

Technische Universität Wien
Institut für Theoretische Physik

Wiedner Hauptstraße 8-10, A-1040 Wien

Tätigkeitsbericht
Studienjahr 1999/2000

Februar 2001

Technische Universität Wien
Institut für Theoretische Physik

Wiedner Hauptstraße 8-10, A-1040 Wien

Telefon: +43 1 58801 13600, 13601

Telex: 131000 TVFAW A

Fax: +43 1 58801 13699

WWW-Homepage: <http://tph.tuwien.ac.at/>

Tätigkeitsbericht
Studienjahr 1999/2000

1. Oktober 1999 – 30. September 2000

Vorwort zum Tätigkeitsbericht 1999/2000

Wie an allen österreichischen Universitätsinstituten war das Studienjahr 1999/2000 durch die politischen Turbulenzen beeinflusst. Die verspätete Verfügbarkeit des Budgets war im Falle des Instituts für Theoretische Physik besonders unangenehm, da notwendige Erneuerungen des Computersystems zuletzt unter erheblichem Zeitdruck stattfinden mussten. Dank der hervorragenden Leistungen der vergangenen Jahre in Wissenschaft und Lehre, die sich wieder in dem leistungsbezogenen Zuteilungsschlüssel unserer Fakultät sehr positiv für unser Institut auswirkten, gab es glücklicherweise trotz der Budgetkürzungen eine erträgliche Situation. Die beachtliche Zahl von 76 Veröffentlichungen in internationalen Zeitschriften, die hohe Zahl von Vorträgen (79, darunter 20 eingeladene Vorträge bei Fachtagungen) und der kontinuierlich grosse Erfolg beim Einwerben von neuen Projektmitteln für Dissertanten und auswärtige Mitarbeiter auch in 1999/2000 stellen eine erfolversprechende Basis für die Finanzierung der Aktivitäten auch in den nächsten Jahren dar. Es wird dabei wichtig sein, das leistungsbezogenen System unserer Fakultät und Fachrichtung auch in allfällige neue Universitätsstrukturen "hinüberzuretten". Als besonders demotivierend muss in allen Diskussionen über - sicher in gewissen Bereichen nötige - Universitätsreformen heute die Rolle der Medien und/oder gewisser Politiker bezeichnet werden, die die beachtliche Zahl jener Institute und Arbeitsgruppen ignorieren, die in internationaler Vernetzung auch im globalen Vergleich hervorragende Leistungen erbringen. Unser Institut kann selbstbewusst genug sein, sich zu diesen zu zählen. Auch dieser Institutsbericht sollte daher benützt werden, um gegen das pauschale Schlechtmachen der Universitäten, oder aber auch das gelegentliche Klassifizieren von Universitäten nach geradezu kindischen Kriterien zu protestieren. Die Physikabsolventen der TU Wien haben dank ihrer breiten Grundausbildung, die ein weites Spektrum von beruflichen Tätigkeiten und eine flexible Anpassung an Weiterentwicklungen erlaubt, einen hervorragenden Ruf. Dazu trägt auch die Tatsache bei, dass nach wie vor eine Theorieausbildung angeboten wird, die dem internationalen Standard (Europa und Spitzenuniversitäten der USA) entspricht. Nicht verschwiegen sollte allerdings werden, dass der Sog, den die Kommunikationswirtschaft gerade auf die Studierenden der Physik ausübt und daher wegen der oft sehr gut bezahlten Nebentätigkeit das Studium deutlich verlängert, gerade für die Theoretische Physik im Lehrbetrieb sehr negative Auswirkungen hat. Diese Prüfungen werden immer mehr ans Ende des Studiums verschoben, wenn die viele Semester früher erworbenen Kenntnisse der Mathematik bereits weitgehend vergessen sind. Unter den vielen Vorschlägen zur Verkürzung des Studiums vermissen wir Theoretiker eine Maßnahme, die - natürlich notwendigerweise auf Kosten einer gewissen Einschränkung der "akademischen Freiheit" - dieser Entwicklung gegensteuert.

Wie jedes Jahr danke ich allen Mitarbeitern, von den Wissenschaftlern bis zur außerordentlich engagierten Verwaltung und nicht zuletzt dem Herausgeber dieses Tätigkeitsberichts für die hervorragende Arbeit.

Wien, Februar 2001

Wolfgang Kummer
Institutsvorstand

Kurzstatistik Studienjahr 1999/2000

• Personalstellen:	Hochschullehrer:	14
	MitarbeiterInnen (Drittmittel):	21

• Budget:	O. Dotation:	ATS	1.403.900.–
	Ao. Dotation:	ATS	307.886.–
	Berufung Burgdörfer:	ATS	1.096.014.–
	Projektmittel (Zusagen 1999/2000):	ATS	5.032.719.–

• Forschung:	Publikationen in intern. wissenschaftlichen Zeitschriften:	76
	Wissenschaftliche Vorträge:	79
	(hiervon 20 eingeladene Vorträge bei Fachtagungen)	
	Ausländische Universitäten (Zusammenarbeiten als Projektmitarbeiter und Koautoren)	41

• Lehre:	Pflichtvorlesungen:	38
	Wahlpflichtlehrveranstaltungen:	415
	Sonstige Lehrveranstaltungen:	10
	Gesamtzahl:	463 Semesterwochenstunden

• Absolventen:	Diplomabschlüsse:	1999/2000:	6
	Doktoratsabschlüsse:	1999/2000:	2

Inhaltsverzeichnis

1	Personal	5
1.1	Planposten	5
1.2	Wissenschaftliche Mitarbeiter	6
1.3	Gäste am Institut	8
1.4	Nichtwissenschaftliches Personal	10
1.5	Zugeteilt dem Institut	10
2	Budget	11
2.1	Budgetmittel des Bundes (Kalenderjahr 2000)	11
2.2	Neue Projekte	12
3	Projekte	13
3.1	Laufende Projekte	13
3.2	Abgeschlossene Projekte	15
4	Forschungstätigkeit	17
4.1	Fundamentale Wechselwirkungen	17
4.1.1	Quantenfeldtheorie	17
4.1.2	Gravitation	20
4.1.3	Strings und zweidimensionale Feldtheorien	22
4.1.4	Elementarteilchenphysik und Kosmologie	24
4.1.5	Publikationen aus Fundamentalen Wechselwirkungen	27
4.1.6	Vorträge aus Fundamentalen Wechselwirkungen	29
4.2	Nichtlineare Dynamik und Physik komplexer Systeme	32
4.2.1	Reguläre und chaotische Bewegung in Coulomb-Systemen	32
4.2.2	Reguläre und Chaotische Dynamik in Quantenpunkten und “Designer” Atomen	35
4.2.3	Quantenoptik	36
4.2.4	Quantenlogik und verwandte Problemstellungen	38
4.2.5	Publikationen aus Nichtlinearer Dynamik und Physik komplexer Systeme	39
4.2.6	Vorträge aus Nichtlinearer Dynamik und Physik komplexer Systeme	41
4.3	Theorie kondensierter Materie	44
4.3.1	Mathematische Grundlagen und Gruppentheorie	44
4.3.2	Physik des flüssigen Zustandes	46
4.3.3	Phasenübergänge in der ‘soft condensed matter’ Physik	48
4.3.4	Ion – Oberflächen Wechselwirkung	50
4.3.5	Ion-Festkörper-Wechselwirkung	51
4.3.6	Piezoelektrische Sensoren	51
4.3.7	Publikationen aus Kondensierter Materie	52
4.3.8	Vorträge aus Kondensierter Materie	54
5	Forschungsaufenthalte	57
6	Gastvorträge am Institut	59

7	Lehrveranstaltungen 1999/2000	61
7.1	Pflichtlehrveranstaltungen	61
7.2	Wählbare Privatissima	62
7.3	Gebundene Wahllehrveranstaltungen	63
7.4	Freie Wahlfächer	68
8	Absolventen	70
8.1	Rigorosen	70
8.2	Diplomprüfungen	71
9	Verwaltungstätigkeit	72
9.1	Mitarbeit in wissenschaftlichen Organisationen	72
9.2	Mitarbeit in der Universitätsverwaltung	74
9.3	Verwaltungstätigkeit am Institut	75
10	Personalia	76

Kapitel 1

Personal

1.1 Planposten

BURGDÖRFER	Joachim	Dipl.-Phys. Dr.	O.Univ.Prof.
KUMMER	Wolfgang	DI. Dr.	O.Univ.Prof. ¹
SCHWEDA	Manfred	DI. Dr.	Univ.Prof.
DIRL	Rainer	DI. Dr. Univ.Doz.	Ao.Univ.Prof.
KAHL	Gerhard	Mag. DI. Dr. Univ.Doz.	Ao.Univ.Prof.
KASPERKOVITZ	Peter	DI. Dr. Univ.Doz.	Ao.Univ.Prof.
KREUZER	Maximilian	DI. Dr. Univ.Doz.	Ao.Univ.Prof.
NOWOTNY	Helmut	DI. Dr. Univ.Doz.	Ao.Univ.Prof.
REBHAN	Anton	DI. Dr. Univ.Doz.	Ao.Univ.Prof.
SVOZIL	Karl	Dr. Univ.Doz.	Ao.Univ.Prof.
GRAU	Dietrich	DI. Dr.	Ass.Prof.
BALASIN	Herbert	DI. Dr.	V.Ass. ²
KRAEMMER	Ulrike	DI. Dr.	V.Ass. ³
LEMELL	Christoph	DI. Dr.	Univ.Ass. ⁴
TROST	Johannes	Dipl.-Phys. Dr.	Univ.Ass. ⁵
YOSHIDA	Shuhui	Dr.	Univ.Ass. ⁶
unbesetzt			Univ.Prof. ⁷

¹ Institutsvorstand

² halbbeschäftigt, von 1.9.2000 bis 31.8.2002

³ halbbeschäftigt, von 1.8.95 bis 15.5.06, Mutterschutz seit 31.7.2000

⁴ von 1.7.98 bis 30.6.00

⁵ von 1.8.98 bis 31.12.99

⁶ seit 19.6.2000

⁷ von 1.10.98

1.2 Wissenschaftliche Mitarbeiter

ERTL	Martin	DI.	FWF P12815-TPH (Kummer) 1.7.1998 — 30.6.2000
ERTL	Martin	DI.	FWF P12815-TPH (Kummer) 1.7.2000 — 15.3.2001
GRIMSTRUP	Jesper		Dnische Forschungsakademie (DFA) Nr: 154-030.0002/BC (Schweda) 1.11.1999 — 31.10.2002
GRUMILLER	Daniel	DI.	FWF P12815-TPH (Kummer) 1.10.1998 — 30.9.2000
KAHLINA	Dragica	Dipl.-Phys.	Schweizer Nationalfonds 83EU-053227 (Kreuzer) 1.7.1998 — 1.7.2000
KLING	Alexander	DI.	OENB 7731 (Kreuzer) 1.7.1999 — 31.10.1999
KLING	Alexander	DI.	FWF P11582-PHY (Schweda) 1.11.1999 — 30.6.2000
LANG	Andreas	DI.	FWF P13062-TPH (Kahl) 1.8.1998 — 31.7.2000
LEROCH	Sabine	DI.	FWF P11194-PHY (Kahl) 1.8.1999 — 30.11.1999
LEROCH	Sabine	DI.	FWF P11194-PHY (Kahl) 1.6.2000 — 30.4.2001
PASCHINGER	Elisabeth	DI.	FWF WK W004 (Dirl, Kahl) 1.4.1999 — 31.3.2002
PISAR	Thomas	DI.	FWF P13125-TPH (Schweda) 1.11.1999 — 30.6.2000
POPP	Lukas	DI.	FWF P13125-TPH (Schweda) 1.6.2000 — 31.5.2001

REINER	Albert	DI.	FWF P13062-TPH (Kahl) 1.8.1999 — 1.8.2001
SCHÖLL-PASCHINGER	Elisabeth	DI.	FWF WK W004 (Dirl, Kahl) 1.4.2000 — 31.3.2002
SCHWARZ	Axel	DI.	FWF P13502-TPH (Kummer) 1.5.1999 — 30.4.2002
SCHWARZ	Dominik	Dr.	ÖAW APART 520 1.4.1999 — 30.3.2002
SCHÜTZ	Herbert	DI.	OENB 7304 (Kummer) 1.7.1998 — 1.7.2001
SEKE	Josip	DI. Dr. Univ.Do.	OENB 7720 1.10.1999 — 30.6.2000
TÓKÉSI	Karoly	Dr.	FWF P12470-TPH (Burgdörfer) 29.6.1998 — 31.12.1999
TÓKÉSI	Karoly	Dr.	FWF P12470-TPH (Burgdörfer) 1.1.2000 — 31.12.2000
TUTSCHKA	Christian	Dr.	ITP-TUW UOG93 3.u.4. (Kasperkovitz) 1.10.1999 — 31.5.2000
TUTSCHKA	Christian	Dr.	OENB 7926 (Kasperkovitz) 1.10.1999 — 31.5.2000
WIRTZ	Ludger	Dipl.-Phys.	FWF P12470-TPH (Burgdörfer) 1.1.2000 - 31.12.2000
ZERROUKI	Hassan	DI. Dr.	FWF P13126-TPH (Schweda) 1.10.1999 — 31.1.2000
ZHOU	Jian-Ge	Dr.	FWF M535-TPH (Kreuzer) 29.9.1999 — 28.9.2000

1.3 Gäste am Institut

G.	ADAM	(Burgdörfer) Inst. f. Theoretische Physik, Techn. Univ. Wien Wien, (Austria) 1.10.1999 — 30.9.2000
N.N.	BOGOLUBOV jr.	(Seke, Adam) Steklov Mathematical Institute, Academy of Science of Russia Moscow, (Russia) 25.7.2000 — 9.8.2000
M.	BORDAG	(Kummer) Institut f. theor. Physik Univ. Leipzig, (Germany) 14.1.2000 — 19.1.2000
Z.	FICEK	(Adam, Seke) Department of Physics and Centre for Laser Science The University of Queensland, Brisbane, (Australia) 13.6.2000 — 27.7.2000
C.	GAROLA	(Karl Svozil) University of Lecce, Lecce, (Italy) 8.6.2000 — 18.6.2000
F.	GIERES	(Schweda) Université Claude Bernard, Lyon II (France) 1.10.1999 — 31.1.2000
E.	HELLER	(Burgdörfer) Harvard University 14.11.1999 — 17.11.1999
S.	HOFMANN	(Kummer, Schwarz) Inst. f. Theor. Phys., Univ. Frankfurt/Main Frankfurt/Main, (Germany) 20.2.2000 — 27.2.2000
H.	ISHIO	(Burgdörfer) Kyokiu University, Osaka, Japan 4.6.1999 — 31.1.2000
M.O.	KATANAEV	(Kummer) Steklov Mathematical Institute Moscow (Russia) 2.11.1999 bis 2.12.1999

P.	LANDSHOFF	(Rebhan) DAMTP, University of Cambridge Cambridge (UK) 10.1.2000 — 12.1.2000
D.	LEVESQUE	(Kahl) Laboratoire de Physique Théorique, Université Paris Sud 22.10.2000 — 30.10.2000
E.	LOMBA	(Kahl) Instituto de Química Física Rocasolano, CSIC, Madrid 23.5.2000 — 29.5.2000
J.	MARTIN	(Rebhan, Schwarz) DARC, Observatoire de Paris, Meudon, (France) 13.3.2000 — 24.3.2000
Th.	PATTARD	(Burgdörfer) University of Tennessee Knoxville (USA) 1.1.1999 — 1.8.2000
C.	REINHOLD	(Burgdörfer) Oak Ridge National Laboratory, USA 26.2.2000 — 7.3.2000
J.	SEKE	(Burgdörfer) Inst. f. Theoretische Physik, Techn. Univ. Wien 1.7.1999 — 30.10.2000
A.V.	SOLDATOV	(Seke, Adam) Steklov Mathematical Institute, Academy of Science of Russia Moscow, (Russia) 17.6.2000 — 26.8.2000
Th.	STROBL	(Kummer) Inst.f.Theor.Physik, Universitt Jena, (Germany) 31.7.2000 — 8.8.2000
J.	TKADLEC	(Svozil) Technische Universitt Prag, Prag, (Czech Republic) 15.6.2000 — 22.6.2000
X.	TONG	(Burgdörfer) University of Electrocommunication, Chofu-Shi Chofu-Shi, Japan 11.11.1999 — 1.12.1999 29.5.2000 — 4.6.2000
D.V.	VASSILEVICH	(Kummer) University St. Petersburg St. Petersburg, (Russia) 20.9.1999 — 20.10.1999
D.V.	VASSILEVICH	(Kummer) Inst. f. Theor. Physik, Univ, Leipzig, (Germany) 9.1.2000 — 27.1.2000 14.5.2000 — 10.6.2000
J.-J.	WEIS	(Kahl) Laboratoire de Physique Théorique, Université Paris Sud 22.10.2000 — 30.10.2000

1.4 Nichtwissenschaftliches Personal

HOCHFELLNER	Franz	Sekretariat
MÖSSMER	Elfriede	Verwaltung

1.5 Zugeteilt dem Institut

HITTMAIR	Otto	Dr. Dr.hc.	O.Univ.Prof. [†]
FLAMM	Dieter	Dr. Ao.Univ.Prof.	Lektor ^a
HAFNER	Jürgen	DI. Dr. O.Univ.Prof.	Lektor ^b
LOCKER	Alfred	Dr.	Ao.Univ.Prof. i.R.
MAJEROTTO	Walter	Dr. Univ.Doz.	Lektor ^{#,c}
MARKYTAN	Manfred	Dr. Univ.Doz.	Lektor ^c
SCHALLER	Peter	Dr. Univ.Doz.	Lektor
SEKE	Josip	Dr. Univ.Doz.	Lektor [#]
SIGMAR	Dieter	Dr. Univ.Doz.	Lektor ^{#,d}
SKARKE	Harald	Dr. Univ.Doz.	Lektor ^e

[†] Emeritus

[#] tit.a.o.Univ.Prof

^a Institut für Theoretische Physik, Universität Wien

^b Institut für Materialphysik, Universität Wien

^c Institut für Hochenergiephysik der Österr. Akad. d. Wissenschaften

^d Massachusetts Institute of Technology (MIT), Cambridge, Massachusetts (USA)

^e Humboldt Universität Berlin, Berlin (Deutschland)

Kapitel 2

Budget

2.1 Budgetmittel des Bundes (Kalenderjahr 2000)

Ordentliche Dotation:	1.403.900.–
Außerordentliche Dotation:	307.886.–
Außerordentliche Dotation: (Burgdörfer)	1.096.014.–
<hr/>	
Gesamt:	2.807.800.–

2.2 Neue Projekte

1. **Rainer Dirl, Gerhard Kahl**
 Mitarbeiter: E. Schöll-Paschinger
Computational Materials Science (1. Verlängerung)
 Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) WK W004
 Gesamtsumme: ATS 1.088.666.– Zusage: 1.4.2000
2. **Joachim Burgdörfer**
 Mitarbeiter:
Advanced Light Sources
 Teilprojekt P10, Sonderforschungsbereich FWF-016,
 Gesamtsumme: ATS 2,496.000.– Zusage: 12.10.1999
3. **Gerhard Kahl**
 Mitarbeiter: E. Paschinger
Structure and thermodynamics of binary liquids in porous media
 österreichischer Akademischer Austauschdienst (OAD) Projekt-Nr.: IV.6
 Gesamtsumme: ATS 38.000.– Zusage: 21.10.1999
4. **Joachim Burgdörfer**
Highly-Charged Ions (Zusatz)
 Fonds z. Förderung der wiss. Forschung (FWF) P12470-TPH
 Gesamtsumme: ATS 16.000.– Zusage: 5.4.2000
 Projektabschluss: 5.4.2000
5. **Gerhard Kahl**
Structure, Thermodynamics, and Phase Transitions in Polydisperse Liquid Mixtures
 Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) P14371-TPH
 Gesamtsumme: ATS 1.218.553.– Zusage: 12.5.2000
6. **Maximilian Kreuzer**
 Mitarbeiter: J.-G. Zhou
Dualities between string theories / supergravities and gauge theories
 Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) M535-TPH-berbrckung
 Gesamtsumme: ATS 138.500.– Zusage: 6.7.2000
7. **Joachim Burgdörfer**
Highly-Charged Ions (Zusatz)
 Fonds z. Förderung der wiss. Forschung (FWF) P12470-TPH
 Gesamtsumme: ATS 19.000.– Zusage: 7.7.2000
 Projektabschluss: 5.8.2000
8. **Joachim Burgdörfer**
Highly-Charged Ions (Zusatz)
 Fonds z. Förderung der wiss. Forschung (FWF) P12470-TPH
 Gesamtsumme: ATS 18.000.– Zusage: 19.7.2000
 Projektabschluss: 24.11.2000

Gesamtsumme: 5.032.719,–

Kapitel 3

Projekte

3.1 Laufende Projekte

1. **Joachim Burgdrfer**

Mitarbeiter: K. Tksi

Classical and quantum models for the interaction of highly charged ions with surfaces

