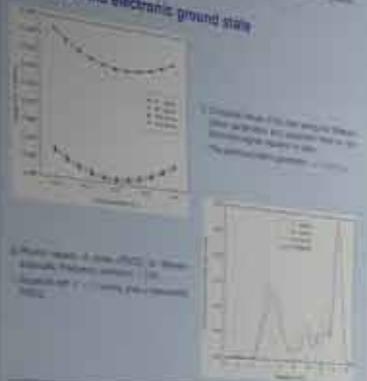


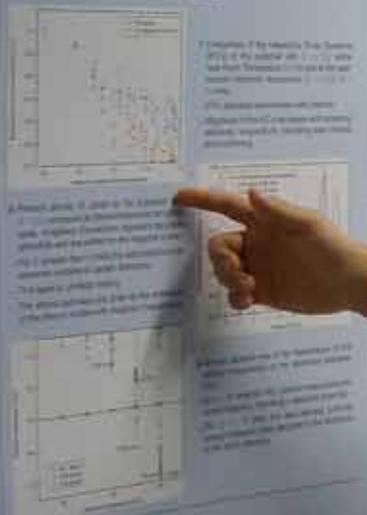
# Ways leading to ultrafast melting of Si

Tomáš Ziegler, Tobias Ziegler, Benjamin Pflüger, Bernd Gumbert, Martin E. Garcia

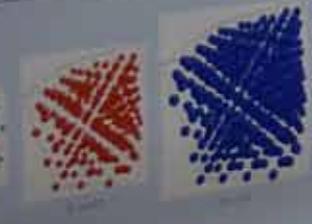
**Results for the electronic ground state**



