

Dr. Nina Winter, RESOLV, Ruhr-Universität Bochum;
Prof. Dr. Martina Havenith, Ruhr-Universität Bochum

Priv.-Doz. Dr. Dennis D. Dietrich, Arnold Sommerfeld Centre for Theoretical Physics, Ludwig-Maximilians-Universität München & Institut für Physik, Goethe-Universität, Frankfurt/Main

#) Tagungsbeiträge und weitere Informationen sind auf <http://home-pages.physik.uni-muenchen.de/~Dennis.Dietrich/WEH2> zu finden.

Exploring Solvation Science

572. WE-Heraeus-Seminar

Ein Großteil aller chemischen Reaktionen findet in flüssiger Umgebung statt – dazu gehören sowohl die heterogene Katalyse im industriellen Umfeld als auch fast alle biologischen Prozesse. Das neue, interdisziplinäre Forschungsgebiet der „Solvation Science“ beschäftigt sich mit molekularen Prozessen in Lösung, vom Ladungstransport in Flüssigkeiten bis zur Rolle des Wassers bei der molekularen Erkennung. Die zukünftigen Anwendungen dieses aufstrebenden Forschungszweigs reichen von der Batterieentwicklung über die Designerflüssigkeit für umweltfreundliche Prozesse bis zur gezielten Medikamentenentwicklung.

Der Exzellenzcluster RESOLV (Ruhr Explores SOLVation, EXC 1069) mit dem Hauptsitz an der Ruhr-Universität Bochum hat zum Thema „Exploring Solvation Science“ vom 27. bis 30. Oktober 2014 im Physikzentrum Bad Honnef das 572. WE-Heraeus-Seminar ausgerichtet. Thematische Dreh- und Angelpunkte waren die drei Forschungsbereiche „Solvation in chemischen Prozessen“, „Solvation und biomolekulare Funktion“ und „Ionen-Solvation und Ladungstransfer an Grenzflächen“. Im Seminar wurden sowohl theoretische Forschungsansätze – von der Methodenentwicklung für Solvationsprozesse bis zu Molekulardynamik-Simulationen von Proteinen – wie auch experimentelle Ansätze – von der Raman-Terahertz-Spektroskopie bis zur NMR-Spektroskopie – vorgestellt.

Dieser besondere thematische Ansatz hat außergewöhnlich viele internationale Wissenschaftler angezogen, aus Deutschland, den Niederlanden und der

Schweiz, Österreich, Großbritannien und Italien, Tschechien, Slowenien und Israel sowie aus Japan, den USA und Kanada. Die 18 eingeladenen Sprecher stellten die unterschiedlichen Aspekte der neuen Disziplin „Solvation Science“ vor. Nach den Übersichtsvorträgen am Vormittag gaben an zwei Nachmittagen 16 junge Wissenschaftler in Kurzvorträgen Einblicke in ihre Arbeit. Allen Vorträgen folgten intensive Diskussionen mit großer Beteiligung der Doktoranden und Postdocs. Die Gespräche wurden bei den zwei Postersessions bis spät in die Nacht weitergeführt, wobei zahlreiche neue Kooperationen angestoßen werden konnten.

Insgesamt zeigte sich das 572. WE-Heraeus-Seminar als hervorragende Gelegenheit, wissenschaftlichen Austausch voranzutreiben und internationale Kooperationen zu initiieren. Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die großzügige finanzielle Unterstützung und Frau Martina Albert und dem Physikzentrum Bad Honnef für die hervorragende Organisation vor Ort.