Fonds zur Frderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) P12470-TH

Gesamtsumme: ATS 1.498.000.– Zusage: 29.9.1997

2. **Joachim Burgdörfer**

Mitarbeiter: K. Tókési, L. Wirtz

Classical and quantum models for the interaction of highly charged ions with surfaces (3. Jahr)

Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) P12470-TH

Gesamtsumme: ATS 840.000.– Zusage: 20.4.1999

3. **Wolfgang Kummer**

Mitarbeiter: M. Ertl, D. Grumiller

Quantentheorie schwarzer Lcher

Fonds zur Frderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) P12815-TPH

Gesamtsumme: ATS 1.380.800.– Zusage: 23.3.1998

4. **Gerhard Kahl**

Mitarbeiter: S. Jorge, S. Leroch

Phasenverhalten von Kolloiden

Fonds 150 Jahre TU Wien

Gesamtsumme: ATS 100.000.– Zusage: 25.3.1998

5. **Wolfgang Kummer**

Mitarbeiter: H. Schtz

Einsteingravitation

Jubilumsfonds der Oesterreichischen Nationalbank (OENB) 7304

Gesamtsumme: ATS 300.000.– Zusage: 26.6.1998

6. **Gerhard Kahl**

Mitarbeiter: A. Lang, A. Reiner

Phasenbergng in einfachen Flssigkeiten

Fonds zur Frderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) P13062-TPH

Gesamtsumme: ATS 1.412.000.– Zusage: 7.7.1998

7. Manfred Schweda

Mitarbeiter: E. Lopez-Manzanares

Branes, duality and supersymmetric gauge theories

Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) P13126-TPH

Gesamtsumme: ATS 984.000.– Zusage: 21.10.1998

8. Manfred Schweda

Mitarbeiter: K. Landsteiner, T. Pisar, A. Kling

Twisted supersymmetry in topological field models of Schwarz

Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) P13125-TPH

Gesamtsumme: ATS 984.000.– Zusage: 22.10.1998

9. Wolfgang Kummer

Mitarbeiter: A. Schwarz

Toponiumschwelle

Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) P13502-TPH

Gesamtsumme: ATS 857.269.– Zusage: 18.3.1999

10. Manfred Schweda

Mitarbeiter: J. Grimstrup

Generalized topological field model

154-030.0002/BC

Gesamtsumme: ATS 864.000.– Zusage: 9.4.1999

11. Gerhard Kahl

Mitarbeiter: A. Reiner

Phasenübergänge in einfachen Flüssigkeiten (Zusatz)

Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) P13062-TPH

Gesamtsumme: ATS 328.000.– Zusage: 28.4.1999

12. Maximilian Kreuzer

Mitarbeiter: A. Kling

BRST Kohomologie, Superstring und Picture Changing

Jubilumsfonds der Oesterreichischen Nationalbank (OENB) 7731

Gesamtsumme: ATS 100.000.– Zusage: 25.6.1999

13. Joachim Burgdrfer

Mitarbeiter: E. Persson

Quantenmechanische Transporttheorie

Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) P13785-TPH

Gesamtsumme: ATS 2.583.440.– Zusage: 7.7.1999

3.2 Abgeschlossene Projekte

1. Gerhard Kahl

Mitarbeiter: C. Tutschka, S. Leroch, C. Likos

Density-functional theory for confined fluids

Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) P11194-PHY

Gesamtsumme: ATS 792.000.– Zusage: 12.12.1995 , Projektabschluss: 31.1.2000

2. Maximilian Kreuzer

Mitarbeiter: H. Zerrouki, D. Kahlina, A. Kling, T. Pisar

Cohomology and non-perturbative string theories

Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) P11582-PHY

Gesamtsumme: ATS 1.296.000.– Zusage: 14.5.1996 , Projektabschluss: 30.9.2000

3. Gerhard Kahl

Mitarbeiter: A. Lang, A. Reiner, S. Leroch

Struktur und Thermodynamik von Flüssigkeiten in porösen Medien

Jubilumsfonds der Oesterreichischen Nationalbank (OENB) 6241

Gesamtsumme: ATS 300.000.– Zusage: 19.12.1996 , Projektabschluss: 31.10.1999

4. Maximilian Kreuzer

Mitarbeiter: M. Nikbakht-Tehrani

Heterotic String Vacua and Dualities

Jubilumsfonds der Oesterreichischen Nationalbank (OENB) 6632

Gesamtsumme: ATS 440.000.– Zusage: 27.6.1997 , Projektabschluss: 30.9.2000

5. Wolfgang Kummer

Mitarbeiter: I. Bandos

Supersymmetric Embedding Approach for Superstrings and High Dimensional Superbranes

Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) M472-TPH

Gesamtsumme: ATS 310.000.– Zusage: 15.12.1997 , Projektabschluss: 30.9.1999

6. Manfred Schweda

Mitarbeiter: B. Hackl

Neue Symmetrien in topologischen und nichttopologischen Feldmodellen

Jubilumsfonds der Oesterreichischen Nationalbank (OENB) 6584

Gesamtsumme: ATS 220.000.– Zusage: 27.6.1997 , Projektabschluss: 31.10.1999

7. Gerhard Kahl

Mitarbeiter: C. Tutschka

Density-functional theory for confined fluids (Zusatz)

Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) P11194-TPH

Gesamtsumme: ATS 328.000.– Zusage: 11.5.1998 , Projektabschluss: 31.1.2000

8. Maximilian Kreuzer

Mitarbeiter: D. Kahlina

(0,2) String Compactifications

Schweizer Nationalfonds 83EU-053227

Gesamtsumme: ATS 782.690.– Zusage: 11.5.1998 , Projektabschluss: 30.9.2000

9. Rainer Dirl, Gerhard Kahl

Mitarbeiter: E. Paschinger

Computational Materials Science

Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) WK W004

Gesamtsumme: ATS 631.333.– Zusage: 30.10.1998 , Projektabschluss: 31.3.2000

10. Maximilian Kreuzer

Mitarbeiter: J. Zhou

Dualities between string theories / supergravities and gauge theories

Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) M535-TPH

Gesamtsumme: ATS 310.000.– Zusage: 18.3.1999, Projektabschluss: 30.9.2000

11. Peter Kasperkovitz

Mitarbeiter: C. Tutschka

Clusterbildung und Phasengleichgewichte

Jubilumsfonds der Oesterreichischen Nationalbank (OENB) 7926

Gesamtsumme: ATS 100.000.– Zusage: 25.6.1999 , Projektabschluss: 30.9..2000

12. Joachim Burgdrfer

Mitarbeiter: J. Seke

Quanteninterferenz und phasenabhängige Spektren von kohärent angetriebenen Atomen

Jubilumsfonds der Oesterreichischen Nationalbank (OENB) 7720

Gesamtsumme: ATS 200.000.– Zusage: 25.6.1999 , Projektabschluss: 30.6.2000

13. Joachim Burgdrfer*Highly-charged ion-surface interactions (Zusatz)*

Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) P12470-TPH

Gesamtsumme: ATS 14.000.– Zusage: 1.9.1999 , Projektabschluss: 3.10.1999

14. Peter Kasperkovitz

Mitarbeiter: C. Tutschka

*Clusterbildung und Phasengleichgewichte*UOG93 3 u. 4 (5th International Wigner Symposium)

Gesamtsumme: ATS 200.000.– Zusage: 20.9.1999 , Projektabschluss: 31.5.2000

Kapitel 4

Forschungstätigkeit

4.1 Fundamentale Wechselwirkungen

Im Mikrokosmos unterhalb der Größe eines Kernbausteins (Proton, Neutron) und bei Stoßenergien ab etwa 1 Milliarde Elektronvolt, wie sie von Großbeschleunigern geliefert werden, werden für die Elementarteilchen die Gesetze der Quantenfeldtheorie wirksam. Die Wechselwirkungen der fundamentalen Materiequanten (Quarks, Leptonen) werden durch Eichbosonen vermittelt: Die Photonen übernehmen diese Rolle für die elektromagnetischen Kräfte, die 1983 entdeckten W- und Z-Bosonen für die sogenannten schwachen Wechselwirkungen, während die Gluonen und Gravitonen für die starken Kernkräfte, bzw. für die Schwerkraft zuständig sind. Eine Vereinigung von schwachen und elektromagnetischen Wechselwirkungen in der elektroschwachen Theorie ist bereits geglückt. Die Formulierung eines alle Wechselwirkungen umfassenden Fundamentalgesetzes ist jedoch noch immer nicht gelungen. Allerdings stellt die Theorie der Strings und Branes eine hierfür sehr attraktive Möglichkeit dar.

4.1.1 Quantenfeldtheorie

Die Beschreibung der fundamentalen Wechselwirkungen erfolgt durch Eichtheorien, d.h. jene Größen, die für die mathematische Formulierung der Grundgleichungen verwendet werden, können umgeeicht werden, ohne die Vorhersagen für experimentelle Daten zu verändern. Das Grundproblem einer Quantenfeldtheorie von Eichfeldern ist die Notwendigkeit, die Freiheit der Umeichung zunächst in geeigneter Weise (durch eine Eichfixierung) zu eliminieren. Natürlich dürfen physikalisch beobachtbare Größen nicht von dieser Eichfixierung abhängen. Besitzt eine Eichtheorie noch weitere Symmetrien, die zu Erhaltungsgrößen führen (einfache Beispiele für derartige Erhaltungsgrößen sind die Energie oder die elektrische Ladung), so können diese durch Quanteneffekte gestört werden. Diese Störungen werden als Anomalien bezeichnet. Anomalien in der Eichsymmetrie selbst widersprechen einer konsistenten Feldtheorie, während andere (äußere) Anomalien erlaubt sind und zu physikalisch beobachtbaren Effekten führen können.

Topologische Vektorsupersymmetrie

Del Cima, Grimstrup, Landsteiner, Pizar, Schweda

Topologische Feldmodelle zeichnen sich durch die Existenz einer besonderen Art von Supersymmetrie aus. Die Generatoren dieser Supersymmetrie transformieren nicht als Spinoren unter der Rotationsgruppe sondern als ein Skalar und ein Vektor. Diese topologische Supersymmetrie kann durch einen "Twist" der gewöhnlichen, spinoriellen SUSY erzeugt werden, wie z.B. bei der topologischen Yang-Mills Theorie in vier Dimensionen. Topologische Feldmodelle vom Schwarz-Typ besitzen diese Symmetrie a priori nicht. Die eichfixierte Wirkung dieser Theorien hat aber eine fermionische Vektorsymmetrie, deren anti-Kommutator zusammen mit der BRS-Symmetrie Translationen erzeugt. Am Beispiel der dreidimensionalen Chern-Simons Theorie und des zweidimensionalen BF-Modells konnte gezeigt werden, daß diese Symmetrien zusammen mit der Anti-BRS Symmetrie die getwistete $N = 4$ SUSY erzeugen. Es konnte gezeigt werden, daß es nur im abelschen Fall möglich ist, den Twist rückgängig zu machen. Weiters wurde die Existenz einer neuen bislang in der Literatur nicht bekannten, fermionischen Pseudoskalarsymmetrie im zweidimensionalen BF-Modell nachgewiesen.

Paper: 13, 22

Projekt: FWF P13125-TPH

Getwistete Supersymmetrie in topologischen Feldmodellen

Del Cima, Landsteiner, Schweda

Die Frage nach der Existenz einer getwisteten Supersymmetrie in topologischen Feldmodellen des Schwarz Typs soll in beliebigen Raumzeitdimensionen untersucht werden. Topologische Eichfeldmodelle vom Schwarz-Typ besitzen alle eine gemeinsame Eigenschaft, denn neben der entsprechenden Eichsymmetrie im Gewand der BRS-Symmetrie existiert auch noch die sogenannte topologische Vektorsupersymmetrie, die für die störungstheoretische Endlichkeit verantwortlich ist. Die BRS-Symmetrie und die topologische lineare Vektorsupersymmetrie bilden, gemeinsam mit den Translationen, eine graduierte Algebra im Sinne von Wess und Zumino. Der momentane Wissensstand zeigt, daß im 3-dimensionalen Chern-Simons Feldmodell die "Twistung" nur für das abelsche Feldmodell möglich ist. Kürzlich wurden in der Literatur auch höher dimensionale topologische Feldmodelle, die eine getwistete Version erlauben, untersucht, ohne auf die Frage einer möglichen Existenz einer linearen Vektorsupersymmetrie einzugehen. Dies soll im gegenständlichen Projekt überprüft werden, um auch für diese Feldmodelle die störungstheoretische Endlichkeit im Rahmen der algebraischen Renormierung zu beweisen.

Projekt: FWF P13125-TPH, FWF P11654-PHY

Dimensionale Reduktion von topologischen Feldmodellen

Del Cima, Grimstrup, Schweda

In systematischer Weise sollen höher dimensionale BF-Modelle und Chern-Simons Feldmodelle dimensional reduziert werden, um festzustellen, wie sich die Symmetriehalte des ursprünglichen Feldmodells auf das reduzierte System auswirken. In einem ersten Schritt wird das vierdimensionale BF-Modell, bei dem erstmals "Geister für Geister" benötigt werden, untersucht. Ein weiterer Aspekt der dimensional Reduktion besteht darin, daß auch die topologische Vektorsupersymmetrie, die für die störungstheoretische Endlichkeit verantwortlich ist, in das reduzierte System einwirkt und so den Symmetriehalt der reduzierten Theorie erhöht.

Paper: 11

Projekt: FWF P13125-TPH, FWF P11654-PHY

Topologische Feldmodelle und nichtkommutative Raum-Zeit Strukturen

Bichl, Grimstrup, Putz, Schweda

Die Diskussion von topologischen Quantenfeldtheorien vom Schwarzschen Typ, die durch eine störungstheoretische Endlichkeit charakterisiert sind, im Rahmen von nichtkommutativen Geometrien waren bislang in der Literatur kaum vorhanden.

Durch eine umfassende Untersuchung der Chern-Simons Theorie in einer 3-dimensionalen nichtkommutativen Raumzeit wurde diese Lücke geschlossen. Dabei wurde eine Reihe von bemerkenswerten neuen Resultaten erzielt. Es konnte gezeigt werden, daß die störungstheoretische Endlichkeit der gewöhnlichen Theorie erhalten bleibt und daß der Limes des “Deformierungsparameters” gegen Null wohldefiniert ist, d.h. in diesem Grenzfall erhält man die Physik des kommutativen Falles.

Paper: 8

Supersymmetrische Strukturen in kommutativen und nichtkommutativen Quantenfeldtheorien (Internationales Großprojekt)

Constandinis¹, Del Cima², Franco², Gieres³, Grimstrup⁴, Grosse⁵, Helayël-Neto², Piguet¹, Popp⁶, Schweda⁶, Wulkenhaar⁵

Das Konzept der Raum-Zeit als differenzierbare Mannigfaltigkeit kann nicht in den Bereich extrem kleiner Distanzen (Plancksche Skala) extrapoliert werden. Aus Konsistenzgründen werden die Raum-Zeit-Koordinaten nichtkommutativ und verändern somit drastisch die entsprechenden Quantenfeldtheorien. Die Feldprodukte einer Wirkung müssen durch “Moyal-Weyl” deformierte \star -Produkte ersetzt werden. Dies impliziert, daß die störungstheoretische Realisation der deformierten Quantenfeldtheorie völlig neue Verhaltensschemata zeigt. Es kommt zum “Mixing” von ultravioletten und infraroten Divergenzen, die den Prozeß der Renormierung entscheidend beeinflussen.

In einem ersten Schritt ist die Diskussion von topologischen Quantenfeldtheorien im Rahmen nichtkommutativer Geometrien vorgesehen. Insbesondere sollen höher dimensionale topologische Feldmodelle in ihrer quantisierten Form auf kommutative und nichtkommutative Geometrien untersucht werden. Die Rolle der linearen Vektorsupersymmetrie, die manchmal auf eine störungstheoretische Endlichkeit führt, soll ebenfalls am Quantenniveau untersucht werden.

In einem zweiten Abschnitt sollen systematisch alle supersymmetrischen Feldmodelle (im Superfeldformalismus) im Rahmen von nichtkommutativen Raum-Zeit-Koordinaten am Quantenniveau untersucht werden, um die Frage des “IR-UV-Mixings” zu klären.

Eine dritte Fragestellung befaßt sich mit der möglichen Existenz eines sogenannten Quanten-Wirkungs-Prinzips (QWP). In herkömmlichen Feldtheorien ist das QWP ein sehr nützliches Instrumentarium der algebraischen Renormierung, da man damit mögliche “Anomalien” aufspüren und so vorhersagen kann, ob die klassischen Symmetriehalte am Quantenniveau überleben. Eine ähnliche Fragestellung soll im Rahmen nichtkommutativer Raum-Zeit-Strukturen untersucht werden. Dies soll an Hand eines Φ^4 -Modells untersucht werden.

¹Universidade Federal do Espírito Santo (UFES), Vitória, Brasilien

²Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF), Rio de Janeiro, und Grupo de Física Teórica (GFT), Universidade Católica de Petrópolis (UCP), Petrópolis, RJ, Brasilien

³Institut de Physique Nucléaire de Lyon, Université Claude Bernard, Lyon, Frankreich

⁴The Danish Research Agency, Aarhus, Dänemark

⁵Institut für Theoretische Physik, Universität Wien

⁶Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Wien

4.1.2 Gravitation

Schwerkraft (Gravitation) wird durch die allgemeine Relativitätstheorie, alle anderen Kräfte werden durch Quantenfeldtheorien beschrieben. Die Formulierung einer einheitlichen Theorie aller fundamentalen Kräfte erfordert ein besseres Verständnis der Gravitationstheorie: Das Auftreten singulärer Lösungen sowie die Schwierigkeiten bei der Formulierung einer Quantentheorie der Gravitation haben es bisher unmöglich gemacht, die Gravitation widerspruchsfrei in den Formalismus der Quantenfeldtheorie einzubauen.

Gravitation in zwei Dimensionen

Ertl, Grumiller, Katanaev ⁷, Kummer, Strobl ⁸, Vassilevich ⁹

Die Betrachtung zweidimensionaler verallgemeinerter Gravitationstheorien erlaubt es (konzeptionelle) Probleme der Quantengravitation wie etwa das Problem der Zeit und das Verhalten schwarzer Löcher anhand mathematisch einfacher Modelle zu diskutieren. Auch sphärisch symmetrische vierdimensionale Allgemeine Relativitätstheorie fällt in diesen Rahmen. Systeme mit dynamischer Torsion, Dilatongravitation, R^n -Gravitation lassen sich in $1 + 1$ Dimensionen allgemein als Spezialfälle von „Poisson-Sigma-Modellen“ (PSM) auffassen, d.h. in einer sogenannten „first order“-Formulierung beschreiben. Damit gelang im Berichtsjahr die Quantisierung der Gravitation in $1+1$ Dimensionen für jene allgemeine Modellklasse, die auch das Schwarze Loch enthält. Während die geometrischen Variablen exakt ausintegriert wurden, können die Quanteneffekte der Materiefelder in einer systematischen Störungsentwicklung angegeben werden. Als Effekt niedrigster Ordnung erlaubt die Betrachtung der Streuung von zwei skalaren Feldern durch die Vermittlung der Gravitation die Berechnung eines Matrixelements, bei dem der Effekt eines „virtuellen schwarzen Loches“ als Zwischenzustand gezeigt wurde. Die Konsequenzen des in $d = 2$ gültigen allgemeinen Erhaltungssatzes wurden untersucht.

Zu der vollständigen Lösung des Problems der Hawking-Strahlung aus der sphärisch reduzierten Theorie wurde ein zusammenfassender Bericht veröffentlicht.

Bei der Behandlung allgemeiner zweidimensionaler Supergravitationstheorien konnten durch die Zurückführung auf ein graduiertes Poisson-Sigma-Modell entscheidende Fortschritte erzielt werden.

Vortrag: A2, A6, A3, A4, A5, A7, A8

Paper: 14, 20, 23, 15, 19

Projekt: FWF P12815-TPH

⁷Steklov Institute, Moskau

⁸Univ. Jena

⁹Univ. Leipzig

Energie–Impuls–Tensor von Geometrien schwarzer LöcherAichelburg¹⁰, Balasin

Im Rahmen der allgemeinen Relativitätstheorie werden Geometrien schwarzer Löcher als Vakuumlösungen der Einsteinschen Feldgleichungen behandelt. Dabei entfernt man die singulären Regionen der Geometrie aus der Raumzeit. Die durchgeführten Untersuchungen zeigen jedoch, daß dies bei Verwendung von distributionellen Methoden nicht nötig ist. Die singulären Regionen erweisen sich vielmehr als Träger der Energie-Impulsverteilung, welche die Raumzeitkrümmung erzeugt. Diese Interpretation ist auch in Bezug auf die Hawkingstrahlung von Bedeutung, da im Rahmen des üblichen Zugangs ein selbst bei vollständiger Evaporation des schwarzen Lochs ein scheinbar unmotivierter Riß in der Raumzeit zurückbleibt. Außerdem gestattet die Kenntnis des Energie-Impuls Tensors die widerspruchsfreie Berechnung der ultrarelativistischen Limesgeometrien, die für die Beschreibung von Teilchenstreuung im Bereich der Planck-Energie von Bedeutung sind.

