

ITPCP Institut für Theoretische Physik Computational Physics



Computational
Material Science



Quantum Many-
Body Systems



Theoretische
Plasmaphysik



Theoretische
Biophysik

Theoretische
Astrophysik

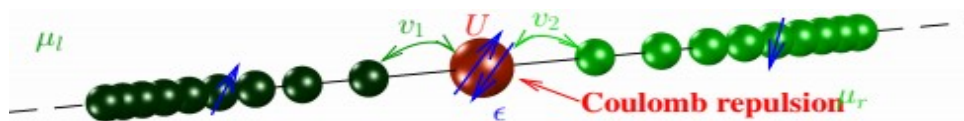


Quantum Many-Body Systems

E. Arrigoni, W. Von der Linden, H.G. Evertz

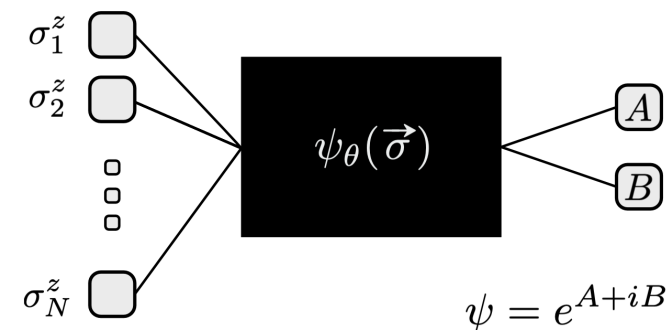
<https://itp.tugraz.at/~arrigoni/>

Nanotransport in korrelierten Systemen



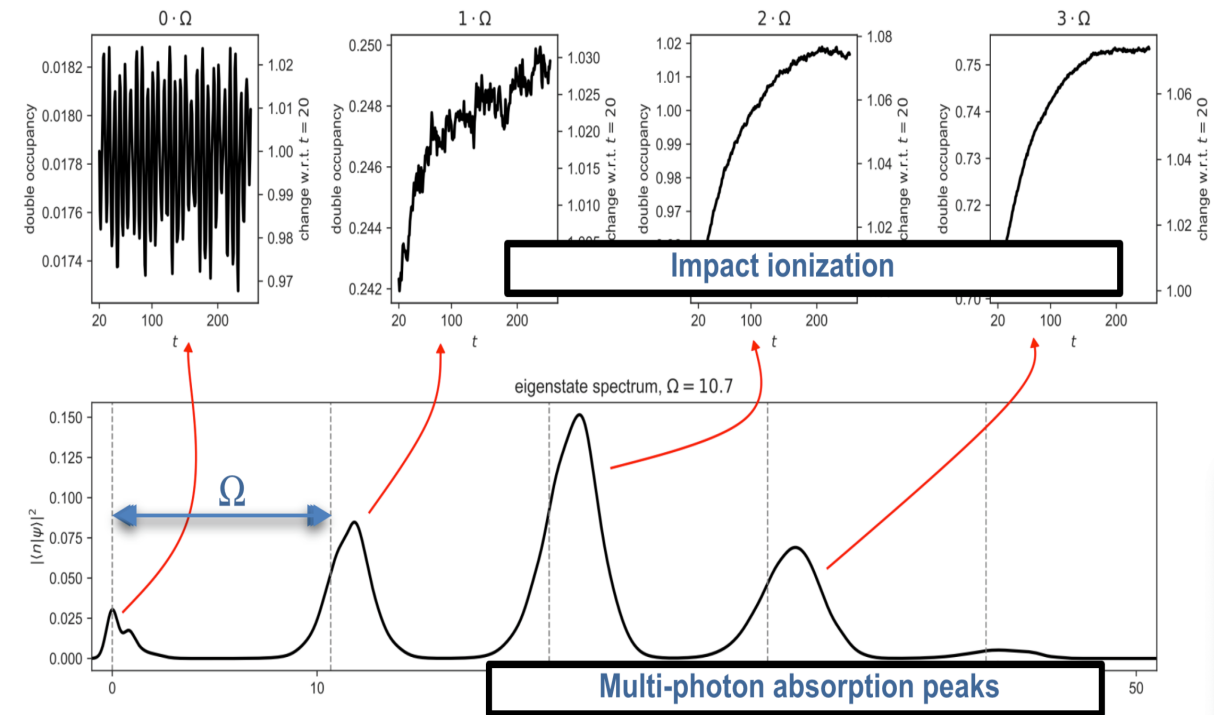
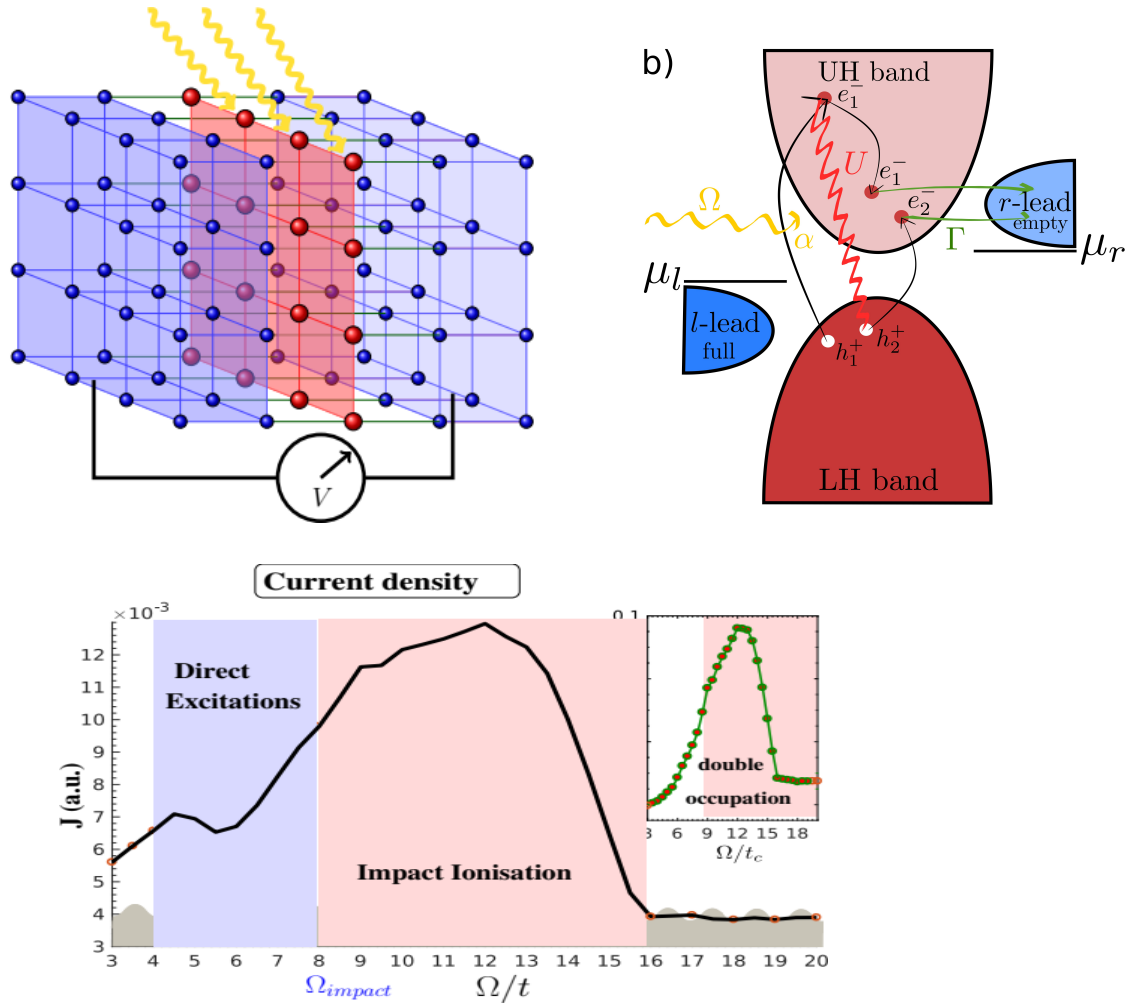
(Copyright Material entfernt)

