

Jahresbericht 2000

des Lehrstuhls Prof. Dr. W. Petry

Physik Department E13



Technische Universität München

Lehrstuhl Prof. Dr. W Petry
Lehrstuhlvertreter 2000/2001:
Prof. Dr. H. Schober
Physik Department E13
Technische Universität München
James-Franck-Straße
D-85748 Garching

Tel.: 089 289 12452
Fax 089 289 12473

Email: wpetry@ph.tum.de
hschober@ph.tum.de
WWW: <http://www.e13.physik.tu-muenchen.de>

Das Titelbild zeigt das Straßenschild der East 13th Avenue, in der das Material Science Institute der Univ. Oregon in Eugene, OR, USA ist. Dort verbringen W. Schirmacher und M. Pöhlmann das Wintersemester 2000/2001, um dort mit Prof. D. Belitz bei der Ausformulierung einer feldtheoretischen Beschreibung der Schwingungsanregungen in ungeordneten Festkörpern zusammenzuarbeiten (s. Beitrag 6.2). Auch die Redaktion des vorliegenden Jahresberichts geschah von dieser Straße aus.

Vorwort

Die Physik ist gegenwärtig in einem starken, strukturellen Wandel begriffen. Obwohl die Ursachen dafür vielfältiger Natur sind, sind sie doch zu einem wesentlichen Teil dem großen Erfolg der Physik in den letzten Jahrzehnten zuzuschreiben. Viele physikalische Untersuchungsmethoden haben einen herausragenden Reifegrad erreicht. Die dadurch geschaffenen Forschungskapazitäten eröffnen innovative Möglichkeiten der Problemlösung in zahlreichen anderen wissenschaftlichen Disziplinen. Zu nennen sind die traditionell der Physik verwandten Naturwissenschaften Chemie und Biologie, aber auch entferntere Disziplinen wie zum Beispiel die Geologie oder die Material- und Ingenieurwissenschaften. Diese Tendenz zur fächerübergreifenden Forschung geht Hand in Hand mit dem Wunsch der Politik und Industrie, die Physik möge mehr unmittelbar anwendbare Resultate liefern. An den Universitäten muß es vorderstes Ziel der Physik sein, um die Gunst der Studenten zu werben. All dies verlangt nach einer attraktiven Kombination von Forschung und Lehre.

Wie man den Beiträgen dieses Jahresberichts entnehmen kann, ist unser Lehrstuhl bestens gewappnet, die Herausforderungen der Zukunft anzunehmen. Seine Mitarbeiter decken ein breites Spektrum zukunftsorientierter wissenschaftlicher Fragestellungen ab. Diese reichen von der grundlegenden Erforschung der Glasdynamik über materialwissenschaftlich orientierte Studien an Metallegierungen und Polymeren bis hin zur Biophysik. All diese Forschungsvorhaben können auf eine breite Instrumentierung zugreifen. Dabei sollen in Zukunft die an Großforschungseinrichtungen erzielten Resultate noch intensiver mit den in unseren Labors erarbeiteten Ergebnissen vereint werden. Dies ist insbesondere im Interesse der optimalen Ausbildung unserer Studenten wünschenswert. Weichen in diese Richtung wurden mit dem Antrag auf die Anschaffung eines Kraftmikroskops sowie dem Kauf eines Infrarotspektrometers gestellt. Dadurch soll die schon beachtliche Laborinstrumentierung weiter ausgebaut werden. Der Lehrstuhl ist darüberhinaus auch am Aufbau und an der Weiterentwicklung der Instrumentierung an den Großforschungseinrichtungen FRM-II, ESRF und LLB beteiligt. Moderne experimentelle Forschung kommt nicht ohne theoretischen Beistand aus. Wir können uns glücklich schätzen, auch auf diesem Gebiete mit einer wachsenden Gruppe von Mitarbeitern vertreten zu sein.

Die beste Instrumentierung ist wertlos ohne das entsprechende Personal. Ich habe die Belegschaft von E13 als hochmotivierte und bestens ausgebildete Mannschaft kennengelernt. Sie stellt die wichtigste Ressource des Lehrstuhls dar. Mit der Besetzung einer C3-Professur auf Zeit, deren Ausschreibung im Gange ist, wird die personelle Basis des Lehrstuhls weiter gestärkt werden. Damit diese Verstärkung voll zum Tragen kommt, sollen die Forschungsaktivitäten noch intensiver aufeinander abgestimmt werden.

Ich möchte die Gelegenheit ergreifen, allen Mitarbeitern für ihren Einsatz und die freundliche Aufnahme als Vertretung von Professor Petry zu danken. Dies gilt ausdrücklich auch für das nichtwissenschaftliche Personal, sowie für unsere zahlreichen Gäste. Ein Dankeschön auch all jenen, die nach hervorragender Arbeit den Lehrstuhl verlassen haben, um zu neuen Ufern aufzubrechen.

Gemeinsam wird der Lehrstuhl auch die anstehenden Aufgaben mit Bravour bewältigen.

München, Dezember 2000

Helmut Schober

Inhaltsverzeichnis

1	Instrumentelle Entwicklungen und Auswertungsmethoden	1
1.1	Das Flugzeitspektrometer mit kalten Neutronen am FRM-II	1
1.2	Messung und Simulation der inelastischen Auflösungsfunktion des Flugzeit- spektrometers IN5	4
1.3	The Neutron Resonance Spin Echo in Saclay	7
1.4	Multiple-scattering effects on smooth neutron scattering spectra	9
1.5	IDA and for2html: Computing tools for data analysis and beyond	10
2	Polymere	12
2.1	Dewetting of thin polymer-blend films	12
2.2	Early stages of film creation and morphology evolution in thin diblock co- polymer films	14
2.3	Surface morphology controlled tack of polymers	16
2.4	Scanning USAX at polymer interfaces	18
2.5	Off-specular neutron scattering pattern from islands on a lamellar film . . .	20
3	Dynamik geordneter Kristalle	23
3.1	Temperature Dependent Partial Phonon Density of States of $\text{Fe}_{72}\text{Pt}_{28}$. . .	23
3.2	Phononenzustandsdichte von FeNi-Legierungen	27
4	Dynamik in Gläsern und unterkühlten Flüssigkeiten	30
4.1	Quasielastic neutron scattering on bulk glass forming liquid $\text{Pd}_{43}\text{Ni}_{10}\text{Cu}_{27}\text{P}_{20}$	30
4.2	Calzium-Rubidium-Nitrat: Modenkopplungs- β -Skalenverhalten ohne Fak- torisierung	32
4.3	Reinvestigating Brillouin Line Shapes	34
4.4	Mikroskopische Dynamik in zähflüssigem GeO_2	35
4.5	Glass dynamics and scaling behaviour under pressure using quasielastic nuclear forward scattering	37
4.6	Spektrale Form von Relaxationsprozessen in Gläsern: Quarzglas	40
4.7	Über den Ursprung quasi-elastischer Lichtstreuung von Gläsern	42

5	Dynamik von Biomolekülen	46
5.1	Interhelix Fluctuations in Bacteriorhodopsin	46
5.2	Oxygen transport in crowded protein solutions	47
5.3	Effekt der Druckauffaltung auf die Dynamik von Myoglobin	50
5.4	Influence of Trehalose on the dynamics of a protein : the C-Phycocyanin . .	53
6	Theorie ungeordneter Festkörper	57
6.1	Vibrational Properties of Disordered Solids: The Binary Force Constant Model	57
6.2	Field theoretic description of vibrational properties of disordered solids . . .	60
7	Fortbildungsveranstaltungen	62
8	Allgemeine Zusammenstellungen	64
8.1	Veröffentlichungen	64
8.2	Poster	70
8.3	Auswärtige Vorträge von Institutsmitgliedern	73
8.4	Eingeladene Vorträge an unserem Institut	77
8.5	Diplomarbeiten	77
8.6	Doktorarbeiten	77
8.7	Mitarbeiter und Gäste	78

1 Instrumentelle Entwicklungen und Auswertungsmethoden

1.1 Das Flugzeitspektrometer mit kalten Neutronen am FRM-II

A. Zirkel, S. Roth, J. Neuhaus, K-H. Schuhbeck, W. Petry

Flugzeitspektrometer mit kalten Neutronen werden zur Untersuchung quasielastischer und inelastischer Prozesse in kondensierter Materie als Funktion des Impulsübertrages eingesetzt. Beispiele sind das Rotationstunneln in Molekulkristallen, die β -Relaxation in Polymeren oder die lokale Dynamik in Proteinen. Einen besonderen Schwerpunkt am Lehrstuhl bildet die Glasdynamik.

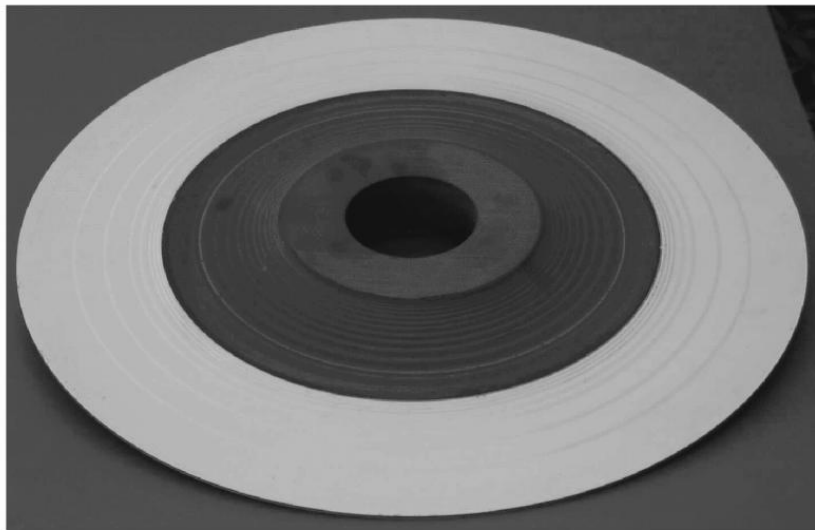


Abbildung 1.1.1: Prototyp der Chopperscheibe

Besonders vielseitig sind hierbei Multichopperinstrumente, da sie einen großen dynamischen Bereich in (q, ω) überdecken. Wahlweise kann mit guter Energieauflösung gemessen werden oder mit hoher Intensität bei relaxierter Auflösung. Das am FRM-II entwickelte Instrument verwendet eine Kaskade von sieben Chopperscheiben im Primärspektrometer zur Auswahl der Einfallsenergie und der Energieauflösung. Gegenläufig rotierende Chopperscheiben ermöglichen es, sehr kurze Neutronenpulse zu erzeugen und damit die Auflösung zu verbessern. Durch Verwendung eines doppelt fokussierenden Neutronenleiters bleibt am Probenort trotz guter Energieauflösung eine hohe Intensität erhalten. Die Auslegung des Instruments ist ausführlich im Jahresbericht 1998 [1], sowie in [2] dargelegt. Das Neutronenleitersystem ist in [3] beschrieben.

1. Choppersystem

Im Jahresbericht 1999 [4] wurde über die Entwicklung der Chopperscheiben aus kohlefaserverstärkten Werkstoffen berichtet, die in Zusammenarbeit mit Herrn Krämer vom Lehrstuhl für Leichtbau (LLB) der TUM (Prof. Baier) durchgeführt wird. Ziel dieser Entwicklung ist es, die maximale Drehzahl der Scheiben auf etwa 27000 U/min zu erhöhen. Gegenüber konventionellen Aluminium-Scheiben desselben Durchmessers (600 mm), die mit maximal 20000 U/min betrieben werden können, kann die Energieauflösung dadurch um etwa 20% gesteigert werden.

Die Aktivitäten der Chopperscheibenentwicklung konzentrierten sich in diesem Jahr zum Großteil auf die Optimierung der Beschichtung der Scheiben. Weiterhin musste die Nabenkonstruktion verbessert werden, um der relativ hohen Aufweitung der Scheibe unter Maximaldrehzahl von etwa 0.6% Rechnung zu tragen. In diesem Jahr wurden drei Prototypen mit 600 mm Durchmesser (Maßstab 1:1) gebaut. Ein solcher Prototyp ist in Abbildung 1.1.1 gezeigt. Die Beschichtung mit dem Neutronenabsorber Gd_2O_3 ist deutlich zu erkennen. Zwei der Prototypen wurden bereits im Schleudertest untersucht. Dabei zeigte sich, daß bei etwa 25000 U/min Risse in der Beschichtung auftraten. Daraufhin wurde das Mischungsverhältnis Gd_2O_3 zu Kleber weiter optimiert. Der dritte, erst kürzlich fertiggestellte Prototyp, wurde mit diesem optimierten Mischungsverhältnis gefertigt. Erstmals ist er auch mit Fenstern und einem Aufdoppler zur Verstärkung des Fenstergrundes ausgestattet. Der Schleudertest steht in den nächsten Wochen an.

Die Rezipienten der Chopperscheiben wurden von der Firma Lutz in Karlsruhe gefertigt. Anschließend wurde in einem der Rezipienten ein Teststand mit einem Prototyp der Magnetlagerachse aufgebaut. Eine der oben beschriebenen Chopperscheiben wurde der Firma Dornier für Tests zur Verfügung gestellt. Die Enddrehzahl konnte allerdings im Berichtsjahr noch nicht angefahren werden, da die oben erwähnten Probleme mit der Beschichtung auftraten.

2. Elektronik und Detektoren

Die Flugzeitelektronik wurde von der Firma SIS gebaut und Ende Mai ausgeliefert. Zur Zeit wird die Software für die TACO-Anbindung erstellt. Abschließende Tests der Flugzeitelektronik stehen noch aus.

Der Auftrag für den Bau der Vorverstärkerelektronik ging an die Firma Leyser Elektronikentwicklungen. Aus Kostengründen wurde die Entscheidung gefällt, die Verstärker in Boxen zu 16 Stück zusammenzufassen. Diese Boxen haben weiterhin den Vorteil, daß sie kompakter sind als 16 einzelne Verstärker. Ein Prototyp der Firma Leyser wurde bereits an der hauseigenen ^{252}Cf -Quelle sowie am EKN am Forschungszentrum Jülich getestet. Alle weiteren Boxen sollen im Frühjahr 2001 geliefert werden.

Am EKN in Jülich wurden weiterhin Detektoren mit unterschiedlichen ^3He -Gasdrucken und unterschiedlichen Löschgasen vermessen. Dabei stellte sich heraus, daß das Standardrohr mit einem Fülldruck von 6 bar und CO_2 als Löschgas gegenüber einem Zählrohr mit 8.2 bar Fülldruck und CF_4 als Löschgas deutliche Einbußen in der Performance zeigte. Die Nachweisempfindlichkeit hängt beim Standardrohr stark von der seitlichen Entfernung des Neutronenauffreffpunktes vom Zählrohr ab. Zu den Rändern hin nimmt sie um etwa 40% ab.

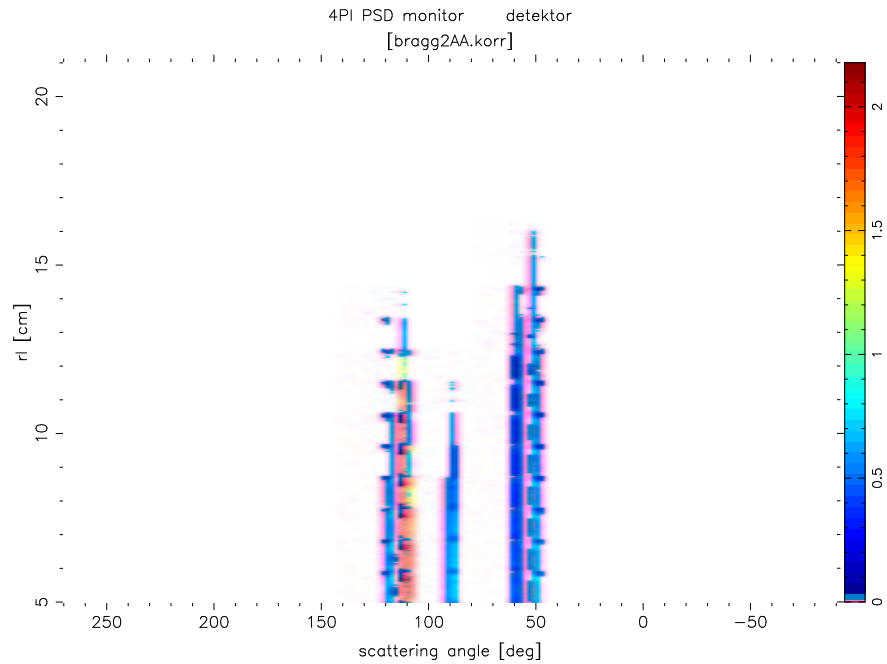


Abbildung 1.1.2: Unterdrückung der Bragg-Reflexe des Kryostatschildes

3. Sekundärspektrometer

Einen Großteil der Aktivitäten des zweiten Halbjahres nahm die Konstruktion des Sekundärspektrometers ein. Im Juli konnten Herr Mironov aus Dubna und Frau Lichtenstein aus der Konstruktionsgruppe von Herrn Nagel als Mitarbeiter gewonnen werden. Die Konstruktion ist im wesentlichen abgeschlossen, die Auftragsvergaben sind für Anfang nächsten Jahres geplant.

Die Detektoren werden ähnlich wie am NIST-Flugzeitspektrometer (DCS) einzeln auf Debye-Scherrer-Ringen und auf einer Kugeloberfläche mit dem Radius 4000 mm angeordnet. Im Zusammenspiel mit einem Wechselkollimator, der optional anstelle des Neutronenleiters in den Primärstrahl gefahren werden kann, kann so eine hohe Winkelauflösung erreicht werden.

4. Radialkollimator

Die Monte-Carlo-Simulationen des Instruments wurden mit der Auslegung des Radialkollimators weitgehend abgeschlossen. Der Radialkollimators soll aus technischen Gründen innerhalb der Probenkammer angebracht werden.

Der Winkelabstand der einzelnen Kollimatorblätter wurde zu 4.4° gewählt und ist damit auf die Wellenlänge von 6 Å zugeschnitten. Ein Großteil der späteren Messungen wird nahe dieser Wellenlänge durchgeführt werden. Die Blattlänge wurde zu 210 mm bestimmt, der Innenradius des Kollimators zu 24 mm.

Bild 1.1.2 zeigt den Einfluß des Radialkollimators auf die verschiedenen Braggreflexe vom Aluminiumschild des Kryostaten bei $\lambda = 2 \text{ Å}$. Lage und relative Intensität der Braggreflexe wurden in Zusammenarbeit mit Ulrich Wildgruber mit dem Programm Lazy Pulverix berechnet. Aufgetragen ist die Intensität der Reflexe bei variablen Blattlängen. Man erkennt, daß oberhalb einer Blattlänge von 170 mm praktisch keine Intensität mehr vorhan-

den ist. Der Radialkollimator fängt damit die parasitäre Streuung des Kryostatenschildes vollständig ab. Die oben angegebene Länge von 210 mm wurde gewählt, da sie über den zu betrachtenden Wellenlängenbereich den besten Kompromiss darstellt.

- [1] A. Zirkel, S. Roth, W. Schneider, J. Neuhaus, W. Petry *Das Flugzeitspektrometer mit kalten Neutronen am FRM-II*, Jahresbericht 1998
- [2] A. Zirkel, S. Roth, W. Schneider, J. Neuhaus, W. Petry *The time-of-flight spectrometer with cold neutrons at the FRM-II*, Physica B 276-278 (2000), 120-121
- [3] S. Roth, A. Zirkel, J. Neuhaus, W. Schneider, W. Petry *Optimization of the neutron guide system for the Time-of-Flight spectrometer at the FRM-II*, Physica B 283 (2000), 439
- [4] S. Roth, A. Zirkel, J. Neuhaus, W. Petry *Optimierung des Flugzeitspektrometers mit kalten Neutronen am FRM-II*, Jahresbericht 1999

1.2 Messung und Simulation der inelastischen Auflösungs- funktion des Flugzeitspektrometers IN5

S. Roth ¹, A. Zirkel ^{1,2}, J. Bossy ³, J. Neuhaus ^{1,2}, J. Peters ²,
H. Schober ^{1,4}, W. Petry ^{1,2}

¹ TU München, Lehrstuhl E13

² ZBE FRM-II

³ CNRS, Grenoble

⁴ ILL, Grenoble

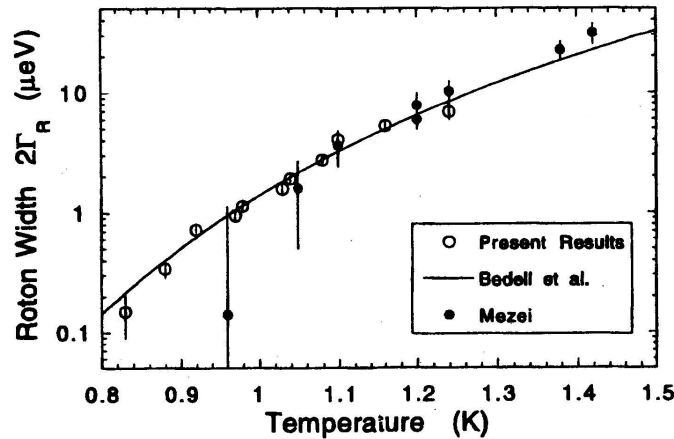


Abbildung 1.2.1:

Linienbreite der Rotonanregung [1]. Für Temperaturen unterhalb 1 K gilt $2\Gamma_R \ll 0.1 \mu\text{eV}$. Da die typische Auflösung des IN5 im Bereich mehrerer $10 \mu\text{eV}$ liegt, ist die durch das Roton verursachte Linienbreite gegenüber der instrumentellen Auflösung vernachlässigbar.

Zur Bestimmung von $S(q, \omega)$ ist die Kenntnis der Auflösungsfunktion zwingende Voraussetzung, um die Spektren zu entfalten. In der quasielastischen Neutronenstreuung wird dazu das Streusignal einer Vanadiumprobe oder das der Probe bei tiefen Temperaturen gemessen. Die so erhaltene elastische Auflösungsfunktion des Spektrometers erlaubt

die Entfaltung der quasielastischen Daten. Bei der Entfaltung inelastischer Anregungen hingegen ist man meist auf analytische Gaußnäherungen der Auflösungsfunktion angewiesen, ohne die genaue Form der Kurve tatsächlich zu kennen. Ziel unserer Experimente

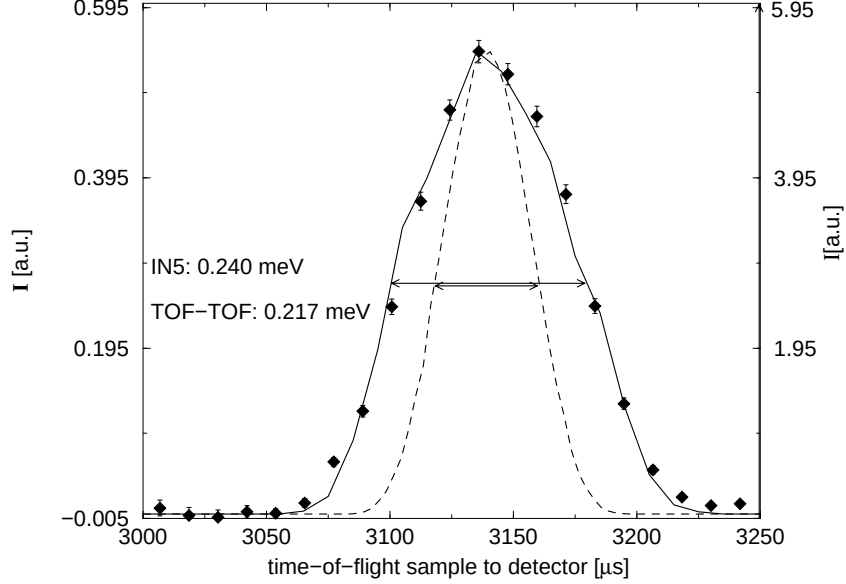


Abbildung 1.2.2:

Roton-Linie ($2\theta=56^\circ$) für $T=400$ mK und Simulation für $\lambda=3$ Å und 20000 upm Choppergeschwindigkeit am IN5. Punkte: Daten, durchgezogene Linie: Simulation des IN5 ($\Delta E(FWHM)=240$ μ eV), gestrichelte Linie: erwartete Auflösungsfunktion für das Flugzeitspektrometer TOF-TOF am FRM-II bei selber Wellenlänge und 25000 upm ($\Delta E(FWHM)=217$ μ eV)[3]. Beide Kurven sind auf eins normiert, die rechte Ordinate gibt die berechnete Intensität für das TOF-TOF am FRM-II relativ zum IN5 an. Der erwartete Intensitätsgewinn liegt bei einer Größenordnung.

mit flüssigem Helium am Flugzeitspektrometer IN5 (ILL) war es daher, die inelastische Auflösungskurve beispielhaft für dieses Flugzeitspektrometer zu bestimmen und mit der aus eigenen Monte-Carlo-Simulationen berechneten zu vergleichen.

Flüssiges Helium ist für diese Aufgabe ein geeigneter Kandidat, da es zwei scharfe inelastische Anregungen besitzt: die sogenannte Maxon-Anregung ($q \approx 1.1$ Å $^{-1}$, $\hbar\omega=1.2$ meV) und die Roton-Anregung ($q = 1.925$ Å $^{-1}$, $\hbar\omega=0.742$ meV). Beide Anregungen besitzen bei genügend tiefen Temperaturen ($T<1$ K) eine gegenüber der instrumentellen Auflösung vernachlässigbare Linienbreite [1], siehe Abb. 1.2.1. Die Messung des Streusignals bei $T=400$ mK bei diesen (q,ω) -Punkten ergibt daher direkt die instrumentelle inelastische Auflösungskurve. Durch Variation der Wellenlänge von 2.3 Å bis 6 Å und der Drehzahl der Chopperscheiben zwischen 10000 upm und 20000 upm war es außerdem möglich, einen großen Bereich der Energieauflösung zu durchfahren und somit einen großen Referenzdatensatz zur Verfügung zu stellen.

Für die Simulation wurde das gesamte Leitersystem und Choppersystem, an der kalten Quelle beginnend, in McStas [2] implementiert und eigene Komponenten (Probe, Quelle) entwickelt, um die zeitaufgelöste Streuung an der im Experiment verwendeten Heliumprobe simulieren zu können. Abb. 1.2.2 zeigt das bei $T=400$ mK gemessene Roton-Signal

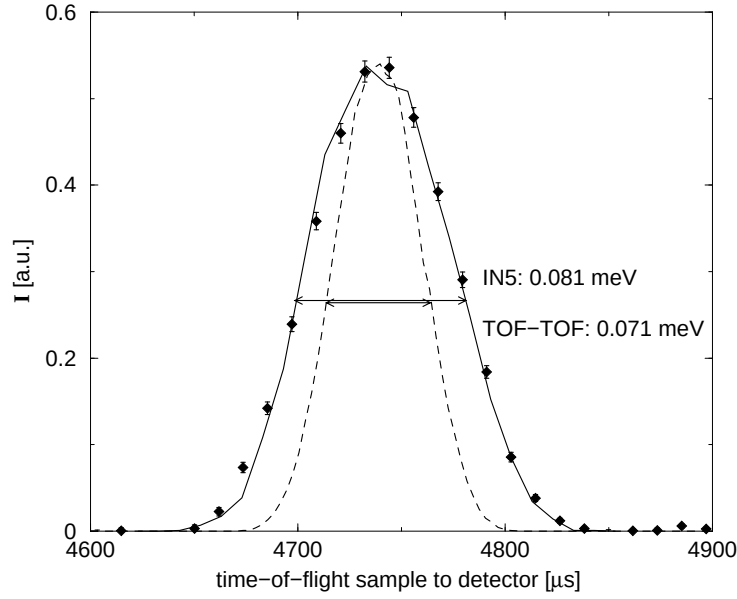


Abbildung 1.2.3:

Roton-Linie ($2\theta=86.7^\circ$) für $T=400$ mK und Simulation für $\lambda=4.3$ Å und 20000 upm Choppergeschwindigkeit am IN5. Punkte: Daten, durchgezogene Linie: Simulation des IN5 ($\Delta E(FWHM)=81 \mu\text{eV}$), gestrichelte Linie: erwartete Auflösungsfunktion für das Flugzeitspektrometer TOF-TOF am FRM-II bei selber Wellenlänge und 25000 upm ($\Delta E(FWHM)=71 \mu\text{eV}$).

nach Abzug der Leermessung für $\lambda=3$ Å und 20000 upm Choppergeschwindigkeit. Aufgetragen ist die Intensität am Detektor gegen die Flugzeit. Die Daten zeigen die zeitliche Verbreiterung des Pulses nach Streuung an der Probe.

Die Simulation des IN5 berücksichtigt mögliche Fehljustierungen des Leiters; die Übereinstimmung Simulation-Experiment ist exzellent. Abb. 1.2.3 zeigt die Roton-Linie bei einer Chopperdrehzahl von 20000 upm und $\lambda=4.3$ Å, Abb. 1.2.4 die Maxon-Linie bei $T=400$ mK, 20000 upm Choppergeschwindigkeit und $\lambda=3.6$ Å. Auch hier beschreibt die Simulation die experimentell bestimmte Auflösungsfunktion sehr gut. Die experimentell durch eine Vanadiummessung leichter zugängliche elastische Auflösungsfunktion des IN5 wurde bereits im letzten Jahresbericht mit einer einfachen Simulation verglichen [4]. Auch hier zeigte sich eine Übereinstimmung über mehr als eine Größenordnung. In den Abb. 1.2.2–1.2.4 sind außerdem die bei den entsprechenden Wellenlängen und einer Drehzahl von 25000 upm simulierten Auflösungskurven für das Flugzeitspektrometer TOF-TOF am FRM-II für dieselbe Heliumprobe eingetragen. In Abb. 1.2.2 ist als rechte Ordinate die berechnete Intensität für das TOF-TOF am FRM-II eingetragen: Wir erwarten eine Größenordnung an Flußgewinn relativ zum IN5.

Diese Ergebnisse ermöglichen es, die inelastische Auflösungsfunktion ausgehend von wenigen Punkten im reziproken Raum für *alle* zugänglichen q - und ω -Werte zu berechnen und somit auch im Hinblick auf den Nutzerbetrieb am FRM-II zum ersten Mal die experimentell erwartete elastische und inelastische Auflösungsfunktion in Form und Breite für das TOF-TOF am FRM-II *a priori* anzugeben.

