

Rotierende Moleküle in starken Feldern

Die faszinierende Topologie rotierender Quanten

VOLKER KARLE | MIKHAIL LEMESHKO

Die Anwendung der Topologie hat in der Physik der kondensierten Materie zu bedeutenden Fortschritten geführt. Dennoch sind die topologischen Eigenschaften von Quantenrotationen und höheren Symmetriegruppen, die für das Verständnis von rotierenden Molekülen in Feldern essenziell sind, weitgehend unerforscht. Diese könnten jedoch spannende Anwendungen in der Molekülphysik und physikalischen Chemie ermöglichen.

Es zeigt sich immer wieder, dass fundamentale Elemente der Mathematik unvorhergesehene Anwendungen in der Physik finden. Ein bemerkenswertes Beispiel hierfür ist die Topologie, Gebiet, das sich mit den unveränderlichen Eigenschaften von Formen und Räumen befasst (siehe „Topologische Eigenschaften“ auf Seite 30). Die bahnbrechende Erkenntnis, dass topologische Konzepte zur Erklärung und Vorhersage neuartiger Materialeigenschaften herangezogen werden können, hat die Festkörperphysik nachhaltig geprägt und wurde 2016 mit dem Nobelpreis gewürdigt. Oft geht es dabei aber nicht um die augenscheinliche Topologie des physikalischen Systems, sondern um abstraktere Räume wie die Topologie des Phasenraums der elektronischen Anregungen und Zustände.

Die Zustände zweier unterschiedlicher Systeme können die gleiche Topologie aufweisen, obwohl ihre mikroskopischen Eigenschaften sich sehr voneinander unterscheiden. Diese auf den ersten Blick einfache Idee hat weitreichende Konsequenzen, insbesondere wenn sie auf die Quantenphysik angewendet wird. Sie ermöglicht es, komplexe Festkörpersysteme, die oft aus vielen Komponenten bestehen, durch einfache Modellsysteme zu beschreiben und ihre topologischen Eigenschaften zu charakterisieren.

Dadurch lassen sich aussagekräftige Vorhersagen über Materialien treffen, selbst wenn Aspekte wie Materialdefekte, thermische Effekte oder Wechselwirkungen zwischen den Elektronen vernachlässigt werden. Dabei ist es von entscheidender Bedeutung, die Symmetrien des Systems zu berücksichtigen [1]. Obwohl die Mathematik dieser sogenannten Symmetry-protected Phases bis in moderne Ansätze der Differentialtopologie vordringt und theoretisch

sehr anspruchsvoll ist, lassen sich die topologischen Invarianten oft relativ einfach für ein gegebenes Modellsystem auswerten.

Ein prägnantes Beispiel für solche Modellsysteme stellen die topologischen Isolatoren dar. Diese Quantenmaterialien zeichnen sich durch eine isolierende Beschaffenheit im Inneren aus, während sie an ihrer Oberfläche Strom leiten. Dieses Phänomen ergibt sich aus der Topologie der Anregungen und gründet auf einer mathematischen Dualität, der sogenannten Bulk-Boundary Correspondence [2]. Diese Dualität legt nahe, dass sich die topologischen Merkmale eines Systems in seinen geometrischen Eigenschaften manifestieren.

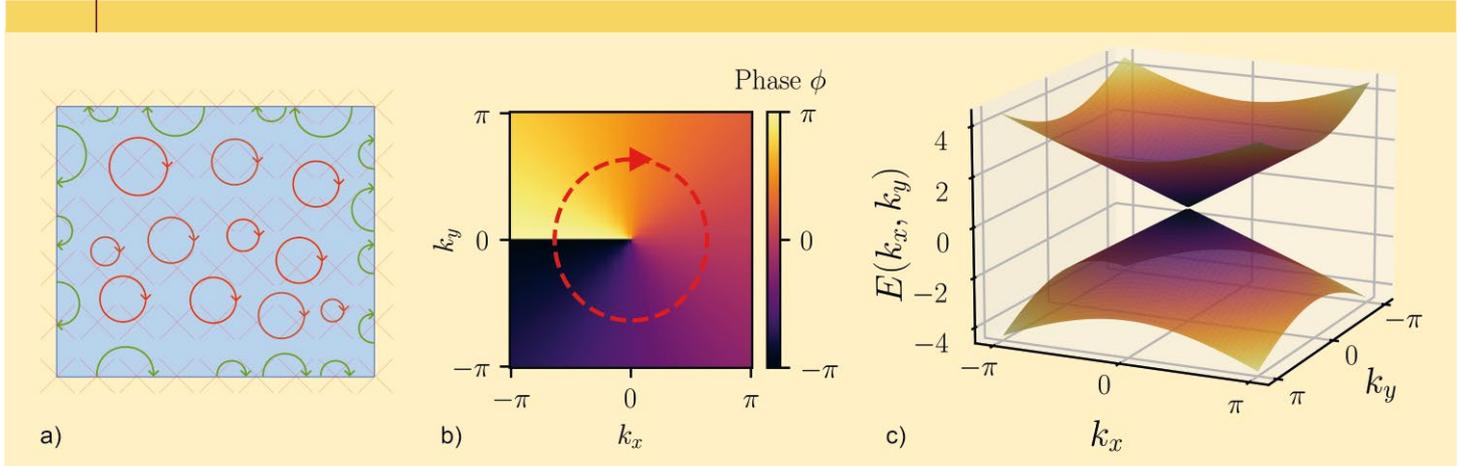
Im Kontext der topologischen Isolatoren bedeutet dies, dass es spezielle Zustände am Rand des Materials gibt, die durch die Topologie geschützt sind. Diese sogenannten Randmoden tragen zur Leitung von Strom an der Oberfläche des Materials bei. Die Entstehung von Randmoden in topologischen Isolatoren mag auf den ersten Blick rätselhaft erscheinen, doch sie ist tief in der Physik verwurzelt und weist Parallelen zu Phänomenen auf, die wir schon lange kennen [3]. Ein Schlüssel zum Verständnis ist die Vorstellung von „topologischen Ladungen“. Dieser Begriff ist nicht zufällig gewählt, denn er deutet auf eine tiefe Verbindung hin: Diese topologischen Invarianten haben in vielerlei Hinsicht Ähnlichkeiten mit den elektrischen Ladungen in der klassischen Elektrodynamik.