Machine-learning Methoden



(Collaboration with Institute of Computer Graphics and Vision)

Photovoltaic systems based on correlated insulators



Computational Material Science

M. Aichhorn und C. Heil

Ab-initio Rechnungen für verschiedene Materialklassen mit unterschiedlichsten Methoden

Dichtefunktionaltheorie

Electron-phonon Wechselwirkung

Dynamische Molekularfeldtheorie

Strukturvorhersagen

GW Rechnungen

(Un)konventionelle Supraleitung

Kollaborationen

Theorie: CCQ Flatiron (Georges, Wentzel), Rom (Boeri), SN Bose Kolkata (Dasgupta), Austin (Giustino), ...

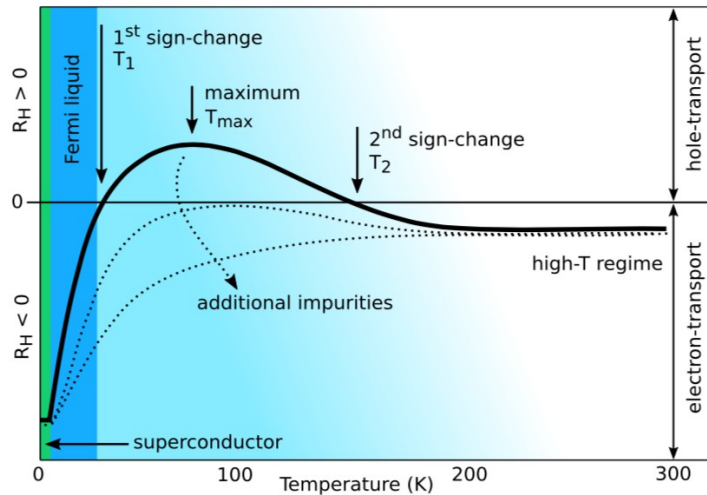
Experiment: St. Andrews (Wahl), Carnegie Institution Washington (Struzhkin), MPI Mainz (Eremets)

Computational Material Science

Arbeitsgruppe M. Aichhorn, H.G. Evertz

Hall Effect in Ruthenates

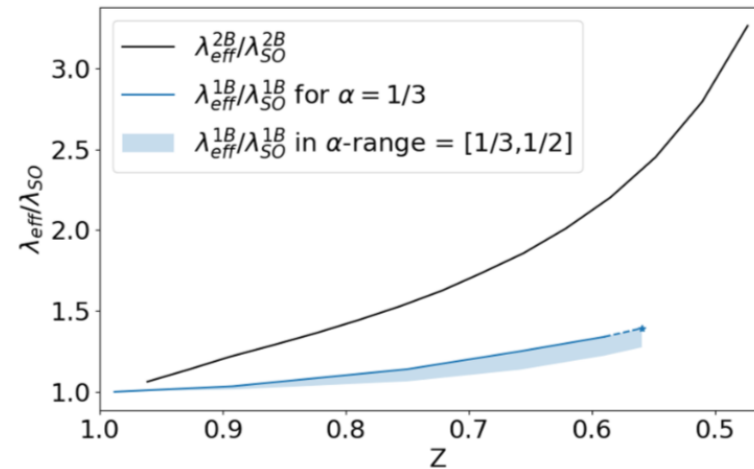
- sign change of the Hall coefficient vs T
- importance of Spin-orbit coupling and impurities



(npj quantum materials 2019)

