

# Forschungsjournal

der Technischen Universität Graz

*Research Journal / Graz University of Technology*



# Inhalt

## **Vorwort / Preface**

- 3 Forschung und Technologie an der Technischen Universität Graz  
*Wolfgang von der Linden*

## **RFT-Projekte / RFT-Projects**

- 4 Entwicklung von Atom- und Molekularstrahlmethoden für die Erzeugung und Charakterisierung neuartiger Materialkomponenten für die Nanotechnologie  
*Wolfgang E. Ernst*
- 6 Massenspektrometrie in der Proteinforschung  
*Ruth Birner-Grünberger, Peter Macheroux*
- 8 Hochfeld (3T)- MRT Forschungsanlage: Gemeinsamer Antrag der Medizinischen Universität Graz (MUG) und der TU Graz  
*Hermann Scharfetter*
- 10 Scientific Supercomputing Teil II  
*Manfred Stepponat*

## **Christian Doppler Labors / CD Laboratories**

- 11 Christian Doppler Labor für Nichtlineare Signalverarbeitung erfolgreich evaluiert  
*Gernot Kubin*
- 13 Christian Doppler Labor für Genomik und Bioinformatik  
*Zlatko Trajanoski*

## **Aus den Fakultäten / Faculty Report**

- 14 Projekt „Stadt und Landschaft“ am Institut für Kunst- und Kulturwissenschaften  
*Susanne Hauser, Christa Kamleithner*
- 15 Neue Hauptverwaltung für die Europäische Zentralbank in Frankfurt wird der erste wirklich natürlich gelüftete Wolkenkratzer der heutigen Zeit  
*Brian Cody*
- 16 Charakteristik von Störungen und Störungsgesteinen des Koralm Komplexes und ihre Auswirkungen auf den Gebirgsbau  
*Walter Kurz, Gerald Pischinger*
- 18 Forschungsprojekt „HylCE“: Entwicklung eines Wasserstoff-Brennverfahrens  
*Helmut Eichlseeder*
- 19 Aktuelle Forschung am Institut für Wärmetechnik  
*Wolfgang Streicher*
- 20 Messung kleinster Kapazitäten  
*Georg Brasseur, Bernhard Brandstätter*
- 22 Forschung an der Fakultät für Technische Mathematik und Technische Physik  
*Peter Grabner*
- 24 Radikale in Graz  
*Georg Gescheidt-Demner*
- 26 Forschung an der Fakultät für Informatik  
*Horst Bischof, Karl-Christian Posch, Franz Wotawa*

## **Neuberufungen / New Professors**

- 28 Vertragsprof. BSc(Hons) CEng MCIBSE *Brian Cody*
- 29 Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. *Walter Sextro*
- 30 Vertragsprof. Dipl.-Ing. Dr.techn. *Ulrich Walder*

## **Junge Forscherinnen und Forscher / Young scientists**

- 32 Diophantische Probleme: Zahlenspielereien und Kryptografie  
*Clemens Josef Fuchs*
- 33 Sehen mit Atomen  
*Bodil Holst*
- 34 Satellitengestützte Positionierung, hochgenau – aber sicher ?!  
*Andreas Wieser*

## **35 Preise, Auszeichnungen und Veranstaltungen**

### **Impressum**

Eigentümer: Technische Universität Graz  
Herausgeber: Vizerektor für Forschung und Technologie  
Redaktion: Büro des Rektorates, Referat für Öffentlichkeitsarbeit  
Gestaltung und Satz: Ulrike Haring  
Wir danken den Autorinnen und Autoren für die Bereitstellung der Texte und Fotos  
Geringfügige Änderungen sind der Redaktion vorbehalten  
Titelfoto: Virtuelle Leberoperationsplanung mit dem Augmented Reality System am Institut für Maschinelles Sehen und Darstellen  
Verlag: Verlag der Technischen Universität Graz  
[www.fti.tugraz.at/Verlag](http://www.fti.tugraz.at/Verlag)



# Forschung und Technologie an der Technischen Universität Graz

## *Research and Technology at Graz University of Technology*

Liebe Kolleginnen und Kollegen!

Das erste Studienjahr im Rahmen des UG2002 geht dem Ende entgegen. Rückblickend hat sich im Bereich Forschung und Technologie (F&T) vieles getan. Wie in der vorherigen Ausgabe des Forschungsjournal bereits mitgeteilt worden ist, hat die TU Graz aus dem Projekt UniINFRASTRUKTUR II 1.4 M€ erhalten. Die damit geförderten Projekte werden in dieser Ausgabe vorgestellt. Daneben präsentieren sich zwei positiv evaluierte CD-Labors. In diesem Zusammenhang sei auch erwähnt, dass Kollege Prof. Dr. H. Kahlert zum neuen Vorsitzenden des Senates der CD-Gesellschaft ernannt worden ist. Auch in dieser Ausgabe werden wieder Neuberufungen und herausragende JungforscherInnen vorgestellt. Als neue Rubriken haben wir „Aus den Fakultäten“ und „Preise, Ehrungen und Veranstaltungen“ eingeführt, um die Leistungen und Aktivitäten der Fakultäten und ihrer ForscherInnen adäquat zu dokumentieren.

Ich freue mich, berichten zu können, dass wir für den Bereich „Forschungs- und Technologiesupport und Patentwesen“, der im Vorwort der letzten Ausgabe kurz beschrieben worden ist, Frau PD Dr. Ursula Diefenbach (habilitierte Chemikerin) gewinnen konnten. Eine genaue Beschreibung ihrer Aufgaben wird in der nächsten Ausgabe des Forschungsjournal erfolgen. Sie ist derzeit damit beschäftigt, den TUGonline Auftritt des F&T-Bereichs sowie den des Patentwesens zusammen mit Herrn Dr. Franz Holzer neu zu gestalten. Daneben wird von ihr ein Organigramm der derzeitigen Supportstellen im F&T-Bereich erstellt. In diesem Zusammenhang wird im nächsten Semester ein Fragebogen verteilt werden, der auch dem Aufbau des geplanten Expertenpools dienen wird. Ich bitte Sie alle, diesen Fragebogen in Ihrem eigenen Interesse sorgfältig auszufüllen, da er die Basis für eine Neugestaltung des F&T-Supports an der TUG sein wird und Sie in vielen Belangen unterstützen soll.

Da die automatische Erstellung des Forschungsjahresberichtes aus den TUGonline Daten (insbesondere im Zusammenhang mit den Forschungsschwerpunkten) unbefriedigende Ergebnisse geliefert hätte und aus dem Kreis der KollegInnen diesbezügliche Kritik geäußert wurde, wurde dieser Bericht in diesem Jahr ausgesetzt. Er wird im nächsten Jahr in überarbeiteter Form wieder erscheinen. In diesem Zusammenhang werden auch das Erscheinungsbild der Forschungsleistungen der Institute und die Datenerfassung überarbeitet. Diesbezügliche Anregungen sind sehr willkommen.

Der Rat für Forschung und Technologieentwicklung hat, basierend auf der Feststellung, dass das Patentaufkommen an österreichischen Universitäten im europäischen Vergleich zu gering ist, dem BMBWK empfohlen, die Universitäten beim Aufbau und Betrieb des Patentmanagements zu unterstützen. Daraus ist das Projekt UniINVENT entstanden, in dem die Universitäten entsprechend der Zahl ihrer bisher angemeldeten Patente ein Budget für Personal und Patentierungskosten erhalten. Da sich das Rektorat und der Unirat der Bedeutung des Patentwesens für eine erfolgreiche Technische Universität und für die österreichische Volkswirtschaft bewusst sind, ist beschlossen worden, das Aufgriffsrecht ernst zu nehmen und ein professionelles IPR-Management aufzubauen. Aus den UniINVENT-Mitteln wurde zunächst Herr Mag. Thomas Bereuter angestellt, der ab 1. August für das IPR-Management an der TU Graz zuständig sein wird.

Am 23.6. fand der Workshop zur Leitstrategie des F&T-Bereichs

statt, an dem die Dekane und die Koordinatoren der Forschungsschwerpunkte teilgenommen haben. Die finale Version der Leitstrategie F&T wird in der nächsten Ausgabe des Forschungsjournal im Detail besprochen werden. Die wichtigsten Punkte des Workshops waren neben der Präsentation und der Diskussion der Leitstrategie zum einen die Forschungskennzahlen, die von Prof. Dr. Ernst Stadlober (Leiter der Arbeitsgruppe Forschungskennzahlen) vorgestellt worden sind. Ein weiteres Thema betraf die Konkretisierung der Forschungsschwerpunkte. Es erging der Auftrag an die Forschungsschwerpunkte, bis Ende November ein eigenes Mission/Vision/Leitstrategie-Konzept zu entwickeln. In diesem Zusammenhang sei auch erwähnt, dass vom Kollegen Prof. Dr. Hermann Maurer ein neuer Forschungsschwerpunkt ins Leben gerufen wurde, der sich mit der e-University beschäftigt.

Liebe Kolleginnen und Kollegen, ich wünsche Ihnen eine erholsame und zugleich produktive vorlesungsfreie Zeit.

Ihr Vizerektor für Forschung und Technologie  
Wolfgang von der Linden

### *Research and Technology at Graz University of Technology*

*The first academic year within the frame work of UG2002 is nearing completion.*

*I am pleased to announce that PD Dr. Ursula Diefenbach is now responsible for 'Research and Technology Support'. There will be a couple of activities in the forthcoming semester in order to reorganize our support services. The input of all institutes is most welcome and a suitable questionnaire will be distributed in October.*

*Based on a recommendation of the 'Rat für Forschung und Technologieentwicklung' a federal funding program 'UniINVENT' has been started by which Austrian universities are supported, both financially and administratively via AWS-Tecma, in all aspects related to intellectual property rights (IPR) and patents. Rektorat and Unirat of the Graz University of Technology are convinced that the IPR-management is of great importance for a technically oriented university and they therefore decided, to set up an IPR-management. To this end Mag. Thomas Bereuter has been employed.*

*A strategy workshop took place on June 23, in which the deans and the coordinators of the key research areas (FoSP) participated. Main topic of the workshop was the 'Leitstrategie 2004+'. Furthermore research indicators were presented by Prof. Dr. Ernst Stadlober. Finally, purpose and goals of the key research areas have been discussed. The coordinators have been asked to develop a mission/vision/strategy concept for each FoSP. In this context it should be noted that Prof. Dr. Hermann Maurer has initiated a new key research area entitled e-university. Details will be given in the next issue of the research journal.*

*In the present issue of the research journal the projects, which are supported by the funding program 'UniINFRASTRUKTUR II', are introduced. Two CD laboratories, which have been positively evaluated recently, are presented as well. Besides 'New professors' and 'Young scientists', we have added two new columns as integral parts of the journal, 'Faculty Report' and 'Awards and Events'.*



## RFT-Projekt:

# Entwicklung von Atom- und Molekularstrahlmethoden für die Erzeugung und Charakterisierung neuartiger Materialkomponenten für die Nanotechnologie

## *Atomic and Molecular Beam Techniques for the Generation and Characterization of New Building Blocks of Nanosize Materials*

Materialbausteine aus einigen tausend Atomen haben Eigenschaften, die grundlegend anders sein können als die der korrespondierenden Stoffe in makroskopischen Mengen. Das Verhältnis von Oberfläche zu Volumen und die Gesetze der Quantenmechanik regeln zum Beispiel, welche Spektralfarben ein aus bestimmten Elementen bestehendes Material absorbiert und ob dieses Material elektrischen Strom leitet oder nicht. Zur Herstellung und Untersuchung von einzelnen Nanoteilchen können Molekularstrahlen eingesetzt werden, in denen die Wechselwirkung der Teilchen mit Laserlicht gemessen wird. Darüber hinaus werden die Welleneigenschaften einfacher Atomstrahlen in einem Materiewellenmikroskop genutzt, um die Struktur von deponierten Teilchen zu analysieren.

Seit vielen Jahrzehnten gehören Atom- und Molekularstrahlen zum Repertoire des Experimentalphysikers, der detaillierte Informationen über die innere Struktur von Atomen und Molekülen sucht. Mit der schnellen Entwicklung der Nanotechnologie in den letzten Jahren ist der Bedarf nach grundlegender Klärung der Eigenschaften nanostrukturierter Materie entstanden. So genannte Nanoteilchen (Größenskala  $\text{nm} = 10^{-9} \text{ m}$ ) bestehen aus einigen tausend Atomen. Während die Zusammensetzung von Festkörpern normaler Alltagsdimensionen ( $\text{mm}$ ,  $\text{cm}$  oder größer) hinsichtlich ihrer geometrischen Kristallstruktur, ihrer elektrischen und magnetischen Eigenschaften und ihrer temperaturabhängigen Phasen (fest, flüssig) in der Regel gut bekannt ist, war es für Teilchen, die aus weniger als einigen Millionen Atomen bestehen, nicht selbstverständlich, ob man von fester und flüssiger Phase sprechen kann, ob ihre Elektronen delokalisiert sein können, sie also elektrisch leitfähig sind und ob ihnen die üblichen magnetischen Eigenschaften fester Stoffe zuzuordnen sind. Seitdem die Forschung an Clustern (freie Aggregate von hunderten Atomen) gezeigt hat, auf welche Weise in solchen Teilchen Phasenübergänge sowie elektronische und magnetische Eigenschaften eindeutig beschrieben werden können, versuchen Wissenschaftler, Bausteine für neue Materialien für verschiedene Anwendungen zu schneiden.

Im folgenden werden zwei neue Projekte skizziert, die am Institut für Experimentalphysik aufgebaut werden und der Herstellung und fundamentalen Untersuchung von Nanoteilchen dienen. Beide basieren auf Atom- und Molekularstrahltechniken.

### Erzeugung neuartiger Molekülbausteine in superfluiden Heliumnanotröpfchen

Teilchen, die aus einigen hundert oder tausend Atomen oder Molekülen bestehen, werden auch atomare bzw. molekulare Cluster genannt. Die Definition einer festen oder flüssigen Phase eines Clusters korrespondiert zu dem Bild, das wir von größeren Stoffmengen haben: Ein Cluster ist in seinem Innern fest, wenn die Atome oder Moleküle feste, regelmäßige Abstände haben, seine Struktur als rigide angesehen kann. Er ist flüssig, wenn sich die Atome oder Moleküle in seinem Innern frei gegeneinander bewegen, analog zu der freien Verschiebbarkeit der Teilchen in einer makroskopischen Flüssigkeit. Das Element Helium ist dafür bekannt, dass die Temperatur für seine Verflüssigung sehr niedrig ist. Eine der Hauptanwendungen besteht gerade darin, dass man in Tieftemperaturanlagen

gewonnenes flüssiges Helium zum Kühlen ganzer Apparaturen auf eine Temperatur von wenigen Kelvin benutzt. Wird Helium auf unter 2 Kelvin abgekühlt, so besitzt die Flüssigkeit eine ungewöhnliche Eigenschaft, die als superflüssig bezeichnet wird: Ein Rotor, der in einem kalten Heliumbad gedreht wird, erfährt keine Reibung und kann ungebremst laufen. Seit den neunziger Jahren des zwanzigsten Jahrhunderts fragten sich Physiker, ob atomare Heliumcluster auch eine superflüssige Phase aufweisen. Im Jahr 1998 wurden experimentelle Ergebnisse veröffentlicht, die nahe legen, dass einzelne kleine Moleküle wie  $\text{SF}_6$  oder OCS sich reibungsfrei und ungehindert in Clustern aus einigen hundert Heliumatomen drehen und bewegen können. Die Ergebnisse werden inzwischen allgemein als Nachweis der Superflüssigkeit von Heliumclustern oder -nanotröpfchen bei einer Temperatur von 0,4 Kelvin akzeptiert.

Heliumnanotröpfchen werden in einer Molekularstrahlapparatur mittels Expansion von Heliumgas sehr hohen Drucks (100 bar) durch eine sehr kalte Düse (10 bis 15 Kelvin) erzeugt. Neben der Verfolgung fundamentaler Fragestellungen bieten die Tröpfchen die Möglichkeit der Einlagerung einzelner Atome und Moleküle, die dann auf die Temperatur von 0,4 Kelvin abgekühlt werden, sich frei innerhalb der Tröpfchen bewegen können und dort mit anderen eingelagerten Molekülen Reaktionen durchführen und neue Verbindungen eingehen. Die tiefe Temperatur erlaubt das „Einfrieren“ ungewöhnlicher Strukturen. So wurde bisher die Bildung ungewöhnlicher Molekülketten beobachtet, z.B. formen bis zu 10 HCN Moleküle in superflüssigen Tröpfchen eine fortlaufende Kette. Organische Moleküle wie Pentazen und etliche Porphyrine konnten bei 0,4 Kelvin in Helium untersucht werden, und bei Messungen am Perylenderivat PTCD, einem interessanten Baustein für die molekulare Elektronik, wurde die Bildung von Dimeren festgestellt. Alkalimetallatome, die auf das Heliumtröpfchen gesetzt werden, bleiben an der kalten Oberfläche, wo sich mehrere von ihnen zu neuen Aggregaten verbinden können. Wir beobachteten dabei neue Verbindungen, bei denen mehrere Elektronenspins parallel ausgerichtet sind, eine Konstellation, die bei Raumtemperatur nicht stabil ist.

Unsere Untersuchungen werden mit Lasern vorgenommen, wobei Methoden der Absorptionsspektroskopie, der Fluoreszenzlichtmessung, der Laserionisation mit nachfolgender Massenspektroskopie und Lasermehrfachresonanzen eingesetzt werden. Das Cartoon-Bild (Abb. 1) veranschaulicht, wie aus einer kalten Düse (7 Kelvin) He-

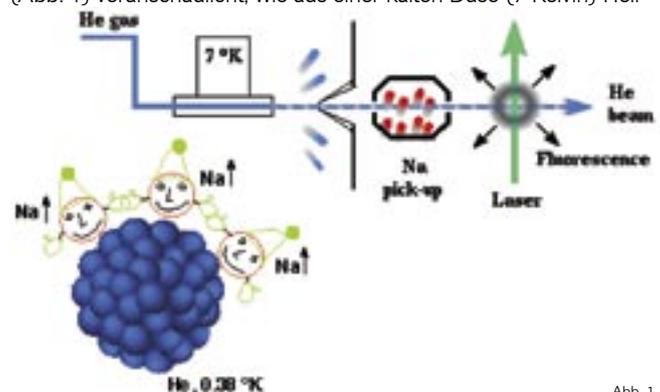


Abb. 1

umgas strömt, Tröpfchen bildet, die durch eine konische Begrenzung in ein Hochvakuum treten, dort in einer Pick-up-Zelle Natriumatome aufsammeln und danach einen Laserstrahl kreuzen. In diesem Experiment wurde die Formation von Natriumtrimeren mit drei parallelen Elektronenspins auf dem kalten Tröpfchen entdeckt.

In Zukunft werden wir größere kalte Metallaggregate herstellen. Bei einigen Metallen ist das Einsetzen von Supraleitung bei tiefen Temperaturen bekannt, d.h. sie setzen dem elektrischen Strom keinen Widerstand entgegen. Ungeklärt ist noch, ob das zugrunde liegende Phänomen, die Paarbildung von Elektronen durch Wechselwirkung mit dem Metallgitter (Cooper-Paare), auch in Metallclustern ein Analogon findet. Eine Klärung dieser Frage wäre nicht nur von grundlegendem Interesse, sondern würde sicher in der Nanotechnologie Anwendungen finden. Dr. Carlo Callegari und Diplomstudent Johann Nagl arbeiten an den Vorbereitungen zu entsprechenden Experimenten. (Abb. 2)

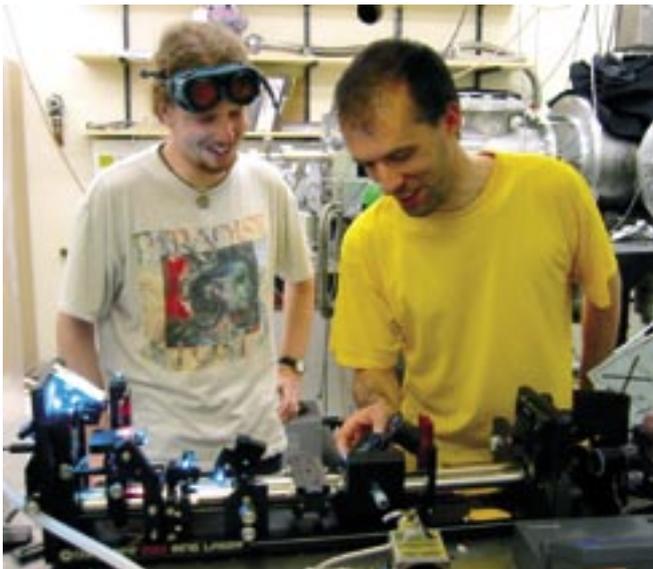


Abb. 2: Johann Nagl und Carlo Callegari bei Justierarbeiten an einem Laser. (Foto W. Ernst)

#### Entwicklung der Materiewellenoptik als Methode der zerstörungsfreien Analyse nanostrukturierter Materialien

Nanostrukturierte Materialien erfordern analytische Messmethoden, die eine der Größe entsprechende Auflösung aufweisen. Die in den achtziger Jahren entwickelte Rastertunnelmikroskopie markierte einen Durchbruch für die Sichtbarmachung von Oberflächenstrukturen im Nanometer-Größenbereich. Methoden wie die Raster-Kraftmikroskopie und optische Nahfeldtechniken folgten. Die Elektronenmikroskopie macht sich die Tatsache zunutze, dass Teilchen auch Wellennatur besitzen und mit einer ihrem Impuls entsprechenden Wellenlänge an kleinen Strukturen gebeugt werden. Da Elektronen eine sehr geringe Masse besitzen, können Elektronenstrahlen einer den Nanostrukturen entsprechenden Wellenlänge gut hergestellt werden. Die Elektronenmikroskopie ist daher sicher eine der universellsten Untersuchungsmethoden. Manche Materialien, insbesondere aus dem biologischen Bereich, sind allerdings sehr empfindlich und werden beschädigt oder zerstört, wenn sie hochenergetischen Elektronen ausgesetzt werden. Neutrale Teilchenwellen niedriger Energie gehen sanfter mit diesen Stoffen um. So wurde die Idee geboren, leichte und chemisch inerte Atome zu einem Strahl einheitlicher Geschwindigkeit zu formieren und Fokussieroptiken für ein neues Teilchenmikroskop zu entwickeln. Heliumatome aus

einer Düsenstrahlquelle besitzen eine Teilchenwellenlänge von ungefähr 0,1 nm und können durch eine „Optik“ aus Zonenplatten und gekrümmten Reflektoren fokussiert werden. Das Projekt der Entwicklung eines Helium-Materiewellenmikroskops wird von der Europäischen Union in ihrem 6. Rahmenprogramm gefördert. Neben dem Institut für Experimentalphysik nehmen 5 andere europäische Partnergruppen teil. Frau Dr. Bodil Holst (s.a. Rubrik Jungforscher in diesem Heft) ist Koordinatorin, Startdatum ist der 1. Juli 2004, und das so genannte Kick-off Meeting mit allen beteiligten Gruppen fand am 14. und 15. Juli 2004 im Institut für Experimentalphysik statt. Erste Anwendungen des Heliummikroskops für die Untersuchung von Biomaterialien sind geplant und die Unterstützung des FWF wurde soeben zugesagt. In weiterer Zukunft möchten wir zusätzlich laseroptische Methoden hoher Ortsauflösung in unser Messprogramm aufnehmen.

Weitere Informationen: <http://iep.tu-graz.ac.at/>

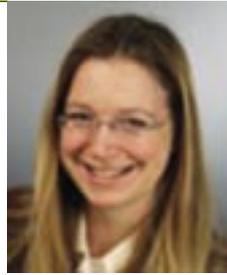
#### *Atomic and Molecular Beam Techniques for the Generation and Characterization of New Building Blocks of Nanosize Materials*

*Aggregates of atoms or molecules, intermediate in size between individual atoms and small pieces of bulk matter, are called clusters. The fundamental physics and chemistry of clusters has been of interest for the last two decades with questions ranging from their nuclear geometry and electronic structure to their chemical reactivity. At what size do clusters start to behave like small samples of condensed material? Can clusters be used as building blocks of new materials? While these questions originally derived from scientific curiosity, in the last decade a new area of technology has begun: The art of nanofabrication developed which has created tiny pieces of material and organized structures consisting of a small number of atoms or molecules. With shrinking size, quantum effects have become important. Fortunately, nanoscience can resort to the results of cluster research with respect to the fundamental issues.*

*At different temperatures, matter exhibits different phases. Formerly, samples of a size that could be called infinite in comparison to the atomic distances, were required to apply strict definitions of phases. When it was discovered that clusters could be in a state of "regular geometric" shape or in a state of fluctuating internuclear distances, definitions of "solid" and "liquid" had to be modified such as to be applicable to finite size samples. Helium in bulk size is known to have a superfluid phase at temperatures below 2 Kelvin. An exciting challenge of the last 10 years has been the experimental and theoretical investigation of finite size samples of helium (or helium nanodroplets). What does the term "superfluidity" mean when applied to a nanometer sized sample of helium? While we actively pursue these fundamental questions by investigating helium nanodroplets that are generated in molecular beam experiments, we also use the cold nanodroplets as a 0.4 Kelvin environment for the aggregation of other atoms and molecules to form new exotic dimers and oligomers that may become building blocks of new materials.*

*While scanning tunnelling microscopy and electron microscopy are very powerful techniques for the investigation of most nanosize materials some samples of biological or geological importance are too sensitive to be exposed to high energy electrons. Helium atom beams of low energy and a de Broglie wavelength of 0.1 nm provide a non destructive method. We are involved with the development of a helium microscope that employs matter wave optics like curved reflectors and zone plates as matter wave optics.*

Dipl.-Ing. Dr.techn. Ruth Birner-Grünberger  
Institut für Biochemie  
E-Mail: ruth.birner@tugraz.at  
Tel: 0316 873 6464



Univ.-Prof. Dr.rer.nat. Peter Macheroux  
Institut für Biochemie  
E-Mail: peter.macheroux@tugraz.at  
Tel: 0316 873 6450



## RFT-Projekt: Massenspektrometrie in der Proteinforschung *Mass Spectrometry in the Field of Protein Research*

Die Massenspektrometrie (MS) hat sich im letzten Jahrzehnt zu einer Schlüsseltechnologie für die naturwissenschaftliche Forschung entwickelt, deren Bedeutung für verschiedenste innovative Bereiche der Chemie, Physik und Biowissenschaften durch die Verleihung des Nobelpreises für Chemie im Jahr 2002 an John B. Fenn und Koichi Tanaka, zwei Pioniere der Massenspektrometrie, Rechnung getragen wurde. Mit Hilfe moderner Massenspektrometer lassen sich Proteine und Proteinbruchstücke auf Grund ihrer Masse und Aminosäuresequenz eindeutig identifizieren und daher stellt die Methode ein unverzichtbares Werkzeug in der Proteinforschung dar. Das vorliegende RFT-Projekt zeichnet sich durch eine starke Vernetzung mit bereits bestehenden Forschungsschwerpunkten der Technischen Universität Graz (FSP Technische Biowissenschaften) und RFT-Projekten ("Know-how cluster für Molekulares Engineering von Enzymen" und "Angewandte Biokatalyse und enzymatische Nanoanalytik", siehe Forschungsjournal WS 2003/04) aus, die von einer verbesserten massenspektrometrischen Analytik profitieren werden.

