

Ab initio Electronic Structure Theory for Solids in the 21st Century

652. WE-Heraeus-Seminar

Die Entwicklung und Anwendung von akkuraten Ab-Initio-Rechnungen ist eine der größten Herausforderungen der numerischen Festkörperphysik. Die Idee ist hierbei, nur auf Basis von atomaren Kennzahlen messbare und technologisch relevante Eigenschaften zu berechnen, ohne jegliche experimentelle Vorgaben. Effiziente selbstkonsistente Bandstruktur-Rechnungen, deren Entwicklung auch Ole K. Andersen (Deutschland/Dänemark) vorangetrieben hat, ermöglichen den Zugang zu den elektronischen Eigenschaften von tausenden relevanten Materialien. Basierend auf bekannten Kristallstrukturen gelang es, elastische, magnetische sowie elektronische Eigenschaften zu berechnen und damit ein neues Feld in den numerischen Materialwissenschaften zu begründen. Inzwischen sind diese Rechnungen so effizient und zuverlässig geworden, dass sie Vorhersagen von Kristallstrukturen ermöglichen, wobei gerade Michele Parrinello (Schweiz) mit seinen Pionier-Arbeiten dazu beigetragen hat, die Notwendigkeit von empirischen Vorgaben fast vollständig zu eliminieren. Gleichzeitig erlauben es neue Methoden erstmals, stark korrelierte Materialien zu beschreiben.

Daher war dieses Seminar, das vom 30. Oktober bis 3. November in Bad Honnef stattfand, dem enormen Fortschritt der letzten zwei Jahrzehnte gewidmet, mit zwei Schwerpunkten:

■ **Methodenentwicklung:** Der rapide Fortschritt in der Computerleistung sowie fortschrittliche Methoden und Algorithmen versetzen uns in die Lage, Kristallstrukturen und elektronische Phänomene von viel höherer Komplexität zu betrachten. Silke Biermann (Frankreich) und Ferdi Aryasetiawan (Schweden) stellen einige Methoden zur Behandlung von stark korrelierten Systemen vor.

■ **Anwendung:** Die großen Fortschritte in der Methodenentwicklung erlauben es nun, in groß angelegten Studien nach neuen Materialien zu suchen. Michelle Johannes (USA) stellte ein Konzept zum Design von überlegenen Materialien für Batterien vor, in welchem Materialien aus besonders leistungsfähigen Komponenten gezielt zusammengestellt werden. Ein alternativer Ansatz, präsentiert von Geoffroy Hautier (Belgien), kombiniert modernste Data-Mining-Techniken und Ab-Initio-Rechnungen, um tausende Materialien zu scannen und solche auszuwählen, welche die gewünschten Eigenschaften in maximaler Ausprägung zeigen. Vielversprechend sind auch die Arbeiten von Alessandro Toschi (Österreich), Sergey Streltsov (Russland) und

Vaclav Drchal (Tschechische Republik), die das Verhalten von Eisen im Erdkern und insbesondere dessen Magnetohydrodynamik untersuchen. Da dieses einzigartige Phänomen experimentell kaum zugänglich ist, sind theoretische Untersuchungen unverzichtbar zu ihrem Verständnis.

Dies sind nur einige wenige Beispiele für die Erfolge, die auf dem Gebiet der Ab-Initio-Rechnungen in den letzten zwei Jahrzehnten erzielt wurden und deren Entwicklung wir auch in den nächsten Jahren gespannt entgegenblicken.

Wir danken der WE-Heraeus-Stiftung für die großzügige Förderung dieses Seminars.

Roser Valenti, Lilia Boeri, I. Mazin und Tanusri Saha-Dasgupta

Optical Microcavities and Their Applications

653. WE-Heraeus-Seminar

Vom 6. bis 10. November 2017 trafen sich im Physikzentrum Bad Honnef 74 Physikerinnen und Physiker aus zehn Ländern, um sich über optische Mikroresonatoren und ihre Anwendungen auszutauschen – ein hochaktuelles Forschungsfeld, zu dem sich Wissenschaftler nach dem ersten Workshop 2009 regelmäßig im Zweijahresrhythmus austauschen.

