

# Eine digitale Machete lichtet den Daten-Dschungel

„Etwa 98 Prozent von allem, was Computer so ausdrucken, ist Müll, den niemand liest.“ An diesem Satz, der einem amerikanischen Nachrichtenjournalisten zugeschrieben wird, ist etwas dran. Und wer könnte darüber ein schöneres Lied singen als der Chor der Physiker, Chemiker und Astronomen, die sich täglich mit einer an Schreckstarre erinnernden Duldsamkeit mit den prallen Output-Dateien automatisch arbeitender Messgeräte auseinander setzen?

Einer dieser PC-gestressten Kollegen ist Reinhard Streitel, der sich in der Arbeitsgruppe von Helmut Dosch am Stuttgarter Max-Planck-Institut für Metallforschung mit den Oberflächeneigenschaften bestimmter Metalllegierungen auseinandersetzt. Der junge Physiker sitzt vor seinem Schreibtisch in einem kleinen Büro im Institutsneubau in Stuttgart-Büsnau. Streitel schiebt die Computermaus zwischen einer Hand voll Blättern und Bleistiften hin und her, tippt etwas auf der Tastatur, wühlt sich durch Verzeichnisse, dann erscheint auf dem zweiten Bildschirm endlich ein Video: Zu sehen ist eine Art rundes Fenster, auf dem sich ganz allmählich so etwas wie ein Lichtreflex abzeichnet, der einem verschwommenen Andreaskreuz aus zwei Stichflammen vor einem orangefarbenen, leicht unscharfen Hintergrund ähnelt.

„Das sind Röntgenreflexe, das Ergebnis einer zeitaufgelösten Röntgenbeugungsmessung, mit der wir untersuchen, wie sich die Oberfläche einer Kobalt-Gallium-Legierung bei hohen Temperaturen in einer Sauer-

stoffatmosphäre verändert“, erklärt Reinhard Streitel.

Doch dieses an sich simple Abbild täuscht: Hinter dem beschaulich erscheinenden Röntgenreflex stecken ungeheuer voluminöse Datenfiles – Messwerte, die Streitel mit einem Röntgendetektor im Raum über dem Kobalt-Gallium-Probenkörper aufnimmt und zu diesem Video verdichtet hat: Man könnte von einem digitalen Eisberg sprechen, sichtbar sind nur wenige Prozent der Daten. Streitel öffnet eines der Files mit den „rohen“ Detektordaten mit einem ASCII-Editor: Mehr als ein Megabyte Zahlen, Ziffern und Trennzeichen erscheint auf dem Bildschirm, eine schier endlose Liste von Messwerten, von denen nur ein Bruchteil zur Weiterverarbeitung – zur Darstellung des Reflexes auf dem Bildschirm – gebraucht wird. Früher extrahierten Reinhard Streitel und seine Kollegen die tatsächlich benötigten Daten aus diesem Zeichenschwungel mühsam, gleichsam von Hand, oder – wenn sie es besonders schlaun anstellten – mit einem Tabellkalkulationsprogramm, um sie für die Weiterver-

arbeitung zu präparieren.

Das dauerte. Früher: Das war, bevor der Amerikaner Kenneth A. Ritley zu dem Physikerteam stieß – vor etwa eineinhalb Jahren. „Schon in meiner ersten Woche hier wurde mir klar: Dieses mühsame Datenextrahieren von Hand mache ich nicht mit. Wozu hat man schließlich Computer?“, sagt Ritley. Damals hat er zur Tastatur gegriffen und eine Lösung für das Datenproblem entwickelt.

Ortswechsel. Ein etwas größeres, helles Büro im selben Gebäude. Helmut Dosch zieht ein leeres Blatt Papier aus einem Stapel hervor und beginnt zu zeichnen. Ein Diagramm: Eine Linie, eine Oberfläche, darauf vertikal angeordnete Striche, die an ihrem oberen Ende kleine Halbkreise tragen. Dosch ist Leiter einer Abteilung am Stuttgarter Max-Planck-Institut für Metallforschung und hat in

Personalunion einen Lehrstuhl am Institut für Theoretische und Angewandte Physik an der Universität Stuttgart inne – und er interessiert sich für metastabile und niederdimensionale Materialsysteme, für Grenzflächen. Warum sind Grenzflächen so interessant? „Weil alle Wechselwirkungen zwischen Dingen zwangsläufig immer über ihre Oberflächen ablaufen“, sagt Dosch, „denken Sie an die Korrosion, an die heterogene Katalyse oder einfach an die Reibung zweier Metallflächen. Wenn Sie die Oberflächen modifizieren, können Sie ihnen mit verblüffend geringem Aufwand völlig neue Eigenschaften verleihen.“