Unter Verwendung der verallgemeinerten Kerr-Schild Klasse konnten diese Untersuchungen auf Schockwellen in allgemeinen (stationären) Geometrien ausgeweitet werden. Im Speziellen gelang die Aufstellung einer verallgemeinerten ‘tHooft-Dray Gleichung, welche das, von einem Teilchen am Horizont eines allgemeinen stationären schwarzen Lochs, erzeugte Gravitationsfeld beschreibt.

Außerdem konnte ein “distributioneller”, konformer Rand, zusammen mit den entsprechenden asymptotischen Krümmungsgrößen, für die ultrarelativistische Schwarzschildgeometrie konstruiert werden.

Vortrag: C1

Paper: 3, 1

Einsteingravitation in einer Formulierung erster Ordnung

Kummer, Schütz

Eine Formulierung der Einsteinschen Gravitationstheorie mit ausschließlich ersten Ableitungen der Cartan Variablen scheint vielversprechende neue Einsichten bezüglich Hamilton Formalismus und Quantisierung zu liefern.

Projekt: OENB 7304

¹⁰Universität Wien

4.1.3 Strings und zweidimensionale Feldtheorien

Seit der Mitte der 80-er Jahre hat sich eine neue Theorie der fundamentalen Wechselwirkungen entwickelt, die unter dem Namen Stringtheorie bekannt ist. Die markanteste Neuheit in dieser Theorie ist die Annahme, daß die elementaren Teilchen Schwingungsmoden von eindimensional ausgedehnten Objekten, sogenannten Strings, sind. Die Strings überstreichen in ihrer Zeitentwicklung Flächen beliebiger Topologie, genannt Weltflächen, was zum Studium zweidimensionaler Quantenfeldtheorien führt. Konsistenzüberlegungen erzwingen, daß die Dimension des sogenannten Zielraumes, in dem sich die Strings bewegen, 26 (für bosonische Strings) oder 10 (für Superstrings) sein muß. In dieser Dimension entsteht eine vermutlich endliche Theorie, die alle Naturkräfte vereinheitlichen könnte. Um zu unserem vierdimensionalen Raum-Zeit-Kontinuum zu gelangen, müssen die zusätzlichen Dimensionen knapp nach dem Urknall zu einem internen Raum von der Größenordnung der Planck'schen Länge (10^{-35} Meter) "eingerollt" worden sein. Die Geometrie und Topologie dieser internen Räume bestimmen weitgehend die physikalischen Eigenschaften unserer vierdimensionalen Raum-Zeit.

Torische Geometrie und Calabi-Yau-Mannigfaltigkeiten

Kreuzer, Riegler, Skarke ¹¹

Für die torische Beschreibung von Calabi-Yau-Mannigfaltigkeiten spielen 4-dimensionale reflexive Polyeder eine entscheidende Rolle. Diese konnten nun vollständig klassifiziert werden: Es gibt 473800776 solche Polyeder, die in sogenannten Mirror-Paaren auftreten. 30108 dieser Objekte sind selbstdual. Die Mirror-Symmetrie ist eine wichtige physikalische Eigenschaft, die auch interessante und weitreichende mathematische Konsequenzen hat. Insbesondere folgt aus unseren Ergebnissen, daß der Modulraum sämtlicher torischer Calabi-Yau-Mannigfaltigkeiten und somit der Modulraum sämtlicher durch Kompaktifizierung auf diesen Mannigfaltigkeiten entstehenden 4-dimensionalen heterotischen Stringtheorien zusammenhängend ist. Weiters wurden Faserungsstrukturen studiert, die die Grundlage für F-Theorie-Kompaktifizierungen und Dualitäten zwischen verschiedenen Stringtheorien bilden. Während es bisher nur für Hyperflächen systematische Untersuchungen gibt, haben wir nun ein Programmpaket entwickelt, mit dem torische Calabi-Yau Varietäten höherer Kodimension konstruiert und analysiert werden können.

Vortrag: A1

BRST Kohomologie von Dirichlet Superstrings

Kling, Kreuzer, Brandt ¹²

Die vollständige Klassifikation von Wirkungen, Anomalien und Deformationen von Dirichlet Superstrings basiert auf der Konstruktion der 2-dimensionalen konformen Supergravitation gekoppelt an supersymmetrische Yang-Mills Felder. Mit Hilfe der verallgemeinerten Konnexionen und Tensorfelder für dieses Modell wurde die allgemeinste Wirkung aus der Kohomologie des BRST-Operators bei Geistzahl 2 berechnet. Dies erlaubt die vollständige Bestimmung der BRST-Transformationen der Antifelder, mit deren Hilfe die BRST-Kohomologie bei Geistzahl 0 und 1 berechnet wurde, welche in direktem Zusammenhang mit den Symmetrien und erhaltenen Strömen der betrachteten Modelle stehen.

Vortrag: B1

Projekt: ÖNB 7731, FWF P11582-PHY

¹¹Humboldt Universität Berlin

¹²Universität Hannover

Holographisches Prinzip & AdS/CFT Korrespondenz

Kreuzer, Zhou

Eine konsistente Theorie, die Quantenmechanik und Allgemeine Relativität vereinigt, erfordert neue Konzepte und Ideen. So werden zum Beispiel derzeit in der String-Theorie das holographische Prinzip und nicht-kommutative Geometrie eingehend untersucht: Die AdS/CFT Korrespondenz stellt einen Zusammenhang zwischen Supergravitation (bzw. geschlossener String-Theorie) im 5-dimensionalen anti-de Sitter Raum und supersymmetrischer Yang-Mills Theorie am 4-dimensionalen Rand her. Im Lichte dieser Korrespondenz ist es wichtig, die Formulierung von Superstrings und supersymmetrischen p-Branes auf diesen gekrümmten Räumen besser zu verstehen. Da $AdS_2 \times S^2$ eng mit realistischen 4-dimensionalen schwarzen Löchern zusammenhängt und supersymmetrische 0-Branes in der M(atric) Theorie eine fundamentale Rolle spielen, untersuchten wir die Eigenschaften der Eichfixierung der κ -Symmetrie von 0-Branes auf diesem Hintergrund in Killing-Eichungen.

Paper: 17, 18

Projekt: FWF M535-TPH

Geometrie und konforme Feldtheorie

Kreuzer, Kahlina

Strings basierend auf einer konformen Feldtheorie mit (0,2) Supersymmetrie haben phänomenologisch interessante Eichgruppen. Solche Feldtheorien können entweder mit algebraischen oder mit geometrischen Methoden konstruiert werden. Es wurde eine große Klasse von (0,2) Modellen herangezogen, für die eine algebraische und vermutlich auch eine geometrische Realisierung existiert. Damit können einerseits Vermutungen über die Eigenschaften der geometrischen Konstruktionen getestet und andererseits die physikalischen Eigenschaften der Modelle in einem größeren Parameterbereich analysiert werden. Der verwendete Simple Current Mechanismus ermöglicht eine modellunabhängige Analyse und insbesondere die Untersuchung von Theorien, die durch ein Landau-Ginzburg Potential definiert sind.

Projekt: FWF P11582-PHY, SNF 83EU-053227

Strings und BranesBandos¹³, Kummer, Vassilevich¹⁴

Die neuesten Ergebnisse zu einer Theorie, die alle bekannten Wechselwirkungen umfassen soll, legen nahe, neben den sogenannten Strings auch höherdimensionale Objekte (Membranen und höhere "Branes") zu betrachten. Im Berichtsjahr wurden hauptsächlich Systeme gekoppelter D-branes untersucht. Der offene bosonische String wurde in einem allgemeinen Hintergrund behandelt. Dabei ergab sich ein möglicher neuer Mechanismus zur Entstehung von D-Branes.

Paper: 2, 4, 7, 5, 6, 21

¹³Kharkov Institute of Technology, Ukraine¹⁴Leipzig, St. Petersburg

4.1.4 Elementarteilchenphysik und Kosmologie

In diesem Fachgebiet werden jene Arbeitsbereiche der theoretischen Elementarteilchenphysik zusammengefaßt, bei denen weniger die Untersuchung theoretischer Grundfragen als eine eher direkte Relevanz für experimentelle Interpretationen im Vordergrund stehen, oder aber auch Anwendungen des Standardmodells auf die Kosmologie, die zur Erklärung von Beobachtungen führen.

Ein Schwerpunkt des Fachgebietes lag bei der Untersuchung jener kurzlebigen Bindungszustände, die das 1995 entdeckte Topquark eingehen kann. Ein weiterer betraf das Verhalten von Quantenfeldtheorien bei endlichen Temperaturen: Es liegen nun erste Ergebnisse von Experimenten vor, in denen schwere Atomkerne (und nicht nur einzelne Elementarteilchen) bei den höchsten erreichbaren Energien zur Kollision gebracht werden. Für winzigste Bruchteile von Sekunden können so Zustände mit hoher Energiedichte simuliert werden, wie sie im Kosmos kurz nach dem Urknall auftraten. Quarks und die Eichquanten der starken Wechselwirkungen (Gluonen) müssen unter solchen Bedingungen nicht mehr in den üblichen Elementarteilchen (Proton, Neutron usw.) eingeschlossen sein, sondern können nach einem Phasenübergang ein sogenanntes Quark-Gluon-Plasma bilden.

Die Teilchenphysik im frühen Universum kann durch Quantenfeldtheorie bei endlicher Temperatur gut beschrieben werden. So ist das Verständnis des Quark-Gluon Plasmas wichtig für den Quark-Hadron Phasenübergang, bei dem die Nukleonen entstehen. Die Inhomogenität der Nukleosynthese bestimmt die Baryondichte im Universum. Ein anderer Phasenübergang, jener der elektroschwachen Theorie, könnte für den

Überschuß von Materie gegenüber Antimaterie im Kosmos verantwortlich sein. Die Entwicklung von Dichteschwankungen (mit Satelliten im kosmischen Mikrowellen-Hintergrund beobachtbar) wird durch Gravitationskräfte zwischen thermischen Teilchen beschrieben.

Gebundene Zustände und Toponiumphysik

Kummer, A. Schwarz

Neben Streuproblemen bei hohen Energien, chiraler oder "heavy quark" Störungstheorie erlaubt auch die Betrachtung schwach gekoppelter gebundener (Quarkonium-) Systeme für nichtabelsche Eichtheorien (Quantenchromodynamik) eine störungstheoretische Behandlung. Der hohe Wert für die Masse des Topquarks bedeutet eine Chance, streng feldtheoretische Methoden (Bethe-Salpeter Gleichung für schwache Kopplung) in einem Top-Antitop System anwenden zu können, da der rasche Zerfall keine Zeit für Confinementeffekte läßt. Andererseits muß man sich aber hier erstmals tiefgehend mit der Behandlung inhärent instabiler Teilchen im Formalismus der Quantenfeldtheorie befassen.

Projekt: FWF P13502-TPH

Quantenfeldtheorie bei endlicher TemperaturBlaizot¹⁵, Iancu¹⁶, Kraemmer, Rebhan

Bei ultrarelativistischen Temperaturen versagen die herkömmlichen störungstheoretischen Methoden ab einer bestimmten Ordnung der Störungsreihe und es kommt zu Infrarotdivergenzen. Diese können teilweise durch Resummation von kollektiven Phänomenen (Debye-Abschirmung, Plasmonendispersion, Landau-Dämpfung) beseitigt werden, wobei seit Anfang der 90er-Jahre ein systematischer Zugang durch die HTL (hard-thermal-loop) Resummation existiert. Die solchermaßen resummierte Störungsreihe zeigt allerdings schlechte Konvergenzeigenschaften und leidet zudem in nicht-Abelschen Eichtheorien unter Infrarotdivergenzen im magnetostatischen Sektor. In Zusammenarbeit mit J.-P. Blaizot (Saclay) and E. Iancu (CERN) konnte eine erweiterte HTL-Resummation von thermodynamischen Potentialen für die nicht-Abelsche Quantenchromodynamik entwickelt werden, die die Thermodynamik der starken Wechselwirkung auf die Spektraleigenschaften von nur schwach wechselwirkenden gluonischen und fermionischen Quasiteilchen zurückführt und dadurch die schlechten Konvergenzeigenschaften herkömmlich resummierter Störungsreihen drastisch verbessert. In den Fällen, wo Gittersimulationen mit verlässlichen Kontinuumsextrapolationen existieren, konnte durch numerische Auswertung und Vergleich gezeigt werden, daß ab Temperaturen vom doppelten der kritischen Temperatur eine quantitativ gute Übereinstimmung erreicht wird. Damit eröffnet sich die Möglichkeit, mit analytischen, semi-perturbativen Methoden die Zustandsgleichungen des Quark-Gluon-Plasmas, für dessen Existenz es seit kurzem mehr oder weniger direkte experimentelle Hinweise gibt, aus den fundamentalen Gleichungen der QCD zu gewinnen.

Vortrag: A10, A5, A9, B1, B4

Paper: 9, 10

Nichtgleichgewichtsthermodynamik eines kosmologischen Phasenübergangs zweiter OrdnungIpp, Rebhan, Woll¹⁷, Yaffe¹⁷

In skalaren Feldtheorien mit Higgs-Mechanismus kommt es bei hinreichend hohen Temperaturen durch das Auftreten von thermischen Massen zu einer Symmetrierestoration. Bei rein quartischen Wechselwirkungen ist der entsprechende Phasenübergang von zweiter Ordnung und im Gleichgewicht durch divergierende Korrelationslängen charakterisiert. Bei realen Phasenübergängen kommt es notwendigerweise zu wichtigen Nichtgleichgewichts-Effekte, die bei kosmologischen Phasenübergängen 2. Ordnung vor allem durch die zeitabhängige Raumzeit-Metrik induziert werden. Diese haben inhärent nicht-linearen Charakter und können auch in den einfachsten Modellen normalerweise nur numerisch behandelt werden. In Zusammenarbeit mit Carl Woll und Lawrence Yaffe wurden analytisch behandelbare Grenzfälle untersucht und mit numerischen Lösungen verglichen.

¹⁵CE Saclay, Gif-sur-Yvette¹⁶Theory Division, CERN, Genf¹⁷University of Washington (Seattle, USA)

Der kosmologische QCD Phasenübergang

Ignatius ¹⁸, Schmid ¹⁹, D. Schwarz, Widerin ²⁰

Im kosmologischen QCD Phasenübergang wird aus dem Quark-Gluon-Plasma, das bei Temperaturen über 200 MeV existiert, ein Gas von Hadronen. Falls der QCD Phasenübergang von erster Ordnung ist, könnten Inhomogenitäten in der Energiedichte dunkler, kinetisch entkoppelter Materie verstärkt werden. Dies hätte zur Folge, daß kalte dunkle Materie auf kleinen Skalen klumpt. Die Häufigkeiten der primordialen Elemente weichen von den Vorhersagen der homogenen Nukleosynthese ab, falls die Dichtefluktuationen im kosmischen Plasma eine wichtige Rolle bei der Nukleation von Blasen während des Phasenübergangs spielen.

Vortrag: B3

Paper: 25

Kosmologische Inflation und Kosmischer Mikrowellenhintergrund

Martin ²¹, Riazuelo ²², D. Schwarz

Inflationäre kosmologische Modelle ermöglichen, neben der Lösung der Probleme der Standardkosmologie, die Erzeugung von primordialen kosmologischen Störungen. Quantenfluktuationen werden während der Phase der beschleunigten Ausdehnung verstärkt. Am Ende der Inflation werden die entstandenen Dichtefluktuationen durch ihr "power spectrum" charakterisiert. Das Spektrum dient als Anfangsbedingung für Strukturbildung. Aus dem primordialen Spektrum folgen Vorhersagen für die Anisotropien des kosmischen Mikrowellenhintergrundes. Die Satelliten MAP (NASA) und Planck (ESA) werden die Anisotropien des kosmischen Mikrowellenhintergrundes sehr genau vermessen. Es wurde vorgeschlagen, aus diesen Messungen die kosmologischen Parameter zu rekonstruieren (auf 1%). Dies wird nur möglich sein, wenn das primordiale Spektrum ebenso präzise bekannt ist.

Wir haben die Genauigkeit der analytischen Methoden geprüft und die Vorhersage von slow-roll Inflation mithilfe der jüngsten Daten von BOOMERanG und MAXIMA überprüft. Wir finden, daß slow-roll Inflation mit den Beobachtungen konsistent ist, in der bisherigen Datenanalyse aber zum Teil falsche Annahmen über die Form der primordialen Spektren getroffen wurden.

Vortrag: B2, C11, C9, C10, C7, C6

Supersymmetrische dunkle Materie

Hofmann ²³, D. Schwarz

Das leichteste supersymmetrische Teilchen, in der minimalen Erweiterung des Standardmodells das Neutralino, ist einer der besten Kandidaten für die dunkle Materie in unserem Universum. Die Vorhersage der räumlichen Verteilung von kalter dunkler Materie ist für die Berechnung von Zählraten für Experimente zur Suche nach kalter dunkler Materie von größter Wichtigkeit. Aus den schwachen Wechselwirkungen der Neutralinos ergibt sich, daß diese im frühen Universum bei Temperaturen von etwa 10 MeV vom Rest der Materie entkoppeln. Dabei werden Inhomogenitäten durch die endliche freie Weglänge gedämpft. Dies hat zur Folge, daß eine kleinste Skala für Wolken aus kalter dunkler Materie existiert. Supersymmetrische Teilchen könnten auch eine Erklärung für die kosmischen Strahlen höchster Energie ($> 10^{20}$ eV) liefern.

Vortrag: C8

Paper: 26

¹⁸Universität Helsinki

¹⁹ETH-Zürich

²⁰ETH-Zürich

²¹DARC, Observatoire de Paris

²²DARC, Observatoire de Paris

²³Universität Frankfurt

4.1.5 Publikationen aus Fundamentalen Wechselwirkungen

1. P.C. Aichelburg, H. Balasin
Generalized asymptotic structure of the ultrarelativistic Schwarzschild Black Hole
Class. Quantum Grav. **17**, 3645-3662 (2000)
2. I. A. Bandos, W. Kummer
P-branes, Poisson-sigma-models and embedding approach to (p+1)-dimensional gravity
Int. J. Mod. Phys. A **14**, 4881-4914 (1999)
3. H. Balasin
Generalized Kerr-Schild metrics and the gravitational field of a massless particle on the horizon
Class. Quantum Grav. **17**, 1913-1920 (2000)
4. I. Bandos, W. Kummer
Current density distributions and a supersymmetric action for the coupled brane system
Phys. Lett. B **462**, 254-264 (1999)
5. I. Bandos, E. Ivanov, A. Kapustnikov, S. Ulanov
General solution of string inspired nonlinear equations
J. Math. Phys. **40**, 5203-5223 (1999)
6. I. Bandos, W. Kummer
On action functionals for interacting brane systems
in *New symmetries and integrable models*, ed. by A. Frydrsyszak, J. Lukierski, Z. Popowicz (World Scientific, Singapore 2000), pp. 95-107
7. I. Bandos, W. Kummer
Superstring 'ending' on super D-9 brane: a supersymmetric action functional for the coupled brane system
Nucl. Phys. B **565**, 291-332 (2000)
8. A.A. Bichl, J.M. Grimstrup, V. Putz, M. Schweda
*Perturbative Chern-Simons theory on noncommutative R^{**3}*
J. High Energy Phys. **0007:046** (2000)
9. J.-P. Blaizot, E. Iancu, A. Rebhan
Entropy of the QCD plasma
Phys. Rev. Lett. **83**, 2906-2909 (1999)
10. J.-P. Blaizot, E. Iancu, A. Rebhan
Self-consistent hard-thermal-loop thermodynamics for the quark-gluon plasma
Phys. Lett. B **470**, 181-188 (1999)
11. O.M. Del Cima, J.M. Grimstrup, M. Schweda
On the finiteness of a new topological model in $D=3$
Phys. Lett. B **468**, 48-56 (1999)
12. F. Gieres, H. Nieder, T. Pisar, L. Popp, M. Schweda
Interacting six-dimensional topological field theories
Mod. Phys. Lett. A **15**, 791-801 (2000)
13. F. Gieres, J. Grimstrup, T. Pisar, M. Schweda
Vector supersymmetry in topological field theories
J. High Energy Phys. **0006:018** (2000)
14. D. Grumiller, W. Kummer
Absolute conservation law for black holes
Phys. Rev. D **61**, 064006-1-064006-7 (2000)

