

# Kondensierte Materie: Elektronen mit starken Korrelationen

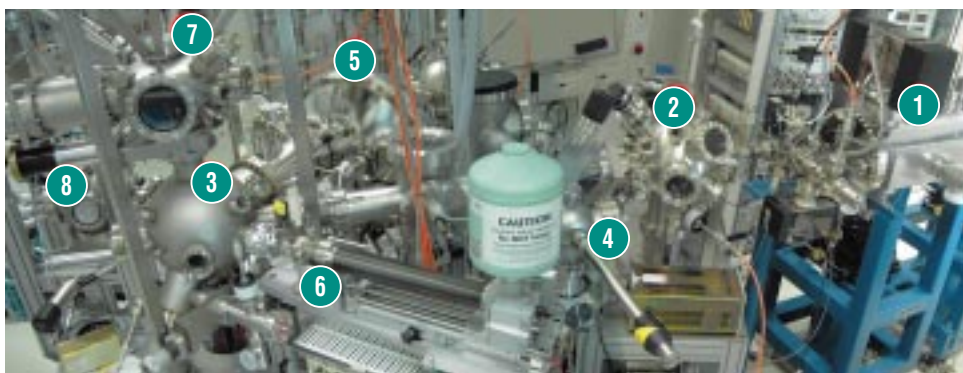
H. v. Löhneysen, IFP und Universität Karlsruhe; K.-P. Bohnen, IFP

Forschung im Bereich kondensierter Materie beschäftigt sich mit den vielfältigen Phänomenen, die durch das Wechselspiel einer großen Zahl von Atomen in Festkörpern oder Flüssigkeiten entstehen. Die Wechselwirkungen und das Zusammenspiel von Elektronen, Atomen und Molekülen in einem Vielteilchensystem entscheiden über die Eigenschaften der Materie: ob sie fest, flüssig oder gasförmig ist, weich oder hart, optisch durchsichtig oder reflektierend, isolierend oder metallisch, magnetisch oder supraleitend. Das HGF-Programm Kondensierte Materie, das von Forschungszentrum Jülich und Forschungszentrum Karlsruhe getragen wird, trägt dieser Vielfalt durch klare Schwerpunktsetzung Rechnung: elektronische und magnetische Phänomene; von Materie zum Material; weiche Materie und Biophysik. Dabei sind die Arbeiten des Forschungszentrums Karlsruhe, die im Institut für Festkörperphysik (IFP) durchgeführt werden, hauptsächlich im Bereich elektronischer und

magnetischer Phänomene angesiedelt.

Die Vielzahl elektronischer und magnetischer Phänomene in kondensierter Materie ist eine direkte Konsequenz elektronischer Wechselwirkungen. Quantenprozesse auf kürzesten Längen- und Zeitskalen haben direkte Auswirkungen auf makroskopisch beobachtbare Phänomene. Stark wechselwirkende Elektronen führen zu neuen Phänomenen wie Spin-, Ladungs- und Orbitalordnung, Metall-Isolator-Übergängen, extrem großen effektiven Massen oder zu neuartiger Supraleitung in der Nähe zu magnetischer Ordnung. Schwer-Fermion-Systeme und Hochtemperatursupraleiter geben neue Rätsel auf – trotz weltweit intensiver Forschung. Die Karlsruher Arbeiten zielen auf ein Verständnis elektronischer und magnetischer Phänomene in Materialien mit starken elektronischen Wechselwirkungen, auch um deren Anwendungspotenzial auszuloten.

