

Für das Nickelat NdNiO_2 ergeben sich mit der Dichtefunktional-Theorie scharfe Energiezustände für jeden Impuls (weiß). Die Dynamische Molekularfeldtheorie beschreibt die Wechselwirkung der Elektronen sehr viel besser. Daher kommt es zu einer Renormierung der Energie-Eigenwerte, und endliche Lebenszeiten verbreitern die Energiezustände (farbig skaliert).

FESTKÖRPERPHYSIK

Supraleitung in der Nickelzeit

Die Entdeckung von supraleitenden Nickeloxiden eröffnet eine neue Perspektive auf die Hochtemperatur-Supraleitung.

Karsten Held, Oleg Janson und Liang Si

Die Entdeckung der Hochtemperatur-Supraleitung gelang vor 35 Jahren in Cupraten. Seither lassen die Fragen nach ihrer physikalischen Erklärung und einem Rezept für Supraleiter bei Raumtemperatur die Festkörperphysik nicht mehr los. Supraleitende Nickelate versprechen neue Erkenntnisse zu diesen offenen Fragen – nicht zuletzt aufgrund vieler Gemeinsamkeiten, aber auch entscheidender Unterschiede zu den Cupraten.

Vladimir Anisimov und Co-Autoren formulierten schon vor über 20 Jahren die theoretische Idee von Supraleitung in Nickelaten (Seltenerd-Nickeloxiden) auf Basis computergestützter Materialrechnungen [1]. Doch erst vor zwei Jahren gelang der Gruppe von Harold Hwang in Stanford der experimentelle Nachweis [2]: In $\text{Nd}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{NiO}_2$ verschwindet der elektrische Widerstand unterhalb einer Sprungtemperatur $T_c = 14,9 \text{ K}$ (**Abb. 1a**), und Supraleitung tritt auf. Die Nickelate bilden dabei ähnlich wie Cuprate (Seltenerd-Kupferoxide) eine Kristallstruktur mit zweidimensionalen NiO_2 -Schichten, die durch Neodym-Atome voneinander getrennt sind (**Abb. 1b**). Die schwierige und aufwändige Synthese sorgte dafür, dass es ein Jahr dauerte, bis eine andere Arbeitsgruppe diese Entdeckung bestätigen konnte [3].

Die Geschichte der Hochtemperatur-Supraleitung lässt sich – ähnlich wie die Menschheitsgeschichte – in Zeitalter einteilen (**Abb. 2**), da die Entdeckung einer neuen Material-

klasse immer wieder große experimentelle und theoretische Anstrengungen auslöst. Elementares Quecksilber, der erste von Heike Kamerlingh Onnes entdeckte Supraleiter, und weitere konventionelle Supraleiter wie Blei stehen dabei für die „Vorzeit“. Die Cuprate als erste Hochtemperatur-Supraleiter wurden 1986 völlig überraschend von Georg Bednorz und Alex Müller entdeckt. Nach dieser Kupferzeit (Cuprate) folgte die Eisenzeit (Eisenpniktide) und nun als jüngstes Zeitalter die Nickelzeit (Nickelate). Im Gegensatz zur Menschheitsgeschichte überlappen diese Zeitalter bei den Supraleitern: In Forschung und Anwendung spielen konventionelle Supraleiter aus der Vorzeit, wie NbTi, und die Cuprate nach wie vor eine tragende Rolle. Insbesondere kommen sie zum Einsatz, um starke Magnetfelder in der Medizin, für Teilchenbeschleuniger oder bei der Fusionsforschung zu erzeugen. Weitere Anwendungen reichen vom SQUID-Magnetometer über Filter im Mobilfunk bis zu Fehlerstrombegrenzern.

Ein Raumtemperatur-Supraleiter würde die Art, wie wir Strom erzeugen, transportieren und verbrauchen, revolutionieren und könnte einen gigantischen Beitrag zur Kohlendioxid-Reduktion leisten. Nach dem schwierigen Start in die Nickelzeit besteht die Hoffnung, dass in dieser Materialklasse auch höhere Sprungtemperaturen als die bisher erreichten $14,9 \text{ K}$ (bzw. 30 K unter Druck) realisierbar sind. Fraglich ist, ob diese auch höher liegen werden als die etwa 150 K bei den Cupraten. Die derzeitige Begeisterung für die