Nehmen wir zum Beispiel ein starkes Magnetfeld, das auf die Oberfläche eines Materials wirkt. Die Lorentz-Kraft zwingt die freien Elektronen des Materials, zyklische Bewegungen auszuführen. Doch was passiert mit den Elektronen am Rand des Materials? Sie können ihren Orbit nicht vollenden und bewegen sich stattdessen entlang des Randes (Abbildung 1). Bei starken Magnetfeldern wird das Material also innen isolierend, während es am Rand leitend wird. Quantenmechanisch ist die Argumentation komplizierter, doch die Intuition dahinter ist die gleiche.

Dieses Phänomen lässt sich noch tiefer verstehen, wenn wir die elektromagnetischen Feldlinien als Krümmung auf einer geometrischen Struktur interpretieren. Diese Struktur hat eine nichttriviale Topologie, die durch die Anzahl der Ladungen bestimmt ist: Jede Ladung sorgt sozusagen für einen mikroskopischen Wirbel, angeregt durch das Magnetfeld. Hier zeigt sich eine bemerkenswerte Verbindung: Eine

This is an open access article under the terms of the Creative Commons Attribution License, which permits use, distribution and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

ABB. 1 | TOPOLOGISCHE LADUNGEN



a) Wenn ein starkes Magnetfeld auf eine Fläche wirkt, veranlasst die Lorentz-Kraft nicht miteinander wechselwirkende Elektronen im Inneren zu zyklischen Bewegungen. Wenn wir nun das vorliegende Feld als eine Art Raumkrümmung interpretieren, kann man zeigen, dass die zugrunde liegende Mannigfaltigkeit eine nichttriviale Topologie aufweist. b) Die nichttriviale Topologie einer Wellenfunktion äußert sich zum Beispiel in Form eines „Wirbels“ in der Phase der Wellenfunktion. In der Mitte, wo die Phase nicht wohldefiniert ist, ist das Zentrum des Wirbels: eine Singularität. Wie im Text ausgeführt, ergibt ein Wegintegral (rot gestrichelt) um den Wirbel herum eine ganze Zahl, die Vortizität. c) Ein Dirac-Kegel ist ein Übergang zweier Bänder mit einer Entartung in der Mitte, in deren Umgebung die Dispersionsrelation linear ist, $E(k) \propto k$. Die Entartung stellt eine Singularität im Raum der Wellenfunktion dar (siehe b), die zwangsläufig zu einer Art Wirbel in der Phase der Wellenfunktion führen muss. Das entspricht der topologischen Ladung des Kegels, die sich einfach aus der Vortizität dieses Wirbels ergibt.

lokale Eigenschaft, die Feldstärke (im übertragenen Sinne also die Krümmung), ist eng verknüpft mit einer globalen Eigenschaft, der Anzahl der Ladungen. Dieser Zusammenhang zwischen Lokalem und Globalem ist ein zentrales Thema in der Topologie und spielt auch in der Theorie der topologischen Isolatoren eine entscheidende Rolle. Es ist diese Verbindung, die den Begriff der topologischen Ladung so treffend macht.

