



**BremHLR**

Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen

**Statusbericht 2010**  
**des**  
**Kompetenzzentrums**  
**für**  
**Höchstleistungsrechnen Bremen**  
**– BremHLR –**

Bremen, Mai 2011



Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen

© 2003-2011 BremHLR – Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen

[www.bremhllr.uni-bremen.de](http://www.bremhllr.uni-bremen.de)

## Das Berichtsjahr 2010 in Stichpunkten

- Bremer HLRN-Nutzung weiter gestiegen
- Mitarbeit am Green-IT Housingkonzept der Universität Bremen
- Dritte Ausbaustufe des Supercomputers am HLRN installiert
- 5. Workshop zur Einführung in die parallele Programmierung
- HLRN User Forum an der Universität Bremen

## Inhaltsverzeichnis

1	Das BremHLR: Aufgaben und organisatorische Struktur .....	5
1.1	Aufgaben.....	5
1.2	Struktur.....	5
1.3	Sitzungen des Lenkungsausschusses .....	6
2	Tätigkeitsprofil des BremHLR im Berichtszeitraum.....	6
2.1	Unterstützung des HLRN.....	6
2.2	Tätigkeiten mit Bezug zur Universität Bremen .....	6
2.3	Weitere Aktivitäten des BremHLR.....	7
3	Statistische Angaben zu den Bremer Höchstleistungsprojekten .....	8
4	Veranstaltungen mit Beteiligung des BremHLR .....	10
5	Informationen zur Infrastruktur: Die dritte Ausbaustufe des Supercomputers HLRN-2.....	12
6	Projektberichte.....	14
6.1	hbc00001: Tailoring the electronic properties of TiO <sub>2</sub> . Defect engineering in TiO <sub>2</sub> – from bulk to nanostructures.....	14
6.2	hbc00002: First Principles Molecular Dynamics Simulations of Di- and Tri-peptides at Titanium Dioxide Surfaces .....	17
6.3	hbc00004: Molecular simulation studies of the interaction of weakly coordinating ions with biological interfaces.....	20
6.4	hbi00002: A matter of disorder. Oxidized silicon nanowires as biomolecular sensors: ab initio structural and electronic analysis .....	23
6.5	hbi00007: Design neuer Metalloxyd-Halbleitermaterialien zur Wasserstofferzeugung durch Sonnenlicht (Photoelektrolyse). Computational Combinatorial Materials Science study to optimize the band gap for metal-oxide based materials for their usage in photoelectrolysis cells .....	26
6.6	hbk00005: Wasser über den Wolken. Berechnung der Wasserdampfkonzentrationen aus Limb-Messungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY .....	29
6.7	hbk00021: Unstructured Mesh Ocean Modelling. Global and regional ocean-ice simulations using FESOM: Toward applications with variable resolution and regional focus	
	33	
6.8	hbk00025: Steuert die Hebung von Gebirgen den Rückzug des tropischen Regenwaldes in Afrika? Die Entwicklung der tropischen Regenzone im späten Neogen...36	
6.9	hbk00026: Tsunami-Simulation. Modellierung und Simulation von Tsunami-Ausbreitung und -Überflutung.....	39

6.10	hbk00027: Wie stabil ist das ozeanische Förderband? Atmosphärische Feuchtetransporte und thermohaline Zirkulation: Untersuchung möglicher Rückkopplungsmechanismen für abrupte Klimaschwankungen .....	42
6.11	hbp00002: Nanostructures for biosensing devices. Functionalization of semiconductor nanowires.....	45
6.12	hbp00003: Heisser Tanz. Verschmelzung von Neutronensternen.....	48

# 1 Das BremHLR: Aufgaben und organisatorische Struktur

## 1.1 Aufgaben

Das Land Bremen beteiligt sich am Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen – HLRN – um an dem rasanten Fortschritt der Computer- und Softwaretechnologie teil zu haben. Das Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen – BremHLR – unterstützt dazu Wissenschaftler im wissenschaftlichen Rechnen insbesondere im Land Bremen. Unterstützung wird für Projekte sowohl in der Konzeption, der Antragstellung als auch der Durchführung geleistet. Der Schwerpunkt der Unterstützung liegt hierbei auf Projekten auf dem HLRN-System. Seit 2005 wurde die Betreuung aber auch auf Rechenprojekte an den nationalen Höchstleistungsrechenzentren wie z. B. dem John von Neumann-Institut für Computing (NIC) in Jülich ausgeweitet.

Als Bestandteil im Kompetenznetzwerk des HLRN beteiligt sich BremHLR unter anderem an der fachspezifischen Nutzerberatung, der Pflege von Software-Paketen und der Veranstaltung überregionaler Nutzerworkshops. Die Geschäftsstelle des BremHLR ist an der Universität Bremen im Zentrum für Technomathematik angesiedelt.

Das BremHLR wurde am 1. Juli 2003 als Kooperation zwischen der Universität Bremen (UB), der Jacobs University Bremen (JUB) und dem Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung (AWI) gegründet. Seit April 2008 ist auch die Hochschule Bremerhaven (HBHV) Kooperationspartner des BremHLR. Das Kompetenzzentrum wird von den beteiligten Kooperationspartnern sowie dem Bremer Senator für Bildung und Wissenschaft (SfBW) finanziell getragen.

## 1.2 Struktur

Dem Lenkungsausschuss des BremHLR als oberstes beschlussfassendes und steuerndes Gremium gehören Vertreter der kooperierenden Einrichtungen an. Im Einzelnen sind dies:

- Prof. Dr. Alfred Schmidt (UB/Zentrum für Technomathematik ZeTeM)
- Prof. Dr. Wolfgang Hiller (AWI/Rechenzentrum)
- Prof. Dr. Ulrich Kleinekathöfer (JUB)
- Prof. Dr. Stephan Frickenhaus (HBHV)
- Helmut Wolf (SfBW)

Die fachspezifische Betreuung der Projekte am Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN), sowie von Projekten an anderen nationalen Höchstleistungsrechenzentren wird von den Fachberatern des BremHLR geleistet, die ebenfalls den Einrichtungen der Kooperationspartner angehören. Im Berichtszeitraum waren folgende Fachberater tätig:

- Dr. Lars Nerger (AWI/Rechenzentrum, UB/ZeTeM, Leiter Geschäftsstelle)
- Thorsten Coordes (UB/ZARM)

- Dr. Achim Geleßus (JUB/CLAMV)
- Dr. Kerstin Fieg (AWI/Rechenzentrum)

Die Geschäftsstelle ist verantwortlich für die Organisation der Workshops (siehe Abschnitt Veranstaltungen) und die Unterstützung der Nutzer, insbesondere im Antragsverfahren. Das Sekretariat der Geschäftsstelle wird betreut von

- Julitta von Deetzen.

### **1.3 Sitzungen des Lenkungsausschusses**

Am 1. Oktober 2010 fand an der Universität Bremen die jährliche Sitzung des BremHLR Lenkungsausschusses unter Anwesenheit der Fachberater statt. Aus den beteiligten Zentren war jeweils mindestens ein Vertreter anwesend. Ein wichtiges Thema der Sitzung war die Steigerung der Nutzung des HLRN durch Bremer Projekte. Trotz mehrerer neuer Projekte, die im Laufe des Jahres 2010 begonnen wurden, bzw. absehbar zum vierten Quartal anlaufen, gibt es noch Kapazität für weitere Projekte. Die Mitglieder des BremHLR werden daher weiterhin in dem Bereich der Projektakquise arbeiten müssen. Abschließend wurden mögliche Nutzerworkshops für das Jahr 2011 besprochen.

## **2 Tätigkeitsprofil des BremHLR im Berichtszeitraum**

### **2.1 Unterstützung des HLRN**

Ein Schwerpunkt der Aktivitäten des BremHLR lag auch in diesem Berichtszeitraum in der Unterstützung des HLRN. Neben den Tätigkeiten von Wolfgang Hiller als Mitglied der Technischen Kommission sowie Alfred Schmidt als Mitglied des Wissenschaftlichen Ausschusses besteht die Unterstützung des HLRN durch das BremHLR hauptsächlich in der Fachberatung für Bremer Projekte am HLRN. Ferner beteiligen sich die Fachberater an der Pflege von numerischen Bibliotheken auf dem Rechensystem sowie der Dokumentation.

### **2.2 Tätigkeiten mit Bezug zur Universität Bremen**

Das BremHLR wurde 2003 gegründet, um Wissenschaftlern die Möglichkeit der Unterstützung im wissenschaftlichen Rechnen zu bieten. Bundesweit sieht die Strategie eine Versorgung des wissenschaftlichen Rechnens mit Rechenressourcen durch eine pyramidenförmige Versorgungsstruktur vor. An der Spitze der Pyramide steht das Höchstleistungsrechnen an den nationalen Zentren (Jülich, München, Stuttgart), die sich als „Gauss Zentrum für Supercomputing“ zusammengeschlossen haben. Die mittlere Schicht deckt das Hochleistungsrechnen mit Zentren/Verbänden der Gauss-Allianz wie dem HLRN ab. Für die Versorgung mit HPC-Servern auf der untersten Ebene sind die Hochschulen und die einzelnen Institute verantwortlich.

An der Universität Bremen wird zurzeit über eine Umstrukturierung dieser untersten Ebene nachgedacht. Ziel der Überlegungen ist es, durch Ressourcen-Sharing brachliegende Rechenkapazität auch über einzelne Fachbereiche und Institute hinweg verfügbar zu machen. Verfügbare Systeme sollen so effizienter genutzt werden und es können Kosten reduziert werden. Der IT-Steuerungskreis der Universität Bremen diskutiert deshalb über die Konsolidierung der Versorgung durch ein Green-IT Housing Center welches eine Strom- und Ressourcenschonende zentrale Aufstellung von Clustersystemen aus den Fachbereichen und Instituten der Universität ermöglicht. Das BremHLR hat dafür die interne Arbeitsgruppe zur Konzeption des Green-IT Housing Centers unterstützt. In dieser AG sind Vertreter der Universitätsleitung, des IT-Steuerungskreises und des Gebäudemanagements sowie

BremHLR und das ZFN vertreten. Die AG hat ein Konzept erstellt auf dessen Basis die Universität beim BMU einen Förderantrag gestellt hat.

### **2.3 Weitere Aktivitäten des BremHLR**

Im Veranstaltungsjahr 2010 wurde vom BremHLR der *5. Workshop zur Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* organisiert und durchgeführt. Mit 31 Teilnehmern war der Workshop wieder sehr gut besucht.

Der Workshop wurde in der Zeit vom 18. bis zum 22. Januar an der JUB abgehalten. Als Referenten konnten wie bereits bei den bisherigen Workshops Dr. Wolfgang Baumann und Dr. Hinnerk Stüben (beide Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin) gewonnen werden. Der Workshop wurde auch wieder für die Studenten der JUB als offizielle Lehrveranstaltung angeboten. Durch die Bearbeitung einer abschließend bewerteten Übungsaufgabe konnten die Studenten Kreditpunkte für ihr Bachelor- und Masterstudium erlangen.

Der sehr gute Zuspruch und der große Erfolg der Veranstaltung spiegelt deutlich den dringenden Bedarf zur Ausbildung im Hoch- und Höchstleistungsrechnen wider und gibt Anlass dazu, sie auch weiterhin als regelmäßige Ausbildungs- und Schulungsmaßnahme anzubieten.

Auch im aktuellen Berichtszeitraum war das BremHLR an einer Reihe weiterer Veranstaltungen beteiligt. So wurde im Oktober 2010 an der Universität Bremen ein User Forum für akkreditierte Nutzer des HLRN sowie für potentielle neue Nutzer durchgeführt. In der Veranstaltung wurde über den HLRN und die Arbeit des BremHLR informiert. Des Weiteren wurde die dritte Ausbaustufe des HLRN näher erläutert.

Fachberater des BremHLR beteiligten sich ausserdem an zwei Fachberaterworkshops an denen unterschiedliche Themen des HLR-Betriebs und der Nutzerbetreuung besprochen wurden. Eine Übersicht über die Veranstaltungen ist in Abschnitt 4 zu finden.

### 3 Statistische Angaben zu den Bremer Höchstleistungsprojekten

Der Trend der intensiven Nutzung des HLRN durch die Bremer Projekte bei gleichzeitig steigendem Bedarf an Rechenleistung setzte sich auch für den aktuellen Berichtszeitraum fort. Für Bremer Projekte wurde für das Jahr 2010 etwa dreimal so viel Rechenzeit bewilligt wie für das Jahr 2009. Im Jahresdurchschnitt wurde ein prozentualer Anteil von 3,5 % an der gesamten am HLRN verfügbaren Rechenleistung erreicht, was etwas unter den investiven Anteil des Landes Bremen am HLRN liegt. Dieses ist auf die große Leistungssteigerung des HLRN-2 Systems bei der zweiten Ausbaustufe im Herbst 2009 zurückzuführen, auf das die Nutzer nur verzögert mit größeren Projekten reagieren konnten. Im Sommer 2010 wurde ausserdem die dritte Ausbaustufe des HLRN-2 installiert, so dass sich die Rechenleistung während des Berichtsjahres nochmals um etwa 10% vergrößert hat. Die Steigerung der abgenommenen Rechenleistung und die neuen Projekte während des Berichtsjahrs zeigen aber, dass sich die Nutzer auf die vergrößerten Kapazitäten einstellen.

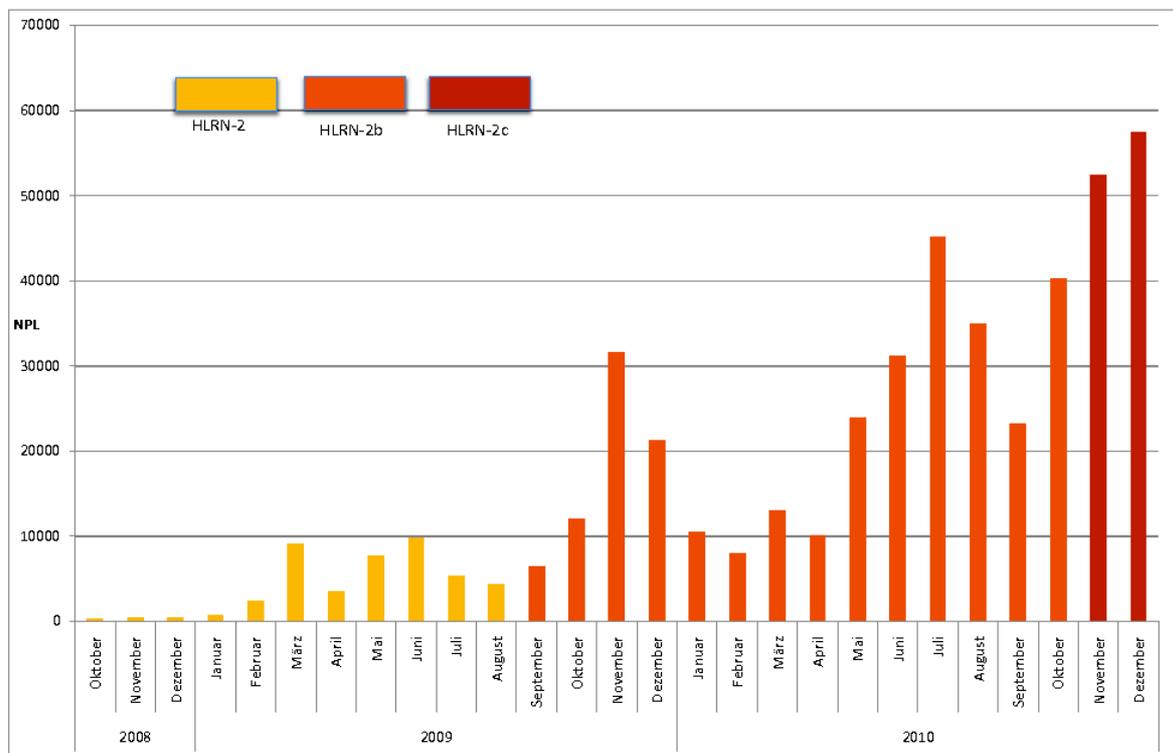


Abbildung 3.1: Grafische Darstellung des monatlichen Rechenzeitverbrauchs der Bremer HLRN-Großprojekte. Verbrauch in der HLRN-Leistungseinheit NPL<sup>1</sup> zwischen Oktober 2008 und Dezember 2010. Ab September 2009 war die zweite Ausbaustufe und ab November 2010 die dritte Ausbaustufe des HLRN-2 allgemein verfügbar.

<sup>1</sup> Norddeutsche Parallelrechner-Leistungseinheit, auf den Systemen der ersten Ausbaustufe entspricht 1 NPL einer CPU-h auf drei Knoten mit je 8 Prozessorkernen. Auf den Systemen der zweiten Ausbaustufe entspricht 1 NPL einer CPU-h auf 1,5 Knoten und auf der dritten Stufe entspricht 1 NPL einer CPU-h auf 16 Prozessorkernen.

Insgesamt wurden im Jahr 2010 etwa 350 000 NPL durch Bremer Projekte am HLRN abgenommen. Dieses ist in etwa das Dreifache der Nutzung im Vorjahr und entspricht einem Verbrauch von fast 6.8 Millionen CPU-h. Eine Übersicht zum monatlichen Verbrauch der Bremer Projekte am HLRN zeigt Abbildung 3.1. Diese zeigt deutlich die starke Zunahme der Rechenzeit Bremer Projekte.

Im Jahr 2010 wurden vom BremHLR 16 Projekte am HLRN betreut. Eine Übersicht zu allen vom BremHLR betreuten Projekten gibt Tabelle 3.1. Die Projekte werden von insgesamt 54 am HLRN akkreditierten Nutzern durchgeführt. Es gab im Jahr 2010 mehrere Neuanträge für Projekte mit großem Rechenzeitbedarf. Neue Nutzergruppen haben sich durch die Initiierung von Kooperationsprojekten zwischen der Universität Bremen und der Jacobs Universität Bremen ergeben. Die Projekte aus den Bereichen Chemie, Astrophysik und Materialwissenschaften haben größtenteils einen sehr hohen Rechenzeitbedarf.

