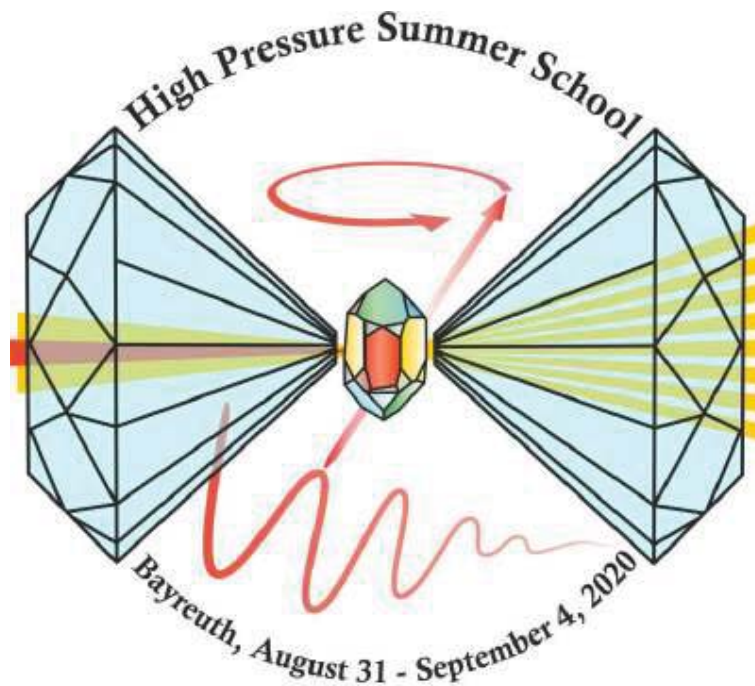


# INTERNATIONALE HOCHDRUCK - SOMMERSCHULE 2020 DER IUCR/DGK IN BAYREUTH

EINFÜHRUNG IN NEUE METHODEN DER ATOMAREN UND ELEKTRONISCHEN  
STRUKTURFORSCHUNG UNTER HOHEM DRUCK



Vom 31. August bis zum 4. September 2020 fand in Bayreuth die internationale Sommerschule über „neuartige Methoden zur Untersuchung atomarer und elektronischer Strukturen unter hohem Druck“ statt (siehe <https://www.dubrovinskaia.uni-bayreuth.de/en/High-Pressure-Summer-School-2020>). Sie wurde von der IUCr (durch die *IUCr Commission on High Pressure*, CHP) und von der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) genehmigt. Wir erwarteten, unsere Studenten aus der ganzen Welt an der Universität Bayreuth zu empfangen. Die COVID-19-Pandemie hinderte die Teilnehmer jedoch daran, sich im Herzen Bayerns zu versammeln, aber sie unterstützten enthusiastisch die Idee der Organisatoren, über „Zoom“ teilzunehmen. Die Schule war ein großer Erfolg und wir glauben fest daran, dass sie zu einer jährlichen Veranstaltung werden wird.

Die Idee der Sommerschule entstand aus dem Wunsch, die Erfahrungen zu teilen, die innerhalb der Dubrovinsky-Dubrovinskaia-Gruppe (siehe <https://www.dubrovinskaia.uni-bayreuth.de>) gesammelt wurden, deren Forschung während des letzten Jahrzehnts hauptsächlich auf die Entwicklung der Hochdruck-Einkristall-Röntgendiffraktometrie (sc-XRD) und der magnetischen Kernresonanz (NMR) in Diamant-Stempelzellen (DAC) ausgerichtet war. Unsere Anstrengungen ermöglichen sc-XRD- und NMR-Experimente bei hohen Drücken von über ~180 GPa und gleichzeitig Temperaturen von mehreren tausend Grad. Dies hat zu bemerkenswerten Ergebnissen in der Festkörperphysik, Chemie und Materialwissenschaft unter extremen Bedingungen geführt.