Doch umgekehrt lassen sich die nichttrivialen topologischen Eigenschaften eines quantenmechanischen Systems auch als effektive elektrische beziehungsweise Eichfelder auffassen. Dabei sind die von Michael Berry popularisierten geometrischen Phasen von zentraler Bedeutung, obwohl sie erst später mit topologischen Eigenschaften in Verbindung gebracht wurden [4]. Es stellt sich heraus, dass die Rolle des Vektorpotentials des effektiven Feldes durch die „Berry-Verbindung“ gegeben ist, welche mit der Wellenfunktion $|\psi(x, t)\rangle$ durch

$$A(x, t) = \langle \psi(x, t) | \nabla \psi(x, t) \rangle$$

berechnet wird. Das effektive Magnetfeld lässt sich dann in gewohnter Weise mit $\text{rot } A = B$ darstellen. In einem zweidimensionalen Material lassen sich nun die Anzahl der Ladungen mithilfe eines Wegintegrals um einen Pfad γ um die Ladungen herum durch

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\gamma} dx \cdot A(x, t) = n \in \mathbb{Z}$$

ermitteln; die ganze Zahl n stellt dabei die Summe aus positiven und negativen Ladungen dar und ergibt sich aus der

Anzahl der Quellen und Senken des Feldes. Für eine Wellenfunktion ergeben sich die topologischen Ladungen aus Wirbeln in der Phase der Wellenfunktion, siehe Abbildung 1b.

Darüber hinaus erlaubt es der mathematische Baukasten, Aussagen über mögliche topologische Phasenübergänge zu treffen, die beim Übergang von einer Topologie zu einer anderen stattfinden. Anders als bei einem klassischen Phasenübergang, beispielsweise von einem festen in einen flüssigen Zustand, wird der Übergang aber nicht von einer Änderung der Symmetrie eingeleitet, sondern einer Änderung der topologischen Invariante, zum Beispiel der Anzahl der topologischen Ladungen.

Topologische Phasenübergänge stellen eine besondere Art von Phasenübergängen dar, bei denen die grundlegenden geometrischen und strukturellen Eigenschaften – die Topologie der Anregungen – eine entscheidende Rolle spielen. Ein solcher Übergang führt zu einem bemerkenswerten Phänomen, dem sogenannten Dirac-Kegel, siehe Abbildung 1c. Dieser tritt auf, wenn sich die Bandlücke eines Materials schließt, welche wiederum die elektrischen Eigenschaften eines Materials bestimmt. Bei topologischen Isolatoren ist es nun so, dass sich die Topologie des Energiebands nur bei der Schließung der Bandlücke ändern kann und es zu einem Dirac-Kegel kommt [5, 6]. Doch auch in anderen Systemen kennzeichnet die Entstehung eines Dirac-Kegels einen topologischen Phasenübergang, wie im Folgenden zu sehen.

Quantenrotation und nichttriviale Phasen

Eine Fülle früherer Studien hat die Auswirkungen der Topologie auf Zweizustandssysteme untersucht, insbesondere

wie sie als effektives Feld auf Elektronen wirkt. Diese Systeme können eine Vielzahl von Phänomenen wie den Quanten-Hall-Effekt erklären. Darüber hinaus hat sich gezeigt, dass die Methoden der topologischen Physik auf andere Bereiche, wie die topologische Photonik, anwendbar sind. Dort wird das Verhalten von Licht in speziell gestalteten Materialien unter dem Einfluss topologischer Konzepte untersucht. Unsere Arbeit erweitert nun das Verständnis topologischer Phänomene über Zweizustandssysteme hinaus und zeigt, dass sie auch in komplexeren Symmetriegruppen, wie den Drehungen eines Moleküls, auftreten können.

Dabei ist es wichtig, die Drehungen quantenmechanisch zu beschreiben. Ein rotierendes Molekül kann nur bestimmte, diskrete, quantisierte Drehgeschwindigkeiten annehmen. Dieses Phänomen der Quantenrotation ist vergleichbar mit der quantisierten Energie von Elektronen in einem Atom, welche in den Orbitalen nicht an einen bestimmten Ort gebunden, sondern delokalisiert sind. Ähn-

lich verhält es sich mit Molekülen, die über alle Winkel hinweg delokalisiert sind und nur in diesen Drehzuständen existieren können.

Wenn wir uns nur die Drehungen eines starren Rotors ansehen, haben jene Drehzustände eine Vielzahl von interessanten Eigenschaften, die auch mit der Topologie der zugrundeliegenden Drehgruppe $SO(3)$ im dreidimensionalen Raum zusammenhängen. Jene Gruppe ist eine topologisch nichttriviale Mannigfaltigkeit. Drehen wir beispielsweise einen linearen Rotor einmal um seine Achse, haben wir einen geschlossenen Pfad beschrieben, da sich die Drehung nicht durch kontinuierliche Verformungen auf den trivialen Fall (keine Drehung) zurückführen lässt (siehe „Drehungen und Topologie“ auf Seite 31).

