

femto

Das DESY-Forschungsmagazin – Ausgabe 01115



ZOOM

BIG DATA

Was bringt die
große Datenflut?

Mondsüchtig

Forscher spähen einer bizarren
Gezeitenmücke ins Auge

Geblitzt

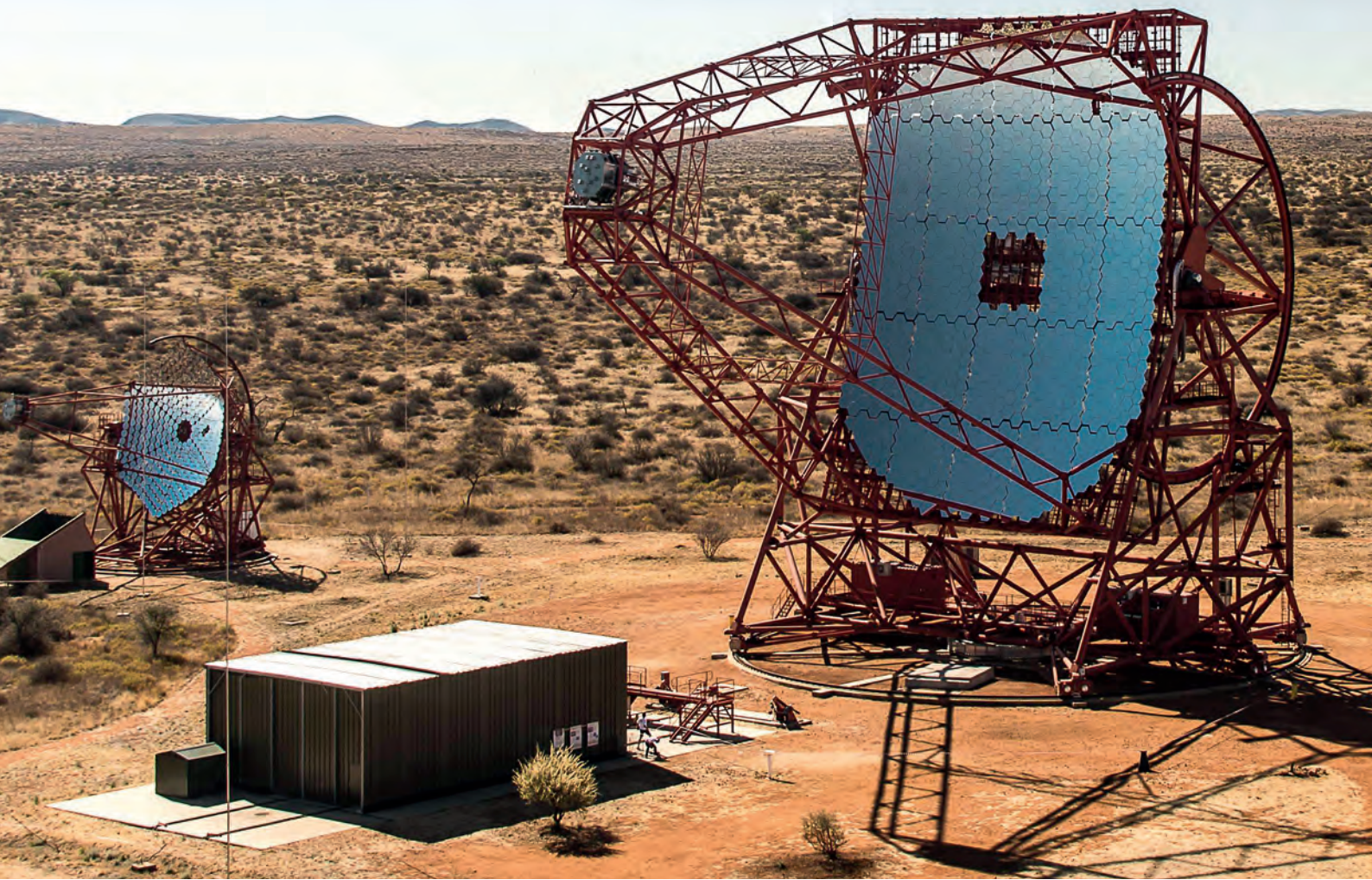
Freie Nanopartikel
erstmal in 3D

Superzeitlupe

Magnetspeicher
bei der Arbeit



femtoskop



In der Wüste von Namibia fahndet das Gammastrahlen-Observatorium H.E.S.S (High Energy Stereoscopic System) nach Quellen hochenergetischer Strahlung im Weltall. Gammastrahlung entsteht, wenn Teilchen in kosmischen Objekten extrem beschleunigt werden und mit Gas oder Licht in ihrer Umgebung wechselwirken. Das Team von H.E.S.S. hat nun eine neue Klasse von Gammastrahlenquellen entdeckt: eine sogenannte Superschale. Wahrscheinlich gleich mehrere Supernova-Explosionen und starke Sternenwinde

Weltall an Wüste



Bild: DESY

haben zu der Bildung von „30 Dor C“ geführt, einem 270 Lichtjahre großen, schalenförmigem Gebilde, das sich als Quelle extrem energiereicher und intensiver Gammastrahlung erwies. Insgesamt 210 Stunden haben die Astroteilchenphysiker die Spiegelteleskope auf die Großen Magellanschen Wolke gerichtet, eine Nachbargalaxie der Milchstraße, in der besonders viele Sterne neu entstehen und am Ende ihres Lebens als Supernova explodieren. Dabei entdeckten sie neben der Superschale noch zwei weitere extrem leuchtstarke Gammastrahlenquellen: den

Pulsarwindnebel des stärksten je beobachteten Pulsars und einen intensiv strahlenden Supernova-Überrest. „Das zeigt, was für ein riesiges Entdeckungspotenzial in der Nutzung kombinierter Systeme von Spiegelteleskopen steckt“, unterstreicht H.E.S.S.-Sprecher Christian Stegmann von DESY. Für die weitere Zukunft planen die Wissenschaftler das Cherenkov Telescope Array (CTA), das ab 2020 noch empfindlichere und höher aufgelöste Bilder im Gammalicht liefern soll.

Science, 2015; DOI: 10.1126/science.1261313

Inhalt



ZOOM

BIG DATA

Was bringt die große Datenflut?

Seite 14–31

Schon längst geben Kilobyte und Megabyte nicht mehr den Ton an. In Tausenderschritten schreiten die Datenmengen voran: Gigabyte sind Standard, Terabyte nicht ungewöhnlich und auch Petabyte kommen schnell zusammen. Allein im DESY-Rechenzentrum lagern elf Petabyte an wissenschaftlichen Daten – also elf Millionen Gigabyte oder elf Billionen Byte. Immer mehr Daten werden immer schneller gesammelt und ausgewertet. Big Data lautet das Schlagwort, das neue Erkenntnisse und neue Herausforderungen gleichermaßen beinhaltet.



CAMPUS

- 06 Mondsüchtig**
Forscher spähen einer bizarren Gezeitenmücke ins Auge
- 10 Im Takt der Femtosekunden**
Der weltweit erste optisch synchronisierte Freie-Elektronen-Laser
- 36 Superzeitlupe**
Magnetspeicher bei der Arbeit
- 38 Geblitzt**
Freie Nanopartikel erstmals in 3D
- 41 Erreger im Röntgenblick**
Forscher untersuchen Viren und lebende Bakterien

ZOOM

- 16 Tera, Peta, Exa**
Auf Datenbergen unterwegs zu den Gipfeln der Erkenntnis
- 26 Big Data für mehr Dynamik**
Leibniz-Preisträger Henry Chapman „filmt“ Biomoleküle bei der Arbeit
- 28 „Größe allein macht keinen Sinn“**
Interview mit Volker Gülzow, IT-Leiter von DESY
- 30 Datengiganten**
Wo Billionen Byte entstehen



02 femtoskop
Weltall an Wüste

13 femtopolis
Auf den Kaktus gekommen

37 femtomenal
Kälter als das Universum

42 femtocartoon
Sind wir reif für die Wissenschaft?

SPEKTRUM

Forschung kurzgefasst

32 Katalysator-Nahaufnahme

32 Moleküle schlagen unendlich Rad

33 Elektronen-Billard

33 Nanopartikel für Solarzellen

34 Tuberkulose-Puzzle

34 Supermagnetfeld auf engstem Raum

35 Van Goghs verblissenes Orange

35 Zeitlupe für Biomoleküle



Mondsüchtig

Forscher spähen einer bizarren Gezeitenmücke ins Auge

Kurz nach dem Vollmond taucht an Europas Gezeitenküsten ein erstaunliches Insekt auf: Wie auf einen geheimen Befehl schlüpfen dann in den abendlichen Stunden des Niedrigwassers die Mondsüchtigen Gezeitenmücken alle gleichzeitig und beginnen einen kurzen Paarungstanz. Denn diese Mücken leben als reife Insekten nur etwa eine Stunde. In dieser Zeit muss das Männchen ein Weibchen finden, ihm aus der Puppenhülle helfen und es befruchten. Dann stirbt es. Das Weibchen legt vor seinem Tod noch schnell ein röhrenförmiges Eigelege, dann ist auch seine Lebenszeit vorbei.

Was nach reichlich komplizierten Paarungsgewohnheiten klingt, hat biologisch durchaus seinen Sinn. Die synchronisierte Fortpflanzung macht es den Mücken in ihrem harschen Lebensraum leichter, einen Geschlechtspartner zu finden. Den optimalen Zeitpunkt markiert dabei der Vollmond, wenn die vereinten Kräfte von Sonne und Mond für besonders starke Gezeiten sorgen, sogenannte Springtiden. Dann steigt nicht nur die Flut besonders hoch, zur Ebbe fällt auch besonders viel von der Algenzone trocken, in der die Mückenlarven leben.

Die Frage lautet: Wie sehen die Larven den Vollmond?

Doch woher weiß die Larve, wann die Springtiden kommen? „Die Mücke hat vier verschiedene Uhren: eine Tagesuhr, eine Monduhr, eine Jahresuhr und eine Gezeitenuhr“, erläutert die Chronobiologin Gerta Fleissner von der Goethe-Universität in Frankfurt am Main. „Es gibt dabei unterschiedliche Signale, um die Uhren zu synchronisieren, die Tide, den Mondschein, die Dämmerung und so weiter.“ Die Tagesrhythmen sind sehr gut untersucht. Der viel längere Mondrhythmus ist dagegen deutlich aufwendiger zu analysieren.

Die Zuckmücke mit dem wissenschaftlichen Namen *Clunio marinus* durchläuft vier Larvenstadien. Im dritten Stadium muss die Larve den Vollmond sehen, um sich zu häuten und zu verpuppen, also das nächste und letzte Larvenstadium zu erreichen. Das Mondlicht löst diesen Entwicklungsschritt aus und legt damit fest, wann das Insekt aus der Puppe schlüpft. „Die Frage lautet: Wie sehen die Larven den Vollmond?“, sagt Gerta Fleissners Ehemann und Forscherkollege Günther Fleissner.

Das Mückenaugen als Belichtungsmesser

Die Hypothese des Forscherpaares: Die Mückenlarve vergleicht von Nacht zu Nacht den Zeitpunkt der maximalen Helligkeit, sie analysiert also die Dynamik des Mondlichts. „Was das Spannende dabei ist: Die Mücke benötigt ein Auge, das nicht simultan, sondern sukzessiv Kontraste misst“, betont Günther Fleissner. „Wir haben festgestellt, dass die Augen in der Zeit, wenn der Mond erwartet wird, ihre Funktion ändern“, berichtet er. „Das Auge funktioniert in diesem Stadium wie ein Belichtungsmesser. Das heißt, es hat seine biologische Funktion geändert. Und dabei ist es empfindlicher geworden. Diese geänderte Funktion bleibt etwa eine Woche bestehen.“ Dazu müssen sich die Pigmente im Auge verändern.

Diese Beobachtung ist ungewöhnlich, denn die normalen Schirmpigmente der Insekten, die sogenannten Ommochrome, verändern sich nicht. Also muss es sich im Auge der Mückenlarve um ein anderes Pigment handeln. Die Literaturrecherche führte die Fleissners auf die Spur von Melanin. Das weit ver-

breitete Pigment Melanin, das auch in der menschlichen Haut vorkommt und dort beispielsweise für sommerliche Bräune sorgt, enthält im Gegensatz zu Ommochromen verschiedene Metalle, die sich besonders gut im Röntgenlicht zeigen. Hier kommt DESYs ultrahelle Röntgenlichtquelle PETRA III ins Spiel. „Wir haben die Mücken mit dem feinen Röntgenstrahl abgerastert, und haben an den Positionen der Augen extrem hohe Metallgehalte detektiert“, berichtet DESY-Forscher Gerald Falkenberg, Leiter der Messstation, an der die Untersuchung stattfand. „Auf diese Weise ließ sich nachweisen, dass es sich tatsächlich um Melanine handelt.“

Dem Melanin auf der Spur

Melanin existiert in unterschiedlichen Formen, darunter das dunkle Eumelanin und das helle Phaeomelanin. „Es sieht so aus, als hätte die *Clunio* einen Weg gefunden, das eine Melanin in das andere umzuwandeln“, erläutert Gerta Fleissner. „Das ist allerdings sehr überraschend, da die Entstehung der beiden Proteine auf unterschiedlichen Prozessen beruht. Normalerweise wird nur eines von beiden Melaninen hergestellt.“ Bei der Veränderung der Transparenz scheinen Metalle eine zentrale Rolle zu spielen.

Die Mücke hat vier verschiedene Uhren: eine Tagesuhr, eine Monduhr, eine Jahresuhr und eine Gezeitenuhr

Dank der hohen räumlichen Auflösung von PETRA III konnten die Frankfurter Forscher einzelne sogenannte Melanosome in den Mückenaugen untersuchen, das sind die Ansammlungen von Melanin in winzigen Membranbläschen. Dabei ließen sich noch Details von einem halben millionstel Meter (0,5 Mikrometer) Größe erkennen. Mit der Mondphase ändern sich demnach die Konzentrationen und die Verteilung von Kalzium, Kupfer, Zink, Nickel und anderen Metallen in den Melanoso-



Bilder: Alfred-Wegener-Institut

men. Diese Beobachtung spricht für die Hypothese, dass die beiden Proteine nebeneinander in den Pigmentkörnern vorkommen, allein die relative Menge des hellen und des dunklen Melanins bestimmt die Transparenz des Schirmpigments.

Forschung für die Biomedizin

Diese Konzentrationsänderungen gehen mit der beobachteten Funktionsänderung einher: Während die Larvenaugen in dunklen Neumondnächten fast komplett undurchsichtig sind, werden sie um den Vollmond herum transparent. So werden sie von einem abbildenden Auge, das wie eine Lochkamera Licht nur aus einer Richtung einfallen lässt, zu einem Helligkeitsmesser.

Die genaue Untersuchung dieses Prozesses hilft nicht nur, den bizarren Lebenszyklus der Mondsüchtigen Gezeitenmücke besser zu verstehen. „Für die Melanisierung gibt es großes Interesse in der Biomedizin, weil die Melanine Radikalfänger sind, und weil die Melanisierung eine entscheidende Rolle bei neurodegenerativen Erkrankungen spielt“, betont Gerta Fleissner. „Und wir glauben, dazu kann uns die *Clunio* einiges sagen.“

In Deutschland gibt es nur eine Felseninsel: Helgoland. Besonders im Westen und Nordosten der Insel fallen große Brandungsterrassen im Wechsel der Gezeiten trocken. Hier lebt eine Vielzahl von Algen, Schnecken, Krebsen und anderen Tieren, die sich an das wechselhafte Dasein im Felswatt angepasst haben. Im Geflecht fädiger Algen und in den Wurzelkrallen großer Tange lebt hier auch die Mondsüchtige Gezeitenmücke.

Im Takt der Femtosekunden

Die Tatsache klingt eher nüchtern: Die neuen Freie-Elektronen-Röntgenlaser erzeugen extrem intensive Lichtblitze auf der Zeitskala von Femtosekunden. Femto? Das ist die Einheit, die auf Milli, Mikro, Nano und Piko folgt und sich unserem Vorstellungsvermögen komplett entzieht. Eine Femtosekunde ist der milliardste Teil einer Sekunde – unvorstellbar kurz, wenn man bedenkt, dass unser menschliches Reaktionsvermögen etwa eine Zehntelsekunde beträgt. In dieser einen Zehntelsekunde sind 100 Billionen Femtosekunden vergangen. Auf der Skala von Femtosekunden laufen chemische Reaktionen ab und bewegen sich Biomoleküle. Das macht Femtosekunden so interessant für die Forscher. Und das macht die neuen Röntgenlaser so spektakulär: Ihre hochintensiven Lichtblitze ermöglichen Belichtungszeiten im Bereich von Femtosekunden. Damit lassen sich künftig ganze Filme von biochemischen Prozessen oder dem Verhalten von Nanomaterialien drehen.

Doch um dieses Ziel zu erreichen, brauchen die Experimentatoren nicht nur Röntgenlaserlicht im Femtosekun-

dentakt – die ganze komplexe Anlage muss ebenfalls mit einer Präzision im Bereich von Femtosekunden synchronisiert sein. Um das zu erreichen, haben die Entwickler um Holger Schlarb und Sebastian Schulz von DESY und Adrian Cavaliere vom Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie ein rein optisches System entwickelt, das alle Komponenten von DESYs Röntgenlaser

Das menschliche Reaktionsvermögen beträgt etwa eine Zehntelsekunde. In dieser sind 100 Billionen Femtosekunden vergangen.

FLASH mit einer bislang unerreichten Präzision aufeinander abstimmt. Damit ist FLASH der weltweit am genauesten synchronisierte Freie-Elektronen-Röntgenlaser.

