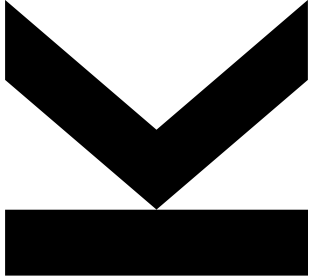


# Bachelor-Infoabend SS 2025

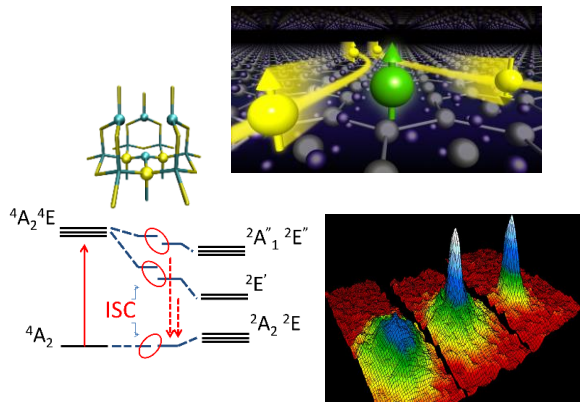


Institut für Theoretische Physik

# Institut für Theoretische Physik

## Quanten- & klassische Dynamik

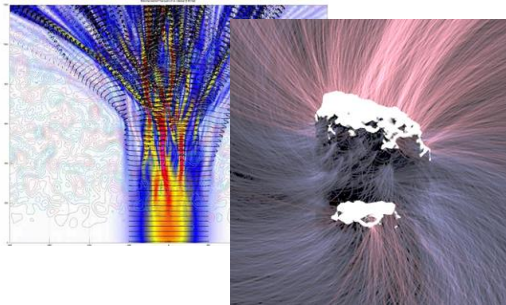
### Vielteilchensysteme



Elektronen & Spin

Topologie & Quantenmaterie

Bose-Einstein-Kondensation

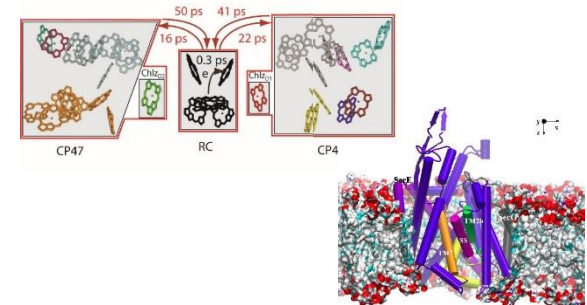


Quantendynamik & Dekohärenz

Materiewellen & Strukturbildung

Licht-Materie-Wechselwirkung

### Theoretische Biophysik



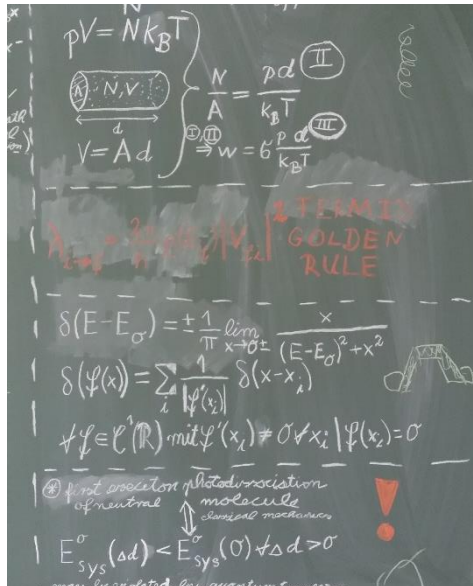
Makro-Moleküle

Photosynthese & offene  
Quantensysteme

Proteinkanäle & Transport

# Institut für Theoretische Physik

## Entwicklung von ...



- Näherungen
- Lösungsmethoden
- Modellen

- ... komplexe Systeme
- ... spezielle Verfahren
- ... numerische Methoden & Simulationen

# Bachelorarbeit @ ITP

- **Thema**

- wissenschaftlich aktuell
- gute Balance zwischen ambitioniert ↔ Zeitaufwand
- aktuelle Literatur zum Thema kennenlernen