Die nichttriviale Topologie der Drehungen hat nun zur Folge, dass durch geeignete Experimente jene topologischen Phänomene zutage treten können, die wir zuvor bei den Beispielen aus der Festkörperphysik gesehen haben. Doch ist es notwendig, die beiden topologischen Sektoren in diesem System sichtbar zu machen oder durch geeignete Wechselwirkungen mit dem Molekül effektive Vektorpotentiale zu erzeugen. In unseren Arbeiten haben wir dazu zwei verschiedene Wege gefunden: zum einen in Form von starken Laserpulsen, die gezielt Drehungen der Moleküle auslösen, und zum anderen durch die Immersion des Moleküls in einem Quantenbad, bei dem die Eichfelder durch Vielteilchen-Wechselwirkungen entstehen.

Um die Rotationsfreiheitsgrade von Molekülen zu besetzen und zu steuern, können starke Laserpulse zum Einsatz kommen, die weit weg von elektrovibronischen Resonanzen des Moleküls liegen [7], also Infrarot- oder Terahertz-Laser; die Rotationsniveaus liegen im GHz-Bereich. Die Laserpulse sind so stark, dass es nicht nötig ist, die Moleküle herunterzukühlen oder in einer Vakuumkammer festzuhalten. Viele Experimente arbeiten mit Molekülen bei Raumtemperatur und -druck. Die Pulse können dann eingesetzt werden, um die Moleküle an einer bestimmten Achse auszurichten. Doch unser Ziel geht über die bloße Kontrolle hinaus: Wir wollen die topologischen Eigenschaften der Rotationen erfassen. Allerdings gehen wir davon aus, dass unser Modell in vielen schon jetzt bestehenden Experimenten umgesetzt werden kann.

Diese Laserstrahlen sind so eingestellt, dass sie das Molekül dazu bringen, sich in einer bestimmten Weise auszurichten oder zu drehen. Je nach Stärke der Laserstrahlen variiert dann die Anzahl der quantenmechanischen Rotationszustände des Moleküls, die besetzt werden. Für einen starren linearen Rotor kann man sich den Raum des Drehimpulses $l = 0, 1, \dots$ als ein eindimensionales Gitter vorstellen, dessen Gitterpunkte die Drehimpulszustände darstellen. Sie haben die Energie

$$E_{\text{rot}}(l) = B \cdot l(l+1),$$

wobei B die Rotationskonstante des Moleküls ist, typischerweise im GHz-Bereich. Sie hängt mit einer Rotationsperiode

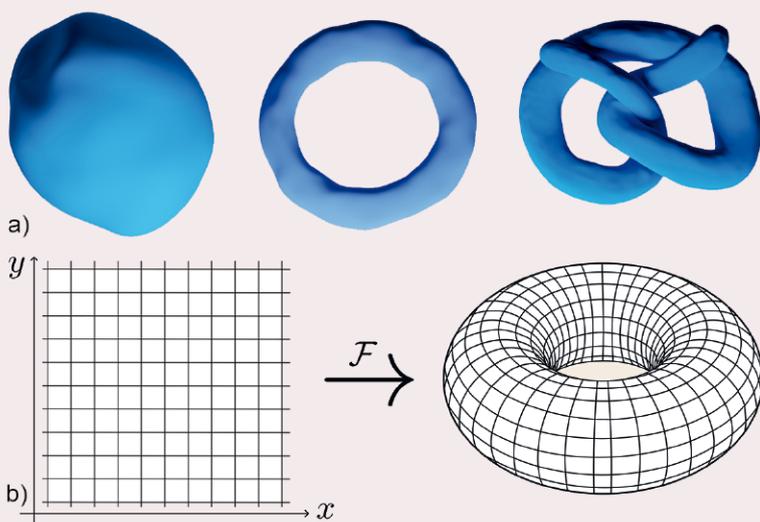
TOPOLOGISCHE EIGENSCHAFTEN

Topologische Merkmale bezeichnen jene Eigenschaften, die unter kontinuierlichen und reversiblen Transformationen konstant, also invariant, bleiben.

Die entscheidenden topologischen Merkmale der in Abbildung a) gezeigten, einfachen Beispiele sind die Anzahl der Löcher oder die Verknötung der Stränge. Diese bestimmen beispielsweise, ob auf einer Oberfläche alle geschlossenen Pfade unter kontinuierlichen Transformationen auf

einen Punkt reduziert werden können – und somit trivial sind – oder nicht.

In der topologischen Physik untersucht man oft die Topologie des Phasenraums der Anregungen. Für ein zweidimensionales quadratisches Kristallgitter bildet der Impulsraum eines Teilchens einen Torus (Abbildung b), der sich topologisch von einer Kugel unterscheidet und daher nichttriviale Windungen der Wellenfunktion innerhalb dieses Raumes ermöglicht.



a) Einfache Beispiele für topologische Merkmale. b) Impulsraum eines Teilchens in einem zweidimensionalen quadratischen Kristallgitter.

τ_B über $\tau_B = \pi\hbar/B$ zusammen und bestimmt, wie leicht drehbar das Molekül ist. Jeder Punkt auf diesem Gitter repräsentiert nun einen bestimmten Drehzustand. Mit unseren Laserpulsen erzeugen wir eine Dynamik auf diesem Gitter: Bei jedem Laserpuls kann das Molekül von einem Punkt auf dem Gitter zu einem anderen übergehen, ähnlich dem, wie Elektronen auf einem Kristallgitter herumspringen.

