

SFB  716



Universität Stuttgart

2011 / 2012

SFB 716 . JOURNAL

Aktuelle Informationen aus dem
Sonderforschungsbereich 716 –
Dynamische Simulation von
Systemen mit großen Teilchenzahlen

AUS DEM INHALT

Visualisierung zeigt physikalisches Phänomen | Prof. Jörg Wrachtrup mit dem Leibniz-Preis der DFG ausgezeichnet | Stabübergabe im SFB 716 | Erste Winter-School der Doktoranden | Junge Forscher zu Gast bei unseren Wissenschaftlern

Liebe Leserinnen und Leser!



Im wissenschaftlichen Wettbewerb kommt der Kommunikation mit der Öffentlichkeit eine immer größere Bedeutung zu. Besonders in großen, interdisziplinären Verbundprojekten der Grundlagenforschung wächst der Rechtfertigungsdruck gegenüber der Gesellschaft, warum gerade dieses oder jenes Forschungsgebiet mit hohem Mitteleinsatz gefördert wird und welche relevanten Ergebnisse im Lauf der Jahre erzielt wurden. Mit der zweiten Förderphase des Sonderforschungsbereiches 716 „Dynamische Simulation von Systemen mit großen Teilchenzahlen“ wurde das Teilprojekt „Öffentlichkeitsarbeit“ bewilligt, das diesen Informationsauftrag in koordinierter und professioneller Weise wahrnimmt.

Dieses Teilprojekt hat nun das SFB716.Journal ins Leben gerufen, das in Zukunft einmal jährlich erscheint. Es richtet sich an unsere Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, Gäste sowie an alle, die sich für unsere Arbeit interessieren. Mit diesem Instrument wollen wir einen Überblick über die Entwicklungen und Ergebnisse des jeweils vergangenen Jahres geben und über Auszeichnungen, Veranstaltungen, personelle Veränderungen sowie verschiedene Aktivitäten außerhalb der Forschungsprojekte informieren.

Die vor Ihnen liegende erste Ausgabe berichtet über eine spannende physikalische Entdeckung bei der Untersuchung von Rissen, die anstehende Zusammenarbeit mit dem DLR zur Positionierung von Satelliten durch Laserstrahlen sowie ein neues Teilprojekt, das gitterfreie Simulationsmethoden entwickeln will. Weiterhin freuen wir uns, dass mit Prof. Jörg Wrachtrup ein Teilprojektleiter unseres Sonderforschungsbereiches mit dem Leibniz-Preis ausgezeichnet wurde. Wir begrüßen die neue Junior-Professorin Maria Fyta und informieren über Aktionen der Doktoranden sowie gut besuchte Workshops für Kinder und Schülerinnen.

Ein wichtiges anstehendes Ereignis ist der Wechsel des Sprecheramtes von Prof. Rainer Trebin zu Prof. Christian Holm, der am 26. September 2012 im Anschluss an das diesjährige Statusseminar in einem festlichen Rahmen erfolgt. Im Namen des gesamten Sonderforschungsbereiches dankt das SFB 716.Journal Prof. Trebin für seine erfolgreiche und liebenswerte Führung in den letzten Jahren und wünscht Prof. Holm alles Gute in seiner neuen Rolle.

Nähere Informationen erhalten Sie auf den nächsten Seiten. Viel Vergnügen beim Lesen!

Prof. Thomas Ertl
Stellvertretender Sprecher des SFB 716

AUS DER FORSCHUNG

Visualisierung zeigt physikalisches Phänomen
Von Schottersteinen zum Mauerwerk

3

Neues Teilprojekt entwickelt gitterfreie Simulationsmethoden
Kooperation mit dem DLR
Bildqualität von Partikelsimulationen verbessert

4

AUSZEICHNUNGEN

Leibniz-Preis für Prof. Jörg Wrachtrup
Johannes Roth erhält Golden Spike
„Top 20 Most Read“ im Journal of Chemical Physics
NVIDIA Best Program Award

5

MENSCHEN

Neu im SFB 716 / Alumni
Stabwechsel im SFB 716
SFB 716 begrüßt neue Junior-Professorin