Tabelle 3.1: Übersicht der Bremer HPC-Projekte, die innerhalb des Berichtszeitraums vom BremHLR betreut wurden. Status: F = Fortsetzung, E = Erstantrag; NPL: Kontingent in NPL im Jahr 2010

Kennung	Projektleiter	Institut	Laufzeit	NPL	Status
hbc00001	Dr. P. Deák/Dr. B. Aradi	UB/BCCMS	I/09 – IV/11	52000	F
hbc00002	Dr. S. Köppen	UB/BCCMS	III/09 – III/11	22000	F
hbc00004	Prof. Dr. Gabel/Prof Dr. D. Roccatano	UB & JUB	IV/10 – III/11	4000	E
hbi00002	Prof. L. Colombi Ciacchi	UB/BCCMS	IV/10 – III/11	5000	E
hbi00005	Prof. Dr. U. Fritsching	UB	III/09 – II/10	14000	F
hbi00007	Prof. Dr. L. Mädler/Prof. Dr. T. Heine	UB & JUB	IV/10 – III/11	15000	E
hbk00005	Prof. Dr. J. P. Burrows	UB	III/03 – III/10	9000	F
hbk00007	Prof. Dr. M. Schulz	UB	III/08 – II/10	10000	F
hbk00020	Prof. Dr. D. Olbers	AWI/UB	I/09 – I/10	6000	F
hbk00021	Prof. Dr. P. Lemke	AWI/UB	II/09 – I/11	33000	F
hbk00023	Prof. Dr. P. Lemke	AWI/UB	III/09 – I/10	8000	F
hbk00025	Prof. Dr. M. Schulz	UB	II/10 – I/12	70000	E
hbk00026	Prof. Dr. W. Hiller	AWI/UB	III/10 – II/11	21000	E
hbk00027	Prof. Dr. M. Schulz	UB	III/10 – 4/11	43000	E
hbp00002	Dr. A. L. da Rosa	UB/BCCMS	II/10 – I/11	30000	E
hbp00003	Prof. Dr. C. Lämmerzahl/Prof. Dr. S. Rosswog	UB & JUB	IV/10 – III/11	30000	E

## 4 Veranstaltungen mit Beteiligung des BremHLR

### 5. BremHLR-Workshop *Einführung in die Programmierung mit MPI und OpenMP*

**Veranstalter:** BremHLR

**Datum:** 18. – 22. Januar 2010

**Ort:** Jacobs University Bremen

**Beschreibung:** In dem Workshop wurden die Grundlagen der parallelen Programmierung vermittelt. Der Schwerpunkt lag auf den Programmiermodellen MPI und OpenMP. Praktische Übungen bildeten einen wesentlichen Teil des Workshops.

**Referenten:** Dr.-Ing. Wolfgang W. Baumann und Dr. Hinnerk Stüben (beide Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, ZIB)

**Teilnehmerzahl:** 31

**Teilnehmende Institutionen:** AWI, DFKI, JUB, MEVIS, UB (IUP, Informatik, ITP, MARUM)

### 18. HLRN-Fachberater-Workshop

**Veranstalter:** HLRN, RZ Universität Kiel

**Datum:** 6. – 7. Mai 2010

**Ort:** Rechenzentrum Universität Kiel

**Teilnehmerzahl:** 21

**Teilnehmende Institutionen:** BremHLR (AWI, ZARM), FU Berlin, GWDG, IOW, RRZN Uni Hannover, RZ Humboldt-Uni Berlin, RZ TU Hamburg-Harburg, RRZ Uni Hamburg, RZ Uni Kiel, TU Braunschweig, ZIB

### 19. HLRN-Fachberater-Workshop

**Veranstalter:** HLRN, RRZ Universität Hamburg

**Datum:** 1. – 2. November 2010

**Ort:** RRZ Universität Hamburg

**Teilnehmerzahl:** 18

**Teilnehmende Institutionen:** BremHLR (AWI, ZARM, Jacobs Uni), IOW, RRZN Uni Hannover, RRZ Uni Hamburg, RZ Humboldt-Uni Berlin, RZ Uni Kiel, RZ Uni Rostock, TU Berlin, ZIB

## **HLRN/BremHLR User Forum**

**Veranstalter:** BremHLR

**Datum:** 9. Dezember 2010

**Ort:** Universität Bremen

**Beschreibung:** Die Veranstaltung diente dazu, Bremer Nutzern den aktuellen Stand des HLRN-II Systems darzustellen sowie zur Diskussion mit den Nutzern. Insbesondere wurde auf die dritte Ausbaustufe des HLRN (siehe Abschnitt 5) eingegangen, die im November 2010 für alle HLRN-Nutzer zugänglich gemacht wurde.

**Teilnehmerzahl:** 17

**Teilnehmende Institutionen:** HS Bremerhaven, AWI, Jacobs Universität, Uni Bremen (IUP, BCCMS, Chemie, MARUM, ZARM, ZeTeM)

## 5 Informationen zur Infrastruktur: Die dritte Ausbaustufe des Supercomputers HLRN-2

Im Sommer 2008 hat die erste Stufe des HLRN-II Rechensystems das alte HLRN-I System abgelöst. Dieses wurde im Sommer 2009 durch eine zweite Ausbaustufe des HLRN-II wesentlich erweitert. Diese Erweiterung durch 960 Rechenknoten des Typs SGI ICE 8200EX pro HLRN-Standort hat die Rechenleistung des MPP (massively parallel processing) Teils des HLRN-II erweitert, so dass mehr Rechnungen mit hochparallelen Programmen möglich sind. Durch den Ausbau der Rechensysteme ist die maximale Rechenleistung der MPP-Systeme pro HLRN-Standort von 31 TFlop/s auf 121 TFlop/s gestiegen.

Im Sommer 2010 wurde der SMP-Teil (symmetric multi processing) des HLRN-II Systems durch eine dritte Ausbaustufe erweitert. Hierbei wurden pro Standort fünf Serverschränke des Systems SGI Altix UltraViolet 1000 installiert. Die Systeme enthalten insgesamt 152 Knoten mit je 16 Prozessorkernen und jeweils 64 GByte Hauptspeicher. Jeder dieser Knoten ist mit zwei 8-Kern Prozessoren des Typs Intel Xeon Beckton (Nehalem EX) mit 2,23 GHz Taktfrequenz bestückt. Diese Aufrüstung des HLRN-II um insgesamt 2432 Prozessorkerne und 9.5 TByte Hauptspeicher erlaubt Rechnungen mit jeweils gemeinsamen Hauptspeicher bis zu 2TByte und 496 Prozessorkernen. Somit sind Anwendungen mit besonders hohem Speicherbedarf sowie die hochparallele Nutzung von Programmen mit Parallelisierung auf Basis von OpenMP möglich.



Abbildung 5.1: Serverschränke des UltraViolet-Systems (grüne Front) und des ICE-Systems (gelbe Front) im Rechnerraum des ZIB.

Durch den Ausbau der Rechensysteme ist die maximale Rechenleistung der SMP-Systeme pro HLRN-Standort von etwa 5 TFlop/s auf etwa 27 TFlop/s gestiegen, wobei die maximal mögliche Rechenleistung einer einzelnen Anwendung auf dem UltraViolet System etwa 4,6 TFlop/s beträgt. Die real erreichbare Anwendungsleistung ist geringer, aber durch den

Ausbau um einen größeren Faktor gestiegen, was auf die neue Prozessorarchitektur des Intel Nehalem Prozessors zurückzuführen ist. Die Gesamtleistung der HLRN-Systeme beträgt mit der dritten Ausbaustufe pro Standort etwa 143 TFlop/s. In der Top500-Liste der weltweit schnellsten Höchstleistungsrechner sind die beiden ICE-Teilsysteme in Berlin und Hannover getrennt vertreten. In der Liste von November 2010 haben die beiden Systeme die Plätze 64 und 65 erreicht. In Deutschland nimmt der HLRN die Plätze 5 und 6 ein.

## 6 Projektberichte<sup>2</sup>

### 6.1 hbc00001: Tailoring the electronic properties of TiO<sub>2</sub>.

#### Defect engineering in TiO<sub>2</sub> – from bulk to nanostructures

HLRN-Projektkenung:	hbc00001
Laufzeit:	I/2009 – IV/2011
Projektleiter:	Dr. Peter Deák
Projektbearbeiter:	Dr. Peter Deák Dr. Bálint Aradi
Institut / Einrichtung:	BCCMS/Uni Bremen

#### Abstract

- TiO<sub>2</sub> is a versatile material, which is already used in many applications.
- In order to achieve better performance and to extend the spectrum of applications, the electronic properties of bulk and nanostructured TiO<sub>2</sub> have to be investigated.
- Defects have a significant effect on the electronic properties; therefore they must be included, when such properties are investigated.
- TiO<sub>2</sub> is a very challenging material for electronic structure calculations, making the application of new methods necessary.

TiO<sub>2</sub> is a wide band gap crystalline oxide with many existing and potential applications, from the pigment industry and photocatalytic air- and water purification, through water splitting and hydrogen storage, high-k dielectric and room-temperature ferromagnetic semiconductor, to electron transmitter in electrochemical solar cells, and transparent conductive oxide in optoelectronics. In most of these applications the understanding of charge carrier generation and recombination is of crucial importance. Such phenomena are governed by intrinsic defects, impurities and dopants. Our research strategy is to establish first a knowledge base about defects and their interaction in bulk material, by means of high-level quantum mechanical computations. Once that achieved, we will analyze the behavior of defects in the presence of surfaces and in nanostructured material. The task is made difficult by the fact that the "standard tool" of defect calculations – (semi)local approximations of density functional theory (DFT) – fails for defects in most wide band gap metal oxides. We have chosen to go beyond the standard approximations by testing the screened hybrid functional HSE06. Although this is essentially a semi-empirical approximation, we have shown that for defects of traditional Group-IV semiconductors the total energy computed with this functional shows the correct linear dependence on the (fractional) occupation number of the defect level. As a consequence of that, the ionization energy of a defect is accurately given by the

---

<sup>2</sup> Für den Inhalt der Projektberichte sind ausschließlich die genannten Projektleiter bzw. die Projektbearbeiter verantwortlich.

Kohn-Sham-energy of the defect level, in unprecedented agreement with experiment [1], [2], [3]. Based on these results, we have investigated the performance of the HSE06 functional for  $\text{TiO}_2$ . The electronic structure is in excellent agreement with the result obtained from ab initio many-body perturbation theory (GW method) and from photoelectron spectroscopy (PES). As a next step, we have demonstrated the equality between the Kohn-Sham energy level and the ionization energy of defects in both the anatase and rutile modifications of  $\text{TiO}_2$ . [5] This is of special importance, because these two modifications show strong and different polaronic effects. In rutile, mobile electrons tend to be self-trapped by a local change in the chemical state of a Ti atom (from  $4+$  to  $3+$ ), while in anatase, a similar local change of an O atom (from  $2-$  to  $1-$ ) traps mobile holes. Standard approximations of DFT fail to describe these effects. Our calculations with HSE06 have found, in agreement with experiment, that  $n$ -type doping in rutile,  $p$ -type doping in anatase are counteracted by these self-trapping effects. These results prove, that the HSE06 functional can supply very accurate electronic structure results in  $\text{TiO}_2$  based systems.

Therefore, we have used the method to calculate the generic band off-sets between bulk rutile and anatase, which have great significance for photochemical applications, where a mixed phase rutile-anatase system is used. [4] We have found that the band alignment leads to bipolar carrier separation: electrons should be accumulated in anatase, and holes in rutile. We have also investigated the optical effective mass of electrons (average mass of the conducting electrons) in highly Nb-doped anatase, which can be used as a transparent conductive oxide. [6] The HSE06 electronic structure gives an excellent description of the observations. Our preliminary investigations on Ta-doping indicate that to be favorable over Nb, as far as the anisotropy of the effective mass is concerned. We have also investigated the possibility of  $p$ -type doping in anatase. We have found that, due to hole localization, the acceptors are all rather deep and the calculated formation energies are just much too high for practical purposes. It should be taken into account, though, that donors (like the oxygen vacancy or hydrogen interstitials), incorporated simultaneously with the acceptors, diminish the heat of solution considerably by charge compensation, and so, in fact, very high concentration of the acceptors can be achieved. (A non-equilibrium concentration of activated acceptors can then be obtained by annealing in dry air and quenching.) Another possibility is doping by complexes, which cause much smaller lattice strain than isolated acceptors. The investigation of such phenomena will be carried out in the present project year. We intend to conclude our studies on bulk defects by investigating the very controversial issue of the intrinsic defects (oxygen vacancy and titanium self-interstitial). These defects are of crucial importance in explaining the room temperature ferromagnetism observed in thin anatase films.

In the last leg of our investigations on  $\text{TiO}_2$ , we will concentrate on low-dimensional systems: besides thin films mainly on nanowires. In structures with lower dimensionality, the large surface to volume ratio will change the energetic relations between dopants and intrinsic defects, and nanostructures can be expected to be more flexible in accommodating volume changes. Recent experimental work has shown the existence of extremely thin anatase nanowires, and their capability to incorporate an unusually high amount of nitrogen. Our simulation of the HRTEM (high resolution transmission electron microscopy) pictures show that the wire structure, the authors have proposed for their measurement, is wrong. Based on some preliminary calculations, we suggest another model, which is more in accordance with the observed HRTEM picture. Using our new models, we will investigate the nitrogen uptake and the effect of surface functionalization on the electronic structure of anatase nanowires.

Finally, we intend to use our results to establish a research direction into phase changes induced by defect aggregation in  $\text{TiO}_2$ . Such phenomena are at the heart of  $\text{TiO}_2$  memristors, to be used for high density storage with resistance switching (RRAM).

## References:

1. P. Deák, B. Aradi, T. Frauenheim, E. Janzén, and A. Gali, *Phys. Rev. B* **81**, 153203 (2010).
2. P. Deák, A. Gali, B. Aradi, and T. Frauenheim, in *Advanced calculations for defects in materials*, Eds. A. Al-kauskas, P. Deák, J. Neugebauer, A. Pasquarello, and C. G. Van de Walle [Wiley-VCH, Berlin 2011] online at DOI: 10.1002/pssb.201046210
3. A. Gali, E. Janzén, P. Deák, G. Kresse, and E. Kaxiras, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 186404 (2009)
4. P. Deák, B. Aradi, and T. Frauenheim, *J. Phys. Chem. C*, accepted
5. P. Deák, B. Aradi, and T. Frauenheim, *Phys. Rev. B*, accepted
6. H. A. Huy, B. Aradi, T. Frauenheim, P. Deák, *Phys. Rev. B*, submitted

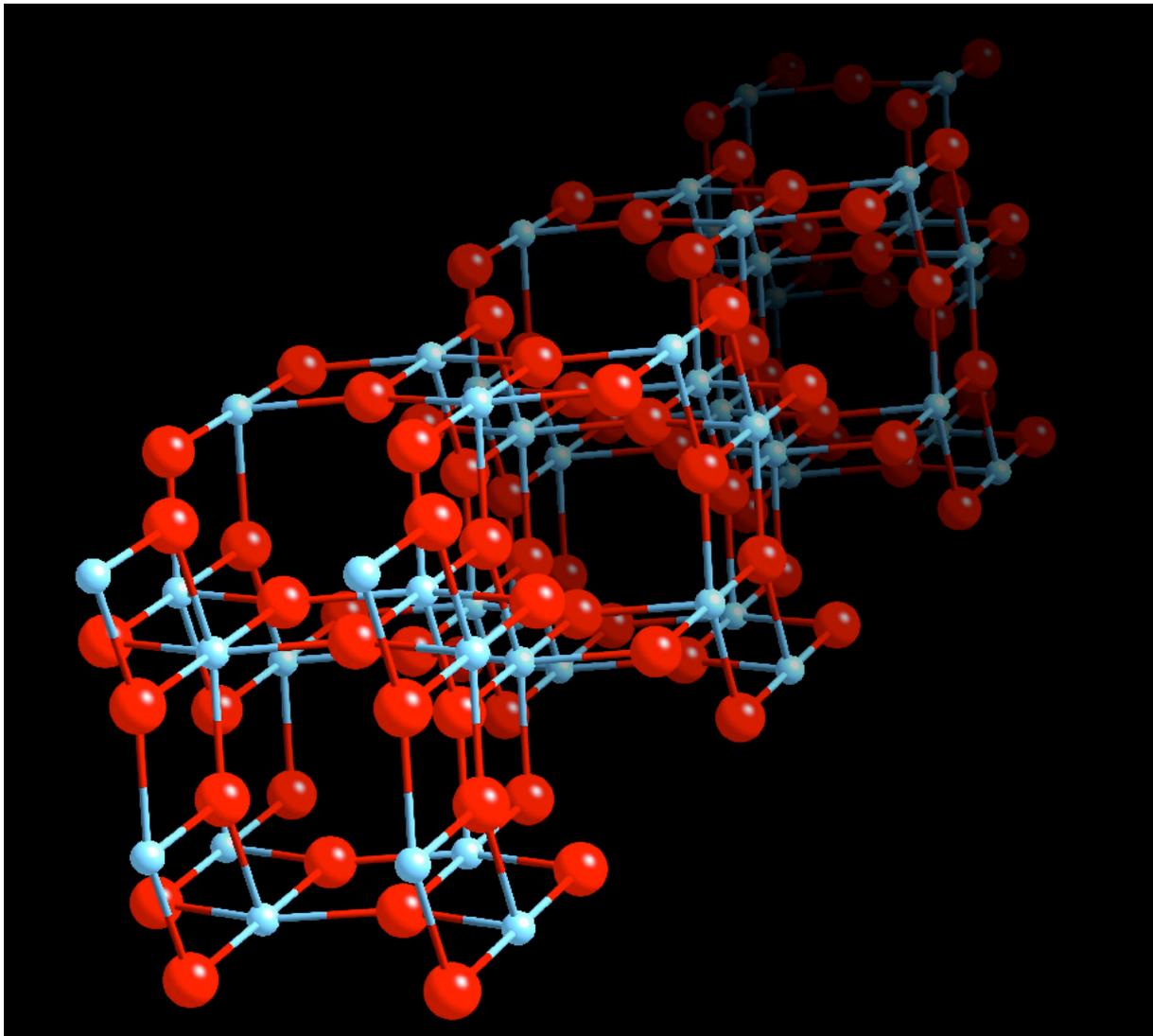


Figure 1: Model for a subnanometer-sized anatase wire

## 6.2 hbc00002: First Principles Molecular Dynamics Simulations of Di- and Tri-peptides at Titanium Dioxide Surfaces

HLRN-Projektkenung:	hbc00002
Laufzeit:	III/09 – III/11
Projektleiter:	Dr. Susan Köppen
Projektbearbeiter:	Dr. Susan Köppen <sup>1</sup> Wenke Friedrichs <sup>2</sup> Julian Bartels <sup>1</sup> Prof. Walter Langel <sup>2</sup> Prof. Lucio Colombi Ciacchi <sup>1</sup>
Institut Einrichtung:	<sup>1</sup> Hybrid Materials Interfaces Group Faculty of Production Engineering and Bremen Center for Computational Materials Science University of Bremen  <sup>2</sup> Biophysical Chemistry, Institute for Biochemistry, University of Greifswald

### Überblick:

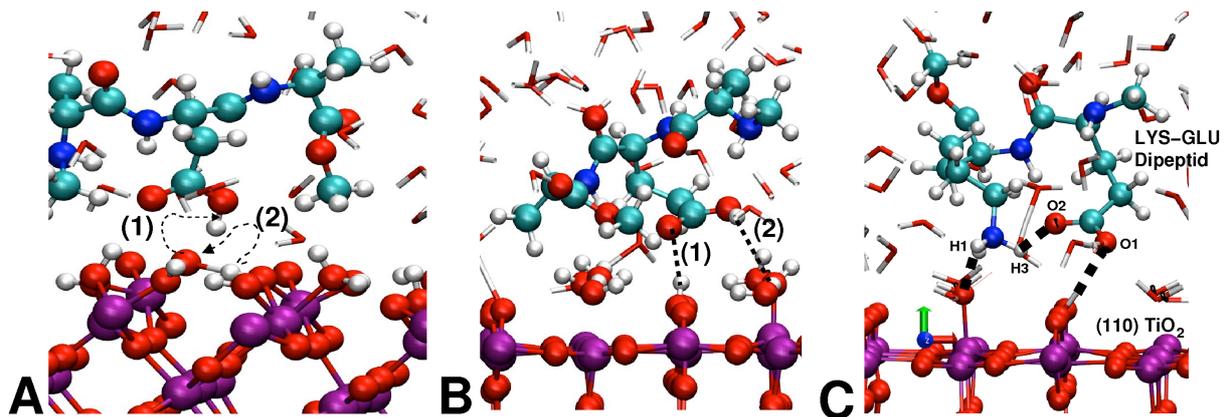
- Oberflächeneigenschaften von Materialien mit technischer Anwendung können durch Biofunktionalisierung optimiert werden
- detailliertes Verständnis der Protein – Oberflächenkontakte und den Triebkräften für die Proteinadsorption kann zur Verbesserung der Beschichtungen führen
- quantenchemische Simulationen veranschaulichen die Adsorption einer Auswahl an reaktiven Aminosäuren
- stabile Adsorptionskonfigurationen von im Peptid gebundenen Aminosäuren auf Oxidoberflächen beinhalten häufig Protonentransferprozesse
- kooperative Effekte benachbarter geladener Aminosäuren wirken auf deren Adsorption durch eine stärkere Polarisierung

### Motivation:

Im Bereich der medizinischen Technik werden "gute Werkstoffe" nicht nur durch passende mechanische Eigenschaften gekennzeichnet, die durch ihre Legierungen noch verbessert werden können, sondern besonders auch durch Ihre Oberflächeneigenschaften. Je nach Anwendung soll der Werkstoff z.B. biokompatibel sein (Implantate) oder aber auch absolut proteinresistent (Medikamentenfläschchen). Bei Zahnimplantaten werden aufgrund der hervorragenden mechanischen Eigenschaften häufig Titanlegierungen als Werkstoff genutzt. Um jedoch die Oberflächeneigenschaften zu optimieren, werden die Materialoberflächen immer häufiger durch die spezifische Anbindung von biologischen Komponenten funktionalisiert. Um die Integration des Implantates makroskopisch verstehen und die biofunktionalen Beschichtungen noch zu verbessern, ist es notwendig, die komplexen Prozesse an der Grenzfläche von Implantatoberflächen und physiologischer Lösung auch auf atomistischer Skala aufzuklären.

