Funktionalität der Materialien im Einsatz dadurch gemindert wird. Andererseits geht es darum, wie man diese Materialien mit umweltfreundlicheren Prozessen herstellen kann.

In der dritten Kategorie, bei der **Vermeidung kritischer Rohstoffe**, handelt es sich schließlich darum, bei Materialien aus der Elektronik-, Energie- und Transportindustrie sowie in Stählen kritische Rohstoffe als Bestandteil zu ersetzen bzw. an alternativen Materialien zu forschen, welche die gleiche Funktionalität aufweisen.

Im Bereich der **AI** ist ist eine zentrale Herausforderung die Entwicklung von AI-Modellen, die „out of the box“ Vorhersagen treffen und über einfache Interpolation hinausgehen können. Im Bereich des Machine Learning bedarf es kontinuierlicher Forschung und Entwicklung im Bereich des maschinellen Lernens, um Algorithmen zu entwickeln, die speziell auf die Herausforderungen der Materialforschung zugeschnitten sind. Dazu gehören beispielsweise Modelle, die mit unvollständigen oder verrauschten Daten umgehen können, sowie solche, die in der Lage sind, komplexe Zusammenhänge zwischen Herstellungsprozess, Materialstruktur und -eigenschaften zu erkennen. Deep-Learning-Ansätze haben in anderen Bereichen, wie der Bild- und Spracherkennung, große Erfolge erzielt. Es gilt, diese Methoden auch für die Materialforschung weiterzuentwickeln und an

die spezifischen Anforderungen anzupassen. Die Erhebung von Materialdaten ist oft aufwändig und kostspielig und die Anzahl der Datenpunkte deshalb oft klein. Daher sind Methoden wichtig, die auch bei wenigen Datenpunkten sinnvolle Aussagen treffen können. In diesem Zusammenhang sind einerseits Methoden gefragt, die Unsicherheiten quantifizieren können, wie es bei der Bayes'schen Optimierung der Fall ist. Andererseits ist die Integration des verfügbaren physikalischen Wissens wesentlich, wie es bei Hybrider Modellierung der Fall ist.

In diesem Zusammenhang ist es empfehlenswert, den Bereich **der AI-basierten Entwicklung grüner Materialien** als **eigenständigen Bereich im Feld der AI-basierten Forschung- und Entwicklung** zu etablieren. Dabei kann der Bereich der berücksichtigten Materialklassen durchaus breit gesehen werden. Die Gründe dafür sind die besondere Ausgangslage in Bezug auf die verfügbaren Daten und die Bedeutung der Einbindung domänenspezifischen Wissens zur Weiterentwicklung dieses Bereichs. Die Ausgangslage in Bezug auf verfügbare Daten ist deshalb besonders, weil typischerweise geringe Menge an Daten vorhanden sind, was die Verwendung besonderer AI-Methoden, hochqualitativer und reproduzierbarer Messmethoden, sowie die Integration physikalisch basierter Modellierungsmethoden notwendig macht. Die Einbindung spezifischen Domänenwissens wiederum bezieht sich auf den ganzen Bereich von Materialentwicklung und -technologie bis hin zu essentiellen Kenntnissen zu effizienter Produktionstechnik und Technologietransfer und ist deshalb von großer Bedeutung, weil nur dadurch die ein echter wirtschaftlicher Impakt erreicht werden kann.

Um die AI für den praktischen Einsatz bei der Materialentwicklung wirksam zu machen, ist es von zentraler Bedeutung, **Materials Acceleration Platforms** (MAPs) aufzubauen und dabei die automatisierte Herstellung und Charakterisierung von Materialien im Sinne von **Self-driving Labs** zu integrieren (s. Abschnitt „Anwendungsfälle").

Ein weiterer, sehr wichtiger Punkt für die internationale Wettbewerbsfähigkeit im Bereich der AI-basierten Entwicklung grüner Materialien ist die Interdisziplinarität. Es ist einerseits wichtig, die Skepsis hinsichtlich der AI-Integration auszuräumen. Dabei ist es für die Forscher:innen, die Materialien entwickeln, wichtig zu verstehen, wie sie AI-generierte Ergebnisse kritisch bewerten können, anstatt sie einfach nur akzeptieren zu müssen. Andererseits ist es wichtig, dass AI-Expert:innen das Fachwissen aus dem Bereich Materialforschung berücksichtigen, indem sie Expert:innen aus diesem Gebiet bei der Auswahl und Entwicklung von Modellen von Anfang an mit einbeziehen. Generell ist die

Förderung interdisziplinären Denkens und Arbeitens bereits in den Lehrplänen, aber auch durch berufsbegleitende Angebote, zu empfehlen.

Die Entwicklung nachhaltiger Materialien mit Hilfe von AI erfordert ein interdisziplinäres Team von Expert:innen aus den Bereichen Materialwissenschaft, Chemie, Physik, Informatik und Ingenieurwesen. Nur durch die Kombination von Fachwissen und fachlichen Perspektiven können die komplexen Herausforderungen in diesem Bereich bewältigt werden. Eine effektive Kommunikation zwischen den verschiedenen Disziplinen ist entscheidend, um sicherzustellen, dass alle Beteiligten die Ziele und Methoden verstehen und gemeinsam an Lösungen arbeiten können.

Auch in Bezug auf die **Bewertung der Nachhaltigkeit** von Materialien gibt es noch wichtige Fragen zu bearbeiten. Um die Auswirkungen von Materialien auf die Umwelt und die Gesellschaft zu berücksichtigen, bedarf es geeigneter Methoden und Metriken, um bewerten zu können, wie nachhaltig Materialien über den gesamten Lebenszyklus sind.

Für die Entwicklung von nachhaltigen und wettbewerbsfähigen Materialinnovationen ist eine **integrierte Betrachtung** des gesamthaften Eigenschaftsprofils über den **vollständigen Lebenszyklus** aus Herstellung, Prozessierung, Nutzung und Wiederverwendung essenziell.

Zuletzt gibt es auch im Bereich der **Ethik** relevante Forschungsfragen: Die erste Frage ist, wie man die von AI-Modellen getroffenen Entscheidungen nachvollziehbar und transparent macht. Dies ist wichtig, um Vertrauen in die Technologie zu schaffen, und ermöglicht es, potenzielle Fehler oder Verzerrungen zu erkennen.

