

Proteinstrukturen sind zwischen 8 und 2000 kDa groß und in einer bis zu fünfstufigen Hierarchie organisiert. Allein eine grafische Darstellung der Atomanordnung ist schon aufwändig. Auch für Biomoleküle werden Einkristalle zur Analyse benötigt, deren Züchtung aus der Lösung wegen der geringen Bindungskräfte zwischen den Molekülen schwieriger als bei nichtbiologischen ist. Während des Experiments mit Röntgen- oder Elektronenstrahlen muss auch die Stabilität des Proteinkristalls gesichert werden. Trotz des hohen Aufwands konnten kurz nach Bekanntwerden des Virus im Dezember 2019 allein im vergangenen Jahr 345 neue Strukturdatensätze für das S Glycoprotein des Spikes ermittelt und der Datenbank wwPDB (Tabelle 1) zugeführt werden [20].

Levinthal-Paradox vor der Lösung

Während die Suche nach einem anorganischen Stein der Weisen in das kombinatorische Abseits führte, käme es auch bei der Suche nach dem biostrukturellen Pendant – dem Eiweiß – zur analogen kombinatorischen Katastrophe, wenn eine Kette von Aminosäuren die richtige Faltung über eine Peptidbindung zufällig (durch Probieren) finden müsste. Dann würden im Gegensatz zur Beobachtung utopische Zeiträume gebraucht [21]: bei einer angenommenen Zeitdauer von $\approx 10^{-13}$ s für die Änderung einer der 10^{30} Konformationen eine Dauer von $\approx 10^{17}$ s $\approx 10^{10}$ Jahre. Der Faltungsprozess des Eiweißmoleküls folgt offenbar einer zielgerichteten Prozedur und ist nicht zufällig.

Der zweijährlich stattfindende Wettbewerb von Berechnungsmethoden der Faltung einer vorgegebenen Aminosäuresequenz (Critical Assessment of Protein Structure Prediction (CASP)) endete 2020 mit einem überlegenen Vorsprung des Programms ‚AlphaFold‘ des Entwicklers ‚Deep Mind‘. Es kombiniert neuronales Netz mit Kurzzeitspeicher für künstliches Gedächtnis und kann Faltungen mit einem mittleren Fehler von $1,6 \cdot 10^{-10}$ m vorhersagen. Diese Qualität wird von

der Fachwelt als Durchbruch bei der Lösung des Levinthal-Paradoxes [22] wahrgenommen, der die gesamte Forschung in Medizin und Biotechnologie verändern wird [23]. Die Methode macht künftig Experimente noch nicht überflüssig, reduziert aber die Anforderungen daran wesentlich.

Der Leitung des ZeHS und allen Angehörigen wünsche ich nutzbringenden Gebrauch der neuen Suchmethoden.

