Institut für Theoretische Physik und Astrophysik der CAU Kiel
Abtlg. Theoretische Physik

AG Schattke: Quanten-Monte-Carlo

Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Quantenmechanische Grundlagen

Die zentrale Gleichung der Physik der Kondensierten Materie ist die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\mathrm{H}\,\Psi = \mathrm{E}\,\Psi$$

Darin ist H *der Hamilton-Operator des betrachteten Systems,* Ψ *die komplexe N-Teilchen-Wellenfunktion und* E *die Gesamtenergie des Systems. Als "Teilchen", die im Rahmen der Quantenmechanik zu beschreiben sind, gelten im Beispiel eines Festkörpers nur die Elektronen, während die Kerne wegen ihrer viel grösseren Masse als klassische Teilchen betrachtet werden.*

Der Hamiltonoperator für Atome und Festkörper enthält somit neben der kinetischen Energie T der Elektronen ein Einteilchenpotential V durch die Kerne und ein Zweiteilchenpotential U, das die Coulombabstoßung zwischen den Elektronen beinhaltet. Schon das Heliumatom mit nur zwei Elektronen ist wegen des Wechselwirkungsterms nur noch approximativ lösbar:

$$H = T + V + U$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\Delta_1 + \Delta_2\right) + \sum_{i,k=1}^{2} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_k|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

Grundlagen aus der Festkörperphysik

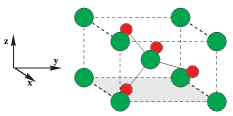
Die grundlegendste Annahme über Festkörper besteht darin, daß sie nur aus Elektronen und Kernen aufgebaut sind. Für kristalline Festkörper fordert man weiterhin, daß die Kerne ein ortsfestes Gitter bilden, das eine Invarianz gegen gewisse Verschiebungen und Drehungen aufweist. Aus dieser Symmetrie des Hamiltonians folgt die Existenz einer weiteren Quantenzahl, des Blochvektors **k**.

Im sog. "Einteilchenbild" betrachtet man nur noch ein Elektron im Festkörper. Die Wechselwirkung zwischen den Elektronen zusammen mit dem Elektron-Kern-Potential wird durch ein effektives Potential $V_{eff}(r)$ ersetzt. Die Lösungen dieses neuen, wesentlich einfacheren Eigenwertproblems sind die sog. "Blochwellen" $\Psi_{\mathbf{k}}(r)$*. Die Vielteilchen-Quantenmechanik kommt durch die Berücksichtigung des Pauliprinzips in Spiel: Bis Erreichen der Fermienergie sind je* **k***-Wert nur zwei Zustände erlaubt, einer je Spin.*

Simulation des Festkörpers

Der Festkörper selbst wird durch das periodische Aneinanderreihen von kleineren Unterzellen, die jeweils nur eine überschaubare Anzahl von Atomen enthalten, simuliert. In die Berechnungen gehen dann nur die Elektronen einer Unterzelle ein, was -je nach Größe der Zellen- eine deutliche Verminderung der Rechenzeit darstellt. Andererseits ist bei der Simulation des gesamten Festkörpers durch verhältnismäßig wenige Elektronen eventuell eine zu große Vereinfachung entstanden. Man muß also eine Simulationszelle gerade so groß wählen, daß die Volumeneigenschaften des Kristalls nicht verloren gehen, aber gleichzeitig der Rechenaufwand so gering wie möglich gehalten wird.

GaAs (110)



Quanten-Monte-Carlo Methode (QMC)

Das Prinzip der QMC beruht auf der Erfahrung, daß die Gesamtenergie eines abgeschlossenen physikalischen Systems am Temperaturnullpunkt minimal ist. In der speziellen Formulierung der Quantenmechanik bedeutet dies, daß der sogenannte Erwartungswert oder Mittelwert der Energie für die "richtige" Wellenfunktion ein Minimum annimmt. Es sind diese "richtigen" Wellenfunktionen, die bestimmt werden sollen. Die Berechnung eines Erwartungswertes geschieht folgendermaßen:

$$\mathrm{E} = \langle \mathbf{H} \rangle = \int \Psi^* \mathbf{H} \Psi$$

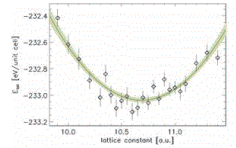
Die Hauptaufgabe liegt in der Berechnung dieser Erwartungswerte. Das ist deshalb so schwierig, weil dafür die Berechnung von Integralen, die von einer großen Anzahl von Variablen abhängen, nötig ist. Hierzu wurde die spezielle QMC-Methode entwickelt, die auf der statistischen Auswahl von Testpunkten beruht, in denen der Integrand ausgewertet wird.

