

Science on Cluster Computers 291. WE-Heraeus-Seminar

Clustercomputer gewinnen in den computergestützten Natur- und Ingenieurwissenschaften zunehmend an Bedeutung. Solche Beowulf-Systeme, preiswert aus PC-Komponenten aufgebaut und vernetzt, lassen sich kostengünstig unter Linux betreiben. Mittlerweile halten sich viele Anwender mit höchstem CPU-Zeitbedarf eigene Systeme, damit sie im boomenden Gebiet der Computersimulationen mithalten können.

Vor diesem Hintergrund trafen sich im Physikzentrum Bad Honnef vom 22. bis 24. August etwa 45 Vertreter aus Computational Science und Informatik zum 291. Heraeus-Seminar „Science on Cluster Computers“. Mit der für Deutschland erstmalig in dieser interdisziplinären Breite ausgerichteten Tagung wollen die Organisatoren, die als Physiker und Mathematiker das ALiCE-Cluster an der Universität Wuppertal betreiben, eine verstärkte Kooperation der Disziplinen anstoßen, zur Optimierung des Zusammenspiels von PCs und Netzwerk in Simulationen der Computational Science.

Dass Deutschland früh eine führende Rolle im angewandten Cluster-Computing eingenommen hat, wurde von Rednern führender deutscher Cluster-Sites wie Chemnitz (U. Hübner), Heidelberg (S. Lang), Paderborn (S. Blazy), Tübingen (P. Leinen) und Wuppertal (Th. Lippert) eindrucksvoll belegt. Als besondere Stärke der deutschen Cluster-Szene ist die Entwicklung der Kommunikationssoftware ParaStation (W. Tichy) zu bewerten, die inzwischen durch die ParTec AG (N. Eicker) vertrieben wird.

International beispielhaft ist das Engagement der US-Gitter-QCD in der SciDAC-Initiative des DOE, vorgestellt von C. Watson (Jefferson Lab), D. Holmgren (Fermilab), R. Brower (BU), S. Gottlieb (Indiana) und J. Negele (MIT). Im Rahmen von SciDAC werden in den USA bis Ende 2004 zwei 10-Teraflops-Cluster aufgebaut. Wie weit man Cluster für die QCD optimieren kann, wurde von M. Hasenbusch (DESY), Z. Sroczynski (Wuppertal), P. Coddington (Adelaide) und Z. Fodor (Budapest) demonstriert.

Interessante Pilotprojekte belegten die Anwendungsbreite der Technologie: Die Palette reichte dabei von der Festkörperphysik (M. Schreiber), über die Dynamik Schwarzer Löcher (R. Spurzem), Computational Chemistry (Th. Müller) bis hin zur medizinischen Bildgebung (S. Vollmar) und Simulation von Turbinen (V. Michelassi, Rom).

Th. Sterling (CALTEC), der Vater der Beowulf-Idee, sowie R. Gupta (LANL) boten den Teilnehmern faszinierende Ausblicke auf Petaflops-Simulationen zu Beginn der nächsten Dekade und verbanden dies mit der Aufforderung an Informatiker und Anwender, im Schulterschluss auf dieses Ziel hinzuarbeiten.

Die Organisatoren danken den Vortragenden für ihre hochkarätigen Präsentationen und allen Teilnehmern für ihre Diskussionsfreudigkeit, die im regen E-Mail-Austausch nachklingt. Ein herzliches Dankeschön geht

an die Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung, deren finanzielle Förderung dieses Treffen erst ermöglicht hat. Es ist deutlich geworden, dass das Treffen der Cluster-Avantgarde nicht das letzte dieser Art gewesen sein wird.

