

Abbildung 1:

Modell, Rekonstruktion und Simulation der Atompositionen im Nano-Cluster.

Oben: Modell eines modifizierten Icosaeders, von oben und entlang zweier fünfzähliger Symmetrieachsen betrachtet.

Mitte: Rekonstruktion der Atompositionen entlang dieser Richtungen.

Unten: Molekulardynamik-Simulationen. Fünfzählige Symmetriezentren sind als Punkte markiert.

Figure 1:

Model, reconstruction and simulation of atomic positions in the nanocluster.

Top: Model of a modified icosahedron seen from the top and along two different fivefold symmetry axes.

Middle: Reconstruction of atomic positions seen along the same directions.

Bottom: Molecular dynamics simulations. Fivefold symmetry centers are indicated as dots.

trägt stark die Handschrift der Arbeitsgruppe. So konnten erstmals Elementquantifizierungen mit atomarer Auflösung an einem Kristallgitter durchgeführt werden. In einer Forschungsarbeit, erschienen in „Physical Review Letters“, zeigte sich, dass die hierbei registrierten Intensitäten ausschließlich mit begleitenden Simulationsrechnungen verstanden werden können – ein Umstand, dem durch intensive Kontakte und Kooperationen mit Theoriegruppen in Melbourne (Australien) und Tokio (Japan) Rechnung getragen wird.

Die dritte Dimension – Elektronentomographie

Dreidimensionale Untersuchungstechniken in der Medizin eröffnen Einblicke in den menschlichen Körper, die konventionelle Verfahren wie die klassische Röntgenuntersuchung aufgrund ihres projektiven Charakters nicht geben können. Ähnlich verhält es sich mit durchstrahlbaren TEM (Transmissionselektronenmikroskop)-Proben, bei denen Detailstrukturen, aus nur einem Betrachtungswinkel aufgenommen, verborgen bleiben. Der Wiener Johann Radon legte vor ziemlich genau 100 Jahren die Grundlagen zur Tomographie, indem er zeigte, dass mit einer genügenden Anzahl von Projektionen und der inversen Radon-Transformation Objekte dreidimensional rekonstruiert werden können.

Die experimentell sehr aufwendige Elektronentomographie hat erst in den letzten 15 Jahren Einzug in die Untersuchung von Materialsystemen gehalten. Seit 2009 ist die Arbeitsgruppe auf diesem hochaktuellen Forschungsgebiet tätig. Neben der Entwicklung experimenteller Methoden befasst sie sich auch mit dem komplexen Gebiet der signalabhängigen Rekonstruktionsoptimierung und der Verschränkung von 3D-Daten mit theoretischen Konzepten, die die Aussagekraft darin enthaltener physikalischer Informationen steigern können. Zwei Beispiele aus Kooperationen mit dem Institut für Experimentalphysik der TU Graz und dem Institut für Physik der Karl-Franzens-Universität Graz seien genannt.

Metallische Nanocluster

Die im Magazin „Nature Communications“ veröffentlichte Studie behandelt die gezielte Herstellung und Untersuchung von metallischen Nanoclustern aus suprafluidem Helium. Um die Frage des Wachstums, der Morphologie und der Zusammensetzung der Strukturen zu beantworten, wurden von Georg Haberfehlner Aufnahmetechniken erarbeitet, die minimales Bildrauschen und geringste Bildverzerrung garantieren. Durch Einsatz verschiedener Rekonstruktionsalgorithmen konnten dann sowohl die Atompositionen als auch die Spezies der

possible to study elemental concentrations on a specific crystallographic lattice site. The work, published in the magazine *Physical Review Letters*, revealed that the recorded analytical intensities can only be understood by complementary simulations. These calculations are carried out by cooperation partners in theory groups located in Melbourne (Australia) and Tokyo (Japan).

