

Quantenphasenübergänge – „Schmelzen“ am Temperaturnullpunkt

Von Quantenfluktuationen getriebene Phasenübergänge liefern den Schlüssel zu bisher unverstandenen Phänomenen der Festkörperphysik

Matthias Vojta

Konventionelle Phasenübergänge wie das Schmelzen von Eis werden durch Variation der Temperatur und damit durch thermische Fluktuationen getrieben. Makroskopische Ordnung kann aber auch am absoluten Temperaturnullpunkt zerstört werden – dafür verantwortlich sind Quantenfluktuationen, die sich aus der Heisenbergschen Unschärferelation ergeben.

Die Natur ist voller Phasenübergänge – alltägliche Beispiele sind das Kochen von Wasser und das Schmelzen von Eis, ein komplizierterer Übergang ist z. B. der eines Metalls in den supraleitenden Zustand. Phasenübergänge treten in Systemen bei Variation eines äußeren Parameters auf, allen Phasenübergängen gemeinsam ist eine qualitative Änderung der Systemeigenschaften am Übergangspunkt.

Phasenübergänge werden üblicherweise in Übergänge 1. Ordnung und kontinuierliche Übergänge unterteilt. Bei Übergängen 1. Ordnung koexistieren beide Phasen am Übergangspunkt, beispielsweise Eis und Wasser bei 0 °C. Bei kontinuierlichen Phasenübergängen dagegen tritt keine Phasenkoexistenz auf. Ein typisches Beispiel ist der ferromagnetische Übergang von Eisen: Hier nimmt die Magnetisierung des Eisens mit zunehmender Temperatur kontinuierlich ab und verschwindet bei der Curie-Temperatur von 770 °C, wo die ferromagnetische Phase in die paramagnetische übergeht. Der Übergangspunkt eines kontinuierlichen Phasenübergangs wird auch kritischer Punkt genannt.

Die bisher genannten Beispiele für Phasenübergänge verlaufen bei endlicher Temperatur. Diese so genannten thermischen oder klassischen Phasenübergänge werden durch thermische Fluktuationen getrieben, d. h. am Übergangspunkt werden diese Fluktuationen so stark, dass die makroskopische Ordnung des Systems (beim Schmelzen z. B. die Kristallstruktur) zerstört wird.

In den letzten Jahren ist eine neue Klasse von Phasenübergängen in das Zentrum der Forschung gerückt, die im Gegensatz zu klassischen Phasenübergängen am absoluten Temperaturnullpunkt verlaufen. Dabei wird ein Kontrollparameter wie Druck, Magnetfeld oder chemische Zusammensetzung variiert, um makroskopische Ordnung zu zerstören. Da es am Temperaturnullpunkt keine thermische Fluktuationen gibt, werden diese Quantenphasenübergänge ausschließlich durch Quantenfluktuationen getrieben, die eine Folge der Heisenbergschen Unschärferelation sind.

Man könnte meinen, dass die Untersuchung von Quantenphasenübergängen ein rein akademisches Problem ist, da sie nur bei speziellen Parameterwerten und ausschließlich am experimentell nicht erreichbaren Temperaturnullpunkt auftreten. Es hat sich aber im Gegenteil herausgestellt, dass Quantenphasenübergänge den Schlüssel zu vielen bisher unverstandenen Phänomenen in der modernen Festkörperphysik liefern. Die physikalischen Eigenschaften der Quantenfluktuationen sind völlig verschieden von denen thermischer Fluktuationen, und die Beschreibung ihrer Dynamik erfordert neue Theorien, die kein Analogon im Rahmen klassischer Phasenübergänge haben.

Beispiel: das Quanten-Ising-System

Ein einfaches Paradebeispiel eines Quantenphasenübergangs findet sich in dem ionischen Kristall Lithium-Holmium-Fluorid (LiHoF_4). Dieses Material ist ein Isolator, und bei Temperaturen unterhalb von 2 K werden die magnetischen Eigenschaften ausschließlich durch die Spins der Holmium-Atome bestimmt. Aufgrund der Kristallstruktur existiert eine ausgezeichnete Achse für die Spin-Ausrichtung, und jeder Spin besitzt nur zwei erlaubte Richtungen: „auf“ und „ab“ bezüglich dieser Kristallachse (im folgenden z -Achse genannt). Die Spins benachbarter Atome sind durch eine Dipol-Wechselwirkung gekoppelt, die die Parallelstellung der Spins favorisiert. Theoretisch lässt sich ein solches System durch ein Ising-Modell beschreiben. Der Zustand tiefster Energie wird erreicht, wenn alle Spins parallel ausgerichtet sind, d. h. LiHoF_4 ist bei $T=0$ ein voll polarisierter Ferromagnet.

Legt man nun ein externes Magnetfeld an, so ergibt sich ein interessantes Phasendiagramm (Abb. 1), das erstmals von Bitko und Mitarbeitern 1996 untersucht wurde. Im feldfreien Fall ist das System bei tiefen Temperaturen ferromagnetisch – wir nehmen an, dass alle Spins im „auf“-Zustand sind, damit gilt für den Mittelwert der z -Komponente der Spins $\langle S_z \rangle > 0$. Mit steigender Temperatur werden zunehmend Spins umklappen,

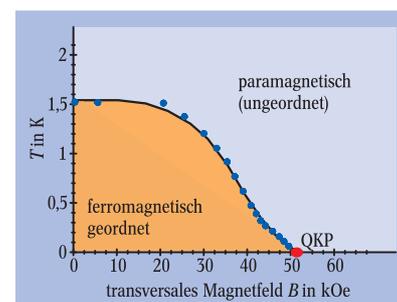


Abb. 1: Die magnetischen Eigenschaften von LiHoF_4 hängen von Temperatur T und Magnetfeld B ab. Bei endlichem T gibt es einen gewöhnlichen Phasenübergang von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase aufgrund von thermischen Spinfluktuationen (blaue Punkte; aus [4]). Die magnetische Ordnung lässt sich aber auch durch rein quantenmechanische Fluktuationen bei $T=0$ und $B \approx 50$ kOe zerstören – ein Paradebeispiel für einen Quantenphasenübergang (roter Punkt).