ANDREAS FROMMER, THOMAS LIPPERT,
KLAUS SCHILLING

Progress in Nonequilibrium Green's Functions 285. WE-Heraeus-Seminar

Hochtemperatur-Supraleitung, Urknall, Exzitonische Absorption in Mikroresonatoren, Coulomb-Explosion von Metallclustern, Leitfähigkeit von Nanotransistoren und organischen Strukturen, Suprafluidität von Kernmaterie, Inertialfusion und Partonen-Dynamik haben auf den ersten Blick nicht allzu viel gemeinsam. So mag die Wahrscheinlichkeit, die führenden Experten auf diesen Gebieten gleichzeitig anzutreffen, gegen null tendieren. Aber genau das konnte man vom 18.–22. August in Dresden auf dem 285. Heraeus-Seminar. Was die Teilnehmer vereinte, war die zentrale Rolle von Quanten-Transport-Prozessen unter wesentlichem Einfluss starker Korrelationen in all den genannten Vielteilchensystemen. Die Ähnlichkeit der grundlegenden physikalischen Probleme und der sich daraus ergebenden theoretischen Konzepte war für viele überraschend. Gerade die Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen (NGF) erweisen sich immer wieder als die am besten geeignete Methode, derart unterschiedliche komplexe Probleme anzupacken, systematisch Näherungen zu entwickeln, dabei aber gleichzeitig ein Höchstmaß an Konsistenz zu bewahren. Der fächerübergreifende Austausch war unkonventionell und äußerst stimulierend, genau wie auf der ersten derartigen Tagung 1999 in Rostock.

Besonderes Highlight waren die Beiträge der Pioniere der Theorie – Paul C. Martin (Harvard), Alex Abrikosov (Argonne) und Leonid Keldysh (Moskau). Hauptschwerpunkt war diesmal der Quantentransport in Halbleitern und Nanostrukturen mit Beiträgen von D. Ferry (Tempe), A.-P. Jauho (Lyngby), N. Horing (Stevens Tech) und R. Lake/D. Jovanovic (Riverside/Motorola). Besonders letztere demonstrierten, dass NGF längst nicht mehr nur auf simple Modellsysteme beschränkt sind, sondern sich inzwischen zum Marktführer in quantitativer und prädiktiver Modellierung in der Nanotechnologie gemauert haben. Aus dem weiteren Programm seien hervorgehoben die Beiträge zur Halbleiteroptik (K. Henneberger, Rostock; F. Jahnke, Bremen) und R. Binder, Tucson), zu Hochenergiephysik (H. van Hees, Biellefeld; P. Danielewicz, Michigan), und Laserplasmen (M. Schlages, Greifswald). Besonders perspektivreich erscheint die Kombination von NGF mit anderen theoretischen und numerischen Methoden, wie zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie (P.-G. Reinhard, Erlangen, R. van Leeuwen, Groningen) oder Quanten-Monte-Carlo und Quanten-Molekulardynamik (M. Bonitz und V. Filinov, Moskau). Das gesamte

Programm, abstracts sowie Informationen zum Tagungs-Buch sind unter www.physik.uni-rostock.de/plasmen/mich/kbt02/kb02part.htm zu finden.

Ein besonderer Dank gebührt der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für ihre großzügige Förderung, die ergänzt wurde durch grants von der DFG und dem Office of Naval Research (USA). Als wenige Tage vor Seminarbeginn die Flutwellen Teile von Dresden (und das Tagungshotel) verwüsteten und auch der Verkehr nach Dresden zusammenbrach, wurden unbürokratisch zusätzliche Mittel bereitgestellt, die es den Organisatoren ermöglichten, umgehend einen neuen Tagungsort zu buchen und alle Kollegen (es gab nur eine Absage!) sicher – wenn auch z. T. auf Umwegen – nach Dresden zu bringen. Schließlich soll hier allen Teilnehmern für ihre Unerschrockenheit gedankt werden, wodurch wieder einmal eindrucksvoll bestätigt wurde, dass sich Physiker auch von widrigen Bedingungen nicht unterkriegen lassen.

