

SFB  716



Universität Stuttgart

2012/2013

SFB 716 . JOURNAL

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

Hintergrund: Implantieren von Fehlstellen in das Atomgitter von Diamanten

AUS DEM INHALT

Präsenz auf Fachtagungen und öffentlichen Veranstaltungen | Billante
Zukunftstechnologien | Sprudelnde Blasen, die Stoffe mischen | Nanopo-
ren, die unser Erbgut scannen | Erneut Auszeichnungen für SFB-Forscher
Doktoranden treffen sich in Österreich | Filmportrait über den SFB 716 fertig

Liebe Leserinnen und Leser!



Sie halten die zweite Ausgabe des SFB716.Journals in ihren Händen. Insbesondere möchte ich Sie auf die neue Rubrik „Forschung im Blickpunkt“ hinweisen, die ausgewählte Forschungsarbeiten im Detail beleuchtet. Zudem können wir erneut von einigen Höhepunkten berichten.

So setzte sich erfreulicherweise der Trend fort, dass unsere Wissenschaftler mit Preisen ausgezeichnet werden. Joachim Groß erhielt den Dechema-Preis der Max-Buchner-Stiftung und Johannes Kästner den Hellmann-Preis der theoretischen Chemie. Eine neue Mitarbeiterin, Katrin Scharnowski, gewann noch während ihres Studiums den IEEE SciVis Forschungswettbewerb und Michael Krone den Best Paper Award der VCMB Konferenz in Schweden. Darüber hinaus gab es vielfältige Forschungsaktivitäten, etwa die alljährliche ESPResSo Sommerschule, das internationale SimGPU Symposium, sowie ein Symposium im Rahmen der InterPore Jahreskonferenz in Prag. Kurz bevor steht eine weitere Konferenz, die Particles 2013, mit zwei eigenen SFB-Sessions.

Unser Wissenschaftsnachwuchs hat sich zu einer Winter- und Sommerschule getroffen, um Fachthemen zu erörtern und die projektspezifische Zusammenarbeit zu intensivieren. Alle Doktoranden haben sich der GS SimTech angeschlossen, was neue Synergien freisetzt und Kooperationen mit SimTech ermöglicht.

Im Frühjahr entstand ein Kurzfilm, der unsere Forschung in Wort und Bild erklärt und sich an die allgemeine Öffentlichkeit wendet. Wie auch in den Jahren zuvor zeigten wir beim Girls Day, der KidsWeek sowie am Tag der Wissenschaft unsere Arbeit und ermöglichten Praktikanten aus der Region und dem internationalen Ausland Einblicke in unsere Forschungsthemen.

Nun steht ein weiterer wichtiger Meilenstein an – der Verlängerungsantrag für die dritte und letzte Förderperiode. Für die laufenden Projekte bedeutet dies, laufenden Arbeiten fertigzustellen und neue Ideen zu formulieren. Es gilt, Strategien für den SFB 716 als Ganzes und Ansätze für weitere vier Jahre zu überlegen. Das wird im Zentrum des anstehenden Status- und Perspektivseminars stehen. Gut vorbereitet wollen wir im Juni nächsten Jahres unsere Visionen zur Begutachtung vorstellen und einen erfolgsversprechenden Antrag präsentieren.

Nun wünsche ich Ihnen viel Vergnügen beim Lesen.

Prof. Christian Holm
Sprecher des SFB 716

VERANSTALTUNGEN Verabschiedung von Hans-Rainer Trebin und Sprecherwechsel Teilkonferenz der InterPore 2013 organisiert	3
Austausch über Computersimulationen auf GPUs Teilchen und ihre Rolle in Simulationen beim Tag der Wissenschaft	4
Junge Forscher besuchen den SFB 716	5
FORSCHUNG IM BLICKPUNKT Brillante Zukunftstechnologien	6
Sprudelnde Blasen, die Stoffe miteinander mischen	7
Nanoporen, die unser Erbgut scannen	8
MENSCHEN Prof. Marc Schweitzer im Rheinland Ruf der Universität Siegen gefolgt Neu im SFB 716 / Alumni	9
AUSZEICHNUNGEN DECHEMA-Preis für Joachim Groß	
Hellmann-Preis für Johannes Kästner Best Paper Award für Michael Krone Katrin Scharnowski gewinnt den IEEE SciVis Contest	10
AKTUELLE MELDUNGEN Winter- und Summer School der Doktoranden Einblicke in die Chemie und Visualisierung Film über den SFB 716 SFB 716 in der Presse	11
AUSBLICK IMPRESSUM	12

Verabschiedung von Prof. Hans-Rainer Trebin und Sprecherwechsel

Rund 140 Gäste kamen im September vergangenen Jahres, um Prof. Trebin im feierlichen Rahmen zu verabschieden und gemeinsam die Übergabe des Sprecheramtes an Prof. Holm zu begehen.

Uni-Rektor Wolfram Ressel würdigte in seiner Ansprache die exzellente Forschung und Lehre von Hans-Rainer Trebin und reichte den Führungsstab im SFB 716 offiziell an Christian Holm weiter. Auch Ulrich Weiß, Altdekan der Fakultät Mathematik und Physik, richtete den Blick zurück auf das Geleistete, dankte dem Hochschulprofessor für sein Engagement und wünschte dem zukünftigen Sprecher alles Gute bei der Weiterführung des Verbundprojektes.

Fachvorträgen von Kurt Kremer (Max-Planck Institut für Polymerforschung, Mainz), Walter Steurer (ETH Zürich) und der Antrittsvorle-



sung von Maria Fyta, Juniorprofessorin am Institut für Computerphysik, ergänzten das Programm der Festveranstaltung.