Inzwischen haben die Materialwissenschaftler zu diesem Zweck außerordentlich diffizile Instrumente in ihrem Werkzeugkasten:

Heute reicht im Extremfall eine einzige Schicht maßgeschneiderter Moleküle, um zum Beispiel Kupfer wasserabstoßend zu machen wie eine Teflonoberfläche oder dem menschlichen Körper vorzugaukeln, die Oberfläche eines Implantats wäre organischen Ursprungs.

Dosch legt den Kuli zur Seite und erklärt seine Skizze: Die Striche mit den Halbkreisen sind Moleküle, die an einer Oberfläche verankert sind. „Wir Physiker sind Karikaturisten. Komplizierte Moleküle sind uns ein Gräuel. Wir versuchen alles so einfach wie möglich zu machen“, sagt er und schlägt einen Artikel in einem aktuellen Wissenschaftsmagazin auf.

„Solche Moleküle zum Beispiel.“ Dosch zeigt auf das Ball-and-Stick-Modell eines Enzyms. „Stellen Sie sich vor, dieses Enzym hier könnte aufgrund seiner Form Zuckermoleküle erkennen und daraufhin Elektronen abgeben. Wenn man derartige Enzyme mithilfe einer flexiblen Verbindung an eine leitfähige Oberfläche bindet, kann man damit winzige Zuckersensoren bauen, die man sogar in Adern einpflanzen könnte.“

## WIE WEIZENHALME AUF DER GOLDOBERFLÄCHE

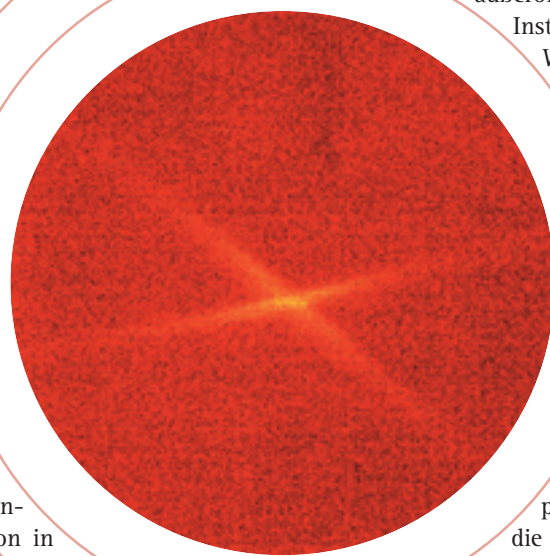
Ein anderes Beispiel bieten Alkanthiole: entfernt stabförmige Moleküle, die an einem Ende eine schwefelhaltige SH-Gruppe enthalten – eine funktionelle Gruppe, die mit Goldoberflächen feste chemische Bindungen eingeht. Mit derartigen Verbindungen kann man Goldoberflächen nahezu jede beliebige Eigenschaft verleihen, je nachdem, wie man das dem Schwefel abgewandte Ende des Moleküls konstruiert. Denn die Alkanthiole ordnen sich auf der Goldoberfläche wie Weizenhalme an: Die SH-Gruppe ist die „Wurzel“, die Ähre entspricht dem anderen Ende des Moleküls. In dem Alkanthiole-Weizenfeld bilden die Ähren demnach eine neue Oberfläche mit ganz anderen Eigenschaften. Ein Weizenfeld sieht aus der Luft ja auch anders aus als ein frisch gepflügter Acker – dieser Vergleich hinkt allerdings, da die lediglich wenige Angströmdicke Molekülschicht durchsichtig, also unsichtbar ist.