Das optische System erlaubt eine rund zehnfach höhere Genauigkeit als die elektronischen Systeme, die üblicherweise zur Synchronisierung verwendet werden. „Damit können wir alle unabhängigen Beschleunigersysteme und externen

Versuchslaser bei FLASH mit einer Genauigkeit von 28 Femtosekunden synchronisieren“, erläutert DESY-Physiker Holger Schlarb, „das ist deutlich kürzer als die 90 Femtosekunden langen Röntgenlaserblitze“. Mit elektronischen Systemen lässt sich bestenfalls eine Synchronisierungsgenauigkeit von etwa 100 Femtosekunden erreichen – eine Limitierung, die das wissenschaftliche Potenzial der Freie-Elektronen-Röntgenlaser einschränkt.

Chemische Reaktionen filmen

Die neue Präzisionssynchronisierung stellt Röntgenlaserblitze mit stabil bleibenden Eigenschaften zum passenden Zeitpunkt bereit. „Das allein ist auf der Skala von Femtosekunden schon schwie-

Der Freie-Elektronen-Laser FLASH (rechts) ist insgesamt 300 Meter lang. Die Elektronen werden in den gelben Modulen beschleunigt.



Holger Schlarb hat das optische System mit entwickelt, das alle Komponenten von FLASH höchst präzise aufeinander abstimmt.

9

10

11

12

13

14

24

25

26

27

28

23

Bei FLASH lassen sich alle unabhängigen Beschleunigersysteme und externen Versuchslaser mit einer Genauigkeit von 28 Femtosekunden synchronisieren

MODUL 6

rig genug“, erläutert Schlarb, „doch die Experimentatoren brauchen noch mehr: zeitgleich eintreffende, unabhängige optische Laserpulse, die wir mit Lasersystemen in der FLASH-Experimentierhalle erzeugen.“ Mit einem solchen Laserblitz im Bereich des sichtbaren Lichtes werden die ultraschnellen Prozesse, die es zu filmen gilt, überhaupt erst ausgelöst. Das „Filmen“ von chemischen Reaktionen oder Phasenübergängen in Materialien besteht aus unzähligen Momentaufnahmen, die aneinandergereiht werden – ähnlich wie ein Daumenkino. Der optische Laserblitz löst also eine Reaktion aus und der Röntgenlaserblitz schießt

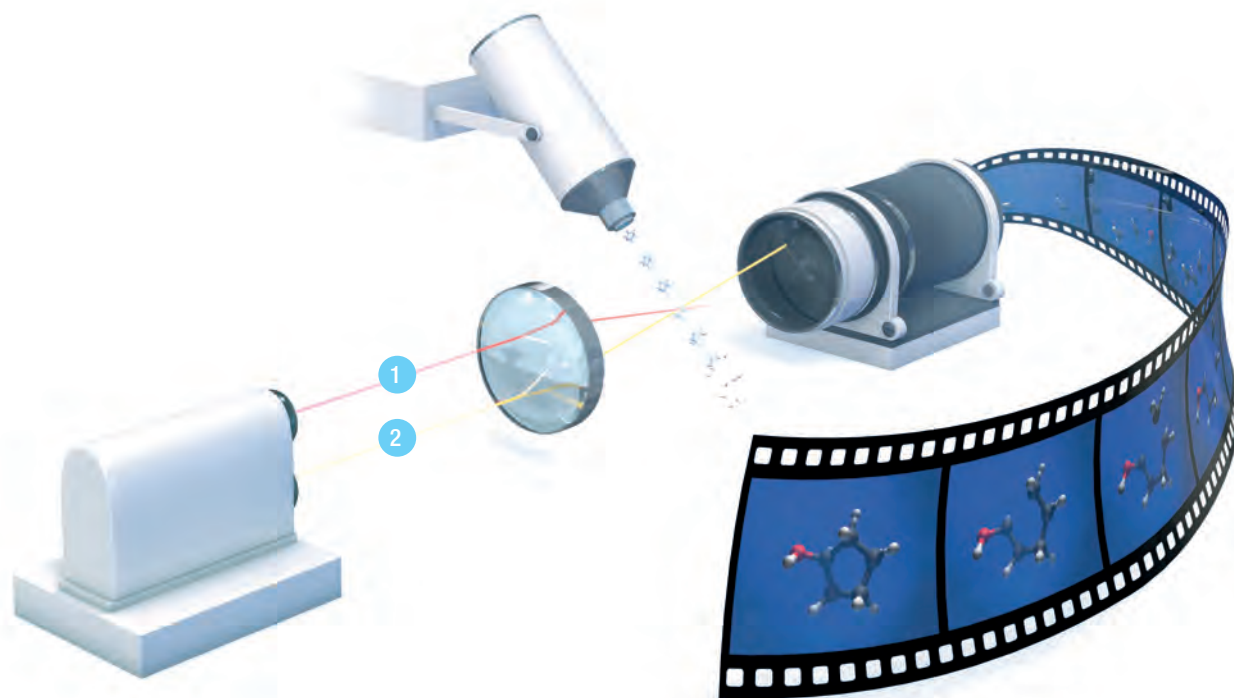
eine Momentaufnahme. Danach ist die Probe zerstört, und die Reaktion muss in einer frischen Probe erneut ausgelöst werden. Der Röntgenlaser blitzt jetzt zu einem etwas späteren Zeitpunkt der Reaktion – und so weiter. Ein aufwendiger Prozess, der nur funktioniert, wenn optischer Laser und Röntgenlaser extrem präzise aufeinander abgestimmt sind. Nur dann können die Schnappschüsse auch wirklich den Reaktionsverlauf mit einer Genauigkeit von Femtosekunden dokumentieren.

Um solche Untersuchungen mit höchstmöglicher Zeitauflösung durchführen zu

können, sollte der optische Laserpuls mit einer zeitlichen Präzision bereitgestellt werden, die nur ein Bruchteil der Röntgenlaser-Pulsdauer beträgt. Und genau dies leistet das erstmals bei FLASH demonstrierte optische Synchronisierungssystem. Dabei ist die Qualität der optischen Synchronisierung in erster Linie durch die Dauer der Röntgenlaserblitze begrenzt, so dass die Genauigkeit bei kürzeren Röntgenpulsen noch besser werden sollte. Eine so präzise Synchronisierung würde nicht nur ultraschnelle Experimente mit höchster Zeitauflösung ermöglichen, sondern auch neue Möglichkeiten für die Weiterentwicklung der Freie-Elektronen-Röntgenlaser eröffnen – insbesondere für den künftigen Europäischen Röntgenlaser European XFEL, der zurzeit vom DESY-Gelände bis ins benachbarte Schenefeld gebaut wird.

Nature Communications, 2015; DOI: 10.1038/ncomms6938

Optische Synchronisierung ermöglicht ultraschnelle Experimente



Molekulares Kino – wie filmt man eine chemische Reaktion?

Um den Ablauf einer chemischen Reaktion zu verfolgen, nutzen die Forscher unvorstellbar kurze Röntgenlaserblitze. Das Prinzip: Ein Lichtpuls (1) löst die chemische Reaktion aus. Kurz darauf erzeugt ein Röntgenlaserblitz (2) ein Bild, und ein Detektor nimmt auf, was bei der Reaktion passiert. Eine Serie solcher Schnappschüsse mit verschiedenen Zeitverzögerungen liefert einen „Film“ des Reaktionsablaufs.

femtopolis

Auf den Kaktus gekommen

Warum Stacheln im Hightech-Einsatz unschlagbar sind

In der großen Experimentierhalle der hochmodernen Röntgenstrahlungsquelle PETRA III reihen sich Hightech-Komponenten und Nachweisinstrumente der neuesten Generation aneinander. Die Büros sind zweckmäßig ausgestattet, kein überflüssiger Schnickschnack – nur auf einer Fensterbank steht ein kleiner grüner Kaktus. Hat sich hier ein Wissenschaftler auf das Dekorieren verlegt? Soll die pieksige Stachelkugel womöglich gar Behaglichkeit schaffen? Weit gefehlt: Auch Kakteen erfüllen hier einen ganz bestimmten Zweck. Die Forscher haben es auf die Stacheln abgesehen. Die sind als Probenhalter unschlagbar – je länger und spitzer, desto besser. Kakteenstacheln sind nicht nur billig und immer verfügbar – es sei denn, man schafft es, selbst eine genügsame Wüstenpflanze vertrocknen zu lassen – sie sind vor allem fast unsichtbar im Röntgenlicht, mit dem die Forscher ihre Proben untersuchen. Diese Proben besitzen meist eine kristalline Struktur, die das Röntgenlicht auf charakteristische Weise streut. Anhand solcher Streubilder können die Forscher die innere Struktur von Proteinen oder neuen Werkstoffen atomgenau berechnen.

Der organische Kohlenstoff in den Stacheln vieler Kakteenarten ist hingegen nicht kristallisiert und streut das intensive Röntgenlicht aus dem PETRA-Beschleuniger fast gar nicht. Daher wird das Streubild der Probe nicht verfälscht. Das ist besonders wichtig bei biologischen Proben, die ebenfalls nur schwache Streusignale liefern. Um die Struktur eines Biomoleküls genau zu analysieren, erzeugen die Forscher zunächst einen 10–20 Mikrometer großen Kristall aus den fraglichen Molekülen. Dieser wird unter dem Mikroskop mit einem winzigen Klebepunktchen auf der Stachelspitze befestigt. Da der Stachel zwar oben sehr spitz ist, aber unten breit und stabil, lässt sich die Probe nun fest und sicher vor dem Detektor platzieren und mit Röntgenlicht bestrahlen.



Eine Stahlnadel scheidet als Probenhalter ebenso aus wie eine dünne Glaskanüle, weil die Atome in ihren Kristallgittern das Röntgenlicht viel stärker streuen als biologische Materialien, und Glas außerdem zu brüchig ist. Auch handelsübliche Kohlenstofffasern taugen nicht. Sie streuen zwar nicht stark, sind aber zu dünn und flexibel, um die Probe sicher halten zu können. Daher haben sich die Kaktusstacheln bei den Experimentatoren durchgesetzt. Doch auch da gibt es Unterschiede. Nicht jeder Stachel ist geeignet: Manche sind zu dünn oder haben eine gekrümmte Spitze, andere haben Silikat eingelagert, das wiederum stärker streut.

Da hilft nur der Gang in den Baumarkt, wo es für kleines Geld ein ganzes Kakteensortiment zum Ausprobieren gibt. Bewährt haben sich Arten mit spitzen, langen und stabilen Stacheln. Ein kleines säulenförmiges Exemplar erwies sich als besonders geeignet und ist mittlerweile zur Hälfte entstachelt. Eine Zierde ist dieser Kaktus nicht mehr, aber die Wissenschaftler haben ihn trotzdem auch in der mehrmonatigen Messpause von PETRA III nicht vertrocknen lassen. Er gehört einfach dazu!



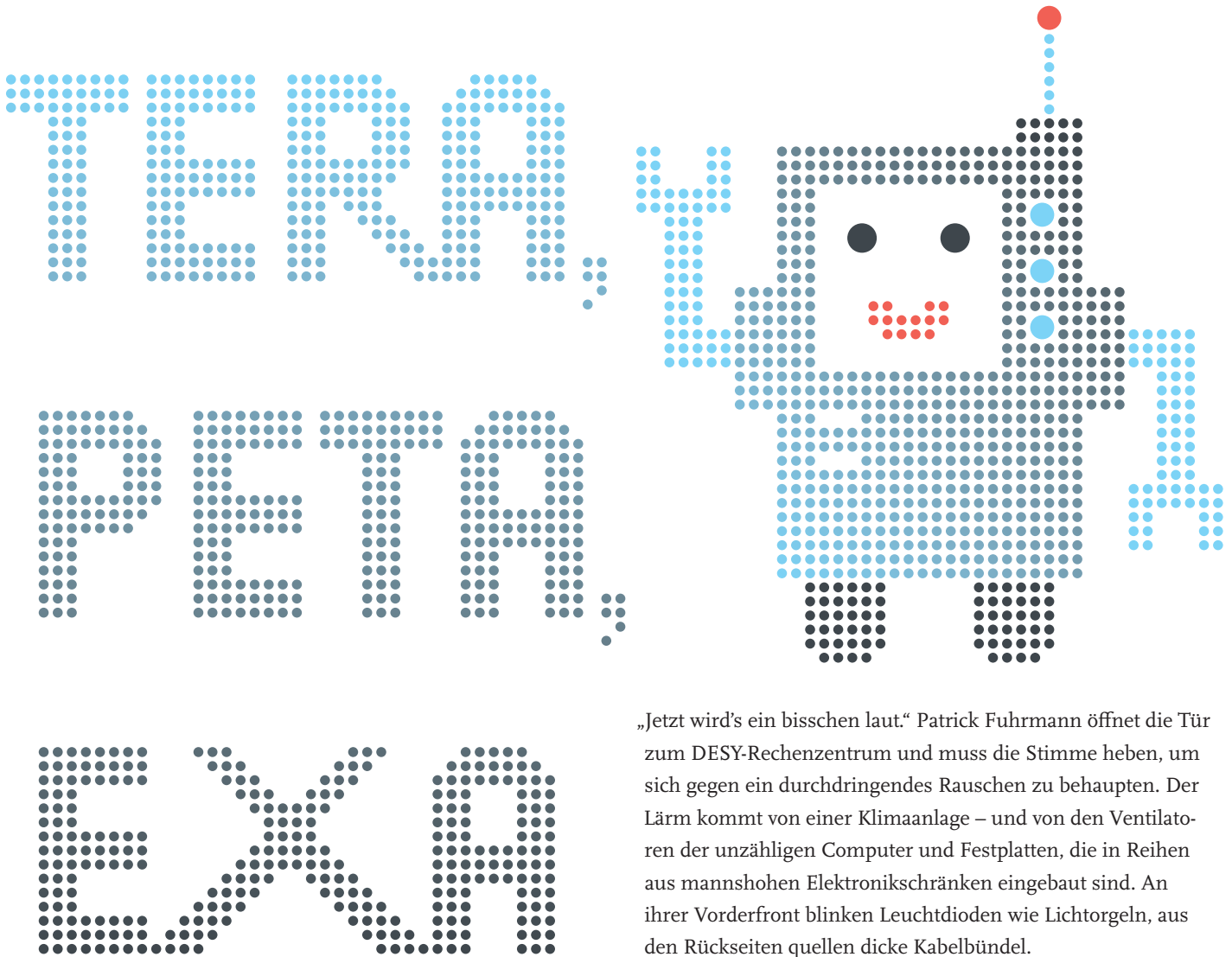
Auch DESY-Physiker Oliver Seeck ist auf den Kaktus gekommen.



ZOOM

Was bringt die große Datenflut?

Schon längst geben Kilobyte und Megabyte nicht mehr den Ton an. In Tausenderschritten schreiten die Datenmengen voran: Gigabyte sind Standard, Terabyte nicht ungewöhnlich und auch Petabyte kommen schnell zusammen. Allein im DESY-Rechenzentrum lagern elf Petabyte an wissenschaftlichen Daten – also elf Millionen Gigabyte oder elf Billionen Byte. Der weltgrößte Beschleuniger LHC liefert 25 Petabyte an Messdaten pro Jahr. Ganz zu schweigen von den gigantischen Datenströmen über soziale Netzwerke wie Facebook und Twitter. Immer mehr Daten werden immer schneller gesammelt und ausgewertet. Big Data lautet das Schlagwort dafür. In der Forschung ermöglichen klug genutzte Datenströme neue Erkenntnisse. Gleichzeitig sind die enormen Datenmengen in vielen Wissenschaftsbereichen selbst Gegenstand neuer Forschungsansätze. Die Gesellschaft steht vor großen Herausforderungen, wenn es um den Schutz sensibler persönlicher Daten geht.



„Jetzt wird’s ein bisschen laut.“ Patrick Fuhrmann öffnet die Tür zum DESY-Rechenzentrum und muss die Stimme heben, um sich gegen ein durchdringendes Rauschen zu behaupten. Der Lärm kommt von einer Klimaanlage – und von den Ventilatoren der unzähligen Computer und Festplatten, die in Reihen aus mannshohen Elektronikschränken eingebaut sind. An ihrer Vorderfront blinken Leuchtdioden wie Lichtorgeln, aus den Rückseiten quellen dicke Kabelbündel.

Auf Datenbergen unterwegs zu den Gipfeln der Erkenntnis



DESY-Physiker Patrick Fuhrmann jongliert mit großen Datenmengen.

Jetzt geht Fuhrmann in den hinteren Teil des Rechenzentrums zu einem Container groß wie eine Wohnung. „Das ist ein Roboter, der Daten auf Magnetbändern verwaltet“, erklärt der DESY-Physiker und zeigt auf eine Glasscheibe, die Einblick ins Containerinnere gewährt. Dort stecken Tausende von Bändern

in Regalen ähnlich wie in einer Bibliothek. Roboterarme rasen auf Spezi­alschienen hin und her, greifen sich Bänder aus den Fächern und transportieren sie zu Bandlaufwerken. „Unser Bandarchiv“, erläutert Fuhrmann. „Die Magnetbänder fungieren als Sicherheitsbackup, sollte mal eine unserer Festplatten kaputtgehen, sowie als Langzeitarchiv.“

Die Datenmengen, die hier im DESY-Rechenzentrum lagern, sind beträchtlich: Elf Petabyte an wissenschaftlichen Daten – also elf Millionen Gigabyte – sind auf mehreren tausend Festplatten abgelegt, etwa dieselbe Menge schlummert auf Band. Auch die Rechenpower ist beeindruckend. Rund 15 000 Prozessorkerne analysieren die Daten, das gesamte Jahr, rund um die Uhr. „Mit der Zeit ist das Aufkommen bei uns förmlich explodiert“, sagt Volker Gülzow, Leiter der IT-Abteilung von DESY. „Vor 15 Jahren waren es noch einige Dutzend Terabyte, das würde heute auf ein paar Festplatten der neuesten Generation passen.“ Jetzt, anno 2015, ist es nahezu das Tausendfache.