Im Rahmen eines Festakts reichte Uni-Rektor Prof. Wolfram Ressel den Führungsstab im SFB 716 von Prof. Hans-Rainer Trebin an Prof. Christian Holm weiter.

i September 2012

Teilkonferenz der InterPore 2013 organisiert

Im Mai 2013 fand die fünfte Jahrestagung der Internationalen Gesellschaft für poröse Medien statt, kurz InterPore genannt. Diese internationale Fachtagung verknüpft Wissenschaftler und Ingenieure aus aller Welt, die sich in Theorie, Experimenten oder Computersimulationen in Wissenschaft und Industrie mit porösen Materialien beschäftigen. Zahlreiche Vorträge, Symposien, Workshops und Poster-Präsentationen ermöglichen den Austausch neuer Erkenntnisse und Ansätze, um das Wissen über poröse Materialien zu erweitern.

Das größte Symposium der diesjährigen InterPore wurde von Projektleitern des SFB 716 aus den

Forschungsbereichen Strömungsmechanik, Thermodynamik, Materialwissenschaften und Mechanik organisiert. Prof. Rudolf Hilfer, Prof. Peter Eberhard und Prof. Ulrich Niekens konnten ein Programm mit insgesamt 28 Präsentationen (darunter 12 eingeladene Vorträge) zum Thema „Grundlegende Aspekte von Strömungen und Transportprozessen in porösen Medien“ aufstellen. Im Zentrum standen hydrodynamische, elektromagnetische, chemische oder mechanische Prozesse, die bei natürlichen und technischen Prozessen auftreten, etwa bei der Erdöl- und Erdgasförderung, CO₂-Verpressung, der Endlagerung radioaktiver Abfälle, chemischer Katalyse, Grundwas-



serströmungen oder der Herstellung von Filtern, Membranen und Papier aller Art.

Die SFB-Wissenschaftler waren mit insgesamt 8 Präsentationen auf der InterPore 2013 vertreten und an der Organisation der Konferenz maßgeblich beteiligt.

i Teilprojekte A.5, A.6, B.3, B.4 | ICP, ICVT, ITM, Mai 2013

VERANSTALTUNGEN

Austausch über Computersimulationen auf GPUs

Rund 40 Fachleute trafen sich zwischen den 27. und 29. Mai 2013 in Freudenstadt im Schwarzwald, um sich auf der SimGPU 2013 über die Computersimulation auf Grafikkarten auszutauschen.

Dieses internationale Symposium wurde vom SFB 716 der Universität Stuttgart, dem Institut für Physik der Universität Mainz und dem Applied Mathematics Research Centre der Coventry University organisiert. Anliegen der Veranstalter war es, Experten auf dem Gebiet des GPU-Rechnens, Spezialisten für Höchstleistungsrechnen sowie Vertreter der Computerindustrie miteinander zu vernetzen. In Vorträgen, Diskussionen und Plakatpräsentationen wurden verschiedene Schwerpunkte beleuchtet

– von der molekularen Simulation über Anwendungen der Informatik und Naturwissenschaften bis hin zu Strömungssimulationen.

Im Vergleich zur ersten SimGPU 2011 wurde deutlich, wie sehr sich das Rechnen auf GPUs innerhalb der vergangenen zwei Jahre weiterentwickelt hat. Während damals vorwiegend Demonstrationsprojekte gezeigt wurden, die durch einzelne GPUs beschleunigt wurden, standen in diesem Jahr produktive Anwendungen auf Multi-GPUs mit hunderten von Grafikkarten im Vordergrund.

i Teilprojekt D.6 | ICP



Rund 40 Experten besuchten die SimGPU 2013 in Freudenstadt.



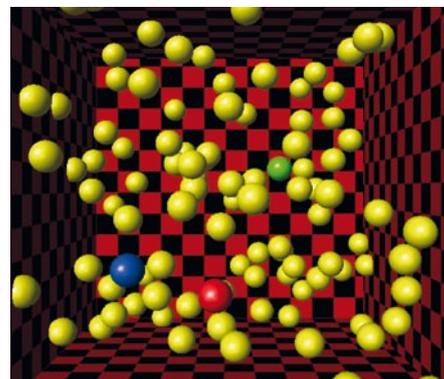
Projektleiter Axel Arnold war maßgeblich an der Organisation beteiligt.

Teilchen und ihre Rolle in Simulationen beim Tag der Wissenschaft

Im Juni 2013 präsentierte sich der SFB 716 beim jährlich stattfindenden Tag der Wissenschaft der Universität Stuttgart.

Interaktive Exponate zeigten die verschiedenen Größenskalen der Teilchen eines Zuckerwürfels und vermittelten ein Gefühl für die enormen Teilchenmengen, die in einem Glas Wasser oder einem Sandkorn zu finden sind. Darüber hinaus konnten die Besucher spielerisch testen, was auf aktuellen Speichermedien speicherbar ist und warfen am Lennard-Jones-Simulator einen Blick auf die Bewegungen von Teilchen bei unterschiedlichen Temperaturen.

Zahlreiche Interessierte nutzten die Gelegenheit, sich mit dem Thema zu beschäftigen und einen Einblick in die Welt der Partikelsimulationen zu bekommen.



Im nächsten Jahr sollen weitere Mitmachangebote entstehen.

i Teilprojekt Ö, D.6 | VISUS, ICP
Juni 2013

Junge Forscher besuchen den SFB 716

Im vergangenen Jahr waren rund 100 Schülerinnen und Schüler bei den Wissenschaftlern des SFB 716 zu Gast. Veranstaltungen wie die von der Stadt Stuttgart organisierte Kids Week, der bundesweite Girls' Day oder BOGY-Praktika waren Anlass ihres Besuches.

Was sind Teilchen? Welche Kräfte wirken zwischen ihnen? Was haben Teilchen mit Computersimulationen zu tun? Diese und ähnliche Fragen waren Hintergrund der Angebote des SFB 716.

An den Instituten für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik sowie für Computerphysik standen die Aggregatzustände und das unterschiedliche Verhalten der Teilchen im Mittelpunkt. In Experimenten konnten die Kinder verschiedene physikalische Phänomene ausprobieren. Anschließend konnte dank einer Simulationssoftware überprüfen, was sie vorher in Theorie und Experiment erlernt hatten.

