



**BremHLR**

Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen

**Statusbericht 2011**  
**des**  
**Kompetenzzentrums**  
**für**  
**Höchstleistungsrechnen Bremen**  
**– BremHLR –**

Bremen, Juli 2012



Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen

© 2003-2012 BremHLR – Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen

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

## Das Berichtsjahr 2011 in Stichpunkten

- Weitere Steigerung der Bremer Nutzung der Computer des Norddeutschen Verbunds für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN)
- 6. Workshop zur Einführung in die parallele Programmierung
- 1. Workshop zur Einführung in die Einzelprozessor-Optimierung
- Mitarbeit des BremHLR an der Antragstellung für das Nachfolgesystem HLRN-III am HLRN

## Inhaltsverzeichnis

|      |   |    |
|------|---|----|
| 1    | Das BremHLR: Aufgaben und organisatorische Struktur .....   | 4  |
| 1.1  | Aufgaben.....   | 4  |
| 1.2  | Struktur .....  | 4  |
| 1.3  | Sitzung des Lenkungsausschusses.....  | 5  |
| 2    | Tätigkeitsprofil des BremHLR im Berichtszeitraum.....   | 5  |
| 2.1  | Unterstützung des HLRN.....   | 5  |
| 2.2  | Weitere Aktivitäten des BremHLR .....   | 6  |
| 3    | Statistische Angaben zu den Bremer Höchstleistungsprojekten .....   | 7  |
| 4    | Veranstaltungen mit Beteiligung des BremHLR.....  | 9  |
| 5    | Projektberichte .....   | 11 |
| 5.1  | hbc00002: First Principles Molecular Dynamics Simulations of Di- and Tri-peptides at Titanium Dioxide Surfaces.....   | 11 |
| 5.2  | hbc00004: Molecular simulation studies of the interaction of weakly coordinating ions with biological interfaces .....  | 15 |
| 6.3  | hbc00010: Solubility of Zinc Oxide Nanoparticles .....  | 20 |
| 5.3  | hbi00014: Modelling turbulent heat transfer of a Rayleigh-Bénard problem with compressible Large-Eddy simulation.....   | 23 |
| 5.4  | hbi00015: Numerical Large Eddy Simulation of a turbulent flow in a spherical gap .....  | 26 |
| 5.5  | hbk00018: Berechnung der Wasserdampfkonzentrationen aus Limb-Messungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY.....  | 30 |
| 5.6  | hbk00021: Unstructured Mesh Ocean Modelling. Understanding the Dynamics and Change in the Arctic Ocean.....   | 35 |
| 5.7  | hbk00025: Die Entwicklung der tropischen Regenzone im späten Neogen .....   | 38 |
| 5.8  | hbk00026: Modellierung und Simulation von Tsunami-Ausbreitung und -Überflutung .....  | 42 |
| 5.9  | hbk00027: Wie stabil ist das ozeanische Förderband? Atmosphärische Feuchtetransporte und thermohaline Zirkulation: Untersuchung möglicher Rückkopplungsmechanismen für abrupte Klimaschwankungen..... | 47 |
| 5.10 | hbp00003: Encounters of Neutron Stars .....   | 51 |
| 5.11 | hbp000011: First-principles investigations of hybrid organic-inorganic interfaces.....  | 55 |

# 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 der Bremer Senatorin 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)
- Helmuth 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, bis April 2011)
- Dr. Natalja Rakowsky (AWI/Rechenzentrum, ab Mai 2011)

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 Sitzung des Lenkungsausschusses**

Am 3. Mai 2011 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 Nutzung des HLRN durch Bremer Projekte. Zum Zeitpunkt der Sitzung zeigte sich bereits eine verstärkte Nutzung des HLRN, mit einer Bewilligung für das zweite Quartal 2011 von etwa 7% der Gesamtkapazität des HLRN und somit deutlich über dem Bremer Landesanteil von etwa 4.3%. Die Steigerung der Nutzung ist eine Folge von neuen Projekten (Kooperationsprojekte zwischen Arbeitsgruppen der Jacobs University und der Universität Bremen, sowie die Nutzung des HLRN durch die Arbeitsgruppe von Dr. Rodion Groll vom ZARM an der Universität Bremen) Außerdem wurden von bestehenden Nutzern Projektanträge mit größeren Kontingenten als bisher gestellt.

Ein weiteres Thema der Sitzung war die Fortschreibung des Kompetenzzentrums BremHLR über das Jahr 2011 hinaus. Die Beantragung der Fortschreibung ist vom Lenkungsausschuss befürwortet wurden. In den Monaten nach der Sitzung ist die Fortschreibung dann erfolgreich beantragt wurden, so dass die erfolgreiche Arbeit des Kompetenzzentrums BremHLR bis zum Ende des Jahres 2015 fortgesetzt werden kann.

## **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 bestand die Unterstützung des HLRN durch das BremHLR hauptsächlich in der Fachberatung für Bremer Projekte am HLRN.

Als besondere Aufgabe waren Mitglieder des Lenkungsausschusses und der Fachberater in den ersten Monaten des Jahres 2011 daran beteiligt, die Anträge an den Wissenschaftsrat und an die DFG um Finanzierung der Bundesanteile für das nächste HLRN Höchstleistungsrechnersystem (HLRN-III) zu formulieren. In der zweiten Jahreshälfte wirkten Mitglieder des Lenkungsausschusses und der Fachberater mit erheblichem Zeitaufwand an der Erstellung der Ausschreibungsunterlagen für das HLRN-III System mit. Ein Schwerpunkt der Arbeiten lag hierbei auf der Auswahl und Bewertung der Benchmarks zur Leistungsbewertung der Angebote für das HLRN-III System.

## 2.2 Weitere Aktivitäten des BremHLR

Im Veranstaltungsjahr 2011 wurde vom BremHLR der *6. Workshop zur Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* organisiert und durchgeführt. Mit 40 Teilnehmern war dieser Workshop noch besser besucht, als in den letzten Jahren.

Der Workshop wurde in der Zeit vom 10. bis zum 14. Januar an der JUB abgehalten. Als Referent konnte wie bereits bei den bisherigen Workshops Dr. Hinnerk Stüben vom Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin gewonnen werden, der den Workshop gemeinsam mit dem BremHLR-Fachberater Dr. Lars Nerger abhielt. Für die Studenten der JUB wurde der Workshop auch wieder als offizielle Lehrveranstaltung angeboten. Durch die Bearbeitung einer abschließend bewerteten Übungsaufgabe konnten die Studenten Kreditpunkte für ihr Bachelor- und Masterstudium erlangen.

Ein weiterer Workshop wurde vom 28. bis 30. März zum Thema Einzelprozessor-Optimierung abgehalten. Wiederum konnte Dr. Stüben als Referent gewonnen werden um in die Optimierung von Programmen einzuführen, die nur einen Prozessor verwenden. Mit 21 Teilnehmern war auch dieser Workshop sehr gut besucht.

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

Auch im aktuellen Berichtszeitraum war das BremHLR an einer Reihe weiterer Veranstaltungen beteiligt. Fachberater des BremHLR beteiligten sich unter anderem 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

Im Jahr 2011 setzte sich der Trend der intensiven Nutzung des HLRN durch die Bremer Projekte bei gleichzeitig steigendem Bedarf an Rechenleistung fort. Für Bremer Projekte wurde für das Jahr 2011 etwas mehr als doppelt so viel Rechenzeit bewilligt wie für das Jahr 2010. Im Jahresdurchschnitt wurde ein prozentualer Anteil von 6,9 % an der gesamten am HLRN verfügbaren Rechenleistung erreicht. Dieses liegt deutlich über dem investiven Anteil des Landes Bremen am HLRN. Der gesteigerte Bedarf ist zum einen auf eine größere Anzahl von Bremer Projekten zurückzuführen. Zum anderen hat sich in bestehenden Projekten der Bedarf an Rechenleistung z.B. durch höher aufgelöste Modellgitter vergrößert.

Insgesamt wurden im Jahr 2011 etwa 640 000 NPL<sup>1</sup> durch Bremer Projekte am HLRN abgenommen. Dieses ist mehr als das Doppelte des Vorjahres und entspricht in etwa 10,5 Millionen CPU-Stunden. Abbildung 3.1 zeigt den monatlichen Verbrauch der Bremer Projekte am HLRN. Die starke Zunahme der Rechenzeit Bremer Projekte ist deutlich sichtbar.

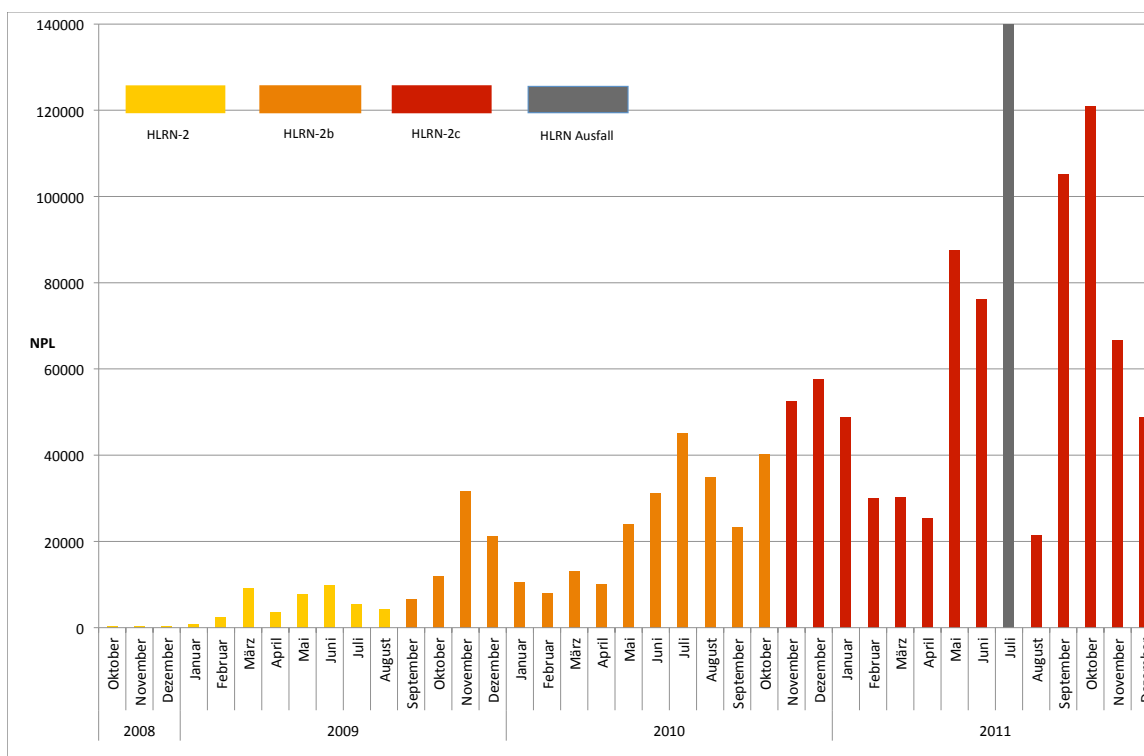


Abbildung 3.1: Grafische Darstellung des monatlichen Rechenzeitverbrauchs der Bremer HLRN-Großprojekte. Verbrauch in der HLRN-Leistungseinheit NPL zwischen Oktober 2008 und Dezember 2011. Die Farben zeigen die Verfügbarkeit der unterschiedlichen Ausbaustufen der HLRN-Systeme. Im Juli 2011 waren die HLRN-Systeme nicht nutzbar, da der Zugang zu den Computern wegen eines Rechnereinbruchs vorübergehend geschlossen werden musste. Auch im August 2011 konnten die HLRN-Systeme nur teilweise genutzt werden.

<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 12 Prozessorkernen und auf der dritten Stufe entspricht 1 NPL einer CPU-h auf 16 Prozessorkernen.

Eine Übersicht zu allen vom BremHLR betreuten Projekten gibt Tabelle 3.1. Im Jahr 2011 wurden vom BremHLR 21 Projekte am HLRN betreut und damit deutlich mehr als in 2010 als 16 Projekte betreut wurden. Die Anzahl der am HLRN akkreditierten Nutzer, die die Projekte durchführen, ist leicht von 54 auf 69 angestiegen. Es gab im Jahr 2011 mehrere Neuanträge für Projekte mit großem Rechenzeitbedarf. Als neue Nutzergruppe ist die Arbeitsgruppe von Dr. R. Groll vom ZARM hinzugekommen. Die Mitglieder der Gruppe führen Strömungsdynamik-Simulationen mit höherem Rechenzeitbedarf durch.

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 2011

| Kennung  | Projektleiter                                    | Institut | Laufzeit       | NPL    | Status |
|----------|--|----------|----------------|--------|--------|
| hbc00001 | Dr. P. Deák/Dr. B. Aradi                         | UB/BCCMS | I/09 – I/12    | 64000  | F      |
| hbc00002 | Dr. S. Köppen                                    | UB/BCCMS | III/09 – IV/11 | 29000  | F      |
| hbc00004 | Prof. Dr. Gabel/<br>Prof Dr. D. Roccatano        | UB & JUB | IV/10 – IV/11  | 14000  | F      |
| hbc00010 | Prof. T. Frauenheim                              | UB/BCCMS | II/11 – I/12   | 24000  | E      |
| hbi00002 | Prof. L. Colombi Ciacchi                         | UB/BCCMS | IV/10 – IV/11  | 15000  | E      |
| hbi00007 | Prof. Dr. L. Mädler/<br>Prof. Dr. T. Heine       | UB & JUB | IV/10 – IV/11  | 25000  | E      |
| hbi00011 | Dr. M. Walter                                    | UB & JUB | I/11 – II/12   | 41000  | E      |
| hbi00014 | Dr.-Ing. R. Groll                                | UB/ZARM  | I/11 – II/12   | 40000  | E      |
| hbi00015 | Dr.-Ing. R. Groll                                | UB/ZARM  | III/11 – II/12 | 20000  | E      |
| hbk00018 | Dr. K. Weigel                                    | UB/IUP   | I/11 – IV/12   | 12000  | E      |
| hbk00021 | Prof. Dr. T. Jung                                | AWI & UB | II/09 – I/12   | 103000 | F      |
| hbk00025 | Prof. Dr. M. Schulz                              | UB/MARUM | II/10 – I/12   | 31000  | F      |
| hbk00026 | Prof. Dr. W. Hiller                              | AWI & UB | III/10 – II/12 | 32000  | F      |
| hbk00027 | Prof. Dr. M. Schulz                              | UB/MARUM | III/10 – IV/12 | 72000  | F      |
| hbk00028 | Prof. Dr. P. Lemke                               | AWI & UB | IV/11 – III/12 | 50000  | E      |
| hbk00029 | Prof. Dr. T. Jung                                | AWI & UB | II/11 – I/12   | 75000  | E      |
| hbk00030 | Prof. Dr. T. Jung                                | AWI & UB | IV/11 – III/12 | 30000  | E      |
| hbp00002 | Dr. A. L. da Rosa                                | UB/BCCMS | II/10 – I/11   | 10000  | E      |
| hbp00003 | Prof. Dr. C. Lämmerzahl/<br>Prof. Dr. S. Rosswog | UB & JUB | IV/10 – III/12 | 117000 | E      |
| hbp00010 | Prof. Dr. C. Lämmerzahl/<br>Prof. Dr. M. Brüggem | UB & JUB | I/11 – II/12   | 71000  | E      |
| hbp00011 | Prof. Dr. T. Frauenheim/<br>Dr. L. da Rosa       | UB/BCCMS | IV/11 – III/12 | 10000  | E      |

## 4 Veranstaltungen mit Beteiligung des BremHLR

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

**Veranstalter:** BremHLR

**Datum:** 10. – 14.1. 2011

**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. Hinnerk Stüben (Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, ZIB) und Dr. Lars Nerger (BremHLR)

**Teilnehmerzahl:** 40

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

### 1. Kurs *Einzelprozessor-Optimierung*

**Veranstalter:** BremHLR

**Datum:** 28. – 30.3. 2011

**Ort:** Jacobs University Bremen

**Beschreibung:** In dem Workshop wurden die Grundlagen der Optimierung serieller Programme vermittelt. In praktischen Übungen konnten die vermittelten Themen direkt getestet werden.

**Referenten:** Dr. Hinnerk Stüben (Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, ZIB)

**Teilnehmerzahl:** 21

**Teilnehmende Institutionen:** AWI, JUB, UB (ZETEM, ITEM, ZARM), TU Hamburg-Harburg, BSH Hamburg

### 20. HLRN-Fachberater-Workshop

**Veranstalter:** HLRN, RRZN Hannover

**Datum:** 9. – 10. Mai 2011

**Ort:** RRZN Universität Hannover

**Teilnehmerzahl:** 18

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

## 21. HLRN-Fachberater-Workshop

**Veranstalter:** HLRN, RZ Humboldt-Universität Berlin

**Datum:** 4. – 5. Oktober 2011

**Ort:** Humboldt-Universität Berlin

**Teilnehmerzahl:** 21

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

## 5 Projektberichte<sup>2</sup>

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

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

#### Überblick:

- Verständnis von makroskopischen Prozessen an hybriden Grenzflächen unterstützt durch Simulationen auf atomistischem Level
- quantenchemische Simulationen der Adsorption einer Auswahl kleiner Peptide auf stabilen Titandioxidoberflächen im ersten Projektabschnitt mit definierten Endkonfigurationen
- Ermittlung von Adsorptionsenergien im zweiten Projektabschnitt

#### Motivation:

In der medizinischen Werkstofftechnik werden die Oberflächeneigenschaften von Werkstoffen immer häufiger durch die Funktionalisierung mit biologischen Komponenten optimiert. Bei Zahnimplantaten werden aufgrund der hervorragenden mechanischen Eigenschaften häufig Titanlegierungen als Werkstoff genutzt und diese mit Proteinen der extrazellulären Matrix funktionalisiert. Um die Integration des Implantates makroskopisch zu verstehen und die biofunktionalen Beschichtungen noch zu verbessern, ist es notwendig, die komplexen Prozesse an der Grenzfläche von Implantatoberflächen und physiologischer Lösung im Detail 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 [1] oder Konformationsänderungen während des Adsorptionsprozesses ermitteln. Offen bleibt allerdings die

---

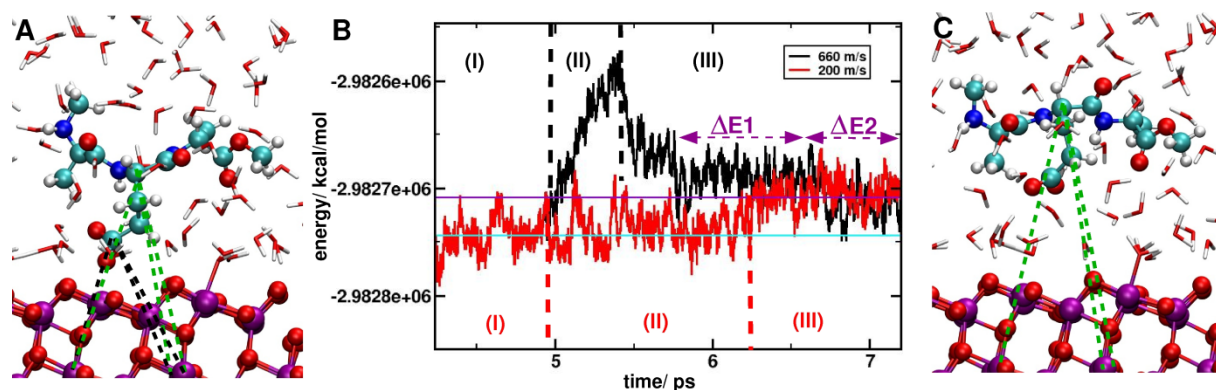
<sup>2</sup> Für den Inhalt der Projektberichte sind ausschließlich die genannten Projektleiter bzw. die Projektbearbeiter verantwortlich.

Chemie bei dem Vorgang, die nur mit den in Rechenzeit eher kostspieligen quantenmechanischen Simulationsprogrammen aufgenommen werden kann.

