

# CSO Loewe

Forschung in Hessen  
am Hochleistungsrechner  
LOEWE-CSC

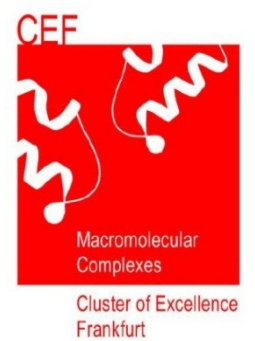
Von der elementaren Materie  
zum Klimamodell

Center for Scientific Computing  
Goethe-Universität

[csc.uni-frankfurt.de](http://csc.uni-frankfurt.de)



HESSEN



# Inhaltsverzeichnis

LOEWE-CSC ein innovativer Hochleistungsrechner für die Forschung in Hessen.....	2
Untersuchung des Quark-Gluon Plasma.....	7
Monte Carlo-Simulation von Schwerionenreaktionen.....	10
Transporttheorie relativistischer Schwerionenreaktionen.....	12
Dynamische Beschreibung heißer und dichter Kernmaterie in hochenergetischen Schwerionenstößen.....	14
QCD-Thermodynamik mit Gittersimulationen.....	16
Hydrodynamische Untersuchungen von Schwerionenkollisionen bei relativistischen Energien.....	18
Ab Initio Kernstruktur- und Reaktionstheorie mit QCD-basierten Hamiltonians .....	20
Exotische hadronische und Quarkmaterie.....	23
Massenberechnung von strange und charm Mesonen mit Gitter-QCD.....	25
Implizite Dichtefunktionale.....	27
Ultrakalte Atome in Optischen Gittern.....	29
Theorie der elektronischen und magnetischen Eigenschaften von Nanostrukturen .....	33
Molekulare Dynamik von mesoskopischen, nano- und biomolekularen Systemen.....	35
Microscopic modelling of correlated electron systems.....	39
DFT-Studien an Molekülkristallen und Oberflächen mit Berücksichtigung von Dispersionswechselwirkungen.....	43
Vom Intermediat bis zum Makromolekül – Computerchemie als Hilfsmittel zur Aufklärung von Reaktionsmechanismen.....	46
Speicherhierarchien im parallelen Umfeld.....	51
Architektur von Hochleistungsrechnern.....	52
Gravity Waves in the Atmosphere.....	56
Regionale Atmosphärische Modellierung.....	58
Taylor-Couette Strömung bei hohen Reynoldszahlen und Turbulenzübergang in der Rohrströmung.....	61
Wechselwirkungen zwischen Klima und terrestrischer Biosphäre.....	63
Bernstein Fokus Neurotechnologie: Frankfurt.....	65

# LOEWE-CSC ein innovativer Hochleistungsrechner für die Forschung in Hessen

Hans Jürgen Lüdde, Volker Lindenstruth  
Center for Scientific Computing und Frankfurt Institute for Advanced Studies  
Johann Wolfgang Goethe-Universität  
Max-von-Laue-Straße 1, 60438 Frankfurt am Main

Bedingt durch die ungebremsste Steigerung der Leistungsfähigkeit moderner Prozessor Architekturen, werden zunehmend realistische Modellierungen komplexer Naturphänomene erreichbar. Neben den klassischen Anwendungen der theoretisch orientierten Naturwissenschaften, bilden Simulationen, die in einigen Bereichen bereits teure Experimente ersetzen können, einen neuen Schwerpunkt im wissenschaftlichen Rechnen. Darüber hinaus sind experimentelle Großprojekte, wie sie am *Large Hadron Collider* (LHC) am CERN oder im Rahmen der *Facility for Antiproton and Ion Research* (FAIR) bei der GSI geplant sind ohne eine rechenaufwändige aufbereitende Datenverarbeitung der Petabytes von Rohdaten undenkbar.

Dies hat die Entwicklung des wissenschaftlichen Rechnens als eine neue Schlüsselkompetenz, in der die Erfahrungen einer großen Zahl von Disziplinen zusammenfließen, stark befördert. Dieses Zusammenspiel zwischen Anwendung, ihrer Realisierung im Algorithmus und der Architektur des Rechners hat in den letzten Jahren immer größere Bedeutung erlangt, da sich nur mit einem Fach übergreifenden Wissen aktuelle Problemstellungen zunehmender Komplexität bearbeiten lassen.

Mit der Entwicklung des Hochleistungsrechners (HLR) *LOEWE-CSC* im Jahr 2010 und dem Beginn des Betriebs im Januar 2011 sind zwei unterschiedliche Ziele verknüpft worden: (i) der Rechner als Forschungsobjekt und (ii) der Rechner als Forschungsinfrastruktur für Großforschungsprojekte mit heterogenem Nutzerprofil.

## LOEWE-CSC als Forschungsprojekt - GreenIT

Der Energieverbrauch der *Informations- und Kommunikationstechnik* (IKT) in Deutschland liegt nach Untersuchungen des Fraunhofer Instituts bei derzeit 60 TWh pro Jahr. Dies entspricht ca. 10,5% des bundesweiten Stromverbrauchs. Allein über 10 TWh entfallen dabei auf die 50.000 Rechenzentren in der BRD und die Tendenz ist stark steigend. Dieser Stromverbrauch bedeutet, dass in Deutschland vier Kohlekraftwerke allein für die Versorgung der Rechenzentren benötigt werden.

Betrachtet man die Energiebilanz von Rechenzentren, so entfallen im Mittel 50% des gesamten Stromverbrauchs auf die Kühlung der Zentren. Dies entspricht einem *Power Usage Efficiency* (PUE) Koeffizient von 2. Hier ergibt sich sowohl ökonomisch als auch ökologisch ein erhebliches Einsparpotential.

Im November 2010 wurde in Frankfurt mit dem Rechner *LOEWE-CSC* einer der Energie effizientesten Großcomputer Europas in Betrieb genommen. Mit einer Rechenleistung von 299 TFlop/s war er zum Zeitpunkt der Inbetriebnahme der zweitschnellste Supercomputer Deutschlands. Die Energie Effizienz beträgt 740 MFlop/s pro Watt. Damit verbraucht *LOEWE-CSC* nur etwa ein Viertel der Energie von vergleichbar schnellen Computern, zu Investitionskosten, die mit knapp fünf Millionen Euro etwa bei einem Drittel liegen.

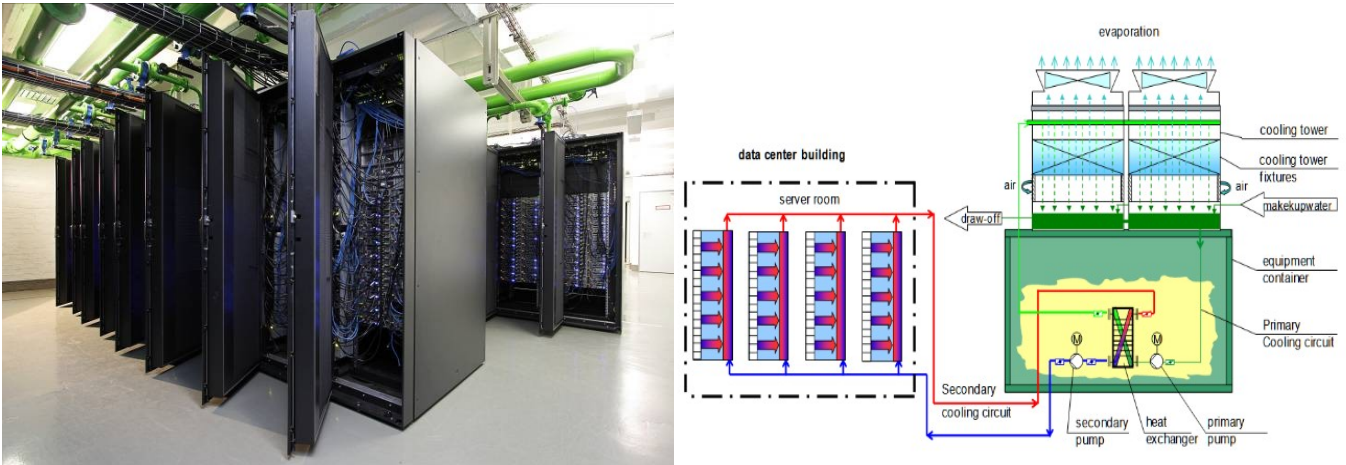


**Figur 1:** Hochleistungsrechner LOEWE-CSC untergebracht in 34 Wasser gekühlten Schränken

Der Frankfurter Rechner ist eine Eigenentwicklung der Goethe-Universität, des *Center for Scientific Computing (CSC)*, des *Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS)* und des *Helmholtz International Center for FAIR (HIC for FAIR)* unter der wissenschaftlichen Leitung der beiden Autoren. Das System umfasst 832 Rechenknoten mit 20.928 AMD-Magny-Cours-Kernen sowie 778 GPU (AMD Radeon HD 5870), 56 TB Hauptspeicher und über 2.5PB Festplattenspeicher. Die Rechenknoten sind über ein Latenz armes QDR Infiniband (40 Gb/s) vernetzt. Der Anteil der Kühlung am Stromverbrauch des Rechners beträgt unter maximaler Last nur 7%. Die Architektur des LOEWE-CSC ist dem sehr heterogenen Anforderungsprofil unterschiedlicher Forschungsprojekte angepasst. U.a. arbeiten am LOEWE-CSC über 200 Wissenschaftler aus den Bereichen Physik der elementaren und komplexen Materie, Quantenchemie, Lebenswissenschaften und Klimaforschung. LOEWE-CSC bietet ebenfalls Rechenleistung für die *Frankfurt-Cloud Initiative*.

Die hohe Rechenleistung erzielt LOEWE-CSC durch den Einsatz von Grafikkarten. Dazu wurde in Frankfurt eine neue Softwarebibliothek entwickelt. Die DGEMM Bibliothek, das Kernstück des Linpack benchmarks, erreicht dabei eine Effizienz von 494 Gflop/s auf der Radeon 5870 – das entspricht 90,8% der peak Leistung der GPU. Das ist Weltrekord: es gibt keine Software für diese GPU Architektur, die leistungsfähiger wäre.

Generell ist die Entwicklung Architektur gerechter Software ein wesentlicher Faktor von GreenIT. Eine optimal angepasste Software erlaubt über geringere Laufzeiten eine erhebliche Einsparung an Energie.



**Figur 2:** Spezielle Wärmetauscher in den Rücktüren sorgen für eine Raumtemperatur, die etwa 2° oberhalb der Wassertemperatur liegt (linke Grafik). Prinzip der realisierten Wasserkühlung (rechte Grafik).

Den hervorragenden PUE Koeffizienten von 1,07 verdankt der Rechner einer mit der Firma Knürr gemeinsam entwickelten Wärmetauscher Technologie. Die heiße Luft wird mit Hilfe der Gehäuselüfter durch den in der Rücktür befindlichen Wärmetauscher geblasen. Dadurch sind keine zusätzlichen Ventilatoren in den Racks notwendig. Die Wasserkühlung wurde mit der Firma Infraserv am Standort des Rechners, dem Industriepark Höchst realisiert. Über zwei Kühltürme wird Flusswasser verdampft und über einen Wärmetauscher das Wasser des inneren Kreislaufs gekühlt.

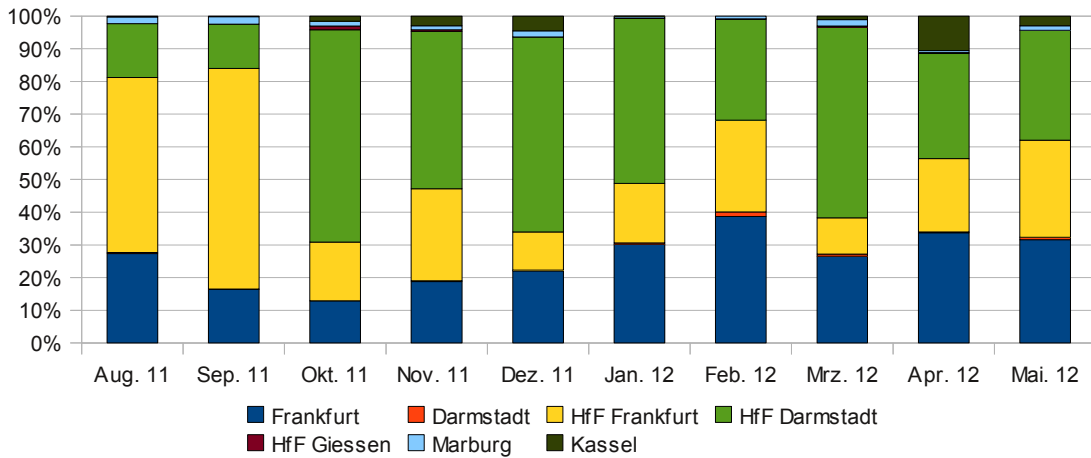
LOEWE-CSC ist inzwischen zum Prototyp für andere HLR geworden. Am Helmholtz-zentrum für Schwerionenforschung GSI wurde die Rechenzentrumstechnologie des LOEWE-CSC weiter entwickelt. Zum Einen wurde ein kleines System mit 10 19-Zoll Schränken aufgebaut, das mit Unterdruck in den Wasserkreisläufen arbeitet, so dass bei Lecks kein Wasser austreten kann. Darüber hinaus wurde das bestehende Rechen-zentrums-konzept auf drei Dimensionen erweitert. Bereits in Betrieb ist ein 3D Rechenzentrum auf 2 Ebenen mit Kapazität für 96 19-Zoll Schränke und einer auf 2 MW ausbaubaren Kühlkapazität. Dieses System wird mit mindestens den gleichen Kühl-effizienzen wie der LOEWE-CSC arbeiten. Darüber hinaus wird ein Rechenzentrum für 800 19-Zoll Racks in 6 Ebenen geplant, das eine Grundfläche von 730 m<sup>2</sup> und eine Leistungsdichte von mehr als 100 kW/m<sup>2</sup> zulässt. Auch hier werden die hohen Energie-effizienzen wie im LOEWE-CSC erreicht werden. Baubeginn wird in 2013 sein.

LOEWE-CSC wurde im Jahr 2011 mit dem GreenIT Best Practice Award in der Kategorie *Visionäre Gesamtkonzepte* ausgezeichnet. In diesem Jahr (2012) gehört LOEWE-CSC zu den Preisträgern im Wettbewerb *365 Orte im Land der Ideen*.

### **LOEWE-CSC als Teil einer Forschungsinfrastruktur**

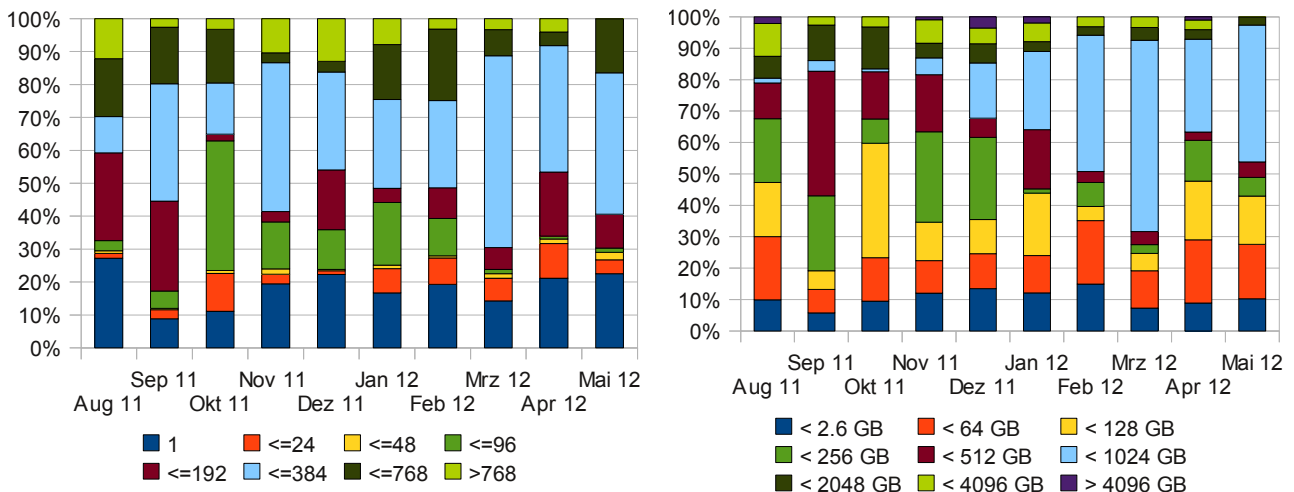
Am LOEWE-CSC arbeiten 40 Arbeitsgruppen mit über 200 Mitarbeitern an sehr unterschiedlichen Forschungsprojekten. Eine Auswahl von Arbeiten wird in diesem Bericht vorgestellt. Die beteiligten Arbeitsgruppen verfügen insgesamt über ein Drittmittelbudget von über 40 Mio Euro für die Zeit 2011-2012. In diesem Zeitraum wurden mehr als 200 Artikel veröffentlicht bzw. zur Veröffentlichung eingereicht. Dabei wären die meisten Projekte ohne eine ausreichende HLR-Versorgung nicht durchführbar gewesen.

### Prozentualer Anteil der Universitäten an der Rechenzeit



**Figur 3:** Nutzung des LOEWE-CSC seit Beginn des Regelbetriebs im August 2011

Größter Nutzer und auch größter Geldgeber des LOEWE-CSC ist das *Helmholtz International Center for FAIR* (HfF), ein durch die Hessische *Landes-Offensive zur Entwicklung Wissenschaftlich-ökonomischer Exzellenz* (LOEWE) gefördertes Großforschungsvorhaben mit vielen Einzelprojekten. Insgesamt wurden seit Beginn des Regelbetriebs im August 2011 über 120 Mio CPU-Kern Stunden an Rechenzeit abgegeben. Das entspricht einer mittleren Auslastung von 80% und das bei einem sehr heterogenen Nutzungsprofil, wie die folgenden Bilder zeigen.



**Figur 4:** Abgegebene Rechenzeit in Abhängigkeit von der Anzahl der genutzten CPU-Kerne (linke Grafik) und des angeforderten Hauptspeichers (rechte Grafik).

Die folgenden Artikel vermitteln einen Eindruck von den vielfältigen Fragestellungen, die mit LOEWE-CSC bearbeitet wurden. Es finden sich Themen aus den Bereichen der elementaren und komplexen Materie, der Quantenchemie, der Informatik, der Klimaforschung und der Hirnforschung.

Die Anforderungen an den Rechner sind dabei sehr unterschiedlich. Programmlaufzeiten von wenigen Minuten bis hin zu einigen Wochen erfordern einen sehr stabilen Rechenbetrieb. Tausende von single-processor-jobs und hoch parallele Anwendungen mit vielen tausend CPU-Kernen müssen zur gleichen Zeit effizient ausgeführt werden. Dies lässt sich nur durch die flexible Rechnerarchitektur und eine konsequente Optimierung des Betriebs erreichen.

Einige Schlüsselanwendungen wurden völlig neu programmiert, um insbesondere die hohe Rechenleistung der Grafikprozessoren auszunutzen. Das erforderte eine intensive Zusammenarbeit zwischen Fachwissenschaftlern und Informatikern.

So hat sich um LOEWE-CSC eine Fach übergreifende Forschungsinfrastruktur entwickelt, die in Zukunft konsequent ausgebaut werden soll.

Die Autoren möchten sich an dieser Stelle bei allen Mitarbeitern, die zum Gelingen des LOEWE-CSC Projekts beigetragen haben bedanken. Insbesondere soll hier auch die hervorragende Zusammenarbeit mit dem *Hochschulrechenzentrum* der Goethe-Universität erwähnt werden.

Im Namen des CSC bedanken sich die Autoren für die vielfältige finanzielle Unterstützung durch das Land Hessen, die Goethe-Universität, das *Helmholtz International Center for FAIR*, das *Frankfurt Institute for Advanced Studies* und die Deutsche Forschungsgemeinschaft. Besonderer Dank gilt auch vielen Forschergruppen, die sich mit ihren Landesmitteln an der Finanzierung des LOEWE-CSC beteiligt haben.

# Untersuchung des Quark-Gluon Plasma

**Harald Appelshäuser**  
Institut für Kernphysik  
Johann Wolfgang Goethe-Universität  
Max-von-Laue-Straße 1, 60438 Frankfurt am Main

Die experimentellen Gruppen am Institut für Kernphysik (Prof. H. Appelshäuser, Prof. C. Blume, Prof. H. Büsching) sind am ALICE Experiment am CERN-LHC beteiligt. Das Hauptziel der dortigen Experimente ist die Charakterisierung des sogenannten Quark-Gluon Plasma (QGP), einem Materiezustand bei ultra-hoher Temperatur und Dichte, der in Kollisionen schwerer Atomkerne am LHC erzeugt wird und in dem sich Quarks und Gluonen, die elementaren Bauteile der Materie, quasi-frei bewegen können. Diese Untersuchungen erweitern unser Verständnis der starken Wechselwirkung und ihrer fundamentalen Symmetrien und geben Einblick in die Evolution des frühen heißen Universum.

Dazu ist nicht nur die Analyse großer Datenmenge, sondern auch die Durchführung umfangreicher Simulationen notwendig. Letztere sind zunächst wichtig, um die notwendigen Korrekturen für die Datenanalyse zu erhalten und sind somit Grundvoraussetzung für eine konsistente Interpretation der Messergebnisse am LHC. Darüber hinaus werden Simulationen durchgeführt, um zukünftige Experimente vorzubereiten und den Aufbau neuer Detektoren zu optimieren, etwa für den geplanten *upgrade* des ALICE-Experimentes ab 2018.

Die Frankfurter Arbeitsgruppe ist die größte am ALICE-Experiment beteiligte Universitätsgruppe und trägt entsprechende Verantwortung durch Projektleitung und Mitgliedschaft in zentralen ALICE-Entscheidungsgremien. Die Gruppe ist federführend in einer Reihe von Analyse- und Simulationsprojekten innerhalb von ALICE.

Zur künftigen Optimierung des ALICE-Detektors wurden beispielsweise aufwändige Simulationen des thermischen Strahlungsspektrums virtueller Photonen durchgeführt, wie es mit Hilfe eines verbesserten Detektoraufbaus und erhöhter Leistungsfähigkeit des LHC ab 2020 über den Zerfall in Elektron-Positron Paare gemessen werden kann, siehe Abbildung 1.

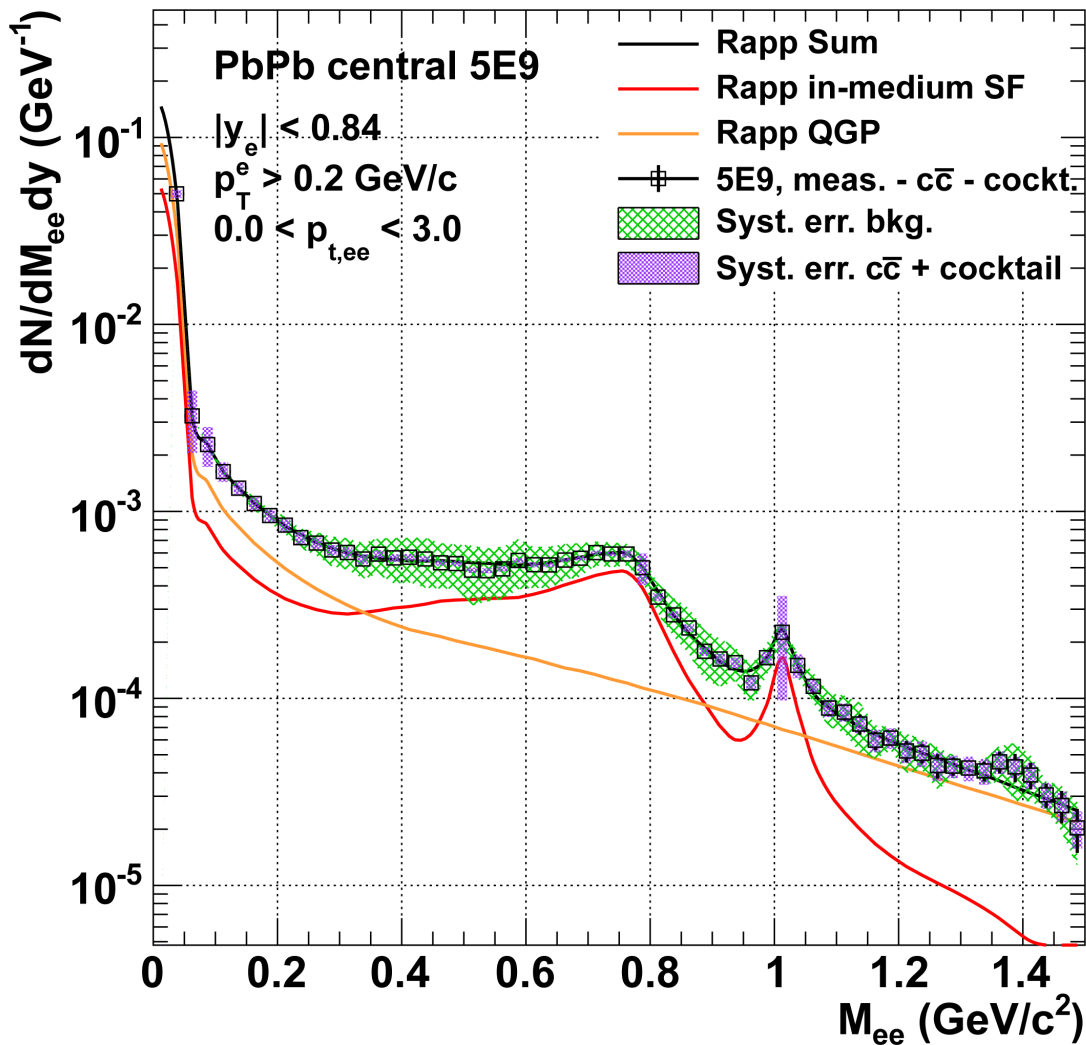
Der aktuelle Fokus unserer Arbeit mit dem Loewe-CSC liegt in der Planung künftiger Messungen und Erweiterungen am ALICE Experiment.

Es wurden umfangreiche Simulationen zur Messung von Elektronen-Positronen Paaren mit kleinen invarianten Massen durchgeführt. Diese Observable bietet einen direkten Zugang zur frühen Phase einer Kern-Kern Kollision und damit auch zu einem möglichen Quark-Gluon Plasma.



Hauptfragestellung ist hierbei die Bewertung der Signifikanz der Messung bei verschiedenen Magnetfeldstärken des zentralen ALICE-Magneten. Hier wurde im Rahmen einer Masterarbeit gezeigt, dass eine Verringerung des Magnetfeldes von 0.5 T auf 0.2 T die Signifikanz der Messung um einen Faktor 2-5 steigern kann.

Desweiteren wurde simuliert, welcher zusätzliche Gewinn durch ein Upgrade des Inner Tracking Systems (ITS) zu erwarten ist. Die Ergebnisse werden derzeit in einem offiziellen ALICE-Letter Of Intent zusammengefasst, der dem CERN-LHCC zur Begutachtung präsentiert werden wird.



**Figur 1:** Am LOEWE-CSC simuliertes elektromagnetisches Strahlungsspektrum des QGP, nachgewiesen mit dem neuen ALICE-Detektoraufbau ab 2020.