Experimentelle Untersuchungen können hier durch atomistische Simulationen sehr unterstützt und ergänzt werden. Mit klassischen Simulationsmethoden kann man so Informationen

über die Vorzugsorientierung eines adsorbierten Proteins oder Konformationsänderungen während des Adsorptionsprozesses ermitteln. Offen bleibt allerdings die Chemie bei dem Vorgang. Um zu verstehen, wie verschiedene funktionelle Gruppen von Aminosäuren an Materialoberflächen haften, muss man auf Simulationsmethoden zurückgreifen, die die elektronische Struktur von Atomen mit berücksichtigen. Solche Simulationsmethoden sind deutlich rechenaufwendiger, jedoch werden dabei chemische Prozesse, wie zum Beispiel Protonenübergänge, oder auch die Polarisierung von adsorbierten Molekülen, mit aufgenommen.



**Abbildung 1:** Momentaufnahmen von Tripeptiden mit einer zentralen reaktiven Aminosäure auf Titandioxid. Verschiedene Farben symbolisieren die chemischen Elemente (rot) Sauerstoff, (magenta) Titan, (cyan) Kohlenstoff, (blau) Stickstoff, (weiß) Wasserstoff. **(A)** Die Adsorption von Glutamat auf einer partiell hydroxylierten (100) Rutiloberfläche wird von einer Serie von Protonenübergängen begleitet. Die Neutralisation von Glutamat (1) induziert einen weiteren Protonenübergang (2) vom Brückensauerstoff der nächsten Reihe **(B)** Das Glutamat ist auf einer (110) Rutiloberfläche durch eine Wasserstoffbrückenbindung (1) gebunden und wird zusätzlich durch ein chemisorbiertes Wassermolekül neutralisiert **(2)**, **(C)** Die gegensätzlich geladenen Aminosäuren Lysin und Glutamat bilden jeweils einen stabilen Kontakt zur (110) Rutiloberfläche aus. Außerdem kommt es durch die interne Wechselwirkung beider Seitenketten zu einer verstärkten Polarisierung der einzelnen funktionellen Gruppen

### Vorläufige Ergebnisse:

In diesem Projekt wird die Adsorption einer Auswahl einzelner und auch unterschiedlich gepaarter reaktiver Aminosäuren mit first principles molecular dynamics Simulationen (CPMD) auf verschiedenen stabilen Titanoxidoberflächen untersucht. Hierbei werden alle reaktiven Aminosäuren in kleinen Peptiden gebunden auf die Oberfläche gesetzt um die Proteinumgebung richtig wiederzugeben und alle Zellen mit Wasser aufgefüllt. Die resultierenden Simulationen enthalten etwa 350 Atome. Jedes einzelne Aminosäure-Oberflächen-System muss für etwa 5 ps simuliert werden. Bei einer Nutzung von 64 Rechenkernen parallel dauert jede Simulation, in Abhängigkeit vom System, 1 bis 2 Wochen. Der Einsatz von quantenchemischen Simulationsmethoden ist sehr kostspielig in der Rechenzeit und eine derart angelegte Untersuchung verschiedener Adsorptionskonfigurationen auf dem quantenchemischen Level ist erst durch die Nutzung von Hochleistungsrechenzentren, wie dem HLRN möglich geworden. Bei der Adsorption von Aminosäuren spielt auch immer Wasser eine wichtige Rolle. Auf allen Oberflächen des Oxidmaterials konnte jeweils eine in hohem Maße orientierte Wasserschicht beobachtet werden. Bei einer der simulierten Oberflächen kam es während der Simulationszeit zur Spaltung einiger Wassermoleküle und so zur Ausbildung geladener Gruppen auf der Materialoberfläche. Diese Gruppen waren im Folgenden als die bevorzugten Adsorptionsplätze für die Aminosäuren identifiziert worden, wobei die endgültige stabile Konfiguration erst durch eine Reihe von

Protonenübergängen entstanden ist (nummerierte Pfeile in Abbildung 1A). Auf anderen Oberflächen konnte beobachtet werden, dass die Adsorption der kleinen Biomoleküle nicht nur direkt zu der Oberfläche stattfindet (1 in Abbildung 1B), sondern auch über diese erste orientierte Wasserschicht verstärkt wird (2 in Abbildung 1B). Hier wurde der Protonentransfer, der zur Ausbildung einer geladenen Oberflächengruppe und zur Neutralisierung der Aminosäure führt, erst durch die Aminosäure induziert und ist kein Effekt der Oberfläche, wie in Abbildung 1A. In Proteinen liegen geladene reaktive Aminosäuren häufig in der Sequenz nebeneinander. In diesem Projekt wurde untersucht, inwieweit diese Aminosäuren sich zum Einen gegenseitig, zum Anderen die Adsorption beeinflussen. In den hier durchgeführten Simulationen kam es nur vereinzelt zu einer internen Wechselwirkung (Abbildung 1C zwischen den Atomen H3 und O2). Es konnte jedoch gezeigt werden, dass durch eine Interaktion der funktionellen Gruppen die einzelnen Aminosäuren stärker polarisiert werden. Dies verstärkt dann wieder den Oberflächenkontakt.

Da die geladenen Aminosäuren bevorzugt an die geladenen Oberflächengruppen adsorbieren, wurde auch schon in klassischen Simulationen gefunden [1] [2], doch kann erst durch den Einsatz der quantenchemischen Simulationsmethoden der vollständige Prozess simuliert werden. Da die Simulation von Aminosäuremonomeren auf den Titandioxidoberflächen zur Ausbildung von Adsorptionskonfigurationen führte, die nicht repräsentativ für die Proteinadsorption ist [3], wurden in diesem Projekt alle Aminosäuren in kleine Peptiden gebunden. Die nun erforderlichen zu simulierenden Zellgrößen beschreiben die obere Grenze der Möglichkeiten der Car-Parrinello Moleküldynamik und die Simulationen sind nur noch durch ein hohes Maß an Parallelisierung in annehmbaren Zeitintervallen zu realisieren.

#### Literatur:

1. S. Köppen, B. Ohler, W. Langel, Z. Phys. Chem. 221 (2007) 3
2. S. Köppen, W. Langel, Langmuir 26, (2010) 15248
3. S. Köppen, O. Bronkalla, W. Langel, J. Phys. Chem C 112 (2008) 13600

#### Konferenzbeiträge:

##### Vorträge:

- S. Köppen, W. Friedrichs, L. Colombi Ciacchi, W. Langel, „Simulation of the adsorption of collagen like peptides on titanium dioxide“, EMRS Spring Meeting 2010: Biofunctional Interfaces, Strasbourg, Frankreich, 7-11 Juni 2010

##### Poster:

- S. Köppen, W. Friedrichs, W. Langel, L. Colombi Ciacchi, “First principles molecular dynamics simulations of small peptides on titanium dioxide surfaces”, Spring College on computational nanoscience, Trieste, Italien, 17-28 Mai 2010
- S. Köppen, W. Friedrichs, W. Langel, L. Colombi Ciacchi, “First principles molecular dynamics simulations of small peptides on titanium dioxide surfaces”, Internat. CECAM-Workshop “Titania for all seasons: Multifunctionality of an undercover semiconductor”, Bremen, 6-10 September 2010

#### Förderung:

Das Projekt wird im Rahmen der DFG Nachwuchsakademie “Computational Materials Science: Grenzflächen und grenzflächendominierte Prozesse” bearbeitet. Das HLNRN fördert das Projekt mit insgesamt 16000 Stunden Simulationszeit verteilt auf 2 Jahre.

### 6.3 hbc00004: Molecular simulation studies of the interaction of weakly coordinating ions with biological interfaces

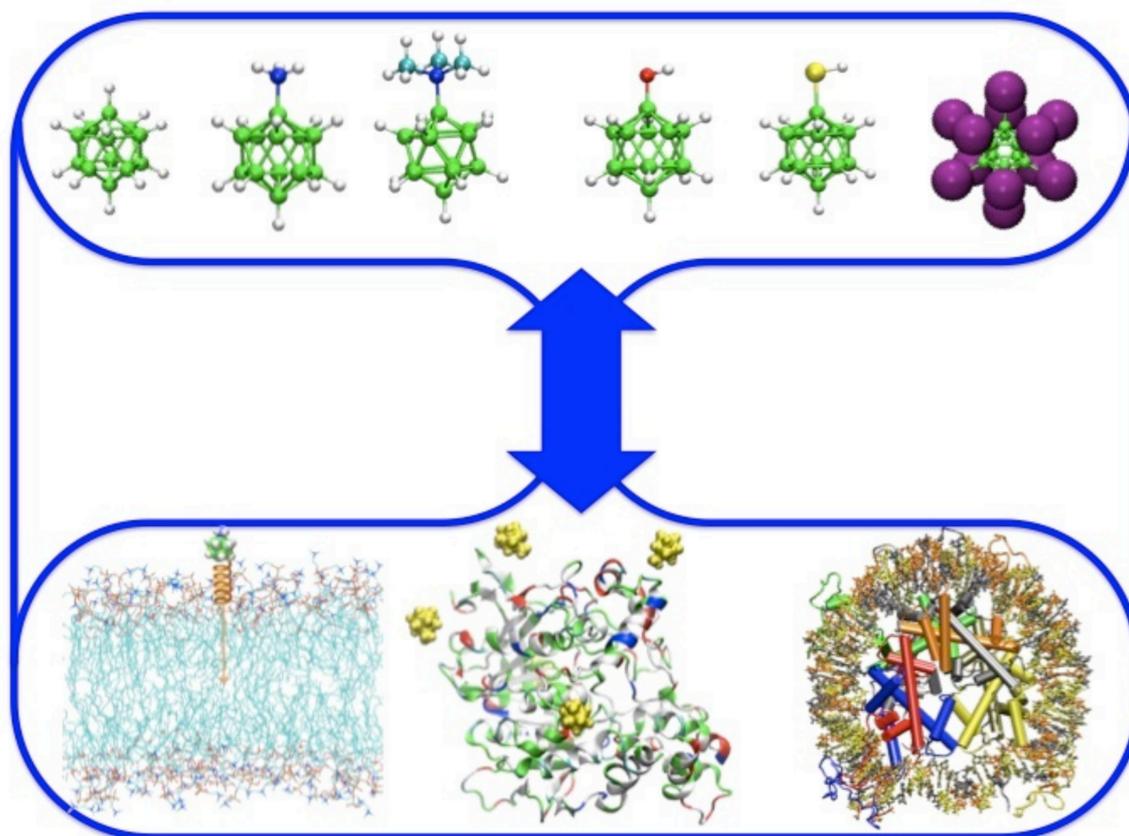
HLRN-Projektkenung:	hbc00004
Laufzeit:	IV/2010 – III/2011
Projektleiter:	Prof. Dr. D. Gabel <sup>1</sup> , Prof. Dr. D. Roccatano <sup>2</sup>
Projektbearbeiter:	Prof. Dr. D. Roccatano <sup>2</sup> , K. Karki <sup>2</sup>
Institut / Einrichtung	1: Department of Chemistry, University of Bremen, 2: School of Engineering and Science, Jacobs University Bremen

#### Abstract

- Weakly coordinating ions show properties, which cannot be explained on purely electrostatic grounds. Such ions are large, and prominent examples are ionic boron clusters (IBC).
- We want to study using molecular dynamics simulations the interaction of IBC with membranes and with proteins, in order to have a better molecular understanding for the experimental results.
- A force field for molecular dynamics simulation of IBC must be developed and optimized against experimental data.
- With this force field, the interaction of IBC with lipid bilayers and proteins (acetylcholine esterase and histones) will be simulated.

Weakly coordinating ions (WCI), both cations and anions, are a broad class of substances known for their peculiar properties in solution. Among them, icosahedral ionic boron cluster compounds (IBC) of the type  $YB_{12} X_{12}(2-)$  ( $X = H, I, CH_3$  and  $Y = SH, OH$ ) and  $XB_{12}H_{11} (-)$  ( $X=H, NH_3, N(CH_3)_3$ ), see Figure 1, are particularly interesting. They influence the structure and tightness of lipid bilayers, and they inhibit enzyme functions. The structure, size, and charge, of anions are known to affect their coordinating properties, and this is especially true for the IBC. We do, however, not yet have an understanding of their structural, dynamics and thermodynamics properties in water and in other solvents. Furthermore, despite their long use in the design and synthesis of therapeutics for Boron Neutron Capture Therapy of cancer and, more recently, in other areas of drug design, the molecular mechanism of their interaction with the components of living cells (protein and biological membranes) is largely unknown both experimentally and theoretically. The aim of this project is the study molecular properties of these anions and the detail of their interactions with biological systems using molecular dynamics (MD) techniques. We will focus on the interaction of IBC with two different systems.

**1. Ion-Membrane Interactions.** It is known that WCI interact with membranes. We have shown that this is especially true for boron cluster anions [1], [2]. Membrane integrity is influenced, and morphological changes (from minor to drastic) are found. Understanding the interaction mechanisms on a molecular level will greatly improve predictive models and the description of toxicologic and pharmacologic effects of the anions.



**Figure 1:** Structure of the icosahedral ionic boron clusters used (top) and their interactions with membranes (bottom left) and proteins (bottom center and right). The approach to SMD is shown in the bottom left: The ICP is pulled into the lipid bilayer by an externally applied field, represented by the spring. The center shows IBC ions interacting with AChE, and the right is an NCP ensemble.

The interaction of boron clusters with membranes will be analyzed using MD simulations. We first have to develop a force field model for the IBC, mandatory for the subsequent MD calculations. The parameters for the force field (equilibrium geometries, force constants, partial charges) are derived from quantum mechanics calculations, which provide a detailed description of the IBC and of the interaction with solvent molecules. The new force field will be checked against experimental data, which we have gathered. In particular, thermodynamics properties, transport properties in water and in other solvents will be considered. Free energies will be estimated using thermodynamics integration methods. Diffusion coefficients will be estimated from experimental conductivity measurements using the Nernst-Einstein equation. The IBC model will be used to perform MD simulations in the presence of phosphatidylcholine lipid bilayer sheet. The calculations will provide information on free energy barrier for percolation, changes of lipid surface area, orientation of asymmetric molecules, stoichiometric ratios of lipid to clusters, induced pore formation. Different types of lipid membrane will be used for these purposes. The free energy barrier of diffusion of anions through membranes will then be calculated using equilibrium and non-

equilibrium approaches such as umbrella sampling, thermodynamics integration and steered molecular dynamics (SMD). The potential mean force necessary to penetrate the lipid bilayer will be calculated using SMD simulations. SMD applies an external force that lowers the energy barrier, and thus allows to study long time scale processes on nanosecond timescale. The trajectories obtained from SMD will be used to obtain accurate free energy barriers of starting conformation from umbrella sampling or from constrained potential mean force calculation.

**2. Ion-Protein Interactions.** The recent discovery of another ICB, metallocarborane, as effective inhibitor of HIV-1 protease has demonstrated that ICB can interact strongly with proteins. Few modeling studies have been performed, and none of them used MD simulations. In this project, two model proteins, acetylcholinesterase (AChE) and the nucleosome core particle (NCP), will be used. AChE is important for the transmission of electric signal in the neuron cells and it is a target enzyme for the treatment of Alzheimer disease. We found that AChE is inhibited by ICB [1], which is surprising, as the ICB are negatively charged and the natural substrate is positively charged. NCP is the molecular building block of the chromatin present in the nuclei of eukaryotic cells. We have found that ICB accumulate in the nuclei of the cells, probably on NCP. It is likely that the anion interacts preferentially with the positively charged histones. We have performed MD simulations of NCP [3], but docking studies with ICB have not yet been conducted on this system. We plan to investigate the binding of ICB to AChE and with the histone proteins in NCP by using MD simulations. MD will be used to analyze preferential binding of the ICB to specific sites on the protein surface, in order to learn about the specific propensity of the ions to bind to specific amino acids. Subsequently, the diffusion of the boron cluster into the AChE active site will be analyzed by calculating the free energy barrier of diffusion and free energy of binding. We expect to obtain information on binding constants and conformational changes, which can be compared with experimental data from enzyme inhibition and NMR spectroscopy.

## References

1. Awad, D., L. Damian, M. Winterhalter, G. Gabel, D., D. Awad, T. Schaffran, D. Radovan, D. Daraban, L. Damian, M. Winterhalter, G. Karlsson, and K. Edwards. 2007. The Anionic Boron Cluster ( $B_{12}H_{11}SH(2-)$ ) as a Means To Trigger Release of Liposome Contents. *ChemMedChem* 2:51-53.
2. Schaffran, T., E. Justus, M. Elfert, T. Chen, and D. Gabel. 2009. Toxicity of N,N,N-trialkylammoniododecaborates as new anions of ionic liquids in cellular, liposomal and enzymatic test systems. *Green Chem* 11:1458-1464.
3. Roccatano D., A. Barthel, M. Zacharias. 2007. Structural flexibility of the nucleosome core particle at atomic resolution studied by molecular dynamics simulations. *Biopolymers*, 85, 401-421.

## Poster presentations

K. Karki1, A. Materny, M. Winterhalter, D. Gabel and D. Roccatano. Molecular Dynamics Simulations of Functional Molecules. Workshop: "4. Treffen der Norddeutschen Biophysiker", Forschungszentrum Borstel, 21.1.2011

## Förderung

The project is supported at the HLRN with 18 kNPL.

