



Carbonchemie am HITS: enormes Potenzial

Neue Juniorgruppe „Computational Carbon Chemistry“ am HITS forscht an Graphen, einem der vielversprechendsten Materialien der Zukunft. Gruppenleiterin Dr. Ganna Gryn'ova und ihr Team entwickeln am Computer Modelle und Werkzeuge für Anwendungen in der metallfreien Katalyse und molekularen Elektronik.

Dr. Ganna Gryn'ova ist die Leiterin der neuen HITS-Juniorgruppe „Computational Carbon Chemistry“ (CCC), die jetzt ihre Arbeit aufnimmt. Die Gruppe arbeitet mit den neuesten Methoden der Computerchemie, um organische Materialien zu erforschen und auf ihre praktische Anwendung hin zu untersuchen. Sie konzentriert sich dabei auf Materialien, die auf Graphen basieren. Diese weisen gegenüber bisher hauptsächlich verwendeten anorganischen Stoffen eine Reihe von Vorteilen auf: Sie sind biokompatibel, das heißt weniger umweltschädlich, sehr variabel in ihrer Struktur, extrem biegsam und besitzen hervorragende elektronische und optische Eigenschaften. Die Gruppe entwickelt computergestützte Modelle für die Gestaltung und die detaillierte Untersuchung von neuen graphen-basierten Materialien und Geräten, die in der metallfreien Katalyse und molekularen Elektronik Anwendung finden. Die Wissenschaftler befassen sich mit Mechanismen der carbokatalytischen Zersetzung von Umweltschadstoffen, sie entwickeln Konzepte zur Katalyse innerhalb molekularer Brücken und entwerfen molekulare Sensoren für Umweltschadstoffe und spinpolarisierte molekulare Brücken mit Graphenelektroden.

Ganna Gryn'ova studierte Chemie an der Oles Honchar National University Dnipro, Ukraine und promovierte in theoretischer Chemie an der Australian National University, Canberra. Danach arbeitete sie als Postdoc an der École polytechnique fédérale de Lausanne, Schweiz. 2016 erhielt Ganna Gryn'ova das „Marie Skłodowska-Curie Actions Individual Fellowship“ von der Europäischen Kommission. „Wir freuen uns sehr, Ganna als neue Juniorgruppenleiterin zu begrüßen“, sagt HITS-Institutsprecher PD Dr. Wolfgang Müller. „Sie ist eine ausgezeichnete Wissenschaftlerin und exzellente Kommunikatorin, die in einem vielversprechenden Forschungsgebiet arbeitet.“ Mit der neuen Juniorgruppe CCC arbeiten nun elf Forschungsgruppen am HITS.



HITS@Explore Science 2019: „Im Lauf der Zeit“ – Auch in diesem Jahr nimmt das HITS an „Explore Science“ teil, den naturwissenschaftlichen Erlebnistagen der Klaus Tschira Stiftung im Mannheimer Luisenpark. Vom 22.05. bis 26.05.2019 bieten die HITS-Köpfe aus fünf Gruppen Mitmachstationen rund um das diesjährige Thema „Zeit“ an, unter anderem eine sogenannte Brachistochrone-Rollbahn.



HITS-Forscher neuer Redakteur bei „Monthly Weather Review“

Seit Januar 2019 ist **Dr. Sebastian Lerch**, Mathematiker aus der Computational Statistics Group (CST) am HITS, assoziiertes Mitglied des Editorial Board der „Monthly Weather Review“, einer renommierten meteorologischen Fachzeitschrift, die von der Amerikanischen Meteorologischen Gesellschaft herausgegeben wird. „Sebastian hat seine Doktorarbeit erst vor zwei Jahren beendet“, so CST-Gruppenleiter **Prof. Tilmann Gneiting**. „Dies zeigt den Erfolg unserer Bemühungen, ein interdisziplinäres Forschungsumfeld für junge Wissenschaftler am HITS zu schaffen, die am Anfang ihrer Karriere stehen“.



Gräter und Strube neue Marsilius-Fellows an der Universität Heidelberg

Die beiden HITS-Gruppenleiter **Prof. Frauke Gräter** (MBM) und **Prof. Michael Strube** (NLP) sind zu Fellows in das Marsilius-Kolleg der Universität Heidelberg berufen worden. Sie werden von April 2019 bis März 2020 gemeinsam mit der Anglistin Prof. Vera Nünning der Frage nachgehen, ob wissenschaftliche Fachartikel gerade dann vermehrt wahrgenommen und zitiert werden, wenn sie verständlich, ansprechend oder gar unterhaltsam geschrieben wurden. Das Marsilius-Kolleg der Universität Heidelberg schlägt wissenschaftliche Brücken zwischen den Wissenschaftskulturen am Standort Heidelberg. Durch wissenschaftliche Gespräche und gemeinsame Projekte sollen die Verständigung und Zusammenarbeit zwischen den Disziplinen gefördert werden. „Dieser interdisziplinäre Ansatz harmonisiert hervorragend mit unserem Motto 'Think Beyond the Limits!'“, so HITS-Institutsprecher **PD Dr. Wolfgang Müller**.