Wenn wir die Zeitabstände T zwischen den Laserpulsen so einstellen, dass sie mit der Dauer einer Rotation des Moleküls übereinstimmen – einer Dauer, die wir als „Resonanz“ bezeichnen und die im Pikosekunden-Bereich liegt – können wir gezielt Energie vom Laser auf das Molekül übertragen. Dies führt dazu, dass das Molekül sich schneller dreht, ähnlich einer Schaukel, die immer höher schwingt, wenn sie im richtigen Rhythmus gestoßen wird.

Sind die Zeitabstände der Laserpulse jedoch nicht mit der Rotationsperiode des Moleküls τ_B synchronisiert, tritt ein überraschendes Phänomen auf: Nach einigen Pulsen erreicht die Energie des Moleküls ein Plateau und bleibt im Wesentlichen konstant, unabhängig von weiteren Laserpulsen. Dieses Phänomen wird als „dynamische Lokalisierung“ bezeichnet und wurde Ende der 1970er-Jahre entdeckt [8]. Dieses Phänomen hängt mit dem Feld des sogenannten Quantenchaos zusammen und hat weitreichende Folgen für viele Systeme. Veranschaulicht entspricht es einer Schaukel, die nicht im richtigen Rhythmus gestoßen wird. Auch wenn die Schaukel weiter gestoßen wird, kann sie nicht höher schwingen. Der Ausschlag der Schaukel stagniert. In ähnlicher Weise stagniert die Rotationsenergie des Moleküls bei einem bestimmten Wert, wenn die Laserpulse nicht in Resonanz mit der natürlichen Rotationsperiode des Moleküls sind.

Lange Zeit waren nur diese beiden Möglichkeiten bekannt – Resonanz und dynamische Lokalisierung – und sie wurden nicht in Verbindung mit topologischen Eigenschaften der Quantenmechanik gebracht. Unsere Arbeit hat jedoch gezeigt, dass die Situation bei der Resonanz komplexer ist als ursprünglich angenommen. Es gibt weitere Zustände, die wir als topologische Zustände bezeichnen und die sich nicht einfach mit der Analogie der Schaukel erklären lassen.

Diese topologischen Zustände ähneln den Randströmen in topologischen Isolatoren. Sie führen zu einem paradoxen Verhalten: Das Molekül verbleibt in einem bestimmten Drehzustand, obwohl weitere resonante Laserpulse auf das Molekül einwirken. In unserem Fall entspricht das „Besetzen des Randes“ des Gitters dem Verbleiben des Moleküls in einem bestimmten Drehzustand. Nur ein topologischer Phasenübergang – ein Übergang von einer Topologie zu einer anderen – kann diese Randzustände zerstören. Ein solcher Übergang wird durch eine spezielle mathematische Struktur, den schon erwähnten Dirac-Kegel, eingeleitet.

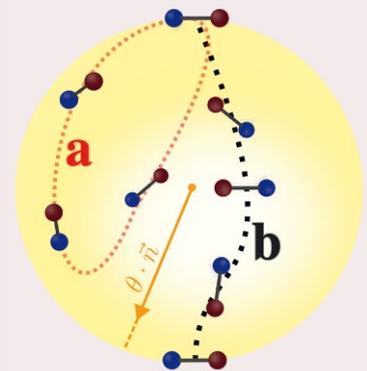
Wir haben nun gezeigt, dass es möglich ist, diese Dirac-Kegel künstlich zu erzeugen, indem wir die Eigenschaften

DREHUNGEN UND TOPOLOGIE

Die Topologie des Raumes von Drehungen im dreidimensionalen Raum lässt sich durch die Achsen-Winkel-Parametrisierung besser verstehen, die wir uns als Kugel vorstellen können, wobei jeder Punkt eine Orientierung des Moleküls repräsentiert.

Der Richtungsvektor der Kugel legt dabei die Richtung fest, in die das Molekül gedreht wird, und der Radius den Winkel der Drehung. Innerhalb dieses Raumes existieren verschiedene Pfade, die die kontinuierliche Drehung des Moleküls darstellen. Wenn wir einen geschlossenen Pfad zum Ausgangspunkt wählen (siehe gestrichelte rote Linie „a“ in der Abbildung), haben wir das Molekül in seine Ausgangslage zurückgedreht. Wichtig ist, dass eine Drehung um 180° um eine bestimmte Achse identisch ist mit einer Drehung von 180° um die entgegengesetzte Richtung, sodass wir vom Nordpol der Kugel zum Südpol wandern können und bei der gleichen Orientierung des Moleküls landen (siehe gestrichelte schwarze Linie „b“ in der Abbildung) und dabei eine 360° -Drehung vollzogen haben.

