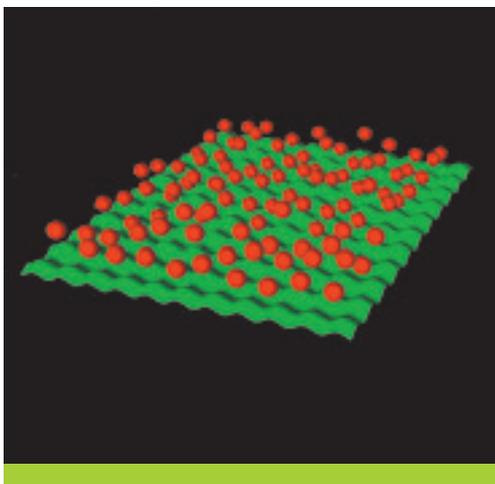


# Eigenschaften der Quantenmaterie

**Zur Theorie der Quantenkorrelationen in Mott-Materie,  
kalten Gasen und mesoskopischen Systemen**



Bekanntlich besteht alle Materie aus einer großen Anzahl verschiedener Atome, welche – je nach Zusammensetzung – die Eigenschaften der betrachteten Materie bestimmen. Während bei herkömmlicher Materie die Zusammensetzung im Allgemeinen von der Natur diktiert wird, sind wir im Bereich der Quantenmaterie an einen Punkt gelangt, wo gezielt gewünschte Eigenschaften eingestellt werden können. Naturgemäß wächst die Komplexität dieser Eigenschaften mit der Anzahl der zur Verfügung stehenden Freiheitsgrade und deren Wechselwirkung an. Eines der aktuellen Forschungsziele im Bereich der kondensierten Materie ist es, stark korrelierte Quantensysteme soweit zu verstehen, dass die Beherrschung ihrer Eigenschaften möglich wird.

Bevor wir konkrete, aktuelle Beispiele stark korrelierter Quantensysteme diskutieren, wollen wir den Begriff der Korrelation zunächst genauer präzisieren. Dazu betrachten wir zunächst ein schwach korreliertes System, d.h. ein System, bei dem der Zustand einer Komponente weitgehend unabhängig vom Zustand der anderen Komponenten ist. In so einem Fall ist es möglich, allgemeine Eigenschaften des Systems durch diejenigen der einzelnen Komponenten zu beschreiben. Ein wohlbekanntes Beispiel dafür sind die gewöhnlichen Metalle, wie zum Beispiel Kupfer, Eisen oder Blei.

Obwohl Metalle seit Jahrtausenden der Menschheit bekannt sind, konnten ihre

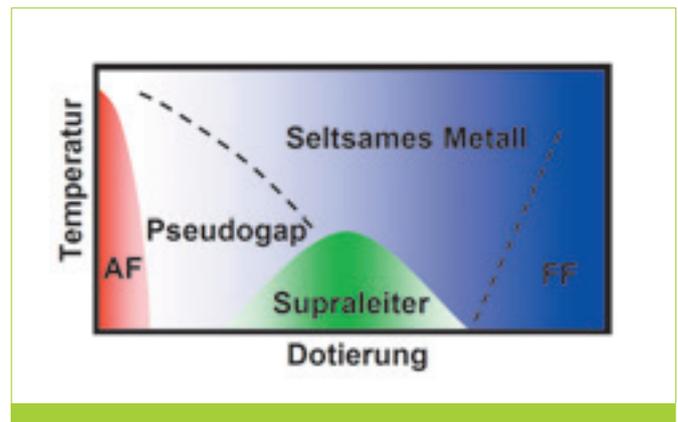
physikalischen Eigenschaften erst mit Hilfe der Quantenmechanik wirklich verstanden werden. Das Tieftemperaturverhalten ihrer spezifischen Wärme kann der Physiker z.B. durch die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion, welche die statistischen Eigenschaften von Elektronen (Fermionen) beschreibt, erklären. Fermionen gehorchen der Fermi-Dirac-Statistik, der das Pauli-Ausschlussprinzip zugrunde liegt. Dieses besagt, dass zwei Fermionen nie denselben Quantenzustand besetzen können. Dennoch sieht man bei genauerer Betrachtung der Berechnungen der spezifischen Wärme, dass man dort nicht-wechselwirkende Teilchen angenommen hat, während Elektronen geladen sind, so

dass sie unter Umständen einer sehr starken Coulomb-Wechselwirkung unterworfen sein können. Die Lösung dieses Widerspruchs hat die Physiker lange beschäftigt. Es war der geniale russische Physiker Lev Landau, der vorschlug, dass die für die grundlegenden Eigenschaften in einfachen Metallen verantwortlichen elementaren Anregungen Quasiteilchen sind, welche dieselben Quantenzahlen wie die Elektronen besitzen (d.h. Spin  $S=1/2$  und Ladung  $Q=e$ ), die aber bei niedrigen Energien bzw. Temperaturen nur schwach miteinander wechselwirken. Systeme, die solche Quasiteilchen besitzen, werden als Landau-Fermiflüssigkeiten bezeichnet. Hinter der Lösung des Widerspruchs steht das Pauli-Ausschlussprinzip, das dafür sorgt, dass selbst wenn die Wechselwirkungsstärke groß sein kann, die Wahrscheinlichkeit, dass zwei Fermionen miteinander wechselwirken, bei kleinen Energien stark abnimmt und somit schwach wechselwirkende Quasiteilchen entstehen.