In diesem Projekt wurden mit Hilfe von solchen quantenchemischen Simulationsmethoden die Adsorption kleinster Peptide auf drei verschiedenen Titandioxidoberflächen analysiert. Während in der ersten Projektphase eine qualitative Auswertung stabiler Adsorptionskonfigurationen stattgefunden hat (siehe Statusreport 2010), haben wir in dem zweiten Projektabschnitt ein Protokoll etabliert und verfeinert, um die stabilen Kontaktkonfigurationen der Peptide auf den Oxidoberflächen nun auch quantitativ auswerten zu können.

### Vorläufige Ergebnisse:

Die Simulationszellen aus dem ersten Projektabschnitt mit etwa 350 Atomen wurden für die Ermittlung der Adsorptionsenergien weiter genutzt und enthalten je ein Oberflächenmodell, das Peptid und sind mit Wasser aufgefüllt (Abbildung 1A). Um im ersten Projektabschnitt die stabilen Adsorptionskonfigurationen zu ermitteln, waren Simulationszeiten von etwa 5 ps je System notwendig. Die „erzwungene Desorption“ zur Ermittlung der Adsorptionsenergien [2] im zweiten Projektabschnitt beanspruchte eine Erweiterung der Simulationszeit auf etwa 10 ps. Bei einer Nutzung von 64 Rechenkernen parallel dauert jede Simulation zur Ermittlung der Adsorptionsenergien, in Abhängigkeit vom System, 1 bis 2 Wochen reine Rechenzeit. Der Einsatz von quantenchemischen Simulationsmethoden ist sehr kostspielig in der Rechenzeit und eine derart angelegte Ermittlung von Adsorptionsenergien auf dem quantenchemischen aus den Trajektorien heraus ist erst durch die Nutzung von Hochleistungsrechenzentren, wie dem HLRN möglich geworden.



**Abbildung 1:** (A) Tripeptid mit Glutamat als zentraler Einheit adsorbiert auf einer (101) Anatasoberfläche (Ti magenta, O rot) sind als Ball and Stick Modell dargestellt. Das Wasser erscheint als Linienmodell (O rot, H weiß). Grüne und schwarze gestrichelte Linien markieren die durch zusätzliche Randbedingungen gesetzten Abstände, die während der „erzwungenen Desorption“ vergrößert werden. (B) Energieverlauf eines Systems während der „erzwungenen Desorption“ bei zwei verschiedenen Desorptionsgeschwindigkeiten (schwarz 660 m/s, rot 200 m/s). Abschnitt (I) Energie mit stabil adsorbiertem Peptid, Abschnitt (II) Energieverlauf während die markierten Abstände aus (A) durch zusätzliche Randbedingungen vergrößert werden und so die Desorption erzwungen wird, (III) Energieverlauf während der Relaxation des desorbierten Systems. (C) Snapshot des desorbierten Peptides während der Relaxationsphase. Die grün gestrichelten Linien markieren die verbleibenden gesetzten Abstände bei einem konstanten Endwert.

Dennoch wurde für die Ermittlung der Adsorptionsenergien die Methode der „erzwungenen Desorption“ gewählt, denn sie ermöglicht es, Adsorptionsenergien von Adsorbaten auf Oberflächen auch aus Simulationszellen mit wässriger Umgebung, mit einer sehr hohen Zahl



an Freiheitsgraden, auszuwerten. In Abbildung 1B ist der energetische Verlauf während der Simulation dargestellt. Der Abschnitt (I) kennzeichnet die Energie des Systems mit adsorbiertem Peptid (Abbildung 1A). Im Abschnitt (II) wird durch das Setzen und lineare Vergrößern von zusätzlich gesetzten Randbedingungen (Abbildung 1A, markierte Abstände zwischen Atomen des Peptides und der Oberfläche) Energie in das System eingeführt und das Peptid von der Oberfläche desorbiert. Aus theoretischen Arbeiten, in denen mit „steered molecular dynamics simulations“ Kraft-Weg-Kurven aus klassischen Simulationen ermittelt wurden, ist bekannt, dass die Geschwindigkeit, mit der das Adsorbat von der Oberfläche gezogen wird, eine kritische Größe ist [3]. Um hier sicherzustellen, dass die Adsorptionsenergien nicht durch zu hohe Geschwindigkeiten  $v_0$  verfälscht werden (z.B. durch irreversible Konformationsänderungen im Peptid), wurden beispielhaft einige Systeme mit unterschiedlichen Desorptionsgeschwindigkeiten  $v_0$  von 200-660 m/s ausgewertet. Der schwarze Graph in Abbildung 1B zeigt den Energieverlauf bei  $v_0=660$  m/s, der rote Graph bei  $v_0=200$  m/s. Der nächste Abschnitt (III) kennzeichnet die Relaxation im desorbierten Zustand. Während der Relaxation des Systems werden einige der vorher gesetzten Randbedingungen auf einem konstanten Wert gehalten um ein erneutes Annähern an die Oberfläche zu verhindern (Abbildung 1C) und so lange molekulardynamisch simuliert, bis sich ein erneutes stabiles Energieniveau ausbildet. Die Differenz der Energieniveaus zwischen Abschnitt (I) und (III) ergeben die Adsorptionsenergie.

In Abbildung 1B wird deutlich, dass der Betrag der zugeführten Energie während des Entfernens des Peptides von der Oberfläche (Abschnitt (II)) mit höherer Geschwindigkeit deutlich größer ist, aber die Lage der resultierenden Energieniveaus des desorbierten Zustandes (Abschnitt (III)), das zur Auswertung herangezogen wird, gleich ist. Alle weiteren Simulationen zur Ermittlung der Adsorptionsenergie wurden daher mit dem Simulationsprotokoll mit  $v_0=660$  m/s durchgeführt. Die Annahme, mit einer höheren Ziehgeschwindigkeit  $v_0$ , Rechenzeit zu sparen, musste jedoch im Laufe des Projektes verworfen werden. Bei einem Simulationsprotokoll mit  $v_0=200$  m/s nimmt der Abschnitt (II) etwa dreimal so viel Rechenzeit in Anspruch wie das Simulationsprotokoll mit  $v_0=660$  m/s. Jedoch muss bei höherer  $v_0$  eine deutlich längere Relaxationsphase (Abschnitt (III)) simuliert werden.  $\Delta E_1=50$  kcal/mol und  $\Delta E_2=30$  kcal/mol in Abbildung 1B kennzeichnen Adsorptionsenergien aus auswertbaren Intervallen für adsorbierten und desorbierten Zustand. Hier wird deutlich, dass ein zu frühes Abbrechen der Relaxationsphase zu stark überinterpretierten Werten für die Adsorptionsenergie führen kann. Diese Fehlerquelle wird bei dem Desorbieren mit geringer Ziehgeschwindigkeit ausgeschlossen.

Eine Liste mit Adsorptionsenergien für Glutamat, Aspartat, Lysin, Arginin und deprotoniertem Cystein auf drei stabilen Titandioxidoberflächen wurde im Rahmen des zweiten Projektabschnittes komplettiert. Jedoch ist es mit Blick auf die mögliche Überinterpretation der Adsorptionsenergien durch ein zu frühes Abbrechen der Relaxationsphase ratsam, durch weiterführende Rechnungen eine vollständige Relaxation der Systeme sicherzustellen. Diese ergänzenden Rechnungen können jedoch mit dem persönlichen Kontingent der Projektmitarbeiter vervollständigt werden. Die Ergebnisse aus dem ersten und zweiten Projektabschnitt werden derzeit in Manuskripten aufgearbeitet, die nach Fertigstellung zur Publikation eingereicht werden.

## Literatur:

1. S. Friedrichs, B. Ohler, W. Langel, S. Monti, S. Köppen, *Advanced Biomaterials*, 13 (2011) B334-B342 (Inside Front Cover)

2. S. Köppen, O. Bronkalla, W. Langel, J. Phys. Chem C 112 (2008) 13600
3. S. Köppen, W. Langel, Langmuir 26, (2010) 15248

### **Konferenzbeiträge:**

#### **Vorträge:**

S. Köppen (invited), "Theoretical Investigations of Bio-functionalized Oxide Surfaces", Thermec -International Conference on processing & manufacturing of advanced materials "Modeling and Simulation" Quebec City, Kanada, August 2011

S. Köppen (invited), "Bio-functionalization of Technically Relevant Oxide Surfaces: A Theoretical Approach" EMRS Spring Meeting "Bioinspired and biointegrated materials as new frontiers nanomaterials II" Nice, Frankreich, Mai 2011

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, 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, 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, September 2010

### **Förderung:**

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

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

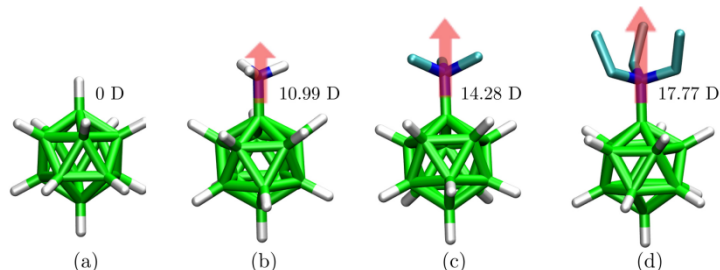
|                        |  |
|------------------------|--|
| HLRN-Projektkenung:    | hbc00004   |
| Laufzeit:              | IV/2010 – IV/2011  |
| Projektleiter:         | Prof. Dr. D. Gabel <sup>1</sup> , Prof. Dr. D. Roccatano <sup>2</sup>  |
| Projektbearbeiter:     | Prof. Dr. D. Roccatano <sup>2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

### I. Overview

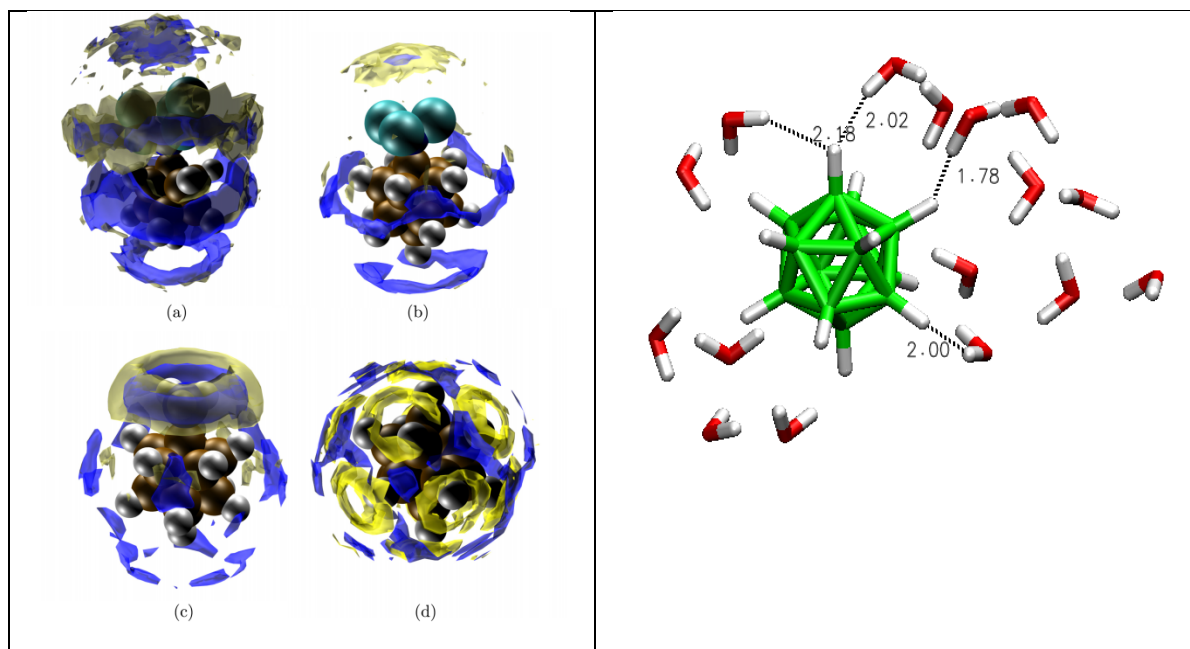
Functionalized dodecaborate anions constitute an important class of weakly coordinating ions largely used for medical applications (e.g. cancer therapy). They are being actively investigated for use in other areas of pharmacological chemistry like drug design, drug delivery, molecular imaging with the prospect of using non-linear optical spectroscopy, etc. Recent works (Gabel 2007, Schaffran 2009, Awad 2009) show that they interact with the membranes influencing the membrane integrity and morphology. 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 (Tiwari, 2010), the molecular mechanism of their interaction with the components of living cell (protein and biological membranes) are little known both from experimental and from theoretical perspectives. Among them, icosahedral boron cluster compounds of the type  $XB_{12}H_{11}(\cdot)$  ( $X=-H$ ,  $-NH_3$ ,  $-N(CH_3)_3$ ), see Figure 1, are particularly interesting (Gabel 1993, Peymann 1996, Peymann 2001, Justus 2008b). The structure, size, and charge, of these anions are known to affect their coordinating properties but a theoretical study of their structural, dynamics and thermodynamics properties in water and in other solvents has not yet been performed. This current project aims to garner insight into the interaction of functionalized dodecaborate with biological interfaces (biological membrane and proteins) by studying the physical chemistry of these processes using computer simulations. In this report, the status and the reached milestones of the current project will be summarized together with the further work that it is necessary for a future prolongation of the project.

## II. Accurate atomistic force field of the different boron clusters.

The study was focused on the following series of the boron clusters:



with (a) the dodecaborate(2-), and (b) ammonio-, (c) trimethyl- and (d) triethyl-ammoniododecaborates (all 1-). The structures have been quantum mechanically optimized and the arrows indicate the dipole moments. The triethyl-ammoniododecaborates derivative, although not present in the initial project proposal, was added to complete the series and to further extend the validation of the model against available experimental data. Initial parameters for the force field (equilibrium geometries, force constants, partial charges) are derived from quantum mechanics calculations, which provide a detailed description of the individual boron anion and of the interaction with solvent molecules. The force field parameters of these boron clusters were tested against experimental thermodynamics data (solvation free energy, partition coefficient in 1-octanol/water systems, and diffusion coefficients) to assess their validity and transferability. In particular, Lennard-Jones and partial charges parameters for boron and hydrogen atoms of the clusters were optimized to reproduce experimental partition coefficients data provided by the group of Prof. Gabel. (Karki 2012). The effort of these accurate parameterizations was rewarded by the unexpected but very interesting results about the organization of water around the ions obtained from the new model. The most intriguing aspect is the peculiar organization of the water molecules in the first solvation shell. This is mediated by the possibility to form hydrogen-hydrogen bond interactions since the hydrogen atoms on the boron cluster are negatively charged. Understanding the nature of these unusual interactions can be the key to understand the details of the Hofmeister behavior of these ions. The study of the water molecules around the boron cluster was performed by calculating the spatial density function (SDF) that provides the average density per unit of volume of near the ions. In Figure 2a, the graphical representations of the SDF are reported. The water molecules form H-H bonds with the hydrogen atoms of the boron clusters (Karki 2012). To further check the validity of our classical model, quantum mechanics DFT calculations of the cluster of water molecules around the boron ions were performed. In Figure 2, the final equilibrated configuration from the QM calculations on a MD generated water cluster around the  $B_{12}H_{12}$  ion is reported. The result of this calculation evidences the presence of H-H interaction with distance in the range 1.78-2.18 Å.



**Figure 2. Left panel:** spatial distribution function of the hydrogen and oxygen atoms of water around the boron anions: (a) amino triethyl- derivative, (b) amino trimethyl, (c) and (d) unfunctionalized boron anion. Yellow and blue isosurfaces represent the distribution of the hydrogen and oxygens atoms, respectively. Isosurface values have been chosen to distinctly show the first solvation shell. **Right panel:** Final equilibrated configuration from the QM calculations on a MD generated water cluster around the B12H<sub>12</sub> anion. The indicated H-H bond distances are in Å.

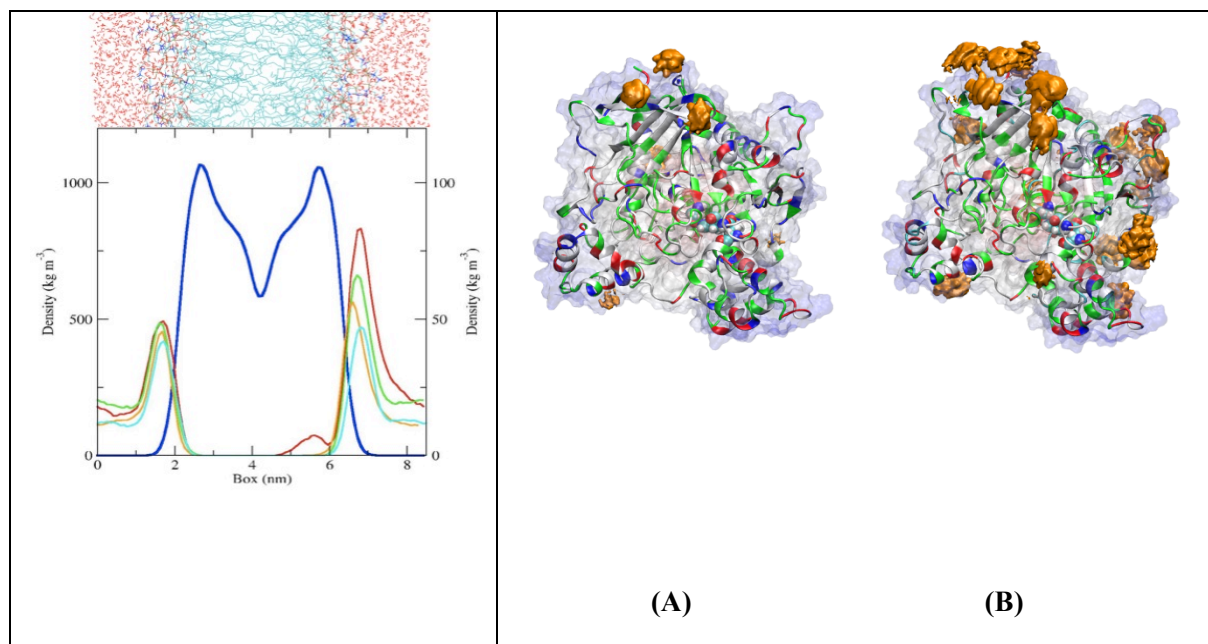
### III. BORON CLUSTER INTERACTION WITH BIOLOGICAL MEMBRANE

It is known from the literature that boron clusters interact with biological membranes (Gabel 2007, Awad 2009, Schaffran 2010) affecting membrane integrity and morphological changes. Studying the binding of anions to biological membranes and understanding the underlying interaction mechanisms on a molecular level will greatly improve predictive models and the description of toxicological and pharmacological effects of the anions. We have performed several MD simulations of the cluster in the presence of dipalmitoylphosphatidylcholine lipid bilayer formed by two layers of 64 lipids each. In Figure 3 (right panel), the density profile of 16 boron clusters localized at the interface of the lipid bilayer and simulated for a minimum simulation length of 50 ns. The preliminary results show a tendency of the ethyl- derivative to penetrate deeper in the lipid bilayer than the other ions. The presence of the longer hydrophobic ethyl moiety is the reason of this faster kinetics.

### IV. ION-PROTEIN INTERACTIONS

In recent years, the discovery of metallocarboranes effective inhibitors of HIV-1 protease (Kozisek 2008), and of therapeutics containing single boron atoms, such as the proteasome inhibitor bortezomib (Moore, 2008), have attracted considerable attention on study the interaction of dodecaboranes with proteins. Few modeling studies are present in literature and none of them have used molecular dynamics simulations to investigate the detailed interaction with the protein structure. In this part of the project, we have considered the interaction of born cluster with the protein Acetylcholinesterase (AChE). This protein is important for the transmission of electric signal in the neuron cells and it is a target enzyme for the treatment of the Alzheimer's disease (Mangialasche, 2010). For AChE, inhibition data exist for some boron-cluster (Schaffran, 2009). Surprisingly, also these negatively charged ions inhibit AChE despite the natural substrate being positively charged. The study was

performed by MD simulation of the monomeric unit of the AchE in boron cluster solutions. The simulations were run for 40 ns. In the left panel of Figure 3, the preliminary analysis of the ions distribution from the simulations for the  $B_{12}H_{12}^{2-}$  and  $B_{12}H_{11}NEt_3^-$  are reported as SDF distribution. The comparison evidences a larger binding of boron cluster on the exposed surface of the protein by the amino derivative than the not-functionalized anion. Analyses are in progress to understand if the observed binding can affect the functionality of the enzyme as from experimental observations (Schaffran, 2009).



