



**BERGISCHE
UNIVERSITÄT
WUPPERTAL**

BERGISCHE UNIVERSITÄT WUPPERTAL
FAKULTÄT FÜR MATHEMATIK UND NATURWISSENSCHAFTEN

**Untersuchung eisenbasierter Supraleiter unter
Dehnung und Entwicklung einer
Tieftemperatur-Dehnungszelle**

Franz Michel Eckelt

Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
im Fach Physik

September 2025

Kurzdarstellung

Eisenbasierte Supraleiter zeichnen sich durch ein komplexes Phasendiagramm aus, in dem strukturelle, magnetische und supraleitende Ordnung eng miteinander verknüpft sind. Bei niedrigen Dotierungen tritt zunächst die nematische Phase auf, die durch eine spontane Brechung der C_4 -Symmetrie des Kristallgitters gekennzeichnet ist. Bereits oberhalb der Übergangstemperatur entstehen dabei nematische Fluktuationen, die als Schlüsselgröße dieser Materialklasse gelten und möglicherweise direkt mit dem Mechanismus der Cooper-Paarbildung verknüpft sind. In einem mittleren Dotierungsbereich schließt sich die supraleitende Phase an, deren Eigenschaften stark durch die Kopplung an magnetische und nematische Fluktuationen beeinflusst werden. Bei hohen Dotierungen gewinnt schließlich die orbitalselektive Mott-Physik an Bedeutung, da sich die elektronische Struktur der Eisen-3d-Orbitale zunehmend dem halbgefüllten $3d^5$ -Zustand annähert, in dem theoretisch ein Mott-isolierender Zustand erwartet wird. Elastowiderstandsmessungen haben sich als besonders vielseitiges Werkzeug zur Untersuchung dieser Systeme erwiesen, da sie sowohl sensitiv auf nematische Fluktuationen reagieren als auch empfindlich für elektronische Korrelationen sind.

Vor diesem Hintergrund wurden in dieser Arbeit systematische Elastowiderstandsmessungen, also Widerstandsmessungen in Abhängigkeit einer angelegten Dehnung, an einer Serie von $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ -Kristallen mit $0.68 < x < 0.98$ durchgeführt, um das Zusammenspiel beider Effekte im stark lochdotierten Bereich detailliert zu untersuchen. Die Ergebnisse zeigen, dass im hochdotierten Bereich elektronische Korrelationen mit Schwerpunkt im d_{xy} -Orbital dominieren, während im schwach dotierten Bereich nematische Fluktuationen vorherrschen, die sich auch bei hoher Dotierung noch in schwacher Form nachweisen lassen. Theoretische Berechnungen auf Basis eines Fünf-Orbital-Modells mit lokaler Wechselwirkung reproduzieren das beobachtete Verhalten qualitativ und deuten auf einen orbitalselektiven Effekt starker elektronischer Korrelationen hin. Weiterhin weisen Koinzidenzen im Verhalten des Sommerfeldkoefizienten, der supraleitenden Sprungtemperatur und des supraleitenden Ordnungsparameters darauf hin, dass elektronische Korrelationen in diesen Materialien für die Supraleitung von großer Bedeutung sind.

Wie die Untersuchung der eisenbasierten Supraleiter zeigt, ist eine mechanische Dehnung ein vielseitiges Mittel, um die elektronischen Eigenschaften von Materialien zu modulieren und diese zu untersuchen. Ausgehend von dieser Motivation wurde im zweiten Teil der Arbeit eine Dehnungszelle entwickelt, die eine große, *in situ* einstellbare Dehnung über einen weiten Temperaturbereich ermöglicht. Um Messungen in einem möglichst großen Temperaturbereich zu ermöglichen, wurde ein zusätzlicher Messstab entwickelt, der durch den Einsatz von flüssigem Helium als Kühlmedium und einem integrierten Heizbecher eine präzise Temperaturregelung von 4.2 K bis Raumtemperatur erlaubt. Erste Testmessungen des Elastowiderstands an $BaFe_2As_2$ bestätigen eine zuverlässige Dehnungsübertragung und -messung sowie eine gute Übereinstimmung mit dem herkömmlichen Verfahren, bei dem die Probe direkt auf einen Piezoaktuator geklebt wird. Darauf hinaus eröffnet die entwickelte Dehnungszelle neue Perspektiven für weiterführende Untersuchungen, etwa zum elastokalorischen Effekt oder zu temperaturabhängigen Transportuntersuchungen unter konstanter mechanischer Dehnung.

Abstract

Iron based superconductors are characterized by a complex phase diagram in which structural, magnetic and superconducting order are closely intertwined. At low doping the nematic phase appears first, which is marked by a spontaneous breaking of the C_4 symmetry of the crystal lattice. Already above the transition temperature nematic fluctuations emerge, which are considered a key feature of this material class and may be directly connected to the mechanism of Cooper pair formation. In an intermediate doping range the superconducting phase follows, whose properties are strongly influenced by the coupling to magnetic and nematic fluctuations. At high doping orbital-selective Mott physics becomes increasingly important, since the electronic structure of the iron $3d$ orbitals gradually approaches the half filled $3d^5$ configuration where a Mott insulating state is theoretically expected. Elastoresistance measurements have proven to be a particularly versatile tool to study these systems, as they are sensitive both to nematic fluctuations and to electronic correlations.

Against this background, systematic elastoresistance measurements were carried out on a series of $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ crystals, meaning resistance measurements as a function of externally applied strain, with $0.68 < x < 0.98$ in order to investigate in detail the interplay of both effects in the strongly hole doped regime. The results show that in the highly doped regime electronic correlations with a strong contribution from the d_{xy} orbital dominate, while in the weakly doped regime nematic fluctuations prevail which can still be detected in weaker form even at high doping. Theoretical calculations based on a five-orbital model with local interactions reproduce the observed behavior qualitatively and point to an orbital selective effect of strong electronic correlations. Furthermore coincidences in the behavior of the Sommerfeld coefficient, the superconducting transition temperature, and the superconducting order parameter suggest that electronic correlations are of great importance for superconductivity in these materials.

As the investigation of iron based superconductors demonstrates, mechanical strain is a versatile means to modulate the electronic properties of materials and to study them. Motivated by this, in the second part of this work a strain cell was developed that allows for a large in-situ-tunable strain over a wide temperature range. To enable measurements over the largest possible temperature range an additional measurement probe was designed which uses liquid helium as coolant and an integrated heater cup to provide precise temperature control from 4.2 K to room temperature. First test measurements of the elastoresistance of $BaFe_2As_2$ confirm a reliable transfer and detection of strain as well as a good agreement with the conventional method where the sample is directly glued onto a piezoelectric actuator. In addition, the developed strain cell opens new perspectives for further studies such as the elastocaloric effect or temperature dependent transport investigations under constant mechanical strain.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Grundlagen zu eisenbasierten Supraleitern	3
2.1. Eisenbasierte Supraleiter	5
2.2. Phasendiagramm von $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$	7
2.2.1. Nematische Phase	10
2.2.2. Supraleitender Ordnungsparameter und Lifshitz-Übergang	13
2.2.3. Korrelationseffekte	18
3. Elastowiderstandsmessungen	25
3.1. Untersuchung von nematischen Fluktuationen	25
3.2. Untersuchung von Korrelationseffekten	33
3.3. Ziel der Messungen	36
3.4. Experimentelle Durchführung	37
3.4.1. Transportstab	37
3.4.2. Piezoaktuator	39
3.4.3. Vierpunktwiderstandsmessung	40
3.4.4. Probenpräparation	41
3.4.5. Dehnungsmessung	42
3.4.6. Messablauf	44
3.4.7. Probleme bei der Versuchsdurchführung	46
3.5. Temperaturabhängige Widerstandsmessung	49
3.6. Elastowiderstandsmessungen von $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$	50
3.6.1. Ergebnisse	54
3.6.2. Diskussion	59
4. Konstruktion eines neuen Aufbaus für dehnungsabhängige Transportmessungen	77
4.1. Konstruktion eines Messstabs	78
4.1.1. Temperaturregelung	83
4.1.2. Vakuumtest	91
4.1.3. Anschlüsse	92
4.2. Konstruktion einer Dehnungszelle	95
4.2.1. Dehnungsmessung	97
4.2.2. Finite-Elemente-Analyse	98
4.2.3. Verhalten der Piezoaktuatoren	104
4.2.4. Einfluss der Vakuumpumpe auf die Messungen	106
4.2.5. Abkühlvorgang der Dehnungszelle	108
4.2.6. Messprogramm	108
4.2.7. Elastowiderstandsmessung mit der Dehnungszelle	115
4.2.8. Ausblick	119
5. Zusammenfassung	123
A. Anhang	127
Literaturverzeichnis	137

1. Einleitung

Korrelationseffekte sind ein zentrales Forschungsfeld der modernen Festkörperphysik. Dabei führen Elektronen-Elektronen-Wechselwirkungen in vielen Materialien zu unterschiedlichen Phänomenen, die von einfachen Einteilchen-Theorien nicht beschrieben werden können. Ein prominentes Beispiel dafür stellt der Mott-Isolator dar. Anders als von der klassischen Bandtheorie vorhergesagt, zeigt dieser ein isolierendes Verhalten bei halbgefüllten Elektronenbändern [1]. Grund dafür ist die starke Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen, die gegenüber der kinetischen Energie, welche eine Delokalisierung der Elektronen begünstigt, überwiegt. Solche Systeme lassen sich im Rahmen des Hubbard-Modells theoretisch beschreiben. Dieses Modell berücksichtigt explizit die konkurrierenden Beiträge von kinetischer Energie und Coulomb-Wechselwirkung [2].

Prominente Vertreter stark korrelierter Materialien sind Übergangsmetallocide wie die Kupraten, die sich durch komplexe Phasendiagramme auszeichnen [3,4]. Eine der bemerkenswertesten Phasen ist die Hochtemperatursupraleitung, deren zugrunde liegender Kopplungsmechanismus trotz intensiver Forschung noch immer nicht vollständig verstanden ist.

Der supraleitende Zustand zeichnet sich im Wesentlichen durch zwei charakteristische Eigenschaften aus. Zum einen verschwindet unterhalb der supraleitenden Sprungtemperatur T_c der elektrische Widerstand vollständig, und zum anderen handelt es sich bei einem supraleitenden Material um einen idealen Diamagneten, das bedeutet, ein extern angelegtes Magnetfeld wird vollständig aus dem Inneren des Supraleiters verdrängt [5]. Dieses Verhalten wird auch als Meissner-Ochsenfeld-Effekt bezeichnet [6]. Eine grundlegende theoretische Beschreibung der Supraleitung ist durch die BCS-Theorie möglich, nach der die Supraleitung durch die Bildung sogenannter Cooper-Paare entsteht [7]. Dabei handelt es sich um Elektronenpaare, die sich durch Gitterschwingungen gegenseitig anziehen und kohärent bewegen. Diese Theorie ist jedoch nicht ausreichend, die Supraleitung in stark korrelierten Systemen wie den Kupraten oder in eisenbasierten Supraleitern zu erklären. In diesen Materialien wird der Ursprung der attraktiven Wechselwirkung, die zur Bildung der Cooper-Paare führt, nicht in Phononen, sondern in Elektron-Elektron-Wechselwirkungen, insbesondere in elektronischen Korrelationen, vermutet.

Eisenbasierte Supraleiter stellen eine weitere bedeutende Materialklasse dar und wurden 2008 erstmals entdeckt [8]. Auch diese sind geprägt von einem vielfältigen Phasendiagramm, in dem unter anderem magnetische Ordnung und unkonventionelle Supraleitung zusammenkommen und in enger Nachbarschaft auftreten [8]. Hier sind sogenannte nematische Wechselwirkungen von großer Bedeutung [9]. Dabei handelt es sich um richtungsabhängige Kopplungen zwischen den Elektronen, die mit einer spontanen Brechung der Rotationssymmetrie des Kristallgitters und einer entsprechenden Kopplung an dieses verbunden sind. Diese äußern sich darin, dass die elektronischen Eigenschaften richtungsabhängig werden und stehen in engem Zusammenhang mit der magnetischen Ordnung [9]. Ein exemplarisches und viel untersuchtes Modellsystem ist dabei BaFe_2As_2 , welches durch Dotierung gezielt verändert werden kann [10–14]. Durch die Substitution von Barium durch Kalium ($\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$) wird das System lochdotiert. Im stark überdotierten Bereich führt dies zu einem orbitalselektiven Mott-Isolationszustand [15]. Dadurch eignet sich dieses System für die Erforschung des Zusammenspiels zwischen elektronischen Korrelationen, nematischen Fluktuationen und der Supraleitung.

Experimentell können diese komplexen Phänomene durch eine Vielzahl unterschiedlicher Methoden untersucht werden. Temperatur- und magnetfeldabhängige Messungen gehören durch ihre Einfachheit und durch den direkten Zugriff auf fundamentale Materialeigenschaften zu

den etabliertesten Methoden [16]. Insbesondere der elektronische Transport, welcher durch Widerstandsmessungen ermittelt werden kann, ermöglicht eine schnelle und empfindliche Detektion von Phasenübergängen wie dem Einsetzen der Supraleitung oder der Ausbildung magnetischer und struktureller Ordnung. Die Anwendung von Druck liefert eine weitere experimentelle Methode. Dabei wurden bereits früh hydrostatische Druckexperimente genutzt, um Übergangstemperaturen zu verschieben oder neue Phasen durch die isotope Kompression des Gitters zu induzieren [17, 18]. Uniaxiale Dehnung hat sich in den letzten Jahren als besonders wertvolles Werkzeug etabliert. Durch die anisotrope Verzerrung entlang ausgewählter Kristallrichtungen lassen sich spezifische Freiheitsgrade ansprechen, etwa solche, die mit elektronischen Anisotropien in Verbindung stehen. So lassen sich insbesondere nematische Fluktuationen und elektronische Korrelationen untersuchen [19–21].

In dieser Arbeit wird eine spezielle Variante solcher Dehnungsexperimente in Form von Elastowiderstandsmessungen eingesetzt. Dabei wird der Probenwiderstand temperaturabhängig und unter kontrollierter uniaxialer Dehnung gemessen und ausgewertet. Diese Methode verbindet die Sensitivität elektronischer Transportmessungen mit der gezielten Verzerrung der Gitterstruktur. Dadurch erlaubt diese Messmethode nicht nur die Untersuchung der Anfälligkeit gegenüber Symmetriebrechung, wie im Fall der nematischen Ordnung, sondern bietet auch einen Zugang zur Untersuchung elektronischer Korrelationseffekte über ihre Kopplung an die mechanische Deformation. Dafür wurden Elastowiderstandsmessungen einer Serie von $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ -Einkristallen im überdotierten Bereich $0.63 \leq x \leq 0.98$ durchgeführt. Ziel war es, das Verhalten elektronischer Korrelationen und nematischer Fluktuationen in diesem Dotierungsbereich systematisch zu analysieren und deren potenziellen Einfluss auf die Supraleitung zu untersuchen. Parallel dazu wurde eine neue Dehnungszelle entwickelt, die eine präzisere uniaxiale Dehnung einer Probe ermöglicht, als es in den oben genannten Messungen möglich war. Diese Zelle wurde durch den Bau eines Messstabs ergänzt, wodurch der Einsatz der Dehnungszelle auch bei kryogenen Temperaturen möglich ist und in zukünftigen Experimenten als neues hochauflösendes Gerät eingesetzt werden kann.

Diese Arbeit gliedert sich in die folgenden Abschnitte: In Kapitel 2 gibt es eine kurze theoretische Einführung in die Supraleitung. Es werden die Klasse der eisenbasierten Supraleiter und dabei ausführlich das Phasendiagramm von $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ vorgestellt. Dabei wird der Fokus besonders auf die nematische Phase und die elektronischen Korrelationseffekte gelegt. Kapitel 3 behandelt die Methode der Elastowiderstandsmessung und beleuchtet dabei, wie sich mit dieser Technik sowohl nematische Fluktuationen als auch elektronische Korrelation untersuchen und unterscheiden lassen. Darüber hinaus werden die experimentelle Durchführung erläutert, die untersuchten Proben vorgestellt und die Messergebnisse präsentiert und diskutiert. In Kapitel 4 werden die Konstruktion und der Bau der Dehnungszelle und des Messstabs thematisiert. Dabei wird die Funktion erläutert und mit Hilfe von Testmessungen anhand einer beispielhaften Elastowiderstandsmessung an einer BaFe_2As_2 -Probe demonstriert.

2. Grundlagen zu eisenbasierten Supraleitern

Im Jahr 1908 gelang es dem niederländischen Physiker Heike Kamerlingh Onnes, Helium zu verflüssigen und somit experimentellen Zugang zu Temperaturen nahe dem absoluten Nullpunkt zu schaffen. Diese technische Errungenschaft ermöglichte 1911 den erstmaligen Nachweis der Supraleitung. Beim Abkühlen von Quecksilber beobachtete Onnes, dass dessen elektrischer Widerstand bei einer Temperatur unterhalb von 4.15 K abrupt auf Null fällt [22]. In den folgenden Jahrzehnten wurden zahlreiche weitere supraleitende Materialien entdeckt. Die Sprungtemperaturen dieser später entdeckten konventionellen Supraleiter erreichten mit Magnesiumdiborid (MgB_2) im Jahr 2001 einen Maximalwert von rund 39 K [23]. Trotz intensiver Forschung blieben die physikalischen Ursachen der Supraleitung lange Zeit unklar.

Eine zweite fundamentale Eigenschaft des supraleitenden Grundzustands neben der verschwindenden elektrischen Resistivität ist die vollständige Verdrängung eines äußeren Magnetfelds aus dem Inneren des Supraleiters. Ein Supraleiter ist demnach ein idealer Diamagnet. Dieser Effekt wird als Meissner-Ochsenfeld-Effekt bezeichnet [6]. Bei dem supraleitenden Zustand handelt es sich um einen thermodynamisch reversiblen Zustand, der durch hohe Temperaturen, zu großen Stromdichten oder Magnetfelder zusammenbricht.

Ein grundlegendes theoretisches Verständnis der Supraleitung gelang 1957 mit der von John Bardeen, Leon N. Cooper und Robert Schrieffer entwickelten BCS-Theorie [7]. Diese mikroskopische Theorie beschreibt Supraleitung durch eine attraktive Wechselwirkung zwischen den Elektronen, die eine Energie nahe der Fermi-Kante haben. Der Theorie zufolge wird diese Korrelation durch eine Polarisation des positiven Atomgitters im Material hervorgerufen (Elektron-Phonon-Wechselwirkung) und ist maximal für Elektronen mit gleich großem aber antiparallelen Impuls. Zwei so zusammenhängende Elektronen werden als Cooper-Paare bezeichnet. Diese Paare kondensieren in einem gemeinsamen Grundzustand, wodurch das Elektronensystem seine Fermionenstatistik auf makroskopischer Skala verliert und ein quantenohärenter Zustand entsteht, in dem sich die Cooper-Paare widerstandsfrei durch das Material bewegen können. Dies erklärt die beobachtete verschwindende elektrische Resistivität sowie die vollständige Verdrängung des Magnetfeldes aus dem Inneren des Materials durch den Meissner-Effekt. Ein zentrales Merkmal des supraleitenden Zustands ist die Ausbildung einer Energielücke $\Delta_{\vec{k}}$ im elektronischen Anregungsspektrum. Diese Lücke kennzeichnet die minimale Energie, die erforderlich ist, um quasiteilchenartige Anregungen oberhalb des Grundzustands zu erzeugen. Diese kann durch folgende Formel bestimmt werden:

$$\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \Delta_{\vec{k}'} \frac{\tanh(E_{\vec{k}'} / 2k_B T)}{2E_{\vec{k}'}}. \quad (2.1)$$

Eine ausführliche Herleitung ist in Ref. [5] zu finden. Dabei beschreibt $V_{\vec{k}, \vec{k}'}$ das Wechselwirkungspotential der Elektronen, welches sowohl das abstoßende Coulombpotential als auch die durch virtuelle Phononen vermittelte attraktive Wechselwirkung enthält. $\Delta_{\vec{k}}$ wird häufig auch als Ordnungsparameter bezeichnet. Für Supraleiter bei denen die attraktive Wechselwirkung, welche die Cooper-Paare bildet, durch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung vermittelt wird, kann das resultierende Wechselwirkungspotential $V_{\vec{k}, \vec{k}'}$ und damit auch der Ordnungsparameter $\Delta_{\vec{k}}$ als isotrop angenommen werden. Demnach besteht keine Abhängigkeit von der Richtung von \vec{k} . Supraleiter, die sich präzise durch die BCS-Theorie beschreiben lassen und

einen isotropen Ordnungsparameter besitzen, werden als konventionelle Supraleiter bezeichnet. Dazu zählen vor allem elementare Supraleiter wie Blei und Niob. Es hat sich jedoch gezeigt, dass es eine Vielzahl von Supraleitern gibt, die sich nicht im Rahmen der BCS-Theorie beschreiben lassen. In diesen Fällen kann die Bildung der Cooper-Paare nicht durch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung erklärt werden. Solche Materialien werden daher als unkonventionelle Supraleiter bezeichnet. Seit ihrer Entdeckung wurden verschiedene alternative Mechanismen vorgeschlagen, wie beispielsweise magnetische Fluktuationen [24]. Dennoch konnte bislang keine einheitliche mikroskopische Theorie entwickelt werden. Diese Frage stellt ein Kernthema der modernen Festkörperphysik dar.

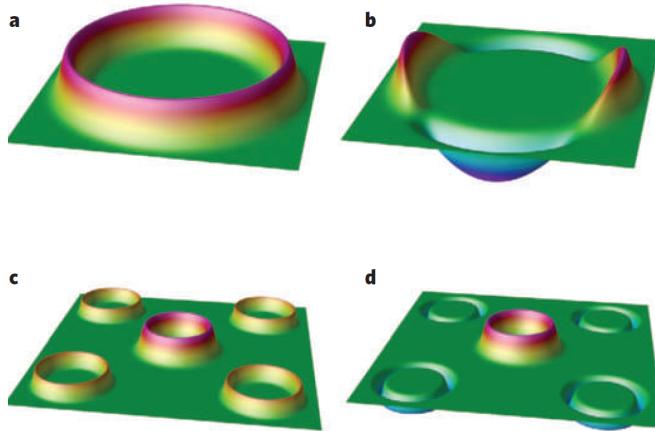


Abbildung 2.1.: Schematische Darstellung verschiedener Symmetrien des supraleitenden Ordnungsparameters projiziert auf eine stark vereinfachte zweidimensionale Fermioberfläche. a) Zeigt die konventionelle s -Welle, b) zeigt die d -Welle, c) zeigt die zweibändige s -Welle mit gleichen Vorzeichen und d) eine s_{\pm} -Welle mit verschiedenen Vorzeichen. Entnommen aus Ref. [25].

Für unkonventionelle Supraleiter kann nicht mehr von einem isotropen Wechselwirkungspotential ausgegangen werden, da die Möglichkeit einer \vec{k} -Richtungsabhängigkeit besteht. Aus diesem Grund ist es notwendig, die erlaubten Symmetrien der Paarwellenfunktion der Elektronen zu betrachten. Die nachfolgenden Ausführungen sind aus Ref. [5] entnommen. Die Gesamtwellenfunktion von Fermionen besitzt neben dem Ortsanteil $\psi(r_1, r_2)$ auch einen Spinanteil $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$.

Dem Pauli-Prinzip zufolge muss die Gesamtwellenfunktion von Fermionen antisymmetrisch sein. Für einen symmetrischen Ortsanteil bedingt dies einen antisymmetrischen Spinanteil und umgekehrt. Mit dem Gesamtspin S , der die Werte $S = 0$ für eine antisymmetrische Singulett-Paarung (symmetrischer Ortsanteil) oder $S = 1$ für eine symmetrische Triplet-Paarung (antisymmetrischer Ortsanteil) annehmen kann, sowie der Drehimpulsquantenzahl L , die den orbitalen Charakter des Ortsanteils widerspiegelt, ergibt sich:

$$\text{Singulett-Paarung: } S = 0, \quad L = 0, 2, 4, \dots \quad (2.2)$$

$$\text{Triplet-Paarung: } S = 1, \quad L = 1, 3, 5, \dots \quad (2.3)$$

Die zugehörigen Paarungen werden in Analogie zum Wasserstoffatom als s , d , ... wellenartig bzw. p , f , ... wellenartig bezeichnet. In Abbildung 2.1 sind die vorgestellten Ordnungsparameter für den stark vereinfachten zweidimensionalen Fall der Fermioberfläche dargestellt, wobei lediglich s - und d -artige Symmetrien berücksichtigt sind. Während das Vorzeichen von $\Delta_{\vec{k}}$ bei der s -Symmetrie konstant ist, kommt es bei der d -Symmetrie zu einem Vorzeichenwechsel, was in Abbildung 2.1 durch die Täler und Berge angedeutet ist. Bei Supraleitern mit mehreren elektronischen Bändern kann es zudem zu weiteren Modifikationen kommen. In solchen Systemen setzen sich die Fermi-Oberflächen aus Beiträgen verschiedener Bänder

zusammen, sodass jede Fermi-Tasche einen eigenen Ordnungsparameter ausbilden kann. Besitzen alle Bänder eine s -Symmetrie mit gleichen Vorzeichen, wird von einer s_{++} -Symmetrie gesprochen, was in Abbildung 2.1c) dargestellt ist. Bei einem entgegengesetzten Vorzeichen wird von einer s_{\pm} -Symmetrie gesprochen, was in Abbildung 2.1d) dargestellt ist.

Ein Beispiel für unkonventionelle Supraleiter stellen die Kuprate dar. Ihre Entdeckung geht auf Georg Bednorz und Karl Alexander Müller zurück, welche 1986 einen keramischen Supraleiter auf Basis von Kupferoxiden mit einer Sprungtemperatur von 35 K entdeckten [3]. Dies markierte den Beginn der Erforschung der sogenannten Hochtemperatursupraleiter. In der Folge wurden zahlreiche weitere Kuprate mit noch höheren Sprungtemperaturen entdeckt, mit einem Rekordwert von etwa 133 K unter Normaldruck [4]. Diese Materialien zeigen viele Merkmale, die nicht durch die klassische BCS-Theorie erklärbar sind. Insbesondere deutet vieles darauf hin, dass die Elektronenpaarung nicht über die Elektron-Phonon-Wechselwirkung vermittelt wird. Stattdessen wird die beobachtete d -Wellensymmetrie des Ordnungsparameters häufig als Hinweis darauf interpretiert, dass Spin-Fluktuationen eine zentrale Rolle spielen könnten [26].

2.1. Eisenbasierte Supraleiter

Im Jahr 2008 wurde mit der Entdeckung der Supraleitung in $\text{La}(\text{O}_{1-x}\text{F}_x)\text{FeAs}$ bei einer Sprungtemperatur von 26 K durch Kamihara et al. [8] eine neue Klasse von Hochtemperatursupraleitern entdeckt. Aufgrund des starken magnetischen Moments von Eisen war dies eine unerwartete Entdeckung, da bis dahin davon ausgegangen wurde, dass dadurch keine Supraleitung möglich sein sollte. Bereits kurz darauf konnten in verwandten Materialien wie $\text{Gd}_{1-x}\text{Th}_x\text{FeAsO}$ und $\text{Sr}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeAsF}$ Sprungtemperaturen von bis zu 56 K erreicht werden [27, 28]. Obwohl diese Werte unter denen der Kuprate liegen, stieß diese neue Materialklasse auf großes wissenschaftliches Interesse, insbesondere aufgrund des komplexen Zusammenspiels von Magnetismus und Supraleitung.

Zahlreiche theoretische und experimentelle Studien deuten darauf hin, dass die Paarungsmechanismen in eisenbasierten Supraleitern nicht durch Gitterschwingungen vermittelt werden und somit nicht durch die konventionelle BCS-Theorie beschrieben werden können [29, 30]. Stattdessen wird ein elektronisch getriebener Mechanismus diskutiert, etwa vermittelt durch Spinfluktuationen. Aufgrund dieser Eigenschaften zählen auch die eisenbasierten Verbindungen zu den unkonventionellen Supraleitern.

Charakteristisch für diese Materialien ist ein geschichteter Kristallaufbau, bei dem alle Vertreter eine zentrale Lage aus Eisen- und Pniktogen-Atomen (meist Arsen) enthalten. Die Eisen-Atome bilden dabei ein ebenes, quadratisches Gitter, welches von Arsen-Atomen in einer tetraedrischen Anordnung umgeben ist. Die Schichten sind durch weitere Lagen, bestehend aus Metall- oder Metalloidstrukturen voneinander getrennt. Diese Zwischenschichten bestimmen die Zugehörigkeit zu einer bestimmten strukturellen Familie. Die wichtigsten Vertreter sind die 11- (FeSe), 111- (NaFeAs), 1111- (LaFeAsO) und 122- (BaFe₂As₂) Familie [31–33]. Eine Übersicht über den strukturellen Aufbau dieser Familien ist in Abbildung 2.2 dargestellt. Neben dem strukturellen Aufbau der unterschiedlichen Familien sind in dem abgebildeten Periodensystem zusätzlich die möglichen Komponenten farblich markiert.

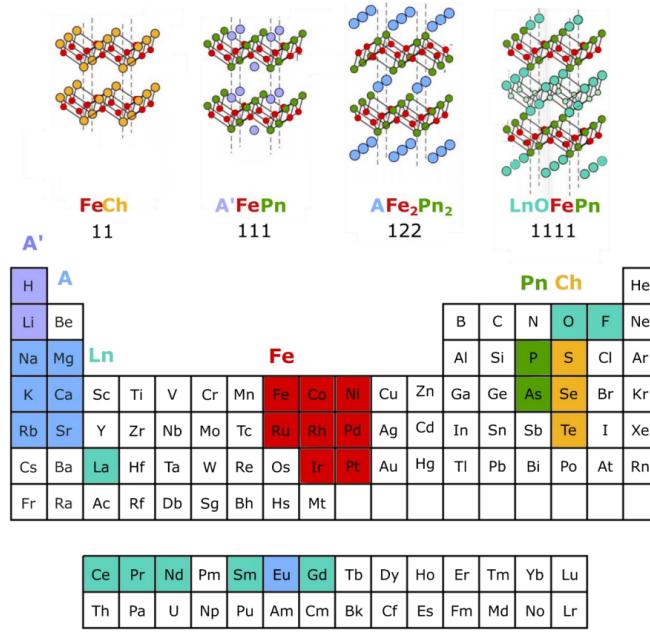


Abbildung 2.2.: Bauplan für die Erzeugung von bekannten eisenbasierten Supraleitern. Entnommen aus Ref. [34].

Während einige Verbindungen, wie z. B. FeSe (11-Familie) oder LiFeAs (111-Familie), bereits als stöchiometrische Verbindungen supraleitend sind [35, 36], tritt die Supraleitung bei den meisten anderen Vertretern erst nach Dotierung oder unter äußerem Druck auf [37, 38]. Wie in Abbildung 2.3 dargestellt ist, spiegelt sich dies auch im typischen Phasendiagramm vieler eisenbasierten Supraleiter wider. Die undotierten Verbindungen sind bei hohen Temperaturen paramagnetisch mit tetragonaler Kristallstruktur. Beim Abkühlen tritt zuerst eine elektronisch nematische Phase auf, die mit einem strukturellen Übergang zu einer orthorhombischen Struktur verknüpft ist. Innerhalb dieser nematischen Phase entwickelt sich eine antiferromagnetische Spindichtewelle (SDW) (lila). Die nematische Phase stellt eine Besonderheit der eisenbasierten Supraleiter dar und wird in Unterabschnitt 2.2.1 genauer thematisiert. Erst durch chemische Dotierung oder äußeren Druck kann die magnetische Ordnung unterdrückt und eine supraleitende Phase induziert werden, die mit zunehmender Dotierung wieder verschwindet (blau). Diese gegensätzliche Entwicklung der beiden Phasen verdeutlicht den Antagonismus zwischen SDW und Supraleitung. Die räumliche Nähe beider Phasen im Phasendiagramm legt nahe, dass magnetische Fluktuationen eine zentrale Rolle im Mechanismus der Supraleitung spielen.

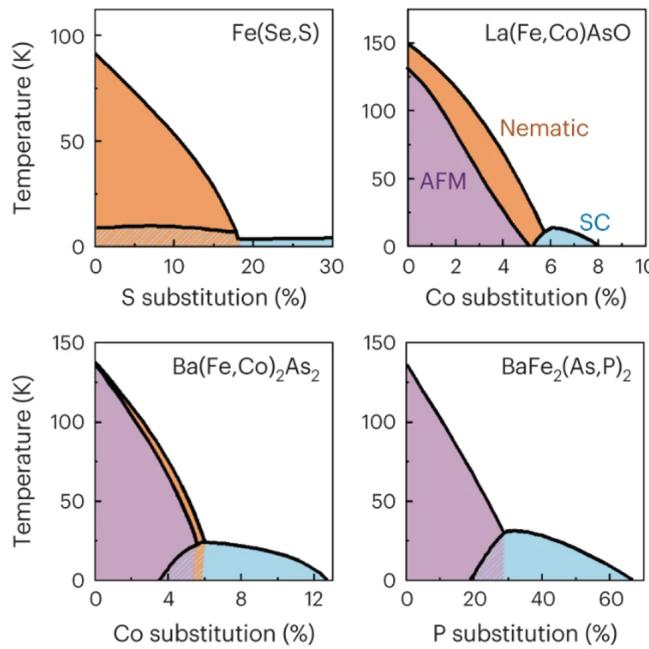


Abbildung 2.3.: Übersicht der Phasendiagramme von unterschiedlichen Fe-Supraleitern. Zu den häufigen Phasen gehören die nematische Phase (orange), die antiferromagnetische Phase (AFM, lila) und die Supraleitung (SC, blau). Entnommen aus Ref. [9].

2.2. Phasendiagramm von $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$

Am Beispiel von $BaFe_2As_2$ soll im Folgenden das Phasendiagramm eisenbasierter Supraleiter näher besprochen werden. Ein schematisches Phasendiagramm ist in Abbildung 2.4 abgebildet. In Abhängigkeit von der Dotierung, die die Lage von T_c im Phasendiagramm bestimmt, lässt sich dieses auf beiden Seiten in drei Bereiche unterteilen. Den optimal dotierten Bereich ($T_c(x_{opt}) = \text{maximal}$), den underdotierten Bereich ($x < x_{opt}$) und den überdotierten Bereich ($x_{opt} < x$). Für den lochdotierten Fall nimmt die Sprungtemperatur zwar ab, wenn die optimale Dotierung überschritten wird, jedoch bleibt sie bis $x = 1$ endlich [10]. Im undotierten System durchläuft $BaFe_2As_2$ beim Abkühlen einen strukturellen Phasenübergang erster Ordnung bei $T_{\text{nem}} = 139$ K von einer tetragonalen ThCr_2Si_2 -Struktur (Symmetriegruppe $I4/mmm$) zu einer orthorhombischen $\beta\text{-SrRh}_2\text{As}_2$ -Struktur (Symmetriegruppe $Fmmm$) [10]. Bei T_{mag} kommt es zudem zu einem magnetischen Übergang in einen langreichweitig geordneten antiferromagnetischen Grundzustand [12]. Für $BaFe_2As_2$ stimmt diese mit T_{nem} überein. Die antiferromagnetische Ordnung tritt in Form einer Spindichtewelle auf, die sich entlang der längeren Fe-Fe-Distanz in der orthorhombischen Phase ausrichtet [39]. Ein supraleitender Grundzustand lässt sich durch chemische Substitution erzeugen. Dabei kann sowohl die Barium (Ba)- als auch die Eisen (Fe)-Position dotiert werden. Beispielsweise führt die Dotierung der Ba-Position mit Kalium (K) zu einer Lochdotierung [40, 41], während die Dotierung der Fe-Position mit Cobalt (Co) eine Elektronendotierung bewirkt [42, 43]. Geringe Substitutionskonzentrationen reduzieren die Phasenübergangstemperaturen T_{nem} und T_{mag} und führen auf der elektronendotierten Seite zu einer Aufspaltung zwischen beiden. Dort gilt $T_{\text{mag}} < T_{\text{nem}}$. Für weitere Substitution entsteht ab einer gewissen Konzentration unterhalb von T_c eine supraleitende Phase. Wie in Abbildung 2.4 sichtbar ist, wird das höchste T_c dort erreicht, wo die magnetische und orthorhombische Phase komplett unterdrückt sind. Bei weiterer Elektronendotierung nimmt die supraleitende Sprungtemperatur T_c kontinuierlich ab. Im elektronendotierten System $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ tritt Supraleitung beispielsweise ab einer Co-Konzentration von etwa $x \approx 0.025$ auf und verschwindet wieder bei Dotierungen oberhalb

von $x \approx 0.18$ [42]. Für höhere Dotierungen ist keine supraleitende Phase mehr nachweisbar. Bei Lochdotierung verhält sich die supraleitende Phase hingegen anders. Auch hier nimmt die supraleitende Sprungtemperatur T_c im überdotierten Bereich mit zunehmender Dotierung ab, jedoch bleibt selbst beim vollständig dotierten Endglied KFe_2As_2 ($x = 1$) ein supraleitender Grundzustand mit $T_c \approx 3\text{ K}$ erhalten [44].

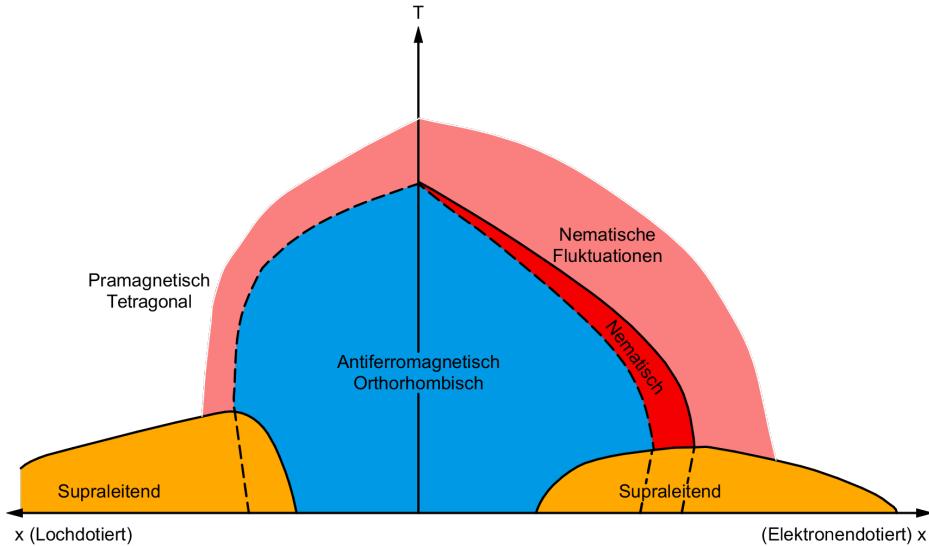


Abbildung 2.4.: Schematisches Phasendiagramm von BaFe_2As_2 mit Elektronen- und Lochdotierung. Der blaue Bereich kennzeichnet den streifenartigen orthorhombischen Magnetismus, der rote Bereich die nematische/orthorhombische paramagnetische Ordnung und der gelbe Bereich die Supraleitung. Der hellrote Bereich bezeichnet ein Regime mit starken nematischen Fluktuationen. Angelehnt an Ref. [45].

