



Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen

**Wissenschaftliche Projekte
auf dem HLRN-System
2003 – 2005**

Dieser Bericht steht auch in elektronischer Form (PDF-Datei) auf der Website des HLRN unter dem URL <http://www.hlrn.de/pr/veroeffentlichungen/HLRN-Report-2005.pdf> zur Verfügung.

Der Inhalt der Einzelbeiträge und deren Darstellung liegt in der Verantwortung der jeweiligen Projekte. Eine Übersicht über die aktuell am HLRN laufenden Projekte kann auf der Website des HLRN unter dem URL <http://zulassung.hlrn.de/projektuebersicht.html> eingesehen werden.

Der HLRN stellt Interessierten gerne den Kontakt zu den Projekt-Ansprechpartnern her. Für Anfragen steht die E-Mail-Adresse contact@hlrn.de sowie die Geschäftsstelle des Wissenschaftlichen Ausschusses (zulassung@hlrn.de) zur Verfügung. Weitere Kontaktinformationen bietet die Website des HLRN unter dem URL <http://www.hlrn.de/org/kontakt.html> .

Herausgeber:
Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) und
Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen (RRZN) im Auftrag des
Norddeutschen Verbundes für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN)
Website: <http://www.hlrn.de>

Redaktion:
Wolfgang Baumann, ZIB Berlin
Peter Endebruck, RRZN Hannover

© 2005 ZIB und RRZN

Vorwort des Verwaltungsrates des HLRN

Das im Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) beschaffte Rechner-system ist Ende 2002 in Betrieb gegangen. Jetzt liegt der erste Projektbericht vor. Allen Lesern sei empfohlen, diesen lohnenswerten Bericht ausgiebig zu studieren.

Der HLRN ist mit der Erwartung gegründet worden, dass die Bereitstellung von Hochleistungsre-chenkapazität zu einer Förderung insbesondere der Spitzenforschung im norddeutschen Raum führt. Die in diesem Projektbericht dargestellten wissenschaftlichen Ergebnisse übertreffen diese Erwartun-gen bei weitem. Die Ergebnisse und die starke Auslastung der beiden gekoppelten Rechner an den Standorten Berlin und Hannover zeigen, dass ein großer Bedarf besteht und das Angebot des HLRN sehr gefragt ist.

Der Verwaltungsrat beglückwünscht an dieser Stelle alle beteiligten Wissenschaftler zu den erziel-ten Ergebnissen und dankt für deren Dokumentation in diesem Bericht. Unser Dank gilt ebenso allen, die am Aufbau des HLRN beteiligt waren und die seinen Betrieb weiterhin sicherstellen, insbesondere dem Wissenschaftlichen Ausschuss, der Technischen Kommission, den beiden Betreiberrechenzentren sowie den angeschlossenen Einrichtungen, der Geschäftsstelle des HLRN und nicht zuletzt unserem Kompetenznetzwerk mit seinen Fachberatern und lokalen Betreuern.

Der HLRN mit seinen zwei Teilsystemen stellt im Hochleistungsrechnerbereich ein Novum dar. Daher gilt unser Dank auch den beteiligten Gremien der DFG und des Wissenschaftsrats, die uns bei der Planung und Beschaffung begleitet und durch ihr Engagement dazu beigetragen haben, ein innovatives Rechnersystem zu installieren.

Ich hoffe, dass Sie, liebe Leser, ein ähnlich positives Fazit ziehen werden wie wir. Ich wünsche Ihnen beim Lesen interessante Einblicke und Anregungen für die eigene Arbeit. Vielleicht finden Sie Anknüpfungspunkte für neue Projekte, die Sie mithilfe des HLRN bearbeiten können.

Rolf Jarmer
(Vorsitzender des Verwaltungsrates des HLRN)
Hamburg, Juni 2005

Vorwort des Wissenschaftlichen Ausschusses des HLRN

Der Wissenschaftliche Ausschuss ist ein vom Verwaltungsrat berufenes unabhängiges Gremium von Fachwissenschaftlern verschiedener Forschungsgebiete mit einschlägigen Erfahrungen im High-Performance-Computing und somit kein interner Bestandteil des HLRN. Seine Aufgabe ist die wissenschaftliche Lenkung des HLRN-I, die in erster Linie in der Beaufsichtigung der wissenschaftlichen und softwaretechnologischen Qualität der dort durchgeführten Großprojekte besteht und eine verantwortungsvolle Nutzung der bereitgestellten Ressourcen zum Ziel hat. Von daher liegt es nahe, dass auch der Wissenschaftliche Ausschuss ein Vorwort zu einem Report beisteuert, der die Berichte der beteiligten Arbeitsgruppen über die von ihnen mit Unterstützung des HLRN-Rechnersystems erzielten wissenschaftlichen Leistungen zusammenfasst.

Das Fazit:

Die hier vorgelegten Projektberichte über den ersten Dreijahreszeitraum weisen den HLRN-Verbund als Erfolgsmodell aus, das den Vergleich mit den Bundeshöchstleistungszentren in Jülich, München und Stuttgart weder von der Leistung noch von den Qualitätsstandards her zu scheuen braucht. In enger Abstimmung mit diesen drei Zentren übernimmt er vielmehr für den norddeutschen Raum die Rolle eines vierten Standbeins in der nationalen Versorgung mit High-Performance-Computing-Technologien, die heutzutage für große Bereiche der Spitzenforschung nicht mehr wegzudenken sind. Hierbei nun lediglich an abrufbare, gegebenenfalls auch anderswo einzukaufende Parallelrechnerkapazität zu denken, wäre allerdings zu kurz gegriffen: Der Verbund hat es sich zur Aufgabe gemacht, gleichrangig mit der Unterstützung bereits existierender Spitzenprojekte die Kompetenz im Höchstleistungsrechnen in den beteiligten Ländern zu entwickeln und zu fördern. Die effiziente Nutzung paralleler Rechnerarchitekturen, die den heutigen Supercomputern überhaupt erst ihre immense Leistungsfähigkeit ermöglichen, bedarf einer erheblichen intellektuellen Kunstfertigkeit und bedingt algorithmische und softwaretechnologische Spitzenleistungen. Die Entwicklung von Kompetenz auf diesem Gebiet, die mit der im HLRN-Verbund angelegten kooperativen Struktur, dem Fachberaterwesen und der räumlichen Nähe zu den Betreiberzentren einhergeht, ist ein weiterer wesentlicher Bestandteil der HLRN-Philosophie. Der Wissenschaftliche Ausschuss wünscht dem HLRN-Verbund im Interesse der Spitzenforschung in Deutschland eine weiterhin fruchtbare Entwicklung.

Volkard Linke

Prof. Dr. Volkard Linke
Institut für Theoretische Physik
Freie Universität Berlin

Vorsitzender des Wissenschaftlichen Ausschusses des HLRN

Inhaltsverzeichnis

Vorwort des Verwaltungsrates des HLRN	i
Vorwort des Wissenschaftlichen Ausschusses des HLRN	iii
Der HLRN – Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen	ix
Chemie	1
bec00006: Nanodynamik von MHC/Peptid-Komplexen und ihre Abhängigkeit vom MHC-Polymorphismus	3
bec00007: Quantenchemische Rechnungen an ein- und zweikernigen Vanadiumoxidclustern	5
bec00008: Molekulardynamik-Simulationen zur Untersuchung des Sauerstofftransports in Oxygenasen	7
bec00010: Molekulardynamik-Simulation zur Untersuchung der Sequenzspezifität des Proteinabbaus im Proteasom	9
bec00013: Anorganische Moleküle und Cluster in astrophysikalischen Staubbildungsprozessen	11
bec00014: Periodic density functional calculations of structure, dynamic and reactivity of transition metal oxides	13
bec00015: Quantenchemische Modellierung der Eisen(III)-katalysierten Michael-Addition . .	15
bec00017: Theoretische Untersuchungen zur Struktur, Energetik und Dynamik heterogener Katalyseprozesse an Zeolithsystemen	17
bec00018: Konformationsdynamik und Schwingungsspektroskopie kleiner Biomoleküle . . .	19
bec00020: Geometric, electronic and vibrational structure of vanadia catalyst supports	21
bec00025: Quantenchemische Untersuchungen zum Mechanismus der Photo-Dehydro-Diels-Alder-Reaktion (PDDA)	23
bec00026: Homochiralität und molekulare Paritätsverletzung	25
bec00029: Schwingungsfeinstrukturen in Elektronenspektren	27
bec00098: Koordinations-Chemie schwefelreicher Verbindungen	29
bec00099: Angeregte Zustände von Chlorophyll und Bacteriochlorophyll in photosynthetischen Pigment-Protein-Komplexen	31
hhc00001: Theoretische Untersuchungen zur Aufklärung des Reaktionsmechanismus und der Kinetik der NOx-Reduktion am Eisen-Zeolith-Katalysator	33
mvc00004: Simulation der Chemisorption von H ₂ O und Biomolekülen auf Titandioxid	35
nic00001: Quantenchemische Untersuchungen von kristallinen Festkörpern und Oberflächen	37
nic00002: Struktur und Reaktivität von Si- und Ge-Carbenanalogen Molekülen	39
nic00003: Ab-Initio-Simulationen zur Stickstofffixierung des Enzyms Nitrogenase	41
nic00004: Compliance Matrizen zur Berechnung der Stärke von Wasserstoffbrücken	43

nic00006: Molekulardynamische Untersuchung chemischer Reaktionen in oxidischen Festkörpern	45
nic00007: Struktur und Eigenschaften früher Übergangsmetall-Komplexe	47
shc00001: Globale Geometrieoptimierung molekularer Cluster	49
shc00002: Siliciumclusterstrukturen	51
Geo-, Meeres- und Umweltwissenschaften	53
hbk00005: Auswertung von geophysikalischen Parametern mit dem Satelliteninstrument SCIAMACHY	55
hbk00012: Schließung der Panama-Passage: Einfluss auf das globale Klimasystem	57
hbk00014: Sensitivitätsstudien mit einem gekoppelten regionalen Klimamodell der Arktis zur Identifizierung der grundlegenden Prozesse für eine realistische Simulation des arktischen Meereises	59
hbk00015: Towards a Global Ocean Modelling and Data Assimilation System based on the Finite Element Ocean Model FEOM	61
hbk00016: High Resolution Modelling of Hydrodynamics and Particle Transport along the Northwest African Coast	63
mvk00002: Modellierung des Ökosystems der Ostsee unter Berücksichtigung des Zooplanktons	65
mvk00004: NAMIBGAS – Untersuchungen zur Dynamik der Sulfideruptionen auf dem Schelf Namibias	67
mvk00005: Messung und Modellierung der Kohlenstoffbilanz in der Arkonasee	69
mvk00006: DYNAS II Dynamik natürlicher und anthropogener Sedimentation, Teilprojekt 2: Entwicklung und Anwendung des Sedimenttransportmodells für die Ostsee	71
nik00002: Grobstruktursimulationen zur Untersuchung des Energie-Imbalanz-Problems	73
nik00003: Grobstruktursimulation von Kaltluftausbrüchen mit stationärem Modellgebiet	75
nik00005: Holistische Modellierung der Interaktion von Seegang, Strömung und Sedimenttransport in Ästuarsystemen	77
nik00007: Untersuchung der Struktur des turbulenten Transports über inhomogener Unterlage	79
nik00008: Hochauflösende Grobstruktursimulationen turbulenter Strömungen im Einflussbereich von Gebäuden unter besonderer Berücksichtigung thermischer Effekte	81
nik00009: Dreidimensionale Simulation zum laminar-turbulenten Übergang in einer rotierenden Grenzschichtströmung (Ekman-Schicht)	83
nik00011: Untersuchung physikalischer Mechanismen zur Organisation und Zellenverbreiterung von Konvektion bei Kaltluftausbrüchen mittels hochauflösender Grobstruktursimulation	85
shk00001: Simulation of Past, Present, and Future Climates	87
Ingenieurwissenschaften	89
bei00003: Aktive Beeinflussung der Strömungsablösung in axialsymmetrischen Diffusoren	91
bei00004: Simulation der Spannbildung beim Hochgeschwindigkeitsspannen einer Nickelbasislegierung	93
bei00005: Numerische Simulation der Materialbearbeitung mittels Laser	95
bei00006: Erweiterung der Detached-Eddy-Simulation für komplexe Anwendungen	97

bei00008: Large-Eddy-Simulation von transitionellen Tragflügeln	99
bei00009: Numerische Simulation der Schallabstrahlung vom Einlauf eines Flugtriebwerks .	101
bei00012: Numerische Simulation der Umströmung eines Zylinderstumpfes	103
bei00016: Strömungssimulation um ein generisches Kraftfahrzeugmodell mit aktiver Beeinflussung des Ablösegebietes	105
bei00099: Simulation von Operationsverfahren an der Lendenwirbelsäule	107
bex00002: Numerische Simulation eines Wirbelschichtreaktors zur Holzvergasung	109
hhi00001: Räumliche FE-Analysen für Kaianlagen	111
nii00002: Mehrkomponentige metallische Schmelzen und Schmelze-Kristall-Schichtpakete .	113
nii00003: Modellierung und Entwurf von erweiterten Flügelendformen	115
nii00004: Simulation der Fluid-Struktur-Wechselwirkung bei der Umströmung heißer Strukturbauteile von Wiedereintrittsfahrzeugen	117
nii00005: Dreidimensionale Simulation von komplexen turbulenten Schmelzenströmungen in Induktionsöfen	119
nii00006: SEDYMO – Modelle für die Feinsedimentdynamik in Hafenbecken	121
nii00007: Berechnung von Wärmeflüssen und lokalen Strömungsphänomenen an Steuerflächen von Wiedereintrittsfahrzeugen	123
nii00008: NEFA – New Empennage for Aircraft	125
nii00013: Berechnung von Strömungsfeldern in dreiphasig betriebenen Blasensäulen mit chemischer Reaktion	127
nii00099: Modellierung der Bauwerks-Boden-Interaktion für Offshore-Windenergieanlagen	129

Physik 131

bep00003: Computation of the decay constant of the D_s -meson and extrapolation to heavy quark masses	133
bep00006: Topology, chiral physics and hadron masses from overlap fermions	135
bep00009: Berechnung der Gluon- und Ghost-Propagatoren in der Gitter-QCD: Confinement nach Gribov und Zwanziger	137
bep00010: Simulations of Non-Commutative Field Theory in Four Dimensions	139
bep00012: Testing scaling and chiral properties of twisted mass regularization of lattice QCD	141
bep00013: Overlap Fermions with a Hypercube Kernel: Simulations in the epsilon-Regime of Quantum Chromodynamics	143
hhp00001: Simulation von Stern- und Planetenatmosphären mit PHOENIX	145
hhp00002: Ab-Initio-Berechnung der elektronischen Struktur niederdimensionaler hybrider Systeme	147
mvp00002: Dichtematrix-Renormierungsgruppen-Untersuchung hochkorrelierter Quantensysteme	149
mvp00003: Simulation der Ionisationsdynamik von Metallclustern in intensiven Femtosekunden-Laserfeldern	151
mvp00006: QMD-Simulationen dichter Fluide	153
nip00002: Ab-initio-Simulationen des Wachstums von High-K-Gateoxiden auf Silizium . . .	155
nip00015: Komplexe Quantenstörstellenprobleme bei tiefen Temperaturen	157
shp00007: 3-D Finite-Differenzen-Simulation seismischer Wellen	159

Der HLRN – Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen)

Aufbauend auf den Erfahrungen des länderübergreifenden Verbunds “Norddeutscher Vektorrechner-Verbund” (NVV) koordinieren die norddeutschen Länder Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein seit 1993 die überregionale Nutzung der Hochleistungsrechnersysteme in ihren Wissenschaftsbereichen. Am 4.12.1995 empfahl die Konferenz der Wissenschaftsressorts der norddeutschen Länder in einem gemeinsamen Papier die Beschaffung eines Höchstleistungsrechners in der Region und die Aufnahme der Verhandlungen mit dem BMBF über eine Beteiligung des Bundes an der Finanzierung. Bereits zu diesem Zeitpunkt wurde vereinbart, dass sich die Anteile der sechs Länder an den Investitionskosten nach dem Königsteiner Schlüssel berechnen. Im Jahr 1998 stellten die norddeutschen Länder erstmals einen Antrag an den Wissenschaftsrat auf Beschaffung eines entsprechend leistungsfähigen Computersystems im “Norddeutschen Zentrum für Höchstleistungsrechnen HLRN”, der nach Überarbeitungen 2001 positiv bewertet wurde. Im gleichen Jahr erfolgte die Ausschreibung und im Jahr 2002 die Inbetriebnahme des HLRN-Systems (IBM pSeries 690). Seit dem Frühjahr 2003 erfolgt die Nutzung im Wesentlichen in Form von Großprojekten. Parallel zur Beschaffung wurde das Kompetenznetzwerk der norddeutschen Fachberater und Fachwissenschaftler ins Leben gerufen, das über die Ländergrenzen hinweg dem Nutzer eine optimale, auf sein Fachgebiet bezogene Betreuung und Unterstützung bietet.

Das organisatorische Konzept des HLRN-Verbunds ist in einem Verwaltungsabkommen der sechs beteiligten Bundesländer geregelt, das im Juli 2001 in Kraft trat.

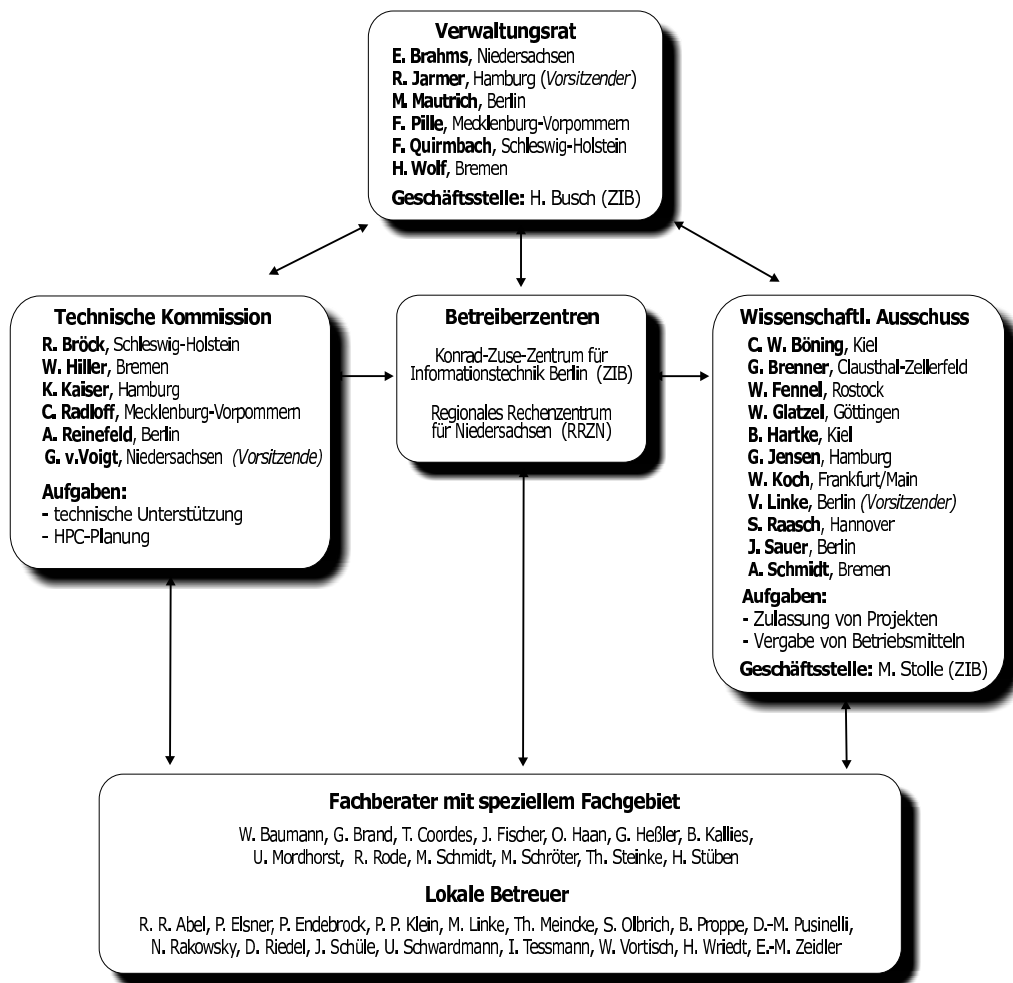


Abbildung 1: Die Organisationsstruktur des HLRN (Personen: Stand Juni 2005)

Alle gemeinsamen Angelegenheiten von grundsätzlicher Bedeutung werden von einem **Verwaltungsrat** entschieden, in dem jedes beteiligte Land eine Stimme hat und von seinem für DV-Angelegenheiten zuständigen Referenten im Ministerium bzw. in den Senatorischen Behörden vertreten wird. Der Verwaltungsrat wird durch zwei ständige Kommissionen beraten und unterstützt, den Wissenschaftlichen Ausschuss und die Technische Kommission.

Der **Wissenschaftliche Ausschuss** entscheidet über die Zulassung von Projekten entsprechend einer wissenschaftlichen Begutachtung nach den bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft üblichen Kriterien für die Begutachtung von Forschungsvorhaben. Er arbeitet mit den entsprechenden Gremien der Höchstleistungsrechenzentren in Deutschland zusammen und gibt den Antragstellern gegebenenfalls Hinweise zur Nutzung anderer Höchstleistungsrechenzentren, insbesondere dann, wenn dies aus technischen Gründen anzuraten ist. Der Wissenschaftliche Ausschuss beteiligt sich an der Durchführung von fachbezogenen HLRN-Workshops. Der Ausschuss besteht derzeit aus elf Wissenschaftlern, die auf Gebieten des HPC fachlich ausgewiesen sind.

Von den beteiligten Ländern sind für den Verbund jeweils federführende Rechenzentren benannt worden. Deren Vertreter bilden die **Technische Kommission** des HLRN. Die Technische Kommission ist verantwortlich für das Systemkonzept des HLRN, die Systemauswahl, Steuerung der Betriebsparameter und Realisierung des Zugangskonzeptes mit Anbindung an das Wissenschaftsnetz. Sie berät den Verwaltungsrat in allen technischen Fragen. Weiter koordiniert sie die Fachberatung im jeweiligen Bundesland und ist ebenfalls an der Durchführung von Workshops beteiligt.

Bei Beantragung einer Kennung auf dem HLRN-System werden dem Projekt ein **Fachberater** und ein **lokaler Betreuer** zugewiesen. Die Fachberater sind die direkten Ansprechpartner der Anwender bei allen Benutzerfragen. Sie stellen die Basis des Kompetenzverbunds des HLRN dar.

Die beiden **Betreiberzentren** Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) und Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen/Universität Hannover (RRZN) sind für den Betrieb des HLRN-Systems einschließlich des HLRN-Links zuständig. Sämtliche Absprachen über den Betrieb erfolgen in enger Abstimmung direkt zwischen den zuständigen Mitarbeitern beider Rechenzentren.

Das HLRN-System besteht aus zwei gleichen Teilsystemen ("Komplexen") in Berlin und Hannover sowie der dedizierten Datenverbindung ("HLRN-Link"). Es umfasst die folgenden Komponenten:

- **Compute Server:** 32 Rechenknoten IBM pSeries 690 ("Regatta") mit je 32 Prozessoren Power4 (1,3 GHz), davon 2 Knoten mit 256 GByte, 2 Knoten mit 128 GByte und 28 Knoten mit 64 GByte Hauptspeicher.
- **Internes Verbindungsnetzwerk:** High Performance Switch HPS ("Federation"), Bandbreite: 8 GByte/s je Knoten, Latenzzeit: ca. 5.5 μ s.
- **Login-Server:** 2 Server IBM pSeries 655 mit je acht Prozessoren Power4 für den interaktiven Zugang.
- **I/O Server:** 22 I/O Server IBM pSeries 655 mit je vier Prozessoren Power4 für den Zugang zum parallelen Dateisystem, Bandarchivsystemen und externen Datenzugriff.
- **Dateisysteme:** 32 FastT500 Fibre-Channel Plattensysteme mit 52 TByte, I/O-Durchsatzleistung: 1,7 GByte/s, aufgeteilt in unterschiedliche Dateisysteme für kurzfristige und langfristige Datenhaltung.
- **Magnetbandarchivsysteme:** Berlin: STK 9310 ACS, Hannover: ADIC Scalar, jeweils ca. 10.000 Stellplätze.
- **HLRN-Link:** Dedizierter 2,4 Gb/s WDM-Kanal des G-WIN zwischen RRZN und ZIB. Derzeit genutzt als Gigabit-Ethernet, Bandbreite: 1 Gb/s, Latenz: 4,5 ms (round trip).

Über den HLRN-Link werden die Dienste Datei-Transfer, direkte MPI-Kommunikation und das gemeinsame Scheduling-System "LoadLeveler" auf der Basis von IP-Diensten mit privaten IP-Adressen genutzt. Das HLRN-System wird als ein gemeinsames virtuelles System betrieben.

Das HLRN-System wird rund um die Uhr und weitgehend ohne Störungen betrieben. Es wird von den Benutzern gut angenommen und ist voll ausgelastet.

Chemie

Nanodynamik von MHC/Peptid-Komplexen und ihre Abhängigkeit vom MHC-Polymorphismus

Verantwortliche Wissenschaftlerin: PD Dr. Ulrike Alexiev

Beantragende Institution: Fachbereich Physik, FU Berlin

Mitarbeiter: Dipl.-Phys. Philipp Schütz

Kooperationspartner: Dr. Rainer Böckmann, Theoretische & Computergestützte Membranbiologie, Zentrum für Bioinformatik Saar, Universität des Saarlandes

Förderung: VolkswagenStiftung, Förderinitiative *Konformationelle Kontrolle biomolekularer Funktionen*

Die Erkennung von an Haupthistokompatibilitätskomplexen (MHC-Proteine) gebundenen Peptiden pathogenen Ursprungs auf der Zelloberfläche durch T-Zell Rezeptoren (TCR) ist das zentrale Ereignis in der Immunantwort des Körpers gegen Pathogene (Abb. 1 A). Die Aufklärung sowohl der Bindungseigenschaften von Peptiden an MHC-Klasse-I oder II-Proteinen als auch der MHC-Peptid-Epitop Erkennung durch TCR ist von großer Bedeutung für das Verständnis der molekularen Ursachen unzureichender bzw. zu starker Immunreaktionen, wie sie bei vielen Krebsarten bzw. bei Autoimmunkrankheiten auftreten. Dieses Projekt zielt auf ein Verständnis der Peptidpräsentation durch das HLA-Antigen HLA-B27, das eng mit Spondyloarthropathien assoziiert ist, einer Gruppe von häufig entzündlichen, chronisch verlaufenden rheumatischen Erkrankungen. Der Grund für die Assoziation des Subtypen HLA-B*2705 mit Spondylitis ankylosans, besser bekannt als Morbus Bechterew, ist noch unbekannt. Die allgemein favorisierte arthritogene Peptidhypothese sieht die Ursache in einer möglichen Kreuzreaktivität der zytotoxischen T-Lymphozyten (CTL) mit Peptiden bakteriellen oder viralen Ursprungs als auch mit Selbstpeptiden. Hier untersuchen wir die Präsentation eines Modellpeptids, eines Peptids viralen Ursprungs sowie eines dazu sequenzähnlichen Selbstpeptids durch den krankheitsassoziierten HLA-B*2705-Subtypen sowie vergleichend durch den nicht mit Morbus Bechterew assoziierten Subtypen HLA-B*2709. Letzterer unterscheidet sich lediglich in einer Aminosäure (Position 116) vom krankheitsassoziierten HLA-B*2705-Subtypen. Die (statischen) Kristallstrukturen beider Subtypen ähneln einander sehr und bieten keine Erklärung für die differentielle Krankheitsassoziation. Wir untersuchen hier daher insbesondere die dynamischen Eigenschaften der Peptidpräsentation durch die HLA-B*2705/09-Subtypen. Dazu verwenden wir die Methode der Moleküldynamik(MD)-Simulation und versuchen in enger Kollaboration mit experimentellen Gruppen in Berlin und Rom die Frage nach einer Korrelation von peptid-induzierten dynamischen Unterschieden der HLA-B27-Peptid Komplexe sowie der biologischen Antwort, nämlich der T-Zell Aktivität, aufzuklären.

In zeit- bzw. rechenaufwändigen MD-Simulationen auf dem HLRN-System untersuchen wir die freie Dynamik der unterschiedlichen MHC-Peptid-Komplexe auf einer Zeitskala von 10–50 Nanosekunden (10^{-9} s) in einer wässrigen Lösung unter physiologischen Bedingungen, also bei einer Temperatur von 37°C sowie einer Salzkonzentration von etwa 150 mM (Systemgröße ca. 100.000 Atome). Diese Zeitskala und die Simulationsbedingungen erlauben einen einmaligen Vergleich mit experimentellen Daten zur Flexibilität der Komplexe wie sie parallel aus zeitaufgelösten Fluoreszenz-Depolarisations Experimenten gewonnen werden sowie deren Interpretation auf mikroskopischer Skala.

In einer ersten Studie mit einem an die untersuchten HLA-B27 Subtypen gebundenen Modellpeptid (m9) konnten wir sowohl in Experimenten als auch in Simulationen eine drastisch erhöhte Flexibilität des Peptids nachweisen, wenn es an den nicht-krankheitsassoziierten Subtypen HLA-B*2709 gebunden ist. Die Simulationen ergaben eine feste Kopplung des Peptids an die die Bindungstasche formenden α -Helizes (siehe auch Abb. 1 A). So zeigte nicht nur das Peptid, sondern auch die Bindungstasche eine deutlich erhöhte Flexibilität (Abb. 1 B, oben). Dies legte eine entropische Kontrolle der Erkennung des MHC-Peptid-Epitops durch den TCR nahe [1]. Diese Pilotstudie belegt eindrücklich, wie sich trotz fast identischer Kristallstrukturen der beiden Subtypen die Dynamik der Komplexe deutlich voneinander unterscheiden kann, und wie sich Experiment und Simulation gegenseitig befruchten.

Unterschiede in der Peptid-Dynamik konnten auch in MD-Simulationen eines viralen Peptids (LMP2: RRRWRRRLTV) sowie eines dazu sequenzähnlichen Selbstpeptids (VIPR: RKKWRRWHL) gezeigt werden. Im Gegensatz zum Modellpeptid ist hier die Flexibilität des Rückgrats der gebundenen LMP2-/VIPR-Peptide im krankheitsassoziierten Subtypen (HLA-B*2705) erhöht (Abb. 1 B). Außerdem zeigen die Simulationen ein Öffnen der Bindungstasche von HLA-B*2705 sowohl am C-Terminus als auch am N-Terminus des viralen Peptids (Abb. 1 C), der T-Zell Rezeptor würde in dieser Konformation einen große-

ren Teil des Peptids 'sehen'. Im Gegensatz dazu bleibt die 'geschlossene' Kristallkonformation für den nicht-krankheitsassoziierten HLA-B*2709 Subtypen erhalten. Die Simulationen belegen ferner, daß die in Kristallstrukturen bei einer Temperatur von -173°C aufgelöste Doppelkonformation des LMP2-Peptids (kanonisch bzw. 4α und nicht-kanonisch bzw. 6α) gebunden an HLA-B*2705 bei 37°C nicht stabil ist, die kanonische Konformation des Peptids erscheint unter physiologischen Bedingungen energetisch bevorzugt. Insofern können die Simulationen zur energetischen Bewertung von unter nicht-physiologischen Bedingungen gewonnenen Kristallstrukturen beitragen.

Neben der arthritogenen Peptidhypothese wurde u.a. vermutet, daß ein differentielles Ablösen des an die schwere Kette gebundenen β -2-Microglobulin (kurz β 2-m, s. Abb. 1 A) zur differentiellen Krankheitsassoziation der beiden untersuchten HLA-Subtypen beitragen könnte. Es ist bekannt, daß eine erhöhte Freisetzung von β 2-m zur Amyloidbildung führen kann, was bislang insbesondere bei Langzeit-Dialyse-Patienten beobachtet wurde. Auf einer 1 ns-Zeitskala konnte aus den Simulationen nicht auf eine unterschiedliche nicht-kovalente Bindung von β 2-m an die schwere Kette des MHC-Moleküls geschlossen werden. Diese Studie wird derzeit auf längere Zeitskalen (10–50 ns) ausgedehnt. Um die dominierenden strukturellen und dynamischen Faktoren für eine Amyloidbildung zu bestimmen, haben wir ferner Simulationen von freiem β 2-m unter *in vitro* sowie unter *in vivo* Bedingungen durchgeführt. Ein Vergleich zeigt die Einschränkung der β 2-m-Dynamik durch die schwere Kette und gibt Indizien für den Verlauf der Amyloidbildung [2].

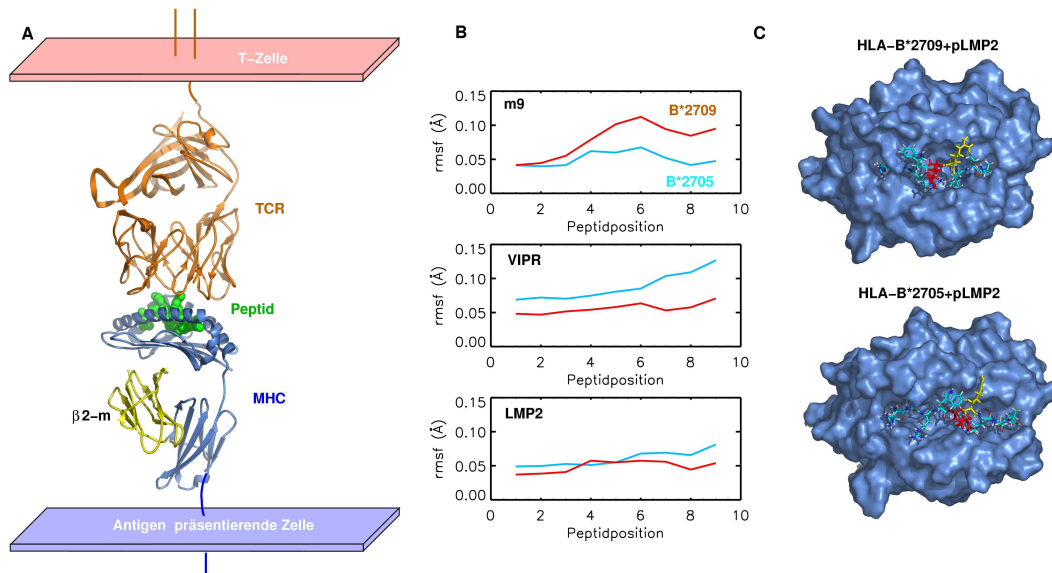


Abbildung 1: Ein Peptid (grün) aus der Zelle wird vom MHC-Komplex (blau) auf der Zelloberfläche dem T-Zell-Rezeptor (orange) präsentiert (A). Die aus MD-Simulationen bestimmten Fluktuationen (*root mean square fluctuations*, kurz *rmsf*) bzw. die Beweglichkeit des Peptids in der MHC Bindungstasche unterscheidet sich je nach HLA-Subtyp und Peptidsequenz (B). Das Peptid LMP2 vom Epstein-Barr-Virus wird unterschiedlich von den Subtypen präsentiert, die Bindungstasche (blau) des krankheitsassoziierten HLA-B*2705 öffnet sich teilweise, während die Bindungstasche des nicht-krankheitsassoziierten Subtypen HLA-B*2709 einen großen Abschnitt des Peptids verdeckt (C).

1. T. Pöhlmann, R. A. Böckmann, H. Grubmüller, B. Uchanska-Ziegler, A. Ziegler, U. Alexiev: Differential peptide dynamics is linked to MHC polymorphism, *J. Biol. Chem.* 279, 28197–28201 (2004).
2. P. Schütz, U. Alexiev, R. A. Böckmann: A comparative study of free and bound β -2-microglobulin, in Vorbereitung

Quantenchemische Rechnungen an ein- und zweikernigen Vanadiumoxidclustern

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Christoph van Wüllen

Beantragende Institution: Institut für Chemie, Technische Universität Berlin

Mitarbeiter: Dr. Mikhail Pykavy

Kooperationspartner: ca. 20 Arbeitsgruppen aus Berliner Universitäten und Forschungseinrichtungen

Förderung: DFG: Sonderforschungsbereich 546

Die meisten chemischen Reaktionen verlaufen glücklicherweise nicht spontan, sonst würde das Buch, das Sie in den Händen halten, jetzt anfangen zu brennen. Man muss eine gewisse Menge Energie (die sogenannte Aktivierungsenergie) einsetzen, um die Reaktion in Gang zu setzen: Ein Blatt Papier brennt erst, nachdem es angezündet worden ist. Man kann die benötigte Aktivierungsenergie durch Zugabe eines Katalysators reduzieren. Ein Katalysator ist eine Substanz, die neue Reaktionswege mit stark reduzierter Aktivierungsenergie eröffnet, so dass die entsprechende chemische Reaktion unter milden Bedingungen sozusagen „von selbst“ abläuft. Das Besondere dabei ist, dass nur kleine Mengen dieses Katalysators benötigt werden. Der größte Teil der Wertschöpfung in der chemischen Industrie beruht auf katalysierten Reaktionen.

Für viele homogenkatalysierte Reaktionen hat man heute detaillierte Vorstellungen darüber entwickelt, wie sie auf molekularer Ebene ablaufen. Allerdings ist zumindest mengenmäßig die heterogene Katalyse in der chemischen Industrie ungleich wichtiger. In der heterogenen Katalyse treffen sich die Reaktionspartner an einem festen Katalysator. Dieser ist in der Regel kein reiner Stoff, sondern weist oft katalytisch aktive Zentren auf einem Trägermaterial auf. Selbst die Natur dieser aktiven Zentren ist oft ungeklärt, erst recht ist dann das Wissen über die Art der chemischen Elementarschritte an diesen Zentren lückenhaft.

Eine ganze Reihe von wichtigen Oxidationskatalysatoren enthält Vanadiumoxidteilchen in den aktiven Zentren, und daher gibt es in Berlin seit einigen Jahren ein gemeinsames Forschungsprojekt von etwa 20 beteiligten Arbeitsgruppen aus allen drei Berliner Universitäten und weiteren außeruniversitären Forschungsinstituten mit dem Ziel, Licht in die Prozesse an Vanadiumoxidkatalysatoren zu bringen. Dieses Vorhaben wird als Sonderforschungsbereich 546 von der Deutschen Forschungsgemeinschaft finanziert. Neben umfangreichen experimentellen Untersuchungen werden im Rahmen dieses Sonderforschungsbereiches in insgesamt 5 Teilprojekten quantenchemische Rechnungen durchgeführt, in denen sowohl vom Experiment dringend benötigte Informationen gewonnen als auch die Reaktivität von Modellsystemen untersucht wird. Die dabei zu lösende Schrödinger-Gleichung ist zwar recht einfach hinzuschreiben, die Berechnung von exakten Lösungen ist in diesen Anwendungen aber unmöglich. Daher kommen in großem Umfang Rechenverfahren zum Einsatz, die teilweise auf recht groben Näherungen beruhen. So werden in den theoretischen Teilprojekten fast ausschließlich Dichtefunktionalrechnungen angewandt, über deren Genauigkeit für die Anwendung auf Vanadiumoxid-Aggregate wenig oder nichts bekannt ist.

In unserem Projekt geht es daher darum, für kleine Modellsysteme eine möglichst gute Näherung für die exakte Lösung der Schrödingergleichung zu erhalten. Nach den obigen Bemerkungen ist klar, dass dies nur für Modellsysteme mit ganz wenigen Atomen überhaupt möglich ist, und dass selbst für solche kleinen Systeme der Rechenaufwand enorm ist. Die Anstrengung lohnt sich aber, weil wir damit zu konkreten Aussagen darüber kommen können, inwieweit Dichtefunktionalverfahren zuverlässig sind und unter welchen Umständen man sich möglicherweise auf Dichtefunktionalergebnissen geringer Genauigkeit gefasst machen muss.

Zunächst haben wir uns die Vanadium-Sauerstoff-Cluster VO [1] und V₂O₄ [2] (jeweils als Kation, neutrales Teilchen und als Anion) angeschaut. Das wichtigste Ergebnis aus diesen Arbeiten ist, dass Molekülstrukturen (also Atomabstände oder Bindungswinkel) aus Dichtefunktionalrechnungen recht zuverlässig sind, obwohl die elektronische Struktur von Teilchen wie V₂O₄ sehr schwierig zu beschreiben ist: Die beiden ungepaarten d-Elektronen auf den Vanadium-Atomen sind nämlich trotz ihrer schwachen Wechselwirkung so gekoppelt, dass ein niedriger Gesamt-Spin resultiert (antiferromagnetische Kopplung). Im Gegensatz zu Molekülstrukturen sind die Voraussagen von Dichtefunktionalrechnungen für relative Energien teilweise von geringerer Genauigkeit, als man dies aus der Hauptgruppenchemie gewohnt ist.

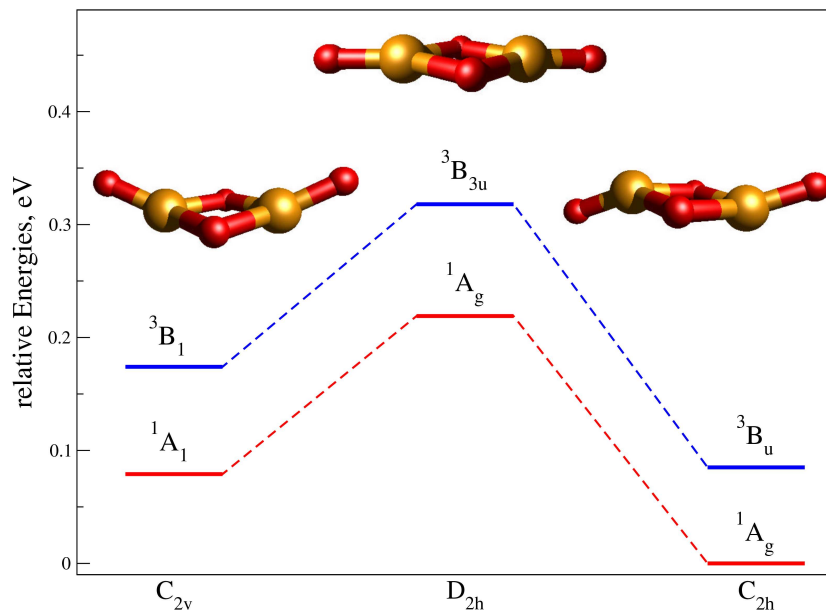


Abbildung 1: Relative Energien verschiedener geometrischer Strukturen eines neutralen V₂O₄ Clusters, jeweils für zwei elektronische Zustände in denen die beiden ungepaarten Vanadium-3d-Elektronen zu hohem (blaue Linien) oder niedrigem (rote Linien) Spin gekoppelt sind. Der Zustand mit niedrigem Spin ist entgegen der Hund'schen Regel in allen Fällen der Zustand niedrigster Energie (antiferromagnetische Kopplung).

Die in unserem Projekt durchgeführten quantenchemischen Rechnungen sind auch technisch sehr schwierig. Wir starten mit einer CASSCF-Rechnung, die dann die Multikonfigurations-Wellenfunktion für eine anschließende Multireferenz-CI-artige Rechnung liefert. Die CASSCF-Rechnung ist nun alles andere als eine „black box“ Methode, da die Zahl der korrelierenden („aktiven“) Orbitale sorgfältig und manuell ausgewählt werden muss. Das liegt daran, dass der Rechenaufwand der CASSCF-Rechnung (und damit auch der anschließenden Multireferenz-CI-Rechnung) extrem stark mit der Zahl der aktiven Orbitale anwächst. Wir müssen also die Zahl der aktiven Orbitale klein halten und so an dieser Stelle Kompromisse eingehen, wenn die Zahl der Atome sich noch weiter erhöht. Dies ist in unseren aktuellen Anwendungen der Fall, in denen wir chemische Reaktionen zwischen solchen Vanadiumoxidteilchen und kleinen Alkanen wie Methan, Ethan und Propan berechnen. Hier sind umfangreiche Tests erforderlich, da man eine Menge aktiver Orbitale auswählen muss, die gleichzeitig eine Vielzahl von Reaktionskanälen beschreiben können. Diese Rechnungen sind daher noch nicht abgeschlossen.

1. Mikhail Pykavy, Christoph van Wüllen: Multireference Correlation Calculations for the Ground States of VO^{+ / 0 / -} Using Correlation Consistent Basis Sets, *Journal of Physical Chemistry A* 107 (2003) 5566.
2. Mikhail Pykavy, Christoph van Wüllen, Joachim Sauer: Electronic ground states of the V₂O₄^{+ / 0 / -} species from multireference correlation and density functional studies, *Journal of Chemical Physics* 120 (2004) 4207.

Molekulardynamik-Simulationen zur Untersuchung des Sauerstofftransports in Oxygenasen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Hermann-Georg Holzhütter

Beantragende Institution: Institut für Biochemie, Charité Universitätsmedizin Berlin

Mitarbeiter: Dipl.-Biophys. Jan Saam, Christopher Ozdoba

Kooperationspartner: Prof. Hartmut Kühn, Institut für Biochemie, Charité; Prof. Sandro Ghisla, Fakultät für Biologie, Universität Konstanz

Förderung: DFG Graduiertenkolleg 268

In der Zelle existiert eine Vielzahl sauerstoffabhängiger Enzyme von denen der Reaktionsmechanismus der Katalyse mehr oder weniger gut bekannt ist. Wie der Sauerstoff ans aktive Zentrum kommt, wird aber erst seit einigen Jahren anhand weniger Beispiele im Detail untersucht, obwohl diese Frage entscheidende Bedeutung für das Verständnis der Reaktionen auf molekularer Ebene hat. In einigen Proteinen existieren spezielle Kanäle oder Pfade, die dem Einfangen von Sauerstoff aus dem Solvent bzw. seiner gezielten Weiterleitung zum aktiven Zentrum, wo die Reaktion schließlich stattfindet, dienen.

Im Rahmen des vorliegenden Projektes wurde mit Hilfe von Molekulardynamik-Simulationen (MD) der Sauerstofftransportweg in drei verschiedenen Enzymen untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass in der Lipoxxygenase (LOX) und auch in der Cyclooxygenase II (COX2) ein solcher Kanal existiert. Beide Projekte werden in Kooperation mit der experimentellen Arbeitsgruppe von Prof. Hartmut Kühn durchgeführt. Der Erfolg dieser Studien regte dann die Untersuchung der D-Aminosäure-Oxidase (DAAO) in Zusammenarbeit mit Prof. Sandro Ghisla an.

MD-Simulationen eignen sich besonders gut solche Kanäle aufzuspüren und deren Funktion im Katalysemechanismus zu erhellen, da sie mit begrenztem Aufwand detaillierte Informationen über die Dynamik bei gleichzeitiger atomarer Auflösung liefern können. Eine MD-Simulation basiert auf den Atomkoordinaten einer Kristallstruktur des zu studierenden Moleküls. Fehlende Atome und umgebende Moleküle können durch entsprechende Modelling-Techniken hinzugefügt werden, um so ein vollständiges atomares Modellsystem zu erhalten. Die Wechselwirkung der einzelnen Atome untereinander wird durch empirische Energiefunktionen beschrieben, die zusammen mit den entsprechenden Parametern Kraftfeld genannt werden. Die resultierenden Newtonschen Bewegungsgleichungen werden numerisch integriert und man erhält die Trajektorien der Atome.

Die gängigen Kraftfelder für biomakromolekulare Systeme enthalten keine Parameter für Metall-Koordinationskomplexe, wie sie in etlichen Enzymen und auch in der LOX enthalten sind. Deshalb wurde von uns eine auf quantenchemischen Berechnungen basierende Methode zur Parametrisierung eines beliebigen Koordinationskomplexes in Proteinen entwickelt, die demnächst zusammen mit einem entsprechenden Softwarepaket veröffentlicht wird [1].

Die wichtigste Technik zum Studium des Sauerstofftransports war das Einsetzen von O₂ in die Bindungstasche genau an den Reaktionsort bzw. außerhalb des Proteins in das Lösungsmittel und die anschließende Beobachtung der Diffusionswege. Lipoxxygenasen stellen die Vorstufen zu einer Vielfalt von Stoffen in der Zelle her, die wichtige Funktionen bei Zellreifung und Differenzierung aber auch bei Entzündungsreaktionen und Artherosklerose haben. Die Reaktion erfolgt tief im Inneren des Proteins, wo eine Fettsäure mit molekularem Sauerstoff reagiert. Es konnte gezeigt werden, dass ein in der Kristallstruktur sichtbarer Seitenkanal nicht dazu geeignet ist, Sauerstoff zu transportieren. Es kann jedoch ein alternativer Pfad postuliert werden. Der von uns identifizierte Kanal ist transient, also nicht ständig sichtbar und meist nur stückweise geöffnet. Die Dynamik der Proteinseitenketten führt letztlich aber doch zu einem passierbaren Weg durch das Protein (Abb. 1). Dieser Kanal transportiert nicht nur den Sauerstoff an seinen Zielort, sondern fungiert gleichzeitig als Zwischenspeicher.

Cyclooxygenasen sind Enzyme, die eine vergleichbare chemische Reaktion wie die LOX katalysieren, jedoch nicht direkt mit den Lipoxxygenasen verwandt sind. Die COX2 gehört zu den pharmazeutisch bedeutsamsten Proteinen, da es eines der wichtigsten Drug-Targets darstellt. Aspirin ist ein COX2 Hemmstoff, um nur ein Beispiel zu nennen. Auch in diesem Enzym existiert eine tiefe Bindungstasche in die der Sauerstoff gelangen muss. Unsere Simulationen ergeben einen Kanal, der an der Proteinoberfläche in einer Art Delta mündet, um die Wahrscheinlichkeit der O₂-Aufnahme zu erhöhen.

Eine ähnliche Problematik besteht auch auf dem Gebiet der Flavoproteine, einer Grossfamilie sauer-

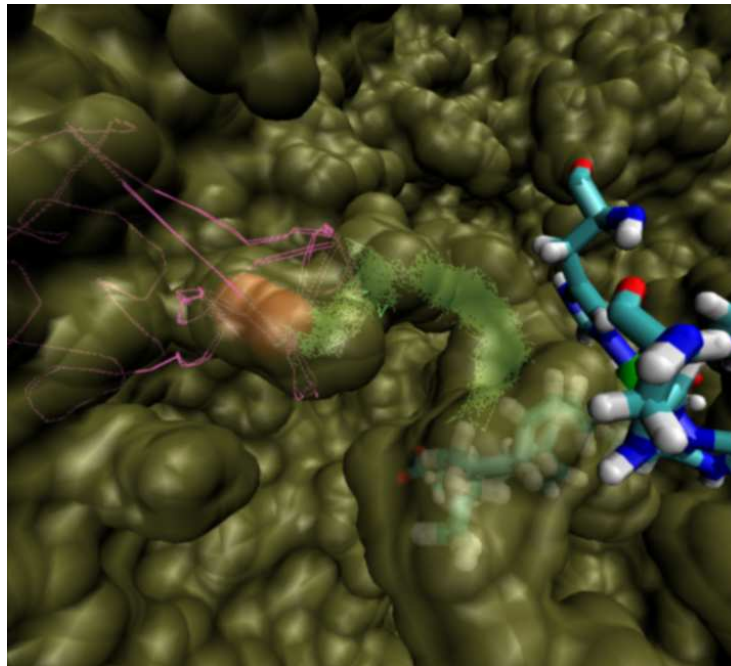


Abbildung 1: Schnappschuss aus der LOX-Simulation, als der Kanal gerade durchgängig geöffnet ist. Rechts ist die Bindetasche mit dem Substrat dargestellt (türkis). Der Kanal erstreckt sich von dort aus nach links in Richtung Außenraum. Zwei Trajektorien (pink und grün) und ein Sauerstoff (rot) sind zur Verdeutlichung mit eingezeichnet.

stoffaktivierender Enzyme. Die Kristallstruktur von vielen dieser Proteine ist bekannt, daraus ist jedoch nur in einem einzelnen Fall ersichtlich (Cholesteroxidase) wie Sauerstoff zum Aktivzentrum gelangt. Zudem ist am Aktivzentrum von Flavoproteinmonooxygenasen sterisch nicht ersichtlich, wie O_2 mit den beiden Reaktionspartnern in Kontakt kommen kann. Bei der D-Aminosäureoxidase konnten wir den Sauerstoffzugang und einen Zwischenspeicher, der wichtig für die Effizienz der Reaktion ist, identifizieren.

Alle drei untersuchten Enzyme sind von besonderer medizinischer Bedeutung und die Ergebnisse können von Bedeutung für die Entwicklung neuer Hemmstoffe etwa als Schmerzmittel oder zur Behandlung von Entzündungserkrankungen sein. Unsere MD-Simulationen leisten einen wichtigen Beitrag zum grundlegenden Verständnis des Mechanismus der Sauerstoffreaktivität. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass spezielle Strukturen den Sauerstoff zielgerichtet und stereochemisch exakt an den jeweiligen Reaktionsort leiten und somit die Produktspezifität entscheidend mitbestimmen. Weiterhin dienen sie angesichts der niedrigen Konzentration an freiem Sauerstoff in der Zelle als Zwischenspeicher zur Beschleunigung der Reaktion. Die Funktionalität dieser Strukturen wird dabei erst durch Betrachtung der Proteindynamik offenbar.

1. Jan Saam, Hermann-Georg Holzhütter: Determination of classical force field parameters for transition metal complexes, J. Comp. Chem., wird Ende Mai 2005 eingereicht.
2. Christopher Ozdoba: Untersuchung des Sauerstofftransports in Kaninchen Retikulozyten 15-Lipoxygenase mit Hilfe von Moleküldynamiksimulationen. Bachelorarbeit im Fach Bioinformatik der FU-Berlin, 2004.
3. Jan Saam: Molekulardynamik Simulationen zur Untersuchung des Sauerstofftransportes in Oxygenasen, Doktorarbeit in Fach Biophysik, Abgabe voraussichtlich Ende 2005.

Molekulardynamik-Simulation zur Untersuchung der Sequenzspezifität des Proteinabbaus im Proteasom

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Hermann-Georg Holzhütter

Beantragende Institution: Institut für Biochemie, Charité Universitätsmedizin Berlin

Mitarbeiter: Dipl. Biophys. Jan Saam

Kooperationspartner: Prof. Dr. Peter Klötzel, Institut für Biochemie, Charité

Förderung: DFG Graduiertenkolleg 268

Das Proteasom ist ein Proteindegradationskomplex, der in allen Zellen vorkommt und den größten Teil der endogenen Proteine in kürzere Peptidfragmente zerlegt (Proteolyse), die von anderen Proteasen weiter abgebaut werden. Ein Teil der Fragmente spielt eine bedeutsame Rolle in der adaptiven Immunantwort des Organismus. Die Peptide werden an die Zelloberfläche transportiert und dort den cytotoxischen T-Zellen des Immunsystems präsentiert. Die T-Zellen erkennen körperfremde Peptide, die beispielsweise von einem Virus stammen können, der die Zelle befallen hat, und leiten die Vernichtung der 'kranken' Zelle ein.

Die Abhängigkeit der proteolytischen Schnitte des Proteasoms von der Aminosäuresequenz des abzubauenden Peptids ist eine zentrale Frage für das molekulare Verständnis der Immunantwort und der Schlüssel zu vielen möglichen medizinischen Anwendungen. Mit Hilfe von Molekulardynamik-Simulationen (MD) wird die Bindung des Peptidsubstrats an die aktiven Zentren des Proteasoms anhand der spezifischen Interaktionen der einzelnen Aminosäuren des Substrats mit der Bindungstasche untersucht. Die Studien werden in Zusammenarbeit mit der experimentellen Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Klötzel durchgeführt.

Das 20S-Proteasom ist ein großer, tonnenförmiger, aus 4 Ringen zu je 7 Untereinheiten bestehender Proteinkomplex (Abb. 1a), die zusammen drei große Kammern bilden (Abb. 1b). An beiden Enden des Proteasoms sitzen in vivo weitere Proteinkomplexe, die die abzubauenden Proteine erkennen, entfalten und durch enge Öffnungen an den beiden Enden des Proteasoms ins Innere führen (grüne Pfeile in Abb. 1b). Die entfaltete Peptidkette wandert zu den aktiven Zentren in der mittleren Kammer, wo sie

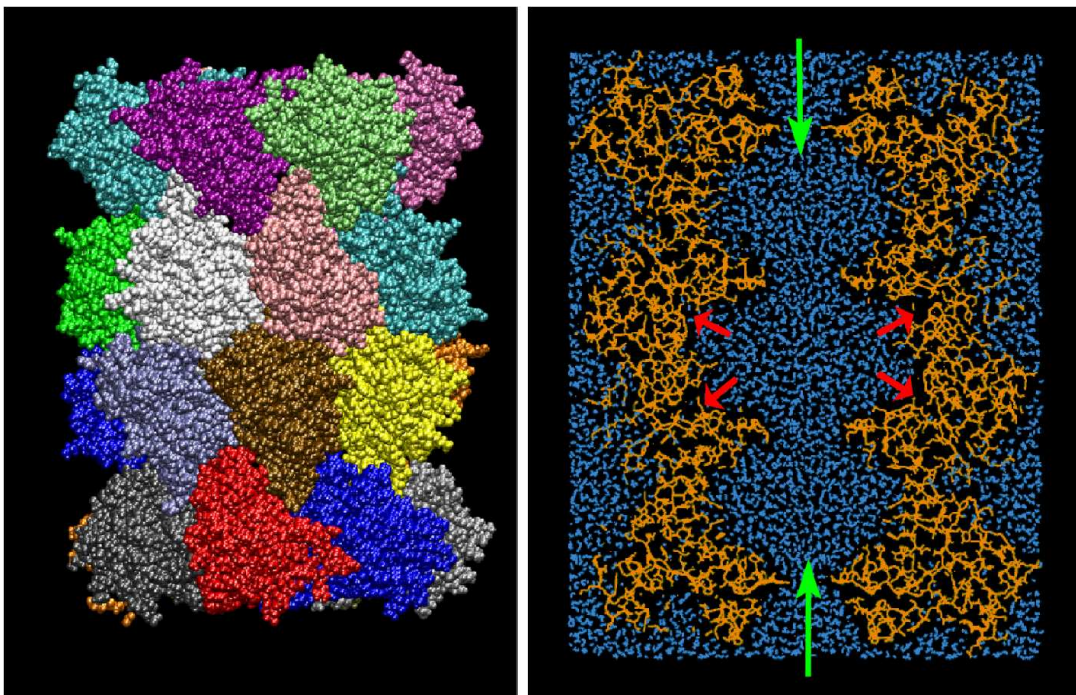


Abbildung 1: a) Seitenansicht des 20S-Proteasoms (*T. acidophilus*) bestehend aus den vier Ringen.

b) Querschnitts des solvatisierten Proteasoms (Protein in orange, Wasser in blau). Die grünen Pfeile markieren die Eingansöffnungen für die Peptide, die roten die aktiven Zentren, an denen die Spaltung stattfindet.

schließlich durch sequenzabhängige proteolytische Schnitte in Fragmente gespalten wird (rote Pfeile in Abb. 1b).

Die Länge der hergestellten Fragmente variiert etwa zwischen 4 und 30 Aminosäuren. Die meisten dieser Peptide werden von anderen zellulären Proteasen weiter abgebaut, eine kleine Fraktion wird jedoch mit Hilfe von MHC-I (= major histocompatibility complex), einem Proteinrezeptor, auf der Oberfläche der Zellen höherer Organismen präsentiert. Den cytotoxischen T-Zellen des Immunsystems wird somit der innere Zustand einer Zelle signalisiert. Werden unbekannte Strukturen wie etwa virale Peptide angeboten, leiten die T-Zellen die Tötung der entsprechenden Zelle ein.

Die Untersuchung der spezifischen Wechselwirkungen zwischen dem Substrat und dem katalytischen Zentrum im Proteasom stellt ein sog. Docking-Problem dar, bei dem man die günstigste Konformation des Liganden in der Bindungstasche sucht. Die üblichen Docking-Programme führen jedoch drastische Vereinfachungen ein, um die Suche zu beschleunigen: So wird z.B. das Protein und oft sogar das Substrat starr gehalten und stark vereinfachte Energieterme verwendet. Weiterhin wird meist das Lösungsmittel (Wasser) vernachlässigt. Für quantitative Vergleiche, wie sie für das vorliegende Projekt vonnöten sind, ist das nicht ausreichend, besonders weil Peptide wesentlich flexibler sind als organische Moleküle, die der Gegenstand der meisten anderen Docking-Experimente sind. Deshalb wurden Molekulardynamik-Simulationen, bzw. Steered Molecular Dynamics (SMD) zur Bestimmung der Wechselwirkungen gewählt.

Eine MD-Simulation basiert auf den Atomkoordinaten einer Kristallstruktur des zu studierenden Moleküls. Fehlende Atome und umgebende Moleküle können durch entsprechende Modelling-Techniken hinzugefügt werden, um so ein vollständiges atomares Modellsystem zu erhalten. Die Wechselwirkung der einzelnen Atome untereinander wird durch empirische Energiefunktionen beschrieben. Aus den Kräften, die die Atome zu einem bestimmten Zeitpunkt gegenseitig ausüben, kann man die Positionen einen kleinen Zeitschritt später berechnen, wo jetzt natürlich wieder andere Kräfte wirken. Wiederholt man dies lange genug, so erhält man die Positionen der Atome im Zeitverlauf, also die Dynamik des Systems. Zwar liefert MD bessere Maße für die Interaktion von Substrat und Protein, allerdings ist sie auch wesentlich rechenaufwendiger, weshalb die Simulationen auf Großrechnern wie dem HLRN-System durchgeführt werden müssen.

Steered Molecular Dynamics ist eine Variante dieser Technik, bei der an ausgewählte Atome des Systems zusätzliche externe Kräfte angelegt werden, um mechanische Eigenschaften des Systems zu untersuchen oder um Prozesse zu beschleunigen, die sonst nicht innerhalb der verfügbaren Simulationszeiten zu beobachten wären. Die externe Kraft kann man sich wie eine an dem Atom befestigte Feder vorstellen, deren Aufhängepunkt entlang der Reaktionskoordinate bewegt wird.

Zunächst wurde ein Modell des Proteasoms, basierend auf der Kristallstruktur, hergestellt und solvatisiert, d.h. in Wasser gelöst, was sich als nicht trivial herausstellte, da der Druckausgleich zwischen Außen- und Innenraum im Vergleich zur erreichbaren Simulationzeit relativ lange dauert. Dann wurde begonnen, mit SMD verschiedene Peptidfragmente langsam an die Bindestellen heranzuführen, sie also zu docken. Dies muss sehr langsam geschehen, damit sowohl das Peptid, als auch die Oberfläche des Proteasoms genügend Zeit haben, sich aufeinander einzustellen und die Konformation der niedrigsten Energie zu finden. Diese Untersuchungen sind sehr aufwendig und dauern noch an. Durch Vergleich der Konformationen und Bindungsstärke verschiedener Peptidsubstrate kann dann Aufschluss gewonnen werden über den molekularen Mechanismus des Proteinabbaus in der Zelle.

Ziel der Arbeit ist schlussendlich eine zuverlässige Vorhersage der Schnittwahrscheinlichkeiten von Aminosäuresequenzen, also die Überlebenswahrscheinlichkeit eines bestimmten Peptids in Gegenwart der proteasomalen Abbau-Maschinerie. Diese Informationen sind von großer Relevanz für die Entwicklung neuer peptidbasierter pharmakologischer Wirkstoffe. Viele Peptide haben potentiell pharmakophore Eigenschaften, jedoch können nur diejenigen sinnvoll eingesetzt werden, die nicht vom Proteasom abgebaut werden bevor sie ihre Wirkung entfalten. Eine effektive Vorhersagemethode wäre also ein großer Schritt auf der ständigen Suche nach neuen Wirkstoffen zur Bekämpfung von Krankheiten.

Anorganische Moleküle und Cluster in astrophysikalischen Staubbildungsprozessen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. E. Sedlmayr

Beantragende Institution: Zentrum für Astronomie und Astrophysik, TU Berlin

Mitarbeiter: Dr. Ch. Chang, Dr. A.B.C. Patzer

Kooperationspartner: Dr. M. John, Fritz–Haber–Institut der Max Planck Gesellschaft

Das übergeordnete Ziel dieses Projektes ist die detaillierte Untersuchung und Aufklärung der Staubbildungsprozesse in speziell sauerstoffreichen astrophysikalischen Situationen, wobei der Schwerpunkt auf den mikrophysikalischen Aspekten der Keimbildung liegt. Für die umfassende, theoretische Beschreibung der Keimbildung ist die Kenntnis der relevanten Daten kleiner anorganischer Cluster unabdingbar. Folglich steht die Berechnung deren physikalischer Eigenschaften im Zentrum dieses Projektes.

In sauerstoffreichen Sternen auf dem asymptotischen Riesenast (AGB) - den M-Riesen - wird eine Vielzahl spektraler Features beobachtet, die unterschiedlichen Staubmaterialien zugeordnet werden. Auf Grund der Vielfalt der prinzipiell möglichen, stabilen Hochtemperaturkondensate in sauerstoffreichen chemischen Situationen existiert zur Zeit kein einheitliches Bild der Keimbildung. Dies führt dazu, daß noch nicht völlig geklärt ist, welche Substanz(en) das primäre Kondensat in den Hüllen von M-Riesen und ähnlichen, astrophysikalischen Objekten bilden, und wie der entsprechende Nukleationsprozeß abläuft. Auch sind die Daten der darin involvierten Moleküle, insbesondere größerer Cluster, größtenteils unbekannt. Daher befassen sich die Arbeiten dieses Projektes mit deren Berechnung, wobei unterschiedliche Methoden (quantenmechanische Rechnungen, Potentialmodelle und Clustergrößen-gleichungen) benutzt werden. Die Ergebnisse fließen in die theoretische Beschreibung der Nukleationsprozesse ein, mit der es schließlich möglich sein wird, die Keimbildungsrate unter den in astrophysikalischen Objekten herrschenden, thermodynamischen Bedingungen zu berechnen. Sie werden ferner für die geplanten Untersuchungen über die Wachstumsprozesse der entstandenen Cluster benötigt. Auf diese Weise wird eine konsistente Beschreibung der Bildung kleiner Moleküle und Cluster bis hin zu makroskopischen Körpern angestrebt.

Ausgangspunkt der theoretischen Untersuchungen bilden dabei solche molekularen Spezies, welche auf Grund des derzeitigen Wissensstandes in diesem Kontext von besonderem Interesse sind: Aluminiumoxide (Al_xO_y), Titanoxide (Ti_xO_y) und Magnesiumsilikate ($\text{Mg}_x\text{Si}_y\text{O}_z$). Die Berechnung der physikalischen Eigenschaften dieser Systeme für den relevanten Clustergrößenbereich hat zunächst zum Ziel, möglichst das globale Minimum jeder einzelnen Potentialhyperfläche des jeweils betrachteten Systems unter Miteinbeziehung verschiedener Spinzustände zu lokalisieren, d.h. durch Auffinden und Charakterisieren der energetisch tiefliegenden stationären Punkte. Der dazu verwendete quantenmechanische Ansatz bewegt sich innerhalb der traditionellen Dichtefunktionaltheorie (DFT/BP86/6-31G(d)). Er wurde anhand von aufwendigen Eichrechnungen an den Clustersystemen, deren Eigenschaften auch experimentell gut bekannt sind, so gewählt, daß er einen gerechtfertigten Kompromiß zwischen rechnerischem Aufwand und akzeptabler Genauigkeit der berechneten physikalischen Größen darstellt. Von entscheidender Bedeutung ist hierbei die Atomisierungsenergie, welche mit großem Gewicht in thermodynamische Größen zur Beschreibung zirkumstellarer Staubbildungsprozesse eingeht. Alle diese oxidischen Systeme zeigen naturgemäß eine mit der Clustergröße "explosionsartig" ansteigende Vielfalt von energetisch tiefliegenden stabilen Isomeren in den verschiedensten Ladungs- und Spinzuständen. Es ist daher offensichtlich, daß eine solche theoretische Studie nur mit Höchstleistungsrechnern, wie sie der HLRN zur Verfügung stellt, zu realisieren ist.

Entscheidende Fortschritte wurden bei der Beschreibung von Aluminium- und Titanoxiden erzielt. So gelang es, bisher unbekannte Elektromere für Al_xO_y ($x \leq 20$ und $y \leq 30$) zu identifizieren und zu beschreiben. Die Berechnung der thermodynamischen Eigenschaften dieser Oxide, erlaubt es erstmalig, die Verhältnisse in sauerstoffreichen astrophysikalisch relevanten Situationen detailliert zu simulieren.

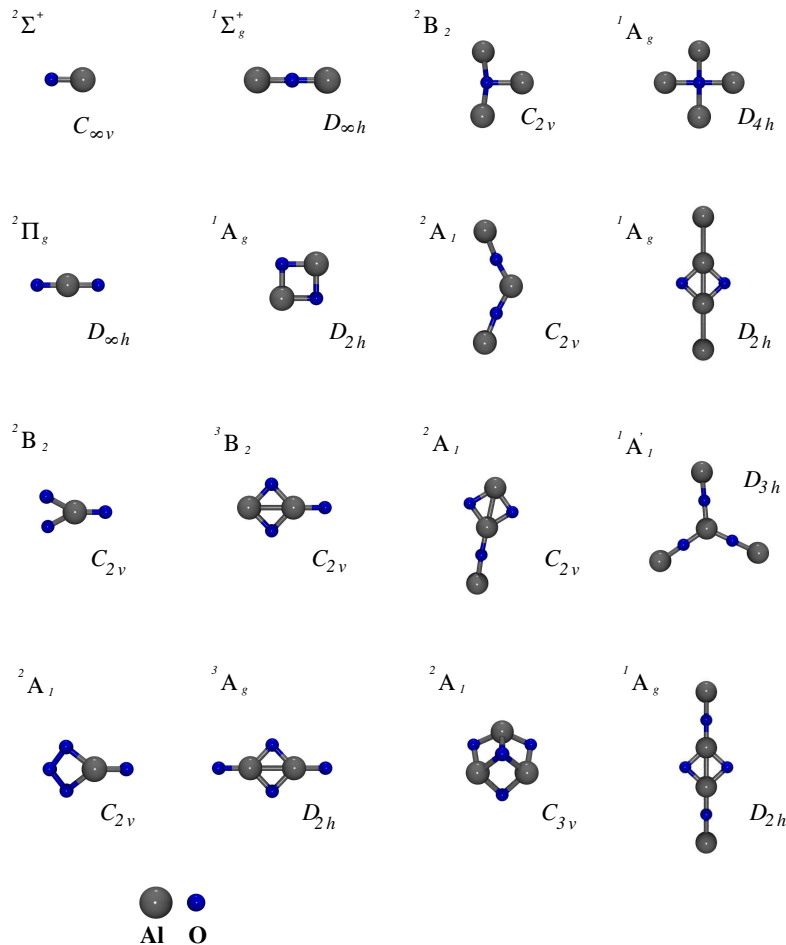


Abbildung 1: Strukturen, elektronische Zustände und Punktgruppen der energetisch tiefsten Aluminiumoxid-isomere (nach Patzer et al. 2005).

Die Vorhersage der spektroskopischen Signatur ist ein Nebenprodukt der eingehenden Charakterisierung dieser Oxidcluster. So unterstützt und ermöglicht die Verwendung der berechneten Schwingungsspektren über die astrophysikalische Anwendung hinaus die Strukturaufklärung von Oxiden in der Gasphase, die bei hohen Temperaturen in terrestrischen Laboratorien hergestellt werden. Basierend auf den im Laufe der Untersuchungen an Oxidclustern gewonnenen Erkenntnissen ergaben sich im Rahmen dieses Projektes auch interessante Impulse im Hinblick auf Studien neuer Materialien.

1. Ch. Chang, A.B.C. Patzer, E. Sedlmayr, D. Sülzle, T. Steinke, Onion-like inorganic fullerenes of icosahedral symmetry, *Comp. Mater. Sci.*, **000**, 000–000 (2004), im Druck
2. A.B.C. Patzer, Ch. Chang, M. John, U. Bolick, D. Sülzle, Theoretical study of stationary points of the $MgSiO_3$ molecule, *Chem. Phys. Lett.*, **363**, 145–151 (2002)
3. A.B.C. Patzer, Dust nucleation in oxygen-rich environments, In A.N. Witt, G.C. Clayton, B.T. Draine (eds). *Astrophysics of Dust*, ASP Conf. Series, Vol. 309, 301–320 (2004)
4. A.B.C. Patzer, Ch. Chang, E. Sedlmayr, D. Sülzle, A density functional study of small Al_xO_y ($x, y = 1-4$) clusters and their thermodynamic properties, *Eur. Phys. J. D*, **32**, 329–337 (2005)

Periodic density functional calculations of structure, dynamic and reactivity of transition metal oxides

Verantwortliche Wissenschaftler: Dr. M. Verónica Ganduglia-Pirovano, Prof. Dr. J. Sauer

Beantragende Institution: Institut für Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin

Mitarbeiter: Mgr. V. Brázdová

Kooperationspartner: DFG Sonderforschungsbereich 546; I. E. Wachs (Lehigh University, PA, USA)

Förderung: DFG SFB 546

Vanadium oxides supported on another oxide (e.g. Al_2O_3 , TiO_2 , ZrO_2 , and SiO_2) are important industrial catalysts, used in selective oxidation and reduction processes. The type of support can affect the catalytic activity by several orders of magnitude. However, the nature of the vanadia-support interaction is not well understood on an atomic scale, hindering the understanding of basic issues such as the nature of the active centers. This is due to the complexity of the vanadium oxide based catalytic surfaces. Therefore, both theoretical and experimental studies on well defined model catalysts are necessary for analyzing the support effect on the stability, reducibility, and reactivity of the active phase.

The goal of this project is to systematically investigate structure, electronic and vibrational properties of supported vanadium oxide aggregates of varying size to resolve the differences between single crystal and submonolayer quantities deposited on a second oxide. The ease of the vanadia reduction in these systems is investigated. By combining DFT with statistical thermodynamics the stability of these systems in contact with a realistic environment (e.g. varying temperature and pressure) is addressed.

Density functional theory with the gradient corrected functional of Perdew and Wang (PW91) is used. The systems are modelled with periodic boundary conditions and with plane wave basis sets, as implemented in the VASP code. This methodology is the state-of-the-art in modelling complex systems in heterogeneous catalysis. The core electrons are approximated by the projector augmented-wave method. VASP is specifically optimized for parallel use. Using 8 CPUs with VASP we obtain an efficiency of about 90%. Using more processors is not more efficient but still while computing very large systems it does not get worse than 70%. This behavior is due to the communication between the processes. Typical jobs use 500–1000 MB per processor on 8 CPUs. Jobs of this size do not fit into cheaper hardware (eg. PCs), due to their memory limit. Moreover, the communication on PCs is very slow and showed to be the bottleneck in case of the systems investigated in this project. Thus the HLRN has been essential to the success of this project.

In previous project periods calculations on bulk and single crystal surfaces of vanadium and aluminium oxides, as well as on thin vanadia films on α -alumina and on bulk AlVO_4 were done [1, 2, 3]. In the last period models for α -alumina supported vanadia clusters were built and investigated. A (2×2) surface unit cell of α - Al_2O_3 ($9.608 \text{ \AA} \times 9.608 \text{ \AA}$) with a vacuum region of 11 \AA ($c = 23 \text{ \AA}$) is used as a model of the support. Two V_2O_5 clusters stable in the gas phase, a linear and a cyclic one, were considered. The stable conformations of the supported clusters were found by a systematic search of about 30 different starting configurations, as well as by several simulated annealing runs. The size of the systems (cf. Figure 1) and the number of starting structures investigated definitely requires a parallel supercomputer.

Summarising the results, a V_2O_5 unit would bind as much as possible to the α - $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ surface, so that the undercoordinated Al and O surface atoms can increase their coordination. The most stable structure (see Fig. 1) is found to be an “extension” of the bulk α - Al_2O_3 structure, i.e., oxygen atoms follow the hexagonal stacking of the oxygen layers, while both V atoms occupy octahedral interstitial sites. Most of the oxygen atoms bound to the alumina support at the interface are 2-fold coordinated. This is different from the models for Al_2O_3 supported vanadia films which had also been investigated in this project [2, 4], which only contain 3-fold coordinated oxygen atoms at the interface.

The removal of the least stable 2-fold coordinated oxygen atom from the supported cluster is by $\sim 0.8 \text{ eV}$ more difficult than removal of a single coordinated (vanadyl) oxygen atom from the $\text{V}_2\text{O}_5(001)$ surface. However, it is by $\sim 1.9 \text{ eV}$ easier than removal of a vanadyl oxygen atom from a thin vanadia film supported on α - Al_2O_3 . Using the V–O bond dissociation energy as a reactivity parameter we conclude that smaller aggregates on Al_2O_3 are more reactive than larger ones (films) but still less reactive than the $\text{V}_2\text{O}_5(001)$ surface.

Harmonic vibrational frequencies of the two most stable systems were calculated by finite differences

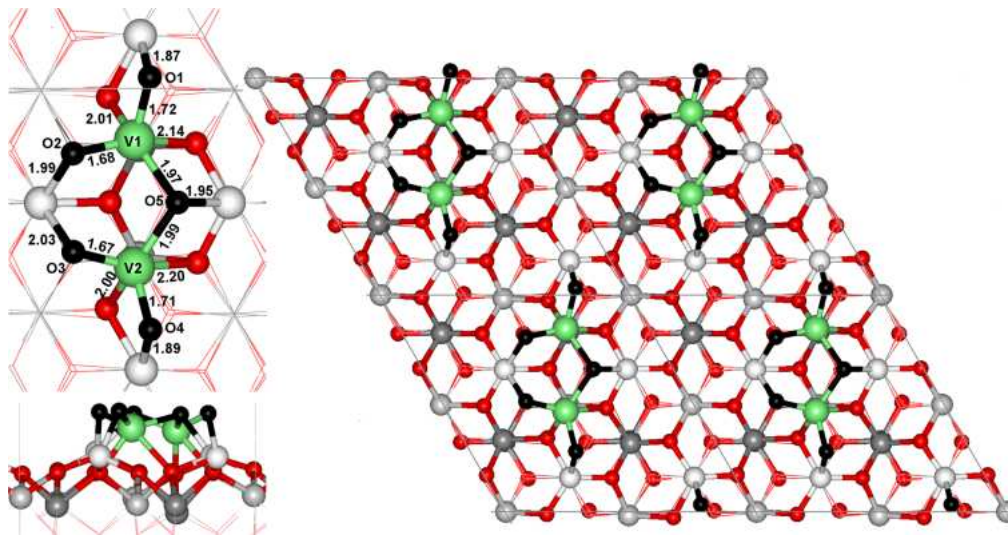


Abbildung 1: The most stable supported V_2O_5 cluster on $\alpha\text{-Al}_2O_3(0001)$. The Al atoms from the topmost substrate layers are depicted in white, light and dark gray. O atoms from the substrate are red, from the cluster black. V atoms are green.

(see Fig. 2). The calculations of vibrational frequencies of supported V_2O_5 clusters provide insight into the nature of the vanadia-alumina interface, namely that the experimental model catalysts may contain two fold coordinated oxygen atoms in $V\text{-O-Al}$ bonds, since bonds with 3-fold coordinated O atoms would not give rise to frequencies as high as 940 cm^{-1} , which had been experimentally observed.

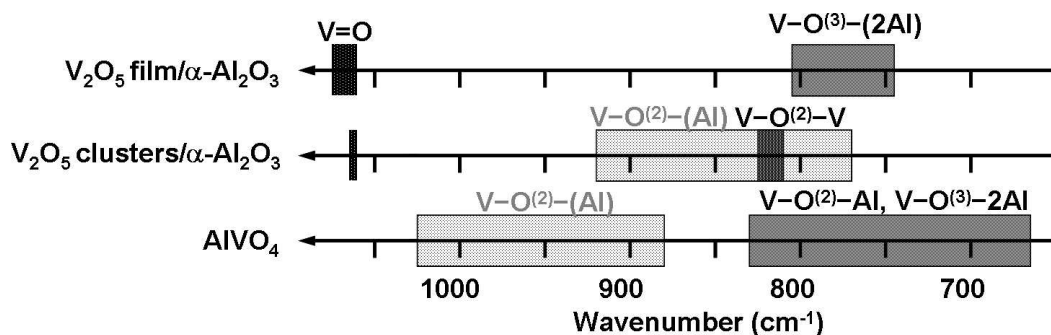


Abbildung 2: Calculated harmonic vibrational frequencies of alumina supported thin vanadia films [2], alumina supported V_2O_5 clusters (this project) and of bulk $AiVO_4$ [3].

1. Ganduglia-Pirovano, M. V., Sauer, J.: Stability of reduced $V_2O_5(001)$ surfaces, *Phys. Rev. B*, 2004, 70, 045422. Ganduglia-Pirovano, M. V., Sauer, J.: Reduction of the (001) surface of $\gamma\text{-}V_2O_5$ compared to $\alpha\text{-}V_2O_5$, *J. Phys. Chem. B*, 2005, 109, 374.
2. Brázdová, V., Ganduglia-Pirovano, M. V., Sauer, J.: Periodic density functional study on structural and vibrational properties of vanadium oxide aggregates, *Phys. Rev. B*, 2005, 69, 165420. Brázdová, V., Ganduglia-Pirovano, M. V., Sauer, J.: $\alpha\text{-}Al_2O_3(0001)$ supported V_2O_5 clusters: structure, stability and vibrational properties and the effect of support on reducibility, in preparation.
3. Brázdová, V., Ganduglia-Pirovano, M. V., Sauer, J.: Crystal structure and vibrational spectra of $AiVO_4$. A DFT study, *J. Phys. Chem. B*, 2005, 109, 394.
4. Todorova, T. K., Ganduglia-Pirovano, M. V., Sauer, J.: Surface termination of epitaxial vanadia films on $\alpha\text{-}Al_2O_3(0001)$, in preparation.

Quantenchemische Modellierung der Eisen(III)–katalysierten Michael–Addition

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Christoph van Wüllen

Beantragende Institution: Institut für Chemie, Technische Universität Berlin

Mitarbeiter: Dr. Silke Pelzer

Kooperationspartner: Prof. Jens Christoffers, Universität Stuttgart

Die meisten chemischen Reaktionen verlaufen glücklicherweise nicht spontan, sonst würde das Buch, das Sie in den Händen halten, jetzt anfangen zu brennen. Man muss eine gewisse Menge Energie (die sogenannte Aktivierungsenergie) einsetzen, um die Reaktion in Gang zu setzen: Ein Blatt Papier brennt erst, nachdem es angezündet worden ist. Ein Katalysator ist eine Substanz, die neue Reaktionswege mit stark reduzierter Aktivierungsenergie eröffnet, so dass die entsprechende chemische Reaktion unter milden Bedingungen sozusagen „von selbst“ abläuft. Der größte Teil der Wertschöpfung in der chemischen Industrie beruht auf solchen katalysierten Reaktionen.

In dem Projekt MICHAEL wird die Funktionsweise eines solchen Katalysators untersucht. Tatsächlich ist es so, dass diese Funktionsweise in vielen Fällen nicht bekannt ist, da Katalysatoren auch heutzutage noch sehr oft durch „systematisches Probieren“ entdeckt werden. So beschrieb J. Christoffers [1], dass die Addition einer 1,3-Dicarbonylverbindung an ein α, β -ungesättigtes Keton in vielen Fällen sehr einfach gelingt, indem man die Reaktionspartner miteinander mischt und ein Eisensalz wie wasserhaltiges FeCl_3 zugibt. Ohne Zugabe des Eisensalzes erfolgt keine Reaktion. Diese Umsetzung ist seit langem als Michael-Addition bekannt, wird aber klassischerweise durch Zugabe starker Basen induziert, was wegen der dann eintretenden Neben- und Folgereaktionen oft zu unbefriedigenden Ergebnissen führt. Die eisenkatalysierte Reaktion hat daher große Vorteile, funktioniert aber leider nicht in allen Fällen. Es ist nun wichtig, den Mechanismus der Katalyse zu erforschen: Erst wenn man versteht, wie das Eisensalz es bewerkstelligt, die Reaktion in Gang zu setzen, kann man den Katalysator gezielt verbessern. An diesem Punkt kam unsere theoretisch-chemische Arbeitsgruppe ins Spiel, da eine nur auf Experimente gestützte Aufklärung des Katalysemechanismus wegen der ungepaarten Elektronen am Eisen sehr schwierig ist.