### Massenspektrometrie von Proteinen

Proteine stellen die biologisch aktiven Bausteine jeder lebenden Zelle dar und werden als lineares Polymer aus zwanzig Aminosäuren aufgebaut. Der Bauplan für alle Proteine einer Zelle ist in Form der Desoxyribonukleinsäure (DNS) gespeichert. Diese so genannte genetische Information (Erbinformation) wird in der Zelle in eine Proteinsequenz übersetzt, die sich zwangsläufig aus der zugrunde liegenden DNS-Sequenz ergibt. Daher ist es möglich bei Kenntnis der gesamten genetischen Information einer Spezies (dem Genom) die Sequenz sämtlicher Proteine und damit auch ihrer Masse zu ermitteln. Aus diesem determinierenden Zusammenhang zwischen der DNS-Sequenz des Gens und der Aminosäuresequenz des Proteins ergibt sich auch die überragende Rolle der Genomforschung ("Genomics") für die Proteinforschung ("Proteomics"): Bei Kenntnis des Genoms erschließen sich alle Proteine eines Organismus dem Zugriff, auch solche deren biologische Funktion bislang unbekannt ist.

Im Unterschied zum Genom, das vom Zeitpunkt der Entstehung eines Organismus annähernd konstant ist, ändert sich das Inventar an Proteinen ("Proteom", die Summe der Proteine zu einem gegebenen Zeitpunkt) in jedem Lebewesen in Abhängigkeit von äußeren und inneren Gegebenheiten. So reagieren Prokaryonten (Bakterien) mit der Ausbildung unterschiedlicher Proteome auf Veränderungen in ihrer Umwelt, wie z. B. die Verfügbarkeit von Nahrung, d. h. sie passen sich an ihre Umwelt an, indem bestimmte für die Situation nützliche Proteine hergestellt werden. Höhere Organismen unterliegen darüber hinaus einem inneren Entwicklungsprogramm, wie z. B. einem bestimmten determinierten Lebenszyklus, der die Bildung verschiedener Proteine

zur Folge hat. Als Beispiel ist in Abb. 1 die Metamorphose eines Schmetterlings dargestellt, der für die jeweiligen Lebensphasen auf unterschiedliche Proteome zurückgreift. Dies ist ein sehr anschauliches Beispiel dafür, dass mit dem exakt gleichen Genom verschiedene Proteome dargestellt werden können, d. h. bestimmte Kombinationen von Proteinen aus den verfügbaren Genen hergestellt werden. Diese Ausprägung eines Proteoms gibt dem Organismus die Möglichkeit sich an die Umwelt anzupassen oder, wie im Beispiel des Schmetterlings dargestellt, vorprogrammierte Entwicklungsstadien zu durchlaufen.

Im Rahmen der Proteomanalytik erhält man somit Einblick in die Funktion der beteiligten Proteine und deren Zusammenwirken bei biologischen Prozessen. Daraus ergibt sich auch deren Bedeutung für die angewandte und insbesondere medizinische Forschung: Durch vergleichende Untersuchungen des Proteoms von gesunden und krankhaften Zellen lassen sich Proteine identifizieren, die möglicherweise eine Rolle bei der Entstehung der Krankheit haben oder ihre Identifizierung erweitert unser Wissen über die zugrunde liegenden molekularen Mechanismen der pathogenen Prozesse.

### Experimentelles Vorgehen

Um die Möglichkeiten der Proteomforschung voll ausschöpfen zu können bedarf es zweier Voraussetzungen:

- 1) Verfügbarkeit einer vollständigen Genomsequenz
- 2) Möglichkeiten einer Auftrennung des Proteingemisches

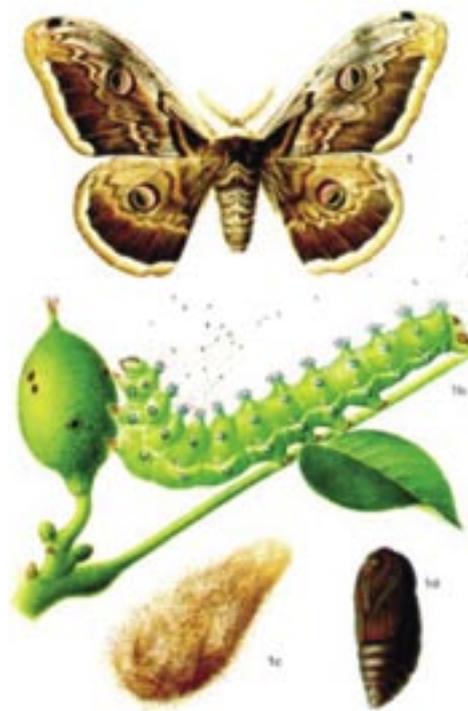


Abb. 1: Entwicklungsstadien des Großen Wiener Nachtpfauenauges (*Saturnia pyri*), dem mit 100-130 mm größten europäischen Schmetterling. 1, Adulter Falter; 1b, Raupe; 1c, Kokon; 1d, Puppe (Abbildung entnommen aus: Novak & Severa, Der Kosmos Schmetterlingsführer, Franckh'sche Verlagshandlung, W. Keller & Co., Stuttgart, 1980).

Wie bereits zuvor erwähnt, ermöglicht die Kenntnis der gesamten DNS-Sequenz die Masse jedes Proteins einer Zelle zu bestimmen. Darüber hinaus stehen Proteasen zur Verfügung die jedes Protein Sequenz-spezifisch nur an bestimmten Stellen zerschneiden (z. B. die Protease Trypsin spaltet ein Protein, wenn eine der beiden basischen Aminosäuren Lysin oder Arginin auftreten). Diese Schnittstellen lassen sich ebenfalls aufgrund der vom Genom bekannten Aminosäuresequenz eines Proteins vorhersagen und daraus kann man die Masse aller Bruchstücke, die mit einer bestimmten Protease generiert werden, errechnen (in silico Proteolyse, "Verdau"). Diese Peptidfragmentkarte entspricht einem so genannten peptide mass fingerprint des Proteins und dient als wesentliches Kriterium bei der Identifizierung eines Proteins.

Diese Vorgehensweise ist aber natürlich nur dann experimentell umsetzbar, wenn die Proteine aus dem vorliegenden Proteingemisch (das idealerweise die Gesamtheit aller in einer Zelle/Organismus vorhandenen Proteine repräsentiert) physikalisch voneinander separiert werden können, um sie schließlich einem proteolytischen Verdau mit anschließender massenspektrometrischer Aufnahme, der für das Protein spezifischen Peptidfragmentkarte, zu unterwerfen. Diese Separation wird heute

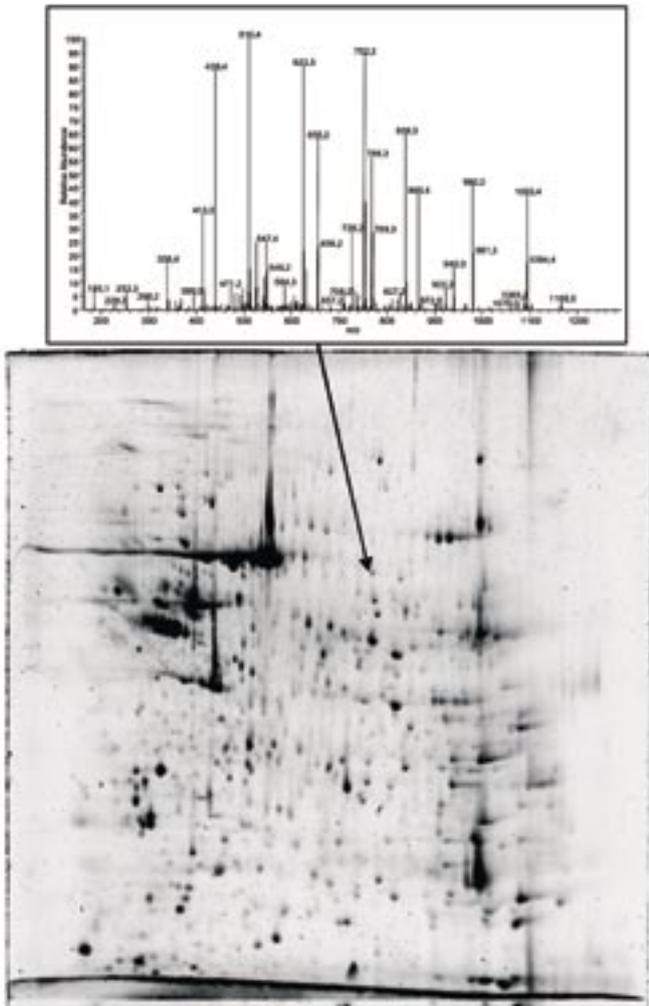


Abb. 2: 2D-Gelelektrophoretische Auftrennung eines Maus Fettgewebe Proteoms und massenspektrometrische Analyse eines Proteins. (Daten erstellt im Genomics of Lipid associated Disorders (GOLD) Projekt im Rahmen der Genomforschung in Österreich (GenAU) finanziert durch das Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft und Kultur).

überwiegend mit Hilfe chromatographischer und elektrophoretischer Methoden erzielt. Ein Beispiel für die elektrophoretische Auftrennung eines Proteingemisches ist in Abb. 2 dargestellt. Hierbei wird das Proteingemisch in der ersten Dimension zunächst nach dem Ladungsneutralpunkt (mittels der so genannten Isolektrischen Fokussierung in einem pH-Gradienten) vorsortiert und im Anschluss daran in der zweiten Dimension über ein zweites Kriterium, der Mobilität der Proteine in einem elektrischen Feld (die unter den verwendeten Bedingungen mit der Masse der Proteine korrespondiert), in einem Gel aufgetrennt. Nach dieser so genannten zwei-dimensionalen Gelelektrophorese werden die Proteine durch Färbetechniken sichtbar gemacht und die einzelnen spots können nun ausgeschnitten und einem enzymatischen Verdau (z. B. mit Trypsin) unterworfen werden (z. B. in einem "in gel Verdau"). Obwohl sich hierbei nur geringste Mengen eines Proteins gewinnen lassen (typischerweise im  $\mu\text{g}$  bis  $\text{ng}$  Bereich), sind moderne Massenspektrometer in der Lage, die auf diese Weise generierten Peptidfragmente eines Proteins zu detektieren. Durch Abgleich der experimentell erhaltenen

Peptidfragmentkarte mit der in silico Datenbank des betreffenden Organismus kann somit das Protein identifiziert werden. Interessant für den Proteinforscher sind natürlich diejenigen Protein spots, die in Art und Vorkommen Unterschiede erkennen lassen. So findet man z. B. in einer gesunden Zelle zum Teil andere Proteine als in einer krankhaften, worüber Aufschluss über Ursache und Entwicklung der Krankheit gewonnen werden können mit dem Ziel, diese Erkenntnisse schlussendlich für eine Therapie nutzbar zu machen.

Die Anschaffung eines matrix-assisted laser desorption/ionisation (MALDI) Massenspektrometers mit Mitteln des RFT schließt eine Lücke in der benötigten Infrastruktur für die massenspektrometrische Analytik von Biomolekülen und wird allen Arbeitsgruppen im Bereich des FSP Technische Biowissenschaften sowie dem Biokatalysezentrum Kplus für ihre zukünftige Forschung im Bereich der Proteine und Enzyme zu Gute kommen.

Weitere Informationen: <http://www.biochemistry.tugraz.at>

### *Mass Spectrometry in the Field of Protein Research*

*Advances in chemical technology play a key role in the development of the life sciences with mass spectrometry being a more recent addition to the tool kit available to researchers in this field. The development of two new mass spectrometry ionisation tools, electrospray (ESI) and matrix-assisted laser desorption/ionization (MALDI), has stimulated biochemical research and given fresh impetus to the biotechnology industry in particular in the field of protein research. The funds made available by the Austrian Council for Research and Technology Development (RFT) will be used to improve our infrastructure in mass spectrometry. This will foster several core research areas, most notably the research focus Technical Biosciences and the Centre of Biocatalysis (Kplus). These well established networks will benefit greatly from our ability to develop a modern bio-analytical core facility which will provide support and stimulus to future research efforts in biotechnology. The main focus in these core research areas revolves around the discovery of proteins that are important for the understanding of biological processes or can be utilized in biosynthesis of chemically interesting compounds. Basically, proteins constitute the carriers of biological activity in all living cells and organisms. The blueprint for generating the proteins is contained in the deoxyribonucleotide (DNA) sequence of an organism with individual so-called genes encoding for a single protein. Hence, the entirety of all genes (the genome) reflects the potential of an organism to manufacture a specific set of proteins, for example to cope with environmental changes or to implement a species-specific developmental program. To put it in other words, knowledge of the kind and abundance of the collection of proteins (the proteome) provides us with essential information concerning the biological processes occurring in the cell.*

*In conjunction with highly-advanced protein separation techniques, such as chromatography and electrophoresis, mass spectrometry enables life scientists to study the proteomes of cells and gather the necessary information to understand how proteins work in concert to bring about the various aspects of life including the processes that are at the root of pathogenic effects. As such the new investments in modern mass spectrometers are expected to give a boost to proteome research at Graz University of Technology.*



## RFT-Projekt:

# Hochfeld (3T)- MRT Forschungsanlage: Gemeinsamer Antrag der Medizinischen Universität Graz (MUG) und der TU Graz

## *High-field (3T) MRI equipment for research: Joint project of the Medical University Graz (MUG) and the Graz University of Technology (TU Graz)*

Die Magnetresonanztomographie (MRT bzw. MRI) ist eines der modernsten und vielfältigsten bildgebenden Verfahren zur Untersuchung von lebenden Organismen und makroskopischen Präparaten in der medizinischen Diagnostik und der biomedizinischen Forschung. Das Anwendungsspektrum der Methode geht von morphologischen Fragestellungen über die Bestimmung von biophysikalischen Parametern und in-vivo Biochemie bis zu Problemen der medizinischen Bildverarbeitung. Typische Forschungsbereiche der MRT sind:

- MR-Methodenforschung, Sequenztechnik, Hardware, Auswertung und Rekonstruktionsverfahren
- Hochaufgelöste und Mikrostrukturelle Gewebedarstellung und Quantifizierung, Diffusion Tensor Imaging (DTI), Fibertracking, Magnetisation Transfer (MTC), Gefäßwand und Plaque Imaging, MR Elastographie, MR-Morphometrie von anatomischen Substrukturen
- Kontrastmittelforschung, Molecular Imaging, Pharmakokinetik
- Energiemetabolismus, Lipidmetabolismus, Glykogenmetabolismus (NMR-Spektroskopie)
- Funktionelles Neuroimaging (fMRI)
- Gewebepfusion und makroskopische Flußquantifikation
- Auswirkung von Medikamenten im Zeitverlauf
- Krebsforschung (Mikrogefäßversorgung, Morphometrie, Stoffwechsel, pH, O<sub>2</sub>...), siehe Bild 1.

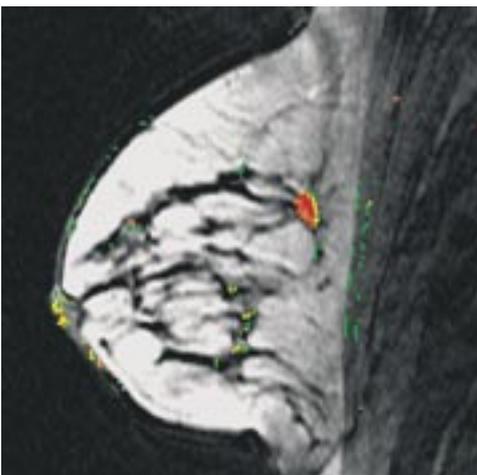


Bild 1: Dynamische MR-Mammographie zur Charakterisierung des Tumormikrogefäßsystems. Sagittale Schicht durch eine weibliche Brust mit einem Tumor. Zur Charakterisierung des Tumormikrogefäßsystems wurde die mit dem „Vascular Endothelial Growth Factor (VEGF)“ korrelierende Kontrastmittelaustauschrate berechnet und dem morphologischen Bild überlagert. (zur Verfügung gestellt von R. Stollberger)

Alle biomedizinischen Anwendungen sind verknüpft mit einer permanenten Weiterentwicklung im technisch-methodischen Bereich.

Die Grenzen der Entwicklung sind zurzeit weder für die medizinischen Anwendung noch für die Methodik und Gerätetechnik absehbar. Es gibt daher an nahezu allen renommierten Universitäten mit medizinischer oder biomedizinischer Forschung zumindest ein dediziertes Forschungsgerät. Die international erfolgreiche Nutzung der Magnetresonanztomographie setzt interdisziplinäre Forschungsgruppen voraus.

In Graz bietet sich durch die TU Graz mit langjähriger Erfahrung in biomedizinisch-technischer Forschung und die neu gegründeten Medizinische Universität (MUG) mit ambitionierten Programmen im Bereich der Bildgebung eine geradezu ideale Basis für eine interdisziplinäre Kooperation.

Im Sinne einer nachhaltigen Entwicklung haben die Medizini-

sche Universität und die TU Graz beschlossen, eine gemeinsame Infrastrukturinvestition im Bereich 3-Tesla Hochfeld-MRT zu tätigen und damit die Basis für weitere Spitzenforschung in Graz mit dieser biomedizinischen Schlüsseltechnologie zu schaffen. Die Finanzierung erfolgt durch ein Projekt, das vom Rat für Forschung und Technologieentwicklung genehmigt wurde. Die TU Graz hat durch ihren Anteil von ca. 16 % an der Antragssumme (2.5 Mio Euro) einen unmittelbaren Zugang zu einem modernen 3T-Ganzkörpersystem für Bildgebung und Spektroskopie.

Beispielhaft seien im Folgenden drei geplante Themenkreise für Forschungsprojekte im Rahmen des Forschungsschwerpunktes „Technische Biowissenschaften“ genannt, welche sehr von der Anschaffung des 3T-MRT profitieren.

### Hochaufgelöste Gefäßwand: Plaque Stabilität und Ballon-Angioplastie (Bischof, Holzapfel (TU Graz), Ebner, Pilger, Stollberger (MUG))

Die hochaufgelöste Abbildung von Arterienwänden und atherosklerotischen Plaques ist ein hoch aktuelles Gebiet im Bereich des MR-Imagings mit einer Reihe von Anwendungsmöglichkeiten in der klinischen Medizin und der biomedizinischen Technik. Die Übertragung der hochaufgelösten in vitro Untersuchungen auf in vivo Anwendungen ist nach wie vor durch methodische Probleme schwierig (physiologische Bewegungen, nicht optimierte Spulensysteme). Für direkte Abbildungen des Fettanteils in einer Arterienwand sind Sequenzen mit extrem kurzen Echozeiten notwendig. Das stark verbesserte Signal-zu-Rausch Verhältnis (SNR) bei 3 Tesla ist für Untersuchungen dieser Art von besonderem Nutzen. Für weitere Fortschritte beim direkten Imaging des Fettanteils in der Arterienwand ist die Verbesserung der Scanmethoden zur in vivo Darstellungen von Gefäßwänden und Plaques notwendig, z. B. Radialscans.

Mit Hilfe der 3-Tesla Hochfeld-MR können biomechanische Eigenschaften von Gefäßwänden im Experiment zuverlässiger untersucht werden. Die entsprechenden experimentellen Daten dienen dann als Grundlage für die physikalische Modellierung und die darauffolgende numerische Simulation mittels der Finiten Elemente Methode. Die Forschungsgruppe „Computational Biomechanics“ unter der Leitung von G. Holzapfel, an der TU Graz, entwickelte eine computer-basierte Methode um atherosklerotisch veränderte Arterien mittels hochauflösender Magnet Resonanztomographie (hrMR) zu charakterisieren und durch Methoden der digitalen Bildverarbeitung die dreidimensionale Geometrie der verschiedenen Gewebekomponenten zu rekonstruieren (siehe auch Bild 2).

### Molecular Imaging (Bischof, Holzapfel, Klimant, Scharfetter, Trajanoski (TU Graz), Stollberger (MUG))

Das sogenannte „Molecular Imaging“ ist der Bereich in der biomedizinischen Bildgebung, dem das größte Zukunftspotential zugestanden wird. Die in diesem Bereich abgebildeten Prozesse und Merkmale auf molekularer und zellulärer Ebene sind zurzeit eine Domäne der Positronen Emissionstomographie (PET), die allerdings die regelmäßige Erzeugung von Radionukliden und Radiopharmaka unter Verwendung eines Zyklotrons erfordert, eine grundsätzlich begrenzte Auflösung besitzt und eine Belastung der untersuchten

Personen mit ionisierender Strahlung bedingt.

In jüngster Zeit sind verschiedene neue Kontrastmittel für MRT entwickelt worden, die die Sensitivität für molecular imaging entscheidend verbessern. Die Gruppe der voll biokompatiblen magnetischen Nanosensoren ermöglicht selektive DNA/RNA, Proteine, enzymatische Aktivität und Pathogene ohne extensive Probenreinigung und Amplifikation zu detektieren. Manche Kontrastmittel ermöglichen bereits die Detektion einzelner Zellen, z.B. zur Verfolgung der Stammzellenmigration.

Um die Entwicklung in diesem für die Bildgebung wichtigen Bereich voranzutreiben müssen Scan- und AuswerteprozEDUREN für die neuen Kontrastmittel in Verbindung mit den unterschiedlichen molekularen Sonden optimiert werden und die Voraussetzungen für Untersuchungen am Maus-Modell geschaffen werden.

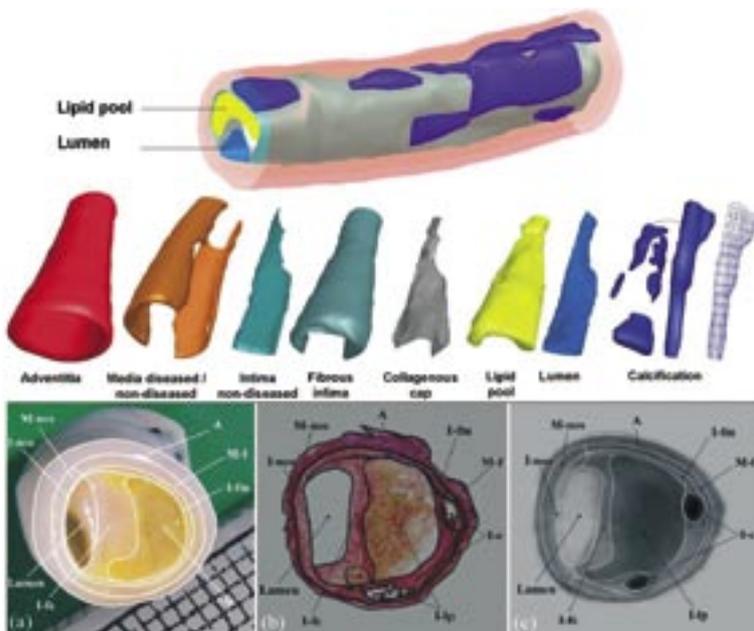


Bild 2: (a) Foto eines Arteriensegments unterteilt in die makroskopisch sichtbaren Gewebekomponenten. (b) Histologischer Schnitt der Arterie in Elastika Van Giesson Färbung. (c) T1 gewichtetes hrMR Bild der Arterie.

Dreidimensionale Rekonstruktion der Arterie mit den unterschiedlichen Gewebesteilen oben (zur Verfügung gestellt von G. Holzzapfel und Mitarbeitern).

### High-throughput Phenotyping für Kleintiere in der funktionellen Genomik (Scharfetter Trajanoski (TU Graz), Stollberger (MUG))

Aufgrund der starken Homologie zwischen menschlichen und anderen Säugetier-Genen erwartet man wichtige Ergebnisse in der Aufklärung der Gen-Funktion aus Tierexperimenten, speziell mit Mäusen. Eine Methode ist, in jedem Maus-Gen eine erbliche Mutation zu erzeugen, um so eine oder mehrere Funktionen einer Mutation zuordnen zu können. Dazu benötigt man eine schnelle und zuverlässige Phänotypisierungs-Methode, bevorzugt hochauflösende 3-D Bildgebung am lebenden Tier. MRT ist aufgrund seiner nicht-invasiven 3-D-Rekonstruktion in der Lage, strukturelle Anomalien in Mutanten abzubilden und ein Vergleich mit einer Referenzmaus kann voll automatisiert werden. Um hohe Bildqualität bei kurzer Messzeit zu gewährleisten ist die Entwicklung spezieller Mehrfachspulensysteme nötig, die es erlauben, mehrere Mäuse in einem einzigen Ganzkörper-MR-Scanner in einem einzigen Bildgebungszyklus bei hoher SNR abzubilden. Dies ist mit mehreren geschirmten Hochfre-

quenzspulen mit Eingangsverstärkern möglich, wobei zur Korrektur von Geisterbildern aufgrund unvermeidbarer Restkopplungen zwischen den Systemen spezielle Techniken des ‚Parallel-Imaging‘ angewendet werden können. Ziel ist es, optimal gepackte Spulen für ein 3-T-Ganzkörpersystem zu entwickeln und Maus-Phenotyping zu betreiben.

Neben diesen drei Themen bleibt natürlich Raum für weitere Aktivitäten. So wird derzeit etwa der sehr interessante Bereich ‚Funktionelle Hirnforschung‘ angedacht, der auch an der MUG etabliert werden soll.

Die Initiatoren bedanken sich bei der Universitätsleitung und beim Rat für Forschung und Technologieentwicklung dafür, dass sie mit der Unterstützung dieses Projekts helfen, die bereits jetzt gute Stellung der TU Graz im Bereich der Biowissenschaften weiter auszubauen und zu stärken.

### High-field (3T) MRI equipment for research: Joint project of the Medical University Graz (MUG) and Graz University of Technology (TU Graz)

Magnetic resonance imaging (MRI) is one of the most modern and versatile imaging methods for the investigation of living organisms and macroscopic specimens in medical diagnostics and biomedical research. The spectrum of applications ranges from morphological imaging to the determination of biophysical parameters and in-vivo biochemical analysis. Typical topics for research are high resolution imaging and characterization of tissue, imaging of vessel walls and plaque, diffusion tensor imaging, fiber tracking, perfusion imaging, molecular imaging and functional neuroimaging.

All biomedical applications permanently imply new methodological challenges for the engineer. Examples are the development of new sequences, new hardware and coil systems as well as new algorithms for reconstruction and data analysis. Currently an end of this trend cannot be foreseen, therefore dedicated MRI systems for research are available nearly at all universities with significant medical or biomedical research. A successful utilization of such a system requires strong interdisciplinary research teams. In Graz the basis for an interdisciplinary cooperation is virtually ideal due to the existence of TU Graz with long-term experience in Biomedical Engineering and the recently founded MUG with ambitious clinical research programs in the field of medical imaging. In order to facilitate a sustainable development of MRI the MUG and TU Graz have decided to establish a common infrastructure for 3-T high-field MRI so as to create the basis for further cutting-edge research with this biomedical key technology. The project has been granted and will be financed by the Austrian Council for Research and Technology Development (RFT). Thus, due to a contribution of about 16% of the overall budget (16 Mio. Euro), TU Graz soon will have access to a modern 3-T whole body scanner for imaging and spectroscopy.

In the near future three main topics shall be tackled within the framework of the research center ‘Life Science Technology’: High-resolution imaging of vessel walls: Plaque, stability and balloon angioplasty, (2) molecular imaging, (3) high-throughput phenotyping for small animals in functional genomics. Additional challenging activities are currently discussed, e. g. ‚functional brain research‘. This project will help to strengthen the already good position of TU Graz in the area of life science technology.