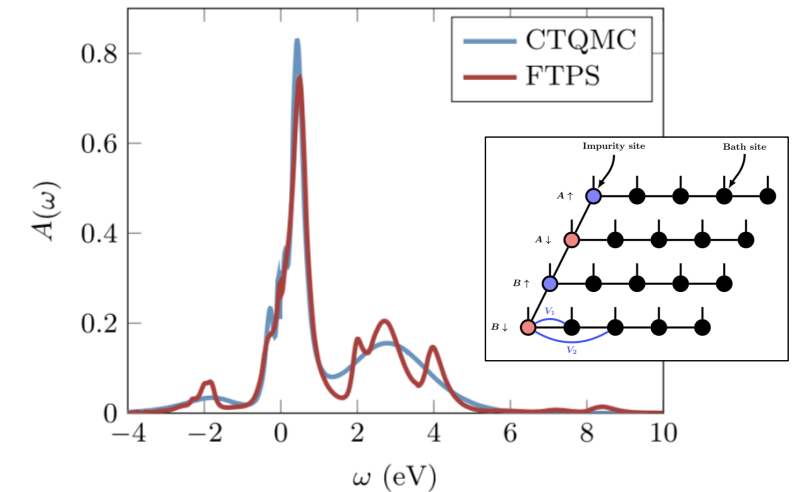
Spin orbit coupling and Correlations

- model level: 3-band, graphene



(several PRB, PRL, JPCM)

Entwicklung neuartiger Methoden (Matrix-Product States)



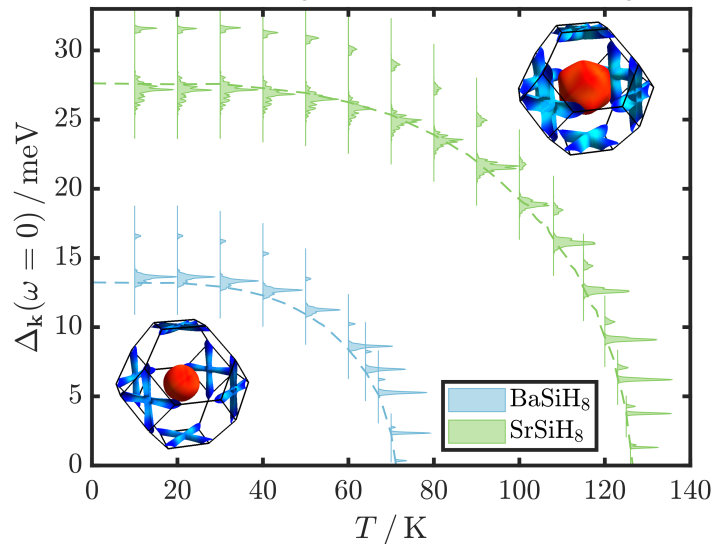
(PRX 2017, SciPostPhys 2020)

Computational Material Science

Arbeitsgruppe C. Heil

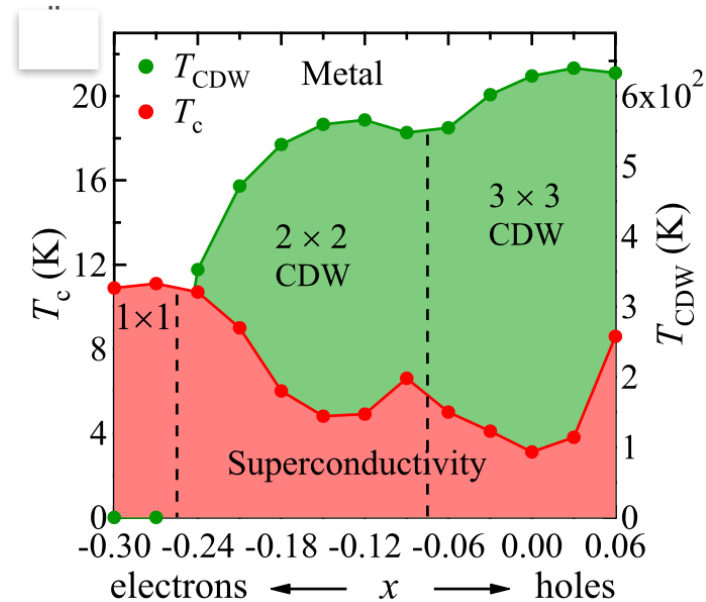
High- T_c Supraleitung in Hydriden

- normalerweise stabil bei Drücken > 100GPa
- Vorhersage: BaSiH₈ (3GPa) und SrSiH₈ (25GPa)



(fünf PRB Rapids/Letters, JCP Roadmap article 2021)