Die quantenmechanischen Gesetze, die das dynamische Verhalten von Atomen und Molekülen regieren, sind wohlbekannt. Die Lösung der entsprechenden Gleichungen ist aber so schwierig, dass man auf teilweise recht grobe Näherungsmethoden angewiesen ist. Allerdings sind selbst dann noch Hochleistungsrechner erforderlich, um zu halbwegs gesicherten Aussagen zu kommen. Aufgrund erster Rechnungen konnten wir einen plausiblen Reaktionsmechanismus entwickeln, der noch verfeinert werden musste, da er nicht mit allen experimentellen Beobachtungen übereinstimmte [2, 3]. Nach unseren Vorstellungen ist das Eisen von zwei Dicarbonylverbindungen umgeben und aktiviert dabei gleichzeitig das Enon, aus dieser Anordnung findet die Reaktion statt. Dabei muss kurzzeitig eine ungünstige geometrische Anordnung (der sogenannte Übergangszustand) durchlaufen werden, bevor sich das Produkt bilden kann. Die genaue Verortung des Übergangszustands ist sehr wichtig (da sich daraus die benötigte Aktivierungsenergie ergibt) aber auch sehr aufwendig. Vorbereitende Rechnungen konnten mit den Rechenmöglichkeiten unserer Arbeitsgruppe durchgeführt werden, zur Lokalisierung der Übergangszustände benutzten wir Hochleistungsrechner des HLRN (Berlin/Hannover) und des HLRS (Stuttgart) [4].

Abbildung 1 zeigt den berechneten Übergangszustand eines solchen Komplexes. Wir haben die Aktivierungsenergien für eine Reihe von verschiedenen Michaelakzeptoren (Enonen) berechnet und damit demonstrieren können, dass die experimentell gefundene Reaktionsträgheit von Acrylsäureestern auf die verminderte Nucleophilie der C-C-Doppelbindung des Enons zurückzuführen ist. Dies ist zwar (akademisch) interessant, löst aber noch nicht das Problem des Experimentators, der aufgrund der interessanten Folgeprodukte gerne Acrylsäurederivate umsetzen würde. Unsere Rechnungen ergeben jedoch, dass die eisenkatalysierte Michael-Reaktion mit Acrylsäurederivaten, die elektronenziehende Gruppen tragen, gelingen sollte. Derartige Experimente mit einem Anhydrid aus Acrylsäure und Trifluoressigsäure werden gerade geplant.

Um zu diesem Ziel zu kommen, haben wir die Übergangszustände für eine ganze Reihe verschiedener Enone lokalisieren müssen. Dies war nur möglich, weil uns Rechenzeit an Großrechnern wie den Rechnern des HLRN zur Verfügung stand.

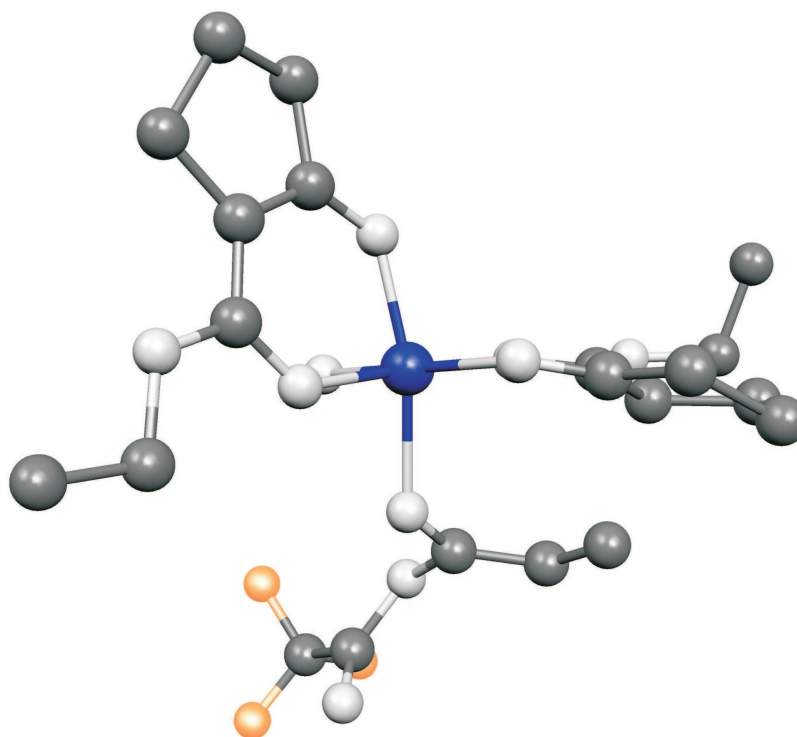


Abbildung 1: Ligandensphäre des Eisens (blau) in der berechneten Molekülstruktur des Übergangszustands. Wasserstoffatome sind der besseren Übersichtlichkeit halber nicht dargestellt. Der Michael-Akzeptor ist ein gemischtes Anhydrid aus Acrylsäure und Trifluoressigsäure.

1. Jens Christoffers: Novel chemoselective and diastereoselective iron(III)-catalyzed Michael reactions of 1,3-dicarbonyl compounds and enones, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1* 1997, 3141–3149.
2. Silke Pelzer, Thomas Kauf, Christoph van Wüllen, Jens Christoffers: Catalysis of the Michael reaction by iron(III): calculations, mechanistic insights and experimental consequences, *Journal of Organometallic Chemistry* 684 (2003), 308–314.
3. Silke Pelzer: Wie es geht – Eine quantenchemische Untersuchung der eisenkatalysierten Michael-Reaktion, Dissertation TU-Berlin, 2004.
http://edocs.tu-berlin.de/diss/2004/pelzer_silke.htm
4. Silke Pelzer und Christoph van Wüllen: The Iron(III) Catalyzed Michael Reaction – Reactivity Differences Between Several Different Acceptors, in: *High Performance Computing in Science and Engineering '04*, hrg. von E. Krause, W. Jäger und M. Resch, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2005.

Theoretische Untersuchungen zur Struktur, Energetik und Dynamik heterogener Katalyseprozesse an Zeolithsystemen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Joachim Sauer

Beantragende Institution: Institut für Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin

Mitarbeiter: Dipl.-Chem. Christian Tuma

Förderung: DFG, SPP 1155 "Molecular Modelling and Simulation in Process Engineering"

Eine besondere Klasse der Festkörperkatalysatoren stellen Zeolithe in ihrer sauren Form dar. Sie weisen vielfältige Porenstrukturen auf und zeigen bei zahlreichen Kohlenwasserstoffreaktionen eine selektive Wirkung, wobei die zugrunde liegenden Mechanismen Gegenstand intensiver Forschung sind. Erst die Kenntnis von Übergangsstrukturen, Reaktionsenergien, Energiebarrieren und Geschwindigkeitskonstanten von Teilschritten erlaubt die komplexe Simulation solcher heterogen-katalytischer Prozesse. Rechentechnisch erschwerend wirkt dabei oft die Größe der sich periodisch wiederholenden Struktureinheit des Zeoliths, die nicht selten mehrere hundert Atome beträgt und somit besonders leistungsfähige Computer erfordert. Die Dichtefunktionaltheorie im Zusammenspiel mit ebenen Wellen als Basisfunktionen, von der in diesem Projekt intensiver Gebrauch gemacht wird, stellt einen inzwischen bewährten Ansatz zur quantenchemischen Beschreibung von periodischen Systemen dar. Von Vorteil ist hier auch, daß entsprechende Programme relativ leicht auch auf mehreren Prozessoren parallel ausgeführt werden können, wodurch die Rechenzeit bedeutend gesenkt werden kann.

Ein aktuelles Projektbeispiel [1] ist die Untersuchung der Protonierungsreaktion von Isobuten im Zeolith Ferrierit. Bei dieser Elementarreaktion steht die Frage, welches der denkbaren Produkte gebildet wird - ein Oberflächenalkoxid (*tert*-Butoxid, Isobutoxid) oder das *tert*-Butylcarbeniumion?

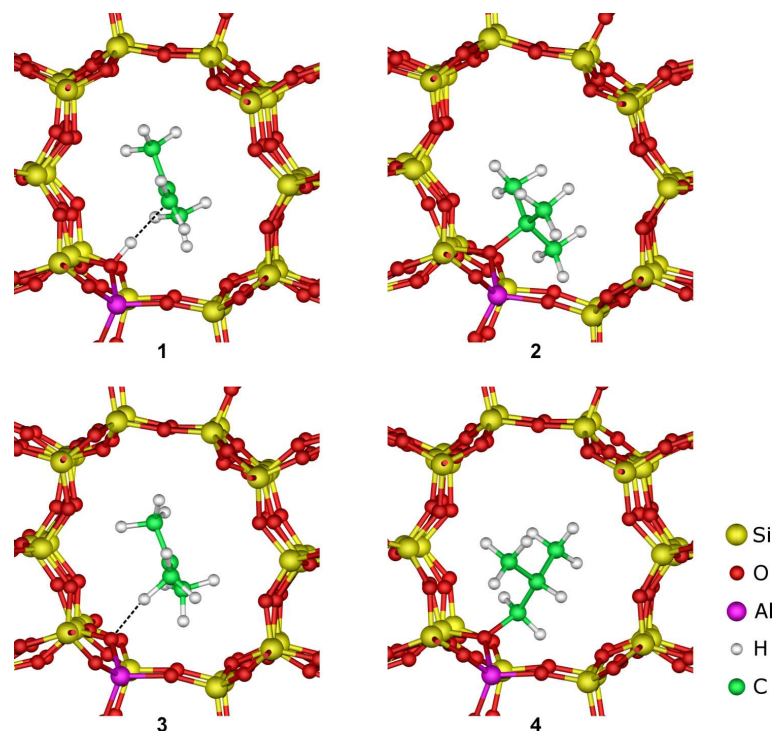


Abbildung 1: Berechnete Strukturen für den π -Komplex von Isobuten (1), das *tert*-Butoxid (2), das *tert*-Butylcarbeniumion (3) und das Isobutoxid (4) in einer Pore des Zeoliths Ferrierit.

Experimentelle Nachweise zur Existenz von Carbeniumionen in zeolithischer Umgebung sind bisher nur für ringförmige Kohlenwasserstoffe gelungen, daher galt insbesondere für kleine Kohlenwasserstoffe lange die Meinung, daß sie nach Protonierung eine kovalente Bindung (Alkoxid) mit dem Zeolithgerüst bilden. Durch die für solche großen Systeme naturgemäß sehr aufwendigen Berechnungen der Schwingungsfrequenzen konnte in diesem Projekt nicht nur gezeigt werden, daß das *tert*-Butylcarbeniumion

eine stabile Struktur darstellt, sondern es konnten erstmalig auch Abschätzungen für Entropie-Effekte und den Einfluß der Temperatur auf die relativen Stabilitäten der in Abbildung 1 dargestellten Strukturen vorgenommen werden. Demnach stellt das *tert*-Butylcarbeniumion bei Temperaturen über 120 K sogar die bevorzugte Form des protonierten Isobutens im Ferrierit dar, siehe Abbildung 2.

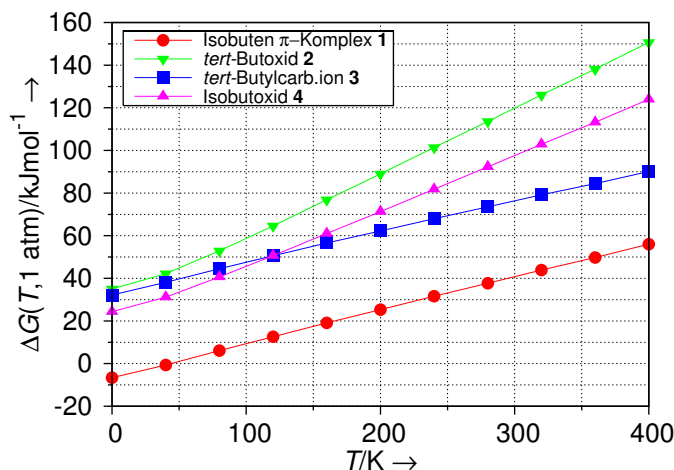


Abbildung 2: Freie Reaktionsenthalpien für verschiedene Produkte der Reaktion von Isobuten mit dem sauren Zentrum des Zeoliths Ferrierit.

Ein charakteristisches Merkmal der Carbeniumionen-Struktur ist die Ausbildung einer Wasserstoffbrückenbindung zwischen einer Methylgruppe und einem Gerüstsauerstoffatom, deren Schwingungsfrequenz eine starke Rotverschiebung im Vergleich zu gasförmigem Isobuten zeigt. Damit kann eine Hilfe gegeben werden, um einen Ansatz zum experimentellen Nachweis des *tert*-Butylcarbeniumions im Ferrierit oder anderen Zeolithen zu finden.

Sobald Kohlenwasserstoffe in engem Kontakt zur Zeolithwand stehen, wird ein Teil der Wechselwirkung durch Dispersionskräfte (van-der-Waals) beeinflusst. Dieser Effekt lässt sich nicht zuverlässig mit gegenwärtigen Dichtefunktionalmethoden beschreiben. Wellenfunktionsbasierte Ansätze, die in der Quantenchemie zu den Standardwerkzeugen gehören, sind eine mögliche Variante, um dieses Problem zu beseitigen. Sie sind in ihrer Nutzung zwar recht teuer, ermöglichen jedoch eine systematische Anwendung, um Ergebnisse gewünschter Qualität zu erhalten. Dazu ist jedoch die Verfügbarkeit leistungsfähigster Hardware eine Grundvoraussetzung. So werden in diesem Projekt weitere Rechnungen nach dem Prinzip der mechanischen Einbettung durchgeführt, um mit Hilfe von Møller-Plesset-Störungsrechnungen eine lokal verbesserte Beschreibung der Wechselwirkung des Kohlenwasserstoffs mit dem Zeolith zu erreichen. Diese in der Arbeitsgruppe entwickelte Methode wurde bereits erfolgreich zur Beschreibung von Protonensprungreaktionen angewendet [2]. Weitere Ergebnisse aus diesem Projekt sind in [3, 4] veröffentlicht.

1. C. Tuma, J. Sauer: "Protonated Isobutene in Zeolites: *tert*-Butyl Cation or Alkoxide?", *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2005, (zur Veröffentlichung angenommen).
2. C. Tuma, J. Sauer: "A hybrid MP2/planewave-DFT scheme for large chemical systems: proton jumps in zeolites", *Chem. Phys. Lett.* 387, 2004.
3. L. A. Clark, M. Sierka, J. Sauer: "Computational Elucidation of the Transition State Shape Selectivity Phenomenon", *J. Am. Chem. Soc.* 126, 2004.
4. L. A. Clark, M. Sierka, J. Sauer: "Stable Mechanistically-Relevant Aromatic-Based Carbenium Ions in Zeolite Catalysts", *J. Am. Chem. Soc.* 125, 2003.

Konformationsdynamik und Schwingungsspektroskopie kleiner Biomoleküle

Verantwortliche Wissenschaftler: Prof. Dr. Christof Schütte, PD Dr. Burkhard Schmidt

Beantragende Institution: Freie Universität Berlin, Institut für Mathematik II

Mitarbeiter: Dr. Jens Antony

Kooperationspartner: Fritz-Haber Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin

Förderung: DFG SFB 450

Das Hauptarbeitsgebiet der Biocomputing Arbeitsgruppe in der numerischen bzw. angewandten Mathematik der FU Berlin ist die Charakterisierung der Konformationen flexibler Moleküle. Dabei versteht man unter dem Begriff der Konformationen metastabile Zustände, bei denen die grobe räumliche Struktur unverändert bleibt und zwischen denen Übergänge selten und nur über energetische Barrieren möglich sind. Dies spielt insbesondere bei der Funktion biologisch relevanter Moleküle eine wesentliche Rolle. Besonderes Augenmerk der aktuellen Arbeiten liegt auf der Konformationsdynamik. Diese umfasst neben der Flexibilität innerhalb einzelner Konformationen insbesondere auch Übergänge zwischen diesen.

Wesentliches Ziel unserer Arbeiten ist die Korrelation der Konformations-Struktur und -Dynamik mit spektroskopischen Observablen, um so eine Brücke zu Experimenten schlagen zu können. Einen direkten Zugang zur Struktur und Dynamik von Molekülen stellt die Schwingungsspektroskopie dar. Neben konventioneller Infrarot- oder Raman-Spektroskopie mit kontinuierlichen Lasern erlauben moderne Methoden mit ultrakurzen Lichtpulsen im Bereich von fs bis ps auch die Beobachtung der Dynamik in Echtzeit. Ein für die Untersuchung der Konformationsstruktur besonders aussagekräftiger Spektralbereich ist neben der sonst häufig untersuchten Region der OH-Streckschwingungen (um 3000 cm^{-1}) auch der mittlere Infrarot-Bereich (500 bis 2000 cm^{-1}). Hier steht mit der neu etablierten Arbeitsgruppe zur Molekülphysik im Fritz-Haber-Institut ein kompetenter Partner zur Verfügung. Die Rechner des HLRN wurden im Rahmen der folgenden beiden Projekte genutzt:

Amid-Spektroskopie von kleinen Peptiden

Die Struktur von Polypeptiden ist außer durch die Torsionssteifigkeit des molekularen Rückgrates und sterische Faktoren insbesondere von der Ausbildung intramolekularer Brückenbindungen bestimmt. Als Untersuchungsmethode im mittleren Infrarotbereich bietet sich hierzu die Amid (I, II, III)-Schwingungsspektroskopie an. Im Rahmen des geförderten Projektes wurden hierzu für das prototypische Glyzin-Dipeptid (siehe Abb. 1) die Konformationsabhängigkeit der Amid-Spektren untersucht. Dabei konnte in Simulationen der zeitabhängigen Spektroskopie in Analogie zur Korrelation von (stationärem) Spektrum und Konformationsstruktur ein neuartiger Zusammenhang zwischen (transientem!) Spektrum und Konformationdynamik etabliert werden [1].

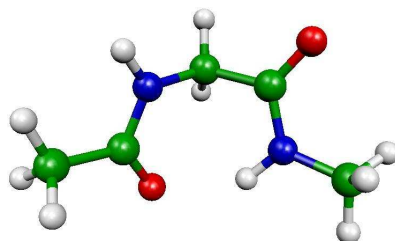


Abbildung 1: Energetisch stabilste Konformation des Glycin-Dipeptids

Spektroskopie von doppelten Wasserstoffbrücken

Die Fähigkeit zur Ausbildung doppelter (und dreifacher) Brückenbindungen ist wesentlich zur Stabilisierung der Basenpaare in der DNS, die dem genetischen Code zugrunde liegt. Als einfachste Prototypen dieser Bindungsart bieten sich Carboxylsäure-Dimere an. Dabei liefern neben den OH-Streckschwingungen auch Biegeschwingungen wertvolle Informationen über die Konformationsstruktur sowie über intermolekulare Bindungsverhältnisse. Im Rahmen des geförderten Projektes wurden hierzu die Schwingungsspektren von Benzoesäure simuliert (siehe Abb. 2). Im Vergleich mit den experimentellen Spektren der Gruppe am FHI ist die Bedeutung der Korrekturen durch die anharmonischen Kopplungen der Schwingungsmoden untersucht worden [2]. Insbesondere konnten so Aussagen über den Gültigkeitsbereich häufig benutzter Näherungsverfahren in der Schwingungsspektroskopie gemacht werden.

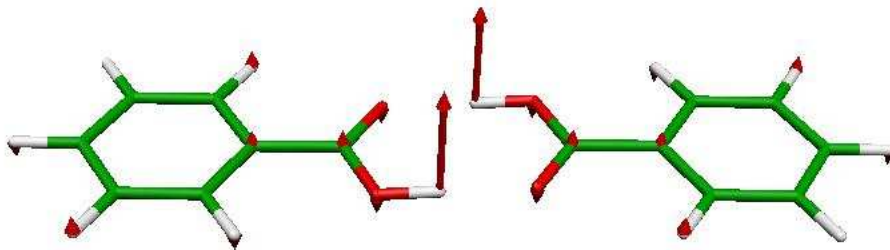


Abbildung 2: Antisymmetrische COH-Biegeschwingung des Benzoesäure-Dimers

1. J. Antony, B. Schmidt, and Ch. Schütte: Nonadiabatic Effects on Peptide Vibrational Dynamics Induced by Conformational Changes, *J. Chem. Phys.* **122**, 014309 (2005).
2. J. Antony, G. v. Helden, G. Meijer, and B. Schmidt: Anharmonic Mid-Infrared Vibrational Spectra of Benzoic Acid Monomer and Dimer, *J. Chem. Phys.*, submitted (2005).

Geometric, electronic and vibrational structure of vanadia catalyst supports

Verantwortliche Wissenschaftlerin: Dr. M. Verónica Ganduglia-Pirovano, Prof. Dr. J. Sauer

Beantragende Institution: Institut für Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin

Mitarbeiter: Dipl.-Chem. Tanya K. Todorova

Kooperationspartner: Participating groups of Sonderforschungsbereich 546

Förderung: DFG, Fonds der Chemischen Industrie

Vanadium oxides supported on other oxide, such as Al_2O_3 , SiO_2 , TiO_2 or ZrO_2 are selective oxidation catalysts. Their application as catalysts results from the specific interaction between the support and the vanadium oxide and it is known that the nature of the support has a tremendous impact on the properties of the supported species. Despite the wide use of this catalytic systems, neither the chemical nor the electronic structure of the surface and the interface are fully understood.

However, key questions like how the surface of the real catalyst is terminated under catalytical relevant conditions and the role of the supporting oxide are still under debate. Identifying those electronic and geometric features that may be correlated with the vanadia-support interaction and in turn with the catalytic performance of the systems is a priority.

The goal of this project is to investigate the electronic, geometric and vibrational properties of vanadia supported model catalysts by performing computer simulations. The focus of this project is a realistic description of the substrate itself since too simple models appear not to be consistent with the experimental findings. Therefore, theoretical studies on well defined model catalysts such as vanadia aggregates (particles and films) of varying size and thickness are essential for understanding the structure, stability and reactivity of supported vanadia oxides and in turn the support effect. Using density functional theory and statistical thermodynamics, the stability of these systems at realistic conditions (varying temperature, oxygen partial pressure and vanadium activity) is obtained and the oxygen defect formation energy evaluated as a reactivity parameter.

Calculations are performed within the density functional theory (DFT) and employ a plane wave basis set as implemented in the Vienna ab-initio simulation package VASP. The generalized gradient corrected functional of Perdew and Wang (PW91) is used. The electron-ion interaction is described by the projector augmented wave (PAW) method. The Brillouin zone is sampled using Monkhorst-Pack grids. VASP is optimized for parallel use. For relatively small systems (up to 100 atoms) using 8 CPUs the scaling of the VASP code on large parallel computers is very good and results in an efficiency of about 90%, which remains as good with increasing the number of CPUs by a factor of 4. For larger systems, the efficiency is worse due to communication problems between the CPU nodes, but still it is always higher than 70%. The typical calculations considered within this project require 1 GB per processor on 32 CPUs. Jobs with the same size can not be calculated on PCs, because of the memory limits. The communications on PCs is very slow and clearly is a bottleneck for our systems of interest. Thus, the HLRN supercomputer made possible all the calculations considered in the project.

The project is complementary to the bec00014 project "Periodic density functional calculations of structure, dynamic and reactivity of transition metal oxides" and the results obtained in both projects are to be compared. We have performed a systematic study of vanadia films supported on $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ with varying thickness of 3–6 Å and different terminations as a function of the oxygen partial pressure and the vanadium concentration at finite temperature [1]. The calculated phase diagram suggests that under UHV and room temperature (RT) yields first (1×1) O=V terminated ultra-thin films (thickness $\lesssim 3$ Å). As the vanadium activity increases films become thicker and different structures are possible, namely an oxygen terminated ($\text{O}_3\text{-V}_3\text{-O}_3\text{-V}$) reconstructed surface, two partially covered by O=V groups, exhibiting a $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ geometry, and an unreconstructed surface exclusively terminated by O=V groups. For the surfaces of these V_nO_m films thermal equilibrium with bulk V_2O_3 reservoir does not necessarily hold. In case it does, the stable structure coincides with that predicted for the single-crystal $\text{V}_2\text{O}_3(0001)$ surface. All of them are likely to be present not only under UHV and RT but at catalytically relevant conditions (1 atm, 500-600 K). A fingerprint of the existence of terminating vanadyl groups (and V^{V} -sites) at the different V_nO_m films is the ~ 2 eV oxygen induced shift towards higher binding of the V_{2p} core-levels of the surface atoms.

The phase diagram indicates that O=V groups are stable at least up to 800 K in UHV. This correlates

with the approximately 4 eV/atom energy that it costs to reduce a V^V -site to a V^{III} -site at the surface of the stable films. In contrast, V^V reduction that yields a pair of V^V centers, as for the $V_2O_5(001)$ surface, costs about half the energy amount due to vacancy induced relaxations [2]. The presence of the alumina support and the rigidity imposed by the film structure do not allow such lattice relaxations. The existence of different film structures leads to changes in the films reducibility that amount up to ~ 0.5 eV in the defect formation energy. The reduction of thicker films is more *facile* than of the ultra-thin ones and is significantly influenced by the vanadyl oxygen coverage at the surface.

In α - Al_2O_3 , all Al ions are octahedrally coordinated, while in the thin alumina films of experimental model catalysts, aluminium occupies also tetrahedral sites. Thus as a more realistic model support, vanadia films and clusters on κ - $Al_2O_3(001)$ surface which has Al ions in tetrahedral positions are examined. This work is still in progress. Different models are constructed and the reducibility of vanadia species in terms of vacancy formation energy is addressed [3]. We report a more *facile* reduction of vanadia on κ - Al_2O_3 , compare to the α - Al_2O_3 support. In contrast to α -phase, the vacancy formation energy on κ - Al_2O_3 is by ~ 0.3 eV larger than on the $V_2O_5(001)$ single crystal surface, due to the formation of additional bonds that occurs upon reduction. Thus, the presence of tetrahedrally coordinated Al ions is found to have a significant influence on the surface properties. According to our reactivity parameter, the alumina support always hinders reducibility, an important factor determining reactivity.

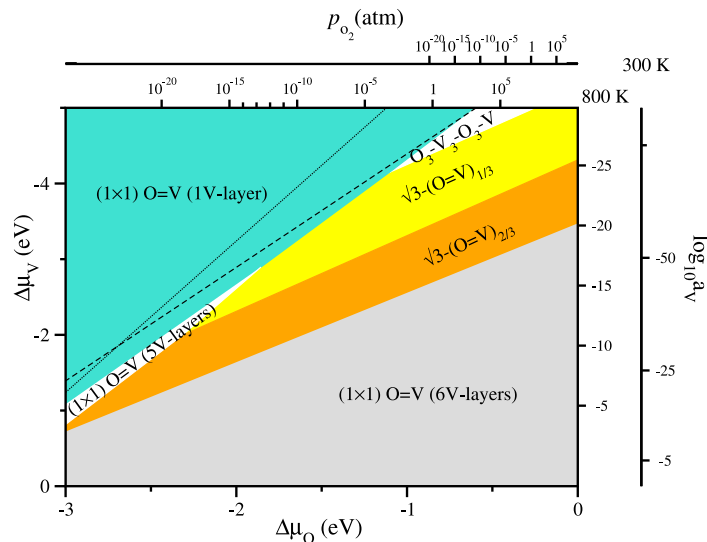


Abbildung 1: Phase diagram as a function of the $\Delta\mu_O$ and $\Delta\mu_V$ chemical potentials for alumina supported thin V_nO_m films. $\Delta\mu_O$ and $\Delta\mu_V$ have been translated into a pressure and an activity scale at $T = 300$ and 800 K. The values of $\Delta\mu_V$ for which vanadium would be in thermodynamic equilibrium with V_2O_5 or VO_2 bulk phases are indicated by the black dashed and dotted lines, respectively.

1. Todorova, T. K., Ganduglia-Pirovano, M. V., Sauer, J.: Surface termination and reducibility of vanadia films on α - $Al_2O_3(0001)$, in preparation.
2. Ganduglia-Pirovano, M. V., Sauer, J.: Stability of reduced $V_2O_5(001)$ surfaces, Phys. Rev. B, 2004, 70, 045422.
3. Todorova, T. K., Ganduglia-Pirovano, M. V., Sauer, J.: Structure, stability and reducibility of vanadia aggregates on κ - $Al_2O_3(001)$, in preparation.

Quantenchemische Untersuchungen zum Mechanismus der Photo-Dehydro-Diels-Alder-Reaktion (PDDA)

Verantwortlicher Wissenschaftler: Priv.-Doz. Dr. Pablo Wessig

Beantragende Institution: Humboldt-Universität zu Berlin

Mitarbeiter: Dipl.-Chem. Andreas Kühn, Dipl.-Chem. Gunnar Müller

Kooperationspartner: Universität Bochum

Förderung: DFG

Mit Hilfe von quantenchemischen Berechnungen sollte der Mechanismus der Photo-Dehydro-Diels-Alder-Reaktion beleuchtet werden. Weiterhin sollten auf sehr hohem Niveau berechnete IR-Spektren kurzzeitspektroskopische Untersuchungen des Mechanismus unterstützen.

Im Rahmen des Projektes ist es gelungen, den Mechanismus der Photo-Dehydro-Diels-Alder-Reaktion durch quantenchemische Rechnungen aufzuklären. Erste Ergebnisse wurden kürzlich publiziert (s.u.). So konnten Erkenntnisse über die Struktur und die mutmaßliche Lebensdauer der reaktiven Zwischenstufen gewonnen werden. Diese Erkenntnisse bilden eine wichtige Basis für die gegenwärtig laufenden kurzzeitspektroskopischen Untersuchungen, bei denen der direkte Nachweis dieser Zwischenstufen erfolgen soll. Eine sehr erfolversprechende Methodik besteht dabei im Vergleich der gemessenen mit den quantenchemisch berechneten Infrarotspektren. Das folgende Bild 1 zeigt das berechnete Energieprofil der Reaktion anhand eines Modellsystems.

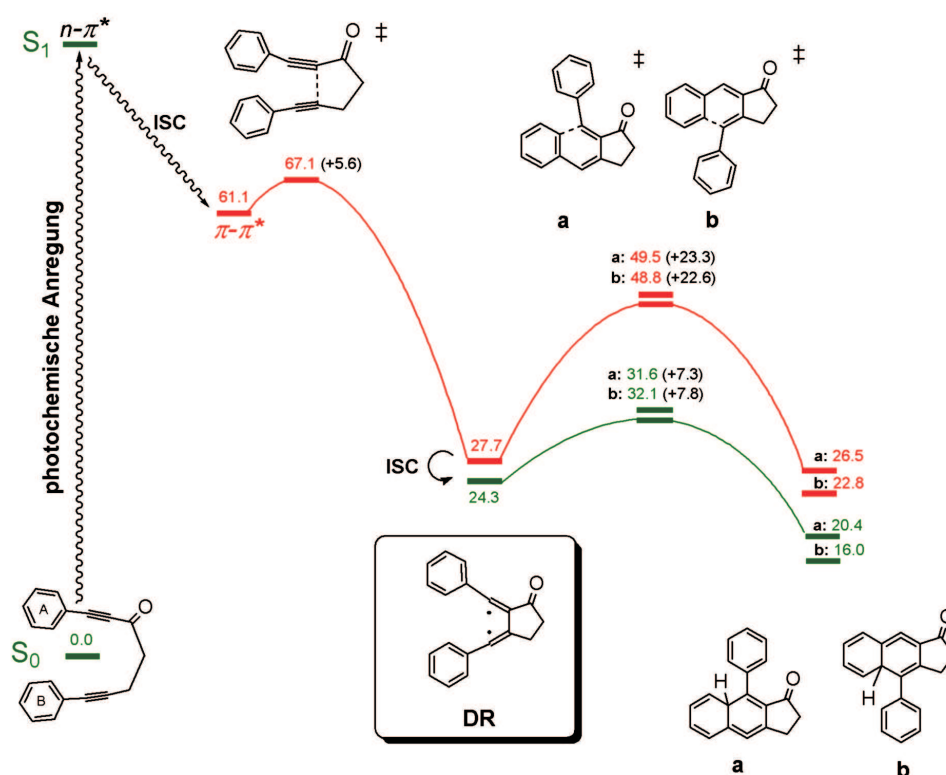


Abbildung 1: Quantenchemische Berechnungen zum Mechanismus der Photo-Dehydro-Diels-Alder-Reaktion (Methode B3LYP/6-311++G**//B3LYP/6-31G*, rot=Triplettzustand, grün=Singulettzustand)

Die Bedeutung der Photo-Dehydro-Diels-Alder-Reaktion liegt vor allem darin, dass sie einen sehr schnellen und eleganten Zugang zu hochfunktionalisierten Diarylen gestattet. Solche Diaryle, d.h. zwei Arylreste, die über eine Einfachbindung verknüpft sind, weisen häufig bezüglich dieser Bindung ein besonderes Stereoisomeriephänomen auf. Ist nämlich die Rotation um diese Bindung aus sterischen Gründen gehindert, dann treten zwei sogenannte Atropisomere auf, die sich zueinander verhalten, wie Bild und Spiegelbild. Solche atropisomeren Strukturmerkmale finden sich zum einen in einer Viel-

zahl von Naturstoffen mit teilweise großer biologischer Aktivität (hierzu zählt z.B. das Notfall-Antibiotikum Vancomycin). Andererseits besitzen solche atropisomeren Verbindungen vielfältige Anwendungsgebiete in Labor und Technik. Zu nennen sind hier vor allem chirale Liganden für Katalysatoren, allen voran das vom Nobelpreisträger R. Noyori eingeführte Binol, ein Dinaphthyl-Derivat, welches hochgradig stereoselektive Hydrierungen erlaubt und daher große Bedeutung besitzt (R. Noyori, Nobelpreis 2001 zusammen mit W. S. Knowles "Für ihre Arbeiten über chiral katalysierende Hydrierungsreaktionen"). Auch die von uns entwickelte Photo-Dehydro-Diels-Alder-Reaktion gestattet es, Dinaphthyle herzustellen. Abbildung 2 zeigt die Kristallstruktur des ersten so von uns hergestellten Dinaphthyl-Derivats.

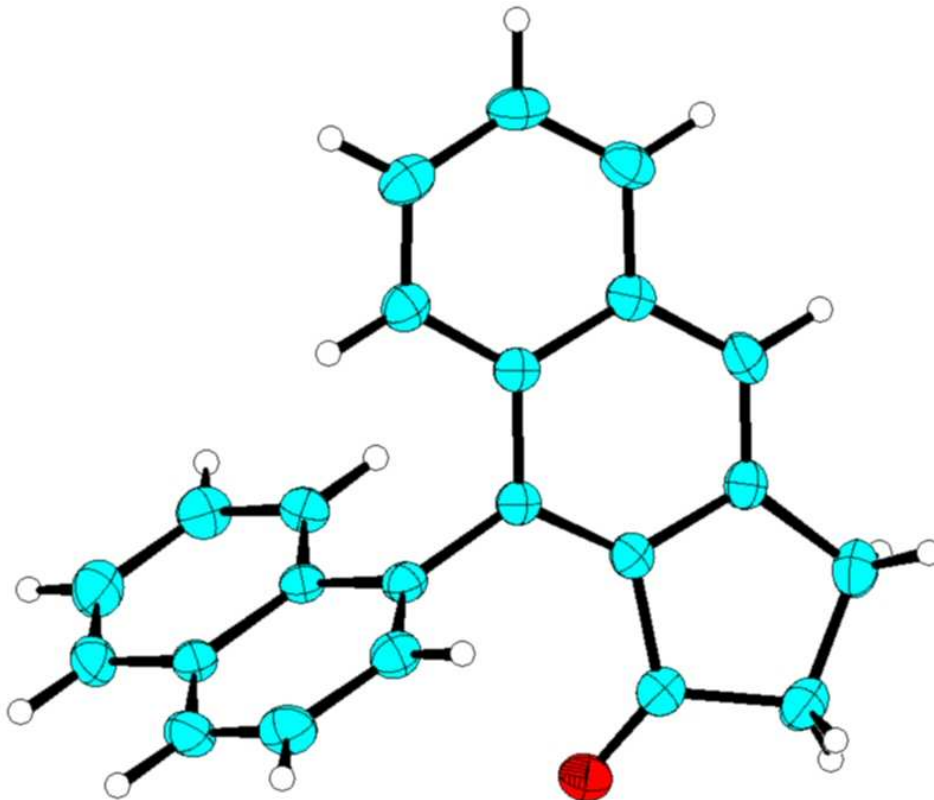


Abbildung 2: Kristallstruktur des ersten von uns durch Photo-Dehydro-Diels-Alder-Reaktion hergestellten Dinaphthyl-Derivats

Die durch die umfangreichen quantenchemischen Rechnungen am HLRN gewonnenen Erkenntnisse zum Mechanismus der Photo-Dehydro-Diels-Alder-Reaktion werden sehr hilfreich für die laufenden Untersuchungen zur Synthese atropisomerer Diaryle sein.

1. Pablo Wessig, Gunnar Müller, Andreas Kühn, Robert Herre, Heiko Blumenthal, Stefanie Trölenberg: The Photo-Dehydro-Diels-Alder-Reaction – An Efficient Route to Naphthalines, *Synthesis* 2005, im Druck

Homochiralität und molekulare Paritätsverletzung

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Robert Berger

Beantragende Institution: Technische Universität Berlin

Mitarbeiter: Dipl.-Chem. Christine Michauk, Cand. Chem. Nancy Frenzel,
Dipl.-Chem. Guido Laubender

Aminosäuren und Zucker stellen zentrale Bausteine der uns bekannten belebten Natur dar. Viele dieser Verbindungen können dabei in zwei Formen existieren, die sich zueinander wie nichtidentische Spiegelbilder verhalten und als Enantiomere bezeichnet werden. Kurioserweise verwenden auf der Erde beheimatete Organismen nahezu ausschließlich eine der beiden möglichen Formen, nämlich L-Aminosäuren und D-Zucker. Über diese sogenannte biochemische Homochiralität wurde schon viel spekuliert, ebenso wie über die Ursache für die Selektion der L- und nicht der D-Aminosäuren bzw. der D- und nicht der L-Zucker. Mit Hilfe unserer quantenchemischen Untersuchungen am HLRN wollen wir etwas Licht in das Dunkel um die biochemische Homochiralität bringen.

Im Rahmen möglicher Erklärungsversuche stellt sich zunächst die Frage, wie ein kleiner Überschuß der L-Aminosäuren gegenüber ihren D-Spiegelbildern bis hin zur Homochiralität vergrößert werden kann. In diesem Zusammenhang wurde in der Vergangenheit eine chemische Reaktion postuliert, die einerseits autokatalytisch abläuft, was bedeutet, daß das Produkt seine eigene Bildung katalysiert, und andererseits einen vorgegebenen Enantiomerenüberschuß vergrößert. Chemische Reaktionen mit diesen Eigenschaften waren lange unbekannt. Im Bereich der metallorganischen Chemie hat eine japanische Arbeitsgruppe um den Chemiker Soai vor etwa zehn Jahren eine derartige vorgestellt. Bei dieser Reaktion katalysiert ein chirales Isopropylzinkalkoxid seine eigene Bildung aus einem achiralen Pyrimidincarbalddehyd und Diisopropylzink (die nichtidentischen Spiegelbilder werden hier mit R bzw. S bezeichnet). Ein anfänglich kleiner vorgelegter Überschuß eines Enantiomers wird im Zuge der Autokatalyse vergrößert. Wie diese Reaktion im Detail abläuft, was also der Mechanismus dieser Reaktion ist, ist noch unbekannt. Um dies zu klären, werden theoretische Untersuchungen auf dem HLRN-System durchgeführt.

Unsere quantenchemischen Rechnungen am HLRN haben gezeigt, daß das Isopropylzinkalkoxid oligomer vorliegt und ein über einen Zn-O-Zn-O-Vierring verbrücktes Dimer (siehe Abbildung 1) eine katalytisch aktive Spezies darstellen kann. Darauf aufbauend wurden mögliche Reaktionswege untersucht.

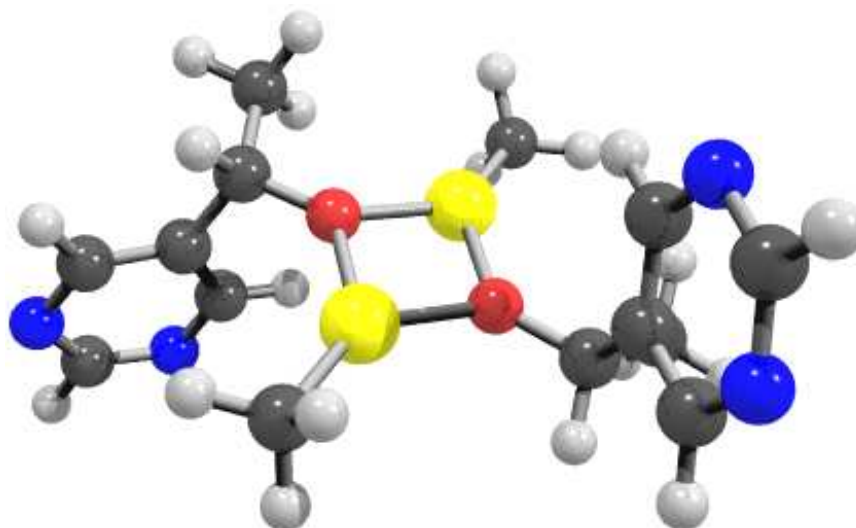


Abbildung 1: Auf dem HLRN-System berechnete Dimer-Struktur, die vermutlich eine entscheidende Rolle bei der Autokatalyse-Reaktion spielt (Farbkodierung: Scharz — Kohlenstoff, rot — Sauerstoff, blau — Stickstoff, gelb — Zink und grau — Wasserstoff).

Es stellte sich heraus, daß es möglich ist, zwei Aldehyd-Moleküle an die Katalysatorspezies zu einem Katalysator-Edukt-Komplex anzulagern, der anschließend zu einem stabilen Isopropylzinkalkoxid-Tetramer reagieren kann. Durch die Dissoziation in zwei Dimere wird der autokatalytische Zyklus ge-

schlossen.

Bei unseren Rechnungen haben wir festgestellt, daß die Anlagerung an ein SS- oder RR-Dimer wieder selektiv zu einem neuen SS- bzw. RR-Dimer führen kann. Ein RS-Dimer kann entweder ein neues RR- oder SS-Dimer bilden. Eine kinetische Modellierung mit angenommenen Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten zeigt im Verlauf der Reaktion eine Erhöhung des Enantiomerenüberschusses, die auch experimentell beobachtet wird. Auch die im Experiment bestimmte Abhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit von der eingesetzten Aldehyd-Konzentration läßt sich sehr gut mit dem gerechneten Modell in Einklang bringen.

Diese Erkenntnisse stellen einen großen Schritt auf dem Weg zu einem detaillierten mechanistischen Verständnis dieser bedeutsamen Reaktion dar.

1. G. Laubender, R. Berger: 2005, in Bearbeitung.

Schwingungsfinstrukturen in Elektronenspektren

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Robert Berger

Beantragende Institution: Technische Universität Berlin

Mitarbeiter: Dipl.-Chem. Hans-Christian Jankowiak

Förderung: Partiiell durch die VolkswagenStiftung

Die Schwingungsfinstruktur von Elektronenspektren beinhaltet Informationen über verschiedene Eigenschaften von Molekülonen sowie von Molekülen in angeregten Zuständen.

Im Rahmen dieses Projektes sollen Schwingungsfinstrukturen, die zum Beispiel in Photoelektronen-, Photoionisations-, UV/VIS- und Circular dichroismus-Spektren mehratomiger Moleküle auftreten, mit theoretischen Methoden untersucht werden. Mit Hilfe quantenchemisch bestimmter Daten wie Gleichgewichtsstrukturen, harmonischer Schwingungsfrequenzen und Normalkoordinaten kann einerseits die Interpretation experimenteller Spektren unterstützt werden. Andererseits lässt der Experiment-Theorie-Vergleich auch eine Abschätzung der Qualität verschiedener Methoden zur Beschreibung von ungeladenen und geladenen Molekülen im elektronischen Grundzustand sowie in elektronisch angeregten Zuständen zu.

Um Schwingungsfinstrukturen zu berechnen, muss die Intensität jedes einzelnen vibronischen Übergangs berechnet werden. Die Intensität der Übergänge ist in der Franck-Condon-Näherung proportional zu den Franck-Condon-Faktoren [Franck J., Trans. Faraday Soc. 1925, 21, 536; Condon, E., Phys. Rev. 1926, 28, 1182; Condon, E., Phys. Rev. 1926, 32, 858].

Zur Berechnung von Schwingungsfinstrukturen wird von uns eine modifizierte Version des Programms HOTFCHT [Berger, R.; Fischer, C.; Klessinger, M., J. Phys. Chem. A, 1998, 102, 7157] eingesetzt. Das Programm folgt dem Ansatz von Doktorov, Malkin und Man'ko [Doktorov, E. V.; Malkin, I. A.; Man'ko, V. I., J. Mol. Spectrosc. 1977, 64, 302], der den Duschinskyeffekt [Duschinsky, F., cta Physicochim URSS, 1937, 37, 551] berücksichtigt und die Franck-Condon-Faktoren mit Hilfe von Rekursionsformeln bestimmt.

Das Ziel dieses Projekts ist es, mit Hilfe von berechneten Photoelektronen- und Photoionenspektren die Interpretation experimentell erhaltener Spektren zu ermöglichen beziehungsweise zu erleichtern.

Die Photoelektronenspektren ergeben sich aus den Franck-Condon-Faktoren als Linienspektren. Die Photoionenspektren wiederum ergeben sich durch Aufsummieren der Intensitäten der Photoelektronenspektren. Mit Hilfe der berechneten Photoionenspektren können bei Molekülen mit einem 0-0-Übergang geringer Intensität durch Vergleich mit den experimentellen Spektren die adiabatischen Anregungsenergien genauer bestimmt werden. Dieses Verfahren wurde schon erfolgreich für das Trimethoxyvanadium(V)-oxid [1] und das Toluoldikation [2] angewandt.

Als weitere Anwendung können Neutralisations-Reionisations-(NR)-Prozesse untersucht werden. Berechnete Franck-Condon-Profile können hier als Ausgangspunkt für kinetische Berechnungen nach dem Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus(RRKM)-Modell dienen. Konkret soll im Rahmen dieses Projektes zunächst das 2-Hydroxyoxolan-2-yl-radikal betrachtet werden, eine "nicht in Flaschen abfüllbare" Substanz, die Gegenstand von Neutralisations-Reionisations-Experimenten war. Vivekananda et al. [Vivekananda, S.; Saddilek, M.; Chen, X.; Turecek, F., J. Am. Soc. Mass. Spectrom., 2004, 15, 1055] haben RRKM-Rechnungen zu Fragmentierungsreaktionen des 2-Hydroxyoxolan-2-yl-radikal veröffentlicht, bei denen die Verteilung der Inneren Energie des in NR-Experimenten erzeugten Radikals abgeschätzt wurde. Hier soll nun stattdessen das Franck-Condon-Profil des Neutralisationsschrittes berechnet werden und anschließend sollen die RRKM-Rechnungen mit der so erhaltenen Energieverteilung nachvollzogen werden. Dies ist unser erstes Anwendungsbeispiel, mit dem untersucht werden soll, ob mit einem Franck-Condon-Ansatz zur Bestimmung der Inneren Energie bei Neutralisationsexperimenten die darauf folgende Reaktionskinetik gut modelliert werden kann.

Da Arbeiten zu diesem Projekt erst vor kurzem aufgenommen wurden, liegen bis jetzt nur Teilergebnisse vor. So zeigt die Abbildung 1 die in der Arbeit von Vivekananda et al. abgeschätzte Verteilung der Inneren Energie $P(E)$. Zusätzlich ist das bis jetzt berechnete Franck-Condon-Profil aufgetragen. Die gerechnete Kurve zeigt hier einen steileren und schmaleren Verlauf. Jedoch lassen sich aus den bisherigen Daten noch keine Aussagen über die Auswirkungen auf die anschließenden kinetischen Rechnungen machen, da der Kurvenverlauf bei höheren Energien noch nicht ausreichend untersucht ist.

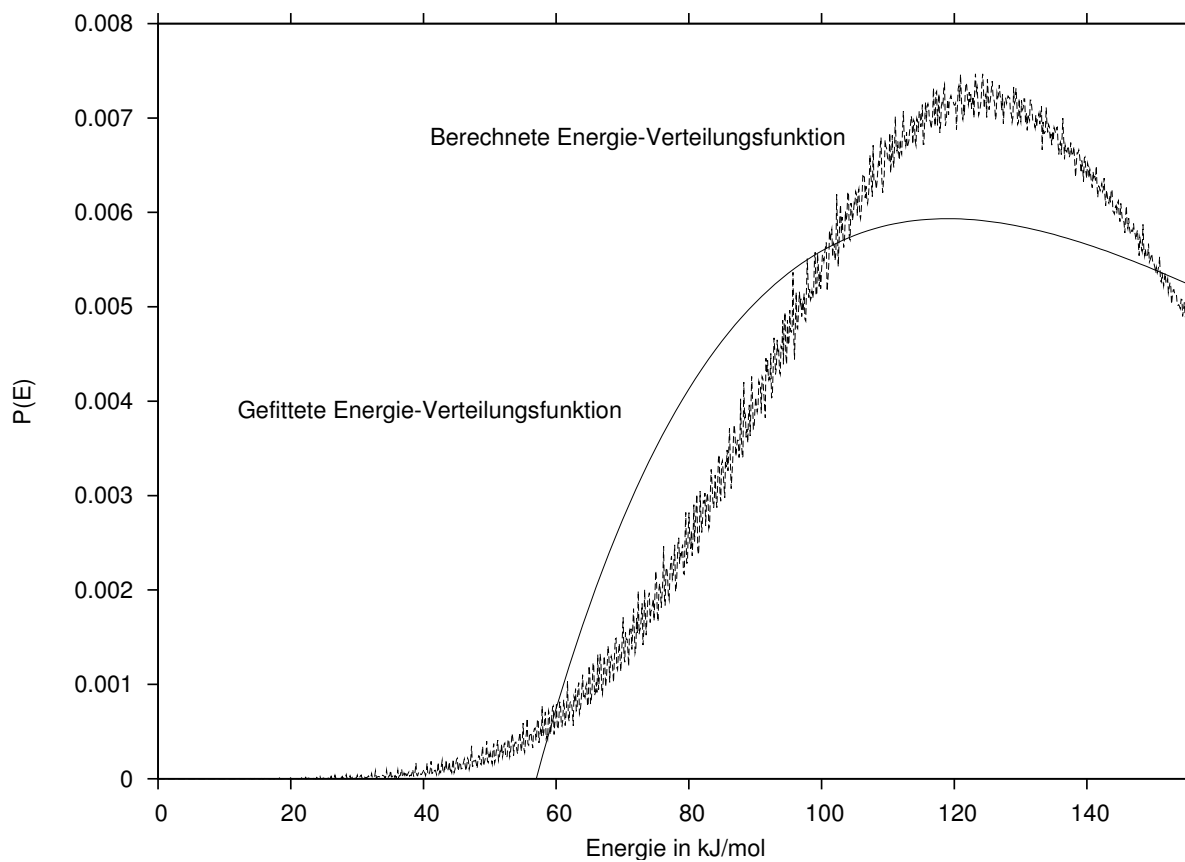


Abbildung 1: In dem Diagramm sind die Verläufe der von Vivekananda et al. angenommenen (gefitteten) und der in der Franck-Condon-Näherung berechneten Verteilungsfunktionen der Inneren Energie $P(E)$ dargestellt.

1. Schröder, D.; Loos, J. Schwarz, H.; Jankowiak, H.-C.; Berger, R.; Thissen, R.; Dutuit, O.; Pritzsche, M.; Döbler, J.; Sauer, J., *Inorg. Chem.* 2004, 43, 1979.
2. Roithova, J.; Schröder D.; Loos, J.; Schwarz, H.; Jankowiak, H.C.; Berger, R; Thissen, R.; Dutuit, O., *J.Chem.Phys.*, 2005, 122, 094306.

Koordinations–Chemie schwefelreicher Verbindungen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Ralf Steudel

Beantragende Institution: Institut für Chemie, Technische Universität Berlin

Mitarbeiter: Dr. Yana Steudel

Kooperationspartner: Prof. Dr. Ming Wah Wong, National University of Singapore

Förderung: DFG

Das Element Schwefel existiert in zahlreichen Molekülgrößen mit zwei bis Tausenden von Atomen. Diese Moleküle können in zahlreichen isomeren Strukturen auftreten, d.h. mit unterschiedlicher räumlicher Anordnung der Atome. Mit theoretischen Methoden haben wir im Falle von S_4 , S_6 , S_7 und S_8 die entsprechenden Strukturen ermittelt und ihre relativen Energien berechnet. So lässt sich feststellen, welche Struktur die stabilste ist. Die weniger stabilen können als Zwischenprodukte bei den thermischen Reaktionen von Schwefel auftreten. Die Kenntnis ihrer Energie und Geometrie erlaubt es, Reaktionsmechanismen aufzustellen, die den Ablauf einer Umsetzung auf molekularer Ebene erklären.

Spektakulär war die Entdeckung eines clusterartigen S_8 -Moleküls, das nur um 25 kJ mol^{-1} weniger stabil ist als die bekannte Kronenform dieses allseits bekannten homocyclischen Ringes. Im Falle von S_4 wurde nun die planare Trapezform endgültig als das stabilste Isomer ermittelt, wozu auch ein Vergleich der berechneten und gemessenen UV-Absorptionsspektren herangezogen wurde.

Um den Schwefel und seine Derivate chemisch zu aktivieren, wurde die Reaktion der oben genannten Moleküle mit den positiven Ionen von Wasserstoff, Lithium, Calcium, Kupfer und Vanadium untersucht. Es entstehen Komplexe mit interessanten und unerwarteten Strukturen.

So führt die Addition eines Protons (H^+) an einen Ring wie S_6 , S_7 und S_8 in allen Fällen zu Derivaten, in denen sich die Ringgröße um ein Atom verringert hat und eine exocyclische S–H-Gruppe vorhanden ist (siehe Abb. 1).

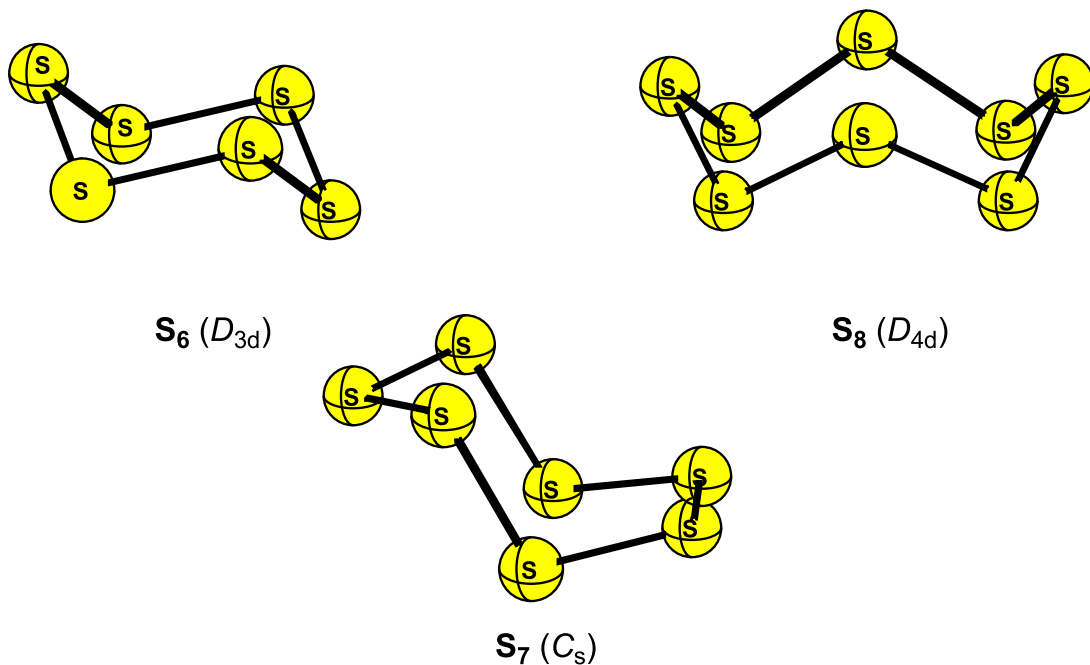


Abbildung 1: Strukturen der stabilsten Isomere der protonierten Homocyclen S_6 , S_7 und S_8

Weitere Beispiele sind die Strukturen von $[V(S_8)]^+$ und $[V(S_4)_2]^+$, die in Abbildung 2 dargestellt sind. Derartige Metallkomplexe spielen als Katalysatoren, zum Beispiel bei der Entschwefelung von Rohöl, eine wichtige Rolle.

Die Änderung der Bindungslängen und der Ladungsverteilung in diesen Komplexen verglichen mit

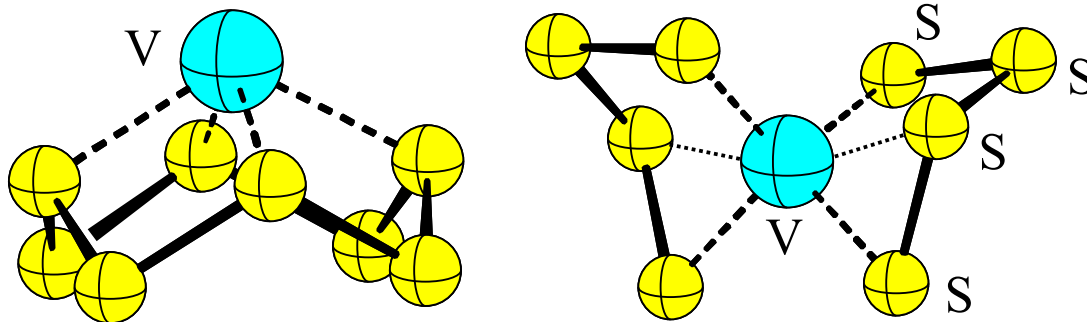


Abbildung 2: Zwei isomere Komplexe des Vanadium-Kations V^+ mit den Liganden S_8 (links) und S_4 (rechts). Das stabilere Isomer ist das Rechte.

den Ausgangsmolekülen lässt auf eine Aktivierung der Schwefel-Schwefel-Bindungen schließen, wodurch chemische Reaktionen erleichtert werden. Entsprechende Prozesse können daher bei niedrigeren Temperaturen durchgeführt werden, wodurch Energie eingespart wird. In ähnlicher Weise wurden Metallkomplexe mit den kettenförmigen Molekülen $(CH_3)_2S_{3-5}$ (Dimethylsulfane) untersucht, wobei clusterähnliche Strukturen gebildet werden. Aufgabe ist es nun, entsprechende Komplexverbindungen, die die berechneten Kationen enthalten, präparativ herzustellen. Da Sulfane dieser Art in fast allen Organismen vorkommen, ist die Kenntnis ihrer Wechselwirkung mit Metallionen von Interesse.

1. M. W. Wong, Y. Steudel, R. Steudel: Isomers of cyclo-Heptasulfur and their Coordination to Li^+ - an ab initio MO Study, Inorg. Chem., eingereicht.
2. Y. Steudel, M. W. Wong, R. Steudel: Coordination of Li^+ , Ca^+ , V^+ and Cu^+ to the Sulfur Molecules S_8 and S_4 - A Computational Study. Eur. J. Inorg. Chem. 2005, im Druck.
3. Y. Steudel, M. W. Wong, R. Steudel: Electrophilic Attack on Sulfur-Sulfur Bonds II: Coordination of Lithium Cations to Sulfur-Rich Molecules - an ab initio MO Study. Chem. Eur. J. 2005, 11, 1281-1293.
4. M. W. Wong, T. S. Chwee, R. Steudel: Electrophilic Attack on Sulfur-Sulfur Bonds I: Protonation of Various Isomers of the Homoatomic Sulfur Molecules S_n ($n = 2-8$). J. Phys. Chem. A 2004, 108, 7091-7098.

Angeregte Zustände von Chlorophyll und Bacteriochlorophyll in photosynthetischen Pigment–Protein–Komplexen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Dr. Th. Renger

Beantragende Institution: Institut für Chemie (Kristallographie), Freie Universität Berlin

Mitarbeiter: Dr. A. Abduraman, Dr. M. E. Madjet, Dipl.-Phys. J. Adolphs

Kooperationspartner: Prof. W. Knapp (FU Berlin), Prof. A. Knorr (TU Berlin), Dr. E. Schlodder (TU Berlin)

Förderung: DFG (Emmy Noether-Programm, Sfb 498, Sfb 429)

In photosynthetischen Antennenkomplexen wird Licht durch die Pigmente (Chlorophylle, Bacteriochlorophylle und Karotenoide) absorbiert und zum photosynthetischen Reaktionszentrum weitergeleitet, wo die Anregungsenergie durch Elektronentransferprozesse in chemische Energie umgesetzt wird. Von 100 absorbierten Lichtquanten führen mehr als 95 zum Ladungstransfer. Die hohe Effizienz des Lichtsammelapparates der Pflanzen und Bakterien ist von großem Interesse, sowohl für die Grundlagenforschung als auch für die Entwicklung artifiziieller Antennensysteme.

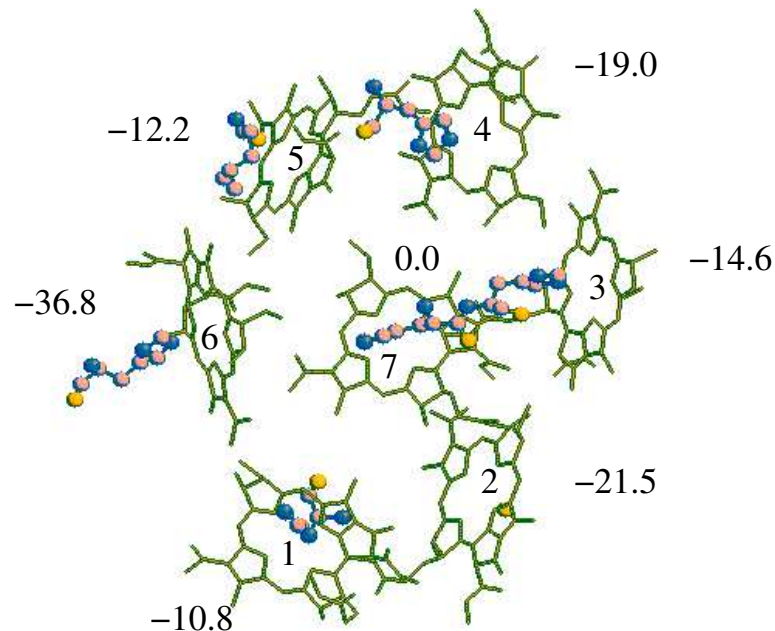


Abbildung 1: Anordnung der 7 Bacteriochlorophylle und der Liganden im FMO-Monomer. Relative Verschiebungen der optischen Übergangsenergien in meV.

Ausgehend von den bekannten atomaren Strukturen einiger Pigment–Protein–Komplexe ist es möglich, optische Experimente an diesen Systemen theoretisch zu beschreiben und daraus Aussagen zu Struktur–Funktionszusammenhängen zu treffen. Eine zentrale Frage etwa richtet sich auf die Mechanismen mit denen es den Proteinen gelingt, den Anregungsenergietransfer zwischen den Pigmenten zu steuern. Ein wesentliches Element dieser Steuerung ist die dynamische und statische Modulation der optischen Übergangsenergien der Pigmente durch die Proteine. Die dynamische Modulation gestattet die Dissipation von elektronischer Überschussenergie in die Proteinschwingungen. Durch die statische Verschiebung der optischen Übergangsenergien der Pigmente wird der Absorptionsquerschnitt des Reaktionszentrums für den Einfang von Sonnenlicht spektral vergrößert.

Ziel dieses Projektes ist die Berechnung der, durch die lokale Proteinumgebung bedingten, spezifischen Verschiebungen der optischen Übergangsenergien der Pigmente in verschiedenen Photosyntheseantennen. Als kleinstes System wurde der sogenannte FMO-Komplex der grünen Schwefelbakterien untersucht. Die Erkenntnisse bei der Berechnung dieses Komplexes, in dem 7 Bacteriochlorophyll *a* Moleküle gebunden sind, werden später benutzt, um größere Systeme zu behandeln. Der größte Komplex stammt aus dem Photosystem I und besteht aus 96 Chlorophyll *a* Molekülen. Im folgenden werden

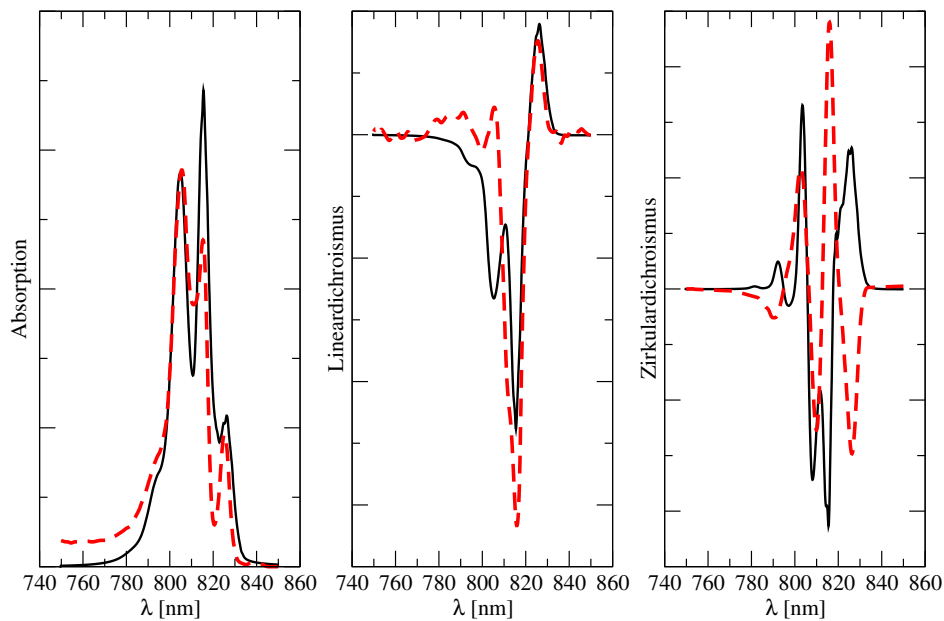


Abbildung 2: Berechnete optische Spektren (durchgezogen), die sich aus den relativen Übergangsenergien in Abb. 1 ergeben und Vergleich mit dem Experiment (gestrichelt).

erste Ergebnisse zur Berechnung von optischen Übergangsenergien der 7 Bakteriochlorophyllmoleküle im FMO-Komplex vorgestellt.

Folgende Berechnungsmethode wurde entwickelt und angewendet: Zunächst wird das elektrostatische Potential auf einem dreidimensionalen Gitter um die Pigmente für den elektronischen Grund- und angeregten Zustand in einer quantenchemischen Rechnung ohne explizite Berücksichtigung der Proteinumgebung berechnet (Die Berücksichtigung der Konformation der einzelnen Pigmente hat sich dabei als wichtig herausgestellt.). Dieses elektrostatische Potential wird in einem nächsten Schritt durch atomare Partialladungen angenähert, die dann in den Elektrostatikrechnungen mit vollständiger Proteinumgebung, einschließlich Mittelung über verschiedene Protonierungszustände, zum Einsatz kommen.

In Abb. 1 ist die Anordnung der 7 Bakteriochlorophyll einschließlich der Protein-Liganden des FMO-Monomers zusammen mit der berechneten Verschiebung der optischen Übergangsenergie relativ zur Übergangsenergie des Pigmentes Nr. 7 (in der Bildmitte) dargestellt. Die sich mit diesen Energien ergebenden optischen Spektren sind in Abb. 2 im Vergleich zu experimentellen Spektren (Vulto *et al.* 1998) gezeigt. Die beste Übereinstimmung mit dem Experiment wird für das Absorptionsspektrum (linke Abb.) erreicht. Die Breite des Spektrums und die 3 Subbanden werden sehr gut wiedergegeben. Auch das Spektrum des Lineardichroismus (Bildmitte) zeigt qualitative Übereinstimmung mit dem Experiment, während im Falle des Zirkulardichroismus lediglich 2 der 5 Subbanden aus Theorie und Experiment übereinstimmen.

Die hier gezeigte parameterfreie Berechnung [1] der optischen Spektren eines Pigment-Proteinkomplexes stellt ein Novum in der Photosyntheseliteratur dar. In Zukunft sind genauere quantenchemische Berechnungen zu den angeregten Zuständen der Pigmente und deren Coulomb-Kopplungen geplant und die Anwendung der entwickelten Berechnungsmethode auf größere Systeme.

Die Größe der Systeme (bis zu 96 Chlorophyll *a* Moleküle) und die geplante Einbeziehung von Korrelationseffekten in der Berechnung der angeregten Zustände erfordern die Nutzung eines Hochleistungsrechners.

1. A. Abduraman, M. E. Madjet, J. Adolphs, and Th. Renger: Calculation of optical spectra of pigment-protein complexes based on ab-initio/electrostatic computations of site energies (in preparation).

Theoretische Untersuchungen zur Aufklärung des Reaktionsmechanismus und der Kinetik der NO_x-Reduktion am Eisen-Zeolith-Katalysator

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Dr. h.c. Frerich Keil

Beantragende Institution: Technische Universität Hamburg-Harburg

Mitarbeiter: Dipl.-Ing. Andreas Heyden, Dipl.-Ing. Niels Hansen

Kooperationspartner: Prof. Dr. Alex T. Bell, UC Berkeley, USA

Förderung: Haushalt

Die Reduktion von Distickstoffmonoxide (Lachgas) ist durch den hohen Treibhausgaseffekt von N_2O ein wichtiges ökologisches Problem. Die spezifische Wirkung von N_2O auf den Treibhauseffekt ist ca. 300 mal stärker als die von Kohlendioxid. Der Eisenzeolithkatalysator, Fe-ZSM-5, ist ein aktiver Katalysator für die stoichiometrische Zerlegung von N_2O in N_2 und O_2 . Die Uhde GmbH setzt im Rahmen ihres EnviNO_x-Verfahrens den Fe-ZSM-5 Katalysator zur Lachgasreduktion von Abgasen einer Salpetersäureanlage seit 2003 in Linz, Österreich, ein.

Es wurde gezeigt, dass sich während der Zerlegung von N_2O in Fe-ZSM-5 eine sehr aktive Sauerstoffspezies bildet (alpha-Sauerstoff), mit der organische Verbindungen wie Benzol selektiv direkt oxidiert werden können. Der Zustand von Eisen in der Zeolithporenstruktur und der Reaktionsmechanismus ist trotz umfangreicher experimenteller und theoretischer Arbeiten bisher nicht aufgeklärt.

In diesem Projekt wird der Reaktionsmechanismus und die Kinetik der N_2O Reduktion und der NO unterstützenden N_2O Reduktion am Fe-ZSM-5 Katalysator untersucht. Hierbei soll insbesondere auch der Zustand und die Nuklearität des aktiven Eisens in der Zeolithporenstruktur bestimmt werden. Zur Validierung theoretischer Ergebnisse wird eng mit der experimentellen Gruppe von Professor Dr. Bell, UC Berkeley, USA, zusammengearbeitet. Die N_2O Zerlegung wurde hierfür auf mononuklearen Eisenoxid und -hydroxid Zentren mittels quantenchemischer Dichtefunktionalmethoden untersucht. Es stellte sich heraus, dass kleinste Wassermengen im ppb bis ppm Bereich einen grossen Einfluss auf die Katalysatoroberfläche in Fe-ZSM-5 haben. Wasserspuren können bei einer Temperatur von 600 K das aktive Eisenoxidzentrum durch Bildung von Eisenhydroxid vergiften. Bei einer Temperatur von 700 K desorbiert dieses Wasser wieder und der Katalysator wird aktiv für die N_2O Zerlegung. Durch unterschiedliche Wassermengen im Reaktionssystem konnten die sehr stark schwankenden kinetische Daten verschiedener Forschergruppen in der Literatur erklärt werden. Eine perfekte Korrelation zwischen Wassergehalt und experimentellen Daten der Aktivierungsenergie und des präexponentiellen Faktors der N_2O Zerlegung konnte nur aus theoretischen DFT Daten hergeleitet werden. Figur 1 zeigt den Logarithmus des präexponentiellen Faktors über die scheinbare Aktivierungsenergie für die Reaktionsrate der N_2O Zerlegung. Die experimentellen Daten unterschiedlicher Forschungsgruppen fallen auf die theoretisch bestimmte Linie. Die durchgezogene Linie zeigt den theoretischen Zusammenhang für unterschiedliche Wassermengen im Reaktionssystem.

Es wurde ein Reaktionsmechanismus basierend auf mononuklearem Eisen und mit kinetischen Daten aus den DFT Rechnungen entwickelt, der verschiedene experimentelle Versuche im instationären wie stationärem Zustand reproduzieren kann. Mononukleares Eisen scheint das aktive Zentrum in Fe-ZSM-5 zu sein. Weiter konnte gezeigt werden, dass die O_2 Desorption unter stationären Bedingungen nicht, wie von vielen Forschergruppen postuliert, den geschwindigkeitsbestimmenden Schritt darstellt. Die eigentliche N_2O Zerlegung ist der langsamste Schritt im Reaktionsmechanismus. Figur 2 zeigt den simulierten O_2 Desorptionsverlauf mit steigender Temperatur (nur auf DFT Daten basierend) und die experimentellen Daten von Kiwi-Minsker et al.. Obwohl kein Fittparameter benutzt wurde, sind Peaktemperatur und O_2 Konzentrationsverlauf sehr ähnlich.

Schließlich wurden im Rahmen des Projektes Methoden zur effizienten Bestimmung von Reaktionspfaden und Übergangsstrukturen wie die "Growing String Method" und die "improved Dimer Method" entwickelt und angewandt. Nur durch die Entwicklung dieser Methoden ist es möglich geworden, das Katalysatorsystem für ein grosses Reaktionsnetzwerk systematisch und effizient zu untersuchen und den Reaktionsmechanismus für die N_2O Zerlegung in Fe-ZSM-5 zu bestimmen.

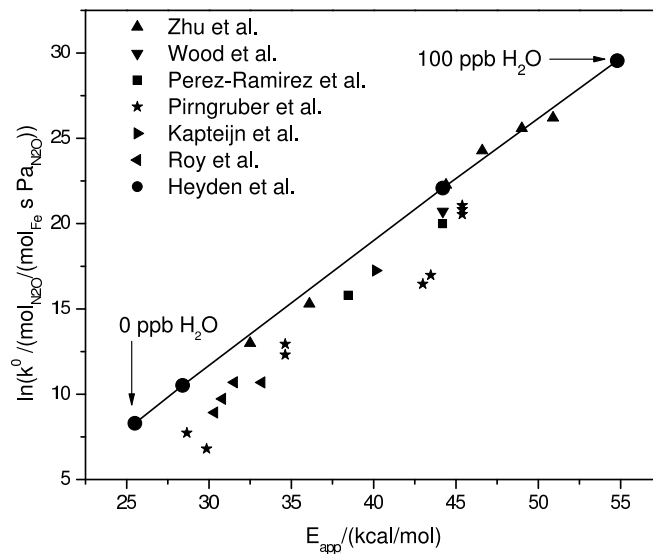


Abbildung 1: Dargestellt ist der Logarithmus verschiedener, experimentell oder theoretisch bestimmter, scheinbarer präexponentieller Faktoren der Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten über die scheinbare Aktivierungsenergie

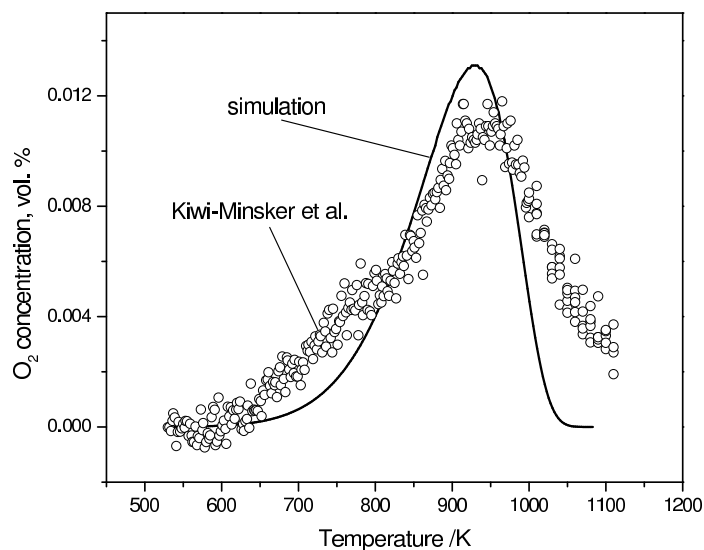


Abbildung 2: Experimentelle und theoretisch berechnete Sauerstoff TPD (Temperature-Programmed-Desorption) von Fe-ZSM-5, nachdem N_2O auf dem Katalysator zerlegt wurde (523 K) und Wasser irreversibel auf dem Katalysator adsorbiert ist. Kein Fittparameter wurde verwendet, um die experimentellen Daten von Kiwi-Minsker et al. zu reproduzieren.

1. Heyden, A., Bell, A. T., Keil, F. J., "Efficient methods for finding transition states in chemical reactions: Comparison of improved dimer method and partitioned rational function optimization method", submitted to the Journal of Chemical Physics.
2. Heyden, A., Bell, A. T., Keil, F. J., "Kinetic modeling of nitrous oxide decomposition on Fe-ZSM-5 based on parameters obtained from first-principles calculations", Journal of Catalysis, in press.
3. Heyden, A., Peters, B., Bell, A. T., Keil, F. J., "Comprehensive DFT study of nitrous oxide decomposition over Fe-ZSM-5", Journal of Physical Chemistry B, 109, 1857 (2005).
4. Peters, B., Heyden, A., Bell, A. T., Chakraborty, A., "A growing string method for determining transition states: Comparison to the nudged elastic band and string methods", Journal of Chemical Physics, 120, 7877 (2004).

Simulation der Chemisorption von H₂O und Biomolekülen auf Titandioxid

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Walter Langel

Beantragende Institution: Institut für Chemie und Biochemie, Universität Greifswald

Mitarbeiter: Dipl.-Biol. Oliver Bronkalla

Förderung: DFG

Einführung

Titanimplantate werden in der Medizin intensiv genutzt, da sie sowohl sehr gut biokompatibel sind als auch hervorragende mechanische Eigenschaften haben. Ihre Oberfläche überzieht sich an Luft mit einer Oxidschicht von etwa 20-30 Å Dicke. Kristallines Titandioxid kommt in der Natur in drei verschiedenen Strukturen vor (Anatas, Rutil und Brookit) und ist nicht nur auf Implantatoberflächen, sondern auch als Zusatz zu Farben, Papier und Kosmetika, als Katalysator und als Photokatalysator von Bedeutung. Kenntnisse der Wechselwirkung oxidierter und hydroxylierter Titandioxidoberflächen mit biologisch interessanten Molekülen, insbesondere mit Aminosäuren, können zu einem besseren Verständnis des Anwachsens von Gewebe auf Implantaten beitragen. Letzteres ist essentiell für deren Verträglichkeit.

Die Oberflächen von Titandioxid werden intensiv experimentell und theoretisch untersucht. Sie sind nicht eben auf einer atomaren Längenskala, wie etwa die Steinsalz-(100) Oberfläche, sondern zeichnen sich durch Reihen von sogenannten Brückensauerstoffatomen aus, die jeweils an zwei darunterliegende Titanatome der Oberfläche gebunden sind. Eine solche Struktur kann sich an der Oberfläche verzerren, d.h. relaxieren, da die Oberflächenatome weniger stark gebunden sind als allseitig von anderen Atomen umgebene im Kristall.

In Kontakt mit Luft oder einer biologischen Lösung lagert sich an Oxidoberflächen zunächst Wasser an. Dieses kann gespalten und chemisch gebunden oder aber nur physisorbiert werden. Die Adsorption von Aminosäuren auf hydroxyliertem Titandioxid ist der erste Schritt zur Ausbildung einer Grenzschicht zwischen Titandioxidimplantaten und dem biologischen System.

Mit Hilfe der von uns verwendeten *ab initio* Moleküldynamischen Simulation nach dem Car-Parrinello-Verfahren (CPMD) ist eine Simulation von Reaktionen an der Oberfläche von Metalloxiden möglich [1, 2, 3]. Diese Methode bezieht thermische Bewegung ein und ist viel weniger abhängig von den Ausgangskonfigurationen als gängige statische Rechenverfahren. Im Rahmen eines derzeit laufenden DFG-Projekts (DFG La 700/6-1) wurden auf dem HLRN-System Reaktionen an der Oberfläche von Titandioxid untersucht. Frühere Arbeiten am Rutil wurden auf die komplexere, aber auf Titanoberflächen häufigere Anatas-(101)-Oberfläche erweitert.

Ergebnisse

Mit den Simulationen auf dem HLRN-System konnten wir folgende Ergebnisse erzielen ([5]):

- Hydroxylierung der Anatas-Oberfläche ist auch bei 300 K stabil, aber energetisch ungünstiger als Physisorption.
- Die untersuchten Aminosäuren Cystein, Glycin sowie Glutaminsäure adsorbieren stabil mit ihren Karboxylgruppen.
- Cystein kann mit dem deprotonierten Schwefel-Atom an ein Ti binden.

Die Anatas-Schicht wird als ein Gitter aus zwei Lagen modelliert, wobei jede Lage aus 8 Ti- und 16 O-Atomen besteht. Aus dem Rechenverfahren resultiert eine periodische Fortsetzung der Simulationszelle in die drei Raumrichtungen. Im natürlichen System werden die dünnen Oxidschichten durch den Kontakt mit der Unterlage stabilisiert. Dies muss in der Rechnung dadurch nachgeahmt werden, dass einzelne Atome an ihrer Ausgangsposition fixiert werden. Deshalb wurden die inneren 16 Atome, d.h. 8 6-fach koordinierte Ti und 8 3-fach koordinierte O-Atome in z-Richtung auf einen geeigneten Wert fixiert, in x- und y-Richtung ist eine Verschiebung während der Rechnung möglich. Alle anderen Atome

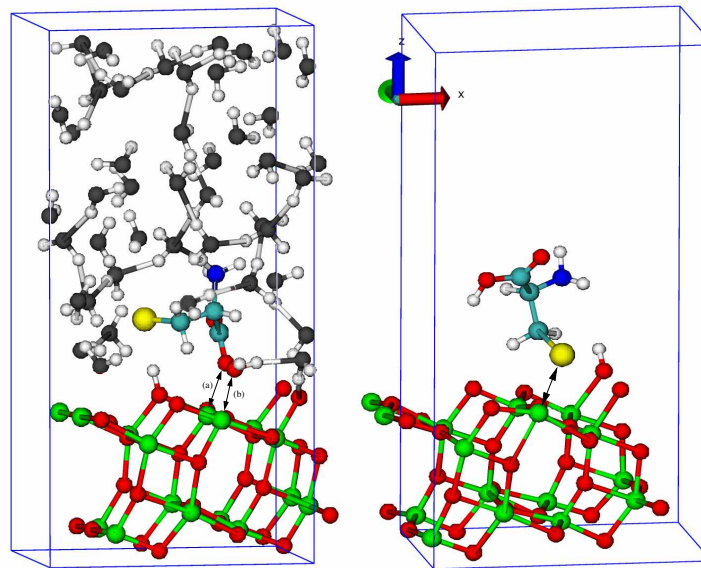


Abbildung 1: Adsorption eines deprotonierten Cysteinmoleküls *links* in wässriger Lösung, mit der Carboxylgruppe gebunden an zwei Ti-Atome, *rechts* im Vakuum, mit einem S-Atom auf einem Ti-Atom.

sind in alle Raumrichtungen freibeweglich. Die Rechnungen zeigten, dass die Chemie der Oberfläche empfindlich davon abhängt, dass ein möglichst großer Teil der Oberflächenatome beweglich ist und die Relaxation der Oberfläche nachgebildet wird. Dies kann nicht mit den gängigen statischen Geometrieoptimierungen erreicht werden, sondern erfordert die aufwendigen ab initio Molekulardynamischen Rechnungen, die Großrechner erfordern. Mit unserer Fixierung wurde eine unrealistische Polarisierung der Oberfläche verhindert, und es konnte eine Temperatur von 300K eingestellt werden, während dessen in früheren Car-Parriello Simulationen bei 100-160K gerechnet werden musste ([4]). In der Regel wurde eine Reaktionszeit von etwa 2ps entsprechend einer Rechenzeit von etwa 2000 CPU-Stunden simuliert.