Zu entwickelnde Kompetenzen

Die AI-basierte Entwicklung grüner Materialien ist ein interdisziplinäres Gebiet. Um hier international wettbewerbsfähig zu sein, sind Kompetenzen auf verschiedenen Ebenen gefragt.

Technologische und wissenschaftliche Kompetenzen:

- **Materialwissenschaft und -technik:** Fachwissen über Materialien und deren chemische und physikalische Eigenschaften sowie interdisziplinäres Wissen in den Bereichen Materialwissenschaften, Physik, Chemie, Mathematik, IT und Nachhaltigkeit

sind essentiell. Das heißt, Maßnahmen zur Stärkung dieser Fächer tragen dazu bei, international noch besser wettbewerbsfähig zu sein.

- **AI/ML-Methoden sowie Datenanalyse und -aufbereitung:** Grundkenntnisse über AI und die Fähigkeit, Methoden der AI und insbesondere des maschinellen Lernens anzuwenden, sind wichtig, um sie für Materialdesign und -optimierung anwenden zu können. Im Konkreten geht es dabei um Kenntnisse in Programmiersprachen wie Python sowie im Umgang mit Software-Bibliotheken wie TensorFlow und PyTorch sowie des gezielten Einsatzes von generativer AI zu Steigerung der Arbeitseffizienz. Außerdem braucht es Kompetenzen im Datenmanagement (Grundlagen, Tools, Workflows), d.h. dem Umgang mit Big Data, aber auch Wissen zu Standards und Software speziell für Datensätze aus der Materialcharakterisierung und -simulation. Schließlich sind auch Fertigkeiten im Bereich Hochleistungsrechnen wichtig, um AI-Methoden in der Praxis anwenden zu können. Um diese Punkte zu erreichen, ist die Einbettung datenwissenschaftlicher Inhalte in den Lehrplänen und das Anbieten von Kurzkursen für die berufliche Weiterbildung wichtig.
- **Simulationstechniken:** Kenntnisse in der Erstellung, Parametrisierung und Anwendung physikalischer Modelle, z.B. zur Vorhersage von Materialeigenschaften, sind deshalb wichtig, weil erst dadurch eine wirksame Kombination mit bzw. Einsatz von AI-Methoden für die Materialentwicklung möglich wird. In diesem Kontext ist es wichtig darauf zu achten, dass Kenntnisse in diesem Bereich erhalten und weiter ausgebaut werden, sowohl in der Lehre als auch bei der Berücksichtigung durch themenspezifische Ausschreibungen.

Fachkompetenzen im Bereich nachhaltiger Materialien:

Expertise im Design von Werkstoffen mit geschlossenen Lebenszyklen und Verständnis für die Grundsätze der Kreislaufwirtschaft (Refuse, Rethink, Reduce, Reuse, Repair, Refurbish, Remanufacture, Repurpose, Recycle, and Recover) ist in diesem Zusammenhang von Bedeutung. Dazu gehört ein Grundverständnis für die Lebenszyklusanalyse (LCA), um die Umweltauswirkungen neuer Materialien besser verstehen zu können. In diesem Kontext ist das Angebot berufsbegleitender Schulungen empfehlenswert ebenso wie die Berücksichtigung in der Lehre im Bereich Materialwissenschaft und verwandten technischen Fächern.

Schaffung eines integrativen und nachhaltigen Forschungs- und Innovationsökosystems:

Wie auch in (European Commission, 2024a) angemerkt, ist einer Fragmentierung des F&I-Ökosystems entgegenzuwirken, um die Effektivität und Effizienz in den Schlüsseltechnologien Materialentwicklung und -technologie zu steigern und so den dringend nötigen Fortschritt bei der Kreislaufwirtschaft, der Materialeffizienz, der Erhöhung des Digitalisierungsgrads und der Übernahme von Forschungsergebnissen in industrielle Anwendungen und Prozess zu beschleunigen.

Hauptschlussfolgerungen und abschließende Empfehlungen

Förderung multidisziplinärer Projekte unter Einbindung von Materialforschung, AI, Data Sciences und Nachhaltigkeit

Österreich ist international sichtbar im Bereich der Materialforschung (TU Wien, MUL, TU Graz, ÖAW-ESI, MCL, AIT, etc.), AI (JKU, SCCH , TU Wien, TU Graz, Know Center, etc.) und Nachhaltigkeit (Boku, TU Wien, MUL, etc.) und es gibt bereits erfolgreiche Kooperationen der Bereiche Material und AI (IC-MPPE, KIRAMET, etc.). Ziel ist es, in diesem Kontext folgende Bereiche zu stärken und weiter zu vertiefen:

- Wissenstransfer von Data Sciences und AI zu Materialentwicklung.
- Anpassung von AI Modellen für Materialentwicklung auf verschiedenen Ebenen, von speziellen Machine-Learning Modellen für Materialcharakterisierung und Simulation, über Bayes'sche Methoden bis hin zu Foundation Models.
- Integration von Wissen und Daten über Nachhaltigkeit aus der gesamten Wertschöpfungskette zur Beurteilung der Umweltauswirkungen von Materialien und zur gezielten Entwicklung von Materialen mit geringerem ökologischem Fußabdruck.
- Senkung des CO_2-Ausstoßes durch erhöhte Verwendung von Rezyklaten bzw. bessere Sortierung von Rezyklaten und Verbesserung der Prozessbedingungen.
- Vorgeschlagene Maßnahmen:
- Kooperative F&E Projekte zu AI basierter grüner Materialentwicklung als Schwerpunkt in zukünftigen AI for Green Ausschreibungen
- Ausschreibung eines Leitprojekts zum Thema

Ausbau der Stellung Österreichs und internationale Vernetzung bei der AI-basierten Entwicklung von grünen Schlüsselmaterialien

Die Entwicklung vieler grüner Schlüsselmaterialien erfordert sehr große Forschungsinitiativen, private Investitionen und Kooperationen. Um international wettbewerbsfähig zu sein, muss Österreich deshalb seine bestehenden Aktivitäten intensivieren und die Vernetzung im Rahmen internationaler Initiativen und Projekte weiter ausbauen. Ein besonderes Augenmerk muss auch auf das beschleunigte Scale-up von innovativen Ideen hin zu industriellen Lösungen gelegt werden. Folgende Bereiche sind dabei vielversprechend:

- Energie (z.B. Batterien, Permanentmagneten für Generatoren, PV, …)
- Mobilität (z.B. Leichtbau, Langlebigkeit, alternative Antriebe, …)
- Elektronik (z.B. Leistungselektronik, Sensorik, …)

Vorgeschlagene Maßnahmen:

- Politischer Einsatz für europäische Förderprogramme im Bereich Circular Advanced Materials (z.B. IPCEI CAM, IAM4EU)
- Bereitstellung von substanziellen Fördermöglichkeiten für die Erhöhung der Zirkularität und der Steigerung der Wettbewerbsfähigkeit im Industrie- und Forschungsumfeld.

