



# LUND UNIVERSITY

## Den kondenserade materiens teori

Teoretiker vid avdelningen för matematisk fysik arbetar med att förstå och förutsäga kvantmekaniska egenskaper hos material inom den subatomära, atomära- och nanometerstora skala.

von Barth, Ulf; Verdozzi, Claudio; Samuelsson, Peter; Forkman, Bengt; Holmin Verdozzi, Kristina

*Published in:*  
Fysik i Lund i tid och rum

2016

*Document Version:*  
Förlagets slutgiltiga version

[Link to publication](#)

### *Citation for published version (APA):*

von Barth, U., Verdozzi, C., Samuelsson, P., Forkman, B. (Red.), & Holmin Verdozzi, K. (Red.) (2016). Den kondenserade materiens teori: Teoretiker vid avdelningen för matematisk fysik arbetar med att förstå och förutsäga kvantmekaniska egenskaper hos material inom den subatomära, atomära- och nanometerstora skala. I *Fysik i Lund i tid och rum* Gidlunds förlag i samarbete med Fysiska institutionen, Lunds universitet.

*Total number of authors:*  
5

*Creative Commons License:*  
CC BY

### **General rights**

Unless other specific re-use rights are stated the following general rights apply:  
Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal

Read more about Creative commons licenses: <https://creativecommons.org/licenses/>

### **Take down policy**

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

LUND UNIVERSITY

PO Box 117  
221 00 Lund  
+46 46-222 00 00

$$\begin{aligned}
 & \langle \psi | H | \psi \rangle = 0 \\
 & \int \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi \\
 & \int \psi \nabla^2 \psi \\
 & \langle \psi_n | v_{\text{ext}} | \psi_n \rangle = 0 \\
 & \psi(r) \langle \psi(r) \psi(r) \psi(r) \psi(r) \rangle \\
 & \int n(r) \epsilon_{xc}(n(r)) dr \\
 & \frac{\delta E_{xc}}{\delta n} = v_{xc}(r)
 \end{aligned}$$

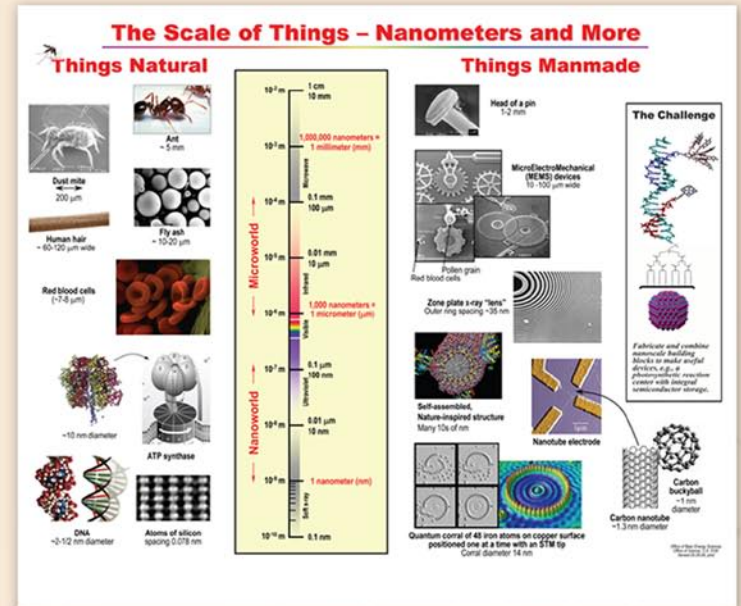
## Den kondenserade materiens teori

Teoretiker vid avdelningen för matematisk fysik arbetar med att förstå och förutsäga kvantmekaniska egenskaper hos material inom den subatomära, atomära- och nanometerstora skalan.

