



1. Einleitung

Etwas mehr als 100 Jahre nach der Entdeckung der Supraleitung durch H. Kammerlingh Onnes [KO11] finden sich zunehmend mehr Anwendungsbereiche für supraleitende Materialien – nicht nur in der Forschung, sondern auch in der Industrie. Der Effekt der Supraleitung, der widerstandslose Transport von elektrischem Strom, kann hierbei multifunktional eingesetzt werden. Bereits in der Anwendung befinden sich supraleitende Strombegrenzer zum Überspannungsschutz von teuren Transformatoren [BIN11]. Im supraleitenden Zustand bildet der Begrenzer aufgrund des nicht messbaren Widerstands keine zusätzliche Belastung für den Transformatorstromkreis. Kommt es zu einem Kurzschluss oder einer Überspannung, bricht die Supraleitung beim kritischen Strom zusammen und über den sich instantan ergebenden Widerstand kann der Kurzschlussstrom begrenzt und damit die entsprechende Kraftwerksanlage geschützt werden. Außerdem wird in Zeiten der Energiewende in Deutschland insbesondere Energiesparen und Schonung der Umwelt groß geschrieben. In diesem Zusammenhang wäre der verlustfreie Transport elektrischer Energie über weite Strecken mittels supraleitender Kabel beispielsweise gegenüber den derzeit eingesetzten, stark verlustbehafteten Hochspannungsleitungen ein deutlicher Gewinn. Im Jahr 2014 wurde dies erstmalig in Deutschland in dem Pilotprojekt „AmpaCity“ in der Stadt Essen in Form eines 1 km langen Kabels zwischen zwei Umspannwerken umgesetzt [Paw14], um die dort eingesetzte Technik in der Praxis zu testen.

Motiviert wurden diese technischen Entwicklungen durch die Entdeckung der Hochtemperatursupraleitung unterhalb von 35 K durch J.G. Bednorz [BM86] und bald darauf dem Durchbrechen der „magischen Grenze“, der Siedetemperatur von flüssigem Stickstoff, für technisch einfache Anwendungen der Supraleitung, beispielsweise in YBCO (Yttrium-Barium-Kupferoxid) mit einer Sprungtemperatur von 92 K [KH07]. Damit konnte Supraleitung unter wirtschaftlichen Aspekten eingesetzt werden. Konventionelle Supraleitung ist im Rahmen der BCS-Theorie (Bardeen, Cooper, Schrieffer) [BCS57] hinreichend genau verstanden. Mit der Entdeckung der unkonventionellen Supraleitung durch F. Steglich [Ste+79] in CeCu_2Si_2 fand eine Erweiterung des Spektrums supraleitender Materialien statt. Beispielsweise sind die Paarungsmechanismen für Cooper-Paare in den Schwere-Fermionen-Supraleitern, zu denen CeCu_2Si_2 gehört, immer noch nicht abschließend geklärt und Gegenstand aktueller Forschung. Schwere-Fermionen-Systeme, meist Verbindungen mit Übergangsmetallen und Seltenen Erden, verhalten sich bei Raumtemperatur wie einfache Metalle, bei denen die Leitungselektronen im Bild des freien Elektronengases ohne jegliche Wechselwirkung untereinander beschrieben werden können. Beim Abkühlen zeigt sich dann ungewöhnliches Verhalten, das in starken Korrelationen der Elektronen begründet liegt. Korrelierte Systeme können Verhalten zeigen, das gegenüber den Eigenschaften eines einzelnen Bausteins eines Vielteilchensystems stark verändert ist. Insbesondere führen in Schwere-Fermionen-Systemen die aufgrund der Korrelationen um bis zu 1000-fach erhöhten effektiven Massen der Elektronen dazu, dass viele experimentelle Messgrößen, wie die spezifische Wärme oder die Pauli-Suszeptibilität, über



1. Einleitung

die größere Zustandsdichte an der Fermi-Kante bei tiefen Temperaturen ebenfalls stark erhöht sind. Dadurch sind diese experimentell gut zugänglich.

