

## Mixed States of Light and Matter

### 450. WE-Heraeus-Seminar

Licht und Materie werden zumeist als getrennte Phänomene betrachtet. Erste Arbeiten zu Licht-Materie-Mischzuständen gehen auf Hopfield zurück, der vor etwa fünfzig Jahren quantisierte Eigenzustände der Kopplung von Licht und Materie betrachtete, um optische Eigenschaften von Festkörpern zu erklären. Im Medium wird eine elektromagnetische Welle von einer Polarisationswelle begleitet. Es entsteht ein Polariton, ein gekoppelter Quantenzustand aus Licht und Materie.

Aufgrund experimenteller Entwicklungen hat das Gebiet der Licht-Materie-Mischzustände vor kurzem besondere Aktualität gewonnen. So gelingt es in atomaren Gasen, begünstigt durch spektral scharfe Dunkelresonanzen, Licht mit optischen Gruppengeschwindigkeiten bis zu wenigen Metern pro Sekunde zu beobachten, was acht Größenordnungen unterhalb der Ausbreitungsgeschwindigkeit von Licht im Vakuum liegt. Eine zentrale Rolle spielen dabei die von Fleischhauer und Lukin vorgestellten Dunkelzustands-Polaritonen, d. h. Atom-Licht-Mischzustände mit langer Lebensdauer. Eine andere spannende Neuentwicklung sind Exciton-Polariton-Kondensate. Dies sind makroskopische Quantenzustände „halb aus Licht, halb aus Materie“.

Vor diesem Hintergrund fand das 450. WE-Heraeus-Seminar vom 8. bis 10. Februar im Physikzentrum Bad Honnef statt. Ziel war es, internationale Spitzenforscher mit Nachwuchswissenschaftlern zusammenzubringen und einen Bogen über die unterschiedlichen Aspekte der Licht-Materie-Mischzustände auf den Gebieten der Quantenoptik mit atomaren Gasen und Molekülen bis hin zur Festkörperphysik zu spannen. Neben den bereits angesprochenen Themen wurden neueste Arbeiten in der Resonator-Quantenelektrodynamik bis hin zu plasmonischen Systemen vorgestellt.

Das aus 21 Vorträgen und einer umfangreichen Postersitzung bestehende Programm lieferte spannende Einblicke in neueste Forschungsergebnisse, die in der gemütlichen Atmosphäre des Physikzentrums ausgiebig diskutiert wurden. Es wurden drei Posterpreise vergeben, wobei der Jury die Auswahl der Sieger nicht leicht fiel. Gedankt sei der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung sowie dem Physikzentrum für ihre kurzfristige Bereitschaft, in Anbetracht der hohen Zahl der Anmeldungen die Aufnahme von 100 Teilnehmern zu ermöglichen, was für ein im Stil der amerikanischen Gordon-Konferenzen gehaltenes Seminar ungewöhnlich hoch ist. Insgesamt war das Seminar eine sehr gelungene Veranstaltung auf höchstem wissenschaftlichem Niveau.

Martin Weitz

## Density Functional Theory and its Applications in Crystallography

### Wilhelm und Else Heraeus-Physikschule

Moderne Implementierungen der Dichtefunktionaltheorie (DFT) bieten einen effizienten numerischen Zugang zum Zusammenhang zwischen strukturellen und elektronischen Eigenschaften von Materialien auf der Nanoskala und damit die Grundlage für eine gezielte Materialoptimierung auf der Basis von Simulationen. Im Rahmen dieser Physikschule befassten sich neun Dozenten und gut 50 Teilnehmer aus Deutschland, Österreich und Belgien vom 7. bis 11. Februar bei Vorlesungen, an Postern und bei zahlreichen intensiven Diskussionen mit der DFT als Methode zur Beschreibung des elektronischen Zustands von Festkörpern.

Der Ferienkurs bestand aus drei Modulen. Im ersten führten W. H. E. Schwarz (U Siegen) und H. Eschrig (IFW Dresden) in die Grundlagen der DFT ein. G. Seifert (TU Dresden) präsentierte die davon abgeleitete, dichtefunktional-basierte tight-binding-Methode, die die genäherte Berechnung größerer und komplexer aufgebauter Materialien erlaubt.

Das zweite Modul war speziellen Implementierungen der DFT gewidmet, die verschieden detailliert die Modellierung physikalischer Phänomene erlauben. Dies sind zunächst die All-Elektronenverfahren wie die von K. Schwarz (TU Wien) im Detail vorgestellte FLAPW-Methodik (FLAPW = Full-potential Linearized Augmented Plane Wave), mit der sich die Gesamtenergie kleiner Materialsysteme und davon abgeleitete Größen sehr genau berechnen lassen. Für größere, strukturell komplexere Materialien besonders gut geeignet sind Verfahren auf der Basis von ebenen Wellen und Pseudopotentialen, die G. Kresse (U Wien) mit Fokus auf die PAW-Implementierung (PAW = Projector Augmented Wave) sowie die konkreten, anwendungsrelevanten numerischen Details darstellte. Darüber hinaus bietet sich gerade für komplexe Systeme, bei denen ein kleiner, elektronisch aktiver Teil in eine große, passiv sterisch selektierende Umgebung eingebunden ist, ein kombiniertes QM/MM-Verfahren an (QM/MM = QuantenMechanik/Molecular-Modeling), das G. Seifert (TU Dresden) vorstellte. Details komplex gekoppelter magnetischer Strukturen lassen sich mit der Vektor-Spindichtefunktionaltheorie modellieren (G. Bihlmayer, FZ Jülich).