## **Methodik (dem Interesse angepasst!)**

- analytische Überlegungen (Papier & Stift, Mathematica)
- eigenständige Programmentwicklung
- Anwendung moderner komplexer Simulationspakete

- **Soft-Skills:**

- Kommunikation/Diskussion mit anderen Wissenschaftlern
- Präsentation von Arbeit und Ergebnissen
- schriftliche Darstellung im Stil einer wissenschaftlichen Publikation

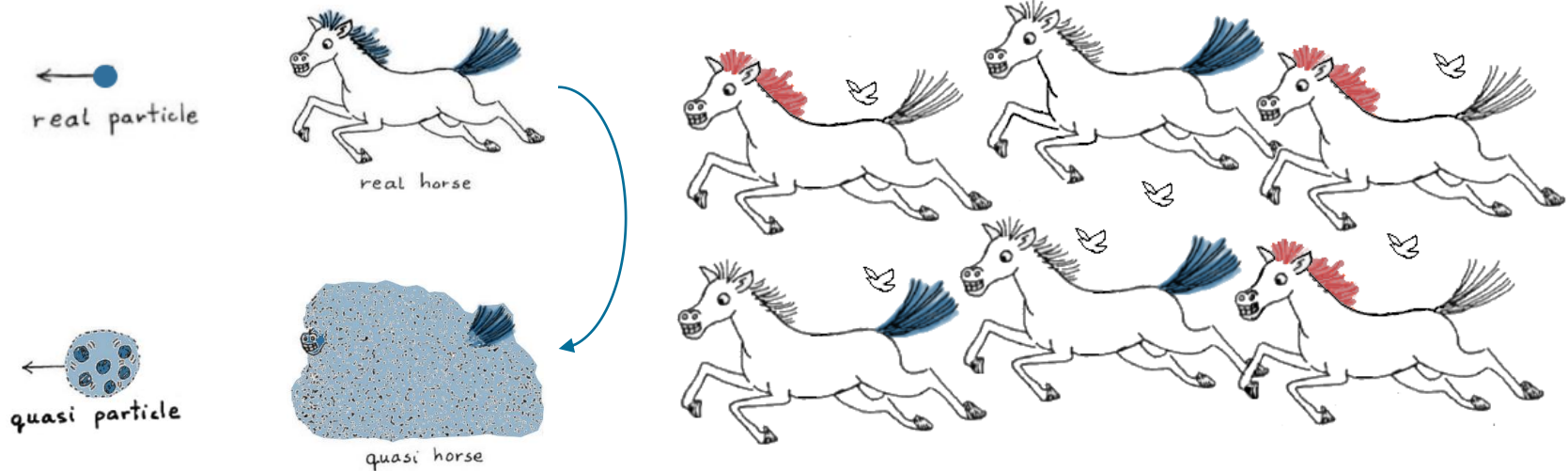
# Ein $\leftrightarrow$ viele Quanten-Teilchen

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \right] \psi = E \psi$$

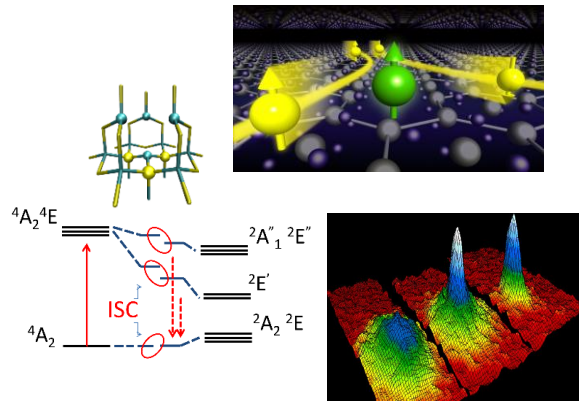
$$\psi = \psi(\mathbf{r})$$

$$\sum_{i=1}^N \left\{ \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i) \right] + \sum_{i < j}^N v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \right\} \psi = E \psi$$