## RFT-Projekt: Scientific Supercomputing Teil II

### *Scientific Supercomputing Part 2*

Die vom Zentralen Informatikdienst angesuchte Förderung um Erweiterung der Rechnerinfrastruktur an der TU Graz mit Schwerpunkt Scientific Supercomputing umfasste folgende Positionen:

- Erweiterung des bestehenden hochperformanten 64 Bit Alpha-Clusters um sechs Knoten mit je vier CPUs und 16 GB RAM. Damit kann der bereits vorhandenen Quadrics Switch optimal ausgenutzt werden. Weiterhin die Aktualisierung bzw. Erweiterung von Softwarelizenzen.
- Ausbau des Storage Artea Networks (SAN) von derzeit ca. eineinhalb auf drei Tera-Byte brutto Speicherkapazität.
- Anschaffung eines zweiten Myrinet-LinuxClusters inkl. Maschinenrauminfrastruktur für den Bereich Bioinformatik.

Diesem Antrag wurde vom Rat für Forschung und Technologie (RFT) entsprochen und mit € 580.000,- dotiert. Realisiert werden die Erweiterung des bestehenden Alpha-Clusters um weitere fünf Rechenknoten (20 CPUs) und eine Verdoppelung der SAN Speicherkapazität. Das seit dem Herbst 2002 sehr effektiv genutzte System wird auch in den kommenden Jahren somit noch vielen Forschenden wertvolle Rechenleistung bieten können.

Aufgrund der ständig erweiterten zentralen Rechnerinfrastruktur und dem Konsolidieren diverser Institutsrechner auf Servern des ZID bzw. in dessen Maschinenraum, wurde eine neue USV-Anlage für

eine Redundanz des Maschinen-Raumes angeschafft. Weiterhin sind dringend benötigte Softwarelizenzen (Gaussian, Matlab u.a.) für das Scientific Supercomputing zu aktualisieren bzw. zu ergänzen.

Dem geplanten Linux-Cluster wurden seitens der Universitätsleitung prioritäre EDV-Infrastruktur Maßnahmen im Bereich Computer Vision sowie Architektur und Medien vorgezogen, da im Bereich Bioinformatik bestehende Einrichtungen synergetisch besser genutzt werden.

Weitere Informationen zu den betreuten Forschungsprojekten, der Rechensysteme und verwendeter Software findet man unter <http://Supercomputing.TUGraz.at>

### *Scientific Supercomputing Part 2*

*As a second step in Scientific Supercomputing the hard- and software for Finite Elements and Computational Fluid Dynamics (FECFD) at the Information and Communication Technology Center represented by a HP-AlphaCluster (10 nodes connected via Quadrics switch technology, 40 CPUs, each EV68 1.25 GHz) will be widened by additional five nodes (20 CPUs), the Storage Area Network will increase its capacity and software licences will be upgraded.*

*More information is available at <http://supercomputing.TUGraz.at/>*



ATHOS (HP SC45 Cluster, Alpha-CPU und Quadrics Switch Technology)



SAN (HP EVA, 1.5 Tera Byte, Fibre Channel Technology)



## Christian Doppler Labor für Nichtlineare Signalverarbeitung erfolgreich evaluiert

### *Successful Evaluation of the CD Laboratory for Nonlinear Signal Processing*

Das Christian Doppler Laboratorium für Nichtlineare Signalverarbeitung wurde im Rahmen der begleitenden wissenschaftlichen Kontrolle am 5. März 2004 in einem Hearing mit Vertretern der Christian Doppler Forschungsgesellschaft (CDG) und Herrn Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Mathis von der Universität Hannover evaluiert. Aufgrund des ohne Einschränkung positiven Evaluierungsergebnisses beschloss das Kuratorium der CDG die planmäßige Weiterführung bis März 2009.

Dieser Erfolg gründet auf die in den ersten beiden Jahren geleistete Aufbauarbeit. Das Labor wurde etwa ein Jahr nach meiner Berufung an die TU Graz gemeinsam mit unserem Industriepartner Infineon Technologies, Microelectronic Design Centers Austria GmbH, beantragt und nahm seine Tätigkeit mit 1. April 2002 auf. Der wissenschaftliche Kern der Arbeiten liegt zum einen in der Signalverarbeitung, also in der Erfassung, Speicherung, Analyse, Darstellung, Interpretation, Manipulation, Erzeugung, Übertragung und Wiedergabe von Information, die entweder als Zahlenfolge oder als physikalisches Signal vorliegt. Zum anderen ist Nichtlinearität eine in natürlichen wie technischen Systemen häufig anzutreffende Eigenschaft, bei der die gemeinsame Wirkung zweier Ursachen nicht

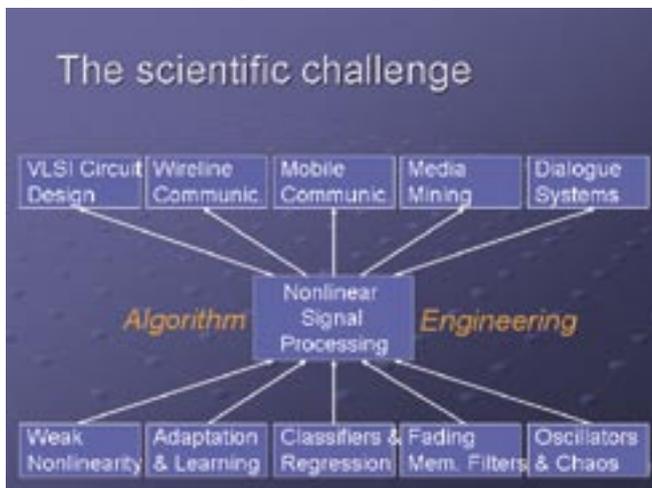


Abb.1. Algorithm Engineering als zentrale Aufgabe der Nichtlinearen Signalverarbeitung

der Summe der Einzelwirkungen entspricht, und deren Modellierung zum Erfassen realer Zusammenhänge oft entscheidend ist. Wir greifen Methoden aus den mathematischen Grundlagen auf, wie sie in Abb.1 beispielsweise als Adaptions- und Lernverfahren, nichtlineare Filter oder Oszillatoren dargestellt sind, und begleiten sie bis in die verschiedenen Anwendungen der Informations- und Kommunikationstechnik, z.B. das Chip Design im Mixed-Signal Bereich, die leitungsgebundene und mobile Telekommunikation, und interaktive Dienste in der Sprachkommunikation. Dabei steht letztlich die für die Problemlösung maßgeschneiderte Rechenvorschrift oder das Algorithm Engineering im Mittelpunkt. Die Leitziele des CD Labors sind dabei

- Exzellenz in der Verknüpfung mathematischer Grundlagen mit informationstechnischen Anwendungen
- „One-stop shopping“ von theoretischer Analyse über Synthese

von Algorithmen bis zur optimierten Realisierung

- Bidirektionaler Wissenstransfer zwischen industrieller und akademischer Forschung

Derzeit arbeiten vier Dissertanten und mehrere Studienassistentinnen in drei Projektmodulen an folgenden Themen:

- Identifikation und Kompensation von Nichtlinearitäten in xDSL Systemen (Digital Subscriber Lines, ADSL bzw. VDSL)
- Digitale Korrektur von analogen Signalverarbeitungsfehlern in schnellen Analog-Digital-Wandlern
- Digitale Vorentzerrung für Mobilfunk-Basisstationen (UMTS)

Als ein Beispiel aus der Grundlagenarbeit ist in Abb.2 ein Volterra Kern zweiter Ordnung für eine nichtlineare Differentialgleichung dargestellt, der mit von uns entwickelten Algorithmen identifiziert wurde.

Weitere Projektmodule zur Modellierung von neuartigen Funkübertragungssystemen insbesondere für Ultra WideBand Communications (UWB) sind in Vorbereitung, wobei eine Ausweitung des CD Labors auf weitere Kooperationspartner geplant ist. Das Labor betreibt auch internationale Kooperationen und ein Gastforscher-Programm (bisher Prof. Dr. Martin Hasler von der EPFL in Lausanne und derzeit Dr. Claudia Lainscsek von der UCSD in San Diego).

Als Ergebnis unserer bisherigen Tätigkeit seien abschließend folgende Punkte hervorgehoben:

- 14 Publikationen mit internationalem Peer Review, davon zwei in Special Issues von führenden Fachzeitschriften
- Wissenstransfer belegt durch Beteiligung von Koautoren aus der Industrie in sechs der genannten Publikationen, durch gemeinsame Nutzung von Hardware- und Softwarewerkzeugen und durch gemischte Anstellung von Dissertanten (z.B. 50 % TU Graz, 50 % Industriepartner)
- 20 Erfindungsmeldungen an den Industriepartner, davon 12 bereits zum Patent angemeldet

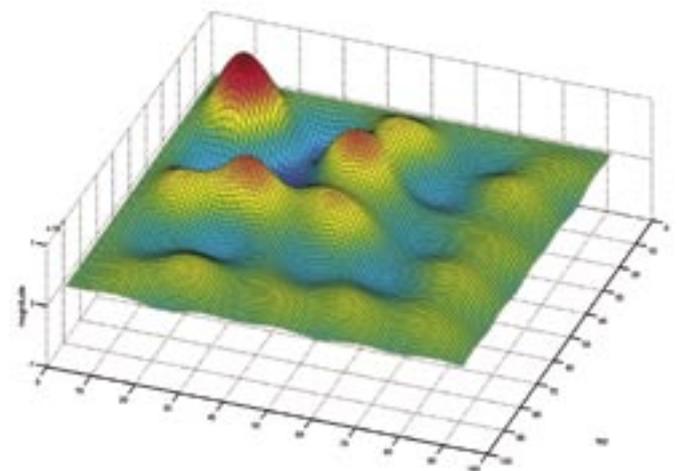


Abb.2. Zweidimensionaler Volterra Kern mit Gedächtnislänge 100 für eine nichtlineare Differentialgleichung

Zusammenfassend möchte ich betonen, dass die Aktivitäten im CD Labor eine hervorragende Ergänzung des wissenschaftlichen Spektrums des Betreiberinstituts an der TU Graz darstellen und in enger Verzahnung mit anderen Formen unserer kooperativen Forschung gesehen werden müssen, insbesondere dem TU Graz Forschungsschwerpunkt Smart Systems for a Mobile Society, dem Forschungszentrum Telekommunikation Wien im K+ Programm, sowie zwei gerade anlaufenden Projekten im 6. Rahmenprogramm der EU.

### ***Successful Evaluation of the Christian Doppler Laboratory for Nonlinear Signal Processing***

*The Christian Doppler Laboratory for Nonlinear Signal Processing underwent its first two-year evaluation by representatives of the Christian Doppler Society (CDG) and Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Mathis (University of Hannover) on March 5, 2004. Based on the fully positive evaluation result, the CDG controlling board has endorsed the planned continuation of the lab until March 2009.*

*This success is rooted in a two-years' build-up phase. One year after my appointment at TU Graz, the proposal for the lab was submitted together with our industrial cooperation partner Infineon Technologies, Microelectronic Design Centers, Austria, and the lab started operation on April 1, 2002. The scientific core lies in signal processing and nonlinearity which often plays a decisive role when modeling real-world systems. The vision of the lab is to combine excellence in linking mathematical foundations to information engineering applications, with one-stop shopping from theoretical analysis through synthesis of algorithms to optimized realizations, and bi-directional knowledge transfer between industry and academia. Current and future project work concentrates on nonlinear methods for digital subscriber line circuits (ADSL, VDSL), fast analog-to-digital converters, mobile-radio base stations for UMTS, and ultra-wide band communications (UWB). The output of our research can be characterized by its strong publication record, the demonstrated knowledge transfer through joint authorship, joint use of hardware/software tools, and joint employment models, as well as by 20 invention reports which led to 12 patent applications so far.*

*In conclusion, the lab constitutes an outstanding enhancement of the scientific spectrum of its host institute at TU Graz, in close connection with our further cooperative research endeavors such as the TU Graz research focus Smart Systems for a Mobile Society, the Vienna Telecommunications Research Center ftw. in the K+ program, and two new projects in the 6th Framework Program of the EU.*



## Christian Doppler Labor für Genomik und Bioinformatik

### *Successful Evaluation of the CD Laboratory for Nonlinear Signal Processing*

Am Institut für Genomik und Bioinformatik der Technischen Universität Graz wurde im Jahre 2002 ein Christian Doppler Labor für Genomik und Bioinformatik unter der Laborleitung von Univ.-Prof. Dr. Zlatko Trajanoski eingerichtet. Es ist das erste CD-Labor im Bereich Biotechnologie. Als Kooperationspartner aus der Industrie sind die Firmen Eccocell und Oridis Biomed beteiligt.

Das Ziel der Forschungsarbeiten ist die Entdeckung und funktionelle Aufklärung jener Gene und Proteine, die beim Prozess der Vermehrung und Differenzierung von Knochenmarkstammzellen beteiligt sind und für die Diagnose und Therapie von chronischen Lebererkrankungen relevant sind. Die Experimente dafür basieren auf der Microarray Technologie, wobei die Microarrays für Untersuchungen von Maus und Mensch selbst hergestellt werden. Dazu werden auf beschichteten Glasobjektträgern bis zu 43.200 Elemente aufgebracht (für Ausschnitt siehe Abbildung). Mit diesen Gen-Chips und der notwendigen Bioinformatik soll das gesamte menschliche und murine Genom auf medizinisch interessante Ziel Gene durchsucht werden.

Mesenchymale Stammzellen (MSC), die neben den hämatopoetischen Stammzellen im Knochenmark existieren, gewinnen in letzter Zeit immer mehr an Bedeutung, da sich gezeigt hat, dass sie nach Isolierung aus dem Knochenmark und in vitro Expansion noch immer ihre Eigenschaft der Pluripotenz und Fähigkeit der vielfältigen Differenzierung in unterschiedliche mesenchymale Gewebe, wie Knochen, Muskel, Knorpel, Fett, etc., besitzen. Trotz umfangreicher Literatur, gibt es einige Unklarheiten bezüglich Isolations- und Anzuchtmethoden und Charakterisierung von Stammzellen. Die Charakterisierung der in vitro expandierten Stammzellen erfolgt über deren Phänotyp und Microarray-Analysen. Weiters werden diese Stammzellen der Differenzierung in Kardiomyozyten, Osteoblasten und Chondrozyten unterzogen, wobei wiederum die Analyse auf Microarray-Technologie basiert.

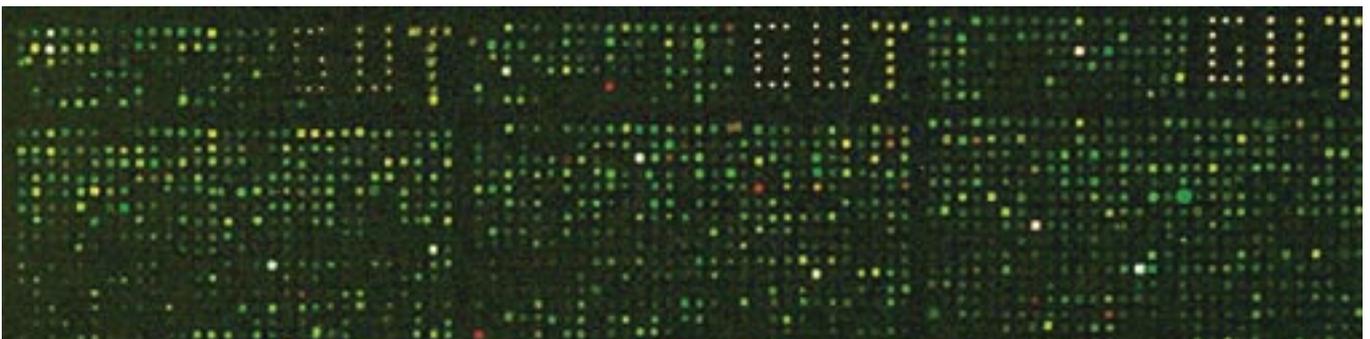
Die Charakterisierung von humanen Leberkrankheiten wird anhand eines etablierten Mausmodells für alkoholische und nicht alkoholische Steatohepatitis untersucht und die Relevanz der erhaltenen Mausdaten in Bezug auf das humane Krankheitsbild validiert. Die Daten werden mit Hilfe von komparativer Transkriptomik analysiert, bei der Gene von Mensch und Maus über Sequenz- und Funktionsähnlichkeiten miteinander verglichen werden. Dazu wird

die im Institut für Genomik und Bioinformatik entwickelte Software verwendet, die sowohl für die Datenverarbeitung der Microarray-Experimente (Statistikanalysen) als auch für die Datenaufbereitung (Erkennung von Kandidaten-Genen in biologischen Regulationswegen) konzipiert ist.

Mehr Informationen finden sie auf unserer Homepage:  
<http://genome.tugraz.at/>

### *Christian Doppler Laboratory for Genomics and Bioinformatics*

*The Christian Doppler Laboratory for Genomics and Bioinformatics was founded 2002 at Graz University of Technology as part of the Institute for Genomics and Bioinformatics. Cooperation partners from industry are the locally situated Biotech companies Lifecord and Oridis Biomed. The principal goal of our research plan is to link genes to function on a genomic scale in order to facilitate investigations of physiological and patho-physiological mechanisms underlying metabolic diseases. The cultivation and microarray-based analysis of human mesenchymal stem cells is part of the investigation of expression profiling and differentiation of stem cells. The characterization of human liver diseases, more precisely the investigation of disease pattern of alcoholic and non alcoholic steatohepatitis, is based upon comparative transcriptomic by using an appropriate mouse model. All microarrays for our experiments are produced in-house, where up to 43.200 elements can be spotted on one object slide. For data analysis, several in-house developed computer programs support in a user-friendly way the extraction of scientific valuable candidate genes for stem cell differentiation and liver disease characterization.*



Microarrays sind wertvolle Werkzeuge, um in kurzer Zeit einen großen Überblick über den Zustand von biologischen Systemen zu erhalten. Die unterschiedlich fluoreszenzmarkierten Proben geben Auskunft über überexprimierte (rot) oder unterexprimierte (grün) Gene. Gelbe Spots werden durch gleiche Expressionlevels in den Proben generiert. Foto: CD-Labor für Genomik und Bioinformatik

Vertragsprof. Mag.art. Dr.phil. Susanne Hauser  
Institut für Kunst- und Kulturwissenschaften  
E-Mail: susanne.hauser@TUGraz.at  
Tel: 0316 873 6275



Mag.phil. Dipl.-Ing. Christa Kamleithner  
Institut für Kunst- und Kulturwissenschaften  
E-Mail: christakamleithner@tele2.at



## Forschung an der Fakultät für Architektur: Projekt „Stadt und Landschaft“ am Institut für Kunst- und Kulturwissenschaften

### *City and Landscape*

Seit Mai 2002 untersucht das interdisziplinäre Ladenburger Kolleg „Mitten am Rand – zur Qualifizierung der Zwischenstadt“ die urbanen Stadtlandschaften Europas und arbeitet an Vorschlägen zu ihrer Qualifizierung. Das Projekt wird finanziert durch die Gottlieb Daimler- und Karl Benz-Stiftung.

Den Begriff „Zwischenstadt“ hat Thomas Sieverts 1997 geprägt, um damit jene Zonen aus Gewerbegebieten, Einkaufszentren, Verkehrsflächen, Gärten, Feldern und Siedlungen verschiedenster Art zu bezeichnen, die geläufigen Konzepten von ‚Stadt‘ und ‚Land‘ nicht mehr entsprechen. Die „Zwischenstadt“ stellt die Unterscheidung von Stadt und Land(schaft) grundsätzlich in Frage und zeigt Tendenzen zur Eigenständigkeit wie zur Ubiquität.

Im kulturwissenschaftlichen Teilprojekt „Stadt und Landschaft“, das 2002 an der Humboldt-Universität zu Berlin begonnen wurde und seit Februar 2004 am Institut für Kunst- und Kulturwissenschaften der TU Graz bearbeitet wird, steht die Frage einer konzeptuellen und ästhetischen Haltung im Mittelpunkt, die der Wahrnehmung und dem Entwerfen in der Zwischenstadt adäquat ist.

Ausgangspunkt ist die Einsicht, dass „Zwischenstadt“ keine Vermischung von Stadt und Land(schaft) ist, sondern ein Handlungsraum mit neuen symbolischen und ästhetischen Qualitäten. Das Projekt setzt die „Zwischenstadt“ zum einen zu Konzepten der ‚Landschaft‘, zum anderen zu Konzepten der ‚Stadt‘ in Beziehung und führt damit eine methodische wie konzeptionelle Trennung (wieder) ein, um sie für die Diskussion der neuen Stadtlandschaften und ihrer aktuellen Qualitäten produktiv zu machen.

Der erste Teil des Projekts stellt die Frage, was traditionelle und neuere Konzepte der ‚Landschaft‘ zur Qualifizierung zwischenstädtischer Situationen beitragen können. Zwei einander widersprechende Standpunkte sind hier zu diskutieren: Dass es ‚Landschaft‘ nicht mehr gibt – oder dass überall ‚Landschaft‘ ist. Die erste Annahme verabschiedet ein Konzept, das seit etwa 500 Jahren die Imaginationen der Beziehung von Mensch und Natur bezeichnet und immer wieder neu gebündelt hat. Die zweite Annahme ist für die Suche nach Qualifizierungsoptionen produktiver, sie öffnet ein Feld von Fragen: Inwiefern verknüpft sich die Frage der landschaftlichen ‚Identität‘ mit derzeitigen räumlichen Entwicklungen? Welche Rolle spielen ‚Geschichte‘ und ‚Gedächtnis‘ für die neuen Stadtlandschaften? Was haben Konzepte wie Sesshaftigkeit oder ‚Heimat‘ mit der heute vorfindlichen Situation zu tun? Ist der postindustrielle, posturbane, postagrare Raum eine neue Kulturlandschaft, die wir nur noch nicht adäquat betrachten? Aus den Antworten auf diese Fragen ergeben sich Handlungsoptionen sowohl für die Planung als auch für das Entwerfen in der Zwischenstadt.

Der zweite Teil des Projekts befasst sich mit Konzepten von Stadt und Urbanität und setzt sie in Beziehung zur ästhetischen, sozialen, politischen und räumlichen Verfasstheit der Zwischenstadt. Nach wie vor bestimmen Konzepte der Stadt, die an der europäischen Stadt des späten 19. Jahrhunderts gewonnen sind, das Alltagsverständnis und spielen planungsleitende Rollen. Das zähe Leben der alten Konzepte deutet darauf hin, dass mit ihnen Qualitäten verbunden werden, die auch heute als erwünscht gelten. Es gilt, diese Wünsche nicht nur

zu ernüchtern, sondern die mit ihnen gemeinten Qualitäten sowie die zu entdeckenden Qualitäten der Zwischenstadt für ihre Entwicklung zu integrieren. Während das Konzept der Landschaft in erster Linie auf identifikatorische und ästhetische Potenziale verweist, steht das Konzept der Urbanität für diffuse Wahrnehmungen und Erlebnis-dichte. Es steht für eine Struktur, die die Begegnung mit dem Unbekannten möglich oder wahrscheinlich macht und für eine Vielfalt von sozialen und politischen Optionen, die im dicht besiedelten Stadt-raum koexistieren können. Das Projekt konzentriert sich hier auf die Frage, inwieweit diese Qualitäten in der räumlichen Zerstreung der Zwischenstadt in neuer Form verfügbar gemacht werden können.

Publikationen zum Projekt:

<http://www.kunstundkultur.tugraz.at/stadtundland.html>

### *City and Landscape*

*„City and Landscape“ is part of the Ladenburger Kolleg „Mitten am Rand: Zwischenstadt – Towards the Qualification of the Urbanised Landscape“. The project started in May 2002 and is supported by the Gottlieb Daimler- and Karl Benz-Foundation.*

*„Zwischenstadt“ is a term coined by Thomas Sieverts for areas showing characteristic features of urban developments and (rural) landscapes at the same time: „Zwischenstädte“ are composed of industrial zones, shopping centres, traffic infrastructures, gardens, fields and settlements of different types. The development of these areas challenges traditional concepts of the city and of urbanity as well as common concepts of cultural landscapes. The first part of the project raises the question of how traditional and more recent concepts of „landscape“ are able to contribute to the qualification of the urbanised landscape. The importance of places, of memory and constructions of regional identity is being analysed. The second part deals with concepts of the city and of urbanity in relation to the aesthetic, social, political and spatial constitution of the „Zwischenstadt“. The leading images of cities in the discourses of city planning and architectural theory are analysed with regard to their impact on planning processes in the „Zwischenstadt“.*



## Neue Hauptverwaltung für die Europäische Zentralbank in Frankfurt wird der erste wirklich natürlich gelüftete Wolkenkratzer der heutigen Zeit

### *European Central Bank Headquarters in Frankfurt to be the first modern skyscraper to be truly naturally ventilated*

Der internationale Wettbewerb für den Neubau der Hauptverwaltung der europäischen Zentralbank in Frankfurt wurde in zwei Phasen abgehalten. In der ersten Phase haben 80 Teams aus aller Welt Entwürfe eingereicht. Anschließend wurden 12 Teams ausgesucht für die 2. Phase. Das Wiener Büro Coop Himmelblau ging in Februar 2003 aus der zweiten Phase als Sieger hervor. Der Gebäudekomplex soll 100.000 m<sup>2</sup> für ca. 2.500 Beschäftigte zur Verfügung stellen. Der Siegerentwurf sieht ein Ensemble aus drei Elementen vor; die bestehende Großmarkthalle, ein "Groundscraper" und polygonale Zwillingstürme. Ein zentrales Thema im Entwurf bilden die innovativen Klima- und Energiekonzepte. Das primäre Ziel dieser Konzepte ist, den Einsatz von den technischen Systemen und der Energieverbrauch des Gebäudes, die notwendig sind, um optimale raumklimatische Bedingungen für die Nutzer zu erreichen, auf ein Minimum zu reduzieren.

Der Komplex wird der erste wirklich natürlich gelüftete Wolkenkratzer der heutigen Zeit. Sämtliche zeitgenössische „natürlich gelüftete“ Hochhäuser in dieser Höhe sind bei extremen Wetterbedingungen auf die installierten mechanischen Lüftungsanlagen angewiesen. Die Installation von solchen Anlagen ist jedoch bei genauer Betrachtung eigentlich verschwenderisch, da diese Systeme für den „Worst Case“ ausgelegt werden müssen und stellen somit die gleichen Systeme dar, die bei einem hermetisch abgeschlossenen mechanisch gelüfteten Gebäude vorgesehen würden – mit all den Nachteilen in Bezug auf Investitionskosten und Platz für Zentralen und Schächte, die damit einhergehen. Die verbundenen Energie-, Betriebs- und Wartungskosten sind auch nicht zu vernachlässigen, insbesondere deswegen, weil die Anlagen häufig in der Praxis auch dann genutzt werden, zu Zeiten, bei denen deren Nutzung eigentlich nicht erforderlich wäre.

Im vorgeschlagenen Konzept werden die zur Verfügung stehenden natürlichen Kräfte herangezogen, um eine kontrollierte wirksame natürliche Lüftung der Büroräume zu ermöglichen. Die Form und Konstruktion der Gebäude wurden während des Entwurfprozesses so optimiert, dass sowohl Wind- als auch Sonnenenergie als direkte Antriebskräfte für die Gebäudelüftung eingesetzt werden. Das vorgesehene Atrium zwischen den Bürotürmen übernimmt hierbei eine zentrale Rolle. Die Fassaden des Atriums sind so konstruiert, dass sie als „Windfänger“ fungieren, um den Wind in das Atrium hinein zu lenken. Die Form der so genannten "suction gaps" (Unterdruckspalten) in der doppelschaligen Außenfassaden der Bürotürme wurde so konzipiert, dass die verbrauchte Luft – unabhängig von der vorherrschenden Windrichtung – aus den Büroräumen heraus gesaugt wird.