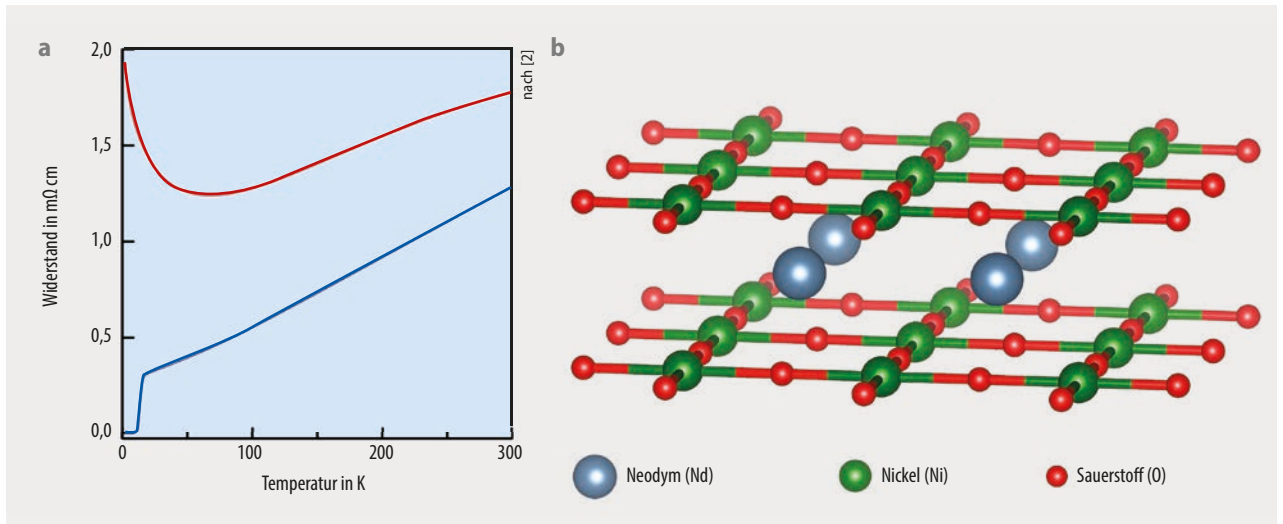


Abb. 1 Im Strontium-dotierten Nd_{0,8}Sr_{0,2}NiO₂ verschwindet der Widerstand unterhalb der supraleitenden Sprungtemperatur $T_c = 14,9$ K (a, blau); für die undotierte Stammverbindung NdNiO₂ steigt der Widerstand bei tiefen Temperaturen dagegen leicht an (rot). Oberhalb von T_c zeigen beide Verbindungen metallisches Verhalten: Mit steigender Temperatur wächst der Widerstand. Entscheidend für die Supraleitung der Nickelate sind die zweidimensionalen NiO₂-Lagen, die durch Nd-Atome voneinander getrennt sind (b).

Nickelate beruht eher darauf, dass sie – im Gegensatz zu den Eisenverbindungen – den Cupraten sehr ähnlich sind: Das Erfolgsrezept der Cuprate ist also offenbar auf andere Übergangsmetalle übertragbar! Daher wecken die Nickelate einerseits die Hoffnung, die Hochtemperatur-Supraleitung besser zu verstehen, und könnten andererseits den Weg weisen, weitere Supraleiter auf Basis anderer Übergangsmetalle zu synthetisieren. Ein Zeitalter X von Supraleitern bei Raumtemperatur erscheint im Bereich des Möglichen. Tatsächlich haben Mikhail Eremets und Kollegen am Max-Planck-Institut für Chemie in Mainz bereits Raumtemperatur-Supraleiter gefunden [4]. Allerdings müssen diese Wasserstoffverbindungen unter einem riesigen Druck von drei Millionen Bar (267 GPa) stehen (**Abb. 2**), der nur mit einer Diamant-Stempelpresse zu erreichen ist. Die Ursache der Supraleitung in diesen Wasserstoffverbindungen lässt sich konventionell beschreiben: Wie von John Bardeen, Leon N. Cooper und John Robert Schrieffer erklärt, vermitteln hier

Gitterschwingungen eine attraktive Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen, sodass diese ein Cooper-Paar mit ganzzahligem Spin bilden. Diese Bosonen kondensieren bei tiefen Temperaturen als Bose-Einstein-Kondensat, was zu Supraleitung und widerstandslosem Stromtransport führt.

Cuprate, Eisenpniktide und Nickelate besitzen als Übergangsmetallverbindungen völlig andere Eigenschaften als die Wasserstoffverbindungen. Hier ist die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen sehr groß, sodass deren Bewegung korreliert ist. Solche stark korrelierten Elektronensysteme gelten als erfolgversprechend auf der Suche nach einem Raumtemperatur-Supraleiter bei Normaldruck. Allerdings ist die Frage nach wie vor umstritten, worauf bei diesen Hochtemperatur-Supraleitern die attraktive Wechselwirkung zur Bildung eines Cooper-Paars beruht. Die wichtigsten Theorien stellen wir später vor. Die Nickelate könnten dabei helfen, den zugrundeliegenden mikroskopischen Mechanismus zu finden.

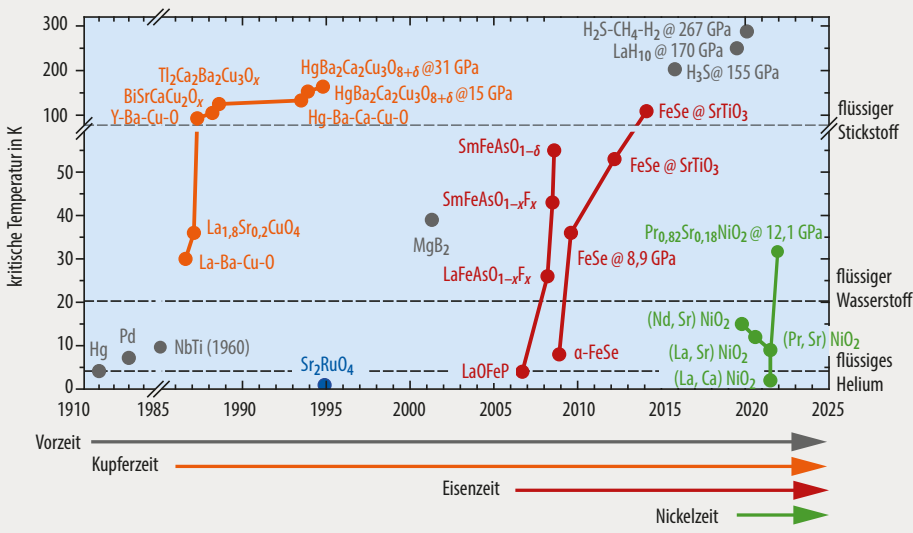


Abb. 2 Da die Entdeckung neuer Materialklassen immer wieder zu einem Aufbruch in der Forschung führt, gliedert man die Hochtemperatur-Supraleiter oft nach Zeitaltern. Konventionelle Supraleiter stehen dann für die „Vorzeit“ der Niedertemperatur-Supraleiter.