## 6.4 hbi00002: **A matter of disorder.**

### Oxidized silicon nanowires as biomolecular sensors: ab initio structural and electronic analysis

HLRN-Projektkenung:	hbi00002
Laufzeit:	IV/2010 – III/2011
Projektleiter:	Prof. Dr. Lucio Colombi Ciacchi
Projektbearbeiter:	Prof. Dr. Lucio Colombi Ciacchi
Institut / Einrichtung:	Hybrid Materials Interfaces Group, Faculty of Production Engineering and Bremen Center for Computational Materials Science, University of Bremen

#### **Abstract**

- Silicon nanowires are widely used as active functional elements in advanced electronic devices, most notably in biological sensors.
- While surface oxidation of the wires occurs upon exposure to a wet environment, theoretical studies are often limited to ideally crystalline, H-terminated wire models.
- We are performing accurate computational studies of the electronic and transport properties of natively oxidized, ultrathin silicon nanowires including dopant elements such as boron and phosphorous.
- We found that their conductance is determined by an unexpected interplay of effects due to oxidation-induced structural distortions and electronegative Si/SiO<sub>x</sub> interfaces.

One of the major goals of the semiconductor industry is to continue scaling down the size of electronic components and place more and more transistors in a single silicon chip. This is necessary to follow the famous Moore's Law, which predicts the evolution of computer speed over the years based on device miniaturization. However, there are intrinsic limits to the device sizes reached by purely lithographic processes, or other so-called "top-down" technologies. These are both connected with exponentially rising costs and with physical laws (e.g. when entering a quantum-tunneling regime), and motivate the scientific and technological communities to seek for novel devices and novel fabrication techniques.

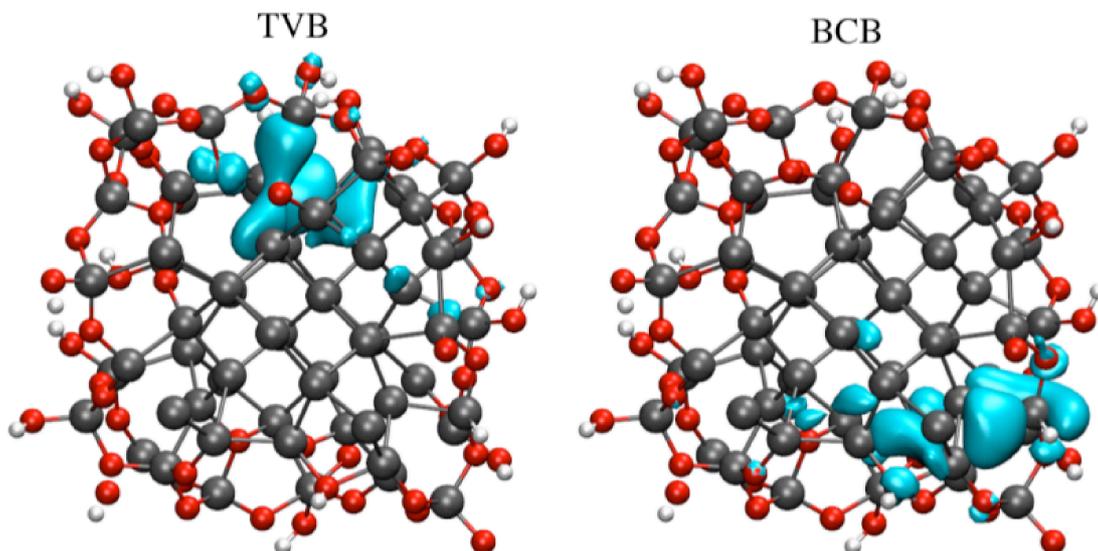
Starting from the other end of the scale, several types of "bottom-up" approaches have been envisaged, all based on the controlled assembly of nano-scale building blocks into well-defined functional devices [1]. Silicon nanowires (SiNWs) are one of the most promising nanostructures developed so far and are becoming fundamental components in a new generation of mixed top-down and bottom-up electronic devices with important applications for instance as sensors for biological molecules [2].

Due to their compatibility with silicon based technology, silicon nanowires are extensively studied and numerous experiments have already characterized some of their structural and

electronic properties [3]. Currently synthesized SiNWs present surfaces passivated either by hydrogen atoms or by a thin native oxide layer, and their conduction properties are modified by choosing an appropriate type and concentration of foreign atoms called dopants, usually P or B, which carry an additional electron or hole (the carriers for electric current).

Several theoretical studies have been undertaken to characterize the electronic properties of different SiNWs structures. However, the lack of a realistic model for Si/SiO<sub>2</sub> core-shell structures explains why most studies to date have focused on the properties of either bare, unpassivated wires or of wires whose surfaces are saturated with hydrogen atoms. This is the origin of a gap between the theoretical predictions made so far and the experimental reality, where the importance of considering the effects of surface oxidation is felt in numerous applications. In the typical cases of biological detection, the wet environment in which the devices operate leads to the formation of an ultrathin hydrated oxide layer. In electronic devices such as FinFETs the conducting wires are embedded in a thicker insulation layer of silicon oxide.

In the first part of our project at the HLRN, we are currently studying the intrinsic conductance of B and P doped SiNWs covered with a hydroxylated native oxide layer. The realistic modelling of a Si/SiO<sub>x</sub> core-shell wire have been made possible by extensive previous work, entirely based on atomic-scale simulations performed on massively parallel computers using highly optimized quantum mechanical computer codes (see ref.[4] and references therein). Starting from an oxidised Si(001) flat surface, we have fabricated a natively oxidised nanowire model structure by means of Molecular Dynamics simulations both at the classical and at the quantum mechanical, ab initio levels.



**Figure 1:** Cross-section of an undoped, natively oxidized Si nanowire showing that the most probable localization regions of hole (top of the valence band, TVB) and electron (bottom of the conduction band, BCB) carriers are at the Si/SiO<sub>x</sub> interface.

A key feature of the resulting structure is the intrinsic disorder of the Si core, naturally induced by the oxidation process. As a first interesting finding, we could prove that the electronic states mostly responsible for the conduction of such wires are located at the interface between the oxide shell and the silicon core (see Figure 1). Furthermore, our comprehensive total energy calculations have revealed the most stable sites for B and P dopant atoms.

Contrary to our expectations, both type of atoms prefer to remain buried in the Si core rather than segregate near the oxide layer. This is interesting, since the carriers of electronic current, provided by the dopants, face now two difficulties in their transport path: the disorder in the silicon core and the presence of an electronegative oxide shell. So, which of these effects will have the most prominent effect on the conductivity of the structures?

To answer this question, we have performed large-scale quantum mechanical calculations of the SiNW transport properties on the parallel supercomputers at the HLRN. While most previous studies of non-oxidized wires relied on more or less approximated approaches, our calculations are based on Density Functional Theory (DFT), which is a computationally very expensive approach for transport calculations even with simple systems. However, we realized that this level of precision is needed for our work, covering subtle effects such as dopant and structural backscattering, and relying on the precise determination of the transmission channels for conductance.

Our results achieved so far [5] clearly show that the conductance of the oxidized wires is decreased with respect to the case of ideally crystalline, H-terminated wires, and the main responsible for this decrease is the oxidation-induced disorder. The overall conductance decrease is very similar for B and P dopants, despite the fact that the transmission of P doped wires is less influenced by structural disorder in the absence of an oxide shell. If an oxide shell is present, though, it attracts the extra electrons carried by the P atoms and changes the transmission channel from a localized (less sensitive to disorder) to a delocalized form.

Future work will be devoted to understand the mechanisms of detection of biomolecules with such oxidized SiNWs. This will require further large-scale quantum transport calculations and thus call for extended use of the HLRN computational resources.

## References

1. W. Lu, C. M. Lieber, "Nanoelectronics from the bottom up", *Nature Mater.* **6**, 841-850 (2007).
2. E. Stern et al., "A nanoelectronic enzyme-linked immunosorbent assay for detection of proteins in physiological solutions", *Small* **6**, 232-238 (2010).
3. V. Schmidt, J. V. Wittemann, U. Gösele, "Growth, thermodynamics, and electrical properties of silicon nanowires", *Chem. Rev.*, **110**, 361-388 (2010).
4. L. Colombi Ciacchi, D. J. Cole, M. C. Payne, P. Gumbsch, "Stress-driven oxidation chemistry of wet silicon surfaces", *J. Phys. Chem. C Letters* **112**, 12077-12080 (2008).
5. M. Koleini, L. Colombi Ciacchi, M.-V. Fernández-Serra, "Electronic transport in natively oxidized silicon nanowires", submitted to *ACS Nano* (2011).

## Förderung:

This project is funded from the University of Bremen and the Deutsche Forschungsgemeinschaft.

## 6.5 hbi00007: Design neuer Metalloxyd-Halbleitermaterialien zur Wasserstofferzeugung durch Sonnenlicht (Photoelektrolyse).

Computational Combinatorial Materials Science study to optimize the band gap for metal-oxide based materials for their usage in photoelectrolysis cells

HLRN-Projektkenung:	hbi00007
Laufzeit:	IV/2010 – III/2011
Projektleiter:	Prof. Dr. L. Mädler <sup>1</sup> , Prof. Dr. T. Heine <sup>2</sup>
Projektbearbeiter:	L. Mädler und T. Heine
Institut / Einrichtung:	1: Universität Bremen 2: Jacobs University Bremen

### Übersicht

- Es soll ein Metalloxyd-Halbleiter aus 2-5 Übergangsmetallen gefunden werden, der sich optimal für die Spaltung von Wasser mittels Sonnenlicht eignet, d.h. er muss wasserstabil sein, eine Bandlücke von ca. 1,5 eV haben, und geeignete Elektrodenpotenziale aufweisen.
- Durch Kombinatorik werden verschiedene Übergangsmetalle des Periodensystems in unterschiedlichen Konzentrationen für die Mischoxyd-Halbleiter ausgewählt. Mit Hilfe der Quantenmechanik (Dichtefunktionaltheorie) werden Struktur, Stabilität und Bandstruktur der Materialien berechnet.
- Rechenzeitintensive Simulationen zur Struktur und Bandstruktur der Materialien werden z.T. am HLRN auf parallelen Hochleistungscomputersystemen durchgeführt.
- Optimale Halbleitersysteme werden ausgewählt und mit experimentellen Techniken weiterverfolgt.

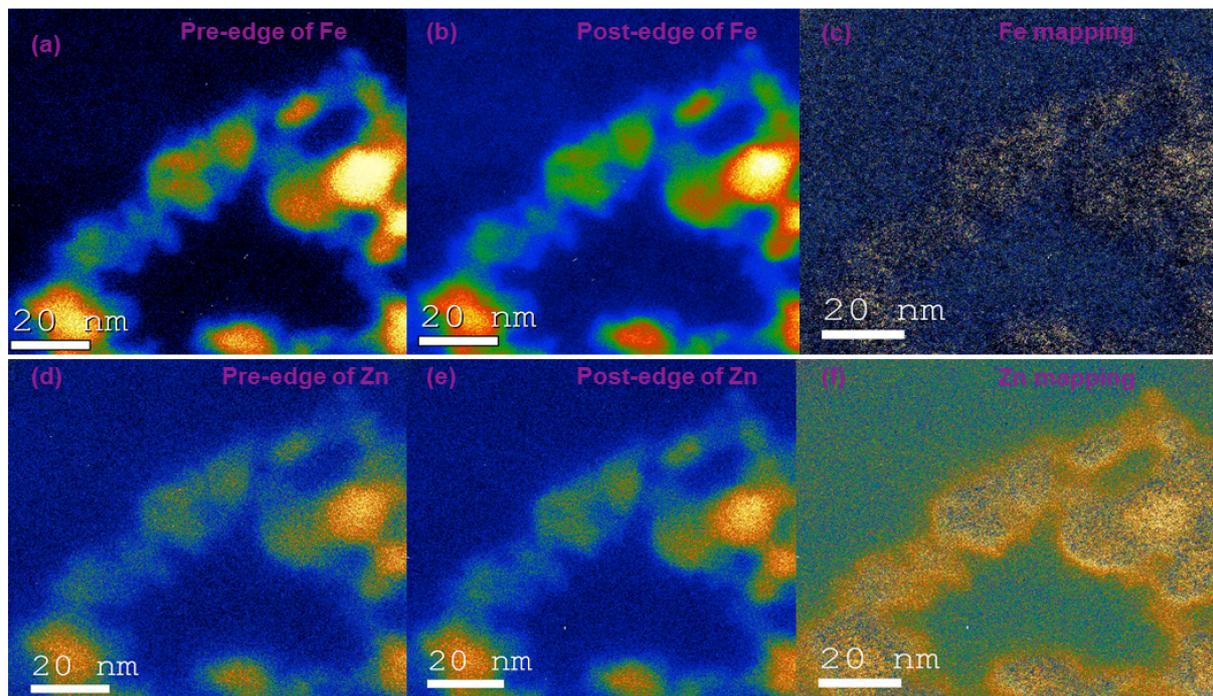
Unter allen erneuerbaren Alternativen zu fossilen Brennstoffen als Energiequelle erscheint die Wasserspaltung durch Licht (Photodissoziation) die vielversprechendste zu sein, denn sie nutzt die verlässlichste Energiequelle des Planeten – das Sonnenlicht, um Wasserstoff und Sauerstoff als Energieträger aus Wasser zu erzeugen. Sauerstoff kann bei der Wasserspaltung an die Atmosphäre abgegeben, und bei der Verbrennung des Wasserstoffs wieder aus der Atmosphäre entnommen werden, so dass ein geschlossener Kreislauf ohne Einfluss auf die Umwelt möglich ist. Speicherung und Transport des entstehenden Wasserstoffs sind immer noch problematisch, neue Forschungsergebnisse legen den Schluss nahe, dass in naher Zukunft zuverlässige Speichermedien zur Verfügung stehen werden.

Eine Photoelektrolysezelle ist ein Gerät, das Sonnenlicht absorbiert und mit Hilfe dessen Energie Wasserstoff (und Sauerstoff) durch Wasserspaltung produziert. Das prinzipielle Konzept wurde von Fujishima und Honda anhand einer Titanoxid (Rutil)-Elektrode demonstriert. Allerdings kann dieses Material aufgrund der grossen Bandlücke von ca. 3 eV nur Licht im harten Ultraviolett-Bereich absorbieren und ist daher nicht als Material für Wasser-Photoelektrolysezellen geeignet. Verschiedene III-V-Halbleiter, beispielsweise CdS, haben elektronische Eigenschaften, die für die Wasserspaltung geeignet sind, müssen aber

aufgrund ihrer Instabilität (Wasser-Löslichkeit) ausgeschlossen werden. Woodhouse und Parkinson schlugen 2009 vor, das Problem mit einem kombinatorischen Ansatz zu untersuchen [1]. Sie wollen mit Hilfe der Robotik eine Vielzahl von binären bis zu tertiären Metalloxyd-Mischhalbleitern herstellen und untersuchen. Dieser interessante Ansatz beinhaltet jedoch ein Problem: die systematische, automatisierte Synthese von homogenen Metalloxydverbindungen mit verschiedenen Metallen ist nur selten möglich, da die reinen Oxyde in der Regel unterschiedliche Gitterstrukturen aufweisen. Es ist sehr aufwändig, die atomatisch produzierten Materialien auf ihre Homogenität zu untersuchen.

In diesem Projekt soll daher ein zweistufiger Ansatz gewählt werden: Im ersten Schritt werden Metallmischoxydmaterialien unterschiedlicher Zusammensetzung mit Hilfe der Quantenmechanik untersucht. Die Materialien, die sich als besonders geeignet für die hier anvisierte Anwendung erweisen, werden danach im zweiten Schritt gezielt experimentell untersucht. Dabei wird die Synthese mit Hilfe der Flamm-spray-Elektrolyse versucht, und das Produkt anschliessend mit verschiedenen Charakterisierungsmethoden, einschliesslich der Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) und der Elektronenenergie-Verlustspektroskopie (EELS), untersucht. Ein Abgleich der experimentellen mit den zuvor berechneten Daten ist wesentlicher Teil der Qualitätssicherung der synthetisierten Materialien.

In den ersten Wochen dieses Projekts, das im November 2010 begann, wurde in einer Pilotstudie Eisen-dotiertes Zinkoxyd ( $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ ,  $x = 0,0 \dots 0,125$ ) untersucht. 2010 konnte experimentell gezeigt werden, dass ein Material aus bis zu 10% FeO in ZnO synthetisiert werden kann. Die Gitterstruktur des Materials entspricht der des ZnO, und verschiedene Analyseverfahren stellten sicher, dass das FeO homogen in den produzierten Nanokristallen verteilt ist (siehe Abb. 1 und die weiterführende Literatur [2]).



**Abbildung 1:** Ein prototypischer Misch-Metalloxyd-Halbleiter aus 90% ZnO und 10% FeO: Das Mapping charakteristischer Signale der Übergangsmetalle im TEM zeigt, dass die Fe-Atome homogen im ZnO-Trägermaterial verteilt sind (Grafik aus [2]).

Wir untersuchten Fe-dotiertes ZnO mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie (DFT) und konnten die experimentellen Ergebnisse sehr genau reproduzieren. Die Ergebnisse der DFT-

Berechnungen lieferten die gleiche Gitterstruktur wie die TEM-Experimente, die Bindungsenergie des Materials deutet auf eine homogene Verteilung von Fe im ZnO hin, und die EELS-Berechnungen unterstützen dieses Ergebnis. Darüberhinaus zeigten unsere Berechnungen, dass die elektronischen Eigenschaften der reinen Systeme sehr gut reproduziert werden konnten. Im Fe-dotierten ZnO verringert sich die Bandlücke von 3,59 eV (Experiment: 3,4 eV) um bis zu ca. 1,5 eV. Es ist bemerkenswert, dass diese Änderung nichtlinear ist und daher nicht a priori aus den Kennwerten der Reinmaterialien abgeschätzt werden kann, jedoch mit Hilfe der quantenmechanischen Festkörpertheorie erklärbar ist. Dieses erste Ergebnis weist auf eine gute Erfolgsaussicht des Projekts, und auf die Notwendigkeit des gemeinsamen experimentell-theoretischen Ansatzes hin.

## References

1. M. Woodhouse and B. A. Parkinson, 2009: Combinatorial approaches for the identification and optimization of oxide semiconductors for efficient solar photoelectrolysis. Chem. Soc. Rev. 38, 197-210.
2. S. George, S. Pokhrel, T. Xia, B. Gilbert, Z. X. Ji, M. Schowalter, A. Rosenauer, R. Damoiseaux, K. A. Bradley, L. Mädler, A. E. Nel, 2010: Use of a Rapid Cytotoxicity Screening Approach To Engineer a Safer Zinc Oxide Nanoparticle through Iron Doping. ACS Nano 4, 15-29. doi:10.1021/nn901503q

## Förderung:

ERC (European Research Council), REA (Research Executive Agency der Europäischen Kommission). Das HLRN fördert das Projekt mit 40.000 NPL.