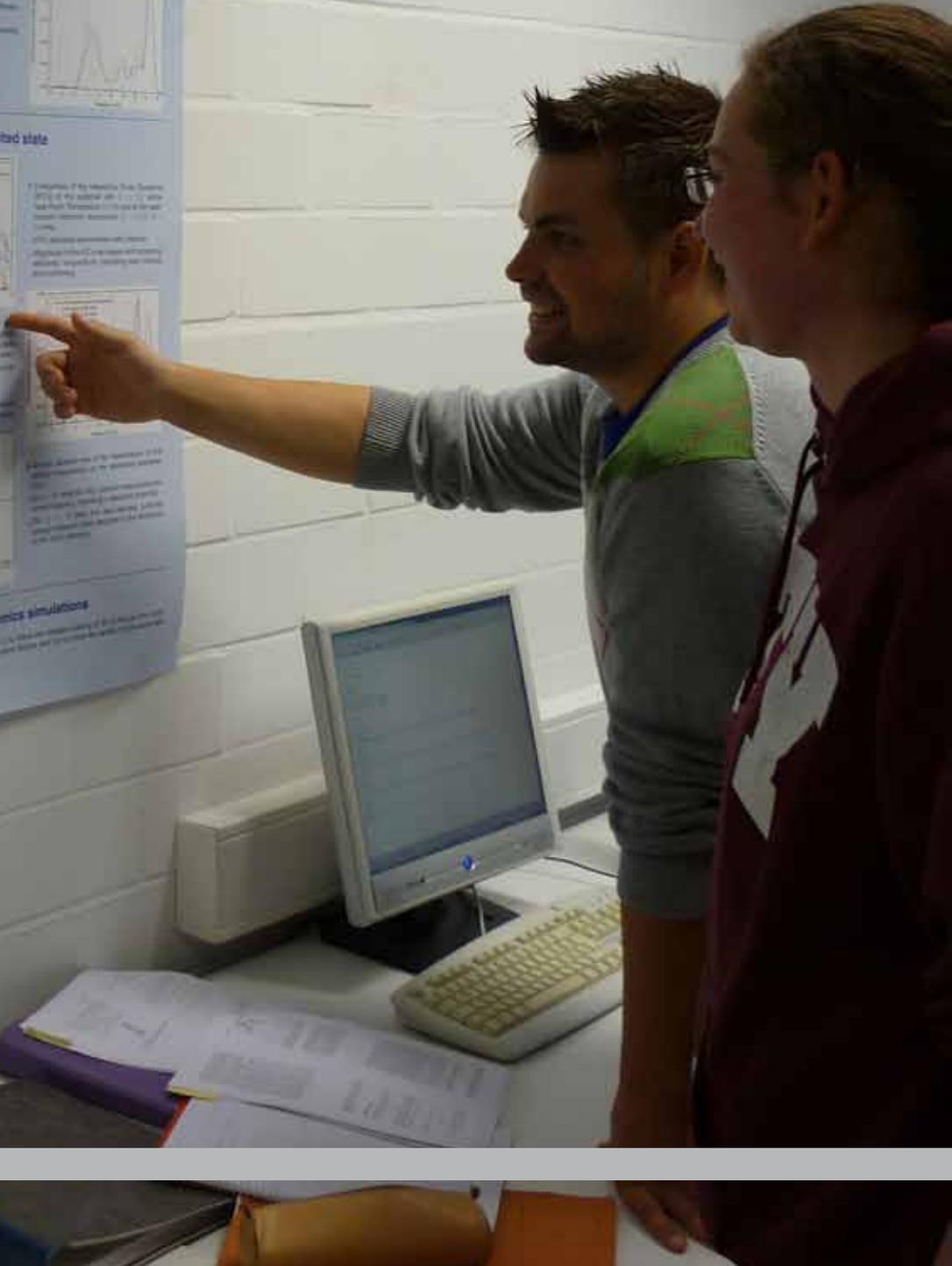
**Results for the laser-excited state**



**DuMol: Molecular Dynamics simulations**



The poster contains several sections of text and graphs. The top section is the title and authors. Below it are two main sections: 'Results for the electronic ground state' and 'Results for the laser-excited state'. Each section contains multiple graphs and blocks of text. The bottom section is titled 'DuMol: Molecular Dynamics simulations' and features several snapshots of a silicon crystal lattice, some colored in red and blue to represent different states or regions.



# Theoretische Festkörper- und Ultrakurzzeitphysik

**Nur mit Hilfe von Gleichungen und Computern lässt sich endgültig aufklären, wie sich Atome und Elektronen in einem Material verhalten, wenn sie ultraschnell geblitzt werden**

Die rasante Entwicklung von Lasersystemen hat die Erzeugung ultrakurz wirkender, aber höchstintensiver Lichtstrahlen ermöglicht. Heutzutage können Wissenschaftler in Großforschungsanlagen ultrakurze Laserpulse einsetzen, die nur einige Femtosekunden (d.h. einige Billiardstel Sekunden) lang wirken, jedoch eine Bestrahlungsstärke besitzen, die 1.000.000.000.000.000.000 (eine Trilliarde) mal höher ist als die der sommerlichen Mittagssonne in Spanien. Solche Lichtpulse können in den kleinen Gebieten, auf die sie fokussiert werden, ähnliche extremste Bedingungen hervorrufen, wie sie bei der Entstehung des Universums kurz nach dem Big-Bang herrschten.

Konventionelle Lasersysteme, wie sie zum Beispiel an den meisten Universitäten benutzt werden, können solche astronomische Bestrahlungsstärken nicht erreichen, aber sie können in einem Material faszinierende neuartige und nicht komplett verstandene physikalische Phänomene herbeiführen. Um die Aufklärung und das Verständnis dieser Phänomene bemüht sich Prof. Dr. Martin Garcia. Er beschäftigt sich hauptsächlich mit der Frage: Kann man Materialien durch Anwendung von Licht manipulieren und transformieren?

Konkret geht es Garcia darum, zu untersuchen, wie ein Festkörper oder eine Nanostruktur auf einen

Die theoretische Physik basiert auf mathematischen Gleichungen und Computerprogrammen.

starken Femtosekundenlaserpuls reagiert. Ist die Kombination der Modebegriffe „Femto“ und „Nano“ lediglich eine Summe der beiden, oder vergeben neuartige Phänomene dieser Kombination einen erheblichen Mehrwert?