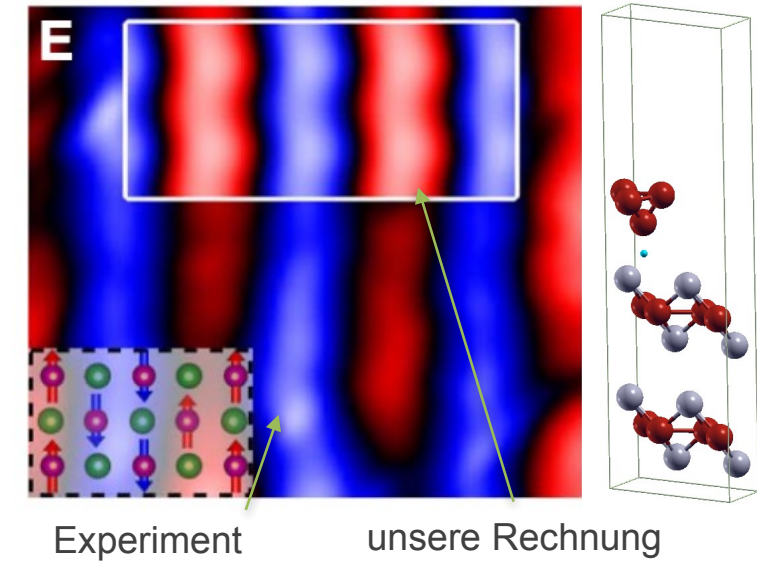
Ladungsordnung und SL in niederdimensionalen Systemen



(PRL 2017, 2018, J. Phys. Chem. Lett 2019, J. Mat. Chem. 2020, u.a.)

Eisenbasierte Supraleiter z.B. FeTe

- spin-polarisierte STM Simulationen
- He als *Probe Particle*



(Sci. Adv. 2019, Nano Lett. 2021, PRL 2021, u.a.)

Theoretische Plasmaphysik

W. Kernbichler und C. Albert

Einbindung in das europäische Fusionsforschungsprogramm

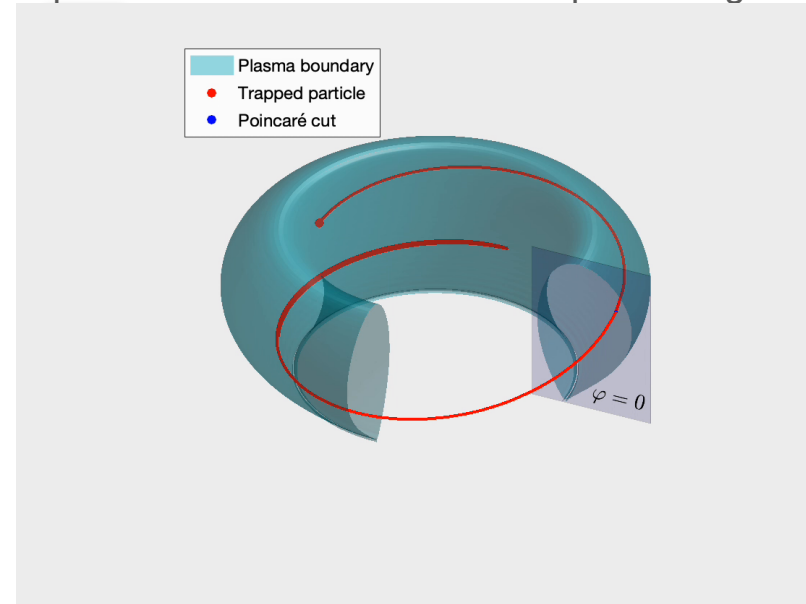
- Langjährige Kooperation mit dem Max-Planck-Institut für Plasmaphysik
- Mitwirkung an der Entwicklung Großexperimenten zur Energiegewinnung (ITER)



Meyer et al. Nuclear Fusion 59 (11), 112014 (2019)

Geometrische Integration und Klassifizierung von Teilchenbahnen

- Berechnung der Verluste hochenergetischer Alpha-Teilchen in der Stellaratoroptimierung