Vermehrt zeigen Schwere-Fermionen-Systeme, deren Verhalten bei tiefen Temperaturen in einem Quasiteilchenbild mit der Theorie zur Landau-Fermi-Flüssigkeit (LFF) beschrieben werden kann, Abweichungen von den Vorhersagen der etablierten Standard-Theorien. Abweichungen vom LFF-Verhalten werden als Nicht-Fermi-Flüssigkeits-Verhalten (NFF) bezeichnet und eine mögliche Ursache für das Auftreten dieser Abweichungen liegt in den Einflüssen der Physik eines quantenkritischen Punkts, einem Phasenübergang zweiter Ordnung bei $T = 0$, auf den Bereich endlicher Temperaturen im Phasendiagramm. In diesem Bereich werden unter anderem neuartige elektronische Phasen und auch Supraleitung gefunden, beispielsweise in CePd_2Si_2 unter Druck [Mat+98].

Zur Untersuchung der Eigenschaften von Schwere-Fermionen-Systemen und quantenkritischer Phänomene hat sich YbRh_2Si_2 als prototypisches System herausgebildet. In dieser Verbindung existiert ein magnetfeldgetriebener antiferromagnetischer quantenkritischer Punkt und NFF-Verhalten oberhalb davon im Phasendiagramm [Geg+08]. Die physikalischen Eigenschaften dieser Verbindung sind bei tiefen Temperaturen von der Konkurrenz der Kondo- und der RKKY-Wechselwirkung um die magnetische Ordnung bestimmt. Zusätzlich zur antiferromagnetischen Ordnung durch eine Dominanz der RKKY-Wechselwirkung und LFF-Verhalten aufgrund der stärkeren Kondo-Energie tritt eine zusätzliche thermodynamische Energieskala im Phasendiagramm auf, die T^* -Linie. An dieser Stelle im Phasendiagramm wird eine Stufe in Messungen des elektrischen Transports wie dem Hall-Koeffizienten und Magnetwiderstand [Pas+04; Fri+10a], sowie eine starke Steigungsänderung in der isothermen Magnetisierung [Geg+07] gefunden. Aus der linearen Entwicklung der Halbwertsbreite mit der Temperatur und einer Extrapolation dieser Signatur zum Ursprung wurde gefolgert, dass bei $T = 0$ eine Diskontinuität in der Fermi-Fläche auftritt. Diese wurde zunächst im Bild des Zusammenbruchs des Kondo-Effekts erklärt [Si10]. Doch mit einer starken Änderung der Kondo-Energie geht nicht zwangsläufig eine Änderung in der T^* -Signatur einher. Aus dieser Tatsache heraus wurde in [HV11a] die Möglichkeit eines Zeeman-bedingten Lifschitz-Übergangs vorgeschlagen, mit dem sich in einem zunächst einfachen Modell die experimentellen Funde in YbRh_2Si_2 qualitativ berechnen ließen. Zur Überprüfung der Ursache für die T^* -Linie im Phasendiagramm wurde im Zusammenhang mit einem Lifschitz-Übergang über eine Verschiebung des chemischen Potentials eine starke Abhängigkeit von der Elektronenkonzentration vorhergesagt. Mittels Loch- beziehungsweise Elektronendotierung soll sich die T^* -Linie stark verschieben oder sogar unterdrücken lassen.

Auf diesen Überlegungen basieren die in dieser Arbeit durchgeführten Experimente. In vorhergehenden Untersuchungen wurde hauptsächlich chemischer Druck auf die Einheitszelle ausgeübt, indem ein Teil des Rh isoelektronisch durch Co beziehungsweise Ir ersetzt wurde. Für die hier vorgestellten Untersuchungen wurden Proben vermessen, in denen Anteile des Rh durch Fe, Ru beziehungsweise Ni substituiert worden sind. Neben dem negativen chemischen Druck werden mittels Ni zusätzliche Elektronen und mit Fe

Löcher in die Verbindung eingebracht. Im Fall von Ru-Dotierung werden dem System Elektronen entzogen und dabei die Ausdehnung der Einheitszelle nur minimal verändert. Gegenstand der Arbeit ist es, den Einfluss einer veränderten Elektronenkonzentration auf die T^* -Linie in YbRh_2Si_2 mit und ohne angewendeten chemischen Druck aufzuzeigen. Mit den hier gewonnen Erkenntnissen wird das Wissen um kollektive elektronische Anregungen in Schwere-Fermionen-Systemen erweitert. Mit Hilfe eines tiefergehenden Verständnisses kollektiver elektronischer Anregungen lassen sich mitunter physikalische Systeme finden oder gezielt herstellen in denen eine supraleitende Phase bei noch höheren Temperaturen existiert.