Das dritte, anwendungsbezogene Modul griff aktuelle Entwicklungen auf den Gebieten der nanostrukturierten Materialien sowie der Systeme mit Wechselwirkungen auf verschiedenen Skalen auf. Die Analyse von nanostrukturierten und partiell unstrukturierten Materialien mit DFT-Verfahren im Vergleich mit Daten aus der experimentellen Mikroskopie erfordert die Berücksichtigung

phononischer Freiheitsgrade (D. Lamoen, U Antwerpen). Wie sich neu entstehende Funktionalitäten an Materialoberflächen und in Multilagensystemen mithilfe der DFT erklären, z. T. auch vorhersagen lassen, zeigte R. Pentcheva (LMU München). Weiterentwicklungen auf der Basis von Greenschen Funktionen bis hin zu effektiven Hamilton-Ansätzen ermöglichen es, auch den elektronischen Transport zu modellieren, und bieten einen Ansatzpunkt für die Einbettung der DFT in die skalenübergreifende Modellierung (S. Gemming, FZ Dresden-Rossendorf).

Ein umfangreiches Rahmenprogramm bot zahlreiche Möglichkeiten zu ausgiebigen Diskussionen zwischen Dozenten und Teilnehmern. Ein besonderes Highlight war der öffentliche Abendvortrag von T. Hahn (RWTH Aachen) zur Symmetrie in Kristallen, Kunst und Musik, bei dem er in die Theorie der Fries-Gruppen anhand von anschaulichen Beispielen einführte und für den musikalischen Teil tatkräftig von H. Klapper (RWTH Aachen) am Klavier unterstützt wurde.

Der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung sei herzlich für die Förderung der Schule gedankt, die diesen intensiven Dialog zwischen wissenschaftlichem Nachwuchs und den Dozenten ermöglicht hat.

Sibylle Gemming, Gerd Raabe  
und Michael Schreiber

## Nanostructured Thermoelectric Materials

### 451. WE-Heraeus-Seminar

Vom 21. bis 24. Februar 2010 trafen sich zu diesem Seminar 21 eingeladene Redner und 52 weitere Teilnehmer aus elf Ländern im Physikzentrum Bad Honnef. Der Zeitpunkt passte ideal in den Rahmen verschiedener aktueller Förderinitiativen zu Thermoelektrika seitens der EU und des BMBF und insbesondere des 2009 eingerichteten DFG-Schwerpunktprogramms „Nanostrukturierte Thermoelektrika“.

An die Historie dieses knapp 15 Jahre alten Forschungsfeldes erinnerte Mildred Dresselhaus, eine der Pionierinnen für den Einsatz nanostrukturierter Materialien in der Thermoelektrik, bevor sie die Perspektiven im Kontext der globalen Krise der Energiewirtschaft schilderte. Die Vorteile der Nanostrukturierung für thermoelektrische Anwendungen wurden thematisiert. Viele Beiträge zeigten, dass es erst seit kurzem Messmethoden gibt, um die Vorzüge der eingeschränkten Dimensionen im Elektronensystem zu erforschen, obwohl die erwartete Reduzierung der Wärmeleitfähigkeit in vielen Messungen bereits beobachtet wurde. Daher sind weitere wissenschaftliche Durchbrüche in Kürze zu erwarten. So wurden wichtige neue thermoelektrische

Prof. Dr. Martin Weitz, Institut für Angewandte Physik, Universität Bonn

Priv.-Doz. Dr. Sibylle Gemming, FZ Dresden-Rossendorf, Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung; Prof. Dr. Gerd Raabe, RWTH Aachen, Institut für Organische Chemie; Prof. Dr. Michael Schreiber, Technische Universität Chemnitz, Institut für Physik

Dr. Raphaël Hermann, Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich; Prof. Kornelius Nielsch, Institut für Angewandte Physik, Universität Hamburg; Dr. Harald Böttner, Fraunhofer Institut für Physikalische Messtechnik, Freiburg

Prof. Dr. Jens-Uwe Sommer und Prof. Dr. Manfred Stamm, Leibniz-Institut für Polymerforschung, Dresden; Prof. Dr. Michael Mackay, University of Delaware, Newark/USA

Messverfahren vorgestellt, sowohl für einzelne Nanodrähte (F. Völklein) als auch für massive Proben (J. de Boor).