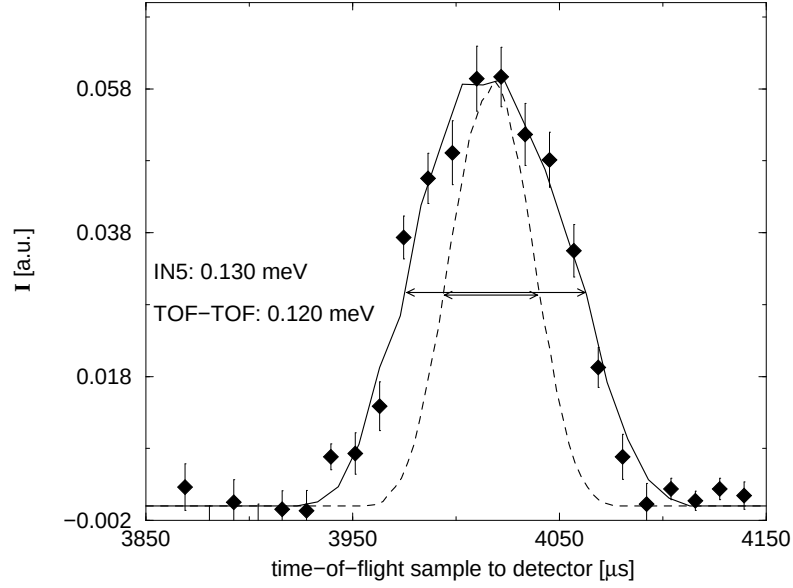


Abbildung 1.2.4:

Maxon-Linie ($2\theta=39.4^\circ$) für $T=400$ mK und Simulation für $\lambda=3.6$ Å und 20000 upm Choppergeschwindigkeit am IN5. Punkte: Daten, durchgezogene Linie: Simulation des IN5 ($\Delta E(FWHM)=130$ μ eV), gestrichelte Linie: erwartete Auflösungsfunktion für das Flugzeitspektrometer TOF-TOF am FRM-II bei selber Wellenlänge und 25000 upm ($\Delta E(FWHM)=120$ μ eV)[3]. Trotz der schlechteren Statistik ist die Übereinstimmung exzellent.

- [1] K. Andersen et al., PRL 77 (1996) 4043
- [2] K. Lefmann et al., Neutron News, Vol. 10, No. 3, (1999), 20
- [3] A. Zirkel, Beitrag in diesem Jahresbericht
- [4] S. Roth, Jahresbericht 1999

1.3 The Neutron Resonance Spin Echo in Saclay

S. Longeville, I. Köper and W. Petry

During the year 2000 the usage of the spectrometer was similar to 1999, 50% of the beam time was reserved for the German community (or BMBF), and the remaining 50% were dedicated to external users. The latter were selected within the *Tables Rondes du LLB*, in which a selection committee establishes a priority list for the year, exclusively on scientific grounds. A total amount of 193 days of experiments was performed over the 206 days of reactor operation for 2000. The rest, nearly 13 days was used exclusively for instrumentation or was lost due to spectrometer breakdown. The list of the main users together with affiliation and number of days of the experiments performed is represented in the table.

Concerning the instrumental developments, we focussed this year on the possibility to measure the intermediate scattering function of single crystals. Therefore an automatization

Tabelle 1.1: Experimental realization 2000

Principal proposer	Origin	Experiment number	Duration
Levelut Claire	Montpellier LDV	5515	15
Köper Ingo	LLB	5645	12
Ain Michel	LLB	test	2
Rathgeber Silke	NIST (USA)	5729	11
Swensson J	Chalmers University (Sweden)	5777	12
Ollivier J.	HMI Berlin	5629	10
Hellweg T	TU Chemnitz	5661	10
Bleul M.	TU München	BMBF Time	7
Rufflé B	Montpellier LDV	5872	15
Doster W.	TU München	BMBF Time	50
Köpper I.	TUM / LLB	BMBF Time	7
Longeville S.	TUM / LLB	5724	14
Longeville S.	TUM / LLB	BMBF Time	28

of sample orientation and scattering angle was commissioned together with the electronics and software necessary for such experiments. We installed a non-magnetic rotation table specially designed and constructed for the spectrometer, as well as an optical coding system and a step motor. Everything is controlled by an LLB type electronic bank, communicating with the computer via an IEEE interface. Since the μ -metal shielding around the sample environment does not allow for the use of a goniometer to orient the sample in the scattering plane, we decided to mount directly the sample on a non-magnetic micro goniometer (similar to the one used in X-Ray scattering). Therefore the sample had to be oriented before performing the experiment on a two-axis spectrometer. Nevertheless, in order to correct for small disorientations of the sample a system with micrometric screws was installed. First measurements were performed on 3 different crystals this year, one test (M. Ain, LLB), the study of critical fluctuations around an incommensurate phase transition of an organic crystal (J. Ollivier, HMI Berlin) and an experiment on the study of excitations of Cr around an incommensurate transition (M. Bleuel). Several improvements will be developed next year especially concerning the software control. We also developed a software package for data treatment. An interesting point is to be noticed, measurements of the dynamics associated to the glass transition of an inorganic polymer was studied up to 800 K, with an ILL high temperature furnace without significant depolarization of the scattered beam due to heater currents. New design for heater coils, at the time being under construction should allow us to perform measurements at much higher temperatures. Therefore the sample environment of the spectrometer are now a cryofurnace (4-600 K), a displax close circle refrigerators (10-800K) and a high temperature

furnace (normally 300-2100K, high temperatures has to be tested).

Litterature :

- [1] S. Longeville, W. Doster, M. Diehl, R. Gähler and W. Petry. (to be published) *Neutron resonance spin echo spectroscopy : oxygen transport in crowded solution.*
- [2] J. Swensson, R. Bergman and S. Longeville (to be published) *Experimental evidence for “fragile-strong” transition of confined water.*
- [3] M-C. Bellissent-Funel, S. Longeville, J. M. Zanotti and S. H. Chen *Experimental observation of the α -relaxation in supercooled water.* Phys. Rev. Lett., 85:3644 (2000)
- [4] S. Longeville *La spectroscopie à écho de spin par résonance* J. Phys. IV France 10, (2000) Pr1-59, Ed. M. Bée, éditions de physique. Proceeding of the École thématique : Diffusion Quasi-élastique de neutrons, La Grande Motte, June 1999.
- [5] S. Dellerue, A. Petrescue, J. C. Smith, S. Longeville and M.-C. Bellissent-Funel *Collective dynamics of a photosynthetic protein probed by neutron spin echo spectroscopy and molecular dynamics simulation.*
Physica B, Proceedings of the Second European Conference on Neutron Scattering 1999 (ECNS'99): 01.09.-04.09.1999, Budapest, Ed. L. Cser and L. Rosta, EPS, 276-278:514, (2000)

1.4 Multiple-scattering effects on smooth neutron scattering spectra [1]

J. Wuttke

Any neutron scattering measurement is unavoidably contaminated by multiple scattering. For intensity reasons, samples must be chosen so thick that a significant fraction of the incident neutrons is scattered. As an inevitable consequence, a significant fraction of the scattered neutrons is scattered more than once. Multiple scattering is basically a convolution of $S(q, \nu)$ with itself, and therefore it is nonlinear in S , and worse: it is nonlocal in q and ν . For this reason, multiple-scattering corrections are much more difficult than all the other manipulations that are necessary for deriving $S(q, \nu)$ from the measured signal.

By performing extensive simulations on simple model systems, I tried to identify some generic trends of multiple scattering. Three models were considered: a rigid solid (as used for normalisation), a glass (with a smooth distribution of harmonic vibrations), and a viscous liquid (described by schematic mode-coupling equations). On a technical level, it is found that multiple-scattering simulations are quantitatively useful only if they are also performed for the normalisation scan.

In viscous liquids and glasses, the input scattering law often factorizes into a wavenumber-dependent amplitude and a frequency-dependent spectral distribution. In these cases, the spectral distribution is found to be only weakly affected by multiple scattering, whereas the wavenumber dependence is severely distorted. In particular, the simulations explain an unphysical q dependence observed in several glass-forming liquids.

- [1] J. Wuttke, Phys. Rev. E 62, 6531 (2000)

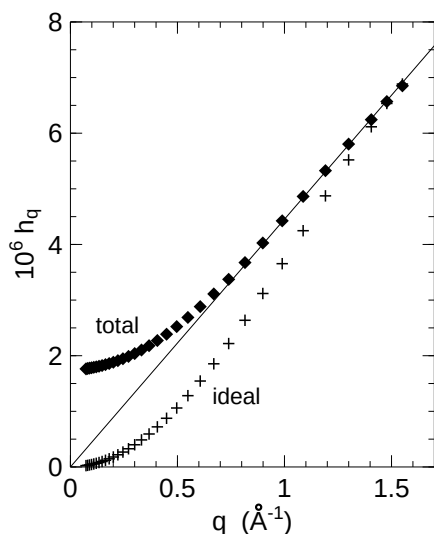


Figure 1.4.1:

Amplitudes h_q obtained by factorisation of the scattering law $S(q, \nu)$ of an idealised liquid. The input data ('ideal scattering law') follow a q^2 expansion; the output data ('total simulated scattering') are enhanced by multiple-scattering contributions which are dominant in the low- q region. The line indicates a transient linear q dependence observed in several real experiments.

1.5 IDA and for2html: Computing tools for data analysis and beyond

J. Wuttke

Originally developed for the analysis of inelastic neutron scattering data, IDA (ingenious data analysis) has now grown into a comprehensive package for manipulating, analysing, fitting, and plotting any multi-dimensional data of the form $y(x, z_1, z_2, \dots)$. Each data set may also contain some parameters $r_1, r_2, \dots$ plus some text lines, including strings that describe the physical meaning of the variables $x, y, z_1, \dots, r_1, \dots$. Basically, IDA is a collection of about 100 subprograms that operate on these data sets.

While many of these subprograms make no assumptions about the meaning of the variables they act upon, others are very specifically written for our special needs in analysing neutron or light scattering data. For instance, IDA contains subroutines to read and refine raw data from all high-resolution neutron time-of-flight spectrometers. IDA even incorporates a Monte-Carlo program for multiple-scattering simulations, based on the MSCAT algorithm [1].

Foreseeably, IDA will also become a standard tool for analysing experiments on the new time-of-flight spectrometer at the FRM-II. With a growing number of users, there will also be a growing demand for documentation. At present, an easy-to-use documentation does not exist. For expert users, however, I made available the most accurate documentation one can imagine: the source code of the program. More than 40.000 lines of FORTRAN77 code have been converted into HTML and published in the world wide web [2]; this documentation is updated regularly.

To generate and maintain the documentation, I wrote **for2html**: the FORTRAN to HTML translator. **for2html** is a PERL script that translates FORTRAN sources into HTML pages. It automatically generates backward and forward links to all **SUBROUTINE** and **FUNCTION** calls, **INCLUDED** files and **BLOCK DATA** sections. It is tested with FORTRAN77 but should work for older FORTRAN dialects as well. Standard extensions to FORTRAN77 like extended source lines (of arbitrary length), long object names, and in-line comments (starting

with an exclamation mark) are implicitly assumed, Furthermore, `for2html` generates a project overview page that enumerates for each source module all `PROGRAM`, `SUBROUTINE`, `FUNCTION`, `ENTRY` and `BLOCK DATA` declarations and contains the list of back-links to the source sections that call them.

As a spin-off product, `for2html` has been made freely available in the web [3]. By now, it is recommended by several renowned computing sites [4]. The `for2html` homepage steadily attracts more than 300 hits per month, making it is the most popular of all E13 web pages.

- [1] J. R. D. Copley, Comput. Phys. Comm. 7, 289 (1974)
- [2] www.e13.physik.tu-muenchen.de/Wuttke/Ida.html
- [3] www.e13.physik.tu-muenchen.de/Wuttke/f2h.html
- [4] For instance, rated 4 of 5 penguins by www.linuxberg.com

2 Polymere

2.1 Dewetting of thin polymer-blend films

P. Müller-Buschbaum, S. Cunis¹, G. von Krosigk¹, R. Gehrke², W. Petry

¹ Universität Rostock, Fachbereich Physik

² HASYLAB at DESY, Hamburg

Thin polymer films are used in many practical applications. The dewetting of these films is of great importance for a broad range of applications in different fields like surface coatings or bio-technologies. In the past experimental as well as theoretical work focused on homopolymer films on top of homogeneous solid substrates. These well-defined model systems are basically described by short- and long-range interactions between polymer molecules and substrate atoms. Though there is still a debate about the underlying dewetting mechanism (spinodal dewetting or nucleation and growth), recently more complex systems have been examined: On one hand the homogeneous substrate is replaced by nano-periodic heterogeneous surfaces, polymer brushes or polymer layers and on the other hand the homopolymer is replaced by liquid crystals, block copolymers, elastomers or polymer blends. In all these examples additional contributions to the excess surface free energy density as compared to the simple model system have to be taken into account.

In the case of polymer blends the immiscibility of the two blend components yields a phase separation process which was investigated extensively in bulk samples. Different phase separation morphologies have been observed as a function of the blend composition and the polymer-polymer interaction parameter. The symmetry breaking at an interface forces a phase separation morphology ordered parallel to the interface. In the state of a thin film, with a thickness below a critical film thickness, the surface-directed spinodal decomposition of polymers is suppressed and a phase separation perpendicular to the interface results. Due to the internal size of the individual polymers which is described by the radius of gyration R_g , a further change in the phase separation is observed below a characteristic thickness of R_g . It results from the spatial constraints in one direction of the blend.

For thin blend films on top of non-wettable surfaces an interplay between phase separation and dewetting increases the variety of accessible surface morphologies. With decreasing blend incompatibility the morphologies observed right after preparation decrease in lateral size and in height. The time scale of both processes, dewetting and phase separation, are different and depend on the internal interaction. Within the spinodal dewetting model the characteristic time constant of the film destabilisation scales as a function of initial film thickness with a power of 5. Thus in case of incompatible blends the phase separation process is fast as compared to the dewetting process. For weakly incompatible blend films the time scales are of similar magnitude. In the presented investigation we focus interest on the dewetting of thin polymer blend films with film thickness up to the characteristic thickness of R_g . Thus we investigated confined thin films. As blend we have chosen a mixture of deuterated polystyrene (dPS) and polyparamethylstyrene (PpMS), which, neglecting the deuteration, only differ by one methyl group. Because of mass conservation

the evolving dewetting structures resulting from confined thin films have to be very small and their spatial dimension is below the optical resolution limit. Consequently usually applied techniques like optical microscopy have been replaced by techniques with a higher resolution. In real space the surface topography is investigated by atomic force microscopy (AFM). Further information is gained by scattering methods. A comparison of grazing incidence small angle scattering (GISAS) by synchrotron radiation and neutrons gives access to the internal structures. Originated from the differing interactions with the investigated sample system dPS:PpMS/Si both techniques have a reversed scattering contrast.

The grazing incidence small angle x-ray scattering (GISAXS) measurements were performed at the BW4 USAX beamline of the DORIS III storage ring at HASYLAB/DESY in Hamburg [1]. The selected wavelength was 1.38 Å. The scattered intensity was recorded with a two-dimensional detector which consist of a 512×512 pixel array. Due to the sample-detector distance of 12.37 m a high resolution was achieved. The beam divergence in and out of the plane of reflection was set by two entrance cross-slits. At one fixed angle of incident the two-dimensional intensity distribution can be cut in several vertical and horizontal slices with respect to the sample surface. Vertical slices contain mainly scattering information from structures perpendicular to the sample surface, whereas horizontal slices contain only scattering contributions with an in-plane information. Thus for the investigation of surface morphologies we restrict ourselves to horizontal slices, which are frequently called 'out-of plane-scans'. [2]

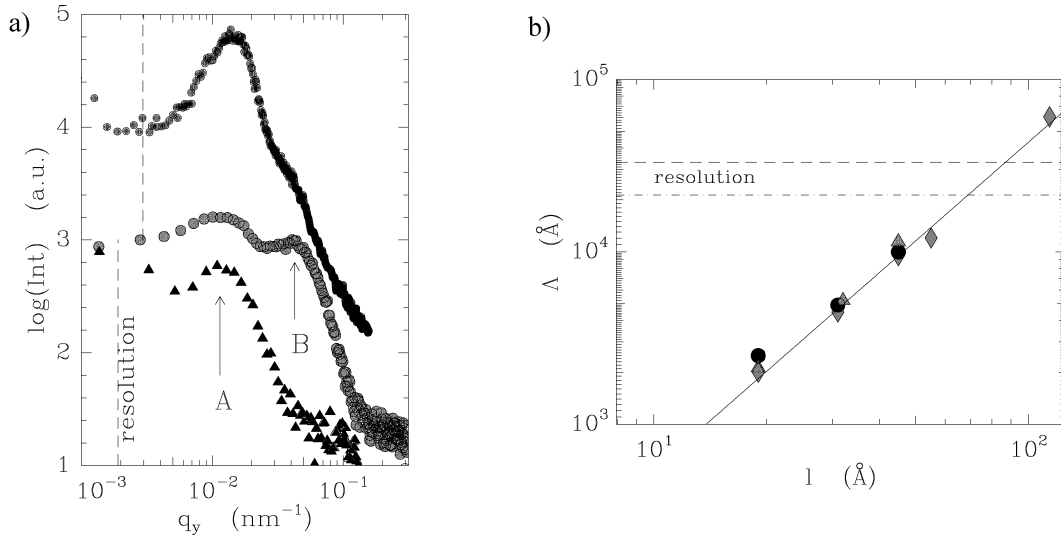


Figure 2.1.1:

a) Out-of plane scans as measured with different techniques. b) Resulting most prominent in-plane length as a function of the originally prepared film thickness suggesting a spinodal like behaviour. [4]

Figure 2.1.1a) exhibits a double-logarithmic plot of horizontal slices from the two-dimensional intensity distribution measured of the dewetted dPS:PpMS sample (film thickness $l = 31$ Å). From the bottom to the top the measurements have been performed using AFM, x-rays and neutrons. The dashed line indicates the resolution limit. The position of characteristic peaks is marked with 'A' and 'B'. The data are shifted for clarity. The structure factor corresponding to the droplet distance causes the peak at the position

marked with 'A'. From the form factor of the individual droplets the second peak marked with 'B' results. It is only weakly visible in the AFM data due to the smearing out but well established in the x-ray data because of the missing contrast between dPS and PpMS. From its absence in the neutron data we conclude an internal blend composition inside the droplets which has to be random without any periodicity [3, 4].

Figure 2.1.1b) shows a double-logarithmic plot of the most prominent in-plane length Λ as a function of originally prepared film thickness l . The values determined by x-ray scattering are plotted with triangles, the ones from the neutron scattering with circles and the values resulting from the AFM data are shown with rhombs [4]. The solid line represents a model calculation based on spinodal dewetting following $\Lambda \sim l^2$. With the dashed and the dashed-dotted line the resolution of the neutron and of the x-ray experiment are shown as well.

- [1] P. Müller-Buschbaum, M. Casagrande, J. Gutmann, T. Kuhlmann, M. Stamm, S. Cunis, G. von Krosigk, U. Lode, R. Gehrke; *Europhys. Lett.* 42, 517 (1998)
- [2] P. Müller-Buschbaum, J. S. Gutmann, M. Stamm, R. Cubitt; *Macromol. Symp.*, 149, 283 (2000)
- [3] P. Müller-Buschbaum, J. S. Gutmann, R. Cubitt, M. Stamm; *Colloid Polym Sci*, 277, 1193 (1999)
- [4] P. Müller-Buschbaum, J. S. Gutmann, M. Stamm, R. Cubitt, S. Cunis, G. von Krosigk, R. Gehrke, W. Petry; *Physica B* 283, 53 (2000)

2.2 Early stages of film creation and morphology evolution in thin diblock copolymer films

P. Müller-Buschbaum, T. Ittner, C. Lorenz-Haas¹, O. Wunnicke²,
M. Stamm², A. Meyer³, R. Döhrmann³, W. Petry

¹ Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz

² Institut für Polymerforschung, Dresden

³ HASYLAB at DESY, Hamburg

Diblock copolymers are macromolecules consisting of two coupled chemically different polymer species A and B. In the bulk due to block segregation and microphase separation diverse ordered morphologies such as lamellae, cylinders, spheres and bicontinuous minimal-surface microstructures occur [1]. These ordered morphologies exhibit properties that differ considerably from those of the disordered state. Various morphologies have been investigated as a function of block ratio, molecular weight, temperature and pressure yielding well established phase diagrams. The order-to-disorder transition is driven by the degree of polymerization N and the Flory-Huggins segment interaction parameter χ . Surfaces and interfaces influence this phase separation process. Due to the different interactions between the interface with the blocks, one component segregates at the interface. Due to this surface induced ordering in thin films of block-copolymers a lamellar order is preferred [2]. The lamellae are oriented parallel to the substrate surface which can be understood as the ordering field. The lamellar period L corresponds to the thickness of

an ABBA or BAAB bilayer. As a function of decreasing film thickness additionally a reorientation of the lamellar domains from a parallel to a perpendicular arrangement was observed. The internal order as well as the ordering of thin films of diblock copolymers was frequently investigated with several experimental techniques as well as theoretically. Commonly as prepared thin films are yielded by spin coating a diblock copolymer solution onto a substrate. During annealing above the glass transition temperature of the copolymer the internal order is installed. The actual film thickness l determines the number of built-up lamellae as well as the creation of holes or islands due to a non integer ratio of l/L . The minimization of the surface free energy density determines which block is present at the interfaces.

In contrast to the ordered state, only less attention was paid to the as-prepared state right after the spin coating. In this disordered state the copolymer microdomains are described as randomly oriented with respect to the surface and the surface of the thin films was reported to be essentially flat. Previous investigations dealing with homopolymer films [3-5] as well as with polymer blend films [6] have shown that as prepared films right after the spin coating exhibit a very special type of surface roughness. The polymer-air interface replicated the substrate roughness over a large frequency range. This roughness replication decays after annealing. In the presented investigation we focus on this long range correlation in case of thin diblock copolymer films. Due to the internal length scale introduced by the lamellar period L in case of diblock copolymer films a different behavior as compared to more simple polymers might be expected. In the present investigation we focus on typical key parameters like the molecular weight and the film thickness.

Reflectivity measurements were performed at the A2 polymer beamline of the DORIS III storage ring at HASYLAB/DESY in Hamburg. The selected wavelength was 1.50 Å. To minimize a sample degradation, originated by the illumination with the x-ray beam, the sample was shifted in the beam and only non-illuminated sample areas were measured. In addition diffuse scattering experiments were performed at this beamline. At one fixed angle of incidence the one-dimensional intensity distribution of a linear wire detector represent so-called 'detector-scans' which mainly carries q_z information. By changing the sample-detector distance a different resolution was obtained. In a q_x - q_z -map a detector scan is a parabolic path through the reciprocal space, which cuts the Yoneda as well as the specular streak. In a typical scan both are visible as peaks. The intensity depends on the roughness of the sample and the chosen incident angle α_i . In the case of correlated roughness additional intensity streaks due to resonant diffuse scattering are present. These streaks are oriented parallel to the q_x -axis. Thus in a detector scan they are observable as an additional modulation of the intensity. From the spacing of these fringes the distance between the correlated interfaces can be estimated.

In figure 2.2.1a) 'detector-scans' measured at the angle of incidence $\alpha_i = 1.23^\circ$ of films with a fixed film thickness at different molecular weights are shown. For clarity the curves are shifted by one order of magnitude against each other. Due to the change in the molecular weight the lamellar spacing is modified as well. Thus at a given film thickness different numbers of lamellae are placeable inside the film.

'Detector-scans' measured at the angle of incidence $\alpha_i = 1.23^\circ$ of the blockcopolymer films with a fixed molecular weight as prepared are shown in figure 2.2.1b). The film thickness is varied between 25 Å and 1190 Å. Again the curves are shifted by one order of magnitude against each other for clarity. In general the roughness replication is not

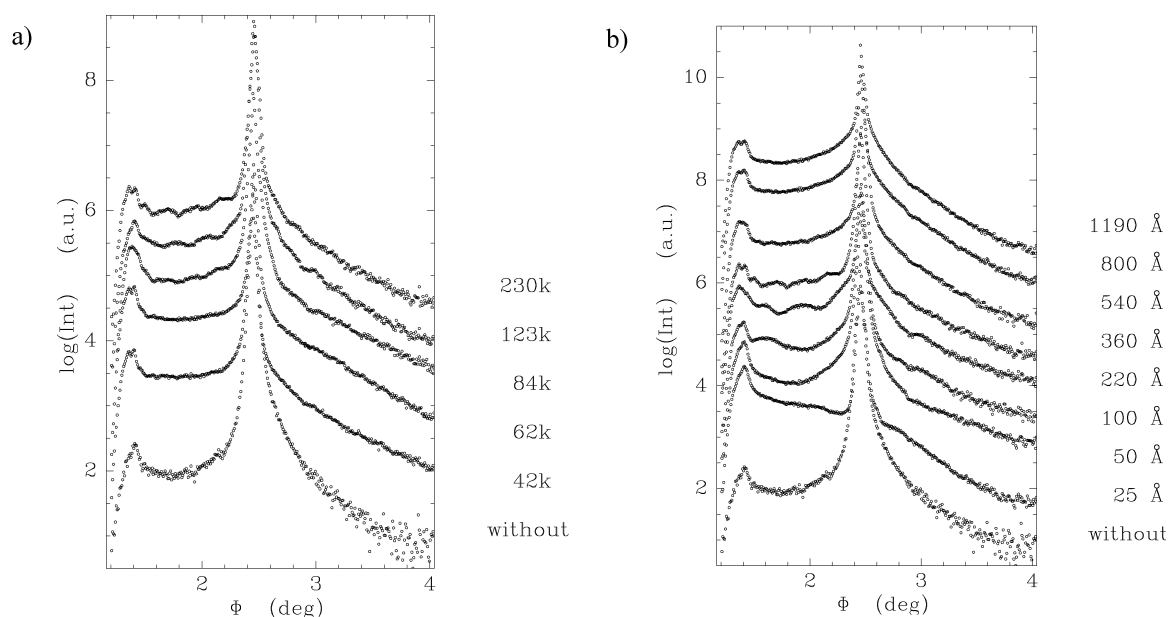


Figure 2.2.1:

a) Detector-scans measured at samples which differ in the molecular weight of the block-copolymer used. b) Detector-scans measured at samples which differ in the film thickness.

that well established as previously observed in case of homopolymer films. In addition it is limited to a drastically smaller range of film thickness, which results from the internal molecular structure.

- [1] P. Alexandridis, R. J. Spontak; Curr. Opin. Coll. Inter. Sci 4, 130 (1999)
- [2] T. L. Morkved, H. M. Jaeger; Europhys. Lett. 40, 643 (1997)
- [3] P. Müller-Buschbaum, M. Stamm; Macromolecules 31, 3686 (1998)
- [4] P. Müller-Buschbaum, J. S. Gutmann, C. Lorenz, T. Schmitt, M. Stamm; Macromolecules, 31, 9265 (1998)
- [5] P. Müller-Buschbaum, J. S. Gutmann, J. Kraus, H. Walter, M. Stamm; Macromolecules, 33, 569 (2000)
- [6] J. S. Gutmann, P. Müller-Buschbaum, D. W. Schubert, N. Stribeck, D. Smilgies, M. Stamm; Physica B 283, 40 (2000)

2.3 Surface morphology controlled tack of polymers

T. Ittner, P. Müller-Buschbaum, W. Petry

Controlling the tackiness of polymer surfaces is of great importance in many applications. The surface of a polymer painting or coating for example is ought not to be sticky. On the other hand high tack is desired in pressure sensitive adhesives, which are used in many day-to-day products as adhesive notes or labels. In order to improve the tack of polymer surfaces it is necessary to understand the mechanisms of bond formation and debonding between two substrates.

Tack between two substrates can be defined as the maximal tension force the connection of the two materials can withstand before separation sets in. Another measureable quantity is the debonding energy which is dissipated during the debonding process. In glassy polymers the dissipation is due to crack formation and propagation along the substrate. In viscoelastic polymers above the glass transition temperature, another debonding process has been identified [1, 2]: As the material slowly can flow, the formation of fibrils causes the strong energy dissipation. This debonding mechanism has been described theoretically recently [3] and is mainly confirmed by our experiments [4]. In this model description, the surface morphologies of the two substrates cause air to be trapped in the contact region. While separating the two substrates, the air bubbles begin to grow in diameter until they reach each other and get connected. Thus only fibrils are left between the two samples. These fibrils are the reason for the existence of a stress plateau in the stress-strain-curve which is obtained by measuring the debonding force during the debonding process (figure 2.3.1). They are predicted not to decrease in diameter during the debonding process but being elongated by pulling new polymer material out of the film. This is the reason for the constant force plateau during the debonding process (figure 2.3.1). Different surface morphologies can result in different length scales in the contact region between the two substrates and therefore in different fibril structures. Surface-morphologies are producible by using polymer-blend films. The lengthscales of these morphologies are controlled by the polymer-polymer interaction parameter [5].

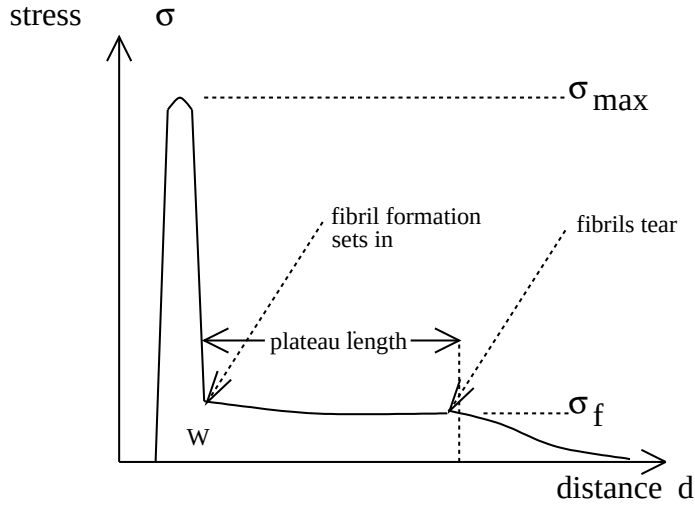


Figure 2.3.1:
Typical force versus distance in a debonding experiment with constant debonding rate between a polymer film and a metal probe.