Literaturverzeichnis

- 1 H.-W. Schütt, Auf der Suche nach dem Stein der Weisen. Die Geschichte der Alchemie., München, 2000.
- 2 W. Barlow, Nature, Bd. 29, pp. 186-188 u. 205-207, 1883.
- 3 W. L. Bragg, Proc. Cambr. Phil. Soc., Bd. 17, pp. 43-57, 1912.
- 4 G.E.R. Schulze, Krist. Technik, Bd. 1, pp. 375-386, 1966.
- 5 J. Dshemuchadse, D. Y. Jung, W. Steurer, Acta Cryst. B, Bd. 67, pp. 269-292, 2011.
- 6 A. Authier, Early days of X-ray crystallography, Oxford, 2013.
- 7 E. M. Savickij, V. B. Gribulja, Prognozirovanie neorganiceskich soedinenii s pomoscju EVM, Moskva, 1977, p. 189.
- 8 Exec. Office Presid. Unit. States, Nat. Sci. Technol. Coun., „Materials Genome Initiative, Strategic Plan,“ Washington D.C., 2014.
- 9 S. Huang, J. M. Cole, Sci. Data, Bd. 7(260), pp. 1-13, 2020.
- 10 D. M. Lowe, R. A. Sayle, J. Cheminf., Bd. 7 (Suppl.1), pp. S5-S9, 2015.
- 11 P. B. de Castro et al., NPG Asia Mater., Bd. 12:35, pp. 1-7, 2020.
- 12 K. T. Mukaddem et al., J. Chem. Inf. Model., Bd. 60, pp. 2492-2509, 2019.
- 13 P. Verma, D. G. Truhlar, Trends in Chem., Bd. 2(4), pp. 302-318, 2020.
- 14 S. Kirklin et al., NPI Comp.Mater., Bd. 1(15010), pp. 1-15, 2015.
- 15 A. C. Walls et al., Cell, Bd. 180, pp. 281-292, 2020.
- 16 https://www.rki.de/DE/Content/InfAZ/N/Neuartiges_Coronavirus/Virologische_Basisdaten.html „Virologische Basisdaten,“ 11.07.2021.
- 17 O. Ziv et al., Mol. Cell, Bd. 80, pp. 1067-1077, 2020.
- 18 L. Zhang et al., Science, Bd. 368, p. 409-412, 2020.
- 19 B. Rupp, Biomolecular Crystallography. Principles, Practice and Application to Structural Biology, Abington, 2010, p. 809.
- 20 E. N. Baker, IUCr, Bd. 8, pp. 331-332, 2021.
- 21 C. Levinthal, J. Med. Phys., Bd. 65, pp. 44-45, 1968.
- 22 D. N. Ivankov, A. V. Finkelstein, Biomol., Bd. 10(250), pp. 1-19, 2020.
- 23 E. Callaway, Nature, Bd. 588, pp. 203-204, 2020.

Das neue Zentrum für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung (ZeHS)

Theresa Lemser im Namen des Direktoriums des ZeHS^{1,2}

Mit der Förderempfehlung des Wissenschaftsrats für einen in Freiberg zu errichtenden Forschungsbau nach erfolgreicher Teilnahme am bundesweiten Wettbewerb gemäß Art. 91 b GG begann im Mai 2015 die Realisierung eines den Wissenschaftskorridor der TU Bergakademie Freiberg (TU BAF) besonders prägenden Bauvorhabens: die des Zentrums für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung (ZeHS). Seitdem wurden viele Etappen durchlaufen, wozu die zurückliegenden Ausgaben der ACAMONTA mehrfach berichtet hatten³. Der nachstehende Überblick benennt wichtige Zeitmarken der Umsetzung dieses Großvorhabens (Abb. 1).

Am 22. Februar 2021 ist das ZeHS nach nur vierjähriger Bauzeit offiziell an die TU BAF übergeben worden. Unter der Regie des SIB (Staatsbetrieb Sächsisches Immobilien- & Baumanagement) war es plankonform unter Beteiligung aller erforderlichen Gewerke errichtet worden. Erste Teilbereiche konnten schon ab dem Frühjahr des Jahres 2020 sukzessive

an die TU BAF übergeben und von den Nutzern in Betrieb genommen werden. Die reinen Baukosten beliefen sich auf 34,2 Mio. Euro. Über 80 Prozent der Aufträge wurden von sächsischen Planungs- und Bauunternehmen ausgeführt. Parallel zum Baugeschehen erfolgte die Installation der im Zuge des Antragsverfahrens mitverteidigten Forschungsgroßgeräte im Gesamtwert von 9,75 Mio. Euro. Damit erhält der Forschungsstandort Freiberg – im bundesweiten Vergleich und erfolgreich im internationalen Wettbewerb stehend – einen maßgeblichen Aufwuchs.

Im Zusammenhang mit der Übergabe des Zentrums hielt Sachsens Wissenschaftsminister Sebastian Gemkow fest: „Mit der Konzentration der an der TU Bergakademie Freiberg vorhandenen Kompetenzen wird am ZeHS interdisziplinäres Forschen auf höchstem Niveau ermöglicht. Im Fokus der wissenschaftlichen Arbeit stehen Ressourcen- und Energieeffizienz zur Schaffung nachhaltiger Industrieprozesse.“