6

AKTUELLE MELDUNGEN

Erste Winter-School der Doktoranden
Professionelles Präsentieren trainiert
Spin-Off wirbt mit Dienstleistungen und Software für Partikelsimulationen
Junge Forscher zu Gast beim SFB 716

7

Einblicke in die Welt der Teilchensimulation
Relaunch der Webseite
In der Presse
Geschäftsstelle erneut umgezogen

8

ANKÜNDIGUNGEN

IMPRESSUM

Visualisierung zeigt physikalisches Phänomen

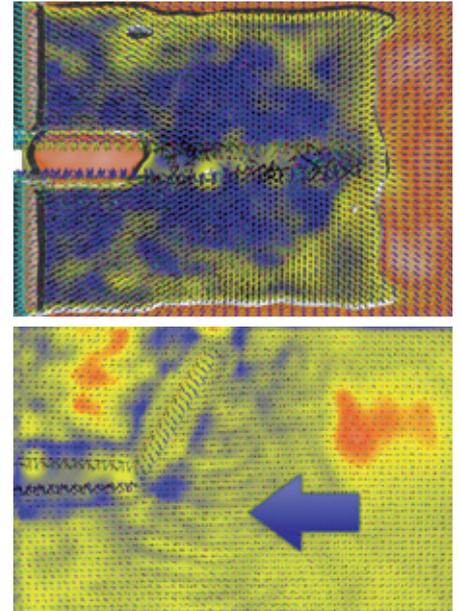
Metalloxide zählen zu den am häufigsten verwendeten Keramiken in mikroelektronischen Bauelementen. Dennoch können sie langfristig reißen und unbrauchbar werden. Physiker des SFB 716 untersuchen am Institut für Theoretische und Angewandte Physik (ITAP) daher in atomistischen Simulationen, wie Risse in dieser Materialsorte entstehen und verlaufen. Eine zentrale Rolle spielen hierbei die für Metalloxide typischen elektrischen Ladungen. In bisherigen Arbeit konnten die Forscher bereits herausfinden, dass Risse einen Einfluss auf die sich ausbildenden elektrostatischen Dipolmomente haben.

Daraufhin wurden von den Mitarbeitern des Visualisierungsinstitutes (VISUS) Darstellungen für die

Riss-Simulationen entwickelt. Dazu übertrugen sie eine zur Magnetresonanz-Bildgebung verwendete Technik auf die physikalischen Visualisierungen. Wo man also in der Medizin Nervenfaserbahnen im menschlichen Gehirn abbildet, kann man nun das Zusammenspiel tausender atomarer Dipolmomente zum Zwecke der Materialforschung präzise abbilden.

In den Bildern entdeckten die Physiker ein spannendes Phänomen: Bei der Ausbreitung eines Risses ergeben sich Störungen im Feld der Dipole. Diese breiten sich von der Riss-Spitze ausgehend wellenförmig aus und verändern die Orientierung der Dipole.

In weiteren Untersuchungen soll dieses Verhalten nun im Detail analysiert werden.



Nach oben abbiegender Riss im Aluminiumoxid: Sichtbar sind Störungen im elektrischen Feld der Dipole.

i Teilprojekte B.1, B.2, D.3 | ITAP, IMWF, VISUS

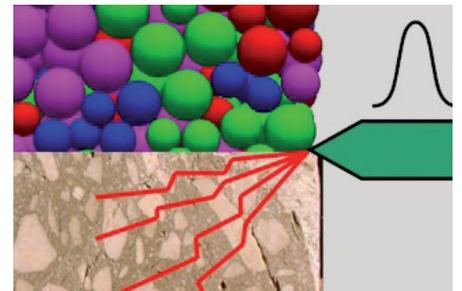
Von Schottersteinen zum Mauerwerk

Die Ingenieure vom Institut für Technische und Numerische Mechanik (ITM) untersuchen im SFB 716 das Verhalten granularer Materialien bei dynamischen Stößen. Bisher konzentrierten sie sich auf Schottersteine, wie sie an Eisenbahnstrecken zu finden sind. Sie simulierten verschiedene Beanspruchungen, unter denen die Steine zerbrechen, was letztlich zum Absenken von Bahnstrecken führen kann. Durch die Anwendung der Diskrete-Elemente-Methode wollen die Forscher die Bewegungen möglichst vieler Teilchen analysieren. Durch neue Algorithmen bauen sie aus Kugeln oder Polyedern realistisch geformte Steine auf, um die Bruchvorgänge in Schotterbetten zu simulieren.

