

Structure and Dynamics of Free Clusters and Nanoparticles Using Short Wavelength Radiation 354. WE-Heraeus-Seminar

Größenabhängige Eigenschaften von Clustern und nanoskopischer Materie standen im Fokus des 354. WE-Heraeus-Seminars, das als Brücke zur Physikalischen Chemie als 86. Bunsen-Diskussionstagung vom 7. bis 9. September 2005 im Physikzentrum Bad Honnef durchgeführt wurde. Ca. 60 Teilnehmer aus neun Ländern diskutierten neueste Entwicklungen auf diesem aktuellen Gebiet zwischen Physik und Chemie.

Die wichtigsten Inhalte der Tagung waren: Einfache Modellsysteme (van der Waals-Cluster) liefern bei Anregung und Photoionisation im weichen Röntgenbereich die klare Unterscheidung zwischen Oberflächen- und Volumeneigenschaften bei element- und ortsspezifischer Anregung. Neue theoretische Modelle ergänzen diese experimentellen Studien. Über die Röntgenanregung von freien Metallclustern wurde berichtet. Diese Experimente waren bisher auf Grund der kurzen Standzeit von kontinuierlich arbeitenden Clusterquellen und zu geringer Intensität der üblicherweise genutzten Synchrotronstrahlung kaum möglich. Es wurde ein neuer, ultraschneller Energieaustausch-Prozess in Clustern diskutiert, der „Interatomic Coulombic Decay“ (ICD). Dieser bewirkt, dass die Energie eines elementarselektiv angeregten Atoms auf die benachbarten Atome verteilt wird. Der ICD-Effekt wurde zunächst durch Modelle vorausgesagt, erst nachfolgend gelang seine experimentelle Beobachtung. Hochintensive, kurzwellige Strahlung des Freie-Elektronen-Lasers der TESLA Test Facility wird für Experimente zur Fragmentation freier Cluster genutzt. Es wurde über Fortschritte zur Interpretation dieser Ergebnisse berichtet. Komplementäre Ansätze zur Anregung und Ionisation von Clustern durch intensive Kurzpuls-Laser und hochgeladene Ionen liefern neue Erkenntnisse zur Fragmentation geladener Cluster. Die Präparation von strukturierten Nanopartikeln gelingt mit Hilfe der Kolloidchemie. Damit werden geordnete Nanostrukturen mit definiertem Aufbau hergestellt. Über gespeicherte Nanopartikel in Fallen sowie im massenselektierten Partikelstrahl präparierte Nanopartikel wurde berichtet. Alternativ werden die Nanopartikel auf Substraten deponiert. Neben grundlegenden Studien an deponierten Clustern und Schichtsystemen dienen Clusterverbindungen mittlerweile auch zur Herstellung von Sensoren.

Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die großzügige Förderung der Tagung. Frau Lang und Herrn Dreisigacker gebührt unser Dank für Hilfe bei der Organisation. Dem Physikzentrum, v. a. den Herren Gomer und Guthy-Rahn, danken wir für die tatkräftige Unterstützung.

ECKART RÜHL UND OLLE BJÖRNEHOLM

Ultrafast dynamics of collective excitations in solids

355. WE-Heraeus-Seminar

Die Dynamik von Streuprozessen und elementaren Anregungen findet im Festkörper auf ultraschnellen Zeitskalen (10^{-12} – 10^{-15} s) statt. Eines der wesentlichen Ziele aktueller Forschung ist es, ein Verständnis der Wechselwirkung dieser Anregungen untereinander, den Einfluss von Ladungsabschirmung und das Entstehen resultierender kollektiver Phänomene zu erarbeiten. In den letzten Jahren wurden hierzu eine Reihe wegweisender experimenteller wie theoretischer Arbeiten durchgeführt, die einerseits durch die rasante technologische Entwicklung der Ultrakurzzeitspektroskopie, aber auch durch neuartige theoretische Ansätze möglich wurden. Der zentrale Ansatz des 355. WE-Heraeus-Seminars war es, einen Brückenschlag zwischen Forschungsgebieten zu versuchen, die zwar hoch entwickelt sind, sich aber auf Teilaspekte dieser elementaren ultraschnellen Prozesse wie Phononen-, Spin- oder Ladungsträgerdynamik spezialisiert haben, und so das Verständnis kollektiver Prozesse voranzubringen.