Am Höchstleistungsrechenzentrum beschäftigten sich die jungen Forscher mit dem Billardspiel. Die Wissenschaftler beleuchteten die verschiedenen physikalischen Phänomene, die dabei eine Rolle spielen und veranschaulichten so die Komplexität von Teilchensimulationen. Über die Veranstaltung am HLRS erschien im Anschluss ein Bericht in der Stuttgarter Zeitung.

Wie kleinste Teilchen, etwa Atome oder Moleküle, am Rechner sichtbar gemacht werden, erfuhren Schülerinnen höherer Klassenstufen am Visualisierungsinstitut. Schritt für Schritt wurden sie an die eigenständige Erstellung von Visualisierungen herangeführt. Im Verlauf des Workshops konnten sie schließlich reale Datensätze visualisieren.

Zudem informieren sich BOGY-Praktikanten über unsere Forschung und probierten sich an einfachen praktischen Aufgaben, etwa der Visualisierung einer Verkehrssimulation.



BOGY-Praktikanten im ICP.



Die Stuttgarter Zeitung berichtete über die Veranstaltung am HLRS.

i Teilprojekte A.7, D.4, D.2, D.6, Ö | HLRS, ICP, ITT, VISUS, November 2012, Juni 2013



Schülerinnen und Schüler bei den Kids Week Workshops „Billardspiel und Teilchenphysik“ am HLRS und „Fest, flüssig, gasförmig“ am ICP und ITT.



Zum Girls Day veranstaltete das VISUS den Workshop „Virtuelle Moleküle sichtbar machen“, das ICP in Kooperation mit dem ITT den Workshop „Fest, flüssig, gasförmig“

Brillante Zukunftstechnologien

Diamanten stehen für Magie, Mythos und Faszination. Reine Diamanten, die ausschließlich aus Kohlenstoff bestehen, gelten dabei als besondere Kostbarkeit. Was die Herzen vieler Schmuck-Liebhaber höher schlagen lässt, begeistert auch die Wissenschaftler vom 3. Physikalischen Institut der Universität Stuttgart. Allerdings greifen sie gezielt in die Struktur der Edelsteine ein und erzeugen spezielle Defekte, um Kernspintomographie im Nanobereich zu ermöglichen, die Entwicklung von Quantencomputern voranzutreiben oder langlebige Biomarker zu produzieren.

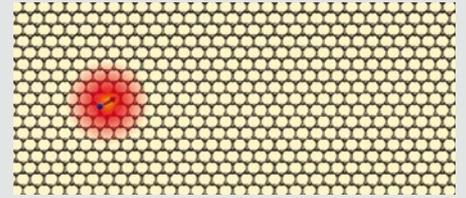
Allem voran ging die Entdeckung von Prof. Jörg Wrachtrup, dass spezielle Defekte in Diamantkristallen rot leuchten, wenn sie mit grünem Laserlicht bestrahlt werden. Seitdem beschäftigt sich der SFB-Forschungsleiter mit der Manipulation von Diamanten. Seine Vision ist es, das Leuchten der Diamanten bis ins Detail zu verstehen und in ihre atomare Struktur präzise einzugreifen, um bestimmte Eigenschaften für spezielle Anwendungen nutzbar zu machen.

Im Labor schießen die Forscher mit einer speziellen Technik Stickstoff in winzige Diamanten. Weniger als fünf Nanometer klein sind die Kantenlängen dieser Kristalle. Durch den Beschuss dringen Stickstoffatome in das naturgemäß sehr stabile Diamantgitter ein und kommen darin zum Stehen. Zudem brechen Kohlenstoffverbindungen auf und Leerstellen werden erzeugt. Wird der Diamant anschließend auf eine Temperatur von 900 °C erhitzt, ordnen sich die Atome neu an. Die erzeugten Leerstellen wandern durch den Kristall und platzieren sich direkt neben einem Stickstoffatom. Damit haben die Physiker zunächst ihr Ziel erreicht: ein sogenanntes NV-Zentrum ist produziert. Die Bestrahlung mit grünem Laserlicht

kann nun das Ergebnis sichtbar machen, um es zu überprüfen und dessen Position auszumessen.

Neben Experimenten werden Computersimulationen eingesetzt. Einzelne Parameter lassen sich am Rechner optimal anpassen und das Ergebnis virtuell überprüfen. So können wichtige Vorhersagen getroffen werden, etwa über die erforderliche Beschuss-Geschwindigkeit für eine möglichst genaue Implantation im Atomgitter oder die Auswirkung unterschiedlicher Oberflächeneffekte, etwa durch anheftende Wasser- oder Sauerstoffteilchen. Die Erkenntnisse aus den physikalischen Berechnungen fließen in die Experimente ein und ermöglichen es, relevante Details zu verändern und das Verfahren zu verbessern.

Die leuchtenden Diamanten haben hohes Anwendungspotential. So könnten sie einen weiteren Schritt zum Quantencomputer sein, der eines Tages enorme Rechenleistungen bewältigen soll. Im Gegensatz zur heutigen Computertechnik, die auf 0 und 1 aufbaut, sollen dann Quantenbits beide Zustände gleichzeitig annehmen und so wesentlich mehr Daten verarbeiten. Diamanten könnten hier zum Einsatz kommen. Dazu müssen es die Wissenschaftler schaffen, ein sogenanntes



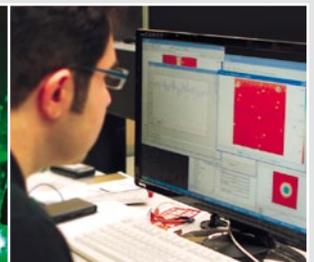
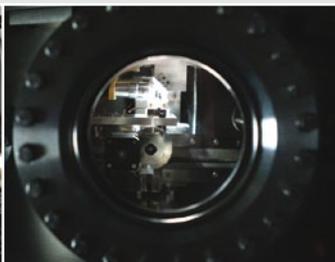
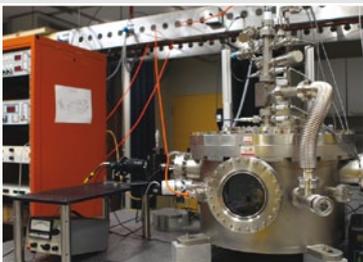
Simulationen klären wichtige Details.