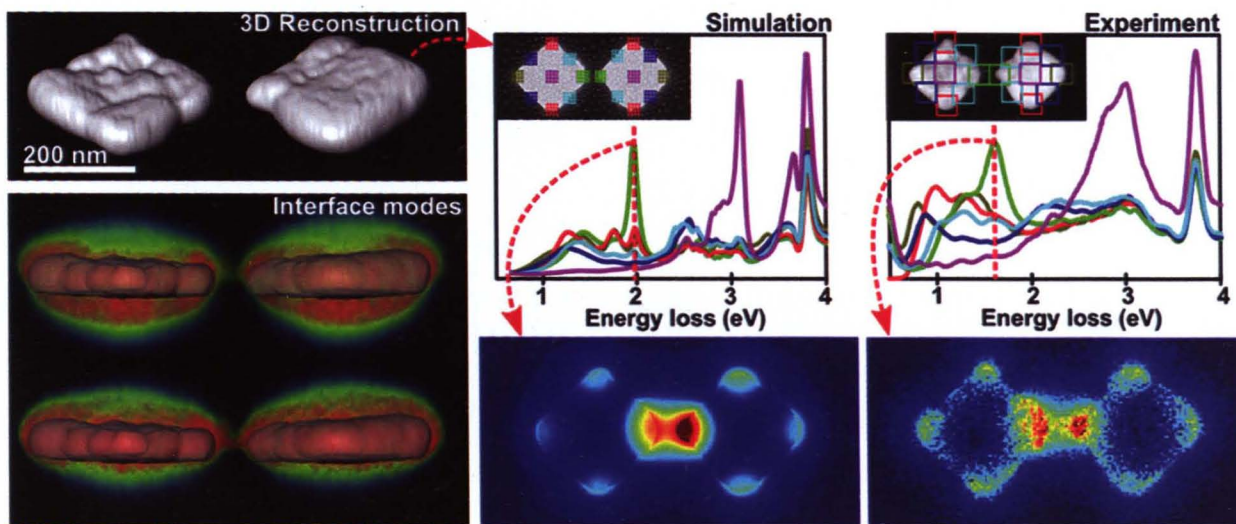
Electron tomography – the third dimension

Three-dimensional diagnostic tools have given insights into the human body, which classical X-ray imaging cannot deliver. In analogy, structural details from a thin and transparent TEM (transmission electron microscopy) specimen sample can also remain obstructed when observed from a single projection only. Approximately 100 years ago, the Viennese Johann Radon laid down the mathematical basis for tomography by showing that a sufficient number of projections taken from different viewing angles enable the three-dimensional reconstruction of an object when subject to an inverse Radon transformation.

Electron tomography in the physical sciences, being experimentally rather challenging, only became popular about 15 years ago. We started our research in this highly dynamic field in 2009. Besides developing new experimental approaches, the workgroup deals with the complex problem of optimizing and adjusting reconstruction algorithms for the respective microscope signals and how to correlate theoretical information with 3D data such that more physically meaningful information can be extracted from the experiment. This shall be exemplified in two co-operation projects with the Institute of Experimental Physics at TU Graz and the Institute of Physics at the University of Graz.

Metallic nanoclusters

A study published in the magazine *Nature Communications* is dealing with the synthesis and characterization of metallic nanoclusters in superfluid Helium. The issues under question were the growth mechanism, and the structure and chemical composition of these clusters. To answer this, our post-doc Georg Haberfehlner first developed a novel acquisition scheme that minimized image noise and scan distortions. Applying different reconstruction algorithms to the optimized projections then enabled the extraction of atomic positions and the chemical make-up from the obtained core-shell object. From the 3D visualization, valuable conclusions about material properties and possible uses could be derived.



© G. Haberlehner, „Nano Letters“ 2015

erhaltenen Kern-Schalen-Struktur in 3D sichtbar gemacht werden, woraus wiederum Schlüsse auf deren Eigenschaften und mögliche Anwendungen gezogen werden konnten.

