Julius-Maximilians-
UNIVERSITÄT
WÜRZBURG

Lehrstuhl für Theoretische Physik I

Theoretische Festkörperphysik

TPI

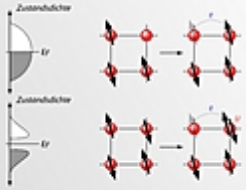
Professoren: *W. Hanke, F. Assaad, C. Honerkamp, R. Oppermann*

Die Theoretische Festkörperphysik beschäftigt sich mit Vielteilcheneffekten, insbesondere elektronischen Anregungen in geordneten und ungeordneten Festkörpern im Volumen und an der Oberfläche; der Theorie elementarer Anregungen (Phononen, Photonen, usw.) und Vergleich mit Experimenten z.B. der Lehrstühle Experimentelle Physik III und IV. Zum Einsatz kommen analytische Methoden sowie Renormierungsgruppen-, Exakte-Diagonalisierungs- und Monte-Carlo-Rechnungen an quantenmechanischen Vielteilchen-modellen. Die Arbeitsgebiete umfassen die Theorie der Hochtemperatursupraleitung, Quantenträge, Stabilität dissipativer Systeme, Störstellenprobleme, außergewöhnlich Phasen und Phasenübergänge sowie die Entwicklung neuer Methoden.

Starke Korrelationen

Als Festkörper bezeichnet man im Allgemeinen alle Materialien die eine kristalline Struktur aufweisen - d.h. Atome sind in einem periodischen Gitter angeordnet. Man unterscheidet dabei grob zwischen Metallen, in denen die Valenz Elektronen delokalisiert sind und Isolatoren, in denen die Elektronen auf die Nähe zu den Atomkernen beschränkt sind.

Der Begriff *starke Korrelationen* umfasst eine Klasse von Materialien und Modellen, in denen kinetische und potentielle Energie der Elektronen von derselben Größenordnung sind und damit verschiedene Wechselwirkungen miteinander konkurrieren. Phänomene in diesen Materialien lassen sich nicht durch effektive Einteilchenbilder beschreiben, sondern erfordern die Behandlung aller Elektronen auf einmal.



Erst die Berücksichtigung aller betroffenen Elektronen und Quanteneffekte ermöglicht die Beschreibung der auftretenden Phänomene.

Grundzustände & (Quasi-)Teilchen

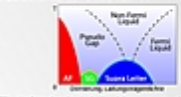
Während der Grundzustand (das Vakuum) in unserem Universum im Rahmen der Teilchenphysik weitgehend verstanden wird, ist die Frage nach dem Grundzustand (GZ) in verschiedenen Kristallen eine zentrale Problemstellung in der Festkörperphysik. Konkurrierende Wechselwirkungen zwischen den Elektronen und dem Kristallgitter, die Gitterstruktur und äußere Kräfte können zu komplexem Verhalten und komplizierten Ordnungen der Elektronen führen.

Die Anregungen aus dem GZ (also die Reaktion auf eine Störung des Gleichgewichts) entsprechen meist einem kollektiven Verhalten aller Elektronen. Dieses Zusammenspiel kann durch ein so genanntes Quasi-Teilchen Bild interpretiert und beschrieben werden. So wie spekuliert wird, dass die elementaren Teilchen der Hochenergiephysik aus noch kleineren Elementen bestehen könnten, entsprechen die Quasi-Teilchen in der Festkörperphysik einer Kombination aus Elektronen und Wechselwirkungen. Der Ursprung und das Verhalten dieser exotischen Teilchen ist ein Kernaspekt in der Theoretischen Festkörperphysik.