Neue MitarbeiterInnen und GastwissenschaftlerInnen

CCC: Dr. Ganna Gryn'ova, Gruppenleiterin; **CME:** Paula Breitling, Masterandin; **Communications:** Angela Michel, Mitarbeiterin; **DMQ:** Prof. Jiawei Zhang, Gastwissenschaftler; **ITS:** Christian Zimmermann, Mitarbeiter; **MBM:** Paula Weidemüller, Masterandin; **MCM:** Lorenzo Fabbri, Masterand / Philip Ullmann, Bachelorand; **NLP:** Haixia Chai, Promotionsstipendiatin; **PSO:** Dr. Róbert Andrásy, Postdoc

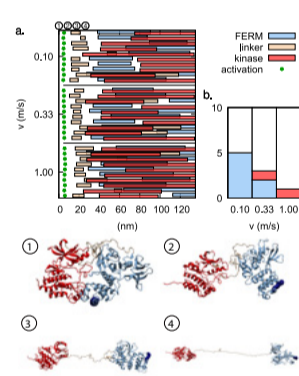
HITS Gruppen (04/2019)

Astroinformatics (AIN), Computational Carbon Chemistry (CCC), Computational Molecular Evolution (CME), Computational Statistics (CST), Data Mining and Uncertainty Quantification (DMQ), Groups and Geometry (GRG), Molecular Biomechanics (MBM), Molecular and Cellular Modeling (MCM), Natural Language Processing (NLP), Physics of Stellar Objects (PSO), Scientific Databases and Visualization (SDBV).



„PINK“: ein cleveres digitales Werkzeug für die Astronomie

Die Astroinformatics-Gruppe hilft Astronomen, die rasch wachsende Datenmenge mit Methoden aus der Informatik besser zu analysieren – mit digitalen, nutzerfreundlichen Werkzeugen. Eines dieser Tools ist „PINK“, das Kernstück einer explorativen Methode zur Analyse großer und komplex strukturierter Datensätze. Es unterstützt Astronomen dabei, Morphologien von Galaxien im Radiowellenlängenbereich besser zu verstehen. „PINK“, ein Akronym für „Parallelized rotation and flipping INvariant Kohonen maps“, wurde von Gruppenleiter **Dr. Kai Polsterer** und seinem Team in enger Zusammenarbeit mit **Dr. Bernd Doser** von der IT Services Gruppe entwickelt. Kürzlich erschien eine neue Version. „PINK“ wird für die Vorläufer des Square Kilometer Array (SKA) Teleskops in Afrika und Australien genutzt. Und auch beim Low Frequency Array (LOFAR), einem supercomputergetriebenen Radioteleskop, kommt die Methode zum Einsatz.



Schlüsselenzym: Verbindliche Kräfte

Um neue Wege zur Prävention von Tumor-Metastasen zu entwickeln, muss zunächst deren Entwicklungsprozess aufgeklärt werden. Die fokale Adhäsionskinase (FAK) ist ein Schlüsselenzym in der Signalkaskade, die zu Ausbreitung und Metastasierung von Tumoren führt. Dadurch wird sie zur idealen Zielstruktur für die Krebstherapie. HITS-Gruppenleiterin **Prof. Frauke Gräter** (Molecular Biomechanics) und ihr Team haben jetzt gemeinsam mit ihren Kooperationspartnern am CNIO Madrid und der LMU München den Aktivierungsprozess eines der beteiligten Schlüsselenzyme aufgeklärt. Die Studie wurde in den Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America (PNAS) publiziert.

Als Signalprotein reguliert die FAK entscheidende Prozesse einer Zelle: Adhäsion, Migration und Zelltod. Die Kinasekomplexe liegen auf der Innenseite der Zellwand als Teil der sogenannten fokalen Adhäsionsstellen. Diese sind sozusagen die Füße der Zelle. Die HITS-Forscher simulierten diesen Prozess mithilfe von High Performance Computern für eine vollständige dynamische Ansicht. „Wir haben erfolgreich die wichtigen Schritte der FAK-Aktivierung dargestellt“, so Frauke Gräter. „Wir konnten zeigen, dass dieses Schlüsselenzym nicht nur durch Kraft aktiviert wird, sondern diese Aktivität auch lange beibehalten kann, selbst wenn es sehr langgestreckt wird.“ Diese Erkenntnisse über die Mechanismen eines Schlüsselenzyms für die Metastasierung von Tumoren eröffnen neue Möglichkeiten für zukünftige Krebstherapien.

