Der **Physik-Preis 2016** wurde Dr. Christoph Karrasch, Berlin, in Anerkennung seiner bahnbrechenden Erweiterung der Dichtematrix-Renormierungsgruppe, welche die Anwendung dieser Methode bei endlichen Temperaturen möglich gemacht hat, verliehen.

Christoph Karrasch
Quantenmechanische Wellen bei endlichen Temperaturen (in eindimensionalen Systemen)

Dr. Christoph Karrasch, Emmy Noether Forschungsgruppe „Theorie der stark korrelierten Materie“, FU Berlin, Träger des Physik-Preises 2016

Die Physik der Atome ist bestimmt durch die Schrödinger-Gleichung. In diesem Artikel wollen wir berichten, wie diese Gleichung für eindimensionale Systeme („Drähte“) bei endlichen Temperaturen effizient gelöst werden kann.

Konkret soll auf das Folgende eingegangen werden: (a) Welche Rolle spielen eindimensionale Systeme in unserer dreidimensionalen Welt? Warum sind diese besonders interessant? Warum ist die theoretische Beschreibung (also die Lösung der Schrödinger-Gleichung) so schwer? Wie können wir die Schrödinger-Gleichung bei endlichen Temperaturen eleganter lösen? Was kann man mit Hilfe dieses neuen Ansatzes über die Quantenphysik eindimensionaler Systeme lernen?

Ein- und zweidimensionale Systeme

Da die uns umgebende Welt dreidimensional ist, muss man sich fragen, warum sich ein Physiker für auf den ersten Blick akademisch anmutende Probleme in ein- oder zwei Raumdimensionen interessiert. Hierfür gibt es im Wesentlichen drei Gründe: Erstens sind viele in der Natur vorkommende Materialien (z. B. hinsichtlich ihrer Kristallstruktur) stark anisotrop; daher werden viele Eigenschaften effektiv von „lose übereinander geschichteten“ ein- oder zweidimensionalen Systemen bestimmt. Zweitens ist es mittels moderner Nanotechnologie möglich, nahezu eindimensionale Quantendrähte (wie bspw. Kohlenstoff-Nanoröhren) herzustellen. Letztlich können niedrig-dimensionale Systeme mit Hilfe sog. „optischer Gitter“ künstlich im Labor realisiert werden [1].

DOI 10.1515/JBG-2016-0014

Studium fundamentaler physikalischer Phänomene

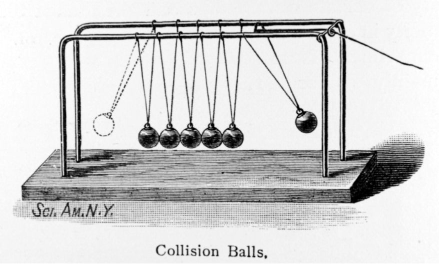

Abb. 1: Newton-Pendel

Wir haben soeben erläutert, dass niedrig-dimensionale Systeme in der Natur auftauchen und auch im Labor künstlich hergestellt werden können. Warum aber sind diese für den Physiker besonders interessant? Ein Grund hierfür ist, dass in solchen Systemen fundamentale physikalische Phänomene oft sehr kontrolliert studiert werden können. Ein schönes Beispiel aus der Alltagswelt ist das in Abbildung 1 gezeigte Newton-Pendel, in welchem an Fäden befestigte Metallkugeln entlang einer Reihe angeordnet sind. Die Kugeln können sich also (nahezu) nur in einer Richtung bewegen und stellen damit ein (nahezu) eindimensionales System dar. Die Dynamik dieser Anordnung ist in gewisser Weise sehr „speziell“: Wird die Kugel am Ende des Pendels ausgelenkt und dann losgelassen, so bleiben bei der folgenden Bewegung die mittleren Kugeln stets in Ruhe, nur die Kugel am anderen Ende wird nach oben gestoßen. Aus dieser „sehr eigenartigen“ Bewegung kann der Physiker viel über die Mechanik makroskopischer Objekte lernen (und bspw. Konzepte wie „Energie- und Impulserhaltung“ verifizieren).

Mittels moderner Technologien ist es nun möglich, ein „Newton-Pendel mit Atomen“ im Labor herzustellen (durch Einsatz eines optischen Gitters; siehe [2]). Dies ist sehr interessant: Wenn man aus einem aus Metallkugeln bestehenden Newton-Pendel viel über klassische Mechanik lernen kann, so wird man sicher aus einem Newton-Pendel mit Atomen viel über die Physik der Atome lernen können. Es stellt sich damit die Frage: Wie kann der Physiker solche Pendel theoretisch modellieren? Das Newton-Pendel mit Metallkugeln kann gut mittels der Newtonschen Mechanik beschrieben werden, deren zentrale Konzepte „Bahnkurven“ sowie die Bewegungsgleichung sind:

$$F = m\frac{d^2x(t)}{dt^2} \quad \text{(Kraft = Masse * Beschleunigung)}$$

In der atomaren Welt verliert die klassische Mechanik ihre Gültigkeit und wird durch die Quantenmechanik ersetzt; anstatt von Bahnkurven treten nun Wellenfunktionen auf, deren Dynamik durch die Schrödinger-Gleichung bestimmt wird.