Von der Beantragung bis zur Eröffnung des ZeHS

28. Juni 2013	Vorlage der Bedarfsanmeldung
13. September 2013	Einreichung der Antragsskizze
05. November 2013	Verteidigung der Antragsskizze (D.C. Meyer)
09. Januar 2014	Einreichung des Vollartrags
21. Februar 2014	Verteidigung des Vollartrags (D.C. Meyer)
16. Januar 2015	Einreichung der erweiterten Version des Vollartrags
04. März 2015	Verteidigung der erweiterten Version des Vollartrags
24. April 2015	Förderempfehlung des Wissenschaftsrats
27. Mai 2015	Planungsauftrag des Sächsischen Staatsministeriums der Finanzen (SMF) an das Sächsische Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst (SMWK)
18. Juni 2015	Anerkennung der Bedarfsanmeldung durch den SIB und das SMF
19. Juni 2015	Förderbeschluss der Gemeinsamen Wissenschaftskonferenz
25. Juni 2015	Auftakt der Bauberatungen im SMWK und SIB
12. Mai 2017	Symbolischer „Baggerbiss“ zum Baubeginn
22. März 2019	Richtfest
22. Februar 2021	Übergabe des Baus an die TU BAF
01. April 2021	Aufnahme der Arbeit durch das neu gebildete Direktorium (D.C. Meyer; B. Meyer, E. Kroke)
04. Mai 2021	Feierliche Inbetriebnahme durch die Nutzer
04. Mai 2021	Verleihung der Goldenen Ehrennadel der Bergakademie an Prof. Dirk C. Meyer

Abbildung 1: Zeitstrahl

Nicht ohne Grund hat der Wissenschaftsrat diesen technologischen Zielstellungen des ZeHS eine ‚sehr hohe gesellschaftliche und wirtschaftliche Relevanz‘ bescheinigt, gehören sie doch zu den drängenden Aufgaben der Zukunft. Gleichzeitig steht die Forschung am ZeHS in der Tradition der Kern-Forschungsbereiche der ältesten montanwissenschaftlichen Hochschule der Welt.“

Dem Wissenschaftlichen Sprecher, Prof. Dirk C. Meyer, war es ein besonderes Anliegen, hervorzuheben, dass „das Zusammenwirken aller Beteiligten, darunter auch das Sächsische Staatsministerium für Wissenschaft, Kultur und Tourismus sowie das Baudezernat der TU BAF, unter Moderation des SIB in einer ausgesprochen konstruktiven Weise erfolgte, womit die Intentionen der Nutzeranforderungen sowie des gesamten Wettbewerbs hervorragend umgesetzt und die vorgesehene Bauzeit eingehalten werden konnten.“

Mit dem wissenschaftlichen Auftakt am 4. Mai 2021 wurden die Arbeiten im ZeHS offiziell gestartet – wozu teilweise umfassende Vorausplanungen wie auch weitere Forschungen gehörten und gehören. Im Rahmen einer feierlichen Veranstaltung würdigte der Rektor der Bergakademie, Prof. Klaus-Dieter Barbknecht, besonders die Verdienste des Wissenschaftlichen Sprechers des Zentrums, Prof. Dirk C. Meyer, für die Bergakademie, insbesondere sein unermüdliches Engagement für das ZeHS mit der Verleihung der Goldenen Ehrennadel der Universität. „Mit Prof. Dr. Dirk Meyer ehren wir einen begabten Leiter sowie international ausgezeichneten Wissenschaftler, der sich seit seiner Berufung an die TU Bergakademie Freiberg im Jahr 2009 für