## Publikationen

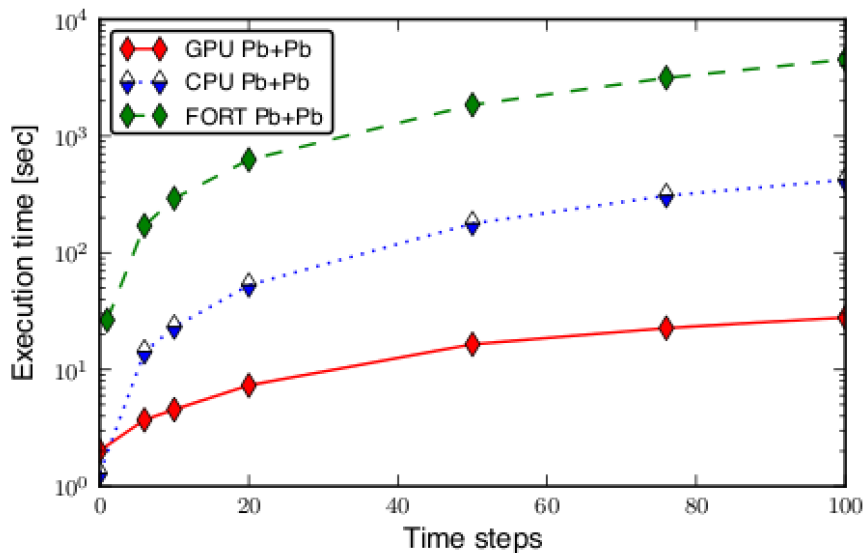
- ALICE Collaboration, 2012 *Harmonic decomposition of two-particle angular correlations in Pb-Pb collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$  TeV*, Phys.Lett. **B708** 249-264
- ALICE Collaboration, 2012 *Light vector meson production in pp collisions at  $\sqrt{s} = 7$  TeV* Physics Letters **B 710** 557-568
- ALICE Collaboration, 2012 *Particle-yield modification in jet-like azimuthal di-hadron correlations in Pb-Pb collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$  TeV*, Phys. Rev. Lett. **108**, 092301
- ALICE Collaboration, 2012 *J/psi polarization in pp collisions at  $\sqrt{s}=7$  TeV* Phys.Rev.Lett. **108** 082001
- ALICE Collaboration, 2012 *Measurement of charm production at central rapidity in proton-proton collisions at  $\sqrt{s} = 7$  TeV* JHEP **01** 128
- ALICE Collaboration, 2012 *Femtoscopy of pp collisions at  $\sqrt{s}=0.9$  and 7 TeV at the LHC with two-pion Bose-Einstein correlations* Phys. Rev. **D 84**, 112004
- ALICE Collaboration, 2012 *Measurement of Event Background Fluctuations for Charged Particle Jet Reconstruction in Pb-Pb collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$  TeV* JHEP **03** 053
- ALICE Collaboration, 2012 *Heavy flavour decay muon production at forward rapidity in proton-proton collisions at  $\sqrt{s} = 7$  TeV* Phys. Lett. **B 708** 265
- ALICE Collaboration, 2011 *Production of pions, kaons and protons in pp collisions at  $\sqrt{s}=900$  GeV with ALICE at the LHC* Eur.Phys.J. **C 71(6)** 1655
- ALICE Collaboration, 2011 *Higher harmonic anisotropic flow measurements of charged particles in Pb-Pb collisions at 2.76 TeV* Phys. Rev. Lett. **107**, 032301
- ALICE Collaboration, 2011 *Rapidity and transverse momentum dependence of inclusive J/psi production in pp collisions at  $\sqrt{s}=7$  TeV*, Phys.Lett. **B704** 442-455
- ALICE Collaboration, 2011 *Strange particle production in proton-proton collisions at  $\sqrt{s} = 0.9$  TeV with ALICE at the LHC* Eur. Phys. J. **C 71 (3)**, 1594
- ALICE Collaboration, 2011 *Two-pion Bose-Einstein correlations in central PbPb collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$  TeV* Phys.Lett. **B 696 (4)** 328-337
- ALICE Collaboration, 2011 *Centrality dependence of the charged-particle multiplicity density at mid-rapidity in Pb-Pb collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$  TeV* Phys. Rev. Lett. **106**, 032301
- ALICE Collaboration, 2010 *Elliptic flow of charged particles in Pb-Pb collisions at 2.76 TeV* Phys. Rev. Lett. **105**, 252302
- ALICE Collaboration, 2011 *Suppression of Charged Particle Production at Large Transverse Momentum in Central Pb-Pb Collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$  TeV* Phys. Lett. **B 696** 30-39
- ALICE Collaboration, 2010 *Charged-particle multiplicity density at mid-rapidity in central Pb-Pb collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$  TeV* Phys. Rev. Lett. **105**, 252301
- ALICE Collaboration, 2010 *Transverse momentum spectra of charged particles in proton-proton collisions at  $\sqrt{s}=900$  GeV with ALICE at the LHC* Physics Letters **B 693** 53-68
- ALICE Collaboration, 2010 *Two-pion Bose-Einstein correlations in pp collisions at  $\sqrt{s}=900$  GeV* Phys. Rev. **D 82**, 052001
- ALICE Collaboration, 2010 *Midrapidity Antiproton-to-Proton Ratio in pp Collisions at  $\sqrt{s}=0.9$  and 7 TeV Measured by the ALICE Experiment* Phys Rev Lett **105**, No.7
- ALICE Collaboration, 2011 *Charged-particle multiplicity measurement in proton-proton collisions at  $\sqrt{s}=7$  TeV with ALICE at LHC* Eur. Phys. J. **C 68** 345-354
- ALICE Collaboration, 2010 *Charged-particle multiplicity measurement in proton-proton collisions at  $\sqrt{s}=0.9$  and 2.36 TeV with ALICE at LHC* Eur. Phys. J. **C68** 89-108
- ALICE Collaboration, *Alignment of the ALICE Inner Tracking System with cosmic-ray tracks* J. Instrum. **5**, P03003

# Monte Carlo-Simulation von Schwerionenreaktionen

Marcus Bleicher

Frankfurt Institute for Advanced Studies und  
Institut für Theoretische Physik, Johann Wolfgang Goethe-Universität  
Ruth-Moufang-Straße 1, 60438 Frankfurt am Main

Die Schwerionenphysik bei relativistischen Energien, wie sie z.B. bei GSI und FAIR, am CERN und am RHIC experimentell untersucht wird, dient dem Verständnis der starken Wechselwirkung (Quanten-Chrom-Dynamik, QCD) wie sie am Anfang des Universum und heutzutage in Neutronensternen vorkommt. Zur Planung und Interpretation der Experimente sind detaillierte Monte Carlo-Simulationen der Teilchendynamik unerlässlich, um Aussagen über die Eigenschaften der QCD bei extremen Temperaturen und Dichten zu gewinnen. In den letzten 10 Jahren wurden hierzu von unserer Gruppe verschiedene international renommierte mikroskopische und makroskopische Simulationsmodelle entwickelt und angewandt. Besonders hervorzuheben ist hierbei die Hybridversion der Ultrarelativistischen Quanten-Molekular-Dynamik (UrQMD v3.3). Dieses Modell erlaubt es erstmals zur Beschreibung von Kern-Kern-Kollisionen die Dynamik in der Nicht-Gleichgewichts-Phase durch eine relativistische Boltzmann-Gleichung mit dynamischer Kopplung an die relativistische Hydrodynamik für die Hochdichte-Phase der Reaktion zu verbinden. Nur so können Fluktuationen in Einzelereignissen konsistent in die Simulation mit einbezogen werden.



**Figur 1:** Ausführungszeiten für die relativistische Hydrodynamik für eine Blei+Blei-Kollision auf verschiedenen Architekturen. Die Nutzung von Graphikkarten (GPU) führt zu einer Reduktion der Rechenzeit im Vergleich zum originären Fortran-Programm (FORT) von über einer Stunde auf ca. 30 Sekunden. Die Rechnungen wurden auf dem L-CSC durchgeführt. Aus J. Gerhard et al, arXiv:1206.0919 [hep-ph], eingereicht bei Computer Physics Communication.

Basierend auf diesen neuen Ansatz konnten mit Hilfe des LOEWE-CSC vielfältige – bis dahin nicht mögliche – Untersuchungen zu den Eigenschaften der QCD-Materie untersucht werden. Hierbei sind insbesondere die Arbeiten zur Di-Leptonen-Produktion und Photonen-Produktion zu nennen, als auch die Untersuchung zum elliptischen und triangularen Fluss, die nur im Rahmen eines Modells mit fluktuierenden Anfangsbedingungen verstanden werden konnten.

## Publikationen

- J. Gerhard, V. Lindenstruth, and M. Bleicher 2012 *Relativistic Hydrodynamics on Graphic Cards* arXiv:1206.0919 [hep-ph].
- A.S. Botvina, K.K. Gudima, J. Steinheimer, I.N. Mishustin, J. Pochodzalla, A. Sanchez Lorente, M. Bleicher, and H. Stoecker 2012 *Production of hypernuclei in peripheral collisions of relativistic ions* Nucl.Phys. **A881**, 228-239.
- J. Gerhard, B. Bäuchle, V. Lindenstruth, and M. Bleicher 2012 *How stable are transport model results to changes of resonance parameters? A UrQMD model study* Phys.Rev. **C85**, 044912.
- Q. Li, G. Graf, and M. Bleicher 2012 *UrQMD calculations of two-pion HBT correlations in central Pb-Pb collisions* Phys.Rev. **C85**, 034908.
- F. Becattini, M. Bleicher, T. Kollegger, M. Mitrovski, T. Schuster, and R. Stock 2012 *Hadronization and Hadronic Freeze-Out in Relativistic Nuclear Collisions* Phys.Rev. **C85**, 044921
- M. Nahrgang, S. Leupold, C. Herold, and M. Bleicher 2011 *Nonequilibrium chiral fluid dynamics including dissipation and noise* Phys.Rev. **C84**, 024912
- E. Santini, J. Steinheimer, M. Bleicher, and S. Schramm 2011 *Dimuon radiation at the CERN SPS within a (3+1)d hydrodynamic+cascade model* Phys.Rev. **C84**, 014901.
- B. Bäuchle and M. Bleicher 2011 *Transport and hydrodynamic calculations of direct photons at FAIR* Phys.Lett. **B695**, 489-494.
- H. Petersen, V. Bhattacharya, S. A. Bass, and C. Greiner 2011 *Longitudinal correlation of the triangular flow event plane in a hybrid approach with hadron and parton cascade initial conditions* Phys.Rev. **C84**, 054908
- K. Werner, Iu. Karpenko, T. Pierog, M. Bleicher, and K. Mikhailov 2010 *Event-by-Event Simulation of the Three-Dimensional Hydrodynamic Evolution from Flux Tube Initial Conditions in Ultrarelativistic Heavy Ion Collisions* Phys.Rev. **C82**, 044904.
- H. Petersen, G.-Y. Qin, S. A. Bass, and B. Müller 2010 *Triangular flow in event-by-event ideal hydrodynamics in Au+Au collisions* Phys.Rev. **C82**, 041901
- H. Petersen and M. Bleicher 2010 *Eccentricity fluctuations in an integrated hybrid approach: Influence on elliptic flow* Phys.Rev. **C81**, 044906.

# Transporttheorie relativistischer Schwerionenreaktionen

**Wolfgang Cassing**  
Institut für Theoretische Physik  
Justus-Liebig-Universität  
Heinrich-Buff-Ring 16, 35392 Giessen

Die Arbeitsgruppe hat einen Schwerpunkt auf der Dynamik relativistischer Schwerionenreaktionen von SIS (1 A GeV) bis zu LHC Energien. Die Nichtgleichgewichtsdynamik dieser Reaktionen, die Teilchenproduktion und Propagation der diversen Reaktionsprodukte sowie deren Wechselwirkung mit dem umgebenden Medium wird im Rahmen von mikroskopischen Transportrechnungen untersucht in engem Kontakt mit experimentellen Arbeitsgruppen an den diversen Beschleunigern. Das explizite Transportmodell wird als Parton-Hadron-String Dynamics (PHSD) bezeichnet und beinhaltet die Beschreibung einer partonischen Phase im Einklang mit der Zustandsgleichung von Gitter-QCD Rechnungen sowie eine dynamische Hadronisierung der partonischen Freiheitsgrade und die hadronischen Endzustandswechselwirkungen.

In den letzten Jahren wurden systematische Studien – ausgehend von elementaren Proton-Proton Reaktionen – zur Mesonenproduktion sowie zur kollektiven Dynamik von Schwerionenreaktionen bei invarianten Energien von 2.5 GeV bis 2.76 TeV durchgeführt. Es zeigte sich, dass das Auftreten einer frühen partonischen Phase notwendig ist zur korrekten Beschreibung der differentiellen Teilchenspektren sowie zur Erklärung der starken Kollektivität der Reaktionen. Ebenfalls in den Dileptonenspektren oberhalb von 1 GeV invarianter Masse konnten bei SPS- und RHIC-Energien signifikante Beiträge einer partonischen Phase identifiziert werden. Die generelle Dynamik der Partonen (Quarks und Gluonen) ist in diesem Zusammenhang als stark wechselwirkendes Plasma charakterisiert worden mit einem Verhältnis von Scherviskosität zur Entropiedichte von 0.1 – 0.3 und einem Minimum in der Nähe der kritischen Temperatur  $T_c$ . Damit wechselwirken die Partonen bei den erreichten Energiedichten stärker als z.B. ein Gas aus Hadronen und können als nahezu ideale/perfekte Flüssigkeit charakterisiert werden.

## Publikationen

- O Linnyk, E L Bratkovskaya, W Cassing, and H Stöcker 2007 *Charmonium dynamics in nucleus-nucleus collisions at SPS and FAIR energies* Nucl Phys **A 786**, 183
- O Linnyk, E L Bratkovskaya, W Cassing, and H Stöcker 2007 *Charmonium dynamics in Au+Au collisions at  $\sqrt{s} = 200$  GeV* Phys Rev **C 76**, 041901(R)
- E L Bratkovskaya and W Cassing 2008 *Dilepton production and off-shell transport dynamics at SIS energies* Nucl Phys **A 807**, 214-250
- O Linnyk, E L Bratkovskaya, and W Cassing 2008 *Evidence for non-hadronic interactions of charm degrees of freedom in heavy-ion collisions at relativistic energies* Nucl Phys **A 807**, 79
- W Cassing and E L Bratkovskaya 2008 *Parton transport and hadronization from the dynamical quasiparticle point of view* Phys Rev **C 78**, 034919
- O Linnyk, E L Bratkovskaya, W Cassing 2008 *Open and hidden charm in proton-nucleus and heavy-*

- ion collisions* Int Jour Mod Phys **E 17**, 1367-1439
- E L Bratkovskaya, W Cassing, O Linnyk 2009 *Low mass dilepton production at ultrarelativistic energies* Phys Lett **B 670**, 428
  - W Cassing 2009 *From Kadanoff-Baym dynamics to off-shell parton transport* Eur Phys J ST **168**, 3
  - W Cassing and E L Bratkovskaya 2009 *Parton-Hadron-String Dynamics: an off-shell transport approach for relativistic energies* Nucl Phys **A 831**, 215-242
  - S Mattiello and W Cassing 2009 *QCD equation of state in a virial expansion* J Phys **G 36**, 125003
  - S Mattiello and W Cassing 2010 *Shear viscosity of the Quark-Gluon-Plasma from a virial expansion* Eur Phys J **C 70**, 243
  - V P Konchakovski, E L Bratkovskaya, W Cassing, and M I Gorenstein 2011 *Jet propagation through a hadron-string medium* Phys Rev **C 82**, 037902
  - J Manninen, E L Bratkovskaya, W Cassing, and O Linnyk 2011 *Dilepton production in p+p, Cu+Cu and Au+Au collisions at 200 AGeV* Eur Phys J **C 71**, 1615
  - E L Bratkovskaya, W Cassing, V P Konchakovski, and O Linnyk 2011 *Parton-Hadron-String Dynamics at Relativistic Collider Energies* Nucl Phys **A 856**, 162
  - V Voronyuk, V D Toneev, W Cassing, E L Bratkovskaya, V P Konchakovski, and S A Voloshin 2011 *(Electro-)Magnetic field evolution in relativistic heavy-ion collisions* Phys Rev **C 83**, 054911
  - O Linnyk, E L Bratkovskaya, V Ozvenchuk, W Cassing, and C M Ko 2011 *Dilepton production in nucleus-nucleus collisions at top CERN Super Proton Synchrotron energy within the parton-hadron-string dynamics transport approach* Phys Rev **C 84**, 054917
  - V P Konchakovski, E L Bratkovskaya, W Cassing, V D Toneev, and V Voronyuk 2012 *Rise of azimuthal anisotropies as a signature of the Quark-Gluon-Plasma in relativistic heavy-ion collisions* Phys.Rev.**C 85**, 011902(R)
  - O Linnyk, W Cassing, J Manninen, E L Bratkovskaya, and C M Ko 2012 *Analysis of dilepton production in Au+Au collisions at  $\sqrt{s_{NN}}=200$  GeV within the Parton-Hadron-String Dynamics transport approach* Phys Rev **C 85**, 024910
  - V D Toneev, V Voronyuk, E L Bratkovskaya, W Cassing, V P Konchakovski, and S A Voloshin 2012 *Theoretical analysis of a possible observation of the chiral magnetic effect in Au + Au collisions within the RHIC beam energy scan program* Phys Rev **C 85**, 034910
  - V P Konchakovski, E L Bratkovskaya, W Cassing, V D Toneev, S A Voloshin, and V Voronyuk 2012 *Azimuthal anisotropies for Au + Au collisions in the parton-hadron transient energy range* Phys Rev **C 85**, 044922

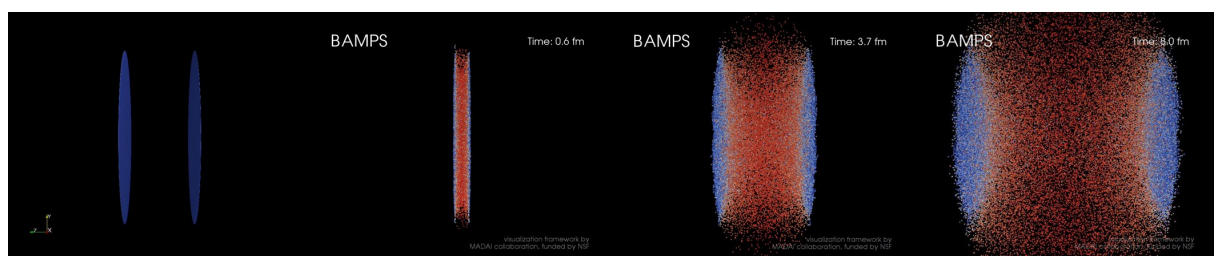
# Dynamische Beschreibung heißer und dichter Kernmaterie in hochenergetischen Schwerionenstößen

**Carsten Greiner**  
Institut für Theoretische Physik  
Johann Wolfgang Goethe-Universität  
Max-von-Laue-Straße 1, 60438 Frankfurt am Main

In dem sehr aktiven Forschungsgebiet der Schwerionenphysik wird das, in hochenergetischen Kern-Kernkollisionen entstehende, extrem heiße und dichte Medium stark wechselwirkender Materie untersucht. Im Rahmen des Standardmodells der Elementarteilchen wird die starke Wechselwirkung durch die Quantenchromodynamik (QCD) mit den Quarks und Gluonen als den elementaren Konstituenten der Hadronen (z.B. Protonen und Neutronen, die ihrerseits die Bausteine der Atomkerne bilden) beschrieben. Unter gewöhnlichen Umständen sind die Quarks und Gluonen stets in den Hadronen gebunden und können nicht als freie Teilchen beobachtet werden (Confinement). Unter extremen Bedingungen sehr hoher Temperaturen und/oder Dichten erwartet man allerdings einen Deconfinement- Phasenübergang der Materie in einen Zustand, in dem sich die Quarks und Gluonen quasi frei bewegen können, dem sogenannten Quark-Gluon-Plasma (QGP).

Hierzu wurde durch unsere Arbeitsgruppe die Parton-Kaskadensimulation BAMPS (Boltzmann Approach to Multi-Parton Scatterings) entwickelt, die zum ersten Mal inelastische perturbative-QCD (pQCD) Vielteilchen-Streukanäle der Gluonen berücksichtigt. Dieser Ansatz erlaubt eine konsistente Beschreibung der Dynamik von Schwerionenstößen, insbesondere der Anfangsphase der Kollision, mit direkter Relevanz für das Verständnis aktueller Experimente.

Unser Modell hat sich schnell als sehr erfolgreich erwiesen. So konnten wir unter anderem nachweisen, dass es in unserer dynamischen Beschreibung zu einer schnellen Thermalisierung kommt und die experimentellen Daten zum elliptischen Fluss in nichtzentralen Stößen am RHIC gut beschrieben werden. Weitere erfolgreiche Arbeiten betrafen z.B. die Modifizierung hochenergetischer Partonen im Medium, die Validierung dissipativer hydrodynamischer Beschreibungen des QGP, das Verhalten schwerer Quarks in Schwerionenstößen und die Ausbildung von Schockwellen, Mach-Cones und Zweiteilchenkorrelationen.



**Figur 1:** Darstellung diverser Zeitschritte einer mit BAMPS simulierten Schwerionenkollision.  
(Visualization framework courtesy MADAI collaboration funded by the NSF)

## Publikationen

- I. Bouras, A. El, O. Fochler, H. Niemi, Z. Xu and C. Greiner, 2012 *Transition From Ideal To Viscous Mach Cones In A Kinetic Transport Approach*, Phys. Lett. **B 710** 641-646
- W.-T. Deng, Z. Xu, and C. Greiner, 2012 *Elliptic and Triangular Flow and their Correlation in Ultrarelativistic High Multiplicity Proton Proton Collisions at 14 TeV*, Phys. Lett. **B 711** 301-306
- D. Hupp, M. Mendoza, I. Bouras, S. Succi and H. J. Herrmann, 2011 *On the relativistic Lattice Boltzmann method for quark-gluon plasma simulations*, Phys. Rev. **D 84** 125015
- O. Fochler, J. Uphoff, Z. Xu, C. Greiner, 2011 *Jet quenching and elliptic flow at RHIC and LHC within a pQCD-based partonic transport model*, J. Phys. **G38** 124152
- C. Wesp, A. El, F. Reining, Z. Xu, I. Bouras, C. Greiner, 2011 *Calculation of shear viscosity using Green-Kubo relations within a parton cascade*, Phys. Rev. **C 84** 054911
- F. Reining, I. Bouras, A. El, C. Wesp, Z. Xu, C. Greiner, 2012 *Extraction of shear viscosity in stationary states of relativistic particle systems*, Phys. Rev. **E 85** 026302
- J. Uphoff, O. Fochler, Z. Xu, C. Greiner, 2011 *Elliptic flow and energy loss of heavy quarks in ultra-relativistic heavy ion collisions*, Phys. Rev. **C 84** 024908
- J. Uphoff, O. Fochler, Z. Xu, and C. Greiner, 2011 *Heavy quarks at RHIC and LHC within a partonic transport model*, Nucl. Phys. **A 855** (2011) 444
- A. El, A. Muronga, Z. Xu, C. Greiner, 2010 *A Relativistic dissipative hydrodynamic description for systems including particle number changing processes*, Nucl. Phys. **A 848** 428-442
- I. Bouras, E. Molnar, H. Niemi, Z. Xu, A. El, O. Fochler, C. Greiner, D.H. Rischke, 2010 *Investigation of shock waves in the relativistic Riemann problem: A Comparison of viscous fluid dynamics to kinetic theory*, Phys. Rev. **C 82** 024910
- O. Fochler, Z. Xu, C. Greiner, 2010 *Energy loss in a partonic transport model including bremsstrahlung processes*, Phys. Rev. **C 82** 024907
- J. Uphoff, O. Fochler, Z. Xu, C. Greiner, 2010 *Heavy quark production at RHIC and LHC within a partonic transport model*, Phys. Rev. **C 82** 044906
- X.-F. Chen, C. Greiner, E. Wang, X.-N. Wang, Z. Xu, 2010 *Bulk matter evolution and extraction of jet transport parameter in heavy-ion collisions at RHIC*, Phys. Rev. **C 81** 064908
- Z. Xu, C. Greiner, 2010 *Dependence of elliptic flow on number of parton degrees of freedom*, Phys. Rev. **C 81** 054901
- A. El, Z. Xu, C. Greiner, 2010 *Third-order relativistic dissipative hydrodynamics*, Phys. Rev. **C 81** 041901



# QCD-Thermodynamik mit Gittersimulationen

Owe Philipsen

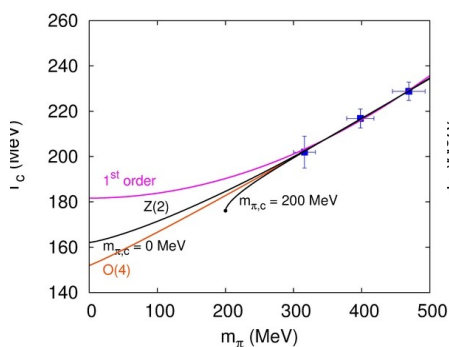
Institut für Theoretische Physik

Johann Wolfgang Goethe-Universität

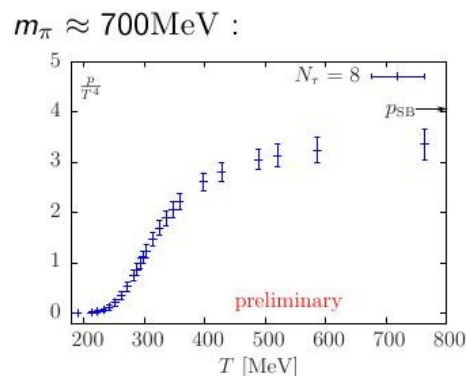
Max-von-Laue-Straße 1, 60438 Frankfurt am Main

Die Arbeitsgruppe befasst sich vor allem mit dem Studium der thermodynamischen Eigenschaften der Quantenchromodynamik, d.h. der Theorie der starken Wechselwirkung, die für die Kernkräfte verantwortlich ist. Ziel sind Vorhersagen für die Eigenschaften von Materie unter extremen Bedingungen wie hohe Temperaturen und Dichten aus ersten Prinzipien, ohne dabei unkontrollierte Näherungen machen zu müssen. Die einzige Methode, die dies derzeit prinzipiell erlaubt, ist die numerische Simulation der auf einem Raumzeitgitter diskretisierten Theorie, der Gitter-QCD. Bisher wurden solche Rechnungen zumeist in der sogenannten staggered Diskretisierung durchgeführt, die am wenigsten rechenzeitintensiv ist, jedoch systematische Unsicherheiten für leichte Quarks aufweist. Daher werden derzeit Anstrengungen unternommen, thermodynamische Rechnungen vermehrt auch mit Wilsonfermionen durchzuführen.

Die Arbeitsgruppe ist an mehreren internationalen Kollaborationen beteiligt. Ein langfristiges Projekt ist die Untersuchung der QCD-Thermodynamik mit Wilsonfermionen in der Twisted-Mass-Formulierung, die für eine Reduktion von Gitterartefakten sorgt. Insbesondere soll die Natur des chiralen Phasenübergangs in der Theorie mit zwei Quarkflavours untersucht werden, da diese sich bestimmend auf die chiralen Eigenschaften des physikalischen Quark-Hadronübergangs, insbesondere auch bei endlicher Baryondichte, auswirkt. Hierzu wurden als Vorarbeiten in [6] das Phasendiagramm im entsprechenden Gitterparameterraum bestimmt und in [2] die kritische Temperatur des Übergangs für verschiedene Pionmassen berechnet, siehe Abb.1. Die vorliegenden Daten erlauben noch keine Unterscheidung verschiedener Skalenverhalten unter Extrapolationen zum masselosen Fall, so dass in Zukunft leichtere Pionmassen simuliert werden müssen.