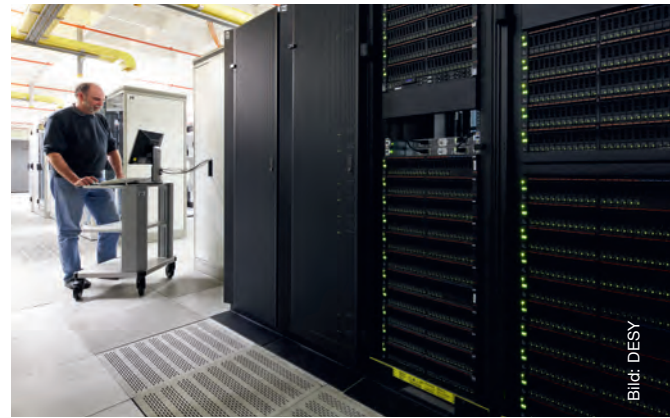
Die Datenschwemme im DESY-Rechenzentrum ist Symptom eines weltweiten Trends: Schätzungen zufolge verdoppelt sich das weltweite Datenvolumen alle zwei Jahre. Computer, Festplatten und Datenleitungen werden immer leistungsfähiger, mittlerweile können sie enorme Mengen an Bits und Bytes verarbeiten und speichern. Die Informationsströme übers Internet, insbesondere über soziale Netzwerke wie Facebook und Twitter, nehmen exponentiell zu.

Das weltweite Datenvolumen verdoppelt sich etwa alle zwei Jahre

Mithilfe von neuartigen, cleveren Algorithmen werten Unternehmen wie Google und Amazon diesen Datenwust aus und können dadurch ihre Kunden mit gezielter Werbung ansprechen. Geheimdienste durchforsten Berge von Kommunikation – in der Hoffnung, Terrorverdächtige und Staatsfeinde aufzuspüren. Das immer emsigere Sammeln und Auswerten von Informationen belegt die Fachwelt mit einem ebenso griffigen wie vagen Schlagwort – Big Data.

Datenberge in Genf

Auch in der Wissenschaft wachsen die Datenberge rasant. Der Hauptgrund: Die Sensoren, Spezialkameras und Detektoren, mit denen Forscher ihre Experimente beobachten, werden immer leistungsfähiger. Sie liefern höhere Auflösungen, schärfere Bilder und schnellere Messungen – und damit immer mehr Daten in immer kürzerer Zeit. Die Folge: Es wird immer schwieriger, die Daten zu übermitteln, zu speichern und zu analysieren.



„Mit der Zeit ist das Datenaufkommen bei uns förmlich explodiert“. Volker Gülzow, Leiter der IT-Abteilung von DESY.

Elf Petabyte an wissenschaftlichen Daten, also elf Millionen Gigabyte, lagern im DESY-Rechenzentrum

„Die alten Techniken reichen dazu nicht aus“, betont Gülzow. „Wir müssen neue Wege gehen.“ Zum einen braucht es innovative Konzepte bei Hardware und Software, um die Daten überhaupt zu erheben und zuverlässig zu speichern. Zum anderen sind schnelle Algorithmen zur Auswertung der Messungen gefragt. Um aus Bergen von Rohdaten wissenschaftliche Erkenntnisse herauszudestillieren, sind innovative, ausgefeilte Computerprogramme nötig.

Als Paradebeispiel gilt der größte Beschleuniger der Welt, der Large Hadron Collider (LHC) am Europäischen Teilchenforschungszentrum CERN in Genf. Eingebaut in einen 27 Kilometer großen Ringtunnel feuert er Wasserstoffkerne mit enormer Energie aufeinander, wobei neue, zuvor unbekannte Elementarteilchen entstehen können – wie das 2012 entdeckte Higgs-Boson. Allerdings sind die Versuche schwierig, und Entdeckungen können nur gelingen, indem die Forscher gewaltige Datenmengen sammeln.

Zum einen entsteht bei den hochenergetischen Kollisionen der Wasserstoffkerne nur selten ein Higgs-Teilchen – bei einem von zehn Milliarden Zusammenstößen. Zum anderen lässt sich der Teilchen-Exot nur indirekt aufspüren, denn das Higgs-Boson ist instabil und zerfällt unmittelbar nach seiner Erzeugung in unzählige andere Teilchen. Diese werden von haushohen Detektoren registriert und vermessen, und erst durch eine genaue Analyse extrem vieler dieser Teilchenspuren können die Fachleute sicher sein, Higgs-Teilchen in ihrem Beschleuniger erzeugt zu haben.



Im ATLAS-Detektor messen 150 Millionen Einzelsensoren 40 Millionen Mal pro Sekunde. Alle zusammen liefern pro Sekunde 1000 Terabyte an Rohdaten, gespeichert wird davon aber nur etwa ein Millionstel.

Konsequentes Aussortieren

Die Herausforderung beginnt schon bei der Datennahme: Die LHC-Detektoren bestehen aus Abermillionen Einzelsensoren, die pro Sekunde mehrere Millionen Mal Messsignale liefern – eine nicht zu bewältigende Datenflut. Allein ATLAS, einer der beiden großen LHC-Detektoren, erzeugt rund 1000 Terabyte pro Sekunde – in etwa der Inhalt von 500 handelsüblichen Computer-Festplatten.

Viel zu viel, um alles speichern zu können – schließlich läuft der LHC im Normalbetrieb rund um die Uhr. Doch ein Umstand kommt den Experten zur Hilfe: „Der Großteil der Daten ist für uns uninteressant“, sagt CERN-Physiker Michael Hauschild. „Denn bei den meisten Kollisionen entstehen Teilchen, die wir bereits kennen.“ Diese Daten brauchen die Forscher gar nicht erst zu speichern, sondern können sie durch eine ausgefeilte Elektronik direkt am Detektor eliminieren.

Nur eine von einer Million Kollisionen wird analysiert

„Bei ATLAS haben wir drei Filterstufen“, beschreibt Hauschild. „Die erste besteht aus fest programmierten Chips, die innerhalb von wenigen millionstel Sekunden eine erste Grobauswahl treffen und jene Daten verwerfen, die auf jeden Fall uninteressant sind.“ Die Signale, die diese erste Barriere passiert haben, durchlaufen anschließend zwei weitere Filterstufen. Diese basieren auf speziellen Software-Algorithmen, die auf Rechnerfarmen mit Hunderten von Computern laufen und alles aussortieren, was aller Voraussicht nach für die spätere Analyse irrelevant ist. Am Ende bleibt von den 1000 Terabyte pro Sekunde maximal ein Gigabyte pro Sekunde übrig. De facto

wird nur eine von einer Million Kollisionen analysiert. Doch wie stellen die Physiker sicher, dass ihnen nicht doch interessante Ereignisse durch die Lappen gehen, weil sie von der Elektronik versehentlich eliminiert werden? Um das zu überprüfen, lassen die Fachleute immer einige Kollisionen ungefiltert passieren. „Diese Kontrollereignisse helfen uns sehr, zu überprüfen, ob unsere Entscheidungskette richtig ist“, sagt Hauschild. „Und bisher scheint uns noch nichts durch die Lappen gegangen zu sein.“

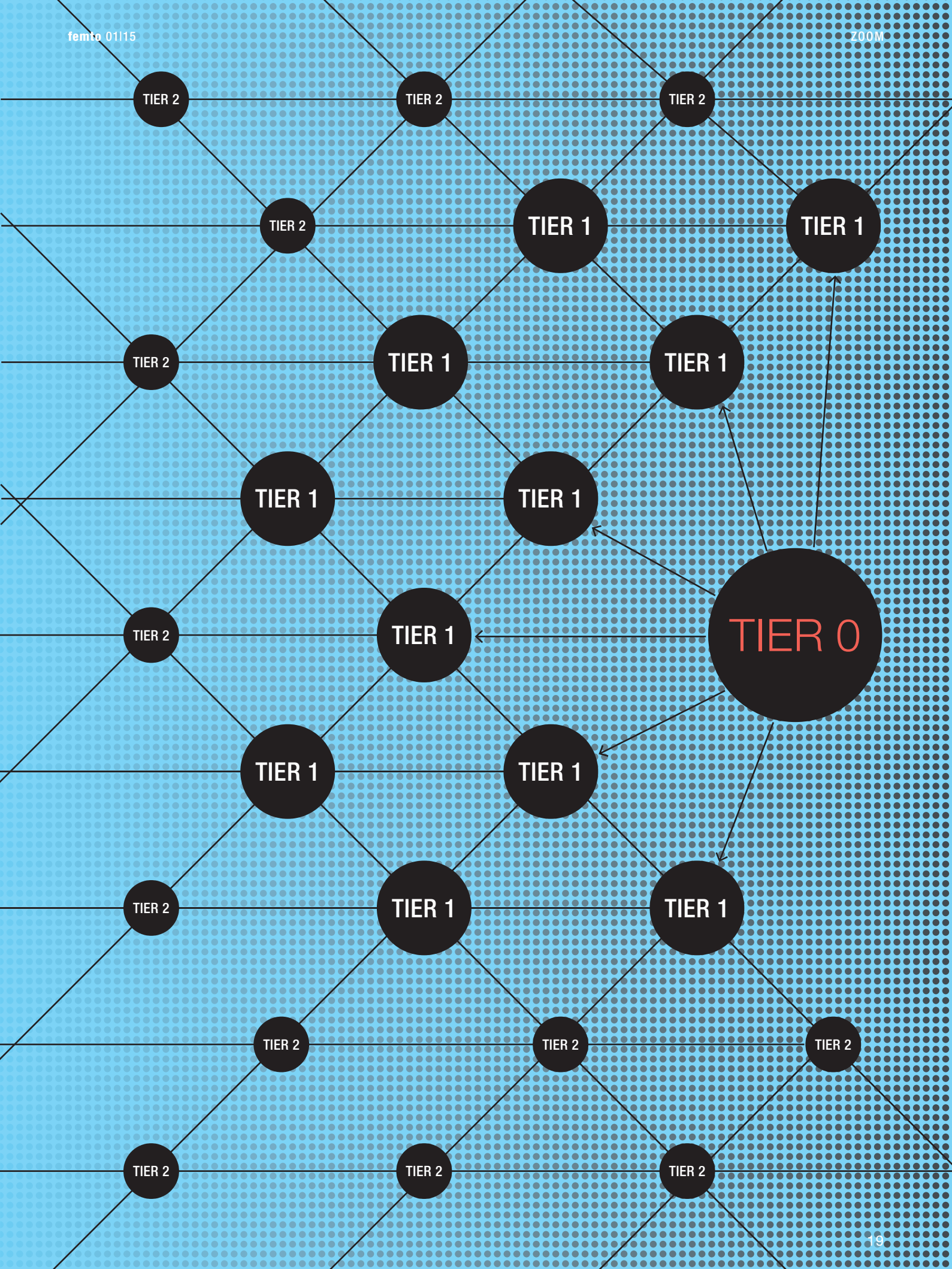
Globales Rechnernetz

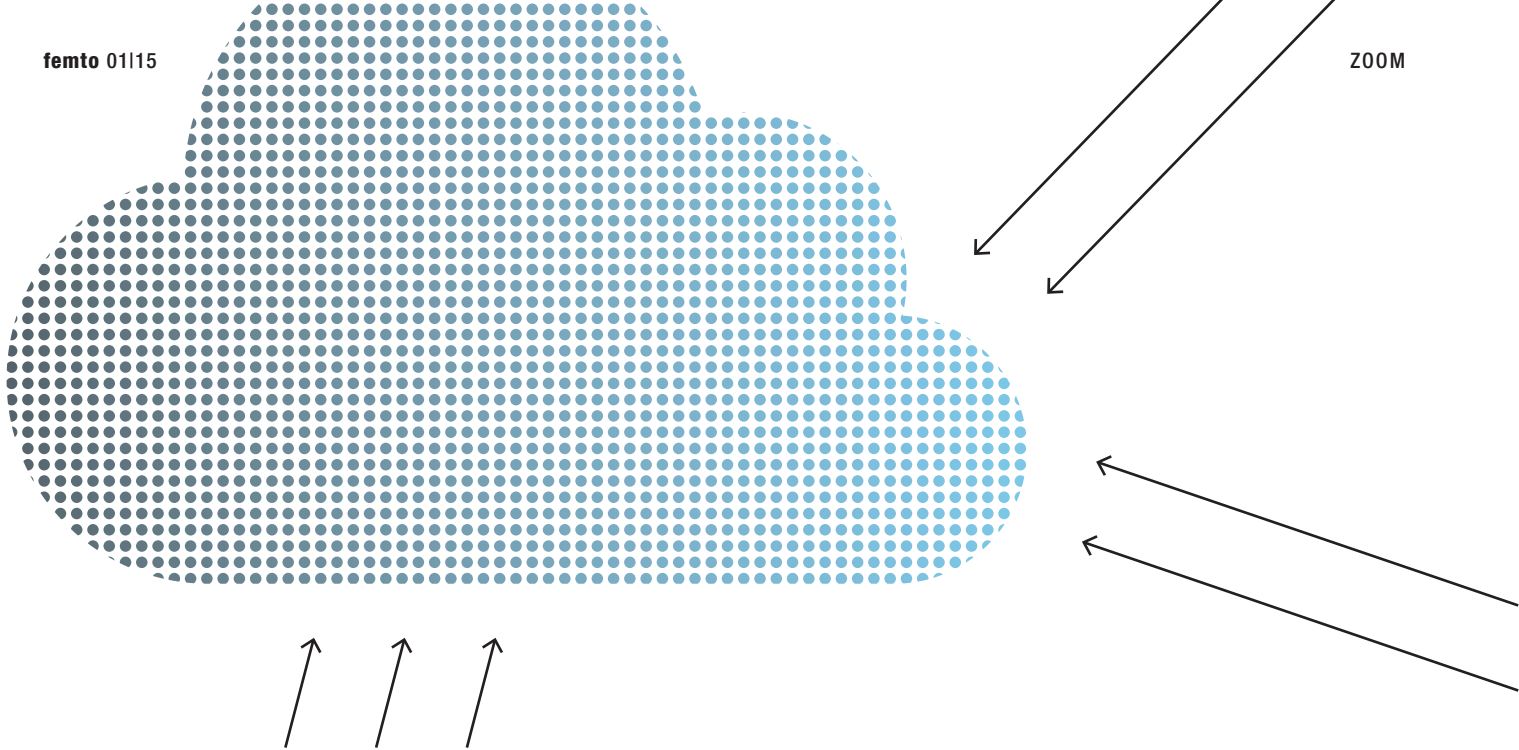
Doch auch die reduzierten Signale sorgen für eine regelrechte Datenflut: Pro Jahr liefern die LHC-Experimente rund 25 Petabyte an Messwerten. Um mit diesen Mengen fertig zu werden, haben sich die Teilchenforscher eine besondere Rechnerarchitektur einfallen lassen – das LHC-Grid. Bei ihm werden im Gegensatz zum World Wide Web nicht nur Daten verschoben, sondern Rechenkapazitäten rund um den Globus verteilt. „Plant ein Wissenschaftler eine Datenauswertung, so schickt er sein Analyseprogramm ins Grid“, erläutert Joachim Mnich, DESY-Direktor für Teilchen- und Astroteilchenphysik. „Das lässt dann dort rechnen, wo die Computer gerade nicht ausgelastet sind.“

Grid-Computing

Um die Datenflut vom LHC zu meistern, nutzen Informatiker das Konzept des Grid-Computing. Dabei sind weltweit verteilte Computer so zusammengeschlossen, dass sie wie ein gewaltiger Supercomputer arbeiten. Am Worldwide LHC Computing Grid (WLCG) sind über 170 Rechenzentren in knapp 40 Ländern beteiligt. Das Netzwerk besteht aus verschiedenen Ebenen, so genannten Tiers. Die vom LHC produzierten Rohdaten werden zunächst am CERN in Genf, dem Tier-0-Zentrum, auf Band gesichert. Nach einer ersten Bearbeitung werden diese Daten zur Speicherung und Rekonstruktion an mehrere internationale Tier-1-Zentren verteilt. Diese Zentren verfügen über eine ausreichende Speicherkapazität für große Datenmengen und sind rund um die Uhr über das Computernetz verbunden.

Die Tier-1-Zentren stellen die Daten wiederum den nachgeordneten Tier-2-Einrichtungen zur Verfügung, die aus einem oder mehreren miteinander verbundenen Rechenzentren bestehen. Diese Tier-2-Ressourcen stellen die entscheidende Ebene für die wissenschaftliche Analyse der Daten über Grid-Werkzeuge dar. DESY betreibt standortübergreifend in Hamburg und Zeuthen ein solches Tier-2-Zentrum für die LHC-Experimente.





Ein Beispiel: Will ein LHC-Forscher bei DESY eine Datenanalyse starten, laufen die komplexen Algorithmen nicht mehr zwangsläufig im DESY-Rechenzentrum. Stattdessen werden sie dort abgearbeitet, wo gerade freie Kapazitäten herrschen – etwa an einem Helmholtz-Zentrum oder einer Universität in Deutschland oder an anderen Instituten in Europa, Asien und den USA. Eine spezielle Software ermittelt, wo sich die relevanten Daten befinden und wo sie sich am schnellsten und günstigsten analysieren lassen. In der Regel wird dort gerechnet, wo die Daten liegen – dann muss man diese nicht kreuz und quer um den Globus schicken.

Plant ein Wissenschaftler eine Datenauswertung, so schickt er sein Analyseprogramm ins Grid

Konzeption und Aufbau des neuartigen Netzwerks hatten nahezu zehn Jahre gedauert. „Rechtzeitig zum Start des LHC hat das Grid funktioniert“, freut sich DESY-Physiker Fuhrmann. „Wenige Stunden, nachdem der Beschleuniger im März 2010 die ersten hochenergetischen Teilchenkollisionen geliefert hatte, lagen seine Daten schon an Zentren rund um den Globus zur Analyse bereit.“

Auf diese Weise gelang auch die Entdeckung des Higgs-Teilchens. Die Forscher hatten dafür rund zwei Billionen Kollisionen durchforsten müssen, die ATLAS und der zweite große LHC-Detektor CMS bis Ende 2012 aufgenommen hatten. Ein enormer Rechenaufwand, der mit Hilfe des Grid bewältigt wurde – sowie mit Unterstützung durch kleinere Rechnerkom-

plexe wie der National Analysis Facility (NAF) bei DESY. Diese gewährleistet Teilchenphysikern in ganz Deutschland einen schnellen Zugang zu den LHC-Messdaten und bietet ihnen zusätzliche Ressourcen für die Datenanalyse.