**Figure 3. Left panel:** Binding of boron clusters to a DPPC lipid bilayer. Average densities profile along the axis of the simulation box perpendicular to the DPPC lipid bilayer (in blue). Densities of  $B_{12}H_{12}^{2-}$  in cyan,  $B_{12}H_{11}NH_3^-$  in orange,  $B_{12}H_{11}NMe_3^-$  in green,  $B_{12}H_{11}NEt_3^-$  in red. **Right panel:** comparison of the SDF from the simulation of the AchE with  $B_{12}H_{12}^{2-}$  and  $B_{12}H_{11}NEt_3^-$  anions. In the figure, the surface of the protein, the secondary structure in cartoon (colored accordingly to the amino acid type) and boron clusters densities (in orange) are represented.

## V. OUTLOOK

More detailed information about the barrier of diffusion of the different clusters through the lipid bilayer will be evaluated using umbrella-sampling methods (Leach 2001). These data will be compared with the experimental data provided by the group of Prof. Gabel. We are also studying with MD simulations the binding of the clusters to other proteins in particular histones and HIV-1 proteases. These results can be very useful to understand the interaction mechanisms of boron cluster based drugs and hence to help the design of new ones.

### Publication and Poster presentations

K. Karki, D. Gabel, D. Roccatano. "Structure and dynamics of dodecaborate clusters in water." *Inorg. Chem.* 2012; under revision.

4<sup>th</sup> Treffen der Norddeutschen Biophysiker, January 21, 2011, Borstel, Germany. Poster: K.Karki, A. Materny, M. Winterhalter, D. Gabel, D. Roccatano, "Molecular Dynamics Simulations of Functional Molecules."

5<sup>th</sup> Treffen der Norddeutschen Biophysiker, January 2012, Borstel, Germany. Poster presentation.



## References

- Awad, D.; Damian, L.; Winterhalter, M.; Karlsson, G.; Edwards, K., and Gabel, D. Interaction of  $\text{Na}_2\text{B}_{12}\text{H}_{11}\text{SH}$  with dimyristoyl phosphatidylcholine liposomes. *Chem Phys Lipids*. 2009; 157:78-85.
- Gabel, D.; Awad, D.; Schaffran, T.; Radovan, D.; Daraban, D.; Damian, L.; Winterhalter, M.; Karlsson, G., and Edwards, K. The Anionic Boron Cluster  $(\text{B}_{12}\text{H}_{11}\text{SH})^{2-}$  as a Means To Trigger Release of Liposome Contents. *ChemMedChem*. 2007; 2:51-53.
- Gabel, D.; Moller, D.; Harfst, S.; Rösler, J., and Ketz, H. Synthesis of S-alkyl and S-acyl derivatives of mercaptoundehydrododecaborate, a possible boron carrier for neutron capture therapy. *Inorg Chem*. 1993; 32:2276-2278.
- Justus, E.; Rischka, K.; Wishart, J. F.; Werner, K., and Gabel, D. Trialkylammoniododecaborates: Anions for Ionic Liquids with Potassium, Lithium and Protons as Cations. *Chemistry Eur J*. 2008; 14:1918-1923.
- Kozisek, M., P. Cigler, M. Lepsik, J. Fanfrlik, P. Rezacova, J. Brynda, J. Pokorna, J. Plesek, B. Gruner, K. Grantz Saskova, J. Vaclavikova, V. Kral, and J. Konvalinka. 2008. Inorganic polyhedral metallacarborane inhibitors of HIV protease: a new approach to overcoming antiviral resistance. *J Med Chem* 51:4839-43.
- Leach A. 2001. *Molecular Modelling, Principles and Applications* (2nd Edition) Prentice Hall.
- Mangialasche, F.; Solomon, A.; Winblad, B.; Mecocci, P., and Kivipelto, M. Alzheimer's disease: clinical trials and drug development. *Lancet Neurol*. 2010; 9:702-16.
- Peymann, T.; Knobler, C. B.; Khan, S. I., and Hawthorne, M. F. Dodecahydroxy-closo-dodecaborate(2-). *J. Am. Chem. Soc.* 2001; 123:2182-2185.
- Peymann, T.; Lork, E., and Gabel, D. Hydroxoundecahydro-closo-dodecaborate(2-) as a nucleophile. Preparation and structural characterization of O-alkyl and O-acyl derivatives of hydroxoundecahydro-closo-dodecaborate(2-). *Inor Chem*. 1996; 35:1355-1360.
- Schaffran, T.; Justus, E.; Elfert, M.; Chen, T., and Gabel, D. Toxicity of N,N,N-trialkylammoniododecaborates as new anions of ionic liquids in cellular, liposomal and enzymatic test systems. *Green Chem*. 2009; 11:1458-1464.
- Schaffran, T.; Li, J.; Karlsson, G.; Edwards, K.; Winterhalter, M., and Gabel, D. Interaction of N,N,N-trialkylammonioundecahydro-closo-dodecaborates with dipalmitoyl phosphatidylcholine liposomes. *Chem Phys Lipids*. 2010; 163:64-73.
- Tiwari, R.; Mahasenan, K.; Pavlovicz, R.; Li, C., and Tjarks, W. Carborane clusters in computational drug design: a comparative docking evaluation using AutoDock, FlexX, Glide, and Surflex. *J Chem Inf Model*. 2009; 49:1581-9.

## 6.3 hbc00010: Solubility of Zinc Oxide Nanoparticles

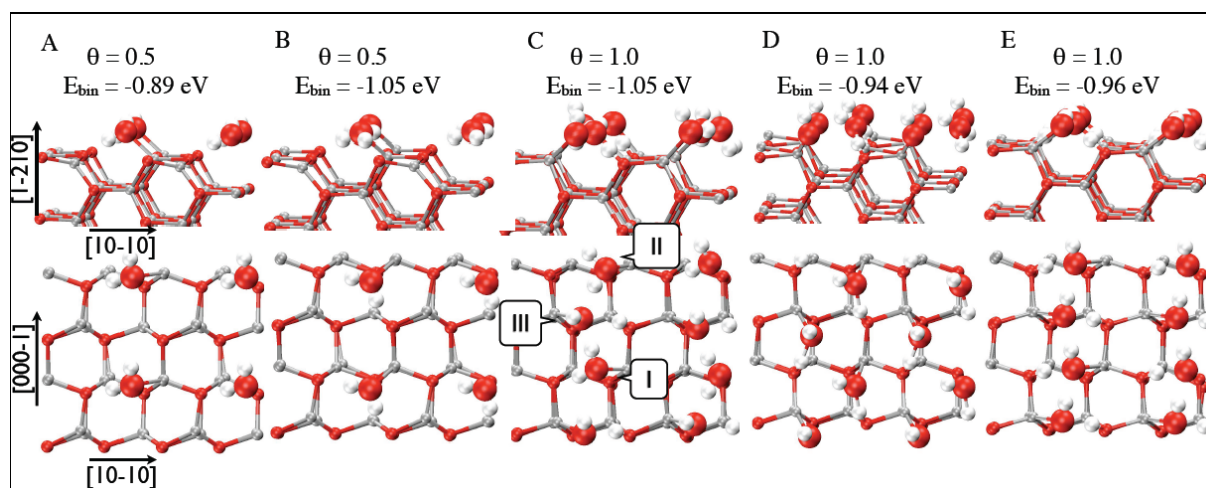
|                        |  |
|------------------------|--|
| HLRN-Projektkenung:    | hbc00010   |
| Laufzeit:              | II/2011 – I/2012   |
| Projektleiter:         |  |
| Projektbearbeiter:     | Prof. Thomas Frauenheim <sup>1 2</sup><br>Svea Sauer <sup>1 2</sup><br>Dr. Susan Köppen <sup>1 3</sup><br>Prof. Lucio Colombi Ciacchi <sup>1 3</sup>   |
| Institut / Einrichtung | <sup>1</sup> Bremen Center for Computational Material Science<br><sup>2</sup> Fachbereich Physik/Elektrotechnik, Universität Bremen<br><sup>3</sup> Fachbereich Produktionstechnik, Universität Bremen |

### 1 Motivation

In a recent study, nanoparticles were tested in an in-vitro toxicological screening study investigating the mechanisms of toxicity in mammalian cells. Within this study the toxicity of ZnO nanoparticles towards mammalian cells was found to be directly related to particle dissolution causing an uptake of particle remnants and toxic  $Zn^{2+}$  ions into the cell. Furthermore, a dependence of the solubility of zinc oxide nanoparticles on the surrounding solute could be observed. In this context, the release of  $Zn^{2+}$  ions was found to be different in cell culture media in terms of the kinetics and the saturation concentration compared to pure water.

The local structure of water on a solid materials surface constitutes the very first step in describing the overall solid liquid interface of a nanoparticle in solution. Since even in more complex systems with additional adsorbates the order of the water close to a surface strongly influences further adsorptions. Therefore, in the first part of this project a gradual investigation of the interactions between the  $(1\bar{2}10)$  surface of zinc oxide and water going from a single water molecule via monolayer to bulk water is investigated. Apart from analyzing the stability of different configurations and coverages, also the influence of bulk water is discussed. As all calculations need to be carried out in an aqueous environment, the model systems will contain at least 300 atoms. Calculations on the quantum level of a system having this size are only feasible by the employment of extended parallel computational resources at the HLRN supercomputing center.





**Figure 1:** Side and top view of the ten different observed adsorption configuration. Coverages go from  $\theta = 0.5$  in A and B to full monolayer,  $\theta = 1.0$ , in C, D and E.

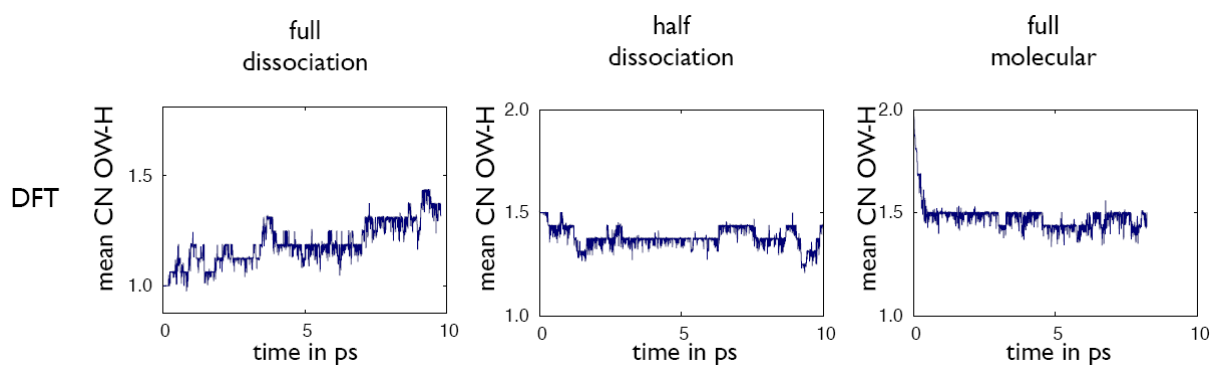
## 2 Current Results

Stable configurations for the adsorption of a single water molecule on the (2x2) super cell surfaces have been determined by starting from five different initial configurations. Molecular dynamics simulations at 300 K for 2 ps have been performed using the code CPMD. The obtained structures were then relaxed using PWscf. Out of the five molecular dynamics simulations runs we obtained two final geometries. These two configurations were then used to investigate the adsorption of various water coverages by gradually increasing the number of water molecules. Therefore, water molecules were placed in different periodicities, corresponding to different coverages, on the surface slab.

The resulting stable configurations for half-monolayer coverage ( $\theta=0.5$ ) and full monolayer coverage ( $\theta=1$ ) are shown in figure 1 A to E. We find that regarding the average binding energies the half dissociated monolayer, C, is favored by about 0.1 eV/  $H_2O$ .

To gain insight into the thermal stability of the various adsorption scenarios, the difference in the Gibbs free energy,  $\Delta\gamma$ , between the water covered and the clean surface was considered. Our results show that for DFT the full monolayer configuration C is energetically favored by 0.02 eV/(surf unit cell) with respect to the other possible configuration until desorption at a temperature of around 520 K takes place. However the energy deviation for the three monolayer configurations is quite small and in the noise level of the applied method. Therefore, we rather expect a locally dependent degree of dissociation and an equilibrium between the half and the fully dissociated monolayers on the macro scale. Furthermore the different types of chemical bonding that occur at the ZnO ( $\bar{1}\bar{2}10$ ) water interface were investigated by plotting the projected density of states (pdos) of the different adsorption scenarios. Additionally, the pdos results might constitute a link between theoretical observations and future experiments focusing on the first water layer on the ( $\bar{1}\bar{2}10$ ) surface of zinc oxide.

As a final step in this work, the dynamics of the local structure of water close to the surface in a cell filled up with bulk water was investigated in detail. Therefore, in the systems with a predefined monolayer of water, the vacuum region was filled up with water up to the standard density of liquid water ( $1g/cm^3$ ).



**Figure 2:** Mean coordination number of water oxygen and hydrogen for three different initial structures: Full dissociation, half dissociation and no dissociation.

To investigate the dynamics of complete first water layers ( $\theta=1$ ) in presence of bulk water, the mean coordination number ( $CN_{OW-HW(surface)}$ ) of adsorbed water oxygen (OW) to the surface and the corresponding water hydrogen (HW) atoms is analyzed. The three different starting configurations taken into account can be described in terms of  $CN_{OW-HW(surface)}$  with a value of 1 for a fully dissociated (configuration E) case, 1.5 for a half dissociated (configuration C) case and a value of 2.0 for a molecular adsorbed monolayer. The DFT simulation reveals a trend of the coordination number towards 1.5 within a time scale of 10 ps for all three initial configurations. By looking at the trajectory it is clear that the dissociated water molecules recombine and molecular adsorbed water dissociates in such a way that a half dissociated structure, where every second water molecule is dissociated, is obtained.

The DFT results were then used as a reference for two approximate methods namely a DFTB and a reactive force field method. Therefore the obtained geometries, Gibbs free energies and the influence of bulk water were compared<sup>3</sup>. Up to a monolayer our results show that DFT and DFTB show similar trends in the description of the system. The reactive forcefield simulations favor a fully dissociated structure with a fully established hydrogen bond network. Adding bulk water to the system did not change the configuration of the first water layer for DFT and the reactive forcefield, whereas for DFTB a shift from a half dissociated to a fully molecular adsorbed layer was observed.

Summing all the obtained results up it is clear that with the help of the computational resources of the HLRN we were able to carefully validate the interaction at ZnO water interface. This provides an excellent foundation for further investigations of more complex systems like the adsorption of single amino acids and more time-consuming methods like metadynamics to get an insight into different surface reactions influencing the solubility of ZnO.

### 3 Conference Contributions

- S. Sauer, S. Köppen, Th. Frauenheim, L. Colombi Ciacchi, Solubility of ZnO: Preliminary Investigations, DPG Frühjahrstagung 2011: Condensed Matter, March 2011 Dresden, Germany
- S. Sauer, S. Köppen, Th. Frauenheim, L. Colombi Ciacchi, Water on (1 $\bar{2}$ 10) ZnO, Perspectives and Challenges of Simulations at Bio-materials Interfaces, CECAM workshop, October 2011 Bremen, Germany

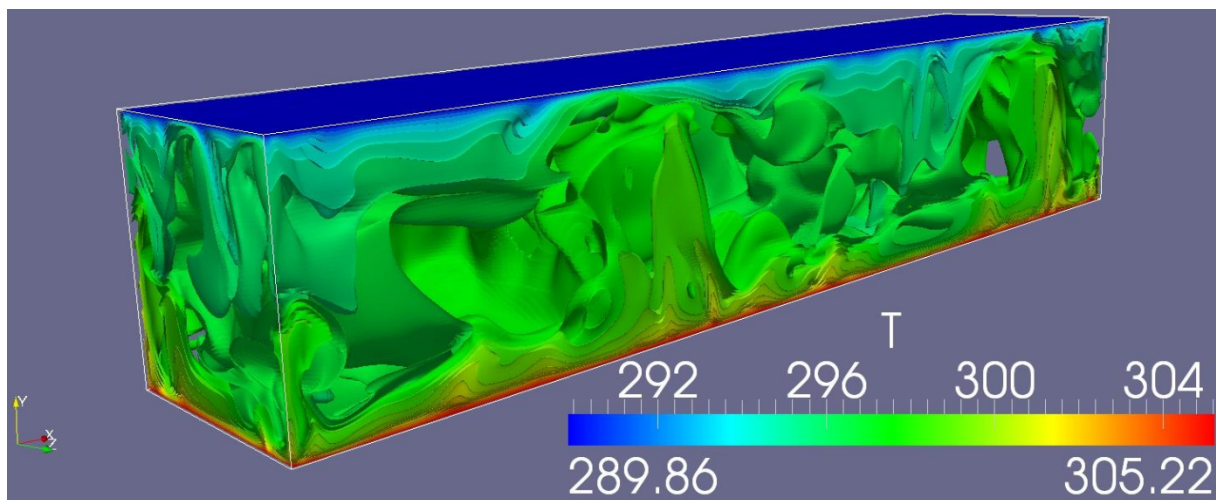
<sup>3</sup> S. Sauer, S. Köppen, Th. Frauenheim, L. Colombi Ciacchi, in preparation

### 5.3 hbi00014: Modelling turbulent heat transfer of a Rayleigh-Bénard problem with compressible Large-Eddy simulation

HLRN-Projektkenung: hbi00014  
 Laufzeit: I/2011 – III/2012  
 Projektleiter: Dr. Rodion Groll  
 Projektbearbeiter: Claudia Zimmermann  
 Institut / Einrichtung: ZARM, Center of Applied Space Technology and Microgravity, University of Bremen

#### Overview

A Rayleigh-Bénard problem describes thermally driven flows against gravity between two heat-controlled plates. The compressible fluid is accelerated by local density differences and the resulting pressure gradient. In close proximity to the heated walls the temperature distribution is determinate by increasing temperature gradients. In the centre region the heat transfer is defined by convective mass exchange. This transfer generates turbulent shear layers parallel to the direction of gravity. In these layers hot lift-streams and cold sink-streams increase the intensity of turbulence. This unsteady behaviour dominates the vertical heat flux. This is illustrated for a natural convection flow in a closed container in figure 1. It shows the instantaneous temperature iso-surfaces after 380 s.