Im Gegensatz zu schwach wechselwirkenden Systemen zeichnen sich stark korrelierte Systeme dadurch aus, dass ihre Eigenschaften erst durch das Zusammenwirken vieler Komponenten und nicht durch die einzelnen bestimmt werden. So spricht man hier von emergenten Phänomenen, welche sich mit herkömmlichen theoretischen Methoden kaum vorhersagen lassen. Ein prominentes Beispiel hierfür sind die Hochtemperatur-Supraleiter (HTSL). Seit der Entdeckung dieser Materialien sind wir mit einer Reihe von Verbindungen konfrontiert, die experimentell auf Abweichungen vom Fermiflüssigkeitsverhalten hinweisen.

### 1. Hochtemperatur-Supraleiter

Wir rufen zunächst einige Grundeigenschaften der HTSL in Erinnerung. Allen HTSL gemeinsam sind  $\text{CuO}_2$ -Schichten, die durch Änderung der chemischen Komposition der Umgebung dotiert werden können. Je nach Umgebung werden Elektronen in diese Schichten hinzugefügt (hier spricht man von Elektron-dotierten Verbindungen) oder aus den  $\text{CuO}_2$ -Schichten entfernt (Loch-dotierte HTSL). Da letztere die höchsten Sprungtemperaturen aufweisen und die ausgeprägtesten Anomalien zeigen, diskutieren wir im Folgenden nur den Fall der Dotierung mit Löchern. Ohne Dotierung stellen die  $\text{CuO}_2$ -Schichten



*Generisches Phasendiagramm der Hochtemperatursupraleiter mit den Kontrollparametern Dotierung und Temperatur. AF bezeichnet die antiferromagnetisch geordnete Region bei kleinen Dotierungen. Supraleitung findet man erst bei endlicher Dotierung innerhalb des kuppelartigen Bereiches. Zwischen dem AF und dem supraleitendem Gebiet zeigen diese Materialien eine Pseudogap Phase, während bei hohen Dotierungen Fermiflüssigkeitsverhalten (FF) vorliegt. Oberhalb der supraleitenden Kuppel wird ebenfalls unkonventionelles (seltsames) metallisches Verhalten beobachtet.*

*Generic phase diagram of the high-temperature superconductors with control parameters doping and temperature. AF denotes the antiferromagnetic ordered region for small doping. Superconductivity is found at finite dopings inside the dome-like region. Between the AF and the superconducting regime, these materials exhibit a pseudogap phase, whereas at high doping Fermi-liquid behavior is recovered. Above the superconducting dome, these systems exhibit unconventional (strange) metal properties.*

einen Isolator dar, wobei  $S=1/2$  magnetische Momente an den Kupfer-Ionen antiferromagnetisch angeordnet sind. Dieser Zustand, Mott-Isolator genannt, ist ein erstes Merkmal der starken Korrelation in diesen Systemen, denn das magnetische Moment  $S=1/2$  pro Kupfer-Ion gehört einem Elektron, das unter normalen Umständen (z.B. in einem konventionellen Metall) zur Leitfähigkeit beitragen würde. Die Tatsache, dass die Elektronen jedoch lokalisiert sind, ist eine Folge einer starken, lokalen Wechselwirkung, welche Zustände mit zwei Elektronen pro Gitterplatz stark unterdrückt. Da sich ohne Dotierung im Mittel ein Elektron pro Gitterplatz befindet, ist es für die Elektronen energetisch nicht möglich, von einem Gitterplatz zum nächsten zu „hüpfen“. Durch Dotierung erhält man ein Metall, das supraleitend werden kann. Die Sprungtemperatur ist zunächst eine ansteigende Funktion der Dotierung, bis eine optimale Dotierung erreicht wird, die durch den höchsten Wert der Sprungtemperatur

gekennzeichnet ist. Dieser Wert kann bis um das Fünffache höher sein als die höchsten Sprungtemperaturen der bis zur Entdeckung der HTSL bekannten Supraleiter. Die oben erwähnten Anomalien sind am deutlichsten im unterdotierten Bereich zu sehen, d.h. bei Dotierungen, die kleiner als die optimale sind. So zeigt dort die elektronische spezifische Wärme anstatt des üblichen linearen Verlaufs mit der Temperatur eine viel stärkere Abnahme, welche durch die Öffnung einer Energielücke phänomenologisch erklärt werden kann. Auch zeigt die Pauli-Suszeptibilität, welche die Änderung der Magnetisierung durch ein konstantes Magnetfeld beschreibt, eine starke Abnahme mit abnehmender Temperatur im Gegensatz zu einer Fermiflüssigkeit, bei der diese Größe temperaturunabhängig ist. Deswegen spricht man von einem *Pseudogap*-Verhalten im unterdotierten Bereich.