Figur 1: Kritische Temperatur als Funktion der Pionmasse



Figur 2: Druck als Funktion der Temperatur

Eine parallele Forschungslinie, die wir schon über Jahre verfolgen, ist die Bestimmung des QCD-Phasendiagramms als Funktion der Quarkmassen und chemischem Potential für Baryondichte. Dichte Materie lässt sich aufgrund des sogenannten Vorzeichenproblems nicht direkt mit Monte-Carlo-Methoden simulieren.

Hier ist es gelungen, mithilfe von Taylorentwicklungen für kleine Dichten und Simulationen bei imaginärem chemischem Potential zu etablieren, dass sich die Deconfinement und chiralen Phasenübergänge der QCD bei schweren und leichten Quarkmassen für kleine chemische Potentiale zunächst abschwächen. Insbesondere bei imaginärem chemischem Potential wurde in [5] eine reichhaltige Phasenstruktur entdeckt, aufgrund dessen sich das Verhalten bei reellen chemischen Potentialen verstehen lässt. Diese Simulationen wurden mit drei Flavours und staggered Fermionen durchgeführt. Schließlich wurde in [1] eine effektive dreidimensionale Gittertheorie entwickelt, mit der sich auch reelle chemische Potentiale direkt simulieren lassen. Ihr Gültigkeitsbereich ist jedoch bislang auf unphysikalisch schwere Quarks beschränkt.

## Publikationen

- M.Fromm, J.Langelage, S.Lottini and O.Philipsen, 2012 *The QCD deconfinement transition for heavy quarks and all baryon chemical potentials*, JHEP **1201** (2012) 042
- F.Burger, E.-M.Ilgenfritz, M.Kirchner, M.P.Lombardo, M.Muller-Preussker, O.Philipsen, C.Urbach and L.Zeidlewicz, 2012 *The thermal QCD transition with two flavours of twisted mass fermions*, submitted to Phys. Rev. D
- C.Bonati, P.de Forcrand, M.D'Elia, O.Philipsen and F.Sanfilippo, 2011 *Constraints on the two-flavor QCD phase diagram from imaginary chemical potential*, PoS LATTICE 2011, 189
- O.Philipsen, C.Pinke, C.Schafer, L.Zeidlewicz and M.Bach, 2011 *LatticeQCD using OpenCL*, PoS LATTICE 2011, 044
- P.de Forcrand and O.Philipsen, 2010 *Constraining the QCD phase diagram by tricritical lines at imaginary chemical potential*, Phys. Rev. Lett. **105** 152001
- E.-M.Ilgenfritz, K.Jansen, M.P.Lombardo, M.Muller-Preussker, M.Petschlies, O.Philipsen, and L.Zeidlewicz, 2009 *Phase structure of thermal lattice QCD with  $N(f) = 2$  twisted mass Wilson fermions*, Phys. Rev. **D80** 094502
- P. de Forcrand and O.Philipsen, 2008 *The chiral critical point of  $N(f) = 3$  QCD at finite density to the order  $(\mu/T)^{**4}$* , JHEP **0811** 012

# Hydrodynamische Untersuchungen von Schwerionenkollisionen bei relativistischen Energien

**Dirk Rischke**  
Institut für Theoretische Physik  
Johann Wolfgang Goethe-Universität  
Max-von-Laue-Straße 1, 60438 Frankfurt am Main

During the last few years relativistic viscous fluid-dynamical models have been extensively used to model heavy-ion collisions at the RHIC and LHC colliders. Even if the equations of motion of fluid dynamics are relatively simple, their analytic solutions are known in only few special cases, and the fluid dynamical models of heavy-ion collisions require heavy numerical computing. These models have provided an intriguing possibility of extracting the properties of the deconfined matter, so called quark-gluon plasma (QGP), formed in these collisions. By calculating the azimuthal anisotropy of the particles emitted in the collision, and comparing it to the measured anisotropy, it is possible in principle to find out how large the ratio of the shear viscosity to entropy density of QGP is. At the time of this writing we are still unable to give a precise value for this ratio, but a careful analysis of all the available data will constrain our estimates further.

However, the present fluid dynamical models are at the limit of their applicability in describing the collisions at RHIC, and the full analysis of the data requires modeling the collisions at lower energies as well. Furthermore the present models take into account only shear viscosity but ignore both bulk viscosity and heat conductivity. We have recently developed a novel way to derive dissipative fluid dynamics from kinetic theory [3]. Preliminary studies show that the region of applicability of these new equations is larger than that of the original Israel-Stewart theory. Another advantage of our approach is that it provides a consistent description of heat flux and bulk viscosity. Thus, we believe that a viscous fluid-dynamical model based on these newly derived equations is better suitable to describe heavy-ion collisions than the models presently available.

Our aim is thus to rewrite our present fluid dynamical model to solve these newly derived equations. Furthermore our present model assumes so called boost invariance, which allows us to solve the evolution numerically in two dimensions only. We plan to relax this assumption and solve the evolution numerically in all three spatial dimensions, which increases the required computing power by an order of magnitude.

## Publikationen

- P. Huovinen and H. Petersen 2012 *Particlization in hybrid models* arXiv:1206.3371 [nucl-th].
- H. Niemi, G. S. Denicol, P. Huovinen, E. Molnar and D. H. Rischke 2012 *Influence of a temperature-dependent shear viscosity on the azimuthal asymmetries of transverse momentum spectra in ultrarelativistic heavy-ion collisions* arXiv:1203.2452 [nucl-th]

- G. S. Denicol, H. Niemi, E. Molnar and D. H. Rischke 2012 *Derivation of transient relativistic fluid dynamics from the Boltzmann equation* arXiv:1202.4551 [nucl-th]
- H. Niemi, G. S. Denicol, P. Huovinen, E. Molnar and D. H. Rischke 2011 *Influence of the shear viscosity of the quark-gluon plasma on elliptic flow in ultrarelativistic heavy-ion collisions* Phys. Rev. Lett. **106**, 212302
- H. Holopainen, H. Niemi and K. J. Eskola 2011 *Event-by-event hydrodynamics and elliptic flow from fluctuating initial state* Phys. Rev. C **83**, 034901
- I. Bouras, E. Molnar, H. Niemi, Z. Xu, A. El, O. Fochler, C. Greiner and D. H. Rischke 2010 *Investigation of shock waves in the relativistic Riemann problem: A Comparison of viscous fluid dynamics to kinetic theory* Phys. Rev. C **82**, 024910
- P. Huovinen and P. Petreczky 2010 *QCD Equation of State and Hadron Resonance Gas* Nucl. Phys. **A 837**, 26

# Ab Initio Kernstruktur- und Reaktionstheorie mit QCD-basierten Hamiltonians

**Robert Roth**  
Institut für Kernphysik  
Technische Universität Darmstadt  
Schlossgarten 2, 64289 Darmstadt

Die Forschungsaktivitäten der Arbeitsgruppe R. Roth an der TU Darmstadt sind fokussiert auf die Entwicklung und Anwendung QCD-basierter ab initio Methoden zur theoretischen Beschreibung von Kernstruktur und Kernreaktionen bei niedrigen Energien. Das Ziel ist es, die Brücke von der QCD als Theorie der starken Wechselwirkung zur Niederenergie-Kernphysik in einem systematischen, konsistenten und kontrollierten Rahmen zu schlagen, um quantitative Vorhersagen zur verschiedensten Struktur- und Reaktionsobservablen zu ermöglichen.

Universeller Ausgangspunkt für diese ab initio Rechnungen sind nukleare Hamiltonians aus der chiralen effektiven Feldtheorie (EFT), die auf den relevanten Freiheitsgraden und Symmetrien der QCD bei niedrigen Energien aufbaut und die Verbindung zur QCD in systematischer und kontrollierter Weise herstellt. Diese Hamiltonians enthalten sowohl Zwei-Nukleon- (NN) als auch Drei-Nukleon-Wechselwirkungen (3N) und ggf. sogar höhere Teilchenzahlordnungen. Bereits die vollständige und exakte Einbeziehung der chiralen 3N-Wechselwirkung in Kernstruktur- und Reaktionsrechnungen ist eine große Herausforderung - nur wenige Gruppen weltweit sind derzeit in der Lage chirale 3N-Wechselwirkungen exakt zu berücksichtigen und unsere Gruppe hat in jüngster Zeit hierbei eine Führungsrolle übernommen.

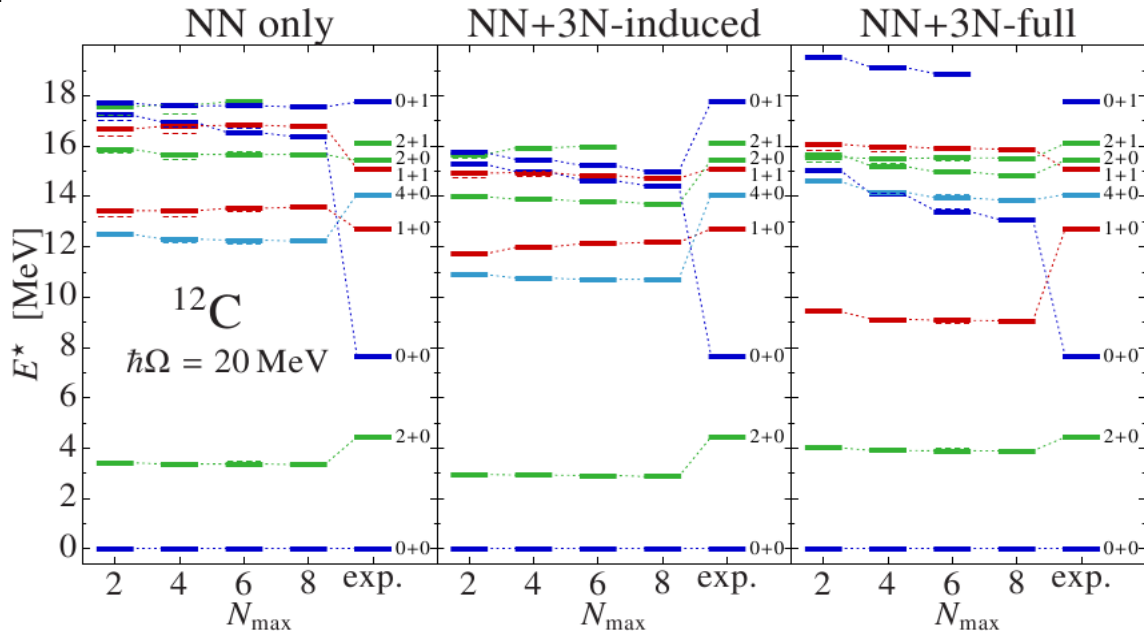
Unsere aktuellen Forschungsarbeiten lassen sich in vier thematische und methodische Schwerpunkte gliedern:

(i) Unitäre Transformationsmethoden zu Konstruktion renormierter nukleare Wechselwirkungen ausgehend von chiralen NN+3N-Wechselwirkungen. (ii) Exakte Vielteilchenrechnungen zur ab initio Beschreibung von der Kernstruktur und Spektroskopie für Kerne der p- und sd-Schale. (iii) Approximative Vielteilchenmethoden für die Vorhersage spezifischer Kerne und Observablen über die gesamte Nuklidkarte hinweg. (iv) Ab initio Beschreibung niederenergetischer Nukleon-Kern-Streuungen und Reaktionen von astrophysikalischer Relevanz.

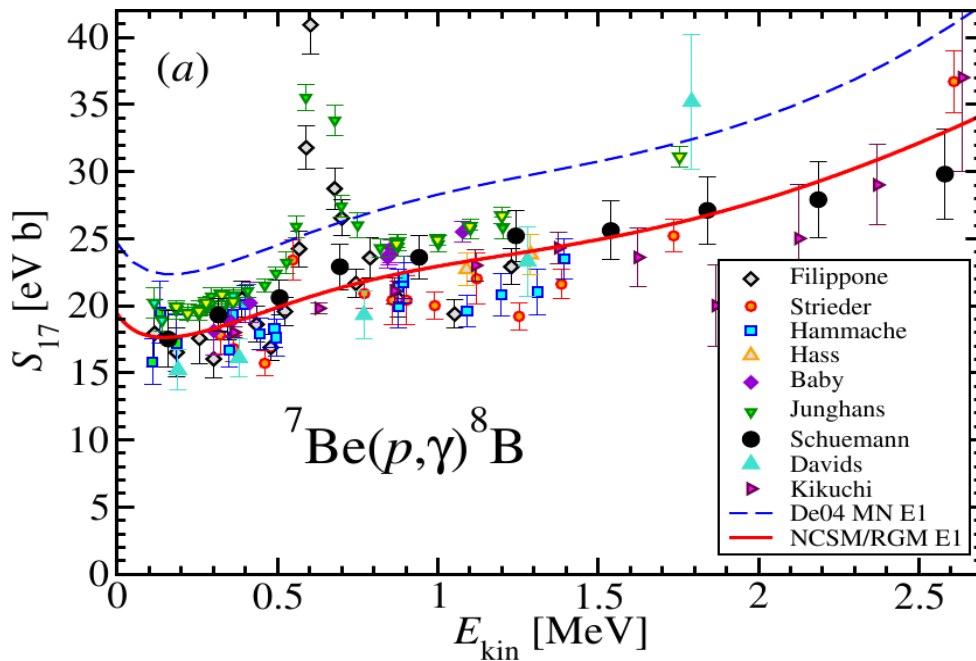
Auf allen Feldern hat die Arbeitsgruppe in den vergangenen Jahren entscheidende Fortschritte erzielt, einerseits in der Methodenentwicklung und andererseits in der Anwendung. Dazu gehören im Schwerpunkt (i) die Weiterentwicklung der Similarity Renormalization Group (SRG) als universelle Methode zur Konstruktion unitär transformierter NN+3N-Wechselwirkungen. Zu den Erfolgen im Schwerpunkt (ii) zählen die Entwicklung des Importance Truncated No-Core Shell Model (IT-NCSM) und dessen Anwendung auf die Beschreibung von Grundzustandseigenschaften und der Spektroskopie von Kernen jenseits des Anwendungsbereichs konventioneller ab initio Methoden. Ein Highlight im Themenschwerpunkt (iii) ist die Entwicklung und Anwendung eines sphärischen Coupled-Cluster-Codes, der eine quasi-ab-initio Berechnung von Grundzustandseigenschaften von Kernen mit abgeschlossenen Schalen unter Einbeziehung normalgeordneter 3N-Wechselwirkungen ermöglicht. In Themenbereich (iv) haben wir das IT-NCSM mit der Resonating Group Method (RGM) zu einer neuen ab

initio Methode zur Beschreibung von Nukleon-Kern-Reaktionen bei astrophysikalisch relevanten Energien verbunden.

In allen vier Themenbereichen sind umfangreiche numerische Rechnungen notwendig, die auf LOEWE-CSC durchgeführt wurden bzw. erst durch LOEWE-CSC möglich geworden sind.



**Figur 1:** Anregungsspektrum von  $^{12}\text{C}$  aus einer ab initio Rechnung im IT-NCSM mit SRG-transformierten chiralen NN+3N Wechselwirkungen. Verwendet wurden drei verschiedene Hamiltonians: "NN only" enthält nur die transformierte NN Wechselwirkung, "NN+3N-induced" beinhaltet zusätzlich die SRG-induzierten 3N Terme, "NN+3N-full" enthält außerdem die chirale 3N-Wechselwirkung. [aus Phys. Rev. Lett. 107 (2011) 072501]



**Figur 2:** Astrophysikalischer S-Faktor für die Reaktion  $^7\text{Be}(p,\gamma)^8\text{B}$ , die für die pp-Kette der Sonne und die Produktion solarer Neutrinos relevant ist, berechnet im ab initio IT-NCSM/RGM (rot) im Vergleich zu einem Clustermodell (blau) und experimentellen Daten. [aus Phys. Lett. B 704 (2011) 379]

## Publikationen

- R. Roth, S. Binder, K. Vobig, J. Langhammer, A. Calci, P. Navrátil 2012 *Medium-Mass Nuclei with Normal-Ordered Chiral NN+3N Interactions* Phys. Rev. Lett. in print; arXiv:1112.0287
- P. Papakonstantinou, H. Hergert, V. Yu. Ponomarev, R. Roth 2012 *Low-energy dipole strength and the critical case of 48-Ca* Phys. Lett. **B 709** 270
- P. Navrátil, R. Roth, S. Quaglioni 2011 *Ab initio many-body calculation of the 7-Be ( $p,\gamma$ ) 8-B radiative capture* Phys. Lett. **B 704** 379
- R. Roth, J. Langhammer, A. Calci, S. Binder, P. Navrátil 2011 *Similarity-Transformed Chiral NN+3N Interactions for the Ab Initio Description of 12-C and 16-O* Phys. Rev. Lett. **107** 072501
- H. Hergert, P. Papakonstantinou, R. Roth 2011 *Quasiparticle Random Phase Approximation with interactions from the Similarity Renormalization Group* Phys. Rev. **C 83** 064317
- P. Navrátil, R. Roth, S. Quaglioni 2010 *Ab initio many-body calculations of nucleon scattering on 4-He, 7-Li, 7-Be, 12-C and 16-O* Phys. Rev. **C 82** 034609
- R. Roth, T. Neff, H. Feldmeier 2010 *Nuclear structure in the framework of the Unitary Correlation Operator Method* Prog. Part. Nucl. Phys. **65** 50
- R. Roth, J. Langhammer 2010 *Padé-resummed high-order perturbation theory for nuclear structure calculations* Phys. Lett. **B 683** 272
- H. Hergert, R. Roth 2009 *Treatment of the intrinsic Hamiltonian in particle-number nonconserving theories* Phys. Lett. **B 682** 27
- R. Roth, J.R. Gour, P. Piecuch 2009 *Center-of-mass problem in truncated configuration interaction and coupled-cluster calculations* Phys. Lett. **B 679** 334
- H. Hergert, R. Roth 2009 *Pairing in the framework of the Unitary Correlation Operator Method: Hartree-Fock-Bogoliubov calculations* Phys. Rev. **C 80** 024312
- R. Roth 2009 *Importance truncation for large-scale configuration interaction approaches* Phys. Rev. **C 79** 064324
- R. Roth, J.R. Gour, P. Piecuch 2009 *Ab initio coupled-cluster and configuration interaction calculations for 16O* Phys. Rev. **C 79** 054325
- P. Papakonstantinou, R. Roth 2009 *Second RPA and correlated realistic interactions* Phys. Lett. **B 671** (2009) 356
- R. Roth, S. Reinhardt, H. Hergert 2008 *Unitary Correlation Operator Method and Similarity Renormalization Group: connections and differences* Phys. Rev. **C 77** 064033
- R. Roth, P. Navrátil 2007 *Ab initio study of 40Ca with an Importance Truncated No-Core Shell Model* Phys. Rev. Lett. **99** 092501
- H. Hergert, R. Roth 2007 *Unitary Correlation Operator Method from a Similarity Renormalization Group perspective* Phys. Rev. **C 75** 051001 (Rapid Communication)

# Exotische hadronische und Quarkmaterie

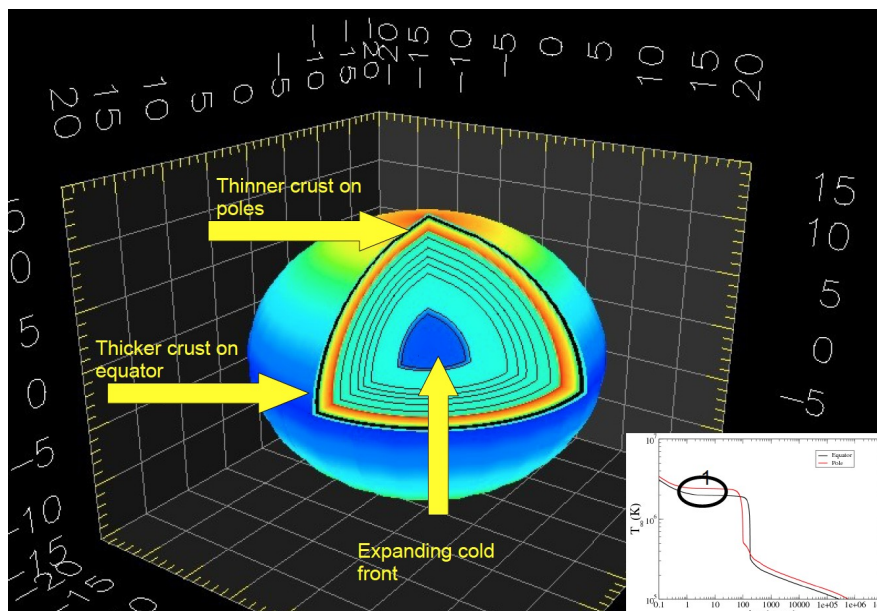
**Stefan Schramm**

Frankfurt Institute for Advanced Studies  
Johann Wolfgang Goethe-Universität  
Ruth-Moufang-Straße 1, 60438 Frankfurt am Main

Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit Eigenschaften der starken Wechselwirkung unter extremen Bedingungen von Dichte, Temperatur und Isospin. Systeme dieser Art werden in ultrarelativistischen Schwerionenstößen sowie in Neutronensternen und Neutronensternkollisionen erzeugt.

In diesem Zusammenhang werden Modelle entwickelt, die den ganzen Bereich möglicher Parameter, einschließlich extrem hoher Temperatur und Dichte beschreiben können. Das erfordert vereinheitlichte Modellbeschreibungen, die als Freiheitsgrade Hadronen als auch Quarks und Gluonen beinhalten. Damit lassen sich sowohl der Grundzustand der Kernmaterie und Atomkerne berechnen, als auch Systeme, die in hochrelativistischen Schwerionenstößen und etwa bei der Kollision von schwarzen Löchern auftreten.

Um extrem dichte Systeme zu verstehen, ist ein Studium der Eigenschaften von Neutronensternen essentiell. Eine wesentliche Information aus astronomischen Beobachtungen ist die Temperatur des Sterns und ihre Zeitentwicklung, die über die Lösung der Differentialgleichungen des Wärmetransports theoretisch bestimmt werden kann, wozu wir die entsprechenden Simulationsprogramme entwickelt haben. In der Figur ist eine numerisch aufwendige zweidimensionale Rechnung der Abkühlung von schnell rotierenden Neutronensternen nach der Supernovaexplosion gezeigt.



**Figur 1:** Momentaufnahme der farbcodierten Temperaturverteilung eines rotierenden Neutronensterns. Im Zentrum erkennt man die kalte Zone des Sterns, die durch Neutrinoemission entsteht. Die Kaltfront erreicht die Oberfläche typischerweise nach etwa hundert Jahren nach der Supernovaexplosion.



## Publikationen

- R. Negreiros, S. Schramm, and F. Weber 2012 *Thermal Evolution of Neutron Stars in Two Dimensions*, Phys. Rev. **D 85**, 104019
- V. Dexheimer, S. Schramm, and D. Zschiesche 2008 *Nuclear Matter and Neutrons Stars in a Parity Doublet Model*, Phys. Rev. **C 77**, 025803.
- J. Steinheimer, M. Bleicher, H. Petersen, S. Schramm, H. Stöcker, and D. Zschiesche 2008 *(3+1)-Dimensional Hydrodynamic Expansion with a Critical Point from Realistic Initial Conditions*, Phys. Rev. **C 77**, 034901.
- V. Dexheimer, S. Schramm, and H. Stöcker 2008 *Neutron Stars in a Chiral Model with Finite Temperature*, J. Phys. **G 35** 014060.
- R. P. Negreiros, V.A. Dexheimer, and S. Schramm 2010 *Modeling Hybrid Stars with an SU(3) non-linear sigma model*, Phys. Rev. **C 82**, 035803.
- V.A. Dexheimer and S. Schramm 2010 *A Novel Approach to Model Hybrid Stars*, Phys.Rev. **C81:045201**.

# Massenberechnung von strange und charm Mesonen mit Gitter-QCD

**Marc Wagner**

Institut für Theoretische Physik  
Johann Wolfgang Goethe-Universität  
Max-von-Laue-Straße 1, 60438 Frankfurt am Main

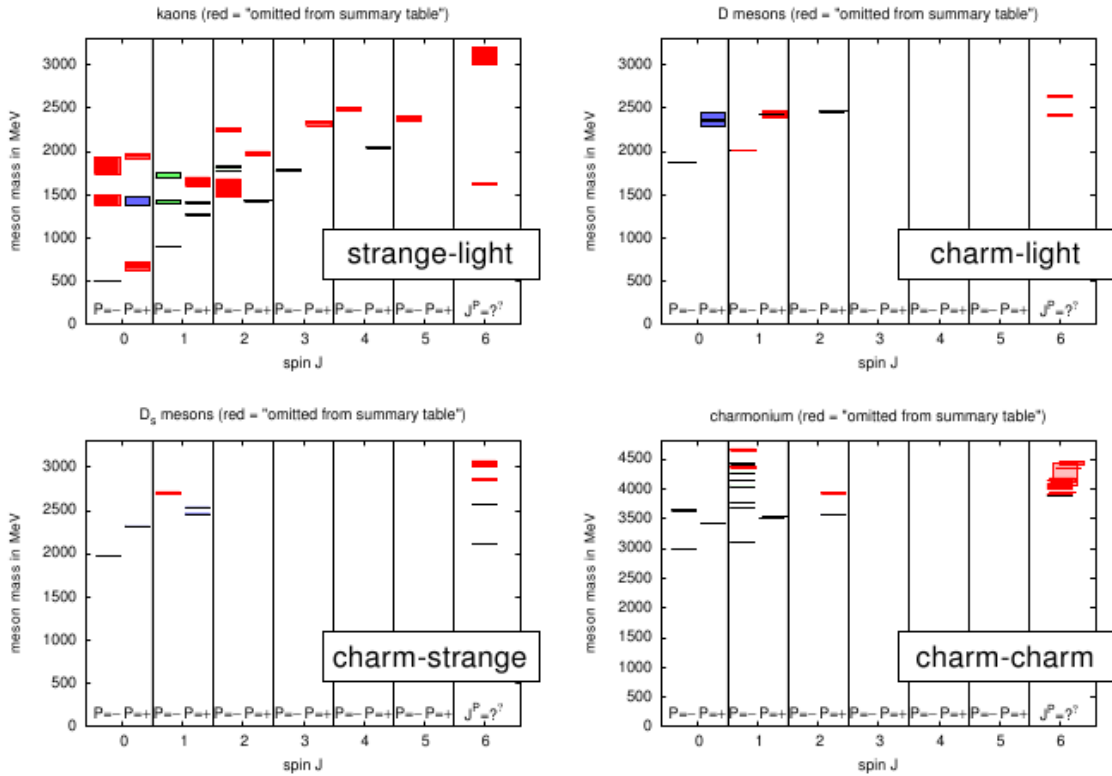
Die Quantenchromodynamik (QCD) beschreibt die zwischen Quarks und Gluonen wirkenden fundamentalen Kräfte und damit den Aufbau der mit Teilchenbeschleunigern, zum Beispiel dem LHC, beobachteten Hadronen, deren bekannteste Vertreter Protonen und Neutronen sind. Die Gleichungen der QCD sind jedoch sehr komplex und häufig nur numerisch mit Hilfe von Gitter-QCD und unter Einsatz modernster Hochleistungscomputer zu lösen.