Inzwischen haben die Ingenieure diese Untersuchungen abgeschlossen und lenken ihren Blick auf ein neues

Anwendungsfeld: Mauerwerke, die durch einen Bohrmeißel bearbeitet werden. Hierbei geht es ebenfalls um Versagensprozesse. Im Gegensatz zur bisherigen Arbeit spielen dabei hochdynamische Vorgänge im Kilohertzbereich eine Rolle, was zu interessanten physikalischen Phänomenen führt und aufwändige Berechnungen erfordert.

Die Experten wollen durch ihre Arbeit neue Erkenntnisse ermöglichen, so dass langfristig Bohrmeißel hinsichtlich Effizienz und Arbeitsschutz verbessert werden können. Denkbar ist es, Mediziner bei der Untersuchung von Berufskrankheiten zu unterstützen. Häufig entsteht nach mehrjähriger Arbeit mit vibrierenden Arbeitsgeräten das sogenannte vasospastische Syndrom, das zum Absterben von Gefäßen und Nervenzellen an Hand und Arm führt.



Simulation von Mauern, die durch einen Bohrmeißel bearbeitet werden.

Simulationen könnten klären, wann und wie solchen Erkrankungen entstehen.

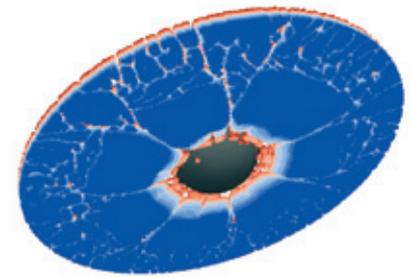
i Teilprojekt B.4 | ITM

AUS DER FORSCHUNG

Neues Teilprojekt entwickelt gitterfreie Simulationsmethoden

Im September 2011 begann ein neues Teilprojekt seine Arbeit. Prof. Marc Alexander Schweitzer sowie sein Mitarbeiter Sa Wu vom Institut für Parallele und Verteilte Systeme (IPVS) wollen im Teilprojekt D.7 gitterfreie Verfahren für Mehrskalensimulationen von Festkörpern entwickeln. Ihr Ziel ist es, ein numerisches Verfahren basierend auf einem Kontinuumsmodell zu ent-

wickeln, das eine ähnliche Genauigkeit in Bezug auf Rissentstehung und -ausbreitung liefert wie etwa molekulardynamische Berechnungen. Zugleich soll es makroskopische Materialproben und Bauteilen effizient simulieren. Als erste Anwendungen werden dynamische Rissausbreitungen untersucht und mit Simulations- und Labordaten aus der Literatur validiert.



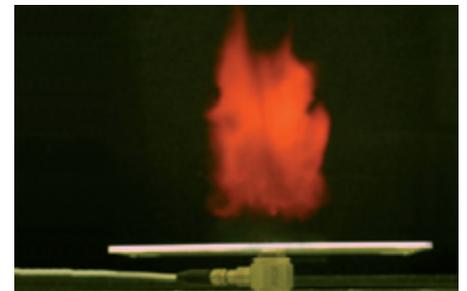
Erste Ergebnisse: Spröde Schreibe beim Auftreffen einer Kugel.

i Teilprojekt D.7 | IPVS

Kooperation mit dem DLR

Physiker des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) wollen Satelliten mit höchster Präzision ausrichten. Ihre Vision ist der Einsatz von Lasern. Das Potenzial des sogenannten lasergestützten Mikroantriebs ist vielversprechend: gezielte, kurze Laserpulse sollen Material von der Oberfläche eines metallischen Treibstoffs abtragen. Der Rückstoß des abgetragenen Materials führt zu einem Impulsübertrag, der sich abhängig vom Material exakt über Intensität, Pulsdauer und Wellenlänge konfigurieren

lässt. Konkrete Fragestellungen zur Auslegung eines zukünftigen Triebwerks sollen nun durch Simulationen beantwortet werden. Johannes Roth vom Institut für Theoretische und Angewandte Physik (ITAP) ist Experte für Vielteilchensimulationen und beschäftigt sich im SFB 716 mit Laserablationen, wie sie die Weltraumphysiker an Satelliten durchführen wollen. In Kooperation wollen die Wissenschaftler die Laserbestrahlung der Satelliten simulieren und möglichst einen weiteren Meilenstein auf dem Weg



Satelliten exakt positionieren durch Laserablationen.

zum Einsatz in der Praxis legen. Dabei wird das Software-Paket IMD (ITAP Molekulardynamik) genutzt.

