

# Topologische Spinflüssigkeiten

Frustration magnetischer Momente durch widerstreitende Kopplungen kann zu Spinflüssigkeiten mit topologischer Ordnung führen.

Kai Phillip Schmidt und Simon Trebst

Frustration kann physikalisch gesehen durchaus positiv wirken und komplexe, reichhaltige Phänomene hervorrufen. Dazu gehört beispielsweise die topologische Ordnung in Quantenmagneten, die nicht nur aus der Sicht der Festkörperphysik, sondern auch der Quanteninformation oder Mathematik besonders interessant ist. Inzwischen ist auch die experimentelle Realisierung solcher topologisch geordneter Systeme in Reichweite gerückt.

Frustration ist ein alltägliches Phänomen, und sie ist natürlich auch Physikern nicht fremd. Sie wissen aber Frustration durchaus zu schätzen, etwa wenn sich diese bei einem System einstellt, auf das gleichzeitig widerstrebende Kräfte wirken und es nicht allen gleichermaßen folgen kann. Denn das kann interessante Konsequenzen haben. Ein Beispiel aus dem Bereich der Festkörperphysik sind „frustrierte“ Quantenmagnete, in denen die elementaren magnetischen Momente – meist Spins genannt – miteinander über verschiedene Austauschwechselwirkungen koppeln, die jedoch nicht alle gleichzeitig minimiert werden können.

Die *geometrische Frustration* tritt immer dann auf, wenn die von einem Antiferromagneten favorisierte antiparallele Anordnung benachbarter Spins (Néel-Ordnung) nicht kommensurabel ist mit den elementaren Bausteinen eines Gitters. Besonders klar wird dies bei Spins auf einem isolierten Dreieck: Da es nie möglich ist, alle drei Spins antiferromagnetisch anzuordnen, bleibt ein Spin immer „frustriert“. Geometrisch frustrierte Gitter sind deswegen häufig aus Dreiecken aufgebaut, wobei sich benachbarte Dreiecke eine Ecke teilen (Abb. 1a). Wichtige Beispiele sind das dreidimensionale Pyrochlor-Gitter oder das zweidimensionale Kagomé-Gitter.

Besonders ausgeklügelte Formen der Austauschwechselwirkung, deren gleichzeitige Minimierung für einen gegebenen Spin niemals erfüllbar sein können, erlauben es ebenfalls, einen Quantenmagneten zu frustrieren. Dies ist beispielsweise der Fall für einen Quantenspin, der mit all seinen nächsten Nachbarn rein durch ferromagnetische Ising-Wechselwirkungen koppelt, letztere aber unterschiedliche, orthogonale Quantisierungsachsen aufweisen. Als Konsequenz stellt sich bei diesem Spin eine *Austausch-Frustration* ein, da er seine Energie genau dann minimieren wür-

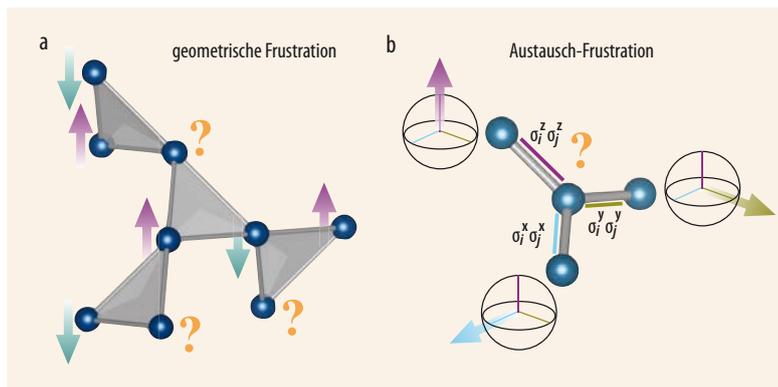


Abb. 1 Die geometrische Frustration tritt z. B. in einem Gitter aus Dreiecken mit gemeinsamen Ecken auf, wenn direkt benachbarte Spins (blaue Kugeln) antiferromagnetisch wechselwirken (a). Konkret sind alle mit Fragezeichen markierten Spins frustriert. Die Austausch-Frustration in (b) ist für den zentralen mit einem Fragezeichen versehenen

Spin veranschaulicht, der durch verschiedene ferromagnetische Ising-Wechselwirkungen in x, y, z-Richtung mit seinen drei Nachbarn koppelt. Da sich der zentrale Spin nicht gleichzeitig parallel zur x, y, z-Achse ausrichten kann, ist er rein aufgrund der Austauschwechselwirkung frustriert.

de, wenn er sich entlang aller Quantisierungsachsen parallel ausrichten würde, was natürlich unmöglich ist (Abb. 1b). Das wohl bekannteste Modell mit Austausch-Frustration ist das Kitaev-Honigwabengitter-Modell. Dieses realisiert eine ganze Reihe exotischer Quantenphasen, in denen die magnetischen Momente auch bei tiefsten Temperaturen keinerlei konventionelle Ordnung zeigen. Stattdessen bildet sich eine subtile langreichweitige Ordnung, welche auch als topologische Ordnung bezeichnet wird. Letztere wollen wir in diesem Artikel näher beleuchten.

