SIMPLAIX: Der „Booster“ für die Molekülforschung geht in die nächste Phase

Computersimulationen und Künstliche Intelligenz sind die Hauptpfeiler der „SIMPLAIX“-Kooperation, initiiert vom Heidelberger Institut für Theoretische Studien (HITS). Gemeinsam mit Kolleg*innen der Universität Heidelberg und des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) befassen sich die HITS-Forschenden mit Herausforderungen bei der Simulation von Biomolekülen und molekularen Materialien, indem sie ihr Know-How in Computersimulationen auf mehreren Skalen und auf dem Gebiet des Maschinellen Lernens bündeln. Die Kooperation wurde 2021 ins Leben gerufen und ist jetzt nach einer erfolgreichen Evaluierung in ihre zweite Phase getreten, mit dem Max-Planck-Institut für Polymerforschung (MPIP) als neuem Partner. SIMPLAIX wird von der Klaus Tschira Stiftung gefördert.

Molekulare Mechanismen und das rationale Design von Molekülen und Materialien für spezifische Anwendungen werden traditionell durch physikbasierte Modellierung und Simulationen erforscht. Diese haben die moderne Wissenschaft und Technologie revolutioniert. Die Wissenschaft kommt jedoch an ihre Grenzen, wenn sie die unendlich komplexen und variablen Strukturen und Eigenschaften molekularer Systeme auf unterschiedlichen Skalen, also vom Nano- bis zu Mikrometerbereich, abbilden, erforschen und analysieren will. Hier bieten datengesteuerte und maschinelle Lernmethoden einen vielversprechenden Ansatz.

Deshalb haben das Heidelberger Institut für Theoretische Studien (HITS), die Universität Heidelberg und das Karlsruher Institut für Technologie (KIT) 2021 die SIMPLAIX-Kooperation ins Leben gerufen. Sie bündeln die Expertise der drei Partnerinstitutionen, und gehen die Herausforderung, unterschiedliche Skalen bei der Simulation von Biomolekülen und molekularen Materialien zu überbrücken, durch Multiskalensimulation und maschinelles Lernen an. In den ersten Jahren der Initiative gab es, neben kooperativen Forschungsprojekten, gut besuchte internationale Workshops, zahlreiche interne Besprechungen sowie eine beachtliche Zahl von Publikationen und mehrere Auszeichnungen für SIMPLAIX-Forschende, unter anderem ein ERC Advanced Grant und ein DFG Heinz-Maier-Leibnitz-Preis.

Nach einer erfolgreichen Evaluation hat SIMPLAIX die zweite Phase gestartet und begrüßt einen neuen assoziierten Partner: Das Max-Planck-Institut für Polymerforschung (MPIP) in Mainz. Mit 10 leitenden Forschenden (Principal Investigators, PIs) und 8 Projekten setzt die Initiative die interdisziplinäre und interinstitutionelle wissenschaftliche Zusammenarbeit fort und erweitert sie in den neuen Forschungsprojekten. Zusätzlich wird die erfolgreiche SIMPLAIX-Workshop-Reihe im Mai 2026 fortgeführt. Der diesjährige Workshop wird gemeinsam mit RTG 2450 organisiert, einer von der DFG geförderten Graduiertenschule am KIT. Die Anmeldung für den Workshop läuft bereits: https://simplaix-workshop2026.h-its.org/.

SIMPLAIX wird von der HITS-Forscherin Rebecca Wade koordiniert, unterstützt von der HITS-Alumna und Direktorin am MPIP Frauke Gräter. Die Initiative wird von der Klaus Tschira Stiftung gefördert, ergänzt durch die vier beteiligten Institutionen.

Pressemitteilung

07.04.2026
Quelle: HITS gGmbH (Heidelberger Institut für Theoretische Studien)

Weitere Informationen

Wissenschaftlicher Kontakt

Prof. Dr. Rebecca Wade
Gruppenleiterin
Molecular and Cellular Modeling
Tel: +49 (0) 6221 533 247

Medienkontakt:

Angela Michel
Head of Communications
Heidelberger Institut für Theoretische Studien (HITS)
E-Mail: angela.michel(at)h-its.org

- HITS gGmbH (Heidelberger Institut für Theoretische Studien)