

Prof. Dr. Ulrich Gerland, Prof. Dr. Erwin Frey, Arnold Sommerfeld Center für Theoretische Physik, LMU München

Dr. Concetta Fazio, Nukleare Sicherheitsforschung, Karlsruher Institut für Technologie

Dr. Thomas Steinbrecher, Institut für Physikalische Chemie, Karlsruher Institut für Technologie

Prof. Dr. René Reifarh, Dr. Kerstin Sonnabend, U Frankfurt/Main  
Dr. Daniel Bemmerer, Helmholtz Zentrum, Dresden-Rossendorf, Prof. Dr. Andreas Zilges, U Köln

## Physics of Biological Function – Multicellular Systems

### 484. WE-Heraeus-Seminar

Nachdem 2009 bereits ein WE-Heraeus-Seminar „Physics of Biological Function“ stattgefunden hat, in dem das Zusammenspiel von physikalischen Mechanismen und biologischer Funktion in einem breiten Spektrum von Systemen diskutiert wurde, folgte vom 11. – 15. Dezember 2011 ein stärker fokussiertes Seminar, das die biologische Physik von multizellulären Systemen intensiv behandeln sollte. Der Zielsetzung entsprechend war auch das Format angepasst, mit dem Charakter einer „Schule“, also weniger eingeladenen Sprechern, einer Vortragszeit von 90 Minuten und viel Zeit für Fragen und Diskussion. Die physikalische Sichtweise erforderte die Betrachtung verschiedener biologischer Systeme, um zugrundeliegende Prinzipien sichtbar zu machen. So ging es um interagierende Mikroorganismen (Michael Cates, Ernst-Ludwig Florin, Jiandong Huang, Melanie Müller), die frühe Entwicklung des Zebrafisches (Julian Lewis, Luis Morelli) und um das Wechselspiel von Mechanik und Biochemie in der Entwicklung (Stephan Grill) und der Regeneration (Eva-Maria Schötz) von Würmern. Außerdem wurden grundlegende Fragen beleuchtet wie die Koordination des Zellwachstums (Frank Jülicher), die selbstorganisierte Dynamik von wechselwirkenden Proteinen (Petra Schwille) und die physikalische Basis der Positionsinformation in der frühen Entwicklung von multizellulären Organismen (Pieter Rein ten Wolde, Gasper Tkacik). Eine große Bereicherung für das Seminar waren exzellente „contributed talks“ von teilnehmenden Wissenschaftlern (Nils Becker, Curtis Callan, Christian Fleck, Chinlin Guo) und die Posterbeiträge, von denen drei mit einem Posterpreis ausgezeichnet wurden. Zusammenfassend ist das Seminar seinem Titel gerecht geworden: Während in der Physik die Wechselwirkungen von Materie Gesetzen folgen, dienen sie in der Biologie meist auch einer Funktion. Dieser für die Physik neuartige Aspekt wurde in dem Seminar anhand von vielfältigen Beispielen deutlich. Ebenfalls zeigte sich, wie physikalische Gesetze die molekulare Implementierungen von biologischer Funktion beeinflussen und begrenzen können. Das Physikzentrum in Bad Honnef schuf eine ideale Atmosphäre für den wissenschaftlichen Dialog zwischen Physik und Biologie. Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die großzügige Förderung dieses Seminars und die hervorragende organisatorische Unterstützung bei der Durchführung.

Ulrich Gerland und Erwin Frey

## Innovative Nuclear Power in a Closed Fuel Cycle Scenario

### 494. WE-Heraeus-Seminar

Vom 5. bis 8. Dezember 2011 fand im Physikzentrum Bad Honnef das 494. WE-Heraeus-Seminar statt, das sich mit der aktuellen Forschung zur Entwicklung der nachhaltigen Kernenergie befasste. Im Mittelpunkt dieser Forschung stehen die Sicherheit, die Wirtschaftlichkeit, die Abfallminimierung, die Optimierung der Ressourcenausschöpfung und die Reduzierung des Proliferationsrisikos durch Entwicklung innovativer Brennstoffkreisläufe. Mehr als zwanzig international anerkannte Referenten aus Europa, USA und Japan haben zum Stand der Entwicklung innovativer, d. h. geschlossener Brennstoffzyklen vorgetragen und mit 60 Teilnehmern diskutiert. Die fachübergreifenden Vorträge und die zahlreichen Diskussionen haben gezeigt, dass ein „schnelles“ Neutronenspektrum die flexibelste Variante ist, um Aktiniden zu brüten oder zu „verbrennen“. Die Abtrennung von Aktiniden aus abgebrannten Brennstoffen, die Entwicklung neuer Materialien und Werkstoffe sowie die Entwicklung und Validierung neuer physikalischer Modelle und numerischer Methoden in den Bereichen der Reaktorphysik und Thermohydraulik wurden ebenfalls thematisiert.