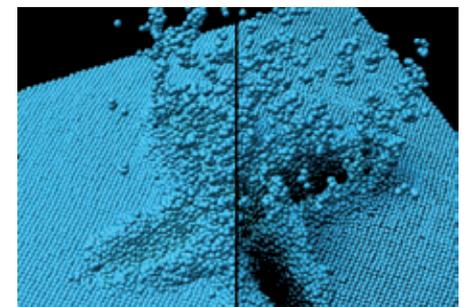
i Teilprojekt B.5 | ITAP

Bildqualität von Partikelsimulationen verbessert

Voraussetzung für effektive Analyse von Visualisierungen ist eine hohe Bildqualität. Dazu gehört auch eine optimale Beleuchtung. Doch das ist einfacher gesagt als getan: Die auszuwertenden Datensätze erreichen viele Gigabyte und enthalten oft mehrere Millionen Partikel pro Zeitschritt. Eine lange Beobachtungsdauer potenziert die zu verarbeitende Informationsflut zusätzlich.

Beleuchtungsmodelle der klassischen Echtzeitcomputergrafik sind für solche umfangreiche Simulationen nicht geeignet. Die Beleuchtung photometrisch exakt zu be-

rechnen, sprengt dagegen schnell die verfügbare Rechenkapazität. Auf der Suche nach Alternativen haben SFB-Forscher am Visualisierungsinstitut (VISUS) nun eine aus der Computergrafik bekannte Methodik auf wissenschaftliche Darstellungen übertragen. Mit dem sogenannten „Ambient Occlusion Verfahren“ werden üblicherweise Szenen für Computerspiele berechnet. Die Darstellungsqualität von Daten aus Partikelsimulationen hat sich dadurch enorm verbessert. Zudem ist das Verfahren schnell genug, um die Visualisierungen auf handelsüblichen Rechnern zu berechnen.



Laserablation. Im Vergleich eine klassische Beleuchtung (links) und die Beleuchtung mit Ambient Occlusion (rechts).

Das Verfahren wurde im März 2012 auf der internationalen Visualisierungskonferenz Pacific VIS in Songdo (Korea) vorgestellt.

i Teilprojekte D.3, D.4 | VISUS



Leibniz-Preis für Prof. Jörg Wrachtrup

Erst im Januar 2011 wurde **Prof. Jörg Wrachtrup**, Leiter des Teilprojektes B.6, für seine Forschungsarbeit mit dem ERC Advanced Investigator Grant des Europäischen

Forschungsrates geehrt. Nur knapp ein Jahr später erhielt er bereits eine weitere renommierte Auszeichnung, den Gottfried-Wilhelm Leibniz-Preis der DFG. Dieser gilt als höchst dotierter deutscher Forschungspreis und wird auch als „deutscher Nobelpreis“ gehandelt. Wrachtrup erhält diesen für die Erschließung seines völlig neuartigen und äußerst erfolgreichen For-

schungsgebietes an der Schnittstelle zwischen Festkörperphysik und Quantenoptik. Vor allem die Detektion einzelner paramagnetischer Stickstoff-Fehlstellen in Diamanten (NV-Zentren), die sich durch eine außergewöhnliche Fotostabilität auszeichnen, gilt als besondere Errungenschaft.