Schlau speichern

Wichtig für das Grid ist auch eine andere Technik, die DESY gemeinsam mit dem US-Forschungszentrum Fermilab und der Nordic Data Grid Facility (NDGF) entwickelt hat: dCache ist ein System zum intelligenten Verwalten gewaltiger Datenmengen. Die Speicher des Grid müssen diese Flut nicht nur sicher aufnehmen, sondern auch von jedem Ort der Welt aus zugänglich machen. „dCache bewegt die Daten automatisch so zwischen verschiedenen Speichermedien wie Festplatte und Magnetband hin und her, wie es für den Anwender am besten ist“, erläutert Projektleiter Fuhrmann. „Das System agiert wie ein Zwischenspeicher, der zuverlässig dafür sorgt, dass die Daten stets zum Rechnen parat sind, egal woher sie kommen.“

Außerdem spart dCache Kosten. Da es mehrere Kopien einer Datei an verschiedenen Stellen ablegt, genügt eine günstigere Hardware: Sollte ein Speichermedium ausfallen, weiß das System genau, wo an anderer Stelle die Datei noch zu finden ist. Mittlerweile ist die Hälfte aller LHC-Daten in dCache-Systemen rund um die Welt gespeichert. Inzwischen wird die Technik auch in anderen Wissenschaftsbereichen genutzt, unter anderem vom europäischen Radioteleskop LOFAR sowie im Rahmen des Helmholtz-Projekts Supercomputing and Modelling for the Human Brain (SMHB). Doch auch die Wirtschaft verwendet das System, etwa Unternehmen aus dem Bankensektor.

Cloud für die Forschung

Zwar ist das LHC-Grid ein Erfolg. Dennoch könnte bald eine Weiterentwicklung anstehen – der Übergang zu einer Wissenschafts-Cloud. Im kommerziellen Bereich gibt es solche Computing-Clouds bereits. Vereinfacht gesagt lässt sich bei den Anbietern nicht nur Speicherplatz, sondern auch Rechenzeit flexibel übers Internet mieten. Doch die Dienste haben ihre Schattenseiten: „Unklar ist, inwieweit Datensicherheit und Privatsphäre gewährleistet sind“, sagt Fuhrmann.

Die Zukunft ist die Cloud

Für die Wissenschaft taugen diese kommerziellen Dienste deshalb nur bedingt, weshalb sie an einer eigenen Cloud-Infrastruktur arbeitet. Das Prinzip: Wissenschaftliche Rechenzentren in ganz Europa, die bislang weitgehend unabhängig voneinander agieren, tun sich zu einer gemeinsamen Computing- und Data-Cloud zusammen. In dieser könnte das LHC-Grid – teilweise oder ganz – aufgehen. Das Ziel: Die Cloud sollte deutlich einfacher zu benutzen sein als das Grid – und damit nicht nur die IT-affine Gemeinde der Teilchenforscher ansprechen, sondern verstärkt auch andere Fachdisziplinen wie etwa Biologen, Chemiker und Materialforscher.

Allerdings sind auf dem Weg dorthin noch manche Probleme zu meistern: Wie lassen sich die Anwender zuverlässig identifizieren, und wie können die Rechenzentren ihre beigesteuerten Kapazitäten untereinander abrechnen? Fragen, die die European Grid Initiative (EGI) in Angriff nehmen soll wie auch ein kürzlich genehmigtes EU-Projekt namens INDIGO-DataCloud, an dem auch DESY beteiligt ist. Das Forschungszentrum hat schon den Prototyp für eine institutseigene, auf dCache basierende Data-Cloud entwickelt. Dieser steht kurz vor der Einsatzreife.

Datenmassen durch Photonen

Doch nicht nur in der Teilchenphysik, auch in anderen Forschungsfeldern hält Big Data verstärkt Einzug – etwa bei Teilchenbeschleunigern, die als extrem helle Lichtquellen fungieren. Das Prinzip: Die Maschinen beschleunigen Elektronen nahezu auf Lichtgeschwindigkeit und lenken sie durch spezielle Magnetfelder. Diese zwingen die Elektronen auf eine Art Slalomparcours und entlocken ihnen dadurch eine gebündelte, hochintensive Strahlung – vor allem Röntgen-

aber auch UV-Licht. Diese Strahlung nutzen Forscher verschiedener Disziplinen, um ihre Proben detailliert zu durchleuchten – darunter Nanopartikel, Halbleitermaterialien, Eiweißmoleküle, Gesteinsproben oder auch Gemälde berühmter Meister und Fundschätze der Archäologen.

In Hamburg stehen gleich zwei dieser Forschungslichtquellen, beide gehören zur Weltspitze: PETRA III, ein Ringbeschleuniger mit einem Umfang von gut zwei Kilometern, erzeugt hochintensive, brillante Röntgenlichtblitze. Der Freie-Elektronen-Laser FLASH liefert ultrakurze Röntgenlichtblitze mit Lasereigenschaften. Und mit dem europäischen Röntgenlaser European XFEL entsteht derzeit eine Lichtquelle der Superlative. Ab 2017 wird die fast dreieinhalb Kilometer lange Anlage ultrakurze, hochintensive Röntgenlaserblitze erzeugen.

All diese Lichtquellen liefern immer größer Datenmengen. Der Grund: Die Detektoren, die das von den Proben abgelenkte Röntgenlicht erfassen, werden immer besser. Ähnlich wie Digital- und Handycameras regelmäßig an Megapixel zulegen, steigt die Auflösung der Röntgendetektoren stetig an. Auch die Bildrate wächst rasant: Liefert FLASH typischerweise 300 Blitze pro Sekunde, werden es beim European XFEL 27 000 sein. Zudem wechseln oft Roboter die Proben vollautomatisch und sorgen so dafür, dass schneller gemessen werden kann. Und schließlich gehen die Forscher immer mehr dazu über, nicht nur einzelne Standbilder einer Probe zu schießen, sondern Filme zu drehen – was das Datenvolumen ordentlich in die Höhe schraubt. „Der European XFEL soll 2017 starten“, sagt Gülzow. „Und er könnte pro Jahr bis zu 100 Petabyte an Daten erzeugen.“

Röntgenfilme in 3D

So zum Beispiel bei der Methode der Mikrotomographie: Ähnlich wie ein CT-Scanner im Krankenhaus erlaubt sie die



„Bei der Echtzeittomographie werden hundert Bilder pro Sekunde aufgenommen, da explodiert das Datenaufkommen.“
Felix Beckmann, Experte für die Methode der Mikrotomographie



Mikrotomogramm eines flohähnlichen Insekts (*Caurinus* sp.), das für die Erforschung des Insektenstammbaums eine wichtige Rolle spielt. Länge: 2 Millimeter; Auflösung: unter 1,22 Mikrometer (tausendstel Millimeter).

Aufnahme dreidimensionaler Röntgenbilder. Da aber die Forscher verglichen mit den Ärzten im Krankenhaus mit deutlich stärkerer Strahlung arbeiten, ist die Bildauflösung ungleich höher. Dadurch lassen sich selbst mikroskopische Details erkennen – von der Struktur kleinster Gehörknöchelchen über die Zähne versteinertes Dinosaurier-Embryonen bis hin zu den Poren und Rissen in einer Hightech-Legierung.

„Wenn wir ein Tomogramm aufnehmen, müssen wir pro Minute typischerweise eine Datenmenge von zwölf Gigabyte speichern“, erläutert Felix Beckmann vom Helmholtz-Zentrum Geesthacht, das bei DESY eine Außenstelle für Materialforschung betreibt. „Das ist noch beherrschbar.“ Anders, wenn die Experten komplexe Prozesse „filmen“ wollen. „Bei dieser Echtzeittomographie muss man zum Beispiel hundert Bilder pro Sekunde aufnehmen“, sagt Beckmann. „Da explodiert das Datenaufkommen.“



Dynamische Prozesse wie der Abbau einer Knochenschraube aus einer neuartigen Magnesiumlegierung lassen sich mit der Echtzeittomographie verfolgen.

Bild: Helmholtz-Zentrum Geesthacht

Das Verfahren bietet interessante Einblicke: So schauen sich Experten aus Karlsruhe die Bewegung eines Käfer-Hüftgelenks an. Fachleute vom Helmholtz-Zentrum Geesthacht untersuchen, wie schnell bestimmte Implantate korrodieren – eine wichtige Information für deren Verhalten im menschlichen Körper. Andere Forscher verfolgen, wie Formgedächtnis-Legierungen ihre Gestalt bei einer bestimmten Temperatur im Detail ändern.

Doch die Herausforderungen an die Datenverarbeitung sind enorm – pro Messung kommen schnell Terabyte zusammen. „Bislang konnten wir die Daten direkt ins Rechenzentrum von DESY leiten“, erläutert Beckmann. „Doch mehr und mehr müssen wir zusätzliche Pufferspeicher dazwischen schalten, um den Datenstrom bewältigen zu können.“

Drohende Speicherkrise

Vor ähnlichen Herausforderungen stehen die Strukturbiologen. Mithilfe des Röntgenstrahls aus dem Beschleuniger enträtseln sie, wie die Atome in Biomolekülen angeordnet sind – eine wichtige Basisinformation für die Entwicklung neuer Medikamente. „Derzeit fällt an jedem unserer PETRA-III-Messplätze ein Terabyte pro Tag an“, sagt Thomas Schneider, Wissenschaftler am Europäischen Laboratorium für Molekularbiologie (EMBL), das in Hamburg eine Außenstelle unterhält. Bei der nächsten Generation von Detektoren, die ab kommendem Jahr installiert werden können, dürften es 20 Terabyte pro Tag sein, also rund fünf Petabyte pro Jahr.

„Für diese riesigen Datenmengen reichen die derzeitigen Infrastrukturen für Archivierung und Transport nicht aus“, sagt Schneider. Zusätzlich verschärft werden könnte die Situation durch einen weiteren Umstand. Bereits heute empfiehlt die

Deutsche Forschungsgemeinschaft, sämtliche Rohdaten, die zu einer Fachpublikation geführt haben, mindestens zehn Jahre lang aufzubewahren. Dadurch ließe sich nachhaltig prüfen, ob ein Forscher, dem Wissenschaftsbetrug vorgeworfen wird, tatsächlich geschummelt hat.

Derzeit aber ist noch unklar, wer diese Langzeitdatenspeicherung übernehmen soll – Großforschungseinrichtungen wie DESY oder jene Wissenschaftler aus den Universitäten, die die Beschleunigeranlagen in Hamburg in großer Zahl nutzen. „Vermutlich werden Zentren wie DESY zur Datenspeicherung verpflichtet, denn die Universitäten können das gar nicht leisten“, meint Edgar Weckert, Direktor für den Bereich Forschung mit Photonen bei DESY. „Doch damit drohen wir in der Datenflut zu ertrinken.“

Um das zu verhindern, arbeiten die Experten an neuen Lösungsansätzen – allein mit der Anschaffung neuer Festplatten und Rechner ist es nicht getan. „Eine Möglichkeit sind intelligente Datenreduktionsalgorithmen“, sagt Weckert. „Bislang ist üblich, dass die Messplätze sämtliche Rohdaten speichern. Künftig

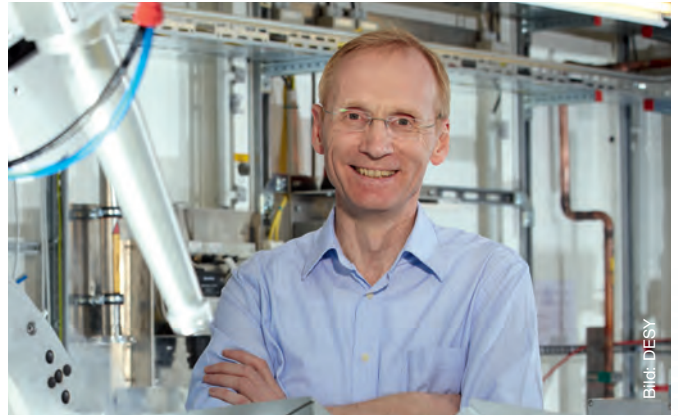
Die riesigen Datenmengen sind in vielen Wissenschaftsbereichen eine große Herausforderung

wird man nicht umhin kommen, die Datensätze vorzusortieren und nur das zu behalten, was wissenschaftlich relevant ist.“

Schlankheitskur für Daten

In der Welt der Digitalfotos sind solche Kompressionsverfahren bereits gang und gäbe: Speichert man ein Bild als JPEG ab, lässt sich das Datenvolumen nahezu verlustfrei auf einen Bruchteil reduzieren. Ähnliche Algorithmen könnten die Forscher auch hinter ihre Röntgendetektoren schalten – mit dem Bestreben, die Datenströme deutlich zu drosseln. Abhängig vom Messverfahren scheint eine Reduzierung um den Faktor zehn möglich. Allerdings haben die Fachleute dafür noch einiges an Entwicklungsarbeit zu leisten. Insbesondere müssen sie die Kompressionsalgorithmen deutlich beschleunigen, damit die Daten schnell genug auf Festplatte geschrieben werden können.

Doch auch nach dieser digitalen Verschlankung werden es die Forscher bei PETRA III mit gehörigen Datenströmen zu tun haben. Deshalb ist DESY mit dem Computerkonzern IBM eine Kooperation eingegangen, um gemeinsam eine neue,



„Künftig wird man nicht umhin kommen, die Datensätze vorzusortieren und nur das zu behalten, was wissenschaftlich relevant ist.“

Edgar Weckert, DESY-Direktor für die Forschung mit Photonen

leistungsfähige Big-Data-Speicherlösung zu entwickeln. Unter dem Stichwort „Elastic Storage“ soll das System pro Sekunde bis zu 20 Gigabyte verarbeiten und speichern können – der Inhalt von fünf Standard-DVDs. Eines der Ziele: Sofort nach einer Messung sollen die Daten verfügbar sein, damit sie die Forscher direkt am Messplatz sichten und prüfen können.

Schließlich gerät auch die Analyse der Daten immer anspruchsvoller. So kommen bei der Auswertung der PETRA-III-Daten zunehmend Supercomputer zum Einsatz. „Im Gegensatz zu den Rechnerfarmen, wie sie zur Analyse der LHC-Daten dienen, sind die Prozessoren eines

Supercomputers eng miteinander vernetzt“, erläutert DESY-IT-Chef Volker Gülzow. „Nur dadurch lassen sich Prozesse, bei denen benachbarte Zellen aktiv wechselwirken, wirklich verstehen und simulieren.“ Zwar besitzt DESY keinen eigenen großen Superrechner auf seinem Gelände, ist aber Teilhaber des John von Neumann-Instituts in Jülich – mit Zugriff auf JUQUEEN, einen der derzeit schnellsten Supercomputer der Welt.

Eines jedenfalls steht fest: Big Data wird in der Forschung langfristig ein Thema bleiben. „Die riesigen Datenmengen sind in vielen Wissenschaftsbereichen eine große Herausforderung“, betont Gülzow.

Big Data in der Wissenschaft

Medizin

Computertomographen, Kernspin, Ultraschall – auch Mediziner sammeln enorme Datenmengen. Zum einen werden die bildgebenden Verfahren immer genauer und liefern Bilder mit stetig steigendem Datenvolumen. Zum anderen kommen neue Verfahren dazu, etwa die digitale Pathologie: Hierbei werden feinste Gewebeschnitte hochauflösend eingescannt, um sie besser archivieren und mit Rechnerhilfe analysieren zu können. Außerdem gehen die Fachleute dazu über, die Informationen aus verschiedenen Bildgebungsverfahren zu verknüpfen. Das Ziel: treffsichere Diagnosen und verbesserte Therapien.

Klimaforschung

Um den globalen Klimawandel möglichst detailliert zu verstehen, entwickeln die Forscher ein hochkomplexes Erdsystemmodell. Es umfasst die physikalischen, chemischen und biologischen Wechselspiele zwischen Atmosphäre, Ozean und Biosphäre – einschließlich dem Tun und Handeln der Menschheit. Dazu berechnen Supercomputer ein feinmaschiges Gittermodell unseres Planeten. Nicht selten dauern diese Simulationen mehrere Monate und erzeugen riesige Datenberge: Allein das Deutsche Klimarechenzentrum in Hamburg archiviert jährlich bis zu zehn Petabyte an Modellergebnissen der Supercomputer-Berechnungen.

Astronomie

Nicht nur Teilchenbeschleuniger, auch Teleskope werden immer größer. Zukunftsprojekte wie das Square Kilometre Array (SKA) und das Cherenkov Telescope Array (CTA) umfassen mehrere Dutzende oder sogar Hunderte von Einzelteleskopen, verteilt über mehrere Regionen mit einer Fläche von jeweils einigen Quadratkilometern. Während CTA nach hochenergetischen Gammastrahlen fahndet, wird SKA nach Radiowellen Ausschau halten. Beide Anlagen dürften enorme Datenberge generieren – CTA drei bis fünf Petabyte pro Jahr, SKA womöglich mehr als ein Petabyte pro Tag.

Ökologie

Ökosystemforscher versuchen, die komplexen Strukturen von Lebensgemeinschaften zu enträtseln. So erkunden Experten der Universität Hamburg das Wechselspiel der Organismen im Ozean: Wie wirkt sich der Klimawandel auf die Meereslebewesen aus, welche Konsequenzen drohen für die Fischerei? Dabei haben es die Wissenschaftler in doppelter Hinsicht mit großen Datenmengen zu tun: Während einer Messfahrt sammeln sie mehrere Terabyte an Kamerabildern. Und um das Geschehen in der Zukunft prognostizieren zu können, nutzen die Forscher Computermodelle, die ebenfalls große Datenberge generieren.

