

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