15. D. Grumiller, W. Kummer, D.V. Vassilevich
The virtual Black Hole in 2d quantum gravity
Nucl. Phys. B **580**, 438-456 (2000)
16. H. Ita, K. Landsteiner, T. Pisar, J. Rant, M. Schweda
Remarks on topological SUSY in six-dimensional TQFTs
J. High Energy Phys. **9911:035** (1999)
17. M. Kreuzer, J.-G. Zhou
Killing gauge for the 0-brane on $AdS_2 \times S^2$ coset superspace
Phys. Lett. B **472**, 309-315 (2000)
18. M. Kreuzer, J.-G. Zhou
Lambda-symmetry and background independence of noncommutative gauge theory on R^n
J. High Energy Phys. **0001:011** (2000)
19. W. Kummer
2D Quantum gravity and Black Hole formation
in *Constraint Dynamics and quantum Gravity 1999, Villasimius*, ed. by V. de Alfaro et al.
Nucl.Phys. B (Proc. Suppl.) **88** (2000), Elsevier, Amsterdam 2000, pp. 281-282
20. W. Kummer, D. V. Vassilevich
Hawking radiation from dilaton gravity in 1+1 dimensions: a pedagogical review
Ann. Phys. (Leipzig) **8**, 801-827 (1999)
21. W. Kummer, D.V. Vassilevich
Renormalizability of the open string sigma model and emergence of D-branes
J. High Energy Phys. **07**, 012-25p. (2000)
22. R. Leitgeb, J. Rant, M. Schweda, H. Zerrouki
Generalized 2-D BF model quantized in the axial gauge
Mod. Phys. Lett. A **15**, 483-498 (2000)
23. M. O. Katanaev, T. Klösch, W. Kummer
Global properties of warped solutions in General Relativity
Annals of Physics **276**, 191-222 (1999)
24. T. Pisar, J. Rant, H. Zerrouki
A generalized P form model in $D=3$
Mod. Phys. Lett. A **15**, 1147-1164 (2000)
25. D.J. Schwarz, C. Schmid, P. Widerin
Clumping of CDM from the cosmological QCD transition
Nuclear Physics B (Proc. Suppl.) **80 CD-Rom 04/21** (2000)
26. D.J. Schwarz, S. Hofmann
Small-scale structure of cold dark matter
Nuclear Physics B (Proc. Suppl.) **87**, 93-95 (2000)

4.1.6 Vorträge aus Fundamentalen Wechselwirkungen

A. Eingeladene Vorträge

1. M. Kreuzer
Strings on Calabi-Yau spaces and toric geometry
Supersymmetry and Quantum Field Theory, Kharkov, (Ukraine)
25.9.2000
2. W. Kummer
2d quantum gravity with torsion, dilaton theory and intermediate black hole formation
9th Marcel Grossmann Conference, Rome, (Italy)
5.7.2000
3. W. Kummer
Classical and quantum gravity in 1+1 dimensions
13th Hutsulian Workshop, Academy of Sciences, Kiev, (Ukraine)
20.9.2000
4. W. Kummer
Exact quantum integral of 2d gravity and intermediate black hole formation
Applications of integrability, Workshop Intern. Erwin Schroedinger Institut, Wien, (Austria)
19.10.1999
5. W. Kummer
Four decades of gauge theory
13th Hutsulian Workshop, Ushgorod University, Ushgorod, (Ukraine)
18.9.2000
6. W. Kummer
Hawking radiation and Hawking flux from spherical reduction
9th Marcel Grossmann Conference 2000, Rom, (Italy)
4.7.2000
7. W. Kummer
Hawking radiation from Black Holes
13th Hutsulian Workshop, University Ivanov-Frankusk, Ivanov-Frankusk, (Ukraine)
22.9.2000
8. W. Kummer
Quantum gravity in $d=2$ and the virtual Black Hole
Supersymmetry and Quantum Field Theory, Kharkow, (Ukraine)
27.7.2000
9. A. Rebhan
Hard-thermal/dense-loop Thermodynamics of the Quark-gluon Plasma
RIKEN-BNL Workshop on Equilibrium and Non-equilibrium aspects of hot, dense QCD, Upton,
(USA)
25.7.2000
10. A. Rebhan
HTL-quasiparticle approach to the entropy and density
INT-99-3 Research Program *Non-equilibrium dynamics in quantum field theory*, Seattle, (USA)
26.10.1999

B. Sonstige Tagungsbeiträge

1. A. Rebhan
Improved resummations for the thermodynamics of the quark-gluon plasma
Strong and Electro-Weak Matter (SEWM2000), Marseille, (France)
17.6.2000
2. D.J. Schwarz
Precision of slow-roll predictions and recent CMB data
Cosmology and Particle Physics (CAPP) 2000, Verbier, (Switzerland)
18.7.2000
3. D.J. Schwarz
The cosmological QCD transition
50. Jahrestagung der Österreichischen Physikalischen Gesellschaft, Graz, (Austria)
25.9.2000

C. Vorträge an Universitäten und Forschungsinstitutionen

1. H. Balasin
Quantisierung von zylindrischen Gravitationswellen
Institut für Theoretische Physik, Universität Wien, Wien, (Austria)
20.4.2000
2. J.M. Grimstrup
Quantization of Noncommutative Supersymmetric Field Theories
The XIII International Hutsulian Workshop, House of Scientists, Kiev, (Ukraine)
20.9.2000
3. A. Kling
BRST Cohomology of Dirichlet Superstrings
Internationale Universitätswochen für Kern- und Teilchenphysik, Schladming, (Austria)
2.3.2000
4. A. Rebhan
New methods and results for the thermodynamics of the quark-gluon plasma
Institut für Theoretische Physik, Universität Wien, Wien, (Austria)
29.6.2000
5. A. Rebhan
Thermische Feldtheorie und kollektive Phänomene im ultrarelativistischen Plasma
Fakultät für Physik, Universität Bielefeld, Bielefeld, (Germany)
21.1.2000
6. D.J. Schwarz
Inflation und der anisotrope kosmische Mikrowellenhintergrund
Fachbereich Physik, J.W. Goethe-Universität, Frankfurt/Main, (Germany)
28.6.2000
7. D.J. Schwarz
Inflation und der kosmische Mikrowellenhintergrund
Institut für Astronomie, Universität Wien, Wien, (Austria)
19.6.2000
8. D.J. Schwarz
Kosmische Strahlung: 10^{20} eV und noch mehr
Habitationsvortrag, FB Physik, Universitaet Frankfurt am Main, Frankfurt am Main, (Germany)
9.2.2000

9. D.J. Schwarz
Recent developments in cosmology
Inst. f. Theor. Phys., Univ. Wien, Wien, (Austria)
28.3.2000
10. D.J. Schwarz
The precision of CMB predictions of slow-roll inflation
Sektion Physik, Ludwig-Maximilians Universität, München, (Germany)
9.5.2000
11. D.J. Schwarz
The precision of the slow-roll predictions for CMBR anisotropies
Inst. f. Theor. Phys., Univ. Helsinki, Helsinki, (Finland)
18.11.1999

4.2 Nichtlineare Dynamik und Physik komplexer Systeme

Nichtlineare Dynamik befaßt sich mit der zeitlichen Entwicklung physikalischer Systeme, ihrer Vorhersagbarkeit und Stabilität. Der Anwendungsbereich erstreckt sich vom Mikrokosmos, z.B. Atomen, bis zum Makrokosmos, z.B. unserem Sonnensystem. Seine Langzeitstabilität und die Beobachtung chaotischer Dynamik im Sonnensystem haben maßgeblich zur Entwicklung dieses Forschungsgebiets beigetragen. Nichtlineare Effekte können zu drastischen Änderungen eines Systems bei kleinsten Störungen führen. Die Antwort eines scheinbar einfachen Systems auf die Störung ist deshalb äußerst komplex. Die Komplexität eines Systems ist bestimmt durch seine dynamischen Eigenschaften, nicht nur von seiner Größe. Die Physik komplexer Systeme schließt zahlreiche Arbeitsgebiete ein: Statistische Mechanik und Chaostheorie, Algorithmische Physik, Quantenoptik und Quantenchaos.

4.2.1 Reguläre und chaotische Bewegung in Coulomb-Systemen

Die Untersuchung von Signaturen von regulärer und chaotischer Dynamik in Quantensystemen bei weichem Chaos, d.h. Systeme mit gemischtem Phasenraum, ist das Grundziel dieses Projekts. Fundamentale Anwendungsbeispiele stellen Ein- und Zwei-Elektronen Rydbergatome dar. Klassische, semiklassische und quantenmechanische Methoden werden verwendet, um Indikatoren von Ordnung und Chaos im Spektrum sowie in anderen dynamischen Variablen zu identifizieren.

Wellenpaket-Dynamik in Rydberg-Atomen

Burgdörfer, Yoshida, Persson, Reinhold²⁴, Tannian²⁵, Dunning²⁵

Der Übergang von Quantendynamik zu klassischer Dynamik läßt sich im Detail an Rydberg-Atomen studieren. Es ist möglich, wohldefinierte Zustände mit Quantenzahl bis zu $n = 500$ durch Laseranregung zu erzeugen. Für diese Zustände ist die klassische Orbitalperiode von der Größenordnung 10 ns. Plötzliche Störung und nichtstationäre Wellenpakete können daher mit großer Präzision mit konventionellen Puls-generatoren erzeugt werden. In Zusammenarbeit mit der experimentellen Gruppe an der Rice University haben wir die Dynamik von Wellenpaketen, die durch sog. "half-cycle pulses" erzeugt werden, studiert. Es konnte gezeigt werden, daß die klassische Phasenraumverteilung das quantenmechanische Wellenpaket für Zeiten gut wiedergibt, die länger sind als die charakteristische Heisenberg-Zeit des Systems. Eine interessante Anwendung stellt die Wechselwirkung mit einer periodischen Sequenz von "half-cycle pulses" dar. Experimentell konnte ein Wellenzug von bis zu 50 solcher Pulse realisiert werden. Für dieses System konnten in diesem Berichtszeitraum interessante neue Resultate gefunden werden. Insbesondere zu erwähnen ist die Beobachtung der dynamischen Lokalisierung. Diese stellt das dynamische Äquivalent zur Anderson-Lokalisierung in ungeordneten Systemen dar. Die Unordnung ist durch die chaotische Dynamik hervorgerufen. Die scheinbar paradoxe Konsequenz ist, dass das Wellenpaket nicht zerfließt, in diesem Fall ionisiert, sondern sich lokalisiert. Bemerkenswerterweise finden wir die Lokalisierung ("Vernarbung des Wellenpakets") um die instabilen klassischen Fixpunkte. Damit konnte zum ersten Mal ein direkter Zusammenhang zwischen Vernarbung und Anderson-Lokalisierung hergestellt werden. Die Verallgemeinerung auf dreidimensionale Systeme wird gegenwärtig untersucht.

Vortrag: B14, B15, B16,

Paper: 20, 24, 23,

Projekt: Teilprojekt 10, Sonderforschungsbereich FWF-SFB 016

²⁴Oak Ridge National Laboratory

²⁵Rice University, Houston, USA

Half-Collision Model for Multiple Ionization by Photon ImpactBurgdörfer, Pattard²⁶,

We have developed a simple half-collision model which allows the approximate calculation of absolute cross sections for multiple ionization by photon absorption by breaking this process down into primary ionization followed by a half-scattering event in which additional electrons are ionized. As a critical test for the feasibility of this approach we consider double ionization of two-electron systems which we describe in terms of single ionization of the “primary” electron followed by impact ionization of the slow “secondary” electron. For triple ionization of lithium, the model decomposes the three-electron break-up process into double ionization of the two inner electrons followed by electron-electron half-scattering of the receding electrons at the residual “spectator” 2s electron. We find surprisingly good agreement with recent experimental data.

Vortrag: B8, B9

Paper: 22

Exclusive and Inclusive Cross Sections for Compton Scattering from H⁻ and HeBurgdörfer, McGuire²⁷, Itza-Ortiz²⁷, Godunov²⁷, Wang²⁸, Ederer²⁷

Exclusive and inclusive cross sections for ionization of H⁻ and He by Compton scattering have been calculated. The exclusive cross section for ionization of one electron, leaving the second electron in the ground state, is 20 % smaller for H⁻ than for He even though the geometric cross section of H⁻ is more than an order of magnitude larger than He. This 20 % decrease is due to multi-electron effects, mostly in double electron transitions. Inclusive cross sections for total single ionization have been evaluated by summing over the final states of the second electron. The inclusive Compton cross sections for both H⁻ and He are about twice the Thomson cross section for elastic scattering of a free electron, even when correlation is accurately included. Analysis of both the inclusive and exclusive cross sections is done using quasi-elastic scattering. The quasi-elastic analysis is used both for multielectron shake terms in the uncorrelated and for the correlated calculations.

Vortrag: B6

Paper: 17

The Adiabatic Limit of Inelastic Transitions in Ion-Atom CollisionsBurgdörfer, Krstic²⁹, Reinhold²⁹

It is a generally held belief that inelastic transition probabilities and cross sections in slow, nearly adiabatic atomic collisions decrease exponentially with the inverse of the collision velocity v (i.e. $\sigma \propto \exp(-\text{Const}/v)$). This notion is supported by the Landau-Zener approximation and the hidden crossings approximation. We have revisited the adiabatic limit of ion-atom collisions and show that for very slow collisions radial transitions are dominated by the topology of the branch points of the radial velocity rather than the branch points of the energy eigensurface. This can lead to a dominant power-law dependence of inelastic cross sections, $\sigma \propto v^n$. We illustrate the interplay between different contributions to the transition probabilities in a one-dimensional collision system for which the exact probabilities can be obtained from a direct numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation.

Vortrag: B5

²⁶University of Tennessee²⁷Tulane University, New Orleans, LA, USA²⁸University of Massachusetts, Dartmouth, MA, USA²⁹Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN, USA

Strahlende Rekombination im Magnetfeld

Burgdörfer, Trost, Hörndl

Beim strahlenden Einfang von niederenergetischen Elektronen durch hochgeladene vollständig gestrippte Ionen in Speicherringen wurden deutlich höhere Rekombinationsraten gemessen, als die Standardtheorie vorhersagt. Eine Erklärung dieses Effekts, der auf das Versagen der Theorie der strahlenden Rekombination hindeutet, welche weitreichende Konsequenzen hätte, steht noch aus. In den bisherigen Modellen blieb die Abhängigkeit der Raten von der Stärke des Führungsfeldes der Elektronen unbeachtet. Das Ziel unseres Projektes ist es, den Einfluß externer Felder auf die Rekombination zu bestimmen. Wir testen gegenwärtig die Vermutung, daß der chaotischen Dynamik in der Nähe von chaotischen "Repellor" eine Schlüsselrolle zukommt.

Monte Carlo Simulations for Electron Emission and Electron TransportTókési, Kövér ³⁰, Sakardi, Barachina ³¹

The doubly differential cross sections of the ionization for ion-atom collisions at intermediate energies were calculated based on the classical trajectory Monte Carlo method. The existence of the cusp-like peak for positron impact was shown. Our calculations support the hypothesis that an unexpected broad structure at backward emission angles relative to the beam direction is due to double scattering of the target electrons on the screened fields of the projectile and the target.

Vortrag: B12, B7,

Paper: 4, 11, 21

³⁰Institute for Nuclear Research of the Hungarian Academy of Sciences, Debrecen, Hungary

³¹Centro Atomico, Bariloche, Argentina

4.2.2 Reguläre und Chaotische Dynamik in Quantenpunkten und “Designer” Atomen

Die klassische und Quanten-Dynamik von Elektronen in Quantenpunkten, d.h. Strukturen artifizierter Geometrie, erlaubt den Vergleich und den Kontrast mit Coulomb-Systemen. Diese werden deshalb oft “Designer-Atome” genannt. Abhängig von der gewählten Geometrie kann reguläre, chaotische oder gemischte Dynamik realisiert werden. Von besonderem Interesse sind offene Strukturen, bei der Eigenschaften der regulären S-Matrix untersucht werden.

Laser excitation of two interacting electrons in a harmonic quantum dot

Burgdörfer, Yoshida, Pitteloud, Pattard³², Tong³³

We investigate a model system of two Coulomb interacting electrons in a quantum dot with a harmonic confining potential subject to an intense laser pulse. Due to the separability of the time-independent problem in center of mass coordinates, its eigenfunctions and eigenvalues are obtained exactly. Moreover, the Feynman propagator for the time-dependent system is analytically known, allowing for an accurate time evolution of the system. Thus, the problem can be solved virtually exactly, making tests of other approximate methods feasible. In the present study, we focus on a comparison between the exact result and the time dependent density functional theory, which is believed to incorporate the essential electron-electron correlation effects through the exchange-correlation potential.

Vortrag: B10, B11

Projekt: Sonderforschungsbereich des FWF-016, Teilprojekt 10

Semiklassische und quantenmechanische Beschreibung von Transmissionsfluktuationen

Burgdörfer, Ishio, Rotter, Trost, Wirtz, Tang³⁴

Es wurde ein numerisches Verfahren entwickelt, das eine genaue und stabile Lösung von Quantentransportproblemen durch Mikrostrukturen ermöglicht. Diese *Modulare Greens-Funktions-Methode* gestattet die Berechnung der Leitfähigkeit durch einen *quantum dot* selbst bei kleinen Wellenlängen, für die auch die Gültigkeit von semiklassischen Näherungen erwartet wird. Wir vergleichen die Ergebnisse von semiklassischen und quantenmechanischen Analysen und erhalten auf diese Weise Aufschluß über die dem Transportsystem zugrundeliegende klassische Dynamik. Der Einfluß von klassischer Chaotizität auf quantenmechanische Transportphänomene wird studiert.

Vortrag: A2, A3, A1, A4, B13, B2

Paper: 10

Resonance trapping in open quantum systems

Persson, Barth³⁵, Kuhl³⁵, Stöckmann³⁵, I. Rotter³², Seba³⁵, Pichugin³⁵, Müller³⁵

We investigate interference effects due to the coupling of a discrete quantum system to a continuum of decay channels. Due to the finite number of channels, the life times of most of the states get dynamically stabilised while a few states get very short-lived. The theoretical expectations are experimentally verified in a microwave cavity, an electromagnetic version of a quantum dot realized for microwave radiation coupled to a waveguide.

Vortrag: C1

Paper: 12, 9, 7, 8

³²Max-Planck-Institut für Komplexe Systeme, Dresden, Germany

³³ICORP, Tokyo, Japan

³⁴University of Tennessee, Knoxville, USA

³⁵Fachbereich Physik, Philipps Universität Marburg, Germany

4.2.3 Quantenoptik

Die Quantenoptik beschäftigt sich mit jenen optischen Erscheinungen, die sich im Rahmen der klassischen Physik nicht vollständig erklären lassen. Diese Erscheinungen sind Folgen der Quantenphysik der elektromagnetischen Strahlung und der Atome. Ein Beispiel dafür ist die experimentell bekannte spontane Strahlungsemission bei Atomen. Hierbei gibt ein angeregtes Atom ohne Einfluß eines äußeren Strahlungsfeldes seine Energie in Form von Strahlung ab und geht in den Grundzustand über. Dagegen liefert die Quantenphysik der Strahlung einen Vakuumzustand des Feldes, bei dem zwar das Strahlungsfeld verschwindet, jedoch nicht das mittlere Schwankungsquadrat dieses Feldes. Diese Schwankungen des Vakuumfeldes verursachen die spontane Emission und sorgen außerdem für eine Verschiebung der Energieniveaus der Atomzustände, die experimentell nachweisbar ist und Lamb-Shift genannt wird. Die Eigenschaften von wechselwirkenden quantenmechanischen Atom–Strahlungsfeldsystemen werden untersucht.

Zwei–Niveau–Atom im multimodigen Strahlungsfeld

Hittmair, Adam, Seke, Ficek³⁶, Bogolubov jr³⁷, Soldatov³⁸

Für ein Zwei–Niveau–Atom, welches von einem multimodigen Strahlungsfeld angetrieben wird, wurde die stationäre Besetzungszahlinversion untersucht, wobei unterschiedliche Systemparameter zugrunde gelegt wurden. Die sukzessiv angewandten Felder von unterschiedlichen Frequenzen führten zu dressed Atomzuständen und korrelierten die vorhandenen Dipolmomente so, daß eine Unterdrückung der spontanen Emission in Abhängigkeit von den Systemparametern und der Phase der antreibenden Felder entstand.

Vortrag: B4, B3

Paper: 2

Projekt: OENB 7720

Eindeutig bestimmbare Zustände bei unvollständigen Beobachtungsebenen

Hittmair, Adam, Seke

Der Zustand eines Quantensystems kann durch die Messung der Mittelwerte eines vollständigen Satzes von Observablen eindeutig bestimmt werden. Sind hingegen nur die Mittelwerte eines unvollständigen Satzes von Observablen (ein solcher Satz wird auch Beobachtungsebene (BE) genannt) bekannt, ist im Allgemeinen der Systemzustand nicht eindeutig bestimmt. Viele unterschiedliche Systemzustände können im Allgemeinen die gemessenen Mittelwerte richtig wiedergeben. Jedoch gibt es die Ausnahme, daß für spezielle Werte der Mittelwerte einer BE nur ein reiner Systemzustand existiert, der in dieser BE durch die Messwerte eindeutig bestimmt ist. Mit Hilfe des Entropiemaximum–Prinzips von Jaynes wurden am Beispiel des Drei–Niveau–Atoms für verschiedene BE jene reinen Systemzustände angegeben, welche in der jeweiligen BE eindeutig bestimmbar sind.