i Teilprojekt B.6 | 3PI, Dezember 2011

Johannes Roth erhält Golden Spike



Anlässlich des Results and Review Workshops wird jedes Jahr durch das Höchstleistungsrechenzentrum (HLRS) der Golden Spike Award an

drei herausragende Projekte auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens vergeben. 2011 ging eine der begehrten Anerkennungen an **Johannes Roth**. Sein vorgestelltes Projekt simuliert Laserablationen mit dem sogenannten Zweitemperaturmodell, dass auf separaten Temperaturen für Elektronen und Gitter basiert. Unter Nutzung der HLRS-Rechner konnte Roth bis zu 200 Millionen Atome großskalig simulieren und so Größen- und Winkelverteilung des vom Laser abgetragenen Materials von einzelnen

Atomen bis zu Tropfen quantitativ analysieren. Weiterhin beobachtete er die Erzeugung von Blasen in Aluminium, wenn die Laserstrahlung für eine Ablation zu gering ist. Zur Berechnung seiner Simulationen rechneten etwa 500 Prozessoren zwei Tage lang. Johannes Roth wurde für die wissenschaftliche Bedeutung seiner Arbeit und die effiziente Nutzung von Höchstleistungsrechnern ausgezeichnet.

i Teilprojekt B.5 | ITAP, Oktober 2011

„Top 20 Most Read“ im Journal of Chemical Physics



Das Journal of Chemical Physics gilt als eines der renommiertesten Fachzeitschriften für physikalische Chemie. Jeden Monat veröffentlicht der Herausgeber eine Liste

der 20 meist gelesenen Artikel. Im Juli 2012 war eine Arbeit von **Matthias Bohner und Jun.-Prof. Johannes Kästner** unter diesen populären Publikationen, was das Interesse der wissenschaftlichen Gemeinschaft an den Forschungsthemen des SFB 716 verdeutlicht. In ihrer Publikation „An algorithm to find minimum free-energy paths using umbrella integration“ stellen sie eine Methode vor, mit der sich der Pfad kleinster freier Energie berechnen lässt. Dieser gibt an, wie sich die einzelnen Atome bei einer chemischen Reaktion bewegen, in welcher Reihenfolge chemische

Bindungen brechen bzw. gebildet werden. So kann vorausgesagt werden, wie die beteiligten Substanzen verändert werden müssen, um höhere Ausbeuten oder höhere Selektivitäten zu erzielen.

Mit der vorgestellten Methodik werden Teilstücke des Pfades bestimmt. Die Forscher wollen nun ihr Verfahren weiterentwickeln, um den gesamten Pfad simulieren zu können. Ihr Ziel ist es, die Bindung von Arzneimitteln an biologische Rezeptoren zu untersuchen.

i Teilprojekt C.6 | TheoChem Juli 2012

NVIDIA Best Program Award

Dominic Röhm gewann für den in seiner Diplomarbeit entwickelten Lattice-Boltzmann CPU Code den NVIDIA Best Program Award, der im Rahmen des CUDA Wettbe-

werbes auf der „20th International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics“ im August 2011 in Fargo (USA) verliehen wurde. Die Jury bewertete Originalität und Lesbarkeit des Codes, Einfachheit im Kompilieren und Ausführen, die gewonnene Performance im Ver-

gleich zu seriellen CPU Versionen, Qualität der Dokumentation sowie dem wissenschaftlichen Gehalt. Der Code ist inzwischen Bestandteil der Software ESPResSo, die in mehreren Teilprojekten des SFB 716 eingesetzt wird.

i Teilprojekt D.6 | ICP, August 2011

MENSCHEN

NEU IM SFB 716

Projektleiter

- **Maria Fyta**, ICP
Junior-Professorin
- **Colin Glass**, HLRS
Teilprojekt D.2
- **Marc A. Schweitzer**, IPVS
Teilprojekt D.7

Wissenschaftliche Mitarbeiter

- **Gernot Bauer**, ITT,
Teilprojekt A.7
- **Matthias Bohner**, ITC
Teilprojekt C.6
- **Dominic Röhm**, ICP
Teilprojekt D.6
- **Timo Häußermann**, 3PI
Teilprojekt B.6
- **Manuel Hirschler**, ICVT
Teilprojekt A.6
- **Daniel Kauker**, VISUS
Teilprojekt D.3
- **Alexander Kiselev**, ITAP
Teilprojekt B.5
- **Kuno Kurzhals**, VIS,
Teilprojekt D.5
- **Andreas Lemmer**, ICP
Teilprojekt B.3
- **Sven Stühler**, ITM
Teilprojekt B.4
- **Sa Wu**, IPVS,
Teilprojekt D.7

