Ultrakalt vom Metall zum Isolator

Fermionische Atome im optischen Gitter können einen Quantensimulator für korrelierte Elektronen bilden und erlauben den kontrollierten Übergang zum Mott-Isolator.

n einem idealen Kristall finden Elektronen ein periodisches Potential mit kontinuierlichen Energiebändern vor. Ist das Valenzband nur teilweise gefüllt, kann ein elektrisches Feld Elektronen in höhere Zustände anregen, und der Kristall leitet metallisch. Trennt jedoch eine Energielücke das volle Valenzband vom höher liegenden Leitungsband, so liegt ein Band-Isolator vor. In vielen Materialien stören mehrere Faktoren dieses einfache Bild der elektrischen Leitfähigkeit. Einer davon ist die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen. Sie kann zu starken Korrelationen der Elektronen untereinander führen und damit die Tendenz zum Metall so stark unterdrücken, dass die Elektronen einen isolierenden Zustand annehmen, den Mott-Isolator [1]. Solche stark korrelierten elektronischen Zustände stellen große Herausforderungen an die Quanten-Vielteilchentheorie und sind zugleich grundlegend, um neue Materialien und deren faszinierende Eigenschaften zu verstehen. Dazu zählen die Hochtemperatur-Supraleitung in den Kupferoxid-Keramiken, moderne

Heteroschichtstrukturen sowie Quantenpunktsysteme.

Ein wichtiger Schritt hin zum Verständnis komplexer Systeme liegt oft darin, ein Modell zu formulieren, das wesentliche Aspekte betont. Für stark korrelierte Elektronen nimmt das Hubbard-Modell diese Stellung ein [2]. Es beschreibt das Tunneln von Elektronen in einem Gitter in Gegenwart der Coulomb-Wechselwirkung, die auf eine lokale Abstoßung reduziert ist. In diesem Modell entsteht der Mott-Isolator, weil die Elektronen lokalisiert werden, um der gegenseitigen Abstoßung zu entgehen. Das ist einsichtig bei halber Füllung des Gitters: Im Mott-Isolator besetzt je ein Elektron einen Gitterplatz, und das Tunneln ist aufgrund der lokalen Abstoßung stark unterdrückt.

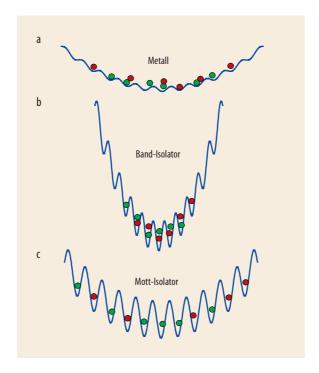
Virtuelles Tunneln kann zudem – je nach Gitterstruktur – eine antiferromagnetische Ordnung hervorrufen. Dabei sind die Spins benachbarter Elektronen entgegengesetzt, und der Spinaustausch verläuft über doppeltbesetzte virtuelle Zwischenzustände. Auch exotische Spinflüssigkeiten sind bei entspre-

chender Gitterstruktur möglich. Weiterhin gibt es Vorhersagen, wonach das Hubbard-Modell bei Dotierung jenseits von halber Füllung zu supraleitenden Zuständen führt, was im Hinblick auf den noch nicht verstandenen Mechanismus der Supraleitung in den Kupraten von großer Bedeutung ist [3].

In realen Materialen sind die elektronischen Verhältnisse komplexer als in dem idealisierten Hubbard-Modell. Eine Vielzahl elektronischer Bänder, die Kopplung an Phononen, Verunreinigungen und Unordnung im Kristallgitter sowie die lange Reichweite der Coulomb-Wechselwirkung beeinflussen das Verhalten. Da schon die theoretische Behandlung des Hubbard-Modells äußerst komplex ist, wäre es ein großer Fortschritt, dieses Modell in einer kontrollierten, von Verunreinigungen freien Form realisieren zu können.

In diesem Zusammenhang werden seit Jahren ultrakalte Atome in optischen Gittern diskutiert - besonders, nachdem es 2002 erstmals gelungen war, 87Rb-Atome eines Bose-Einstein-Kondensats in einen Mott-isolierenden Zustand zu bringen [4]. Dies war eine Realisierung des Bose-Hubbard-Modells, ein Modell korrelierter Bosonen statt Fermionen, das auch Anordnungen von Josephson-Kontakten und granulare Supraleiter beschreibt. Nun ist es gelungen, einen Mott-Isolator fermionischer 40K-Atome zu erzeugen und überzeugend zu identifizieren [5]. Dieses Experiment der Gruppe um Immanuel Bloch an der Universität Mainz ergänzt einen früheren Ansatz von Tilman Esslinger und Mitarbeitern an der ETH Zürich, den Mott-Isolator aus 40K-Atomen über die Reduktion doppelt besetzter Gitterplätze nachzuweisen [6].

