

Advanced Physical and Computational Techniques to Investigate Protein Dynamics

723. WE-Heraeus-Seminar

Ziel dieses Seminars, das vom 26. bis 28. April online stattfand, war es, Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus Experiment und Theorie zusammenzubringen, um die neuesten Entwicklungen auf dem Feld der Proteindynamik zu diskutieren. So wurden methodische Entwicklungen in spektroskopischen Verfahren, z. B. NMR- und EPR-Spektroskopie, ebenso dargestellt wie Fortschritte in der Röntgenkristallographie oder der Elektronenmikroskopie. Computer-gestützte Methodenentwicklungen zielten darauf, neue Lernalgorithmen zur Analyse der strukturellen und dynamischen Eigenschaften biologisch relevanter Makromoleküle oder Prozesse zu verwenden. Zentral ist die Frage, wie es gelingt, die wesentlichen Eigenschaften atomistisch beschriebener Makromoleküle in komplexere Systeme zu integrieren, ohne die atomistische Beschreibung im Detail beizubehalten. Cecilia Clementi (Berlin), Rommie Amaro (San Diego), Bert de Groot (Göttingen) und Gianni De Fabritiis (Barcelona) zeigten interessante Lösungen auf, die invariante und erlernte Eigenschaften kombinieren, um Funktionen zu definieren, die das Verhalten von miteinander wechselwirkenden Eiweißen beschreiben. Dabei wurden experimentelle Systeme einbezogen oder simuliert, für die experimentelle Parameter vorlagen, z. B. aus Einzelmolekül-Mikroskopie-Verfahren oder thermodynamischen Experimenten. Diese Rückkopplung von theoretischen Simulationen mit experimentellen Daten zog sich als Thema durch das Seminar. Die Nutzung großer Datenmengen erlaubt in Kombination mit neuen Modellierungsansätzen zunehmend Voraussagen auch zu größeren biologischen Systemen, sog. Multi-Protein-Komplexen.

Die atomare Beschreibung großer makromolekularer Systeme war auch in den experimentellen Vorträgen ein Hauptthema, wobei insbesondere die neuen elektronenmikroskopischen Verfahren zu einer Explosion neuer Strukturen führten, die sich oft auch in verschiedenen Zuständen charakterisieren lassen. Eindrucksvolle Beschreibungen der mitochondrialen Teilung, der bakteriellen Transkription oder bakterieller Toxine wurden gezeigt. Um die Dynamik von Eiweißen in wässriger Umgebung atomar zu beschreiben, ist die NMR-Methode nach wie vor bedeutsam und ergänzt sich gut mit mikroskopischen Messungen, wie Birthe Kragelund (Kopenhagen) und Ben Schuler (Zürich) zeigten. Die sehr dynamischen Eigenschaften intrinsisch ungefalteter Proteine lassen sich dabei eingrenzend beschreiben, und wir beginnen ihre Bedeutung in der Biologie zu verstehen, wie Julie Forman-Kay (Toronto) verdeutlichte.

Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die Bereitstellung der Plattform MeetAnyway und die hervorragende organisatorische Unterstützung des Seminars.

Prof. Dr. Christian Freund
Prof. Dr. Frank Noé und
Dr. Esam Abualrous, FU Berlin

Collective Effects and Non-Equilibrium Quantum Dynamics

724. WE-Heraeus-Seminar

Dieses Seminar behandelte kollektive nicht-lineare Effekte, die zur Selbstorganisation von Materie führen. Solche Prozesse können von klassischer oder quantenmechanischer Natur sein und treten in vielen Bereichen auf, von der Biologie über die Chemie bis zur nicht-linearen Optik oder der Festkörperphysik. Im Zentrum dieses Seminars standen jedoch ultrakalte Atome und ihre kollektive Wechselwirkung mit Licht. Anhand dieser experimentellen Plattform, die eine nahezu perfekte Kontrolle von quantenmechanischen Vielteilchensystemen mit langreichweitigen Wechselwirkungen erlaubt, lassen sich Phänomene von Phasenübergängen bis zu Nichtgleichgewichtsdynamiken studieren. Ein Schwerpunkt des Seminars war die Bildung kristallähnlicher Strukturen durch lichtinduzierte Wechselwirkung in selbstkonsistenten dynamischen Lichtfeldern. Weitere Themen waren Zeitkristalle und kollektive Streuung, insbesondere Fortschritte in der Superradianz, Subradianz und der Anderson-Lokalisation von Licht.