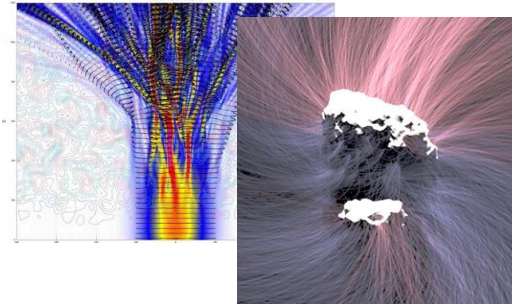
$$\psi = \psi(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N)$$



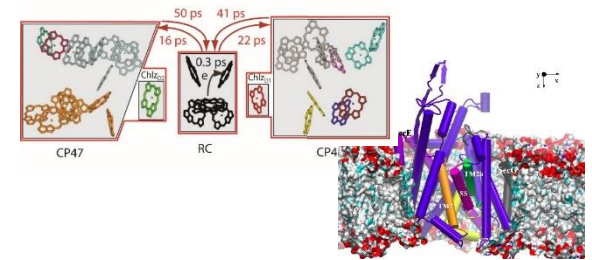
# Ein ↔ viele Quanten-Teilchen



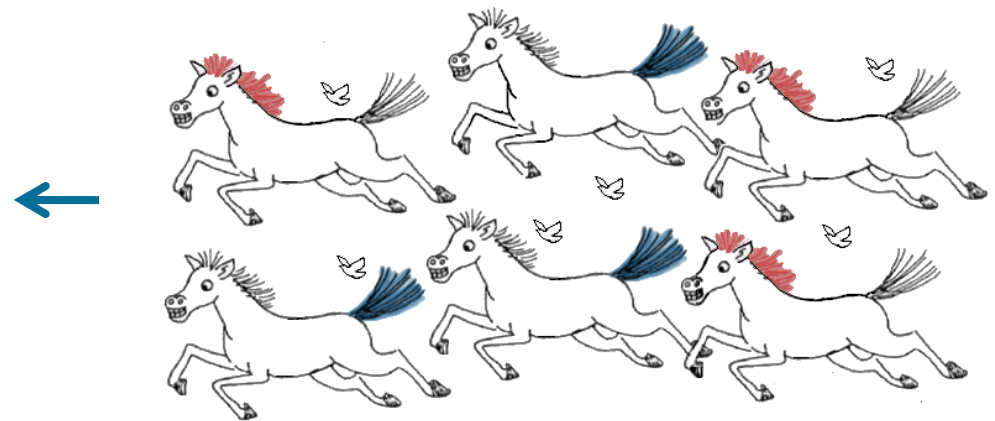
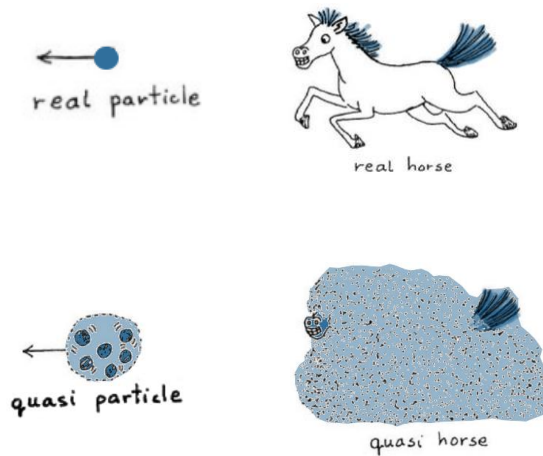
Vielteilchensysteme



Quanten- & klassische Dynamik



Theoretische Biophysik



# Bachelorarbeitsthemen

## Abteilung Vielteilchenphysik

**SS 2025**



# Vielteilchenphysik und Modellierung

Arthur Ernst

([Arthur.Ernst@jku.at](mailto:Arthur.Ernst@jku.at), [ORCID ID: 0000-0003-4005-678](https://orcid.org/0000-0003-4005-678))