Wissenschaftlich war das Seminar breit aufgestellt. Die Themen reichten von deformierten Mikroresonatoren mit chaotischer Wellen- und Strahldynamik über nicht-klassische Lichtemission in Halbleiter-Nanolasern (Stichwort Superradianz, u. a. demonstriert in einem eindrucksvollen Experiment der Gruppe von Kyungwon An aus Seoul, in dem Atome eines Strahls mit einem Abstand von 30 m kohärent agierten) bis hin zur Untersuchung der Dynamik von Quantenflüssigkeiten mittels optomechanischer Methoden. Dazu wurden zahlreiche Anwendungen präsentiert: Miniaturuhren, Gyroskope, Sensoren und Einzelphotonenquellen, sodass den zumeist studentischen Teilnehmern Vielfalt und Potenzial des Gebietes besonders deutlich wurden.

Ein Programm, das viele Freiräume zum Ideenaustausch ließ, und die wunderbare Atmosphäre im Physikzentrum führten zu regen Diskussionen. Dabei ging es um grundsätzliche Fragen sowie die Zukunft des Feldes. Mehrere Postersitzungen mit 37 Postern wurden reg und bis spät in die Nacht genutzt und trugen weiter zum konstruktiven Klima des Seminars bei. Als besonderer Erfolg ist es gelungen, eine enge Wechselwirkung zwischen Theoretikern und Experimentatoren herzustellen.

Besonders gelobt wurde die Intensität des Austauschs. Tatsächlich freuten sich

alle sehr auf den Ausflug zum 320 Meter hohen Drachenfels am Mittwoch, der viele erstmals seit Ankunft am Sonntag das Gebäude verlassen ließ. Hermann-Hesse-Nebel und fehlender Ausblick weckten dabei eher den Wunsch, noch einmal wiederzukommen, und die im Anschluss geplante Weinprobe im Weinhaus Broel wurde mit einiger Spannung und Vorfreude erwartet. Es wurde ein lebensnaher, uriger Abend, der unvergesslich bleiben wird.

Die Rückmeldungen zum Seminar waren ausschließlich positiv. Unser herzlicher Dank geht an die WE-Heraeus-Stiftung für die großzügige wie unkomplizierte Unterstützung und die hervorragende Kooperation bei der Vorbereitung des Seminars!

Martina Hentschel, Jan Wiersig und Yun-Feng Xiao

Fundamental Physics in Space

656. WE-Heraeus-Seminar

Was ist das Besondere am Weltraum? Zum einen sind dies die fantastischen Phänomene der Astrophysik, von denen im Moment die Detektion von Gravitationswellen und das Zusammenschmelzen von Schwarzen Löchern und Neutronensternen im Mittelpunkt stehen. Zum anderen bietet der Weltraum eine besondere Experimentierumgebung: Man kann unendlich lange frei schweben, es stehen extrem große Distanzen zur Verfügung, sehr große Geschwindigkeiten lassen sich erreichen und große gravitative Potentialdifferenzen überwinden. Schließlich hat man den Vorteil einer extrem ruhigen Umgebung ohne Seismik und kann bei Bewegungen alle Freiheitsgrade nutzen.

Erst diese spezielle Umgebung macht viele Experimente möglich. So ist der Weltraum die ideale Umgebung, um das Äquivalenzprinzip zu testen, wie zurzeit mit der Mission MICROSCOPE. Die ersten Zwischenresultate verbessern die bislang nur erdgebundenen Tests um zunächst eine Größenordnung. Auch hochgenaue Tests der gravitativen Rotverschiebung sind nur im Weltraum möglich (wie es die Mission Gravity Probe A und die momentane Datenanalyse der Galileo-Satelliten 5 und 6 zeigen). Der Test der gravitativen Mitführung, der mit der Mission Gravity Probe B (GP-B) und mit den Satelliten LAGEOS und LARES durchgeführt wurde bzw. noch wird, ist ein weiteres Beispiel. Gerade Experimente, welche die Langzeitdynamik von Quantensystemen untersuchen sollen, zum einen im Hinblick auf Tests der Grundlagen der Quantenmechanik und zum anderen für Anwendungen in Geodäsie, erfordern lange Schwerelosigkeit.