Zur Untersuchung der Auswirkungen nicht-iselektronischer Dotierung auf die T^* -Linie wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit feld- und temperaturabhängig elektrische Transportmessungen, Messungen der magnetischen Suszeptibilität sowie Längenmessungen durchgeführt. Für die Messungen des elektrischen Widerstands wurde die in [Sch10] aufgebaute Einrichtung verwendet. Die Messung der AC-Suszeptibilität erfolgte in einem eigens für diese Messungen angefertigten Millikelvin-Suszeptometer mit speziell auf die geringen Probandimensionen angepasster Geometrie. Längenmessungen fanden in dem in [Sti11] aufgebauten Dilatometeraufbau statt.

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt gegliedert. Im Kapitel „Grundlagen“ wird zunächst eine theoretische Basis für die in dieser Arbeit behandelte Physik in Auszügen dargestellt. Es wird auf die Grundlagen der Fermi-Flüssigkeits-Theorie eingegangen, sowie über klassische Phasenübergänge hin zu Quantenphasenübergänge geführt, die in Schwere-Fermionen-Systemen auftreten können. Der für das Schwere-Fermionen-Verhalten verantwortliche Kondo-Effekt und die konkurrierende RKKY-Wechselwirkung werden ebenfalls knapp dargelegt. Eine theoretische Beschreibung des Lifschitz-Szenarios findet auf einer phänomenologischen Ebene statt. Das Kapitel „Experimentelles“ führt die für diese Arbeit relevanten Messgrößen von der theoretischen Seite her ein und die experimentellen Messmethoden werden beschrieben. Der Aufbau und die Kalibration des verwendeten AC-Suszeptometers werden im Detail vorgestellt. Für die jeweiligen Messmethoden sind am Ende der jeweiligen Abschnitte die während der Messung verwendeten Parameter aufgezeigt. Die Ergebnisse der durchgeführten Messungen, deren Auswertung und Interpretation findet sich im Kapitel „ $\text{Yb}(\text{Rh}_{1-x}\text{Tr}_x)_2\text{Si}_2$ “ (Tr steht für Übergangsmetall). Dort werden zunächst die Ergebnisse der Messungen an den einzelnen Proben aufgeführt, jeweils gefolgt von einer Zusammenfassung für die jeweilige Dotierungsart. Den Einzelvorstellungen ist ein global vergleichendes Kapitel angeschlossen. Hier werden die charakteristischen Energieskalen wie Kondo-Energie, Néel-Temperatur, T^* -Linie, die dazugehörige Signaturamplitude und Halbwertsbreite im Detail ausgewertet und diskutiert. Eine kompakte Zusammenfassung und Diskussion der Messergebnisse für $\text{Yb}(\text{Rh}_{1-x}\text{Tr}_x)_2\text{Si}_2$ schließt dieses Kapitel ab.





2. Grundlagen

Im folgenden Kapitel werden die theoretischen Grundlagen für die im Rahmen dieser Arbeit behandelten Physik gelegt. Hierbei liegt der Fokus auf einer skizzenhaften Zusammenfassung der wichtigsten theoretischen Grundlagen. Die entsprechenden experimentellen Messgrößen, deren Bedeutung und schließlich auch deren Messung werden im anschließenden Kapitel erläutert. Für eine tiefergehende Diskussionen sei auf die an den jeweiligen Stellen zitierte Literatur verwiesen.

