

Modellexperiment zur Massenspektrometrie (Rainer Pippig, München) sowie zur Speicherung von Partikeln in verschiedensten Teilchenfallen (Annette Schmitt, U Mainz) vorgeführt, was die Teilnehmer zu regem Experimentieren veranlasste.

In gewohnt perfekter Weise wurde das Seminar nunmehr von Victor Gomer als Nachfolger von Joachim Debrus am Physikzentrum Bad Honnef betreut. Mit Umsicht, Bergen an Unterrichtsmaterial und der optimalen Organisation einer Wanderung zum Drachenfels und eines wunderschönen Grillabends lieferten Herr Gomer und die anderen Mitarbeiter des Physikzentrums den passenden Rahmen zu einer mehr als gelungenen Fortbildungsveranstaltung.

KLAUS WENDT UND GERMAN HACKER

Adaptivity in Finite Element Analysis: Models, Meshes and Polynomial Order

303. WE-Heraeus-Seminar

Das zentrale Thema des 303. Heraeus-Seminars, das vom 8. – 10. September 2003 im Physikzentrum Bad Honnef stattfand, waren effiziente Methoden zur hierarchischen Diskretisierung von Partiellen Differentialgleichungen mit Anwendungen in der computergestützten Physik und den Ingenieurwissenschaften. In 33 Vorträgen und bei ca. zehn Posterpräsentationen berichteten Experten der Strukturmechanik, der Luft- und Raumfahrttechnik, Strömungsmechanik, angewandten Mathematik und Informatik sowie Software-Entwickler aus Europa, den USA und Israel über ihre aktuellen Forschungsarbeiten.

Die zur hierarchischen Approximation häufig verwendete p- bzw. hp-Version der Finite-Elemente-Methode vereint den klassischen Ansatz der Courant-Elemente der Strukturmechanik mit der vor allem in der Strömungsmechanik erfolgreichen Spektralmethode. Eine gleichzeitige Netzverfeinerung und Polynomgraderhöhung erlaubt dabei eine exponentielle Konvergenz sogar dann, wenn die exakte Lösung der Differentialgleichung Singularitäten aufweist.

Etwa zu gleichen Teilen wurden grundlegende mathematische Fragen zu Methoden hoher Ordnung und anwendungsbezogene Problemstellungen behandelt. Von zentraler mathematischer Bedeutung sind Aussagen über die Konvergenz und die numerische Robustheit der Verfahren sowie adaptive Ansätze, die Lösungssingularitäten erkennen und den Verfeinerungsprozess automatisch steuern. Wesentliche Diskussionspunkte zur algorithmischen Umsetzung stellten z.B. Vorkonditionierer zur iterativen Lösung der auftretenden Gleichungssysteme und Methoden zur parallelen Bearbeitung dar.

In Hinblick auf komplexe praktische Anwendungen wurden Arbeiten vorgestellt, die Mehrfachschädigungen an Flugzeugrümpfen mit bis zu 50 Millionen Freiheitsgraden lösen und einen Grad an Vorhersagezuverlässigkeit liefern können, der mit herkömmlichen Verfahren nicht möglich ist. Weitere Vorträge aus den Ingenieurwissenschaften berichteten über neue Entwicklungen zur Simulation von Fluid-Struktur-Wechselwirkungen, die z.B. in Blutgefäßen oder bei der Interaktion von Wind und Bauwerken auftreten.

Einen breiten Raum nahm schließlich auch die Frage der Wahl des ‚richtigen‘ mathematischen Modells ein. Auch hier erlaubt es das Konzept der hierarchischen Ansätze, mit einer Diskretisierung eines einfachen, oftmals dimensionsreduzierten Modells zu beginnen und, gesteuert von der a posteriori geschätzten Lösungskomplexität, lokal oder global aufwändigere Modelle zu integrieren.

Wir danken der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die Unterstützung, die diesen fruchtbaren Gedankenaustausch erst möglich gemacht hat.

ERNST RANK

Carbon Nanotubes

305. WE-Heraeus-Seminar

Kohlenstoff-Nanoröhrchen (carbon nanotubes) haben sich in den vergangenen Jahren aufgrund ihrer vielseitigen Eigenschaften zu einem Gebiet intensiver Forschung entwickelt. Diesem Umstand wurde mit der Durchführung des 305. Wilhelm und Else Heraeus-Seminars vom 3. bis 5. November 2003 Rechnung getragen, zu dem sich Wissenschaftler aus aller Welt im Physikzentrum in Bad Honnef trafen, wobei der große Anteil an Nachwuchswissenschaftlern besonders erfreulich war. Anhand von 16 Vorträgen und 21 Postern ergab sich ein umfassender Überblick über das weitgefächerte Feld der auf Kohlenstoff-Nanoröhrchen basierenden synthetischen Nanostrukturen.

Die 1991 von Iijima entdeckten Kohlenstoff-Nanoröhrchen bestehen aus in sich geschlossenen, aufgerollten Graphitschichten. Es existieren einwandige und mehrwandige Nanoröhrchen, die man im Allgemeinen abgekürzt mit SWNT (single-walled nanotube) und MWNT (multi-walled nanotube) bezeichnet. Diese Moleküle besitzen Durchmesser von wenigen Nanometern und Längen von vielen Mikrometern. Es sind daher quasi-eindimensionale Strukturen, die interessante elektronische und mechanische Eigenschaften besitzen.

