



DIETER VOLLHARDT

ELEKTRONISCHE KORRELATIONEN UND MAGNETISMUS – EINE EINFÜHRUNG

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

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 Teilchens, 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, einem Fundamentalprinzip der Quantentheorie, beeinflusst: In einem gegebenen System dürfen zwei Elektronen nicht in allen physikalischen Eigenschaften übereinstimmen. Im vorliegenden Fall bedeutet das, daß zwei Elektronen nur dann aufeinandertreffen können, d.h. 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 Orientierung dieser magnetischen Richtungen führen kann.

Wechselwirkungen zwischen mikroskopisch 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 Phänomenen“, da makroskopisch viele Teilchen zusammenwir-

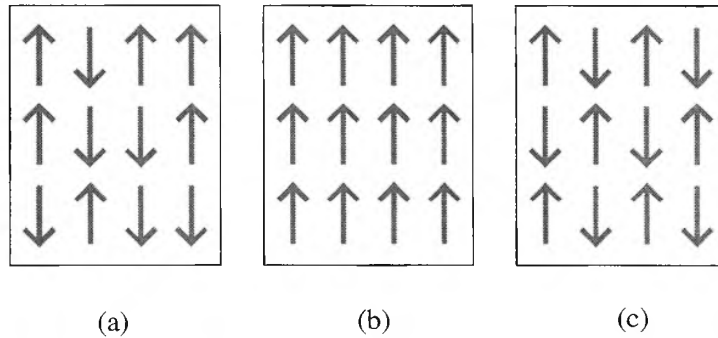


Abb. 1: Schematische Darstellung verschiedener Ordnungszustände der magnetischen Richtung der Elektronen im Festkörper: a) *unmagnetisch* (ungeordnete Verteilung gleich vieler \uparrow - und \downarrow -Elektronen), b) *ferromagnetisch* (alle magnetischen Richtungen zeigen in dieselbe Richtung), c) *antiferromagnetisch*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

ken. 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 Ferromagne-

tismus zu erklären. Im Rückblick läßt sich sagen, daß die Geschichte des Ferromagnetismus auch die Geschichte unserer Kultur und Wissenschaft ist.

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 Jahrtausenden 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 (= 770°C). Dieser charakteristischen Temperatur entspricht eine Energie, die typisch für die Ladungswchselwirkung zwischen den Elektronen ist. Damit wird deutlich, daß es gerade diese — von der magnetischen Richtung *unabhängige* — Ladungswchselwirkung 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; eine echte Wechselwirkung, bei der zum Beispiel Energie ausgetauscht wird, liegt gar nicht mehr vor. 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“. Das Wort „Korrelation“ bedeutet so viel wie Wechselbeziehung, oder Zusammenspiel und wird in der theoretischen Physik häufig benutzt.

Mit **elektronischen Korrelationen** werden Effekte der Wechselwirkung zwischen Elektronen (meistens im Festkörper) bezeichnet; genauer gesagt sind es solche Effekte, die sich nicht im Rahmen einer Näherung der elektronischen Wechselwirkung durch ein mittleres Feld verstehen lassen.

Bekannte Beispiele für korrelierte Elektronensysteme sind die Übergangsmetalle (z.B. Vanadium, Eisen, Kobalt, Nickel) und ihre Oxide, Cer- und Uranverbindungen (insbesondere die Schwere-Fermionensysteme, mit denen sich die Beiträge von U. Eckern und K.-H. Höck und von E.-W. Scheidt Th. Schreiner und G.R. Stewart befassen), sowie die Klasse der neuen Hoch-Temperatur-Supraleiter.

Ein einfaches elektronisches Korrelationsmodell

Das einfachste mögliche mikroskopische Modell zur Untersuchung korrelierter Elektronensysteme ist das sogenannte Hubbard-Modell, das 1963 von Gutzwiller, Hubbard und Kanamori unabhängig voneinander eingeführt wurde. Es beschreibt einzig und allein die beweglichen Elektronen — häufig wird genau ein Elektron pro Atom angenommen. Die Ionenrümpfe treten lediglich in Gestalt eines zugrundeliegenden Gitters auf. Dieses Modell besteht nur aus zwei Teilen: einer kinetischen Energie der Elektronen und einer extrem vereinfachten Wechselwirkung. Die kinetische Energie beschreibt die Bewegung der Elektronen: Elektronen mit magnetischer Richtung \uparrow und \downarrow können auf dem Gitter von einem Gitterplatz zum benachbarten hüpfen. Bei dem Hüpfen ist das Paulische Ausschließungsprinzip zu beachten. Im vorliegenden Fall erzwingt es, daß zwei Elektronen nur dann denselben Gitterplatz besetzen können, wenn sie sich bezüglich ihrer magnetischen Richtungen unterscheiden. Ein Gitterplatz kann also maximal doppelt besetzt werden, nämlich von je einem Elektron mit \uparrow - und \downarrow -Richtung. Ein beliebig herausgegriffener Gitterplatz ist demnach entweder leer, einfach besetzt (mit einem \uparrow - oder \downarrow -Elektron) oder doppelt besetzt (ein \uparrow - und ein \downarrow -Elektron).

Es wird nun eine weitere drastische Modellannahme gemacht, nämlich daß die Abstoßung zwischen den Elektronen nur extrem kurzreichweitig wirkt (tatsächlich ist sie aufgrund wohlverstandener Abschirmeffekte zumindest nicht sehr langreichweitig). Im vorliegenden Modell soll die Wechselwirkung also nur dann gespürt werden, wenn sich ein \uparrow - und ein \downarrow -Elektron auf *demselben* Gitterplatz treffen. Die so entstehende Wechselwirkungsenergie, die sich zur kinetischen Energie addiert und dadurch die Gesamtenergie erhöht, ist in diesem einfachen Modell also direkt proportional zur Zahl der doppelt besetzten Gitterplätze. Eine anschauliche Darstellung des oben beschriebenen Modells ist in Abb. 2 zu sehen. Man könnte nun meinen, daß es energetisch am günstigsten wäre, wenn es überhaupt keine doppelt besetzten Gitterplätze gäbe, so daß es dann auch gar nicht erst zur Wechselwirkung der Elektronen — und damit zur Energieerhöhung — käme. Das würde aber voraussetzen, daß die Bewegung der Elektronen, die ja durch das Hüpfen der \uparrow - und \downarrow -Elektronen automatisch auch doppelt besetzte Gitterplätze erzeugt, auf sehr spezielle Weise eingeschränkt werden müßte. Dadurch wäre die Beweglichkeit stark gehemmt — ein energetisch ungünstiger Effekt. Wie immer in der Natur haben wir es auch hier mit einem subtilen Wettbewerbsproblem zu tun: Kinetische Energie und Wechselwirkung müssen *gemeinsam* optimiert werden. Damit die Beweglichkeit der Elektronen möglichst groß ist, müssen also auch Wechselwirkungen zugelassen werden, aber eben gerade im richtigen Verhältnis, so daß die Gesamtenergie möglichst gering ist.

Wie bereits gesagt, ist das soeben beschriebene Hubbard-Modell

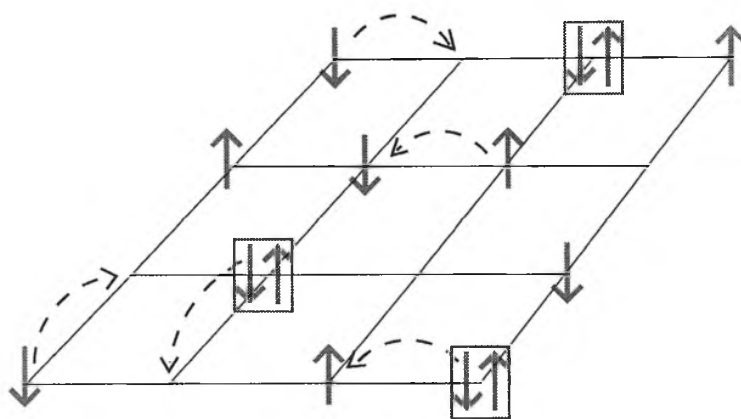


Abb. 2: Bildliche Darstellung eines wechselwirkenden Elektronensystems, das durch ein Hubbard-Modell beschrieben wird. Die Elektronen, hier nur angedeutet durch ihre magnetischen Richtungen \uparrow und \downarrow , bewegen sich von einem Gitterplatz zum benachbarten (gestrichelte Pfeile). Aufgrund des Pauli-Prinzips können sich höchstens ein \uparrow -Elektron und ein \downarrow -Elektron auf einem Gitterplatz treffen (Rechtecke); in diesem Fall kommt es zur Wechselwirkung.

das einfachste mögliche Gittermodell korrelierter Elektronensysteme. Es nimmt damit ganz natürlich eine zentrale Stellung in der Theorie elektronischer Systeme ein und ist aus diesem Grund seit mehr als drei Jahrzehnten das am meisten untersuchte Modell in diesem Themenbereich. Trotz der bereits eingeflossenen drastischen Näherungen stellt dieses Modell immer noch ein kompliziertes quantentheoretisches Vielteilchenproblem dar, das im allgemeinen nicht exakt lösbar ist. Zusätzlich kommen auch noch die Temperatur, die Elektronendichte, sowie die Struktur und die Raumdimension des zugrundeliegenden Gitters hinzu, die alle für das Verhalten der Elektronen von Bedeutung sind. Schon die Untersuchung dieses scheinbar einfachen elektronischen Korrelationsmodells führt also zu größten mathematisch-technischen Schwierigkeiten, so daß man auf weitere Näherungen angewiesen ist. Diese Näherungen waren in der Vergangenheit häufig derart drastisch und unzulänglich, daß die Ergebnisse keineswegs die wahren Eigenschaften des Modells beschrieben, sondern sich später als Artefakte der Annahmen erwiesen.

Das Hubbard-Modell wurde 1963 in der Hoffnung eingeführt, mit seiner Hilfe die Ursachen des Ferromagnetismus in metallischen Systemen, wie zum Beispiel Eisen, mikroskopisch verstehen zu können. Der Gedanke war einfach: Die energetisch ungünstige Wechselwirkung zwischen den Elektronen, d.h. die Bildung von doppelt besetzten Gitterplätzen, läßt sich im Prinzip dadurch vermeiden, daß sich *alle* Elektronen paral-

lel zueinander ausrichten. Dann schließt bereits das Pauli-Prinzip eine weitere Annäherung und damit Wechselwirkung der Elektronen aus. Im vollständig ferromagnetischen Zustand (Abb. 1b) wäre die Wechselwirkungsenergie also tatsächlich exakt Null. Dieses Argument berücksichtigt aber nicht, daß das Pauli-Prinzip in einem solchen Zustand auch keine *Bewegung* der Elektronen mehr erlaubt (zumindest, wenn es im Mittel ein Elektron pro Gitterplatz gibt). Es stellte sich bald heraus, daß das beschriebene Modell keineswegs ein natürliches Modell für Ferromagnetismus ist — im Gegenteil: Auf den meisten Gittern wird der Antiferromagnetismus (Abb. 1c) bevorzugt, da dann eine Bewegung der Elektronen immer noch möglich ist. Viele Fragen sind hier auch heute noch offen. Deshalb ist das Gebiet des Magnetismus weiterhin hochaktuell.

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. 3 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. Da es sich hier um die Untersuchung elektronischer Korrelationseffekte handelt, steht das oben eingeführte Hubbard-Modell wie-

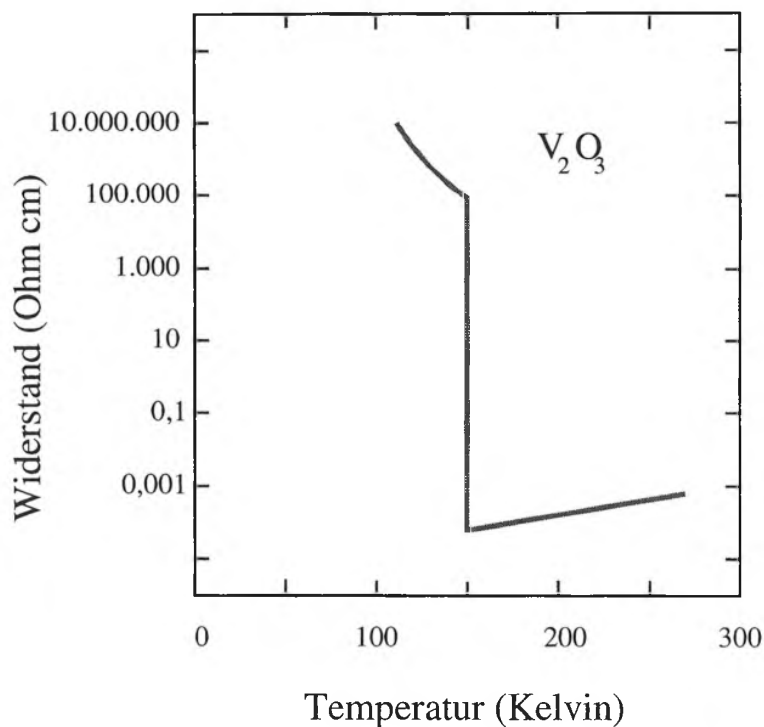


Abb. 3: Beispiel eines Metall-Isolator-Übergangs: Bei Abkühlung unter eine Temperatur von ca. 150 Kelvin erhöht sich der elektrische Widerstand von metallischem Vanadiumoxid (V_2O_3) schlagartig um das Einhundertmillionenfache (Faktor 10^8) — das System wird zum Isolator.

derum im Zentrum theoretischer Überlegungen. Tatsächlich stellte sich kurz nach Einführung des Modells und dem vergeblichen Versuch, es zur Erklärung des metallischen Ferromagnetismus nutzbar zu machen, heraus, daß es sich hier (zumindest bei höheren Temperaturen) eher um ein Modell für den Metall-Isolator-Übergang handelt. In diesem Modell ist der Keim des Metall-Isolator-Übergangs *per constructionem* bereits enthalten. Bei schwacher Wechselwirkung dominiert die kinetische Energie; die Elektronen sind also beweglich und es handelt sich um ein Metall. Bei starker Wechselwirkung dagegen werden Doppelbesetzungen fast völlig vermieden; die Elektronen sind dann nur einzeln verteilt (Abb. 1), so daß ein elektrischer Strom nicht fließen kann. Bei einer endlichen „kritischen“ Wechselwirkung sollte es also zu einem Metall-Isolator-Übergang kommen. Die Gültigkeit dieses intuitiven Bildes muß natürlich bewiesen werden. Leider handelt es sich aber wie im Fall des Ferromagneten um ein Korrelationsphänomen, dessen Untersuchung auf besonders große

mathematisch-technische Probleme stößt. Hier hat ein von W. Metzner (jetzt Universität München) und mir 1989 eingeführter und danach international weiterentwickelter theoretischer Zugang zu neuen Erkenntnissen geführt. Er beruht auf der künstlichen (d.h. nur in der Theorie möglichen) Erhöhung der räumlichen Dimension des Systems von drei auf unendlich viele Dimensionen. Auf diese Weise erhält man eine neuartige „Theorie des mittleren Feldes“, bei der nun die elektronischen Korrelationen explizit enthalten sind.

Gerade bei der Untersuchung von Metall-Isolator-Übergängen hat es in den letzten drei Jahren sowohl im theoretischen wie auch im experimentellen Bereich große Fortschritte gegeben. Im Beitrag der DFG-Forschergruppe „Metall-Isolator-Übergang und Magnetismus“ wird darauf näher eingegangen. Aber auch hier gibt es noch viele offene Fragen.