MICHAEL BONITZ, ROSTOCK

Optical Methods in Atmospheric Analysis

286. WE-Heraeus-Seminar

Zum 286. WE-Heraeus-Seminar vom 14.–18. Oktober 2002 trafen sich im Physikzentrum Wissenschaftler aus Europa, Amerika und Asien, um sich mit dem Thema der atmosphärischen Diagnostik vertieft zu befassen. Anthropogene atmosphärische Veränderungen, wie beispielsweise Sommersmog, Wintersmog, der stratosphärische Ozonabbau sowie die globale Erwärmung verleihen der Thematik eine besondere Bedeutung, denn um solche Phänomene grundlegend zu verstehen und um verlässliche Vorhersagen treffen zu können, sind umfangreiche Modellrechnungen erforderlich. Diese sollten alle relevanten physikalischen und chemischen Prozesse innerhalb der Atmosphäre berücksichtigen. Dieses ist jedoch nur dann möglich, wenn die Modelle sich auf verlässliche, dreidimensional aufgelöste Langzeitbeobachtungen stützen können. Optische Verfahren liefern hierfür die besten Voraussetzungen.

Um die Bedeutung der atmosphärischen Diagnostik herauszustellen und um dem Seminar eine klare wissenschaftliche Basis zu verleihen, wurden zunächst die grundlegenden Aspekte der Atmosphärenchemie und -physik vorgestellt. Basierend darauf wurde erörtert, wie die Architektur atmosphärischer Modelle im lokalen, regionalen und globalen Maßstab aufgebaut ist.

Dann wurden lokale Sensoren präsentiert, die am Boden, vom Ballon aus, im hochfliegenden Forschungsflugzeug sowie vom Satelliten aus meteorologische Parameter, Spurengaskonzentrationen sowie Aerosolverteilungen erfassen. Der Forderung nach dreidimensional aufgelösten Messungen ist am ehesten mittels optischer Radarverfahren (LIDAR) zu genügen. Damit können routinemäßig Spurengase wie NO, NO₂, Ozon, SO₂, Benzol, Toluol, Methan usw. bei Empfindlichkeiten bis in den ppb-Bereich (10⁻⁹) nachgewiesen werden. Weiterhin lassen sich mittels LIDAR wichtige Aussagen über Windfelder, die Luftfeuchtigkeit und das Aerosol treffen. Bis dahin jedoch war es ein langer Weg, und

Prof. Dr. Andreas
Frommer, FB Mathe-
matik, U Wuppertal

Dr. Dr. Thomas Lip-
pert, FB Physik, U
Wuppertal

Prof. Dr. Klaus
Schilling, FB Physik,
U Wuppertal

Priv.-Doz. Dr.
Michael Bonitz, FB
Physik, Universität
Rostock,

um die Entwicklung an Hand der Historie deutlich zu machen, kamen in der ersten Sitzung die Pioniere zu Wort. Sie schilderten lebendig und eindrücklich die ersten LIDAR-Messungen über Industriestandorte und in der Ozonschicht. Dabei überraschte, dass der methodische Ansatz sich seitdem nur kaum verändert hat; die eigentliche Weiterentwicklung fand im Technologiebereich statt, bei den Lasersystemen und der Datenerfassung. Dank dessen werden LIDAR-Messungen heute verlässlich durchgeführt und sie sind zu einer tragenden Säule der Atmosphärenbeobachtung geworden. Trotzdem gibt es neuerdings auch Perspektiven zu grundsätzlich neuen methodischen Ansätzen: So können mittels Hochleistungs-Femtosekunden-Lasersystemen in der Atmosphäre ausgedehnte Plasmakanäle induziert werden, die - verstärkt in Rückstreichrichtung - weißes Licht generieren. Damit eröffnet sich nicht nur die Möglichkeit, mittels LIDAR erstmals mehrere Komponenten gleichzeitig nachzuweisen, sondern aus emittierten Plasmalinien kann sogar eine Elementaranalyse des Aerosols getroffen werden. Die elektrische Leitfähigkeit der Licht-induzierten Plasmakanäle lässt darüber hinaus interessante Anwendungen im Bereich der Gewitterforschung erwarten.

Abgerundet von einer ausführlichen Postersitzung und langen Diskussionsabenden bot das 286. Heraeus-Seminar eine hervorragende Gelegenheit, sich über den Forschungsstand dieses dynamischen Gebietes zu informieren. Dabei hat das besondere Ambiente des Physikzentrums erneut dazu beigetragen, eine offene und gelockerte Atmosphäre zu schaffen, wobei der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung Dank für die finanzielle Unterstützung und organisatorische Hilfe gebührt.

