

Laser FLASH beim DESY in Hamburg wurden dargestellt. Dazu werden neue diagnostische Methoden wie die Röntgen-Thomson-Streuung entwickelt.

Ab-initio-Simulationen und theoretische Modelle haben in den letzten Jahren dank des enormen Zuwachses an Rechenkapazität eine neue Qualität bei der Vorhersagbarkeit von Eigenschaften komplexer Systeme erreicht. So wurden Quanten-Molekulardynamik- und Pfadintegral-Monte-Carlo-Simulationen sowie ihre breite Anwendung bis hin zur Astrophysik und Bose-Einstein-Kondensation in Exzitonensystemen vorgestellt.

Die 60 Teilnehmer haben drei sehr interessante Tage mit intensiven Diskussionen besonders an den schönen Sommerabenden im Physikzentrum verbringen können und danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die großzügige Förderung des Seminars und den Mitarbeitern des Physikzentrums für die Unterstützung vor Ort.

Ronald Redmer und Dieter H. H. Hoffmann

Trends in Molecular Biophysical Spectroscopy

393. WE-Heraeus-Seminar

Das Ziel des Seminars, das vom 26. bis 28. April im Physikzentrum in Bad Honnef stattfand, war es, ein Forum zur Präsentation und Diskussion neuester Entwicklungen auf dem hochaktuellen interdisziplinären Gebiet der experimentellen und theoretischen Biospektroskopie zu bieten. Diese soll dazu beitragen, Lebensvorgänge auf molekularer Ebene besser zu verstehen. Dabei stand besonders die Förderung des Austausches zwischen Wissenschaftlern aus verschiedensten Fachgebieten, die an dieser wichtigen Fragestellung arbeiten, im Vordergrund. Eingeladen waren deshalb aktive Forscher aus den Gebieten Physik, Chemie, Physikalische Chemie, Biochemie, Molekulare Medizin, Bio-Informatik und anderen interdisziplinären Bereichen aus Europa und den USA.

19 Vorträge und 20 Poster umfassten experimentelle und theoretische Beiträge aus dem hochaktuellen Gebiet der Biospektroskopie. Die Hauptschwerpunkte dabei lagen auf der Anwendung innovativer spektroskopischer Techniken und leistungsstarker theoretischer Methoden zur spezifischen Detektion und Strukturaufklärung von Biomolekülen sowie der Charakterisierung ihrer spezifischen Funktionen zur Steuerung lebenswichtiger Prozesse.

Obwohl die Teilnehmer aus verschiedenen Teilgebieten der Naturwissenschaften kamen, gelang es den eingeladenen Sprechern, das Übergreifende zu den benachbarten Arbeitsgebieten darzustellen, sodass alle von den Vorträgen profitierten. Das wurde vor allem von Teil-

nehmern, die zum ersten Mal bei einem Heraeus-Seminar dabei waren, positiv bemerkt. Die Vortragenden und die Posterbeiträge berichteten über eine Vielzahl neuester Aspekte und wissenschaftlicher Durchbrüche der experimentellen und theoretischen Biospektroskopie. Neueste Erkenntnisse wurden z. B. auf dem Gebiet chiraler Raman-Spektroskopie einzelner Moleküle, im Rahmen von UV-Resonanz-Raman-Streuung zum Studium von Protein Faltung und von Raman-Methoden für größere Bio-Organismen vorgestellt. Des Weiteren wurde über experimentelle Aspekte der Ultrakurzzeitspektroskopie als Mittel zur Untersuchung molekularer dynamischer Vorgänge berichtet. Die Interpretation experimenteller Daten bedarf einer leistungsstarken Theorie. So gaben die vorgetragenen theoretischen Studien Übersichten über die neuesten umfangreichen Berechnungen angeregter Zustände mittels quantenmechanischer Methoden und molekulardynamischer Simulationen.

Die Organisatoren bedanken sich bei der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die großzügige Förderung des Workshops und für die Unterstützung bei der technischen Organisation.