Wie schon bei der Diskussion im schwach korrelierten Fall erwähnt wurde, entsteht eine Fermiflüssigkeit ganz allgemein aufgrund der Fermi-Dirac-Statistik der Elektronen. Das weist darauf hin, dass nur singuläre Wechselwirkungen zum Zusammenbruch einer Fermiflüssigkeit führen können. Eine solche Situation findet man bei wechselwirkenden Elektronen in einer Dimension vor, wo eine störungstheoretische Behandlung der Wechselwirkung zu Singularitäten führt. Anstelle einer Fermiflüssigkeit bildet sich bei einer repulsiven Wechselwirkung eine Luttinger-Flüssigkeit. Dieser Zustand zeichnet sich dadurch aus, dass das eindimensionale Metall keine Fermikante besitzt, und elementare Spinanregungen (*Spinons*) und Ladungsanregungen (*Holons*) die Quasielektronen bzw. Quasilöcher einer Fermiflüssigkeit ersetzen. Hier spricht man von der Spin-Ladungstrennung, da die Quantenzahlen für Spin und Ladung, welche in einer Fermiflüssigkeit ein und derselben elementaren Anregung (dem Quasiteilchen) zugeordnet werden, in einer Luttinger-Flüssigkeit den oben erwähnten neuen elementaren Anregungen zugeordnet werden:  $S = 1/2$  und  $Q = 0$  für Spinons und  $S = 0$  und  $Q = -e$  für Holons. Da Konsens darüber besteht, dass in den HTSL die Supraleitung in den  $\text{CuO}_2$ -Schichten zustande kommt, können die HTSL als zweidimensionale Systeme betrachtet werden, so dass es nicht zwingend ist, dass die Abweichungen vom Fermiflüssigkeitsverhal-

ten durch eine Luttinger-Flüssigkeit erklärt werden. Vielmehr stellt sich die Frage, welche Bedingungen in zwei Dimensionen zu den oben erwähnten Anomalien führen können, und darüber hinaus, ob dieselben Gründe für die Supraleitung bei den hohen Temperaturen verantwortlich sind.

Etablierte theoretische Methoden sind bislang nicht in der Lage, die bei den HTSL beobachteten Anomalien zu erklären. Zwei Methoden sind hier zu erwähnen, um die bei stark korrelierten Systemen auftretenden Schwierigkeiten zu erläutern. Die Störungstheorie erlaubt es, Wechselwirkungseffekte als kleine Abweichungen eines nicht wechselwirkenden Systems zu berechnen. Dies bedeutet, dass das resultierende Verhalten sich nur quantitativ – aber nicht qualitativ – vom nicht wechselwirkenden Fall unterscheidet. Demnach kann nicht erwartet werden, dass Abweichungen vom Fermiflüssigkeitsverhalten auf dieser Weise geklärt werden können.

Ein anderer Zugang wird durch die Molekularfeldtheorie angeboten. Hier wird die Wechselwirkung durch eine gemittelte Form ersetzt. Wenn auch in diesem Fall keine Annahme über die Stärke der Wechselwirkung gemacht wird, vernachlässigt man dennoch vollständig die Fluktuationen um dieses mittlere Feld (*mean-field*), welche den korrelierten Zustand bestimmen. Für eine adäquate Beschreibung müssen Methoden eingesetzt werden, die störungstheoretische Ansätze vermeiden, um in der Tat stark korrelierte Quantensysteme ohne unkontrollierte Fehler zu behandeln. Weiterhin muss man Quantenfluktuationen korrekt beschreiben, da sie in niedrigen Dimensionen womöglich eine wesentliche Rolle spielen können. D.h. es ist wünschenswert, Methoden einzusetzen, die über Mean-Field-Näherungen, welche generell Fluktuationen vernachlässigen, hinaus gehen. Hier bieten sich vor allem numerische Methoden an.

Eine erste, naheliegende Alternative ist es, ein möglichst einfaches Modell stark korrelierter Systeme einzuführen und dieses dann mit Hilfe der uns heute zur Verfügung stehenden Computer numerisch exakt zu lösen. Ein solches Modell ist das sogenannte Hubbard-Modell, bei dem Elektronen von einem Gitterplatz zum nächsten hüpfen können und nur dann miteinander wechselwirken, wenn sich