Diese und ähnliche Fragen versucht Garcia, von seinem Büro aus zu beantworten. Denn Garcia macht keine Experimente. Er ist einer der 3 Professoren für Theoretische Physik der Universität Kassel.

Aus experimentellen Daten, die Gruppen in Deutschland, den USA, Schweden, der Schweiz und Japan erhalten, versuchen Garcia und seine Mitarbeiter, mit Hilfe von der Mathematik und von Höchstleistungsrechnern allgemeine Modelle zur Beschreibung ultrakurzer Prozesse in Materialien zu entwickeln und Zusammenhänge zwischen anscheinend unabhängigen Effekten zu finden. Ein detailliertes Verständnis laserinduzierter Prozesse ist von großer Bedeutung, da Laser verwendet werden können, um Halbleiter auf unkonventionellem Weg zu manipulieren. Diese Phänomene finden Anwendung

$$D_w^0 = \partial_w + \sum_{s=0}^{\infty} ((I/\varphi)\chi_I)_{I^s} \partial_{\tau_I^s}, \quad D_w^1 = - \sum_{s=0}^{\infty} \tau_I^{s+1} \partial_{\tau_I^s}.$$

Substituting Eqs. (4.47) into Eqs. (4.48) we arrive at a following system of recurrent differential equations:

$$D_w^0 q^i + (1 - \delta_{i,0}) (D_w^1 q^{i-1} + D_I(p^i)) = 0, \quad (4.49)$$

$$D_w^0 p^i + (1 - \delta_{i,0}) D_w^1 p^{i-1} - \frac{I}{\varphi} D_I(q^i) = 0. \quad (4.50)$$

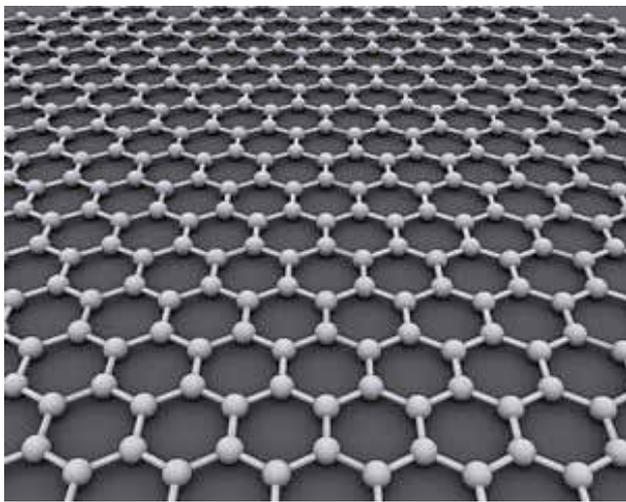
The system (4.49)–(4.50) can be solved sequentially starting from a given  $g^0$ . Thus, integration of Eqs. (4.49)–(4.50) gives

$$p^i = \int dw \left\{ \sum_{s=0}^{\infty} (1 - \delta_{i,0}) \tau_I^{s+1} \partial_{\chi_I^s} p^{i-1} + \frac{I}{\varphi} \left[ \partial_I + \sum_{s=0}^{\infty} (\tau_I^{s+1} \partial_{\tau_I^s} + \chi_I^{s+1} \partial_{\chi_I^s}) \right] q^i \right\} + P^i, \quad (4.51)$$

$$q^i = (1 - \delta_{i,0}) \int dw \left\{ \sum_{s=0}^{\infty} \tau_I^{s+1} \partial_{\chi_I^s} q^{i-1} - \left[ \partial_I + \sum_{s=0}^{\infty} (\tau_I^{s+1} \partial_{\tau_I^s} + \chi_I^{s+1} \partial_{\chi_I^s}) \right] p^{i-1} \right\} + Q^i.$$

Here  $P^i$  and  $Q^i$  are arbitrary functions of invariants

$$I, \quad \chi_I^s, \quad \text{and} \quad \tilde{\tau}_I^s = \tau_I^s - w \sum_{p=0}^s C_p^s (\partial^p (I/\varphi) / \partial I^p) \chi_I^{s-p+1}, \quad i \geq 1,$$