Der Name "Monte-Carlo-Methode" wurde zuerst 1949 von N.Metropolis geprägt, der für seine Abhandlungen auch eine Liste von Zufallszahlen des berühmten Kasinos in Monte-Carlo benutzte.

Selbst mit dieser Methode benötigen die schnellsten Großrechner Deutschlands mehrere Tage für die vollständige Energieminimierung.

Resultate von Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen

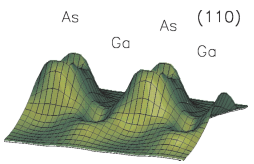
In der unteren Abbildung ist für den Festkörper Galliumarsenid die Gesamtenergie pro Einheitszelle gegen die Gitterkonstante aufgetragen. Aus dem gefitteten Minimum der Kurve erhält man die Gesamtenergie und die Gitterkonstante. Aus der Krümmung der Kurve ergibt sich der Kompressionsmodul B. Diese Werte sind in der Tabelle zusammengefaßt mit Resultaten von anderen Methoden.



	E_{atom} eV/uc	E_{tot} eV/uc	E_{bind} eV/uc	a_0 Bohr	B kbar
Experiment	−226.773 ±0.030	−233.43 ±0.12	−6.57 ±0.09	10.6831 ±0.0001	756 ±4
VQMC LCAO nlac	−228.134 ±0.008	−233.04 ±0.08	−4.90 ±0.20	10.589 ±0.080	786 ±100
VQMC LCAO lac	−226.56 ±0.01	−226.10 ±0.04	−4.54 ±0.05	10.13 ±0.04	673 ±50
LDA Ortiz (1992)			−8.16	10.41	
LDA Casek (1994)			−7.13	10.90	710
GGA BP Ortiz (1992)			−6.45	10.70	
GGA BP Casek (1994)			−5.76	10.92	680
INC Paulus (1996)			−6.20	10.67	770

Bulk properties of galliumarsenide in different calculation methods

Nach der erfolgten Energieminimierung kann man mit der optimierten Wellenfunktion Erwartungswerte "beliebiger" Observablen ausrechnen. Als Beispiel ist hier die Elektronendichte für GaAs in der (110)-Ebene gezeigt:



Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

Quantenmechanische Grundlagen

Die grundlegende mikroskopische Gleichung ist die zeitabhängige Schrödingergleichung:

$$\mathrm{H}\,\Psi(t) = i\hbar(\partial/\partial t)\,\Psi(t)$$

Die Lösung läßt sich bei nicht explizit zeitabhängigem Hamiltonoperator formal angeben:

$$\Psi(t) = U(t)\,\Psi(0) = \exp(-i\mathrm{H}t/\hbar)\,\Psi(0)$$

Der sogenannte Zeitentwicklungsoperator U(t) ist eine operatorwertige Exponentialfunktion. Für kurze Zeiten im fs-Bereich ist die Kurzzeitnäherung durch Entwickeln der exp-Funktion möglich. Für längere Zeiten im ps-Bereich wird die Exponentialfunktion in Chebyscheff-Polynome entwickelt, was zu numerisch stabilen Ergebnissen führt. Die Dämpfung durch inelastische Streuprozesse im Festkörper wird heuristisch durch ein komplexwertiges sog. "optisches Potential" berücksichtigt, das hier linear im Blochvektor **k** *angesetzt ist.*

Hochfeldtransport

Für den Fall eines Einteilchen-Hamiltonoperators $\mathrm{H}(\vec{E})$ *mit homogenem elektrischen Feld* $\vec{E}$ *ist die zeitliche Entwicklung von mittlerer Geschwindigkeit und mittlerer Energie im quantenmechanischen Kurzzeit- als auch Langzeitbereich für verschiedene Zustände mit und ohne Dämpfung dargestellt.*

$$H(\mathbf{E}) = H + \mathbf{E}\left(\sum_j \mathbf{r}_j - \sum_{\alpha\kappa} Z_{\alpha\kappa}\,\mathbf{R}_{\alpha\kappa}\right)$$

$$U(t) = \exp\left[-i\left(H(\mathbf{E}) - i\frac{1}{2}k_{opt}\,\mathbf{k}\right)t\right]$$

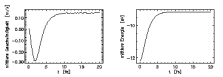


Abbildung 1: Die Zeitentwicklung des Eigenzustandes von $H(\vec{E})$ bei Γ mit Bandindex ν=1 für k_{opt} = 0 a.u.