In diesem Projekt soll mit Hilfe von Gitter-QCD das strange und charm Mesonspektrum möglichst vollständig berechnet werden, ebenso wie einige der zugeordneten Zerfallskonstanten. Angestrebt wird eine Berechnung aller Mesonen, die mindestens ein strange oder ein charm Quark enthalten, also Kaonen, **D**- und **D<sub>s</sub>**-Mesonen, Charmonium und Strangeonium. Es sollen negative und positive Paritäten sowie neben dem Grundzustand auch radiale und orbitale Anregungen studiert werden. Besonderes Augenmerk soll hierbei auf eine Untersuchung aller möglichen systematischen Effekte gelegt werden, zum Beispiel Diskretisierungseffekte, Finite-Volume-Effekte und der Einfluss unphysikalisch schwerer up/down Quarkmassen. Diese Effekte sollen durch geeignete Extrapolationen aus den erhaltenen Ergebnissen entfernt werden. Desweiteren ist geplant, mögliche Verfälschungen durch Vielteilchenzustände zu berücksichtigen beziehungsweise auszuschließen.

Das abschließende Ziel ist, ein umfassendes realistisches Bild des QCD strange und charm Mesonspektrums zu erhalten, das aufgrund des physikalisch realistischen Simulationssetups mit 2+1+1 dynamischen Quarkflavors direkt mit den reichhaltig vorliegenden bzw. zu erwartenden experimentellen Ergebnissen vergleichbar sein sollte; außerdem wird erwartet eine Reihe bis jetzt noch nicht gemessener Mesonzustände vorhersagen zu können.

Die gegenwärtige experimentelle Situation wird in Abbildung 1 zusammengefasst. Auf der vertikalen Achse ist die Mesonmasse, auf der horizontalen Achse Mesonquantenzahlen (Drehimpuls und Parität) aufgetragen. Die ausgedehnten Rechtecke spiegeln den experimentellen Messfehler wieder. Rote Rechtecke markieren dabei Zustände, die im Particle Data Booklet das Prädikat „omitted from summary table“ tragen, was bedeutet, dass der experimentelle Status eher vage ist und die Existenz des Zustands bestätigt werden muss. Hier kann Gitter-QCD von theoretischer Seite zur Klarheit beitragen.

Umgekehrt zu experimentell bereits bekannten Mesonzuständen, die mit Hilfe von Gitterrechnungen besser verstanden werden können, ist in näherer Zukunft auch eine größere Menge neuer experimenteller Ergebnisse zu erwarten, die mit Hilfe der Gitter-QCD bereits im Vorfeld vorhergesagt werden und damit wertvollen Input für diese Experimente liefern können.



**Figur 1:** Aktuell existierende experimentelle Ergebnisse zum Mesonspektrum mit charm- und strange Quarks; rote gefärbte Zustände „omitted from summary table“.

## Publikationen

- R. Baron et al. [ETM Collaboration], 2011 *Computing K and D meson masses with  $N_f = 2+1+1$  twisted mass lattice QCD*, Comput. Phys. Commun. **182**, 299-316 [arXiv:1005.2042 [hep-lat]].
- C. Michel, A. Schindler and M. Wagner [ETM Collaboration], 2010 *The continuum limit of the static-light meson spectrum*, JHEP **1008**, 009. [arXiv:1004.4235 [hep-lat]].
- R. Baron et al. [ETM Collaboration], 2010 *Light hadrons from lattice QCD with light (u,d) and charm dynamical quarks*, JHEP **1006**, 111 [arXiv:1004.5284 [hep-lat]].
- K. Jansen, C. Michael, A. Shindler and M. Wagner [ETM Collaboration], 2008 *Static-light meson masses from twisted mass lattice QCD*, PoS LATTICE2008, 122 [arXiv:0808.2121 [hep-lat]].

# Implizite Dichtefunktionale

**Eberhard Engel**

**Institut für Theoretische Physik**

**Johann Wolfgang Goethe-Universität**

**Max-von-Laue-Straße 1, 60438 Frankfurt am Main**

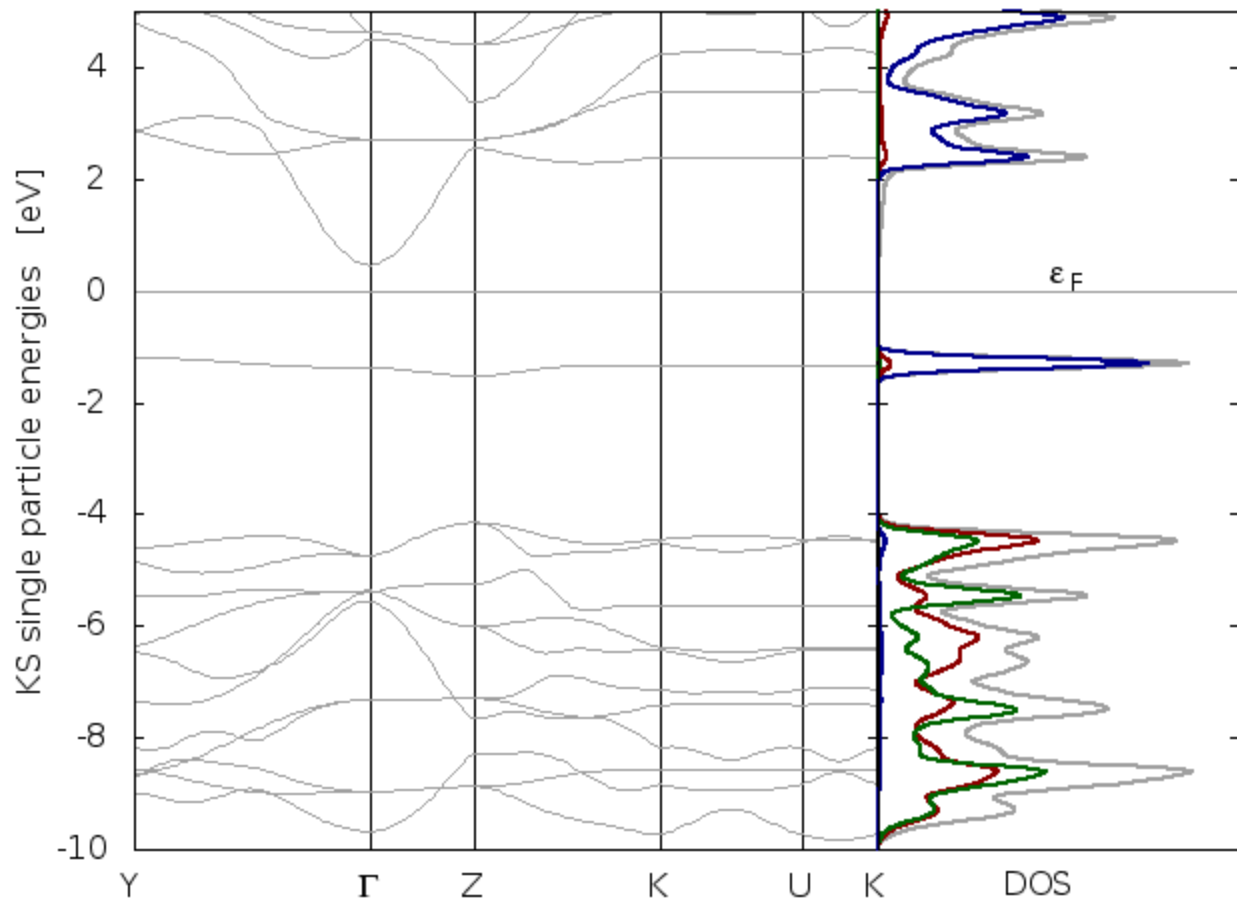
Die Arbeitsgruppe Dichtefunktionaltheorie beschäftigt sich seit vielen Jahren mit der Entwicklung von leistungsfähigen Methoden zur Computersimulation von Vielelektronensystemen, vor allem mit der präzisen Darstellung von Austausch-Korrelationseffekten im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie (DFT). Dabei wurde in erster Linie das Konzept impliziter Funktionale verfolgt, bei denen zur Darstellung der Austauschkorrelationseffekte auch die Kohn-Sham (KS) Orbitale verwendet werden. Im Rahmen der DFT stellen implizite Funktionale gegenwärtig den aussichtsreichsten Zugang zur Überwindung der verschiedenen Schwächen herkömmlicher Dichtefunktionale (LDA/GGA) dar: Im Gegensatz zu LDA und GGA erlauben sie insbesondere die Beschreibung von negativen Ionen und von Dispersionskräften. Auch Bandlücken werden häufig wesentlich besser reproduziert.

Darüber hinaus bietet der Zugang (auch Optimized Effective Potential Method — OEP — genannt) die Möglichkeit der systematischen Verbesserung: Das elementarste implizite Funktional ist der exakte Austausch (EXX) der DFT. Unter Verwendung des KS Hamiltonoperators als Ausgangspunkt für Standard-Vielteilchenmethoden lassen sich vom Austausch ausgehend, in systematischer Form Korrelationsbeiträge ableiten. Deren einfachste Variante resultiert aus 2. Ordnung Störungstheorie und wurde bereits intensiv untersucht. Aufgrund der beobachteten Überschätzung von Korrelationseffekten stehen mittlerweile resummierte Formen der Störungsentwicklung im Fokus, insbesondere die Random Phase Approximation (RPA), sowie deren Erweiterung um Austauschsterme 2.Ordnung (SOX).

Für Atome und kleine Moleküle führen diese Funktionale auf ausgesprochen gute Resultate für Korrelationsenergien und -potentiale (und damit auch für Ionisationsenergien etc). Die ersten RPA-Resultate für Festkörper sind ebenfalls vielversprechend. Seit mehreren Jahren wird in der Arbeitsgruppe primär die Anwendung impliziter Funktionale auf Übergangsmetalloxide verfolgt, für die konventionelle Dichtefunktionale meist falsche (metallische) Grundzustände vorhersagen. Vor drei Jahren konnte gezeigt werden, dass bei Verwendung des exakten EXX-Potentials für die Übergangsmetallmonoxide tatsächlich eine Bandlücke entsteht, deren Größe zudem recht gut mit dem Experiment übereinstimmt (siehe auch die Bandstruktur von FeO in AFII-Phase in der beigefügten Abbildung). Dabei ist die Verwendung des vollen, numerischen OEP-Potentials essentiell — die zusammen mit dem exakten Austausch häufig benutzte semi-analytische KLI-Näherung ist dagegen aufgrund von inhärenten Symmetriebeschränkungen nicht in der Lage, die beim FeO nötige Stabilisierung des besetzten d-Zustands gegenüber den unbesetzten zu bewirken.

In den letzten Jahren wurde außerdem die Anwendbarkeit von Pseudopotentialen (PPs) in EXX-Rechnungen untersucht, nachdem erste EXX-Resultate für Halbleiter auf der Basis der Full-Potential-LAPW Methode Zweifel an EXX-PP Resultaten geschürt hatten: In vielen Fällen zeigten die LAPW Bandlücken gravierende Abweichungen von älteren EXX-

PP Werten. Die Diskrepanzen wurden auf das Fehlen der Rumpf-Valenz Wechselwirkung in den EXX-PP Rechnungen zurückgeführt. Eigene All-Elektronen-EXX-Rechnungen zeigten aber, dass die Rumpf-Valenz Wechselwirkung keinen relevanten Einfluss auf die Bandstruktur von Diamant oder Lithium hat. Das gleiche Bild ergab sich auch bei Atomen und Molekülen der ersten Reihe.



## Publikationen

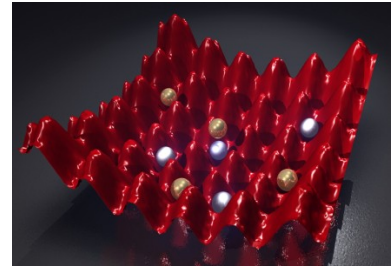
- E. Engel and R. M. Dreizler 2011 *Density Functional Theory: An Advanced Course* (Springer, Berlin).
- E. Engel 2009 *Relevance of core-valence interaction for electronic structure calculations with exact exchange* Phys. Rev. **B 80**, 161205(R).
- E. Engel and R. N. Schmid 2009 *Insulating Ground States of Transition-Metal Monoxides from Exact Exchange*, Phys. Rev. Lett. **103**, 036404.
- E. Engel, D. Ködderitzsch and H. Ebert 2008 *Exact exchange in relativistic spin-density-functional theory: Exchange splitting versus spin-orbit coupling*, Phys. Rev. **B 78**, 235123.
- D. Ködderitzsch, H. Ebert and E. Engel 2008 *Relativistic optimized potential method for open-shell systems* Phys. Rev. **B 77**, 045101.
- H. Jiang and E. Engel 2007 *Random-phase-approximation-based correlation energy functionals: Benchmark results for atoms* J. Chem. Phys. **127**, 184108.

# Ultrakalte Atome in Optischen Gittern

Walter Hofstetter

Institut für Theoretische Physik  
Johann Wolfgang Goethe-Universität  
Max-von-Laue-Straße 1, 60438 Frankfurt am Main

Ein zentrales Forschungsgebiet der Arbeitsgruppe sind Quantenphasen ultrakalter Atome in optischen Gittern und deren Beschreibung mit Methoden der theoretischen Festkörperphysik. Dabei liegt der Schwerpunkt auf nichtperturbativen numerischen Simulationen der zugehörigen quantenmechanischen Modellsysteme.

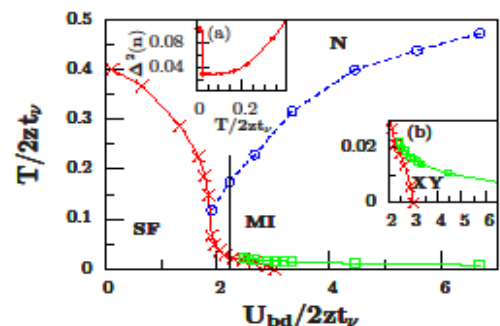


Figur 1: Optisches Gitter mit ultrakalten Atomen.

Seit der Entdeckung von Bose-Einstein Kondensation haben sich ultrakalte Atome zu einem neuen Laborsystem für die Quanten-Vielteilchenphysik entwickelt. Dabei können sowohl die Quantenstatistik als auch Wechselwirkungen und Dimensionalität des Systems experimentell kontrolliert werden. Optische Gitter erlauben darüber hinaus die Realisierung stark korrelierter Quantensysteme vom Hubbard-Typ, in denen neuartige Quantenphasenübergänge beobachtet werden können. Diese werden in Zukunft durch Quantensimulationen zum Verständnis komplexer Materialien wie beispielsweise Hochtemperatur-Supraleitern beitragen können.

Die Arbeitsgruppe Hofstetter hat entscheidenden Anteil an der Entwicklung der Theorie stark korrelierter Quantensysteme in optischen Gittern. Hierbei liegt der Schwerpunkt auf der Entwicklung und Anwendung entsprechender nichtperturbativer Methoden wie der Dynamischen Molekularfeldtheorie (DMFT) für atomare Ensembles mit verschiedenen flavours (internen Quantenzuständen) und gemischter Quantenstatistik. Damit konnten beispielsweise langreichweitig geordnete Phasen (unter anderem Antiferromagnetismus, Supersolid) in mehrkomponentigen Quantengasen analysiert werden, die aktuell in verschiedenen weltweit führenden experimentellen Gruppen realisiert werden (MIT, Mainz, ETH Zürich, Florenz, Hamburg u.a.).

In einer *zweikomponentigen Bose-Bose Mischung* haben wir den auf adiabatischer Entmagnetisierung beruhenden Kühlungseffekt untersucht und entdeckt, dass es möglich ist, analog zum Pomeranchuk Effekt in  $^3\text{He}$ , das System durch Erhitzen von der suprafluiden Phase in den Mott Isolator zu überführen. Um das Phasendiagramm auch bei endlichen Temperaturen berechnen zu können, benutzen wir eine Weiterentwicklung des Gutzwiller Ansatzes, die bosonische dynamische Molekularfeldtheorie.



Figur 2: Phasendiagramm für endliche Temperaturen eines zwei-komponentigen bosonischen Gases in einem kubischen Gitter bei halber Füllung für jede Komponente [4].

Desweiteren haben wir den Einfluss von *Unordnung*, beispielsweise durch Speckle-Potentiale, auf ultrakalte Atome in optischen Gittern untersucht. Wir haben dazu unter anderem das vollständige paramagnetische Grundzustands-Phasendiagramm mit Hilfe der statistischen dynamischen Molekularfeldtheorie berechnet. Dabei zeigt sich, dass es einen direkten Phasenübergang vom korrelationsinduzierten Mott-Isolator, zum Anderson-Mott Isolator gibt, der durch Unordnung induziert wird.

In Systemen *zweikomponentiger Fermionen* interessieren wir uns für die kritische Entropie der antiferromagnetischen und suprafluiden Phase, sowohl im spinausgeglichenen Fall als auch bei endlicher Magnetisierung, für unterschiedliche Tunnelraten der Komponenten und in der Gegenwart inhomogener Fallenpotentiale. Für die numerische Simulation verwenden wir hier unter anderem sogenannte Continuous-Time Quantum-Monte-Carlo Algorithmen in Kombination mit dynamischer Molekularfeldtheorie .

Neben den zweikomponentigen Systemen haben wir auch *3-Spezies Fermionen* im Gitter untersucht. Ein zentrale Fragestellung war hierbei, wie sich 3-Teilchenverluste auf die Stabilität der Phasen auswirken. Wir konnten zeigen, dass die 3-Teilchen Verluste die sogenannte Farbsuprafluidität stabilisieren. Hierbei tritt ein mehrkomponentiger suprafluider Ordnungsparameter auf. Wenn keine 3-Teilchenverluste vorliegen, wird jedoch ein trionischer Zustand bevorzugt. Für die numerische Simulation haben wir neben der dynamischen Molekularfeldtheorie auch variationelle Monte-Carlo Techniken eingesetzt.

Ein weiterer exotischer Zustand der Materie, der ebenfalls in optischen Gittern realisiert werden kann, ist das *Suprasolid*. Ein solches konnten wir durch Berechnungen für dipolare und damit langreichweitig wechselwirkende Fermionen nachweisen. Wir haben das Schmelzen des Suprasolids bei Erhöhung der Temperatur studiert und das Phasendiagramm bei endlicher Temperatur und fester Füllung berechnet, um diejenigen Parameter zu bestimmen, für die man möglicherweise ein Suprasolid im Experiment beobachten kann. Zur Berechnung haben wir eine Verallgemeinerung der dynamischen Molekularfeldtheorie benutzt, welche eine ortsabhängige Selbstenergie zulässt.

Für eine *Bose-Fermi Mischung* konnten wir mit unseren numerischen Rechnungen experimentelle Beobachtungen von Best et al. (PRL 102, 030408 (2009)) bestätigen und erklären. Dazu haben wir eine Erweiterung der dynamischen Molekularfeldtheorie auf Bose-Fermi Mischungen verwendet. So konnten wir das im Experiment beobachtete Maximum im Kondensatanteil bei verschwindender Bose-Fermi Wechselwirkung erklären.

Ein weiteres Gebiet unserer Forschung sind *topologische Isolatoren* und ihre Realisierung in ultrakalten Quantengasen mittels künstlicher Eichfelder. Obwohl nicht leitend in ihrem Inneren, weisen topologische Isolatoren stromtragende Zustände auf ihrem Rand auf, die immun gegen Störstellen sind. Uns interessiert hier, wie sich Wechselwirkungen auf die Randzustände auswirken und welche Form diese Zustände haben, wenn anstatt harten Rändern weiche Randpotentiale beispielsweise durch eine optische Falle vorhanden sind.

## Publikationen

### *Physical Review Letters*

- A. Rapp, G. Zarand, C. Honerkamp, and W. Hofstetter 2007 *Color superfluidity and "baryon" formation in ultracold fermions* Phys. Rev. Lett. **98**, 160405.
- I. Titvinidze, M. Snoek, and W. Hofstetter 2008 *Supersolid Bose-Fermi Mixtures in Optical Lattices* Phys. Rev. Lett. **100**, 100401.
- K. Byczuk, W. Hofstetter, and D. Vollhardt 2009 *Competition between Anderson localization and antiferromagnetism in correlated lattice fermion systems with disorder* Phys. Rev. Lett. **102**, 146403.
- Andreas Hackl, David Roosen, Stefan Kehrein, and Walter Hofstetter 2009 *Nonequilibrium Spin Dynamics in the Ferromagnetic Kondo Model* Phys. Rev. Lett. **102**, 196601.
- A. Kantian, M. Dalmonte, S. Diehl, W. Hofstetter, P. Zoller, A. J. Daley 2009 *An atomic colour superfluid via three-body loss* Phys. Rev. Lett. **103**, 240401.
- E. Gorelik, I. Titvinidze, W. Hofstetter, M. Snoek, and N. Blümer 2010 *Néel transition of lattice fermions in a harmonic trap: a real-space DMFT study* Phys. Rev. Lett. **105**, 065301.
- Michiel Snoek, Irakli Titvinidze, Immanuel Bloch, and Walter Hofstetter 2011 *Effect of interactions on harmonically confined Bose-Fermi mixtures in optical lattices* Phys. Rev. Lett. **106**, 155301.
- U. Bissbort, Y. Li, S. Götze, J. Heinze, J. S. Krauser, M. Weinberg, C. Becker, K. Sengstock, and W. Hofstetter 2011 *Detecting the Amplitude Mode of Strongly Interacting Lattice Bosons by Bragg Scattering* Phys. Rev. Lett. **106**, 205303.
- K. Byczuk, J. Kunes, W. Hofstetter, and D. Vollhardt 2012 *Quantification of correlations in quantum many-particle systems* Phys. Rev. Lett. **108**, 087004.

### **Weitere relevante Publikation 2011/2012**

- M. Snoek, I. Titvinidze, and W. Hofstetter 2011 *Canted antiferromagnetic order of imbalanced Fermi-Fermi mixtures in optical lattices by dynamical mean-field theory* Phys. Rev. B **83**, 054419.
- I. Titvinidze, A. Privitera, S.-Y. Chang, S. Diehl, M. Baranov, A.J. Daley, and W. Hofstetter 2011 *Magnetism and domain formation in SU(3) symmetric multi-species mixtures* New J. Phys. **13** 035013.
- L. He and W. Hofstetter 2011 *Supersolid Phase of Cold Fermionic Polar Molecules in 2D Optical Lattices* Phys. Rev. A **83**, 053629.
- A. Privitera, I. Titvinidze, S.-Y. Chang, S. Diehl, A.J. Daley, and W. Hofstetter 2011 *Loss-induced phase separation and pairing for 3-species atomic lattice fermions* Phys. Rev. A **84**, 021601(R).
- M. Buchhold, U. Bissbort, S. Will, and W. Hofstetter 2011 *Creating exotic condensates via quantum-phase-revival dynamics in engineered lattice potentials* Phys. Rev. A **84**, 023631.
- D. Semmler, K. Byczuk and W. Hofstetter 2011 *Anderson-Hubbard model with box disorder: Statistical dynamical mean-field theory investigation* Phys. Rev. B **84**, 115113.
- Yongqiang Li, M. Reza Bakhtiari, Liang He, and W. Hofstetter 2011 *Tunable anisotropic magnetism in trapped two-component Bose gases* Phys. Rev. B **84**, 144411.
- F. May, M. R. Wegewijs and W. Hofstetter 2011 *Interaction of spin and vibrations in transport through single-molecule magnets* Beilstein J. Nanotechnol. , **2**, 693-698.
- Y. Li, R. Bakhtiari, L. He, and W. Hofstetter 2012 *Pomeranchuk effect and spin-gradient cooling of Bose-Bose mixtures in an optical lattice* Phys. Rev. A **85**, 023624.
- M. Snoek and W. Hofstetter 2012 *Bosonic Dynamical Mean-Field Theory* preprint. [arXiv:1007.5223] .
- B. Kubala, D. Roosen, M. Sindel, W. Hofstetter, and F. Marquardt 2012 *Decoherence in a Double-Dot Aharonov-Bohm Interferometer* preprint. [arXiv:1011.3518].
- U. Bissbort, F. Deuretzbacher, W. Hofstetter 2012 *Effective multi-body induced tunneling and*



*interactions in the Bose-Hubbard model of the lowest dressed band of an optical lattice* preprint. [arXiv:1108.6047].

- J. Wernsdorfer, G. Harder, U. Schollwöck, and W. Hofstetter 2012 *Signatures of Delocalization in the Fermionic 1D Hubbard Model with Box Disorder: Comparative Study with DMRG and R-DMFT* preprint. [arXiv:1108.6057].
- S. Backes, I. Titvinidze, A. Privitera, and W. Hofstetter 2012 *Monte Carlo study of fermionic trions in a square lattice with harmonic confinement* preprint. [arXiv:1202.4021].
- Y. Li, L. He, and W. Hofstetter 2012 *Anisotropic pair-superfluidity of trapped two-component Bose gases* preprint. [arXiv:1203.4262].
- A. Sotnikov, D. Cocks, and W. Hofstetter 2012 *Advantages of mass-imbanced ultracold fermionic mixtures for approaching quantum magnetism in optical lattices* preprint. [arXiv:1203.4658].
- M. Buchhold, D. Cocks, and W. Hofstetter 2012 *Effects of Smooth Boundaries on Topological Edge Modes in Optical Lattices* preprint. [arXiv:1204.0016].
- Cocks, P. Orth, S. Rachel, M. Buchhold, K. Le Hur, and W. Hofstetter 2012 *Interaction effects in the spinful time-reversal invariant Hofstadter problem* preprint. [arXiv:1204.4171].
- Y.-Q. Li, L. He, and W. Hofstetter 2012 *Supersolid phase of strongly correlated bosons in an optical cavity* preprint. [arXiv:1205.0813].
- He, Y.-Q. Li, E. Altman, and W. Hofstetter *Quantum phases of Bose-Bose mixtures on a triangular lattice* preprint. [arXiv:1205.1806].
- B. Schmidt, R. Bakhtiari, I. Titvinidze, U. Schneider, M. Snoek, and W. Hofstetter 2012 *Dynamical arrest of ultracold lattice fermions* preprint. [arXiv:1205.4031].

# Theorie der elektronischen und magnetischen Eigenschaften von Nanostrukturen

**Gustavo M. Pastor**  
Institut für Theoretische Physik  
Universität Kassel  
Heinrich-Plett-Straße 40, 34132 Kassel

Die Gruppe Nanopartikel und Nanostrukturen am Institut für Physik der Universität Kassel besteht aus theoretischen Physikern der kondensierten Materie, welche einen starken Hintergrund über Cluster, Nanopartikel, niedrig-dimensionaler Systeme und Nanostrukturen besitzen. Unsere Forschungsinteressen umfassen insbesondere die methodologische Entwicklung von Dichtefunktionaltheorie, die Theorie neuer magnetischer Materialien, die Physik starker elektronischer Korrelationen, die nicht adiabatische Quantendynamik und die stochastische Dynamik in komplexen Energielandschaften.

Unter den laufenden Projekten findet man folgende Themen:

- Magnetismus, Struktur und chemische Ordnung in kleinen FeRh Clustern.
- Dichtefunktionaltheorie stark korrelierter Fermionen auf Gittermodellen.
- Die Optimierung der magnetische Momente und Anisotropie von CoRh Nanolegiierungen.
- Die elektronischen, strukturellen und magnetischen Eigenschaften von Metallclustern mit magnetischen Verunreinigungen: Kondo Effekt und Valenzfluktuationen.
- Relaxationsprozesse und stochastische Dynamik in magnetischen Nanostrukturen.
- Die elektronische Theorie von magnetischen Domainwänden und von Domänenumschaltungen mittels äußerer Felder in Nanodrähte aus Übergangsmetallen.
- Magnetische Verunreinigungen in Nanodrähte: Ab initio Untersuchung der Entstehung und Stabilität lokaler magnetischen Momenten in eindimensionaler Metalle.