Die Synthese und das Problem mit dem Wasserstoff

Supraleitende Nickelate herzustellen, ist äußerst kompliziert [5]. Zuerst gilt es, $\text{Nd}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{NiO}_3$ mittels Laserstrahlverdampfen in ein Plasma zu überführen. Liegen Sauerstoffpartialdruck und Temperatur in einem sehr engen Wertebereich, lagern sich die freien Ionen als $\text{Nd}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{NiO}_3$ -Film auf einem Substrat ab, z. B. einem SrTiO_3 -Kristall (**Abb. 3a**). Eine besondere Schwierigkeit stellt das Aufdampfen von Strontium-dotiertem Nickelat dar, weil sich leicht Inhomogenitäten der Strontium-Dotierung bilden können, welche die Supraleitung verhindern.

Nach diesem ersten Schritt liegt noch das falsche Nickelat vor: $\text{Nd}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{NiO}_3$ besitzt eine Perowskit-Kristallstruktur, die nur als ultradünne Schicht theoretisch supraleitend werden kann [6]. Dickere Schichten sind kubisch und besitzen ein Sauerstoffatom zu viel zwischen den NiO_2 -Schichten. Um dieses Sauerstoffatom zu entfernen, folgt ein Aufheizen der Probe in einer verschlossenen Ampulle mit dem Reduktionsmittel CaH_2 . Idealerweise entsteht dabei eine Schichtstruktur aus $\text{Nd}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{NiO}_2$, CaO und H_2O (**Abb. 3b**, oben). Da die Struktur der resultierenden Phase mit der ursprünglichen Perowskit-Struktur eng verwandt ist, bezeichnet man diese Reaktion auch als topotaktisch.

Das weitere Verfeinern solcher komplizierter Synthesen half in den letzten Jahren dabei, Nickel in der ungewöhnlich niedrigen Oxidationsstufe Ni^{1+} zu stabilisieren. Eine besondere Herausforderung stellen Fremdphasen dar. Bereits beim Laserstrahlverdampfen können konkurrierende (Ruddlesden-Popper-)Phasen mit oktaedrischen Schichten und Strontium-Inhomogenitäten entstehen. Die Reduktion mit CaH_2 entfernt den Sauerstoff oft auch nicht vollständig, oder Wasserstoff besetzt die freiwerdenden Sauerstoffplätze (**Abb. 3b**, unten). Letzteres ist besonders tückisch, da der leichte Wasserstoff mit Röntgenstreuung kaum nachweisbar ist; nur in Kernspinresonanz-Experimenten verrät er sich [7]. Wasserstoffatome können aufgrund ihrer geringen Größe auch später leicht in die Kristallstruktur eindringen. Eine schützende SrTiO_3 -Deckschicht kann dies verhindern. Bandstruktur-Rechnungen ergeben für undotiertes NdNiO_2 einen Energiegewinn durch Einbinden von Wasserstoff [8], woraus sich eine Tendenz zur Bildung von NdNiO_2H ableiten lässt. Erst die Sr-Dotierung verändert die Energiebilanz: $\text{Nd}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{NiO}_2$ und $\frac{1}{2} \text{H}_2$ sind energetisch vorteilhafter als $\text{Nd}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{NiO}_2\text{H}$. Dynamische Molekularfeldtheorie-Rechnungen zeigen gravierende Folgen der ebenfalls topotaktischen Wasserstoff-Einbindung [8]: Anstelle des gewünschten zweidimensionalen Supraleiters und einem Spin-1/2-Zustand im Nickel (**Abb. 3c**, oben) bildet $\text{Nd}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{NiO}_2\text{H}$ einen Mott-Isolator mit dreidimensionaler Struktur und einem Spin-1-Zustand für Nickel (**Abb. 3c**, unten).

Gemeinsamkeiten und Unterschiede zu Cupraten

Da mittlerweile viele unterschiedliche Cuprat-Supraleiter bekannt sind, beschränken wir den Vergleich mit Nickelaten auf den wohl einfachsten, wenn auch nicht besten unter ihnen: CaCuO_2 . Dieser besitzt die gleiche Kristallstruktur