# Kunskapen om material

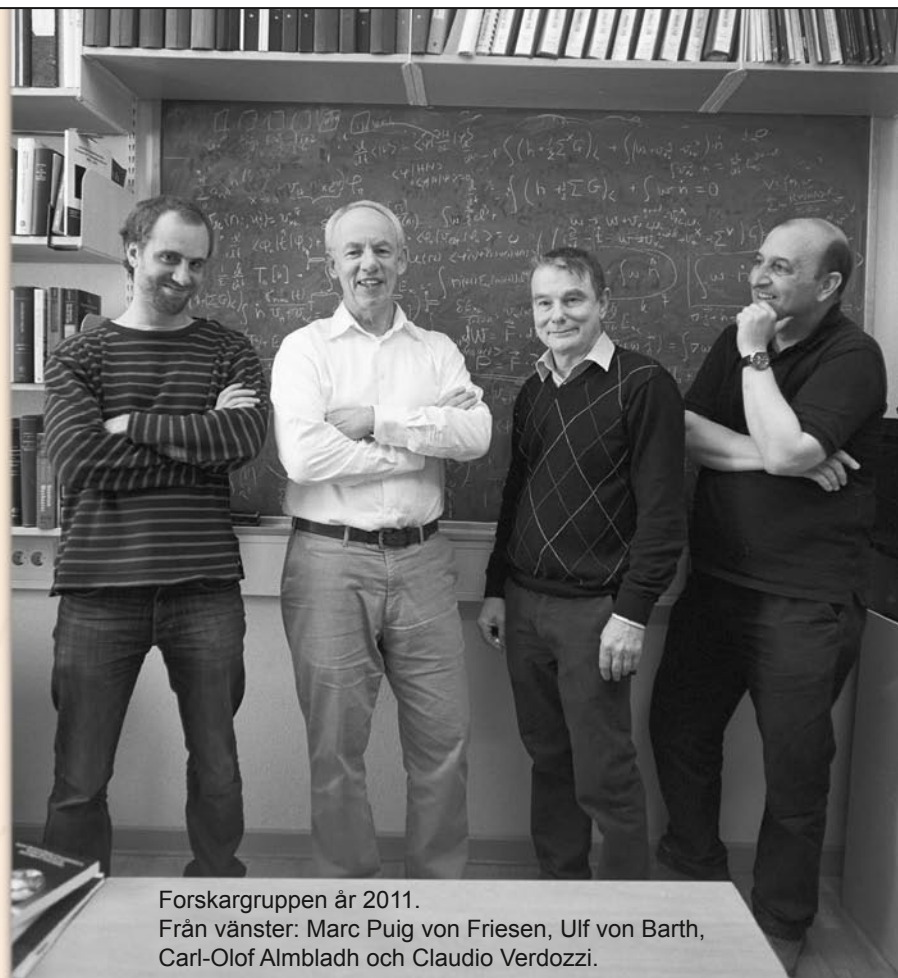
En av de stora utmaningarna i fysik är att finna nya vägar att förstå, kontrollera och utnyttja egenskaper hos olika material. Detta kräver en noggrann och helst prediktiv, teoretisk beskrivning av material.

Detta är inte lätt av flera skäl, t.ex. har vissa material en mycket komplex struktur, eller så kan det vara nödvändigt att ta hänsyn till flera samtidiga längd- och tidsskalor för att förutse de funktionella egenskaperna man vill studera. Dessutom framträder ofta nya egenskaper när samspelen mellan elektroner och mellan elektroner och gittervibrationer spelar en viktig roll.

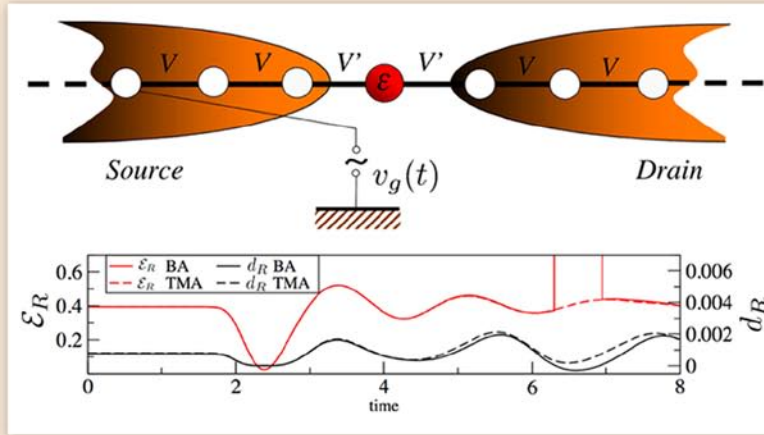


## Tidsberoende fält

Carl-Olof Almladh har strävat efter att för-  
ena avancerad teori med närhet till relevanta  
experiment. Områden som självenergi och  
excitationsenergi, täthetsfunktionalteori,  
spektroskopier och på senare år, system med  
stark korrelation, nanoskopiska system och  
system i externa tidsberoende fält har varit  
hans huvudintressen.