## 6.6 hbk00005: **Wasser über den Wolken.**

Berechnung der Wasserdampfkonzentrationen aus Limb-Messungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY

HLRN-Projektkenung:	hbk00005
Laufzeit:	III/2003 – III/2010
Projektleiter:	Prof. J. P. Burrows
Projektbearbeiter:	Wolfhardt Lotz, Dr. Alexey Rozanov, Dr. Marco Vountas, Dr. Katja Weigel,
Institut / Einrichtung:	Institut für Umweltphysik (IUP), Universität Bremen

### Übersicht

- Wasserdampf ist das wichtigste natürliche Treibhausgas in der Atmosphäre.
- Auch der Wasserdampf oberhalb der Wolken, in der oberen Troposphäre und unteren Stratosphäre beeinflusst unser Klima.
- SCIAMACHY (engl.: Scanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartography) Satellitenmessungen bieten uns die Möglichkeit, eine lange und dichte Zeitserie des Wasserdampfs zu berechnen; es gibt bis heute fast 3 Millionen solcher Messungen und täglich kommen über 1000 dazu.
- Wegen der Menge der Profile und weil zur Berechnung des Wasserdampfs aufwendige Strahlungstransportrechnungen nötig sind, ist der Rechenzeitbedarf dabei groß.

### Wasserdampf in der Atmosphäre

Wasser gibt es in der Atmosphäre nicht nur als Regen, Schnee und in Form von Wolkentröpfchen und Eiskristallen, sondern auch als Wasserdampf. Der ist durchsichtig, das heißt wir können ihn mit unseren Augen nicht sehen, weil Wassermoleküle wenig sichtbares Licht absorbieren. Im Gegensatz dazu absorbieren Wassermoleküle im langwelligeren, infraroten Bereich des Spektrums besonders viel Strahlung. Diesen Bereich können wir nicht mit bloßem Auge sehen, eine Wärmebildkamera kann ihn aber beispielsweise sichtbar machen. Trotzdem spielt er für die Strahlung in unserer Atmosphäre eine wichtige Rolle: Er lässt das sichtbare Licht, das von der Sonne kommt ungehindert zum Boden durch, absorbiert aber viel Strahlung im infraroten Bereich und damit die von der Erde emittierte Wärmestrahlung. Das macht den Wasserdampf zum wichtigsten natürlichen Treibhausgas in unserer Atmosphäre. Den meisten Wasserdampf findet man nahe des Erdbodens, aber selbst oberhalb der Wolken gibt es noch Wasserdampf. Modellstudien haben gezeigt, dass auch er in diesem Höhenbereich, der oberen Troposphäre und untere Stratosphäre, einen deutlichen Einfluss auf unser Klima am Boden hat. Wie groß dieser Einfluss genau ist, hängt dabei von der Konzentration des Wasserdampfes ab.

### Aber wie viel Wasserdampf ist dort genau?

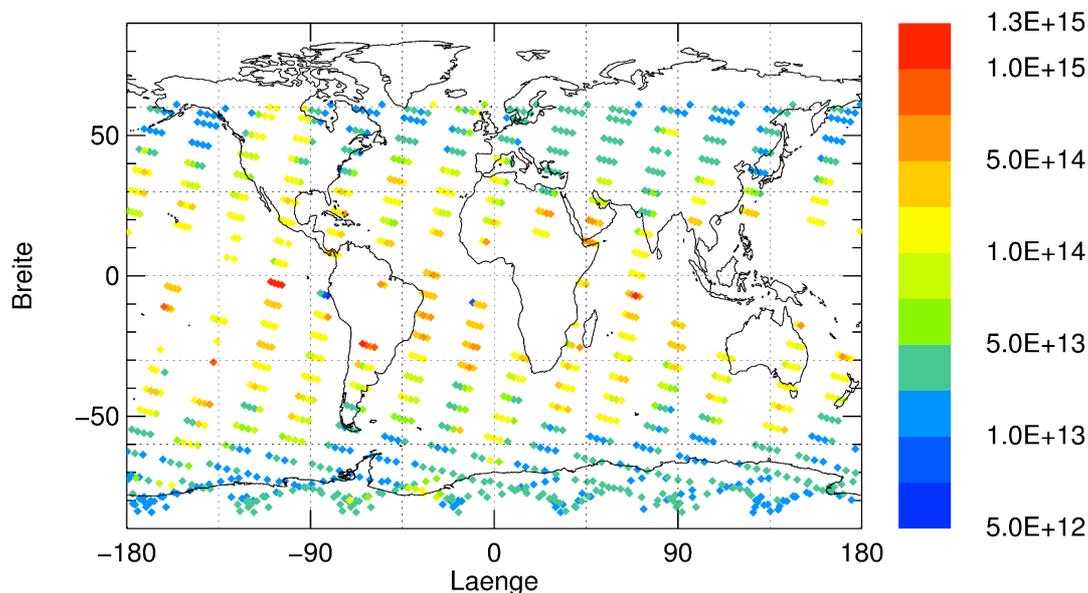
Das variiert je nach Ort und Zeit stark. Deshalb ist es ein Ziel des DFG Projektes SHARP (engl.: Stratospheric Change and its Role for Climate Prediction) [1] zu einem besseren Verständnis der Verteilung und der zeitlichen Änderung des Wasserdampfgehaltes in der

Atmosphäre und dessen Wirkung auf das Klima beizutragen. Dazu braucht man möglichst globale, regelmäßige und dichte Messungen des Wasserdampfs. Solche Messungen oberhalb der Wolken gibt es vor allem von Satelliten.

Wir arbeiten daran im Rahmen von SHARP eine Zeitserie der zonal gemittelten Wasserdampfkonzentration aus Messungen von SCIAMACHY (engl.: Scanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartography) ab August 2002 bereitzustellen.

### Was ist SCIAMACHY?

SCIAMACHY ist ein Spektrometer auf dem europäischen Satellit ENVISAT und umrundet die Erde seit 2002 14.4 Mal jeden Tag [2]. Um Informationen aus verschiedenen Höhen in der Atmosphäre zu bekommen sind Limb-Messungen von SCIAMACHY besonders gut geeignet. Bei diesem Messmodus schaut das Instrument durch die Atmosphäre über den Erdboden hinweg in Richtung des Weltraumes. Dabei wird für Höhenstufen von jeweils 3.3 km ein Spektrum des gestreuten Sonnenlichts gemessen. Aus diesen Spektren berechnen wir Wasserdampfprofile im Höhenbereich zwischen 11km und 23km.



**Abbildung 1:** SCIAMACHY Wasserdampf [Moleküle pro Kubikzentimeter] in 12km Höhe am 02. Januar 2008.

### Wie kommt man von der gemessenen Strahlung zu Wasserdampfprofilen?

Dazu werden die charakteristischen Absorptionen der Wassermoleküle im infraroten Bereich des Spektrums genutzt. SCIAMACHY misst das gestreute Sonnenlicht in der Atmosphäre. Auf dem Weg zum Instrument absorbiert der Wasserdampf einen Teil der Strahlung, so dass man Absorptionslinien im gemessenen Spektrum sieht. Vereinfacht gesagt, verrät die Position der Linien, welche Gase sich in der Atmosphäre befinden. Die Linienstärke spiegelt die Konzentration der jeweiligen Gase wieder. Allerdings spielen auch noch andere atmosphärische Größen, zum Beispiel Druck und Temperatur, eine Rolle. Deshalb kann man nicht direkt aus den Spektren auf die Wasserdampfkonzentration schließen. Um alle Einflüsse richtig berücksichtigen zu können, berechnen wir mit dem Strahlungstransportmodell SCIATRAN aus einer gegebenen Atmosphärenzusammensetzung die Strahlung, die SCIAMACHY messen würde. Auf Grundlage dessen wird mit Hilfe inverser mathematischer

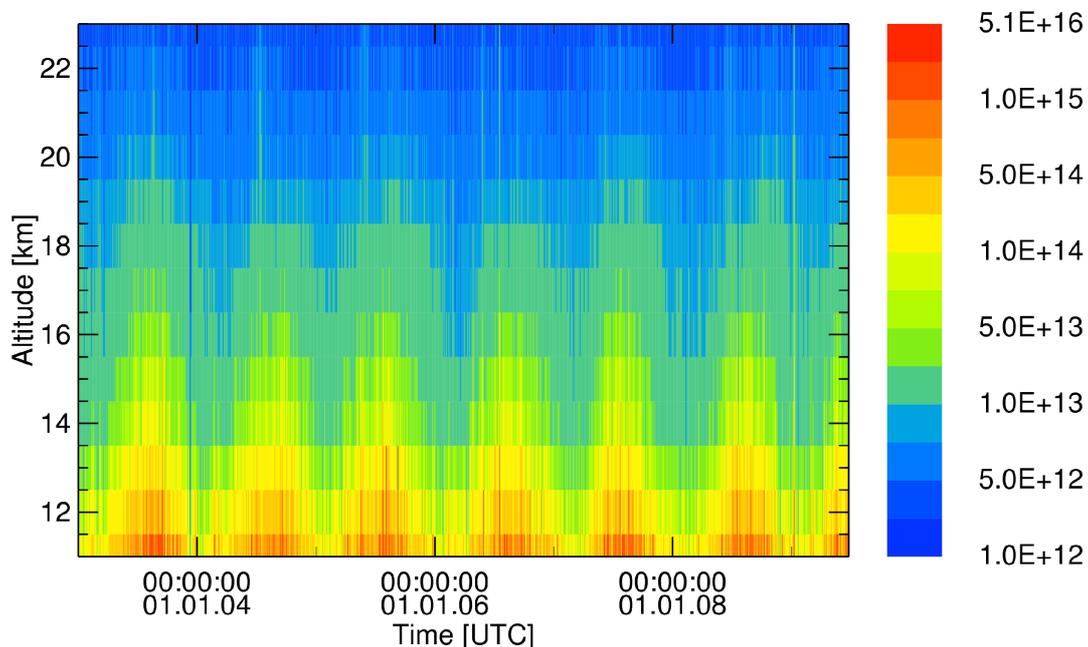
Methoden in einem iterativen Verfahren das am besten zur Messung passende Wasserdampfprofil ermittelt [3].

### Was ist das Besondere an den Wasserdampfprofilen aus SCIAMACHY Messungen?

Diese Messungen sind mit wenigen Unterbrechungen seit August 2002 verfügbar. Das ist im Vergleich zu vielen anderen Satellitenmissionen bereits eine sehr lange, konsistente Zeitreihe, die auch in den nächsten Jahren weiter fortgesetzt werden soll. Der gesamte SCIAMACHY Datensatz umfasst bereits ca. 3 Millionen Profile, die für die Berechnung des Wasserdampfes geeignet sind und jeden Tag kommen meist über 1000 neue dazu. Abbildung 1 zeigt alle berechneten Wasserdampfkonzentrationen aus den SCIAMACHY Messungen am 2. Januar 2008 auf einer Höhe von 12km. Man erkennt die höheren Wasserdampfkonzentrationen in den Tropen und Subtropen im Vergleich zu höheren Breiten, aber auch Variationen auf einzelnen Breitenkreisen. Lücken gibt es, wenn hohe Wolken eine Auswertung der Daten verhindern und durch die Lage der Messpositionen von SCIAMACHY: Sie sind so gewählt, das jeweils innerhalb von 6 Tagen die gesamte Erde betrachtet wird.

### Warum ist die Berechnung dieser Wasserdampfprofile besonders aufwendig?

Um die Wasserdampfkonzentrationen bestimmen zu können, muss die Mehrfachstreuung in der Atmosphäre berücksichtigt werden, dazu sind Rechnungen auf einem dichten Gitter nötig. Gleichzeitig muss ein relativ breiter Spektralbereich abgedeckt werden, um genügend Informationen über die Wasserdampfabsorptionen zu erhalten. Dazu kommt die Datenmenge: Eine ähnliche Anzahl Messungen wie in der Abbildung gibt es für fast jeden Tag seit August 2002.



**Abbildung 2:** Zeitserie von zonal gemitteltem SCIAMACHY Wasserdampf [Moleküle pro Kubikzentimeter] zwischen 30° und 35° nördlicher Breite von Januar 2003 bis Juni 2009. Nur jeder siebte Messtag wurde verwendet.

Zur Zeit können wir nur etwa jeden siebten Tag der Messungen auswerten. Abbildung 2 zeigt eine Zeitserie des zonal gemittelten Wasserdampfes für jeden siebten Tag von Januar 2003

bis Juni 2009. Mittlerweile gibt es eine verbesserte Datenversion. Unser Ziel ist es, für diese die Wasserdampfkonzentrationen für den gesamten Messzeitraum zu bestimmen, um mehr über den Wasserdampf in der Atmosphäre und seine Auswirkung auf das Klima lernen zu können.

### References:

1. [www.fu-berlin.de/sharp/](http://www.fu-berlin.de/sharp/)
2. Bovensmann, H., Burrows, J. P., Buchwitz, M., Frerick, J., Noël, S., Rozanov, V. V., Chance, K. V., and Goede, A. P. H.: SCIAMACHY: Mission objectives and measurement modes, *J. Atmos. Sci.*, 56, 127--149, 1999

### Veröffentlichung

3. Rozanov, A., Weigel, K., Bovensmann H., Dhomse, S., Eichmann, K.-U., Kivi, R., Rozanov, V., Vömel, H., Weber, M., and Burrows, J. P.: Retrieval of water vapor vertical distributions in the upper troposphere and the lower stratosphere from SCIAMACHY limb measurements: [www.atmos-meas-tech-discuss.net/3/4009/2010/amtd-3-4009-2010.html](http://www.atmos-meas-tech-discuss.net/3/4009/2010/amtd-3-4009-2010.html), *Atmos. Meas. Tech. Discuss.*, 3, 4009-4057, 2010

### Präsentationen

4. K. Weigel, A. Rozanov, M. Weber, H. Bovensmann, and J. P. Burrows: Water vapor in the UTLS from SCIAMACHY Limb observations, SADDU Meeting, 15.04.2010
5. K. Weigel, A. Rozanov, M. Weber, F. Azam, K.-U. Eichmann, S.Noël, G. P. Stiller, H. Bovensmann, and J.P. Burrows: Status of the water vapor retrieval from SCIAMACHY limb measurements, SHARP Jahrestagung, 20.05.2010
6. K. Weigel, A. Rozanov, M. Weber, H. Bovensmann, G. P. Stiller, and J. P. Burrows: Validation of water vapor retrieval in the upper troposphere and lower stratosphere from SCIAMACHY limb measurements, European Geosciences Union General Assembly 2010, EGU2010-11478, 05.05.2010
7. K. Weigel, A. Rozanov, M. Weber, K.-U. Eichmann, G. P. Stiller, H. Bovensmann, and J.P. Burrows: Water vapor retrieval in the upper troposphere and lower stratosphere from SCIAMACHY limb measurements, ESA Living Planet Symposium, 29.06.2010
8. K. Weigel, A. Rozanov, M. Weber, K.-U. Eichmann, G. P. Stiller, H. Bovensmann, and J. P. Burrows: Validation of water vapor retrieval from SCIAMACHY limb measurements in the upper troposphere and lower stratosphere, COSPAR, 24.07.2010

### Förderung:

DFG-Forschergruppe SHARP (FOR 1095).

## 6.7 hbk00021: **Unstructured Mesh Ocean Modelling.**

### Global and regional ocean-ice simulations using FESOM: Toward applications with variable resolution and regional focus

HLRN-Projektkenung:	hbk00021
Laufzeit:	II/2009 – I/2011
Projektleiter:	Prof. Dr. P. Lemke
Projektbearbeiter:	Q. Wang, D. Sidorenko
Institut / Einrichtung:	Alfred-Wegener-Institute for Polar and Marine Research, Bremerhaven

#### **Abstract**

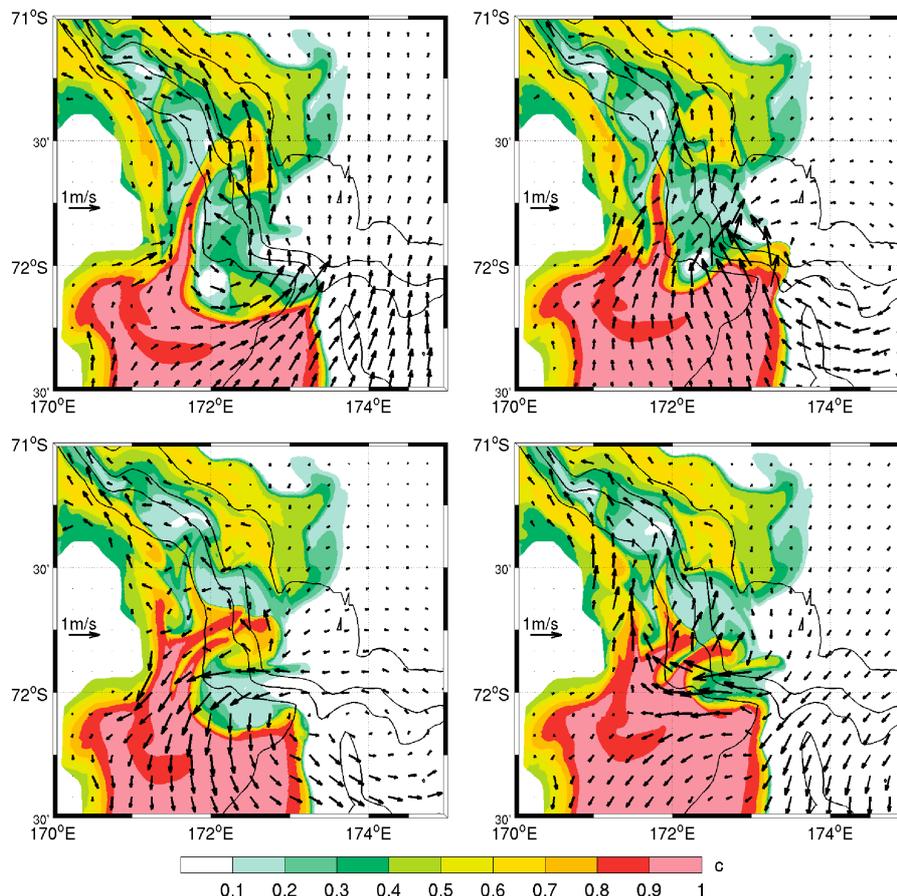
- The Finite Element Sea ice-Ocean Model (FESOM) developed at AWI provides the possibility to simulate ocean and sea-ice on global unstructured meshes with a regional focus. Fine-scale processes can be studied with less computational resources than in traditional models using fine resolution everywhere.
- A global FESOM setup is validated using climatology forcing. The model results compare well with those from other models driven by the same forcing.
- The formation process of Antarctic Bottom Water in the western Ross Sea is studied using FESOM with variable resolution. Tides can increase the bottom water outflow rate by 70% in our model simulations.

Simulations with global sea ice-ocean models are widely used to assist in understanding climate dynamics. The Finite Element Sea ice-Ocean Model (FESOM) developed at AWI is a novel ocean general circulation model allowing one to simulate ocean and sea-ice on unstructured meshes with variable resolution. Local mesh refinement without nesting and a realistic representation of coastlines and bottom topography is possible with FESOM. It consists of the Finite Element Ocean Model (FEOM) coupled with a finite element sea ice model [1][2].

Since FESOM numerics are essentially different from those of regular grid models, model intercomparison studies are essential to assess the long-term performance of FESOM against other models well approved by the oceanographic community. The feedbacks from such studies can help to further improve the model with respect to both numerics and parameterizations. In this project we validated the model in a global setup under the CORE (Coordinated Ocean-ice Reference Experiments) framework, as it provides a common reference point for research groups developing and analyzing global ocean-ice models. The model was run for 500 years under repeating normal year climatology forcing. The model results agree well with previous studies in terms of hydrography, sea ice, heat and volume transport, and their long term trend as well [3]. It is demonstrated that FESOM has become a reliable tool for studying the ocean general circulation.