Daten damals und heute

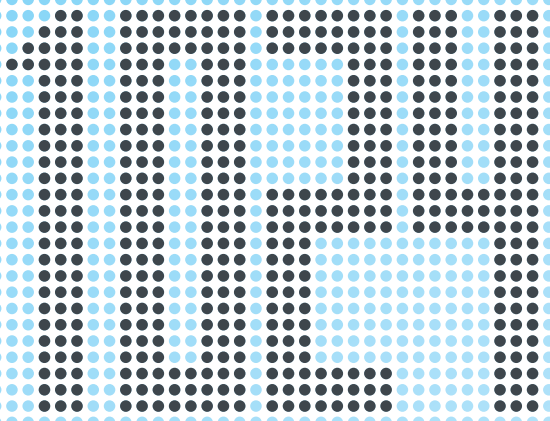
Die gleiche Datenmenge, die die Menschheit von der Steinzeit bis zum Jahr 2002 gesammelt hat, entsteht heute innerhalb einer Kaffeepause – in 10 Minuten.

Das Telefon-Modem von einst schaffte eine Datenübertragung von 300 Bit pro Sekunde – der aktuelle Weltrekord für eine einzelne Glasfaser liegt bei 42 Terabit pro Sekunde.

Die gute alte Diskette speicherte 160 Kilobyte an Daten; heutige Festplatten schaffen 4 Terabyte.

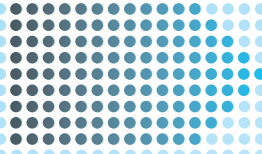
Der erste Intel-Prozessor von 1971 lieferte eine Taktrate von 740 Kilohertz und besaß 2300 Transistoren. Der Intel-Prozessor von heute kommt auf Taktraten bis zu 3,9 Gigahertz und bis zu 5,5 Milliarden Transistoren.

Die erste kommerzielle Digitalkamera von 1976 kam auf 0,01 Megapixel, heutige kommerzielle Kameras liefern bis zu 50 Megapixel.



Kilobyte [kB]

Tausend Byte



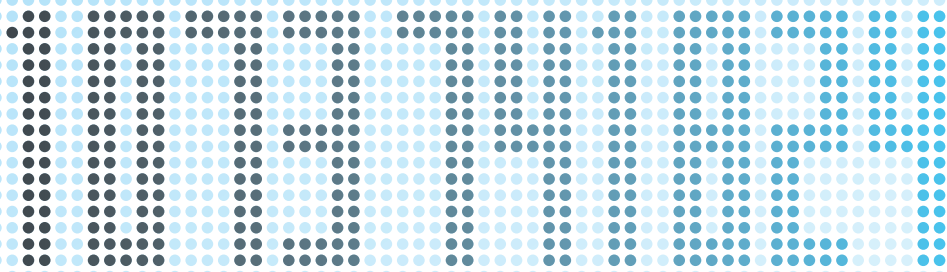
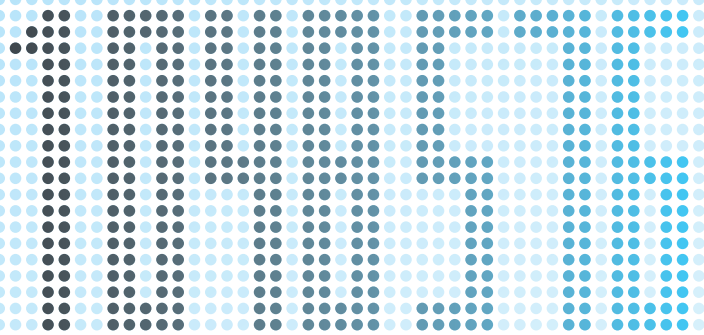
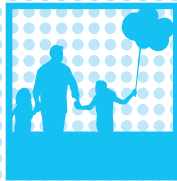
E-Mail

Megabyte [MB]

Millionen Byte



Foto



Gigabyte [GB]

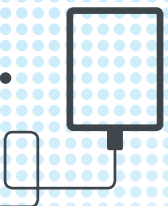
Milliarden Byte



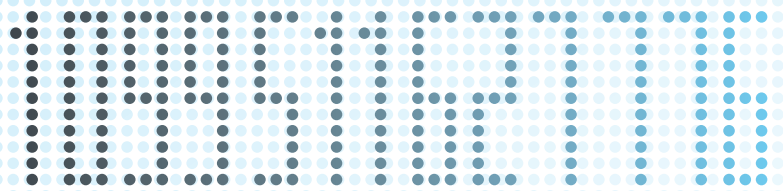
HD Film



Terabyte [TB]



Festplatte

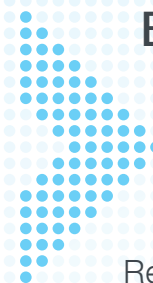


Billionen Byte

Petabyte [PB]

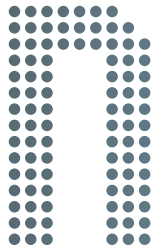
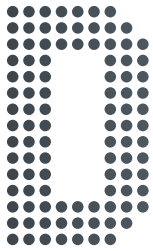


Billiarden Byte



Rechenzentrum DESY

Big Data für mehr



Leibniz-Preisträger und DESY-Forscher Henry Chapman bestimmt aus hunderttausenden Röntgenbildern den atomaren Aufbau von Biomolekülen und erforscht, wie sich ganze Filme von biochemischen Prozessen mit molekularer Auflösung aufnehmen lassen. Die enormen Datenmengen, die dabei erzeugt werden, ebnen den Weg in die bewegte Welt der Moleküle.

Henry Chapman erforscht die Natur auf unvorstellbar kleinen Skalen und nutzt dazu die neuesten Forschungslichtquellen: Freie-Elektronen-Röntgenlaser, die ultrakurze Röntgenlichtblitze mit Belichtungszeiten im Bereich von Femtosekunden (billiardstel Sekunden) erzeugen. Er geht der komplexen, dreidimensionalen Struktur von Biomolekülen mit einer räumlichen Auflösung im Bereich von zehnmillionstel Millimetern (Ångström) auf den Grund, das entspricht der Größenordnung von Atomen. Und er ist ein

Pionier auf dem Gebiet, die Dynamik von Biomolekülen sichtbar zu machen. Von Australien über New York und Kalifornien kam Chapman nach Hamburg, wo er die Abteilung Kohärente Röntgenbildgebung am Center for Free-Electron Laser Science bei DESY leitet und Physikprofessor an der Universität Hamburg ist. Für seine Arbeit bekam Henry Chapman einen der begehrten Gottfried Wilhelm Leibniz-Preise 2015.

Henry Chapman und sein Team produzieren in einem Jahr dieselbe Datenmenge, die derzeit in der internationalen Protein-Datenbank mit ihren rund 100 000 Einträgen gespeichert ist – ein Petabyte

Warum Chapman für seine Forschungsreisen in die Welt der Atome und der molekularen Dynamik enorm große Datenmengen im Gepäck hat, illustriert ein Blick in seine Arbeit: „Wir nutzen leistungsstarke Röntgenlaser, um Strukturinformationen von Proben zu bekommen, die zu klein für die Messung an herkömmlichen Röntgenlichtquellen sind“, erläutert Chapman. „Gerade von Biomolekülen lassen sich häufig keine großen Kristalle erzeugen, manchmal bekommen wir nur winzige Nanokristalle. Solche Proben streuen die Röntgenstrahlung nur schwach. Wir brauchen

daher hochintensive Laserblitze, um ein Streubild aufzunehmen, kurz bevor die Probe von der Strahlung zerstört wird. Jedes dieser Bilder enthält nur einen Teil der Strukturinformation, daher müssen wir Hunderttausende Streubilder aufnehmen. Erst wenn wir alle zusammenfügen, ergibt sich die gesamte Molekülstruktur.“ Ein solcher Datensatz erreicht die Größenordnung von zwei bis drei Terabyte (Billionen Byte).

Um zum Beispiel das Enzym Cathepsin B zu analysieren, das bei der Schlafkrankheit eine Rolle spielt, ließen Chapmans Forscherkollegen Millionen von winzigen Enzymkristallen in einem feinen Wasserstrahl durch den Strahl des Röntgenlasers LCLS am US-Forschungszentrum SLAC in Kalifornien rieseln. Der Röntgenlaser feuerte 120 Blitze pro Sekunde auf den Strahl, im Schnitt traf jeder elfte einen Kristall. So entstanden insgesamt 293 195 Beugungsbilder, die nur mit einem großen Parallelrechner verarbeitet werden konnten. „Die Kombination ergab zunächst eine dreidimen-



Bild: DESY

sionale Karte der kompletten Streueigenschaften des Enzyms“, sagt Chapman. „Daraus konnten wir seine Struktur bis auf 2,1 Ångström genau berechnen.“

Zum Vergleich: Analysieren die Forscher ein Enzym an einer herkömmlichen Röntgenlichtquelle, kommen sie mit einigen Hundert oder Tausend Beugungsbildern und Datensätzen im Bereich von einigen Gigabyte (Milliarden Byte) aus. Ein Röntgenlaser produziert also etwa tausendfach größere Datenmengen. Doch der Aufwand lohnt sich: Die neuartigen Freie-Elektronen-Röntgenlaser wie LCLS oder European XFEL, der derzeit in Hamburg gebaut wird, produzieren Lichtblitze mit einer Leuchstärke, die milliardenfach höher ist als die bisheriger Forschungslichtquellen – und das im Fall des European XFEL sogar 27 000-mal pro Sekunde. „Diese

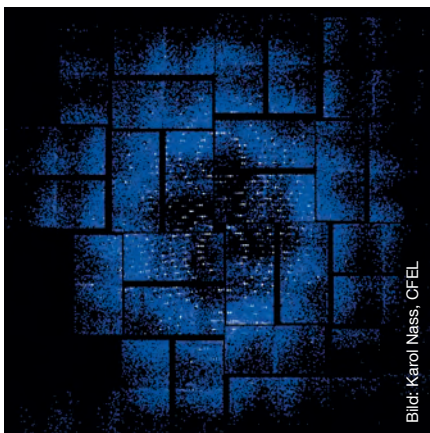


Bild: Karol Nass, XFEL

hohe Pulsrate wird auch zu einer sehr viel höheren Datenrate führen, die uns aber auch neue Möglichkeit der Strukturbestimmung bietet“, betont Chapman. „Wir werden in der Lage sein, nicht nur statische Strukturen zu bestimmen, sondern auch dynamische zeitaufgelöste Messungen von Molekülreaktionen zu machen.“

In einer wegweisenden Studie konnten Henry Chapman und seine Forscherkollegen zeigen, dass Röntgenlaser mit ihren extrem kurzen Blitzen tatsächlich die schnelle Dynamik von Biomolekülen in einer Art Ultrazeitlupe festhalten kön-

nen. Sie erzeugten Momentaufnahmen mit einer Zeitauflösung im Bereich von Femtosekunden (billiardstel Sekunden). „Wenn wir solche ultraschnellen Schnappschüsse zu einem Film anordnen, können wir die Moleküldynamik in Zeitlupe zeigen“, erläutert Chapman.

Diese Dynamik geht mit enormen Datenmengen einher: Wird ein dynamischer Prozess beispielsweise in tausend Zeitschritten abgebildet, dann vertausendfacht sich auch die Datenmenge hin zu einigen Petabyte (Billiarden Byte) und einigen hundert Millionen Beugungsbildern pro Experiment.

„Unsere Arbeit öffnet die Tür zu zeitaufgelösten Untersuchungen dynamischer Prozesse mit atomarer Auflösung“

Henry Chapman, DESY

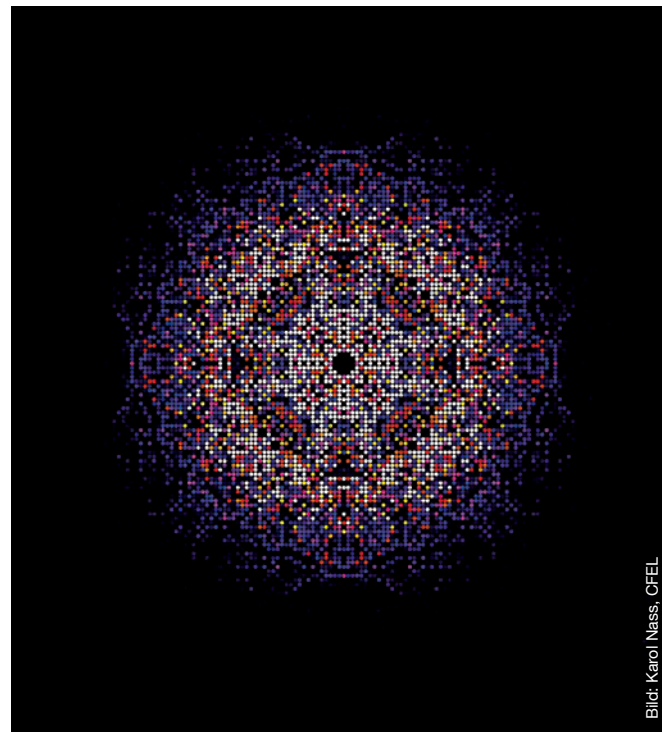


Bild: Karol Nass, XFEL

Die Intensitätskarte für das Enzym Cathepsin B wurde aus fast 200 000 einzelnen Streubildern von Kristallen erzeugt. Sie diente dazu, die dreidimensionale molekulare Struktur des Enzyms zu bestimmen.

Röntgen-Streuaufnahme eines einzelnen Kristalls des Enzyms Cathepsin B. Der Detektor besteht aus 64 einzelnen Elementen, die als Kachelmuster zu erkennen sind. Die Beugung am Kristall führt zu dem regelmäßigen Muster (weiß).



„Größe allein macht keinen Sinn“



Big Data in der Wissenschaft sorgen für immer höhere Auflösungen, schärfere Bilder, schnellere Messungen. Sie zeigen globale Zusammenhänge und zoomen in kleinste Dimensionen. Sie ermöglichen Fortschritt und Erkenntnis. Doch große Datenberge entstehen in verschiedensten gesellschaftlichen Bereichen und türmen sich etwa auf, wenn soziale Netzwerke umfassende Daten über die persönlichen Vorlieben und Gewohnheiten ihrer Nutzer sammeln. Wo liegen die Chancen und wo die Risiken von Big Data? Dazu sprach femto mit Volker Gülzow, Leiter der IT-Abteilung von DESY und versierter Jongleur im Umgang mit großen Datenmengen.

femto: Was sind überhaupt Big Data?

Volker Gülzow: Big Data ist sozusagen das „new kid on the block“. In der IT-Welt müssen ja immer neue Schlagworte her. Big Data im Sinne großer Datenmengen gab es auch in der Vergangenheit, gerade wir bei DESY hatten immer mit großen Datenmengen von unseren

Beschleunigern zu tun, und das wird auch so bleiben. Neu ist das Interesse der Wirtschaft an „sozialen“ Daten und das Bedürfnis vieler Menschen, elektronische Hilfsmittel zu nutzen, um zu kommunizieren oder sich darzustellen.

femto: Welches sind die Hauptverursacher von Big Data?

Volker Gülzow: In vielen klassischen Bereichen der Naturwissenschaften werden immense Datenmengen produziert. Gleichzeitig wird die Welt immer datenhungriger. Dahinter steht die Industrie, die ihre Produkte verbessern möchte oder unter dem Buzzword Industrie 4.0 effizienter und leider auch mit weniger Personal produzieren möchte, oder die Werbebranche, die das Produkt-Placement durch Analyse von Daten aus sozialen Netzwerken verbessern möchte. Aber auch die Sicherheitsbehörden, die ja ein durchaus berechtigtes Interesse an Daten haben, sammeln eine Vielzahl von Informationen, was sicherlich nicht immer unproblematisch ist. Erstaunlicherweise sind es aber auch wir selber, die beispielsweise eine App auf unserem Handy haben, die unsere Gesundheitsdaten während des Joggens aufnimmt – und diese so nebenbei in die Cloud überträgt.

femto: Gilt die Devise „Big is beautiful“ oder macht die Größe allein keinen Sinn?

Volker Gülzow: Größe allein macht mit Sicherheit keinen Sinn, und nicht jeder Datensatz erscheint mir wirklich

wichtig zu sein für eine gesellschaftliche Entwicklung. Wir dürfen auch nicht vergessen, was die ökologischen Konsequenzen von Google, Facebook und Co. sind: Dahinter stehen eine Vielzahl von Rechnern und Speichermedien, die eine ungeheure Menge Strom fressen. Die Frage ist doch: Muss wirklich alles inklusive Urlaubsfotos gepostet und geteilt werden? Um jeden Preis?

femto: Wo sehen Sie die Chancen und die Möglichkeiten von Big Data?

Volker Gülzow: Big Data kann uns sicherlich in vielen Anwendungen nutzen. Das Geheimnis liegt darin, diese Daten sinnvoll zu verknüpfen, beispielsweise um komplexen Zusammenhängen in Umwelt- oder Gesundheitsfragen auf die Spur zu kommen. Wir in der Physik sind es gewohnt, Daten zu verknüpfen. Aber wir sind in der guten Situation, strukturierte und verlässliche Daten zu haben. Das ist bei den sozialen Netzen anders. Und da beginnt die Problematik: Sinnvoll verknüpfen lassen sich diese Daten leider oftmals nicht, scheinbar Offensichtliches lässt sich nicht halten. Denken Sie an den Rückgang der Klapperstörche und den Rückgang der Geburtenrate in den 1970ern. Und verlässlich sind die Daten auch nicht immer.

femto: Facebook und Google wissen schon heute mehr über uns, als manch einem lieb ist. Müssen wir uns vor Big Data fürchten?

Volker Gülzow: Es gibt viele Menschen, die sagen: „Wieso, ich habe doch nichts zu verbergen“. Ich halte das für einen ziemlich naiven Ansatz, denn diesen Menschen ist nicht klar, wie und wozu die persönlichen Daten genutzt werden. Die vermeintliche Anonymisierung von Daten lässt sich nur allzu leicht aushebeln. Beispielsweise war in den Nachrichten zu lesen, wie Daten von Taxifahrten des letzten Jahres mit dem

Telefonbuch verknüpft wurden und herauskam, wie oft sich prominente Personen in zwielichtigen Spelunken aufhielten. Es gibt Untersuchungen, die zeigen, dass man lediglich vier anonymisierte Datensätze braucht, um in über 90 Prozent der Fälle Personen richtig zu identifizieren.

femto: Sind wir reif für Big Data? Haben wir die technischen und gesellschaftlichen Werkzeuge in der Hand, um die Chancen von Big Data zu nutzen und die Risiken zu minimieren?