Für die Simulation wässriger Lösungen wurde der Raum oberhalb des Anatas bis zur Standarddichte mit etwa 45 H₂O-Molekülen aufgefüllt. In Abb. 1 ist eine Ergebniskonfiguration für die Adsorption von Cystein an die Titanoberfläche in einer solchen Lösung dargestellt. Ein O-Atom der Carboxylgruppe ist an einen 5-fach koordiniertes Ti-Atom der Oberfläche gebunden (a), während diese Position über dem Nachbar-Ti vom O-Atom eines Wassermoleküls eingenommen wird (b). Der Abstand Ti-O ist bei beiden Molekülen etwa 2 Å. Diese Konstellation ist auch mit Glycin und Glutaminsäure stabil. Für Cystein ergibt sich eine weitere stabile Konfiguration mit der Bindung des S-Atoms an ein Ti-Atom von 2,4 Å Länge (s. Abb. 1).

1. W. Langel, M. Parrinello: Ab initio molecular dynamics of H₂O adsorbed on solid MgO, Physical Review Letters, 1995.
2. W. Langel: Car-Parrinello simulation of H₂O dissociation on rutile, Surface Science, 2002.
3. W. Langel, L. Menken: Simulation on the interface between titanium oxide and amino acids in solution by first principles MD, Surface Science, 2003.
4. A. Tilocca, A. Selloni: Structure and Reactivity of Water Layers on Defect-Free and Defective Anatase TiO₂(101) Surfaces, J. Phys. Chem. B, 2004.
5. O. Bronkalla, W. Langel: Adsorption of H₂O, Ca, and amino acids on anatase(101): A first principles molecular dynamics study (in Vorbereitung).

Quantenchemische Untersuchungen von kristallinen Festkörpern und Oberflächen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Priv.-Doz. Dr. Thomas Bredow

Beantragende Institution: Theoretische Chemie, Universität Hannover

Mitarbeiter: M.Sc. Mazharul M. Islam, Dr. Volodymyr V. Maslyuk

Kooperationspartner: Prof. Dr. Martin Lerch, Institut für Anorganische Chemie, TU Berlin;
Prof. Dr. Cristian Minot, Laboratoire de Chimie Theorique, Paris

Förderung: DFG

Im Projekt wurden zwei Problemstellungen bearbeitet, die eng mit der Entwicklung neuer Materialien für Brennstoffzellen und Batterien verknüpft sind. Zum einen wurde die Frage behandelt, inwieweit Stickstoffsubstitution die Ionenleitfähigkeit von Zirkondioxid beeinflusst. Zirkondioxid wird technisch als schneller Sauerstoffionenleiter in Brennstoffzellen eingesetzt. Durch die Substitution des zweiwertigen Sauerstoffs durch dreiwertigen Stickstoff wird die Anzahl von Leerstellen im Zirkondioxid erhöht, wodurch die Leitfähigkeit gesteigert werden soll. Nanokomposite aus Lithiumoxid und Boroxid haben eine ungewöhnlich hohe Lithiumionen-Leitfähigkeit gezeigt, die in zukünftigen Batterien ausgenutzt werden soll.

Diese Substanzen wurden von uns quantenchemisch auf atomarem Niveau untersucht. Die Struktur und Stabilität neuartiger Materialien wird in unseren Modellrechnungen bestimmt. Die Modelle beruhen auf der periodischen Anordnung der Atome im Feststoff, wodurch nur ein kleiner Ausschnitt betrachtet werden muss. Die Berechnungen erfolgten auf dem näherungsfreien Dichtefunktionalniveau und mit Hilfe einer halbempirischen Methode. Es wurden die Programme CRYSTAL03 und MSINDO verwendet. Beide Verfahren ließen sich auf den Hochleistungsrechnern des HLRN sehr effizient parallelisieren (Abbildung 1), wodurch die aufwändigen Rechnungen erst innerhalb vertretbarer Zeiträume realisierbar waren. Für das System Stickstoff (N)/Sauerstoff (O)/Zirkon (Zr) wurden die Stabilitäten verschiedener

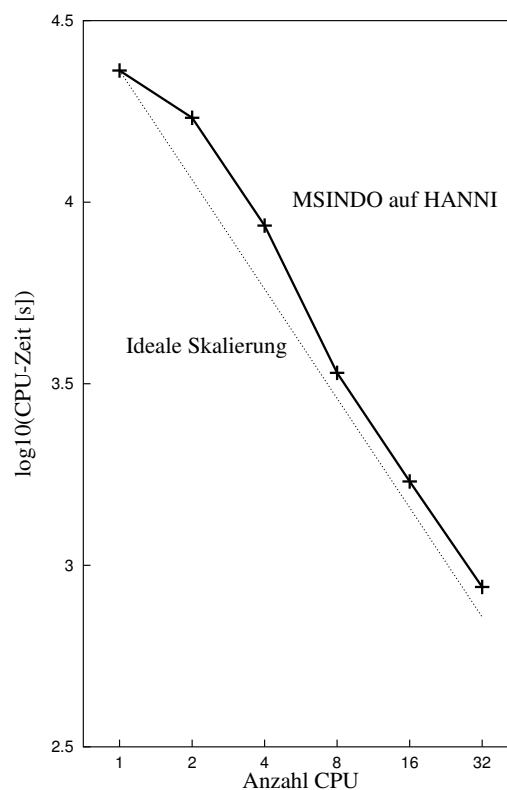


Abbildung 1: Skalierung der Rechenzeit von MSINDO auf dem HLRN-System

Anordnungen der Atome im Gitter berechnet. Es konnte die Frage geklärt werden, ob in der Verbindung Zr_2ON_2 (Abbildung 2) die N- und O-Anionen geordnet oder statistisch verteilt vorliegen [1]. Die

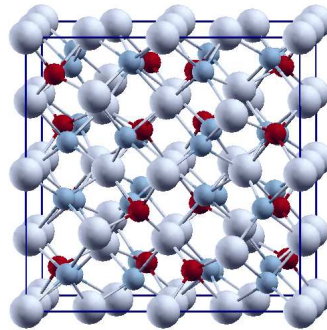


Abbildung 2: Struktur des Zr_2ON_2 -Gitters

quantenchemischen Berechnungen ergaben eine Bevorzugung der statistischen Verteilung.

Als Modellsubstanz für Nanokomposite aus Lithiumoxid (Li_2O) und Boroxid (B_2O_3) wurde das Lithiumtetraborat ($Li_2B_4O_7$, LTB) untersucht [2]. Das LTB besitzt eine komplexe Struktur (Abbildung 3) und war zuvor noch wenig untersucht. Unsere quantenchemischen Arbeiten konnten die thermodynamische Stabilität und die Elektronenstruktur aufklären. In einer weiteren Arbeit wurde die Wanderung

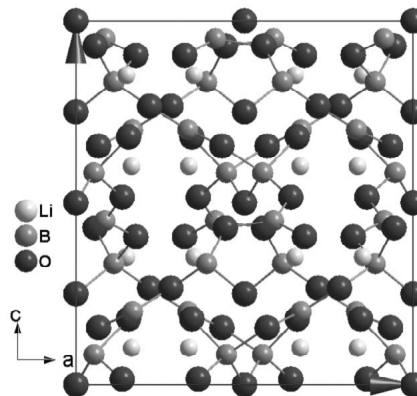


Abbildung 3: Struktur des Lithiumtetraborats

von Li-Ionen von ihren Gitterplätzen auf freie Positionen im Gitter modelliert, um den Mechanismus der Ionenleitfähigkeit dieser Substanz zu untersuchen. Die Aktivierungsenergie ist im LTB höher als im reinen Lithiumoxid. Die Bildung des Lithiumtetraborats in der Zwischenregion von Lithiumoxid- und Boroxid-Nanopartikeln würde daher hemmend auf den Ionentransport wirken und sollte bei der Herstellung vermieden werden.

1. Thomas Bredow, Martin Lerch, Anion Distribution in Zr_2ON_2 , Z. Anorg. Allg. Chem., 2004.
2. Mazharul M. Islam, Volodymyr V. Maslyuk, Thomas Bredow, Christian Minot, Structural and electronic properties of $Li_2B_4O_7$, J. Phys. Chem. B, 2005.

Struktur und Reaktivität von Si- und Ge-Carbenanalogen Molekülen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Dr. Rainer Koch

Beantragende Institution: Institut für Reine und Angewandte Chemie, Carl von Ossietzky Universität Oldenburg

Mitarbeiter: Dr. Rainer Koch, Dipl.-Chem. Thorsten Bruhn

Kooperationspartner: Prof. Dr. Manfred Weidenbruch, Institut für Reine und Angewandte Chemie, Carl von Ossietzky Universität Oldenburg

Förderung: DFG, Universität Oldenburg (Forschungspool - Personalmittel)

Fachliche Beschreibung: Das experimentell beobachtete Verhalten von Silylenen und Germylenen unterscheidet sich grundlegend von dem der homologen Carbene. Auch sind Unterschiede in der Reaktivität der jeweiligen Si- und Ge-Verbindung festzustellen. Ziel des geplanten Vorhabens ist daher die Aufklärung der verschiedenen Reaktionsverhalten durch quantenmechanische Rechnungen mit dichtfunktional- und störungstheoretischen Methoden.

Dazu sollen Unterschiede in den entsprechenden Si-R- und Ge-R-Bindungen mit Hilfe verschiedener Populationsanalysen herausgearbeitet und Reaktionspfade gesucht und aufgeklärt werden.

Ergebnisse: Carbenanaloge Verbindungen mit höheren Gruppe14-Elementen, insbesondere Silylene und Germylene liegen im Gegensatz zu den meisten Carbenen im Singulettzustand vor. Daraus resultiert ein unterschiedliches Reaktionsverhalten, das Gegenstand der Untersuchungen in diesem Projekt war.

Es ist aus den experimentellen Arbeiten von Prof. Weidenbruch bekannt, dass Silylene an konjugierte Dreifachbindungssysteme unter Bildung von bicyclischen Bissilirenen addieren, während Germylene bevorzugt acetylenverbrückte Bisgermaethene bilden. Unsere Rechnungen auf dichtefunktional- und störungstheoretischen Niveau zeigten, dass die Bildung der bicyclischen Verbindung thermodynamisch fast immer bevorzugt ist, sowohl für Silylene als auch für Germylene. Dies widerspricht zunächst dem beobachteten Reaktionsverhalten. Die experimentell beobachtete Bildung des Bisgermaethens ist auf Substituenteneinflüsse zurückzuführen: So führen sehr große sterisch anspruchsvolle Reste (2-tert-Butyl-Phenyl) am Germylen in der Rechnung tatsächlich zu einer Bevorzugung dieser Reaktion. Der mechanistische und thermodynamische Verlauf der beiden Reaktionen ist ähnlich: Alle Reaktionen laufen fast ohne Aktivierungsbarrieren ab, da die Addition des Carbenanalogons stark exotherm ist. Lediglich die bereits erwähnten Substituenten erlauben die Bestimmung eines Übergangszustandes für die Addition an eine Dreifachbindung, mit einer sehr kleinen Barriere von rund 1.5 kJ/mol. Dabei werden geometrische Anordnungen durchlaufen, die beide Produkte möglich machen, so dass letztlich die thermodynamische Stabilität der Produkte über den Verlauf der Reaktion entscheidet.

Im weiteren Verlauf des Projekts wurden verwandte Systeme untersucht: Es galt, die Substituentenabhängigkeit der Stabilität isomerer Si_4R_6 - bzw. Ge_4R_6 -Verbindungen zu ergründen. Für beide gilt, dass mit zunehmendem sterischen Anspruch offenkettige Strukturen gegenüber cyclischen oder bicyclischen bevorzugt werden. Im Falle des Si_4R_6 existieren bei kleinen Gruppen Bindungsdehnungsisomere für die zentrale Brücke, die durch Verwendung unterschiedlicher Orbitale entstehen.

Durch die Reaktivitätsstudien konnten einige überraschende experimentelle Reaktions- und Strukturbefunde erklärt werden, die im Bereich der Grundlagenforschung der Gruppe 14-Chemie liegen. Die Notwendigkeit der Verwendung großer sterisch anspruchsvoller Substituenten erhöht dramatisch die erforderliche Rechenzeit. Zur Durchführung des Projekts war daher ein Höchstleistungsrechner wie das HLRN-System eine essentielle Voraussetzung.

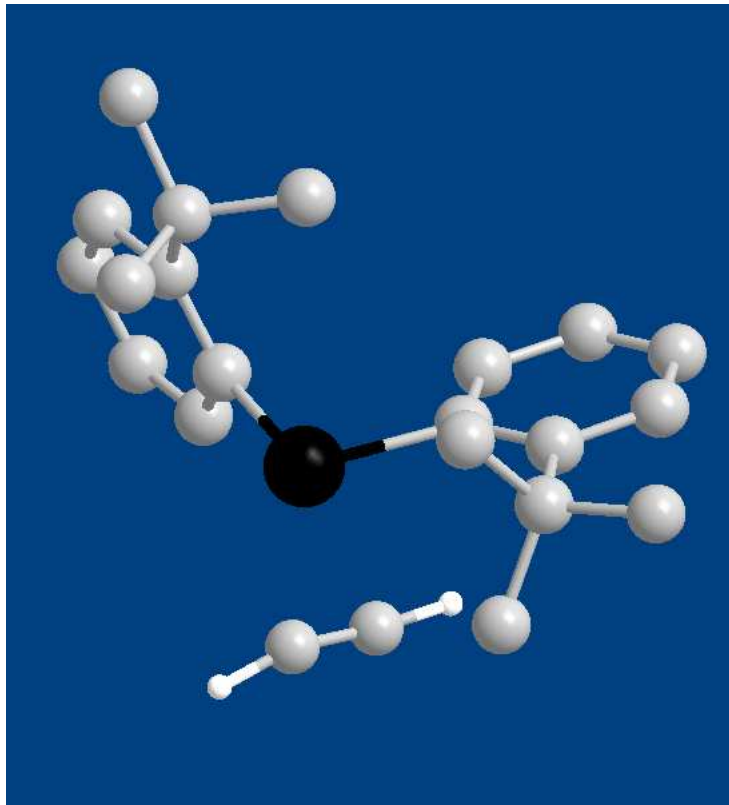


Abbildung 1: Übergangszustand der Addition eines Germylens an eine Dreifachbindung.

1. R. Koch, T. Bruhn, M. Weidenbruch, Silylene and Germylene Additions to 1,3-Diines: Bis(silacyclopropenes) versus Germaethenes Formation, a DFT Study, *Organometallics*, 2004, 23, 1570-1575.
2. R. Koch, T. Bruhn, M. Weidenbruch, Theoretical Group 14 Chemistry. Part2. Si_4R_6 -A Theoretical Approach, *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, 2004, 680, 91-97.
3. R. Koch, T. Bruhn, M. Weidenbruch, Theoretical Group 14 Chemistry. Part3. A DFT Study of Ge_4R_6 , *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, 2005, 714, 109-115.

Ab-Initio-Simulationen zur Stickstofffixierung des Enzyms Nitrogenase

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Peter Blöchl

Beantragende Institution: Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Clausthal

Mitarbeiter: Dr. Johannes Kästner (bis Okt. 04), Dipl.-Phys. Sascha Hemmen

Nitrogenase ist ein Enzym, das für die Versorgung von Organismen mit Stickstoff verantwortlich ist. Dieser ist mit 11% in der Trockenmasse organischer Materie vertreten. Die wesentliche natürliche Quelle von Stickstoff ist unsere Atmosphäre, die zu 78% aus Stickstoff besteht. Um molekularen Stickstoff verwertbar zu machen, muss Nitrogenase eine der stärksten in der Natur vorkommenden Bindungen brechen. Das aktive Zentrum des Enzyms ist ein Molybdän-Eisen-Schwefelcluster, der als komplexester bioanorganischer Katalysator bezeichnet wird. Das Ziel dieser Arbeit ist die Aufklärung der Funktion von Nitrogenase auf der Basis von parameterfreien und hochgenauen quantenmechanischen Simulationen. Auf der Basis umfangreicher Computersimulationen ist es uns gelungen, den in Abbildung 1 dargestellten Reaktionsmechanismus am aktiven Zentrum des Enzyms im Detail auszuarbeiten.

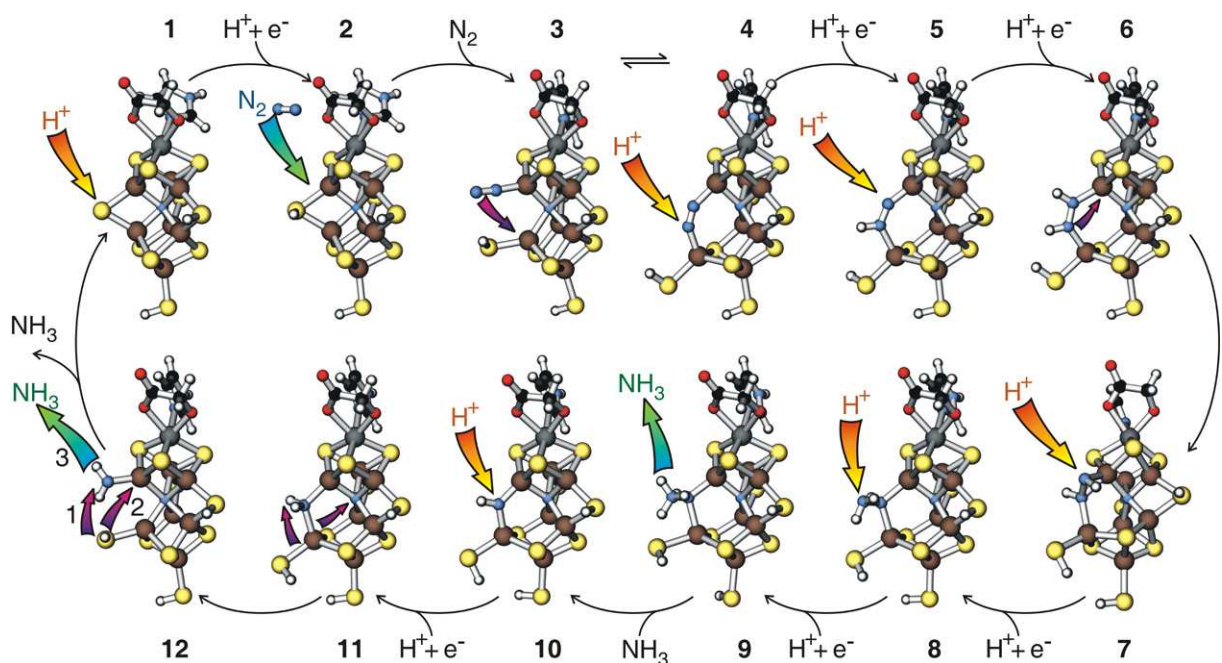


Abbildung 1: Reaktionsmechanismus der Stickstofffixierung der Nitrogenase.

Damit ist ein Durchbruch in einem Forschungsgebiet gelungen, in dem seit der Aufklärung der Kristallstruktur des Proteins vor über 10 Jahren intensiv auf dieses Ziel hingearbeitet wurde. Die dabei aufgedeckten Prinzipien liefern nun eine Richtschnur für die Suche nach chemischen Analoga dieses Enzyms, welche potentiell von direktem Interesse für die chemische Industrie sind. Während das ausgeklügelte Haber-Bosch-Verfahren die großindustrielle Herstellung von Dünger – im wesentlichen eine künstliche Stickstoffquelle – dominiert, erwartet man sich von Nitrogenase-ähnlichen Prozessen einfachere chemische Anlagen, die dann zum Beispiel auch in Drittweltländern einsetzbar sind.

Die Aufklärung dieses komplexen katalytischen Systems liefert darüber hinaus wertvolle Erfahrungen mit mehrzentrigen Katalysatoren, die derzeit noch recht wenig untersucht sind. Die Biologie könnte sich hierbei als nützliche Lehrmeisterin erweisen.

Der Kofaktor bindet das sehr unreaktive Stickstoffmolekül, indem es eine Schwefelbrücke des Clusters aufbricht und damit eine reaktive Bindungsstelle an einem Eisenatom für das Stickstoffmolekül bereitstellt (3). Das Öffnen des Clusterkäfigs war eines der wesentlichen neuen und überraschenden Resultate dieser Arbeit. Durch den Übergang in einen verbrückenden Bindungsmodus (4) wird das Stickstoffmolekül aktiviert und damit für die erste Protonierung, den zeitbestimmenden Schritt der Vakuumreaktion, vorbereitet. Dabei spielt der erst kürzlich von Prof. Einsle (Universität Göttingen) und

Mitarbeitern bestimmte zentrale Stickstoffligand eine wesentliche Rolle, indem er selbst eine Bindung zu dem entsprechenden Eisenatom aufgibt. Relativ komplexe Umlagerungen erleichtern die schrittweise Reduktion, Protonierung und schließlich die Abspaltung des ersten Ammoniakmoleküls. Ein besonders hervorzuhebender Effekt ist bei der Abspaltung des zweiten Ammoniakmoleküls zu beobachten (12-1): Laut Pauling wirkt ein Katalysator, in dem er den energetisch ungünstigsten Zustand stabilisiert. Dies hat jedoch zur Folge, dass sich auch die Reaktionsprodukte, in diesem Fall Ammoniak, nicht leicht vom Katalysator ablösen und letzteren sozusagen vergiften. Im Fall von Nitrogenase wird die Ablösung durch das Schließen der Schwefelbrücke unterstützt, wodurch das Ammoniakmolekül von seinem Bindungspartner, einem Eisenatom, verdrängt wird.

Die auf den Rechnern des HLRN verfügbaren Ressourcen erlaubten es, den Mechanismus global zu untersuchen und die Vielzahl möglicher Seitenreaktionen abzuklären. Nur so ist es möglich geworden, zu einer relativ verlässlichen Aussage über den Mechanismus zu gelangen. Dies unterscheidet sich darüber hinaus grundlegend von bisherigen Arbeiten zu diesem Thema, die sich auf die partielle Untersuchung einzelner Reaktionsschritte beschränken mussten. Es war uns mit zur Zeit noch einer Ausnahme möglich, alle bisherigen Vorschläge zu überprüfen und damit auszuschließen. Neue methodische Entwicklungen, welche nur auf Großrechnern einsetzbar sind, führten zu einer deutlichen Verbesserung der Aussagekraft unserer Simulationen.

Weitere Forschungsarbeiten konzentrieren sich auf den zweitwichtigsten bioanorganischen Komplex des Enzyms, den P-Cluster, und das makromolekulare Wechselspiel der beiden Cluster im Proteinverbund. Hierbei werden moderne Simulationverfahren entwickelt und untersucht, die später auf vielfältige Multiskalenprobleme anwendbar sein werden.

1. J. Schimpl, H.M. Petrilli and P.E. Blöchl: Nitrogen Binding to the FeMo Cofactor of Nitrogenase, *J. Am. Chem. Soc.*, 2003
2. J. Kästner and P.E. Blöchl: Towards Understanding the workings of nitrogenase: A mechanistic model derived from density functional calculations, *ChemPhysChem*, in press
3. A Model for Acetylene Reduction by Nitrogenase Derived from Density Functional Theory J. Kästner and P.E. Blöchl, submitted.

Compliance Matrizen zur Berechnung der Stärke von Wasserstoffbrücken

Verantwortlicher Wissenschaftler: Dr. Jörg Grunenberg

Beantragende Institution: Institut für Organische Chemie, Technische Universität Braunschweig

Mitarbeiter: Cand. Chem. Kai Brandhorst, Cand. Chem. Maike Waldmann

Förderung: DFG

Wasserstoffbrücken spielen eine wichtige Rolle bei der Feinabstimmung der nativen Tertiärstrukturen von Biomolekülen. Eine Abschätzung der unterschiedlichen Beiträge einzelner Brücken zur Stabilisierung der einzigartigen nativen Struktur mit Hilfe von ab initio Compliance Matrizen ist daher zum Beispiel für ein Verständnis des Faltungsprozesses in Proteinen sehr wichtig. In einem ersten Schritt des Projektes sollten die Unterschiede der verschiedenen quantenchemischen Verfahren zur Berechnung der ab initio Compliance Matrix für kleinere Modellsysteme verglichen werden. In späteren Studien können dann die effizientesten Methoden zur Beschreibung von größeren Systemen wie Polypeptiden eingesetzt werden.

Obwohl nicht-kovalente Bindungen viele biochemische Phänomene bestimmen, sind heute immer noch viele Fragen über die Stärke und Ursache von Wasserstoffbrücken offen. Dies liegt zum Teil daran, dass die meisten Untersuchungen indirekter Natur sind. Die unterschiedlichen, indirekten Ansätze führen dazu, dass man im Falle der schwachen C-H...O=C Brücken oder auch der C-H... π -Wechselwirkungen in der Literatur alle möglichen Charakterisierungen - von 'repulsiv' über 'nicht-existent' bis 'stark' - findet. Wie kommt man nun an direkte und eindeutige Informationen über einzelne Wasserstoffbrücken? In einem Gedankenexperiment könnte man über eine 'Atomic Force' Zange eine Kraft auf eine bestimmte H-Brücke einwirken lassen und die resultierende Auslenkung aus der Gleichgewichtslage heraus messen. Mit Hilfe von ab initio Compliance Konstanten kann man solche Experimente im Computer simulieren. Da hierzu jeweils die vollständige Matrix der Energie-Zweit ableitungen quantenchemisch berechnet werden muss, ist der Rechenaufwand enorm. Liegt die Compliance Matrix dann vor, erlaubt sie aber eine direkte und eindeutige Charakterisierung individueller Wasserstoffbrücken auch in mehrfach überbrückten oder vernetzten Systemen.

Im Gegensatz zu den Kraftkonstanten haben die Compliance Konstanten den großen Vorteil, dass sie unabhängig vom gewählten Koordinatensystem sind. Wie alle quantenchemischen Berechnungen sind jedoch auch die Compliance Konstanten von der Qualität der Wellenfunktion oder des Dichtefunktional abhängig. In einem ersten Schritt war deswegen eine Evaluation der verschiedenen quantenchemischen Methoden notwendig. Die Ergebnisse für einen Datensatz aus 50 Dimeren, die über O-H...O, O-H...N, N-H...O oder N-H...N Wasserstoffbrücken miteinander verbunden waren, lassen den Schluss zu, dass sich die aufwendigen störungstheoretischen Rechnungen (MP2) meist schon mit einfacheren DFT Rechnungen reproduzieren lassen. Die Dispersion spielt also oft eine untergeordnete Rolle. Wir konnten auf diese Weise die Stärke der viel diskutierten dritten C-H...O=C Wasserstoffbrücke eindeutig bestimmen (siehe Abbildung 1). Durch den Einsatz von DFT Methoden ist nun auch eine Berechnung größerer Systeme mit über 2000 Basisfunktionen möglich. Abbildung 1 zeigt einen Komplex eines Zuckermoleküls mit einem künstlichen Rezeptor. Auch hier konnte erstmalig die Stärke der umstrittenen C-H... π -Wechselwirkungen mit Hilfe von Compliance Konstanten eindeutig charakterisiert werden.

1. J. Grunenberg, R. Streubel, G. v. Frantzius, W. Marten, J. Chem. Phys. 2003, 119, 165-169.
2. F. Breher, J. Grunenberg, S. C. Lawrence, P. Mountford, H. Rügger, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 2004, 43, 2521.
3. J. Grunenberg, J. Am. Chem. Soc. 2004, 126, 16310.
4. F. Rutz, R. Wilk, T. Kleine-Ostmann; J. Grunenberg, M. Koch, Proceedings of SPIE-The International Society for Optical Engineering 2005, 5727, 12-19.

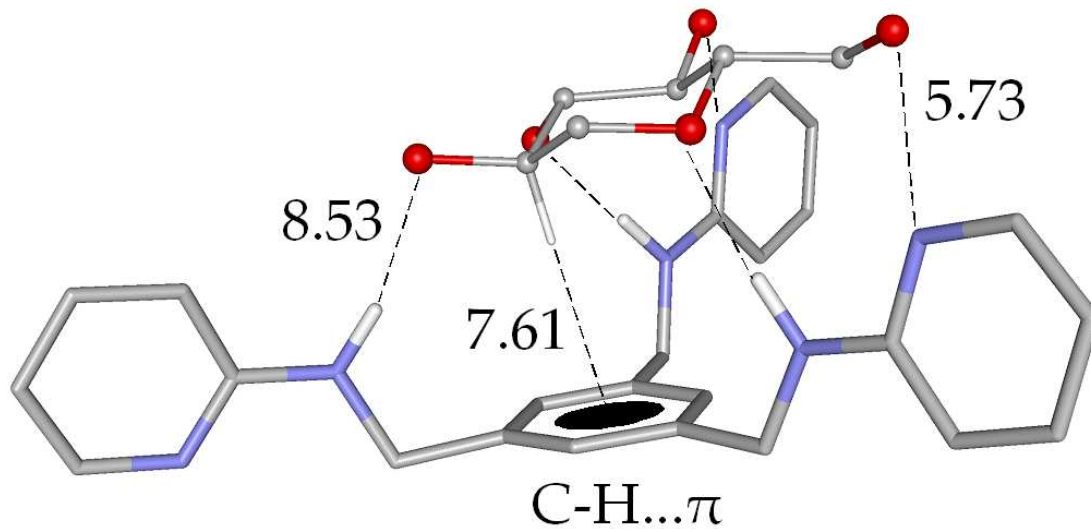


Abbildung 1: DFT Compliance Konstanten in Å/mdyn für ausgewählte Wasserstoffbrücken und die C-H... π -Wechselwirkung in einem Zucker-Rezeptor-Komplex. Ein höherer Wert entspricht einer schwächeren Bindungsstärke. Die C-H... π -Wechselwirkungsstärke liegt im Bereich einer typischen H-Brücke.

Molekulardynamische Untersuchung chemischer Reaktionen in oxidischen Festkörpern

Verantwortlicher Wissenschaftler: Priv.-Doz. Dr. Thomas Bredow

Beantragende Institution: Theoretische Chemie, Universität Hannover

Mitarbeiter: Dr. Nisanth N. Nair

In diesem Projekt wurden drei Themen behandelt, die für die Katalyse umweltrelevanter chemischer Reaktionen von Bedeutung sind. Das erste Teilprojekt befasste sich mit dem Abbau von schädlichem Stickstoffoxid (NO) aus Auto- und Industrieabgasen an den Oberflächen von Vanadiumoxid-Titandioxid (V_2O_5/TiO_2) Mischkatalysatoren. Eine mögliche Struktur des Katalysators auf atomarer Ebene ist in Abbildung 1 dargestellt. Obwohl diese Katalysatoren bereits technisch eingesetzt werden, ist über den

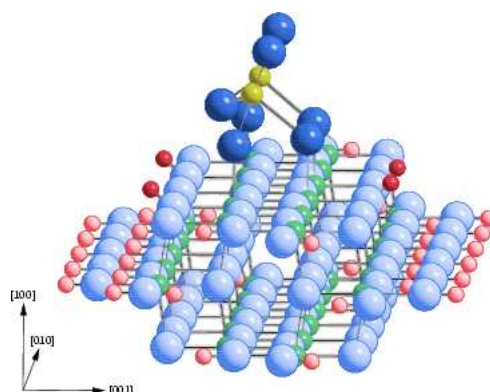


Abbildung 1: Vanadiumoxid auf einer Titandioxidoberfläche

Mechanismus ihrer Bildung und ihre genaue Struktur wenig bekannt. Daher wurde in diesem Teilprojekt die Entstehung katalytisch aktiver V_2O_5/TiO_2 -Spezies quantenchemisch untersucht [1]. Dabei wurde die semiempirische Methode MSINDO und ein darin implementiertes Molekulardynamik-Verfahren verwendet, das die Beschreibung chemischer Prozesse bei realistischen Temperaturen erlaubt. Herkömmliche quantenchemische Berechnungen entsprechen einer Temperatur von 0 K. Der hohe Rechenaufwand molekuldynamischer Simulationen wird durch die immens hohe Anzahl von Zeitschritten verursacht. Für alle Teilprojekte war die Verwendung der Hochleistungsrechner des HLRN daher von entscheidender Bedeutung. Auf herkömmlichen Rechnern hätten die Simulationen Monate in Anspruch genommen, statt einiger Tage. Die Eignung des Programms MSINDO zur Verarbeitung auf den Parallelrechnern des HLRN ist bereits im Projekt nic00001 detailliert dokumentiert worden.

Es wurde gefunden [1], dass sich aktive Vanadiumoxid-Spezies nur auf bestimmten Oberflächen von Titandioxid anlagern. Mit den verschiedenen ermittelten Strukturen lassen sich die Resultate früherer experimenteller Untersuchungen erklären.

Titandioxid selbst wird ebenfalls als Katalysator, etwa zur Abwasserreinigung, oder als aktive Substanz selbstreinigender Oberflächen (Lotuseffekt) eingesetzt. Bisher unverstanden ist der Einfluss der Wanderung von immanent vorhandener Sauerstoffleerstellen im Gitter auf chemische Reaktionen, die an der Oberfläche von Titandioxid ablaufen. Aus diesem Grund wurde im zweiten Teilprojekt die Wanderung von Sauerstoffleerstellen vom Inneren des Titandioxids zur Oberfläche molekuldynamisch mit MSINDO untersucht [2]. Es wurde gefunden, dass die Wanderung eines Defekts vom Inneren des Oxids an die Oberfläche sowohl thermodynamisch als auch kinetisch leicht möglich ist, und bei allen betrachteten Reaktionen berücksichtigt werden muss. Dies wird in Abbildung 2 durch ein schematisches Energiediagramm belegt. Die berechneten Aktivierungsenergien für die Wanderung einer Leerstelle zur Oberfläche sind so klein, dass sie bei Raumtemperatur in Bruchteilen von Sekunden stattfinden kann.

Die Oberfläche von Titandioxid ist unter normalen Bedingungen schnell von Wassermolekülen aus der Umgebungsluft bedeckt. Diese können einerseits die wichtigen katalytischen Reaktionen durch Passivierung behindern, andererseits jedoch als aktive Spezies an den Reaktionen teilnehmen. Eine Simulation von Wasserschichten auf der Titandioxidoberfläche kann durch Vergleich mit experimentel-

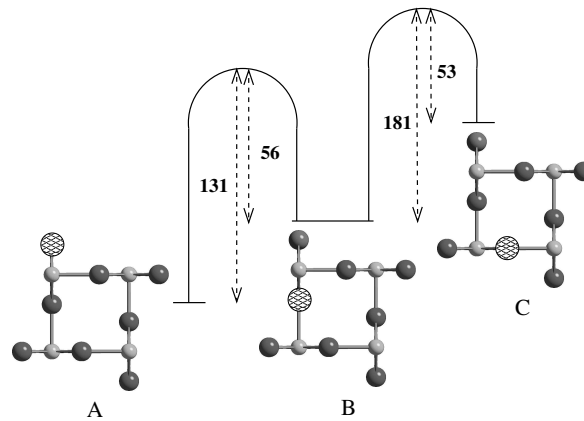


Abbildung 2: Aktivierungsbarrieren für die Wanderung von Sauerstoffleerstellen in Titandioxid

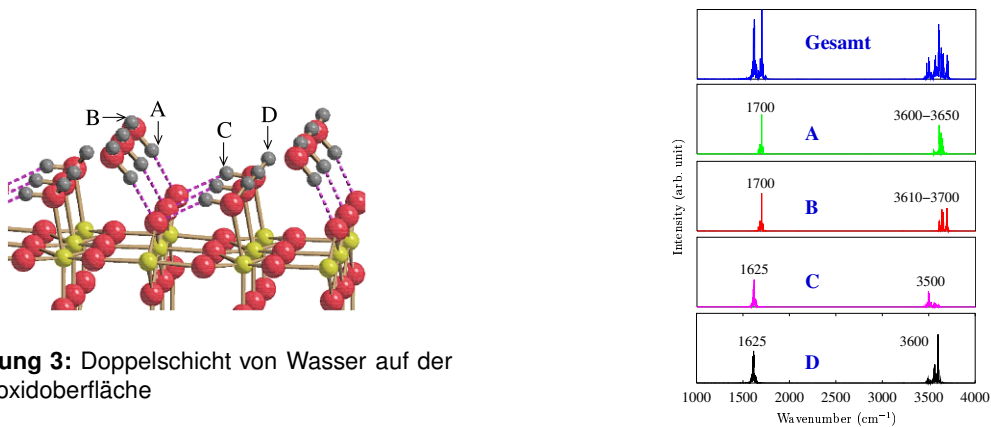


Abbildung 3: Doppelschicht von Wasser auf der Titandioxidoberfläche

Abbildung 4: Berechnetes Schwingungsspektrum

len Spektren aus der Literatur zur Klärung des Sachverhalts beitragen. Solche Simulationen wurden im dritten Teilprojekt durchgeführt. Auch hier wurde die Kombination molekular-dynamischer Techniken und semiempirischer Verfahren (MSINDO) eingesetzt, um die Struktur und das Schwingungsspektrum von Wasserschichten auf Titandioxidoberflächen zu untersuchen [3]. In den Abbildungen 3 und 4 sind die optimierte Struktur einer Doppellage Wasser auf Rutile und das dazugehörige berechnete Schwingungsspektrum dargestellt. Mit der Molekular-dynamik-Technik war es möglich, atomare Beiträge zu den Spektren zu identifizieren, wodurch experimentelle Spektren interpretiert werden konnten.

1. Nisanth N. Nair, Thomas Bredow, Karl Jug, Towards an understanding of the formation of vanadia-titania catalysts, *J. Phys. Chem. B*, 2005.
2. Karl Jug, Nisanth N. Nair, Thomas Bredow, Molecular Dynamics Investigation of Oxygen Vacancy Diffusion in Rutile, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2005.
3. Karl Jug, Nisanth N. Nair, Thomas Bredow, Molecular Dynamics Investigation of Water Adsorption on Rutile Surfaces, *Surf. Sci.*, 2005.

Struktur und Eigenschaften früher Übergangsmetall-Komplexe

Verantwortlicher Wissenschaftler: Dr. Rainer Koch

Beantragende Institution: Institut für Reine und Angewandte Chemie, Carl von Ossietzky Universität Oldenburg

Mitarbeiter: Dr. Rainer Koch, Dipl.-Chem. Eva Bölter

Kooperationspartner: Prof. Dr. Rüdiger Beckhaus, Institut für Reine und Angewandte Chemie, Carl von Ossietzky Universität Oldenburg

Förderung: Universität Oldenburg (Forschungspool - Personalmittel)

Fachliche Beschreibung: Die Komplexe der frühen Übergangsmetalle Titan und Zirkonium spielen eine entscheidende Rolle als Katalysatoren bei industriell wichtigen Polymerisationsprozessen. Das Verständnis von Einflussnahme auf Struktur, Eigenschaften und Reaktivität bildet die Voraussetzung für das Design verbesserter Katalysatorsysteme. Ziel des geplanten Vorhabens ist daher die Aufklärung von Faktoren, die diese Einflussnahme ermöglichen durch quantenmechanische Rechnungen mit in erster Linie dichtefunktionaltheoretischen Methoden.

Dazu sollen am Beispiel von Fulvenkomplexen unterschiedliche Bindungssituationen analysiert, der Einfluss von Substituenten auf die Geometrie sowie spektroskopische Eigenschaften mit Hilfe verschiedener Methoden (time-dependent-Rechnungen, Populationsanalysen) herausgearbeitet und aufgeklärt werden.

Weitere Untersuchungen sind an Ti-Heterocyclen-Systemen vorgesehen. Diese reagieren je nach Ligand zu unterschiedlichen Oligomeren. Das mechanistische Verhalten sowie die magnetischen Eigenschaften einiger Repräsentanten soll aufgeklärt werden.

Ergebnisse: Titan-Fulven-Komplexe zeichnen sich durch feine Unterschiede in der Koordination des "Henkels" des Fulvens an das Zentralatom aus. Unsere dichtefunktionaltheoretischen Rechnungen können diesen Einfluss anhand des Strukturvergleichs zwischen experimentellen und berechneten Daten quantifizieren. Dabei zeigt sich, dass ein Wechsel von einer $\pi\text{-}\eta^5\text{:}\sigma\text{-}\eta^1$ zu einer reinen $\pi\text{-}\eta^6$ -Koordination durch die Verwendung aromatischer anstelle aliphatischer Fulvensubstituenten stattfindet. Auch die Rolle der Substitution von Fulven und Titanocen auf die Struktur und Bindung ist untersucht. Unsere zeitabhängigen Rechnungen der in Lösung farbigen Komplexe haben ergeben, dass sich sowohl die Anregungsenergie, die zur Farbigkeit führt, als auch die bathochrome Verschiebung des Absorptionsmaximums zuverlässig bestimmen lassen. Weiterhin wurde der Ursprung der Farbe als ein Ligand-Metall-Ladungstransfer identifiziert, so dass nicht etwa Elektronen aus den d-Orbitalen des Titans in unbesetzte Orbitale des Fulvens angeregt werden, sondern umgekehrt aus der Bindung des Titans an das exocyclische Fulvenkohlenstoffatom in leere Ti-d-Orbitale gelangen.

Untersuchungen zu den magnetischen Eigenschaften zweikerniger Ti-Heterocyclen-Komplexe haben ergeben, dass v.a. stickstoffhaltige Liganden wie Pyrazin in der Lage sind, hohe Kopplungen zu zeigen, während dies bei O-Heterocyclen nicht der Fall ist. Hier liefern die "broken symmetry"-Rechnungen Kopplungskonstanten um Null.

Durch die Ergebnisse ist ein verbesserter Einblick in die Funktionsweise potentieller Polymerisationskatalysatoren möglich. Auch das Design dieser Systeme kann zielgerichtet auf spezielle Eigenschaften ausgerichtet werden aufgrund des Verständnisses der Bindungsverhältnisse in den Titankomplexen. Die mehrkernigen Titankomplexe, die auch quadratische und rechteckige Anordnungen bilden, sollten sich durch geschickte Beeinflussung der Koordinationsmöglichkeiten zu "molekularen Röhren" stapeln lassen, die für den Transport von Teilchen, aber auch aufgrund der magnetischen Eigenschaften als "Nanomagnete" geeignet erscheinen. Aufgrund der Größe der zu untersuchenden Systeme, speziell der mehrkernigen Komplexe ist ein Hochleistungsrechner unabdingbare Voraussetzung gewesen für die erfolgreiche Durchführung des Vorhabens.

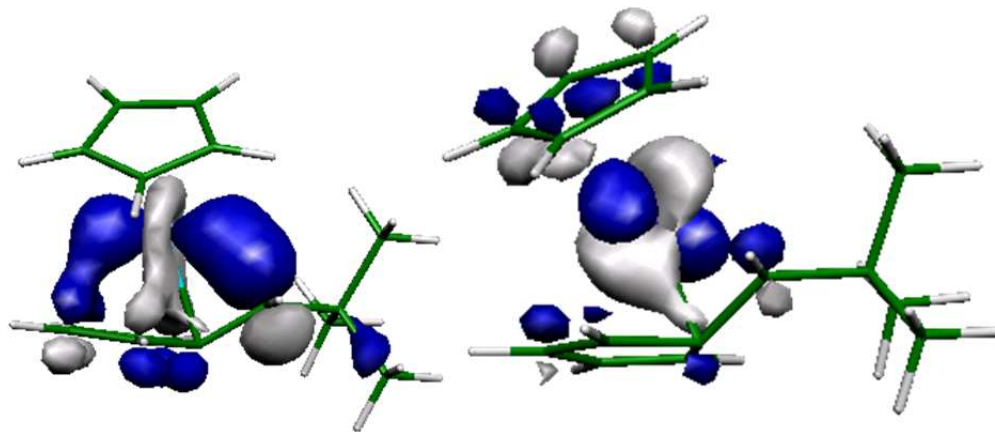


Abbildung 1: NBO-Orbitale des "ligand to metal charge transfer" in einem Titan-Fulven-Komplex

1. R. Koch, E. Bölter, R. Beckhaus, Bonding in titanium fulvene complexes, a DFT Study, Organometallics, 2005.

Globale Geometrieoptimierung molekularer Cluster

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Bernd Hartke

Beantragende Institution: Institut für Physikalische Chemie, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

Mitarbeiter: Dipl.-Phys. Bernhard Bandow

Kooperationspartner: Pacific Northwest National Laboratory, University of Utah, Universität Göttingen, University of Illinois

Förderung: DFG

Theoretische Simulationen chemischer Eigenschaften einzelner, isolierter Moleküle beschränkter Größe sind heutzutage vielfach mit einer Genauigkeit möglich, die quantitative Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten bei ähnlichen Isolationsbedingungen erwarten läßt. Reale chemische Vorgänge finden jedoch in der Regel in einer größeren, heterogenen Umgebung einer Vielzahl wechselwirkender Moleküle statt. Für die effiziente Untersuchung derartiger Systeme befindet sich das theoretische Methodenarsenal erst im Entwicklungsstadium.

Ein erstes, extrem schwieriges Problem ist bereits die Bestimmung der optimalen relativen räumlichen Anordnung einer größeren Anzahl von Molekülen (Cluster). Bereits bei atomaren Clustern wächst die Anzahl möglicher Clusterstrukturen exponentiell mit der Clustergröße, wodurch die Bestimmung der optimalen Clusterstruktur in die Klasse der Optimierungsprobleme größtmöglicher Komplexität fällt (siehe Projekt shc00002). Auf der Basis sogenannter evolutionärer Algorithmen konnten wir jedoch eine globale Optimierungsmethode etablieren, die zumindest in einfachen atomaren Benchmark-Systemen lediglich kubisch mit der Clustergröße skaliert.

Molekulare Cluster sind noch schwieriger zu behandeln, da hier nicht nur die Positionen der Teilchen wichtig sind, sondern auch ihre relative Orientierung. Die Optimierung der relativen Orientierungen bei festgehaltenen Positionen ist ebenfalls eine mit der Clustergröße exponentiell schwieriger werdende Aufgabe. Offensichtlich hängt die Wechselwirkung zwischen zwei Molekülen aber gleichzeitig von ihrem Abstand und ihrer relativen Orientierung ab. Die Bestimmung der optimalen Struktur eines molekularen Clusters erfordert also die simultane Lösung zweier extrem schwieriger, miteinander gekoppelter Optimierungsprobleme.

Wir konnten unsere evolutionären Algorithmen erfolgreich von atomaren auf molekulare Cluster erweitern [1]. Eine Analyse des Algorithmus zeigte, daß er effizient auf einer großen Anzahl von Prozessoren parallelisierbar und damit sehr gut für Höchstleistungsrechner wie am HLRN geeignet sein sollte, was sich in Vorstudien am HLRS Stuttgart bestätigte. Die Effizienz dieser Vorversion wurde jedoch u.a. stark dadurch behindert, daß gut parallelisierte Phasen mit rein seriellen Phasen auf einem einzigen Prozessor abwechselten, sodaß im Mittel etwa die Hälfte der Prozessoren im Leerlauf wartete.

Im vorliegenden HLRN-Projekt konnten einerseits diese seriellen Engpässe durch eine grundlegende Umstrukturierung des Algorithmus beseitigt werden und andererseits das resultierende, erheblich effizientere und flexiblere Programm für eine erste konkrete Anwendung auf Wassercluster genutzt werden. Wasser ist die für biologische Vorgänge wichtigste chemische Verbindung überhaupt, aber vom Verhalten großer Wassermolekülensembles bis hin zur Entwicklung seiner makroskopischen Eigenschaften noch immer nicht voll verstanden. Wassercluster dienen in der Theorie und im Experiment als kontrollierte Modelle für den Einfluß wäßriger Lösungen auf chemische Reaktionen, treten aber auch in der Atmosphärenchemie als entscheidende katalytische Zentren auf (z.B. Ozonabbau). Bei reinen Wasserclustern interessiert die Grundlagenforschung das erste Entstehen von Eisstrukturen beim Anwachsen der Cluster, das bisher noch jenseits der Möglichkeiten theoretischer Simulationen lag. Unsere Anwendungen zielten daher einerseits auf die Strukturen reiner Wassercluster in Abhängigkeit ihrer Größe, andererseits auf Wassercluster um Alkalikationen (wie Natrium, Kalium oder Cäsium), als einfachste Solvatationsmodelle.

Für kleinere Wassercluster im Bereich von 6–30 Molekülen konnten erste Ergebnisse publiziert werden [2]. Dabei wurde das hochgenaue, aber rechnerisch sehr aufwendige TTM2-F-Potential (Dr. Christian Burnham, University of Utah, und Prof. Sotiris Xantheas, Pacific Northwest National Laboratory) verwendet, was nur mit unserer effizienten Implementation auf dem HLRN-System realisierbar ist. Wir konnten demonstrieren, daß häufig verwendete, um einen Faktor von etwa 20 schneller berechenbare Potentiale wie TIP4P zwar bei kleinsten Clustern richtige Strukturen liefern, aber bei größeren Clustern (ab etwa 17 Molekülen) zu qualitativ falschen Strukturen führen. Gleichzeitig konnten wir Infrarot-(IR)-

Schwingungsspektren für unsere Clusterstrukturen simulieren und damit zeigen, daß es experimentell möglich sein sollte, die vermutlich falschen TIP4P-Strukturen von den vermutlich richtigen TTM2-F-Strukturen anhand ihrer IR-Spektren zu unterscheiden. Prof. Dr. Udo Buck (Universität Göttingen) plant zur Zeit die experimentelle Überprüfung dieser Vorhersage, die gleichzeitig die erste selektive Untersuchung in diesem Größenbereich sein wird und ohne theoretische Unterstützung bei der Spektreninterpretation nicht sinnvoll ist. Zur Zeit fahnden wir im Bereich größerer reiner Wassercluster (30–150 Moleküle) nach dem ersten Auftauchen von Eisstrukturmustern im Inneren unserer TTM2-F-Cluster, also nach den ersten Anzeichen eines Übergangs zu Strukturen, die im quasi-unendlich ausgedehnten Festkörper auftreten. Der größte Teil der Produktionsrechnungen dafür steht noch aus, trotzdem zeigen sich bereits jetzt interessante Befunde, wie etwa das erste Auftreten eines Rings aus Wassermolekülen im Inneren unserer besten Struktur für einen Cluster aus 65 Wassermolekülen (Bild 1).

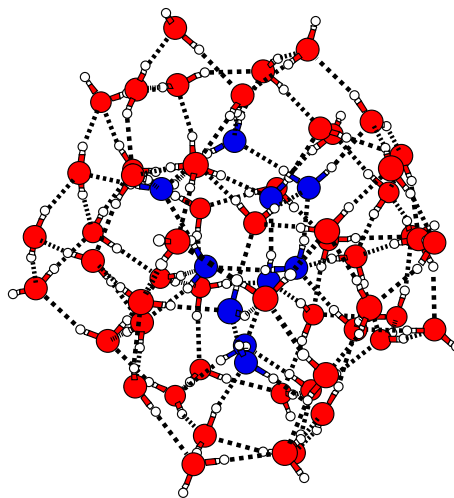


Abbildung 1: Optimaler Cluster aus 65 Wassermolekülen (innere Moleküle blau)

Mit den gleichen Methoden untersuchen wir auch Mikrohydratationscluster von Alkalimetallkationen. Hier konnten wir fundierte Erklärungsvorschläge für den bisher unverstandenen experimentellen Befund liefern, daß Cluster bestimmter Größen („magische Zahlen“) regelmäßig häufiger zu beobachten sind als ihre Nachbarn [3]. Auch hier konnten wir im gesamten Größenbereich von 4 bis 25 Wassermolekülen Vorhersagen über zu erwartende IR-Spektren liefern [4] und belegen, daß bevorzugte Strukturen aus charakteristischen Signaturen in diesen Spektren ablesbar sein sollten, auch wenn Gemische verschiedener Clusterstrukturen vorliegen. Prof. James Lisy (University of Illinois) mißt diese Spektren zur Zeit. Für kleinste Strukturen finden wir hervorragende quantitative Übereinstimmung, was erstmals eine verlässliche Zuordnung dieser Spektren erlaubt. Für größere Cluster arbeitet Prof. Lisy daran, durch Komplexierung mit Argon-Atomen die Cluster weiter abzukühlen und so besser aufgelöste Spektren zu erhalten. Wir sind zuversichtlich, in naher Zukunft aus dieser experimentell-theoretischen Zusammenarbeit erstmals direkte Strukturaussagen über Cluster dieser Systeme im Bereich der magischen Zahlen zu erhalten.

1. B. Hartke, „Global geometry optimization of molecular clusters: TIP4P water“, *Z. Phys. Chem.* 214 (2000) 1251.
2. B. Hartke, „Size-dependent transition from all-surface to molecule-centered structures in pure neutral water clusters“, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 5 (2003) 275.
3. F. Schulz und B. Hartke, „Dodecahedral clathrate structures and magic numbers in alkali cation microhydration clusters“, *Chem. Phys. Chem.* 3 (2002) 98.
4. F. Schulz und B. Hartke, „Structural information on alkali cation microhydration clusters from infrared spectra“, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 5 (2003) 5021.

Siliciumclusterstrukturen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Bernd Hartke

Beantragende Institution: Institut für Physikalische Chemie, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

Mitarbeiter: M.Sc. Adem Tekin

Kooperationspartner: Northwestern University, Indiana, USA; Universität Wien, Österreich

Förderung: DFG

Die Nanotechnologie zielt auf kontrollierte Fabrikation und technische Verwendung von Atom- und Molekülaggregaten mit Abmessungen im Nanometerbereich, durch zunehmende Verkleinerung von Bauteilen. Die Chemie arbeitet schon seit langer Zeit mit kleinen und größeren Molekülen, also auf noch kleineren Längenskalen, und beginnt nun in einigen Bereichen (Supramolekulare Chemie, Clusterchemie und -physik) kontrolliert zu größeren Gebilden vorzustoßen, so daß sich diese beiden Forschungsrichtungen in absehbarer Zeit „treffen“ werden. Strukturen und Eigenschaften kleiner und mittelgroßer Cluster sind weder diejenigen, die man aus einer Extrapolation des Festkörpers zu kleinsten Abmessungen gewinnt, noch diejenigen, die man aus der Betrachtung einzelner Teilchen und kleinster Cluster vorhersagen würde. Stattdessen findet man noch völlig unverstandene Abhängigkeiten von der Clustergröße, insbesondere sogar abrupte Struktur- und Eigenschaftsübergänge [1].

Clusterstrukturen mit lokal minimaler Energie sind gegen kleine äußere Störungen stabil. Durch Wechselwirkung mit der Umgebung können jedoch auch größere Störungen auftreten. Da die Energie dazu tendiert, sich in die Umgebung zu verteilen, ist die in vielen Experimenten am wahrscheinlichsten anzutreffende Struktur das globale Minimum, also das lokale Minimum mit niedrigster Energie. Aufgrund abstrakter Überlegungen und konkreter Beobachtung an kleinen Clustern weiß man jedoch, daß die Anzahl lokaler Minimumstrukturen exponentiell mit der Clustergröße anwächst. Bereits bei Clustern unverfänglich erscheinender Größe muß daher das globale Minimum in einer astronomischen Zahl lokaler Minima gesucht werden. Deshalb wird die theoretische Vorhersage realer Clusterstrukturen bereits dann zu einem rechnerisch extrem aufwendigen Problem, wenn man die Kräfte zwischen den Atomen durch einfache empirische Funktionen modelliert, die es erlauben, die Energie jeder Clusterstruktur in Sekundenbruchteilen zu berechnen. In den einfachst möglichen Fällen benötigt eine hinreichend sichere Vorhersage der globalen Minimumstruktur eines Clusters moderater Größe (etwa 50–100 Atome) auf diesem Niveau etwa einen Tag auf einem Standard-PC, auch unter Verwendung unserer effizienten globalen Optimierungsmethoden mit besonders günstiger Größenskalierung (siehe Projekt shc00001).

Diese empirischen Funktionen geben jedoch die realen Verhältnisse nicht hinreichend genau wieder. Für quantitativ mit dem Experiment vergleichbare Aussagen ist man daher gezwungen, die Energie jeder einzelnen Clusterstruktur exakter zu bestimmen, nämlich auf dem ab-initio-Niveau der Quantenmechanik, durch Lösung der Schrödingergleichung für die Elektronen im Cluster. Dies ist rechnerisch aber um einen Faktor von etwa 100.000 bis 1.000.000 aufwendiger als mit empirischen Funktionen. Im obigen Beispiel würde dadurch die Rechenzeit von einem Tag auf 250 bis 2.500 Jahre anwachsen – mit anderen Worten, globale Strukturoptimierungen von Clustern im interessanten Größenbereich sind auf ab-initio-Niveau prinzipiell utopisch.

Wir konnten daher dieses Problem nicht lösen, aber immerhin umgehen, indem wir die eigentliche globale Strukturoptimierung weiterhin mit empirischen Funktionen durchführen, diese aber im Verlauf der Optimierung an eine kleine, aber ausreichende Anzahl gezielt ausgewählter ab-initio-Rechnungen anpassen. Die prinzipielle Durchführbarkeit dieser Strategie konnten wir u.a. an kleinsten Siliciumclustern (mit 4–10 Atomen) belegen [2].

Silicium ist nach wie vor das wichtigste Material in der Mikroelektronik und -mechanik, und damit auch für die Nanotechnologie hochinteressant. Abmessungen kleinster Bauelemente geraten dabei schon jetzt in die Größenordnungen von Clustern, womit Strukturen und Eigenschaften nicht mehr aus denen ausgedehnter Siliciumkristalle extrapolierbar sind. Siliciumcluster unterschiedlichster Größe werden daher intensiv experimentell und theoretisch untersucht. Gut verstanden sind bisher nur kleinste Cluster bis zu 10 Atomen. Bei etwas größeren Clustern deuten Experimente auf zunächst längliche äußere Formen der Cluster hin, die jedoch bei etwa 25 Atomen abrupt kugelförmig werden (Prof. Martin Jarrold, Northwestern University).

Unterhalb dieses Übergangs konnten wir mit unserer Strategie mehrere neue globale Minimumstrukturen finden [3]. Im Bereich des Übergangs selbst kam uns die internationale Konkurrenz um wenige Monate damit zuvor, einen Strukturübergang zwischen 25 und 26 Atomen mit Dichtefunktionalrechnungen (DFT) zu lokalisieren; wir konnten diese Ergebnisse bestätigen [4]. Gleichzeitig ermöglichten uns die HLRN-Ressourcen jedoch auch die Durchführung von Rechnungen mit expliziter, störungstheoretischer Berücksichtigung der Elektronenkorrelation (MP2). Dabei zeigen sich deutliche, qualitative Unterschiede zwischen DFT und MP2: Während auf DFT-Niveau ab 26 Atomen sphärische Formen bevorzugt werden, favorisiert MP2 dort nach wie vor längliche Formen (Bild 1).

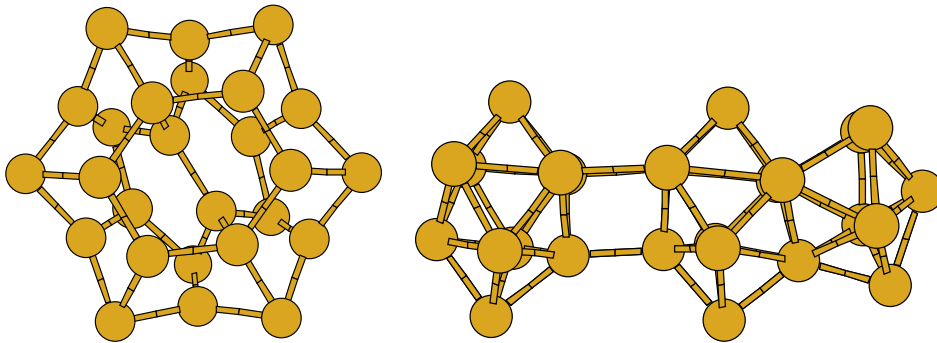


Abbildung 1: Konkurrenz zwischen sphärischen und länglichen Formen bei Si_{26}

Tatsächlich gibt es durchaus auch Diskrepanzen zwischen verschiedenen experimentellen Resultaten. Gleichzeitig zeigen verschiedene Indikatoren in unseren Testrechnungen an kleineren Clustern, daß Siliciumcluster eigentlich nur durch noch aufwendigere Rechenmethoden (CASSCF, MRCI) adäquat und zuverlässig beschreibbar sind. Daher ist es durchaus möglich, daß sowohl die DFT- als auch die MP2-Resultate nicht ausreichend sind. Zur Zeit gibt es also erste Übereinstimmungen zwischen Experiment und Theorie für den ersten Strukturübergang bei Siliciumclustern, gleichzeitig aber auf beiden Seiten auch noch erhebliche Schwierigkeiten.

Daher arbeiten wir zur Zeit mit Prof. Neumaier (Mathematik, Universität Wien) an neuartigen Techniken zur Rejustierung empirischer und semiempirischer Methoden an aufwendigen CASSCF- und MRCI-Rechnungen. In einem weiteren Schritt sollte es dann möglich werden, mit unseren Methoden der globalen Strukturoptimierung und mit größeren Rechnerressourcen unser Verständnis des ersten Strukturübergang bei Siliciumclustern auf eine solide Grundlage zu stellen.

1. B. Hartke: „Structural transitions in clusters“, *Angew. Chem.* 114 (2002) 1534.
2. B. Hartke: „Global geometry optimization of small silicon clusters at the level of density functional theory“, *Theor. Chem. Acc.* 99 (1998) 241.
3. A. Tekin und B. Hartke: „Global geometry optimization of small silicon clusters with empirical potentials and at the DFT level“, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 6 (2004) 503.
4. A. Tekin und B. Hartke: „Global optimization, DFT and MP2 calculations of silicon clusters below, at, and beyond the shape transition region“, *J. Phys. Chem. A*, eingereicht (Februar 2005).

Geo-, Meeres- und Umweltwissenschaften

Auswertung von geophysikalischen Parametern mit dem Satelliteninstrument SCIAMACHY

Verantwortlicher Wissenschaftler: Dr. Marco Vountas

Beantragende Institution: Inst. für Umweltphysik, Universität Bremen

Mitarbeiter: Dr. M. Vountas, Dipl.-Math. W. Lotz, Dr. A. Rozanov, Dr. C. von Savigny

Kooperationspartner: Karlsruhe Research Centre (FZK), Instituto de Astrofísica de Andalucía, CSIC, Uni Karlsruhe, Norwegian Institute for Air Research (NILU), Uni Leeds, Forschungszentrum Jülich, Université Pierre et Marie Curie, DLR Oberpfaffenhofen, University of L'Aquila, Uni Cambridge, Technische Universität Eindhoven

Förderung: DLR, EU, ESA

Das Instrument, SCIAMACHY (Scanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartographY¹), tastet weltraumgestützt die Erdatmosphäre global erstmals abwechselnd in Limb- und in Nadir-Geometrie ab.

Als Limb-Geometrie bezeichnet man diejenige Perspektive des Sensors, die schräg auf den Rand der Atmosphäre blickt. Im Falle von SCIAMACHY beginnt ein sogenannter "Limb-State" bei etwa 3 km Höhe und tastet nacheinander bei Abständen von ebenfalls 3 km 34 Höhenschichten der Erdatmosphäre ab. Man spricht daher auch von "Randabtastungsmessungen". Die Messungen in Nadir-Geometrie sind diejenigen, in denen der Sensor direkt nach unten misst.

Diese technische Besonderheit der abwechselnden Limb-Nadirmessungen wurde mit dem Ziel implementiert, die Höhengauflösung und Verteilung verschiedener Spurengase zu bestimmen (auch in der Troposphäre), welche für eine ganze Reihe wissenschaftlicher Fragestellungen von besonderer Bedeutung ist. Insbesondere die Erfassung und Überwachung troposphärischer Ozon-, Brommonoxid- und Stickstoffdioxid-Konzentrationen eröffnet neue Möglichkeiten im Bereich des Umweltmonitorings. Die Datenprodukte dienen der flächendeckenden und dauerhaften Überwachung von industriellen Emissionen und der Biomassenverbrennung. Die Auswertung von Spurengasen in Limb-Geometrie ist bei der angestrebten Genauigkeit überaus rechenzeitintensiv.

Die resultierenden Spurengasverteilungen² liefern einen entscheidenden Beitrag zur globalen Erfassung der Erdatmosphäre und sind in dieser Güte bisher nicht systematisch erstellt worden. Für ausgesuchte atmosphärische Parameter wird eine Abdeckung angestrebt, die sowohl räumlich wie auch zeitlich so lückenlos wie möglich ist. Die Datenlage im Fall von SCIAMACHY läßt eine globale Abdeckung innerhalb von etwa 6 Tagen zu.

Die beim HLRN abgenommene Rechenleistung dient der (langfristigen) Erstellung von globalen Spurengaskarten und Profilen und damit die — noch vorhandene — Lücke in der Verfügbarkeit von höher-rangigen SCIAMACHY-Datenprodukten schließen. Ferner wird die Validation der operationellen Level 2-Produkte und der Abwicklung von Drittmittelprojekten dienen.

Neben der projektspezifischen Bereitstellung von Daten dient die Rechenleistung daher vor allem der wissenschaftlichen Gemeinde, die auf diese Weise mit (den zur Zeit einzigen) systematisch berechneten Profildaten versorgt wird. Ohne die Kapazitäten des HLRN wäre dies nicht möglich. Zum Zeitpunkt einer potentiellen Inbetriebnahme eines HLRN-II werden aller Voraussicht nach die Rohdaten des Instruments von den verantwortlichen Agenturen reprozessiert worden sein, so daß auch eine Reprozessierung der Profile nötig sein wird.

Ein weiterer wichtiger (zukünftiger) Schritt wird die Einbeziehung von Wolkenparametern sein. Die Spurengasauswertung ist dringend auf die Einbeziehung von Wolkenhöhe (genauer: Höhe der Wolkenoberkante), geometrischer Ausdehnung der Wolke und Wolkenbedeckungsgrad angewiesen. Die Bestimmung dieser Parameter ist ebenfalls sehr rechenzeitintensiv und gut für die Berechnung auf Großrechnerplattformen geeignet.

¹<http://www.sciamachy.de>

²<http://www.iup.uni-bremen.de/scia-arc>

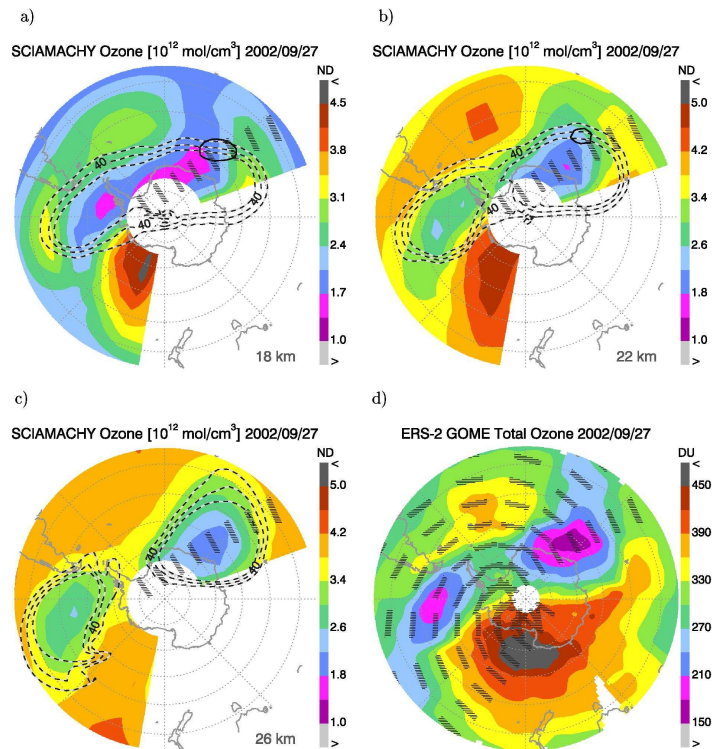


Abbildung 1: Höhenquerschnitte durch die Ozonschicht. Die Höhenschnitte durch die Ozonschicht über der Antarktis in 18, 22, und 26 km Höhe am 27. September 2002, d. h., wenige Tage nach der stratosphärischen Erwärmung. Die gestrichelten Linien entsprechen dem Rand des polaren Wirbels. Die grauen Felder zeigen die Koordinaten der Limb-Messungen von SCIAMACHY. Bild links unten zeigt das Ergebnis der Auswertung eines "klassischen" Nadir-Instruments, wie GOME. Offensichtlich findet man eine sehr gute Übereinstimmung des Wirbelrandes mit den Ozonkonturlinien. Während sich in 22 km und 26 km das Ozonloch in zwei Teile aufgespalten hat, ist eine Zweiteilung in 18 km Höhe nicht erkennbar. Durch Messung lediglich des Gesamtozongehaltes, siehe Abb. links unten, ist diese dynamische Entkopplung unterschiedlicher Höhenschichten experimentell nicht zugänglich gewesen.

1. C. von Savigny, A. Rozanov, H. Bovensmann, K.-U. Eichmann, S. Noel, V. V. Rozanov, B.-M. Sinnhuber, M. Weber, J. P. Burrows: The ozone hole break-up in September 2002 as seen by SCIAMACHY on ENVISAT, J. Atmosph. Sci. revised, in press, 2005
2. A. Rozanov, H. Bovensmann, A. Bracher, S. Hrechanyy, V. Rozanov, M. Sinnhuber, F. Stroh, J.P. Burrows: NO₂ and BrO vertical profile retrieval from SCIAMACHY limb measurements- Sensitivity studies, Adv. Space Res., in press, 2004
3. B. Sierk, A. Richter, A. Rozanov, C. von Savigny, A.M. Schmoltnner, H. Bovensmann, J.P. Burrows, Retrieval and Monitoring of atmospheric trace gas concentrations in nadir and limb geometry using the space-borne SCIAMACHY instrument, Proc. of "5th International Symposium on Advanced Environmental Monitoring", Seoul, Korea, 2004,
4. M. Bruns, S. Buehler, J.P. Burrows, K.-P. Heue, U. Platt, I. Pundt, A. Richter, A. Rozanov, T. Wagner, P. Wang: Retrieval of Profile Information from Airborne Multi Axis UV/visible Skylight Absorption Measurements, Appl. Opt., 2003

Schließung der Panama-Passage: Einfluss auf das globale Klimasystem

Verantwortliche Wissenschaftler: Prof. Dr. Michael Schulz, Dr. Matthias Prange

Beantragende Institution: Fachbereich Geowissenschaften (FB 5), Universität Bremen

Kooperationspartner: IFM-GEOMAR Leibniz-Institut für Meereswissenschaften an der Universität Kiel, AG "Klima- und Umweltphysik" an der Universität Bern

Förderung: DFG-Forschungszentrum "Ozeanränder" (RCOM)

Das Verständnis von Klimaschwankungen in der Erdgeschichte kann wertvolle Hinweise auf Ursachen- und Wirkungsketten kurz- und langfristiger Klimawechsel liefern. Für den Übergang in ein bis heute anhaltendes eiszeitlich-variables Klimaregime wird häufig die Schließung des Isthmus von Panama während des Pliozäns vor 3–5 Millionen Jahren verantwortlich gemacht. Wie die Analyse stabiler Isotope in marinen Sedimentkernen zeigt, führte die Abschnürung des Wassermassenaustausches zwischen tropischem Atlantik und Pazifik zu einer Zunahme des Oberflächensalzgehalts in der Karibik und einer Intensivierung der Tiefenwasserbildung im Nordatlantik. Die Rolle des damit verbundenen ozeanischen Wärmetransports von den Tropen in hohe nördliche Breiten wird kontrovers diskutiert. Während manche Wissenschaftler dahingehend argumentieren, dass erhöhte Wärmetransporte in den Nordatlantik zu einer Verzögerung der nordhemisphärischen Vereisung im Pliozän führten ('Panama-Paradoxon'), vermuten andere, dass die Temperaturerhöhung im Nordatlantik eine Verstärkung des hydrologischen Kreislaufs in hohen nördlichen Breiten einleitete. Die damit verbundenen erhöhten Schneefallraten über den Kontinenten stellten demnach eine notwendige Bedingung für das starke Wachstum nordpolarer Eisschilde vor rund drei Millionen Jahren dar, als ein geringer Neigungswinkel der Erdachse ein Abschmelzen von Schnee- und Einfeldern während relativ kühler Sommermonate verhinderte ('Panama-Hypothese').

Im Rahmen des DFG-finanzierten Projekts wird die Rolle des Panama-Seeweges erstmals mit Hilfe eines komplexen globalen Klimamodells untersucht, indem Klimazustände für verschiedene Tiefen der Panama-Schwelle berechnet werden. Es wird das für IBM-Systeme optimierte Klimamodell CCSM2 (Community Climate System Model Version 2) verwendet, das für Hybrid-Parallelisierung unter Verwendung von MPI und OpenMP konzipiert ist. Das gekoppelte System besteht aus den Modellkomponenten Atmosphäre, Ozean, Land und Meereis, die über ein zentrales Kopplermodul miteinander kommunizieren. Das Erreichen von klimatischen Gleichgewichtszuständen wird mit Hilfe einer asynchronen Integrationstechnik beschleunigt.

Um Klimasimulationen mit CCSM2 mit T31-Auflösung (entspricht einer horizontalen Auflösung von 3.7° für das Atmosphärenraster; die CCSM2-Standardversion besitzt eine Auflösung von 2.8°) durchzuführen, musste zunächst ein neues 'Modell-Tuning' vorgenommen werden. Ein Gleichgewichtskontrolllauf des CCSM2/T31 mit heutigen Antriebsparametern wurde anschließend erfolgreich durchgeführt.

Erste paläoklimatische Ergebnisse aus dem Projekt zeigen, dass die Implementierung einer 750 m tiefen Panama-Passage (entsprechend den paläobathymetrischen Bedingungen vor 5–12 Millionen Jahren) in das Modell einen mittleren Volumentransport von ca. $12 \cdot 10^6 \text{ m}^3/\text{s}$ tropischer, relativ salzärmer Pazifik-Wassermassen in den Atlantik bewirkt, der die Bildung von nordatlantischem Tiefenwasser abschwächt. Die Schließung des Isthmus führt somit zu einer Zunahme von Oberflächensalzgehalten im Nordatlantik, einer Anfachung der Tiefenwasserbildung und infolgedessen zu einer Zunahme des nordwärts gerichteten ozeanischen Wärmetransports.

Das gekoppelte Klimamodell CCSM2 erlaubt erstmals eine Untersuchung der dynamischen Antwort der Atmosphäre, die dabei helfen kann, die 'Panama-Hypothese' physikalisch zu bewerten. So zeigt sich im Modell, dass arktische und subarktische Temperaturen infolge der Panama-Schließung über den Kontinenten großräumig ansteigen (siehe Abbildung 1, links). Damit verbunden ist eine Zunahme der winterlichen Schneefallrate um ca. 10% über weiten Teilen Sibiriens und sogar um mehr als 15% über den östlichen Inseln des Kanadischen Archipels (Abbildung 1, rechts) – ein Befund, der die 'Panama-Hypothese' zu untermauern scheint (erhöhte Schneefallraten als notwendige Bedingung für ein rapides Anwachsen von Eisschilden). Allerdings übersteht der gefallene Schnee nicht die warmen Sommermonate bei den in den Experimenten verwendeten heutigen Erdorbitalparametern, so dass sich keine Eisschilde aufbauen können. Zusätzliche Experimente, in denen astronomische Parameter verwendet werden, die günstig für das Einsetzen einer Eiszeit sind (kalte Sommer), erweisen sich für

einen weiteren Test der 'Panama-Hypothese' als notwendig. Diese Experimente werden derzeit auf dem HLRN-System durchgeführt.

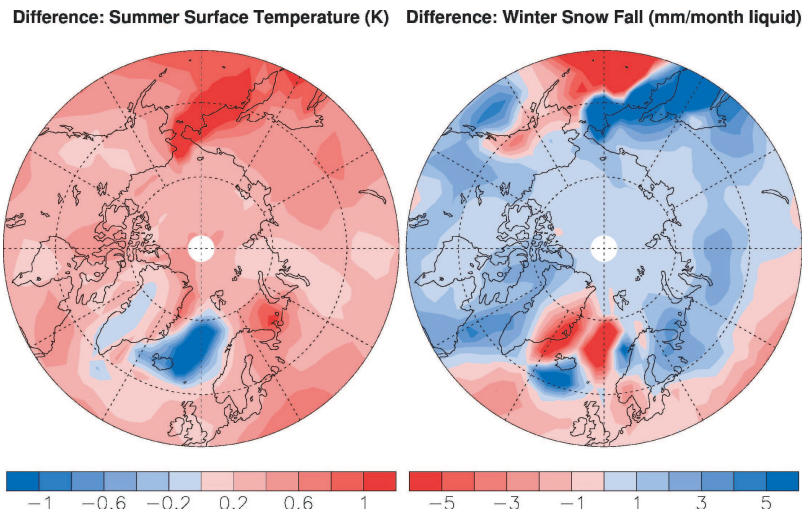


Abbildung 1: Mittlere Differenzen zwischen dem Kontrolllauf mit geschlossenem Isthmus und einem Sensitivitäts-experiment mit 750 m tiefer Panama-Passage. Links: Arktische und subarktische Oberflächentemperaturen im Sommer (Juli–September). Rechts: Schneefallrate im Winter (Januar–März) als Flüssigwasser-Äquivalent.

Wissenschaftliche Ergebnisse des Projekts wurden bereits in Form von Vorträgen und Postern auf verschiedenen Workshops und Fachtagungen vorgestellt. Veröffentlichungen für Fachzeitschriften sind in Vorbereitung.

1. Prange M, Schulz M: The Community Climate System Model on HLRN: Accelerated Integrations and Paleoclimatic Applications, Vortrag auf dem AWI-BremHLR-HLRN joint Workshop zu 'Current Issues in Atmosphere/Ocean Modeling and Data Assimilation', 10.–11. Mai 2004, Bremerhaven.
2. Prange M, Schulz M: Effects of a Panamanian Seaway in CCSM2, Vortrag auf dem Workshop 'Pliocene Closure of the Panama Gateway and its Effect on Ocean Circulation, Climate and Evolution', 11.–12. Juni 2004, Universität Kiel.
3. Prange M, Schulz M: Pliocene Closure of the Central American Seaway: Effects on the Global Climate System, Poster auf dem 'Ninth Annual CCSM Workshop', 7.–9. Juli 2004, Santa Fe, New Mexico.
4. Schmittner A, 17 Koautoren (Schulz M): Global Impact of the Panamanian Seaway Closure, EOS Transactions 85, 526–528, 2004.

Sensitivitätsstudien mit einem gekoppelten regionalen Klimamodell der Arktis zur Identifizierung der grundlegenden Prozesse für eine realistische Simulation des arktischen Meereises

Verantwortliche Wissenschaftler: Prof. Dr. Dirk Olbers, Dr. Wolfgang Dorn

Beantragende Institution: Institut für Umwelphysik, Fachbereich Physik, Elektro- und Informationstechnik, Universität Bremen

Mitarbeiter: Prof. Dr. Stephan Frickenhaus, Dipl.-Ing. Ines Hebestadt

Kooperationspartner: Alfred Wegener Institute for Polar and Marine Research, Bremerhaven, Germany; Norwegian Meteorological Institute, Oslo, Norway; Swedish Meteorological and Hydrological Institute, Norrköping, Sweden; Naval Postgraduate School, Monterey, California, USA

Förderung: BMBF-Projekt ACSYS II, EU-Projekt GLIMPSE

Die Arktis spielt eine wichtige Rolle im globalen Klimasystem, da einerseits Änderungen in der Arktis, wie der Rückzug grönländischer Gletscher, das Abschmelzen des Packeises oder die reduzierte Tiefenwasserbildung im nördlichen Nordatlantik, globale Auswirkungen haben und andererseits die gegenwärtig größten Änderungen des Klimas in der Arktis beobachtet werden. Auch Treibhausgas-Szenarienrechnungen globaler Klimamodelle zeigen das weltweit größte Klimaänderungssignal in den polaren Breiten der Nordhemisphäre, doch liefern verschiedene Modelle, trotz äquivalenter Rand- und Anfangsbedingungen, teilweise deutlich unterschiedliche Ergebnisse, was das Ausmaß und das regionale Muster dieser Änderungen betrifft.

Eine entscheidende Rolle scheint hierbei das arktische Meereis zu spielen, das wegen seiner aktiven (Schmelzen, Gefrieren) und passiven (Isolation, Strahlungsreflexion) Modifikation des Austausch zwischen Atmosphäre und Ozean ein wichtiger Bestandteil des arktischen Klimasystems ist. Die grundlegenden physikalischen Prozesse für eine realistische Simulation des arktischen Meereises sind allerdings noch nicht ausreichend verstanden, sodass gerade beim Meereis große Modellunterschiede und Abweichungen zu Beobachtungen auftreten. Um diese Prozesse zu identifizieren und in ihrer Bedeutung bewerten zu können, wurde ein gekoppeltes regionales Atmosphären-Ozean-Eis-Modell der Arktis konzipiert, das an seinen seitlichen Rändern mit Beobachtungsdaten angetrieben werden kann, um damit die Simulation realer Klimazustände in für Klimasimulationen hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung zu ermöglichen. Dazu ist ein leistungsfähiges Computersystem notwendig, wie es am HLRN zur Verfügung steht. Das Ziel ist letztlich, zu einer verbesserten, realitätsnäheren Wiedergabe des arktischen Meereises in gekoppelten Klimamodellen zu gelangen. Dies ist eine wichtige Voraussetzung für glaubhafte Simulationen sowohl des gegenwärtigen als auch des zukünftigen arktischen Klimas.

Mit dem gekoppelten regionalen Modell wurden auf dem HLRN-System verschiedene Sensitivitätsstudien durchgeführt, die vor allem zeigen, dass eine realitätsnahe Wiedergabe des sommerlichen Eisrückgangs ganz entscheidend von der zu Beginn der Schmelzperiode vorhandenen Eisdickenverteilung im Modell abhängt. Diese wiederum wird von mehreren Modellparametern beeinflusst, insbesondere von der relativ willkürlichen Wahl einer auch als Rinnenschließungsparameter bezeichneten Referenzdicke H_0 im Eismodell, die im Prinzip das Verhältnis zwischen Breiten- und Tiefenwachstum des Meereises bestimmt und letztlich das thermodynamische Gleichgewicht des Modells verändert. Bei einem kleineren Wert von H_0 (d.h. bei geringerem Tiefenwachstum) ergeben sich im Modell insgesamt geringere Eisdicken. Dadurch wird weniger Energie zum kompletten Schmelzen des Eises im Sommer benötigt, und es kommt zu einem stärkeren Eisrückzug, der am Ende des Sommers seinen Höhepunkt erreicht, sodass dann auch die größten Modellabweichungen auftreten (siehe Abbildung 1).

Ein Vergleich mit beobachteten Eiskonzentrationen und Eisdicken deutet darauf hin, dass die sommerliche Meereisausdehnung im Modell umso realistischer wiedergegeben wird, je näher die simulierten Eisdicken an den Beobachtungen liegen. Allerdings sind Eisdickenmessungen nur spärlich vorhanden, sodass ein detaillierter Vergleich bislang nicht möglich ist und es insgesamt schwer zu entscheiden ist, welche Eisdickenverteilung wirklich als realistisch anzusehen ist.