## KOMPAKT

- Das Kitaev-Modell auf einem Honigwabengitter weist eine Austausch-Frustration auf und zählt zu den wenigen quantenmechanischen Vielteilchen-Modellen, die sich exakt lösen lassen.
- Je nach Wahl der Parameter ist der Grundzustand dieses Modells eine von zwei möglichen Spinflüssigkeiten: Bei Typ I treten masselose Anregungen auf, beim Typ II massive Anregungen sowie eine nichtlokale topologische Ordnung.
- Dieses Modell ist auch eng verwandt mit dem ebenfalls exakt lösaren Toric-Code-Modell, das im Zusammenhang mit robusten Quantenbits für die Quanteninformationsverarbeitung diskutiert wird.

Dr. Kai Phillip Schmidt, Lehrstuhl für Theoretische Physik 1, Technische Universität Dortmund, 44221 Dortmund; Prof. Dr. Simon Trebst, Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln, Zülpicher Str. 77, 50937 Köln

### Konventionelle ...

Topologische Ordnung ist ein in der Tat höchst ungewöhnliches Phänomen, das sich drastisch von konventioneller Ordnung unterscheidet, wie man sie beispielsweise im Bereich des Magnetismus von Ferromagneten kennt. Bei diesen ordnen sich die lokalen magnetischen Momente bei Abkühlung an, d. h. alle Spins zeigen bei niedrigen Temperaturen in die gleiche Richtung. Generell beschreibt man ein physikalisches System wie dieses in der Regel mit einem Hamiltonian, der insbesondere auch alle Symmetrien des Systems reflektiert. In konventionell geordneten Phasen kommt es zu *spontaner Symmetriebrechung*, d. h. der Grundzustand bricht eine oder mehrere Symmetrien des Systems. Insbesondere bedeutet dies, dass der Grundzustand weniger Symmetrie als der zugehörige Hamiltonian aufweist. Im Falle des Ferromagneten bricht der geordnete Zustand die kontinuierliche Rotationssymmetrie der magnetischen Momente am (thermischen) Phasenübergang. Die resultierende Ordnung mit endlicher Magnetisierung lässt sich somit lokal verstehen und auch gut durch kleine klassische Magnete (Pfeile) illustrieren.

Konventionelle Ordnung lässt sich allgemein durch lokale Ordnungsparameter charakterisieren, etwa die (lokale) Magnetisierung beim Ferromagneten. Ein endlicher Ordnungsparameter impliziert magnetische Ordnung, wohingegen ein verschwindender Ordnungsparameter signalisiert, dass ein System magnetisch ungeordnet ist. Insgesamt ist der Grundzustand eines typischen (unfrustrierten) Quantenmagneten nur leicht verschränkt und eine Abhängigkeit von der Topologie des Systems liegt definitiv nicht vor. Beispielsweise ist der Grundzustand eines Ferromagneten der unverschränkte Produktzustand  $|\uparrow\uparrow\dots\uparrow\rangle$ , in welchem alle Spins in die gleiche Richtung zeigen.

Systeme mit topologischer Ordnung, wie wir sie hier vorstellen werden, verhalten sich auf faszinierende Weise grundlegend anders. Elementare Eigenschaften solcher makroskopisch verschränkter Quantensysteme, wie die Anzahl der Grundzustände, hängen von der globalen Topologie ab: In diesem Sinne verhält sich ein topologisch geordnetes System auf einem Donut genau wie auf einer Kaffeetasse, aber verschieden auf einem Fußball. Im Folgenden stellen wir diese verrückt anmutenden Quantenwelten anhand der exakt lösbaren Kitaev-Modelle vor.

### ... und topologische Ordnung

Alexei Kitaev, Professor für Theoretische Physik am Caltech und Träger des kürzlich erstmals ausgelobten Fundamental Physics Preises, ist es gelungen, das heute nach ihm benannte Modell analytisch zu lösen. Eine derartige exakte Lösung eines elementaren quantenmechanischen Modells ist nicht nur ein äußerst ungewöhnlicher Einzelfall – Generationen an Physikern haben sich erfolglos an Lösungen der ähnlich einfach

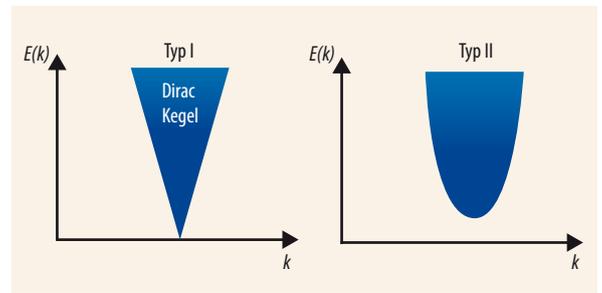


Abb. 2 Die masselosen Spinon-Anregungen der Spinflüssigkeiten vom Typ I bilden einen Dirac-Kegel (a), während das Energiespektrum für Typ II eine Anregungslücke aufweist – die elementaren Spin-Anregungen sind massiv (b). Spinflüssigkeiten von Typ II zeigen nichtlokale, topologische Ordnung.

anmutenden Heisenberg- oder Hubbard-Modelle versucht –, sondern auch deshalb bahnbrechend, weil die gefundenen quantenmechanischen Grundzustände lang gesuchte Beispiele für so genannte Quantenspinflüssigkeiten sind, die auch die oben schon erwähnte topologische Ordnung zeigen können.