Volker Gülzow: Nein, eigentlich nicht, die meisten Menschen machen sich kein Bild von den Risiken – oder sie sind ihnen egal. Denken Sie mal daran, wie wir früher gegen die Volkszählung waren, und was die Leute heute alles posten! Darum achten wir bei DESY sehr auf Datensparsamkeit bei den Personendaten. Technisch gibt es zwar noch viele Herausforderungen, aber das werden wir beherrschen. Und die Erfahrung zeigt: Alles was technisch möglich ist, wird auch benutzt werden.

femto: Wo sehen Sie den größten Handlungsbedarf?

Volker Gülzow: Es gibt viele Bereiche, in denen Daten heute verknüpft werden und dann beispielsweise zu Bewertungen von Kreditwürdigkeiten führen, die schlicht falsch sind, weil die Datenqualität oder der Algorithmus nicht stimmt. Es muss klare und sauber geregelte Mechanismen geben, um so etwas zu verhindern oder zu korrigieren. Entsprechende Einrichtungen müssten auch in die Haftung genommen werden können. Ein Problem ist, dass sich die IT-Welt für die Gesetzgebung viel zu schnell entwickelt – und sich manchmal auch das Gefühl aufdrängt, dass der Gesetzgeber das Problem nicht verstanden hat.

femto: Welchem Anwendungsbereich von Big Data sehen Sie persönlich mit



Bilder: DESY

der größten Spannung und Vorfreude entgegen?

Volker Gülzow: Mich interessiert nicht, ob mein Kühlschrank selbständig einkaufen kann und der Kaufmann schon weiß, welchen Käse ich gerne esse. Mich interessieren die klassischen wissenschaftlichen Anwendungen. Und wenn ich dazu beitragen kann, dass wir da einen kleinen Schritt weiter kommen, wäre das toll!

femto: Und vor welchem Anwendungsbereich fürchten Sie sich?

Volker Gülzow: Die Verknüpfung von teilweise nur bedingt zuverlässigen Daten ist eines der ganz großen Probleme, da gibt es Raum für beliebig viel Unsinn. Und das kann ganz schnell sehr persönliche direkte Konsequenzen haben oder zu gesellschaftlichen Fehlentwicklungen führen. Da müsste man den Leuten viel mehr auf die Finger schauen. Und wir müssen achtgeben, dass wir bei all diesen rasanten Entwicklungen gerade die älteren Menschen nicht verlieren.

DATA



US Census Bureau
Daten

30 PB

Digitale
Krankenakten

US-Versicherung
Kaiser Permanente

100 PB

Google-Suchindex

160 PB

ATLAS
Kompletter Datensatz
(2014)



US Library of Congress
Digitale Sammlung

3000 PB/Jahr

E-Mails weltweit



NASDAQ
Aktien-Datenbank

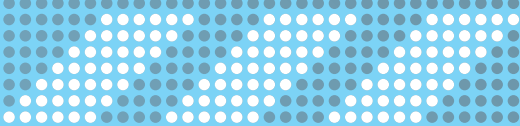
180 PB/Jahr
Facebook-Uploads

Petabyte [PB]

15 PB/Jahr
Youtube-
Uploads

25 PB/Jahr
LHC-Daten

US-Klima-
Datenbank



Nahaufnahme

Forscher beobachten Übergangszustand auf einer Katalysatoroberfläche

Bild: SLAC National Accelerator Laboratory

Künstlerische Darstellung einer Momentaufnahme während der Reaktion von CO zu CO₂, wie sie nun erstmals gelungen ist.

Ein internationales Forscherteam hat erstmals die flüchtigen Zwischenstufen beobachtet, die bei der Umwandlung von Kohlenmonoxid in Kohlendioxid auf einer Katalysatoroberfläche entstehen. Die Wissenschaftler, unter ihnen Forscher von der Universität Hamburg und DESY, nutzten dafür ultrakurze Röntgenblitze des Röntgenlasers LCLS am Forschungszentrum SLAC in Kalifornien.

Dabei erhitze ein optischer Laserpuls zunächst eine Ruthenium-Oberfläche, die einen einfachen Katalysator bildet. Dadurch wurden die absorbierten Kohlenmonoxid-Moleküle (CO) und Sauerstoff-Atome aktiviert. Mit einer speziellen Beobachtungstechnik, der Röntgenabsorptionsspektroskopie, konnte das Team dann ermitteln, wie sich die elektronische Struktur der beteiligten Sauerstoffatome veränderte, während sich Kohlendioxid-Moleküle (CO₂) bildeten – ein Vorgang wie er in ähnlicher Form täglich in jedem Autokatalysator abläuft. Die beobachteten Übergangszustände stimmen mit quantenchemischen Berechnungen gut überein.

Überraschend war jedoch, wie viele Reaktionspartner in einen Übergangszustand aktiviert wurden – und ebenso überraschend war die Entdeckung, dass nur ein kleiner Bruchteil davon anschließend tatsächlich stabile CO₂-Moleküle bildet. „Es ist so, als ob man Murmeln einen Berg hochschießt und die meisten, die es bis oben geschafft haben, rollen einfach wieder auf der gleichen Seite herunter“, sagt Forschungsleiter Anders Nilsson von SLAC und der Universität Stockholm.

Science, 2015; DOI: 10.1126/science.1261747

Moleküle schlagen unendlich Rad

Synchrone Drehungen für neuartige Untersuchungen

Mit einem physikalischen Trick haben Hamburger Forscher ganze Gruppen von Molekülen dazu gebracht, nahezu unendlich im Gleichtakt Rad zu schlagen. Die Technik eröffnet neue Möglichkeiten zur Abbildungen von Molekülen und deren chemischer Dynamik.

Das Team um Jochen Küpper vom Center for Free-Electron Laser Science (CFEL) bei DESY schoss einen gezielten Infrarot-Laserpuls auf einen Strom aus Carbonylsulfid-Molekülen, die sich jeweils im niedrigsten Energiezustand befanden. Der Laserpuls mischte diesen Zustand mit dem ersten angeregten quantenphysikalischen Zustand. Dadurch begannen die Moleküle eine sogenannte Inversion im Gleichtakt, bei der das Schwefelatom aller Moleküle abwechselnd nach oben und nach unten orientiert war. „Der Laser lässt die Moleküle quasi synchron Rad schlagen“, erläutert Hauptautor Sebastian Trippel.

Die Methode funktioniert nicht nur für die beiden niedrigsten Energiezustände, sondern grundsätzlich in allen Zuständen eines linearen Moleküls, schreiben die Forscher in ihrem Fachartikel. „Diese gezielte Molekül-Choreographie eröffnet neue Möglichkeiten, Ensembles freier Moleküle kontrolliert in den Röntgenstrahl eines Freie-Elektronen-Lasers zu halten und dort zu untersuchen“, betont Küpper.

Physical Review Letters, 2015; DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.103003

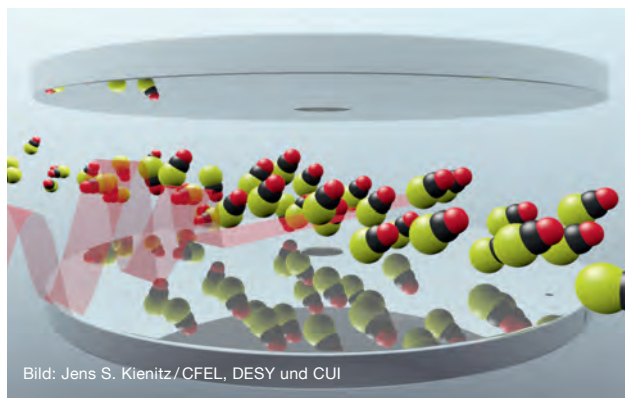


Bild: Jens S. Kienitz / CFEL, DESY und CUI

Ein Infrarotlaser (rot) bringt die zunächst ungeordneten Moleküle dazu, synchron Rad zu schlagen.

Elektronen-Billard

Nachweis einer direkten Vier-Teilchen-Wechselwirkung

Physiker haben an DESYs Forschungslichtquelle PETRA III einen seltenen Vier-Teilchen-Prozess beobachtet. Dabei katapultiert ein Elektron drei andere Elektronen aus der Hülle eines Kohlenstoffatoms hinaus. Die Beobachtungen des Forscherteams um Alfred Müller und Stefan Schippers von der Universität Gießen sind für

zahlreiche Multi-Elektronenprozesse in der Physik von Bedeutung und könnten helfen, bestimmte Experimente mit Röntgenlasern besser zu verstehen.

In den Versuchen sprang ein Elektron angeregt durch Röntgenstrahlung auf eine höhere Schale im Kohlenstoffatom. Die hinterlassene Lücke wird nach kurzer Zeit von einem hinabfallenden Elektron neu besetzt. In seltenen Fällen wird die Energie dieses Elektrons auf zwei und manchmal sogar auf drei andere Elektronen des Kohlenstoffs übertragen, die dann aus der Atomhülle hinausgeschleudert werden. In dem Experiment konnten die Forscher erstmals die Häufigkeit dieses sogenannten dreifachen Auger-Zerfalls im Kohlenstoff bestimmen: Nur in 0,01 Prozent aller Fälle

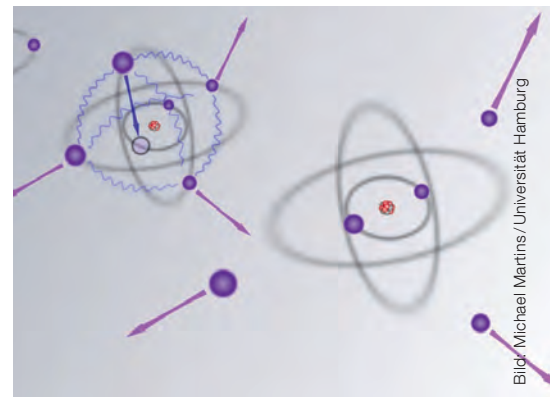


Bild: Michael Martins/Universität Hamburg

Dreifacher Auger-Zerfall: Ein Elektron schleudert drei weitere Elektronen aus der Atomhülle hinaus.

katapultiert das Elektronen-Billard drei Elektronen aus der Atomhülle hinaus.

Physical Review Letters, 2015; DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.013002

Die Mischung macht's

Magnetische Nanopartikel steigern Leistung von Solarzellen

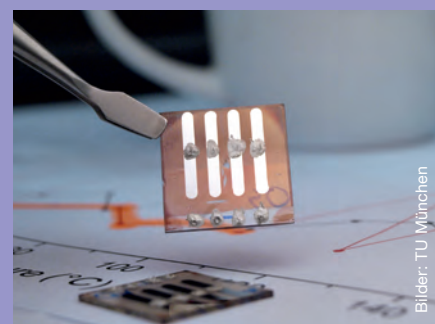
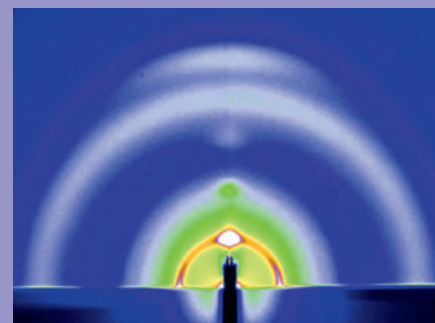
Magnetische Nanopartikel können die Leistung von Kunststoff-Solarzellen steigern – sofern die Mischung stimmt. Das zeigt eine Röntgenuntersuchung an DESYs Forschungslichtquelle PETRA III. Eine Beimischung der Nanopartikel von etwa einem Gewichtsprozent macht bestimmte sogenannte organische Solarzellen effizienter, wie Forscher um Peter Müller-Buschbaum von der Technischen Universität München beobachtet haben.

Das Licht erzeugt in Solarzellen Paare elektrischer Ladungsträger, die zur Stromgewinnung getrennt werden

müssen, bevor sie sich wieder vereinen. Die Wissenschaftler stellten fest, dass Nanopartikel aus Magnetit (Fe_3O_4) die Lebensdauer der Ladungsträgerpaare erhöht, so dass mehr von ihnen getrennt werden können – die Effizienz der Zelle steigt um elf Prozent von 3,05 auf 3,37 Prozent.

Allerdings darf die Beimischung der Nanopartikel nicht zu hoch sein, denn sie verändert die innere Struktur der organischen Solarzellen, wie die Röntgenuntersuchung belegt. „Die untersuchte Solarzelle kann eine Dotierung mit Magnetit-Nanopartikeln von bis zu einem Gewichtsprozent verkräften, ohne dass sich die Struktur ändert“, erläutert Ko-Autor Stephan Roth von DESY. Die Forscher erwarten, dass sich auch die Leistung anderer Kunststoff-Solarzellen durch die Dotierung mit Nanopartikeln steigern lässt.

Advanced Energy Materials, 2015; DOI: 10.1002/aenm.201401770



Bilder: TU München

Kristalline Strukturen innerhalb einer organischen Solarzelle führen zu charakteristischen Streubildern in den Untersuchungen mit Röntgenlicht (oben).

Die untersuchten organischen Solarzellen, hier auf einem Glasträger für Forschungszwecke (unten).

Tuberkulose-Puzzle

Bakterienenzym
überrascht Forscher



Bild: Ray Builer/CDC

Tuberkulosebakterien unter dem Elektronenmikroskop

Die Hamburger schickten genetisch veränderte Bakterien, denen dieser Komplex fehlte, an französische Kollegen vom Forschungszentrum CNRS. Die stellten überraschenderweise jedoch keinen Unterschied in der Zellwand im Vergleich mit normalen Tuberkulosebakterien fest. Kooperationspartner aus Zürich analysierten daraufhin, welche anderen Moleküle des Bakteriums im Zusammenhang mit dem untersuchten Enzymkomplex standen, EMBL-Forscher bestimmten die genaue Architektur des Enzyms.

Eine internationale Forscherkooperation hat die bislang unbekannt Funktion eines Tuberkulose-Enzymkomplexes aufgeklärt. Die Wissenschaftler um Matthias Wilmanns von der Hamburger Niederlassung des Europäischen Laboratoriums für Molekularbiologie (EMBL) auf dem DESY-Campus waren eigentlich auf der Suche nach Enzymen, die am Aufbau der ungewöhnlich dicken Zellwand des Erregers *Mycobacterium tuberculosis* beteiligt sind. Zusammen mit Kollegen der Polnischen Akademie der Wissenschaften hatten die Forscher dazu den Komplex AccD1-AccA1 als lohnendes Ziel identifiziert.

„Wir haben festgestellt, dass dieses Enzym an einem völlig anderen Prozess beteiligt ist“, berichtet Wilmanns. Es spielt demnach eine Rolle beim Abbau der essentiellen Aminosäure Leucin, einem der Bausteine von Proteinen. „Soweit wir wissen, ist dies der erste Hinweis, dass Mykobakterien einen eigenen Abbaupfad für Leucin besitzen“, erläutert Wilmanns. „Auch wenn dies nicht die Antwort ist, die wir erwartet haben, ist es von Bedeutung, ein weiteres Teil zum Puzzle hinzuzufügen zu können. Und das wird helfen, genauere Hemmstoffe gegen andere Komplexe dieser Proteingruppe zu finden.“

PLoS Pathogens, 2015; DOI: 10.1371/journal.ppat.1004623

Supermagnetfeld auf engstem Raum

Max-Planck-Physikern gelingt es, winzige Nanomagnete gezielt umzupolen

Die Kraft des stärksten Dauermagneten der Welt in einem Fleck so groß wie ein Atom. Diese rekordverdächtige Konstellation ist einem Forscherteam vom Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie auf dem Hamburger DESY-Campus geglückt. Sie sind in der Lage, eine aus drei Atomen bestehende Eisenkette mit einer feinen Mikroskopspitze gezielt magnetisch umzupolen. Der neue Effekt könnte die Entwicklung von Quantencomputern beflügeln und alternative Konzepte für künftige Speichermedien erschließen.

Zunächst formierten die Physiker auf einer glatten Kupferoberfläche drei Eisenatome mit der feinen Spitze eines Rastertunnelmikroskops zu einer kurzen Kette. Dadurch entstand ein winziger Nanomagnet. Dann manövrierten die Forscher eine magnetische Spitze sehr dicht über die Eisenkette. Durch einen Quanteneffekt baut sich dabei zwischen Mikroskopspitze und Eisenkette ein Magnetfeld mit besonderen Eigenschaften auf. „Einerseits ist es äußerst stark, andererseits räumlich sehr begrenzt“, sagt Shichao Yan, Erstautor der Studie.

Die Stärke erreicht einen Wert von einigen Tesla, mehr als der beste Dauermagnet. Dagegen beschränkt sich die Ausdehnung des Feldes auf den Bereich eines Atomdurchmessers. „Durch diese räumliche Begrenzung können wir winzigste Nanostrukturen gezielt ansteuern“, erläutert Max-Planck-Forscher Sebastian Loth. „Ein einzelnes Atomgrüppchen

lässt sich umpolen, seine Nachbarschaft bleibt dagegen völlig unbeeinflusst.“ Das macht den neuen Effekt als Kontrollprozess für Quantenbits interessant – der Schalteinheit von Quantencomputern. Zum anderen könnte das Phänomen für die Datenspeicherung relevant sein.

Nature Nanotechnology, 2014; DOI: 10.1038/nnano.2014.281



Mit dem starken Magnetfeld an der Mikroskopspitze lassen sich gezielt Nanomagnete kontrollieren.

Bild: Jörg Harms / MPSD



„Heuschober an einem Regentag“ (Korenschelf onder wolkenlucht; 1889, Kröller-Müller Museum). In und unter der winzigen Farbprobe (rechts) ist noch das leuchtende Orangerot zu sehen.