In this work a tack-apparatus has been constructed which allows a simultaneous measurement of the distance between the samples and the debonding force during the debonding process. Furthermore, the polymer structures being formed in the contact region between the two samples are examined with ultra-small-angle x-ray scattering (USAX). The scattering experiments were performed at the BW4 USAX beamline of the DORIS III storage ring at HASYLAB/DESY in Hamburg. A two-dimensional detector consisting of a 512×512 pixel array was used to collect the scattering information. The detector-sample distance was 12.7m, thus very small scattering angles leading to information about structure sizes up to 500nm could be detected. As the scattering sample consists of vertical fibrils between two horizontal plates, only the scattering signal in the horizontal direction is of interest. The horizontal plates lead to reflections in vertical directions. A typical two-dimensional intensity distribution is shown in figure 2.3.2. Information about the

polymer fibrils are gathered by cutting this two-dimensional data array into horizontal slices through the middle of the array, which is defined by the position of the primary beam and the beamstop. Information about the fibril formation between a film of poly (n-butyl-acrylate) and a metal probe is obtained from a fit to the data [4].

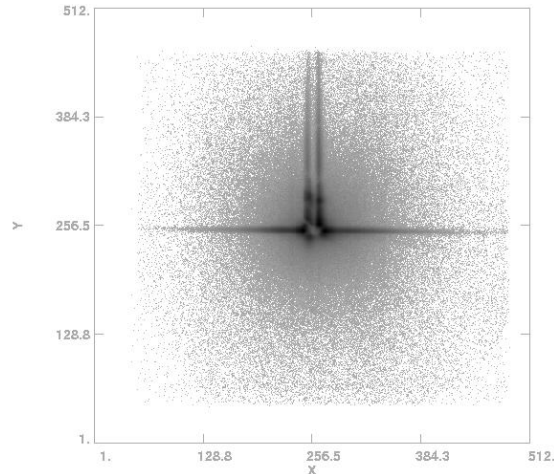


Figure 2.3.2:

Two-dimensional intensity distribution of a scattering experiment on polymer fibrils between two horizontal plates.

- [1] A. Zosel; Int. J. Adhesion and Adhesives 18, 265 (1998)
- [2] H. Lakrout, J. Adhesion, 69, 307 (1999)
- [3] C. Gay, L. Leibler; Phys. Rev. Let. 82, 936 (1999)
- [4] T. Ittner, Diplomarbeit, TU München (2000)
- [5] J. S. Gutmann, P. Müller-Buschbaum, M. Stamm, Faraday Discussion 112, 285 (1999)

2.4 Scanning USAX at polymer interfaces

C. Lorenz-Haas¹, P. Müller-Buschbaum, T. Ittner, O. Wunnicke²,
M. Stamm²

¹ Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz

² Institut für Polymerforschung, Dresden

The defect structures created with the double cantilever beam test method (DCB) was investigated with scanning ultra-small angle scattering (S-USAX). The DCB is a simple but effective technique to estimate the interface toughness between two polymer plates [1-3]. For a measurement a razor plate is pushed between them (Figure 2.4.1) and from the resulting crack length the calculation of the interface toughness is possible. The energy enters not only into the creation of the crack between the plates but also into the formation of a plastic zone. This means that at the tip of the crack defect structures inside each plate appear. Details of the deformation process are not quite well known up to now.

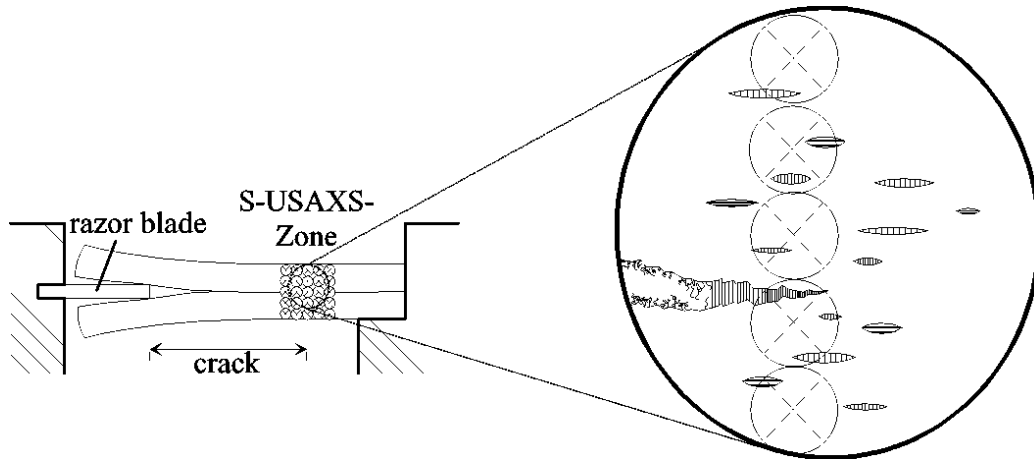


Figure 2.4.1:

The DCB test: a razor blade has initiated a crack along the interface. The small circles with crosses inside symbolise the beam positions during the S-USAX experiments around the crack tip. The plastic zone with various defect structures is enlarged in the big circle.

Our model system consists of polymethylmethacrylate (PMMA) of different molecular weights (134 kg/mol and 191 kg/mol). The samples were prepared by annealing two PMMA plates on top of each other, applying a slight pressure. Different annealing times have been used to install different interface toughnesses via interdiffusion of polymer chains at the interface. The USAX measurements were performed at the BW4 beamline of the DORIS III storage ring at HASYLAB/DESY in Hamburg. The beam had a spot size on sample of about $300\text{ }\mu\text{m}$ in diameter and the distance between sample and area detector was 12.66 m. The measurements have been carried out at a fixed energy of 8.8 kV. Scanning was implemented by stepping motors in both directions (y and z) perpendicular to the beam (x -direction). The spatial resolution thereby is limited by the beam size on sample exclusively. Depending on the beam position in the plastic zone different USAX pattern have been observed which differ markedly from scattering of the bulk material. We can picture a great variety of defect structures responsible for the scattering pattern, e. g. crazes, micro voids or fibrils. For analysis pie shaped sector cuts have been performed on each USAX image. An example of such a cut is shown in Figure 2.4.2. The log-log plots could be fitted with straight lines. This shows the presence of a scaling behaviour. We found up to three different slopes in one cut. Similar results were reported previously [4]. In the work of Salomons et al. [4] these regimes have been addressed with 3 different scattering regions: a) fibril-fibril scattering, b) fibril-void scattering and c) intra fibril scattering. With the USAX-scan an area around the crack tip of about one millimeter squared has been observed. In this whole area we found deviations from the bulk scattering. This shows that in the DCB test energy dissipation does not only take place at the interface. Therefore the interface fracture toughness (adhesion) determined by DCB strongly depends on failure mechanisms in the bulk material. It is also a property of the material observed.

- [1] R. Schnell, M. Stamm and C. Creton, *Macromolecules* 31, 2284 (1998)
- [2] R. Schnell, M. Stamm and C. Creton, *Macromolecules* 32, 3420 (1999)
- [3] J. Washiyama, C. Creton and E. J. Kramer, *Macromolecules* 25, 4751 (1992)

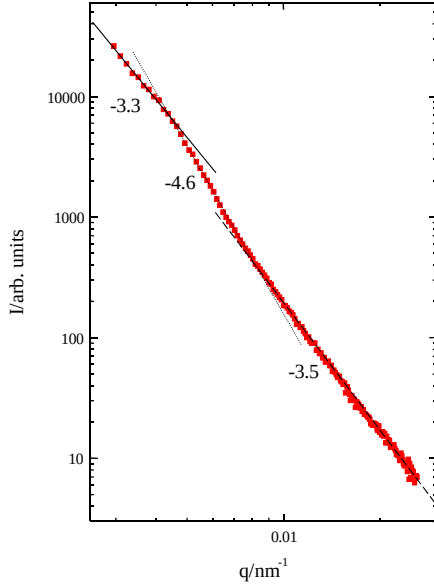


Figure 2.4.2:
Example for the crossover in scaling laws in the log-log plot of the scattering intensity in dependency on the scattering vector q .

- [4] G. J. Salomons, M. A. Singh, T. Bardouille, W. A. Foran, M. S. Capel, J. Appl. Cryst. 32, 71 (1999)

2.5 Off-specular neutron scattering pattern from islands on a lamellar film

V. Lauter, H. Lauter¹, P. Müller-Buschbaum, W. Petry, B. Toperverg²,
A. Petrenko³

¹ ILL, Grenoble

² IFF, Jülich

³ JINR, Dubna

It is well recognized that X-ray and neutron reflection and off-specular scattering are rather powerful tools to study surface formation of diblock copolymers such as P(S-b-BMA) (polystyrene-block-polybutylmethacrylate) which can be prepared in ordered multilayered structures [1, 2, 3]. In these multilayers the sequence of the basic stack of diblock copolymers L (PBMA-b-PS-PS-b-PBMA) repeats in each next lamellar period. The top stack L , however, may not be complete which results in the formation of the islands, holes, bicontinuous structures, etc. In a previous investigation by Vignaud et al. [1] it was reported that X-ray off-specular scattering from a surface with islands shows its intensity peaks at certain values of the lateral wave vector transfer. These peaks were interpreted as a manifestation of the correlations between the island positions on the surface, while the scattered intensity variation as a function of the transverse wave vector transfer q_z was used to find the island height and the film thickness. Due to the low scattering contrast between Ps and PBMA no information on the internal structure of the islands in the direction normal to the surface where deduced [1] either from specular, or off-specular X-ray

scans. The measurements of Vignaud et al. [1] were evaluated at $0.15 < q_z < 0.2 \text{ \AA}^{-1}$, i.e. values of q_z , where the scattering is already quite weak, and the data were interpreted in terms of the Born Approximation (BA).

Similar features were observed in our measurements of off-specular neutron scattering from a single film of the diblock copolymer stack PBMA-b-dPS-dPS-b-PBMA (d denotes the deuteration of the PS block) covered with islands. The data were collected in a broad range in reciprocal space, including the total reflection region. In this region, however, the BA is invalid and one should consider not only the process of scattering from islands of the incident neutron wave, but also of the wave, which is reflected from the mean value of the optical potential, as well as interference of these two scattering processes. All of them are taken into account within the framework of DWBA [3], while their interference, as we shall see, gives rise to a number of quite prominent features in the scattering pattern. In particular, DWBA well reproduces the peaks observed in our experiment [4], but does not require any correlations in the island positions as assumed in [1]. Moreover, due to the quite appreciable scattering length density contrast between dPS and PBMA neutrons are rather sensitive to the internal structure not only of the film, but also of the islands on its surface. The structure factor of islands and the film regulates the ratio between different peak intensities and the best description of our data was reached for an internal island structure close to that of the film.

The experiment has been carried out on the reflectometer D17 at ILL. The neutron wave length was $11 \text{ \AA}$ and the data were collected within the range of angles corresponding to the transverse momentum transfers $0.001 < q_z < 0.15 \text{ \AA}^{-1}$. The data recorded with a position sensitive detector at each angle of incidence were rearranged to build the contour plot, as shown in Fig. 2.5.1 in order to be compared with the results of the calculations (Fig. 2.5.2) for the model described in [4].

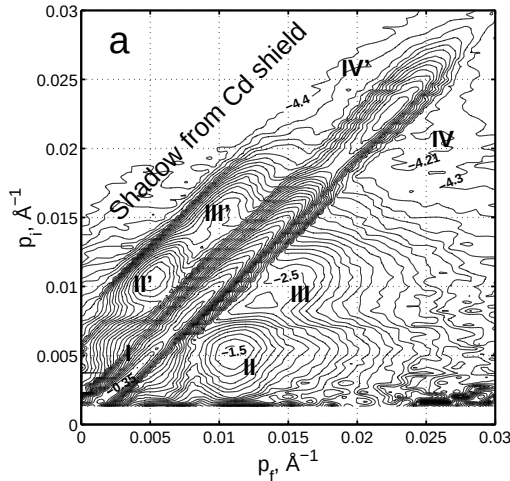


Figure 2.5.1:
Experimental contour map of specular reflection and off-specular scattering from a P(dS-b-BMA) lamellar film with islands. p_i and p_f are the transverse components of wave vector of the incoming and scattered neutron waves, respectively.

Most of the features in Fig. 2.5.2 remarkably reproduce those seen in the experimental pattern of Fig. 2.5.1. Analyzing this distribution we found $\rho_0 \sim 5000 \text{ \AA}$. The ratio between the intensities in specular reflection and off-specular scattering provides the coverage rate $c_0 \approx 25\%$.

In conclusion, major features observed in off-specular neutron scattering from randomly distributed islands on lamellar films may be well understood in terms of DWBA and

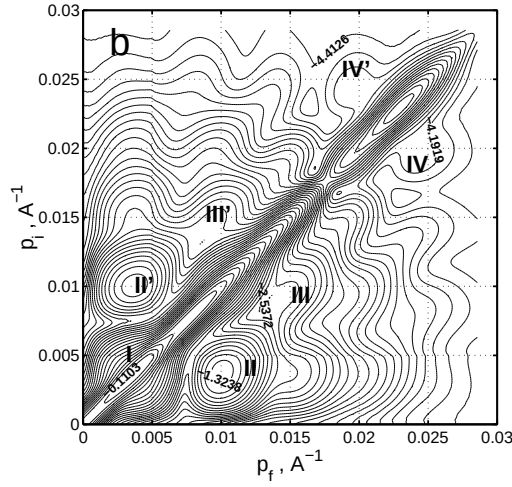


Figure 2.5.2:
Theoretically calculated contour maps of specular reflection and off-specular scattering from the corresponding P(dS-b-BMA) film.

quantitatively described with a set of physical parameters. This observation leads us to conclude that peaks in the map with the coordinates $\{p_f, p_i\}$ (or $\{q_x, q_z\}$) do not necessary imply a kind of in-plane ordering.

- [1] G. Vignaud, A. Gibaud, J. Wang, S. K. Sinha, J. Daillant, G. Grübel, Y. Gallot, J. Phys.: Condens. Matter 9, L125 (1997)
- [2] V. Lauter-Pasyuk, H. J. Lauter, D. Ausserré, Y. Gallot, V. Cabuil, E. I. Kornilov, B. Hamdoun, Physica B 241-243, 1092 (1998)
- [3] G. Vignaud, A. Gibaud, G. Grübel, S. Joly, D. Ausserré, J. F. Legrand, Y. Gallot, Physica B 248, 250 (1998)
- [4] B. Toperverg, V. Lauter-Pasyuk, H. Lauter, O. Nikonov, D. Ausserré, Y. Gallot, Physica B 283, 60 (2000)

3 Dynamik geordneter Kristalle

3.1 Temperature Dependent Partial Phonon Density of States of $\text{Fe}_{72}\text{Pt}_{28}$

N. Wiele, A. Zirkel ¹, T. Asthalter ², H. Franz ³, W. Petry

¹ TU München, FRM-II

² TU München, E13, delegated to ESRF/Grenoble, France

³ TU München, DESY/HASYLAB

We have investigated during the last years the phonon density of states (DOS) of $\text{Fe}_{x-1}\text{Pt}_{x,x=24-28}$ in the temperature range from 16K up to room temperature and with

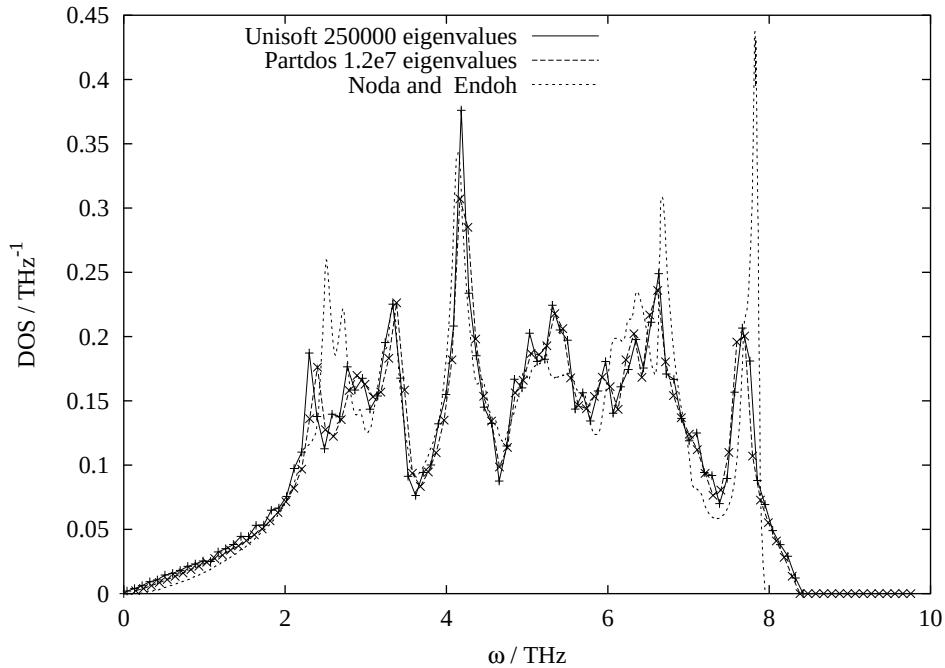


Figure 3.1.1:

Total DOS of ordered $\text{Fe}_{72}\text{Pt}_{28}$ at room temperature calculated with UNISOFT [7] and PARTDOS using the force constants given by Noda and Endoh [8]. The results calculated with UNISOFT and PARTDOS are almost equal. The DOS of Noda and Endoh differ from our own calculations. This might originate from an insufficient summation over the Brillouin zone by Noda and Endoh due to poor computer capacity 12 years ago.

different degrees of order [1,2,3,4] by means of nuclear inelastic absorption (NIA) [5]. All these experiments have been analyzed only qualitatively so far. Now we present a quantitative analysis.

The invar alloy $\text{Fe}_{72}\text{Pt}_{28}$ shows a softening of the $\text{TA}_{[110]}$ phonon branch [6]. Two possible

techniques have been applied to gain information about the phonons in the system. Each of them gives specific information.

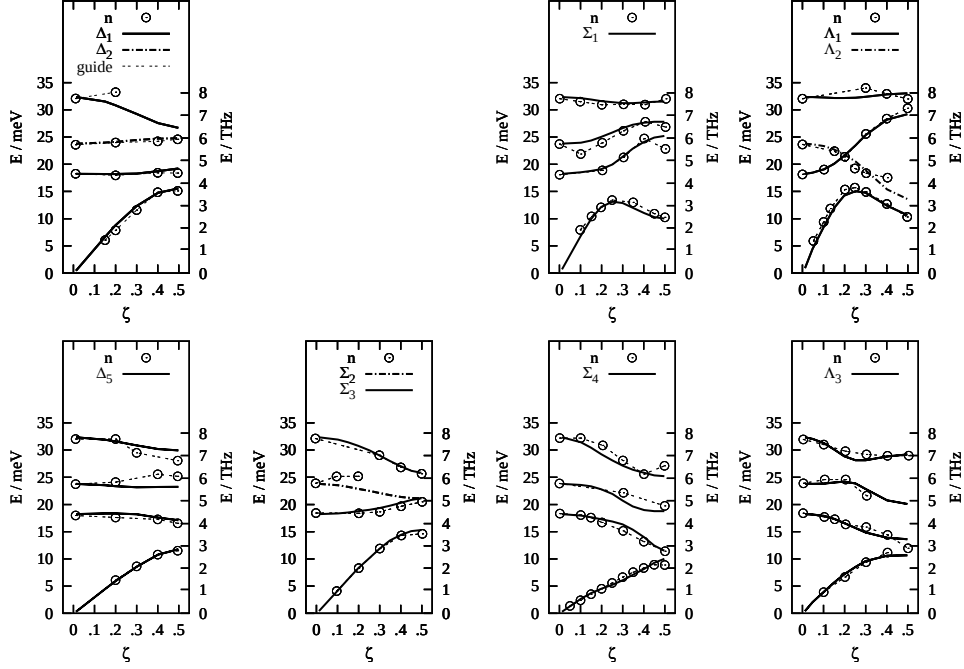


Figure 3.1.2:

Fit of the phonon branches using a 3 shell BvK-model with force constants. The neutron data are taken from [8] except the data of the $\text{TA}_{[110]}$ phonon branch (acoustic branch of Σ_4), which were taken from [6].

Scattering of neutrons using a triple axis spectrometer was done by Noda and Endoh [8] and Kästner et al. [6]. The coherent cross sections of Fe and Pt for neutrons differ by less than 4 %. Hence a neutron interacts with a Fe- or Pt-atom with roughly the same weight. From a triple axis experiment one obtains the phonon branches of the lattice. The next step is to fit a Born-von Kármán-model (BvK-model) to these phonon branches. Using that model a DOS can be calculated by summation of the frequencies over the first Brillouin zone.

A different method to obtain the DOS is NIA. Here the DOS can be obtained from the measured data without any further knowledge about the lattice examined. The NIA experiment can only detect the interaction between the synchrotron radiation and the ^{57}Fe -atoms. Therefore only that part of the phonons, which involves the movements of Fe-atoms, can be detected. Due to that restriction the DOS obtained is not the total DOS but just the partial Fe-DOS. This is, however not a shortcoming but an advantage. In fact, it is quite difficult to obtain information on partial atomic motions by other methods.

In order to combine both techniques we needed a program to fit the phonon branches gained by the triple axis experiments. Therefore we extended the program UNIFIT written by Markus Zolliker (PSI/Switzerland) to fit our data using tensor force constants. Previously only radial force constants could be fitted by UNIFIT. The program UNISOFT

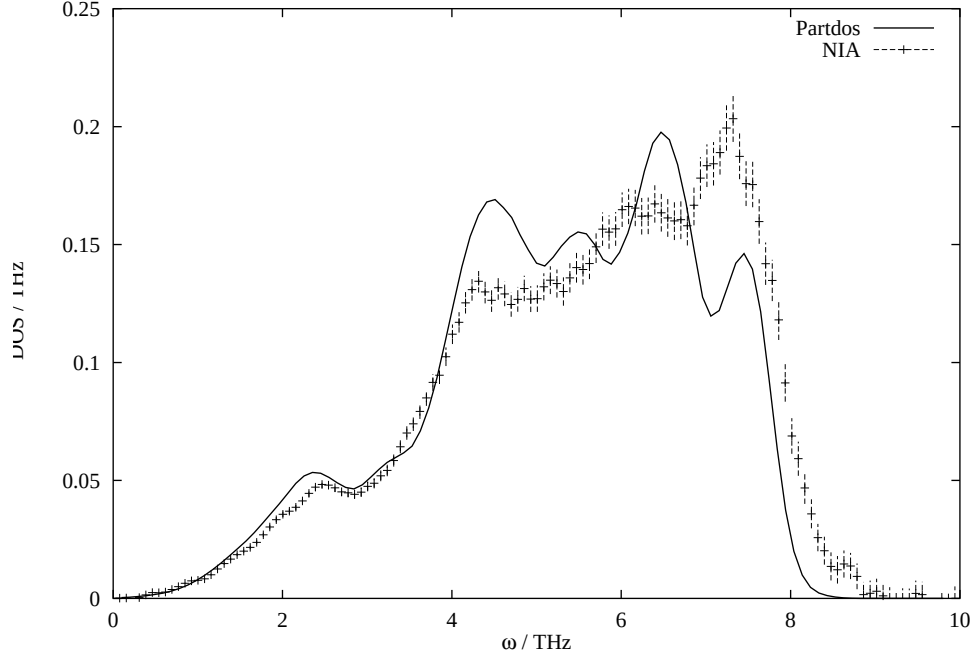


Figure 3.1.3:

Partial DOS of ordered $\text{Fe}_{72}\text{Pt}_{28}$ at room temperature measured via NIA (at the ESRF/ID18) and calculated with PARTDOS. The calculated DOS is convoluted with the resolution of the monochromator used in the experiment.

[7] had also to be changed to include tensor force constants to be able to calculate the eigenvalues and for plotting the phonon branches. Both programs can handle all types of lattices but require a rather long time for the calculation. To calculate the DOS a faster program was needed. Hence we wrote the Program PARTDOS by directly setting up the dynamical matrix for the L_{12} -lattice involved. It is 300 times faster than UNISOFT. The results of PARTDOS and UNISOFT match very well (fig. 3.1.1).

An example for the fitting results of UNIFIT is given in (fig. 3.1.2). Some branches are still fitted unsatisfactory. Therefore UNIFIT and UNISOFT were changed to handle a BvK-model including 4 shells. The fits with 4 shells have a 10 % better χ^2 then the fits with 3 shells. A DOS with the 4 shell fits cannot be shown here, because PARTDOS has to be changed as well. This is still in progress.

In fig. 3.1.3 an example for the measured and the calculated DOS is given. In contrast to the total DOS shown in fig. 3.1.1 there are much less low frequency modes. Due to the high mass of Pt the low frequency modes are dominated by Pt. As mentioned above, NIA can just trace movements of the Fe-atoms. Thus those Pt-modes can't be measured. Below 4 THz the agreement of NIA and calculation is good. Above they still differ by up to 20 %. We expect to improve this by performing 4-shell fits.

Two different techniques have been applied here: neutrons and synchrotron radiation. Different ways to evaluate the DOS have been presented. Keeping the experimental uncertainties and the indirect calculation of the DOS from the neutron data in mind, the results match rather well. The last figure (fig. 3.1.4) shows the calculated partial Fe-DOS

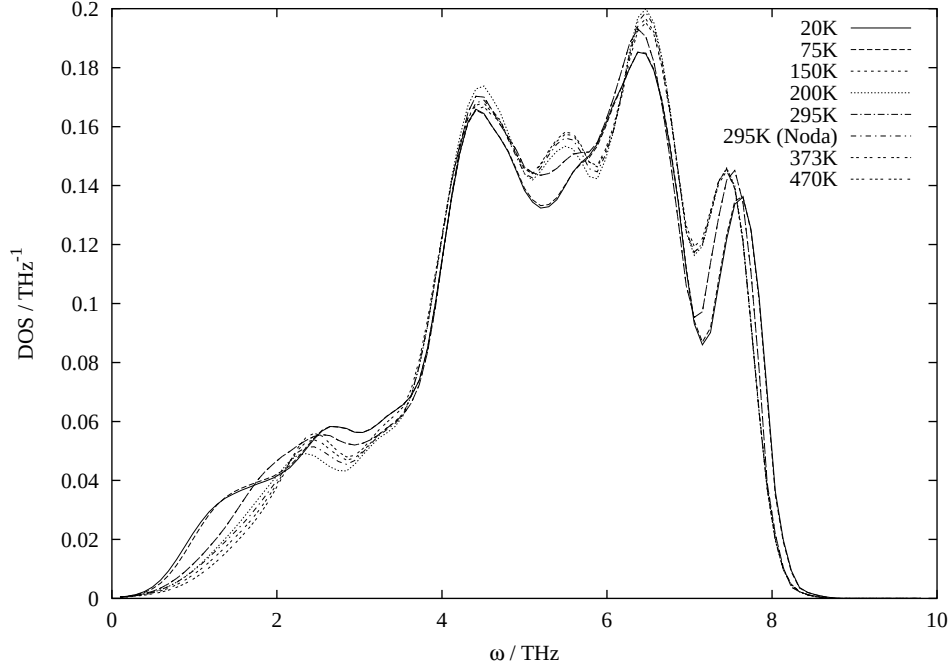


Figure 3.1.4:

Temperature dependent partial Fe-DOS calculated with PARTDOS. The $TA_{[110]}$ branch softens with decreasing temperature. Hence the saddle in the DOS at 2 THz shifts towards lower frequencies. The force constants are obtained from a 3 shell BvK fit using the program UNIFIT by Markus Zolliker.

at different temperatures. The softening of the $TA_{[110]}$ branch can be seen quite well.

- [1] N. Wiele, H. Franz, A.I. Chumakov. and O.Leupold, Jahresbericht E13 (1997) 23-25
- [2] N. Wiele, H. Franz, W. Petry and A.I. Chumakov, Jahresbericht E13 (1998) 23-24
- [3] N. Wiele, H. Franz T. Asthalter and W. Petry, Jahresbericht E13 (1999) 43-47
- [4] N. Wiele, H. Franz and W. Petry, Physika B 263-264 (1999) 716
- [5] M. Seto, Y. Yoda, S. Kikuta, X.W. Zhang and M. Ando., Phys.Rev.Lett. 74 (1995) 3828
- [6] G. Eckold, UNISOFT; Berichte des Forschungszentrums Jülich, 2nd ed., 1992
- [7] Y. Nado and Y. Endoh, J. Phys. Soc. Japan 57 (1988) 4225
- [8] J. Kästner, W.Petry, S.M. Shapiro, A. Zheludev, J. Neuhaus, Th. Roessel, E.F. Wassermann and H. Bach Eur. Phys. J. B 10 (1999) 641

3.2 Phononenzustandsdichte von FeNi-Legierungen

K. Messel, T. Asthalter², H. Franz¹, W. Petry, , I. Sergueev

¹ HASYLAB bei DESY, Hamburg

² ESRF, Grenoble

Das FeNi-Legierungssystem zeigt ein komplexes Phasendiagramm [1]. Es gibt magnetische Phasenübergänge, einen martensitischen Übergang und intermetallische Phasen. Die am besten bekannte Anomalie der FeNi-Legierung ist der sogenannte Invar-Effekt. Der thermische Ausdehnungskoeffizient ist nahe null oder sogar negativ. Die mikroskopische Ursache dieses Verhaltens ist noch weitgehend unverstanden [2]. Besonders die Korrelation mit dem martensitischen Übergang und/oder mit dem magnetischen Verhalten ist nicht vollständig verstanden, obwohl die martensitische Umwandlung mehr als ein Jahrhundert studiert worden ist.

Der Zweck unserer Messungen an FePt- [3] und FeNi-Legierungen ist die Anomalien des Schwingungsverhalten zu bestimmen. Die inelastische Streuung von Neutronen und die kernresonante Streuung von Röntgenstrahlen erlaubt die Beiträge der Legierungsbestandteile zu trennen und somit einen tieferen Einblick in die Wechselwirkungskräfte zu gewinnen. Dieser Bericht präsentiert die Ergebnisse der Eisen-Phononenzustandsdichte bei Raumtemperatur auf der eisenreichen Seite des FeNi-Phasendiagramms. Er zeigt die Möglichkeiten der neuen Anlage für kernresonante inelastische Streuung, die wir im letzten Jahr aufgebaut haben.

Nukleare inelastische Absorption wurde in den letzten 5 Jahren als Technik entwickelt um die Schwingungsanregungen von Festkörpern zu untersuchen [4]. Als inkohärente Methode ergibt sie die partielle Zustandsdichte des resonanten Elementes in der Probe. Sie bietet eine Auflösung bis zum sub-meV Bereich.