Verwaltung

- **Claudia Lemke**, ICP
Geschäftsstelle

ALUMNI

Wissenschaftliche Mitarbeiter

- Andrew Aird (B.6)
- Sven Bachtaler (D.5)
- Sebastian Grottel (D.3)
- Johannes Karlin (B.5)
- Franz Keller (A.2)
- Rainer Keller (D.2)
- Nahren M. Mascarenhas (C.6)
- Bertram Thomaß (D.3)

Verwaltung

- Marianne Jungjohann

Stabwechsel im SFB 716



Prof. Hans-Rainer Trebin (links) wird im September das Sprecheramt an Prof. Christian Holm (rechts) übergeben.

Der SFB 716 hat 2007 seine Arbeit mit Prof. Hans Hasse als erstem Sprecher aufgenommen. Als dieser einem Ruf nach Kaiserslautern folgte, übernahm Prof. Hans-Rainer Trebin 2008 diese Funktion. Er führte den SFB in eine zweite Förderphase, die im Januar vergangenen Jahres begann.

SFB 716 begrüßt neue Junior-Professorin



Maria Fyta arbeitet seit März 2012 als neue Junior-Professorin am Institut für Computerphysik (ICP) und wird im Rahmen des

SFB 716 eine eigene Arbeitsgruppe aufbauen.

Maria Fyta studierte Physik an der Universität Kreta in Griechenland und promovierte dort 2005 über Energetik und mechanische Eigenschaften von nanostrukturiertem amorphem Kohlenstoff. Ab 2005 war sie wissenschaftliche Mitarbeiterin bei Prof. Eftimios Kaxiras in der Forschungsgruppe „Computational Physics and Materials Science“ in Harvard (USA), wo sie schwerpunktmäßig an biophysikalischen Projekten arbeitete. 2008 wechselte sie zur Technischen Universität München, um in der Forschergruppe „Bio Soft-Matter

Da absehbar war, dass Prof. Trebin während dieser Zeit in die Nähe des Ruhestands rückt, wurde vereinbart, dass er im September 2012 dieses Amt an Prof. Christian Holm übergibt.

Die Übergabe wird am 26. September 2012 im Anschluss an das diesjährige Statusseminar in einer offiziellen Festveranstaltung erfolgen, zu der über 100 Gäste erwartet werden.

Der SFB 716 dankt Prof. Trebin für seine erfolgreiche und liebenswerte Führung in den letzten Jahren und wünscht Prof. Holm alles Gute in seiner neuen Rolle.

Theory“ unter Leitung von Prof. Roland Netz die Optimierung von ionischen Kraftfeldern zu untersuchen.

Die Einbettung in das Forschungsprogramm des SFB 716 erlaubt der neuen Junior-Professorin nun die Kombination ihrer beiden bisherigen Forschungsfelder Festkörperphysik und Biophysik. In ihrer wissenschaftlichen Tätigkeit wird sie sich auf multiskalige, atomistische und mesoskopische Simulationen zur Analyse von biomodifizierten Oberflächen und Nanoteilchen, DNA Translokationen durch kleine Poren sowie elastischen und optoelektronischen Eigenschaften von Kohlenstoff-Materialien konzentrieren.

Maria Fyta wird sich im Rahmen der Festveranstaltung „STABWECHSEL im SFB 716“ am 26. September um 10:00 Uhr in einer Antrittsvorlesung vorstellen.

