Themen für Bachelor-Arbeiten

Professur für Theorie der kondensierten Materie

Signaturen von Bogoliubov-Fermi-Flächen in Multiband-Supraleitern

Kürzlich wurde gezeigt, dass bestimmte Multiband-Supraleiter, die spontan die Zeitumkehrsymmetrie brechen, zweidimensionale Fermi-Flächen für Bogoliubov-Quasiteilchen haben können. Diese Fermi-Flächen sind durch eine Z_2 -Invariante topologisch geschützt, die aus einer Pfaffschen Determinante („Pfaffian“) berechnet werden kann. Die Fermi-Flächen führen zu einer endlichen Zustandsdichte an der Fermi-Energie, ungewöhnlich für Supraleiter. Die Quasiteilchen an der Fermi-Energie sind jedoch im Mittel elektrisch neutral, können also keinen Ladungsstrom tragen. Die Ladung ist aber keine gute Quantenzahl für Bogoliubov-Quasiteilchen, so dass Fluktuationen und damit Stromrauschen möglich sind. In einer Reihe von Projekten sollen experimentelle Signaturen von Bogoliubov-Fermi-Flächen vorhergesagt werden. Beispiele sind thermodynamische Größen wie die spezifische Wärme, Wärmeleitung im Magnetfeld, Stromrauschen und Kernspinresonanz.

Instabilität flacher Majorana-Oberflächenbänder in YPtBi

In der Arbeitsgruppe wurden bereits Oberflächenzustände in supraleitendem YPtBi untersucht. Im erwarteten supraleitenden Zustand könnte dieses Material flache (dispersionslose) Bänder von Oberflächenzuständen zeigen. Die Quasiteilchen, auf die sich diese Bänder beziehen, können als Majorana-Teilchen beschrieben werden, das sind Fermionen, die ihre eigenen Antiteilchen sind. In einer anderen Arbeit haben wir gezeigt, dass solche flachen Majorana-Bänder bei tiefen Temperaturen instabil gegenüber spontaner Brechung der Zeitumkehrsymmetrie werden. In diesem Projekt soll diese Idee auf ein quantitatives Modell von YPtBi angewendet werden.

Zufallsmatrixtheorie für die Quanten-Mastergleichung

Die Quanten-Mastergleichung ist ein wichtiges Instrument zur Beschreibung offener Quantensysteme, z. B. von Quantenpunkten oder Einzelmolekülen in Kontakt mit einem Wärme- und Teilchenbad. Ist das System sehr kompliziert, kann man mit Hilfe der Zufallsmatrixtheorie Fortschritte machen. Dabei wird die in der Mastergleichung auftretende Matrix von Übergangsraten (formal „Generator“ genannt) als typischer Vertreter eines Zufallsensembles von Matrizen mit gewissen Eigenschaften betrachtet. In diesem eher der mathematischen Physik zuzurechnenden Projekt sollen bestimmte Aussagen über diese Ensembles analytisch und numerisch untersucht werden.

Frustrierte RKKY-Wechselwirkung

Ziel des Projekts ist die Untersuchung der RKKY-Wechselwirkung für einfache zweidimensionale Gitter, insbesondere hinsichtlich der Frage von Frustration. Frustration ist wahrscheinlich, da das Vorzeichen der Wechselwirkung zwischen gegebenen Spins durch die Füllung (Elektronenzahl pro Gitterplatz) kontrolliert werden kann. Es sollen der Einfachheit halber nur Wechselwirkungen zwischen lokalen Spins auf denselben Gittern behandelt werden, auf denen auch die Elektronenorbitale lokalisiert sind. Außerdem soll nur Nächste-Nachbar-Hüpfen der Elektronen auf diesen Gittern betrachtet werden; für diesen Fall existieren exakte Aussagen über bipartite Gitter mit halber Füllung. Mögliche konkrete Aufgaben sind: 1. Numerische Berechnung der RKKY-Wechselwirkung im Rahmen der Lineare-Antwort-Theorie für (a) Quadratgitter, (b) Dreiecksgitter, (c) Honigwabengitter als Funktion der Füllung. Vergleich mit der exakten Form für freie Elektronen in zwei Dimensionen. 2. Untersuchung der magnetischen Ordnung in den genannten Fällen mit Hilfe einer Mean-Field-Näherung. Vergleich mit Resultaten aus der Literatur, soweit vorhanden.