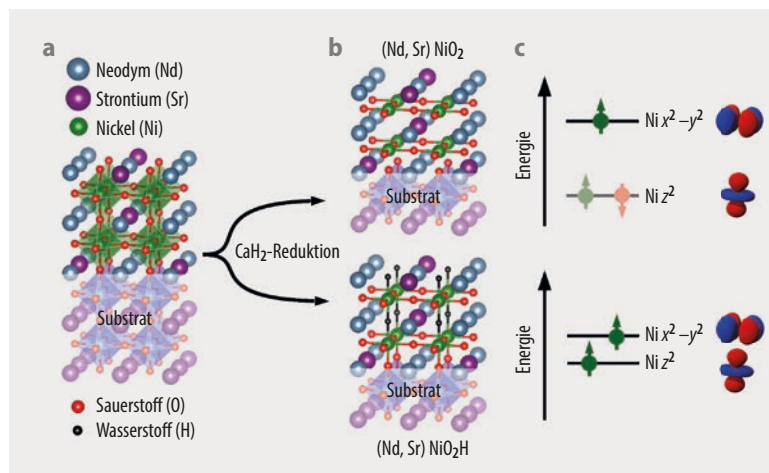


Abb. 3 Durch Laserstrahlverdampfen entsteht zunächst ein Film aus Strontium-dotiertem NdNiO_3 auf einem SrTiO_3 -Substrat (a). Die Reduktion mit CaH_2 entfernt danach den Sauerstoff zwischen den NiO_2 -Schichten (b, oben). Das kann auch unerwünschte, die Supraleitung unterdrückende Fremdphasen wie NdNiO_2H mit zusätzlichem topotaktischen Wasserstoff erzeugen (b, unten). Die entscheidenden Nickel- $3d$ -Orbitale im lokalen (Kristall-)Feld des NdNiO_2 -Gitters (c, oben) bzw. des NdNiO_2H -Gitters (c, unten) sind die x^2-y^2 - und z^2 -Orbitale. Der Wasserstoff nimmt ein Ni-Elektron auf, sodass hier zwei ungepaarte Elektronen vorliegen: Lokal betrachtet ordnen sich diese gemäß Hundscher Regel zu einem Spin-1 an.

wie NdNiO_2 , ist also isostrukturell. Da Calcium zweiwertig ist und Neodym dreiwertig, sind die Ionen Cu^{2+} und Ni^{1+} formell auch isoelektrisch mit jeweils 9 Elektronen bzw. einem Loch in der $3d$ -Schale. Für die Supraleitung spielen jeweils zwei der fünf $3d$ -Orbitale eine entscheidende Rolle (**Abb. 3c**). Trotz dieser Gemeinsamkeiten unterscheiden sich die Verbindungen entscheidend im Detail, insbesondere in welchen Orbitalen sich die Löcher bei der Dotierung in den supraleitenden Bereich befinden. Für die Nickelate ersetzt man beispielsweise dreiwertiges Nd^{3+} durch zweiwertiges

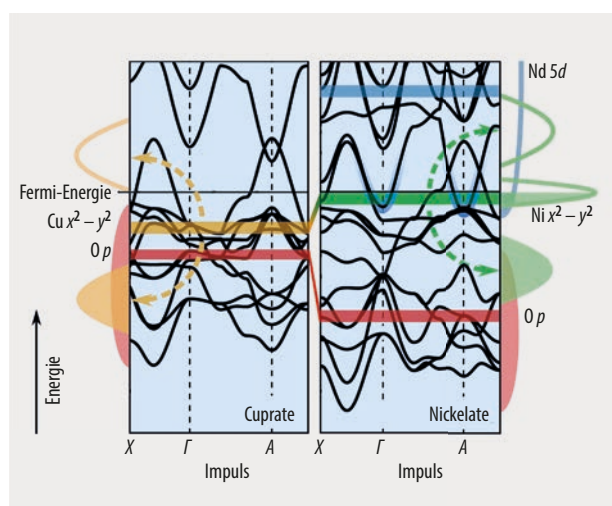


Abb. 4 Die Energie-Eigenwerte (schwarz) für jeden Impuls entlang eines Pfades von $X = (\pi, 0, 0)$ über $\Gamma = (0, 0, 0)$ nach $A = (\pi, \pi, \pi)$ sind für Cuprate (links) und Nickelate (rechts) in Einheiten $\hbar/\text{Gitterkonstante}$ dargestellt. Farbige Balken markieren impulsunabhängige Energie-Schwerpunkte der wichtigsten Orbitale. Die Pfeile zeigen, wie Kupfer- und Nickel-Bänder in unteres und oberes Hubbard-Band aufspalten, was zur Zustandsdichte am Rand führt.

Sr^{2+} . Dies entnimmt dem restlichen System ein Elektron bzw. fügt ein Loch hinzu.

Auf der Dichtefunktional-Theorie basierende Bandstruktur-Rechnungen decken die Unterschiede zwischen Nickelaten und Cupraten am besten auf. Viele Gruppen haben diese unmittelbar nach Entdeckung der supraleitenden Nickelate durchgeführt [9, 10] und konnten nach dem Bloch-Theorem für jeden Impuls der Elektronen deren Energieeigenwerte und -zustände bestimmen. Für die elektrische Leitfähigkeit sind nur die Zustände nahe der Fermi-Energie wichtig (Abb. 4). Jedes Orbital besitzt einen impulsunabhängigen Schwerpunkt. Die Energieeigenzustände folgen in diesen Energiebereichen vorwiegend dem lokalen orbitalen Charakter; es mischen aber auch die anderen Orbitale bei.