Aufbau von Materials Acceleration Platforms und Self-Driving Labs

Materials Acceleration Platforms und Self-Driving Labs bilden die Rahmenbedingungen, um AI für die beschleunigte Entwicklung grüner Materialien wirksam zu machen. In diesem Zusammenhang gibt es folgende Ziele:

- Stärkung der österreichischen Aktivitäten für die Entwicklung von Infrastruktur und Methoden in Österreich.
- Langfristiger Aufbau von Programmen/Zentren, die das Wissen aufbauen und tief in Industrie und Forschung verankern.
- Bereitstellung von beschleunigten Materialentwicklungs-Services für Industrie und Forschung.

Vorgeschlagene Maßnahmen:

- Förderung des Aufbaus von zentralen Materials Acceleration Platforms und Self-Driving Labs mittels langfristiger Förderinstrumente.

Materialsimulation: Weiterer Ausbau bestehender Stärkefelder und weitere Integration von AI

Österreich ist weltweit sichtbar für die Entwicklung von Software und Methoden für Materialsimulation (DFT: VASP, Wien2k, GreenALM; CALPHAD: MatCalc). Simulationen bilden ein wichtiges Element der Materialentwicklung. Ziel ist es, die Verbindung von AI und Materialsimulation auf den verschiedenen Ebenen zu stärken:

- Beschleunigung von Simulationsmethoden durch AI
- Automatisierung der Parametrisierung von interatomaren Potentialen anhand von DFT-Rechnungen mithilfe von AI und Active Learning Methoden.
- Verbesserte und beschleunigte Modellierung durch Kombination von AI-Methoden mit empirischen Modellen und physik-basierten Simulationen.

Vorgeschlagene Maßnahmen:

- Spezifische Grundlagen-Förderprogramme (ähnlich dem ACRP-Programm)
- Berücksichtigung dieses Themas in zukünftigen Förderprogrammen zu industrieller Forschung und experimenteller Entwicklung.

Schaffung der passenden Rahmenbedingungen

Um AI Modelle in der Praxis zu trainieren und anzuwenden ist Zugang zu geeigneter Hardware, aber auch ein passender Rahmen für die Umsetzung der rechtlichen Anforderungen nötig. Deshalb sind folgende Aspekte zu berücksichtigen, um international wettbewerbsfähig zu sein:

- Leistungsstarke, AI-gerechten Rechencluster werden benötigt, um AI-Modelle zu trainieren und auszuführen.
- Zugang zu zukünftigen Technologien wie etwa Quantencomputern ist notwendig, um AI-Algorithmen an diese Technologien anzupassen und durchzuführen.
- Kontrollierte Umgebungen werden benötigt, in denen KI-Systeme entwickelt, getestet und validiert werden können, entsprechend Artikel 57 in Kap. IV des AI Acts.

- Weiters ist die Schaffung einer Infrastruktur für wirksames Forschungsdatenmanagement nötig.

Vorgeschlagene Maßnahmen:

- Ermöglichung eines niederschwelligen Zugangs für Forschungseinrichtungen und Industrie zu bestehenden leistungsstarken, AI-gerechten Rechenclustern wie MUSICA (Österreich) und Großrechnern des europäischen HPC Ökosystems wie Leonardo (IT) und Mare Nostrum (Spanien); Ermöglichung eines niederschwelligen Zugangs zu Zukunftstechnologien wie Quantencomputern.
- Berücksichtigung von „AI-Sandboxes“ in Ausschreibungen mit AI-Bezug.

5 Anhänge /Begleitdokumente

- Ergebnisse der Literaturrecherche (Excel File)
- Materialflussanalyse und Lebenszyklusanalyse (pdf Dokument)
- Umfrageergebnis (pdf Dokument)
- Juristische Studie (pdf Dokument)

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Beiträge der beteiligten Institutionen zur Studie (W…Workshop, E…Expert:innen-Interview, F…Fachgespräch, P…Partner bei der Erstellung der Studie). Abkürzungen für die „Art der Institution“: Entsch. … politischer Entscheidungsträger, Forsch. … Außeruniversitäre Forschungseinrichtung, Uni. … Universität, Indust. … Industrieunternehmen. 11
Tabelle 2: Beispiel einer Suchkaskade. Verwendetes Literatur-Suche-Tool: https://www.scopus.com. Suchdatum: 19.02.2025. 13
Tabelle 3: Dokumente mit direktem Bezug zur AI basierten Entwicklung grüner Materialien, alphabetisch sortiert nach Ländern. 21
Tabelle 4: Dokumente mit indirektem Bezug zur AI-basierten Entwicklung grüner Materialien, alphabetisch sortiert nach Ländern. 22
Tabelle 5: Namen und Positionen der interviewten Expert:innen 27
Tabelle 6: Namen und Positionen der Teilnehmer:innen des Fokusgruppenworkshops 30
Tabelle 7: Digitale Datenbanken zu Materialeigenschaften 36
Tabelle 8: Digitale Datenbanken für die Lebenszyklusanalyse 38
Tabelle 9: Digitale Datenbanken zu Rohstoffabbau und Materialflüssen 39
Tabelle 10: Services und Initiativen im Bereich der Datenräume und des Datenmanagement für Materialdaten 40
Tabelle 11: Kategorisierung der in der Literaturrecherche identifizierten MODELLE entsprechend der in Abschnitt „Kategorisierung von AI-Methoden“ erklärten Systematik. Zu den Unterkategorien sind in der jeweiligen Zeile repräsentative Einführungsarbeiten (Lehrbücher, Tutorials, Übersichtsarbeiten) angeführt. 42
Tabelle 12: Kategorisierung der in der Literaturrecherche identifizierten METHODEN (letzte Spalte) entsprechend der in Abschnitt „Kategorisierung von AI-Methoden“ erklärten Systematik. Zu den Unterkategorien sind in der jeweiligen Zeile repräsentative Einführungsarbeiten (Lehrbücher, Tutorials, Übersichtsarbeiten) angeführt. 43
Tabelle 13: Andere in der Literaturrecherche identifizierte Begriffe aus dem Bereich AI. . 43
Tabelle 14: Anzahl der Literaturstellen zu den in der Kategorisierung verwendeten Methoden und Modelle. (Stand 22.11.2024) 44
Tabelle 15: Literaturstellen für ausgewählte AI-Methoden und Modelle in anderen Branchen. Die Ergebnisse für Materialentwicklung sind in der letzten Zeile gegenübergestellt. (Stand 16.01.2025). 48
Tabelle 16: Tabelle der erwähnten Rechtsakte: 70
Tabelle 17: Bewertung relevanter Materialien nach verschiedenen Nachhaltigkeitskriterien 78