Dr. Matthias Vojta,
Lehrstuhl für Theoretische Physik III,
Universität Augsburg,
86135 Augsburg

d. h. durch thermische Fluktuationen werden einige Spins „ab“ statt „auf“ zeigen. Bei einer kritischen Temperatur $T_c \approx 1,5$ K wird durch diese Fluktuationen der Ferromagnetismus zerstört, d. h. die Anteile der „auf“- und „ab“-Spins werden gleich sein, $\langle S_z \rangle = 0$. Dies ist ein konventioneller kontinuierlicher Phasenübergang.

Die neue Eigenschaft von LiHoF_4 ist nun, dass die magnetische Ordnung auch auf andere Weise, insbesondere auch bei beliebig tiefen Temperaturen, zerstört werden kann. Ein Magnetfeld, angelegt senkrecht zur z -Achse, induziert quantenmechanisches Tunneln zwischen den „auf“- und „ab“-Zuständen. Wenn das Magnetfeld einen kritischen Wert $B_c \approx 50$ kOe überschreitet, sind diese Spinfluktuationen so stark, dass die ferromagnetische Ordnung selbst bei $T=0$ zerstört wird. Dies ist ein Quantenphasenübergang, der also ausschließlich durch Quantenfluktuationen, die hier durch das Magnetfeld induziert werden, getrieben wird.

Betrachtet man die paramagnetische Phase von LiHoF_4 (Abb. 1), so ist die Spindynamik bei hoher Temperatur und kleinem Magnetfeld von klassischen Fluktuationen geprägt („thermischer Paramagnet“), während bei tiefer Temperatur und großem Feld Quantenfluktuationen dominieren („Quanten-Paramagnet“). Die Eigenschaften eines solchen Quanten-

Paramagneten sind sehr verschieden von denen eines thermischen Paramagneten. Im klassischen Fall kann man sich die Spins als zeitlich zwischen „auf“ und „ab“ fluktuierend vorstellen. Eine solche Vorstellung ist jedoch im Quanten-Paramagneten nicht zutreffend (und irreführend) – vielmehr gibt es am Temperaturnullpunkt eine eindeutige quantenmechanische Wellenfunktion, die eine Superposition von „auf“- und „ab“-Spins beschreibt. Die quantenmechanischen Fluktuationen erkennt man daran, dass der Erwartungswert $\langle (S_z - \langle S_z \rangle)^2 \rangle$, der die Abweichung der z -Komponente der Spins vom Mittelwert misst, von Null verschieden ist. Mathematisch ist dies eine Folge der Nichtvertauschbarkeit der verschiedenen Komponenten des Spin-Operators und damit der Heisenbergschen Unschärferelation.

Phasenübergänge und kritisches Verhalten

Um das obige Beispiel genauer verstehen zu können, wollen wir zunächst einige grundlegende Fakten über Phasenübergänge zusammenfassen [5]. In der Nähe eines Phasenübergangs lässt sich ein System durch einen Ordnungsparameter charakterisieren – dies ist eine Größe, deren thermodynamischer Mittelwert in einer der beiden Phasen verschwindet und in der anderen von Null verschieden ist. Für viele Phasenübergänge ist die Wahl des Ordnungsparameters offensichtlich – so bietet sich im Falle eines Ferromagneten die Magnetisierung an –, es gibt aber Ausnahmen, bei denen ein geeigneter Ordnungsparameter bis heute strittig ist (z. B. beim Metall-Isolator-Übergang durch elektronische Korrelationen, dem Mott-Übergang).

Im Folgenden betrachten wir Systeme in der Nähe kontinuierlicher Phasenübergänge. In der ungeordneten Phase verschwindet der thermodynamische Mittelwert des Ordnungsparameters, aber seine Fluktuationen, also Abweichungen vom Mittelwert an einem bestimmten Ort und Zeitpunkt, sind von Null verschieden. Nähert man sich dem kritischen Punkt von der ungeordneten Seite, dann wird die typische Längenskala der Fluktuationen, die Korrelationslänge ξ , immer größer. Für einen Ferromagneten bedeutet dies, dass immer größere „Inseln“ mit parallel ausgerichteten Spins entstehen. Am kritischen Punkt divergiert die Korrelationslänge wie

$$\xi \propto t^{-\nu} \quad (1)$$

Dabei ist ν der so genannte kritische Exponent der Korrelationslänge und t ist ein dimensionsloses Maß für den Abstand vom kritischen Punkt. Für einen Phasenübergang bei endlicher Temperatur T_c kann man z. B. $t = |T - T_c| / T_c$ definieren. Eine analoge Divergenz der Korrelationslänge tritt auch auf, wenn man sich dem kritischen Punkt von der geordneten Seite nähert; der wesentliche Unterschied ist, dass hier Fluktuationen um den *endlichen* Mittelwert des Ordnungsparameters beschrieben werden.

Neben den langreichweitigen räumlichen Ordnungsparameter-Korrelationen gibt es analoge langreichweitige Ordnungsparameter-Korrelationen in der Zeit. Die typische Zeitskala für den Zerfall einer Fluktuation ist die Korrelationszeit τ_c . Bei Annäherung an den kritischen Punkt divergiert sie wie

$$\tau_c \propto \xi^z \propto t^{-\nu z} \quad (2)$$

Dabei ist z der dynamische kritische Exponent.

Klassische und quantenmechanische Fluktuationen

Wie kann man sich thermische und quantenmechanische Fluktuationen vorstellen? Dazu betrachten wir ein Teilchen in einem Doppelmuldenpotential.

