

Prof. Dr. Christian Heiliger, Universität Gießen, **Dr. Phivos Mavropoulos**, Forschungszentrum Jülich, **Dr. Ilja Turek**, Academy of Sciences of the Czech Republic, Brno/CZ

Prof. Dr. Carsten Beta, Universität Potsdam; **Prof. Dr. Harald Engel**, Technische Universität Berlin; **Prof. Dr. Kenneth Showalter**, West Virginia University, Morgantown, USA

Green's Functions in Ab Initio Electronic Structure Calculations of Solids: From Implementations to Applications

584. WE-Heraeus-Seminar

Zur ab-initio-Beschreibung elektronischer Eigenschaften von Festkörpern existieren vielfältige Methoden. Solche, die auf Greenschen Funktionen basieren, sind dabei vor allem für Vielteilchen- und Nichtgleichgewichtsphänomene prädestiniert. Diese Methoden eignen sich zur Beschreibung grundlegender elektronischer Eigenschaften, z. B. Bandstruktur und Zustandsdichte, sowie von elektronischem Transport, Magnetismus und Spektroskopie. Dabei ist eine methodische Entwicklung für das Verständnis neuer physikalischer Phänomene und zur Verbesserung existierender Modelle unabdingbar.

Im Rahmen des 584. WE-Heraeus-Seminars, das vom 9. bis 11. Februar im Physikzentrum in Bad Honnef stattgefunden hat, wurden die wichtigsten aktuellen Herausforderungen für methodische Entwicklungen basierend auf Greenschen Funktionen vorgestellt. Es kam zu zahlreichen intensiven Diskussionen, sowohl im Rahmen der zwölf eingeladenen Vorträge und vier Kurzvorträge als auch bei der gut besuchten Postersitzung. Insgesamt haben am Seminar rund 60 Teilnehmer aus Europa, Japan und den USA teilgenommen.

Ganz klar im Mittelpunkt stand die voll-relativistische Beschreibung, die sich in den Vorträgen, Postern und Diskussionen von der Elektronenstruktur über den Transport bis hin zum Magnetismus gezogen hat. Zum Beispiel wurden methodische Ansätze zur Beschreibung von Effekten mit Spin-Bahn-Wechselwirkungen, wie Spin-Hall-Effekt, spezielle magnetische Ordnungen und Spindynamik diskutiert. Darüber hinaus war die Beschreibung von realistischen Systemen, also mit Unordnung und bei endlichen Temperaturen, Bestandteil vieler interessanter Diskussionen. Aber auch grundlegende Aspekte zur Beschreibung großer Superszellen und damit einhergehend Stra-

tegien zur massiven Parallelisierung auf mehrere tausend Rechenkernen wurden erörtert. Vor allem hat sich gezeigt, dass die Methoden basierend auf Greenschen Funktionen eine große Chance für die Zukunft bieten und dass es trotz vieler anderer verfügbarer Programme einer vitalen Entwicklungsgemeinschaft bedarf, auch um eine Vielfalt innerhalb der Festkörpertheorie zu erhalten. Gerade hier hat das WE-Heraeus-Seminar dazu beigetragen, einen Schritt hin zu einer besseren Koordinierung der verschiedenen Entwicklergruppen zu gehen. Insbesondere wurde auch deutlich, dass das Gebiet für junge, aufstrebende Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler sehr attraktiv ist.

Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die großzügige Unterstützung des Seminars. Besonders bedanken möchten wir uns auch bei Dr. E. Dreisigacker und Frau M. Albert, die mit Rat und Tat sehr zum Gelingen des Seminars beigetragen haben.

Christian Heiliger, Phivos Mavropoulos und Ilja Turek

Model Systems for Understanding Biological Processes

International WE-Heraeus Physics School

Im Zuge einer rasanten Entwicklung haben sich die modernen Biowissenschaften seit der Mitte des 20. Jahrhunderts zu einem molekular begründeten interdisziplinären Forschungsfeld entwickelt. Die enge Verknüpfung mit den quantitativen mathematisch-naturwissenschaftlichen Nachbardisziplinen ist ein integraler Bestandteil dieser Entwicklung. Eine zentrale Rolle spielt dabei das Konzept des Modellsystems. Im Sinne der Biologie sind dies Modellorganismen wie *E. coli*, Hefe oder *Dictyostelium*, an denen bestimmte Prozesse und Phänomene stellvertretend für ganze Klassen von Organismen untersucht werden. Im Sinne der Physik hingegen ist ein Modellsystem meist ein vereinfachendes experimentelles oder theoretisches Konstrukt, das ein reales

komplexes System auf wenige, für sein Verhalten relevante, mathematisierbare Eigenschaften reduziert. Die fruchtbare Überlappung dieser beiden Ansätze ist der Nährboden vielversprechender aktueller Entwicklungen im Grenzgebiet zwischen Physik und Biowissenschaften.

Ziel der internationalen WE-Heraeus-Schule vom 22. bis 27. Februar im Physikzentrum Bad Honnef war es, fortgeschrittene Masterstudierende und Promovierende mit diesem Begriff des Modellsystems vertraut zu machen und ihnen darüber hinaus einen Einblick in ausgewählte aktuelle Entwicklungen auf diesem Gebiet zu geben. In insgesamt 30 Vorträgen haben international führende Experten die Teilnehmer in zentrale Konzepte wie Synchronisation gekoppelter Oszillatoren, anregbare Medien und aktive Teilchen eingeführt und die Anwendung dieser prototypischen Ansätze auf biologische Modellsysteme anhand aktueller Forschungsarbeiten beispielhaft dargestellt. Ein besonderer Höhepunkt war der Eröffnungsvortrag von Albert Goldbeter aus Brüssel, der die Erforschung rhythmischer Prozesse in der Natur über Jahrzehnte maßgeblich vorangetrieben und geprägt hat.

Die Teilnehmer waren über eigene Posterbeiträge in den Verlauf der Schule eingebunden, ein Konzept, dessen Erfolg durch die rege Teilnahme und die intensiven Diskussionen in den beiden Postersitzungen eindrücklich bestätigt wurde. Vier herausragende Posterbeiträge wurden mit einem von der WE-Heraeus-Stiftung ausgelobten Posterpreis ausgezeichnet. Darüber hinaus bekamen acht Nachwuchswissenschaftler die Möglichkeit, ihre Beiträge in Form von Kurzvorträgen im Plenum vorzustellen.

Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die großzügige finanzielle Förderung und, insbesondere Frau Elisabeth Nowotka und dem Team des Physikzentrums, für die perfekte organisatorische Unterstützung, ohne die diese erfolgreiche internationale Physikschule nicht hätte stattfinden können.

Carsten Beta, Harald Engel und Kenneth Showalter

Newsletter des Physik Journal

Mit Online-Meldungen aus der Redaktion, Neuigkeiten aus der DPG, Forschungsnachrichten und TV-Tipps

Registrierung unter:

www.dpg-physik.de/mitgliedschaft/aenderung.html