Darüber hinaus wirkt sich auch die Art der Parametrisierung des Rückstrahlvermögens des Eises, der so genannten Albedo, stark auf das thermodynamische Gleichgewicht und damit auf den sommerlichen Eisrückgang aus, wogegen Variationen der atmosphärischen Wärmeaustauschkoeffizienten und Strömungswiderstandsbeiwerte eher von geringerer Bedeutung für das thermodynamische Gleichge-

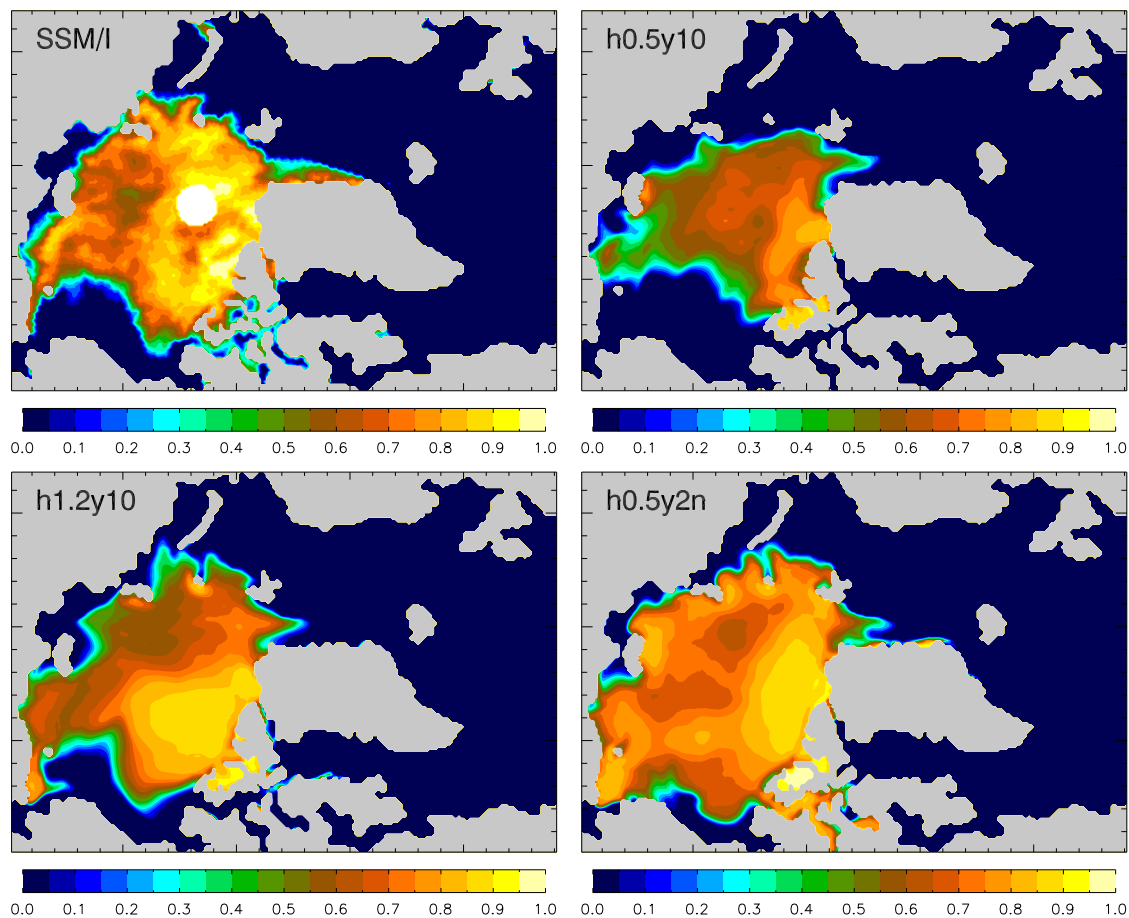


Abbildung 1: Mittlere Eiskonzentrationen im arktischen Ozean im September 1998 aus SSM/I–Satellitendaten (oben links), einer Simulation mit kleinem H_0 , die extrem dünnes Eis aufweist (oben rechts), einer Simulation mit großem H_0 , die deutlich dickeres Eis aufweist (unten links), sowie einer nicht eingeschwungenen Simulation mit kleinem H_0 , die aber etwa doppelt so dickes Eis aufweist, da sie ihren Gleichgewichtszustand noch nicht erreicht hat (unten rechts). Die Bilder dokumentieren indirekt, welchen großen Einfluss die Eisdicken auf den sommerlichen Eisrückzug im Modell haben, und wie stark die simulierten Eisdicken von der Wahl von H_0 , aber auch von einer adäquaten Einschwingzeit abhängen.

wicht, dafür aber von größerer Bedeutung für die atmosphärische Zirkulation sind. Letztere modifiziert jedoch die regionale Eisverteilung durch ihre Auswirkung auf Energietransport und Eisdrift. Rückkopplungen zwischen Atmosphäre und Meereis spielen insgesamt eine wichtige Rolle, wobei nicht nur thermodynamische Prozesse, wie die Eis-Albedo-Rückkoppelung, sondern eben auch dynamische Prozesse im Spiel sind. Solche Rückkopplungen und Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Komponenten des Klimasystems erschweren das Erkennen von Ursachen und Wirkungen. Eine verbesserte Prozessbeschreibung führt nicht automatisch zu einer realistischeren Simulation, sondern muss immer in Verbindung mit anderen Modellparametern betrachtet werden, um zu einem besseren Prozessverständnis und damit zu einem besseren Modell zu gelangen. Diesbezüglich liefert das Projekt wichtige wissenschaftliche Erkenntnisse, die durch Nutzung des HLRN-Systems ermöglicht wurden.

1. W. Dorn, K. Dethloff, A. Rinke, S. Frickenhaus, R. Gerdes, M. Karcher, F. Kauker: Simulation of the Arctic sea-ice anomaly during summer 1998 with a coupled atmosphere–ocean–ice model, *Geophys. Res. Lett.*, eingereicht, 2005.

Towards a Global Ocean Modelling and Data Assimilation System based on the Finite Element Ocean Model FEOM

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. D. Olbers

Beantragende Institution: Institut für Umweltphysik, Fachbereich Physik, Elektro- und Informationstechnik, Universität Bremen

Mitarbeiter: Dr. G. Kivman, Dr. L. Nerger, Dr. S. Danilov, and Dr. J. Schröter

Kooperationspartner: Alfred Wegener Institute for Polar and Marine Research, Bremerhaven, Germany; Model development with Imperial College (London, Dr. C. Pain) and TU Delft (Dr. J. Pietrzak)

Förderung: COM initiative at AWI, CLIVAR project (partly)

The project hbk00015 is the continuation of hbk00010 and is aimed to the development of a data assimilation system based on a finite element ocean circulation model (FEOM). The model gives the first application of the unstructured mesh approach to large-scale climate ocean modelling.

During the first phase of the project (hbk00010), the FEOM performance was tested against other well-established models for the North Atlantic and showed comparable skills. FEOM was able to reproduce many features of the North Atlantic circulation with realism typical for eddy-permitting models showing the consistent North Atlantic Current and Deep Western Boundary Current known to be problematic for standard z-coordinate ocean circulation models.

Neither of current ocean circulation models is perfect on long time scales and should therefore be augmented by data assimilation system that would correct the model trajectory. Thus our other direction of activity was developing the ocean data assimilation system based on FEOM and testing data assimilation methodology. Three different reduced error-subspace Kalman filter algorithms (the so-called SEEK, SEIK and Ensemble Kalman filter) were compared. The parallel filter interface is model independent and can be used for any types of the evolutionary model and observational data. Our experiments for idealized cases as well as for the real North Atlantic show that despite the Ensemble Kalman filter is most widely used in oceanography and meteorology the best results are generally furnished by the SEIK filter.

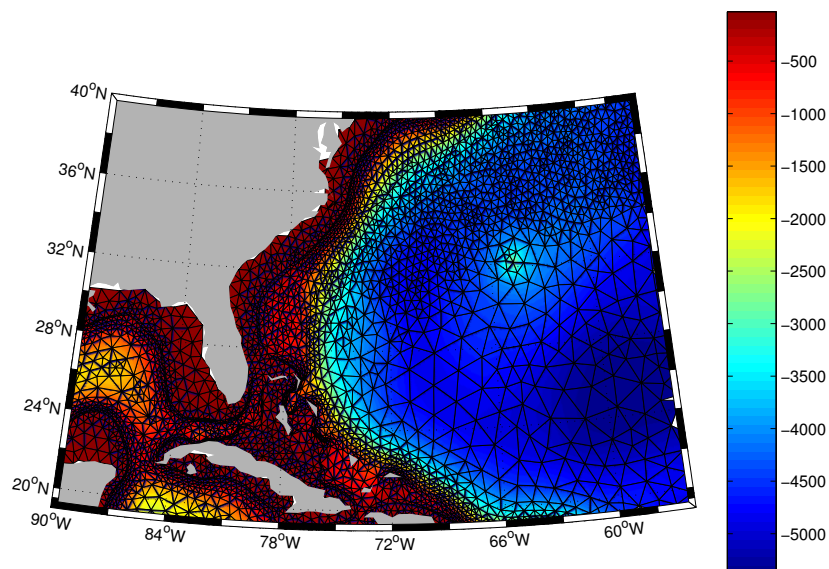


Abbildung 1: A fragment of the North Atlantic discretization used with FEOM illustrating possibilities of finite-element meshes. The underlying bottom topography is given in color.

Our current direction of activity is development of a global version of the model. The advantage of finite-element discretization is that grid size is variable so that one could combine a fine-resolved area of interest with the coarse rest of the ocean. In this way one can get rid of introducing open boundaries which are unphysical and strongly influence many features of the circulation. Figure 1 illustrates possi-

lities of finite-element discretization by presenting a fragment of the North Atlantic mesh superimposed on the bottom topography. Only important regions along coastlines are resolved in fine detail.

One of our current results is that the global version of FEOM is working. Its parameters are still to be adjusted and for this purpose we carry out numerous test runs using a 1.5° global grid. Figure 2 below shows the sea surface height in the spin up phase of the global model. The tasks to be solved in the near future are testing setups with fine-resolved area of interest embedded in a coarse global ocean.

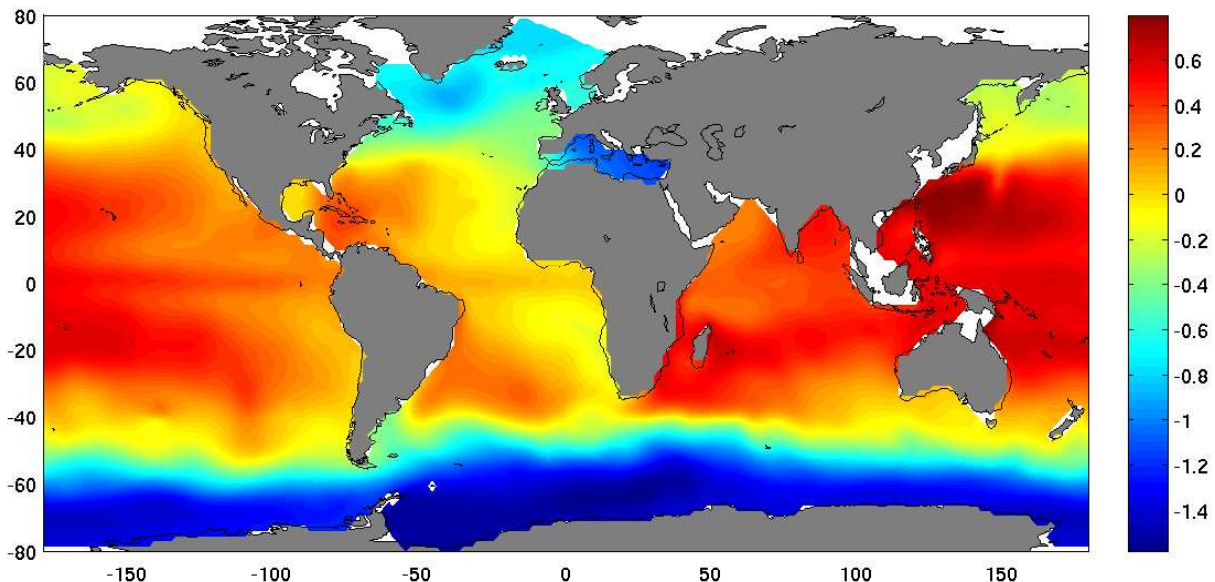


Abbildung 2: Mean sea surface height after one year of integration in the global version of FEOM initialized with WOA01 temperature and salinity and driven by relaxation to monthly mean surface temperature and salinity of WOA01 and wind stress from NCEP reanalyses.

One of the fundamental problems in the ocean modelling is the surface forcing (fluxes of heat and salt between the atmosphere and ocean). Although it determines long-term behaviour of the ocean, it is not known with sufficient accuracy. Forcing fields provided by the weather forecast centers (NCEP and ECMWF) are generally inconsistent with ocean models due to their own and ocean model uncertainties. An attempt to correct these first guess fluxes by assimilating ocean data has been performed in the frame of the ECCO project. We perform computations of the ocean-atmosphere heat flux and explore an impact of assimilating TOPEX/POSEIDON altimetry data onto it. Results are very promising and currently we continue experiments.

The HLRN resources made available through projects hbk00015 and hbk00010 are crucial for our work with data assimilation. Doing it requires simulating an ensemble of oceans trajectories as one should be able to estimate the variability of the ocean state. That is why tasks involving data assimilations are at least a factor of 10 – 30 more CPU time consuming compared to a single prognostic run. They would hardly be possible to us without the HLRN support.

1. Danilov, S., Kivman, G., Schröter, J.: Evaluation of an eddy-permitting finite-element ocean model in the North Atlantic. *Ocean Modelling*, 2005.
2. Nerger, L., Danilov, S., Kivman, G., Hiller, W., Schröter, J.: Data Assimilation with the Ensemble Kalman Filter and the SEIK Filter applied to a Finite Element Model of the North Atlantic, *Journal of marine systems*, submitted, 2004.

High Resolution Modelling of Hydrodynamics and Particle Transport along the Northwest African Coast

Verantwortlicher Wissenschaftler: Dr. Gökay Karakaş

Beantragende Institution: Universität Bremen

Mitarbeiter: Prof. Dr. Reiner Schlitzer

Kooperationspartner: Alfred-Wegener-Institut für Polar und Meeresforschung

Förderung: DFG Forschungszentrum "Ozeanränder" (RCOM)

Particle flux is an important mechanism in the oceanic biogeochemical cycle of carbon owing to its role in transferring atmospheric carbon dioxide into the deep ocean. The upwelling systems along eastern boundary currents are particularly noteworthy, where significant amounts of particulate material are transported to the ocean floor. In this context, the NW African coast deserves a special interest as being one of the major upwelling regions of the world ocean. The region off Northwest Africa has a complex flow dynamics associated with alongshore Canary Current and filaments extending off shore, which spread the region of high productivity stimulated by upwelling. The description of the relation between the physical system and biogeochemistry in this region is required for the determination of carbon budget and fluxes as part of the DFG project, Research Center Ocean Margins (RCOM) at the Bremen University. We aim to numerically study the hydrodynamics of the region and associated cross-shore particle transport by setting up an high resolution ocean model. The key scientific question to answer with the help of numerical experiments is how the variations in sinking velocities affect the 3D distributions of particles in the water column and their lateral and vertical flux patterns. The fate of the particles from different origins is investigated under variable atmospheric forcing mechanisms.

In order to study the effects of the vigorous and highly variable small-scale features on the transport of particulate material, one needs to resolve the dynamics of the flow in the region off Northwest Africa and simulate the energetic flow components, i.e. alongshore flowing Canary Current and eddies, squirts, filaments, and jets extending offshore. For that purpose, we have implemented the Regional Ocean Modeling System (ROMS) ocean circulation model in a configuration with two nested grids. The inner part (see Figure 1 for size of the inner domain) has a resolution of only 2.7 km and is embedded in a much larger overall model domain with 8 km resolution. The HLRN platform allows us to achieve high resolution solutions at reasonable run times. The model realistically reproduces the temporal and spatial variability as well as time-mean features of the flow (see Figure 1 for a snapshot of surface velocities superimposed on sea surface temperature in January).

In agreement with observations, the strength of the Canary Current varies with season, while filaments, vortices and jets are produced all year around. Eddies associated with the filaments are observed to have typical lifetimes of several tens of days. These sub-mesoscale features of the flow are to a great extent compatible with the satellite-derived sea surface temperatures and chlorophyll (MODIS, SeaWiFS). The simulations capture dynamic coastal activity of mesoscale flow reasonably well. Sea surface temperature shows indications of not only upwelling and longshore flow of the Canary Current but also northward extension of warm North Equatorial Counter Current. The simulation estimates for the upwelling intensity, that is the temperature difference between the coastal waters and the offshore waters, upwelling location as well as warm water intrusion south of Cape Timiris are generally in a good agreement with the satellite imagery. The cold filaments of upwelled waters and onshore intrusion of warm waters are noticeable. Offshore flow of narrow, meandering filaments between warm-core anticyclonic and cold-core cyclonic eddies, confrontation of Canary Current and North Equatorial Counter Current waters off Cape Blanc and their westward flow and two cyclonic gyres on the south of Cape Timiris appear to be the most distinguishing features of the surface circulation.

The model was then used to simulate the transport of idealised, non-reactive particles with specified source regions and sinking properties. One application was to test whether shelf erosion could explain the sub-surface particle maxima frequently observed with a particle camera in recent cruises. The model was seeded in the bottom layer over the shelf with particles of two size classes with different sinking velocities (5 and 15 m/d). It was observed that the small-scale dynamics in the region has clear implications on the off-shore transport and the lateral distributions of particles. In the vertical, the model reproduces the observed sub-surface particle abundance maxima, suggesting that these features derive from particle sources on the shelf.

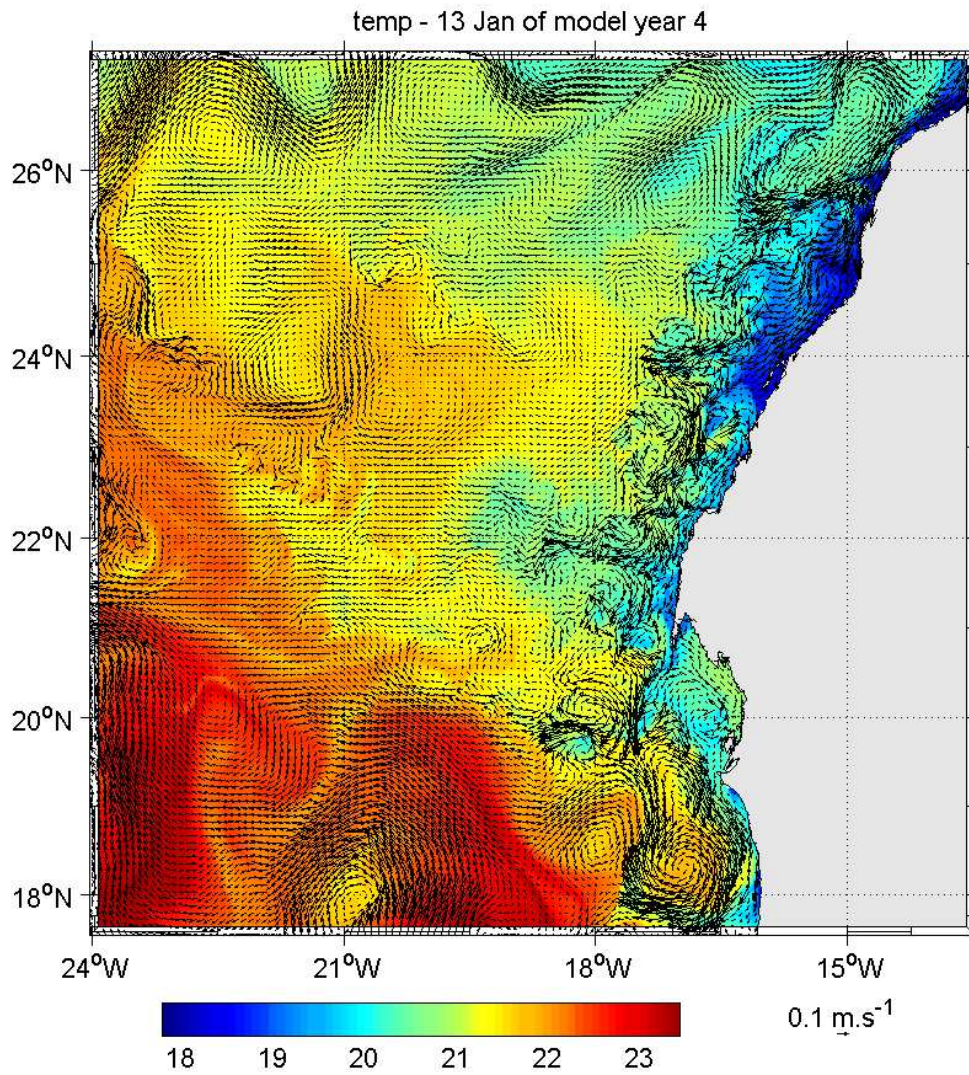


Abbildung 1: A snapshot of surface velocities superimposed on sea surface temperature from the child grid, which is located off Cape Blanc, where upwelling is persistent all year round. High-resolution modelling reveals energetic coastal dynamics by eddies and jets, with significant implications on material fluxes.

1. Karakaş, G., Marchesiello, P., Nowald, N., Schlitzer, R. (2005): Particle Fluxes in the Coastal Upwelling Zone off North-West Africa, Geophysical Research Abstracts, Vol.7, 02283, European Geosciences Union.
2. Karakaş, G., Nowald, N., Marchesiello, P., Blaas, M., Frickenhaus, S., Schlitzer, R.: Modelling Particle Transport across the NW African Shelf, in preparation.

Modellierung des Ökosystems der Ostsee unter Berücksichtigung des Zooplanktons

Verantwortlicher Wissenschaftler: Dr. Thomas Neumann

Beantragende Institution: Leibniz-Institut für Ostseeforschung Warnemünde an der Universität Rostock

Mitarbeiter: Dr. Christine Kremp

Kooperationspartner: Universität Hamburg, Universität Kiel, AWI Bremerhaven

Förderung: BMBF

Das Vorhaben ist ein Teilprojekt des deutschen GLOBEC (Global Ocean Ecosystem Dynamics) Projektes. Ziel des deutschen GLOBEC ist ein besseres Verständnis der Wechselwirkungen zwischen Zooplankton und Fischen unter dem Einfluss physikalischer Prozesse, um damit die prinzipiellen Mechanismen zu erklären, die die hohe Variabilität im Reproduktionserfolg der Fische und in der Produktion der Copepoden bewirken. Dieses Wissen soll die Basis für strategische Modellierungen des Rekrutierungserfolges von Fischen bilden.

Das wissenschaftliche Hauptziel des Teilprojektes besteht in theoretischen Untersuchungen mit Hilfe eines Modells. Experimentelle Simulationen sollen ein genaueres Verständnis der physikalischen Steuerungsprozesse im marinen Nahrungsnetz bis zur Stufe des Zooplanktons (Bottom-up) ermöglichen sowie neue Erkenntnisse zu den Auswirkungen des größenabhängigen Fraßdrucks (Top down) liefern.

Im Verlauf des Projektes wurde ein Stadien auflösendes Copepoden Modell in ein Ökosystem Modell der Ostsee integriert. Das Copepoden Modell beschreibt zwei Modell-Arten mit jeweils 5 Entwicklungsstadien. Die Modell-Arten repräsentieren Lebenszyklen und Verhalten der wichtigsten Copepoden Arten der Ostsee. Ein Beispiel für die Vertikalverteilung des adulten Stadiums des Modell Copepoden Temora und Acartia ist in der Abbildung 1 gezeigt. Copepoden können nicht mehr als passive Variablen model-

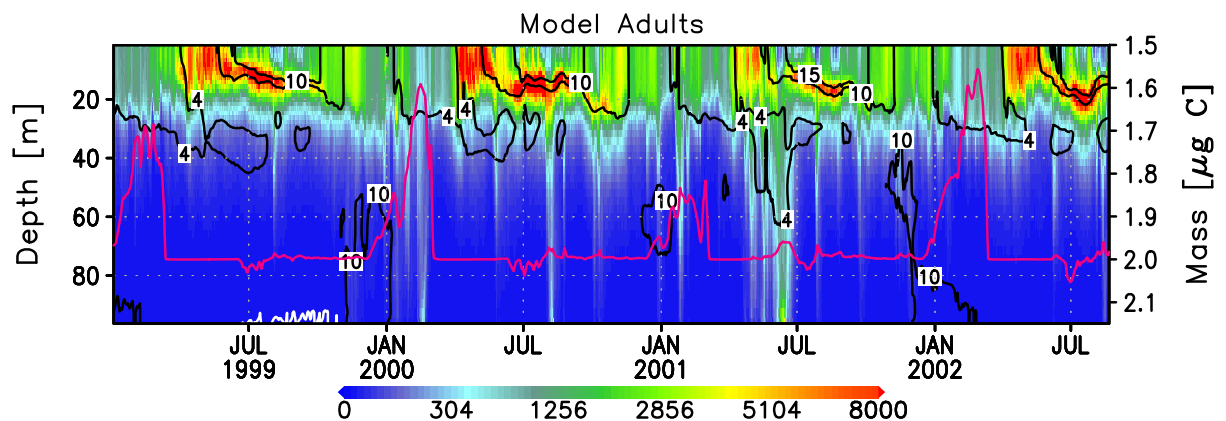


Abbildung 1: Zeitreihe der Vertikalverteilung (Abundanz) des Modell Copepoden Temora und Acartia in der Zentralen Bornholmsee (15.6E 55.3N). Die rote Linie zeigt die individuelle Masse, die schwarzen Linien sind Isolinien der Temperatur.

liert werden. Sie wandern aktiv und besiedeln verschiedene Habitate. Um das Verhalten von Copepoden adäquat widerspiegeln zu können, wurde ein einfacher Algorithmus zur Darstellung von Verhalten entwickelt. Im obigen Beispiel (siehe Abbildung 1) wurde die Vertikalwanderung insbesondere durch Temperatur und Ernährungszustand gesteuert. Beobachtungen haben gezeigt, dass die hier simulierte Copepodenart hohe Temperaturen zu vermeiden versucht. Im Beispiel der Simulation erkennt man, dass die Copepoden sich im Sommer im Bereich bzw. unter der thermischen Sprungschicht aufhalten. Dieses Verteilungsmuster stimmt gut mit den Beobachtungen überein.

Ein weiterer Problemkreis der bisherigen Modellstudien war die Parametrisierung der Mortalität des

Zooplanktons. Neben der natürlichen Mortalität muss auch die Mortalität durch Räuber (z. B. Fische) berücksichtigt werden. Da diese nicht explizit simuliert werden, wird ihre Wirkung geeignet parametrisiert. In Abhängigkeit der Wahl dieser Parametrisierung fallen die Simulationsergebnisse unterschiedlich aus. Die Ergebnisse wurden in [1] publiziert.

Simulationen mit diesen komplexen Ökosystemmodellen sind bezüglich Rechenleistung und Hauptspeicherbedarf sehr anspruchsvoll. Konventionelle Zirkulationsmodelle berechnen mit Temperatur, Salzgehalt und horizontaler Geschwindigkeit in der Regel vier prognostische Variablen. Das Ökosystemmodell mit Copepodenmodell berechnet weitere 26 Zustandsvariablen. Für eine praktikable Durchführung von Modellexperimenten ist ein Höchstleistungsrechenzentrum wie der HLRN wichtige Voraussetzung. Das betrifft sowohl die Bereitstellung von Rechenleistung als auch die Bereitstellung von Infrastruktur für die Datenbearbeitung und Archivierung. Ohne ein leistungsfähiges Rechenzentrum sind die im Projekt durchgeführten und vorgesehenen Simulationen nicht möglich.

1. Th. Neumann and Ch. Kremp: A Model Study with Light-Dependent Mortality Rates of Copepod Stages. *Journal of Marine Systems*, in press, 2005

NAMIBGAS – Untersuchungen zur Dynamik der Sulfideruptionen auf dem Schelf Namibias

Verantwortlicher Wissenschaftler: Dr. Martin Schmidt

Beantragende Institution: Leibniz-Institut für Ostseeforschung Warnemünde an der Universität Rostock

Mitarbeiter: Dr. Hans-Ulrich Lass, Dr. Thomas Neumann

Kooperationspartner: MPI für Mikrobiologie Bremen, Universität Hamburg, NatMIRC Swakopmund, (Namibia)

Förderung: BMBF

NAMIBGAS ist ein Verbundprojekt verschiedener Institutionen und Fachdisziplinen zur Untersuchung von Ausbrüchen toxischer Gase (H₂S) auf dem Schelf vor Namibia. Für die Erklärung dieses alljährlich wiederkehrenden Phänomens gibt es verschiedene Hypothesen. Das Projekt mvk00004 ist die Modellierungskomponente des Vorhabens und zielt auf die Überprüfung der meteorologisch/ozeanographische Hypothese mit Hilfe eines gekoppelten bio-geochemischen Modells. Für den namibischen Schelf wird von einem Zusammenspiel von drei Faktoren ausgegangen, die den Sauerstoffhaushalt bedingen:

- Durch den Unterstrom auf dem Schelf wird permanent Wasser mit geringem Sauerstoff- aber hohem Nährstoffgehalt am Schelfrand südwärts transportiert (siehe Abbildung 1).
- Durch windbedingten Auftrieb an der Küste gelangen viele Nährstoffe in die euphotische Zone, was zu intensiver Primärproduktion und letztlich zu einer hohen Dichte absinkenden Detritus führt. Damit ist eine intensive Sauerstoffzehrung in der Wassersäule und im Sedimentnähe verbunden. Der Ekman-Kompensationsstrom führt zu einer geringen, aber ständigen Belüftung des bodennahen Wassers.
- Bei Schwachwind wird die Ekman-Drift von Oberflächenwasser unterbrochen, die Phytoplankton seewärts vom Schelf weg transportiert. Gleichzeitig erfolgt keine Belüftung des Schelf, so dass sich in Bodennähe anoxische Bedingungen ausbilden können. Mit Wiedereinsetzen des Passats kommt es zu erneutem Auftrieb an der Küste. Dabei kann anoxisches Wasser an die Oberfläche gelangen.

Auf Basis von MOM3-1, [2] [3], wird ein regionales Modell des südlichen Atlantiks, mit erhöhter horizontaler Auflösung über dem Schelf von Namibia, erstellt. Dabei ist es vorteilhaft, dass derselbe Modellcode, der etwa für ein Atlantikmodell geeignet ist, auch mit entsprechend höherer Modellauflösung für regionale Modellierung verwendet werden kann. Die Randwerte werden einem quasioperationellen Lauf des Ecco-Modells, [5], entnommen.

Für die Modellierung von wesentlichen Ökosystemeigenschaften hat es sich als ausreichend erwiesen, die Kreisläufe von Stickstoff und Phosphor durch eine vereinfachte Nahrungskette bestehend aus einer oder mehreren Phytoplankton- und Zooplanktonkomponenten unter Berücksichtigung von Remineralisation und Sedimentation zu betrachten, [1]. In Ökosystemen mit Stickstofflimitierung muss die Stickstofffixierung durch Cyanobakterien als weiterer Prozess berücksichtigt werden, unter anoxischen Bedingungen kann Denitrifizierung stattfinden. Aus den Stoffumsätzen in der Nahrungskette, dem Gasaustausch mit der Atmosphäre sowie den Mineralisierungsprozessen an der Sedimentoberfläche kann eine Sauerstoffbilanz des Ökosystems abgeleitet werden. Die Gleichungen für die Stoffumsätze zwischen den Komponenten des Ökosystems sind mit den dreidimensionalen Transportgleichungen des Zirkulationsmodells gekoppelt. Ein derartiges Ökosystemmodell kann z.B. die Sauerstoffbilanz der Ostsee gut beschreiben und ist insbesondere in der Lage, in Hindcasting-Experimenten das Auftreten und die Intensität anoxischer Bedingungen zu reproduzieren.

Die Simulation umfasst Szenarienrechnungen mit realistischen Windfeldern über einen Zeitraum von mehreren Modelljahren. Zur Modellvalidierung werden verfügbare Satellitendaten und hydrographische Messungen, insbesondere der AHAB-Fahrt 2004, herangezogen. Dabei zeigt sich eine hochgradige Sensibilität der Ergebnisse gegenüber den Eigenschaften der Winddaten, mit denen das Modell angetrieben wird. Nur die satellitengestützten QuikScat-Winddaten, [4], haben eine für die Belange des Projektes hinreichende räumliche Auflösung.

Die Rechnungen sind nur auf einem Rechner von der Leistungsfähigkeit des HLRN-Systems möglich. Für ein Modelljahr werden etwa 1000 CPU-Stunden benötigt, die bei der gegenwärtigen Hardwarekonfiguration und dem laufenden Batchbetrieb zweckmäßig mit 32 CPUs abgefordert werden. Dabei erfolgt die Kommunikation über MPI. Die Infrastruktur des HLRN, insbesondere der große verfügbare Plattenplatz und das globale Filesystem, ermöglicht eine schnelle Nachbereitung des umfangreichen Modelloutputs von etwa 400 GB pro Experiment.

Die ersten Modellergebnisse zeigen, dass die meteorologisch/ozeanographische Hypothese die Ausbildung toxischer Gase auf dem namibischen Schelf erklären kann (siehe Abbildung 1). Das Projekt befindet sich jedoch gegenwärtig in der Bearbeitungsphase und eine abschliessende Beurteilung ist verfrüht. Publikationen sind in Vorbereitung.

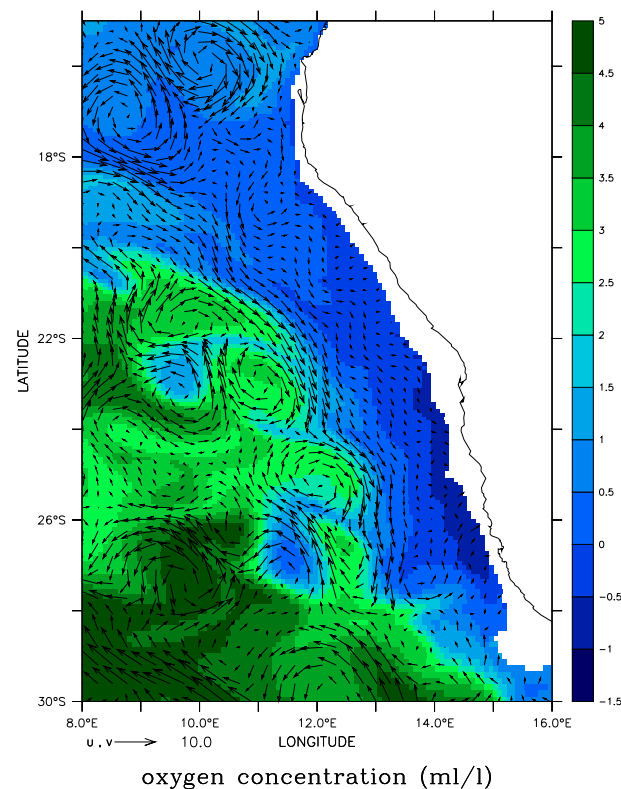


Abbildung 1: Der Transport von hypoxischem Wasser über den namibischen Schelf im September 2003. Die Sauerstoffkonzentration ist farbkodiert, negative Konzentrationen bedeuten Schwefelwasserstoff in der Wassersäule. Das hypoxische Wasser (blau dargestellt) stammt aus einem grossen Pool im Norden. In Regionen auf dem Schelf mit geringer Stromgeschwindigkeit kann die Sauerstoffzehrung gegenüber der Belüftung des bodennahen Wassers überwiegen. Im dargestellten Beispiel korrespondiert das dunkelblaue Gebiet zwischen 27° S und 22° S mit einem Patch aus anoxischem Wasser. Der Austausch zwischen Schelf und offenem Ozean erfolgt über filamentartige Strukturen die sauerstoffhaltiges Wasser auf den Schelf tragen und Wolken anoxischen Wasser vom Schelf exportieren.

1. Wolfgang Fennel and Thomas Neumann. *Introduction to the Modelling of Marine Ecosystems*. Number 72 in Elsevier Oceanographic Series. Elsevier, Amsterdam, 1 edition, 2004.
2. S.M. Griffies, R.C. Pacanowski, M. Schmidt, and V. Balaji. Tracer conservation with an explicit free surface method for z-coordinate ocean models. *Monthly Weather Review*, 129:1081–1098, 2001.
3. R. C. Pacanowski and S. M. Griffies. Mom 3.0 manual. Technical report, Geophysical Fluid Dynamics Laboratory, 2000.
4. QuikScat data are produced by Remote Sensing Systems and sponsored by the NASA Ocean Vector Winds Science Team. Data are available at www.remss.com.
5. The “Ecco”-data are a contribution of the Consortium for Estimating the Circulation and Climate of the Ocean (ECCO) funded by the National Oceanographic Partnership Program.

Messung und Modellierung der Kohlenstoffbilanz in der Arkonasee

Verantwortlicher Wissenschaftler: Dr. B. Schneider

Beantragende Institution: Leibniz-Institut für Ostseeforschung Warnemünde an der Universität Rostock

Mitarbeiter: Dr. B. Schneider, Dr. J. Kuß, Dr. T. Seifert

Kooperationspartner: Meteorologisches Institut, Universität Hamburg, University of Montana, USA

Förderung: DFG

Das Wissen über den Kohlenstoffkreislauf ist für das Verständnis des marinen Ökosystems wichtig. Das gilt auch für kleine Randmeere wie die Ostsee [4]. Während dreier Messkampagnen wurden im Jahr 2003 alle Kompartimente des Kohlenstoffkreislaufs auf einem dichten Stationsnetz, siehe Abb. 1, in der Arkonasee gemessen und an der Zentralstation PF-AK wurde eine Dauerregistrierung zum CO_2 -Austausch zwischen Atmosphäre und Oberflächenwasser durchgeführt. Aus diesen Beobachtungen soll eine verbesserte Parametrisierung für den Gasaustausch abgeleitet werden.

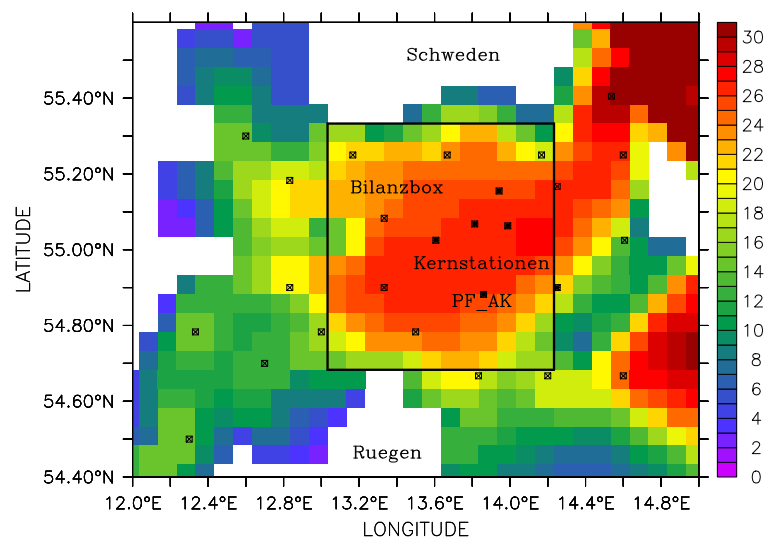


Abbildung 1: Stationsnetz in der Arkonasee (Symbole) über der 3-Seemeilen Modellbathymetrie (Anzahl der Modellschichten in Farbe). Zentralstation PF-AK mit Dauerregistrierung zum CO_2 -Gasaustausch. Der schwarze Rahmen zeigt die Testschnitte für Modelltransporte.

Das Modellierungsprojekt war ein Test für ein neu erstelltes Modul, das den Gesamtkohlenstoff, den pCO_2 -Partialdruck und die Alkalinität im Meerwasser beschreibt. Die Parametrisierung für die CO_2 -Löslichkeit und die Gleichgewichtskonstanten folgt dem Handbuch von Dickson und Goyet [2]. Für den CO_2 -Gasaustausch werden 3 Parametrisierungen nach [1], [3] und [4] bereitgestellt. Die Simulationen wurden mit einem 3-Seemeilen-Modell gerechnet. Der Modellzeitraum umfasst den Jahrgang 2003 mit den 3 Messkampagnen.

Die Abb. 2 zeigt den Verlauf des Modell-Kohlenstoffs im Oberflächenwasser des Arkonabeckens. Die Abweichungen zwischen den verschiedenen Mittelwerten zeigen, dass eine Beschränkung auf die Kernstationen zur Beschreibung der CO_2 -Bilanz im Untersuchungsgebiet nicht ausreichend ist, sondern dass die Einbeziehung aller Messstationen zu einer besseren Abschätzung führt. Das Modell folgt der durch Messungen belegten Änderung von Juli bis September 2003. Das stärkste Jahrgangssignal tritt jedoch mit dem Salzwassereinstrom im Januar auf.

Der Kohlenstoffkreislauf ist durch ein festes Redfieldverhältnis an die Stickstoffumsätze im Ökosystemmodul gekoppelt. Obgleich nur wenige Prozente des Gesamtkohlenstoffs umgesetzt werden, hängt der Partialdruck pCO_2 , der den Gasaustausch mit der Atmosphäre bestimmt, empfindlich von der Entwicklung der Biologie ab. In der Regel tritt vom Frühjahr bis in den Herbst infolge der Algenblüten im

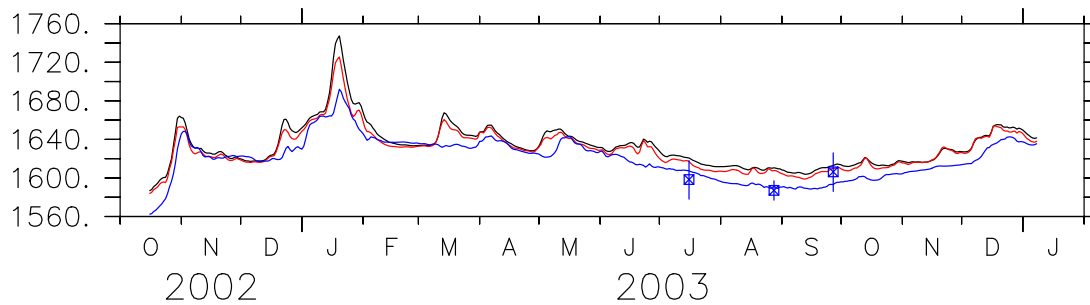


Abbildung 2: Jahresgang des Modell-Kohlenstoffs ($mmol/m^3$) im Oberflächenwasser (0 bis 25 m) im zentralen Arkonabecken (Mittelwerte über Kernstationen blau, alle Stationen rot, Gesamtgebiet schwarz). Blaue Symbole entsprechen den Messungen an den Kernstationen.

Oberflächenwasser eine Untersättigung auf, die zu einer starken CO_2 -Aufnahme führt, während im Winter infolge des Abbaus organischer Substanzen und der verstärkten vertikalen Durchmischung Übersättigung mit CO_2 -Abgabe an die Atmosphäre beobachtet wird. Die Abb. 3 zeigt, dass dieser Jahresgang vom Modell nicht richtig wiedergegeben wird, die CO_2 -Aufnahme im Sommer ist zu gering, im Mittel wird CO_2 an die Atmosphäre abgegeben. Weiterführende Modellexperimente müssen ein variables Redfield-verhältnis zulassen, das die in der Ostsee beobachteten Abweichungen [5] berücksichtigt. Außerdem ist zu prüfen, ob das Modell die regionale Alkalinitätsverteilung, die durch die Flusswassereinträge gespeist wird, richtig wiedergibt. Das erfordert Langzeitexperimente bis zu 40 Modelljahren (Einstellzeit der Biologie 5-10 Jahre, Umwälzperiode des Wasserkörpers in der Ostsee 30-40 Jahre). Diese Simulationen sind nur auf Höchstleistungsrechnern wie dem HLRN-System zu realisieren.

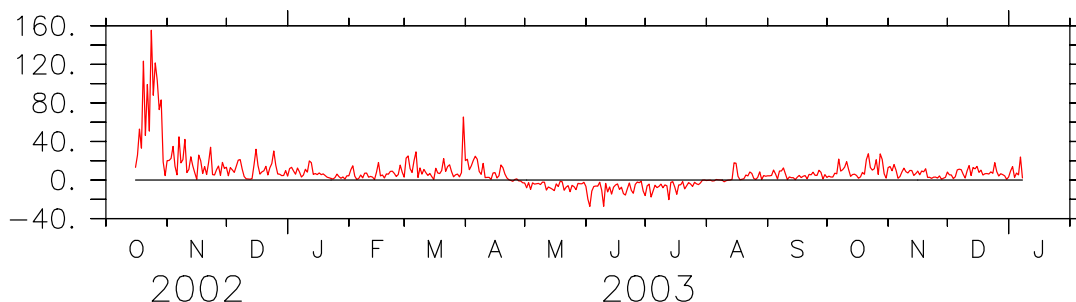


Abbildung 3: CO_2 -Fluss ($mmol/m^2/Tag$) durch die Meeresoberfläche in der Bilanzbox im zentralen Arkonabecken (positive Werte entsprechen der Abgabe an die Atmosphäre, negative dem Eintrag ins Meer).

1. Relations between wind speed and gas exchange over the ocean, J. Geophys. Res. 97, C5: 7373–7382, 1992.
2. A. G. Dickson, and C. Goyet, eds.: Handbook of Methods for the Analysis of the Various Parameters of the Carbon Dioxide System in Sea Water; version 2, ORNL/CDIAC-74, U. S. Department of Energy, 1994.
3. Nightingale P. D., Malin G., Law C. S., Watson A. J., Liss P. S., Liddicoat M. I., Boutin J., Upstill-Goddard R. C. : In situ evaluation of air-sea gas exchange parameterizations using novel conservative and volatile tracers, Global Biogeochem. Cycles 14(1): 373–387, 2000.
4. J. Kuss, K. Nagel and B. Schneider: Evidence from the Baltic Sea for an enhanced CO_2 air-sea transfer velocity, Tellus 56B: 175–182, 2004.
5. M. Nausch, G. Nagel and N. Wasmund: Phosphorus dynamics during the transition from nitrogen to phosphate limitation in the central Baltic Sea, Mar. Ecol. Prog. Ser. 266: 15–25, 2004.

DYNAS II Dynamik natürlicher und anthropogener Sedimentation, Teilprojekt 2: Entwicklung und Anwendung des Sedimenttransportmodells für die Ostsee

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Jan Harff

Beantragende Institution: Institut für Ostseeforschung Warnemünde an der Universität Rostock

Mitarbeiter: Prof. Dr. W. Fennel, Dr. C. Kuhrts, Dr. T. Seifert

Kooperationspartner: Universität Rostock, Wasser- und Schifffahrtsamt Stralsund, Bundesanstalt für Gewässerkunde Berlin, Forschungsanstalt für Wasserschall und Geophysik der Bundeswehr, Institut für Küstenforschung

Förderung: BMBF

Mit dem Verbundvorhaben DYNAS wird ein Beitrag zum vertieften Verständnis der Sedimentationsprozesse in der südwestlichen Ostsee geleistet. Die Arbeiten erfolgen in multidisziplinärer Kooperation zwischen Sedimentologen, Benthos- und Mikrobiologen, Sedimentphysikern und physikalischen Ozeanographen. Eine Schlüsselrolle spielt der Einsatz eines gekoppelten 3D-Strömungsmodells, für das ein Modul entwickelt wurde, das den Transport sedimentären Materials in der Wassersäule, das Absetzen auf dem Meeresboden sowie die Resuspension durch starke Strömungsereignisse und die Wirkung von Seegang beschreiben kann. Wesentlich ist dabei die Parametrisierung der Modellprozesse durch experimentelle Bestimmung kritischer Schubspannungsgeschwindigkeiten für verschiedene Sedimenttypen in Abhängigkeit von Lithofazies, physikochemischen Milieu und Mikro- bzw. benthosbiologischen Prozessen. Dazu wurden Labor- und Feldmessungen in Schlüsselgebieten vor der Küste Mecklenburg-Vorpommerns durchgeführt. Die experimentelle Untersuchung einer Probeverklappung von Baggergut diente dem Studium des Verhaltens anthropogen gestörten Sediments und dem Vergleich mit natürlichen Ablagerungen.

In der Projektphase DYNAS I (Projekt mvk00003) wurde das Modul für den Sedimenttransport entwickelt und in Ostseemodelle implementiert, die auf dem Modular Ocean Model (Version 3.1) beruhen [3]. Zur Beschreibung der Seegangseffekte wurde das parametrische Wellenmodell von [4] implementiert. Modellsimulationen mit einer horizontalen Auflösung von 3 Seemeilen (ca. 5.5 km) zeigten, dass die Ausbreitung von suspendiertem Material und Feinsand realitätsnah beschrieben werden kann [2].

Sensitivitätsexperimente mit leicht erodierbarem biogenen Material (Flocken, engl. fluff) ergaben, dass dieses Material in Flachwassergebieten bis ca. 30 m Tiefe vollständig erodiert und in die tiefen Becken transportiert wird, wo es sich an den Beckenrändern absetzt, sobald die kritische Schubspannungsgeschwindigkeit für Deposition unterschritten wird. Aus dem Jahresgang Oktober 1992 bis Oktober 1993, der sich durch eine Reihe von Starkwindereignissen auszeichnet, wurden Karten der Erosionswahrscheinlichkeit abgeleitet.

In der zweiten Phase DYNAS II wurden Simulationen mit einem hochauflösenden Modell durchgeführt, das die südwestliche Ostsee mit 1 Seemeile (ca. 2 km) darstellt. Bei dieser Auflösung werden die dynamischen Skalen (transiente Wirbel, Küstenstrahlströme) viel realistischer aufgelöst. Damit ergibt sich ein detailliertes Bild für den Transport und die Verteilung sedimentären Materials. Die Abbildung 1 zeigt, wo im Test-Jahr 1993 maximale Schubspannungen (charakterisiert durch eine Geschwindigkeitsskala u_*) am Meeresboden auftraten. Es ist offensichtlich, dass Erosionsereignisse vorrangig in Flachwassergebieten bis zu 30 m durch die Wirkung des Seegangs hervorgerufen werden.

In weiteren Modellsimulationen wird der Einfluss biologischer Strukturen am Meeresboden untersucht. Dafür wird die Verteilung der Rauheitsparameter modifiziert. Die Bodenfelder wurden aus umfangreichen meeresbiologischen Datensätzen und aus Messungen in Strömungskanälen abgeleitet [1]. Modellexperimente zur Ausbreitung von Schwebstoffen und Sand von Punktquellen haben Bedeutung für die Kooperationspartner des Projektes, die sich mit der Bewertung von Verklappungsgebieten befassen.

Da jeder Sedimenttyp durch ein dreidimensionales Modellfeld beschrieben wird, stellen die hochauflösenden Simulationen sehr hohe Anforderungen an Rechenzeit und Speicherkapazität, die nur auf Hochleistungsrechnern wie dem HLRN-System zu realisieren sind. Ein Jahreslauf mit dem 1-Seemeilenmodell und 4 Sedimenttypen verbraucht über 3000 Stunden Rechenzeit und erfordert die Vorhaltung von ca. 30 GBytes Daten für die Auswertung.

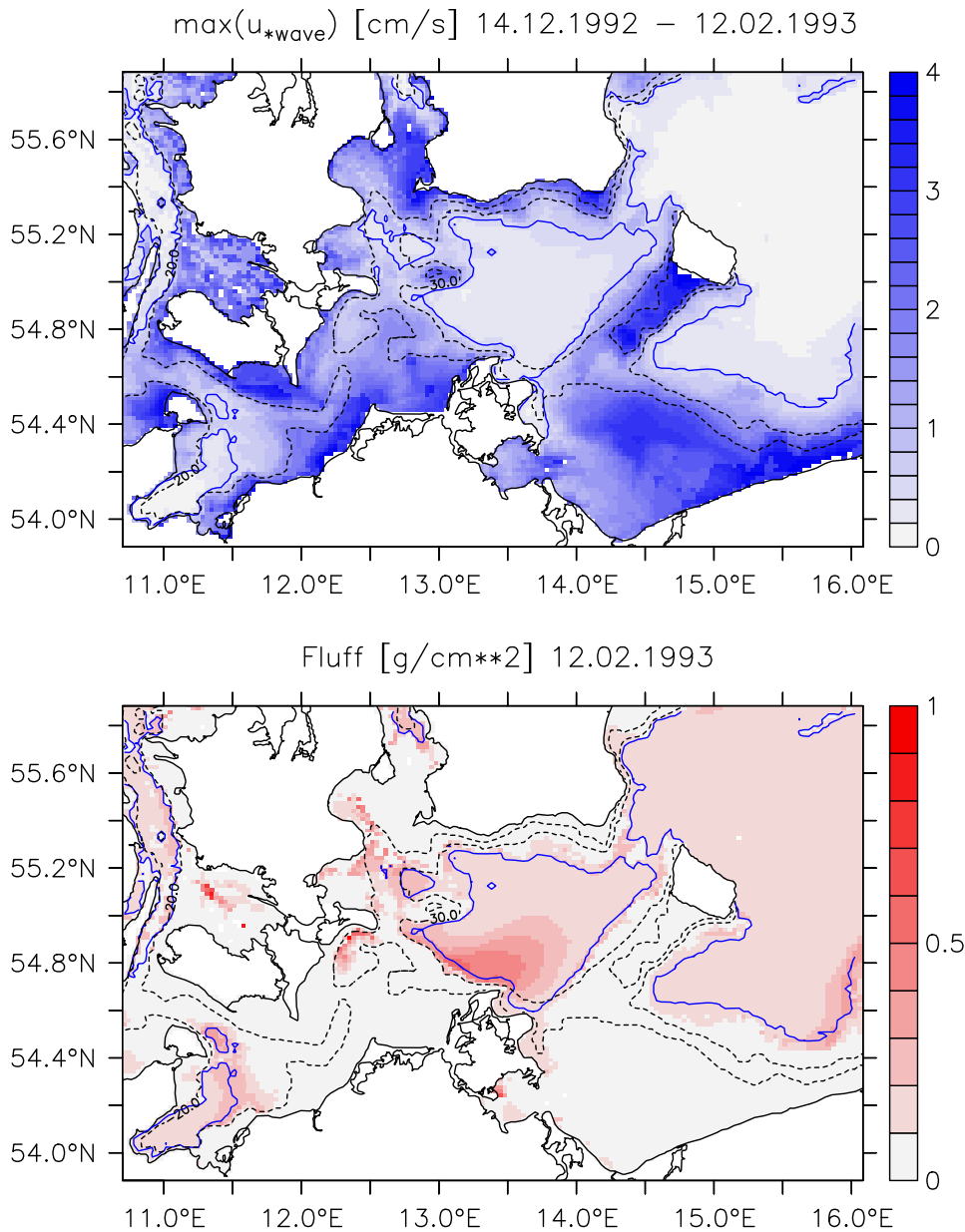


Abbildung 1: Maximum der durch Seegang induzierten Schubspannungsgeschwindigkeit (oben) und Verteilung von Flocken (unten) am Meeresboden nach 60 Modelltagen mit realistischen Antrieben. Die blaue Isolinie zeigt den Schwellwert 0.5 cm/s für die Erosion von Flocken (fluff). Die gerissenen Isolinien entsprechen den Wassertiefen 20 m bzw. 30 m.

1. M. Friedrichs: Flow-induced effects of macrozoobenthic structures on the near-bed sediment transport. PhD thesis, University of Rostock (Germany), 2003.
2. Ch. Kuhrts, W. Fennel, and T. Seifert: Model studies of transport of sedimentary material in the Western Baltic, *Journal of Marine Systems*, 52: 167, 2004.
3. R. C. Pacanowski and S. M. Griffies: MOM 3.0 manual, Technical report, Geophysical Fluid Dynamics Laboratory, 2000.
4. D. J. Schwab, J. R. Bennett, P. C. Liu, and M. A. Donelan: Application of a Simple Numerical Wave Prediction Model to Lake Erie, *Journal of Geophysical Research*, 89 (C3):3586–3592, 1984.

Grobstruktursimulationen zur Untersuchung des Energie–Imbalanz–Problems

Verantwortlicher Wissenschaftler: PD Dr. Siegfried Raasch

Beantragende Institution: Institut für Meteorologie und Klimatologie, Universität Hannover

Mitarbeiter: Dipl.-Met. Gerald Steinfeld

Kooperationspartner: Department of International Development Engineering, Tokyo Institute of Technology

Förderung: Deutscher Akademischer Austauschdienst (DAAD), Japanisches Ministerium für Erziehung, Kultur, Sport, Wissenschaft und Technologie (MEXT)

Die Eddy-Kovarianz-Methode (EC-Methode) ist ein in der Mikrometeorologie weit verbreitetes Verfahren zur Bestimmung von vertikalen turbulenten Austauschflüssen zwischen Vegetation und Atmosphäre. Die möglichst exakte Bestimmung von räumlich repräsentativen Flüssen ist dabei auch zur Entwicklung von realistischen Parametrisierungen zur Beschreibung der Austauschprozesse am Erdboden in Wettervorhersage- und Klimamodellen von Bedeutung. Während die Anwendbarkeit der räumlichen EC-Methode an das Vorhandensein eines dichten, räumlich verteilten Messnetzes gebunden ist, wird in den meisten Feldexperimenten versucht, die für ein Gebiet repräsentativen Flüsse durch Messungen an einzelnen Masten über die zeitliche EC-Methode zu bestimmen. Die Beobachtungen einer Diskrepanz zwischen über die räumliche bzw. zeitliche EC-Methode bestimmten Flüssen, einer räumlichen Variabilität von zeitlichen EC-Flüssen und einer nicht-geschlossenen Energiebilanz am Erdboden in Feldexperimenten verdeutlicht einen dringenden Untersuchungsbedarf der zeitlichen EC-Methode.

Eine erste Untersuchung der zeitlichen EC-Methode mit Hilfe der numerischen Methode der Grobstruktursimulation wurde in einer Kooperation der PALM-Arbeitsgruppe von PD Dr. Raasch mit der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Manabu Kanda vom Department of International Development Engineering des Tokyo Institute of Technology in den Jahren 2001-2002 durchgeführt. Die Benutzung eines numerischen Modells bot dabei den Vorteil, ideale Messgeräte bereit zu stellen. Damit wird eine Konzentration auf die physikalisch bedeutenderen, weil in Bezug zu den Strukturen des untersuchten turbulenten Flusses stehenden Ursachen der Imbalanzen möglich. Im Rahmen des hier vorgestellten Projekts wurden die Untersuchungen zur Imbalanz-Problematik der oben beschriebenen Kooperation fortgesetzt. Insbesondere wurde durch die Verfügbarkeit der neuen Hochleistungsrechner des HLRN die Durchführung von Studien möglich, die während der ersten Kooperationsphase noch an den mangelnden Computerressourcen gescheitert waren. So konnten in der ersten Kooperationsphase die virtuellen Messungen von Flüssen in der konvektiven Grenzschicht nur in Höhen ab 50 m durchgeführt werden. Weil in realen Feldexperimenten die Messungen jedoch üblicherweise in deutlich geringeren Höhen durchgeführt werden, führte dies zu Zweifeln der experimentellen Meteorologen daran, ob der in der ersten Kooperationsphase gefundene Mechanismus, der zur Erklärung der Energieimbalanzen herangezogen wurde, in den realen Messhöhen überhaupt von entscheidender Bedeutung ist. Die neuen Hochleistungsrechner des HLRN erlaubten eine erhebliche Verfeinerung des verwendeten numerischen Gitters, so dass auch virtuelle Messungen von Flüssen in Höhen von 20 m und damit innerhalb des Bereichs realer Messhöhen möglich wurden. Wie aus Abbildung 1 hervorgeht, lassen sich tatsächlich auch in einer Höhe von 20 m nach zeitlicher Mittelung über einen Zeitraum von einer Stunde noch turbulente organisierte Strukturen nachweisen. Deren Existenz wurde aber in der ersten Kooperationsphase als Ursache für das Auftreten von Imbalanzen gesehen. Allerdings zeigt die Abbildung auch deutlich, dass die turbulenten organisierten Strukturen in einer Höhe von 20 m deutlich schwächer als in einer Höhe von 100 m sind, und gleichzeitig wurde eine Abnahme der Größe der Imbalanzen mit abnehmender Höhe festgestellt, so dass nach den Ergebnissen dieses Projekts, der in der ersten Kooperationsphase gefundene Mechanismus zur Erklärung der in der realen Atmosphäre auftretenden Imbalanzen unzureichend ist. In weiteren Schritten der neuen Kooperationsphase wurde dann untersucht, welchen Einfluss ein synoptisch-skaliges Absinken, die Größe des bodennahen Wärmestroms oder der Übergang von Zellen- zu Rollenkonvektion auf die Größe von Imbalanzen und räumlicher Variabilität von Flüssen hat. Hierbei konnte sowohl eine Abhängigkeit der Größe der Varianzen und Imbalanzen von der jeweiligen Höhe der Grenzschicht als auch von der im Messniveau vorherrschenden mittleren Horizontalgeschwindigkeit festgestellt werden. Da die Messung von Kohlendioxidflüssen im Zusammenhang mit der Überprüfung der Auswirkungen und Einhaltung von Abkommen zum Klimaschutz, wie z.B. des Kyoto-Protokolls, zunehmend an Be-

deutung gewinnt, ist es sinnvoll zu überprüfen, ob das Phänomen der systematischen Unterschätzung des repräsentativen Flusses mit der EC-Methode auch für die Flüsse von passiven Skalaren konstatiert werden muss. Im Rahmen dieses Projekts ergaben sich deutliche Hinweise darauf, dass dies der Fall ist. An die Untersuchungen des Imbalanzphänomens in der konvektiven Grenzschicht schlossen sich Untersuchungen in der neutral sowie stabil geschichteten Grenzschicht an. Aufgrund der geringen Größe der Turbulenzelemente insbesondere in der stabil geschichteten Grenzschicht bedarf es zur expliziten Auflösung der den Großteil der Energie tragenden Turbulenzelemente einer sehr hohen räumlichen Auflösung, deren Realisierung durch die neuen Rechner des HLRN ermöglicht wurde. Es ergab sich, dass der in der ersten Kooperationsphase beschriebene Imbalanz-Mechanismus ungeeignet zur Erklärung der laut experimentellen Beobachtungen in der nächtlichen Grenzschicht sehr großen Imbalanzen ist. Da sich im Verlauf dieser Studie für die konvektive Grenzschicht gezeigt hatte, dass es in den gemessenen Zeitreihen der turbulenten Größen enthaltenen niederfrequenten Trends sind, die letztendlich zu räumlicher Varianz von zeitlichen EC-Flüssen und Imbalanzen führen, ergab sich schließlich noch die Frage, welche Auswirkung bisher standardmäßig verwendete Verfahren zur Filterung der Trends auf die Größe von Varianzen und Imbalanzen besitzen. Es zeigte sich, dass das heute am weitesten verbreitete Verfahren der Filterung mit den linearen Trends vollkommen ungeeignet zur Reduktion der systematischen Unterschätzung der repräsentativen Flüsse ist. Daraufhin wurde aus theoretischen Überlegungen ein neues Filterverfahren entworfen, das auf einer Filterung mit dem horizontalen Mittel der potentiellen Temperatur basiert, und es wurde dessen Erfolg durch Anwendung auf die virtuellen Messdaten gezeigt.

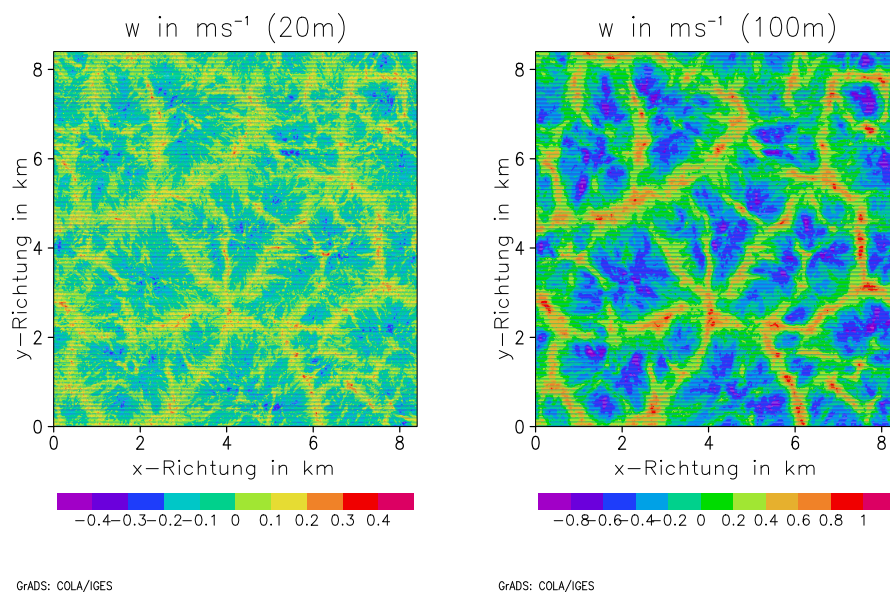


Abbildung 1: Über den Zeitraum von 4 h bis 5 h nach Start der hochauflösenden Simulation gemittelte Felder der Vertikalgeschwindigkeit w in Höhen von 20 m (links) und 100 m (rechts)

1. Steinfeld, G., Letzel, M. O., Raasch, S., Kanda, M. und Inagaki, A.: Spatial representativeness of single tower measurements and the imbalance problem with EC fluxes - results of an LES study, Agric. For. Meteorol., 2005, submitted.
2. Steinfeld, G., Kanda, M., Raasch, S. und Letzel, M. O.: Hochaufgelöste LES-Studie zum Energie-Imbalanz-Problem der EC-Methode über homogenem Untergrund, Proceedings DACH-Meteorologentagung, Karlsruhe, Deutschland, 2004

Grobstruktursimulation von Kaltluftausbrüchen mit stationärem Modellgebiet

Verantwortlicher Wissenschaftler: PD Dr. Siegfried Raasch

Beantragende Institution: Institut für Meteorologie und Klimatologie, Universität Hannover

Mitarbeiter: Dipl.-Met. Micha Gryschka

Förderung: institutsintern

In sogenannten Kaltluftausbrüchen strömt kalte und trockene Luft von Eisflächen herkommend über das offene relativ warme Meereswasser. Die vertikale Ausdehnung der sich hierbei entwickelnden konvektiven Grenzschicht wächst mit zunehmendem Abstand zur Eiskante an und infolge des Feuchteintrages vom Meer her kommt es stromabwärts zu Wolkenbildung. In zahlreichen Satellitenaufnahmen ist zu erkennen, daß die Wolken typischerweise in parallel zueinander liegenden Bändern in Strömungsrichtung angeordnet sind. Diese sogenannten Wolkenstraßen stehen in Zusammenhang mit einer Zirkulation in Form von longitudinalen Rollen (Konvektionsrollen), welche zueinander parallel angeordnet sind. Der Drehsinn der helikalen Zirkulation zweier aufeinander folgenden Rollen ist dabei verschieden, so daß sich entsprechend parallel angeordnete Auf- und Abwindgebiete ergeben, welche sich vertikal durch die gesamte Grenzschicht erstrecken.

Konvektionsrollen haben einen erheblichen Einfluß auf vertikale Austauschprozesse zwischen dem Meer und der Atmosphäre. Da grobmaschige Modelle, wie z.B. Klimamodelle, nicht in der Lage sind derartige Rollen explizit zu erfassen, sollten die damit verbundenen Austauschprozesse indirekt über Parametrisierungen erfaßt werden, was Kenntnis über die Eigenschaften sowie über die Bedingungen für das Auftreten jener Rollen voraussetzt. Ein geeignetes Mittel zur Untersuchung derartiger Strömungsphänomene ist die Grobstruktursimulation. Die hier verwendeten Maschenweiten sind fein genug, als dass sowohl die organisierten Strömungsstrukturen sowie die kleinskaligeren nicht organisierten Turbulenzen explizit aufgelöst werden und so mögliche Wechselwirkungen zwischen diesen beiden Skalen mit erfaßt werden. Hochauflösende Grobstruktursimulationen von Kaltluftausbrüchen wurden bisher mit lateral periodischen Rändern durchgeführt. In einer solchen Simulation bewegt sich das Modellgebiet mit der Strömung. Vorteil ist hierbei die Ersparnis an Rechenzeit, da das Modellgebiet relativ klein gewählt werden kann und die zeitliche Integration in größeren Schritten erfolgen kann gegenüber Simulationen mit stationärem Modellgebiet. Allerdings unterdrücken periodische Ränder insbesondere in Strömungsrichtung mögliche physikalische Effekte, die auf der Inhomogenität des Phänomens in dieser Richtung beruhen. So entstehen in einem Kaltluftausbruch horizontale Temperaturgradienten in Strömungsrichtung innerhalb der sich stromabwärts erwärmenden konvektiven Grenzschicht sowie verstärkt an deren Obergrenze aufgrund der Neigung derselben. Solche großräumig und lang anhaltenden Temperaturgradienten bewirken die Entstehung von thermischen Winden, die die Entwicklung der konvektiven Grenzschicht und möglicherweise die der organisierten Strömungsstrukturen beeinflussen. In Simulationen mit periodischen Rändern in Strömungsrichtung können sich solche mesoskaligen Gradienten in den meteorologischen Größen prinzipiell nicht ausbilden. Insbesondere kann die Grenzschichthöhe keine Neigung aufweisen.

Erstmals wurde nun im vorliegenden Projekt ein Kaltluftausbruch mit feststehendem Modellgebiet simuliert. Die Modellgebietsgröße betrug $205\text{ km} \times 26\text{ km} \times 3\text{ km}$ bei einer Maschenweite von 50 m horizontal und 25 m vertikal. Mit 3×10^8 Gitterpunkten ist diese Simulation eine der umfangreichsten Grobstruktursimulationen, die in der Meteorologie bisher durchgeführt wurden. Auf 256 Prozessoren des HLRN-Systems betrug die Ausführungszeit 10,5 Tage. Verwendet wurde das am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover entwickelte und für Massivparallelrechner optimierte Grobstrukturmodell PALM (Parallelized LES Model). Für diese Studie wurde PALM um einen Ein- und Ausströmrand erweitert, wofür vorab einige Testsimulationen erforderlich waren.

Im Verlauf der Simulation entwickelten sich Konvektionsrollen, deren Merkmale mit denen in der Natur vergleichbar sind. So wuchsen die Wellenlängen der Rollen von etwa 1 km in 60 km Entfernung von der Eiskante stromabwärts auf mehr als 6 km in 180 km Entfernung an. Die Rollen erstreckten sich durch die gesamte Grenzschicht. Daher sind diese in der Simulation in Form von Streifen sowohl in größeren Höhen im Wolkenfeld (Wolkenstraßen) als auch nahe des Modellunterrandes im Feld der Schubspannungen zu erkennen (Abbildung 1). Letzteres stimmt überein mit Satellitenaufnahmen mittels Radartechnik von Ozeanoberflächen, die Rückschlüsse auf die an die Wasseroberfläche angreifenden

Schubspannungen erlauben. Auch hier konnten während Kaltluftausbrüchen Muster von Konvektionsrollen identifiziert werden. Die Simulation zeigte auch, daß vertikale Windscherungen einen Einfluß auf die Rollentwicklung sowie auf die Ausrichtung der Rollenachsen haben. Weitere Auswertungen deuten darauf hin, daß Feuchteprozesse und langewellige Strahlungsprozesse wesentlich zum Wachstum der Wellenlängen beitragen.

Zum Vergleich wurde eine weitere Simulation des gleichen Kaltluftausbruches mit periodischen Rändern (in Strömung mitbewegtes Modellgebiet) durchgeführt. Gegenüber der stationären Simulation fiel hier die vertikale Windscherung im Bereich der Obergrenze der konvektiven Grenzschicht um den Faktor 2,4 geringer aus und es bildete sich dort kein Jet aus. Dies konnte auf das Fehlen der thermischen Winde in der periodischen Simulation zurückgeführt werden. Desweiteren löste sich die Rollenstruktur hier frühzeitig auf.

Die explizite Simulation von Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Skalen der Turbulenz, wie in dieser Studie, stellt sehr große Anforderungen an die Rechenleistung, welche nach neuestem Stand der Technik von massiv parallelen Rechnersystemen erfüllt werden.

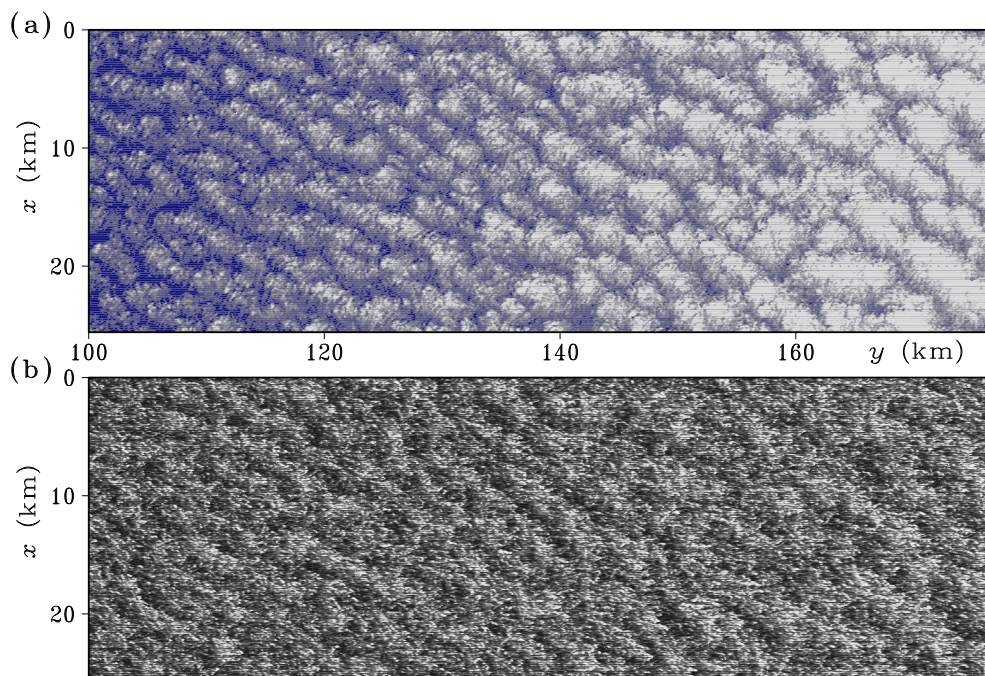


Abbildung 1: Horizontale Schnitte von a) dem Feld des Flüssigwasserpfad (gleichbedeutend mit Wolkenfeld) und b) der Schubspannung am Modellunterrand nach 5 h Simulationszeit für einen Ausschnitt des Modellgebietes. Der Grundstrom verläuft hierbei von links nach rechts.

1. M. Gryschka, S. Raasch: Roll Convection during a Cold Air Outbreak: A Large Eddy Simulation with Stationary Model Domain, Geophysical Research Letters, in review, 2005.
2. M. Gryschka, S. Raasch, D. Etling: Large Eddy Simulation of a Cold Air Outbreak with Stationary Model Domain, Geophysical Research Abstracts, 7, 09780, 2005.
3. M. Gryschka, S. Raasch: Grobstruktursimulation eines Kaltluftausbruches mit stationärem Modellgebiet, Deutsch-Österreichisch-Schweizerische Meteorologentagung DACH (Vortrag), Karlsruhe, Deutschland, 2004.

Holistische Modellierung der Interaktion von Seegang, Strömung und Sedimenttransport in Ästuarsystemen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Dr.-Ing. habil. Peter Milbradt

Beantragende Institution: Institut für Bauinformatik, Universität Hannover

Kooperationspartner: Bundesanstalt für Wasserbau Dienststelle Hamburg

Die Hydrodynamik der Küstennahbereiche sowie der Ästuarsysteme an der deutschen Nordseeküste (Abbildung 1) ist gekennzeichnet durch eine starke Interaktion zwischen dem einlaufenden Seegang sowie den Tidenströmungen, welche die treibenden Kräfte für Umlagerungsprozesse von Sedimenten darstellen. Zur Beurteilung der Entwicklung von Küstenzonen sowie von Eingriffen des Menschen in Form von Schutzbauwerken und Häfen haben sich in den letzten Jahren numerische Modelle als Standardwerkzeuge etabliert. Typische Vertreter solcher Simulationsmodelle sind Strömungs-(Tide-), Seegangs-, Transport- und morphodynamische Modelle.

Die Simulation der Interaktion dieser verschiedenen Prozesse, wie Seegang, Strömung und Sedimenttransport, erfolgte in der Vergangenheit durch die externe Kopplung bestehender Teilmodelle. Diese iterative Kopplung von Modellen erfordert ein hohes Maß an Erfahrung des Modellierers in Hinsicht auf die Kopplungszeitschritte und führt häufig zu einer unzureichenden Wiedergabe dieser Wechselwirkungen.

Durch eine einheitliche mathematische Beschreibung in Form eines Systems partieller Differentialgleichungen aller physikalischen Prozesse ist eine adäquate Beschreibung der komplexen Phänomene im Küstenbereich möglich. Durch die Verwendung stabilisierter Finiter Dreieckselemente kann die Modellauflösung sowohl den bathymetrischen als auch den physikalischen Gegebenheiten angepasst werden. Das holistische Simulationsmodell Martin beschreibt das Zusammenwirken von Seegang, Strömung und Morphodynamik direkt. Es ist in Ansi C implementiert und mit OpenMP parallelisiert.

Die dynamische Entwicklung im interkontinentalen Warenverkehr führt zu einer beachtlichen Steigerung des Containerumschlags. Dabei werden immer größere Containerschiffe eingesetzt, die die bestehenden Hafenzufahrten zu den deutschen Containerterminals in Hamburg und Bremerhaven nur eingeschränkt (teilabgeladen) befahren können. Mit dem Bau des JadeWeserPort (Abbildung 2, siehe auch www.JadeWeserPort.de) entsteht in Deutschland ein Tiefwasser Containerhafen, der von Schiffen der zukünftigen Generation mit Tiefgängen bis 16m angelaufen werden kann.

Zur Beurteilung der Auswirkungen eines solchen Eingriffes in das Jade-Ästuar wurden wasserbau-liche Systemanalysen von verschiedenen Institutionen durchgeführt. Mit dem holistischen Simulationsmodell Martin wurde untersucht, inwieweit die Interaktion von großräumiger Strömung, Seegang und Sedimenttransport im numerischen Modell wiedergegeben und zur Abschätzung der ausbaubedingten Veränderungen eingesetzt werden kann. Die Berechnungsnetze (Abbildung 3) für den aktuellen Zustand und zwei Ausbauvarianten bestehen jeweils aus ca. 75000 Knoten und ca. 15000 Dreieckselementen.

Die Modelluntersuchungen erfolgten mit zwei Szenarien auf den drei Berechnungsnetzen. Szenario A umfasste Simulationen mit instationären Tidenströmungen und stationären Seegangseignissen. Diese Untersuchungen führten zu einer ersten Abschätzung der ausbaubedingten Änderungen auf die Tidenströmung und die Seegangsverhältnisse. Mit den Modellrechnungen des Szenario B, gekoppelte Simulation eines real gelaufenen meteorologischen Ereignisses, konnte eine Einordnung der stationären bzw. quasistationären Modelluntersuchungen in Bezug auf vollständig gekoppelte Simulationsmodelle vorgenommen werden.

Durch den holistischen Modellansatz, bei dem im Rahmen der numerischen Simulation die physikalischen Prozesse Seegang, Strömung und Sedimenttransport direkt gekoppelt realisiert werden, in Verbindung mit der Rechenkapazität des HLRN konnten für kurze Zeiträume von einigen Tagen realistische Abschätzungen der durch den Bau des JadeWeserPort zu erwartenden ausbaubedingten Veränderungen auf das Tide-, Seegangs und Sedimenttransportgeschehen gegeben werden. Alle ausbaubedingten Änderungen der hydro- als auch morphodynamischen Größen haben einen eher lokalen Charakter. Die erhöhten Tidenströmungen im Zufahrtbereich des JadeWeserPorts führen zu lokalen morphologischen Anpassungen des Meeresbodens und zu einem ungleichmäßigen Füllen der Sandlöcher, aber auch zu einer Beeinflussung der lokalen Seegangsverhältnisse.

Um Aussagen über die morphodynamische Entwicklung von Küstenregionen über längere Zeiträume von Monaten und Jahren treffen zu können, sind weiter Anstrengungen sowohl in der Entwicklung nume-

rischer Modelle als auch bei der Verfügbarkeit von Rechenkapazitäten zu unternehmen. Auf der Grundlage von direkten morphodynamischen Simulationen über lange Zeiträume und deren Analyse werden in Zukunft Strategien entwickelt, die die Identifikation morphologisch relevanter Szenarien und deren Kombination und Wichtung in einem makroskopischen Sinne erlauben. Durch diese Vorgehensweise soll erreicht werden, das auf eine deterministische und reproduzierbare Art und Weise der numerische Aufwand für Langzeituntersuchungen und unter Umständen auch Prognosen wesentlich verringert werden.

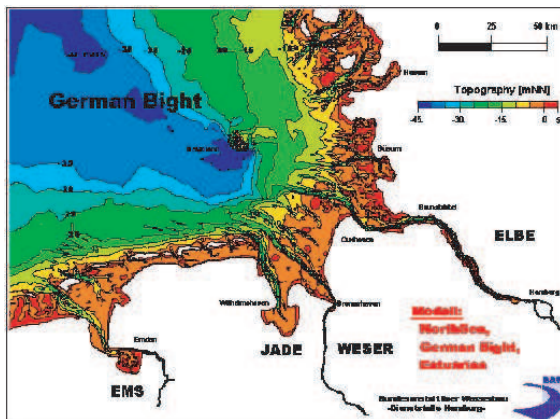


Abbildung 1: Ästuar der deutschen Nordseeküste



Abbildung 2: geplanter JadeWeserPort



Abbildung 3: Berechnungsnetz

1. P. Milbradt, A. Plüß, Numerical Modelling of Wave Current Interaction in an Estuary. COPEDEC VI, Colombo, Sri Lanka, 2003
2. P. Milbradt, Systemstudie Jade - Holistische Modelluntersuchungen zur Interaktion von Seegang, Tideströmung und Morphodynamik in der Jade, Abschlussbericht an die BAW-DH, Institut für Bauinformatik, 2004

Untersuchung der Struktur des turbulenten Transports über inhomogener Unterlage

Verantwortlicher Wissenschaftler: PD Dr. Siegfried Raasch

Beantragende Institution: Institut für Meteorologie und Klimatologie, Universität Hannover

Mitarbeiter: Dr. Michael Schröter, Dipl.-Met. Marcus Oliver Letzel, Msc.

Kooperationspartner: Institut für Meteorologie, Universität Leipzig, Tokyo Institute of Technology, Japan

Förderung: BMBF, DAAD

Dieses Projekt war Teil des Forschungsverbundes VERTIKO (**VERTIK**altransporte von Energie- und Spurenstoffen an Ankerstationen und ihre räumliche/zeitliche Extrapolation unter **KOM**plexen natürlichen Bedingungen), welches vom BMBF im Rahmen des Atmosphärenforschungsprogramms AFO2000 im Zeitraum 2001-2004 gefördert wurde.

Hintergrund der Untersuchungen ist die Frage, wie heterogene Landoberflächen (d.h. die natürliche Anordnung von Wäldern, Ackerflächen, Seen, Ortschaften, etc.) den Vertikaltransport von Wärme und Feuchte in den unteren 1-2 Kilometern der Atmosphäre - das ist die sogenannte atmosphärische Grenzschicht - beeinflussen. Die Erdatmosphäre erhält sämtliche Wärme und Feuchte von der Erdoberfläche her. Deshalb ist ein Verständnis der Transportprozesse u.a. für die Wetter- und Klimavorhersage von enormer Wichtigkeit. Die entsprechenden Vorhersagemodelle sind aber aufgrund ihrer groben räumlichen Auflösung nicht in der Lage, die Oberflächenheterogenitäten und die durch sie ausgelösten Prozesse direkt zu repräsentieren bzw. zu simulieren. Sie müssen statt dessen über so genannte Parametrisierungen berücksichtigt werden. Die Entwicklung solcher Parametrisierungen setzt allerdings eine genaue Kenntnis der physikalischen Prozesse voraus, die mit ihrer Hilfe beschrieben werden sollen.

Im Wesentlichen verantwortlich für den vertikalen Austausch in der atmosphärischen Grenzschicht ist die Strömungsturbulenz (Wirbel mit typischen Durchmessern von 100 m bis hin zu 10 km). Durch die Heterogenitäten heizt sich die Erdoberfläche und die jeweils aufliegende Luft unterschiedlich stark auf (z.B. über Wasserflächen weniger als über Ackerflächen) und dadurch werden Luftströmungen induziert, die diese Temperaturgegensätze auszugleichen versuchen (ähnliche dem Land-See Wind). Diese sogenannten Sekundärzirkulationen beeinflussen den turbulenten Austausch in der Grenzschicht, allerdings war bisher nicht bekannt, in welchem Ausmaß dies geschieht.

Um den Effekt der Sekundärzirkulationen zu quantifizieren, wurde im Projekt daher die Strömung über einer heterogenen Landoberfläche mit einem sehr hoch auflösenden Turbulenzmodell (englisch: Large-Eddy Simulation, LES) simuliert. Diese Modelle sind für ihren enormen Rechenzeitbedarf bekannt. Die Untersuchungen wurden für ein reales Gebiet von $40 \times 40 \text{ km}^2$ im Raum Lindenberg (südöstlich von Berlin) durchgeführt. Bei einer räumlichen Auflösung (Gitterweite) von 50 m benötigte eine Simulation eine Rechenzeit von mehr als 2 Tagen auf 128 CPUs des HLRN-Systems. Damit gehören die durchgeführten Rechnungen zu den aufwändigsten Turbulenzsimulationen, die bisher weltweit durchgeführt worden sind. Als LES-Modell wurde das von uns entwickelte PALM verwendet (**PAR**allelized **L**arge-Eddy **S**imulation **M**odel), welches sich durch sehr gute Skalierbarkeit auszeichnet und auch bei Einsatz großer Prozessorzahlen effizient arbeitet.

Parallel zu den Simulationen fand in 2003 im Raum Lindenberg unter Federführung des Deutschen Wetterdienstes (DWD) ein umfangreiches Messexperiment statt (LITFASS-2003), das unter anderem der Verifizierung der Modellergebnisse dienen sollte. In der Abbildung 1 ist als Beispiel die mit PALM simulierte Sekundärzirkulation über dem Messgebiet an einem der Messtage (30.5.2003) gezeigt. Es sind deutlich ausgeprägte Sekundärzirkulationen zu erkennen, die allerdings wesentlich schwächer als die Grenzschichtturbulenz sind (deren Wirbel erreichen Windgeschwindigkeiten von mehr als 5 ms^{-1}).