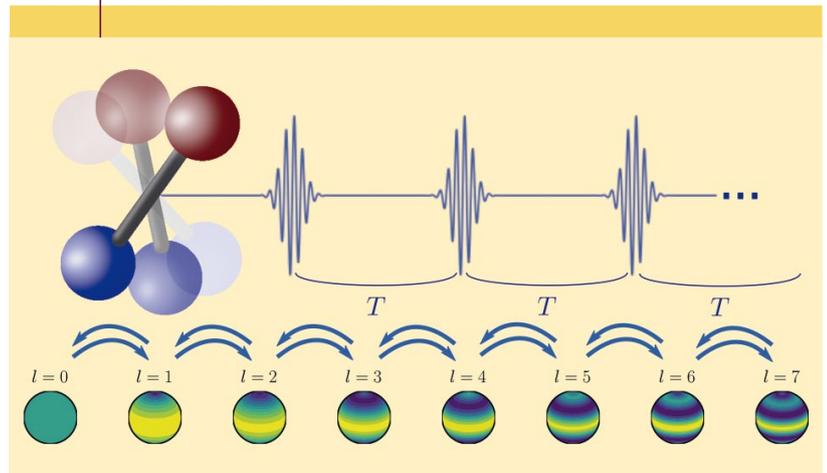
Beide Pfade, der rote und der schwarze, sind geschlossene Pfade,



Topologie der Drehungen in einem dreidimensionalen Raum.

aber topologisch nicht gleichwertig [12]! Der rote Pfad kann zu einem Punkt zusammengezogen werden, der schwarze nicht. Wenn wir das Molekül noch einmal um 360° (also um 720°) drehen, dann hätten wir wieder eine Schleife, die zu einem Punkt zusammenziehbar ist. Daher gibt es zwei topologische Sektoren: den der geraden Anzahl von ganzen Drehungen und den der ungeraden Anzahl von ganzen Drehungen.

ABB. 2 | DREHIMPULSZUSTÄNDE



Ein rotierendes Molekül kann nur diskrete Drehimpulszustände einnehmen, wodurch der Raum der möglichen Zustände einem Gitter ähnelt. Durch periodische Laserpulse, die das Molekül in Rotation versetzen, entsteht ein „Hüpfen“ auf diesem Gitter, da sowohl höhere als auch niedrigere Zustände besetzt werden können. Diese Parallele zu den sogenannten Tight-binding-Modellen in der Festkörperphysik ermöglicht die Anwendung von Methoden aus der topologischen Physik auf dieses System. Außerdem führen die Laserpulse dazu, die Topologie der Drehungen offenzulegen [14].

des Lasers und seine Intensität auf eine bestimmte Weise im Laufe der Zeit verändern (in diesem Artikel unter „Laserparameter α “ zusammengefasst). Auf diese Weise können wir das System von einer trivialen Phase, in der keine topologischen Randzustände existieren, in eine nichttriviale Phase bringen, in der solche Zustände auftreten (Abbildungen 2 und 3). Dies führt zu einer Veränderung der Dreheigenschaften des Moleküls, die wir mit unseren Laserpulsen steuern können.