Zur Untersuchung solcher neuartiger Materialien werden hochauflösende Spektroskopien mit Neutronen und mit Photonen (Synchrotronstrahlung) eingesetzt. So steht mit dem Weichröntgenanalytisch-Strahlrohr WERA an der Karlsruher Synchrotronstrahlungsquelle ANKA ein Instrument zur Verfügung, an dem elektronische Eigenschaften und etwa ihr Orbitalcharakter mittels Photoemissionsspektroskopie und -mikroskopie sowie Röntgenabsorption bestimmt werden können. Abb. 1 zeigt einen Überblick über die Experimentierstationen von WERA. Neutronenstreuexperimente liefern Informationen über magnetische Ordnungszustände und magnetische Anregungen, über Schwingungszustände der Atome sowie über Kopplungseffekte zwischen elektronischen, magnetischen und strukturellen Freiheitsgraden. Hierzu betreibt das IFP am Neutronenreaktor „Orphée“ am Centre d'Etudes Saclay (Frankreich) des Commissariat à l'énergie atomique (CEA) ein thermisches Dreiachsenspektrometer. Diese Untersuchungen werden ergänzt durch hochempfindliche Messungen der thermodynamischen Eigenschaften und des elektronischen Transports zur Ermittlung energetisch sehr niedrig liegender Anregungen und kollektiver Effekte bei Phasenübergängen. Schichten und Schichtsysteme aus geeigneten Materialien mit korrelierten Elektronen werden auf eine Änderung der elektronischen Eigenschaften durch Variation der Schichtabfolge und chemischen Zusammensetzung und in Blick auf mögliche Anwendungen untersucht. Die Arbeiten werden durch theoretische Analysen begleitet,



**Abb. 1:** Die kombinierten Experimentierstationen am IFP-Strahlrohr WERA bei ANKA ermöglichen empfindliche spektroskopische und mikroskopische Untersuchungen. Der Weichröntgenstrahl trifft von rechts ein und läuft nach links. (1) Refokussierspiegel; (2) Photoemissions-Elektronenmikroskop (PEEM); (3) Kammer für Photoemission und Röntgenabsorption (PES/NEXAFS); (4) Schleuse; (5) Elektronen-Energieanalysator; (6) Fluoreszenzdetektor; (7) Oberflächen-Präparationskammer; (8) Kammer zur Herstellung epitaktischer Schichten mit Laserablation.

wobei der Schwerpunkt auf Dichtefunktional-Berechnungen liegt.

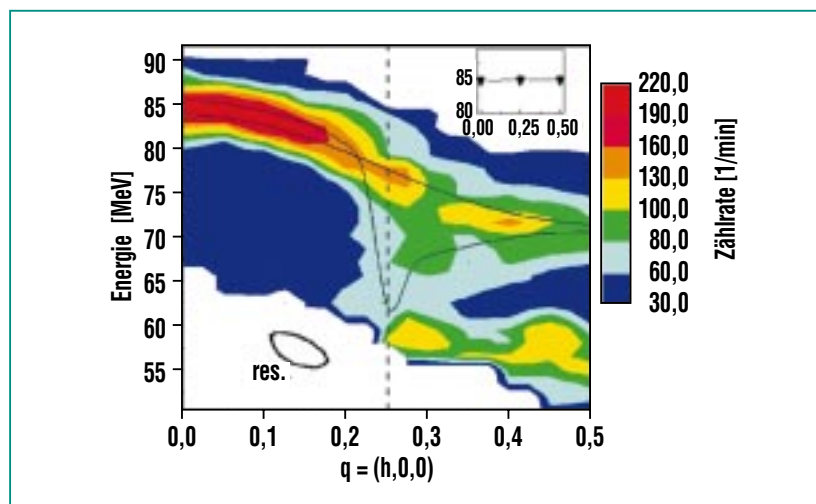
Aus der Vielzahl der am IFP in letzter Zeit untersuchten Systeme seien hier einige wenige Ergebnisse exemplarisch herausgegriffen.