Baut man als Ähre einen wasserabstoßenden Molekülteil ein, erhält man einen Goldfilm, von dem Wasser abperlt. Baut man Alkanthiole mit komplexeren Molekülgruppen als „Ähre“, die Cholesterinmoleküle binden, kann man mit einer damit beschichteten Goldfolie Cholesterin aus Lösungen buchstäblich heraus-

kämmen und später spektroskopisch nachweisen – fertig ist der hochempfindliche Cholesterinsensor. „Die Möglichkeiten sind enorm“, sagt Dosch, „die Forschung ist hier erst am Anfang.“

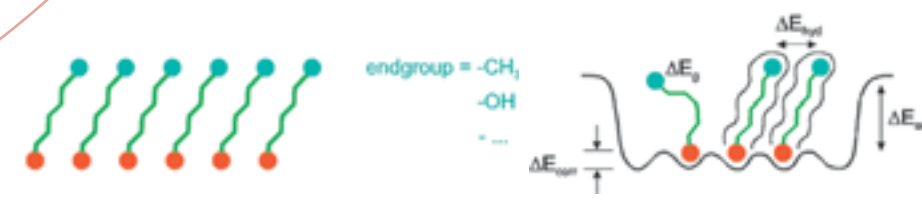
Zumindest, was den Einsatz des Methodenarsenals der organischen Chemiker angeht: Diesen gewaltigen Werkzeugschrank, in dem sich auch die Alkanthiole befanden, haben die Materialwissenschaftler erst vor kurzem aufgeschlossen. Die Beschichtung von Oberflächen war bisher eine Spielwiese vor allem für anorganische Chemiker, die zum Beispiel keramische Substrate mit Ionen beschossen haben, um Halbleiterschichten herzustellen. „Dabei bieten organische Moleküle einen viel größeren Gestaltungsspielraum: Man kann sie nahezu beliebig auf bestimmte Aufgaben hin zuschneiden. Außerdem lassen sie sich unter viel schonenderen Bedingungen applizieren – wenn ich eine Goldfolie in eine Alkanthiol-Lösung tauche, ist die Beschichtung im Prinzip fertig“, erklärt Helmut Dosch.

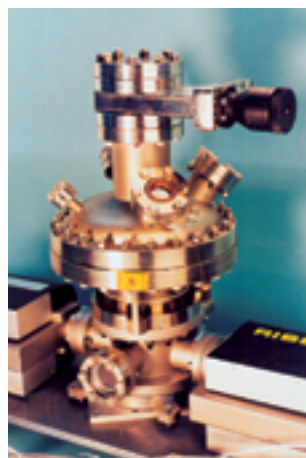
Dennoch bereiten die neuen Möglichkeiten Doschs Kollegen einige Kopfschmerzen: Die Chemiker arbeiten derzeit an zunehmend komplexen „Ähren“ und Rezeptormolekülen, obwohl man immer noch wenig über die Gesetzmäßigkeiten weiß, nach denen sich diese Moleküle auf Oberflächen organisieren, wie sie Strukturen ausbilden und sich zum Beispiel unter dem Einfluss höherer Temperaturen umorganisieren. Denn die gewünschte, gewissermaßen zweidimensional-kristalline Ordnung des molekularen Weizenfelds entsteht nicht von selbst: Moleküle kommen in der falschen Orientierung an und müssen sich erst ihren Platz auf der Grenzfläche suchen; dabei entstehen Arrangements, die den „fertigen“ Strukturen nicht



FOTOS UND AB.: MPI FÜR METALLFORSCHUNG

Wie sich Teilchen auf Oberflächen anordnen: Organische Moleküle (Alkanthiole) auf einer Goldoberfläche. Rechts daneben ist die zugehörige Potenziellandschaft dargestellt.





Um Ultrahochvakuum-Kammern wie dieser dreht sich alles in der Arbeitsgruppe von Helmut Dosch. In den Kammern werden dünne Filme mit Molekülen beschossen und mit Röntgenlicht bestrahlt.

unbedingt ähneln müssen. Von den Alkanthionen wissen die Forscher zum Beispiel, dass sie sich bei niedrigen Oberflächenbedeckungsgraden erst zu Strukturen organisieren, die einem von einem Orkan niedergeworfenen Getreidefeld ähneln; erst wenn mehr und mehr dieser stabförmigen Moleküle auf die Goldfläche gebracht werden, richten sich die Halme auf. Bei mehrschichtigen

Systemen anderer Verbindungen kann die oberste Schicht eine andere Anordnung zeigen als die unterste.

„Außerdem beobachten wir hier starke dynamische Einflüsse: Die Moleküle sind mobil, das heißt, sie sitzen je nach Temperatur fest oder bewegen sich mehr oder weniger schnell über die Oberfläche, verteilen sich zufällig, ordnen sich zu Inseln an oder bilden zweidimensionale Phasen mit unterschiedlich orientierten Domänen aus“, sagt Dosch. Um festzustellen, nach welchem Fahrplan einzelne Moleküle freie Oberflächen bedecken, nutzt Dosch zurzeit noch relativ einfach gebaute Modellmoleküle: flache, scheibchenförmige Polyzyklen zum Beispiel, die einem kleinen Ausschnitt aus den Netzebenen des Graphits gleichen, sich jedoch durch leichte Modifikationen schnell zu chemischen Spezialisten ähnlich den bekannten Alkanthiolen ausbauen lassen.