Wenn man also ein aus Atomen aufgebautes Newton-Pendel theoretisch modellieren möchte, so muss man die Schrödinger-Gleichung für dieses System lösen. Wir wollen als nächstes erläutern, warum dies in vielen Fällen sehr schwierig ist.

Theoretische Beschreibung: Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar = \frac{d}{dt}\ \psi(x,t) = H\psi(x,t)$$

bestimmt die Dynamik einer Wellenfunktion $\psi(x,t)$; hierbei ist H der sog. Hamilton-Operator, welcher mit der Energie des Systems zusammenhängt. Typische Beiträge zur Energie sind Bewegungsenergie, potentielle Energie oder die Wechselwirkungsenergie zwischen mehreren Teilchen (z. B. die Coulomb-Abstoßung elektrischer Ladungen). Letztere führt nun aber gerade dazu, dass Teilchen nicht mehr unabhängig sind, sondern etwas von ihrer gegenseitigen Existenz wissen – wann immer aber verschiedene Konstituenten eines Systems „miteinander sprechen“, wird dessen Beschreibung (also hier die Lösung der Schrödinger-Gleichung) kompliziert.

Sind dem Physiker Dinge zu kompliziert, so ist er geneigt, sie zunächst zu vernachlässigen. Berücksichtigt man in der Schrödinger-Gleichung nur Bewegungsenergie und potentielle Energie (und vernachlässigt die Wechselwirkungs-Energie), so bewegen sich die Teilchen unabhängig voneinander (von Dingen wie dem Pauli-Prinzip sei einmal abgesehen). Die Schrödinger-Gleichung kann dann oftmals „einfach“ gelöst werden, und man findet Dinge wie die Bandstruktur der Festkörper oder das Bohrsche Atommodell (bei welchem der schwere Atomkern sich nicht bewegt, es also potentielle, aber keine echte Wechselwirkungs-Energie gibt).

Leider gibt es aber a priori keine gute Rechtfertigung, die Wechselwirkungs-Energie zu vernachlässigen – diese ist nicht „klein“. Weiterhin gibt es viele experimentell beobachtete Phänomene, die ohne Berücksichtigung der Wechselwirkungs-Energie nicht durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben werden. Ein bekanntes Beispiel hierfür ist die Supraleitung.

Es stellt sich also die Frage: Wie löse ich die Schrödinger-Gleichung, wenn Teilchen nicht mehr unabhängig voneinander sind, sondern miteinander wechselwirken?

Schrödinger-Gleichung in einer Dimension

In den letzten 20 Jahren wurde ein Algorithmus entwickelt [3], der die Schrödinger-Gleichung unter Berücksichtigung der Wechselwirkungs-Energie in einem eindimensionalen System lösen kann (die sog. Dichtematrix-Renormierungsgruppe, kurz DMRG). Wenn man eine Wellenfunktion $\psi(x,t)$; zu einer Zeit vorgibt, so kann dieser Algorithmus (neben vielen anderen Dingen) die Wellenfunktion zu späteren Zeiten berechnen; man kann also studieren, wie sich der vorgegebene Zustand eines Systems räumlich und zeitlich entwickelt. Wir wollen an dieser Stelle nicht auf die Details eingehen (Interessierte seien auf den Übersichtsartikel [4] verwiesen), sondern nur vermerken, dass der DMRG-Algorithmus „exakt" ist, allerdings der numerische Aufwand typischerweise exponentiell mit der Simulationszeit anwächst.

Es gibt also einen Algorithmus, der die Schrödinger-Gleichung lösen und die Dynamik einer Wellenfunktion berechnen kann. Was macht man aber, wenn man an endlichen Temperaturen interessiert ist? Eine praktische Fragestellung könnte wie folgt aussehen: Man präpariere einen Quantendraht bei endlicher Temperatur und schieße eine Ladung in seine Mitte – wie breitet sich diese Ladung in Raum und Zeit aus?