Die oxidischen Hochtemperatursupraleiter sind Paradebeispiele stark korrelierter Elektronensysteme. Detaillierte Messungen der Dispersion der Cu-O-Streckschwingungen in optimal dotiertem  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.95}$  mittels inelastischer Neutronenstreuung zeigen eine sehr starke Temperaturabhängigkeit der Schwingungsfrequenz der Gitterschwingungen (Phononen) in einem engen Wellenvektorbereich [1]. Eine mögliche Erklärung ist das Entstehen einer räumlich variierenden Elektronenkonzentration, d. h. eine sogenannte Ladungsdichtewelle, die durch Elektron-Elektron-Wechselwirkung hervorgerufen wird. Diese Tendenz zur Ladungsdichtewellen-Instabilität wurde durch Untersuchungen an anderen Kupferoxiden (Kupraten) bestätigt, in denen bei tiefen Temperaturen statische Ladungsdichtewellen beobachtet wurden: Es treten hier Phononanomalien auf (Abb. 2), wie sie für eine Kopplung von Ladungsdichtewellen und Gitterschwingungen erwartet werden [2]. Weitere wichtige Konsequenzen für die theoretischen Modelle zur Beschreibung der Hochtemperatursupraleitung hat die Entdeckung einer Lücke im magnetischen Anregungsspektrum wie sie bei  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  bei 33 meV mittels Neutronenstreuung gefunden wurde [3].

Unter den Systemen mit ungewöhnlichen elektronischen Eigenschaften nimmt der kürzlich entdeckte Supraleiter  $\text{MgB}_2$  mit einer

– für Nichtoxide – sehr hohen Übergangstemperatur von 39 K eine besondere Stellung ein [4]. Er hat eine relativ einfache Kristallstruktur und ist daher modernen numerischen Verfahren zur Bestimmung von elektronischer Struktur, Gitterdynamik und Elektron-Phonon-Wechselwirkung sehr gut zugänglich. In enger Zusammenarbeit von Experiment und Theorie konnte gezeigt werden, dass die Supraleitung in zwei elektronischen Bändern unterschiedlicher Symmetrie entsteht, wobei die Elektron-Phonon-Wechselwirkung für die Supraleitung verantwortlich ist. Neutronen- und Röntgenstreuuntersuchungen stimmen sehr gut mit berechneten

Phononenspektren überein [5-8]. Tunnelexperimente an dünnen Filmen haben den schlüssigen Nachweis gebracht, dass der Kopplungsmechanismus tatsächlich vom Elektron-Phonon-Typ ist. Der genaue Vergleich mit parameterfreien Berechnungen der Gitterdynamik und der für die Supraleitung verantwortlichen Kopplungsfunktionen zeigt überraschenderweise, dass der Interband-Paarung eine entscheidende Bedeutung zukommt (Abb. 3) [9]. Anschaulich gesprochen „springen“ die beiden Elektronen eines Cooper-Paars unter dem Einfluss von Gitterschwingungen von einem Band zum anderen und werden so stärker mit-



**Abb. 2:** Farbdarstellung der Intensitäten inelastisch gestreuter Neutronen, beobachtet an der Verbindung  $\text{La}_{1.875}\text{Ba}_{0.125}\text{CuO}_4$  bei einer Temperatur von  $T = 10 \text{ K}$ . Die Intensitäten oberhalb und unterhalb der Energie von 62 meV entsprechen der Anregung der Kupfer-Sauerstoff-Streckschwingungen bzw. Biegeschwingungen. Die durchgezogenen Linien zeigen die aus diesen Daten abgeleitete Dispersion der Streckschwingungen. Die gestrichelte Linie zeigt den Wellenvektor der statischen Ladungsordnung. Hier sieht man eine starke Energieverbreiterung der Neutronenstreuintensität. Für die weißen Bereiche liegen keine Daten vor. Die in der linken unteren Ecke abgebildete Ellipse veranschaulicht die instrumentelle Auflösung. Das in der rechten oberen Ecke eingefügte Diagramm zeigt die Dispersion der Streckschwingungen in einer anderen kristallographischen Richtung.

einander gekoppelt. Diese Wechselwirkung ist sehr selektiv, da sie hauptsächlich an niedrig liegende optische Phononen koppelt, bei denen die Bor-Atome senkrecht zu den Bor-Ebenen schwingen [9].