Ein wesentliches Ergebnis der Simulationen ist, dass Sekundärzirkulationen keinen zusätzlichen Beitrag zum Vertikaltransport von Wärme und Feuchte leisten und daher dieser Heterogenitätseffekt in Wetter- und Klimavorhersagemodellen nicht berücksichtigt werden muss (Uhlenbrock et al., 2005). Allerdings bewirken die Zirkulationen eine deutliche Erhöhung des horizontalen Luftaustausches in der Grenzschicht und haben damit u.a. einen unmittelbaren Einfluss auf die Ausbreitung von Luftbeimengungen (z.B. Industrieabgase), die es in den genannten Modellen zu berücksichtigen gilt.

Neben den bisher erwähnten Untersuchungen wurden auch umfangreiche Vergleiche zwischen simulierten und gemessenen Turbulenzdaten durchgeführt, die insbesondere Aussagen über die Re-

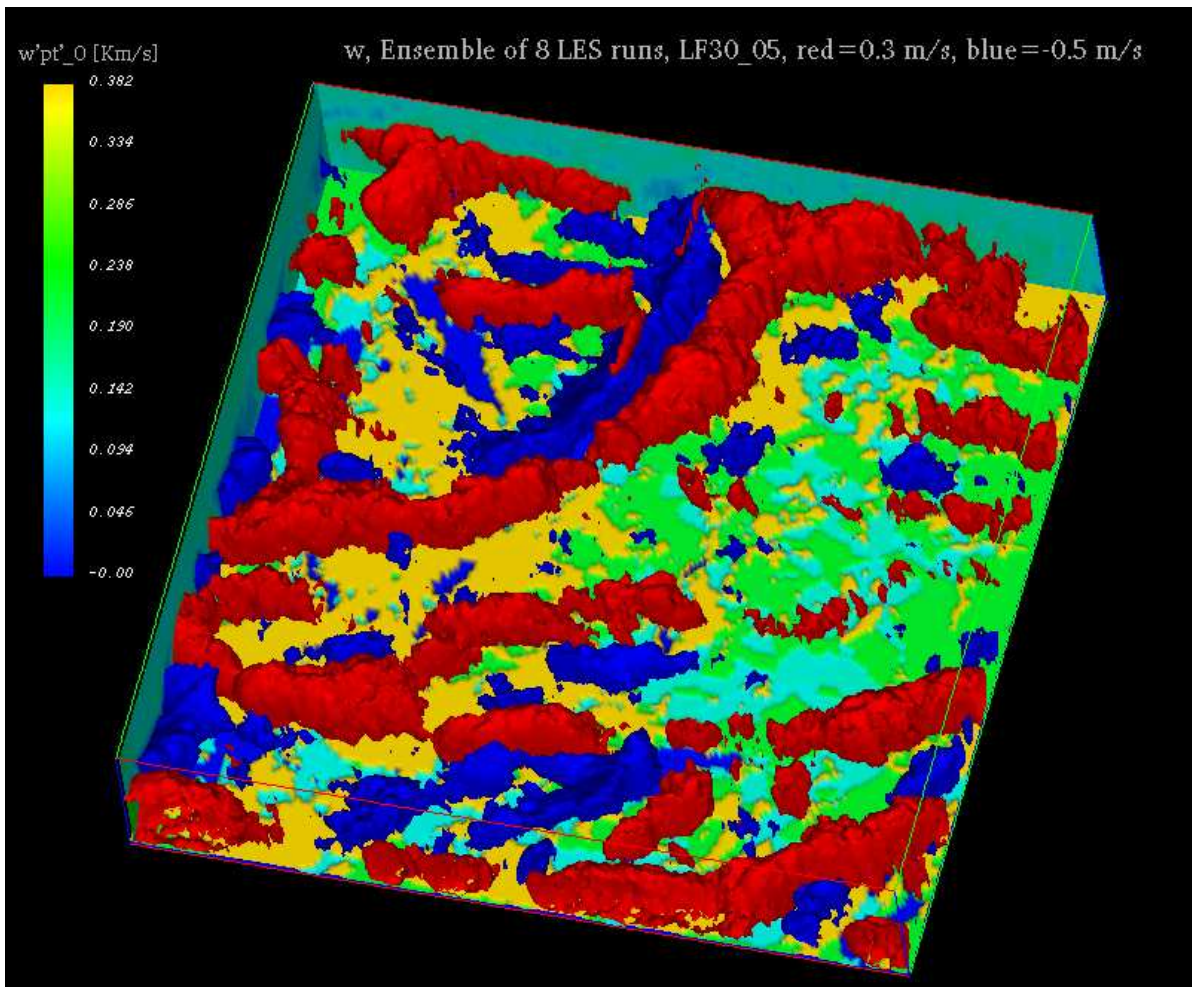


Abbildung 1: Sekundärzirkulationen über dem LITFASS-Experimentgebiet am 30.5.2003, 12 UTC. Das abgebildete Gebiet hat eine Kantenlänge von $20 \times 20 \text{ km}^2$. Dargestellt sind Isoberflächen der Vertikalwindgeschwindigkeit (rot: $+0.3 \text{ ms}^{-1}$, blau: -0.5 ms^{-1}). Die unterliegende Farbfläche stellt ein Maß für die Oberflächentemperaturen dar (blau:kalt, rot: warm).

präsentativität von Messungen zulassen. Diese werden in der Regel an einem bestimmten Ort durchgeführt, sollen aber meistens für ein größeres Gebiet repräsentativ sein. Zur Klärung dieses Problemkreises wurden mit dem LES-Modell im Simulationsgebiet Messungen simuliert. Ein wichtiges Ergebnis dieser Rechnungen ist, dass die durch Messungen bestimmten gebietsgemittelten turbulenten Wärme- und Feuchteflüsse um mehr als 15% zu niedrig sein können. Diese Untersuchungen wurden in Zusammenarbeit mit dem Tokyo Institute of Technology durchgeführt (Inagaki et al., 2005).

1. Gryanik, V., Hartmann, J., Raasch, S., Schröter, M.: A refinement of the Millionshchikov quasi-normality hypothesis for convective boundary layer turbulence, *J. Atmos. Sci.*, 2005.
2. Inagaki, A., Letzel, M.O., Raasch, S. Kanda, M.: The impact of the surface heterogeneity on the energy imbalance problem using LES, *J. Meteor. Soc. Japan*, 2005.
3. Uhlenbrock, J., Rautenhaus, M., Raasch, S.: The effect of real land surface heterogeneities on the turbulent transport within the atmospheric boundary layer, *Boundary-Layer Meteorol.*, 2005, zur Veröffentlichung eingereicht.

Hochauflösende Grobstruktursimulationen turbulenter Strömungen im Einflussbereich von Gebäuden unter besonderer Berücksichtigung thermischer Effekte

Verantwortlicher Wissenschaftler: PD Dr. Siegfried Raasch

Beantragende Institution: Institut für Meteorologie und Klimatologie, Universität Hannover

Mitarbeiter: Dipl.-Met. Marcus Oliver Letzel, MSc

Kooperationspartner: Prof. Dr. Manabu Kanda, Department of International Development Engineering, Tokyo Institute of Technology, Japan

Förderung: DFG, Studienstiftung des deutschen Volkes

Ziel dieses Projektes ist die Untersuchung von Luftströmungen im Einflussbereich von Gebäuden mittels numerischer Simulation in einer bisher unerreichten räumlichen Auflösung. Die Kenntnis der Eigenschaften des durch komplexe Gebäude modifizierten turbulenten Windfeldes unter typischen atmosphärischen Bedingungen ist noch sehr unvollständig, insbesondere bezüglich etwaiger Abhängigkeiten von der thermischen Schichtung, aber dennoch besonders wichtig im Hinblick auf Fragen wie die nach der Luftqualität in der Nachbarschaft von Industriegebieten oder vielbefahrenen Straßen.

Entsprechende Strömungen werden für unterschiedliche thermische Schichtungen mit dem hochauflösenden, parallelisierten Grobstruktursimulationsmodell (LES-Modell) PALM-CITY untersucht. Auf dem Massivparallelrechner des HLRN sind dazu erstmals Simulationen mit bis zu 2000^3 Gitterpunkten unter dem teilweisen Einsatz zweier gleich großer, gekoppelter Rechnersysteme mit Standort in Hannover und Berlin möglich. Damit kann die gebäudeinduzierte Turbulenz unter konvektiven Anströmbedingungen untersucht werden, welche durch Auf- und Abwinde von einigen hundert Metern Durchmesser charakterisiert sind, wobei gleichzeitig turbulente Strukturen in Wandnähe mit Abmessungen kleiner als 1 m explizit auflösbar sind.

Erst dank des Einsatzes auf dem HLRN-System sind somit nun realistische Simulationen in Bezug auf die feine Auflösung in Wandnähe sowie in Bezug auf das große Simulationsgebiet möglich. Das große Simulationsgebiet ermöglicht einerseits Untersuchungen unter konvektiven Anströmbedingungen, welche für die gewöhnlich tagsüber vorherrschenden Bedingungen wesentlich realistischer sind als thermisch neutrale Schichtungen. Andererseits ermöglicht das große Simulationsgebiet auch eine sukzessive Ausweitung des Untersuchungsgegenstandes von einzelnen Gebäuden über Gruppen von Gebäuden oder Straßenschluchten bis hin zu teilweisen oder ganzen Stadtsimulationen, wie wir sie in den kommenden Monaten gemeinsam mit unserem japanischen Kooperationspartner Prof. Dr. Manabu Kanda durchführen werden.

Die aus politischer Sicht wichtigste praktische Anwendung der Stadtsimulationen liegt auf dem Gebiet der Luftreinhaltung. So kann das vorliegende Projekt beispielsweise einen wertvollen Beitrag zur aktuellen Diskussion um Feinstaub in Städten leisten.

Erste Zwischenergebnisse zeigen, dass PALM-CITY die Strömung um einzelne Gebäude gut wiederzugeben vermag. Abbildung 1 zeigt die Wirbel im Strömungsfeld, die sich bei einer Gebäudeumströmung im zeitlichen Mittel in der Draufsicht ergeben. Die Anströmung des $50 \times 50 \times 50$ m großen Gebäudequaders erfolgt mit etwa 1 m/s Windgeschwindigkeit von links nach rechts, dargestellt sind die Strömungsstrukturen auf Höhe des Erdbodens, also dort, wo sich beispielsweise Passanten aufhalten und von den durch die Wirbel verursachten Windböen erfasst werden können.

1. S. Raasch, M. Schröter: PALM - A Large-Eddy Simulation Model Performing on Massively Parallel Computers, Meteorologische Zeitschrift, 10:363-372, 2001.

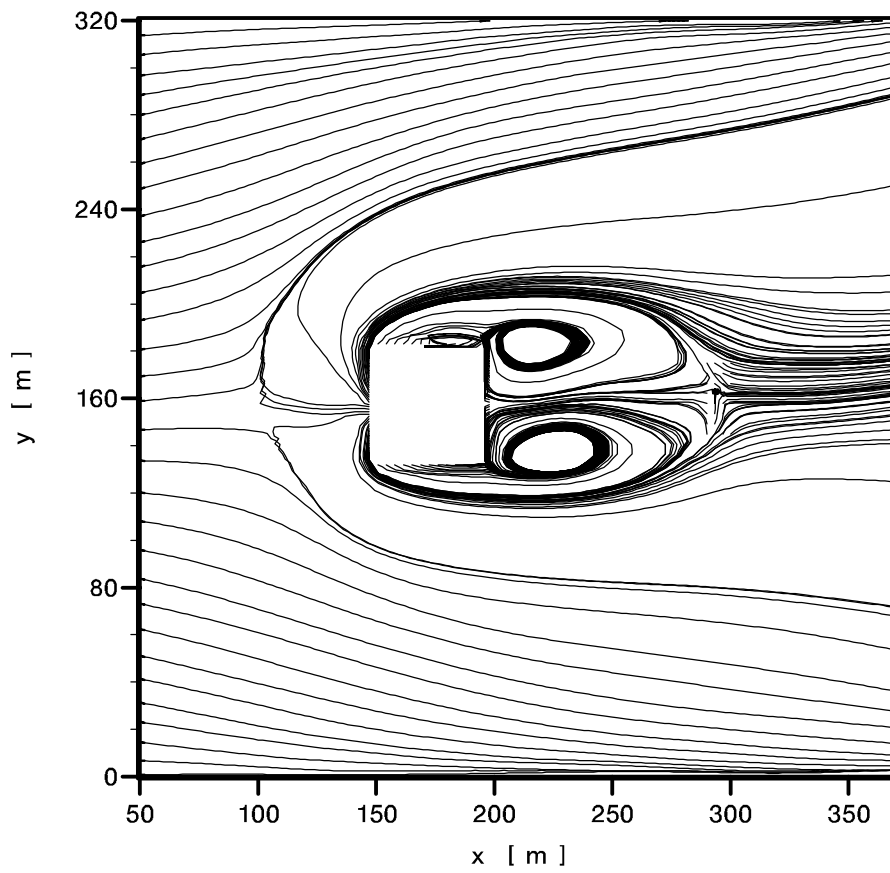


Abbildung 1: Ausschnitt aus einer Simulation zur Umströmung eines quaderförmigen Gebäudes, dargestellt sind die Stromlinien des mittleren Strömungsfeldes.

Dreidimensionale Simulation zum laminar–turbulenten Übergang in einer rotierenden Grenzschichtströmung (Ekman–Schicht)

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Dieter Etling

Beantragende Institution: Institut für Meteorologie und Klimatologie, Universität Hannover

Mitarbeiter: Dipl.-Met. Micha Gryschka

Förderung: institutsintern

In rotierenden Grenzschichten (Ekman-Grenzschicht) bilden sich häufig Sekundärströmungen in Form von longitudinalen Wirbelrollen aus. Diese stellen einen Übergang zur turbulenten Ekmanströmung dar. Aber auch in einer turbulenten Grenzschicht können sich rollenartige Wirbelstrukturen ausbilden. Dies ist besonders in der Grenzschicht der Erdatmosphäre der Fall, wo solche Wirbelrollen durch bänderförmig angeordnete Kumuluswolken (Wolkenstraßen) sichtbar werden. Die Ausbildung solcher laminarer und turbulenter Sekundärzirkulationen sollte im vorliegenden Vorhaben mit Hilfe von numerischen Simulationen untersucht werden.

Das am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover entwickelte Rechenmodell PALM (Parallized LES Model) basiert auf den Navier-Stokes-Gleichungen in der Boussinesq-Form. Durch den parallelisierten Modellcode können aufwendige Modellsimulationen effektiv durchgeführt werden. Die Nutzung der Rechner des HLRN ermöglicht darüberhinaus Simulationen mit sehr vielen Gitterpunkten, sodass eine besonders geringe Maschenweite (d.h. hohe Auflösung der Strömungsphänomene) für das Rechengitter verwendet werden konnte.

Zunächst wurde mit einem kleineren Modellgebiet (4096x128x128 Gitterpunkte) die Entstehung quasi laminarer Sekundärzirkulationen in Form von Wirbelrollen simuliert. In einer weiteren Simulation wurde das Modellgebiet vervierfacht um auch turbulente Wirbelrollen mit größerer Wellenlänge detailliert erfassen zu können.

Als Beispiel für die umfangreichen Ergebnisse der Modellsimulationen ist in der Abbildung 1 das Feld der Vertikalgeschwindigkeit für den quasi-laminaren Fall dargestellt. Man erkennt deutlich die periodische Anordnung der Auf- und Abwindgebiete quer zur mittleren Strömung (in der Atmosphäre hätte man sich die Ausbildung von Wolken oberhalb der Aufwindgebiete vorzustellen). Die Ergebnisse dieser Simulationen wurden auf dem 21st Congress for Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM 2004) in Warschau, Polen vorgestellt (Etling und Gryschka, 2004).

Die Erweiterung der Modellrechnungen für eine turbulente atmosphärische Grenzschichtströmung wurde am Beispiel eines sogenannten Kaltluftausbruches (kalte Luft strömt von Eisoberflächen auf das warme Meer) durchgeführt. Hierbei wurden die Modellergebnisse mit Beobachtungen in Form von Wolkenstraßen und Windstreifen auf der Meeresoberfläche verglichen. Ein Teil des umfangreichen Datenmaterials wurde auf der Tagung der European Geophysical Union (EGU 2005) in Wien vorgestellt (Gryschka et al., 2005) sowie in einer Fachzeitschrift publiziert (Gryschka und Raasch, 2005).

Insgesamt kann gesagt werden, dass die umfangreichen Modellsimulationen ohne Nutzung von Rechenkongingenten des HLRN nicht hätten durchgeführt werden können.

1. Etling, D., M. Gryschka: Roll vortices in the atmospheric boundary layer. Proc. 21 ICTAM, Warsaw, Poland, 2004.
2. Gryschka, M., S. Raasch, D. Etling: Large Eddy Simulation of Cold Air Outbreak with Stationary Model Domain. Geophys. Research Abstracts, 7, 09780, 2005.
3. Gryschka, M., S. Raasch: Roll Convection during a Cold Air Outbreak: A Large Eddy Simulation with Stationary Model Domain, Geophysical Research Letters, in review, 2005.

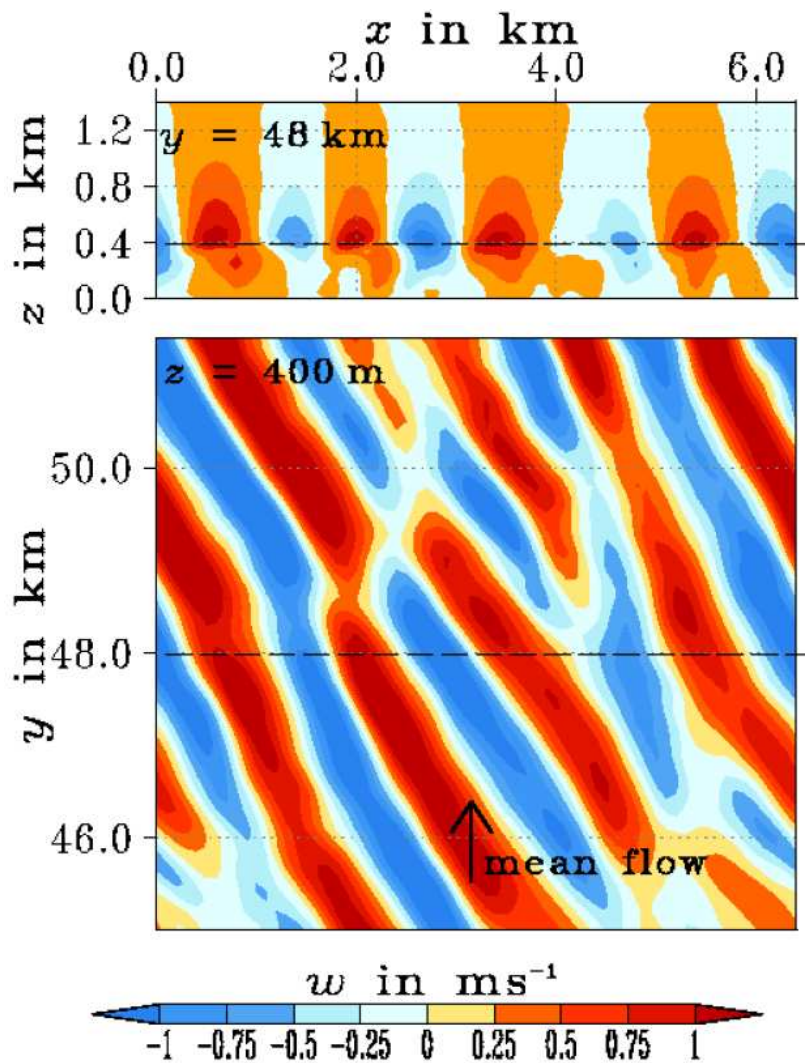


Abbildung 1: Feld der Vertikalgeschwindigkeit. rot= aufwärts, blau= abwärts. Oberer Bildteil: Vertikalschnitt quer zur Strömungsrichtung. Unterer Bildteil: Horizontalschnitt in der Höhe 400m über Grund.

Untersuchung physikalischer Mechanismen zur Organisation und Zellenverbreiterung von Konvektion bei Kaltluftausbrüchen mittels hochauflösender Grobstruktursimulation

Verantwortlicher Wissenschaftler: Dr. Heiko Jansen

Beantragende Institution: Institut für Meteorologie und Klimatologie, Universität Hannover

Kooperationspartner: Prof. Dr. Yign Noh, Department of Atmospheric Sciences, Yonsei University, Seoul, Korea

Förderung: DFG, DAAD

Ziel des Projektes ist die detaillierte Simulation von Kaltluftausbrüchen im Hinblick auf offene Probleme bezüglich der Organisationsstruktur der Konvektion. Bei einem Kaltluftausbruch gerät sehr kalte Luft von Kontinenten oder Eisflächen her über vergleichsweise warmes Wasser und wird von der Oberfläche her aufgeheizt. Die sich ausbildende Konvektion nimmt anfänglich die Form von horizontal liegenden Rollen an, die in größerem Küstenabstand in hexagonale Zellen übergehen. Durch entsprechende Wolkenmuster (sogenannte Wolkenstraßen und Zellen) sind die Konvektionsmuster in Satellitenaufnahmen sehr gut erkennbar. Trotz jahrzehntelanger Forschung sind bezüglich dieser Konvektionsformen noch eine Reihe von Fragen offen, z.B. die nach dem Aspektverhältnis der Zellen, definiert als das Verhältnis ihres Durchmessers zu ihrer Höhe. In der Natur beträgt dieses Verhältnis 10-30, was bislang in numerischen Modellen nicht reproduziert werden konnte. Außerdem ist unklar, warum manchmal offene (Abwindgebiete in Zellenmitte) und manchmal geschlossene Zellen (Aufwinde in Zellenmitte) beobachtet werden und welche physikalischen Mechanismen für das Anwachsen der Wolkenzellen im Verlauf eines Kaltluftausbruchs verantwortlich sind.

Entsprechende Fragen sollen mittels numerischer Simulation untersucht werden. Zu diesem Zweck wird das hochauflösende, parallelisierte Grobstruktursimulationsmodell PALM mit einem wolkenphysikalischen Modul eingesetzt, welches Verdunstungs- und Kondensationsprozesse berücksichtigt. Eine Klärung der oben angesprochenen Fragen ist wesentlich für die Parametrisierung der Ozean-Atmosphäre Energiebilanz in globalen Klimamodellen, da die hier angesprochenen Prozesse auf einer räumlichen Skala operieren, die in globalen Modellen nicht explizit aufgelöst werden kann.

Zur Untersuchung der oben angesprochenen Fragen wurden Simulationen durchgeführt, die sich an einem während der Feldstudie ARKTIS 1991 beobachteten Kaltluftausbruch orientierten. Das Modellgebiet erstreckt sich horizontal über eine Fläche von $102.5 \text{ km} \times 102.5 \text{ km}$ und vertikal bis in 5.5 km Höhe. Die Gitterweiten betragen horizontal 100 m und vertikal 50 m . Insgesamt ergibt sich ein Modellgebiet mit ~ 100 Millionen Gitterpunkten. Jede Modellrechnung erstreckte sich über 15 h simulierte Zeit. Auf 128 Prozessoren der IBM pSeries 690 des HLRN wurde pro Modelllauf eine Rechenzeit von ~ 40 Stunden benötigt. In allen Modellläufen ist das Entstehen von Wolkenzellen zu beobachten (siehe Abbildung 1). Das Wachstum der Wolkenzellen wurde anhand der spektralen Darstellung der spezifischen Variable beurteilt. Anstatt visuell den Durchmesser der entstehenden Wolkenzellen heranzuziehen, wurde das Aspektverhältnis als dominierende Wellenlänge zu Grenzschichthöhe definiert. Es ergaben sich so zwei Aspektverhältnisse, nämlich das des Flüssigwasserpfads (d.h. vertikal integrierter Flüssigwassergehalt als Maß der Wolkendicke, bezeichnet mit A_{LWP}) und der potentiellen Temperatur (A_{Θ}). Zunächst wurden Modellläufe mit und ohne Wolkenphysik untersucht, wobei im letzteren Fall die Wolken durch passive Skalare simuliert wurden. Dabei zeigt sich, daß feuchte Prozesse wesentlich für das Anwachsen von zellulären Strukturen sind. Ohne die Berücksichtigung von Verdunstungs-, Kondensations- und Strahlungsprozessen ist kein Anwachsen der Wolkenzellen zu verzeichnen. Um eine Differenzierung der beiden relevanten Prozesse (a) Freisetzen von latenter Wärme am Wolkenunterrand und (b) Strahlungsabkühlung am Wolkenoberrand zu gelangen, sind Modellsimulationen durchgeführt worden, in denen jeweils ein Prozeß selektiv abgeschaltet wurde. Hier ergibt sich, daß innerhalb der wolkenphysikalischen Prozesse die Strahlungsabkühlung die wesentliche Rolle spielt.

Im Anschluss daran wurden Modellrechnungen mit unterschiedlich starkem Hintergrundwind ($0 - 22 \text{ m s}^{-1}$) ausgewertet. Zusätzlich wurde eine Modellsimulation mit $204.8 \text{ km} \times 204.8 \text{ km}$ Modellgebiet gerechnet. Diese Simulation umfasste ~ 400 Millionen Gitterpunkte und benötigte auf 128 Prozessoren der IBM pSeries 690 des HLRN ~ 175 Stunden Rechenzeit. Die Motivation für die Vergrößerung des Modellgebietes liegt zum Einen in der spektralen Auswertung der Ergebnisse. Eine Verdopplung der Kantenlänge ergibt eine erheblich verbesserte Auflösung der relevanten Wellenlängenbereiche.

Überdies gewinnen die Ergebnisse an Zuverlässigkeit, da sich große Wirbel unabhängiger vom Randeinfluß entwickeln können.

Es zeigt sich, daß A_{LWP} und A_{Θ} nur mit 22 m s^{-1} Hintergrundwind signifikant anwachsen. In den anderen Modellläufen ist kein wesentliches Wachsen der Wolkenzellen erkennbar. Die Stärke des Hintergrundwindes korreliert also positiv mit dem Anwachsen der Wolkenzellen, was sich wie folgt erklären läßt: Je stärker der Hintergrundwind ist, desto größer ist die beobachtete vertikale Scherung, da der Horizontalwind zum Boden hin auf Null abfällt. Die vertikale Scherung wiederum ist u.a. verantwortlich für die Produktion von turbulenter kinetischer Energie (TKE), die erhöhte TKE schlägt sich in vermehrter horizontaler Diffusion nieder. Die erhöhte horizontale Diffusion schließlich bewirkt die beobachtete Zellenverbreiterung.

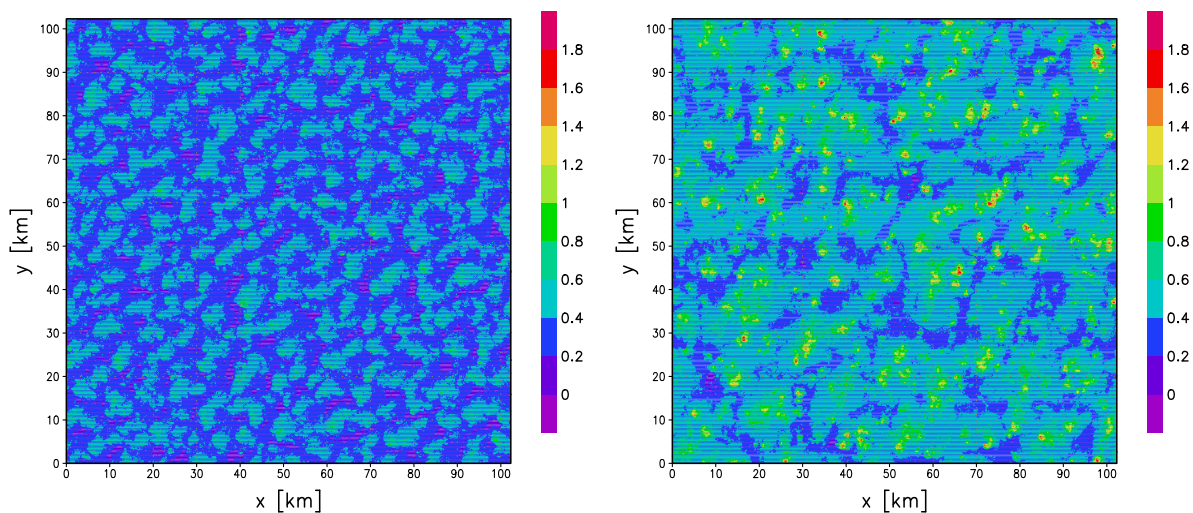


Abbildung 1: Wolkenzellen nach 5 h Simulation (links) und 15 h Simulation (rechts) in einem horizontalen Schnitt durch das Modellgebiet. Dargestellt ist der Flüssigwasserpfad [mm]. Deutlich sichtbar sind die im Zeitverlauf grösser werdenden geschlossenen Wolkenzellen (mittlere bis hohe Flüssigwassergehalte ab 0.4) unterbrochen von relativ schmalen wolkenfreien Gebieten (blau).

1. Schröter, M., Raasch, S. and Jansen, H., New Results on the Cell Broadening Problem during Cold Air Outbreaks from High Resolution Large-Eddy Simulations, *Journal of the Atmospheric Sciences*, in press, 2005.
2. Jansen, H., Schröter, M., Raasch, S., Kang, I.-S., The influence of background wind on aspect ratios of convective cells during cold air outbreaks - Investigations with a large eddy simulation model, *Geophysical Research Letters*, eingereicht, 2005.

Simulation of Past, Present, and Future Climates

Verantwortlicher Wissenschaftler: Professor Dr. Mojib Latif

Beantragende Institution: Institut für Meereswissenschaften an der Universität Kiel

Mitarbeiter: Dr. N. Keenlyside, Dr. U. Merkel, Dr. V. Semenov, Dr. D. Dommenges, and Dr. U. Lötjens

Kooperationspartner: Max Planck Institut für Meteorologie

Förderung: ENSEMBLES (EU), DYNAMITE (EU), MOTIF (EU), and SFB-460 (DFG)

A hierarchy of climate models is used to perform simulations of past, present, and future climates with the aim of better understanding the mechanisms for climate variability, and the limits of predictability. The focus of the project is the pronounced decadal to multi-decadal variability of the North-Atlantic-European sector. These variations are manifest in the ocean and atmosphere, and are also associated with weather over Europe. Hence understanding the causes of this variability, quantifying its predictability, and developing prediction capabilities are of socio-economic interest to Europe.

The climate models used in this project are coupled atmosphere ocean/sea-ice general circulation models. These models are able to simulate the multi-decadal variability over the North-Atlantic-European, and hence provide an ideal tool for investigating it. Among the mechanisms proposed for this variability are tropical-extratropical interactions. We have investigated the impact of the tropics on the extra-tropics via the atmosphere in high-resolution atmospheric model simulations. High resolution simulations are computationally expensive, but required since the process responsible cannot be adequately represented otherwise.

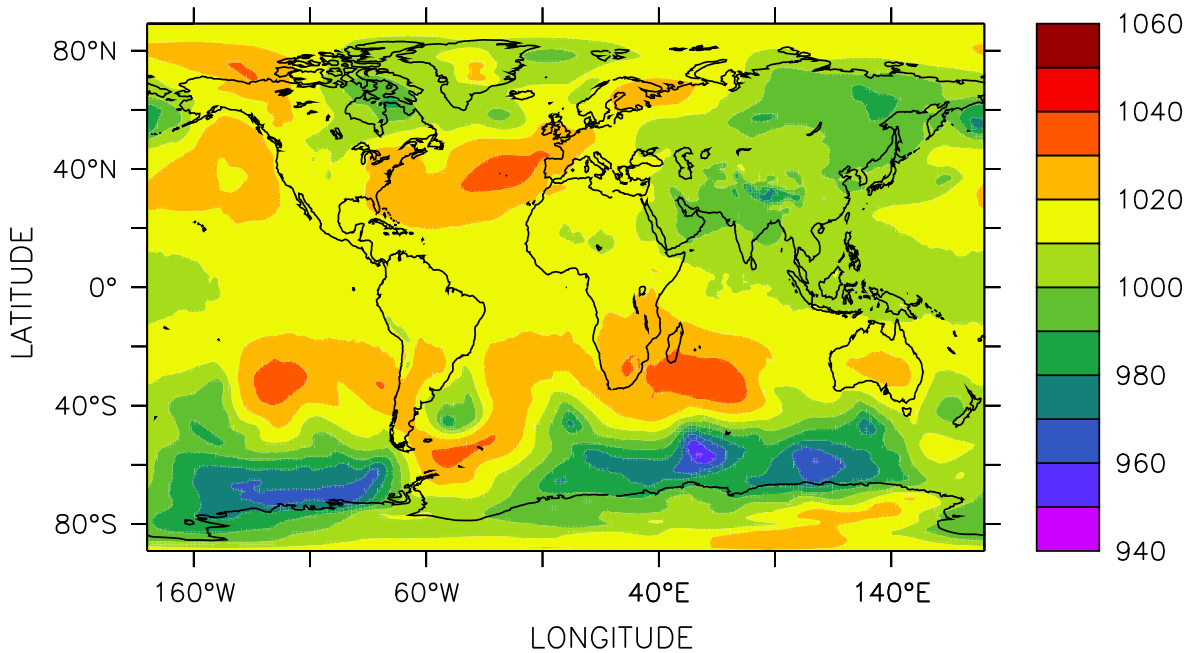
High resolution atmospheric simulations are also being performed of future climate conditions to better understand how anthropogenic climate change may impact European weather. Increased frequency of extreme weather events is perhaps one of the predicted changes of most significance to the region. Extreme weather events can only be realistically simulated at high resolution. As an example, figure 1 shows simulated developing strong high and low pressure systems in summer and winter of 1998.

Understanding how things were in the past is important too, since it provides a means to more fully understand the climate system and to test climate models. Both of which will give us confidence in projected future climate changes. Hence we are also performing simulations of past climate.

Climate models are nowadays used to make seasonal-to-interannual predictions, with clear economic benefits. There are clear indications that the multidecadal variability of the European sector may be partly predictable. Hence, in addition to investigating the mechanisms for the multidecadal variability, we are also investigating the extent to which climate models can predict this variability. Such a capability has also clear economic benefits.

1. Renner, S., M. Latif, and U. Merkel: The sensitivity of the ECHAM5 model to glacial boundary conditions and horizontal resolution, in preparation, 2005
2. Semenov, V.: The role of Barents Sea inflow for Arctic climate variability, in preparation, 2005

Sea Level Pressure (hPa), 18-Jun-1998, 06:00



Sea Level Pressure (hPa), 13-Dec-1998, 06:00

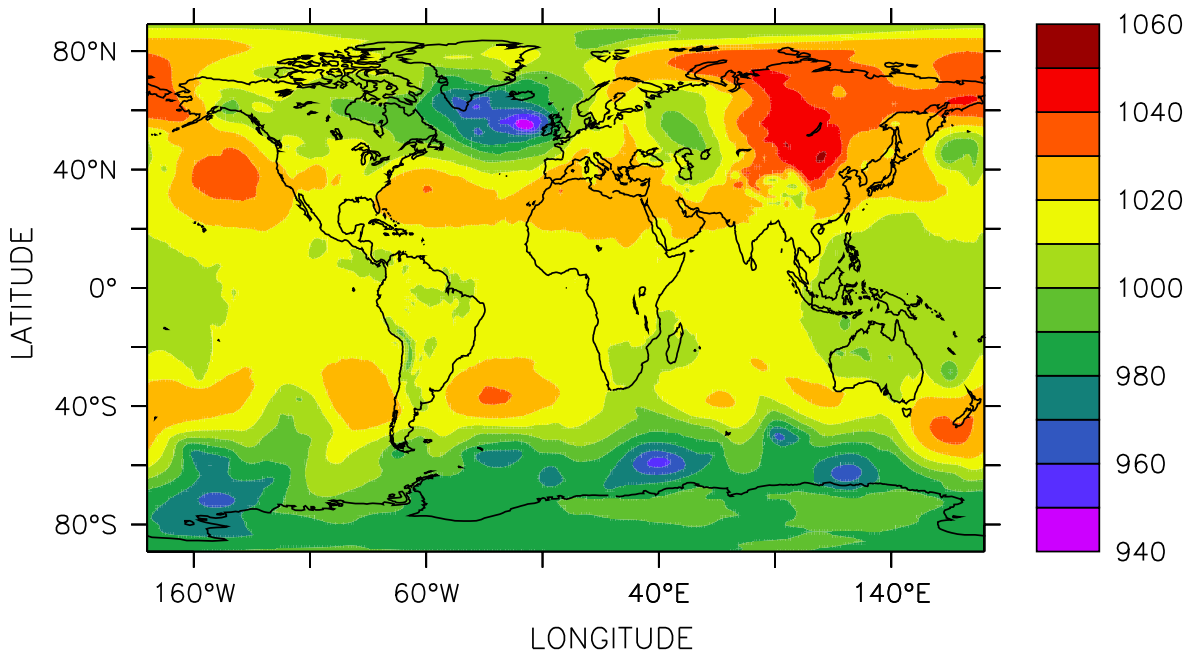


Abbildung 1: Upper: Sea level pressure anomalies for a day in boreal summer 1998, with a strong high pressure system developing in the Atlantic. Lower: Sea level pressure anomalies for a day in boreal winter 1998, with a strong low pressure system developing in the Atlantic.

Ingenieurwissenschaften

Aktive Beeinflussung der Strömungsablösung in axialsymmetrischen Diffusoren

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr.–Ing. Frank Thiele

Beantragende Institution: Hermann–Föttinger–Institut für Strömungsmechanik, TU Berlin

Mitarbeiter: Dr.–Ing. Erik Wassen

Kooperationspartner: Institut für Luft– und Raumfahrt, TU Berlin

Förderung: DFG, Sonderforschungsbereich 557

Axialdiffusoren sind einfache axialsymmetrische Bauteile, die in weiten Bereichen der Strömungs- und Verfahrenstechnik verwendet werden. Ihre Aufgabe besteht darin, die Strömungsgeschwindigkeit zu verringern bzw. den Druck in der Strömung zu erhöhen. Dies geschieht durch eine Erweiterung des Strömungsquerschnitts auf einen größeren Durchmesser. Im Bereich der Querschnittserweiterung kann es zu einem Ablösen der Strömung und zur Ausbildung eines Rezirkulationsgebiets kommen. Für kleine Öffnungswinkel des Diffusors ist die Ablösung druckinduziert, d.h. die Strömung folgt zunächst der Kontur, löst aber weiter stromab aufgrund des positiven Druckgradienten ab. Für größere Öffnungswinkel kommt es zu einer geometrieinduzierten Ablösung, da die Strömung aufgrund der Trägheitskräfte der Kontur nicht folgen kann. Die Grenze zwischen druck- und geometrieinduzierter Ablösung liegt bei einem Öffnungshalbwinkel von $\alpha \approx 18^\circ$. Im Allgemeinen ist das Ablösen der Strömung nicht erwünscht, da dadurch der Druckverlust des Diffusors erhöht und der Wirkungsgrad der technischen Anlage verringert wird.

Um das Ablösegebiet zu verkleinern und somit den Energieverlust des Diffusors zu verringern, wurde in diesem Projekt eine gezielte Beeinflussung der Strömung untersucht. Diese Beeinflussung erfolgte in aktiver Form mittels eines periodischen Einblasens und Absaugens. Die Untersuchungen hierzu wurden mit Hilfe der Large–Eddy–Simulation (LES) durchgeführt. Dabei werden die großen turbulenten Wirbel in der Strömung direkt berechnet, während der Einfluss der kleineren Wirbel lediglich mit Hilfe eines Modells berücksichtigt wird. Für die Simulationen, die auf dem HLRN–System durchgeführt wurden, wurde eine Konfiguration mit dem oben erwähnten kritischen Öffnungshalbwinkel von $\alpha \approx 18^\circ$ bei einer Reynoldszahl von $Re_d = 10\,000$ (bezogen auf den Einströmdurchmesser d und die Einströmgeschwindigkeit \bar{v}_b) verwendet.

Zunächst erfolgte eine detaillierte Untersuchung der unbeeinflussten Grundströmung. Daran anschließend wurde die Strömung mittels Einblasen/Absaugen angeregt. Dazu wurde ein ringförmiger Schlitz verwendet, der sich unmittelbar an der Abströmkante des Diffusors befand (siehe Abbildung). Die Breite des Schlitzes betrug 2% des Einströmdurchmessers.

Insbesondere wurden mit Hilfe der Visualisierung transiente Strömungsstrukturen sichtbar gemacht, um die Auswirkung der Beeinflussung auf diese Strukturen zu untersuchen. In der Abbildung 1 sind Wirbelstrukturen für die unbeeinflusste Grundströmung sowie für den Fall mit Strömungsanregung gezeigt. Die Wirbelstrukturen wurden mit Hilfe der so genannten λ_2 –Methode visualisiert, bei der die Kerne der Wirbel sichtbar gemacht werden. Der besseren Übersicht halber ist der Diffusor in Längsrichtung aufgeschnitten und es ist nur die "hintere" Hälfte dargestellt. Für den angeregten Fall im unteren Teil der Abbildung ist der Zeitpunkt des stärksten Einblasens gezeigt, d.h. die Phase $\phi = \pi/2$. Außerdem ist die Richtung des Einblasens durch Pfeile angedeutet. Es ist zu erkennen, dass im Falle der Strömungsbeeinflussung deutlich mehr Wirbel im Bereich der Querschnittserweiterung des Diffusors vorhanden sind. Insbesondere ist ein großer Wirbel entlang der Abströmkante zu sehen, der offensichtlich durch das Einblasen erzeugt wird. Diese verstärkte Wirbelbildung ist die Ursache für einen intensivierten Impulsaustausch zwischen Kern– und Außenbereich der Strömung. Weiter stromab der Kante sind weder in der angeregten noch in der unbeeinflussten Strömung großskalige, geordnete Strukturen zu beobachten. Der durch das Einblasen erzeugte Wirbel zerfällt schnell in kleinere Wirbel, die außerdem noch ihre Orientierung ändern. Die Untersuchung der Phasenabhängigkeit der Wirbelerzeugung (ohne Abbildung) ergab, dass lediglich während der Ausblaspulse ein Effekt zu beobachten ist. Während der übrigen Phasen der Anregung scheint kein signifikanter Einfluss auf die Strömung vorhanden zu sein.

Mit Hilfe der Simulationen auf dem HLRN–Rechner konnte gezeigt werden, dass durch eine aktive Strömungsbeeinflussung über einen Ringschlitz die Rezirkulationslänge der Diffusorströmung um ca. 30–40% reduziert werden kann. Der Druckverlust wurde gleichzeitig um über 40% verringert.

Aufbauend auf dieses viel versprechende Ergebnis wurde dann eine weitere Anregekonfiguration

betrachtet, und zwar ein segmentierter Schlitz. Es wurden dazu vier Schlitzsegmente verwendet, die gleichmäßig über den Umfang verteilt waren. Dabei zeigte sich, dass bei gleichen Massenströmen die Anregung mit einem segmentierten Schlitz etwas effektiver ist als die Ringschlitzanregung. Dies liegt daran, dass sich bei den Schlitzsegmenten zusätzlich zu den oben erwähnten Querwirbeln an den Schlitz-Enden Längswirbel ausbilden, die für eine etwas intensivere Durchmischung sorgen.

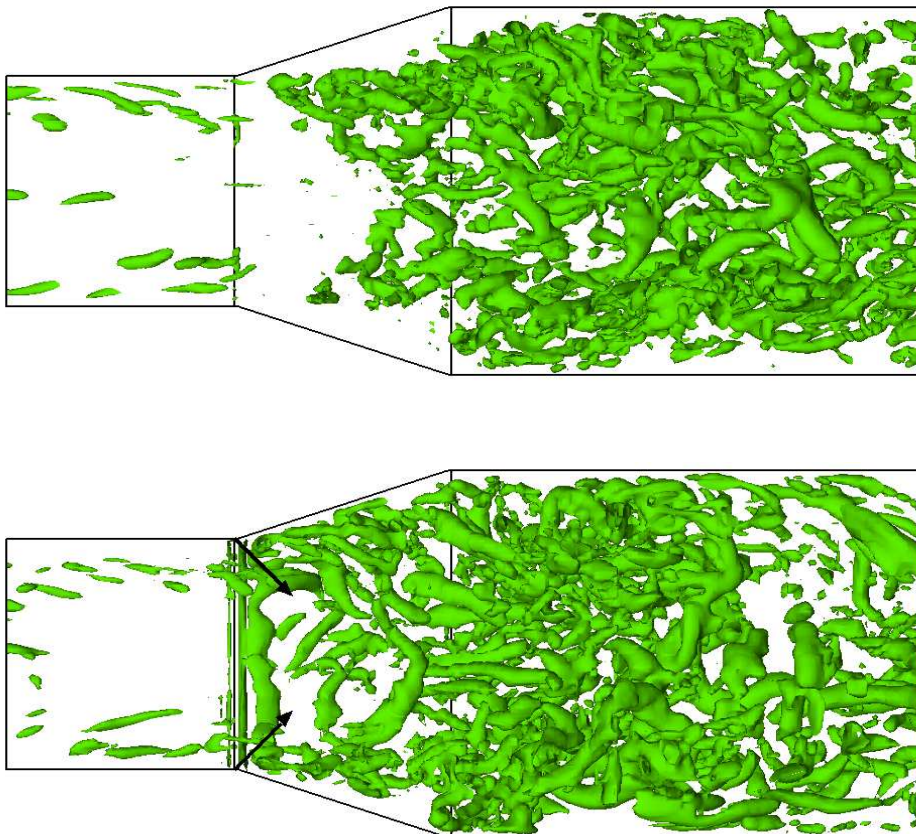


Abbildung 1: Oben: Wirbelstrukturen in der unbeeinflussten Diffusorströmung; unten: Wirbelstrukturen in der angeregten Strömung (Anregung mit Ringschlitz).

1. Wassen, E., Thiele, F.: Separation Control in Diffuser Flow using Periodic Excitation, In: New Results in Numerical and Experimental Fluid Mechanics IV, Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design, Vol. 87, pp. 327-334, Springer Verlag, 2004.
2. Wassen, E., Thiele, F.: Simulation of Separation Control in Axisymmetric Diffuser Flow. In: Proceedings of the FEDSM'03 - 4th ASME/JSME Joint Engineering Conference, Paper Nr. FEDSM2003-45574, Honolulu, Hawaii, USA, 2003.

Simulation der Spanbildung beim Hochgeschwindigkeitsspanen einer Nickelbasislegierung

Verantwortlicher Wissenschaftler: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Eckart Uhlmann

Beantragende Institution: Institut für Werkzeugmaschinen und Fabrikbetrieb (IWF), TU Berlin

Mitarbeiter: Dipl.-Ing. Ralph Zettler

Kooperationspartner: IEP Magdeburg, BAM Berlin

Förderung: DFG

In der spanenden Fertigung haben im letzten Jahrzehnt neue, hochharte, verschleißfeste Schneidstoffe sowie neue Antriebssysteme für Werkzeugmaschinen zu einer erheblichen Steigerung der nutzbaren Schnittgeschwindigkeiten geführt. Die Erhöhung der Schnittgeschwindigkeit geht mit einer Zunahme des je Zeiteinheit spanbaren Volumens und einer Verbesserung der Oberflächenqualität des Werkstücks einher. Somit ist das Hochgeschwindigkeitsspanen (High-Speed Cutting, HSC) generell von wirtschaftlicher Bedeutung. Auch die wissenschaftliche Zerspanforschung hat in den letzten Jahren einen Fortschritt zur Anwendung dieser neuen Fertigungstechnologie geleistet. Damit wurden wesentliche Grundlagen für die industrielle Einführung der HSC-Bearbeitung geschaffen.

Ziel des Projekts war es, eine deutliche Steigerung nutzbarer Schnittgeschwindigkeiten beim HSC-Drehen von Nickelbasis-Werkstoffen zu erreichen. Die FEM-Simulation des Zerspanprozesses sollte dabei eine rechnergestützte Abschätzung der bei der HSC-Bearbeitung auftretenden mechanischen und thermischen Werkzeugbelastungen sowie der Beeinflussung der Werkstückoberfläche durch den Zerspanprozess ermöglichen. Langfristig werden Simulationen den Fertigungsingenieur bei der Prozessplanung und der Werkzeugauslegung unterstützen.

Da die der HSC-Bearbeitung zu Grunde liegenden physikalischen Phänomene, z.B. die Segmentspanbildung bei hohen Schnittgeschwindigkeiten, die im Zerspanprozess auftretenden Kräfte maßgeblich beeinflussen, wurde im Rahmen des hier vorgestellten Verbundprojekts der Simulation der Spansegmentierung eine besondere Bedeutung beigemessen. Innerhalb dieses Projekts wurde beispielhaft die Nickelbasislegierung Inconel 718 (IN718) untersucht. IN718 weist die für die HSC-Bearbeitung typische Neigung zur Ausbildung von Segmentspänen auf und eignet sich somit als Modellwerkstoff. Die z.B. im Turbinenbau und bei Verbrennungsmotoren gerade erwünschte Hochwarmfestigkeit von Nickelbasislegierungen stellt für die Fertigungstechnik eine anspruchsvolle Aufgabe dar. Um die Vorteile der HSC-Bearbeitung auch für diese Superlegierungen zu nutzen, sind Kenntnisse über die im Zerspanprozess auftretenden Kräfte und Temperaturen sowie über die Beeinflussung der neuentstehenden Werkstück-Randzone durch den Bearbeitungsprozess erforderlich.

Zur Bearbeitung der Fragen der komplexen Beanspruchung des Spanens einer Nickelbasislegierung mit hohen Geschwindigkeiten wurden in enger Zusammenarbeit des IWF, der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM Berlin) und dem Institut für Experimentelle Physik der Otto-von-Guericke-Universität in Magdeburg (IEP Magdeburg) theoretische und experimentelle Ansätze aus den Bereichen Fertigungstechnik, Kontinuumsmechanik sowie der Materialphysik zusammengeführt.

Eine wesentliche Voraussetzung für die Abbildung des Zerspanprozesses durch die FEM-Simulation war die Beschreibung des Werkstoffverhaltens bei hoher mechanischer und thermischer Beanspruchung. Das der Simulation zugrundeliegende Werkstoffgesetz für das viskoplastische Materialverhalten von IN718 entstand im Rahmen eines von der DFG geförderten Projekts. Es wurde von der BAM Berlin in Zusammenarbeit mit dem IEP Magdeburg entwickelt und verifiziert. Die Basis des Werkstoffgesetzes entspricht dem Johnson-Cook-Modell mit einer dehnungs- und dehnratenabhängigen Verfestigung sowie einer thermischen Entfestigung. Eine Erweiterung dieses Basismodells ermöglichte die Berücksichtigung duktiler Schädigungsmechanismen. Mit Hilfe des so modifizierten Materialgesetzes konnten die in Experimenten des IEP Magdeburg beobachteten Effekte bei der Segmentspanbildung von der BAM Berlin mit einem 2D-Modell simuliert werden.

Aufbauend auf den Erkenntnissen hinsichtlich der Werkstoffmodellierung fanden numerische Untersuchungen an 3D-Modellen des Zerspanprozesses statt. Der qualitative Vergleich der experimentellen Ergebnisse im Außenlängs-Runddrehen mit den Simulationsergebnissen im Orthogonalschnitt hinsichtlich der auftretenden Kräfte und Spanformen zeigte prinzipielle Übereinstimmungen (Abb. 1). Der Abfall der Schnittkräfte mit steigender Schnittgeschwindigkeit war sowohl in den Experimenten als auch in den Simulationen erkennbar. Ebenso konnte in den experimentellen Untersuchungen sowie auch in den

Simulationen bei zunehmender Schnittgeschwindigkeit ein Übergang von der Ausbildung eines Fließspans zur Entstehung von Segmentspänen festgestellt werden.

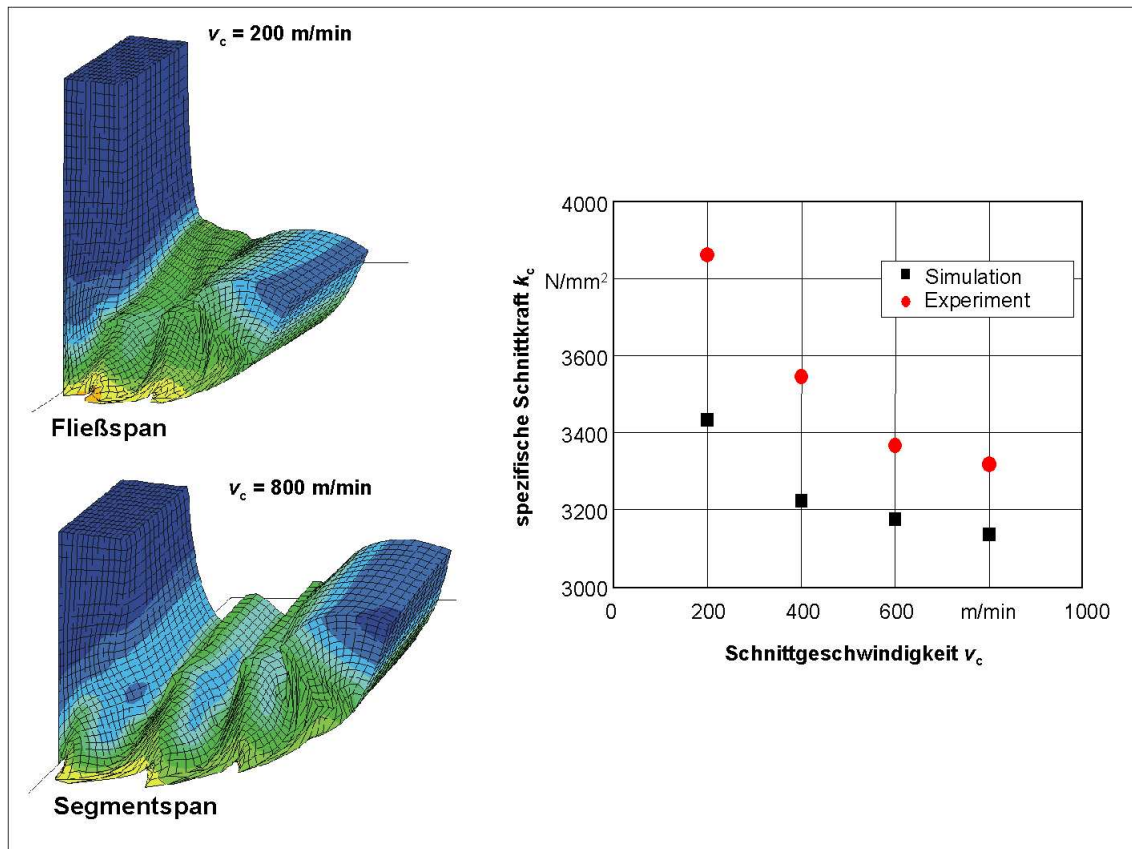


Abbildung 1: 3D-Simulation der Spanbildung von IN718

Der quantitative Vergleich zwischen Experiment und Simulation erbrachte, dass die simulierten spezifischen Schnittkräfte geringer ausfielen als die experimentell bestimmten. Dabei ist der Rückgang der simulierten spezifischen Schnittkräfte weniger stark ausgeprägt als in den Versuchen. Die Grenze des Übergangs von der Fließspan- zur Segmentspanbildung konnte in Experimenten bei einer Schnittgeschwindigkeit von etwa 100 m/min beobachtet werden. In den Simulationen hingegen kam es bei einer Schnittgeschwindigkeit von 200 m/min noch zur Fließspanbildung. Diese Unterschiede zwischen Realität und Simulation lassen sich vermutlich auf die vereinfachte Modellierung des Werkzeugs und des Werkstücks zurückzuführen.

1. Uhlmann E.; Zettler R.: Experimentelle und Numerische Untersuchungen zur Spanbildung beim Hochgeschwindigkeitsspanen einer Nickelbasislegierung; In: Tönshoff, H. K.; Hollmann, F. (Hrsg.); Hochgeschwindigkeitsspanen metallischer Werkstoffe, Wiley-VCH, Weinheim 2005, S. 404 - 425.
2. Uhlmann, E.; Zettler, R., Sievert, R., Clos, R.: FE Simulation of High-speed Turning of Inconel 718; In: Moisan, A.; Poulachon, G. (Editors); Proceedings of the 7th CIRP International Workshop on Modeling of Machining Operations, 4.-5.5.2004, Cluny, France, S. 67-74.

Numerische Simulation der Materialbearbeitung mittels Laser

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. rer. nat. Wolfgang H. Müller

Beantragende Institution: TU Berlin

Mitarbeiter: Dr. Markus Gross

Kooperationspartner: University of Cambridge (UK)

Förderung: TU Berlin

Die Zielsetzung dieses Forschungsprojektes war die Simulation der Materialbearbeitung durch Laser mit dem Schwerpunkt Laserschneiden. Das Verfahren des Laserschneidens ist weit verbreitet im industriellen Einsatz, obwohl die physikalischen Abläufe längst nicht vollständig verstanden sind. Oft werden Parameter wie Schnittgeschwindigkeit und Assistenzgasdruck anhand von Erfahrungswerten gewählt oder einfach ausprobiert. Falsch eingestellte Prozeßparameter führen jedoch zu ineffizienten Produktionsraten und im schlimmsten Fall zu unbrauchbaren Produkten, z.B. durch zu große Wärmebeanspruchung des Materials (HAZ), Riefenbildung an der Schnittoberfläche (striations), Bartbildung an der Schnittkante (adherent dross) oder zu weiter Schnittfuge (kerf). Es ist daher erstrebenswert, dieses Verfahren in der Simulation abzubilden, um die analytischen Zusammenhänge der Prozeßparametern aufzudecken und das Verständnis dieser zu erweitern. Die Simulation der Materialbearbeitung mittels Laser stellt jedoch ein Problem dar, das zur Zeit nur mit sehr hohem Rechenaufwand gelöst werden kann. Das Ziel ist die Kombination der Simulation des Gasflusses aus der Schneiddüse und der Schmelzbadformation unter der Berücksichtigung des Problems der freien Oberflächen, des Phasenüberganges (fest \rightarrow flüssig \rightarrow gas) und der thermischen Spannungen im Festkörper. Die Kombination der hohen Geschwindigkeit des Assistenzgases (Überschallgeschwindigkeit) mit den in Relation extrem kleinen physikalischen Längenskalen (mm- μ m) erzwingt sehr kurze Zeitschritte und eine hohe räumliche Auflösung bei der numerischen Lösung. Zu diesem Zweck stand den Antragstellern keine geeignete Plattform zur Verfügung, um realistische Zeitspannen (1-10s) zu rechnen. Die Möglichkeit, die Rechner des HLRN zu nutzen war somit ausschlaggebend für den Erfolg dieses Projektes.

Die Diskretisierung ist nur durch adaptive Netze zu realisieren, da es, insbesondere im dreidimensionalen Raum, nicht möglich, und auch nicht notwendig ist, den kompletten Raum (in der Größenordnung von 10cm x 10cm) mit einem Netz zu diskretisieren, das den Schmelzfluß auflösen kann (Schmelzfilmdicke 1-20 μ m). Des weiteren stellt eine bewegliche Laserquelle für statische Netze ein Problem dar. Aus diesem Grund wurde eine adaptive Netzgenerierung (AMR - adaptive mesh refinement) gewählt. Aufgrund der hohen Geschwindigkeiten und feinen Diskretisierung können nur sehr kurze Zeitschritte gerechnet werden (der Zeitschritt hängt im wesentlichen von der Courant Zahl ab, die idealerweise 0.8 betragen sollte und sich aus minimaler Diskretisierungsgröße (Gitterweite) geteilt durch die maximale Geschwindigkeit multipliziert mit dem Zeitschritt ergibt). Daher muß die Lösung der Feldvariablen für jeden dieser Zeitschritte in extrem kurzer Zeit erfolgen. Dieses ist nur mittels ausgeklügelter und optimierter numerischer Methoden möglich.

Die Ergebnisse dieses Projektes haben in eindrucksvoller Weise gezeigt, dass die Simulation des Laserschneidens auch physikalische Prozesse berücksichtigen muss, die in erster Näherung nebensächlich erscheinen. So hat zum Beispiel konvektiver Wärmetransport, der nur einen Bruchteil der Energiebilanz darstellt, einen bedeutenden Einfluss auf die Qualität der Schnittfuge (Abb.1). Die Abbildung zeigt die Oberfläche der Schnittkante, d.h. die Fläche parallel zu der Ebene aufgespannt aus der Vorschubrichtung und Laser-Orientierung. Die entsprechenden Prozessparameter und Modellvariationen sind in Tabelle 1 zusammengefasst.

Zur Zeit wird an der University of Cambridge (UK) die zweite Generation der Software entwickelt.

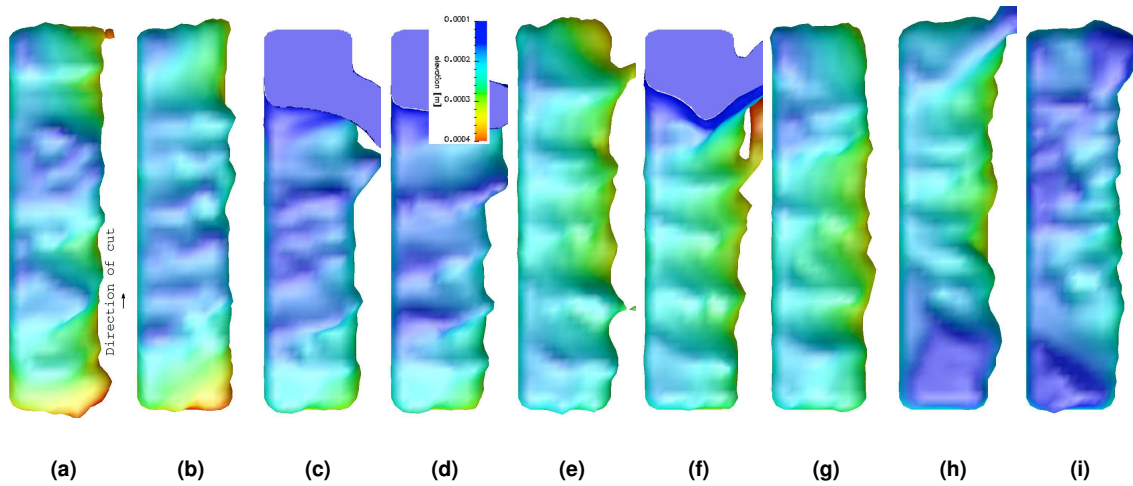


Abbildung 1: Oberflächenprofile der Schnittfugen (a)-(i)

	a	b	c	d	e	f	g	h	i
viscous forcing				✓	✓	✓	✓	✓	✓
temperature dependent conductivity						✓	✓	✓	✓
convection							✓	✓	✓
evaporation								✓	✓
nozzle diameter [mm]	1	1	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3
cutting speed [m/s]	2.5	2.5	2.5	2.5	5	5	5	5	5
standoff [mm]	0.4	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2
supply pressure [bar]	8	8	8	8	8	8	8	8	16

Tabelle 1: Prozessparameter und Modellvariationen

Erweiterung der Detached–Eddy–Simulation für komplexe Anwendungen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr.-Ing. Frank Thiele

Beantragende Institution: Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, TU Berlin

Mitarbeiter: M.-Eng. Charles Mockett, Dr.-Ing. Ulf Bunge

Kooperationspartner: Das FLOMANIA Projekt (Flow Physics Modelling — An Integrated Approach) ist eine Zusammenarbeit von Alenia, AEA, Bombardier, Dassault, EADS–CASA, EADS–Military Aircraft, EDF, NUMECA, DLR, FOI, IMFT, ONERA, Chalmers University, Imperial College, TU Berlin, UMIST und St. Petersburg State University.

Förderung: EU: FLOMANIA (Contract G4RD-CT2001-00613)

Im Rahmen des EU-Vorhabens FLOMANIA ist unter anderem die Erweiterung eines hybriden Ansatzes zur computernumerischen Simulation instationärer, turbulenter Strömungen mit massiver Ablösung erfolgt. Dieser hybride Ansatz versucht die Methode der Large-Eddy-Simulation (LES) mit der Strömungssimulation auf der Basis der Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (RANS) flexibel zu verbinden. Das Ergebnis - die Detached-Eddy-Simulation (DES) - ist eine Methode, die im wandnahen Bereich die auf vielen Modellannahmen basierende RANS und in wandfernen Bereichen mit großen turbulenten Strukturen die LES zum Einsatz kommen lässt.

Der wesentliche Vorteil ist, dass die DES auf diesem Wege die Stärken der einzelnen Methoden kombiniert und ihre Schwächen vermeidet. Darüberhinaus wird gegenüber der reinen LES in erheblichem Maß Rechenzeit eingespart, weil die dafür notwendige feine räumliche und zeitliche Diskretisierung zur Auflösung aller turbulenten Skalen vermieden wird.

Bei Anwendungen aus der Ingenieurspraxis ist dies ein entscheidendes Kriterium. Es verbleibt jedoch auch mit dieser Methode nicht selten die Notwendigkeit, auf Großrechner wie die am HLRN zurückgreifen zu müssen. Dies gilt insbesondere, wenn langwellige Prozesse mit breitem Frequenzspektrum simuliert werden sollen, und das Ergebnis eine belastbare statistische Aussage sein soll. Im vorliegenden Fall soll die Strömung um einen Tragflügel mit einem symmetrischen NACA0012-Profil bei einer Reynolds-Zahl $Re=100\,000$ untersucht werden. Der Anstellwinkel der Strömung beträgt 60° , woraus eine instationäre, hoch-komplexe Strömungsablösung im Nachlauf resultiert, die der Wirbelstraße hinter einem stumpfen Körper bei Umströmung sehr ähnlich ist. Dieser Nachlauf wird von niederfrequenten und großen Strukturen in der Dimension der Profillänge respektive der Höhe des Körpers senkrecht zur Hauptanströmrichtung dominiert, doch existieren besonders in Wandnähe ebenfalls sehr kleinskalige und hochfrequente Strukturen (grob mit 'Turbulenz' umschrieben), die einen entscheidenden Einfluss auf die gesamten Strömungsvorgänge haben. Diese kleinen Strukturen müssen folglich wie bei der LES Rechenzeit- und Speicherintensiv aufgelöst oder wie bei der RANS modelliert werden.

In Abbildung 1 sind beispielhafte Ergebnisse der zahlreichen Simulationen dargestellt. In den beiden Darstellungen der Isoflächen des Druckes sind zwei unterschiedliche momentane Zustände der Strömung gezeigt, die beide in zeitlichem Wechsel bei einer DES erhalten werden. Wendet man dagegen nur eine instationäre RANS (URANS) an, so findet man einen eher regelmäßigen Verlauf mit zum größten Teil zweidimensionalen Strukturen bei gleichem Rechenaufwand. Neben zu niedrigen Frequenzen erhält man so mit der URANS deutlich falsche Mittelwerte aller integralen Parameter, wie z.B. für den Auftriebsbeiwert. Dies erkennt man in den Diagrammen im unteren Teil der Abbildung 1, in denen der zeitliche Verlauf des Auftriebsbeiwertes gezeigt wird. Darüberhinaus ist der Verlauf des experimentellen Ergebnisses von einem charakteristischen aber unregelmäßigen Wechsel von hohen und niedrigen Amplituden gekennzeichnet, den man ebenfalls nur in den numerischen Ergebnissen der DES findet. Dieser Wechsel im Verlauf spiegelt den oben angesprochenen Wechsel von überwiegend zweidimensionalen Strukturen zu kleineren und chaotischeren, dreidimensionalen Strukturen im Nachlauf wieder.

Die Simulationen haben die Überlegenheit der DES gegenüber herkömmlichen RANS-Ansätzen gezeigt und sie erlauben Ergebnisse von der Qualität einer LES bei erheblich reduziertem Rechenzeitaufwand. Aufbauend auf diese allgemeine und bekannte Erkenntnis sind Weiterentwicklungen der DES bezüglich der verwendeten Hintergrundmodelle und implementierungstechnischer Fragestellungen im Rahmen des hier vorgestellten Projektes erfolgt, die insbesondere die Flexibilität und Einsatzbereiche der DES vergrößert und deren Fehleranfälligkeit bei unbedachtem Einsatz verringert hat.

Im Speziellen handelt es sich dabei um die Erweiterung der DES um ein kompaktes explizites al-

gebrauchtes Spannungsmodell (CEASM) als Hintergrundmodell, das auf einem Zwei-Gleichungsmodell aufbaut. Im Gegensatz zur bisher empfohlenen Methode wird bei diesem Modell das turbulente Längemaß lediglich im Dissipationsterm der Transportgleichung der turbulenten kinetischen Energie ersetzt, nicht aber in den Termen, die das Verhalten des Modells im wandnahen Bereich mittels des geometrischen Wandabstandes steuern. Damit und mit dem Wandabstand kann für dieses Modell das Beibehalten der Eigenschaften in Wandnähe garantiert werden, was einen wesentlichen Beitrag zur Robustheit und Fehlertoleranz für den industriellen Einsatz der DES darstellt.

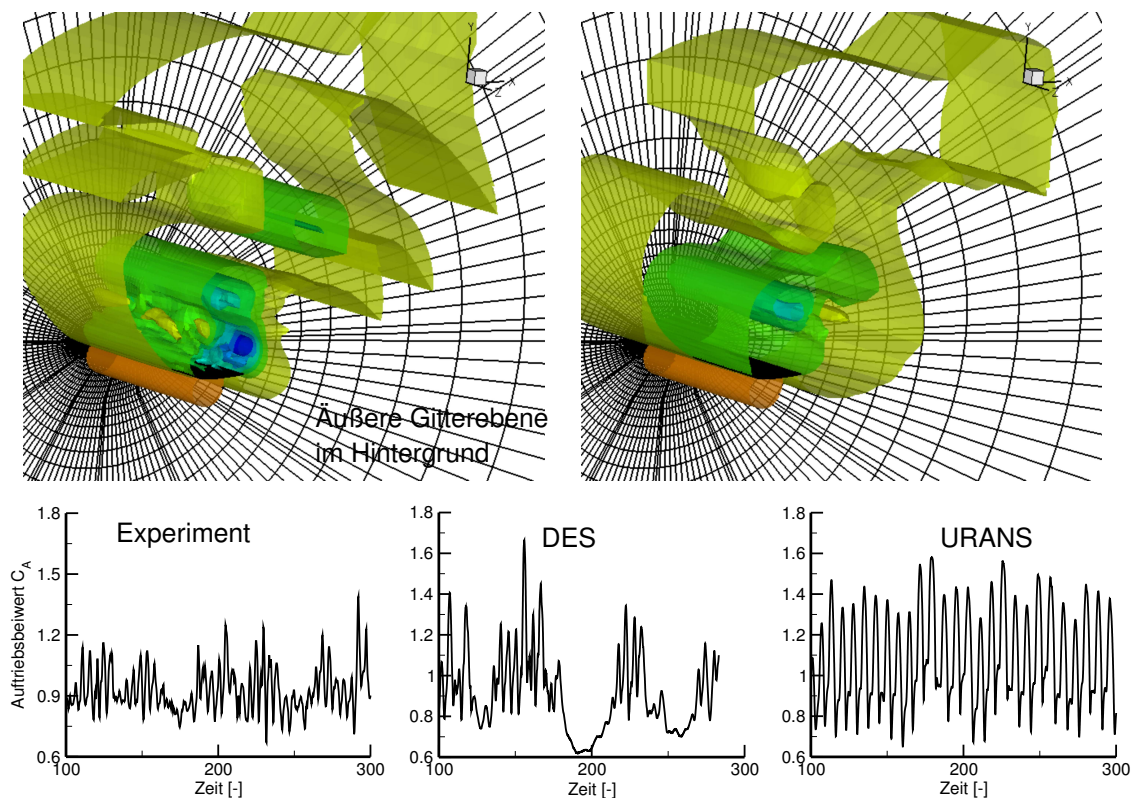


Abbildung 1: Oben: Instantane Verteilung der Isoflächen des Druckes mit überwiegend 3D Strukturen (links) und 2D Strukturen (rechts) im nahen Nachlauf des Profils auf dessen Oberseite (Anströmung von unten links unter 60° zur X-Achse). Unten: Verlauf des Auftriebsbeiwertes für Experiment (links), DES (Mitte) und URANS (rechts)

1. Bunge, U.: Numerische Simulation turbulenter Strömungen im Kontext der Wechselwirkung zwischen Fluid und Struktur. Dissertation, Technische Universität Berlin, 2004.
2. Mockett, C., Bunge, U., Thiele, F.: Turbulence Modelling in Application to the vortex shedding of stalled airfoils. Angenommen für ERCOFTAC Int. Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements - ETMM6, 23.-25. Mai, 2005, Sardinien, Italien, 2005.
3. Haase, W., Aupoix, B., Bunge, U., Schwamborn: FLOMANIA: Flow-Physics Modelling - An Integrated Approach. Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design, zur Veröffentlichung vom Springer-Verlag, 2005.
4. Yan, J., Mockett, C., Thiele, F.: Investigation of alternative length scale substitutions in Detached-Eddy Simulation. Journal of Flow, Turbulence and Combustion, 2005.

Large-Eddy-Simulation von transitionellen Tragflügeln

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr.-Ing. Frank Thiele

Beantragende Institution: Hermann-Föttinger Institut für Strömungsmechanik, TU Berlin

Mitarbeiter: Dr. Stefan Schmidt

Förderung: DFG (SFB 557)

Die rechnergestützte Entwicklung aerodynamischer Systeme und Baugruppen (z.B. Tragflügelkomponenten) ist seit langem Gegenstand weltweiter Forschungsaktivitäten. Diese haben in der letzten Dekade durch die rasante Entwicklung von Hochleistungsrechenanlagen sowie verbesserter numerischer Algorithmen und Methoden einen deutlichen Fortschritt erfahren.

So wurden auf dem Gebiet der Turbulenzmodellierung verschiedene direkte Verfahren auf aerodynamische Fragestellungen angewendet, die ohne ausreichende Rechenleistung undenkbar wären. Diese Methoden sind in der Lage, mehr Details der zugrunde liegenden Strömung (z.B. Rückströmgebiete und Wirbelstrukturen) in ihrer räumlichen und zeitlichen Entwicklung direkt zu erfassen. Ferner kann eine detaillierte Analyse der Strömung einer Verbesserung der strömungsphysikalischen Modellbildung zu Gute kommen.

Für die Verwendung numerischer Methoden im Entwicklungsprozess müssen diese jedoch gegen abgesicherte Vergleichsdaten (z.B. Experiment) abgeglichen bzw. validiert werden. Die Untersuchungen dieses Projektes haben daher zum Ziel, durch 3-dimensionale Strömungssimulationen eines Tragflügelprofils das numerische Verfahren hinsichtlich der Einsetzbarkeit für zukünftige Fragen zu validieren.

Gegenstand der Untersuchungen ist ein Einkomponenten-Tragflügelprofil (Onera-A, [2]) bei 13 Grad Anstellwinkel (Bereich maximalen Auftriebs), welches eine Hinterkantenablöseblase ausbildet, die sich bei weiterer Anstellung zur Vorderkante hin vergrößert und in letzter Konsequenz zu einem totalen Strömungsabriss auf der Profilerseite führt, welcher natürlich in der Praxis um jeden Preis vermieden werden muß. Der zuverlässigen Vorhersage dieser Hinterkantenablösezone kommt daher eine zentrale Bedeutung hinsichtlich der zuverlässigen Anwendbarkeit des numerischen Verfahrens im aerodynamischen Entwicklungsprozess zu.

Für die Grobstruktursimulation des Tragflügelprofils wurde zunächst ein im Rahmen des europäischen LESFOIL-Projektes entwickeltes Feinstrukturmodell [3] in das Verfahren implementiert, welches bereits erfolgreich für ähnliche Strömungskonfigurationen eingesetzt worden ist. Die Validierung auf Basis einer 3D-Kreiszyliinderumströmung ($Re=3900$) zeigt im Vergleich zu bereits in das Verfahren integrierten Modellen Schwachstellen in Bezug auf die turbulente Dissipationsrate durch das Turbulenzmodell, was zu einer erhöhten turbulenten kinetischen Energie und damit zu einer Verkürzung des Ablösegebietes im Nachlauf des umströmten Körpers führt.

Im Hinblick auf die Vorhersage der relativ kleinen Ablöseblase an der Tragflügelhinterkante ist daher zweifelhaft, ob dieses Modell überhaupt in der Lage ist, eine Ablöseblase vorherzusagen. Daher ist von den Antragstellern eine Modifikation des langjährig erprobten Smagorinsky Modells vorgeschlagen worden, welches bei ähnlichen Fragestellungen eine Hinterkantenablösung wiedergibt [4, 5]. Diese spezielle Modellierung wurde zugunsten einer universelleren Modellbildung aufgegeben. Aufgrund des enormen Rechenzeitbedarfes einer transienten Profilsimulation können wegen limitierten Rechenkontingentes keine vergleichenden Modellanalysen mit anderen Modellen durchgeführt werden. Die aktuelle Simulation hat rund 30% der geplanten physikalischen Zeit absolviert.

Die Schubspannungsverteilung auf der Profilerseite (Abb. 1) vermittelt einen Eindruck von der Dynamik der wandnahen Strömungsstrukturen auf der Saugseite des Profils. Ab einer Profiltiefe von ca. 12%c schlägt die laminare Strömung von links kommend in den turbulenten Strömungszustand um. Dieses als Transition bezeichnete Verhalten wird durch strömungsinhärente Störungen verursacht, die an Größe zunehmen und zu einer dreidimensionalen Ausbildung dieser sog. Tollmien-Schlichting-Wellen und schließlich zum Strömungsumschlag führen. Diese Strukturen wachsen in ihrer Größe an und verschmelzen miteinander stromab.

Die Abbildung 2 zeigt die Druckverteilung um das Profil mit der typischen Ausbildung der Saugspitze auf der Profilerseite und dem anschließenden Druckanstieg zur Abströmhinterkante. Eine Hinterkantenablösung wird durch einen horizontalen Druckverlauf charakterisiert, der in der laufenden Simulation noch nicht zu erkennen ist. Die Vergleichsdaten aus dem LESFOIL-Bericht [1] zeigen die Unterschiede der aktuellen Simulation und den Resultaten von Sagaut Onera-M3.

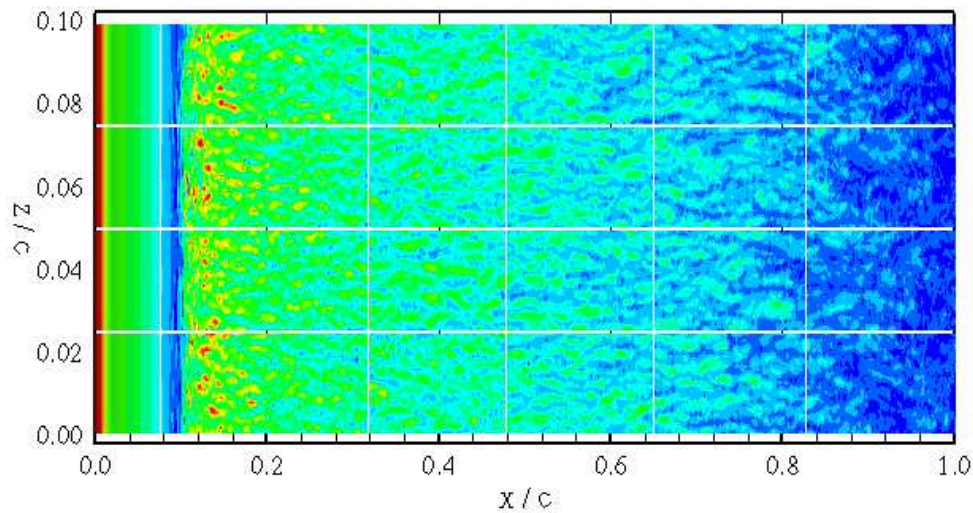


Abbildung 1: Schubspannung auf der Saugseite des Tragflügelprofils

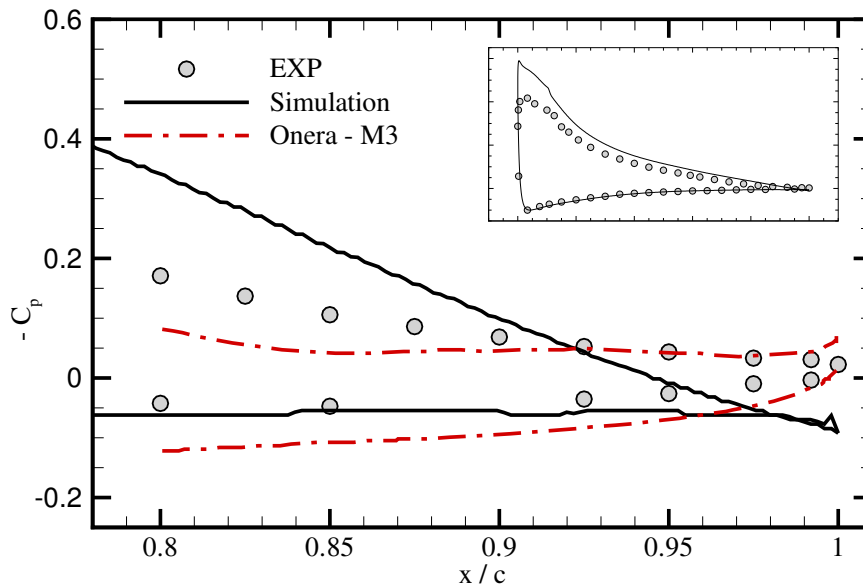


Abbildung 2: Druckverteilung um das Tragflügelprofil

1. L. Davidson, D. Cokljat, J. Fröhlich, M. Leschziner, C. Mellen, and W. Rodi. In *LESFOIL: Large Eddy Simulation of Flow Around High Lift Airfoil*, volume 83 of *Notes on Numerical Fluid Mechanics, and Multidisciplinary Design (NNFM)*. Springer Verlag, 2003. ISBN 3-540-00533-1.
2. I. Mary and P. Sagaut. Large Eddy simulation of flow around an airfoil near stall. *AIAA paper*, 36(1):1139–1145, 2001.
3. P. Sagaut. *Large-Eddy Simulation For Incompressible Flows*. Springer, 2000.
4. St. Schmidt and F. Thiele. Detached and large eddy simulation of airfoil flow on semi-structured grids. In R. Friedrich and W. Rodi, editors, *Advances in LES of Complex Flows, Proceedings of the EUROMECH Colloquium 412, Munich, 4.-6.10.2000*, volume 65 of *Fluid Mechanics and its Applications*, pages 255–272. Kluwer Academic Publishers, April 2002. ISBN 1-4020-0486-9.
5. St. Schmidt and F. Thiele. Detached Eddy Simulation of Flow around A-Airfoil. *J. Flow Turbulence & Combustion*, 71:261–278, 2003.

Numerische Simulation der Schallabstrahlung vom Einlauf eines Flugtriebwerks

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr.-Ing. Frank Thiele

Beantragende Institution: Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, TU Berlin

Mitarbeiter: Dipl.-Ing. Norbert Schönwald, Dipl.-Ing. Christoph Richter, Dr.-Ing. Xiaodong Li

Kooperationspartner: Institut für Antriebstechnik, Abteilung Turbulenzforschung, DLR Berlin; Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik, DLR Braunschweig; Institut für Akustik und Sprachkommunikation, TU Dresden; Institut für Aerodynamik und Gasdynamik, Uni Stuttgart; Aerodynamisches Institut, RWTH Aachen; Beihang University, Peking, VR China

Förderung: DFG-Verbundvorhaben SWING+

Die durch den Flugverkehr entstehende Lärmbelästigung ist ein ernstes Umweltproblem von großem öffentlichen Interesse. Infolge des stetig steigenden Flugverkehrs und der dadurch bedingten stärkeren Auslastung der Flughäfen mit vielen Starts und Landungen, ist Lärm zu einem zentralen Problem der zivilen Luftfahrt geworden. Für die Entwicklung und Konstruktion von neuen Flugzeugtypen ist es daher erstrebenswert, nicht nur die Flugleistungen bereits am Reißbrett zu berechnen, sondern auch die Lärmemission.

Einen wesentlichen Anteil an der Lärmemission von Flugzeugen haben die Triebwerke. In der Vergangenheit war der Strahlärm die dominierende Komponente des Triebwerkslärms. Durch die Einführung von Nebenstromtriebwerken, die zu geringeren Strahlgeschwindigkeiten und damit zu geringerem Strahlmischungsärm führte, konnte die Lärmemission deutlich verringert werden. Die immer weitere Erhöhung des Nebenstromverhältnisses hatte zur Folge, dass bei modernen Triebwerken andere Lärmkomponenten, insbesondere der Fanlärm, wesentliche Beiträge zum Antriebsgeräusch liefern.