## Publikationen

- Muñoz-Navia M., Dorantes-Dávila, J., Zitoun, D., Amiens, C., Chaudret, B., Casanove, M.-J., Lecante, P., Jaouen, N., Rogalev, A., Respaud, M. and Pastor, G. M. (2008). *Magnetic properties of  $Co_nRh_m$  nanoparticles: experiment and theory*. Faraday Discuss. **138**, 181-192.
- Pastor, G. M. and Jensen, P. J. (2008). *Elementary transitions and magnetic correlations in two-dimensional disordered nanoparticle ensembles*. Phys. Rev. B **78**, 134419-1-7.
- Muñoz-Navia, M., Dorantes-Dávila, J., Respaud, M. and Pastor, G. M. (2009). *Theoretical study of the magnetic moments and anisotropy energy of CoRh nanoparticles*. Eur. J. Phys. D **52**, 171-174.
- López-Urías, F. and Pastor, G. M. (2009). *Exact diagonalization of Hubbard clusters at finite temperatures*. Eur. J. Phys. D **52**, 159-162.
- Garibay-Alonso, R., Dorantes-Dávila, J. and Pastor, G. M. (2009). *Functional-integral study of spin-fluctuations in small Fe clusters*. Eur. J. Phys. D **52**, 167-170.
- Ruiz-Díaz, P., Dorantes-Dávila, J. and Pastor, G. M. (2009). *Onset of non-collinear magnetism in small Fe clusters*. Eur. J. Phys. D **52**, 175-178.

- Garibay-Alonso, R., Dorantes-Dávila, J. and Pastor, G. M. (2009). *Electronic spin-fluctuation theory of finite-temperature cluster magnetism: Size and environment dependence in Fe<sub>n</sub>*. Phys. Rev. B **79**, 134401-1-12.
- Muñoz-Navia, M., Dorantes-Dávila, J., Zitoun, D., Amiens, C., Jaouen, N., Rogalev, A., Respaud, M. and Pastor, G. M. (2009). *Tailoring the magnetic anisotropy in CoRh nanoalloys*. Appl. Phys. Lett. **95**, 233107-1-3.
- Valvidares, S. M., Dorantes-Dávila, J., Isern, H., Ferrer, S. and Pastor, G. M. (2010). *Interface driven manipulation of the magnetic anisotropy of ultrathin Co films on Pt(111): Substrate deposition of hydrogen and model calculations*. Phys. Rev. B **81**, 024415-1-11.
- Ruiz-Díaz, P., Ricardo-Chávez, J. L., Dorantes-Dávila, J., and Pastor, G. M. (2010). *Magnetism of small Cr clusters: Interplay between structure, magnetic order and electron correlations*. Phys. Rev. B **81**, 224431-1-11.
- Saubanère, M., Ricardo-Chávez, J. L. and Pastor, G. M. (2010). *Electronic and magnetic properties of Co and Ni impurities in Cu wires: First-principles investigation of local moment formation in one dimension*. Phys. Rev. B **82**, 054436-1-11.
- Saubanère, M., Tanveer, M., Ruiz-Díaz, P. and Pastor, G. M. (2010). *First principles theoretical study of complex magnetic order in transition-metal nanowires*. Phys. Status Solidi B **247**, 2610-2620.
- Ruiz-Díaz, P., Garibay-Alonso, R., Dorantes-Dávila, J. and Pastor, G. M. (2011). *Noncollinear magnetism in transition metal nanostructures: Exchange interaction and local environment effects in free and deposited clusters*. Phys. Rev. B **84**, 024431-1-11.
- Mokka, J. and Pastor, G. M. (2012). *First-principles study of the structural, magnetic, and electronic properties of small FeRh alloy clusters*. Phys. Rev. B **85**, 054407-1-7.
- Garibay-Alonso, R., Dorantes-Dávila, J. and Pastor, G. M. (2012). *Finite temperature magnetism of Ni monolayers: Interplay between flips and module fluctuations of the local moments*. Phys. Rev. B **85**, 224409-1-9.

# Molekulare Dynamik von mesoskopischen, nano- und biomolekularen Systemen

**Andrey Solov'yov**

**Frankfurt Institute for Advanced Studies  
Johann Wolfgang Goethe-Universität  
Ruth-Moufang-Straße 1, 60438 Frankfurt am Main**

Die Theoriegruppe, die von Prof. Dr. Andrey V. Solov'yov im Jahre 2004 am FIAS gegründet wurde, befasst sich mit der Strukturentstehung und der Dynamik von belebter und unbelebter Materie im Mikro- und Nanobereich. Die wissenschaftlichen Untersuchungen konzentrieren sich auf die Strukturbildung und Dynamik komplexer Meso-Bio-Nano (MBN)-Systeme unterschiedlichster Natur. Die Aggregation von Atomen und kleinen Molekülen in Cluster, Nanopartikel und Mikro-Tröpfchen stellen Prozesse dar, mittels derer eine Vielzahl von komplexen Bio-, Nano- und mesoskopischen Objekten erzeugt werden können. Auf dem gegenwärtigen Niveau der technologischen Möglichkeiten und Rechnerkapazitäten können Methoden und Ansätze, die traditionell mit der Atom- und Molekülphysik assoziiert sind, auf biomolekulare Systemen angewendet werden. Die Erforschung solcher Systeme, basierend auf grundlegenden physikalischen Mechanismen, umfassen eine Vielzahl unterschiedlicher biomolekularer Vorgänge, wie z.B. die Proteinfaltung, Strahlenschäden von Biomolekülen, Assoziation und Dissoziation von makromolekularen Komplexen usw. Die Größe der betrachteten biomolekularen Systeme befindet sich in der Regel auf der Nanometer-Skala. Daher ist der Fokus der Aktivitäten der Gruppe in den Nanowissenschaften angesiedelt, wobei stets ein starkes Feedback durch die interdisziplinäre Vernetzung besteht. In den letzten Jahren wurden zahlreiche Nanosysteme mit einzigartigen strukturellen, optischen, elektrischen und magnetischen Eigenschaften gefunden. Oft werden solche Systeme als Bausteine für neue nanostrukturierte Materialien mit maßgeschneiderten Eigenschaften benutzt. Die Arbeit der Gruppe konzentriert sich daher auf die theoretische Charakterisierung einer Vielzahl von ausgewählten Nanosystemen. Wir versuchen, unterschiedliche Mechanismen der Stabilität, der Selbst-Organisation und des Wachstums sowie die Art und Weise einer Manipulation und Kontrolle dieser Systeme und ihre Eigenschaften zu verstehen. Die Auswahl von Systemen für diese Studien gruppiert sich in der Regel nach zwei Kriterien. Erstens sollte das System während seiner Bildung eine spezielle fundamentale Eigenschaft besitzen die kontrollierbar ist. Zweitens sollte das System für direkte oder potentielle Anwendungen in der Nanotechnologie, Mikroelektronik oder Medizin wichtig sein. Ein weiterer wesentlicher Aspekt unserer Tätigkeit besteht darin, eine Verbindung zwischen den analogen Prozessen des Wachstums und der Selbst-Organisation herzustellen, die in weit größeren Nanosystemen und in biologischen Systemen vorkommen.

Die bisherigen Forschungsergebnisse beinhalten die Strukturbildung und Dynamik von MBN-Systeme, Phasenumwandlungen auf Nano-Skalen, Kollisionen und Photonen-Prozesse von Nanostrukturen, Multi-Skalen Ansatz für die Physik der Therapie mit Ionenstrahlen, kristalline Undulatoren und kristallin-Undulator-basierte Gamma-Laser.

## Publikationen

2010

### Journal publications:

- A.V. Yakubovich, A.V. Solov'yov and W. Greiner; *Conformational changes in polypeptides and proteins*, Proceedings NATO Advanced Research Workshop "Molecular Self-Organization in Micro-, Nano, and Macro Dimensions: From Molecules to Water, to Nanoparticles, DNA and Proteins" dedicated to Alexander S. Davydov 95th birthday June 8 – 12, 2008, Kiev, Ukraine; International Journal of Quantum Chemistry, v.110, p.257-269 (2010)
- E. Scifoni, E. Surdutovich, A.V. Solov'yov, *Spectra of secondary electrons generated in water by energetic ions*, Phys. Rev. E, v.81, p.021903-(1-7) (2010); [arXiv: 0911.3855v1 \[physics.bio-ph\] 19 Nov \(2009\)](#)
- R. Polozkov, V.K. Ivanov, A.V. Solov'yov, *Angle-resolved photoelectron spectra of metal cluster anions with a many-body-theory approach*, Phys.Rev.A, Rapid Communications, v.81, p.021202(R)-(1-3) (2010); [arXiv: 0905.0026v1 \[physics.atm-clus\] 30 Apr \(2009\)](#)
- A. Hussien, A. Yakubovich, A.V. Solov'yov, W. Greiner, *Phase transition, formation and fragmentation of fullerenes*, European Physical Journal D, v. 57 (2), p. 207-217 (2010); [arXiv: 0807.4435v1 \[physics.atm-clus\] 28 Jul \(2008\)](#)
- E. Surdutovich, E. Scifoni, A.V. Solov'yov, *Ion-beam cancer therapy: news about a multiscale approach to radiation damage*, Mutation Research – Reviews, v.704, p.206-212 (2010), Proceedings of ESF-EMBO Conference 2009 "Spatio-Temporal Radiation Biology" Sant Feliu de Guixols, Spain, May 2009
- R. A. Gherghescu, D. N. Poenaru, A. Solov'yov, W. Greiner, *Hemispheroidal atomic clusters on planar surfaces*, Physica E, v.42, p.1555-1562 (2010)
- R. A. Gherghescu, D. N. Poenaru, A. Solov'yov, W. Greiner, *Spheroidal cap configurations of atomic clusters on planar surfaces*, European Physical Journal B, v.77, p. 1411-1423 (2010)
- A.V. Solov'yov, *Virtual Institute of Nano Films: current status and perspectives*, VINF Newsletter n°11, p.2-4, VINF, Spring 2010
- J. Geng, I.A. Solov'yov, D.G. Reid, P. Skelton, A.E.H. Wheatley, A.V. Solov'yov, B.F.G. Johnson, *Fullerene (C60)-based 1D crystalline nanopolymer formed through topochemical transformation of the parent Nanowire*, Phys. Rev. B, v.81, p. 214114-(1-13) (2010); [arXiv: 0906.2216v1 \[physics.atm-clus\] 11 Jun \(2009\)](#)
- A. Kostyuk, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, W. Greiner, *Stable propagation of a modulated positron beam in a bent crystal channel*, J. Phys. B: At. Mol.Opt.Phys.(FAST TRACK COMMUNICATION, IOP SELECT), v.43, p.151001-(1-5) (2010); [arXiv:0809.4657v2 \[physics.acc-ph\] 16 Oct \(2008\)](#)
- A.V. Korol, A.V. Solov'yov, *Confinement resonances in photoionization of endohedral atoms: myth or reality?*, J.Phys.B At. Mol.Opt.Phys. (FAST TRACK COMMUNICATION), v.43, p.201004-(1-5) (2010); [arXiv: 0912.2690v2 \[physics.atm-clus\] 14 Dec \(2009\)](#)
- I. Baccarelli, F.A. Gianturco, E. Scifoni, A.V. Solov'yov, E. Surdutovich, *Editorial on topical issue "Molecular level assessments of radiation biodamage"*, European Physical Journal D, v.60, p.1-10 (2010)
- E. Scifoni, E. Surdutovich, A.V. Solov'yov, *Radial dose distribution from carbon ion incident on liquid water*, European Physical Journal D, v.60, p.115–119 (2010)
- E. Surdutovich, A.V. Yakubovich, A.V. Solov'yov, *Multiscale approach to radiation damage induced by ion beams: complex DNA damage and effects of thermal spikes*, European Physical Journal D, v.60, p.101-108, (2010); [arXiv: 1005.3983v1\[physics.bio-ph\] 20 May \(2010\)](#)
- E. Surdutovich, A.V. Solov'yov, *Shock wave initiated by ion passing through liquid water*, Physical Review E, v.82, p. 051915-(1-5) (2010)
- V.V. Dick, I.A. Solov'yov, A.V. Solov'yov, *Nanoparticles dynamics on a surface: fractal pattern*

*formation and fragmentation*, The International Conference on Theoretical Physics “Dubna-Nano2010”, July 5-10 (2010) Dubna, Russia; Journal of Physics: Conference Series, v.248, p. 012025-(1-11) (2010)

- R.G. Polozkov, V.K Ivanov, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, *Theoretical investigation of angular distribution of photoelectrons in processes of photoionization of metal cluster anions*, Nauchno-technicheskije vedomosti SPbGTU, v.3(104), p.75-80 (2010) (in Russian)

#### **Book articles and chapters:**

- A. Kostyuk, A.V. Korol, A.V. Solov'yov and W. Greiner, *Modulated particle beam in a crystal channel*, in book "Charged and Neutral Particles Channeling Phenomena - Channeling 2008", Proceedings of the 51 Workshop of the INFN Eloisatron Project, S.B. Dabagov and L. Palumbo (Eds.), World Scientific, p. 438-447 (2010) (The Science and Culture series - Physics, Series Ed. A. Zichichi); "Channeling 2008" International Conference on Charged and Neutral Particles Channeling Phenomena, the Erice Majorana Centre, October 25 – November 1, 2008.
- I.A. Solov'yov, V.V. Dick, A.V. Solov'yov, *Nanoparticles on a surface: atomistic approach for structure, dynamics and pattern formation*, in Conference Series: "XVII Symposium on Atomic, Cluster and Surface Physics 2010 (SASP 2010, January 24-29, 2010, Universitätszentrum Obergurgl, Austria), I. Milewski, A.Kendl, P. Scheier (Eds.), Innsbruck University Press, p. 21-24 (2010); ISBN 978-3-902719-52-2
- A.V. Korol, A.V. Solov'yov, *On the photoionization of endohedral atoms*, in Conference Series: "XVII Symposium on Atomic, Cluster and Surface Physics 2010 (SASP 2010, January 24-29, 2010, Universitätszentrum Obergurgl, Austria), I. Milewski, A.Kendl, P. Scheier (Eds.), Innsbruck University Press, p. 193-196 (2010); ISBN 978-3-902719-52-2
- A. Hussien, A.V. Yakubovich, A.V. Solov'yov, W. Greiner, *Thermodynamics of the carbon gas–fullerene transition*, in Conference Series: "XVII Symposium on Atomic, Cluster and Surface Physics 2010 (SASP 2010, January 24-29, 2010, Universitätszentrum Obergurgl, Austria), I. Milewski, A.Kendl, P. Scheier (Eds.), Innsbruck University Press, p. 237-240 (2010); ISBN 978-3-902719-52-2
- I.A. Solov'yov, J.Geng, A.V.Solov'yov, B.F.G. Johnson, *Understanding the formation process of exceptionally long fullerene-based nanowires*, in Conference Series: "XVII Symposium on Atomic, Cluster and Surface Physics 2010 (SASP 2010, January 24-29, 2010, Universitätszentrum Obergurgl, Austria), I. Milewski, A.Kendl, P. Scheier (Eds.), Innsbruck University Press, p. 241-244 (2010); ISBN 978-3-902719-52-2
- V.V. Dick, I.A. Solov'yov, A.V. Solov'yov, *Theoretical study of nanofractal stability on the surface*, in Conference Series: "XVII Symposium on Atomic, Cluster and Surface Physics 2010 (SASP 2010, January 24-29, 2010, Universitätszentrum Obergurgl, Austria), I. Milewski, A.Kendl, P. Scheier (Eds.), Innsbruck University Press, p. 245-248 (2010); ISBN 978-3-902719-52-2

#### **2011**

##### **Journal publications:**

- A. Kostyuk, A. Korol, A. Solov'yov, W. Greiner, *Planar channeling of 855 MeV electrons in silicon: Monte-Carlo simulations*, J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys., v. 44, p. 075208-(1-10) (2011); [arXiv: 1008.1707v1](https://arxiv.org/abs/1008.1707v1) [physics.acc-ph] 10 Aug (2010)
- A.V. Korol, A.V. Solov'yov, *Vacancy decay in endohedral atoms: the role of non-central position of the atom*, J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys., v.44, p.085001-(1-17) (2011); [arXiv:1011.2053v1](https://arxiv.org/abs/1011.2053v1) [physics.atm-clus] 9 Nov (2010)
- A.V. Verhovtzev, R.G. Polozkov, V.K Ivanov, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, *Investigation of electronic structure of endohedral fullerenes of inert gases*, Nauchno-technicheskije vedomosti SPbGTU, v.1(116), p.61-70 (2011) (in Russian)
- A. Kostyuk, A. Korol, A. Solov'yov, W. Greiner, *Photon Emission in Crystalline Undulator (PECU)*, NEST-PECU article (2011)
- V.V. Dick, I.A. Solov'yov, A.V. Solov'yov, *Fragmentation pathways of nanofractal structures on surface*, Phys. Rev. B, v. 84, 115408-(1-14) (2011); [arXiv: 1001.3992v4](https://arxiv.org/abs/1001.3992v4) [physics.atm-clus] 3 Jun (2011)

- A. Kostyuk, A. Korol, A.V. Solov'yov, W. Greiner, *Demodulation of a positron beam in a bent crystal channel*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, v. 269, p. 1482-1492 (2011); [arXiv:1101.4138v1 \[physics.acc-ph\]](https://arxiv.org/abs/1101.4138v1) 21 Jan (2011)
- E. Surdutovich, D.C. Gallagher, A.V. Solov'yov, *Calculation of complex DNA damage induced by ions*, Phys.Rev. E., v.84, 051918-(1-7) (2011); [arXiv: 1107.1702v1 \[physics.bio-ph\]](https://arxiv.org/abs/1107.1702v1) 8 Jul (2011)
- A.V. Solov'yov, *A real program for the virtual institute: a new period of the VINF development*, VINF Newsletter n°14, p.2-3, VINF, Summer 2011; <http://www.vinf.eu/newsletters>

#### **Book articles and chapters:**

- A.V. Yakubovich, E. Surdutovich, A.V. Solov'yov, *Atomic and molecular data needs for radiation damage modeling: multiscale approach*, Proceedings of 7th International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications (ICAMDATA2010), Vilnius, Lithuania, September 21-24, 2010, Editors A. Bernotas, R. Karazija, Z. Rudzikas, AIP Conference Proceedings, v.1344, p.230-238 (2011)
- A. Kostyuk, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, W. Greiner, *Planar channeling of electrons: numerical analysis and theory*, Proceedings of International Conference "Channeling 2010", Ferrara (FE), Italy, October 3 - 8, 2010, Il Nuovo Cimento, v.34C, N.4 , pp.167-174 (2011)
- A.V. Solov'yov, A.V. Yakubovich, E. Surdutovich, *Multiscale Approach to the Physics of Ion-Beam Therapy: Thermo-Mechanical Damage*, Proceedings of Advances in Nuclear Physics in our time, Cidade de Goa, Goa, India, November 29-December 02, (2011)
- A.V. Solov'yov, E. Surdutovich, *Multiscale approach to radiation damage induced by ions*, in Proceedings of 7th International Conference on Radiation Damage in Biomolecular Systems, 30 June - 4 July 2010 Madrid, Spain, (2011)
- A.V. Solov'yov, *Supervisor's Foreword*, in 'Theory of phase transitions in polypeptides and proteins' by A. V. Yakubovich, Springer PhD Thesis series, Springer-Verlag, Heidelberg, London, New York, p.v-vii (2011)

#### **Patents:**

- W. Greiner, A.V. Korol, A. Kostyuk, A.V. Solov'yov, *Vorrichtung und Verfahren zur Erzeugung elektromagnetischer Strahlung*, (2011), (German patent, DE: 10 2010 023 632.2, published on December 15, 2011)

#### **2012**

##### **Journal publications:**

- A.V. Verhovtzev, R.G. Polozkov, V.K Ivanov, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, *Role of exchange interaction in self-consistent calculations of endohedral fullerenes*, NIMB, v.279, p. 202-204 (2012); [arXiv:1108.0918v1 \[physics.atm-clus\]](https://arxiv.org/abs/1108.0918v1) 3 Aug (2011)
- A.V. Yakubovich, E. Surdutovich, A.V. Solov'yov, *Thermomechanical damage of nucleosome by the shock wave initiated by ion passing through liquid water*, NIMB, v.279, p. 135-139 (2012)
- S.N. Volkov, E.V. Paramonova, A.V. Yakubovich, A.V. Solov'yov, *Micromechanics of base pair unzipping in DNA duplex*, Journal of Physics: Condensed Matter, v.24, p. 035104-(1-6) (2012)
- A.V. Yakubovich, A.V. Solov'yov, W. Greiner, *Quantitative thermodynamic model for globular protein folding*, Phys.Rev.E, submitted (2012); [arXiv: 1005.0504v1 \[physics.bio-ph\]](https://arxiv.org/abs/1005.0504v1) 4 May (2010)
- A.V. Verkhovtsev, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, P. Bolognesi, A. Ruocco, L. Avaldi, *Interplay of the volume and surface plasmons in the electron energy loss spectra of C(60)*, Physical Review A, Rapid Communication, submitted (2012)

# Microscopic modelling of correlated electron systems

**Roser Valenti**

Institut für Theoretische Physik  
Johann Wolfgang Goethe-Universität  
Max-von-Laue-Straße 1, 60438 Frankfurt am Main

The focus of our research lies in the development of computational methods for the description of electronic, magnetic and thermodynamic properties of solid state systems where electrons are strongly correlated. For that we combine ab initio density functional theory (DFT) with various many-body methods. Most recently, we have been working with the so-called LDA+DMFT (local density approximation combined with dynamical mean field theory) where local correlations are exactly taken into account. We also have shown that extensions to include the effect of spatial correlations as LDA+DCA (dynamical cluster approximation) can account for features observed in ARPES measurements. These methods have proven to be very powerful for a realistic description of correlated materials.

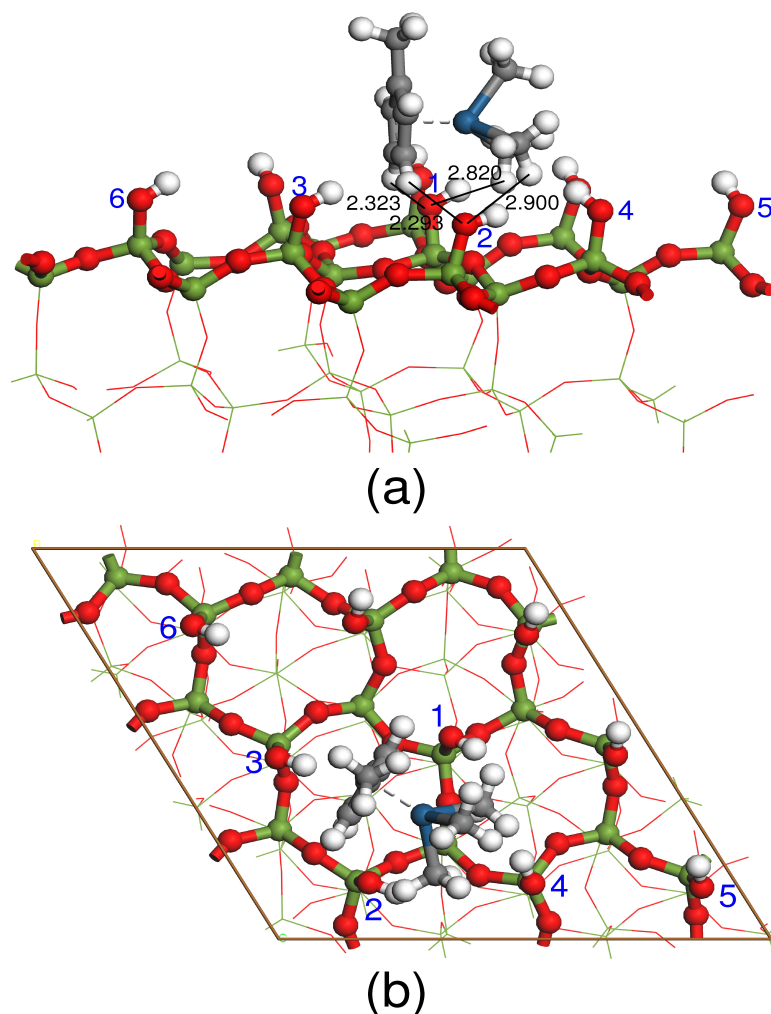
With these computational techniques we have been able to investigate various classes of correlated materials where spin, orbital and lattice degrees of freedom are in strong competition.

These systems show under pressure or doping effects complex phases like unconventional superconductivity ( Cu-based superconductors and the recently discovered Fe-based superconductors, as well as the organic charge transfer salts ) or spin liquid behavior (organic charge transfer salts as well as a few low-dimensional Cu-based systems).

In collaboration with various experimental groups in Frankfurt, we have been also involved in the microscopic simulation of FEBID (focused electron beam deposition) of metallic nanodeposits on a SiO<sub>2</sub> substrate by considering precursor organometallic molecules. Such calculations have provided, to our knowledge, the first results of a microscopic understanding of the FEBID process.

Below we are listing the publications related to the work described above. All the results listed below have only been possible with the help of the HPC-system LOEWE-CSC of the Center for Scientific Computing.





**Figure 1:** The interaction of trimethyl methylcyclopentadienyl platinum (MeCpPtMe3) with a fully hydroxylated SiO2 surface has been explored by means of ab initio calculations. A large slab model cut out from the hydroxylated -cristobalite SiO2 (111) surface was chosen to simulate a silica surface. Density functional theory calculations were performed to evaluate the energies of MeCpPtMe3 adsorption to the SiO2 surface. Our results show that the physisorption of the molecule is dependent on both (i) the orientation of the adsorbate and (ii) the adsorption site on the substrate. The most stable configuration was found with the MeCp and Me3 groups of the molecule oriented towards the surface. The most stable structure found of MeCpPtMe3 adsorbed on SiO2 surface is shown in the figure (a) for side view and (b) for top view. Distances in (a) are given in unit of Å, relevant surface silanols are numbered in blue.