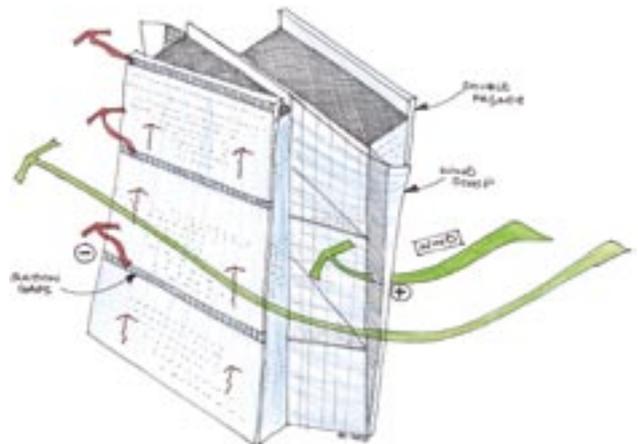
Außenluft strömt in das Atrium hinein, anschließend durch die Bürogänge durch und verlässt die Büroräume durch Fenster auf den Außenseiten der Türme. Somit wird eine effektive Querlüftung der Büroräume ermöglicht. Die doppelschaligen Fassaden auf den Außenseiten der Bürotürme fungieren als solarthermische Abluftkammine. Die leichtere warme Luft steigt im Zwischenraum der Fassade auf und zieht kühlere schwere Luft durch die Büroetagen nach. Auf Grund der Höhe des Gebäudes wird die Fassade in drei horizontale Abschnitte aufgeteilt, die eine jeweilige Höhe von ca. 50 m haben, um die sich einstellenden Druckdifferenzen innerhalb kontrollierbarer Grenzen zu halten.

"Windfänger" in der Außenhaut des Atriums sorgen dafür, dass der Wind in das Atrium hineingelenkt wird. Durch eine automatische Steuerung von Klappen wird der vorherrschende Druckunterschied in den

Büroetagen so eingestellt, dass eine kontrollierte natürliche Lüftung der Büroräume stattfinden kann.

Speziell konstruierte Elemente in den Außenfassaden der Türme (so genannten "Suction Gaps") sorgen dafür, dass unabhängig von der Windrichtung der Druckkoeffizient der Fortluftöffnungen immer niedriger als der der Außenluftansaugung in den Fassaden des Atriums ausfällt.

Freiliegende Betondecken in den Büroräumen sorgen für thermische Masse. Durch nächtliche Lüftung wird das Kühlpotential der Nachtluft herangezogen und eine Auskühlung der Speichermasse ermöglicht. Die Decken werden zu dem mit einem Wassersystem thermisch aktiviert (Bauteilaktivierung). Dabei kann ein Großteil des hierfür notwendigen jährlichen Energiebedarfs durch Energiepfähle, welche in den Gebäudefundamenten integriert sind, abgedeckt werden.



Darstellung des Klimakonzeptes

### *European Central Bank Headquarters in Frankfurt to be the first modern skyscraper to be truly naturally ventilated*

*The new headquarters of the ECB in Frankfurt will be the first modern skyscraper to be truly naturally ventilated. In the proposed concept the available natural forces are harnessed to provide controlled effective natural ventilation of the offices. The form and construction of the building were optimised in the design process, so that both wind and solar energy are used to drive natural ventilation. The atrium linking the two towers plays a central role in the concept. The atrium facades are constructed so that they act as "wind scoops" and divert the wind into the atrium. Specially designed elements (suction gaps) are provided in the external double skin façades of the office towers, the form of which ensures that the pressure coefficient at the air exhaust points is always lower than those at the air inlet points. Thus used air is exhausted naturally out of the office spaces regardless of the prevailing wind direction. Air flows from the atrium across the office floors before exiting on the external sides of the towers, thus ensuring effective cross ventilation of the office floors. The double façade acts as a solar thermal exhaust flue. The less dense warmer air rises up through the flue and is replaced by cooler heavier air flowing through the office floors. Dampers in the external skin of the building are operated to control the pressure difference operating across the office floors.*



## Forschung an der Fakultät für Bauingenieurwissenschaften: Charakteristik von Störungen und Störungsgesteinen des Koralm Komplexes und ihre Auswirkungen auf den Gebirgsbau

### *Characterization of faults and fault rocks of the Koralm Complex and its influence on rock mass*

Im Rahmen des Instituts-Forschungsschwerpunktes „Engineering Geological Characterisation of Fault Zones“ (Ingenieurgeologische Charakterisierung von Störungszonen) ist geplant, die junge strukturgeologische Entwicklung der Koralmpe zu untersuchen. Im Rahmen dieses Forschungsschwerpunktes wird die Genese von spröden Störungszonen anhand von Tiefenaufschlüssen (Bohrungen, Tunnel) und von Geländeerkundungen untersucht. Besonderes Augenmerk gilt der kinematischen Störungsanalyse sowie den Eigenschaften von Störungsgesteinen, sowie Tonmineralentwicklungen im Zusammenhang mit niedrigtemperierten Lösungsumsätzen im Bereich der Störungszonen.

Die Entwicklung der Koralmpe (Abb. 1) unter niedriggradigen Metamorphosebedingungen ist leider durch Daten wenig belegt. Die vermutlich im Tertiär gebildeten Störungen und Störungszonen, sowie die jüngsten unter relativ kühlen Temperaturenbedingungen gebildeten Strukturen, prägen maßgeblich das Erscheinungsbild dieses Bergmassivs und stellen die für Felsbauvorhaben maßgeblichen tektonischen Elemente dar (Abb. 2 oben). Erst mit Beginn der Erkundungsarbeiten für den Koralmbasistunnel wurde intensiver damit begonnen, diese tektonischen Verhältnisse näher zu untersuchen. Seit 1996 wurden im Auftrag der HL-AG geologische Kartierungsarbeiten (3G ZT GmbH, BGG) und seit 1999 auch zahlreiche Kernbohrungen durchgeführt um für dieses Projekt detaillierte Informationen über die Gesteins- und vor allem die Störungsverhältnisse zu sammeln. Diese Arbeiten wurden von einem intensiven geophysikalischen und geologisch – geotechnischen Untersuchungsprogramm begleitet. Die im Rahmen dieser Untersuchungen entlang der Koralmtunneltrasse durchgeführten Bohrungen bzw. Tiefbohrungen ermöglichen es, die bisher vorliegenden Geländedaten um eine weitere Dimension zu erweitern.

Im Rahmen dieses Projektes werden die im Zuge dieser Arbeiten

gewonnenen Bohrkern, über die bisher durchgeführten Untersuchungen hinausgehend, strukturgeologisch untersucht um detaillierte Informationen über die Bildungsbedingungen und die Charakteristika dieser Störungszonen zu erhalten. Vor allem im Bereich der Lavanttal-Störung, und im Bereich des Ostrand des Koralm-Komplexes müssen noch umfangreiche strukturgeologische Untersuchungen durchgeführt werden, da zu erwarten ist, dass die jüngere Hebungsgeschichte der Koralmpe im Zusammenhang mit der Bewegung entlang der Lavanttal-Störung, bzw. einer vermuteten Störung am Ostrand zusammenhängt. Dazu sollen erbohrte Kataklasite aus dem Bereich der Lavanttalstörung und dem Ostrand mittels moderner strukturgeologischer Methoden untersucht werden. Dies beinhaltet vor allem meso- und mikrostrukturelle Detailstudien zur Erfassung der Kinematik der Störungsbereiche (z.B. „kinematische Trennflächenanalysen“), sowie Tonmineralanalysen aus den Kataklasiten. Kinematische Trennflächenanalysen sollen auch an den Kernen aus den Tiefbohrungen durchgeführt werden (Abb. 2 unten). Weiters soll versucht werden, neu gebildete Minerale entlang einzelner Störungsbereiche zu analysieren und das Alter der Deformation entlang dieser Störungen geochronologisch zu erfassen, um die zeitlichen Zusammenhänge zwischen Störungsaktivität und Hebung des zentralen Teiles des Koralm-Komplexes zu erarbeiten. Zusätzlich soll die hydrothermale Alteration und deren Auswirkungen auf die Gebirgsfestigkeit (Auflockerung des Gebirgsverbandes) im Umgebungsbereich dieser Störungen detailliert untersucht werden. Dies umfasst einerseits die Analyse der Druck- und Temperaturbedingungen während der Alterationsprozesse mittels petrophysikalischer, petrologischer und petrochemischer Untersuchungen.

Ergänzend sind detaillierte strukturelle Untersuchungen an Großaufschlüssen, auch innerhalb des Koralmmassivs, durchzuführen, um die Zusammenhänge zwischen der Störungsaktivität an den Rändern und den Strukturen in den zentralen Teilen zu analysieren. Diese Untersuchungen beinhalten eine detaillierte Erfassung des Trennflächeninventars und ihrer strukturgeologischen Bedeutung. Die Datenerfassung soll unter anderem photogrammetrisch erfolgen. Die Datenauswertung ist mit dem „Joint Matrix“ System geplant, das im Zuge des Forschungsprojektes „SITU – Simulation in Tunneling“ an der TU Graz entwickelt wurde. Dies soll eine möglichst objektive und lückenlose Datenerfassung auch an unzugänglichen Aufschlussbereichen gewährleisten. Ziel dieser detaillierten Untersuchungen soll eine präzisere Charakterisierung von spröden Störungszonen im Bereich der Koralmpe sein. Dies sollte eine bessere Prognostizierbarkeit und eine verbesserte Früherkennung von Störungen im Untertagebau ermöglichen. Die in diesem Projekt verwendeten und erarbeiteten methodi-

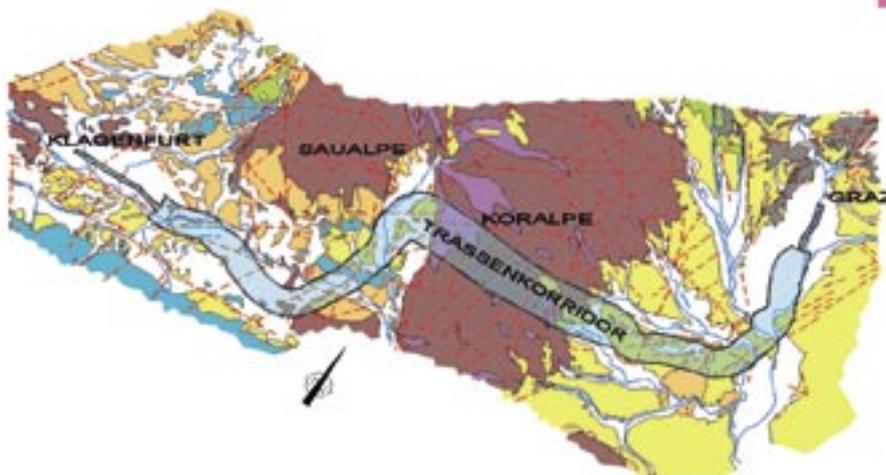


Abbildung 1: Vereinfachte geologische Karte der Koralmpe mit dem geplanten Trassenkorridor des Koralmtunnels.

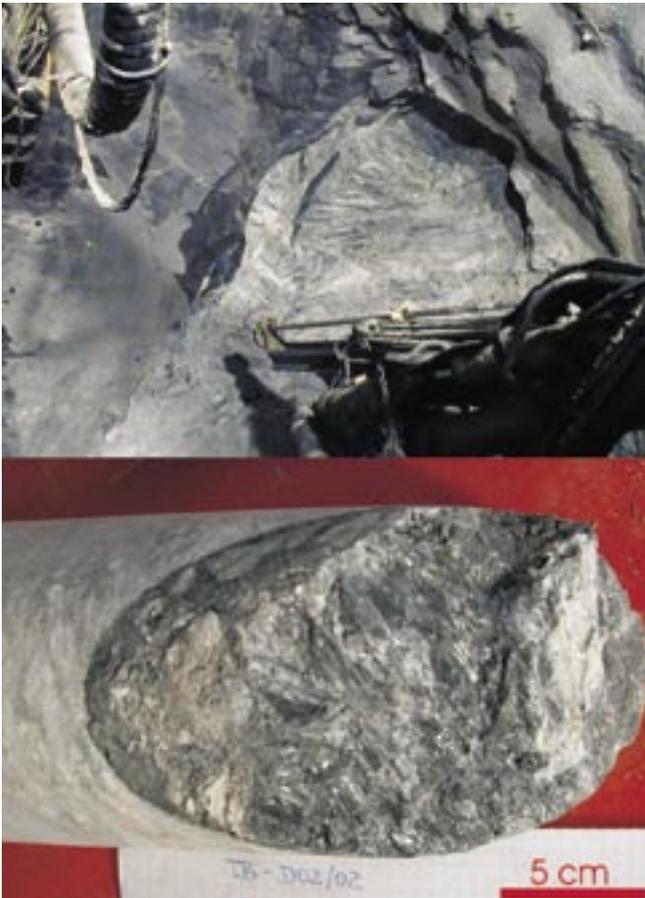


Abbildung 2: Spröde Störungszone im Bereich der Koralpe mit ausgeprägtem Festigkeitskontrast zwischen Störungsmaterial und intaktem Fels. Oben: Tunnelvortrieb. Unten: Bohrkern aus der Tiefbohrung TB-D02/02 (Teufe 485,25 m).

schon Ansätze sollen in Zukunft auch in anderen geologischen Regionen helfen eine zuverlässigere Prognose von Störungszone zu ermöglichen.

An der Durchführung der Arbeiten sind Mag. Robert Rabitsch und Mag. Gerald Pischinger, Ao.Univ.Prof. Dr. Franz Josef Brosch und Univ. Doz. Mag. Dr. Walter Kurz (Institut für Angewandte Geowissenschaften) auf dem Gebiet der Technischen Geologie, sowie o.Univ.Prof. Dipl. Ing. Dr. Wulf Schubert (Institut für Felsmechanik und Tunnelbau) im Bereich der numerischen Modellierung und Felsmechanik beteiligt.

### **Characterization of faults and fault rocks of the Koralm Complex and its influence on rock mass**

*Faults are of major interest both in structural geology, tectonics, and in engineering geology and rock mechanics. The interest in faults and fault zones is practical as well as scientific and aesthetic because faults and associated structures form the major discontinuities in the Earth's upper crust and are largely responsible for the design and shape of the great mountain belts.*

*The formation of faults dramatically changes the characteristics of the rock mass at all scales and has therefore a major impact on the feasibility of underground infrastructures. At the scale of the orogen and at outcrop-scale, associated structures (shear and extensional fractures) result in disintegration of the rock mass and enhanced accessibility to the weathering processes; at smaller scales, brittle*

*tectonic faulting generates structural, chemical and mechanical changes of the rocks (e.g., shear resistance).*

*The main intention of this project is the reconstruction of the evolution of fault rocks during continuous deformation within a brittle shear zone, the alterations of both the host and the fault rocks, and the relationship between confining faults and structures in the internal parts of an uplifting massif. For a case study, we have chosen the Lavanttal Fault at the western margin of the Koralm Complex. This area has been selected because of our wide knowledge of this part of the Eastern Alps due to own field studies, and because the Koralm Tunnel with a length of 32.8 km is planned to be built under Koralm Massif between Deutschlandsberg and St. Andrä south of Wolfsberg. Especially a certain number of deep core drillings, partly reaching depths of up to 1200 m, has extended the access to geological and geotechnical samples to a third dimension. The acquisition of this material shall facilitate the elaboration of a model providing a detailed reconstruction of the structural inventory and its influence on rock mass behaviour. The Koralm Massif is bordered by major confining faults along its western margin (the Lavanttal Fault system), and along its eastern margin. Thus, the Koralm Massif exposes a well situated testing area providing the elaboration of the relationships between faulting along the margins of the Koralm Complex, brittle structures in the internal parts and morphological processes, as well as the investigation of the structural evolution of a major fault zone (the Lavanttal Fault) and related fault rocks.*

*This project provides the chance for a detailed investigation of a major fault zone within a case study, due to the access to essential exposures, outcrops, and rock samples that will be gained during the site investigations and the excavation work related to the construction of the Koralm Tunnel. Vice versa, these detailed structural geological investigations are considered an important toll to adjust excavation and support to the actual geotechnical conditions, as well as to continuously assess the tunnel stability, and may facilitate geological predictions as well. Moreover, new insight into the orientation distribution of stresses adjacent to major faults, at least in a qualitative manner, may be achieved, allowing a quantitative evaluation of the state of stress in the future.*



## Forschung an der Fakultät für Maschinenbau und Wirtschaftswissenschaften: Forschungsprojekt „HylCE“: Entwicklung eines Wasserstoff-Brennverfahrens

### *Integrated Project „HylCE - Optimization of a Hydrogen Powered Internal Combustion Engine“*

Das Automobil mit Verbrennungsmotor ist seit über 100 Jahren ein wesentlicher Garant für unsere Mobilität. Aufgrund der Erschließung neuer Märkte und der mittelfristig damit verbundenen deutlichen Steigerung des weltweiten Fahrzeugaufkommens auf der Strasse wird zunehmend die Nachhaltigkeit zukünftiger Mobilitätsszenarien zur Schonung der Umwelt sowie der endlichen fossilen Energiereserven gefordert.

Durch den Einsatz von Wasserstoff kann dieser Anspruch erfüllt werden, wenn seine Gewinnung durch Verwendung von regenerativen Energiequellen erfolgt. Bei seiner energetischen Umsetzung wird genau die Wassermenge wieder freigesetzt, die zur Herstellung erforderlich war, so dass ein geschlossener Kreislauf ohne die Nutzung der limitierten fossilen Kraftstoffreserven und ohne Beeinträchtigung der Umwelt (z.B. Treibhauseffekt durch Ausstoß von CO<sub>2</sub>) entsteht. Seit dem Jahr 2001 wird am



Hochdruckeinblasung und kryogene Gemischbildung (Quelle: BMW)

Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik gemeinsam mit BMW an der Weiterentwicklung des Wasserstoff-Verbrennungsmotors gearbeitet.

Wesentliche Aktivitäten des Institutes bezüglich alternativer Brennverfahren mit niedrigsten Kohlendioxidemissionen werden mit heutigem Jahr in ein Forschungsprojekt innerhalb des 6. EU-Rahmenprogramms übergeführt. Hinter dem Projekt mit dem Namen „HylCE“ verbirgt sich ein Forschungsvorhaben zur Weiterentwicklung eines Wasserstoff-Verbrennungsmotors, das von der Europäische Union mit ca. € 5 Mio. gefördert wird. Unter der Leitung der BMW AG haben sich Motorenhersteller im PKW-Bereich (Volvo, Ford) und im LKW-Bereich (MAN) zusammengeschlossen, um gemeinsam mit Zulieferern (Mecel, Hörbiger) und Universitäten aus ganz Europa (Institut Français du Pétrole, Universität der Bundeswehr München, Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik) die Entwicklung von Wasserstoff-Verbrennungsmotoren voranzutreiben.

In der Planungsphase wurden drei Hauptentwicklungsrichtungen festgelegt, die in dem auf drei Jahre geplanten Forschungsvorhaben untersucht werden sollen. Diese umfassen die H<sub>2</sub>-Direkteinblasung mit hohem sowie niedrigem Einblasedruck und die kryogene (tiefkalte) Gemischbildung mit äußerer Wasserstoffzufuhr. Zur Erreichung der hochgesteckten Ziele sind wesentliche Entwicklungsfortschritte vor allem in den Bereichen Injektortechnik und Zündsystem erforderlich, da bestehende Komponenten aufgrund der geänderten Stoffeigenschaften von Wasserstoff nicht oder nur bedingt für den Einsatz im Wasserstoff-Verbrennungsmotor geeignet sind. Darüber hinaus wird intensiv an der Weiterentwicklung von Simulationswerkzeugen gearbei-

tet, um deren Einsetzbarkeit unter den geänderten Randbedingungen sicherstellen zu können.

Das Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik der TU Graz übernimmt im Rahmen dieses Projektes wesentliche Aufgaben sowohl im Bereich der experimentellen Aktivitäten als auch in der begleitenden 3D-CFD-Simulation. Neben detaillierten Untersuchungen am thermodynamischen Wasserstoff-Verbrennungsmotor wird ein für den H<sub>2</sub>-Betrieb ausgerüsteter, optisch zugänglicher 1-Zylinder-Forschungsmotor aufgebaut. Damit kann zukünftig sowohl die Qualität von entwickelten Injektorkonzepten als auch die Güte optimierter Gemischbildungs- und Verbrennungskonzepten beurteilt werden. Die gewonnenen Ergebnisse am optischen Versuchsmotor stellen auch eine

unverzichtbare Eingangsgröße zur Validierung und Optimierung der weiterentwickelten Simulationswerkzeuge dar. Ziel der Entwicklungen im Rahmen des Projektes „HylCE“ ist die Darstellung

von Wasserstoff-Brennverfahren, die die Forderungen nach hohen Wirkungsgraden und hohen spezifischen Leistungen bei gleichzeitig nahezu emissionsfreiem Betrieb („Zero Impact“) bestmöglich erfüllen. Die praktische Umsetzung der Forschungsergebnisse wird einerseits durch den Aufbau eines Vollmotors sichergestellt, andererseits wird auch die Übertragbarkeit der gewonnenen Erkenntnisse auf alternative Motorkonzepte, z.B. den Free Piston Engine, überprüft.

### *Integrated Project „HylCE - Optimization of a Hydrogen Powered Internal Combustion Engine“*

*Major activities of the institute referring alternative combustion concepts with low carbon dioxide emissions will be conducted within the research project “HylCE”. Under the leadership of BMW AG, car and truck manufacturer (Volvo, Ford, MAN), technical supplier (Mecel, Hörbiger) and universities from all over Europe (Institut Français du Pétrole, University of the Armed Forces Munich, Institute of Internal Combustion Engines and Thermodynamics) work together in developing an optimized hydrogen internal combustion engine.*

*During the planning phase hydrogen direct injection into the cylinder and hydrogen cryogenic port injection were found to be the most promising concepts for achieving the high aims of this project. Main fields of activities are injector and ignition development, test bed investigations with thermodynamical as well as optical engines and enhancement of simulation tools for hydrogen operation. The overall target of this project is the development of an optimized combustion concept with high performance and efficiency and near-zero emissions.*



## Aktuelle Forschung am Institut für Wärmetechnik

### *Current Research at the Institute of Thermal Engineering*

Das Institut für Wärmetechnik der Technischen Universität Graz erfüllt Lehr- und Forschungsaufgaben in den Bereichen wärmetechnischer Anlagen und Systeme. Die generelle Zielsetzung aller Aufgaben ist die effiziente, umwelt- und ressourcenschonende sowie nachhaltige Wärmeumwandlung und -verwendung.

Organisatorisch ist das Institut in vier Arbeitsgruppen unterteilt:

- Thermische Energieanlagen
- Heizungs-, Kälte- und Klimatechnik
- Solarthermie und thermische Gebäudesimulation sowie
- Mess- und Versuchswesen

Das Institut beschäftigt derzeit acht Drittmittelmitarbeiter.

Die Forschungsarbeiten werden als theoretische (z.B. als Computersimulationen) und auch als experimentelle Untersuchungen durchgeführt. Das Spektrum umfasst sowohl Bereiche des Umwandlungssektors als auch einen großen Teil des Endenergieeinsatzes bis hin zur Energiedienstleistung sowie die daraus resultierenden Umweltauswirkungen, insbesondere den anthropogenen Treibhauseffekt.



Abb. 1. Grundausrichtung des Instituts für Wärmetechnik

#### Derzeitige Forschungsprojekte

Das Institut für Wärmetechnik ist in die beiden k+ Kompetenzzentren ABC (Austrian Biomass Center) im Bereich der Gasreinigung von Biomasse-Vergasung sowie VIF (Virtuelles Fahrzeug) im Bereich Fahrzeugklimatisierung eingebunden.

Innerhalb der TU Graz werden die Forschungsschwerpunkte „Integrierte Gebäudeentwicklung“ und „Energiesysteme und Anlagentechnik“ durch das Institut geleitet.

In den vergangenen drei Jahren wurde ein Steam-Reformer-Versuchsstand zur Reformierung von Erdgas zu wasserstoffreichen Produktgas errichtet, der Ende 2003 um eine spezielle Biogasreinigungslinie und um einen 1,5 kW<sub>el</sub> PEM-Stack erweitert wurde.

Im Rahmen der Arbeiten um die Biomassevergasung wurde ein kompletter Vergasungsprozess mit Gasmotor (ca. 50 kW<sub>el</sub> und 100 kW<sub>thermisch</sub>) mit einer Produktgasreinigungslinie aufgebaut. Derzeit wird an der Verbesserung des Vergasungsvorgangs an sich mit einem eigenentwickelten Versuchsträger gearbeitet. Diese Arbeiten werden über EU Projekte sowie über das Forschungsprogramm „Energiesysteme der Zukunft“ des BMVIT finanziert.

Der Forschungsschwerpunkt im Bereich Heizungs-, Kälte- und Klimatechnik liegt in der theoretischen und experimentellen Untersuchung von Alternativkältemitteln für Wärmepump-Prozesse. Neben den Arbeiten im

Rahmen des k+ VIF (PKW-Klima-/Zuheizanlage mit CO<sub>2</sub> als Kältemittel) werden Projekte zu den Themen „Erdwärmenutzung“ (CO<sub>2</sub> als Wärmeträger) und „Absorptionswärmepumpe kleiner Leistung“ bearbeitet. Im Bereich Solarthermie und thermische Gebäudesimulation konnten bisher für ca. zehn Gebäude detaillierte Berechnungen zur Unterstützung von Architekten, Baufirmen, Wohnbauträgern und Bauherren durchgeführt werden. Zielsetzung ist jeweils ein inhärent intelligentes Gebäude welches mit möglichst geringer und einfacher Haustechnik ein komfortables Raumklima und Belichtung gewährleistet. Außerdem wurden grundlegende Arbeiten zum Bereich solarunterstützte Wärmenetze sowie Heizungssysteme für im Passivhausstandard gedämmte Mehrfamilienhäuser im Rahmen des Forschungsprogramms „Haus der Zukunft“ durchgeführt. Im Bereich Solarthermie konnte eine neue Produktentwicklung (Solarregler ohne Kollektor- und Speicherfühler) unterstützt werden. Zudem wurde an Schwerpunkten der Internationalen Energieagentur im Bereich solarunterstützter Raumheizung, solarunterstützte Klimatisierung und fortschrittliche Wärmespeicher teilgenommen. In diesen Rahmen fallen auch zwei Projekte (finanziert über EU und „Energiesysteme der Zukunft“) mit mikroverkapselten Phasenwechselmaterialien zur Wärmespeicherung. Daneben wurde eine Softwareentwicklung (Simulation von Solaranlagen) für die Fa. Vaillant durchgeführt. Ein ähnliches Programm steht im Downloadbereich der Homepage des Institutes gratis zur Verfügung. Das Labor des Institutes ist für die experimentellen Arbeiten zu den o.a. Themenstellungen bestens geeignet: Es stehen eine Schornsteinanlage für Kesselleistungen bis 1,2 MW, eine Rückkühlanlage mit einer Leistung von bis zu 5,4 MW, eine 2,7 MW-Hochstromanlage als Wärmequelle, eine Versuchsanlage zur Biomassevergasung mit Gasreinigung, ein Gasmotor mit Wärmeauskopplung und Stromerzeugung, diverse kleinere Wärmequellen- und Wärmesenkenanlagen, eine 9 x 6 x 4,3 m große Klimakammer für einen Temperaturbereich von -20 bis +40°C, sowie mehrere Warmwasserspeicher-Versuchsstände zur Verfügung.

