

Spektralfunktionen und Bandstrukturen im Nichtgleichgewicht

Calculation of Spectral Functions in Out-of-Equilibrium Setups

C. Meyer, S. R. Manmana, Institut für Theoretische Physik, Georg-August-Universität Göttingen

Kurzgefasst

- Physikalische Systeme streben stets einen Gleichgewichtszustand an.
- Systeme, die durch eine Störung aus dem Gleichgewicht gebracht wurden, zeigen beim Rückgang in das Gleichgewicht zum Teil für sie sonst nicht charakteristisches Verhalten.
- Im Rahmen dieser Arbeit werden Prozesse nach einer optischen Anregung anhand verschiedener numerischer Modelle untersucht und charakterisiert.
- Die Arbeit ist Teil des Sonderforschungsbereiches SFB 1073 Kontrolle der Energiewandlung auf der atomaren Skala der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG), bei der die numerischen Ergebnisse mit experimentellen Ergebnissen verglichen werden.

Dass sich ein physikalisches System einen für sich möglichst günstigen Ruhezustand sucht, in dem es ohne Einwirkung weiterer Störungen bleiben wird, ist Newton bereits im Jahre 1687 bewusst geworden. Er manifestierte diese Beobachtung in dem nach ihm benannten Trägheitsgesetz. Ein System befindet sich dann in Ruhe, also im Gleichgewicht (oder auch Grundzustand), wenn es die geringst mögliche Energie aufwenden muss, um dauerhaft in diesem Zustand zu verharren. Aus dem Alltag kennen wir zahlreiche Beispiele für dieses Verhalten: Füllen wir ein Glas mit Wasser, so wird das Wasser eine gerade Oberfläche parallel zur Erdoberfläche bilden und sich nicht etwa in Form eines Haufens anordnen. Da eben dieser Gleichgewichtszustand für das System ideal ist, wird es alles tun, um nach einer Störung wieder in diesen Zustand zurück zu gelangen. Rühren wir zum Beispiel in unserem Wasserglas herum und stören damit das Gleichgewicht, so wird sich das Wasser erst für eine gewisse Zeit bewegen – je nach dem, wie stark wir gerührt haben – danach wird es jedoch wieder in seinen ursprünglichen Zustand zurück gekehrt sein. Nach einer gewissen Zeit werden wir dann auch gleichermaßen nicht mehr in der Lage sein, zu erkennen dass das Wasser jemals gerührt worden ist. Durch die Beobachtung allerdings, wie genau das Wasser auf unsere Störung reagiert hat, können wir jedoch Rückschlüsse

auf seine Beschaffenheit ziehen. Ist es zum Beispiel nach starkem Rühren nur ausgesprochen langsam wieder in seinen Ausgangszustand zurück gekehrt, so könnte dies zum Beispiel ein Hinweis dafür sein, dass besonders viel Salz darin gelöst worden ist.

Ganz ähnlich funktionieren Messungen an elektronischen Systemen, wie sie zum Beispiel in sogenannten ARPES-Experimenten durchgeführt werden (ARPES = engl. **A**ngle **R**esolved **P**hoto **E**mission **S**pectroscopy, etwa Winkel-aufgelöste Photoemissionsspektroskopie). Dabei wird eine Probe, das kann zum Beispiel ein Metall wie Gold sein oder auch ein komplexes Molekül, mit einem Laser bestrahlt, sodass die nun angeregte Probe Elektronen emittiert, die dann detektiert werden. So ist es möglich, die sogenannte Bandstruktur dieser Probe zu erhalten, die ganz konkret Auskünfte darüber gibt, wie die Elektronen in diesem System angeordnet sind und welchen Energien dies entspricht. Wie der Name suggeriert wird diese Information im Falle von ARPES-Experimenten sogar Winkel aufgelöst dargestellt, das heißt, es ist sogar möglich herauszufinden, in welchem Winkel die Elektronen die Probe nach der Anregung verlassen haben.

Alle bisherigen Überlegungen beziehen sich auf die Untersuchung des Gleichgewichtes von Systemen. Dies sind bereits äußerst komplexe Probleme derer Lösung es ausgeklügelter Methoden bedarf. Experimentelle Beobachtungen weisen jedoch darauf hin, dass auch das Verhalten der Systeme während der Störung selbst von physikalischen Interesse ist. Diese Schlussfolgerung liegt darin begründet, dass ein System unter Einfluss einer Störung möglicherweise völlig andere Eigenschaften hat als im Gleichgewichtszustand. Bezogen auf unser Anfangsbeispiel kann das bedeuten, dass sich unser Wasser während des Rührens auf einmal wie Honig verhält, sprich signifikant anders als wir es von seinem Ruhezustand kennen. An dieser Stelle setzen sogenannte trARPES-Experimente an (trARPES = engl. **t**ime **r**esolved ARPES, also zeitaufgelöstes ARPES). Dabei wird eine Probe dauerhaft mit einem Laser bestrahlt, um sie aus dem Gleichgewicht zu bringen, und zeitgleich gemessen, wie sie sich unter dieser andauernden Störung verhält.