In den Cupraten kreuzt das Kupfer- x^2-y^2 -Band die Fermi-Energie (Abb. 4, links) und nimmt das eine Loch der Kupfer- $3d$ -Schale auf. Weil die Sauerstoff- $2p$ -Zustände nur wenig unterhalb der Fermi-Energie liegen, kommt es zu einer starken Hybridisierung und Mischung mit den Sauerstoff-Orbitalen. Fast noch wichtiger ist die starke lokale Coulomb-Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen in den Kupfer- x^2-y^2 -Orbitalen, die dieses Band in zwei Hubbard-Bänder aufspaltet. Denn auf jedem Kupfer-Platz lässt sich ein Elektron im unteren Hubbard-Band unterbringen, ohne die starke Coulomb-Wechselwirkung zu spüren. Erst das Hinzufügen eines zweiten Elektrons mit entgegengesetztem Spin auf dem gleichen Platz führt zur Coulomb-Wechselwirkung; dies sind die Anregungen im oberen Hubbard-Band. Diese Aufspaltung der Bänder erzeugt für undotierte Cuprate einen Isolator mit einer Lücke an der Fermi-Energie in der Zustandsdichte. Energetisch liegen die Sauerstoffzustände jetzt näher an der Fermi-

Energie. Beim Dotieren besetzen die Löcher die Sauerstoff- p -Orbitale anstelle der Kupfer- x^2-y^2 -Orbitale. Undotierte Cuprate stellen daher Ladungstransfer-Isolatoren dar. Die Cuprate mit Kupfer- x^2-y^2 -Orbital und Sauerstofforbitalen lassen sich somit durch das Emery-Modell als minimales Modell beschreiben (Infokasten).

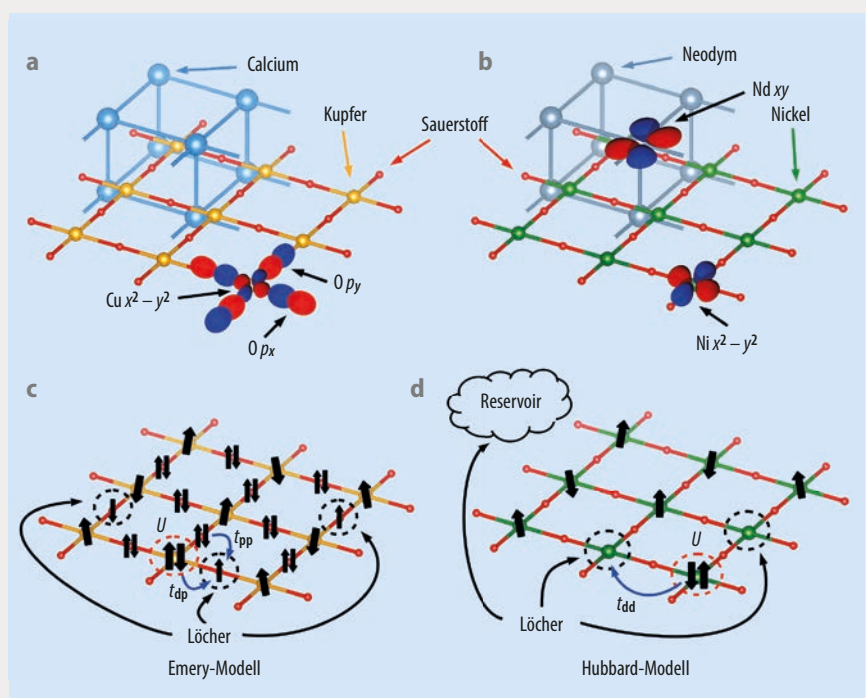
Mehr Orbitale im Spiel

Auch in den Nickelaten kreuzt das Nickel- x^2-y^2 -Orbital die Fermi-Energie. Allerdings liegen die Sauerstoffzustände bei sehr viel geringeren Energien. Beim Aufspalten in Hubbard-Bänder liegen daher beide oberhalb der Sauerstoffbänder (Abb. 4, rechts). Stattdessen kommen andere Orbitale ins Spiel. Am Γ -Punkt bei einem Impuls Null sowie am A -Punkt mit (π, π, π) kreuzen die Ausläufer der ansonsten unbesetzten Neodym- $5d$ -Orbitale die Fermi-Energie. Daher bilden sich Fermi-Flächen mit kleinen „Elektronentaschen“ um die Impulse Γ und A . Eine Dotierung in den supraleitenden Bereich schiebt die Elektronentasche am Γ -Punkt über die Fermi-Energie, sodass diese Tasche verschwindet. Einige Rechnungen betonen die Bedeutung der Nickel- z^2 -Orbitale [11, 12], die unterhalb der Nickel- x^2-y^2 -Orbitale liegen. Genaue Rechnungen mit der Dynamischen Molekularfeldtheorie berücksichtigen Wechselwirkungseffekte wie die Aufspaltung in Hubbard-Bänder [13, 14]. Sie deuten an, dass die z^2 -Orbitale bis etwa 30 Prozent Strontium-Dotierung keine Rolle spielen [14]. Das bestätigen neueste Experimente mit resonanter inelastischer Röntgenstreuung (RIXS). Die Neodym- $4f$ -Elektronen tragen – anders als anfangs gemutmaß – nicht zur Supraleitung bei: Die Entdeckung von supraleitendem $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_2$, das keine $4f$ -Elektronen besitzt, schließt dies aus.

