**Rubrik: Festkörperphysik**

**Anderson-Modell korrelierter Elektronen bestätigt**

*Das Anderson-Modell (Anderson Impurity Model) wird in der Festkörperphysik zur Beschreibung von korrelierten, also stark wechselwirkenden Elektronen genutzt. Es besteht aus lokalen Energieniveaus, die aufgrund der Wechselwirkung mit delokalisierten Leitungselektronen eine nach Yun Kondo benannte Kondo-Resonanz hervorrufen. Nun ist es erstmals gelungen, diese Energieniveaus zusammen mit der Kondo-Resonanz präzise zu vermessen, wodurch eine quantitative Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment demonstriert wurde.*

Bereits Anfang der 1930er-Jahre entdeckten Tieftemperaturphysiker, dass der elektrische Widerstand unerwarteterweise mit sinkender Temperatur ansteigt, wenn magnetische Fremdatome in ein nichtmagnetisches Metall legiert werden. Die erste störungstheoretische Behandlung dieses Phänomens von Jun Kondo 1964 konnte dieses Widerstandsverhalten mit Hilfe der Wechselwirkung zwischen dem lokalisierten Spin des magnetischen Fremdatoms und den delokalisierten Elektronen des Metalls erklären, beinhaltete jedoch unphysikalische Divergenzen bei T = 0 K [1]. Die exakte Lösung des Kondo-Problems wurde erst durch die Anwendung der numerischen Renormierungsgruppentheorie (NRG) von Kenneth G. Wilson auf das Modell von Philip W. Anderson möglich [2, 3]. Für ihre Arbeiten erhielten beide den Physik-Nobelpreis, Anderson 1977 und Wilson 1982.

Im Anderson-Modell betrachtet man einen lokalen elektronischen Zustand, etwa ein atomares Orbital, welches gemäß dem Pauli-Prinzips mit einem oder zwei Elektronen besetzt werden kann. Füllt man den Zustand mit einem Elektron, so ist dessen Energie *ε* und sein Spin *s* = 1/2. Fügt man ein zweites Elektron dazu, so muss zusätzlich eine Coulomb-Energie *U* aufgebracht werden, da nun zwei negativ geladene Elektronen im selben Zustand räumlich lokalisiert sind. Koppelt man nun dieses System mit einem Elektronensee (etwa den Leitungselektronen eines Metalls), der mit Elektronen bis zu einer Energie *E*F (der Fermi-Energie) zwischen dem einfach und dem zweifach besetzten Energieniveau aufgefüllt ist, so treten virtuelle Austauschprozesse zwischen den lokalisierten Zuständen und den Elektronensee auf, wie in Abbildung 1a dargestellt.

So kann etwa zunächst das Elektron des Energieniveaus *ε* unter Verletzung der Energieerhaltung in einen freien Zustand bei *E*F hüpfen, wenn anschließend ein Elektron mit umgekehrtem Spin von dort in das Niveau hüpft. Diese mehrfach auftretenden Austauschprozesse sind die Ursache der Kondo-Resonanz bei *E*F, die der Ausdruck eines neuen kollektiven Grundzustandes mit Gesamtspin Null ist. Die Wechselwirkung zwischen dem lokalisierten Zustand und dem Elektronensee kann auch als Streuung aufgefasst werden, die immer stärker wird, je geringer die Temperatur ist, und somit das Widerstandsverhalten intuitiv erklärt.

Mit Hilfe von NRG-Berechnungen können nun die Form, Größe, Temperatur- und Magnetfeldabhängigkeit der Kondo-Resonanz vorhergesagt werden, wenn nur die Breite *γ*, die Coulomb-Energie *U* und die Energie *ε* des halbgefüllten Energieniveaus relativ zu *E*F bekannt sind. In den bisher bekannten Realisierungen des Kondo-Systems war die genaue Messung dieser Parameter nicht möglich. Eine solche Realisierung ist beispielsweise ein magnetisches Atom – wobei das Energieniveau einem einfach besetztem d- oder f-Orbital entspricht – auf einer nichtmagnetischen Metalloberfläche – dort besteht der Elektronensee aus den delokalisierten Valenzelektronen des Metalls).

Das neuartige Kondo-System, das die Überprüfung des Anderson-Modells ermöglichte, besteht aus einer Zwillingsgrenze in einer Insel einer einzelnen Lage von Molybdändisulfid (MoS2), die wiederum auf einer Lage Graphen ruht [4]. Die durch weiße Pfeile hervorgehobene Linie im Rastertunnelmikroskopbild in Abbildung 1b ist beispielsweise eine solche Zwillingsgrenze. Sie entstand durch um 180° verdrehtes Zusammenwachsen von MoS2. Eine solche Zwillingsgrenze ist ein eindimensionaler Quantentopf für Elektronen. Aufgrund der endlichen Länge des Topfs sind die erlaubten elektronischen Zustände quantisierte Energieniveaus, in denen die Elektronen stehende Wellen bilden, ganz so wie es die Lösung der Schrödinger-Gleichung für einen eindimensionalen Quantentopf vorschreibt.