Structural and mechanistic insights into mechanoactivation of Focal Adhesion Kinase. Bauer MS, Baumann F, Daday C, Redondo P, Durner E, Jobst MA, Milles LF, Mercadante D, Pippig DA, Gaub HE, Gräter F, Lietha D. PNAS, 2019, doi 10.1073/pnas.1820567116.



Kerstin Hoppenhaus: „Ich habe viel über Daten gelernt.“

Kerstin Hoppenhaus versteht etwas von Timing. Schon nach dem zweiten Klingeln ist sie am Telefon: „In zehn Minuten muss ich weg – zu einem Interview.“ Drei Monate nach dem Ende ihres Aufenthalts als Journalist in Residence am HITS ist die Wissenschaftsjournalistin längst wieder im Alltag angekommen. „Ich arbeite gerade an einer Geschichte über genetische Ressourcen und die bedrohten ‚wildern‘ Verwandten von Nutzpflanzen.“

Seit 2005 arbeitet Kerstin Hoppenhaus als freie Regisseurin für Dokumentationen, Forschungsfilm und Online-Projekte. Zuvor studierte sie Biologie in Mainz, Tübingen, Lyon und Jena sowie Regie an der Filmakademie Baden-Württemberg. Kerstin Hoppenhaus wurde für ihre Projekte mit zahlreichen Preisen ausgezeichnet, unter anderem mit dem Peter Hans Hofschneider Recherchepreis für Wissenschafts- und Medizinjournalismus. Die HITS-Jury aus Wissenschaftsjournalisten und Wissenschaftlern wählte sie aus Bewerbern aus sechs Kontinenten als „Journalist in Residence“ für das Jahr 2018 aus.

Woran erinnert sie sich, wenn sie an ihre Zeit am HITS denkt? „Ich bin immer noch überrascht davon, wie schnell die sechs Monate vergangen sind.“ Sie kam mit dem Ziel ans Institut, das Zusammenspiel von Wissenschaft und Daten besser zu verstehen und daraus wenn möglich neue mediale Formate über das Fernsehen hinaus zu entwickeln. „Ich habe sehr viel Neues erfahren und viel über Daten gelernt, zum Beispiel über graphische Prozessoren und maschinelles Lernen“, erzählt sie. „Da sind schon einige Groschen gefallen.“ Besonders intensive Gespräche hat sie mit der Chemikerin Frauke Gräter und dem Computerlinguisten Michael Strube geführt, die beide an einem interdisziplinären Projekt über die Wirkung von Sprache in lebenswissenschaftlichen Publikationen arbeiten – mit maschinellen Lernmethoden. Kerstin Hoppenhaus bot während ihres Aufenthalts ein sehr gut besuchtes internes, interaktives Seminar an, zur Kommunikation von Komplexität und Unschärfe im Internet und einen öffentlichen Vortrag mit dem Titel „Gibt es ein Leben nach dem Fernsehen?“ Sie nutzte ihren Aufenthalt auch, um andere Heidelberger Institute, das KIT in Karlsruhe sowie Kollegen beim SWR in Baden-Baden zu besuchen. Ganz „nebenbei“ entstanden auch einige Projektideen: Mit Vincent Heuveline erarbeitete sie eine Projektskizze für ein modulares Tutorial im Bereich der Künstlichen Intelligenz. „Ich würde auch gerne eine Interviewreihe über ‚Error logs‘, also Fehler in der Datenforschung entwickeln.“ Ein Projekt hatte sie schon vor ihrem Aufenthalt geplant: die „Unkenpostille“, ein hyperlokales Wissenschaftsmagazin in ihrer Wahlheimat Uckermark, das sie gemeinsam mit den Anwohnern gestaltet. „So, nun muss ich los“, sagt Kerstin Hoppenhaus. Die zehn Minuten am Telefon sind um, die Frau versteht etwas von Timing.

Impressum | Dr. Peter Saueressig (V.i.S.d.P), saueressig@h-its.org, Tel. +49 6221 533 245
Fotos: HITS, Sandip De, Gülay Keskin | www.h-its.org



NO 34 / 04-2019

Heidelberg Institute for
Theoretical Studies



THE
CHARTS