Quantenspinflüssigkeiten sind recht unkonventionelle quantenmechanische Zustände, in denen die lokalen Momente hochgradig korreliert sind, aber dennoch jede Art von konventionellem Ordnungsverhalten und entsprechendem Phasenübergang vermeiden und bis zu den tiefsten Temperaturen stark fluktuieren [1].

Mittlerweile ist ein ganzer Zoo unterschiedlicher Quantenspinflüssigkeiten bekannt, welche sich grob in zwei Klassen unterteilen lassen: Zum einen sind das Spinflüssigkeiten, deren elementaren Anregungen, die so genannten Spinonen, masselos bleiben. Das Energiespektrum dieser Typ-I-Spinflüssigkeiten hat daher über dem quantenmechanischen Grundzustand keine Anregungslücke und weist oftmals eine lineare Energiedispersion auf (Dirac-Kegel, Abb. 2a). Die zweite große Klasse von Spinflüssigkeiten besitzt eine Anregungslücke zu massiven Quasiteilchen im Energiespektrum (Abb. 2b). Die auszeichnende Eigenschaft dieser Typ II-Spinflüssigkeiten ist aber die Ausprägung einer nichtlokalen, topologischen Ordnung, weshalb diese Phasen trotz endlicher Korrelationslänge langreichweitig verschränkt sind.

Um Quantenspinflüssigkeiten und topologischer Ordnung auf den Grund zu gehen, wollen wir nun Kitaevs Modell in seiner Honigwabengitter-Variante genauer beschreiben. Der elementare Freiheitsgrad in diesem Modell sind auf den Eckpunkten des Gitters lokalisierte Spins mit halbzahligem Spinquantenzahl,  $s = 1/2$  (Abb. 3a). Benachbarte Spins koppeln über eine Ising-artige Wechselwirkung, die jeweils eine parallele Ausrichtung der Spins entlang einer der drei möglichen Spinquantisierungsachsen in x-, y- oder z-Richtung favorisieren. Der Clou ist nun, dass diese bevorzugte Ausrichtung der Spins an die räumliche Orientierung der Austauschwechselwirkung gekoppelt ist, sodass die drei unterschiedlichen Orientierungen der Kanten im Honigwabengitter jeweils eine der drei Spinachsen bevorzugen und starke Austausch-

Frustration vorliegt. In der Form eines mikroskopischen Hamiltonians lässt sich dies wie folgt formalisieren

$$H_{\text{Kitaev}} = -\sum_{\langle j,k \rangle \in \{\alpha\text{-link}\}} J_\alpha \sigma_j^\alpha \sigma_k^\alpha, \quad (1)$$

wobei die Spinfreiheitsgrade durch die drei aus der Quantenmechanik bekannten Pauli-Matrizen  $\sigma^\alpha$  gegeben sind und  $\alpha = x, y, z$  die drei Richtungen im Spin- und Ortsraum parametrisieren. Die Summe läuft dabei über alle Paare nächster Nachbarn  $j$  und  $k$ , die abhängig vom Linktyp ( $\alpha$ -link) durch die Ising-Wechselwirkung  $\sigma_j^\alpha \sigma_k^\alpha$  mit  $\alpha \in \{x, y, z\}$  gekoppelt sind. Die Stärke der drei Austauschkopplungen  $J_\alpha$  soll im weiteren ferromagnetisch gewählt sein ( $J_\alpha \geq 0$ ), darf aber für die drei verschiedenen Kopplungen  $J_x, J_y$ , und  $J_z$  unterschiedlich stark sein. Dieses Modell ist aufgrund einer Vielzahl von Erhaltungsgrößen exakt lösbar [2]. Im resultierenden Grundzustandsphasendiagramm (bei  $T = 0$ ) findet man insgesamt vier ausgedehnte Phasen, die zwei von Natur aus verschiedene Quantenspinflüssigkeiten realisieren (Abb. 3b). Rund um den isotropen Punkt  $J_x = J_y = J_z$  erstreckt sich eine Spinflüssigkeit vom Typ I, in welcher das Energiespektrum lückenlos bleibt. Ähnlich zu Graphen, welches durch konventionelle elektronische Freiheitsgrade auf dem Honigwabengitter beschrieben wird, weist auch das Energiespektrum des Kitaev-Modells in dieser Phase zwei Dirac-Kegel auf, d. h. man findet eine relativistische (lineare) Energie-Impuls-Beziehung für die elementaren Spinon-Anregungen in dieser Spinflüssigkeit.