ihre Weiterentwicklung in Forschung und Lehre einsetzt“. Prof. Dirk C. Meyer war von 2010 bis 2016 als Prorektor tätig und engagierte sich in den Bereichen Bildung und Strukturentwicklung, wo er sich unter anderem maßgeblich an der Einwerbung des vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Vorhabens MESIOR zu strukturellen Maßnahmen und zur Personalstärkung im Bildungsbereich sowie für den Antrag für das hier dargestellte Vorhaben erfolgreich einsetzte. Im mehrstufigen Antragsprozess des letztgenannten Vorhabens gelang es ihm, die Interessen von zirka 25 Professuren und damit die Forschungsprogrammatik der gesamten TU BAF vor Kommissionen des Wissenschaftsrats erfolgreich zu vertreten und die Fördermittel für den Bau des ZeHS mit persönlichem Einsatz einzuwerben. Auch nach seiner Prorektorenzeit begleitete Prof. Dirk C. Meyer das Projekt während der gesamten, fünfjährigen Bauphase mit besonderer Intensität weiter. Vorbilder für die am ZeHS vorgesehene Zusammenarbeit waren für ihn die im Zentralen Reinraumlabor bereits gelebte Kooperation, klug konzipierte Infrastrukturen, wie die Kompetenzzentren der Sächsischen Landesexzellenzinitiative und das tägliche Erleben der stetigen Fortentwicklung der Universität. In besonderer Weise setzt er sich auch für die Vernetzung des ZeHS mit internationalen Großforschungseinrichtungen ein, wie dem Deutschen Elektronen-Synchrotron DESY und dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf.

Die Forschungsschwerpunkte am ZeHS werden maßgeblich durch die beiden Kompetenzzentren „Hochtemperaturprozesse – Vom Mechanismus zur Anwendung“ und

„Hochtemperaturmaterialien – Vom Material zum Bauteil“ bestimmt; sollen durch deren Leiterinnen und Leiter vorangebracht werden. Ergänzt wird deren Arbeit durch drei fachspezifische Koordinationsstellen in den Bereichen „Materialien und Eigenschaften“, „Material-, Bauteil- und Prozesssimulation“ sowie „Technologiemanagement und Systemanalyse“, die die methodischen Kompetenzen mit der Geräteinfrastruktur innerhalb des ZeHS repräsentieren. In der damit gegebenen Matrix aus Methoden-, Stoff-, Prozess- und Systemkompetenz ist eine Qualität des Zusammenspiels sich gegenseitig ergänzender und durchdringender Wissensgebiete möglich, wie sie nur in einem Forschungszentrum dieser Größe und strategischen Ausrichtung zu erreichen ist.

Im Wintersemester 2021/22 findet eine Ringvorlesung statt, in deren Rahmen Vorträge aus dem Forschungs- und Lehrgebietsfundus der Mitglieder des ZeHS präsentiert werden. Die Veranstaltung wird im 100 Plätze bietenden Vortragssaal im Erdgeschoss des ZeHS stattfinden; sie umfasst in der Auftaktrunde ausschließlich Vorträge in deutscher

Sprache und ermöglicht damit auch im Freiburger Umfeld einen direkten Zugang zur Arbeit dieser auch für die Region bedeutenden Einrichtung. Der Einladung eines internationalen Fachverlags folgend ist angedacht, die Beiträge dann ebenfalls in englischer Sprache in Buchform zu veröffentlichen. Dazu ist vorgesehen, eine Übersicht der während der gesamten Entwicklungszeit des ZeHS bisher geleisteten wissenschaftlichen Arbeiten unter dem Arbeitstitel „*High-Temperature Processes and Materials Conversion – Future Prospect Demand*“ in kompakter Form international zu kommunizieren.

- 1 Ass. iur. Theresa Lemser, Referentin des ZeHS, Winklerstraße 5, 09599 Freiberg. Die Referentin ist dem Direktorium des ZeHS zugeordnet, dem der Wissenschaftliche Sprecher Prof. Dirk C. Meyer, der Direktor Prof. Bernd Meyer und der Stellvertretende Direktor Edwin Kroke angehören; sie ist seit Beginn der Antragstellung im Jahr 2013, überwiegend mit Prof. Dirk C. Meyer, der Entwicklung des ZeHS fachlich verbunden.
- 2 Das Direktorium wird unterstützt durch Dr. Barbara Abendroth in ihrer Eigenschaft als Hausdirektorin des ZeHS.
- 3 22. Jg. 2015, S. 93 ff.; 24. Jg. 2017, S. 107; 26. Jg. 2019, S. 96 f.; 27. Jg. 2020, S. 108 ff.

