idw - Informationsdienst Wissenschaft
Nachrichten, Termine, Experten

Pressemitteilung

Max-Planck-Institut für Struktur und Dynamik der Materie
Dr. Joerg Harms

13.10.2021
http://idw-online.de/de/news777416

Forschungsergebnisse, Wissenschaftliche Publikationen
Physik / Astronomie
überregional

Eine stark vereinfachte Methode zur Vorhersage von Quantenwechselwirkungen zwischen Licht und Materie

Wenn Licht mit Materie wechselwirkt kann dies das Verhalten des Materials grundlegend verändern. Je nach Art der Wechselwirkung laufen manche chemische Reaktionen anders ab, werden Stoffe magnetisch oder ferroelektrisch oder beginnen, Strom ohne Verluste zu leiten. Besonders interessant sind Fälle, in denen nicht einmal eine reale Lichtquelle notwendig ist, weil schon die bloße Möglichkeit der Existenz von Licht oder seines Quantenäquivalents, der Photonen, das Verhalten von Materie verändern kann. Theoretiker versuchen, diese faszinierenden Phänomene zu beschreiben und vorherzusagen, weil sie für die Entwicklung neuer Quantentechnologien entscheidend sein könnten.

Die Berechnung der Quantenwechselwirkungen zwischen Licht und Materie verschlingt jedoch enorme Mengen an Zeit und Rechenleistung. Die Beschreibung der starken Wechselwirkung zwischen einem realistischen Material und Photonen kostet schnell Tausende von Euro. Nun haben Wissenschaftler der Theorieabteilung des Max-Planck-Instituts für Struktur und Dynamik der Materie (MPSD) in Hamburg einen Weg gefunden, einige dieser Berechnungen zu vereinfachen. Ihre in PNAS veröffentlichte Arbeit ist ein wichtiger Schritt auf dem Weg zur Integration der Quantennatur des Lichts in moderne Geräte.

„Stellen Sie sich vor, Sie bekommen einen Satz Bauklötze, um ein Modell des berühmten Berliner Tors zu bauen", sagt Christian Schäfer, Hauptautor der Studie. „Intuitiv fangen wir an, die Steine übereinander zu legen, um die Form des Tors nachzubilden, aber mit jedem Stein wird die Konstruktion instabiler und teurer. Da wir manchmal viele hundert Photonen berücksichtigen müssen, können unsere Berechnungen sehr komplex werden, und die Kosten für unsere theoretischen Vorhersagen steigen sehr schnell an. Tatsächlich sind diese Kosten so hoch, dass die Vorhersage des gesamten Zusammenspiels zwischen vielen Photonen und realistischen Molekülen de facto unmöglich ist, selbst auf den schnellsten und größten existierenden Supercomputern."

Nun hat das MPSD-Team am Center for Free-Electron Laser Science (CFEL) in Hamburg einen einfachen, aber genialen Weg gefunden, dieses Problem weitgehend zu umgehen. Indem sie die Gleichung so umgestalten, dass die quantenmechanische Unschärfe des Lichts bereits im Materialteil selbst berücksichtigt wird, sind weit weniger zusätzliche Photonen nötig, um das kombinierte System aus Quantenlicht und Materie zu beschreiben.

„Im Grunde haben wir das Berliner Tor gebaut, indem wir es aus dem ersten Stein gemeißelt haben, um zu ungefähr dem gleichen Ergebnis zu kommen", erklärt Schäfer. „So können wir die Quantenwechselwirkung zwischen Licht und Materie mit sehr viel geringerem Mehraufwand beschreiben, als wenn wir nur die Materie betrachten würden."

Wenn zum Beispiel die Wechselwirkung zwischen Licht und Materie so stark wird, dass eine Unterscheidung beider Systeme nicht mehr möglich ist, kann jede Konfiguration des Lichtfeldes die Berücksichtigung von Hunderten von Photonen erfordern. Der neue Ansatz kann die meisten Merkmale dieser extremen Grenze erfassen, ohne dass überhaupt ein Photon berücksichtigt werden muss. Schon das Hinzufügen einiger weniger Photonen vervollständigt