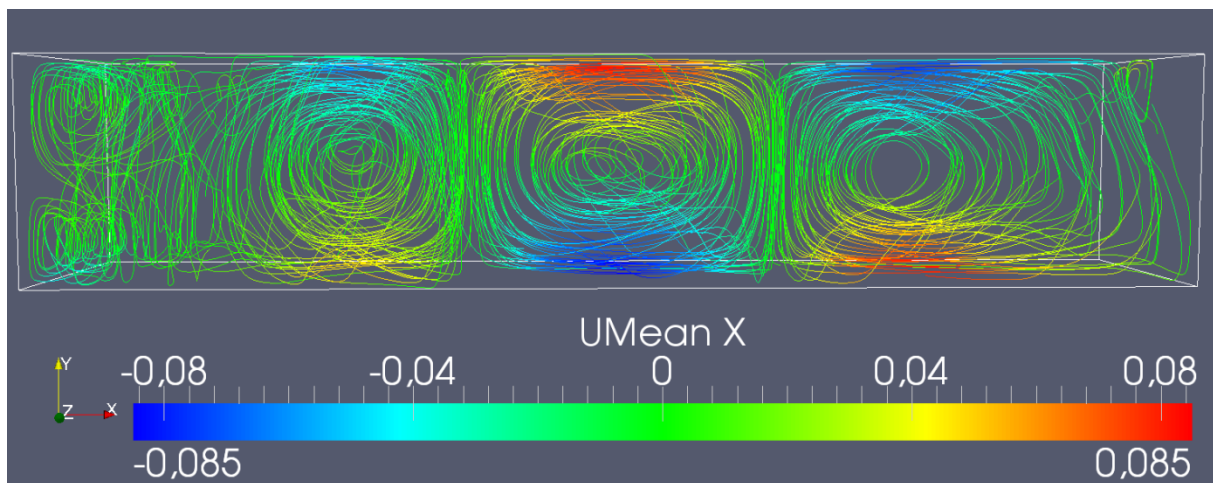


**Figure 1:** Instantaneous temperature iso-surfaces in the closed container for a Rayleigh-number of  $Ra = 1.92 \cdot 10^8$  after 380 s

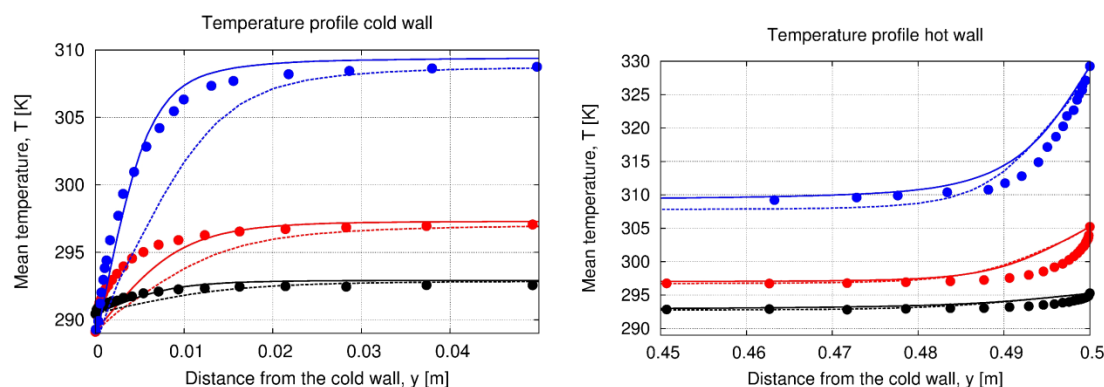
Natural convection flows are caused for example in the atmosphere by solar radiation and can affect hurricanes. Furthermore they are used for cooling systems in technical setups instead of fans to reduce noise exposure and technical failures.

## Numerical Simulation

To investigate the turbulent flows the numerical simulations are compared with a suitable experimental setup of [1]. As test case a rectangular, air-filled container with an aspect ratio of  $\Gamma = \frac{L}{H} = 5$  is chosen as it is shown in figure 1. The walls are smooth and the horizontal ones are heated homogeneously with a constant temperature difference  $\Delta T$ . Lateral walls are adiabatic with  $\frac{\partial T}{\partial y}|_{y=0} = 0$ . The velocity field at the walls is zero due to a non-slip-condition ( $\mathbf{u} \equiv 0$ ). Because of transient turbulence and high local density gradients, a Large Eddy simulation (LES) with a compressible coupled model is highly suited for the numerical discretisation. Previous work investigates similar setups with a Boussinesq-approximation [3].



**Figure 2:** Mean horizontal velocity profile at the xy-midplane in the closed container for a Rayleigh-number of  $Ra = 1.92 \cdot 10^8$  after 380 s.



**Figure 3:** Temperature profile at the cold (left) and hot (right) wall for the Rayleigh-numbers: -  $Ra = 4.1 \cdot 10^8$  (blue), -  $Ra = 1.92 \cdot 10^8$  (red) and -  $Ra = 6.16 \cdot 10^7$  (black), - fine simulation grid (140x140x430) cells, - - coarse simulation grid (50x50x150) cells, · study [1].

For the LES the flow is separated in large and small scales, the so-called sub-grid scales. The large scales are solved directly on the discretisation grid, while the sub-grid scales are modelled with an applicable turbulence model. This reduces essentially the required compu-

ting time. The chosen turbulence model of Fureby [2] is based upon a compressible Smagorinsky-model. The turbulent structures are developed mainly directly close to the temperatured walls. Hence, an adequate fine resolution must be chosen in this region. The discretisation grid of the simulation consists of approximately 8 million cells. Therefore, a high computer performance and the possibility of parallelisation in several hundreds processes is essential for the simulation. The LES is used in the open-source software Open-FOAM® at the HLRN.

The main focus of the numerical investigation are the temperature and velocity distributions in the vicinity of the temperatured walls for different parameters like the Rayleigh-number and different grid resolutions. The Rayleigh-number characterises the heat flux through the particular flow layers. The investigated Rayleigh-numbers lie between  $6 \cdot 10^7$  and  $4 \cdot 10^8$ . The mean horizontal velocity at the xy-midplane after 380 s shows the typical convection cells, which are developed between the temperature-controlled walls (s. figure 2). The temperature gradients are plotted for two different grid resolutions and three Rayleigh-numbers at the hot and cold wall in figure 3 against the experimental data of [1]. The gradients directly at the walls are smaller and not anti-symmetrical like in the experimental results. This could be due to a higher wall heat flux or a more intense mixing of hot and cold streams in the experiment. The importance of a sufficient fine grid resolution can clearly be seen at the cold wall. In the bulk of the container, both simulation results approach the experimental data.

## Outlook

The next step in the future work will be the investigation of the hydrodynamic stability of the turbulent natural convection. Therefore, a modal analysis will be conducted. Additionally, the stabilizing effect of the Coriolis acceleration is tested. Subsequently, the results of further LES will be validated by the data of a suitable experiment in a huge-scale centrifuge.

## References

1. Ebert, C. Resagk and A. Thess. Experimental study of temperature distribution and local heat flux for turbulent Rayleigh-Bénard convection of air in a long rectangular enclosure. *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, **51**: 4238-4248, 2008.
2. C. Fureby. On subgrid scale modeling in large eddy simulations of compressible fluid flow. *Physics of Fluids*, **8** (5): 1301-1311, 1996.
3. O. Shishkina and A. Thess. Mean temperature profiles in turbulent Rayleigh-Bénard convection of water. *J. of Fluid Mechanics*, **633**: 449-460, 2009.

## Conference proceedings

C. Zimmermann, R. Groll, H. J. Rath „Kompressible Large-Eddy-Simulation thermischer Wandgrenzschichten in turbulenten Konvektionsströmungen“, 128. Norddeutsches Mechanikkolloquium, Berlin, Germany (2011)

## Support

The project is funded by the “Zentrale Forschungsförderung” of the University Bremen, project “TurboTherm”. The HLRN supports the project totally with 70kNPL. The authors wish to thank Dr. C. Resagk from the Ilmenau University of Technology for providing the experimental data of [1].



## 5.4 hbi00015: Numerical Large Eddy Simulation of a turbulent flow in a spherical gap

|                         |  |
|-------------------------|--|
| HLRN-Projektkennung:    | hbi00015   |
| Laufzeit:               | III/2011 – II/2012   |
| Projektleiter:          | Dr. Rodion Groll   |
| Projektbearbeiter:      | K. Leach   |
| Institut / Einrichtung: | ZARM, Center of Applied Space Technology and<br>Microgravity, University of Bremen |

### Abstract

- Design and simulation of a new kind of miniature abrading sphere, which is magnetically mounted inside a spherical gap and set in rotation pneumatically with air.
- A Large Eddy Simulation is performed in conjunction with the compressible Smagorinsky model according to Fureby [1]. Minimal temperature variation allows for the assumption of adiabatic walls. Fluid-solid interaction is modeled using the law of the wall for compressible turbulent flow [2].
- A parametric study is done to determine the optimal geometric layout while taking physical restrictions into account. The resulting optimal configuration is then examined in detail in order to determine demands to be met by the computerised control of the magnetic bearing as well as to quantify the force available to the abrasion process.
- Finally, a mathematical relation is obtained that determines available abrasion force depending on standard volumetric flow rate and rotation frequency.

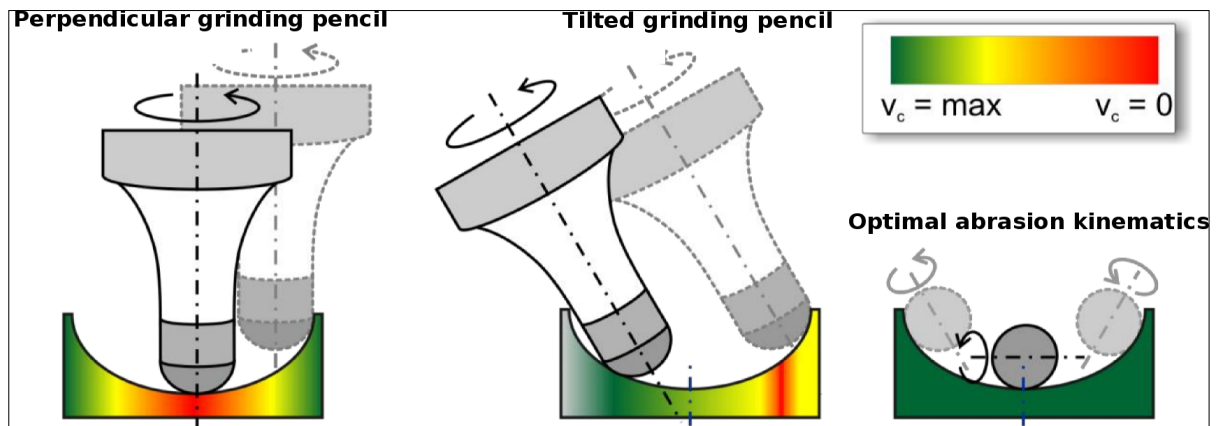
### Motivation

Miniaturisation is of great importance in many fields such as mechatronics, optics, or medicine as it enables new functionality or makes processes more economical. While increasing precision has made it possible to produce smaller and smaller workpieces, the tools used to work on them have, for the most part, remained constant in size. The skewed ratio of tool size to workpiece size creates a growing ecological, economic and technical inefficiency regarding respective processes. Until now, miniaturising existing tools was performed in order to combat this skewed ratio. This approach is, however, reaching its limits regarding technical feasibility and usefulness. For this reason, new innovative concepts and tools need to be developed in order to advance in the field of miniaturization.

Since the ratio of surface to volume increases dramatically with increasing miniaturisation, one has, proportionally, far more functional surface to work with as volume decreases. This effect is extremely useful for abrasive tools, as the control dynamics improve with decreasing tool size, thus also improving the tools ability to adapt to particular machining conditions. Most abrasive tools used to create micro cavities suffer from the following problem: since the axis of rotation and its orientation to the workpiece are crucial in ensuring positive grinding results, aligning the axis of rotation is key when grinding a cavity.

A grinding pencil, for instance, has its theoretical maximum effectiveness when the axis of rotation is parallel to the work piece. This, however, is not always practical since the grinding pencil's mounting apparatus could touch down on to the workpiece. Furthermore, should the

axis of rotation be perpendicular to the workpiece, the grinding pencil's abrasion would tend to zero. This problem can be countered by tilting the apparatus slightly, however, this still delivers mediocre results at best. Figure 1 depicts the problems stated along with a theoretical solution in which the axis of rotation is parallel to the workpiece at all times, thereby maximising the tool's effectiveness. It is the goal of project GrindBall to develop such a tool, which, in addition, combines propulsion and control into one single element.



**Figure 1:** Grinding speed  $v_c$  depending on axis orientation (picture courtesy of the Laboratory for Precision Machining (LFM)).

### Basic setup

To achieve the objectives stated above, fluid driven propulsion is used in conjunction with a ferromagnetic sphere covered in an abrasive coating. The repelling force exerted by the fluid is compensated by an adjustable opposing force generated by a magnetic bearing so that the sphere is held in a fixed relative position at all times.

The first prototype will utilise a sphere with a diameter of 40mm. Throughout the duration of the project, this diameter is to be gradually scaled down to 4mm with surrounding elements shrinking in proportion.

The force necessary to achieve abrasion is applied via fluid flow by setting the sphere in rotation. Due to the sphere having little mass and its resulting low moment of inertia, high rotational frequencies and an extremely high control dynamic are to be expected. Planning and construction of the GrindBall requires interdisciplinary cooperation between production technology, electrical engineering, and fluid mechanics.

### Simulation framework

Simulations are conducted using the OpenCFD package OpenFOAM-2.0.1. Mach numbers between 0.1 and 0.9 as well as Reynolds numbers ranging from  $10^3$  to  $10^5$  justify the use of compressible Large Eddy Simulation (LES) in conjunction with the compressible Smagorinsky model according to Fureby [1]. Specifically, transport equations are solved using the pressure-based finite volume solver `rhoPimpleFoam`. Pressure and density are linked via the Ideal Gas Law [2]. The temperature dependence of viscosity is modeled according to Sutherland's viscosity model [2]. Minimal temperature variation allows for the assumption of adiabatic walls. Finally, fluid-solid interaction is modeled using the Law of the Wall [2].

### Preliminary results

First, a parametric study is conducted in order to identify an optimal geometric configuration for the tool. The resulting optimal setup is subsequently simulated and analysed in detail to

determine the demands to be met by the magnetic bearing and the force effectively available to the abrasion process. Furthermore, a mathematical relation governing the behaviour of the available abrasion force is derived.

### **1. Parametric Study**

The goal of the parametric study is to make the GrindBall as efficient as possible while abiding to certain practical and physical restrictions. Geometric features are varied in an attempt to maximise abrasion force available to the tool while maintaining a stable state of operation easily manageable by the magnetic bearing. Once found, the optimum geometric layout is subjected to a detailed analysis.

### **2. GrindBall Prototype**

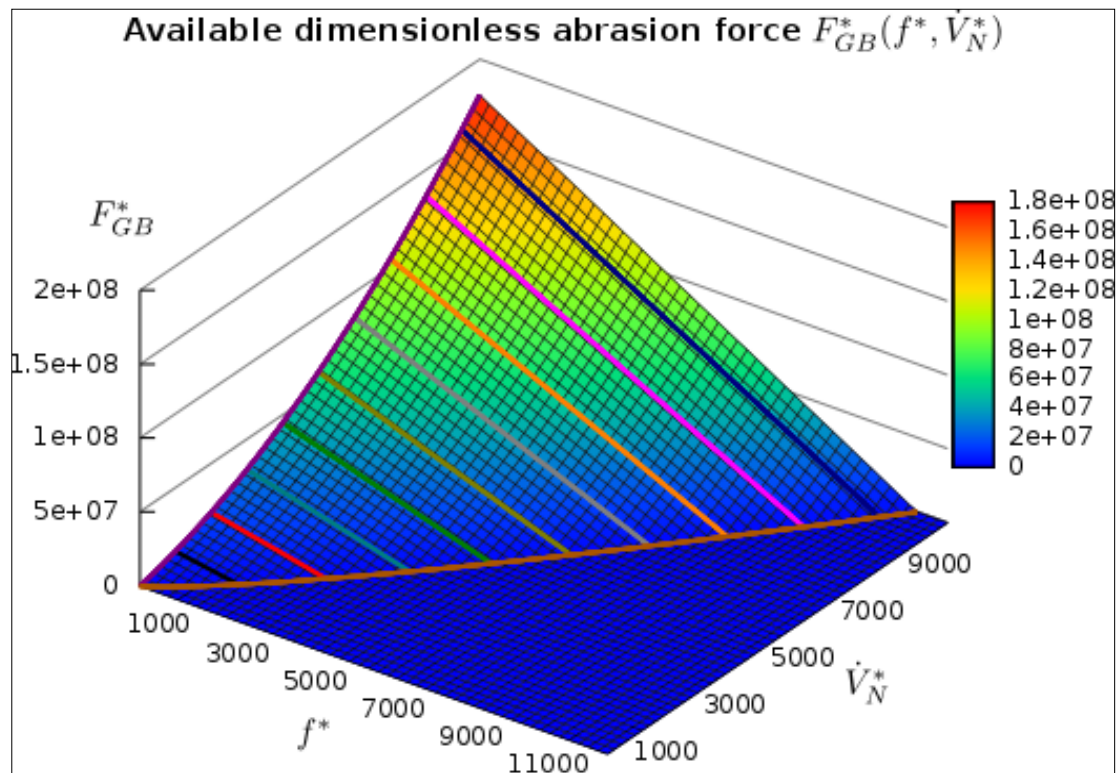
The resulting optimum setup is subjected to a series of simulations with a variety of mass flow rates and rotation frequencies of the sphere. Pressure forces acting on the sphere are determined in order to ascertain demands to be met by the magnetic control element prior to its construction. Forces available to the process of abrasion are examined in detail. Individual relations are established between flow rate, rotation frequency and abrasion force. These individual relations are then combined into a single three-dimensional relation governing abrasion force as a function of rotation rate and flow rate (see Figure 2). The results obtained for this first prototype are vital for further development of the tool.

### **Outlook**

The main focus of future work on this project is scaling down the tool. The first objective is a diameter of 8mm for the grinding sphere with surrounding elements shrinking in proportion. Several parametric studies are to be conducted regarding the choice of a suitable propulsion medium and optimum geometric layout. Once found, the dynamics of the new geometry are to be analysed in great detail prior to construction and use of the actual tool. Influence of surface coating on the tools performance is to be simulated and analysed. Once the previously mentioned goals are achieved, further miniaturisation is to be performed, most likely to 4mm. In addition, several publications are to be made on this topic.

Adequately determining pressure and viscous forces requires extremely fine computational grids which in turn require access to parallel super-computers. Accurate work on this project would not be possible without access to the super-computing facilities provided by the HLRN.





**Figure 2:** Dimensionless force  $F_{GB}^*$  available to the abrasion process in terms of dimensionless rotation frequency  $f^*$  and dimensionless standard volumetric flow rate  $\dot{V}_N^*$ .

## References

- [1] C. Fureby. On subgrid scale modeling in large eddy simulations of compressible fluid flow. *Physics of Fluids* , 8:1301–1311, 1996.
- [2] F.M. White. *Viscous Fluid Flow* . McGraw-Hill, 1991.

## Sponsorship

This project is sponsored by the German Research Foundation (DFG) as part of the work-group Small Machine Tools (SPP 1476) and supported by the North-German supercomputing alliance (HLRN) with 40kNPL.

## 5.5 hbk00018: Berechnung der Wasserdampfkonzentrationen aus Limb-Messungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY

|                         |   |
|-------------------------|---|
| HLRN-Projektkenung:     | hbk00018  |
| Laufzeit:               | I/2011 – IV/2012  |
| Projektleiter:          | Prof. Dr. J. P. Burrows                                     |
| Projektbearbeiter:      | Wolfhardt Lotz, Alexej Rozanov, Marco Vountas, Katja Weigel |
| Institut / Einrichtung: | Institut für Umweltphysik, Universität Bremen               |

### 1 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 aufwändige Strahlungstransportrechnungen nötig sind, ist der Rechenzeitbedarf dabei groß.

