

Vorschlag für Bachelor-oder Masterarbeiten in der Professur „Theoretische Physik - Simulation neuer Materialien“

Die hier vorgestellten Arbeiten befassen sich mit der Untersuchung von Materie durch die sogenannte Raman-Spektroskopie. Diese wird u.a. eingesetzt zur Analyse von Nanopartikeln und Proteinen und von Materialeigenschaften bei Halbleitern. Ein weiterer Anwendungsbereich ist die Untersuchung von Kunstwerken (Farbe, Pigmente, Lack) zum Beispiel im Rahmen einer Restaurierung.

Die Ramanstreuung beruht im allgemeinen auf der Wechselwirkung des einfallenden Lichts mit Gitterschwingungen. Die Frequenz des Lichts wird dadurch erhöht oder erniedrigt. Eine solche Wechselwirkung ist allerdings viel unwahrscheinlicher als eine elastische Streuung von Licht an Materie, die sogenannte Rayleigh-Streuung, bei der das ausfallende Licht dieselbe Frequenz hat wie das einfallende. Das Raman-Signal ist deshalb um einen Faktor 10000 – 1 Million schwächer als das Rayleigh-Signal.

Infolgedessen ist beispielsweise die Ramanspektroskopie an einzelnen Atome oder Molekülen nicht ohne weiteres möglich und die gezielte Verstärkung des Signals ist ein Thema von großem Interesse. Hierzu kann man Nanostrukturen verwenden, die die Lichtintensität räumlich variieren und dadurch an Orten hoher Lichtintensität das Ramansignal um bis zu 15 Größenordnungen verstärken können. Dies ermöglicht die Detektion von Raman-Spektren einzelner Nanostrukturen und dadurch Rückschlüsse auf chemische Intensität und Größe derselben. Gebräuchlich sind in diesem Bereich die Methoden der „Surface Enhanced Raman Spectroscopy“ (SERS) und der „Tip Enhanced Raman Spectroscopy“ (TERS).

Zur Auswertung der Ergebnisse ist eine genaue Kenntnis des Lichtfelds in der Nanostruktur von großer Wichtigkeit. Dieses lässt sich beispielsweise mithilfe der kommerziell erhältlichen Software Comsol berechnen. Dies soll in Zusammenarbeit mit der Gruppe von Prof. Dr. Peter Klar (Justus-Liebig-Universität Gießen) im Rahmen von Bachelor- und Masterarbeiten erfolgen. Die Gruppe von Prof. Klar beschäftigt sich seit längerem mit dem Thema und verfügt insbesondere auch über die Ausstattung und das Fachwissen für eine Herstellung der oben erwähnten Mikrostrukturen und eine Messung des Raman-Signals. Die Simulation der Mikrostrukturen bietet deshalb die Möglichkeit der steten Rückkopplung mit dem Experiment, d.h. es besteht die Möglichkeit, eigenen Ideen einzubringen und Ergebnisse der Simulationen z.B. bezüglich einer möglichen Verbesserung von Strukturen einfließen zu lassen.

Eine Definition der zu berechnenden Strukturen erfolgt zeitnah zu Beginn der Arbeit. Die Wahl der Strukturen gibt den Fokus des Forschungsinteresses zu diesem Zeitpunkt wieder.

Prof. Dr. Angela Thraenhardt

Professorin für „Theoretische Physik – Simulation neuer Materialien“

Kontakt am besten über email: angela.thraenhardt@physik.tu-chemnitz.de