

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 Energiespeicherungsmöglichkeiten 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

Bewertungsparametern bereit, die über rein energetische Kennzahlen hinausgehen und in der Lebenszyklusanalyse auch weitere ökologische Parameter heranziehen. Diese können Entscheidungsträgern für eine fundierte Wahl bestimmter Energiespeichersysteme dienen. Wie die Energiesystemanalyse aufzeigte, gibt es aktuell eine Diskrepanz zwischen dem gesellschaftlichen Energiespeicherbedarf und der Möglichkeit, hiermit Erträge zu erzielen. Im Hinblick auf die CO₂-Neutralität gilt es, alle Optionen zu betrachten, inklusive der CO₂-Abscheidung, -Nutzung oder -Speicherung. Ob solche – häufig günstigen – Optionen realisiert werden, ist im gesellschaftlichen Konsens zu entscheiden.

Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die organisatorische Unterstützung, insbesondere bei der Bereitstellung der online-Plattform MeetAnyway.

Prof. Dr. Burak Atakan, U Duisburg-Essen und
Prof. Dr. Johannes Janicka, TU Darmstadt

Koopman Methods in Classical and Classical-Quantum Mechanics

746. WE-Heraeus-Seminar

Zu diesem Online-Seminar, das vom 19. bis 23. April stattfand, trafen sich rund 70 internationale Vertreterinnen und Vertreter von Chemie, Mathematik und Physik zu einem umfangreichen Programm aus 25 eingeladenen und 14 weiteren Vorträgen sowie einer Postersitzung. Die von der Stiftung zur Verfügung gestellte elektronische Plattform „MeetAnyway“ sowie die Videoaufnahmen der Vorträge durch die Organisatoren ermöglichten spontane und vielfältige Kontakte unter den Teilnehmern und insgesamt einen sehr erfolgreichen Verlauf, wie die Teilnehmenden vielfach bestätigten.

Ausgehend von den Beiträgen der „Gründerväter“ (Lajos Diósi, Raymond Kapral und Viktor Gerasimenko) standen zum Auftakt verschiedene quanten-klassische Theorien im Mittelpunkt. Die von Denys Bondar geleitete Diskussion war sehr gut besucht und drehte sich hauptsächlich um quantenklassische Hybridmethoden.

Am zweiten Tag kam eine breite Mischung von Aspekten zur Sprache, von relativistischer Dynamik zur Molekulardynamik und Plasmaphysik. Zu den vorgestellten neuen Konzepten gehörte die Anregung von Ilon Joseph, Koopman-Wellenfunktionen zu verwenden, um mithilfe von Quantenrechnern klassische Simulationen durchzuführen. Diesen Gedanken griff Dimitris Giannakis später auf. Die Postersitzung fand breites Interesse und deckte vor allem diverse quantenklassische Hybridformulierungen sowie offene Quantensysteme ab.

Der Schnittstelle zwischen Chemie und Mathematik war der dritte Tag gewidmet,

illustriert etwa durch die komplementären Beiträge von Caroline Lasser und Irene Burghardt. Quantenklassische Beschreibungsformen in der „Mathematischen Chemie“ besitzen großes Anwendungspotenzial – und ein hohes Potenzial für Synergie –, selbst wenn die beiden Forschungsfelder häufig nicht in direktem Kontakt miteinander stehen. Die von Igor Mezic geleitete Diskussion deckte Aspekte der quantenklassischen Kopplung und die von Ilon Joseph herausgestellte Rolle klassischer Phasen ab.

Der vierte Seminartag begann mit Beiträgen aus der Mathematischen Physik, gefolgt von Vorträgen aus der Chemie und über dynamische Systeme; dabei hielt Nelida Črnjarić-Zic einen Spezialvortrag über die Anwendung von Koopman-Operatoren. Die von Eberhard Gross geleitete Diskussionsitzung befasste sich mit Fragen aus der Chemie und Festkörperphysik.

Am Abschluss tag stand die quantenklassische Dynamik im Vordergrund, mit Ausnahme der Beiträge von Stefan Klus und Ignacio Franco aus der Mathematik bzw. Chemie. Abschließend wurden Fragen zur quantenklassischen Formulierung im Rahmen der Koopman-Theorie erörtert. Cesare Tronci stellte heraus, dass konsistente Koopman-Hybridsysteme den grundlegenden Erhaltungsgesetzen genügen.

Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die organisatorische Unterstützung und finanzielle Förderung dieses Seminars.

Prof. Dr. Denys I. Bondar, Tulane University, USA, **Prof. Dr. Irene Burghardt**, U Frankfurt
Prof. Dr. François Gay-Balmaz, CNRS und École Normale Supérieure, Paris, Frankreich
Prof. Dr. Igor Mezic, UC Santa Barbara, USA und **Prof. Dr. Cesare Tronci**, University of Surrey, UK, und Tulane University, USA

Wochenendseminar „PhysikerInnen im Beruf“

Das Ziel des Wochenendseminars „PhysikerInnen im Beruf“ ist es, kurz vor dem Abschluss stehenden Studierenden und Promovierenden der Fachrichtung Physik Orientierungshilfen beim Übergang in das Berufsleben zu bieten. Zum 60. Geburtstag dieser Veranstaltung gab es am 7./8. Mai ein besonders schönes Geschenk: die bislang höchste Teilnehmendenzahl bei gleichzeitig sehr positiver Resonanz!

Die Veranstaltung fand virtuell auf den Plattformen „ZOOM“ (Tagesprogramm und Vorträge) und „WONDER“ (Abendveranstaltung und Networking) statt. Fünfzehn berufstätige Physikerinnen und Physiker aus Wirtschaft, Forschung und öffentlichem Dienst zeigten die Bandbreite des Berufsfeldes nach einem Physikstudium und gaben Einblicke in ihren Berufsalltag, ihre persönliche berufliche Entwicklung und Einschätzungen zum Berufseinstieg.

Sie machten deutlich, welche interessanten Möglichkeiten und Chancen die breit angelegte Ausbildung im Studienfach Physik bei der späteren Auswahl des Berufes bietet, obgleich es eine rein „physikalisch orientierte Industrie“ nicht gibt.

Die Vortragenden präsentierten ein weites Spektrum an Themen: von der Arbeit an selbstfahrenden Fahrzeugen über Optikdesign, die Optimierung von Gläsern und Keramiken, die Entwicklung von Endoskopen in der Medizintechnik, Data Science, Erzeugung digitaler Identitäten und deren Absicherung beim BSI, Grundlagenforschung, der Deutschen Börse, der Drucktechnik, Robotik oder Digitalisierung in Großunternehmen bis hin zur Photovoltaik-/Wasserstoff-Speichertechnologie.

Die Vortragenden zeichneten ein sehr persönliches Bild der eigenen Karriere. Dabei kristallisierte sich die Erfahrung heraus, dass die geradlinige Planung der eigenen Karriere nur selten möglich ist, aber Flexibilität und realistische Einschätzung der eigenen Fähigkeiten und Grenzen Zufriedenheit im Arbeitsleben versprechen. Um den Zuhörenden den Einstieg in das Berufsleben zu erleichtern, gab es Hinweise zu wertvollen Erfahrungen, die sich schon im Studium oder während der Promotion sammeln lassen.

Von den über 180 angemeldeten Personen nahmen dauerhaft etwa 100 an den Vorträgen und Diskussionsrunden teil. Trotz der erschwerten Bedingungen, unter denen das Seminar stattfand, war das Feedback überaus positiv: Zählt man nur die Nennungen „sehr gut“ und „gut“, bestätigten im Feedback der Teilnehmenden 90 Prozent eine hohe Relevanz und 93 Prozent eine hohe Qualität der Vorträge, 70 Prozent würden das Seminar weiterempfehlen und 66 Prozent nach einer gewissen Berufszeit auch selbst für einen Vortrag zur Verfügung stehen. Leider ermöglichte das virtuelle Konzept nur eingeschränkt sehr persönliche Gespräche.

Die Organisation und der reibungslose Ablauf der Veranstaltung war wieder Dank des motivierten Teams aus DPG-Geschäftsstelle, insbesondere von Michaela Lemmer, und Ehrenamt, namentlich Alexander Heinrich und Angelika Hofmann, gesichert. Herzlichen Dank auch allen Vortragenden, die mit ihrem Engagement den Seminarteilnehmenden einen interessanten Einblick in die vielfältigen Berufsmöglichkeiten mit Physikabschluss und ihr Berufsleben geboten haben und in vielen Gesprächen „brennende“ Fragen beantworten konnten.

Eberhard Schultheiß