

Ab-initio-Berechnung der thermophysikalischen Eigenschaften von Materie unter extremen Bedingungen

In diesem Projekt werden thermophysikalische Eigenschaften von Materie unter hohem Druck (Mbar - Gbar) und hohen Temperaturen (1000 - 100000 K) untersucht. Derart extreme Materiezustände kommen z.B. im Inneren von Großen Planeten und Braunen Zwergen vor, sie können aber auch in Laborexperimenten erzeugt werden. Für die theoretische Beschreibung verwenden wir Quantenmolekulardynamik (QMD)-Simulationen. Hierbei werden die Ionen (klassische Teilchen) mit Hilfe von quantenmechanisch berechneten Kräften (aus Dichtefunktionalrechnungen für das Elektronensystem) propagiert. Mit dieser Methode lassen sich Zustandsgleichungen, strukturelle, optische und Transporteigenschaften der untersuchten Materialien (z.B. H, He, H₂O, NH₃, Be, C) gewinnen.