# Korrelerade nanosystem

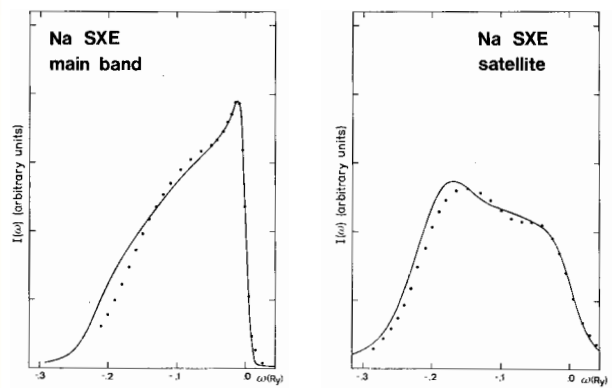


Dubbelockupation i en nanoskopisk ledare enligt ett arbete av Puig von Friesen, Almladh och Verdozzi från 2011.

Ett nyckelexperiment i nanofysik är kvanttransport där ström leds genom ett nanoskopiskt system, till exempel en molekyl, anslutet till externa ledande elektroder.

Stefanucci och Almladh har utarbetat en teori där systemet studeras när det från initial jämvikt störs av pålagda eventuellt tidsvarierande fält och spänningar på elektroderna. I Lund har arbetet fortsatt av Almladh och Verdozzi och deras studenter genom teoriutveckling och detaljerade beräkningar på starkt korrelerade nanosystem.

# The Final-State Rule



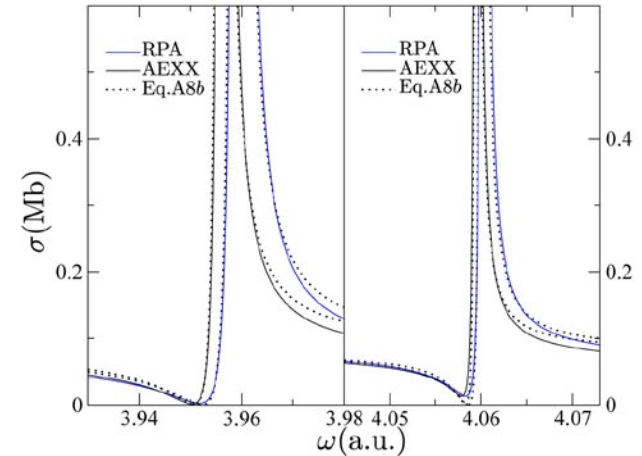
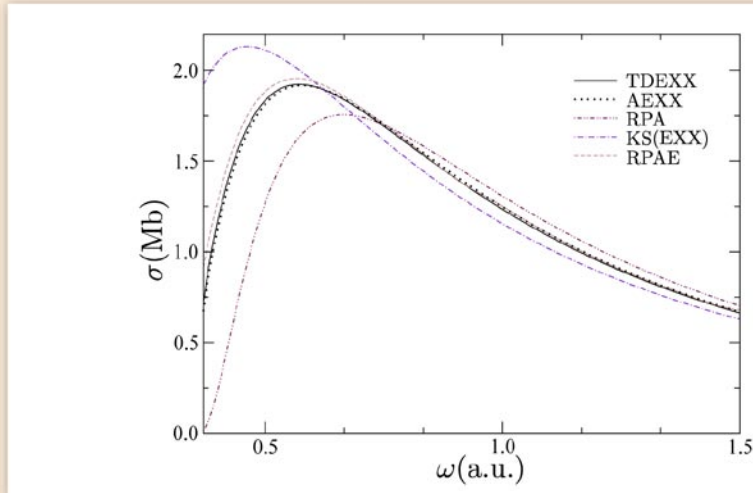
Ulf samtalar med fakultetsopponenten professor Langreth vid disputationen.

Ulf von Barths första doktorand, Günter Grossmann disputerade 1981 med en avhandling som bland annat innehåller en numerisk utvärdering av en modell för att beskriva röntgen- och Auger-spektra. Modellen ger en god bild av formen på röntgenkanterna.