Die Fermi-Fläche von BaFe_2As_2 besteht aus mehreren Bändern, die aus den $3d$ -Orbitalen der Fe-Atome sowie deren Hybridisierung mit den As-Atomen hervorgehen. Diese Struktur konnte experimentell mithilfe winkelaufgelöster Photoemissionsspektroskopie (ARPES) nachgewiesen werden [46, 47]. Erste theoretische Vorhersagen auf Basis der Dichtefunktionaltheorie (DFT) lieferten jedoch signifikante Abweichungen hinsichtlich der Größe der Fermi-Flächen und der Banddispersionen. Erst durch die Einbeziehung elektronischer Korrelationen, beispielsweise mittels dynamischer Mean-Field-Theorie (DMFT), konnte eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen erreicht werden [48–51]. Abbildung 2.5 zeigt die Fermi-Flächen und die Bandstruktur von BaFe_2As_2 in den verschiedenen Phasen. Aufgrund der zweidimensionalen Schichtstruktur ist die Fermi-Fläche zylinderartig geformt und besteht aus lochartigen Zylindern im Zentrum der Brillouin-Zone (Γ -Punkt) sowie elektronenartigen Zylindern an den Zonenrändern. Das beobachtete Multibandverhalten ist eine Folge der Kristallaufspaltung. Durch das Kristallfeld der As-Liganden werden die ursprünglich entarteten d -Orbitale der Fe-Atome energetisch aufgespalten. Zusätzlich führt die unterschiedliche Hybridisierung der einzelnen d -Orbitale mit den p -Orbitalen der As-Atome zu einer komplexen Bandstruktur mit mehreren elektronisch aktiven Bändern in der Nähe der Fermi-Energie. Durch den Übergang in die magnetisch geordnete SDW-Phase verdoppelt sich die kleinste periodische Einheit im Ortsraum aufgrund der magnetischen Ordnung, wodurch sich die Brillouin-Zone halbiert und es zu einer Rückfaltung der Elektronenbänder kommt (siehe Abbildung 2.5 rechts) [52]. Die an den Symmetriepunkten der Fermifläche liegenden loch- und elektronenartigen Taschen haben in BaFe_2As_2 nahezu die gleiche Größe, weshalb diese mit einem Nesting-Vektor miteinander verbunden werden können. Dies ist in Abbildung 2.6 schematisch abgebildet. Da der Nesting-Vektor gleichzeitig der Ordnungsvektor der magnetischen Struktur in der SDW ist, wird dies als Grund für die Instabilität der elektronischen Struktur in der tetragonalen Phase angegeben [50, 53, 54]. Diese einfache Sichtweise ist jedoch nur

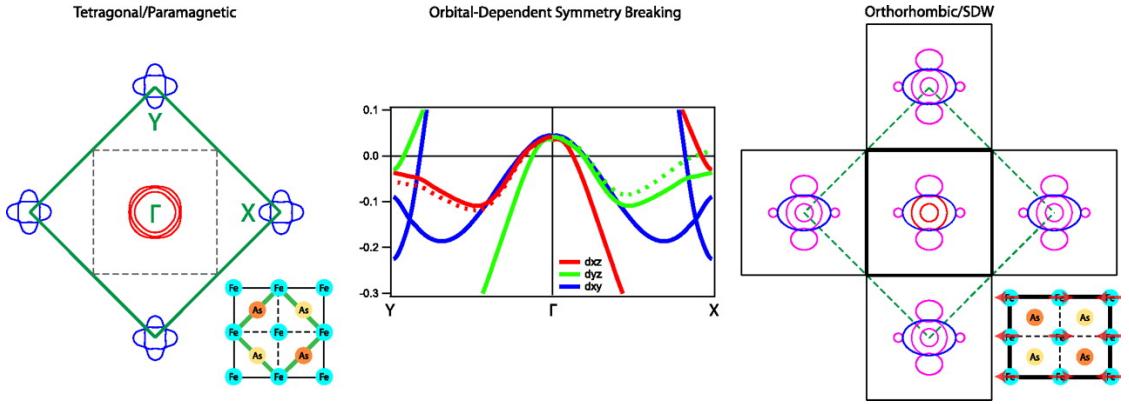


Abbildung 2.5.: Schematische Darstellung der Fermioberfläche und der Bandstruktur von $BaFe_2As_2$, entnommen aus Ref. [52]. Links: Fermioberfläche in der tetragonalen, paramagnetischen Phase. Die durchgezogene grüne Linie zeigt die tetragonale Brillouin-Zone. Die schwarz gestrichelte Linie zeigt die orthorhombische Brillouin-Zone. In der Mitte ist die Bandstruktur entlang beider Richtungen in der tetragonalen Phase dargestellt. Die Farbgebung der Bänder entspricht den dominanten orbitalen Anteilen: rot für d_{xz} , grün für d_{yz} und blau für d_{xy} . Die durchgezogenen Linien gehören dabei zu der tetragonalen Phase und die gestrichelten Linien zu der orthorhombischen Phase. Rechts ist die rekonstruierte Fermioberfläche in der orthorhombischen, SDW-geordneten Phase gezeigt. Die zugrunde liegende elektronische Struktur wurde mittels DFT-Rechnungen unter Einbeziehung der magnetischen Ordnung berechnet.

bedingt zutreffend. Wie später noch diskutiert wird, könnte die SDW-Phase durch die zuvor auftretende nematische Ordnung ausgelöst werden, welche selbst eine elektronische Instabilität darstellt, die unabhängig oder sogar vor der magnetischen Ordnung entsteht. Fernandes et al. [45] argumentieren, dass eine starke Kopplung zwischen nematischer und magnetischer Ordnung besteht, die zu einer Rückkopplung zwischen beiden Ordnungsparametern führt. Daraus resultiert eine „Henne-Ei“-Problematik, bei der nur schwer eindeutig zu bestimmen ist, ob die magnetische SDW-Ordnung die nematische Phase treibt oder umgekehrt. In diesem Szenario könnte also nicht allein das Fermi-Surfaces-Nesting die SDW-Instabilität hervorrufen, sondern vielmehr die komplexe Wechselwirkung zwischen magnetischer und nematischer Ordnung entscheidend sein.

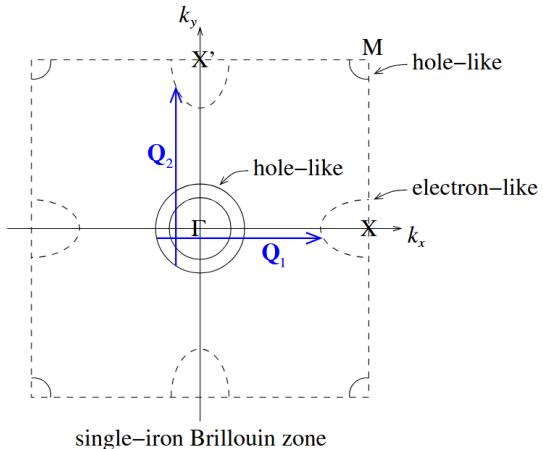


Abbildung 2.6.: Nesting Vektoren Q_1 und Q_2 eingezeichnet in die tetragonale Brillouin-Zone. Dabei verbinden diese die Lochtasche bei Γ und die Elektronentaschen bei X . Entnommen aus Ref. [55].

2.2.1. Nematiche Phase

Die nematische Phase beschreibt den Übergang von der tetragonalen in die orthorhombische Kristallstruktur bei dem die vierzählige planare Rotationssymmetrie gebrochen wird. In Abbildung 2.7a ist die schematische Kristallstruktur in der FeAs-Ebene in beiden Phasen dargestellt. In der tetragonalen Phase besitzt das Kristallgitter eine quadratische Grundfläche mit der Gitterkonstanten a_T (siehe Abbildung 2.7a oben). In der orthorhombischen Phase ist dies nicht der Fall und es gilt $a_0 \neq b_0$ (siehe Abbildung 2.7a unten), was sich deutlich durch temperaturabhängige Röntgenbeugungsmessungen nachweisen lässt (siehe Abbildung 2.7b). Oberhalb von T_{nem} in der tetragonalen Phase hat das Gitter eine C_4 -Rotationssymmetrie, was bedeutet, dass das Gitter bei einer 90° Drehung um die c -Achse unverändert bleibt. Unterhalb von T_{nem} besitzt das Gitter eine C_2 -Rotationssymmetrie, da das Gitter nur bei einer Drehung um 180° um die c -Achse unverändert bleibt. Wie in Abbildung 2.7a angedeutet, erfolgt die Ausbildung dieser Gitterstruktur in Domänen, die gegeneinander unterschiedlich ausgerichtet sind, was als verzwillingter Zustand bezeichnet wird. In Abbildung 2.7a sind die zwei verschiedenen Domänen durch die rote und grüne Färbung angedeutet.

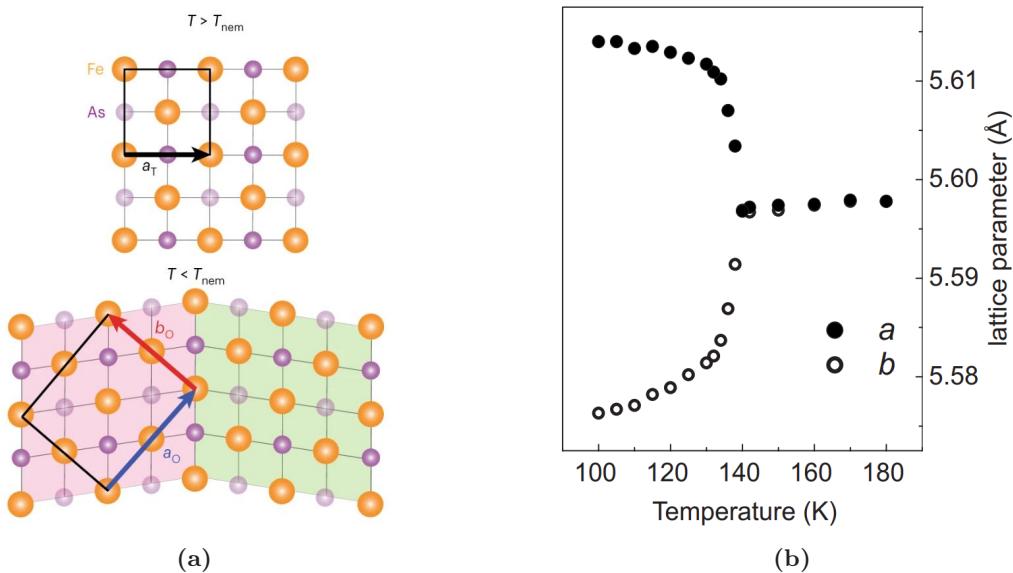


Abbildung 2.7.: a) Schematische Darstellung der Kristallstruktur in der tetragonalen Phase (oben) und in der orthorhombischen Phase (unten). Die c -Achse zeigt aus der Bildebene heraus und die unterschiedlichen Domänen sind in der unteren Abbildung durch die rote und grüne Färbung angedeutet. Entnommen aus Ref. [9]. b) Temperaturabhängige Messung der Gitterparameter a und b von BaFe_2As_2 durch Röntgenbeugungsmessungen. Entnommen aus Ref. [12].

Um die Auswirkungen dieser Anisotropie entlang der a - und b -Richtung messen zu können, wird ein „verzwillingter“ Kristall benötigt, in dem die Domänen zueinander ausgerichtet sind. Dies kann beispielsweise durch eine induzierte Dehnung erreicht werden. Auf diese Weise konnte der elektrische Widerstand entlang der a - und b -Richtung in $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ für verschiedene Dotierungsstufen gemessen werden (siehe Abbildung 2.8) [56]. Während die größte Anisotropie der Gitterparameter in BaFe_2As_2 $(a - b)/(a + b) = 0.36\%$ beträgt und mit steigender Dotierung monoton abnimmt [12], verhält sich die Widerstandsanisotropie ρ_b/ρ_a mit steigender Dotierung nicht monoton und erreicht Werte von bis zu 2 nahe optimaler Dotierung, bezogen auf die höchste supraleitende Sprungtemperatur [56]. Weitere Anisotropien des spezifischen Widerstands wurden auch in anderen eisenbasierten Supraleitern beobachtet [57–59]. Darüber hinaus zeigen auch der Seebeck-Koeffizient [57, 60] sowie der Nernst-Koeffizient [60] in verschiedenen Systemen ein anisotropes Verhalten.

Infolge der nematischen Symmetriebrechung kommt es zu einer energetischen Absenkung bzw.

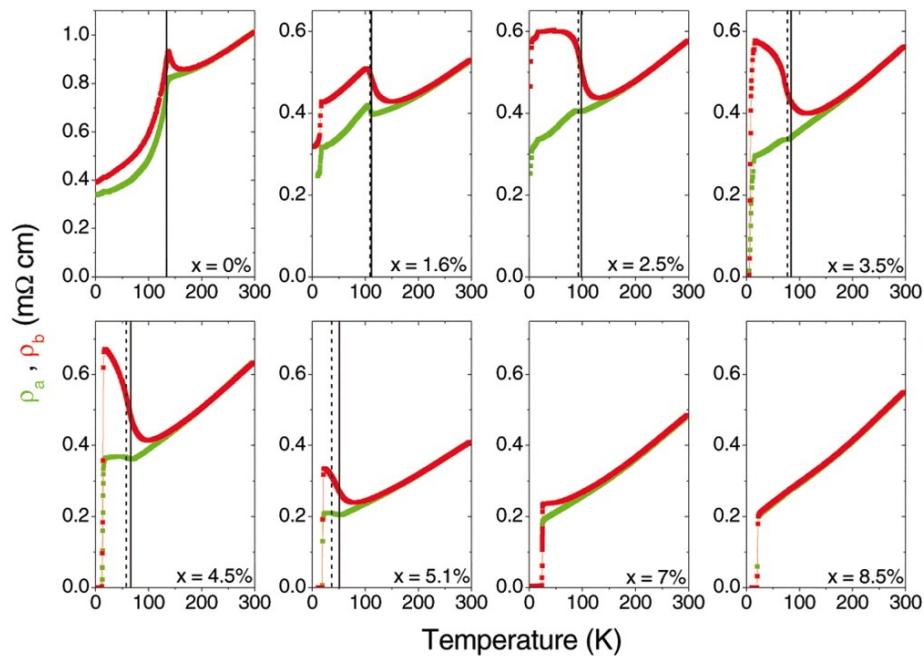


Abbildung 2.8.: Temperaturabhängigkeit des planaren elektrischen Widerstands ρ_a (grün) und ρ_b (rot) entlang der a - bzw. b -Kristallachse von $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ für Kobalt-Konzentrationen zwischen $x = 0$ und $x = 0.085$, gemessen an durch uniaxiale Dehnung entzwilligten Einkristallen. Die durchgezogenen und gestrichelten vertikalen Linien markieren die kritischen Temperaturen der strukturellen (T_S) und magnetischen (T_N) Phasenübergänge, bestimmt durch eine Kombination aus Streu-, thermodynamischen und Transportmessungen [61]. Die T_N -Werte gedehnter Proben, abgeleitet aus dem Maximum der Ableitung des Widerstands, stimmen mit jenen ungedehnter Proben überein. Dies zeigt, dass die einachsige Spannung lediglich als schwaches, symmetriebrechendes Feld wirkt, um Zwillingsdomänen zu orientieren, ohne die makroskopischen magnetischen Eigenschaften zu verändern. Entnommen aus Ref. [56].

Anhebung der d_{xz} - und d_{yz} -Fe-Orbitale, was zu einer Verkleinerung bzw. Vergrößerung der Elektronentaschen am Rand der Brillouin-Zone führt. Diese orbitale Verschiebung verursacht eine Anisotropie bezüglich der orthogonalen kristallographischen Richtungen. Abbildung 2.9a zeigt ARPES-Messdaten entzwillinger BaFe₂As₂-Kristalle unterhalb von T_{nem} entlang der orthogonalen Γ -X- und Γ -Y-Richtungen. Dabei wird eine deutliche Anisotropie der elektronischen Struktur sichtbar. In Abbildung 2.9b ist die schematische Orbitalaufspaltung unterhalb von T_{nem} abgebildet.

Zusätzlich zeigt sich in der Nähe von T_{nem} eine Symmetriebrechung im magnetischen System, die sich durch unterschiedliche statische elektronische Spinsuszeptibilitäten χ_{aa} und χ_{bb} äußert. Überraschend ist dabei, dass diese Anisotropie bereits oberhalb der magnetischen Ordnungstemperatur T_{mag} auftritt, also in einem Zustand ohne statische Magnetisierung. Dies wurde durch Messungen des magnetischen Drehmoments in mit Phosphor dotiertem BaFe₂As₂ nachgewiesen [62]. Unterhalb von T_{nem} weicht die Suszeptibilität entlang der a -Richtung, χ_{aa} , deutlich von derjenigen entlang der b -Richtung, χ_{bb} , ab. Die Spinsuszeptibilität ist dabei die Proportionalitätskonstante zwischen der induzierten Magnetisierung und dem angelegten magnetischen Feld. Im tetragonalen System gilt aufgrund der C_4 -Symmetrie $\chi_{aa} = \chi_{bb}$ und $\chi_{ab} = \chi_{ba} = 0$. Diese Gleichheiten sind im nematischen Zustand nicht mehr erfüllt.

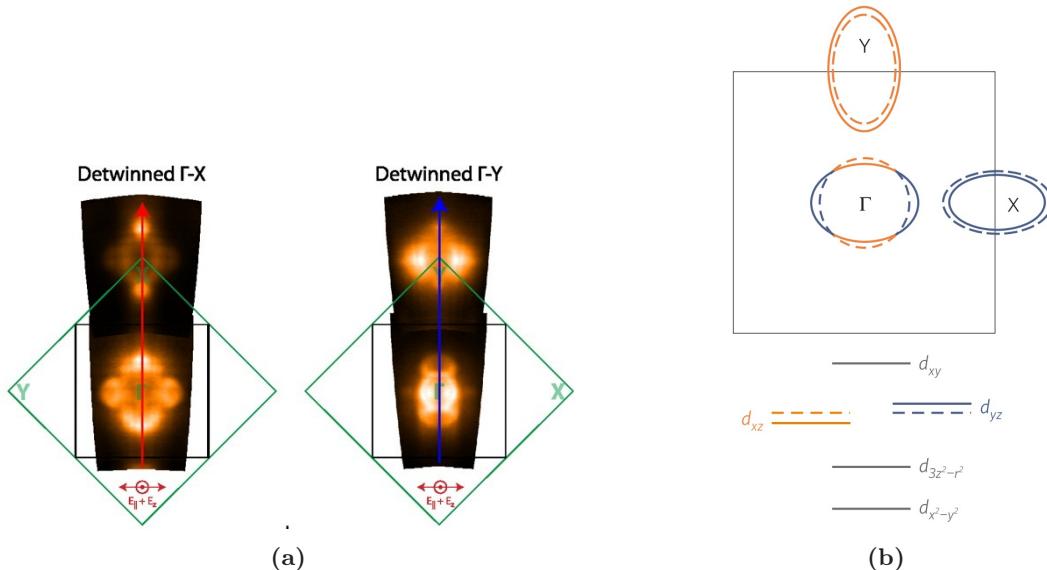


Abbildung 2.9.: a) Fermifläche rekonstruiert aus ARPES-Messungen an entzwilligtem BaFe₂As₂ in zwei orthogonale Richtungen entlang Γ – X und Γ – Y für $T < T_{\text{nem}}$. Entnommen aus Ref. [52]. **b)** Schematische Orbitalaufspaltung unterhalb von T_{nem} und der damit einhergehenden Änderung der Fermifläche. Die durchgezogenen Linien stellen den Zustand unterhalb von T_{nem} und die gestrichelten Linien oberhalb von T_{nem} dar. Durch den Übergang kommt es zu einer Vergrößerung bzw. Verkleinerung der Elektronen-Taschen am Rand der Brillouin-Zone sowie zu einer Verzerrung der Loch-Tasche im Zentrum der Brillouin-Zone. Entnommen aus Ref. [45].

In BaFe₂As₂ gibt es also in drei unterschiedlichen Systemen Symmetriebrechungen, welche in der C_2 -Phase zu Anisotropien in unterschiedlichen physikalischen Messgrößen führen. Diese sind das Gitter, die orbitale Ordnung und die Spin-Ordnung. Dabei stellt sich die Frage, welcher Ordnungsparameter der drei Klassen die Ursache für die kollektive Rotationssymmetriebrechung ist. Da der starken Anisotropie der elektronischen Transporteigenschaften lediglich eine geringe Anisotropie der Gitterparameter gegenübersteht, liegt die Ursache der Symmetriebrechung vermutlich im elektronischen System [45].

In Anlehnung an die nematische Phase von Flüssigkristallen, bei der die Translationssymmetrie erhalten bleibt, während die Rotationssymmetrie gebrochen ist, wird die Phase unterhalb von T_{nem} als elektronisch-nematisch bzw. nematisch geordnet bezeichnet [63, 64]. Anders als

bei normalen strukturellen Phasenübergängen, bei denen Gitterinstabilitäten in Form von Phononen für die Symmetriebrechung verantwortlich sind, folgt hier das Gitter lediglich dem elektronischen Phasenübergang, welcher durch Instabilitäten des elektronischen Systems getrieben wird [45]. Da es wahrscheinlich ist, dass die Instabilitäten, welche zur supraleitenden Phase führen, ebenfalls für die Entstehung der orbitalen und magnetischen Ordnung verantwortlich sind, ist die Frage nach der Ursache der nematischen Ordnung essenziell.

2.2.2. Supraleitender Ordnungsparameter und Lifshitz-Übergang

Durch die zunehmende Lochdotierung mit Kalium setzt, ausgehend von der Stammverbindung $BaFe_2As_2$, ab einem Kaliumgehalt von $x = 0.13$ ein supraleitender Grundzustand ein (siehe Abbildung 2.10a) [10]. Durch weitere K-Dotierung kommt es dabei zu einer Änderung des supraleitenden Ordnungsparameters. Die unterschiedlichen Ordnungsparameter sind in Abbildung 2.10b abgebildet. Bei beiden Diagrammen in Abbildung 2.10 handelt es sich um Phasendiagramme von $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$, wobei es sich bei Abbildung 2.10b um eine vergrößerte Variante lediglich im Bereich $x = 0.4 - 1$ handelt und zusätzlich zur supraleitenden Sprungtemperatur die Symmetrie des supraleitenden Ordnungsparameters vermerkt ist. Die Nähe zur SDW-Phase, die durch starkes Nesting von loch- und elektronenartigen Fermi-Taschen und die damit verbundenen Spinfluktuationen gekennzeichnet ist, begünstigt die Ausbildung eines s_{\pm} -Ordnungsparameters (Abbildung 2.10b grün) [10, 29]. Das bedeutet, dass der supraleitende Ordnungsparameter einen konstanten Betrag aber ein wechselndes Vorzeichen zwischen den loch- und elektronenartigen Fermiflächen hat. In diesem Fall beträgt die Phasendifferenz des supraleitenden Ordnungsparameters zwischen den unterschiedlichen Bändern π .

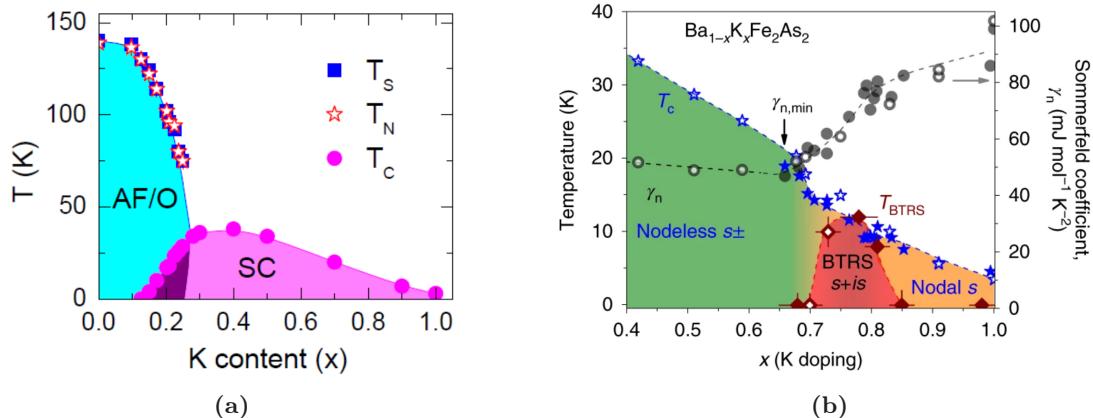


Abbildung 2.10.: a) Phasendiagramm von $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ mit der supraleitenden Sprungtemperatur T_c , der Néel-Temperatur T_N und der Strukturübergangstemperatur T_S . b) Phasendiagramm von $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ mit der supraleitenden Sprungtemperatur (linke Achse) und dem Sommerfeld-Koeffizienten (rechte Achse) und den verschiedenen Ordnungsparametern. Entnommen aus Ref. [65].

Für Dotierungslevel mit $x > 0.8$ gibt es Hinweise darauf, dass $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ einen nodalen s -Wellen-Ordnungsparameter aufweist (Abbildung 2.10b orange). Diese Interpretation wird durch eine Reihe experimenteller Befunde aus ARPES-Messungen, thermischer Leitfähigkeit und spezifischer Wärme gestützt [66–68]. Das derzeitige Bild legt nahe, dass diese beiden Dotierungsbereiche mit unterschiedlicher Struktur des supraleitenden Ordnungsparameters durch eine Zwischenphase verbunden sind, in der ein sogenannter $s + is'$ -Ordnungsparameter realisiert wird (Abbildung 2.10b rot). Diese Phase wird typischerweise im Bereich $0.7 < x < 0.8$ vermutet. Charakteristisch für diese Ordnung ist eine Phasendifferenz zwischen zwei konkurrierenden s -Wellen-Komponenten, die weder 0 noch π beträgt. Ein solcher komplexer Ordnungsparameter bricht aufgrund seiner nicht-reellen Struktur die Zeitumkehrsymmetrie, da sich der Ordnungsparameter unter Zeitumkehr nicht in sich selbst, sondern in sein komplex

konjugiertes Gegenstück transformiert [65]. Dieses Verhalten wird als broken time-reversal symmetry (BTRS) bezeichnet.

Grinenko et al. [65] haben systematische Messungen der Myonenspinrelaxation (μ SR) und der spezifischen Wärme an einer Reihe hochwertiger $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ -Einkristalle ($0.68 < x < 0.98$) durchgeführt, um den Ordnungsparameter mit gebrochener Zeitumkehrsymmetrie genau untersuchen zu können. Durch die $s + is'$ -Phase können spontane Ströme und damit verbundene Magnetfelder erzeugt werden, welche sich mittels μ SR-Messungen nachweisen lassen [69–71]. Die physikalischen Eigenschaften des supraleitenden und des Normalzustands wurden mittels Gleichstromsuszeptibilität und spezifischer Wärmemessungen charakterisiert. Diese Messungen werden im Folgenden genauer dargestellt, weil sie an denselben Proben vorgenommen wurden, die in dieser Arbeit untersucht wurden.

In Abbildung 2.11a-c sind Asymmetrie-Zeit-Spektren im Nullfeld für drei Proben mit unterschiedlicher Dotierung dargestellt, die mittels μ SR-Messungen aufgenommen wurden. Für die Proben mit $x = 0.68$ und $x = 0.85$ bleibt die Depolarisationsrate beim Abkühlen unterhalb der Sprungtemperatur T_c nahezu unverändert, was ein typisches Verhalten für Supraleiter mit Zeitumkehrsymmetrie ist [72, 73]. Im Gegensatz dazu zeigt die Probe mit einer Dotierung von $x = 0.78$ eine erhöhte Relaxation, was auf das Auftreten von spontanen Magnetfeldern im supraleitenden Zustand hindeutet.

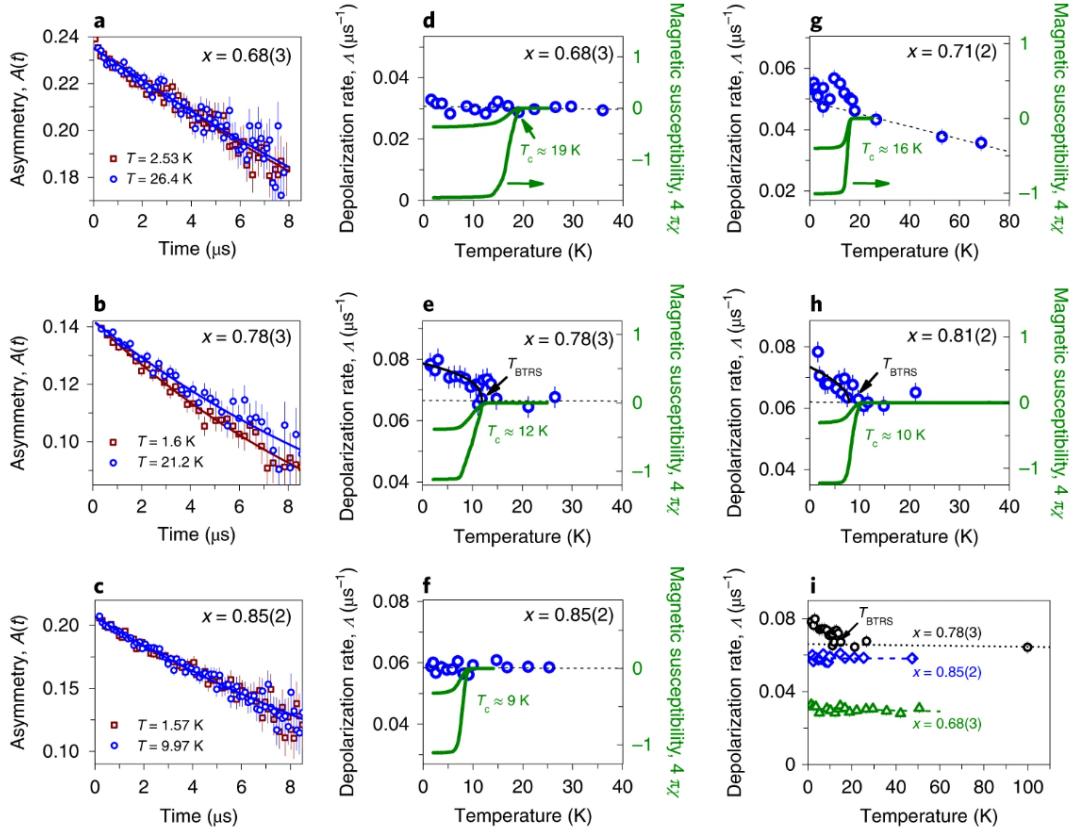


Abbildung 2.11.: Beispiele für μ SR-Zeitspektren bei Nullfeld ober- und unterhalb der Sprungtemperatur T_c für $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ -Proben mit unterschiedlichen Kaliumdotierungen: $x = 0.68$ (a), $x = 0.78$ (b) und $x = 0.85$ (c). (d)-(h) Auf der linken Achse ist die Temperaturabhängigkeit der Myonenspin-Depolarisationsrate Λ für $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ -Proben mit den Dotierungen $x = 0.68$ (d), $x = 0.78$ (e), $x = 0.85$ (f), $x = 0.71$ (g) und $x = 0.81$ (h) dargestellt. Die gestrichelten Linien zeigen lineare Fits für $T \geq T_{\text{BTRS}}$, die durchgezogenen Linien Fits für $T \leq T_{\text{BTRS}}$. Auf der rechten Achse ist die Temperaturabhängigkeit der Volumensuszeptibilität für dieselben Dotierungen gezeigt. Diese wurde in einem kleinen Magnettfeld von $B = 0.5$ mT gemessen, das entlang der a - b -Ebene angelegt wurde. Die Messung erfolgte nach einer Abkühlung im Nullfeld, anschließendem Erwärmen im Feld sowie erneutem Abkühlen im gleichen Feld. (i) Zusammenfassung der Temperaturabhängigen von Λ für die in (a)-(c) dargestellten Proben. Entnommen aus Ref. [65].

In Abbildung 2.11d-h ist die Temperaturabhängigkeit der Myon-Spin-Depolarisationsrate Λ im Nullfeld sowie die magnetische Suszeptibilität für verschiedene Dotierungsstufen abgebildet. Für Proben mit $0.71 < x < 0.81$ wird dabei im supraleitenden Zustand unterhalb einer charakteristischen Temperatur T_{BTRS} ein systematischer Anstieg der Depolarisationsrate Λ beobachtet. Dieses Verhalten wird dem Auftreten spontaner Magnetfelder im supraleitenden Zustand bei der Unterschreitung der Übergangstemperatur T_{BTRS} zur gebrochenen Zeitumkehrsymmetrie zugeschrieben. Die zusätzlich gemessene magnetische Suszeptibilität zeigt hingegen ausschließlich den Eintritt in den supraleitenden Zustand, jedoch keine Anomalie bei T_{BTRS} , was darauf hindeutet, dass die mit der Zeitumkehrsymmetriebrechung verbundenen internen Felder makroskopisch schwach und lokal begrenzt sind [65]. Darüber hinaus konnte gezeigt werden, dass die Myon-Depolarisationsrate nur dann ansteigt, wenn die Spinpolarisation der eingebrachten Myonen parallel zur kristallographischen c -Achse ausgerichtet ist. Für eine Ausrichtung der Spinpolarisation entlang der a -Achse konnte keine Zunahme und teils eine Abnahme der Depolarisationsrate gemessen werden. Dies ist ein klarer Hinweis auf die $s + is'$ -Struktur des supraleitenden Ordnungsparameters, da für eine $s + id$ -Struktur die Komponenten der spontanen Felder in der a - b -Ebene und entlang der c -Achse gleich groß wären [71].

In Abbildung 2.12 sind die Messungen der magnetischen Suszeptibilität (a) und der spezifischen Wärme (b) gezeigt. Mit zunehmender K-Dotierung zeigen sowohl die magnetische Suszeptibilität im Normalzustand als auch der Sommerfeld-Koeffizient γ_n eine Tendenz zur Zunahme. Ein klar systematischer Verlauf ist in den Suszeptibilitätsdaten allerdings nicht eindeutig erkennbar.

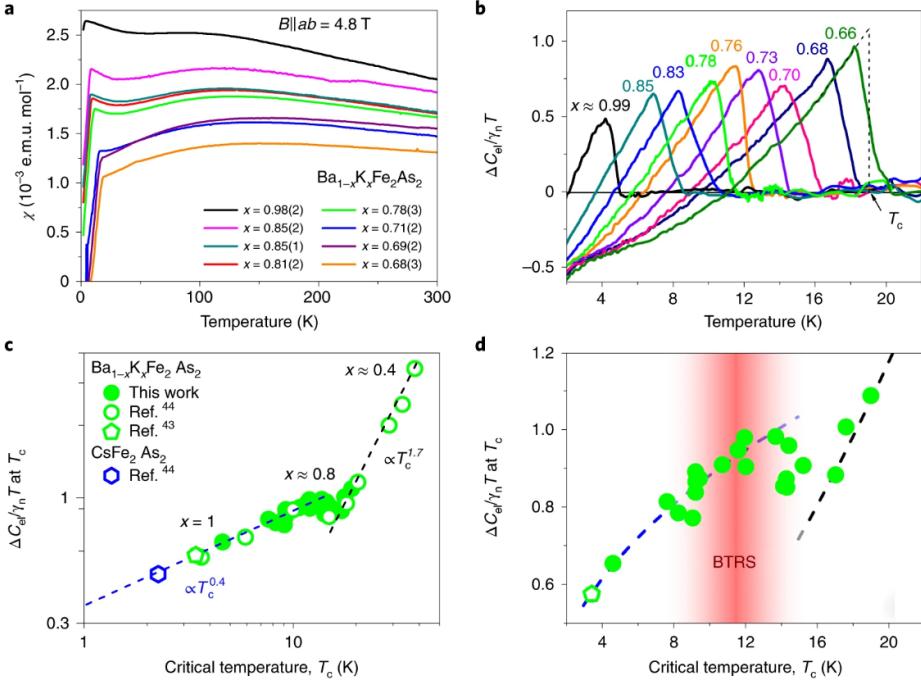


Abbildung 2.12.: a) Magnetische Suszeptibilität von $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ -Einkristallen. b) Temperaturabhängigkeit der elektronischen spezifischen Wärme $\Delta C_{\text{el}} = C_{\text{el}} - \gamma_n T$ für $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ -Einkristalle mit verschiedenen Dotierungsgraden. Der Sommerfeld-Koeffizient γ_n wurde aus spezifischen Wärmemessungen im normalleitenden Zustand bestimmt und beschreibt den elektronischen Beitrag zur spezifischen Wärme. c) Doppelt logarithmische Darstellung des normalisierten Sprungs der spezifischen Wärme bei T_c aus den in b) gemessenen Daten. d) $\Delta C_{\text{el}}/\gamma_n T$ nahe des Bereichs mit gebrochener Zeitumkehrssymmetrie. Entnommen aus Ref. [65].

Hinweise für die Änderung des supraleitenden Ordnungsparameters ergeben sich auch aus der T_c -Abhängigkeit des Sprungs der spezifischen Wärme $\Delta C_{\text{el}}(T_c)$, also der Diskontinuität der elektronischen spezifischen Wärme an der Übergangstemperatur. Diese Größe ist in Abbildung 2.12c normiert als $\Delta C_{\text{el}}/\gamma_n T_c$ gegen T_c doppelt logarithmisch aufgetragen. Diese unterscheidet sich von der temperaturabhängigen Abweichung $\Delta C_{\text{el}}(T) = C_{\text{el}}(T) - \gamma_n T$, die den Verlauf der elektronischen spezifischen Wärme relativ zum Normalzustand über einen Temperaturbereich beschreibt. Für den Dotierungsbereich $x < 0.7$ folgt $\Delta C_{\text{el}}/\gamma_n T_c \propto T_c^\alpha$ mit einem Exponenten $\alpha \approx 2$, was charakteristisch für eine knotenlose, mehrbandige s_{\pm} -Supraleitung in Eisenpniktiden ist [65]. Dieses Verhalten lässt sich durch die interbandige Kopplung zwischen unterschiedlich großen, aber jeweils konstanten (knotenfreien) Gap-Amplituden auf verschiedenen Fermioberflächen erklären, wie sie für s_{\pm} -Zustände typisch ist. In einem solchen Fall steigt der Wärmesprung bei T_c mit zunehmender Zustandsdichte und Kopplungsstärke quadratisch an, was sich in der beobachteten Skalierung widerspiegelt [74, 75]. Für $x > 0.8$ ergibt sich hingegen ein Exponent von $\alpha \approx 0.4$, was ebenfalls über dem Wert im eindimensionalen BCS-Modell liegt, bei dem $\alpha = 0$ ist [75]. In einem einkanaligen BCS-Supraleiter mit konstanter Zustandsdichte und isotroper, knotenfreier Lücke ist der normierte Wärmesprung unabhängig von T_c . Daraus ergibt sich dort kein Skalierungsexponent. Die beobachtete Abweichung kann jedoch mit erweiterten theoretischen Modellen für s_{\pm} -Supraleiter im clean limit reproduziert werden, in

denen mehrere Bänder mit ungleichen Lücken und veränderlicher interbandiger Kopplung berücksichtigt werden [75]. Die Existenz einer nodalen Lückenstruktur im hochdotierten Bereich von $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ ($x \gtrsim 0.8$) wird durch ARPES-Messungen gestützt, die anisotrope oder nodale supraleitende Lücken auf einzelnen Fermioberflächen zeigen [66]. Aufgrund dieser nodalen Struktur kann ein konventioneller s_{++} -Ordnungsparameter ausgeschlossen werden, weshalb ein alternativer s'_{\pm} -Zustand angenommen wird, bei dem der Vorzeichenwechsel des Ordnungsparameters zwischen verschiedenen Loch-Fermi-Flächen erfolgt. Im Dotierungsreich $0.7 < x < 0.8$ zeigt $\Delta C_{el}/\gamma_n T_c$ ein ungewöhnliches Verhalten, indem es ein lokales Maximum bei der BTRS-Übergangstemperatur $T_{BTRS} \approx T_c$ aufweist. Dies ist in Abbildung 2.12d abgebildet. Im Hinblick auf die mit höherer K-Dotierung monoton fallende Sprungtemperatur T_c ist der negative Exponent $\alpha < 0$ in diesem Zwischenbereich besonders auffällig und ein eindeutiger Hinweis darauf, dass sich im Übergangsbereich zwischen den zwei unterschiedlichen Skalierungsverhalten eine grundlegende Veränderung der Paarungswechselwirkung stattfindet. Der $s+is'$ -Zustand entsteht demnach infolge einer Frustration konkurrierender Paarungskanäle, die durch eine topologische Veränderung der elektronischen Bandstruktur bei zunehmender Lochdotierung ausgelöst wird und als Lifshitz-Übergang bezeichnet wird [65].

