

Bachelor-Themen 2024

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

January 21, 2024

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 und/oder eine wissenschaftliche Publikation angestrebt wird. 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. Als theoretische Einführung werden die Vorlesungen “Quantenstatistik” bzw. Plasmatheorie empfohlen.

1. Anregungsdynamik von Elektronen in zwei-dimensionalen korrelierten Festkörpern.

Zusammenfassung: Nanobänder aus Graphene (GNR) sind finite Cluster aus Kohlenstoff-Monolagen. Ähnlich interessant sind Monolagen aus Übergangsmetall-Dichalcogeniden (TMDCs), die auch in Kiel experimentell untersucht werden. Sie haben ungewöhnliche elektronische Eigenschaften, die von ihrer genauen Geometrie abhängen. Von besonderem Interesse sind topologische Zustände und maßgeschneiderte lokale Zustandsdichten und magnetische Eigenschaften der Elektronen, s. J.-P. Joost *et al.*, Nano Letters **19**, 9045 (2019). Besonders interessant ist es, das Verhalten der Elektronen in diesen Systemen bei externer Anregung – entweder durch einen kurzen Laserpuls oder durch ein hochgeladenes Ion zu untersuchen und mit entsprechenden Experimenten zu vergleichen.

Da die zeitabhängige Schrödingergleichung für derartige Probleme in vielen Fällen zu aufwändig ist, haben wir Greenfunktions-(NEGF-)Verfahren entwickelt, die deutlich effizienter sind. Dabei lösen wir die Keldysh-Kadanoff-Baym-Gleichungen. Als noch effizienter haben sich die G1–G2-Gleichungen – gekoppelte Gleichungen für die Einteilchen- und Zweiteilchen-NEGF herausgestellt, die wir vor kurzem abgeleitet haben, s. N.

Schlünzen *et al.*, Phys. Rev. Lett. **124**, 076601 (2020). Eine ausführliche Einführung ist in der Dissertation von Jan-Philip Joost (CAU 2022) zu finden. Im Rahmen der Bachelor-Arbeit wird ein G1-G2-Code zur Verfügung gestellt, der auf diese Systeme angewendet und ggf. erweitert werden soll. Folgende Themen stehen derzeit zur Auswahl:

- (a) Anwendung des G1-G2-Schemas auf die Wechselwirkung hochgeladener Ionen mit einer Monolage von MoS₂. Untersuchung des Ladungstransfers und der Sekundärelektronen-Emission. Vergleich mit den Experimenten und früheren Simulationen, s. Niggas *et al.*, Phys. Rev. Lett. **129**, 086802 (2022).
- (b) Weiterentwicklung eines zeitlinearen Embedding-Schemas, Ref. Balzer *et al.*, Phys. Rev. B **107**, 155141 (2023), durch Einbeziehung von Korrelationseffekten (analytische Arbeit)
- (c) Anwendung des G1-G2-Schemas auf die Wechselwirkung eines kurzen Laserpulses mit einem finiten Graphen-Cluster, Ref. Joost *et al.*, in Vorbereitung.

2. **Eigenschaften der Ionen in “Warmer Dichter Materie”.**

Zusammenfassung: “Warme Dichte Materie” (WDM) ist ein exotischer Zustand, der im Inneren von Planeten und Sternen, sowie bei der Kompression von Festkörpern mit hochintensiver Laserstrahlung erzeugt wird. Eine wichtige Anwendung ist die Inertialfusion. Dabei ist der Druck so hoch (bis zu 100-fache Festkörperdichte), dass–wegen des Pauliprinzips der Elektronen–Atome und Moleküle (partiell) ionisiert werden. Die stark korrelierten Ionen in WDM lassen sich im Gegensatz zu den Elektronen klassisch beschreiben. Von besonderem Interesse sind die Eigenschaften bei starker Coulomb-Wechselwirkung (hohe Dichte) sowie in einem externen Magnetfeld, aktuelle Resultate und weitere Referenzen sind in Ref. Phys. Rev. Research **4** (1), 013197 (2022) zu finden. Die Eigenschaften der Ionen werden häufig im Rahmen eines Einkomponenten-Plasma Modells beschrieben. Ziel dieser Arbeit ist es, sich mit *klassischen Molekulardynamik-Simulationen* vertraut zu machen und eigenständig Simulationen mit der open-source Software LAMMPS durchzuführen. Dabei werden die Bewegungsgleichungen für mehrere zehntausend Ionen gelöst, und aus ihren Trajektorien Informationen über das Plasma gewonnen.

Betreuung: Priv.-Doz. Dr. Hanno Köhler