## Parallisierung und Erweiterung einer klassischen Monte Carlo Methode:

Temperaturabhängiger Magnetismus in Oxiden

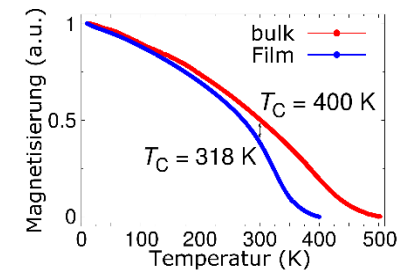
- Charakterisierung der Wechselwirkungen zwischen magnetischen Momenten, Verwendung von Materialspezifischen Größen
- Programmierung in python/C++, Parallelisierung der Routinen
- Interface konstruieren für bessere Zusammenarbeit verschiedener Programme

## Toolkit for Quantum Theory:

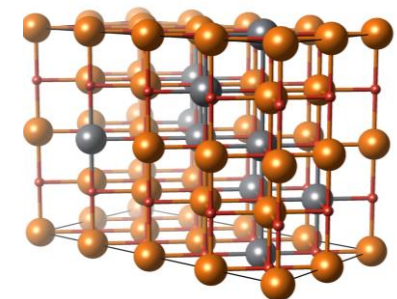
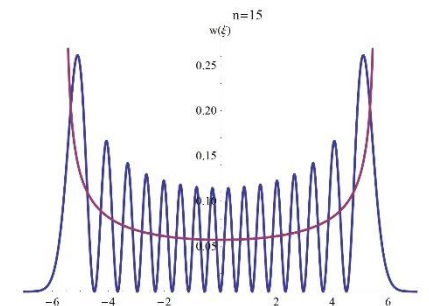
- Erweiterung und Umsetzung der Visualisierungen aus der Quantenmechanik im aktuellen Mathematica oder Python
- Aufbereitung als Package für Vorlesungen

## Materialphysik für Übergangsmetalloxide und Defekte

- Untersuchung verschiedener Oxide mittels Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen am Rechenzentrum
- magnetische Eigenschaften, Unordnung, Defekte, Verzerrung möglich



Magnetisierung in  $\text{Sr}_2\text{FeMo}_6$





# Vielteilchenphysik und Modellierung

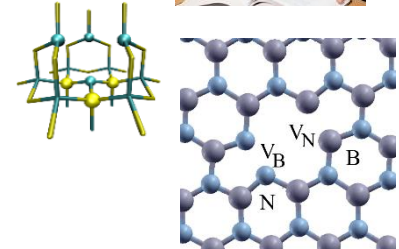
**Michel Bockstedte**

([Michel.Bockstedte@jku.at](mailto:Michel.Bockstedte@jku.at) [ORCID: 0000-0001-5720-4010](https://orcid.org/0000-0001-5720-4010))



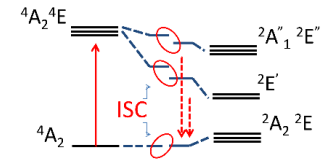
**Photo- & Spinphysik von Farbzentren  
in Siliziumcarbid (4H-SiC) und 2D Materialien (hex. BN & TMDC):**

[Quantenbits, Quantensensoren](#) & Ein-Photon-Quellen



**Ab initio Methode für korrelierte Spins in Molekülen + Farbzentren**

- Weiterentwicklung unseres [Verfahrens für korrelierte Defektzustände](#)
- Anwendung auf prototypische Moleküle + Farbzentren



**Kohlenstoffcluster in SiC: charge traps und Elektrolumineszenz:**

[Thermisch stabile cluster](#)/Ein-Photonen-Quellen @ [SiC/SiO2-Grenzfläche](#)

- Modellierung von Defektkomplexen mittels Dichtefunktionaltheorie
- Berechnung und Analyse von angeregten Zuständen und optischen Spektren mit einem einfachen Vielteilchenverfahren

# Quantum Many-Body Physics

Robert Zillich & *current Bac/Master-Studierende*

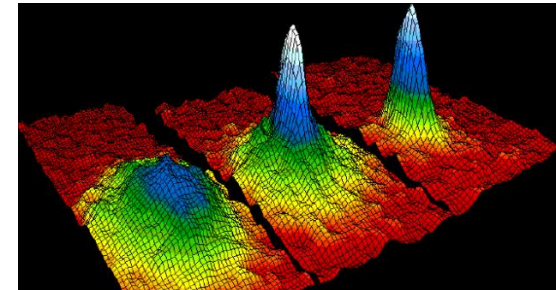
([Robert.Zillich@jku.at](mailto:Robert.Zillich@jku.at) , [ORCID: 0000-0003-0157-3890](https://orcid.org/0000-0003-0157-3890))