Schrödinger-Gleichung bei endlichen Temperaturen

Grob gesprochen ist die Physik eines Systems bei endlichen Temperaturen nicht nur durch eine einzige, sondern von einer Vielzahl physikalischer Konfigurationen bestimmt (damit verbunden sind bspw. Begriffe wie die „Boltzmann-Verteilung"). Möchte man also die Dynamik eines quantenmechanischen Systems bei endlichen Temperaturen berechnen, so reicht es nicht, dass man die Schrödinger-Gleichung für eine Wellenfunktion lösen kann – man muss diese Gleichung für viele Wellenfunktionen (Konfigurationen) gleichzeitig lösen!

Das eben skizzierte Problem kann wie folgt angegangen werden: Es existiert eine mathematische Abbildung, mit deren Hilfe man viele Wellenfunktionen (Konfigurationen) durch eine einzige, „kompliziertere, aus mehr Freiheitsgraden bestehende" Wellenfunktion ausdrücken kann. Der DMRG-Algorithmus „interessiert" sich nun aber nicht dafür, „wie kompliziert" eine Wellenfunktion ist – er kann direkt für die neue, „kompliziertere“ Wellenfunktion, welche mittels der mathematischen Abbildung die Information über alle Konfigurationen des Systems gleichzeitig enthält, angewandt werden. Folglich kann man im Prinzip die Schrödinger-Gleichung bei endlichen Temperaturen und ohne Vernachlässigung der Wechselwirkungs-Energie (nahezu) exakt lösen – leider aber wächst der Rechenaufwand so stark mit der Simulationszeit an, dass die in der Praxis erreichbaren Zeitskalen oft so klein sind, dass nicht hinreichend viel über die Physik des Systems gelernt werden kann.

Zusammenfassung der Problemstellung

An dieser Stelle wollen wir noch einmal die ursprüngliche Problemstellung zusammenfassen: Wenn man die Dynamik eines Quantensystems (bspw. des Newton-Pendels mit Atomen) beschreiben möchte, so muss man die Schrödinger-Gleichung für dieses Problem lösen. Für eindimensionale Systeme („Drähte“) existiert hierfür ein Algorithmus; bspw. liefert dieser bei Vorgabe einer Wellenfunktion zu einer Anfangszeit die Wellenfunktion zu einer späteren Zeit. Dieser Algorithmus kann auch bei endlichen Temperaturen verwendet werden; hierzu werden mittels einer mathematischen Abbildung die vielen, bei endlicher Temperatur auftretenden Konfigurationen durch eine einzige, „kompliziertere“ Konfiguration ausgedrückt. Dieses Vorgehen ist exakt; leider steigt aber der Simulationsaufwand oftmals so schnell an, dass nur sehr kleine Simulationszeiten möglich sind.

Der Lösung (besser gesagt: Minderung der Schwere) genau dieses Problems haben wir uns im Jahr 2012 angenommen [5]; hierüber soll nun kurz berichtet werden.

Ein neuer Algorithmus bei endlichen Temperaturen

Die zentrale Einsicht zur Lösung obigen Problems ist die Folgende: Die erwähnte Abbildung, welche die vielen, bei endlicher Temperatur beitragenden Konfigurationen (Stichwort „Boltzmann-Verteilung“) durch eine einzige, „komplizierte“ Konfiguration ausdrückt, ist nicht eindeutig! Man kann sich fragen: Kann diese Abbildung so modifiziert werden, dass der Rechenaufwand reduziert wird? Anders ausgedrückt: Kann die Schrödinger-Gleichung eines eindimensionalen Systems bei endlichen Temperaturen durch Ausnutzen eines mathematischen Tricks „eleganter“ gelöst werden? In der Tat ist dies möglich; das ist das zentrale Ergebnis unserer Arbeit (Details sind in [5] erörtert). Durch den so modifizierten Algorithmus können aufgrund des geringeren Rechenaufwands längere Simulationszeiten erreicht werden. Wir wollen nun ein Beispiel diskutieren.

Es ist instruktiv, zum Test des Algorithmus die Wechselwirkungs-Energie zu vernachlässigen. Die Teilchen werden dann (abgesehen vom Pauli-Prinzip) unabhängig voneinander, und die Schrödinger-Gleichung kann „mit Papier und Bleistift" exakt gelöst werden. Alternativ kann dieses Problem natürlich mit dem DMRG-Algorithmus attackiert werden; die exakte Lösung dient für diesen dann als „Referenz-Test".

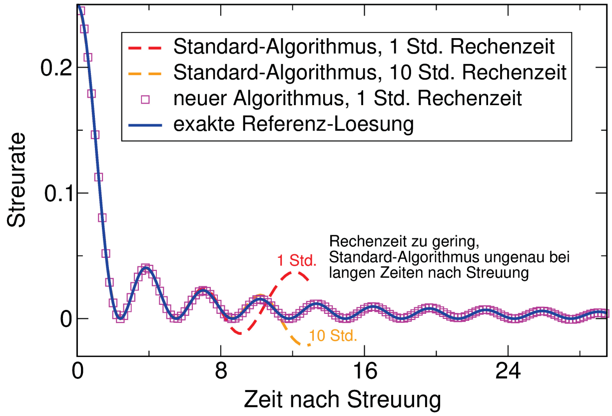

Abb. 2: Streurate eines Systems von Teilchen ohne Wechselwirkungs-Energie in Abhängigkeit von der Zeit nach der Streuung.