Vortrag: B1

Projekt: OENB 7720

³⁶The University of Queensland, Brisbane, Australia

³⁷Academy of Science of Russia, Moscow, Russia

³⁸V.A. Steklov Mathematical Institute, Moscow, Russia

Renormierung der nichtrelativistischen und der relativistischen QED über die konventionelle Methode hinausHittmair, Adam, Seke, Bogolubov jr³⁷, Soldatov³⁸

Es konnte gezeigt werden, daß die konventionelle Renormierungsmethode unvollständig ist. Dies wurde in der Literatur bisher übersehen, da man die konventionelle Prozedur ausschließlich in der S -Matrix-Theorie anwandte. Es wurde bewiesen, daß die konventionelle Massenschalenrenormierung die Normierungsbedingung der U -Matrix drastisch verletzt. Daraufhin wurde eine neue eindeutige und vollständige Renormierungsmethode entwickelt, die sowohl in der nichtrelativistischen als auch in der relativistischen QED (für freie und gebundene Elektronen) anwendbar ist. Die konsistente Renormierung ermöglicht zum ersten Mal die korrekte Berechnung der U -Matrix und der natürlichen Spektrallinienform.

Paper: 16, 17, 13, 15, 14

Projekt: OENB 7720

4.2.4 Quantenlogik und verwandte Problemstellungen

Quantenlogik

Svozil

Die Quantenlogik stellt eine Algebraisierung der Quantenmechanik mit verbandstheoretischen Methoden dar. Eines der wesentlichsten Ergebnisse ist das sogenannte Kochen-Specker Theorem, welches die Unmöglichkeit von nichtkontextuellen verborgenen Parametern beweist. Ein weiterer Forschungsbereich sind Automatenlogiken. Es wird untersucht, inwieweit die Automaten- oder Partitionslogik mit der Quantenlogik übereinstimmt.

Vortrag: A5, C2, C3, C4

Paper: 3, 5, 1, 18, 19

4.2.5 Publikationen aus Nichtlinearer Dynamik und Physik komplexer Systeme

1. C.S. Calude, E. Calude, K. Svozil
Quantum Correlations Conundrum
in *Recent Topics in Mathematical and Computational Linguistics*, ed. by C. Martin-Vide, G. Paun
(Editura Academiei Romane, Bucharest 2000), pp. 55-67
2. Z. Ficek, J. Seke, A.V. Soldatov, G. Adam
Phase control of subharmonic resonances
Optics Comm. **182**, 143-150 (2000)
3. Franck-Oberaspach, D. B. Schweiger, K. Svozil
A packing problem, solved by genetic algorithms
J. of Uni. Com. Sci. **5**, 464-470 (1999)
4. M. Kavcic, M. Budnar, A. Mühleisen, P. Pelicon, Z. Smit, M. Zitnik, D. Castella, D. Corminboeuf,
J.-Cl. Dousse, J. Hoszowska, P.A. Raboud, K. Töksi
L-shell ionization in near-central collisions of heavy ions with low-Z atoms
Phys. Rev. A **61**, 052711-1-052711-12 (2000)
5. G. Krenn, J. Summhammer, K. Svozil
Interferometric information gain versus interaction-free measurement
Phys. Rev. A **61**, 052102-1-052102-10 (2000)
6. J.H. McGuire, S. Itza-Ortiz, A.L. Godunov, J. Wang, D.L. Ederer, J. Burgdörfer
Exclusive and inclusive crosssections for Compton scattering from H^- and He
Phys. Rev. A **62**, 012702-1-012702-7 (2000)
7. U. Kuhl, E. Persson, M. Barth, H.-J. Stöckmann
Mixing of wavefunctions in rectangular microwave billiards
Eur. Phys. J. B **17**, 253-259 (2000)
8. E. Persson, I. Rotter, H.-J. Stöckmann, M. Barth
Observation of resonance trapping in an open microwave cavity
Phys. Rev. Lett. **85**, 2478-2481 (2000)
9. I. Rotter, E. Persson, P. Seba, K. Pichugin
Spectroscopic studies in open quantum systems
Phys. Rev. E **62**, 450-461 (2000)
10. S. Rotter, J. Tang, L. Wirtz, J. Trost, J. Burgdörfer
A modular recursive Green's function method for ballistic quantum transport
Phys. Rev. B **62**, 1950-1960 (2000)
11. L. Sarkadi, K. Töksi, R.O. Barrachina
Electron capture to the continuum induced by dipolar interaction
J. Phys. B **33**, 847-859 (2000)
12. P. Seba, I. Rotter, M. Müller, E. Persson, K. Pichugin
Collective modes in an open microwave billiard
Phys. Rev. E **61**, 66-70 (2000)
13. J. Seke
Complete renormalization method beyond the conventional on-shell renormalization in both non-relativistic and relativistic QED: Renormalized expressions for the U-matrix and the spectral line shape
Physica A **278**, 222-234 (2000)

14. J. Seke
Correct electron-propagator and U-matrix renormalization replacing the inconsistent on-mass-shell renormalization and the renormalized natural line shape
Mod. Phys. Lett. B **14**, 539-546 (2000)
15. J. Seke
Drastic violation of the normalization condition by the conventional on-shell renormalization in QE
Mod. Phys. Lett. B **14**, 355-360 (2000)
16. J. Seke, A.V. Soldatov and N.N. Bogolubov, Jr.
Application of the Seke self-consistent projection operator method in the case of a discretized atom-field interaction model
Int. J. Mod. Phys. B **13**, 3159-3170 (1999)
17. A.V. Soldatov, J. Seke, N.N. Bogolubov, Jr.
On the Widder inversion method in problems of statistical mechanics
Cond. Matt. Phys. **3**, 371-380 (2000)
18. K. Svozil
Logic of reversible automata
Int. J. Theor. Phys. **39**, 889-895 (2000)
19. K. Svozil, D. Bridges
Constructive mathematics and quantum physics
Int. J. Theor. Phys. **39**, 501-513 (2000)
20. B. Tannian, C. Stokely, F. Dunning, C. Reinhold, S. Yoshida, J. Burgdörfer
The kicked atom: behavior with uni- and bi-directional train of impulses
Phys. Rev. A **62**, 043402-1-043402-9 (2000)
21. K. Töksi, . Kövr
Electron capture to the continuum at 54.4.eV positron-argon atom collisions
J. Phys. B **33**, 3067-3077 (2000)
22. R. Wehlitz, T. Pattard, M.-T. Huang, I.A. Sellin, J. Burgdörfer, Y. Azuma
Near-threshold triple photoionization cross section of lithium
Phys. Rev. A **61**, 030704-1-030704-4 (2000)
23. S. Yoshida, C.O. Reinhold, J. Burgdörfer
Quantum localization of the periodically kicked Rydberg atom
Phys. Rev. Lett. **84**, 2602-2605 (2000)
24. S. Yoshida, C. Reinhold, P. Kristöfel, J. Burgdörfer
Exponential and non-exponential localization of the one-dimensional periodically kicked Rydberg atom
Phys. Rev. A **62**, 023408-1-023408-14 (2000)

4.2.6 Vorträge aus Nichtlinearer Dynamik und Physik komplexer Systeme

A. Eingeladene Vorträge

1. J. Burgdörfer
Transport Through Open Quantum Dots
Seminar at Institute of Theoretical Physics, University of Vienna, Vienna, (Austria)
28.3.2000
2. J. Burgdörfer
Scattering at Microstructures
DOE Research Meeting on Atomic, Molecular and Optical Physics, Boulder, CO, (USA)
25.10.1999
3. J. Burgdörfer
Electron Scattering at Designer Atoms
Atomic Physics Seminar, Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, Cambridge, MA, (USA)
20.12.1999
4. J. Burgdörfer
Semiclassical and Quantum Dynamics of 'Designer' Atoms
Spring Meeting of the German Physical Society, Bonn, (Germany)
5.4.2000
5. K. Svozil
Quantum information theory - the new frontier
GI-Fachgruppe 0.1.5 /10.Theorietag *Automaten und Formale Sprachen*, Wien, (Austria)
25.9.2000

B. Sonstige Tagungsbeiträge

1. G. Adam
Eindeutig bestimmbare Zustände von unvollständigen Beobachtungsebenen
Jahrestagung der ÖPG, Graz, (Austria)
25.9.2000
2. G. Corso, S. Prado, S. Yoshida
Quantum signature of reconnection of resonances
International Workshop on Quantum Dynamics in Terms of Phase-Space Distributions, Dresden, (Germany)
24.5.2000
3. Z. Ficek, J. Seke, A.V. Soldatov and G. Adam
Saturation of a two-level atom in polychromatic fields
Jahrestagung der ÖPG, Graz, (Austria)
25.9.2000
4. Z. Ficek, J. Seke, A.V. Soldatov and G. Adam
Phase control of subharmonic resonances
Jahrestagung der ÖPG, Graz, (Austria)
25.9.2000
5. P. Krstic, C. Reinhold, J. Burgdörfer
Is the low-energy limit of inelastic collisions well understood?
The 2000 DAMOP Meeting, Storrs, Connecticut, (USA)
15.6.2000

6. J.H. McGuire, S. Itza-Ortiz, A.L. Godunov, D.L. Ederer, J. Burgdörfer
Calculations of Compton scattering in He and H⁻
The 2000 DAMOP Meeting, Storrs, Connecticut, (USA)
17.6.2000
7. B. Paripis, G. Vitz, Gy. Viktor, K. Töksi
Influence of post collision interaction on the line-shape of Auger-electron spectra at electron impact ionization
International Conference of Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules and Surfaces, Halle/Saale, (Germany)
27.7.2000
8. T. Pattard, J. Burgdörfer
Triple photoionisation of lithium at intermediate energies
The 2000 DAMOP Meeting, Storrs, Connecticut, (USA)
16.6.2000
9. T. Pattard, J. Burgdörfer,
Triple photoionisation of lithium: from high energies to threshold
Frühjahrstagung der DPG, Bonn, (Germany)
4.4.2000
10. J. Pitteloud, T. Pattard, X-M. Tong, J. Burgdörfer
Laser excitation of two interacting electrons in a harmonic potential
The 2000 DAMOP Meeting, Storrs, Connecticut, (USA)
17.6.2000
11. J. Pitteloud, T. Pattard, X.-M. Tong, J. Burgdörfer
Ultrashort pulse excitation of two interacting electrons in a harmonic well
XVII Int. Conf. on Atomic Physics, Firenze, (Italy)
5.6.2000
12. B. Sulik, K. Töksi, Cs. Koncz, . Kövr, S. Ricz, A. Orbn, N. Stolterfoht, J.-Y. Chesnel, D. Bernyi
Multiple scattering of emitted electrons in intermediate velocity C⁺⁺Ne collisions
International Conference on the Physics of Highly Charged Ions, Berkeley, (USA)
1.8.2000
13. L. Wirtz, S. Rotter, J. Burgdörfer
Semiclassical electron scattering in open quantum billiards
Frühjahrstagung der DPG, Bonn, (Germany)
5.4.2000
14. S. Yoshida, C.O. Reinhold, P. Kristöfel, J. Burgdörfer
Quantum localization of the kicked Rydberg atom
The 2000 DAMOP Meeting, Storrs, Connecticut, (USA)
17.6.2000
15. S. Yoshida, C.O. Reinhold, P. Kristöfel, J. Burgdörfer, F.B. Dunning
Quantum localization of the periodically kicked Rydberg atom
International Workshop on Quantum Dynamics in Terms of Phase-Space Distributions, Dresden, (Germany)
23.5.2000
16. S. Yoshida, C.O. Reinhold, P. Kristöfel, J. Burgdörfer, F.B. Dunning
Quantum localization of the periodically kicked Rydberg atom
International Workshop and Seminar on Atomic Systems in Extreme Fields, Dresden, (Germany)
25.3.2000

C. Vorträge an Universitäten und Forschungsinstitutionen

1. E. Persson
Observation of resonance trapping in a microwave cavity
Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Dresden, (Germany)
23.6.2000
2. K. Svozil
Information and measurement
Department of Mathematics, University of Canterbury, Christchurch, (New Zealand)
16.2.2000
3. K. Svozil
Quantum information
Department of Computer Science, Massey University at Albany, Albany, (New Zealand)
25.2.2000
4. K. Svozil
Recent developments in quantum information theory
Department of Computer Sciences, Auckland University, Auckland, (New Zealand)
9.2.2000

4.3 Theorie kondensierter Materie

Die Aktivitäten im Bereich der Theorie der kondensierten Materie betreffen einerseits die Entwicklung neuer quantenmechanischer, mathematischer und statistisch-mechanischer Methoden zur Berechnung der physikalischen und chemischen Eigenschaften von geordneten und ungeordneten Materialien: sie dienen zum Studium der Festkörperoberflächen und der Beschreibung von komplexen Prozessen in Materialien und ihre Umsetzung in effiziente Software. Andererseits werden diese Methoden auf Problemstellungen von fundamentalem wie auch technologischem Interesse angewandt; hierzu gehören u.a. folgende Themenbereiche: exakt lösbare Modellsysteme, Beschreibung realistischer Materialien (mit Hilfe von numerischen Methoden und Computersimulationen), Untersuchung dynamischer Wechselwirkungsprozesse zwischen Oberflächen und geladenen Teilchen und Photonen und elektrischer Transporteigenschaften durch sogenannte Quantendots auf der Meso- und Nano-Skala.

4.3.1 Mathematische Grundlagen und Gruppentheorie

Gegenstand der Mathematischen Grundlagen der Theoretischen Festkörperphysik ist die Analyse mathematischer Modelle, die physikalische Phänomene beschreiben. Sie umfaßt daher jenen Teil der Theoretischen Festkörperphysik, in dem man mit mathematisch strengen Methoden aus genau definierten Grundannahmen exakte Ergebnisse ableitet. Das Ziel ist dabei nicht nur, möglichst alle Probleme der Theoretischen Festkörperphysik mathematisch einwandfrei zu formulieren, sondern auch Verallgemeinerungen systematisch zu erforschen.

Die Gruppentheorie beschäftigt sich mit den algebraischen und analytischen Strukturen von Gruppen und ihren Darstellungen. Die meisten physikalischen Probleme weisen gewisse räumliche/zeitliche Symmetrien auf, d.h. die Grundgleichungen sind gegen bestimmte Transformationen invariant. Aus diesen Symmetrien lassen sich oft ohne genauere Festlegung des physikalischen Systems weitreichende Schlüsse auf die Gestalt der Lösungen ziehen. Es ist zweckmäßig diese allgemeinen Aussagen von jenen zu trennen, die für das betrachtete System spezifisch sind.

Software Pakete für Raumgruppen

Davies³⁹, Dirl, Zeiner⁴⁰

Unter einer Raumgruppe eines Kristalls versteht man alle räumlichen Transformationen, die den Kristall in sich selbst überführen, unter einer magnetische Raumgruppe alle Transformationen, die eine magnetisch geordnete Struktur invariant lassen. Der Anwendungsbereich der entwickelten Software Pakete umfaßt alle gewöhnlichen und magnetischen Raumgruppen (230 + 230 + 1191 Gruppen).

Die Software Pakete erlauben nicht nur theoretische Untersuchungen (algebraische Eigenschaften, Gruppen-Untergruppen Beziehungen, Klassifikation von Wyckoff-Positionen bei Symmetriereduktion, Identifikation von Untergittern, Orbit-Splitting von Layer- und Rod-Gruppen, Darstellungstheorie, Subduktions- und Clebsch-Gordan Matrizen), sondern auch praktische Anwendungen (Analyse von Domänenstrukturen bei Phasenübergängen, Symmetrisierung ebener Wellen, Berechnung von Auswahlregeln).

Vortrag: A2

Topologische Eigenschaften von Energiebändern — Berry Phasen

Zeiner⁴⁰, Dirl, Davies³⁹

Es wurde gezeigt, dass die regulären Darstellungen von kristallographischen Raumgruppen in direkte Summen von *einfachen*, bzw. *elementare* Banddarstellungen zerlegt werden können. Diese Zerlegungen sind jedoch nicht eindeutig, da im allgemeinen verschiedene inäquivalente Zerlegungen zulässig sind, die mit den Symmetrien von entweder einer oder mehreren Wyckoff Positionen verknüpft sind. Dies erlaubt die Vorhersage möglicher Strukturen von Energiebändern auf Grund von Symmetrieüberlegungen.

Vortrag: A5

Paper: 26

³⁹University of Wales, Bangor, Wales, UK

⁴⁰University of Nijmegen, Nijmegen, Netherlands

Statistische Physik von Modellsystemen

P. Kasperkovitz, H. Renezeder, C. Tutschka

Jede mathematische Beschreibung eines realen Systems, das aus einer großen Zahl von Teilchen besteht, ist nur unter vereinfachenden Annahmen über die Art der Teilchen und ihre Wechselwirkungen möglich. Gehen diese Annahmen soweit, daß man nur mehr qualitative Ähnlichkeiten mit Systemen erwarten kann, die man in der Natur vorfindet, spricht man von "Modellsystemen". Die ziemlich drastischen Vereinfachungen, die zur Definition solcher Modellsysteme führen, haben den Zweck, die mathematische Herleitung der thermodynamischen Eigenschaften des Systems aus seiner Dynamik genauer und schlüssiger, im günstigsten Fall sogar exakt durchführen zu können.

Bei den im Berichtszeitraum untersuchten Modellsystemen handelt es sich um ein- und zweidimensionale Systeme, bei denen undurchdringliche ("harte") Teilchen durch anziehende Kräfte endlicher Reichweite miteinander wechselwirken. Um die Rechnungen und Simulationen zu vereinfachen, wurde diese Anziehung durch Kastenpotentiale beschrieben; es gibt jedoch Gründe anzunehmen, daß eine realistischere Form der Paarwechselwirkung nichts am qualitativen Verhalten des Systems ändert. Bei den zweidimensionalen Systemen wurde weiters angenommen, daß die Teilchen von quadratischer Form sind und nur translatorische Bewegungen ausführen können; wie sich diese "unrealistischen" Annahmen auf das thermodynamische Verhalten auswirken, ist eine noch offene Frage.

Für das eindimensionale System sind seit langem verschiedene thermodynamische Potentiale und die daraus folgenden Zustandsgleichungen (Energie und Volumen als Funktion von Temperatur und Druck) bekannt. Es konnte gezeigt werden, daß sich diese Beziehungen exakt reproduzieren lassen, wenn man folgendes annimmt: (1) Das System besteht aus zwei Teilsystemen: einem Gas nicht wechselwirkender Teilchen und einer langen Kette von Teilchen, die durch die anziehenden Kräfte aneinander gebunden sind ("Kondensat"). (2) Temperatur und Druck haben in beiden Teilsystemen dieselben Werte. (3) Die beiden chemischen Potentiale sind nicht gleich, sondern unterscheiden sich durch einen Term, der vom Mengenverhältnis Gas:Kondensat abhängt. Diese Darstellung des Gesamtsystems (das – in Übereinstimmung mit allgemeinen Aussagen – keinen wirklichen Phasenübergang aufweist) als ein System, das aus zwei miteinander wechselwirkenden thermodynamischen Systemen besteht, ergibt sich aus einer speziellen Berechnung der Zustandssummen, bei der von modernen Konzepten der Wahrscheinlichkeitstheorie (Large Deviations Techniques) Gebrauch gemacht wurde.

Paper: 14

Um festzustellen, in welchem Ausmaß das obige "2-Phasen-Bild" auch für höherdimensionale Systeme verallgemeinert werden kann, wurden für die 1- und 2-dimensionalen Systeme Molekulardynamik-Simulationen durchgeführt. Dabei stellte sich heraus, daß keines dieser Systeme die Ergodenhypothese erfüllt; für einen Vergleich von Schar- und Zeitmittelwerten muß daher entweder nach den Zeitmittelwerten eine weitere (Schar-)Mittelung erfolgen oder es sind die ergodischen Komponenten (Teile der Energiefläche) und die ihnen zugeordneten Maßfunktionen explizit zu bestimmen. Da der zweite Weg ein äußerst schwieriges und komplexes mathematisches Problem ist, wurde zunächst nur das 1-dimensionale 3-Teilchensystem im Detail betrachtet. Das interessante Ergebnis dieser im wesentlichen abgeschlossenen Untersuchung ist, daß dieses System – und wahrscheinlich auch die anderen Systeme mit mehr Teilchen und/oder höherer Dimension – mit wachsender Energie von einem pseudo-integrablen in ein praktisch vollständig chaotisches System übergeht ('Soft Chaos' in einem konservativen System mit schlagartigen Änderungen der fast immer sichtbaren gleichförmigen Bewegung).

Im Berichtszeitraum wurde auch die algorithmische Berechnung der Zustandssummen von 2-dimensionalen Systemen (mit kleiner Teilchenzahl) weiterentwickelt. Zu erwähnen ist (1) die Erstellung eines Programms, das eine vollständige Liste von gefärbten Graphen erzeugt und ihre Symmetrieeigenschaften bestimmt; (2) die Implementierung eines aus der Literatur übernommenen optimierten Programms zur Berechnung des Inhalts von konvexen Polyedern exakt zu berechnen. Die mathematischen Probleme, die bei dieser Rechnung auftreten, gehören zur Kombinatorik, Graphentheorie und vieldimensionalen Geometrie.