## Quantum Gases:

Theory of Bose-Einstein Condensation and ultracold quantum gases using variational methods und Quantum Monte Carlo simulations (+ UPC Barcelona)

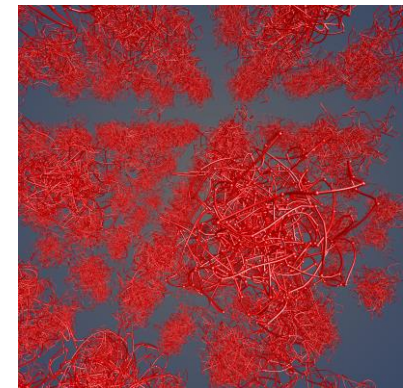
- Nonlinear [many-body dynamics](#) for *time-dependent* interactions
- [Polarons](#): quasiparticles = impurity atom + environment (*Fabian Prieschl*)
- [Dipolar Bose-Einstein](#) condensate of molecules (*Chiara Polteraueer*)



Formation of BEC (NIST/JILA/CU-Boulder)

## Condensed Matter:

- [Rotation dynamics](#) of molecules on graphene (*Martin Gidl* + Univ. Augsburg)
- Electron correlations using Quantum Monte Carlo (QMCpack)
- [Pump-probe spectroscopy](#) of molecules in superfluid helium-4
- (*Fabian Steigersdorfer*, + Univ. Aarhus, Denmark)
- Solvation free energy: statistical physics with cluster-diagrams and AI (+ Univ. Graz)



Monte Carlo Pfadintegral-Knäuel

*Most topics: programming + "paper & pencil"*

# Bachelorarbeitsthemen

## Abteilung Quanten- & klassische Dynamik

SS 2025

# Quanten- und klassische Dynamik

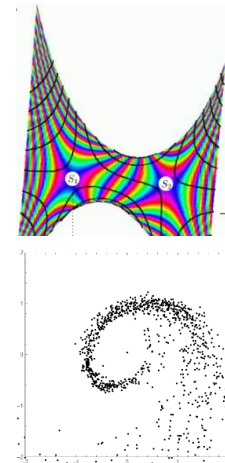
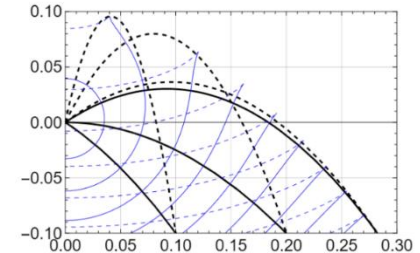


**Tobias Kramer**

([Tobias.Kramer@jku.at](mailto:Tobias.Kramer@jku.at), [ORCID: 0000-0003-1106-3587](https://orcid.org/0000-0003-1106-3587))

## Research areas:

1. Analytical and numerical methods to describe the propagation of waves and particles (Hamilton-Jacobi, Lagrangian mechanics, Heisenberg equation of motion, canonical transformations).
2. Algorithm design for high precision numerical evaluation (numerical methods, rational approximations, analytic and asymptotic evaluation of oscillatory integrals).
3. Algorithm design for many-core processors (GPU, CPU) to describe interacting particles classically or quantum mechanically (open quantum systems).
4. Explicit time-dependent forces: analytical solvable cases, numerical methods.



---

Hamiltonian  $H(t)$

---

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} - V_0 \delta(x)/t$$

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} - V_0 \delta(x)/\sqrt{t^2 + Bt + C}$$

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - V_0 e^{-\omega t} \delta(x)$$