zwei Elektronen mit entgegengesetzten Spinausrichtungen auf demselben Gitterplatz befinden. Im Fall einer starken Wechselwirkung und bei gleicher Anzahl von Elektronen und Gitterplätzen (d.h. im sog. halb-gefüllten Fall, da aufgrund der Fermi-Dirac-Statistik maximal zwei Elektronen einen Gitterplatz besetzen können), realisiert dieses Modell den Mott-Isolator. Deswegen ist dieses ein paradigmatisches Modell für die HTSL Materialien. Trotz seiner Einfachheit stellt sich schnell heraus, dass eine exakte numerische Lösung auch mit heutigen Supercomputern weitgehend ausgeschlossen ist, denn die Anzahl der quantenmechanischen Zustände, die das Modell annehmen kann, wächst exponentiell mit der Anzahl der Gitterplätze. Im Fall des Hubbard-Modells stehen den Elektronen vier Zustände pro Gitterplatz zur Verfügung, denn jeder Gitterplatz kann leer sein, einfach besetzt mit einem Elektron mit Spin rauf oder runter, oder doppelt besetzt sein. Gegeben  $N$  Gitterplätze, ist die Anzahl der möglichen Zustände  $4^N$ . Mit heutigen Computern ist es möglich, Systeme mit  $N$  ca. 20 Gitterplätzen exakt zu lösen. Ist man aber an Phasenübergängen (z.B. zur Supraleitung oder Antiferromagnetismus) interessiert, sollte man in der Lage sein, möglichst große Systeme zu behandeln, um eine Extrapolation zu experimentell relevanten Systemgrößen ( $N \sim 10^{23}$ ) erreichen zu können.

In Anbetracht der oben genannten Schwierigkeit, den gesamten Hilbertraum zu umfassen, bietet die Idee des *importance Sampling*, der die Monte-Carlo-Simulationen unterliegen, eine Möglichkeit, dieses Problem zu umgehen. Solche Simulationen werden vielfach bei klassischen Systemen eingesetzt, um numerisch exakte Ergebnisse, d.h. solche, die nur einen kontrollierbaren statistischen Fehler aufweisen, zu erzielen. Dabei werden Konfigurationen des Systems stochastisch erzeugt und je nach der dazugehörigen Wahrscheinlichkeit berücksichtigt oder verworfen. Diese Wahrscheinlichkeiten werden durch die grundlegenden Prinzipien der Statistischen Mechanik festgelegt. Dieselbe Idee kann aber auch bei quantenmechanischen Vielteilchensystemen angewandt werden, falls es gelingt, sie möglichst exakt durch ein klassisches System abzubilden, d.h. so, dass die bei der Abbildung auftretenden systematischen Fehler in

einer kontrollierbaren Weise verringert werden können.

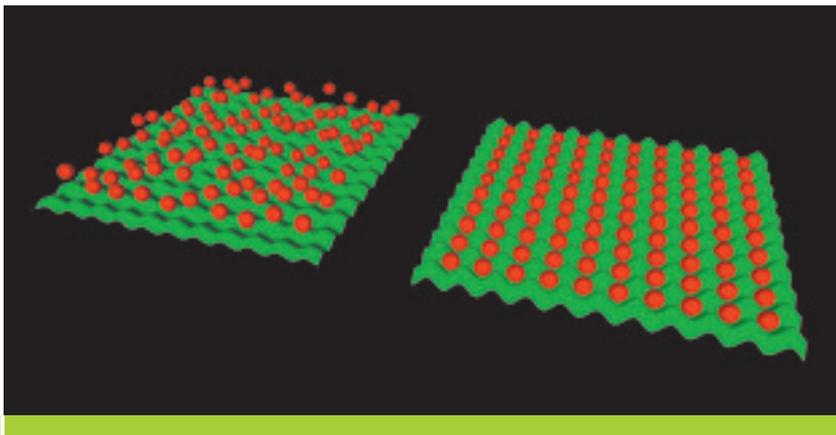
Leider lässt sich das Hubbard-Modell im Fall repulsiver Wechselwirkung und mit einer für die HTSL relevanten Elektronendichte (d.h. weg vom halb-gefüllten Fall) nicht mit den bisherigen Monte-Carlo-Algorithmen behandeln. Der Grund dafür ist das sog. Vorzeichen-Problem. Dieses Problem entsteht generell bei Simulationen von Fermionen in zwei oder mehr Dimensionen, da die Wellenfunktionen für Fermionen antisymmetrisch bezüglich des Austausches zweier Teilchen sind. Dies bedeutet, dass während einer Simulation Beiträge mit wechselnden Vorzeichen auftreten, welche zu exponentiell wachsenden statistischen Fluktuationen (d.h. statistischen Fehlern) mit zunehmender Anzahl von Gitterplätzen oder mit abnehmender Temperatur führen.

Mit großem Erfolg konnten jedoch neue Simulationsalgorithmen entwickelt werden, die es erlauben, die magnetischen Eigenschaften der Mott-Isolatoren zu untersuchen. Dabei konnten insbesondere auch theoretische Vorhersagen getestet werden, welche die speziellen quantenmechanischen Vielteilcheneffekte dieser stark korrelierten Mott-Materialien aufzeigen. In den letzten Jahren hat sich in der Tat die Erforschung solcher Quanten-Magnete zu einem fundamentalen Gebiet der Festkörpertheorie entwickelt. Dabei wird speziell das Wechselspiel zwischen starken Quantenfluktuationen und magnetischen Frustrationseffekten untersucht. Letztere treten auf, wenn ein magnetisches System z.B. durch die geometrische Anordnung der Atome nicht alle magnetischen Wechselwirkungsenergien