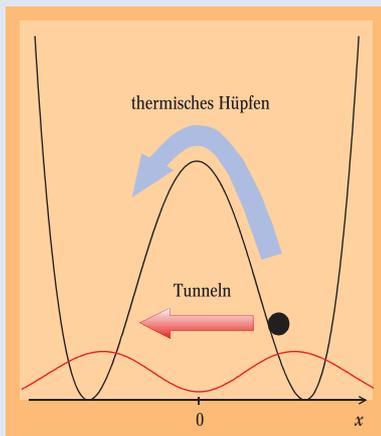
Ein klassisches Teilchen befindet sich am Temperaturnullpunkt am Boden einer der beiden Mulden. Führt man dem Teilchen durch Kopplung an ein Wärmebad Energie zu, wird es zunächst in seiner Mulde schwingen.

Wird die Temperatur und damit die thermische Energie des Teilchens genügend groß, nämlich von der Größenordnung des Potentialberges, so kann es über den Berg in die andere Mulde gelangen. Dies ist eine thermische Fluktuation. Bei genügend hoher Temperatur wird das Teilchen stochastisch zwischen den Mulden hin und her springen und dabei im Zeitmittel genauso häufig rechts wie links sein. Der thermische Mittelwert der x -Koordinate ist deshalb $\langle x \rangle_{\text{th}} = 0$.

Für ein quantenmechanisches Teilchen gibt es neben thermischen Fluktuationen noch einen anderen Mechanismus, um von einer Mulde in die andere gelangen, der auch bei tiefen Temperaturen wirksam ist: Das Teilchen kann unter der Barriere hindurch tunneln, wobei die Wahrscheinlichkeit dafür mit zunehmender Höhe und Breite der Barriere abnimmt. Dies ist eine Quantenfluktuation, hervorgeru-

fen durch die Energie-Zeit-Unschärfe. Bei $T=0$ bildet sich dabei eine kohärente Wellenfunktion (im Bild durch die rote Linie angedeutet). Das Teilchen hüpfet also nicht in Realzeit zwischen den Mulden hin und her, sondern sein Zustand ist eine quantenmechanische Superposition aus den Zuständen in der rechten und der linken Mulde. Folglich verschwindet der quantenmechanische Erwartungswert der x -Koordinate, $\langle x \rangle_{\text{qm}} = 0$. Die Fluktuationen sind in beiden Fällen an $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle > 0$ zu erkennen.

Das Quanten-Ising-System aus unserem Beispiel LiHoF_4 kann man sich nun als periodische Anordnung solcher Doppelmulden mit jeweils einem Teilchen vorstellen. Die Spin-Wechselwirkung favorisiert eine Anordnung der Teilchen, in der sich benachbarte Teilchen in derselben Mulde (beide links oder beide rechts) befinden. Der geordnete Zustand – alle Teilchen gemeinsam links oder rechts – kann zerstört werden, indem man die Fluktuationen, d. h. die Tendenz jedes Teilchens, die Mulde zu wechseln, verstärkt. Dies passiert durch Erhöhen der Temperatur oder/und durch Erhöhen der Tunnelwahrscheinlichkeit (Magnetfeld im Fall von LiHoF_4) – das resultierende Phasendiagramm entspricht genau Abbildung 1.



Die beschriebenen Divergenzen sind verantwortlich für die so genannten kritischen Phänomene: Am kritischen Punkt sind Korrelationslänge und -zeit unendlich, es gibt also Fluktuationen auf allen Längen- und Zeitskalen – das System ist skaleninvariant. Eine Konsequenz ist, dass alle physikalischen Messgrößen über Potenzgesetze von den externen Parametern abhängen. Die zugehörigen Exponenten sind wesentliche Charakteristika eines kontinuierlichen Phasenübergangs.

Eine bemerkenswerte weitere Folge der divergierenden Korrelationslänge ist die so genannte Universalität: Das kritische Verhalten ist unabhängig von mikroskopischen Details, da das System effektiv über große Volumina mittelt. So sind die kritischen Exponenten für ganze Klassen von Phasenübergängen in sehr verschiedenen Systemen exakt identisch – diese Universalitätsklassen werden nur durch die Dimensionalität des Systems und die Symmetrie des Ordnungsparameters bestimmt.

Quantenmechanik und die Umgebung des kritischen Punktes

Wie oben erwähnt, ist der wesentliche Unterschied zwischen klassischen Phasenübergängen und Quantenphasenübergängen die Abwesenheit von thermischen Fluktuationen bei $T=0$.

Es stellt sich unmittelbar die Frage, wie wichtig Quantenmechanik überhaupt für Phasenübergänge ist. Diese Frage hat zwei Aspekte. Einerseits kann Quantenmechanik wichtig sein, um die Physik der beteiligten Phasen zu verstehen – dies ist von Fall zu Fall verschieden. Beispielsweise ist die Quantenmechanik unverzichtbar für die Phänomene der Supraleitung und Suprafluidität.

Der zweite Aspekt, der im Folgenden näher erläutert werden soll, ist die Frage, inwiefern Quantenmechanik das kritische Verhalten eines Systems beeinflusst. Dazu ist es wichtig, für einen allgemeinen Phasenübergang zwischen klassischen (thermischen) und quantenmechanischen Fluktuationen zu unterscheiden. Die typischen Energieskalen sind $k_B T$ für thermische und $\hbar\omega_c = \hbar/\tau_c$ für quantenmechanische Fluktuationen; im obigen Beispiel von LiHoF_4 misst $\hbar\omega_c$ die zum Umklappen eines einzelnen Spins benötigte Energie. Wie bereits erläutert, divergiert die typische Zeitskala für Fluktuationen, τ_c , bei Annäherung an den kritischen Punkt. Deshalb verschwindet die typische Frequenzkala der Quantenfluktuationen, und damit

$$\hbar\omega_c \sim |t|^{p_z}. \tag{3}$$

Damit gilt $\hbar\omega_c < k_B T$ in der Nähe aller Phasenübergänge, die bei einer endlichen Temperatur T_c stattfinden, und die quantenmechanischen Fluktuationen können gegenüber den thermischen vernachlässigt werden. Folglich ist das kritische Verhalten asymptotisch nahe an solchen Übergängen immer von klassischen Fluktuationen dominiert; deshalb nennt man alle Phasenübergänge bei endlichen Temperaturen auch klassische Phasenübergänge.