Quantenregister zu produzieren, also beliebig viele Defekte gleichmäßig und in einem maximalen Abstand von zehn Nanometern zueinander anzuordnen.

Auch als winzige Sensoren für Magnetfelder könnten die Diamanten dienen und Kernspintomographie für Nano-Objekte ermöglichen. Durch Abtasten der Oberfläche lassen sich 3D-Bilder von Molekülen, Proteinen sowie kleinsten Materialproben erstellen, etwa um die Dynamik in lebenden Zellen zu verfolgen oder unsichtbare Details und chemische Verbindungen zu offenbaren. Erste Versuche haben die Physiker bereits durchgeführt. Vielleicht könnte diese Technologie schon in naher Zukunft ein Instrument für Biologen, Mediziner und Materialwissenschaftler sein.

Eine weitere Idee ist es, durch Diamantpartikel medizinische Wirkstoffe oder Zellen zu markieren. Diese könnten sichtbar machen, ob Antikörper ihr Ziel erreichen oder von Krankheiten befallene Zellen über einen bestimmten Zeitraum existieren. Im Gegensatz zu heutigen Biomarkern können Nanodiamanten lange in Zellen bleiben ohne Schaden anzurichten oder ihre Funktion zu verlieren.

i Teilprojekt B.6 | 3PI



Im Labor des Institutes wird ein winziger Diamant in einem Implanter mit Stickstoffatomen beschossen.

Um das Ergebnis zu überprüfen, wird der Nanodiamant an einem Lichttisch mit grünem Laserlicht bestrahlt.

Sprudelnde Blasen, die Stoffe miteinander mischen

Gasbläschen steigen in einer Flüssigkeit auf. Was an eine Flasche mit sprudelndem Mineralwasser erinnert, ist in der Chemieindustrie ein häufig eingesetzter Reaktortyp – eine Blasensäule. Darin werden Produkte hergestellt, die Ausgangsstoffe für zahlreiche Gegenstände aus unserem Alltag sind. Das Interesse ist daher groß, die Abläufe in Blasensäulen zu optimieren und steuerbar zu machen. Wissenschaftler vom Institut für Chemische Verfahrenstechnik der Universität Stuttgart entwickeln Simulationen, mit denen sich relevante Faktoren wie Säulengröße, Flüssigkeitsmengen oder Stoffkombinationen am Computer virtuell testen lassen.



Wissenschaftler des SFB 716 wollen in Simulationen die Reaktionen in Blasensäulen vorhersagbar machen.

Blasensäulen sind Apparaturen, in denen Reaktionen zwischen gasförmigen und flüssigen Stoffe erfolgen. Dazu wird Gas am Boden der Blasensäule kontinuierlich einer Flüssigkeit zugeführt. Während die Blasen nach oben steigen, laufen an ihren äußeren Schichten chemische Prozesse ab, bei denen sich die Stoffe miteinander verbinden. Die zahlreichen Blasen bilden eine große Oberfläche und begünstigen so den Erfolg und Umsatz der Reaktionen.

Auf diese Weise entstehen rund 90 Prozent aller Produkte der Chemieindustrie, die in vielfältige Endprodukte einfließen: Kosmetik und Kleidung, Kunststoffartikel sowie synthetische Kraftstoffe. Das Interesse ist dementsprechend groß, die Abläufe in Blasensäulen-Reaktoren zu optimieren und besser

steuerbar zu machen. Teilchensimulationen können ein Weg sein, um in Zukunft den Umsatz und die Selektivität der Endprodukte von Blasensäulen besser vorhersagen zu können.

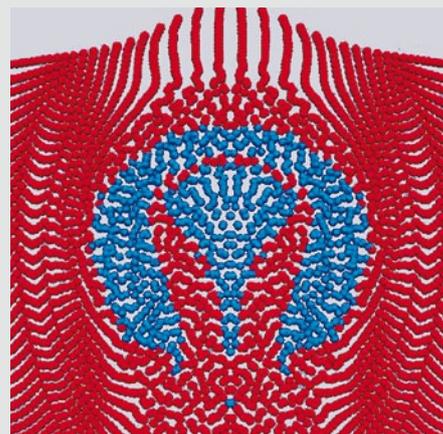
Seit mehreren Jahren werden Computersimulationen für die Entwicklung neuer Stoffe eingesetzt. Bislang stellten Wissenschaftler vor allem die Zirkulation der Gasblasen und die damit verbundene Strömung der Flüssigkeiten am Rechner nach. Damit lassen sich jedoch nur eingeschränkt Voraussagen über variable Bedingungen treffen, etwa über das Verhalten in größeren Säulen, bei größeren Flüssigkeitsmengen oder bei verschiedenen Stoffen. Teilchensimulationen, wie sie innerhalb des SFB 716 entwickelt werden, könnten das ändern.

Das Forscherteam um Prof. Ulrich Niekien konzentriert sich auf die Gasblasen, genauer gesagt auf deren Grenzschichten und die darin ablaufenden chemische Reaktionen. Die Stuttgarter Simulationsexperten lösen die Systeme mit gitterfreien Verfahren in bis zu 20.000 Elemente auf und erarbeiten aufwändige numerische Berechnungen, die große Rechencluster oder die Speicherung auf Grafikkarten erforderlich macht. Vor allem die Ausnutzung der verfügbaren Rechenkapazitäten steht im Zentrum ihrer Forschungsarbeit.

Mit ihrer Vorgehensweise sind die SFB-Wissenschaftler Vorreiter bei der Simulation der beschriebenen



Während Gasblasen in einer Flüssigkeit aufsteigen, entstehen an ihren Grenzschichten neue Produkte.



Simulationen machen sichtbar, wie es zur Verbindung der Stoffe kommt.

nen Prozesse in Blasensäulen mit gitterfreien Verfahren. Erstmals konnten sie nun mit ihrer Methodik mehrere Blasen am Computer abbilden.