2.1. Das Fermi-Flüssigkeitsmodell

Ursprünglich zur Beschreibung der Zustände von flüssigem ^3He entwickelt, wird das Landau-Fermi-Flüssigkeitsmodell (LFF) heute standardmäßig auch für Leitungselektronen in Festkörpern herangezogen. Es basiert auf der ursprünglichen Theorie von Sommerfeld, der die Leitungselektronen mit ihrer negativen Ladung und einem halbzahligen Spin als nicht wechselwirkendes System von Fermionen beschrieb. Einzig über das Pauli-Prinzip sind die Elektronenzustände hier miteinander verbunden. Die leitende Probe wird in diesem Zusammenhang als Potenzialtopf mit hohen Wänden und konstantem Potenzial von Null im Inneren beschrieben. Somit besitzen die Elektronenzustände in diesem Potenzialtopf lediglich kinetische Energie [AM07]. Die entsprechenden Impulse sind im Impulsraum aufgrund der geometrischen Randbedingungen gleichmäßig verteilt und die maximalen Impulswerte p_F mit Fermi-Energie E_F bilden am Temperaturnullpunkt ($T = 0$) eine Kugeloberfläche, die Fermi-Fläche. In realen Festkörpern können unterschiedlich starke Abweichungen von der idealen Kugelform auftreten und in Verbindung mit der Gestalt dieser Fläche sind die Anregungsprozesse nahe E_F bestimmend für die elektronischen Eigenschaften eines jeden Materials.

Metallische Systeme haben typischerweise Fermi-Energien von einigen 10^4 bis 10^5 K und entsprechend sind die thermischen Anregungen von Elektronen über die Fermi-Energie selbst bei Raumtemperatur vergleichsweise klein und das System verhält sich nahezu wie am Temperaturnullpunkt [KH07]. Diese Beschreibung ist allerdings nur für schwach wechselwirkende, quasi freie Fermionen anwendbar. Aber ein System aus stark wechselwirkenden (korrelierten) Fermionen kann dennoch mit geringfügigen Anpassungen über einen identischen Formalismus erfasst werden. Diese Erkenntnis geht auf Landau zurück [Lan57]. Er beschreibt ein System von stark wechselwirkenden Fermionen, indem er es in ein System aus nicht wechselwirkenden Quasiteilchen überführt. Deren Spin und Ladung ist identisch mit denen freier Elektronen, aber die Elektronenmasse m_e renormiert zu m^* [EH00]. Dies resultiert aus der Tatsache, dass die starke Wechselwirkung zwar die Fermi-Energie E_F verändert aber gleichzeitig die Impulszustände p_F in Anzahl und Größe über die unveränderlichen geometrischen Randbedingungen gegeben sind. Nun gilt:

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m^*} \quad (2.1)$$



2. Grundlagen

Somit kann sich die Fermi-Energie nur über eine renormierte Masse m^* verändern. Diese Quasiteilchenzustände sind keine wahren Eigenzustände mehr, im Gegensatz zu denen der Elektronen eines Fermi-Gases. Aus diesem Grund ist die Fermi-Statistik nur anwendbar wenn die Quasiteilchen wohldefiniert sind. Dies ist solange der Fall, wie die Verbreiterung $\delta E \sim \frac{\hbar}{\tau}$ der Elektronen-Energieniveaus durch die starke Korrelation zu den Quasiteilchen-Energieniveaus, mit der Lebensdauer τ der Quasiteilchen, klein ist im Vergleich zur thermischen Aufweichung $\Delta E \sim k_B T$, mit k_B der Boltzmannkonstanten. Auch die fermionischen Quasiteilchen unterliegen dem Pauli-Prinzip und bei $T = 0$ existiert ein klar definiertes E_F . In diesem Fall gibt es nur oberhalb von E_F freie Streuzustände und die Zerfallsrate Γ der Quasiteilchen ist

$$\Gamma \sim \frac{(\Delta E)^2}{2}, \quad (2.2)$$

und damit direkt proportional zu T^2 . Nur bei tiefen Temperaturen ist Γ demnach hinreichend klein und damit sind nur dort die Quasiteilchen wohldefiniert [Ros99].