Ziel dieses Projekts war die Prognose des ins Fernfeld abgestrahlten Fanlärms von der Quelle durch den Triebwerkseinlauf bis ins Fernfeld. Die Simulation der Schallausbreitung mit herkömmlichen CFD-Verfahren erfordert entsprechend der wiederzugehenden Wellenlängen und Frequenzen sehr feine Gitter und sehr kleine Zeitschritte. Eine Simulation der Schallausbreitung von der Quelle bis ins Fernfeld ist daher selbst mit den uns zugänglichen Supercomputern wie dem HLRN-System praktisch undurchführbar. Um dennoch eine numerische Vorhersage über den vom Einlauf eines Flugtriebwerks abgestrahlten Schalls erhalten zu können, wird das Problem in Zonen zerlegt, die entsprechend der physikalischen Gegebenheiten mit verschiedenen numerischen Verfahren behandelt werden.

Die Quellzone um den Fan und den Stator herum, in der der Schall generiert wird, wird mit den Navier-Stokes-Gleichungen modelliert und mit einem hochauflösenden CFD-Verfahren gelöst. In der sich anschließenden quellfreien Einlaufzone, in der die Schallausbreitung durch Wände beeinflusst ist, erfolgt die Modellierung der Schallausbreitung mit den linearisierten Euler-Gleichungen. Zur Lösung werden speziell optimierte Simulationsverfahren verwendet. Diese sogenannten CAA-Verfahren minimieren die erforderliche Auflösung der Diskretisierung, so dass die Simulation realer Triebwerkskonfigurationen mit den vorhandenen Supercomputern möglich wird. Die Schallausbreitung vom durch die Triebwerksgeometrie nicht mehr beeinflussten Nahfeld bis zu Beobachtern im Fernfeld erfolgt mit einem Integralverfahren auf der Grundlage der akustischen Analogie von Ffowcs Williams und Hawkings (FWH). Der numerische Aufwand dieses Verfahrens ist so gering, dass auf einem herkömmlichen PC in akzeptabler Zeit Ergebnisse erhalten werden.

Im Rahmen des Projekts wurde ein 3D-CAA-Verfahren zur Simulation der Schallausbreitung im Einlauf des Triebwerks und ein FWH-Integralverfahren entwickelt und validiert.

Mit diesen Verfahren wurde die Fernfeldemission eines Triebwerks nur aus Kenntnis der Quellen in Abhängigkeit der Fluggeschwindigkeit für verschiedene Einlaufgeometrien untersucht. Besonderes Augenmerk lag dabei auf so genannten negativ geschärften Einläufen, da in der Theorie durch die hervorragende Gondelunterkante der Schall mehr nach oben abgestrahlt wird und so die Lärmbelästigung am Boden reduziert wird. Die Simulationsergebnisse bestätigen diese Vermutung. In Abbildung 1 ist erkennbar, dass mit zunehmendem Schärfungswinkel die Schallabstrahlung in Richtung Boden reduziert wird. Gegenüber dem aus aerodynamischen Gründen positiv geschärften Triebwerkseinlauf sind Lärmreduzierungen von über 6dB, also etwa 50%, in der zum Boden gerichteten Hauptabstrahlrichtung erreichbar, was eine erhebliche Lärmeminderung darstellt.

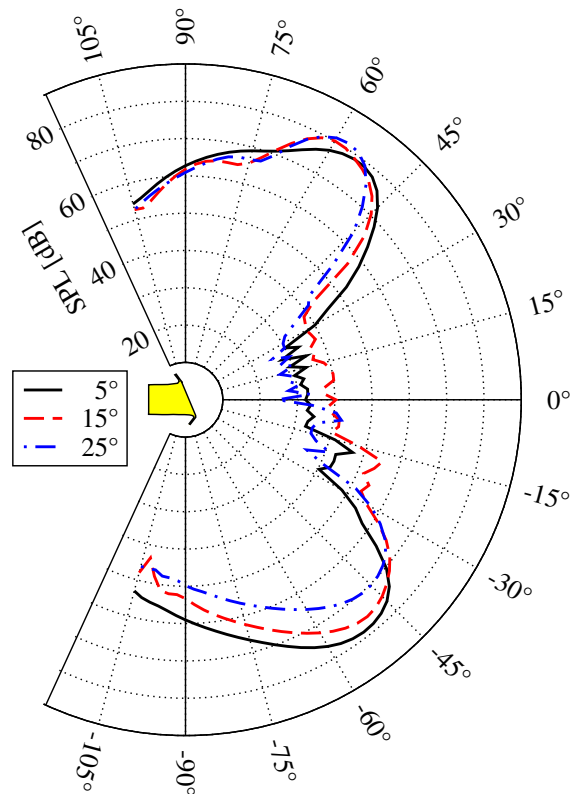


Abbildung 1: Richtcharakteristik des abgestrahlten Schalls für verschiedene Schärfungswinkel

Es konnte gezeigt werden, dass mit dem vorgestellten Verfahren unter Zuhilfenahme des HLRN-Supercomputers eine Vorhersage des abgestrahlten Schalls von Einlauf eines realen Flugtriebwerks möglich ist und durch Geometrievariationen eine große Lärmreduktion erreicht werden kann.

Lärmreduktion und aerodynamische Anforderungen stehen oft im Widerspruch. Um einen guten Kompromiß zwischen Akustik und Aerodynamik zu erzielen, ist für die Zukunft angedacht, ein Werkzeug zu entwickeln, das es erlaubt, mit Hilfe von CAA- und CFD-Simulationen über einen Feedback-Algorithmus die Bauteil-Geometrie zu optimieren. Damit ließe sich die Konstruktion leiser Flugzeugkomponenten erheblich effizienter gestalten.

1. X. Li, C. Schemel, U. Michel, F. Thiele: On the azimuthal mode propagation in axisymmetric duct flows, AIAA/CEAS Paper 2002-2521, 2002.
2. X. Li, N. Schönwald, J. Yan, F. Thiele: A Numerical Study on the Acoustic Radiation from a Scarfed Intake, AIAA/CEAS Paper 2003-3245, 2003
3. N. Schönwald; C. Schemel; D. Eschricht; U. Michel; F. Thiele: Investigation on the Sound Propagation and Radiation from Aero-Engine Intake, Proceedings of DFG - BMBF 4th Aeroacoustics Workshop SWING, Aachen, 2004.

Numerische Simulation der Umströmung eines Zylinderstumpfes

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr.-Ing. Frank Thiele

Beantragende Institution: Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, TU Berlin

Mitarbeiter: Dipl.-Ing. Octavian Frederich, Dr.-Ing. Erik Wassen

Kooperationspartner: Institut für Maritime Systeme und Strömungstechnik, Uni Rostock; Institut für Luft- und Raumfahrt, TU Berlin; Institut für Visualisierung und Interaktive Systeme, Uni Stuttgart; viele weitere Projektpartner aus dem SPP

Förderung: DFG SPP-1147 „Bildgebende Meßverfahren für die Strömungsanalyse“

Projektzielsetzung und fachspezifische Bedeutung

Als Referenzfall und Leitexperiment einer komplexen dreidimensionalen und instationären Strömung, wird das zeitlich-räumliche Strömungsfeld der Umströmung eines Zylinderstumpfes mit Endplatte mittels hochauflösender Verfahren numerisch simuliert. Die Simulationen liefern sämtliche Strömungsgrößen im gesamten Gebiet mit einer hohen zeitlichen und insbesondere räumlichen Auflösung. Die Ergebnisse der Simulationen dienen als Datenbasis und Validierungsgrundlage für die experimentellen und „bildgebenden“ Meßverfahren im DFG-Schwerpunktprogramm. Mit dem Programm soll die Strömungsmeßtechnik vorangetrieben und auf ein höheres Leistungsniveau gebracht werden, wobei bildgebende Meßverfahren zur Gewinnung flächenhafter bzw. räumlicher Informationen in stationären und instationären Strömungen im Vordergrund stehen.

Da eine Direkte Numerische Simulation (DNS) auf Basis der vollständigen strömungsmechanischen Bilanzgleichungen bei der vorliegenden Reynoldszahl von ca. 200 000 selbst auf gegenwärtigen Höchstleistungsrechnern nicht alle zeitlichen und räumlichen Skalen auflösen kann, bieten sich Modellierungsansätze wie Large-Eddy-Simulation (LES) und Detached-Eddy-Simulation (DES) an. Hierzu wurde die vorliegende Strömungskonfiguration mit strukturierten Gittern vernetzt, womit eine Unterteilung des Strömungsfeldes in mehrere Blöcke relativ einfach ist. Dadurch lassen sich alle Vorteile ausnutzen, die sowohl Lösungsalgorithmen auf strukturierten Gittern als auch das Domain-Decomposition für massiv parallele Rechner bieten.

Wesentliche Ergebnisse und erzielte Fortschritte

Die Konfiguration des Leitexperimentes wurde in reduzierter Form schon am Institut für Maritime Systeme und Strömungstechnik (MST) der Universität Rostock experimentell untersucht. Die in den ersten Schritten mit Detached-Eddy-Simulation auf relativ grobem Gitter (ca. 1 Mio Gitterpunkte) durchgeführten numerischen Untersuchungen führen zu einer guten Übereinstimmung mit den dort erzielten experimentellen Ergebnissen. Es konnte gezeigt werden, daß die einzelnen Komponenten des komplexen Wirbelsystems gut wiedergegeben werden und daß dieses hochgradig instationär ist.

In weiteren Schritten wurde ein an das Problem angepaßtes Simulationsgitter mit $12.3 \cdot 10^6$ Gitterpunkten für die hochauflösenden Simulationen generiert. Aufgrund des hohen Bedarfs an Hauptspeicher von ca. 31 GB und der notwendigen Simulationszeit für die statistische Auswertung des instationären Strömungsfeldes von ca. 110 000 CPU-h je Testfall werden die Simulationen auf dem Höchstleistungsrechner des HLRN verteilt auf 42 Prozessoren durchgeführt. Die Ergebnisse aus der Large-Eddy-Simulation auf dem angepaßten Gitter zeigen eine hervorragende Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus dem zugehörigen Experiment. Erste instationäre Datensätze wurden visualisiert und stehen zur weiteren Verarbeitung durch bildgebende Meßverfahren zur Verfügung. Zur Untersuchung des Einflusses modellierter turbulenter Skalen und der Vergleichbarkeit verschiedener Ansätze sind weitere Simulationen mit DES und „grober“ DNS (LES ohne Feinstrukturmodell) angelaufen.

Abbildung 1 zeigt instationäre und zeitlich-gemittelte Wirbelstrukturen (λ_2 -Isoflächen) – vorhergesagt durch die Large-Eddy-Simulation. Während in der Momentaufnahme die Instationarität der Strömung verdeutlicht wird, ist im letzteren Fall das detektierte Wirbelsystem zu erkennen. Der Rezirkulationswirbel auf der Zylinderoberseite, die seitlichen Kopfwirbel, die Scherschichten aus der seitlichen Ablösung am Zylinder, die Rezirkulation auf der stromabgewandten Seite des Zylinders und der Hufeisenwirbel

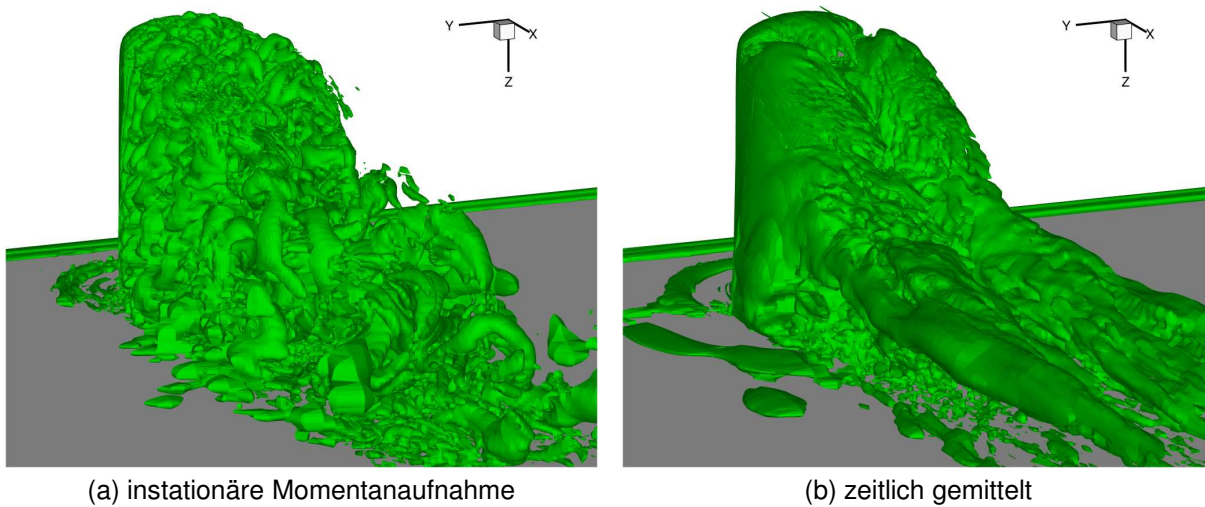


Abbildung 1: Visualisierung von Wirbelstrukturen (λ_2 -Isoflächen)

in Bodennähe bilden dieses Wirbelsystem. Diese Strukturen sind im instationären Schnappschuß nur schwer identifizierbar.

Ausblick und mögliche Anwendungen

Im weiteren Verlauf des Projektes steht, neben dem Abschluß der Simulationen, der Vergleich der numerischen Ergebnisse mit den experimentellen Untersuchungen im Vordergrund. Der Vergleich soll dabei sowohl qualitativ als auch quantitativ erfolgen.

Längerfristig ist es notwendig, Voraussetzungen und Details der Strömungskonfiguration zu untersuchen. Im Einzelnen soll dabei der Einfluß fixierter Transition auf der Platte und die durch die Ablösung fixierte Transition am Zylinder untersucht werden. In Ergänzung dazu werden erstmalig höhere statistische Momente (Tripelkorrelationen) zwischen Experiment und Simulation verglichen, wobei diese sehr lange Rechenzeiten bis zur Konvergenz benötigen werden, so daß weiterer Bedarf an massiv-paralleler Simulationszeit notwendig ist. Im Hinblick auf den mittelfristigen industriellen Einsatz von DES ist besonders die Frage nach Rechenzeiterparnis und Güte der Lösung mit DES im Vergleich zur LES von großem Interesse.

Die instationären Daten werden Projektpartnern im Schwerpunktprogramm dazu dienen, ihre Visualisierungsmethoden zu validieren und an realen Datensätzen zu erproben. In Zusammenarbeit mit anderen Projektgruppen sollen dabei auch Anforderungen und Verbesserungen für Visualisierungswerkzeuge erarbeitet werden.

Die hochaufgelösten Simulationen dienen zur gegenseitigen Validierung von Experiment und Simulation, können aber auch nach erfolgtem Abgleich zur Validierung und Modellierung vorhandener sowie neuer Simulationsverfahren bzw. LES-Feinstrukturmodelle verwendet werden. Ein solcher Benchmark-Fall, bei dem auch höhere statistische Momente verglichen werden sollen, bietet außerdem ein Potential zur Validierung zukünftiger Entwicklungen im Bereich der Reynoldsspannungsmodelle.

1. Frederich, O., Wassen, E. & Thiele, F.: Flow simulation around a finite cylinder on massively parallel computer architecture. Int. Conf. on Parallel CFD, Washington, 24-27. Mai 2005.
2. Frederich, O., Wassen, E. & Thiele, F.: Large-Eddy Simulation of the flow around a wall-mounted finite cylinder. ERCOFTAC Workshop Direct and Large-Eddy Simulation 6, Poitiers, 12-14. September 2005.
3. Bunge, U., Frederich, O., Schönwald, N., Wassen, E. & Thiele, F.: CFD-Entwicklungen und Arbeiten des HFI am HLRN. In: Proceedings of the HLRN-Workshop Hannover, 2004.

Strömungssimulation um ein generisches Kraftfahrzeugmodell mit aktiver Beeinflussung des Ablösegebietes

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr.–Ing. Frank Thiele

Beantragende Institution: Hermann–Föttinger–Institut für Strömungsmechanik, TU Berlin

Mitarbeiter: Dr.–Ing. Erik Wassen

Kooperationspartner: Institut für Luft– und Raumfahrt, TU Berlin

Förderung: DFG, Sonderforschungsbereich 557

Der aerodynamische Widerstand von Bodenfahrzeugen, wie z.B. Kraftfahrzeugen, setzt sich im Wesentlichen zusammen aus dem Reibungswiderstand und dem Druckwiderstand. Je höher die Geschwindigkeit des Fahrzeugs ist, desto höher ist auch der aerodynamische Widerstand. Bei einem großen Lastkraftwagen wird z.B. bei einer Geschwindigkeit von 100 km/h ca. 65% der Antriebsenergie nur zur Überwindung dieses Widerstands aufgewendet. Während der Reibungswiderstand aufgrund der Reibung zwischen dem umströmenden Fluid und der festen Fahrzeugoberfläche entsteht, resultiert der Druckwiderstand aus einer ungleichmäßigen Druckverteilung um das Fahrzeug. Diese wird durch massive Ablösegebiete verursacht, die auf der stromab gewandten Fahrzeugseite entstehen. Diese Ablösegebiete zeigen sowohl räumlich als auch zeitlich einen sehr komplexen Aufbau, der von großskaligen Wirbelstrukturen geprägt ist. Der Druckwiderstand bildet den deutlich größten Anteil am aerodynamischen Gesamtwiderstand eines solchen Fahrzeugs. Außerdem verursacht die Wirbelablösung instationäre Kräfte auf das Fahrzeug, die die Fahrstabilität und –kontrolle negativ beeinflussen können.

Das Ziel des vorliegenden Projektes ist es, anhand eines vereinfachten Kraftfahrzeugmodells Methoden zu untersuchen, um das Nachlaufgebiet gezielt zu beeinflussen und dadurch den aerodynamischen Widerstand zu reduzieren sowie die Fahrstabilität zu erhöhen. Als vereinfachtes Modell dient der so genannte “Ahmed–Body”. Das Modell besitzt einen abgerundeten Vorderteil, einen rechteckigen Mittelbau und ein schräges Heck. Die Länge des Modells beträgt $L/H = 3.625$, die Breite $B/H = 1.351$ und der Abstand der Fahrzeugunterseite zum Boden ist $h/H = 0.174$. Der aerodynamische Widerstand dieses generischen Fahrzeugmodells resultiert zu ca. 85% aus dem Druckwiderstand. Über 90% des Druckwiderstands wiederum werden am Heck des Fahrzeugs durch das dort vorhandene Ablösegebiet verursacht. Der Heckrampenwinkel des Modells hat einen großen Einfluss auf die Wirbelstrukturen im Nachlauf und somit auf die Größe des Widerstands. Es gibt einen kritischen Winkel von $\phi \approx 30^\circ$. Unterhalb dieses Winkels existieren großskalige Wirbel, die an den schrägen Heckkanten entstehen. Diese Wirbel bewirken, dass die Strömung an der schrägen Heckrampe teilweise anliegt. Oberhalb des kritischen Winkels sind diese Wirbel nicht mehr zu beobachten. Für diesen Winkelbereich ist der Widerstand deutlich reduziert und die Strömung über dem schrägen Teil der Heckrampe vollkommen abgelöst.

Mit Hilfe der Large–Eddy–Simulation (LES) soll zunächst die unbeeinflusste Strömung um den Ahmed–Body bei einer Reynoldszahl von $Re_L = U_\infty L/\nu = 5 \cdot 10^5$ untersucht werden, wobei U_∞ die Anströmgeschwindigkeit und ν die kinematische Viskosität des Fluides ist. Dabei sind für zwei verschiedene Heckrampenwinkel von $\phi = 25^\circ$ und $\phi = 35^\circ$ die dominierenden, zeitlich gemittelten sowie instationären Strömungsstrukturen zu identifizieren. Des Weiteren wird der aerodynamische Widerstand ermittelt und die instationären Kräfte, die auf den Körper einwirken, bestimmt.

Auf der Basis dieser Erkenntnisse werden Parameter für eine aktive Beeinflussung der Strömung untersucht. Insbesondere soll hier die Strömungsanregung mittels instationärem Einblasen und/ oder Absaugen an den Körperhinterkanten zum Einsatz kommen. Dabei ist das Ziel, sowohl den zeitlich gemittelten aerodynamischen Widerstand als auch die durch die Ablösung verursachten instationären Kräfte, z.B. Seitenkräfte, zu reduzieren.

In den Simulationen auf dem HLRN-System wurde zunächst die unbeeinflusste Grundströmung um das Fahrzeugmodell bei einem Heckrampenwinkel von $\phi = 25^\circ$ berechnet. In der Abbildung 1 ist eine Momentanaufnahme der turbulenten Strömung um den Körper gezeigt. Die Strömungsrichtung ist dabei von links hinten nach rechts vorne. Die Darstellung zeigt Wirbelstrukturen, die zusätzlich mit der Größe der Geschwindigkeit (in Hauptströmungsrichtung) eingefärbt wurden. Die rote Farbe kennzeichnet hierbei hohe Geschwindigkeiten, die blaue Farbe kennzeichnet niedrige bzw. negative Geschwindigkeiten. Es lassen sich zwei Bereiche erkennen, in denen Wirbel erzeugt werden. Der erste Bereich befindet in Kopfnähe des Körpers, wo sich flache, kurze Ablösegebiete ausbilden. Der zweite Bereich ist der Nachlauf des Modells, wo die Strömung von der Körperkontur ablöst. Das Nachlaufgebiet hinter dem

Fahrzeug weist eine sehr komplexe Struktur auf. An den schrägen Hinterkanten sind die Längswirbel zu erkennen, die für den höheren Widerstand dieser Konfiguration verantwortlich sind. Außerdem bilden sich in der Scherschicht, die vom Dach des Modells ablöst, relativ regelmäßige Wirbelstrukturen aus, die in etwa parallel zur Dachkante orientiert sind.

Aus der Analyse der Dynamik dieser instationären Strukturen lassen sich Strategien für eine gezielte Beeinflussung der Strömung ableiten. In weiteren Simulationen, die ebenfalls im Rahmen dieses Projektes auf dem HLRN-System durchgeführt werden, sollen diese Beeinflussungsstrategien getestet und optimiert werden. Letztendlich soll dadurch der Widerstand des Fahrzeugs deutlich verringert werden.

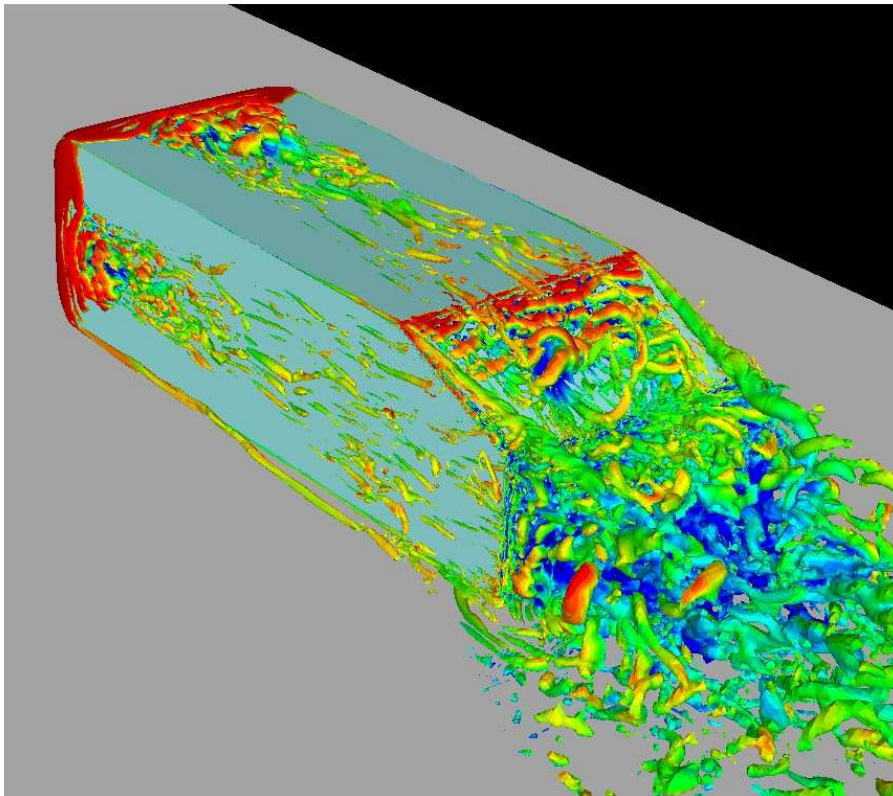


Abbildung 1: Wirbelstrukturen in der turbulenten Strömung um das Fahrzeugmodell

1. Wassen, E., Thiele, F.: Numerical Investigation of the Unsteady Wake Structure behind a Generic Vehicle, Proc. 4th Conference on Bluff Body Flows and Vortex-Induced Vibrations, 2005.
2. Brunn, A., Wassen, E., Nitsche, W., Thiele, F.: Experimental and numerical investigation of the instantaneous bluff body wake behind the Ahmed car model, Proc. Joint EWA and PivNet 2 Workshop on CFD, PIV and Experiments in Aerodynamics, 2005.

Simulation von Operationsverfahren an der Lendenwirbelsäule

Verantwortlicher Wissenschaftler: Dr.-Ing. Antonius Rohlmann

Beantragende Institution: Biomechanik-Labor, Campus Benjamin Franklin, Charité, Universitätsmedizin Berlin

Mitarbeiter: Dr. rer. medic. Thomas Zander

Förderung: DFG

Die Zahl der Wirbelsäulenoperationen ist in den letzten Jahren stark gestiegen. Verschiedene Hersteller bieten eine Vielzahl von Implantaten für den Einsatz im Bereich der Wirbelsäule an. Der Anteil der bewegungserhaltenden Implantate steigt ständig. Die Lendenwirbelsäule ist im Alltag am stärksten belastet und wird am häufigsten operiert. Mechanische Faktoren spielen sowohl für die Pathogenese als auch beim Implantatversagen eine wichtige Rolle. Kenntnisse der Wirbelsäulen-Biomechanik können helfen, den kurz- und langfristigen Operationserfolg zu verbessern. Die rechnerische Analyse der mit einem Implantat versorgten Wirbelsäule ist nicht ganz einfach. Die Geometrie der beteiligten Strukturen ist kompliziert, die nichtlinearen Materialeigenschaften der verschiedenen Gewebe sind nur unzureichend bekannt und streuen interindividuell sehr stark. Die Belastung mit Gewichts- und Muskelkräften kann nur grob abgeschätzt werden. Um dennoch Aussagen machen zu können, müssen die Rechenmodelle mit experimentell ermittelten Daten validiert werden. Die meisten Größen können in vivo nicht gemessen werden. An Präparaten können die intersegmentalen Bewegungen und intradiskalen Drücke gemessen werden. Die Kräfte in den Bändern und Bogengelenken sowie die Spannungen in den verschiedenen Strukturen, beispielsweise nach Einbau eines Implantats, können praktisch nur mit der Finite-Element-Methode bestimmt werden.

Im Rahmen eines DFG-Projekts wurde ein detailliertes Finite-Element-Modell der Lendenwirbelsäule erstellt (Abb. 1) [1]. Das Modell enthält die 5 Lendenwirbel, die dazwischenliegenden 4 Bandscheiben und die verschiedenen Bänder. Die Wirbel wurden inhomogen und orthotrop modelliert und enthalten im posterioren Bereich die Bogengelenke. Die Bandscheiben bestehen aus dem Nukleus pulposus und

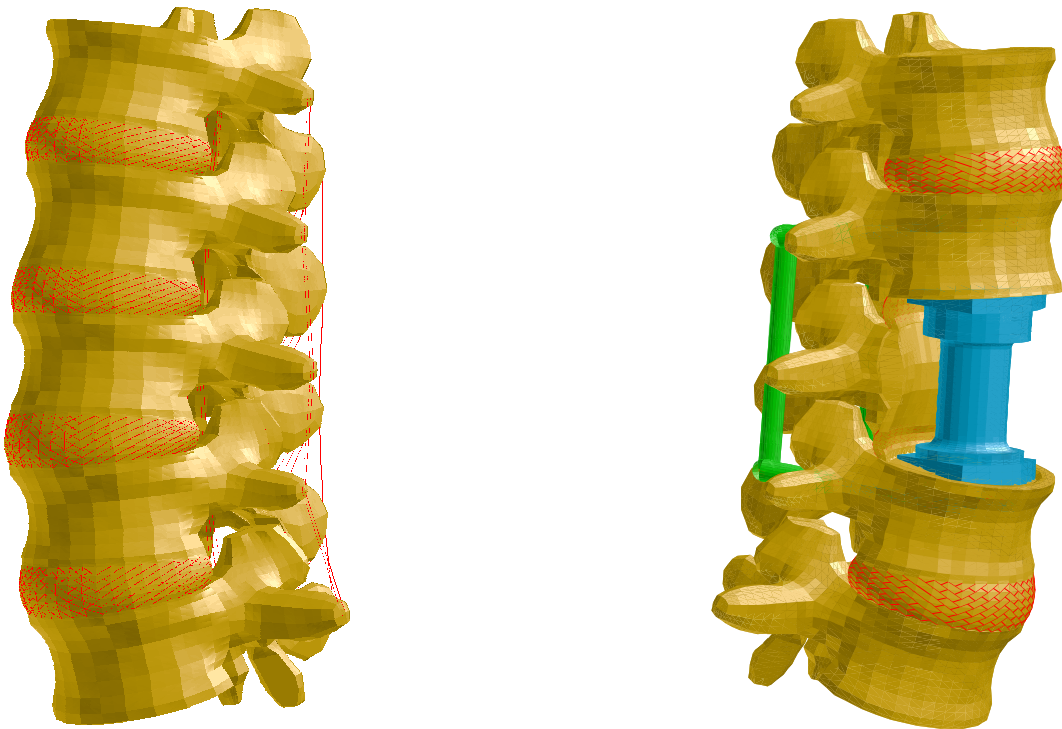


Abbildung 1: Finite-Element-Modell der Lendenwirbelsäule ohne Implantate (l.) und (r.) mit Wirbelkörperersatz (blau) und Fixateur interne (grün)

dem Annulus fibrosus. Der Nukleus wurde als inkompressibles Volumen modelliert, während für den Annulus faserverstärkte, hyperelastische Elemente verwendet wurden. Das nichtlineare Materialverhalten sowohl der Bandscheibenfasern als auch der lumbalen Bänder wurde berücksichtigt. Das Modell besitzt fast 200.000 Freiheitsgrade. Die Berechnung dieser strukturmechanischen Aufgabe muss inkrementell und hinsichtlich der vorhandenen Kontaktbedingungen, des Materialverhaltens und der großen Dehnungen nichtlinear durchgeführt werden.

Die geometrischen und materiellen Daten einer durchschnittlichen Lendenwirbelsäule wurden mit bildgebenden Verfahren bestimmt bzw. aus der Literatur entnommen. Das Modell wurde ausgiebig mit experimentell ermittelten Daten validiert. Mit Hilfe von Messergebnissen aus In-vivo-Versuchen mit telemetrischen Implantaten konnten die bisher wenig bekannten muskulären Kräfte für verschiedene statische Körperpositionen ermittelt werden.

Das Modell dient dazu, die Gegebenheiten nach verschiedenen Operationen zu untersuchen. Dazu wurden verschiedene Operationsparameter systematisch variiert und die Ergebnisse bewertet. Eine besondere Rolle spielt die Behandlung krankhafter Bandscheiben. Je nach Krankheitsbild kommen hierfür unterschiedliche Vorgehensweisen in Betracht:

Häufig wird eine partielle Bandscheibenentfernung durchgeführt, um die freigelegten Bereiche mit so genannten Cages oder mit Knochenspänen zu füllen. Zusätzlich wird der betroffene Bereich temporär mit meist dorsal eingebrachten Implantaten stabilisiert. Während des Heilungsprozesses sollen auf diese Weise die beiden benachbarten Wirbelkörper verwachsen. Dabei kann es zu Pseudarthrosen oder Wirbelkörpereinbrüchen kommen. Mit Hilfe des Modells konnte festgestellt werden, dass neben der Größe der Vorspannungskraft auch die Kontaktfläche und die Wahl der Position des Cages bzw. Knochenspans hierfür verantwortlich sein können [2].

Infolge der Weiterentwicklung der Implantatetechniken werden zunehmend häufiger bewegungserhaltende Implantate wie beispielsweise künstliche Bandscheiben eingesetzt. Die Situation nach Einsatz einer künstlichen Bandscheibe kann sich jedoch stark von der intakten Situation unterscheiden. Das Finite-Element-Modell sagt voraus, dass insbesondere die richtige Wahl der Größe des Implantats als auch das Ausmaß der Bandscheibenentfernung und der anschließende Ersatz des vorderen Längsbands wichtig zum Erreichen einer physiologischen Kinematik sind [3].

Neben der mechanischen Beschreibung weiterer diskogener Erkrankungen oder Veränderungen wie den Degenerationserscheinungen wurde und wird in diesem Projekt noch eine Reihe anderer Fragen mit klinischer oder biomechanischer Relevanz betrachtet. So wurden beispielsweise Veränderungen im Bereich der Bogengelenke nachgebildet, die Einflüsse eines kompletten Wirbelkörperersatzes und von dorsal bzw. ventral eingebrachten Stabilisierungsimplantaten untersucht [4], die Wirkungsweise so genannter dynamischer Implantate ermittelt und die Stabilisierung von osteoporotischen Wirbelkörpern mit Knochenzement simuliert.

Für eine weitergehende Analyse ist die alleinige Betrachtung des Lendenbereichs der Wirbelsäule nicht ausreichend, so dass gegenwärtig eine Erweiterung des Modells auf die Brustwirbelsäule und den Hüftbereich durchgeführt wird. Diese Erweiterung ermöglicht unter anderem die Bestimmung der Balance, die für die Beurteilung der Biomechanik des gesamten Oberkörpers erforderlich ist, jedoch mit erheblich größerem Rechenaufwand einhergehen wird. Die Ergebnisse der Untersuchungen wurden und werden in führenden Fachzeitschriften der Biomechanik veröffentlicht.

1. Zander, Th., Rohlmann, A., Calisse, J., Bergmann, G.: Estimation of muscle forces in the lumbar spine during upper-body inclination, *Clinical Biomechanics* 16, 2001, S73-S80.
2. Zander, Th., Rohlmann, A., Klöckner, C., Bergmann, G.: Effect of bone graft characteristics on the mechanical behavior of the lumbar spine, *Journal of Biomechanics* 35, 2002, 491-497.
3. Rohlmann, A., Zander, Th., Bergmann, G.: Effect of total disc replacement with ProDisc on Intersegmental Rotation of the lumbar spine, *Spine* 30, 2005, 738-743.
4. Rohlmann, A., Zander, Th., Bergmann, G.: Comparison of the biomechanical effects of posterior and anterior spine-stabilizing implants, *European Spine Journal*, 2005 (im Druck).

Numerische Simulation eines Wirbelschichtreaktors zur Holzvergasung

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. rer. nat. habil. Frank Behrendt

Beantragende Institution: Institut für Energietechnik, Technische Universität Berlin

Mitarbeiter: Dipl.-Ing. Stephan Wahrenburg, Dipl.-Ing. Birgit Wilmes

Kooperationspartner: ERK Eckrohrkessel GmbH

Förderung: BMW/AiF

Ziel dieses Projektes ist die Optimierung von mit biogenen Brennstoffen gefeuerten Verbrennungsanlagen hinsichtlich Verschlackung und Verschmutzung zur Erhöhung von Standzeit und Verfügbarkeit. Hierzu ist es grundsätzlich notwendig, die Vorgänge im Kessel so realitätsnah wie möglich zu modellieren. Die Hauptvorgänge im Kessel sind zum einen die turbulente Gasströmung samt Berücksichtigung der Partikelbahnen mitgerissener Partikel und zum anderen die chemischen Vorgänge wie Abbrand des Brennstoffs sowie Nachverbrennung reaktiver Rauchgasbestandteile in der Gasphase.

Die Chemie kann angesichts der Größe des Kessels und der 3D-Betrachtung nur mittels reduzierter Mechanismen bzw. globaler Modelle beschrieben werden. Es muss ein System von Transportgleichungen für Gesamtmasse, Impuls, Energie, Speziesmassen und Turbulenzgrößen aufgestellt werden, das einem großen partiellen Differentialgleichungssystem, welches zudem nichtlinear, gekoppelt und steif ist, entspricht. Dieses System wird mit Hilfe des kommerziellen CFD-Codes FLUENT™ unter Verwendung von Turbulenz-Modellen gelöst.

Ergebnisse

Eine gezielte Einflussnahme auf den Verbrennungsprozess und die Strömungsführung in der Brennkammer lassen eine Verminderung des Staubmitrisses und der Haftungsneigung der Partikel erwarten. Darüberhinaus kann durch eine gestufte optimal eingestellte Luftzuführung ein vergleichmäßigt Temperatur- und Geschwindigkeitsfeld sowie eine verbesserte Verbrennung der brennbaren gasförmigen und festen Komponenten erreicht werden.

Die zu variierenden Parameter sind zahlreich und müssen unter Berücksichtigung der technischen Restriktionen gewählt werden.

- Austrittsgeschwindigkeit der zugeführten Luft aus der Düse
- Düsendurchmesser
- Anstellwinkel der Düsen
- Temperatur Sekundärluftzufuhr
- Temperatur Rauchgas
- Rauchgasgeschwindigkeit
- ...

Verschiedene Konfigurationen mit variierten Parametern wurden für eine Kesselgeometrie aufgesetzt, um diese mit FLUENT™ zu lösen. Hierzu ist eine 3D-Vergitterung des Kessels notwendig und für jeden Gitterknoten müssen Gleichungen für alle oben aufgeführten Transportgrößen sowie die Bewegungsgleichungen zur Bestimmung der Partikelbahnen gelöst werden. Für eine konvergente Lösung sind mehrere tausend Iterationsschritte notwendig. Dies zeigt den enormen erforderlichen Rechenaufwand auch in Anbetracht der zu variierenden Parameter, der nur mit einem parallelisierten Code auf Mehrprozessormaschinen wie sie vom HLRN bereitgestellt werden in einem angemessenen Zeitrahmen bewältigbar ist.

Mit Hilfe geeigneter Bewertungskriterien (maximale CO_2 -, SO_2 -Bildung, minimale CO -, SO_3 - und NO_x -Bildung, maximaler Ausbrand sowie günstige Verweilzeitverteilung) konnte ein geeigneter Satz an Parametern gefunden werden. So wurden beispielsweise horizontal angestellte Düsen untersucht als eine Variante des Anstellwinkels, bei der die Aufprägung eines Dralls auf die Grundströmung resultiert. Die Sekundärluftstrahlen werden hier zum Teil in das Zündgewölbe hineingedrückt, wobei Rauchgase hoher Temperatur mitgerissen werden. Die Temperaturerhöhung beschleunigt in diesem Bereich die

Nachverbrennung der oxidierbaren Bestandteile im Rauchgas. Darüberhinaus weist diese Konfiguration die günstigste Verweilzeitverteilung und ein vergleichmäßigtetes Temperaturfeld (siehe Abbildung 1) auf.

Im Rahmen des Projektes konnten leistungsfähige Modelle zur Simulation von Strömung und Verbrennung in mit Biomasse gefeuerten Kesseln entwickelt werden, die eine verlässliche Vorhersage der Betriebsbedingungen ermöglicht. Eine quantitative Vorhersage zur Verschmutzung ist bisher nicht möglich, zumal es hier extreme Varianzen zwischen den eingesetzten Brennstoffen gibt. Allerdings wurde ein Ablagerungsmodell entwickelt und in FLUENTTM implementiert, das eine Vorhersage von Bereichen, in denen es zu verstärkten Anhaftungen kommt, ermöglicht. Hier kann mitunter durch konstruktive Maßnahmen auf diese Umstände optimierend reagiert werden.

Die bezüglich der Eindringtiefe der Sekundärluftstrahlen gewonnenen Erfahrungen können auf andere Anlagen übertragen werden. Der Vergleich unterschiedlicher Sekundärlufteindüsungskonzepte inklusive der Bewertungsmethodik der Verweilzeitverteilung hat ein vorteilhaftes Eindüsungskonzept hervorgebracht, dass in Zukunft bei allen mit Biomasse gefeuerten Eckrohrkesseln Anwendung finden wird.

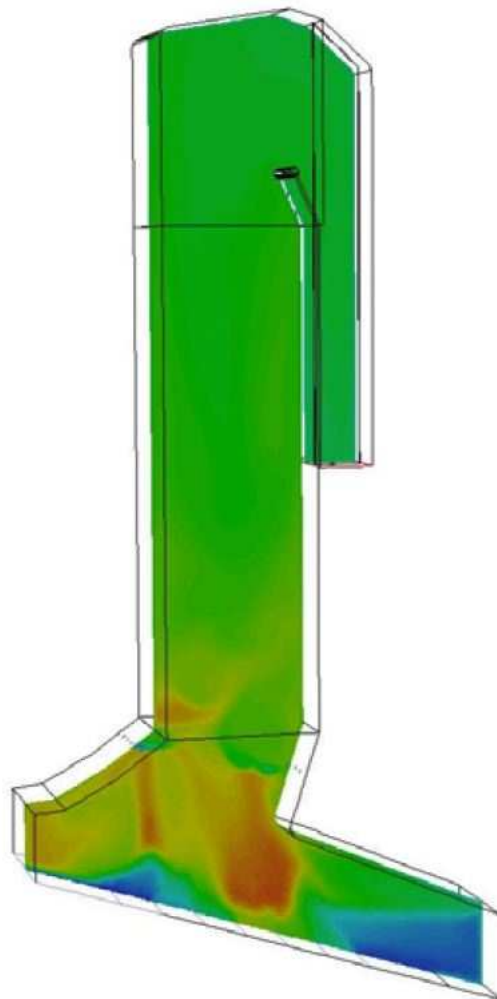


Abbildung 1: 3D-Simulation eines Kessels, 2D-Schnitt des Temperaturfeldes (Wertebereich 0-1400°C)

Räumliche FE-Analysen für Kaianlagen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Dr.-Ing. Hans Mathäus Hügel

Beantragende Institution: Arbeitsbereich Geotechnik und Baubetrieb, TU Hamburg-Harburg

Mitarbeiter: Dipl.-Ing. Björn Mardfeldt, Dipl.-Ing. Klaus-Peter Mahutka

Kooperationspartner: Hamburg Port Authority

Förderung: Eigenfinanzierung

Der Containerschiffsverkehr entwickelt sich nach wie vor rasant, die Containerschiffe nehmen immer größere Dimensionen an, im Hafengebäude wird darauf mit größeren Kaianlagen reagiert. Um den steigenden Anforderungen gerecht zu werden, ist eine ständige Weiterentwicklung und Anpassung der Kaimauerkonstruktionen und der Bauverfahren erforderlich. Es stellt sich die Frage, inwieweit sich das Trag- und Verformungsverhalten moderner Kaimauerkonstruktionen von herkömmlichen Konstruktionen unterscheidet und ob sich herkömmliche Lastansätze und Berechnungsverfahren auch für moderne Kaimauerkonstruktionen eignen.

Im Rahmen eines Forschungsprojektes wird beispielhaft das Tragverhalten der Kaianlage des Container Terminal Altenwerder (CTA) in Hamburg mit Hilfe von Computersimulationen untersucht. Dazu wird die Finite-Elemente-Methode zur numerischen Lösung des nichtlinearen statischen Randwertproblems angewendet. Das räumliche FE-Modell umfasst einen Abschnitt der Kaianlage mit einem großen Untergrundausschnitt sowie dem massiven Überbau inklusive seiner Gründung auf Ortbetonpfählen, der Kaimauer aus Stahlprofilen mit ihrem Schrägpfehlern als Rückverankerung sowie den vorgesetzten Reibepfehlern, siehe Abb. 1. Das Randwertproblem ist durch geometrische und materielle Nichtlinearität sowie nichtlineare Randbedingungen infolge wechselnder Kontaktbedingungen an den Grenzflächen Stahl/Boden und Beton/Boden charakterisiert. Hauptziel der Computersimulationen ist die Erstellung einer Klasse-A-Prognose des Verformungsverhaltens der Kaianlage und des Bodens und der Vergleich von Prognose und Messung.

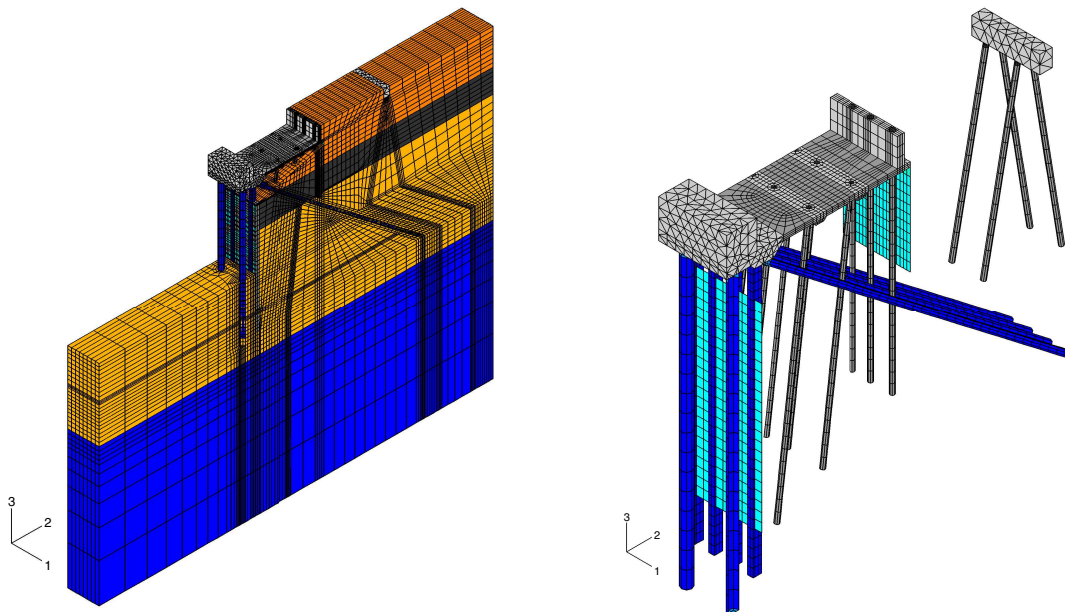


Abbildung 1: 3D FE-Modell der Kaianlage des CTA (links) mit Detail der Beton- und Stahlbauteile (rechts)

Weiterhin werden folgende Teilprobleme mit höherem Diskretisierungsgrad untersucht:

- Statische Spannungsanalyse zur Simulation des Herausziehverhaltens der Schräganker mit 3D FE-Modellen (Randwertproblem).
- Gekoppelte Spannungs-Porenwasserdruckanalyse zur Simulation der instationären Grundwasserströmung mit 2D FE-Modellen (Anfangs-Randwertproblem).

- Quasi-statische und dynamische Spannungsanalysen zur Simulation der Penetration der Betonpfähle in den Untergrund mit einem 3D FE-Modell (Randwertproblem bzw. Anfangsrandwertproblem).

Es wird das kommerzielle FE-Programm ABAQUS/Standard eingesetzt. Für Stahl und Beton werden nichtlineare hyperplastische Stoffmodelle, für Boden nichtlineare hypoplastische Stoffmodelle verwendet. Diese Modelle und die zahlreichen Kontaktoberflächenpaare des FE-Modells erfordern einen unsymmetrischen Gleichungslöser. Im FE-Programm wird das Newton-Verfahren zur Lösung der nichtlinearen Gleichungssysteme angewendet. Das FE-Programm ABAQUS/Standard wird bis Version 6.4-3 als SMP-Programm angewendet, d.h. auf dem HLRN-System wird für parallele Jobs maximal 1 Knoten mit 32 Prozessoren verwendet. Das große 3D FE-Modell erfordert bei Minimierung des I/O ca. 20 GByte Hauptspeicher. Es zeigte sich bei Vergleichsanalysen, dass das FE-Programm mit dem Tree Parallel Solver bei 16 Prozessoren für dieses Randwertproblem mit 370.000 Freiheitsgraden einen akzeptablen Speed-Up von ca. 10 erzielt. Aufgrund der eingesetzten Stoffmodelle für Boden (Hypoplastizität) muss die Lastgeschichte fein diskretisiert werden, wodurch ein FE-Job mit 16 Prozessoren etwa 7 Tage Laufzeit in Anspruch nimmt.

Ergebnisse

Die ersten Berechnungen wurden erfolgreich abgeschlossen. Ein Vergleich der Berechnungsergebnisse mit den Messergebnissen am realen Bauwerk zeigt eine überwiegende Übereinstimmung, siehe auch Mardfeldt & Grabe (2004). Es konnte gezeigt werden, dass die FEM erfolgreich zur Prognose von Beanspruchungen und Verformungen für derart komplexe Systeme eingesetzt werden kann. Eine praktische Relevanz ergibt sich z.B. aus der Anwendung der Beobachtungsmethode nach DIN 1054 (2005).

Die abgeschlossenen Berechnungen haben auch gezeigt, dass wesentliche Effekte im Tragverhalten nur durch eine räumliche Betrachtung zutreffend erfasst werden können. Die durchgeführten FE-Analysen haben einen wichtigen Beitrag zum Verständnis der aufgetretenen Besonderheiten im Tragverhalten der Kaimauerstruktur des Container Terminal Altenwerder geliefert. Mit Hilfe der FE-Analysen konnten zum Beispiel die gemessenen Ankerkraftverläufe, die durch die herkömmlichen Berechnungsverfahren nicht erfasst werden, mechanisch erklärt werden. Hierzu wurde ein einfacher Berechnungsansatz zur Abschätzung der Schrägpfehlbeanspruchung durch Aushubentlastung aus den Ergebnissen der FE-Analysen abgeleitet, siehe Grabe und Mardfeldt (2004). Die durchgeführten Analysen liefern auch einen Beitrag zur Festlegung einer wirklichkeitsnahen Erddruckumlagerungsfigur, wie sie z.B. in den Empfehlungen des Arbeitsausschusses Uferneubau (EAU) der Deutschen Gesellschaft für Geotechnik angegeben sind.

Ausblick

Am Beispiel des Container Terminal Altenwerder sollen weitere Untersuchungen durchgeführt werden, insbesondere soll der Einfluss lokaler Auskolkungen vor der Kaimauer untersucht werden. Des Weiteren ist die Untersuchung des Einflusses zyklischer Beanspruchungen auf das Tragverhalten geplant. Zusätzlich zum Container Terminal Altenwerder ist die Untersuchung weiterer Kaimauerkonstruktionen geplant.

1. Grabe Jürgen, Mardfeldt Björn (2004): Schrägpfehlbeanspruchung durch Aushubentlastung. HANSA 141(5):64–67
2. Mardfeldt Björn, Grabe Jürgen (2004): 3D FE-Analyse zum Container Terminal Altenwerder mit Vergleich, Tagungsband zum Workshop 'Kaimauern – Messungen und Numerik', Gemeinsamer Sprechtag der HTG und TUHH in Hamburg 2004, Veröffentlichung des Arbeitsbereiches Geotechnik und Baubetrieb der TU Hamburg-Harburg, Heft 7, 151–178
3. Mardfeldt Björn (2005): Analyse des Tragverhaltens der Kaimauer des Container Terminals Altenwerder, Tagungsband zum Workshop 'FEM in der Geotechnik – Qualität, Prüfung, Fallbeispiele', Veröffentlichungen des Arbeitsbereiches Geotechnik und Baubetrieb der TU Hamburg-Harburg, Heft 10, 121–146

Mehrkomponentige metallische Schmelzen und Schmelze-Kristall-Schichtpakete

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Helmar Teichler

Beantragende Institution: Institut für Materialphysik der Universität Göttingen

Mitarbeiter: Dr. M. Guerdane, Dr. K. -B. Küchemann

Kooperationspartner: I. und IV. Physikalisches Institut der Universität Göttingen, FH Karlsruhe, FZ Karlsruhe, DLR Köln, TU München, TU Chemnitz

Förderung: DFG

Der weitaus größte Anteil metallischer Werkstoffe, insbesondere auch der modernen 'maßgeschneiderten' Hochleistungsmaterialien, wird aus der Schmelze gewonnen. Insofern kommt dem Prozess der Erstarrung aus der Schmelze eine kaum zu überschätzende technologische Bedeutung zu. Die 'maßgeschneiderten' Hochleistungswerkstoffe sind in der Regel mehrkomponentige Legierungen aus einer größeren Zahl atomarer Komponenten, wobei das Wechselspiel zwischen den verschiedenen atomaren Bausteinen in weitem Umfang die speziell gewünschten Eigenschaften des Materials bestimmen. Dem steht gegenüber, daß die auf atomarer Ebene ablaufenden physikalischen Vorgänge beim Erstarren solcher Schmelzen, die maßgeblich die Eigenschaft bestimmende Mikrostruktur des Materials hervorrufen, in vielen Aspekten noch nicht verstanden sind. Das Problem ist dabei die Komplexität der Vorgänge, die auch heute noch eine detaillierte experimentelle Analyse auf atomarer Ebene verhindert. Hier kommen nun die modernen Methoden der Computermodellierung komplexer kondensierter Systeme ins Spiel, die einerseits auf der enormen technischen Steigerung der Computerleistungen und andererseits auf der deutlich verbesserten realitätsnahen Modellierung der atomaren Wechselwirkungen in kondensierter Materie basieren. Die aus der Steigerung der Computerleistungen folgenden Möglichkeiten werden im vorliegenden Projekt zusammen mit modernen Ansätzen für die interatomaren Wechselwirkungen eingesetzt, um für binäre und mehrkomponentige metallische Legierungssysteme die auf atomarer Ebene ablaufenden physikalischen Phänomene beim Kristallwachstum aus der Schmelze aufzuklären.

Zentrales Mittel unserer Analysen sind Molekulardynamik-Simulationen (MD). Dabei kommt eine auf MPI-Routinen basierende Fortran-Version des TABB-Codes zum Einsatz, ein von uns in C++ für Parallelrechner mit 'shared memory' optimierter Algorithmus mit dynamischer Lastverteilung auf die verschiedenen Knoten. Zur Parallelisierung wird das zu simulierende System in Gebiete (je nach Anzahl der Prozessoren, Probengröße und Reichweite des Potentials in Streifen, Scheiben oder Quader) zerlegt, wobei jedem Prozessor die Atome eines Gebietes zugeordnet werden. Die Computer-'Experimente' werden an 'mittelgroßen' (20000 - 50000 Atome) NiZr bzw. NiZrAl Computermodellen durchgeführt. Die simulierte Systemzeit muß in der Größenordnung von 10 bis 100 ns liegen, um relevante Aussagen über die hier untersuchten physikalischen Phänomene machen zu können. Die daraus resultierenden Rechenzeiten und Speicheranforderungen sind nur durch den massiven Einsatz von Parallelrechnern, wie vom HLRN bereitgestellt, zu bewältigen.

Die hier durchgeführten Untersuchungen lassen sich in zwei Stufen einteilen. Die ersten Untersuchungen waren methodischen Entwicklungen bezüglich Prozessführungen von MD-Simulationen und Analyseansätzen zur Ermittlung von freier Enthalpie und chemischem Potential der Schmelze als charakteristischer Kenngrößen für die treibende Kraft beim Kristallwachstum gewidmet. Hinter diesen Studien stand letztendlich die Frage, wieweit heutige MD-Simulationen - als beschränkte Modellierungen des Zeitmittels eines Systems - in der Lage sind, thermodynamische Größen wie die Entropie der Anordnung adäquat zu erfassen. Soll aus Computer-Modellierungen für Legierungen die thermische Stabilität der Schmelze gegenüber dem Kristall berechnet werden, die Liquiduslinien im Phasendiagramm, so ist Kenntnis der Entropie der Schmelze eine unabdingbare Notwendigkeit. Sollen darüber hinaus kinetische Parameter, z.B. die Erstarrungsgeschwindigkeit einer Schmelze, aus MD-Modellierungen in Abhängigkeit von den treibenden Kräften in Nicht-Gleichgewichtsanordnungen ermittelt werden, so muß eine adäquate Erfassung der Entropie und der Abweichung vom thermodynamischen Gleichgewicht gewährleistet sein. Dies exemplarisch zu testen war Ziel des ersten Teils unserer Untersuchungen. Diese Fragestellungen haben ihre Bedeutung nicht nur in der Physik, sondern in anderen Feldern der modernen Wissenschaft wie Chemie und Biologie.

Ein wesentliches Ergebnis der Untersuchungen ist die Abschätzung der Entropie der binären Schmelzen, die zwei unterschiedliche Beiträge beinhaltet: die Vibrationsentropie solcher Atome die, zu-

mindest temporär, in Käfigen von Nachbaratomen gefangen sind sowie Translationsbeiträge temporär freier Atome und die Konfigurationsentropie infolge der in der Schmelze möglichen unterschiedlichen Konfigurationen, wobei letztere auch die Auswirkungen des Vorhandenseins zweier atomarer Spezies umfaßt [1].

In logischer Folge aus diesen Ergebnissen wurde im weiteren die Struktur und Dynamik der Schmelze-Kristall Grenzflächen in den Mittelpunkt gestellt. Die Abbildung 1 zeigt eine Zr-Kristall/ Ni_xZr_{1-x} -Schmelze GF bei $1500K$ mit (100)-Orientierung der GF im Kristall. Im wandnahen Bereich der Schmelze sind Auswirkungen der Kristallstruktur auf die Ordnung in der flüssigen Phase deutlich zu erkennen. Der direkte Kontakt der Flüssigkeit mit der kristallinen krz Zr-Schicht führt zu einer Anpassung der in der Flüssigkeit vorhandenen trigonal-prismatischen Struktureinheiten an die periodische Struktur der Wand. In der Schmelze entsteht eine geordnete NiZr-Schicht von maximal 2 Gitterkonstanten Dicke, was der Reichweite des Zr-Zr-Wechselwirkungspotentials entspricht. Analyse der potentiellen Energie nahe der GF zeigt, daß die Atome an der geordneten GF eine deutlich niedrigere potentielle Energie als die Atome der selben Sorte sowohl in der Schmelze als auch im Kristall haben. Darüber hinaus wird eine drastische Abnahme der Beweglichkeit der Atome vor der kristallinen Wand festgestellt. Die hier skizzierte Beeinflussung der strukturellen Ordnung in der mehrkomponentigen Schmelze bei Kontakt mit einer kristallinen Wand - die typische Situation beim Erstarren der Schmelze - und die daraus resultierende charakteristische Veränderung der Wachstumskinetik des Kristalls, d.h. der Erstarrungskinetik der Schmelze, deuten an, welche komplexen physikalischen Phänomene bei diesen Prozessen ablaufen [2]. Diese auch aus technologischer Sicht wichtigen Prozesse aufzuklären, ist heute nur mit Hilfe von Computerstudien möglich und erfordert Höchstleistungs-Parallelrechner, wie sie vom HLRN bereitgestellt werden.

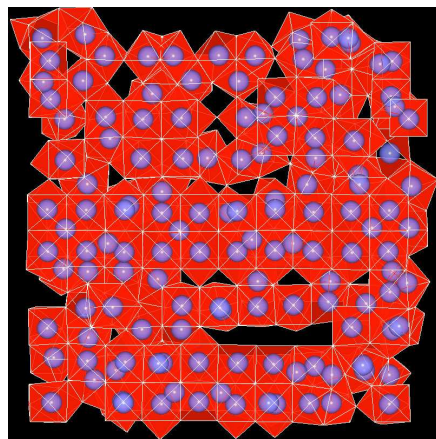


Abbildung 1: Ni-Atome in einer NiZr-Schmelze mit ihren trigonal-prismatischen Umgebungen vor der Schmelze/Kristall Grenzfläche bei (100)-Orientierung des unterliegenden krz Zr-Kristalls.

1. B. Küchemann, H. Teichler: Free enthalpy and entropy of metallic Ni_xZr_{1-x} melts from molecular dynamics simulations. Zur Publikation eingereicht.
2. M. Guerdane, H. Teichler: Structure and Dynamics of crystal/liquid interfaces in the binary Ni_xZr_{1-x} system: molecular dynamics simulations. In Vorbereitung.

Modellierung und Entwurf von erweiterten Flügelendformen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr.-Ing. Rolf Radespiel

Beantragende Institution: Institut für Strömungsmechanik, Technische Universität Braunschweig

Mitarbeiter: Dipl.-Ing. Alexander Büscher

Kooperationspartner: Airbus UK, Airbus D, Alenia, ETW, DLR, NLR, ONERA, PW, UMIST

Förderung: Europäische Union

Im Rahmen des kooperativen, europäischen Forschungsprojektes 'Modelling and Design of Advanced Wing tip devices (M-DAW)' zur Reduzierung des induzierten Widerstandes an Flügeln von Verkehrsflugzeugen wird als ein Lösungsvorschlag die Verwendung von nichtplanaren Flügelendformen untersucht. Zum Erreichen der angestrebten Widerstandsreduzierung ist eine Neuauslegung des Flügelendes erforderlich. Dies soll vor allem mit Hilfe von Navier-Stokes-Rechnungen erreicht werden. Da der induzierte Widerstand auftriebsabhängig ist und sich somit bei unterschiedlichen Flugzuständen ändert, ist die Auslegung einer Flügelendform nur für einen Arbeitspunkt zu optimieren. Soll die Widerstandsreduzierung für mehrere Flugzustände erfolgreich erreicht werden, müssen Kompromisse bei der Auslegung eingegangen werden. Dies erfordert eine ausführliche Parameterstudie mit entsprechend vielen Simulationen. Da es sich bei dem zu untersuchenden Effekt um ein dreidimensionales Problem handelt, ist auch eine dreidimensionale Modellierung eines gesamten Flugzeuges zwingend erforderlich.

Zu Beginn des Projektes M-DAW wurden sog. *blind case* Rechnungen an drei verschiedenen Flügelendformen durchgeführt. Neben einer planaren Küchemann Konfiguration werden die beiden nichtplanaren Geometrien einer Fence und eines großen Winglets verwendet. Der Zweck dieser vorangehenden Rechnungen an bekannten Geometrien bestand zum einen in der Bereitstellung von Daten, um diese anhand von zeitgleich ermittelten Windkanalergebnissen zu validieren. Eine solche Gegenüberstellung ist sowohl für alle relevanten aerodynamischen Gesamtbeiwerte als auch für Druckverteilung entlang verschiedener Flügelschnitte geschehen. Als Auszug aus diesem Vergleich zeigt die Abbildung 1 die Widerstandsbeiwertberechnungen der verschiedenen Flügelendformen, die mit dem TAU-Code, bzw. aus der ETW-Messung bereitgestellt wurden.

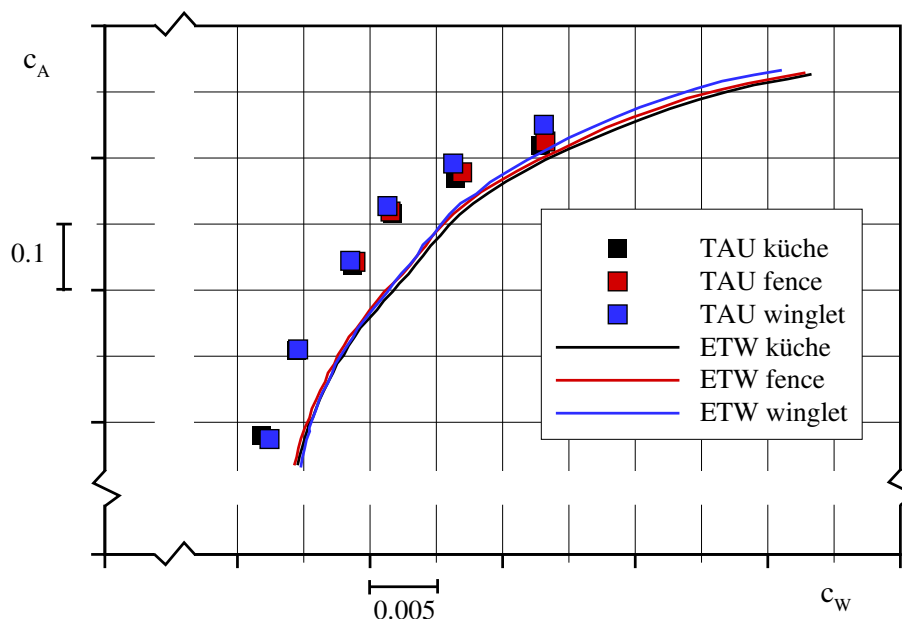


Abbildung 1: Validierung des TAU-Codes mittels ETW Windkanalmessungen

Die TAU-Ergebnisse zeigen im unteren Auftriebsbeiwertbereich eine konstante Verschiebung hin zu kleineren Widerständen. Diese Diskrepanzen sind mit Modelldeformationen und kleinen Konfigurations-

unterschieden, die aus der angewendeten Halbmodelltechnik in der Windkanalmessung resultieren, zu erklären. Die für das Vorhaben relevanten Widerstandsbeiwertdifferenzen der unterschiedlichen Konfigurationen zeigen sehr gute Übereinstimmung zwischen den experimentellen und den numerischen Ergebnissen [1].

Des Weiteren sollten, ergänzend zu den Auswertungen der Windkanalmessungen, die numerischen Ergebnisse dafür genutzt werden, die Strömungsphänomene an den unterschiedlichen zur Verfügung stehenden Flügelendformen zu untersuchen und zu verstehen. Dabei sollten vor allem die Ursachen analysiert werden, die zur Reduzierung des induzierten Widerstandes führen.

Basierend auf diesen Ergebnissen wurden Auslegungsstudien gestartet, um weitere Verbesserungen im Bereich der Widerstandsreduktion zu erreichen. Während der Vorauslegung wurde ein im Institut für Strömungsmechanik entwickeltes Datenbankverfahren genutzt. Die dafür notwendigen Validierungsrechnungen wurden mittels RANS-Simulationen zur Verfügung gestellt, welche auf dem HLRN-Supercomputer entstanden [2]. Die mit Hilfe des Datenbankverfahrens gefundenen Geometrien wurden im Anschluß für den Reiseflugfall durch RANS-Ergebnisse bestätigt [3].

Die in diesem Projekt genutzte Bewertungsfunktion der unterschiedlichen Flügelendformen basiert nicht nur auf der Reduzierung des aerodynamischen Widerstandes, sondern berücksichtigt auch eine Gewichtszunahme aufgrund der neuen Geometrie. Diese teilt sich wiederum in die beiden Anteile des Eigengewichtes der Flügelendform selbst und des die höheren Kräfte und Momente tragenden Strukturgewichtes. Die Berücksichtigung des Trimmwiderstandes läßt die Bewertungsfunktion weiter an Komplexität zunehmen.

Das auf diesem Ansatz basierende Optimum einer Flügelendform hat eine negative V-Stellung und eine starke Pfeilung. Diese geometrische Form und eine starke Entlastung des Flügel-Winglet-Bereichs begründen einen im Projekt neu gefundenen Kompromiss zwischen Aerodynamik und Strukturgewicht im Reiseflug. Eine entsprechende numerische Untersuchung für Langsamflug und Hochauftrieb laufen zur Zeit, bzw. werden bis zum Abschluss des Projektes durchgeführt worden sein. Abgeschlossen wird das Projekt M-DAW mit der Auswahl einer neuen Flügelendform, die anschließend in Windkanaltests ihre Leistungsfähigkeit beweisen muss.

1. Streit, Th.; Ronzheimer, A. and Büscher, A.: Numerical analysis of transport aircraft using different wing tip devices, New results in numerical and experimental fluid mechanics V: Notes on numerical fluid mechanics and multidisciplinary design, Springer Verlag, angenommen zur Veröffentlichung.
2. Büscher, A. and Radespiel, R.: A method for the aerodynamic analysis and design of nonplanar lifting configurations at transonic speeds, DGLR Jahrbuch, Bd. I, S. 603-612, 2003.
3. Büscher, A.; Radespiel, R. and Streit, Th.: Two-point-design of nonplanar lifting configurations using a data-based aerodynamic prediction tool, DGLR Jahrbuch, Bd. I, S. 319-327, 2004.

Simulation der Fluid–Struktur–Wechselwirkung bei der Umströmung heißer Strukturbauteile von Wiedereintrittsfahrzeugen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr.-Ing. R. Radespiel

Beantragende Institution: Institut für Strömungsmechanik der TU Braunschweig

Mitarbeiter: Dipl.-Ing. M. Hinderks

Kooperationspartner: Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, DLR

Förderung: DFG - Graduiertenkolleg 432 an der TU Braunschweig

Für künftige Transportaufgaben mit hohen Machzahlen insbesondere für den Wiedereintritt werden sicherere, leistungsfähigere und zugleich kostengünstigere Fahrzeuge gebraucht. Diese Fahrzeuge sollen aus wirtschaftlichen Gründen wiederverwendbar sein, damit sie ein geeignetes Mittel für den künftigen Raumtransport sind. Die Bestimmung der aerothermodynamischen Lasten und die damit einhergehende Auswahl von Bauweisen und Materialien spielt bei den Wiedereintrittsfahrzeugen eine zentrale Rolle. Das Vorgehen bei der Analyse der Lasten ist dabei in hohem Maße durch die Interaktion von Strömung und Struktur gekennzeichnet. Die thermischen und mechanischen Lasten führen bei heißen Strukturbauteilen wie zum Beispiel der Nasenkappe zu Unstetigkeiten im Konturverlauf und zu Veränderungen der Spaltgeometrie. Die Antwort der Strömung auf diese Konturveränderungen ist nicht-linear wegen lokal komplexer Strömungstopologien mit Ablösung, Strahlungseffekten und Hochtemperatureinflüssen.

Für die Untersuchung dieser Phänomene wird ein Verfahren mit loser Kopplung eingesetzt. Bei diesem Verfahren werden das Strömungs- und das Strukturproblem mit unterschiedlichen Gleichungslösern behandelt. Die Kopplung erfolgt über die Kopplungsbibliothek MpCCI. Die Schnittstelle zwischen den Programmen und MpCCI bilden sogenannte Ko-Prozessoren, die speziell an die jeweiligen Programme angepaßt sind. Diese Struktur gestattet es, auf verteilten Rechner-Systemen zu arbeiten, und somit auch die Ressourcen des HLRN zu nutzen. Da der größte Anteil an Rechenleistung bei einer gekoppelten Simulation für die Strömungsanalyse benötigt wird, werden diese auf dem HLRN-System durchgeführt. Die Strukturanalysen sowie Interpolationen zwischen den Teilmodellen erfolgen auf lokalen Systemen.

Im Rahmen des Projektes wurden Fluid-Struktur-Wechselwirkungsanalysen zunächst für ein generisches Nasenkappenmodell mit einem repräsentativen T-Spalt durchgeführt. Dieses Modell setzt sich zusammen aus einer Nasenkappenplatte und zwei dahinter angeordneten Stufenplatten. Damit verfügt das Modell über einen Quer- und einen Längsspalt. Die beiden hinteren Platten sind unabhängig voneinander zur Einstellung von vor- und rückspringenden Stufen in der Höhe verstellbar. Zur Validierung des verwendeten Rechenverfahrens liegen für das Modell Experimente vor, die in Hyperschallkanälen des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) in Köln durchgeführt wurden. Neben unterschiedlichen geometrischen Kombinationen wurden bei den Experimenten die Reynoldszahl und der Anstellwinkel variiert. Aus dem vorliegenden experimentellen Datensatz wurde eine Anzahl von Fällen zur Nachrechnung ausgewählt. Da nach der durchschnittlichen Zeitdauer eines Kanallaufs kein stationärer Temperaturzustand der Struktur erreicht wird, erfolgen die Nachrechnungen der Experimente instationär.

Die Abbildung 1 zeigt exemplarisch die Wärmestromverteilung bei isothermer Wand für eine Modellkonfiguration mit vorspringender Stufe als Ergebnis einer laminaren Rechnung (initialer Zustand bei Umgebungstemperatur). Zusätzlich sind Stromlinien zur Visualisierung der Strömungstopologie dargestellt. Die Parameter für diese Rechnung sind $Re = 2.9 * 10^6$, $Ma = 6$, $\alpha = 10^\circ$.

Die Abbildung weist hohe thermische Belastungen im Bereich der lokalen Staupunkte Nase und vorspringende Stufe aus. Vergleichsweise höhere Wärmeströme treten ebenfalls an überströmten Kanten auf. Die Ursache hierfür ist die Verminderung der Grenzschichtdicke an den überströmten Kanten. Vor der vorspringenden Stufe bildet sich ein Ablösegebiet aus. Der Vergleich der Ablösegebietslängen aus Experiment und numerischer Simulation liefert eine gute Übereinstimmung. Sehr gut ist die Übereinstimmung zwischen gemessenen und berechneten Drücken. Die gekoppelten Analysen liefern die zeitliche Entwicklung der Oberflächentemperatur an allen Punkten. Der Vergleich mit Infrarot-Daten zeigt, dass im Bereich lokaler Staupunkte die Temperaturanstiege gut wiedergegeben werden. Die deutlich

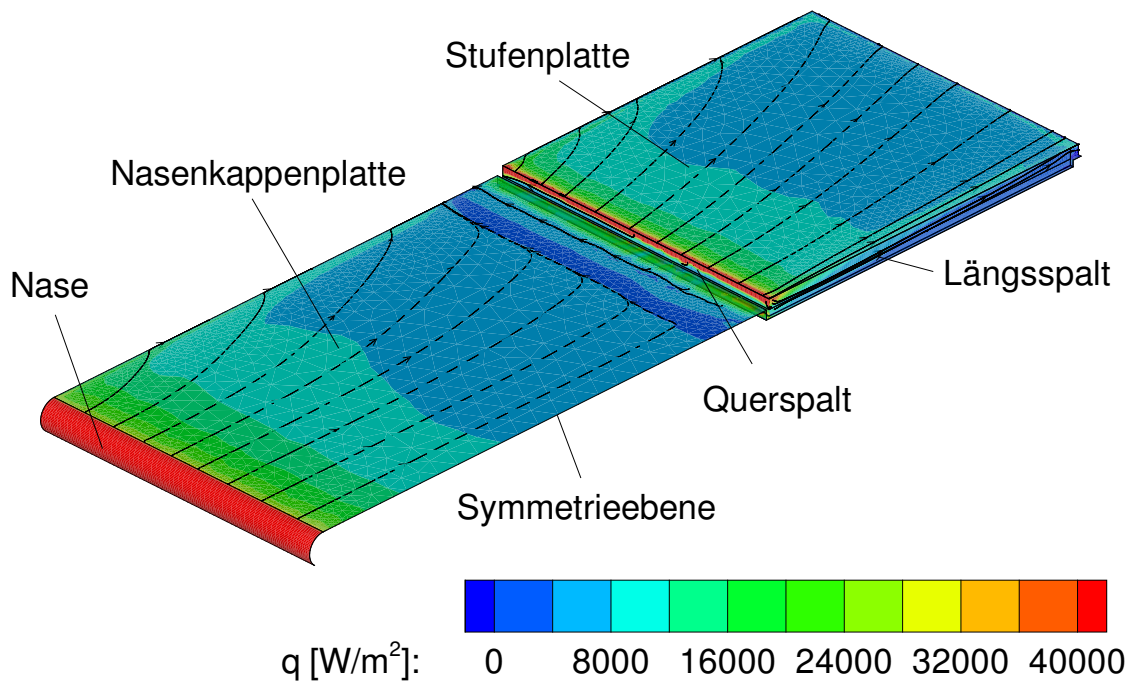


Abbildung 1: Wärmestromverteilung auf dem Nasenkappenmodell

höhere Temperatur an der Ecke der Stufenplatte als Folge der dreidimensionalen Umströmung wird ebenfalls gut erfasst. Der Vergleich für den Längsspalt zeigt, dass der Temperaturanstieg unterschätzt wird. Als mögliche Ursache wird das Auftreten turbulenter Strömung im Längsspalt vermutet. Bislang durchgeführte turbulente Rechnungen konnten die zugrundeliegenden Phänomene noch nicht hinreichend erklären. Insgesamt zeigen die Validierungsrechnungen, dass das eingesetzte Verfahren für die beabsichtigten Untersuchungen geeignet ist [1].

Nach der Qualifizierung des Verfahrens werden als Fortsetzung des Projektes Fluid-Struktur-Wechselwirkungsanalysen an einem realistischen Demonstrationsmodell im Hinblick auf Flugbedingungen durchgeführt, um strömungs- und strukturseitige Entwurfsempfindlichkeiten zu untersuchen. Dieses Modell ist die Nasenkappe der X-38. Die Kenntnis entwurfssensitiver Parameter ist hilfreich für die zukünftige Entwicklung des thermischen Schutzes von Wiedereintrittsfahrzeugen. Für die Nasenkappe der X-38 soll eine instationäre, gekoppelte Simulation des Wiedereintritts durchgeführt werden. Die Simulation basiert bis zum Einsetzen der Kontinuumsströmung auf einer generalisierten Wärmestromverteilung, die für den Punkt der maximalen Wärmebelastung ermittelt wird, der Annahme thermischen Gleichgewichts sowie chemischen Nicht-Gleichgewichts für Mach-Zahlen größer 10 und der Annahme idealer Gase für Mach-Zahlen kleiner 10.

1. Hinderks, M., Radespiel, R., Gülhan, A.: Simulation of Hypersonic Gap Flow with Consideration of Fluid Structure Interaction, AIAA paper 04-2238, 34th Fluid Dynamics Conference and Exhibit, Portland, 2004.

Dreidimensionale Simulation von komplexen turbulenten Schmelzenströmungen in Induktionsöfen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr.-Ing. Egbert Baake

Beantragende Institution: Institut für Elektrothermische Prozesstechnik, Universität Hannover

Mitarbeiter: Dipl.-Phys. Andrejs Umbraschko

Kooperationspartner: Prof. Dr. Phys. Andris Jakovics, Laboratory for Mathematical Modelling of Environmental and Technological Processes, University of Latvia, Latvia

Förderung: Eigenfinanzierung durch das Institut

Induktionsöfen werden in vielen Industriezweigen zum Schmelzen qualitativ hochwertiger Metalle, Keramiken und Gläser verwendet. Dabei bewirken die durch eine wechselstromdurchflossene Spule hervorgerufenen elektromagnetischen Felder das Schmelzen des Einsatzmaterials und führen zugleich zu elektromagnetischen Kräften in der Schmelze, die wiederum eine Schmelzenströmung verursachen. Diese turbulente Schmelzenströmung in Induktionsöfen soll eine gewünschte Homogenisierung der Schmelze hinsichtlich deren Temperaturverteilung und chemischer Zusammensetzung bewirken. Zur Analyse und Optimierung dieser Schmelzprozesse ist die Entwicklung dreidimensionaler transienter numerischer Berechnungsmodelle und deren Anwendung zur Simulation der turbulenten Strömungsfelder sowie daraus resultierende Massentransportvorgänge und Temperaturverteilungen erforderlich.

Zusätzlich wird die Verformung der freien Schmelzenoberfläche (Badkuppe) aufgrund der elektromagnetischen Kräfte einbezogen. Die berechnete räumliche Verteilung der elektromagnetischen Kraftdichte, die den Antrieb der Schmelzenströmung darstellt, wird als Eingangsgröße für die Simulation der Strömungsverteilung verwendet. Daneben wird die elektromagnetisch verursachte Wärmequellenverteilung in der Schmelze berechnet, die wiederum die Ursache für das Temperaturfeld ist und thermische Auftriebskräfte aufgrund von Dichteunterschieden zur Folge hat. Die Gleichungen der Strömungs- und Temperaturfeldverteilungen sind hierbei gekoppelt.

Die Schmelzenströmungen in Induktionsöfen weisen wirbelartige Strömungsmuster auf, die durch niederfrequente dreidimensional ausgeprägte Schwankungen überlagert sind. Diese instationären Strukturen mit Schwingungsperioden von bis zu 10 Sekunden sind durch übliche stationäre Turbulenzmodelle nicht korrekt nachzubilden und konnten erstmals durch dreidimensionale instationäre Berechnungen mit dem sogenannten Large-Eddy-Simulation (LES) Turbulenzmodell im Rahmen dieses HLRN-Projekts realitätsnah simuliert werden. Diese für Induktionsöfen durchgeführten instationären dreidimensionalen(3D) Berechnungen zeigen eine gute Übereinstimmung mit entsprechenden experimentellen Ergebnissen.

Schwerpunktmäßig wurde der Kaltwand-Induktions-Tiegelofen (KIT), der zum Schmelzen von Titanlegierungen eingesetzt wird, im Rahmen dieses Projekts genauer betrachtet. Er besteht im wesentlichen aus einem geschlitzten wassergekühlten Kupfertiegel, der von einer Induktionsspule umgeben ist. Die Kenntnis der komplexen Strömungs- und Temperaturverteilung in der Schmelze ist Voraussetzung für das Design und für die effizienten Nutzung des KIT. Vor diesem Hintergrund wurden 3D instationäre numerische Berechnungen der turbulenten Schmelzenströmung im KIT mit dem LES-Modell auf dem HLRN-System durchgeführt. Die numerischen Berechnungen der elektromagnetischen Kraftdichte- und Wärmequellenverteilung sowie Form der freien Schmelzenoberfläche erfolgt mit dem Programmpaket ANSYS sowie selbstentwickelten Berechnungsroutinen. Nachdem die Form der freien Schmelzenoberfläche berechnet ist, erfolgt die Bestimmung der elektromagnetischen Volumenkraftdichteverteilung, die mit Hilfe selbstentwickelter Programmrountinen in das Programmpaket FLUENT implementiert wird. Die transienten dreidimensionalen Strömungsberechnungen werden mit dem LES Modell durchgeführt, wobei das Smagorinsky-Lilly-Subgrid-Zähigkeitsmodell verwendet wird. Das Strömungsgebiet mit einer Höhe von 20 cm und einen Durchmesser von 15 cm wurde in etwa 1,4 Millionen Tetraederzellen diskretisiert, und die verwendete Zeitschrittweite bei der Strömungsberechnung beträgt in der Regel 10 ms.

Das instationäre Strömungsverhalten im Vergleich zum zeitlich mittleren Strömungsbild zeigt, dass im instationären Zustand, d.h. im realen Betriebsverhalten, die Rotationssymmetrie vollständig gestört ist (Abb. 1).

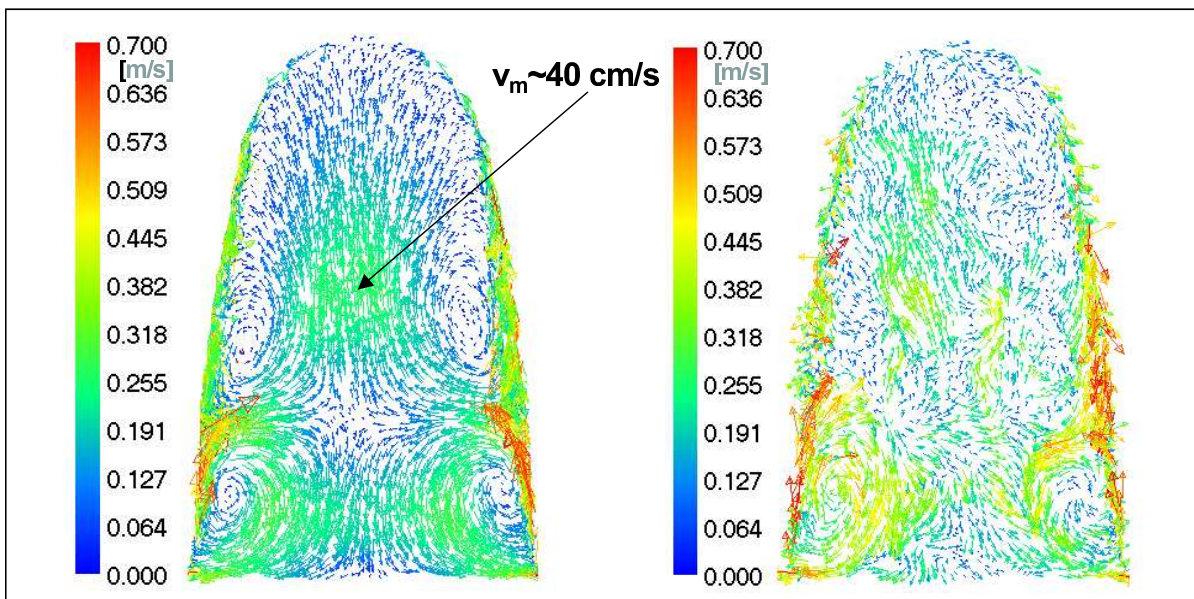


Abbildung 1: Strömungsverteilung berechnet mit dem 3D LES Modell im instationären Zustand (rechts) und im über 20 s zeitlich gemittelten Zustand (links) mit Messpunkt

Die berechnete Strömungsgeschwindigkeit wurde experimentell punktuell überprüft, wobei sich eine für Strömungssimulationen gute Übereinstimmung zwischen Messung und Berechnung ergibt. Die Lage der Wirbelzentren, die Ausdehnung der Wirbel und auch die quantitative Geschwindigkeitsverteilung verändern sich während der Zeit instationär und sind durch zeitliche und räumliche Schwankungen geprägt. Somit ist eine vollständige realistische Nachbildung der Schmelzenströmung nur mit dreidimensionalen instationären Simulationsmodellen möglich. Es wird deutlich, dass die niederfrequenten Schwankungen der Schmelzenströmung im KIT, die erstmalig mit dem Large-Eddy-Simulation-Verfahren simuliert werden konnten, eine bedeutende Rolle für den Wärme- und Stofftransport beim Schmelzen im Kaltwand-Induktions-Tiegelofen spielen.