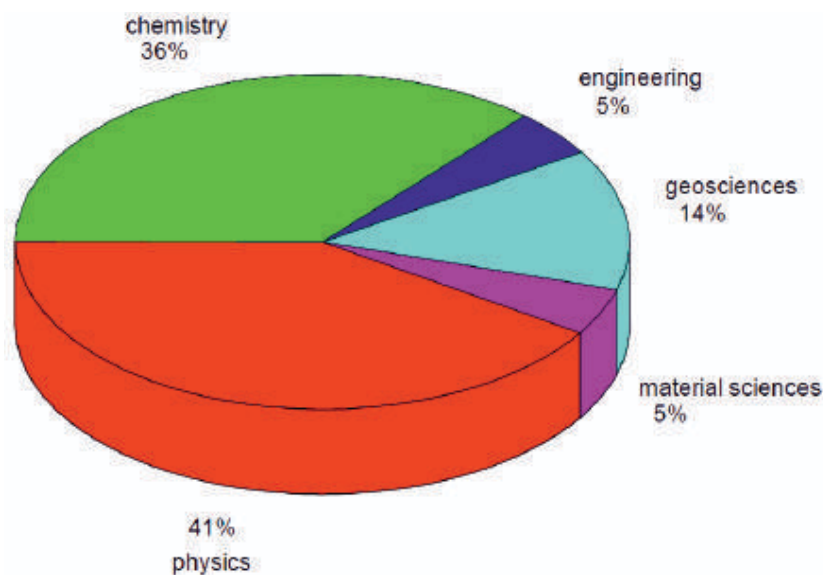


*Das Bayreuther Team aus Vortragenden und Studenten (von links nach rechts und von der hinteren Reihe nach vorne): Timofey Fedotenko, Saiana Khandarkhaeva, Dominique Laniel, Thomas Meier, Kirill Vlasov, Sergey Ovsyannikov, Alena Krupp, Andrey Aslandukov, Alena Aslandukova, Natalia Dubrovinskaia, and Leonid Dubrovinsky (Achim Schaller ist nicht auf dem Foto).*

Die Schule, deren Organisation von Dominique Laniel und Thomas Meier vorangetrieben wurde, zielte darauf ab, Wissenschaftlern im frühen Karrierestadium (Masterstudenten und Doktoranden, Postdocs) sowie Wissenschaftlern, die auf dem Gebiet der Hochdruckforschung tätig sind, eine Einführung in neuartige Methoden zur Untersuchung atomarer und elektronischer Strukturen bei hohen Drücken in einer Diamant-Stempelzelle zu geben. Der Schwerpunkt wurde auf die neuen Entwicklungen gelegt, die auf dem Gebiet der Hochdruck-sc-XRD und NMR bahnbrechend sind.

Ein Überblick über die notwendigen theoretischen und methodischen Grundlagen, einschließlich der DAC-Vorbereitung und der Strategie der Experimente, wurde durch Vorträge mit zahlreichen Demonstrationen, praktischen Übungen und Schritt-für-Schritt-Tutorials vermittelt. Am Ende des Kurses sollten die Teilnehmer in der Lage sein, grundlegende Hochdruck-sc-XRD- und NMR-Experimente sowie Datenverarbeitung und -interpretation durchzuführen.

Die Sommerschule wurde online von 25 Teilnehmern aus 7 Ländern besucht: Deutschland (8), Indien (6), Frankreich (3), China (3), Italien (2), Großbritannien (2) und Slowenien (1). Darunter befanden sich 11 Doktoranden, sieben Postdoktoranden, 2 Masterstudenten und 5 wissenschaftliche Mitarbeiter. Sie wurden von 12 Dozenten und Dozentinnen unterrichtet, von denen zehn entweder gegenwärtige oder ehemalige Mitglieder unserer Bayreuther Gruppe sind.



*Akademischer Hintergrund der Teilnehmer*

Der Lehrplan der Sommerschule umfasste 30 Unterrichtsstunden (6 Stunden pro Tag), die sich wie folgt verteilen: Der sc-XRD-Teil von 23 Stunden beinhaltete Kristallographie-Vorlesungen (10 Stunden), die Themen von den Grundlagen der Kristallographie und Röntgenbeugung bis zu fortgeschrittenen Themen der Datenverarbeitung und Software abdeckten, Vorlesungen über die technischen Aspekte der Arbeit mit DACs, einschließlich eines historischen Einblicks (3 Stunden), und Vorlesungen über Synchrotronaufbauten (2 Stunden); zwei Stunden waren Anwendungsfällen gewidmet, die einen Einblick in ein breites Spektrum wissenschaftlicher Probleme in Physik, Chemie und Materialwissenschaften geben sollten, die mit den während der Schule gelehrt Methoden behandelt werden konnten. Die sc-XRD-Praxissitzungen umfassten 6 Stunden Übungen (6 verschiedene Praxissitzungen wurden von vier Ausbildern für 4 Gruppen von Studenten parallel geleitet). Der NMR-Teil von 7 Stunden umfasste NMR-Vorträge (4 Stunden) und praktische Übungen (3 Stunden) für drei Gruppen zu verschiedenen Zeiten.