Vortrag: A3

4.3.2 Physik des flüssigen Zustandes

Ziel der in diesem Abschnitt vorgestellten Arbeiten ist die Untersuchung der thermodynamischen und strukturellen Eigenschaften klassischer Flüssigkeiten und ihrer Mischungen. Die dabei von uns entwickelten oder verwendeten Verfahren sind Integralgleichungsverfahren und thermodynamische Störungstheorien. Obwohl die Verfahren dieser beiden Klassen vom physikalischen Standpunkt aus gesehen auf unterschiedlichen Grundlagen basieren, liefern die verschiedenen Methoden – dank sehr verfeinerter Konzepte und verlässlicher numerischer Algorithmen – Ergebnisse, die innerhalb der numerischen Genauigkeit übereinstimmen. Der Vergleich mit Computersimulationen oder mit experimentellen Streudaten zeigt im allgemeinen eine sehr befriedigende Übereinstimmung.

Struktur und Thermodynamik einfacher Flüssigkeiten und ihrer Mischungen

Lang, Leroch, Tutschka, Kahl, Likos⁴¹, Schmidt⁴², Jorge⁴³, Lomba⁴³

Die 'optimized random phase approximation' (ORPA) – eine thermodynamische Störungstheorie – und darauf aufbauende Konzepte sind mittlerweile für flüssige Mischungen mit – im Prinzip – beliebig vielen Komponenten implementiert; dabei sind auch polydisperse Mischungen berücksichtigt. Diese flüssigkeitstheoretischen Methoden wurde im letzten Jahr auf folgende Modellsysteme angewandt: 'double square-wells', Asakura-Oosawa Potentiale, binäre Mischungen von Hartkugel-Yukawa Systemen und polydisperse 'square-well' Mischungen. Ergänzend wurden Rechnungen mit Integralgleichungsmethoden (Rogers-Young Verfahren, 'modified hypernetted chain approximation') durchgeführt. In Kooperation mit ausländischen Gruppen wurden diese Ergebnisse mit Resultaten aus Computersimulationen verglichen: die Ergebnisse zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. Die Arbeiten zur Bestimmung von Dreiteilchenkorrelationsfunktionen in binären flüssigen Mischungen wurden abgeschlossen: auch hier zeigt der Vergleich mit Computersimulationen eine sehr zufriedenstellende Übereinstimmung.

Paper: 13, 16, 20

Projekte: FWF P11194-TPH, FWF P13062-TPH, FWF P14371-TPH, Wiener Handelskammer

Struktur und Thermodynamik von Flüssigkeiten in porösen Medien

Paschinger⁴⁴, Kahl, Gottwald, Levesque⁴⁵, Weis⁴⁶

Einfache Flüssigkeiten, die in Kontakt mit einer porösen Matrix sind, können als eine spezielle binäre Mischung angesehen werden, bei der die Matrixteilchen an ihren Orten fixiert werden; die Flüssigkeitsteilchen können sich in dem somit verbleibenden Raum bewegen. Derartige Systeme zeigen bereits bei geringer Porosität (d.h. geringer Packungsdichte der Matrix) ein Phasenverhalten, das sich vom Phasenverhalten der reinen Flüssigkeit deutlich unterscheidet. Der zur Beschreibung derartiger Systeme hergeleitete Formalismus wurde für den Fall einer binären Flüssigkeit in einem Programmpaket implementiert. Die strukturellen Eigenschaften wurden mit Ergebnissen aus Computersimulationen verglichen und zeigen eine sehr gute Übereinstimmung.

Vortrag: A4, B9

Paper: 18

Projekt: FWF W004, FWF P13062-TPH, Projekt Amadée IV.6

⁴¹Institut für Theoretische Physik II, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Deutschland

⁴²Institut für Theoretische Physik II, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Deutschland

⁴³Instituto de Química Física "Rocasolano", CSIC, Madrid, Spanien

⁴⁴Wissenschaftskolleg 'Computational Materials Science'

⁴⁵Laboratoire de Physique Théorique, Université de Paris-Sud, Orsay, Frankreich

⁴⁶Laboratoire de Physique Théorique, Université de Paris-Sud, Orsay, Frankreich

Struktur und Thermodynamik von Systemen mit ultraweichen WechselwirkungenLang, Likos⁴⁷, Löwen⁴⁸

Manche Suspensionen mesoskopischer Teilchen, wie etwa Polymere, lassen sich sehr gut durch s.g. ultraweiche Potentiale beschreiben. Charakteristisch für diese Klasse von Wechselwirkungen ist, daß sich die Teilchen – im Gegensatz zu atomaren Flüssigkeiten – in einem hohen Maß durchdringen können. Die einfachsten entsprechenden Modellsysteme sind durchdringbare Kugeln und Flüssigkeiten, deren Wechselwirkung durch ein Gauß-Potential beschrieben werden. Im Berichtszeitraum wurden Struktur und Thermodynamik derartiger Systeme ermittelt.

Paper: 20, 15

Projekte: FWF P11194-TPH, FWF P13062-TPH

Selbstkonsistente Verfahren in der FlüssigkeitsphysikReiner, Paschinger⁴⁹, Kahl, Stell⁵⁰, Pini⁵¹

Herkömmliche Verfahren in der Flüssigkeitstheorie (wie Integralgleichungsverfahren oder thermodynamische Störungstheorien) können das Verhalten von Flüssigkeiten in der Nähe der Phasentrennungskurve und in der Nähe des kritischen Punktes zwar *qualitativ*, aber nicht *quantitativ* richtig beschreiben; der Grund dafür liegt in der Tatsache, daß diese Methoden die langreichweitigen Fluktuationen, die für die Phasenübergänge charakteristisch sind nicht berücksichtigen. Im Berichtszeitraum wurde an der Implementierung von zwei Konzepten weiter gearbeitet, die in den letzten Jahren vorgeschlagen wurden und die diese Effekte explizit berücksichtigen können ('hierarchical reference theory' und 'self-consistent Ornstein-Zernike approximation'). Ergebnisse für einfache Modellsysteme wurden bereits berechnet, derzeit wird an der Ausweitung der Programme auf allgemeinere Systeme gearbeitet.

Projekte: FWF W004, FWF P13062-TPH

⁴⁷Institut für Theoretische Physik II, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Deutschland

⁴⁸Institut für Theoretische Physik II, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Deutschland

⁴⁹Wissenschaftskolleg 'Computational Materials Science'

⁵⁰Department of Chemistry, State University of New York, Stony Brook, USA

⁵¹Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano, Milano, Italien

4.3.3 Phasenübergänge in der 'soft condensed matter' Physik

Das Phasendiagramm einfacher Systeme, die in unserer Arbeitsgruppe untersucht werden (wie etwa atomare Flüssigkeiten, Kolloide, Polymere, etc.) kann – je nach Wechselwirkungstyp – sehr komplexe Formen annehmen: so werden neben dem wohlbekannten, van der Waals-ähnlichen Phasenverhalten, auch Phasendiagramme beobachtet, bei denen ein direkter Übergang von der gasförmigen in die feste Phase oder isostrukturelle fest-fest Phasenübergänge möglich sind. Die Vielfalt derartiger Phasendiagramme ist natürlich im Fall binärer Flüssigkeiten noch viel größer. Ziel dieses Arbeitsbereiches ist es, – basierend auf Methoden der Flüssigkeitstheorie – das Phasenverhalten derartiger Systeme vorherzusagen und mit jenem experimentell untersuchten Systemen zu vergleichen.

Konstruktion klassischer Dichtefunktionale in der Flüssigkeitsphysik

Tutschka, Kahl, Roth ⁵²

Die Kenntnis verlässlicher Dichtefunktionale ist unerlässlich für die Beschreibung von Erstarrungsphänomenen in der Flüssigkeitsphysik. Basierend auf einer Idee von Percus wurde, ausgehend von der direkten Korrelationsfunktion der homogenen Flüssigkeit, ein Dichtefunktional für adhäsive harte Kugeln konstruiert; es soll in der Folge an einfachen Beispielen (Flüssigkeit an einer harten Wand oder zwischen zwei parallelen Wänden) getestet werden. Aus (semiempirischen) Parametrisierungen der Zustandsgleichungen von Mischungen harter Kugeln, wurden ebenfalls Dichtefunktionale ermittelt, die sich in den bisher durchgeführten Tests als sehr verlässlich herausgestellt haben.

Vortrag: B22

Paper: 24

Projekte: FWF P13062-TPH, Wiener Handelskammer

Phasenverhalten einfacher Flüssigkeiten und ihrer Mischungen

Lang, Leroch, Gottwald, Kahl, Likos ⁵³, Schmidt ⁵³, Löwen ⁵³, Watzlawek ⁵³, Denton ⁵⁴, Roth ⁵⁵

Mit Hilfe flüssigkeitstheoretischer Methoden lassen sich die Übergänge von der flüssigen in die gasförmige Phase mit Hilfe der bekannten Gleichgewichtsbedingungen einfach berechnen. Zur Beschreibung des festen Zustandes greift man im allgemeinen auf die klassische Dichtefunktionaltheorie zurück und betrachtet den Festkörper als eine hochgeordnete, stark inhomogene flüssige Phase. Zur (näherungsweise) Konstruktion der benötigten Dichtefunktionale werden derzeit bekannte Modelle (WDA, 'modified' WDA – MWDA, etc.) verwendet, bzw. neue Modelle vorgeschlagen. Für Systeme mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen ('square-well', 'square-shoulder', Yukawa-Potentiale) wurden isostrukturelle fest/fest Übergänge untersucht und mit Ergebnissen aus Computersimulationen verglichen. Die MWDA wurde auf den binären Fall erweitert: das Erstarrungsverhalten von Mischungen harter Kugeln und von symmetrischen Mischungen binärer Hartkugel-Yukawa Systeme werden untersucht. Schließlich wird weiter an der Bestimmung von Phasendiagrammen polydispenser flüssiger Mischungen gearbeitet.

Paper: 16, 15

Projekte: FWF P11194-TPH, FWF P13062-TPH, FWF P14371-TPH, Wiener Handelskammer

⁵²Department of Physics, University of Bristol

⁵³Institut für Theoretische Physik II, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Deutschland

⁵⁴Department of Physics, North Dakota State University, Fargo, USA

⁵⁵Department of Physics, University of Bristol

Phasenverhalten binärer Flüssigkeiten in porösen MedienPaschinger ⁵⁶, Kahl, Gottwald, Levesque ⁵⁷, Weis ⁵⁷

Die Berechnung von Phasendiagrammen symmetrischer binärer flüssiger Mischungen in Kontakt mit einer porösen Matrix (Übergang zwischen einer dampfförmigen sowie einer homogen gemischten und entmischten Flüssigkeit) wurde abgeschlossen. Je nach Wahl der Wechselwirkungsstärke des Potentials zwischen ungleichen Teilchen ergeben sich verschiedene Typen von Phasendiagrammen, die durch die relative Lage der λ -Linie zur Dampf-Flüssigkeitstrennkurve charakterisiert sind. Es konnte gezeigt werden, daß sich das Phasenverhalten und der Typ des Phasendiagramms durch Modifikation der Matrixeigenschaften verändern läßt. Die Rechnungen wurden mit Hilfe einer thermodynamischen Störungstheorie ('optimized random phase approximation') durchgeführt und durch Daten aus großkanonischen Monte-Carlo Simulationen ergänzt; die Übereinstimmung ist sehr zufriedenstellend.

Vortrag: A4, B9

Paper: 18

Projekt: FWF W004, FWF P13062-TPH, Projekt Amadée IV.6

Phasenverhalten von Mischungen aus Kolloiden und PolymerenLang, Kahl, Likos ⁵⁸, Schmidt ⁵⁸, Löwen ⁵⁸

Aus theoretischen und experimentellen Untersuchungen weiß man, daß sich Mischungen aus Kolloiden und Polymeren sehr gut durch ein binäres, stark nicht-additives Hartkugelsystem beschreiben lassen. Mittelt man bei der Berechnung der Zustandssumme über die Freiheitsgrade der Polymerteilchen, so erhält man ein effektive Einteilchenpotential für die Kolloidteilchen (Asakura-Oosawa Potential), das eine einfache analytische Form besitzt. In Abhängigkeit des Größenverhältnisses der Kolloide zu den Polymeren ergeben sich verschiedene Phasendiagramme, die bislang nur mit Hilfe einfacher Flüssigkeitstheorien untersucht wurden. Diese wurden mit Hilfe des thermodynamisch selbstkonsistenten Rogers-Young Integralgleichungsverfahrens und der klassischen Dichtefunktionaltheorie (zur Modellierung des festen Zustandes) genauer untersucht.

Paper: 15

Projekte: FWF P11194-TPH, FWF P13062-TPH

⁵⁶Wissenschaftskolleg 'Computational Materials Science'

⁵⁷Laboratoire de Physique Théorique, Université de Paris-Sud, Orsay, Frankreich

⁵⁸Institut für Theoretische Physik II, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Deutschland

4.3.4 Ion – Oberflächen Wechselwirkung

Die Streuung von Ionen an Oberflächen ist mit einer Vielzahl von inelastischen Prozessen verbunden, die den Response der Oberfläche auf ein starkes zeitabhängiges Coulombfeld proben. Von besonderem Interesse sind dabei hochgeladene Ionen, für die die in den Streuprozess eingebrachte reaktive potentielle Energie größer sein kann als die kinetische Energie der Translationsbewegung. In diesem Grenzfall ist nicht mehr die Stoßgeschwindigkeit, sondern der Ladungszustand und das Ionisationspotential die entscheidende Größe, die über den Ablauf des Streuprozesses entscheidet. Vergleichende Untersuchungen für Metalle, Halbleiter und Isolatoroberflächen geben Aufschluß über Unterschiede der dielektrischen Antwort und Abschirmung sowie den Ladungstransfer.

Wechselwirkung hochgeladener Ionen mit Isolatoroberflächen

Burgdörfer, Lemell, Wirtz, Dallos⁵⁹, Müller⁵⁹, Lischka⁵⁹, Hägg⁶⁰, Reinhold⁶¹

Die Beschreibung der Wechselwirkung hochgeladener Ionen mit Isolatoroberflächen mit Methoden, die für Ion-Metall Wechselwirkungen entwickelt wurden (“Classical-Over-Barrier Model”), ist aufgrund der inhomogenen Elektronendichte nur in eingeschränktem Rahmen möglich. Mit Hilfe einer “Classical-Trajectory-Monte-Carlo-Methode” berechnen wir Raten für den Elektroneneinfang in hochangeregte Zustände von mehrfach geladenen Ionen. Diese Raten werden dann für eine Simulation der Entwicklung des Projektil-Ladungszustandes vor der Oberfläche verwendet. Für einfach geladene Projektil-Ionen vor einer LiF-Oberfläche führen wir ab-initio Rechnungen mit dem Quantenchemiecode COLUMBUS durch. Ziel ist die genaue Identifizierung von vermiedenen Überkreuzungen, an denen der Elektronenübergang zwischen einem in der Oberfläche eingebetteten Li_mF_n -Cluster und dem Projektil-Ion stattfindet.

Vortrag: A1, B23, B24, B25

Projekt: FWF-Projekt: “Interaction of Highly Charged Ions with Surfaces”

Elektronenemission aus Festkörperoberflächen

Burgdörfer, Lemell, Aumayr⁶², Betz⁶², Stöckl⁶², Varga⁶², Winter⁶²

Die Wechselwirkung von Projektilen mit Festkörperoberflächen führt in vielen Fällen zur Emission von Sekundärteilchen, vor allem Elektronen. In Abhängigkeit deren Produktionsmechanismus spricht man von Potential- oder kinetischer Emission. Eine experimentelle Trennung der daraus resultierenden Anteile zur Gesamtausbeute wurde kürzlich möglich. Unsere Untersuchungen konzentrieren sich auf die Simulation der zugrundeliegenden Prozesse, die auch eine quantitative Analyse der experimentellen Daten ermöglicht.

Vortrag: B15

Paper: 17

Projekt: FWF-Projekt: “Interaction of Highly Charged Ions with Surfaces”

Wechselwirkung hochgeladener Ionen mit Mikrokapillaren

Burgdörfer, Lemell, Tökési, Wirtz, Tong³³

Um die Eigenschaften sogenannter “hohler Atome”, exotischer Gebilde, die im Zuge von Wechselwirkungen hochgeladener Ionen mit Festkörperoberflächen entstehen und beim Aufprall zerstört werden, besser untersuchen zu können, verwendet man Mikrokapillaren als Targetmaterial. Diese bieten den Vorteil, daß ein kleiner Anteil der Projektile in hohle Atome umgewandelt wird, enge Stöße mit der Oberfläche aber vermieden werden können. Produktion und Zerfall dieser hohlen Atome konnten erfolgreich simuliert werden. In einem weiteren Schritt wurde der Energieverlust jener Projektile berechnet, die die Kapillare ohne Ladungsaustausch passieren. Unter Verwendung unseres Modells ist es möglich, die dielektrische Funktion von Oberflächen ohne störende Einflüsse des restlichen Festkörpers aus Energieverlustmessungen zu bestimmen.

Vortrag: B19, B20, B21, B18

Paper: 22, 23, 21

Projekt: FWF-Projekt: “Interaction of Highly Charged Ions with Surfaces”

⁵⁹Institut für Theoretische Chemie, Universität Wien

⁶⁰Midsweden University, Sundsvall, Sweden

⁶¹Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, USA

⁶²Institut für Allgemeine Physik, TU Wien

Potentialsputtering von IsolatoroberflächenBurgdörfer, Lemell, Wirtz, Hägg⁶⁰, Reinhold⁶¹, Aumayr⁶², Hayderer⁶², Schmid⁶², Varga⁶², Winter⁶²

Die Zerstäubung von Festkörperoberflächen aufgrund des Aufpralls schneller Teilchen ist ein seit langem wohlbekanntes und gut untersuchtes Phänomen. Es zeigt sich aber, daß nicht nur die kinetische sondern auch die potentielle Energie hochgeladener Ionen in der Lage ist, Teilchen aus Isolatoroberflächen abzulösen. Ein möglicher Mechanismus für diesen Prozeß ist die Erzeugung von elektronischen Defekten durch resonanten Elektronentransfer. Für einfach geladene Ionen vor einer LiF-Oberfläche haben wir ein Modell entwickelt, das das Schwellwertverhalten des Potentialsputtering in Übereinstimmung mit dem Experiment beschreibt.

Paper: 10, 11, 25

Projekt: FWF-Projekt: "Interaction of Highly Charged Ions with Surfaces"

4.3.5 Ion-Festkörper-Wechselwirkung**Transport von relativistischen Ionen durch Kohlenstofffolien**Burgdörfer, Seliger, Tókési, Reinhold⁶¹

Der Transport von hoch geladenen Ionen durch Folien ermöglicht die Untersuchung der Auswirkungen von mehrfachen Stößen auf die Stabilität eines Systems. Dazu wurden verschiedene Aspekte des Transports durch dünne Kohlenstoff-Folien untersucht. Die Emission von Convoy Elektronen als Resultat vom Transport von 390 MeV/amu Ar¹⁷⁺-Ionen wurde mit Hilfe klassischer Monte-Carlo Methoden beschrieben. Die stochastische Bewegung des gebundenen Electrons wird aus der Lösung der mikroskopischen Langevin-Gleichung ermittelt. Die errechneten Elektronenspektren stimmen sehr gut mit neuesten Messungen überein. Quantenmechanische Berechnungen zur Besetzung der Zustände wurden mittels Monte-Carlo Simulationen durchgeführt und weisen gute Übereinstimmung mit dem Experiment auf.

Vortrag: B17, B12, B3, B13, B8, B14, B16

Paper: 1, 19

Projekt: FWF Projekt: "Quantenmechanische Transporttheorie"

4.3.6 Piezoelektrische SensorenH. Nowotny, Benes⁶³, Gröschl⁶³

Bei piezoelektrischen Sensoren wird die durch die Umgebung bedingte Frequenzänderung von piezoelektrischen Volumsresonatoren zur Bestimmung bestimmter Eigenschaften dieser Umgebung benützt. Die Veränderung mehrerer Resonanzfrequenzen eines piezoelektrischen Volumsresonators bei der Ankopplung an zu untersuchende Materialien kann zur gleichzeitigen Bestimmung von mehreren Materialkonstanten (z.B. Massendichte und viskose Zähigkeit einer Flüssigkeit) oder zur Kompensation störender Einflüsse (z.B. der Temperatur) bei der genauen Messung einer Materialeigenschaft verwendet werden.