Falls der Phasenübergang jedoch exakt bei $T=0$ stattfindet, ist das gesamte Verhalten von Quantenfluktuationen dominiert, und konsequenterweise heißen Phasenübergänge am Temperaturnullpunkt auch Quantenphasenübergänge. Die Konkurrenz zwischen thermischen und Quantenfluktuationen führt zu einer sehr reichen Struktur des Phasendiagramms, die in den Abbildungen 2 und 3 illustriert ist. Dabei steht r an der

horizontalen Achse für den Parameter, welcher den Quantenphasenübergang steuert (z. B. Magnetfeld, Druck, chemische Zusammensetzung). Man muss prinzipiell zwei Fälle unterscheiden, je nachdem, ob die geordnete Phase auch bei endlichen Temperaturen existiert oder nicht.

In Abbildung 2 ist der Fall diskutiert, wo nur am Temperaturnullpunkt makroskopische Ordnung auftreten kann – dies ist beispielsweise in zweidimensionalen Magneten mit Rotationsinvarianz im Spin-Raum ($\text{SU}(2)$ -Symmetrie) der Fall. Es gibt nur einen Phasenübergangspunkt bei $T=0$ und $r=r_c$; in einem fiktiven Experiment bei $T=0$ würde man bei Variation von r den Übergang von der geordneten in die ungeordnete Phase beobachten. In jedem realen Experiment, also bei endlicher Temperatur [Pfad (a)], ist das System immer ungeordnet, d. h. der Ordnungsparameter verschwindet für alle $T>0$ und die Korrelationslänge ξ ist endlich. Die ungeordnete Phase zerfällt jedoch in drei Regionen mit sehr verschiedenen Eigenschaften, die im Wesentlichen von dem zugehörigen Grundzustand und seinen Fluktuationen bestimmt werden. Diese drei Regionen sind nicht durch scharfe Phasenübergänge, sondern durch allmähliche *Crossover* bei $k_B T \sim \hbar\omega_c \sim |r-r_c|^{p_z}$ getrennt (in der Abbildung durch die gestrichelten Linien gekennzeichnet). Von besonderem Interesse ist die so genannte quantenkritische Region – diese liegt bei endlichen Temperaturen über dem quantenkritischen Punkt (!). Entscheidend ist, dass hier wegen $k_B T > |r-r_c|^{p_z}$ die thermischen Fluktuationen wesentlich wichtiger für das Systemverhalten sind als die Abweichung $|r-r_c|$ vom kritischen Punkt. In der quantenkritischen Region werden die Eigenschaften des Systems also durch thermische Anregungen des quantenkritischen Grundzustandes bestimmt. In einem Experiment entlang Pfad (b) beobachtet man die Divergenz der Ordnungsparameter-Fluktuationen mit sinkender Tem-

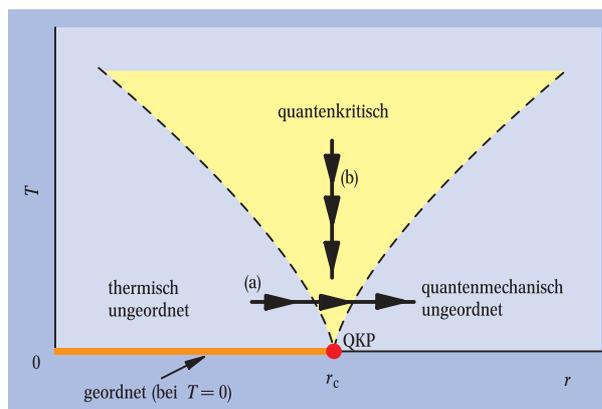


Abb. 2: Schematisches Phasendiagramm in der Umgebung eines quantenkritischen Punktes (QKP), falls makroskopische Ordnung nur bei $T=0$ existiert.

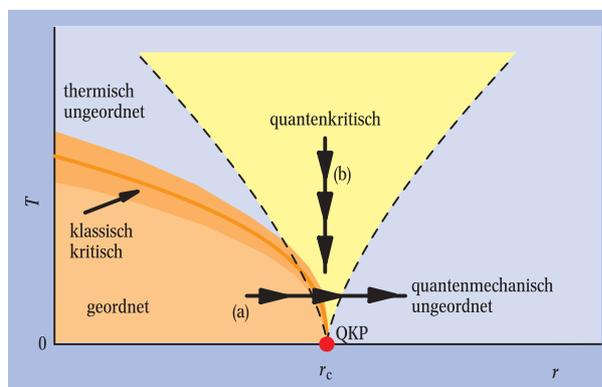


Abb. 3: Schematisches Phasendiagramm in der Umgebung eines quantenkritischen Punktes (QKP), falls makroskopische Ordnung auch bei endlichen Temperaturen existiert.

peratur und erhält folglich Aussagen über das Temperatur-Skalenverhalten am quantenkritischen Punkt.