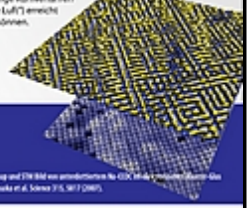
Hochtemperatur Supraleitung

Normale Metalle sind durch das Vorhandensein eines elektrischen Widerstandes charakterisiert. Der Widerstand ist eine Folge von Streuprozessen der Elektronen an dem Festkörpergitter. Das als Metall bekannte Quecksilber zeigt hingegen ein auffälliges Verhalten unter einer kritischen Sprungtemperatur $T_c = 4$ Kelvin: es verliert seinen elektrischen Widerstand. Dieses Verhalten wird als Supraleitung bezeichnet. Vor ungefähr 50 Jahren konnten Bardeen, Cooper und Schrieffer diesen Effekt in ihrer BCS Theorie vollständig beschreiben. Hierbei formieren sich Elektronen zu so genannten Cooper-Paaren, die sich nahezu ohne Widerstand duch den Festkörper bewegen können. Der Klebstoff zwischen den Cooper-Paaren ist durch Phononen, den Quanten der Gitterschwingung, gegeben.

Eine weitere Klasse von Supraleitern ist durch spezielle Keramiken gegeben, die wesentlich höhere supraleitende Sprungtemperaturen (bis zu 90K) aufweisen. Die Muttersubstanzen dieser Materialien zeigen zunächst ein antiferromagnetisches isolierendes Verhalten. Das supraleitende Verhalten tritt erst auf, wenn das System mit Löchern oder Elektronen dotiert wird. Durch das gemeinsame Auftreten von antiferromagnetischer Ordnung und supraleitender Phase geht man davon aus, dass Spinwechselwirkungen der Elektronen eine wesentliche Rolle bei der Erklärung der Hochtemperatur Supraleitung (HTSL) spielen. Es ist weitgehend klar, dass Cooper-Paarbildung nicht durch das elastische Gitter (via Phononen), sondern durch die antiferromagnetische Ordnung der Elektronen auf den Gitterplätzen bewirkt wird.



HTSL sind technologisch hochinteressant: sie verlieren den Leitungswiderstand bereits bei Temperaturen die durch billige Kühlverfahren ("flüssige Luft") erreicht werden können.



Cooper Paare - sind Paare aus Elektronen mit gegengleichem Impuls. Diese Elektronenpaare wechselwirken über Phononen miteinander und bewegen sich nahezu widerstandsfrei durch das Kristallgitter.

Tunneling map and STM Bild von antiferroïdischen Na-CCK (Mott-Hubbard-Mission-Gas Regime. Kohsaka et al. Science 315, 1380 (2007).

Quanten-Phasenübergänge & exotische Grundzustände

Ein Phasenübergang bezeichnet die Zustandsänderungen eines Materials bei Variation einer Außenbedingung wie z.B. Temperatur, Druck, Magnetfeld, etc. Am Phasenübergang gehen unterschiedliche Phasen bzw. Ordnungszustände eines Materials ineinander über. Man unterscheidet zwischen Phasenübergängen 1. Ordnung und kontinuierlichen Phasenübergängen.

Am kritischen Punkt eines kontinuierlichen Phasenübergangs kann die Physik des Systems immer durch ein klassisches Modell beschrieben werden. Die Eigenschaften dieses Modells sind durch dessen kritischen Exponenten gegeben, die experimentell leicht zu bestimmen sind. Dies ermöglicht eine allgemeine Klassifizierung des physikalischen Systems. Es wird angenommen dass ähnliche Arten von Phasenübergängen durch dieselbe Modell-Klasse beschrieben werden.

Während klassische Phasenübergänge aus einem Wettbewerb zwischen innerer Energie und thermischen Anregungen (bzw. der Entropie) entspringen, treibt am absoluten Nullpunkt (0K) die Konkurrenz verschiedener Wechselwirkungen so genannte Quanten- Phasenübergänge. Dies erlaubt eine Vielzahl an neuen Grundzuständen und Phänomenen die scheinbar der Beschreibung wie sie von klassischen Phasenübergängen bekannt ist widersprechen.