Zu den charakteristischen Eigenschaften einer Fermi-Flüssigkeit gehört unter anderem ein temperaturunabhängiger, konstanter Sommerfeld-Koeffizient γ_0 , der elektronische Beitrag zur spezifischen Wärme C/T . Dieser ist über

$$\gamma_0 = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 g(E_F) = \frac{m^*}{m_e} \gamma_e \quad (2.3)$$

gegeben und ermöglicht eine direkte Erfassung der Zustandsdichte $g(E_F)$ an der Fermi-Kante eines Systems. Im Fall von voll ausgebildeten Quasiteilchen skaliert der Beitrag der Leitungselektronen γ_e demnach mit der Elektronenmasse m_e über den Faktor m^*/m_e . Außerdem zeigt eine Fermi-Flüssigkeit eine temperaturunabhängige und nahezu konstante Pauli-Suszeptibilität χ_0 :

$$\chi_0 = \mu_B g(E_F) = \frac{m^*}{m_e} \frac{1}{\left(1 + \frac{G_0}{4}\right)} \chi_e \quad (2.4)$$

Diese ist über das Bohrsche Magneton μ_B auch direkt proportional zur Zustandsdichte an der Fermi-Kante. Neben dem Skalierungsfaktor m^*/m_e bei starken Wechselwirkungen der Fermionen muss hier der Beitrag χ_e der Leitungselektronen noch um einen weiteren ergänzt werden, bei dem G_0 die Stärke der spinabhängigen Austauschwechselwirkung beschreibt [EH00]. Im Widerstand ρ_{FL} zeigt eine Fermi-Flüssigkeit einen durch Quasiteilchen-Quasiteilchen-Streuung bedingten quadratischen Beitrag in Abhängigkeit von der Temperatur:

$$\rho_{FL} = A T^2 \quad (2.5)$$

Auch hier zeigt sich eine Abhängigkeit von der renormierten Masse m^* , denn die Streuamplitude A im Widerstand ist direkt proportional zum Quadrat des Sommerfeld-Koeffizienten γ_0 und damit auch m^* .

Die Messgrößen χ_0 und γ_0 dienen zusammen mit dem A -Koeffizienten des Landau-Fermi-Flüssigkeit-Verhaltens zur Charakterisierung des jeweilig untersuchten Systems. Um normierte Bezüge zu anderen physikalischen Systemen herstellen und die entsprechenden Funde mit anderen Systemen vergleichen zu können wird jeweils dimensionslos das Sommerfeld-Wilson- (R_{SW}) und das Kadowaki-Woods-Verhältnis (R_{KW}) gebildet. Hierbei kürzt sich die effektive Masse der Quasiteilchen heraus. Durch R_{SW} wird die Pauli-Suszeptibilität mit dem Sommerfeld-Koeffizienten verglichen:

$$R_{SW} = \frac{4\pi^2 k_B}{3\hbar^2 (g\mu_B)^2} \frac{\chi_0}{\gamma_0} . \quad (2.6)$$

Bei g handelt es sich um den Lande-Faktor. Über diese Relation kann indirekt die Austauschwechselwirkung G_0 bestimmt werden und damit die Stärke der ferromagnetischen Korrelationen in der untersuchten Probe. Im Fall des freien Elektronengases gilt $R_{SW} = 1$. Sind die Elektron-Phonon-Wechselwirkungen vergleichsweise stärker, ist γ_0 gegenüber χ_0 erhöht mit einem kleineren Wert für R_{SW} . Dahingegen könnten elektronische Spin-Spin-Austauschprozesse in Schweren-Fermionen-Systemen für eine Erhöhung von R_{SW} verantwortlich sein [Geg+05], sofern G_0 negativ ist. Für Kondo-Systeme wird ein Wert von $R_{SW} = 2$ und für Schwere-Fermionen-Systeme sogar ein Wert von bis zu 5 erwartet [Löh+07]. Das Kadowaki-Woods-Verhältnis vergleicht den A - mit dem Sommerfeld-Koeffizienten über:

$$R_{KW} = \frac{A}{\gamma_0^2} = \text{const.} . \quad (2.7)$$

Entsprechend wird der Quasiteilchen-Quasiteilchen-Streuquerschnitt mit der elektronischen spezifischen Wärme verglichen. Für unterschiedliche Schwere-Fermionen-Systeme wird hierbei ein konstanter Wert von etwa $10 \mu\Omega\text{cmK}^2\text{mol}^2\text{J}^{-2}$ gefunden [KW86].