Man mag sich verwundert fragen, wie neutrale Atome die Coulomb-Abstoßung der geladenen Elektronen simulieren können. Für die Physik des Hubbard-Modells



Je nach der Stärke des Fallenpotentials (Einhüllende der blauen Kurve), dem Gitterpotential (Oszillationen der blauen Kurve) sowie der lokalen Abstoßung treten unterschiedliche Phasen von ultrakalten ⁴⁰K-Atomen auf. Die Atome befinden sich in zwei Hyperfeinzuständen (rote und grüne Kreise) im Zentrum einer harmonischen Falle (hier auf eine Dimension reduziert dargestellt).

reicht jedoch eine lokale Abstoßung aus, die in Atomgasen aufgrund interatomarer Wechselwirkung gegeben ist. Zudem erlaubt eine Feshbach-Resonanz, diese Wechselwirkung kontrolliert einzustellen, zwischen schwacher und dominanter Abstoßung. Bei dem Experiment befinden sich bis zu 250 000 ⁴⁰K-Atome, die jeweils zur Hälfte zwei entartete Hyperfeinzustände besetzen, in einer optischen Falle. Mithilfe der Verdampfungskühlung sinkt ihre Temperatur auf ca. 15 % der Fermi-Temperatur des schwach wechselwirkenden Gases, bevor die effektive Wechselwirkung und das optische Gitter eingestellt werden.

Der Mott-Isolator sowie andere Phasen des Systems lassen sich nachweisen, indem man die Kompressibilität der gefangenen Atome direkt über eine Variation des Fallenpotentials misst – dies ist ein Vorteil gegenüber Elektronen in einem Kristallgitter, wo dies naturgemäß nicht möglich ist. Ein Vergleich mit Rechnungen

erlaubt es dann, die Phasen zu identifizieren. Diese Rechnungen haben Theoretiker der Universität Köln und des Forschungszentrums Jülich mit modernen Methoden der Quanten-Vielteilchentheorie – der Dynamischen-Molekularfeld-Theorie (DMFT) [7] - durchgeführt. Auf diese Weise lassen sich drei Phasen unterscheiden (Abb.) [5]: (a) ein metallischer Zustand bei schwacher Wechselwirkung und flacher Falle, (b) ein Band-Isolator mit Doppelbesetzung aller Gitterplätze im zentralen Bereich einer tiefen Falle, sowie (c) der Mott-Isolator bei dominanter Wechselwirkung, mit einer Besetzung von einem Atom pro Gitterplatz im zentralen Bereich. In allen Fällen sinkt die Füllung aufgrund des harmonischen Fallenpotentials weiter außen auf

Mit dem Nachweis eines fermionischen Mott-Isolators in einem optischen Gitter ist ein erster Schritt hin zu einem Quantensimulator aus kalten Atomen für komplexe elektronische Systeme getan.
Bemerkenswerte Perspektiven
wären ein Quantensimulator für
Hochtemperatur-Supraleiter und
Untersuchungen zum Quantenmagnetismus. Ein nächster großer
Schritt in diese Richtung wäre die
Beobachtung einer antiferromagnetischen Anordnung der beiden
Hyperfeinzustände im optischen
Gitter. Hierzu müssen die Atome
jedoch auf noch tiefere Temperaturen gebracht werden, aber auch
dazu gibt es schon neue Ideen.

Stefan Wessel

- [1] *N. F. Mott*, Metall-Insulator Transitions, Taylor & Francis (1990)
- [2] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London Ser. A 276, 238 (1963)
- [3] P. A. Lee, N. Nagaosa und X.-G. Wen, Rev. Mod. Phys. **78**, 17 (2006)
- [4] M. Greiner et al., Nature 415, 39 (2002)
- [5] *U. Schneider* et al., Science **322**, 1520 (2008)
- [6] R. Jördens et al., Nature 455, 204 (2008)
- [7] A. Georges et al., Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996)

Priv.-Doz. Stefan Wessel, Ph.D., Institut für Theoretische Physik III, Universität Stuttgart, 70550 Stuttgart