Der Haken an der Sache: Zu ermitteln, wie sich die Teilchen auf dem Substrat organisieren, ist keine leichte Aufgabe. Computer helfen dabei kaum. „Dafür sind die Wechselwirkungen zwischen Substrat und den bedeckenden Molekülen zu komplex“, meint Dosch. Wie aber untersucht man Oberflächen, die ja nur einen winzigen Teil des Probekörpers ausmachen? Alle Methoden, die die

Probe durchleuchten, scheiden von vornherein aus. Dafür ist das Molekülarrangement, das die Grenzfläche ausmacht, viel zu dünn. Die Untersuchung mit einem Mikroskop hingegen würde lediglich ein statisches Bild der Situation liefern, das über die Dynamik der Adsorption und der Selbstorganisation nichts aussagt – um das Wachstum eines Molekülfilms zu verstehen, müssen die Forscher dem „Gewusel“ auf der Oberfläche praktisch in Echtzeit zusehen können.

Dosch greift noch einmal zum Kuli. Er skizziert eine Lichtreklame-tafel aus einer dicken Plexiglasscheibe, deren Kante von einer versteckten Lichtquelle beleuchtet wird. Dosch erläutert: „Schaut man senkrecht zum eingestrahlenen Licht auf die Scheibe, sieht man nicht, dass sie durchleuchtet wird. Aber wenn man die Scheibe mit einem Filzschreiber beschriftet, flammt die Schrift auf.“ Was passiert hier?

### EIN FILM AUS EVANESZENTEN WELLEN

Evaneszente Wellen sind des Rätsels Lösung. Helmut Dosch zeichnet Detailausschnitte von Oberflächen: Optische Dichten, Lichtstrahlen, Brechungsindizes, Totalreflexion. „Wenn man eine Oberfläche unter einem sehr flachen Winkel mit Licht bestrahlt, so dass es zur Totalreflexion kommt, bildet sich auf der Grenzfläche ein nur wenige Mikrometer dünner Lichtfilm aus. Dieser Film besteht aus stehenden, so genannten evaneszenten („verschwindenden“) Wellen. Der Lichtfilm wird erst erkennbar, wenn diese stehenden Wellen durch Fremdkörper, etwa Farb- oder Staubpartikel, gestört werden. Dann wird das Licht daran gestreut – und damit für den Beobachter sichtbar.“ Diesen Effekt nutzt Dosch in seinem Labor aus: Er beleuchtet eine Oberfläche, auf der organische oder anorganische Moleküle adsorbiert sind, unter einem sehr flachen Winkel mit sehr intensivem Röntgenlicht. Unter bestimmten Winkeln kommt es auch hier zur Totalreflektion – und in unmittelbarer Nähe der

Grenzschicht entsteht auch hier ein dünner, unsichtbarer Film aus Röntgenlicht, eine evaneszente Röntgenlichtwelle. Der Trick: Diese Welle wird durch die adsorbierten Moleküle gestört. Aus der Verteilung der gestreuten Röntgenstrahlen lassen sich Rückschlüsse auf die Anordnung und Struktur der adsorbierten Moleküle ziehen – bis hin zu atomaren Details des Molekülbaus.

Allerdings: Die Datenflut, die durch das Aufzeichnen der Röntgenreflexe über der Substratoberfläche entsteht, reicht an die heran, die in strukturchemischen Laboratorien anfällt, wenn es den atomaren Aufbau komplizierter Moleküle mithilfe der Röntgen-Kristallstrukturanalyse aufzuklären gilt: Für die Echtzeitanalyse der Organisationsprozesse auf der Oberfläche einer Metalllegierung ist dieser Zahlenwust außerordentlich hinderlich.

