

Quantenmechanische Vielteilchenzustände: Spinflüssigkeiten

Die ersten Rechenzyklen des neuen Supercomputers MACH wurden für ein ambitioniertes Projekt aus der Quantenphysik eingesetzt. Im Rahmen dieses Projektes werden Computersimulation von einem Material durchgeführt, in dem sich die Elektronen nicht mehr frei bewegen können, sondern durch die starke elektrostatische Abstoßung jeweils an einen Gitterplatz gebunden sind (sogenannte Mott-Isolatoren). Der noch verbleibende Freiheitsgrad – der Drehimpuls der Elektronen – verhält sich wie ein mikroskopischer Magnet. In vielen bisher untersuchten Materialien stellt sich in so einem Fall kollektive magnetische Ordnung ein, bei der sich benachbarte Magnete ausrichten. In dem nun betrachteten Modell auf dem Kagome-Gitter stellt sich diese Ordnung interessanterweise nicht ein, stattdessen wurde eine Quanten-Spinflüssigkeit ohne magnetische Ordnung gefunden. Die nun durchgeführten Rechnungen zeigen, dass möglicherweise sogar topologische Ordnung vorliegt. In dem Fall könnte das Material in der Zukunft als topologisches Qbit verwendet werden, da diese viel stärker vor äußeren Einflüssen geschützt sind und daher robuste Quantencomputer ermöglichen würden.

Die durchgeführten Rechnungen gehören zu den größten numerisch berechneten Eigenwertproblemen überhaupt. Die Problemgröße betrug 48 Elektronen welche 500 Milliarden quantenmechanischen Zustände einnehmen können, die alle in der Simulation berücksichtigt wurden. Die Simulation wurde mit einem hochperformanten parallelen Code durchgeführt, welcher in Zusammenarbeit mit den Max Planck Instituten in Garching und Dresden entwickelt wurde. Die Simulationen gehen mit 14 Terabytes Hauptspeicher und 1852 Prozessoren an die Grenzen der Speicher- und Rechenkapazität des neuen MACH Supercomputers und wären in dieser Form anderswo nicht möglich gewesen.

Kontakt:

Univ.-Prof. Dr. Andreas Läuchli
Institut für Theoretische Physik
Universität Innsbruck

Tel.: +43 512 507-6218
Mobile: +43 664 73666444
Email: andreas.laechli@uibk.ac.at