Neben der Untersuchung stark korrelierter Elektronensysteme ist insbesondere das Studium von Phasenübergängen ein weiterer Schwerpunkt der Arbeiten am IFP. Hier sind vor allem die Systeme ausgezeichnet, bei denen der Phasenübergang durch Variation externer Parameter wie z. B. Magnetfeld, chemische Zusammensetzung oder Druck kontinuierlich zu tiefen Temperaturen (im Extremfall bis zum absoluten Nullpunkt  $T = 0$ ) verschoben werden kann. Bei hinreichend niedrigen Übergangstemperaturen beeinflussen niedrig liegende Anregungen des Systems den Phasenübergang und Quantenphänomene können dann zu völlig neuartigen Erscheinungen führen. Unter anderem sind  $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$  [10] und  $\text{MnSi}$  [11] Systeme, die solch quantenkritisches Verhalten zeigen.  $\text{MnSi}$  ist ein schwacher Ferromagnet ( $T_c = 35$  K), bildet am Phasenübergang aufgrund des Fehlens eines Inversionszentrums in der Kristallstruktur jedoch eine langwellige Spiralstruktur aus, d.h. auf einer Länge von etwa  $180 \text{ \AA}$  dreht sich das magnetische Moment der Mn-Atome um  $360^\circ$ . Die Temperatur des Phasenübergangs lässt sich durch Druck bis herab zu  $T_c = 0$  verschieben (Abb. 4). Dies ist ein Beispiel für Quantenphasenübergänge, also Übergänge, die streng genommen am absoluten Temperaturnullpunkt stattfinden. Sie bestimmen aber das Verhalten und dominieren viele Eigenschaften

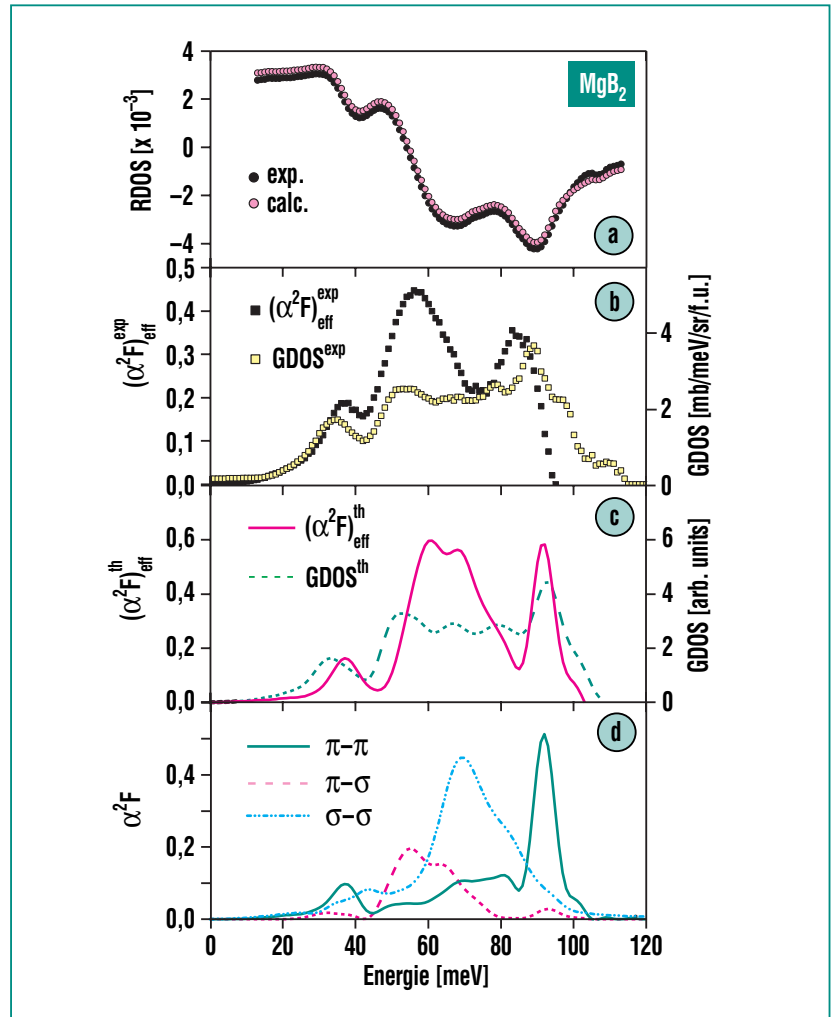


Abb. 3: Analyse der Tunneldaten von  $\text{MgB}_2$ -Schichten.

a) Reduzierte Zustandsdichte (RDOS) aus Strom-Spannungs-Messungen an einer  $\text{MgB}_2$ -Tunneliode (schwarze Punkte) und der Fit als Resultat der sog. McMillan-Rowell-Inversion der Eliashberg-Gleichungen.