## SUMMARY

*Das physikalische Verständnis quantenmechanischer Vielteilchensysteme gelingt seit der Entwicklung der Quantenmechanik durch die Identifizierung elementarer Anregungen, welche als schwach wechselwirkende Bausteine des Ganzen betrachtet werden können. In Systemen, die durch eine starke Korrelation der elementaren Bausteine gekennzeichnet sind, versagen jedoch bekannte theoretische Methoden wie die Molekularfeldtheorie, bei der die Wechselwirkung nur in gemittelter Form berücksichtigt wird, oder Störungstheorien, welche auf sehr schwache Korrelationen limitiert sind. Prominente Beispiele für stark korrelierte Quantensysteme sind die Hochtemperatur-Supraleiter, ultrakalte Atome in optischen Gittern und mesoskopische Systeme wie Quantenpunkte im sogenannten Kondo-Regime. In diesem Beitrag stellen wir die Hauptmerkmale solcher Systeme vor und geben einen Überblick über moderne theoretische Methoden, die Fortschritte beim Verständnis ihrer grundlegenden Physik erlauben.*

*Our current understanding of interacting quantum many-body systems is based on the identification of elementary excitations that can be considered as their weakly-interacting building blocks. However, in systems that are dominated by strong correlations among these building blocks, conventional theoretical methods such as mean field theory, that treat interactions in an averaged form only, and perturbation theory, valid for weak interactions, often fail to account for the most relevant physics. Prominent examples of such strongly correlated quantum systems include high-temperature superconductors, ultra-cold atoms in optical lattices, and mesoscopic systems such as quantum dots in the Kondo-regime. Here, we present the main features of such systems, and provide an overview of modern theoretical approaches, that allow for progress in our understanding of the physical principles that govern strongly correlated quantum matter.*



Ultrakalte Atome (rot) auf einem periodischen optischen Gitter (grün). Im linken Bild ist der Fall eines schwachen Gitterpotentials illustriert, in dem die Atome in einem suprafluiden Zustand sind. Sie besitzen eine hohe kinetische Energie, und bewegen sich zwischen den Gitterplätzen her, so dass deren Besetzung stark fluktuiert. Wird jedoch das Gitterpotential erhöht, so wird das Quantentunneln der Atome zwischen den Gitterplätzen schließlich stark unterdrückt (rechtes Bild). Aufgrund starker Abstoßung der Atome bilden sie nun eine homogene Besetzung der einzelnen Gitterplätze aus, was zur Lokalisierung und einer damit einhergehenden Energie-lücke in den Anregungen führt. Das System bildet somit einen Mott-Isolator aus kalten Atomen.

Ultra-cold atoms (red) on a periodic optical lattice (green). The left panel illustrates the case of a weak lattice potential, for which atoms remain in a superfluid state, with dominant kinetic energy. Their tunneling between the lattice sites leads to strong fluctuations in the local site occupations. An increase of the lattice potential leads to the suppression of the quantum tunneling of the atoms, and the formation of a Mott-insulator of the cold atom gas (right panel). This leads to a homogeneous occupation of the lattice sites and the opening of an excitation gap.

minimieren kann. In solchen Systemen treten ganz neue magnetische Phasen auf, die durch komplex verschränkte Wellenfunktionen beschrieben werden. In der Tat kann durch Variation der Prozesse bei der Herstellung magnetischer Mott-Materie derzeit eine Vielzahl interessanter Phänomene experimentell untersucht werden. Zudem ist es in einigen Mott-Systemen gelungen, durch die Änderung kontrollierbarer äußerer Parameter, wie z.B. Druck oder Magnetfelder, Übergänge zwischen verschiedenen Quantenphasen zu steuern. Das Studium solcher Quantenphasenübergänge erlaubt einen weiteren faszinierenden Einblick in die Welt stark korrelierter Elektronensysteme, zu deren Verständnis neue theoretische Ansätze entwickelt werden müssen. Das betrifft auch wieder die numerische Simulation, denn im Fall starker Frustration tritt wiederum ein schwieriges Vorzeichen-Problem auf, das die Behandlung solcher Systeme mit numerisch exakten Quanten-Monte-Carlo Simulationen derzeit noch nicht erlaubt.

## 2. Stark korrelierte ultra-kalte Atome in optischen Gittern

Ein neues Beispiel für stark korrelierte Quantensysteme wurde vor wenigen Jahren in einem Experiment mit ultrakalten Atomen unter dem Einfluss eines Gitterpotentials vorgeführt, in dem der Übergang von einem Bose-Einstein-Kondensat zu einer Mott-Isolator-Phase nachgewiesen werden konnte. Hier gelten, wie im Fall der Fermionen, dieselben energetischen Argumente, um diesen Zustand zu verstehen. Dadurch, dass ultrakalte Atome bei sehr tiefen Temperaturen ( $\sim$  Nanokelvinbereich) nur eine Kontaktwechsel-