In the ocean it frequently happens that localized, small-scale dynamics have impact on the large or even global scale. A very fine resolution is usually required to properly resolve them in numerical simulations. To include their effects on the large or even global scale it is computationally beneficial to use unstructured mesh models, which allow for variable

resolution with focus on these particular regions. Many regional studies performed thus far have been using regional configurations with prescribed open boundaries. Models formulated on unstructured meshes overcome this difficulty by seamlessly embedding the refined regions in a larger domain or even in the global ocean. Besides, many important geometric and bathymetric features in the ocean can only be resolved if a regional focus is allowed.



**Abbildung 1:** Four snapshots of bottom passive tracer concentration at spring tides with 6h intervals (clockwise). The passive tracer was injected into the high salinity shelf water (HSSW), the source of the overflow water. It is restored to one inside HSSW over the inner shelf and is set to zero anywhere else at the beginning of the simulation. Reduction of concentration along the plume path is due to mixing of HSSW with ambient warm water. The black arrows indicate the near bottom velocity. These snapshots show the tidal advection effect on the overflows.

The overflow from the western Ross Sea exhibits pronounced variability at The Antarctic Bottom Water (AABW) is an important ingredient of the global meridional overturning circulation. It feeds the coldest part of the global bottom water and spreads at the sea floor over roughly twice the area covered by the North Atlantic Deep Water (NADW). AABW forms mainly in a few regions in the Southern Ocean. In this project we exploit FESOM to study the bottom water formation process in the western Ross Sea. Simulating overflows in the western Ross Sea requires a very high mesh resolution. This is not only due to the smallness of the baroclinic Rossby radius in this region (about 6 km), but also because of the need to resolve small topographic features which can be important for both steering and mixing effects. High mesh resolution is also required to adequately simulate the plume water over

steep continental slopes (with slopes larger than 0.1 in many regions). A mesh with 0.5 km horizontal resolution in a coarse resolution (30 km) setup is used in this work. The research is focused on the tidal impact on overflow dynamics and bottom water production rate [4].

The overflow from the western Ross Sea exhibits pronounced variability at both daily and spring-neap tidal time scales. Tides increase mixing over both the outer shelf and upper slope there. Plume jets are shaped by tidal currents at a bathymetric bend west of the mouth of the Drygalski Trough, descending rapidly and supplying the bottom water (see Figure 1). A fraction of shelf water remains over the shelf and propagates westward from the Ross Sea, but it does not contribute significantly to bottom water formation because of energetic mixing over the upper slope. Compared to a simulation without tidal forcing, tides (with the major K1 and O1 constituents) increase the outflow rate over the continental slope off Cape Adare by about 70%. A set of sensitivity experiments show that the rate of bottom water production is not a monotonic function of the tidal currents amplitude. Tidal forcing with intermediate strength leads to the most efficient bottom water formation.

FESOM simulations require a massively parallel environment and would hardly be possible without the support from HLRN. Our future work will need larger meshes and more computational resources. We hope that it will also benefit from the HLRN assistance.

### References:

1. Wang, Q., S. Danilov, and J. Schröter (2008), Finite element ocean circulation model based on triangular prismatic elements, with application in studying the effect of vertical discretization, *J. Geophys. Res.*, 113, C05015, doi:10.1029/2007JC004482.
2. Timmermann, R., S. Danilov, J. Schröter, C. Böning, D. Sidorenko, and K. Rollenhagen (2009), Ocean circulation and sea ice distribution in a finite element global sea ice-ocean model, *Ocean Modell.* 27, 114-129.
3. Sidorenko, D., Q. Wang, S. Danilov, and J. Schröter (2010), FESOM under Coordinated Ocean-ice Reference Experiment forcing, *Ocean Dynamics*, submitted.
4. Wang, Q., S. Danilov, H. H. Hellmer, and J. Schröter (2010), Overflow dynamics and bottom water formation in the western Ross Sea: Influence of tides, *J. Geophys. Res.*, 115, C10054, doi:10.1029/2010JC006189.

### Förderung:

Helmholtz Gemeinschaft

## 6.8 hbk00025: Steuert die Hebung von Gebirgen den Rückzug des tropischen Regenwaldes in Afrika?

Die Entwicklung der tropischen Regenzone im späten Neogen

HLRN-Projektkenung:	hbk00025
Laufzeit:	II/2010 – I/2012
Projektleiter:	Prof. Dr. M. Schulz
Projektbearbeiter:	G. Jung, M. Prange
Institut / Einrichtung:	DFG-Forschungszentrum / Exzellenzcluster „Der Ozean im System Erde“ (MARUM), Universität Bremen

### Übersicht

- In diesem Projekt [1] werden Modellexperimente zur Abschätzung der Niederschlags- und Vegetationsentwicklung in Afrika vor 2-10 Millionen Jahren durchgeführt.
- Der Schwerpunkt liegt dabei auf dem Einfluss tektonischer Faktoren wie veränderter Ozeanpassagen und der Auswirkung von Gebirgshebungen.
- Das zur Modellierung verwendete Modell ist das gekoppelte parallele *Community Climate System Model* (Version 3), welches Atmosphäre, Ozean, Meereis, Landoberfläche und Vegetationsbedeckung simuliert.
- Erste Ergebnisse zeigen einen starken Einfluss der Hebung Ost- und Südafrikas, sowie einen schwächeren, gegensätzlichen Einfluss der Hebung von Himalaya und Tibetischem Plateau auf Niederschlag und Vegetationsverteilung in Afrika.

Die Entwicklung aufrecht gehender Hominiden wird in Zusammenhang gebracht mit dem Rückgang des afrikanischen tropischen Regenwaldes, der im Zeitraum von vor 8 bis 2 Millionen Jahren stattfand [2].

Neben Gebirgshebungsprozessen gelten Öffnungen und Schließungen von Ozeanpassagen als wichtige tektonische Prozesse, die einen nachhaltigen Einfluss auf das Klimasystem und in Folge auch auf die Vegetationsbedeckung haben [3]. Gebirgshebungen verändern zum Beispiel die regionale Niederschlagsverteilung durch Stau- und Abschattungseffekte, haben aber auch weitreichendere Folgen für den Wärme- und Feuchtetransport in der Atmosphäre. Zudem können hohe Gebirgszüge die atmosphärische Zirkulation weltweit bis in große Höhen beeinflussen. Die topographische Hebung Ostafrikas wird als wichtiger Antriebsmechanismus für die ostafrikanische Klima- und Vegetationsentwicklung angesehen. Zudem hat diese Hebung möglicherweise einen maßgeblichen Einfluss auf den asiatischen Monsun.

Die Hebung des Himalayas und des Tibetischen Plateaus und der damit verbundene Klimawandel wird häufig als klassisches Beispiel für die Verbindung von Tektonik und Klima genannt. So haben frühere Modellstudien gezeigt, dass die Hebung des Tibetischen Plateaus einen erheblichen Einfluss auf das asiatische Monsun-System hatte. Auch eine verstärkte Hebung der Anden wirkt sich nicht nur auf das Klima Südamerikas aus. Nachdem die Anden das einzige Hindernis der Strömung auf der Südhalbkugel und zweithöchstes Plateau der Erde darstellen, beeinflussen sie sehr stark den globalen Wärme- und

Feuchtetransport. Ähnlich globale Auswirkungen werden für die Hebung der Rocky Mountains und des Colorado Plateaus vermutet.

Öffnungen und Schließungen von Ozeanpassagen wiederum beeinflussen zunächst die Ozeanzirkulation und damit den Wärmetransport des Ozeans von den Tropen zu den Polen. Über den Wärmeaustausch zwischen Ozean und Atmosphäre hat dies dann auch einen starken Einfluss auf globale und regionale atmosphärische Zirkulation und Niederschlagsverteilung. Beispielsweise wirkte sich die Entwicklung der Landbrücke zwischen Nord- und Südamerika (zwischen 13 und 2,6 Millionen Jahren) stark auf die globale Klimadynamik aus [4]. Durch die Schließung des Seewegs kam es zu einer verringerten Durchmischung atlantischer und pazifischer Wassermassen und einer Verstärkung der großskaligen Umwälzzirkulation des Atlantiks. Die Stärke dieser Zirkulation bestimmt unter anderem das Ausmaß der sommerlichen Nordwärtsverlagerung des tropischen Regengürtels und somit auch die Niederschlagsverteilung von Zentralafrika bis in den Sahel.

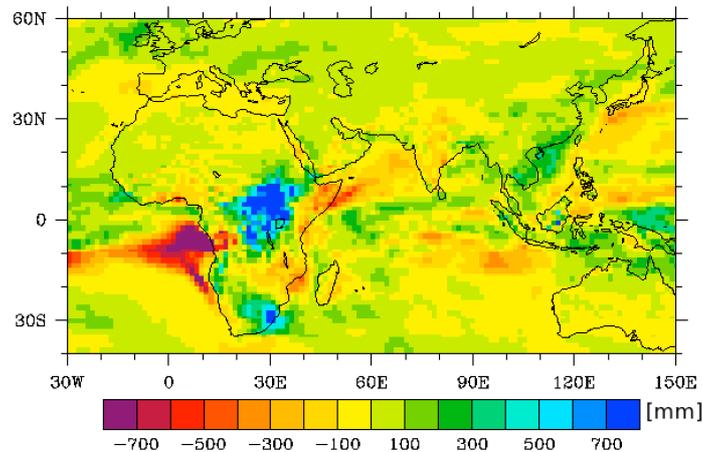
Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die vorangehend genannten Prozesse alle nicht nur einen Einfluss auf das regionale Klimageschehen haben, sondern sich mit großer Wahrscheinlichkeit auch auf die globale Klimadynamik auswirken.

Um die verschiedenen Einflussfaktoren sowie mögliche Rückkopplungsmechanismen im Klimasystem und vor allem die Auswirkungen auf die Vegetationsbedeckung in Afrika im Zeitraum des späten Miozäns und frühen Pliozäns (vor ca. 2-10 Millionen Jahren) abzuschätzen wurden verschiedene Sensitivitätsläufe mit Hilfe eines globalen, gekoppelten Klimamodells durchgeführt. Es wird das parallele *Community Climate System Model* (Version 3) verwendet. Dieses Modell simuliert in gekoppelten Teilmodellen Atmosphäre, Ozean, Meereis und Landoberflächenprozesse inklusive der Vegetationsbedeckung. Dabei werden unter anderem der Einfluss von Gebirgshebungsprozessen (Ostafrika, Tibet/Himalaya, Anden, Rocky Mountains/Colorado Plateau), der Einfluss geänderter Ozeanpassagen und der Einfluss einer erhöhten atmosphärischen Kohlendioxidkonzentration modelliert.

Erste Simulationsergebnisse zweier Modellexperimente, welche zum einen die Auswirkungen der Hebung des Himalayas sowie des Tibetischen Plateaus und zum anderen die Folgen der Hebung Ost- und Südafrikas beschreiben, zeigen entgegengesetzte Auswirkungen auf das Niederschlagsverhalten sowie die Vegetationsbedeckung Afrikas.

Die Hebung des Tibetischen Plateaus sowie des Himalayas bewirkt erwartungsgemäß eine Verstärkung des asiatischen Monsuns. Daneben zeigt sich dabei auch eine deutliche Abnahme der Niederschlagsmengen über Zentralafrika sowie eine Zunahme über Ostafrika. Für die Vegetationsbedeckung bedeutet dies eine leichte Abnahme des Waldanteils in Zentralafrika bei gleichzeitiger Zunahme der Bedeckung mit Gräsern und Buschland.

Die Hebung Ost- und Südafrikas hat einen stärkeren Einfluss auf das Niederschlagsgeschehen sowie die Vegetationsbedeckung Afrikas. Die Anwesenheit der Berge führt zu einer Verstärkung der äquatorialen Passatwinde über dem tropischen Atlantik, was dort zu einer höheren Verdunstung und einer Erhöhung des Feuchtetransportes mit dem Sommermonsun nach Zentralafrika führt. Dieser Effekt wiederum bewirkt dort eine Erhöhung der Niederschlagsmenge (vergleiche Abbildung 1). Über Ostafrika kann hingegen eine Abnahme der Niederschläge beobachtet werden, die mit einer Abnahme des Feuchtetransports vom Indischen Ozean nach Ostafrika in Zusammenhang gebracht werden kann. Die genannten Niederschlagsunterschiede bedeuten für Zentralafrika eine Zunahme des Waldanteils bei gleichzeitiger starker Abnahme von Gräsern und Buschwerk. Im relativ trockenen Teil Ostafrikas zeigt sich durch die Abnahme der Niederschläge vor allem eine Abnahme der Bedeckung mit Gräsern und Buschwerk.



**Abbildung 1:** Effekt der Hebung von Ost- und Südafrika auf die jährliche Niederschlagsmenge [mm]. Positive Werte zeigen eine Niederschlagszunahme mit der Gebirgshebung an, negative Werte eine Niederschlagsabnahme.

Die bisherigen Experimente zeigen gegensätzliche Änderungen in Vegetationsbedeckung und Niederschlag. Weitere Modellexperimente und die gleichzeitige Berücksichtigung der einzelnen tektonischen Änderungen in einer einzelnen Modellsimulation werden es ermöglichen, die Wichtigkeit der unterschiedlichen Einflussfaktoren für die Vegetationsentwicklung zur Zeit der Entwicklung der aufrecht gehenden Hominiden abzuschätzen.

### References:

1. [www.marum.de/en/Page8307.html](http://www.marum.de/en/Page8307.html)
2. Die Frühzeit des Menschen. Der Weg zum Homo sapiens. C. H. Beck, 5., vollständig neubearbeitete und ergänzte Auflage, München 2008 (C.H.Beck Wissen)
3. Hay, W.W. (1996), Tectonics and Climate. Geol. Rundsch., V.85, S. 409-437
4. Steph, S., R. Tiedemann, M. Prange, J. Groeneveld, D. Nürnberg, L. Reuning, M. Schulz, and G. Haug (2006), Changes in Caribbean surface hydrography during the Pliocene shoaling of the Central American Seaway. Paleoclimatology, 21, PA4221, doi:10.1029/2004PA001092

### Poster:

- Modeling the impact of mountain lifting in the late Neogene on the African-Asian monsoon circulation and African vegetation development, (2010, Jung, Prange, Schultz), Shanghai PAGES 2nd Global Monsoon Symposium
- Late Neogene evolution of the tropical rainbelt - Sensitivity studies with a comprehensive climate model, (2010, Jung, Prange, Schultz), North Cluster Meeting, Hamburg

### Förderung:

DFG: FZT 15 und EXC 309

## 6.9 hbk00026: Tsunami-Simulation.

### Modellierung und Simulation von Tsunami-Ausbreitung und -Überflutung

HLRN-Projektkenung:	hbk00026
Laufzeit:	III/2010 – II/2011
Projektleiter:	Prof. Dr. W. Hiller
Projektbearbeiter:	N. Rakowsky, S. Harig, A. Fuchs
Institut / Einrichtung:	Zentrum für Technomathematik, Universität Bremen und Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung, Bremerhaven

#### Übersicht

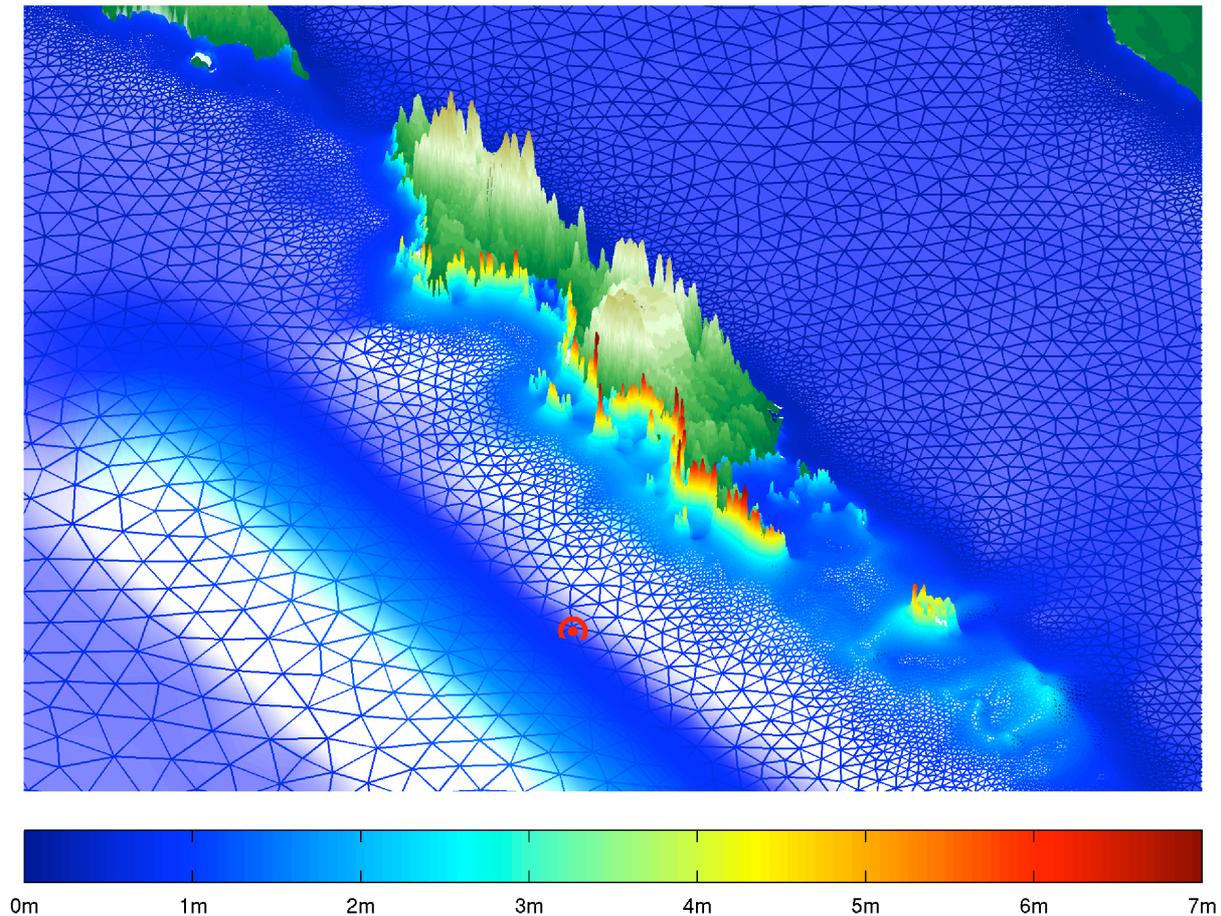
- Simulation der Tsunamiausbreitung und -Überflutung u.a. für das indonesische Tsunami-Frühwarnsystem
- Innovatives Finite-Elemente-Modell mit einem Rechengitter, das die Geografie besonders gut auflöst.
- MPI-paralleler Ansatz zur Steuerung OpenMP-paralleler Modellläufe zu Parameterstudien und somit optimale Nutzung der Rechnerarchitektur des HLRN.