Van Goghs verblissenes Orange

In einem Gemälde des Niederländers Vincent van Gogh haben belgische Forscher bei DESY ein sehr seltenes Bleimineral entdeckt. Der Fund erhellt den Verfallsprozess des leuchtend orangeroten Pigments Bleimennige. Sein Orangerot kennen viele vor allem als Rostschutzfarbe. Künstler jedoch schätzen das Pigment schon seit der Antike. Verschiedene Alterungsprozesse führen allerdings mit der Zeit zum Verblässen des satten Farbtons. So reagiert Mennige (Pb_3O_4) beispielsweise unter dem Einfluss von Licht und Luft zu Bleiweiß (Hydrocerussit) und Weißbleierz (Cerussit).

Diesen Prozess hat das Team um Koen Janssens von der Universität Antwerpen jetzt weiter aufgeklärt. Die Forscher untersuchten eine mikroskopisch kleine Farbprobe aus van Goghs Gemälde „Heuschober an einem Regentag“ an DESYs Röntgenlichtquelle PETRA III und bestimmten dabei die Verteilung der verschiedenen Verbindungen in der Probe mit sehr hoher räumlicher Auflösung. Dabei stießen sie auf das sehr seltene Bleicarbonat-Mineral Plumbonacrit.

„Das ist das erste Mal, dass diese Substanz in einem Gemälde aus der Zeit vor Mitte des 20. Jahrhunderts gefunden wurde“, berichtet Frederik Vanmeert, Erstautor der Veröffentlichung. „Unsere Entdeckung wirft ein neues Licht auf den Aufhellungsprozess.“ Basierend auf den neuen Erkenntnissen nehmen die Wissenschaftler an, dass Licht zunächst eine Reduktion der Mennige zu PbO auslöst. Kohlendioxid aus der Luft oder aus Zersetzungsprodukten der Bindemittel der Ölfarbe bildet dann Plumbonacrit als eine wichtige Zwischenstufe, die dann unter fortschreitender CO_2 -Fixierung weiter zu Bleiweiß und zu Weißbleierz umgesetzt wird.

Angewandte Chemie, 2015; DOI: 10.1002/ange.201411691

Zeitlupe für Biomoleküle



Bild: SLAC National Accelerator Laboratory

Mit dem weltstärksten Röntgenlaser hat ein internationales Forscherteam unter Beteiligung von DESY ein lichtempfindliches Biomolekül bei der Arbeit beobachtet. Die Studie belegt, dass extrem kurze Röntgenblitze die schnelle Dynamik von Biomolekülen in einer Art Ultrazeitlupe festhalten können.

Die Wissenschaftler um Marius Schmidt von der Universität von Wisconsin hatten für ihre Untersuchungen das sogenannte photoaktive gelbe Protein (photoactive yellow protein, PYP) als Modellsystem benutzt. PYP ist ein Rezeptor für blaues Licht und Teil der Photosynthese-Maschinerie in bestimmten Bakterien. Sobald es ein blaues Lichtteilchen (Photon) einfängt, durchläuft es einen sogenannten Photozyklus, während es die Energie des Photons erntet. Schließlich kehrt es in seinen Ausgangszustand zurück. Die meisten Schritte des PYP-Photozyklus sind gut untersucht, was das Molekül zu einem exzellenten Kandidaten macht, um neue Untersuchungsmethoden an ihm zu überprüfen.

Für ihre ultraschnellen Schnapsschüsse der PYP-Dynamik nutzten die Forscher den Röntgenlaser LCLS am US-Beschleunigerzentrum SLAC in Kalifornien. Dank der ultrakurzen und -hellen LCLS-Röntgenblitze konnten die Wissenschaftler beobachten, wie das PYP im Verlauf des Photozyklus seine Form ändert. Mit einer Auflösung von 0,16 Nanometern sind diese Bilder die detailliertesten, die bisher mit einem Röntgenlaser von einem Biomolekül aufgenommen wurden.

Die Messung zeigt den Ablauf des PYP-Photozyklus in feinerem Detail als frühere Untersuchungen und belegt damit, dass die neue Technik funktioniert. „Das ist ein echter Durchbruch“, betont Henry Chapman von DESY. „Unsere Arbeit öffnet die Tür zu zeitaufgelösten Untersuchungen dynamischer Prozesse mit atomarer Auflösung.“

Science, 2014; DOI: 10.1126/science.1259357

Forscher filmen Magnetspeicher in Superzeitlupe

Die guten alten Musik- und Videokassetten gehören dazu, ebenso Magnetkarten, Disketten und Festplatten, allesamt magnetische Datenspeicher, die elektromagnetisch beschrieben und gelesen werden. Von gestern sind Magnetspeicher aber keineswegs. „Zwar kommen heute in Laptops und anderen mobilen Geräten immer häufiger nichtmagnetische Speichermaterialien wie beispielsweise Flash-Speicher zum Einsatz, aber wenn es um große Datenmengen geht, sind magnetische Datenspeicher konkurrenzlos günstig“, betont Philipp Wessels, der am Hamburg Centre for Ultrafast Imaging (CUI) in der Gruppe von Markus Drescher Magnetspeicher untersucht hat. „Der Trend geht zum Speichern in der Cloud, und die Cloud ist magnetisch.“

Der Trend geht zum Speichern in der Cloud, und die Cloud ist magnetisch

Um die Dynamik magnetischer Speichermaterialien besser zu verstehen, haben Wessels und seine Forscherkollegen mit einer Superzeitlupe bei DESY einen Datenspeicherkandidaten der Zukunft bei der Arbeit gefilmt. Der Film aus dem Röntgenmikroskop zeigt, wie sich magnetische Wirbel in ultraschnellen Speicherzellen ausbilden. „Zum ersten Mal lässt sich mit unseren Aufnahmen in Echtzeit verfolgen, wie die Magnetisierung genau abläuft“, betont Wessels. „Damit lässt sich das Schalten dieser Magnetzellen erstmals im Detail beobachten.“ Die Forscher haben für ihre Untersuchung eine Speicherzelle bestehend aus einer Mischung (Legierung) aus Nickel und Eisen gewählt, die sich in weniger als einer milliardstel Sekunde magnetisieren lässt.

Mit einem eigens konstruierten Röntgenmikroskop, das die Universität Hamburg zusammen mit der Hochschule Koblenz entwickelt hat, konnten die Wissenschaftler verfolgen, wie eine Speicherzelle gelöscht und neu beschrieben wird. Die extrem kurzen Röntgenblitze von DESYs Forschungslichtquelle PETRA III ermöglichten dabei eine Zeitauflösung von 0,2 milliardstel Sekunden (200 Pikosekunden). Die Magnetisierung lässt sich daran ablesen, wie stark einzelne Bereiche der Probe das polarisierte Röntgenlicht absorbieren. Das Röntgenmikroskop kann dabei noch 60 millionstel Millimeter (60 Nanometer) kleine Details erkennen.

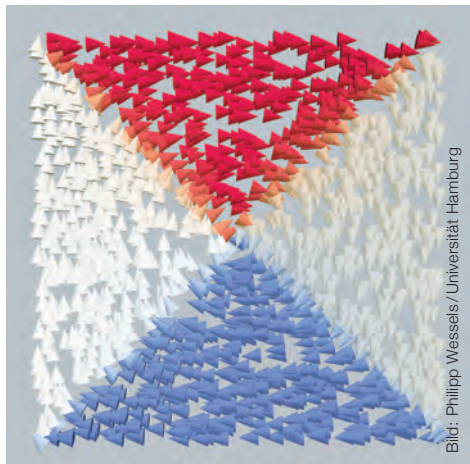
Magnetwirbel in der Speicherzelle

Für ihre Untersuchungen nutzten die Wissenschaftler winzige, quadratische Speicherzellen mit einer Kantenlänge von zwei tausendstel Millimetern (2 Mikrometer). Diese Speicherzellen formen in ihrem Inneren vier magnetische Bereiche aus, sogenannte Domänen, zwischen denen sich die Magnetisierung entweder mit oder gegen den Uhrzeigersinn ändert. Diese magnetischen Domänen sind dreieckig, und ihre Spitzen treffen sich in der Mitte der Speicherzelle. Auf diese Weise entsteht im Zentrum der Zelle ein magnetischer Wirbelkern.

Wird eine Speicherzelle durch ein äußeres Magnetfeld gelöscht, wandert der Magnetwirbelkern aus ihr heraus. „In unseren Untersuchungen ließ sich erstmals messen, mit welcher Geschwindigkeit die Wirbelkerne aus dem Material herausgedrückt werden“, erläutert Jens Viefhaus von DESY. Ein solcher Kern schießt demnach mit über 3600 Kilometern pro Stunde aus der Speicherzelle hinaus. „Dieser Vorgang lässt



Philipp Wessels von der Universität Hamburg untersucht Magnetspeicher.



Darstellung der Magnetfeldrichtung in der Speicherzelle

sich sehr gut reproduzieren, so dass wir die Geschwindigkeit zuverlässig bestimmen konnten“, ergänzt CUI-Forscher Guido Meier. „Möglich wurde diese Messung nur, weil wir sehr starke und stabile magnetische Anregungspulse verwenden konnten.“

Ein besseres Verständnis der Magnetdynamik kann zu schnelleren, leistungsfähigeren Speichermaterialien führen

Zickzack in Superzeitlupe

Das äußere Magnetfeld erzwingt in der gesamten Speicherzelle eine einheitliche Magnetisierung. Wird es abgeschaltet, bildet die Zelle erneut die vier magnetischen Domänen und einen zentralen Wirbel aus – je nach Richtung des äußeren Magnetfelds ist sie damit neu beschrieben worden. Dieser Vorgang ist jedoch komplex. „Der Vier-Domänen-Zustand entwickelt sich über ein kompliziertes Zickzackmuster, und die Entstehung dieses Zustandes konnten wir erstmals ‚live‘ beobachten“, berichtet Wessels. Dieses Verhalten deckt sich mit Ergebnissen aus Simulationsrechnungen. Die Superzeitlupe erlaubt nun genauere Einblicke in diese schnelle Dynamik. „Mit derselben Methode lässt sich die Dynamik beliebiger anderer Magnetmaterialien untersuchen“, betont Wessels. „Unsere Experimente können dazu beitragen zu verstehen, wie schnell man Daten prinzipiell auf magnetische Speichermaterialien kodiert in Domänenform schreiben kann.“ Ein besseres Verständnis der Magnetdynamik kann so zu schnelleren und leistungsfähigeren Speichermaterialien führen.

Physical Review B, 2014; DOI: 10.1103/PhysRevB.90.184417

femto menal



Kälter als das Universum

Kein Ort und kein Gegenstand im Universum kann kälter werden als minus 273,15 Grad Celsius. Der englische Physiker Lord Kelvin wählte daher diesen Punkt als absoluten Nullpunkt der nach ihm benannten Temperaturskala. Auf der Erde sind wir von solchen Temperaturen weit entfernt. In Deutschland melden die Schlagzeilen schon Kälterekorde, wenn die Temperaturen unter minus 30 Grad fallen, in der Antarktis liegt der eisige Rekord bei minus 93 Grad. Deutlich frostiger ist das Weltall mit minus 270,42 Grad Celsius oder 2,73 Kelvin.

Noch kälter als im Weltall geht es bei den Beschleunigerexperten auf dem DESY-Campus in Hamburg zu. Die Beschleunigermodule für den Freie-Elektronen-Laser FLASH und den europäischen Röntgenlaser European XFEL bringen die Elektronen erst bei minus 271 Grad ausreichend auf Trab. Erst dann arbeiten die Beschleunigerelemente aus dem Metall Niob supraleitend.

Noch kälter geht es, wenn man nicht kilometerlange Beschleuniger, sondern nur einzelne Atome auf Tiefsttemperaturen bringt. Solche ultrakalten Atome nähern sich dem absoluten Temperaturnullpunkt bis auf Milliardstel Kelvin oder sogar noch weniger an.

Röntgenblitze zeigen freie Nanopartikel erstmals in

3D

Nanopartikel sind dabei, unseren Alltag zu erobern. Die Anwendungen dieser winzigen, mit dem Auge nicht wahrnehmbaren Teilchen reichen vom Sonnenschutz über Effektlacke, Farbfilter und elektronische Komponenten bis hin zum medizinischen Einsatz, etwa zur Krebsbekämpfung. Die Abmessungen der Teilchen liegen im Bereich von Nanometern (millionstel Millimeter), hunderte Male dünner als ein menschliches Haar.

Ein deutsch-amerikanisches Forscherteam hat mit DESYs Röntgenlaser FLASH erstmals die dreidimensionale Form frei fliegender Silber-Nanopartikel bestimmt. „Die Funktionalität der Nanopartikel ist mit ihrer geometrischen Form verknüpft, die oft experimentell sehr schwierig zu bestimmen ist“, erläutert Ingo Barke von der Universität Rostock. „Das gilt vor allem, wenn sie als freie Teilchen vorliegen, also ohne Kontakt zu einem Untergrund oder einer Flüssigkeit.“

Die Gestalt eines Nanopartikels lässt sich aus der charakteristischen Art und Wei-

se berechnen, wie es Röntgenlicht streut. Röntgenquellen wie FLASH dienen damit als eine Art Supermikroskop für die Nanowelt. Bisher haben Forscher die räumliche Struktur von Nanopartikeln üblicherweise aus mehreren zweidimensionalen Aufnahmen rekonstruiert, die aus unterschiedlichen Richtungen aufgenommen wurden. Bei Teilchen, die sich auf festen Substraten befinden, ist das kein Problem – sie können aus vielen verschiedenen Richtungen aufgenommen werden, um ihre dreidimensionale Form zweifelsfrei zu rekonstruieren.

„Bringt man Nanopartikel in Kontakt mit einer Oberfläche oder Flüssigkeit, können sie sich jedoch verändern, so dass wir nicht mehr ihre eigentliche Form sehen“, sagt Daniela Rupp von der TU Berlin. Ein freies Teilchen kann im Flug jedoch nur ein einziges Mal abgebildet werden, bevor es aus dem

Die Funktionalität der Nanopartikel ist eng mit ihrer geometrischen Form verknüpft

Untersuchungsbereich entkommen ist oder durch das intensive Röntgenlicht zerstört wurde. Daher ist eine Methode notwendig, bei der bereits das Streubild eines einzigen Laserblitzes die volle räumliche Strukturinformation enthält.

Ein komplettes Bild mit einem Blitz

Den Physikern um Thomas Möller von der TU Berlin sowie Karl-Heinz Meiwes-Broer und Thomas Fennel von der Universität Rostock ist dies nun in Zusammenarbeit mit den Kollegen von SLAC und DESY am Röntgenlaser FLASH mit einem Trick gelungen. Dazu wird das Streubild nicht wie sonst üblich unter einem kleinen Winkel rund um die Richtung des einfallenden Röntgenblitzes aufgenommen, sondern in einem weiten Bereich um das Nanopartikel herum. „Mit diesem Ansatz nehmen wir

sozusagen gleichzeitig die Struktur aus vielen unterschiedlichen Richtungen auf, ohne die Teilchen mehrfach belichten zu müssen“, erklärt Fennel.

Die Forscher testeten dieses Verfahren an 50 bis 250 Nanometer (0,00005 bis 0,00025 Millimeter) kleinen Nanoteilchen aus Silber, die in einem Trägergas durch den Röntgenstrahl geleitet wurden. Der Test belegt nicht nur, dass diese Methode funktioniert, sondern förderte auch überraschende Ergebnisse zutage. Die Untersuchung zeigt, dass vergleichsweise große Nanoteilchen eine größere Formenvielfalt aufweisen als erwartet.

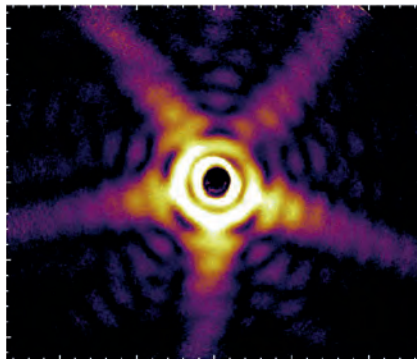
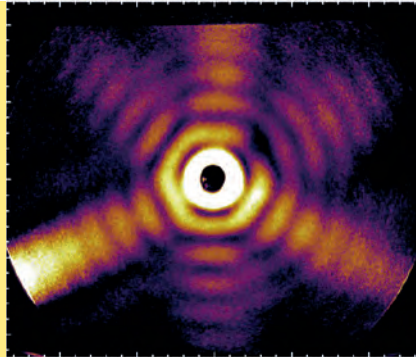
Die äußere Gestalt von freien Nanoteilchen resultiert aus unterschiedlichen physikalischen Prinzipien, besonders aber aus dem Bestreben des Teilchens, seine Energie zu minimieren. Dadurch ergeben sich für große Partikel aus

Tausenden oder Millionen von Atomen oft vorhersagbare Formen, da diese Atome nur in einer bestimmten Art und Weise energetisch besonders günstig angeordnet sind.

Silber in 3D

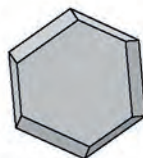
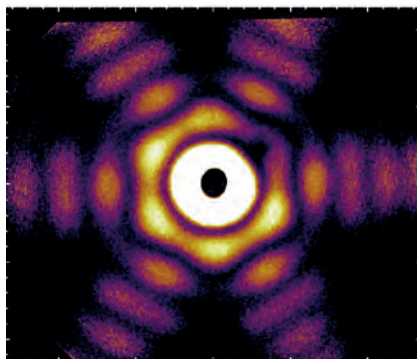
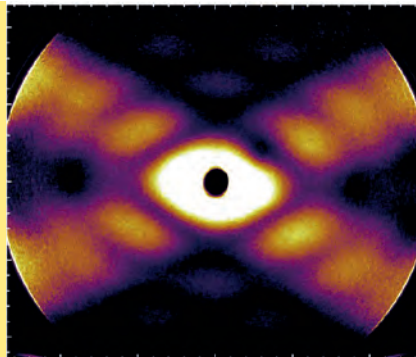
In ihrer Untersuchung beobachteten die Forscher jedoch eine große Vielfalt hochsymmetrischer dreidimensionaler Formen, darunter sogenannte Platonische und Archimedische Körper wie den Oktaederstumpf (ein Körper aus acht gleichen Dreiecken, dessen Spitzen gekappt wurden) und den Ikosaeder (ein Körper aus zwanzig gleichen Dreiecken). Letzterer ist eigentlich nur für extrem kleine Teilchen aus wenigen Atomen besonders stabil, und sein Vorkommen bei freien Partikeln dieser Größe war bisher nicht bekannt. „Die Ergebnisse zeigen, dass metallische Nanopartikel eine Art Gedächtnis ihrer Struktur aus frühen Wachstumsstadien bis hin zu einem bisher unerforschten Größenbereich behalten“, führt Barke aus.