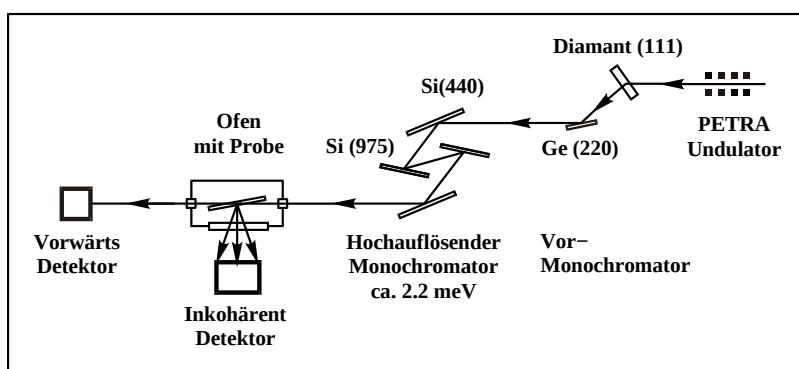


Abbildung 3.2.1:
Experimentelle
Anlage für NIA
an der PETRA1-
Beamline

Die gezeigten Daten sind an der PETRA1-Beamline gemessen worden. Wir haben den *nested* Si-(440)(975)-Monochromator [5] mit einer Auflösung von 2.2 meV benutzt. Der experimentelle Aufbau ist in Abbildung 3.2.1 dargestellt. Alle Daten wurden zunächst im Ofen nur bei Raumtemperatur aufgenommen. Die weitere Messungen werden bei hoher Temperatur mit demselben experimentellen Aufbau durchgeführt. Die Proben wurden aus hochreinen Ni- und ⁵⁷Fe-(Anreicherung 95.3%)-Folien hergestellt. Die Proben mit

einer Ni-Konzentration zwischen 5% und 30% wurden im Lichtbogen unter Argonatmosphäre geschmolzen. Die Schmelzkugeln wurden zu Folien mit $9\mu\text{m}$ Dicke gewalzt und in einem ausgepumpten Quarzglas im Ofen getempert. Danach wurden sie in Eiswasser abgeschreckt um eine reine γ -Phase zu erhalten.

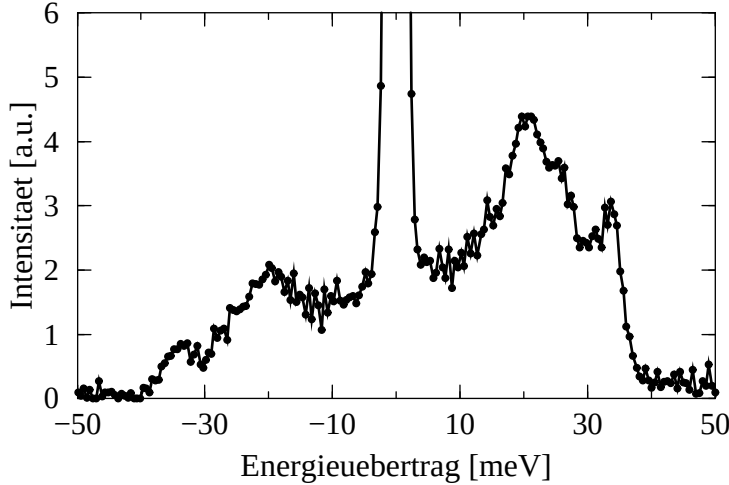


Abbildung 3.2.2:
Phononenspektrum
von $\text{Fe}_{95}\text{Ni}_5$. Die
elastische Linie im
Zentrum wurde ab-
geschnitten um den
inelastischen Teil
hervorzuheben.

Die strukturelle Textur wurde mit Diffraktion hochenergetischer Photonen nachgeprüft. Dabei zeigte sich, dass durch die Temperaturbehandlung die Walztextur beseitigt wurde. Mit kernresonanter Vorwärtsstreuung wurde die magnetische Textur überprüft. Weil die Probe vorher im Magnetfeld orientiert worden war, verblieb eine Textur von 40%. Die Abwesenheit von Verunreinigungen wurde mit Mößbauerspektroskopie bestätigt.

Die Abbildung 3.2.2 zeigt die Rohdaten der 5%-Ni-Probe als Beispiel. An beiden Seiten des elastischen Peaks bei $\Delta E = 0$ sind die Beiträge der inelastischen Streuung sichtbar. Die Asymmetrie demonstriert die Tatsache, dass die Wahrscheinlichkeit der Phononerzeugung höher ist als der Phononvernichtung (detailed balance).

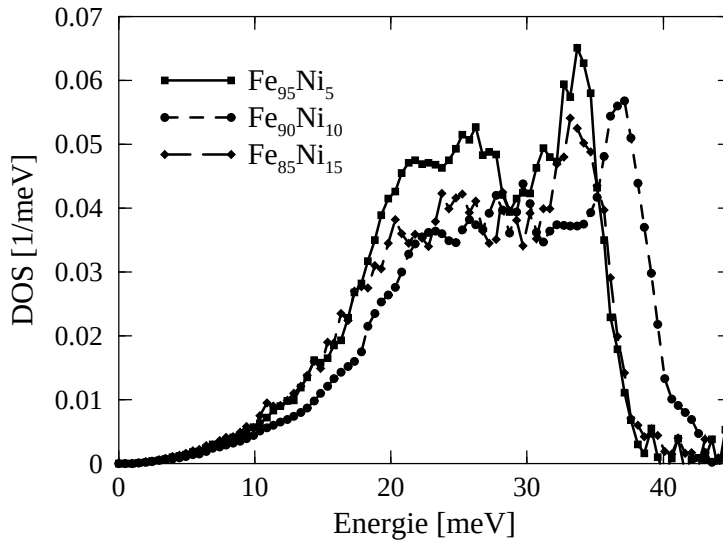


Abbildung 3.2.3:
Phononenzustandsdichte
der Proben mit niedri-
ger Ni-Konzentration

In Abbildung 3.2.3 haben wir verschiedene partielle Fe-Phononenzustandsdichten aufgetragen. Sie wurden aus den experimentellen Spektren von Proben mit einer Nickelkonzentration

tration von 5%, 10% und 15% berechnet. Wir nutzten das Programm von A. Chumakov und V. Kohn [6] um den Multiphononenbeitrag und den Untergrund abzutrennen.

Alle Kurven sind auf die Rückstoßenergie des ^{57}Fe -Kerns ($\Delta E_r = 1.95$ meV) normiert. Bei niedrigen Energien (bis zu 15 meV) zeigen alle Proben das typische E^2 -Verhalten (Debye-Näherung). Erst oberhalb von 10 meV sind die individuellen Kurven von der Konzentration abhängig. Die Zustandsdichten der Proben mit 5% und 15% sind sehr ähnlich, während die 10%-Probe deutlich härtere Phononen zeigt. Auf ersten Blick ist das ein unerwartetes Resultat, weil das Phasendiagramm keine Besonderheiten in diesem Bereich zeigt. Weitere Messungen und eine detailliertere Auswertung der Daten werden mehr Erkenntnisse liefern.

- [1] O.Kubaschewski, Iron Binary Phase Diagrams, Springer Verlag (1982)
- [2] zum Beispiel M. van Schilfgaarde, I.A. Abrikosov, B. Johansson, Nature, 400, 46 (1999)
- [3] N. Wiele, H. Franz, W. Petry, Physica B, 263/264, 716 (1999)
- [4] A.I. Chumakov, phys. stat. sol., 215, 165 (1999)
- [5] T. Ishikawa, Y. Yoda, K. Izumi, C.K. Suzuki, X.W. Zhang, M. Ando, S. Kikuta, Rev. Sci. Instrum., 63, 1015 (1992)
- [6] A.I. Chumakov, V.G. Kohn, Hyperfine Interact., 125, 205 (2000)

4 Dynamik in Gläsern und unterkühlten Flüssigkeiten

4.1 Quasielastic neutron scattering on bulk glass forming liquid $\text{Pd}_{43}\text{Ni}_{10}\text{Cu}_{27}\text{P}_{20}$

S. Roth ¹, A. Meyer ¹, H. Schober ^{1,2}, W. Petry ¹, H. Harlandt ¹

¹ TU München, Lehrstuhl E13

² Institut Laue-Langevin, Grenoble

New multicomponent glass forming metallic alloys have been developed during the last decade. Compared to binary metallic glass formers found in the 1960s [1] their critical cooling rates are several orders of magnitude lower. $\text{Pd}_{43}\text{Ni}_{10}\text{Cu}_{27}\text{P}_{20}$ is the best metallic

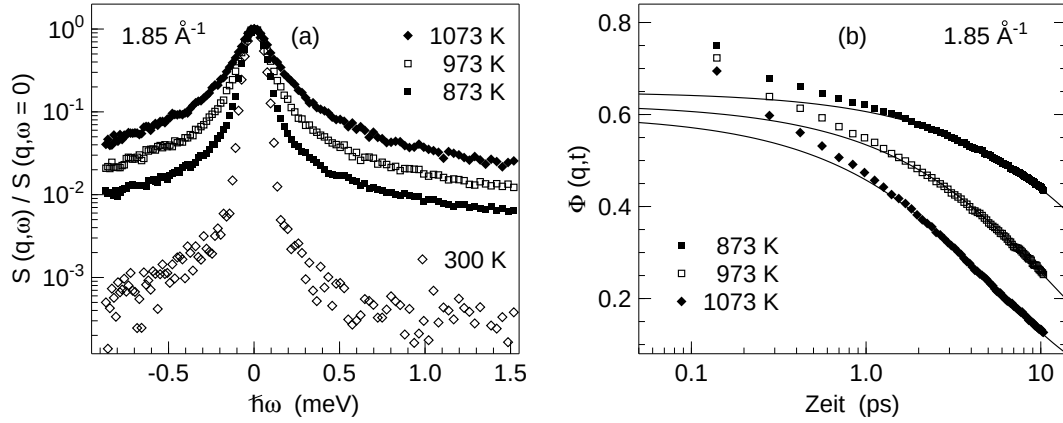


Figure 4.1.1:

a) $S(q, \omega)/S(q, \omega = 0)$ of $\text{Pd}_{43}\text{Ni}_{10}\text{Cu}_{27}\text{P}_{20}$ for $q=1.85 \text{ \AA}^{-1}$. The data at 300 K represent the instrumental resolution function. The spectra in the liquid phase display a broad quasielastic signal, broadening with increasing with temperature. b) Normalized density-density correlation function $\Phi(q, t)$. The solid lines are fits with a Kohlrausch stretched exponential $F(q, t) = f_q \exp(-(t/\tau_q)^\beta)$ with $\beta=0.74 \pm 0.06$ [5].

glass former known so far: Its critical cooling rate is as low as 0.33 K/s [2]. The liquidus temperature is $T_{liq}=865 \text{ K}$, its calorimetric glass transition temperature is $\simeq 578 \text{ K}$.

The quaternary glass forming alloy $\text{Pd}_{43}\text{Ni}_{10}\text{Cu}_{27}\text{P}_{20}$ was prepared in a two step process. First, pure Pd, Ni, Cu have been alloyed by arc melting under Ar atmosphere. In the second step pure P was added, and the sample was purified using B_2O_3 -fluxing [2] in a HF-induction furnace: In a quartz tube the sample was melted together with B_2O_3 -powder to reduce heterogenous nucleation and hence crystallization upon cooling below the liquidus temperature.

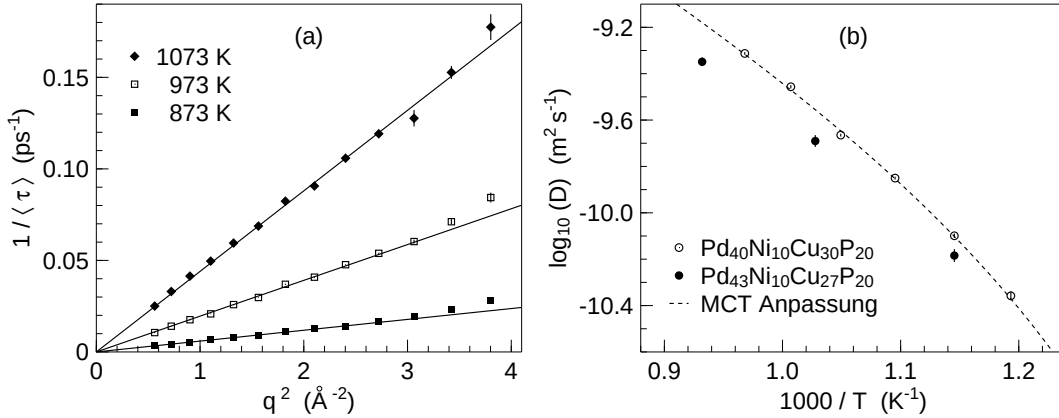


Figure 4.1.2:

a) $1/\langle\tau_q\rangle$ for 873 K, 973 K and 1073 K. $1/\langle\tau_q\rangle \propto q^2$ hold for the entire q range. b) Calculated diffusivity for Pd₄₃Ni₁₀Cu₂₇P₂₀ and Pd₄₀Ni₁₀Cu₃₀P₂₀ [4]. A critical law $(T - T_c)^{-\gamma}$ according to mode-coupling theory is included [4] giving an estimate for $T_c \approx (695 \pm 30)$ K.

Afterwards the alloy has been checked for its composition by ERDA and RBS [3]. The sample material was filled together with B₂O₃ on top of it into the sample container, which prevented crystallization by fluxing during the experiment.

We investigated structural relaxation in liquid Pd₄₃Ni₁₀Cu₂₇P₂₀ by quasielastic neutron scattering at the time-of-flight spectrometer IN6 of the ILL. The wavelength used was 5.1 Å. The observed wavevector transfer was $q=0.75\text{--}1.95$ Å⁻¹. Since this is below the position of the first structure factor maximum at $q_0=2.9$ Å⁻¹, the signal is dominated by the incoherent contributions of Ni ($\approx 73\%$) and Cu ($\approx 20\%$). The data have first been corrected for container scattering by empty cell measurements at different temperatures and detector efficiency by a Vanadium measurement. Fig. 4.1.1a) shows $S(q=1.85 \text{ Å}^{-1}, \omega)/S(q=1.85 \text{ Å}^{-1}, 0)$ and Fig. 4.1.1b) the density-density correlation function $\Phi(q, t)$, which is the Fourier transform of $S(q, \omega)$ normalized to one. After Fourier transformation $S(q, \omega) \rightarrow \Phi(q, t)$ the resolution could be divided out. The solid lines are fits with a Kohlrausch stretched exponential $F(q, t) = f_q \exp(-(t/\tau_q)^\beta)$. Above 1 ps the liquid undergoes structural relaxation, below $\simeq 1$ ps phonons and the fast β -relaxation lead to deviations from the fit [5].

By interpreting the Kohlrausch stretched exponential as a distribution function for relaxation times, it is possible to define a mean relaxation time: $\langle\tau_q\rangle = \int_0^\infty F_q(t)/f_q dt = \tau_q \beta^{-1} \Gamma(\beta^{-1})$. In Fig. 4.1.2a) $1/\langle\tau_q\rangle$ is plotted as a function of q^2 for the three measured temperatures: At each temperature a linear relation between $1/\langle\tau_q\rangle$ and q^2 holds. This is expected in the hydrodynamic limit as $q \rightarrow 0$, for liquid Pd₄₃Ni₁₀Cu₂₇P₂₀ it however holds up to 1.9 Å^{-1} ! Therefore structural relaxation leads to long-range transport, and hence an atomic diffusivity for Ni- and Cu-atoms can be calculated via $1/D=1/\langle\tau_q\rangle q^2$. Fig. 4.1.2b) displays D as a function of temperature for Pd₄₃Ni₁₀Cu₂₇P₂₀ and Pd₄₀Ni₁₀Cu₃₀P₂₀ [4]. The diffusivities of both glass forming alloys are of the order of $10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, thus being about a factor of 100 smaller than the diffusivities of simple metallic melts at their melting points. Included in the graph is a fit [4] to the Pd₄₀Ni₁₀Cu₃₀P₂₀ data showing a critical behaviour $(T - T_c)^{-\gamma}$ above T_{liq} according

to mode coupling theory. T_c is the microscopic critical temperature, γ is the critical exponent. We attribute the slightly smaller diffusivity of $\text{Pd}_{43}\text{Ni}_{10}\text{Cu}_{27}\text{P}_{20}$ to its better glass forming ability. To perform a detailed mode-coupling theory analysis further experiments are planned at the time-of-flight spectrometer FOCUS (PSI).

- [1] see e.g. W. Klement, R. Willens, P. Duwez, *Nature* **187** 869 (1960)
- [2] J. Löffler, J. Schroers, W. Johnson, *Appl. Phys. Lett.* **77** 681 (2000)
- [3] We thank W. Assmann (Beschleunigerlabor, Universität München) for performing the ERDA and RBS experiments
- [4] A. Meyer, R. Busch, H. Schober, *Phys. Rev. Lett.* **83** 5027 (1999)
- [5] A. Meyer, S. Roth, W. Petry, *Mat. Sci. Forum*, in press

4.2 Calcium-Rubidium-Nitrat: Modenkopplungs- β -Skalenverhalten ohne Faktorisierung

M. Goldammer, C. Losert, J. Wuttke, W. Petry, F. Terki¹, H. Schober, P. Lunkenheimer²

¹ Université Montpellier, Laboratoire des Verres

² Universität Augsburg, Experimentalphysik V

Eine überraschende Diskrepanz zwischen den chemisch homologen Glasbildnern $\text{Ca}_{0.4}\text{K}_{0.6}(\text{NO}_3)_{1.4}$ (kurz CKN) und $\text{Ca}_{0.4}\text{Rb}_{0.6}(\text{NO}_3)_{1.4}$ (kurz CRN) regte eine Reihe von Experimenten an, die wir seit dem ersten Bericht [1] mit einem weiteren Experiment mit inelastischer Neutronenstreuung und einem umfangreichen Satz von Spektren aus depolarisierter Lichtstreuung vervollständigten. Dielektrische Messungen bestätigten den Exponentenparameter $\lambda = 0.76$ für CKN, ergaben aber für CRN mit $\lambda = 0.91$ einen ungewöhnlichen Wert [2]. Doch zeigte sich schon in den ersten, in [1] vorgestellten Experimenten, daß dieser Wert nicht durch Neutronenstreuung oder Lichtstreuung reproduziert wird.

Ein zweites Experiment am Flugzeitspektrometer IN 5 am ILL Grenoble mit höherer Auflösung ermöglichte es das β -Minimum direkt im Frequenzraum aufzulösen und die Daten mit der β -Skalenfunktion der idealen Modenkopplungstheorie zu vergleichen. Damit bot sich die Möglichkeit λ nicht nur allein auf der Hochfrequenzseite des Minimums zu bestimmen, sondern die vollständige Kurvenform zu betrachten. Die Daten sind mit einem Wert für λ zwischen 0.7 und 0.8 kompatibel, keinesfalls aber mit 0.91. Aber erst die Lichtstreuungsmessungen erreichten die Datenqualität, mit der eine präzise Bestimmung zu $\lambda = 0.79 \pm 0.01$ (CKN: 0.76) möglich ist (Abb. 4.2.1).

Eine neue Auswertung der dielektrischen Daten mit fest vorgebenem $\lambda = 0.79$ ergab, daß damit auch diese Daten rund um das Minimum gut beschrieben werden können, aber auf der Hochfrequenzseite keine Erklärung für den langsamen Anstieg bieten. Aus diesem Anstieg, der sich über 3 Dekaden in der Frequenz mit ν^a beschreiben läßt, leitete sich der ungewöhnliche Wert für λ ab, der $a = 0.2$ entspricht.

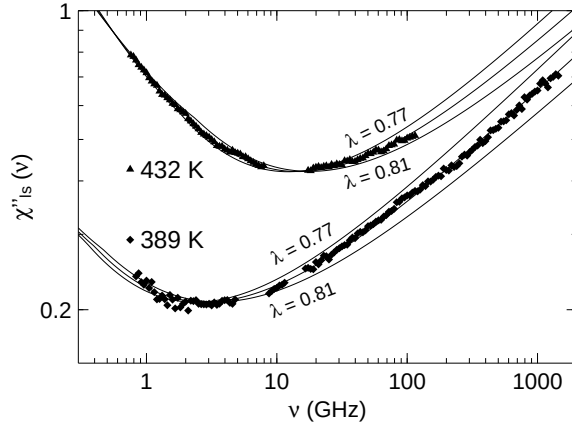


Abbildung 4.2.1:

Suszeptibilität von CRN aus Lichtstreuung bei 389 und 432 K und dazugehörige Modenkopplungsfits mit den Exponentenparametern $\lambda=0.77$, 0.79 , und 0.81 . Bei 389 K beschreibt die theoretische Kurve die Daten über drei Frequenzdekaden. Gezeigt ist nur der Bereich, der in die Fits eingegangen ist, die Brillouinlinie bei 8-10 GHz wurde vor den Fits ebenfalls ausgeblendet.

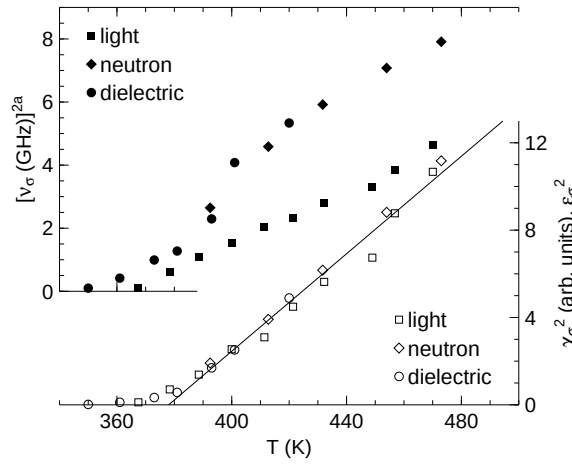


Abbildung 4.2.2:

Charakteristische Frequenz ν_σ und Amplitude χ_σ der Suszeptibilitätsminima, extrahiert aus Fits der Modenkopplungsasymptote mit $\lambda = 0.79$. Die Darstellung ν_σ^{2a} und χ_σ^2 gegen T erlaubt die Bestimmung der kritischen Temperatur T_c aus dem Schnittpunkt einer extrapolierten Geraden durch die Punkte mit der T -Achse. Aus den Amplituden läßt sich $T_c = 378$ K ablesen, wenn man Temperaturen unter dem geschätzten T_c nicht in die Extrapolation aufnimmt.

Obwohl sich alle drei Methoden mit einer gemeinsamen Kurvenform beschreiben lassen, zeigt der direkte Vergleich der Suszeptibilität aus den einzelnen Messungen deutliche Unterschiede. Wie schon für einen kleinen Ausschnitt in [1] gezeigt, stimmen die Steigungen auf der Hochfrequenzseite nicht überein, die vervollständigten Datensätze zeigen, daß dementsprechend auch die Minimumspositionen deutlich voneinander abweichen. Die von der Modenkopplungstheorie vorhergesagte Faktorisierung, nach der die unterschiedlichen Observablen die gleiche Frequenzabhängigkeit zeigen sollen, ist für die gemessenen Daten nicht erfüllt, auch wenn jeder Datensatz für sich genommen sehr gut den Vorhersagen folgt.

In Abbildung 4.2.2 sind die charakteristischen Amplituden χ_σ und Frequenzen ν_σ der β -Relaxation aus den verschiedenen Experimenten aufgetragen, in der Darstellung ν_σ^{2a} und χ_σ^2 sollten alle Punkte auf je einer Gerade zu liegen kommen, die bei der kritischen Temperatur T_c der Modenkopplungstheorie die T -Achse schneiden. Die Frequenzen ν_σ differieren dabei nicht nur stark voneinander, sondern extrapolieren auch nicht auf einen konsistenten Wert für T_c . Die Amplituden χ_σ sind hingegen für Licht- und Neutronenstreuung nicht absolut bestimmt, extrapolieren aber im Gegensatz zu den ν_σ auf ein konsistentes $T_c = 378$ K (CKN: 375 K).

Die Ergebnisse an CRN sind ein Beispiel dafür, daß Einzelmessungen zur β -Relaxation für sich genommen sehr gute Übereinstimmung mit der Theorie zeigen, im Vergleich zu

anderen Methoden aber starke Widersprüche aufwerfen. Obwohl die unterschiedlichen Positionen der Minima zeigen, daß der asymptotische Bereich in den Messungen nicht erreicht wird, bleibt es aber dennoch möglich, Parameter wie λ und T_c konsistent zu extrahieren. Die Ergebnisse zeigen, daß CRN auch über die chemische Zusammensetzung hinaus CKN sehr ähnlich ist. Eine einzelne Methode reicht nicht aus, um verlässliche Abschätzungen der Modenkopplungsparameter zu erhalten.

- [1] M. Goldammer, M. Köppe, C. Losert, P. Lunkenheimer, T. Pakula, W. Petry, U. Rauch, S. Roth, H. Schober, J. Wuttke: Jahresbericht E13 1998, p. 25
- [2] P. Lunkenheimer, A. Pimenov, A. Loidl: Phys. Rev. Lett. 78, 2995 (1997)

4.3 Reinvestigating Brillouin Line Shapes

A. Brodin¹, H. Z. Cummins¹, M. Frank, M. Goldammer, P. Shen^{1,2},
S. Wiebel, J. Wuttke

¹ City College, City University New York

² now at Oklahoma State University

Inelastic light scattering spectra $I(q, \nu)$ contain two different contributions: (i) Brillouin lines, due to coherent superposition of light scattered by sound waves, and (ii) a much weaker signal, due to correlations on a molecular scale, which is independent of q and spread over several decades in ν .

Both contributions can be used to monitor structural relaxation in glass-forming liquids. The broad-band susceptibility (ii), best measured in depolarised back-scattering, can be interpreted in very much the same way as a susceptibility from incoherent neutron scattering; in many cases, it is compatible with asymptotic results of mode-coupling theory. More recently, light scattering, neutron scattering and dielectric loss measurements on glass-forming propylene carbonate have been fitted simultaneously by numerical solutions of a schematic mode-coupling model [1].

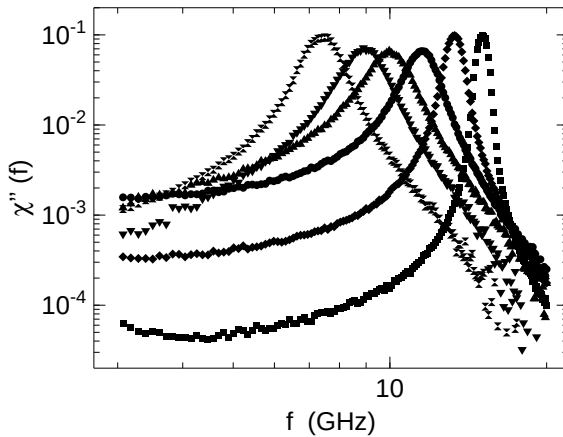


Figure 4.3.1:
Isotropic part of light scattering
spectra from propylene carbonate at
340, 270, 240, 210, 180, 150 K.

We now want to investigate whether the same approach can also provide a consistent description of the Brillouin lines (i). As a first step, we repeated previous Brillouin scattering

experiments [2]. Experiments were performed in New York and in Garching. The figure shows isotropic spectra (polarised minus depolarised) measured with the Fabry-Perot interferometer at Garching. Data analysis is in progress.

[1] W. Götze and T. Voigtmann, Phys. Rev. E 61, 4133 (2000)

[2] W. M. Du *et al.*, Phys. Rev. E 49, 2192 (1994)

4.4 Mikroskopische Dynamik in zähflüssigem GeO₂

A. Meyer, H. Schober, J. Neuhaus, H. Harlandt

In den letzten Jahren konnten die Vorhersagen der Modenkopplungstheorie des Glas-Flüssig-Überganges in zahlreichen Experimenten – zumeist an molekularen Glasbildnern – bestätigt werden [1]. In metallischen Glasbildnern finden wir quantitative Übereinstimmung mit den asymptotischen Gesetzen der Modenkopplungstheorie (siehe auch Beitrag 4.1). Eine weitere wichtige Materialklasse sind die Netzwerk-Gläser. Molekulardynamiksimulationen an reinem SiO₂ und an Na₂O–SiO₂-Schmelzen [2] zeigen unter anderem, daß auch dort das Modenkopplungsszenario gültig ist. Während für die experimentell interessanten metallischen Massivglasbildner MD Simulationen aufgrund der Vielzahl an Komponenten sehr schwierig sein werden, erlauben MD-Simulationen an Netzwerkgläsern einen Vergleich mit dem Experiment. Am Experiment kann sich die Simulation eichen und dann wichtige Informationen zu experimentell nicht zugänglichen Fragestellungen liefern, z.B. extreme Drücke und Temperaturen (Vulkanismus) und die Bestimmung der Korrelationsfunktion einzelner Komponenten. Aus einem Vergleich mit Theorie und Simulation erwarten wir ein tieferes Verständnis der mikroskopischen Eigenschaften dieser Glasbildner.

Streuexperimente an zähflüssigem SiO₂ sind aufgrund der hohen Temperaturen – kalorische Glasübergangstemperatur $T_g \simeq 1500$ K, MCT- T_c aus MD-Simulation $\simeq 3300$ K – mit derzeit zur Verfügung stehenden Probenumgebungen nicht möglich. Wir untersuchen daher in einem ersten Schritt GeO₂, das eine dem SiO₂ ähnliche Struktur aufweist, jedoch ein vergleichsweise niedriges $T_g \simeq 800$ K hat [3].

Das Experiment wurde am Neutronen-Flugzeitspektrometer IN 6 des Instituts Laue-Langevin bei Temperaturen zwischen 1300 K und 1600 K in einem Probenhalter aus Platin durchgeführt. Bei 1600 K hat GeO₂ noch eine Viskosität von etwa 1500 Pa s, d.h. die strukturelle Relaxation findet bei dieser Temperatur in der Größenordnung von 100 ns statt – zu langsam um auf der ps Skala des Spektrometers aufgelöst zu werden. Um die mikroskopische Dynamik auf Anharmonizitäten hin zu überprüfen wurden die Spektren in Abbildung 1 mit der Bose-Besetzung $n(\omega) = [\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1]^{-1}$, reskaliert, die man im Fall harmonischer Schwingungen erwartet.