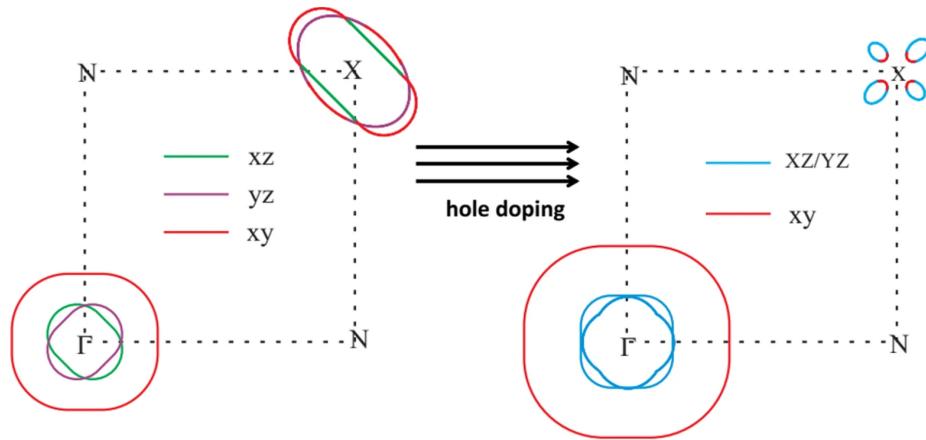


Abbildung 2.13.: Schematische Darstellung der Veränderungen der Fermi-Oberfläche von $BaFe_2As_2$ durch Lochdotierung. Entnommen aus Ref. [76]

Vor dem Lifshitz-Übergang besteht die Fermi-Oberfläche aus mehreren lochförmigen Taschen um den Γ -Punkt und elektronenartigen Taschen um den X -Punkt. Durch den Lifshitz-Übergang verschwinden durch zunehmende K-Dotierung die Elektronentaschen vollständig und es entstehen zusätzlich propellerförmige Lochtaschen um den X -Punkt. Eine Skizze der Fermi-Oberflächen vor und nach dem Lifshitz-Übergang ist in Abbildung 2.13 abgebildet. Die genaue Lage des Lifshitz-Übergangs in $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ bezüglich der Dotierung ist bislang umstritten, da verschiedene experimentelle Methoden zu teils widersprüchlichen Ergebnissen kommen. Eine ARPES-Studie berichtet über eine abrupte Änderung der supraleitenden Lückengröße bei $x = 0.6$, die mit einem Lifshitz-Übergang zusammenfällt [77]. Eine weitere ARPES-Untersuchung zeigt bei $x = 0.7$ Elektronentaschen, jedoch keine propellerförmigen Lochtaschen, was auf eine Verlagerung des Lifshitz-Übergangs in den Bereich $x = 0.8$ bis 0.9 hindeutet [78]. Dagegen werden in ARPES-Messungen bei optimaler Dotierung ($x = 0.4$) bereits propellerförmige Lochtaschen beobachtet, was jedoch nicht von allen ARPES-Studien bestätigt werden konnte [79, 80]. Auch Andreev-Reflektionsmessungen liefern bis zu einer Dotierung von $x = 0.77$ keine Hinweise auf einen topologischen Übergang [81]. Hall-Effekt-Messungen zeigen dagegen im Bereich $0.65 < x < 0.8$ signifikante Veränderungen des Hall-Koeffizienten und des Hall-Winkels, die als Folge eines Lifshitz-Übergangs interpretiert wurden [82]. Zusätzlich wurde in Thermospannungsmessungen ein Plateau bei $x = 0.8$ festgestellt, das ebenfalls mit einem solchen Übergang in Verbindung gebracht wird [83]. Die uneinheit-

lichen Ergebnisse zur Dotierungslage des Lifshitz-Übergangs könnten darauf zurückzuführen sein, dass es experimentell herausfordernd ist, im stark lochdotierten Bereich homogene und strukturell stabile Kristalle herzustellen, was die Vergleichbarkeit und Reproduzierbarkeit der Messergebnisse erschwert [80, 84].

2.2.3. Korrelationseffekte

Die Stammverbindung BaFe_2As_2 hat nominell eine $3d^6$ -Fe-Elektronenkonfiguration. Durch Lochdotierung nähert sich die Fe-Elektronenkonfiguration dem halbgefüllten $3d^5$ -Zustand an, in dem theoretisch ein Mott-Isolationszustand vorhergesagt wird [15, 85, 86]. Ein Mott-Isolator ist ein Material, welches nach dem klassischen Bandmodell eigentlich ein Metall sein sollte, aufgrund starker elektronischer Korrelationseffekte jedoch ein isolierendes Verhalten zeigt. Die isolierenden Eigenschaften entstehen dabei durch starke Coulomb-Abstoßung zwischen Elektronen in halbgefüllten Bändern [1].

Basierend auf dem Hubbard-Modell lässt sich ein Mott-Isolator beschreiben. Das Modell berücksichtigt die kinetische Energie der Elektronen und die Coulomb-Abstoßung. Der Hamilton-Operator lässt sich wie folgt schreiben [87]:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2.4)$$

Dabei ist $c_{i\sigma}^\dagger$ bzw. $c_{i\sigma}$ der Elektronenerzeugungs- bzw. Vernichtungsoperator am Ort i mit Spin σ , t der Hopping-Parameter, welcher die kinetische Energie der Elektronen beschreibt, U die Coulomb-Abstoßungsenergie zwischen zwei Elektronen am gleichen Gitterplatz und $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ die Besetzungszahl der Elektronen am Ort i mit Spin σ .

Die Elektronenlokalisierung, die zur Ausbildung eines Mott-Isolators führt, ergibt sich aus dem Wettbewerb zwischen kinetischer Energie und Coulomb-Abstoßung. Die kinetische Energie ($\sim t$) fördert die Delokalisierung der Elektronen zwischen benachbarten Gitterplätzen, ein Prozess, der als Hopping bezeichnet wird. Die Coulomb-Abstoßung U hingegen macht eine Doppelbesetzung eines Gitterplatzes energetisch ungünstig [87]. Wenn U deutlich größer ist als die Bandbreite $W \sim z \cdot t$, wobei z die Anzahl benachbarter Gitterplätze, also die Koordinationszahl ist, dominiert die Wechselwirkung. In diesem Regime ist es für die Elektronen energetisch vorteilhafter, an ihrem Gitterplatz lokalisiert zu bleiben, um eine Doppelbesetzung zu vermeiden. Der stärkste Korrelationseffekt tritt bei Halbfüllung auf, also wenn im Mittel ein Elektron pro Gitterplatz vorhanden ist [87]. In dieser Konfiguration konkurrieren Hopping und Coulomb-Abstoßung besonders stark. Jeder Sprung eines Elektrons würde zwangsläufig zu einer Doppelbesetzung führen, die durch U energetisch bestraft wird. Das System befindet sich daher in einem Zustand maximaler elektronischer Korrelation, da sich die Elektronen gegenseitig am freien Bewegen hindern. In realen Materialien lassen sich die Parameter U und t durch äußere Einflüsse gezielt beeinflussen. Während U im Wesentlichen durch die lokale Elektronendichte und Abschirmung bestimmt wird und relativ materialspezifisch ist, kann der Hopping-Parameter t durch strukturelle Modifikationen wie Gitterdehnung oder chemische Substitution variiert werden. Beispielsweise führt eine Dehnung des Kristallgitters, etwa durch das Einbringen größerer Atome (chemische Dotierung) oder durch externen Druck oder Dehnung, zu einer Vergrößerung der Gitterkonstanten und damit zu einer Verringerung der Überlappung der Elektronenwellenfunktionen. Dies reduziert den Wert von t und erhöht damit effektiv das Verhältnis U/t , was das System näher an den Mott-isolierenden Zustand bringen kann [15].

Mit verschiedenen Messmethoden konnte nachgewiesen werden, dass es durch Dotierung in BaFe_2As_2 zu einer Zunahme der effektiven Masse der Ladungsträger mit abnehmender Füllung kommt, was in Abbildung 2.14 dargestellt ist. Die effektive Masse beschreibt, wie sich ein Elektron aufgrund des periodischen Potentials des Kristallgitters in einem Festkörper bewegt. Die Zunahme der effektiven Masse ist ein charakteristischer Hinweis auf elektronische

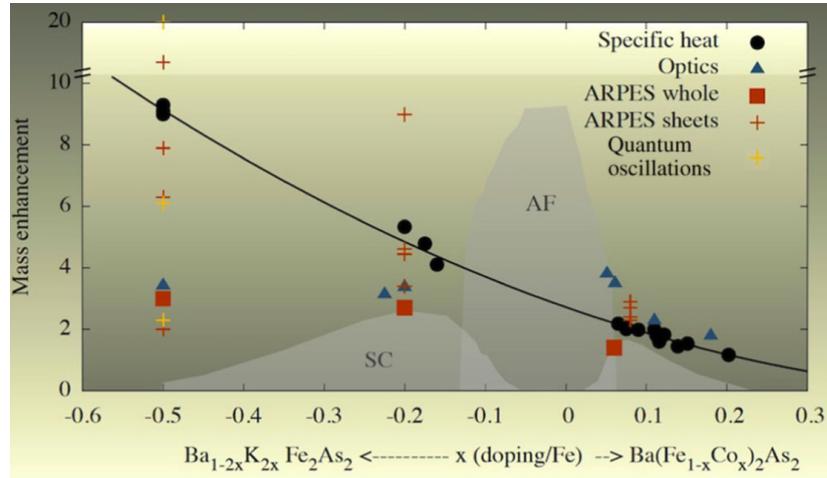


Abbildung 2.14.: Auf verschiedene Weise experimentell bestimmte Massenzunahme für dotiertes $BaFe_2As_2$ eingezeichnet in das Phasendiagramm des Systems. Die schwarze Linie entspricht der Anpassung an die durch spezifische Wärmemessungen bestimmten Daten. Entnommen aus Ref. [15].

Korrelationen, da dadurch die Beweglichkeit der Ladungsträger eingeschränkt wird.

In Abbildung 2.14 ist durch die schwarzen Punkte die Zunahme der effektiven Masse dargestellt, die anhand von Messungen der spezifischen Wärmekapazität an Einkristallen bestimmt wurde [88–93]. Die Massenzunahme $m^*/m_b = \gamma/\gamma_b$ ergibt sich dabei aus dem Verhältnis des gemessenen Sommerfeld-Koeffizienten γ zur bandtheoretischen Schätzung $\gamma_b = \pi^2 k_B^2 / 3 N_0$, wobei N_0 die elektronische Zustandsdichte an der Fermi-Energie bezeichnet [15]. Die effektive Masse wächst dabei kontinuierlich von etwa 2 in elektronenüberdotiertem $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$, über Werte um 3 im elektronenunterdotierten Bereich und in der stöchiometrischen Verbindung, auf etwa 5–6 im optimal dotierten $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ und erreicht schließlich Werte von ungefähr 9 in vollständig substituiertem KFe_2As_2 . Dies deutet auf die zunehmende Bedeutung elektronischer Korrelationen hin, die in der bandtheoretischen Schätzung nicht berücksichtigt sind.

Ein anderes Bild ergeben Messungen der optischen Leitfähigkeit, über die ebenfalls die Massenzunahme bestimmt werden kann [94–97]. Dabei wird die bandtheoretische Abschätzung des Drude-Gewichts mit den experimentellen Werten verglichen. Das Drude-Gewicht beschreibt die kohärente Antwort der Ladungsträger auf ein äußeres elektrisches Feld. Für dieses gilt [15]:

$$D_{\text{Band}} = \sum_{\alpha, k} \left(\frac{\partial \epsilon_k^\alpha}{\partial k_x} \right)^2 \delta(\epsilon_k^\alpha - \epsilon_F), \quad (2.5)$$

wobei ϵ_k^α die Dispersion des Bandes α ist. Die optische effektive Masse ergibt sich aus dem Verhältnis $D_{\text{Band}}/D_{\text{exp}} = m^*/m_b$ [15]. In Abbildung 2.14 ist sie durch die blauen Dreiecke dargestellt. Dabei zeigt sich auf der elektronenunterdotierten Seite eine leichte Abnahme der effektiven Masse, während auf der lochdotierten Seite ein nahezu konstanter Wert von etwa 3.5 beobachtet wird.

Diese Diskrepanz bezogen auf die Messung der spezifischen Wärme lässt sich durch die Existenz von Elektronen mit unterschiedlich starker effektiver Massenrenormierung erklären. In einer Multibandumgebung ergeben sich sowohl die elektrische Leitfähigkeit als auch die Zustandsdichte bei der Fermi-Energie als Summen über die Beiträge der einzelnen Bänder. Der Zusammenhang

$$\frac{\gamma}{\gamma_b} = \frac{D_{\text{Band}}}{D_{\text{exp}}}$$

gilt daher nur unter der Voraussetzung, dass die Massenerhöhung für alle Orbitale identisch ist.

Im Fall einer orbitalabhängigen Renormierung ergeben sich jedoch fundamentale Unterschiede in der Gewichtung der Beiträge zu γ und zum Drude-Gewicht [15]. Die elektronische spezifische Wärme ist direkt proportional zur Zustandsdichte am Fermi-Niveau, die sich als Summe über alle beteiligten Orbitale mit einem Beitrag $\sim (m^*/m_b)_\alpha$ ergibt. Stark korrelierte Orbitale mit hoher effektiver Masse liefern daher einen dominanten Beitrag zur Gesamtzustandsdichte und damit zum Sommerfeld-Koeffizienten γ . Das Drude-Gewicht hingegen beschreibt die kohärente Antwort der Ladungsträger auf ein äußeres elektrisches Feld und hängt in vereinfachter Form $D \sim \sum_\alpha (m_b/m^*)_\alpha$ invers von der effektiven Masse ab. Dadurch tragen zum Drude-Gewicht hauptsächlich die schwächer korrelierten, leichteren Orbitale bei, da sie eine höhere Beweglichkeit aufweisen. Diese entgegengesetzte Abhängigkeit führt dazu, dass im ersten Fall die stark korrelierten, trügeren Elektronen dominieren, während im zweiten Fall die dynamisch aktiven, schwach korrelierten Elektronen den Hauptbeitrag liefern. Bei einer ausgeprägten Differenzierung der Korrelationsstärken zwischen den Orbitalen spiegelt der Sommerfeld-Koeffizient γ somit vorwiegend die Eigenschaften der stark korrelierten Orbitale wider, während das Drude-Gewicht überwiegend von den schwach korrelierten Elektronen bestimmt wird [15].

Durch ARPES-Messungen kann dieses Bild bestätigt werden [98, 99]. Für eine Übereinstimmung mit den experimentellen Daten muss die DFT-Bandstruktur mit einem globalen Renormierungsfaktor skaliert werden, der mit abnehmender Füllung zunimmt. Dieser ist in Abbildung 2.14 als „ARPES whole“ bezeichnet [15]. Durch die Messung der Fermi-Geschwindigkeit auf den verschiedenen Fermi-Oberflächen kann im Vergleich mit DFT-Rechnungen die Massenzunahme der entsprechenden niederenergetischen Elektronen unabhängig voneinander abgeschätzt werden. Wie in Abbildung 2.14 dargestellt, zeigt sich auf der elektronendotierten Seite eine homogene Renormierung der Fermi-Geschwindigkeit um einen Faktor der Größenordnung ~ 2 , während auf der lochdotierten Seite eine unterschiedliche Renormierung für die verschiedenen Bänder beobachtet wird, mit Werten zwischen 3 und 9 für $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ und zwischen 2 und 18 für KFe_2As_2 . Auch Quantenoszillationsmessungen an KFe_2As_2 , die ebenfalls in Abbildung 2.14 eingezeichnet sind, zeigen eine starke Differenzierung der Massenverstärkungen [100]. Es lässt sich festhalten, dass das elektronen- und lochdotierte Phasendiagramm von BaFe_2As_2 einen stark ausgeprägten, monotonen Anstieg der Korrelationen mit zunehmender Lochdotierung aufweist. Dieser geht einher mit einer parallel dazu stattfindenden, progressiven Differenzierung der Massenrenormierungen in den verschiedenen Bändern, sodass von einem orbitalselektiven Mott-Verhalten gesprochen werden kann [15].

Das orbitalselektive Mott-Verhalten wird wesentlich durch die Hundsche Kopplung J bestimmt. Diese beschreibt eine Spin-Korrelation zwischen Elektronen, die sich auf unterschiedlichen Orbitalen desselben Atoms befinden und fördert eine parallele Spinausrichtung, wodurch der Gesamtspin maximiert wird. Dies führt zu einer orbitalen Entkopplung, da die Hund-Kopplung die Korrelationen zwischen den Orbitalen unterdrückt und somit die Ladungsanregungen in den verschiedenen Orbitalen nahezu unabhängig voneinander werden lässt [101]. Zur Untersuchung dieser Effekte wurden Rechnungen im Rahmen der lokalen Dichteapproximation (LDA) in Kombination mit der Slave-Spin-Mean-Field-Theorie bei $T = 0$ durchgeführt [15]. Ausgangspunkt war eine DFT-Bandstruktur der tetragonalen Phase von dotiertem BaFe_2As_2 . Die Slave-Spin-Mean-Field-Methode erlaubt es, korrelationsbedingte Massenrenormierungen sowie orbitalspezifische Mott-Übergänge systematisch zu erfassen. In Abbildung 2.15 sind die auf diese Weise berechneten orbitalaufgelösten Massenzunahmen als Funktion der Gesamtelektronendichte dargestellt. Dabei zeigt sich deutlich, dass die Korrelationseffekte mit abnehmender Gesamtdichte stetig zunehmen, wobei das d_{xy} -Orbital die stärkste Massenrenormierung aufweist.

Die theoretisch berechnete Massenerhöhung bei starker Lochdotierung erreicht deutlich höhere Werte als experimentell ermittelt (siehe zum Vergleich Abbildung 2.14). Dieser Unterschied resultiert aus der zunehmenden Kovalenz in den Fe-As-Ebenen infolge der steigenden Kali-

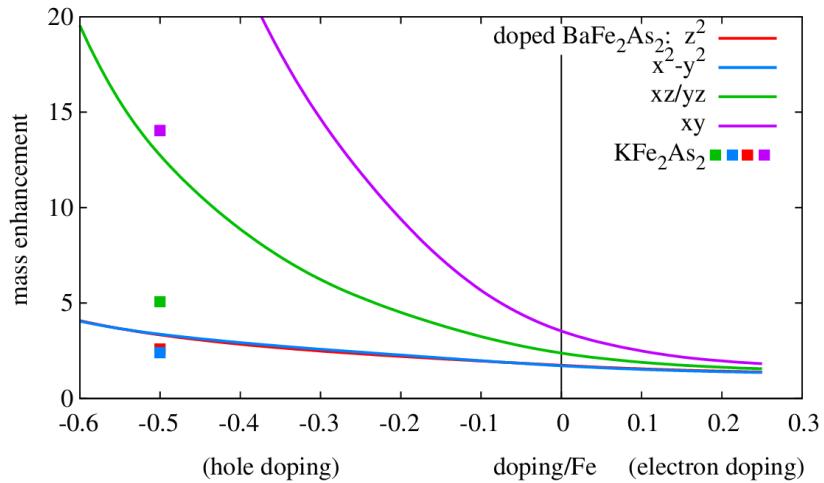


Abbildung 2.15.: Orbitalaufgelöste Massenzunahme in BaFe₂As₂-Verbindungen in Abhängigkeit von der Dotierung. Die durchgezogenen Linien zeigen die theoretisch berechnete effektive Masse ohne Berücksichtigung der zunehmenden Kovalenz in den Fe-As-Ebenen. Die farbigen Quadrate stellen die korrigierten Werte für KFe₂As₂ dar, bei denen dieser Effekt einbezogen wurde. Entnommen aus Ref. [15].

umdotierung. Wird dieser Effekt berücksichtigt, ergeben sich Korrelationsstärken, die näher an den experimentell bestimmten Werten liegen. Die entsprechend korrigierten Werte sind in Abbildung 2.15 durch die farbigen Quadrate dargestellt. Man erkennt dabei insbesondere eine ausgeprägte Massenrenormierung für das d_{xy} -Orbital [15].

In Abbildung 2.16 sind zusätzlich das Quasiteilchengewicht Z_α sowie die Orbitalbesetzung in Abhängigkeit von der Dotierung für die verschiedenen Orbitale dargestellt. Das Quasiteilchengewicht $Z_\alpha = (m_b/m^*)_\alpha$ beschreibt die Stärke der elektronischen Korrelation für das jeweilige Orbital α . Ein kleiner Wert von Z_α deutet auf eine starke Renormierung durch Korrelationen hin, da die effektive Masse m_α^* gegenüber der bandtheoretischen Masse m_b deutlich erhöht ist [15]. Neben der generellen Zunahme der Korrelationseffekte mit abnehmender Gesamt elektronendichte nimmt auch die Differenzierung der Korrelationsstärke zwischen den Orbitale mit zunehmender Lochdotierung zu. Die Berechnungen zeigen, dass die Stärke der elektronischen Korrelationen in jedem Orbital primär davon abhängt, wie stark das jeweilige Orbital von der Halbbesetzung abweicht. Mit abnehmender Gesamtbesetzung nähern sich alle Orbitale der Halbbesetzung an und die Quasiteilchengewichte gehen gegen Null bei der Halbfüllung $n = 5$, was dem Zustand eines Mott-Isolators ohne orbitale Polarisierung entspricht. Bemerkenswert ist dabei, dass dieser Übergang bei jedem Orbital unterschiedlich schnell erfolgt. Das d_{xy} -Orbital ist bereits bei $n = 6$ nahezu halb besetzt und daher besonders stark korreliert. Das d_{z^2} -Orbital hingegen bleibt bis nahe $n = 5$ deutlich von der Halbbesetzung entfernt und ist deshalb über weite Bereiche der Dotierung hinweg nur schwach korreliert. KFe₂As₂ liegt dabei am lochdotierten Ende mit einer Gesamtbesetzung von $n \approx 5.5$ und befindet sich damit bereits in einem Bereich, in dem das d_{xy} -Orbital stark renormiert und nahe an den Mott-Zustand herangerückt ist [15]. Diese Koexistenz von Elektronen mit unterschiedlich stark ausgeprägten Korrelationen, abhängig vom Abstand ihrer Orbitale zum Mott-Zustand, definiert das Konzept der „orbitalen Mottness“ und weist auf deren mögliche Bedeutung im Phasendiagramm von BaFe₂As₂ sowie der Eisenpniktide im Allgemeinen hin [15].

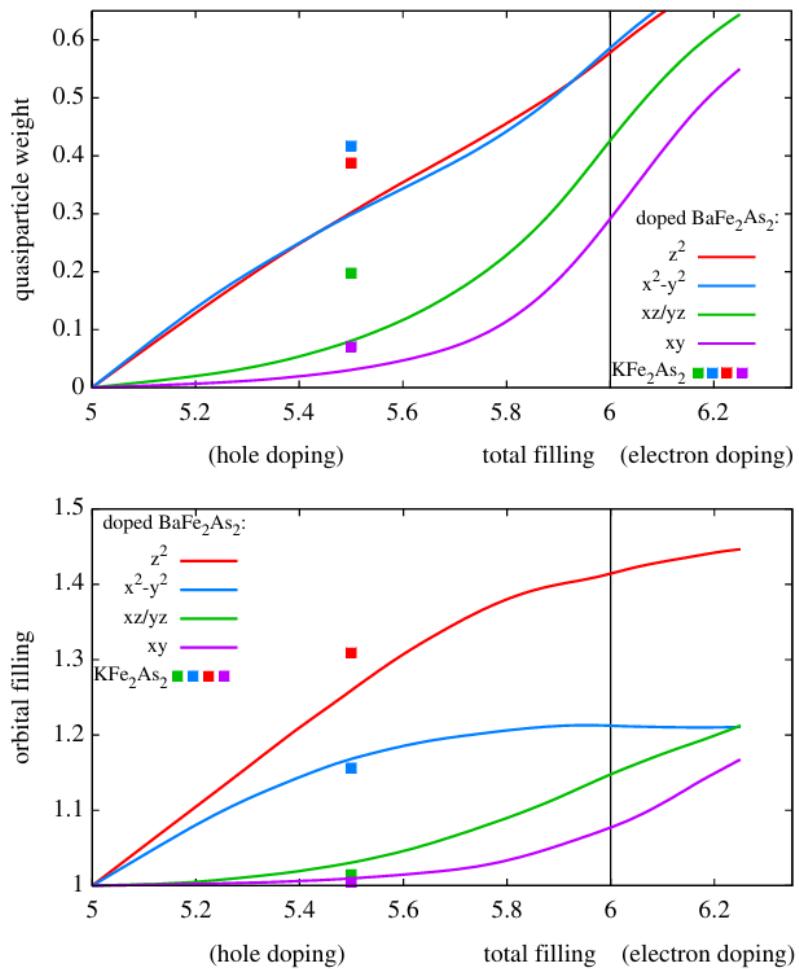


Abbildung 2.16.: Berechnete, orbitalaufgelöste Quasiteilchengewichte (obere Abbildung) und Orbitalbesetzung n_α (untere Abbildung) für dotiertes BaFe_2As_2 sowie für das stöchiometrische KFe_2As_2 (Quadrat) im Slave-Spin-Mean-Field-Ansatz. Entnommen aus Ref. [15].

Kondo-Effekt

Die in den stark lochdotierten Systemen nachgewiesenen Korrelationseffekte können unter anderem zu einer ausgeprägten Lokalisierung von Ladungsträgern führen, was sich in einem Kondo-artigen Verhalten äußern kann. Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen zeigen Hinweise auf eben dieses Verhalten, weshalb im Folgenden die physikalischen Grundlagen des Kondo-Effekts kurz dargestellt werden.

In stark korrelierten Elektronensystemen können lokale magnetische Momente in Wechselwirkung mit den delokalisierten Leitungselektronen komplexe Vielteilcheneffekte hervorrufen. Ein besonders gut untersuchtes Beispiel dafür ist der sogenannte Kondo-Effekt. Dabei kommt es durch die Streuung von Leitungselektronen an lokalisierten Spins zu einer charakteristischen Änderung der elektronischen Transporteigenschaften. Dieser Effekt wurde erstmals von Jun Kondo 1964 theoretisch beschrieben [102].

Ursächlich für den Kondo-Effekt ist die Austauschwechselwirkung zwischen einem lokalisierten magnetischen Moment und den delokalisierten Leitungselektronen, welche durch den Kondo-Hamiltonian beschrieben werden kann [103]:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + j \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \vec{S} \cdot c_{\mathbf{k}}^\dagger \vec{\sigma} c_{\mathbf{k}'} \quad (2.6)$$

Dabei beschreibt der erste Term die kinetische Energie der Leitungselektronen mit Dispersionsrelation $\varepsilon_{\mathbf{k}}$. Der zweite Term beschreibt die antiferromagnetische Austauschkopplung, wobei J die Kopplungskonstante, \vec{S} der lokale Spin und $\vec{\sigma}$ der Spinoperator der Leitungselektronen, dargestellt durch die Pauli-Matrizen, ist. Bei tiefen Temperaturen führt diese Kopplung zur Ausbildung eines kollektiven Singulettzustands, in dem das lokale Moment durch eine Wolke von Leitungselektronen abgeschirmt wird. Dieser Prozess wird auch als Kondo-Screening bezeichnet [87].

Die charakteristische Energieskala des Kondo-Effektes ist die Kondo-Temperatur T_K , unterhalb derer die Austauschkopplung dominiert. Diese hängt exponentiell von der Kopplungskonstante J sowie der elektronischen Zustandsdichte $\rho(E_F)$ am Fermi-Niveau ab [104]:

$$k_B T_K \sim D \cdot \exp\left(-\frac{1}{J\rho(E_F)}\right), \quad (2.7)$$

wobei D die Bandbreite der Leitungselektronen ist. Aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit von J und $\rho(E_F)$ reagiert T_K empfindlich auf eine Änderung dieser, was den Kondo-Effekt zu einem nützlichen Indikator für elektronische Wechselwirkungen macht.

Bei hohen Temperaturen sind die thermischen Fluktuationen groß genug, dass das Austauschpotenzial zwischen dem lokalisierten Moment und den delokalisierten Leitungselektronen nur eine kleine Korrektur zur Streuung beiträgt. Sinkt die Temperatur in die Nähe von T_K , wächst die effektive Kopplung stark an. Über Spinflip-Streuprozesse koppelt der Spin des lokalen Moments an die entgegengesetzt ausgerichteten Spins der Leitungselektronen und wird bei $T \ll T_K$ von einer vierteiligen Singulett-Wolke aus Elektronen vollständig abgeschirmt [87]. Anschaulich lässt sich der Prozess als Bildung eines gebundenen Singulettzustands zwischen dem lokalisierten Spin und den ihn umgebenden Elektronen auffassen. Dieser gebundene Vielteilchenzustand hat eine Energie nahe der Fermi-Energie und verändert dadurch die Anregungsspektren des Systems. Oberhalb von T_K ist das lokale Moment nur teilweise oder gar nicht abgeschirmt und verhält sich paramagnetisch.

Ein Merkmal des Kondo-Effekts ist die Ausbildung einer schmalen Resonanz im elektronischen Zustandsdichte-Spektrum nahe der Fermi-Energie. Diese wird als Kondo-Resonanz bezeichnet [103]. Diese Resonanz spiegelt den beschriebenen gebundenen Singulettzustand wider. In der lokalen Zustandsdichte am Ort des lokalen Moments erscheint bei E_F ein schmaler Peak, dessen Halbwertsbreite in der Größenordnung $k_B T_K$ liegt.

Der Kondo-Effekt wird durch mehrere experimentelle Methoden sichtbar. Der am frühesten beobachtete experimentelle Effekt ist der nichtmonotone Temperaturverlauf des elektrischen Widerstands in Metallen mit magnetischen Störstellen [105]. Während der Widerstand in reinen Metallen mit sinkender Temperatur aufgrund verringelter Phononenstreuung typischerweise abnimmt, zeigt ein Kondo-System ein charakteristisches Minimum gefolgt von einem logarithmischen Anstieg bei weiterer Abkühlung. Dieser Anstieg entsteht durch die verstärkte Spinflip-Streuung der Leitungselektronen an den lokalen magnetischen Momenten, sobald die Kondo-Streuung dominant wird. Exemplarisch ist dieses Verhalten für eine dünne eisenhaltige Goldschicht in Abbildung 2.17 abgebildet. Im Vergleich zu der reinen Goldschicht (Au) ist dabei für die eisenhaltige Goldschicht (Au(Fe)) deutlich der Widerstandsanstieg sichtbar.

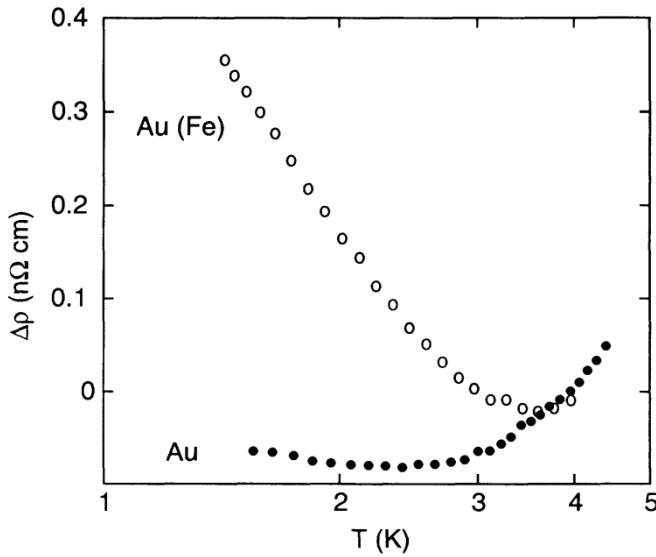


Abbildung 2.17.: Temperaturabhängige Widerstandsmessung für dünne Schichten aus reinem Gold (Au) und eisenhaltigem Gold (Au(Fe)). Im zweiten Fall ist der aus dem Kondo-Effekt resultierende Anstieg des Widerstands sichtbar. Entnommen aus Ref. [105].

3. Elastowiderstandsmessungen

Bei einer Elastowiderstandsmessung wird die relative Änderung des elektrischen Widerstands $\eta = (R(\epsilon) - R_0)/R_0$ als Funktion einer äußeren mechanischen Dehnung ϵ bei einer konstanten Temperatur gemessen. Dabei ist $R_0 = R(\epsilon = 0)$ der temperaturabhängige Widerstand im dehnungsfreien Zustand. Die Ableitung der relativen Widerstandsänderung η nach der Dehnung ϵ wird als Elastowiderstand \tilde{n} bezeichnet [106]:

$$\tilde{n} = \frac{d\eta}{d\epsilon}. \quad (3.1)$$

Wie der Vergleich verschiedener Elastowiderstandsmessungen im Folgenden zeigt, ist die Bezeichnung des Elastowiderstands in der Literatur nicht einheitlich. Neben \tilde{n} findet sich der Zusammenhang $d\eta/d\epsilon$ in unterschiedlichen Schreibweisen, etwa als $1/R_i \cdot dR_i/\epsilon$. Darüber hinaus wird, wie später noch näher erläutert, auch der Ausdruck χ_{nem} verwendet.

Elastowiderstandsmessungen ermöglichen eine detaillierte Untersuchung der nematischen Phase in eisenbasierten Supraleitern und haben wesentlich zur Klärung der Frage beigetragen, ob diese durch das Gitter induziert oder elektronisch getrieben ist [20, 106–109]. In dem folgenden Kapitel wird zunächst erläutert, wie sich mithilfe von Elastowiderstandsmessungen sowohl nematische Fluktuationen als auch elektronische Korrelationen untersuchen lassen. Anschließend werden die verwendete Messmethode sowie der für die Messungen notwendige Präparationsprozess detailliert beschrieben. Im letzten Teil werden die Messergebnisse vorgestellt und diskutiert.

3.1. Untersuchung von nematischen Fluktuationen

Die bereits besprochene Anisotropie des elektrischen Widerstands in $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ (siehe Abbildung 2.8) liefert einen entscheidenden Hinweis auf die elektronische Natur der nematischen Ordnung. Einen eindeutigen Nachweis sowie eine quantitative Bestimmung der elektronisch-nematischen Suszeptibilität erzielten Chu et al. [20] durch Elastowiderstandsmessungen an $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$. Die elektronisch-nematische Suszeptibilität beschreibt die Reaktion eines Systems auf eine nematische Störung. Analog zur magnetischen Suszeptibilität, die die Antwort eines Systems auf ein externes Magnetfeld misst, erfasst die nematische Suszeptibilität die Reaktion auf eine Störung, welche die Symmetrie zwischen zwei kristallographischen Richtungen bricht. Ein hoher Wert der nematischen Suszeptibilität bedeutet, dass bereits kleine Störungen zu starken nematischen Fluktuationen führen. Nematische Fluktuationen sind dabei kurzzeitige, lokale Schwankungen der elektronischen Anisotropie, bei denen das System spontan eine bevorzugte Richtung annimmt, ohne jedoch bereits eine stabile nematische Ordnung auszubilden. Somit ist die nematische Suszeptibilität ein Maß dafür, wie ausgeprägt diese nematischen Fluktuationen im System sind. Im Fall der Elastowiderstandsmessungen wird eine solche nematische Störung experimentell durch das Anlegen einer äußeren Dehnung erzeugt. Um die C_4 -Rotationssymmetrie des Kristalls analog zur nematischen Phase gezielt zu brechen, muss im Falle von $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ die Dehnung entlang der [110]-Kristallrichtung erfolgen. Dadurch wird eine bevorzugte Richtungsabhängigkeit der elektronischen Eigenschaften induziert, was eine kontrollierte Untersuchung der nematischen Reaktion des Systems ermöglicht.

Im Allgemeinen kann der elektronisch-nematische Ordnungsparameter ψ als Funktion der Widerstandsanisotropie Φ ausgedrückt werden, da beide Größen dieselbe zugrunde liegende

Symmetriebrechung reflektieren [110]. Für die Widerstandsanisotropie gilt:

$$\Phi = \frac{R_b - R_a}{R_b + R_a}, \quad (3.2)$$

wobei R_a und R_b die Widerstände senkrecht und parallel zur angelegten Dehnung sind. Da der nematische Ordnungsparameter die Widerstandsanisotropie erzeugt, ist die Widerstandsanisotropie vom nematischen Ordnungsparameter abhängig. In der Nähe zum tetragonalen Zustand ist ψ sehr klein, weshalb diese Abhängigkeit um $\psi = 0$ entwickelt werden kann. Da im tetragonalen Zustand $\psi = 0$ gilt und damit keine Widerstandsanisotropie vorliegt, verschwindet der konstante Term der Entwicklung. Die Widerstandsanisotropie ist daher in erster Näherung proportional zum nematischen Ordnungsparameter. Im Experiment wird die durch eine Dehnung ϵ induzierte relative Widerstandsänderung:

$$\eta = \Delta R/R_0 = (R(\epsilon) - R_0)/R_0 \quad (3.3)$$

bei einer konstanten Temperatur gemessen. Im ungedehnten Zustand gilt $R_a = R_b = R_0$. Beim Anlegen einer infinitesimal kleinen Dehnung $\delta\epsilon$, lassen sich R_a und R_b als lineare Funktionen von $\delta\epsilon$ ausdrücken. Es gilt:

$$R_a = R_0(1 - \alpha\delta\epsilon), \quad (3.4)$$

$$R_b = R_0(1 + \alpha'\delta\epsilon). \quad (3.5)$$

Wird Gleichung 3.4 und 3.5 in Gleichung 3.2 eingesetzt und für kleine $\delta\epsilon$ entwickelt, ergibt sich:

$$\Phi = \frac{\alpha + \alpha'}{2}\delta\epsilon + \mathcal{O}(\delta\epsilon^2). \quad (3.6)$$

Wenn sich R_b unter Dehnung im gleichen Maß vergrößert, wie sich R_a verkleinert, gilt $\alpha = \alpha'$. Durch Einsetzen von Gleichung 3.5 in Gleichung 3.3 für $R(\epsilon)$ und dem Vergleich mit Gleichung 3.6 folgt daraus $\eta = \Phi$ und damit $\eta \propto \psi$. Auch im allgemeinen Fall, in dem sich die Widerstand R_a und R_b nicht exakt symmetrisch mit der Dehnung $\delta\epsilon$ ändern (d. h. $\alpha \neq \alpha'$), lässt sich der Zusammenhang zwischen der gemessenen relativen Widerstandsänderung η und dem nematischen Ordnungsparameter ψ im linearen Näherungsbereich explizit angeben. In diesem Fall muss ein zusätzlicher Proportionalitätsfaktor berücksichtigt werden.