Die im Rahmen dieses Forschungsvorhabens erzielten Ergebnisse leisten wertvolle wissenschaftliche Beiträge zum physikalischen Verständnis und zur numerischen Simulation von komplexen turbulenten magnetohydrodynamischen Schmelzenströmungen und somit zur Optimierung von Schmelzprozessen in Induktionsschmelzanlagen.

1. Baake, E.; Umbrashko, A.; Jakovics, A.; Nacke, B.: Experimentelle Untersuchung und LES-Modellierung der Schmelzenströmung und Temperaturverteilung im Kaltwand-Induktions-Tiegelofen. 48. Internationales Wissenschaftliches Kolloquium der Technischen Universität Ilmenau, 22.-25.09.2003, Tagungsband, S. 515-516.
2. Baake, E.; Umbrashko, A.; Jakovics, A.; Nacke, B.: Experimental investigations and LES modelling of the turbulent melt flow and temperature distribution in the cold crucible induction furnace. Proceedings of the 4th International Conference on Electromagnetic Processing of Materials, EPM 2003, Lyon (France), 14-17 Oct. 2003, pp. 214-219.
3. Baake, E.; Nacke, B.; Umbrashko, A.; Jakovics, A.: Large eddy simulation modelling of heat and mass transfer in turbulent recirculated flows. MAGNETOHYDRODYNAMICS Vol. 39 (2003), No. 3, pp. 291-297.
4. Umbrashko, A.; Baake, E.; Nacke, B.; Jakovics, A.: Experimental investigations and numerical modelling of the melting process in the cold crucible. Compel: The International Journal for Computation and Mathematics in Electrical and Electronic Engineering, Vol. 24, No.1, 2005 pp. 314-323.

SEDYMO – Modelle für die Feinsedimentdynamik in Hafenbecken

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr.-Ing. W. Zielke

Beantragende Institution: Institut für Strömungsmechanik und elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover

Mitarbeiter: Dipl.-Ing. Dirk Ditschke

Kooperationspartner: Kooperationen im Rahmen des Verbundprojektes SEDYMO mit 10 Instituten deutscher Universitäten und der Bundesanstalt für Gewässerkunde

Förderung: BMBF

Das Projekt 'Modelle für die Feinsedimentdynamik in Hafenbecken und Hafeneinfahrten unter Berücksichtigung der Feinstruktur der Strömungs- und Transportprozesse' ist als Teilprojekt 14 Bestandteil des vom BMBF geförderten Verbundprojektes 'Feinsedimentdynamik und Schadstoffmobilität' (SEDYMO). Es befasst sich mit den Ursachen und der Quantifizierung von Ablagerungsvorgängen in Hafenbecken und Hafenzufahrten sowie mit der modellgestützten Entwicklung von Vermeidungsstrategien. Im Mittelpunkt des Projektes steht die Simulation von Strömung und Feinsedimentdynamik mit Hilfe hochauflösender 3D-numerischer Modelle. Besondere Aufmerksamkeit gebührt der Erfassung der Turbulenzstruktur bei ausgeprägten Dichtegradienten im Bereich der CBS (Concentrated Benthic Sediment) und der komplizierten Strömungen an Hafeneinfahrten, die durch ihre Wirbelbildung den Ablagerungsvorgang begünstigen.

Die Ablagerung von Sand und Schlick in Häfen verursacht weltweit jährlich immense Baggerungskosten zur Aufrechterhaltung der Schifffahrt. Hierzu kommt die Umweltbelastung des Gewässers als Konsequenz der Baggerung und landseitig durch die Entsorgung des kontaminierten Baggerguts. Allein in den Hafenbecken des Hamburger Hafens lagern sich jährlich etwa zwei Millionen m³ Schlick und Sand ab. Die Minimierung kontaminierten Schlicks und die Minimierung der Freisetzung von Schadstoffen hat eine herausragende wirtschaftliche Bedeutung.

Messungen im Bereich der Hafenbecken und deren Einfahrten zeigen eine ausgeprägte Abhängigkeit der Sedimentations- und Remobilisierungsprozesse von Oberwasserabfluss und den Gezeiten, somit auch von singulären Ereignissen wie Hochwasser im Zufluss und Sturmfluten, die von der See her einlaufen. Sie stehen demnach in Wechselwirkung mit den Prozessen im Brackwasserbereich und in der Trübungszone. Abhängig von der Beckenform kann an der Hafeneinfahrt eine starke Drehströmung entstehen, die große Mengen an Schlick und Sand fängt und zu linsenförmigen Ablagerungen von mehreren Metern Höhe führen können (Christiansen 1997). Solche Prozesse haben sich auch in physikalischen Modellen gezeigt. Im Hamburger Hafen konnte mit Hilfe einer Strömungslenkwand eine deutliche Herabsetzung der Ablagerungsmenge in einem Hafenbecken erzielt werden. Die Wirkungsweise der Umlenk wand in Zusammenhang mit einer Sohlschwelle konnte im numerischen Modell wiedergegeben werden und ist in der Abbildung 1 dargestellt. (Ditschke, Markofsky 2003)

Ziel des Projektes ist es, die Ursachen der Ablagerungsvorgänge in tidefreien und tidebeeinflussten Hafenbecken zu qualifizieren und zu quantifizieren sowie Vorschläge zu ihrer Reduktion zu erarbeiten. Es soll auch festgestellt werden, unter welchen Bedingungen (z.B. lange Aufenthaltsdauer, Extremereignisse) Freisetzungsvorgänge erfolgen können.

Die bislang übliche Betrachtungsweise, bei der die unterschiedlichen Sinkgeschwindigkeiten der Schwebstoffe nicht berücksichtigt werden, reicht für eine Quantifizierung der Ablagerungsmengen nicht aus. Daher wird das verwendete dreidimensionale Strömungsmodell weiterentwickelt, um unterschiedliche Korndurchmesser und Sedimentklassen sowie die Flockulationseigenschaften der Sedimentpartikel berücksichtigen zu können.

Das Bedürfnis nach einer detailgetreuen, hochaufgelösten, prozessorientierten Simulation der natürlichen Vorgänge konkurriert mit der Notwendigkeit, die Wirkung dieser Vorgänge über einen längeren Zeitraum zu betrachten. Dieser Konflikt ist nur mit Hilfe moderner Höchstleistungsrechner wie dem HLRN-System zu lösen. Ergebnisse der Mittel- und Langfristsimulation werden im Herbst 2005 vorliegen.

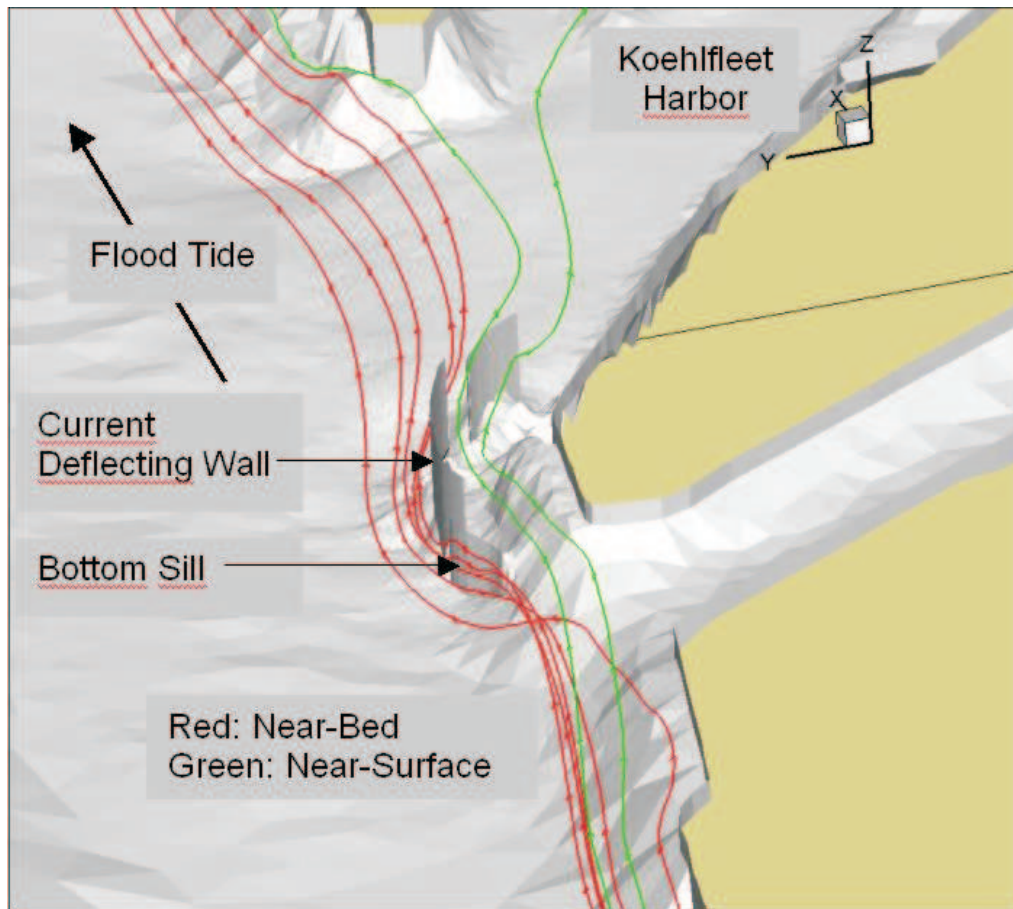


Abbildung 1: Berechnete Stromlinie zeigen die Ablenkung der sohnlahen Strömung

1. Ditschke, D., Markofsky, M.: Optimisation of a Structure to Reduce Sedimentation in an Estuarine Harbor. COPEDEC VI - Sixth International Conference on Coastal Engineering in Developing Countries, Colombo, Sep. 15-19, 2003.

Berechnung von Wärmeflüssen und lokalen Strömungsphänomenen an Steuerflächen von Wiedereintrittsfahrzeugen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr.-Ing. Rolf Radespiel

Beantragende Institution: Institut für Strömungsmechanik der TU Braunschweig

Mitarbeiter: Dipl.-Ing. Torsten Wolf, Dipl.-Ing. Malte Estorf

Kooperationspartner: Hyperschall- und Strömungstechnik GmbH, Universität Stuttgart, DLR Göttingen, DLR Braunschweig

Förderung: teilweise DFG Graduiertenkolleg 432

Für künftige Transportaufgaben mit hohen Machzahlen insbesondere für den Wiedereintritt in die Erdatmosphäre werden sichere, leistungsfähige und zugleich kostengünstige Fahrzeuge gebraucht. Diese Fahrzeuge sollen aus wirtschaftlichen Gründen wiederverwendbar sein und ferner auch zahlreiche Betriebsanforderungen erfüllen. Dieses stellt eine große Herausforderung für die Raumfahrttechnik dar. Zu ihrer Bewältigung sind in den letzten Jahren verschiedene Prototypen der künftigen Generation von Raumflugzeugen entworfen und teilweise gebaut worden, wie z. B. die NASA-Versuchsfluggeräte X-33, X-34, X-38 und das japanische Hope-X. Unter den vielen Anforderungen an den Entwurf besteht die Notwendigkeit, Gewicht zu sparen, denn es ist das Gewicht, was die Kosten des Raumtransports am meisten beeinflusst. Das Wärmeschutzsystem eines Raumfahrzeugs und jedes aerodynamische System, das im Fahrzeug eingesetzt wird, muss einem detaillierten Entwurfsprozess unterzogen werden, um somit das Gewicht des Fahrzeugs zu minimieren. Um die Flexibilität der Raumfahrzeuge zu verbessern, benötigen die heutigen Entwürfe leistungsfähige aerodynamische Steuerflächen. Aerothermische Entwürfe von aerodynamischen Steuerflächen für Wiedereintrittsflüge bedürfen sehr guter Grundkenntnisse der auftretenden Strömungsphänomene.

Da an bislang ausgeführten Steuerflächen unerwartet hohe Wärmelasten auftreten, die auf weitgehend unerforschte, lokale Strömungsphänomene zurückzuführen sind, sollen im Rahmen des Projektes Navier-Stokes-Rechnungen an generischen Klappenmodellen durchgeführt werden, anhand derer diese Effekte möglichst genau beschrieben und quantifiziert werden können. Begleitet werden die Rechnungen von Experimenten im kalten Hyperschallwindkanal des Instituts, wobei die CFD-Rechnungen zur Auslegung der Windkanalmodelle und umgekehrt die Versuchsdaten zur Validierung der Rechnungen herangezogen werden sollen. Darüberhinaus soll die Strömung im gesamten Hyperschallwindkanal des Instituts einschließlich des Modells in der Kanalmessstrecke zeitgenau simuliert werden. Beginnend mit dem Start des Testlaufs wird die Ausbreitung der Gasfront in der Kanaldüse, die Ausbildung des heißen Gaspropfens hinter dem Anlaufstoß, die Interaktion des Modells mit der einfallenden Strömung, die Ausbildung des Stoßsystems und der Grenzschichten am Modell sowie die im instationären Aufbauprozess der Strömung stattfindende Aufheizung des Modells erfasst. Damit soll der Einfluss des instationären Anlaufs der Hyperschallströmung im Windkanal auf die am Klappenmodell ermittelten Strömungsgrößen bewertet werden.

Die Umsetzung der Forschungsarbeiten auf Basis der numerischen Strömungsuntersuchungen wird zum besseren Verständnis folgender Punkte beitragen:

- Entwicklung der Strömungstopologien mit dem Klappenausschlag und Erkenntnisse über die Zusammenhänge zwischen Strömungstopologien und den lokalen Spitzen im Wärmeübergang,
- Detailuntersuchung der Strömungsdivergenz der 3D-Grenzschicht bei der Umströmung der Kanten von Steuerflächen und der aerodynamischen Entwurfssensitivitäten hinsichtlich der geometrischen Form der Klappenkanten,
- Auswirkung des instationären Anlaufs der Windkanalströmung auf die Strömungsgrößen am Klappenmodell im Vergleich zur stationären Anströmung.

Die Abbildung 1 zeigt beispielhaft das Ergebnis einer Strömungssimulation um ein generisches Windkanalmodell bei einer Reynoldszahl von $Re = 250\,000$ und einer Machzahl von $Ma = 5.9$. Die Anströmdaten entsprechen denen einer Windkanalsimulation bei einem Speicherrohrdruck von 3.2 bar und einer mittleren Totaltemperatur von $T = 500\text{ K}$. Der Anstellwinkel des Vorkörpers gegenüber der Strömung beträgt $\alpha = 0^\circ$, der Klappenausschlag beträgt $\beta = 20^\circ$. Die Abbildung verschafft durch die

farbliche Darstellung des Temperaturfeldes und einiger Stromlinien einen Eindruck vom Strömungsfeld. Man sieht deutlich die Kopfwelle vor dem Körper und den Rampenstoß sowie das durch ihn hervorgerufene Ablösegebiet am Klappenscharnier. Die den bisherigen Rechnungen entnommenen Wärmestromdichten auf der Modelloberfläche (hier nicht gezeigt) zeigen eine deutliche Überhöhung an den Klappenkanten, was auf die Ausdünnung der Grenzschicht in dem dort divergenten Strömungsfeld zurückzuführen ist. Die Untersuchung der Parameter, die dieses Phänomen beeinflussen, ist Gegenstand der aktuellen Arbeit.

Auf Seiten der Simulation des instationären Strömungsfelds im Windkanal konnte bereits gezeigt werden, dass eine genaue Modellierung des zum Starten der Strömung verwendeten Ventils notwendig ist, um den Anlaufprozess sowie die nachfolgende Entwicklung des Strömungsfelds in guter Übereinstimmung mit Messungen simulieren zu können. Erste numerische Ergebnisse sowie detaillierte Angaben zu der Windkanalanlage finden sich in [1] und [2].

Die zur Strömungslösung benötigten Rechenzeiten übersteigen bei weitem die im Rechenzentrum der TU Braunschweig zur Verfügung stehenden Kapazitäten. Die Berechnung des stationären Strömungsfelds erfolgt auf Netzen mit 20 Millionen Punkten, die Rechenzeit auf 32 Prozessoren des HLRN-Systems beträgt dabei pro Simulation 48h. Die Rechenetze zur Berechnung des instationären Strömungsfelds sind zwar kleiner, allerdings erhöht sich die Rechenzeit bei 6 Prozessoren auf mehrere Wochen. Somit ist die Rechenleistung des HLRN für die Durchführung des Projektes unerlässlich.

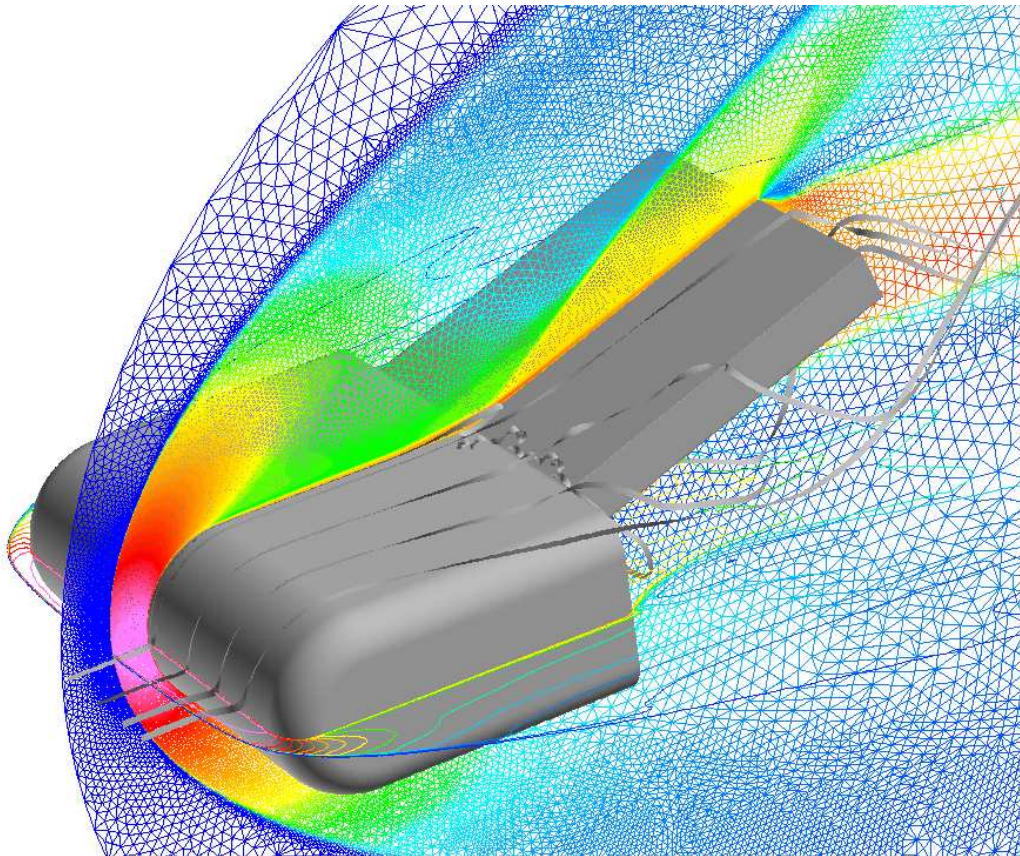


Abbildung 1: Simuliertes Strömungsfeld und Temperaturverteilung in der Umgebung des Windkanalmodells; $Ma = 5.9$, $Re = 250\,000$, $\alpha = 0^\circ$

1. M. Estorf, T. Wolf, R. Radespiel: Experimental and numerical investigations on the operation of the Hypersonic Ludwig Tube Braunschweig, 5th European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, Köln, 2004.
2. T. Wolf, M. Estorf, R. Radespiel: Simulation of the Time-Dependent Flow Field in the Hypersonic Ludwig Tube Braunschweig, 4th International Symposium Atmospheric Reentry Vehicles & Systems, Arcachon, 2005.

NEFA – New Empennage for Aircraft

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr.-Ing R. Radespiel

Beantragende Institution: Institut für Strömungsmechanik, Technische Universität Braunschweig

Mitarbeiter: Dipl.-Ing. Martin Kruse

Kooperationspartner: Airbus F, Airbus D, Airbus E, DLR, ONERA, INTA, PEDECE, HUT

Förderung: EU

Im Rahmen des europäischen Verbundprojekts NEFA soll die Einsatzmöglichkeit unkonventioneller Leitwerksformen für Verkehrsflugzeuge untersucht werden. Hierbei stehen die Senkung des aerodynamischen Widerstands sowie eine Reduktion der Flugzeugmasse im Mittelpunkt des Interesses, ohne dabei Einbußen auf Seiten der Flugstabilität und Steuerungsfähigkeit hinzunehmen. Das Projekt verfolgt daher von Beginn einen interdisziplinären Ansatz mit Arbeitsanteilen aus Struktur- und Flugmechanik sowie umfangreichen aerodynamischen Untersuchungen. Letztere gliedern sich in Windkanalversuche sowie numerische Strömungssimulationen (CFD). Zusammen werden sie dazu beitragen, das Strömungsverhalten im Bereich der Leitwerke genauer zu verstehen und die Vorhersagemethoden weiter zu verbessern.

Der Projektanteil des Instituts für Strömungsmechanik umfasst hierbei die umfassende numerische Untersuchung des Hochauftriebsverhaltens einer V-Leitwerkskonfiguration. Dabei sollen insbesondere die Mechanismen sowie der Zeitpunkt eines einsetzenden Leitwerksüberziehens durch Ablösen der Strömung untersucht werden. Zum Vergleich dient eine Referenzkonfiguration mit konventionellem Kreuzleitwerk. Unabhängig von der gewählten Konfiguration kommt einer sicheren Vorhersage des Leitwerksüberziehens große Bedeutung zu. Da das Leitwerk zum Ausgleich der Momentenbilanz und der Steuerung des Flugzeugs dient, ist ein Strömungsabriss an dieser Baugruppe flugmechanisch fatal und daher innerhalb der gesamten Flugtrajektorie unzulässig.

Die Berechnung des dreidimensionalen, kompressiblen und reibungsbehafteten Strömungsfelds erfolgt mittels geeigneter Navier-Stokes-Strömungslöser (DLR TAU-Code). Durch die Lage der Leitwerke am Heck des Flugzeugs ist ihre Umströmung wesentlich durch das Abwindfeld des Hauptflügels, die Grenzschicht des Rumpfes sowie Interferenzen einzelner Baugruppen zueinander beeinflusst. Dies macht eine vollständige Modellierung der Gesamtkonfiguration unumgänglich. Aus Gründen der Vergleichbarkeit werden die numerischen Strömungssimulationen unter den Strömungsbedingungen der experimentellen Untersuchungen im DNW-LLF Windkanal durchgeführt. Hierbei wurde das Modell im Maßstab 1:7,25 mit einer Mach-Zahl von $Ma = 0,2$ angeströmt. Bezogen auf die aerodynamische Referenzflügelteufe wird eine Reynoldszahl von $Re = 2,3 \cdot 10^6$ erreicht.

Die räumliche Diskretisierung des Strömungsfelds erfolgt mittels hybrider Rechenetze. Diese kombinieren die Vorteile einer strukturierten Auflösung der Grenzschicht sowie einer hohen Flexibilität bei der Anpassung an komplexe Geometrien. Aufgrund der erforderlichen Netzauflösung im Bereich der Grenzschicht ergeben sich Knotenpunktzahlen von $11 - 15 \cdot 10^6$ für Halbkonfigurationen (Ausnutzung der Symmetrie) sowie $22 - 30 \cdot 10^6$ für Gesamtkonfigurationen.

Der weitgehend abgeschlossene Hauptteil der Berechnungen widmet sich der Untersuchung des longitudinalen Überziehverhaltens unter symmetrischen Anströmbedingungen. Die Ergebnisse zeigen für die Unterseite des V-Leitwerks die Ausbildung einer spannweitig sehr gleichförmigen Druckverteilung, die auch bei hohen negativen Trimm- und Anstellwinkeln zunächst erhalten bleibt. Das Einsetzen der Strömungsablösung (negative tail stall) beginnt von der Hinterkante im Bereich zwischen 50 % und 75 % der Spannweite (siehe Abbildung 1). Ein solches, als Trailing Edge Stall bezeichnetes Überziehverhalten ist in der Regel erwünscht, da es zu einem graduellen Rückgang der aerodynamischen Kräfte führt, der flugmechanisch beherrschbar ist. Das Einsetzen der Strömungsablösung auf der Leitwerksobenseite (positive tail stall) folgt anderen Mechanismen. Zu beobachten ist eine im Aussenbereich von der Vorderkante her einsetzende Ablösung, die sich bei einer weiteren Steigerung des effektiven Anstellwinkels vergrößert. Im Innenbereich bleibt die Strömung hierbei anliegend. Im Vergleich mit den Windkanaldaten ergibt sich für Ober- und Unterseite des V-Leitwerks eine gute Übereinstimmung hinsichtlich der berechneten Ablöselage und dem Zeitpunkt des Überziehens. Gegenüber der Referenzkonfiguration zeigt das V-Leitwerk eine signifikante Verbesserung des longitudinalen Stall-Verhaltens. Insgesamt wurden bislang 43 numerische Simulationen an 5 Konfigurationen des V-Leitwerks und 2 Konfigurationen der Referenzleitwerks durchgeführt. Die Rechnungen umfassen hierbei auch eine Studie zum Einfluss der eingesetzten Turbulenzmodelle auf das Strömungs- und Ablöseverhalten. Ein weiterer Aspekt gilt der

Verbesserung der numerischen Vorhersagequalität durch eine Modellierung des natürlichen laminar-turbulenten Strömungsumschlags. Das hierbei eingesetzte Verfahren ist numerisch sehr aufwendig, da es auf einer lokalen Stabilitätsanalyse der berechneten Grenzschicht beruht. Die Auswertung des Grenzschichtverhaltens ist jedoch notwendig, um ein besseres Verständnis lokaler Ablösephänomene (z.B. laminare Ablöseblasen) zu erlangen.

Wie die Windkanaluntersuchungen zeigten, ändert sich das Überziehverhalten des V-Leitwerks drastisch, sobald die Anströmung eine signifikante Querströmungskomponente aufweist. Hierbei besteht die Gefahr eines schlagartig einsetzenden Ablösens der Strömung auf einer gesamten Leitwerksfläche. Die derzeitigen Arbeiten konzentrieren sich darauf, dieses Verhalten durch numerische Simulationen wiederzugeben.

Der gegenwärtige Stand des Projektes NEFA zeigt, dass unkonventionelle Leitwerksentwürfe auch an Verkehrsflugzeugen ein Potential bergen, das sich zu untersuchen lohnt. Die weit fortgeschrittenen Arbeiten zum V-Leitwerk zeigen, dass ein solcher Entwurf technisch realisierbar ist und die Erwartungen an eine Widerstandsreduktion im Reiseflug erfüllt.

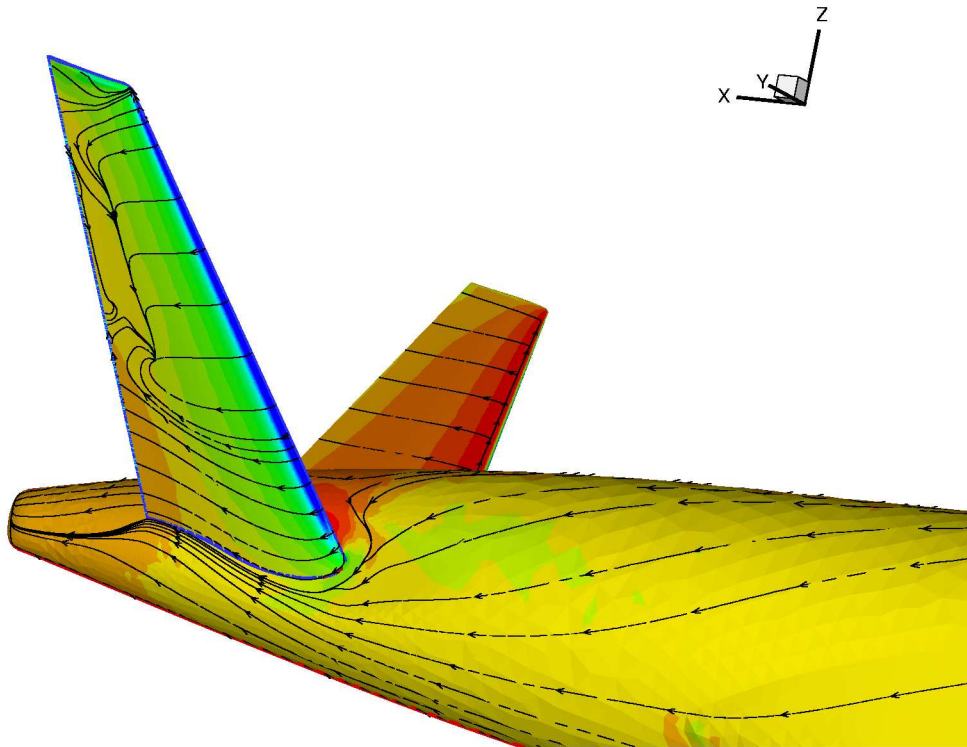


Abbildung 1: Einsetzende Strömungsablösung auf der V-Leitwerksunterseite, Trimmwinkel $I_H = -14^\circ$

Berechnung von Strömungsfeldern in dreiphasig betriebenen Blasensäulen mit chemischer Reaktion

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr.-Ing. D. Mewes

Beantragende Institution: Institut für Verfahrenstechnik, Universität Hannover

Mitarbeiter: Dipl.-Ing. D. Wiemann

Förderung: DFG

Das Großprojekt dient der Durchführung von numerischen Strömungssimulationen im Rahmen des DFG-Forschungsprojektes "Berechnung des Strömungsfeldes in dreiphasig betriebenen Blasensäulen mit chemischer Reaktion". In den theoretischen Untersuchungen werden die dreidimensionalen, zeitveränderlichen Strömungsfelder in Blasensäulenreaktoren unter Berücksichtigung des Stofftransports infolge einer chemischen Reaktion berechnet.

Blasensäulen sind zylindrische Reaktoren, in denen eine gasförmige Phase in einer kontinuierlichen Flüssigkeit dispergiert wird. Dazu wird das Gas am Boden durch einen Gasverteiler zugeführt. Die entstehenden Blasen steigen als Schwarm auf und bewirken in der Flüssigkeit ein komplexes Strömungsfeld. In dreiphasig betriebenen Blasensäulen ist neben der dispersen Gasphase und der kontinuierlichen flüssigen Phase ein Feststoff als dritte Phase dispergiert. Diese Reaktoren werden in der chemischen Industrie und in der Biotechnologie für zahlreiche Prozesse verwendet. In der chemischen Industrie werden sie für Hydrier- und Oxidationsreaktionen eingesetzt, in der Biotechnologie für die Gewinnung von Biomasse und die Abwasserbehandlung. Für die Dimensionierung der Reaktoren sind die lokale Phasengrenzfläche zwischen der Gas- und der Flüssigphase und die Verteilung des Feststoffs wesentliche Parameter. Die Feststoffpartikeln beeinflussen den Zerfall und die Koaleszenz von Blasen indirekt durch das veränderte turbulente Geschwindigkeitsfeld in der Flüssigkeit und direkt durch Kollisionen mit den Blasen. Dadurch wird die für den Impuls- und Stoffaustausch zur Verfügung stehende lokale Phasengrenzfläche zwischen der Gas- und der Flüssigphase gegenüber der zweiphasigen Gas-Flüssigkeitsströmung verändert. Handelt es sich um katalytisch wirksame Partikeln sehr kleinen Durchmessers, so beeinflussen diese den Stofftransport in unmittelbarer Nähe der Blasenoberfläche. Die heterogene chemische Reaktion verändert die Zusammensetzung der flüssigen Phase und kann so zu einem veränderten Zerfalls- und Koaleszenzverhalten der Blasen beitragen.

Ziel der Arbeiten ist es, die Blasengrößenverteilung und das Strömungsfeld in dreiphasig betriebenen Blasensäulen unter dem Einfluss einer heterogenen chemischen Reaktion numerisch zu berechnen. Ein entscheidender Bestandteil des angewendeten Berechnungsverfahrens ist dabei die Kopplung der Strömungssimulation mit der Populationsbilanz der Blasenanzahldichte. Durch eine aus der Lösung der Populationsbilanz erhaltene Transportgleichung für das lokale, mittlere Blasenvolumen ist ein effizientes Berechnen des Strömungsfelds in Abhängigkeit der veränderlichen Blasengröße und Anzahl möglich. Der Feststoff ist Katalysator einer chemischen Reaktion, die an der Partikeloberfläche abläuft. Die Stofftransportvorgänge zwischen den Phasen und der Reaktionsablauf werden durch entsprechende Transport- und Reaktionsgleichungen berücksichtigt. Die Reaktionsstromdichte lässt sich in Abhängigkeit der lokalen Eduktkonzentrationen und der lokalen Phasengrenzfläche berechnen. Die numerische Lösung führt auf dreidimensionale zeitveränderliche Strömungsfelder in zylindrischen Blasensäulen. Als Ergebnis werden sowohl die mit der Zeit veränderlichen als auch die zeitgemittelten Felder der Geschwindigkeit, der Phasenanteile und der Konzentration der reagierenden Komponente in den einzelnen Phasen erhalten.

Aufgrund des hohen numerischen Aufwands, erfordert das Berechnen der Strömungsfelder den Einsatz von Hochleistungsrechnern. Durch die Nutzung des HLRN-Systems konnten umfangreiche Untersuchungen zur Vermischung der Flüssigkeit- und Gasphase und des Stoffaustauschs durchgeführt werden. Die Ergebnisse sind auf mehreren internationalen Konferenzen vorgestellt worden und international publiziert worden.

In Abbildung 1 ist ein berechnetes Strömungsfeld für eine Blasensäule im Labormaßstab dargestellt. Das Strömungsfeld des Feststoffs ist durch Stromlinien dargestellt, die mit der axialen Geschwindigkeit farbig kodiert sind. Für den Stoffaustausch wird eine heterogen katalysierte Reaktion berücksichtigt. Dazu wird das gasförmige Edukt 1 zunächst in der Flüssigkeit absorbiert. An der Oberfläche der Partikeln erfolgt dann die Reaktion mit dem flüssigen Edukt 2. In den Längsschnitten sind die Massenanteile der Edukte und des Produkts an der Flüssigphase dargestellt. Die auf die Querschnittsfläche der Säule

bezogenen Volumenströme des Gases, der Flüssigkeit und des Feststoffs betragen $0,12$ und $0,03 \frac{m}{s}$.

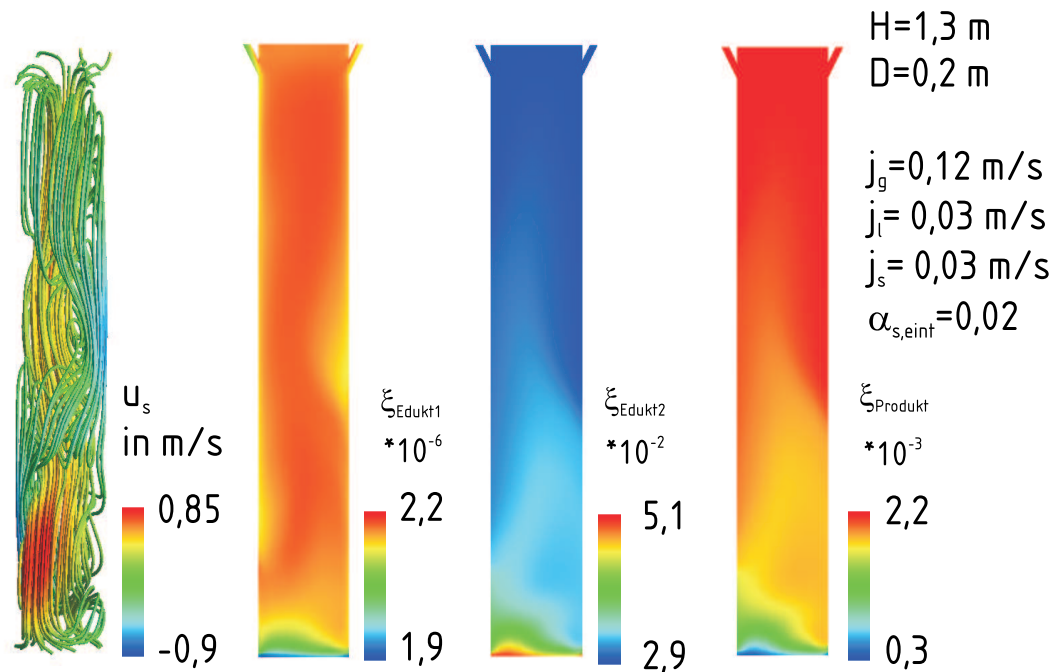


Abbildung 1: Berechnetes Strömungsfeld und Massenanteile des Edukts und Produkts

1. D. Wiemann, D. Mewes: Numerical calculation of backmixing and mass transfer in bubble columns; CHISA 2004, 16th Int. Congress Chem. Proc. Engng., 22-26 Aug. 2004, Prague.
2. D. Wiemann, D. Mewes: Multi-fluid model applied to calculate backmixing and mass transfer in bubble columns; AIChE Annular Meeting 2004, Austin, Nov. 7th - 12th 2004.
3. D. Wiemann, D. Mewes: Calculation of flow fields in two- and three-phase bubble columns considering mass transfer; 7th Conf. On Gas-Liquid-Solid Reactor Engineering, GLS-7, Aug. 21th - 24th, 2005, Strasbourg, France, accepted for publication in Chem. Eng. Sci.
4. D. Wiemann, D. Mewes: Prediction of backmixing and mass transfer in bubble columns using a Multi-Fluid Model; Ind. & Eng. Chem. Res., accepted for publication.

Modellierung der Bauwerks–Boden–Interaktion für Offshore–Windenergieanlagen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr.-Ing. Martin Achmus

Beantragende Institution: Institut für Grundbau, Bodenmechanik und Energiewasserbau, Universität Hannover

Mitarbeiter: Dr.-Ing. Khalid Abdel-Rahman

Förderung: Niedersächsisches Ministerium für Wissenschaft und Kultur

Die Gründung von Offshore-Windenergieanlagen stellt - insbesondere bei Wassertiefen um rd. 30 m wie an potenziellen Standorten in der Nordsee vorhanden - eine neue technische Herausforderung dar. Die geplanten Anlagen weisen Höhen von rd. 160 m über dem Meeresspiegel mit Rotordurchmessern von rd. 120 m auf. Entsprechend wirken erhebliche, vor allem horizontal gerichtete Lasten aus Wind und Wellen auf eine solche Struktur ein, welche über die Gründungskonstruktion mit ausreichender Sicherheit und vor allem auch mit für den Betrieb der Windenergieanlage akzeptablen Verformungen in den Baugrund abzuleiten sind.

Um hierfür wirtschaftliche Lösungen zu finden, ist die genaue Kenntnis des Tragverhaltens, insbesondere auch des Langzeittragverhaltens, der Gründung unter Berücksichtigung der komplexen wechselnden Belastungen aus Seegang und Wind von großer Bedeutung. In diesem Vorhaben sollen daher mittels Erweiterung und Übertragung vorhandener Erkenntnisse zum Verhalten von Böden unter wechselnden quasi-statischen oder dynamischen Belastungen und zur Modellierung von Boden-Bauwerks-Wechselwirkungen Simulationsmodelle für das Tragverhalten der Gründung von Offshore-Windenergieanlagen entwickelt werden.

Als Gründungsvariante für Offshore-Windenergieanlagen kommen Schwergewichtsgründungen, Monopiles und Tripodgründungen in Frage. Die Identifikation der für bestimmte Randbedingungen optimalen Gründungskonstruktion erfordert die möglichst genaue Abbildung ihres Verhaltens im Rechenmodell. Für die genannten Konstruktionsvarianten sollen numerische Modelle auf Grundlage der Finite-Elemente-Methode generiert werden. Die Problemstellung erfordert hierbei dreidimensionale Modelle relativ großer Abmessungen. Darüber hinaus sind für die realistische Erfassung des Bodenverhaltens komplexe nichtlineare Stoffgesetze einzusetzen, welche einen schrittweisen Modellaufbau und eine inkrementelle Lastaufbringung notwendig machen.

Zunächst wird das Tragverhalten unter monotoner Bemessungslast untersucht. Hier steht besonders die Monopilekonstruktion (s. Abb. 1) im Zentrum der Untersuchungen, da dieses Gründungskonzept zumindest für derart hochbelastete Strukturen neu ist und Pfähle mit den erforderlichen Durchmessern von rd. 6 bis 8 m bisher auch noch nicht hergestellt wurden. Hier soll anhand der numerischen Modelluntersuchungen beurteilt werden, ob existierende Bemessungsverfahren für Pfähle kleinerer Durchmesser übertragen werden können oder ob und gegebenenfalls in welcher Form modifizierte Verfahren zu entwickeln sind.

Für die Berücksichtigung der durch Seegang und Wind geprägten zyklischen Belastungen sind geeignete Stoffgesetzerweiterungen zu formulieren bzw. zu übertragen und mittels entsprechender numerischer Algorithmen in ein Programmsystem zu implementieren. Weitere Modellentwicklungen sollen schließlich das Bodenverhalten bzw. das Verhalten der Gründung unter dynamischer Belastung abbilden.

Die geplanten Entwicklungsarbeiten sollen dazu beitragen, die statische Auslegung der Gründungen von durch Wind und Wellen belasteten Windkraftanlagen unter Berücksichtigung der lokalen Standortbedingungen zu optimieren und damit wirtschaftliche Lösungen zu ermöglichen. Die Ergebnisse der numerischen Simulationen sollen in die Entwicklung vereinfachter Ingenieurmodelle für die praktische Bemessung von Offshore-Windenergieanlagen einfließen.

Aufgrund der Größe der zu untersuchenden numerischen Modelle für Offshore-Windenergieanlagen ist ein Hochleistungsrechner wie das HLRN-System eine unabdingbare Voraussetzung für die Durchführung solcher Simulationsmodelle.

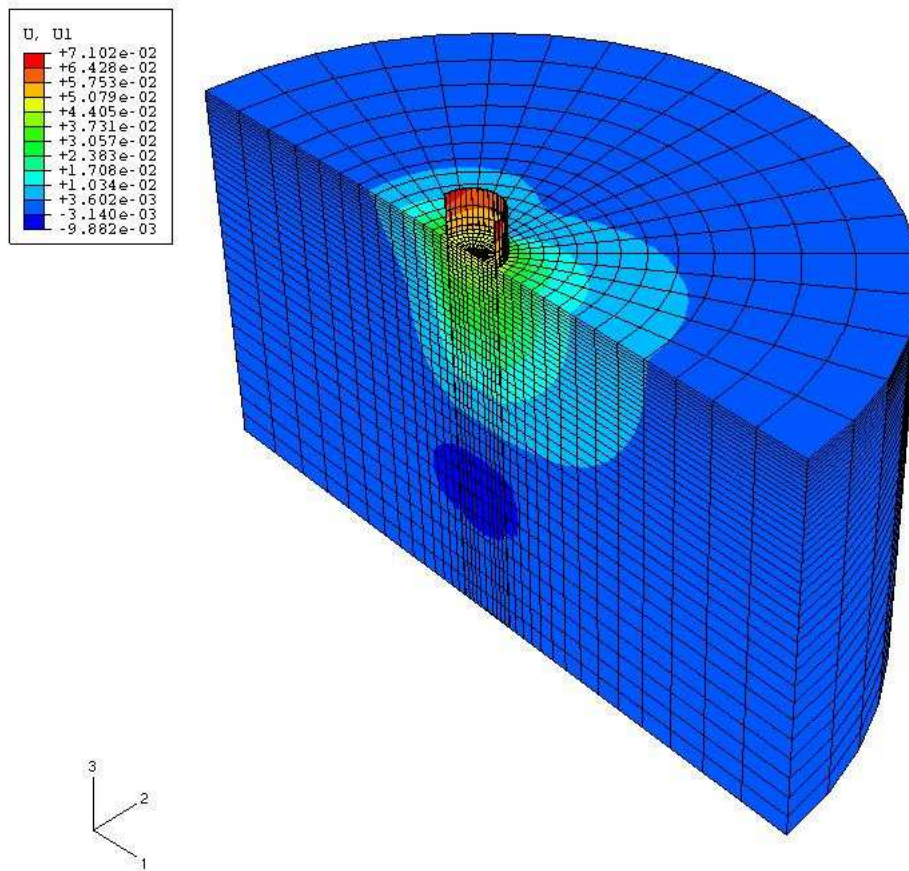


Abbildung 1: Horizontalverschiebung für einen Monopile $D=7,5$ m, $L=30$ m in mitteldichtem Sand

1. K. Abdel-Rahman & M. Achmus: Finite Element Modeling of Horizontally Loaded Monopile Foundations for Offshore Wind Energy Converters in Germany. International Symposium on Frontiers in Offshore Geotechnics (ISFOG), 19-21 Sep. 2005.
2. M. Achmus & K. Abdel-Rahman: Design of Monopile Foundations for Offshore Wind Energy Plants. 11th ICSGE, Ain-Shams University, Faculty of Engineering, Cairo, Egypt, Mai 2005.
3. M. Achmus & K. Abdel-Rahman et al.: Untersuchungen zum Tragverhalten von Monopiles für die Gründungen von Offshore-Windenergieanlagen. Braunschweig Pfahl-Symposium, Braunschweig/ Germany, März 2005.
4. M. Achmus & K. Abdel-Rahman: Numerische Untersuchung zum Tragverhalten horizontal belasteter Monopile-Gründungen für Offshore-Windenergieanlagen, 19th Christian Veder Kolloquium, Graz/Österreich, April 2004.

Physik

Computation of the decay constant of the D_s -meson and extrapolation to heavy quark masses

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Ulrich Wolff

Beantragende Institution: AG Computational Physics; Humboldt-Universität zu Berlin

Mitarbeiter: Dr. Andreas Jüttner

Kooperationspartner: DESY-Zeuthen, Westfälische Wilhelms-Universität Münster

Förderung: Sonderforschungsbereich Transregio 9, Graduiertenkolleg 271

With the goal of a unification of quantum mechanics and special relativity, Dirac formulated his famous equation of motion for free spin- $\frac{1}{2}$ particles in 1928. They have solutions with both positive and negative energy which soon found an interpretation in terms of anti-particles when Anderson discovered the positron in cosmic rays.

Today, elementary particles are described as the quanta of fields in local quantum field theories. According to the CPT-theorem, a quantum field theory has to be invariant under the combined application of charge conjugation (C), parity (P) and time-reversal (T), postulates an anti-particle to be associated to each particle. The electro-magnetic (QED), the weak and the strong (QCD) interactions can all be described as field theories and have been combined in the Standard Model of elementary particles. The gluons, the particles mediating the interaction (gauge bosons) in QCD and the photons and the Z-bosons of the electro-weak interaction couple symmetrically to the left- and the right-handed fermions. C and P are therefore good quantum numbers in these cases. In contrast, the W^\pm -boson of the electro-weak sector couples differently to fermions of either handedness and therefore parity is violated. At least CP for the time being seemed to be a symmetry of the electro-weak interactions.

However, the Standard Model for three generations of quarks comprises the possibility of CP -violation in the quark mixing matrix (CKM) of the electro-weak Lagrangian. In 1964, Cronin, Fitch and Christenson found experimental evidence for a CP -violating effect.

Since then a lot of effort has been put into precision measurements of the CKM-matrix. Once the parameters of the Standard Model have been fixed by experiment, the consistency of the theory can be checked. Super-symmetric models for example suggest CP -violating effects, that would exceed the magnitude of CP -violation allowed by the Standard Model. Furthermore, a deeper understanding of CP -violation in connection with electro-weak symmetry breaking in the early universe may help in understanding the observed matter/anti-matter asymmetry in the observable part of the universe.

In order to assess possible inconsistencies, precision measurements and predictions from theory are required to minimize the error on the CKM-matrix. The D_s -meson investigated here is a particular case in this context since the matrix element $|V_{cs}|$ can be determined independently from theory as well as from experiment. Hence, it offers an independent test of the theory thus hopefully increasing our confidence in theoretical predictions for experimentally less explored meson systems. Similarly, from the measurements of B -meson mixings, the product $|V_{td}||V_{tb}|$ and the ratio $|V_{td}|/|V_{ts}|$ can be determined, using accurate predictions from theory.

This work is a feasibility study for precision lattice computations in the heavy-flavor sector of quenched QCD regularized using a Euclidean space-time lattice. We obtain physical observables as the expectation values of observables evaluated on an ensemble of field configurations, which we computer-generated by means of a Monte-Carlo simulation. The control of all sources of systematic errors, apart from quenching (neglect of quantum fluctuations of the quark fields), was emphasized and we focused on the phenomenology of the heavy-light pseudo scalar mesons D_s and B_s and the corresponding vector mesons. The simulations aimed at the computation of the associated leptonic decay constants, which are important for the CKM-analysis.

Simulations of lattice QCD for heavy-light mesons in large volume ($L \gtrsim 1.5$ fm) and with a continuum extrapolation currently are constrained to quark masses lighter than the one of charm and rely on computing facilities like the ones at HLRN, due to the large memory consumption and the time-consuming linear algebra (matrix inversion). A high degree of parallelism is indispensable. We simulated directly for the D_s -meson avoiding extrapolations in the quark mass.

Once one confides in the lattice computations, the techniques can be applied to sectors of the Standard Model, like the B_s -mesons, which are not easily accessed through experiments. Due to the short

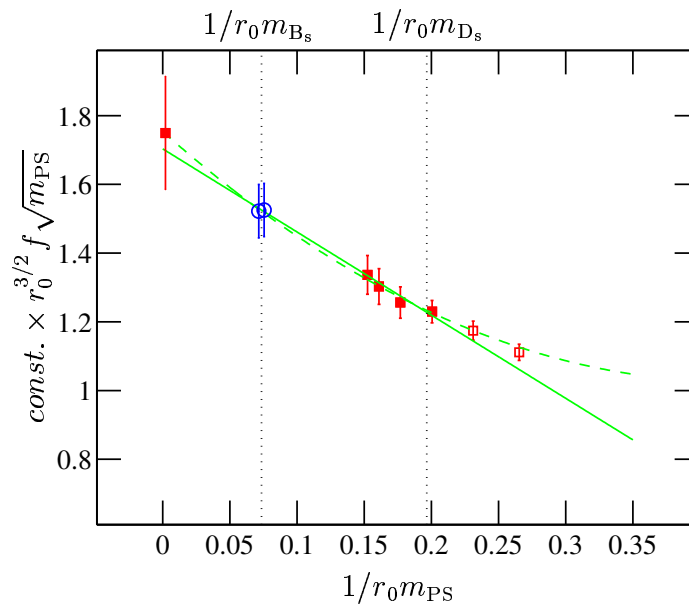


Abbildung 1: Interpolation for the decay constant f of the pseudo scalar meson with a linear and a quadratic fit ansatz (solid and dashed line resp.). Only the data at the filled squares was included into the fit. The circles represent the values at the physical point of the B_s -meson. ($r_0 = 0.5\text{fm}$ is the Sommer scale, the interpolation was carried out in the inverse meson mass, which is compatible with the interpolation in the inverse quark mass)

Compton wave length of the b -quark (large mass), a direct lattice simulation of the B_s -meson is not feasible. Instead, we apply the procedure illustrated with our simulation results in figure 1: In addition to the simulations at the physical point of the D_s -meson, we simulated also at a number of unphysical heavy quark masses around charm (red squares around $1/r_0 m_{D_s}$) and then used predictions for the mass dependence of mesonic observables as a polynomial in the inverse heavy quark mass (heavy quark effective theory (HQET)) and for the static limit ($1/m_{PS} \rightarrow 0$), to carry out an interpolation.

Our results show, that Standard Model observables can be determined to the experiment's precision while keeping all systematic errors (apart from quenching) under control. Furthermore, the combination of HQET in the static limit with lattice QCD simulations in the charm region allows for a controlled interpolation to the region of the b -quark mass, while keeping systematic effects under control. The interpolation can be improved in the future by also taking into account 1st order contributions in the heavy quark expansion. Assessing the functional form of the resulting interpolation, the order of magnitude of the leading order coefficients in the heavy quark expansion turned out to be sufficiently small, supporting its validity.

1. ALPHA collaboration (A. Jüttner, J. Rolf), A precise determination of the decay constant of the D_s meson in quenched QCD, Published in Phys.Lett. B560:59-63,2003, e-Print Archive: hep-lat/0302016
2. A. Jüttner, J. Rolf, A precise determination of the decay constant of the D_s meson in quenched QCD, Presented at 21st International Symposium on Lattice Field Theory (LATTICE 2003), Tsukuba, Ibaraki, Japan, 15-19 Jul 2003, Nucl.Phys.Proc.Suppl.129:319-321,2004, e-Print Archive: hep-lat/0309069
3. ALPHA collaboration (J. Rolf, M. Della Morte, S. Dürr, J. Heitger, A. Jüttner, H. Molke, A. Shindler, R. Sommer), Towards a precision computation of F_{B_s} in quenched QCD, Presented at 21st International Symposium on Lattice Field Theory (LATTICE 2003), Tsukuba, Ibaraki, Japan, 15-19 Jul 2003, Published in Nucl.Phys.Proc.Suppl.129:322-324,2004, e-Print Archive: hep-lat/0309072
4. Jüttner, Andreas, PhD-thesis, Precision lattice computations in the heavy quark sector e-Print Archive: hep-lat/0503040, HU-Berlin edoc-server: <http://edoc.hu-berlin.de/>

Topology, chiral physics and hadron masses from overlap fermions

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Volkard Linke

Beantragende Institution: Institut für Theoretische Physik, FU Berlin

Mitarbeiter: Dr. Martin Gürtler, Dr. Roger Horsley, Prof. Dr. Volkard Linke, Dr. Paul E. L. Rakow, Prof. Dr. Gerrit Schierholz, Dipl.-Phys. Thomas Streuer, Dipl.-Phys. Volker Weinberg

Kooperationspartner: DESY Hamburg, DESY Zeuthen, NIC Zeuthen, ZIB, Universität Leipzig, Universität Regensburg, Edinburgh University, Liverpool University

Förderung: DESY/BMBF, DFG, EU

Das Projekt wird aufgrund eines langjährig bestehenden Kooperationsvertrags "Nichtstörungstheoretische Rechnungen zur Struktur der Hadronen" zwischen dem DESY und der Freien Universität Berlin im Rahmen einer internationalen Kollaboration (QCDSF-UKQCD) durchgeführt.

Untersucht wird die Struktur der Hadronen. Diese Teilchen, zu denen beispielsweise das Proton zählt, sind aus Quarks, den Grundbausteinen der Quantenchromodynamik (QCD), zusammengesetzt. Charakteristische Merkmale dieser außerordentlich ungewöhnlichen Theorie, die zu den sogenannten Eichtheorien gehört, sind ihre "asymptotische Freiheit" (bei kleinen Abständen wechselwirken die Quarks nur schwach miteinander, Prozesse, die bei kleinen Abständen ablaufen, können mithin im Rahmen einer Störungstheorie mit den üblichen Methoden der Theoretischen Physik berechnet werden) wie aber auch ihr "confinement"-Verhalten (für große Abstände fallen die Kräfte zwischen den Bausteinen nicht ab wie in anderen physikalischen Theorien, etwa der Quantenelektrodynamik, so dass Quarks als freie Objekte nicht existenzfähig sind sondern nur in Form von gebundenen Zuständen, den Hadronen). Für die Behandlung dieses letzteren Bereichs fehlt eine ausreichend wirkungsvolle Mathematik. Die einzig verfügbare Methode, die es erlaubt, Eigenschaften der Hadronen zu berechnen, besteht in einer "Vergröberung" der 4-dimensionalen kontinuierlichen Raum-Zeit auf ein diskretes Gitter, die zum Abschluss der Untersuchungen durch einen Grenzübergang wieder behoben werden muss. Die Eigenschaften der Hadronen ergeben sich dann in der sogenannten *Pfadintegralformulierung* aus hochdimensionalen Integralen, die jedoch wegen ihres außerordentlich hohen Dimensionsgrades - typische Größenordnung schon für einen einfachen approximativen Fall etwa eine Milliarde(!) - nur mithilfe von Monte-Carlo-Methoden ausgewertet werden können, einer Art stochastischer Mathematik. Die freien Parameter der Theorie sind neben der Anzahl der verwendeten Quarksorten (experimentell sind sechs Sorten nachgewiesen, für dieses Projekt erscheint es jedoch ausreichend, mit den beiden leichtesten zu arbeiten) deren Massen. Die "Kosten" von Monte-Carlo-Simulationen hängen entscheidend von der Größe der verwendeten Quarkmassen ab. Mit abnehmenden Massen steigt der rechnerische Aufwand dramatisch an. Bei den heute generell verfügbaren Computerressourcen ist es nicht möglich, mit denjenigen Quarkmassen zu arbeiten, die tatsächlich physikalisch nötig wären. Stattdessen führt man die Rechnungen bei einer Reihe größerer Massen durch und extrapoliert die Ergebnisse mit geeigneten Verfahren anschließend zum sogenannten physikalischen Punkt.

Man kann sich nun recht unterschiedliche Möglichkeiten ausdenken, die Kontinuums-QCD zu einer Gitter-QCD zu diskretisieren. Sie unterscheiden sich unter anderem durch die Art und Weise, wie in ihnen die Quarks behandelt werden, die in der ursprünglichen Kontinuums-QCD als hochkomplizierte mathematische Objekte auftreten. Die älteste vorgeschlagene Methode ("Wilson-Quarks") hat den Nachteil, dass sie die sogenannte *chirale Symmetrie* der QCD nicht angemessen wiedergibt, die jedoch, wie man heute weiß, von entscheidender Bedeutung für das korrekte physikalische Verhalten insbesondere im Bereich kleiner Quarkmassen ist. Die Verletzung dieser Symmetrie in der Gitterformulierung führte in der Vergangenheit daher zu einer Reihe von Problemen sowohl konzeptioneller als auch praktischer Natur.

Erst in den letzten Jahren wurden Möglichkeiten gefunden, die Theorie so zu diskretisieren, dass die chirale Symmetrie erhalten bleibt. Wir benutzen im vorliegenden Projekt sogenannte *overlap quarks*. Mit diesen ist es prinzipiell möglich, leichte Quarks zu simulieren, was allerdings durch eine erhöhte numerische Komplexität erkauft wird. Simulationen mit Overlap-Quarks sind in den "Kosten" um etwa zwei Größenordnungen aufwendiger als solche mit Wilson-Quarks.

Fundamentale Größen, die wir im Rahmen dieses Projekts untersuchen, sind unter anderem die Abhängigkeiten der berechneten Massen der Hadronen von den eingegebenen Quarkmassen. Dieser Teil der Rechnungen hat gewissermaßen Kontrollcharakter: Die Anbindung an wohlbekanntes physika-

lich sehr genau gemessene Größen erlaubt uns Aussagen über die Zuverlässigkeit und Genauigkeit der angewandten Verfahren.

In der nachfolgenden Abbildung 1 haben wir zur Illustration die berechnete Masse des Protons in Abhängigkeit von der Quarkmasse dargestellt.

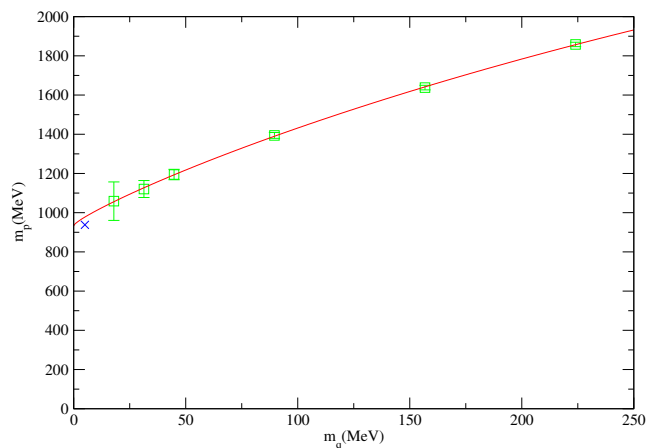


Abbildung 1: Berechnete Masse des Protons für verschiedene Ausgangswerte der Quarkmasse. Der physikalische Punkt ist durch das blaue Kreuz gekennzeichnet. Ferner ist die Extrapolationskurve eingetragen.

Unser Hauptinteresse gilt der Untersuchung der inneren Struktur der Hadronen:

Für den Betazerfall spielt die sogenannte achsiale Ladung g_A des Nukleons eine entscheidende Rolle. Die Berechnung dieser Größe fällt ebenfalls in den Bereich, der nur mit Gitterverfahren bewältigt werden kann. Unsere Rechnung reproduziert den experimentell gemessenen Wert auf etwa 10% genau.

Die Verteilung der Impulse der einzelnen Quarks innerhalb des Protons wird durch eine sogenannte Distributionsfunktion beschrieben. Wir berechnen in unseren Simulationen deren 1. Moment $\langle x \rangle$: Diese Größe ist ein Maß für den Bruchteil des Protonimpulses, der auf ein einzelnes Quark entfällt. Bisherige Berechnungen mithilfe von Wilson-Quarks konnten den im Experiment gemessenen Wert nicht richtig wiedergeben. Für dieses fehlerhafte Ergebnis sind mehrere Ursachen denkbar. Ein möglicher Grund könnte die Verletzung der chiralen Symmetrie durch die verwendeten Wilson-Quarks sein. Wir untersuchen deshalb auch, ob die Diskrepanz zum experimentellen Ergebnis bei der Verwendung von Overlap-Quarks verschwindet.

1. M. Gürtler *et al.*, "A lattice determination of g_A and $\langle x \rangle$ from overlap fermions", Preprint arXiv: hep-lat/0409164, erscheint in Nucl. Phys. Proc. Suppl. (2005)
2. D. Galletly *et al.*, "Quark spectra and light hadron phenomenology from overlap fermions with improved gauge field action", Nucl. Phys. Proc. Suppl. **129** (2004) 453

Berechnung der Gluon- und Ghost-Propagatoren in der Gitter-QCD: Confinement nach Gribov und Zwanziger

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. M. Müller-Preussker

Beantragende Institution: Institut für Physik, Humboldt-Universität zu Berlin

Mitarbeiter: Dr. E.-M. Ilgenfritz, Dr. V. K. Mitrjushkin, Dr. A. Schiller, Dipl.-Phys. A. Sternbeck, Dr. H. Stüben

Kooperationspartner: DESY Zeuthen, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, Universität Leipzig, Joint Institute for Nuclear Research Dubna

Förderung: DFG

Das Phänomen des Eingeschlossenseins (Confinement) der Quarks und Gluonen innerhalb der Hadronen gehört zu den nach wie vor nicht befriedigend geklärten Fragen an die Quantenchromodynamik (QCD), der Eichfeldtheorie für die starken Wechselwirkungen innerhalb des Standardmodells der Elementarteilchenphysik. Mit störungstheoretischen Methoden ist das Confinement nicht beschreibbar. Es gibt verschiedene Modelle, die das Phänomen über die Kondensation von abelschen Monopolen oder von Zentrums-Vortizes erklären.

Ein modellunabhängiger, feldtheoretischer Zugang zum Confinement wurde von Gribov und Zwanziger entwickelt [1]. Er ist unmittelbar mit dem Infrarotverhalten der eichabhängigen Gluon- und Ghost-Propagatoren der QCD verknüpft. Während der Gluon-Propagator im Limes verschwindender Impulse gegen Null gehen muss, soll sich der Ghost-Propagator singularär in diesem Grenzfall verhalten. Ein über Ward-Identitäten diktiertes Verhältnis der Renormierungsfaktoren dieser Propagatoren liefert die vom Impulsübertrag abhängende "laufende QCD-Kopplung" im sogenannten MOM-Renormierungsschema.

Die Berechnung der Propagatoren im Infrarotlimes gelingt aber nur mit nicht-störungstheoretischen Methoden. In der Literatur werden dazu einerseits begrenzte Systeme von Dyson-Schwinger-Gleichungen gelöst [2] und andererseits Simulationen der QCD auf einem Raum-Zeit-Gitter [3] durchgeführt. Der Berechnung werden in der Regel die Landau- oder die Coulomb-Eichung für die Gluonfelder zugrunde gelegt. Dazu ist jeweils ein entsprechendes Eichfunktional zu maximieren, das eine Vielzahl von lokalen Extrema besitzt (Gribov-Problem). Numerische Untersuchungen des einfacheren Falles der SU(2)-Gittereichtheorie haben gezeigt, dass in der Landau-Eichung der Gluon-Propagator nicht nachweisbar und der Ghost-Propagator aber bei kleinen Impulsen von der Wahl der Eichkopie abhängt [4]. In der realistischen reinen SU(3)-Eichtheorie wurde dies vor uns noch nicht untersucht. Das vorliegende Projekt schließt diese Lücke und liefert über die Untersuchung des Eigenwert-Spektrums des Faddeev-Popov-Operators zugleich Aussagen über die Beschaffenheit der Eichkopien [4]. Mit Hilfe von Simulationen auf sehr großen elongierten Gittern berechnen wir die Gluon- und Ghostpropagatoren und die QCD-Kopplung im Infrarotlimes, um verlässlich mit den auf analytischem Wege approximativ gewonnenen Dyson-Schwinger-Resultaten vergleichen zu können. Eine Erweiterung der Rechnungen auf die volle QCD mit zwei Quark-Flavour-Freiheitsgraden ist geplant.

Die erforderlichen Simulationen sind ohne sehr leistungsfähige, massiv-parallele Rechner wie das HLRN-System undenkbar.

1. V. N. Gribov, Nucl. Phys. B 139, 1 (1978); D. Zwanziger, Nucl. Phys. B 364, 127 (1991); Nucl. Phys. B 399, 477 (1993); Nucl. Phys. B 412, 657 (1994).
2. R. Alkofer, L. von Smekal, Phys. Rept. 353, 281 (2001), da auch weitere Literaturangaben.
3. H. Suman, K. Schilling, Phys. Lett. B 373, 314 (1996); S. Furui, H. Nakajima, Phys. Rev. D 69, 074505 (2004); Phys. Rev. D 70, 094504 (2004); J.C.R. Bloch, A. Cucchieri, K. Langfeld, T. Mendes, Nucl. Phys. B 687, 76 (2004), da auch weitere Literaturangaben.
4. T. Bakeev, E.-M. Ilgenfritz, V. K. Mitrjushkin, M. Müller-Preussker, Phys. Rev. D 69, 074507 (2004); A. Sternbeck, E.-M. Ilgenfritz, M. Müller-Preussker, A. Schiller, Nucl. Phys. Proc. Suppl. 140, 653 (2005); Contribution 6th Conf. on Quark Confinement and the Hadron Spectrum, Villasimius, Sardinia, Italy, Sep. 21 - 25, 2004, e-Print Archive: hep-lat/0412011.

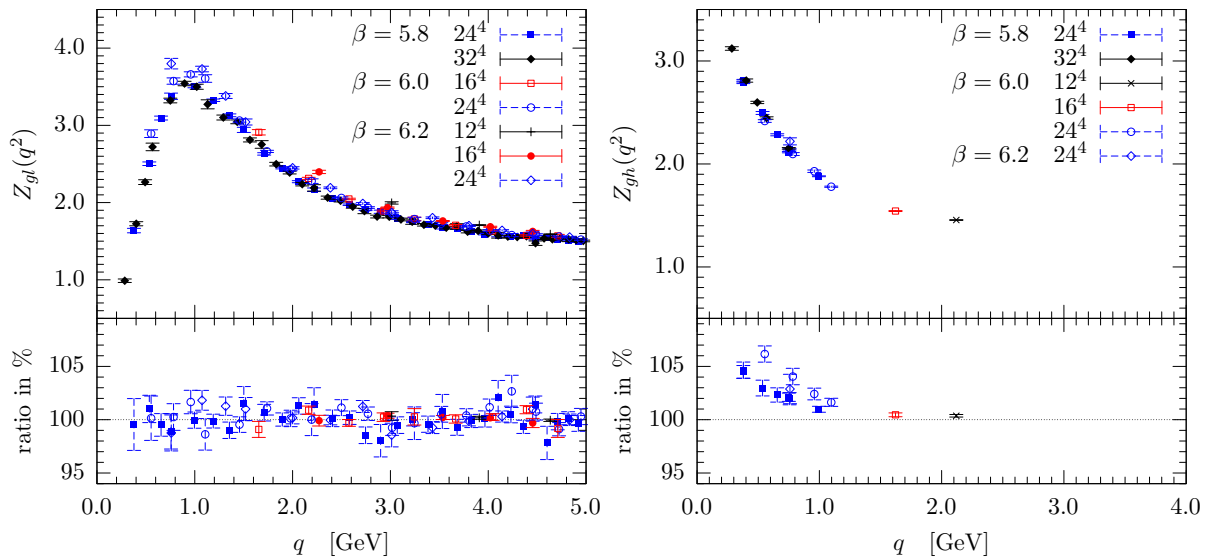


Abbildung 1: Renormierungsfaktoren für den Gluon-Propagator (links) und den Ghost-Propagator (rechts) berechnet in der reinen $SU(3)$ -Gittereichtheorie für die Landau-Eichung auf verschiedenen Gittergrößen. Es wurde jeweils eine größere Zahl von Zufalls-Eichkopien erzeugt, wonach die Eichung iterativ mittels Überrelaxation fixiert wurde. Die Kurven zeigen das Ergebnis jeweils für das 'globale' (beste gefundene) Extremum des Eichfunktionals. Darunter wird jeweils das Verhältnis für das erstgefundene Extremum zu bestem Extremum gezeigt. Während dieses Verhältnis praktisch Eins ist für den Gluon-Propagator, erkennt man klar für den Ghost-Propagator die Abhängigkeit von den Gribov-Kopien bei kleinen Impulswerten.

Simulations of Non-Commutative Field Theory in Four Dimensions

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. M. Müller-Preussker

Beantragende Institution: Institut für Physik, Humboldt Universität zu Berlin

Mitarbeiter: Dr. W. Bietenholz, Dipl.-Phys. A. Bigarini, Dr. F. Hofheinz, Dr. J. Nishimura, Dipl.-Phys. Y. Suzuki, Dipl.-Phys. J. Volkholz

Kooperationspartner: Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Perugia; INFN, Italy; High Energy Accelerator Research Organization (KEK), Japan; Institute of Physics, University of Tsukuba, Japan

Förderung: DFG, INFN

It is a fundamental property of quantum mechanics that coordinates and momentum components do not commute. As an extension of this property, one may also introduce non-commutative (NC) coordinates, which imply a new geometry of our space-time. For the last ten years, quantum field theories on such spaces have been extremely popular in theoretical physics, since it was observed that they correspond to string theory in a certain low energy limit. There are also arguments for such spaces to be a natural framework for a conciliation of quantum theory and gravity. In addition NC spaces are applied in solid state physics — especially in the context of the quantum Hall effect — as a formalism, which substitutes a magnetic background field.

The most wide-spread treatment of field theory in general uses perturbation theory, i.e. it starts from free particles and includes their interactions order by order as a power series. However, field theories on NC spaces are very hard to handle with perturbation theory, because a new type of singularity arises. These terms diverge at both ends of the energy spectrum (*UV/IR mixing*), and a systematic renormalisation procedure for them has not been found yet beyond the leading order. Therefore we took a fully non-perturbative approach to NC field theory in this project.

In the functional integral formalism, quantum field theories are given by integrals over an infinite set of all possible configurations of the fields involved. The only known method to study such theories non-perturbatively uses a lattice discretisation of space-time and performs Monte Carlo simulations to generate a set of typical configurations. The expectation values of the observables of interest can then be measured based on this set, and within the statistical errors (and systematic errors due to the discretisation and the finite volume) a non-perturbative result is obtained.

NC spaces can still be lattice discretised, but as an unusual property, those lattices are automatically periodic. In order to extrapolate to the renormalised NC field theory, we need simultaneously a continuum limit (which removes the lattice discretisation, i.e. the UV regularisation), and an infinite volume limit (which takes us to the IR limit). This simultaneous limit is a peculiar requirement of NC field theories; it is denoted as the “*double scaling limit*” (DSL).

In contrast to the commutative space, NC field theories are *non-local*. In the lattice formulation this implies that the field variables on any two lattice sites or links are coupled, which makes a direct simulation extremely tedious. Fortunately it is possible to circumvent this problem to a large extent by using instead the mapping of such models onto matrix models; in particular, the degrees of freedom on a NC plane are then represented by elements of a matrix, which is located on a single point. This mapping is indeed rigorous, since the algebras of the resulting theories are identical (Morita equivalence).

We first simulated pure quantum electrodynamics on a NC plane, and we were able to extrapolate to a DSL, which shows that this model is non-perturbatively renormalisable: the cut-off in the regularisation can be removed, and we end up with finite observables. At small areas we observed an area law for the Wilson loop (the simplest gauge invariant term), and at large area it displays a linearly rising complex phase.

Next we proceeded to the scalar $\lambda\phi^4$ model in three dimensions, which involve a NC plane along with a commutative Euclidean time [1]. This study was computationally more demanding, and it already involved runs on the IBM p690 clusters of the HLRN. As an important observable, we studied the dispersion relation, i.e. the energy as a function of the spatial momentum. In contrast to the commutative space, we observed indeed a divergence at very large *and at very small* momenta, which is a direct manifestation of the UV/IR mixing. This behaviour stabilises in the DSL, which reveals again renormalisability (which could not be demonstrated for this model in perturbation theory). Moreover we investigated the

phase diagram, first on the lattice and then also in the DSL. A strongly negative quadratic coefficient imposes some order in the ground state, which is also the case in the commutative world. However, as a completely new feature of the NC model, this order is not always uniform, but it can also lead to the dominance of stripe patterns. In fact, the existence of such a striped phase has been conjectured earlier based on theoretical arguments, though contradictory claims appeared in the literature. Our simulation results provide compelling evidence in favour of such a striped phase.

Finally we proceeded to four space-time dimensions, where we are now studying again pure $U(1)$ gauge theory [2, 3]. This means that we are investigating a photon field in a NC space, and we are most interested in effects, which can be confronted with experimental observations. For instance, a NC distorted dispersion relation as we observed in the $\lambda\phi^4$ model would imply a frequency dependent speed of light. In fact, for instance the GLAST project is going to search for exactly this effect in cosmic rays over a large energy range (its start is scheduled for 2006).

The first goal in this project was to establish an efficient parallel code. This was accomplished successfully at the Humboldt University of Berlin, and the code is tested extensively against an independent version by our Japanese collaborators in Tsukuba. We already measured a number of physical observables related to Wilson loops and Polyakov lines on the NC lattice [2]. But the main goal is of course again the identification of a DSL, which enables us to take the limits to the continuum and to an infinite volume. In particular the study of square shaped Wilson loops has now led to a breakthrough in this delicate but crucial point, such that a successful scaling law for a DSL is now identified [3]. This double scaling law relates the inverse gauge coupling squared to the lattice spacing in dimensional unit, $\beta \equiv 1/g^2 \propto 1/a$. As a consequence, the lattice size N and β should be sent to infinity while keeping the ratio $N/\beta^2 = \text{constant}$. In Figure 1 below we show the real part of the Wilson loops of NC $U(1)$ gauge theory in four dimension over a wide range in N and β , at a fixed ratio $N/\beta^2 = 20$. We see a convincing double scaling behaviour. This allows us now to proceed to the DSL also for other physical observables, which may be of phenomenological relevance for the photon.

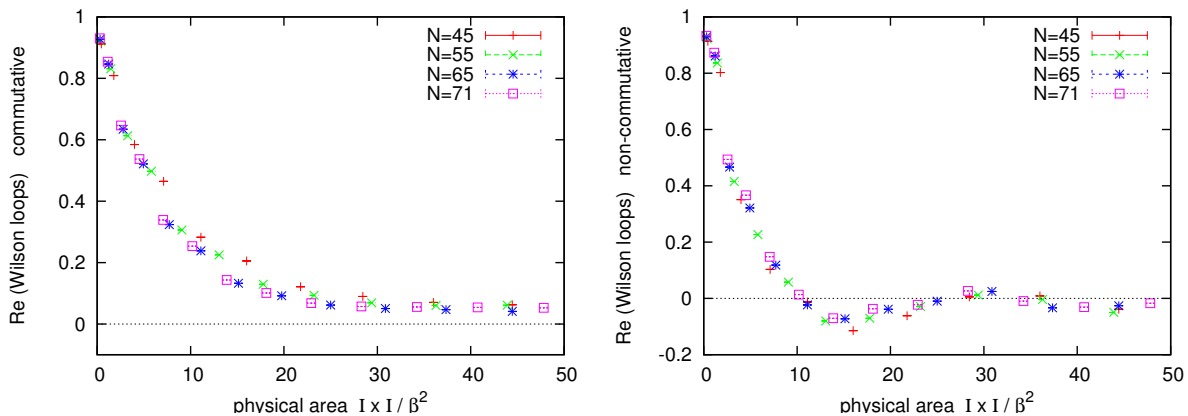


Abbildung 1: The real part of the Wilson loop for a photon in a non-commutative space-time. The data at different system sizes N show a stable behaviour in the limit towards the continuum and an infinite volume, which removes the regularisation cut-offs so that we arrive at the physical result. The plot on the left (on the right) refers to the commutative (non-commutative) plane. They emerged from simulations on the IBM p690 clusters at HLRN. The oscillating shape on the right is completely unknown in the ordinary (commutative) space.

1. W. Bietenholz, F. Hofheinz, J. Nishimura, Phase Diagram and Dispersion Relation of the Non-Commutative $\lambda\phi^4$ Model in $d = 3$, J. High Energy Phys. 06, 042 (2004).
2. W. Bietenholz, F. Hofheinz, J. Nishimura, J. Volkholz, First Simulation Results for the Photon in a Non-Commutative Space, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 140, 772-774 (2005).
3. W. Bietenholz, A. Bigarini, F. Hofheinz, J. Nishimura, J. Volkholz, Numerical Results for $U(1)$ Gauge Theory on 2d and 4d Non-Commutative Spaces, HU-EP-02/02, hep-th/0501147 (2005), to appear in Fortschr. Phys.

Testing scaling and chiral properties of twisted mass regularization of lattice QCD

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Volkard Linke

Beantragende Institution: Institut für Theoretische Physik, Freie Universität Berlin

Mitarbeiter: PD Dr. Karl Jansen, Dr. Mauro Papinutto, Dr. Andrea Shindler, Dipl.-Phys. Carsten Urbach, Dr. Ines Wetzorke

Kooperationspartner: NIC/DESY Zeuthen

Förderung: DFG, EU

Das Projekt wird im Rahmen eines Kooperationsvertrags zwischen dem DESY und der Freien Universität Berlin durchgeführt. Es beschäftigt sich mit ab-initio-Berechnungen der Struktur der Hadronen auf der Grundlage der Quantenchromodynamik (QCD).

Eine kurze Einführung in die Techniken zur Behandlung dieses extrem schwierigen Problemfeldes findet sich in der vorangehenden Beschreibung zu unserem Projekt bep00006, das dem gleichen Fachgebiet zuzuordnen ist: Nach unserer heutigen Kenntnis sind Hadronen aus Quarks zusammengesetzt, den Grundbausteinen der QCD. Charakteristische Merkmale dieser Theorie sind ihre "asymptotische Freiheit" (bei kleinen Abständen wechselwirken die Quarks nur schwach miteinander, Prozesse, die bei kleinen Abständen ablaufen, können mithin im Rahmen einer Störungstheorie mit den üblichen Methoden der Theoretischen Physik berechnet werden) wie auch ihr "confinement"-Verhalten (für große Abstände fallen die Kräfte zwischen den Bausteinen anders als in den üblichen physikalischen Theorien wie der Elektrodynamik oder der Gravitation nicht auf Null ab, so dass Quarks als einzelne freie Objekte nicht existieren können, sondern nur in Form gebundener Zustände, eben der Hadronen). Für die Behandlung dieses letzteren Bereichs fehlt eine ausreichend wirkungsvolle analytische Mathematik. Die einzige verfügbare Methode, die es erlaubt, Eigenschaften der Hadronen zu berechnen, besteht in einer "Vergrößerung" der 4-dimensionalen Kontinuums von Raum und Zeit auf ein endliches diskretes Gitter (die zum Abschluss der Untersuchungen durch einen Grenzübergang wieder behoben werden muss). Die Eigenschaften der Hadronen ergeben sich dann im Rahmen der sogenannten *Pfadintegralformulierung* aus "hochdimensionalen" Integralen, die jedoch wegen ihres wirklich außerordentlich hohen Dimensionsgrades - schon für einen einfachen approximativen Fall hat man es schnell mit einer Milliarde zu tun - nur mithilfe von Monte-Carlo-Methoden ausgewertet werden können, einer Art stochastischer Mathematik.

Die "Kosten" von Monte-Carlo-Simulationen hängen entscheidend von der Größe der verwendeten Quarkmassen ab. Mit abnehmenden Massen steigt der rechnerische Aufwand dramatisch an. Bei den heute verfügbaren Computerressourcen ist es nicht möglich, mit denjenigen Quarkmassen zu arbeiten, die tatsächlich physikalisch nötig wären. Stattdessen führt man die Rechnungen bei einer Reihe größerer Massen durch und extrapoliert die Ergebnisse mit geeigneten Verfahren abschließend zu deren relevanten physikalischen Werten.

Es gibt unterschiedliche Möglichkeiten, die Kontinuums-QCD zu einer Gitter-QCD zu diskretisieren. Sie unterscheiden sich unter anderem durch die Art und Weise, wie in ihnen die Quarks behandelt werden, die in der ursprünglichen Kontinuums-QCD als hochkomplizierte mathematische Objekte auftreten. Die älteste vorgeschlagene Methode ("Wilson-Quarks") hat den Nachteil, dass sie die sogenannte *chirale Symmetrie* der QCD nicht angemessen wiedergibt, die jedoch, wie man heute weiß, von entscheidender Bedeutung für das korrekte physikalische Verhalten insbesondere im Bereich kleiner Quarkmassen ist.

Erst in den letzten Jahren wurden Möglichkeiten gefunden, die Theorie so zu diskretisieren, dass die chirale Symmetrie erhalten bleibt. Das vorliegende Projekt arbeitet mit sogenannten *twisted mass quarks*. Sie stellen eine Alternative zu den in Projekt bep00006 verwendeten Overlap-Quarks dar. Mit Twisted-Mass-Quarks ist es ebenfalls möglich, bei kleinen Quarkmassen zu simulieren, die den physikalischen Werten schon recht nahe kommen. Auch hier erhöht sich allerdings der numerische Aufwand gegenüber den ursprünglich verwendeten Wilson-Quarks erheblich. Welche der beiden Formulierungen "twisted mass" versus "overlap" letztlich die geeignetere ist - von den Eigenschaften her wie auch vom numerischen Aufwand - ist noch offen und unter anderem Gegenstand der Untersuchungen, die mit unseren beiden Projekten auf dem HLRN-System durchgeführt werden.

Das vom HLRN für das vorliegende Projekt zur Verfügung gestellte Kontingent ermöglichte unter anderem den Nachweis, dass in der Twisted-Mass-Formulierung leichte Quarks auch dann behandelt werden können, wenn man deren dynamische Freiheitsgrade einschaltet, was eigentlich zwar zwingend erforderlich ist, da die Physik aufgrund der Unschärferelation selbst im “absoluten Nichts” Quantenfluktuationen in Form ständig entstehender und wieder vergehender Quark-Antiquark-Paare verlangt, was man rechnerisch bisher aber kaum leisten konnte, da sich der Aufwand dafür noch einmal erheblich erhöht. Des weiteren konnte gezeigt werden, dass die Twisted-Mass-Formulierung den Einfluss der Diskretisierungsfehler geringer ausfallen lässt als andere Formulierungen und damit die abschließende Extrapolation zu den Kontinuumswerten sehr viel zuverlässiger gestaltet.

Neben den Untersuchungen des Twisted-Mass-Konzepts auf seine Tauglichkeit für QCD-Rechnungen in puncto Zuverlässigkeit und Effizienz hat sich das Projekt auch um die Aufklärung fundamentaler Fragen zur Struktur der hadronischen Welt bemüht. So ist es gelungen, das unerwartete überraschend komplizierte Phasendiagramm der Gitter-QCD zu berechnen, ein Ergebnis, das international Beachtung gefunden hat. Eine schematische Darstellung findet sich in der nachfolgenden Abbildung 1.