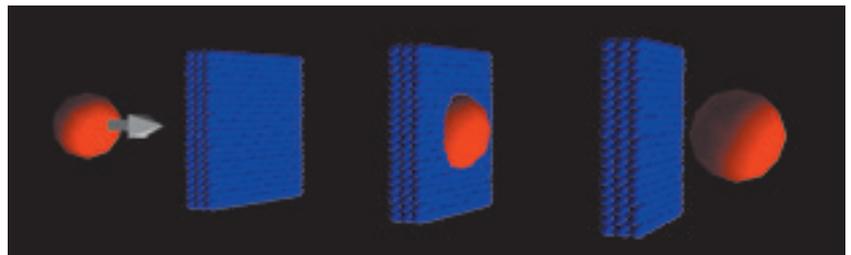
wirkung erfahren, stellen sie in einem optischen Gitter (d.h. ein periodisches Potential, das durch eine stehende Lichtwelle erzeugt wird) die beste Realisierung eines Hubbard-Modells dar, im Gegensatz zu den Systemen in der Festkörperphysik, wo das Hubbard-Modell nur den kurzreichweitigen Anteil der Coulomb-Wechselwirkung berücksichtigt.

Die oben erwähnten Experimente haben gezeigt, dass Quantengase besonders geeignet sind, Effekte, welche durch starke Korrelation hervorgerufen werden, modellhaft zu realisieren. Diese neue, faszinierende Entwicklung könnte zu neuartigen fermionischen Systemen neben den Hochtemperatur-Supraleitern führen. Ähnlich wie im Fall der Bose-Einstein-Kondensation mit bosonischen Atomen ist es möglich, fermionische Atome in einer magneto-optischen Falle einzufangen. Wie im Fall von Bosonen demonstriert, kann der stark korrelierte Limes durch die Überlagerung eines optischen Gitters erreicht werden. Es ist sogar denkbar, in solchen Systemen ähnliche Bedingungen wie in den Hochtemperatur-Supraleitern zu erreichen. Da die ultra-kalten Atome in der Regel ladungsneutral sind, entspricht der supraleitende Zustand in diesem Fall einer Supraflüssigkeit, d.h. einer Flüssigkeit, die ohne Viskosität fließen kann. Seit der bahnbrechenden theoretischen Arbeit von Bardeen, Cooper und Schrieffer (BCS) im Jahre 1957 weiß man, dass der konventionelle supraleitende Zustand durch die Paarung von Elektronen zustande kommt. Auch im Falle der HTSL findet eine solche Paarung statt, allerdings mit einer besonderen Symmetrie der Paarwellenfunktion (d-Wellen-Supraleitung), welche die starke Abstoßung umgeht. Bei den ultra-kalten Atomen ist es möglich, mittels sog. Feshbach-Resonanzen, welche die Art der Kontaktwechselwirkung zwischen den Atomen kontrolliert, die Paarung der Fermionen durch eine anziehende Wechselwirkung hervorzurufen. Die Stärke der Wechselwirkung lässt sich vom schwachen bis zum starken Limes regeln. Bei einer schwachen Wechselwirkung liegt ähnlich wie bei konventionellen Supraleitern der BCS-Fall vor. Bei einer starken Wechselwirkung bilden sich Moleküle mit einer Ausdehnung, die kleiner als der mittlere Abstand zwischen den Teilchen ist. Dabei entsteht die Suprafluidität durch die Bose-Einstein-Kondensation der Moleküle.

Jüngste Experimente haben in beeindruckender Weise gezeigt, dass es möglich ist, den Übergang (*crossover*) von einem zum anderen Limes im Detail zu verfolgen. Hier wurde, wie bei den unterdotierten HTSL, ein Pseudogap-Verhalten beobachtet, so dass auch hier Abweichungen von einer Fermiflüssigkeit zu erwarten sind. Eine theoretische Untersuchung des Pseudogapbereichs ist glücklicherweise mit Quanten-Monte-Carlo-Simulationen möglich. Im Fall einer anziehenden Wechselwirkung tritt das oben genannte Vorzeichen-Problem nämlich nicht auf. Dies eröffnet zum ersten Mal die Möglichkeit, numerisch exakte Ergebnisse für eine Nichtfermiflüssigkeit zu erzielen. Eine weitere interessante Variante des Systems kann durch den Einsatz eines optischen Gitters erreicht werden. Wie im Fall des Mott-Isolators entsteht hier ein neuer Zustand der Materie, wenn eine kommensurable Füllung des Systems vorliegt (d.h., wenn die Anzahl der Teilchen und der Gitterplätze gleich ist). Bei einer anziehenden Wechselwirkung ist es energetisch günstig, dass je zwei Fermionen einen Gitterplatz besetzen. Im Extremfall wäre die eine Hälfte der Gitterplätze besetzt und die andere leer. Eine periodische Anordnung der besetzten Gitterplätze, so dass sie von unbesetzten umgeben sind, würde den Teilchen gelegentlich einen Sprung zu den Nachbarplätzen ermöglichen, um somit etwas kinetische Energie zu gewinnen. Dadurch entsteht ein neuer kristalliner Zustand mit einer vom ursprünglichen Gitter abweichenden Periodizität. Da aber durch Fermionenpaarung auch Suprafluidität entsteht, würde beides gleichzeitig vorliegen. Dies lässt sich durch die Symmetrieeigenschaften des Systems mathematisch rigoros zeigen. Diesen neuen Zustand der Materie bezeichnet man als *Supersolid*. Unsere Quanten-Monte-Carlo-Simulationen haben gezeigt, dass selbst dann, wenn durch ein Fallenpotential – das notwendig ist, um die Teilchen einzufangen – die oben erwähnte Symmetrie verletzt ist, Quantenfluktuationen diese wieder herstellen, so dass ein Supersolid entstehen kann.

Eine weitere Entwicklung, welche bei ultrakalten Atomen stattfindet, ist die kontrollierte Untersuchung von korrelierten Systemen außerhalb des Gleichgewichts. Hier betritt man physikalisches Neuland, denn im Gegensatz zur Physik im Gleich-

gewicht, bei der die Grundlagen durch die Statistische Mechanik gegeben sind, stehen noch keine allgemeinen Formulierungen zur Verfügung, welche der statistischen Natur eines Systems mit vielen Teilchen Rechnung tragen. Während nämlich im Gleichgewicht die statistischen Gewichte der verschiedenen Konfigurationen aus den Prinzipien der Statistischen Physik gegeben sind, müssen sie außerhalb des Gleichgewichts je nach Situation bestimmt werden. Neue numerische Methoden wie die sog. Dichtematrixrenormierungsgruppe erlauben es nun erstmals, die zeitliche Evolution eines stark korrelierten quantenmechanischen Vielteilchensystems akkurat zu beschreiben. Dies wird erreicht durch eine optimale Wahl der Zustände, welche bei der Lösung der grundlegenden Gleichung der Quantenmechanik, nämlich der Schrödinger-Gleichung, die



führende Rolle spielen. Somit ist es nun möglich, Experimente zu simulieren und detaillierte Informationen über die Evolution des Systems zu erlangen, insbesondere auch über solche physikalischen Größen, welche experimentell schwer zugänglich sind.

Somit bieten ultra-kalte Atome einerseits die Möglichkeit, zentrale Aspekte von HTSL, wie Abweichungen vom Fermiflüssigkeitsverhalten, zu erforschen. Andererseits können durch sie neue Zustände der Materie, die wie im Fall von Supersolids vor langer Zeit vorhergesagt wurden, Realität werden. Weiterhin erlauben sie im engen Zusammenspiel mit theoretischen Arbeiten fundamentale Fragen der Physik außerhalb des Gleichgewichts anzugehen.

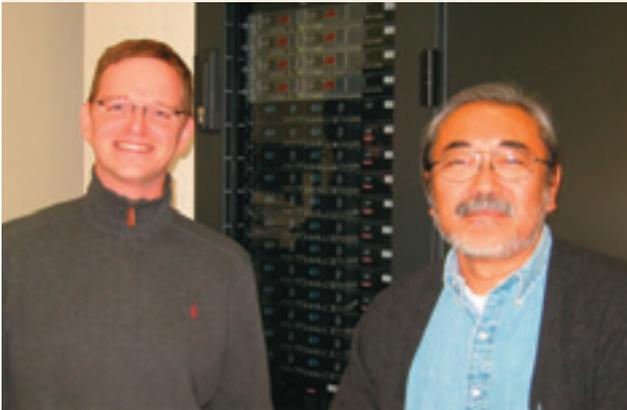
### 3. Stark korrelierte mesoskopische Systeme

Ein weiterer Bereich, der die Beherrschung von Quantenkorrelationen durch die gezielte Strukturierung von Materie erlaubt, sind die mesoskopischen und nanoskopi-

*Illustration des Verhaltens eines idealen Supersolids (blau) unter Teilchenbeschuss (rot). Das im linken Teilbild ankommende Teilchen durchquert in der mittleren Teilsequenz ungehindert den Supersolid und verlässt diesen, ohne die periodische Struktur zerstört zu haben (rechts). Mit dem im Artikel angesprochenen Supersolid lässt sich ein derartiges Gedankenexperiment derzeit nur durchführen, wenn das Testteilchen auf dem diskreten Gitter hüpfen kann, auf dem auch der Supersolid existiert.*

*An illustration of the behavior of an ideal supersolid (blue) under particle (red) bombardment. In the left panel, a test particle approaches the supersolid, and transverses it (central panel), without destroying the periodic structure (right panel). Such an experiment can be performed with the supersolids discussed in this article only if the test particle moves on the same discrete lattice that underlies the supersolid structure.*

## DIE AUTOREN



## STEFAN WESSEL

(l.) hat Physik an der LMU München studiert, und im Anschluss daran an der USC in Los Angeles, USA über theoretische Festkörperphysik promoviert. Nach einer Postdoktorandenzeit am Institut für Theoretische Physik der ETH Zürich, Schweiz, habilitierte er 2006 am Institut für Theoretische Physik III der Universität Stuttgart über stark korrelierte Quantensysteme. Seit 2004 ist er als wissenschaftlicher Angestellter Privatdozent an der Universität Stuttgart in permanenter Anstellung.