Spontane Symmetriebrechung - bezeichnet die zufällige Auswahl eines bestimmten Zustandes, wenn mehrere Zustände gleicher Energie existieren. Symmetriebrechung wird durch Ordnungsparameter (z.B. die Magnetisierung) beschrieben.

Zwei-Mode Vortex, Illustration eines Defekts welcher die periodische Ordnung im Grundzustand eines Quanten-Antiferromagneten zerstört. Balents, 05'08.

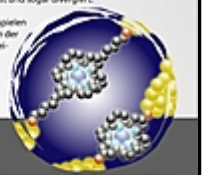
Kondo-Physik

Untersucht man den elektrischen Widerstand von Metallen, so stellt man fest, dass sich dieser aus mehreren Effekten zusammensetzt. Elektronen, welche sich durch das Metall bewegen, können sowohl an anderen Elektronen, als auch an sogenannten Phononen - das sind quantisierte Gitterschwingungen - gestreut werden. Diese beiden Mechanismen führen zu einem mit der Temperatur abnehmenden elektrischen Widerstand. Befinden sich in dem Metall Störstellen, so liefert die Streuung an den Störstellen einen temperaturunabhängigen Beitrag zum elektrischen Widerstand, welcher bei sehr tiefen Temperaturen dominiert.

Bei der Entdeckung des Kondo-Effekts wurde jedoch an Legierungen mit magnetischen Störstellen ein abweichendes Widerstandsverhalten gemessen. Der elektrische Widerstand nimmt bei diesen Proben zunächst mit der Temperatur ab, wie oben beschrieben. Jedoch wird bei einer sehr tiefen Temperatur, welche bei den meisten Proben in der Größenordnung von 10K liegt ein Minimum des Widerstandes erreicht und der Widerstand beginnt mit weiter sinkender Temperatur wieder anzusteigen. Die Lage des Widerstandsminimums hängt von der Konzentration der magnetischen Störstellen ab.

Das Phänomen konnte von Jun Kondo durch eine genaue Untersuchung der Streuung von Elektronen an den magnetischen Störstellen erklärt werden. Dabei stellte sich heraus, dass Streuprozesse, bei denen sowohl der Spin des gestreuten Elektrons, als auch das magnetische Moment der Störstelle umklappen, einen wesentlichen Beitrag zum elektrischen Widerstand der Probe liefern, welcher mit sinkender Temperatur anwächst und sogar divergiert.

Störstellensysteme spielen eine zentrale Rolle in der realistischen Beschreibung von Festkörpern.

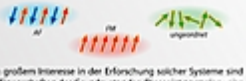


Phononen - sind quantisierte Gitterschwingungen (thermische Anregungen des Kristallgitters), deren Einfluss mit der Temperatur abnimmt. Diese Freiheitsgrade koppeln an die Elektronen und beschreiben den Einfluss der Atomrümpfe.

Ein-Atom Transistoren. Mittels Ladungstransport durch die Molekülle können Effekte wie z.B. Single-electron charging, der Kondo Effekt und Vibrationsgrundzustände bestimmt werden. Park et al. Nature 417, 722 (2002).

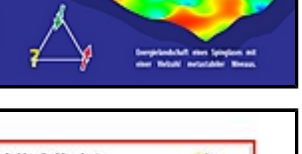
Spin Gläser & Frustration

Glasartige Phasen entstehen bei tiefen Temperaturen, wenn die Wechselwirkung in einem Vielteilchensystem ungeordnet ist. Wenn beispielsweise die Spin-Spin Wechselwirkung ein von Spinpaar zu Spinpaar zufällig variierendes Vorzeichen aufweist, ist der Grundzustand dieses Systems nicht geordnet (z.B. antiferromagnetisch, ferromagnetisch), sondern ungeordnet. Jeder einzelne Spin in seiner Orientierung "eingefroren".



