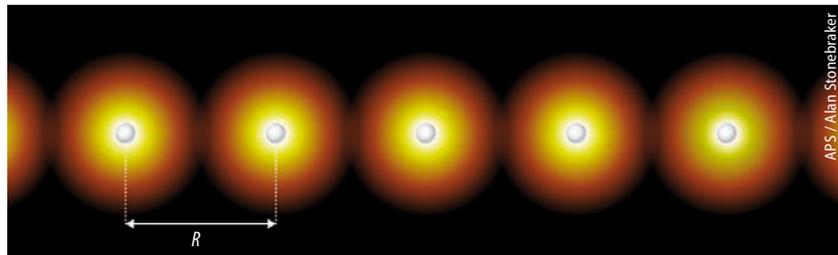


# Das reiche Innenleben der Wasserstoffkette

Selbst in einem so einfachen System wie der Wasserstoffkette im Grundzustand treten unerwartete Vielteilchenphänomene auf.

Dieter Vollhardt

Systeme, in denen viele Teilchen miteinander wechselwirkenden, haben häufig unerwartete Eigenschaften. Wechselwirkungen verursachen nämlich Korrelationen zwischen den Teilchen in Raum und Zeit, die sich nicht in einem Einteilchenbild beschreiben lassen. Insbesondere führen in Festkörpern elektronische Korrelationen zu Phänomenen wie Hochtemperatur-Supraleitung [1] und dem Mott-Übergang zwischen einer metallischen und einer isolierenden Phase [2], die immer noch nicht umfassend erklärt sind. Hier lassen sich durch die Untersuchung stark vereinfachter Systeme, mit denen Korrelationseffekte modellhaft beschrieben werden, wichtige Erkenntnisse gewinnen. Eine lineare Kette aus  $N$  Wasserstoffatomen ist ein solches Modell, da es wesentliche Merkmale des Vielelektronenproblems realer Materialien erfasst. Durch eine Kombination der genauesten heute verfügbaren numerischen Methoden ist es der „Simons Collaboration on the Many-Electron Problem“ erstmals gelungen, mikroskopische Grundzustandseigenschaften der



**Abb. 1** In dieser linearen Kette aus Wasserstoffatomen haben die Kerne den gleichen Abstand  $R$ ; die Helligkeit der Farben bildet die elektronische Dichte ab. Ist  $R$  groß (wie dargestellt), verhält sich das System im Wesentlichen wie separate Atome mit jeweils einem Elektron – es ist deshalb isolierend. Mit abnehmendem  $R$  überlappen die elektronischen Wellenfunktionen immer stärker, bis bei einer kritischen Bindungslänge ein Übergang vom Isolator zum Metall stattfindet [3].

Wasserstoffkette genau zu berechnen [3]. Die Ergebnisse zeigen, dass in diesem eindimensionalen (1D) System überraschende Vielteilchenphänomene auftreten. Dazu gehören räumliche Korrelationen zwischen den elektronischen Spins in der Kette und zwischen der lokalen Dichte der Elektronen sowie ein Isolator-Metall-Übergang, der sich grundlegend von dem bisher bekannten Mott-Übergang in 3D-Materialien unterscheidet.

Die Untersuchung quantenmechanischer Vielteilchensysteme und ins-

besondere von Elektronen in Festkörpern ist prinzipiell schwierig, da die Schrödinger-Gleichung gelöst werden muss, deren Komplexität exponentiell mit der Zahl der Elektronen anwächst. Das einfachste mikroskopische Modell von Elektronen im Festkörper ist das Hubbard-Modell. Hier besetzen die Elektronen an jedem Gitterplatz nur ein Orbital, und ihre Coulomb-Abstoßung ist rein lokal. Trotz dieser starken Vereinfachungen reproduziert das Hubbard-Modell typische Eigenschaften korrelierter Elektronen, einschließlich Magnetismus, Isolator-Metall-Übergängen und Supraleitung.

Doch auch das Hubbard-Modell lässt sich nur in wenigen Fällen exakt lösen (in 1D [4] und in unendlichen Dimensionen [5, 6]). Meist bedeutet „Lösen“ des Vielelektronenproblems lediglich, dass Systemeigenschaften näherungsweise berechnet werden. Heute stehen zahlreiche numerische Verfahren mit unterschiedlichen Anwendungsbereichen zur Verfügung, die aber alle mit hohem Rechenaufwand und schwer quantifizierbaren Fehlern verbunden sind.

