

First principle simulations of classical and quantum charged-particle systems

Dieses Projekt ist der Untersuchung geladener Teilchen- und Vielteilchensysteme unter dem Einfluss starker Korrelationen sowie intensiver elektromagnetischer Felder gewidmet. Es besteht aus zwei Teilbereichen:

I.) Der Einfluss der Teilchen-Teilchen-Korrelation auf das kollektive Verhalten geladener Teilchensysteme wird im Hinblick auf die Experimente an komplexen (staubigen) Plasmen mit Hilfe von first principle Molekulardynamiksimulationen untersucht. Von besonderem Interesse ist hierbei der Übergang von mesoskopischen zu makroskopischen Ordnungsstrukturen sowie der Einfluss externer Magnetfelder auf Transport- und Welleneigenschaften in zweidimensionalen Monolagen und dreidimensionalen Systemen.

II.) Mit Hilfe von zeitaufgelösten Computersimulationen werden Experimente am Freien-Elektronen-Laser FLASH und bei PETRA III am DESY theoretisch beschrieben und Vorhersagen für künftige Experimente bei XFEL ermöglicht. Im Zentrum steht die Wechselwirkung von Atomen und Molekülen mit intensiver XUV- und Röntgenstrahlung. Die Ergebnisse sollen neue Erkenntnisse auf dem Gebiet der Atomphysik liefern und gleichzeitig das Anwendungspotential der Strahlungsquellen am DESY erweitern. Es werden dazu Methoden der Quantenstatistik (Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen) sowie der zeitabhängigen Schrödingergleichung eingesetzt.