Abbildung 1c zeigt die gemessenen stehenden Wellen energieaufgelöst entlang einer Zwillingsgrenze. Wenn nun in das elektronische Niveau direkt unterhalb der Fermi-Energie ein zweites Elektron eingefüllt wird, dann führt die Coulomb-Abstoßung dazu, dass dieses Niveau oberhalb von *E*F sichtbar wird. Die Energie *E*F wird dabei durch die Füllhöhe des Elektronensees der Valenzelektronen im Graphen festgelegt, an das die Quantenzustände um *E*F ankoppeln. Somit verhalten sich die eingesperrten Zustände in der Zwillingsgrenze ganz so wie in der Schemazeichnung von Abbildung 1a skizziert.

Eine rastertunnelspektroskopische Messung (blau) der mittleren Wahrscheinlichkeitsdichte (genauer der Spektralfunktion) um *E*F zeigt die Abbildung 2a. An die Messung der Energieniveaus (blau) wurde die NRG-Berechnung (rot) angepasst, bestimmt lediglich durch die drei oben erwähnten Parameter *γ*, *U* und *ε*. Für die Anpassung wurden nur die zueinander weisenden Flanken der Energieniveaus um *E*F verwendet, da die Außenflanken durch inelastische Tunnelprozesse (Anregungen von Gitterschwingungen) verfälscht sind.

Hervorgehoben durch ein kleines schwarzes Rechteck sieht man in Abbildung 2a die Kondo-Resonanz als kaum sichtbare Erhebung. Vergrößert man die spektroskopische Auflösung der Messung, so kann die Kondo-Resonanz sehr viel besser aufgelöst werden. Die Vorhersagen der NRG-Berechnungen (rot) stimmen mit den Messungen (blau) für verschiedene Magnetfelder (Abbildung 2b) und Temperaturen (Abbildung 2c) ausgezeichnet überein, eine Qualität der Übereinstimmung, die von den beteiligten Experimentatoren und Theoretikern nicht für möglich gehalten wurde. Die in Abbildung 2b ersichtliche Aufspaltung der Kondo-Resonanz mit steigendem Magnetfeld ist übrigens durch den Zeeman-Effekt hervorgerufen und zeigt anschaulich ihren „magnetischen“ Ursprung.

Die konzeptionelle Einfachheit des neuen Kondo-Systems motiviert weitere Präzisionsexperimente an diesem System. Aktuell arbeiten die Autoren mit großer Neugier daran, die Energieniveaus einer Zwillingsgrenze mit denen eines adsorbierten magnetischen Atoms oder einer weiteren Zwillingsgrenze zu koppeln. So können fundamentale Eigenschaften der Elektronenspins, die zum Beispiel als Qubit in einem Quantencomputer technologische Relevanz finden, auf atomarer Skala beobachten werden.

Referenzen

[1] J. Kondo, Prog. Theor. Phys. **1964**, *32*, 37.

[2] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **1975**, *47*, 773.

[3] P. W. Anderson, J. Phys. C: Solid State Phys. **1970**, *3*, 2436.

[4] C. van Efferen et al., Nat. Phys. **2024**., *20*, 82.

Autoren:

Wouter Jolie, Jeison Fischer, Thomas Michely, Universität zu Köln; Theo Costi, Forschungszentrum Jülich

Abb. 1 Kondo-Resonanz

a) Schematisches Energiediagramm zur Kopplung eines lokalen Energieniveaus mit einem Elektronensee. b) Rastertunnelmikroskopbild von MoS2-Inseln mit Zwillingsgrenzen (helle gerade Linien in Inseln) auf Graphen. c) Links: Spektroskopisches Bild entlang eines Teilstückes einer Zwillingsgrenze (schwarzer Pfeil in b). Gut erkennbar sind die stehenden Wellen auf den diskreten Energieniveaus in der Zwillingsgrenze. Rechts: Längs der Zwillingsgrenze gemitteltes Signal, dass mit dem Schemabild in a) korrespondiert.

Abb. 2 Theorie und Messung

a) Spektroskopisches Messsignal der Energieniveaus der Zwillingsgrenze (blau) und NRG-Anpassung (rot). Ein schwarzes Rechteck hebt die kaum erkennbare Kondo-Resonanz hervor. b) und c) zeigen die die überraschend gute Übereinstimmung der hochaufgelösten spektroskopischen Messsignale (blau) der Kondo-Resonanz von Magnetfeld (B) und Temperatur (T) im Vergleich mit den NRG-Vorhersagen (rot).