

Bachelor-Themen 2020

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

January 13, 2020

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 einwöchige Einführung in die Thematik und in die Simulationen. Im Sommersemester finden wöchentliche Seminare zu Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen und zu Quanten-Monte Carlo statt.

1. Energieverlust und Neutralisierung von Ionen in korrelierten Festkörpern

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. Gleichzeitig kann das Ion Elektronen aus dem Target ziehen und dadurch (teilweise) neutralisiert werden. In einem korrelierten Material (wie etwa Graphen o. anderen 2D-Strukturen) überträgt sich die Störung dabei in komplexer Weise von einem Gitterplatz auf dessen Nachbarn. Ziel der Bachelorarbeit ist es, den Energieverlust und die Neutralisierung zeitaufgelöst zu untersuchen. Als theoretische Methode werden Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen (NEGF) verwendet. Grundlage: K. Balzer *et al.*, Phys. Rev. B **94**, 245118 (2016), M. Rasmussen, Bachelorarbeit 2017, K. Balzer *et al.*, Phys. Rev. Lett. **121**, 267602 (2018), L. Wulf, Masterarbeit 2019.

2. Anregungsdynamik von Elektronen in einem kurzen Laserpuls

Zusammenfassung: Ein kurzer Laserpuls kann Atome stark anregen bzw. ionisieren. Besonders interessant ist das Verhalten von Mehrelektronenatomen, da sich dort die Anregungsenergie in nicht-trivialer Weise auf

die Elektronen verteilen kann (Mehrfachanregungen, Auger-Prozesse u.a.). Da die zeitabhängige Schrödingergleichung für derartige Probleme in vielen Fällen zu aufwändig ist, haben wir Greenfunktionsverfahren entwickelt, die deutlich effizienter sind. Ziel der Bachelorarbeit ist es, das neue G1–G2-Schema kennenzulernen und auf die Anregungsdynamik von Heliumatomen anzuwenden. Grundlage: N. Schlünzen *et al.*, Phys. Rev. Lett. im Druck (2020), arXiv:1909.11489

- 3. 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, den Pfadintegral-Zugang und diese Simulationen kennenzulernen, selbst zu implementieren und erste Tests zu realisieren.

Thema 3.I: Eigene Implementierung von CPIMC-Simulationen für das ideale Elektronengas bei endlichen Temperaturen und Berechnung des statischen Strukturfaktors

Thema 3.II: PB-PIMC-Simulationen für das stark korrelierte 2D Elektronengas bei endlichen Temperaturen

Thema 3.III: CPIMC-Simulationen für das stark entartete 2D Elektronengas bei endlichen Temperaturen

Thema 3.IV: Erweiterung der Simulationen auf ein Elektron-Ion-Plasma bei endlichen Temperaturen unter Verwendung des Average Atom Modells.