Weyl-Semimetalle: Chirale Anomalie und Streuung

Weyl-Semimetalle sind durch zwei bemerkenswerte Eigenschaften ihrer elektronischen Bandstruktur charakterisiert: 1. die Dispersion ist bei niedrigen Energien linear, ähnlich wie für masselose relativistische Teilchen und 2. die Bänder sind nicht spin-entartet. Kürzlich wurde experimentell festgestellt, dass einige eigentlich sehr einfache Verbindungen, z. B. TaAs, Weyl-Semimetalle sind. Die Bandberührungspunkte in der Bandstruktur von Weyl-Semimetallen haben nichttriviale topologische Eigenschaften – sie sind „magnetische Monopole im Impulsraum“. Im Zusammenhang damit realisieren Weyl-Semimetalle auch die sogenannte chirale Anomalie. Eine Anomalie in diesem Kontext bezeichnet die Brechung einer klassischen bestehenden Symmetrie in der quantenmechanischen Beschreibung. Die chirale Anomalie führt zu charakteristischen Effekten im Ladungstransport, die schon intensiv untersucht wurden. Allerdings existieren konkurrierende Mechanismen aufgrund der Streuung von Elektronen in realen Materialien, die eine chirale Anomalie vortäuschen können. Diese muss man verstehen, um Experimente korrekt zu interpretieren. In diesem Projekt sollen solche Streueffekte im Rahmen semiklassischer Boltzmann-Theorie untersucht werden.

Weyl-Semimetalle mit gekrümmten Oberflächen

Die elektronische Struktur von Weyl-Semimetallen (s.o.) hat nichttriviale topologische Eigenschaften und es treten, im Zusammenhang damit, zusätzliche Oberflächenzustände auf. Diese bilden an der Fermi-Energie unvollständige Fermi-Flächen („*Fermi arcs*“). Bisher

wurden diese Oberflächenzustände offenbar nur für ebene Oberflächen untersucht. Eine Analogie zu Graphen (zweidimensionalem Graphit) legt nahe, dass für gekrümmte Oberflächen zusätzliche Terme im Hamiltonian auftreten, die zu neuartigen elektronischen Eigenschaften führen. In diesem Projekt sollen gekrümmte Oberflächen mittels eines minimalen Modells für ein Weyl-Semimetall untersucht werden.

Eigenzustände von wechselwirkenden Elektronen in Quanten-Spin-Hall-Quantenpunkten

Die Eigenzustände und Eigenenergien von wenigen wechselwirkenden Elektronen in Quanten-Spin-Hall-Quantenpunkten sollen bestimmt werden. Dies ist eine mögliche Anschlussarbeit für die unten genannte zu Quanten-Spin-Hall-Randzuständen. In der eindimensionalen Kante eines zweidimensionalen Elektronengases im Quanten-Spin-Hall-Zustand sei durch magnetische Barrieren ein Potentialkasten mit effektiv unendlich hohen Wänden realisiert. Es sollen verschiedene Näherungen für die Elektron-Elektron-Wechselwirkung untersucht werden, darunter (a) eine lokale δ -Funktions-Wechselwirkung, (b) eine langreichweitige Ladungsenergie und (c) eine realistische Coulomb-Wechselwirkung. Alternativ oder zusätzlich könnte die Kante eines kleinen, kreisförmigen Quanten-Spin-Hall-Tröpfchens untersucht werden.

Topologische Randzustände in Multibandmodellen

Modelle für wechselwirkungsfreie Elektronen in Festkörpern mit mehreren relevanten Energiebändern können topologisch nichttriviale Eigenschaften zeigen. Diese äußern sich in der Existenz von an der Oberfläche lokalisierten Zuständen an der Fermi-Energie. Kürzlich haben wir gefunden, dass auch die als die neuen Hochtemperatursupraleiter bekannten Eisenpniktide solche Oberflächenzustände zeigen können. In diesem Fall ist der zugrundeliegende Modell-Hamiltonian topologisch trivial, er kann aber kontinuierlich in einen nichttrivialen Hamiltonian deformiert werden. Dessen topologisch geschützte Oberflächenzustände an der Fermi-Energie werden verschoben aber nicht zerstört, wenn die Deformation rückgängig gemacht wird. Ein anderes Beispiel für diesen Mechanismus sind die Randzustände von Graphen (zweidimensionalem Graphit). Hier soll genauer untersucht werden, unter welchen Umständen solche Oberflächenzustände in Multibandmodellen auftreten. Das Ziel ist letztlich eine allgemeine Theorie für Oberflächenzustände „fast topologischer“ Modelle. Außerdem könnte untersucht werden, wie die Oberflächenzustände bei Änderungen der Modellparameter schließlich verschwinden.