Das Vortragsprogramm beinhaltete Abschnitte über die Synthese der Kohlenstoff-Nanoröhrchen, Möglichkeiten der chemischen Modifikation bzw. Reinigung und Abschnitte über Komposit-Materialien, die auf Nanoröhrchen basieren. Weitere Themen waren der elektrische Transport in Nanoröhrchen, Spektroskopie und diverse Anwendungen. Ferner gab es einen Ausflug in die Theorie der Bor-Nitrid-Nanoröhrchen.

Besondere Highlights aus dem Bereich der Anwendungen waren die Vorträge von Georg Düsberg (Infineon) und John Robertson (Cambridge University), die sich beide mit der gezielten Synthese von Carbon Nanotubes am Ort der geplanten Anwendung beschäftigen. Obwohl in beiden Fällen die Synthese durch Abscheidung aus der Gasphase (chemical vapour deposition, CVD) erfolgt, reichen die Anwendungen von Vias und Interconnects in hochintegrierten Schaltungen bis hin zu Feldemittern für Flachbildschirme. Kannan Balasubramanian (MPI Stuttgart) zeigte, wie die Eigenschaften von Nanoröhrchen durch chemische Modifikation verändert werden können, um deren Anwendungsspektrum zum Beispiel in der Elektronik zu verbreitern.

Wir danken Siegmund Roth und Jiří Čech (Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart) für die Organisation und der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung für die großzügige Unterstützung dieser gelungenen Veranstaltung.

JANNIK MEYER UND DIRK OBERGFELL

Excited State Processes of Carotenoids in Photosynthesis

311. WE-Heraeus-Seminar

Carotenoide sind langkettige, teilweise substituierte, lineare Polyene. Sie fungieren in photosynthetisierenden Pigment-Protein-Komplexen sowohl als Lichtsammel in Anregungsenergie-Transferketten, wie auch als Energiefluss-regulierende und die Struktur stabilisierende Elemente. In der Erforschung der Lichtsammelfunktion waren die Carotenoide bis vor wenigen Jahren das „Aschenputtel“ gegenüber den (Bakterio)chlorophyllen. Die Situation änderte sich Ende der 1990er-Jahre: Schon länger vorliegende quantenchemische Ergebnisse zu „optisch dunklen“ Zuständen inspirierten eine außergewöhnliche Fülle von Forschungsaktivitäten zur Funktion der Carotenoide in der Photosynthese. Die aus diesen Aktivitäten resultierenden hochinteressanten, teilweise aber auch widersprüchlichen Ergebnisse veranlassten den Berlin-Potsdamer SFB 429, ein Zusammentreffen der international führenden Arbeitsgruppen für ein fundiertes Resümee des gegenwärtigen Kenntnisstandes zu initiieren.

Dankenswerterweise hat es die Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung übernommen, dieser Thematik eines ihrer Seminare zu widmen. Für beste fachliche Voraussetzungen sorgte die weltweit hohe Akzeptanz der Einladung an die wichtigsten Repräsentanten dieses interdisziplinären Forschungsgebietes, so waren vom 20.–22. Oktober 2003 in Bad Honnef 45 Teilnehmer aus 11 Ländern mit insgesamt 40 eingeladenen Vorträgen, Kurzvorträgen und Postern vertreten.

Einen Schwerpunkt des Seminars bildete die Natur und die energetische Lage der Elektronenanregungszustände von Polyenen und Carotenoiden und deren Abhängigkeit von der Kettenlänge (R. L. Christensen, Y. Koyama). Die Übergangsdipolmomente hängen streng von den Auswahlregeln der C_{2h} -Symmetrie und der Kohlenstoff-Alternierung ab, demzufolge sind die Übergänge vom Grundzustand zu den beiden energieärmsten Singulett-Anregungszuständen für den Einphotonenübergang verboten. Zur Lokalisierung dieser optisch dunklen Zustände werden verschiedene Messtechniken (Fluoreszenz, Resonanz-Raman, transiente Absorption, NEXAFS) erprobt, deren Informationsgehalt vom Einzelfall abhängt (V. Sundström, W. I. Gruszecski).

Das Interesse an dunklen Zuständen resultiert insbesondere auch aus den zunehmenden Hinweisen, dass diese am photosynthetischen Energietransfer zwischen Carotenoiden und (Bakterio)chlorophyllen beteiligt sind. Die komplex verzweigten Kaskaden von ultraschnellen intra- und intermolekularen Prozessen sind gegenwärtig erst in Ansätzen zweifelsfrei identifiziert (H. Hashimoto, A. Holzwarth, T. Gillbro).

Einen direkten Zugang zu Carotenoid-Funktionen erwartet man aus dem Vergleich

Dr. Klaus Wendt,
Universität Mainz;
Dr. German Hacker,
Universität Erlangen-Nürnberg

Prof. Dr. Ernst Rank,
Lehrstuhl für
Bauinformatik, TU München

Dipl.-Phys. Jannik Meyer und Dipl.-Phys. Dirk Obergfell,
Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart