

Elektronische Korrelationen und Magnetismus

Von Dieter Vollhardt

Was versteht man eigentlich unter elektronischen Korrelationen und Magnetismus? Diese Begriffe werden im folgenden Beitrag erklärt. Dabei wird insbesondere auch auf die Rolle der theoretischen Physik bei der Klärung grundlegender Fragestellungen eingegangen.

Einleitung

Das Phänomen des Magnetismus ist der Menschheit schon seit Tausenden von Jahren bekannt. Tatsächlich ist die Geschichte der Naturwissenschaften zum großen Teil eine Geschichte des Magnetismus. Bis in das letzte Jahrhundert hinein war Magnetismus eine geheimnisvolle Erscheinung. Die Anziehung und Abstoßung zweier Magnete wurde als Allegorie für die Liebe und Abneigung zwischen den Menschen verstanden. Aus diesem Grund hat der Magnetismus als Begriff sogar Eingang in die frühe Medizin und Psychologie gefunden. Und selbst heute noch ist der Magnetismus als Erscheinungsform von einem gewissen Schleier des Magischen umgeben.

Der Magnetismus fester Körper, wie er zum Beispiel im Hufeisenmagneten auftritt, ist für unser tägliches Leben mittlerweile von nicht zu unterschätzender Bedeutung. Wer weiß schon, daß allein in einem modernen Kraftfahrzeug bis zu 70 Permanentmagnete eingebaut sind? Der Magnetismus ist insbesondere unverzichtbare Grundlage der Computertechnologie und Informationsspeicherung, des Telefons, des Fernsehens und der so hilfreichen Magnetspinresonanz in der Medizin. Um den Ursprung des

Magnetismus verstehen zu können, müssen wir uns zunächst die Struktur der Materie und insbesondere des Festkörpers in Erinnerung rufen.

Elektronen, Atome, Festkörper

Festkörper sind durch eine regelmäßige, mehr oder weniger starre Anordnung makroskopisch vieler Atome (ca. 10^{22} Teilchen pro cm^3) charakterisiert. Atome bestehen aus einem Kern und der ihn umgebenden Elektronenhülle. Die meisten dieser Elektronen sind fest gebunden. Wenn überhaupt, sind nur wenige Elektronen pro Atom in einem beweglichen Zustand. Trotzdem kommt diesen Elektronen, gerade weil sie die einzigen beweglichen Teilchen sind, eine besondere Bedeutung zu. Tatsächlich bestimmen die Elektronen die thermischen, elektrischen und magnetischen Eigenschaften eines Festkörpers maßgeblich.

Elektronen sind negativ geladene Teilchen. Ihnen ist von der Natur außerdem eine magnetische Richtung vorgegeben. Letztere Eigenschaft gibt es auch in makroskopischen Systemen: Ein Stabmagnet (z. B. eine Kompaßnadel) besitzt aufgrund seines Nord- und Südpols eine magnetische Richtung, die sich in einem äußeren Magnetfeld nach einer gewissen Einschwingphase allmählich, d. h. kontinuierlich, in Richtung dieses Feldes ausrichtet. Im Gegensatz dazu gibt es für die magnetische Richtung eines Elektrons genau zwei diskrete Einstellungsmöglichkeiten: entweder exakt parallel oder exakt antiparallel zum äußeren Feld, wobei die parallele Richtung bevorzugt wird. Diese Quantisierung bestimmter Größen, hier der magnetischen Richtung eines elementaren Teil-

chens, ist typisch für die auf atomarer Skala gültige Physik – die Quantentheorie. Ein Elektron ist also ein Elementarmagnet, dessen zwei Einstellungsmöglichkeiten bezüglich eines Magnetfeldes man mit "nach oben" und "nach unten" bezeichnen kann; dies läßt sich durch die Pfeilsymbole \uparrow und \downarrow veranschaulichen. Zusammenfassend können wir zunächst feststellen, daß viele Eigenschaften von Festkörpern wesentlich durch die Elektronen, genauer gesagt, durch deren negative elektrische Ladung und ihre magnetische Richtung bestimmt werden.