Durch Einsetzen von Gleichung 3.5 in Gleichung 3.3 für den Fall einer Stauchung ($\delta\epsilon < 0$) ergibt sich $\delta\epsilon = \eta/\alpha'$. Wird dieser Ausdruck in Gleichung 3.6 eingesetzt, ergibt sich:

$$\Phi = \frac{\alpha' + \alpha}{2\alpha'}\eta. \quad (3.7)$$

Analog folgt für eine Dehnung ($\delta\epsilon > 0$):

$$\Phi = \frac{\alpha' + \alpha}{2\alpha}\eta. \quad (3.8)$$

Diese Ausdrücke zeigen, dass η linear proportional zu Φ ist, wobei der Proportionalitätsfaktor vom Verhältnis der Dehnungskoeffizienten α und α' abhängt. Somit kann η auch in Fällen ohne perfekte Symmetrie als Maß für den nematischen Ordnungsparameter verwendet werden [20]. Da es sich um eine lineare Beziehung handelt, gilt dieselbe Proportionalität auch für die Ableitungen, also:

$$\frac{d\eta}{d\epsilon} \propto \frac{d\psi}{d\epsilon} \quad (3.9)$$

Daraus folgt, dass aus der dehnungsabhängigen Messung der Widerstandsänderung auf die nematische Suszeptibilität geschlossen werden kann.

Im folgenden Teil wird mit Hilfe eines Landau-Ansatzes beschrieben, wie die nematische Suszeptibilität aus theoretischer Sicht zu verstehen ist und welche Information sich aus ihrem Temperaturverlauf über die Natur des nematischen Phasenübergangs gewinnen lassen.

Zur Beschreibung der Wechselwirkung zwischen nematischer Ordnung und Gitterverzerrung wird ein phänomenologischer Landau-Ansatz verwendet [110]. Dabei wird die freie Energie F des Systems als Funktion des nematischen Ordnungsparameters ψ und der orthorhombischen Gitterverzerrung ϵ entwickelt, die die Abweichung des Kristallgitters von der tetragonalen Symmetrie beschreibt. Im Gegensatz zum bisherigen Teil der Arbeit, in dem ϵ die von außen angelegte Dehnung im Experiment bezeichnet, steht ϵ im Rahmen der Landau-Theorie für die vom System selbst induzierte orthorhombische Verzerrung des Kristallgitters, die als struktureller Ordnungsparameter fungiert. Für eine bessere Übereinstimmung mit der Literatur wird trotzdem das gleiche Symbol verwendet. Im restlichen Teil der Arbeit wird ϵ wieder für die von außen angelegte Dehnung verwendet, wobei es sich sowohl um Zug- als auch um Druckbelastung handeln kann.

Die freie Energie hat in dieser Beschreibung die Form [110]:

$$F = \frac{a}{2}\psi^2 + \frac{b}{4}\psi^4 + \frac{c}{2}\epsilon^2 + \frac{d}{4}\epsilon^4 - \lambda\psi\epsilon. \quad (3.10)$$

Die Parameter a , b , c und d sind die Koeffizienten der jeweiligen Terme in der Landau-Entwicklung, und λ ist die Kopplungskonstante zwischen elektronischem und strukturellem Ordnungsparameter.

Im Rahmen der Landau-Theorie ist ein Phasenübergang dadurch charakterisiert, dass der quadratische Koeffizient eines Ordnungsparameters sein Vorzeichen ändert. Dementsprechend gibt es zwei grundsätzliche Szenarien. Im ersten Fall wird der Übergang durch die elektronische Ordnung ψ initiiert. In diesem Fall hängt der Koeffizient a linear von der Temperatur ab und es gilt $a(T) = a_0(T - T_a^*)$, wobei T_a^* die kritische Temperatur der elektronischen Instabilität ist und $a_0 > 0$. Für $T > T_a^*$ ist $a > 0$, das System befindet sich im symmetrischen Zustand und die freie Energie hat ihr Minimum bei $\psi = 0$. Für $T < T_a^*$ wird $a < 0$ und ein nichtverschwindender Wert $\psi \neq 0$ wird energetisch bevorzugt, wodurch eine spontane elektronische Nematik entsteht.

Im zweiten Fall kann der Phasenübergang strukturell getrieben sein. In diesem Fall hängt der Koeffizient c linear von der Temperatur ab und es gilt $c(T) = c_0(T - T_c^*)$ mit $c_0 > 0$. Für $T > T_c^*$ ist $c > 0$ und das System bleibt strukturell tetragonal. Bei $T < T_c^*$ wird $c < 0$, was zu einer spontanen Deformation $\epsilon \neq 0$ des Kristallgitters führt, also einem Übergang in die orthorhombischen Phase.

Durch die Berücksichtigung einer bilinearen Kopplung λ zwischen ψ und ϵ kommt es zu einer gegenseitigen Beeinflussung der Ordnungsparameter. Dies führt dazu, dass der Übergang nicht bei der Übergangstemperatur T_a^* , sondern bereits bei einer höheren Temperatur T_S stattfindet. Um dies zu zeigen, werden die Ableitungen der freien Energie nach ψ und ϵ betrachtet und Null gesetzt, um die Gleichgewichtsbedingung zu erhalten:

$$\frac{\partial F}{\partial \psi} = a\psi + b\psi^3 - \lambda\epsilon = 0, \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \epsilon} = c\epsilon + d\epsilon^3 - \lambda\psi = 0. \quad (3.12)$$

Diese beiden Gleichungen bestimmen die elektronischen und strukturellen Ordnungsparameter als Funktion der Temperatur unter der Bedingung der Minimierung der freien Energie. Aus Gleichung 3.11 ergibt sich $\epsilon = (a\psi + b\psi^3)/\lambda$. Wird dies in Gleichung 3.12 eingesetzt ergibt sich:

$$(a - \frac{\lambda^2}{c})\psi + (b + \frac{da^3}{c\lambda^2})\psi^3 = 0. \quad (3.13)$$

Analog resultiert aus Gleichung 3.12 nach Einsetzen von ψ :

$$(c - \frac{\lambda^2}{a})\epsilon + (d + \frac{dc^3}{a\lambda^2})\epsilon^3 = 0. \quad (3.14)$$

Dies zeigt, dass es aufgrund der Kopplung an das Gitter zu einer Renormalisierung der Koeffizienten kommt. Ein nichttrivialer Ordnungsparameter $\psi \neq 0$ tritt genau dann auf, wenn der effektive quadratische Koeffizient verschwindet, also $a - (\lambda^2/c) = 0$ [110]. Mit $a = a_0(T_S - T_a^*)$ folgt daraus:

$$T_S = T_a^* + \frac{\lambda^2}{a_0 c}. \quad (3.15)$$

Das bedeutet, dass die Kopplung an das Gitter die nematische Instabilität verstärkt und die Übergangstemperatur auf T_S angehoben wird. Aus Gleichung 3.14 folgt, dass sich aufgrund der Kopplung an den elektronischen Freiheitsgrad auch der Koeffizient c zu einem neuen effektiven Modul renormalisiert ($c_{\text{eff}} = c - \frac{\lambda^2}{a}$). Obwohl der Koeffizient c stets positiv ist und somit keine strukturelle Instabilität im klassischen Sinn vorliegt, kann sich das Gitter durch die Kopplung an die elektronische Ordnung dennoch bei der Temperatur T_S spontan verzerren. Dies geschieht, weil c_{eff} durch die elektronische Instabilität gegen null geht. Die zuvor hergeleiteten Gleichungen zeigen eine vollständige Symmetrie zwischen elektronischer Ordnung ψ und Gitterverzerrung ϵ . Eine Instabilität in einem der beiden Kanäle führt automatisch zur Ausbildung von Ordnung im anderen.

Daraus ergibt sich die Frage, wie sich klären lässt, ob die beobachtete elektronische Anisotropie in $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ tatsächlich auf eine intrinsische elektronische Nematik zurückzuführen ist, oder lediglich als Folge einer strukturellen Instabilität auftritt.

Ein Ansatz dafür besteht darin, den unrenormalisierten Koeffizienten a direkt zu messen und zu überprüfen, ob dieser tatsächlich bei einer bestimmten Temperatur gegen null geht. Dies kann durch die Messung der Größe $d\psi/d\epsilon$ realisiert werden, bei der das System mit einer symmetriebrechenden mechanischen Spannung gestört wird. Um dieses Ergebnis zu erhalten, wird die Spannung h , das zur Gitterverzerrung ϵ konjugierte Feld, in die freie Energie eingeführt [110]:

$$F = \frac{a}{2}\psi^2 + \frac{c}{2}\epsilon^2 - \lambda\psi\epsilon - h\epsilon. \quad (3.16)$$

Die Spannung h bricht die Symmetrie zwischen ψ und ϵ in der freien Energie, da ψ nicht direkt an h koppelt. Da der Fokus auf dem Verhalten oberhalb der Phasenübergangstemperatur liegt, werden die Terme vierter Ordnung in ψ und ϵ vernachlässigt, da ψ und ϵ dort klein bleiben [110]. Durch die Minimierung der freien Energie hinsichtlich ψ und ϵ ergibt sich:

$$\frac{\partial F}{\partial \psi} = a\psi - \lambda\epsilon = 0, \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \epsilon} = c\epsilon - \lambda\psi - h = 0. \quad (3.18)$$

Um zu untersuchen, wie das System auf eine äußere Spannung h reagiert, wird Gleichung 3.17 nach h abgeleitet

$$a \frac{d\psi}{dh} - \lambda \frac{d\epsilon}{dh} = 0, \quad (3.19)$$

woraus

$$\frac{d\psi}{d\epsilon} = \frac{d\psi/dh}{d\epsilon/dh} = \frac{\lambda}{a} = \frac{\lambda}{a_0(T - T_a^*)} \quad (3.20)$$

folgt.

Wenn tatsächlich ein elektronisch getriebener nematischer Phasenübergang vorliegt, sollte eine Curie-Weiss-artige Divergenz der Größe $d\psi/d\epsilon$ mit einer kritischen Temperatur T_a^* beobachtet werden. Wie durch die Herleitung von Gleichung 3.9 gezeigt, ist die Messgröße $d\eta/d\epsilon$ direkt

proportional zu $d\psi/d\epsilon$.

Eine beispielhafte Messung der nematischen Suszeptibilität $d\psi/d\epsilon$ durch Elastowiderstandsmessungen an einer Reihe $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ -Einkristalle ist in Abbildung 3.1a abgebildet. Dabei ist deutlich der Anstieg der Suszeptibilität mit sinkender Temperatur zu T_S zu erkennen. Der divergente Anstieg der Suszeptibilität bleibt auch bei Dotierungsstufen erhalten, bei denen kein nematischer Phasenübergang beobachtet wird. Die zugrunde liegenden nematischen Fluktuationen, die diesen Anstieg verursachen, sind über den gesamten untersuchten Dotierungsbereich hinweg nachweisbar. Diese nematischen Fluktuationen werden auch mit χ_{nem} bezeichnet, da sie über die nematische Suszeptibilität erfasst werden. Aus diesem Grund wird χ_{nem} häufig auch als Bezeichnung für Elastowiderstandsmessungen in Diagrammen verwendet. Die Messungen lassen sich mit Hilfe einer Curie-Weiss-Anpassung beschreiben und auswerten. Bei der Analyse muss jedoch zusätzlich der sogenannte Piezowiderstandseffekt berücksichtigt werden. Dieser beschreibt die Änderung des elektrischen Widerstands eines Materials infolge mechanischer Deformation, unabhängig von nematischen Fluktuationen oder Symmetriebrechungen. Um den Einfluss des Piezowiderstandseffekts auf die gemessene Widerstandsanisotropie korrekt zu erfassen, wird die Curie-Weiss-Anpassungsfunktion um einen temperaturunabhängigen Beitrag n_0 erweitert [110]. Dieser Parameter beschreibt die intrinsische, nicht-nematische Anisotropie der Widerstandsantwort und ermöglicht eine präzisere Bestimmung der echten elektronisch-nematischen Suszeptibilität:

$$\tilde{n} = \frac{d\eta}{d\epsilon} = \frac{\lambda/a_0}{T - T^*} + n_0. \quad (3.21)$$

Dabei wird λ/a_0 als Curie-Konstante bezeichnet, T^* ist die kritische Temperatur des nematischen Fluktuationsregimes und n_0 ist der Piezowiderstandsterm. Erst durch diese erweiterte Modellierung lassen sich die experimentellen Daten zuverlässig beschreiben und interpretieren. Curie-Weiss-Anpassungen wurden auch an den Daten in Abbildung 3.1a durchgeführt, womit das in Abbildung 3.1b gezeigte Phasendiagramm erstellt wurde. Die kritische Temperatur ist durch die roten Sterne markiert und zusätzlich ist die temperaturabhängige Widerstandsanisotropie durch die Farbskala eingezeichnet. Dabei ist über den gesamten Dotierungsbereich ein monoton abfallendes T^* zu beobachten, welches den Nulldurchgang bei der optimalen Dotierung hat und anschließend negativ wird. Zusätzlich zeigen sich bei der Dotierungsstufe des Nulldurchgangs die stärksten nematischen Fluktuationen. Dieses Verhalten wird auch bei anderen Vertretern der eisenbasierten Supraleiter wie z.B. $\text{LaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsO}$ beobachtet [106]. Der Punkt bei $T^* = 0$, an dem die nematische Ordnung endet, wird dabei als quantenkritischer Punkt (QCP) bezeichnet. Er unterscheidet sich von klassischen Übergängen dadurch, dass er nicht durch thermische, sondern durch Quantenfluktuationen getrieben ist. An diesem Punkt ist das System hochgradig instabil. Aus theoretischer Sicht eröffnet ein QCP interessante Möglichkeiten. An einem solchen kritischen Punkt divergieren die nematischen Fluktuationen sowohl in ihrer Amplitude als auch in ihrer Korrelationslänge. Dadurch werden die durch diese Fluktuationen vermittelten elektronischen Wechselwirkungen sowohl stark als auch langreichweitig. Solche kritischen Fluktuationen können das konventionelle metallische Verhalten zerstören und zu einem von zwei möglichen Ergebnissen führen. Entweder bildet sich Supraleitung aus, oder es tritt ein Nicht-Fermi-Flüssigkeitsverhalten im metallischen Zustand auf [9].

Im Zusammenhang mit Supraleitung ist anzumerken, dass die durch nahezu kritische nematische Fluktuationen vermittelte Wechselwirkung in allen Paarungskanälen anziehend ist. Das bedeutet, sie kann jede bereits vorhandene Paarungstendenz, die sich aus anderen Mechanismen ergibt (z.B. Spinfluktuationen), verstärken [111], oder sogar eigenständig eine supraleitende Phase erzeugen [111–113]. Diese Eigenschaft könnte erklären, warum in vielen eisenbasierten Supraleitern die optimale Dotierung für Supraleitung nahe an jener Dotierung liegt, bei der die nematische Suszeptibilität ihr Maximum erreicht. Bleibt das System trotz kritischer nematischer Fluktuationen im metallischen Zustand und bildet keine supraleitende Phase

aus, zeigen sich deutliche Abweichungen vom klassischen Fermi-Flüssigkeitsverhalten. In diesem Fall verlieren die elektronischen Quasiteilchen auf großen Teilen der Fermi-Oberfläche ihre charakteristischen Eigenschaften, da sie stark gestreut und somit überdämpft werden. Dies äußert sich in ungewöhnlichen, sogenannten Nicht-Fermi-Flüssigkeits-Effekten, wie etwa einer veränderten Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstands, einer anomalen spezifischen Wärme oder auffälligen Signaturen in spektroskopischen Untersuchungen [114–116]. Beispiele dafür sind $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ und $\text{FeSe}_{1-x}\text{S}_x$ [117–119].

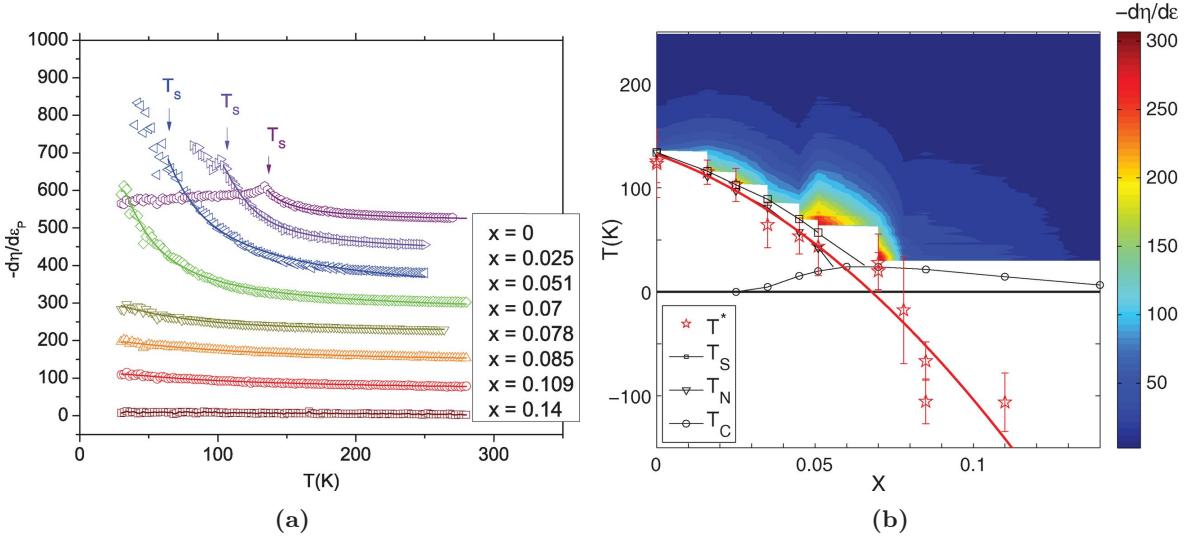


Abbildung 3.1.: a) Elastowiderstandsmessung von $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ in Abhängigkeit der Temperatur. Entnommen aus Ref. [20]. b) Phasendiagramm der nematischen Suszeptibilität in $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ in Abhängigkeit der Temperatur und der Dotierung. Die erhaltenen Temperaturen T^* resultieren aus Curie-Weiss-Anpassungen der in Abbildung 3.1a gezeigten Daten und sind durch rote Sterne dargestellt. Entnommen aus Ref. [20].

Einfluss eines Lifshitz-Übergangs auf Elastowiderstandsmessungen

In einer von Hong et al. [120] durchgeführten Studie wurde der Elastowiderstand von stark lochdotiertem $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ ($0.55 < x < 0.97$) gemessen und mittels einer Curie-Weiss-Anpassung ausgewertet. Dabei konnte, wie in Abbildung 3.2A-E zu sehen ist, für jede Dotierungsstufe ein divergierender Elastowiderstand entlang der [110]-Richtung beobachtet werden, welcher sehr gut mit der jeweiligen Curie-Weiss-Anpassung (rote Linie) übereinstimmt. In Abbildung 3.2F ist der Parameter λ/a_0 in Abhängigkeit der Dotierung aufgetragen. Dabei ist zu erkennen, dass es um $x \approx 0.8$ zu einer Erhöhung von λ/a_0 kommt. Dahingegen sinkt T^{nem} , welches mit dem oben definierten T^* übereinstimmt, von etwa 45 K bei $x = 0.4$ (optimaler Dotierung) auf etwa 0 K ab einer Dotierung von $x \approx 0.7$ (siehe Abbildung 3.2G) und bleibt bis $x = 1$ konstant bei 0 K. Anders als auf der elektronendotierten Seite bei $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ kann dieses Verhalten nicht mit einem QCP erklärt werden. Dies zeigt sich im Verlauf von T^{nem} , die zwar mit zunehmender Dotierung abnimmt, sich jedoch bei 0 K stabilisiert und nicht negativ wird. Auch zeigt die supraleitende Sprungtemperatur T_c keine Korrelation mit der Amplitude der Suszeptibilität [120]. Darüber hinaus zeigen Dreipunkt-Biegeexperimente in diesem Dotierungsbereich keine Anomalien [11]. All diese Tatsachen sind mit dem gut verstandenen QCP auf der elektronendotierten Seite unvereinbar [121].

Zur Erklärung dieses verstärkten Elastowiderstands in stark lochdotiertem $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ nahe $x \approx 0.8$ schlagen Hong et al. [120] ein konventionelles Modell vor, das ohne die Annahme eines QCP auskommt. Stattdessen basiert die Erklärung auf dem sogenannten „Small Pocket Effect“, also der erhöhten elektronischen Empfindlichkeit gegenüber Gitterverzerrun-

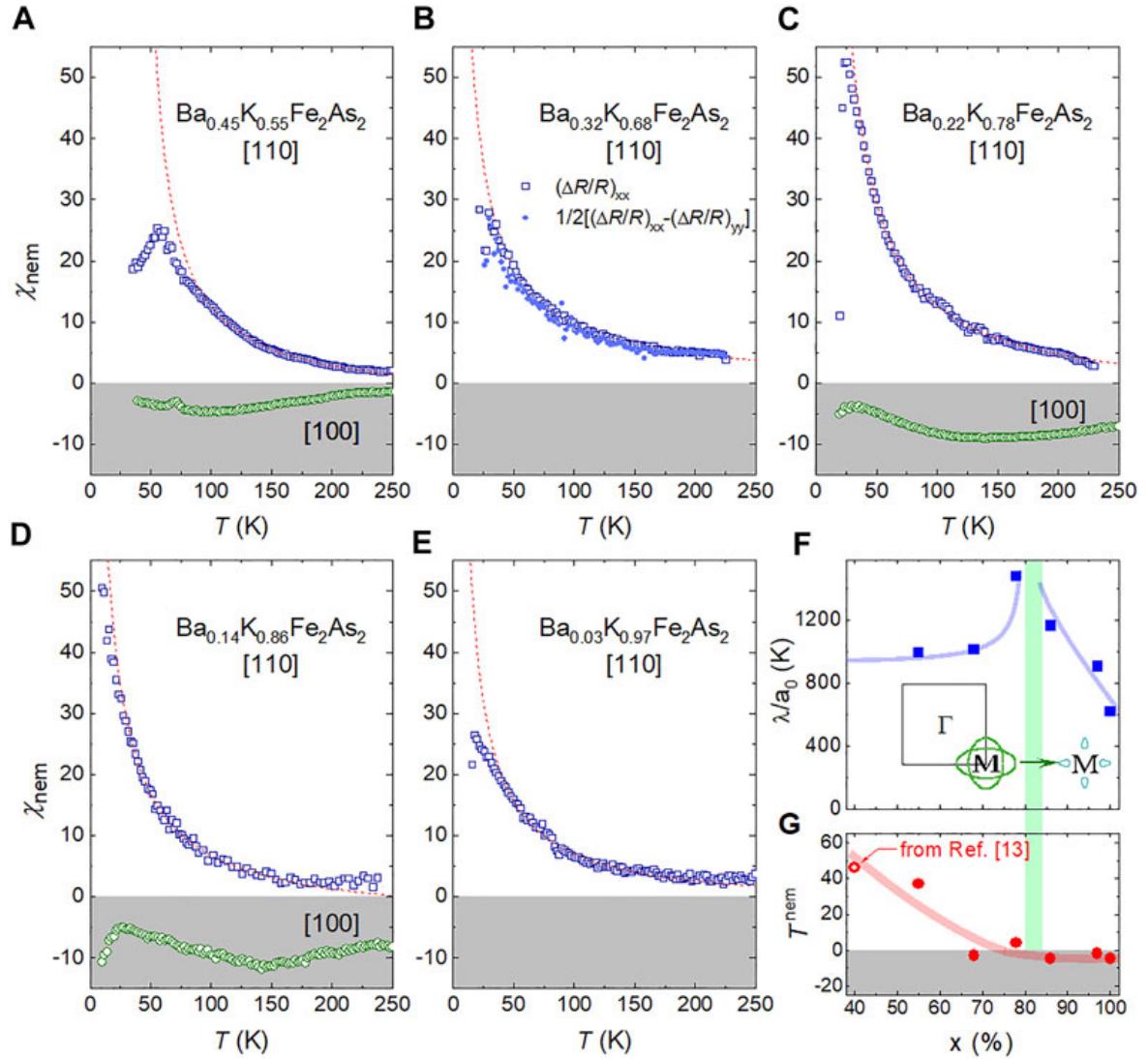


Abbildung 3.2.: A)-E) Elastowiderstand in Abhängigkeit der Dotierung von $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ im Bereich $x = 0.55 - 0.97$ gemessen entlang der [110]-Richtung. Die rot gestrichelten Linien zeigen eine Curie-Weiss-Anpassung. F) Entwicklung des Anpassungsparameters λ/a_0 der Curie-Weiss-Anpassung in Abhängigkeit der Dotierung, welcher bei $x \approx 0.8$ ein Maximum bildet. G) Anpassungsparameter T^{nem} der Curie-Weiss-Anpassung in Abhängigkeit der Dotierung, welcher bis $x = 0.7$ monoton abnimmt und anschließend bei 0 K liegt. Die dicken Linien dienen als Orientierungshilfen. Der grüne Bereich in den Abbildungen F) und G) gibt die Lage des Lifshitz-Übergangs an. Entnommen aus Ref. [120].

gen in der Nähe eines Lifshitz-Übergangs. Zur Untersuchung dieses Zusammenhangs zwischen einem Lifshitz-Übergang und dem Elastowiderstand wurde ein minimaler Zwei-Orbital-Modellansatz für eisenbasierte Supraleiter verwendet. Das Modell beschreibt die elektronische Struktur mit zwei effektiven Orbitalen und berücksichtigt eine Fermi-Oberfläche, die nahe eines Lifshitz-Übergangs sehr klein wird [120]. Die nematische Kopplung wurde im Modell auf einen kleinen Wert gesetzt, sodass sie lediglich zur Erzeugung einer temperaturabhängigen Suszeptibilität nach dem Curie-Weiss-Gesetz dient. Zusätzlich wurde eine kleine Gitterverzerrung in x -Richtung eingeführt, um den Effekt externer Dehnung auf das Elektronensystem zu simulieren.

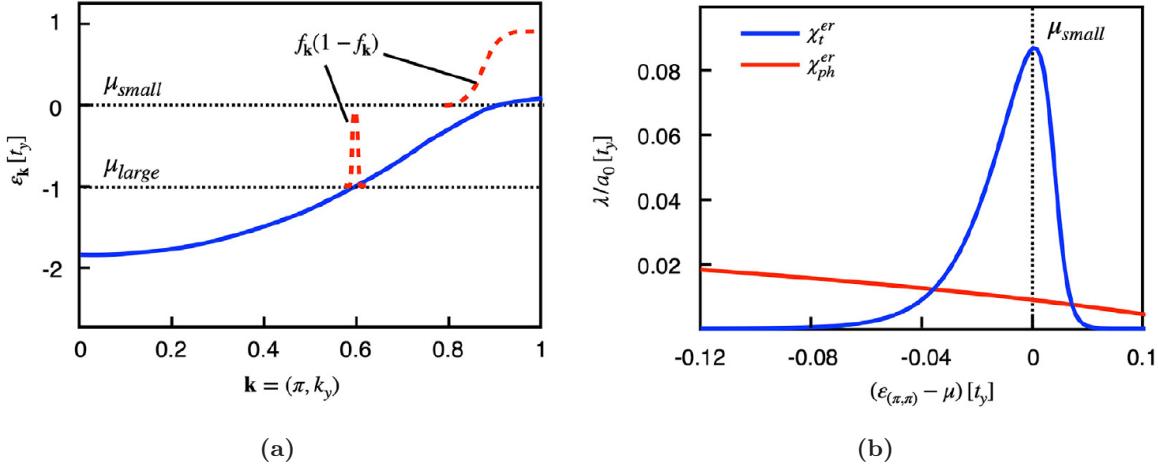


Abbildung 3.3.: a) Dispersionsrelation eines lochartigen Bandes mit einer sehr kleinen Fermi-Tasche bei dem chemischen Potenzial μ_{small} (obere gestrichelte Linie) nahe eines Lifshitz-Übergangs. Der durch die Fermi-Funktion bestimmte Bereich der Impulsvektoren, der zum Elastowiderstand beiträgt, ist durch gestrichelte Linien (rot) angedeutet. Eine deutlich größere Fermi-Tasche ergibt sich bei einem tieferen chemischen Potential μ_{large} (untere gestrichelte Linie). **b)** Berechnete Beiträge zum Elastowiderstand. In der Nähe des Lifshitz-Übergangs (μ_{small}) dominiert der Beitrag χ_t^{er} gegenüber dem Beitrag χ_{ph}^{er} , welcher jedoch für Werte von μ fern des Lifshitz-Übergangs die Hauptkomponente darstellt. Entnommen aus Ref. [120].

Basierend auf diesem Modell wurden zwei Mechanismen berücksichtigt, wie die Gitterverzerrung mit den Elektronen koppeln kann und damit einen Beitrag zum Elastowiderstand liefert. Der erste Mechanismus ist die konventionelle Kopplung an die lokale Elektronendichte (Elektronen-Phononen-Kopplung), dessen Suszeptibilität mit χ_{ph} bezeichnet wird und sich durch folgende Formel beschreiben lässt [120]:

$$\chi_{ph} \propto \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{g}{\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \right)^2 \cdot \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (3.22)$$

Dabei ist $f_{\mathbf{k}}$ die Fermi-Verteilungsfunktion bei Wellenvektor \mathbf{k} , $\epsilon_{\mathbf{k}}$ die Elektronendispersion, welche in Abbildung 3.3a gezeigt ist, ω die Phononenenergie, g die Kopplungskonstante zwischen Gitterverzerrung und Elektronendichte und N die Anzahl der Gitterpunkte. Die dem zweiten Mechanismus zugeordnete Suszeptibilität wird mit χ_t bezeichnet und beschreibt eine direkte Kopplung der Gitterverzerrung an das Hüpfmatrixelement t_x in x -Richtung. Dieser wird durch

$$\chi_t \propto g \cdot \lim_{\Delta t_x \rightarrow 0} \frac{\sigma_{xx}^{-1}(t_x + \Delta t_x) - \sigma_{yy}^{-1}(t_x + \Delta t_x)}{\Delta t_x} \quad (3.23)$$

bestimmt, wobei Δt_x eine kleine Variation des Hüpfmatrixelements und σ_{xx} und σ_{yy} die elektrische Leitfähigkeit in x - bzw. y -Richtung ist.

Abbildung 3.3b zeigt die Anteile von χ_{ph} und χ_t als Funktion des chemischen Potentials μ , um verschiedene Dotierungsgrade zu simulieren. Um die Ergebnisse mit den Messungen in

Abbildung 3.2 vergleichen zu können, wurde aus den Werten für χ_{ph} und χ_t jeweils λ/a_0 in Energieeinheiten von t_y bestimmt. Die Summe aus χ_t und χ_{ph} zeigt dabei einen ähnlichen Verlauf wie die experimentell bestimmten Daten in Abbildung 3.2F. Der Anstieg resultiert demnach aus einer Dominanz von χ_t in einem Bereich des chemischen Potenzials in dem die Fermi-Oberfläche besonders klein ist. Für andere Dotierungen hingegen dominiert der χ_{ph} -Anteil, wobei die Intensität deutlich geringer ist. Die Verstärkung von χ_t bei kleinen Fermi-Oberflächen wird dadurch erklärt, dass in diesem Fall niederenergetische Anregungen in einem breiteren Impulsbereich existieren. Da die elektrischen Leitfähigkeiten im Modell proportional zu $f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}})$ gewichtet sind, gilt:

$$\sigma_{ii} \propto \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_i} \right)^2 f_{\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{k}}). \quad (3.24)$$

Bei tiefen Temperaturen und kleinen Fermi-Oberflächen ist der Impulsbereich, in dem $f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}})$ ungleich null ist, deutlich größer (siehe Abbildung 3.3a rote gestrichelte Linie), was zu einer verstärkten Antwort im Elastowiderstand führt.

3.2. Untersuchung von Korrelationseffekten

Wiecki et al. [122, 123] zeigten, dass sich Elastowiderstandsdaten deutlich tiefergehend analysieren lassen als bisher dargestellt. Auf diese Weise ist es möglich, nicht nur nematische Fluktuationen, sondern auch elektronische Korrelationen mithilfe von Elastowiderstandsmessungen zu untersuchen. In $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$, das in der tetragonalen Phase zur Punktgruppe D_{4h} gehört, lassen sich äußere Störungen, insbesondere Dehnungen, nach ihrer Symmetrie in irreduzible Darstellungen dieser Punktgruppe einteilen. Für Elastowiderstandsmessungen sind insbesondere die Symmetriekanäle A_{1g} , B_{2g} und B_{1g} von Bedeutung, da sie unterschiedliche Arten von Dehnungen und deren Kopplung an elektronische Freiheitsgrade beschreiben.

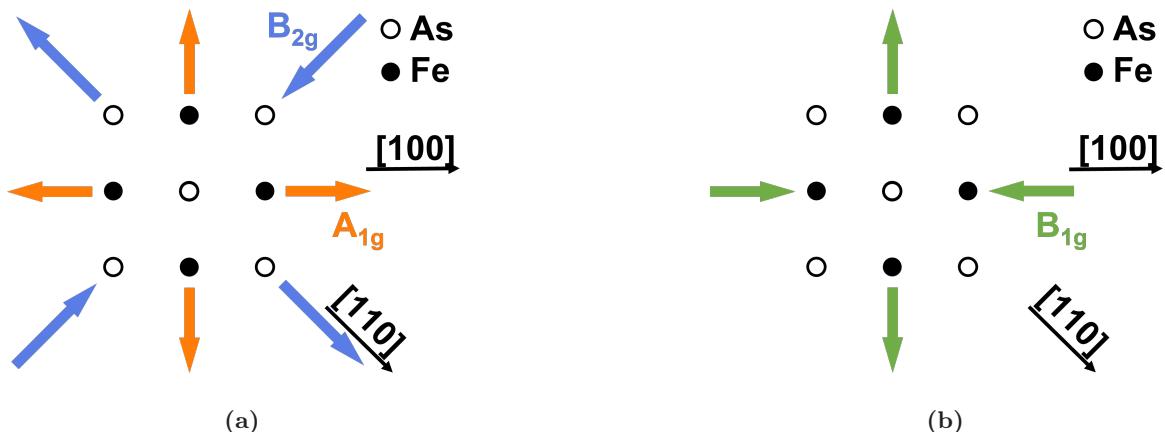


Abbildung 3.4.: Skizze der Wirkung der Dehnung in den verschiedenen Symmetriekanälen A_{1g} , B_{2g} (a) und B_{1g} (b).

Der B_{2g} -Kanal beschreibt eine Dehnung und Stauchung entlang der kristallographischen x - und y -Achsen, die eine Symmetriebrechung zwischen diesen Richtungen hervorruft. In der zweiatomigen Basis entspricht dies den $[110]$ - und $[1\bar{1}0]$ -Richtungen (siehe Abbildung 3.4a). Diese Form der Deformation steht in direktem Zusammenhang mit der elektronisch-nematischen Ordnung in Eisenpniktiden, da die Symmetrie der Kristallstruktur genau in derselben Richtung reduziert wird. Daher ist der B_{2g} -Kanal besonders sensitiv gegenüber nematischen Fluktuationen und erlaubt über die elastische Kopplung eine direkte Bestimmung der elektronisch-nematischen Suszeptibilität, wie im vorangegangenen Abschnitt gezeigt wurde.

Der B_{1g} -Kanal beschreibt eine Scherdeformation, bei der das Kristallgitter in [100]-Richtung gestaucht und in [010]-Richtung gedehnt wird (siehe Abbildung 3.4b). Diese Art der Dehnung führt zu einer Anisotropie zwischen den diagonalen Achsen, ist jedoch orthogonal zur Symmetrie der nematischen Ordnung in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$. Entsprechend zeigt das System in diesem Kanal keine ausgeprägte Antwort und der Widerstand reagiert nur sehr schwach auf Dehnungen dieser Symmetrie. In Abbildung 3.5 ist der longitudinale und transversale Elastowiderstand von $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ für Dehnungen parallel zur [100]-Richtung (Abbildung 3.5a) und parallel zur [110]-Richtung (Abbildung 3.5b) gezeigt. Die Bezeichnungen longitudinal und transversal beziehen sich dabei auf die Orientierung der Vier-Punkt-Widerstandsmessung relativ zur angelegten Dehnung, d. h. ob Stromrichtung und elektrische Feldkomponente parallel (longitudinal) oder senkrecht (transversal) zur Dehnungssachse verlaufen. Dabei zeigt sich nur für die Elastowiderstandsmessungen entlang der [110]-Richtung ein divergenter Elastowiderstand.

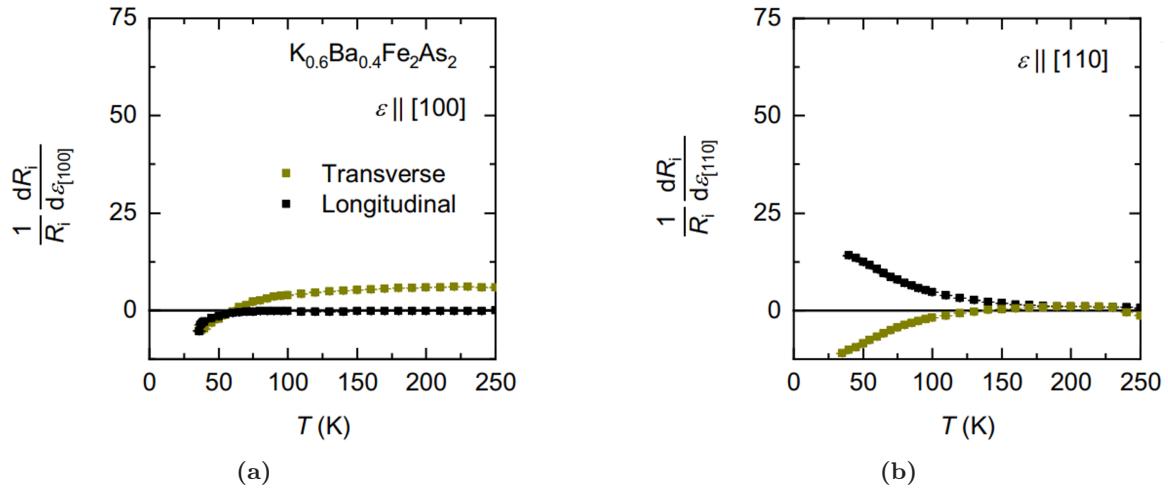


Abbildung 3.5.: Longitudinaler und transversaler Elastowiderstand von $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ für Dehnungen parallel zur [100]-Richtung (a) und [110]-Richtung (b). Entnommen aus Ref. [123].

Der A_{1g} -Kanal beschreibt eine vollsymmetrische, isotrope Dehnung innerhalb der Kristallebene, bei der die Einheitszelle gleichmäßig in den [100]- und [010]-Richtungen expandiert oder kontrahiert wird, ohne dabei die tetragonale Symmetrie zu brechen (vgl. Abbildung 3.4a). Diese Dehnungsform verändert die Fe-Fe- und Fe-As-Abstände, welche entscheidend die elektronischen Eigenschaften bestimmen. Dabei wirkt sie jedoch nicht auf die anisotrope Freiheitsgrade und koppelt daher nur schwach an die elektronische Nematik. Die A_{1g} -Dehnung kann die elektronischen Korrelationen im System stark beeinflussen, da sie über die Veränderung der Gitterabstände direkt die Bandstruktur modifiziert. Die Bandbreite W der Fe-3d-Bänder, welche sich im Rahmen des Tight-Binding-Modells aus der elektronischen Hüpfamplitude t zwischen benachbarten Eisenatomen ergibt, hängt maßgeblich von der räumlichen Überlappung der 3d-Orbitale ab. Sie skaliert mit der Koordinationszahl z gemäß $W \sim z \cdot t$. Eine Zugdehnung im A_{1g} -Kanal vergrößert die Gitterkonstante, reduziert dadurch die Orbitalüberlappung und verringert die Hüpfamplitude t , was zu einer schmaleren Bandbreite führt. Umgekehrt erhöht eine Kompression die Überlappung, steigert t und verbreitert das entsprechende Band. Da bei konstanter Coulomb-Wechselwirkung U eine Verkleinerung der Bandbreite das Verhältnis U/t erhöht, treten elektronische Korrelationen verstärkt in den Vordergrund. Der A_{1g} -Kanal bietet somit eine gezielte Möglichkeit, die Stärke elektronischer Korrelationen im System zu modulieren und ihre Auswirkungen auf Transporteigenschaften experimentell zugänglich zu machen.