Die Vortragsreihe hat gezeigt, dass diese neuen Ansätze die Endlagerung der nuklearen Abfälle nicht ausschließt. Die Endlagerung in tiefen geologischen Formationen ist der sicherste Weg, den hochradioaktiven Abfall von der Biosphäre zu isolieren. Dennoch kann das mehrfache Rezyklieren der Aktiniden in den neuen Systemen, das Volumen, die Radiotoxizität und die Wärmeentwicklung der Abfälle stark reduzieren und die Belastung auf ein Endlager verringern.

Eine lebhafte Diskussion hat der Themenkomplex zu den strategischen und wirtschaftlichen Aspekten der Kernenergie hervorgerufen. Der endliche Bestand fossiler Energieträger und die Risiken des Klimawandels haben viele Länder dazu gebracht, die Kernenergie unter neuen Perspektiven zu betrachten. Trotz abnehmender Akzeptanz bleibt die Kernenergie für viele Länder ein wichtiger Bestandteil der Energieversorgung. Deswegen muss die Forschung zur Nachhaltigkeit der Kernenergie auf Fragen zu höchstmöglichen Sicherheitsstandards und zur sicheren Entsorgung priorisiert werden.

Das fachübergreifende Seminar hat einen konstruktiven Austausch zwischen Experten und Nachwuchswissenschaftlern ermöglicht und Ideen für die eigenen Arbeit erzeugt. Dieser Erfolg ist nicht zuletzt der großzügigen finanziellen Unterstützung durch die Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung und der exzellenten Organisation des Physikzentrum zu verdanken.

Concetta Fazio

## Frontiers in Biomolecular Simulation – Modeling Processes on a Large Scale

### 495. WE-Heraeus-Seminar

Inhalt dieses Seminars waren die in den letzten Jahren deutlich weiterentwickelten Methoden zur Beschreibung großer biochemischer Systeme mithilfe von Computersimulationen. Durch die Teilnahme vieler weltweit führender Wissenschaftler aus diesem Bereich erhielten Doktoranden und junge Wissenschaftler einen ausgezeichneten Überblick über den aktuellen Stand der Forschung und konnten in ungezwungener Atmosphäre mit Experten diskutieren. Das zentrale Thema vieler Beiträge war die Weiterentwicklung klassischer Moleküldynamik-Simulationen zu nicht-atomistischen Coarse Grained-Modellen, also Beschreibungen mit einer reduzierten Dimensionalität. Verschiedene Aspekte dieser Entwicklung wurden in vier Arbeitsitzungen bearbeitet.

Im ersten Teilbereich wurde eine besonders populäre Anwendung für membrangebundene Biomoleküle behandelt, das MARTINI-Kraftfeld von Marrink et al. Mehrere Redner beleuchteten die Stärken und Grenzen dieses Ansatzes im Hinblick auf thermodynamische und strukturelle Eigenschaften von Lipiden im Vergleich zu experimentellen Daten und atomistischen Referenzsimulationen. Ein immer wiederkehrendes Thema war die Notwendigkeit einer korrekten Beschreibung der Struktur flüssigen Wassers. Das erste Coarse Grained-Wassermodell wurde als defizitär erkannt und verschiedene Vorschläge vorgestellt, es durch polarisierbare Alternativen zu ersetzen. Kontroverse Diskussionen zu diesem Thema vermittelten allen Teilnehmern einen guten Eindruck dieses noch weitgehend ungelösten Problems. Grundsätzlich bleibt die Schwierigkeit, strukturelle Wassermoleküle zu behandeln, die für die Bildung von Membranporen wichtig sind.

Die zweite Arbeitssitzung zur Simulation von Membranen beschäftigte sich mit der Einbettung von Peptiden und Proteinen in Biomembranen. In diesem Arbeitsfeld sind in den letzten Jahren große Fortschritte gelungen, die es heute erlauben, die Bildung von Membranporen und -defekten theoretisch gut zu beschreiben und die Struktur und Verteilung von membrangebundenen Peptiden vorherzusagen. Die Bedeutung der Kooperation mit Experimentatoren, speziell wegen der ausgezeichneten Komplementarität von NMR-Spektroskopie und Dynamiksimulationen, wurde herausgestellt.

In der Arbeitssitzung zur Modellierung flächig ausgedehnter quantenmechanischer Systeme lag der Schwerpunkt auf der Beschreibung photosynthetischer Prozesse. In dieser Sitzung zeigten die Redner, wie durch die Kombination quanten-