### 2 Einleitung

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 Menge des Wasserdampfes in der Luft ab. Diese wird häufig als Volumenmischungsverhältnis zwischen Wasserdampf und "trockener" Luft in Teilen pro Million [ppmV] angegeben. Dieses Mischungsverhältnis 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, [30](http://www.fu-</a></p></div><div data-bbox=)

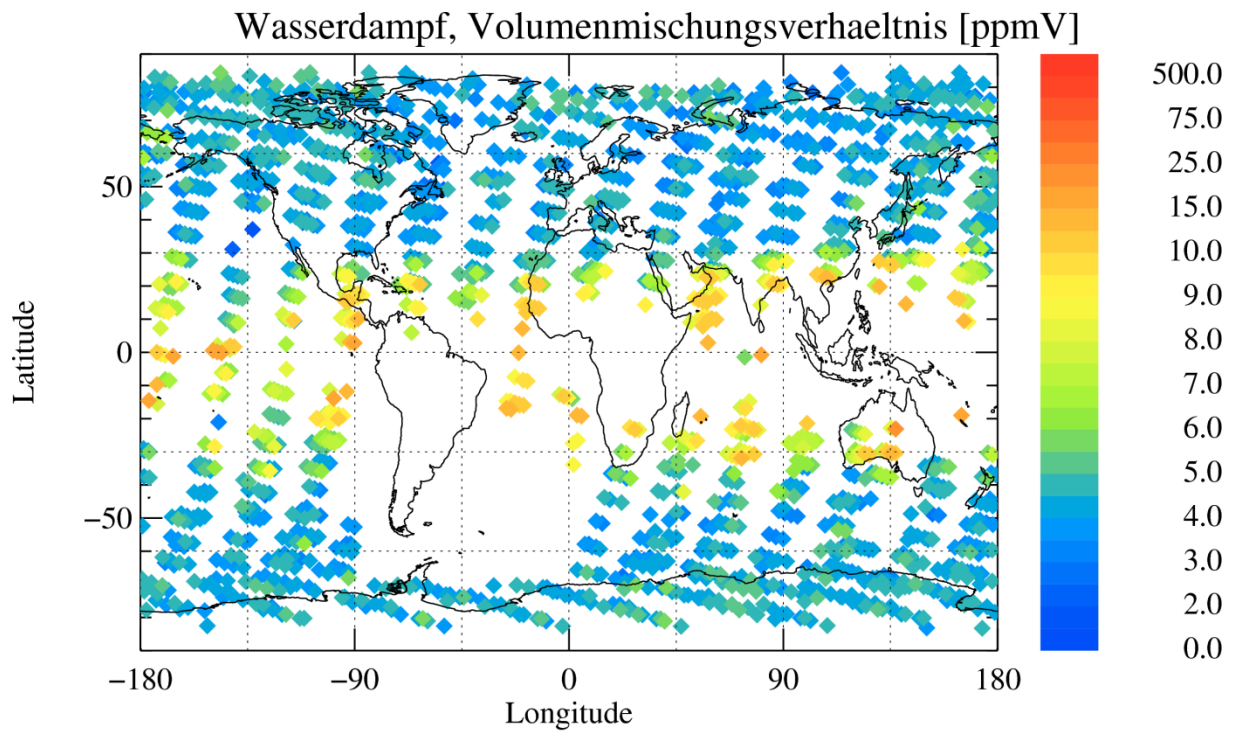
berlin.de/sharp/) zu einem besseren Verständnis der Verteilung und der zeitlichen Änderung des Wasserdampfgehaltes in der Atmosphäre und dessen Wirkung auf das Klima beizutragen. Dazu braucht man möglichst globale, regelmäßige und dichte Messungen des Wasserdampfs. Solche Messungen oberhalb der Wolken gibt es vor allem von Satelliten. Wir arbeiten daran im Rahmen von SHARP eine Zeitserie der zonal gemittelten Wasserdampfmischungsverhältnissen aus Messungen von SCIAMACHY (engl.: Scanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartography) ab August 2002 bereitzustellen.

SCIAMACHY ist ein Spektrometer auf dem europäischen Satellit ENVISAT und umrundet die Erde seit 2002 14.4 Mal jeden Tag. 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.

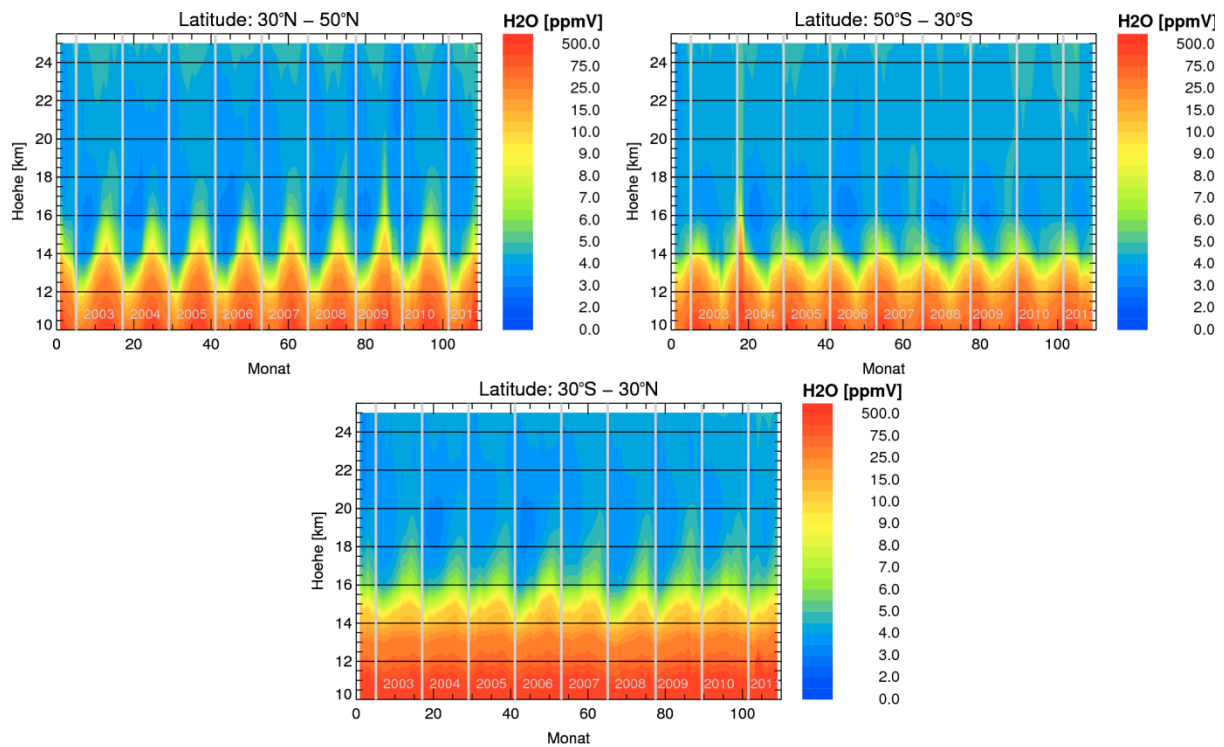
**Wie kommt man von der gemessenen Strahlung zu Wasserdampfprofilen?** Dazu werden die charakteristischen Absorptionen der Wassermoleküle im infraroten Bereich des Spektrums genutzt. SCIAMACHY misst das gestreute Sonnenlicht in der Atmosphäre. Auf dem Weg zum Instrument absorbiert der Wasserdampf einen 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 Wasserdampfprofile 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 (Rozanov et al., 2011).

### 3 Ergebnisse

**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 der Wasserdampfes geeignet sind und jeden Tag kommen meist über 1000 neue dazu. Um den gesamten Messzeitraum abzudecken, wurde zunächst nur jeder 8. Tag berechnet. Abbildung 1 zeigt alle berechneten Wasserdampfmischungsverhältnissen aus den SCIAMACHY Messungen im März 2011 (04., 12., 20. und 28.03.2011) auf einer Höhe von 15km. 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. Zusätzlich wurden Messungen herausgefiltert, bei denen sich der Satellit im Bereich der Südatlantischen Anomalie (SAA) befand, dadurch kommt die große Lücke über Südamerika zustande.



**Abbildung 1:** Wasserdampf-Volumenmischungsverhältnis [ppmV] aus SCIAMACHY Limb-Messungen in 15km Höhe im März 2011.



**Abbildung 2:** Zeitserie von zonal und monatsweise gemitteltem SCIAMACHY Wasserdampf [ppmV] zwischen 10 und 25km für 3 verschiedene Breitenbereiche (30°N-50°N, 30°S-30°N und 50°S-30°S).

**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: Bisher wurde der Wasserdampf für jeden 8. Tag zwischen August 2002 und August 2011 berechnet. Abbildung 2 zeigt eine Zeitserie des zonal und monatsweise gemittelten Wasserdampfes für diesen Datensatz für 3 verschiedene Breitenbereiche. Die Gebiete zeigen erwartungsgemäß unterschiedliche Jahressgänge und Variationen zwischen den verschiedenen Jahren.

#### 4 Ausblick

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. Zur Zeit werden die Wasserdampfprofile für die anderen Tage berechnet. Gleichzeitig arbeiten wir daran, die Berechnung des Wasserdampfes weiter zu verbessern und die Qualität der berechneten Daten. Abhängig vom Ergebnis dieser Tests werden wir entscheiden ob eine neuer, verbesserter Datensatz berechnet werden soll.

#### Literatur

- 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, *Atmos. Meas. Techn.*, 4, 933-954, doi:10.5194/amt-4-933-2011, 2011.

#### Präsentationen

- Weigel, K., Rozanov, A., Weber, M., Bovensmann, H., and Burrows, J. P.: Water vapor in the UTLS from SCIAMACHY Limb observations, SADDU Meeting, 15.04.2010.
- Weigel, K., Rozanov, A., Weber, M., Azam, F., Eichmann, K.-U., Noël, S., Stiller, G. P., Bovensmann, H., and Burrows, J. P.: Status of the water vapor retrieval from SCIAMACHY limb measurements, SHARP Jahrestagung, 20.05.2010.
- Weigel, K., Rozanov, A., Weber, M., Bovensmann, H., Stiller, G. P., and Burrows, J. P.: 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.
- Weigel, K., Rozanov, A., Weber, M., Eichmann, K.-U., Stiller, G. P., Bovensmann, H., and Burrows, J. P.: Water vapor retrieval in the upper troposphere and lower stratosphere from SCIAMACHY limb measurements, ESA Living Planet Symposium, 29.06.2010.
- Weigel, K., **Rozanov, A.**, Weber, M., Eichmann, K.-U., Stiller, G. P., Bovensmann, H., and Burrows, J. P.: Validation of water vapor retrieval from SCIAMACHY limb measurements in the upper troposphere and lower stratosphere, COSPAR, 24.07.2010.
- Weigel, K., Rozanov, A., Weber, M., Bovensmann, H., Stiller, G. P., **Burrows, J. P.**: Time series of water vapor in the upper troposphere and lower stratosphere from SCIAMACHY limb measurements, European Geosciences Union General Assembly 2011, EGU2011-717, 05.04.2011.
- Weigel, K., **Rozanov, A.**, Azam, F., Eichmann, K.-U., Weber, M., Bovensmann, H., Stiller, G. P., and Burrows, J. P.: Water vapor from SCIAMACHY limb measurements in



the upper troposphere and lower stratosphere, version 3, 2003-2007, 6th Limb Conference, 01.12.2011.

### Poster

- Weigel, K., Rozanov, A., Azam, F., Weber, M., Bovensmann, H., Stiller, G. P., and Burrows, J. P.: Water vapor retrieval from SCIAMACHY limb measurements in the upper troposphere and lower stratosphere, WAVACS Winter School, 06.-12.02.2011.
- Weigel, K., Rozanov, A., Azam, F., Eichmann, K.-U., **Weber, M.**, Bovensmann, H., Stiller, G. P., and Burrows, J. P.: SPARC Water Vapor Assessment: Water vapor from SCIAMACHY limb measurements in the upper troposphere and lower stratosphere, WCRP OSC (World Climate Research Project, Open Science Conference), Climate Research in Service to Society, Denver, 24--28. 10. 2011.
- Weigel, K., Rozanov, A., Azam, F., Eichmann, K.-U., Weber, M., Bovensmann, H., Stiller, G. P., and Burrows, J. P.: Water vapor in the upper troposphere and lower stratosphere, a time series from SCIAMACHY limb measurements, WaVacs Final Workshop, Paris, France, 26--28. 09. 2011.

## 5.6 hbk00021: **Unstructured Mesh Ocean Modelling.** Understanding the Dynamics and Change in the Arctic Ocean

|                         |  |
|-------------------------|--|
| HLRN-Projektkenung:     | hbk00021   |
| Laufzeit:               | II/2009 – I/2011   |
| Projektleiter:          | Prof. Dr. Thomas Jung  |
| Projektbearbeiter:      | W. Wang, C. Wekerle, X. Wang   |
| Institut / Einrichtung: | Alfred-Wegener-Institute for Polar and Marine Research,<br>Bremerhaven |

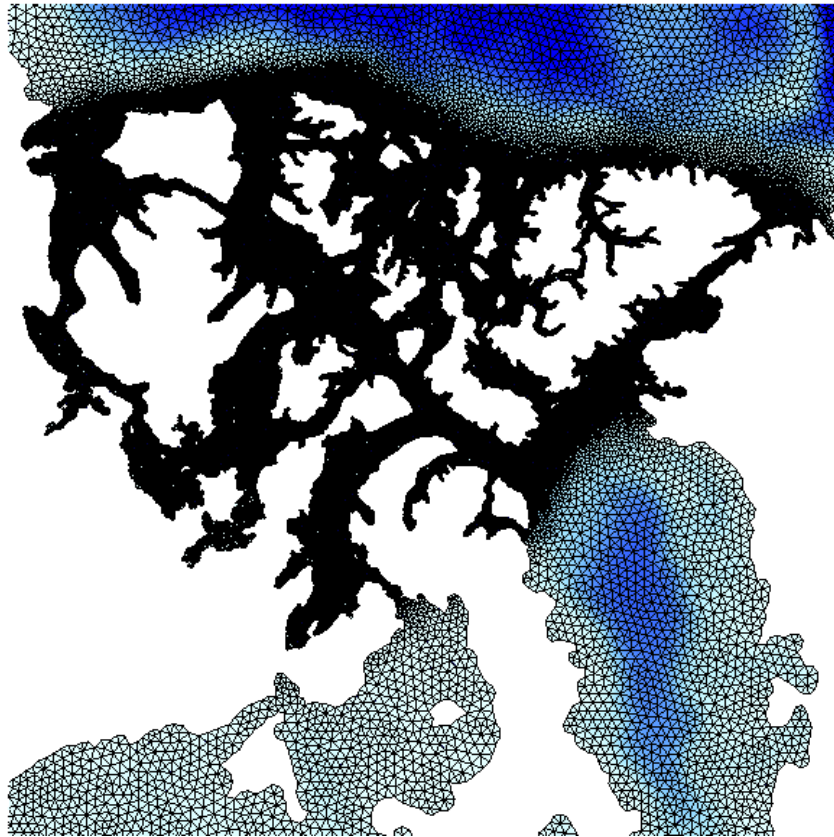
### Introduction

The Arctic Ocean is a very important component in the global climate system. Many processes involved in the Arctic region, for example, the sea-ice albedo feedbacks, the freshwater export into the North Atlantic, the storage and release of greenhouse gases, are key factors controlling the climate variability. The Arctic Ocean has been experiencing significant changes under global warming since the last decade. It is crucial to understand the changes in the Arctic climate dynamics and their impact on the climate on larger scales.

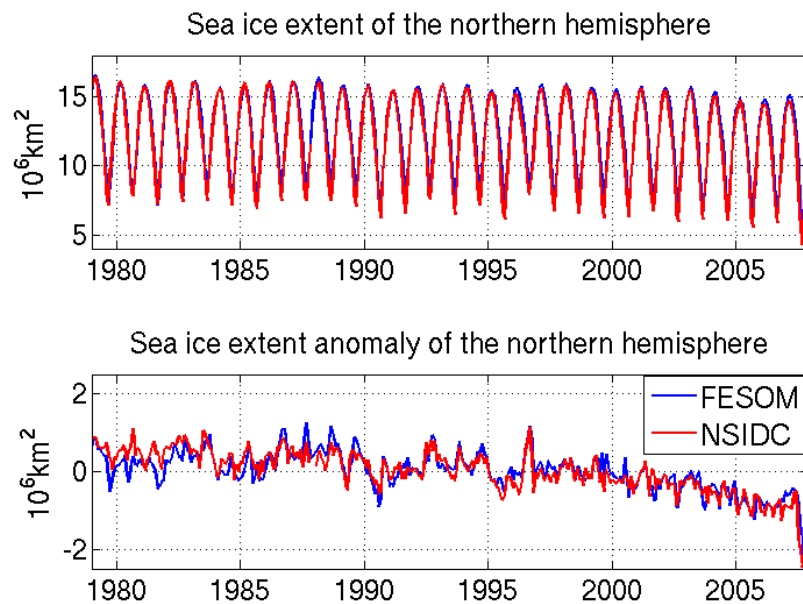
### Simulations

The Canadian Arctic Archipelago (CAA) is one of the main pathways for freshwater exiting the Arctic Ocean. The amount of exported freshwater influences the deep water formation in the North Atlantic, which is crucial for the meridional overturning circulation (MOC). Modeling the ocean and sea ice conditions in the CAA is difficult because of narrow straits and complex coastlines. Based in previous projects, this project uses the Finite Element Sea-ice Ocean Model FESOM, developed at the Alfred Wegener Institute, in a global configuration with local refinement in the Arctic Ocean and particularly in the CAA. A global mesh is used, with a background resolution of  $1.5^\circ$ , 24 km north of  $50^\circ\text{N}$ , and 5 km in the CAA region (Fig. 1). The model is initialized from the PHC climatology and forced by the CORE interannual forcing and run for 50 years (1958-2007). Fig. 2 shows the modeled Arctic monthly sea-ice extent and its anomaly with comparison to observations. The model well represents the sea-ice interannual variability and the observed recent decline.

Fig. 3 shows that the correlation between the freshwater transport through the main CAA straits and the along strait sea surface height (SSH) difference is very significant. This result is consistent with previous model studies. A detailed analysis shows that both the dynamical and thermodynamical forcing influence the SSH gradient and thus the transport through the straits (Wekerle et al., 2012).

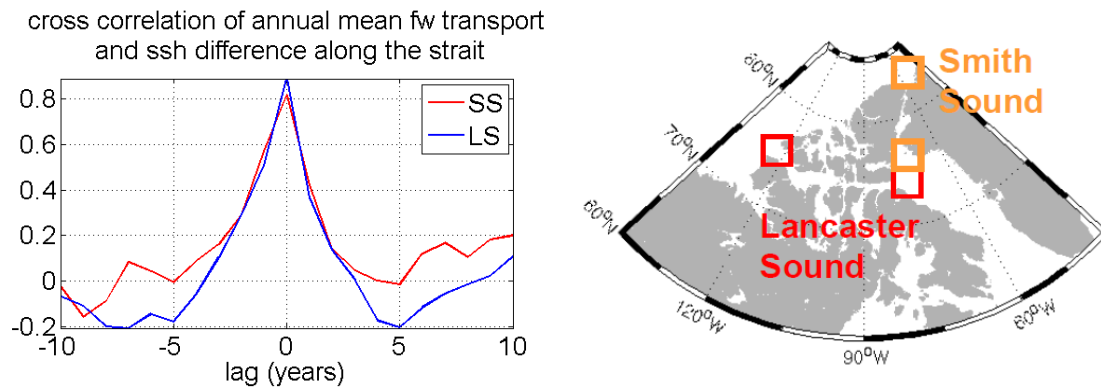


**Figure 1:** A global mesh with high resolution of 5 Km in the CAA region.



**Figure 2:** Arctic sea ice extent (up) and its anomaly (bottom) from the model (blue) and satellite observation (red).





**Figure 3:** The correlation between the freshwater transport and the along-strait sea surface height (SSH) difference for the two main straits (left). The locations where the SSH is taken are indicated on the right figure.

A comparison with another simulation without a local refinement in the CAA region showed that the magnitude of freshwater transport through the two main straits of the CAA is much higher and much closer to observations for the refined mesh. This shows that it is very important to properly resolve the narrow straits in model simulations in order to well represent the Arctic freshwater export. Future work will study the impact of the distribution of freshwater export between the CAA and the Fram Strait passages.

### References

Wekerle C. and others, (2012). Variability of freshwater transports through the Canadian Arctic Archipelago. *J. Geophys. Res.*, in preparation.

Wang, X. and others, (2012). Ocean response to increasing Greenland Ice Sheet melting. *J. Geophys. Res.*, in preparation.