Falls das System auch bei endlichen Temperaturen makroskopische Ordnung aufweisen kann – dies ist in unserem Beispiel LiHoF_4 der Fall – wird das Phasendiagramm noch reicher (Abb. 3). Zusätzlich zum quantenkritischen Punkt gibt es eine Linie von klassischen Phasenübergängen bei $T > 0$ (dicke orange Linie in Abb. 3). Wie oben erläutert, ist die unmittelbare Umgebung dieser Linie immer von (klassischen) thermischen Fluktuationen dominiert, jedoch ist bei tiefen Temperaturen dieser Bereich sehr schmal. Die quantenkritische Region befindet sich wie oben bei endlichen Temperaturen über dem quantenkritischen Punkt. Ein Experiment entlang Pfad (a) zeigt hier, im Gegensatz zum oben diskutierten Fall, einen echten Phasenübergang. Dabei beobachtet man (bei hinreichend tiefer Temperatur) ein *Crossover* von quantenkritischem Verhalten etwas entfernt von der Phasengrenze zu klassischem kritischem Verhalten direkt an der Phasengrenze. Durch Absenken der Temperatur kann der klassische Bereich beliebig schmal gemacht werden. Ein Experiment entlang Pfad (b) zeigt wie im obigen Fall das Temperatur-Skalenverhalten des quantenkritischen Punktes.

An dieser Stelle sei noch einmal betont, dass ein Quantenphasenübergang, obwohl er formal ausschließlich bei $T=0$ auftritt, die physikalischen Eigenschaften eines Systems über einen weiten Temperaturbereich bestimmen kann (quantenkritische Region mit $k_B T > \hbar \omega_c$). So lässt sich quantenkritisches Verhalten (z. B. in Spinsystemen) durchaus bei Zimmertemperatur beobachten.

In den folgenden Abschnitten sollen einige Aspekte und Beispiele für Quantenphasenübergänge besprochen werden, die die Forschung auf dem Gebiet der Festkörperphysik in den letzten Jahren mitbestimmt haben.

1) Es ist wahrscheinlich, dass das Verständnis dieses Phasenübergangs wichtig für das Verständnis des Mechanismus der Hochtemperatur-Supraleitung insgesamt ist, darauf soll hier jedoch nicht weiter eingegangen werden.

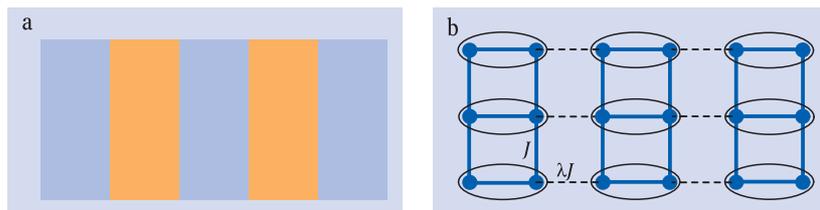


Abb. 4:

► (a) Anordnung von Löchern in lochreiche (orange) und locharme (blau) Gebiete in den Kupferoxid-Ebenen der Hochtemperatur-Supraleiter. Die Breite der Streifen verändert sich mit der Lochkonzentration.

► (b) „Spielzeugmodell“ für das magnetische Verhalten der Spins in Hochtemperatur-Supraleitern. Die Spins in den locharmen Gebieten bilden Leitern mit einer Austauschwechselwirkung J , während die dazwischenliegenden lochreichen Gebiete eine Kopplung der Stärke λJ zwischen den Leitern vermitteln. Für kleine Werte von λ bilden benachbarte Spins auf den Leitern so genannte Valenzbindungen (angedeutet durch die Ellipsen), d. h. sie befinden sich in einen quantenmechanischen Singulett-Zustand mit Gesamt-Spin 0.

Hochtemperatur-Supraleiter

Konventionelle Supraleiter sind Metalle, die bei hinreichend tiefen Temperaturen (typischerweise 20 K oder darunter) keinen elektrischen Widerstand aufweisen. Im Jahre 1986 wurde von Bednorz und Müller eine völlig neue Klasse von Supraleitern entdeckt: keramische Verbindungen aus der Klasse der Perovskite, die aus zweidimensionalen Kupferoxid-Schichten bestehen, welche durch Ionen wie Lanthan, Strontium oder Yttrium getrennt werden. In den vergangenen

Jahren sind supraleitende Kupferoxid-Verbindungen mit Sprungtemperaturen von bis zu 130 K entdeckt worden; diese Hochtemperatur-Supraleiter bilden ein zentrales Forschungsgebiet in der Festkörperphysik [6].

Neben vielen anderen interessanten Eigenschaften wurden Hinweise auf einen Quantenphasenübergang gefunden, an dem magnetische Ordnung verschwindet.¹⁾ Die magnetische Ordnung lässt sich am einfachsten in den undotierten „Muttersubstanzen“ verstehen. Betrachten wir z. B. La_2CuO_4 – dies ist ein Isolator, in dem die Kupfer-Ionen jeweils einen ungepaarten Spin $1/2$ tragen. Die Fluktuationen dieser Spins sind die dominierenden Niederenergie-Anregungen in La_2CuO_4 . Die Spins in einer Kupferoxid-Ebene bilden ein zweidimensionales Quadratgitter und sind über eine Austauschwechselwirkung gekoppelt. Bei tiefen Temperaturen ordnen die Cu-Spins antiferromagnetisch, d. h. benachbarte Spins zeigen jeweils in entgegengesetzte Richtung. Würde es sich bei den Spins um klassische Objekte handeln, wäre der Grundzustand eines solchen zweidimensionalen Antiferromagneten einfach: Alle Spins würden sich nach einem idealen Schachbrett-Muster abwechselnd „auf“ und „ab“ ausrichten. In einem quantenmechanischen Antiferromagneten ist der Grundzustand ähnlich, aber komplizierter: Durch Quantenfluktuationen können Paare von Spins von der idealen antiferromagnetischen Ordnung abweichen, dadurch wird das mittlere magnetische Moment pro Gitterplatz reduziert.