Plasmonik

Eine weitere Einsatzmöglichkeit für die Elektronen-tomographie liegt im Forschungsgebiet der Plasmonik. Hier wird Licht an nanometergroße Strukturen (Gold, Silber...) gekoppelt. Abhängig von Größe, Form, Umgebung und Material bilden sich resonant schwingende Elektronenwolken aus, sogenannte Oberflächenplasmonen. Bereits im Mittelalter wurde dieser Effekt unbewusst zur Färbung von Kirchenfenstern eingesetzt, indem man nanometergroße Goldpartikel ins Glas einschmolz. Ein TEM bietet genug Auflösung, um Bilder der Feldverteilung dieser Schwingungen aufzunehmen. Elektronen in der Umgebung der Probe erfahren Energieverluste, die spektroskopisch gemessen werden können. Aus Kippserien kann dann die räumliche und energetische Verteilung von Oberflächenplasmonen rekonstruiert und in Relation zu theoretischen Berechnungen gesetzt werden (publiziert im Magazin „Nano Letters“).

Physikalisch-chemische Materialforschung

Die analytische Elektronenmikroskopie findet ein weites Anwendungsgebiet in der physikalisch-chemischen Materialforschung. Der Vielzahl an Methoden steht ein beträchtlicher apparativer Aufwand gegenüber, der großes Expert/innenwissen, intensiven Austausch mit anderen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern sowie eine enge internationale Vernetzung erfordert. Das FELMI-ZFE ist daher in ein europaweites Netzwerkprojekt namens ESTEEM eingebettet, das die Forschungskompetenz der 14 führenden elektronenmikroskopischen Labore in Europa zusammenführt. ■

Plasmonics

Another application for electron tomography lies in the field of plasmonics. Light or electromagnetic radiation is coupled onto nanometer-sized structures (for instance, gold or silver). Depending on shape, size, environment and chemistry of the object, so-called surface plasmons are formed, which are resonances of the metal electrons, responding to the incoming radiation. During the Middle Ages, glass-makers unknowingly used this phenomenon when they produced colored church windows by adding tiny gold particles to the melt. A TEM offers enough spatial and spectral resolution to resolve such modes. Microscope beam electrons, running by these structures in close proximity, loose energy and this can be measured spectroscopically. If this is carried out for each tilt-angle, the full 3D energetic distribution of the modes can be reconstructed and related to theoretical calculations (published in the magazine "Nano Letters").

Physical science research

Analytical electron microscopy is a versatile tool in physical science research and offers many ways to characterize exciting materials. The multitude of possibilities require considerable expenditure on equipment, expertise and intense exchange of knowledge with other scientists at an international level. Consequently, the FELMI-ZFE is embedded into an international consortium of 14 toplevel electron microscopy facilities throughout Europe, called ESTEEM, aiming to aggregate microscopy research know-how. ■

Abbildung 2:
Dreidimensionale Rekonstruktion und Simulationsrechnungen der Feldverteilung von Oberflächenplasmonen in gekoppelten Silber-Nano-cuboiden.

Figure 2:
Three-dimensional reconstructions and simulations of localized surface plasmon resonances in coupled silver nano-cuboids.

Human & Biotechnology



Bernd Nidetzky, Leitungsteam FoE „Human & Biotechnology“
Bernd Nidetzky, executive team FoE Human & Biotechnology



Gernot Müller-Putz, Leitungsteam FoE „Human & Biotechnology“
Gernot Müller-Putz, executive team FoE Human & Biotechnology

Für das Field of Expertise „Human & Biotechnology“ an der TU Graz bringt die neue Leistungsvereinbarungsperiode erfreuliche Kontinuität, signifikante Chancen und natürlich auch eine Reihe von wichtigen Aufgaben. Grundsätzlich haben sich die FoE gut entwickelt und sind breit anerkannt. Ihre

Bedeutung für unsere Universität ist unbestritten und soll in der Zukunft sogar noch verstärkt werden. Identifikation mit den FoE im Inneren und Erhöhung ihrer Sichtbarkeit nach außen sind daher wesentliche Ziele für

die Entwicklung der kommenden Jahre. Der aus unserer Sicht sehr gelungene neue Webauftritt stellt hierfür einen ersten wichtigen Schritt dar. Neben allgemeinen Informationen über das FoE werden aktuelle Projekte mit professioneller Unterstützung effektiv ins Rampenlicht gestellt. Wir würden uns daher über Vorschläge aus dem FoE freuen, welche Projekte man als Nächstes vorstellen könnte.