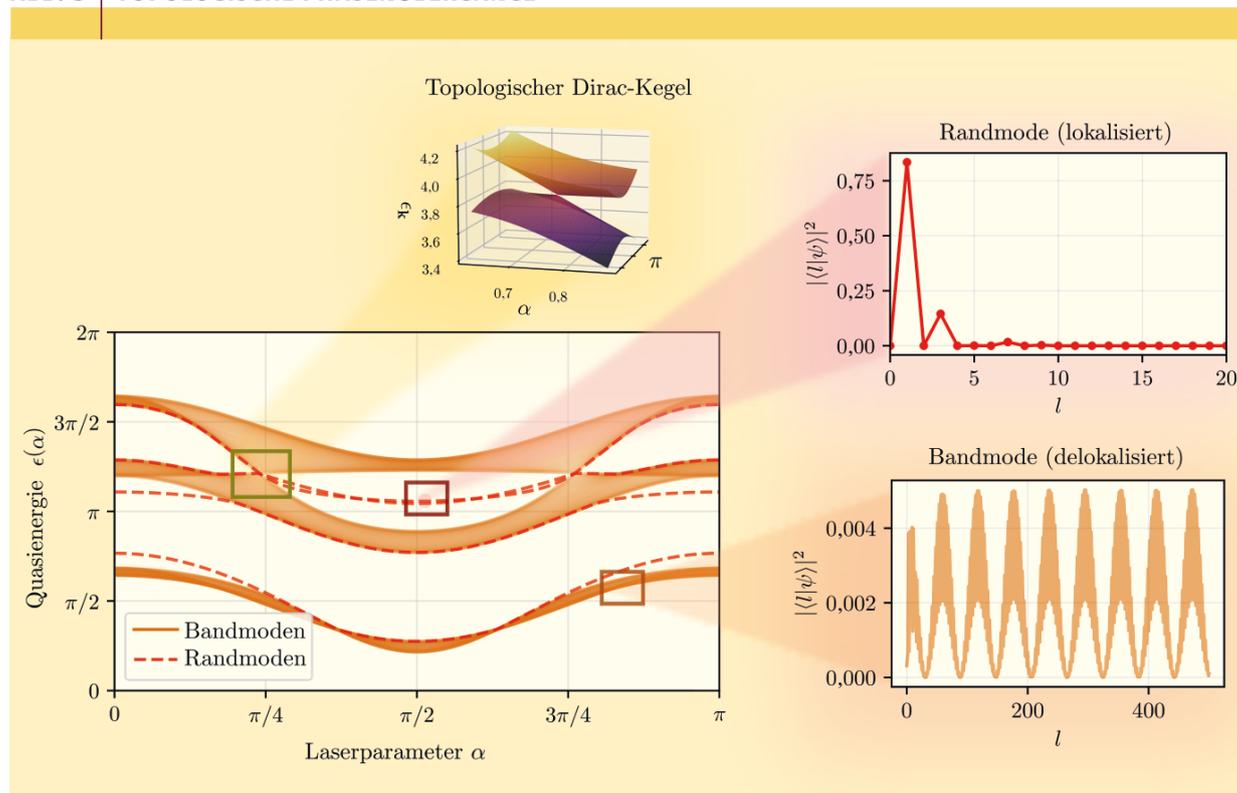
Doch die Einwirkung eines Lasers ist nicht die einzige Möglichkeit, um die nichttriviale Topologie der Drehgruppe sichtbar zu machen. Vielteilchen-Wechselwirkungen stellen eine weitere Möglichkeit dar, effektive Eichfelder zu erzeugen. Dabei tauchen wir die rotierenden Moleküle in ein Quantenbad, beispielsweise ein Bad aus flüssigem Helium oder ultrakalten Atomen. Die Freiheitsgrade des Bades, die Phononen, streuen an den rotierenden Molekülen und führen somit zu einer Renormierung der Rotationskonstante.

Dieses Phänomen lässt sich effektiv durch die Einführung eines neuen Quasiteilchens erklären, des sogenann-

ten *Angulons*, welches im Rahmen von mehreren Experimenten mit Rotationsspektroskopie nachgewiesen wurde [9]. Bei einem Angulon handelt es sich um rotierendes Molekül, welches sich durch Wechselwirkungen mit seiner Umgebung verschränkt hat und daher andere Eigenschaften aufweist als ein Molekül ohne das Quantenbad im Vakuum.

Nun hat sich in einer Reihe von Arbeiten gezeigt, dass die Wechselwirkungen mit dem Quantenbad zu einer ganzen Reihe von topologischen Phänomenen führen, die bei Quasiteilchen mit trivialen Symmetriegruppen, wie beispielsweise dem Polaron, nicht auftreten können. Betrachtet man beispielsweise ein rotierendes Molekül in einem Heliumtröpfchen, so lässt sich der Einfluss des Bades als nichtabelsche Eichfelder, exotische Felder mit komplexen Transformationsregeln, umformulieren [10]. Später konnten wir zeigen, dass mehrere Moleküle auf einem zweidimensionalen Quantenbad sich wie sogenannte Anyonen verhalten, also anyonische Vertauschungsregeln aufweisen [11].

ABB. 3 | TOPOLOGISCHE PHASENÜBERGÄNGE



Durch Änderung eines Laserparameters α kann man künstlich Dirac-Kegel und somit topologische Phasenübergänge herbeiführen. Dabei interessieren wir uns für die Reaktion des Moleküls auf eine Reihe von periodischen Laserpulsen, die dreimal pro Rotationsperiode auf das Molekül einwirken; für diesen Fall kann man herleiten, dass sich drei Bänder ergeben. Eine solche Situation fern des Gleichgewichts – und daher ohne Energieerhaltung, da der Laser ständig Energie in das System bringt – lässt sich mithilfe der sogenannten Floquet-Theorie [15] beschreiben, welche anstelle der Energie die Quasi-Energie $\epsilon(\alpha)$ setzt. Das Spektrum lässt sich dann folgendermaßen interpretieren: Eine über das ganze Gitter delokalisierte Mode impliziert den Resonanzfall, in dem die Energie unauhörlich ansteigen wird. Eine lokalisierte Randmode hingegen führt zu einer Stagnation der Energie. Wir haben nun gezeigt, dass diese Moden aus topologisch geladenen Dirac-Kegeln hervorgehen [14].