Die supraleitende Phase wird nun durch Dotierung der „Muttersubstanz“ erreicht, dabei wird Lanthan durch Strontium ersetzt. Der wesentliche Effekt einer solchen Dotierung ist eine Änderung der Ladungsträgerkonzentration in den Kupferoxid-Ebenen: Strontium besitzt ein Elektron weniger als Lanthan, damit enthält $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ genau x zusätzliche „Löcher“, d. h. x ungepaarte Spins weniger, pro Kupfer-Ion. Die Physik solcher dotierter Quanten-Antiferromagneten ist extrem reichhaltig. Es stellt sich heraus, dass die antiferromagnetische Ordnung mit zunehmender Dotierung unterdrückt wird; bei einer kritischen Lochkonzentration verschwindet sie völlig. Damit bildet das magnetische Verhalten von $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ eine Realisierung des in Abbildung 3 gezeigten Phasendiagramms, wobei der Parameter ν mit der Lochkonzentration x identifiziert werden kann.

Spins und Streifen

Eine höchst interessanter Aspekt der Lochdotierung in Hochtemperatur-Supraleitern ist, dass sich die Löcher vornehmlich in eindimensionalen Strukturen, so genannten Streifen, anordnen. Das System zerfällt also in Regionen mit hoher und geringer Lochkonzentration, dabei wird der Magnetismus im Wesentlichen von den Regionen mit wenigen Löchern (also vielen Spins) getragen.

Im Folgenden wollen wir ein einfaches „Spielzeugmodell“ für das magnetische Verhalten eines solchen Streifensystems diskutieren (Abb. 4). Das Modell besteht aus Spinleitern, die die Gebiete kleiner Lochkonzentration modellieren. In jeder Leiter sind benachbarte Spins untereinander mit einer antiferromagnetischen Wechselwirkung J gekoppelt. Zwischen diesen Spinleitern wirkt eine indirekte Kopplung, die durch die lochreichen Streifen vermittelt wird – in dem einfachen Modell wird dieser Effekt einfach durch eine schwächere Kopplung λJ modelliert. Dabei ist λ umso kleiner,

je mehr Löcher in das System eingebracht werden. (Die Spins in den lochreichen Gebieten selbst werden wir im Folgenden ignorieren.)

Dieses Modell definiert einen anisotropen zweidimensionalen Antiferromagneten. Die Eigenschaften des Systems hängen entscheidend von dem Verhältnis λ der beiden Kopplungen ab. Im Grenzfall $\lambda = 1$ geht das Modell in den oben diskutierten „gewöhnlichen“ zweidimensionalen Antiferromagneten über, und der Grundzustand ist langreichweitig geordnet. Diese Situation ist im undotierten La_2CuO_4 gegeben. Im anderen Grenzfall, λ wesentlich kleiner als 1, sind die Spinleitern entkoppelt. Dann bilden die quantenmechanischen Spins Singulets, also zwei benachbarte Spins auf den Ketten befinden sich in einer kohärenten Überlagerung von „auf“- und „ab“-Zuständen, und das magnetische Moment auf jedem Gitterplatz verschwindet. Dieser Zustand ist ein Beispiel für einen Quanten-Paramagneten.

Das einfache Modell hat also zwei qualitativ verschiedene Grundzustände für $\lambda = 1$ und $\lambda \rightarrow 0$; folglich muss es einen Quantenphasenübergang bei einem gewissen kritischen Wert λ_c geben. Die Eigenschaften dieses Systems gekoppelter Leitern sind ausgiebig untersucht worden und heute im Wesentlichen verstanden: Es existiert genau ein kritischer Punkt im Phasendiagramm; und im Gegensatz zu LiHoF_4 gibt es keine Phasenübergänge bei endlichen Temperaturen.²⁾ Das Phasendiagramm entspricht also dem in Abbildung 2, wobei der Parameter r hier mit $1/\lambda$ identifiziert werden kann.

Dieses Phasendiagramm weist nun bei endlichen Temperaturen drei Gebiete auf, die völlig verschiedene Eigenschaften besitzen. Für unseren Antiferromagneten sind im thermisch ungeordneten Gebiet, $\lambda > \lambda_c$, die Anregungen des antiferromagnetischen Grundzustands wichtig, dies sind so genannte Spinwellen, die bei tiefen Temperaturen quasiklassisch behandelt werden können. Das quantenmechanisch ungeordnete Gebiet, $\lambda < \lambda_c$, ist komplementär: Hier werden die Anregungen durch Aufbrechen der Singulets auf den Leitersprossen gebildet. Diese Triplet-Anregungen können als quasiklassische Teilchen verstanden werden. Zwischen diesen beiden Gebieten befindet sich die faszinierende quantenkritische Region. Beim *Crossover* von den beschriebenen quasiklassischen Bereichen in das quantenkritische Regime wird die Dichte der Anregungen (Wellen bzw. Teilchen) so groß, dass eine klassische Beschreibung nicht mehr möglich ist und neue theoretische Methoden benötigt werden [2].

Bemerkenswerterweise wurden die oben beschriebenen Anregungen in Experimenten an Hochtemperatur-Supraleitern mittels Kernspin-Resonanz [8] und Neutronenstreuung [9] tatsächlich nachgewiesen. Beispielsweise haben Imai und Mitarbeiter beim Messen der Spinrelaxationsrate in einem Kernquadrupolresonanz-Experiment drei verschiedene Typen von Temperaturabhängigkeit beobachtet, die den drei Regionen im Phasendiagramm aus Abb. 2 entsprechen. Die Eigenschaften des magnetischen Quantenphasenübergangs erlauben es außerdem, interessante Störstelleneffekte, die in Neutronenstreu-Experimenten gefunden wurden, zu erklären. [10]

Diese Übereinstimmungen legen nahe, dass sich die Spindynamik in den Hochtemperatur-Supraleitern zu einem gewissen Grade in dem einfachen skizzierten Modell verstehen lässt, zumindest in einem Tempera-

tur- bzw. Energiebereich zwischen etwa 100 und 500 K. Bei tieferen Temperaturen kann die Kopplung zwischen Spin- und Ladungsfreiheitsgraden nicht mehr vernachlässigt werden; dies ist natürlich auch von Bedeutung für den Übergang in den supraleitenden Zustand. Ein tieferes Verständnis der gekoppelten Ladungs- und Spindynamik ist entscheidend für Fortschritte auf diesem Gebiet.