Exakt lösbare Modelle wechselwirkender Bosonen

Es ist möglich, Modelle wechselwirkender, sogar stark wechselwirkender, Bosonen mit exakt bekanntem Grundzustand zu finden. Dabei konstruiert man einen Hamilton-Oper

rator, der aufgrund von exakten mathematischen Sätzen (z. B. dem Perron-Frobenius-Theorem) einen vorgegebenen Vielteilchengrundzustand haben muss. In diesem Projekt soll eine Familie derartiger Modelle mit Wechselwirkungen zwischen Bosonen an demselben Gitterplatz und an Nachbarplätzen genauer untersucht werden. Eine offene Frage ist, ob diese Modelle als Funktion eines die Wechselwirkung charakterisierenden Parameters einen Quantenphasenübergang, d. h. einen Phasenübergang im Grundzustand, haben. Eine andere ist, ob sie (für manche Parameterwerte?) integrabel sind.

Boltzmann-Theorie mit Transmutation

Die semiklassische Boltzmann-Theorie beschreibt unter gewissen Bedingungen sehr erfolgreich den Transport von Teilchen in Anwesenheit von verschiedenen Streumechanismen. Die Beschreibung mehrerer Teilchensorten, z. B. von Elektronen und Löchern in Halbleitern, ist ebenfalls möglich. Nun ist in manchen Halbleitern die Bildung von gebundenen Elektron-Loch-Zuständen, sogenannten Exzitonen, wichtig für den Transport. Es sollen erste Schritte für die Entwicklung einer semiklassischen Transporttheorie für Elektronen, Löcher und Exzitonen unternommen werden, in der der Transport der Teilchensorten durch Boltzmann-Gleichungen sowie die Bildung und der Zerfall von Exzitonen durch Ratengleichungen beschrieben werden. Als nächster Schritt ist der Übergang zur Quanten-Master-Gleichung anstelle der Ratengleichungen denkbar, wodurch Kohärenzen z. B. zwischen den Zuständen des durch den Zerfall eines Exzitons entstehenden Elektrons und des entsprechenden Lochs beschrieben werden könnten. Welche Konsequenzen haben solche Kohärenzen?

Folgende Themen wurden oder werden bereits bearbeitet. Sie sind hier als Beispiele mit aufgeführt. Für die meisten könnten Fortsetzungsprojekte formuliert werden.

Kontakt-Prozess und Ratengleichung

Der eindimensionale Kontakt-Prozess ist ein einfaches Modell für Epidemien: Die Plätze einer Kette können entweder „gesund“ oder „infiziert“ sein, gesunde Plätze werden mit einer Rate proportional zur Anzahl ihrer infizierten Nachbarn ebenfalls infiziert, infizierte Plätze werden mit einer anderen Rate wieder gesund. Das Modell zeigt einen Phasenübergang als Funktion des Verhältnisses der beiden Raten. Hier soll die Dynamik mit Hilfe von Ratengleichungen für endliche Ketten untersucht werden. Insbesondere ist die Verteilung der Eigenwerte der Ratenmatrix im Limes langer Ketten interessant. Mögliche weiterführende Fragestellungen betreffen Näherungen für die Behandlung längerer Ketten sowie die Rolle von Unordnung.

Elektronen in Quanten-Spin-Hall-Randzuständen

Die Eigenzustände und Eigenenergien eines Elektrons am Rand eines Quanten-Spin-Hall-Isolators sollen für verschiedene einfache Potentiale bestimmt werden. Diese Randzustände sind interessant, da die kinetische Energie der Elektronen linear anstatt quadratisch vom Impuls abhängt und perfekte Spin-Impuls-Kopplung auftritt: Nach rechts (links) laufende Elektronen haben Spin auf (ab). Durch ein ortsabhängiges Magnetfeld können verschiedene „magnetische Potentiale“ realisiert werden. Für einfache Potentiale (harmonisch, Stufen, Barrieren, Kästen, δ -Funktion, Kronig-Penney) sollte sich die Schrödinger-Gleichung analytisch lösen lassen. Das ist hier das Ziel.

Mastergleichung in Superoperatorformulierung für ein einfaches System

Offene Quantensysteme in Kontakt mit Reservoirs können ganz allgemein durch Mastergleichungen beschrieben werden. Dies sind Gleichungen für die Dichtematrix des offenen Systems. Eine besonders elegante und kompakte Formulierung verwendet Superoperatoren, d. h. Operatoren, die auf Operatoren statt auf Zustände wirken. Damit lassen sich im Prinzip *exakte* Mastergleichungen herleiten. In diesem Projekt sollen exakte Mastergleichungen auf ein analytisch lösbares System angewandt werden, z. B. auf zwei wechselwirkende Spins, wobei einer das System und der andere das Reservoir repräsentiert. Das Ziel ist ein besseres Verständnis des physikalischen Gehalts der Mastergleichung und insbesondere der Störungsentwicklung in der Kopplung zwischen System und Reservoir.