Nina Winter und Martina Havenith

Strong Interactions in the LHC Era

574. WE-Heraeus-Seminar

Der Large Hadron Collider hat uns nicht nur ein Higgs gebracht, sondern auch zahlreiche andere Daten und neue Fragestellungen, die uns helfen, zusammen mit Resultaten von anderen Experimenten, unser Verständnis starker Wechselwirkungen und nichtstörungstheoretischer Effekte zu verbessern. Dies betrifft die Physik im Standardmodell genauso wie die seiner Erweiterungen. Während die

Quantenchromodynamik die prototypische starke Wechselwirkung des Standardmodells ist, beeinflussen nichtperturbative Effekte auch andere Sektoren. Dies gilt ebenso für alle Erweiterungen des Standardmodells, aber insbesondere natürlich, wenn es sich um stark wechselwirkende Erweiterungen im engeren Sinn handelt. Diese diversen Erscheinungsformen starker Wechselwirkungen und nichtperturbativer Physik teilen sich dieselben theoretischen Methoden, und Fortschritt auf einem der Gebiete bringt Fortschritt auf den anderen mit sich.

Vor diesem Hintergrund sind beim 574. WE-Heraeus-Seminar, das vom 12. bis zum 14. November 2014 im Physikzentrum Bad Honnef stattfand, Experten für die diversen Aspekte starker Wechselwirkungen und Wissenschaftler, die dies werden wollen, zusammengekommen, um die neuesten Entwicklungen zu präsentieren, zu diskutieren und mit neuen Aspekten vertraut zu werden. Das Tagungsprogramm bestand aus 45-minütigen Vorträgen der eingeladenen Sprecher und aus Postersessions, die durch dazugehörige Kurzvorträge ergänzt wurden. Zudem wurden Preise für die besten Poster verliehen.

Nach Meinung der Teilnehmer ergab gerade die interdisziplinäre Mischung der Themen^{#)} ein außergewöhnlich inspirierendes und informatives Seminar, das unbedingt fortgesetzt werden müsse. Zum Gelingen trug auch wieder die ungemein diskussionsfördernde Atmosphäre des Physikzentrums bei, die den Teilnehmern nicht nur während der eigentlichen Sitzungen Zeit und Raum zur Interaktion bot, die sie auch intensiv nutzten.

Diese Atmosphäre zusammen mit der großzügigen finanziellen und organisatorischen Unterstützung durch die Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung waren wieder einmal essentiell für den Erfolg dieses Seminars. Daher möchte ich an dieser Stelle nochmals allen Mitwirkenden auch im Namen aller Teilnehmer herzlich danken.

Dennis D. Dietrich

Die Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung trauert um ihr Vorstandsmitglied

Wilhelm Heraeus

1944 – 2015

Wilhelm Heraeus hat über viele Jahre mit großem Einsatz an der Erfüllung des Vermächtnisses seines Onkels und Stiftungsgründers Dr. Wilhelm Heinrich Heraeus mitgewirkt und die Förderung der Forschung und Ausbildung auf dem Gebiet der Naturwissenschaften verantwortungsvoll mitgestaltet. Wir werden ihm ein ehrendes Andenken bewahren.



Vorstand • Wissenschaftlicher Beirat • Geschäftsstelle

Functional Metalorganics and Hybrids

575. WE-Heraeus-Seminar

Forschungsarbeiten auf dem Gebiet der Nanotechnologie erfahren derzeit ein großes wissenschaftliches wie auch öffentliches Interesse. Ein wesentliches Ziel aktueller technologischer Entwicklungen ist es, in neuartigen Bauteilen den Elektronenspin als weiteren Freiheitsgrad bis hinunter auf die molekulare Ebene nutzbar zu machen. Das Interesse ist dabei nicht nur fundamentaler Natur, sondern auch technologisch begründet. Eine Gruppe von Materialien, die derzeit als vielversprechend auf diesem Gebiet

Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung
Deadline für Anträge zur nächsten Sitzung der Stiftungsgremien:

27. März 2015
(zur Sitzung Ende April 2015)

Bitte nehmen Sie schon vor der Deadline Kontakt mit der Stiftung auf.

gilt, sind funktionale metallorganische Moleküle und Hybridstrukturen, die solche Moleküle beinhalten. Diese Hybridstrukturen, die z. B. durch die Adsorption von Molekülen auf ferromagnetischen Oberflächen hergestellt werden, weisen neuartige magnetische Eigenschaften auf, die die einzelnen Bausteine nicht zeigen. Neben dem Interesse für die Grundlagenforschung ist es langfristig im Hinblick auf die Entwicklung neuer integrierter Bauelemente notwendig, neue funktionale, metallorganische Moleküle mit spezifischen Eigenschaften in herkömmliche Nanoelektronik-Bauteile auf Festkörperbasis zu integrieren. Genau diese Integration/Kombination birgt eine Reihe interessanter Herausforderungen, die im Fokus des Seminars standen, das vom 17. bis 19. November im Physikzentrum in Bad Honnef unter reger Beteiligung internationaler Experten stattfand.