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1a: Grafische Darstellung der Herkunftsländer der Autor:innen der Artikel aus der Suchkaskade: Top 5 der Trefferzahlen weltweit mit Europa als Überbegriff für die Länder der Europäischen Union 15
Abbildung 1b: Grafische Darstellung der Herkunftsländer der Autor:innen der Artikel aus der Suchkaskade: Top 5 der Länder innerhalb der Europäischen Union. 15
Abbildung 2: Kategorisierung der in der Recherche gefundenen Begriffe. 16
Abbildung 3: Literaturstellen zu Materialentwicklung (wie in Tabelle 2) in Zusammenhang mit spezifischen AI-Modelle bzw. Methoden (siehe Abbildung 2). 19
Abbildung 4: Literaturstellen zu Materialentwicklung in Zusammenhang mit einer spezifischen AI Methode, wobei die Methoden aus Abbildung 2 in die im Abschnitt „Kategorisierung von AI-Methoden“ eingeführten Kategorien unterteilt wurden. 19
Abbildung 5: Zeitlicher Verlauf der Erwähnungen von AI Methoden und Modellen in der Materialentwicklung (Abfrage mit „material w/3 development“ am 22.11.2024) 47
Abbildung 6: Ausgewählte Trends im Bereich AI, dargestellt durch Anzahl der Erwähnungen in der Literatur. (Abfrage mit „material w/3 development“, Stand 12.12.2024) 53
Abbildung 7: Darstellung der häufigsten Materialien, die in der Literatur im Zusammenhang mit AI-gestützter Materialentwicklung genannt wurden. 57
Abbildung 8: Inländischer Materialverbrauch (DMC) und Materialfußabdruck (MF) Österreich 2020. Quelle: (Statistik Austria 2024). „Nicht zuordenbar“ umfasst gehandelte Güter, die wegen einer unbekannten Materialzusammensetzung bzw. aus Gründen der Geheimhaltung keiner der anderen Gruppen zugeordnet werden können. DMC umfasst all jene Materialien, die innerhalb der Österreichischen Grenzen in Produktion und Konsum verbraucht wurden. MF umfasst alle Rohstoffe, die weltweit entnommen und für den inländischen Endkonsum verbraucht wurden. 58
Abbildung 9: Klimawirkung (Global warming potential (GWP)) von ausgewählten Materialien in kg CO2 eq /kg. 61
Abbildung 10: Bandbreite der Climate Change-Ergebnisse [kg CO2 eq/kg] für Zement (links) und Stahl (rechts). 62

Literaturverzeichnis

ADMIRABLE Group. (2018). Novamag Database. http://crono.ubu.es/novamag/

Advanced Materials Initiative AMi2030. (2022). Materials 2030 Manifesto. https://www.ami2030.eu/wp-content/uploads/2022/06/advanced-materials-2030-manifesto-Published-on-7-Feb-2022.pdf

AIT. (2025). Austrian Institute of Technology (AIT). https://www.ait.ac.at/

AMAG. (2025). AMAG Austria Metall GmbH. https://www.amag-al4u.com/

AMi2030. (2025). The Materials 2030 roadmap. https://www.ami2030.eu/roadmap/

Andritz AG. (2025). Andritz AG. https://www.andritz.com/group-en

ANSYS. (2024). Granta Materials Selector. https://www.ansys.com/products/materials/granta-selector%0A

ASAI. (2025). Austrian Society for Artificial Intelligence (ASAI). https://www.asai.ac.at/en/

AVL. (2025). AVL List GmbH. https://www.avl.com/en

Bishop, C. (2007). Pattern Recognition and Machine Learning. Journal of Electronic Imaging, 16(4), 49901. https://doi.org/10.1117/1.2819119

BMF. (2025). Bundesministerium für Finanzen. https://www.bmf.gv.at/

BMK. (2024). Bundesministerium für Klimaschutz, Umwelt, Energie, Mobilität, Innovation und Technologie. https://www.bmk.gv.at/

BOKU University. (2025). Universität für Bodenkultur Wien. https://boku.ac.at/

Borealis AG. (2025). Borealis AG. https://www.borealisgroup.com/

British Geological Survey. (2025). Mineral resource security and flows. https://www.bgs.ac.uk/geology-projects/mineral-resources/

Bundesministerium für Finanzen. (2025). World Mining Data. https://www.world-mining-data.info/?World_Mining_Data

Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz, D. (2024). Plattform Industrie 4.0. https://www.plattform-i40.de/IP/Navigation/DE/Home/home.html

Bundesministerium für Wohnen, Stadtentwicklung und Bauwesen, D. (2025). WECOBIS. https://www.wecobis.de/

Cai, S., Wang, Z., Wang, S., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2021). Physics-Informed Neural Networks for Heat Transfer Problems. Journal of Heat Transfer, 143(6). https://doi.org/10.1115/1.4050542

CALPHAD. (2025). Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry. https://calphad.org/Computer-Coupling-of-Phase-Diagrams-and-Thermochemistry

CAPeX. (2025). CAPeX Pioneer Center for Accelerating P2X Materials Discovery. https://capex.dtu.dk

Catena-X Automotive Network e.V. (2025). Catena-X Your Automotive Network. https://catena-x.net/de/

CERN, & European Organization for Nuclear Research. (2024). Zenodo. https://zenodo.org/