Ihre aktuellen Ergebnisse veröffentlichten sie im Juli im Sonderheft „Blasensäulen“ des Fachjournals „Chemie Ingenieur Technik“ veröffentlicht. Diese gilt als wichtigste deutschsprachige Zeitschrift für Verfahreningenieure, technische Chemiker, Apparatebauer und Biotechnologen.

i Teilprojekt A.6 | ICVT

Nanoporen, die unser Erbgut scannen

Analysen des menschlichen Erbguts, die DNS-Sequenzierung, wie sie derzeit durchgeführt werden, dauern ihre Zeit und sind teuer. Daher forschen Professor Christian Holm, die Junior-Professorin Maria Fyta und ihr Team an einer neuen Form der Erbgutanalyse. Dabei wird die DNA durch eine Nanopore gefädelt. Anhand elektrischer Pulse könnten die vorhandenen Nukleobasen abgelesen werden. Mit mathematischen Methoden versuchen die Forscher, die Vorgänge bei der DNS-Sequenzierung mittels Nanoporen zu simulieren. Das soll wesentliche Details zur Realisierung des Verfahrens klären.

Wer das Wort Erbgutanalyse hört, denkt vermutlich aktuell an die vererbten Risiken, an Brust- oder Darmkrebs zu erkranken. Vor dem geistigen Auge agieren dann Wissenschaftler im Labor, untersuchen zwischen Reagenzgläsern und den unterschiedlichsten Apparaturen die DNA eines Menschen auf mögliche Abweichungen hin, um ihm zu mehr Klarheit über sein Erkrankungsrisiko zu verhelfen.

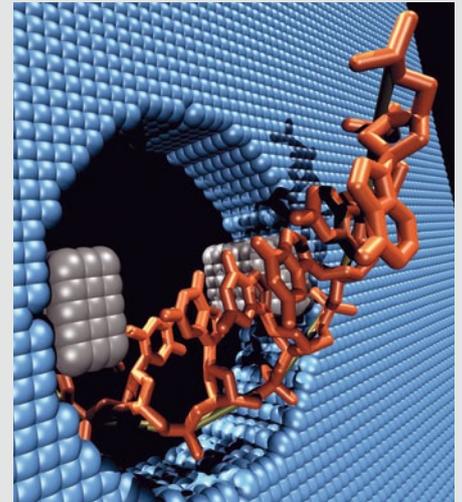
Analysen des menschlichen Erbguts, wie sie derzeit durchgeführt werden, dauern ihre Zeit und sind teuer. Wissenschaftler des Institut für Computerphysik forschen daher an einer neuen Form der Erbgutanalyse. Ein Labor benötigen die Physiker nicht, sie arbeiten an und mit Computern. Durch mathematischer Methoden versuchen sie die Vorgänge bei der DNA-Sequenzierung mittels Nanoporen zu simulieren – bunte Kugeln und Stränge werden dabei auf den Bildschirmen lebendig.

Grundlage des neuen Analyseverfahrens sind zwei Wasserreservoirs, die eine Membran trennt, in der sich eine winzige Pore befindetet. Diese Nanoporen – für Ionen und Biomoleküle wie die DNA durchlässige Proteine in der Zellmembran – kommen natürlicherweise in den Zellen aller Organismen vor. Neben diesen natürlichen Nanoporen gibt es aber auch künstliche, so zum Beispiel aus Graphen, Silicium- oder Gallium-Stickstoff. Ihnen gemein ist ihre unvorstellbare Kleinheit von zwei bis zehn Nanometer. Wird zwischen den beiden Reservoirs eine Spannung

angelegt, fließt ein Strom, der auf den Transport von Ionen durch die Nanopore zurückgeführt werden kann. Ist in einem der Reservoirs ein Biomolekül – wie hier die DNA – enthalten, so ändert sich der Strom immer dann, wenn das Molekül die Pore passiert, und je nach dessen Aufbau zeigt der Strompuls unterschiedliche Signaturen.

Die Idee ist: Man fädelt die DNA in eine Nanopore, liest anhand der elektrischen Pulse deren Nukleobasen ab, und hat so ein schnelles und kostengünstiges Verfahren zur Erbgutanalyse. „Auf diese Weise könnte sich einmal der Traum vieler Mediziner erfüllen, Patienten eine individuelle Therapie zukommen lassen zu können“, erzählt die Junior-Professorin Maria Fyta. Damit dies keine Vision bleibt, haben die Forscher aber noch viel Arbeit vor sich, denn das System insgesamt ist noch nicht beschrieben. Zwar können DNA-Moleküle derzeit schon in Nanoporen eingefädelt werden, jedoch sind die Signaturen der DNA schwach und es kommt zu überlappenden Impulsen.

Mithilfe von Simulationen nehmen sich die Wissenschaftler nun dem Zustandekommen des Stroms durch die Pore und grundlegenden Mechanismen des Transportprozesses an. Zu den Fragen, die sie sich dabei stellen, zählen unter anderem: Wie wirken sich verschiedene Salzkonzentrationen auf den Transport der DNA durch die Pore aus und wie auf die Strompulse während der Passage? Welche Porenabmessungen sind optimal für genaue Messungen? „Zur präzisen



DNA-Sequenzierung mittels Nanoporen – ein neues Verfahren zur Erbgutanalyse, bei dem eine DNA durch eine Nanopore gefädelt wird.

Klärung wichtiger Details arbeiten wir mit molekulardynamischen und quantenmechanischen Simulationen“, erklärt Fyta. „Um jedoch Gesetzmäßigkeiten zu finden, die den Prozess im Allgemeinen beschreiben, vergrößern wir die Systeme, modellieren Ionen als Kugeln und die DNA als Kette.“ Bei der Wahl zwischen genauem Detail und grobem kompletten Überblick spielt die zu verarbeitende Datenmenge eine zentrale Rolle. Atomare Simulationen liefern exakte Details, können etwa die elektrische Signatur der Biomoleküle vorausbekimmen oder zeigen, wie Ionen auf das Erbgut wirken. Komplexe DNA-Stränge auf diese Weise abzubilden, ist jedoch auch heute noch aufgrund der Rechenintensivität schlicht unmöglich.