Ausblick

Die Entdeckung topologischer Zustände in der Quantenrotation eröffnet faszinierende Perspektiven für zukünftige Forschungen. Die Möglichkeit, diese Zustände durch die Anpassung von Laserpuls-Eigenschaften zu erzeugen und zu steuern, birgt zudem Potenzial für technologische Entwicklungen. Beispielsweise könnte diese Methode in der physikalischen Chemie Anwendung finden, um Moleküle in spezifische Quantenzustände zu versetzen und somit ihre Reaktivität in chemischen Reaktionen zu beeinflussen. Dies könnte bei der Entwicklung effizienter Katalysatoren zum Einsatz kommen, da deren Reaktivität oft stark von den Quantenzuständen ihrer Bestandteile abhängt.

Ein weiteres spannendes Anwendungsfeld ist die Entwicklung neuer Materialien, die teils aus herkömmlichen Atomgittern, teils aber aus Molekülen oder anderen rotierenden Quanten bestehen, deren Rotationszustände durch externe Felder gesteuert werden können. Ein Beispiel sind metallorganische Perowskitverbindungen, die als Hoffnungsträger für neue Solarzellen gelten. In ihrem Kristallgitter befinden sich organische Methylammonium-Moleküle, deren Rotationen die Absorptionseigenschaften verändern [13]. Doch es gibt noch viele weitere spannende Materialien, in denen die effektiven Freiheitsgrade statt Spins eher Rotationen abbilden. Dort rotieren dann nicht die Moleküle, sondern die Elektronenwolken. Auch in diesen Materialien könnte die Topologie der Rotationen eine wichtige Rolle für Transport- oder optische Eigenschaften spielen.

Zusammenfassung

Die Quantenrotation ist ein spannendes Phänomen, das in vielen verschiedenen Systemen auftritt, von Molekülen und Atomen bis hin zu subatomaren Teilchen wie Neutronen und Protonen. Durch den Einsatz von starken Laserpulsen ist es möglich, die mathematisch anspruchsvolle Topologie der Rotation von Molekülen aufzudecken und topologisch geschützte Zustände zu erzeugen, die unerwartetes Verhalten zeigen. Diese Entdeckungen könnten Auswirkungen auf die Molekülphysik und physikalische Chemie haben und die Entwicklung neuer Technologien ermöglichen. Die Verbindung von Quantenrotation und Topologie stellt ein aufregendes, interdisziplinäres Forschungsfeld dar und bietet neue Wege zur Kontrolle und Nutzung von quantenmechanischen Phänomenen.

Stichwörter

Topologie, Quantenrotation, Kontrolle von Molekülen, Laser-Materie-Wechselwirkungen, Angulon.

Literatur

- [1] C.-K. Chiu et al., Rev. Mod. Phys. **2016**, 88(3), 035005.
- [2] X.-G. Wen, Adv. Phys **1995**, 44(5), 405.
- [3] M. V. Berry, Proc. R. Soc. Lond. A. Math. Phys. Sci. **1984**, 392(1802), 45.
- [4] F. D. M. Haldane, Rev. Mod. Phys. **2017**, 89(4), 040502.
- [5] A. H. Castro Neto et al., Rev. Mod. Phys. **2009**, 81(1), 109.
- [6] L. Tarruell et al., Nature **2012**, 483(7389), 302.
- [7] C. P. Koch et al., Rev. Mod. Phys. **2019**, 91(3), 035005.
- [8] G. Casati et al., Stochastic behavior of a quantum pendulum under a periodic perturbation. In: Stochastic behavior in classical and quantum Hamiltonian systems. Springer, Berlin-Heidelberg 1979, Seite 334.
- [9] I. N. Cherepanov, M. Lemeshko, Phys. Rev. Mater. **2017**, 1, 035602.
- [10] E. Yakaboylu et al., Phys. Rev. Lett. **2017**, 119(23), 235301.
- [11] E. Yakaboylu, M. Lemeshko, Phys. Rev. B **2018**, 98, 045402.
- [12] S. Khatua, R. Ganesh, Phys. Rev. B **2022**, 105(18), 184401.
- [13] A. Walsh, J. Phys. Chem. C **2015**, 119, 5755.
- [14] V. Karle et al., Phys. Rev. Lett. **2023**, 130, 103202.
- [15] T. Oka, S. Kitamura, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **2019**, 10, 387.

Die Autoren



Volker Karle studierte in Freiburg im Breisgau, Como (Italien) und Heidelberg und promoviert derzeit in der Lemeshko-Gruppe am Institute of Science and Technology Austria (ISTA) in Klosterneuburg über Theorie topologischer Phasen von lasergetriebenen Molekülen und topologischen Eigenschaften von Quantenrotationen.



Mikhail Lemeshko promovierte 2011 am Fritz-Haber-Institut in Berlin. Nach einer ITAMP Fellowship an der Harvard University begann er als Assistenzprofessor am ISTA und wurde dort 2019 zum Professor berufen. Er forscht zur verschiedenen Facetten der Theorie der Quantenrotation.

Anschrift

Volker Karle, Mikhail Lemeshko, Institute of Science and Technology Austria, Am Campus 1, 3400 Klosterneuburg, Austria.
volker.karle@ist.ac.at, mikhail.lemeshko@ist.ac.at