## 5.7 hbk00025: Die Entwicklung der tropischen Regenzone im späten Neogen

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

### Übersicht

- In diesem Projekt werden Modellexperimente zur Abschätzung der Niederschlags- und Vegetationsentwicklung in Afrika vor 10 bis 2 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 explizit berücksichtigt.
- 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.

### Einleitung

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 (Beck, 2008). 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 (Hay, 1996). 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 werden häufig als 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 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. Über den Wärmeaustausch zwischen Ozean und Atmosphäre hat dies dann auch einen starken Einfluss auf die globale und regionale atmosphärische Zirkulation und Niederschlagsverteilung. Beispielsweise kam es durch die Entwicklung der Landbrücke zwischen Nord- und Südamerika (zwischen 13 und 2,6 Millionen Jahren) zu einer verringerten Durchmischung atlantischer und pazifischer Wassermassen und einer Verstärkung der großskaligen Umwälzzirkulation des Atlantiks (Steph et al., 2006). 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.

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 des Pliozäns (vor ca. 2-10 Millionen Jahren) abzuschätzen, werden 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.

## Ergebnisse

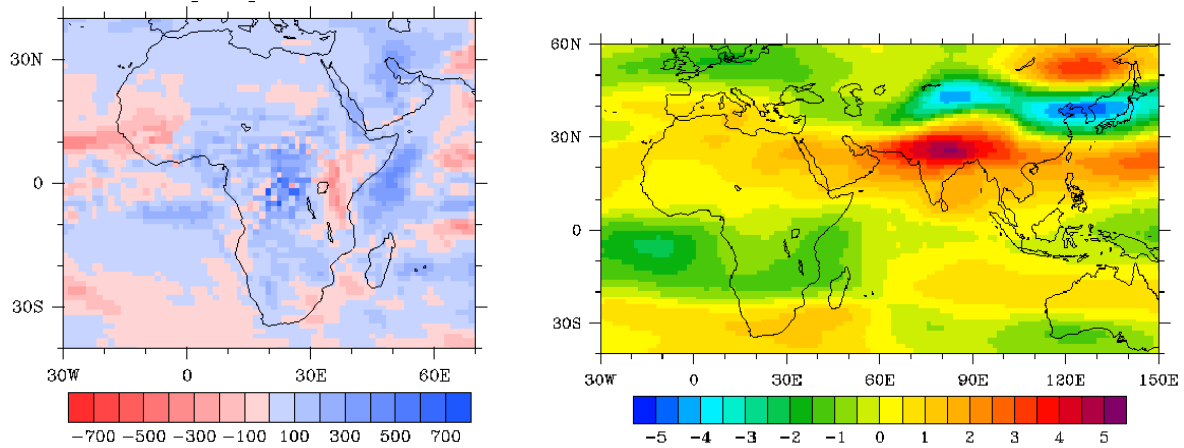
Die Sensitivitätsläufe zu den Gebirgshebungsprozessen zeigen, dass die Verflachung der Topographie von sowohl Ost- und Südafrika als auch des Himalayas und des Tibetischen Plateaus die Afrikanisch-Asiatische Monsunzirkulation beeinflussen.

Die Absenkung des Tibetischen Plateaus sowie des Himalayas bewirkt erwartungsgemäß eine Abschwächung des asiatischen Monsuns. Daneben zeigt sich dabei auch eine deutliche Zunahme der Niederschlagsmengen über Zentralafrika sowie eine Abnahme über Ostafrika (Abbildung 1). Für die Vegetationsbedeckung bedeutet dies eine leichte Zunahme des Waldanteils in Zentralafrika bei gleichzeitiger Abnahme der Bedeckung mit Gräsern und Buschland. Obwohl eine Abschwächung des Tropical Easterly Jet (TEJ) über Asien beobachtet werden konnte, konnte keine deutliche Auswirkung auf die Stärke des TEJ über Westafrika und den Westafrikanischen Monsun verifiziert werden (Abbildung 1).

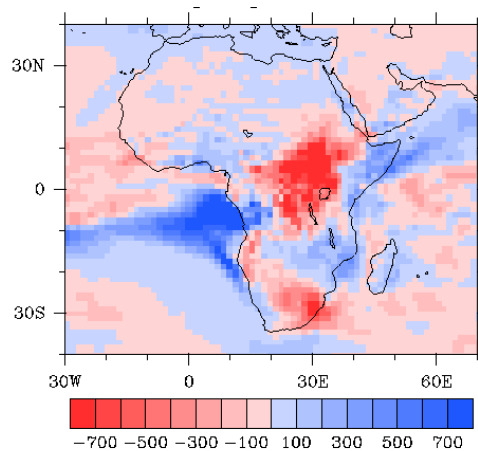
Die Verflachung Ost- und Südafrikas hat einen stärkeren Einfluss auf das Niederschlagsgeschehen sowie die Vegetationsbedeckung Afrikas. Die Abflachung der Berge führt zu einer Abschwächung der äquatorialen Passatwinde über dem tropischen Atlantik, was dort zu einer geringeren Verdunstung und einer Verringerung des Feuchtetransportes mit dem Sommermonsun nach Zentralafrika führt. Dieser Effekt wiederum bewirkt dort eine Verringerung der Niederschlagsmenge (Abbildung 2). Über Ostafrika kann hingegen, in Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Sepulchre et al. (2006), eine Zunahme der Niederschläge beobachtet werden (Abbildung 2), die vermutlich mit einer Zunahme des Feuchtetransports vom Indischen Ozean in Zusammenhang mit dem dann weniger stark konzentrierten Low-Level Somali Jet entlang der ostafrikanischen Küste einhergeht. Die genannten Niederschlagsunterschiede bedeuten für Zentralafrika eine Abnahme des Waldanteils bei gleichzeitiger starker Zunahme von Gräsern und Buschwerk. Im relativ trockenen Teil Ostafrikas zeigt sich durch die Zunahme der Niederschläge vor allem eine Zunahme der Bedeckung mit Gräsern und Buschwerk (Abbildung 3).

Die Simulation beider Hebungsprozesse (Ost-/Südafrika und Himalaya/Tibet Plateau) zusammen zeigt deutlich den dominierenden Einfluss der Hebung Ost-/Südafrikas auf Niederschlags- und Vegetationsverteilung im afrikanischen Regengürtel. Die noch nicht abgeschlossene Analyse mithilfe einer Faktor-separationsmethode deutet an, dass ein Teil der, durch die Hebung des Himalayas und des Tibetischen Plateaus bedingten Änderungen in Ostafrika stark von Wechselwirkungen mit der afrikanischen Orografie moduliert werden.

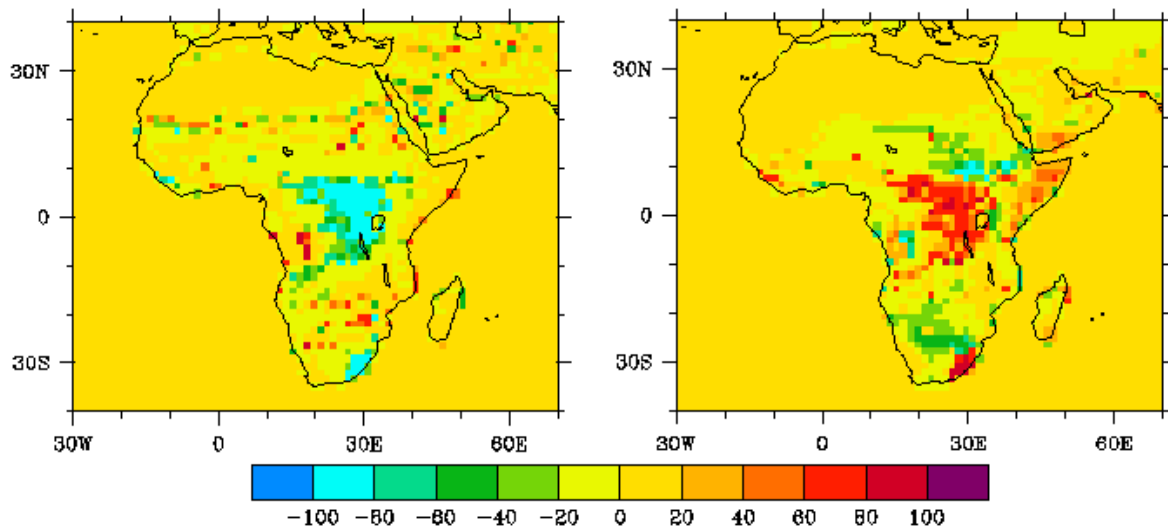
Die Verflachung der Anden und der Rocky Mountains bewirkt eine Zunahme des Niederschlags in Zentralafrika, sowie eine Abnahme in West- und in geringem Maße auch in Ostafrika, welche allerdings noch eingehend untersucht werden muss (v.a. im Hinblick auf die Signifikanz).



**Abbildung 1:** Effekt der Verflachung von Himalaya und Tibetischem Plateau auf den mittleren Jahresniederschlag [mm] (links) und auf die Stärke des TEJ [m/s] in 200 hPa (rechts) (Mittel über 100 Jahre) .



**Abbildung 2:** Effekt der Verflachung von Ost- und Südafrika auf den mittleren Jahresniederschlag [mm] (Mittel über 100 Jahre).



**Abbildung 3:** Effekt der Verflachung von Ost- und Südafrika auf die Vegetationsbedeckung (Mittel über 100 Jahre). Gezeigt ist die Änderung der prozentualen Bedeckung mit Bäumen (links), sowie Gräsern und Buschwerk (rechts).

#### Literatur:

- (1) Beck, 2008: Die Frühzeit des Menschen. Der Weg zum Homo sapiens, 5., vollständig neubearbeitete und ergänzte Auflage, München 2008 (C.H.Beck Wissen)
- (2) Hay, W.W. (1996): Tectonics and Climate, *Geol. Rundsch.*, V.85, S. 409-437
- (3) 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, *Paleoceanography*, 21, PA4221, doi:10.1029/2004PA001092
- (4) Sepulchre, P., G. Ramstein, F. Fluteau, M. Schuster, J.-J. Tiercelin and M. Brunet (2006): Tectonic Uplift and Eastern Africa Aridification, *Science*, Vol. 313 no. 5792 pp. 1419-1423, DOI: 10.1126/science.1129158
- (5) [www.marum.de/en/Page8307.html](http://www.marum.de/en/Page8307.html)

#### Poster:

- (1) 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
- (2) Late Neogene evolution of the tropical rainbelt - Sensitivity studies with a comprehensive climate model, (2010, Jung, Prange, Schultz), North Cluster Meeting, Hamburg

## 5.8 hbk00026: Modellierung und Simulation von Tsunami-Ausbreitung und -Überflutung

|                         |  |
|-------------------------|--|
| HLRN-Projektkenung:     | hbk00026   |
| Laufzeit:               | III/2011 – II/2012   |
| 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 |

### 1. Übersicht

- Simulation der Tsunamiasausbreitung und -Überflutung u.a. für das indonesische Tsunami-Frühwarnsystem
- Innovatives Finite-Elemente-Modell mit einem Rechengitter, das die Geografie besonders gut auflöst.
- Sensitivitätsstudien u.a. für hochaufgelöste Überflutungsrechnung, Tsunami-Ausbreitung im gesamten Indischen Ozean

Die Tsunami-Arbeitsgruppe am AWI ist Teil von GITEWS (German-Indonesian Tsunami Early Warning System<sup>4</sup>), das nach dem verheerenden Tsunami 2004 ins Leben gerufen wurde, und der anschließenden Nachhaltigkeitsphase PROTECTS. Gemeinsam mit deutschen und indonesischen Projektpartnern wurde in Jakarta ein Tsunami-Warnzentrum installiert und am 29. März 2011 offiziell an Indonesien übergeben.

Im Entwicklungsprojekt am HLRN soll das im Rahmen von GITEWS entstandene Modell zur Tsunami-Ausbreitung, TsunAWI, weiter entwickelt und sowohl für das Warnzentrum in Jakarta als auch für andere Gebiete Tsunami-Szenarien mit verbesserter Modellphysik erstellt werden.

### 2. Modellphysik und Numerik

Die Simulationen basieren auf den Flachwassergleichungen für die Oberflächenauslenkung und die Geschwindigkeit im zweidimensionalen Rechengebiet. Die numerische Umsetzung folgt im Modell TsunAWI der Arbeit von Hanert et. al. (2005) mit finiten Elementen, wobei die Auslenkung mit linearen konformen ( $P_1$ ), die Geschwindigkeit mit linearen non-konformen Elementen ( $P_1^{NC}$ ) berechnet wird. Im Küstenbereich wird das Zurückziehen des Wassers in Wellental und die Überflutung nach dem numerischen Schema von Lynett und Liu (2002) berechnet. Das unstrukturierte Dreiecksgitter löst den Küstenbereich mit Überflutungszone sehr viel feiner auf als den tiefen Ozean. Als Zeitschrittverfahren wird das explizite Leap-Frog-Schema eingesetzt.

---

<sup>4</sup> <http://gitews.org>



Der Antrieb erfolgt aus Erdbeben-Modellen; wahlweise nach Okada-Parametern, dem Modell RuptGen (Babeyko, GFZ Potsdam) speziell für den Sundagraben oder einer anderen Bodenanregung aus einem Eingabe-File.

### 3. Projektverlauf am HLRN

#### Nichtlineare Advektion und Code-Optimierung

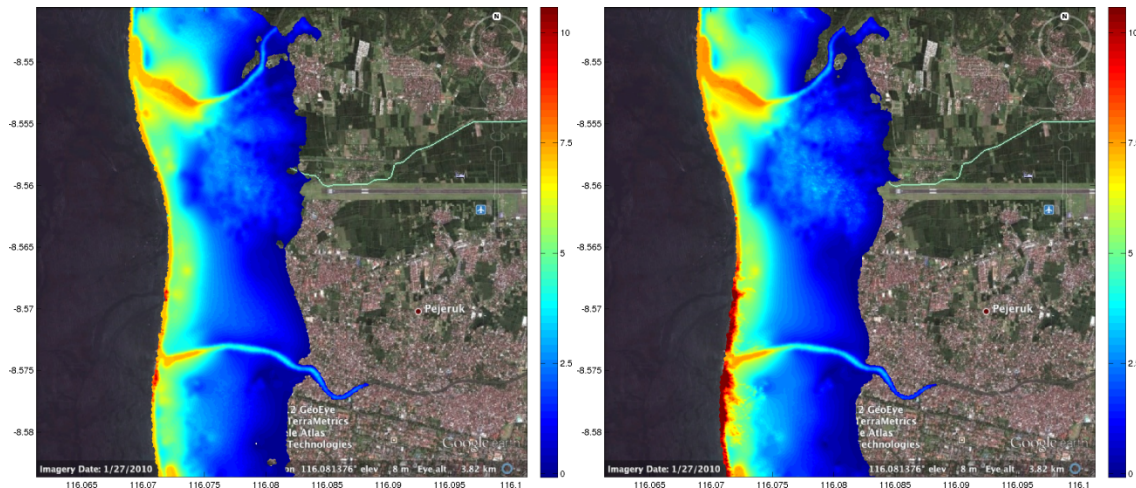
Im ersten Projektjahr wurden wie geplant die verschiedenen Implementierungen des nichtlinearen Advektionsterms verglichen. Dabei wurde der Programmcode substantiell optimiert, die Rechenzeit pro Zeitschritt deutlich verkürzt. Als wichtigste Methoden sind die Umsortierung der Unbekannten entlang einer Space Filling Curve und die konsequente First-Touch-Initialisierung im OpenMP-Code zu nennen, die den Speed-Up deutlich erhöhen.

Die Rechenzeiten des optimierten Codes sind in der Tabelle 1 zusammengefasst. Wegen des guten Speedups des OpenMP-parallelen Codes haben wir die Rechnungen meist auf der SGI Altix UV durchgeführt. Mit Setup und Ausgabe benötigt ein regionales Szenario nun 35min Rechenzeit auf einem UV-Blade, also ca. 0,6 NPL. Im Rahmen der Sensitivitätsstudien zur nichtlinearen Advektion konnte zudem die Überflutungsrechnung mit sorgfältigen Fallunterscheidungen robuster implementiert werden. Auch in geographisch komplexen Regionen ist die Überflutung nun numerisch stabil und neigt nicht mehr zu gelegentlichen artifiziellen Peaks (ein Problem, dass in vielen numerischen Tsunamimodellen auftritt).

**Tabelle1.** Rechenzeit pro Zeitschritt (ohne I/O) für das regionale indonesische Modell mit nichtlinearer Advektion am HLRN. Die Rechengeschwindigkeit wurde indirekt mit dem Hardware-Zähler des IBM Power6-Clusters am AWI ermittelt, der für einen Zeitschritt 1,2 GFlop misst (1 FMA=2 Flop).

| Architektur | OpenMP-Threads | Rechenzeit pro Zeitschritt | Rechengeschwindigkeit | Speedup |
|-------------|----------------|----------------------------|-----------------------|---------|
| Altix UV    | 1              | 1,47 s                     | 0,8 GFlop/s           | 1,0     |
|             | 2              | 0,90 s                     | 1,4 GFlop/s           | 1,6     |
|             | 4              | 0,51 s                     | 2,4 GFlop/s           | 2,9     |
|             | 8              | 0,31 s                     | 3,9 GFlop/s           | 4,7     |
|             | 16             | 0,17 s                     | 7,2 GFlop/s           | 8,6     |
|             | 32(*)          | 0,14 s                     | 8,7 GFlop/s           | 10,5    |

(\*)mit Hyperthreading



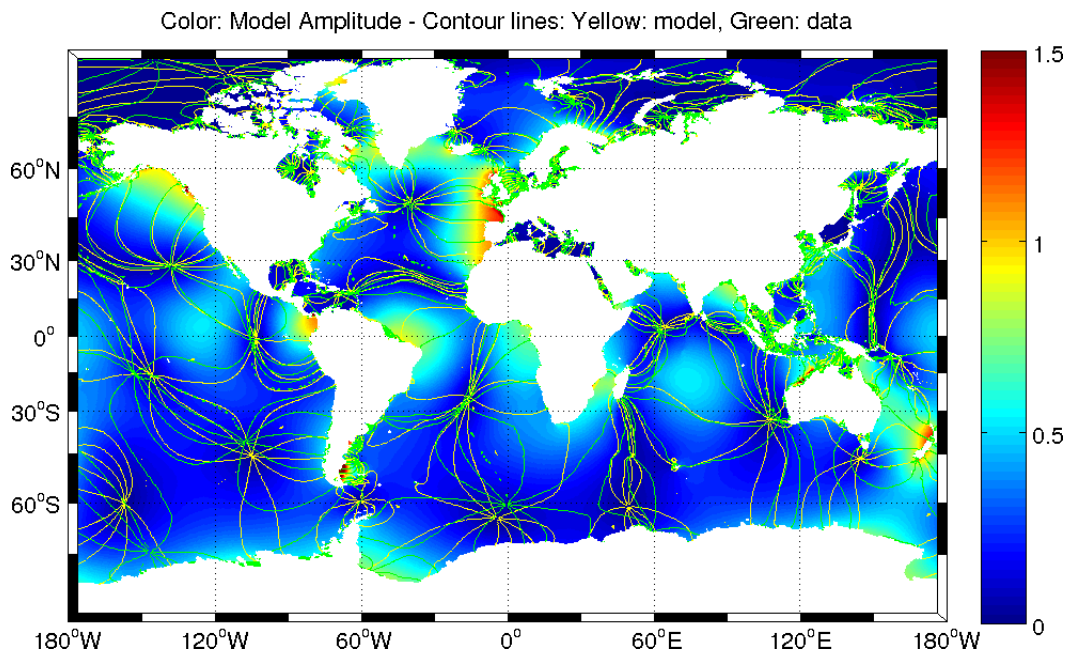
**Abbildung 1:** Einfluss der Bodenreibung auf die Simulation der Überflutung von Mataram, Lombok, Indonesien. Links konstante mittlere Reibung, rechts variable Reibung in Abhängigkeit von der Topographie: geringere Reibung für Straßen, Kanäle, offene Flächen, höhere Reibung für bebauten und bewaldeten Gebiete.