Abbildung 1a zeigt unsere Daten als dynamische Suszeptibilität, um den Bereich zwischen instrumenteller Auflösung (bis etwa 0.7 meV) und dem breiten Band der Phononen hervorzuheben. In diesem Zwischenbereich verhält sich χ'' direkt proportional zu ω^a mit einem temperaturunabhängigen Exponenten $a = 1$. Dies vergleicht sich mit akustischen Phononen, die einem Debye-Verhalten folgen. Die β -Relaxation der Modenkopplungstheorie würde zu zusätzlicher Intensität in diesem Bereich und somit zu $a < 1$ führen. Bis zu

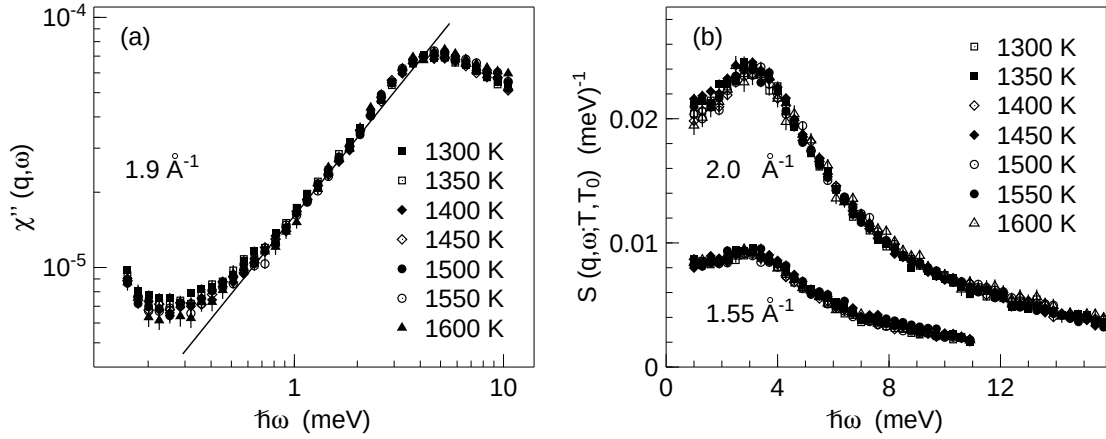


Abbildung 4.4.1:

Mikroskopische Dynamik in zähflüssigem GeO_2 : (a) Die dynamische Suszeptibilität $\chi''(q, \omega) = S(q, \omega; T, T_0) / n(\omega, T_0)$ verhält sich im Bereich um 1 meV direkt proportional zu ω (Linie). Es gibt kein Anzeichen einer schnellen β -Relaxation. (b) Die Schwingungsspektren zeigen harmonisches Verhalten um einen ausgeprägten Bosonpeak bei $\simeq 3$ meV.

$T \simeq 2 \times T_g$ finden wir kein Anzeichen einer schnellen β -Relaxation. Geht man von einem ähnlichen Verhalten von GeO_2 und SiO_2 aus, würde man aus den MD-Simulation an SiO_2 erwarten, ein Anzeichen der β -Relaxation zu finden.

Abbildung 1b zeigt das reskalierte Streugesetz $S(q, \omega; T, T_0)$ bei $2.0 \text{ \AA}^{-1}$ und im ersten Strukturfaktormaximum bei $q_0 = 1.55 \text{ \AA}^{-1}$. Die Spektren zeigen ein ausgeprägtes Maximum bei etwa 3 meV. Bei Wellenzahlen um q_0 ändert sich die Position des Maximums nicht erkennbar. Innerhalb des statistischen Fehlers skalieren die Spektren. Zähflüssiges GeO_2 weist in jeder Hinsicht harmonisches Verhalten auf [4]. In einem nächsten Schritt werden wir uns mit dem $\text{Na}_2\text{O} \cdot 2\text{SiO}_2$ System ($T_g \simeq 740 \text{ K}$) beschäftigen. Erste Experimente am Neutronenrückstreuungsspektrometer des NIST Center for Neutron Research und kürzlich am IN 6 des ILL Grenoble liefern Ergebnisse zur Struktur, zur Natriumdifusion, zur strukturellen Relaxation des SiO_2 -Tetraeder-Netzwerkes und zu den Schwingungseigenschaften des Systems. Eine detaillierte Auswertung und Vergleich mit den MD-Simulationen [2] ist im Gang.

- [1] W. Götze, J. Phys.: Condens. Matter **11**, A1 (1999) und enthaltene Referenzen
- [2] J. Horbach, W. Kob, K. Binder Phil. Mag. B **77**, 297 (1998) und enthaltene Referenzen
- [3] D.B. Dingwell, R. Knoch, S.L. Webb, Phys. Chem. Minerals **19**, 445 (1993).
- [4] A. Meyer, H. Schober, J. Neuhaus, Phys. Rev. B (eingereicht).

4.5 Glass dynamics and scaling behaviour under pressure using quasielastic nuclear forward scattering

I. Sergueev, T. Asthalter¹, H. Franz², W. Petry, K. Messel, R. Verbeni¹

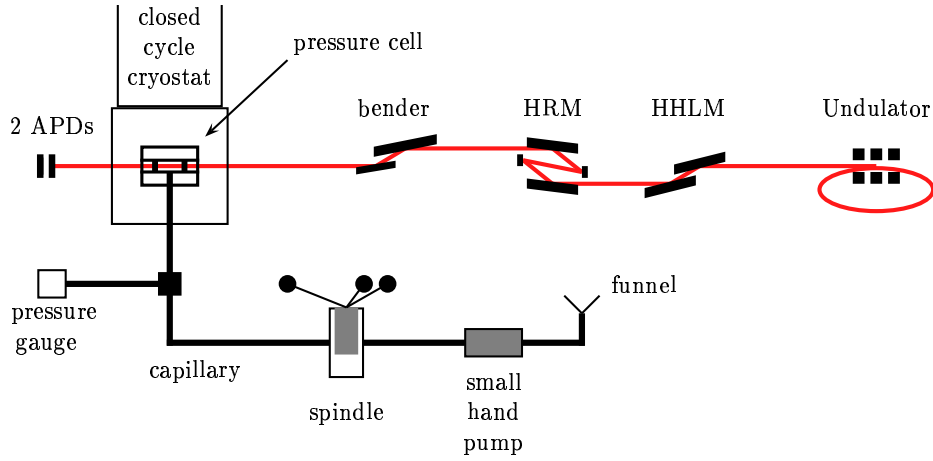
¹ European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble

² Hasylab/DESY, Hamburg

For practical reasons, combined studies of glass dynamics where both temperature and pressure are varied are rather scarce in literature. Such studies are nevertheless invaluable if one wishes to test the validity of various theories, such as mode-coupling theory [1,2] or the still largely popular free-volume model [3] for structural α -relaxation in the extended Vogel-Fulcher-Tammann parametrization. Here the pressure dependence is introduced, e.g., by the Tammann-Tait equation of state [4]. Specific-heat spectroscopy of glassy ortho-terphenyl (OTP) at two different temperatures [5], for example, provided a strong evidence for the failure of free-volume models, whereas another study of dibutyl phthalate by dielectric spectroscopy at one fixed temperature [6] is suggested to support their validity. The time window of specific-heat spectroscopy is limited to large relaxation times above $\sim 10^{-5}$ s; quasielastic nuclear forward scattering (QNFS) of synchrotron radiation extends the accessible range down to $\sim 10^{-8}$ s. Following recent atmospheric-pressure investigations of dibutylphthalate doped with 5 atomic % ferrocene (enriched to 95.3 % in ^{57}Fe) [7], we have therefore applied the QNFS technique to this system at various pressures and temperatures.

The QNFS experiment was carried out at the beamline ID22N at the European Synchrotron Radiation Facility [8]. A standard Si(111) high-heat load monochromator with LN_2 cooling and a 3.5 meV four-bounce high-resolution monochromator [9] served to reduce the detector load. A seven-hole Beryllium compound refractive lens [10] in the beamline front-end collimated the beam, thus optimizing the flux through the HRM [11]. A two-crystal bender [12,13] having a flat first and a sagittally bent second Si (1 1 1) crystal was used to focus the beam horizontally down to a spot size of less than 0.5 mm. The pressure apparatus [14] consisted of a closed-cycle cryostat with a specially designed cell having entrance and exit diamond windows of 1 mm thickness, respectively, a spindle and a Nova-Swiss pressure gauge. A sketch of the setup is shown in Fig. 4.5.1.

Forward count rates were in the range of 15 Hz (160 K/2 kbar; 180 K/4 kbar) down to 0.5 Hz (220 K/2 kbar; 250 K/4 kbar). The spectra, which showed a simple quantum beat structure owing to the quadrupole splitting of ferrocene (cf. [7]), were subjected to a first preliminary fit assuming exponential diffusion; a more detailed data evaluation is under way. In order to separate the contributions from the Lamb-Mössbauer factor and the relaxational dynamics, delayed rocking curves were recorded for each T, P point. After integration over time the QNFS spectrum can be factorized into two terms: one is the intensity within the resonant bandwidth that has impinged upon the sample during the measurement, the other is a “response function” $R(f_{\text{LM}}, \tau_D)$ that only depends on the properties of the sample and not on the experimental conditions which may change during the integration time. By recording the *delayed rocking curve* of the high-resolution monochromator, we obtain a quantity that is proportional to this response function. With the help of low-



HHLM: high-heat-load monochromator

HRM: high-resolution monochromator

Figure 4.5.1: Experimental setup for the QNFS pressure experiment

temperature spectra where $\tau_D = \infty$ this enables us to separate f_{LM} and τ_D also for the high- T measurements.

The resulting Lamb-Mössbauer factors and diffusion times are shown in Fig. 4.5.2 (left and right side, respectively). We observe the expected stiffening of the “lattice” as well as a shift of the onset of relaxation to higher temperatures.

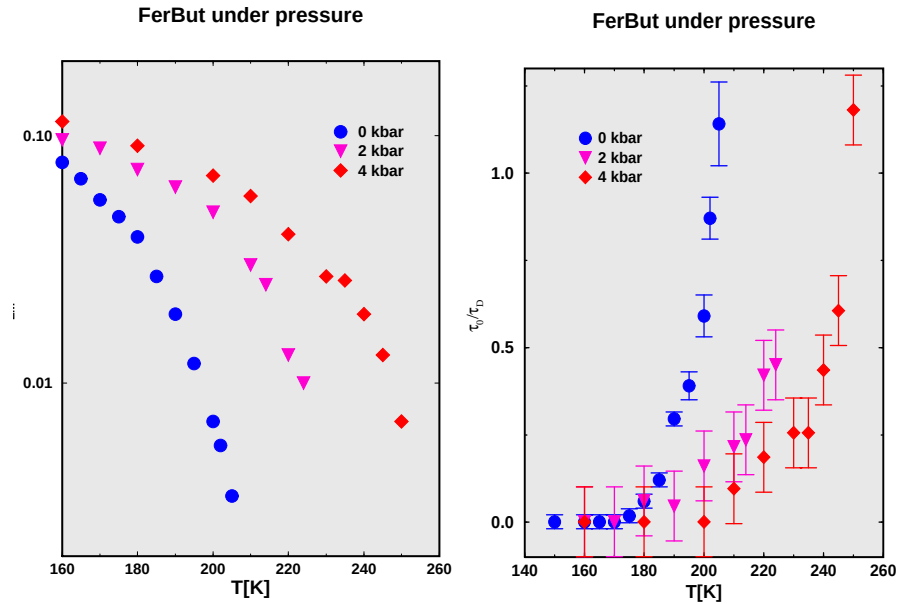


Figure 4.5.2:
Lamb-Mössbauer factors (left) and diffusion times (right) for ferrocene/dibutylphthalate for three different pressures

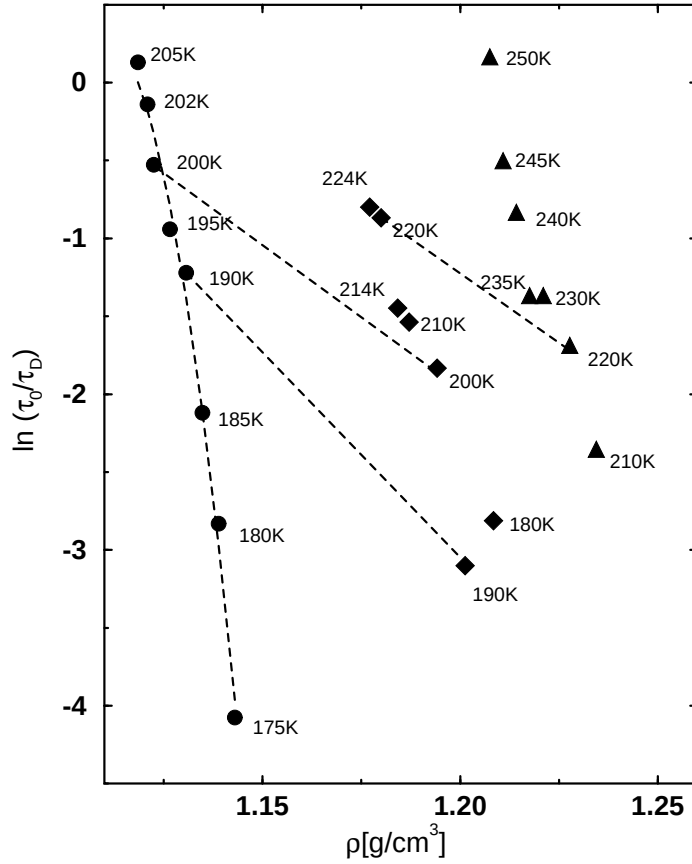


Figure 4.5.3:
Diffusion times for ferrocene/dibutylphthalate scaled versus density. Circles: atmospheric pressure, diamonds: 2 kbar, triangles: 4 kbar. The atmospheric-pressure data and some isotherms are provided with guides to the eye (dotted lines)

Using known V, P data and thermal expansion coefficients and applying the Tammann-Tait equation [17] to calculate the density, we obtain the plot of the diffusion times versus density shown in Fig. 4.5.3. We can conclude – in analogy to the study of OTP [5] (see Fig. 5 in this paper) – that the diffusion times do not show the same scaling behaviour, depending on whether density is changed by applying pressure or by heating. Thus the validity of the free-volume model seems to be disproved also in our case of high q .

- [1] U. Bengtzelius, W. Götze, A. Sjölander, J. Phys. C 17, 5915 (1984)
- [2] W. Götze, L. Sjögren, Transp. Theory Stat. Phys. 24, 801 (1995)
- [3] M. H. Cohen, G. S. Grest, Phys. Rev. B 20, 1077 (1979)
- [4] G. Tammann, Z. Phys. Chem. 17, 620 (1895)
- [5] H. Leyser, A. Schulte, W. Doster, W. Petry, Phys. Rev. E 51, 5899 (1995)
- [6] M. Paluch, J. Ziolo, P. Habdas, S. R. Rzoska, W. Suchański, High Temp. High Press. 29, 155 (1997)
- [7] A. Meyer, H. Franz, J. Wuttke, W. Petry, N. Wiele, R. Rüffer, C. Hübsch, Z. Phys. B 103, 479 (1997)
- [8] T. Asthalter, R. Rüffer, W. Petry, Jahresbericht E13, TUM 1998
- [9] design A. I. Chumakov, outer reflection: Si (3 3 3), inner reflection: Si (9 7 5), asymmetry parameter $b =$
- [10] A. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva, B. Lengeler, Nature 384, 49 (1996)

- [11] A. I. Chumakov, R. Rüffer, O. Leupold, A. Barla, H. Thiess, T. Asthalter, B. P. Doyle, A. Snigirev, A. Q. R. Baron, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 31 (2000)
- [12] D. W. Berreman, J. Stamatoff, S. J. Kennedy, *Appl. Opt.* **16**, 2081 (1977)
- [13] B. Jenninger, Internal report about the OFIR bender, ESRF 1994
- [14] A. Mermet, A. Cunsolo, E. Duval, M. Krisch, C. Masciovecchio, S. Perghem, G. Ruocco, F. Sette, R. Verbeni, G. Viliani, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4205 (1998)

4.6 Spektrale Form von Relaxationsprozessen in Gläsern: Quarzglas

J. Wiedersich, S. V. Adichtchev¹, N. V. Surovtsev^{1 2}, N. Bagdasarov³,
E. Rössler¹

¹ Lehrstuhl für Experimentalphysik II, 95440 Universität Bayreuth

² Institute for Automation & Electrometry, Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 630090, Russia

³ Institut für Meteorologie und Geophysik, Goethe-Universität, 60323 Frankfurt/Main

Relaxationsprozesse sind ein charakteristisches Phänomen von Flüssigkeiten ($T > T_g$) und Gläsern. Ein experimentell relevanter Unterschied zwischen Flüssigkeit und Glas ist die Tatsache, dass die Amplitude von Relaxationsprozessen in Gläsern wesentlich geringer ist als im Temperatur- und Frequenzbereich der α -Relaxation. Im GHz-Bereich ist das Signal für Quarzglas um 4–6 Größenordnungen niedriger als das von typischen organischen Flüssigkeiten wie Toluol oder Orthoterphenyl (OTP). Während die Flüssigkeitsdynamik mit Neutronenstreuung, Lichtstreuung und dielektrischer Spektroskopie über viele Größenordnungen in der Frequenz untersucht wird, sind Relaxationsprozesse im Glas in der Praxis nur mit Festfrequenzmessungen zugänglich (v. a. Schallabsorption, Dielektrischer Verlust).

Durch apparative Verbesserungen wurde es erstmals möglich, mittels quasi-elastischer Lichtstreuung die spektrale Form von Relaxationsprozessen im Glas zu untersuchen [1]. Abbildung 4.6.1 zeigt quasi-elastische Lichtstreudaten an Quarzglas im Vergleich zu Messungen der Inneren Reibung (Schallabsorptionsmessungen). Durch Brillouin-Messungen wurden die Lichtstreudaten auf die absoluten Werte der Inneren Reibung normiert. Die Lichtstreuungsuszeptibilität zeigt bei niedrigen Frequenzen ein Potenzgesetzverhalten (gestrichelte Linien) mit einem Exponenten, der für $T \leq 200$ K proportional mit der Temperatur zunimmt: $\alpha = T/319$ K. Dieses Potenzgesetzverhalten setzt sich für die akustischen Daten im Rahmen der Streuung verschiedener Datensätze bis in den Hz-Bereich fort. Es ist erstaunlich, dass die Daten über einen solch großen Frequenzbereich (9 Größenordnungen!) solch ein einfaches Verhalten zeigen.

Dieses Verhalten lässt sich zudem über den Temperaturbereich ($10 \text{ K} < T < 1600 \text{ K}$; $T_g \simeq 1480 \text{ K}$) und den gesamten zugänglichen Frequenzbereich (dünne Linien in Abb. 4.6.1 u. 4.6.2) durch ein einfaches Modell beschreiben. Im Rahmen dieses ADWP-Modells (Asymmetric double-well potentials) wird angenommen, dass Relaxationen im Glas als thermisch aktivierte Übergänge in asymmetrischen Doppelmuldenpotentialen stattfinden. Bei tiefen Temperaturen ($T \lesssim 1 \text{ K}$) werden die Barrieren durch Tunneln überwunden, und dieses Verhalten wird für die Tieftemperaturanomalien der Gläser verantwortlich gemacht. Bei

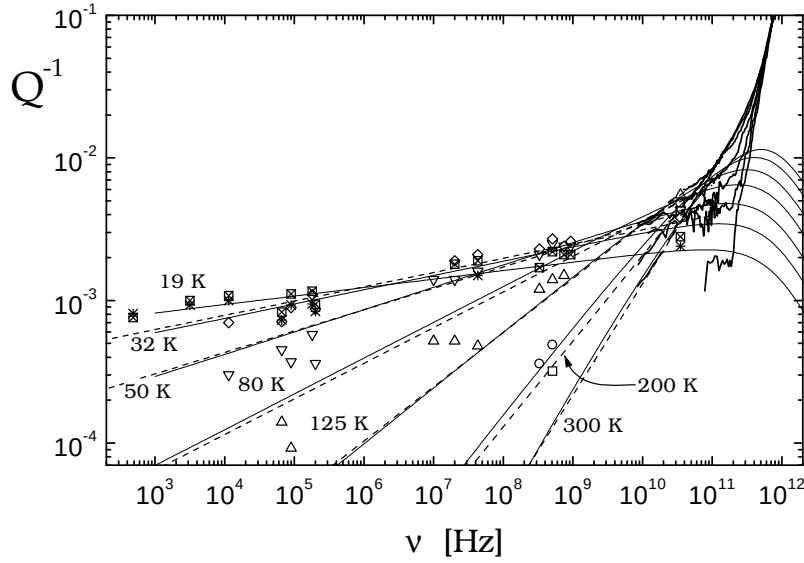


Abbildung 4.6.1:

*Lichtstreuungsuszeptibilität (dicke Linien) skaliert auf die innere Reibung und innere Reibung von Quarzglas. Die gestrichelten Linien sind Potenzgesetzextrapolationen des Niederfrequenzflügels der Lichtstreudaten. Symbole zeigen die innere Reibung für die selben Temperaturen: □: 300 K, ○: 200 K, △: 125 K, ▽: 80 K, ◇: 50 K, ⊠: 32 K und *: 19 K. Die Referenzen für die akustischen Daten finden sich in [1,2]. Die dünnen Linien zeigen numerische Berechnungen für eine exponentielle Verteilung von Barrierenhöhen $g(V) \propto \exp(\frac{-V}{k_B 319 \text{ K}})$ und $\nu_0 = 800 \text{ GHz}$. Für alle Temperaturen wurden dieselben Parameter verwendet.*

Annahme einer exponentiellen Verteilung von Barrierenhöhen sind die einzigen Parameter des Modells die Ankloppfrequenz $\nu_0 = 800 \text{ GHz}$ und die Breite der Verteilung von Barrierenhöhen $V_0 = k_B \cdot 319 \text{ K}$. Bei Temperaturen oberhalb von 600 K zeigen die Daten – wie vom Modell vorausgesagt – ein „Weißes Rauschen“, ein spektrales Charakteristikum, das hier erstmalig experimentell beobachtet wurde (vgl. auch Bericht 4.4).

Aus weiteren Messungen an der Bayreuther Lichtstreu-Apparatur ist bekannt, dass dieses Modell in seiner einfachsten Form auch zur Beschreibung der Daten von CKN (Calcium-Kalium-Nitrat) geeignet ist. Es ist nicht sonderlich überraschend, dass bei anderen Substanzen (Toluol, OTP, Polystyrol, Polymethylmetacrylat, Polycarbonat, Boroxid [Daten bei solch niedrigen Amplituden sind bislang nur mit der Bayreuther Lichtstreu-Apparatur zugänglich]) auch Abweichungen von diesem einfachen Verhalten auftreten. Andererseits sollte der Befund, dass das Modell das Verhalten des paradigmatischen Systems Quarzglas bemerkenswert gut beschreibt, bei Verfeinerungen von Modellen zur Beschreibung von Relaxationen in Gläsern hilfreich sein.

- [1] J. Wiedersich, Dissertation, Universität Bayreuth (2000); die vorgestellten Lichtstreuemessungen wurden am Bayreuther Lichtstreuexperiment durchgeführt.
- [2] J. Wiedersich, S. V. Adichtchev, E. Rössler, Phys. Rev. Lett. 84, 2718 (2000) und cond-mat/9910347

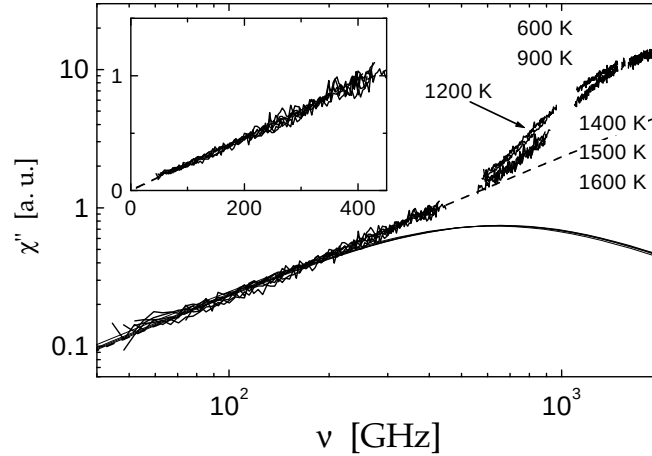


Abbildung 4.6.2:

Lichtstreu susceptibility von Quarzglas für die Temperaturen 600 K, 900 K, 1200 K, 1400 K, 1500 K und 1600 K. Der Bosonpeak verschiebt sich mit steigender Temperatur zu höheren Frequenzen. Der Niederfrequenzflügel zeigt im Rahmen der Messgenauigkeit für alle Temperaturen eine Proportionalität zur Frequenz: $\chi''(\nu) \propto \nu$ (gestrichelte Linie), wie es auch im Rahmen des ADWP-Modells erwartet wird (durchgezogene Linien: Berechnungen). Der Einschub zeigt das Niederfrequenzverhalten im linearen Maßstab.

4.7 Über den Ursprung quasi-elastischer Lichtstreuung von Gläsern

J. Wiedersich, N. V. Surovtsev^{1 2}, V. N. Novikov^{1 2}, S. V. Adichtchev¹,
E. Rössler¹

¹ Lehrstuhl für Experimentalphysik II, 95440 Universität Bayreuth

² Institute for Automation & Electrometry, Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 630090, Russia

Im Bereich der quasi-elastischen Lichtstreuung werden in der Literatur fast ausschließlich depolarisierte Messungen diskutiert, weil hier in der Rückstreugeometrie die Brillouinlinien unterdrückt werden, deren Intensität deutlich über den „Untergrund“ dominiert. Andererseits gibt es eine Vielzahl von Brillouinmessungen, die sich mit dem Verhalten der hochfrequenten Schallwellen beschäftigen. Ein umfassender Vergleich von polarisierten (VV) und depolarisierten (VH) Lichtstreuungen über den gesamten Frequenzbereich steht bislang noch aus. (Monaco et al. berichten niederfrequente Messungen ($\nu < 40$ GHz) an Orthoterphenyl (OTP) [1].)

Abbildung 4.7.1 zeigt polarisierte und depolarisierte Lichtstreuungen an Quarzglas. Man sieht, dass die spektrale Form der Spektren im Frequenzbereich zwischen der Brillouinlinie und dem Maximum des Bosonpeaks gleich ist. Hier sind die Spektren aufeinander skaliert. Die Brillouinlinie, die in den polarisierten Messungen im Bereich um 35 GHz das Spektrum dominiert, ist bei den depolarisierten Messungen um vier Größenordnungen unterdrückt (was die gute Unterdrückung des polarisierten Signals widerspiegelt). Bei

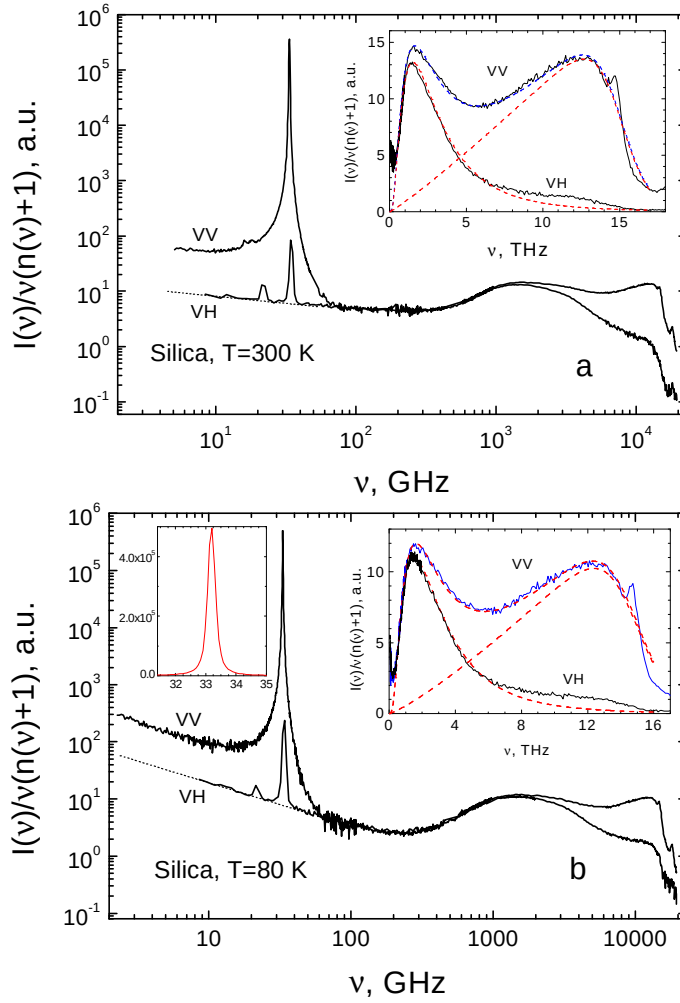


Abbildung 4.7.1:
Polarisierte und depolarisierte
Lichtstremessungen an Quarz-
glas. Die Kurven sind bei
hohen Frequenzen aufeinander
skaliert. Die Einschübe zeigen
die longitudinalen Brillouinlini-
en (links) und den Bosonpeak
(rechts) auf linearer Skala.

niedrigen Frequenzen zeigt sich, dass das Signal nicht auf den „Untergrund“ der depolarisierten Messungen abfällt, sondern eine „Stufe“ aufweist: die spektrale Form ist gleich der der depolarisierten Messungen, aber die Amplitude hat bei Unterschreiten der Brillouinlinie zugenommen.

Ein ähnliches Verhalten beobachten wir auch für OTP und Ethanol. Im Fall von OTP wurde dieses Auftreten einer Stufe als zusätzlicher Relaxationsprozess gedeutet [1]. Bei genauerer Betrachtung des Relaxationsmechanismus zeigt sich, dass die Daten für die drei hier untersuchten Glasbildner auch ohne Annahme zusätzlicher Relaxationsmechanismen, die nur im polarisierten Lichtstreupektrum auftreten würden, erklärbar sind.

Bislang ist nicht klar, wie Relaxationsprozesse (vgl. Abschn. 4.6) im Glas zum Lichtstreuungssignal führen. Zwei unterschiedliche Lichtstreuemechanismen werden diskutiert: die direkte Streuung des Lichts an Relaxationsprozessen oder ein schwingungsmediierter Mechanismus [2]. Ein Beweis dafür, welcher Mechanismus zutrifft, steht noch aus, da bislang keine eindeutigen experimentellen Daten vorliegen.

Betrachten wir den schwingungsmedierten Mechanismus genauer: Lichtstreuung an einer Schwingungsmode der Frequenz Ω führt zu einem Signal, das im Vergleich zum elastischen Signal um die Frequenz $\pm\Omega$ verschoben ist. Handelt es sich um eine Schwingung,

	$k = I_{<}/I_{>}$	$1 + S_{\text{Br}}/S_{\text{bp}}$
Quarzglas, 80 K	4.8	5.8
Quarzglas, 300 K	5.8	5.7
OTP, 240 K	5.5	3.3
Ethanol, 90 K	10	17

Tabelle 4.1: Parameter aus Gleichung (4.7.1) für verschiedene Gläser und Temperaturen

die gedämpft ist, so ergibt sich neben der Verbreiterung der Linie bei der Frequenz Ω außerdem ein Signal bei Frequenzen $\nu \ll \Omega$, wobei dieses Signal den Dämpfungsterm der Schwingung widerspiegelt. Somit könnte man das quasi-elastische Signal für die depolarisierten Messungen als Beitrag auffassen, der dadurch entsteht, dass die Schwingungen im Bereich des Bosonpeaks durch Relaxationsprozesse gedämpft werden. Dies gilt ebenso für die polarisierten Messungen im Frequenzbereich zwischen der Brillouinlinie und dem Bosonpeak.