Die Tsunami-Arbeitsgruppe am Alfred-Wegener-Institut ist Teil des BMBF-Projekts „German-Indonesian Tsunami Early Warning System GITEWS“, das nach dem verheerenden Tsunami am 26.12.2004 im Indischen Ozean ins Leben gerufen wurde. Gemeinsam mit deutschen und indonesischen Projektpartnern (u.a. GFZ, DLR) wird in Jakarta ein Tsunami-Warnzentrum installiert. Über Lehrveranstaltungen, Praktikums- sowie Abschlussarbeiten und Dissertationen ist die Tsunami-Modellierung und -Simulation mit dem Zentrum für Technomathematik der Universität Bremen verbunden.

Im Entwicklungsprojekt am HLRN wird das im Rahmen von GITEWS entstandene Modell zur Tsunami-Ausbreitung, TsunAWI (Referenzen siehe 1, 2), weiter entwickelt. Damit können für das Warnzentrum in Jakarta als auch für andere Gebiete Tsunami-Szenarien mit verbesserter Modellphysik erstellt werden.

Im indonesischen Warnzentrum dient eine Datenbank mit prototypischen Szenarien sowohl der Risikoanalyse zur Überflutungsgefährdung indonesischer Küstenabschnitte als auch der schnellen Vorhersage im Warnfall. Erfasst das Sensor-System ein Seebeben, werden anhand der Messdaten Tsunami-Szenarien aus der Datenbank gewählt und ein wahrscheinlicher Verlauf des Tsunamis bestimmt. So kann rechtzeitig mit der Evakuierung der Bevölkerung in den betroffenen Küstenregionen begonnen werden. Wie wichtig GITEWS ist, hat zuletzt am 25.10.2010 das untermeerische Beben der Stärke 7,8 vor der Küste von Sumatra gezeigt.

TsunAWI zeichnet sich u.a. durch den Finite-Elemente-Ansatz aus, der es erlaubt, mit unstrukturierten Rechengittern zu arbeiten, die auch komplexe Bathymetrie und Topographie gut darstellen können. So kann im tiefen Ozean rechenzeitsparend mit einer groben Auflösung gerechnet werden, und zugleich in Gebieten von besonderem Interesse und im sensiblen Flachwasser- und Küstenbereich mit sehr feiner Auflösung.



**Abbildung 1:** Rechengitter und Maximale Wellenhöhe (im Vergleich zur Topographie 25-fach überhöht) des a priori erstellten Szenarios aus der Tsunami-Datenbank, das dem Tsunami am 25.10.2010 vor den indonesischen Pagai-Inseln am nächsten kommt. Rot markiert ist das gemessene Epizentrum, die Bebenstärke betrug 7,8. Das Rechengitter weist im tiefen Ozean Kantenlängen bis 15km auf, an den Küsten beträgt die Auflösung ca. 100m.

Das Programmpaket TsunAWI wird ständig weiterentwickelt. Aktuell wird unter anderem das zugrundeliegende, auf den Flachwassergleichungen basierende mathematisch-physikalische Modell durch Berücksichtigung nichtlinearer Advektion, nicht-hydrostatischer Korrekturterme und Interaktion mit Tiden verfeinert und verbessert. Eine weitere Aufgabe ist die Durchführung von Vergleichsstudien auf Grundlage immer umfangreicherer realer Datensätze zur Anpassung von Parametern wie Reibungskoeffizienten. Die Simulationsrechnungen für ein derart komplexes Modell können im notwendigen Umfang nur auf Höchstleistungsrechnern wie dem HLRN-II durchgeführt werden.

Bisher ist TsunAWI OpenMP-parallel, d.h. pro Modelllauf kann nur ein Rechenknoten genutzt werden, dessen Prozessorcores gemeinsam arbeiten. Da umfangreiche Parameterstudien gerechnet werden müssen, verteilt und koordiniert ein MPI-Skript mehrere Läufe gleichzeitig auf verschiedene Rechenknoten, so dass die Rechner-Ressourcen optimal genutzt werden. Um künftig noch komplexere Modellphysik auf noch feineren Rechengittern simulieren zu können, ist die Erweiterung von TsunAWI auf hybride Parallelisierung (eine Kombination aus OpenMP und MPI) oder ein vollständiger Umstieg auf MPI geplant.

Umgekehrt werden zudem Sensitivitätsstudien durchgeführt, die zeigen sollen, wie weit Modell und Rechengitter vereinfacht werden können, um mit schnellen und dennoch realistischen Rechnungen im Warnfall die Vorhersage präzisieren zu können.

Mit TsunAWI werden auch Simulationen zu anderen Seegebieten, etwa dem Mittelmeer und dem Pazifischen Ozean, und zu untermeerischen Landrutschen als Tsunami-Auslöser gerechnet. Im Rahmen von GITEWS ist die Ausweitung der Szenarien-Datenbank auf den gesamten Indischen Ozean und die nordöstlichen Seegebiete Indonesiens geplant.

Im Berichtszeitraum wurde zunächst der Open-MP-parallele Programmcode TsunAWI optimiert, in dem die Variablen im unstrukturierten Gitter entlang einer Space-Filling Curve sortiert wurden. Damit liegen im Gitter benachbarte Werte auch im Hauptspeicher des Rechners möglichst nah zusammen, sodass die Datenlokalität auf allen Ebenen der Speicherhierarchie garantiert wird; sowohl in OpenMP-parallelen Schleifen als auch auf Einprozessorebene im Cache. Die Rechenzeit pro Szenario konnte so mehr als halbiert werden.

In der Anwendung lag ein Fokus auf verbesserten Gittern, die die Küstengebiete und insbesondere die Umgebung von Gezeitenpegeln und Bojen noch genauer auflösen. In Zusammenarbeit mit der GFZ wurde der Einfluss verschiedener Ansätze zur Geometrie der Bruchzone prototypischer Erdbeben untersucht. Hintergrund waren hier vor allem die Erkenntnisse aus der Analyse des Mentawai-Bebens vom 25.10.2010. Zudem bieten die Messwerte realer Tsunamis die Möglichkeit, Parameter wie Reibungs- und Viskositätskoeffizienten zu kalibrieren. Mit all diesen Verfeinerungen wird die Vorhersagekraft weiter verbessert.

## References:

1. S. Harig, C. Chaeroni, W.S. Pranowo, J. Behrens (2008). Tsunami Simulations on several scales: Comparison of approaches with unstructured meshes and nested grids, *Ocean Dynamics*, 58(5-6), 429-440, doi:10.1007/s10236-008-0162-5.
2. A. Androsov, S. Harig, J. Behrens, J. Schröter, S. Danilov (2008). Tsunami Modelling on Unstructured Grids: Verification and Validation, *Proceedings of the International Conference on Tsunami Warning (ICTW)*, Bali, Indonesia.

## Förderung:

BMBF

## 6.10 hbk00027: **Wie stabil ist das ozeanische Förderband?**

Atmosphärische Feuchtetransporte und thermohaline Zirkulation:  
Untersuchung möglicher Rückkopplungsmechanismen für abrupte  
Klimaschwankungen

HLRN-Projektkenung:	hbk00027
Laufzeit:	III/2010 – II/2011
Projektleiter:	Prof. Dr. M. Schulz
Projektbearbeiter:	Dr. M. Prange, H. Liu
Institut / Einrichtung:	Fachbereich Geowissenschaften und Zentrum für Marine Umweltwissenschaften (MARUM), Universität Bremen

### Übersicht

- Der Export von Wasserdampf aus dem tropischen Atlantik in den Pazifik über Nordostpassate spielt eine maßgebliche Rolle für die Aufrechterhaltung der nordatlantischen Tiefenwasserbildung und somit der globalen Ozeanzirkulation. Änderungen in diesem Feuchtetransport können daher einen wichtigen Rückkopplungsmechanismus für abrupte Klimaschwankungen darstellen.
- In diesem Projekt wird die räumlich hochaufgelöste Version eines komplexen Klimamodells verwendet, um die Variabilität tropischer Wasserdampftransporte während der letzten 20 000 Jahre zu untersuchen.
- Die Modellsimulationen sollen Aufschluss darüber geben, wie sich Änderungen der Ozeanzirkulation auf den tropischen Wasserkreislauf auswirken und ob Feuchtetransportänderungen einen positiven oder negativen Rückkopplungsmechanismus für Klimaschwankungen darstellen.

Die immensen Regenmengen über dem tropischen Ostpazifik können dem atmosphärischen Wasserdampftransport durch Nordostpassate über die zentralamerikanische Landbrücke zugeschrieben werden. Für das heutige Klima wird dieser Wasserdampfexport vom Atlantik in den Pazifik auf 0,1–0,3 Millionen  $\text{m}^3 \text{s}^{-1}$  geschätzt. Dieser Feuchtefluss ist mitverantwortlich für die gegenüber dem Pazifik relativ hohen Salzgehalte des Atlantiks. Er ist somit ein wichtiger Antrieb für die globale Ozeanzirkulation, die ein wesentliches Element im Klimasystem der Erde darstellt.

Die globale Ozeanzirkulation kann man sich als ein weltumspannendes Förderband vorstellen, das große Mengen Wärme und Salz transportiert. Im nördlichsten Nordatlantik sinkt Wasser das aufgrund seiner niedrigen Temperatur und seines relativ hohen Salzgehalts eine große Dichte besitzt, in die Tiefe ab. Dieses nordatlantische Tiefenwasser strömt 2000 bis 4000 m unterhalb der Oberfläche in den Südatlantik und von dort ins Südpolarmeer, den Indischen Ozean und den Pazifik. Infolge von Vermischungsprozessen und Windeinwirkung quillt das Tiefenwasser allmählich wieder auf und strömt an der Oberfläche zurück in Richtung Nordatlantik. Aufgewärmt von der subtropischen und tropischen Sonneneinstrahlung transportiert die Ozeanzirkulation rund 1 Petawatt Wärme in den Nordatlantik, was der 2700-fachen Leistung aller weltweit existierenden Kernreaktorblöcke entspricht. Wenn dieses ozeanische Förderband ins Stocken gerät sind

weitreichende Konsequenzen für das Klima zu erwarten. Die Achillesferse des ozeanischen Förderbandes befindet sich im nördlichen Nordatlantik, dort wo Tiefenwasser gebildet und die Zirkulation in Gang gesetzt wird. Gelangen übermäßig große Mengen Süßwasser in diese Region, wird die Dichte des Meerwassers reduziert, so dass dieses nicht mehr in die Tiefe sinken kann – das Förderband wird gebremst. In der erdgeschichtlichen Vergangenheit ist dies häufiger geschehen, insbesondere während Eiszeiten als schmelzende Eisberge die Tiefenwasserbildung zum Erliegen brachten. Für die Zukunft sind ähnliche Prozesse zu befürchten, wenn sich der hydrologische Kreislauf beschleunigt oder die grönländischen Eismassen schmelzen.

Obwohl die Bedeutung tropischer Wasserdampftransporte für die Aufrechterhaltung des ozeanischen Förderbandes in der Klimaforschung akzeptiert ist, ist wenig über zeitliche Variationen der Feuchteflüsse bekannt. Eine der entscheidenden Fragen hierbei ist: Wirkt der Wasserdampfexport vom tropischen Atlantik in den Pazifik als positiver oder negativer Rückkopplungsmechanismus auf Änderungen der Ozeanzirkulation? Positiver Rückkopplungsmechanismus bedeutet hierbei: Schwächt sich die Zirkulation ab, verringert sich der atlantische Wasserdampfexport in den Pazifik, was den Salzgehalt im Atlantik weiter absenkt und die ursprüngliche Störung der Zirkulation verstärkt. Ein negativer Rückkopplungsmechanismus wäre hingegen mit einer Verstärkung des Wasserdampfexports verbunden.

Bislang existieren lediglich drei paläozeanografische Studien, die der Abschätzung vergangener Änderungen im Feuchteexport gewidmet sind (siehe Referenzen in [1]). In diesen Studien wurden Meeresoberflächensalzgehalte im tropischen Ostpazifik anhand mariner Sedimentkerndaten rekonstruiert. Dabei wurden Salzgehaltszunahmen (relativ zum tropischen Atlantik) einer Abnahme des Wasserdampftransportes über Zentralamerika zugeschrieben, während Salzgehaltsabnahmen als Feuchteexportzunahmen interpretiert wurden. Hinsichtlich dieser Interpretation zeigen die drei Studien allerdings kein einheitliches Ergebnis. Für Heinrich-Stadial 1 (vor ca. 15 000 – 17 000 Jahren) – einem Intervall mit nachweislich stark abgeschwächter Ozeanzirkulation – deuten zwei der drei Rekonstruktionen auf Salzgehaltszunahmen im tropischen Ostpazifik hin, was als Reduzierung des atlantischen Feuchteexports infolge einer abgeschwächten Ozeanzirkulation gedeutet wurde. Im Gegensatz dazu wurde aus einer dritten Rekonstruktion eine Zunahme der Niederschläge während des Heinrich-Stadials abgeleitet.

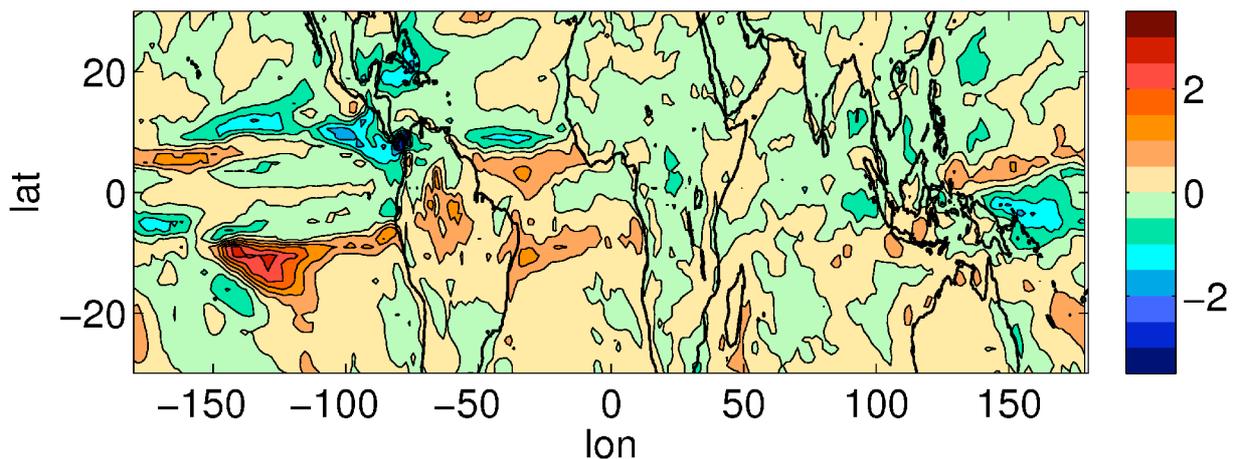
Bisherige Modellstudien, in denen die Ozeanzirkulation durch Süßwassereinträge in den Nordatlantik gestört wurde, ergaben eine Zunahme des Wasserdampftransportes vom Atlantik in den Pazifik (hauptsächlich durch verstärkte Nordostpassate), wenn die Ozeanzirkulation abschwächt. Die Modellexperimente wurden allerdings unter heutigen Randbedingungen durchgeführt. Unter eiszeitlichen Randbedingungen können sich die Feuchteexporte jedoch ganz anders verhalten, wie die Untersuchung von Niederschlagsvariationen in vorhergegangenen Modellstudien unserer Arbeitsgruppe vermuten lässt (vgl. [2]). Welchen Einfluss Eisschilde, verringerte Treibhausgaskonzentrationen und veränderte Erdbahnparameter auf die Variabilität tropischer Feuchteexporte ausüben ist nicht bekannt und soll in diesem Projekt systematisch untersucht werden.

Hierzu verwenden wir das komplexe Klimamodell CCSM3 (*Community Climate System Model*, Version 3). Das Klimamodell wurde hauptsächlich am *National Center for Atmospheric Research* (NCAR) in Boulder (Colorado, USA) in Zusammenarbeit mit dem *Los Alamos National Laboratory* (LANL) in New Mexico (USA) entwickelt. Das Modell wird mit einer horizontalen Auflösung von ca.  $1,4^\circ$  für das Atmosphäregitter betrieben, während das Ozeanmodellgitter eine räumlich variable Gitterweite von ca.  $1^\circ$  in zonaler und bis zu  $0,3^\circ$  in meridionaler Richtung besitzt. Die vertikale Darstellung des Atmosphärenmodells umfasst 26 Schichten, der Ozean wird mit 40 Niveaus in der Vertikalen diskretisiert. Die relativ hohe

räumliche Auflösung ist notwendig, um das komplexe Windsystem in der tropischen Ostpazifikregion adäquat darstellen zu können.

Um zu untersuchen, wie sich Änderungen der Ozeanzirkulation auf den tropischen Wasserkreislauf auswirken und ob tropische Wasserdampftransporte einen positiven oder negativen Rückkopplungsmechanismus darstellen, ist eine Serie von Experimenten geplant. Hierbei wird unter entsprechenden Randbedingungen für verschiedene Klimaereignisse während der letzten 20 000 Jahre jeweils eine Süßwasserstörung in den Nordatlantik eingebracht, um die Tiefenwasserbildung zu reduzieren. Das Referenzexperiment mit vorindustriellen Randbedingungen hinsichtlich Eisschildvolumen, Erdbahnparameter und Treibhausgaskonzentrationen wurde bereits durchgeführt und ist derzeit Gegenstand detaillierter Analysen (Abb. 1).

Inwieweit sich die Ergebnisse dieses Experiments auf eiszeitliche Verhältnisse, wie sie z.B. während Heinrich-Stadial 1 herrschten, übertragen lassen, wird eine der zentralen Fragen sein, die dieses Projekt zu beantworten versucht. Hierdurch wird ein tieferes Verständnis hinsichtlich der Stabilität der globalen Ozeanzirkulation gewonnen. Dieses Verständnis ist nicht nur ausschlaggebend für die Interpretation vergangener Klimaschwankungen, sondern ist auch von wesentlicher Bedeutung im Hinblick auf die Vorhersage zukünftiger Klimaänderungen.



**Abbildung 1:** Tropische Niederschlagsanomalien im Jahresmittel (in mm/d) infolge einer ungefähren Halbierung der Tiefenwasserbildungsrate im Nordatlantik.

### References:

1. Prange, M., S. Steph, M. Schulz, L. D. Keigwin (2010), Inferring moisture transport across Central America: Can modern analogs of climate variability help reconcile paleosalinity records? *Quaternary Science Reviews*, 29, 1317-1321.
2. Merkel, U., M. Prange, M. Schulz (2010), ENSO variability and teleconnections during glacial climates, *Quaternary Science Reviews*, 29, 86-100.

### Förderung:

DFG, Schwerpunktprogramm 1266 (Interdynamik)

## 6.11 hbp00002: Nanostructures for biosensing devices. Functionalization of semiconductor nanowires

HLRN-Projektkenung:	hbp00002
Laufzeit:	II/2010 – I/2011
Projektleiter:	Dr. A. L. da Rosa
Projektbearbeiter:	A. L. da Rosa, N. H. Moreira and Th. Frauenheim
Institut / Einrichtung:	Universität Bremen, BCCMS

### Abstract

- Tailored nanodevices with a specific or various functionalities can be designed by capping the surface of nanostructures with organic molecules.
- The design of such devices with optimal performance requires a deep understanding of their physical properties such as the investigation of surface defects and surface functionalization.
- In this project we employ first principles density functional theory to design hybrid semiconductor nanostructures with specific functionality via surface modification and doping.
- Equilibrium structures of semiconductor nanowires functionalized with organic molecules are investigated. We propose optimal anchor groups for functionalization of these wires.