Kritische Exponenten in einem Spin-Crossover-Modell

Spin-Crossover-Materialien enthalten Übergangsmetallionen, die sich entweder in einem Hoch-Spin- oder einem Niedrig-Spin-Zustand befinden können, die energetisch nahe beieinander liegen. Für Fe^{2+} sind die entsprechenden Spin-Quantenzahlen $S = 2$ und $S = 0$. Liegt der Niedrig-Spin-Zustand höher in der Energie, so kann man ein solches System in Abwesenheit magnetischer Anisotropie als Heisenberg-Modell mit fluktuierender Verdünnung verstehen. Monte-Carlo-Simulationen lassen vermuten, dass der kritische Exponent β der Magnetisierung für dieses Modell vom Wert für das reine Heisenberg-Modell abweicht und von der Energiedifferenz von Hoch-Spin- und Niedrig-Spin-Zustand abhängt. Dies soll mit präzisen klassischen Monte-Carlo-Simulationen untersucht werden. Dieses Projekt erfordert gute Kenntnisse in der Programmierung in C oder C++, da ein existierendes C++-Programm weiterentwickelt werden soll.

Eigenwertverteilung von Zufallsmatrizen aus dem Ginibre orthogonal ensemble (GinOE)

Es soll mit Hilfe von Computer-Simulationen und evtl. analytischen Methoden die Wahrscheinlichkeit $p_{n,k}$ ermittelt werden, dass eine $n \times n$ Matrix aus dem GinOE genau k reelle Eigenwerte hat. Das GinOE ist ein Ensemble aus gaußverteilten reellen Matrizen ohne weitere Nebenbedingungen. Es wird als wichtiges Zufallsmatrixensemble in der mathematischen Physik untersucht. Die hier gesuchten Wahrscheinlichkeiten $p_{n,k}$ sind nur in Grenzfällen bekannt. Interessant ist insbesondere der Limes großer n und k bei geeigneter Skalierung von k mit n . Die Betrachtung anderer Zufallsmatrixensembles ist ebenfalls möglich.

Elektronischer Transport durch einen ausgedehnten Quantenpunkt

Elektronentransport durch nanoskopische Systeme ist wichtig für zukünftige Anwendungen, aber auch von großem fundamentalem Interesse aus Sicht der Nichtgleichgewichtsstatistik. Ein nanoskopisches System enthält nur eine kleine Anzahl von Elektronen in energetisch erreichbaren Zuständen. Die Strom-Spannungs-Charakteristik von effektiv nulldimensionalen Quantenpunkten ist gut verstanden. Hier soll untersucht werden, wie sich diese Transportcharakteristik verändert, wenn das System ausgedehnt ist, z. B. ein kurzer Nanodraht oder ein Kettenmolekül, so dass ein neu hinzukommendes Elektron die schon vorhandenen wegen ihrer Coulomb-Abstoßung verdrängt.

Bogolibov-Fermi-Flächen und Oberflächenzustände

Kürzlich wurde gezeigt, dass bestimmte Multiband-Supraleiter, die spontan die Zeitumkehrsymmetrie brechen, zweidimensionale Fermi-Flächen für Bogoliubov-Quasiteilchen haben können. Diese Fermi-Flächen sind durch eine $\mathbb{Z}_2$ -Invariante topologisch geschützt,

die aus einer Pfaffschen Determinante („Pfaffian“) berechnet werden kann. Oft stehen topologische Invarianten im Inneren eines Systems mit Zuständen bei der Energie Null an der Oberfläche in Verbindung. Bisher ist nicht bekannt, ob dies auf in diesem Fall so ist. Es sollen geeignete Modelle erstellt und hinsichtlich dieser Frage numerisch untersucht werden.

Frustrierte RKKY-Wechselwirkung

Ziel des Projekts ist die Untersuchung der RKKY-Wechselwirkung auf dem stark frustrierten Kagome-Gitter. Es sollen der Einfachheit halber nur Wechselwirkungen zwischen zwei lokalen Spins auf demselben Gitter behandelt werden. Außerdem soll nur Nächste-Nachbar-Hüpfen der Elektronen betrachtet werden; für diesen Fall existieren exakte Aussagen über bipartite Gitter mit halber Füllung. Es existieren auch schon Ergebnisse für das Honigwabengitter von Graphen. Konkret soll die Wechselwirkung über die Gesamtenergie für parallele bzw. antiparallele Spins zweier Störstellen nicht-perturbativ berechnet werden.