

## 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