2.2. Klassische Phasenübergänge

Physikalische Systeme liegen äußeren Parametern wie Temperatur T , Druck p oder Magnetfeld H entsprechend in unterschiedlichen Phasen mit unterschiedlichen Eigenschaften vor. Ist zu dem jeweiligen thermodynamischen System das entsprechende thermodynamische Potenzial im Sinne der Beschreibung der generalisierten Kräfte gegeben, ist das jeweilige Verhalten entsprechend Veränderungen der äußeren Parameter bestimmt. Demnach ist das jeweilige Problem in den betreffenden natürlichen Variablen zu beschreiben. Für magnetische Systeme ist dies beispielsweise die Gibbsche freie Energie G , die nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik als totales Differenzial

$$dG = -SdT + Vdp - MdH \quad (2.8)$$



2. Grundlagen

angegeben wird, unter Verwendung der Entropie S , dem Volumen V und der Magnetisierung M . Die partiellen Ableitungen, jeweils mit sämtlichen anderen Parametern konstant gehalten, ergeben dann wiederum die natürlichen Variablen (z. B. das Volumen als $V = (\partial G/\partial p)_{T,H}$). Aus der Ableitung der natürlichen Variablen, sprich der zweiten Ableitung des Gibbs'schen Potentials, lassen sich auch die Suszeptibilität $\chi = (\partial M/\partial H)_{T,p}$ und die spezifische Wärme $C_p/T = (\partial S/\partial T)_{H,p}$ berechnen [Nol05a].

Ein thermodynamisches System kann mit Veränderung der äußeren Parameter von einer Phase in eine andere übergehen. Beispiele sind zum einen eine Flüssigkeit, die bei der Siedetemperatur in den gasförmigen Zustand übergeht, und zum anderen ein Paramagnet, der unterhalb einer kritischen Temperatur ferromagnetisch ordnet. Eine einfache Klassifizierung dieser Phasenübergänge nach Ehrenfest in Übergänge erster und zweiter Ordnung erfolgt nach Auftreten einer Diskontinuität in der ersten bzw. zweiten Ordnung der Ableitung des thermodynamischen Potentials, wie etwa dem Sprung im Volumen V beim Übergang flüssig-gasförmig. Allerdings ist diese Einteilung nicht praxisgerecht. Genauer und genereller ist die Einteilung in diskontinuierliche und kontinuierliche Phasenübergänge, denn ein Phasenübergang geht allgemeiner einher mit einer Symmetrieänderung. Beispielsweise reduziert sich die aufgrund fehlender Fernordnung existierende Rotations- und Translationssymmetrie einer Flüssigkeit stark mit dem Erstarren eines Fluids zu einem geordneten Kristall. Zur Erfassung der jeweiligen gebrochenen Symmetrie wird diese nach Landau über einen Ordnungsparameter Φ charakterisiert. Dieser verschwindet im ungeordneten Zustand mit hoher Symmetrie im statistischen Mittel und in der geordneten Phase mit niedriger Symmetrie nimmt er einen endlichen Wert an. Für den Übergang flüssig-gasförmig wäre dies etwa der Dichteunterschied zur gasförmigen Phase, oder für einen Magneten der Magnetisierungsvektor, der in der paramagnetischen Phase keine ausgezeichnete Richtung besitzt, für die jeweilige Domäne im Ferromagneten aber klar definiert ist.