---

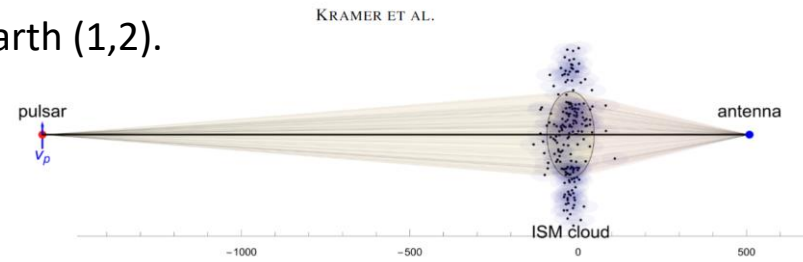
# Quanten- und klassische Dynamik

Tobias Kramer

## Applications:

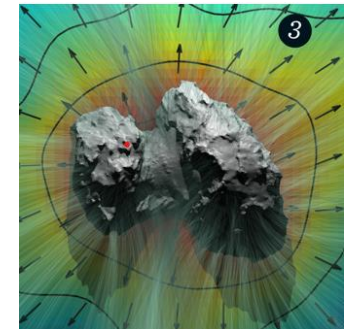
- a) Electromagnetic pulses from a pulsar propagating through the galaxy: distorted and interfering wave fronts observed on Earth (1,2).

Goal: structure of the interstellar medium.



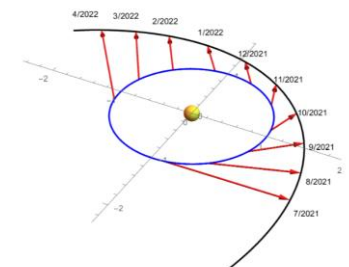
- b) Visualization of dust emission around cometary nuclei in virtual reality.

Goal: study geometric projection effects and visualization techniques for volumetric data sets



- c) Orbital dynamics of comets and changes in rotational state due to gas sublimation (2,3,4).

Goal: predicting the origin and destiny of solar system objects



# Quanten- und klassische Dynamik

**Tobias Kramer**

## **Tools:**

- i. Books: Mathematical physics (theory of special functions, asymptotic evaluation of integrals, Green's functions).
- ii. Computer algebra systems (Mathematica): verification and derivations of analytical and numerical steps. OpenCL/CUDA/C++: high performance programming of subroutines to accelerate computations.

## **Topics for thesis work:**

- open quantum systems: quantum dynamics via maps (with Msc Akhil Bhartiya)
- wave packet propagation with explicit time-dependent Hamiltonian (with Msc Manuel Adlberger)
- stability of orbits around small solar system bodies (with Dr Daniel Waltner)
- virtual walk on a comet (excellent programming skills required)

# Bachelorarbeitsthemen

## Abteilung Theoretische Biophysik

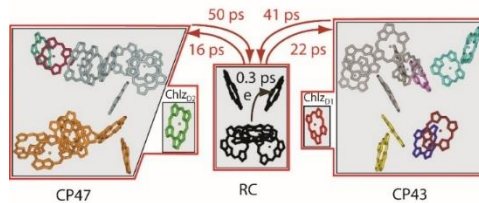
SS 2025

# Theoretische Biophysik

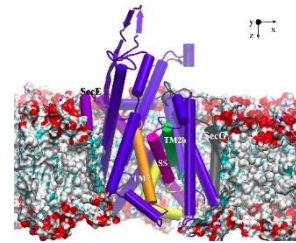
Energie-, Ladungs-, Materietransport und  
Signaltransduktion in biologischen Makromolekülen  
und künstlichen Modellsystemen