Genau hier kommt Ritleys Lösung ins Spiel. Dosch: „Kenneth hat ein Programm geschrieben, das ihm die Konvertierung der benötigten Daten abnimmt. Keine große Sache eigentlich. Ehrlich gesagt hat uns der Erfolg dieses Programms völlig überrascht. Das ist der typische Fall eines Spin-offs, das manchmal und zeitweise mehr bewirkt als die eigentliche Hauptaktion, für die das Programm geschaffen wurde.“ ScanRead – so heißt das in Visual Basic geschriebene Tool – macht nämlich eigentlich nichts weiter, als die gigantischen Spec-Files, die die Detektoren in Doschs Röntgenspiegelkabinett liefern, von Datenballast zu befreien und so aufzupolieren, dass sie von einem kommerziellen Windows-Datenanalyseprogramm verstanden werden können. „Eigentlich habe ich für das Schreiben der Routine nicht

viel mehr als eine Woche gebraucht“, sagt Kenneth A. Ritley.

Dennoch: Kleiner Aufwand – große Wirkung. Durch ScanRead sind die Stuttgarter Max-Planck-Forscher inzwischen in der Lage, die Veränderung der Oberflächenstruktur eines Substrats, zum Beispiel Adsorptions- und Oxidationsprozesse, quasi im Sekundentakt am Bildschirm zu verfolgen.

Die Überraschung kam für Dosch und Ritley, als der Postdoc sein Programm zum kostenlosen Download ins Internet stellte: Innerhalb kurzer Zeit waren tausend Kopien der Software in alle Welt unterwegs, Kollegen griffen zum Telefon, Fachzeitschriften wie das renommierte US-amerikanische Blatt RESEARCH & DEVELOPMENT berichteten über das nützliche Tool.

„Das zeigt, dass viele einen Bedarf an einer solchen Routine hatten, aber keiner sich die Mühe gemacht hat, ein derartiges Programm selbst zu entwickeln“, sagt Ritley.

Angeregt durch Anfragen von Kollegen – in der heißen Phase etwa eine pro Woche – hat Ritley sein Programm weiter verbessert. Mittlerweile hat es sich von einer digitalen Machete für den Datendschungel zu einer Art virtuellem schweizer Taschenmesser für Physiker gemauert, das inzwischen nicht nur wuchernde Datentabellen egal welchen Ursprungs ausmistet, sondern auch einige ständig benötigte Rechenroutinen auf Knopfdruck bereitstellt: Ein Beispiel dafür, dass sich mit kleinem Aufwand große Probleme lösen lassen.

„Wir haben überlegt, ob wir ScanRead patentieren lassen sollten, aber das erschien uns nicht lohnenswert“, sagt Kenneth A. Ritley – eine Fehleinschätzung. Reich geworden ist

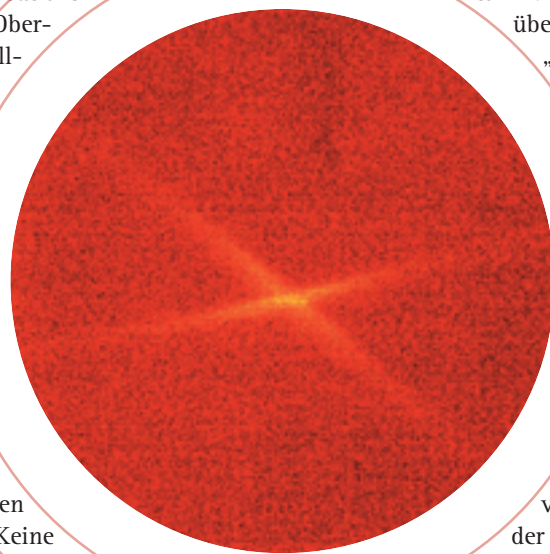
Ritley mit seinem Geistesblitz also nicht, obwohl sich in gewisser Weise schon ein wirtschaftlicher Erfolg eingestellt hat – allerdings anders als gedacht: Im Januar dieses Jahres rollte man Ritley bei einem bekannten Sindelfinger Informatikunternehmen einen roten Teppich aus. „Letztlich“, so Ritley, „war für die Einstellung weniger meine physikalische Forschung als die Idee zu ScanRead verantwortlich“. Nun sorgt der ehemalige Physiker dafür, dass die unterschiedlichsten Datenströme in Großunternehmen bald durch ein gemeinsames Bett fließen – eine Aufgabe, die verdächtig der ähnelt, die Ritley schon einmal bezwungen hat.