Cuprate versus Nickelate

Die Kristallstruktur und die wichtigsten Orbitale der **Cuprate** (a) lassen sich mit dem Emery-Modell (c) beschreiben. Dieses besteht neben den Kupfer- x^2-y^2 -Orbitalen aus Sauerstoff- p_x - und - p_y -Orbitalen, die bei Dotierung die Löcher aufnehmen. Elektronen können vom Kupfer zum Sauerstoff „hüpfen“ (t_{pd}) oder auch direkt von Sauerstoff zu Sauerstoff (t_{pp}). Weil die Kupfer- x^2-y^2 -Orbitale stark lokalisiert sind, stoßen sich zwei Elektronen am gleichen Gitterplatz stark ab (U).

Die **Nickelate** (b) lassen sich minimalistisch durch ein Hubbard-Modell mit zusätzlichem Reservoir beschreiben (d). Hier liegen die Sauerstoff-Orbitale bei sehr viel niedrigeren Energien, und die Löcher füllen etwa zur Hälfte die Nickel- x^2-y^2 -Orbitale und die xy -Neodym-Orbitale. Letztere bilden eine kleine Fermi-Fläche um den Impuls A , mischen aber aus Symmetriegründen nicht mit den Nickel- x^2-y^2 -Orbitalen. Daher stellen diese Neodym- xy -Orbitale ein weitgehend entkoppeltes Reservoir dar, das bei Dotierung ebenfalls Löcher aufnimmt. Ein einfaches Einband-Hubbard-Modell beschreibt die supraleitenden NiO_2 -Ebenen: Die Löcher in den Nickel- x^2-y^2 -Orbitalen können „hüpfen“ (t_{dd}); für zwei Elektronen am gleichen Gitterplatz wirkt die Coulomb-Abstoßung (U).



Obwohl weder die Γ -Tasche noch die Nickel- z^2 -Orbitale oder die Neodym- $4f$ -Elektronen eine Rolle für die Supraleitung spielen, bleibt die Elektronentasche am A -Punkt eine wichtige Besonderheit der Nickelate. Denn diese A -Taschen nehmen einen Teil der Löcher aus der Strontium-Dotierung auf. Bereits ohne Strontium-Dotierung tritt so ein Selbstdotierungseffekt auf: Das Nickel- x^2-y^2 -Orbital ist – im Gegensatz zu den Cupraten – nicht halbgefüllt, da sich auch Elektronen in der Tasche um den A -Punkt befinden. Aus dieser Selbstdotierung des Nickel- x^2-y^2 -Orbitals folgt, dass neben dem unteren und oberen Hubbard-Band bei den Nickelaten zusätzliche (Quasiteilchen-)Anregungen an der Fermi-Energie existieren. Aus Symmetriegründen hybridisieren oder mischen die Nickel- x^2-y^2 -Orbitale und die A -Taschen nicht, was die Beschreibung sehr vereinfacht.

Renaissance des Hubbard-Modells

Insgesamt lässt sich die Situation daher mit einem Einband-Hubbard-Modell beschreiben, das die Nickel- x^2-y^2 -Orbitale und ein zusätzliches, weitgehend entkoppeltes Reservoir der Neodym- $5d$ -Orbitale um den A -Punkt berücksichtigt (**Infokasten**). Dieses Hubbard-Modell stellt das grundlegende Modell für stark korrelierte Elektronensysteme dar – ähnlich dem Ising-Modell in der Statistischen Physik oder der Drosophila-Fliege für die Genetik. Während John Hubbard damit den Ferromagnetismus beschreiben wollte, erlebte es mit der Entdeckung der Hochtemperatur-Supraleitung in den Cupraten eine Renaissance – obwohl das Emery-Modell geeigneter und grundlegender erscheint.

Das letzte Jahrzehnt brachte erhebliche Fortschritte bei der numerischen Lösung des Hubbard-Modells: Einerseits liegen nun zuverlässige (auch diagrammatische) Quanten-Monte-Carlo-Ergebnisse und Matrix-Produkt-Zustands-Wellenfunktionen vor. Andererseits gelang es, die vor 30 Jahren von Walter Metzner, Dieter Vollhardt, Antoine Georges und Gabriel Kotliar entwickelte Dynamische Molekularfeldtheorie zu erweitern. Hier lassen sich jetzt zusätzlich nicht-lokale und sogar langreichweitige Korrelationen mit Feynman-Diagrammen berücksichtigen [15], die den Elektronen-Propagator und die Coulomb-Wechselwirkung als Basiselemente nutzen.

Diese Erweiterung, die originäre dynamische Vertex-Approximation, erlaubte es, das Phasendiagramm der Nickelat-Supraleiter noch vor den ersten Experimenten zu berechnen (**Abb. 5**). Als Ausgangspunkt diente das Hubbard-Modell mit einer Berechnung der richtigen Dotierung bzw. Aufteilung der Löcher in die relevanten Nickel- x^2-y^2 -Orbitale und das Reservoir der A -Elektronentaschen. Da die kritische Temperatur für Supraleitung nur schwer vorherzusagen ist, ist die Genauigkeit der Berechnungen im Vergleich zu den späteren Messdaten bemerkenswert. Diese Übereinstimmung bestätigt die Relevanz des Einband-Hubbard-Modells.