### Sensitivitätsstudie für den gesamten Indischen Ozean

Durch die umfangreichen Entwicklungsarbeiten nach dem Mentawai-Tsunami im Oktober 2010 hat sich dieses Teilprojekt um ein Quartal verzögert. Die Sensitivitätsstudien ergaben, dass die Modelllaufzeit auf 24 Stunden verdoppelt werden muss, um sichere Vorhersagen zur Entwarnung an entfernten Küsten treffen zu können. Zudem sollen die Epizentren nicht ausgedünnt werden, um möglichst vergleichbar zu den regionalen Szenarien zu bleiben. Somit waren umfangreiche technische Modifikationen notwendig, um die Datenmengen zu reduzieren, die um ein Vielfaches größer ausfallen als im regionalen Modell. Zeitreihen im Minutenabstand werden nur an vorgegebenen POI (Points of Interest) und in Wassertiefen bis 50m ausgeschrieben. Der Informationsverlust ist gering, denn im Vergleich zum regionalen Modell ist das Rechengitter an den meisten Küsten gröber und außerhalb Indonesiens steht uns nur GEBCO 30" Bathymetrie zur Verfügung. Die Überflutungsrechnung ist für Risikoanalysen somit nicht akkurat genug und hat eine rein numerische Bedeutung bei der Vermeidung zu starker Reflektionen an den Küsten.

### Sensitivitätsstudie für Überflutungsrechnungen in Projektgebieten

Gemeinsam mit der DLR Oberpfaffenhofen und in Kooperation mit australischen und indonesischen Partnern (AIFDR, Australia-Indonesia Facility for Disaster Reduction) haben wir Modellstudien für die Projektgebiete Mataram und Gili-Inseln, Lombok, Indonesien erstellt und dabei den Einfluss von Reibungsparametern untersucht. Dabei konnten wir besonders hoch aufgelöste Geographie-Datensätze nutzen. Das Rechengitter basiert auf der frei verfügbaren GEBCO-Bathymetrie in 30" Auflösung im tiefen Ozean, in der Straße von Lombok auf Rasterdaten in 90m Auflösung von TCarta Marine, an Land auf SRTM Topographiedaten in 30m Auflösung (am DLR prozessiert) und auf Intermap Daten in 5m Auflösung für Mataram und Gili Islands. Vergleichbare Rechnungen für weitere Projektgebiete sind in der Vorarbeitung, konkret soll ein Modellvergleich für die Überflutung durch den Flores Tsunami am 12. Dezember 1992 gerechnet werden.



**Abbildung 2:** Mit dem um Tiden erweiterten TsunAWI berechnete globale Tiden verglichen mit Messdaten.

### Parameteranalyse für ein globales Modell mit Tiden

Die Interaktion von Tiden und Tsunamiwellen ist nichtlinear. Je länger die Laufzeit, desto größer wird der Fehler, wenn Tsunami- und Tidenverlauf einfach addiert werden. Der erste Wellenberg wird im Nahfeld ohne Tidenkorrektur gut vorhergesagt, aber bei längerer Laufzeit werden Ankunftszeiten sowie Tsunami-Wellenverläufe falsch abgeschätzt. Als Vorarbeit haben wir ein globales Tidenmodell einschwingen lassen (Schwiderski 1980) und die Reibungsparameter justiert (Feddersen et. al. 2003). Zur Validierung wurden die modellierten Gezeiten mit einer Gezeitenkarte, die aus Messdaten erstellt wurde, abgeglichen, siehe Abb. 2.

Im nächsten Schritt wollen wir die Ausläufer des Weihnachts-Tsunamis 2004 über den Pazifik bis an die amerikanische Küste und zwei weitere Tsunamis (z.B. Japan 2011, Chile 2010) simulieren. Anschließend sind Sensitivitätsstudien für Gebiete mit besonders starken Gezeitenströmen geplant. Ursprünglich hatten wir geplant, mit einem grob aufgelösten globalen Tiden-Modell mit entsprechend großem Zeitschritt zu starten. In Küstennähe ist aber die Interpolation des Geschwindigkeitsfeldes auf ein feiner aufgelöstes Gitter, wie es für Tsunami-Rechnungen notwendig ist, nicht immer möglich. Starke Gezeitenströmungen etwa in Meerengen können nur von einem Rechengitter erfasst werden, das von Anfang an sensible Bereiche hoch genug auflöst. Das globale Gitter, auf dem das Tidenmodell zunächst in 24 Tidenzyklen einschwingt, muss also die Küstenbereiche, die später von besonderem Interesse sind, von Anfang an fein auflösen. Damit ist auch ein kleiner Zeitschritt notwendig. Ausgehend von einem Gitter mit 2 Millionen Knoten und einem Zeitschritt von 1 Sekunde bei 300 Stunden Modellzeit, verbraucht ein Lauf des globalen Tidenmodells 45 NPL. Es werden ca. 100 Läufe benötigt, um die Parametrisierung gut einzustellen.

Ist das globale Modell gut parametrisiert und eingeschwingen, kann es mit regionalen Modellen kombiniert und für Modellrechnungen realer Tsunamis sowie für Sensitivitätsstudien genutzt werden. Für jedes Modellgebiet ist ein erneutes Einschwingen auf der

endgültigen feinen Auflösung notwendig. Dann folgen ausgewählte indonesische Szenarien, um zu untersuchen, in welchen Gebieten die Interaktion von Tsunami und Tide eine relevante Rolle in der Vorhersage spielt.

### **Erweiterung um nicht-hydrostatische Korrekturterm**

Hier ist eine besonders hoch aufgelöste Tsunami-Simulation vorgesehen, bei der nicht-hydrostatische Effekte nachgewiesen werden können. Typische Benchmarks, die mit ausführlichen Daten aus Tank-Experimenten verglichen werden, zeigen bereits gute Ergebnisse (Run-Up auf einen gleichmäßig geneigten Strand, Okushiri-Testfall).

### **Veröffentlichungen**

Zu den am HLRN und anderweitig mit TsunAWI erzielten Ergebnissen sind folgende Vorträge gehalten worden. Hinzu kommen Poster auf nationalen und internationalen Konferenzen.

- Wekerle, C., Harig, S., Pranowo, W. S., Androsov, A., Fuchs, A., Rakowsky, N., Schröter, J., Danilov, S., Behrens, J. (2010). Dependency of tsunami simulations on advection scheme, grid resolution, bottom friction and topography, IMUM 2010, MIT, Boston, August 17-20, 2010.
- Harig, S., Sidorenko, D., Wang, Q., Timmermann, R., Wekerle, C., Rakowsky, N., Danilov, S., Schröter, J. (2010). Recent applications of FEOM and TsunAWI: regional and global experiments, IMUM 2010, MIT, Boston, August 17-20, 2010.
- Fuchs, A., Harig, S., Hiller, W., Rakowsky, N. (2010). Efficient Preconditioning Techniques Applied to a Parallel Tsunami Simulation Model, 14th Workshop on Use of High Performance Computing in Meteorology, ECMWF, Reading, November 1-5 2010.
- Rakowsky, N., Fuchs, A. (2011). Efficient local resorting techniques with space filling curves applied to a parallel tsunami simulation model, SIAM Conference on Mathematical and Computational Issues in the Geosciences, Long Beach, California, March 21-24, 2011.
- Fuchs, A., Frickenhaus, S., Hiller, W., Rakowsky, N. (2011) Comparison of Preconditioning Techniques for Optimization of a Nonhydrostatic, Parallel Tsunami Simulation Model, IMUM 2011, AWI, Bremerhaven, August 22-25 2011.

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

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

|                         |  |
|-------------------------|--|
| HLRN-Projektkenung:     | hbk00027   |
| Laufzeit:               | III/2010 – IV/2012   |
| Projektleiter:          | Prof. Dr. M. Schulz  |
| Projektbearbeiter:      | Huadong Liu, Dr. Matthias Prange   |
| Institut / Einrichtung: | Fachbereich Geowissenschaften und Zentrum für Marine<br>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 Ozeanzirkulation auf globaler Skala. Klimabedingte Änderungen dieses Feuchtetransports könnten 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.
- Das zur Modellierung verwendete Modell ist das gekoppelte parallele Community Climate System Model (Version 3), welches Atmosphäre, Ozean, Meereis und Landoberfläche simuliert.

Atmospheric moisture transport from the Atlantic to the Pacific basin plays an important role in regulating North Atlantic salinity and thus the strength of the thermohaline circulation. Today, vast amounts of rainfall in the Panama Bight (eastern tropical Pacific) are often attributed to the atmospheric transport of water vapor from tropical Atlantic/Caribbean sources into the tropical eastern Pacific via the northeasterly trade winds that cross Central America (e.g., Weyl, 1968; Benway and Mix, 2004). This net export of freshwater helps to maintain relatively high salinities, and hence densities, within the Atlantic and is an important driving factor for the global thermohaline circulation (THC; e.g., Broecker et al., 1990; Stocker and Wright, 1991; Zaucker et al., 1994; Schmittner et al., 2000; Hasumi, 2002). In modern climate, the relative influence of Atlantic/Caribbean vs. Pacific moisture sources within the Panama Bight area depends on the state of the El Niño-Southern Oscillation and/or the latitudinal position of the Intertropical Convergence Zone (ITCZ) (Prange et al., 2010).

A sequence of new sediment cores from high deposition rate locations along the Colombian

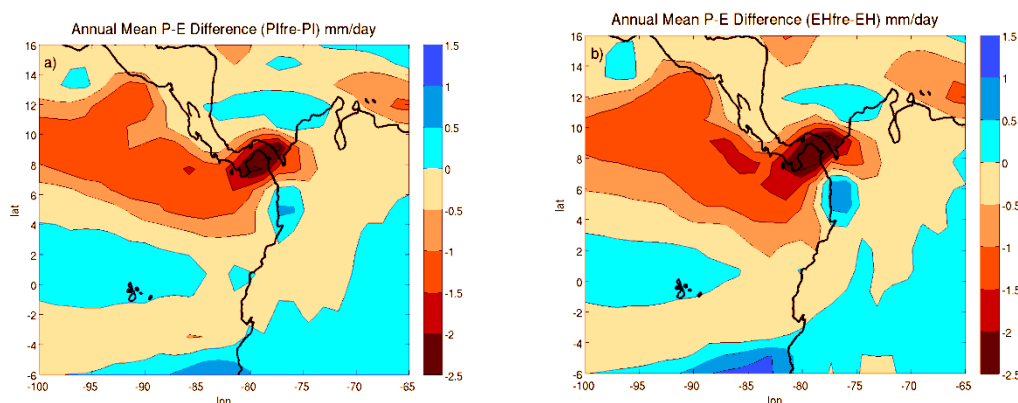


and Panamanian margins provides an opportunity to improve our understanding of the role of the tropical hydrological cycle affecting climate globally. Simulations of Holocene and deglacial climate states, using a high-resolution version of the comprehensive climate model CCSM3, will be used to interpret the proxy records and to place them into a global dynamical context. In particular, the model will provide quantitative information about changes in the Atlantic-to-Pacific water vapor flux, while the proxy records will be indispensable for verifying the model output.

A time slice simulation for the late Holocene with pre-industrial boundary conditions (PI run hereafter) has been already been carried out as a control run. To this end, the fully coupled model has been integrated for 600 years taking preindustrial greenhouse gas, aerosol and ozone concentrations into account. Analysis of this control run shows that the model is able to successfully simulate the annual cycle of the regional wind and rainfall patterns.

In addition, a “freshwater-hosing” experiment with pre-industrial boundary conditions (PI\_freshwater hereafter) has been performed in order to simulate the impact of a slowdown of the Atlantic Ocean meridional overturning circulation on the eastern tropical Pacific hydroclimatology under modern boundary conditions. In the hosing experiment, 0.2 Sv (1 Sv =  $10^6$  m<sup>3</sup>/s) of freshwater was injected into the northern North Atlantic for 300 years. As a result, Atlantic meridional overturning decreased by approximately 50% compared to the control run, leading to a substantial cooling in the Northern Hemisphere. The northeasterly trades strongly increase in the freshwater-hosing run in all seasons except for winter. The wind-field changes result in rainfall anomalies. The northeasterly wind anomaly leads to a southward shift of the ITCZ and its associated rainbelt in the tropical eastern Pacific (Fig. 1a). Interestingly, the P–E pattern in the Panama Bight region exhibits a dipole structure with wetter conditions in western Colombia and dryer conditions over Panama.

Finally, a simulation for the early Holocene (EH hereafter) has been performed for 500 years with the constant orbital forcing and greenhouse gas concentrations for 8 500 years before present. Then, a freshwater hosing experiment with the same boundary conditions (EH\_freshwater hereafter) has been carried out, also with 0.2 Sv of freshwater discharge into the northern North Atlantic for 300 years. The dipole structure of the P-E difference in the early Holocene is similar to the late Holocene in our simulation (Fig. 1b). This finding suggests that the appearance of the dipole structure is a robust feature, independent of the orbital forcing.



**Figure 1.** a) Annual mean P-E difference between the experiments PI\_freshwater and PI. b) Annual mean P-E difference between EH\_freshwater and EH. The last 100 years of each run has been used for averaging.

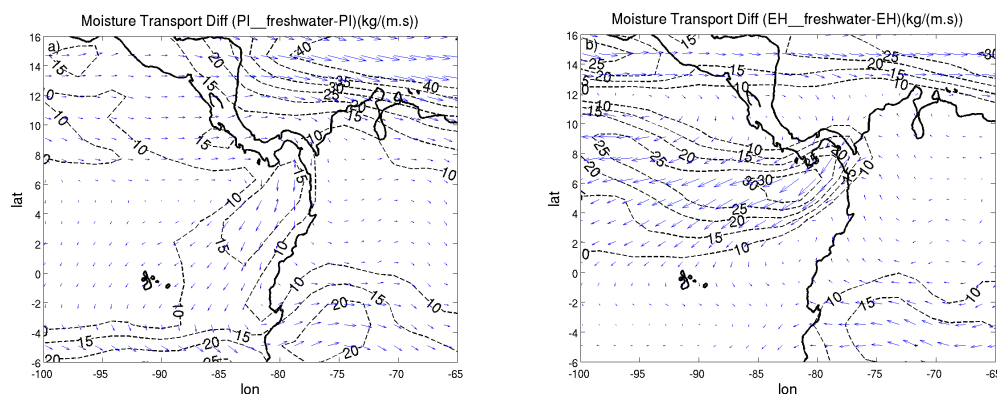
The annual mean moisture transports from the Atlantic to the Pacific in the above mentioned



simulations were computed based on daily model output (Table 1). The net moisture transports in the experiments PI and PI\_freshwater across Central America show no difference, because meridional and zonal vapour transports balance each other in this region (Fig. 2a). Compared to the EH run, the moisture transport in the EH\_freshwater run increases by 4%. The effect of the increased trade winds on the moisture transport is dominant in the early Holocene water-hosing run, despite a decrease in atmospheric moisture content over Central America. In summary, the results suggest that the P-E anomaly pattern in the Panama Bight region is insensitive to the changes in Atlantic-to-Pacific moisture transport across Central America.

**Table 1.** Net moisture transport across Central America (here along the 6°N-14°N segment computed with 20 year daily model output).

| Experiment                  | PI   | PI freshwater | EH   | EH freshwater |
|-----------------------------|------|---------------|------|---------------|
| Net moisture transport (Sv) | 0.30 | 0.30          | 0.28 | 0.29          |



**Figure 2.** a) Annual mean moisture transport difference between the experiments PI\_freshwater and PI. b) Annual mean moisture transport difference between EH\_freshwater and EH. 20 years daily model output of each run has been used for averaging.

**References:**

- Benway, H. M., and A. C. Mix (2004), Oxygen isotopes, upper-ocean salinity, and precipitation sources in the eastern tropical Pacific, *Earth Planet. Sci. Lett.*, 224, 493–507.
- Broecker, W. et al. (1990), A salt oscillator in the glacial Atlantic?, *Paleoceanography*, 5, 469–477.
- Hasumi, H. (2002), Sensitivity of the Global Thermohaline Circulation to Interbasin Freshwater Transport by the Atmosphere and the Bering Strait Throughflow, *J. Climate*, 15, 2516–2526.
- Prange, M., S. Steph, M. Schulz and L.D. Keigwin (2010), Inferring moisture transport across Central America: Can modern analogs of climate variability help reconcile paleosalinity records? *Quat. Sci. Rev.*, 29, 1317–1321.
- Schmittner, A., C. Appenzeller, and T. F. Stocker (2000), Enhanced Atlantic freshwater export during El Niño, *Geophys. Res. Lett.*, 27, 1163–1166.

- Stocker, T. F., and D. G. Wright (1991), Rapid transitions of the ocean's deep circulation induced by changes in surface water fluxes, *Nature*, 351, 729–732.
- Weyl, P. K. (1968), The role of the oceans in climatic change: A theory of the ice ages, *Meteorol. Monogr.*, 8, 37–62.
- Zaucker, F., T. F. Stocker, and W. S. Broecker (1994), Atmospheric freshwater fluxes and their effect on the global thermohaline circulation, *J. Geophys. Res.*, 99, 12,443–12,457.
- Richter, I., S. Xie (2009), Moisture transport from the Atlantic to the Pacific basin and its response to North Atlantic cooling and global warming, *Clim Dyn*, 35,551–566

**Förderung:** DFG, Schwerpunktprogramm 1266 (Interdynamik)

## 5.10 hbp00003: Encounters of Neutron Stars

|                         |  |
|-------------------------|--|
| HLRN-Projektkenung:     | hbp00003   |
| Laufzeit:               | IV/2010 – III/2012   |
| 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<br>2: Jacobs University Bremen                     |

### 1. Overview

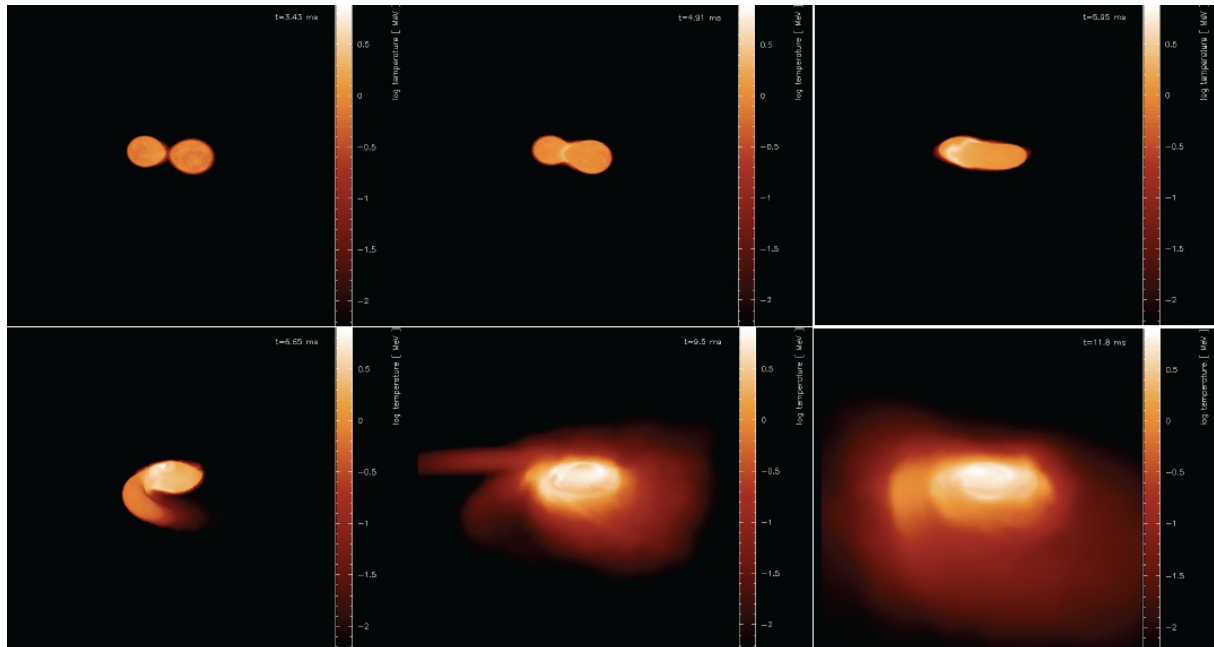
- Mergers of two compact objects (either two neutron stars or a neutron star and a black hole) are the prime targets of existing gravitational wave detectors.
- The first direct gravitational wave detections will likely be marginal, therefore it is of paramount importance to understand which additional, electromagnetic signals such mergers produce. This will enhance the effective detector sensitivity and allow to place mergers in their astrophysical context (host galaxy, surrounding gas etc.)
- Our calculations predict two such electromagnetic signals:
  - a) A transient signal ("Macronova") that is powered by radioactive decays occurring within the ejected material from such a compact encounter.
  - b) The ejecta are shot into the surrounding galaxy with  $\sim 20\%$  of the speed of light. When they are braked by the surrounding gas they produce a detectable signal at radio wavelengths that is visible for years.
- The nuclear reactions that occur inside the ejected material are likely responsible for about half of the heavy elements in the Universe (among them gold and platinum)

### 2. Introduction

Stars with more than eight solar masses end their lives in cataclysmic fireworks called supernovae. During this explosion their luminosity rivals those of whole galaxies. Supernovae eject most of their mass into space where it forms the basis for the next generation of stars. The stellar centers, however, become enormously compressed and – if the star was not too massive – the explosion produces a neutron star, or otherwise a black hole of a few solar masses. Neutron stars can be thought of as gigantic atomic nuclei: with a mass of about 1.4 solar masses and radii of only 12 km their densities exceed  $10^{14} \text{ gcm}^{-3}$ , the density of an atomic nucleus.