Neben diesen Grundlagenexperimenten im Weltraum gibt es viele weitere

Prof. Roser Valenti, Uni Frankfurt/Main; Prof. Lilia Boeri, TU Graz, Österreich; Dr. I. Mazin, Naval Research Laboratory, Washington, USA; Prof. Tanusri Saha-Dasgupta, Kalkutta, Indien

Prof. Dr. Martina Hentschel, TU Ilmenau; Prof. Dr. Jan Wiersig, Universität Magdeburg; Prof. Dr. Yun-Feng Xiao, Peeking University

Vorschläge, um diese einzigartige Experimentierumgebung zu nutzen. Dies betrifft bessere Tests des Äquivalenzprinzips, Tests mit Bose-Einstein-Kondensaten, Tests mit großen Molekülen oder Nanoteilchen, um die Grenzen der Quantenmechanik auszuloten, oder Experimente von Suprafluiden, also makroskopischen Quantensystemen. Mit Letzterem könnten universelle Eigenschaften, kritische Phänomene und Phasenübergänge viel genauer als auf der Erde ausgemessen werden, da diese mit ihrer Schwerkraft die Symmetrie des Systems stören.

Dies alles sowie aufkommende Technologien und Modellierungsverfahren wurde beim 565. WE-Heraeus-Seminar, das vom 23. bis 27. Oktober 2017 in Bremen stattfand, vorgestellt und diskutiert. Als Redner kamen die Projektverantwortlichen sowie leitenden Wissenschaftler einer Reihe von Raumfahrtprojekten, darunter F. Everitt aus Stanford (GP-B), M. Rodrigues aus Paris (MICROSCOPE) und I. Ciufolini aus Lecce (LAGEOS und LARES). Zudem haben Vertreter von Raumfahrtagenturen teilgenommen. Auch wenn wie so oft die Zeit zu kurz war, gab es doch viel Gelegenheit zur angeregten Diskussion. Als ein Ergebnis dieses Seminars soll eine Roadmap für Projekte aus dem Bereich Fundamental Physics in Space formuliert werden.

Wir danken der WE-Heraeus-Stiftung ganz herzlich für ihre großzügige finanzielle Unterstützung.

Meike List und Claus Lämmerzahl

QCD – Old Challenges and New Opportunities

WE-Heraeus Physikschule

Die Theorie der starken Wechselwirkung zwischen den Quarks, den Bausteinen, aus denen Protonen, Neutronen und Atomkerne aufgebaut sind, ist die Quanten-Chromodynamik (QCD). Diese Theorie ist als nicht-Abelsche Eichtheorie mit einer zugrunde liegenden SU(3)-Farbsymmetrie der wechselwirkenden Quarks und Gluonen, der Austauschbosonen der QCD, formuliert. Der Freiheitsgrad der Farbladung führt zu Selbstkopplung von Gluonen und zu den zwei charakteristischen Eigenschaften der QCD, Confinement und asymptotische Freiheit. Die theoretische Beschreibung von QCD-Prozessen auf einer harten Skala, das heißt bei großen Impulsüberträgen, beruht auf einer störungstheoretischen Entwicklung nach der starken Kopplungskonstanten. Bei QCD-Prozessen mit kleinen Impulsüberträgen ist die Konvergenz dieser störungstheoretischen Behandlung nicht mehr gegeben, und effektive hadronische Freiheitsgrade werden zur Beschreibung in diesem nicht-perturbativen Bereich verwendet.

Bei dieser Physikschule, die vom 24. bis 30. September im Physikzentrum Bad Honnef stattfand, fassten einführende Vorlesungen das gegenwärtige Verständnis der Struktur des Protons innerhalb der QCD zusammen und vermittelten den Teilnehmern das Rüstzeug zum Verständnis der folgenden Vorlesungen. Diese stellten viele Aspekte des nicht-perturbativen Bereichs der QCD vor, z. B. den Schwinger-Dyson-Ansatz, die chirale Dynamik, das Tensor-Pomeron-Modell zum Verständnis der Spin-Struktur des Pomerons sowie die Formulierung der QCD als Gittertheorie. Übersichtsvorträge behandelten die Experimente zur QCD bei HERA (DESY), am TEVATRON (Fermilab) sowie am RHIC (Brookhaven). Sprecher der ALICE-, ATLAS-, CMS-, LHCb- und TOTEM-Kollaborationen am LHC präsentierten den Stand der Analysen von QCD-Prozessen.

Vorträge der Teilnehmer sowie Posterbeiträge mit eigenen Resultaten ergänzten das Programm. Eine Wanderung rundete das wissenschaftliche Programm ab und gab Gelegenheit für Diskussionen. Weitere Möglichkeiten für anregende Diskussionen gab es für die 82 Teilnehmer aus 24 Ländern im Lichtenberg-Keller des Physikzentrums. Im Namen aller Teilnehmer möchten wir uns bei der WE-Heraeus Stiftung herzlich bedanken für die großzügige finanzielle Unterstützung und für die perfekte Organisation.