Bei den polarisierten Spektren tritt bei der Frequenz ν_{Br} die intensive, verbreiterte Brillouinlinie auf. Bei Frequenzen, die deutlich unterhalb der Brillouinlinie liegen, $\nu \ll \nu_{\text{Br}}$ besteht das Signal dann aus der Summe der Niederfrequenzbeiträge von Brillouinlinie und Bosonpeak. Für den Grenzfall exponentieller Dämpfung lässt sich die Brillouinlinie durch eine Lorentzlinie beschreiben, d. h. der Niederfrequenzflügel der Brillouinlinie hätte die Form eines „Weißen Rauschens“. Die Tatsache, dass die Frequenzabhängigkeit für $\nu \ll \nu_{\text{Br}}$ im Rahmen der Genauigkeit gleich ist wie für die depolarisierten Messungen und wie für die polarisierten bei höheren Frequenzen, lässt den Schluss zu, dass auch der Dämpfungsmechanismus für die Brillouinlinie ($\Omega \sim 35$ GHz) ganz ähnlich oder gleich ist wie der Dämpfungsmechanismus für die Schwingungen im Bereich des Bosonpeaks ($\Omega \sim 1500$ GHz).

Unter diesen Voraussetzungen sollte die Höhe der Stufe, die bei Unterschreiten der Brillouinlinie auftritt, mit dem Verhältnis der integrierten Amplituden von Brillouinlinie und Bosonpeak verknüpft sein. Die integrierte Amplitude der Brillouinlinie ist hierbei gegeben durch: $S_{\text{Br}} = \int_{\text{Brill.}} \chi''(\nu)/\nu d\nu$, wobei hier $\chi''(\nu) = I(\nu)[1 - \exp(-h\nu/k_{\text{B}}T)]$ ist. Analog integriert man über die Spektraldichte des Bosonpeaks $S_{\text{bp}} = \int_{\text{bp}} \chi''(\nu)/\nu d\nu$. Die Integration wird über die jeweils relevanten Frequenzbereiche ausgeführt (genauer in [3]).

Dann sollte für die Höhe der Stufe bzw. für das Verhältnis der integrierten Amplituden gelten:

$$k \equiv \frac{I_{<}(\nu_{\text{Br}})}{I_{>}(\nu_{\text{Br}})} = \frac{S_{\text{Br}}}{S_{\text{bp}}} + 1, \quad (4.7.1)$$

d. h. die Höhe der Stufe im polarisierten Spektrum unterscheidet sich vom Verhältnis der Integrale über die Brillouinlinie und den Bosonpeak um den Wert Eins. Die Höhe der Stufe ist hier definiert als das Verhältnis der von niedrigen bzw. hohen Frequenzen zur Frequenz der Brillouinlinie ν_{Br} extrapolierten VV-Spektren, wobei man den unmittelbaren Beitrag der Brillouinlinie ignoriert.

Tabelle 4.1 zeigt Werte für k , die durch die beiden beschriebenen Verfahren für verschiedene Systeme und Temperaturen gewonnen wurden. Die gute Übereinstimmung der unterschiedlich erhaltenen Werte ist überraschend, wenn man berücksichtigt, dass bei den

Spektraldichten von Brillouinlinie und Bosonpeak spektrale Charakteristika verglichen werden, die sich in Linienbreite und Amplitude jeweils um mehrere Größenordnungen unterscheiden (vgl. Abb. 4.7.1).

Zusammenfassend zeigen polarisierte und depolarisierte Lichtstreuung für Frequenzen zwischen Brillouinlinie und Bosonpeak dieselbe Frequenzabhängigkeit. Für Frequenzen deutlich unterhalb der Brillouinlinie zeigen sie wiederum dieselbe Frequenzabhängigkeit, wobei das polarisierte Signal im Vergleich zu den höheren Frequenzen einen Sprung in der Amplitude aufweist. Diese Stufe lässt sich ohne Annahme zusätzlicher Relaxationsprozesse und unabhängig vom tatsächlichen Relaxationsmechanismus erklären, wenn man annimmt, dass quasi-elastische Lichtstreuung nicht Relaxationen direkt beobachtet, sondern Schwingungen, die durch Relaxationen gedämpft sind. Der Dämpfungsmechanismus ist für die Schwingungen am Bosonpeak in guter Näherung derselbe wie der für die Brillouinlinien.

Für Quarzglas ergibt sich mit den Ergebnissen aus Beitrag 4.6 ein umfassendes Verständnis der quasi-elastischen Lichtstreuung: Aus den depolarisierten Lichtstreuemessungen erhält man die Verteilung der Relaxationsprozesse von Quarzglas. Es ergibt sich eine exponentielle Verteilung von Barrierenhöhen mit den beiden Parametern $V_0 = k_B \cdot 319 \text{ K}$ und $\nu_0 = 800 \text{ GHz}$. Durch Bestimmung des Schwingungsspektrums sollte sich mit diesen Parametern die spektrale Form der polarisierten und depolarisierten Lichtstreuenspektren für den gesamten Frequenzbereich unterhalb des Bosonpeaks bestimmen lassen. Die Breite der Brillouinlinie bestimmt hierbei die Amplitude der Relaxationen auf absoluter Skala.

Im Rahmen des ADWP-Modells in Verbindung mit dem Tunnelmodell sollten sich mit diesen aus der Lichtstreuung gewonnenen Parametern auch die Ergebnisse der anderen Methoden wie Neutronenstreuung, Schallabsorptionsmessungen, dielektrischer Verlust, spezifische Wärme und Wärmeleitfähigkeit im Temperaturbereich $\approx 30 \text{ mK} < T < 1600 \text{ K}$ berechnen lassen. Für den Zusammenhang mit den Schallabsorptionsmessungen ist dies für den Bereich thermisch aktivierter Übergänge bereits gezeigt worden (s. Beitrag 4.6). Leider ist die vollständige numerische Behandlung dieses Problems, d. h. die simultane Beschreibung aller bekannten Daten, nicht einfach und darüber hinaus zeitaufwendig. Nach derzeitigem Stand der Analyse spricht allerdings alles dafür, dass die Beschreibung aller experimentellen Befunde über das Relaxationsverhalten von Quarzglas aus den wenigen mittels Lichtstreuung gewonnenen Parametern gelingen wird.

- [1] G. Monaco, D. Fioretto, C. Masciovecchio, G. Ruocco, F. Sette, Phys. Rev. Lett., 82, 1776 (2000)
- [2] G. Winterling, Phys. Rev. B, 12, 2432 (1975); V. Z. Gochiyaev, V. K. Malinovsky, V. N. Novikov, A. P. Sokolov, Phil. Mag. B, 63, 777 (1991)
- [3] On the origin of quasi-elastic light scattering in glasses, V. N. Novikov, N. V. Surovtsev, J. Wiedersich, S. Adichtchev, S. Kojima, E. Rössler, eingereicht

5 Dynamik von Biomolekülen

5.1 Interhelix Fluctuations in Bacteriorhodopsin

W. Doster, R. Lechner¹, Th. Hauss¹, N.A. Dencher²

¹ Hahn Meitner Institut, BENSCH, Berlin

² Physikalische Biochemie, Universität Darmstadt

Breathing motions of secondary structure elements of proteins play an important role in large scale conformational changes, open/closed transitions, regulation and folding. The goal of this project is to characterise the interhelix fluctuations of oriented bacteriorhodopsin trimers. The trimers form a two-dimensional hexagonal lattice in the purple membrane fragments. The first step was to study the melting phase transition of this crystal and its effect on concerted motions. The force field surrounding the trimers changes at the transition providing a sensitive tool to modulate breathing modes. The figure shows the Bragg peaks of the two-dimensional lattice which disappear above 90 degrees. The 2-D trimer liquid is represented by broad interhelix correlations. Neutron time of flight experiments using NEAT at HMI reveal a softening in the interhelix modes at the transition.

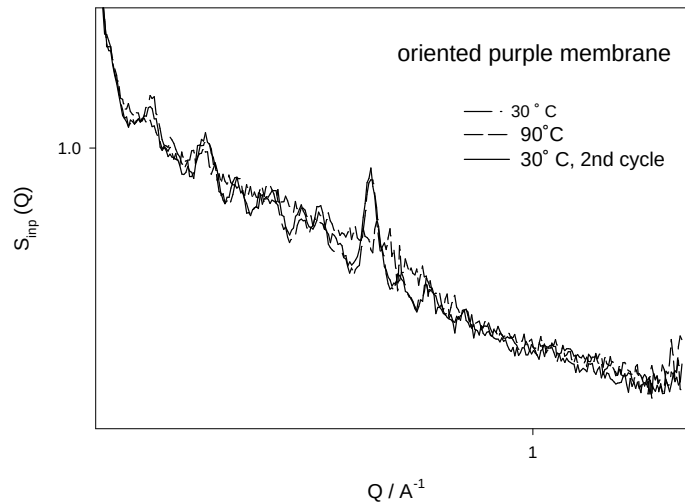


Figure 5.1.1:

Structure factor of BR below and above the phase transition observed with the instrument V1 at HMI

The project is supported by a grant of the Bundesministerium für Forschung und Technologie.

5.2 Oxygen transport in crowded protein solutions

S. Longeville, W. Doster and W. Petry

When increasing the concentration of macromolecules in solution self-diffusion becomes hindered by interaction with neighbors. It is obvious that a departure from Einstein's law of diffusion for large particles at infinite dilution should be observed. Above a certain concentration the molecules are trapped in transient cages formed by neighbors. In biological systems, such as cells, protein concentrations occur with volume fraction up to $\Phi \sim 0.2 - 0.3$, thus some biological reactions become limited by protein diffusion [1].

Myoglobin, an oxygen binding protein facilitates oxygen transport in muscle cells by macromolecular diffusion at high concentration. Moreover the kinetics of oxygen exchange in blood cells depends on hemoglobin mobility. Therefore to understand oxygen assisted protein diffusion we undertook a detailed study of myoglobin and hemoglobin diffusion in very concentrated or *crowded* solutions. Oxygen diffusion studies are usually performed using macroscopic gradients. Dynamic light scattering experiments are impeded by strong absorption by the heme group and multiple scattering. The light scattering by blood cells for instance is dominated by the cell membrane and not by hemoglobin motion. Here neutron spin-echo spectroscopy provides a very fruitful and unique tool to study diffusion of protein solutions on length scales corresponding to the center-of-mass distances. We also studied for the first time *in vivo* hemoglobin diffusion directly in blood cells.

The measurements were performed on myoglobin dissolved in D_2O as a function of the concentration and wavevector, at a temperature of 310 K (37°C). As far as it can be observed in the range of measurement, the intermediate scattering function follows a single relaxation time decay, whatever the concentration of the solution (cf. figure 5.2.1). The wavevector dependence of this relaxation time always follows the same evolution with two characteristic regimes. In the higher Q range ($Q \geq 0.1 \text{ \AA}^{-1}$) we observe a quadratic Q dependence of the inverse relaxation time: $1/\tau \sim Q^2$, whereas at smaller Q the dependence is less clear but undoubtedly follows a departure from this Q^2 law.

The results of $D_s(Q)$ versus Q are plotted in figure 5.2.2 for 4 different solutions. For each concentration the diffusion coefficient D_s was determined as the asymptotic value of $D_s(Q)$ in the high Q regime, the extension of this range being concentration dependent. In figure 5.2.3 the concentration dependence of D_s is depicted. We also report in the same figure the results obtained by previous authors with macroscopic techniques [5] or time-of-flight neutron scattering [6].

The agreement between our results and the previous macroscopic measurements is quite good if one takes into account the scattering of points given by ref. [6]. According to Riveros et al. the diffusion coefficient is almost concentration independent in the small concentration regime ($C < 10mM$). Our results don't seem to confirm this assumption. The measurements were performed using solutions of protonated myoglobin in D_2O , therefore we investigated the coherent intermediate scattering function. However our results don't show any significant de Gennes' narrowing effects on the dynamics as is usually expected [7] $\tau \sim S(Q)/D_s Q^2$. A possible explanation could be associated to the rather smooth character of the structure factor of the solution under investigation. At small wave vectors (typically $< 1 \text{ \AA}^{-1}$) the apparent diffusion coefficient $D_s(Q)$ is no more Q -independent and increases when Q decreases. This means that the associated relaxation

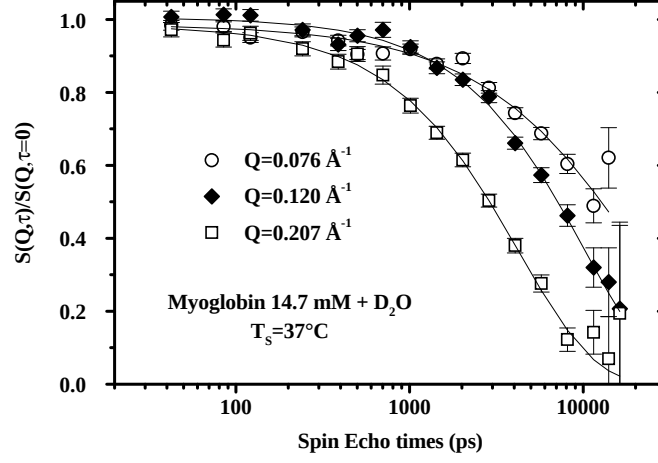


Figure 5.2.1: Intermediate scattering function $S(Q, \tau)$ measured for 3 different wavevectors on 14.7 mM myoglobin solution. The lines are fits with a single relaxation time decay function.

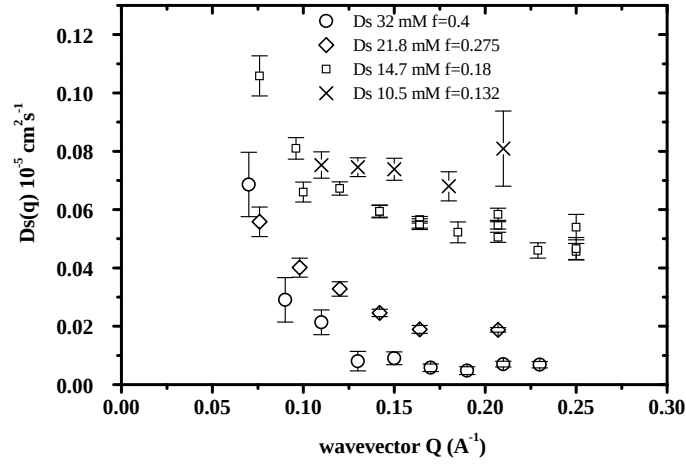


Figure 5.2.2: Apparent diffusion coefficient $D_s(Q)$ for different myoglobin concentration solutions.

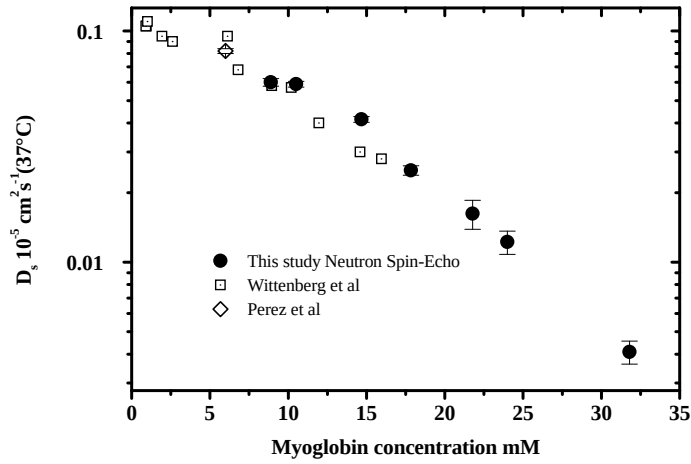


Figure 5.2.3: Concentration dependence of the Myoglobin diffusion coefficient D_s .

time follows a departure from the Q^2 law (cf. fig 5.2.2). Such an effect was previously reported on hemoglobin solutions [8] but the author interpreted it as an artifact. We also measured hemoglobin solutions, where we didn't observed such a phenomenon. However, hemoglobin is a tetramer of molecules similar to myoglobin and thus, this effect may be shifted to smaller wave vectors, i. e. out of the window of the spectrometer. Several hypotheses for the departure from the Q^2 law are under investigation, such as multiple scattering, cage effect or plasmon modes [9]. Detailed investigations of this phenomenon including different globular protein solutions, concentration and ionic strength effects are in progress.

Following our procedure to determine the diffusion coefficient evolution as a function of the protein concentration, we were able to double the range over which concentration dependence of D_s was investigated. For myoglobin the diffusion coefficient is reduced by a factor of 15 between dilute solution to 32 mM myoglobin solutions. We compare our results to two different theories, Free Volume Theory (FVT) and Mean Field Theory (MFT). Both theories involve a hard sphere system (HSS) *without solvent*. FVT was introduced by Cohen and Turnbull [10]. They assumed that a jump can occur when a significantly free volume is available to permit diffusion and computed the free volume distribution for hard a sphere system where no energy change is associated with a volume redistribution. FVT underestimates the concentration effects on the reduction of the diffusion coefficient which cannot totally be explained by the absence of solvent effects in the theory, which, introducing a viscosity has the trivial effect of reducing the diffusion. In the MFT of Han and Herzfeld [11] the computation of the work necessary to create a free volume for a jump diffusion is performed using scaled particle theory [12]. On the contrary to FVT, MFT predicts an overestimation of the macromolecular crowding effect on the reduction of the diffusion. A possible explanation could be the presence of charges on the protein surface and consequently the repulsive long-range interaction between molecules. A detailed investigation of this effect using solutions with different salt concentrations (screening of the long-range Coulomb interactions) are in progress.

[1] A. P. Minton, Biopolymers, **20** (1981) 2093-2120.

[2] S. H. Northup, Current opinion in structural Biology, **4** (1994) 265-274.

- [3] R. P. Cole, Science, **216** (1982) 523.
- [4] D. J. Levingston, G. N. La Mar, W. D. Browne, Science, **220** (1983) 71-73.
- [5] V. Riveros-Moreno and J. B. Wittenberg, The Journal of Biological Chemistry, **247** (1972) 895-901.
- [6] J. Pérez, J. M. Zanotti and D. Durand, Biophysical Journal, **77** (1999) 454-469.
- [7] P. G. de Gennes, Physica, **25** (1959) 825-839.
- [8] Y. Alpert, Neutron Spin-Echo, Lecture Notes in Physics, F. Mezei Ed., Springer Verlag 1980, 87-93.
- [9] I. F. Hakem, A. Johaner and T. A. Vilgis, Europhys Lett. (2000)
- [10] M. H. Cohen and D. Turnbull, The Journal of Chemical Physics, **31** (1959) 1164-1169.
- [11] J. Han and J. Herzfeld, Biophysical Journal, **65** (1993) 1155-1161.
- [12] H. Röss, H. L. Frisch and J. L. Leibowitz, J. Chem. Phys., **31** (1959) 369-380.

5.3 Effekt der Druckaufaltung auf die Dynamik von Myoglobin

J. Wiedersich, W. Doster, M. Diehl, H. Schober, and W. Petry

Stand des experimentellen Aufbaus

Im Rahmen einer DFG-Forschergruppe [1] sollen mittels Licht- und Neutronenstreuung Druckdenaturierungsphänomene von Proteinen untersucht werden. Während die Neutronenstreuexperimente an externen Geräten durchgeführt werden, erfordert die Durchführung von Lichtstreuexperimenten unter Druck eine Erweiterung der bestehenden Photokorrelationsapparatur. Als erste Schritte wurden im ablaufenden Jahr die Software zur Steuerung und Datenaufnahme der Photokorrelationsapparatur erneuert. Ausserdem wurde eine Druckzelle mit Saphirfenstern angeschafft, die es ermöglicht, optische Experimente bei Drücken bis zu 7000 MPa (7 kbar) durchzuführen.

Mittelfristig soll die Photokorrelationsanlage auf einem größeren optischen Tisch so installiert werden, dass ohne größeren Umbau Goniometer, Druckzelle und Kryostat unterschiedlichste Probenumgebungen ermöglichen. Dies erfordert eine völlige Neukonzeption des optischen Aufbaus.

Ergebnisse aus Neutronenstreuung

Die Denaturierung von Proteinen unter Druck wird vermutlich durch ein Aufbrechen intramolekularer Hohlräume induziert, in die Wasser eindringt. Im Gegensatz hierzu sollte die höhere Packungsdichte unter Druck eigentlich unpolare Wechselwirkungen stärken und damit die Stabilität der Proteine erhöhen. Ein dritter Mechanismus betrifft Hydratwasser, das die native Struktur durch stärkere polare Wechselwirkung destabilisieren könnte.

Die Abbildungen 5.3.1 und 5.3.2 zeigen die Ergebnisse von Neutronenstreuexperimenten zur Untersuchung der Entwicklung der molekularen Dynamik von Myoglobin und seiner Hydrathülle unter Druck. Das Flugzeitspektrometer IN6 in Grenoble wurde bei

einer Wellenlänge von $5,1 \text{ \AA}$ betrieben und gestattete Untersuchungen im Zeitbereich zwischen $0,1 \text{ ps}$ und 15 ps . Mit der Druckzelle konnte der hydrostatische Druck zwischen $0,1$ und 800 MPa (1 bar und 8 kbar) auf 10 MPa reproduzierbar eingestellt werden. Hierbei wurden konzentrierte H_2O - und D_2O -Lösungen von Myoglobin ($0,8 \text{ g Wasser/g Protein}$) untersucht, um zwischen Fluktuationen der Hydrathülle (H_2O) und des Proteins (D_2O) unterscheiden zu können.

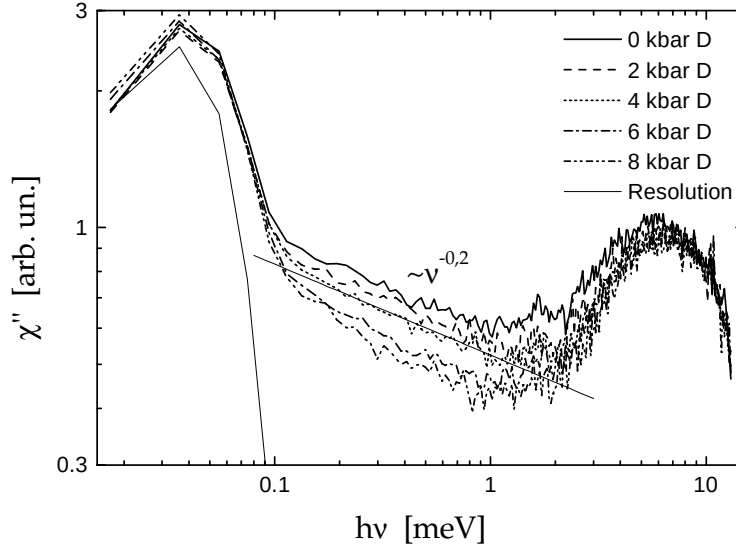


Abbildung 5.3.1:
Suszeptibilität $\chi''(\nu)$ von Myoglobin in D_2O unter Hochdruck: Neutronenstreuung. Die dünne Linie zeigt ein Potenzgesetzverhalten: $\sim \nu^{-0,2}$.

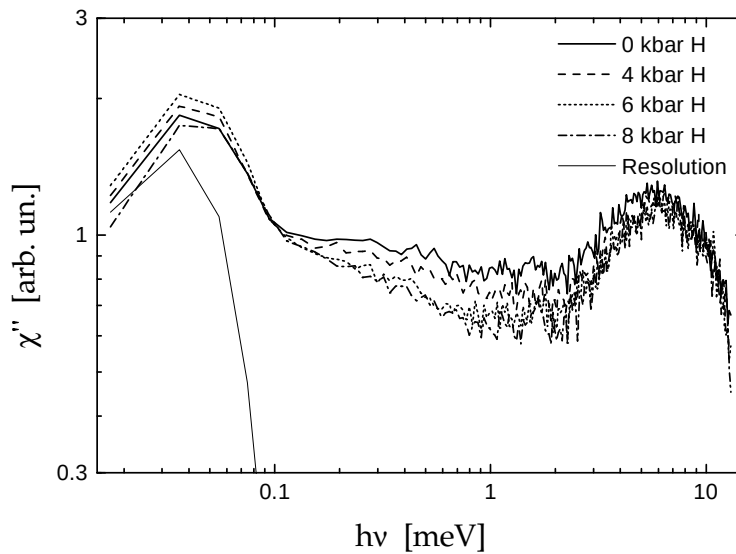


Abbildung 5.3.2:
Suszeptibilität $\chi''(\nu)$ von Myoglobin in H_2O unter Hochdruck: Neutronenstreuung

Bei beiden Proben wird mit steigendem Druck ein Abfall der quasi-elastischen Intensität und damit Beweglichkeit beobachtet. Die Beweglichkeit des Hydratwassers (H_2O -Messungen) zeigt das erwartete Langsamerwerden, vor allem bei Drücken oberhalb von 400 MPa . Im Gegensatz hierzu lässt sich der Druckeffekt auf die Proteindynamik (D_2O -Messungen) besser durch eine Reduktion der Amplitude beschreiben – ohne signifikante Verlangsamung der Dynamik. Die Druckabhängigkeit der Amplitude der Bewegungen zeigt einen sigmoidalen Verlauf um den Denaturierungsdruck von 400 MPa . Bei 800 MPa ist das Protein irreversibel denaturiert. Folglich beobachten wir bei der folgenden Druckreduzierung einen Hystereseeffekt. Sowohl für das Hydratwasser wie auch für die Struk-

turfluktuationen ist die Beweglichkeit im denaturierten System auch nach Reduktion des Drucks verringert. Also wechselwirkt das Wasser mit dem denaturierten Zustand stärker als mit der nativen Struktur. Dies legt nahe, dass das Eindringen von Wasser eine entscheidende Rolle bei der Druckauffaltung von Proteinen spielt.

Ergebnisse aus Blitzphotolyse

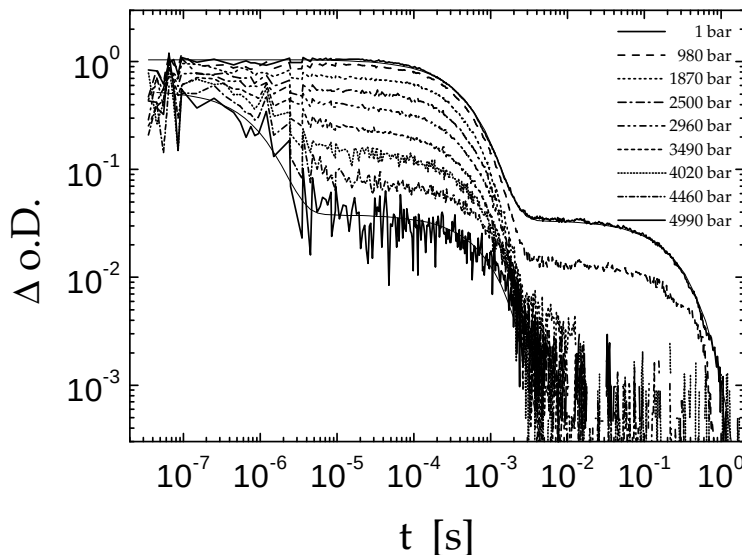


Abbildung 5.3.3:
Blitzphotolyseexperimente
von Myoglobin unter
Hochdruck.

Abbildung 5.3.3 zeigt erste Ergebnisse von Laserblitzphotolysemessungen an Myoglobin. Eine 20 μ molare Lösung von Myoglobin wurde unter 1 bar CO-Atmosphäre in einem wässrigen Phosphatpuffer (pH: 7,5) in die Druckzelle gefüllt ($T = 20^\circ\text{C}$).

Bei Umgebungsdruck lassen sich die Daten über mehrere Größenordnungen in Zeit und Amplitude gut durch einen biexponentiellen Abfall beschreiben, wobei die Relaxationszeiten $5 \cdot 10^{-4}$ s und 0,3 s betragen. Die Amplitude des langsameren Prozesses beträgt etwa 3 % der Amplitude des schnelleren. Der schnellere Prozess beschreibt die Rückreaktion (Bindung) des CO-Moleküls in der Tasche des Myoglobins; der langsamere Prozess ist wohl darauf zurückzuführen, dass geringe Mengen Sauerstoffs in der Probe vorhanden waren: bei einem Teil der Moleküle kann das stärker bindende CO erst nach Verdrängung des Sauerstoffs anbinden.

Bei Erhöhung des Drucks nimmt die Amplitude beider Prozesse deutlich ab, wobei dieser Abfall im Kurzzeitbereich geringer ausgeprägt ist. Damit lassen sich die Daten nicht mehr allein durch die beiden exponentiellen Prozesse beschreiben, es findet sich bei kürzen Zeiten ein schneller Abfall mit einer Zeitkonstanten von etwa 10^{-6} s. Bei Erreichen des Enddruckes von 5,5 kbar ist die Probe irreversibel denaturiert.

[1] Einfluss von Hochdruck auf molekulare und zelluläre Systeme in Lebensmitteln,
<http://www.lfp.blm.tu-muenchen.de/for-hd/default.htm>

5.4 Influence of Trehalose on the dynamics of a protein : the C-Phycocyanin

I. Köper¹, M.C. Bellissent-Funel¹, W. Petry

¹ Laboratoire Léon Brillouin, CEA-Saclay

We investigate the influence of the disaccharide trehalose on the dynamics of the C-phycocyanin(CPC) protein by elastic and inelastic neutron scattering.

Trehalose, a non-reducing disaccharide is a well known bioprotecting molecule. It is found in a variety of cells, plants and organisms able to survive extreme stresses such as periods of drought or very low temperatures [1-3]. The protecting effect can also be found for several other molecules, but trehalose seems to be the most effecting protecting agent [4]. It is already used for several applications. Pharmaceutical products on protein basis can be conserved in trehalose solution at room temperature instead of using conservation at low temperatures. Trehalose solutions are also used during human organ transplantations [5].

Despite many scientific work in this field, the protective mechanism on a molecular length scale still remains unclear. There exist two different theories, trying to explain the effect by a) the formation of a glassy structure of trehalose around the biomolecule or b) the replacement of surface-bonded water molecules by trehalose to avoid cell damages.

The C-phycocyanin is a light-harvesting protein, that we extract from cyanobacteria. Recently dynamics of this protein in hydrated powders as well as in solution has been studied by quasielastic neutron scattering and Molecular Dynamics Simulations [6]. We dispose of the hydrogenated form as well as a completely deuterated form.