## Publikationen

- Johannes Ferber, Harald O. Jeschke, Roser Valentí 2012 *Fermi surface topology of LaFePO and LiFeP*, [arXiv:1206.4551]
- Kaliappan Muthukumar, Harald O. Jeschke, Roser Valentí, Evgeniya Begun, Johannes Schwenk, Fabrizio Porrati, Michael Huth 2012 *Spontaneous Dissociation of Co<sub>2</sub>(CO)<sub>8</sub> and Autocatalytic growth of Co on SiO<sub>2</sub> : A Combined Experimental and Theoretical Investigation*, [arXiv:1205.4167]

- I. I. Mazin, H. O. Jeschke, R. Valentí, D. I. Khomskii 2012 *Formation of quasi-molecular orbitals and suppression of spin-orbit coupling in Na<sub>2</sub>IrO<sub>3</sub>*, [arXiv:1205.0434]
- Juan Shen, Kaliappan Muthukumar, Harald O. Jeschke, Roser Valentí 2012 *Physisorption of an organometallic platinum complex on silica. An ab initio study*, New Journal of Physics (in press) [arXiv:1203.4109]
- Hunpyo Lee, Kateryna Foyevtsova, Johannes Ferber, Markus Aichhorn, Harald O. Jeschke, Roser Valentí 2012 *Benchmarking a dynamical cluster approximation within an augmented plane-wave framework: the example of SrVO<sub>3</sub>*, Phys. Rev. B **85**, 165103. [arXiv:1111.0890]
- Milan Tomic, Roser Valentí, Harald O. Jeschke 2012 *Uniaxial versus hydrostatic pressure-induced phase transitions in CaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> and BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>*, Phys. Rev. B **85**, 094105. [arXiv:1106.5623]
- Johannes Ferber, Kateryna Foyevtsova, Roser Valentí, Harald O. Jeschke 2012 *LDA+DMFT study of the effects of correlation in LiFeAs*, Phys. Rev. B **85**, 094505. [arXiv:1111.1620]
- Katerina Medjanik, Dennis Chercka, Peter Nagel, Michael Merz, Stefan Schuppler, Martin Baumgarten, Klaus Muellen, Sergej A. Nepijko, Hans-Joachim Elmers, Gerd Schoenhense, Harald O. Jeschke, Roser Valentí 2012 *Orbital-Resolved Partial Charge Transfer from the Methoxy Groups of Substituted Pyrenes in Complexes with Tetracyanoquinodimethane- A NEXAFS Study*, J. Am. Chem. Soc., **134** (10), pp 4694 - 4699
- Yu-Zhong Zhang, Hunpyo Lee, Hai-Qing Lin, Chang-Qin Wu, Harald O. Jeschke, Roser Valentí 2012 *A General Mechanism for Orbital Selective Phase Transitions*, Phys. Rev. B **85**, 035123. [arXiv:1201.1689]
- Harald O. Jeschke, Mariano de Souza, Roser Valentí, Rudra Sekhar Manna, Michael Lang, John A. Schlueter 2012 *Temperature dependence of structural and electronic properties of the spin-liquid candidate kappa-(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu<sub>2</sub>(CN)<sub>3</sub>*, Phys. Rev. B **85**, 035125. [arXiv:1111.1620]
- Kaliappan Muthukumar, Ingo Opahle, Juan Shen, Harald O. Jeschke, Roser Valentí 2011 *Interaction of W(CO)<sub>6</sub> with SiO<sub>2</sub> Surfaces -- A Density Functional Study*, Phys. Rev. B **84**, 205442 [arXiv:1107.5172]
- Hunpyo Lee, Yu-Zhong Zhang, Harald O. Jeschke, Roser Valentí 2011 *Orbital selective phase transition induced by different magnetic states: A dynamical cluster approximation study*, Phys. Rev. B (RC) **84**, 020401. [arXiv:1011.0334]
- Hunpyo Lee, Yu-Zhong Zhang, Harald O. Jeschke, Roser Valentí 2011 *Anisotropic two-orbital Hubbard model: single-site versus cluster dynamical mean-field theory*, Annalen der Physik **523**, 583. [arXiv:1106.5255]
- Harald Jeschke, Ingo Opahle, Hem Kandpal, Roser Valentí, Hena Das, Tanusri Saha-Dasgupta, Oleg Janson, Helge Rosner, Andreas Bruehl, Bernd Wolf, Michael Lang, Johannes Richter, Shijie Hu, Xiaoqun Wang, Robert Peters, Thomas Pruschke, Andreas Honecker 2011 *Multi-step approach to microscopic models for frustrated quantum magnets - the case of the natural mineral azurite*, Phys. Rev. Lett. **106**, 217201. [arXiv:1012.1090]
- P. T. Cong, B. Wolf, M. de Souza, N. Krueger, A. A. Haghighirad, S. Gottlieb- Schoenmeyer, F. Ritter, W. Assmus, I. Opahle, K. Foyevtsova, H. O. Jeschke, R. Valentí, L. Wiehl, M. Lang 2011 *Distinct magnetic regimes through site-selective atom substitution in the frustrated quantum antiferromagnet Cs<sub>2</sub>CuCl<sub>4-x</sub>Br<sub>x</sub>*, Phys. Rev. B **83**, 064425. [arXiv:1012.2269]
- N.H. Phan, I. Halasz, I. Opahle, E. Alig, L. Fink, J.W. Bats, P.T. Cong, H.-W. Lerner, B. Sarkar, B. Wolf, H.O. Jeschke, M. Lang, Roser Valentí, R. Dinnebier and M. Wagner 2011 *Thermally induced crystal-to-crystal transformations accompanied by changes in the magnetic properties of a Cull-p-hydroquinonate polymer*, CrystEngComm **13**, 391
- Kateryna Foyevtsova, Ingo Opahle, Yu-Zhong Zhang, Harald O. Jeschke, Roser Valentí 2011 *Derivation of effective microscopic models for the frustrated antiferromagnets Cs<sub>2</sub>CuCl<sub>4</sub> and Cs<sub>2</sub>CuBr<sub>4</sub> from first principles*, Phys. Rev. B **83**, 125126 [arXiv:1009.0697]

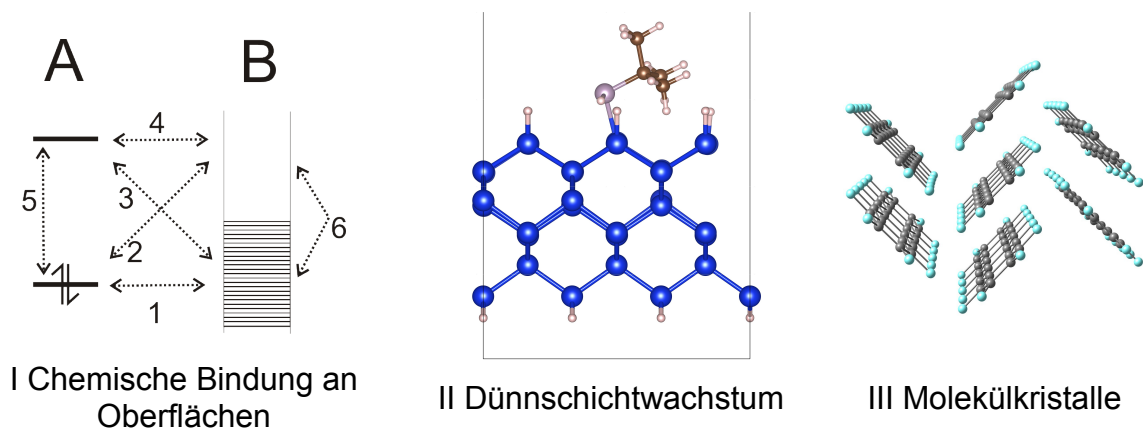
- Johannes Ferber, Yu-Zhong Zhang, Harald O. Jeschke, Roser Valentí 2010 *Analysis of spin density wave conductivity spectra of iron pnictides in the framework of density functional theory*, Phys. Rev. **B 82**, 165102 [arXiv:1005.1374]
- Simon A.J. Kimber, Adrian H. Hill, Yu-Zhong Zhang, Harald O. Jeschke, Roser Valentí, Clemens Ritter, Inga Schellenberg, Wilfred Hermes, Rainer Poettgen, Dimitri N. Argyriou 2010 *Local moments and symmetry breaking in metallic PrMnSbO*, Phys. Rev. **B (Rapid Comm.) 82**, 100412 [arXiv:1006.0341]
- Kateryna Foyevtsova, H. C. Kandpal, Harald O. Jeschke, S. Graser, H.-P. Cheng, Roser Valentí, and P. J. Hirschfeld 2010 *Modulation of pairing interaction in  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$  by an O dopant: A density functional theory study*, Phys. Rev. **B 82**, 054514 [arXiv:1006.2014]
- S. Sarkar, T. Maitra, Roser Valentí, and T. Saha-Dasgupta 2010 *Comparative study of  $FeCr_2S_4$  and  $FeSc_2S_4$ : Spinels with orbitally active A site*, Phys. Rev. **B (RC) 82**, 041105 [arXiv:1007.2753]
- Hunpyo Lee, Yu-Zhong Zhang, Harald O. Jeschke, Roser Valentí 2010 *Possible origin of the reduced magnetic moment in iron pnictides: Frustrated versus unfrustrated bands*, Phys. Rev. **B (RC) 81**, 220506 [arXiv:0912.4024]
- Yu-Zhong Zhang, Hunpyo Lee, Ingo Opahle, Harald O. Jeschke, Roser Valentí 2010 *Importance of Itineracy and Quantum Fluctuations for the Magnetism in Iron Pnictides*, accepted for publication in Jour. of Phys. and Chem. in Solids [arXiv:1005.1170]
- Yu-Zhong Zhang, Kateryna Foyevtsova, Harald O. Jeschke, Martin U. Schmidt, Roser Valentí, *Can the Mott Insulator  $TiOCl$  be Metallized by Doping? A First-Principles Study* 2010 Phys. Rev. Lett **104**, 146402 [arXiv:0905.1276]
- Yu-Zhong Zhang, Ingo Opahle, Harald O. Jeschke, Roser Valentí 2010 *Itinerant Nature of Magnetism in Iron Pnictides: A first principles study*, Phys. Rev. **B 81** 094505 [arXiv:1001.0536]
- S. Thirupathaiyah, S. de Jong, R. Ovsyannikov, H.A. Duerr, A. Varykhalov, R. Follath, Y. Huang, R. Huisman, M.S. Golden, Yu-Zhong Zhang, H.O. Jeschke, R. Valentí, A. Erb, A. Gloskovskii, J. Fink 2010 *Orbital character variation of the Fermi surface and doping dependent changes of the dimensionality in  $BaFe_{2-x}Co_xAs_2$  from angle-resolved photoemission spectroscopy*, Phys. Rev. **B 81**, 104512 [arXiv:0910.0147]
- Hunpyo Lee, Yu-Zhong Zhang, Harald O. Jeschke, Roser Valentí, Hartmut Monien 2010 *Dynamical cluster approximation study of the anisotropic two-orbital Hubbard model*, Phys. Rev. Lett **104**, 026402 [arXiv:0910.3911]
- Yu-Zhong Zhang, Ingo Opahle, Harald O. Jeschke, Roser Valentí 2010 *Pressure-driven phase transitions in correlated systems*, J. Phys.: Condens. Matter **22** 164208 [arXiv:0910.0158].
- Harald O. Jeschke, Hem C. Kandpal, Ingo Opahle, Yu-Zhong Zhang, Roser Valentí 2010 *First principles determination of the model parameters in  $\kappa\text{-(ET)}_2\text{Cu}_2(\text{CN})_3$* , Physica **B 405**, 224 [arXiv:0909.5658]

# DFT-Studien an Molekülkristallen und Oberflächen mit Berücksichtigung von Dispersionswechselwirkungen

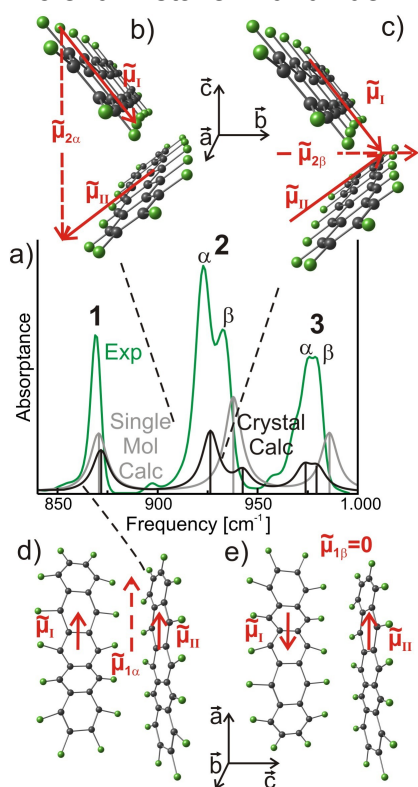
**Ralf Tonner**  
Fachbereich Chemie  
Philipps-Universität Marburg  
Hans-Meerwein Straße, 35032 Marburg

Die Nachwuchsgruppe Tonner am Fachbereich Chemie der Philipps-Universität Marburg beschäftigt sich mit Fragestellungen der Oberflächen- und Festkörperchemie unter Verwendung quantenchemischer *ab initio*-Methoden mit Fokus auf Anwendung der Dichtefunktionaltheorie (DFT). Die drei Hauptinteressen der Gruppe sind (i) die Beschreibung der chemischen Bindung an Oberflächen, (ii) die *ab initio*-Beschreibung des Wachstums dünner Filme auf Halbleiteroberflächen und (iii) die Berechnung von Spektroskopie und Dispersionswechselwirkungen in Molekülkristallen. Im ersten Themengebiet entwickeln wir momentan eine neue energiedispersive Analysemethode für periodische Oberflächenrechnungen. Die Arbeit am zweiten Themengebiet fokussiert sich auf Gasphasen- und Oberflächenreaktionen von Vorläufermolekülen für III/V-Halbleiterschichten auf Silizium-Oberflächen in enger Kooperation mit Kooperationspartnern aus den Fachbereichen Chemie, Physik und Materialwissenschaften in Marburg. In ersten Publikationen zum dritten Themengebiet zeigten wir die Bedeutung der Behandlung von Dispersionswechselwirkung in der DFT-gestützten Berechnung von Molekülkristallen auf und konnten so die Bandenlage und Davydov–Aufspaltung in Infrarot-Spektren des organischen Halbleiters Perfluoropentacen aufklären. Auch eine erste Arbeit zum Anteil an dispersiven Wechselwirkungen in Halbleiter-Festkörpern und an Oberflächen ist erschienen und wird durch laufende Arbeiten momentan vertieft.

Zur Simulation dieser aufwändigen Molekülkristall-Spektren war die Rechenleistung des LOEWE-CSC Clusters der Schlüssel. Für die Zukunft planen wir die Untersuchung größerer Einheitszellen, die weitergehende Rechenkapazitäten benötigen werden.



Ein bereits publiziertes Projekt umfasst die Modellierung von Perfluoropentacen (PFP)-Molekülkristallen und den Vergleich berechneter und experimenteller Schwingungsspektren im Einzelmolekül- und periodischen Kristallansatzes. Es zeigte sich, dass die explizite Behandlung des Kristalls notwendig ist, um die im Experiment beobachtete Modenpolarisation und Davydov-Aufspaltung zu erklären (Abb. 1). Ein weiterer wichtiger Aspekt stellt die Beobachtung dar, dass unpolare Molekülkristalle ohne die Behandlung von Dispersionswechselwirkungen nur unzureichend beschrieben werden können (Tab. 1).



**Figur 1** a) Ausschnitt aus dem experimentellen (KBr pellet) und berechneten IR-Spektrum für das Molekül (PBE/def2-TZVPP) und den Molekülkristall (PBE-D2) von PFP mit Modenzuordnung und Richtungen im Molekülkristall, dynamischem Dipolmoment beider Moleküle in der Einheitszelle für die berechneten Moden 2a (b), 2b (c), 1 (d) und die IR-inaktive Kombinationsbande e).

Die Berechnung von Molekülkristallen in einem periodischen Ansatz erfordert erhebliche Rechenressourcen. Das gerade beendete PFP-Projekt wäre ohne die Rechenkapazität des LOEWE-CSC nicht durchführbar gewesen.

Die für PFP durchgeführten Berechnungen werden aktuell für ein anderes organisches Halbleitermolekül 1,4,5,8-Naphthalene-tetracarboxylic dianhydrid (NTCDA) erstellt und sollen helfen, die für PFP aufgestellten Hypothesen an einem anderen System zu überprüfen. Die Adsorption von NTCDA auf Silber-Oberflächen führt zu Änderungen in den IR-Spektren die mit Hilfe von *ab initio*-Berechnungen ebenfalls besser verstanden werden können. Zu diesem Zweck findet eine Kooperation mit Prof. Jakob (FB Physik/Marburg) statt.

Insbesondere die in aktuellen Dichtefunktional-Näherungen nicht berücksichtigten Dispersionswechselwirkungen stellen ein hochaktuelles und aktives Forschungsfeld dar.

Sowohl der Einfluss auf die Beschreibung von Oberflächenadsorptions-Phänomenen als auch auf die korrekte Beschreibung von Molekülkristallen bedarf noch deutlicher Forschungsaktivität.

**Tabelle 1** Experimentelle und berechnet Strukturparameter (in ° und Å) sowie Einheitszellvolumina (V) für den PFP-Molekülkristall mit und ohne Dispersionskorrekturen.

	a	b	c	α	β	γ	V	ΔV[a]
Exp.	15.51 (1)	4.490 (4)	11.449 (11)	90	90	90	797.0 (13)	
PBE-D3	15.564	4.431	11.506	90	91.122	90	793.4	-0.5%
PBE-D2	15.546	4.356	11.352	90	91.490	90	768.4	-3.6%
PBE	15.678	4.727	11.927	90	90.416	90	883.9	+10.9%
rPBE-D3	15.648	4.453	11.581	90	91.084	90	806.8	+1.3%

[a] Abweichung vom exp. Volumen.

## Publikationen

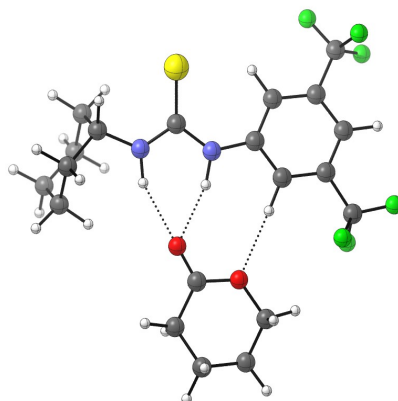
- Breuer, T.; Celik, M.; Jakob, P.; Tonner, R.; Witte, G. 2012 *Vibrational Davydov-Splittings and Collective Mode Polarizations in Oriented Organic Semiconductor Crystals*. J. Phys. Chem. **C**, zur Publikation angenommen.
- Möllmann, J.; Ehrlich, S.; Tonner, R.; Grimme, S. 2012 *A DFT-D Study of Structural and Energetic Properties of TiO<sub>2</sub> modifications* J. Phys.: Condens. Matter, (Langreth Special Issue), zur Publikation angenommen.

# Vom Intermediat bis zum Makromolekül – Computerchemie als Hilfsmittel zur Aufklärung von Reaktionsmechanismen

**Peter R. Schreiner**  
Institut für Organische Chemie  
Justus-Liebig Universität Gießen  
Heinrich-Buff-Ring 58, 35392 Gießen

Die Forschung Arbeitsgruppe Schreiner, einem internationalen Team aus organischen Chemikern, gliedert sich in drei Schwerpunkte: (a) Organokatalyse, (b) Nanodiamanten, sowie (c) reaktive Intermediate (insbesondere Hydroxycarbene). Das enge Zusammenspiel experimenteller und qualitativ hochwertiger computerchemischer Methoden kennzeichnet unsere Arbeitsweise:

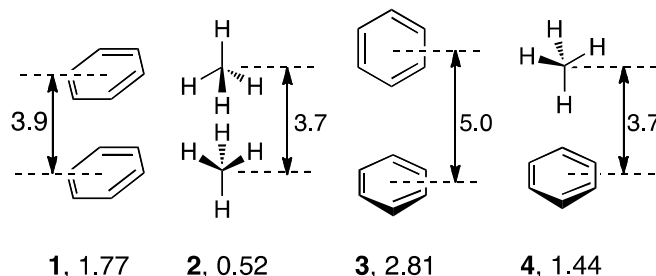
- (a) Metallfreie Katalysatoren auf der Basis von Thioharnstoffen haben sich in vieler Hinsicht als sehr leistungsfähige Katalysatorsysteme herausgestellt. Die Computerchemie hat die mechanistische Aufklärung der Thioharnstoffkatalyse ermöglicht und damit den Grundstein für ein gezieltes Katalysatordesign gelegt. Vor diesem Hintergrund haben wir experimentell und computerchemisch zeigen können, dass die polarisierten N–H und C–H Protonen in die Bildung des katalytisch aktiven, H-Brücken gebundenen Komplexes involviert sind.



**Figur 1:** Exemplarischer H-Brücken gebundener Komplex aus einem Thioharnstoff Derivat und Valerolacton, optimiert auf M06/6-31+G(d,p).

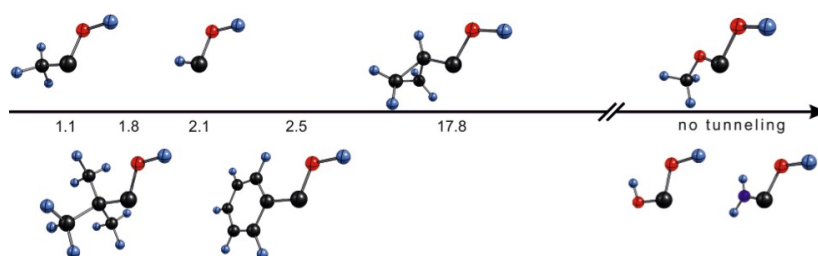
- (b) Eine empirisch fest etablierte Faustregel bezüglich chemischer Bindungen besagt, dass die Bindungsstärke invers mit deren Länge korreliert. Mit unseren Arbeiten auf dem Gebiet der Nanodiamanten gelang uns vor kurzem nicht nur die experimentelle Darstellung einer Verbindung, die bezüglich der Länge ihrer C–C-Einfachbindung den bisherigen Rekord brach. Vielmehr konnten wir auch zeigen, dass diese Verbindungen ungewöhnlich stabil sind und daher die klassische Korrelation zwischen Bindungslänge und Bindungsstärke nicht mehr zutreffend ist. Die computerchemische Untersuchung dieser Verbindung zeigte, dass die überlange C–C Einfachbindung durch Dispersionswechselwirkungen zwischen den großen Diamantoid-Grundkörpern außerordentlich gestärkt wird. Diese Wechselwirkungen sind auf längeren Distanzen wirksam als kovalente Bindungen und wurden in der Vergangenheit lediglich im

Bereich von Biomolekülen oder anderen hochgeordneten Strukturen (Polymeren) diskutiert, jedoch nicht quantifiziert. Wir konnten zeigen, dass Wechselwirkungen dispersiver Natur bereits für die Bindungen zwischen einfachen gesättigten und ungesättigten Kohlenwasserstoffen (Abb. 2) verantwortlich sind: Die Bindungsenergien für das Benzol- und Methan Dimer belaufen sich auf 0.5 bzw. 2.8 kcal mol<sup>-1</sup>; der Beitrag der Dispersionswechselwirkung steigt linear mit der Atomanzahl an.



**Figur 2:** Prototypen für Kohlenwasserstoff Dimere:  $\pi/\pi^*$  (1),  $\sigma/\sigma^*$  (2),  $\sigma/\pi^*$  (3 und 4). Energien auf CCSD(T)/aug-cc-pVQZ, Bindungslängen in Å, Bindungsenergien ( $D_0$ , kursiv) in kcal mol<sup>-1</sup>.

- (c) Im Jahr 2008 berichteten wir über die erstmalige Darstellung von Hydroxymethylen, einem Singulett-Carben, das in der Vergangenheit bereits mehrfach als Intermediat für chemische Reaktionen in der Atmosphäre, bei Verbrennungsprozessen und im interstellaren Medium postuliert wurde. Die experimentelle Beobachtung, dass sich das Carben kinetisch nicht stabilisieren lässt, sondern mittels quantenmechanischen Tunnelns die hohe Aktivierungsbarriere (ca. 30 kcal mol<sup>-1</sup>) zu seinem Isomer Formaldehyd untergräbt, motivierte uns, den zugrundeliegenden Prozess computerchemisch zu erfassen. So sind wir nun in der Lage, Halbwertszeiten für tunnelnde Systeme mit einer Genauigkeit im Bereich der experimentellen Werte zu berechnen. Die zuverlässige Abschätzung von Tunnelraten ist der Schlüsselschritt, um die Abhängigkeiten des Prozesses vor dem Hintergrund chemisch interpretierbarer Größen zu verstehen.



**Figur 3:** Experimentelle Halbwertszeiten [in h] bislang bekannter Hydroxycarbene.

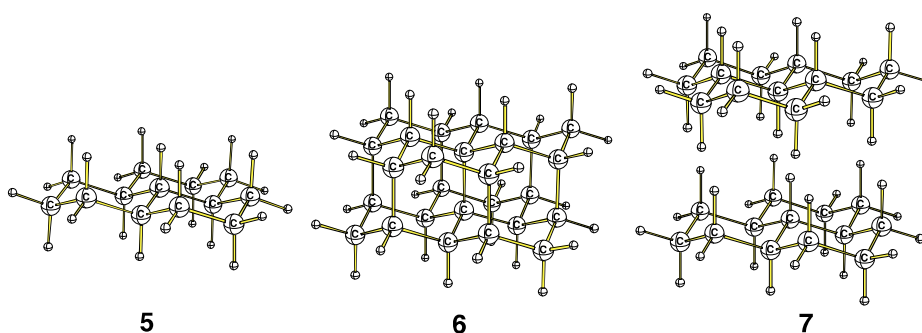
Aktuell befasst sich die Arbeitsgruppe mit den folgenden Themen:

- (a) Eine große Unbekannte in unseren Katalysatorsystemen sind deren aktive Vorzugskonformationen. Mit den bisherigen computerchemischen Methoden konnten wir diese noch nicht ausreichend bestimmen und möchten unsere Bemühungen daher auf Berechnungen nach dem AIM (atoms in molecules) Modell ausdehnen. Ein

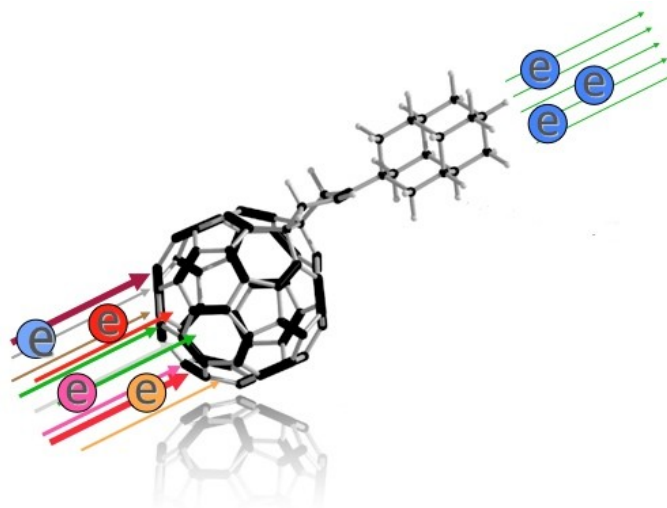


jüngstes Beispiel für unsere Arbeiten auf dem Gebiet der Organokatalyse ist die Cyanosilylierung von Aldehyden und Iminen (Strecker-Reaktion). Wir versuchen derzeit, die experimentell beobachtete Reaktivität des Katalysatorsystems mittels computerchemischer Ansätze zu verstehen. Der vorgeschlagene Mechanismus geht größtenteils von binären und ternären Komplexen relativ großer Moleküle aus, welche zudem einem computerchemisch zu erfassenden Solvenseffekt ausgesetzt sind. Für die computerchemische Evaluierung derartiger Systeme auf qualitativ hochwertigem Niveau sind wir daher von großen Computerressourcen abhängig.

- (b) Um den Beitrag dispersiver Wechselwirkungen zu chemischen Bindungen genauer zu untersuchen, möchten wir in Zukunft eine Breite an chemischen Systemen genaueren computerchemischen Betrachtungen unterwerfen. Unseren Fokus richten wir dabei insbesondere auf die Graphane, eine neue Stoffklasse zweidimensionaler Kohlenwasserstoffe, welche nicht nur theoretisch vorhergesagt, sondern bereits durch Hydrierung von Graphit experimentell dargestellt wurden. Da die reproduzierbare Synthese von Graphanen allerdings eine große experimentelle Herausforderung darstellt, ist diese Stoffklasse noch weitgehend unerforscht. In Abb. 4 sind kleine Graphane dargestellt und man erkennt deutlich, dass diese Materialien sehr stark der [111]-Oberfläche von hydrierten Diamant ähneln – einem organischen Material, welches aufgrund seiner negativen Elektronenaffinität einen exzellenten Elektronenemitter darstellt und somit für den Anwendungen im Bereich der organischen Elektronik in Frage kommt (z. B. als Kohlenwasserstoff-Diode, Abb. 5). Zur Berechnung der Eigenschaften dieser Systeme sind vor allem Dispersionskorrekturen notwendig, was *a posteriori* durch entsprechende Korrekturen (z. B. Grimmes D3-Ansatz oder hochparametrisierte Funktionale) oder unter Verwendung expliziter Korrelationskorrekturen (z. B. SCS-MP2 oder SAPT) möglich ist. Letztere Ansätze als benchmarks sind für solch große Systeme rechentechnisch äußerst aufwendig.

