

Deutsch-Französisches Doktorandenkollegium (DFDK) / Collège Doctoral Franco-Allemand (CDFA) „Statistische Physik komplexer Systeme“

Die statistische Physik komplexer Systeme stellt ein enorm weites Forschungsfeld dar, das sich über Quantenphänomene bis hin zum Konformationsverhalten von Biomolekülen erstreckt und daher die Anwendung unterschiedlicher theoretischer Grundlagen erfordert. Das Doktorandenkollegium soll in erster Linie eine enge Zusammenarbeit der Doktorandinnen und Doktoranden aus Leipzig und Nancy befördern. Indem wir die Kompetenz im Bereich der analytischen Theorie aus Nancy und die langjährige Erfahrung in hochentwickelter Computersimulation aus Leipzig zusammenbringen, verspricht unser seit Juli 2007 bestehendes Graduiertenkolleg einzigartige Ausbildungsmöglichkeiten in der Forschung dieser wichtigen Fachrichtung.

Nach erfolgreicher Begutachtung im Jahr 2010 wird das Doktorandenkollegium ab 2011 für weitere drei

Jahre fortgeführt werden. Insbesondere hat sich der Hochschulrat der Deutsch-Französischen Hochschule auf der Grundlage der Ergebnisse der Gutachter, die unserem Programm einen exzellenten und innovativen Charakter beschieden haben, dafür ausgesprochen, das Doktorandenkollegium durch zusätzliche attraktive Auslandsstipendien im Vergleich zur ersten Förderperiode deutlich stärker zu unterstützen.



Wolfhard Janke



Teilnehmer des DFDK (von links nach rechts): Professor Dr. Wolfhard Janke, Professor Dr. Malte Henkel (Nancy), Monika Möddel, Dr. Dragi Karevski (Nancy), Dr. Christoph Chatelain (Nancy), Sebastian Schöbl, Mario Collura (Nancy/Leipzig), Xavier Durang (Nancy).

Ausgewählte Projektgruppe

Teilchentransport per Ratscheneffekt

M. Aust et al.

In diesem von der DFG-Forschergruppe FOR877 kofinanzierten Projekt wird ein neuer Typ einer sogenannten Temperaturregelschicht vorgeschlagen und theoretisch sowie experimentell untersucht. Das System besteht aus eindimensionalen Nanoporen, deren Durchmesser periodisch, aber unsymmetrisch variiert (Sägezahnprofil). In den Poren befindet sich ein binäres Flüssigkeitsgemisch, das unterhalb einer kritischen Temperatur T_c Phasenseparation zeigt. Wird das thermische Gleichgewicht gestört, indem periodisch zwischen Temperaturen über und unter T_c gewechselt wird, so ist nach Curies Prinzip durch die gebrochene Symmetrie ein Strom der beiden Flüssigkeitskomponenten in jeweils unterschiedliche Richtungen zu erwarten. Dieses System wurde als kollektive Temperaturregelschicht mit entropischem Potential klassifiziert und bildet somit ein neuartiges Modell.

Stark vereinfachte Computersimulationen („Random Walks“) wurden durchgeführt, um Parameter für das Porenprofil zu finden, die den resultierenden Strom maximieren. Die Simulationen für einzelne Parametrisierungen zeigten, dass ein kleiner Strom zu erwarten ist. Der Effekt blieb in den Simulationen allerdings zu klein, um daraus die optimale Geometrie bestimmen zu können.

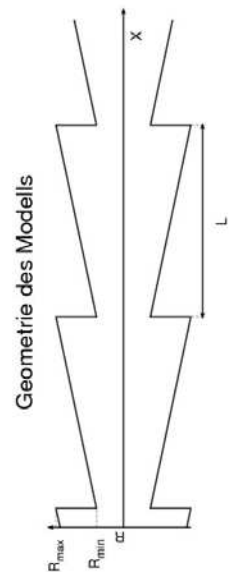


Abb.: Geometrie des vorgeschlagenen Ratschenmodells. Die charakteristischen Parameter sind die Porenradien R_{min} und R_{max} sowie die Segmentlänge L der dreidimensionalen Kanäle. In den Computersimulationen wurden $R_{min}=1$, $R_{max}=5$ und $L=20$ (in natürlichen Einheiten) gesetzt.

Ausgewähltes Promotionsprojekt

Tieftemperaturverhalten minimalistischer Polymermodelle

Stefan Schnabel

Die Dissertation behandelt eine sehr anspruchsvolle Themenstellung im Grenzgebiet zwischen Statistischer Physik, Biophysik und Computational Physics, wofür eine souveräne Beherrschung moderner Simulationsverfahren Voraussetzung ist. Die von Herrn Schnabel geschickt weiterentwickelten Methoden ermöglichen es, Fragestellungen im Zusammenhang mit Polymeren erfolgreich zu behandeln, die an der Grenze des derzeit numerisch Machbaren liegen. So kann er z.B. experimentell beobachtete Faltungseigenschaften von Proteinen durch Computersimulationen sehr gut verstehen. Und auch bei seinen Untersuchungen der Kristallbildung einzelner Polymere beweist Herr Schnabel mit der Identifizierung geometrischer Grundzustandsstrukturen (Ikosaeder mit Mackay oder Anti-Mackay Hüllen, Tetraeder, Dekaeder usw.) und „magischer“ Kettenlängen, dass er schon jetzt zum engsten Kreis der weltweiten Experten auf diesem Gebiet der Computersimulationen gehört.

Auswahl Veröffentlichungen

- S. Schnabel, M. Bachmann, and W. Janke, Two-State Folding, Folding Through Intermediates, and Metastability in a Minimalistic Hydrophobic-Polar Model for Proteins, *Phys. Rev. Lett.* 98, 048103-1-4 (2007).
- S. Schnabel, M. Bachmann, and W. Janke, Identification of Characteristic Protein Folding Channels in a Coarse-Grained Hydrophobic-Polar Peptide Model, *J. Chem. Phys.* 126, 105102-1-6 (2007).
- S. Schnabel, T. Vogel, M. Bachmann, and W. Janke, Surface Effects in the Crystallization Process of Elastic Flexible Polymers, *Chem. Phys. Lett.* 476, 201-204 (2009).
- S. Schnabel, M. Bachmann, and W. Janke, Elastic Lennard-Jones Polymers meet Clusters - Differences and Similarities, *J. Chem. Phys.* 131, 124904-1-9 (2009).
- S. Schnabel, W. Janke, and M. Bachmann, Advanced Multicanonical Monte Carlo Methods for Efficient Simulations of Nucleation Processes of Polymers, Athens/Leipzig/Jülich preprint (September 2010), submitted to *J. Comp. Phys.*