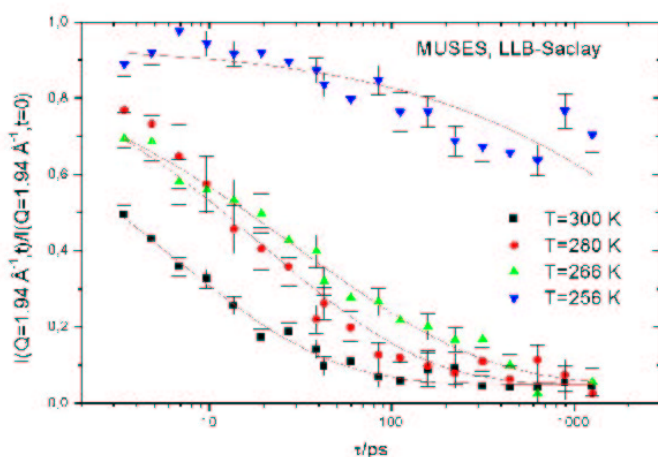


Figure 5.4.1:
Intermediate scattering function for a trehalose/D₂O solution (50w%) at different temperatures and a Q-vector of 1.94 Å⁻¹, solid lines represent fits using a stretched exponential function.

In a first step we investigate the dynamics of trehalose/water solutions. Commercially, deuterated trehalose is not available. We arrived to modify an experimental protocol for the deuteration of sugars and obtained a 80% deuterated form of trehalose. Figure 5.4.1 shows the intermediate scattering function, measured on the neutron spin-echo spectrometer MUSES at the LLB Saclay. We used a solution of 50 w% Trehalose in D₂O. The

curves show a relaxing behavior that can be described using a Kohlrausch-William-Watt law, finding a nearly temperature independent exponent $\beta = 0.5$.

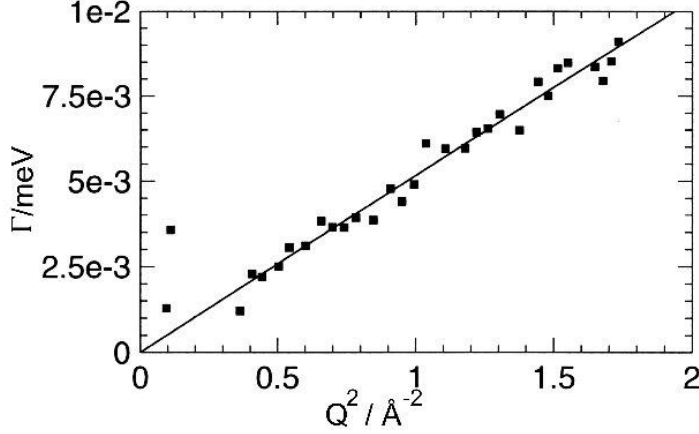


Figure 5.4.2:
Half width of a Lorentzian describing the scattering function for a trehalose/D₂O Solution (50 w%).

We also performed an experiment on a similar sample (but this time with hydrogenated trehalose) on the time of flight spectrometer MIBEMOL. From the analysis of the scattered signal using a single Lorentzian line, we could extract a diffusion coefficient for the trehalose molecule in heavy water : $D = 7.8 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ (see figure 5.4.2), which is in good agreement with results from photon correlation spectroscopy experiments.

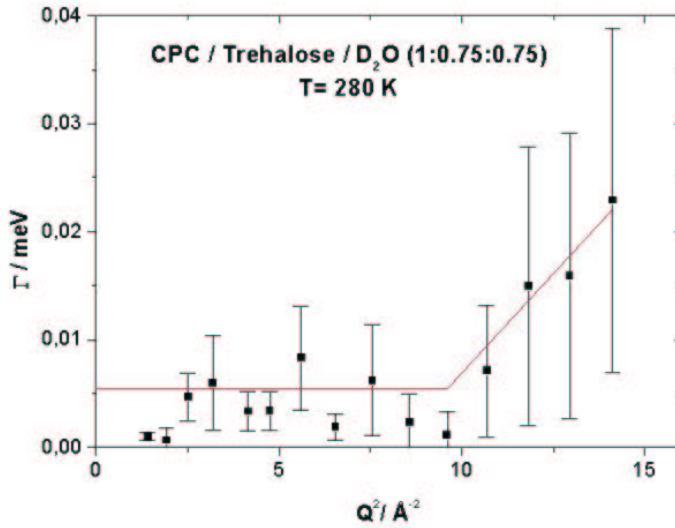


Figure 5.4.3:
Half width of a Lorentzian describing the scattering function for a hydrated CPC/Trehalose powder. Solid lines are only guides for the eye

In order to study the influence of trehalose on the internal motions of proteins, we ran in a second step a set of elastic and quasielastic measurements at high resolution ($8 \mu\text{eV}$) using the IN13 spectrometer to investigate CPC/trehalose samples. We prepared the samples in the following way: the protein and the deuterated sugar are mixed in the desired ratio, co-lyophilized and finally hydrated under a D₂O atmosphere. Using this procedure assures that the measured signal is mainly due to the protons in the protein.

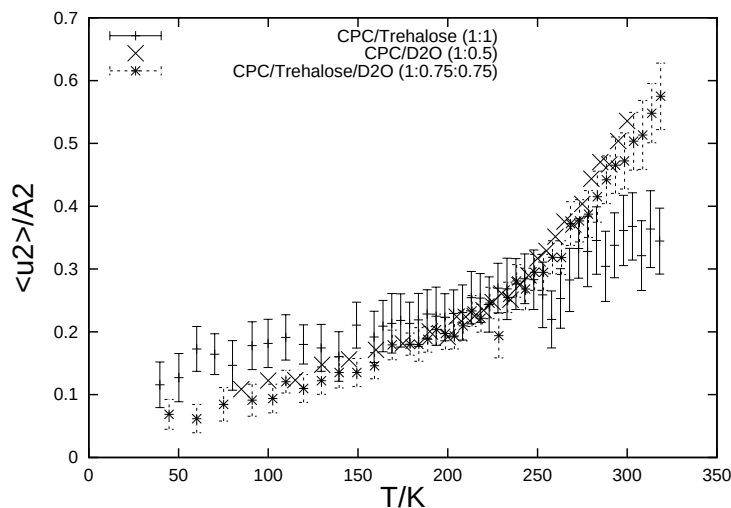


Figure 5.4.4:
Mean square displacement as a function of temperature of the hydrogen atoms in a hydrated and a dry CPC/trehalose samples. Some comparison is done with hydrated CPC ($h=0.5\text{g/g}$)

We performed elastic scattering experiments on the backscattering spectrometer IN13 at the ILL Grenoble. Figure 5.4.4 shows the mean square displacement of the protons in three different samples : one containing only CPC and trehalose, a second containing a hydrated CPC powder ($h=0.5\text{ g/g}$) and a third consisting of a hydrated CPC/trehalose mixture. One can see that for hydrated samples at about 220 K a transition from a harmonic to a non-harmonic regime occurs. Furthermore the amplitudes of the movements are reduced in the presence of sugar.

We also did quasielastic neutron scattering on the same samples. The scattered signal can be analysed by using a Lorentzian curve. The width of this curve is independent of Q until values for Q^2 of about $9.5\text{ \AA}^{-2}$ and shows a linear dependence for higher Q -values. This behavior can be interpreted in terms of a diffusion in a sphere of a radius $a = 0.98\text{ \AA}$ and the diffusion coefficient $D=2.10^{-7}\text{ cm}^2\text{s}^{-1}$. These values are significantly smaller values as found for pure protein [6].

- [1] R. Payen, Can.J.Res. 27B, 749-756 (1949)
- [2] J. Clegg, M. Filosa, Nature 192,1077-1078 (1981)
- [3] J. Crowe, L. Crowe, D. Chapman, Science 223, 701-703 (1984)

- [4] M. Sola-Penna, J.R. Meyer-Fernandes, Arch.Biochem.Biophys. 360, 10-14 (1998)
- [5] C. Colcao, S. Sen, M. Thangavelu, S. Pinder, B. Roser, Bio/Technology 10, 1007-1011 (1992)
- [6] S. Dellerue, PhD Thesis LLB Saclay (2000)

6 Theorie ungeordneter Festkörper

6.1 Vibrational Properties of Disordered Solids: The Binary Force Constant Model

W. Schirmacher, G. Diezemann¹

¹ Institut für phys. Chemie, Universität Mainz, Welterweg 15, D-55099 Mainz

The anomalous low-frequency vibrational properties of disordered solids are still poorly understood, although they are subject to an enormous amount of theoretical and experimental investigations on this subject. A controversial point in the discussion in this field is, whether the observed excess vibrational density of states (DOS) $g(\omega)$ (with respect to Debye's ω^2 law, "boson peak") is due to localised or extended vibrational modes. This question is important, because it is related to the mechanism of thermal transport in the ~ 10 K temperature range. Recently the present authors have shown [1] that a model

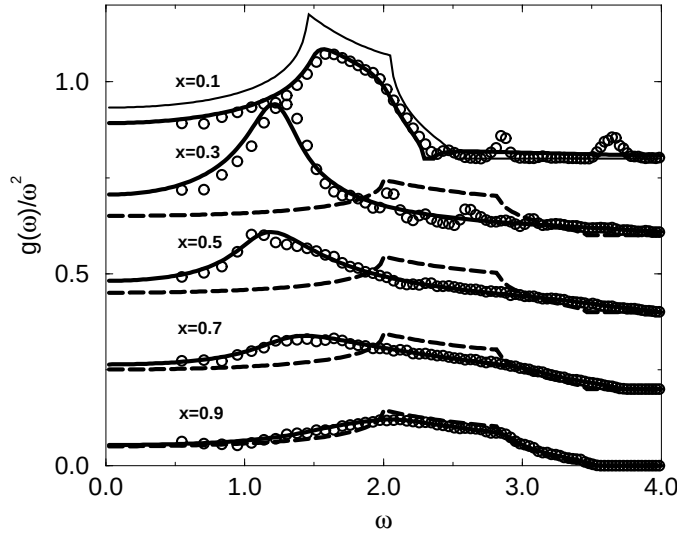


Figure 6.1.1:
Reduced DOS $g(\omega)/\omega^2$ vs. frequency for $K_2/K_1 = 0.1$ and concentrations $x = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$, and 0.9 (from top to bottom). Frequencies are given in units of the square root of the average force constant, which is normalised to unity. Symbols: diagonalisation results; thick lines: CPA; thin line: regular DOS for the K_2 sublattice ($x = 0.1$); dashes: regular DOS for the averaged force constants. (For clarity the curves for $x \leq 0.7$ have been shifted upwards.)

of coupled harmonic oscillators placed on a simple cubic lattice with spatially fluctuating force constants K produces a boson-peak like anomaly. As distribution of force constants $P(K)$ we took a Gaussian which was truncated on its negative side to avoid instability. The model was solved for the DOS both by numerical diagonalisation and using the single-bond coherent potential approximation (CPA). The results of both methods are in good agreement with each other.

In order to find out how general these features are, i. e., whether they are typical for disordered solids, it is important to investigate different kinds of models. We have therefore

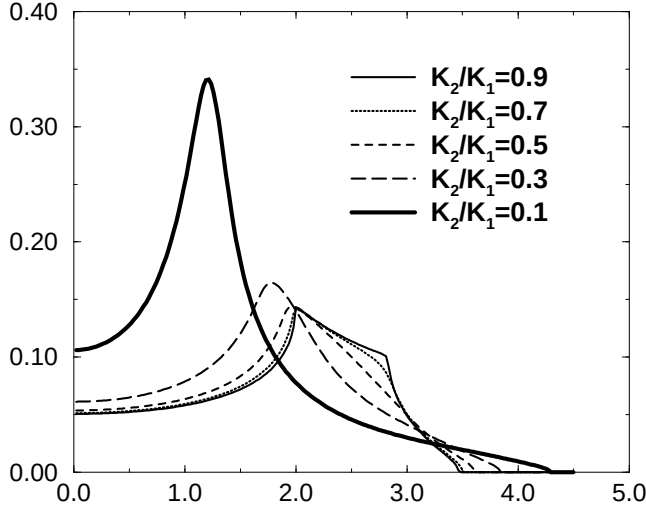


Figure 6.1.2:
Reduced DOS $g(\omega)/\omega^2$ vs.
frequency for different ra-
tios K_2/K_1 and $x = 0.3$,
calculated in CPA

considered a model with a binary distribution of force constants. As explained in the following we have found, that at the concentration at which the larger of the coupling constants percolate the system is “most disordered“, which means that the van-Hove

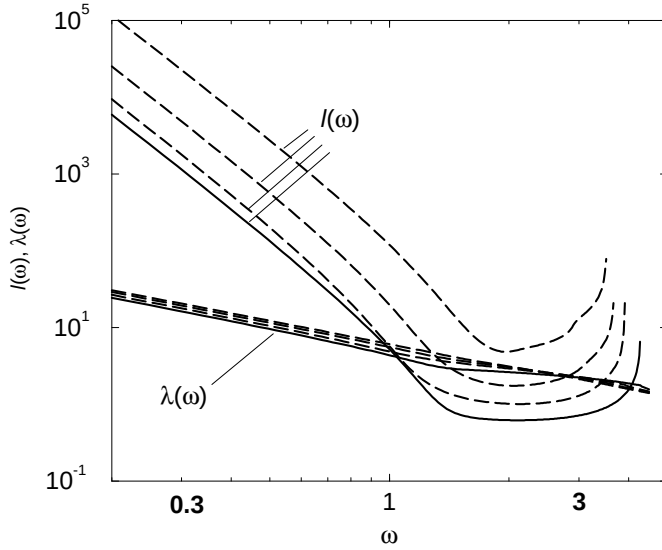


Figure 6.1.3:
Mean free path $\ell(\omega)$ and
wavelength $\lambda(\omega)$ as defi-
ned in the text. Dashes:
 $x = 0.9, 0.7, 0.5$ (from top
to bottom). Full lines: $x =$
 0.3 .

singularities are completely washed out and the boson peak is most pronounced. As in the models with a continuous force constant distribution [1] the states in the boson peak frequency range are shown to be neither propagating nor localised.

We consider a set of coupled (scalar) harmonic oscillators with nearest- neighbour force constants K on a simple cubic lattice. K is a random number distributed according to the density $P(K) = x\delta(K - K_1) + (1 - x)\delta(K - K_2)$. As in ref. [1] we compare a numerical diagonalisation with CPA results. For calculational details see [1]. We normalise the K_i such that $\langle K \rangle = xK_1 + (1 - x)K_2 = 1$. For the numerical work we consider only the

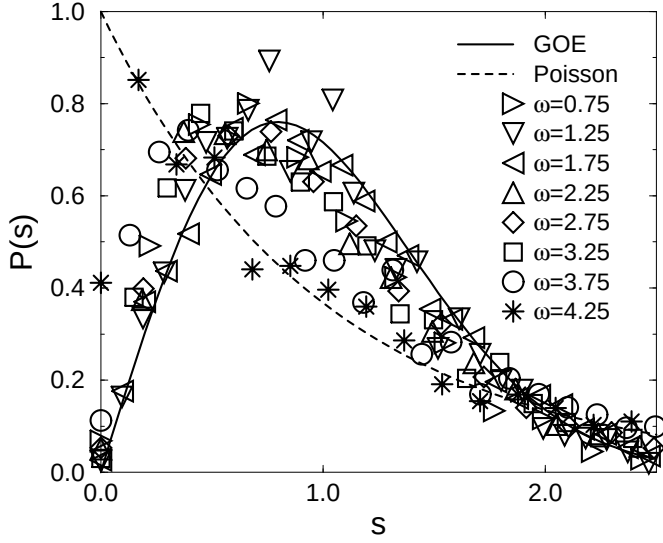


Figure 6.1.4:
Level distance statistics for $x = 0.3$ taken in frequency intervals of width $\Delta\omega = 0.5$ around the frequency values indicated. The boson peak is located at $\omega = 1.25$, where the statistics follows the GOE. The mobility edge is near $\omega = 3.75$.

case $K_2 \ll K_1$ and take the ratio as $K_2/K_1=0.1$.

In fig.6.1.1 we have plotted the DOS, divided by the frequency squared, i. e. $g(\omega)/\omega^2$ for five values of the concentration x . Clearly the diagonalisation results are in excellent agreement with those of the CPA. By comparing the curves corresponding to the different concentrations it is striking that for $x = 0.3$ the van-Hove singularities are washed out completely and a pronounced low-frequency “boson peak“ appears, which, to our opinion is a benchmark for strong disorder.

In the following we are going to investigate the case $x = 0.3$ in more detail. In fig. 6.1.2 we have plotted $g(\omega)/\omega^2$ as calculated in CPA for different values of the ratio K_2/K_1 . The change in the DOS from the regular to the strongly disordered case is most striking. In order to show that for $K_2/K_1 = 0.1$ and $x = 3$ the disorder is really strong we have calculated in CPA the mean free path given in terms of the frequency dependent complex sound velocity [1] $v(\omega)$ as $\ell(\omega) = |v(\omega)|^2 / 2\omega \text{Im}\{v(\omega)\}$ and compared it with the sound wavelength $\lambda(\omega) = 2\pi \text{Re}\{v(\omega)\} / \omega$ (see fig. 6.1.3). Comparing fig. 6.1.1 with fig. 6.1.3 it becomes clear that the boson peak coincides with the frequency where ℓ becomes comparable to λ . The Ioffe-Regel criterion now would suggest that the states beyond the frequency, where ℓ becomes equal to λ are localised. We have investigated this question by evaluating the level distance statistics. We deconvoluted the eigenvalues $\lambda_i = \omega_i^2$ using the averaged integrated DOS (as described in [1]) in order to obtain the normalised level distances s . The statistics of these distances was obtained by taking 11 samples of side length 14. The frequencies given in the legend of fig. 6.1.4 are the mid-points of frequency intervals of width $\Delta\omega = 0.5$ in which the statistics has been evaluated. It is clear from the figure that in the boson peak range $\omega \leq 1.75$ the GOE statistics is obeyed, i. e. the states are delocalised. Only at higher frequencies in the vicinity of the upper band edge the Poissonian statistics is approached, indicating the presence of a mobility edge near $\omega = 4$. This means that the boson peak in the binary force constant model is not associated with localized states.

In conclusion we find that also in this “toy model“ it is the presence of both strong

disorder and “soft configurations” that produce the boson peak. In the model the strong disorder is realized by the percolating sublattice with large force constants, whereas the soft configurations are the remaining voids with small force constants. It is worth while to remark that, if one would set the small force constants equal to zero (“phonon fracton model“, [2,3]) no boson peak would be present. The soft configurations are obviously needed to maintain the wave character of the excitations. The boson peak appears at the frequency, where these waves cross over from being nearly plane waves to strongly scattered ones (see figs. 6.1.1 and 6.1.3. As evidenced by fig. 6.1.4 these excitations, however, are not localized but extended, indicating that they support a diffusive type of energy transport.

- [1] W. Schirmacher, G. Diezemann, and C. Ganter, Phys. Rev. Lett. **81**, 136 (1998)
- [2] S. Alexander and R. L. Orbach, J. Phys. (Paris) Lett. **43**, L625 (1982)
- [3] T. Nakayama, K. Yakubo, and R. L. Orbach, Rev. Mod. Phys. **66**, 381 (1994)

6.2 Field theoretic description of vibrational properties of disordered solids

M. Pöhlmann¹, W. Schirmacher¹

¹ presently at Material Science Institute, Univ. of Oregon, Eugene, OR, USA

We consider the single-particle excitations and the energy transport properties of disordered solids including anharmonic interactions. This is done for a hydrodynamic model using path integral quantization. We proceed in a similar way as Belitz and Kirkpatrick [1] do in treating elementary electronic excitations and transport in disordered solids. By assuming a Gaussian local disorder in the elastic Lamé constants we use the replica trick to transform the quenched disorder to an effective quartic interaction. Anharmonic effects are

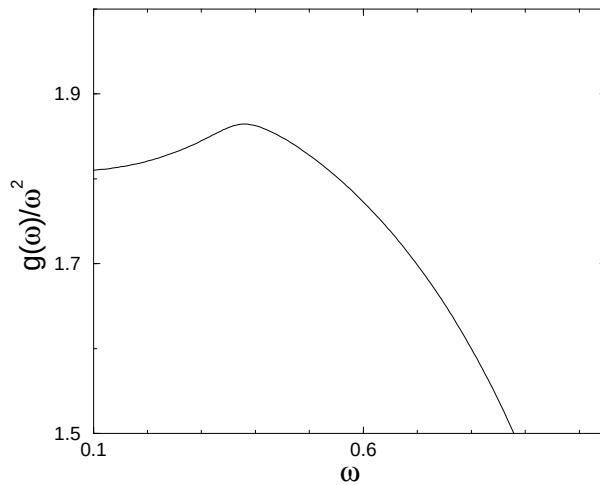


Figure 6.2.1:
Reduced DOS $g(\omega)/\omega^2$ vs. frequency for strong disorder, i. e. the width of the Gaussian distribution is of the order of the mean

induced by considering a local density dependence of the elastic constants. We construct an effective field theory by constraining the effective field to fluctuations of pair modes. A saddle-point approximation then yields a selfconsistent theory for the excitation spectrum. The disorder part of this mean field theory looks like a simplified CPA (see previous report). In fig. 6.2.1 a preliminary calculation for longitudinal degrees only and without anharmonic interaction is shown. The peak can be interpreted as “boson peak“, showing that also within the present formalism it can be considered to be a salient feature of harmonic disordered solids. Within the harmonic theory the modes with different frequencies are decoupled. This is no more the case in the presence of anharmonic interactions. The self-consistent equations of the saddle-point approximation lead to mode-mode coupling. The mean-field equations can be interpreted as a version of a mode-coupling theory. By means of this theory the low-temperature anomalies in the temperature dependence of the specific heat and thermal conductivity in glasses can be explained.

- [1] D. Belitz, T. R. Kirkpatrick, Phys. Rev. B **56**, 6513 (1997)

7 Fortbildungsveranstaltungen

RLFB–Tagungsprogramm
EDGAR–LÜSCHER–PHYSIKSEMINAR 2000
Thema: Akustik,

Datum: Freitag, 17. März bis Sonntag, 19. März 2000

Tagungsort: Gymnasium Zwiesel

Veranstalter: Der Ministerialbeauftragte für die Gymnasien in Niederbayern, G. Rauprich
Wissenschaftliche Leitung: Priv. Doz. Dr. W. Schirmacher, Technische Universität München
Organisation am Ort: Gymnasium Zwiesel (OStD H. Kratzer, OStR G. Haller)

PROGRAMM

Freitag, 17. 3. 2000

- | | |
|---------------|--|
| 15.15 – 15.30 | Begrüßung, Organisatorisches |
| 15.30 – 16.45 | Prof. Dr. L. Schreiber, Fa. Müller-BBM, Planegg
<i>Einführung</i> |
| 16.45 – 17.00 | Diskussion |
| 18.00 | Ensemble Gymnasium Zwiesel und TU München
<i>Konzert</i> |

Samstag, 18. 3. 2000

- | | |
|---------------|--|
| 9.00 – 10.15 | H. A. Müller, Müller-BBM Planegg
<i>Raumakustik</i> |
| 10.15 – 10.30 | Diskussion |
| 11.00 – 12.15 | Prof. Dr. H.-J. Stöckmann, Univ. Marburg
<i>Akustik und „Wellenchaos“</i> |
| 12.15 – 12.30 | Diskussion |
| 15.00 – 16.15 | Prof. Dr. L. Schreiber, Fa. Müller-BBM, Planegg
<i>Schallschutz</i> |
| 16.15 – 16.30 | Diskussion |
| 17.00 – 18.15 | H. A. Müller, Fa. Müller-BBM, Planegg
<i>Die Akustik der Geige</i> |
| 18.15 – 18.30 | Diskussion |

Sonntag, 19. 3. 2000

- | | |
|---------------|--|
| 9.00 – 10.15 | Dr. H. Wollherr, Inst. f. Rundfunktechnik, München
<i>Akustik von Aufnahmestudios</i> |
| 10.15 – 10.30 | Diskussion |
| 11.00 – 12.15 | N. N., Univ. Regensburg
<i>Phononen: quantisierte Schwingungen in Festkörpern</i> |
| 12.15 – 12.30 | Diskussion |

Chaos-Phänomene in der Physik

Edgar-Lüscher Fortbildungskurs für Physiklehrer vom 4. bis 6. Oktober 2000

Lehrerfortbildungsakademie Dillingen

Leitung: Prof. Dr H. Friedrich, Dr. W. Schirmacher, TU München, und StD. Dr. R. Fichtner, Akademie
Dillingen

	Mittwoch, 4. 10.	Donnerstag, 5. 10.	Freitag, 6. 10.
8.30 - 9.45		PD Dr. G. Hackenbroich, Univ. Essen <i>Chaos in Lasern</i>	Dr. R. Richter, Univ. Bayreuth: <i>Raum-zeitliches Chaos in magnetischen Flüssigkeiten</i>
9.45 - 10.00		Diskussion	Diskussion
10.15 - 11.30		Prof. Dr. H. Meinhardt MPI, Tübingen <i>Strukturbildung</i>	Prof. Dr. L. van Hemmen, TU München: <i>Wie erinnert sich ein neuronales Netz? Biodynamik neuronaler Lernregeln</i>
11.30 - 11.45		Diskussion	Diskussion
15.00 - 16.15	Prof. Dr. B. Eckhardt, Univ. Marburg: <i>Mathematische Beschreibung von Chaosphänomenen</i>	Dr. A. Kittel, Univ. Oldenburg: <i>Strukturbildung in dotierten Halbleitern</i>	
16.15 - 16.30	Diskussion	Diskussion	
18.30 - 19.45	Prof. Dr. F. Haake, Univ. Essen: <i>Auswirkungen des klassischen Chaos in der Quantenmechanik</i>	Dr. H. Schanz, Univ. Göttingen <i>Chaos in mesoskopischen Halbleiterstrukturen</i>	
19.45 - 20.00	Diskussion	Diskussion	

8 Allgemeine Zusammenstellungen

8.1 Veröffentlichungen

- M-C. Bellissent-Funel, S. Longeville, J. M. Zanotti and S. H. Chen
Experimental observation of the α -relaxation in supercooled water
Phys. Rev. Lett., **85**, 3644 (2000)
- W. Doster, M. Diehl, W. Petry, C. Pfister and H. Schober
Time-resolved mean square displacements of protein-water hydrogens
Eur. Biophys. J. **29**, 390 (2000)
- W. Doster, M. Diehl, W. Petry and H. Schober
Elastic resolution spectroscopy, a new method to measure the dynamics of small biological samples
Physica B in press (2000)
- A. I. Chumakov, R. Rüffer, O. Leupold, A. Barla, H. Thiess, T. Asthalter, B. P. Doyle, A. Snigirev,
A refractive collimator for high-resolution X-ray optics
Surface (Moscow), Proceedings of "X-ray Optics" (2000)
- A. I. Chumakov, R. Rüffer, O. Leupold, A. Barla, H. Thiess, T. Asthalter, B. P. Doyle, A. Snigirev, A. Q. R. Baron,
A high resolution monochromator with a refractive collimator
Appl. Phys. Lett. **77**, 31 (2000)
- S. Dellerue, A. Petrescue, J. C. Smith, S. Longeville and M.-C. Bellissent-Funel
Collective dynamics of a photosynthetic protein probed by neutron spin echo spectroscopy and molecular dynamics simulation.
Physica B, Proceedings of the Second European Conference on Neutron Scattering 1999 (ECNS'99): 01.09.-04.09.1999, Budapest, Ed. L. Cser and L. Rosta, EPS, **276-278** 514, (2000)
- M. Eichengrün, W. Schirmacher, W. Breymann
Quantum chaotic scattering with a mixed phase space: The three-disk billiard in a magnetic field
Phys. Rev. E **61**, 382 (2000)
- M.R. Gibbs, W.G. Stirling, K.H. Andersen, and H. Schober
Pressure Dependence of the Multiphonon Excitations Superfluid ^4He
J. of Low Temp. Phys. **120**, 55 (2000)
- W. Gläser, W. Petry
The new neutron source FRM-II
Physica B **276-278**, 30 (2000)
- H.R. Glyde, O. Plantevin, B. Fåk, G. Coddens, P.S. Danielson, and H. Schober,
Dynamics of liquid ^4He in Vycor
Phys. Rev. Lett., **84**, 2646 (2000)

- J. S. Gutmann, P. Müller-Buschbaum, D. W. Schubert, N. Stribeck, D. Smilgies, M. Stamm
Roughness correlations in ultra-thin polymer blend films.
 Physica B **283**, 40 (2000)
- I. Köper, W. Petry, M.C. Bellissent-Funel
Influence of trehalose on the dynamics of a protein : the C-phycocyanin
 Eur. Biophys.J., **29**, 263 (2000)
- M.M. Koza, H. Schober, Th. Hansen, A. Tölle, and F. Fujara
Ice XII in its second regime of metastability
 Phys. Rev. Lett., **84**, 4112 (2000)
- J. Kraus, P. Müller-Buschbaum, T. Kuhlmann, D. W. Schubert, M. Stamm
Confinement effects on the chain conformation in thin polymer films.
 Europhys. Lett. **49**, 210 (2000)
- E. Kravtsov, V. Lauter-Pasyuk, H. Lauter, B. Toperverg, O. Nikonov, A. Petrenko, M. Milyaev, L. Romashev, V. Ustinov
Interface formation and magnetic ordering in Fe/Cr hybrid nanostructures
 Physica B, 2000, in print
- H. Leyser and W. Doster
Time-resolved enthalpy measurements of light-induced reactions by optical interferometry
 Eur. Biophys. J. **29**, 321 (2000)
- A. Krimmel, A. Loidl, M. Klemm, S. Horn, and H. Schober
Interplay between spin glass and heavy fermion behavior in the d-metal oxides $Li_{1-x}Zn_xV_2O_4$
 Phys. Rev. B **61**, 12578-12581 (2000)
- T. Krinitsina, E. Kravtsov, N. Kurtina, V. Lauter-Pasyuk, H. Lauter, L. Romashev, A. Semerikov, B. Toperverg, V. Tsurin, V. Ustinov
Crystalline and magnetic structure of non-collinear Fe/Cr multilayers
 J Magn Magn Mater, 2000, in print
- V. Lauter-Pasyuk, H. Lauter, M. Lorenz, A. Petrenko, O. Nikonov, V. Aksenov, P. Leiderer
Magnetic field distribution around flux-lines in $YBa_2Cu_3O_7$ superconducting thin films in a parallel field
 Phys.B, **276-278** 776 - 777 (2000)
- V. Lauter-Pasyuk, H. Lauter, B. Toperverg, O. Nikonov, E. Kravtsov, M. Milyaev, L. Romashev, V. Ustinov
Magnetic off-specular neutron scattering from Fe/Cr multilayers
 Phys.B, **283**, 194 (2000)
- V. Lauter-Pasyuk, H. Lauter, B. Toperverg, O. Nikonov, E. Kravtsov, M. Milyaev, L. Romashev, V. Ustinov
Magnetic neutron off-specular scattering for the direct determination of the coupling

angle in exchange couple multilayers

J Magn Magn Mater, 2000, in print

S. Longeville

La spectroscopie à écho de spin par résonance

J. Phys. IV France 10, (2000) Pr1-59, Ed. M. Bée, éditions de physique.

S. Longeville, W. Doster, M. Diehl, R. Gähler and W. Petry

Neutron resonance spin-echo: oxygen transport in crowded protein solutions, (2000) submitted.