Atomare Struktur von Graphen

Über dessen Ursachen und Verlauf wird seit Jahren kontrovers diskutiert. Prof. Dr. Garcia und Mitarbeitern ist es vor kurzem gelungen, die mikroskopischen Mechanismen des laserinduzierten „kalten Schmelzens“ in Halbleitern wie Silizium und Indiumantimonid, zu erklären. Dieser ultraschnelle Prozess läuft in einem so kurzen Zeitraum ab, wie das Licht benötigt, um eine Distanz von ca. einem Zehntel Millimeter zurückzulegen, und unterscheidet sich dramatisch vom Schmelzen unter normalen Bedingungen, wenn zum Beispiel ein Eiswürfel oder ein Stück Butter bei Hitze schmilzt.

in der Materialbearbeitung, in der Herstellung von mikroskopischen Werkzeugen und in Schaltkreisen sowie in der Medizin.

### Laserpulse können unsere materielle Welt verändern

**T**rifft ein Laserpuls genügend hoher Intensität auf ein Material ein, so entsteht ein neuartiger, in der Natur nicht existierender Zustand, in dem die Elektronen auf Temperaturen von bis zu 30.000 Grad Celsius aufgeheizt werden, d.h. fünfmal höher als die Temperatur auf der Oberfläche unserer Sonne, während die Atome bei Zimmertemperatur „kalt“ verbleiben. Dieser künstlich erzeugte Zustand bestimmt die darauffolgende Bewegung der Atome im Material. Je nach Bestrahlungsintensität sieht die „laserinduzierte atomare Choreographie“ anders aus.

**G**arcia beschäftigt sich mit Fragen, wie zum Beispiel: Kann man mit Hilfe von Licht gewöhnlichen Kohlenstoff in Diamant umwandeln? Oder: Wie lange dauert es, bis ein heller Lichtpuls Silizium erst „schwach werden“ und dann schmelzen lässt?

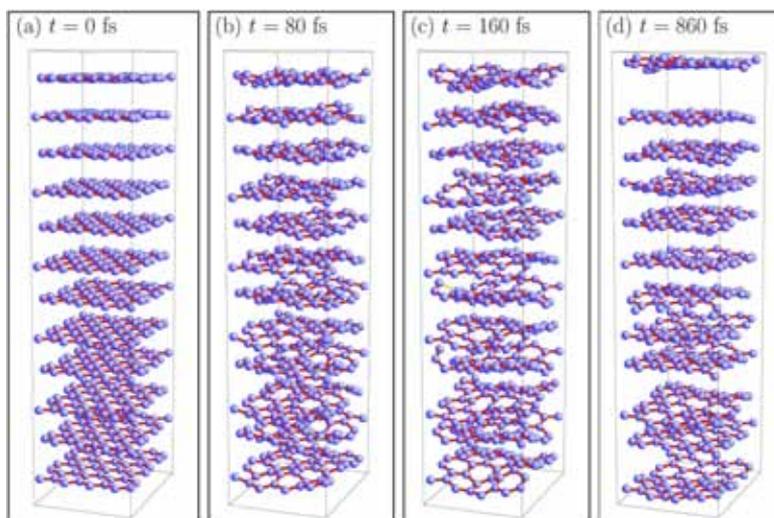
**B**ei hohen Bestrahlungsstärken sorgen die vom Lichtstrahl erzeugten heißen Elektronen dafür, dass sich die kalten Atome über längere Strecken bewegen. Als Folge wird der Festkörper sofort zur Flüssigkeit. Dieses Phänomen, welches nur im Labor produziert werden kann, wird als „kaltes Schmelzen“ bezeichnet.