Die anderen drei Phasen im Kitaev-Modell sind Spinflüssigkeiten vom Typ II, sie zeigen also eine endliche Anregungslücke im Energiespektrum und bilden topologische Ordnung aus. Tatsächlich handelt es sich wegen der zyklischen Vertauschbarkeit der drei  $x$ -,  $y$ -,  $z$ -Richtungen bei allen drei Phasen um Repräsentanten derselben topologisch geordneten Spinflüssigkeit vom Typ II. Man kann alle drei Grenzfälle, in welchen eine der Kopplungen  $J_\alpha$  viel größer als die beiden anderen

Kopplungen ist, auf ein von Kitaev ursprünglich schon 1997 eingeführtes Modell abbilden, den so genannten Toric Code [2, 3]. Letzterer hat sich seitdem zu einem Standardmodell einer Spinflüssigkeit mit topologischer Ordnung entwickelt.

### Vom Quadratgitter zum Torus

Wir betrachten konkret den Grenzfall  $J_z \gg J_x, J_y$ , um die Verknüpfung zum Toric-Code-Modell zu beschreiben (Abb. 3c). In diesem Grenzfall erhält man schwach gekoppelte  $J_z$ -Ising-Dimere, die effektiv auf einem Quadratgitter angeordnet sind. Jeder dieser isolierten Ising-Dimere besitzt die beiden ferromagnetischen Konfigurationen mit Energie  $-J_z$  als zwei entartete Niederenergiezustände (die beiden antiferromagnetischen Konfigurationen haben jeweils die Energie  $+J_z$ ). Folglich tritt eine hohe Entartung an Grundzuständen auf, wenn man viele isolierte Dimere betrachtet. Der Einfluss der beiden anderen Kopplungen  $J_x$  und  $J_y$  lässt sich nun mit entarteter Störungstheorie untersuchen [2, 4]. Identifiziert man die beiden ferromagnetischen Konfigurationen mit den beiden Einstellungen eines Pseudo-Spins  $\tau = 1/2$ , findet man in vierter Ordnung Störungstheorie ein effektives Quantenspinmodell auf dem Quadratgitter der Ising-Dimere (Abb. 3c), das per Konstruktion dem Toric-Code-Modell von Kitaev entspricht [2, 3] und die Wechselwirkungen zwischen den ferromagnetischen Konfigurationen auf den Dimeren beschreibt.

Der Toric Code ist ebenso wie das gerade beschriebene Kitaev-Modell ein exakt lösbares Quantenspinmodell [3]. Es ist auf dem Quadratgitter definiert, wobei nun die Pseudo-Spins  $\tau$  auf den Kanten des Gitters lokalisiert sind (Abb. 4a). Der Toric Code besteht aus zwei verschiedenen Typen von Vierspinwechselwirkungen  $A_s$  und  $B_p$ , die sich aus obiger Störungstheorie vierter Ordnung zwischen den jeweils vier Plätzen der so genannten Sterne  $s$  und Plaketten  $p$  ergeben (Abb. 4a).

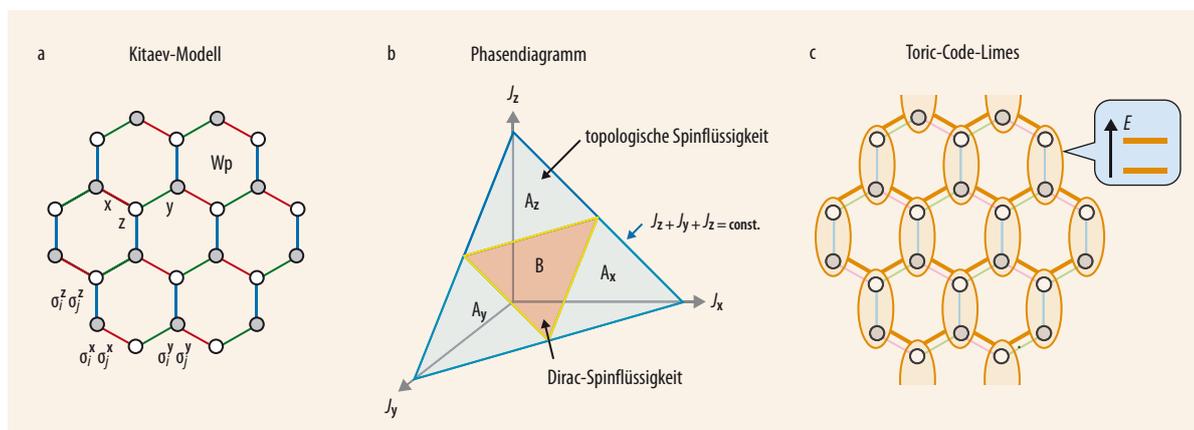


Abb. 3 Beim Kitaev-Modell auf dem Honigwabengitter (a) koppeln die Spins über Ising-artige Wechselwirkungen, die unterschiedliche Ausrichtungen favorisieren. In Abhängigkeit von den Kopplungskonstanten  $J_x, J_y$  und  $J_z$  mit

$J_x + J_y + J_z = -1$  weist das Phasendiagramm eine Phase vom Typ I und drei vom Typ II auf (b). Im Grenzfall  $J_z \gg J_x, J_y$  erhält man schwach gekoppelte Ising-Dimere (Ellipsen), die ein effektives Quadratgitter bilden (c). Das Inset zeigt das

Energiespektrum eines einzelnen Ising-Dimers, das aus den beiden ferromagnetischen (antiferromagnetischen) Konfigurationen mit Energie  $-J_z$  ( $+J_z$ ) besteht.