Antoni Szczurek und Rainer Schicker

Foundations and New Methods in Theoretical Physics

WE-Heraeus-Sommerschule und 23. Doktorandenschule „Saalburg“

Vom 4. bis 15. September 2017 fand in Wolfersdorf (nahe Jena) die 23. Auflage der Doktorandenschule statt, welche bis 2001 in Saalburg (Thüringen) beheimatet war. Es kamen 28 Studentinnen und Studenten aus 17 Institutionen zusammen, um ihre Ausbildung im Hinblick auf eine Postdoktoranden-Phase zu verbreitern in den Gebieten Quantenfeldtheorie, Teilchenphysik und Gravitation. Ziel der Schule ist das Heranführen an neue Methoden, Techniken und mathematische Hilfsmittel, die wegen der starken Vernetzung der modernen theoretischen Physik für eine akademische Karriere nutzbringend sind.

Geboten wurden fünf Kurse über Three dimensional gravity (Maximo Bañados, Universidad Católica de Chile, Santiago de Chile), Dark matter, baryogenesis and all that (Laura Covi, U Göttingen), Entanglement (Jan de Boer, U Amsterdam), Cosmology, where smallest and largest scales meet (Ruth Durrer, U Genf) und Exact perturbation theory (Marco Serone, SISSA, Triest).

Die üblichen vormittäglichen Vorlesungen wurden nachmittags ergänzt durch vierstündige Übungssitzungen, in denen unter Betreuung eines Dozenten in Kleingruppen eine Reihe von Übungsaufgaben zu bearbeiten und zu diskutieren waren. Lange Mittagspausen und ein gelegentliches Abendprogramm (Barbecue, Bowling, Fußball) erlaubten die notwendige Entspannung zwischendurch.

Traditionell wird an der Tafel vorgelesen, und gelegentlich finden sich Freiwillige, die aus ihren Aufzeichnungen mit Unterstützung des Dozenten ein LaTeX-Skript erstellen, welches später auf den Webseiten der Schule zu finden ist. Die Doktorandinnen und Doktoranden arbeiteten mit hoher Motivation und großem Einsatz an den Übungen und mussten häufig mit sanfter Gewalt zum Abendessen geholt werden.

Wie erstmalig 2015 fanden zunächst drei Kurse an sechs Tagen statt, der Sonntag war frei, danach wurden zwei Kurse an fünf Tagen durchgeführt. Aufgrund terminlicher Einschränkungen einiger Dozenten wurde die erste Woche erstmalig in Block-Form durchgeführt: Die Kurse fanden sequenziell statt und nicht parallel. Das Feedback der Teilnehmer hierzu war uneinheitlich. Der thematische Schwerpunkt lag in diesem Jahr auf „Gravitation“, was zu unerwarteten Synergieeffekten zwischen den Vorlesungen führte.

Etwa 65 % der Teilnehmer waren nicht deutschsprachig, gut ein Drittel (10) kamen aus dem Ausland, u. a. aus dem Iran, Japan, Mexiko und den USA. Der enge Kontakt zu den Dozenten und die informelle Atmosphäre eines abgeschiedenen Hotels tragen mit bei zum Erfolg der Schule, der sich auch in diesem Jahr wieder in einer sehr positiven studentischen Evaluation zeigte. Die elf Arbeitstage wurden durch einen Exkursionstag unterbrochen, der für Wanderungen zu Schlössern der Umgebung und für einen Besuch der Stadt Weimar genutzt wurde.

Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für ihre großzügige Förderung der Sommerschule.^{#)}

Laura Covi, Olaf Lechtenfeld, Ivo Sachs und Stefan Theisen

#) Weitere Informationen zu der Sommerschule, einschließlich aller bisherigen Auflagen, lecture notes und Teilnehmer-Fotos finden sich unter <https://saalburg.aei.mpg.de>

Dr. Meike List, Prof. Dr. Claus Lämmerzahl; ZARM, Uni Bremen

Prof. Antoni Szczurek, Institute of Nuclear Physics PAN und Universität Krakau, Polen; Dr. Rainer Schicker, Universität Heidelberg

Prof. Dr. Laura Covi, Universität Göttingen; Prof. Dr. Arthur Hebecker, Universität Heidelberg; Prof. Dr. Olaf Lechtenfeld, Universität Hannover; Prof. Dr. Ivo Sachs, LMU München; Prof. Dr. Stefan Theisen, Albert-Einstein-Institut Potsdam