Viktigare var dock att resultaten gav teoretiskt stöd för *The Final-State Rule*. Denna regel förklarar t.ex. varför man inte ser några effekter av innerskalsvakansen i röntgenemission men väl i tillhörande satellit-spektrum eller att KLV-Auger-spektra är starkt påverkade av vakansen medan KVV-spektra inte är det.



# Tidsberoende täthetsfunktionalteori



Täthetsfunktionalteori (DFT) är ett sätt att förenkla det komplicerade mångpartikelproblemet till ett enpartikelproblem. DFT utgör en stor del av Ulf's forskargärning och han var tidigare en av världens ledande forskare inom området.

Ulf visade bl.a. att de egenvärden, som finns i teorin, inte beskriver bandgap i halvledare. Ett tidigt arbete med Hedin har cirka fem tusen citeringar. Där generaliserades teorin till magnetiska material.

Ovan till vänster: Photoionization cross section for Be after the first ionization threshold.

Ovan till höger: First two Fano resonances resulting from the  $1s \rightarrow 2p$  and  $1s \rightarrow 3p$  transitions.

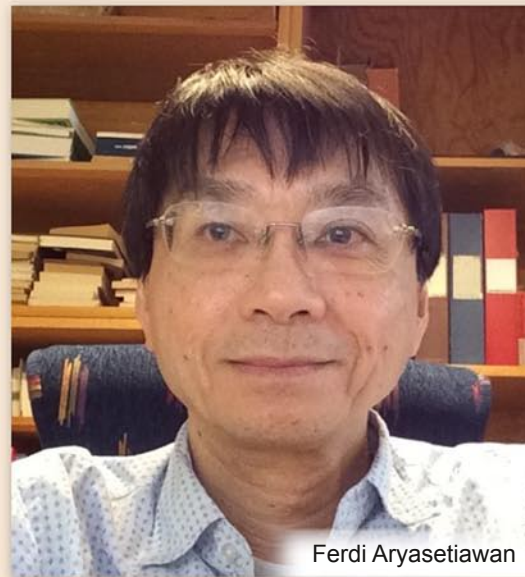
På senare år har Ulf arbetat med en tidsberoende variant av DFT (TDDFT), som möjliggör beräkningar av excitationer. En av Ulf's doktorander, Maria Hellgren, visade att en viss approximation fungerar bra för spektra vid låga energier.

## Den elektroniska strukturen hos starkt korrelerade föreningar

*Ungefärliga praktiska sätt att tillämpa kvantmekaniken bör utvecklas som kan leda till en förklaring av huvuddragen i komplexa atomsystem utan alltför mycket beräkning.*

Paul Dirac

Många nya material med intressanta egenskaper har fabricerats eller upptäckts de senaste årtionden. Man hoppas att dessa kommer att utgöra byggstenarna i framtidens elektronik. Ett välkänt exempel är den okonventionella högtemperatursupralederen.

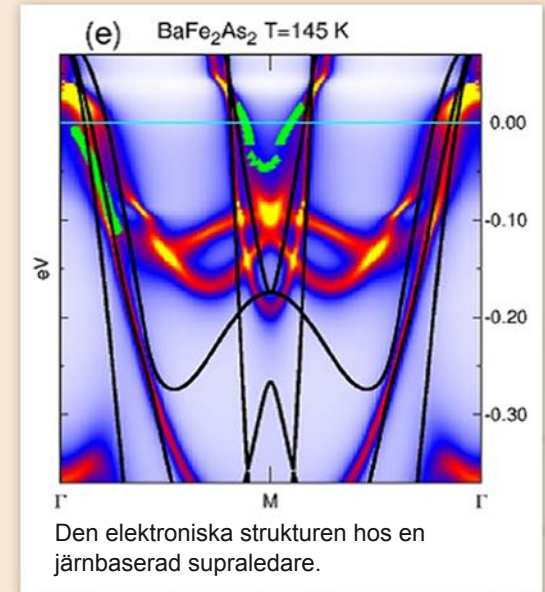


Ferdi Aryasetiawan



## Framtidens elektronik

Ferdi Aryasetiawans forskargrupp arbetar med att utveckla kvantmekaniska metoder för att studera elektronstrukturen hos komplexa föreningar. Ett strikt kriterium som måste uppfyllas, i Diracs anda, är att metoden ska vara teoretiskt rigorös och samtidigt gälla för riktiga material.