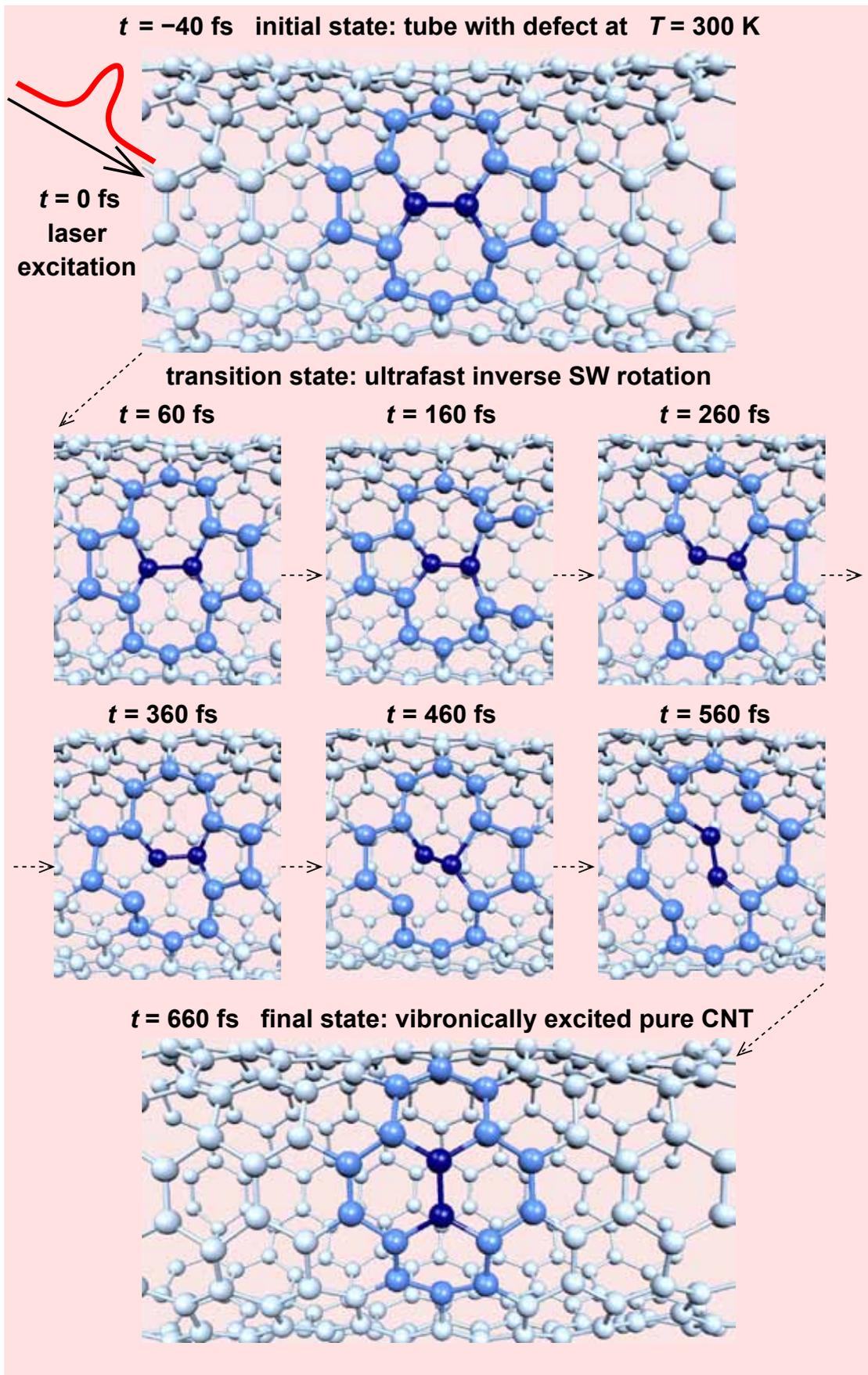
**D**ie in der Arbeitsgruppe Garcia durchgeführten Berechnungen zeigen mit bisher noch nicht erreichter Genauigkeit die Pfade auf, entlang derer sich die Atome kurz nach der Laseranregung fortbewegen, und beenden damit eine Kontroverse über die mikroskopischen Ursachen des „kalten Schmelzens“.