Ursprünglich in Bad Honnef für Sommer 2020 geplant, fand das Seminar nun online vom 28. bis 30. Juli statt. Die Zahl der Anmeldungen übertraf unsere Erwartungen bei Weitem. Das virtuelle Format erlaubte es uns, allen über 120 Interessierten die Teilnahme zu ermöglichen. Das Programm umfasste 18 eingeladene Vorträge und sechs Vorträge zu aktuellen Themen, die aus den Anmeldungen ausgewählt wurden. Über 50 Poster wurden in zwei Postersitzungen vorgestellt. Das virtuelle „mingling“ zu Beginn stellte sich als belebendes Element heraus und führte in einigen Fällen zu überraschenden Begegnungen.

Umrahmt wurde das Programm von zwei Vorträgen zu rein klassischen Phänomenen der Musterbildung, wie sie bei der Entstehung von Wüsten oder der Färbung von Tieren auftreten. Den Schwerpunkt bildeten experimentelle und theoretische Vorträge zur Kristallisation von Quantengasen in Hochfrequenz-Resonatoren sowie zur kollektiven Kopplung zwischen Licht und neutralen Atomen oder Ionen. „Hot-Topic“-Vorträge, nicht zuletzt von Nachwuchswissenschaftlern, gaben einen Ein-

blick in neueste Entwicklungen in Themen wie stark wechselwirkende Fermi-Gase, Zeitkristalle, dissipative Phasen in Resonatoren, lichtinduzierte Selbstorganisation in kolloidalen Suspensionen und Quanten-Thermodynamik. Eine Podiumsdiskussion am Abend des zweiten Seminartages rundete das Programm ab. Zu unserer Freude waren trotz des dichten Programms alle Vorträge sehr gut besucht und von lebhaften Diskussionen begleitet.

Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die umsichtige Organisation und die finanzielle Förderung.

Dr. Tobias Donner, ETH Zürich, Schweiz
Prof. Dr. Sebastian Slama, U Tübingen
und **Prof. Dr. Thorsten Ackemann**,
U of Strathclyde, UK

Process Integration, Chemical and Thermal Energy Storage for the Energy Transformation

743. WE-Heraeus-Seminar

Dieses Seminar, das vom 22. bis 24. März online stattfand, befasste sich mit den Möglichkeiten der Energiespeicherung und deren Bewertung. Aufgrund der großen Herausforderungen der Energiewende und des Klimawandels, aber auch der unterschiedlichen Sichtweisen der Disziplinen, waren Fachleute aus Ingenieur-, Natur- und Wirtschaftswissenschaften sowie der Industrie zum Austausch eingeladen. Einig waren sich die rund 60 Teilnehmerinnen und Teilnehmer darin, dass es einen zunehmenden Bedarf an Energiespeichermöglichkeiten geben wird, dieser jedoch ausreichend Energie aus CO₂-armen Energiequellen voraussetzt, was bisher nicht absehbar ist. Besonders vorteilhaft wäre es, CO₂-intensive Prozesse zu ersetzen. Neben der Elektrolyse von Wasserstoff, der sich zu verschiedenen weiteren Energieträgern hoher Energiedichte wie Kohlenwasserstoffen oder Ammoniak umwandeln lässt, standen alternative Möglichkeiten im Zentrum des Interesses. Ein Beispiel ist die Nutzung von Eisen-Eisenoxid-Zyklen; hierbei ließe sich die bestehende Infrastruktur (z. B. Kohlekraftwerke) weiter nutzen und eine verhältnismäßig hohe Effizienz erzielen, bei vergleichsweise geringen Risiken. Zusätzlich zur Energiespeicherung in Ammoniak und dessen Rekonversion in Verbrennungssystemen gibt es interessante Überlegungen und Untersuchungen, um Schwefeloxide oder Calciumhydroxid als Energieträger zu nutzen, deren hohe Energiedichte den Transport aus anderen Weltregionen erleichtern würde.

Methoden der Entscheidungsanalyse, wie sie für das Land Niedersachsen angewandt wurden, in den Natur- und Technikwissenschaften aber kaum verbreitet sind, stellen umfassende Kataloge von