Manfred L. Ristig, Salim Abdali,
Henrik G. Bohr und Jürgen Popp

Interfaces between Physics and Computer Science

International WE-Heraeus Summer School

Schnittstellen zwischen Statistischer Physik, Theoretischer Computer Science und Informatik haben in den vergangenen Jahren zunehmend an Bedeutung gewonnen, da es eine Ähnlichkeit zwischen Kernproblemen von Computer Science und Informatik einerseits und Modellen der Statistischen Mechanik andererseits gibt. Zufallsprozesse in großen Ensembles von interagierenden Einheiten kommen in beiden Bereichen vor, seien die Einheiten so genannte Agenten, Teilchen, Variablen oder Prozessoren. So lassen sich Methoden zum Auffinden der Grundzustandsenergie eines ungeordneten Spinsystems auf die Lösung von Optimierungsproblemen anwenden, oder exakte Abbildungen zwischen Wachstumsprozessen (diffusion-limited aggregation) außerhalb des Gleichgewichts und klassischen Such- und Kodierungsalgorithmen in der Informatik führen auf Lösungen von Problemen, die zuvor in der Informatik als ungelöst galten. Im Hinblick auf Kryptographie ist die experimentelle Realisierbarkeit von Quantencomputern von großer Bedeutung und die Effizienz von Quantenalgorithmen ist von praktischem und theoretischem Interesse.

In der Zeit vom 10. bis 24. Juni 2007 trafen sich etwa 40 Teilnehmer (vorwiegend graduierte Studenten und Postdoktoranden) aus ganz Europa auf dem Campus der Jacobs University in Bremen, um im Rahmen der Sommerschule die Schnittstellen zwischen Physik und Computer Science zu analysieren. Sechzehn international renommierte Sprecher aus dem In- und Ausland präsentierten in 35 Vorlesungen aktuelle Themen aus drei Bereichen, in denen Methoden der Theoretischen Physik auf Optimierung, Kodierung und algorithmische Fragestellungen angewandt wurden.

Der erste Teil (Optimierungsprobleme und Spingläser) handelte von so genannten satisfiability problems (SAT), einer Klassifizierung von algorithmischer Komplexität, Vertex-Überdeckungen von Zufallsgraphen, Kodierung und multi-user communication, der cavity-method in Spingläsern und sog. message-passing-Algorithmen.

Im zweiten Teil (Wachstumsprozesse in der Physik) wurden Wachstumsmodelle auf Bäumen in Beziehung gesetzt zur Konstruktion von verschiedenen Suchbäumen, Phasenübergängen außerhalb des Gleichgewichts und Kondensationsphänomenen in Transportprozessen.

Der dritte Teil (Quantum Computing) enthielt Einführungen in Quantenalgorithmen von Shor und Grover, Josephson-Qubits, deren optische Kontrolle sowie Ursachen und Modelle für Dekohärenz und einen Einblick in Experimente aus der Quantenoptik zur Kontrolle von Kohärenz in Halbleiter-Quantenpunkten. Interessante Querverbindungen zu Modellen der Statistischen Mechanik zeigten sich bei einer bestimmten Darstellung von Zuständen, die als universelle Quelle von Quantum Computing dienen können.

Die Sommerschule machte deutlich, wie vielseitig Methoden aus der Theoretischen Physik Anwendung auch außerhalb der Physik finden, und regte die Teilnehmer an, ihr Wissen über das eigene Arbeitsgebiet hinaus zu erweitern.

Außerhalb der Vorlesungen hatten auch die Teilnehmer Gelegenheit, in Kurzvorträgen ihre aktuellen Arbeiten vorzustellen. Darüber hinaus gab es an den Abenden und am Wochenende bei einer Reihe von Aktivitäten auf und außerhalb des Campus zahlreiche Gelegenheiten, über den Vorlesungsstoff und die eigenen Interessen an diesem Gebiet zu diskutieren und Kontakte zu knüpfen.

Im Namen aller Teilnehmer möchte ich der Heraeus-Stiftung ganz herzlich für die großzügige finanzielle Unterstützung danken.

Hildegard Meyer-Ortmanns

Prof. Dr. Manfred L. Ristig, Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln; Prof. Dr. Salim Abdali, Prof. Dr. Henrik G. Bohr, Department of Physics, Technical University of Denmark, Lyngby /Dänemark; Prof. Dr. Jürgen Popp, Institut für Physikalische Chemie, Universität Jena

Prof. Dr. Hildegard Meyer-Ortmanns, School of Engineering and Science, Jacobs University Bremen