Chen, C., & Ong, S. P. (2022). A universal graph deep learning interatomic potential for the periodic table. Nature Computational Science, 2(11), 718–728. https://doi.org/10.1038/s43588-022-00349-3

CIMTEC. (2024). Global Conference on Materials in an Explosively Growing Informatics Worls. https://2024.cimtec-congress.org/

Citrine Informatics. (2024). Citrine. https://citrine.io/platform/

CNRS – Centre national de la recherche scientifique. (2025). DIADEM Priority research program and equipment on the development of innovative materials using artificial intelligence. https://www.pepr-diadem.fr/en/

Commonwealth Scientific and Industrial Research Organisation. (2025). Spectroscopy data base. https://luminescence.csiro.au/material_index

Computing Research Association CRA. (2019). A 20-Year Community Roadmap for Artificial Intelligence Research in the US. https://cra.org/ccc/wp-content/uploads/sites/2/2019/08/Community-Roadmap-for-AI-Research.pdf

Coscine. (2024). Coscine. https://about.coscine.de/

CRM Alliance. (2025). Critical Raw Materials. https://www.crmalliance.eu/

Database, O. M. (2025). Open Materials database. https://openmaterialsdb.se/index.php?limit=100#tab_material

dataloop. (2024). Dataloop. https://dataloop.ai/

Daw, A., Bu, J., Wang, S., Perdikaris, P., & Karpatne, A. (2022). Mitigating Propagation Failures in Physics-informed Neural Networks using Retain-Resample-Release (R3) Sampling. http://arxiv.org/abs/2207.02338

Deng, B., Zhong, P., Jun, K., Riebesell, J., Han, K., Bartel, C. J., & Ceder, G. (2023). CHGNet as a pretrained universal neural network potential for charge-informed atomistic modelling. Nature Machine Intelligence, 5(9), 1031–1041. https://doi.org/10.1038/s42256-023-00716-3

Deutsche Gesellschaft für Materialkunde e.V. (2024). Materials Science and Engineering MSE Congress. https://dgm.de/mse/2024/

Dr. Sommer Werkstofftechnik GmbH. (2024). Datenbank Stahlwissen.

Eclipse Contributors. (2021). Eclipse Dataspace Components. https://projects.eclipse.org/projects/technology.edc

ecoinvent. (2025). ecoinvent. https://ecoinvent.org/

ECSSRIA. (2022). Strategic Research and Innovation Agenda “Electronic Components and Systems.” https://aeneas-office.org/strategy/ecs-sria/

Elsevier B.V. (2025). Scopus. https://www.scopus.com/

EMMC. (2025). European Materials Modelling Council (EMMC). https://emmc.eu/

Engel Austria GmbH. (2025). Engel Austria GmbH. https://www.engelglobal.com/de/at/home

ESTEP. (2021). Strategic Research and Innovation Agenda “Clean Steel Partnership.” https://www.estep.eu/assets/CSP/CSP_SRIA_Oct2021_clean.pdf

ESU-services Ltd. (2025). Public LCI background data in EcoSpold format. https://esu-services.ch/data/public-lci-reports/

EU Initiative Battery2030. (2019). Battery2030 Manifesto. https://battery2030.eu/wp-content/uploads/2021/10/BATmanifesto.pdf

EU Initiative Battery2030. (2022). Battery2023 Roadmap. https://battery2030.eu/research/roadmap/

European Commission. (2002). ePrivacy Richtlinie. https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DE/ALL/?uri=celex%3A32002L0058

European Commission. (2019). Ethik-leitlinien für eine vertrauenswürdige KI. https://op.europa.eu/de/publication-detail/-/publication/d3988569-0434-11ea-8c1f-01aa75ed71a1

European Commission. (2021). 2030 Digital Compass: the European way for the Digital Decade. https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/HTML/?uri=CELEX:52021DC0118

European Commission. (2022a). EMPFEHLUNG (EU) DER KOMMISSION zur Schaffung eines europäischen Bewertungsrahmens für „inhärent sichere und nachhaltige“ Chemikalien und Materialien. https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DE/TXT/PDF/?uri=CELEX:32022H2510

European Commission. (2022b). European Data Governance Act. https://digital-strategy.ec.europa.eu/en/policies/data-governance-act

European Commission. (2022c). Towards a green & digital future. https://publications.jrc.ec.europa.eu/repository/handle/JRC129319

European Commission. (2024a). Advanced Materials for Industrial Leadership. https://doi.org/0fcf06ea-c242-44a6-b2cb-daed39584996_en

European Commission. (2024b). Commission adopts EU-wide scheme for rating sustainability of data centres. https://energy.ec.europa.eu/news/commission-adopts-eu-wide-scheme-rating-sustainability-data-centres-2024-03-15_en

European Commission. (2024c). Data Act. https://digital-strategy.ec.europa.eu/en/policies/data-act

European Commission. (2024d). Datenschutz im Rahmen der Datenschutz-Grundverordnung. https://europa.eu/youreurope/business/dealing-with-customers/data-protection/data-protection-gdpr/index_de.htm

European Commission. (2024e). EUSurvey online survey management system. https://ec.europa.eu/eusurvey/

European Commission. (2024f). Open data and high-value datasets: step-by-step access guide. https://digital-strategy.ec.europa.eu/en/factpages/open-data-and-high-value-datasets-step-step-access-guide

European Commission. (2024g). Produkthaftungsrichtlinie: RICHTLINIE (EU) 2024/2853 DES EUROPÄISCHEN PARLAMENTS UND DES RATES über die Haftung für fehlerhafte Produkte und zur Aufhebung der Richtlinie 85/374/EWG des Rates. https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DE/TXT/PDF/?uri=OJ:L_202402853

European Commission. (2024h). The EU Artificial Intelligence Act. https://artificialintelligenceact.eu/

European Commission. (2025). European Platform on LCA | EPLCA. https://eplca.jrc.ec.europa.eu/LC

European Open Science Cloud. (2024). European Open Science Cloud. https://eosc.eu/

European Parliament. (2021). Key enabling technologies for Europe's technological sovereignty. https://www.europarl.europa.eu/thinktank/en/document/EPRS_STU(2021)697184

EV Group. (2025). EV Group. https://www.evgroup.com/

FAIRmat. (2024). FAIR-DI European Conference on Data Intelligence. https://events.fairmat-nfdi.eu/event/9/

FIZ Karlsruhe - Leibnitz Institute for Information Infrastructure. (2024a). CCDC. https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/%0A

FIZ Karlsruhe - Leibnitz Institute for Information Infrastructure. (2024b). Inorganic Crystal Structure Database ICSD.