58 Teilnehmer aus elf Ländern haben sich daher vom 11. bis 15. September 2005 auf der Ostseeinsel Hiddensee mit dem Ziel zusammen gefunden, Verknüpfungen zwischen den unterschiedlichen Teilgebieten auszuloten und ungelöste oder kontroverse Fragen zu diskutieren. Das vergleichsweise dichte Programm mit 20 eingeladenen und 13 Kurzvorträgen war eingeteilt in fünf Sitzungen zu den Themen kohärente Phononen, korrelierte Elektronensysteme, Quasiteilchen-Wechselwirkungen, Spindynamik und Dynamik an Oberflächen. Im Sinne des angestrebten Brückenschlages kam dabei den jeweiligen Sitzungsleitern die besondere Aufgabe zu, eine auch für den Nichtspezialisten verständliche Einführung in das jeweilige Spezialgebiet und eine Einordnung der nachfolgenden Beiträge zu liefern. Das Vortragsprogramm wurde ergänzt durch zwei abendliche Postersitzungen sowie durch einen runden Tisch zum Thema „Perspektiven und Möglichkeiten der neuen beschleuniger-basierten Kurzpuls VUV- und Röntgenquellen (FELs etc.)“.

Die intensiven, zum Teil kontroversen und auch provokativ geführten Diskussionen, die das Programm (anfangs) gehörig durcheinander wirbelten, wie auch die überaus positiven Rückmeldungen zahlreicher Teilnehmer sind für uns als Organisatoren ein guter Indikator dafür, dass dieses Seminar dem Ziel eines Brückenschlages zwischen verschiedenen Teilgebieten zumindest nahe gekommen ist. Wir hoffen sehr, dass die in Hiddensee geknüpften neuen Kontakte vertieft werden und sich letztendlich auch in wissenschaftlichem Fortschritt niederschlagen.

Besonders bedanken möchten wir uns bei der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung, deren großzügige finanzielle Förderung dieses Seminar erst möglich gemacht hat. Desweiteren gilt unser Dank dem Team des Hotels Heiderose auf Hiddensee für die

flexible Unterstützung bei der Durchführung der Veranstaltung, aber auch allen Sprechern, Sitzungs- und Diskussionsleitern und allen Teilnehmern, deren Engagement dieses Seminar zu einem Ereignis gemacht hat, welches hoffentlich nicht nur wir Organisatoren in bester Erinnerung behalten werden.

UWE BOVENSIEPEN UND KLAUS SOKOLOWSKI-TINTEN

40 Years of the GW Approximation for the Electronic Self-Energy: Achievements and Challenges 356. WE-Heraeus-Seminar

Da die Schrödinger-Gleichung für Festkörper wegen der großen Anzahl elektronischer Freiheitsgrade nicht direkt gelöst werden kann, haben sich je nach Anwendungszweck verschiedene ab initio-Methoden etabliert. Die Vielteilchen-Störungstheorie, die auf der Entwicklung Greenscher Funktionen beruht, erlaubt im Gegensatz zur Dichtefunktionaltheorie eine im Prinzip exakte Beschreibung des Anregungsspektrums und wird daher bevorzugt zur Berechnung von Bandstrukturen und spektroskopischen Funktionen verwendet. Fast alle Implementierungen benutzen dabei die so genannte GW-Näherung für die elektronische Selbstenergie, die Austausch- und Korrelationseffekte beschreibt. Diese Näherung wurde von Lars Hedin 1965 erstmals systematisch hergeleitet, die ersten Bandstrukturrechnungen für reale Materialien erschienen zwanzig Jahre später. Noch einmal zwanzig Jahre danach hatte sich dieses Seminar, das vom 12. bis 15. September 2005 im Physikzentrum Bad Honnef stattfand, das Ziel gesetzt, die bisher gewonnenen Erfahrungen zusammenzufassen und aktuelle Entwicklungen zu diskutieren. Unter den 85 Teilnehmern befanden sich neben eingeladenen Sprechern aus Europa, den USA und Japan auch erfreulich viele jüngere Wissenschaftler, die ihre Beiträge in Kurzvorträgen und Postern präsentierten und viel zur lebhaften Atmosphäre der Veranstaltung beitrugen.