Nähere Informationen über: <http://www.iwt.tugraz.at>

### *Current Research at the Institute of Thermal Engineering*

*The Institute of Thermal Engineering is organized in the following four working groups*

- Thermal Power Plants
- Heating, Refrigerating, Air Conditioning
- Solar Energy and Low Energy Buildings
- Energy and Environment related Measurement and Testing

*Research expertise includes: modelling, optimisation and environmental analysis of thermal engineering systems in the sectors energy conversion, energy utilisation and energy service.*

*Generally the field of work is the optimal system integration of specific components into thermal systems (like optimisation of the thermal behaviour of buildings with integrated HVAC-System, ab- or adsorption technology into combined electricity, heat and cooling systems).*

*The main topics of research are at present: Biomass (CHP, gasification, product gas cleaning); fuel cells (reforming processes), thermal electricity generation (heat- and CHP plants); heat pumps and cooling plants (new refrigerants, ground coupled systems); solar thermal applications; thermal building analysis, low energy buildings*

*The laboratory is equipped with a 2.7 MW high current rectifier, chimney up to 1.2 MW, 5.4 MW cooling tower, pilot plant for biomass gasification and CHP, climatic chamber (-20°C to +40°C), water storage test bench, various heat sources and heat sinks, data logging and data processing systems.*



# Forschung an der Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik: Messung kleinster Kapazitäten

## *Measuring small electrical capacitances in the femto to the pico Farad range*

In der industriellen Elektronik wird der Einsatz von berührungslos arbeitenden Messprinzipien seit langem gefordert, um Zuverlässigkeit und Standzeit zu erhöhen. Dieser Ansatz ist jedoch nur dann tragfähig, wenn das Messverfahren auf die jeweiligen Umgebungsbedingungen abgestimmt ist. So verhindern beispielsweise starke magnetische Störungen den Einsatz induktiv arbeitender Messverfahren. Deshalb erforscht das Institut für Elektrische Messtechnik und Messsignalverarbeitung (EMT) seit Jahren kapazitive Sensoren, die speziell für raue Umgebungsbedingungen bei industriellen Anwendungen ausgelegt sind.

Aufbauend auf dieser Expertise begann man vor zwei Jahren am EMT mit Hilfe von kapazitiven Messungen Materialverteilungen ortsauflösend darzustellen. Für die Funktionsweise dieser, unter dem Namen Kapazitätstomografie zusammengefassten, Prinzipien unter industriellen Bedingungen, ist das am EMT erworbene Wissen über die robuste Messung kleinster Kapazitäten unumgänglich.

### Industrielle Anforderungen und notwendige Komponenten

Da die geringen Empfangssignalpegel in Verbindung mit der inhärenten Anfälligkeit gegenüber störender Konduktions- und Verschiebungsströme einer aufwendigen Signalvorverarbeitung bedürfen, können sich speziell kapazitive Systeme erst durch den Einsatz vollständig integrierter Ansteuer- und Auswerteschaltungen durchsetzen. Diese anwendungsspezifischen integrierten Schaltungen (ASICs) erlauben nicht nur die Implementierung aller erforderlichen analogen Funktionen (Erzeugung der Ansteuersignale, analoge Vorverarbeitung des Sensorsignals, analog-digital Umsetzung), sondern auch die effiziente und kostengünstige Realisierung von komplexen Algorithmen zur digitalen Signalverarbeitung.

Neben den herkömmlichen Anforderungen an das Sensorsignal selbst (Genauigkeit, Auflösungsvermögen, Dynamikbereich, Abtastrate etc.) muss ein industrielles, kapazitives Messsystem einigen zum Teil aufwendig zu realisierenden Randbedingungen genügen: Dazu zählen Langzeitstabilität, großer Einsatztemperaturbereich, hohe Vibrationsbelastung, Unempfindlichkeit gegenüber Verschmutzung, möglichst geringer Energiebedarf, aber auch insbesondere die Zuverlässigkeit der Messung. Das System muss entsprechend robust ausgelegt sein und in den meisten Fällen auch über Eigendiagnosemechanismen verfügen, um so fehlerhafte Eingangssignale entweder korrigieren bzw. ausfiltern zu können oder zumindest den übergeordneten Steuerrechner zuverlässig über eine Fehlfunktion zu informieren. Besonders im Automobilbau ist darüber hinaus die geringe Baugröße in Verbindung mit großen Einbautoleranzen zu beachten. Diese zwingenden Forderungen resultieren aus dem beschränkten Platzangebot beispielsweise im Motorraum eines Kfz und führen zu extrem kleinen Kapazitäten von weniger als 50 fF, die mit einer Genauigkeit von mindestens 8 Bit gemessen werden müssen.

Eine diskret aufgebaute Sensorelektronik besteht im Prinzip immer aus einem leistungsfähigen  $\mu$ Controller, der die Ansteuerung der Sendesegmente, die Berechnung der Messgröße, die Ausgabe der Messwerte und die zeitliche Koordination der Messung übernimmt. Weiters ist noch Hardware zur analogen Signalvorverarbeitung notwendig, die entweder ein Ladungsverstärker oder ein Trägerfrequenzverstärker sein kann. In beiden Fällen

ist die Elektronik direkt mit der Empfangselektrode der jeweiligen Sensortopologie verbunden. Für eine Ladungsverstärkervariante spricht eine einfache und kostengünstige Elektronik sowie der geringe Leistungsverbrauch des Sensors (wichtig in explosionsgefährdeter Umgebung), für ein Trägerfrequenzverfahren spricht die Unempfindlichkeit gegenüber Schmutz und Betauung, die bessere Beherrschung der elektromagnetischen Verträglichkeit (EMV), selbst unter Kfz- oder Prozess-Bedingungen, und der größere Freiheitsgrad in der Wahl der Ansteuerungsmuster (bei einem Ladungsverstärker darf das Ansteuerungsmuster keinen Gleichanteil enthalten).

Bei einem diskret aufgebauten Trägerfrequenzverfahren besteht die Elektronik aus einem 16-bit  $\mu$ Controller mit integriertem A/D-Wandler, aus einem Eingangsfiler, einem Hochfrequenzverstärker, einem diskret aufgebauten Spitzenwertgleichrichter und einem externen Quarzoszillator. Der Aufbau des Systems ist schematisch in Abb.1. dargestellt.

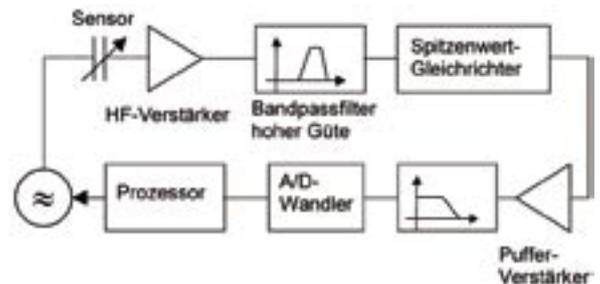


Abb. 1. Struktur einer Prototypimplementierung mit Trägerfrequenzverstärker

### Elektrische Kapazitätstomografie

Die elektrische Kapazitätstomografie ist ein Verfahren mit dem durch Messung der elektrischen Kapazität im Äußeren eines Rohres der Inhalt des Rohres räumlich aufgelöst dargestellt werden kann. Die Entstehung dieses Forschungsgebietes verdankt das Institut zu einem der umfangreichen Erfahrung, die bei der Messung von kleinsten Kapazitäten gesammelt werden konnte (aufgrund der unterschiedlichen Distanzen der Elektroden, die sich am Rohrfumfang befinden, treten Signaldynamikbereiche von 60 bis 80 dB auf), und andererseits der Kompetenz von Mitarbeitern auf dem Gebiet der Inversen Probleme.

Das Vorwärtsproblem bei der elektrischen Kapazitätstomografie besteht darin, von einer gegebenen Materialverteilung die Kapazitäten zwischen Elektroden zu berechnen. Dies kann effizient mittels numerischer Methoden, wie der Finiten Elemente Methode oder der Randelement Methode erfolgen, für die Mitarbeiter des Institutes maßgeschneiderte Softwarepakete erstellt haben.

Das Inverse Problem, das Kernstück der Kapazitätstomografie, besteht nun darin, aus den Kapazitätsmessdaten auf die Materialverteilung zu schließen. Hierzu wird die Materialverteilung im Vorwärtsproblem so lange variiert, bis die Differenz der errechneten Kapazitäten aus dem Vorwärtsproblem und den tatsächlich gemessenen Kapazitäten minimal wird. Wenn dies der Fall ist, entspricht die aktuelle Materialverteilung im Vorwärtsproblem der tatsächlichen Materialverteilung (Abb. 2).

Anwendung findet die Kapazitätstomografie vor allem in der

Prozessmesstechnik, wo die Kenntnis von Materialverteilungen für eine nachfolgende Prozessregelung unumgänglich ist.

Die Kapazitätstomographie Gruppe des EMT ([www.emt.tugraz.at/research/ect](http://www.emt.tugraz.at/research/ect)) beschäftigt sich derzeit neben Verbesserung mathematischer Methoden zur Lösung Inverser Probleme mit folgenden Schwerpunkten:

- Statistische Inversion: Messsignale und Prozesszustände werden als statistische Größen aufgefasst (ein schlecht-gestelltes Inverses Problem kann durch Anwendung statistischer Methoden regularisiert werden)
- Fusion von elektrischer Kapazitätstomographie mit Ultraschall-Messtechnik
- Verbesserung der Bildauflösung unter Anwendung der Level-set Methode

Um das, im internationalen Vergleich, hohe Niveau dieses Forschungszweiges weiter zu erhöhen, sind in naher Zukunft Kooperationen mit internationalen Forschergruppen, mit denen schon erste Gespräche geführt wurden, geplant.

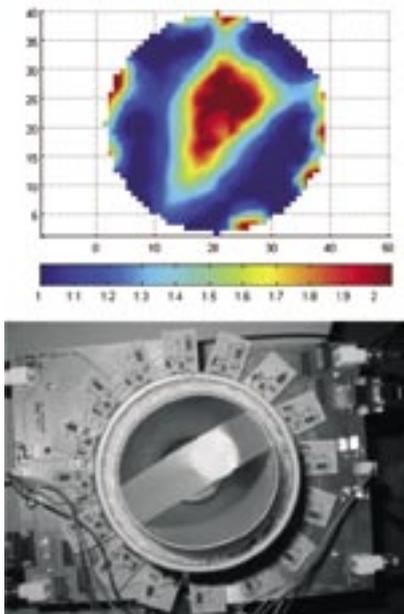


Abb. 2.: Kapazitätstomographie: Oben Rekonstruierte Materialverteilung im Rohrinne. Unten: Kapazitätstomographiesensor mit PVC-Stab als Testverteilung.

#### Weiterführende ausgewählte Literatur

##### Kapazitive Sensoren:

Zangl, H.; Cermak, S.; Gruber, G.; Brasseur, G.: A Robust Planar Capacitive Sensor for Angular Measurement. - in: Proceedings of the 11th International Conference Sensor 2003 (2003) S. 47-51

Steiner, G.; Watzenig, D.: Accurate Estimation of Angular Position and Speed for a Capacitive Sensor based on an Extended Kalman Filter Approach. - in: Proceedings of the 1st IEEE International Workshop on Robotic Sensing - ROSE '03. (2003) S. 8-10

Watzenig, D.; Steiner, G.; Zangl, H.: Capacitive Sensor Signal Processing based on Decentralized Kalman Filtering. - in: Proceedings of the 2003 IEEE International Conference on Industrial Technology

- ICIT '03. (2003) S. 333-338

Brandstätter, B.; Brasseur, G.; Cermak, S.; Zangl, H.; Fulmek, P. L.: An incremental capacitive sensor for harsh environment. - in: IEEE International Conference on Sensors ; 1 (2002) S. 841-842

##### Kapazitätstomografie:

B. Brandstätter, G. Holler, D. Watzenig, Reconstruction of Inhomogeneities in Fluids by means of Capacitance Tomography, Proceedings of the 10th International IGTE Symposium 2002 on Numerical Field Calculation in Electrical Engineering, Graz, September 16 -18, 2002, pp. 44 - 48.

G. Holler, A. Fuchs, B. Schweighofer, Hardware Design and Measurement Results for an Electrical Capacitance Tomography System, Proceedings of the 6th International Conference on Electronic Measurement and Instruments (ICEMI 2003), Taiyuan, China, August 18 -21, 2003, pp. 1-6.

A. Fuchs, B. Brandstätter, G. Holler, D. Watzenig, Flow Profile Estimator for Closed Pipes Based on Electrical Capacitance Tomography Techniques, Proceedings of the Instrumentation and Measurement Technology Conference (IMTC'04), Como, Italy, May 18-20, pp 2326-2331, 2004.

#### *Measuring small electrical capacitances in the femto to the pico Farad range*

*This article aims to describe the research at the Institute of Electrical Measurement and Measurement Signal Processing (EMT) in the field of measuring small electrical capacitances in the femto to the pico Farad range. The EMT has gained experience in developing robust capacitance sensors for industrial applications, operating in harsh environments. The requirements for such sensors involve long-term stability, operation in a wide temperature range, stability with respect to vibrations and dirt and low energy consumption. Low signal levels and the presence of electrical or magnetic stray fields make the use of application specific integrated sensor electronics (ASICs) in the front end of the sensor mandatory. Those ASICs allow the implementation of all necessary analog functions (like excitation signals, signal conditioning), analog to digital conversion and cost effective realization of complex signal processing algorithms. To increase robustness with respect to dirt or humidity, the use of a carrier frequency signal is necessary.*

*The sensors that have been developed in the past at the EMT involve angular position and velocity measurement sensors, torque sensors, fill level sensors, inclination sensors etc, which are suitable for harsh automotive applications.*

*The experience in measuring small capacitances in a robust, and hence, reliable way led to the initiation of a new research branch at the EMT - the electrical capacitance tomography (ECT). ECT is a technique, which allows the spatially resolved reconstruction of the material distribution in closed pipes or vessels, by measuring the capacitances between electrodes, which are located outside the pipe or vessel. As such, ECT is an imaging method, which, besides sophisticated sensor electronics to cope with harsh environments and small measurement signals, needs experience in solving inverse problems. Highly sophisticated methods to tackle inverse problems, which have been noticed by other international research groups working in the field, have been developed by members of the EMT in the past two years, but still inverse problems (a synonym for inverse problems is model based measurement) are one of the main research activities at the EMT (the interested reader is referred to the EMT homepage [www.emt.tugraz.at](http://www.emt.tugraz.at) for further information).*



# Forschung an der Fakultät für Technische Mathematik und Technische Physik

## *Research at the Faculty of Technical Mathematics and Technical Physics*

### 5010 Institut für Mathematik A (Analysis und Computational Number Theory)

Gastprofessoren: im Dezember war Prof. Helmut Prodinger (University of the Witwatersrand, Johannesburg) zu Gast. Mit ihm wurden redundante Ziffernentwicklungen und deren Anwendung in der Kryptographie untersucht. Solche Ziffernentwicklungen sind besonders für die Optimierung von Kryptosystemen von Bedeutung, die durch elliptische Kurven gegeben sind.

In Zusammenarbeit mit Prof. Andrej Dujella aus Zagreb hat Dr. Clemens Fuchs ein klassisches Problem von Diophantus und Euler betreffend diophantische  $m$ -Tupel gelöst.

### 5020 Institut für Mathematik B (Mathematische Optimierung, dynamische Systeme und Diskrete Mathematik)

Seit einigen Jahren werden am Institut für Mathematik B Schedulingprobleme untersucht, die in Batch-Produktionsumgebungen in der chemischen Industrie auftreten. Die in letzter Zeit erzielten Ergebnisse lassen sich in zwei Hauptbereiche gliedern: (1) Es wurden Fortschritte erzielt, was die Lösung von Probleminstanzen mittlerer Größe mittels gemischt-ganzzahliger Programme betrifft. (2) Es wurde eine iterative Heuristik entwickelt, die Näherungslösung von zufriedenstellender Qualität für große Probleminstanzen bestimmt. Das neue Verfahren arbeitet deutlich schneller als die bisher bekannten Ansätze. Die Dissertation von Johannes Hatzl zu diesem Thema steht kurz vor dem Abschluss.

### 5030 Institut für Mathematik C (Mathematische Strukturtheorie)

Gastprofessoren: im März war Prof. Andrzej Zuk (ENS Lyon) zu Gast, ein international anerkannter Experte auf dem Gebiet der Spektraltheorie und harmonischen Analyse diskreter Gruppen. Herr Zuk hat gemeinsam mit Herrn Dr. Neuhauser und Prof. Woess über geometrische Gruppentheorie gearbeitet. Im Mai 2004 war Prof. Jean-Luc Chabert (Univ. de Picardie) zu Gast, der mit Frau Ao.Prof. Frisch unter anderem an einem Problem der Co-Maximalität von Idealen unter Ringerweiterungen, das sich aus früherer erfolgreicher Zusammenarbeit ergeben hat.

Forschungsaufenthalt: Im April 2004 hat Prof. Woess als „Visiting scholar“ die Universität von Sydney besucht, wo ihn eine langjährige Zusammenarbeit mit Herrn Prof. Donald I. Cartwright verbindet. Ein neues Forschungsprojekt on funktionalanalytischer Natur („Spectrum of averaging operators on one-dimensional complexes“) wurde in Angriff genommen.

Tagung: Im Juni findet eine internationale Tagung über „Geometric Group Theory, Random Walks, and Harmonic Analysis“ in Cortona (Toskana, Italien) statt, die von Prof. Woess gemeinsam mit internationalen Fachleuten organisiert wird. Die prominenten Hauptvortragenden kommen unter anderem aus Frankreich, England, USA und Israel.

### 5070 Institut für Geometrie

Das Institut für Geometrie organisierte im Juni eine internationale Tagung über Geometrie.

### 5060 Institut für Statistik

Das Institut für Statistik organisierte im Mai eine internationale

Konferenz über „Statistical Models for Financial Data“.

### 5080 Institut für Navigation & Satellitengeodäsie

Mitarbeiter des Instituts haben über das Thema der Navigation ein Buch verfasst, das im Herbst 2003 im Springer-Verlag erschienen ist.

Projekttätigkeiten: über das langjährige ESA-Projekt GOCE (Gravity Field and steady-state Ocean Circulation Explorer) wurde bereits an anderer Stelle berichtet.

Das BMVIT-Projekt EPRIS (Evaluation of Positioning technologies for the generation of value-added services in the environment of River Information Services) hat die Mitte der Laufzeit erreicht und den Midterm-Review positiv passiert. Das Projekt wurde bereits mehrfach auf Vorträgen vorgestellt, zuletzt auf der GNSS 2004 in Rotterdam im Mai 2004.

### 5110 Institut für Experimentalphysik

Die Arbeitsgruppe Subsekunden Thermophysik unter der Leitung von Prof. G. Pottlacher beteiligt sich am Projekt EVITherM (European Virtual Institute for Thermal Metrology) im 5. Rahmenprogramm der EU, dessen Ziel es ist, in 3 Projektjahren (2003-2005) in 7 technischen und 3 infrastrukturellen Workpackages (WPs) ein internet-basiertes virtuelles Institut für thermische Metrologie zu errichten. Potentielle Kunden aus Forschung und Industrie können sich an diese Adresse wenden, wenn sie z.B. zuverlässige Daten suchen, Beratung bei Problemstellungen brauchen oder einen geeigneten Ansprech- bzw. Kooperationspartner suchen.

In der Arbeitsgruppe Plasma- und Gasentladungsphysik (Leitung Prof. T. Neger) gibt es zwei neue Forschungsaktivitäten mit Verbrennungsmotor-relevanter optischer Diagnostik: 1. In Zusammenarbeit mit den Instituten für Photonik und für Verfahrenstechnik der TU Wien und GE Jenbacher wird das Prinzip der Laserzündung magerer Gemische mit dem Ziel größerer Abgasreinheit untersucht (unterstützt durch FFF). 2. Im Rahmen des EU Projektes PREVERO ENK6-CT2002-00605 werden laseroptische Messungen zur Ermittlung der durch Kavitation erzeugten Erosion in diversen Diesel-Einspritzsystemen durchgeführt.

Die Arbeitsgruppe New Magnetometer unter Leitung von Prof. L. Windholz (gefördert im EU Projekt G6RD-CT-2001-00642) hat ein EU-Netzwerktreffen vom 18. bis 20.12.2003 in Graz mit Teilnehmern aus Italien, Belgien und Bulgarien veranstaltet und richtet einen weiteren Workshop zum gleichen Thema vom 15. bis 17.7.2004 an der TU Graz aus. Prof. L. Windholz wurde darüber hinaus als Mitglied des Steering Committees für das Netzwerk der European Science Foundation (ESF) mit dem Titel Collisions in Atom Traps (CATS) bestellt.

Im Bereich Materiewellenoptik (Leitung Frau Dr. B. Holst -s. Rubrik Jungforscher- und Prof. W. Ernst) findet am 14. und 15. Juli 2004 das Kick-off Meeting für das kürzlich bewilligte EU-Projekt INA (Imaging with Neutral Atoms) mit Vortragenden und Teilnehmern aus Großbritannien, Frankreich, Spanien, Polen und den USA statt. Die Projektleitung liegt beim Institut für Experimentalphysik der TU Graz (s. Artikel zum RFT-geförderten Projekt Entwicklung von Atom- und Molekularstrahlmethoden für die Erzeugung und Charakterisierung neuartiger Materialkomponenten für die Nanotechnologie).

### 5130 Institut für Festkörperphysik

Das 49th International Field Emission Symposium stellt die einzige internationale Fachtagung über Grundlagen und Anwendungen der

Feldemission von Elektronen und Ionen dar, aus Entwicklungen in diesem Gebiet haben neueste Methoden in den Nanowissenschaften und in der Nanotechnologie entscheidende Impulse erhalten. Beispiele für Anwendungsfelder sind z.B. Punktkatoden in der hochauflösenden Elektronenmikroskopie, Flüssigmetallionenquellen für Feinfokusanwendungen (Focussed Ion Beam) sowie Punktquellenanordnungen für Displays (z.B.: Carbonanotube-arrays als großflächige kalte Elektronenquellen). Die Feldemission von Ionen wird auch ausgenutzt um moderne Werkstoffe (Metalle, Halbleiter) auf atomarem Niveau ortsaufgelöst zu charakterisieren (quantitative Analyse mit 3D Atom Probe bzw, Local Electrode Atom Probe).

Nach den vorliegenden Zusagen werden eine Reihe von Wissenschaftler aus führenden Forschungsstätten aus Ost und West auf der Tagung vertreten sein. Eingeladene Referenten aus Berkeley, Oak Ridge, Oxford, Göteborg, Berlin, Rouen, Damaskus, Tokyo und Taipei werden ein aktuelles Bild von Forschung und Anwendung aus diesem Bereich präsentieren.

#### 5170 Institut für Materialphysik

Auslandskooperationen - Wissenschaftler des Institutes für Materialphysik der TU Graz und des Institutes für Nanotechnologie des Forschungszentrums Karlsruhe entwickelten ein neuartiges nanoporöses Metall, das sich beim Anlegen einer elektrischen Spannung reversibel ausdehnt. So kann elektrische Energie direkt in mechanische Energie umgewandelt werden. Erstmals lassen sich damit an einem Metall makroskopisch messbare Längenänderungen durch Anlegen von geringen elektrischen Spannungen hervorrufen. Auf der Grundlage dieser in „Science“ (300 (2003) S. 312) veröffentlichten Arbeit sind eine Vielzahl von Anwendungen möglich. So können aus dem nanostrukturierten Platin so genannte Aktuatoren gebaut werden, das sind Bauelemente, die elektrische Arbeit direkt in Bewegung umsetzen. Am Institut für Materialphysik laufen derzeit Untersuchungen, inwieweit auch andere Materialeigenschaften von Metallen, wie beispielsweise Leitfähigkeit oder optische Reflektivität, durch elektrische Spannungen verändert werden können.

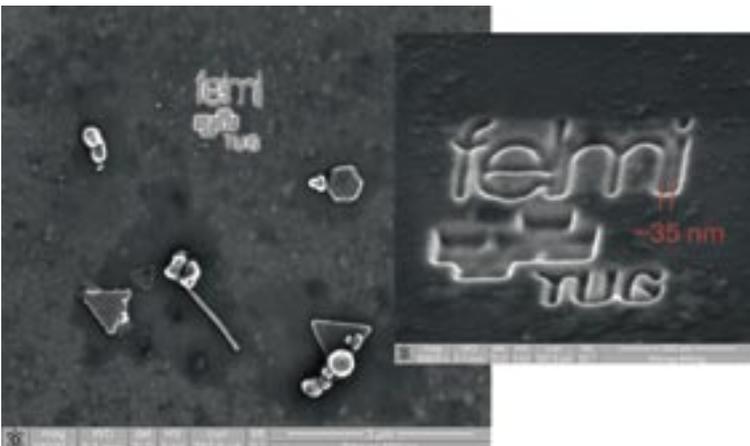
Im Rahmen einer Kooperation mit Kollegen der Universität Stuttgart ist es erstmals gelungen, einen strukturellen Phasenübergang in einer Legierung mit der Methode der Positronenzerstrahlung auf atomarer Skala zu untersuchen. Die Positronenzerstrahlung ist ein wichtiges Werkzeug zum spezifischen und empfindlichen Nachweis von freien Volumen in Materialien, wie beispielsweise Leerstellen

in einem Kristallgitter. Die vorliegende Arbeit, die kürzlich in „Physical Review Letters“ (92 (2004) 127403-1) erschienen ist, basiert auf neueren Entwicklungen der Messmethodik zum koinzidenten Nachweis der Positron-Elektron Annihilationsstrahlung. Hiermit ist es nunmehr möglich, aus Untersuchungen der Positronenzerstrahlung neben der Größe und relativen Konzentration von freien Volumen auch Informationen über die lokale chemische Umgebung dieser freien Volumen zu gewinnen. Damit eröffnen sich neuartige Möglichkeiten zur chemischen Analytik strukturell komplexer Materialien auf atomarer Skala. Am Institut für Materialphysik soll diese Methode künftig vor allem zur chemischen Grenzflächenanalytik von nanoskalierten Materialien eingesetzt werden.