LUDGER WÖSTE

Quantum Magnetism: Microscopic Techniques for Novel States of Matter

288. WE-Heraeus-Seminar

Vom 4. bis zum 6. November 2002 trafen sich Festkörperphysiker aus aller Welt im Physikzentrum Bad Honnef, um über Fragen des niederdimensionalen Magnetismus zu diskutieren. Niederdimensionale Magnete sind und bleiben zentraler Forschungsgegenstand bei der Untersuchung stark korrelierter Quantensysteme. Dies ist nicht nur auf die immer größer werdende Zahl von experimentell relevanten Verbindungen und Verfeinerung der experimentellen Techniken zurückzuführen, sondern gerade auch darauf, dass solche Systeme immer wieder Grund und Prüfstein bei der Entwicklung neuer theoretischer Werkzeuge zur mikroskopischen Beschreibung von Quantensystemen geworden sind. In diesem Seminar standen methodische Weiterentwicklungen und daraus resultierende Erkenntnisse über den quantalen Magnetismus im Zentrum; dabei stellte sich heraus, dass in verschiedenen Bereichen in den letzten Jahren wichtige Fortschritte gelungen sind. So hat die seit kurzem mögliche Berechnung von Matrixelementen im Bethe-Ansatz dynamische und Transporteigenschaften der exakten Berechnung zugänglich gemacht. Ebenso haben sich verschiedene Tech-

niken der Reihenentwicklung als sehr leistungsfähig zur Behandlung von frustrierten und fermionischen Modellen erwiesen, die die bisher vorhandenen numerischen Resultate aus exakten Diagonalisierungen gut ergänzen. Große Fortschritte bei der Behandlung von Systemen nahe an Phasenübergängen erster wie zweiter Art in der Monte-Carlo Simulation haben das präzise Studium von Unordnungsübergängen in Magneten erlaubt, während es mithilfe der Dichtematrix-Renormierungsgruppe zum ersten Male gelang, spontane Plakettenströme in elektronischen Leitern nachzuweisen, sowie beim Spin-Peierls-Übergang dynamische Phononen zu betrachten. Aber auch fast schon klassische Methoden wie Bosonisierung oder die Betrachtung topologischer Terme in Kontinuumsfeldtheorien sind weiterhin von großem Interesse, wie Vorträge zur Analyse von ESR-Experimenten (I. Affleck) und zur Klassifizierung der Phasen in frustrierten und dimerisierten Spinketten (F.D.M. Haldane) zeigten. Aufgrund der rasanten Entwicklung im Bereich des molekularen Magnetismus wird es, wie sich ebenfalls herausstellte, von immer größerem Interesse, zu versuchen, die zur Beschreibung von Bulk-Systemen entwickelten Techniken auf endliche Systeme zu übertragen.

Die gleichermaßen anregende wie gastliche Atmosphäre des Physikzentrums Bad Honnef hat dieses Seminar zu einer besonders produktiven wie auch schönen Veranstaltung werden lassen. Dafür und nicht zuletzt für die finanzielle und organisatorische Unterstützung durch die Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung bedanken sich die Organisatoren Ray Bishop und Damian Farnell (beide UMIST Manchester) sowie Johannes Richter (U Magdeburg) und Ulrich Schollwöck (MPI Festkörperforschung Stuttgart) recht herzlich.

ULRICH SCHOLLWÖCK

Trapped charged particles and fundamental interactions

292. WE-Heraeus Seminar

Ungebrochen ist die Faszination, die von der Beobachtung und den Möglichkeiten der Manipulation gespeicherter geladener Teilchen ausgeht. Ende August 2002 haben sich daher 120 Physiker (50% Doktoranden) im Rahmen des 292. WE-Heraeus-Seminars im hervorragend geführten Tagungszentrum der Hanns-Seidel-Stiftung in Wildbad-Kreuth (Tegernsee) zusammengefunden. Bereits an der Spanne der zur Speicherung geladener Teilchen eingesetzten Instrumente, die von Miniatur-Paul-Fallen über Penning-Fallen und Elektronenstrahlionenfallen (EBIT) bis hin zu Schwerionenspeicherringen reichte, zeichnete sich die Breite der vertretenen physikalischen Themenbereiche ab: der Quantenoptik und Atomphysik, der Physik kalter Einkomponentenplasmen und Schwerionenstrahlen, sowie der Kernphysik kurzlebiger radioaktiver Isotope.