Diese Experimente wollen wir mit numerischen Berechnungen erklären, beziehungsweise verstehen helfen. Unser Ziel ist es dabei, zunächst die Beobachtungen aus Experimenten erklären zu können und danach Vorhersagen für das Verhalten nach bestimmten Anregungen zu treffen. Dazu berechnen wir die sogenannte Spektralfunktion über die Zeit

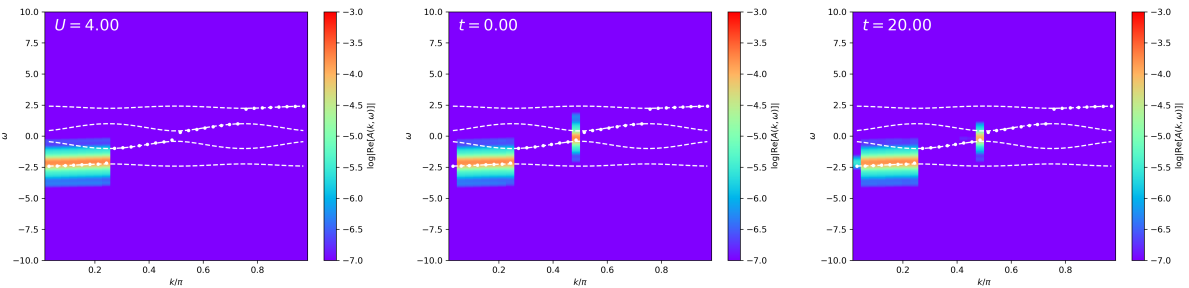


Abbildung 1: Spektralfunktion im Grundzustand (links), unmittelbar nach einer Anregung (Mitte) und zu einem späteren Zeitpunkt (rechts) für ein theoretisches Modellmanganat. Die numerischen Ergebnisse sind in rot dargestellt. Die weißen Punkte und Linien zeigen analytische Vergleichsrechnungen, die hier lediglich zur Orientierung dienen.

entwicklung nach der Störung eines vereinfachten Modelles eines Manganates [1]. Solche Manganate werden in unserem Sonderforschungsbereich (SFB) intensiv untersucht, sodass ihre Konfiguration als Ausgangspunkt für die Entwicklung unseres Modelles diente. Wir arbeiten dabei mit sogenannten Matrix-Produkt-Zuständen (MPS = engl. **Matrix-Product States**), bei denen die quantenmechanische Wellenfunktion als Serie von Matrixmultiplikationen definierter Größe codiert wird, die dann weiter verrechnet wird. Die Berechnung quantenmechanischer Systeme ist ausgesprochen anspruchsvoll und in der Regel nur approximativ möglich. Schon um einfachste Systeme exakt zu lösen, benötigten heutige Supercomputer Zeiten, die das Alter des Universums erreichen, wenn nicht gar überschreiten. Folglich stellen Matrix-Produkt-Zustände ebenfalls eine approximative Lösung dar, die jedoch erstaunlich genau sind. Die Restriktion dabei ist, dass diese Genauigkeit für eindimensionale Systeme gegeben ist, was eine drastische Näherung unserer dreidimensionalen Welt darstellt. Nichtsdestoweniger hat sich diese Methode in den letzten Jahren bewährt und ist heutzutage ein Standardwerkzeug in der numerischen Physik [2].

Abbildung 1 zeigt links eine Spektralfunktion, wie wir sie numerisch für unser Modellmanganat im Grundzustand berechnet haben. Sehr deutlich ist dabei ein Band zu sehen, das in rot hervorgehoben ist. Die Intensität der Farbe zeigt dabei die Besetzungsdichte der jeweiligen Bänder an. Ziel unseres Projektes ist es nun, eine Anregung dieses Systems, wie sie im Experiment durch einen Laser erzeugt werden könnte, zu simulieren und nach und während dieser Zeit zu untersuchen. Insbesondere interessiert uns, ob qualitative Änderungen der Bandstruktur zu beobachten sein werden, wie sich die Besetzung der Bänder mit der Zeit ändert, ob es zur Ausbildung eines quasi-stationären Zustandes kommt, also eines solchen Zustandes, der nicht der Gleichgewichtszustand ist, aber dennoch langlebig und, wenn dies nicht der Fall sein sollte, auf welchen

Zeitskalen die Rekombinationsprozesse der Elektronen, also deren Rückgang in die Konfiguration des Grundzustandes, ablaufen. Ein Beispiel für den Startzustand einer zuerst beschriebenen Anregung ist in der Mitte von Abbildung 1 gegeben. Ein Teilprojekt ist dann die Berechnung der Zeitentwicklung dieser Konfiguration. Rechts in Abbildung 1 ist die Konfiguration des Systems zu einem späteren Zeitpunkt gezeigt. Hier ist deutlich zu sehen, dass sich die Elektronen bereits verlagert haben.

Experimentell werden diese Systeme unter anderem in experimentellen Gruppen unseres SFBs realisiert [3]. Weiterhin werden unsere Ergebnisse mit anderen Theoretikern des SFBs besprochen, die andere numerische Methoden anwenden.

WWW

<https://www.uni-goettingen.de/de/forschung/200460.html>

Weitere Informationen

- [1] T. Köhler, S. Rajpurohit, F. Biebl, M. Sotoudeh, P. Blöchl, S. Kehrein, S. Manmana, et al, *Phys. Rev. B* **97**, 235120 (2018). doi:10.1103/PhysRevB.97.235120
- [2] U. Schollwöck, *Annals of Physics* **326**, 1 (2011). doi:10.1016/j.aop.2010.09.012
- [3] Homepage des Sonderforschungsbereiches SFB 1073 der DFG <https://www.uni-goettingen.de/de/437142.html>

Förderung

Im Rahmen des Sonderforschungsbereiches SFB 1073 wird diese Arbeit gefördert durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) – 217133147/SFB 1073, Projekt B03.