Der mikroskopische Hamiltonian des Toric Codes ist nun einfach die Summe aller Vierspinoperatoren  $-A_s$  und  $-B_p$  auf dem Gitter. Hierbei ist das Besondere, dass beliebige Operatoren im Toric Code kommutieren. Als Konsequenz hat man pro Stern- und Plaketten-Operator  $A_s$  und  $B_p$  eine Erhaltungsgröße mit Eigenwerten  $\pm 1$ , was eine exakte Lösung des Toric Codes ermöglicht. Grundzustände sind dann alle Zustände mit allen diesen Erhaltungsgrößen  $+1$ , da so die Gesamtenergie des Systems minimiert wird.

Die Anzahl der Grundzustände des Toric Codes hängt interessanterweise von der Topologie des zugrunde liegenden Gitters ab. Auf einer offenen Ebene sind alle Erhaltungsgrößen unabhängig und es existiert genau ein Grundzustand. Studiert man das gleiche Modell hingegen auf einem Torus – einer Topologie mit Genus  $g = 1$  – erhält man im Gegensatz zur offenen Ebene vier Grundzustände. Allgemein ist die Grundzustandsentartung  $4^g$ , sie wächst also exponentiell mit dem Genus der Topologie. Diese Abhängigkeit der Zahl der entarteten Grundzustände von der Topologie des zugrundeliegenden Gitters ist eine zentrale Charakteristik für topologische Ordnung und illustriert anschaulich ihren nichtlokalen Charakter. Letzterer offenbart sich auch in der quantenmechanischen Verschränkung der Spinfreiheitsgrade – man spricht dabei von einer makroskopischen Verschränktheit im Gegensatz etwa zum unverschränkten Ferromagneten (Abb. 5).

Die vier Grundzustände auf dem Torus lassen sich durch die Quantenzahlen  $\pm 1$  so genannter Loop-Operatoren unterscheiden, die auch wieder Erhaltungsgrößen darstellen (Abb. 4b). Diese Loop-Operatoren entsprechen Produkten von Pauli-Matrizen auf genau den Plätzen des Gitters, die sich entlang der zwei nicht kontrahierbaren Schnitte eines Torus um das gesamte System winden und somit in der Lage sind, die globale Topologie des Systems zu spüren. Tatsächlich rührt der Name „Toric Code“ von der weiterführenden Idee Kitaevs her, die vier Grundzustände auf dem Torus als topologisch geschützten Quantenspeicher für zwei Quanten-Bits zu nutzen. Hierbei entsprechen die Quantenzahlen  $\pm 1$  jeweils eines Loop-Operators den beiden Einstellungen eines Quanten-Bits. Das Besondere ist nun, dass die Information in einer nicht-lokalen (topologischen) Größe gespeichert ist, die per Konstruktion robust gegenüber jeglichen lokalen Störungen ist.

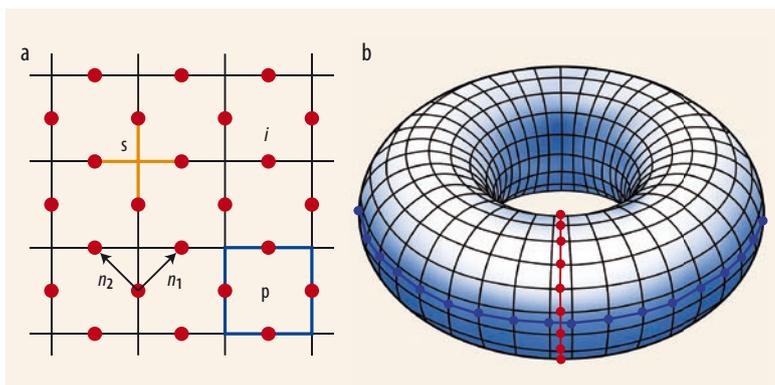


Abb. 4 Das Toric-Code-Modell ist auf einem Quadratgitter definiert, wobei die Spin-1/2-Freiheitsgrade an den Kanten des Gitters (rote Kreise) lokalisiert sind (a). Die beiden Operatortypen  $A_s$  und  $B_p$  sind auf den orangen Sternen  $s$  bzw. dem blauen Plaketten  $p$  definiert. Die beiden nicht kontrahierbaren Loop-Operatoren wirken auf den roten bzw. blauen Plätzen auf dem Torus.