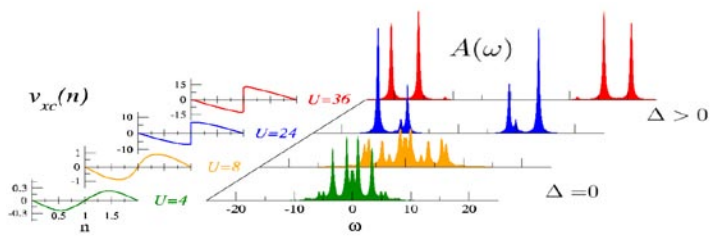


## Icke-jämviktsfenomen

Det är troligt att nya tekniska tillämpningar i framtiden kommer att kräva små, ultrasnabba enheter som kan fungera i snabba föränderliga miljöer. Dessutom, råder bred samstämmighet bland fysiker att banbrytande tekniska innovationer sannolikt kommer att baseras på system vars egenskaper inte kan beskrivas i ett partikeloberoende sammanhang. Detta är anledningen till att betydande forskningsinsatser nu ägnas åt att utveckla teorier för system med starkt korrelerande partiklar som befinner sig inom och utanför jämvikt.

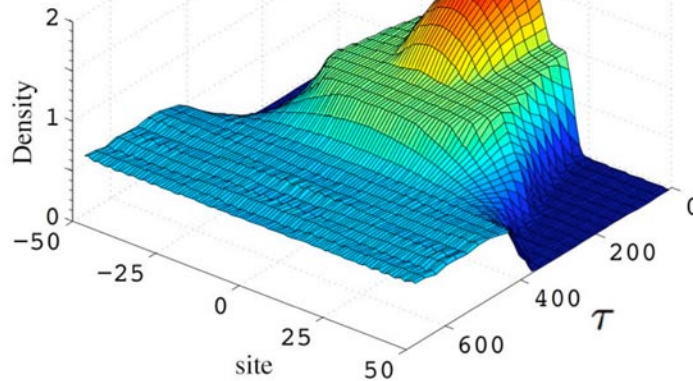


# Den tidsupplösta dynamiken i system utanför jämvikt



Utbytes-korrelationspotential DFT i 3D Hubbard modellen (vänster) kontra metall-isolatorövergång (höger), som en funktion av elektron-elektronväxelverknings.

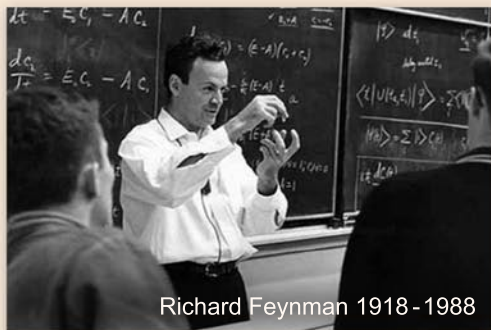
Smältning av Mott isolatorfasen i en sluten fermionisk gas enligt tidsberoende täthetsfunktionalteori.



Sedan han kom till Lund 2004, har Claudio Verdozzi's forskning varit inriktad mot utveckling och tillämpning av teoretiska and numeriska metoder för system med korrelationer bland partiklar som befinner sig i och utanför jämvikt, såsom Greenfunktion-metoder, täthetsfunktionalteori och exakta ändliga system.

Målet är att ta itu med konceptuella frågor associerade med dessa metoder och att beskriva fysikaliska situationer så olika som elektrontransport i nanostrukturer (tillsammans med Carl-Olof Almladh), ultrakalla atomer i optiska gitter, magnetism i kluster, oordnade system och ultrasnabb spektroskopi.