Um Materialien mit korrelierten Elektronen realistisch zu beschreiben, ist es nötig, neben den Elektronen auch die Ionen einzubeziehen. Das einfachstmögliche Beispiel ist

## Kurzgefasst

### Glühend heiß und rasend schnell

Das europäische Weltraumteleskop CHEOPS hat den Exoplaneten WASP-189b in 326 Lichtjahren Entfernung genauer unter die Lupe genommen. Erste Ergebnisse zeigen, dass der jupiterartige Riesenplanet mit 3200 °C sehr heiß ist und für einen Umlauf um seinen Planeten nur 2,7 Tage benötigt. Die Umlaufbahn verläuft nicht wie erwartet in der Äquatorebene seines Sterns, sondern über dessen Pole. Auch der Stern selbst ist etwas Besonderes: Seine Rotationsgeschwindigkeit ist so hoch, dass er sich stark verformt hat. Am Äquator ist er daher deutlich kühler als an seinen Polen.

M. Lendl et al., A&A (2020),

DOI: 10.1051/0004-6361/202038677

### Akustischer Schwarzer Körper

Heiße Objekte emittieren elektromagnetische Schwarzkörperstrahlung und geben Energie als Schallwellen ab. US-amerikanischen Forschern ist es nun gelungen, diese akustische Schwarzkörperstrahlung mithilfe einer optomechanischen Antenne nachzuweisen. Sie besteht aus einer Membran aus Siliziumnitrid, die sich in einem ein Quadratmillimeter großen Fenster eines Siliziumsubstrats befindet. Vier rechteckige Epoxid-Punkte emittierten beim Erwärmen die Schallwellen, die auf der wenige Millimeter entfernten Membran charakteristische Vibrationsmuster erzeugten.

R. Singh und T. P. Purdy, Phys. Rev. Lett.

125, 120603 (2020)

eine lineare Kette aus äquidistanten Wasserstoffatomen mit jeweils einem Elektron (**Abb. 1**). Im Gegensatz zum 1D-Hubbard-Modell können die Elektronen in der Kette an jedem Gitterplatz mehrere, im Prinzip unendlich viele, Orbitale besetzen und durch die langreichweitige Coulomb-Abstoßung miteinander wechselwirken. In einer früheren Studie gelang es der Simons Collaboration bereits, die Grundzustandsenergie einer unendlichen Kette von Wasserstoffatomen – eine fundamentale thermodynamische Größe – sehr genau zu berechnen [7]. Dabei kamen eine Vielzahl numerischer Methoden sowie umfangreiche Gegenproben und Validierungen zum Einsatz.

Auf dieser Grundlage gelang es nun, auch mikroskopische Grundzustandseigenschaften der Wasserstoffkette mithilfe verschiedener numerischer und theoretischer Vielteilchenmethoden, einschließlich Monte-Carlo- und Dichtematrix-Renormierungsgruppen-Techniken, detailliert zu bestimmen. Das Team berechnete unter anderem die magnetische Struktur der Kette und die räumliche Ausdehnung eines elektronischen Wellenpakets (die Elektronenlokalisationslänge) abhängig von der Kettenlänge, d. h. der Zahl der Atome  $N$ , und des Abstands zwischen den Kernen  $R$ . Nach der Extrapolation der Ergebnisse auf unendliches  $N$  wird der Grundzustand des Systems nur noch durch den Parameter  $R$  charakterisiert.

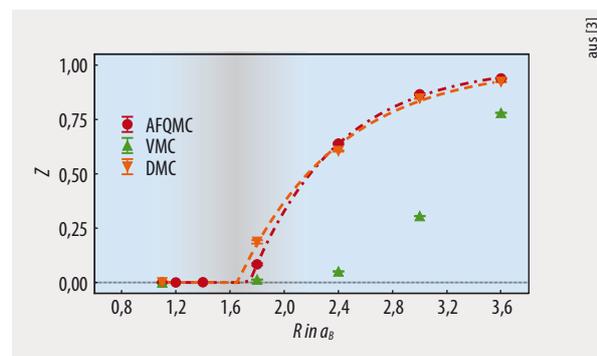
Für große Abstände  $R$  entspricht das System im Wesentlichen separaten Wasserstoffatomen mit jeweils einem Elektron im atomaren  $1s$ -Orbital. Da jedes Elektron auf dem Atom lokalisiert ist, ist das System ein Isolator. Dieses Verhalten ähnelt dem des Hubbard-Modells bei starker Abstoßung und damit dem einer Spin-1/2-Heisenberg-Kette. Tatsächlich liegen in der Wasserstoffkette ähnlich wie in der Heisenberg-Kette für große  $R$  antiferromagnetische Korrelationen vor, die über die Entfernung mit einem Potenzgesetz zerfallen. Darüber hinaus wurde beobachtet, dass sich die

Elektronenverteilungen benachbarter Ionen paarweise verzerren. Diese Dimerisierung nimmt mit wachsender Anzahl  $N$  der Atome ab. Hier handelt es sich um Vielteilcheneffekte, die sich nicht in einer Einteilchen-Näherung erklären lassen.

