

Fast Methods for Long-Range Interactions in Complex Systems

WE-Heraeus-Sommerschule

Vom 6. bis 10. September 2010 fand am Supercomputing Centre des Forschungszentrums Jülich diese WE-Heraeus-Sommerschule statt. Über 30 Teilnehmer aus sechs europäischen Ländern kamen nach Jülich, um sich in moderne Verfahren zur effizienten Lösung des Coulomb-Problems in Vielteilchensystemen zu vertiefen. Zehn Dozenten der Universitäten Bielefeld, Chemnitz, Stuttgart, Wuppertal und des Forschungszentrums Jülich aus den Fachbereichen Mathematik, Physik und Computational Science gaben Einführungen in aktuelle Methoden, Algorithmen und Implementierungen unterschiedlicher Verfahren, um das Problem von langreichweitig wechselwirkenden Teilchen in Computersimulationen effizient zu behandeln.

In vielen Bereichen der Physik, z. B. Astrophysik, Plasmaphysik, Materialwissenschaften oder Statistische Physik, werden inzwischen sehr aufwändige Computersimulationen von Teilchensystemen mit stetig wachsender Anzahl von Freiheitsgraden durchgeführt, wobei häufig das Problem von langreichweitigen Wechselwirkungen gelöst werden muss. Da der Rechenaufwand dieser Systeme aber in der Regel quadratisch mit der Anzahl der Freiheitsgrade wächst, sind schnelle, effiziente Algorithmen notwendig, um Probleme auf großen Skalen angehen zu können. Dazu kommt eine effiziente Parallelisierung der Algorithmen, ohne die es heutzutage unmöglich ist, im Bereich der Teilchensimulationen international wettbewerbsfähig zu sein.

Die Sommerschule hatte daher zum einen das Ziel, die Methoden und Algorithmen fundiert in ihren mathematischen Grundlagen darzustellen. Zum anderen wurden aber auch konkrete Implementierungen auf Parallelrechnern vorgestellt, wobei die Teilnehmer in praktischen Übungen die Verfahren an verschiedenen Problemstellungen vertiefen konnten. Die Vormittage waren Vorträgen der Dozenten gewidmet, während die Nachmittage kurze Einführungen in die parallele Programmierung sowie praktische Anwendungen aus den Bereichen Numerische Mathematik, Soft-Matter-Physik und Plasmaphysik enthielten, basierend auf schnellen Algorithmen, wie z. B. der Fast-Fourier-Transformation, dem Mehrgitter-Verfahren, Multipol-Methoden oder hierarchischen Baum-Algorithmen.

Darüber hinaus zeigten 17 Präsentationen aus verschiedensten Bereichen der Physik das breite Anwendungsspektrum der vorgestellten Methoden. Während eines Get-Together am ersten Abend, einer Poster-Session und eines Ausflugs nach Aachen gab es auch viele Möglich-

keiten, um gemeinsam ins Gespräch zu kommen. Auch in den Pausen zwischen den Vorträgen wurde lebhaft diskutiert, und es ergaben sich unter den Teilnehmern sowie zwischen Teilnehmern und Dozenten neue Kontakte, die sicherlich auch in Zukunft fortgeführt werden. Teilnehmer, Dozenten und Organisatoren danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die großzügige Förderung.

Godehard Sutmann

Biophysics of Membrane Transformations

467. WE-Heraeus-Seminar

Die funktionelle Basis aller lebenden Zellen sind Membranen. Sie sind durch Selbstorganisation entstanden, flüssig und nur wenige Nanometer dick und umschließen die Zelle und ihre Zellorganellen. In allen Membranen der Zelle sind eine Vielzahl von Proteinen und anderen Biomakromolekülen integriert. Sie spielen eine entscheidende Rolle in biologischen Prozessen, wie Zelladhäsion, Signalweiterleitung und Zellfusion. Gleichzeitig stellen die Membranen eine Plattform dar, in der Phasenseparation, Domänenbildung und Sortierung von Proteinen stattfinden. Die Untersuchung dieser membrangebundenen Prozesse ist eine der Grundlagen der modernen Zellbiologie. Auf dem 467. Wilhelm und Else Heraeus-Seminar wurden Phänomene verschiedenster Membranveränderungen, sowohl aus der experimentellen als auch aus der theoretischen Sichtweise, diskutiert.