Den Auftakt der Konferenz bildete die Präsentation kalter, lasergekühlter Ionenensembles, so genannter Ionenkristalle. Hier stand vor allem die Dynamik dieser dünnen Kristalle im Vordergrund, die Ausbreitung von Störungen sowie die Einbettung fremder Spezies bis hin zur Demonstration chemi-

scher Reaktionen. Eng verwandt schloss sich die Thematik gekühlter Schwerionenstrahlen an. Zum einen wurden von den etablierten Speicherringen (ESR, CRYRING) neue Erkenntnisse zur Ordnung dünner Strahlen vorgebracht, zum anderen die erstmalige Realisierung kristalliner Ionenstrahlen an einem Miniaturspeicherring (PALLAS) vorgestellt.

Den nächsten Schwerpunkt bildete die Präzisionslaserspektroskopie an schmalen atomaren Linien einzelner Ionen (Einzelionen-Zeitstandard). Beeindruckend war die herausragende Präzision der von den führenden Gruppen (NIST, MPQ, PTB) vorgestellten Messungen im Bereich von 10^{-14} , aber auch die hohen Anforderungen an das systematische Verständnis der Apparaturen. Es ist bereits möglich, das existierende Frequenzstandard in der Genauigkeit zu übertreffen. Neueste Ergebnisse aus dem Bereich der Quantenoptik wurden vorgestellt, vor allem aus dem Bereich der Quanteninformationsverarbeitung mit gespeicherten Ionen (NIST, Innsbruck, Hamburg), sowie der Abtastung der Felder einer Kavität höchster Finesse mit Hilfe eines einzelnen gespeicherter Ions (MPQ, Innsbruck).

Große Fortschritte wurden auch bei der Massenmessung hochgeladener (SMILE-TRAP) stabiler (MIT) und radioaktiver Isotope (ISOLDE/CERN) in Penning-Fallen gemacht. Relative Genauigkeiten von bis zu 10^{-11} wurden bei gleichzeitiger Speicherung zweier verschiedener Ionen berichtet und präzise Massenmessungen, die beispielsweise für die Beschreibung des nuklearen Betazerfalls oder Prozesse der Elementsynthese benötigt werden. Darüberhinaus wurden Messungen des g-Faktors des gebundenen Elektrons an wasserstoffähnlichen Ionen (Mainz) (ähnlich den originären Messungen am freien Elektron) berichtet, aus denen ein verbesserter Wert für die Elektronenmasse gewonnen werden konnte.

Den Abschluss der Konferenz bildeten Vorträge zum Status der Antiwasserstoffherzeugung (ATRAP, ATHENA), die aber leider auf die erfolgreichen aktuellen Strahlzeiten am CERN nicht Bezug nehmen konnten.

Unvergessen wird wohl allen Teilnehmern neben der inspirierenden Atmosphäre der Konferenz auch der Auftritt der lokalen Goafßlschnoizler Gruppe bleiben, die mit Schuhplattler und rhythmischem Peitschenknallen eine eindrucksvolle Vorstellung bot. Eine Sammlung ausgewählter Präsentationen wird im Frühjahr 2003 bei J. Phys. B (IOP) erscheinen.

ULRICH SCHRAMM

Prof. Dr. L. Woeste,
Freie Universität
Berlin, Institut für
Experimentalphysik

Priv.-Doz. Dr. Ulrich
Schollwöck, MPI für
Festkörperforschung,
Stuttgart

PD Dr. Ulrich
Schramm, Sektion
Physik LMU Mün-
chen