**T. Renger**



Energie- und Ladungstransfer in der  
Photosynthese



Proteintransport durch  
Membranen



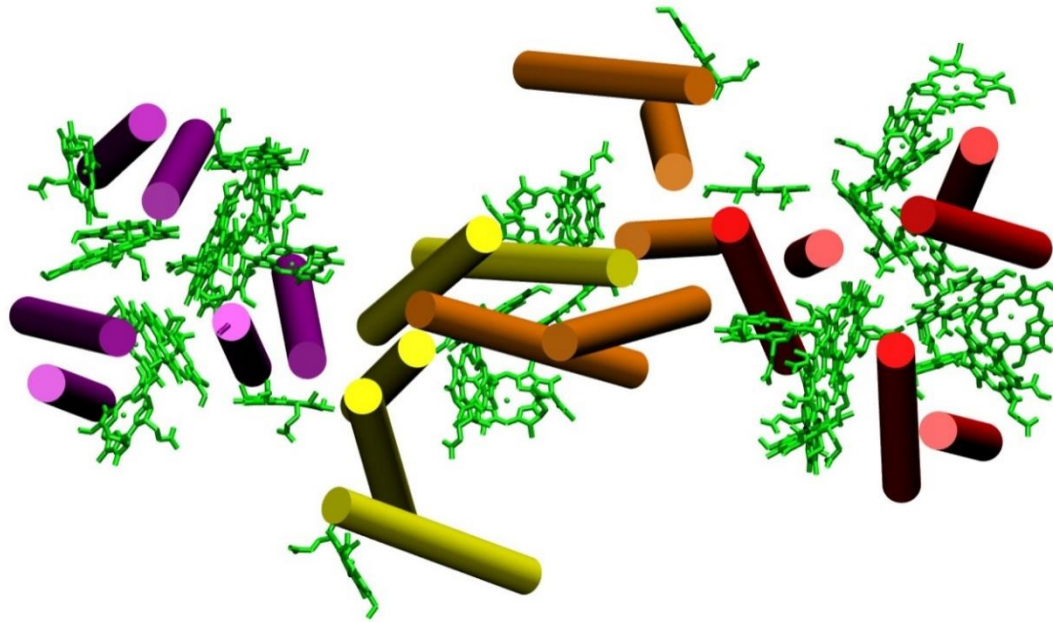
**F. Müh**



**H. Krobath**



# Energie- und Ladungstransfer in der Photosynthese



Photosystem II

Welche Theorie?  
Welche Parameter?

# Frenkel-Exziton Hamiltonoperator and Parametrisierung

$$H = \sum_m \left( E_m^{(0)} + \sum_{\zeta} \hbar \omega_{\zeta} g_{\zeta}(m, m) Q_{\zeta} \right) |m\rangle \langle m| + \sum_{m \neq n} \left( V_{mn}^{(0)} + \sum_{\zeta} \hbar \omega_{\zeta} g_{\zeta}(m, n) Q_{\zeta} \right) |m\rangle \langle n| + \sum_{\zeta} \frac{\hbar \omega_{\zeta}}{4} (Q_{\zeta}^2 + P_{\zeta}^2)$$

**Lokale Übergangsenergie**

PB/QC Methode: [Müh et al. PNAS 2007](#)

CDC Methode: [Adolphs et al. Photosynth. Res. 2008](#)

**Energietransferkopplung**

TrEsp : [Madjet et al. J. Phys. Chem. B 2006](#)

Poisson-TrEsp: [Adolphs et al. Photosynth. Res. 2008](#)

Improved Poisson-TrEsp: [Friedl et al. PCCP 2022](#)

Screening: [Eder and Renger, Int. J. Mol. Sci. 2024](#)

**Spektraldichte**

$$J_{mnkl}(\omega) = \sum_{\zeta} g_{\zeta}(m, n) g_{\zeta}(k, l) \delta(\omega - \omega_{\zeta})$$

**Bachelorarbeit von Matthias Eder**

Schnelle Fluktuationen:  
(Dynamische Unordnung)

**NMA/TrEsp/CDC Methode:** Renger et al.

J. Phys. Chem. B 2012, [Klinger et al. J. Chem. Phys. 2020](#),

**Bachelorarbeit von Alex Klinger und Florian Steinecker**

Langsame Fluktuationen:  
(Statische Unordnung)

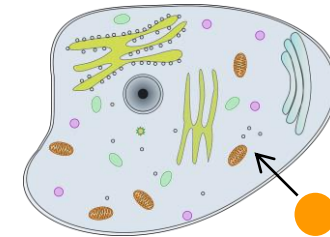
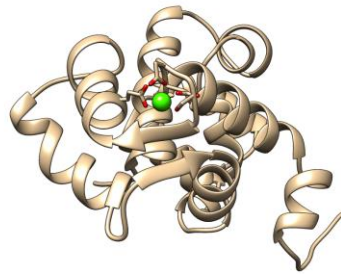
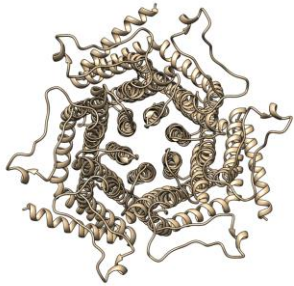
**FIRST/FRODA/CDC Methode:** [Chaillet et al. J. Phys. Chem. Lett. 2020](#)