Insgesamt zeigte das Seminar, dass gerade in den letzten Jahren enorme Fortschritte erzielt wurden. Rechnungen für Nanostrukturen wie Oberflächen oder Defekte sind bereits üblich. Nachdem die GW-Näherung wegen des hohen numerischen Aufwands lange weitgehend auf die Pseudopotentialmethode mit ebenen Wellen beschränkt war, existieren nun aber auch Implementierungen in fast allen gängigen Basisdarstellungen (LAPW, LMTO, KKR, tight-binding etc.). Damit einher geht eine Fülle neuer Anwendungen, die vorher nicht zugänglich waren, insbesondere im Bereich der Übergangsmetalle und Oxide. Da der störungstheoretische Ansatz bei stark korrelierten Systemen jedoch an seine Grenzen stößt, wurden zudem Verbindungen mit alternativen Methoden diskutiert, wobei vor allem die Einbeziehung von Elementen der dynamischen Mean-Field-Theorie sehr vielversprechend erscheint. Ein zweiter Schwerpunkt lag auf der mit der GW-Näherung verwandten Bethe-Salpeter-Gleichung für ladungsneutrale optische Anregungen. Zahlreiche Beiträge zeigten, dass diese Methode inzwischen ebenfalls ausgereift ist und auf so komplexe Systeme wie die Dynamik von Exzitonen in Kohlenstoff-Nanoröhren oder das

Prof. Dr. Eckart Rühl, Institut für Physikalische Chemie, Universität Würzburg; Dr. Olle Björneholm, Physics Dept. Uppsala University

Dr. Uwe Bovensiepen, FB Physik, FU Berlin, AG Ultrafast Electron Dynamics and Femtochemistry at Interfaces of Solids; Prof. Dr. Klaus Sokolowski-Tinten, Institut für Optik und Quantenelektronik der Universität Jena, Max-Wien-Platz 1, 07743 Jena

Absorptionsverhalten von Wasser angewandt werden kann.

Die Organisatoren bedanken sich bei der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung, namentlich bei Frau Heike Uebel, sowie den Mitarbeitern des Physikzentrums Bad Honnef für die tatkräftige Hilfe und die finanzielle Unterstützung dieses Seminars.

ARNO SCHINDLMAYR

Dr. Arno Schindlmayr, Forschungszentrum Jülich, Institut für Festkörperforschung

Prof. Dr. Walter Zimmermann, Lehrstuhl für Theoretische Physik Ia, Universität Bayreuth

Prof. Dr. Gerd Ganteför, Fachbereich Physik, Universität Konstanz

Prof. Dr. Jürgen Schnack, Fachbereich Physik, Universität Osnabrück; Prof. Dr. Rainer Fink, LS Physikalische Chemie II, Universität Erlangen

Dr. Markus Abel, Universität Potsdam, Institut für Physik, Potsdam; Dr. Jörg Schumacher, Universität Marburg, AG Komplexe Systeme, Marburg

*) weitere Informationen auf www.molmag.de

Nonlinear Dynamics of Complex Continua

360. WE-Heraeus-Seminar

Bewegung gehört zu den faszinierendsten Daseinsformen der Materie, ihre mathematische Beschreibung zählt zu den fundamentalen Problemen der Physik. Im Blickpunkt des 360. WE-Heraeus-Seminars, das vom 2. bis 5. Oktober an der Universität Bayreuth stattfand, standen komplexe, dynamische Systeme, deren (nichtlineare) Dynamik einer Kontinuumsbeschreibung zugänglich ist. Letzteres betrifft sowohl die grundlegenden Transportgleichungen der jeweiligen Systeme als auch die abgeleiteten, reduzierten nichtlinearen Gleichungen, wie sie häufig in der Nähe von Verzweigungspunkten auftreten. Dieses Grundmuster kommt in sehr unterschiedlichen nichtlinearen Systemen aus der belebten und unbelebten Natur vor, worüber auf dem Workshop mit einem breiten Spektrum von höchst anregenden experimentellen und theoretischen Vorträgen berichtet wurde. Für die Diskussion nichtlinearer Phänomene in weicher und biologischer Materie erwies sich der angestrebte Austausch mit Wissenschaftlern, die bereits Erfahrungen mit strukturell ähnlichen Problemen bei Systemen aus der unbelebten Natur haben, als höchst hilfreich.