Von großem Interesse in der Erforschung solcher Systeme sind die Eigenschaften des Grundzustandes. Dieser ist normalerweise definiert als der Zustand des Phasenraumes mit der niedrigsten Energie. Man muss dem System natürlich lange genug Zeit geben, den Grundzustand zu finden. In der Realität, also bei Beobachtungszeiten in der Größenordnung von Sekunden, Minuten oder sogar Jahrzehnten, tritt bei glasartigen Phasen allerdings das Problem der Ergodizitätsbrechung auf. Das bedeutet, dass das System nicht das Energieminimum erreichen kann. Das System hat, aufgrund der niedrigen Temperatur, nicht genug Energie um die Energiebarrieren, welche Bereiche des Phasenraumes abtrennen, zu überwinden und das System ist stattdessen in einem lokalen Energieminimum gefangen.

Um nun solche Glasphasen theoretisch zu beschreiben, reicht ein einzelner Ordnungsparameter (z.B. die Magnetisierung beim (Anti-)Ferromagneten) nicht mehr aus. Man muss vielmehr mit unendlich vielen Ordnungsparametern arbeiten, um die Ergodizitätsbrechung richtig zu verstehen. Diese unendliche vielen Ordnungsparameter werden als Ordnungsfunktion dargestellt und durch die sogenannte Replikasymmetriebrechung (RSB) beschrieben.



Frustration - bezeichnet die Eigenschaft, dass Wechselwirkungen in einer Weise konkurrieren und folglich keine eindeutige Konfiguration niedrigster Energie existiert. Anstelle wird der Grundzustand aus einer Vielzahl von Zuständen gleicher (minimaler) Energie gebildet.

Energiebeschaffenheit eines Spinglases mit einer Vielzahl metastabiler Minima.

UNIVERSITÄT WÜRZBURG

Research Highlights 2008
Arbeitsgruppen F.F. Assaad & C. Honerkamp

PHYSICAL REVIEW LETTERS

Spin Gap and String Order Parameter in the Ferromagnetic Spiral-Staircase Heisenberg Ladder: A Quantum Monte Carlo Study

C. Brünger, F.F. Assaad, S. Capponi, F. Alet, D.N. Arnosan, and M.N. Kiselev

PHYSICAL REVIEW LETTERS

Density Waves and Cooper Pairing on the Honeycomb Lattice

Carsten Honerkamp

PHYSICAL REVIEW LETTERS

Topological Mott Insulators

S. Raghu, Xiao-Liang Qi, C. Honerkamp, and Shou-Cheng Zhang

PHYSICAL REVIEW LETTERS

Evolution of the Fermi Surface across a Magnetic Order-Disorder Transition in the Two-Dimensional Kondo Lattice Model: A Dynamical Cluster Approach

E.C. Marino and F.F. Assaad

Institut für Theoretische Physik und Astrophysik, Universität Würzburg, Am Hubland, D-97074 Würzburg, Germany

Breakdown of Landau Theory in Overdoped Cuprates near the Onset of Superconductivity

to appear in Physical Review Letters

M. Ossadnik[1], C. Honerkamp[2], T.M. Rice[1], and M. Sigrist[1]

[1] Theoretical Physics, ETH Zürich, CH-8093 Zürich, Switzerland.

[2] Theoretical Physics, Universität Würzburg, D-97074 Würzburg, Germany

(Dated: October 2, 2008)

We use the functional renormalization group to analyze the temperature dependence of the quasiparticle scattering rates in the two-dimensional Hubbard model below half-filling. Using a band structure appropriate to overdoped $Tl_2Ba_2CuO_{6+\delta}$, we find a strongly angle dependent term linearly dependent on temperature which derives from an increasing scattering vertex as the energy scale is lowered. This behavior agrees with recent experiments and confirms earlier conclusions on the origin of the breakdown of the Landau Fermi liquid near the onset of superconductivity.

UNIVERSITÄT WÜRZBURG

Research Highlights
Arbeitsgruppe W.Hanke

TPI
Lehrstuhl für Theoretische Physik I