

Bachelor-Themen 2019

Prof. Dr. Michael Bonitz
Institut für Theoretische Physik und Astrophysik
Lehrstuhl “Statistische Physik”

December 29, 2018

Abstract

Die Themen für Bachelor-Arbeiten ergeben sich aus aktuellen Forschungsprojekten des Lehrstuhls, für die in der Regel Drittmittelprojekte für Doktorandenstellen eingeworben wurden. Die Themen sind anspruchsvoll, so dass bei erfolgreichem Abschluss innerhalb eines Jahres ein Beitrag auf einer Fachkonferenz vorgesehen ist. Darüber hinaus wird eine wissenschaftliche Publikation angestrebt. Alle Themen basieren auf aktuellen Original-Publikationen unserer Gruppe, und es existieren ausführliche Einführungen in unseren Büchern, die zu Beginn der Bachelorarbeit bereitgestellt werden. Für Simulationsthemen wird in der Regel ein entsprechendes Computerprogramm bereitgestellt, und in den Winterferien erfolgt eine Einführung in die Thematik und in die Simulationen.

1. Energieverlust von Ionen in Graphen-Fragmenten

Zusammenfassung: Energiereiche geladene Teilchen spielen eine große Rolle, wenn Festkörper in Kontakt mit einem Plasma kommen. Der Energieverlust (stopping power) entscheidet über die Aufheizung des Materials, kann aber auch zu Anregung von Wellen oder zur Umverteilung von Elektronen führen. In einem korrelierten Material (wie etwa kleine Graphen-Fragmente) überträgt sich die Störung dabei in komplexer Weise von einem Gitterplatz auf dessen Nachbarn. Ziel der Bachelorarbeit ist es, den Energieverlust für Graphenfragmente unterschiedlicher Größe und Form zu untersuchen. Als theoretische Methode werden Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen (NEGF) verwendet. Grundlage: Phys. Rev. B **94**, 245118 (2016), Maximilian Rasmussen, Bachelorarbeit 2017 und Balzer et al., Phys. Rev. Lett. **121**, 267602 (2018).

Thema 1.I: Zeitabhängige NEGF-Simulationen für ein Graphen-Fragment unter Einfluss einer thermischen Ionenverteilung.

Thema 1.II: NEGF-Simulationen der Grundzustandseigenschaften von Graphen-Fragmenten unterschiedlicher Form und Größe.

2. Thermodynamische Eigenschaften “Warmer Dichter Materie”.

Zusammenfassung: “Warme Dichte Materie” ist ein exotischer Zustand, der im Inneren von Planeten und Sternen, sowie bei der Kompression von

Festkörpern mit hochintensiver Laserstrahlung erzeugt wird. Dabei ist der Druck so hoch (bis zu 100-fache Festkörperdichte), dass–wegen des Pauliprinzips der Elektronen–Atome und Moleküle ionisiert werden. Die starke Coulombwechselwirkung, Quanten- und Spineffekte, die simultan zu berücksichtigen sind, erschweren die theoretische Behandlung enorm. Darüber hinaus existiert für Fermionen das sogenannte Vorzeichenproblem, dass Simulationen extrem verkompliziert. Ein erfolgreicher Zugang zu diesen Problemen basiert auf Feynman’s Pfadintegral-Idee, in Kombination mit Monte Carlo-Verfahren.

Wir haben in den letzten zwei neue Quanten-Monte-Carlo(PIMC)-Verfahren entwickelt–Permutation Blocking PIMC (PB-PIMC) und Configuration PIMC (CPIMC), deren geschickte Kombination hier entscheidende Durchbrüche ermöglicht hat, s. z.B. Phys. Rev. Lett. **113**, 130402 (2015), Phys. Rev. Lett. **117**, 156403 (2016), Phys. Rev. Lett. **119**, 135001 (2017) und Phys. Rev. Lett. **121**, 255001 (2018).

Ziel der Bachelorarbeit ist es, diese Simulationen kennenzulernen, selbst zu implementieren bzw. auf den wichtigen Fall des zweidimensionalen Elektronengases auszudehnen.

Thema 2.I: Eigene Implementierung von CPIMC-Simulationen für das ideale Elektronengas bei endlichen Temperaturen

Thema 2.II: PB-PIMC-Simulationen für das stark korrelierte 2D Elektronengas bei endlichen Temperaturen

Thema 2.III: CPIMC-Simulationen für das stark entartete 2D Elektronengas bei endlichen Temperaturen

3. Dynamik korrelierter Fermionensystems: Feldoperatoren, Korrelationen, Fluktuationen.

Zusammenfassung: Das Zeitverhalten wechselwirkender Fermionen, die durch eine externe Anregung aus dem Gleichgewicht gebracht werden, stellt enorme Anforderungen an die theoretische Beschreibung. Ein erfolgreicher Zugang basiert auf der zweiten Quantisierung, die auf die exakten Bewegungsgleichungen für die Feldoperatoren führt. Ziel der Bachelorarbeit ist es, diese Theorie kennenzulernen und neue Lösungsmethoden für die Feldgleichung zu finden. Literatur: M. Bonitz, *Vorlesungsskript Quantenstatistik und Quantenfeldtheorie*.