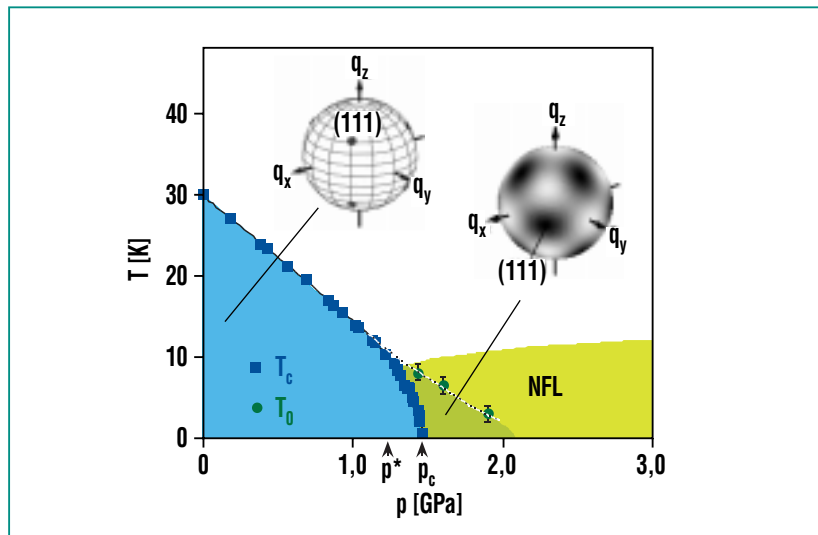
b) Effektive Eliashberg-Funktion  $(\alpha^2 F)_{\text{eff}}^{\text{exp}}$  – dabei ist  $F$  die Phononenzustandsdichte und  $\alpha$  ein Maß für die über die Fermi-Fläche gemittelte Elektron-Phonon-Kopplung – resultierend aus der Inversion und die verallgemeinerte Phononenzustandsdichte von  $\text{MgB}_2$ . Man beachte die starke Abweichung von der experimentell bestimmten Phononenzustandsdichte  $\text{GDOS}^{\text{exp}}$  [12].

c) Effektive Eliashberg-Funktion als Resultat  $(\alpha^2 F)_{\text{eff}}^{\text{th}}$  einer McMillan-Rowell-Inversion einer berechneten Tunnelzustandsdichte der  $\pi$ -Fermifläche und theoretische verallgemeinerte Phononenzustandsdichte  $\text{GDOS}^{\text{th}}$ .

d) Berechnung der einzelnen Eliashberg-Funktionen für virtuelle Übergänge  $\pi$ - $\pi$ ,  $\pi$ - $\sigma$  und  $\sigma$ - $\sigma$ . In die Rechnung wurde die Verbreiterung durch die Phononenlebensdauer mit einbezogen.

stark korrelierter Systeme auch bei endlichen Temperaturen. Dabei werden große Abweichungen vom Standardmodell der Metalle, dem Landau-Modell der Fermi-Flüssigkeiten, beobachtet, deren Ursache in vielen Fällen noch völlig ungeklärt ist. Neutronenstreuungsmessungen, bei denen die MnSi-Probe verschiedenen hydrostatischen Drücken ausgesetzt wurde, haben ein überraschendes Bild ergeben: In der Nähe dieses Quantenphasenübergangs bleibt zwar die Periodizität dieser Spiralstruktur erhalten, sie verliert aber ihre Orientierung (Abb. 4). Dies führt zu einer völlig neuartigen magnetischen Phase [13], deren Topologie an bestimmte Flüssigkristallphasen erinnert.