# Början på nanotekniken

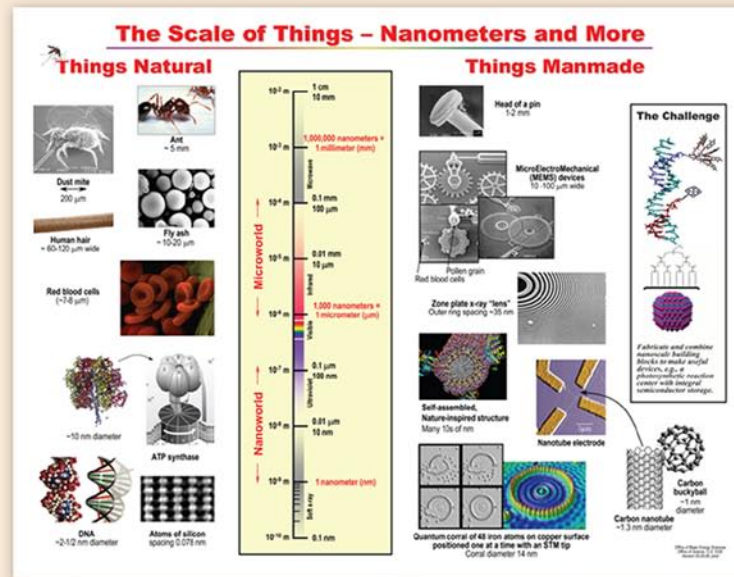


Richard Feynman 1918-1988

I en framåtblickande föreläsning på Caltech år 1959 förutsade den amerikanske fysikern och blivande nobelpristagaren Richard Feynman en ny tidsålder där forskare i stället för att utnyttja naturliga material skapade nya skräddarsydda material för nya tillämpningar.

Detta skulle göras genom att manipulera individuella atomer på nanonivå. I denna pyttelilla värld spelar kvanteffekter en dominerande roll som bestämmer materialets ledningsförmåga, dess optiska och mekaniska egenskaper.

Men det krävdes nya teoretiska modeller för att förklara uppkomna effekter och förutspå andra.





## Partiklar i samspel



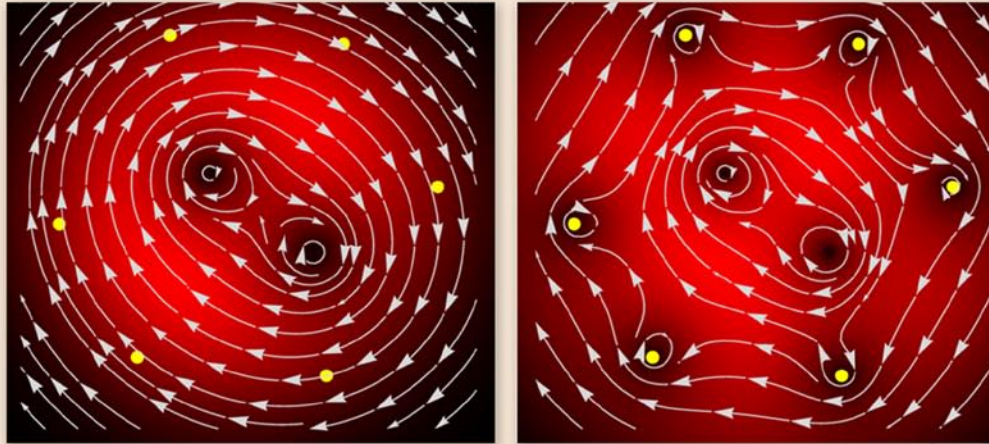
Stephanie Reimann

Stephanie Reimann och hennes grupp arbetar med teoretiska beräkningar för hur små, nanometerstora system med flera partiklar som växelverkar med varandra, beter sig.

Ett exempel är små halvledarsystem, t. ex. kvantprickar och kvantrådar, där kvantmekaniken bestämmer fysikens lagar. Här är samspelet och växelverkan mellan de olika partiklarna helt avgörande för fysikaliska fenomen man undersökt, som korrelationer i tid och rum, virvelformationer och skalstruktur hos energierna hos de olika partiklarna.



# Bose-Einstein kondensat



Alla partiklar i universum kan delas upp i två typer, bosoner och fermioner. När bosoner, som kan vara olika typer av atomer, fångas i små system och kyls ner till temperaturer nära absoluta nollpunkten kan de forma ett Bose-Einstein kondensat. Detta mycket speciella tillstånd kan bara förklaras av kvantmekaniken.

Stephanie och hennes grupp har undersökt fundamentala egenskaper hos Bose-Einstein kondensat och även hos fermioner kyllda till mycket låga temperaturer. Ett mycket intressant exempel är partiklar med så kallade dipolegenskaper.