Erste Winter-School der Doktoranden

Im Februar 2012 trafen sich die Doktoranden des SFB 716 zum ersten Mal zu einer Winter-School im österreichischen Schruns im Alpen-tal Montafon. In Vorträgen, Workshops und Diskussionsrunden wurden Ansätze für mögliche Kooperationen sichtbar gemacht und die interdisziplinäre Zusammenarbeit gefördert. Ein weiteres Ziel war es, die Qualität der Ausbildung durch eine klare Strukturierung zu sichern sowie wesentliche Aufgaben des Doktoranden-Netzwerkes festzulegen.



i Doktoranden-Netzwerk

Professionelles Präsentieren trainiert

Um das professionelle Präsentieren zu trainieren, organisierte das Doktoranden-Netzwerk im Juni 2012 einen Workshop für den wissenschaftlichen Nachwuchs. Das zweitägige Seminar wurde in englischer Sprache gehalten. Jeder der acht Teilnehmer brachte einen Vortrag aus seiner wissenschaftlichen Arbeit mit und präsentierte Auszüge daraus. Dabei wurden Kriterien wie Körpersprache, Wortwahl oder Folienaufbau in der Gruppe analysiert und diskutiert. Der Referent Peter Harriefeld gab zudem intensive Impulse, etwa zur Eröffnung des Vortrages oder zur Ansprache des Publikums. In Übungen und Videoanalysen erhielt jeder Einzelne direktes, ausführliches Feedback und Hinweise für Verbesserungen. Für Dezember ist bereits ein weiteres Seminar geplant, dann zum Thema „Wissenschaftliches Schreiben“.

i Doktoranden-Netzwerk

Spin-Off wirbt mit Dienstleistungen und Software für Partikelsimulationen

Simulationen werden zunehmend eingesetzt, um Entwicklungs- und Produktionsabläufe zu überprüfen und zu verbessern. An dieser Entwicklung orientierte sich auch Florian Fleissner, als er im April 2012 seine Firma Inpartik gründete. Der Ingenieur, der am Institut für Technische und Numerische Mechanik (ITM) und im SFB 716 noch in Teilzeit arbeitet, wirbt mit Dienstleistungen und Software für Partikelsimulationen. Florian Fleissner setzt dabei auf die Software Pasimodo, die er gemeinsam mit Doktoranden und Studierenden seit nunmehr acht Jahren entwickelt. Pasimodo wurde innerhalb des SFB 716 sowie in verschiedenen Institutskooperationen bereits für vielfältige wissenschaftliche Anwendungen eingesetzt. Die Intension des Jungunternehmers ist es, das erarbeitete Potential nun auch der Industrie zugänglich zu machen. Als Spin-Off aus der Universität Stuttgart kann sich Inpartik über ein solides Startpaket freuen: einschlägiges Know-How und ausgezeichnete Wirtschaftskontakte bilden eine optimale Grundlage, die bereits jetzt auf großes Interesse aus der Verfahrenstechnik, Automobilindustrie sowie der Luft- und Raumfahrt stößt.

i Teilprojekt A.5 | ITM

Junge Forscher zu Gast beim SFB 716

Rund 70 Mädchen und Jungen zwischen 8 und 14 Jahren besuchten in den vergangenen Herbst- und Osterferien bei der Kids Week die Forscher des SFB 716. Sie erkundeten die Geheimnisse der Teilchenphysik und Simulationswissenschaft und erfuhren, dass Experimente heute zu einem großen Teil am Computer durchgeführt werden. Die

angebotenen Veranstaltungen waren jeweils bis auf den letzten Platz ausgebucht.

Im Workshop „Fest, flüssig, gasförmig“ erfuhren die jungen Forscher, warum Gas gasförmig, Wasser flüssig und Eis fest ist und welche Rolle Druck und Temperatur bei den jeweiligen Aggregatzuständen spielen. Am Institut für Technische Thermodynamik und thermische Verfahrenstechnik (ITT) beobachteten sie in Experimenten physikalische Phänomene und untersuchten anschließend im Computerpool der Computerphysik (ICP), wie sich dabei die einzelnen Teilchen verhalten.



Am Höchstleistungsrechenzentrum (HLRS) tauchten die Gäste in die Welt des Billardspieles ein. Sie informierten sich über die Grundkräfte der Natur, Mechanik und Verdrängung, untersuchten im Kugelbad das Verhalten von Teilchen und beobachteten am Rechner rotierende Kugeln. Ende Oktober werden beide Veranstaltungen erneut im Rahmen der Kids Week stattfinden.



i Teilprojekte A.7, C.5, D.2, D.6, Ö | ICP, ITT, HLRS, VISUS

AKTUELLE MELDUNGEN

Einblicke in die Welt der Teilchensimulation

Im April 2012 nutzte eine Gruppe von zwölf bis vierzehn Jahre alten Mädchen beim Girls' Day die Möglichkeit, sich beim SFB 716 über Teilchensimulation zu informieren.