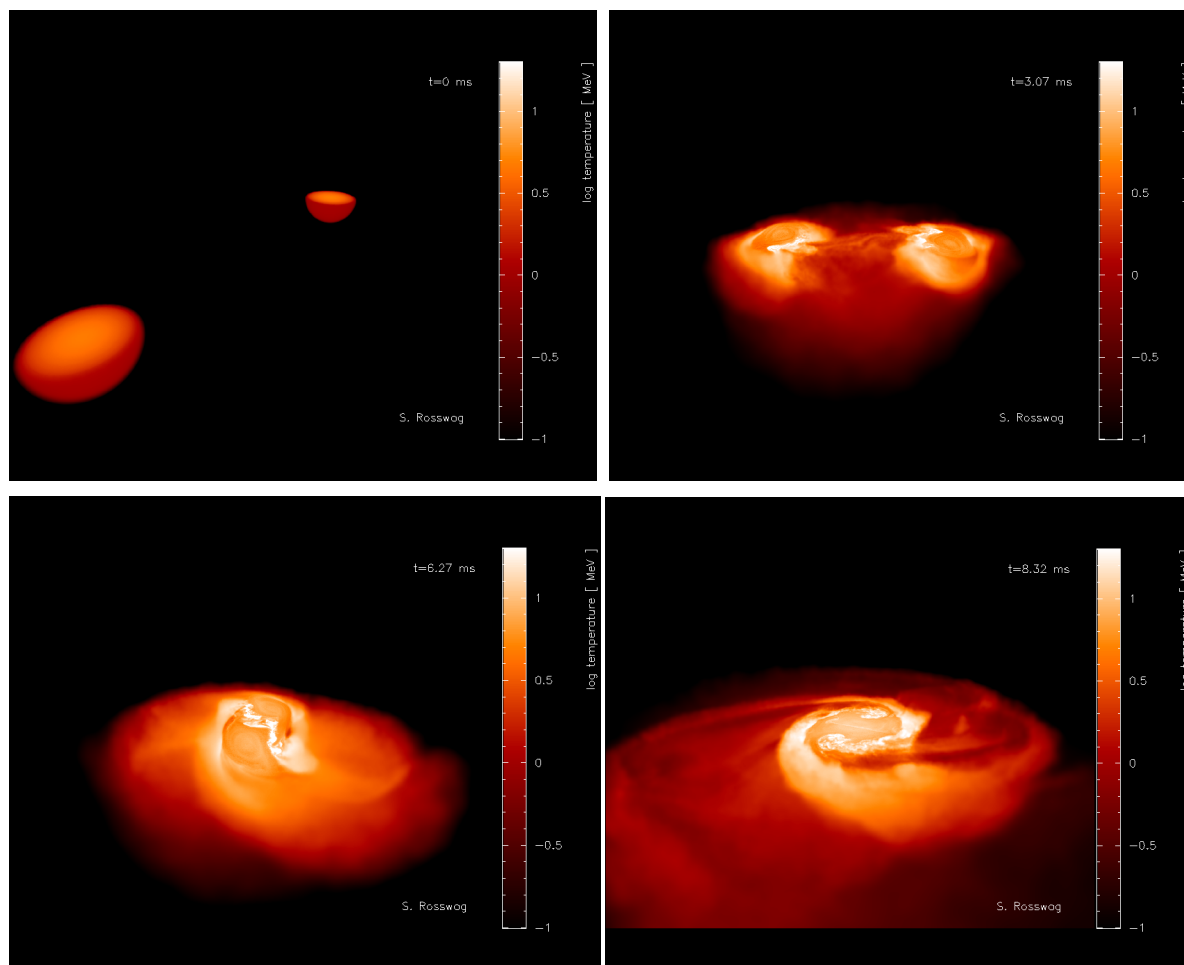
In some cases, these exotic stars are observed in binary systems where they orbit their common centre of mass. Due to their enormous compactness such stars can revolve around each other at very small separations and in such systems strong-field gravity effects become important, making such systems excellent laboratories to test theories such as Einstein's theory of General Relativity. In fact, the first indirect evidence for the existence of gravitational waves came exactly from such a system and it earned its discoverers, Russel Hulse and Joseph Taylor, the Nobel Prize for Physics in 1993. One implication of the emission of gravitational waves is that the binary orbit shrinks further until the stars finally merge. This releases gigantic amounts of gravitational energy, more than the Sun could radiate away during the whole lifetime of the Universe. The final merger most likely causes (a

fraction of) the brightest explosions in the Universe since its beginning in the Big Bang, so-called Gamma-Ray Bursts.



**Figure 1:** Merger of a neutron star binary with 1.3 and 1.4 solar masses. Color-coded is the surface temperature at a given optical depth. The temperatures during the merger reach values of up to  $6 \times 10^{11}$  K.

A variant to this theme are dynamical collisions of compact objects. In the solar neighborhood the density of stars is only moderate, there is about one star in every cube of 3 light years of edge length. There are however, regions in the Universe where this is very different: in the cores of Globular Star Clusters the same volume can contain as many as 100 millions of stars and under these conditions stars frequently suffer direct collisions. If two compact objects collide their overall energetics is similar to merger but their dynamics – and therefore their gravitational wave emission – is very different. In our HLRN project, we study the question how different mergers and collisions are in a) their gravitational wave, b) neutrino and c) electromagnetic emission. Moreover, we want to understand d) what their contribution to the cosmic inventory of heavy nuclei is.



**Figure 2.** Dynamical collision between two neutron stars with 1.3 and 1.4 solar masses. This system suffers several close encounters before it finally can merge into a single remnant. To allow for a view into the stars the upper half of the matter distribution was "chopped off". Color-coded is the temperature in units of MeV (1 MeV corresponds to roughly  $10^{10}\text{K}$ .)

### 3. Recent Results

We have performed a very large set of simulations where we have explored the parameter space of neutron star mergers with unprecedented breadth. One example, the most common neutron star merger case with two stars of 1.3 and 1.4 solar masses, is shown in Fig. 1. We have also explored in much detail dynamical collisions between compact objects. Particular simulations were run at very high resolutions, for example, the simulation shown in Fig. 2 took more than 6 months on 128 processors (the major bottleneck of such a simulations is the enormous sound speed in neutron star matter: it is about 30 % of the speed of light; the sound speed sets via the Courant-Friedrichs-Lewy stability criterion the allowed numerical time step).

The major results that were obtained so far are laid down in three publications [1,2,3] that are at the moment of writing close to submission. We have calculated how the dynamics of mergers and collisions differ [1]. This has serious consequences for their gravitational wave and neutrino emission and also for their potential to launch a Gamma-Ray Burst. We have put a particular focus on the material that is dynamically ejected in such a compact object

encounter. We make predictions for electromagnetic, transient signals that accompany a compact binary merger and collision [1,2]. We have identified two such signals: a) so-called "macronovae" and b) longer lasting radio flares. Macronovae result from the radioactive decays of heavy nuclei within the ejected material. Being powered by radioactivity they are not too different from a supernova explosion, but with their larger velocities and smaller amounts of radioactive material they evolve on much shorter time scales of only about one day. Most interestingly, the resulting nuclei form a pattern that fits the observed distribution of the heaviest elements in the Universe (including gold and platinum; so-called "rapid neutron capture elements") very well [3]. This makes compact binary mergers prime candidates for the cosmic source of these elements. Of order 1 % of the binary mass is dynamically flung into the surrounding galaxy at velocities of 20 % of the speed of light. When this material dissipates its kinetic energy in the surrounding gas it drives strong shocks, which in turn produce long-lasting radio flares. These flares reach their peak luminosity a few years after the merger and should be detectable for years [2].

#### 4. Outlook

We have investigated in detail the fate of two compact objects, either neutron stars or a neutron star with a stellar-mass black hole, that either merge after having been driven together by the emission of gravitational waves or that collide dynamically, say, in a Globular Star Cluster. We have predicted in detail the observable signatures in various channels: gravitational waves, neutrinos and electromagnetic emission. Such predictions will substantially enhance the effective sensitivity of existing gravitational wave detector facilities such as Geo600, LIGO, VIRGO.

Our future efforts will focus on enhancing and refining further the physics input in our simulations (more General Relativity, more refined nuclear heating physics) and implementing computationally more efficient gravity solvers.

#### Publications

- [1] *The multi-messenger picture of compact object encounters: binary mergers versus dynamical collisions*, S. Rosswog, T. Piran and E. Nakar, to be submitted to Monthly Notices of the Royal Astronomical Society (2012)
- [2] *The electromagnetic signals of neutron star mergers*, T.Piran, E. Nakar and S. Rosswog, to be submitted to Monthly Notices of the Royal Astronomical Society (2012)
- [3] *On the astrophysical robustness of neutron star merger r-process*, O. Korobkin, S. Rosswog, A. Arcones, C. Winteler, to be submitted to Monthly Notices of the Royal Astronomical Society (2012)



## 5.11 hbp000011: First-principles investigations of hybrid organic-inorganic interfaces

|                         |   |
|-------------------------|---|
| HLRN-Projektkenung:     | hbp00011  |
| Laufzeit:               | 01.10.2011 – 30.09.2012   |
| Projektleiter:          | Prof. Dr. Thomas Frauenheim<br>Dr. Andréia Luisa da Rosa  |
| Projektbearbeiter:      | Dr. Andréia Luisa da Rosa<br>Mr. Jianping Xiao  |
| Institut / Einrichtung: | Bremen Center for Computational Materials Science,<br>Universität Bremen, Am Fallturm 1, 28359 Bremen |

### Overview

Understanding the atomistic details and elementary physical and chemical processes of molecules on metal oxide surfaces is a topic of pronounced general interest and a necessary prerequisite for applications in optoelectronics, photovoltaics, catalysis and sensing. Successful surface modification of metal oxides with organic groups usually requires strong (but not necessarily covalent) binding. The modifications of metal oxide surfaces by organic molecules are manifold: they can change the surface wettability, tune their electronic properties and should provide immobilization of further attached biological or organic molecules through covalent binding. Zinc oxide (ZnO) is a direct wide-gap semiconductor with potential applications in light emitting diodes, lasers and solar cells [1]. Several anchoring groups on ZnO surfaces have been experimentally investigated. One important group includes molecules containing phosphonic acid groups (R-PO(OH)<sub>2</sub>), which are expected to form strong bonds on metal oxide surfaces[2].

In this project, we employ density-functional theory to investigate structural and electronic properties of hybrid ZnO/organic interfaces. We have investigated the chemical interactions between ZnO surfaces and several organic functional groups. Here, we describe the adsorption mechanism of phosphonic acid on ZnO surfaces. As a prototype molecule we use methyl phosphonic acid (MPA) and as substrate the non-polar ZnO(10 $\bar{1}$ 0) surface, which is particularly relevant because it is one of the most common surfaces of ZnO.

### Current results

The optimized geometries and adsorption energies for coverages of 1/2, 1/4, and 1/8 ML (monolayer, defined relative to the (1x1) unit cell) of MPA on ZnO(10 $\bar{1}$ 0) surfaces are shown in Fig. 1 and Table 1, respectively. The adsorption energy per molecule  $E_{ads}$  is calculated as  $E_{ads} = (E_{tot} - E_{ZnO} - N \times E_{MPA}) / N$ , where  $E_{tot}$  is the energy per cell of the slab with the adsorbed molecules,  $E_{ZnO}$  is the energy for the bare surface,  $E_{MPA}$  is the energy of a single MPA molecule, and N is the number of MPAs asorbed on the ZnO surface.

We first discuss the coverage regime of 1/2 ML. The final optimized geometries are shown in Figs. 1(a)-(d). The MC mode is shown in Fig. 1(a) while three configurations for the BB modes are shown in Figs. 1(b)-(d). The most stable geometry is BB2, lower by 0.41 eV and 0.18 eV than BB1 and BB3, respectively (Table 1). Fig. 1(e) shows bond lengths for the energetically most favored adsorbed geometry BB2. The MC configuration (Fig. 1(a)) is higher in energy and therefore will not be discussed further. We see in Fig. 1(e) that in the

optimized BB2 geometry the two H of the MPA's OH groups dissociate on the surface and form hydrogen bonds between a single MPA O and two substrate O atoms. At lower coverages, such as 1/4 ML, there are two possible ways for pairs of neighboring MPA molecules to align on the surface: along  $[1\bar{2}10]$  Fig. 1(f), or along  $[0001]$ , Fig. 1(g). Usually, steric repulsion, as in the more closely packed case along  $[0001]$ , leads to higher energy configurations. However, the energy is lower for the molecules dimerizing along the  $[0001]$  direction versus along  $[1\bar{2}10]$ , although the assembly along the  $[1\bar{2}10]$  direction gives the molecules more space to relax. The energy difference between these two configurations is 0.58 eV (Table 1).

In conclusion, we find that the in-plane  $[0001]$  direction (parallel to the Zn-O dimer orientation) is the favored molecular dimer assembly orientation and that the charge on the surface Zn-O dimer based local adsorption complexes is the key factor for the favored assembly direction. We suggest that this effect is in general an important stabilization mechanism for adsorbates on metal oxide surfaces containing metal-oxygen dimers.

**Table 1:** Adsorption energies of MPA on ZnO surfaces (eV/molecule). (a)-(h) refer to panels in Fig. 1.

| MC              | BB1             | BB2             |                                   |                             |                 | BB3             |                 |
|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------------------------|-----------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| a               | b               | c               | f                                 | g                           | h               | d               | Not shown       |
| 1/2 ML<br>(1x2) | 1/2 ML<br>(1x2) | 1/2 ML<br>(1x2) | 1/4 ML<br>(2x4)<br>$[1\bar{2}10]$ | 1/4 ML<br>(2x4)<br>$[0001]$ | 1/8 ML<br>(2x4) | 1/2 ML<br>(1x2) | 1/4 ML<br>(2x2) |
| -2.16           | -2.29           | -2.70           | -2.24                             | -2.82                       | -2.42           | -2.52           | -1.67           |

## Outlook

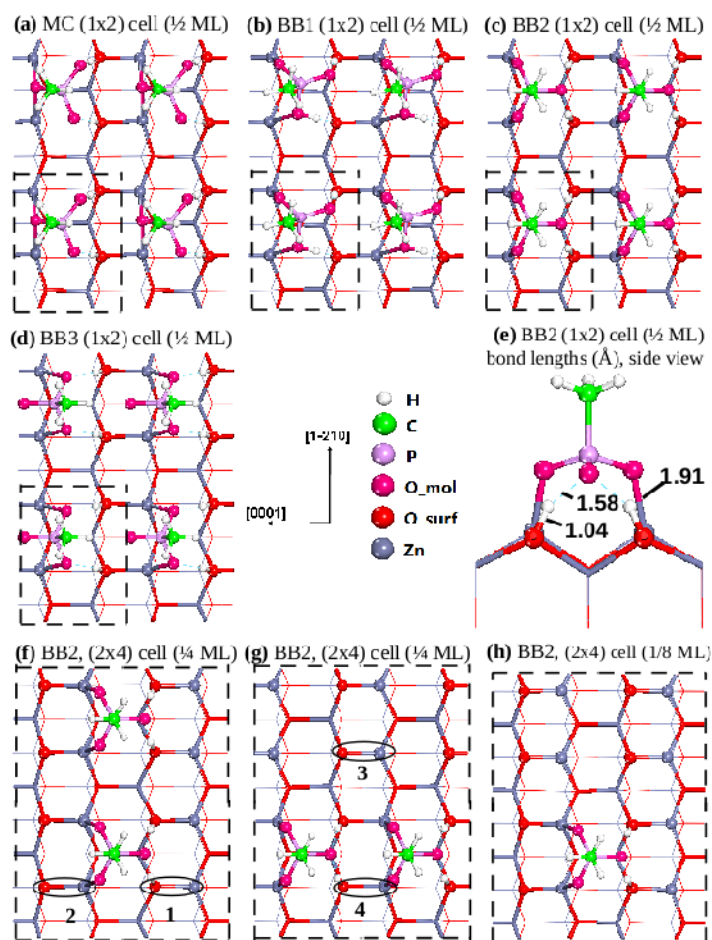
We have been performing calculations for adsorption of organic molecules on ZnO surfaces focusing mainly on the cohesive properties. We plan in the near future to determine the electronic properties of these hybrid organic/inorganic interfaces.

## Publications

- X. Q. Shi, H. Xu, M.A. Van Hove, N.H. Moreira, A.L. Rosa and Th. Frauenheim, Substrate mediated stabilization of methylphosphonic acid on ZnO non-polar surfaces, *Surf. Sci.* 606, 289 (2012) (Original Research Article)
- T. Kaewmaraya, B. Pathak, C. M. Araujo, A. L. Rosa and R. Ahuja, Water adsorption on ZnO(10 $\bar{1}$ 0): The role of intrinsic defects, *European Physics Letters* 97, 17014 (2012)

## References

1. C. Wöll, *Prog. Surf. Sci.* 82, 55 (2007)
2. O. Taratula, E. Galoppini, D. Wang, D. Chu, Z. Zhang, H. H. Chen, G. Saraf, Y. C. J. Lu, *Phys. Chem. B* 110, 6506 (2006)



**Figure 1:** (a)–(e), optimized geometries for 1/2 ML (monolayer) of MPA on ZnO ( $10\bar{1}0$ ) surfaces in the (a) MC mode, (b–d) BB (BB1 to BB3) modes; (e) bond lengths for BB2 in side view; (f) molecules in a (2x4) cell in the BB2 geometry, 1/4 ML aligned along  $[1\bar{2}10]$ , (g) 1/4 ML aligned along  $[0001]$ , and (h) 1/8 ML. The dashed lines show the surface unit cells used in the calculations. The ellipses in (f) and (g) show the four local (adsorption) complexes based on surface Zn-O dimers (see text). In the central panel, the arrows show the two in-plane directions for the top views; the colored spheres show the element names.

### Presentation at conferences

1. SPIE Conference on Oxide-based Materials and Devices III, San Francisco, January 22–26, 2012
2. Frontiers in Interface Science: Theory And Experiment, June 28–July 1, 2011, Berlin, Germany
3. Nano-Materials for Energy Conversion, February 14–15, 2011, Delmenhorst, Germany