Folgende Fragen wurden in den Vorträgen unter anderem aufgegriffen und lebhaft diskutiert: Wie schaffen es beispielsweise Polymere in dünnen Kanälen, zwei verschiedene Flüssigkeiten höchst effektiv zu vermischen, obwohl sie ohne Polymerzusatz unvermischt bleiben? Welcher grundlegende nichtlineare physikalische Mechanismus verbirgt sich dahinter, und für welche biotechnologischen Anwendungen ist das interessant? Welche Grenzflächenmuster bilden sich zwischen Sand und fließendem Wasser aus, und was sind die treibenden Kräfte und geeigneten Modelle hierfür? Mit der Vermessung der mechanischen, also der physikalischen Eigenschaften von Zellen kann seit jüngster Zeit zwischen gesunden und (krebs-)kranken Zellen mit solcher Sicherheit unterschieden werden, dass sie bereits als Diagnosemethode in Betracht gezogen wird. Was sind die hierfür eingesetzten physikalischen Messmethoden? Was sind die jüngsten Fortschritte bei der theoretisch-physikalischen Modellierung der Rissbildung? Welche strukturellen Ähnlichkeiten hat die genau verfolgbare Ausbreitung von Banknoten in den USA mit möglichen Ausbreitungsformen von Pandemien?

Mitorganisator des Seminars war die jüngst von der DFG an der Universität Bayreuth eingerichtete Forschergruppe *Nichtlineare Dynamik komplexer Kontinua* (Sprecher I. Rehberg). Den gesellschaftlichen Höhepunkt für die 62 Teilnehmer bildete der sog. Heraeus-Abend in einem fränkischen

Dorfwirtshaus in einem nahe gelegenen Weiler mit dem überaus passenden Namen Theta. Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die großzügige finanzielle Unterstützung.

WALTER ZIMMERMANN

Hydrogen Storage with Novel Nanomaterials

361. WE-Heraeus-Seminar

Im Zentrum des Seminars, das vom 23. bis 28. Oktober 2005 im Physikzentrum Bad Honnef stattfand, stand die Frage, ob das Problem der Speicherung von Wasserstoff durch den Einsatz von Nanopartikeln und Clustern gelöst werden kann. Die Idee zu dem Seminar kam von Seiten der Clusterforscher, in deren Gebiet die Problematik der Wasserstofftechnologie bisher nur am Rande behandelt wird. Offensichtlich hat dieser Brückenschlag zwischen Wasserstoff und „Nano“ viele hochkarätige Wissenschaftler angesprochen, denn die internationale Resonanz, besonders aus den USA und Japan, und die Beiträge aus der Industrie, denen ein ganzer Tag des Seminars gewidmet waren, war überwältigend. Obwohl die Organisatoren aus dem Bereich der Cluster in der Gemeinde der Wasserstoffspeicherung eher weniger bekannt sind, fanden sich unten den etwa 80 Teilnehmern viele bekannte Namen aus diesem Bereich im Physikzentrum ein.

Benötigt werden Materialien, die möglichst viel Wasserstoff binden können, ähnlich wie ein Schwamm Wasser aufnimmt. Wichtige Kenngrößen sind dabei das Gewicht und das Volumen des gespeicherten Wasserstoffs im Verhältnis zum Gewicht und Volumen des Speichers. Es sollten Dichten erreicht werden, die der des flüssigen Wasserstoffs entsprechen, wobei der Anteil des Gewichts des gespeicherten Wasserstoffs am Gesamtgewicht des Speichers mindestens 5 bis 10 % sein sollte. Diese Vorgaben legte zur Eröffnung Carole Read als Vertreterin des Departments of Energy in Washington in ihrem Vortrag über das Forschungsprogramm in den USA dar.