Gaia-x. (2024). Gaia-x. https://gaia-x.eu/

GC. (2025). Goldbeck Consulting (GC). https://www.goldbeck.de/unternehmen/newsroom/news/goldbeck-sustainability-consulting

Gramacy, R. B. (2020). Surrogates: Gaussian Process Modeling, Design, and Optimization for the Applied Sciences. Chapman and Hall/CRC. https://doi.org/10.1201/9780367815493

Haghighat, E., Raissi, M., Moure, A., Gomez, H., & Juanes, R. (2021). A physics-informed deep learning framework for inversion and surrogate modeling in solid mechanics. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 379, 113741. https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.113741

Harvard Business Review. (2025). What Is Agentic AI, and How Will It Change Work? https://hbr.org/2024/12/what-is-agentic-ai-and-how-will-it-change-work

Harvard University. (2025). The Harvard Clean Energy Project Database. https://www.molecularspace.org/cepdb_subdomain/index/

Hoffer, J. G., Ofner, A. B., Rohrhofer, F. M., Lovrić, M., Kern, R., Lindstaedt, S., & Geiger, B. C. (2022). Theory-inspired machine learning—towards a synergy between knowledge and

data. Welding in the World, 66(7), 1291–1304. https://doi.org/10.1007/s40194-022-01270-z

Horizon Europe. (2024). Horizon Europe, Work Programme 2025 “7. Digital, Industry and Space.”

Hornik, K., Stinchcombe, M., & White, H. (1989). Multilayer feedforward networks are universal approximators. Neural Networks, 2(5), 359–366. https://doi.org/10.1016/0893-6080(89)90020-8

HUB. (2025). Humboldt-Universität zu Berlin. https://www.hu-berlin.de/de

IAMI. (2025). The Innovative Advanced Materials Initiative. https://www.iam-i.eu/

Infineon. (2025). Technologies Austria AG. https://www.infineon.com/cms/austria/

International Energy Agency. (2025). EV Life Cycle Assessment Calculator. https://www.iea.org/data-and-statistics/data-tools/ev-life-cycle-assessment-calculator

International EPD System. (2025). EPD Library. https://www.environdec.com/library

JMatPro. (2024). JMAT Pro. https://www.sentesoftware.co.uk/

JR-LIFE. (2025). Joanneum Research – Institut für Klima, Energiesysteme und Gesellschaft (JR-LIFE). https://www.joanneum.at/life/

Kaddour, J., Lynch, A., Liu, Q., Kusner, M. J., & Silva, R. (2022). Causal Machine Learning: A Survey and Open Problems. http://arxiv.org/abs/2206.15475

KAI. (2025). KAI Kompetenzzentrum Automobil- und Industrieelektronik GmbH. https://www.k-ai.at/

Karlsruher Institut für Technologie. (2022). Plattform MaterialDigital. https://www.materialdigital.de/

Karniadakis, G. E., Kevrekidis, I. G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S., & Yang, L. (2021). Physics-informed machine learning. Nature Reviews Physics, 3(6), 422–440. https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5

Karpatne, A., Atluri, G., Faghmous, J. H., Steinbach, M., Banerjee, A., Ganguly, A., Shekhar, S., Samatova, N., & Kumar, V. (2017). Theory-Guided Data Science: A New Paradigm for Scientific Discovery from Data. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 29(10), 2318–2331. https://doi.org/10.1109/TKDE.2017.2720168

Khan, S., Naseer, M., Hayat, M., Zamir, S. W., Khan, F. S., & Shah, M. (2021). Transformers in Vision: A Survey. https://doi.org/10.1145/3505244

KIT. (2025). Karlsruher Institut für Technologie. https://www.kit.edu/

KNOW. (2025). Know-Center Research GmbH. https://www.know-center.at/

Krishnapriyan, A. S., Gholami, A., Zhe, S., Kirby, R. M., & Mahoney, M. W. (2021). Characterizing possible failure modes in physics-informed neural networks. http://arxiv.org/abs/2109.01050

Krizhevsky, A., Sutskever, I., & Hinton, G. E. (2017). ImageNet classification with deep convolutional neural networks. Communications of the ACM, 60(6), 84–90. https://doi.org/10.1145/3065386

Lenzing AG. (20205). Lenzing AG. https://www.lenzing.com/

Lu, X., & Wang, D. (2021). Effect of hydrogen on deformation behavior of Alloy 725 revealed by in-situ bi-crystalline micropillar compression test. Journal of Materials Science and Technology, 67, 243 – 253. https://doi.org/10.1016/j.jmst.2020.08.006

Manufacturing-X. (2024). Manufacturing-X. Manufacturing-X

Matcench Discovery. (2023). Matbench Discovery. https://matbench-discovery.materialsproject.org/

Matdat d.o.o. (2025). MatDat. https://www.matdat.com/

Materials Center Leoben Forschung GmbH. (2024). ALPmat. https://www.mcl.at/foerderprogramme/comet/success-stories/success-stories/?tx_news_pi1%5Bnews%5D=727&tx_news_pi1%5Bcontroller%5D=News&tx_news_pi1%5Baction%5D=detail&cHash=2b07c08bd1e3af32bfcd8eaf48b54852

Materials Genome Initiative. (2024). MGI Challenges. https://www.mgi.gov/2024-materials-genome-initiative-mgi-challenges

Materialscloud. (2015). Materialscloud. https://www.materialscloud.org

materiom. (2025). materiom. https://materiom.org/

MatWeb, L. (2025). MatWeb: Online Materials Information Resource. https://www.matweb.com/

Max Planck Institute of Colloids and Interfaces. (2022). Database of Photocharged Materials. https://pcmat.mpikg.mpg.de/

MCL. (2025). Materials Center Leoben Forschung GmbH. https://www.mcl.at/

Merchant, A., Batzner, S., Schoenholz, S. S., Aykol, M., Cheon, G., & Cubuk, E. D. (2023). Scaling deep learning for materials discovery. Nature, 624(7990), 80–85. https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9