#### 5190 Institut für Elektronenmikroskopie und Feinstrukturfor- schung (FELMI)

Nano-Gravur mit der neuen NANOLAB-Anlage: Nach einer berühmten Rede von Richard P. Feynman gibt es im Mikrokosmos genug Platz („There's Plenty of Room at the Bottom...“, 1959). Diesem Motto folgt das FELMI mit der neuen NANOLAB Anlage, mit der Werkstoffe und Bauelemente mit Nanometerpräzision präpariert, analysiert und modifiziert werden können. Die NANOLAB Anlage besteht aus einem Hochauflösungs-Rasterelektronenmikroskop, das mit einer fokussierten Gallium-Ionenquelle und einem integrierten Mikromanipulator ausgerüstet ist. Mit dem Ionenstrahl können Nanostrukturen in Materialoberflächen geschnitten werden und dies kann auch für das „Gravieren“ von Materialoberflächen benützt werden. In einem ersten Versuch konnte Dipl.-Ing. Michael Rogers das Logo der TU Graz mit einem 7 Nanometer feinen Ionenstrahl (30 kV) in einen etwa 50 Nanometer dünnen Gold-Einkristall schreiben. Die Auflösung betrug bei diesem Experiment etwa 30 nm und kann wahrscheinlich noch deutlich reduziert werden. Das Verfahren eröffnet neue Möglichkeiten für die Kodierung von wertvollen Materialien (z.B. Diamanten), denn die durch Eingravieren erzielbare Nanoschrift ist wesentlich beständiger als die durch konventionelle Verfahren abgeschiedenen Strukturen. Ein weiteres ebenfalls sehr breites Anwendungsgebiet der NANOLAB Anlage besteht im Aufbau von funktionellen dreidimensionalen Nanostrukturen. Diesbezügliche Experimente befinden sich im Planungsstadium.

Die NANOLAB-Anlage wurde im September 2003 am FELMI in Vollaussstattung installiert. Die Anlage wurde von FEI (USA) gebaut und über die Uni-Infrastruktur Offensive I des Rates für Forschung und Technologieentwicklung (RFT) finanziert.



Nanoschrift in Gold-Einkristall neben Gold-Nanoteilchen, eingraviert mit einem fokussierten Ionenstrahl. (Foto: Felmi)

#### Research at the Faculty of Technical Mathematics and Technical Physics

Research at the Faculty of Technical Mathematics and Technical Physics is as diverse as the different departments of the faculty: it ranges from the study of optimal expansions of integers used in elliptic curve cryptography, over discrete optimization to geometric group theory at the mathematics departments; from navigation to estimating the earth's gravity field at the departments of geodesy; from thermal metrology over optical diagnostics of cavitation in Diesel engines to the Scanning Helium Atom Microscope at the Department of Experimental Physics; from semiconductor physics to field emission with applications to electron microscopy at the Institute of Solid State Physics; from nanostructured materials to their analysis at the Institute of Materials Physics; from the focused ion beam processing of materials to new developments in electron microscopy at the Research Institute for Electron Microscopy and Fine Structure Research.



# Forschung an der Fakultät für Technische Chemie, Verfahrenstechnik und Biotechnologie: Radikale in Graz

## Radicals in Graz

Radikale sind überall, inzwischen auch an der TU Graz! Zum 1. September 2003 wurde Georg Gescheidt als Professor für Theoretische und Physikalische Chemie an die TU Graz berufen.

Die Hauptinteressen seiner Forschung liegen auf dem Gebiet paramagnetischer (radikalischer) Systeme.

Wo kommen solche Systeme vor und was kann man damit anfangen?

Radikale oder Radikationen sind chemische Verbindungen mit ungepaarten Elektronen und treten in zahlreichen Gebieten der Chemie, Biochemie und Technik auf. Man findet sie als höchst reaktive Zwischenstufen in (bio)chemischen Reaktionen oder in molekularen Stromleitern und Magneten. Zahlreiche im Alltag verwendete Materialien basieren auf radikalischen Verfahren. Als Beispiel sei die Härtung von Lacken (Möbel, Autos, Ski) oder die Herstellung elektronischer Prints angeführt.

Übergangsmetallkomplexe mit paramagnetischen Metallionen wiederum finden Einsatz z.B. als Katalysatoren für stereoselektive Synthesen; diese werden insbesondere zur Herstellung von Pharmaka benötigt.

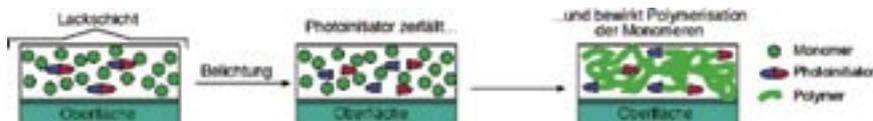


Abb 1. Härtung mittels Photoinitiator

Was will man wissen?

1. Wie sehen die reaktiven Spezies, welche im Verlauf der Reaktionen gebildet werden, aus, d.h. welche Geometrie besitzen sie?
2. Wie schnell verlaufen diese Reaktionen?

Die Antworten auf diese Fragen liefern nicht nur einen Einblick in die Grundsätze chemischer Reaktivität sondern sind entscheidend für die Optimierung industrieller und chemischer Prozesse. Eine detaillierte Kenntnis von Reaktionssequenzen und Reaktionsmechanismen gibt Aufschluss darüber, welche strukturellen Parameter auf molekularer Ebene dafür verantwortlich sind, dass Reaktionen möglichst effizient ablaufen.

Die Interessen der Forschungsgruppe Gescheidt liegen derzeit auf den Gebieten der Photoinitiatoren für radikalische Polymerisation (Lacke, Prints, Drucktechnik) [1-5], Photodynamischer Therapie [6], stereoselektiven Katalyse und elektroaktiven organischen Verbindungen [7-9]. Zurzeit laufen Vorbereitungen auf dem Gebiet der Enzymdynamik.

Wie macht man das?

Die Eigenschaften paramagnetischer Systeme werden spezifisch mittels Methoden der (para)magnetischen Resonanz untersucht. Während EPR (Electron Paramagnetic Resonance) Spektroskopie sowie fortgeschrittene Techniken wie die Mehrfachresonanz ENDOR (Electron Nuclear Double Resonance), TRIPLE (electron nuclear TRIPLE resonance) und EIE (ENDOR Induced EPR) vor allem Auskunft über die Geometrie und molekulare Dynamik geben, liefert der Einsatz von Verfahren wie TR-EPR (Time-Resolved EPR) oder CIDEP (Chemically Induced Dynamic Electron Polarization) Daten über Reaktionsgeschwindigkeiten. Solche kinetischen Daten erlangt man auch über eine von der magnetischen Kernresonanz abgeleitete Methode, nämlich CIDNP (Chemically Induced Dynamic Nuclear Polarization), die zugleich in der Lage ist Reaktionsprodukte zu analysieren, die mittels Radikalreaktionen gebildet werden. Die hier genannten Techniken repräsentieren den Stand der Technik, umfassen den Einsatz von Lasern und erfordern eigene instrumentelle Entwicklungen.

Trotz allen technologischen Aufwandes darf man nicht übersehen, dass chemische Reaktivität im Zentrum der Forschung von G. Ge-

scheidt steht. Die Kenntnis und Beherrschung zahlreicher chemischer, elektro-, photo- und biochemischer Methoden bildet die Basis der wissenschaftlichen Arbeiten. Darüber hinaus werden quantenmechanische Rechnungen auf problemangepasstem theoretischem Niveau durchgeführt, um die experimentell erreichten Ergebnisse theoretisch zu untermauern.

Ein Beispiel: Wie funktioniert die Härtung von Lacken mittels Photoinitiatoren?

In dem aufzutragenden Lack befinden sich die zu polymerisierenden Monomere, Bindemittel, Additive zur Einstellung der gewünschten Eigenschaften, Farbstoffe oder Pigmente und der Photoinitiator. (Abb. 1).

Die Bestrahlung mit Licht bewirkt die kontrollierte Spaltung des Photoinitiatormoleküls. Dabei entstehen sehr reaktive Molekülfragmente, sogenannte Radikale (Radikale (gezeigt als rote und blaue Bruchstücke in Abb. 1)). Diese Radikale initiieren eine Polymerisation indem sie mit einem Monomer reagieren. Nach dieser Startreaktion wächst ein Polymer. Die so gebildeten Polymerketten, die untereinander dreidimensional vernetzt sind, bilden die harte Schutzschicht. Für die Qualität der Beschichtung ist der Photoinitiator wesentlich verantwortlich. Der Initiator muss selektiv auf die verwendete Lichtquelle reagieren und die Belichtung zu einer möglichst quantitativen Spaltung des Initiatormoleküls führen, damit eine effiziente Polymerisation initiiert wird.

Wie stellt man auf molekularer Ebene fest, wie gut ein Photoinitiator ist?

Der Photoinitiator absorbiert das eingestrahelte Licht. Die so erhaltene Überschussenergie wird zur homolytischen Spaltung einer chemischen Bindung umgesetzt. An die so entstandenen Radikale addiert sich zunächst ein Monomermolekül (Startreaktion), anschließend weitere Monomere.

Diese entscheidenden Schritte der photoinitierten Polymerisation finden innerhalb weniger Nanosekunden (ca.  $10^{-9}$  s) statt. Will man diese Schritte auf der entscheidenden Zeitskala – also zeitaufgelöst – untersuchen, muss man sich relativ aufwendiger Apparaturen bedienen. Zunächst benötigt man einen möglichst kurzen Lichtimpuls, der die Spaltung des Initiatormoleküls bewirkt. Dies wird am besten durch den Einsatz eines Lasers erreicht. Die durch den Laserpuls erzeugten Radikale müssen detektiert werden. Hier nimmt man die Elektronen-TR-EPR zur Hilfe. Diese Technik beruht darauf, dass Radikale im Magnetfeld spezifisch elektromagnetische Strahlung absorbieren. Eine solche Apparatur ist in Abb. 2 wiedergegeben. Abb. 3 zeigt ein typisches zeitaufgelöstes EPR Spektrum.

Untersuchungen an zahlreichen Photoinitiatorsystemen liefern Auskunft über ihre Struktur und Reaktivität. Der Vergleich zwischen experimentellen Daten und mittels theoretischer quantenmechanischer Rechnungen berechneten Größen führt zu Struktur-Wirkungsbeziehungen. Damit wird ein Beitrag zum Design neuer Photoinitiatoren geleistet.

Ein Kompetenzzentrum entsteht...

Zahlreiche Arbeitsgruppen an der Fakultät für Technische Chemie, Biotechnologie und Verfahrenstechnik an der TU Graz beschäftigen sich direkt oder indirekt mit der Chemie paramagnetischer Systeme.



Abb. 2. Zeitauflösendes EPR Spektrometers (TR-EPR).

Hier bietet die Kombination der von Prof. Gescheidt an die TU Graz gebrachten Methoden mit solchen, die bereits am Institut für Physikalische und Theoretische Chemie vorhanden sind, ein außerordentlich breites und den modernstem Stand der Technik repräsentierendes Instrumentarium.

Neben den oben erwähnten Magnetresonanzmethoden steht folgendes zur Verfügung: Eine Synthese aus paramagnetischer Resonanz und Fluoreszenzspektroskopie stellt MARY (MAGnetic-field dependent Reaction Yield) dar. Zeitaufgelöste optische Spektroskopie (Laser)blitzlichtphotolyse und Photoleitfähigkeit liefern wichtige Informationen über Kinetik und Reaktivitätsmuster (Prof. Grampp). Instrumentelle Entwicklungen finden statt auf dem Gebiet optischer Spektroskopie: Miniaturisierte Geräte unter Ausnutzung modernster (Laser)diodentechnik führen zu neuen Einsatzgebieten für Modulations- und Fluoreszenzverfahren (Prof. Landgraf). Elektrochemische Techniken wie Cyclovoltammetrie, Photovoltammetrie runden die Spektroskopietechniken ab. Informationen über paramagnetische Eigenschaften von Festkörpern erhält man durch Suszeptibilitätsmessungen (Prof. Gatterer).

Hier ergeben sich Kooperationsmöglichkeiten auf zahlreichen Feldern der Naturwissenschaften, der (industriellen) Technologie und Medizin innerhalb der TU Graz im weltweit verzweigten Forschungsnetzwerk der Universitäten und mit Partnern aus der Industrie.

#### Es kann noch weiter gehen!

Der oben dargestellte Kompetenzumfang und die entsprechende apparative Ausstattung ist weltweit nur in einer Hand voll Institutionen zu finden. Um auch weiterhin den „state-of-the-art“ zu repräsentieren, werden in der nächsten Zeit Ergänzungen notwendig sein. Während in den letzten Jahren bedeutende Fortschritte auf dem Gebiet zur Erforschung der Geometrie und Konnektivität von z. B. Enzymen, DNA und anderen (Bio)katalysatoren gemacht wurden, bleibt die Frage nach der Funktionalität solcher Systeme immer noch offen. Hier kann insbesondere die paramagnetische Resonanz zur Aufklärung wesentlich beitragen. Dieser Beitrag kann nur dann effizient geleistet werden, wenn auch neueste Entwicklungen wie FT-EPR und, entsprechend der NMR, die Hochfeldtechnik zum Einsatz kommen.

- [1] G. Gescheidt, D. Neshchadin, G. Rist, A. Borer, K. Dietliker, K. Misteli, Phys. Chem. Chem. Phys. 2003, 5, 1071.
- [2] D. Neshchadin, I. Gatlik, G. Rist, N. J. Turro, G. Gescheidt, J.-L.

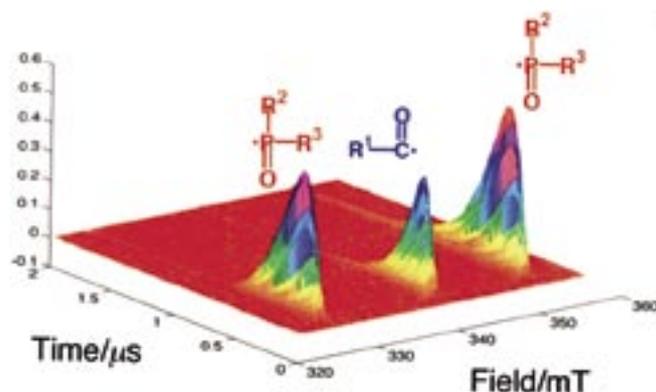


Abb. 3. Dreidimensionales TR-EPR Spektrum nach Belichtung eines Acylphosphin-Photoinitiators.

Birbaum, K. Dietliker, J.-P. Wolf, Radtec Europe Proceedings 2001, 711.

- [3] I. Gatlik, P. Rzadek, G. Gescheidt, G. Rist, B. Hellrung, J. Wirz, K. Dietliker, G. Hug, M. Kunz, J.-P. Wolf, J. Am. Chem. Soc. 1999, 121, 8332.
- [4] M. Spichty, N. J. Turro, G. Rist, J.-L. Birbaum, K. Dietliker, J.-P. Wolf, G. Gescheidt, J. Photochem. Photobiol. A 2001, 142, 209.
- [5] M. Spichty, B. Giese, A. Matsumoto, H. Fischer, G. Gescheidt, Macromolecules 2001, 34, 723.
- [6] S. Rahimpour, C. Palivan, F. Barbosa, I. Bilkis, Y. Koch, L. Weiner, M. Fridkin, Y. Mazur, G. Gescheidt, J. Am. Chem. Soc. 2003, 125, 1376..
- [7] C. Bolm, M. Martin, G. Gescheidt, C. Palivan, D. Neshchadin, H. Bertagnolli, M. Feth, A. Schweiger, G. Mitrikas, J. Harmer, J. Am. Chem. Soc. 2003, 125, 6222.
- [8] E. Beer, J. Daub, C. Palivan, G. Gescheidt, J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2 2002, 1605.
- [9] B. Grossmann, J. Heinze, T. Moll, C. Palivan, S. Ivan, G. Gescheidt, J. Phys. Chem. B 2004, 108, 4669.

### Radicals in Graz

*Radicals are everywhere, now even at Graz University of Technology!*

*In the research group of Georg Gescheidt, the properties of radicals, radical ions and paramagnetic metal complexes are investigated. These species are decisive for the functionality of enzymes, technological processes, chemical reactions and molecular based materials. Therefore the knowledge about the structure of such (mostly short-lived) paramagnetic stages of matter is not only of importance in terms of their activity but also for the optimization of technological processes. The state-of-the-art methods to specifically gain insight into these structures are based on magnetic resonance and include EPR (Electron Paramagnetic Resonance), CIDNP (Chemically Induced Dynamic Nuclear Polarization), advanced multiresonance, time-resolved techniques and their combinations with, e.g., electrochemical and photochemical methodology. Significantly, a detailed knowledge of chemical reactivity is necessary to generate the reactive species.*

*A short example of our work on photoinitiators for radical polymerizations for coatings is given. It involves the use of time-resolved EPR (Figures 1-3).*

*The methods introduced here together with the knowledge already present at Graz University of Technology is an excellent basis for co-operations in various fields within our University and the worldwide research network industrial partners.*



Vertragsprof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Horst Bischof  
Institut für Maschinelles Sehen und Darstellen  
E-Mail: bischof@icg.tu-graz.ac.at  
Tel: 0316 873 5014



Ao.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Karl-Christian Posch  
Institut für Angewandte Informationsverarbeitung und  
Kommunikationstechnologie  
E-Mail: Karl.Posch@iaik.tugraz.at  
Tel: 0316 873 5517



Vertragsprof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Franz Wotawa  
Institut für Softwaretechnologie  
E-Mail: wotawa@ist.tugraz.at  
Tel: 0316 873 5724

## Forschung an der Fakultät für Informatik *Research at the Computer Science Faculty*

Die Forschungsaktivitäten der jungen Fakultät für Informatik sind vielfältig und reichen von Projekten im Bereich der graphischen Datenverarbeitung und Multimedia hin zu Arbeiten im Bereich der Künstlichen Intelligenz und Neuronalen Netze. Exemplarisch werden drei angewandte Forschungsgebiete an der Fakultät näher vorgestellt (für eine Zusammenstellung aller Forschungsaktivitäten sei auf <http://www.informatik.tugraz.at> verwiesen).

Das erste Forschungsgebiet beschäftigt sich mit Anwendungen der Bildverarbeitung im medizinischen Bereich und wird von Horst Bischof vom Institut für Maschinelles Sehen und Darstellen betreut. Das zweite Projekt beschäftigt sich mit dem Einbruch in Smart Devices. Für weitere Auskünfte steht Karl-Christian Posch vom Institut für Angewandte Informationsverarbeitung und Kommunikationstechnologie zur Verfügung. Das dritte vorgestellte Forschungsgebiet beschäftigt sich mit Werkzeugen zur Verbesserung der Qualität in der Softwareentwicklung und wird von Franz Wotawa vom Institut für Softwaretechnologie betreut.

### Angewandte Informatik in der Medizinischen Bildverarbeitung

Basierend auf dem Erfolg mit dem virtuellen Leberplanungssystem (siehe Abb.1), das heuer den Matrix Preis am Europäischen Radiologenkongress gewonnen hat, konnten das Institut für Maschinelles Sehen und Darstellen (ICG) im letzten halben Jahr drei neue medizinische Bildverarbeitungsprojekte starten. Das erste Projekt, das vom FWF finanziert wird, beschäftigt sich als Nachfolgeprojekt Leberplanungssystem mit dem Bereich der Beurteilung von medizinischen Daten. Die detaillierte Planung von Leberoperationen erfordert die Beurteilung der (Patho-)Anatomie und regionale Verteilung der

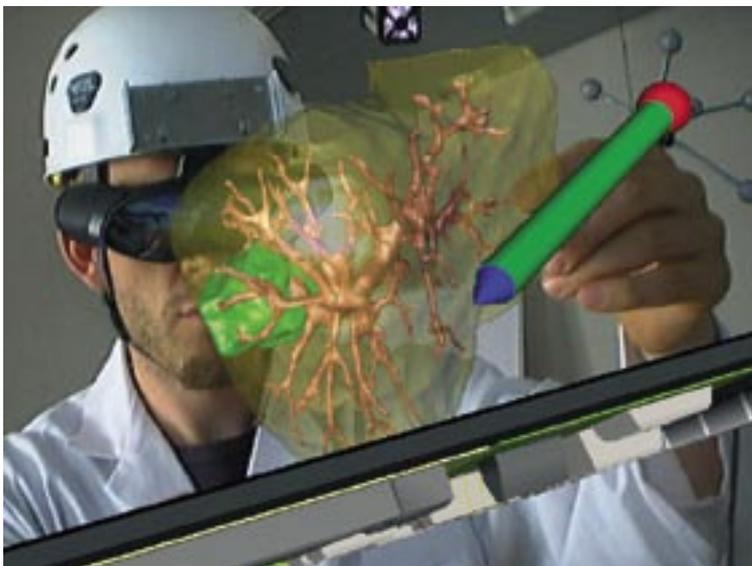


Abb. 1: Virtuelle Leberoperationsplanung mit dem Augmented Reality System am ICG.

hepatischen Funktionen. Das Ziel dieses Forschungsprojektes ist es, eine Methode zu entwickeln, die die zusätzliche Verwendung von Leberaufnahmen im virtuellen Leberoperationsplanungssystem,

ermöglicht. Im Vordergrund der Entwicklung stehen neben der Weiterentwicklung des Augmented Reality Systems neue Methoden zur Datenfusion. Ein zweites, ebenfalls vom FWF gefördertes Projekt, beschäftigt sich mit einer vollständig automatischen Methode zur Quantifizierung des Verlaufes der Rheumatoiden Arthritis basierend auf Röntgenaufnahmen. Diese Krankheit ist eine chronische Krankheit, die zu schmerzhaften Entzündungen der Gelenke führt. Die Folge sind schwere Gelenksschäden, die zu körperlicher Behinderung führen. Die Krankheit ist relativ häufig, sie ist für ca. 17 % aller Behinderungen von Personen die älter als 15 Jahre sind, verantwortlich. Der Schwerpunkt der Entwicklungen in diesem Bereich wird auf robusten Segmentierungsverfahren und der Reduktion von Trainingsdaten liegen. Dieses Projekt wird gemeinsam mit dem AKH Wien durchgeführt. Das dritte von der Firma Siemens (Bereiche PSE Graz und MED Erlangen) geförderte Projekt ist die Fusion von 3D Daten (CT) von Organen (insbesondere der Lunge) zum Thema. Im Rahmen dieses Projektes werden eine Reihe neuer Methoden für das noch weitgehend ungelöste Problem der nicht-rigidem Registrierung entwickelt. Durch diese Entwicklungen soll einerseits die Fusion von anatomischen und funktionalen Datenquellen sowie die Reduktion von Atmungsartefakten ermöglicht werden. In weiterer Folge können die Methoden zum besseren Verständnis der Physiologie der Atmung und Radiotherapieplanung herangezogen werden.

### Links:

<http://liverplanner.icg.tu-graz.ac.at/>

<http://www.prip.tuwien.ac.at/Research/AAMIR/>

### Über den routinemäßigen Einbruch in Smart Devices

Smart Devices stellen derzeit eine der interessantesten Herausforderungen aus sicherheitstechnischer Sicht dar. Darunter fallen nicht nur Chipkarten, sondern in zunehmenden Maße RFID-Tags (Radio Frequency Identification Chips oder auch Smart Wireless Devices genannt). Am Institut für Angewandte Informationsverarbeitung und Kommunikationstechnologie (IAIK) arbeitet man im Rahmen von zwei Europäischen Projekten (IST innerhalb von FP6) und drei nationalen Projekten (FIT-IT und FWF) intensiv an diesem Thema. In einem international angesehenen Labor werden am IAIK Chipkarten einem Intensivtest hinsichtlich ihrer Resistenz gegenüber so genannten Seitenkanal-Attacken unterzogen. Bei diesen Attacken wird der Energieverbrauch oder auch das abgestrahlte elektromagnetische Feld während des Betriebs von Smart Devices herangezogen, um den im Chip gespeicherten geheimen kryptografischen Schlüssel zumeist unberechtigterweise zu ermitteln. Das in diesem Labor vorhandene Knowhow dient vor allem auch dazu, geeignete Gegenmaßnahmen beim Entwurf von Chipkarten und Smart Devices zu entwickeln. Das IAIK wurde nicht zuletzt auf Grund der Resultate in diesem Labor eingeladen, als Partner im „European Network of Excellence in Cryptological Research“ die Forschung im Bereich Hardware-Sicherheit maßgeblich mitzubestimmen. Das IAIK ist zudem wissenschaftlicher Leiter des europäischen IST-Projektes SCARD (Side Channel Analysis Resistant Design Flow), in welchem neue Entwurfsmethoden für den sicheren Entwurf von Smart Devices untersucht werden. Der wichtigste Industriepartner in diesem Projekt ist Infineon Technologies. RFID-Tags sind derzeit ein noch „heißeres“ Thema als Chipkarten.

Chipkarten sind bei vielen Anwendungen, wie etwa im Bankbereich relativ bekannt und werden akzeptiert. RFID-Tags hingegen stellen derzeit in Aussicht, nicht nur in jeder Geldbörse, sondern auf „allen möglichen Dingen“ des täglichen Gebrauchs als Strichcode-Ersatz aufzutreten. Damit besteht die Gefahr, bei sicherheitstechnisch nicht richtiger Verwendung die Besitzer von Gütern mit solchen RFID-Tags aufspüren und verfolgen zu können. Dies ist offensichtlich unerwünscht und verlangt nach geeigneten kryptografischen Methoden. Aus diesem Grund beschäftigt sich das IAIK (zusammen mit Philips Semiconductors und anderen Partnern) mit der Authentifizierung von RFID-Tags.

Links:

<http://www.iaik.tu-graz.ac.at/research/sca-lab/>

<http://www.iaik.tu-graz.ac.at/research/sca-lab/projects/scard.php>

<http://www.iaik.tu-graz.ac.at/research/vlsi%20design/art>

#### Qualitätssteigerung in der Software-Entwicklung

Neben Prozess- und Managementmethoden zur Steigerung der Qualität von Software spielt die Verwendung standardisierter Methoden zur Überprüfung der Funktionalität des fertigen Softwareprodukts eine wesentliche Rolle. Dieser Bereich wird durch das Testen und in zunehmendem Maß von der formalen Verifikation abgedeckt. Im Rahmen des 6. Forschungsprogramms wird am Institut für Softwaretechnologie (IST) das Projekt PROSYD durchgeführt, das zum Ziel hat, die Verwendung von Verifikationstechniken im Entwurf von elektronischen Systemen und der Programmierung weiter zu steigern. Dieses Projekt wird gemeinsam mit 7 Partnern unter anderem IBM und Infineon durchgeführt. PROSYD beschäftigt sich mit der Standardisierung einer Sprache zur Spezifikation von Bedingungen, die ein Programm beziehungsweise eine elektronische Schaltung erfüllen muss. Durch die Verwendung von Verifikationsmethoden kann sowohl die Produktivität als auch die Qualität des fertigen Produkts erhöht werden. Ein weiterer Aspekt von PROSYD ist die Automatisierung der Fehlersuche basierend auf den angegebenen Programmbedingungen. In diesem Bereich kann das IST bereits auf eine fundierte Basis verweisen. Im Rahmen zweier vom FWF geförderter Projekte beschäftigen sich drei Mitarbeiter bereits seit mehreren Jahren mit der automatischen Fehlersuche in Programmen. Im Rahmen des DEV-Projekts wird ein Werkzeug zur Fehlerlokalisierung in VHDL-Programmen, die zur Beschreibung von elektronischen Schaltungen verwendet werden, entwickelt. Dieses Werkzeug kann automatisch, ausgehend von Testfällen Fehler in Programmen lokalisieren. Das zweite Projekt (JADE-X) beschäftigt sich mit der Fehlerlokalisierung in objekt-orientierten Sprachen, wobei die Programmiersprache JAVA als Referenzsprache verwendet wird. In den Projekten konnten bereits sehr gute und erfolgversprechende Resultate erarbeitet werden. So ist es möglich, Fehler in größeren VHDL-Programmen mit mehreren tausend Zeilen innerhalb von wenigen Minuten zu lokalisieren. Dabei können im Durchschnitt 93 % des Programms als korrekt klassifiziert werden. Das heißt, ein Programmierer muss sich nur mehr 7 % des Programms ansehen, um den Fehler zu lokalisieren. Mit anderen Techniken ist ein Ausschluss von Programmzeilen bei den verwendeten Programmen nicht möglich.