Zweifelsohne unterscheidet sich eine Schule via Zoom sehr von einem Workshop vor Ort. Wie von vielen Dozenten hervorgehoben wurde, stellte das Fehlen eines unmittelbaren Feedbacks des Publikums, insbesondere während der „Lehr“-Vorträge, eine wesentliche Schwierigkeit dar. Interessanterweise besuchte die Mehrheit der Dozenten auch die Vorträge der anderen Dozenten. Für diejenigen, die von der Ostküste der USA aus online zugeschaltet waren, begann die Schule mitten in der Nacht (um 2:30 Uhr), aber, wie einer der Teilnehmer schrieb: „sie genossen die Schule sehr, trotz der Zeitzoneunterschiede zu Deutschland“.

Unter Berücksichtigung der großen Vielfalt an Hintergründen und Vorkenntnissen der Teilnehmer war das Programm der Sommerschule sehr vielfältig. Die Vorträge reichten von den Grundlagen der Symmetrie und NMR über sehr komplexes Material für fortgeschrittene Kristallographen bis hin zu interessanten Fällen aus realen Experimenten. Die Mehrheit der Teilnehmer bewertete diese Breite sehr positiv: Einerseits konnte jeder dem seinem eigenen Wissen entsprechenden Material folgen und es somit verbessern. Andererseits konnte man das über das eigene Niveau hinausgehende Material sehen und es als nächstes Lernziel betrachten.

Eine exemplarische Rückmeldung der Studierenden: „Alle Referenten haben ihre Vorträge auf eine ‚nicht langweilige Art und Weise‘ gehalten, dafür möchte ich ihnen meinen besonderen Dank aussprechen.“

Wir glauben, dass unsere Erfahrungen auch für andere Kollegen nützlich wären, die beabsichtigen, in Zukunft Online-Schulen und -Workshops durchzuführen. Wir haben einige technische Empfehlungen zusammengefasst, die Online-Veranstaltungen noch effizienter machen könnten:

- Es wäre sehr hilfreich, wenn die Teilnehmer alle Materialien und Software mindestens eine Woche vor Kursbeginn ohne Hektik und Stress herunterladen könnten.
- In der Woche vor dem Kurs würden wir vorschlagen, eine/zwei Online-Sitzungen zum Testen der Software zu organisieren: Das würde helfen, mögliche Probleme im Voraus zu beseitigen und wertvolle Zeit zu Beginn des Kurses zu sparen.
- Es sollte im Voraus festgelegt werden, dass die Verwendung eines großen Monitors oder zweier getrennter Monitore während der praktischen Übungen eine wichtige technische Voraussetzung ist, um die praktischen Übungen effizient durchführen zu können. Da mehrere Programme parallel laufen müssen und man schnell zwischen dem gemeinsamen Bildschirm des Dozenten und den eigenen laufenden Programmen hin- und herschalten muss, reicht ein einziger kleiner Monitor nicht aus.
- Die Zeit für die Hands-On-Sitzungen sollte großzügiger eingeplant werden; ein häufiger Vorschlag für unseren sc-XRD-Teil war, sie um den Faktor 1,5 zu erhöhen, d. h. 9 statt 6 Stunden Hands-On zu planen, was bedeutet, dass fast 40 % der Unterrichtszeit für Hands-On eingeplant werden sollten.
- Man sollte sich um die Pausen zwischen den Vorträgen kümmern. Eine angemessene Pausenzeit (bis zu 15 Minuten) würde es nach Meinung der Teilnehmer erlauben, über den gerade beendeten Vortrag nachzudenken und sich auf den folgenden vorzubereiten.

Vortragende: Natalia Dubrovinskaia, Dominique Laniel, Thomas Meier, Konstantin Glazyrin, Saiana Khandarkhaeva, Achim Schaller, Vitali Prakapenka, Stella Chariton, Elena Bykova, Sergey Ovsyannikov, Maxim Bykov, Karen Friese, Leonid Dubrovinsky



*Die Schule ist vorbei. Danke an alle und auf Wiedersehen!*

Natalia Dubrovinskaia, Dominique Laniel, Thomas Meier und Leonid Dubrovinsky, Bayreuth