Als konkretes Beispiel betrachten wir nun die Streuung von Teilchen (ohne Wechselwirkungs-Energie) bei hohen Temperaturen und berechnen die „Streurate" dieses Systems in Abhängigkeit von der „Zeit nach der Streuung". Abbildung 2 zeigt hierfür vier Kurven: die exakte, mit „Papier und Bleistift" bestimmte Referenzlösung, die Vorhersage des ursprünglichen Algorithmus mit einer bzw. zehn Stunden Rechenzeit und letztlich die Vorhersage des neuen, modifizierten Algorithmus mit nur einer Stunde Rechenzeit. Man sieht, dass der alte Algorithmus nur bis zu einer bestimmten Zeit nach der Streuung verlässliche Ergebnisse liefert – danach wird er zu ungenau, da die investierte Rechenzeit zu gering war. Insbesondere sieht man, dass eine Vergrößerung des Rechenaufwands um einen Faktor zehn (von einer auf zehn Stunden) die Streurate nur für etwas größere Streuzeiten verlässlich beschreibt. Im Gegensatz hierzu liefert der modifizierte Algorithmus selbst mit nur einer Stunde Rechenzeit gut mit der exakten Referenzlösung übereinstimmende Ergebnisse!

Das eben diskutierte Beispiel ist sicherlich ein „glücklich gewähltes“; aber auch generell gilt, dass mittels des modifizierten Algorithmus der Rechenaufwand zur Lösung der Schrödinger-Gleichung reduziert wird, also längere Zeitskalen in der Simulation erreicht werden können.

Anwendungen des Algorithmus

Wir wollen zunächst nochmal kurz unser zentrales Ergebnis zusammenfassen: Es existiert seit langem ein Algorithmus [3], mit dessen Hilfe die Schrödinger-Gleichung eines eindimensionalen Systems gelöst werden kann. Weiterhin existiert eine mathematische Abbildung, welche die vielen Konfigurationen eines Systems bei endlicher Temperatur durch eine einzige, kompliziertere Konfiguration ausdrückt [4]. Wir haben eingesehen, dass diese Abbildung nicht eindeutig ist und eine modifizierte Abbildung konstruiert, welche den Rechenaufwand des Algorithmus stark reduziert, oder anders: Wir haben eine „elegantere“ Art gefunden, die Schrödinger-Gleichung eines eindimensionalen Systems bei endlicher Temperatur zu lösen [5].

Der neue Algorithmus kann nun verwendet werden, um eine Vielzahl von quantenmechanischen Problemen bei endlicher Temperatur zu untersuchen. Als anschauliches Beispiel klebe man einen „heißen Quantendraht“ an einen kalten Draht, berechne, welche Wärme von heiß nach kalt fließt und frage, was man daraus über die fundamentale Physik des Systems lernen kann. Der fließende (Nichtgleichgewichts-) Strom kann mit der thermischen Leitfähigkeit in Verbindung gebracht werden, und man kann einen Vorschlag erarbeiten, wie diese Größen in einem Experiment (ähnlich dem des Newton-Pendels mit Atomen) gemessen werden könnten. Insbesondere kann man eine besondere Kenngröße der Leitfähigkeit (das sog. Drude-Gewicht) berechnen – die Tatsache, dass diese Größe in einem System einen endlichen Wert annimmt, ist „das atomare Äquivalent“ der Tatsache, dass im Newton-Pendel mit Metallkugeln die mittleren Kugeln bei der Bewegung stets in Ruhe bleiben.

Durch unsere „elegantere“ Lösung der Schrödinger-Gleichung bei endlichen Temperaturen können wir also eine Eigenschaft berechnen, die ein einfaches Analogon im klassischen Newton-Pendel besitzt! Hieraus kann man wiederum Fundamentales über die Physik der Atome lernen.

[1] I. Bloch, Nature 453, 1016 (2008).
[2] T. Kinoshita, T. Wenger, D. S. Weiss, Nature 440, 900 (2006).
[3] S. White, Phys. Rev. Lett. 69, 2863 (1992).
[4] U. Schollwöck, Ann. Phys. 326, 96 (2011).
[5] C. Karrasch, J. Bardarson, J. Moore, Phys. Rev. Lett. 108, 227206 (2012).