Links:

<http://www.prosyd.org/>

<http://www.ist.tugraz.at/DEV/>

#### Research at the Computer Science Faculty

*The computer science faculty carries out a large number of research projects which range from multimedia to artificial intelligence and neural networks. In this article three research topics in the area of applied computer science are introduced.*

##### Medical Image Recognition

*The Institute for Computer Graphics and Vision (ICG) has recently acquired three new medical imaging projects. Two of them are founded by the FWF and one is funded by Siemens (PSE and MED): The continuation of the award winning liver-planner project deals with the incorporation of functional data from the HIDAR-SPECT in the planning process. A new joint project with AKH-Vienna develops novel methods for quantitative evaluation of rheumatoid arthritis. The joint project with Siemens will investigate novel non-rigid registration methods for CT-data from lungs.*

##### Security Issues of Smart Devices

*The Institute for Applied Information Processing and Communications (IAIK) is researching security topics for smart cards, RFID tags, and smart wireless devices. Within two European Framework-6 IST projects and three nationally funded projects, IAIK looks at side-channel analysis, design methods for incorporating counter measures against side-channel attacks in the chip design process, and studies authentication for RFID tags. IAIK has gained international recognition with its side-channel analysis laboratory, is member of the „European Network of Excellence in Cryptological Research“, and leads an international IST project on side-channel analysis resistant chip design flow. IAIK's work on authentication for smart wireless devices is crucial in order to deploy these devices on a large scale without compromising data protection.*

##### Quality Improvement in Software Engineering

*The Institute for Software Technology (IST) has been carrying out three projects which deal with formal verification and fault localization. The objective of the EU funded project PROSYD is to introduce property-based verification for the design of electronic systems and software. Moreover, PROSYD aims in providing techniques for fault localization. In fault localization the IST has carried out 2 FWF funded research projects. The DEV Project aims at supporting and automating software debugging of VHDL programs which are used to describe hardware designs. During the project a debugging tool has been developed. The second project (JADE-X) aims in supporting the debugging process of object-oriented languages, e.g., Java. The first results of the projects are promising and indicate their usefulness. With the debugging tool fault localizing a fault in larger VHDL programs having several thousands lines of code in several minutes is possible. As a result the tool classifies only 7 percent of the code as fault candidates. This is a tremendous improvement when compared with other approaches where 100 percent of the code for the same programs remains to be fault candidates.*



## Brian Cody

### *Seit 29.12.2003 Professor für „Gebäude und Energie“ am Institut für Gebäude und Energie*

Die Energiefrage ist zweifellos das größte Problem, dem wir heute gegenüber stehen. Der Anteil des Weltenergieverbrauches, welcher auf Gebäude direkt zurückzuführen ist, beträgt ca. 50 %. Berücksichtigt man noch den Anteil, welchen Gebäude in den restlichen 50 % (Verkehr und Industrie) indirekt verursachen, ist der Gesamtanteil weit höher. Die Lösung dieses Problems wird nur bedingt in dem Erschließen von neuen Energiequellen – ob regenerativ oder nicht – bzw. in der Optimierung von technischen Anlagen in Gebäuden gefunden werden können. Beide Ansätze sind wichtig. Weitaus wichtiger jedoch ist es, den Energiebedarf zu senken.

Am neu gegründeten Institut für Gebäude und Energie wird das Ziel in Forschung und Lehre verfolgt, den Energiebedarf von Gebäuden durch Optimierung der Form und Konstruktion zu reduzieren. Ich begreife Energieeffiziente Architektur als Triade aus minimalem Energieverbrauch, optimalem Raumklima und architektonischer Qualität. Gebäude müssen so entworfen werden, dass sie inhärent höchst energieeffizient sind. Computersimulation bildet den methodischen Schwerpunkt der Forschung, wird aber auch als Lehrmittel verwendet, um die thermischen und energetischen Vorgänge in Gebäuden zu illustrieren.

Mich interessiert insbesondere das Thema des wachsenden Einflusses der Energieperformance in der Formfindung von Gebäuden sowie den Einsatz von Technologie (Computersimulation) während des Entwurfsprozesses mit dem Ziel, auf überflüssigen Technikeinsatz im fertig gestellten Gebäude verzichten zu können. Bei Projekten wie das Niedrigenergiehaus in Marzahn, Berlin, das Sunbelt Management Office Building in Kalifornien, die Hauptverwaltung von Braun in Frankfurt, der Duales System Pavillon der EXPO 2000 in Hannover und die Hauptverwaltung von Infineon in Singapur, habe ich solche Ansätze in der Praxis bereits umgesetzt.

Das bestehende Netz von internationalen Kontakten in der Forschung wird gepflegt und ausgebaut. Bei Projekten wie die neue Hauptverwaltung der europäischen Zentralbank in Frankfurt, wo es um High-End konzeptionelle Planung in diesem Gebiet geht, werde ich als Berater durch das weltweit operierende Ingenieurbüro Arup konsultiert. Das Strukturkonzept des Instituts sieht eine intensive Zusammenarbeit mit den anderen Instituten der TU Graz aber auch mit nationalen und internationalen Partner in der Forschung vor. Sämtliche Aspekte der Problematik werden interdisziplinär und ganzheitlich behandelt. Nur durch einen solchen holistischen Ansatz sind die Lösungen dieses zentralen Problems unserer Gesellschaft zu finden.

Beim Institut für Gebäude und Energie handelt es sich um ein neues Institut, dass in seiner Ausrichtung ein einzigartiges Gebilde im deutschsprachigen Raum darstellt. Das angestrebte Ziel in der Forschung ist es, das Institut als international beachtetes Research Laboratory for Energy Efficient Architecture zu etablieren. Durch die Präsenz dieses

Fachgebiets in der Lehre an der TU Graz wird das Ziel angestrebt, dass die Grazer Architekturausbildung u.a. dafür international bekannt wird, dass die Fähigkeit, Gebäudeplanung ganzheitlich zu betrachten und energetisch effiziente und behagliche Gebäude zu konzipieren, eine prägende Eigenschaft der Absolventinnen und Absolventen und ein integraler Bestandteil deren Entwurfsansätze ist.

Webseite des Instituts für Gebäude und Energie  
[www.ige.tugraz.at](http://www.ige.tugraz.at)

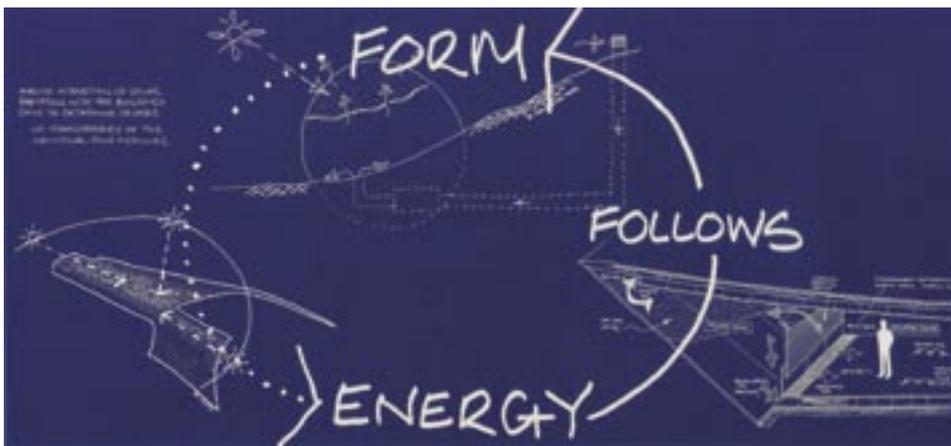
#### Lebenslauf

1967	geboren in Dublin, Irland
1984-1989	Studiums des Ingenieurwesens an der University of Dublin Abschluss mit First Class Honours und dem besten Abschlussergebnis des Jahrgangs
1989-1992	Aufenthalte in Boston, London und Berlin. Mitarbeit in Ingenieurbüros, Ausführungsfirmen und in der Forschung und Entwicklung
1993-2003	Arup GmbH, Tochtergesellschaft des weltweit operierenden Ingenieurbüros Ove Arup, welches seit 1950 die Philosophie der interdisziplinären ganzheitlichen Planung verfolgt
1996	Verleihung des Titels Chartered Engineer (CEng) in England
1997	Ernennung zum Associate von Arup
1997-2001	Lehrauftrag an der Universität Hannover
2002	Ernennung zum Associate Director von Arup
2003	Ruf als Professor an die TU Graz
2004	Institutsleiter des Instituts für Gebäude und Energie an der TU Graz

*The energy issue is clearly the greatest problem facing humanity today. The proportion of the world's energy consumption arising directly from energy use in buildings is approx. 50 %. However when one considers the energy consumption due indirectly to buildings in the remaining 50 % (transport and industry), the total proportion caused by buildings is larger still. The solutions are only partially to be found in renewable energy sources and more intelligent and efficient technical systems. Both of these approaches are valid and necessary. Much more important however, is to reduce energy consumption.*

*Energy efficient architecture needs to be understood as a triad, combining minimal energy consumption and an optimal internal environment with architectural quality. Through optimised form and construction, buildings should be designed, so that they are inherently highly energy efficient. The issues should be viewed as a challenge leading to a new architectural quality and not as a limitation in creative freedom.*

*The main focus of my research is concentrated on issues related to the holistic design of buildings and the improvement of their energy performance and comfort. I am particularly interested in the growing influence of energy performance in the form finding design process of buildings and the use of technology (computer simulation) during building design in order to avoid the excessive use of technical systems in finished buildings.*





## Walter Sextro

### Seit 2.2.2004 Professor für „Mechanik“ am Institut für Mechanik

In der Mechanik steht unter anderem die Entwicklung von schnellen effizienten Algorithmen zur Simulation von großen mechanischen bzw. mechatronischen Systemen im Vordergrund. Die zu entwickelnden Modelle sollten von daher so einfach wie möglich, aber so genau wie nötig sein. Um dieses Optimum zu finden, sind experimentelle Grundlagenuntersuchungen hinsichtlich spezieller physikalischer Effekte und auch experimentelle Untersuchungen am realen System erforderlich. Erst das Zusammenwirken von Theorie, Numerik und Experiment führt auf ein besseres Verständnis des zu untersuchenden Systems und damit auf eine effiziente Modellierung, die dann auch aufgrund der effizienten Funktionsweise Eingang in die Praxis finden wird.

In diesem Sinne forscht das Institut für Mechanik auf folgenden Gebieten: Mehrkörperdynamik, Schwingungstechnik, Maschinendynamik, Fahrzeugdynamik, Kontaktmechanik, Mechatronik, Kinematik und Robotik. Im Folgenden werden drei Arbeitsschwerpunkte, die sich aus mehreren Forschungsgebieten zusammensetzen, kurz vorgestellt.

#### Reibungsdämpfung von Turbinenschaufeln und Motoren

In vielen Dampf- und Gasturbinen werden heute Reibelemente erfolgreich eingesetzt, um Schwingungsamplituden zu reduzieren und somit das Risiko eines Schaufelschadens deutlich zu mindern. Das Prinzip ist einfach: Werden die Schaufeln in Schwingungen versetzt, kommt es in den Kontaktzonen zwischen den Schaufeln zu Relativbewegungen und trockener Reibung. Die hierbei stattfindende Umsetzung von Bewegungs- in Wärmeenergie führt letztlich zu geringeren Schwingungsamplituden der Schaufeln und somit zur Erhöhung der Lebensdauer.

Effiziente Näherungs- und Lösungsverfahren zur Berechnung erzwungener Schwingungen von Turbinenschaufeln mit Reibkontakten werden weiter entwickelt. Insbesondere wird versucht, das entwickelte Berechnungsverfahren auf die Berechnung des Schwingungsverhaltens von Motoren zu übertragen und experimentell abzusichern.

#### Verschleißberechnungen von Rad-Schiene Rollkontakten

Die Räder von Rad-Schiene Systemen können durch Verschleiß mit der Zeit unrund werden, wobei die Kontur der Radoberfläche in Umfangsrichtung wellenförmig wird. Diese Unrundheiten führen auf eine erhöhte Geräuschentwicklung, Wartung, Schädigung von Rad und Schiene und eine reduzierte Betriebssicherheit. Deshalb wird

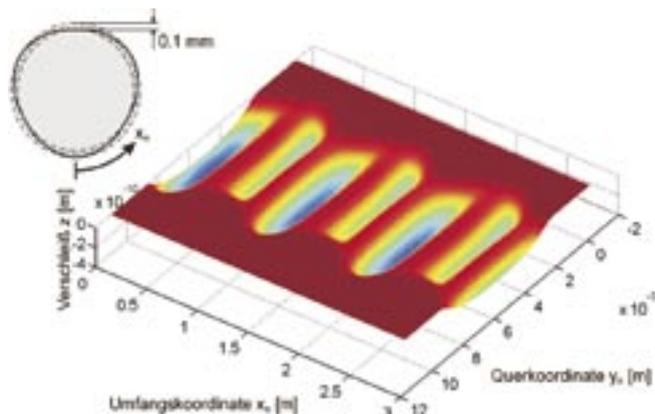
ein Berechnungsverfahren zur Simulation des Verschleißverhaltens unter Berücksichtigung der Temperaturverteilung im Kontakt entwickelt um die Ursachen für den wellenförmigen Verschleiß zu klären. Dieses Berechnungsverfahren erlaubt eine schnelle Berechnung der generalisierten Kontaktkräfte für die räumliche Bewegung von Rad und Schiene. Auch hier zeigt der Vergleich Messung-Rechnung eine gute Übereinstimmung. In der Abbildung ist der berechnete Verschleiß in Abhängigkeit von der Umfangskoordinate  $x_R$  und der Querkordinate  $y_R$  dargestellt.

#### Instationäre Berechnung von Reifen-Straße Rollkontakten

Stationäre Reifenmodelle verlieren ihre Genauigkeit, wenn die Bewegung des Reifens oszillierende Anteile mit höheren Frequenzen enthält. Ein Berechnungsverfahren zur Behandlung von transienten Rollkontaktproblemen unter Berücksichtigung der Temperaturverteilung am Beispiel des Kontaktes Reifen-Straße wird entwickelt, das allgemein in Mehrkörperprogrammsystemen eingesetzt werden kann. Dieses instationäre Rollkontaktmodell soll experimentell mit Hilfe einer mobilen Messeinrichtung überprüft werden.

#### Lebenslauf

1982 - 1990	Maschinenbaustudium an der Universität Hannover und am Imperial College in London
1990 - 1993	Entwicklungsingenieur/Projektkoordinator, Baker Hughes INTEQ, Drilling Research Center, Celle, davon drei Monate im Headquarter, Houston, Texas, USA
1993 - 1999	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Mechanik, Projektarbeit für die Forschungsvereinigung Verbrennungsmaschinen (FVV)
1997	Promotion, Thema der Dissertation: Schwingungsverhalten von Schaufelkränzen mit Reibelementen bei Frequenzverstimmung
1998	„Wissenschaftspreis Hannover 1998“ verliehen durch den Freundeskreis der Universität Hannover e.V.
1999 - 2001	Habilitandenstipendium der DFG
2001 - 2003	Gruppenleiter Schwingungstechnik am Institut für Mechanik der Universität Hannover
2001	Habilitation an der Universität Hannover, Lehrbefugnis für das Fach Mechanik
2003	Ruf an die Universität Erlangen-Nürnberg (abgelehnt)
2003	Ruf an die TU Graz



Verschleißberechnung von Rad-Schiene Rollkontakten

*The development of fast algorithms to simulate large mechanical or mechatronical systems is one aim within the field of mechanics. Therefore the developed models should be as simple as possible and as accurate as necessary. To find this optimum experimental investigations have to be carried out with respect to special physical effects and the real system. The coaction of theory, numeric and experiment gives a better understanding of the investigated system and hence leads to an efficient modelling of the system, which can be transferred into praxis.*

*In this sense the Institute of Mechanics makes research within the following fields: multibody dynamics, nonlinear vibrations, dynamics of machinery, vehicle dynamics, contact mechanics, mechatronics, kinematics and robotics, for example:*

- Friction damping of turbine blades and motors
- Wear of wheel-rail rolling contacts
- Instationary calculation of tyre-road rolling contacts

Vertragsprof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Ulrich Walder  
Institut für Bauinformatik  
E-Mail: ulrich.walder@TUGraz.at  
Tel: 0316 873 4340

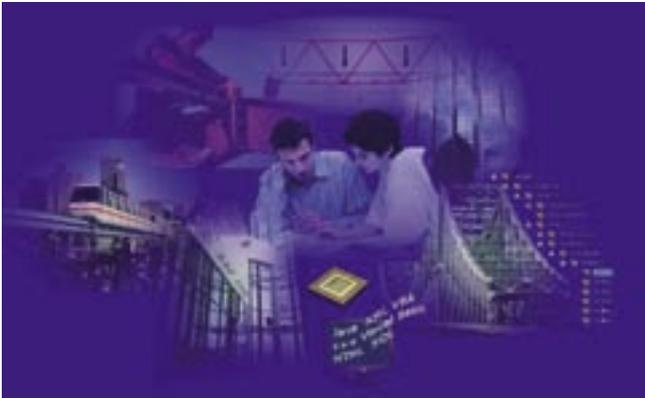


## Ulrich Walder

*Seit 29.12.2003 Professor für „Bauinformatik“ am Institut für Bauinformatik*

### Das Institut für Bauinformatik

Der Lehrstuhl für Bauinformatik und das gleichnamige Institut bestehen seit dem 1. Jänner 2004. Die Fakultät für Bauingenieurwissenschaften berücksichtigt damit die zunehmende Bedeutung der Informatik in allen Bereichen des Bauwesens von der Planung, über die Erstellung, die Nutzung und die Umnutzung bis zum Rückbau eines Bauwerks.



Informatik im Bauwesen (Bild Institut für Bauinformatik)

Die junge Disziplin der Bauinformatik beschäftigt sich hauptsächlich mit folgenden Themen:

- der Entwicklung von numerischen Methoden für Ingenieurberechnungen und deren Informatikumsatzung (computational mechanics). Dabei ist die Methode der finiten Elemente die eleganteste und effizienteste. Sie erlaubt es, beinahe alle Ingenieurprobleme mit einer vereinheitlichten Theorie zu erfassen und zu berechnen.
- der grafischen Datenverarbeitung, insbesondere der Simulation von Bauwerken in der Entwurfsphase und die Erstellung der notwendigen Pläne für die Ausführung. Dazu gehört die Verknüpfung von grafischen Daten mit numerischen Attributen, bzw. mit Datenbanken.
- der Entwicklung von Datenstrukturen und Prozesssteuerungen, welche die reibungslose Zusammenarbeit verschiedenster dezentral arbeitender Planungspartner z.B. über das Internet ermöglichen. Dazu gehören Methoden zur Modellierung eines virtuellen Bauwerks, welches in allen Phasen der Planung und der Nutzung jedem Interessierten seine Informationen in der gewünschten Form und Auswahl zur Verfügung stellt.

Weitere Spezialgebiete liegen auf den Gebieten der geografischen Informationssysteme, der Ausschreibung, Vergabe und Abrechnung von Bauleistungen bis hin zu allen Teilbereichen des computerunterstützten Facility Managements, wie dem Flächenmanagement, dem Unterhalt von Bauten und Technischen Anlagen, dem Sicherheitsmanagement, dem Miet- und Kostenmanagement.

Last but not least gehört die Grundausbildung in Informatik für die jungen Ingenieure zum Aufgabenbereich des Lehrstuhls für Bauinformatik. Die Vielfalt und Breite der Bauinformatik zeigt sich auch im Vorlesungsangebot:

- Grundlagen der EDV I (Hardware, Betriebssysteme, Officeprogramme, Datenbanken)
- Grundlagen der EDV II (Programmieren)
- Technisches Zeichnen mit CAD (normengerechte Plandarstellung, AutoCAD)

- EDV Statik (Computerstatik für Stab- und Flächentragwerke)
- Facility Management (technisch, infrastrukturell, kaufmännisch, Sicherheitsmanagement)
- Computerunterstütztes Facility Management (Design und Programmierung).

Die Forschungstätigkeit des Instituts, welches im Moment mit zwei Assistentenstellen dotiert ist, konzentriert sich auf drei Gebiete:

- Im Rahmen des Forschungsschwerpunktes ACT (Advanced Construction Technology) soll ein verallgemeinertes Datenmodell entwickelt werden, welches ein Bauwerk in all seinen Stadien von der Entstehung über die Nutzung bis zum Rückbau so beschreibt, dass jederzeit jedermann alle benötigten Informationen in der gewünschten Form zur Verfügung stehen. Die vorgesehenen Technologien basieren auf XML und verteilten Datenbanken.
- In Zusammenarbeit mit weiteren Instituten wird ein allgemeines Bewertungsmodell entwickelt, welches es erlaubt, große Bauwerksbestände nicht nur nach ökonomischen Grundsätzen zu bewerten, sondern auch nach ökologischen und nach realen Erfahrungswerten, wie sie sich aus dem laufenden Betrieb eines umfassenden Facility Management Systems ergeben.
- Die vielfältigen Sicherheitsmaßnahmen bei der Planung und während der Nutzung von Infrastrukturen sollen durch ein computerunterstütztes integrales Sicherheits-Managementsystem koordiniert und effizienter betrieben werden.

Weitere Informationen:

[www.bauinformatik.tugraz.at](http://www.bauinformatik.tugraz.at)  
[www.bauinformatik-institut.de](http://www.bauinformatik-institut.de)  
[www.ifma.com](http://www.ifma.com)

### Lebenslauf

- 1970 - 1979 Assistent und wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Baustatik und Konstruktion, sowie am Institut für Informatik der ETH Zürich, bei den Professoren Dr. Bruno Thürlimann, Dr. Christian Menn und Dr. Edoardo Anderheggen. Dissertation zum Thema „Beitrag zur Berechnung von Flächentragwerken nach der Methode der Finiten Elemente“, 1977. Mitarbeit an verschiedenen Expertisen (CN-Tower, Toronto; John Hancock Tower Boston, usw.). Entwicklung des FE-Programmes FLASH.
- 1980 - 1981 Mitarbeiter im Ingenieurbüro Lorenz in Graz.
- 1981 - 2000 Gründung der Walder & Trüb Engineering AG. Computeranwendungen im Bauwesen (Statik, CAD, Facility Management). 18 Mitarbeiter in Bern, Zürich und Nyon.
  - Gastvorträge und Lehrtätigkeit an Hochschulen (ETH Zürich, Aachen, Berlin, Kaiserslautern, Graz, Wien, Ljubljana, Brüssel, Peking). Zahlreiche öffentliche Vorträge und Veröffentlichungen.
  - Mitarbeit in Fachkommissionen und nationalen Forschungsprojekten.
  - Generalstabsausbildung, verschiedene Kommandos in der Schweizerischen Armee.
- 2001 - 2003 Divisionskommandant im Grade eines Generalmajors.

*The chair and Institute for Building Informatics exist since 1.1.2004.*

*Lecture offer:*

*Computer Science I (hardware, operating systems, office applications, data bases)*

*Computer Science II (programming)*

*Technical Drawing with CAD Systems*

*Computer Statics*

*Facility Management (technical, infrastructural, commercial, safety management)*

*Computer Aided Facility Management (system design and programming).*

*The research work concentrates on three areas:*

- *In the context of the research project ACT (Advanced Construction Technology) a generalized data model for buildings will be developed. The intended technologies are based on XML and distributed data bases.*
- *In co-operation with other institutes a general evaluation model is developed, which allows to benchmark buildings not only by economic principles, but also by ecological and other parameters, .e.g. from the long-term data received by a Facility Management System.*
- *Development of an integrated safety management tool for buildings.*

*Short personal record of the chair owner:*

*1970 - 1979 Scientific assistant at the Institute for Structural Design and Construction at the Swiss Federal Institute of Technology (ETH) Zurich.*

*1980 - 1981 Co-worker in the engineering company Lorenz in Graz.*

*1981 - 2000 Establishment of Walder & Trüb Engineering AG, in Bern, Zurich and Nyon.*

*2001 - 2003 Division commander in the Swiss Army (major general).*



## Diophantische Probleme: Zahlenspielereien und Kryptografie

### *Diophantine Problems: Number-baubles and Cryptography*

Am Beginn jeder Mathematik-Ausbildung steht das Verständnis der verschiedenen Zahlensysteme. Ausgangspunkt sind dabei stets die natürlichen Zahlen von denen schon L. Kronecker gesagt hat „Die natürlichen Zahlen hat der liebe Gott geschaffen, alles andere in der Mathematik ist Menschenwerk“. So darf es einen nicht wundern, dass die natürlichen Zahlen bis heute ein reges Forschungsfeld bieten. In meiner Forschung geht es zu einem großen Teil um das Lösen von Diophantischen Problemen, benannt nach Diophantus von Alexandria: dabei werden Lösungen in den natürlichen Zahlen und nicht etwa in den reellen Zahlen für die betrachteten Probleme gesucht. Es werden verschiedenste Methoden, die wiederum aus allen Bereichen der Mathematik kommen, dazu eingesetzt.

**Diophantische Gleichungen:** Seit Y. Matijasevic im Jahr 1970 bewiesen hat, dass es keinen universellen Algorithmus für die Lösbarkeit einer gegebenen polynomiellen Diophantischen Gleichung gibt, sind Mathematiker auf der Suche nach möglichst großen Klassen von Diophantischen Problemen für die wir die algorithmische Lösbarkeit beweisen können. Es sind aber auch schwächere Aussagen von Interesse, wie z. B. die Herleitung einer oberen Schranke für die Anzahl der Lösungen. Eine interessante Klasse von Diophantischen Gleichungen, die seit kurzem intensiv untersucht wird, sind so genannte exponentiell-polynomielle Gleichungen, wie z. B.  $2^n + 3^m = x^2$  wobei natürlichen Zahlen  $n$  und  $x$  als Lösungen gesucht werden. Für solche und allgemeinere Gleichungen konnte ich - teilweise zusammen mit Kollegen von der TU Graz, sowie aus dem Ausland (Italien, Ungarn) - explizite obere Schranken für die Anzahl der Lösungen angeben. Darüber hinaus gilt ein Strukturresultat: eine solche Gleichung kann nur dann unendlich viele Lösungen besitzen, wenn das „offensichtlich“ ist (z. B.  $18^n + 2 \cdot 6^m + 2^n = (18^n + 2^n)^2 = x^2$ ).

**Diophantische Tupel:** Eine Menge von  $m$  verschiedenen natürlichen Zahlen, wie z. B.  $\{1,3,8,120\}$ , wird ein Diophantisches  $m$ -Tupel genannt, wenn das Produkt von je zwei Zahlen plus  $\pm 1$  ein Quadrat einer natürlichen Zahl ist. Im obigen Beispiel gilt  $1 \cdot 3 + 1 = 2^2$ ,  $1 \cdot 8 + 1 = 3^2$ ,  $1 \cdot 120 + 1 = 11^2$ ,  $3 \cdot 8 + 1 = 5^2$ ,  $3 \cdot 120 + 1 = 19^2$  und schließlich  $8 \cdot 120 + 1 = 31^2$ ; somit handelt es sich um ein Diophantisches Quartupel. In den letzten Jahren wurden zahlreiche Beiträge zu diesem Thema verfasst, die wichtigsten durch A. Dujella (siehe <http://www.math.hr/dtupels.html>). Zum Beispiel konnte er die so genannte Quintupel-Vermutung, die besagt, dass es kein Diophantisches Quintupel mit  $+1$  gibt, nahezu vollständig beweisen. Kürzlich habe ich gemeinsam mit ihm gezeigt, dass es kein Quintupel mit  $-1$  gibt. Damit haben wir gleichzeitig ein altes Problem gelöst, dass auf Diophant und L. Euler zurückgeht: es gibt keine Menge bestehend aus vier positiven natürlichen Zahlen mit der Eigenschaft, dass das Produkt von je zwei solchen Zahlen plus deren Summe das Quadrat einer natürlichen Zahl ist (wie z. B. bei  $\{4,9,28\}$ , denn  $4 \cdot 9 + 4 + 9 = 7^2$ ,  $4 \cdot 28 + 4 + 28 = 12^2$ ,  $9 \cdot 28 + 9 + 28 = 17^2$ ).