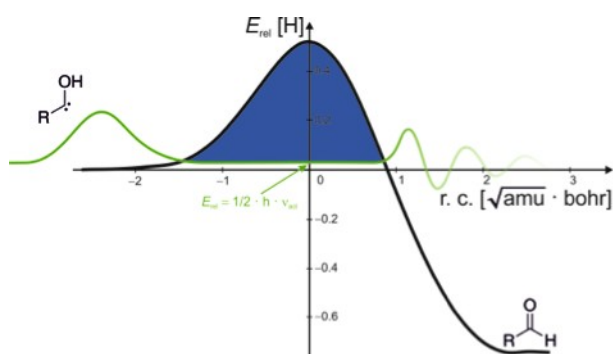


**Figur 4:** Ausgedehnte Alkane als Prototypen des Graphan-Systems: Einschichtiges [13]Graphan (**5**), Cyclohexamantane, natürlicher Diamandoid (**6**) und doppelschichtiges CH/s [13]Graphan (**7**).



**Figur 5:** Schematische Darstellung einer organischen Diode basierend auf einem Fulleren als  $e^-$  Akzeptor und einem Diamantoid als  $e^-$  Emitter.

- (c) Das quantenmechanische Tunneln wird im Hinblick auf chemische Reaktionen stark unterschätzt. Den Grund dafür sehen wir hauptsächlich in der schweren Detektierbarkeit. So werden beispielsweise kinetische Isotopeneffekte (der wichtigste Indikator für Tunneln) nicht routinemäßig gemessen. Um die starke Vielfalt chemischer Reaktionen auf Beiträge durch Tunneln zu *screenen*, arbeiten wir derzeit an einer Automatisierung der Tunnelrechnungen. Dabei wird zunächst die intrinsische Reaktionskoordinate des betrachteten Systems evaluiert und anschließend um den energetischen Beitrag der Nullpunktkorrektur basierend auf den Schwingungsfrequenzen, welche entlang des Reaktionspfades projiziert werden, erweitert (Abb. 6). Da wir genaueste Ergebnisse auf der Basis qualitativ hochwertigsten *ab initio* Methoden [AE-CCSD(T)/cc-pVQZ] benötigen (möglichst auch hochgradig parallelisiert, ist ein sehr großer computerchemischer Aufwand absehbar, weshalb wir auf große Rechnerressourcen angewiesen sind.



**Figur 6:** Schematische Darstellung der computerchemischen Erfassung des Tunnelprozesses auf der Basis des Durchtrittsintegrals.

## Publikationen

- P. R. Schreiner, H. P. Reisenauer, D. Ley, D. Gerbig, Chia-Hua Wu, and W. D. Allen 2011 *Methylhydroxycarbene: Tunneling Control of a Chemical Reaction Science* **332**, 1300–1303.
- D. Ley, D. Gerbig, J. P. Wagner, H. P. Reisenauer, and P. R. Schreiner 2011 *Cyclopropylhydroxycarbene J. Am. Chem. Soc.* **133**, 13614–13621.
- P. R. Schreiner, L. V. Chernish, P. A. Gunchenko, E. Yu. Tikhonchuk, H. Hausmann, M. Serafin, S. Schlecht, J. E. P. Dahl, R. M. K. Carlson, and A. A. Fokin 2011 *Overcoming lability of extremely long C–C alkane bond through attractive dispersion forces Nature* **477**, 308–311.
- A. A. Fokin, D. Gerbig, and P. R. Schreiner 2011  *$\sigma/\sigma$ - and  $\pi/\pi$ -Interactions are Equally important: Multilayered Graphanes J. Am. Chem. Soc.* **133**, 20036–20039.
- S. Grimme and P. R. Schreiner 2011 *Steric crowding can stabilize a labile molecule: Solving the hexaphenylethane riddle Angew. Chem. Int. Ed.* **50**, 12639–12642.
- P. R. Schreiner, H. P. Reisenauer, J. Romanski, and G. Mloston 2009 *A Formal Carbon-Sulfur Triple Bond: H–CS–O–H. Angew. Chem. Int. Ed.* **48**, 8133–8136.
- P. R. Schreiner, H. P. Reisenauer, F. Pickard, A. C. Simmonett, W. D. Allen, E. Mátyus, and A. G. Császár 2008 *Capture of Hydroxymethylene and its Fast Disappearance Through Tunnelling. Nature* **453**, 906–909.

# Speicherhierarchien im parallelen Umfeld

**Ulrich Meyer**

Institut für Informatik

Johann Wolfgang Goethe-Universität

Robert-Mayer-Straße 11-15, 60325 Frankfurt am Main

Die moderne Sichtweise des Algorithmen-Designs ist ein Kreislauf aus Entwurf, Analyse, Implementierung und experimenteller Bewertung von praktikablen Algorithmen. Realistische Modelle, für Maschinen und Anwendungen sind dabei essentiell um den Praxisbezug zu wahren.

Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit dem Design und Engineering von Algorithmen für große Datenmengen insbesondere Graphen [2] (z.B. Straßennetze oder auch die Links zwischen Webseiten), die nicht mehr in den Hauptspeicher eines Rechners passen. Durch Algorithmen mit besseren Zugriffsmustern haben wir schon mehr als tausendfache Beschleunigungen gegenüber dem State-of-the-Art erzielen können, z.B. für das theoretisch wie praktisch bedeutsame Problem des Findens kürzester Verbindungen in Netzwerken. Aktuelle Arbeiten behandeln insbesondere die speichereffiziente Graph-traversierung in sich dynamisch ändernden Daten und approximative Lösungen. Neben problemspezifischen Datenzugriffs- Lösungen untersuchen wir auch allgemeine Paging-Strategien, teilweise optimiert für neuartige Speichermedien wie Solid State Disks (SSDs). Berechnungen auf großen Datenmengen erfordern typischerweise eine Parallelverarbeitung; die Arbeitsgruppe beschäftigt sich deshalb auch mit Parallelisierungen der STXXL-Bibliothek für Externspeicher-Algorithmen.

Der bestehende LOEWE-CSC Rechner wurde bisher z.B. benutzt um theoretische Average-Case Analysen bei kürzeste-Wege Algorithmen experimentell zu stützen. Ebenso kam er zum Einsatz, um mittels parallel-externe Verfahren die Struktur des sog. A5/1 Graphen mit Anwendungen in der GSM-Verschlüsselung zu analysieren.

## Publikationen

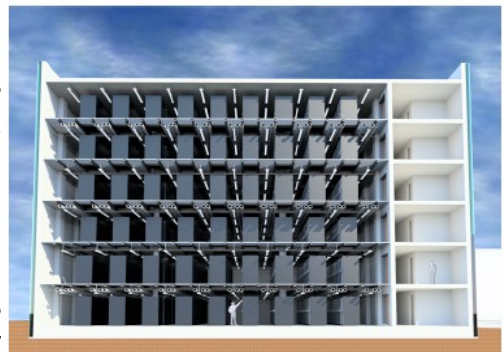
- A. Beckmann, J. Fedorowicz, J. Keller, and U.Meyer. 2012 *A structural analysis of the A5/1 state transition graph*. In Proc. 1st Workshop on Graph Inspection and Traversal Engineering (GRAPHITE), EPTCS.
- U. Meyer, A. Negoescu, and V. Weichert 2011 *New Bounds for Old Algorithms: On the Average-Case Behavior of Classic Single-Source Shortest Path Approaches*. In Proc. 1st. Int. ICST Conference on Theory and Practice of Algorithms in (Computer) Systems (TAPAS), volume 6595 of LNCS, pages 217-228, Springer.

# Architektur von Hochleistungsrechnern

**Volker Lindenstruth**  
**Frankfurt Institute for Advanced Studies**  
**Johann Wolfgang Goethe-Universität**  
**Ruth-Moufang Straße 1, 60438 Frankfurt am Main**

Die Schwerpunkte der Arbeiten dieses Lehrstuhls konzentrieren sich um die Erfassung und Verarbeitung sehr großer Datenmengen und Lösung komplexer Probleme in der Wissenschaft mit Hilfe von Höchstleistungsrechnern. Hierbei werden neue höchst effiziente Algorithmen für verschiedene Forschungsbereiche entwickelt, neue Rechner Architekturen konzipiert und wo notwendig neue Rechenzentrumsarchitekturen gebaut. Diese Arbeitsgruppe unterscheidet sich von den anderen Arbeitsgruppen, indem sie nicht „nur“ den Höchstleistungsrechner benutzt sondern auch am Rechner selbst forscht.

Für den LOEWE-CSC wurde ein neues Rechenzentrum konzipiert, das neue Standards in Energie-Effizienz setzt, indem es im Jahresmittel nur 7% der Rechnerleistung zur Kühlung benötigt, wo andere Systeme zwischen 40 und 100% benötigen. Darüber hinaus ist das Gesamtsystem CO<sub>2</sub> neutral. Basierend auf diesen Ergebnissen wurde mittlerweile am Helmholtzzentrum GSI ein Rechenzentrum (*MiniCube*) errichtet und es wird gerade das FAIR Tier-0 Rechenzentrum geplant (Abbildung rechts). In diesem Rechenzentrum werden alle Computer der FAIR Beschleuniger Anlage einschließlich der Experimente und alle IT Systeme des Helmholtzzentrums GSI untergebracht werden. Dieses Rechenzentrum (*GreenCube*) wird ebenfalls nach dem LOEWE-CSC Rollenmodell mit einer Kühleffizienz von 5% der Rechnerleistung arbeiten, Platz für 800 19“ Schränke bieten und 16 MW kühlen können. Die Baukosten sind mit 11 M€ sehr niedrig. Hier wird Ökonomie mit Ökologie verknüpft. Diese speziell für den LOEWE-CSC ursprünglich entwickelte Technologie wurde mit verschiedenen Preisen ausgezeichnet:



- Green-IT Award der Bundesregierung „Visionäre Gesamtkonzepte“ – November 2011 mit dem LOEWE-CSC
- 3. Platz bei den DataCenterDynamics Awards im Dezember 2011 in der Kategorie „Green IT“ mit dem LOEWE-CSC
- 2. Platz bei den DataCenterDynamics Awards im Dezember 2011 in der Kategorie „DataCenterBlueprint“ für *MiniCube* am GSI Helmholtzzentrum
- „Land der Ideen“ im Jahr 2012 mit dem LOEWE-CSC
- Deutscher Rechenzentrumspreis 2012 in der Kategorie energieeffiziente Kühlung – März 2012 für *MiniCube* am GSI Helmholtzzentrum
- „Green Cube“ Projekt des Monats des BMBF

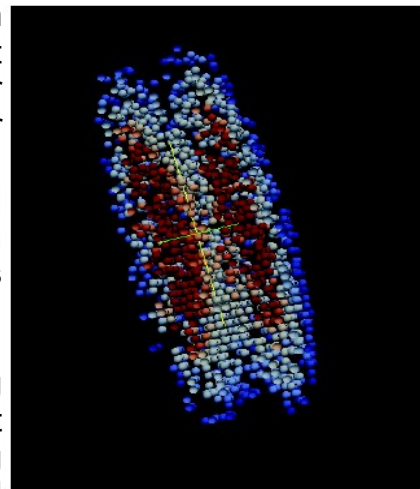
Die Universität Heidelberg hat gerade angekündigt, diese Technologie auch für ihr neues Rechenzentrum einsetzen zu wollen. Das King Abdulla Center for Science and Technology KACST wurde auf die Ergebnisse des LOEWE-CSC aufmerksam und sind mit dem FIAS einen F&E Kooperationsvertrag eingegangen, in dem basierend auf dem LOEWE-CSC für

2 M€ ein Prototype für einen 10 PF Rechner gebaut werden soll. Weitere Höchstleistungsrechner und Rechenzentren werden gerade in der Industrie nach dem LOEWE-CSC Konzept geplant.

Die Entwicklung von Moores Law hat mit dem Erreichen einer nicht mehr steigbaren Taktrate eine neue Wendung genommen, indem immer mehr Parallelität in den Prozessoren eingebaut wird. Computer werden also nicht mehr schneller sondern paralleler. Dies zeigt sich durch höhere Zahlen an Rechenkernen und auch an höherer Vektorisierung der Rechenwerke. Besonders deutlich kann man diesen Trend am Beispiel von ManyCore Prozessoren und GPGPUs erkennen. Heute unterstützt jeder gängige Prozessor mindestens 4x Vektorbefehle, die aber von Compilern nur selten genutzt werden. Hierdurch werden höchstens 25% der Rechenleistung von Prozessoren genutzt. Als Lösung dieses Problems wurde eine C++ Klassenbibliothek (VC) entwickelt, die es erlaubt, Hardware unabhängig und ohne jeden Overhead vektorisiert zu programmieren. Diese Bibliothek wird schon an vielen Stellen eingesetzt und wird gerade in die Kernbibliotheken der Analysesoftware des CERN: ROOT und AliROOT eingebaut.

Darüber hinaus wurde großes Augenmerk auf die Verwendung von GPGPUs gelegt. Die Leistungs- und Kosteneffizienz einer GPGPU übersteigt einen marktüblichen Prozessor um mehr als einen Faktor 20. Die Ausbeuten sind hier besonders groß wenn mit einfacher Fließkomma Genauigkeit gerechnet werden kann. Ein Beispiel ist der höchst effiziente DGEMM und Linpack Algorithmus des LOEWE-CSC, der mit einer Gesamteffizienz von 90% DGEMM 75% Linpack neue Standards setzte.

Es wurden eine Reihe von wissenschaftlichen Anwendungen im Kontext der SimLab Aktivitäten analysiert und weiter entwickelt. Zum Beispiel wurde der Frankfurter Molekulardynamik Code UrQMD in Zusammenarbeit mit der Gruppe um Prof. Dr. Marcus Bleicher neu entwickelt, wobei der Speicherabdruck auf 20% gesenkt werden konnte und das Programm ohne Verluste an Rechengenauigkeit um einen Faktor 160 beschleunigt wurde. Die Abbildung rechts zeigt zwei Lorentz kontrahierte Kerne kurz vor der Kollision.



Eine weitere Anwendung, die sehr hohe Rechenleistung erfordert sind die Gitter Eichtheorie. Diese Anwendung ist insbesondere problematisch, da sie verhältnismäßig wenig Rechenschritte pro Speicherzugriff erfordert, also I/O-bound ist. Hier aber sind GPGPUs ebenfalls den Prozessoren überlegen. In Zusammenarbeit mit der Gruppe um Owe Phillipsen wurde der Lattice QCD Code auf GPGPUs portiert und ist lauffähig. Er erreicht z.B. auf einer AMD 7970 für die Routine DSLASH 80 GFlops und für 200 GFlops für die Routine Heatbath. Es werden wesentliche weitere Leistungssteigerungen mit der neuesten gerade angekündigten GPU Generation erwartet. Bei den GPGPU Algorithmen wurde großes Augenmerk darauf gelegt, dass die Implementierung das verteilte Rechnen auf mehreren GPGPUs ermöglicht, was gerade entwickelt wird.

Im Forschungsbereich der Schwerionenforschung wurden die schnellen Ereignisrekonstruktionsalgorithmen für die zentrale Spurkammer des ALICE Experimentes auf GPGPUs portiert und sind seit 18 Monaten im 24/7 Regelbetrieb. Die gesamten

Rohdaten des Experimentes können mit einer Rate von 1 kHz, was einem Datenstrom von mehr als 25 GB/s entspricht mit Hilfe von nur 50 GPGPUs verarbeitet werden. Der LOEWE-CSC steht für weiterführende off-line Analyse der Daten des ALICE Experimentes zur Verfügung.

In Zusammenarbeit mit dem House of Finance und der Deutschen Bank ist das Frankfurt Cloud Projekt entstanden, in dem die Tauglichkeit kommerzieller und wissenschaftlicher Anwendungen in Cloud Umgebungen evaluiert wird. Gleichzeitig wird die Rechner- und Rechenzentrumsarchitektur für Cloud Systeme optimiert. Mittlerweile hat die Frankfurt Cloud zwei Standorte, von denen einer aus einem kleinen (5%) Anteil des LOEWE-CSC besteht. Die beiden Standorte sind über ein Hochgeschwindigkeitsnetz (ab August 2012 120 GBits/s) miteinander verbunden. Hierdurch können auch Anwendungen verteilt betrieben werden. An entsprechenden Cloud Massenspeichern wird gerade gearbeitet. Ein wichtiges Ergebnis dieser Forschung ist, dass es möglich ist, selbst die sehr I/O intensive Analyse der Hochenergiephysik effizient in Cloud Umgebungen zu betreiben, was das gesamte Betriebsmodell der Physik Analyse in diesem Feld verändern wird.

## Publikationen

- V. Lindenstruth, H. Stöcker Mai 2012 *Method for operating a data centre with efficient cooling means* Patent eingereicht bei EP, 12 003 748.6
- V. Lindenstruth, H. Stöcker *Method for operating a data centre with efficient cooling means* Patent eingereicht beim DPMA
- V. Lindenstruth, H. Stöcker 7.1.2010 *Method and apparatus for 3D Green-IT PCT: Building for a computer centre with devices for efficient cooling* Patent eingereicht beim DPMA, WO 2010/000440A1, PCT/EP2009/004704
- Betty Abelev et al. 2012 *Multi strange baryon production in Proton-Proton collisions at  $(S)^{1/2} = 7$  TEV with ALICE*, ALICE Collaboration, Phys.Lett. B712 309-318 DOI: 10.1016/j.physletb.2012.05.011
- J. Gerhard, B. Bauchle, V. Lindenstruth, M. Bleicher 2012 *How stable are transport model results to changes of resonance parameters? A URQMD Model study* Phys.Rev. C85 044912 DOI: 10.1103/PhysRevC.85.044912
- B. Abelev et al. 2012 *J/ψ Production as a function of charges particle multiplicity in Proton-Proton collisions at  $S^{1/2} = 7$  TEV* ALICE Collaboration Phys.Lett. B712 165-175 DOI: 10.1016/j.physletb.2012.04.052
- B. Abelev et al. 2012 *Heavy flavour decay muon production at forward rapidity in proton-proton collisions at  $\sqrt{s} = 7$  TEV* ALICE Collaboration Phys.Lett. B708 265-275; CERN-PH-EP-2011-215
- B. Abelev et al. 2012 *Measurement of event background fluctuations for charges particle jet reconstruction in PB-PB collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$  TEV* ALICE Collaboration JHEP 1203 053 DOI: 10.1007/JHEP03(2012)053
- B. Abelev et al. 2012 *Light vector meson production in proton-proton collisions at  $\sqrt{s} = 7$  TEV* ALICE Collaboration Phys.Lett. B710 557-568 DOI: 10.1016/j.physletb.2012.03.038
- M. Meoni, S. Böttger, P. Zelnicek, V. Lindenstruth, U. Keschull 2011 *Exploiting the ALICE HLT for proof by scheduling of virtual machines* J.Phys.Conf.Ser. 331 072054 DOI: 10.1088/1742-6596/331/7/072054
- J. Cuveland et al. 2011 *A first level event selector for the CBM experiment at FAIR* CBM Collaboration J.Phys.Conf.Ser. 331 022006, DOI: 10.1088/1742-6596/331/2/022006

- M. Richter et al. 2011 *Event reconstruction performance of the ALICE high level trigger for P+P collisions* ALICE Collaboration IEEE Trans.Nucl.Sci. **58** 1706-1713
- K. Aamodt et al. 2011 *ALICE HLT high speed tracking on GPU* ALICE Collaboration IEEE Transactions on Nuclear Science **58**,4 1845-1851
- K. Aamodt et al. 2011 *Rapidity and transverse momentum dependence of inclusive J/PSI production in proton-proton collisions at  $\sqrt{s} = 7$  TEV* ALICE Collaboration Phys.Lett. B704, 442-455
- D. Rohr, M. Bach, M. Kretz, V. Lindenstruth 2011 *Multi-GPU DGEMM and HPL on highly energy efficient clusters* IEEE Micro **31**,5 18-27
- M. Kretz, V. Lindenstruth 2011 *VC: A C++ Library for explicit vectorization Practice and Experience* DOI: [HTTP://DX.DOI.ORG/10.1002/SPE.1149](http://dx.doi.org/10.1002/spe.1149)
- K. Aamodt et al. 2011 *Higher harmonic anisotropic flow measurements of charged particles in PB-PB collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$  TEV* ALICE Collaboration Phys. Rev. Lett. **107**, 032301
- S. Kalcher, V. Lindenstruth 2011 *Accelerating Galois Field Arithmetic for Reed-Solomon erasure codes in storage applications* IEEE Cluster Computing 290-298
- K. Aamodt et al. 2011 *Production of pions, kaons and protons in PP collisions at  $\sqrt{s} = 900$  GEV with ALICE at the LHC* ALICE Collaboration Eur.Phys.J.C71:1655, e-Print: arXiv:1101.4110 [hep-ex]
- M. Bach, M. Kretz, V. Lindenstruth, D. Rohr 2011 *Optimized HPL for AMD GPU and multi-core CPU usage* Computer Science - Research and Development **26**, Issue 3, 153
- V. Lindenstruth 2011 *Grafikkarten für die Datenflut* Physik Journal 10 Nr. 1 23-28
- K. Aamodt et al. 2011 *Suppression of charged particle production at large transverse momentum in central PB-PB collisions at  $\sqrt{s} = 2.76$  TEV* ALICE Collaboration Phys.Lett.B696:30-39
- K. Aamodt et al. 2011 *Two-pion bose-Einstein correlations in central PB-PB collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$  TEV* ALICE Collaboration Phys.Lett.B696:328-337, e-Print: arXiv:1007.0516
- K. Aamodt et al. 2011 *Strange particle production in proton-proton collisions at  $\sqrt{s} = 0.9$  TEV with ALICE at the LHC* ALICE Collaboration Eur.Phys.J.C71:1594, e-Print: arXiv:1012.3257 [hep-ex]
- K. Aamodt et al. 2011 *Centrality dependence of the charged-particle multiplicity density at mid-rapidity in PB-PB collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$  TEV* ALICE Collaboration Phys.Rev.Lett.106:032301, e-Print: arXiv:1012.1657 [nucl-ex]
- K. Aamodt et al. 2011 *Suppression of charged particle production at large transverse momentum in central PB-PB collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$  TEV* ALICE Collaboration Phys.Lett.B696:30-39, e-Print: arXiv:1012.1004 [nucl-ex]



# Gravity Waves in the Atmosphere

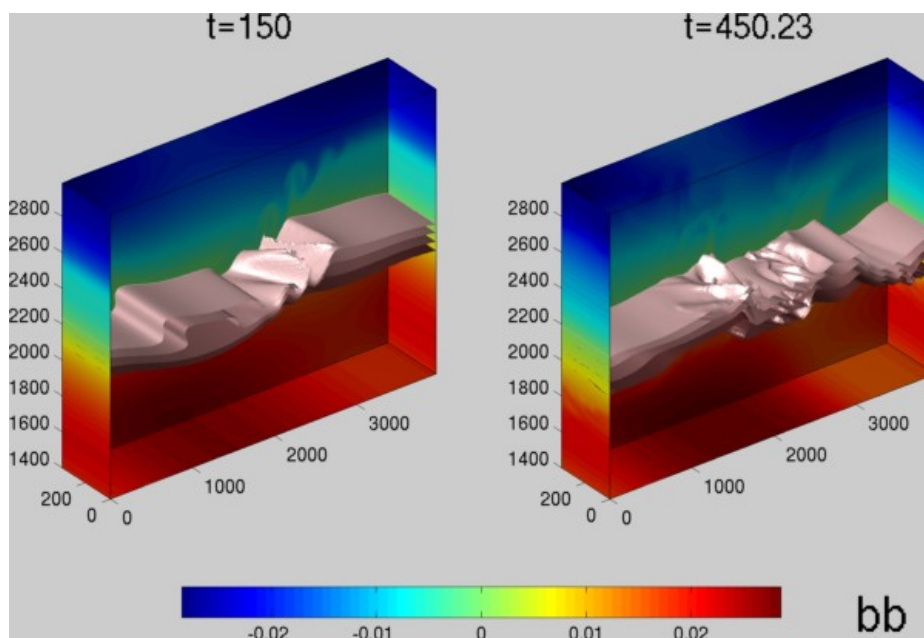
Ulrich Achatz

Institut für Atmosphäre und Umwelt  
Johann Wolfgang Goethe-Universität  
Altenhöfer Allee 1, 60438 Frankfurt am Main

In our group, we study the dynamics of gravity waves in the atmosphere. While long since recognized as an important driver of the general circulation, particularly in the middle-atmosphere, as well as a source of atmospheric turbulence, much remains not well understood about their generation, propagation and dissipation.

As gravity waves propagate upwards, they grow in amplitude and become unstable, eventually “breaking” and transferring their momentum to the background wind. Accounting for this process is vital to the correct modeling of weather and climate, but at present it is done through relatively crude parameterizations with many tunable parameters. In order to validate and improve parameterizations, data from realistic simulations of breaking gravity waves is required.

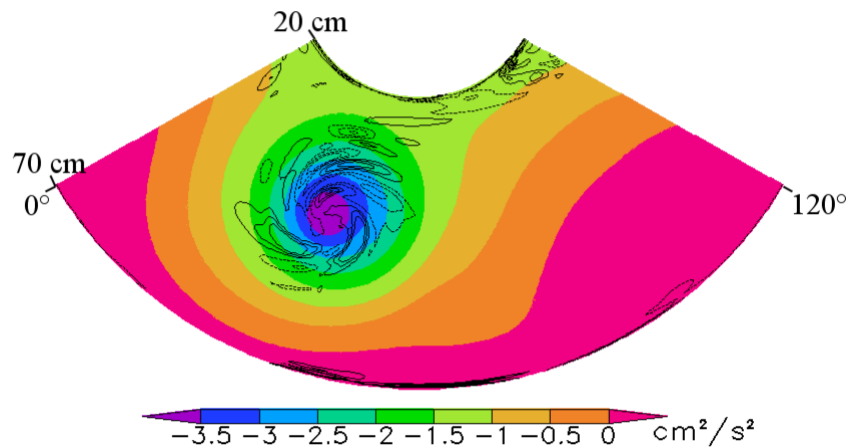
We use a combination of linear and nonlinear numerical analyses (Achatz 2007a,b; Fruman and Achatz 2012) to determine the most efficient model parameters and initial conditions for a three-dimensional direct numerical simulation of a breaking gravity wave. Such simulations require large vector or significantly parallelized computing clusters. See Figure 1 for an example of such a simulation performed at LOEWE-CSC.



**Figure 1** – Buoyancy in  $\text{ms}^{-2}$  at two times during the early stages of breaking of an inertia-gravity wave. Grey surfaces represent four values of buoyancy near the level of maximum instability. From computation on 128 processors at LOEWE-CSC.

We also study a poorly understood but probably significant source of atmospheric gravity waves, namely their emission by spontaneous imbalances of large-scale baroclinic waves. For this purpose, we use a numerical model of the well-known differentially-heated rotating annulus laboratory experiment. In addition to simulations of classic annulus configurations which can be tested against repeatable laboratory experiments, we study new configurations which are more atmosphere-like with regard to the background stratification of the fluid (see Figure 2).