Bei kleineren Abständen  $R$  spielt das „Innenleben“ des Wasserstoffatoms – die Komplexität seiner Orbitale – eine Schlüsselrolle. Insbesondere wird die Kette bei einem kritischen Wert von  $R$ , der etwa 85 Prozent des Durchmessers eines Wasserstoffatoms im Grundzustand entspricht, metallisch (**Abb. 2**). In 3D-Materialien tritt ein solcher Mott-Übergang auf, wenn Elektron-Loch-Paare (Exzitonen) dissoziieren, was zu einer dramatischen Abschirmung der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung führt. Der resultierende Phasenübergang ist diskontinuierlich (1. Ordnung). Im Fall der Wasserstoffkette wirkt ein anderer Mechanismus: Bei Verringerung der Bindungslänge  $R$  beginnen die elektronischen Wellenfunktionen zu überlappen, wodurch sich die besetzten  $1s$ -Zustände mit angeregten Zuständen ( $2s$ -,  $2p$ -Orbitale usw.) vermischen. Dabei entstehen mehrere sich überlappende Energiebänder, welche die Fermi-Oberfläche kreuzen, was zu der Erzeugung beweglicher Ladungsträger führt. Das System wird also mittels einer „Selbst-Dotierung“ metallisch. Die numerischen Simulationen deuten an, dass dieser Übergang, der im 1D-Hubbard-Modell nicht auftritt [4], kontinuierlich (2. Ordnung) ist. Ein solches Verhalten könnte auch in höheren Dimensionen auftreten und damit einen grundlegend neuen Typ von Mott-Übergang charakterisieren.

Die theoretischen Erkenntnisse lassen sich im Prinzip experimentell überprüfen, beispielsweise mit ultrakalten Atomen in optischen Gittern [8], linear angeordneten Rydberg-Atomen [9] oder eingeschlossenen Kohlenstoffketten [10]. Derartige Untersuchungen könnten wichtige Erkenntnisse über die Metallizität von Wasserstoff bei extremer Dichte liefern, die für das Verständnis astrophysikalischer Körper von Bedeutung sind.

Die Ergebnisse der Kollaboration zeigen, dass die Wasserstoffkette ein



**Abb. 2** Der Betrag  $Z$  der komplexen Polarisation gibt an, ob die Wasserstoffkette metallisch ( $Z = 0$ ) oder isolierend ( $Z > 0$ ) ist. Verschiedene numerische Methoden finden [3], dass bei einer Bindungslänge von ca.  $1,7a_0$  ( $a_0$ : Bohr-Radius) ein Metall-Isolator-Übergang auftritt; hier  $N = 40$ .

faszinierendes Vielteilchensystem darstellt, dessen Eigenschaften sich dank der Kombination unabhängiger Methoden sehr genau berechnen lassen. Ähnliche Untersuchungen an realistischen 3D-Festkörpern erfordern allerdings noch viele Vorarbeiten. Zunächst sollten die Berechnungen der Wasserstoffkette über den Grundzustand hinausgehen und angeregte Zustände, endliche Temperatur und Nichtgleichgewichtsbedingungen berücksichtigen. Am wichtigsten ist aber der Schritt über eine Dimension hinaus: Hier werden die Erfahrungen mit systematischen Untersuchungen des 2D-Hubbard-Modells [11] hilfreich sein.<sup>+)</sup>

- [1] P. A. Lee et al., *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006)
- [2] N. F. Mott, *Rev. Mod. Phys.* **40**, 677 (1968)
- [3] M. Motta et al. (Simons Coll.), *Phys. Rev. X* **10**, 031058 (2020)
- [4] E. H. Lieb und F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445 (1968)
- [5] W. Metzner und D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989)
- [6] A. Georges et al., *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996)
- [7] M. Motta et al. (Simons Coll.), *Phys. Rev. X* **7**, 031059 (2017)
- [8] I. Bloch et al., *Rev. Mod. Phys.* **80**, 885 (2008)
- [9] M. Endres et al., *Science* **354**, 1024 (2016)
- [10] L. Shi et al., *Nat. Mater.* **15**, 634 (2016)
- [11] J. P. F. LeBlanc et al. (Simons Coll.), *Phys. Rev. X* **5**, 041041 (2015)

## Der Autor

**Prof. Dr. Dieter Vollhardt**, Zentrum für Elektronische Korrelationen und Magnetismus, Institut für Physik, Universität Augsburg, Universitätsstr. 1, 86159 Augsburg

<sup>+) Der Text ist in ähnlicher Form bereits auf Englisch erschienen: D. Vollhardt, *Physics* **13**, 142 (2020).</sup>