Die Frage nach dem Mechanismus

In den Rechnungen treten antiferromagnetische Spinfluktuationen auf. Die Elektronen können dann trotz der Cou-

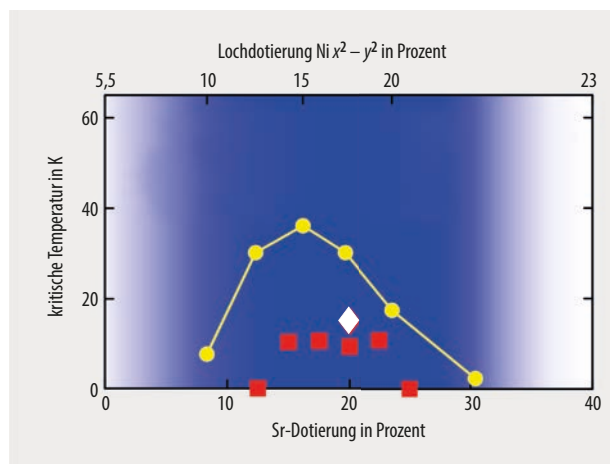


Abb. 5 Die Sr-Dotierung in $\text{Nd}_{1-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_2$ führt im Vergleich zu einer d^9 -Konfiguration zu mehr Löchern in den Nickel- x^2-y^2 -Orbitalen. Davon hängt die kritische Temperatur in theoretischen Vorhersagen (gelb [14]) und Messungen (weiß [2] und rot [16]) ab. Ein Einband-Hubbard-Modell mit Lochdotierung reicht im blauen Bereich zur Beschreibung aus; für kleinere und größere Dotierungen spielen weitere Orbitale eine Rolle.

lomb-Abstoßung Cooper-Paare bilden, weil die Zeitverzögerung und längere Reichweite dieser Spinfluktuationen in gewissen Bereichen zu einer attraktiven Wechselwirkung führen. Tatsächlich ist die Existenz von Supraleitung im Hubbard-Modell heute gesichert. Dies spricht dafür, dass Spinfluktuationen die Ursache für Hochtemperatur-Supraleitung in den Nickelaten sind. Allerdings bleibt zu untersuchen, ob es analog zu den Cupraten einen Isotopeneffekt bei der Supraleitung der Nickelate gibt. Dieser beruht auf den unterschiedlichen Massen verschiedener Isotope, die direkt nur die Gitterschwingungen beeinflussen. Diese Kopplung deutet darauf hin, dass Gitterschwingungen zumindest in den Cupraten nicht gänzlich vernachlässigbar sein könnten, auch wenn sich eine konventionelle Supraleitung auf Basis von Gitterschwingungen ausschließen lässt. Neben Spinfluktuationen kommen auch Ladungsfluktuationen als Ursache der Supraleitung infrage. Um dies zu beschreiben, gilt es, über das Hubbard-Modell hinaus langreichweitigere Coulomb-Wechselwirkungen zu berücksichtigen. Eine weitere Theorie hält die Fluktuationen oberhalb eines quantenkritischen Punkts für ausschlaggebend, also eines Phasenübergangs am absoluten Nullpunkt.

Auch wenn einiges für Spinfluktuationen spricht, bleibt die Ursache der Hochtemperatur-Supraleitung umstritten. Weitere Untersuchungen zu den Nickelaten und der Vergleich mit den Cupraten können hier die Forschung entscheidend vorantreiben, beispielsweise anhand der sehr unterschiedlichen Rolle der Sauerstoff-Orbitale bzw. der A -Taschen in den beiden Materialklassen. Die Synthese weiterer Nickelat-Supraleiter und Messungen zusätzlicher Größen sollten im Zusammenspiel von Experiment und Theorie, Chemie und Physik weitere Erkenntnisse liefern. Um z. B. die Rolle der Spinfluktuationen überzeugend zu klären, bedarf es materialspezifischer Vorhersagen und deren experimenteller Verifikation. Die bisher vorliegenden Ergebnisse stellen nur einen ersten Schritt dar (**Abb. 5**).

Ausblick

Heute stehen wir noch am Anfang der Nickelzeit, die uns einem großen Ziel der Festkörperphysik – der Supraleitung bei Raumtemperatur und Normaldruck – näherbringen könnte. Die Nickelate haben gezeigt, wie wichtig es ist, die richtigen Kochrezepte bei der Synthese zu befolgen. Die Vorhersagekraft theoretischer Rechnungen lässt sich verbessern, sobald weitere Vergleiche mit experimentellen Daten möglich sind. Um die kritische Temperatur T_c zu erhöhen, könnte Schwefel den Sauerstoff als Anion ersetzen; auch Fluor anstelle einiger Sauerstoffatome in einer Einsicht-Perowskitstruktur ist denkbar.

Wenn das Hubbard-Modell tatsächlich die Supraleitung der Nickelate beschreibt, ist der einfachste Weg wohl, die (Energie-)Bandbreite des x^2-y^2 -Orbitals leicht zu erhöhen. Das gelingt zum Beispiel durch das Ersetzen der kompakteren $3d$ -Orbitale von Nickel mit räumlich ausgedehnteren $4d$ - oder sogar $5d$ -Orbitalen. Um dabei die Anzahl der Valenzelektronen konstant zu halten, bedarf es Elemente aus derselben Gruppe des Periodensystems wie Nickel, also Palladium oder Platin. Eine andere Möglichkeit ist externer Druck, was jüngst experimentell bestätigt wurde. Vielleicht weist die Supraleitung in Nickelaten so den Weg in das eingangs erwähnte Zeitalter X der Raumtemperatur-Supraleiter.