S. Longeville and R. E. Lechner

Light and heavy water dynamics

Physica B, Proceedings of the Second European Conference on Neutron Scattering 1999 (ECNS'99): 01.09.-04.09.1999, Budapest, Ed. L. Cser and L. Rosta, EPS, **276-278**, 534, (2000).

S. Magazu, R. E. Lechner, S. Longeville, G. Maisano, D. Majolino, P. migliardo and U. Wanderlingh

Diffusive dynamics in trehalose aqueous solution by QENS

Physica B, Proceedings of the Second European Conference on Neutron Scattering 1999 (ECNS'99): 01.09.-04.09.1999, Budapest, Ed. L. Cser and L. Rosta, EPS, **276-278**, 475 (2000).

A. Meyer, S. Roth, W. Petry

Relaxation and Diffusion in Glas-Forming Metallic Liquids

Materials Science Forum (im Druck)

A. Meyer, H. Schober, J. Neuhaus

Microscopic Dynamics in Liquid GeO₂

Phys. Rev. B (eingereicht)

M. Müller, Ch. Czihak, H. Schober, Y. Nishiyama, and G. Vogl

All disordered regions of native cellulose show common low-frequency dynamics

Macromolecules, **33**, 1834 (2000)

P. Müller-Buschbaum, J. S. Gutmann, J. Kraus, H. Walter, M. Stamm

Suppression of roughness replication in bilayer films prepared by spin coating

Macromolecules **33**, 569 (2000)

P. Müller-Buschbaum, J. S. Gutmann, M. Stamm, R. Cubitt

Surface structure analysis of thin dewetted polymer blend films

Macromol. Symp. **149**, 283 (2000)

P. Müller-Buschbaum, J. S. Gutmann, M. Stamm, R. Cubitt, S. Cunis, G. von Krosigk, R. Gehrke, W. Petry

Dewetting of thin polymer blend films: Examined with GISAS

Physica B **283**, 53 (2000)

P. Müller-Buschbaum, J. S. Gutmann, M. Stamm

Influence of blend composition on phase separation and dewetting of thin blend films

Macromolecules **33**, 4886 (2000)

- V.N. Novikov, N.V. Surovtsev, J. Wiedersich, S. Adichtchev, S. Kojima, E. Rössler
On the origin of quasi-elastic light scattering in glasses
 Phys. Rev. B, submitted
- W. Petry
The New German Neutron Source FRM-II
 IAEA-SM-360/39, Proc. of Int. Symp. on Research Reactor Utilization, Safety and Management, Lisbon, 1999 (2000)
- B. Rinn, U. Braunschweig, P. Maass, W. Schirmacher
Effective-Medium Approximation for Energy-Dependent Hopping on a Lattice
 Phys. Stat. Sol. (b) **218**, 93 (2000)
- C. Renger, P. Müller-Buschbaum, M. Stamm, G. Hinrichsen
Investigation and retardation of liquid/solid and liquid/liquid dewetting processes of thin polystyrene films on top of an amorphous polyamide layer
 Macromolecules **33**, 8388 (2000)
- B. Renker, H. Schober, M.T. Fernandez-Diaz, and R. Heid
Structure and dynamics of C_{60} intercalation compounds: N_2C_{60} and O_2C_{60}
 Phys. Rev. B **61**, 13960 (2000)
- S. Rols, Z. Benes, E. Anglaret, J.L. Sauvajol, P. Papanek, J.E. Fischer, G. Coddens, H. Schober, and A.J. Dianoux
Phonon Density of States of Single-Wall Carbon Nano tubes
 Phys. Rev. Lett. **85**, 5222-5225 (2000)
- S. Roth, A. Zirkel, J. Neuhaus, W. Schneider, W. Petry
Optimization of the neutron guide system for the time-of-flight spectrometer at the FRM-II
 Physica B, **283**, 439 (2000)
- B. Rufflé, J. Ollivier, S. Longeville and R. E. Lechner
Neutron time-of-flight measurement techniques: new possibilities of TOF spectroscopy with NEAT at BENSC
 Nuclear Instruments and Methods, Phys. Res. A, **449**, 332 (2000).
- B. Rufflé, J. Ollivier, S. Longeville and R. E. Lechner
TOF diffraction experiments with NEAT at BENSC
 Physica B, Proceedings of the Second European Conference on Neutron Scattering 1999 (ECNS'99): 01.09.-04.09.1999, Budapest, Ed. L. Cser and L. Rosta, EPS, **276-278**, 170 (2000).
- M. Russina, F. Mezei, R. Lechner, S. Longeville, and B. Urban
Experimental evidence for fast heterogeneous collective structural relaxation in a supercooled liquid near the glass transition.
 Phys. Rev. Lett., **84**, 3630, 2000.
- B. Sandow, K. Gloos, R. Rentzsch, A. N. Ionov, W. Schirmacher
Electronic correlation effects and the Coulomb gap at finite temperature
 Phys. Rev. Letters, in print (accepted).

- W. Schirmacher, G. Diezemann, C. Ganter
Model Calculations for the Vibrational Anomalies of a Disordered Lennard-Jones Solid
 Physica B **284-288**, 1147 (2000)
- C. Ganter, W. Schirmacher
Effective-Medium Approximation for Energy-Dependent Hopping on a Lattice
 Phys. Stat. Sol. (b) **218**, 218 (2000)
- T. Schmitt, P. Guttman, O. Schmidt, P. Müller-Buschbaum, M. Stamm, G. Schnhense, G. Schmahl
Microscopy of thin polymer blend films of polystyrene and poly-n-butyl-methacrylate.
 AIP CP507, 245 (2000)
- H. Schober, Ch. Losert, F. Mezei, and J.C. Cook
Chopper Cascades: An Analytic Treatment of the Contamination Problem
 J. Neutron Research, **8**, 175-185 (2000)
- H. Schober, M.M. Koza, A. Tölle, C. Masciovecchio, F. Sette, and F. Fujara
Crystal-like High Frequency Phonons in the Amorphous Phases of Solid Water
 Phys. Rev. Lett. **85**, 4100-4103 (2000)
- J. A. Stride, U. A. Jayasooriya, N. Mbogo, R. P. White, G. J. Kearley and S. Longeville
Restricted proton mobility in the self-organizing system 3,5-dimethylpyrazole.
 Physica B, Proceedings of the Second European Conference on Neutron Scattering 1999 (ECNS'99): 01.09.-04.09.1999, Budapest, Ed. L. Cser and L. Rosta, EPS, **276-278**, 308 (2000)
- N. V. Surovtsev, J. Wiedersich, A.E. Batalov, V.N. Novikov, M.A. Ramos, E. Rössler
Inelastic light scattering in B₂O₃ glasses with different thermal histories
 J. Chem. Phys., **113**, 5891 (2000)
- N. V. Surovtsev, J. A. H. Wiedersich, E. Duval, V. N. Novikov, E. Rössler, A. P. Sokolov
Light scattering spectra of fast relaxation in B₂O₃ glass
 J. Chem. Phys., **112**, 2319 (2000)
- A. Tölle, H. Zimmermann, F. Fujara, W. Petry, W. Schmidt, H. Schober, J. Wuttke
Vibrational States of Glassy and Crystalline Orthoterphenyl.
 Eur. Phys. J. B **16**, 73 (2000)
- B. Toperverg, V. Lauter-Pasyuk, H. Lauter, O. Nikonov, D. Ausserr, Y. Gallot
Off-specular neutron scattering from islands on a lamellar film
 Phys.B, **276 - 278**, 355 (2000)
- B. Toperverg, V. Lauter-Pasyuk, H. Lauter, O. Nikonov, D. Ausserr, Y. Gallot
Morphology of off-specular neutron scattering pattern from islands on a lamellar film
 Phys.B, **283**, 60 - 64 (2000)

- B. Toperverg, O. Nikonov, V. Lauter-Pasyuk, H. Lauter
Towards 3D polarization analysis in neutron reflectometry
 Physica B, 2000, in print
- V. Ustinov, M.A. Milyaev, L. Romashev, T. Krinitsina, E. Kravtsov, V. Lauter-Pasyuk, H.J. Lauter
In-plane magnetization anisotropy of Fe/Cr superlattices with biquadratic exchange coupling
 J Magn Magn Mater, 2000, in print
- A. Vix, P. Müller-Buschbaum, W. Stocker, M. Stamm, J. P. Rabe
Crossover between dewetting and stabilization of ultrathin liquid crystalline polymer films.
 Langmuir **16**, 10456 (2000)
- J. Wiedersich
Quasi-elastische Lichtstreuung an Gläsern
 Doktorarbeit, Universität Bayreuth (2000)
- J. Wiedersich, N. V. Surovtsev, V. N. Novikov, E. Rössler, A. P. Sokolov
Light scattering spectra of fast relaxation in silica and $\text{Ca}_{0.4}\text{K}_{0.6}(\text{NO}_3)_{1.4}$ glasses
 Phys. Rev. B, submitted
- J. Wiedersich, N. V. Surovtsev, E. Rössler
A comprehensive light scattering study of the glass former toluene
 J. Chem. Phys., **113**, 1143 (2000)
- J. Wiedersich, S. V. Adichtchev, E. Rössler
Spectral Shape of Relaxations in Silica Glass
 Phys. Rev. Lett. **84**, 2718 (2000) and cond-mat/9910347
- J. Wuttke, M. Ohl, M. Goldammer, S. Roth, U. Schneider, P. Lunkenheimer, R. Kahn, B. Rufflé, R. Lechner, M. A. Berg
Propylene Carbonate Reexamined: Mode-Coupling β Scaling without Factorisation ?
 Phys. Rev. E **61**, 2730 (2000)
- J. Wuttke
Self-Absorption Coefficient for Tubular Samples — Erratum and Addendum to Physica B 266, 112 (1999).
 Physica B **292**, 194 (2000)
- J. Wuttke
Fast relaxation in viscous liquids.
 Festkörperprobleme: Advances in Solid State Physics, Bd. 40, hrsg. von B. Kramer, Vieweg Braunschweig (2000)
- J. Wuttke
Multiple-scattering effects on smooth neutron scattering spectra.
 Phys. Rev. E **62**, 6531 (2000)

8.2 Poster

W. Doster, M. Diehl, H. Schober, W. Petry und J. Wiedersich,
Effect of Pressure Denaturation on Molecular Motions of Myoglobin
International High Pressure Conference in Kyoto, Japan. 27. - 30. 11. 2000

W. Doster, M. Diehl, W. Petry, C. Pfister and H. Schober
Time-Resolved Mean Square Displacements of Protein-Water Hydrogens
European. Biophysics. Congress. in Mnchen: 9. - 13. 9. 2000

W. Doster and M. Diehl,
Elastic Resolution Spectroscopy
QENS, International Workshop on Quasielastic Neutron Scattering in Edinburgh,
Schottland: 30.8. - 3. 9. 2000

M. Goldammer, M. Köppe, S. Longeville, C. Losert, P. Lunkenheimer, W. Petry,
U. Rauch, S. Roth, H. Schober, J. Wuttke
Schnelle Dynamik in Calcium-Rubidium-Nitrat
Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft Regensburg 27. - 31. 3.
2000

J. S. Gutmann, P. Müller-Buschbaum, M. Stamm
Interfacial and buried morphologies of ultra-thin polymer blend films
Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft Potsdam, März 2000

J. S. Gutmann, P. Müller-Buschbaum, C. Lorenz-Haas, R. Weidisch, S. Cunis, G. von
Krosigk, R. Gehrke, M. Stamm
Interfacial and buried morphologies of ultra-thin polymer blend films
HASLAB User Meeting Hamburg, Januar 2000

T. Ittner, P. Müller-Buschbaum, W. Petry
Surface controlled tack of polymers
Internat. Konferenz Polymerwerkstoffe 2000 Halle, September 2000

T. Ittner, P. Müller-Buschbaum, W. Petry
Control of surface morphologies in blend films
Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft Potsdam, März 2000

I. Köper W. Petry, M.-C. Bellissent-Funel
it Influence of Trehalose on the dynamics of a protein : the C-phycocyanin
Journées de la Diffusion Neutronique 9
Colleville-sur-mer, 22. - 26. 3. 1999

I. Köper W. Petry, M.-C. Bellissent-Funel
it Influence of Trehalose on the dynamics of a protein : the C-phycocyanin
Multi-scales dynamics in soft matter and biophysics
CNRS-Summer school, Cargese, 3.-15.7.2000

- I. Köper W. Petry, M.-C. Bellissent-Funel
 it Influence of Trehalose on the dynamics of a protein : the C-phycocyanin
 Eurobiophysics 2000
 München, 9.-13.9.2000
- E. Kravtsov, V. Lauter-Pasyuk, H.J. Lauter, B. Toperverg, O. Nikonov, L. Romashev, M. Mylyaev, A.V. Petrenko, V. Ustinov
Interface formation and magnetic ordering in Fe/Cr hybrid nanostructures
 International workshop Polarized Neutrons for Condensed Matter Investigations PP-NCMI' 2000, St Petersburg 19 -24 June 2000
- T. Krinitsina, E.. Kravtsov, N. Kurtina, V. Lauter-Pasyuk, H. Lauter, L. Romashev, A. Semerikov, B. Toperverg, V. Tsurin, V. Ustinov
Crystalline and magnetic structure of non-collinear Fe/Cr multilayers
 16th International Colloquium on magnetic films and surfaces, Natal. Brasil 13-18 August 2000
- H. Leyser and W. Doster
Time-resolved enthalpy measurements of light-induced reactions by optical interferometry
 European. Biophysics. Congress. in München 9. - 13. 9. 2000
- H.J. Lauter, B. Toperverg, O. Nikonov, E. Kravtsov, M.A. Milyaev, L. Romashev, V. Ustinov, A.V. Petrenko, V. Lauter-Pasyuk
Magnetic ordering in Fe/Cr hybrid nanostructures
 International conference on magnetism ICM 2000, Recife, Brasil August 6-11, 2000.
- V. Lauter-Pasyuk, H.J. Lauter, B. Toperverg, O. Nikonov, E. Kravtsov, A.V. Petrenko, L. Romashev, V. Ustinov
Interface formation in hybrid nanostructures
 16th International Colloquium on magnetic films and surfaces, Natal. Brasil 13-18 August 2000
- S. Longeville, J. M. Zanotti, M.-C. Bellissent-Funel and S. H. Chen
A neutron Spin echo Study of the dynamics of supercooled water
 Gordon Conference "Water and Aqueous solutions" 02. - 06. 8. 2000
- C. Lorenz-Haas, T. Ittner, J. Kraus, B. Mahltig, S. Cunis, G. von Krosigk, R. Gehrke, P. Müller-Buschbaum, C. Creton, M. Stamm
Adhesion and failure mechanisms at polymer interfaces
 Internat. Konferenz Polymerwerkstoffe 2000 Halle, September 2000
- C. Lorenz-Haas, P. Müller-Buschbaum, A. Meyer, R. Döhrmann, C. Creton, M. Stamm
Adhesion tests and structure formation in the plastic zone
 HASYLAB User Meeting Hamburg, Januar 2000
- C. Lorenz-Haas, P. Müller-Buschbaum, C. Creton, M. Stamm
Measurement of correlation between adhesion and interdiffusion of polymers
 DECHEMA Workshop Haftung - Enthaftung in technischen Systemen Frankfurt, Mai 2000

- T. Ittner, P. Müller-Buschbaum, W. Petry
Surface controlled tack of polymers
 Internat. Konferenz Polymerwerkstoffe 2000 Halle, September 2000
- C. Lorenz-Haas, T. Ittner, J. Kraus, B. Mahltig, S. Cunis, G. von Krosigk, R. Gehrke,
 P. Müller-Buschbaum, C. Creton, M. Stamm
Adhesion and failure mechanisms at polymer interfaces
 Internat. Konferenz Polymerwerkstoffe 2000 Halle, September 2000
- B. Mahltig, P. Müller-Buschbaum, R. Jerome, M. Stamm
Adsorption behaviour of polyampholyte blockcopolymers
 Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft Potsdam, März 2000
- A. Meyer, S. Roth, W. Petry
Relaxation and Diffusion in Glas-Forming Metallic Liquids
 DIMAT 2000 Paris, 17. – 21. Juli 2000
- P. Müller-Buschbaum, C. Cassignol, G. Schreyeck, C. Lorenz-Haas, M. Stamm,
 S. Cunis, G. von Krosigk, R. Gehrke, W. Petry
Dewetting of confined polymer films
 HASYLAB User Meeting Hamburg, Januar 2000
- P. Müller-Buschbaum, T. Ittner, O. Wunnicke, M. Wolkenhauer, M. Stamm, W. Petry,
 D. Smilgies
Long range correlation in thin polymer films
 ESRF User meeting Grenoble, Februar 2000
- P. Müller-Buschbaum, T. Ittner, W. Petry
Abhängigkeit des Haftvermögens dünner Polymerfilme von der Oberflächenmorphologie
 DECHEMA Workshop Haftung - Enthaftung in technischen Systemen Frankfurt,
 Mai 2000
- I. Sergueev, T. Asthalter, H. Franz, W. Petry, K. Messel, P. Härter, A. Huwe
Glass dynamics in confined geometries using quasielastic nuclear forward scattering
 Workshop on Dynamics in Confinement, ILL, Grenoble, 26. - 29. 1. 2000
- I. Sergueev, T. Asthalter, H. Franz, W. Petry, K. Messel, P. Härter, A. Huwe
Glass dynamics in confined geometries using quasielastic nuclear forward scattering
 Workshop on Structure and Dynamics of the Liquid and Glassy States, ESRF, Grenoble, 21. - 22. 5. 2000
- I. Sergueev, T. Asthalter, H. Franz, W. Petry, K. Messel, P. Härter, A. Huwe, G. V. Smirnov
Glass dynamics in confined geometries using quasielastic nuclear forward scattering
 Jahrestagung der Deutschen Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie, Würzburg, 30. 5. - 1. 6. 2000
- H. Thiess, B. Sepiol, G. Vogl, J. Korecki, O. Leupold, I. Sergueev, T. Asthalter, W. Petry, R. Ruffer

Probing Self Diffusion in Crystalline and Glassy Solids by Nuclear Resonant Scattering of Synchrotron Radiation

ESRF Science Days, Annecy, 24. - 25. 5. 2000

B. Toperverg, O. Nikonov, V. Lauter-Pasyuk, H.J. Lauter

Towards 3D polarization analysis in neutron reflectometry

International workshop Polarized Neutrons for Condensed Matter Investigations PP-NCMI' 2000, St Petersburg 19 -24 June 2000

V. Ustinov, M.A. Milyaev, L. Romashev, T. Krinitsina, E. Kravtsov, V. Lauter-Pasyuk, H.J. Lauter

In-plane magnetization anisotropy of Fe/Cr superlattices with biquadratic exchange coupling

International conference on magnetism ICM 2000, Recife, Brasil August 6-11, 2000.

N. Wiele, H. Franz, T. Asthalter, W. Petry

Fe₃Pt, ein Beispiel für Phononenenergieweichen am strukturellen Phasenübergang

Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft Regensburg 27. - 31. 3. 2000

M. Wolkenhauer, P. Müller-Buschbaum, O. Wunnicke, B. Mahltig, J. Roovers, G. Fytas, M. Stamm

Analysis of the structure of adsorbed star polymers

Workshop Surface Science 2000: Self-Organization at Interfaces and in thin films Grenoble, Februar 2000

M. Wolkenhauer, P. Müller-Buschbaum, O. Wunnicke, B. Mahltig, M. Stamm, J. Roovers, R. Cubitt, G. von Krosigk

Analysis of the structure of adsorbed star polymers

Internat. Konferenz Polymerwerkstoffe 2000 Halle, September 2000

O. Wunnicke, P. Müller-Buschbaum, B. Mahltig, W. Häussler, C. Lorenz-Haas, K. Page, A. Meyer, R. Döhrmann, M. Stamm

In-situ observation of the early stages of dewetting

HASYLAB User Meeting in Hamburg, Januar 2000

O. Wunnicke, P. Müller-Buschbaum, M. Stamm

Dewetting and structure formation in polymer films

Internat. Konferenz Polymerwerkstoffe 2000 Halle, September 2000

O. Wunnicke, P. Müller-Buschbaum, M. Stamm

Dewetting and structure formation in thin polymer films

Workshop Surface Science 2000: Self-Organization at Interfaces and in thin films Grenoble, Februar 2000

8.3 Auswärtige Vorträge von Institutsmitgliedern

T. Asthalter, Workshop on Nuclear Resonant Scattering at the DESY X-FEL, Hamburg

Dynamics in soft condensed matter – some perspectives

27. 4. 2000

T. Asthalter, Hasylab-Seminar, Hamburg

Untersuchung der Dynamik kondensierter Materie durch Röntgenstreuung – Kernresonanz und Comptonstreuung

25. 5. 2000

T. Asthalter, ESRF Experiments Division Seminar, Grenoble

Quasielastic Nuclear Forward Scattering – A Novel Tool to study Glass Dynamics in Confined Geometries and under Pressure

23. 10. 2000

T. Asthalter, BMBF-Verbundtreffen, Hamburg

Quasielastische kernresonante Streuung an Gläsern

10. 10. 2000

W. Doster, NMR- Frühjahrstreffen in Lehnin

Hydratwasser in Proteinen

17.-20. 3. 2000

W. Doster, Biophysical Annual Symposium on Frontiers in Biophysics, in Hsinchu, Taiwan

Terahertz Spectroscopy of Proteins

3.-6. 5. 2000

W. Doster, QENS 2000, International Workshop on

Quasielastic Neutron Scattering in Edinburgh, Schottland

Elastic Resolution Spectroscopy, a new method to study the dynamics in small biological samples

30.8. -2.9. 2000

W. Doster, Laboratoire Leon Brillouin in Saclay, Paris

Intramolecular and surface-coupled molecular motions in proteins

6. 7. 2000

W. Doster, Glastag 2000 in München

Zur Protein-Glas Analogie

20.6. 2000

W. Doster, BENSC, Hahn Meitner Institut in Berlin

Intramolekulare und Oberflächen-gekoppelte Dynamik in Proteinen

17.7. 2000

W. Doster, European Molecular Biology Lab in Grenoble

Intramolecular and surface-coupled protein motions

30.10. 2000

J. S. Gutmann, P. Müller-Buschbaum, M. Stamm, 10th IACIS Meeting in Colloid and Interface Science, Bristol

Grazing incidence scattering and scanning force microscopy study of the interfacial and internal structure of thin polymer blend films

28.7.2000

V. Lauter-Pasyuk, H. Lauter, M. Lorenz, A. Petrenko, O. Nikonov, V. Aksenov, P. Leiderer

Flux line row transition in YBa₂Cu₃O₇ superconducting thin films in a parallel field
International workshop Polarized Neutrons for Condensed Matter Investigations PP-NCMI' 2000, St Petersburg 19 -24 June 2000

V. Lauter-Pasyuk, H.J. Lauter, B. Toperverg, O. Nikonov, E. Kravtsov, M.A. Milyaev, L. Romashev, V. Ustinov *Magnetic neutron off-specular neutron scattering for the direct determination of the coupling angle in exchange coupled multilayers*
International conference on magnetism ICM 2000, Recife, Brasil August 6-11, 2000.

V. Lauter-Pasyuk, H.J. Lauter, B. Toperverg, O. Nikonov, E. Kravtsov, A.V. Petrenko, M.A. Milyaev, L. Romashev, V. Ustinov *Magnetic off-specular neutron scattering from Fe/Cr multilayers*
16th International Colloquium on magnetic films and surfaces, Natal. Brasil 13-18 August 2000

S. Longeville, Meeting "International Workshop on Neutron Spin Echo", Berlin
Neutron Resonance Spin Echo spectroscopy : application to Biology and condensed matter physics
16. 10. 2000

A. Meyer, Forschungsreaktor München II.
Das Neutronenrückstreuenspektrometer am NIST Center for Neutron Research
4. 2. 2000

A. Meyer, Arbeitskreistagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Jena.
Fluktuation und Relaxation in metallischen Glasbildnern
9. 10. 2000

P. Müller-Buschbaum, J. S. Gutmann, M. Stamm, W. Petry, Workshop Surface Science 2000: Self-Organization at Interfaces and in thin films, Grenoble
Dewetting of confined polymer films
12.2.2000

P. Müller-Buschbaum, J. S. Gutmann, M. Stamm, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Potsdam
Dewetting of confined thin polymer films
14.3.2000

P. Müller-Buschbaum, KFS-Kolloquium, Berlin
Polymere Strukturen
7.7.2000

P. Müller-Buschbaum, Kolloquium der Universität Freiburg
Entnetzung räumlich beschränkter Polymerfilme
18.7.2000

P. Müller-Buschbaum, O. Wunnicke, J. S. Gutmann, M. Wolkenhauer, M. Stamm, W. Petry, Internationale Konferenz Polymerwerkstoffe 2000, Halle
Dewetting of ultrathin polymer films
26.9.2000

S. Roth, ESRF Grenoble

The cold time-of-flight spectrometer at the FRM-II

12. 12. 2000

S. Roth, FRM

Das kalte Flugzeitspektrometer am FRM-II

Juni 2000

S. Roth, TUM

Beschleuniger gestützte Reaktoren - Waste Burning

Feb. 2000

W. Schirmacher, Spring Meeting of the European Physical Society, Montreux, 13.-17.3. 2000

Vibrational excitations of disordered solids and the "boson peak"

13. 3. 2000

W. Schirmacher, Meeting on the dynamics of glasses at low temperatures, Dresden, 3.-12. 10. 2000

Vibrational excitations of disordered solids

5. 10. 2000

J. Wiedersich, S. V. Adichtchev, N. V. Surovtsev, V. N. Novikov und E. Rössler , DPG-Frühjahrstagung Regensburg

Relaxationen in Gläsern: Ergebnisse aus quasi-elastischer Lichtstreuung

März 2000

J. Wiedersich, Seminar „Spezielle Probleme der Vielteilchenphysik“, TU München

Light scattering: vibrations in glasses

25.07.00

O. Wunnicke, P. Müller-Buschbaum, M. Stamm, 10th IACIS Meeting in Colloid and Interface Science, Bristol

Dewetting and structure formation in thin polymer films

25.7.2000

O. Wunnicke, P. Müller-Buschbaum, M. Stamm, 10th IACIS Meeting in Colloid and Interface Science, Bristol

Dewetting and structure formation in thin polymer films

25.7.2000

J. Wuttke, Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik der DPG, Regensburg

Wie erstarrt eine zähe Flüssigkeit ?

27.-31. 3. 2000

J. Wuttke, Gemeinsamer Workshop des DEGA-Fachausschusses Physikalische Akustik und des Fachverbandes Akustik der DPG, Bad Honnef

Informationen aus dem Untergrund. Brillouin- und depolarisierte Streuung an zähen Flüssigkeiten.

4.-6. 9. 2000

8.4 Eingeladene Vorträge an unserem Institut

Dr. Olaf Bleibaum, Univ. Magdeburg
Dispersive energy transport in bandtails of amorphous semiconductors
13. 01. 2000

Prof. Dr. Donald Dingwell, Univ. Bayreuth
Geological constraints an explosive volcanism
13. 01. 2000

Dr. rer. nat. Michael Ege, MPI Stuttgart
Relaxationsprozesse in amorphem ZrCuNiAl im Bereich der Glasübergangstemperatur
25. 02. 2000

Prof. Isao Sakamoto, Dr. Tanoue, Ibaraki, Japan
Electrotechnical Laboratory
R20. 3. 2000

Dr. Thomas Thurn-Albrecht, Universität Freiburg
Electric Field Induced Fluctuations in Block Copolymers
16.6.2000

Dr. Gerald Hinze, Univ. Mainz
Dynamik in unterkühlten Flüssigkeiten: Optische Experimente in der Zeitdömäne
30. 06. 2000

Dr. Helmut Schober, ILL Grenoble
Zellulose: Struktur und Dynamik eines natürlichen Verbundstoffs
20. 07. 2000

8.5 Diplomarbeiten

Frank, Martin
Brillouin light scattering of propylene carbonate
November 2000

Ittner, Thilo
Zusammenhang zwischen Oberflächenmorphologie und Haftvermögen von Polymer-Grenzflächen
November 2000

8.6 Doktorarbeiten

Lippok, Rüdiger
Nichtresonante Vibrating-Reed-Experimente an metallischen Gläsern
Juli 2000

8.7 Mitarbeiter und Gäste

Leitung: Univ.-Prof. Dr Winfried Petry;
Prof. Dr. Helmut Schober (Vertretung von Herrn Prof. Petry)

Wissenschaftliche Mitarbeiter:

Dr. Tanja Asthalter
PD Dr. habil. Wolfgang Doster
Dr. Stéphane Longeville
Dr. Valeria Lauter-Pasyuk
Dr. Andreas Meyer
Dr. Peter Müller-Buschbaum
Dr. Jürgen Neuhaus
PD Dr. habil. Walter Schirmacher
Dr. Johannes Wiedersich
PD Dr. habil. Joachim Wuttke
Dr. Achim Zirkel

Doktoranden:

Matthias Goldammer
Ingo Köper
Kiril Messel
Stephan Roth
Ilya Sergueev
Sabine Wiebel
Nils Wiele

Diplomanden:

Thilo Ittner
Martin Frank
Markus Pöhlmann
Ulrich Häberle

Werkstudenten:

Johannes Bolten
Ulrich Grasemann
Stefan Kudera

Martin Stadlbauer
Christina Thöne

Nichtwissenschaftliche Mitarbeiter:

Helga Harlandt
Edith Lubitz
Dieter Müller
Cornelia Simon

Gäste:

Dr. Peter Link
Prof. Dr. Otto Schärpf
Prof. Dr. Gennadi Smirnov