### IM VAKUUM WACHSEN DIE KOBALTOXIDKRISTALLE

Die andere Seite der Medaille: Dosch hat jetzt nun einen hervorragenden Mann weniger im Boot. „So ist das“, sagt er, „wir sind eben ein Durchlauferhitzer für exzellente Leute“. Während er das sagt, klickt Reinhard Streitel an einem seiner Bildschirme auf das ScanRead-Fenster. In der Vakuumkammer wachsen Kobaltoxidkristalle auf einem silbrig glänzenden Metallscheibchen aus seiner Kobalt-Gallium-Legierung. Streitel zeigt auf die sich kreuzenden Streifen, die auf seinem Bildschirm schimmern. „Diese Röntgenreflexe hier werden verursacht von länglichen Kobaltoxid-Kristallen, die sich oberhalb von 300 Grad Celsius allmählich auf der Oberfläche bilden.“

Streitel schlägt seine Diplomarbeit auf: Darin sind Mikroskopaufnahmen solcher Oxidoberflächen zu sehen, die wie die Luftaufnahme einer Großstadt wirken, mit rechtwinklig verlaufenden „Straßen“ und rechteckigen „Gebäuden“ unterschiedlicher Größe. Derartige Oxidfilme sind wichtig für die Herstellung magnetischer Speichermedien. Streitel klickt auf einen der Buttons im ScanRead-Fenster. In Sekundenschnelle erscheint auf dem zweiten Bildschirm das Intensitätsprofil eines Röntgenreflexes. Dann noch eins. Und noch eins. Im Sekundentakt. So einfach geht das.

STEFAN ALBUS



### SINDELFFINGEN STATT SILICON VALLEY

Dr. Kenneth A. Ritley ist so etwas wie ein amerikanischer „Computer-Indler“: Nach einem Postdoc-Aufenthalt am Stuttgarter Max-Planck-Institut für Metallforschung in der Arbeitsgruppe um Prof. Helmut Dosch packte er mitnichten seine Sachen, um Karriere in den Staaten zu machen, sondern blieb in Deutschland – dank Greencard und einer unbefristeten Aufenthaltsgenehmigung, die Ritleys neuer Arbeitgeber, die Sindelfinger HP Consulting, in Rekordzeit besorgte. Warum bleibt einer, der zwischen Silicon-Valley und Sindelfingen wählen kann, in Deutschland? Ist der „Standort Deutschland“ vielleicht doch besser als sein Ruf?



MPF: Herr Dr. Ritley, Ihnen stehen in Ihrem Heimatland alle Türen offen. Warum bleiben Sie?

RITLEY: Sicher, in Amerika kann man mit guter Arbeit schnell viel Geld verdienen. Aber in Deutschland ist die Lebensqualität einfach höher.

MPF: Wie meinen Sie das?

RITLEY: Ich fahre zum Beispiel gerne Ski – da finde ich hier natürlich ideale Bedingungen (lächelt). Natürlich kommt da einiges mehr zusammen. In Amerika bekomme ich zum Beispiel nur eine Woche Urlaub – hier sind es 48 Tage. Außerdem kann ich mich hier auf einen Dienstwagen freuen, damit könnte ich in Amerika so schnell nicht rechnen. Und ich muss auch sagen: Ich mag Deutschland. Ich habe hier gute Erfahrungen gemacht, zum Beispiel war die Zusammenarbeit mit Helmut Dosch ganz ausgezeichnet. Die Atmosphäre in seiner Gruppe ist hervorragend, er hat mich von Anfang an arbeiten lassen, woran ich wollte. Ich weiß aber nicht, ob Helmut ein typischer Deutscher ist.

MPF: Er ist eher so, wie wir uns einen Amerikaner vorstellen. Aber ist denn der IT-Bereich in Amerika nicht viel weiter? Bieten sich da nicht ganz andere Chancen?

RITLEY: Schon – in Amerika ist die IT-Industrie vor fünf Jahren förmlich explodiert. In Deutschland geschieht das jetzt gerade. HP Consulting hat zum Beispiel vergangenes Jahr 300 neue Mitarbeiter eingestellt – und es hätten sehr viel mehr sein können. Hätten wir zehnmal so viele Mitarbeiter, könnten wir zehnmal so viele Aufträge bearbeiten. Es gibt mehr zu tun, als wir erledigen können. Aber in diesem Aufbruch liegt ja genau der Reiz: Ich kann hier von Anfang an dabei sein und die Entwicklung mitgestalten.

MPF: Deutsch gilt im Ausland als schwierig. Ist die Sprache ein Problem für Sie?

RITLEY: Ja. Bei HP sprechen wir Hochdeutsch. In der Gruppe von Helmut Dosch habe ich eher Schwäbisch gelernt. Aber das Problem kriege ich auch noch in den Griff.

DAS INTERVIEW FÜHRTE STEFAN ALBUS