Supraleiter bilden bereits heute einen Milliarden-Euro-Markt. Als wichtigste Anwendung gilt die Erzeugung großer, stabiler Magnetfelder von der Magnetresonanztomographie in der Medizin und Magnetschwebbahn bis hin zu Teilchenbeschleunigern am CERN und Fusionsreaktoren wie dem im Bau befindlichen ITER. Hier kommen meist noch Niedertemperatur-Supraleiter aus der „Vorzeit“ wie NbTi zum Einsatz. Sie verlangen zwar eine Kühlung mit Helium statt Stickstoff, sind aber in der Herstellung deutlich preiswerter als Hochtemperatur-Supraleiter. Diese finden sich heute schon in SQUID-Magnetometern, Filtern im Mobilfunk und in Fehlerstrombegrenzern, um großflächige Stromausfälle zu vermeiden. Eine Anwendung mit großem Potenzial ist der weitgehend verlustfreie Stromtransport, der höhere Stromdichten, niedrigere Spannungen und dünnere Drähte erlaubt. Da dies insbesondere innerstädtisch von Vorteil ist, gibt es bereits Hochtemperatur-Supraleiter im Stromnetz von Long Island bei New York. Die derzeit längste Verbindung von einem Kilometer befindet sich im Netz der Stadt Essen. Wir können nicht vorhersagen, ob ein Raumtemperatur-Supraleiter morgen gefunden wird bzw. ob ein solcher überhaupt existiert. Fest steht allerdings, dass die Nickelate eine ganz neue Perspektive für diese Suche eröffnen.

Danksagung

Wir möchten an dieser Stelle unseren Co-Autoren, Motoharu Kitatani, Jan Tomczak, Paul Worm und Zhicheng Zhong, mit denen wir das neue Feld der Nickelat-Supraleitung erkundet haben, ganz herzlich danken. Des Weiteren gilt unser Dank Marta Gibert, Michael Eisterer und Torsten Held für hilfreiche Diskussionen zum Artikel.

Literatur

- [1] V. I. Anisimov et al., Phys. Rev. B **59**, 7901 (1999)
- [2] D. Li et al., Nature **572**, 624 (2019)
- [3] S. Zeng et al., Phys. Rev. Lett. **125**, 147003 (2020)
- [4] A. Drozdov et al., Nature **525**, 73 (2015)
- [5] K. Lee et al., APL Mater. **8**, 041107 (2020)
- [6] P. Hansmann et al., Phys. Rev. Lett. **103**, 016401 (2009)
- [7] Y. Cui et al., Chin. Phys. Lett. **38**, 067401 (2021)
- [8] L. Si et al., Phys. Rev. Lett. **124**, 166402 (2020)
- [9] X. Wu et al., Phys. Rev. B **101**, 060504 (2020)
- [10] Y. Nomura et al., Phys. Rev. B **100**, 205138 (2019)
- [11] F. Lechermann, Phys. Rev. X **10**, 041002 (2020)
- [12] A. S. Botana et al., Phys. Rev. X **10**, 011024 (2020)
- [13] J. Karp et al., Phys. Rev. X **10**, 021061 (2020)
- [14] M. Kitatani et al., npj Quantum Mater. **5**, 59 (2020)
- [15] G. Rohringer et al., Rev. Mod. Phys. **90**, 025003 (2018)
- [16] D. Li et al., Phys. Rev. Lett. **125**, 027001 (2020)

Die Autoren



Karsten Held (FV Tiefe Temperaturen) studierte Physik an der RWTH Aachen und promovierte an der U Augsburg. Nach einem Postdoc-Aufenthalt in Princeton leitete er eine Emmy Noether-Nachwuchsgruppe am MPI für Festkörperphysik in Stuttgart. Seit 2008 ist er Professor an der

TU Wien. Auch dank der Förderung des European Research Council (ERC) konnte er die Dynamische Molekularfeldtheorie um Feynman-Diagramme für nicht-lokale Korrelationen und Supraleitung erweitern.

Oleg Janson studierte Kristallographie in St. Petersburg und promovierte 2012 in numerischer Festkörperphysik an der TU Dresden. Als Postdoc in Wien hat er die dynamische Molekularfeldtheorie u. a. für Heterostrukturen der Nickelate vorangetrieben. Seit 2019 leitet er eine durch die Leibniz-Gemeinschaft geförderte Nachwuchsgruppe am Leibniz-Institut für Festkörper- und Werkstofforschung (IFW) in Dresden.



Liang Si hat an der Northwest University in China Physik studiert und 2017 an der TU Wien promoviert. Danach forschte er als Postdoc an der U Wien, als Assistenz-Professor an der Chinesischen Akademie der Wissenschaften (CAS) in Ningbo und als Gastwissenschaftler an der TU Wien. Heute ist er Profes-

sor an der Northwest University. Sein Forschungsschwerpunkt sind Berechnungen stark korrelierter Elektronensysteme mittels Dichtefunktionaltheorie und Dynamischer Molekularfeldtheorie.

Prof. Dr. Karsten Held, Institut für Festkörperphysik, TU Wien, Wiedner Hauptstr. 8–10/138, 1040 Wien, Österreich, **Dr. Oleg Janson**, IFW Dresden, Helmholtzstr. 20, 01069 Dresden und **Prof. Dr. Liang Si**, School of Physics, Northwest University, Xi'an 710069, China