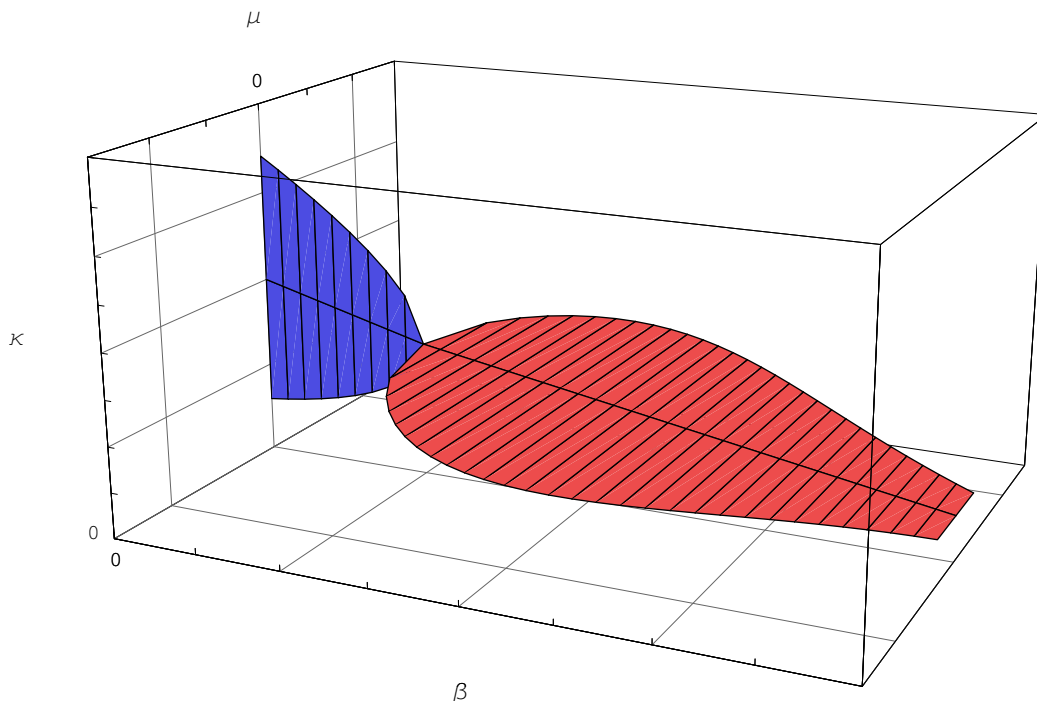


Abbildung 1: Phasendiagramm der Twisted-Mass-Gitter-QCD als ein Ergebnis der durchgeführten Untersuchungen. Innerhalb der blauen Fläche ist das sogenannte Aoki-Szenario realisiert, der Rand besteht aus einer Linie von Phasenübergängen 2. Ordnung. Die rote Fläche kennzeichnet die Parameterwerte, für die das sogenannte normale Szenario vorliegt.

1. K. Jansen, M. Papinutto, A. Shindler, C. Urbach and I. Wetzorke [XLF-Collaboration], “Light quarks with twisted mass fermions”, Preprint arXiv:hep-lat/0503031.
2. W. Bietenholz *et al.* [XLF Collaboration], “Going chiral: Overlap versus twisted mass fermions”, JHEP **0412** (2004) 044
3. F. Farchioni *et al.*, “Twisted mass quarks and the phase structure of lattice QCD”, Eur. Phys. J. C **39** (2005) 421

Overlap Fermions with a Hypercube Kernel: Simulations in the epsilon-Regime of Quantum Chromodynamics

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. M. Müller-Preussker

Beantragende Institution: Institut für Physik, Humboldt Universität zu Berlin

Mitarbeiter: Dr. W. Bietenholz, Dr. K.-I. Nagai, Dr. M. Papinutto, Dr. S. Shcheredin, Dr. U. Wenger

Kooperationspartner: Fakultät für Physik, Universität Bielefeld. NIC/DESY Zeuthen.

Förderung: DFG, DESY

According to the Standard Model of particle physics, the strong interaction among quarks and gluons is described by an $SU(3)$ gauge theory denoted as Quantum Chromodynamics (QCD). In this framework, perturbation theory explains that quarks are asymptotically free at very short distances resp. extremely high energy. On the other hand, there is a notorious lack of analytical tools to handle QCD at moderate or low energy, although this sector is most relevant for our every days perceptions.

To some extent, at least the lightest hadrons can still be analysed in this regime by using a low energy effective theory, called *chiral perturbation theory*, instead of QCD. It relates a number of quantities based on the approximate realisation of a global symmetry, the so-called chirality. The corresponding Lagrangian includes all the terms which obey this symmetry in some hierarchical order based on the energy. However, the coefficients of these terms (the *Low Energy Constants*) enter the chiral perturbation theory as free parameters. In the leading order, the chiral Lagrangian reads

$$\mathcal{L}_{\text{eff}}[U] = \frac{F^2}{4} \text{Tr}[\partial_\mu U^\dagger \partial_\mu U] - \frac{1}{2} \Sigma \text{Tr}[\mathcal{M}(U + U^\dagger)] + \dots, \quad U \in SU(N_f),$$

where N_f is the number of light quark flavours involved, and \mathcal{M} is a diagonal matrix with the corresponding quark masses. The *pion decay constant* F and the *scalar condensate* Σ appear here as the two leading Low Energy Constants. They do play an important rôle in particle physics, but their determination is not possible within chiral perturbation theory. Theoretical predictions for their values can only emerge from the fundamental theory, which is QCD in this case.

The main goal of this project is an evaluation of these Low Energy Constants from QCD simulations on a lattice. Such simulations can provide non-perturbative results, but a number of technical obstacles have to be overcome. It was a long-standing problem to keep track of the chiral symmetry in the lattice regularised system, which has been solved a few years ago by the use of *Ginsparg-Wilson fermions*. The standard formulation of such lattice fermions is H. Neuberger's overlap operator, but in this project we also consider an overlap hypercube operator. Both are chirally symmetric and the latter is computationally more involved, but it has clear advantages in view of locality, rotation symmetry and presumably also in the scaling behaviour (i.e. in the sensitivity to the lattice regularisation). In both versions, the evaluation of overlap operators is a considerable numerical task, so that QCD simulations with chiral quarks are so far only feasible in the quenched approximation, which neglects the contributions of quark loops.

This lattice quark formulation provides access to light pions, close to their real masses in Nature. However, this also implies a long correlation length, which may distort the simulation results due to finite size effects. A computationally expensive way to control the finite size effects would be the use of very large lattices. However, since the evaluation of overlap operators is tedious already, we follow in this project a different strategy. In fact, it is possible to extract the physically relevant information also from a small volume (compared to the correlation length or inverse pion mass). This setting is called the *ϵ -regime*.

Squeezing pions into such a small box is not a realistic situation. However, as Gasser and Leutwyler pointed out, the strong finite size effects which occur in the ϵ -regime are parametrised by the Low Energy Constants *of the infinite volume*. Therefore measurements in the small volume can indeed provide the physically relevant information that we are looking for.

As a peculiarity of the ϵ -regime, observables tend to depend strongly on the topological sector. In general, such sectors are not well defined on the lattice, but fortunately the Ginsparg-Wilson fermions come along with a sound definition for them. This type of lattice fermions has exact zero modes with a definite chirality, so the topological charge can be defined by the fermionic index ν .

We now discuss our evaluations of the leading Low Energy Constants F and Σ from simulations with overlap fermions in the ϵ -regime. With respect to Σ , we considered the eigenvalue distribution in

the lowest part of the Dirac spectrum, which is described by chiral Random Matrix Theory (RMT). We confirmed that this description is indeed valid up to the second non-zero Dirac eigenvalue, if the box length exceeds 1.1 fm [1, 2]. Then the RMT predictions and the lattice data for chiral fermions in the ϵ -regime agree, with Σ as the only free fitting parameter. In our plot on the left we show the mean values for the first non-zero eigenvalue $\langle \lambda_1 \rangle$ (re-scaled by a factor ΣV , where V is the volume) that we measured in the sectors with topological charge $|\nu| = 0, 1$ and 2 . We include results for the standard Neuberger operator on two different lattice sizes, and also for the hypercube overlap operator [3]. In each case, an explicit value of Σ is singled out, which is consistent with the values in the literature. (There are remaining artifacts due to quenching and the finite lattice spacing, hence these values do not need to coincide exactly.)

Now we turn our attention to the pion decay constant. We first tried an evaluation based on the axial correlation function, which came out somewhat too large [4]. Then we evaluated the contributions of the zero modes to the pseudo-scalar correlations functions, and compared the results to the analytic predictions from quenched chiral perturbation theory [3]. Here we found a good agreement for the topologies $|\nu| = 1$ and 2 . One of the free parameters in these fits is F , so that the successful fits provide a value for the pion decay constant.

To be more precise, the pseudo-scalar correlators are decomposed in two parts called connected and disconnected contributions, and the slopes of these two parts in the centre of the temporal direction is parametrised by F and some quenching specific constant. A combined fit for these quantities at a lattice distance s from the centre leads to the results shown on the right-hand side of Figure 1. The slope is obtained in the limit $s \rightarrow 0$, which is most stable for the overlap hypercube fermion. Its result is compatible with the experimentally observed pion decay constant.

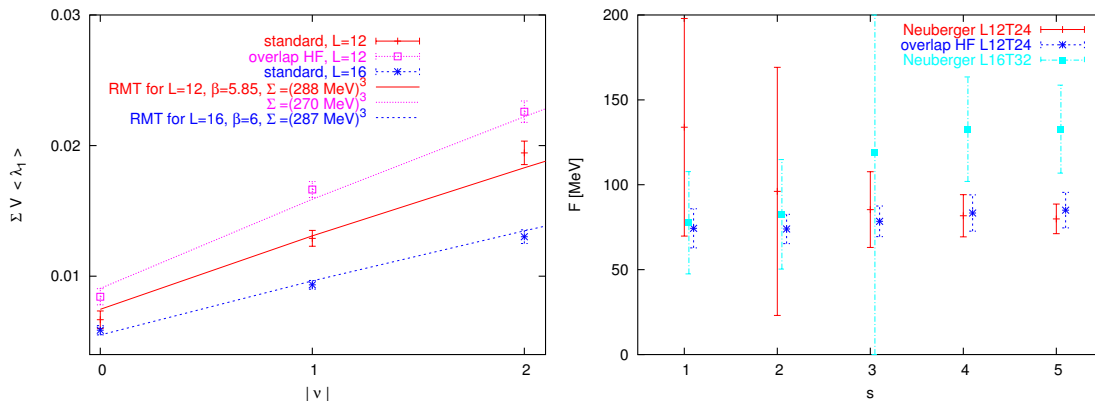


Abbildung 1: Results for the leading Low Energy Constants of the chiral Lagrangian, extracted from QCD simulations with chiral quarks in the ϵ -regime of QCD. These simulations were performed on the IBM p690 clusters at HLRN. On the left we show the (re-scaled) mean values of the first non-zero Dirac eigenvalue at topological charges $|\nu| = 0, 1$ and 2 , which follow closely the predictions by chiral RMT (curves) for suitable values of Σ . On the right we show the pion decay constant F evaluated from the zero mode contributions to the pseudo-scalar correlation functions, with a fitting range s around the lattice centre in time direction. We obtain a stable and physically sensible extrapolation in particular for the overlap hypercube fermion (HF).

1. W. Bietenholz, K. Jansen and S. Shcheredin, Spectral Properties of the Overlap Dirac Operator in QCD, Journal of High Energy Physics 0307, 033 (2003).
2. W. Bietenholz, T. Chiarappa, K. Jansen, K.-I. Nagai, and S. Shcheredin, Simulating Chiral Quarks in the epsilon-Regime of QCD, HU-EP-05/03, SFB/PPP-05-04, hep-lat/0501012, to appear in Nucl. Phys. A.
3. W. Bietenholz and S. Shcheredin, Relating Chiral Perturbation Theory and QCD Simulations with Overlap Hypercube Fermions, Roumanian Journal of Physics 50, 249-258 (2005).
4. W. Bietenholz, T. Chiarappa, K. Jansen, K.-I. Nagai, and S. Shcheredin, Axial Correlation Functions in the epsilon-Regime: a Numerical Study with Overlap Fermions, Journal of High Energy Physics 0402, 023 (2004).

Simulation von Stern- und Planetenatmosphären mit PHOENIX

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Peter Hauschildt

Beantragende Institution: Hamburger Sternwarte

Mitarbeiter: Prof. Dr. E. Baron, Dr. Travis Barman, Dr. Andreas Schweitzer, Dipl.-Phys. Alexander Petz, Dipl.-Phys. Matthias Dehn, Dipl.-Phys. Sebastian Knop, Dipl.-Phys. Christine Johnas, Fr. Ines Brott, Hr. A. C. Wawrzyn

Kooperationspartner: University of Oklahoma, CRAL Lyon, Caltech, Arizona State University

Förderung: DFG, NASA

Wir verwenden das HLRN-System, um hoch detaillierte Modelle von Stern- und Planetenatmosphären mit unserem state-of-the-art-Programmpaket PHOENIX zu berechnen. Unsere Modelle von extrasolaren Gasplaneten (EGPs) sind weltweit führend und beinhalten nicht nur die Effekte von Staubbildung und Millionen von Moleküllinien auf die Struktur der Planetenatmosphäre, sondern auch Effekt wie externe Beleuchtung durch den Elternstern des Planeten. Mit diesen Modellen können wir beobachtete Spektren analysieren und auch Vorhersagen machen, die z.B. zu verbesserten Beobachtungs- und Detektions-Strategien für EGP's führen. Des weiteren wollen wir unsere Modelle von Sternatmosphären, die für praktisch alle vorkommenden Sterntypen gültig sind, weiter verbessern und ausbauen. Zusätzliche Arbeitsbereiche der Gruppe sind die Simulation von Nova- und Supernova-Atmosphären, die Konstruktion von Opazitäts- und Zustandsgleichungstabellen für allgemeine Verwendung in der Astronomie sowie die Entwicklung neuer Strahlungstransport-Algorithmen für 3D Medien mit relativistischen Geschwindigkeitsfeldern.

Das PHOENIX-Team hat sein Hauptquartier an der Hamburger Sternwarte und besteht zusätzlich aus internationalen Mitarbeitern in Frankreich (Lyon) und den USA (University of Oklahoma, Caltech, Arizona State University). Das Programmpaket besteht aus ca. 800.000 Zeilen Fortran 95, C++ und C code, ist voll parallelisiert (MPI) und läuft auf IBM-pSeries-Maschinen sehr effizient. Es werden ca. 25GB Eingabedateien benötigt, Modellgitter und andere Ergebnisdateien können 1TB oder mehr benötigen. Unsere Ergebnisse sind elektronisch verfügbar und werden oft von der astronomical community genutzt. Dabei wird pro Jahr ca. 500000 mal via FTP auf Daten unserer Gruppe zugegriffen, dabei wurden meistens synthetische Spektren angefordert. Aus diesen Zugriffen werden in vielen Fällen auch Anfragen für spezielle Modelle oder Spektren, die wir dann, falls möglich, erfüllen.

Der HLRN hat uns eine Reihe von wichtigen Ergebnissen ermöglicht. Eines der spektakulärsten Resultate ist vielleicht das möglicherweise erste Bild eines extrasolaren Gasriesen-Planeten (GQ Lupi, siehe Abb. 1).

Zur Bestimmung der Masse dieses Objektes wurden unsere auf dem HLRN-System berechneten Modelle verwendet. Ohne den HLRN hätten wir die benötigten Modellgitter, die zur Analyse der beobachteten Spektren verwendet werden müssen, nicht berechnen können. Diese Arbeit hat auch in der internationalen Presse ein sehr großes Echo gefunden und zeigt, wie interessant astronomische Entdeckungen auch für die breite Öffentlichkeit sein können. Zur Zeit arbeiten wir nicht nur daran, diese Modelle zu verbessern, um damit die Masse des möglichen Planeten besser bestimmen zu können, sondern auch an Erweiterungen auf terrestrische Planeten (in Zusammenarbeit mit Kollegen in Lyon).

Unsere Modellgitter wurden z. B. dazu verwendet, die Instrumentierung des von der ESA geplanten GAIA Satelliten zu entwerfen. GAIA ist ein astrometrischer Satellit, der fast alle Sterne (es ist geplant ca. 1 Milliarde Sterne zu erfassen) der Milchstraße vermessen soll, d.h., ihre exakten Positionen, Entfernungen und Geschwindigkeiten bestimmen wird. Damit werden wir dann ein viel genaueres Bild der Milchstraße und ihrer Dynamik bekommen. Unsere Modelle werden verwendet, um die Spektrographen und Photometer von GAIA so zu konstruieren, dass maximale Informationsausbeute bei minimalen Kostenfaktoren erreicht wird. Wir konnten die dazu benötigten ca. 25000 Modelle nur auf dem HLRN-System berechnen, kein anderes System hat dazu genügend Rechenleistung liefern können.

Die am HLRN verfügbare Rechenleistung hat es uns auch erlaubt, zum ersten Mal detaillierte Modelle von bestrahlten Sternen (die z.B. in engen Doppelsternen vorkommen) und Planeten zu berechnen. Dazu werden Teile der bestrahlten Atmosphäre in konzentrischen Kreisen um den Zenit berechnet und dann später zu einem Gesamtbild zusammengefügt. Damit kann man das Spektrum des System zu verschiedenen Zeiten vorhersagen und mit Beobachtungen, z.B. mit dem Hubble Space Teleskop im sichtbaren Licht oder mit NASA's Spitzer Space Teleskop im Infraroten, vergleichen. Dadurch können

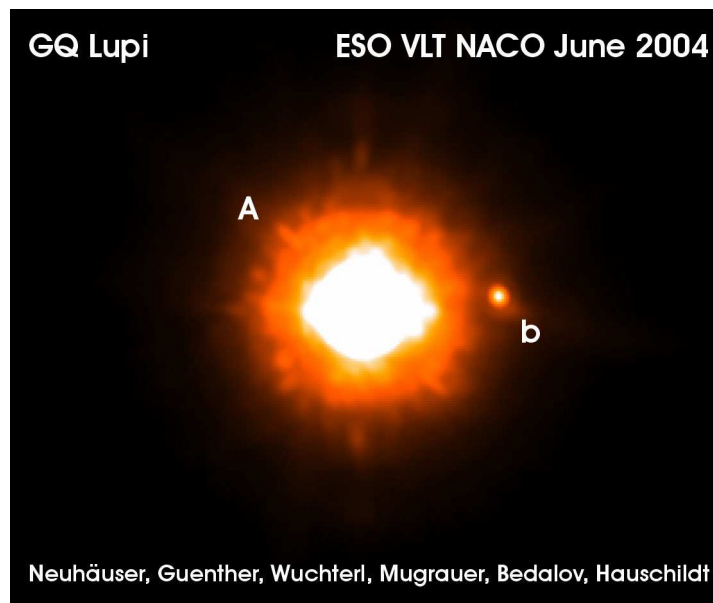


Abbildung 1: Das möglicherweise erste Photo eines extrasolaren Planeten. Das Bild wurde von ESO's VLT 8m Teleskopen aufgenommen. Der mögliche Planet ist Objekt 'b', sein Elternstern ist Objekt 'A'. Aus Neuhäuser et al, A&A, 2005, in press.

wir dann die physikalischen Bedingungen in der Stern- bzw. Planetenatmosphäre untersuchen. Wir planen unsere Modelle in der Zukunft mit vollständigem 3-dimensionalen Simulationen des Strahlungstransportes zu verbessern (s.u.).

Ein weiteres wichtiges Ergebnis unserer Arbeit auf dem HLRN-System ist die Konstruktion der ersten Computersimulationen der Röntgenspektren von klassischen Novae, ein wichtiger Typus von explodierenden Sternen. Dabei wurden im Rahmen der Doktorarbeit von A. Petz neue Methoden entwickelt, um diese Objekte zu modellieren. Sowohl die Entwicklung als auch die Modellrechnungen wurden dabei mit Hilfe des HLRN-Systems durchgeführt. Diese Simulationen sind die ersten ihrer Art, die die neuen Nova Beobachtungen von NASA's CHANDRA Satelliten im Röntgenbereich erklären können und sind weltweit einzigartig.

Wir haben den HLRN auch zur Entwicklung von neuen Algorithmen eingesetzt. Dabei haben wir zunächst Algorithmen zur genaueren Berechnung von Strahlungsfeldern in expandierenden Medien mit relativistischen Geschwindigkeiten entwickelt und diese dann auf beliebig komplizierte Geschwindigkeitsverteilungen erweitert. Da diese Methoden extrem komplexe Rechnungen benötigen, sind wir dabei auf Parallelrechner wie das HLRN-System angewiesen. In der Zukunft planen wir, diese Methoden auf 3-dimensionale Konfigurationen anzuwenden. Dazu werden im Endausbau Computer mit 1TB RAM pro CPU, ca. 1024 CPUs und einigen PB Plattenplatz notwendig werden. Dies liegt an der enormen Menge an Information, die in Strahlungsfeldern kodiert ist: an jedem Punkt des betrachteten Raumes muss man die frequenzabhängige Strahlung in alle möglichen Richtungen betrachten. Daher sind gigantische Parallelrechner notwendig, um solche Simulationen mit physikalisch brauchbaren Details durchführen zu können.

1. Hauschildt, P. & Baron, E.: Improved discretization of the wavelength derivative term in CMF operator splitting numerical radiative transfer, *Astronomy & Astrophysics*, 417, 317–324, 2004
2. Baron, E. & Hauschildt, P.: Co-moving frame radiative transfer in spherical media with arbitrary velocity fields, *Astronomy & Astrophysics*, 427, 987, 2004
3. Barman, T., Hauschildt, P., Allard, F.: Model Atmospheres for Irradiated Stars in Pre-Cataclysmic Variables, *Astrophysical Journal*, 614, 338, 2004
4. Petz, A., Hauschildt, P., Ness, J.-U., Starrfield, S.: Modeling CHANDRA Low Energy Transmission Grating Spectrometer Observations of Classical Novae with PHOENIX. I. V4743 Sagittarii, *Astronomy & Astrophysics*, 431, 321-328, 2005

Ab-Initio-Berechnung der elektronischen Struktur niederdimensionaler hybrider Systeme

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Roland Wiesendanger

Beantragende Institution: Universität Hamburg

Mitarbeiter: Dipl.-Phys. Lilli Sacharow

Kooperationspartner: Forschungszentrum Jülich

Förderung: Graduiertenkolleg der DFG

Eines der wichtigsten Themen der heutigen Physik ist die Technologie der "spintronic", bei der nicht nur die Ladung von Elektronen, sondern auch deren Spin zur Informationsverarbeitung verwendet werden. Motiviert durch die Fragestellungen der "spintronic" sind die Untersuchungen der Austauschwechselwirkung in magnetischen Halbleitern. Magnetische Halbleiter sind Stoffe, die sowohl magnetische als auch halbleitende Eigenschaften in sich vereinen. Sie bestehen aus einem Halbleiter, dotiert mit den magnetischen Atomen. Besseres Verständnis der Austauschwechselwirkung ist wichtig, um magnetische Halbleiter mit einer Curie-Temperatur, die im Bereich der Raumtemperatur liegt, zu erhalten.

Wir untersuchten mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie die Austauschwechselwirkung von magnetischen Atomen im Halbleiter am Beispiel eines hybriden Systems, bestehend aus einer InAs(110)-Oberfläche als Halbleiter und Fe-Ketten als magnetischen Atomen. Eine wesentliche Voraussetzung für die korrekte Bestimmung der magnetischen Struktur und damit der Austauschwechselwirkung ist die Geometrie des Systems. Der anspruchsvollste Teil der Arbeit im Bezug auf Computerressourcen ist die Bestimmung der Geometrie. In einer iterativen Prozedur relaxiert man die Positionen der Atome von einer Anfangskonfiguration zu der Konfiguration, in der die Kräfte verschwinden. Diese Prozedur verlangt sowohl großen Speicher als auch sehr viel Rechenzeit. Aus diesem Grund verzichtete man bis heute meistens auf die Relaxation. Besonders kompliziert ist die Behandlung von Strukturen, bei denen die Periodizität des Systems gestört ist. Dazu gehören Oberflächen jeder Art. Trotz der Entwicklung von speziellen Verfahren zur Oberflächenberechnung wie des Verfahrens von H. Krakauer et al. (Phys. Rev. B, 19:1706 1979) ist der Bedarf an Rechenzeit immer noch sehr hoch. Eine andere Komponente, die den Ressourcenbedarf hochtreibt, ist die Größe des Systems. Der Bedarf an Rechenzeit steigt kubisch mit der Anzahl der Atome.

Bei den von uns untersuchten Fe-Ketten auf der InAs(110)-Oberfläche entlang zweier verschiedener Richtungen $[001]$ und $[1\bar{1}0]$ treten diese Schwierigkeiten kombiniert auf. Zur Kettensimulation wurde ein Fe-Atom auf zwei InAs(110) Einheitszellen gerechnet, was zu einer Verdoppelung der Einheitszelle und damit zu der Verdoppelung der Anzahl der Atome führte. Mit den Rechenkapazitäten am HLRN war es jedoch möglich, in einer vertretbaren Zeit die Systeme zu relaxieren. Auf der Basis der experimentellen Daten und Vorarbeiten haben wir die Anfangsposition der Atome geschätzt. Trotz der identischen Anfangskonfiguration erhalten wir für die zwei verschiedenen Richtungen sehr unterschiedliche Endkonfigurationen, die in Abb. 1 zu sehen sind. Im Fall $\text{Fe}[1\bar{1}0]/\text{InAs}(110)$ geht das Fe-Atom in die Oberfläche hinein in eine fast planare Umgebung von den drei As-Atomen. Im Fall $\text{Fe}[001]/\text{InAs}(110)$ dagegen bleibt das Fe-Atom auf der Oberfläche. Diese großen Unterschiede in den relaxierten Strukturen bestätigen die Notwendigkeit der Relaxation.

Im nächsten Schritt verdoppelten wir die berechnete Einheitszelle, um die Energien der ferromagnetischen und antiferromagnetischen Ordnung der Fe-Atome zu vergleichen. Wir stellten fest, dass im Fall $\text{Fe}[1\bar{1}0]/\text{InAs}(110)$ eine antiferromagnetische Ordnung und im Fall $\text{Fe}[001]/\text{InAs}(110)$ eine ferromagnetische Ordnung bevorzugt wird. Der Abstand zwischen Atomen in der Kette beträgt 4.26 \AA für $\text{Fe}[1\bar{1}0]/\text{InAs}(110)$ und 6.03 \AA für $\text{Fe}[001]/\text{InAs}(110)$, was sehr groß ist verglichen mit der Gitterkonstanten von bcc Fe 2.87 \AA . Der größere Abstand lässt erwarten, dass die direkte Wechselwirkung zwischen den Fe-Atomen klein ist. Die magnetische Ordnung ist das Ergebnis der durch InAs vermittelten Wechselwirkung zwischen den Fe-Atomen. Abhängig von der Richtung der Ketten erweisen sich unterschiedliche magnetische Strukturen als energetisch günstiger. Daraus schließen wir, dass mindestens zwei verschiedene Mechanismen der Austauschwechselwirkung von Fe in InAs existieren. Eine Austauschwechselwirkung, die zu einer antiferromagnetischen Ordnung magnetischer Atome in einem Halbleiter führen kann, ist der Superaustausch. Die Geometrie im Fall $\text{Fe}[1\bar{1}0]/\text{InAs}(110)$, bei dem die Fe-Atome in der Kette durch As-Atome getrennt sind, legt die Vermutung nahe, dass hier der Superaustausch zu der antiferromagnetischen Ordnung führt. Im Fall $\text{Fe}[001]/\text{InAs}(110)$ ist wahrscheinlich ein

p-d-Austausch für die ferromagnetische Ordnung verantwortlich.

Es bedarf weiterer Auswertungen und Rechnungen, um die Austauschmechanismen besser zu verstehen. In Zukunft ist geplant, zusätzlich den Aspekt der Spin-Orbit-Wechselwirkung in die Simulation einfließen zu lassen.

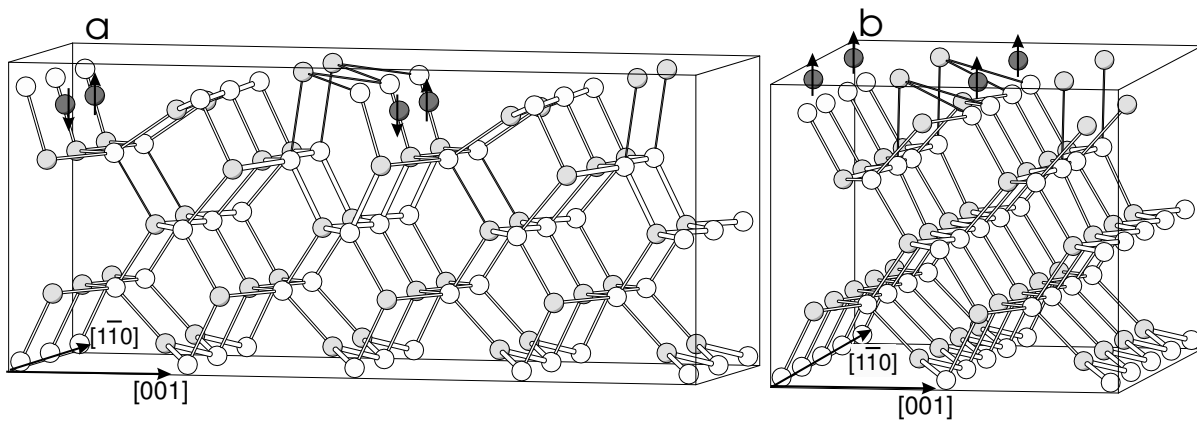


Abbildung 1: (a) 5-Lagen InAs(110) Film mit Fe-Ketten (dunkelgrau) auf der Oberfläche entlang der Richtung $[1\bar{1}0]$. As-Atome sind markiert als weiße Kugeln und In-Atome als graue. (b) 5-Lagen InAs(110) Film mit Fe-Ketten auf der Oberfläche entlang der Richtung $[001]$. Die Pfeile an Fe-Atomen zeigen die bevorzugte magnetische Ordnung entlang der Ketten.

1. Sacharow L.: Direction-dependent exchange mechanism of Fe on InAs(110), planned publication

Dichtematrix–Renormierungsgruppen–Untersuchung hochkorrelierter Quantensysteme

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Holger Fehske

Beantragende Institution: Lehrstuhl für Theoretische Physik II der Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald

Mitarbeiter: Dipl.-Phys. Georg Hager

Kooperationspartner: Dr. E. Jeckelmann, Institut für Physik der Universität Mainz, Gruppe KOMET 337

Förderung: Kompetenznetzwerk für wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern (KONWIHR)

Ziel des Projektes ist die Untersuchung komplexer Quantensysteme im Rahmen generischer, mikroskopischer Elektron/Spin-Phonon-Modelle der Festkörperphysik, wie zum Beispiel des Hubbard-, t - J , oder Holstein-Modells. Trotz deren scheinbarer Einfachheit ist eine analytische Beschreibung der interessierenden Effekte (Magnetismus, Ladungsordnung, Supraleitung. . .) nur in Ausnahmefällen möglich. Hochkorrelierte (Quanten-) Vielteilchensysteme sind mehr als die einfache Summe ihrer Konstituenten. So führt das komplexe Wechselspiel von Elektronen und Gitterschwingungen (sog. Phononen) zu einer extrem reichhaltigen Phänomenologie, und man ist heute noch weit davon entfernt, alle experimentell beobachteten Effekte auch theoretisch erklären zu können. Numerische Verfahren müssen die Lücke zum Experiment schließen. Die Computerprogramme, die für diesen Zweck eingesetzt werden, sind größtenteils Eigenentwicklungen von Wissenschaftlern, für die moderne Höchstleistungsrechner ein unverzichtbares Werkzeug geworden sind.

Im Zusammenhang mit dem theoretisch immer noch unverstandenen Phänomen der Hochtemperatur-Supraleitung — z.B. in den Kupraten — wird seit geraumer Zeit die Möglichkeit der Ausbildung sogenannter “Stripes” (streifenartige Strukturen mit unterschiedlicher Ladungsträger- und Spindichte) diskutiert. Ende 2003 wurden von White und Scalapino (PRL 91, 136403) mit Hilfe der Dichtematrix-Renormierungsgruppen-Methode (DMRG) Evidenzen für Stripe-Formation in endlichen “ n -leg Hubbard-ladder” Modellen gefunden, wobei eine gesicherte Analyse für große Leiterlängen und verschwindende Abschneidefehler fehlte. Im Rahmen des HLRN-Projektes wurde ein existierender DMRG-Programmcode, der bisher nur auf kleinen Workstation-Systemen einsetzbar war, mit Hilfe einer “Shared-Memory-Parallelisierung” Supercomputer-tauglich gemacht. Dies ermöglichte es, mehrere Prozessoren und eine fast beliebige Menge an Hauptspeicher einzusetzen und somit das Problem der Streifenbildung in dotierten Hubbard-Leitern systematisch zu untersuchen. Interessant war insbesondere die Frage, ob die Ausbildung von Streifen bei bestimmten Parametersätzen nur ein Artefakt der eingesetzten numerischen Methode und der implementierten Randbedingungen ist. Um dies zu klären, wurden aufwändige numerische Untersuchungen mit Hilfe des HLRN-Systems durchgeführt. Zunächst wurden die Ergebnisse von White und Scalapino für kleine Systeme verifiziert, danach längere Leitersysteme untersucht und eine “finite-size” Skalierung vollzogen. Der parallelisierte DMRG-Code erlaubte dabei mit extrem hoher Rechengenauigkeit bisher unerreichte Systemgrößen zu behandeln, wobei die Ergebnisse zur Ausbildung von Streifenstrukturen (s. Abb. 1 links) auf verschwindenden Abschneidefehler extrapoliert werden konnten.

Als zentrales Ergebnis wurde festgestellt, dass es im Limes langer Leitern physikalische Streifenstrukturen gibt, allerdings nur, wenn die Abstoßung U zweier am gleichen Gitterplatz befindlicher Elektronen einen bestimmten Wert übersteigt (Abb. 1 rechts). Bei kleinen U ist die Streifenbildung zwar numerisch vorhanden, hält jedoch der o. a. Extrapolationsprozedur nicht stand. In diesem Fall handelt es sich also um Artefakte des DMRG-Algorithmus. Zukünftige Untersuchungen werden die Abhängigkeit der Streifenbildung von der Dotierung zu klären versuchen.

Neben den physikalischen Fragestellungen sind diese Arbeiten insbesondere als Anwendungs- und Testfall für quasi-1D bzw. 2D DMRG-Rechnungen von Bedeutung, da DMRG für so große Probleme bisher nicht eingesetzt worden ist.

Es muss darauf hingewiesen werden, dass dieses Projekt auf eine fruchtbare Zusammenarbeit mit HLRN-Beratern und -Verantwortlichen zurückblicken kann, ohne die die erreichten Ergebnisse nicht möglich gewesen wären.

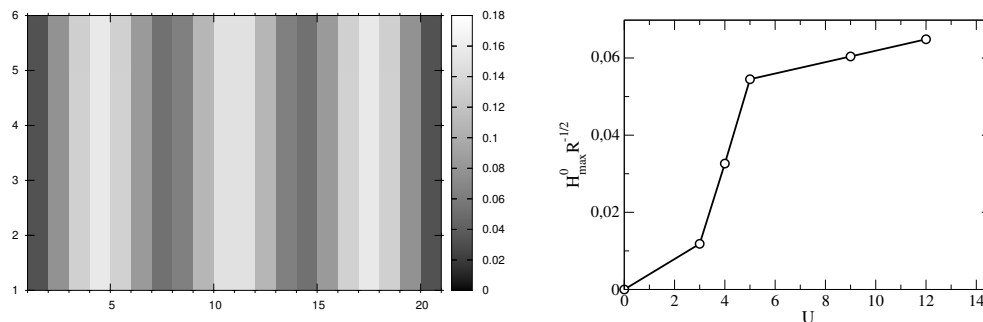


Abbildung 1: Links: numerisch ermittelte Lochdichte bei Dotierung von 9,5% auf einer Hubbard-Leiter mit 21×6 Plätzen. Rechts: Amplitude der Streifenstrukturen in Abhängigkeit von U , extrapoliert für unendlich lange Leitern und verschwindenden Abschneidefehler.

1. G. Hager, G. Wellein, E. Jeckelmann and H. Fehske: Stripe formation in doped Hubbard ladders, Phys. Rev. B 71, 075108 (2005)
2. G. Hager, E. Jeckelmann, H. Fehske and G. Wellein: Parallelization Strategies for Density Matrix Renormalization Group Algorithms on Shared-Memory Systems, J. Comp. Phys. 194(2), 795 (2004)
3. G. Hager, E. Jeckelmann, H. Fehske and G. Wellein: Exact Numerical Treatment of Finite Quantum Systems using Leading-Edge Supercomputers, in H. G. Bock et al. (eds.): Proceedings of the International Conference on High Performance Scientific Computing, March 10–14 2003, Hanoi, Vietnam, 2004
4. G. Hager, G. Wellein, E. Jeckelmann and H. Fehske: DMRG Investigation of Stripe Formation in Doped Hubbard Ladders, in A. Bode (ed.): High Performance Computing in Science and Engineering 2004 - Transactions of the Second Joint HLRB and KONWIHR Result and Reviewing Workshop (Second Joint HLRB and KONWIHR Result and Reviewing Workshop Munich - Germany 2-3 March 2004), 2004

Simulation der Ionisationsdynamik von Metallclustern in intensiven Femto-sekunden-Laserfeldern

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Karl-Heinz Meiwes-Broer

Beantragende Institution: Universität Rostock

Mitarbeiter: Dipl.-Phys. Thomas Fennel

Kooperationspartner: Institute for Nuclear Theory, University of Washington, Seattle, USA

Förderung: DFG Sonderforschungsbereich 198

Moderne Lasersysteme ermöglichen es, die Wechselwirkung von Strahlung mit Materie unter extremen Bedingungen zu untersuchen. Allerdings steht heutzutage nicht nur die Erzeugung immer kürzerer und intensiverer Laserpulse, sondern auch die Erforschung ihrer Wirkung auf außergewöhnliche Targets im Vordergrund.

Finite Systeme stellen in diesem Zusammenhang interessante Untersuchungsobjekte dar, um ein umfassenderes Verständnis der Natur der Wechselwirkung von Licht mit Materie zu erlangen, neuartige wissenschaftliche Fragestellungen aufzuwerfen und technische Anwendungen zu entwickeln. Beispielsweise ist die gezielte und genau steuerbare Erzeugung hochgeladener Ionen eine wichtige Voraussetzung für die Entwicklung von EUV³-Strahlungsquellen. Von besonderem Interesse sind atomare Cluster, die als Bindeglied zwischen der mikroskopischen und makroskopischen Welt aufgefasst werden. Ihre Response bei optischer Anregung ist durch die Mischung von Eigenschaften finiter atomarer Systeme und festkörperartiger Materie bestimmt. Metallcluster nehmen dabei eine Sonderstellung ein, da ihre optischen Eigenschaften aufgrund der bereits im Grundzustand vorliegenden delokalisierten Elektronen maßgeblich durch Vielteilcheneffekte beeinflusst werden. Unter dem Einfluss intensiver Laserstrahlung können Cluster hoch angeregt und ionisiert werden, wobei es zur Ausbildung eines extrem heißen, auf der Nanometerskala lokalisierten Plasmas kommt, das über eine Coulombexplosion zerfällt. Durch gezielte Strukturierung des Laserfeldes konnte in unserer Gruppe die Ionisationsdynamik anhand der Erzeugung hochgeladener Ionen sichtbar gemacht und sogar auf der Femtosekunderskala ($1\text{ fs} = 10^{-15}\text{ s}$.) gesteuert werden [2]. In Abb. 1a ist die experimentell festgestellte Ionenausbeute von hochgeladenen Silberionen, hier am Beispiel von Ag^{5+} , aus der Bestrahlung von Silberclustern mit Doppelpulsen in Abhängigkeit von der optischen Verzögerung der Laserpulse aufgetragen. Für kurze Pulsabstände Δt beobachtet man nahezu keine Ereignisse in dem dargestellten Fragmentkanal, während die Ausbeute nach einigen hundert Femtosekunden stark ansteigt und im Bereich von $\Delta t = 500\text{ fs}$ ein Maximum zeigt. Das Maximum verschiebt sich bei einer höheren Laserintensität zu kürzeren Zeiten (siehe obere Kurve) und besitzt weiterhin eine starke Abhängigkeit vom betrachteten Ladungszustand (hier nicht gezeigt).

Die theoretische Beschreibung solcher Wechselwirkungsprozesse von intensiver Strahlung mit Clustern zur Untersuchung der für die ausgeprägte Ionisationsdynamik verantwortlichen Mechanismen stellt ein komplexes Vielteilchenproblem dar. Da störungstheoretische Methoden für die untersuchten dynamischen Prozesse im Nichtgleichgewicht nicht anwendbar sind, stellen direkte Simulationen zur Lösung der mikroskopischen Bewegungsgleichungen für die Elektronen und Ionen ein zweckmäßiges Werkzeug zur Verbesserung des Verständnisses der Licht-Materie-Wechselwirkung dar. Um den Beitrag delocalisierter Elektronen auf die Response von Metallclustern zu berücksichtigen eignet sich die Thomas-Fermi-Vlasov-Molekulardynamik [1], die eine semiklassische Näherung der zeitabhängigen Dichtefunktionaltheorie darstellt. Unter Verwendung dieser Methode wurde in dem vorliegenden Projekt mit einem parallelisierten Simulationscode die Reaktion von Metallclustern nach Doppelpuls-Anregung untersucht, um einen möglichst engen Bezug zu den Experimenten herzustellen. Diese Studien sind mit einem hohen numerischen Aufwand verbunden. Zum Einen erfordert die Beschreibung der Coulombexplosion ein großes Simulationsvolumen, zum Anderen muss für jede betrachtete optische Verzögerung der Laserpulse eine separate Rechnung durchgeführt werden. Mit Hilfe der auf dem HLRN-Parallelrechner zur Verfügung gestellten Kapazitäten konnten die entsprechenden Simulationen durchgeführt werden. Zur Realisierung einer hohen parallelen Effizienz wurde in dem verwendeten Code unter anderem eine parallele iterative Multigrid-Routine eingesetzt, um die für jeden Zeitschritt notwendige Lösung der Poissongleichung zu bestimmen [1].

Als wesentliches Resultat wurde die Ionisationseffizienz des Modellsystems Na_{55} bei Doppelpuls-

³extended ultra-violet

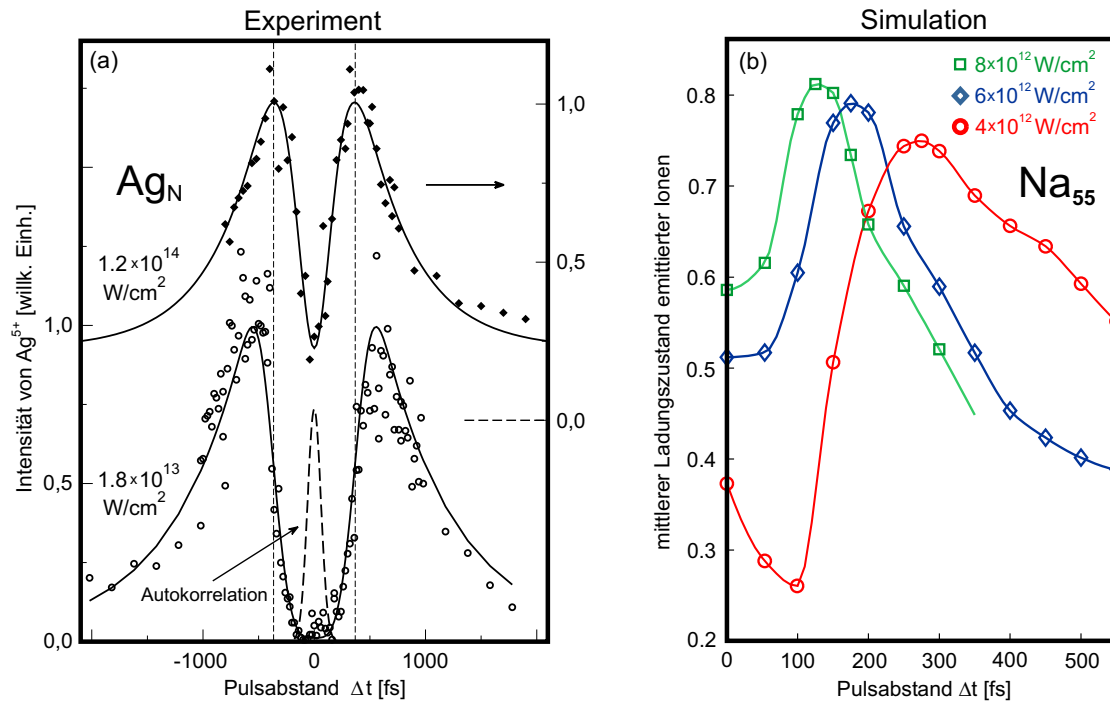


Abbildung 1: Ionisationsdynamik von Metallclustern nach Doppelpuls-Anregung mit Infrarotpulsen (800 nm). Teilbild (a) zeigt die gemessene Ionenausbeute von Ag^{5+} aus der Bestrahlung (Pulsbreite: $\tau = 100$ fs) von Silberclustern mit einer mittleren Größe von $N \approx 40$ in Abhängigkeit von deren optischer Verzögerung für zwei Laserintensitäten. Man beobachtet eine ausgeprägte Dynamik des Ionensignals mit einem scharfen Maximum. Verwendet man Pulse höherer Intensität verschiebt sich das Maximum zu kürzeren Pulsabständen. Negative Verzögerungen entsprechen einer Umkehrung der Pulsereihenfolge. In Teilbild (b) ist die mit Hilfe der Simulationen berechnete mittlere Aufladung emittierter Ionen bei der Doppelpuls-Anregung (Pulsbreite: $\tau = 50$ fs) von Na_{55} aufgetragen. In Übereinstimmung mit dem Experiment zeigt sich eine deutliche Strukturierung des Ionisationssignals sowie eine optimale Verzögerung für die maximale Aufladung. Auch die Verschiebung des Maximums, die durch die schnellere Ionenreaktion hervorgerufen wird, wird von der Simulation qualitativ richtig wiedergegeben.

Anregung im infraroten Bereich berechnet. Die Auswertung der Läufe für verschiedene Pulsabstände und Laserintensitäten führt auf das in Abb. 1b dargestellte Ergebnis für die mittlere Aufladung pro Atom. Es zeigt sich, dass auch in den Simulationen eine starke Dynamik innerhalb Ionisationssignal auftritt, das in Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden ein ausgeprägtes Maximum besitzt. In den Rechnungen lässt sich die hohe Aufladung bei einem optimalen Pulsabstand eindeutig auf die resonante Anregung der kollektiven Oszillation delocalisierter Elektronen und der dadurch erhöhten Energieeinkopplung zurückführen. In dem Projekt wurde erstmals die Gültigkeit des Modells der plasmoverstärkten Ionisation für die Doppelpuls-Anregung nachgewiesen [2]. Für höhere Intensitäten zeigt sich in den Simulationen ebenfalls die experimentell beobachtete Verschiebung der maximalen Aufladung zu kürzeren Pulsabständen. Darüber hinaus konnten auch Vorhersagen zur Winkelabhängigkeit der Ionenemission gemacht werden. Unter anderem soll in zukünftigen Untersuchungen der Prozess der Elektronenemission näher untersucht werden.

1. Th. Fennel, G.F. Bertsch, K.-H. Meiwes Broer: „Ionization dynamics of simple metal clusters in intense fields by the Thomas-Fermi-Vlasov method“, Eur. Phys. J. D 29:367, 2004
2. T. Döppner, Th. Fennel, Th. Diederich, J. Tiggesbäumker, K.-H. Meiwes-Broer: „Controlling the Coulomb explosion of silver clusters by femtosecond dual-pulse laser excitation“, Phys. Rev. Lett. 94:13401, 2005

QMD–Simulationen dichter Fluide

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. R. Redmer

Beantragende Institution: Institut für Physik, Universität Rostock

Mitarbeiter: Dipl.-Phys. Andre Kietzmann

Kooperationspartner: Universität Erlangen, FSU Jena, DESY Hamburg, HU Berlin, GSI Darmstadt, Sandia Natl. Lab. (USA), Los Alamos Natl. Lab. (USA), Livermore Natl. Lab. (USA), Institute of Chemical Physics Chernogolovka (Russia), Institute for High Energy Density in Matter Moscow (Russia)

Förderung: DFG

Dichte Fluide sind zum Studium stark korrelierter Systeme geeignet. Besonders interessant sind Zustände der „warmen dichten Materie“, welche sich durch Festkörperdichten und Temperaturen von einigen Tausend Kelvin auszeichnen. Beispiele sind dichte Alkalimetalle nahe dem kritischen Punkt oder das Innere von Riesenplaneten wie Jupiter und Saturn. Zur Beschreibung des physikalischen Verhaltens in diesem Dichte-Temperatur-Bereich müssen quantenstatistische Methoden angewendet werden, da Quanteneffekte und starke Korrelationen auftreten [1,2,3]. Hierzu wird im Rahmen des Projekts die Methode der Quantenmolekulardynamik (QMD) verwendet, um dynamische Eigenschaften des Systems in Gleichgewichtssituationen zu studieren. Dazu gehören die Zustandsgleichung und die Paarkorrelationsfunktion sowie die Diffusionskonstante und die elektrische Leitfähigkeit. Die Verhaltensweise der Elektronen wird mit quantenmechanischen Ansätzen auf dem Niveau der Dichtefunktionaltheorie berechnet, während die Ionen als klassische Teilchen beschrieben werden. Im Rahmen des vor kurzem angelaufenen Projekts wurden bereits QMD-Simulationen für fluides Cäsium durchgeführt und erste Resultate für die Zustandsgleichung und die Paarkorrelationsfunktion erhalten.

Für unsere Simulationen verwenden wir den Code VASP⁴. QMD-Simulationen erfordern einen enormen Rechenaufwand, welcher nur mit schnellen Parallelrechnern wie z.B. dem IBM-Parallelrechner des HLRN bewältigt werden kann. Es sollen Simulationen für etwa 50 verschiedene Dichte-Temperatur-Punkte durchgeführt werden, um die Zustandsgleichung für Cäsium in einem großen Bereich der Dichte-Temperatur-Ebene bestimmen zu können. Die Berechnung eines solchen Datenpunktes bedarf einer Rechenleistung von 20 bis 50 NPL, was z.B. der Rechenleistung einer state-of-the-art Workstation eines Monats und mehr entspricht.

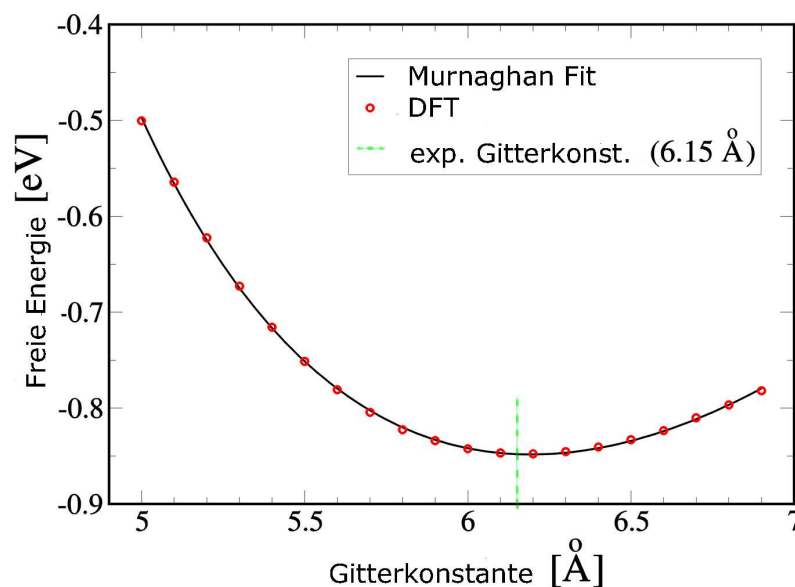


Abbildung 1: Auf kleineren Computersystemen ist die Berechnung statischer physikalischer Eigenschaften wie z.B. der Gitterkonstanten möglich. Die berechnete und experimentelle Gitterkonstante für Cs stimmen überein.

Zur Zeit sind mit dem HLRN–System Simulationsläufe für die untersuchten Systeme von bis zu

⁴<http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>

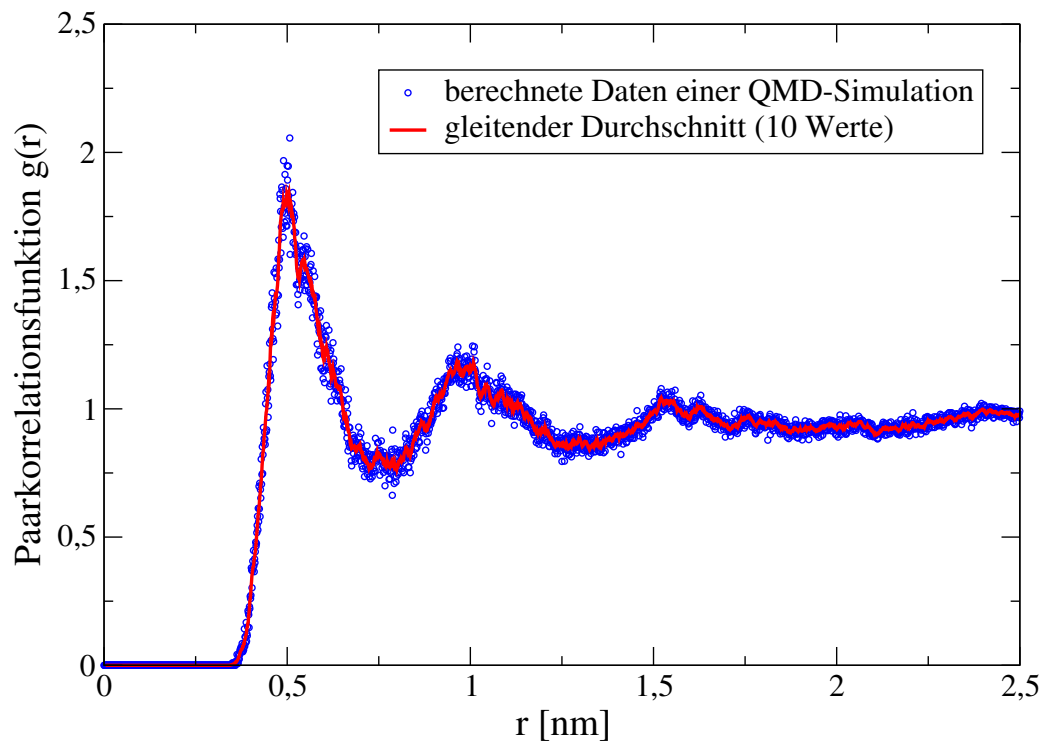


Abbildung 2: Paarkorrelationsfunktion für Cs bei einer Dichte von $1,6 \text{ g/cm}^3$ und einer Temperatur von 1000 K .

3000 Zeitschritten möglich. Somit sind momentan einige physikalische Größen schwer zugänglich, wie z.B. der dynamische Strukturfaktor, zu dessen Berechnung deutlich mehr (ungefähr zehnmal soviel) Simulationsschritte erforderlich wären. Mit einem Computersystem wie dem zukünftigen HLRN-II wären solche rechenintensiven Simulationen durchführbar, womit ein wesentlich umfangreicheres Spektrum an interessanten physikalischen Problemen mit der Methode der QMD untersucht werden könnte.

In der Arbeitsgruppe „Statistische Physik“ des Instituts für Physik der Universität Rostock werden langfristig die physikalischen Eigenschaften von warmer dichter Materie mit quantenstatistischen Methoden untersucht. So sollen auch zukünftig Themen für Diplom- und Doktorarbeiten auf dem Gebiet der QMD-Simulation vergeben werden, was maßgeblich von der Verfügbarkeit leistungsfähigster Parallelrechnersysteme abhängig ist. Deswegen ist die Bereitstellung eines in seinen Leistungsparametern deutlich verbesserten HLRN-II für eine erfolgreiche Bearbeitung der Forschungsprojekte der Arbeitsgruppe unabdingbar.

1. H. Juranek, R. Redmer, Y. Rosenfeld, J. Chem. Phys. 117, 1768-1774, 2002
2. R. Redmer, H. Juranek, S. Kuhlbrodt, V. Schwarz, Z. Phys. Chem. 217, 782-793, 2003
3. V. Schwarz, H. Juranek, R. Redmer, Phys. Chem. Chem. Phys., 7, 1990-1995, 2005

Ab-initio-Simulationen des Wachstums von High-K-Gateoxiden auf Silizium

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Peter Blöchl

Beantragende Institution: Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Clausthal

Mitarbeiter: Dr. Clemens Först (bis Okt. 04), Dr. Christopher Ashman (bis Apr. 04), Dipl.-Phys. Andrei Reyes-Huamantincó

Kooperationspartner: Europäisches Konsortium INVEST mit IBM Forschungslaboratorium Zürich (Schweiz), Philips, Demokritos (Griechenland), Riber (Frankreich), Oxford Applied Research (Großbritannien), MPI Halle (Deutschland), IMEC (Belgien); Europäisches Konsortium ET4US "Epitaxial Technologies for Ultimate Scaling" mit IBM (Schweiz), IMEC (Belgien), DCA Instruments (Finnland), Ecole Polytechnique Federale de Lausanne (Schweiz), Laboratorio MDM (Italien) und Philips Research Leuven (Belgien)

Förderung: EU

Das enorme Wachstum der Informationstechnologie wird von Moores Gesetz getrieben, welches voraussagt, dass sich die Rechengeschwindigkeit von Computern alle eineinhalb Jahre verdoppelt. Die Grundlage von Moores Gesetz ist die anhaltende Miniaturisierung von Halbleiterbauelementen. Diese stößt aber an fundamentale Grenzen, wenn die Bauelemente in atomare Dimensionen vordringen. Das Problem tritt jetzt in Transistoren offen zutage und kann nur mit Hilfe neuer Materialien gelöst werden. Es erfordert den Ersatz herkömmlicher Gateoxide durch sogenannte High-K-Gateoxide. Herkömmliche Gateoxide, die auf Siliziumoxid basieren, müssten in wenigen Jahren eine Dicke von nur wenigen Atomlagen haben. Bei dieser Dicke wären sie aufgrund des quantenmechanischen Tunneleffekts elektrisch durchlässig. Die elektrischen Eigenschaften von High-K-Oxiden erlauben es, die Dicke des Oxids wieder heraufzusetzen und damit die Tunnelströme zu unterbinden. In einem Verbundprojekt der EU untersuchen wir deshalb in enger Kooperation mit Experimentatoren die Möglichkeiten der Integration von High-K-Oxiden in die CMOS-Technologie. Unsere genauen quantenmechanischen Verfahren geben Aufschluss über Reaktionsprozesse, Atomstruktur und elektrische Eigenschaften der Grenzfläche zwischen Silizium und High-K-Gateoxiden.

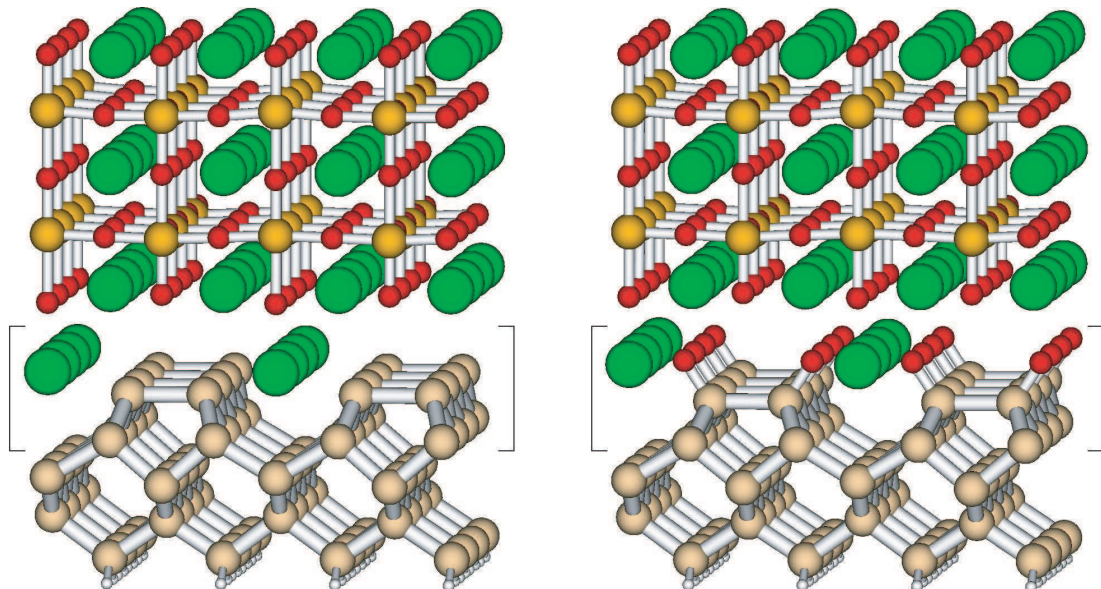


Abbildung 1: Atomstruktur der Grenzfläche zwischen STO und Silizium, unoxidiert und oxidiert.

Um die Anforderungen für die Transistorgenerationen von etwa 2013 zu erfüllen, ist es notwendig, High-K-Oxide epitaktisch, d.h. atomar definiert auf einen Halbleiterkristall aufzuwachsen. 1998 ist es Wissenschaftlern um McKee von Oak Ridge National Lab. (USA) zum ersten Mal gelungen, ein Oxid, Barium-Strontiumtitanat (BSTO), epitaktisch auf Silizium aufzuwachsen. Dies löste einen wahren For-

schungsboom aus, der bis heute anhält. Ein detailliertes Verständnis der Wachstumsprozesse ist bei dieser Herausforderung unumgänglich.

Mit Hilfe von ab-initio-Simulationen war es uns möglich, eine Reihe grundlegender Fragen im Detail aufzuklären.

- Es wurde das Phasendiagramm der Ordnungsstrukturen von Submonolagen von Strontium auf Silizium für unterschiedliche Bedeckungen untersucht. Dadurch konnten die Materialprozesse bei der Metallabscheidung aufgeklärt werden. Wir finden gute Übereinstimmung mit vorhandenen Experimenten. Allerdings unterscheidet sich das mikroskopische Bild jedoch fundamental von der gängigen Lehrmeinung. Dadurch wurden neue Perspektiven für die Prozessführung eröffnet.
- Die genaue Atomstruktur der Grenzfläche von Silizium zu BSTO ist heftig umstritten. Die schrittweise Untersuchung der Oxidbildung lieferte ein neues Modell der Grenzfläche (siehe Abbildung 1). Bei der Untersuchung, wie die Grenzfläche mit Sauerstoff reagiert, stießen wir auf ein interessantes Phänomen: Die Barriere, die das Oxid für die Elektronen im stromführenden Halbleitermaterial bildet, ist im allgemeinen so klein, dass BSTO inzwischen als ungeeignet für Transistoranwendungen angesehen wird. Wir haben herausgefunden, dass durch Einbringen von Sauerstoff die Barriere in Einklang mit den technologischen Anforderungen gebracht werden kann. Diese Arbeit führte zu einer Patentanmeldung.
- Um die Auswahl geeigneter Materialien als High-K-Oxide zu erleichtern, haben wir die Metallabscheidung exemplarisch für die drei wesentlichen Klassen von Metallen untersucht. Darunter waren das zweiwertige Strontium, das dreiwertige Lanthan und die vierwertigen Metalle Hafnium und Zirkonium. Bei letzteren fanden wir Hinweise spontaner Silizidbildung. Für die anderen Metalle konnten die Ordnungsprinzipien aufgeklärt werden. Interessanterweise verhält sich das dreiwertige Lanthan bei höheren Bedeckungen wie das zweiwertige Strontium. Allerdings neigt es deutlich stärker zur Silizidbildung als Strontium. Aufgrund dieser Arbeit erhielt C.J. Först einen Young-Author Best-Paper Award von der E-MRS Konferenz 2002.
- Wegen der geringen Barriere, die STO für Elektronen bildet, wird momentan LaAlO_3 (LAO) als wichtigster Kandidat als High-K-Oxid in der Roadmap der Semiconductor Industry Association genannt. Obwohl es noch nicht gelungen ist, LAO epitaktisch auf Silizium aufzuwachsen, waren neue Experimente beim umgekehrten Wachstum, d.h. Silizium auf LAO, erfolgreich. Unsere Simulationen der Grenzfläche zeigen, dass sie geladen und damit ungeeignet für Transistoranwendungen sind. Nur gezielte Dotierung könnte die überschüssigen Elektronen der Grenzfläche kompensieren.

Die Ressourcen des HLRN erlaubten uns einerseits, den Phasenraum der relevanten Strukturen systematisch und im Detail auszuloten und darüber hinaus die Wachstumsschritte in der Simulation zu nachzuverfolgen. Bisherige Arbeiten waren hierbei zumeist auf eine mehr oder weniger zufällige Auswahl von Strukturen beschränkt. Dadurch konnte die Aussagekraft der Simulationen hinreichend gesteigert werden, um Einfluss auf die laufenden Experimente nehmen zu können.

Das langfristige Ziel dieser Forschung ist die Herstellung komplexer Materialstrukturen mit einer Kontrolle bis hinunter zum einzelnen Atom. In dieser Nanotechnologie werden Simulationen vermehrt zum wichtigen Partner des Experiments.

1. C.J. Först and C.R. Ashman and K. Schwarz and P.E. Blöchl: The Interface between Silicon and a High-K Oxide, *Nature* 427, 53 (2004)
2. C.J. Först, C. Ashman and P.E. Blöchl Struktur, insbesondere Halbleiterstruktur, sowie Verfahren zur Herstellung einer Struktur, German Patent Application, Aktenzeichen 103 03 875.2 of Jan. 2003. PCT application PCT/DE2004/000038 of Jan. 15, 2004.
3. C.R. Ashman, C.J. Först, K. Schwarz and P.E. Blöchl: Chemistry of La on the Si(001) surface from first principles, *Phys. Rev. B* 70, 155330 (2004).
4. C.R. Ashman, C.J. Först, K. Schwarz and P.E. Blöchl: First-principles Calculations of Strontium on Si(001), *Phys. Rev. B* 69, 75309 (2004).

Komplexe Quantenstörstellenprobleme bei tiefen Temperaturen

Verantwortlicher Wissenschaftler: Prof. Dr. Thomas Pruschke

Beantragende Institution: Institut für Theoretische Physik, Universität Göttingen

Mitarbeiter: Dr. S. Nishimoto, Dipl.-Phys. R. Hedden, Cand.-Phys. R. Peters, Cand.-Phys. P. Fuchs

Kooperationspartner: Prof. Dr. M. Vojta, Institut für Theoretische Physik, Universität Karlsruhe; Dr. F. Anders, Institut für Theoretische Physik, Universität Bremen; Prof. Dr. M. Jarrell, Dept. of Physics, University of Cincinnati; Dr. R. Bulla, Theoretische Physik III, Universität Augsburg

Förderung: SFB 602 "Komplexe Strukturen in kondensierter Materie von atomarer bis mesoskopischer Skala"

Die Berechnung dynamischer Eigenschaften von Quantenstörstellen ist in der Anwendung sowohl auf nanostrukturierte Materialien (Quantenpunkte, künstliche Atome) als auch auf stark wechselwirkende Elektronensysteme (Übergangsmetalle und deren Oxide, Verbindungen mit Elementen der Lanthanide bzw. Actinide) von höchstem aktuellen Interesse. Phänomene wie Quantenphasenübergänge, wie sie z.B. im Bereich der Übergangsmetalloxide (Hochtemperatursupraleiter, magnetische Supraleiter) antizipiert werden, haben im Bereich der Quantenstörstellen oftmals eine einfache Realisierung, welche jedoch bereits die generellen physikalischen Effekte enthält und somit einen kontrollierten Zugang zum theoretischen Studium solcher Phänomene in Abhängigkeit von wenigen Kontrollparametern ermöglicht.

Während die Eigenschaften einer Quantenstörstelle mit einem Freiheitsgrad (sog. "Kondoproblem") weitgehend erforscht sind, gibt es bei Systemen mit z.B. orbitalen oder bosonischen Freiheitsgraden bzw. im Falle gekoppelter Störstellen relativ wenig gesicherte Kenntnisse. Probate Verfahren, um speziell bei tiefen Temperaturen physikalische Größen auszurechnen, sind die numerischen Renormierungstheorie, ein iteratives Diagonalisierungsverfahren, und die Dichtematrix Renormierungsgruppentheorie. Der typische exponentielle Anstieg der Matrixgröße bei üblichen Diagonalisierungsverfahren wird hier dadurch reduziert, daß in jedem Schritt nur ein bestimmter Anteil der Zustände jeweils zur Konstruktion des nächsten Schrittes benutzt wird.

Dennoch benötigen selbst solche effizienten Algorithmen, speziell für Probleme mit größerer Zahl interner Freiheitsgrade, einen großen Hauptspeicher (typischerweise bis zu 16 GB) und lange Laufzeiten. Letztere läßt sich allerdings sehr gut durch Parallelisierung der Algorithmen reduzieren. Die hier angesprochenen Verfahren erzielen mit Parallelisierung per POSIX-Threads auf SMP-basierten Multiprozessormaschinen wie der IBM Regatta einen nahezu linearen Geschwindigkeitsgewinn bei sehr guter Prozessorauslastung (typischerweise 80%).

Dieser, durch die spezielle Architektur der Höchstleistungsrechner des HLRN erzielte Performancegewinn, ermöglichte erstmals den Einsatz der zuvor beschriebenen Verfahren zum theoretischen Studium des in den technologisch eminent wichtigen Übergangsmetalloxiden als Funktion eines äußeren Kontrollparameters wie z.B. Druck auftretenden Metall-Isolator-Überganges. Die wesentliche Fragestellung bei unseren Untersuchungen war, welche Rolle mögliche Anisotropien in der sog. Hundschen Kopplung J für Auftreten und Natur dieses Überganges spielen. Die "Hundsche Kopplung" J entsteht aus der Wechselwirkung der elektrischen geladenen Elektronen in den Atomen und ist eine der wesentlichen Ingredienzen zum Verständnis der magnetischen Eigenschaften von Übergangsmetallverbindungen. Inwieweit sie auch das Verhalten im magnetisch ungeordneten Zustand und hier speziell in der Nähe von Metall-Isolator-Übergängen beeinflusst, ist bisher nicht sehr tiefgehend untersucht.

Obwohl die Übergangsmetalloxide stöchiometrische Verbindungen sind, läßt sich die Berechnung der elektronischen Eigenschaften näherungsweise auf ein effektives Quantenstörstellenproblem zurückführen ("Dynamische Molekularfeldtheorie"). Diese Näherung ist eine Erweiterung der aus der Beschreibung des Magnetismus bekannten Weiß'schen Molekularfeldtheorie auf wechselwirkende Elektronen. Die Ergebnisse unserer bisherigen Arbeiten zu diesem Punkt sind in Abb. 1 zusammengefaßt, in der der Lokalisierungsgrad der Elektronen im System über dem äußeren Druck als Kontrollparameter abgebildet ist. Dabei bedeutet ein Lokalisierungsgrad von 0%, daß das System sich bezüglich seiner elektrischen Eigenschaften wie ein gutes Metall (z.B. Kupfer) verhält. Zunehmender Lokalisierungsgrad bedeutet, daß für feste Temperatur die Leitfähigkeit schlechter wird, und bei einem Lokalisierungsgrad von 100% verhält sich das System wie ein Isolator.

Zunächst einmal sei angemerkt, daß in allen drei untersuchten Fällen – d.h. Wechselwirkung ohne den Anteil J , isotropes J und anisotropes J – ein Übergang vom Metall zum Isolator auftritt. Interessant

an den Ergebnissen ist, daß ohne Hundsche Kopplung J der Übergang erst bei sehr großem Druck auftritt und ziemlich unspektakulär ist, während mit Hundscher Kopplung der Übergang bereits sehr viel früher eintritt und sich in deutlichen Strukturen im Lokalisierungsgrad bemerkbar macht. Außerdem findet man bei Anwesenheit lokaler Anisotropien einen sprunghaften Übergang ("Phasenübergang 1. Ordnung"), während im isotropen Fall der Übergang glatt verläuft ("Phasenübergang 2. Ordnung").

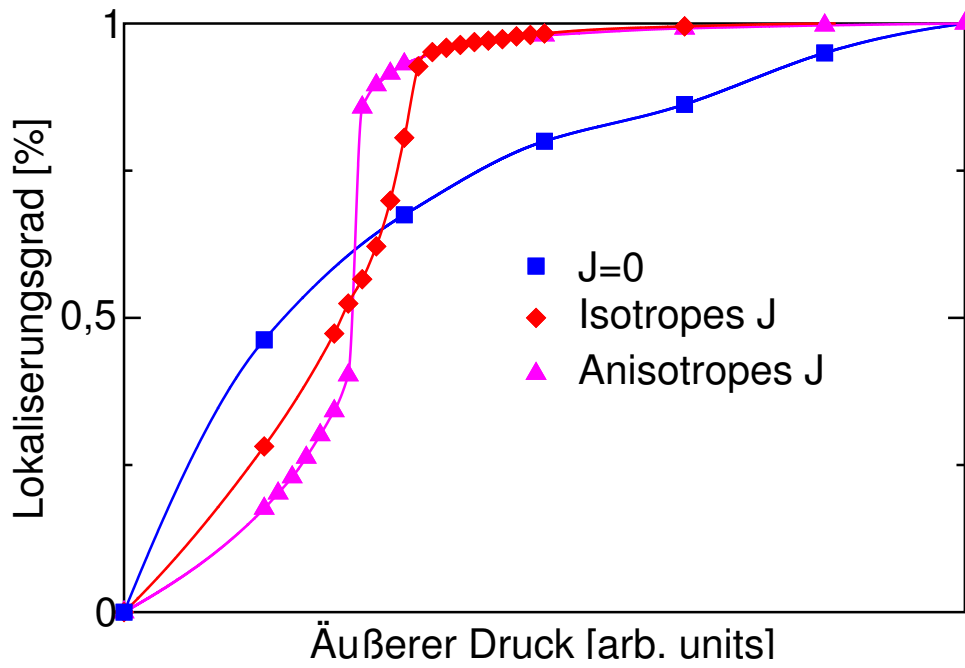


Abbildung 1: Lokalisierungsgrad der Elektronen als Funktion des äußeren Druckes. Die verschiedenen Kurven zeigen Rechnungen ohne Hundsche Kopplung J und mit isotroper bzw. anisotroper Hundscher Kopplung.

1. Th. Pruschke und R. Bulla, Hund's rule coupling and the metal-insulator transition in the two-band Hubbard model, Eur. Phys. J. B 44, 217 (2005).
2. Th. Pruschke, How effective are non-local fluctuations in the 2D Hubbard model at $T \rightarrow 0$?, Physics B (im Druck).
3. Th. Pruschke, The physics of quantum impurities – a bridge from micro/nano to macro systems, Phys. Stat. Solid. B 242, 252 (2005).

3-D Finite-Differenzen-Simulation seismischer Wellen

Verantwortlicher Wissenschaftler: PD Dr. Thomas Bohlen

Beantragende Institution: Institut für Geowissenschaften, Abteilung Geophysik, Universität Kiel

Mitarbeiter: Dipl.-Geophys. Sascha Bussat, Daniel Köhn, Ulrich Lorang

Kooperationspartner: GeoForschungsZentrum (GFZ) Potsdam, FU Berlin, WTD 71 (Bundesmarine Kiel)

Förderung: DFG, Forschungs- und Entwicklungsverträge mit dem GFZ Potsdam, WTD 71 (Bundesmarine Kiel)

Auf dem HLRN-System sowie gleichzeitig auf dem Parallelrechner Altix der Universität Kiel wurden in dem Bearbeitungszeitraum Simulationen seismischer Wellen mit einem Finite-Differenzen-Algorithmus durchgeführt. Dieses Verfahren erlaubt die Berechnung des vollständigen elastischen Wellenfeldes in beliebig komplexen 3-D Medien. Alle auftretenden Wellenphänomene, wie z.B. Reflexionen, Refraktionen und Oberflächenwellen, werden simuliert. Durch eine Gebietszerlegung kann eine gute Performance auf Parallelrechnern erzielt werden. Der Parallelcode FDMPI (Bohlen, 2002) - eine Eigenentwicklung auf Basis von Finite-Differenzen-Methode und Message-Passing - kommt in unterschiedlichen Forschungsprojekten zum Einsatz.

Füttert man das Simulationsprogramm FDMPI mit komplexen 3-D geologischen Modellen, ist es in der Lage, die Ausbreitung seismischer Wellen durch feine bis sogar sehr feine Gesteinsstrukturen realistisch zu simulieren. In Zusammenarbeit mit dem GeoForschungsZentrum (GFZ) Potsdam und der FU Berlin setzt man es z.B. ein, um seismische Wellen um den Gotthart-Tunnel zu simulieren (siehe Abbildung 1).

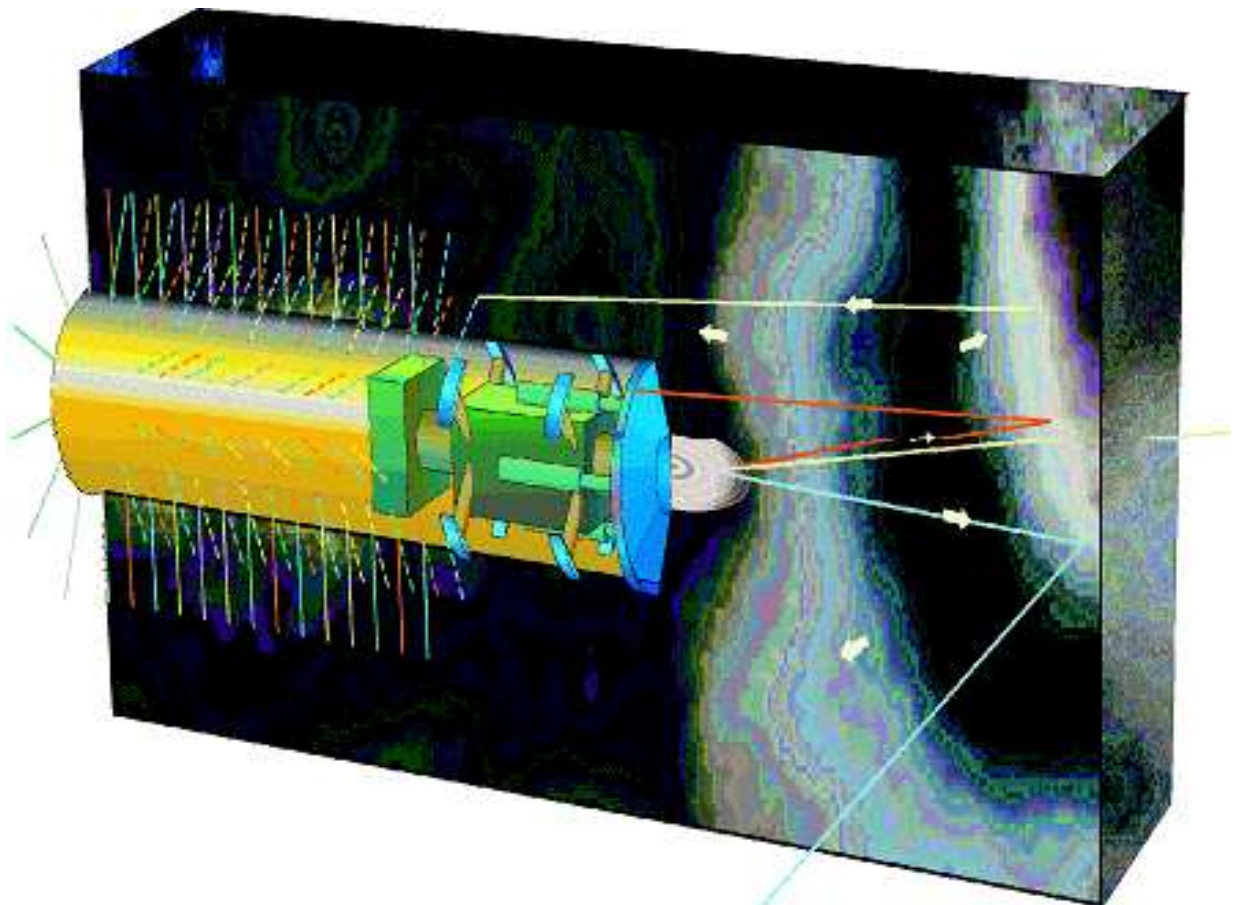


Abbildung 1: Die Simulation seismischer Wellen um einen Tunnel hilft bei der Entwicklung neuer Abbildungsverfahren, die gefährliche Schwächezonen im Vorfeld eines Tunnels rechtzeitig erkennen können.

Durch Simulationsrechnungen wird untersucht, inwieweit Schwächebereiche des Gesteins in der Nähe der Tunnelvortriebsmaschine sich bereits im Vorfeld mit seismischen Verfahren lokalisieren lassen, so dass die Ingenieure frühzeitig alle erforderlichen Absicherungsmaßnahmen gegen lebensbedrohende Gebirgseinbrüche ergreifen können. Mithilfe dieser sehr realistischen Simulationen konnte ein vollständig neuer Ansatz zur seismischen Abbildung solcher Schwächezonen entwickelt werden. Ein erster Praxistest wurde kürzlich mit großem Erfolg durchgeführt. Es konnte eine Schwächezone, deren Existenz von Geologen vorhergesagt wurde, im vorderen Bereich des Tunnels mit guter Genauigkeit lokalisiert werden. Diese Idee wird von uns zur Zeit als Patent geschützt und anschließend in internationalen Fachjournalen veröffentlicht.

Ebenfalls in Zusammenarbeit mit dem GFZ wird das Programm darauf angesetzt, die Festigkeit von Deichen zu untersuchen. Seit der Hochwasserkatastrophe im Sommer 2002 gilt der treffsicheren Suche nach gefährdeten Deichstellen erhöhtes Interesse. Hier gilt es, noch kleinere Strukturen zu erkennen. Eine sehr hohe Auflösung ist in beiden Fällen kritisch. Beim Tunnel simulieren wir ein rund 100 m ausgehntes Areal und arbeiten mit Gitterpunktabständen von 10 cm, um die Kontraste einer vielleicht 20m großen Schwächezone zu identifizieren. Bei den Deichen haben wir es mit Durchfeuchtungsfronten zu tun, die nicht nur kleinräumig sind, sondern auch noch ausgeprägte Topographien haben. Hier müssen wir mit weniger als 1cm-Abständen operieren. Hier wie dort sind es bis zu 1000x1000x1000 Gitterpunkte, die heute auf modernen Parallelrechnern rechenbar sind. Typische Modellrechnungen benötigen ca. 20 h auf 128 Prozessoren - der Arbeitsspeicherbedarf beträgt dabei mindestens 10 GB.

Außerdem simuliert FDMPI in Zusammenarbeit mit der Wehrtechnischen Dienststelle 71 (Bundesmarine Kiel) im Rahmen eines mehrjährigen Kooperationsprojektes auch Szenarien, bei denen nicht der Explorationstrupp die anregende Quelle gibt, sondern das gesuchte Objekt selbst. FDMPI simuliert die akustische Abstrahlung von Schiffen mit dem Ziel, neue Verfahren zu ihrer Ortung zu entwickeln. Wasserschallwellen, emittiert von Schrauben und schlagenden Rümpfen, wandeln sich am Meeresboden auch zu sehr tieffrequenten seismischen Grenzflächenwellen, die in manchen Fällen über weitere Strecken detektierbar sind als der Wasserschall. Der Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Messwerten von am Meeresboden der Ostsee ausgebrachten Seismometern hilft, die komplexen Wellenvorgänge zu verstehen und für die Ortung zu nutzen. Kürzlich konnten auf diese Weise erstmals Schiffe geortet und charakterisiert werden. Die Ergebnisse werden Ende dieses Jahres zur Publikation eingereicht.

1. Bohlen, T.: Parallel 3-D viscoelastic finite-difference seismic modelling, *Computers@Geosciences*, 28 (8) pp. 887-899, 2002.
2. Bohlen, T., Saenger, E.H.: Accuracy of heterogeneous staggered-grid finite-difference modeling of Rayleigh waves, *Geophysics*, 2005.
3. Bohlen, T., Kugler, S., Klein, G., Theilen, F.: 1.5-D Inversion of Lateral Variation of Scholte Wave Dispersion, *Geophysics*, 69, No. 2, 330-344, 2004.