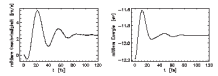


Abbildung 2: Die Zeitentwicklung des Eigenzustandes von $H(\vec{E})$ bei Γ mit Bandindex ν=1 für k_{opt} = 10 a.u.

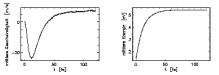


Abbildung 3: Die Zeitentwicklung des Eigenzustandes von $H(\vec{E})$ bei Γ mit Bandindex ν=8, für k_{opt} = 0 a.u.

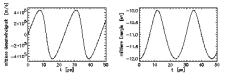


Abbildung 4: Die Langzeitentwicklung des Zustandes bei Γ mit Bandindex ν=1 ohne optischen Potential.

AG Schattke: Theoretische Festkörperphysik

Lehre

Grundvorlesungen

- Mechanik
- Elektrodynamik
- Quantenmechanik
- Statistische Physik

Spezialveranstaltungen

- Festkörpertheorie
- Transportphänomene
- Oberflächenphysik
- Chaostheorie
- Computational Physics
- Numerische Methoden
- Fortgeschrittenenpraktikum : Methoden der Festkörpertheorie
- Seminar : Vielteilchentheorie

Forschung

Was machen wir ?

Grundlagen

- ♦Photoeffekt
- ♦Quantenmechanik
- ♦Festkörper- und Oberflächenphysik
- ♦Vielteilcheneffekte

Anwendungen

- ♦Neue Materialien
  - nanoporöse Substanzen
  - Halbleiter
  - Schichtstrukturen
- ♦Spektroskopie
  - elektronische Struktur
  - optische Eigenschaften
  - Photoemission
  - Streuung langsamer Elektronen

Wie machen wir es?

Analytisch

- ♦Erweiterung der Theorie
- ♦Entwicklung von Algorithmen
- ♦Mathematik
- ♦mit Papier und Bleistift
- ♦Computeralgebra

Computational

- ♦Numerik
- ♦Programmierung (Fortran, C, C++)
- ♦Rechner:
  - Workstations (Institut)
  - Skalarrechner (Rechenzentrum)
  - Vektorrechner (Kiel, Hannover, Jülich, Berlin)
  - Parallelrechner (Berlin, Jülich)

Aktive Mitglieder

Wolfgang Schattke

Robert Bahnsen
Sven Brodersen
Olga Krasovska
Eugen E. Krasovskii
Claudia Ramirez
Claus-Henning Solterbeck
Thomas Strasser
Oliver Tiedje

Vielteilchenrechnungen zu Festkörperoberflächen
Optische Eigenschaften von Festkörperoberflächen
Elektronische Struktur komplexer Oxide
Photoemission für ungeordnete Systeme
Molekulardynamik von Schichtkristalloberflächen
Winkelverteilung in der Photoemission
Analyse von Photoemissionsspektren
Gesamtenergierechnungen für komplexe Materialien

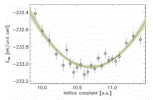
Kooperationen

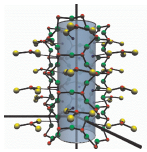
Michael Skibowski, Lutz Kipp	exp. Photoemission	Kiel (exp. Phys.)
Wolfgang Hackbusch	Mehrgitterverfahren	Kiel (Mathematik)
Friedrich Liebau	nanoporöse Substanzen	Kiel (Mineralogie)
Ronald Redmer	Hochfeldtransport	Rostock
Ulrich Simon	nanoporöse Substanzen	Essen
DFG-Forschergruppe	"Schichtstrukturen"	Kiel (5 Institute)
Igor Bartos	VLEED	Prag (Tschechien)
Charles S. Fadley	exp. Photoemission	Berkely (USA)
Michel A. Van Hove	theor. Photoemission	Berkely (USA)
Hiroshi Daimon	exp. Photoemission	Osaka (Japan)
Takashi Fujikawa	theor. Photoemission	Chiba (Japan)
Wolfgang Bensch	Festkörperchemie	Kiel (Anorg. Chemie)