Wie bei der Kids Week vermittelten die SFB Forscher der Institute für Technische Thermodynamik und thermische Verfahrenstechnik (ITT) und Computerphysik (ICP) in Experimenten Grundlagen über das Verhalten von Teilchen bei verschiedenen Aggregatzuständen. Beispielsweise gingen die Mädchen der Frage nach, ob man auf dem Mount Everest ein Frühstücksei kochen kann.

Unter Anleitung programmierten die Mädchen anschließend kleine Simulationen und bewiesen weibliches Geschick am Rechner.

i Teilprojekte A.7, C.5, D.6, Ö | ICP, ITT, VISUS

Relaunch der Webseite

Seit Februar 2012 präsentiert sich der SFB 716 mit einer neuen Internetpräsenz. Geändert hat sich in erster Linie das visuelle Erscheinungsbild, zudem gab es inhaltliche Überarbeitungen. Die Besucher erhalten nun mehr Informationen über die Projektbereiche, Teilprojekte und Kooperationspart-

ner. Weiterhin wurde ein Bereich für Schüler, Besucher und Mitarbeiter mit zielgruppenspezifischen Informationen eingerichtet. Seit Juli kann auch ein RSS-Feed zu den aktuellen News abonniert werden.

i Teilprojekt Ö | VISUS

In der Presse

Im Mai 2012 berichtete „Medizin und Technik“ über eine Arbeit des SFB 716. Das Heft richtet sich an Ingenieure, Projektmanager und Führungspersonal aus dem Bereich der Medizintechnik und informiert sechs mal jährlich über aktuelle Technik und Forschung. Auf einer A4-Seite (S. 62) wurde die verbesserte Bildqualität von wissenschaftlichen Visualisierungen vorgestellt, die auf einer neuen Beleuchtungsmethode basierte.



Das Heft ist online verfügbar unter <http://medizin-technik.tpk6.de/medizin+technik/iframe/2012003>.

i Teilprojekte D3, D4, Ö | VISUS

Geschäftsstelle erneut umgezogen

Die SFB Geschäftsstelle finden Sie ab sofort unter folgender Adresse: Universität Stuttgart, SFB 716, c/o Institut für Computerphysik, Allmandring 3, 70569 Stuttgart.

Die Telefonnummer bleibt gleich.

ANKÜNDIGUNGEN

SFB 716 KOLLOQUIEN

Die nächsten Kolloquien des SFB 716 finden an folgenden Terminen statt: **25. Oktober 2012, 22. November 2012, 10. Januar 2013, 07. Februar 2013**, jeweils um 16:00 Uhr.

Neuer Ort! **Allmandring 3, Seminarraum, Stuttgart.**

PARTICLES 2013

Der SFB 716 wird sich bei der internationalen Konferenz „Third Conference on Particle-Based Methods (PARTICLES 2013)“ vom **18. bis 20. September 2013**, in **Stuttgart** präsentieren und eine eigene Session organisieren.

Weitere Infos unter <http://congress.cimne.com/particles2013>.

WORKSHOP ESPRESSO SUMMER SCHOOL 2012

Das ICP veranstaltet vom **8. bis 12. Oktober 2012** (Ort: **Allmandring 3, Stuttgart**) eine einwöchige Sommerschule, in der die Teilnehmer in Vorlesungen und Übungen in die Benutzung der Softwarepakete ESPResSo, ESPResSo++ und VOTCA und die dahinterstehende Physik eingeführt werden.

Details unter <http://espressomd.org/wordpress/ess2012/>.

IMPRESSUM

Herausgeber:
Universität Stuttgart
Sonderforschungsbereich 716
c/o Visualisierungsinstitut
Allmandring 19
70569 Stuttgart

www.sfb716.uni-stuttgart.de

Konzept, Gestaltung, Redaktion:
Tina Barthelmes

Fotos: SFB 716

Online-Version www.sfb716.uni-stuttgart.de/journal

September 2012

Die Forschung des SFB 716 der Universität Stuttgart wird gefördert durch die

DFG