Bei der Ultraschallseparation werden die durch ein stehendes Ultraschallfeld auf suspendierte Teilchen ausgeübten Schallstrahlungskräfte zur Manipulation dieser Teilchen verwendet. Durch einen geeigneten Versuchsaufbau kann einerseits ein Zurückhalten dieser Teilchen z.B. beim Auswechseln der Nährflüssigkeit von Zellkulturen erreicht werden. Andererseits ist aber auch eine gezielte Bewegung dieser Teilchen möglich. Das Ziel dieser durch Schallkräfte verursachten Teilchenbewegung kann eine Anreicherung mit anschließender Ausscheidung der Teilchen sein, wie dies bei der Reinigung von verschmutzten Flüssigkeiten erforderlich ist. Es kann aber auch direkt eine Mikromanipulation der Teilchen erfolgen, z.B. die Herstellung eines mechanischen Kontaktes zwischen den Teilchen zur Einleitung eines chemischen oder biologischen Prozesses.

Vortrag: B2, B1, B5

⁶³Institut für Allgemeine Physik, TU Wien

4.3.7 Publikationen aus Kondensierter Materie

1. D. Arbô, C.O. Reinhold, S. Yoshida, J. Burgdörfer
Quantum evolution of atomic states during transmission through solids
Nucl. Instr. and Meth. B **164**, 495-503 (2000)
2. L. Benco, T. Demuth, J. Hafner, F. Hutschka
Bronsted acid sites in gmelinite
J. Chem. Phys. **16**, 7536-7537 (1999)
3. L. Benco, T. Demuth, J. Hafner, F. Hutschka
Spontaneous proton transfer between O-sites in zeolites
Chem. Phys. Lett. **324**, 373-380 (2000)
4. T. Demuth, Y. Jeanvoine, J. Hafner, J. Angyan
Polymorphism in silica studied in the local density and generalized-gradient approximations
J. Phys: Cond. Matt. **11**, 3833-3874 (1999)
5. T. Demuth, J. Hafner, L. Benco, H. Toulhoat
Structural and acidic properties of mordenite
J. Phys. Chem B **104**, 4593-4607 (2000)
6. R. Duschek, F. Mittendorfer, R.I.R. Blyth, F.P. Netzer, J. Hafner, M.G. Ramsey
The adsorption of aromatics on sp-metals: benzene on Al (111)
Chem. Phys. Lett. **318**, 43-48 (2000)
7. A. Eichler, F. Mittendorfer, J. Hafner
Precursor-mediated adsorption of oxygen on the (111) surfaces of platinum-group metals
Phys. Rev. B **62**, 4744-4755 (2000)
8. R. Hafner, D. Spisak, R. Lorenz, J. Hafner
Ab initio local-spin-density study of oscillatory exchange coupling and spin density waves in Fe/Cr multilayers
J. Appl. Phys. **87**, 5756-5758 (2000)
9. J. Hafner, K. Seifert-Lorenz, O. Genser
Ab initio studies of polyanionic clustering in liquid alloys
J. Non-Cryst. Solids **250-252**, 225-235 (1999)
10. G. Hayderer, C. Lemell, L. Wirtz, M. Schmid, J. Burgdörfer, P. Varga, HP. Winter, F. Aumayr,
Observation of a threshold in potential sputtering of LiF surfaces
Nucl. Instr. and Meth. B **164**, 517-521 (2000)
11. G. Hayderer, M. Schmid, P. Varga, HP. Winter, F. Aumayr, L. Wirtz, C. Lemell, J. Burgdörfer, L. Hägg, C.O. Reinhold
Threshold for potential sputtering of LiF
Phys. Rev. Lett. **83**, 3948-3952 (1999)
12. P. Herzig, R. Dirl
Tensor representations
in *Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry*, ed. by J.C. Lindon, G.E. Tranter, J.L. Holmes (Academic Press, London 2000), pp. 2342-2353
13. S. Jorge, G. Kahl, E. Lomba, J.L.F. Abascal
On the triplet structure of binary liquids
J. Chem. Phys. **113**, 3302-3309 (2000)
14. P. Kasperkovitz, C. Tutschka
Cluster analysis of a one-dimensional system with nearest-neighbour interaction
Ukr. J. Phys. **45**, 488-496 (2000)

15. A. Lang, C.N. Likos, M. Watzlawek, H. Löwen
Fluid and solid phases of the Gaussian core model
J. Phys: Cond. Matt. **12**, 5087-5108 (2000)
16. A. Lang, G. Kahl, C.N. Likos, H. Löwen
Structure and thermodynamics of square-well and square-shoulder fluids
J. Phys: Cond. Matt. **11**, 10143-10161 (1999)
17. C. Lemell, J. Stöckl, J. Burgdörfer, G. Betz, P. Varga, F. Aumayr, HP. Winter
Coincidence measurements of highly charged ions with a clean Au(111) surface
Phys. Rev. A **61**, 012902-1-012902-7 (2000)
18. E. Paschinger, G. Kahl
Structure and thermodynamic properties of a binary liquid in a porous matrix: The formalism
Phys. Rev. E **61**, 5330-5338 (2000)
19. C.O. Reinhold, D.G. Arb, J. Burgdörfer, B. Gervais, E. Lamour, D. Vernhet, J.P. Rozet
Enhanced population of high l-states due to the interplay between multiple scattering and dynamical screening in ion-solid collisions
J. Phys. B **33**, L111-L117 (2000)
20. J. Stellbrink, J. Allgaier, M. Monkenbusch, D. Richter, A. Lang, C.N. Likos, M. Watzlawek, H. Löwen, G. Ehlers, P. Schleger
Neither Gaussian chains nor hard spheres - star polymers seen as ultrasoft colloids
Progr.Colloid.Polym.Sci. **115**, 88-92 (2000)
21. K. Töksi, J. Burgdörfer
Energy loss of highly charged ions in distant collision with microcapillary surfaces
Surface Science **454-456**, 1038-1041 (2000)
22. K. Töksi, L. Wirtz, C. Lemell, J. Burgdörfer
Transmission of highly charged ions through microcapillaries
Nucl. Instr. and Meth. B **164-5**, 504-510 (2000)
23. K. Töksi, L. Wirtz, C. Lemell, J. Burgdörfer
Charge state evolution of highly charged ions transmitted through microcapillaries
Phys. Rev. A **61**, 020901-1-020901-4 (2000)
24. C. Tutschka, G. Kahl
Analytic example of a free energy functional
Phys. Rev. E **62**, 3640-3647 (2000)
25. L. Wirtz, G. Hayderer, C. Lemell, J. Burgdörfer, L. Hägg, C.O. Reinhold, P. Varga, HP. Winter, F. Aumayr
Curve crossing analysis for potential sputtering of insulators
Surface Science **451**, 197-202 (2000)
26. P. Zeiner, R. Dirl, B.L. Davies
Comments on the decomposition of the regular representation of crystallographic space groups into band representations
J. Phys. A: Math. Gen. **33**, 1631-1646 (2000)

4.3.8 Vorträge aus Kondensierter Materie

A. Eingeladene Vorträge

1. J. Burgdörfer
Introduction to the Physics of Highly Charged Ions
Spectroscopy and Collision Dynamics Symposium, Abisko, (Norway)
15.5.2000
2. B.L. Davies, R. Dirl, P. Zeiner
Remarks on a set of integrated software packages on crystallographic space groups
Sixth International School on Theoretical Physics: Symmetry and Structural Properties of Condensed Matter, Myczkowce, (Poland)
4.9.2000
3. P. Kasperkovitz
'Phase coexistence' in a one-dimensional system with nearest-neighbor interaction
Problems of Theoretical and Mathematical Physics (Bogolyubov Conference), Kiew, (Ukraine)
5.10.1999
4. E. Paschinger, G. Kahl, D. Levesque, J.-J. Weis
Phase Diagram of a Symmetric Binary Liquid in a Porous Matrix
Computational Materials Science - Advisory Board Meeting, Wien, (Austria)
19.5.2000
5. P. Zeiner, R. Dirl, B.L. Davies
Alternative decompositions of the regular representations of crystallographic space groups into band representations
Sixth International School on Theoretical Physics: Symmetry and Structural Properties of Condensed Matter, Myczkowce, (Poland)
2.9.2000

B. Sonstige Tagungsbeiträge

1. E. Benes, M. Gröschl, C. Delouvroy, F. Trampler, H. Böhm, S. Radel, L. Gherardini, H. Nowotny
Ultrasonic separation and micro-manipulation of suspended particles and biological cells
Jahrestagung der Österr. Physikalischen Gesellschaft, Fachtagung Akustik, Graz, (Austria)
28.9.2000
2. E. Benes, A. Frank, H. Böhm, M. Gröschl, F. Trampler, W. Burger, H. Nowotny
Vibration Amplitude Distribution Measurements on Piezoelectric PCT/Glass Composite Transducers for Ultrasonic Bio-Cell Filters
12th Int. Symposium on Applications of Ferroelectrics IEEE-ISAF 2000, Honolulu, Hawaii, (USA)
31.7.2000
3. C. Fourment, E. Lamour, D. Vernhet, J.-P. Rozet, B. Gervais, F. Martin, L.J. Dub, T. Minami, C.O. Reinhold, M. Seliger, J. Burgdörfer
Transport of Kr^{35+} inner-shells through solid foils: A test for quantum effects
The Tenth Int. Conf. on the Physics of Highly Charged Ions, Berkeley, CA, (USA)
1.8.2000
4. E. Gratz, K. Hense, H. Nowotny, H. Müller
Influence of the crystal electric field on the thermal expansion and the lattice dynamic in rare earth intermetallics
13th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements SCTE2000, Stresa, (Italy)
4.4.2000

5. M. Gröschl, R. Thalhammer, B. Devcic-Kuhar, F. Trampler, E. Benes, H. Nowotny
Viscosity sensor based upon an angular momentum compensated piezoelectric thickness shear sandwich resonator
Jahrestagung der Österr.Physikalischen Gesellschaft, Fachtagung Akustik, Graz, (Austria)
28.9.2000
6. P. Kasperkovitz, H. Renezeder, C.Tutschka
Ergodic properties of 1D and 2D model systems
50.Jahrestagung der ÖPG, Graz, (Austria)
28.9.2000
7. P. Kasperkovitz, H.C. Renezeder, C. Tutschka
Ergodic properties of a class of model systems
XIII Int. Congress on Mathematical Physics, London, (UK)
17.7.2000
8. T. Minami, C.O. Reinhold, M. Seliger, J. Burgdörfer
Quantum transport of highly charged ions through thin foils
The 2000 DAMOP Meeting, Storrs, Connecticut, (USA)
15.6.2000
9. E. Paschinger, D. Levesque, G. Kahl, J.-J. Weis
Phase Diagram of a symmetric binary fluid in a porous matrix
50. Jahrestagung der ÖPG, Graz, (Austria)
28.9.2000
10. J. Schöll, E. Paschinger
Classification by Random Walks
7th Conference of the International Federation of Classification Societies, Namur, (Belgium)
12.7.2000
11. J. Schöll, E. Paschinger
Suche von Clusterzentren mit Zufallswegen
24. Jahrestagung der Gesellschaft für Klassifikation, Universität Passau, (Germany)
15.3.2000
12. M. Seliger, K. Töksi, C.O. Reinhold, J. Burgdörfer
Inelastic mean free path for relativistic collisions
International Workshop, Inelastic Mean Free Path of Electrons (IMPF2000), Budapest, (Hungary)
28.1.2000
13. M. Seliger, K. Töksi, C.O. Reinhold, J. Burgdörfer
Relativistic electron transport through carbon foils
The Tenth Int. Conf. on the Physics of Highly Charged Ions, Berkeley, CA, (USA)
2.8.2000
14. M. Seliger, K. Töksi, C.O. Reinhold, J. Burgdörfer
Relativistic electron transport through carbon foils
The 2000 DAMOP Meeting, Storrs, Connecticut, (USA)
16.6.2000
15. J. Stöckl, C. Lemell, HP. Winter, F. Aumayr
Electron emission in grazing HCl - LiF(001) collisions
HCI 2000, Berkeley, (USA)
31.7.2000

16. A. Sulyok, G. Gergely, M. Menyhrd, D. Varga, J. Tth, K. Töksi, Z. Bernyi, L. Kövr, G. Lesiak, A. Kosinski
Recoil correction in EPES for determining the IMFP
International Workshop, Inelastic Mean Free Path of Electrons (IMPF2000), Budapest, (Hungary)
28.1.2000
17. K. Töksi
Relativistic electron transport through carbon foils
ATOMKI seminar, Debrecen, (Hungary)
24.4.2000
18. K. Töksi
Transmission of highly charged ions through microcapillaries
Institute of Nuclear Research of the Hungarian Academy of Sciences, Debrecen, (Hungary)
1.11.1999
19. K. Töksi, J. Burgdörfer
Probe of surface dielectric response function by microcapillary transmission
International Workshop, Inelastic Mean Free Path of Electrons (IMPF2000), Budapest, (Hungary)
29.1.2000
20. K. Töksi, X-M. Tong, C. Lemell, J. Burgdörfer,
Surface dielectric properties probed by microcapillary transmission of highly charged ions
The Tenth Int. Conf. on the Physics of Highly Charged Ions, Berkeley, CA, (USA)
3.8.2000
21. K. Töksi, X-M. Tong, C. Lemell, J. Burgdörfer
Surface dielectric properties probed by microcapillary transmission
The 2000 Meeting of the American Physical Society's Division of Atomic, Molecular and Optical
Physics, Storrs, Connecticut, (USA)
14.6.2000
22. C. Tutschka, G. Kahl
Example of an exact free energy functional
50.Jahrestagung der ÖPG, Graz, (Austria)
28.9.2000
23. L. Wirtz, C. Lemell, J. Burgdörfer,
Potential energy curves for charge exchange between singly charged ions and Alkali Halide surfaces
The 2000 DAMOP Meeting, Storrs, Connecticut, (USA)
16.6.2000
24. L. Wirtz, C. Lemell, C.O. Reinhold, L. Hägg, J. Burgdörfer
Charge transfer during scattering of slow singly and multiply charged ions at a LiF-surface
Frühjahrstagung der DPG, Bonn, (Germany)
6.4.2000
25. L. Wirtz, C. Lemell, L. Hägg, C.O. Reinhold, J. Burgdörfer
Influence of hole mobility on charge transfer between slow highly charged ions and insulator surfaces
European Research Conference, San Sebastian, (Spain)
1.10.1999

Kapitel 5

Forschungsaufenthalte

- Joachim Burgdörfer
Institute for Theoretical Atomic and Molecular Physics,
Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics,
Cambridge, MA (USA)
7.12. — 17.12.1999
- Joachim Burgdörfer
Université Paris 6 et 7,
23.2. — 28.2.2000
- Rainer Dirl
School of Informatics, University of Wales, Bangor, UK
18.6. — 9.7.2000
- Gerhard Kahl
Laboratoire de Physique Théorique, Université Paris Sud
24.4. — 8.5.2000
- Maximilian Kreuzer
NSC Kharkov Institute of Physics and Technology, Kharkov, UKRAINE
21.7. — 28.7.2000
- Andreas Lang
Institut für Theoretische Physik II, Heinrich-Heine Universität Düsseldorf
1.3. — 15.5.2000
- Elisabeth Paschinger
Laboratoire de Physique Théorique, Université Paris Sud
25.4. — 9.5.2000
- Emil Persson
Max Planck Institut für Komplexe Systeme, Dresden
29.7. — 5.8.2000
- Anton Rebhan
INT, University of Washington, Seattle, USA
17.10. — 30.10.1999
- Anton Rebhan
Fakultät für Physik, Uni Bielefeld, Deutschland
20.1. — 21.1.2000

- Anton Rebhan
CERN, Genf, Schweiz
16.4.–23.4.2000 und 20.8.–27.8.2000
- Anton Rebhan
Brookhaven National Laboratory, Upton, USA
16.7. – 26.7.2000
- Albert Reiner
Dipartimento di Fisica Teorica, Università di Trieste
18. — 23.10.1999
- Dominik Schwarz
Dept. of Physics, Univ. Helsinki, Finland
15.11.–21.11.1999
- Dominik Schwarz
Inst. f. Theor. Physik, J.W.Goethe-Univ. Frankfurt/Main, Deutschland
8.2.–11.2.2000 und 2.6.–1.7.2000
- Dominik Schwarz
CERN, Genf, Schweiz
3.4.–8.4.2000
- Dominik Schwarz
Fakultät f. Physik, Ludwig-Maximilians-Univ. München, Deutschland
8.5.–10.5.2000
- Marek Seliger
University of Tennessee, Knoxville, USA
25.1. — 28.2.2000
- Karoly Tőkési
Institute for Nuclear Research,
Hungarian Academy of Sciences, Debrecen
17.4. — 22.4.2000
- Shuhei Yoshida
National Research Council Ottawa, Canada
6.8. — 22.8.2000

Kapitel 6

Gastvorträge am Institut

- U. Saalman (Burgdörfer)
Manne-Siegbahn Institute, Stockholm
Dynamics of Metal-Cluster Collisions
5.10.1999
- H. Rauch (Burgdörfer)
Atominstitut der Österreichischen Universitäten
Physics with cold neutrons
9.11.1999
- E. Heller (Burgdörfer)
Harvard University, Cambridge, MA, USA
Theory and Experiment of Wave and Quantum Billiard
(zusammen mit Wiener Phys. Colloquium)
15.11.1999
- X.M. Tong (Burgdörfer)
University of Electrocommunications, Chofu-Shi, Tokyo, Japan
Time-Dependent Density Functional Theory
18.11.1999
- J. Yngvasson (Burgdörfer)
Institut für Theoretische Physik, Univ. Wien
Atoms in Neutron-Star Magnetic Fields : The High B Limit at Fixed Z
23.11.1999
- F. Kerschbaum (Kummer, Schwarz)
Inst. f. Astronomie, Univ. Wien
ESA's fourth space horizon 2000 cornerstone mission: the Far InfraRed and Submillimetre Telescope
24.11.1999
- H. Eberl (Kummer, Schwarz)
HEPHY, OeAW, Wien
Search for Supersymmetry at the LHC
9.12.1999
- W. Grimus (Kummer, Schwarz)
Inst. f. Theor. Phys., Univ. Wien
Recent developments in neutrino masses and mixing
14.1.2000

- D. Milosevic (Burgdörfer)
Max-Born-Institut, Berlin
Control of High-Harmonic Generation with Laser-Assisted X-Ray-Atom Scattering
21.1.2000
- A. Kolovsky (Burgdörfer)
Universität Kaiserslautern
Wannier-Stark Ladder of Resonances in Optical Lattices
25.1.2000
- U. Hohenester (Burgdörfer)
Dipartimento di Fisica, Università di Modena
Role of Coulomb Correlation in the Optical Spectra of Semiconductor Quantum Dots
31.1.2000
- C. Bracher (Burgdörfer)
Technische Universität München
Quantum Ballistic Motion and its Application
21.2.2000
- H. Kauffmann (Burgdörfer)
Institut für Physikalische Chemie, Univ. Wien
*Femto-Second Fluorescence Interferometry:
Experiments on Quantum Dynamics in Molecules*
21.3.2000
- Jérôme Martin (Rebhan, Schwarz)
DARC, Observatoire de Paris, Meudon, France
Cosmological implications of supergravity quintessence
23.3.2000
- H. Lischka (Burgdörfer)
Institut f. Theoretische Chemie, Univ. Wien
Ab Initio Quantum Chemical Calculations of Electronically Excited States
9.5.2000
- E. Lomba (Kahl)
Instituto de Química Física Rocasolano, CSIC, Madrid
A Theoretical Approach for Dipolar Spin Films
24.5.2000
- X.M. Tong (Burgdörfer)
University of Electrocommunication Chofu-Shi, Tokyo, Japan
High-Harmonics Generation
30.5.2000
- R. Folk (Kahl)
Institut für Theoretische Physik, Universität Linz
Critical Dynamics in Fluids
7.6.2000
- H. Lichtenegger (Kummer, Schwarz)
Inst. f. Weltraumforschung, ÖAW, Graz
A possible new test of general relativity in space
16.6.2000

Kapitel 7

Lehrveranstaltungen 1999/2000

7.1 Pflichtlehrveranstaltungen

- Schweda
Methoden der Theoretischen Physik (135.004)
VO WS 3st
- Svozil
Methoden der Theoretischen Physik (135.295)
UE WS 3st
- Nowotny
Elektrodynamik und Relativitätstheorie (132.880)
VO WS 5st
- Grau
Elektrodynamik und Relativitätstheorie (132.891)
UE WS 3st
- Kummer
Quantentheorie (132.869)
VO SS 5st
- Grau
Quantentheorie (132.870)
UE SS 3st
- Kahl/Kasperkovitz
Statistische Physik (132.004)
VO SS 2st
- Kasperkovitz/Kahl (132.003)
Statistische Physik
UE SS 1st
- Burgdörfer, Trost
Thermodynamik (Verbundlehrveranstaltung) (134.009)
VO WS 4st (1.5 + 2.5)
- Lemell, Winter
Rechenübungen Thermodynamik (Verbundlehrveranstaltung) (134.010)
AG WS 3st (1.5 + 1.5)