Das Seminar fand vom 27. bis 30. Oktober im Physikzentrum Bad Honnef statt, mit fast 70 Teilnehmer aus aller Welt und mehr als 20 eingeladenen Sprechern. In den 39 Vorträgen und 25 Posterpräsentationen wurden aktuelle Ergebnisse aus folgenden Gebieten diskutiert: Phasenübergänge und Phasenseparation in Membranen; Adhäsion von Membranen; Prozesse in biologischen Membranen; Membranen in elektrischen Feldern und Membranrheologie.

Die Basis der Membranbiophysik sind Experimente, die an Modellen zellulärer Membranen durchgeführt werden. Mit stetig wachsender Beliebtheit werden dafür Riesenvesikel verwendet, die eine ähnliche Größe wie die äußere Membran von Zellen haben. Dieser Trend spiegelte sich auch in dem großen Anteil der Vorträge und Poster wider, die sich auf Studien von Lipid- oder Polymer-Riesenvesikel stützen.

Obwohl Membranen bereits seit mehr als einem Jahrhundert erforscht werden, liefern gegenwärtige Untersuchungen noch immer neue Erklärungen und Weiterentwicklungen des Grundkonzepts für ihre Struktur, Eigenschaften und ihr Verhalten. Ein anschauliches Beispiel hierfür

sind das aktuelle Verständnis und die lebhaften Diskussionen während dieses Workshops über Lipid-Rafts. Lipid-Rafts sind wenige Nanometer große Domänen auf der Membran, welche mit gesättigten Lipiden, Cholesterol und spezifischen Proteinen angereichert sind. Es wird angenommen, dass sie in viele biologische Prozesse, wie Signalweiterleitung, Transport von Molekülen innerhalb von Membranen, Fusion oder Abspaltung von Zellinhalten, Apoptose, Zytoskelettorganisation und Adhäsion involviert sind. Ein weiteres rege diskutiertes Thema war die Linienspannung. Diese trägt zur Stabilisierung der Domänen auf Membranen bei. Betrachtet wurden sowohl der Prozess der Phasenseparation, welche zur Entstehung von Domänen führt, als auch die Annäherung von biologischen Membranen an sog. kritische Punkte. Heftig diskutiert wurde die weitere Entwicklung von Riesemembranen in Richtung minimaler, künstlicher Zellen sowie die Motivation, die sich hinter solchen Experimenten verbirgt.

Nachwuchswissenschaftler beteiligten sich mit zahlreichen Vorträgen und Postern sehr aktiv am Workshop. In einer anregenden und entspannten Atmosphäre kamen lebhaft und direkte Diskussionen mit erfahrenen Wissenschaftlern über die aktuellsten und spannendsten Forschungsthemen zustande. Die Organisatoren und Teilnehmer bedanken sich bei der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung recht herzlich für die finanzielle und organisatorische Unterstützung.

Rumiana Dimova und Carlos Marques

Ab initio Description of Iron and Steel

468. WE-Heraeus-Seminar

Dieses Seminar, das vom 24. bis 29. Oktober 2010 auf Schloss Ringberg am Tegernsee stattfand, hatte seine Begründung in der rasanten Entwicklung bei den *ab initio*-Methoden, die es uns heutzutage erlaubt, grundlegende physikalische Fragen selbst für chemisch und mikrostrukturell so komplexe Werkstoffe wie Stähle zu beantworten. Der entscheidende Vorteil von *ab initio* (lat.: von den Grundlagen) gegenüber klassischer Materialsimulation ist dabei, dass Erkenntnisse allein aus der Quantenmechanik und nicht empirisch aus experimentellen Beobachtungen abgeleitet werden. Zwei vorherige Seminare beschäftigten sich bereits mit den thermodynamischen und magnetischen Eigenschaften von Stählen. Die mechanischen Eigenschaften, die diesmal im Vordergrund standen, sind *ab initio*-Simulationen besonders schwer zugänglich, da sie aus einem Zusammenspiel von Volumeneigenschaften, chemischer Zusammensetzung und Mikrostruktur

Dr. Godehard Sutmann, Jülich Supercomputing Centre, Forschungszentrum Jülich, 52425 Jülich