Im Licht dieser zahlreichen unerwarteten Phänomene lässt sich ohne Übertreibung sagen, dass der Bereich der kondensierten Materie am Anfang einer neuen Epoche steht mit vielen neuen Herausforderungen, die sowohl zu grundlegend neuen Konzepten in der Physik kondensierter Materie führen wie auch dem Ziel dienen, Materialien mit speziellen Eigenschaften gezielt herzustellen.



**Abb. 4: Druckabhängigkeit der ferromagnetischen Übergangstemperatur  $T_c$  von MnSi (Quadrates). Das mit makroskopischer Suszeptibilität gemessene  $T_c$  verschwindet beim kritischen Druck  $p_c$ . Zwischen  $p^*$  und  $p_c$  ist der ferromagnetisch-paramagnetische Übergang 1. Ordnung, bei kleineren Drücken 2. Ordnung. Die langwellige magnetische Spiralordnung ( $l = 180 \text{ \AA}$ ) führt zu Reflexen („Überstrukturefle“ in der elastischen Neutronenstreuung, die auf einer Kugel mit Durchmesser  $4p / l$  um einen reziproken Gittervektor liegen. Für  $p = 0$  liegen die Reflexe scharf in den (111)-Richtungen (linke Kugel). Nahe  $p_c$  sind diese Reflexe über die ganze Kugel verschmiert, was einer Orientierungsunordnung entspricht, bei der der Radius der Kugel aber erhalten bleibt (rechte Kugel). Die Kreise bezeichnen die Temperatur  $T_0$ , unterhalb der diese partielle Ordnung beobachtet wird. In dem mit NFL bezeichneten Bereich beobachtet man im elektrischen Widerstand ausgeprägte Abweichungen vom Fermi-Flüssigkeitsmodell.**

## Literatur

- [1] L. Pintschovius, D. Reznik, W. Reichardt, Y. Endoh, H. Hiraka, J.M. Tranquada, H. Uchiyama, T. Masui, S. Tajima, *Phys. Rev. B* 69, 214506 (2004)
- [2] D. Reznik, L. Pintschovius, M. Ito, S. Iikubo, M. Sato, H. Goka, M. Fuzjita, K. Yamada, G.D. Gu, J.M. Tranquada, *Nature*, in print
- [3] D. Reznik, P. Bourges, L. Pintschovius, Y. Endoh, Y. Sidis, T. Masui, S. Tajima, *Phys. Rev. Lett.* 93, 207003 (2004)
- [4] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, J. Akimitsu, *Nature* 410, 63 (2001)
- [5] K.-P. Bohnen, R. Heid, B. Renker, *Phys. Rev. Lett.* 86, 5771 (2001)
- [6] Y. Kong, O.V. Dolgov, O. Jepsen, O.K. Andersen, *Phys. Rev. B* 64, 020501 (2001)
- [7] H.-J. Choi, D. Roundy, H. Sun, M.L. Cohen, S.G. Louie, *Nature* 418, 758 (2002)
- [8] A.Q.R. Baron, H. Uchiyama, Y. Tanaka, T. Ishikawa, R. Heid, K.-P. Bohnen, S. Tajima, T. Ishikawa, *Phys. Rev. Lett.* 92, 197004 (2004)
- [9] J. Geerk, R. Schneider, G. Linker, A.G. Zaitsev, R. Heid, K.-P. Bohnen, H. v. Löhneysen, *Phys. Rev. Lett.* 94, 227005 (2005)
- [10] H. v. Löhneysen, *J. Phys.: Cond. Matt.* 8, 9689 (1996)
- [11] C. Pfleiderer, S.R. Julian, G.G. Lonzarich, *Nature* 414, 427 (2001)
- [12] Osborn et al., *Phys. Rev. Lett.* 87, 017005 (2001)
- [13] C. Pfleiderer, D. Reznik, L. Pintschovius, H. v. Löhneysen, M. Gast, R. Rosch, *Nature* 427, 227 (2004)