- Kahl
Grundzüge und Methoden der EDV (in engl. Spr.) (132.435)
VO WS oder SS 2st
- Grau
Theor. Physik 2 f. Lehramtskandidaten (132.682)
VO WS und SS 2st
- Grau
Theor. Physik 2 f. Lehramtskandidaten (132.693)
UE WS und SS 1st

7.2 Wählbare Privatissima

- Burgdörfer
Privatissimum für Diplomanden (132.040)
PV WS oder SS 3st
- Burgdörfer
Privatissimum für Dissertanten (132.041)
PV WS oder SS 3st
- Dirl
Privatissimum für Diplomanden (132.043)
PV WS oder SS 3st
- Dirl
Privatissimum für Dissertanten (132.044)
PV WS oder SS 3st
- Kahl
Privatissimum für Diplomanden (132.346)
PV WS oder SS 3st
- Kahl
Privatissimum für Dissertanten (132.018)
PV WS oder SS 3st
- Kasperkovitz
Privatissimum für Diplomanden (132.946)
PV WS oder SS 3st (WS 1999/2000 nicht abgehalten)
- Kasperkovitz
Privatissimum für Dissertanten (132.020)
PV WS oder SS 3st (1999/2000 nicht abgehalten)
- Kreuzer
Privatissimum für Diplomanden (135.030)
PV WS oder SS 3st
- Kreuzer
Privatissimum für Dissertanten (135.032)
PV WS oder SS 3st
- Kummer
Privatissimum für Diplomanden (135.498)
PV WS oder SS 3st

- Kummer
Privatissimum für Dissertanten (135.674)
PV WS oder SS 3st
- Majerotto
Privatissimum für Diplomanden (135.982)
PV WS oder SS 3st
- Majerotto
Privatissimum für Dissertanten (135.028)
PV WS oder SS 3st
- Nowotny H.
Privatissimum für Diplomanden (132.935)
PV WS oder SS 3st (WS 1999/2000 nicht abgehalten)
- Nowotny H.
Privatissimum für Dissertanten (132.019)
PV WS oder SS 3st (1999/2000 nicht abgehalten)
- Rebhan
Privatissimum für Diplomanden (135.034)
PV WS oder SS 3st
- Rebhan
Privatissimum für Dissertanten (135.035)
PV WS oder SS 3st
- Schweda
Privatissimum für Diplomanden (135.762)
PV WS oder SS 3st
- Schweda
Privatissimum für Dissertanten (135.773)
PV WS oder SS 3st
- Seke
Privatissimum für Diplomanden (132.225)
PV WS oder SS 3st (1999/2000 nicht abgehalten)
- Seke
Privatissimum für Dissertanten (132.017)
PV WS oder SS 3st (1999/2000 nicht abgehalten)
- Svozil
Privatissimum für Diplomanden (132.028)
PV WS oder SS 3st

7.3 Gebundene Wahlllehrveranstaltungen

- Burgdörfer
Klassisches und Quantenchaos (132.006)
SV SS 2st
- Burgdörfer
Advanced Topics in Atomic Theory (132.035)
SV WS 2st

- Burgdörfer, Trost
PrA: Über klassisches und Quantenchaos (132.037)
PR WS oder SS 8st
- Burgdörfer, Lemell
PrA: Über dynamische Oberflächenprozesse (132.039)
PR WS oder SS 8st
- Dirl
Anw. d. Guppenth. i. Festk.- u. Atomphysik (132.512)
SV WS 4st
- Dirl, Kasperkovitz
PrA: Mathematische Physik (132.012)
PR WS oder SS 8st (1999/2000 nicht abgehalten)
- Eberl
UE zu Modelle der Elementarteilchenphysik 1 (135.118)
UE WS 1st
- Eberl
UE zu Modelle der Elementarteilchenphysik 2 (135.129)
UE SS 1st
- Ertl
Symbolische Mathematik in der Theor. Physik (132.456)
VO SS 2st
- Ertl
Symbolische Mathematik in der Theor. Physik (132.478)
UE SS 2st
- Gratz, H. Nowotny
Transportphänomene in Festkörpern (131.291)
SV SS 2st
- Hafner
Elektronenstruktur von Materialien (132.001)
SV WS 2st (WS99/2000 nicht abgehalten)
- Hafner
Computereperimente in der Physik (132.424)
SV WS 2st (WS99/2000 nicht abgehalten)
- Hafner
Phasenübergänge u. kritische Phänomene (132.968)
SV WS 2st (WS99/2000 nicht abgehalten)
- Hafner, Kahl
PrA: Statistische Mechanik (132.013)
PR WS oder SS 8st
- Hafner, Kahl
Praktikum Computational Physics (132.391)
PR SS 4st (1999/2000 nicht abgehalten)
- Hafner, Kummer
PrA: Vorbereitung zur Diplomarbeit von Lehramtskandidaten (132.007)
PR WS oder SS 8st (1999/2000 nicht abgehalten)

- Kahl
Grundzüge und Methoden der EDV (in engl. Spr.) (132.467)
UE WS oder SS 2st
- Kahl
Physik des flüssigen Zustandes (132.380)
SV WS 2st (WS99/2000 nicht abgehalten)
- Kahl, Dirl
Seminar für Theoretische Physik (132.011)
SE WS 2st
- Kahl, Hafner
PrA: Computersimulationen (132.008)
PR WS oder SS 8st
- Kahl, Kasperkovitz
Seminar für Theoretische Physik (132.011)
SE SS 2st
- Kahl, Nowotny
PrA: Theorie der kondensierten Materie (132.010)
PR WS oder SS 8st
- Kasperkovitz
Streutheorie (132.847)
SV WS 2st (1999/2000 nicht abgehalten)
- Kasperkovitz
Von der Quantenmechanik zur klassischen Mechanik (132.051)
SV WS 2st
- Kraemmer
Kosmologie und Teilchenphysik (135.009)
SV SS 2st
- Kreuzer
Einführung in die Superstring–Theorie (135.251)
SV WS 2st
- Kreuzer
Einführung in die Superstring–Theorie II (135.005)
SV SS 2st
- Kreuzer
Arbeitsgemeinschaft: Teilchenphysik I (135.685)
PR WS 2st
- Kummer
Elementary Particle Physics I (in engl. Spr.) (135.017)
SV WS 2st
- Kummer
Elementary Particle Physics II (in engl. Spr.) (135.018)
SV SS 2st
- Kummer
Quantum Theory of Gauge Fields I (in engl. Spr.) (135.021)
SV WS 2st

- Kummer
Quantum Theory of Gauge Fields II (in engl. Spr.) (135.022)
SV SS 2st

- Kummer
gemeinsam mit Kreuzer
Seminar f. Theor. Physik (135.850)
SE WS 2st

- Kummer
gemeinsam mit Kreuzer
Seminar Theor. Physik (135.993)
SE SS 2st

- Kummer
gemeinsam mit Markytan
PrA: Phänomenologie der Elementarteilchen (135.012)
PR WS oder SS 8st (1999/2000 nicht abgehalten)

- Kummer
gemeinsam mit Kreuzer
PrA: Quantenfeldtheorie (135.013)
PR WS oder SS 8st

- Kummer
gemeinsam mit Kraemmer
PrA: Theoretische Elementarteilchenphysik (135.015)
PR WS oder SS 8st

- Kummer
gemeinsam mit Rebhan
PrA: Elektroschw. und starke Wechselwirkungen (135.016)
PR WS oder SS 8st

- Majerotto
Modelle in der Elementarteilchenphysik 1 (135.839)
SV WS 2st

- Majerotto
Modelle in der Elementarteilchenphysik 2 (135.840)
SV SS 2st

- Majerotto
PrA: Modelle der Elementarteilchenphysik (135.023)
PR WS oder SS 8st

- Markytan
Experimentelle Elem. Teilchenphysik, Einf. (135.377)
VO WS 2st

- Markytan
Exp. Elementarteilchenphysik - Prak. (135.388)
PR WS 3st (WS 1999/2000 nicht abgehalten)

- Markytan
Experimente für schwache Wechselwirkungen (135.311)
VO SS 2st (SS 2000 nicht abgehalten)

- Nowotny, Hafner
PrA: Nichtrelativistische Quantentheorie (132.009)
PR WS oder SS 8st (1999/2000 nicht abgehalten)
- Nowotny H.
Theoretische Festkörperphysik I (132.913)
SV WS 2st
- Nowotny H.
Theoretische Festkörperphysik II (132.902)
SV SS 2st
- Nowotny H.
Quantenmechanik von Vielteilchensystemen (132.814)
SV SS 2st (SS 2000 nicht abgehalten)
- Rebhan
Thermische Quantenfeldtheorie (135.006)
SV SS 2st
- Rebhan
Einführung in die Quantenelektrodynamik (135.751)
SV WS 2st
- Schaller
Lie-Gruppen in der Feldtheorie (135.053)
SV WS 2st
- Schweda
Einf. in d. Quantisierg. u. Feldtheorie v. schwing. Saiten (135.007)
VO SS 2st
- Schweda
Einf. i. d. Quantenfeldtheorie 1 (135.817)
VO WS 2st
- Schweda
Einf. i. d. Quantenfeldtheorie 2 (135.828)
VO SS 2st
- Schweda
Einführung in die Allgemeine Relativitätstheorie (135.718)
VO WS oder SS 1st
- Schweda
Quantenfeldtheorie u. Symmetrien 1 (135.806)
VO WS 2st
- Schweda
Quantenfeldtheorie u. Symmetrien 2 (135.872)
VO SS 2st
- Schweda
PrA: Feldtheorie (135.024)
PR WS oder SS 8st
- Schweda
Arbeitsgemeinschaft Teichenphysik II: Einführung in die Supersymmetrie (135.696)
PR SS 2st

- Schweda
gemeinsam mit Kreuzer
PrA: Symmetrien in d. fundamentalen Wechselwirkungen (135.026)
PR WS oder SS 8st
- Schweda
gemeinsam mit Rebhan
PrA: Teilchenphysik (135.027)
PR WS oder SS 8st
- Seke
Einführung in die Quantenoptik (132.022)
SV WS 2st
- Seke
Höhere Quantenoptik (132.501)
SV SS 2st
- Seke
Stat. Th. d. elektromag. Strahlungsemission (132.033)
SV SS 2st
- Seke
PrA: Theoretische Quantenoptik (132.014)
PR WS oder SS 8st (WS99/00 nicht abgehalten)
- Sigmar
Theor. Plasma Physics f. Astrophys. and Fusion (in engl. Spr.) (132.029)
SV SS 2st (SS 2000 nicht abgehalten)
- Svozil
Quantenberechenbarkeit und Komplexitätstheorie (132.002)
SV SS 2st
- Svozil
Chaotische Systeme (132.015)
PR WS oder SS 8st
- Svozil
Theorie der Supraleitung (132.038)
PR SS 8st

7.4 Freie Wahlfächer

- Locker
Natur und Leben, Mensch und Technik (132.616)
SE WS und SS 2st
- Locker
Theorie der Kybernetik I (132.024)
VU WS 2st
- Locker
Theorie der Kybernetik II (132.026)
VU SS 2st
- Seke, Herfort
PrA: Math. Meth. der Quantenoptik (132.236)
PR WS oder SS 8st (1998/99 nicht abgehalten)

- Kreuzer
Geometrische Methoden der Theoretischen Physik (135.029)
SV SS 2st (1999/2000 nicht abgehalten)
- Svozil
Unentscheidbarkeit und Zufall (132.523)
VO WS 2st
- Wulz
Perspektiven der experimentellen Hochenergiephysik (135.284)
VO WS 1st (WS 1999/2000 nicht abgehalten)

Kapitel 8

Absolventen

8.1 Rigorosen

- U. Feichtinger
Betreuer: M. Schweda
Field Theories from String Theory
Rigorosum: 15.12.1999
- T. Pisar
Betreuer: M. Schweda
Supersymmetric Structure in Topological Field Models
Rigorosum: 21.6.2000

8.2 Diplomprüfungen

- R.M. Hammerling
Betreuer: R. Dirl, P. Weinberger
Magnetic anisotropy of cobalt on copper(111)
2.Diplomprüfung: 28.6.2000
- D. Hofmann
Betreuer: W. Kummer
Spherical reduction of Brans-Dicke theory
2.Diplomprüfung: 13.10.1999
- A. Ipp
Betreuer: A. Rebhan
Phase transition of a scalar field theory in the early universe
2.Diplomprüfung: 16.2.2000
- H. Nieder
Betreuer: M. Schweda
Batalin-Vilkovisky Formulation of Topological Field Models
2.Diplomprüfung: 22.5.2000
- L. Popp
Betreuer: M. Schweda
Higher Dimensional Interacting Topological Field Theory
2.Diplomprüfung: 22.3.2000
- G. Sommer
Betreuer: M. Schweda
Der Symmetriebegriff in der modernen Physik
2.Diplomprüfung: 9.5.2000

Kapitel 9

Verwaltungstätigkeit

9.1 Mitarbeit in wissenschaftlichen Organisationen

BALASIN Gutachter (Classical and Quantum Gravity, Physical Review D)
BURGDÖRFER Member of Commission 15 on Atomic,
Molecular and Optical Physics der International Union
of Pure and Applied Physics (IUPAP), 1999–2005;
Associate Member of Commission on Nuclear Physics of IUPAP, 2000–2003;
Member of the Executive Committee of the
International Conference on the Physics of Electronic
and Atomic Collisions (ICPEAC) and Local Co-chairman
of XXII ICPEAC in Santa Fe (2001);
Member of the International Advisory Board of the
International Conference on Highly Charged Ions (HCI);
Member, Int. Advisory Board, Int. Workshop on Fast Ion - Atom
Collisions;
Member, Int. Scientific Committee, Int. Conf. on X-Ray
and Inner-Shell Processes (1996-2002);
Member, International Advisory Board, International Workshop
on Atomic Collisions and Atomic Spectroscopy with Slow
Antiprotons, 1999–2001;
Member of the Atomic and Material Physics Working Group,
Nuclear Physics European Collaboration Committee, 2000-2001;
Gutachter für National Science Foundation (USA),
Department of Energy (USA),
Gutachter für Humboldt-Forschungspreis (Deutschland);
Gutachter für APS Fellowship Committee;
Co-Organizer of Pan American Study Institute on Chaos, Decoherence
and Quantum Entanglement, Ushuaia, Argentina;
Gutachter der Max Planck Gesellschaft
– Chem. Phys. Sektion (Deutschland);
Reviewer für Physical Review A, Physical Review B,
Physical Review E, Physical Review Letters,
Journal of Physics, Physics Letters A, Physica Scripta,
Nuclear Instruments & Methods, European Physical Journal D,
Comments in Atomic and Molecular Physics,
Surface Science, Europhysics Letters

- DIRL
 Reviewer (Mathematical Reviews, Cambridge University Press)
 Gutachter (Acta Crystallographica, Computer Physics Communications,
 Ferroelectrics, Journal of Mathematical Chemistry,
 Journal of Mathematical Physics, Journal de Physique,
 Journal of Physics A, Journal of Physics C, Molecular Physics,
 Physical Review B, Physical Review Letters,
 Reports on Mathematical Physics)
 Member of International Advisory Committee of International School on
 Symmetries and Structural Properties of Condensed Matter, Rzeszow (PL)
- KAHL
 Gutachter (Physical Review B und E, Physical Review Letters
 Journal of Chemical Physics, Molecular Physics, Physica B,
 Journal of Non-Crystalline Solids)
 Delegierter der TNI im FWF (Stellvertreter)
 Vorstandsmitglieder der Chemisch Physikalischen Gesellschaft
- KREUZER
 Organisationskomitee des Forschungsprogramms
 “Duality, String Theory and M-Theory” von Mrz bis Juli 2000
 am Erwin Schrödinger Institut für Mathematische Physik in Wien
- KUMMER
 Gutachter (Physical Review D, Physical Review Letters, Nuclear Physics B)
 Kuratorium des Instituts für Hochenergiephysik der ÖAW (stv. Obmann)
 High Energy and Particle Physics Board of the European Physical Society
 (Chairman 1.1.1997 – 31.12.1999)
 Member of the International Advisory Board
 “Supersymmetry and Quantum Field Theory”, Kharkov, Juli 2000
 Member of the International Organizing Committee
 “Fundamental Physics in Space”, April 2000
 International Organizing Committee
 “3rd Caribbean Workshop”, Havanna (Cuba), Dezember 2000
 Österreichisches Nationalkomitee der IUPAP (Vorsitzender)
- REBHAN
 Vorsitzender des Fachausschusses Kern- und Teilchenphysik
 der Österreichischen Physikalischen Gesellschaft
 Gutachter für Physical Review Letters, Physical Review D, Nuclear Physics B,
 Physics Letters B, Annals of Physics (N.Y.)
- SCHWEDA
 Begutachter des FWF und des Jubiläumsfonds d. ÖNB
- SVOZIL
 Associate Editor, Journal of Universal Computer Sciences (Springer)
 Associate Editor, Chaos, Solitons and Fractals
 External faculty member, Center for Discrete Mathematics,
 University of Auckland, NZ

9.2 Mitarbeit in der Universitätsverwaltung

BURGDÖRFER	Fakultät (Stv.), Fachkommission (Stv.), Studienkommission, Kommission für Wiener Physikalisches Kolloquium Habitationskommission Dr. J. Schweinzer Habitationskommission Dr. L. Erdös (Universität Wien)
GRAU	Organisation und Koordination des Maturantentages (3.2.2000) Organisation der Studienberatung Technische Physik und Physik Lehramt (BeSt) Studienkommission Lehramt Physik Terminkoordination für die schriftlichen Prüfungen der Physik Institute
KAHL	Fachkommission Physik (UOG 93) Studienkommission Physik, Dr. techn., LA (jeweils Stv.) Studienberatung (BeSt)
KASPERKOVITZ	Fachgruppe, Studienberatung (BeSt) Mitarbeiter Maturantentag (Berufsbild) Absolventenbefragung O. und Ao. Dotation (Söllner – Gruppe)
KREUZER	Studienkommission Physik (Stv.)
KUMMER	Fakultät, Fachgruppe UPV der TU Wien (Vorstandsmitglied) Studienkommission Physik (Stv.)
REBHAN	Institutskonferenz
SCHWEDA	Fakultät (Ersatzmitglied), Fachgruppe Vorstandsmitglied des UPV

9.3 Verwaltungstätigkeit am Institut

BALASIN	Computer Hard- und Software-Betreuung (Linux), Netzwerkbetreuung
BURGDÖRFER	Stv. Institutsvorstand
DIRL	Institutsbericht 1998/99
ERTL	Computer Hard- und Software-Betreuung
GRAU	Lehrveranstaltungsankündigungen Studienplankontrolle Technische Physik und Physik Lehramt für das Vorlesungsverzeichnis SIDES-Administrator Arbeitsbericht des Institutsvorstandes, Teile: 1, 2, 3 ÖSTAT-Erhebung Forschung und experimentelle Entwicklung
KAHL	Institutskoordination des Maturantentages, Informationstag
KASPERKOVITZ	O. und Ao. Dotation (Söllner – Gruppe) Arbeitsbericht des Institutsvorstandes, Teil: 4
KREUZER	Computer Hard- und Software-Betreuung FODOK SLAC Datenbank
KUMMER	Institutsvorstand
LANG	Hard- und Software-Betreuung der Workstations
LEMELL	Institutskonferenz, Systemadministration der LINUX- und AIX-Server der Arbeitsgruppe Nicht-Lineare Dynamik und Physik komplexer Systeme
LIEBL	Computer Hard- und Software-Betreuung
H. NOWOTNY	Brandschutzbeauftragter, Sicherheitsbeauftragter
REBHAN	Systemadministration des Instituts-Email/Webserver-Rechners und der Druckerserver, Institutsdatenbankverwaltung, Installation und Betreuung der LINUX-Server der Arbeitsgruppe Fundamentale Wechselwirkungen
SCHWEDA	stv. Institutsvorstand
SVOZIL	Webauftritt
TUTSCHKA	Hard- und Software-Betreuung der Workstations

Kapitel 10

Personalia

- Seit Beginn seines Ruhestandes ist Gerhard Adam freier Mitarbeiter.
- Am 25.9.2001 wurde Ulrike Kraemmer von ihrem fünften Sohn, Philipp Leon entbunden.
- Wolfgang Kummer wurde (gemeinsam mit L.Faddeev) am 20.9.2000 der “Walter-Thirring”-Preis der Ukrainischen Akademie der Wissenschaften verliehen.
- DI Elisabeth Paschinger und DI Joachim Schöll haben am 3.6.2000 geheiratet.
- DI Albert Reiner hat vom 2.11.1999 bis zum 30.6.2000 seinen Präsenzdienst abgeleistet.
- Dominik Schwarz wurde am 9.2.2000 von der Fakultät Physik der J.W.Goethe-Universität Frankfurt am Main die *venia legendi* verliehen.
- Peter Zeiner: Schrödinger Stipendiat (bis 31. Oktober 2000, bei Professor Ted Janssen, Institute for Theoretical Physics, University of Nijmegen, Nijmegen, Netherlands)
- Bezüglich Sponsionen und Promotionen von Institutsmitarbeitern siehe Abschnitt **Absolventen** (Seite 70).