Eine uniaxiale Dehnung entlang der [110]-Richtung besitzt in ihrer Symmetrieeanteilszerlegung Beiträge aus dem A_{1g} - und dem B_{2g} -Kanal. Entsprechend setzt sich der gemessene Elastowi-

derstand aus Komponenten beider Symmetriekanäle zusammen. Analog enthält eine uniaxiale Dehnung entlang der [100]-Richtung Beiträge aus dem A_{1g} - und dem B_{1g} -Kanal. Da die real angelegte Dehnung keine reine Symmetriekomponente anregt, sondern eine Linearkombination mehrerer Kanäle darstellt, lässt sich aus den gemessenen Elastowiderstandsantworten durch geeignete Kombination und Symmetrieanalyse der jeweilige Anteil der einzelnen Kanäle rekonstruieren. Die folgenden Relationen ermöglichen eine getrennte Extraktion der zugehörigen Elastowiderstandsbeiträge aus den Kanälen A_{1g} , B_{1g} und B_{2g} [122]. Mit m_i ($i = A_{1g}$, B_{1g} und B_{2g}) wird das Elastowiderstandssignal des entsprechenden Kanals bezeichnet:

$$m_{A_{1g}} = \frac{1}{1 - \nu_p} \left[\frac{d(\Delta R/R_0)_{[100]}}{d\epsilon_{[100]}} + \frac{d(\Delta R/R_0)_{[100]}}{d\epsilon_{[010]}} \right] \quad (3.25)$$

$$= \frac{1}{1 - \nu_p} \left[\frac{d(\Delta R/R_0)_{[110]}}{d\epsilon_{[110]}} + \frac{d(\Delta R/R_0)_{[\bar{1}10]}}{d\epsilon_{[110]}} \right], \quad (3.26)$$

$$m_{B_{1g}} = \frac{1}{1 - \nu_p} \left[\frac{d(\Delta R/R_0)_{[100]}}{d\epsilon_{[100]}} - \frac{d(\Delta R/R_0)_{[100]}}{d\epsilon_{[010]}} \right], \quad (3.27)$$

$$m_{B_{2g}} = \frac{1}{1 - \nu_p} \left[\frac{d(\Delta R/R_0)_{[110]}}{d\epsilon_{[110]}} - \frac{d(\Delta R/R_0)_{[\bar{1}10]}}{d\epsilon_{[110]}} \right]. \quad (3.28)$$

Dabei bezeichnet ν_p die Poisson-Zahl des Piezoaktuators. Sie beschreibt das Verhältnis zwischen der Dehnung in Längsrichtung (entlang der Dehnungssachse) und der dadurch induzierten Stauchung in Querrichtung. Wird der Piezoaktuator z. B. entlang der x -Achse gedehnt, zieht er sich aufgrund der elastischen Kopplung gleichzeitig in y -Richtung zusammen. Die Poisson-Zahl verknüpft diese beiden orthogonalen Dehnungen gemäß $\nu_p = -\epsilon_{yy}/\epsilon_{xx}$. Für die Zerlegung des Elastowiderstandes in die unterschiedlichen Kanäle ist es deshalb zwingend notwendig, den Widerstand sowohl longitudinal als auch transversal zur Dehnungsrichtung zu messen. Abbildung 3.6 zeigt die Zerlegung von Elastowiderstandsmessungen an $\text{Ba}_{0.4}\text{K}_{0.6}\text{Fe}_2\text{As}_2$ sowie an den voll substituierten Verbindungen AFe_2As_2 mit $\text{A} = \text{Cs}, \text{Rb}$ oder K . Für letztere zeigt sich ein stark divergentes Signal im A_{1g} -Kanal, eine schwache Divergenz im B_{2g} -Kanal und kaum eine Veränderung im B_{1g} -Kanal.

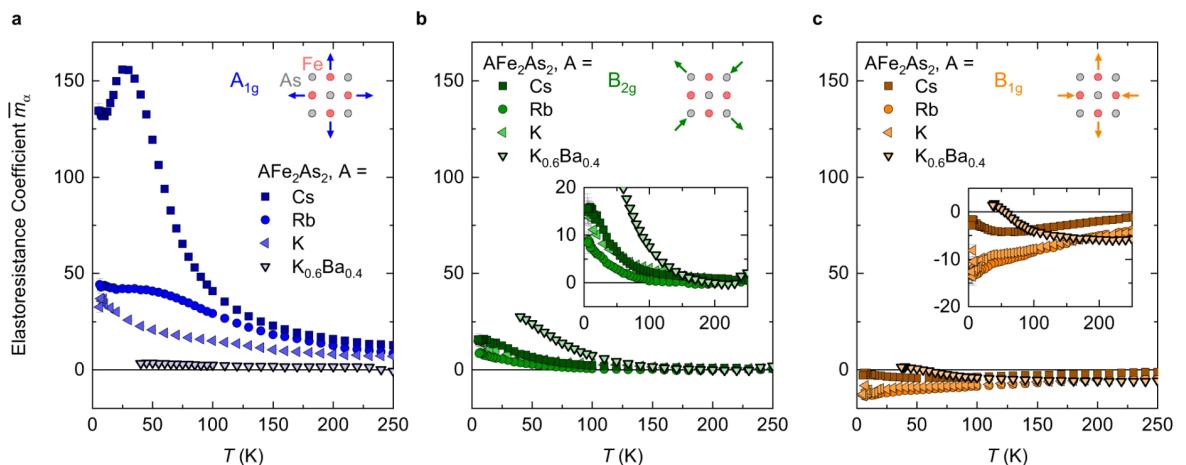


Abbildung 3.6.: Separierter Elastowiderstand im A_{1g} - (a), B_{2g} - (b) und B_{1g} -Kanal (c) für $\text{Ba}_{0.4}\text{K}_{0.6}\text{Fe}_2\text{As}_2$ und AFe_2As_2 ($\text{A} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$). Entnommen aus Ref. [123].

Zum besseren Vergleich der Amplituden sind in Abbildung 3.6 die Amplituden der verschiedenen Symmetriekanäle der unterschiedlichen Proben bei 40 K aufgetragen. Dabei ist deutlich ein starker Anstieg des Signals im A_{1g} -Kanal zu erkennen, was mit der zunehmenden Dehnungsempfindlichkeit der elektronischen Korrelationen infolge der chemischen Substitution erklärt wird [123]. Bei der chemischen Substitution von KFe_2As_2 über RbFe_2As_2 bis zu CsFe_2As_2

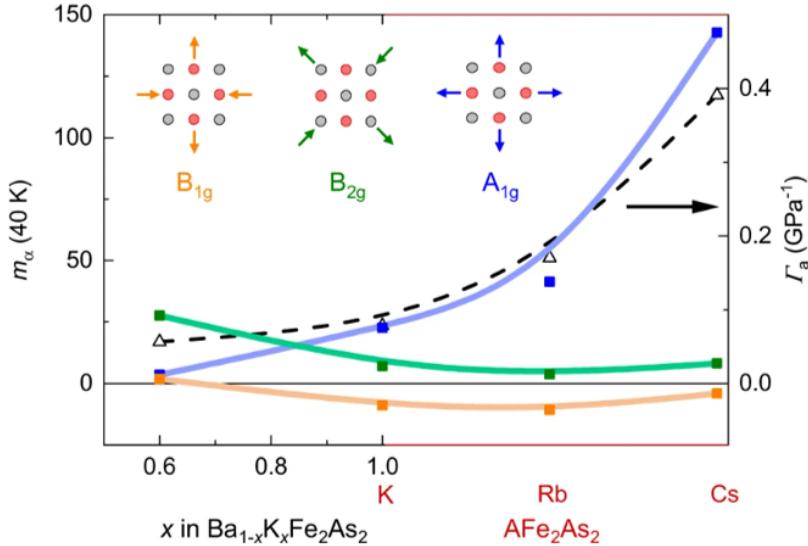


Abbildung 3.7.: Wert der Elastowiderstandskoeffizienten m_α bei 40 K in Abhängigkeit der Dotierung für die drei Symmetriekanäle. Dargestellt sind Daten der lochdotierten Serie $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ für $x > 0.6$ sowie der isoelektronischen $3d^{5.5}$ -Serie AFe_2As_2 ($A = K, Rb, Cs$), gemeinsam auf der horizontalen Achse aufgetragen. Entnommen aus Ref. [123].

nimmt die Größe des Alkalimetallatoms kontinuierlich zu. Diese Zunahme der Atomradien führt zu einer effektiven Dehnung des Kristallgitters. Obwohl sich die Elektronenkonfiguration der Fe-As-Schichten durch die Substitution nicht ändert, beeinflusst die strukturelle Modifikation die elektronischen Eigenschaften deutlich. Die Vergrößerung der Gitterabstände reduziert die Hüpfamplitude zwischen den Eisenatomen, was die kinetische Energie der Elektronen verringert. Infolgedessen steigen die elektronischen Korrelationen systematisch an, da das Verhältnis von Wechselwirkungsenergie zur Bandbreite zunimmt.

Die B_{2g} -Mode nimmt mit steigender Lochdotierung und anschließender chemischer Substitution kontinuierlich ab, was als Überbleibsel der nematischen Fluktuationen interpretiert wird, die sich auch in den vollständig substituierten AFe_2As_2 -Verbindungen noch nachweisen lassen [123]. Dahingegen zeigt die B_{1g} -Mode für alle untersuchten Verbindungen nur eine geringe Amplitude, was darauf hinweist, dass das System nicht in der Nähe einer B_{1g} -nematischen Instabilität liegt. Diese Ergebnisse zeigen, wie vielfältig Elastowiderstandsmessungen genutzt werden können, um die elektronischen Eigenschaften von eisenbasierten Supraleitern zu untersuchen.

3.3. Ziel der Messungen

Die bisherigen Elastowiderstandsmessungen zeigen, dass sich mit dieser Methode sowohl der Einfluss nematischer Fluktuationen als auch elektronischer Korrelationen nachweisen lassen. Beide Effekte spielen in $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ eine zentrale Rolle, wobei im leicht dotierten Bereich die nematischen Fluktuationen dominieren und im überdotierten Bereich die elektronischen Korrelationseffekte zunehmend an Bedeutung gewinnen. Letztere wurden insbesondere an den Endgliedern der Dotierungsreihe experimentell nachgewiesen.

Der Übergangsbereich beider Effekte im Dotierungsintervall $0.6 < x < 1$ ist besonders interessant, da hier das Zusammenspiel von nematischen Fluktuationen und Korrelationseffekten untersucht werden kann. Experimentell zeigt sich in diesem Bereich ein Anstieg des A_{1g} -Beitrags im Elastowiderstand, wobei bei $x = 0.6$ noch kein signifikanter Beitrag nachgewiesen wird und dieser bei $x = 1$ deutlich ausgeprägt ist. Der genaue Verlauf dieses Übergangs als Funktion der Dotierung innerhalb dieser großen Dotierungsspanne ist bislang jedoch offen

und stellt eine zentrale Frage für das Verständnis der zugrunde liegenden Korrelationseffekte dar. Die von Hong et al. [120] durchgeführten Elastowiderstandsmessungen zeigen in diesem Bereich einen deutlichen Anstieg des Signals, der mit dem Auftreten eines Lifshitz-Übergangs in Zusammenhang gebracht wurde. Allerdings wurde in dieser Studie keine getrennte Analyse der Beiträge in den A_{1g} - und B_{2g} -Symmetriekanal vorgenommen. Dadurch lässt sich der jeweilige Beitrag von nematischen Fluktuationen und elektronischer Korrelation nicht eindeutig voneinander trennen. Zudem wurden lediglich fünf Proben untersucht, was die Auflösung der Dotierungsabhängigkeit stark einschränkt.

Aus diesem Grund wurde im Rahmen dieser Arbeit Elastowiderstandsmessungen an insgesamt neun $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ -Proben mit Dotierungen im Bereich von $x = 0.63$ bis $x = 0.98$ durchgeführt, welche mit einer KAs-Selbstflussmethode hergestellt wurden [124]. Die Messungen erfolgen entlang der [110]-Kristallrichtung, wodurch eine Separation des Signals in den A_{1g} - und B_{2g} -Kanal möglich ist. Die gleichen Proben wurden ebenfalls für die vorgestellten μSR - und Messungen der spezifischen Wärme verwendet, wodurch gezeigt werden konnte, dass es im Phasendiagramm eine Kuppel mit einem supraleitenden Ordnungsparameter mit gebrochener Zeitumkehrsymmetrie gibt.

3.4. Experimentelle Durchführung

Wie bereits beschrieben, basiert die Elastowiderstandsmessung auf der Untersuchung der Widerstandsänderung einer Probe unter dem Einfluss mechanischer Dehnung in einem weiten Temperaturbereich. In diesem Abschnitt wird der experimentelle Aufbau zur Durchführung dieser Messungen detailliert vorgestellt. Dabei werden zunächst die wesentlichen verwendeten Komponenten wie der Messstab, der Piezoaktuator und die Elektronik erläutert. Anschließend wird auf die Probenpräparation eingegangen und der Ablauf der eigentlichen Messung beschrieben.

3.4.1. Transportstab

Da die Messungen in einem großen Temperaturbereich von Raumtemperatur bis zu möglichst tiefen Temperaturen durchgeführt werden sollen, dient als Experimentierplattform ein Transportmessstab. Durch den Einsatz von flüssigem Helium als Kühlmittel können Temperaturen bis zur Siedetemperatur von Helium bei 4.2 K erreicht werden [125]. In Kombination mit einem Kryostaten, der über eine integrierte Magnetspule verfügt, besteht grundsätzlich auch die Möglichkeit, Messungen in Abhängigkeit eines äußeren Magnetfeldes durchzuführen. Diese Option wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit jedoch nicht genutzt.

In Abbildung 3.8 ist eine schematische Skizze des verwendeten Transportstabs dargestellt. Am Ende des Stabs befindet sich ein Probenhalter, der von einem Innenbecher zum Schutz vor Wärmestrahlung sowie einem Heizbecher umgeben ist. Zusammen mit einem am Probenhalter angebrachten CERNOX-1050-Temperatursensor kann die Probentemperatur über einen Temperaturregler präzise eingestellt werden. Dabei handelt es sich um einen Widerstandstemperatursensor dessen Widerstand einen negativen Temperaturkoeffizienten hat, wodurch eine präzise Temperaturmessung bei tiefen Temperaturen möglich ist [127]. Zur Temperaturmessung und -regelung wird ein Lakeshore 340 Temperature Controller verwendet, der über einen integrierten PID-Regler verfügt. In dieser Kombination kann die Temperatur bei 4 K mit einer Genauigkeit von etwa 0.008 K und bei Raumtemperatur auf etwa 0.1 K genau gemessen werden [128]. Um zu verhindern, dass Bestandteile der Luft wie Wasserdampf oder Stickstoff bei tiefen Temperaturen kondensieren oder ausfrieren, ist der Probenhalter innerhalb eines evakuierten Vakuumrohrs untergebracht. Für die elektrischen Messungen verfügt der Probenhalter über insgesamt 16 Messanschlüsse. Die elektrischen Leitungen dieser Anschlüsse verlaufen durch den Transportstab bis zu dessen oberem Ende, wo sie in Vierergruppen über

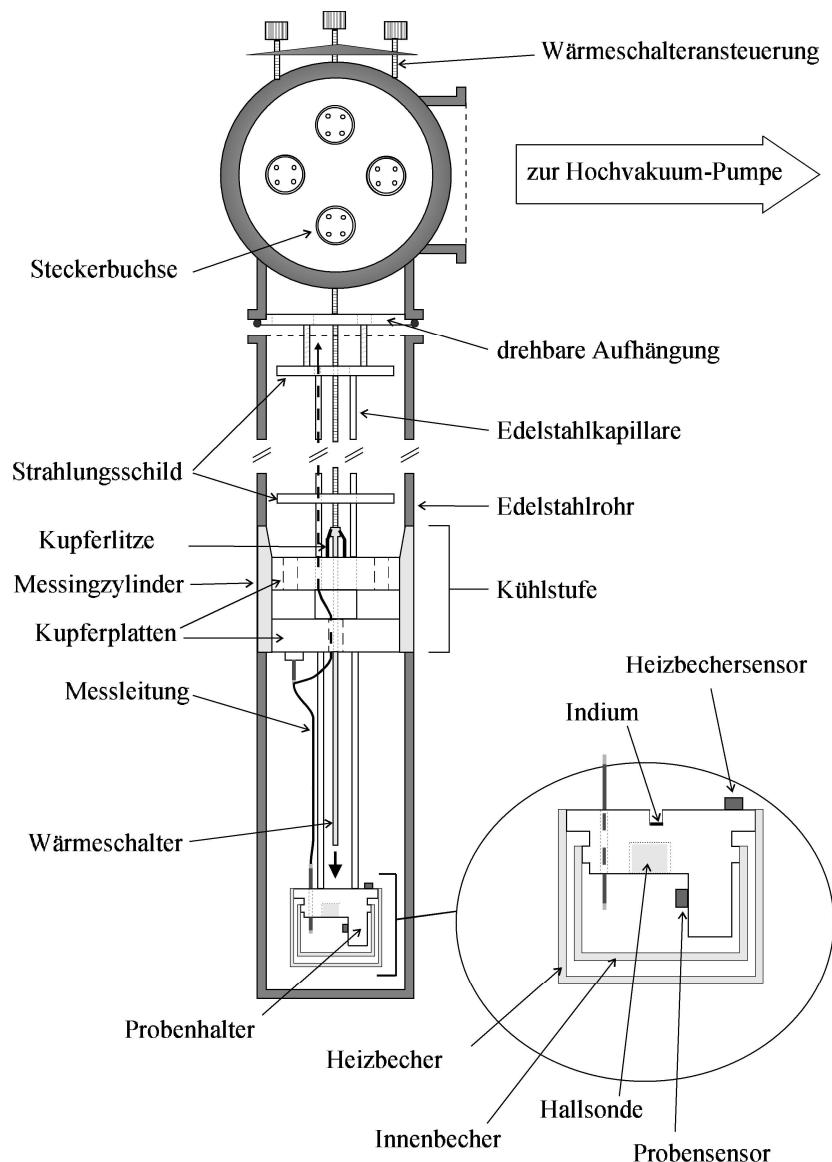


Abbildung 3.8.: Schematische Darstellung des verwendeten Transportstabs. Entnommen aus Ref. [126].

entsprechende Vakuumdurchführungen nach außen geführt werden. An diesen Durchführungen können sie mit den benötigten Messgeräten verbunden werden.

Mit einem Außendurchmesser von 38 mm ist der Transportstab dünn genug, um sowohl in einer Heliumtransportkanne als auch in einem Kryostaten mit flüssigem Heliumbad eingesetzt zu werden. Dadurch können Temperaturen zwischen 4.2 K und 300 K eingestellt und Transportuntersuchungen in Abhängigkeit von der Temperatur durchgeführt werden. Um eine möglichst geringe Probentemperatur zu erreichen, ist ein guter thermischer Kontakt zwischen Probenhalter und Heliumbad erforderlich. Hierzu ist der Probenhalter über eine Kühlstufe mit dem Heliumbad verbunden. Durch diesen thermischen Kontakt wird kontinuierlich Wärme vom Probenhalter abgeführt. Um eine konstante Probentemperatur einstellen zu können, wird der resultierende Wärmeverlust durch den Heizbecher kompensiert, wobei die Temperatur über den Strom durch den Heizbecher geregelt werden kann. Eine ausführliche Beschreibung des Aufbaus und der Funktion des Messstabs ist in Kapitel 4 gegeben. Dabei handelt es sich zwar um einen anderen Messstab, allerdings sind der Aufbau und die wesentlichen Funktionsmechanismen die gleichen.

3.4.2. Piezoaktuator

Die für das Experiment erforderliche Dehnung der Probe wird mithilfe von Piezoaktuatoren erzeugt. Piezoaktuatoren nutzen den piezoelektrischen Effekt, um mechanische Deformationen durch das Anlegen elektrischer Spannung zu erzeugen. Der piezoelektrische Effekt beschreibt die Eigenschaft bestimmter kristalliner Materialien, sich bei Anlegen einer elektrischen Spannung mechanisch zu verformen.

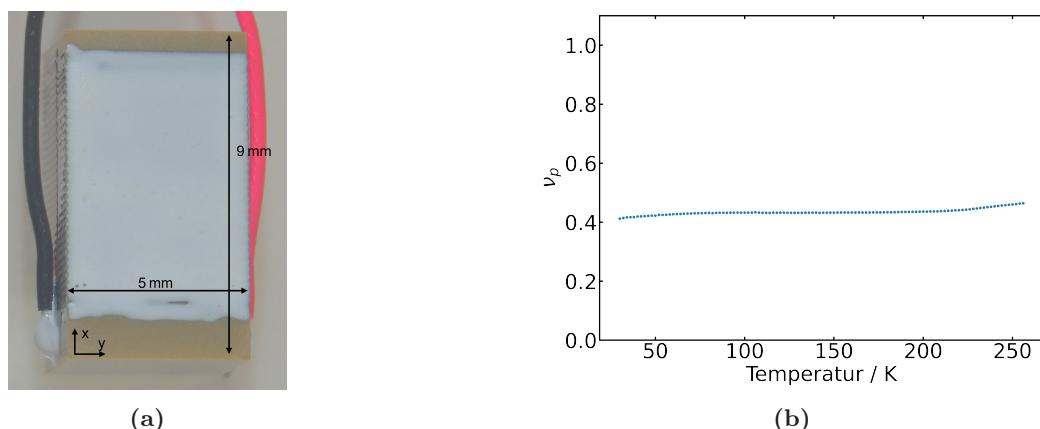


Abbildung 3.9.: a) Verwendeter Piezoaktuator der Firma Piezomechanik GmbH. b) Poisson-Zahl des Piezoaktuators in Abhängigkeit der Temperatur.

Für die in dieser Arbeit durchgeführten Messungen wurden Piezoaktuatoren vom Typ PSt 150/5x5/7 der Firma Piezomechanik GmbH verwendet. Diese Aktuatoren bestehen aus mehreren gesinterten Schichten aus Blei-Zirkonat-Titanat (BZT), zwischen denen mehrere Elektroden eingebettet sind. Durch Anlegen einer elektrischen Spannung (Piezospaltung) an diese Elektroden wird eine mechanische Deformation des Aktuators erzeugt. In Abbildung 3.9a ist ein Foto des verwendeten Piezoaktuators mit den Anschlüssen dargestellt. Dieser besitzt Abmessungen von $5 \text{ mm} \times 5 \text{ mm} \times 7 \text{ mm}$, wobei die Spannung über die angebrachten Kabel angelegt wird. Das Anlegen einer positiven Spannung führt zu einer Längenausdehnung entlang der x -Richtung und gleichzeitig zu einer Verkürzung in den senkrecht dazu verlaufenden Richtungen (y -Richtung). Das Verhältnis zwischen der Querdehnung (ϵ_y) und der Längsdehnung (ϵ_x) wird durch die Poisson-Zahl ν_P beschrieben, definiert als $\nu_P = -\epsilon_y/\epsilon_x$. Zur experimentellen Bestimmung der Poisson-Zahl des verwendeten Piezoaktuators wurden zwei orthogonal zueinander ausgerichtete Dehnungsmessstreifen auf dessen Oberfläche angebracht. Sie erfassen

die Dehnung in den beiden Hauptachsen, wobei der eine entlang der x -Richtung die Längsdehnung ϵ_x und der andere entlang der y -Richtung die Querdehnung ϵ_y misst. Die Funktionsweise der Dehnungsmessstreifen wird im weiteren Verlauf noch detaillierter erläutert. Durch temperaturabhängige Messungen der beiden Dehnungskomponenten kann das Verhältnis ν_P direkt bestimmt werden. Die temperaturabhängige Poisson-Zahl ist in Abbildung 3.9b dargestellt und zeigt lediglich eine geringe Variation mit der Temperatur. Im Experiment wird die Piezospnung mit einem Keithley 2400 SourceMeter eingestellt.

3.4.3. Vierpunktwiderstandsmessung

Der Probenwiderstand wird mit einer Vierpunktwiderstandsmessung gemessen. Dabei wird die zu untersuchende Probe mit vier Kontakten, wie in Abbildung 3.10 gezeigt, kontaktiert. Über die beiden äußeren Kontakte wird ein konstanter und homogener Strom I in der Probe induziert. Über die beiden inneren Kontakte kann der Spannungsabfall U , welcher durch den Probenwiderstand R und den angelegten Strom entsteht, gemessen werden. Dafür müssen die beiden inneren Kontakte möglichst parallel aufgebracht werden. Der Vorteil der Vierpunkt-messung liegt darin, dass durch die hohe Eingangsimpedanz des verwendeten Spannungsmessgeräts kein Strom durch den Spannungsstromkreis fließt und deshalb nur der Widerstand der Probe zwischen den beiden Spannungskontakten gemessen wird. Bei einer alternativen Zweipunktmessung würde zusätzlich zum Probenwiderstand noch der Widerstand der Drähte und Klebstellen gemessen werden.

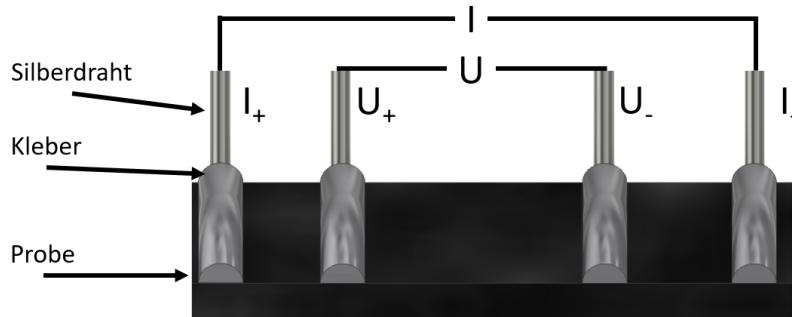


Abbildung 3.10.: Schematische Darstellung einer Vierpunktwiderstandsmessung. Die Probe ist über Silberdrähte und Kontakte aus Silberleitlack kontaktiert. Die äußeren Drähte (I_+ , I_-) dienen der Einspeisung des Stroms, während über die inneren Kontakte (U_+ , U_-) der Spannungsabfall gemessen wird.

Für jeden Messvorgang wird mithilfe der Stromquelle ein Strom I durch die Probe geleitet. Nach einer kurzen Wartezeit von etwa 0.2 s, in der sich der Strom stabilisieren kann, wird die über die Spannungskontakte abfallende Spannung U_+ gemessen. Anschließend wird der Strom $-I$ mit entgegengesetzter Polarität angelegt und analog die Spannung U_- gemessen. Dies ist wichtig, um intrinsische elektrische Spannungen in der Messapparatur, die beispielsweise aufgrund nicht verschwindender thermischer Gradienten entstehen können, herauszurechnen. Durch Mittelung der beiden Einzelmessungen ergibt sich der Messwert der Spannung U :

$$U = \frac{|U_+| + |U_-|}{2} . \quad (3.29)$$

Vor und nach der Widerstandsmessung wird ebenfalls die Temperatur gemessen und gemittelt. Dadurch kann aus den Werten I , U und T der Widerstand in Abhängigkeit von der Temperatur mithilfe des Ohmschen Gesetzes berechnet werden [5]:

$$R(T) = \frac{U}{I} . \quad (3.30)$$

Im Experiment wird als Stromquelle ein Keithley 2400 SourceMeter verwendet und die abfallende Spannung mit einem Keithley 2182 Nanovoltmeter gemessen. Durch die hohe Präzision der Geräte ergeben sich sehr kleine Messunsicherheiten. Die Messunsicherheit der Stromquelle liegt bei $\Delta I/I = 0.034\%$ [129]. Die Messunsicherheit des Voltmeters liegt bei $\Delta U/U = 0.01\%$ [130].

3.4.4. Probenpräparation

Im ersten Schritt der Probenpräparation muss die Probe orientiert werden, da die Dehnung gezielt entlang der [110]-Richtung erfolgen soll. Die Orientierung der Proben wurde mithilfe der Laue-Diffraktion bestimmt [5]. Bei der Laue-Diffraktion wird die Probe mit polychromatischer Röntgenstrahlung bestrahlt. Dadurch erfüllen zahlreiche Netzebenen des Kristalls die Bragg-Bedingung und es entsteht ein charakteristisches Beugungsbild mit vielen Reflexen.

Ein exemplarisches Beugungsbild ist in Abbildung 3.11a dargestellt. Die aufgenommenen Beugungsbilder können mit dem theoretisch berechneten Beugungsbild verglichen werden, das auf Basis der tetragonalen Kristallstruktur der Proben erstellt wurde. In Abbildung 3.11b ist ein solches theoretisches Beugungsbild gezeigt. Die Symmetriearchsen, die den [110]- bzw. [100]-Richtungen entsprechen, sind in beiden Abbildungen farblich hervorgehoben (blau bzw. rot). Die [100]-Richtung ist dabei insbesondere daran zu erkennen, dass die zugehörigen Reflexe näher am Mittelpunkt des Beugungsbilds liegen als diejenigen der [110]-Richtung.

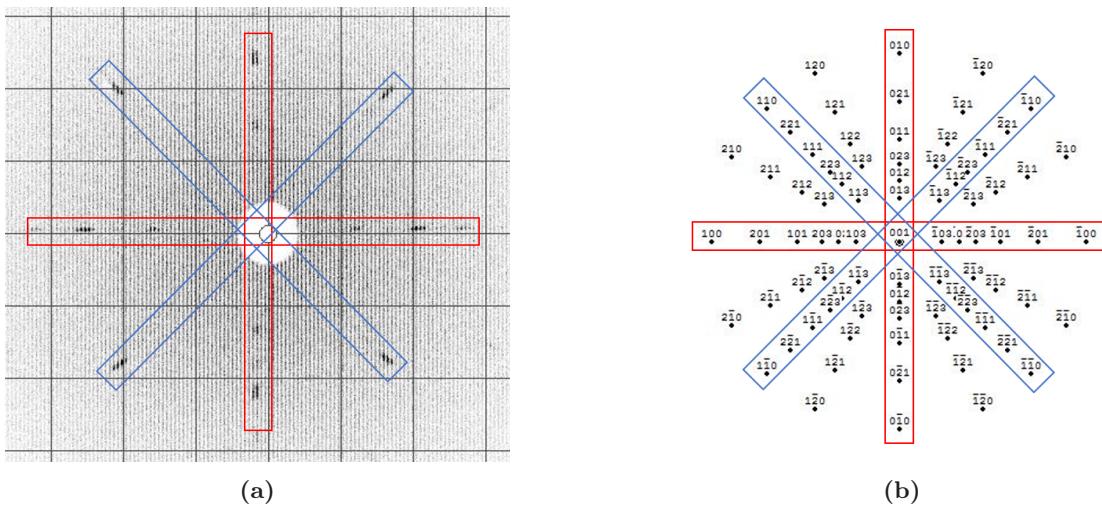


Abbildung 3.11.: a) Aufgenommenes Beugungsbild mit der von Laue-Methode an einer Probe mit bekannter Kristallorientierung. Für den einfacheren Vergleich mit dem berechneten Beugungsbild, sind die Reflexe ebenfalls farblich markiert. b) Theoretisch berechnetes Beugungsmuster mit der von Laue-Methode. Die Reflexe der [100]- und [110]-Richtung sind rot beziehungsweise blau markiert.

Aus der orientierten Probe wird anschließend die finale Probengeometrie mit einer Rasierklinge herausgeschnitten. Eine typische Probengröße beträgt etwa $1.5\text{ mm} \times 0.5\text{ mm}$, sodass ausreichend Platz für das Anbringen der Silberdrähte vorhanden ist. Ein exemplarischer Zuschnitt einer Probe ist in Abbildung 3.12a dargestellt. Je nach ursprünglicher Probendicke wird die zugeschnittene Probe zusätzlich mit einer Rasierklinge gespalten, um die Dicke auf unter $100\text{ }\mu\text{m}$ zu reduzieren. Durch die geringe Probendicke wird zum einen die Übertragung der aufgebrachten Dehnung verbessert, und zum anderen wird eine saubere Probenoberfläche erzeugt [109]. Durch die hohe Reaktionsfreudigkeit von Kalium kann es bei längerem Luftkontakt der Proben zu chemischen Reaktionen an der Probenoberfläche kommen. Aus diesem Grund werden die Proben in einer mit Argon gefüllten Glovebox gelagert und nur für den Präparationsprozess kurzzeitig der Umgebungsluft ausgesetzt. In Abbildung 3.12a ist die Probe vor dem Spalten abgebildet, wobei die Probe eine gräuliche Verfärbung der Oberfläche

zeigt, die durch die Oberflächenreaktion kommen kann. Das in Abbildung 3.12b abgebildete Probenstück ist frisch gespalten und zeigt eine schwarze Oberfläche mit deutlich geringerer gräulicher Verfärbung.

Der Kontaktierungsprozess ist in Abbildung 3.12b dargestellt. Dabei werden 50 μm dicke Silberdrähte mit einer Länge von etwa 20 mm zunächst mit einer geringen Menge Silberleitlack (DuPont 4929N) auf der Probenoberfläche fixiert. In vorherigen Arbeiten, bei denen Elastowiderstandsmessungen mit derselben Methode durchgeführt wurden, zeigte sich, dass der verwendete Silberleitlack der mechanischen Beanspruchung nicht ausreichend standhält, was zu Problemen während der Messungen führen kann [120, 123]. Aus diesem Grund wurden die Kontakte zusätzlich mit dem Silberkleber EPO-TEK H20E umhüllt, um eine mechanisch stabilere Verbindung zwischen Silberdraht und Probenoberfläche herzustellen. Zum Aushärten des Klebers wird die Probe für 20 min auf 120 °C erhitzt. Um Reaktionen zwischen Probe und Umgebungsluft zu vermeiden, erfolgte dieser Schritt in einer mit Argon gefüllten Glovebox. Durch die Verwendung zweier verschiedener Kleber und den Probentransfer zur Glovebox gestaltet sich diese Kontaktierungsvariante relativ aufwändig und birgt Potenzial für Fehlerquellen. Aus diesem Grund wurde für einen Teil der Messungen alternativ Hans Wolbring Leitsilber 200N verwendet. Dieser ist mechanisch ausreichend stabil, um der Beanspruchung während der Dehnungsmessungen standzuhalten, und erfordert kein zusätzliches Aushärten. Ein kleiner Nachteil besteht jedoch darin, dass dieser bereits nach wenigen Sekunden trocknet, sodass die Kontaktierung sehr zügig erfolgen muss.

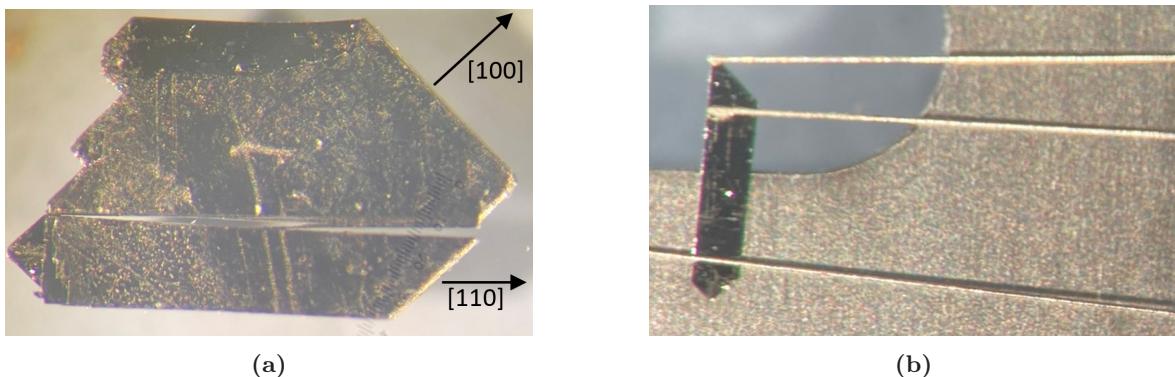


Abbildung 3.12.: a) Zuschnitt der Probe entlang der [110]-Richtung. b) Kontaktierung der Probe mit Silberdrähten für die Vier-Punkt-Widerstandsmessung. Die Probe in a) ist nicht gespalten und die Oberfläche zeigt eine gräuliche Verfärbung. Das in b) gezeigte Probenstück ist frisch gespalten und zeigt eine schwarze Oberfläche.

Die fertig kontaktierte Probe wird mit Devcon 5-Minute Epoxy (No. 14250) auf den Piezoaktuator geklebt. Dabei ist darauf zu achten, dass die Kleberschicht zwischen Probe und Oberfläche so dünn wie möglich bleibt, um die Dehnung bestmöglich auf die Probe zu übertragen. Zudem muss die Probe präzise ausgerichtet werden, damit die Dehnung später entlang der [110]-Richtung erfolgt. In Abbildung 3.13a ist ein Piezoaktuator mit einer aufgeklebten, fertig kontaktierten Probe dargestellt. Um zu verhindern, dass die Silberdrähte beim Einbau in den Messstab von der Probe abgerissen werden, werden diese zusätzlich mit Devcon 5-Minute Epoxy an der Kante des Piezoaktuators fixiert.

3.4.5. Dehnungsmessung

Die von dem Piezoaktuator erzeugte Dehnung wird mithilfe eines Dehnungsmessstreifens gemessen, der ebenfalls mit Devcon 5-Minute Epoxy auf den Piezoaktuator aufgeklebt wird. Da auf der Vorderseite des Piezoaktuators neben der Probe nicht ausreichend Platz für den Dehnungsmessstreifen vorhanden ist, wird dieser auf die Rückseite geklebt (siehe Abbildung 3.13b). Auch hierbei ist darauf zu achten, dass möglichst wenig Kleber verwendet wird

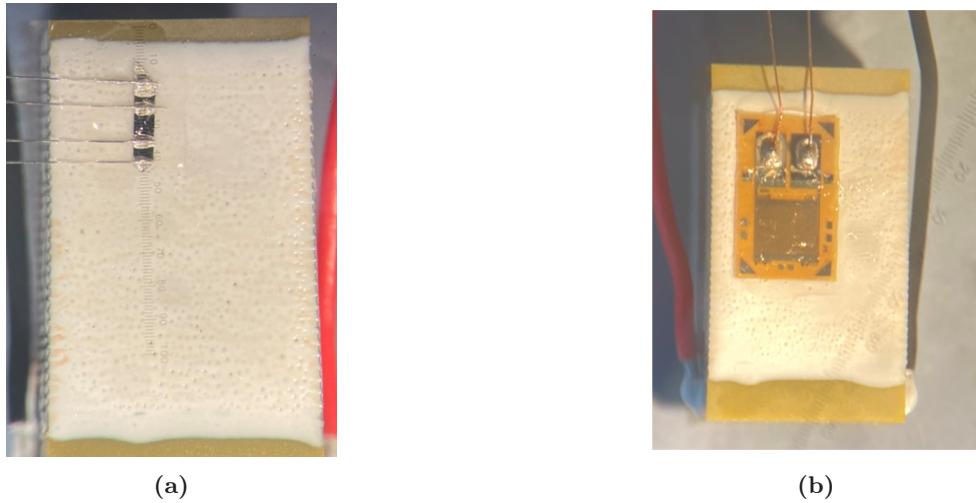


Abbildung 3.13.: a) Fertig kontaktierte Probe, welche auf einen Piezoaktuator aufgeklebt ist. b) Auf den Piezoaktuator geklebter Dehnungsmessstreifen.

und der Dehnungsmessstreifen über seine gesamte Fläche gleichmäßig auf dem Piezoaktuator haftet. Ein Dehnungsmessstreifen besteht im Wesentlichen aus einer metallischen Leiterschleife, die auf einem flexiblen Substrat aufgebracht ist. Wird der Dehnungsmessstreifen gedehnt, verlängert sich die Leiterschleife, was zu einer Erhöhung des elektrischen Widerstands führt. Bei einer Stauchung verkürzt sich die Leiterschleife entsprechend, wodurch der Widerstand abnimmt. Um den Widerstand des Dehnungsmessstreifens messen zu können, werden zwei 50 µm dicke Kupferdrähte an den Anschlussflächen des Dehnungsmessstreifens angelötet. Zur mechanischen Entlastung der Lötstellen werden die Kupferdrähte zusätzlich an der Kante des Piezoaktuators mit Devcon 5-Minute Epoxy fixiert.