Eine Steigerung der Anzahl der registrierten FoE-Mitglieder und die damit verbundene Erhöhung der Dynamik in personeller und fachlicher Hinsicht sind wichtige weitere Aufgaben des FoE für die Zukunft. Wissenschaftliche Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter sollten über das FoE Bescheid wissen und durch ihre Mitgliedschaft im FoE integriert sein. Mit einem eigenen FoE-Tag, geplant für den Herbst 2016, wollen wir unserem FoE „Human & Biotechnology“ eine neue Plattform der Darstellung und des Miteinanders bieten.

Mit der interuniversitären Initiative BioTechMed-Graz bleibt ein zentrales Standortprojekt bestehen, das für das FoE „Human & Biotechnology“ prägende Bedeutung hat. In der Ausrichtung auf Spitzenforschung trägt BioTechMed-Graz auch zu einem der zentralen Ziele unseres FoE bei. Die Verleihung eines ERC Consolidator Grants an Gernot Müller-Putz Ende des vergangenen Jahres ist ein sehr schönes Erfolgsbeispiel.

Das bewährte Instrument der Anschubfinanzierung wird innerhalb des FoE beibehalten. Finanziert durch Rückflüsse aus dem IDB von Projekten, welche fachspezifisch dem FoE zuzuordnen sind, soll die Anschubfinanzierung weiterhin zur Incentivierung von Antragsforschung an der TU Graz dienen. Alle Forscherinnen und Forscher unseres FoE sind aufgefordert, dieses Instrument breit zu nutzen, um die Umsetzung von individuellen und kooperativen Projektideen in konkrete Anträge zu erleichtern.

The new performance agreement term at our university will involve a gratifying continuity for the Field of Expertise Human & Biotechnology. In addition it will bring new opportunities as well as significant tasks and challenges for our FoE. Overall, the development of the FoE has been considered to have been promising in the previous term. The FoE are now widely and well recognized within our university. They play a central role in representing the research of TU Graz, and their role is even expected to gain in importance in the future. To strengthen the identification with the FoE internally and to increase the visibility of the FoE externally constitute important goals of development in our FoE in the next years. The new web appearance of the FoE was very successful in our opinion and it represents a first important step for improving the communication of activities within the FoE. Besides providing general information about the FoE, three projects are introduced effectively in a professional layout. We would be pleased to receive suggestions for new projects that are of interest to be introduced next on the FoE website.

One immediate goal in the FoE Human & Biotechnology will be to increase the number of registered members. This is expected to enhance the dynamics within the FoE regarding both the people and the science performed by them. Researchers at TU Graz should be informed about the FoE and its goals. Membership is one important way of integrating them. By organizing a special event entitled "FoE Day", planned for the fall of 2016, we would like to create an additional platform for researchers in the FoE to meet and discuss.

The inter-university collaboration project BioTechMed-Graz represents an important lead activity for the FoE Human and Biotechnology. In being oriented towards top-class research, BioTechMed-Graz clearly contributes to one of the central aims of our FoE. The award of an ERC Consolidator Grant to Gernot Müller-Putz at the end of the last year represents an important success for our FoE.

The initial funding program was previously well accepted and will therefore be continued. It will be supported from the financial return into the FoE from the "IDB" of projects that are thematically assigned to the FoE. The initial funding should serve as an incentive to promote increased project acquisition activity and is available equally for projects of basic and applied research. We encourage all researchers in the FoE to make use of the initial funding to facilitate the development of project ideas into stand-alone or cooperative project applications.