Die 23 eingeladenen Vortragenden erläuterten das Verhalten einzelner Moleküle auf Oberflächen bis hin zu molekularen Aggregaten und metallorganischen Kristallen eingehend. Die dadurch angeregten Diskussionen zogen sich bis in die späten Abendstunden. Dabei war auch entscheidend, dass die mehr als 60 Teilnehmer aus dem interdisziplinären Umfeld von Physik, Chemie und den Ingenieurwissenschaften kamen. Die regen Diskussionen in diesem Umfeld machten auch die Postersitzung mit 28 Beiträgen zu einem Höhepunkt des Seminars. Die von einer international besetzten Jury ausgewählten Posterpreise wurden stark beachtet und führten zu einer interdisziplinären Zusammenarbeit bei der Lösung der Konstruktionsaufgabe, die mit dem Posterpreis verbunden war.

Sowohl in den Vorträgen als auch auf den Postern wurden visionäre Konzepte zur Generierung neuer magnetischer Eigenschaften vorgestellt, die durch enge Zusammenarbeit in Experiment und Theorie gewonnen wurden: Der Spinzustand sog. Spin-crossover-Moleküle lässt sich selbst bei Bedeckung weniger Lagen durch Licht schalten. Ebenso kann die Wechselwirkung von magnetischen Molekülen mit Graphen ein Spin-crossover-Verhalten induzieren. Es ist zudem möglich, die Spinpolarisation

an der Grenzfläche zwischen Molekül und ferromagnetischem Film gezielt zu modifizieren. Supraleitende Substrate für paramagnetische Moleküle erlauben eine dramatisch längere Lebensdauer der angeregten Spinzustände, und die Adsorption von diamagnetischen Molekülen auf ferromagnetischen Metallen kann die magnetische Anisotropie für das Hybridsystem eindrucksvoll erhöhen. Diese neuen Eigenschaften könnten den Weg zur Verwendung molekularer Spinhybride in zukünftigen spintronischen Bauelementen ebnet.

Wir bedanken uns auch im Namen aller Sprecher und Teilnehmer bei der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung und ihren Mitarbeitern für die großzügige finanzielle Unterstützung und die exzellente Organisation dieses Seminars. Auch den Mitarbeitern des Physikzentrums Bad Honnef möchten wir nochmals herzlich danken.

**Heiko Wende, Claudia Weis und
Claus Michael Schneider**

Charge-Transfer Effects in Organic Heterostructures: Fundamentals and Applications

578. WE-Heraeus-Seminar

Ladungstransfer (engl. Charge Transfer, CT) spielt eine zentrale Rolle bei elektronischen und optischen Prozessen in organischen Halbleitermaterialien, beispielsweise der Ladungstrennung in organischen Solarzellen, der Ladungsträgerinjektion in organischen Leuchtdioden oder dem Ladungsträgertransport in elektronischen Bauelementen. Auf Grund der hohen Zahl innerer Freiheitsgrade von organischen Molekülen und Polymeren hängt die Effizienz dieser Prozesse stark von der lokalen Morphologie und der intermolekularen Kopplung ab. Daneben werden die elektronischen und optischen Eigenschaften der Materialien zum Teil auch erheblich von intramolekularen CT-Effekten beeinflusst. Mit diesen Themen beschäftigte sich das 578. WE-Heraeus-Seminar, das vom 9. bis 12. Dezember 2014 im Physikzentrum Bad