Das Wechselwirkungsproblem

Geladene Teilchen wechselwirken miteinander – sie stoßen sich aufgrund der elektrischen Kräfte ab oder ziehen sich an. Auch zwischen den magnetischen Richtungen der Elektronen und Ionen gibt es Wechselwirkungen, die im allgemeinen aber viel schwächer sind als diejenigen zwischen Ladungen. Die 10^{22} Elektronen und Ionen führen deshalb zu einem überaus komplizierten Vielteilchen-Wechselwirkungsproblem. Dazu kommt noch, daß sich dieses Problem nur im Rahmen der Quantentheorie korrekt behandeln läßt. Das gilt insbesondere für die sich im Festkörper bewegenden Elektronen. Jedes Elektron läßt sich im einfachsten Fall durch seinen Ort und seine magnetische Richtung beschreiben.

Die Bewegung der Elektronen wird aber nicht nur durch die oben beschriebenen Wechselwirkungen, sondern auch noch durch das Paulische Ausschließungsprinzip, ein Fundamentalprinzip der Quantentheorie, beeinflusst: In einem gegebenen System dürfen zwei

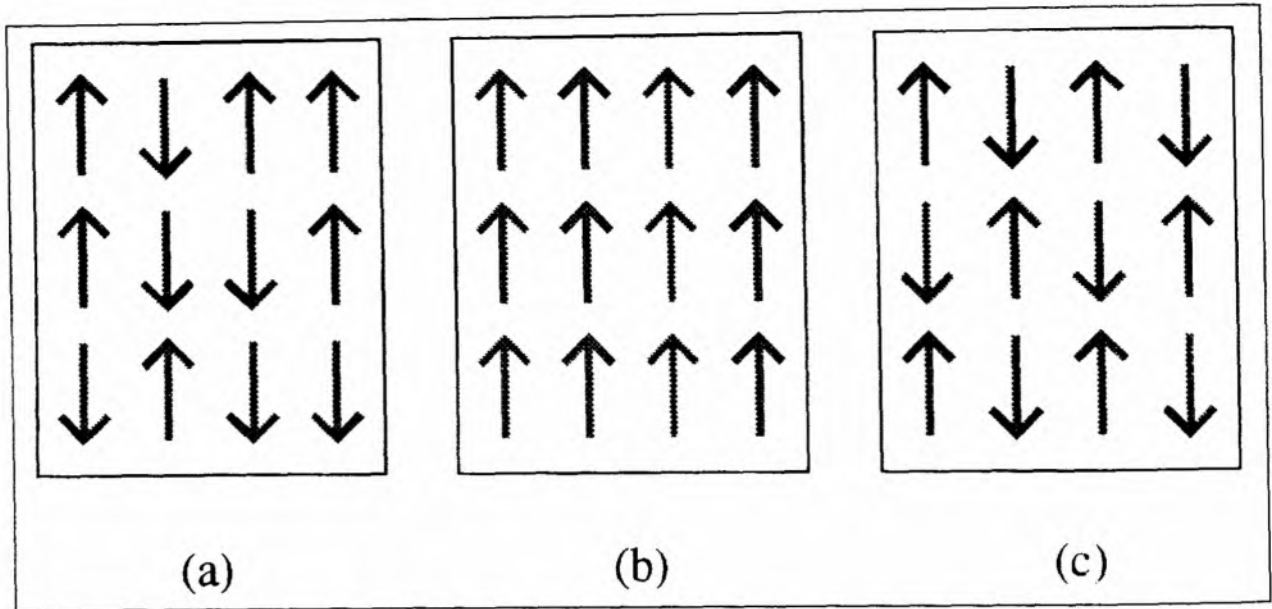


Abb. 1: Schematische Darstellung verschiedener Ordnungszustände der magnetischen Richtung der Elektronen im Festkörper:
 a) unmagnetisch (ungeordnete Verteilung gleich vieler \uparrow - und \downarrow -Elektronen),
 b) ferromagnetisch (alle magnetischen Richtungen zeigen in dieselbe Richtung),
 c) antiferromagnetisch (alternierende Anordnung der magnetischen Richtung auf benachbarten Gitterplätzen)

Elektronen nicht in allen physikalischen Eigenschaften übereinstimmen. Im vorliegenden Fall bedeutet das, daß zwei Elektronen – selbst wenn sie gar keine Wechselwirkung ihrer Ladungen spüren würden – nur dann am selben Ort sein können, wenn sie sich in ihrer zweiten Eigenschaft – der magnetischen Richtung – unterscheiden. Dementsprechend können sich zwei Elektronen überhaupt nur dann sehr nahe kommen, wenn ihre beiden magnetischen Richtungen entgegengesetzt sind: hat das eine Elektron die Richtung \uparrow , so muß das andere in die Richtung \downarrow zeigen. Hier beobachten wir, daß die Ladungswchselwirkung, die von der magnetischen Richtung zweier Elektronen eigentlich völlig unabhängig ist, aufgrund des Pauli-Prinzips sehr wohl zu einer Beeinflussung dieser magnetischen Richtungen führen kann.

Wechselwirkungen zwischen mikroskopischen kleinen Teilchen können in Verbindung mit der Größe eines Festkörpers zu faszinierenden physikalischen Erscheinungen führen, wie z. B. zum Magnetismus, zu Metall-Isolator-Übergängen und zur Supraleitung. Man spricht hier von „kooperativen Phäno-

menen“, da makroskopisch viele Teilchen zusammenwirken. Auf die beiden erstgenannten Erscheinungen und die theoretischen Erklärungsmöglichkeiten möchte ich in diesem Beitrag näher eingehen.

Magnetismus

In Abwesenheit eines äußeren Magnetfelds sind die magnetischen Richtungen der Elektronen in Festkörpern im allgemeinen ungeordnet. Dies ist in Abb. 1a dargestellt: Die mit \uparrow - und \downarrow -Pfeilen angedeuteten magnetischen Richtungen der einzelnen Elektronen sind mehr oder weniger zufällig verteilt; außerdem gibt es im Mittel genauso viele \uparrow - wie \downarrow -Richtungen.

Der Festkörper ist dann unmagnetisch. In der Natur werden bekanntlich aber auch magnetische Zustände beobachtet. Das setzt voraus, daß die magnetischen Richtungen der Elektronen im Festkörper räumlich geordnet sind. Am bekanntesten ist der Magnetismus des Eisens („Ferromagnetismus“), wie er z. B. im Hufeisenmagneten vorliegt. In diesem Fall sind die magnetischen Richtungen der Elektronen alle mehr oder weniger

parallel ausgerichtet: Ihre Summe ergibt dann eine meßbare Gesamtmagnetisierung (Abb. 1b).

Daneben gibt es aber noch viele andere mögliche Ordnungszustände, z. B. den „Antiferromagnetismus“. Hier alternieren die magnetischen Richtungen benachbarter Elektronen, so daß zwar eine räumliche Ordnung, aber keine Gesamtmagnetisierung vorliegt (Abb. 1c). Von allen kooperativen Phänomenen ist der Ferromagnetismus wahrscheinlich der Menschheit am längsten bekannt. Schon vor mehr als 2800 Jahren wurden in griechischen Schriften die ungewöhnlichen Eigenschaften des Magnetits (Eisenoxid) im Detail beschrieben, und seitdem wurde versucht, den Ursprung des Ferromagnetismus zu erklären.

Mit Magnetismus werden solche physikalischen Phänomene bezeichnet, die sich aus der räumlichen Ordnung der magnetischen Richtungen mikroskopischer Teilchen (meistens der Elektronen) ergeben. Diese Ordnungszustände beruhen auf Wechselwirkungen zwischen den Teilchen. Die Existenz magnetischer Richtungen

läßt sich nur im Rahmen der Quantentheorie verstehen.

Während der Ferromagnetismus also schon seit langem bekannt ist, wurde der Antiferromagnetismus erst 1932 von Néel postuliert. Erstaunlicherweise ist aber der mikroskopische Ursprung des antiferromagnetischen Ordnungszustandes, obwohl dieser komplizierter aussieht als der ferromagnetische, heute besser verstanden als der Ursprung des Ferromagnetismus in Eisen oder anderen metallischen Ferromagneten wie Kobalt und Nickel. (Ferromagnetismus ist auch keineswegs die häufigste Form des Magnetismus). Die Gründe für die Schwierigkeiten, die Ursachen des metallischen Ferromagnetismus im mikroskopischen Detail zu verstehen, sind relativ leicht einzusehen; sie sind auch schon seit fast 70 Jahren – aufbauend auf Arbeiten von Heisenberg und Bloch – bekannt. Wird magnetisches Eisen erhitzt, so verschwindet der ferromagnetische Zustand oberhalb der sogenannten Curie-Temperatur von 1043 Kelvin ($\approx 770^\circ\text{C}$). Dieser charakteristischen Temperatur entspricht eine Energie, die typisch für die Ladungswechselwirkung zwischen den Elektronen ist. Damit wird deutlich, daß es gerade diese – von der magnetischen Richtung unabhängige – Ladungswechselwirkung ist, die zusammen mit dem Pauli-Prinzip zu einer Ausrichtung der magnetischen Richtungen der Elektronen führt. Im Falle von Eisen, Kobalt und Nickel kommt noch eine weitere Komplikation dazu: Die Elektronen befinden sich keineswegs auf festen Gitterplätzen, wie ja Abb.1 suggeriert, sondern sind in metallischen Systemen beweglich. Das dadurch entstehende quantentheoretische Vielteilchenproblem beweglicher, wechselwirkender Elektronen ist extrem komplex. Für derartige Probleme gibt es auch heute noch keine systematischen theoretischen Lösungszugänge.

Theorie und Modellbildung

Ziel der theoretischen Physik ist es, die experimentell zugängliche Natur mit Hilfe vereinfachender Modelle unter

Anwendung mathematischer Methoden zu erklären. Die Tragfähigkeit einer Theorie muß dann im nächsten Schritt durch die Untersuchung ihrer Konsequenzen, insbesondere durch die Vorhersage neuer Phänomene getestet werden. Das Zurückführen komplexer (oder nur scheinbar komplexer) Erscheinungen auf einige wenige, fundamentale Gesetzmäßigkeiten ist nur durch Modellbildung möglich. Außer in wenigen Spezialfällen lassen sich aber selbst diese zum Teil stark vereinfachenden Modelle nicht exakt lösen, so daß man stets gezwungen ist, weiter zu nähern, zu vereinfachen und zu abstrahieren. Dabei muß natürlich darauf geachtet werden, daß die physikalischen Voraussetzungen des zu erklärenden Phänomens bewahrt bleiben. In dieser Aufgabe („Reduktion unter Beibehaltung der Essenz“) liegt die große Kunst der Modellbildung, das heißt der theoretischen Physik im allgemeinen.

Das vorliegende Problem eines Festkörpers mit 10^{22} wechselwirkenden Elektronen und Ionen ist besonders schwierig zu behandeln und bietet deshalb ein sehr gutes Beispiel für die Modellbildung in der theoretischen Physik. Da wir insbesondere am Magnetismus in Metallen, einem elektronischen Effekt, interessiert sind, beschränken wir uns zunächst auf die Elektronen. Wir betrachten die Ionenrümpfe, die das Skelett des kristallinen Festkörpers bilden, also lediglich als positiv geladenen Hintergrund für die negativ geladenen, sich abstoßenden Elektronen. In der einfachsten Näherung nehmen wir zunächst an, daß gar nicht jedes Elektron mit jedem anderen wechselwirkt, sondern daß jedes Elektron immer nur eine effektive Wechselwirkung spürt, die sich aus der Gegenwart der anderen Elektronen im Mittel ergibt. Jedes Elektron befindet sich dann also lediglich in einem *mittleren* Feld. Man spricht hier von einer „Theorie des mittleren Feldes“. Diese spezielle Näherung gibt häufig einen sehr nützlichen ersten Einblick in die allgemeinen Eigenschaften des wechselwirkenden Elektronensystems. Für die Beantwortung vieler anderer Fragestellungen ist sie aber doch zu grob, d. h. es

gibt Effekte, die sich nur durch eine genauere Berücksichtigung der Wechselwirkung verstehen lassen; sie heißen „Korrelationseffekte“.

Der Begriff der Korrelation (aus lat. *con + relatum*), der soviel wie „Wechselbeziehung“ bedeutet, tritt in vielen verschiedenen Bereichen auf, so z. B. in der Grammatik, Statistik und Physik. Trotzdem ist damit eigentlich immer dasselbe gemeint: Zwei Bereiche oder Größen sind „korreliert“, wenn sie nicht unabhängig voneinander auftreten. So sind etwa die Wörter „sowohl“ und „auch“ grammatikalisch streng korreliert: Wenn wir in einem Text zufällig auf das Wort „sowohl“ stoßen, wissen wir mit Sicherheit, daß dann im *selben* Satz die Wörter „als auch“ folgen müssen, denn sie benötigen einander zur gegenseitigen Ergänzung. Die Menschen in einem vollen Fahrstuhl sind ebenfalls stark korreliert, da die Position jeder einzelnen Person im Aufzug von der des Nachbarn empfindlich abhängt. Korrelation entsteht immer durch eine Wechselwirkung im allgemeinsten Sinn.

So ist es auch bei der Korrelation in der Physik: Eine Korrelation zwischen Elektronen bezeichnet die wechselwirkungsbedingte Abhängigkeit des Orts eines Elektrons von den Orten aller anderen Elektronen. Korrelationseffekte liegen also gerade jenseits einer Näherung der elektronischen Wechselwirkung durch ein *mittleres* Feld.

Mit elektronischen Korrelationen werden Effekte der Wechselwirkung zwischen Elektronen bezeichnet; genauer gesagt sind es solche Effekte, die durch die Abhängigkeit des Orts eines Elektrons von den Orten aller anderen Elektronen entstehen.

Bekanntere Beispiele für korrelierende Elektronensysteme sind Vanadium, Eisen, Kobalt, Nickel und ihre Oxide, sowie Cer- und Uranverbindungen und die 1986 entdeckten Materialien, die bei überraschend hohen Temperaturen superleitend werden.