Röntgenstreubild (links) eines Nanopartikels in Form eines Oktaederstumpfs (rechts) mit 200 Nanometern Durchmesser



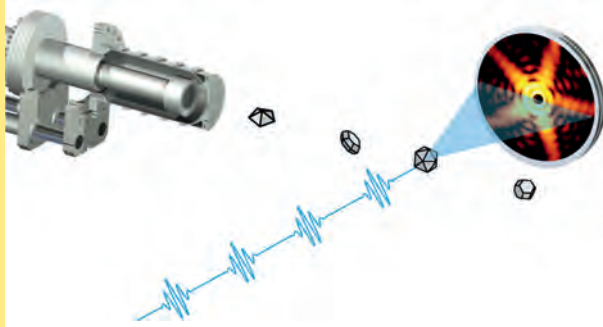
Röntgenstreubild (links) eines Nanopartikels in Form eines Ikosaeders (rechts) mit 240 Nanometern Durchmesser

Röntgenstreubild (links) eines Nanopartikels in Form eines Dekaeders (rechts) mit 180 Nanometern Durchmesser



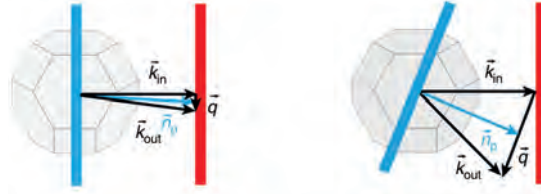
Röntgenstreubild (links) eines Nanopartikels in Form eines Zwillings-Tetraederstumpfs (rechts) mit 150 Nanometern Durchmesser

Die Struktur wird gleichzeitig aus vielen unterschiedlichen Richtungen aufgenommen, ohne dass die Teilchen mehrfach belichtet werden müssen



Im Experiment werden die Silberteilchen in einer Partikelquelle (links im Bild) erzeugt und in den Fokus des FLASH-Lasers (blau dargestellt) geleitet. Das an den einzelnen Teilchen gestreute Licht wird von einem Detektor registriert (rechts).

Wird das gestreute Licht nur unter einem kleinen Winkel aufgenommen (links), enthält es lediglich die Informationen über die Projektion des Partikels. Aufnahmen unter großem Winkel (rechts) enthalten vergleichbare Informationen wie viele Aufnahmen unter kleinem Winkel, bei denen das Partikel gedreht wird. Auf diese Weise liefern Aufnahmen unter großem Winkel Informationen über die dreidimensionale Struktur.



Teilchen könnten künftig beim Wachstum oder während Phasenübergängen direkt dreidimensional „gefilmt“ werden

Bilder: Harnes Hartmann/
Universität Rostock

Insbesondere wegen der Formenvielfalt war es besonders wichtig, eine schnelle Rechenmethode zu verwenden, um die Gestalt jedes einzelnen Teilchens zuzuordnen zu können. Die Forscher bedienten sich dabei eines zweistufigen Verfahrens: Zunächst wurde die grobe Form bestimmt, die dann mit aufwendigen Simulationen an einem Großrechner bis ins Detail verfeinert wurde. Diese Taktik stellte sich als so effizient heraus,

dass sie nicht nur eine große Vielfalt an Formen zuverlässig bestimmen, sondern auch unterschiedliche Orientierungen derselben Form unterscheiden konnte.

Die neue Möglichkeit, die dreidimensionale Form und Orientierung von Nanopartikeln mit nur einem einzigen Schuss eines Röntgenlasers bestimmen zu können, eröffnet eine Vielzahl neuer Forschungsrichtungen. Teilchen

könnten in zukünftigen Projekten beim Wachstum oder während Phasenübergängen direkt dreidimensional „gefilmt“ werden. „Die Reaktion eines Teilchens auf den intensiven Röntgenblitz direkt zu filmen ist ein lang gehegter Traum vieler Physiker, der jetzt Wirklichkeit werden könnte – und das in 3D!“, freut sich Rupp.

Nature Communications, 2015; DOI: 10.1038/ncomms7187

Erreger im Röntgenblick

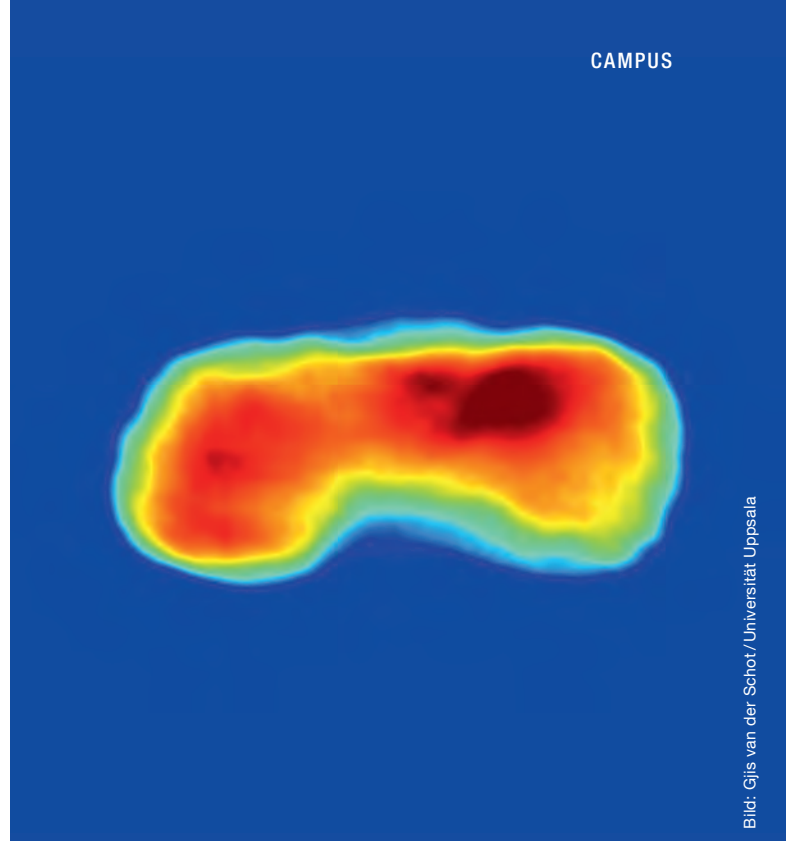
Forscher untersuchen
Viren und lebende Bakterien

Mit dem stärksten Röntgenlaser der Welt sind Forscher tief in den biologischen Mikrokosmos vorgedrungen. Den Wissenschaftlern unter Leitung von Jonas Hajdu von der Universität Uppsala ist es gelungen, lebende Bakterien zu durchleuchten und sogar einzelne Zellorganellen abzulichten. Zudem konnten sie eine dreidimensionale Aufnahme eines Virus gewinnen. Die Versuche am Röntgenlaser LCLS des US-Forschungszentrums SLAC, an denen auch DESY-Wissenschaftler beteiligt waren, illustrieren das enorme Potenzial solcher Untersuchungen.

Üblicherweise sind biologische Zellen tot und chemisch fixiert, wenn sie mit Röntgenstrahlung untersucht werden. „Wenn man die Details der Funktionsweise einer Zelle ganz verstehen will, braucht man sie lebend“, betont Hajdu. Um die Durchleuchtung lebender Zellen zu demonstrieren, sprühten die Forscher sogenannte Cyanobakterien durch den LCLS-Röntgenstrahl. Trifft der Röntgenstrahl ein solches Bakterium, entsteht ein charakteristisches Streubild, aus dem sich die Struktur der untersuchten Zelle berechnen lässt.

„Obwohl die Röntgenstrahlung die Zellen zerstört, lassen sich mit den ultrakurzen und sehr hellen Blitzen eines Röntgenlasers Streubilder schnell genug aufnehmen, um ein korrektes Bild der Probe zu gewinnen, bevor sie verdampft“, erläutert DESY-Forscher Anton Barty, einer der beteiligten Wissenschaftler. „Die Blitze sind schneller als die Zerstörung.“ Auf diese Weise rekonstruierten die Wissenschaftler individuelle Bakterienzellen mit einer Detailschärfe von 76 Nanometern. Ein Nanometer ist ein millionstel Millimeter. „Die gesammelten Daten deuten darauf hin, dass wir bis hinunter zu 4 Nanometern gehen können, das ist die Größe eines Proteinmoleküls“, berichtet Tomas Ekeberg von der Universität Uppsala, Leiter des Experiments.

In einem weiteren Versuch sprühten die Forscher einzelne Zellorganellen in den Röntgenstrahl. Zellorganellen sind die funktionalen Einheiten innerhalb der Zelle. Die Wissenschaftler wählten sogenannte Carboxysomen von Cyanobakterien, das sind rund 100 Nanometer kleine Organellen, die für die Fixierung von Kohlenstoff zuständig sind. Für herkömmliche



Rekonstruktion eines Cyanobakteriums aus dem Röntgenstreubild

Röntgenuntersuchungen müssen Moleküle in der Regel kristallisiert werden. Das ist bei vielen Biomolekülen jedoch nur schwer oder gar nicht möglich. Forscher suchen daher nach Methoden, individuelle, nicht-kristallisierte Objekte mit Hilfe der Röntgenstreuung zu untersuchen.

„Die Carboxysomen sind bislang die kleinsten biologischen Objekte, die in nicht-kristallisierter Form mit einem Röntgenlaser untersucht wurden“, sagt der Leiter dieser Versuche, Max Hantke von der Universität Uppsala. Die berechneten Bilder zeigen Details bis zu einer Größe von 18 Nanometern.

Das Potenzial für die Untersuchung von Viren demonstrieren die Forscher in einer dritten Studie, in der sie die dreidimensionale Struktur des sogenannten Mimivirus mit dem Röntgenlaser bestimmten. Das Mimivirus gehört zu den Riesenviren, es hat einen Durchmesser von etwa 750 Nanometern. Die Wissenschaftler sprühten intakte Viruspartikel durch den Röntgenstrahl und kombinierten die Einzelporträts der individuellen Viren zu einem dreidimensionalen Modell eines Mimivirus. „Unsere Untersuchung liefert nur einen flüchtigen Blick auf das Potenzial künftiger Untersuchungen dreidimensionaler biologischer Strukturen mit Röntgenlasern wie der LCLS oder dem European XFEL, der zurzeit in Hamburg entsteht“, betont DESY-Forscher Henry Chapman, Mitautor der Studie.

Nature Communications, 2015; DOI: 10.1038/ncomms6704

Nature Photonics, 2014; DOI: 10.1038/NPHOTON.2014.270

Physical Review Letters, 2015; DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.098102

MIT ENTSETZEN SCHAUTE ICH AUF DIE BILDER UM DEN CHARLIE HEBDO ANSCHLAG VOR EINIGER ZEIT IN PARIS.



ES LIEGT WOHL IN DER NATUR DES SATIRIKERS, WIE AUCH DES WISSENSCHAFTLERS, WELTBILDER IN FRAGE ZU STELLEN, WODURCH SICH EINIGE MENSCHEN ANGEGRIFFEN FÜHLEN UND TATSÄCHLICH SOLCHE TATEN RECHTFERTIGEN...



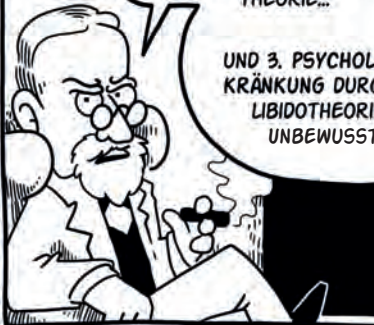
SIGMUND FREUD POSTULIERTE 1917 DIE „3 KRÄNKUNGEN DER MENSCHHEIT“ FÜR SEINER MEINUNG NACH REVOLUTIONÄRE WISSENSCHAFTLICHE ERKENNTNISSE, DIE DAS NARZISTISCHE SELBSTBEWUSSTSEIN DER MENSCHEN IN FRAGE STELLEN UND DESHALB BESONDERE ABLEHNUNG ERFAHREN.



1. KOSMOLOGISCHE KRÄNKUNG DURCH KOPERNIKANISCHE WENDE VOM GEOZUM HELIOZENTRISCHEN WELTBILD...

2. BIOLOGISCHE KRÄNKUNG DURCH DARWIN'S EVOLUTIONSTHEORIE...

UND 3. PSYCHOLOGISCHE KRÄNKUNG DURCH MEINE LIBIDOTHEORIE DES UNBEWUSSTEN.



ECHT JETZT, SIGGI?

EINFACH MAL DEINE THEORIE AUF EINER STUFE MIT EINIGEN DER GRÖßTEN WISSENSCHAFTLICHEN ARBEITEN DER MENSCHHEIT?!



WERDN'S NET GOSCHAT, BUB!

ABER WENN ICH ES MIR JETZT SO ÜBERLEGE, HAT ES SICH AUCH IN DEN LETZTEN JAHRHUNDERTEN GEBESSERT...



SO IST MIR KEIN EINZIGER FALL DER NEUZENT BEKANTT, BEI DEM JEMAND SEINE ARBEIT ÖFFENTLICH WIDERRUFEN MUSSTE...



ODER GAR...

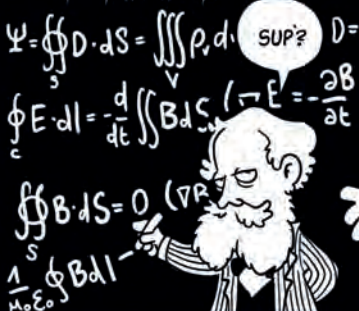
ABER MONSIGNOR!! EIN NEGATIVES PEER-REVIEW HÄTTE ES AUCH GETAN!



...ODER GANZE MEDIENKAMPAGNEN INSZENIERT WERDEN.



IST WISSENSCHAFT HEUTZUTAGE SO ABSTRAKT, DASS SIE NICHT MEHR IN ALL IHREN IMPLIKATIONEN VERSTANDEN WIRD...



ODER WURDE SIE GAR ALS KATALYSATOR DES MODERNEN FORTSCHRITTS AKZEPTIERT?!

KLIMAWANDEL EXISTIERT NICHT!

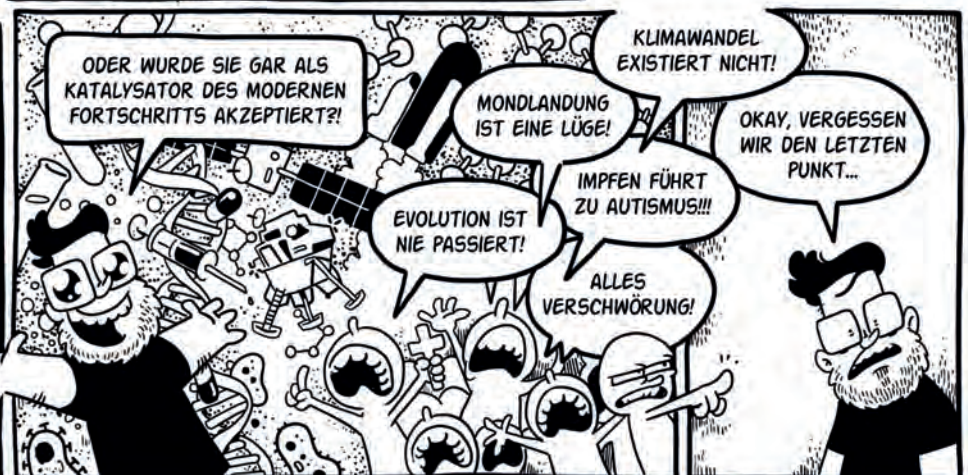
MONDLANDUNG IST EINE LÜGE!

OKAY, VERGESSEN WIR DEN LETZTEN PUNKT...

EVOLUTION IST NIE PASSIERT!

IMPFEN FÜHRT ZU AUTISMUS!!!

ALLES VERSCHWÖRUNG!



Impressum

femto wird herausgegeben vom
Deutschen Elektronen-Synchrotron DESY,
einem Forschungszentrum der Helmholtz-Gemeinschaft

Redaktionsanschrift

Notkestraße 85, D-22607 Hamburg
Tel.: +49 40 8998-3613, Fax: +49 40 8998-4307
E-Mail: femto@desy.de
Internet: www.desy.de/femto
ISSN 2199-5184

Redaktion

Till Mundzeck (v.i.S.d.P.), Ute Wilhelmssen

An dieser Ausgabe hat mitgewirkt

Frank Grotelüschen

Gestaltung und Produktion

Diana von Ilsemann

Druck und Bildbearbeitung

reset, Hamburg

Redaktionsschluss

März 2015

femto

Das DESY-Forschungsmagazin

Abonnieren Sie
femto kostenlos!

www.desy.de/femto oder 040 8998-3613



Das Forschungszentrum DESY

DESY zählt zu den weltweit führenden Beschleunigerzentren. Mit den DESY-Großgeräten erkunden Forscher den Mikrokosmos in seiner ganzen Vielfalt – vom Wechselspiel kleinster Elementarteilchen über das Verhalten neuartiger Nanowerkstoffe bis hin zu jenen lebenswichtigen Prozessen, die zwischen Biomolekülen ablaufen. Die Beschleuniger und die Nachweisinstrumente, die DESY an seinen Standorten in Hamburg und Zeuthen entwickelt und baut, sind einzigartige Werkzeuge für die Forschung: Sie erzeugen das stärkste Röntgenlicht der Welt, bringen Teilchen auf Rekordenergien und öffnen völlig neue Fenster ins Universum.



DESY ist Mitglied der Helmholtz-Gemeinschaft,
der größten Wissenschaftsorganisation Deutschlands.