Bis der Arzt das kleine, günstige Gerät in Händen halten wird, das innerhalb eines Tages das gesamte Erbgut eines Menschen entschlüsselt, ist also noch viel Entwicklungsarbeit zu leisten. „Wir gehen aber davon aus“, sagt Maria Fyta, „dass unsere Erkenntnisse vorab schon für ähnliche interessante biomolekulare Systeme genutzt werden können.“ (Text: Julia Alber)

i Teilprojekt C.5 | ICP

Prof. Marc Schweitzer im Rheinland



Nachdem er fast drei Jahre lang den Lehrstuhl „Simulation großer Systeme“ am Institut für Parallele und Verteilte Systeme leitete, zog

ein Ruf der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn den Simulationsexperten Prof. Marc Alexander Schweitzer im April ins Rheinland. So kehrte er an den Ort zurück, an dem seine wissenschaftliche Laufbahn mit einem Studium der Mathematik begann.

Im Zuge dieser Veränderung erlebte auch das von Prof. Schweitzer geleitete Teilprojekt D.7 einen Ortswechsel, das ein neues Verfahren entwickeln möchte, um Risse in Materialien genau und effizient vorherzusagen. Das Teilprojekt wird bis März 2014 aus Bonn agieren.

i Teilprojekt D.7 | Friedrich-Wilhelm-Universität Bonn, Institut für Numerische Simulation

Ruf der Universität Siegen gefolgt



Seit Beginn der ersten Förderphase hat der Junior-Professor Robert Seifried im SFB 716 geforscht. Dabei lag sein Fokus auf der Modellierung, Simulation und Optimierung

mechanischer Systeme. Gemeinsam mit Prof. Peter Eberhard leitete er die beiden Teilprojekte A.5 und B.4, in denen er sich mit der Simulation von Schädigungs- und Bruchvorgängen an Maschinen, Gesteinen und Beton beschäftigte.

Nun ist er einem Ruf der Universität Siegen gefolgt, wo er ab sofort einen Lehrstuhl für Dynamische Systeme in der Fahrzeugtechnik aufbauen wird. Der SFB 716 dankt dem Kollegen für sein Engagement und wünscht ihm alles Gute und viel Erfolg für die Zukunft.

i Teilprojekt A.5, B.4 | ITM

NEU IM SFB 716

Wissenschaftler/-innen

- **Katrin Scharnowski**
Teilprojekt D.4
- **Florian Weik**
Teilprojekt C.5
- **Georg Rempfer**
Teilprojekt C.5

Verwaltung

- **Silke Schade**, ICP
Geschäftsstelle

ALUMNI

Projektleiter/-innen

- Robert Seifried (B.4)

Wissenschaftler/-innen

- Christian Ergenzinger (A.4)
- Philipp Beck (B.1)



DECHEMA- Preis

für **Joachim Groß** vom Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik.

Im November 2012 erhielt der Forschungsleiter des SFB 716 in Frankfurt am Main den mit 20.000 Euro dotierten DECHEMA-Preis der Max-Buchner-Stiftung für seine herausragenden Forschungsarbeiten zur Thermodynamik von Gemischen.

Seine Aktivitäten basieren auf der molekularen Thermodynamik. Joachim Groß untersuchte unter anderem die Wechselwirkungen von Makromolekülen, ionischen, assoziierenden und polaren Komponenten. Auf dieser Grundlage gelang es ihm, Stoffgemische zu beschreiben und ihre Eigenschaften vorauszuberechnen. Auch für spezielle Bedingungen wie Stoffgemische am kritischen Punkt hat er Simulationen entwickelt.

Dank seiner Erkenntnisse ist es Verfahrenstechnikern möglich, Eigenschaften von Stoffgemischen

mit polaren Wechselwirkungen oder am kritischen Punkt voraus zu berechnen. Dies ist eine wichtige Voraussetzung, um die Verhaltensweisen neuer oder modifizierter Materialien.

Innerhalb des SFB 716 untersucht Joachim Groß in molekulardynamischen Simulationen die Superstruktur von Nanokristallen mit dem Ziel, deren Materialdesign zu rationalisieren.

i Teilprojekt A.7 | ITT,
November 2012

AUSZEICHNUNGEN

AUSZEICHNUNGEN



Hellmann-Preis

für **Johannes Kästner** vom Institut für Theoretische Chemie.

Dieser Preis wird jährlich für hervorragende wissenschaftliche Leistungen im Bereich der theoretischen Chemie an Nachwuchswissenschaftler aus dem deutschsprachigen Raum verliehen. Im September 2012 wurde der Projektleiter des SFB 716, der sich vorrangig mit der Ergänzung

experimenteller Erkenntnisse im Bereich der Chemie und Biochemie durch Computersimulationen beschäftigt, mit dieser Auszeichnung geehrt.

Der Junior-Professor erhielt den Hellmann-Preis für die Entwicklung und Anwendung quantenchemisch basierter Methoden zur Behandlung biomolekularer Systeme, die er insbesondere zur Simulation enzymatischer Reaktionen einsetzt. Ferner wurden seine Arbeiten zur Geometrieoptimierung, zur Berechnung freier Energien und

zur Bestimmung von Tunnelraten in komplexen biomolekularen Systemen gewürdigt. „Johannes Kästner konnte das Arsenal an Simulationswerkzeugen für quantenchemische und Kraftfeldsimulationen wesentlich verbessern und durch entsprechende exemplarische Anwendungen zur Aufklärung biochemischer Reaktionsmechanismen beigetragen“, so die Würdigung der Arbeitsgemeinschaft für Theoretische Chemie.

i Teilprojekt C.6 | TheoChem, Oktober 2012



Best Paper Award

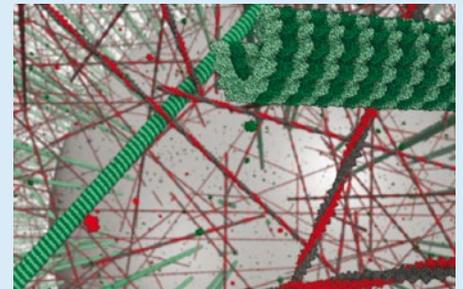
Eine Publikation von **Michael Krone** wurde im September beim ‚Eurographics Workshop

on Visual Computing for Biology and Medicine‘ (VCBM) 2012 in Schweden mit dem Best Paper Award ausgezeichnet.