MIBA AG. (2025). MIBA AG. https://www.miba.com/

Microsoft. (2025). AI meets materials discovery: The vision behind MatterGen and MatterSim. https://www.microsoft.com/en-us/research/story/ai-meets-materials-discovery/

Mills, A. W., Goings, J. J., Beck, D., Yang, C., & Li, X. (2022). Exploring Potential Energy Surfaces Using Reinforcement Machine Learning. Journal of Chemical Information and Modeling, 62(13), 3169–3179. https://doi.org/10.1021/acs.jcim.2c00373

Mission Innovation. (2018). Materials Accelerator Platform. https://mission-innovation.net/wp-content/uploads/2018/01/Mission-Innovation-IC6-Report-Materials-Acceleration-Platform-Jan-2018.pdf

Mondi plc. (2025). Mondi Group. https://www.mondigroup.com/

MUL. (2025). Montanuniversität Leoben. https://www.unileoben.ac.at/

NASA. (2021). Vision 2040: A Roadmap for Integrated, Multiscale Modeling and Simulation of Materials and Systems.

NASA. (2025). TPSX database. https://tpsx.arc.nasa.gov/

Neumann, M., Gin, J., Rhodes, B., Bennett, S., Li, Z., Choubisa, H., Hussey, A., & Godwin, J. (2024). Orb: A Fast, Scalable Neural Network Potential. http://arxiv.org/abs/2410.22570

Newsweek. (2025). Data Center Energy Demand Could Triple by 2028, Government Report Warns. https://www.newsweek.com/data-center-energy-demand-could-triple-2028-government-report-warns-2004468

NIST. (2018). NIST Configurable Data Curation System (CDCS). https://cdcs.nist.gov

NIST. (2025a). National Institute of Standards and Technology (NIST). https://www.nist.gov/

NIST. (2025b). NIST database. https://data.nist.gov/sdp/#/

NIST Materials Genome Initiative. (2021). The 2021 MGI Strategic Plan. https://www.mgi.gov/

NOMAD. (2025). NOMAD. https://nomad-lab.eu/nomad-lab/

OECD. (2022). Advanced Materials: Working Description. https://one.oecd.org/document/ENV/CBC/MONO(2022)29/en/pdf

Open Industry 4.0 Alliance Implementation GmbH. (2025). FACTORY-X The digital ecosystem. https://factory-x.org/

Österreichisches Institut für Wirtschaftsforschung. (2024). Schlüsseltechnologien – Position und Potenzial Österreichs. https://www.wifo.ac.at/publication/274010/)

PCCL. (2025). Polymer Competence Center Leoben (PCCL). https://www.pccl.at/

Plansee SE. (2025). Plansee SE. https://www.plansee.com/en.html

PLUS. (2025). Paris Lodron Universität Salzburg. https://www.plus.ac.at/

Primetals Technologies Austria GmbH. (2025). Primetals Technologies Austria GmbH. https://www.primetals.com/

Processes4Planet co-programmed Partnership. (2022). Processes4Planet - Strategic Research and Innovation Agenda. https://www.aspire2050.eu/sites/default/files/users/user85/p4planet_07.06.2022._final.pdf

Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational Physics, 378, 686–707. https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045

Raissi, M., Yazdani, A., & Karniadakis, G. E. (2020). Hidden fluid mechanics: Learning velocity and pressure fields from flow visualizations. Science, 367(6481), 1026–1030. https://doi.org/10.1126/science.aaw4741

RHI. (2025). RHI Magnesita GmbH. https://www.rhimagnesita.com/de/

RMIS – Raw Materials Information System. (2025). Raw Materials Profiles. https://rmis.jrc.ec.europa.eu/rmp/

Rohrhofer, F. M., Posch, S., Größnitzer, C., & Geiger, B. C. (2022). On the Role of Fixed Points of Dynamical Systems in Training Physics-Informed Neural Networks. https://doi.org/10.48550/arXiv.2203.13648

Sansana, J., Joswiak, M. N., Castillo, I., Wang, Z., Rendall, R., Chiang, L. H., & Reis, M. S. (2021). Recent trends on hybrid modeling for Industry 4.0. Computers & Chemical Engineering, 151, 107365. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2021.107365

SCCH. (2025). Software Competence Center Hagenberg (SCCH). https://www.scch.at/

Schoelkopf, B., Janzing, D., Peters, J., Sgouritsa, E., Zhang, K., & Mooij, J. (2012). On Causal and Anticausal Learning. http://arxiv.org/abs/1206.6471

SCRREEN. (2025). critical raw materials list 2023. https://scrreen.eu/crms-2023/

Semiconductor Research Corporation SRC. (2021). Decadal Plan for Semiconductors - SRC. https://www.src.org/about/decadal-plan/

Simeone, O. (2022). Machine Learning for Engineers. Cambridge University Press. https://doi.org/10.1017/9781009072205

Sphera Solutions, I. (2025). GaBi.

Srinivas, A. (2024). Perplexity. https://www.perplexity.ai/

Stanford University. (2025). Introducing the Center for Research on Foundation Models (CRFM). https://hai.stanford.edu/news/introducing-center-research-foundation-models-crfm

Statistik Austria. (2024). Materialflussrechnung. https://www.statistik.at/statistiken/energie-und-umwelt/umwelt/materialflussrechnung

Statistik Austria. (2025). Importe und Exporte von Gütern. https://www.statistik.at/statistiken/internationaler-handel/internationaler-warenhandel/importe-und-exporte-von-guetern

Sutton, R. S., & Barto, A. G. (2018). Reinforcement Learning. An Introduction. (2nd ed.). A Bradford Book, Cambridge. http://incompleteideas.net/book/the-book-2nd.html

Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., McDermott, M. J., Gallant, M., Cubuk, E. D., Merchant, A., Kim, H., Jain, A., Bartel, C. J., Persson, K., Zeng, Y., & Ceder, G. (2023). An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of novel materials. Nature, 624(7990), 86–91. https://doi.org/10.1038/s41586-023-06734-w

TDK Electronics AG. (2025). TDK Electronics AG. https://www.tdk-electronics.tdk.com/

The University of Manchester. (2025). Carbon Calculations over the Life Cycle of Industrial Activities (CCaLC). http://www.ccalc.org.uk/