Diskontinuierliche Phasenübergänge Ein diskontinuierlicher Phasenübergang, oder ein Phasenübergang erster Ordnung, zeigt am Phasenübergang im Ordnungsparameter einen Sprung, eine Divergenz oder eine Singularität. Im Falle des Übergangs flüssig-gasförmig wäre dies etwa die spontane Zunahme des Volumens um ein Vielfaches. Außerdem koexistieren beim Phasenübergang von flüssig nach gasförmig bei der Temperatur T_c beide Phasen und es ist die latente Wärme $\Delta Q = T_c \Delta S$ vonnöten um die zusätzliche potenzielle Energie für den Übergang in die Gasphase aufzubringen. Der metastabile Zustand am Übergang ermöglicht ein Über- bzw. Unterhitzen und begünstigt damit das Auftreten von Hystereseeffekten. Der Übergang flüssig-gasförmig wurde hier als Beispiel gewählt, aber die Prinzipien sind übertragbar auch auf andere Phasenübergänge erster Ordnung. Der Betrag der latenten Wärme des Phasenübergangs flüssig-gasförmig ist im p - V -Diagramm von der Temperatur abhängig, bei der die Phasenumwandlung stattfindet und wird mit zunehmender Temperatur kleiner. Bei einer kritischen Temperatur ist keine latente Wärme mehr nötig und der Phasenübergang ist zu einem kontinuierlichen geworden [Nol05a].

Kontinuierliche Phasenübergänge Ein kontinuierlicher Phasenübergang zeichnet sich durch eine stetige erste Ableitung des thermodynamischen Potenzials aus. Diskontinuitäten treten hier erst in der zweiten Ableitung auf, weshalb diese Übergänge Ehrenfest entsprechend auch als Übergänge zweiter Ordnung bezeichnet werden. Für eine stetige Änderung der äußeren Parameter geht mit Annäherung an den Punkt des Phasenübergangs auch der Ordnungsparameter stetig gegen Null und folgt hierbei einem Potenzgesetz der Form [Nol05a]:

$$\Phi \sim |T - T_c|^x \quad \text{mit } x = 0,5 \text{ für } T \leq T_c \quad (2.9)$$

In Landaus Theorie der Phasenübergänge verschwindet zwar das statistische Mittel des Ordnungsparameters in der ungeordneten Phase, aber die Fluktuationen um diesen Mittelwert gerade nicht [Gri70]. Den Fluktuationen des Ordnungsparameters wird eine Längenskala, die Korrelationslänge ξ und eine Zeitskala, die Korrelationszeit τ zugewiesen. Mit Annäherung an den Übergang korrelieren die Fluktuationen über einen längeren Zeitraum, was als *critical-slowng-down* bezeichnet wird, und werden langreichweitiger mit divergierendem Charakter. Als Funktion der reduzierten Temperatur $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ werden experimentell für die Entwicklung der Fluktuationen mit Annäherung an die Übergangstemperatur T_c Potenzgesetze der Form

$$\xi \sim t^{-\nu} ; \quad \tau \sim \xi^z = t^{-\nu z} \quad (2.10)$$

gefunden. Mit ν wird der kritische Exponent der Korrelationslänge bezeichnet und z ist der dynamisch-kritische Exponent. Im Bereich der kritischen Fluktuationen ist ξ wesentlich größer als die effektive Reichweite typischer Teilchenwechselwirkungen. Als Konsequenz daraus ergeben sich die physikalischen Eigenschaften eines Systems hier nicht mehr aus der speziellen Form irgendeiner mikroskopischen Teilchenwechselwirkung, sondern aus der Ausdehnung ξ der kohärenten Schwankungen des Ordnungsparameters um dessen statistischen Mittelwert. Dies führt zu universellem Verhalten physikalischer Größen nahe des kritischen Punkts und Größen wie die spezifische Wärme, die magnetische Suszeptibilität oder die Kompressibilität folgen Potenzgesetzen mit einem dazugehörigen kritischem Exponenten. In manchen Systemen wird auch eine logarithmische Divergenz der Messgrößen gemäß $f(t) \sim \log t^{-1}$ gefunden. Deswegen wird der kritische Exponent allgemeiner definiert über $\phi = -\lim_{t \rightarrow 0} \log(f(t))/\log(t)$, wobei $\phi = 0$ sowohl einen Sprung in $f(t)$ als auch eine logarithmische Divergenz der Messgröße beschreibt. Das Verhalten eines physikalischen Systems am Phasenübergang ist entsprechend durch einen endlichen Satz kritischer Exponenten $\{\nu\}$ gegeben [Nol05b]. Die Exponenten sind allerdings nicht unabhängig voneinander sondern sind über Skalengesetze miteinander verbunden. Unterschiedlichste physikalische Systeme lassen sich entsprechend den kritischen Exponenten in Universalitätsklassen zusammenfassen, bei denen die kritischen Exponenten nur von