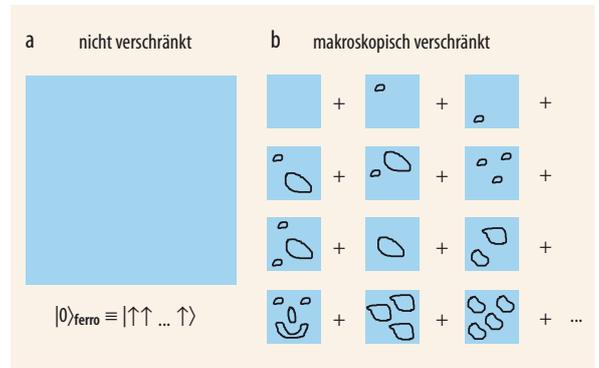


Abb. 5 Wenn man die Zustände  $|\uparrow\rangle$  bzw.  $|\downarrow\rangle$  eines zweidimensionalen Magneten mit Spin 1/2 mit blauer bzw. schwarzer Farbe illustriert, dann entspricht der nicht-verschränkte ferromagnetische Grundzustand  $|0\rangle_{\text{ferro}} \equiv |\uparrow\uparrow\dots\uparrow\rangle$  bei  $T=0$  einer homogenen blauen Fläche (a). Der makroskopisch-verschränkte Grundzustand des Toric Codes (b) entspricht hingegen der gleichgewichteten Überlagerung aller Zustände mit geschlossenen Schleifen aus geflippten Spins  $|\downarrow\rangle$  relativ zu  $|0\rangle_{\text{ferro}}$ .

### Unkonventionelle Phasenübergänge

Die Manifestierung topologischer Ordnung im Toric Code und im Kitaev-Modell wirft aufgrund des unkonventionellen, nicht-lokalen Charakters dieser Ordnung eine Reihe substanzieller Fragen auf: Wie kann man die Entstehung solcher Ordnung verstehen? Lassen sich die gut verstandenen Theorien zur Bildung quantenmechanischer Ordnung auch für diese Phasen nutzen? Gibt es neue quantenkritische Phänomene, die mit der Bildung topologischer Ordnung einher gehen?

Konventionelle Ordnung lässt sich wie oben schon erwähnt, durch lokale Ordnungsparameter charakterisieren, etwa die lokale Magnetisierung im Falle eines Ferromagneten. Ein verschwindender Ordnungsparameter signalisiert, dass ein System ungeordnet ist, wohingegen ein endlicher Ordnungsparameter eine Ordnung impliziert. Auf dem Konzept des lokalen Ordnungsparameters basiert die sehr erfolgreiche Theorie der kontinuierlichen Phasenübergänge nach Ginzburg und Landau.

Topologische Ordnung kann nicht durch lokale Ordnungsparameter klassifiziert werden, da die physikalischen Eigenschaften dieser makroskopisch-verschränkten Phasen von der globalen Topologie abhängen. Gleichzeitig findet man – im kompletten

Gegensatz zu spontaner Symmetriebrechung –, dass der Grundzustand eine *höhere* Symmetrie aufweist als der zugehörige Hamiltonian des Systems. Folglich ist die Theorie der Phasenübergänge nach Ginzburg und Landau nicht anwendbar, sodass die Suche nach einer allgemeineren Theorie der Phasenübergänge aktuell in den Fokus der Forschung gerückt ist.

Als eine Art Drosophila für einen Quantenphasenübergang zwischen einer topologischen und einer konventionellen Phase hat sich das Studium des Toric Codes in einem externen Magnetfeld etabliert [5]. Für starke Magnetfelder erwartet man eine konventionelle Phase, in der die Spins im wesentlichen in Magnetfeldrichtung zeigen, d. h. es liegt definitiv kein topologisch geordneter und hochverschränkter Grundzustand vor. Als Konsequenz muss es mindestens einen Quantenphasenübergang als Funktion der Stärke des Magnetfeldes geben.

Interessanterweise findet man schon in diesem paradigmatischen Beispiels eines Systems mit topologischer Ordnung ein sehr reichhaltiges Phasendiagramm [5]. Der Zusammenbruch der topologischen Phase kann, abhängig von der Richtung des Magnetfeldes, sowohl ein Phasenübergang erster als auch zweiter Ordnung sein. Insbesondere die Möglichkeit, neues quantenkritisches Verhalten aufgrund der exotischen Eigenschaften topologisch geordneter Systeme zu finden, ist hier von besonderem Interesse.