Honnef stattfand. Mit 80 Teilnehmern aus 14 Ländern stieß das Seminar auf sehr große Resonanz. In 21 eingeladenen Hauptvorträgen beleuchteten namhafte internationale Experten aus Physik und Chemie die unterschiedlichen Facetten des Seminarthemas aus experimenteller wie theoretischer Perspektive. Zahlreiche Nachwuchswissenschaftler präsentierten ihre Ergebnisse in sieben Kurzvorträgen und 37 Postern. Drei Preise für die besten Poster gingen an Rupak Banerjee (Tübingen), Michael Heiber (Chemnitz) und Janina Roemer (München).

Breiten Raum nahm die Diskussion der Ladungstrennung an organischen Donor-Akzeptor-Grenzflächen ein. Die Lichtabsorption in organischen Halbleitern führt nicht direkt zu freien Ladungsträgern, sondern zunächst zu stark gebundenen Exzitonen, die erst an der Grenzfläche zu einem Elektronenakzeptor (z.B. Fullerenen) dissoziieren können. Nach derzeitigem Kenntnisstand bildet sich dabei ein intermolekularer CT-Zustand aus, der in ein freies Elektron-Loch-Paar getrennt werden oder wieder rekombinieren kann. Für intensive Diskussionen sorgte dabei die Frage, ob für die effiziente Trennung überschüssige Anregungsenergie notwendig oder zumindest vorteilhaft ist, oder ob die Erzeugung von Ladungsträgern aus dem relaxierten CT-Zustand erfolgt. Für beide Szenarien wurden experimentelle Daten vorgestellt; die Diskussion konnte jedoch insoweit zur Klärung der Kontroverse beitragen, als die involvierten Zeit- und Energieskalen sowie die lokale Morphologie als entscheidende Parameter identifiziert wurden. Breiten Raum nahm auch die Diskussion von Struktur-Eigenschaftsbeziehungen für die Erhöhung der Ladungsträgermobilität in organischen Halbleitern ein. Mehrere Sprecher präsentierten Mobilitätsdaten über $1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ auf der Basis von Materialien mit erhöhter Ordnung.

Die Autoren bedanken sich bei der WE-Heraeus-Stiftung für die finanzielle und organisatorische Unterstützung des Seminars sowie beim Team des Physikzentrums für die gewohnt freundliche Aufnahme in ihrem Haus, die mit zu dem großartigen Erfolg der Veranstaltung beigetragen haben.

Wolfgang Brütting und Frank Schreiber

Prof. Dr. Heiko Wende, Universität Duisburg-Essen; **Dr. Claudia Weis**, Universität Duisburg-Essen; **Prof. Dr. Claus Michael Schneider**, Universität Duisburg-Essen & Forschungszentrum Jülich

Prof. Dr. Wolfgang Brütting, Institut für Physik, Universität Augsburg; **Prof. Dr. Frank Schreiber**, Institut für Angewandte Physik, Universität Tübingen

NOTIZEN

Jürgen-Geiger-Preis

Die Jürgen-Geiger-Stiftung vergibt ihren Preis an Doktoranden und Diplomanden und / oder technische Mitarbeiter für Ideen und Arbeiten, die zu hervorragenden Ergebnissen auf dem Gebiet der experimentellen Festkörperphysik oder der experimentellen Elektronenspektroskopie geführt haben. Das Preisgeld beträgt 1000 Euro.

Die Bewerbung erfolgt auf Vorschlag eines auf den genannten Forschungsge-

bieten arbeitenden Hochschullehrers. Mit dem Vorschlag sind einzureichen: Gutachten des Hochschullehrers als Betreuer und / oder Hinweise auf die Bedeutung der Arbeiten des Vorgesprochenen und / oder Nachweise seiner wissenschaftlichen und beruflichen Laufbahn.

Vorschläge sind bis zum **15. April 2015** zu richten an den Vorstand der Stiftung, z. Hd. Herrn Dr. Jan Fritz Geiger, Breslauer Straße 10, 67659 Kaiserslautern.