Zurzeit werden zwei unterschiedliche Klassen von Materialien untersucht: Zunächst gibt es Speichermaterialien auf Basis einer schwachen Bindung (Physisorption) mit hochporösen Materialien, die allerdings nur bei Kühlung mit flüssigem Stickstoff wirkungsvoll arbeiten können. Zur zweiten Materialklasse zählen zum Beispiel die Metallhydride, die den Wasserstoff chemisch binden, aber nur bei hohen Temperaturen wieder abgeben. Im Auto müsste ein solcher Tank im ersten Fall tiefgekühlt, im zweiten Fall auf hohe Temperaturen gebracht werden. Die Beiträge der Industriefirmen machten deutlich, dass sich solche Speicher kaum in der Praxis durchsetzen werden. Eine Lösung bieten hier möglicherweise Cluster und Nanopartikel: Diese Teilchen formen hochporöse Festkörper mit einer extrem großen inneren Oberfläche. Gleichzeitig sind die Teilchen so klein, dass ihre Eigenschaften signifikant mit der Größe variieren. Es ist denkbar, eine Art Nanoteilchen zu finden, die den Wasserstoff mit optimaler Bindungsenergie speichern, so dass ein entsprechendes Speichermaterial bei Normalbedingungen arbeitet.

Als Nebenergebnis dieser Aktivitäten ist

inzwischen das Problem der Speicherung und des Transports von Methan gelöst worden: Omar Yaghi (U of Michigan, USA) stellte die neue Materialklasse der MOFs (Metal-Organic Frameworks) vor, die bereits in Zusammenarbeit mit der BASF in größeren Mengen hergestellt werden und Methan bei moderaten Bedingungen speichern können. Dies ist eine bedeutende Verbesserung für den Transport und die Lagerung von Methan. Einen weiteren, faszinierenden Ansatz präsentierte Ho-Kwang Mao (Carnegie Institute, Washington, USA): die Clathrate. Dies sind Käfigstrukturen aus Wasser, Wasserstoff und Methan, die unter Druck und bei niedrigen Temperaturen stabile Verbindungen aufbauen.

Insgesamt wurde das Treffen mit seinen vielen internationalen Beiträgen aus Industrie, Materialforschung und Nanowissenschaften von allen Beteiligten als motivierend, kreativ und auf hohem wissenschaftlichem Niveau empfunden. Die aus aller Welt angereisten Wissenschaftler lobten insbesondere auch den neuen Hörsaal und die familiäre Atmosphäre des Physikzentrums. Der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung danke ich für die großzügige Unterstützung, durch die dieses Treffen in zuvor noch nie erprobter Zusammensetzung erst möglich gemacht wurde. Wie zahlreiche sehr positive Rückmeldungen belegen, ist das Experiment, die Wasserstoffspeicherung aus Sicht der Nanoclusterforschung zu behandeln, voll und ganz gelungen.

GERD GANTEFÖR

Advances and Prospects in Molecular Magnetism

362. WE-Heraeus-Seminar

Magnetische Moleküle sind faszinierende neue magnetische Materialien. Sie enthalten eine vergleichsweise geringe Anzahl magnetischer Momente, die miteinander wechselwirken. Einige dieser Moleküle verfügen über einen hohen Spin im Grundzustand und zeigen Hysterese-Effekte, metamagnetisches Verhalten sowie makroskopisches Quantentunneln der Magnetisierung. Andere Moleküle wiederum weisen aufgrund ihrer starken Frustration ein Verhalten auf, wie man es sonst von frustrierten zwei- oder dreidimensionalen Spingittern kennt. Spin-crossover-Substanzen wiederum erlauben es, mittels Licht, Druck oder Temperatur vom Grundzustand in einen metastabilen angeregten Zustand umzuschalten um makroskopische Materialparameter zu verändern.

Um aktuelle Fragestellungen und Entwicklungen auf diesem Gebiet zu diskutieren, trafen sich vom 13. bis 16. November 2005 etwa 60 Teilnehmer aus dem In- und Ausland zum 362. WE-Heraeus-Seminar im Physikzentrum Bad Honnef. In 19 Plenar- sowie mehreren Kurzvorträgen und Posterbeiträgen stellten Physiker und Chemiker ihre Ansätze, Erfolge und offenen Probleme vor.

In den durchweg sehr guten Vorträgen ließ sich ein klarer Trend zur Untersuchung dynamischer Phänomene ausmachen. Neben dem schon länger diskutierten Magnetisierungstunneln spielen magnetische Moleküle auf Oberflächen oder zwischen elektrischen Kontakten eine bedeutende Rolle. Beim Thema „Rational design“ geht es um zielgerichtete Synthese von molekularen