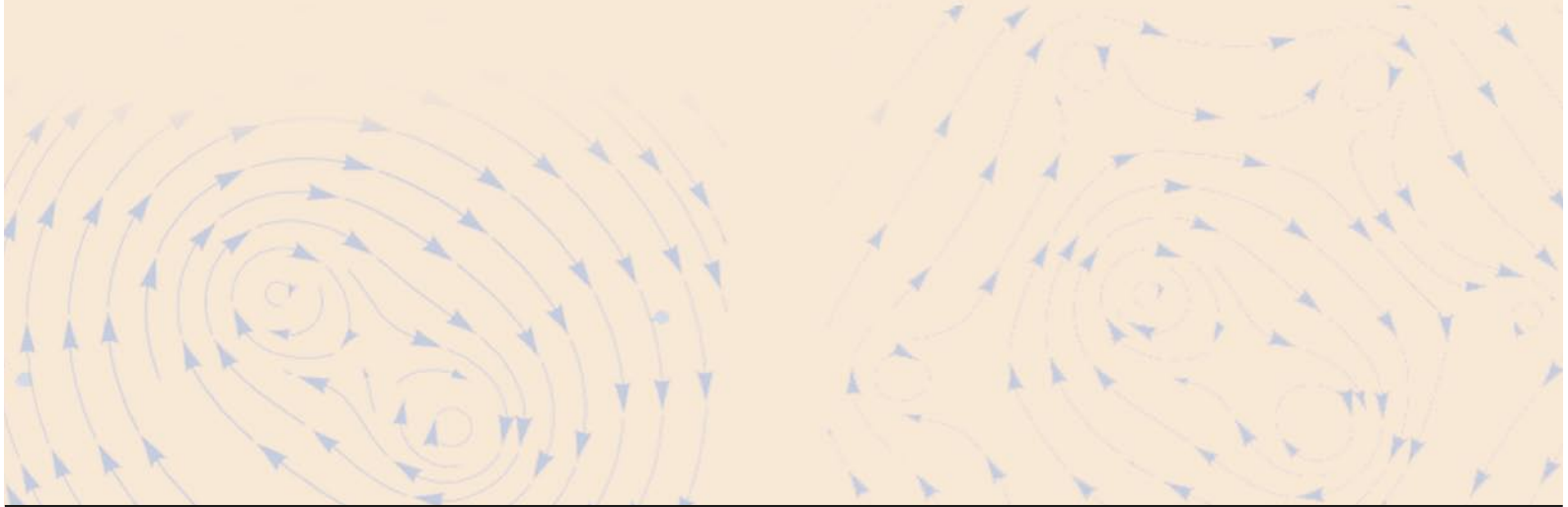


## Oväntade samband



Peter Samuelsson och hans grupp arbetar med teorier för nanometerstora system, med fokus på transport av elektroner genom sådana system. Detta kan leda till snabbare och bättre elektroniska kretsar. Speciellt intressant är kvantmekaniska effekter som kan medföra säkrare information än dagens teknik.

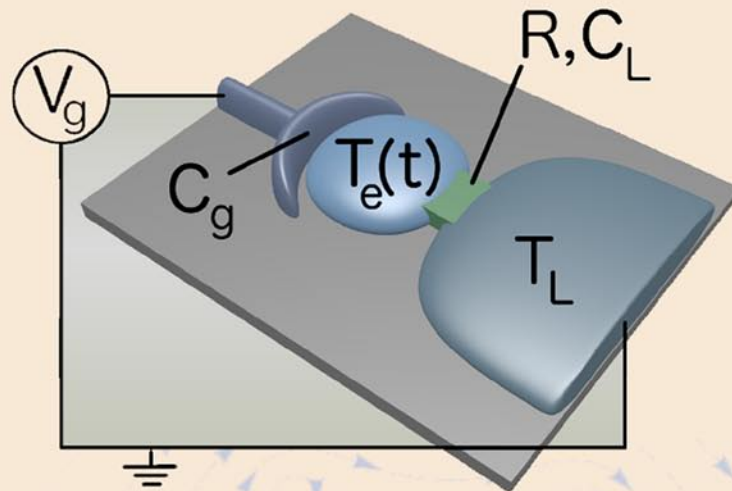
Peters forskning har visat på oväntade samband mellan, å ena sidan kvantinformation med elektroner och å andra sidan, ljus från olika avlägsna stjärnor som samtidigt når jorden.