- der Dimension d des Systems,
- der Reichweite der Wechselwirkungen und

2. Grundlagen

- der Spindimensionalität (des Ordnungsparameters) n

abhängig sind. Dabei zeigt sich eine deutliche Abhängigkeit von der Spindimensionalität. Beispielsweise gilt für das Ising-Modell $n = 1$, das XY -Modell $n = 2$ und das Heisenberg-Modell $n = 3$ [Gri70].

Die Landausche Beschreibung kritischer Phänomene ist phänomenologischer Natur und es handelt sich hierbei, ähnlich der Weissischen Theorie des Ferromagnetismus, um eine Molekularfeld- beziehungsweise eine Mean-Field-Theorie. In diesem Kontext wird der kritische Anteil der freien Energie nahe T_c nach dem Ordnungsparameter entwickelt und die Theorie ist nur selbstkonsistent, solange das Ginzburg-Kriterium $\langle(\Phi - \langle\Phi\rangle)^2\rangle \ll \langle\Phi\rangle^2$ erfüllt ist, d.h. dass die Fluktuationen klein gegenüber dem Mittelwert sind. Gerade im Bereich starker Fluktuationen ist dieses Kriterium verletzt und die Vorhersagen der Landau-Theorie weichen von den experimentellen Funden ab. Für Dimensionen größer als 4 ist das Ginzburg-Kriterium allerdings stets erfüllt und hier werden auch die Vorhersagen der Mean-Field-Theorien wieder korrekt. Entsprechend wird $d > 4$ als die obere kritische Dimension bezeichnet.

Die Gültigkeit von Universalitätsklassen konnte Wilson mit seiner Renormierungsgruppentheorie bereits 1972 zeigen [WF72] und ermöglichte somit auch die Berechnung nicht exakt lösbarer Modelle. Sie gelten seitdem als wichtiges Werkzeug zur Behandlung kritischer Phänomene.

2.3. Quantenphasenübergänge

Experimentelle Funde zeigen, dass es klassische Phasenübergänge gibt, sie sich durch einen externen Kontrollparameter zu einer niedrigeren oder höheren Temperatur verschieben lassen. In der Verbindung CePd_2Si_2 beispielsweise ist die Temperatur der antiferromagnetischen Ordnung unterdrückbar durch Anlegen eines externen hydrostatischen Drucks. Diese Entwicklung kann extrapoliert werden zu einem Punkt, wo der Übergang theoretisch bei $T = 0$ stattfinden würde [Sch03]. Hier kann die einsetzende Ordnung nicht mehr thermisch bedingt sein, sondern findet aufgrund rein quantenmechanisch beschreibbarer Phänomene statt. Bei $T = 0$ existiert entsprechend in Abhängigkeit des Drucks ein magnetisch geordneter und ein magnetisch ungeordneter Grundzustand. Eine schematische Darstellung des sich ergebenden Phasendiagramms ist in Abbildung 2.1 gezeigt. Repräsentativ für den Druck p steht hier der Parameter q . Je nach Beeinflussbarkeit des Phasenübergangs kann q auch für Dotierung oder ein magnetisches Feld stehen. Ein Phasenübergang findet hier mit einer charakteristischen Frequenz $\omega_c \propto 1/\tau$ der quantenmechanischen Fluktuationen statt, die mit Annäherung an den Übergang verschwindet. Analog zur reduzierten Temperatur t kann der Abstand zum kritischen Punkt auch auf der q -Achse definiert werden als $a = (q - q_c)/q_c$. Der Temperaturnullpunkt ist nach dem dritten Hauptsatz der Thermodynamik allerdings experimentell unerreichbar. Ein Vergleich der thermischen Energie $k_B T$ mit der