Funktionsschichten mittels flexibel strombasierter Beschichtungs- und Modifizierungsprozesse

Wege zu Verbundvorhaben vor dem Hintergrund der Forschungsprogrammatisierung des Zentrums für effiziente Hochtemperatur-Stoffwandlung (ZeHS)

Dirk C. Meyer¹, Barbara Abendroth², Hartmut Stöcker³, Tina Weigel⁴, Matthias Zschornak⁵, Theresa Lemser⁶

Eine maßgebliche Aufgabenstellung des ZeHS zielt auf die Ablösung fossiler Energieträger für die Bereitstellung von Aktivierungsenergie und Prozesswärme insbesondere in der Grundstoffindustrie. Damit ist die Forderung nach neuen Strategien und Materialien auf der Grundlage elektrischen Stromes als Energiequelle verbunden. Die Nutzung erneuerbarer Energiequellen erfordert im besten Falle einen zeitlich flexiblen Einsatz nach Maßgabe der angepassten Stromtarife bzw. des aktuellen Preises an der Energiebörse. Zugleich werden bei der diesbezüglich möglichen Bilanzierung auch neue Prozesswege wirtschaftlich.

Eine entsprechend angepasste Führung von Syntheserouten kann materialwissenschaftlich beispielsweise auf die Entwicklung und Optimierung neuartiger Hochtemperatur-(HT)-Stoffsysteme für Funktionsschichten fokussieren. Die für die HT-Synthese spezifischen und teils extremen Prozessbedingungen – nicht nur hinsichtlich hoher Temperaturen (Abb. 1) – stellen fundamentale Herausforderungen an die Materialstabilität. Geforderte Funktionsschichten realisieren Lösungen für Anwendungsbereiche in der Sensorik, als Transportbarrieren, Elektroden oder Haftvermittler. Sie bieten aber auch neue, alternative Wege für die Materialentwicklung:

Reaktivschichten

Mehrlagenkomposite aus im thermodynamischen Gleichgewicht mischbaren Einzelkomponenten für die Aktivierung von Fügeprozessen.

Wärmedämmschichten/Diffusionsbarrieren

Mehrlagenkomposite aus hochschmelzenden Metallen, ge-

trennt durch Oxidschichten, oder auch Metallkeramikverbünde zur Vervielfachung des Temperatursprungs an den Grenzflächen bei Wärmedurchgang bzw. Unterdrückung von Diffusion.

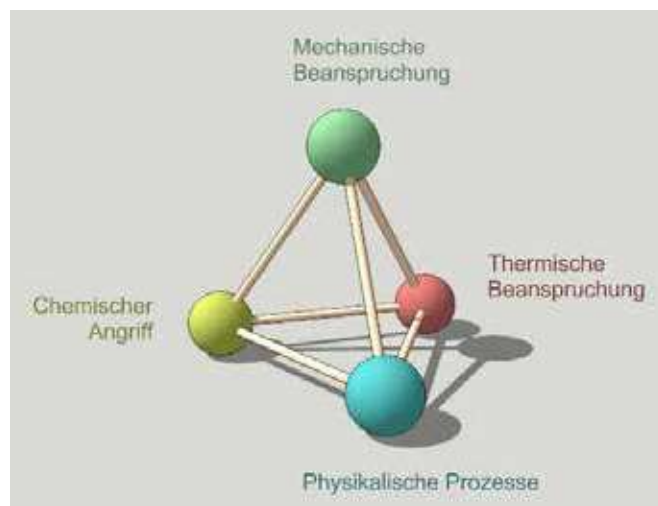


Abb. 1: Die Auslegung geeigneter HT-Materialien muss der Komplexität hoher thermochemo-physikalischer Beanspruchungen genügen.

- 1 Prof. Dr. Dirk C. Meyer, Wissenschaftlicher Sprecher des ZeHS, Winklerstraße 5, 09599 Freiberg, Direktor des Instituts für Experimentelle Physik, Leipziger Straße 23, 09599 Freiberg
- 2 Dr. Barbara Abendroth, Hausdirektorin des ZeHS
- 3 Dr. Hartmut Stöcker, Institut für Experimentelle Physik
- 4 Tina Weigel (M.Sc.), Institut für Experimentelle Physik
- 5 Dr. Matthias Zschornak, Institut für Experimentelle Physik
- 6 Ass. iur. Theresa Lemser, Referentin des ZeHS, Winklerstr. 5, 09599 Freiberg