Tian, S., Jiang, X., Wang, W., Jing, Z., Zhang, C., Zhang, C., Lookman, T., & Su, Y. (2025). Steel design based on a large language model. Acta Materialia, 285, 120663. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2024.120663

TNO innovation for life. (2025). polySCOUT. https://www.tno.nl/en/sustainable/circular-plastics/biopolymer-design-machine-learning/

Tsukuba : National Institute for Materials Science (NIMS). (2024). MatNavi - NIMS Materials Database. https://julib.fz-juelich.de/vufind/Record/436534

TU-Clausthal. (2025). Technische Universität Clausthal. https://www.tu-clausthal.de/

Tu, T., Azizi, S., Driess, D., Schaekermann, M., Amin, M., Chang, P.-C., Carroll, A., Lau, C., Tanno, R., Ktena, I., Mustafa, B., Chowdhery, A., Liu, Y., Kornblith, S., Fleet, D., Mansfield, P., Prakash, S., Wong, R., Virmani, S., … Natarajan, V. (2023). Towards Generalist Biomedical AI. http://arxiv.org/abs/2307.14334

TU Wien. (2025). Technische Universität Wien. https://www.tuwien.at/

U.S. Geological Survey. (2025). International Minerals Statistics and Information. https://www.usgs.gov/centers/national-minerals-information-center/international-minerals-statistics-and-information

Umweltbundesamt. (2024). Klimaschutzbericht des Umweltbundesamtes 2024. https://www.umweltbundesamt.at/fileadmin/site/publikationen/rep0913.pdf

Umweltbundesamt. (2025). Globales Emissions-Modell integrierter Systeme. https://www.umweltbundesamt.at/angebot/leistungen/angebot-cfp/gemis

Uni-Bayreuth. (2025). Universität Bayreuth. https://www.uni-bayreuth.de/

United Nations. (2025). THE 17 SUSTAINABLE DEVELOPMENT GOALs. https://sdgs.un.org/goals

United Nations Statistics Division. (2025). Industrial Statistics. https://unstats.un.org/unsd/industry/Commodity/

University of Graz Business Analytics and Data Science-Center. (2024). aTRain. https://apps.microsoft.com/detail/9n15q44szns2?hl=de-de&gl=US

US Department of Energy. (2022). Industrial Decarbonization Roadmap. https://www.energy.gov/sites/default/files/2022-09/Industrial Decarbonization Roadmap.pdf

UWK. (2025). Universität für Weiterbildung Krems. https://www.donau-uni.ac.at/de.html

Vaswani, A., Shazeer, N., Parmar, N., Uszkoreit, J., Jones, L., Gomez, A. N., Kaiser, L., & Polosukhin, I. (2017). Attention Is All You Need. http://arxiv.org/abs/1706.03762

Verein Holzforschung Austria – Österreichische Gesellschaft für Holzforschung. (2024). dataholz. https://www.dataholz.eu/index.htm

Verlag Stahlschlüssel Wegst GmbH. (2025). Stahlschlüssel. https://www.stahlschluessel.de/de/produkte/onlineversion/inhalt.aspx

voestalpine. (2025a). voestalpine. https://www.voestalpine.com/

voestalpine. (2025b). voestalpine Stahl GmbH. https://www.voestalpine.com/stahl/Gesellschaften/voestalpine-Stahl-GmbH

Vrahatis, A. G., Lazaros, K., & Kotsiantis, S. (2024). Graph Attention Networks: A Comprehensive Review of Methods and Applications. Future Internet, 16(9), 318. https://doi.org/10.3390/fi16090318

Wagner, J., Berger, C. G., Du, X., Stubhan, T., Hauch, J. A., & Brabec, C. J. (2021). The evolution of Materials Acceleration Platforms: toward the laboratory of the future with AMANDA. Journal of Materials Science, 56(29), 16422–16446. https://doi.org/10.1007/s10853-021-06281-7

Wehrens, R., Putter, H., & Buydens, L. M. C. (2000). The bootstrap: a tutorial. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 54(1), 35–52. https://doi.org/10.1016/S0169-7439(00)00102-7

Whitley, D. (1994). A genetic algorithm tutorial. Statistics and Computing, 4(2). https://doi.org/10.1007/BF00175354

Wilkinson, M. D., Dumontier, M., Aalbersberg, Ij. J., Appleton, G., Axton, M., Baak, A., Blomberg, N., Boiten, J.-W., da Silva Santos, L. B., Bourne, P. E., Bouwman, J., Brookes, A.

J., Clark, T., Crosas, M., Dillo, I., Dumon, O., Edmunds, S., Evelo, C. T., Finkers, R., … Mons, B. (2016). The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship. Scientific Data, 3(1), 160018. https://doi.org/10.1038/sdata.2016.18

WOOD KPLUS. (2025). Wood K plus – Kompetenzzentrum Holz GmbH. https://wood-kplus.at/de

Yang, H., Hu, C., Zhou, Y., Liu, X., Shi, Y., Li, J., Li, G., Chen, Z., Chen, S., Zeni, C., Horton, M., Pinsler, R., Fowler, A., Zügner, D., Xie, T., Smith, J., Sun, L., Wang, Q., Kong, L., … Lu, Z. (2024). MatterSim: A Deep Learning Atomistic Model Across Elements, Temperatures and Pressures. http://arxiv.org/abs/2405.04967

Zeni, C., Pinsler, R., Zügner, D., Fowler, A., Horton, M., Fu, X., Wang, Z., Shysheya, A., Crabbé, J., Ueda, S., Sordillo, R., Sun, L., Smith, J., Nguyen, B., Schulz, H., Lewis, S., Huang, C.-W., Lu, Z., Zhou, Y., … Xie, T. (2025). A generative model for inorganic materials design. Nature. https://doi.org/10.1038/s41586-025-08628-5

Zvyagin, M., Brace, A., Hippe, K., Deng, Y., Zhang, B., Bohorquez, C. O., Clyde, A., Kale, B., Perez-Rivera, D., Ma, H., Mann, C. M., Irvin, M., Ozgulbas, D. G., Vassilieva, N., Pauloski, J. G., Ward, L., Hayot-Sasson, V., Emani, M., Foreman, S., … Ramanathan, A. (2023). GenSLMs: Genome-scale language models reveal SARS-CoV-2 evolutionary dynamics. The International Journal of High Performance Computing Applications, 37(6), 683–705. https://doi.org/10.1177/10943420231201154