There is considerable technological interest in combining organic molecules with semiconductor nanostructures in order to obtain hybrid materials with novel properties, which includes highly specific sensors and new multifunctional devices. Nanostructured materials have large surface-to-volume ratio, which offer a unique possibility of enhanced sensitivity and selectivity. Chemical species introduced onto the surface of such nanostructures could then be employed to create novel hybrid multi-functional devices. Nowadays, the used sensing devices require large complexity and time-consuming sample preparation and offer limited sensitivity. Compared to two-dimensional planar devices, where binding to the surface leads to depletion or accumulation of charge carriers only on the surface region, the charge accumulation or depletion in the one-dimensional nanostructures takes place in the bulk region of the structure, which gives rise to large changes in their electrical properties. Such feature is particularly desirable for rapid and real time detection of biomolecules and proteins. One of the crucial aspects for the realization of such hybrid systems is the understanding of the semiconductor/organic interface.

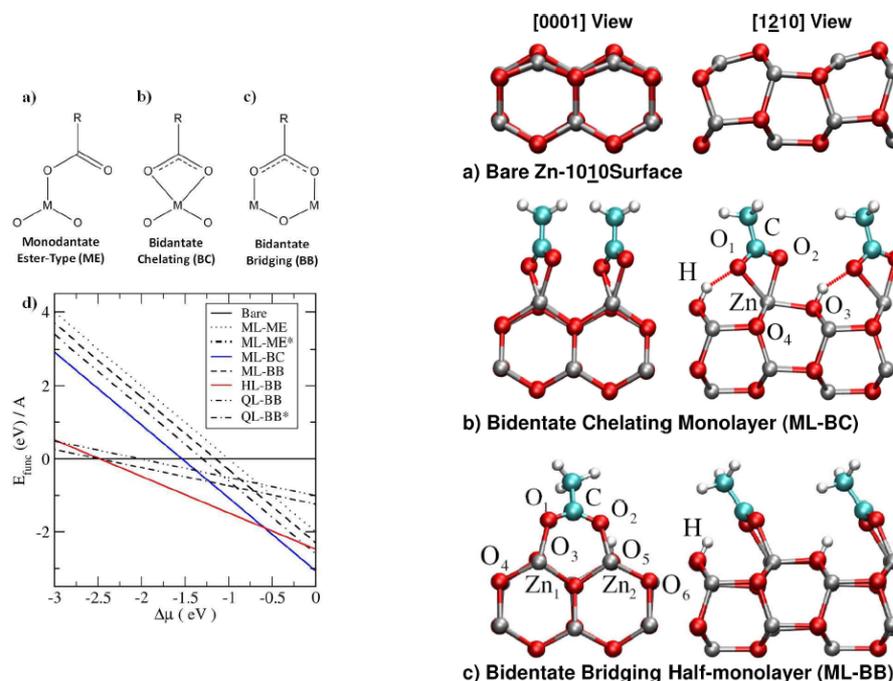
ZnO can offer many advantages, such as good conductivity, which provide many transport channels in nanoscale, excellent chemical stability and biocompatibility. Surface modification of ZnO nanostructures should provide immobilization of further attached biological or organic molecules through covalent binding. Due to the complexity of the systems, it is not always straight forward to obtain all aspects of ZnO/organic interface by experimental characterization. In this context, density functional calculations are a powerful tool for the quantitative interpretation of experiments, and can help to determine the most stable binding

groups, the geometry of the adsorbed molecules as well the electronic and electrical properties of the ZnO/organic system.

We employ density-functional theory based methods, including first-principles and tight-binding approaches to investigate structural and electronic properties of hybrid ZnO/organic nanowires. We have investigated the chemical interactions between ZnO nanowire facets and several organic functional groups. Moreover we have investigated dopants in ZnO wires for spintronics applications.

We have demonstrated the covalent functionalization of  $(10\bar{1}0)$ -ZnO surfaces with carboxylic acids. We have found two thermodynamically stable surface configurations: a monolayer coverage with a bidentate chelating ligand and a half-monolayer coverage with a bidentate bridging ligand (as shown in Fig.1). In both cases, the electronic band structures show the presence of covalent surface/adsorbate interactions. Besides, a nonbonding carboxylate character is verified for the bidentate adsorbate [2], [4].

Besides we have calculated the atomic relaxations and formation energies for neutral and charged defects using an empirical potential alignment procedure. Oxygen vacancies and zinc interstitials have been found the lowest energy defects under Zn-rich conditions, with oxygen interstitials and zinc vacancies favored under O-rich conditions. Most defects have been found favorable on the surface of the wire, with exception of the charged oxygen interstitials, which prefer inner positions to allow a better charge accommodation observed there. Besides, we have also investigated the interaction between oxygen vacancies and carboxylic acids, demonstrating that an oxidation-reduction reaction may explain the suppression of green luminescence bands experimentally observed for organic-coated ZnO nanowires [1].



**Abbildung 1:** The stability of acetic acid on ZnO  $(10\bar{1}0)$  surfaces. The picture at the bottom shows the surface phase diagram for the most stable structures. The picture at the top shows the optimized geometries for  $\text{CH}_3\text{-COOH}$  on  $\text{ZnO}(10\bar{1}0)$ .

## References:

1. Native Defects in ZnO Nanowires: Atomic Relaxations, Relative Stability and Defect Healing with Organic Acids, N. H. Moreira, B. Aradi, A. L. Rosa and Th. Frauenheim, J. Phys. Chem. C **114**, 18860 (2010)
2. Glycine Adsorption on (10 $\bar{1}$ 0)-ZnO Surfaces, A. Dominguez, N. H. Moreira, G. Dolgonos, A. L. Rosa and Th. Frauenheim, J. Phys. Chem. C, (2010) accepted
3. N-doped ZnO nanowires: surface segregation, the effect of hydrogen passivation and applications in spintronics, H. Xu, A. L. Rosa, Th. Frauenheim and R. Q. Zhang, phys. stat. sol. (b) **247**, 2195(2010)
4. First principles calculations of atomic and electronic properties of ZnO nanostructures, W. Fan, H. Xu, D. Fang, A. L. Rosa, R. Q. Zhang and Th. Frauenheim, phys. stat. sol. (b) Feature Article, **247**, 2581 (2010)

## Förderung:

The authors thank the German-Israeli Cooperation Program (DIP) and the Deutsche Forschungsgemeinschaft under the Priority Program SPP-1165.

## 6.12 hbp00003: Heisser Tanz. Verschmelzung von Neutronensternen

HLRN-Projektkenung:	hbp00003
Laufzeit:	IV/2010 – III/2011
Projektleiter:	Prof. Dr. C. Lämmerzahl <sup>1</sup> , Prof. Dr. S. Rosswog <sup>2</sup>
Projektbearbeiter:	C. Lämmerzahl, S. Rosswog
Institut / Einrichtung:	1: Universität Bremen 2: Jacobs University Bremen

### Übersicht

- Doppelsternsysteme aus Neutronensternen sind Laboratorien für Physik unter extremsten Bedingungen.
- Sie sind starke Quellen von Gravitationswellen, die man in naher Zukunft zu detektieren hofft.
- Ihre Verschmelzung ist vermutlich verantwortlich für einige der leuchtkräftigsten Explosionen im Universum seit dem Urknall.

Die Entwicklung von Sternen vollzieht sich in Stadien, die denen eines menschlichen Lebens nicht unähnlich sind. Am Beginn steht die Geburt eines Sternes durch den Gravitationskollaps einer interstellaren Gaswolke. Der Kollaps wird gestoppt, wenn der Gasdruck im Inneren der kollabierenden Region groß genug wird, um der Eigengravitation Paroli zu bieten: ein 'Proto-Stern' ist geboren. Übersteigt die Zentraltemperatur mehrere Millionen Grad, setzt Wasserstoffbrennen ein. Diese Brennphase ist die längste in einem Sternenleben. Danach können sich weitere Brennphasen anschließen: ist der Brennstoffvorrat der aktuellen Phase aufgebraucht, kommt es zu einer Kontraktion und Temperaturerhöhung, die die nächste Brennphase einläutet, in der nun die 'Asche' der vorherigen Phase als neuer Brennstoff dient. Wie weit ein Stern in dieser Entwicklung kommt, hängt ganz entscheidend von seiner ursprünglichen Masse ab. Leichte Sterne können bereits nach dem Helium- oder Kohlenstoffbrennen nicht weiter kontrahieren, ihre Eigengravitation ist zu schwach. In ihrem Todeskampf stoßen sie ihre äußere Hülle ab, zurück bleibt ein 'planetarischer Nebel', in dessen Zentrum der noch glühend heiße Kern des Sternes, ein 'Weisser Zwerg', zurückbleibt. Sterne, die etwa die achtfache Masse unserer Sonne übersteigen, durchlaufen einer Reihe weiterer Brennphasen bis sich ein Eisenkern im Zentrum des Sterns gebildet hat. Eisengruppenelemente können aus kernphysikalischen Gründen nicht weiter fusionieren, deshalb wächst der zentrale Eisenkern bis zu einer kritische Masse, bei der er kollabiert. Dieser Kollaps läutet das finale Feuerwerk ein, in dem der massereiche Stern sein Leben aushaucht: eine Supernova. Dabei zerstört er einen Großteil der Elemente, die er über seine Lebenszeit synthetisiert hat. Zurück bleibt, abhängig von der ursprünglichen Sternmasse, entweder ein Neutronenstern oder ein Schwarzes Loch.

Neutronensterne bestehen, wie im Namen angedeutet, überwiegend, aber nicht ausschliesslich, aus Neutronen. Diese liegen dicht gepackt, wobei die Dichte im Neutronenstern sogar jene in einem Atomkern übersteigt. In diesem Sinne kann man sich einen Neutronenstern als einen gigantischen Atomkern vorstellen, mit einem Radius von

etwa 15 Kilometern und etwa dem 1.4-fachen der Masse der Sonne. Die Physik in einem Neutronenstern ist in jeder Hinsicht extrem: sein Gravitationsfeld krümmt nach Einsteins Relativitätstheorie die Raumzeit, sein Magnetfeld kann in Extremfällen jenes der Erde um einen Faktor von  $10^{15}$  übersteigen, und seine zentrale Dichte übertrifft alles, was in Laborexperimenten bei der Kollision von Atomkernen erreicht werden kann, um ein Vielfaches.

Die Mehrzahl der Sterne im Universum befindet sich Doppel- oder Mehrfachsystemen, ein isolierter Stern wie unsere Sonne ist also eher die Ausnahme denn die Regel. Um ein Doppelsternsystem aus zwei Neutronensternen zu formen, muss das ursprüngliche Sternensystem zwei Supernova-Explosionen überstehen. In der Mehrzahl der Fälle wird das System von der Wucht der Explosionen zerfetzt, aber in einigen wenigen Fällen überlebt tatsächlich ein Doppelsternsystem aus zwei Neutronensternen. Momentan sind 10 solcher Systeme bekannt. Diese stellen Physiklabore von unschätzbarem Wert dar. Das erste derartige System, das entdeckt wurde, der Binärpulsar PSR 1913+16, lieferte die ersten, wenn auch indirekten, Hinweise für die Existenz der von der Relativitätstheorie vorhergesagten Gravitationswellen. Ein solches relativistisches Binärsystem emittiert Energie und Drehimpuls in Form von Gravitationwellen, wodurch die Orbitalbewegung langsam, aber messbar 'ermüdet': die beiden Sterne spiralisieren langsam aufeinander zu. Für den ersten Nachweis der Existenz von Gravitationswellen wurden die Entdecker des Systems, Russel Hulse und Joseph Taylor, 1993 mit dem Nobelpreis für Physik belohnt. Vor kurzem haben mehrere bodengebundene Gravitationswellendetektoren ihre Arbeit aufgenommen. Die vielversprechendsten Systeme für den ersten *direkten* Gravitationswellennachweis sind Doppelsternsysteme aus Neutronensternen.

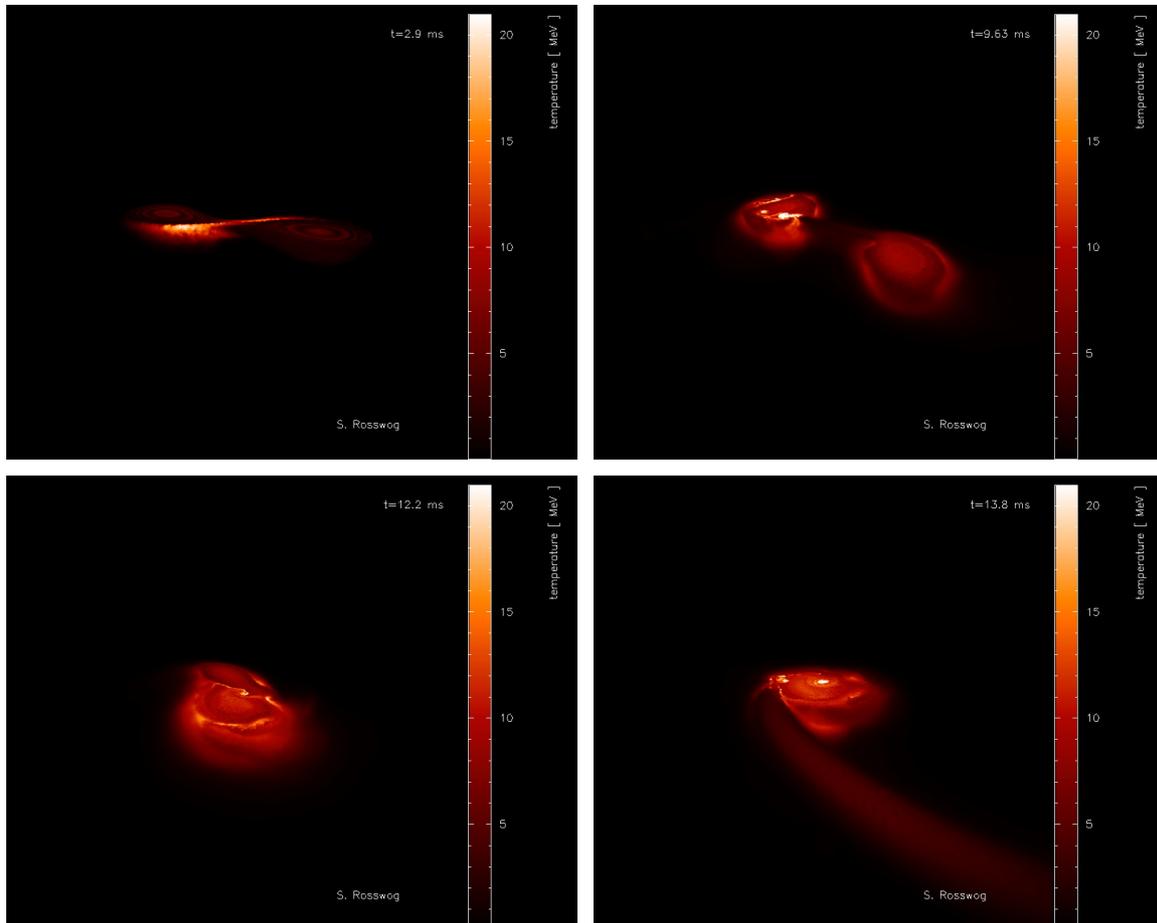
Gewöhnlich ist es sehr schwierig, die Massen von Sternen genau zu bestimmen. Bei Doppelsternsystemen kann man über das Dritte Keplersche Gesetz relativ einfach wenigstens die *Gesamtmasse* bestimmen. Bei relativistischen Doppelsternsystemen wie dem Doppelneutronensternsystem PSR 1913+16, erlaubt die Messung von zwei relativistischen Effekten die Bestimmung *individueller* Sternmassen. Die Massen von PSR 1913+16 konnten mit unglaublicher Präzision zu  $m_1 = 1.4414 M_{\odot}$  and  $m_2 = 1.3867 M_{\odot} \pm 0.0002 M_{\odot}$  [1] bestimmt werden ( $M_{\odot}$  : Masse unserer Sonne). Derartig genau bestimmte Massen bilden wichtige Testfälle für die Theorie der Materiezustandsgleichung jenseits von Kernmateriedichte. Solche relativistischen Doppelsternsysteme stellen darüber hinaus 'Gravitationslabore' dar, die längerfristig eine Unterscheidung zwischen der Allgemeinen Relativitätstheorie und alternativen Gravitationstheorien erlauben könnten.

Die Emission von Gravitationswellen treibt ein relativistisches Binärsystem kontinuierlich näher auf einander zu, so dass es letztendlich zu einem Verschmelzen der beiden Neutronensternkomponenten kommt. Bei einer solchen Verschmelzung werden in Bruchteilen einer Sekunde Gravitationsbindungsenergien von etwa  $10^{53}$  erg frei, mehr Energie als die Sonne seit Bestehen des Universums hätte abstrahlen können. Dieses Verschmelzen erzeugt wahrscheinlich einen sogenannten (kurzen) Gamma-ray Burst [2], eine der leuchtkräftigsten Explosionen im Universum seit dem Urknall.

In einem solchen Verschmelzungsprozess wird außerdem neutronenreiche Materie ins All geschleudert, wobei wahrscheinlich einige der schwersten Elemente im Universum, sogenannte 'R-Prozess' (für 'rapid neutron capture') Elemente, synthetisiert werden [3].

Die Simulation eines solchen Verschmelzungsprozesses ist eine typische Multi-Physik Anwendung: die Materiebewegung wird über (Lagrange) Hydrodynamik-Gleichungen mit Eigengravitation beschrieben. Darüber hinaus ist es wichtig, den von der Materie ausgeübten Druck korrekt mittels einer nuklearen Zustandsgleichung zu berechnen, und weitere physikalische Prozesse wie Kühlung durch Neutrino-Prozesse und die dynamische

Entwicklung von Magnetfeldern zu berücksichtigen. All diese Physik-Module sind im Programmpaket MAGMA [4] implementiert. Die ersten Neutronensternsimulationen sind kürzlich am HLRN begonnen worden. Abbildung 1 zeigt 'Schnappschüsse' einer ersten Simulation der Kollision zweier Neutronensterne.



**Abbildung 1:** Kollision zweier Neutronensterne mit 1.3 und 1.4 Sonnenmassen. Farbkodiert ist die Oberflächentemperatur in Einheiten von MeV, 1 MeV entspricht etwa  $10^{10}$  Kelvin.

### References:

1. J.M. Weisberg, J.H. Taylor, in: Binary Radio Pulsars, vol. 328 of Astronomical Society of the Pacific Conference Series, 2005.
2. Eichler et al., Nature 340 (1989) 126; Rosswog et al., MNRAS 345 (2003) 1077
3. Lattimer & Schramm, ApJ 192 (1974) L145 ; Freiburghaus et al., ApJ 525 (1999) L121
4. Rosswog & Price, MNRAS 379 (2007) 915

### Förderung:

Teile des Projekts werden von der DFG unter *Electromagnetic transients from radioactive decays accompanying short gamma-ray bursts* gefördert.