

Challenges of Applied Cryoelectrics

365. WE-Heraeus-Seminar

Das Seminar fand vom 21. bis 24. Mai im Schlosshotel Weilburg statt. Es brachte Wissenschaftler aus zwölf Ländern zusammen, die die neuesten Entwicklungen bei Anwendungen von Supraleitern in der Elektronik und der dafür notwendigen Kühltechnik vorstellten und über neue Ideen diskutierten.

Von den 35 Beiträgen entfielen zehn auf neueste Entwicklungen bei Kleinkühlern, die anderen auf kryoelektronische Anwendungen wie SQUIDs, Josephson-Spannungsstandards, Bolometer und digitale Schaltungen. Bei den SQUID-Anwendungen wurden Themen wie Magnetokardiographie, zerstörungsfreie Werkstoffprüfung, Kernspinresonanzmessungen, geomagnetische Exploration und Raster-SQUID-Mikroskope behandelt. Als weitere interessante Anwendung wurde eine Kombination von Nanomechanik und supraleitenden Schaltungen vorgestellt. Zum viel diskutierten Gebiet des Quantum Computing gab es Vorträge über sehr hochwertige supraleitende Qbits und zum Einfluss des niederfrequenten Rauschens auf deren Eigenschaften. Weitere Beiträge beschäftigten sich mit Anwendungen von Bolometern für die Radioastronomie und für die THz-Bildgebung.

Schwerpunkt der Diskussion waren die Anforderungen, die an Kleinkühler gestellt werden müssen, wenn supraleitende Schaltungen gekühlt werden sollen. Von größter Bedeutung sind dabei verschwindend geringe elektromagnetische Störungen, ausreichende Temperaturstabilität, hohe Zuverlässigkeit und ein akzeptabler Preis. Durch den Betrieb von Kleinkühlern mit He-3 bzw. durch eine Kombination mit anderen Kühltechniken, wie der adiabatischen Entmagnetisierung oder He-4/He-3-Mischkühlern, öffnen sich Kleinkühlern jetzt auch solche Anwendungsgebiete, die bislang eine Kühlung mit flüssigem Helium nötig machten. Das zeigt sich besonders auf dem Gebiet von supraleitenden Bolometern für die Radioastronomie. Hier wurde eine Reihe von Beispielen vorgestellt, bei denen die supraleitende Elektronik bereits jetzt mit Kleinkühlern (vornehmlich Pulsrohrkühlern) betrieben wird.

Das Seminar fand großes internationales Interesse, was dadurch deutlich wurde, dass 22 der 50 Teilnehmer aus dem Ausland kamen, die meisten davon aus den USA, Kanada und Japan. Auch in der Industrie, die mit zwölf Teilnehmern vertreten war, besteht ein wachsendes Interesse an Anwendungen der supraleitenden Elektronik in Kombination mit Kleinkühlern. Alle Teilnehmer des Seminars danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die großzügige Unterstützung, die das Seminar erst ermöglicht hat.

Michael Mück und Günter Thummes

Biomolecular Simulation

367. WE-Heraeus-Seminar

Das Seminar mit dem vollständigen Titel: „Biomolecular Simulation: from physical principles to biological function“ fand großen Zuspruch über die Grenzen der Fachgebiete hinweg. Insgesamt 92 Teilnehmer aus der Physik, der Chemie, der Pharmazie und der Informatik sorgten für rege Anteilnahme an den 22 eingeladenen Vorträgen. Über sechzig Posterbeiträge unterstrichen das aktive Interesse der Teilnehmer am Themengebiet der Tagung. Die Beiträge konzentrierten sich zu etwa gleichen Teilen auf die Forschungsfelder „Proteinfaltung“ und „Proteinfunktion“. Das erste Themengebiet wurde im Eröffnungsvortrag von H. Scheraga (Cornell) eingeführt, der in über 40 Jahren die Entwicklung des Feldes, insbesondere in der Entwicklung von Simulationsmethoden, entscheidend mitgeprägt hat. J. Onuchic (UC San Diego) gab eine Übersicht über die Theorie der Energielandschaften, die sich in den letzten zehn Jahren zum „neuen Paradigma“ zum Verständnis des Mechanismus der Proteinfaltung entwickelt hat. Ken Dill (UC San Francisco) referierte über die Möglichkeit, die dreidimensionale Proteinstruktur aus sich spontan bildenden Molekülfragmenten (Nukleationskernen) zu rekonstruieren. Aus den vielen interessanten Beiträgen im Bereich Proteinfunktion soll hier exemplarisch der Vortrag von H. Grubmüller (MPI Göttingen) über die Funktionsbeschreibung der „Nanomaschine Protein“ erwähnt werden, der an einer Reihe von Beispielen die Beiträge der biomolekularen Simulationsverfahren zur Aufklärung dieser komplexen Vorträge lieferte. G. Klebe (Marburg) berichtete über die Fortschritte auf dem Gebiet der rechnergestützten Medikamentenentwicklung, in der Ausgangsmoleküle für die präklinische pharmazeutische Forschung zunehmend am „Reißbrett“ des Rechners entworfen werden können. D. Marx (Bochum) demonstrierte, wie auch dem Einfluss von Quantenphänomenen in gemischt quantenmechanisch/klassischen Simulationen Rechnung getragen werden kann. Die Autoren der beiden prämierten Posterbeiträge (M. A. Cuenod und P. Baillod) hatten ebenfalls die Gelegenheit, ihre Arbeiten in Kurzvorträgen darzulegen. Insgesamt unterstrich das rege Interesse an der Veranstaltung den wachsenden Einfluss moderner Simulationsmethoden für biomolekulare Fragestellungen.