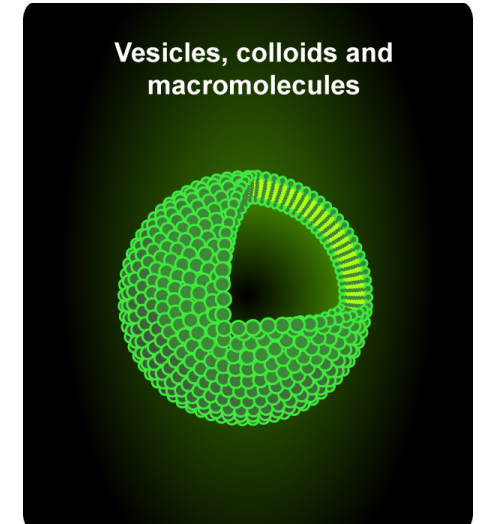
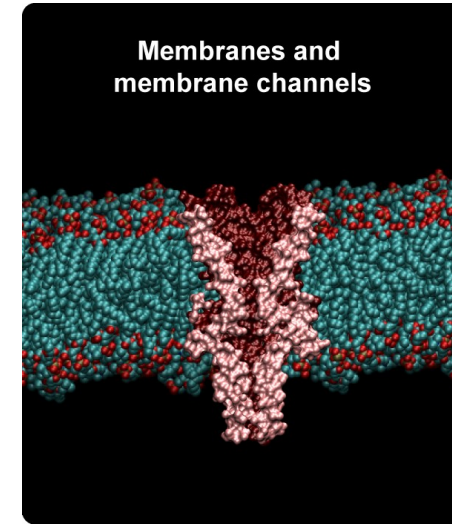
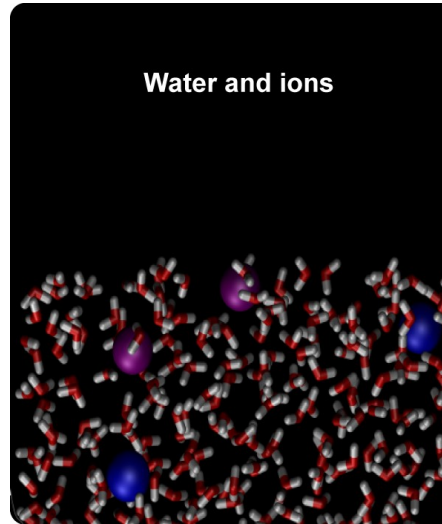
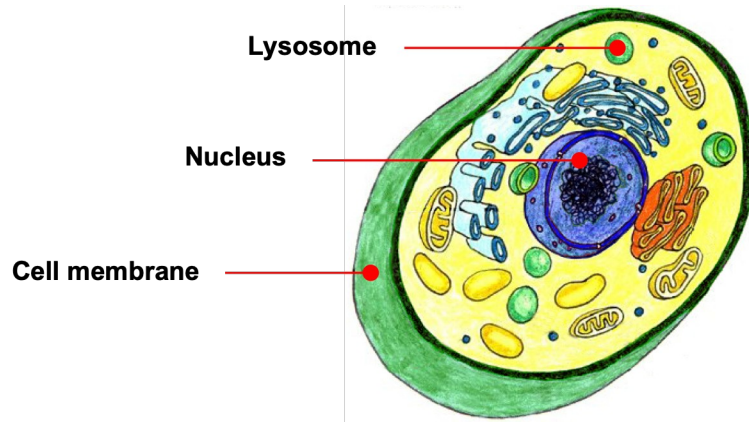
3 papers in JCP und PoP by Albert, Eder, Kasilov et al. (2020)

Weitere Aktivitäten

- Berechnungen zur Plasmaheizung im Stellarator Wendelstein 7-X
- Modellierung von 3D-Störungen im Tokamak ASDEX Upgrade
- Beteiligung an zwei EUROfusion-Arbeitsgruppen zu Theorie&Computing



Components of a biological cell



Research questions

How do membrane channels transport water and ions?