**Kryptografie:** Nachdem die bisher erwähnten Resultate zwar für einen Mathematiker, wohl aber nicht für einen „Anwender“ interessant sind, muss erwähnt werden, dass Diophantische Probleme eine wichtige Anwendung in der Kryptografie, also bei der Geheimhaltung von Daten (man denke z. B. an Internetbanking, Emails, E-Commerce oder unser TUGOnline) gefunden haben. Gewisse

polynomielle Diophantische Gleichungen haben nämlich eine geometrische Interpretation als sogenannte „elliptische“ Kurven. Auf diesen Kurven können Punkte addiert werden. Diese Operation ist leicht ausführbar und wird daher zum Verschlüsseln einer Nachricht verwendet, die Entschlüsselung (d. h. die Bildung der inversen Operation) kann aber nur mit Zusatzinformationen, die wiederum nur Berechtigte haben, effizient ausgeführt werden, womit die Sicherheit gewährleistet werden kann.

**Mein Werdegang:** Nach dem Studium der Technischen Mathematik an der TU Wien bin ich im Jahr 2000 an die TU Graz gewechselt, wo ich im Rahmen des FWF-Projektes „Algorithmic Diophantine Problems“ unter der Leitung von R. Tichy an meiner Dissertation gearbeitet habe, die ich 2002 abschließen konnte. Seitdem bin ich am Institut für Mathematik A als Assistent tätig. Vor kurzem wurde meine Arbeit mit einem Erwin-Schrödinger-Auslandsstipendium des FWF ausgezeichnet. Für weitere Informationen zu meiner Forschung siehe: <http://finanz.math.tu-graz.ac.at/~fuchs>.

### *Diophantine Problems: Number-baubles and Cryptography*

*In my scientific work I am mainly concerned with Diophantine problems: here we are looking for solutions to the problem in the set of integers. To obtain such results methods from all areas of mathematics are utilized.*

*One of my working areas are Diophantine equations. Here, I obtained - partly in joint work with colleagues from the TU Graz, but also from abroad - explicit upper bounds for the number of solutions of certain families of exponential-polynomial Diophantine equations. Another interesting problem I am dealing with are Diophantine tuples: a Diophantine  $m$ -tuple with the property  $D(n)$  is a set of different integers with the property that the product of any two of them plus  $n$  is a square of an integers. Jointly with A. Dujella I was able to show that there does not exist a  $D(-n)$ -quintuple. This result implies an old problem due to Diophant and Euler: there is no set consisting of four positive integers having the property that the product of any two of them plus their sum is a square of an integer. Diophantine problems are used in cryptography, where the aim is to encrypt data in order to protect it from unauthorized usage.*

*My Vita: I received my MSc in mathematics from the TU Wien and my PhD from TU Graz. Since 2002 I am assistant at the Department of Mathematics A.*



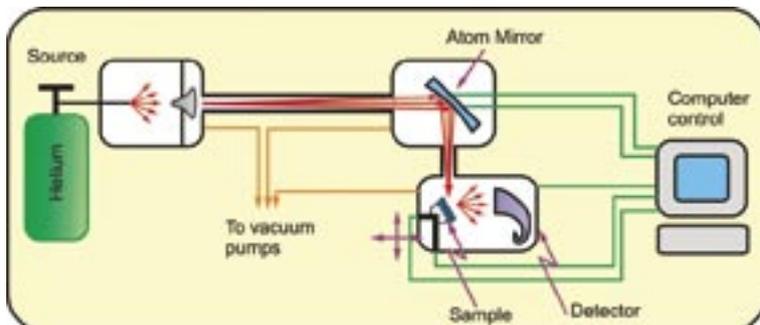
## Sehen mit Atomen

### *Imaging with Atoms*

Seit dem letzten Jahr bin ich als Universitätsassistentin am Institut für Experimentalphysik tätig (<http://iep.tu-graz.ac.at/people/holst/>). Seit Juli dieses Jahres koordiniere ich das EU-Projekt INA (Imaging mit Neutral Atoms), ein im Rahmen von NEST (New and Emerging Science and Technology) gefördertes Forschungsprojekt (<http://www.cordis.lu/nest/home.html>). In dem Zusammenhang wurde ich gebeten, einen Beitrag für das Forschungsjournal zu schreiben.

Ich bin Dänin und wurde mit dem alten heidnischen Mädchenamen „Bodil“ getauft. Dieser Name hat häufig für Verwirrung gesorgt, da er in den Ohren der meisten Nicht-Skandinavier wie ein Männername klingt. Er ist jedoch ein Walküre-Name und lautet in seiner ursprünglichen Form „Both-Hildur“ was so viel bedeutet wie „Geschenk des Kampfes“.

Mit 18 begann ich an der Kopenhagener Universität Physik und Mathematik zu studieren. Nach abgeschlossenem Bachelor ging es nach Cambridge in England. Ich hatte mir als Thema für meine Diplomarbeit „Oberflächenuntersuchungen mit Heliumatomen“ ausgesucht: Die Idee, man könnte Atome als Sonde benutzen, fand ich schon damals spannend. Außerhalb des Labors verbrachte ich in Cambridge viel Zeit mit Freunden, mit denen ich unter anderem mit flüssigem Stickstoff betriebene Raketen baute (<http://rocket>).



Schematischer Aufbau des Helium-Atom-Mikroskopes - copyright Dr. Donald McLaren, Cambridge University

tc/) und Gedichte las. Leben am College in Cambridge bedeutete Menschen zahlreicher Fachrichtungen kennen zu lernen. Diese Interdisziplinarität war für mich von Anfang an eine Quelle von Freude und immer Bestandteil auch meines eigenen wissenschaftlichen Arbeitens.

Durch ein Stipendium meines College, Trinity Hall war es mir möglich in Cambridge zu promovieren. Das herausragendste Ergebnis konnte ich in der renommierten Zeitschrift Nature präsentieren: Einen Spiegel, mit dem sich neutrale Atome in zwei Dimensionen fokussieren lassen – immer noch ein zentraler Punkt in meiner Forschung. Seit einigen Jahren arbeite ich an der Entwicklung eines neuen Instruments – des Helium-Atom-Mikroskops.

Helium-Atom-Streuung ist bereits als zuverlässige Methode für die Untersuchung der strukturellen und dynamischen Eigenschaften von Oberflächen bekannt. Die niedrige Energie des Helium-Strahls (weniger als 100 meV) und die Tatsache, dass Helium-Atome elektrisch neutral und chemisch inert sind, bedeutet, dass es möglich ist ohne Beschädigung isolierende Materialien wie Polymere oder

empfindliche biologische und geologische Materialien zu untersuchen, die sich mit anderen Methoden nur schwer untersuchen lassen. Ein Helium-Atom-Mikroskop bietet von daher eine große Breite von Anwendungsmöglichkeiten. Das Abbildungsprinzip ist vergleichbar mit dem in bereits existierenden Raster-Instrumenten. Der Helium-Strahl wird mit einem atom-optischen Element (i.e. ein Spiegel) auf eine Probe fokussiert. Die Ausdehnung des fokussierten Strahls bestimmt die laterale Auflösung. Die Probe wird unter dem Strahl bewegt und das zurückgestreute oder durchgelassene Signal mit einem hochempfindlichen Ionisations-Detektor nachgewiesen. Das Signal variiert mit der lokalen Topographie oder der lokalen Durchlässigkeit, und so wird ein Bild der Probe erzeugt. Das Mikroskop kann auch für Streuungs-Experimente an Mikrokristallen verwendet werden.

Die jetzigen Experimente in Graz verteilen sich auf zwei Bereiche: Erstens möchten wir den fokussierenden Spiegel verbessern um eine höhere Auflösung zu erreichen. Das Ziel besteht darin, den Fokus von derzeit 1,5  $\mu\text{m}$  auf 20 nm zu verringern. Dieses geschieht im Rahmen des EU-Projektes. Die Spiegel werden hergestellt aus 50  $\mu\text{m}$  dünnen Siliziumkristallen, die in einem elektrostatischen Feld gebogen werden. Da die Wellenlänge der Atome bei 0.1 nm liegt, muss der Spiegel auch bis auf weniger als 0.1 nm genau sein! Die gegenwärtigen Herausforderungen bestehen darin, die Oberfläche so vorzubereiten, dass die reflektierte Strahlintensität maximiert, und dass die elektrostatische Verbiegung mittels einer exakten Elektrodenstruktur besser kontrolliert wird.

In einem anderen Projekt wollen wir das Mikroskop ausnutzen um künstliche und biologische Membranen zu untersuchen. Diese Arbeit wird vom FWF gefördert. Wir kooperieren mit FELMI-ZFE (Prof. Hofer und Dr. Pöit) wo ESEM-Untersuchungen gemacht werden sollen.

### *Imaging with Atoms*

*Bodil Holst was born in Denmark in 1972. She studied Physics and Mathematics at University of Copenhagen and obtained her Ph.D. in Experimental Physics from Cambridge University in 1998 in the group of Dr. Allison. The main result of her Ph.D. was the construction of a mirror for two dimensional focusing of neutral atoms. Dr. Holst went on to the Max Planck Institut für Strömungsforschung in Göttingen in the group of Professor Toennies. Her work here was mainly centred on the design and development of an apparatus where the focusing mirror could be applied for helium microscopy. The low energy of the He-beam (less than 20 meV at room temperature) and the fact that the atoms are neutral, makes helium an excellent probe for studying fragile samples. 2003 Dr. Holst took up a position as University Assistant at the Institute of Experimental Physics, headed by Professor Ernst. She brought with her the apparatus from Göttingen and is now continuing her work on helium atom microscopy. From July this year this work will be funded as a STREP project by the European Union in the NEST priority (New and emerging science and technology). The main aim of the EU-project is to optimise the focusing mirrors to enable an improvement in the focus size from the present 1,5  $\mu\text{m}$  to 20 nm.*

Univ.-Ass. Dipl.-Ing. Dr.techn. Andreas Wieser  
Institut für Ingenieurgeodäsie und Messsysteme  
E-Mail: andreas.wieser@TUGraz.at  
Tel: 0316 876 6323

Department of Geomatics Engineering  
University of Calgary, Canada  
Tel: +140 321 098 65



## Satellitengestützte Positionierung, hochgenau – aber sicher ?!

### *Quality control for precise GPS positioning*

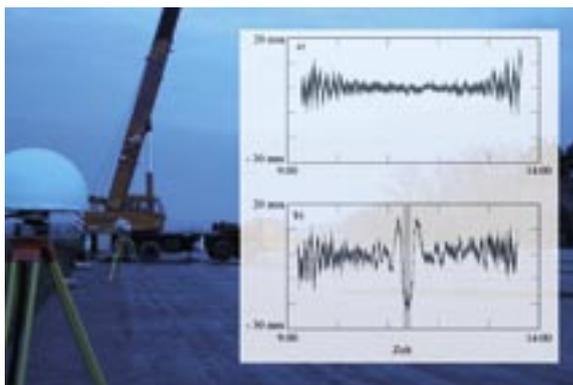
Als die Berufsberater aus der Großstadt ans Gymnasium nach Linz kamen, war ich voller Erwartung. Meine Lieblingsfächer deckten beinahe den gesamten Stundenplan ab, und mein Traumberuf war entsprechend scharf eingegrenzt... Leider änderte sich das an jenem Tag nicht. Eine Reihe von Zufällen führte mich schließlich zum Geodäsie-Studium an die TU Wien. Zugleich studierte ich am Konservatorium Klarinette, was mir zu Konzerten und Reisen verhalf, mich aber von praktischen Erfahrungen im Vermessungsbüro fernhielt. Nach einer Diplomarbeit aus dem Bereich „Digitale Bildverarbeitung“ nahm ich die Gelegenheit wahr, als Assistent an der TU zu bleiben. Ich hatte einen spannenden Beruf gefunden, der meinem Forschungsdrang ebenso entsprach wie meiner schwindenden Freude am Klarinette-Üben.

1998 wechselte ich an die TU Graz, um bei Herrn Prof. Brunner zu dissertieren. Seit damals interessiert mich das Globale Positionierungssystem GPS besonders. Je nach Empfänger, Messstrategie und Auswertemodellen kann man seinen Standpunkt damit auf einige Meter bis wenige Millimeter genau bestimmen, unter Umständen sogar noch genauer. So wird GPS auch in unzähligen Bereichen eingesetzt - von der Segeljacht bis zum Kampfjet, von der Autonavigation bis zur Erforschung der Erdkrustenbewegungen. Die Tücke steckt im Detail: Obwohl „der Millimeter“ erreichbar ist, kann die berechnete Position im Einzelfall um viele Meter falsch sein, ohne dass dies den Messdaten oder berechneten Koordinaten leicht anzusehen wäre.

Die Positionierung mit GPS beruht auf der Laufzeitmessung von Signalen. Während man die großen Fehlereinflüsse, etwa die Uhrfehler, modellieren kann, gelingt das mit einigen anderen nicht, z.B. mit zeitlich stark veränderlichen ionosphärischen Störungen oder Reflexionen an Gebäuden. Bei ungünstiger Verteilung der Satelliten (diese ändert sich ständig) können aber selbst kleine Restfehler in der Laufzeitmessung große Fehler in der berechneten Position bewirken.

GPS ist also zwar potentiell präzise, aber nicht unbedingt „sicher“. Für kritische Anwendungen ist die Zuverlässigkeitskontrolle essentiell, also die Frage, ob sich Fehler rechtzeitig aufdecken lassen, und wie groß eventuell nicht aufgedeckte Fehler sein können. In meiner Dissertation „Robust and fuzzy techniques for parameter estimation and quality assessment in GPS“ habe ich statistische und heuristische Methoden dafür vorgeschlagen, die nur Daten verwenden, welche von (besseren) GPS-Empfängern ausgegeben werden. Es hat sich gezeigt, dass die Arbeit auch auf die Positionierung mit Pseudostrecken anwendbar ist, die selbst der billigste GPS-Empfänger liefert. Die Arbeit wurde mit einem Josef Krainer-Förderungspreis des Landes Steiermark ausgezeichnet.

Nichtsdestotrotz konnte sie das Problem mangelnder Zuverlässigkeit nicht allgemein lösen, denn die Schwachstelle liegt nicht mehr in den Auswertemodellen, sondern ist systemimmanent: Die GPS Daten allein enthalten nicht genug Information. Zusätzliche Information kann zum Beispiel in Form von Differentialgleichungen in die Auswertung einfließen, die die Bewegung des Empfängers beschreiben, oder in Form von Messdaten zusätzlicher Sensoren. Der FWF ermöglicht mir zurzeit, im Rahmen eines Erwin-Schrödinger-Auslandsstipendiums an der University of Calgary zu arbeiten. Das Ziel meines Forschungsprojektes „INS aided fuzzy quality control for precise RTK GPS positioning“ ist es, mit Simulationsrechnungen und Experimenten zu untersuchen, wie und in welchem Maße günstige MEMS Inertial-Sensoren (mikrotechnologisch gefertigte Kreisel und Beschleunigungsmesser) eingesetzt werden können, um die Qualität kinematischer Echtzeit-Positionierung mit GPS nachzuweisen. Solche Sensoren sind nahezu unabhängig von äußeren Einflüssen und über kurze Zeit extrem präzise, akkumulieren allerdings über längere Zeiträume große Abweichungen. Kombiniert man sie mit GPS, so erhält man ein besonders



Einfluss eines einzelnen Objekts (Autokran) auf GPS Trägerphasenmessungen. (a) Messfehler PRN 7, Tag 1, ohne Kran, (b) Tag 2, mit Kran.

zuverlässiges und dennoch kostengünstiges Positionierungssystem für viele Anwendungen.

Im Jahr 1987 hat mir kein Berufsberater empfohlen, Forscher zu werden. Glücklicherweise haben der Zufall und einige Mentoren nachgeholfen.

Im Jahr 1987 hat mir kein Berufsberater empfohlen, Forscher zu werden. Glücklicherweise haben der Zufall und einige Mentoren nachgeholfen.

### *Quality control for precise GPS positioning*

*The global positioning system GPS has not only revolutionized navigation. Processing the signal's carrier phase, its real-time kinematic (RTK) mode allows to guide machines with cm-level accuracy, to survey traffic routes precisely while driving along them, to set out points efficiently. Engineering geodesy has become unthinkable without RTK GPS. However, objects close to the antenna may cause signal distortions which can hardly be modelled. These effects may bias the estimated position even by meters. They are extremely difficult to detect while measuring kinematically. Consequently, RTK GPS is of limited use in critical applications, and its potential accuracy is not fully exploited.*

*Currently, I am working at the University of Calgary as an Erwin-Schrödinger fellow of the FWF. My research aims at investigating the capability of low-cost inertial sensors (IMU) to mitigate the above problem. The errors of low-cost IMU are modelled numerically and used for a statistical analysis of minimum-detectable biases based on Kalman filtering. The resulting algorithms are embedded into a strategy for robust estimation and quality control using fuzzy logic, which I have developed as part of my dissertation.*

## Preise und Auszeichnungen

Am 15. Oktober 2003 verlieh die Universität Maribor an O.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. **Stephan SEMPRICH**, Institut für Bodenmechanik und Grundbau, die Festurkunde für vorbildliche und vertiefte Zusammenarbeit mit der Fakultät für Bauwesen der Universität Maribor auf dem Gebiet der Lehre und Forschung.

Dipl.-Ing. **Markus PÖTSCH**, Institut für Felsmechanik und Tunnelbau, wurde mit dem Förderpreis der Österreichischen Gesellschaft für Geomechanik für seine Diplomarbeit „Influence of the three-dimensional stress condition at the tunnel face on the stability of removable blocks“ ausgezeichnet.

Vertragsprof. Dipl.-Ing. Dr.techn. **Horst BISCHOF**, Institut für Maschinelles Sehen und Darstellen, erhielt im Oktober 2003 den 29th Annual Award der Pattern Recognition Society für das „most original manuscript 2002“ des Journals Pattern Recognition.

Dipl.-Ing. Dr.techn. **Marion GFRERER**, Institut für Analytische Chemie und Radiochemie, wurde am 31. Oktober 2003 der Dissertationspreis 2003 der Gesellschaft Österreichischer Chemiker verliehen.

Dipl.-Ing. Dr.techn. **Elmar TEUFL**, Institut für Mathematik B, erhielt im Oktober 2003 den Studienpreis der Österreichischen Mathematischen Gesellschaft für seine verfasste Dissertation „Asymptotic Problems Related to Self-Similar Graphs and Fractals“.

Dipl.-Ing. **Christoph WULZ**, Institut für Elektrizitätswirtschaft und Energieinnovation, erhielt am 5. November 2003 den ÖVE/ÖGE-Preis 2003 für seine Diplomarbeit „Portfoliooptimierung und Risikomanagement in der Elektrizitätswirtschaft“.

Am 21. November 2003 wurde der Würdigungspreis für die besten Studienabsolventen des Studienjahres 2002/2003 an Dipl.-Ing. **Gerfried MAIER**, Institut für Elektrische Maschinen und Antriebstechnik, und Dipl.-Ing. **Michael MONSBERGER**, Fakultät für Maschinenbau und Wirtschaftswissenschaften, verliehen.

Dipl.-Ing. **Elisabeth GASSNER**, Institut für Mathematik B, wurde im November 2003 mit dem Preis der Österreichischen Gesellschaft für Operations Research (ÖGOR) für Diplomarbeiten und Dissertationen für ihre Diplomarbeit „Maximale spannende Baumprobleme mit einer Hierarchie von zwei Entscheidungsträgern“ ausgezeichnet.

Em.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. **Rudolf PISCHINGER**, Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik, hat am 12. Dezember 2003 das Große Ehrenzeichen des Landes Steiermark durch Frau Landeshauptmann Klasnic verliehen bekommen.

Das Große Goldene Ehrenzeichen für Verdienste um das Land Steiermark (2003) hat am 15. Dezember 2003 Herr O.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. **Josef W. WOHINZ** erhalten.

Am 18. Dezember 2003 erhielt Mag.rer.nat. Dr.rer.nat. Univ.-Doz. **Walter KURZ**, Institut für Angewandte Geowissenschaften, den Förderungspreis für Wissenschaft und Forschung des Landes Steiermark.

Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. **Gert PFURTSCHELLER**, Institut für Human-Computer Interface, erhielt am 20. Dezember 2003 den Kardinal-Innitzer-Würdigungspreis im Bereich Naturwissenschaft.

Dipl.-Ing. Mag. **Ludwig PISKERNIK**, Institut für Elektrizitätswirtschaft und Energieinnovation, erhielt für seiner Diplomarbeit „Energieinnovation und energiebezogenes Verhalten aus energietechnischer und energiepsychologischer Sicht: Möglichkeiten der Beeinflussung und Nutzen“ folgende Preise:

- Klimaschutzpreis 2003 des Bundesministeriums für Land- und Forstwirtschaft, Umwelt- und Wasserwirtschaft
- Förderpreis 2003 des Forum Technik und Gesellschaft der TU Graz als beste Diplomarbeit mit besonderer gesellschaftlicher Relevanz
- gefördert vom Land Oberösterreich Programms Junge EnergieforscherInnen

Im Februar 2004 wurde Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. **Gernot KUBIN**, Institut für Signalverarbeitung und Sprachkommunikation“ der Innovation Award der „Air Traffic Control“ in Maastricht (Niederlande) für die Entwicklung von „Speech Watermarking für Aircraft Identification Tags“ (gemeinsam mit dem Eurocontrol Experimental Centre, Bretigny, Frankreich und Fa. Frequentis, Graz) verliehen.

Dipl.-Ing. Dr.techn. **Rosa KRAINER**, Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft, und Univ.-Ass. Dipl.-Ing. Dr.techn. **Helmut WOSCHITZ**, Institut für Ingenieurgeodäsie und Messsysteme, wurden am 19. März 2004 mit dem Josef Krainer-Förderpreis für ihre Dissertationen ausgezeichnet.

O.Univ.-Prof. Dr.phil. **Robert TICHY**, Institut für Mathematik A, wurde am 11. Mai 2004 in der Wahlsitzung der Gesamtakademie für das Fach Mathematik (Zahlentheorie, Analysis) zum korrespondierenden Mitglied der Österreichischen Akademie der Wissenschaften im Inland gewählt.

Am 15. Mai 2004 wurde in Linz an Frau Dipl.-Ing. Dr.techn. **Alexandra LOIDL**, Institut für Biochemie, der Hauptpreis für Arterioskleroseforschung von der Austrian Atherosclerosis Society verliehen.

Em.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. **Herbert JERICHA**, Dipl.-Ing. **Emil GÖTTLICH**, Ao.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. **Wolfgang SANZ**, Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. **Franz HEITMEIR**, Institut für Thermische Turbomaschinen und Maschinendynamik, wurden am 15. Juni 2004 in Wien mit dem Best Paper Award von der IGTI (International Gas Turbine Institute der ASME – American Society of Mechanical Engineers) für ihre Arbeit „Design optimisation of the Graz Cycle prototype plant“ ausgezeichnet.

## Veranstaltungen

12. Aug. 2004, 09:00 – 17:30 Uhr, HS I (Rechbauerstraße 12/K1)  
**Sommerakademie „Kosten im Verkehr“**, Institut für Straßen- und Verkehrswesen

01. Sept. – 14. Sept. 2004, SR ID02104 (Inffeldgasse 16c/II)  
**Summer School on Control Theory and Applications**, Institut für Regelungs- und Automatisierungstechnik

06. Sept. – 10. Sept. 2004, Wien  
**XIIth European Signal Processing Conference**, Institut für Signalverarbeitung und Sprachkommunikation (Mitorganisation und Mitveranstalter im Rahmen der Beteiligung am Kplus Forschungszentrum Telekommunikation Wien)

08. Sept. – 10. Sept. 2004, 08:00 – 20:00 Uhr, HS P1 (Petersgasse 16/EG)  
**Jahrestagung der Fachgruppe Angewandte Elektrochemie der Gesellschaft Deutscher Chemiker**, Institut für Chemische Technologie Anorganischer Stoffe

12. Sept. – 15. Sept. 2004, 16:00 – 20:00 Uhr (12.9.) 09:00 – 18:00 Uhr, Schloss Seggau bei Leibnitz  
**11th International IGTE Symposium**, Institut für Grundlagen und Theorie der Elektrotechnik

16. Sept. – 18. Sept. 2004, 09:00 – 18:00 Uhr, Universität Klagenfurt  
**Business Building – „Basic Training I“**, Science Park Graz GmbH, build! Gründerzentrum Kärnten GmbH, Universität Klagenfurt – Lehrstuhl für Innovationsmanagement und Unternehmensgründung

17. Sept. – 18. Sept. 2004, 08:00 – 20:00 Uhr, SR IF02074 (Inffeldgasse 6a/II)  
**2nd international Brain-Computer Interface Workshop and Training Course 2004**, Institut für Human-Computer Interfaces

22. Sept. – 24. Sept. 2004, Graz  
**IRCOBI Conference on the Biomechanics of Impacts** ([www.ircobi.org](http://www.ircobi.org))

24. Sept. 2004, ab 17:00 Uhr, HS E (Kopernikusgasse 24/I)  
**BWL-Symposium mit dem Thema „Erfolgreich im benachbarten Zentral- und Osteuropa“**, Institut für Betriebswirtschaftslehre und Betriebssoziologie

30. Sept. – 02. Okt. 2004, 09:00 – 18:00 Uhr, Universität Klagenfurt  
**Business Building – „Basic Training II“**, Science Park Graz GmbH, build! Gründerzentrum Kärnten GmbH, Universität Klagenfurt – Lehrstuhl für Innovationsmanagement und Unternehmensgründung

15. Okt. 2004, 08:00 – 17:00 Uhr, HS i7 (Inffeldgasse 25/D/I)  
**Tagung „Das Bauwesen vor neuen Herausforderungen“**, Forschungsschwerpunkt „Integrierte Gebäudeentwicklung (IGE)“, Institut für Wärmetechnik, Institut für Hoch- und Industriebau

19. Nov. 2004, 09:00 – 18:00 Uhr, HS I (Rechbauerstraße 12/K1)  
**Werkstoff-Tagung**, Institut für Werkstoffkunde, Schweißtechnik und Spanlose Formgebungsverfahren

24. Nov. 2004, 08:15 – 20:00 Uhr, HS WB (Stremayrgasse 10/II)  
**Tagung „Wasser am Nachmittag – Bier am Abend“**, Institut für Siedlungswasserwirtschaft und Landschaftswasserbau



Kontaktadresse:  
Technische Universität Graz  
Referat für Öffentlichkeitsarbeit  
Rechbauerstraße 12, 8010 Graz  
Tel: ++43 (0) 316 873 6064  
info@tugraz.at  
<http://www.TUGraz.at>