Die Kooperationsarbeit mit dem SimTech-Wissenschaftler Martin Falk beschreibt eine erweiterte Simulations- und Visualisierungsumgebung für Transportprozesse in

Zellen, die Zellen mit enorm hohen Teilchenzahlen in Echtzeit darstellen kann. Mehr als zehn Milliarden Atome können damit berücksichtigt werden, was die effiziente Analyse der Simulationsergebnisse auf atomarer Ebene ermöglicht.

Die Anwendung ist auch für Lehrzwecken einsetzbar, da sie eine stufenlose Darstellung des kompletten Zellmodells bis hin zu einzelnen Atomen eines Proteins bereit stellt. Es lassen sich die Skalenunterschiede in Zellen darstellen, welche im Bereich vom einzelnen Nano- bis zu mehreren Mikrometern reichen.



Simulations- und Visualisierungsumgebung, die mehr als zehn Milliarden Atome abbildet. Die Abbildung zeigt eine vereinfachte Zelle mit 25 Milliarden Atomen.

i Teilprojekt D.4 | VISUS, Oktober 2012

Studentin gewinnt den IEEE SciVis Contest

Katrin Scharnowski konnte sich als Studentin der Informatik beim IEEE SciVis Contest 2012 gegenüber der internationalen Forschergemeinschaft durchsetzen und gewann mit ihrer Einreichung den ersten Platz. Der Contest wird jährlich im Rahmen der Visualisierungskonferenz IEEE VisWeek organisiert. Dabei müssen Phänomene verschiedener Fachbereiche anhand bereitgestellter Datensätze ausgewertet werden. Im Zentrum der Aufga-

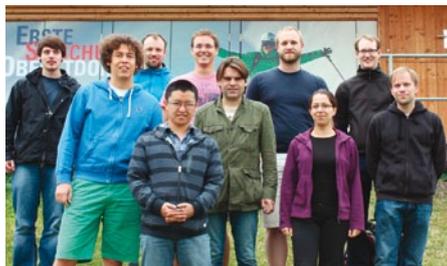
benstellung stand diesmal das Material Bariumtitanat, das aufgrund seiner besonderen elektrochemischen Eigenschaften häufig als Dielektrikum oder Kaltleiter in Kondensatoren oder Mikro-Chips verwendet wird. Unter bestimmten thermischen Einflüssen treten in diesem Stoff sogenannte Phasenübergänge auf. Dabei verändert sich das atomare Gefüge des Kristallgitters, was die magnetischen Eigenschaften beeinflusst und Risse oder sogar Brüche verursachen kann.

Die angehende Informatikerin entwickelte eine Software zur Analyse der Daten. Damit konnte sie den Verlauf der Prozesse sichtbar machen und die komplexen Fragen beantworten. Unterstützt wurde sie unter anderem von Michael Krone und Philipp Beck aus dem SFB 716.

Katrin Scharnowski ist inzwischen Mitarbeiterin des SFB 716 und wird als Doktorandin das Teilprojekt D.4 aktiv unterstützen.

i Teilprojekt B.1, D.4 | ITAP, VISUS, Oktober 2012

Winter- und Summer School der Doktoranden



Die SFB-Doktoranden in Österreich.

Nach dem positiven Resümee auf die Winter School 2012 fuhren die SFB-Doktoranden in diesem Jahr gleich zwei Mal nach Österreich. Im März beschäftigten sie sich mit den unterschiedlichen Workflows und Parallelisierungsansätzen für die Simulationen in den einzelnen Fachbereichen. Dabei wurden Unterschiede und Gemeinsamkeiten zwischen molekularen und makroskopischen Teilchensimulationen erörtert und Fähigkeiten und Erfahrungen ausgetauscht. Juniorprofessor Johannes Kästner referierte zudem über Wissenschaftsmarketing und beleuchtete Themen wie Ergebnistransparenz und -marketing, die für eine wissenschaftliche Karriere unverzichtbar sind.

Fünf Monate später folgte eine Summer School mit dem Schwerpunkt auf fachfremden Inhalten. Die Doktoranden wollten ihr Fachwissen erweitern, etwa zu den Themen OpenAccess, High Performance Architekturen von Höchstleistungsrechnern, professionelle Visualisierung oder Zukunftsperspektiven im Consulting. Im Zentrum der Gespräche standen ferner die bevorstehende Projektverlängerung und neue Kooperationen.

i Doktoranden-Netzwerk, März/August 2013

Einblicke in die Chemie und Visualisierung

Zwei Forschungspaktikanten verweilten im Sommer 2013 bei unseren Wissenschaftlern – ein Student der Chemie aus den USA und

ein angehender Informatiker aus Portugal. Ihr Wunsch war es, praktische und theoretische Kenntnisse im wissenschaftlichen Umfeld zu sammeln und darüber hinaus Deutschland mit seiner Sprache und Kultur kennenzulernen. Ihr Aufenthalt war gefördert durch das DAAD Programm „RISE weltweit“.

Einer der Praktikanten war drei Monate lang am Institut für Theoretische Chemie. Er setzte sich unter fachlicher Anleitung durch unsere Simulationsexperten mit dem sogenannten Umbrella-Sampling-Verfahren für Partikelsimulationen auseinander und erhielt Einblicke in die Berechnung freier Energie in chemischen Reaktionen.



Forschungspaktikant aus Portugal entwickelt mit Studenten eine App, mit der sich 3D-Visualisierungen auf der Powerwall des Visualisierungsinstitutes interaktiv steuern lassen.