Um die relative Widerstandsänderung und damit die erzeugte Dehnung möglichst präzise messen zu können, wird eine Wheatstone-Brückenschaltung eingesetzt, bei der vier baugleiche Dehnungsmessstreifen verwendet werden. Ein exemplarisches Schaltbild der Brückenschaltung ist in Abbildung 3.14 dargestellt. Im Experiment wird ein Dehnungsmessstreifen auf den Piezoaktuator geklebt, auf dem sich auch die Probe befindet. Die drei weiteren Dehnungsmessstreifen werden auf einem zweiten Piezoaktuator angebracht, der als Dehnungsbrücke bezeichnet wird und im Experiment ohne externe Spannung betrieben wird. Über die gemessene Spannung an der Brücke kann diese Widerstandsänderung bestimmt und in die zugehörige Dehnung umgerechnet werden.

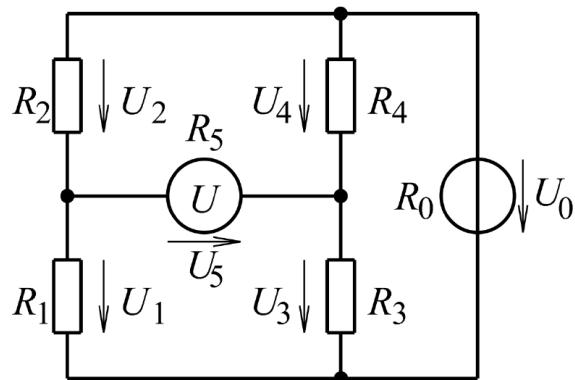


Abbildung 3.14.: Schaltbild einer Wheatstone-Brücke zur Erfassung der Dehnung mittels Dehnungsmessstreifen. Die Spannung U_0 wird angelegt, über die Ausgangsspannung U_5 kann die Widerstandsänderung gemessen und daraus die erzeugte Dehnung berechnet werden.

Die Ausgangsspannung U_5 der Brücke ergibt sich für eine angelegte Versorgungsspannung U_0 zu:

$$U_5 = U_0 \left(\frac{R_1}{R_1 + R_2} - \frac{R_3}{R_3 + R_4} \right), \quad (3.31)$$

wobei R_1 der Widerstand des belasteten Dehnungsmessstreifens ist, während R_2 , R_3 und R_4 die Referenzdehnungsmessstreifen darstellen, die im unbelasteten Zustand ebenfalls den Wert R besitzen. Solange keine Dehnung anliegt, gilt somit $R_1 = R_2 = R_3 = R_4 = R$ und die Brücke ist ausgeglichen ($U_5 = 0$).

Wird der Dehnungsmessstreifen gedehnt, so ändert sich sein Widerstand um ΔR , sodass $R_1 = R + \Delta R$ gilt. Für kleine Änderungen $\Delta R \ll R$ ergibt sich dann näherungsweise:

$$\frac{U_5}{U_0} = \frac{R + \Delta R}{2R + \Delta R} - \frac{1}{2} \approx \frac{1}{4} \cdot \frac{\Delta R}{R}. \quad (3.32)$$

Die relative Widerstandsänderung eines metallischen Leiters ergibt sich aus geometrischen und materialabhängigen Beiträgen. Unter Annahme kleiner Dehnungen gilt:

$$\frac{\Delta R}{R} = k \cdot \epsilon, \quad (3.33)$$

wobei $\epsilon = \Delta L / L$ die relative Längenänderung (Dehnung) ist und k der sogenannte k -Faktor des Dehnungsmessstreifens. Der k -Faktor ist material- und temperaturabhängig und wird vom Hersteller spezifiziert. Für dieses Experiment wurden N5K-06-S5030K-50C/DG/E4-Dehnungsmessstreifen der Firma Micro-Measurements verwendet, welche einen k -Wert von

$$k = 2.10882 - 0.0002205 \cdot T$$

haben, wobei T die Temperatur in Kelvin bezeichnet [131].

Durch Einsetzen von Gleichung 3.33 in Gleichung 3.32 ergibt sich ein direkter Zusammenhang zwischen der gemessenen Spannung und der Dehnung:

$$\frac{U_5}{U_0} = \frac{k}{4} \cdot \epsilon. \quad (3.34)$$

Somit kann aus der gemessenen Brückenspannung U_5 bei gegebener Versorgungsspannung U_0 und bekanntem k -Faktor unmittelbar auf die Dehnung ϵ geschlossen werden. Die Messunsicherheit der Dehnungsmessstreifen beträgt 0.2 %. Im Experiment wird die Spannung U_0 mit einem Keithley 2400 SourceMeter erzeugt und die Spannung U_5 mit einem Keithley 2182 Nanovoltmeter gemessen.

3.4.6. Messablauf

Eine Skizze des fertig präparierten Piezoaktuators ist in Abbildung 3.15a abgebildet. Dieser wird zusammen mit dem als Dehnungsbrücke fungierenden Piezoaktuator auf den Probenhalter des Messstabs geklebt. Ein Foto der beiden Piezoaktuatoren im eingebauten Zustand ist in Abbildung 3.15b dargestellt. Am ersten Anschluss der Messstabs werden die Kabel des Piezoaktuators mit der Probe verbunden, um die Piezospaltung einzustellen zu können. Der zweite Anschluss dient der Kontaktierung der Vier-Punkt-Widerstandsmessung an der Probe. Am dritten Anschluss werden die vier Dehnungsmessstreifen der Wheatstone-Brückenschaltung angelötet. Da die verwendeten Silberdrähte der Probe nicht isoliert sind, muss beim Anschließen besonders darauf geachtet werden, dass sich diese nicht gegenseitig berühren, um Kurzschlüsse und dadurch fehlerhafte Messwerte zu vermeiden.

Nach dem erfolgreichen Einbau der Probe wird das Volumen im Inneren des Transportstabs evakuiert, bis ein Basisdruck von unter $1 \cdot 10^{-5}$ mbar erreicht ist. Da für das Experiment kein Magnetfeld benötigt wird, erfolgen die Messungen in einer mit flüssigem Helium gefüllten



Abbildung 3.15.: a) Skizze des fertig kontaktierten Piezoaktuators mit den wesentlichen Elementen. b) Unteres Ende des Messstabs mit eingebautem Piezoaktuator mit Probe und Dehnungsbrücke.

Transportkanne, in die der Transportstab eingetaucht wird. Die niedrigste erreichbare Temperatur entspricht dabei der Siedetemperatur von Helium, welche bei Normaldruck 4.2 K beträgt. Da der thermische Kontakt zwischen Probe und Heliumbad vom Aufbau des jeweiligen Transportstäbchen abhängt, kann die tatsächlich erreichte Basistemperatur zwischen verschiedenen Transportstäben variieren. Ist die Temperatur zu hoch, kann durch kontrolliertes Einleiten von Heliumgas in das evakuierte Volumen der thermische Kontakt verbessert und somit die Basistemperatur weiter abgesenkt werden. Vor dem Start der Elastowiderstandsmessung wird die Probe auf die Basistemperatur abgekühlt und währenddessen der temperaturabhängige Widerstand gemessen. Dabei wurde darauf geachtet, dass die Basistemperatur kleiner als die supraleitende Sprungtemperatur der Probe ist, da über die Sprungtemperatur die Dotierung der Probe ermittelt wird.

Die Elastowiderstandsmessung verläuft in mehreren Schritten: Zunächst wird die Probentemperatur über einen PID-Regler eingestellt. Dabei wird die Temperatur so lange geregelt, bis die Standardabweichung der Temperatur unter 10 mK liegt. Um sicherzustellen, dass sich die Probe tatsächlich im thermischen Gleichgewicht befindet, wird anschließend eine zusätzliche Wartezeit von 300 s eingehalten, bevor die dehnungsabhängige Widerstandsmessung beginnt. Durch die zusätzliche Wartezeit betrug die maximale Temperaturschwankung während der dehnungsabhängigen Widerstandsmessung lediglich wenige mK, wodurch der Einfluss auf die Messung gering ist. Die maximale Widerstandsänderung bei einer Temperaturänderung um 3 mK beträgt typischerweise etwa 0.001 mΩ. Die Widerstandsänderung durch die Dehnungsvariation beträgt, wie in Abbildung 3.16a gezeigt, etwa 0.03 mΩ und ist damit deutlich größer. Zur Erzeugung der Dehnung wird die Piezospansspannung typischerweise in Schritten von etwa 2 V von 0 V auf +90 V, anschließend auf -30 V und schließlich wieder auf 0 V variiert. Nach jeder Änderung der Piezospansspannung wird die Spannung U_5 gemessen, die über der Wheatstone-Brückenschaltung abfällt. Diese dient zur Bestimmung der aktuellen Dehnung. Als Versorgungsspannung U_0 wird dabei eine Spannung von 0.5 V verwendet.

Parallel dazu wird nach jedem Spannungsschritt der Probenwiderstand bestimmt. Hierbei wird typischerweise ein Strom von 1 mA angelegt. In Abbildung 3.16a sind die gemessene Dehnung (rot) und der Probenwiderstand (blau) als Funktion der angelegten Piezospansspannung bei konstanter Temperatur dargestellt. Die enge Korrelation zwischen den Verläufen der Widerstands- und Dehnungsmessung zeigt, dass die Dehnung zuverlässig auf die Probe übertragen wird.

Zur Bestimmung des Elastowiderstands wird die relative Widerstandsänderung $\Delta R/R_0 = (R_i - R_0)/R_0$ in Abhängigkeit der Dehnung ϵ_x ausgewertet, wobei R_i den Widerstand unter Dehnung und R_0 den Widerstand im spannungsfreien Zustand bezeichnet. Dazu wird die relative Widerstandsänderung gegen die Dehnung aufgetragen, wie in Abbildung 3.16b ex-

emphatisch für verschiedene Probentemperaturen gezeigt ist. In allen Fällen ergibt sich ein linearer Zusammenhang, dessen Steigung dem Elastowiderstand entspricht.

Nach Abschluss eines vollständigen Dehnungszyklus bei gegebener Temperatur, bei dem Dehnung und Probenwiderstand kontinuierlich erfasst werden, wird die Probentemperatur in diskreten Schritten erhöht und die Messung wiederholt. Die Temperatur wurde dabei typischerweise in 2 K-Schritten variiert.

Die Messung wird vollautomatisch über ein LabView-Programm gesteuert, welches die Kommunikation der verschiedenen Messgeräte übernimmt und durch eine graphische Oberfläche die Kontrolle der laufenden Messung ermöglicht.

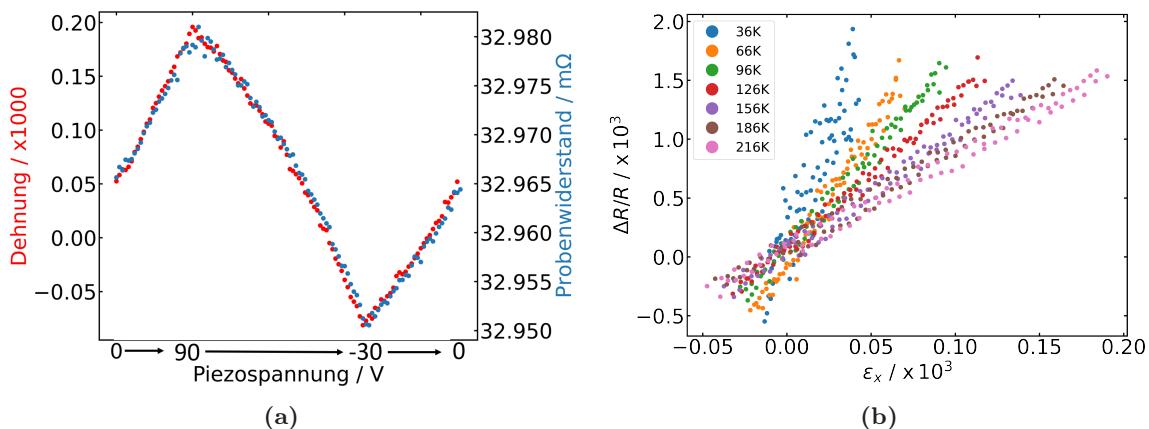


Abbildung 3.16.: a) Probenwiderstand (blau) und über Dehnungsmessstreifen erfasste Dehnung (rot) in Abhängigkeit der angelegten Piezospansnung. Die übereinstimmende Charakteristik beider Größen weist auf einen guten mechanischen Kontakt zwischen Probe, Dehnungsmessstreifen und Piezotransduktoren hin. b) Widerstandsänderung in Abhängigkeit der Dehnung für verschiedene Temperaturen. Alle Kurven zeigen einen linearen Verlauf, wobei die Steigung dem Elastowiderstand entspricht.

3.4.7. Probleme bei der Versuchsdurchführung

Während der Durchführung von Elastowiderstandsmessungen können verschiedene Probleme auftreten, die zu fehlerhaften oder nicht verwertbaren Messdaten führen. Für eine gute Messung ist die Qualität der elektrischen Kontakte sowie deren mechanische Belastbarkeit während der Dehnung entscheidend. Da die Dehnung auf die gesamte Probenstruktur wirkt, müssen die elektrischen Kontakte mechanisch stabil sein. Ein unzureichend haftender Kontakt führt unter mechanischer Belastung zwangsläufig zu fehlerhaften oder verrauschten Messsignalen.

Ein zuverlässiger Indikator für die Qualität der Kontaktierung ist die temperaturabhängige Widerstandsmessung beim ersten Abkühlen der Probe. Im Idealfall zeigt sich dabei ein kontinuierlicher Abfall des elektrischen Widerstands mit abnehmender Temperatur sowie ein scharfer Übergang in den supraleitenden Zustand unterhalb der Sprungtemperatur. Im Gegensatz dazu treten bei mangelhaften Kontakten häufig starke Rauschsignale auf oder einzelne Kontakte lösen sich vollständig von der Probenoberfläche, wodurch eine Widerstandsmessung und damit eine Elastowiderstandsmessung nicht mehr möglich ist.

Ein weiteres Problem, das die erfolgreiche Durchführung von Elastowiderstandsmessungen beeinträchtigen kann, ist die Bildung von Rissen im Inneren der Probe. Diese Risse können sowohl horizontal entlang der Schichtebenen des Kristalls als auch vertikal zwischen den elektrischen Kontakten verlaufen. Ihre Entstehung führt zu einer effektiven Verkleinerung des Querschnitts der Probe, was in einem erhöhten Widerstand resultiert. Ein exemplarischer Verlauf einer solchen Messung ist in Abbildung 3.17a dargestellt. In diesem Beispiel treten bei etwa 210 K sowie bei 95 K sprunghafte Anstiege des elektrischen Widerstands auf. Da

der Gesamtverlauf des Widerstands außerhalb dieser Sprungstellen dem einer intakten Probe ähnelt, liegt die Vermutung nahe, dass diese Diskontinuitäten auf das Aufreißen der Probe infolge thermischer Spannungen zurückzuführen sind. Solche Spannungen entstehen durch die thermische Dehnung des Piezoaktors, auf dem die Probe montiert ist. Die Tatsache, dass die Sprünge im Widerstand diskret und nicht kontinuierlich auftreten, deutet darauf hin, dass sich die Risse bei bestimmten Temperaturen abrupt bilden und sich anschließend nicht weiterentwickeln. Wäre dies nicht der Fall, so wäre ein kontinuierlicher Anstieg des Widerstands über einen größeren Temperaturbereich zu erwarten. Ein solcher Verlauf ist exemplarisch in Abbildung 3.17b dargestellt.

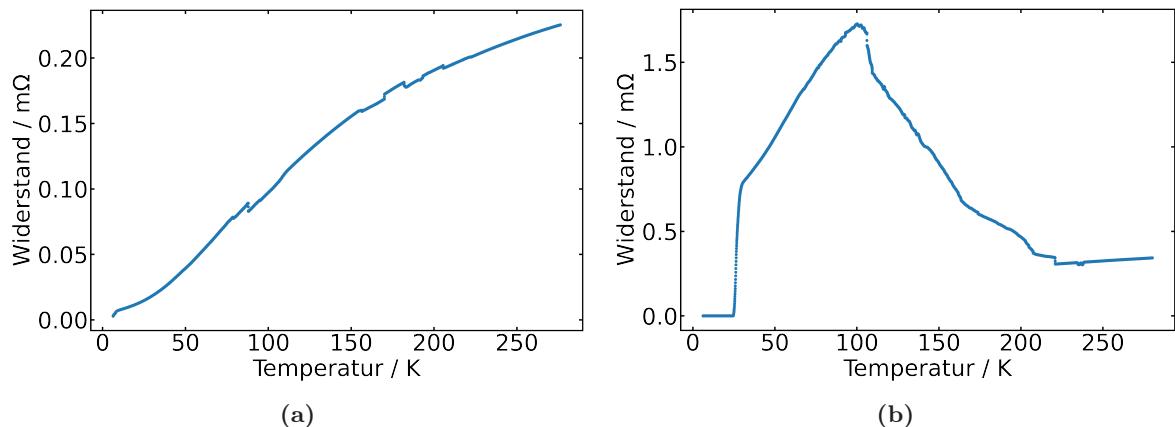


Abbildung 3.17.: a) Temperaturabhängige Widerstandsmessung mit mehrfachen kleinen Sprüngen, welche aus Rissen in der Probe resultieren und zu Problemen während der Elastowiderstandsmessung führen können. b) Temperaturabhängige Widerstandsmessung, bei der der Widerstand über einen großen Temperaturbereich mit abnehmender Temperatur ansteigt, möglicherweise durch einen langsam aufbrechenden Riss. Da sich der Riss nicht über die gesamte Breite ausdehnt, bleibt die supraleitende Sprungtemperatur messbar.

Das Auftreten kleiner Risse beim Abkühlen der Probe muss nicht zwangsläufig die Durchführung einer erfolgreichen Elastowiderstandsmessung verhindern, da bei dieser Methode lediglich die relative Änderung des Widerstands unter Dehnung betrachtet wird. Trotzdem kann dies vorkommen. Abbildung 3.18a zeigt eine beispielhafte Messung der dehnungsabhängigen Widerstandsänderung bei einer konstanten Temperatur bei der eine erfolgreiche Messung des Elastowiderstands nicht möglich ist. Dabei kommt es bei einer Dehnung von etwa $0.2 \cdot 10^{-3}$ zu einem Anstieg der Widerstandsänderung, was sich durch Bildung eines Risses erklären lässt, der mit weiter zunehmender Dehnung jedoch konstant bleibt und sich bei der Reduktion der Dehnung anschließend wieder schließt. Dadurch verschiebt sich das zu erwartende lineare Verhalten zwischen Widerstandsänderung und Dehnung, weshalb die Elastowiderstandsmessung unbrauchbar wird.

Neben der Messung des Probenwiderstands ist auch die Erfassung der mechanischen Dehnung mittels Dehnungsmessstreifen essenziell. Auch hierbei können Störungen auftreten, die die Aussagekraft der Elastowiderstandsmessung erheblich beeinträchtigen. Eine mögliche Fehlerquelle stellen schlechte elektrische Kontakte dar, was durch die Lötstellen der Dehnungsmessstreifen jedoch selten auftritt. Kritischer ist die mechanische Kopplung zwischen Dehnungsmessstreifen und Piezoaktuator. Eine unzureichende Klebeverbindung führt dazu, dass die tatsächlich auftretende Dehnung nicht korrekt erfasst wird, was zur Folge hat, dass der Elastowiderstand nicht korrekt berechnet werden kann.

In Abbildung 3.18b sind exemplarisch zwei Ausgangssignale der Wheatstone-Brücke bei Variation der angelegten Piezospaltung dargestellt. Die Piezospaltung wird in 1 V-Schritten von 0 V auf +90 V erhöht, anschließend auf -30 V reduziert und abschließend wieder auf 0 V zurückgeführt. Bei guter Haftung zwischen Dehnungsmessstreifen und Piezoaktuator ergibt

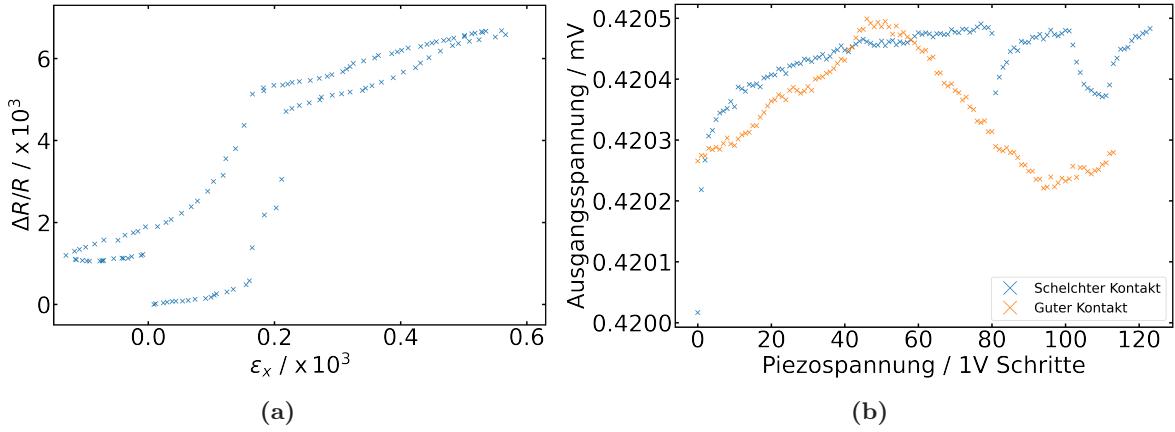


Abbildung 3.18.: a) Widerstandsänderung in Abhängigkeit der Probendehnung bei einer konstanten Temperatur. Der starke Anstieg der Widerstandsänderung bei einer Dehnung von etwa $0.2 \cdot 10^{-3}$ kann durch einen dehnungsinduzierten Riss erklärt werden, der sich bei geringerer Dehnung wieder schließt. b) Ausgangssignal der Dehnungsmessbrücke in Abhängigkeit von der angelegten Piezospansnung. Die orangefarbene Kurve zeigt den charakteristischen Verlauf einer erfolgreichen Messung. Die durch die Piezospansnung induzierte Dehnung führt zu einem symmetrischen, dreiecksförmigen Spannungsverlauf, wie er bei gutem mechanischem Kontakt zwischen Dehnungsmessstreifen und Piezoaktuator zu erwarten ist. Im Gegensatz dazu weist das blaue Signal keine systematische Abhängigkeit von der Piezospansnung auf, was auf eine unzureichende Kopplung zwischen Dehnungsmessstreifen und Piezoaktuator hindeutet. In diesem Fall kann die Dehnung nicht zuverlässig erfasst werden.

sich, wie in den orangefarbenen Datenpunkten dargestellt, ein nahezu dreieckiger Verlauf der Ausgangsspannung. Dieser spiegelt die reversible Zu- und Abnahme der Dehnung infolge der Piezospansnung wieder. Im Gegensatz dazu zeigt das Signal bei unzureichendem mechanischem Kontakt (blaue Punkte) keine systematische Reaktion auf die angelegte Spannung. Da unter diesen Bedingungen die tatsächliche Dehnung der Probe nicht erfasst werden kann, ist eine verlässliche Elastowiderstandsmessung nicht möglich.

Die im Rahmen dieser Arbeit gesammelten Erfahrungen mit Elastowiderstandsmessungen zeigen, dass die Hauptursache für Probleme bei Elastowiderstandsmessungen in der Widerstandsmessung liegt, wobei verrauschte und unbrauchbare Signale nicht zwangsläufig auf die Wahl des verwendeten Silberleitlacks oder Silberklebers zurückzuführen sein müssen, wie es in Ref. [123] und [120] diskutiert wurde. In vielen Fällen liegt die Ursache vielmehr in der Beschaffenheit der Proben selbst. Für eine zuverlässige Übertragung der mechanischen Dehnung ist eine möglichst homogene und defektfreie Probe erforderlich. Jeder strukturelle Defekt oder Einschluss kann als Ausgangspunkt für die Bildung von Mikrorissen dienen, die sich unter Belastung weiter ausbreiten. Da die Probenqualität visuell nur eingeschränkt beurteilbar ist, ist die Auswahl des geeigneten Probenstücks auch zum Teil Zufall. Zudem stellt das Zuschneiden der Proben im Vorbereitungsprozess eine zusätzliche mechanische Belastung dar, bei der bereits erste, mikroskopisch kleine Risse entstehen können. Diese sind in der Regel nicht sichtbar, können sich aber auf die spätere mechanische Probenbelastung der Probe während der Messung auswirken. In mehreren Fällen war es daher notwendig, mehr als vier verschiedene Probenstücke aus einer Probe zu präparieren und zu kontaktieren, bevor eine verwertbare Elastowiderstandsmessung durchgeführt werden konnte.

3.5. Temperaturabhängige Widerstandsmessung

Insgesamt konnte an neun Proben der longitudinale Elastowiderstand erfolgreich gemessen werden. Die Messungen des temperaturabhängigen Widerstands aller Proben sind in Abbildung 3.19a für den gesamten Temperaturbereich dargestellt. Dieser wurde gemessen, um die Dotierung der verschiedenen Proben zu bestimmen. In Abbildung 3.19b ist ein vergrößerter Ausschnitt der Widerstandsmessung bei tiefen Temperaturen gezeigt. Dabei ist gut zu erkennen, dass alle Proben einen supraleitenden Grundzustand aufweisen, da bei allen Proben unterhalb der jeweiligen Sprungtemperatur eine abrupte Abnahme des elektrischen Widerstands erkennbar ist. Mithilfe der in Abbildung 2.10b gezeigten Daten lässt sich über die Sprungtemperatur das Dotierungsniveau zurückrechnen. Dabei ist die Sprungtemperatur als die Temperatur definiert, bei der der Widerstand auf Null abfällt. Exemplarisch ist die ermittelte Sprungtemperatur von Probe 1 in Abbildung 3.20 eingezeichnet. Diese beträgt (22 ± 0.2) K, wodurch sich ein Dotierungsniveau von $x = 0.63 \pm 0.03$ ergibt. Aus dem abgeschätzten Fehler der ermittelten Sprungtemperatur und der durchgeführten Umrechnung wurde der Fehler der Dotierung auf 0.03 abgeschätzt. Da die Sprungtemperatur mit zunehmender Lochdotierung systematisch und monoton abnimmt, erlaubt die Methode eine zuverlässige Aussage über die relative Dotierung der Proben untereinander. Vergrößerte Abbildungen der übrigen temperaturabhängigen Widerstandsmessungen sind in Abschnitt A abgebildet.

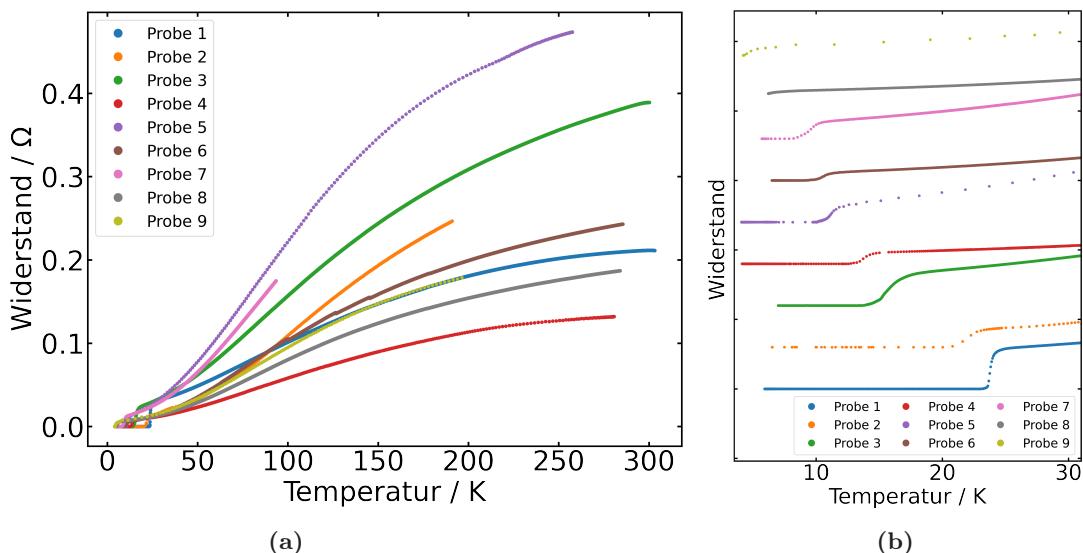


Abbildung 3.19.: a) Temperaturabhängige Widerstandsmessungen der untersuchten Proben. b) Vergrößerter Temperaturbereich derselben Messdaten zur detaillierten Darstellung des Übergangs.

Tabelle 3.1.: Sprungtemperaturen T_c und das resultierende Dotierungsniveaus der gemessenen Proben.

Name	P 1	P 2	P 3	P 4	P 5	P 6	P 7	P 8	P 9
$T_c \pm 0.2 / K$	23	20	14	13	10	9	8	5	4
$x \pm 0.03$	0.63	0.67	0.72	0.74	0.8	0.81	0.85	0.95	0.98

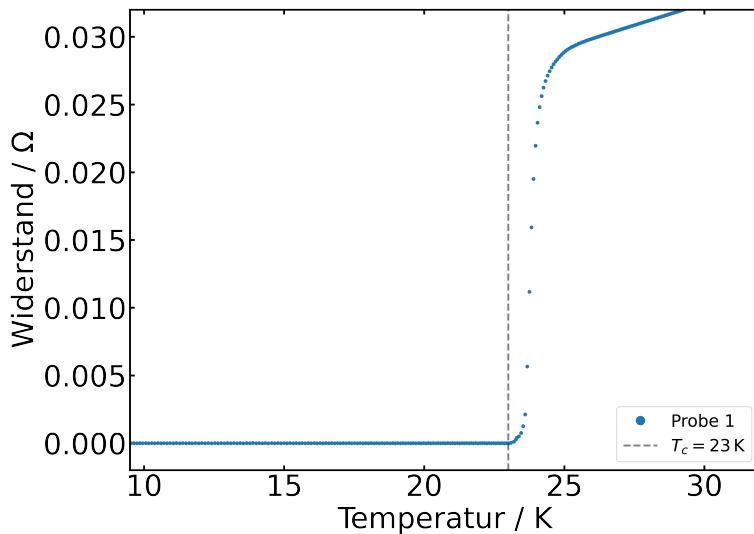


Abbildung 3.20.: Beispielhafte Bestimmung der Sprungtemperatur T_c an Probe 1.

3.6. Elastowiderstandsmessungen von $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$

In Abbildung 3.21 sind in blau alle in dieser Arbeit erfolgreich aufgenommenen longitudinalen Elastowiderstandsmessungen an $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ entlang der [110]-Richtung abgebildet. Die Messungen sind so angeordnet, dass die Lochdotierung von links nach rechts und von oben nach unten ansteigt. Um die verschiedenen Messungen besser miteinander vergleichen zu können, wurde für alle Messungen der gleiche Achsenbereich gewählt.

Der Elastowiderstand zeigt für alle Proben einen stark ansteigenden Verlauf mit sinkender Temperatur. Für tiefe Temperaturen ist bei einigen Messungen eine verstärkte Zunahme des Rauschens zu beobachten. Dies liegt zum einen an dem geringer werdenden Probenwiderstand, wodurch eine präzise Messung schwieriger wird, und zum anderen an der temperaturabhängigen maximalen Dehnung des Piezoaktuators, welche mit abnehmender Temperatur ebenfalls abnimmt. Für alle Proben ist der gemessene Elastowiderstand positiv. Eine Ausnahme davon bildet die Probe mit einer Kaliumkonzentration von $x = 0.85$. Bei dieser Probe ist der Elastowiderstand bei Temperaturen über 120 K negativ und wird infolge der Divergenz positiv. Für eine erste rein qualitative Betrachtung des Anstiegs des Elastowiderstands wird die Amplitude der einzelnen Proben bei einer Temperatur von 40 K verglichen. Dieser Temperaturwert wird gewählt, da es bei manchen Proben, wie z.B. bei einer Dotierungsstufe von $x = 0.74$ unterhalb dieser Temperatur zu einem starken Rauschen kommt, was die Vergleichbarkeit erschwert. Um die Schwankungen der Messungen zu berücksichtigen, wird für den Vergleich jeweils der Mittelwert von vier Messpunkten um 40 K gebildet. Da sich die Probengeometrie auf den Offset des Elastowiderstands auswirkt, dieser jedoch für die zu untersuchenden Probe-Neigenschaften keine Rolle spielt, werden die bestimmten Amplitudenwerte bei 40 K bezüglich des Offsets korrigiert. Dafür wurde der Elastowiderstandswert bei 250 K von diesem Wert abgezogen. In Abbildung 3.22 sind die so ermittelten Amplituden gegen die Dotierungsstufe aufgetragen. Der jeweilige Fehler entspricht der Standardabweichung der vier verwendeten Werte um 40 K pro Probe.

Im Dotierungsbereich von $x = 0.68$ bis $x = 0.8$ ist ein deutlicher Anstieg der Amplitude von etwa 12 auf 30 zu beobachten, gefolgt von einer Abnahme bis $x = 0.98$ auf etwa 8. Dies zeigt, dass es auch in dieser Probenserie in Folge der starken Lochdotierung zu einer Zunahme des longitudinalen Elastowiderstand kommt [120].

Wie in Abschnitt 3.1 beschrieben, kann der divergente Verlauf des Elastowiderstands \tilde{n} mit

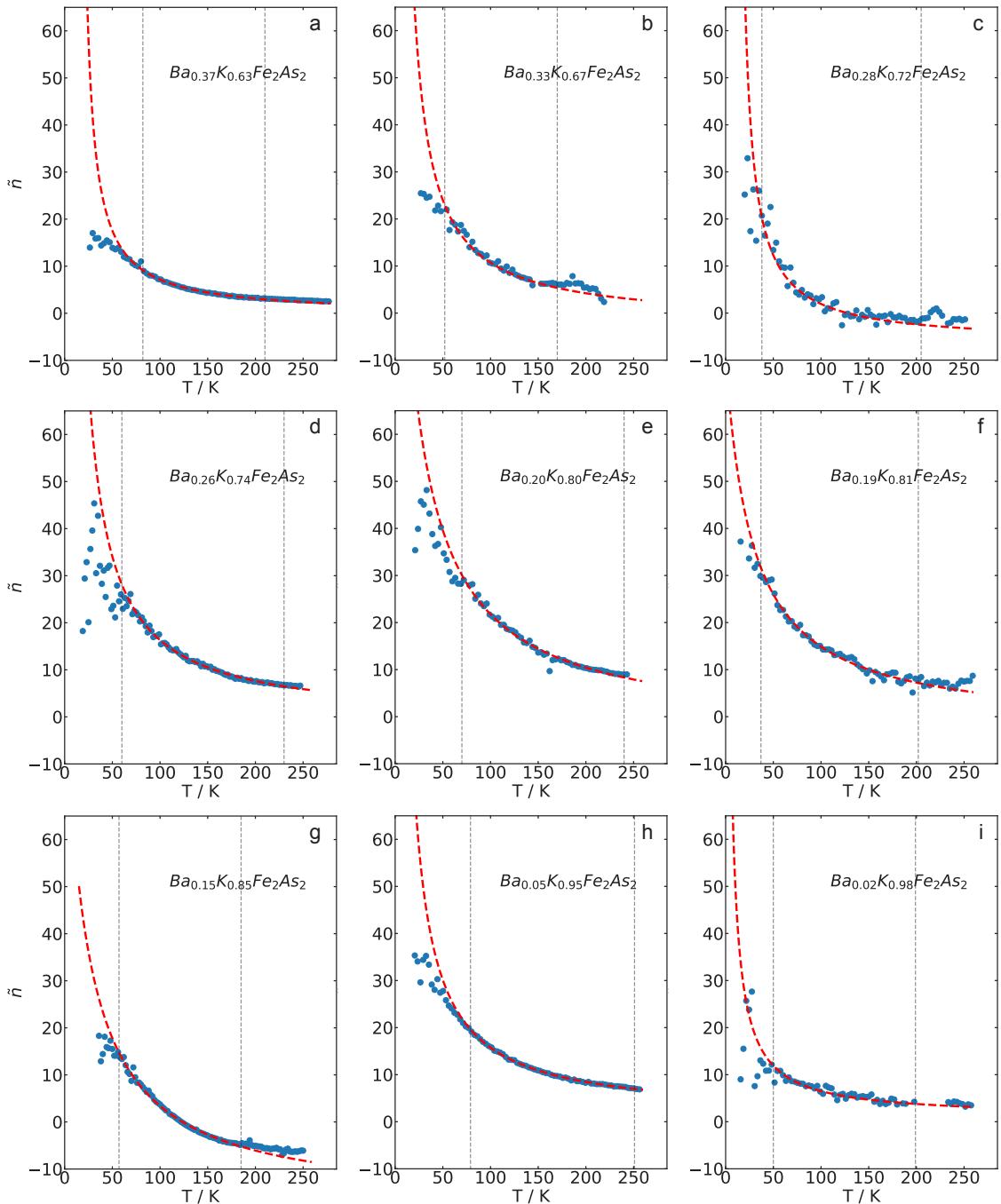


Abbildung 3.21.: Elastowiderstandsmessungen aller in dieser Arbeit untersuchten $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ Proben. Die Kaliumkonzentration nimmt dabei von oben links nach unten rechts zu. Das gemessene Elastowiderstandssignal ist in blau dargestellt, die dazugehörige Curie-Weiss-Anpassung in rot. Die senkrechten Linien kennzeichnen den jeweils verwendeten Anpassungsbereich für die Auswertung.

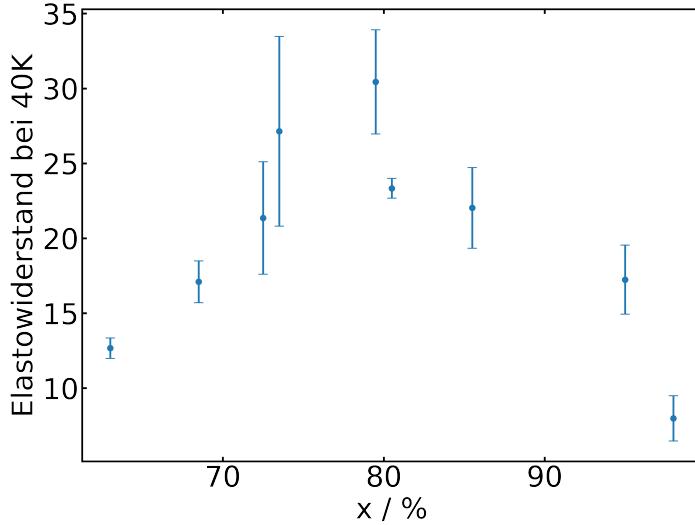


Abbildung 3.22.: Amplitude der Elastowiderstandsmessungen bei 40 K in Abhängigkeit der Dotierung.

einem Curie-Weiss-Verhalten der Form:

$$\tilde{n} = n_0 + \frac{a}{T - b} \quad (3.35)$$

beschrieben werden. Für sehr hohe und tiefe Temperaturen kann es zu einer Abweichung zwischen den Daten und der Funktion kommen [109]. Dies liegt bei tiefen Temperaturen an den zum Teil verrauschten Messwerten, welche aus dem geringeren Probenwiderstand und der kleineren Dehnungsvariation folgen. Bei hohen Temperaturen wird der Kleber im Vergleich zu niedrigeren Temperaturen weicher, wodurch die erzeugte Dehnung weniger präzise auf die Probe übertragen werden kann.