**Bachelorarbeit von Florian Lengauer**

# Aktuelle Forschungsprojekte zur Photosynthese

- *Blue-Green Light Harvesting in the Ocean: Theory meets Experiment* (FWF, 2024-2026), in Kooperation mit experimenteller AG Jürgen Hauer TU München
- *Teaming Spectroscopy and Quantum Theory of Photosystem II* (FWF, 2024-2027), in Kooperation mit experimenteller AG Petar Lambrev, Biological Research Centre Szeged
- *Charge Transfer States and Higher Excited States in Light Harvesting* (Marie Curie European Training Network PhotoCaM, 2024-2026), in Zusammenarbeit mit verschiedenen theoretischen Arbeitsgruppen in Europa

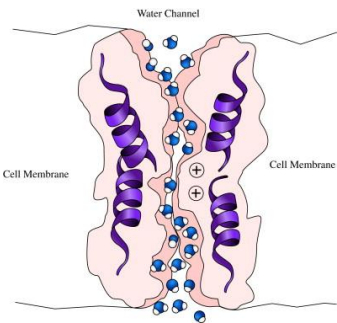
# Ionen-, Wasser- und Molekültransport



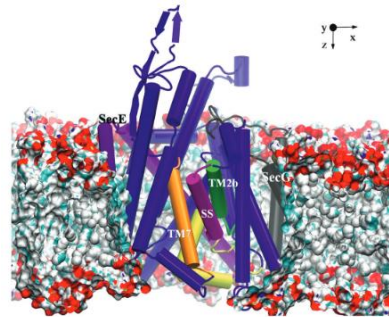
Fluoreszenzmikroskopiedaten

Ca-Kanal, in Kooperation mit experimenteller Biophysik (Isabella Derler)

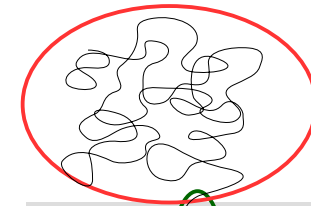
Ca-Sensorprotein



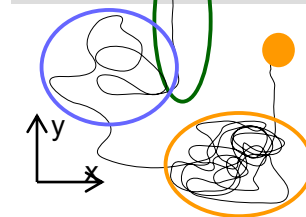
Wasserkanal Aquaporine, in Kooperation mit experimenteller Biophysik (Andreas Horner)



Proteintransport durch/in die Membran, in Kooperation mit experimenteller Biophysik (Peter Pohl)



Zellmembran



Auswertung von Fluoreszenzmikroskopiedaten in Kooperation mit AG Jacak (FH-OÖ)

# Abteilung Theoretische Biophysik: Überblick

## **Ansprechpartner**

- Thomas Renger ([Thomas.Renger@jku.at](mailto:Thomas.Renger@jku.at), [ORCID: 0000-0001-9245-3805](https://orcid.org/0000-0001-9245-3805))
- Frank Müh ([Frank.Mueh@jku.at](mailto:Frank.Mueh@jku.at), [ORCID: 0000-0002-8818-2616](https://orcid.org/0000-0002-8818-2616))
- Heinrich Krobath ([Heinrich.Krobath@jku.at](mailto:Heinrich.Krobath@jku.at), [ORCID: 0000-0001-6473-8109](https://orcid.org/0000-0001-6473-8109))

## **Theorie/Methodik**

- Quantenchemie, Moleküldynamik, Elektrostatik
- Quantenmechanik, Licht-Materie-Wechselwirkung, Theorie offener Quantensysteme
- Thermodynamik, statistische Physik

## **Anwendungsgebiete**

- Energie- und Ladungstransfer in der Photosynthese und in künstlichen Modellsystemen, optische Spektren von Makromolekülen
- Wasser-, Ionen-, Molekültransfer und Signaltransduktion