Im Fokus des zweiten Stipendiaten stand die Visualisierung von Simulationsdaten. Innerhalb von sechs Wochen entwickelte er am Visualisierungsinstitut gemeinsam mit Studenten der Uni Stuttgart eine App für Android-Smartphones und -TabletPCs. Mit dieser sind nun 3D-Darstellungen auf der hochauflösenden Großprojektionsleinwand im Visualisierungslabor des Institutes interaktiv steuerbar.

i Teilprojekte C.6, D.4 | VISUS, TheoChem, Juli 2013

Film über den SFB 716

Ein Film über den SFB 716 wurde im vergangenen April fertiggestellt. Innerhalb von sechs Minuten zeigt er die aktuelle Forschung hinsichtlich Teilchensimulationen, de-

ren besondere Herausforderungen und einige Anwendungsbereiche.

Zum Tag der Wissenschaft wurde er erstmals öffentlich gezeigt und ist seitdem auf unserer Webseite und im YouTube Kanal der Universität zu sehen, wo er bereits eine Woche nach dem Upload 200 Mal abgerufen wurde.



Eindrücke vom Filmset.

i Teilprojekt Ö | VISUS

SFB 716 in der Presse

November 2012 | Die **Stuttgarter Zeitung** berichtet über die Kids Week Veranstaltung am HLRS.

Januar 2013 | **Transmitter**, das Magazin der Maschinenbau fakultäten der Uni Stuttgart, stellte die Firmenausgründung von Florian Fleissner und Passimodo vor.

Juni 2013 | Eine **Sonderausgabe der Stuttgarter Zeitung** zum Tag der Wissenschaft präsentiert die Forschung am ICP, wo in Simulationen an der Entwicklung eines neuen Erbgutanalyse-Verfahrens gearbeitet wird.

i Teilprojekt Ö | VISUS

SFB 716 KOLLOQUIEN

Die Termine für das Kolloquien des SFB 716 im Wintersemester sind:

- **24.10.2013, 16:00 Uhr**
2 Vorträge – intern
- **21.11.2013, 16:00 Uhr**
2 Vorträge – extern und intern
- **19.12.2013, 16:00 Uhr**
1 externer Vortrag, anschließend Weihnachtsfeier
- **30.01.2014, 16:00 Uhr**
2 Vorträge – extern und intern

Veranstaltungsort ist wie gewohnt:

Institut für Computerphysik, Allmandring 3, 70569 Stuttgart,
Seminarraum 1.079.

PARTICLES 2013

Vom **18. bis 20. September 2013** findet die internationale Konferenz Particles 2013 in **Stuttgart** statt. Zwei der Sessions wurden vom SFB 716 arrangiert:

- Multi-scale Particle Methods in Engineering Applications
(19.9.2013, 14:00 - 16:00, organisiert durch Joachim Groß, Andreas Kronenburg und Robert Seifried)
- Biochemical Simulations and Soft Matter.
(19.9.2013, 10:45 - 12:45, organisiert durch Christian Holm und Johannes Kästner)

In verschiedenen Vorträgen werden Forschungsarbeiten aus dem Verbundprojekt dem internationalen Fachpublikum präsentiert.

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

WORKSHOP ESPRESSO SUMMER SCHOOL 2013

Das ICP veranstaltet vom **7. bis 11. Oktober 2013 (Ort: Allmandring 3, Stuttgart)** erneut 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.

Weitere Details sind verfügbar unter <http://espressomd.org/word-press/ess2013/>.

Interessierte sind zur Teilnahme herzlich eingeladen.

IMPRESSUM

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

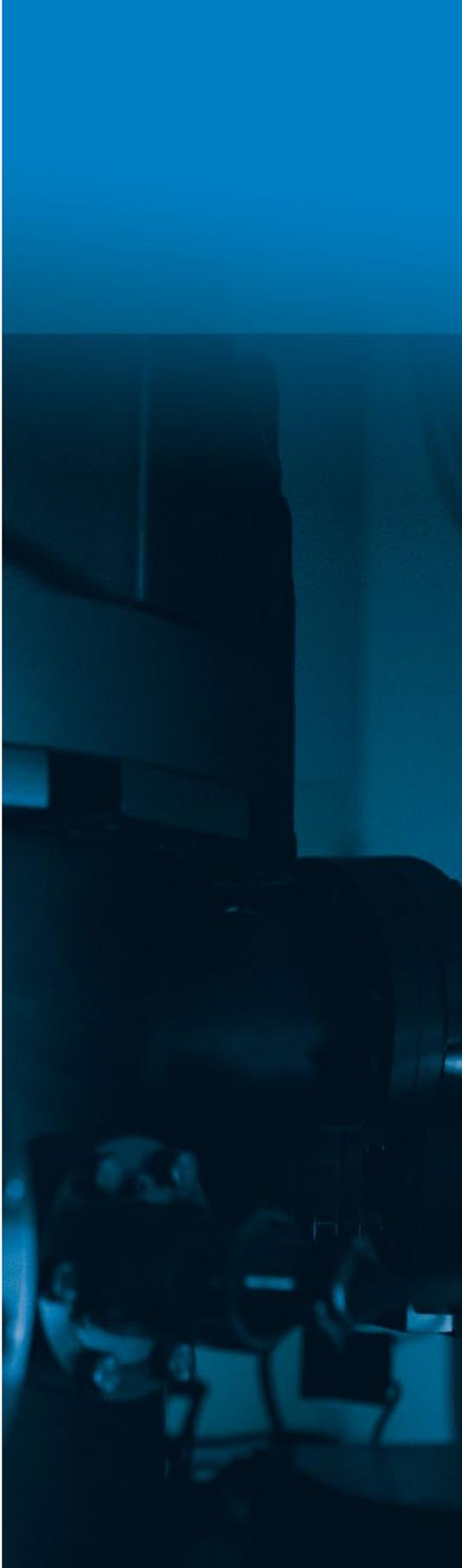
www.sfb716.uni-stuttgart.de

Konzept, Gestaltung, Redaktion:
Tina Barthelmes

Fotos: SFB 716

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

September 2013



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

DFG