Um dies bei der Analyse der Messwerte zu berücksichtigen, hat sich ein spezielles Verfahren für die Auswertung von Elastowiderstandsmessungen etabliert [109]. Ziel des Verfahrens ist es, den Temperaturbereich so auszuwählen, dass die Größe $(\tilde{n}_0 - n_0) \cdot (T - b)$ möglichst konstant ist. Diese Größe entspricht dem a -Parameter, welcher laut dem Modell temperaturunabhängig sein sollte [109]. Dafür wird im ersten Schritt im größtmöglichen Temperaturbereich, in dem die Daten einem Curie-Weiss-Verhalten folgen, eine Anpassung durchgeführt. Die so erhaltenen Anpassungsparameter n_0 und b werden verwendet, um $\delta(T) = (\tilde{n}_0 - n_0) \cdot (T - b) - \langle (\tilde{n}_0 - n_0) \cdot (T - b) \rangle$ zu bestimmen. Die dreieckigen Klammern bezeichnen dabei den Mittelwert der berechneten Größe. Um die Abweichung zum Mittelwert zu reduzieren, wird die obere Temperaturgrenze bis zu der Temperatur reduziert, bei der es zu einer merklichen Abweichung kommt. Anschließend wird eine neue Anpassung in dem neuen Temperaturbereich durchgeführt und erneut $\delta(T)$ bestimmt. Anschließend wird die untere Temperaturgrenze unter der Prämisse angehoben, die resultierende Streuung zu minimieren. Im letzten Schritt wird die obere Temperaturgrenze so weit angehoben, bis erneut systematische Abweichungen auftreten.

Exemplarisch ist dieses Verfahren für die Messung mit $x = 0.75$ in Abbildung 3.23 dargestellt. Dabei wurde im ersten Schritt eine Anpassung im gesamten Temperaturbereich von 15 K bis 250 K durchgeführt und daraus $\delta(T)$ bestimmt (blau). Anschließend wurde der obere Temperaturgrenze auf 200 K reduziert, da oberhalb dieser Temperatur zunehmende Abweichungen erkennbar sind. Eine erneute Anpassung im so reduzierten Temperaturbereich liefert ein neues $\delta(T)$ (orange), welches jedoch unterhalb von 60 K deutliche systematische Abweichungen zeigt. Aus diesem Grund wurde im dritten Schritt die untere Grenze des Temperaturbereichs auf 60 K angepasst und eine erneute Anpassung durchgeführt und ein neues $\delta(T)$ (grün) bestimmt.

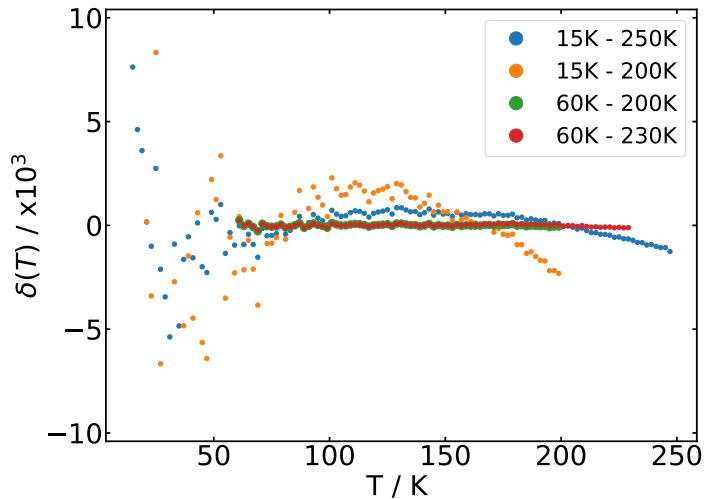


Abbildung 3.23.: $\delta(T)$ für verschiedene Temperaturbereiche, um den maximal verwendbaren Temperaturbereich für die Curie-Weiss-Anpassung zu finden. Ziel ist es, einen möglichst großen Temperaturbereich zu finden, in dem $\delta(T)$ möglichst konstant ist. Die Daten entsprechen der Probe mit $x = 0.75$.

Um den maximal möglichen Temperaturbereich zu erfassen, wurde die obere Grenze anschließend erhöht bis erneut systematische Abweichungen auftraten (rot). Durch dieses Verfahren ergibt sich in einem großen Temperaturbereich zwischen 60 K und 230 K ein konstantes $\delta(T)$. Dieser Bereich wird daher für die finale Anpassung des Curie-Weiss-Verhaltens verwendet. Diese Vorgehensweise wird analog für alle Messungen wiederholt. Die daraus resultierenden Curie-Weiss-Anpassungen sind neben den Messwerten ebenfalls in Abbildung 3.21 durch die rot gestrichelten Linien dargestellt. Die vertikalen Linien markieren den jeweils verwendeten Temperaturbereich. Zusätzlich sind alle Anpassungsparameter und Temperaturbereiche in Tabelle 3.2 aufgelistet. Die angegebenen Fehler der Anpassungsparameter entsprechen der geschätzten Standardabweichung (1σ) des jeweiligen Parameters, basierend auf der Kovarianzmatrix der Anpassung.

Tabelle 3.2.: Anpassungsparameter der durchgeführten Curie-Weiss-Anpassungen an die longitudinalen Elastowiderstandsmessungen. Die angegebenen Fehler entsprechen der geschätzten Standardabweichung (1σ) des jeweiligen Parameters, basierend auf der Kovarianzmatrix der Anpassung.

Dotierung	a / K	b / K	n_0	Anpassungsbereich / K
0.63	585 ± 28	15.7 ± 2.5	0.1 ± 0.1	82 - 210
0.67	1272 ± 277	-4.5 ± 9.2	-2.5 ± 1.3	52 - 170
0.72	1145 ± 224	1.4 ± 4.1	-6.2 ± 0.8	38 - 205
0.74	1702 ± 102	1.4 ± 3.2	0.9 ± 0.4	70 - 230
0.80	2987 ± 357	-19.8 ± 8.5	-3.1 ± 1.2	70 - 240
0.81	2297 ± 264	-28.6 ± 6.6	2.6 ± 1.1	37 - 202
0.85	2620 ± 220	-23.6 ± 5.2	-17.8 ± 0.8	57 - 185
0.95	1475 ± 50	-0.9 ± 2.2	1.12 ± 0.2	79 - 251
0.98	558 ± 230	-1.2 ± 8.5	-1.0 ± 1.1	50 - 199

3.6.1. Ergebnisse

Die resultierenden Fitparameter sind in Abbildung 3.24 dargestellt. Sie wurden durch Literaturwerte ergänzt, die ebenfalls mittels Elastowiderstandsmessungen und anschließender Curie-Weiss-Anpassung ermittelt wurden. Um in dieser und den folgenden Abbildungen eine klare Unterscheidung zu ermöglichen, sind Literaturwerte durch offene Symbole und die im Rahmen dieser Arbeit bestimmten Werte durch gefüllte Symbole gekennzeichnet.

Im Dotierungsbereich zwischen $x = 0.4$ und $x = 0.72$ liegt der a -Parameter im Mittel bei 1000 K. Aufgrund der Streuung der Messwerte und der begrenzten Datenlage lässt sich jedoch keine eindeutige Aussage über den Verlauf in diesem Bereich treffen. Für höhere Dotierungen steigt a bis $x \approx 0.8$ auf über 2900 K an, bevor er bis $x = 1$ kontinuierlich auf etwa 500 K abfällt.

Der b -Parameter zeigt im Bereich zwischen $x = 0.4$ und $x = 0.5$ einen konstanten Wert von etwa 45 K. Ab $x = 0.5$ sinkt er und erreicht bei $x = 0.67$ etwa 0 K. Bis $x = 0.78$ bleibt der Parameter auf diesem Niveau, bevor sich zwischen $x = 0.78$ und $x = 0.86$ ein Minimum von etwa -30 K bei $x = 0.81$ ausbildet. Ab $x = 0.85$ steigt der Parameter wieder an und bleibt bis $x = 1$ bei 0 K.

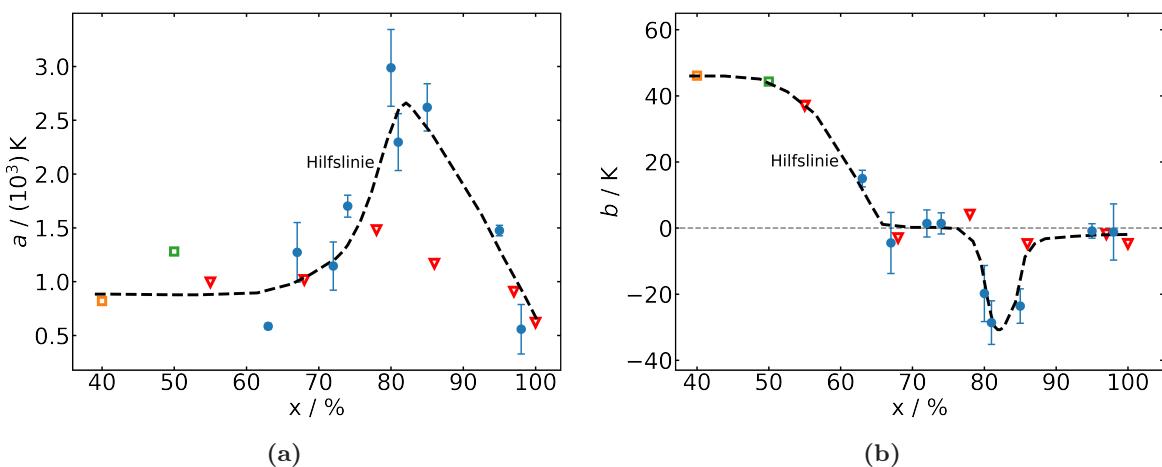


Abbildung 3.24.: Fitparameter a und b der longitudinalen Elastowiderstandsmessungen. Die in dieser Arbeit aufgenommenen Messungen sind in blau dargestellt. Die weiteren Datenpunkte wurden aus der Literatur übernommen und wurden ebenfalls mit Elastowiderstandsmessungen und einer anschließenden Curie-Weiss-Anpassung bestimmt. Das orangefarbene Rechteck basiert auf Werten aus Ref. [109], das grüne Rechteck auf Ref. [132] und die roten Dreiecke entsprechen den in Ref. [120] veröffentlichten Messungen. Die Verbindungslinien zwischen den Messpunkten dienen ausschließlich der Veranschaulichung des Trends und stellen keine funktionale Anpassung dar.

Die Ausbildung eines Maximums im a -Parameter bei einer Dotierung von etwa $x = 0.8$ zeigt eine deutliche Parallele zur temperaturabhängigen Amplitude des Elastowiderstandssignals bei $T \approx 40 \text{ K}$, die in demselben Dotierungsbereich ebenfalls ein Maximum aufweist (siehe Abbildung 3.22). Auch das markante Minimum des b -Parameters fällt in diesen Bereich und stellt ein weiteres charakteristisches Merkmal dar. Das Maximum des a -Parameters der in dieser Arbeit untersuchten Proben liegt somit im gleichen Dotierungsbereich wie das in Ref. [120] beobachtete Maximum, das, wie in Unterunterabschnitt 3.1 beschrieben, mit einem Lifshitz-Übergang in Verbindung gebracht wurde. Durch die größere Anzahl analysierter Proben, besonders im Bereich $x = 0.8 - 0.85$, ist das Maximum der in dieser Arbeit untersuchten Proben deutlich ausgeprägter als in der früheren Studie. Gleichzeitig zeigt die höhere Datenauflösung erstmals die Identifikation eines Minimums im b -Parameter, das in Ref. [120] nicht beobachtet werden konnte. Die Übereinstimmung mit der Literatur ist zwar bemerkenswert, dennoch bleibt offen, in welchem Ausmaß der Lifshitz-Übergang tatsächlich für die beobachteten Veränderungen verantwortlich ist. Insbesondere das zusätzliche Minimum im b -Parameter

sowie mögliche Effekte elektronischer Korrelationen, die ebenfalls einen Einfluss auf das Elastowiderstandsverhalten haben, lassen auch alternative oder ergänzende Erklärungen zu.

Zur genaueren Untersuchung dieses Verhaltens wurde zusätzlich der transversale Elastowiderstand gemessen, um mithilfe von Gleichung 3.25 und 3.28 eine Zerlegung des Elastowiderstandssignals in die verschiedenen Symmetriekanäle durchführen zu können. Insgesamt wurde der transversale Elastowiderstand für drei Proben mit Dotierungen von $x = 0.74, 0.8$ und 0.98 aufgenommen. Diese Proben decken den Bereich des beobachteten Maximums im Elastowiderstandssignal ab. Die Probe mit $x = 0.74$ liegt auf der ansteigenden Flanke des Maximums, jene mit $x = 0.8$ im Bereich des Maximums selbst und die Probe mit $x = 0.98$ auf der abfallenden Flanke. Da für die übrigen Dotierungen kein ausreichendes Probenmaterial zur Verfügung stand, konnte die transversale Messung bei diesen Dotierungen nicht durchgeführt werden.

Abbildung 3.25 zeigt die aufgenommenen transversalen Elastowiderstandsmessungen (orange) zusammen mit den bereits zuvor dargestellten longitudinalen Messungen (blau). Die Dotierung nimmt dabei von links nach rechts zu.

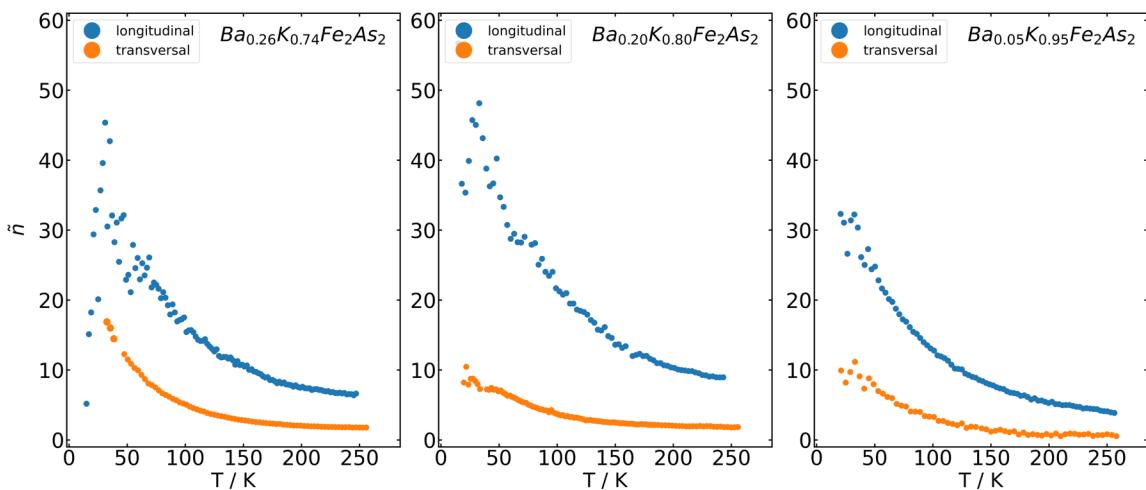


Abbildung 3.25.: Die in blau schon gezeigten longitudinalen Messungen des Elastowiderstands wurden um die in orange gezeigten transversalen Widerstandsmessungen ergänzt.

Alle untersuchten Proben zeigen auch im transversalen Elastowiderstand ein deutliches, Curie-Weiss-artiges divergentes Verhalten, wobei die Amplituden jedoch deutlich kleiner sind als im longitudinalen Fall. Für die Probe mit einer Dotierung von $x = 0.74$ beträgt die Amplitude bei 40 K etwa 18, während sie für die Proben mit $x = 0.8$ und $x = 0.98$ jeweils bei etwa 10 liegt. Aus dem longitudinalen und transversalen Elastowiderstand entlang der [110]-Richtung kann gemäß Gleichung 3.25 der Beitrag der Symmetriekanäle A_{1g} und B_{2g} bestimmt werden. Für die Berechnung wurde die in Abbildung 3.9b dargestellte, temperaturabhängige Poisson-Zahl des verwendeten Piezoaktuators berücksichtigt. In Abbildung 3.26 sind die mit Gleichung 3.25 und 3.28 errechneten A_{1g} - und B_{2g} -Anteile aufgetragen. Der A_{1g} -Anteil ist orange und der B_{2g} -Anteil in blau dargestellt. Für eine bessere Vergleichbarkeit der Daten wurde für alle drei Proben der gleiche Achsenbereich für die x - und y -Achse gewählt. Für alle Proben dominiert deutlich der A_{1g} -Anteil mit einer Amplitude zwischen 60 und 70 bei 50 K. Dahingegen erreicht die Amplitude des B_{2g} -Kanals lediglich Werte zwischen 10 und 25 bei 50 K. Ebenfalls wurde für beide Anteile jeweils eine Curie-Weiss-Anpassung durchgeführt, die durch eine schwarze Strich-Punkt-Linie dargestellt ist. Die senkrechten gestrichelten Linien kennzeichnen den Temperaturbereich, der für die Anpassung verwendet wurde. Die daraus resultierenden Anpassungsparameter sind in Tabelle 3.3 aufgelistet.

Die Fitparameter der Curie-Weiss-Anpassung des A_{1g} - und B_{2g} -Kanals sind in Abbildung 3.27 zusammen mit den Fitparametern der nicht separierten Messungen in Abhängigkeit von der

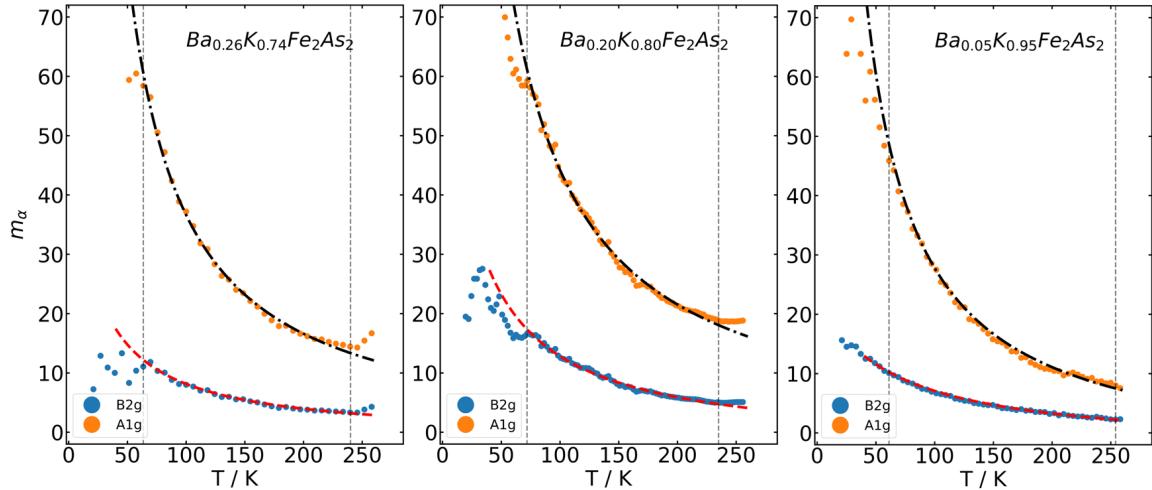


Abbildung 3.26.: Zerlegung der longitudinalen und transversalen Elastowiderstandsmessungen in den B_{2g} - (blau) und A_{1g} -Kanal (orange).

Tabelle 3.3.: Anpassungsparameter der durchgeföhrten Curie-Weiss-Anpassungen an die Signale des A_{1g} - bzw. B_{2g} -Kanals. Die angegebenen Fehler entsprechen der geschätzten Standardabweichung (1σ) des jeweiligen Parameters, basierend auf der Kovarianzmatrix der Anpassung.

Dotierung	Kanal	a / K	b / K	\tilde{n}_0	Anpassungsbereich / K
0.74	A_{1g}	3786 ± 250	3.7 ± 3.3	-2.7 ± 1.1	60 - 240
	B_{2g}	1060 ± 147	-17.3 ± 9.2	-0.9 ± 0.5	60 - 240
0.80	A_{1g}	4886 ± 261	-5.1 ± 3.3	-2.4 ± 0.9	70 - 235
	B_{2g}	1923 ± 143	-24.1 ± 5.5	-2.7 ± 0.5	70 - 235
0.95	A_{1g}	3420 ± 146	-3.5 ± 2.4	-5.9 ± 0.6	60 - 258
	B_{2g}	1600 ± 75	-63.1 ± 3.4	-2.7 ± 0.2	60 - 258

Dotierung dargestellt. Abbildung 3.27a zeigt dabei den Verlauf des b -Parameters. Die Werte des A_{1g} -Kanals sind in orange, die des B_{2g} -Kanals in blau und die unseparierten Daten in grün eingezeichnet. Für den A_{1g} -Kanal liegen die b -Werte aller separierten Proben nahe bei 0 K und zeigen keine signifikante Veränderung. Der b -Parameter des B_{2g} -Kanals ist hingegen für alle separierten Proben negativ und nimmt mit zunehmender Dotierung stark ab. Bei der höchstdotierten Probe ($x = 0.95$) erreicht er einen Wert von -63 K. Auffällig ist die Übereinstimmung der Änderungsraten des b -Parameters des B_{2g} -Kanals und der nicht separierten Elastowiderstandssignale im Dotierungsbereich von $x = 0.55$ bis $x = 0.68$.

Der a -Parameter der beiden Symmetriekanäle sowie der nicht separierten Messungen ist in Abbildung 3.27b dargestellt. Die Werte des a -Parameters im A_{1g} -Kanal liegen mit Werten zwischen 3400 K und 4900 K deutlich über denen des B_{2g} -Kanals und der nicht separierten Elastowiderstandssignale, welche jeweils Maximalwerte im Bereich von 2000 K bis 3000 K erreichen. Trotz der Tatsache, dass für den A_{1g} -Kanal nur drei Datenpunkte vorliegen, folgt dessen Verlauf qualitativ dem der nicht separierten Daten und zeigt ebenfalls ein Maximum im Dotierungsbereich $x = 0.8$, wobei durch die lediglich drei vorliegenden Werte die Aussagekraft eingeschränkt ist.

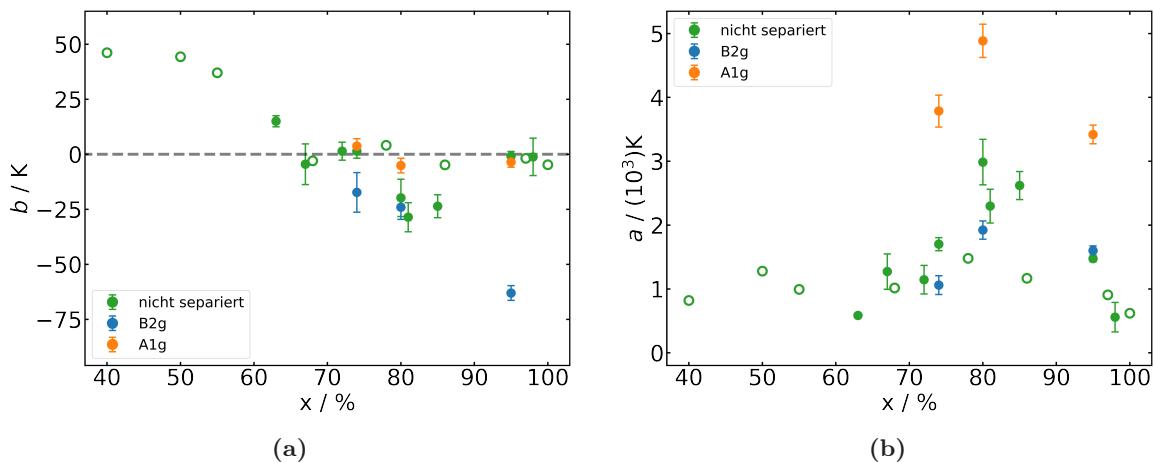


Abbildung 3.27.: Anpassungsparameter der durchgeführten Curie-Weiss-Anpassungen an die Signale des A_{1g} - (orange) und B_{2g} -Kanals (blau). In grün sind zusätzlich die Ergebnisse der nicht separierten Messungen eingezeichnet, welche schon in Abbildung 3.24 gezeigt wurden. Eigene Messdaten sind durch geschlossene, Literaturdaten durch offene Symbole dargestellt und entsprechen den bereits in Abbildung 3.24 gezeigten Daten.

Die Zerlegung der Elastowiderstandsmessungen in die A_{1g} - und B_{2g} -Symmetriekanäle zeigt deutlich, dass im Dotierungsbereich $x > 0.74$ der Beitrag im A_{1g} -Kanal denjenigen im B_{2g} -Kanal signifikant übersteigt. Dies wirft die Frage auf, ob dies für den gesamten Dotierungsbereich gilt oder ob es unterhalb eines bestimmten Dotierungsniveaus zu einem Wechsel des dominierenden Symmetriekanals kommt.

Hong et al. [120] konnten für eine Elastowiderstandsmessung an $Ba_{0.32}K_{0.68}Fe_2As_2$ ebenfalls eine Separation in den A_{1g} - und B_{2g} -Kanal durchführen. Diese ist in Abbildung 3.28a gezeigt. Dabei hat sich gezeigt, dass die Differenz aus longitudinalen und transversalen Elastowiderstand genau so groß ist wie der longitudinale Elastowiderstand selbst, woraus abgeleitet werden kann, dass das Signal stark vom B_{2g} -Kanal dominiert wird und keinen Anteil im A_{1g} -Kanal aufweist. Die Separation der Elastowiderstandssignale wurde von Wiecki et al. [123] ebenfalls für $Ba_{0.4}K_{0.6}Fe_2As_2$ durchgeführt. Die Zerlegung in die unterschiedlichen Symmetriekanäle ist in Abbildung 3.28b dargestellt. Auch in dieser Untersuchung konnte eine Dominanz des B_{2g} -Kanals festgestellt werden. Die abnehmende Signalstärke im A_{1g} -Kanal für $T < 100$ K, ermittelt aus Messungen entlang der [100]-Richtung, wurde auf unzuverlässige elektrische Kontakte zurückgeführt [123].

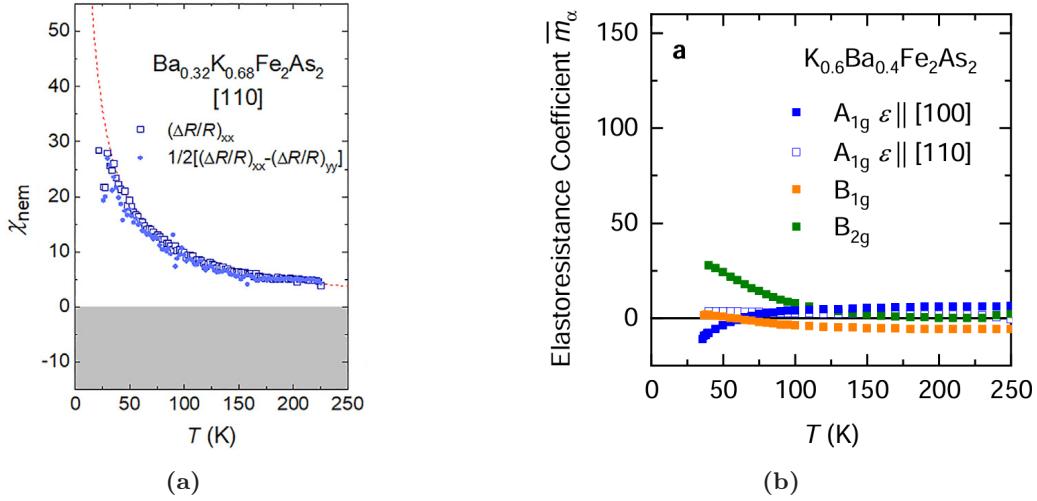


Abbildung 3.28.: a) Longitudinale und transversale Elastowiderstandsmessung von $\text{Ba}_{0.32}\text{K}_{0.68}\text{Fe}_2\text{As}_2$. Da die Differenz aus longitudinalen und transversalen Elastowiderstand so groß wie der longitudinale Elastowiderstand ist, kann geschlussfolgert werden, dass das Signal stark vom B_{2g} -Kanal dominiert wird und keinen Anteil im A_{1g} -Kanal aufweist. Entnommen aus Ref. [120]. b) Elastowiderstandsmessung mit anschließender Zerlegung in die unterschiedlichen Kanäle für $\text{Ba}_{0.4}\text{K}_{0.6}\text{Fe}_2\text{As}_2$. Dabei zeigt sich deutlich die Dominanz des B_{2g} -Kanals. Entnommen aus Ref. [123].

Da sich das Elastowiderstandssignal im Bereich niedriger Lochdotierung aufgrund der Nähe zur nematischen Phase ausschließlich aus einem Beitrag im B_{2g} -Kanal zusammensetzt und dies auch für höhere Dotierungen von $x = 0.6$ und $x = 0.68$ experimentell bestätigt werden konnte, ist davon auszugehen, dass bei allen in Abbildung 3.27 dargestellten Proben mit einem Dotierungsniveau von $x \leq 0.68$ ausschließlich ein B_{2g} -Anteil im Elastowiderstandssignal vorhanden ist.

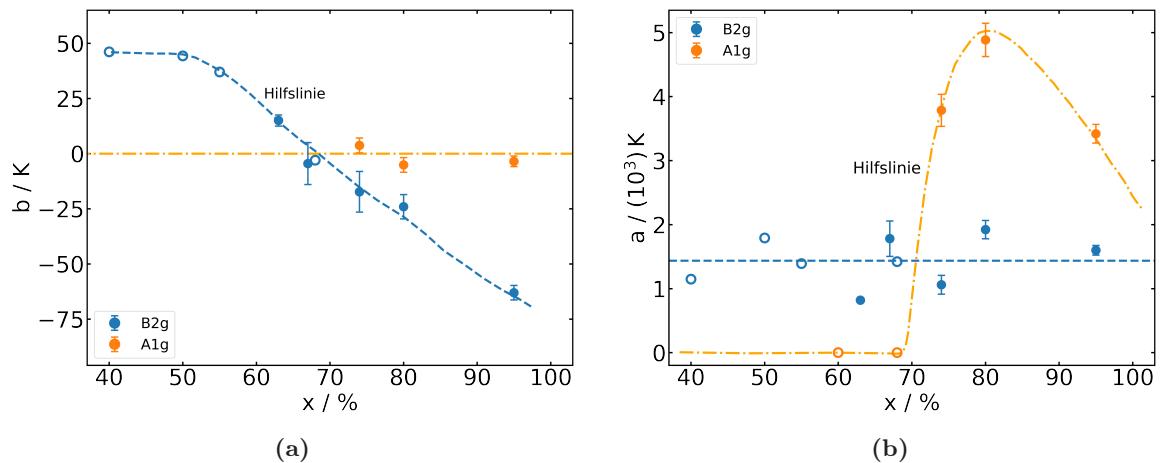


Abbildung 3.29.: a) b-Parameter der durchgeföhrten Curie-Weiss-Anpassungen eingeteilt in den A_{1g} - und B_{2g} -Kanal in Abhängigkeit der Dotierung. b) a-Parameter der durchgeföhrten Curie-Weiss-Anpassungen eingeteilt in den A_{1g} - und B_{2g} -Kanal in Abhängigkeit der Dotierung. Die Daten entsprechen dabei denen aus Abbildung 3.27. Die Verbindungslienien zwischen den Messpunkten dienen ausschließlich der Veranschaulichung des Trends und stellen keine funktionale Anpassung dar.

In Abbildung 3.29 sind die gleichen Fitparameter wie in Abbildung 3.27 dargestellt, jedoch nun den jeweiligen Symmetriekanälen A_{1g} und B_{2g} zugeordnet. Die Fitparameter der nicht separierten Proben mit $x > 0.68$ wurden dabei nicht berücksichtigt, da ohne Zerlegung eine eindeutige Zuordnung der Beiträge nicht möglich ist. Für den A_{1g} -Kanal liegen weiterhin nur drei Werte des b -Parameters vor, da keine weiteren Literaturdaten verfügbar sind. Diese

befinden sich sämtlich im Bereich um 0 K. Für alle Proben mit $x < 0.68$ ist der b -Parameter nicht definiert, da der A_{1g} -Kanal in diesem Dotierungsbereich keinen messbaren Beitrag liefert. Für den B_{2g} -Kanal ergibt sich im Gegensatz dazu ein deutlich strukturierterer Verlauf. Für Dotierungen zwischen $x = 0.4$ und $x = 0.5$ liegt der b -Parameter konstant bei etwa 45 K. Mit zunehmender Dotierung sinkt dieser Wert näherungsweise linear ab und erreicht bei $x = 0.98$ einen Wert von -63 K. Der Nulldurchgang des b -Parameters liegt dabei bei einer Dotierung von etwa $x = 0.68$.

Für den a -Parameter des A_{1g} -Kanals ergeben sich durch den Vergleich mit den besprochenen Literaturdaten neue Werte für die Dotierungsstufen $x = 0.6$ und $x = 0.68$. Da für diese Proben experimentell gezeigt wurde, dass der Elastowiderstand ausschließlich durch Beiträge aus dem B_{2g} -Kanal bestehen und kein signifikanter Anteil des A_{1g} -Kanals vorhanden ist, muss der a -Parameter in diesem Kanal folglich null oder nahe null sein. Diese Werte wurden ergänzend in Abbildung 3.29 eingetragen.

Die orange gestrichelte Verbindungslinie visualisiert den Anstieg des Beitrags des A_{1g} -Kanals zum Elastowiderstand, der ab einer Dotierung von etwa $x = 0.68$ einsetzt. Zwischen $x = 0.68$ und $x = 0.74$ nimmt der a -Parameter deutlich zu, erreicht ein Maximum bei $x \approx 0.80$ und zeigt anschließend eine leichte Abnahme bei $x = 0.98$, wie bereits in Abbildung 3.27b diskutiert wurde. Da dieser Verlauf jedoch nur auf drei Messpunkten beruht, lässt sich die genaue Lage des Maximums nicht verlässlich festlegen, da es ebenso bei geringfügig niedrigerer oder höherer Dotierung liegen könnte. Die Existenz eines Maximums selbst erscheint jedoch aufgrund des beobachteten Trends plausibel. Der a -Parameter des B_{2g} -Kanals bleibt über den gesamten betrachteten Dotierungsbereich nahezu konstant mit einem Mittelwert von etwa 1430 K. Gegenüber Abbildung 3.27b wurden die Werte leicht korrigiert. Wie in Abbildung 3.28a dargestellt, weisen longitudinale und transversale Elastowiderstandsmessungen im Fall einer rein B_{2g} -dominierten Antwort gleiche Amplituden auf, jedoch mit entgegengesetztem Vorzeichen. Wird aus diesen beiden Messungen mithilfe von Gleichung 3.25 der reine B_{2g} -Beitrag extrahiert, ergibt sich aufgrund des Vorfaktors $1/(1 - \nu)$ eine um diesen Faktor vergrößerte Amplitude. Hierbei ist ν die Poisson-Zahl des verwendeten Piezoaktuators. Da der a -Parameter direkt proportional zur Amplitude des Elastowiderstandssignals ist, ergibt sich in den nicht separierten Messungen systematisch ein um den Faktor $1/(1 - \nu)$ zu kleiner Wert. Um dennoch eine korrekte Vergleichbarkeit mit den separierten Messungen zu gewährleisten, wurden die in Abbildung 3.29b dargestellten a -Werte der nicht separierten Messungen entsprechend skaliert.

3.6.2. Diskussion

Zunächst sollen die Ergebnisse im B_{2g} -Kanal diskutiert werden. Bei Elastowiderstandsmessungen an $LaFe_{1-x}Co_xAsO$ sowie am elektronendotierten $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ konnte ebenfalls für jede Probe eine Curie-Weiss-artige Divergenz des Elastowiderstands beobachtet werden [20, 106]. Die Phasendiagramme beider Systeme sowie die jeweils aus Elastowiderstandsmessungen entlang der [110]-Richtung abgeleiteten nematischen Suszeptibilitäten sind in Abbildung 3.30a für $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ und in Abbildung 3.30b für $LaFe_{1-x}Co_xAsO$ dargestellt. Für eine bessere Übersicht ist das schon bereit gezeigte Phasendiagramm von $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ nochmals abgebildet. Die beobachtete Divergenz wird durch nematische Fluktuationen erklärt, die im B_{2g} -Symmetriekanal auftreten, da auch die mit der nematischen Phase verbundene Strukturverzerrung in diesem Kanal liegt. Der b -Parameter der durchgeführten Curie-Weiss-Anpassung entspricht somit der nematischen Übergangstemperatur T^{nem} im Rahmen der Mean-Field-Theorie (siehe Abschnitt 3.1). Der Verlauf von T^{nem} zeigt in beiden Materialsystemen eine sehr ähnliche Dotierungsabhängigkeit, wobei diese in Abbildung 3.30a als T^* bezeichnet wird. Mit zunehmender Dotierung nimmt T^{nem} kontinuierlich ab und hat einen Nulldurchgang im Bereich der optimalen Dotierung, an dem auch die supraleitende Sprungtemperatur ihr Maximum erreicht.

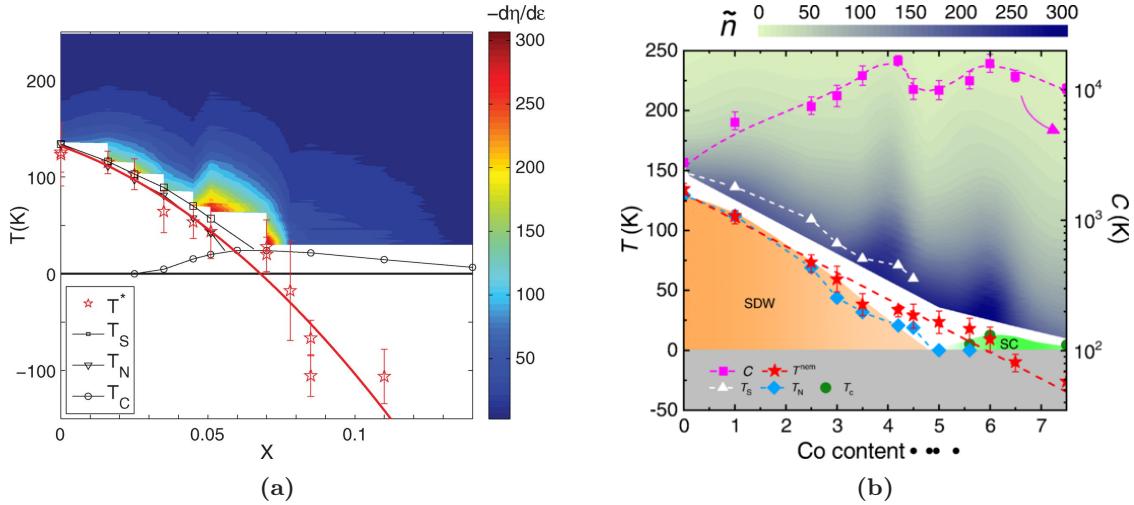


Abbildung 3.30.: a) Phasendiagramm von $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ mit farblich kodierten nematischen Suszeptibilität ermittelt durch Elastowiderstandsmessungen. Entnommen aus Ref. [20]. b) Phasendiagramm von $\text{LaFe}_{1-x}\text{C}_{\text{Co}}\text{AsO}$ ebenfalls mit farblich kodierter nematischen Suszeptibilität. Entnommen aus Ref. [106].