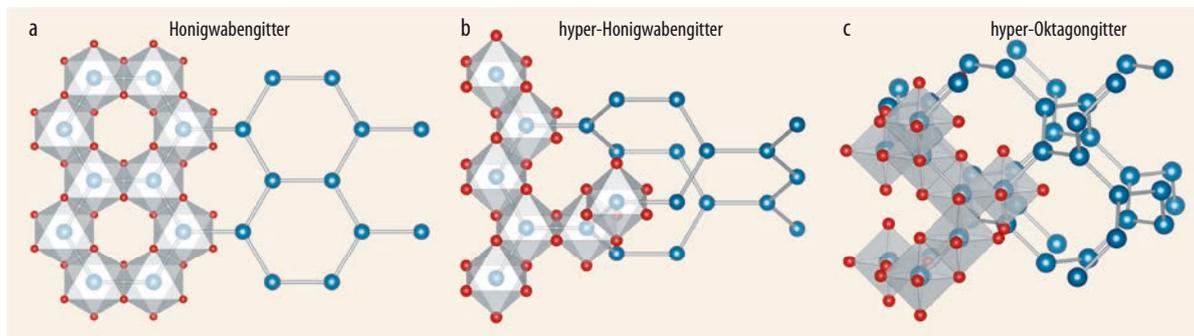
### Vom Modell zu Materialien

Die eben beschriebene reichhaltige Physik der Kitaev-Modelle hat eine Suche nach experimentell zugänglichen Realisierungen gestartet. Während erste Ansätze die Idee verfolgten, die mikroskopischen Wechselwirkungen in optischen Gittern oder supraleitenden Schaltkreisen zu konstruieren, konzentriert sich die Suche heute auf festkörperbasierte Systeme. Dabei sind insbesondere 5d-Übergangsmetalloxide wie die Iridate oder Osmate in den Fokus gerückt, deren Physik von einem komplexen Wechselspiel zwischen elektronischen Korrelationen, starker Spin-Bahn-Wechselwir-

kung und verschiedensten Kristallfeld-Effekten dominiert wird. Die eher zufällige energetische Balance dieser drei konkurrierenden Kräfte wird in verschiedenen 5d-Materialien unterschiedlich aufgelöst, was zu einer großen Vielfalt an elektronischen Zuständen führt.

Wir wollen uns hier auf ein besonders interessantes Szenario einschränken, welches sich etwa in den Iridaten  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ ,  $\text{Na}_2\text{IrO}_3$  oder  $\text{Li}_2\text{IrO}_3$  ergibt – die Bildung von neuartigen Mott-Isolatoren, deren lokale Freiheitsgrade effektive Quantenspins  $j = 1/2$  sind, die aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung zustande kommen. Diese Systeme zeichnen sich insbesondere auch durch eine ungewöhnliche Form der Wechselwirkungen zwischen eben jenen Spins aus. Wie die Gruppe um Giniyat Khaliullin am Max-Planck-Institut für Festkörperforschung in Stuttgart zeigen konnte, beinhaltet diese nicht nur eine aus dem Quantenmagnetismus wohlbekannte Heisenberg-Wechselwirkung, welche alle Komponenten zweier benachbarter  $j = 1/2$ -Spins gleichermaßen koppelt [6]. Hinzu kommt auch eine hochgradig anisotrope Wechselwirkung, welche bestimmte Komponenten zweier benachbarter  $j = 1/2$ -Spins einer Ising-Wechselwirkung ähnlich koppelt – mit der Besonderheit, dass die Vorzugsachse mit der räumlichen Orientierung des Austauschpfades verbandelt ist und auf die orbitalen Beiträge der effektiven Spins zurückzuführen ist.

Für eine hexagonale Anordnung der Iridium-Ionen ergibt dieser anisotrope Austausch dann eben jenes Kitaev-Modell auf dem Honigwabengitter, welches wir oben besprochen haben. Auf der Materialseite findet sich eine derartige hexagonale Anordnung der Iridium-Ionen in den geschichteten Iridaten  $\text{Na}_2\text{IrO}_3$  und  $\text{Li}_2\text{IrO}_3$ , wie sie erstmals in den Arbeitsgruppen rund um Hidenori Takagi am Max-Planck-Institut für Festkörperforschung in Stuttgart und jener um Philipp Gegenwart an der Universität Augsburg synthetisiert wurden. Die schnelle Verfügbarkeit hochwertiger (Ein-)Kristalle hat insbesondere zu einem großen Fundus experimenteller Daten geführt, welcher nun im Wechselspiel mit Ab-initio-Rechnungen und modellbasierten Analysen zu einer sehr produktiven Diskussion der tieferliegenden Ordnungsmechanismen dieser



**Abb. 6** In den Iridaten  $\text{Na}_2\text{IrO}_3$  und  $\text{Li}_2\text{IrO}_3$  formen die von oktaedrischen Sauerstoffkäfigen (rot) umgebenen Iridium-Atome (blau) Gitter mit Koordinationszahl drei in zwei- und dreidimensionalen Anordnungen. Für beide Materialien

wurden geschichtete Lagen hexagonaler Anordnungen in einem Honigwabengitter synthetisiert (a).  $\text{Li}_2\text{IrO}_3$  wurde kürzlich auch in einer zweiten kristallinen Variante gewachsen, in der die Iridium-Atome im dreidimensionale hyper-

Honigwabengitter angeordnet sind (b). Das ebenfalls drei-koodinierte hyper-Oktagongitter wurde theoretisch als weitere alternative Konfiguration für  $\text{Li}_2\text{IrO}_3$  vorgeschlagen (c).

ungewöhnlichen Spin-Bahn-gekoppelten Systeme geführt hat.

Durch den Austausch mit den Materialwissenschaftlern hat sich erst in den letzten Monaten ein weiteres, völlig neues Terrain erschlossen, das viele weitere experimentelle wie theoretische Durchbrüche hoffen lässt – die unerwartete Synthetisierung von Materialien, in denen die Iridium-Ionen dreidimensionale Gitterstrukturen formen, welche die für das Honigwabengitter charakteristische Dreifachkoordinierung aller Gitterplätze aufweisen und somit eine direkte Verallgemeinerung des Kitaev-Modells in drei Dimensionen erlauben.