Nicht-Fermi-Flüssigkeiten

Bisher haben wir unsere Diskussion von Quantenphasenübergängen auf Spin-Freiheitsgrade in isolierenden oder supraleitenden Systemen konzentriert. Dort ist zum Erzeugen einer Ladungsanregung immer eine endlich große Energie nötig (z. B. um im Isolator oder Halbleiter ein Elektron aus dem Valenzband in das Leitungsband anzuregen). In Metallen dagegen sind Ladungsanregungen mit beliebig kleiner Energie möglich; die Kopplung von Ordnungsparameter-Fluktuationen

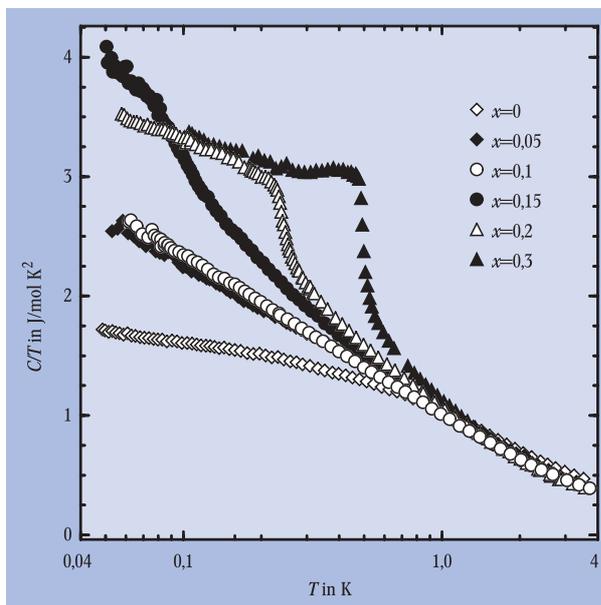


Abb. 5: Spezifische Wärme C von $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$ für verschiedene Goldkonzentrationen x dargestellt als C/T über $\log T$ (aus [11]).

nen und Ladungsfreiheitsgraden kann nicht vernachlässigt werden. Die Anwesenheit niederenergetischer fermionischer Anregungen führt zu weiteren interessanten Aspekten in der Physik der Quantenphasenübergänge. Ein vieldiskutierter Punkt ist das Auftreten von so genanntem Nicht-Fermi-Flüssigkeitsverhalten in der Nähe eines quantenkritischen Punktes.

In einem konventionellen Metall bilden die Elektronen eine Fermi-Flüssigkeit – sie verhalten sich (trotz ihrer starken Coulomb-Wechselwirkung) im Wesentlichen wie ein System nahezu wechselwirkungsfreier „Quasiteilchen“ mit renormierten Parametern (z. B. einer effektiven Masse). Dieses von Landau eingeführte Konzept erlaubt zahlreiche universelle Voraussagen über das Tieftemperatur-Verhalten von Elektronen in Metallen. Beispielsweise ist die Wärmekapazität proportional zum Produkt aus Temperatur und effektiver Masse, und der spezifische Widerstand folgt $\rho(T) = \rho_0 + AT^2$, wobei ρ_0 der durch Defekte bedingte Restwiderstand ist. Das Modell der Fermi-Flüssigkeit beschreibt sehr erfolgreich die Eigenschaften der meisten leitenden Materialien. In den letzten Jahren sind jedoch verschiedene experimentelle Beobachtungen gemacht worden, die im Widerspruch zum Fermi-Flüssigkeitsbild stehen.

2) Um die in La_2CuO_4 beobachtete magnetische Ordnung bei tiefen, aber endlichen Temperaturen zu modellieren, muss man die Kopplung zwischen den einzelnen Kupferoxid-Ebenen berücksichtigen.

Klassen von Materialien, in denen ein solches Nicht-Fermi-Flüssigkeitsverhalten gefunden wurde, sind die oben erwähnten Hochtemperatur-Supraleiter [6] (bei Temperaturen oberhalb der supraleitenden Sprungtemperatur) sowie Systeme schwerer Fermionen (dies sind meist metallische Systeme mit einer effektiven Quasiteilchenmasse von bis zu tausend Elektronenmassen) [7]. Als Beispiel dafür ist in Abbildung 5 die spezifische Wärmekapazität C von $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$ für verschiedene Goldkonzentrationen gezeigt. In einer Fermi-Flüssigkeit sollte C/T bei tiefen Temperaturen konstant sein; statt dessen sieht man eine deutliche Temperaturabhängigkeit. Insbesondere zeigt sich für $x=0,1$ über einen weiten Temperaturbereich eine Abhängigkeit der Form $C/T \sim \log(1/T)$.