### Mit Licht Nanoscheiben schneiden

**D**ie Zusammenarbeit zwischen Theorie und Experiment ist unverzichtbar, um neue Wege in der Wissenschaft zu gehen. Ein Theoretiker sollte nicht nur in der Lage sein, aus der Analyse experimenteller Daten und der entsprechenden Modellierung Phänomene zu erklären, sondern auch Vorhersagen zu treffen, die experimentell bestätigt werden können. So haben Garcia und Kollegen vor einigen Jahren vorhergesagt, dass aus der Laserbestrahlung von Graphit mit geschickt ausgewählten Intensitäten das neue Material Graphen entstehen soll. Graphen ist eine aus Kohlenstoffatomen bestehende zweidimensionale

Entstehung von Graphen aus der Laserbestrahlung von Graphit





Laserinduzierte „Nanochirurgie“ von Defekten in Kohlenstoff-Nanoröhren

Struktur, in der jedes Kohlenstoffatom von drei weiteren umgeben ist, so dass sich ein bienenwabeförmiges Muster ausbildet.

Da Graphit aus einer „Stapelung“ von Graphenschichten besteht, bedeutete die Vorhersage von Garcia, dass man mit Hilfe eines Laserpulses das nacheinander folgende Abtragen der Graphen-Scheiben erzielen kann. Wenige Jahre nach der Veröffentlichung dieser Rechnungen kam die experimentelle Bestätigung der Vorhersage. Und sie kam aus höchster Stelle, nämlich aus der Arbeitsgruppe des Chemie-Nobelpreisträgers Achmed Zewail. Vor kurzem hat die erwähnte theoretische Vorhersage eine weitere Anerkennung bekommen: Physiker des Fraunhofer-Instituts in Aachen haben experimentell nachgewiesen, dass das laserinduzierte Abtragen von einzelnen Graphen-Schichten eine alternative und originelle Methode darstellt, um frei stehendes Graphen herzustellen.

Die erste konventionelle Herstellung frei stehenden Graphens ist erst 2004 den Physikern Geim und Novoselov gelungen, die 2010 für ihre Untersuchungen an diesem neuartigen und faszinierenden Material mit dem Nobelpreis für Physik ausgezeichnet worden

sind. Graphen ist fast so hart wie Diamant und besitzt die höchste Zugfestigkeit, die je ermittelt wurde (etwa 125mal höher als die von Stahl). Man denkt bereits über die verschiedensten Anwendungen von Graphen in den Bereichen Elektronik, Kommunikationstechnik, Energieerzeugung, Luftfahrt, Fahrzeugbau, Farbenindustrie, usw. nach.