## Nyttigt brus

Ett annat forskningsområde handlar om brus och fluktuationer hos elektrisk ström i nanosystem. Ofta ses brus som något man vill bli av med, men bruset i sig kan innehålla mycket information, eller, för att använda forskaren Rolf Landauers egna ord, *bruset är signalen*. Peter och hans forskargrupp har undersökt flera olika aspekter av brus i nanometerstora elektriska ledare.

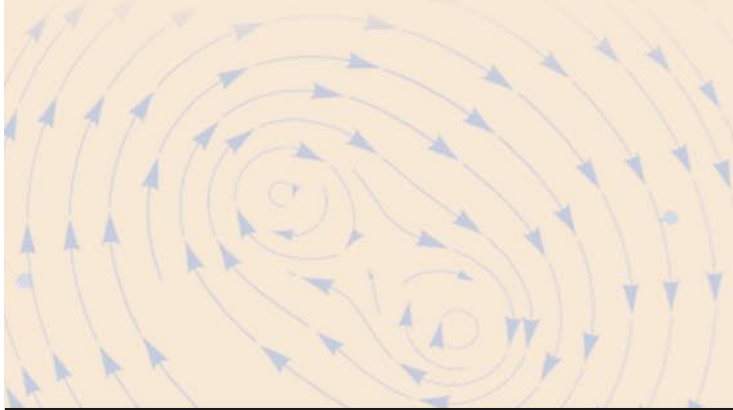
Man har även undersökt vad som händer med begrepp som temperatur och värme, i nanometerstora system. Förhoppningen är att kunna hitta nya, effektivare sätt att t.ex. omvandla värmeenergi till elektrisk energi, genom att använda nanosystemens unika egenskaper.



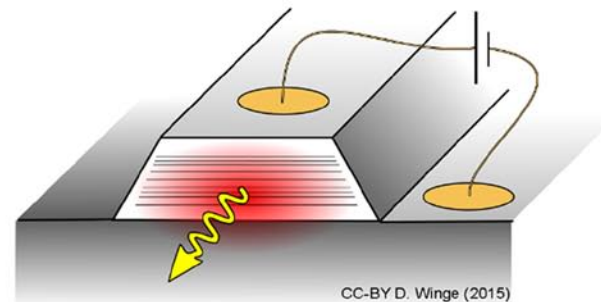
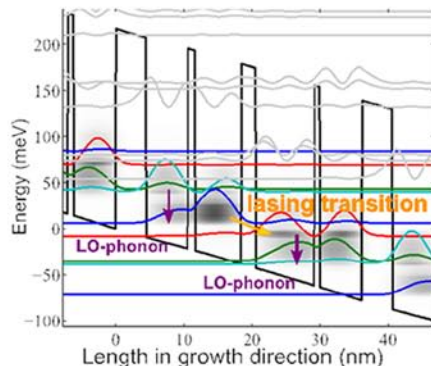
## Elektroner i trånga utrymmen

Andreas Wacker och hans grupp arbetar med teorier för hur elektrisk ström, värme och atomvibrationer, transporteras genom nanometerstora system, typiskt tillverkade av halvledarmaterial. Speciellt handlar det om transport när nanosystemet inte befinner sig i jämvikt, vilket leder till intressanta fysikaliska effekter.

Ett viktigt område är hur man kan göra bättre lasrar i system byggda av olika, varvade, halvledarmaterial. Dessa så kallade kvantkaskadlasrar har flera spännande tillämpningar i vardagen. Andreas och hans grupp har undersökt grundläggande kvantmekaniska fenomen i dessa varvade halvledarsystem och hur dessa fenomen kan kontrolleras för att höja prestandan hos lasrarna.



# Kvantkaskadlasrar



Ett annat område handlar om transport genom kvantprickar, nanometerstora prickar av halvledarmaterial. Elektronerna kan hoppa in i och ut från kvantprickarna och därigenom föra med sig både elektrisk laddning och värmeenergi från ena sidan prick till den andra.

Speciellt har Andreas Wacker undersökt vad som händer när *hoppande* elektroner växelverkar med varandra eller med omgivningen i form av t.ex. vibrationer hos atomerna i materialet som utgör kvantpricken.