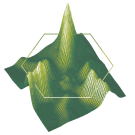
Erfolge

1987* Photoemissionsrechnung für Schichtkristalle
1989* Photoemissionsrechnung für Halbleiter
1992* Abschirmung des Lichtes in der Photoemission
1993* Einfluß der Oberfläche auf die Photoemission
1993 Longitudinale Photonfelder in der Oberflächenabschirmung
1994* Plasmonenverstärkung und Photoelektrischer Effekt für Halbleiteroberflächen
1994 Impact Ionization Rate in GaAs
1995 Selbstkonsistenter elektronischer Oberflächen-Response
1995* Komplexe ELAPW Bandstruktur
1995* Photoemission mit abgeschirmtem Photonenfeld
1995* Variations-Quanten-Monte-Carlo für Li
1995 Impact Ionization Rate in ZnS
1996* Genetische Algorithmen und elektronische Struktur
1996* Berechnung lokaler Feldeffekte für Schichtkristalle
1996* Linienformen und Vielteilcheneffekte in der Photoemission
1996* Berechnung des Photostromes für die volle Hemisphäre und zirkularer Dichroismus
1996* Variations-Quanten-Monte-Carlo für GaAs
1996 Berechnung der GW-Σ Selbstenergie
1996* Photoemissionsrechnung mit GW-Σ
1996* Photoemissionsrechnung für Adsorbate auf Halbleitern
1997 Schnelle Berechnung von Elektronenstreuzuständen
1997* Oberflächenbandstruktur mit linearen Methoden
1997* GaN-Photostrom geklärt
1997* Räumliche Herkunft von Photoelektronen
1997* Effektive Lokalisierung in der Photoemission
1998 Physik der Streuzustände
1998* Elektronische Struktur und optische Eigenschaften von Cetineiten
1998* Genauigkeit der Auswertung von Photoemissionsspektren
1998* Mapping bei Winkelscans der Photoemission
1998* Full-potential ELAPW
1998* Variations-Quanten-Monte-Carlo für GaAs (110)-Oberfläche
1999* Neue Methode zur Bestimmung von Fermiflächen
1999* Photoemissionsrechnung für hexagonale GaN(0001)-Oberfläche
1999* Photoemissionsrechnung für rekonstruierte Halbleiteroberflächen
1999 Ab-initio Potential für Streuzustände
1999* Universeller Zugang zur Konstruktion des Kristallpotentials
1999* Lokale Feldeffekte in optischen Absorptions-Spektren
2000* Relativistische Berechnung der makroskopischen Abschirmung
2000* Photoemissionsrechnung für Halbleiterheterostrukturen
2000* Photoemissionsrechnung ohne Dipolnäherung
2000* Photoemissionsrechnung mit diamagnetischem Anteil des Lichtes

(* : erste solche Arbeit überhaupt)







Einige ehemalige Mitglieder

Dietmar Schulz	Unternehmensberatung	Andersen
Axel Kistner	Unternehmensberatung	Andersen
Anke Bödicker	medizinische Analyseverfahren	Mevis
Roland Kaltefleiter	Inter- und Intranet Consulting	Netuse
Klaus-Willi Pieper	Spezialchipsimulation	Infineon
Dirk Lukas	unterseeische Gasvorkommen	Geomar
Harald Eckstein	SAP-R/3 Projekteinführung	Bayer
Michael Stobbe	Investmentbanking	Deutsche Bank
Carsten Kruse	internationaler Zahlungsverkehr	Deutsche Bank
Jürgen Henk	elektronische Struktur	MPI Halle
Dirk Samuelsen	Dieselmotorentwicklung	Bosch
Eckhard Pehlke	Oberflächenrekonstruktion	Uni Essen

Adresse : Institut für Theoretische Physik und Astrophysik der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel Leibnizstr. 15 D-24098 Kiel

Internet : http://www.theo-physik.uni-kiel.de/schattke

Email: schattke@tp.cau.de, drschattke@tp.cau.de

Phone: (++49) 0431 880 -4116, -4063, -4129, -4112