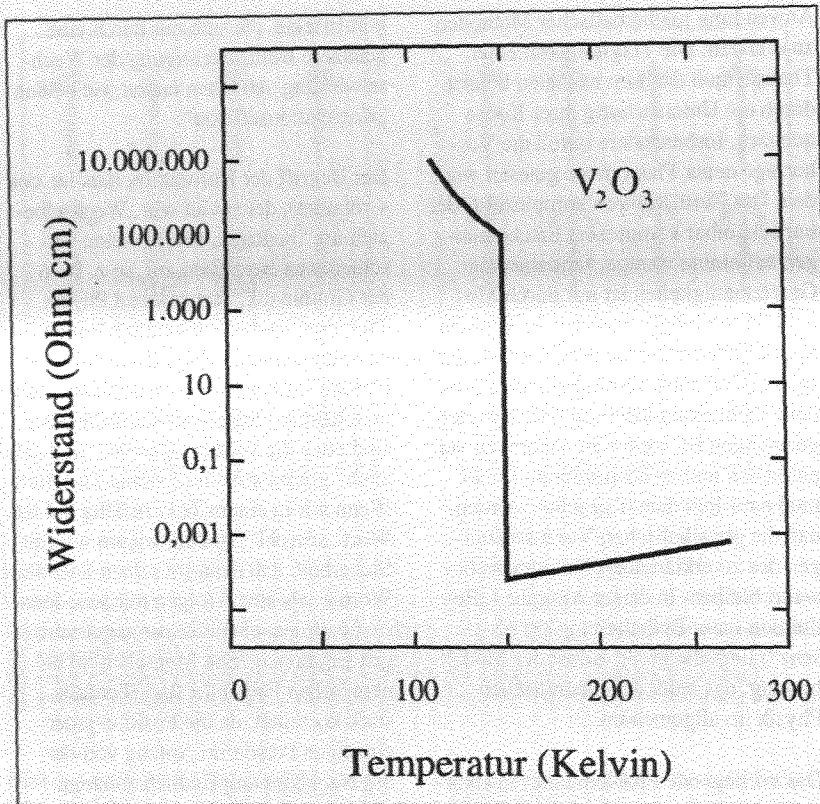


Abb. 2: Beispiel eines Metall-Isolator-Übergangs: Bei Abkühlung unter eine Temperatur von ca. 150 Kelvin erhöht sich der elektrische Widerstand von metallischem Vanadiumoxid (V_2O_3) schlagartig um das Einhundertmillionenfache (Faktor 10^8) - das System wird zum Isolator.

Metall-Isolator-Übergänge

Festkörper lassen sich hinsichtlich ihrer elektrischen Leitfähigkeit bzw. der dazu inversen Größe, des elektrischen Widerstands, grob in vier Klassen einteilen: Supraleiter, Metalle, Halbleiter und Isolatoren. Im Supraleiter verschwindet der Widerstand völlig, in Metallen ist er zwar endlich, aber gering, und Isolatoren besitzen einen extrem hohen elektrischen Widerstand. (Halbleiter nehmen diesbezüglich eine Zwischenstellung ein.) Metalle können einen elektrischen Strom also gut leiten – die

Elektronen sind hier offensichtlich sehr beweglich. In Isolatoren ist dies nicht der Fall – die Elektronen sind dort unbeweglich, d. h. räumlich lokalisiert. Seit vielen Jahren ist bekannt, daß es Systeme gibt, die bei Veränderung eines physikalischen Parameters, z. B. der Temperatur, einen abrupten Übergang vom Isolator zum metallischen Verhalten zeigen, oder umgekehrt. Der elektrische Widerstand ändert sich dabei um mehrere Größenordnungen – ein dramatischer Effekt, wie man in Abb. 2 am Beispiel des Vanadiumoxids sieht. Ein derartiger Metall-Isolator-Übergang

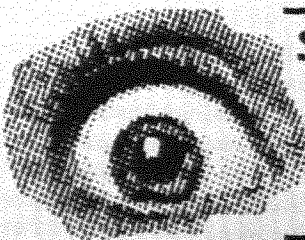
wird durch Wechselwirkungen im Festkörper hervorgerufen und ist damit, wie der Magnetismus, ein kooperatives Phänomen. Ursache hierfür kann ein ionischer Effekt sein, zum Beispiel eine Veränderung in der Gitterstruktur des Festkörpers; der Metall-Isolator-Übergang kann jedoch auch durch rein elektronische Wechselwirkungen hervorgerufen werden.

Die Natur eines solchen elektronisch induzierten Metall-Isolator-Übergangs wurde in den letzten 50 Jahren intensiv untersucht. Dabei wurden verschiedene theoretische Zugänge entwickelt, deren Ergebnisse zum Teil aber nicht kompatibel sind.

Typische Fragestellungen sind zum Beispiel, ob der Übergang abrupt oder stetig ist, ob er mit magnetischen Übergängen zusammenhängt und wie er die Tieftemperatureigenschaften des Systems beeinflusst. Gerade bei der Untersuchung von Metall-Isolator-Übergängen hat es in den letzten drei Jahren durch intensive Forschung auf internationaler Ebene sowohl im theoretischen wie auch im experimentellen Bereich große Fortschritte gegeben.

Ausblick

Elektronische Korrelationen und Magnetismus beruhen auf faszinierenden Vielteilchenphänomenen, deren Untersuchungen noch über viele Jahre hinweg weltweit und insbesondere hier an der Universität Augsburg von großem Interesse sein werden. Dies gilt sowohl für die Grundlagen wie auch für anwendungsorientierte Fragestellungen, die gerade in den letzten Jahren immer mehr an Bedeutung gewonnen haben.



SCHAUINSBUCH!

**BÜCHER
PUSTET**

Karolinstraße 12
86150 Augsburg
Tel. 0821/50224-0