Ausgelöst wurde diese Entdeckung durch die Versuche, hochwertige Einkristalle für das  $\text{Li}_2\text{IrO}_3$ -System zu wachsen – was wegen der hohen Mobilität der Li-Ionen während des Wachstumsprozesses eine große Herausforderung darstellt. Bei der Verfeinerung dieser Wachstumsprozesse wurden unabhängig voneinander in den Arbeitsgruppen von Hidenori Takagi in Stuttgart und jener um James Analytis in Berkeley eben jene neuartigen kristallinen Formen von  $\text{Li}_2\text{IrO}_3$  gefunden, welche diese besondere dreidimensionale, trikoordinierte Form des Iridium-Gitters aufweisen [7] (Abb. 6).

Unser Verständnis der Physik solcher dreidimensionaler Kitaev-Modelle, welche sich ähnlich zu ihrem zweidimensionalen Vorfahren analytisch exakt untersuchen lassen, ist erst am Anfang. Doch Interessantes zeichnet sich bereits nach den ersten Schritten ab – so hat die Konstruktion derartiger 3D-Modelle eine Quantenspinflüssigkeit als Grundzustand eines analytisch lösbaren, mikroskopischen Modells [8] hervorgebracht, deren elementare Spinonanregungen durch eine Fläche im Impulsraum beschrieben werden können – ähnlich zu der Fermi-Fläche der elementaren Anregungen eines Metalls. Derartige Spinflüssigkeiten mit einer *Spinon-Fermi-Fläche* werden seit langem als Grundzustände einer ganzen Reihe anderer frustrierter Quantenmagnete vermutet, sodass die Gewissheit, ein derartiges Modellsystem nunmehr theoretisch festgemacht zu haben, sicherlich ihren ganz eigenen Beitrag dazu liefert, die alltägliche Frustration des einen oder anderen Physikers zu mindern.

## Fazit

Die Physik topologisch geordneter Quantenmagnete ist überaus vielfältig und stellt in all ihren Facetten einen wichtigen Baustein der modernen Festkörperphysik dar. In diesem Übersichtsartikel haben wir aktuelle Entwicklungen in diesem Gebiet beleuchtet, wobei

wir ausgehend von den analytisch lösbaren Kitaev-Modellen einen Einblick in aktuelle Forschungsfragen gegeben haben – etwa die Untersuchung des quantenkritischen Verhaltens beim Zusammenbruch topologisch geordneter Phasen oder die aktive Suche nach experimentellen Realisierungen von Kitaev-Modellen. Dieses sich rasch entwickelnde Forschungsfeld an der Grenze zwischen Grundlagenforschung, Materialwissenschaften und Quanteninformation mit interdisziplinären Verbindungen zu Mathematik und Informatik verspricht sicherlich noch einige spannende Entdeckungen in der nahen Zukunft.

## Literatur

- [1] L. Balents, *Nature* **464**, 199 (2010)
- [2] A. Kitaev, *Ann. Phys.* **321**, 2 (2006)
- [4] K.P. Schmidt, S. Dusuel und J. Vidal, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 057208 (2008)
- [3] A. Kitaev, *Ann. Phys.* **303**, 2 (2003)
- [5] S. Trebst, P. Werner, M. Troyer, K. Shtengel und C. Nayak, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 070602 (2007); S. Dusuel, M. Kamfor, R. Orus, K. P. Schmidt und J. Vidal, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 107203 (2011)
- [6] G. Jackeli und G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 017205 (2009); J. Chaloupka, G. Jackeli und G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 027204 (2010)
- [7] K. A. Modic et al., *Nature Communications* **5**, 4203 (2014); T. Takayama et al., *Phys. Rev. Lett.* **114**, 077202 (2015)
- [8] M. Hermanns und S. Trebst, *Phys. Rev. B* **89**, 235102 (2014)

## DIE AUTOREN

**Kai Phillip Schmidt** (FV Tiefe Temperaturen) studierte in Bonn und Sydney, promovierte in Köln und absolvierte einen Postdoc an der EPF Lausanne im Bereich stark korrelierter Quantensysteme. Dank eines European Young Investigator Awards übernahm er 2008 die Leitung einer Forschungsgruppe an der Technischen Universität Dortmund. Er beschäftigt sich mit emergenten und kollektiven Quantenphänomenen in Vielteilchensystemen der kondensierten Materie, in der Atomphysik und in Modellen für Quanteninformation.



**Simon Trebst** (FV Tiefe Temperaturen) befasst sich seit seiner Promotion in Bonn und einem Postdoc an der ETH Zürich mit numerischen Simulationen quantenmechanischer Vielteilchensysteme. Er verbrachte mehrere Jahre am Microsoft Research Lab „Station Q“ an der UCSB in Santa Barbara, wo sein Interesse an topologischen Aspekten der Festkörperphysik und Quanteninformationsverarbeitung geweckt wurde. 2012 folgte er einem Ruf auf eine Professur für Theoretische Physik an der Universität zu Köln.