## ALEJANDRO MURAMATSU

(r.) studierte Physik an der Universität Buenos Aires, Argentinien. Mit einer Doktorarbeit am Max-Planck-Institut für Festkörperforschung promovierte er an der Universität Stuttgart. Nach einer Postdoktorandenzeit am Institute for Theoretical Physics, University of California, Santa Barbara, habilitierte er an der Universität Würzburg. Seinen ersten Ruf erhielt er an die Universität Augsburg. Seit 1996 leitet er das Institut für Theoretische Physik III der Universität Stuttgart.

## Kontakt

Institut für Theoretische Physik III, Universität Stuttgart  
 Pfaffenwaldring 57, 70569 Stuttgart, Tel.: 0711/685-65203, Fax: 0711/685-65098  
 E-Mail: [mu@theo3.physik.uni-stuttgart.de](mailto:mu@theo3.physik.uni-stuttgart.de)

schen Systeme. Hier spielen die sog. Quantenpunkte auf der Basis von Halbleitern eine führende Rolle. Mit sehr ausgefeilten Techniken werden heutzutage Strukturen im Nanometer-Bereich gebaut, bei denen Quanteneffekte dominieren. Solche künstlichen Atome können als Verunreinigungen angesehen werden, deren Eigenschaften gezielt durch das Anlegen von Spannungen und Magnetfeldern kontrolliert werden können. Es ist insbesondere für die Integration von solchen Strukturen in Schaltkreise interessant, ihre Eigenschaften in Bezug auf den elektrischen Transport zu beherrschen. Bei hinreichend kleinen Abmessungen ist es möglich, dass die elektrische Kapazität solcher Strukturen so klein wird, dass die Anzahl der Elektronen in den jeweiligen Energieniveaus festgelegt werden kann. Durch die kleine Kapazität kann sogar die Energie, ein zusätzliches Elektron in den Quantenpunkt hineinzubringen, so groß sein, dass das zuletzt besetzte Niveau nur ein Elektron erlaubt. Hier spricht man von der Coulomb-Blockade. Liegen die Energieniveaus weit genug auseinander, kann man dieses letzte Elektron direkt adressieren. Ein be-

sonders interessantes Beispiel von Korrelationen entsteht, wenn sich die Elektronen der Zuleitungen zum Quantenpunkt mit denjenigen im Quantenpunkt durch Tunnelprozesse austauschen. Dieser Prozess kann als Streuung der Elektronen in einem Metall mit einer magnetischen Verunreinigung angesehen werden. Somit entsteht der Kondo-Effekt, der darin besteht, dass die Elektronen des Metalls mit denen der Verunreinigung einen gebundenen Zustand eingehen, der durch eine Resonanz bei Nullenergie gekennzeichnet ist. Dadurch entsteht ein neuer Zustand, der ein Maximum des Leitwertes bei verschwindender Spannung zur Folge hat. Weitere Entwicklungen zielen darauf, komplexere Strukturen zu bilden, bei denen noch exotischere Zustände auftreten, wie beim sog. Zwei-Kanal-Kondo-Effekt, bei dem theoretisch eine von Null verschiedene Entropie im Limes von Temperatur Null vorhanden ist. Für ein theoretisches Verständnis solcher Systeme spielen wiederum numerische Simulationen mittels Quanten-Monte-Carlo-Methoden und Dichtematrixrenormierungsgruppe eine wichtige Rolle. Insbesondere erlaubt

die letztere Methode Untersuchungen der Transporteigenschaften jenseits des linearen Bereichs, d.h. in einem Nichtgleichgewichtszustand.

#### 4. Zusammenfassung und Ausblick

Die oben diskutierten Systeme zeigen, dass numerische Simulationen von quantenmechanischen Vielteilchensystemen in vielen Fällen in der Lage sind, eine sehr genaue Beschreibung stark korrelierter Systeme zu geben, bei denen keine andere theoretische Methode zuverlässige Aussagen machen kann. Dabei konnte festgestellt werden, wie neue Zustände der Materie wie etwa ein Supersolid erreicht werden können. Weiterhin konnte die zeitliche Entwicklung von stark korrelierten Systemen genau simuliert werden. Dennoch haben derzeit die Quanten-Monte-Carlo-Methoden das sog. Vorzeichen-Problem zu überwinden, um dotierte Quantenantiferromagneten in zwei

Dimensionen oder frustrierte Quantenantiferromagnete zu behandeln. Die Lösung dieses Problems stellt derzeit die größte Herausforderung auf dem Gebiet der Simulation stark korrelierter Quantensysteme dar.

#### Danksagung

Wir sind dem John von Neumann-Institut für Computing und dem Höchstleistungszentrum Stuttgart dankbar für die Vergabe von Rechenzeit auf Massiv-Parallelrechnern. •

*Stefan Wessel, Alejandro Muramatsu*

#### Literatur

- „Starken Korrelationen auf der Spur”,  
C. Lavalley, M. Rigol, and A. Muramatsu,  
Physik Journal 3, 57 (2004).  
„Optical lattices”, M. Greiner and  
S. Foelling, Nature, 453, 736 (2008).  
Nature insight „Quantum Coherence”,  
Nature, 453, 1003 (2008).