

# Lehrstuhl für Computational Quantum Materials

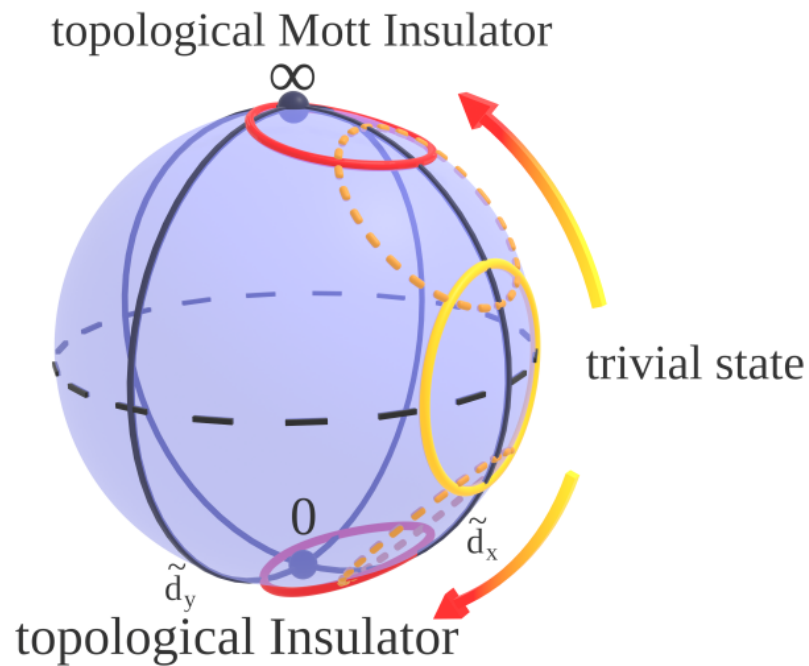
Der Lehrstuhl für Computational Quantum Materials von Professor Sangiovanni beschäftigt sich mit der Berechnung von realistischen Bandstrukturen und stark wechselwirkenden Elektronen-Systemen.

Ein wichtiger Aspekt, um die Elektronen in einem Festkörper zu beschreiben, ist die Bandstruktur, die Aufschluss über die Energien der Elektronen gibt. Damit kann man u.a. erklären, ob ein System ein Metall ist oder eine Bandlücke hat und somit ein Isolator ist. Die einfachste Beschreibung eines Festkörpers ignoriert die Wechselwirkung zwischen den Elektronen; aus den Überlappintegralen zwischen Elektronen auf unterschiedlichen Plätzen (Hüpfsterme) erhält man die Bandstruktur.

Dieses stark vereinfachte Modell lässt sich in zwei Richtungen verbessern. Zum einen muss man für die Berechnung von realistischen Materialien berücksichtigen, wie sich unterschiedliche Atome und deren Anordnung auf die Dispersion der Elektronen auswirken. Dies kann mit Hilfe von Density Functional Theory (DFT) berechnet werden. Zum anderen kann man Effekte der Wechselwirkung berücksichtigen. Dass man die Wechselwirkung zwischen den Elektronen ignoriert, ist in vielen Fällen gerechtfertigt, da diese abgeschirmt wird bzw. die einzelnen Elektronen einen großen Abstand haben; sie also stark korre-

liert sind. Allerdings ist dies nicht in allen Fällen so. Die Auswirkung der Elektronen-Elektronen-Wechselwirkung kann so groß sein, dass ein System, das laut der einfachen Bandstruktur-Rechnung ein Metall sein sollte, tatsächlich isolierend ist weil die Abstoßung der Elektronen die Beweglichkeit der Elektronen verhindert (Mott-Isolator).

Die Berechnung der Eigenschaften von stark-wechselwirkenden Systemen ist im Allgemeinen analytisch nicht möglich und numerische Methoden sind erforderlich. Wir nutzen und entwickeln Algorithmen, die in der Lage sind diese Probleme zu lösen und wenden diese auf verschiedene Systeme mit interessanten physikalischen Eigenschaften an. Neben dem grundsätzlichen Verhalten von korrelierten Elektronen interessieren wir uns insbesondere für die Auswirkung auf Systeme, die schon ohne Korrelationen interessante Eigenschaften haben, z.B. topologische Isolatoren und Weyl-Semimetalle. Ein Beispiel dafür sind topologische Mott-Isolatoren. Diese haben wie die normalen topologischen Isolatoren Randzustände, allerdings treten diese nicht als elektronische Zustände auf, sondern als "Nullen". Ein solcher Null-Randzustand hat die interessante Eigenschaft, dass er einen normalen Randzustand annihilieren kann.



Skizze des topologischen Verhaltens eines normalen topologischen Isolators und eines topologischen Mott-Isolators. Die topologische Phase lässt sich daran ablesen, ob der Kreis den Ursprung umschließt. Der untere, rote Kreis ist somit in einer anderen topologischen Phase als der gelbe Kreis. Ein Wechsel zwischen diesen beiden Phasen geschieht, indem der Kreis durch den Ursprung bewegt wird. Für stark wechselwirkende Systeme gibt es eine andere Möglichkeit. Anstatt durch den Ursprung kann der Übergang auch geschehen, indem der Kreis durch Unendlich bewegt wird (oberer, roter Kreis). Die beiden roten Kreise sind in der gleichen topologischen Phase, da man sie ineinander verformen kann, ohne dabei durch den Ursprung oder Unendlich gehen zu müssen.