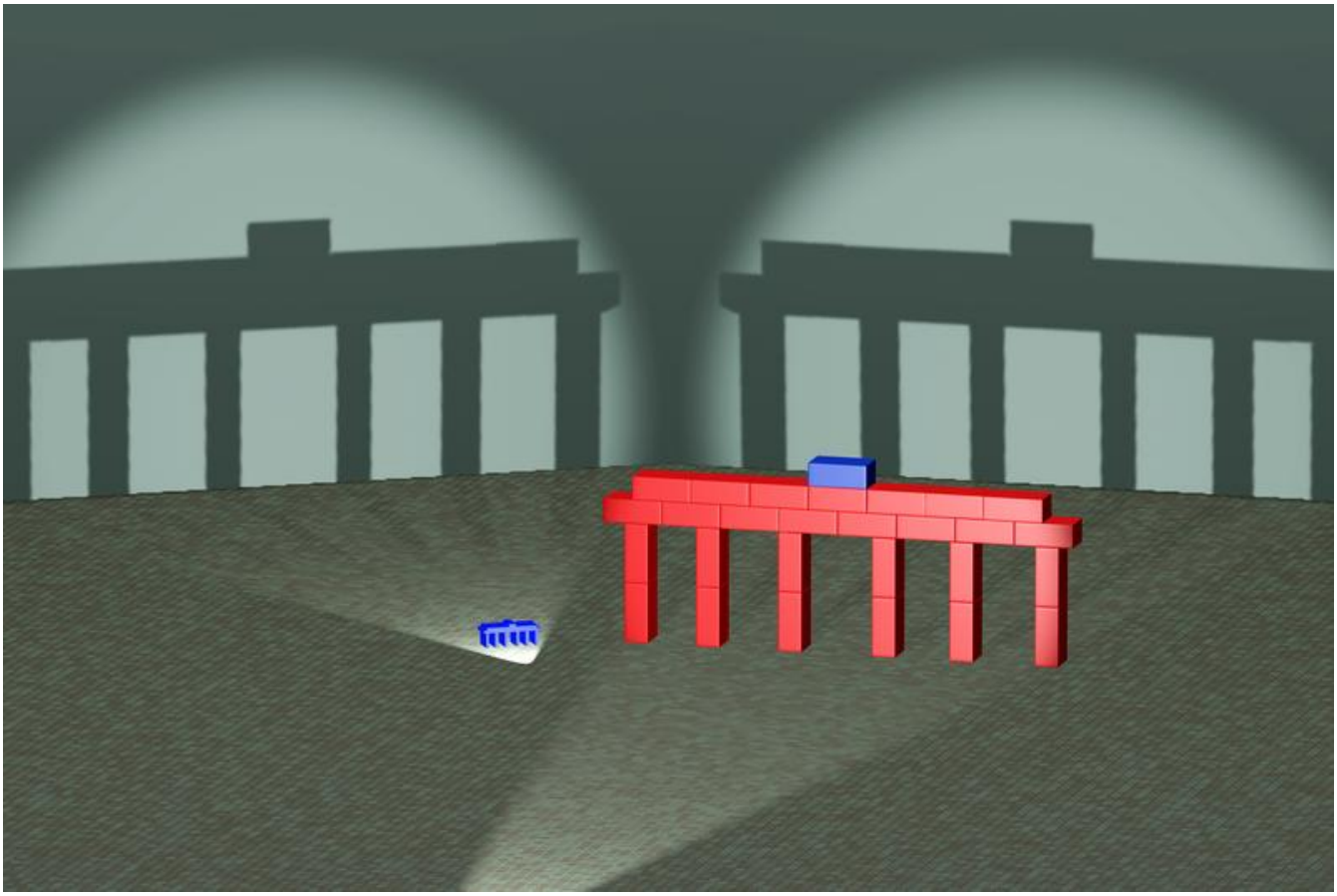
dann das Bild.

Die Methode führt zu signifikanten Einsparungen bei der Rechenzeit und erlaubt es Wissenschaftler*innen, das Zusammenspiel zwischen Quantenlicht und Materie für realistische Systeme in Situationen vorherzusagen, die bisher nur schwer zu simulieren waren. „Unser Ansatz bietet eine solide Grundlage für zukünftige Entwicklungen und bietet einen Weg, Quantenlicht stärker in die Chemie, das Materialdesign und die Quantentechnologie zu integrieren", sagt Schäfer. „Der Formalismus dient uns als wichtiges Instrument für die genauere Vorhersage etlicher neuer Effekte“, fügt Angel Rubio, der Direktor der Theorieabteilung am MPSD, hinzu. „Die Konstruktion von neuartigen Materialien und molekularen Komplexen mithilfe von Licht wird nun Realität. Wir beginnen eine lange und aufregende Reise zur Erforschung seiner potenziellen Auswirkungen in neuartigen Quantentechnologien und die Arbeit des Teams ist ein wichtiger Schritt auf diesem Weg."

wissenschaftliche Ansprechpartner:
Erstautor: Dr. Christian Schäfer, christian.schaefer@mpsd.mpg.de

Originalpublikation:
https://dx.doi.org/10.1073/pnas.2110464118

URL zur Pressemitteilung: https://www.mpsd.mpg.de/574166/2021-10-schaefer-predictions?c=2724



In der umgestalteten Gleichung, welche die Wechselwirkung zwischen Licht und Materie beschreibt, wird ein Teil des Quantenlichts von vorneherein in die Materiekomponente integriert – ähnlich, als würde man das Berliner Tor aus

einem einzelnen Stein meiße
Jörg Harms
Jörg Harms/MPSD