Die 30 gezeigten Poster repräsentierten die komplette Bandbreite der Forschung an Thermoelektrika von der Nanodrahtsynthese bis zur Anwendung in der Automobilindustrie. Dank der Förderung der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung, der Deutschen Thermoelektrik Gesellschaft, und des DFG SPP-1386 „Nanostrukturierte Thermoelektrika“ wurden drei Posterpreise vergeben. Sie gingen an C. Schade-Birkel (U Mainz), P. Bauer Pereira (FZ Jülich) und M. E. Toimil-Morales (GSI Darmstadt).

Als Fazit des wissenschaftlichen Teils kristallisierten sich zwei wesentliche Punkte heraus: einerseits die weniger erfreuliche mangelnde Reproduzierbarkeit einiger Resultate, die standardisierte Messmethoden dringend erforderlich macht, andererseits das erfreuliche zeitnahe Zusammenkommen vieler interessanter Synthesemethoden (u. a. Spark-Plasma-Sinterverfahren, spinodale Entmischung) mit abgestimmten Messverfahren, das eine vielversprechende nahe Zukunft für die Thermoelektrik ankündigt.

Der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung danken wir für die großzügige Förderung und die gute organisatorische Arbeit.

Raphaël Hermann, Kornelius Nielsch und  
Harald Böttner

## Polymer-Nano-Particles Interactions: Concepts, Observations and Applications

### 454. WE-Heraeus Seminar

Nanoteilchen-Polymer-Systeme revolutionieren die Materialforschung auf dem Gebiet der weichen kondensierten Materie mit vielversprechenden Anwendungen, welche von der organischen Photovoltaik bis zur Medizin reichen. Gleichzeitig gibt es viele ungelöste Probleme bei der theoretischen Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen Polymeren und Nanoteilchen. Ziel des Seminars, das vom 28. – 31. März 2010 stattfand, war es, über grundlegende Aspekte der Polymer-Nanoteilchen-Wechselwirkungen, aber auch über neue Experimente und Anwendungen intensiv zu diskutieren. Mehr als 70 Teilnehmer waren der Einladung der Organisatoren nach Bad Honnef gefolgt.

In vielen Anwendungen spielen Komposite aus Nanoteilchen und dichten Polymersystemen (Schmelzen) eine Rolle. Ein Verständnis der effektiven Wechselwirkungsmechanismen der Nanoteilchen, verbunden mit einer Beeinflussung der Polymermatrix stellt eine der größten Herausforderungen an die

theoretische Beschreibung dieser Systeme dar. Verschiedene numerische Methoden (Integralgleichungsansätze, Dichtefunktionaltheorie und direkte Computersimulationen) geben Einblicke in effektive Wechselwirkungsmechanismen zwischen den Teilchen und in das Phasenverhalten von Polymer-Nanoteilchen-Mischungen. Im Falle repulsiver mikroskopischer Wechselwirkungen zwischen Monomeren und Nanoteilchenoberfläche zeigt sich eine Dominanz der Flüssigkeitseigenschaften auf der Monomerskala. Derartige Mischungen haben ungewöhnliche Eigenschaften wie eine erhöhte Mobilität und eine Verringerung der Viskosität. Die numerischen Analysen ergeben eine anziehende effektive Wechselwirkung („potential of mean force“), was die Tendenz zur Clusterbildung und Phasentrennung fördert. Im Falle einer anziehenden Monomer-Nanoteilchen-Wechselwirkung kann sich dieser Effekt umkehren und unter bestimmten Bedingungen ist eine ideale Dispersion von Nanoteilchen in der Polymermatrix möglich.

Nanoteilchen können als einfachste Modelle von Proteinen angesehen werden. Die Adsorption von Nanoteilchen auf Polymeroberflächen ist deshalb ein interessantes Modellbeispiel für biologische Anwendungen. Einfache analytische Modelle (Skalentheorien, Näherungen des mittleren Feldes) gestatten hier einen Einblick in das Wechselspiel von Konformationsentropie der Polymere und energetischen Wechselwirkungen. In diesem Zusammenhang sind auch Ladungseffekte von besonderer Bedeutung. Proteine und die meisten wasserlöslichen Polymere tragen dissoziierbare Molekülgruppen, welche durch Freisetzung von Gegenionen eine elektrostatische Ladung bekommen. Ladungseffekte und die Entropie der Gegenionen lassen sich nun ausnutzen, um Nanoteilchen (Proteine) an Polymeroberflächen zu binden.

Das Seminar war durch interdisziplinäre Diskussionen von der Physik über die Chemie und Biologie bis hin zu materialwissenschaftlichen Fragen geprägt. Neben 20 eingeladenen Vorträgen boten über 40 Posterbeiträge Anlass zu vielen Diskussionen über theoretische und experimentelle Aspekte und zu persönlichen Gesprächen, für die das Physikzentrum in Bad Honnef den idealen Rahmen bildete. Die Organisatoren möchten sich bei der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die Förderung und bei Frau Nowotka für die hervorragende Unterstützung bei der Organisation des Seminars sowohl in der Vorbereitungsphase als auch vor Ort bedanken.

Jens-Uwe Sommer, Manfred Stamm  
und Michael Mackay