How do different types of molecules affect the shape of biological membranes?

What physical mechanisms govern the mobility of vesicles?

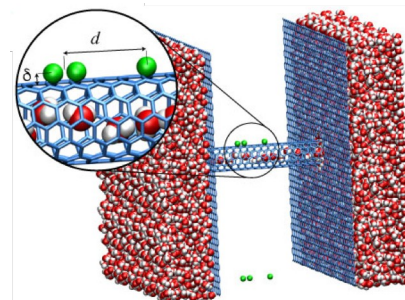
Technological applications

Biomedical applications and biomimetics

Nanofluidics

Energy conversion strategies

Water filtering and cleaning



Possible BSc/MSc topics

Molecular dynamics simulations of ion adsorption on amyloid bundles

Nonlinear electrokinetics of a charged sphere using finite element calculations

Monte Carlo simulations of a simple lipid in water

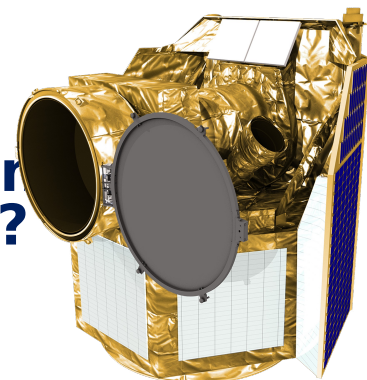
... and many more!

Wetter und Klima extrasolarer Planeten unter dem Einfluß verschiedener Zentralgestirne

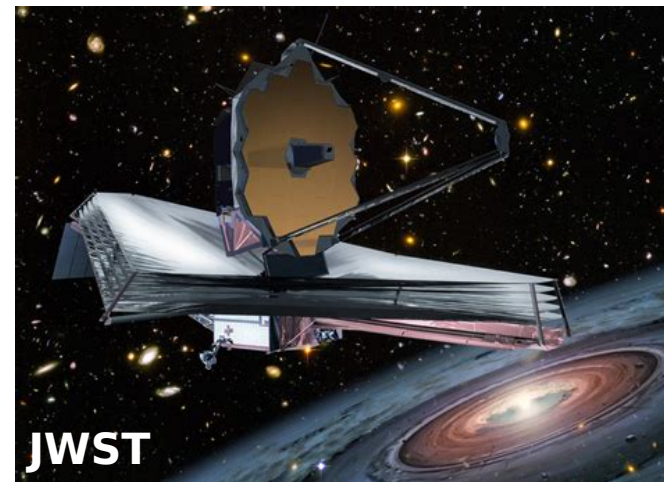
- Modellierung von Wolkenbildung und Wolkenfeedback auf extrasolare Atmosphären (zB Bildung von Metalloxidclustern (TiO_2 , V_2O_5 , Al_2O_3) als *cloud condensation nuclei*)
- Simulation der globalen Wolkenbedeckung extrasolarer Gasriesenplaneten 3D GCMs
- Modellierung von Ionisationsprozesse und Ionosphären in Exoplanets

Ziel: Unterstützung der Interpretation von Beobachtungsdaten (CHEOPS, JWST)

Inwiefern repräsentiert die Atmosphärencher den Entwicklungszustand eines Exoplaneten?



CHEOPS



JWST

Wo arbeiten unsere AbsolventInnen ?

Nach Ihrem Abschluss arbeiten unsere AbsolventInnen in verschiedenen lokalen und internationalen Firmen, sowie im internationalen und nationalen Universitären oder Forschungsbereich.

(Copyright Material wurde entfernt)

Bachelorarbeiten

- Im Umfeld der Theorie-Lehrveranstaltungen aus dem Bachelorstudienplan
 - Simulation von Quantenalgorithmien
 - Erweiterte Probleme aus der Theoretischen Mechanik
 - Fusions-Plasmaphysik
 - Quantenkryptographie
 - Quanten-Monte-Carlo
 - Machine Learning in der Physik
 - **Vereinzelt in Kooperation mit Firmen**
- **Eigene Ideen und Vorschläge seitens der Studierende sind Willkommen!**
-