Finally, we are interested in improving the treatment of gravity wave propagation in weather and climate models. Many existing parameterizations are based on WKB theory, which describes the dynamics of linear waves in a background varying slowly in space and time. However they inevitably include many further simplifications, such as neglecting the temporal variation of the background and the nonlinear feedback of the waves on the background. We are developing a numerical model based on WKB theory which includes these effects. The predictions of the model are then compared to a fully nonlinear wave-resolving large-eddy simulation code whose only approximation is the parameterization of subgrid-scale turbulence.



**Figure 2** – Simulation of baroclinic waves and gravity waves in the differentially heated rotating annulus. Color field: pressure indicating the baroclinic wave, thin black contour lines: horizontal divergence (interval:  $10^{-2} \text{ s}^{-1}$ ) indicating the gravity waves.

## Publikationen

- Fruman, M. D. and U. Achatz, 2012: *Secondary instabilities in breaking inertia-gravity waves*. J. Atmos. Sci., **69**, 303-322.
- Achatz, U., R. Klein and F. Senf, 2010: *Gravity waves, scale asymptotics and the pseudo-incompressible equations*. J. Fluid Mech., **663**, 120-147.
- Rieper, F., U. Achatz and S. Hickel, 2012: *Conservative integration of the pseudo-incompressible equations with implicit LES*. Submitted to Theor. Comput. Fluid Dyn.
- Achatz, U., 2007a: *The primary nonlinear dynamics of modal and nonmodal perturbations of monochromatic inertia-gravity waves*. J. Atmos. Sci., **64**, 74-95.
- Achatz, U., 2007b: *Modal and nonmodal perturbations of monochromatic high-frequency gravity waves: Primary nonlinear dynamics*. J. Atmos. Sci., **64**, 1977- 1994.
- Dolaptchiev, S. I., U. Achatz and I. Timofeyev, 2012: *Stochastic closure for local averages in the finite-difference discretization of the forced Burgers equation*. Theor. Comput. Fluid Dyn. doi 10.1007/s00162-012-0270-1

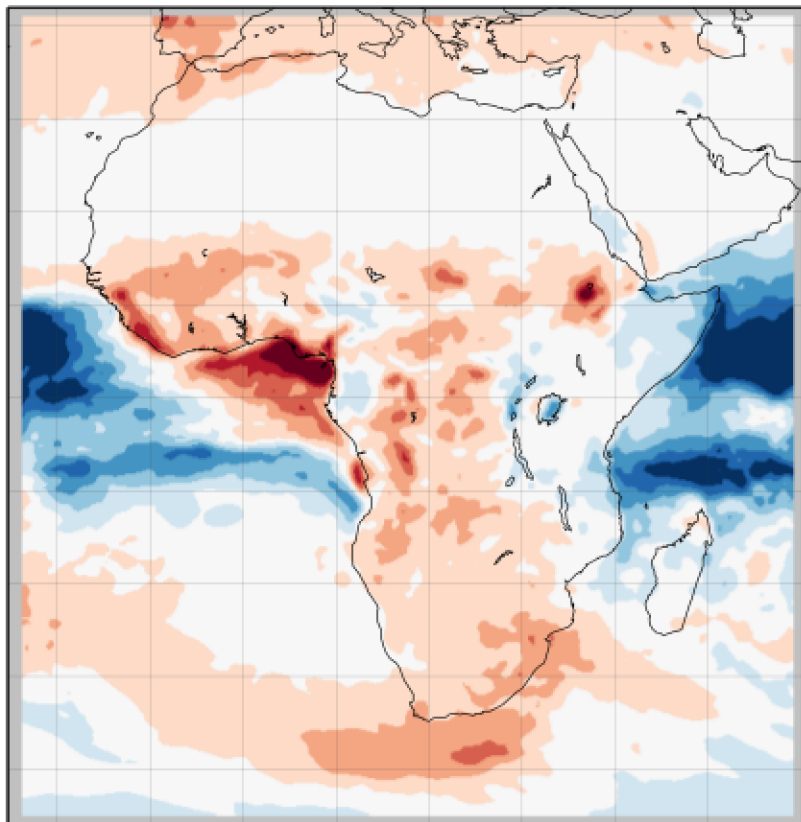
# Regionale Atmosphärische Modellierung

**Bodo Ahrens**

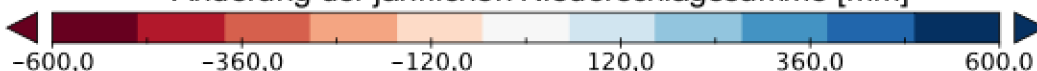
Institut für Atmosphäre und Umwelt  
Johann Wolfgang Goethe-Universität  
Altenhöfer Allee 1, 60438 Frankfurt am Main

Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit mesoskaligen atmosphärischen Prozessen und dem regionalen Energie- und Wasserkreislauf im Klimasystem. Zielsetzung ist dabei die regionale Klimavorhersage auf der saisonalen, interannuellen, bis zur multidekadischen Zeitskala zu verbessern, und Unsicherheiten zu verringern und zu quantifizieren. Hierbei steht der regionale Fokus im Vordergrund, da eine wirtschaftliche Verwertung von saisonalen Wettervorhersagen nur mit regionalen, räumlich gut aufgelösten atmosphärischen Simulationen möglich ist bzw. auch die Klimafolgenforschung gut

## COSMO-CLM Niederschlag 2071-2100 minus 1961-1990



Änderung der jährlichen Niederschlagssumme [mm]



**Figur 1:** Projizierte Niederschlagsänderung mit dem regionalen Klimamodellsystem COSMO-CLM. Nach diesem simulierten Szenario müssen Länder in der Westafrikanischen Monsun Region und im Südlichen Afrika mit bis zu 40% weniger Niederschlag rechnen. Deutlich werden die regionalen Unterschiede, die mit heutigen globalen Klimamodellen noch nicht erfasst werden können.

aufgelöste Antriebsdaten wie Niederschlags- und Temperaturfelder benötigt (Dobler & Ahrens 2008; Casanova & Ahrens 2009). Existierende globale saisonale Vorhersagesysteme bzw. Klimamodellsysteme dienen dabei zum Antrieb des regionalen Klimamodells COSMO-CLM der Arbeitsgruppe (<http://www.clm-community.eu>).

Die Zielregionen dieser Arbeiten sind nicht nur Europa sondern aktuell auch Südostasien (EU Projekt WATCH) und Afrika (CORDEX/IPCC, LOEWE BiK-Forschungszentrum, BMBF/MiKliP) und sollen auf alle Kontinente ausgeweitet werden, da durch die verschiedenen Klimate bestehende Unsicherheiten im Modellsystem (Dobler & Ahrens 2009; Kothe et al. 2009) bestens identifiziert werden können und die Anwendbarkeit der Projektionen verbessert wird. In den letzten Jahren besteht ein Trend zu probabilistischen Wettervorhersagen, da auch mit angenommenen perfekten Modellen eine Initialisierungsunsicherheit zu mit Simulationszeitraum zunehmender Vorhersageunsicherheit führt. Diese probabilistischen Aussagen werden durch Ensemblevorhersagen mit jeweils leicht variierten Anfangsbedingungen approximiert (Tödter & Ahrens 2012, Jaun & Ahrens 2009). Der Trend zu probabilistischen Aussagen mittels Ensemblesimulation findet zunehmend Eingang in die globalen und regionalen Klimaprojektionen (z.B. in den dekadischen Klimaprognosen, die in Projekten DecReg und DEPARTURE in der Arbeitsgruppe mit BMBF-Förderung durchgeführt werden). Wir wollen diesen Zugang konsequent in der saisonalen bis multidekadischen regionalen Klimamodellierung umsetzen.

## Publikationen

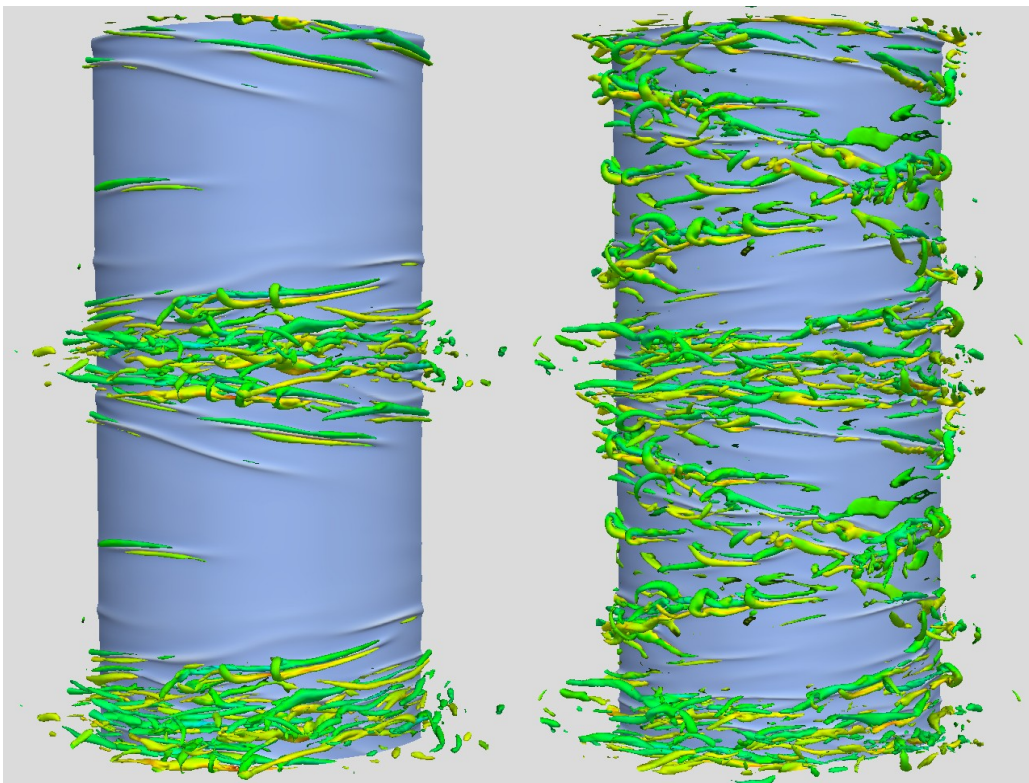
- Asharaf, S., A. Dobler, B. Ahrens (2012). *Soil moisture--precipitation feedback processes in the Indian summer monsoon season*. *J of Hydrometeorology*. [Early online](#).
- Tödter, J., B. Ahrens (2012). *Generalization of the Ignorance Score: Continuous Ranked Version and its Decomposition*. *Mon. Wea. Rev.*, 140(6), 2005-15. <http://dx.doi.org/10.1175/MWR-D-11-00266.1>
- Dobler, A., B. Ahrens (2011). *Four climate change scenarios for the Indian summer monsoon by the regional climate model COSMO-CLM*. *Journal of Geophysical Research - Atmospheres*, 116, D24104, 16pp. [doi:10.1029/2011JD016329](https://doi.org/10.1029/2011JD016329)
- Dobler, A., R. Müller, B. Ahrens (2011). *Development and evaluation of a method for estimating evapotranspiration from satellite data*. *Meteorol. Zeitschrift*, 20(6), 615-623. <http://dx.doi.org/10.1127/0941-2948/2011/0256>
- Krähenmann, S., P. Bissolli, J. Rapp, and B. Ahrens (2011). *Spatial gridding of daily maximum and minimum temperatures in Europe*. *Meteorology and Atmospheric Physics*, 114, 151-161. [doi:10.1007/s00703-011-0160-x](https://doi.org/10.1007/s00703-011-0160-x)
- Asharaf, S., A. Dobler, B. Ahrens (2011). *Soil moisture initialization effects in the Indian monsoon system*. *Adv. Sci. Res.*, 6, 161–165, 2011. [doi:10.5194/asr-6-161-2011](https://doi.org/10.5194/asr-6-161-2011)
- Lucas-Picher, P., J.H. Christensen, F. Saeed, P. Kumar, S. Asharaf, B. Ahrens, A. Wiltshire, D. Jacob, and S. Hagemann. (2011). *Can regional climate models represent the Indian Monsoon?* *J. of Hydrometeorology*, 12, 849-868. [doi:10.1175/2011JHM1327.1](https://doi.org/10.1175/2011JHM1327.1)
- Kothe, S., Dobler, A., Beck, A., B. Ahrens (2011). *The radiation budget in a regional climate model*. *Climate Dynamics*, 36:1023-1036, [DOI: 10.1007/s00382-009-0733-2](https://doi.org/10.1007/s00382-009-0733-2)
- Kothe, S., B. Ahrens (2010). *On the radiation budget in regional climate simulations for West Africa*, *J. Geophys. Res.*, 115, D23120. [doi:10.1029/2010JD014331](https://doi.org/10.1029/2010JD014331)
- Krähenmann, S., B. Ahrens (2010). *On daily interpolation of precipitation backed with secondary*

- information*. Advances in Science and Research. 4, 29–35, 2010. [www.adv-sci-res.net/4/29/2010/](http://www.adv-sci-res.net/4/29/2010/)
- Dobler, A., B. Ahrens (2010). *Analysis of the Indian summer monsoon system in the regional climate model COSMO-CLM*. JGR–Atmospheres. 115, D16101. doi:10.1029/2009JD013497
  - Jaun, S., B. Ahrens (2009). *Evaluation of a probabilistic hydrometeorological forecast system*. Hydrol. Earth Syst. Sci., 13, 1031–1043, [www.hydrol-earth-syst-sci.net/13/1031/2009/](http://www.hydrol-earth-syst-sci.net/13/1031/2009/)
  - Casanova, S., B. Ahrens (2009). *On the weighting of multi-model ensembles in seasonal and short-range weather forecasting*. Mon. Wea. Rev., 137, 3811-3822, DOI: 10.1175/2009MWR2893.1
  - Ahrens, B. (2009). *On evaluation of precipitation fields with rain station data*. Interfacing Geostatistics and GIS, ed. J. Pilz, Springer, ISBN-10: 3-540-33235-9, pp. 121–136
  - Ahrens, B. and Walser, A. (2008). *Information based skill scores for probabilistic forecasts*. Mon. Wea. Rev., 136, 352-363
  - Ahrens, B. and Beck, A. (2008). *On upscaling of rain-gauge data for evaluating numerical weather forecasts*. Meteorology and Atmospheric Physics, 99, 155-167
  - Jaun, S., B. Ahrens, A. Walser, T. Ewen, and C. Schär (2008). *A probabilistic view on the August 2005 floods in the upper Rhine catchment*. Nat. Hazards Earth Syst. Sci., 281-291
  - Dobler, A., B. Ahrens (2008). *Precipitation by a regional climate model and bias correction in Europe and South-Asia*. Meteorol. Zeitschrift, 17(4), 499-509

# Taylor-Couette Strömung bei hohen Reynoldszahlen und Turbulenzübergang in der Rohrströmung

Bruno Eckhardt  
Fachbereich Physik  
Philipps-Universität Marburg  
Renthof 6, 35032 Marburg

Die Arbeitsgruppe Komplexe Systeme befasst sich mit verschiedenen Aspekten nichtlineare, komplexer Systeme und ihrer Dynamik in Raum und Zeit. Ein Schwerpunkt bilden die Untersuchungen zum Turbulenzübergang in Scherströmungen, wie der Rohrströmung und der ebenen Couette Strömung. Durch die Übertragung und Weiterentwicklung von Konzepten aus der nichtlinearen Dynamik sind wesentliche Einsichten in den Turbulenzübergang gewonnen worden. Die Identifikation von stationären und periodischen Zuständen mit groß skaligen kohärenten Strukturen, die Identifikation chaotisch-transienter Sätteln im Übergangsbereich und die Entwicklung des Konzeptes der 'Edge-states' als Schlüssel für den Übergangsmechanismus gehören dazu. In jüngerer Zeit hat sich das Augenmerk auf die raum-zeitliche Dynamik, die Untersuchung von Lokalisierungseigenschaften und die Vernetzung in räumlich ausgedehnten Systemen verlagert.



**Figur 1:** Visualisierung von Wirbelstrukturen am Innenzylinder zu zwei unterschiedlichen Zeitpunkten bei schwacher Gegenrotation des äußeren Zylinders. Die Wirbel (eingefärbte Schläuche) wechseln zwischen Zuständen, in denen sie in Bändern angeordnet oder über die gesamte Fläche verteilt sind. Der Flüssigkeitstransport durch die Wirbel führt zu Streifen in der Winkelgeschwindigkeit nahe des Innenzylinders, wie die blau-graue Isofläche dieser Größe zeigt.

Ein zweiter Schwerpunkt liegt bei der Untersuchung vollturbulenter Systeme, wie etwa dem Taylor-Couette System (5), bei dem es um das Skalenverhalten für große Reynoldszahlen und die Dynamik der Grenzschichten geht.

Für all diese Simulationen wird viel lokale Rechenzeit benötigt, da Simulationen mit möglichst vielen verschiedenen Anfangsbedingungen durchgeführt werden müssen.

In den letzten 5 Jahren sind aus den Aktivitäten der Arbeitsgruppe insgesamt 40 Beiträge in begutachteten Journalen sowie 9 Beiträge zu Konferenzen erschienen. Im Zusammenhang mit Rechnungen am CSC sind insbesondere die folgenden Publikationen relevant.

## Publikationen

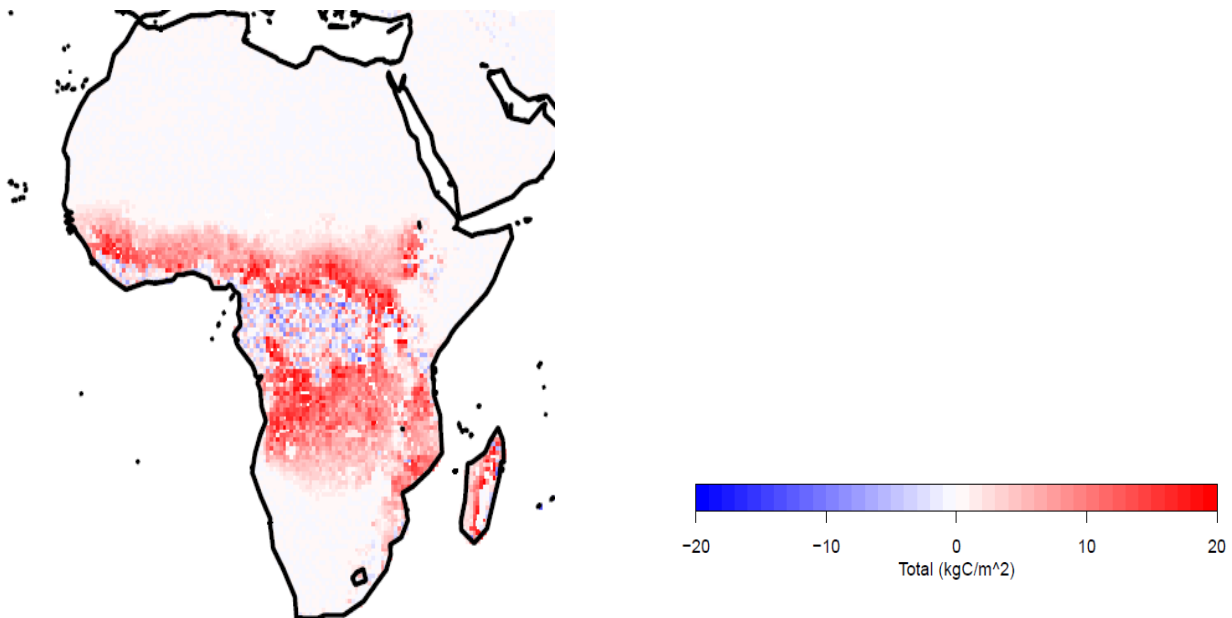
- B. Eckhardt, S. Grossmann and D. Lohse, 2007 *Turbulent transport in Rayleigh-Bénard, Taylor-Couette and pipe flows*, Europhys. Letters **78**, 24001
- B. Eckhardt, D. Lohse and S. Grossmann, 2007 *Torque scaling in turbulent Taylor-Couette flow between independently rotating cylinders*, J. Fluid Mech. **571**, 221–250
- T.M. Schneider, B. Eckhardt und J.A. Yorke, 2007 *Turbulence transition and the edge of chaos in pipe flow*, Phys. Rev. Lett. **99**, 034502
- T.M. Schneider, D. Marinc und B. Eckhardt 2010 *Localised edge states nucleate turbulence in extended plane Couette cells* Journal of Fluid Mechanics **646**, 441-451
- B. Eckhardt, 2011 *A transition point for turbulence*, Science **333**, 165-166

# Wechselwirkungen zwischen Klima und terrestrischer Biosphäre

Thomas Hickler

Biodiversity and Klima Forschungszentrum (BiK-F)  
Johann Wolfgang Goethe-Universität  
Senckenberganlage 25, 60325 Frankfurt am Main

Die AG von Prof. Hickler entwickelt komplexe Computermodelle, welche die Wechselwirkungen zwischen Klima und terrestrischer Biosphäre darstellen. Dazu gehören Projektionen der möglichen Effekte des Klimawandels auf Ökosysteme und deren Dienstleistungen (z. B. Holzproduktion, Kohlenstoffspeicher) sowie die biologische Vielfalt. Außerdem wird untersucht, wie Ökosysteme wiederum das Klima beeinflussen können, z. B. über Veränderungen des Kohlenstoffkreislaufs. In einer aktuellen Studie haben wir untersucht, welche Rolle Feuer bei der Bildung von Savannen spielt. Die Simulationen deuten darauf hin, dass Feuer Savannen maßgeblich prägt. Nur wenn Feuer explizit im Modell dargestellt ist, werden die afrikanischen Savannen simuliert (Abb. 1) und die simulierte Biomasse stimmt gut mit Satelliten-basierten Schätzungen überein (nicht gezeigt).



**Figur 1:** Unterschied in der simulierten Biomasse zwischen einer Modellrechnung mit Feuer und einer ohne (nur Klima; ohne Feuer – mit Feuer). Ein Unterschied von 20kg Kohlenstoff (C) pro m<sup>2</sup> entspricht der Transformation eines geschlossenen Waldes in eine offene Savanne.



## Publikationen

- Allen, J. R. M., T. Hickler, J. S. Singarayer, M. T. Sykes, P. J. Valdes, and B. Huntley. 2010. *Last glacial vegetation of northern Eurasia*. *Quaternary Science Reviews* **29**:2604-2618.
- Hickler, T., B. Smith, I. C. Prentice, K. Mjöfors, P. Miller, A. Arneth, and M. T. Sykes. 2008. *CO<sub>2</sub> fertilization in temperate FACE experiments not representative of boreal and tropical forests*. *Global Change Biology* **14**:1531-1542.
- Hickler, T., K. Vohland, J. Feehan, P. A. Miller, B. Smith, L. Costa, T. Giesecke, S. Fronzek, T. R. Carter, W. Cramer, I. Kühn, and M. T. Sykes. 2012. *Projecting the future distribution of European potential natural vegetation zones with a generalized, tree species-based dynamic vegetation model*. *Global Ecology and Biogeography* **21**:50-63.
- Kümmerle, T., T. Hickler, J. Olofsson, G. Schurgers, and V. C. Radeloff. 2011. *Reconstructing range dynamics and range fragmentation of European bison for the last 8000 years*. *Diversity and Distributions* **18**:47-59.
- Morales, P., T. Hickler, B. Smith, M. T. Sykes, and D. P. Rowell. 2007. *Changes in European ecosystem productivity and carbon stocks driven by Regional Climate Model outputs*. *Global Change Biology* **13**:108-122.

# Bernstein Fokus Neurotechnologie: Frankfurt

**Visvanathan Ramesh**  
Institut für Mathematik und Informatik  
Johann Wolfgang Goethe-Universität  
Robert-Mayer-Straße 10, 60325 Frankfurt am Main

Das Ziel der des Bernstein Fokus Neurotechnologie ist es, signifikante Fortschritte beim Verständnis der visuellen Wahrnehmung, d.h. des Sehens, zu machen und diese Erkenntnisse in technische Systeme zu übersetzen. Visuelle Informationen sind prinzipiell unvollständig (2d Projektion, Verdeckungen, etc.), haben eine hohe Variabilität (Beleuchtung, Reflexionen, etc.), sind komplex und mehrdeutig. Die Interpretation visueller Szenen, Handlungen und Objekte stellt technische Systeme immer noch vor große Herausforderungen und ist ein weitestgehend ungelöstes wissenschaftliches und technisches Problem. Mit dem menschlichen Gehirn haben wir gleichzeitig ein Beispiel für ein System, das zuverlässig, energieeffizient und in Echtzeit visuelle Informationen verarbeitet und handlungsrelevante Informationen ableitet. Das menschliche Gehirn ist sowohl durch Millionen Jahre von Evolution, als auch, und das ist nicht zu unterschätzen, durch Lernen während der Lebenszeit für diese Aufgabe vorbereitet.

Den Teilprojekten aus dem Bernstein Fokus ist gemeinsam, dass diese große Datenmengen zu verarbeiten haben. Von diesen Datensätzen ist die Struktur von Objekten und Szenen zu lernen und relevante Parameter sind in Repräsentationen zu speichern. Die Daten stammen teilweise aus Videosequenzen, die mit Multi-Kamera-Anordnungen aufgenommen wurden. Somit stehen, analog zum menschlichen Gehirn, große Datenmengen zur Verfügung von denen unüberwacht gelernt werden kann. Allerdings stehen nur vergleichsweise wenige interpretatorische und etikettierte Daten zur Verfügung, da diese aufwändig manuell hinzugefügt werden müssen. Um die Verfügbarkeit von etikettierten Daten zu erhöhen, werden Techniken der virtuellen Realität (Computer-Graphik) eingesetzt, um künstlich generierte visuelle Daten zu erzeugen. Für diese stehen vollständige Interpretation und Ground-Truth Informationen bereit.

## Publikationen

- J. Bornschein, Z. Dai, and J. Lücke, "Approximate EM Learning on Large Computer Clusters," in *LCCC: NIPS 2010 Workshop on Learning on Cores, Clusters and Clouds*, 2010, pp. 1-4.
- Z. Dai, J. A. Shelton, J. Bornschein, A. S. Sheikh, and J. Lücke, "Combining approximate inference methods for efficient learning on large computer clusters," in *BigLearn: NIPS 2011 Workshop Big Learning*, 2011, pp. 1-5.
- G. Puertas, J. Bornschein, and J. Lücke, "The Maximal Causes of Natural Scenes are Edge Filters," in *Advances in Neural Information Processing Systems 23*, 2011, pp. 1939-1947.
- J. Bornschein, J. A. Shelton, A.-S. Sheikh, and J. Lücke, "The Maximal Causes of Binary Data," in *Front. Comput. Neurosci. Conference Abstract: Bernstein Conference on Computational Neuroscience.*, 2011.

- J. Bornschein, M. Henniges, G. Puertas, and J. Lücke, “Sparse codes of V1 simple-cells and the emergence of globular receptive fields – a comparative study,” in *Proc. Computational and Systems Neuroscience*, 2011, vol. 30.
- J. A. Shelton, J. Bornschein, A.-S. Sheikh, P. Berkes, and J. Lücke, “Select and Sample — A Model of Efficient Neural Inference and Learning,” in *Advances in Neural Information Processing Systems 24*, 2012.
- Z. Dai and J. Lücke, “Autonomous Cleaning of Corrupted Scanned Documents -- A Generative Modeling Approach,” in *IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, 2012.
- Z. Dai and J. Lücke, “Unsupervised Learning of Translation Invariant Occlusive Components,” in *IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, 2012.