Wolfgang Wenzel

Quantum Transport at the Molecular Scale

371. WE-Heraeus-Seminar

Gut 30 Jahre nach dem visionären Vorschlag von A. Aviram und M. Ratner, Moleküle als Gleichrichter in einer zukünftigen Elektronik einzusetzen, und 10 Jahre nach den ersten Experimenten von M. Reed zur Messung des Stroms durch Einzelmoleküle befindet sich das Feld der Molekularen Elektronik im rasanten Aufwind. Molekulare Elektronik befasst sich mit der Frage, wie (einzelne) Moleküle als Bausteine einer möglichen zukünftigen Nanoelektronik fungieren könnten. Unabdingbar für einen technologischen Fortschritt in dieser Richtung ist allerdings zunächst ein vertieftes Verständnis der Ladungstransportphänomene in Einzelmolekülkontakten und der dabei inhärenten Quanteneffekte.

Das von den Autoren organisierte Seminar führte vom 29. Mai bis 1. Juni 2006 etwa 60 Wissenschaftler aus der experimentellen und theoretischen Physik, Chemie und Ingenieurwissenschaften im Physikzentrum Bad Honnef zusammen. Im Mittelpunkt standen Transportprozesse in Einzelmolekülbrücken zwischen metallischen Leitern sowie Rastersondenspektroskopie von Molekülen auf Oberflächen. Während das Feld in der Frühphase durch eine Vielzahl interessanter individueller Ergebnisse geprägt war, die eher nebeneinander standen und teilweise auch nicht vereinbar waren – sowohl im Experiment als auch in der Theorie –, markierte das Seminar in dieser Hinsicht positive Trends: Auf experimenteller Seite eine zunehmend genauere Charakterisierung der Systeme und eine wachsende Systematik, beispielsweise Messungen an gleichen Molekülen mit komplementären Verfahren, wie mechanische Bruchkontakte, Elektromigration oder Rastersondenmethoden. Auf Seiten der Theorie wurden zum einen neueste Entwicklungen modell-basierter Zugänge vorgestellt, wobei dem Einfluss vibronischer Freiheitsgrade auf den Ladungstransport wachsende Bedeutung beigegeben wird; hier sind z. B. das Verständnis inelastischer Streuung und die Erklärung auf inelastischer Spektroskopie beruhender Messungen zu erwähnen. Zum anderen wurden die Möglichkeiten, aber auch Grenzen von Dichtefunktionaltheorie-basierten Zugängen im Nichtgleichgewichtstransport offen diskutiert.

Als weitere erfreuliche Entwicklung wurde erkennbar, dass zunehmend die Vielfalt molekularer Systeme mit ihrem Reichtum an individuellen und funktionalen Eigenschaften im Vordergrund aktueller Forschung stehen, die sie gegenüber Nanosystemen wie Halbleiter-Quantenpunkten hervorheben.

Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die großzügige Förderung des Seminars.¹⁾

Thomas Frauenheim, Klaus Richter, Heiko Weber

Priv.-Doz. Dr. Michael Mück und Prof. Dr. Günter Thummes, Institut für Angewandte Physik der Universität Gießen

Priv.-Doz. Dr. Wolfgang Wenzel, Forschungszentrum Karlsruhe, Institut für Nanotechnologie

Prof. Dr. Thomas Frauenheim, Universität Bremen, Fachbereich 01: Physik; Prof. Dr. Klaus Richter, Universität Regensburg, Institut für Theoretische Physik; Prof. Dr. Heiko Weber, Universität Erlangen-Nürnberg, Institut für Angewandte Physik

1) Die Tagung in Bad Honnef diente zugleich als „Kick-off“-Meeting für das gleichnamige DFG-Schwerpunktprogramm 1243 „Quantentransport auf molekularer Ebene“, das unter Federführung der drei Organisatoren der Konferenz (Sprecher T. Frauenheim) Anfang Juli startete.