Um diese Ergebnisse interpretieren zu können, betrachten wir zunächst das Phasendiagramm von $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$, Abbildung 6. Bei verschwindendem Goldanteil ist CeCu_6 ein Paramagnet; jedoch treibt die Dotierung mit Gold ($x > 0$) einen Übergang zu einem Antiferromagneten. Der quantenkritische Punkt liegt bei $x_c \approx 0,1$. Dieses Phasendiagramm hat die Struktur des schematischen Diagramms aus Abbildung 3. Betrachten wir nun noch einmal die Messungen der spezifischen Wärme aus Abbildung 5: Bei $x=0,1$ verläuft die gesamte Messung in der quantenkritischen Region; mit sinkender Temperatur divergieren hier die antiferromagnetischen Fluktuationen. Da die Elektronen an diesen Fluktuationen gestreut werden, wächst mit sinkender Temperatur ihre effektive Masse und damit auch C/T . Bei Goldkonzentrationen $x \neq x_c$ verlaufen die Messungen nur bei hohen Temperaturen in der quantenkritischen Region, hier stimmt C/T mit der bei $x=x_c$ gemessenen Kurve überein. Mit sinkender Temperatur verlassen die Messungen den quantenkritischen Bereich, entweder in Richtung der ungeordneten (paramagnetischen) oder in Richtung der geordneten (antiferromagnetischen) Phase. In beiden Fällen ist das Tieftemperaturverhalten das einer Fermi-Flüssigkeit und C/T näherungsweise konstant, für $x > x_c$ führt der antiferromagnetische Phasenübergang bei endlicher Temperatur außerdem zu der ausgeprägten „Schulter“ in C/T . (Die beobachtete schwache Temperaturabhängigkeit für $x \neq x_c$ und kleine T , Abbildung 5, verschwindet vermutlich bei noch tieferen Temperaturen.)

Das Nicht-Fermi-Flüssigkeitsverhalten in $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$ kann also mit der Existenz des antiferromagnetischen Quantenphasenübergangs bei $x \approx 0,1$ erklärt werden. Anomales (quantenkritisches) Verhalten tritt dabei in der quantenkritischen Region, nämlich bei x nahe x_c und relativ hohen Temperaturen auf, wo die magnetischen Fluktuationen mit sinkender Temperatur divergieren. Es ist aber bisher unklar, ob sich das Nicht-Fermi-Flüssigkeitsverhalten in anderen Schwerfermion-Systemen (z. B. $\text{UCu}_{5-x}\text{Pd}_x$) oder in Hochtemperatur-Supraleitern ebenfalls auf Quantenphasenübergänge zurückführen lässt.

Ausblick

Die Entwicklung der Festkörperphysik in den letzten Jahren hat gezeigt, dass elektronische Wechselwirkungen und Korrelationen für das Verständnis neuer Phä-

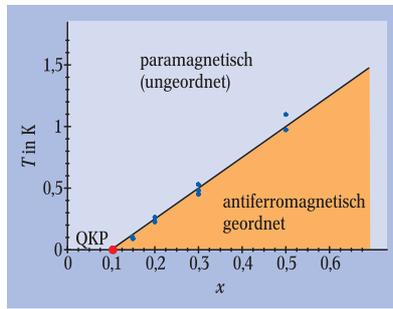


Abb. 6: Magnetisches Phasendiagramm von $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$. x ist die Goldkonzentration, T die Temperatur (nach [11]).

nomene entscheidend sind. In vielen dieser stark korrelierten Systeme versagen konventionelle Theorien und Methoden, da eine Beschreibung im Bild unabhängiger Elektronen nicht mehr möglich ist. Ein vielversprechender Weg zum Verständnis dieser Systeme ist, die quantenkritischen Punkte zwischen den verschiedenen Grundzustandsphasen zu identifizieren, um sie dann als Ausgangspunkte für die Untersuchung des gesamten Phasendiagramms zu benutzen. Diese Entwicklungen stehen heute erst an ihrem Anfang.

Literatur

Einführungen in die Thematik der Quantenphasenübergänge finden sich in den Referenzen [1] bis [3].

- [1] S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini und D. Shahar, Rev. Mod. Phys. **69**, 315 (1997)
- [2] S. Sachdev, Quantum Phase Transitions, Cambridge University Press (1999)
- [3] D. Belitz und T.R. Kirkpatrick, in J. Karkheck (Hrsg.), Dynamics: Models and kinetic methods for non-equilibrium many-body systems, Kluwer, Dordrecht (2000)
- [4] D. Bitko, T. F. Rosenbaum und G. Aeppli, Phys. Rev. Lett. **77**, 940 (1996)
- [5] N. Goldenfeld, Lectures on phase transitions and the renormalization group, Addison-Wesley, Reading (1992)
- [6] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994), M. B. Maple, J. Magn. Magn. Mater. **177**, 18 (1998)
- [7] P. Coleman, Physica B **259-261**, 353 (1999), G. R. Stewart, Rev. Mod. Phys. **73**, 797 (2001)
- [8] T. Imai, C. P. Slichter, K. Yoshimura und K. Kosuge, Phys. Rev. Lett. **70**, 1002 (1993)
- [9] G. Aeppli, T. E. Mason, S. M. Hayden, H. A. Mook und J. Kulda, Science **278**, 1432 (1997)
- [10] S. Sachdev, C. Buragohain und M. Vojta, Science **286**, 2479 (1999), M. Vojta, C. Buragohain und S. Sachdev, Phys. Rev. B **61**, 15152 (2000)
- [11] H. von Löhneysen, J. Phys. Cond. Matter **8**, 9689 (1996), A. Schröder, G. Aeppli, R. Coldea, M. Adams, O. Stockert, H. von Löhneysen, R. Ramazashvili und P. Coleman, Nature **407**, 351 (2000)

Der Autor

Matthias Vojta, Jahrgang 1972, studierte Physik in Dresden und promovierte dort 1998 über Magnetismus und Transport in dotierten Spinsystemen. Anschließend forschte er als Postdoc bei Subir Sachdev an der Yale University, wo sein Interesse an Quantenphasenübergängen geweckt wurde. Seit Herbst 2000 ist er wissenschaftlicher Assistent bei Dieter Vollhardt an der Universität Augsburg und beschäftigt sich mit unkonventionellen Supraleitern, Störstellen-Problemen und Schwer-Fermion-Systemen. Einen Teil seiner physik-freien Zeit verbringt er beim Wandern und Bergsteigen.