Dr. Rumiana Dimova, Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung, Potsdam; Prof. Dr. Carlos Marques, Institute Charles Sadron, UPR22 – CNRS, Strasbourg, Frankreich

resultieren. Im Seminar wurde eindrucksvoll gezeigt, dass eine Weiterentwicklung und Kombination verschiedener physikalischer Konzepte entscheidend ist, um hierbei voranzukommen. Wichtige Konzepte, Neuentwicklungen und wissenschaftliche Durchbrüche wurden in 18 einstündigen Vorträgen von international führenden Experten auf diesem Gebiet vorgestellt. V. Vitek lieferte mit seinem Auftaktvortrag zur Kopplung von atomaren Versetzungsmodellierungen und makroskopischem Verformungsverhalten einen exzellenten Einstieg ins Thema. Weitere Vorträge (u. a. von E. Bitzek, P. Gumbsch) diskutierten spannende atomistische Simulationen der statischen und dynamischen Eigenschaften von Gitterfehlern (Versetzungen, Stapelfehler, Korngrenzen). Die Möglichkeiten, diese Methoden für konkrete Materialprobleme in der Industrie einzusetzen, zeigten u. a. R. Kirchheim und W. Curtin am Beispiel der Wasserstoffversprödung von Stählen. Weitere Tutorials und Teilnehmerbeiträge befassten sich außerdem mit vielversprechenden methodischen Entwicklungen.

Ob im Rahmen dieser Vorträge, der Postersession, gemütlicher Abendrunden oder bei der Wanderung im Schnee – von den zahlreichen Gelegenheiten zum Erfahrungsaustausch und zur Diskussion machten die Gastredner und die vielen Nachwuchswissenschaftler ausführlich Gebrauch. Auch in deren Namen möchten wir uns daher bei der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung vielmals für die großzügige finanzielle Unterstützung bedanken, den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern der Tagungsstätte Schloss Ringberg danken wir für die perfekte Betreuung.

Tilmann Hickel, Johann von Pezold,
Jörg Neugebauer und Ralf Drautz

Analytische und numerische Methoden korrelierter Elektronen

465. WE-Heraeus-Seminar

Vom 27. September bis zum 1. Oktober 2010 tauschten sich in Bad Honnef etwa 75 Physikerinnen und Physiker über neuere Entwicklungen im Bereich theoretischer Methoden zur Untersuchung elektronischer und magnetischer Eigenschaften kondensierter Materie aus. Die Teilnehmer, darunter viele Nachwuchswissenschaftler, waren vorwiegend aus Deutschland und einigen Nachbarländern angereist.

Das Gebiet der stark korrelierten quantenmechanischen Vielteilchensysteme wird weltweit untersucht und gerade im deutschsprachigen Raum intensiv und in vielfältiger Weise bearbeitet. Viele physikalische Systeme zeigen wissenschaftlich und technologisch interessante Eigenschaften, die sich nicht in effektiven

Einteilchenbildern verstehen lassen. Kollektive Phänomene treten auf, wenn die Bewegung der Elektronen durch gegenseitige Wechselwirkungen oder dimensionale Reduktion auf Schichten bzw. Drähte eingeschränkt wird.

Der aktuelle Stand zu Modellbildung, analytischen und numerischen Untersuchungsmethoden wurde in Vorträgen und einer gut angenommenen Postersitzung präsentiert und ausführlich diskutiert. Zur Untersuchung der Eigenschaften insbesondere von Phasenübergängen kommen verschiedene Varianten der Renormierungsgruppe, dynamische Molekularfeldtheorien, Quanten-Monte-Carlo-Simulationen sowie exakte Diagonalisierungsverfahren zum Einsatz. Analytische Lösungsmethoden für Modelle mit exakt konstruierbarem Grundzustand und insbesondere für vollständig integrierbare Systeme, Bosonisierungsverfahren und Skalenrelationen an quantenkritischen Punkten wurden präsentiert, sowie kontinuierliche unitäre Transformationen und perturbative Verfahren zur Herleitung effektiver Quantenspinsysteme aus Hubbard-Modellen vorgeschlagen.

Das Ziel des Seminars, die Erörterung weiterer methodischer Entwicklungen unter breiter Beteiligung der in der Theorie korrelierter Elektronen arbeitenden Wissenschaftler und die Einbindung von Nachwuchswissenschaftlern in diese Diskussion, wurde unserer Ansicht nach voll und ganz erreicht. Obwohl dieser Aspekt vor und während des Seminars durchaus kontrovers diskutiert wurde, sind wir der Meinung, dass dieser Erfolg auch der Wahl von Deutsch als Seminarsprache anzurechnen ist.

Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung sowohl für die großzügige finanzielle Unterstützung dieses Seminars als auch für die kompetente Organisation durch Elisabeth Nowotka.