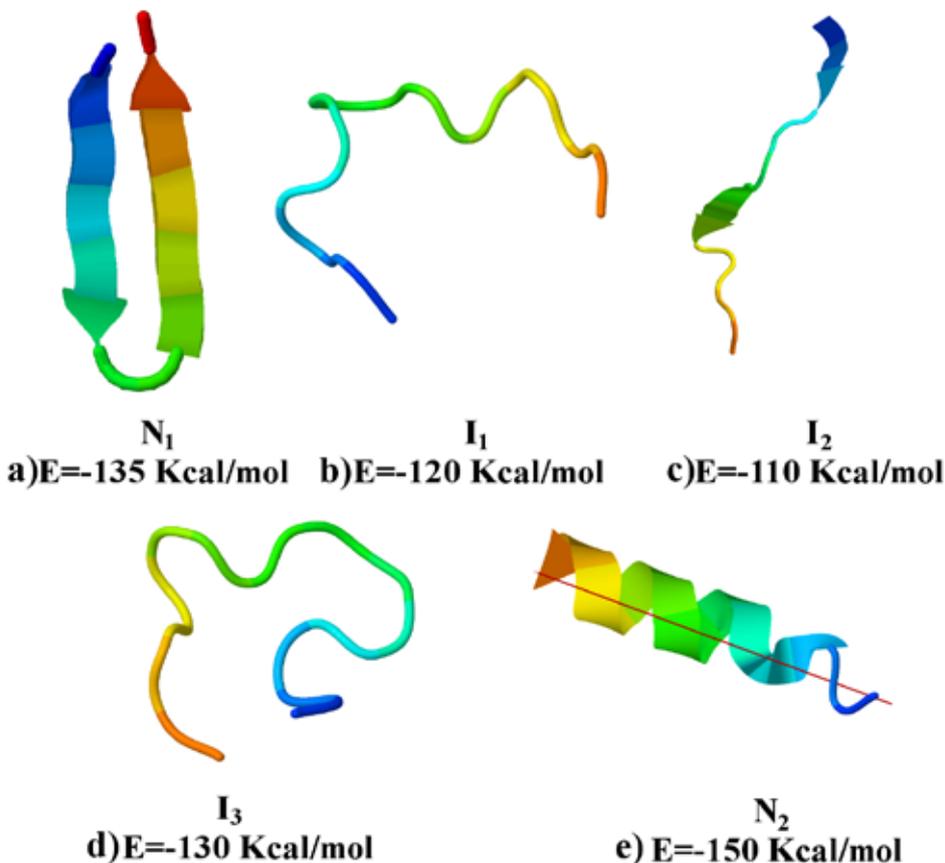
### Laserbasierte Nanochirurgie

Weitere Vorhersagen der Arbeitsgruppe Garcia betreffen die strukturelle Manipulation von Nanostrukturen. Beispielsweise haben Garcia und seine Mitarbeiter gezeigt, dass die ultrakurze Laserbestrahlung von Kohlenstoff-Nanoröhrchen gezielte „chirurgische Eingriffe“ auf der Nanometerskala ermöglicht. So könnten beispielsweise strukturelle Nanodefekte mit Hilfe der Laserbestrahlung ultraschnell geheilt werden.

### Proteine zum Falten bringen

Vor etwa 4 Jahren hat Garcia die neue Forschungsrichtung Biophysik in seine Arbeitsgruppe eingeführt. Die Fragestellungen, mit denen sich Garcia und Mitarbeiter derzeit beschäftigen, beinhalten das Faltungsverhalten von Proteinen unter schwierigen Bedingungen. Um überhaupt funktionieren zu können und lebenswichtige Aufgaben in den Zellen lebender Organismen übernehmen zu können, müssen sich Proteine in eine bestimmte, kompakte Struktur „falten“.

Kann sich das Protein nicht in die sogenannte native Struktur falten, so entstehen Funktionsstörungen, die zu schweren Krankheiten führen können. Garcia untersucht mit Hilfe von computergestützten



Strukturen, die das Protein V3-loop annehmen kann, wenn es durch ein äußeres, elektrisches Feld beeinflusst wird.

Rechnungen, wie sich die Faltung von Proteinen durch äußere Bedingungen, wie elektromagnetische Strahlung, Temperaturschwankungen oder die Nähe anderer Proteine, beeinflussen lässt. Die Antwort auf

diese Frage hätte weitreichende Konsequenzen zur Folge. Denn es ist noch zum Beispiel noch unklar, wie Proteine sich verhalten, wenn wir Handygespräche führen.

## Prof. Dr. Martin E. Garcia

Prof. Dr. Martin Garcia studierte Physik am Instituto Balseiro, einem Elite Institut für Physik in Bariloche, Argentinien und promovierte 1992 an der Freien Universität Berlin. Er habilitierte 1999 in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Bennemann, auch an der Freien Universität Berlin (Fachgebiet Theoretische Physik). Mit Hilfe verschiedener Stipendien (wie, zum Beispiel, der „Iberdrola-“ oder „Ramón y Cajal“ Fellowships) war Martin Garcia als Postdoc, Gastwissenschaftler und auch als Gastprofessor unter anderem an der Michigan State University (USA), an der Universität de les Illes Balears (Spanien), am Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica (San Luis Potosí, Mexiko), und an der Universidad de Valladolid (Spanien) tätig. Im Wintersemester 2000/2001 hat Martin Garcia einen Lehrstuhl für Theoretische Physik (Statistische Physik) am Institut für Physik der Universität Greifswald vertreten. Seit 2004 ist er Professor für Theoretische Physik an der Universität Kassel. Seine Forschungsinteressen liegen schwerpunktmäßig auf den Gebieten der Kondensierten Materie, der laserinduzierten Ultrakurzzeitphänomene, der Biophysik und der Computational Physics.