Andreas Honecker, Thomas Pruschke und
Andreas Klümper

5th Symposium on Vacuum based Science and Technology

Wie schon im vergangenen Jahr war die 9. Jahrestagung der Deutschen Vakuumgesellschaft DVG mit dem bereits zum fünften Mal stattfindenden Symposium on Vacuum based Science and Technology SVST5 verbunden, das die DVG zusammen mit den Vakuumgesellschaften Polens und Schwedens vom 28. bis 30. September 2010 in Kaiserslautern ausgerichtet hat.

Die Themen der sieben wissenschaftlichen Fachsitzungen und einer Postersitzung reichten von Nano- und Mikrostrukturen über dünne Schichten für verschiedene Anwendungsbereiche bis zu neuen Entwicklungen in der

Vakuumtechnologie. Besonderes Interesse fanden die eingeladenen Vorträge von F. J. Giessibl (Regensburg) zur Rasterkraftmikroskopie mit einer Auflösung bis in den subatomaren Bereich, J. Wrachtrup (Stuttgart) zur Nutzung von Spineffekten in Diamant, J. Birch (Linköping/Schweden) zur Optimierung von Multilagen-Röntgenspiegeln mit Einzelschichtdicken um ein Nanometer und J. Smet (Stuttgart) zur Erzeugung und zu den Eigenschaften von Graphen. L. Schäfer (Braunschweig) berichtete über die großflächige Abscheidung von Diamant- und Siliziumschichten mittels Heißdraht-CVD. Bei M. Godlewski (Warschau) und O. Malyshev (Daresbury/UK) standen mit der Atomic Layer Deposition von ZnO für die miniaturisierte 3D-Elektronik bzw. mit neuen Getterbeschichtungen aus nicht verdampfenden Legierungen für die UHV/XHV-Technologie wichtige Fortschritte bei der Materialentwicklung im Vordergrund. Den Abschluss bildete ein gemeinsam mit der Deutschen Gesellschaft für Plasmatechnologie DGPT veranstalteter Workshop über Photovoltaik mit drei Übersichtsvorträgen.

Ein Höhepunkt der Tagung war die Verleihung des diesjährigen Rudolf Jaekel-Preises der Deutschen Vakuumgesellschaft an Matthias Scheffler vom Fritz Haber-Institut der Max Planck-Gesellschaft in Berlin, der erste theoretische Physiker unter den bisherigen Preisträgern. In seinem brillanten Vortrag zeigte er ausgehend von *ab initio*-Rechnungen zur Elektronenstruktur auch neue Ansätze zur Lösung von umwelt- und energierelevanten Problemen mittels heterogener Katalyse auf.

SVST5 trug zur Vertiefung der Kontakte zwischen Wissenschaftlern aus den beteiligten Ländern, insbesondere aus Polen und Deutschland, bei. Dementsprechend lud W. Gulbinski im Namen der Polnischen Vakuumgesellschaft bereits zum nächsten Symposium vom 20. bis 22. September 2011 an der TU Koszalin ein. Das Symposium fand zeitgleich mit der 16. Arbeitstagung Angewandte Oberflächenanalytik AOFA 16 statt, die die DVG in Zusammenarbeit mit dem Kaiserslauterer Institut für Oberflächen- und Schichtanalytik IFOS ausgerichtet hat. Die Tagungsprogramme waren so ausgelegt, dass die jeweiligen Hauptvorträge von den Teilnehmern beider Veranstaltungen besucht werden konnten. Zusammen mit dem gemeinsamen Konferenzausflug nach Trier mit einer Schifffahrt auf der Mosel trug dies zu den guten Kontakten zwischen den in- und ausländischen Teilnehmern der beiden Tagungen bei.

Hans Oechsner

Dr. Tilmann Hickel,
Dr. Johann von Pezold, Prof. Dr. Jörg Neugebauer, MPI für Eisenforschung GmbH, Computational Materials Design, Düsseldorf; Prof. Dr. Ralf Drautz, Ruhr-Universität Bochum, ICAMS, Bochum

Priv.-Doz. Dr. Andreas Honecker, Prof. Dr. Thomas Pruschke, Institut für Theoretische Physik, Universität Göttingen; Prof. Dr. Andreas Klümper, Fachbereich C – Mathematik und Naturwissenschaften, Bergische Universität Wuppertal

Prof. Dr. Hans Oechsner, Institut für Oberflächen- und Schichtanalytik (IFO)