Durch elastische Schermodulmessungen mit einem Dreipunkt-Biegeaufbau in einem Kapazitätsdilatometer lassen sich ebenfalls nematische Fluktuationen in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ nachweisen. Die auf diese Weise bestimmte nematische Suszeptibilität ist in Abbildung 3.31a dargestellt. Bis zu einer Dotierung von $x = 0.28$ zeigt sich eine ausgeprägte Curie-Weiss-artige Divergenz, was auf die Nähe zum antiferromagnetischen Grundzustand zurückgeführt wird, der bis zu dieser Dotierung experimentell nachgewiesen werden konnte [14]. Für höhere Dotierungen bleibt die Divergenz zwar erkennbar, nimmt jedoch kontinuierlich ab, wobei sie sich nicht mehr durch ein Curie-Weiss-Verhalten beschreiben lässt und ist bei $x = 0.82$ schließlich nicht mehr nachweisbar. Wie bereits besprochen, konnte auch in der isoelektronischen Reihe AFe_2As_2 ($\text{A} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) mit verschiedenen Endgliedern in mehreren Studien ein Curie-Weiss-artiges Verhalten des Elastowiderstands entlang der [110]-Richtung beobachtet werden [106, 123]. Die Zerlegung dieser Messdaten in die verschiedenen Symmetriekanäle zeigt ebenfalls eine schwache Divergenz im B_{2g} -Kanal, die als Überbleibsel nematischer Fluktuationen interpretiert werden. Die durchgeführte Zerlegung von Elastowiderstandsmessungen in den B_{2g} -Kanal für $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ mit $x = 0.6$ und $x = 1$ zeigt ebenfalls eine Abnehmende Intensität, was diese Entwicklung unterstützt. Diese Ergebnisse sind zusammenfassend in Abbildung 3.31b dargestellt, welche für eine bessere Übersicht ebenfalls erneut gezeigt wird.

Der Vergleich mit den zuvor diskutierten Messungen legt nahe, dass das in dieser Arbeit gemessene Signal im B_{2g} -Kanal ebenfalls als Ausdruck nematischer Fluktuationen im überdotierten Bereich interpretiert werden kann und der b -Parameter der durchgeführten Curie-Weiss-Anpassung in Zusammenhang mit der nematischen Übergangstemperatur T^{nem} gebracht werden kann. Der entscheidende Unterschied zu den geringer lochdotierten Systemen besteht jedoch darin, dass keine der hier untersuchten überdotierten Proben einen Phasenübergang aufweist, was sich auch in den temperaturabhängigen Widerstandsmessungen zeigt.

Abbildung 3.32 zeigt den elektrischen Widerstand einer Serie von $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ -Einkristallen mit $x = 0$ bis $x = 1$ in Abhängigkeit der Temperatur. Der Phasenübergang ist dabei durch eine markante Reduktion des Widerstands erkennbar, wie insbesondere für $x = 0$ und $x = 0.1$ in Abbildung 3.32 deutlich wird. Dabei handelt es sich um den strukturellen bzw. magnetischen Übergang. Die in Abbildung 3.19a dargestellten Widerstandsmessungen der in dieser Arbeit untersuchten Proben zeigen hingegen keine sprunghafte Abnahme. Dies entspricht dem zu erwartenden Verhalten in einem überdotierten System, in dem ein solcher temperaturabhängiger Phasenübergang nicht mehr stattfindet. Da Widerstandsmessungen im überdotierten

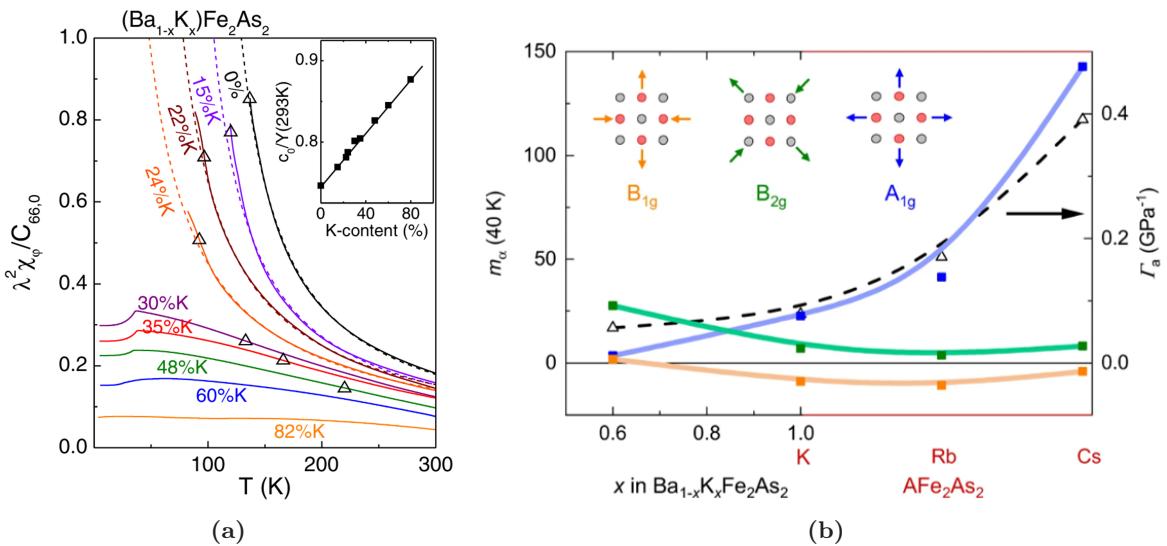


Abbildung 3.31.: a) Nematische Suszeptibilität von $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ bestimmt durch elastische Schermodulmessungen durch einen Dreipunkt-Biegeaufbau in einem Kapazitätsdilatometer. Entnommen aus Ref. [11]. b) Elastowiderstandswerte bei 40 K der verschiedenen Symmetriekanäle. Entnommen aus [123].

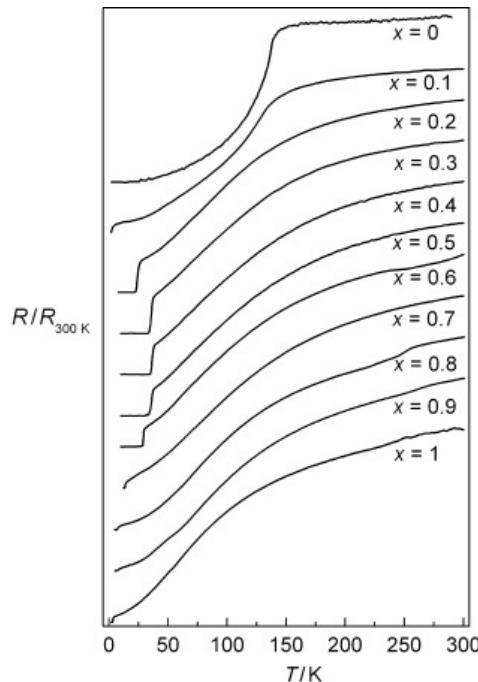


Abbildung 3.32.: Temperaturabhängiger Widerstand einer Reihe $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ -Einkristalle. Entnommen aus Ref. [41].

Bereich möglicherweise nicht empfindlich genug sind, um schwach ausgeprägte Ordnungsphänomene sicher nachzuweisen, kann zusätzlich auf struktur- und spinaufgelöste Methoden zurückgegriffen werden. Ein Indiz für das Verschwinden des strukturellen Phasenübergangs mit zunehmender K-Dotierung liefert die temperaturabhängige Entwicklung der Gitterparameter a und b in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$, wie sie in Abbildung 3.33a dargestellt ist. Die Gitterkonstanten wurden dabei mithilfe hochauflösender, temperaturabhängiger Pulver-Neutronenbeugung ermittelt. Diese sind nicht mit den gleichnamigen Fitparametern der Curie–Weiss-Anpassungen zu verwechseln. Für die Proben mit $x = 0.0, 0.1$ und 0.21 ist die charakteristische tetragonal-orthorhombische Strukturumwandlung anhand der sich aufspaltenden Gitterkonstanten a und b deutlich erkennbar. Im Gegensatz dazu zeigt die Probe mit $x = 0.3$ keinerlei Aufspaltung der Gitterparameter, was ein klarer Hinweis darauf ist, dass der strukturelle Phasenübergang bei dieser Dotierung vollständig unterdrückt ist. Dieses Ergebnis belegt, dass die strukturelle Ordnung nur bis etwa $x = 0.24$ aufrechterhalten bleibt und bei höheren Dotierungen verschwindet [133]. Diese Ergebnisse wurden zusätzlich durch temperaturabhängige Röntgenbeugungsmessungen bestätigt, die ebenfalls zeigen, dass oberhalb von $x \approx 0.2$ keine tetragonal-orthorhombische Aufspaltung der Gitterkonstanten mehr beobachtbar ist [134]. Ein direkter Nachweis für das Verschwinden der magnetischen Ordnung in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ bei höheren K-Dotierungen konnte beispielsweise mithilfe temperaturabhängiger ^{57}Fe -Mössbauer-Spektroskopie erbracht werden [134]. In Abbildung 3.33b sind die Mössbauer-Spektren bei $T = 4.2\text{ K}$ für verschiedene Dotierungsstufen dargestellt. Für Dotierungen bis $x = 0.2$ zeigt sich eine deutliche magnetische Hyperfeinaufspaltung, die ein typisches Merkmal für die Existenz einer langreichweiten, antiferromagnetischen SDW-Ordnung ist. Bei $x = 0.3$ ist diese Aufspaltung vollständig verschwunden und das Spektrum weist nur noch ein singuläres Absorptionsmaximum auf, was ein klares Indiz dafür ist, dass die magnetische Ordnung in diesem Dotierungsbereich verschwindet. Diese Ergebnisse liefern somit eine experimentelle Evidenz dafür, dass die SDW-Phase in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ bei Dotierungen oberhalb von $x \approx 0.3$ nicht mehr existiert.

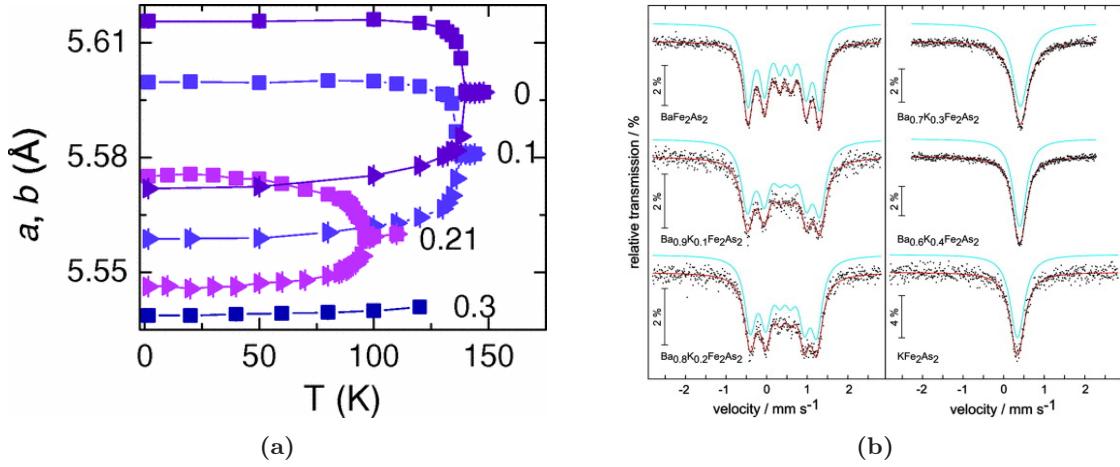


Abbildung 3.33.: a) Temperaturabhängigkeit der Gitterkonstanten a und b für $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ mit $x = 0.0, 0.1, 0.21$ und 0.3 . Für $x = 0.0, 0.1$ und 0.21 ist die tetragonal-orthorhombische Strukturumwandlung durch eine Aufspaltung von a und b erkennbar. Bei $x = 0.3$ bleibt diese Aufspaltung aus, was das vollständige Verschwinden des strukturellen Phasenübergangs anzeigen. Entnommen aus Ref. [133]. b) ^{57}Fe -Mössbauer-Spektren von $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ bei $T = 4.2\text{ K}$ für verschiedene Kalium-dotierungen x . Für $x = 0$ bis $x = 0.2$ zeigen die Spektren eine magnetische Hyperfeinaufspaltung, die auf eine antiferromagnetische (SDW-)Ordnung hinweist. Ab $x = 0.3$ verschwindet die Aufspaltung vollständig, was auf das Verschwinden der magnetischen Ordnung bei höheren Dotierungen hinweist. Die durchgezogenen Linien stellen die jeweiligen Fitkurven dar. Entnommen aus Ref. [134].

Das bedeutet, dass der berechnete b -Parameter formal nicht mit T^{nem} gleichgesetzt werden kann, da ein echter Ordnungsübergang nicht beobachtet wird, und ein positiver Wert von

T^{nem} eine solche Ordnung implizieren würde. Dennoch kann der b -Parameter als Maß für die Tendenz zur Ausbildung der nematischen Ordnung interpretiert werden. Die kontinuierliche Abnahme des b -Parameters mit zunehmender Dotierung, der Nulldurchgang bei $x \approx 0.68$ und der weitere Rückgang auf -63 K bei $x = 0.95$ verdeutlichen, dass die Tendenz zur nematischen Ordnung in diesem Bereich stark unterdrückt ist. Der Nulldurchgang des b -Parameters liegt genau in dem Dotierungsbereich von $x = 0.6$ bis $x = 0.82$, in dem die elastische Schermodulmessungen keine erkennbare Divergenz der nematischen Suszeptibilität mehr zeigen, selbst nicht in abgeschwächter Form (siehe Abbildung 3.31a). Dass die Elastowiderstandsmessungen dennoch ein deutlich divergierendes Signal im B_{2g} -Kanal liefern, deutet darauf hin, dass diese Methode deutlich sensitiver auf nematische Fluktuationen reagiert und diese auch noch im stark überdotierten Bereich vorhanden und nachweisbar sind.

Die geringe Tendenz zur nematischen Ordnung zeigt sich auch im Vergleich der Signalstärke des Elastowiderstands. In den Phasendiagrammen in Abbildung 3.30 ist diese farblich kodiert dargestellt. Sowohl in $LaFe_{1-x}Co_xAsO$ als auch in $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ erreicht das Elastowiderstandssignal Maximalwerte von bis zu 300. Diese treten im Fall von $LaFe_{1-x}Co_xAsO$ bei Dotierungen zwischen $x=0.04$ und $x=0.06$ auf, im Fall von $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ bei Dotierungen zwischen $x=0.05$ und $x=0.07$. Im Vergleich dazu liegt der Maximalwert des Elastowiderstandssignals in den hier untersuchten $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ -Proben lediglich bei etwa 50 für $x = 0.8$. Das Signalmaximum ist somit in den beiden elektronendotierten Systemen etwa um den Faktor sechs höher als im lochdotierten $BaFe_2As_2$ -System, was die insgesamt geringere Ausprägung nematischer Fluktuationen in diesem Dotierungsbereich unterstreicht.

Der Nulldurchgang der nematischen Übergangstemperatur T^{nem} fällt bei $LaFe_{1-x}Co_xAsO$ und $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ mit dem Maximum der supraleitenden Sprungtemperatur T_c sowie einem Maximum des Fitparameters a zusammen. Für $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ trifft dies hingegen nicht zu. Die maximale Sprungtemperatur wird bereits bei einer Dotierung von etwa $x = 0.4$ erreicht [10], wohingegen der Nulldurchgang des b -Parameters erst bei einer deutlich höheren Dotierung von etwa $x \approx 0.68$ erfolgt. Der a -Parameter in $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ zeigt über den gesamten betrachteten Dotierungsbereich hinweg einen nahezu konstanten Verlauf und weist weder bei der maximalen Sprungtemperatur noch beim Nulldurchgang des b -Parameters ein ausgeprägtes Maximum auf. Während in $LaFe_{1-x}Co_xAsO$ deutlich höhere Werte von über 10^4 K erreicht werden, beträgt der Mittelwert in $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ lediglich etwa 1400 K. Dies ist ebenfalls ein Zeichen für die insgesamt geringe Ausprägung nematischer Fluktuationen in diesem System und unterstreicht die schwächere Tendenz zur Ausbildung einer nematischen Ordnung im Vergleich zu anderen Eisenpniktiden.

Als nächstes sollen die Ergebnisse des A_{1g} -Signals diskutiert werden. Das nachweisbare Auftreten des divergenten Elastowiderstands im A_{1g} -Kanal ist ein klares Zeichen für die elektronischen Korrelationen in stark lochdotiertem $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ und ihrer Empfindlichkeit gegenüber symmetrischer A_{1g} -Dehnung [122, 123, 135]. Das Signal ist dabei erst für Dotierungen mit $x > 0.68$ nachweisbar und bildet einen Peak, bei etwa $x = 0.8$, wobei durch die geringe Datenlage von lediglich drei Messpunkten im stark überdotierten Bereich die genau Lage des Maximums lediglich auf den Bereich $0.74 < x < 0.95$ eingegrenzt werden kann.

Im Hinblick auf die von Wiecki et al. [123] durchgeführten Elastowiderstandsmessungen an $Ba_{0.4}K_{0.6}Fe_2As_2$ sowie an AFe_2As_2 ($A = K, Rb, Cs$), bei denen ebenfalls eine Zerlegung in die A_{1g} - und B_{2g} -Symmetriekanäle vorgenommen wurde, ist das Einsetzen eines messbaren Beitrags im A_{1g} -Kanal konsistent mit dem dort dargestellten Gesamtbild. Während für $Ba_{0.4}K_{0.6}Fe_2As_2$ kein signifikanter Beitrag im A_{1g} -Kanal nachgewiesen werden konnte, zeigen die vollständig substituierten Verbindungen KFe_2As_2 , $RbFe_2As_2$ und $CsFe_2As_2$ einen ausgeprägten Anstieg des A_{1g} -Signals, was in Abbildung 3.31b durch die blaue Linie verdeutlicht ist [123]. Dieses Verhalten spiegelt die Zunahme elektronischer Korrelationen entlang der Substitutionsreihe von K zu Cs wieder und steht in engem Zusammenhang mit dem in Unterabschnitt 2.2.3 beschriebenen orbitalselektiven Mott-Verhalten. Die unterschiedlichen Atom-

radien von Kalium, Rubidium und Cäsium üben einen chemischen Druck aus, der das Gitter dehnt und dadurch die Stärke der elektronischen Korrelationen verändert, was wiederum das zunehmende Signal im A_{1g} -Kanal erklären kann [136]. Die in dieser Arbeit durchgeführten Messungen ermöglichen eine präzise Eingrenzung des Einsetzens des Signals im A_{1g} -Kanal auf den engen Dotierungsbereich zwischen $x = 0.68$ und $x = 0.74$. Anders als durch die blaue Linie in Abbildung 3.31b impliziert wird, kommt es dabei jedoch nicht zu einer stetigen Zunahme des Signals im A_{1g} -Kanals sondern zu der Ausbreitung eines Maximums. Basierend auf dem Konzept des orbitalselektiven Mott-Verhaltens ist eher eine kontinuierliche Zunahme des Signals im A_{1g} -Kanal zu erwarten, da mit zunehmender Lochdotierung die Halbfüllung der Bänder stärker erreicht wird und dadurch die elektronischen Korrelationen zunehmen müssten. Eine Erklärung für dieses Verhalten könnte der Lifshitz-Übergang spielen, was durch Hong et al. [120] vorgeschlagen wurde.

Berechnung des Elastowiderstands basierend auf einem Modell

Zur besseren Einordnung des in dieser Arbeit beobachteten Verhaltens der B_{2g} - und A_{1g} -Komponenten des Elastowiderstands wurden diese theoretisch berechnet, um den Einfluss der unterschiedlichen Elektronenorbitale zu untersuchen. Die Berechnungen wurden von Steffen Sykora am Leibniz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung Dresden durchgeführt. Zur theoretischen Beschreibung von $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ wurde ein Tight-Binding-Hamiltonian mit Wechselwirkung verwendet, wie er auch in Ref. [15] eingeführt wurde. Dieser besteht aus zwei Teilen, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$, wobei der erste Teil \mathcal{H}_0 den ungestörten Tight-Binding-Hamiltonian der fünf d -Orbitale beschreibt, die zu den Leitungsbändern führen. Der zweite Teil \mathcal{H}_1 erfasst elementare Wechselwirkungen, die für die elektronischen Korrelationen verantwortlich sind. Für \mathcal{H}_0 gilt:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{i \neq j} \sum_{mm',\sigma} t_{ij}^{mm'} d_{im\sigma}^\dagger d_{jm'\sigma} + \sum_{im\sigma} (\varepsilon_m - \mu) d_{im\sigma}^\dagger d_{im\sigma}, \quad (3.36)$$

wobei $d_{im\sigma}^\dagger$ ein Elektron mit Spin σ am Gitterplatz i im Orbital m erzeugt. Die Überlappungsintegrale $t_{ij}^{mm'}$ beschreiben das Hüpfen zwischen verschiedenen Gitterplätzen, wobei auch Übergänge zwischen unterschiedlichen Orbitalen berücksichtigt werden. Eine Hybridisierung am selben Ort wird in diesem Modell jedoch nicht berücksichtigt. Stattdessen wird eine orbitalspezifische Onsite-Energie ε_m angenommen. Die chemische Potenzialdifferenz μ simuliert die Dotierung des Systems mit Elektronen und Löchern.

Der Wechselwirkungsbeitrag \mathcal{H}_1 des Hamiltonians lautet:

$$\mathcal{H}_1 = U \sum_{i,m} n_{im\uparrow} n_{im\downarrow} + U' \sum_{i,m > m',\sigma} n_{im\sigma} n_{im'\bar{\sigma}} + (U' - J) \sum_{i,m > m',\sigma} n_{im\sigma} n_{im'\sigma}, \quad (3.37)$$

wobei $n_{im\sigma} = d_{im\sigma}^\dagger d_{im\sigma}$ die Teilchenzahldichte am Gitterplatz i im Orbital m und mit Spin σ ist. Die Parameter U und $U' = U - 2J$ beschreiben die Coulomb-Abstößungen zwischen Elektronen im gleichen bzw. in verschiedenen Orbitalen. Dabei ist J die sogenannte Hundsche Kopplung, die hier in einer Ising-ähnlichen Form behandelt wird, das bedeutet, dass lediglich die z -Komponenten der Spins berücksichtigt werden und Spin-Flips zwischen den Orbitalen vernachlässigt bleiben. Die Notation $\bar{\sigma}$ bezeichnet den entgegengesetzten Spin. Ist $\sigma = \uparrow$, dann ist $\bar{\sigma} = \downarrow$ und umgekehrt. Aufgrund der Hundschen Regel ist die Coulomb-Abstößung im dritten Term von Gleichung 3.37 für gleiche Spins um J kleiner als im zweiten Term für entgegengesetzte Spins.

Zur Behandlung der elektronischen Korrelationen wird eine Renormierungsmethode auf Basis unitärer Transformationen eingesetzt, mit der der Hamiltonian mit Wechselwirkungen $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$ in ein effektives, lösbares Modell überführt wird. Dieses effektive Modell ist so konstruiert, dass es ein System freier Quasiteilchen beschreibt. Das bedeutet, dass es dasselbe Eigenwertspektrum wie das ursprüngliche System besitzt, jedoch sind alle Wechselwirkungen,

die einer exakten Lösung im Weg stehen, systematisch entfernt. Die zentrale Idee besteht darin, die Hubbard-Wechselwirkung \mathcal{H}_1 durch eine sukzessive Transformation des Hamiltonians zu eliminieren. Die dabei entstehende Beschreibung erlaubt die Berechnung physikalisch relevanter Größen wie der elektrischen Leitfähigkeit oder der elastoresistiven Antwort. Für die konkrete Umsetzung wird dabei auf die Methode aus Ref. [137] zurückgegriffen, deren Grundprinzip im Folgenden skizziert wird.

Ausgangspunkt ist die bereits eingeführte Zerlegung des Hamiltonians in einen lösbarer Teil und eine Wechselwirkung, also $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$, wobei der zweite Term Übergänge zwischen den Eigenzuständen von \mathcal{H}_0 induziert. Die Lösbarkeit von \mathcal{H}_0 bedeutet hier, dass die Eigenmoden \mathcal{A}_i und Eigenwerte ω_i des zugehörigen Liouville-Operators \mathbf{L}_0 bekannt sind. Dieser ist definiert durch:

$$\mathbf{L}_0(\mathcal{A}_i) := [\mathcal{H}_0, \mathcal{A}_i] = A_i \mathcal{A}_i. \quad (3.38)$$

Die Wechselwirkung \mathcal{H}_1 beschreibt im Allgemeinen Übergänge zwischen diesen Eigenmoden \mathcal{A}_i . Im Rahmen der Methode werden diese Übergänge nach den zugehörigen Übergangsenergien klassifiziert und schrittweise - beginnend mit den größten Energien - eliminiert. Angenommen, es wurde bereits ein renormierter Hamiltonian \mathcal{H}_λ konstruiert, der nur Operatoren mit Übergangsenergien kleiner als einem gegebenen Cutoff λ enthält. Dieser Hamiltonian \mathcal{H}_λ wird weiter renormiert, in dem zusätzlich alle Übergänge im Energiebereich zwischen λ und einem reduzierten Cutoff $\lambda - \Delta\lambda$ eliminiert werden. Dies geschieht über eine unitäre Transformation:

$$\mathcal{H}_{(\lambda - \Delta\lambda)} = e^{X(\lambda, \Delta\lambda)} \mathcal{H}_\lambda e^{-X(\lambda, \Delta\lambda)}, \quad (3.39)$$

die garantiert, dass das Eigenwertspektrum erhalten bleibt. Der Generator $X(\lambda, \Delta\lambda)$ dieser unitären Transformation wird mithilfe eines geeigneten Verfahrens konstruiert. Durch fortgesetzte Renormierung bis hin zu $\lambda = 0$ werden alle durch $\mathcal{H}_{1,\lambda}$ induzierten Übergänge vollständig entfernt.

Das Ziel dieses Ansatzes ist es, den vollständig renormierten Hamiltonian $\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_{(\lambda=0)}$ zu berechnen. Er ist lösbar im Sinne der obigen Gleichung 3.38 und erlaubt prinzipiell die Berechnung aller physikalisch interessanten Observablen, die sich aus den in \mathcal{H}_λ enthaltenen Operatoren zusammensetzt. Diese Operatoren müssen dabei durch die Eigenmoden von $\tilde{\mathcal{H}}$ ausgedrückt werden. Da der Erwartungswert einer Korrelationsfunktion mit $\tilde{\mathcal{H}}$ gebildet wird und alle Observablen in Eigenmoden dargestellt sind, kann dieser Erwartungswert mithilfe der Eigenwertgleichung 3.38 für $\tilde{\mathcal{H}}$ berechnet werden.

In Anlehnung an Ref. [137] wurde für das hier betrachtete Material ein konkreter Ansatz für den renormierten Hamiltonian \mathcal{H}_λ konstruiert. Dieser Hamiltonian wurde durch eine exakte Störungstheorie in Potenzen der Wechselwirkung \mathcal{H}_1 entwickelt. Die Störungsentwicklung lautet:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_\lambda = & \mathcal{H}_0 + \mathbf{P}_\lambda \mathcal{H}_1 - \frac{1}{2} \mathbf{P}_\lambda \left[(\mathbf{Q}_\lambda \mathcal{H}_1), \frac{1}{\mathbf{L}_0} (\mathbf{Q}_\lambda \mathcal{H}_1) \right] \\ & - \mathbf{P}_\lambda \left[(\mathbf{P}_\lambda \mathcal{H}_1), \frac{1}{\mathbf{L}_0} (\mathbf{Q}_\lambda \mathcal{H}_1) \right] + \mathcal{O}(\mathcal{H}_1^3), \end{aligned} \quad (3.40)$$

wobei \mathbf{L}_0 der Liouville-Operator in Bezug auf den lösbarer Teil \mathcal{H}_0 ist (siehe Gleichung 3.38). Diese Formel stellt eine Entwicklung von \mathcal{H}_λ bis zur zweiten Ordnung in \mathcal{H}_1 dar, die prinzipiell auf höhere Ordnungen erweitert werden kann. Da \mathcal{H}_λ über eine unitäre Transformation mit dem ursprünglichen Hamiltonian \mathcal{H} verbunden ist, besitzt er dasselbe Eigenwertspektrum. Die Projektion \mathbf{P}_λ und \mathbf{Q}_λ beziehen sich auf das Eigenwertproblem von \mathcal{H}_0 :

$$\mathbf{P}_\lambda \mathcal{A} = \sum_{m,n} |n\rangle \langle m| \langle n| \mathcal{A} |m\rangle \Theta(\lambda - |E_n - E_m|), \quad (3.41)$$

$$\mathbf{Q}_\lambda = \mathbf{1} - \mathbf{P}_\lambda, \quad (3.42)$$

wobei $|n\rangle$ Eigenzustände und E_n die zugehörigen Eigenwerte von \mathcal{H}_0 sind, also $\mathcal{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle$ und \mathcal{A} ein beliebiger Operator ist.

Gleichung 3.40 stellt somit eine perturbative Verbindung zwischen dem renormierten Hamiltonian \mathcal{H}_λ , in dem hochenergetische Anregungen bereits eliminiert wurden und dem ursprünglichen Hamiltonian \mathcal{H} dar. Es zeigt sich, dass effektive Vielteilchenwechselwirkungen prinzipiell in beliebig hoher Ordnung auftreten können. Eine Analyse der Beitragsgrößen in diesem Modell zeigt jedoch, dass neben dem Erstordnungsterm $\mathbf{P}_\lambda \mathcal{H}_1$ zwei weitere Terme zweiter Ordnung berücksichtigt werden müssen. Für $\mathcal{H}_\lambda = \mathcal{H}_{0,\lambda} + \mathcal{H}_{1,\lambda}$ ergibt sich aus Gleichung 3.40 folgender Ansatz:

$$\mathcal{H}_{0,\lambda} = \sum_{i \neq j} \sum_{mm',\sigma} t_{ij,\lambda}^{mm'} d_{im\sigma}^\dagger d_{jm'\sigma} + \sum_{im\sigma} (\varepsilon_{m,\lambda} - \mu_\lambda) d_{im\sigma}^\dagger d_{im\sigma}, \quad (3.43)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{1,\lambda} = & \mathbf{P}_\lambda \mathcal{H}_1 - \mathbf{P}_\lambda \sum_{i,m > m',\sigma} g_{mm'\lambda} (n_{im\sigma} - n_{im'\sigma})^2 \\ & - \mathbf{P}_\lambda \sum_{i,m > m'} j_{mm'\lambda} \mathbf{s}_{im} \cdot \mathbf{s}_{im'}, \end{aligned} \quad (3.44)$$

wobei $\mathbf{s}_{im} = \sum_{\alpha\beta} \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{2} d_{im\alpha}^\dagger d_{im\beta}$ der Spinoperator eines Elektrons am Gitterplatz i im Orbital m ist. Der erste Term $\mathcal{H}_{0,\lambda}$ stellt den lösbarer Teil des renormierten Hamiltonians dar und unterscheidet sich vom ursprünglichen \mathcal{H}_0 lediglich durch von λ abhängige Parameter. Der renormierte Wechselwirkungsteil $\mathcal{H}_{1,\lambda}$ enthält neben dem projizierten Ursprungswechselwirkungsterm zwei zusätzliche Beiträge, die gemäß Gleichung 3.40 aus den Zweitordnungstermen resultieren. Eine effektive nematische Dichte-Dichte-Wechselwirkung mit dem Parameter $g_{mm'\lambda}$, sowie eine Spin-Spin-Wechselwirkung mit dem Parameter $j_{mm'\lambda}$. Beide sind für das betrachtete Material relevant und entstehen auf natürliche Weise aus der ursprünglichen Wechselwirkung.

Es wurden Renormierungsgleichungen für alle λ -abhängigen Parameter hergeleitet. Diese bilden ein System gekoppelter Differenzengleichungen, die die Parameter bei einem Cutoff λ mit denen bei einem kleineren Cutoff $\lambda - \Delta\lambda$ verknüpfen. In diesen Gleichungen treten Erwartungswerte der Elektronenbesetzungszahlen auf, die im Zuge einer Faktorisierung innerhalb der Renormierungsschritte entstehen. Diese Näherung ist erforderlich, um die Struktur des Hamiltonians während der Renormierung zu erhalten und erfolgt in Analogie zu Ref. [137]. Die dabei auftretenden Erwartungswerte werden selbstkonsistent berechnet. Im Unterschied zur Mean-Field-Theorie werden sie jedoch nicht mit einem approximierten Modell wie \mathcal{H}_0 , sondern mit dem vollständigen, interagierenden Hamiltonian \mathcal{H} berechnet. Dadurch enthält der Ansatz sämtliche Quantenfluktuationen und geht über das Niveau der Mean-Field-Theorie hinaus. Zusätzlich zu den faktorisierungsbedingten Erwartungswerten, die für die Selbstkonsistenz notwendig sind, werden auch messbare Korrelationsfunktionen, etwa die elektrische Leitfähigkeit, explizit mit derselben Methode berechnet.

Die Renormierungsgleichungen wurden numerisch bis $\lambda = 0$ ausgewertet, sodass der ursprüngliche Hamiltonian vollständig in ein effektives Quasiteilchenmodell überführt wurde, in dem die Coulomb-Wechselwirkung vollständig eliminiert ist. Dieses effektive Modell hat die Form:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_{\lambda=0} = \sum_{i \neq j} \sum_{mm',\sigma} \tilde{t}_{ij}^{mm'} d_{im\sigma}^\dagger d_{jm'\sigma} + \sum_{im\sigma} (\tilde{\varepsilon}_m - \tilde{\mu}) d_{im\sigma}^\dagger d_{im\sigma}. \quad (3.45)$$

Es ist zu erkennen, dass $\tilde{\mathcal{H}}$ dieselbe Operatorstruktur wie \mathcal{H}_0 besitzt, wobei lediglich die Koeffizienten renormiert sind. Aufgrund der Abbildung auf ein freies System sind die Erwartungswerte aller messbaren Größen direkt zugänglich. Das effektive Modell kann bei Bedarf aus der Orbital- in die Bandbasis transformiert werden. Nach Fourier-Transformation in den Impulsraum ergibt sich für die Darstellung in der Bandbasis folgende einfache Form:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k}n\sigma} (\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}n} - \tilde{\mu}) c_{\mathbf{k}n\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}n\sigma}, \quad (3.46)$$

wobei der Einteilchenoperator $c_{\mathbf{k}n\sigma}^\dagger$ ein Elektron mit Impuls k , Spin σ und Bandindex n erzeugt. In dieser Darstellung ist auch der orbitale Charakter der Quasiteilchen entlang der Fermi-Kante zugänglich.

Ziel ist es, den Elastowiderstand theoretisch zu bestimmen. Dafür muss der elektrische Widerstand des Materials bestimmt werden. Der dissipative Anteil des statischen Widerstands $\rho(\omega)$ bei $\omega = 0$ ergibt sich als Kehrwert der Leitfähigkeit $\Re\rho(\omega = 0) = 1/\sigma(\omega = 0)$. Dabei bezeichnet $\sigma(\omega)$ die frequenzabhängige Leitfähigkeit, die über die Kubo-Greenwood-Relation der linearen Antworttheorie definiert ist:

$$\sigma_{\nu\mu}(\omega) = \frac{\beta}{i} \left(j^\nu \left| \frac{1}{\mathbf{L} - (\omega + i\eta)} \right| j^\mu \right). \quad (3.47)$$

Dabei ist j^ν die ν -te Komponente des Stromoperators im Limes $\mathbf{q} \rightarrow 0$:

$$\mathbf{j} = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \mathbf{j}_\mathbf{q} = \frac{e}{\sqrt{N}} \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}n\sigma} \nabla \varepsilon_{\mathbf{k}n} c_{\mathbf{k}n\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}n\sigma} \quad (3.48)$$

Hier ist \mathbf{L} der Liouville-Operator bezüglich des vollständigen, interagierenden Hamiltonians \mathcal{H} . In Gleichung 3.47 wird das sogenannte Mori-Skalarprodukt für Operatoren verwendet:

$$(A|B) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\lambda \langle A^\dagger e^{-\lambda\mathcal{H}} B e^{\lambda\mathcal{H}} \rangle, \quad (3.49)$$

wobei $\beta = 1/(k_B T)$ die inverse Temperatur ist. Die elektrische Leitfähigkeit ergibt sich somit als Erwartungswert einer Strom-Strom-Korrelationsfunktion.

Die Berechnung des Elastowiderstands erfolgt über die Ermittlung der Widerstandsänderung infolge einer gerichteten mechanischen Dehnung des Kristallgitters. Die Dehnung des Gitters wird dabei simuliert, indem die Transferintegrale in der jeweiligen Richtung leicht variiert werden. Die entsprechenden Elastowiderstände, die in den Transportexperimenten gemessen werden, lassen sich durch folgende Ausdrücke beschreiben:

$$n_{xx} = \frac{1}{\sigma_{xx}^{-1}} \lim_{\Delta t_x \rightarrow 0} \frac{\sigma_{xx}^{-1}(t_x + \Delta t_x) - \sigma_{xx}^{-1}}{\Delta t_x}, \quad (3.50)$$

$$n_{xy} = \frac{1}{\sigma_{yy}^{-1}} \lim_{\Delta t_x \rightarrow 0} \frac{\sigma_{yy}^{-1}(t_x + \Delta t_x) - \sigma_{yy}^{-1}}{\Delta t_x}. \quad (3.51)$$

In beiden Fällen beschreibt Δt_x eine kleine Variation der Transfermatrixelemente $t_{ij}^{mm'}$, die dem Hopping in x -Richtung zugeordnet sind und unabhängig von den Orbitalindizes m und m' sind. Die erste Gleichung n_{xx} beschreibt den longitudinalen Elastowiderstand, während die zweite Gleichung n_{xy} den transversalen Elastowiderstand beschreibt.

Für einen aussagekräftigen Vergleich mit den durchgeföhrten Elastowiderstandsmessungen ist es wichtig, dieselbe Zerlegung des theoretisch berechneten Elastowiderstands in seine Symmetrikanäle vorzunehmen, wie sie auch in der Auswertung der experimentellen Daten angewendet wurde. Dafür wurden die Linearkombinationen $m_{A_{1g}} = n_{xx} + n_{xy}$ und $m_{B_{2g}} = n_{xx} - n_{xy}$ als Funktion der Lochdotierung und bei $T = 0$ ausgewertet.

In Abbildung 3.34a sind die berechneten Beiträge des A_{1g} - und des B_{2g} -Kanals in Abhängigkeit der Lochdotierung gezeigt. Der Beitrag im A_{1g} -Kanal zeigt insgesamt einen deutlichen Anstieg mit zunehmender Dotierung und erreicht im Bereich starker Lochdotierung bei etwa $x = 0.75$ ein ausgeprägtes Maximum. Darauf hinaus tritt im Bereich bei etwa $x = 0.85$ eine schwach ausgeprägte Anomalie auf. Der Beitrag im B_{2g} -Kanal zeigt über den gesamten Dotierungsbereich hinweg nur eine geringe Zunahme mit der Dotierung, und die Signalstärke ist deutlich geringer als im A_{1g} -Kanal, ausgenommen dem Bereich bis $x < 0.55$, in dem die Beiträge beider Kanäle in einer vergleichbaren Größenordnung liegen. Darüber hinaus zeigt

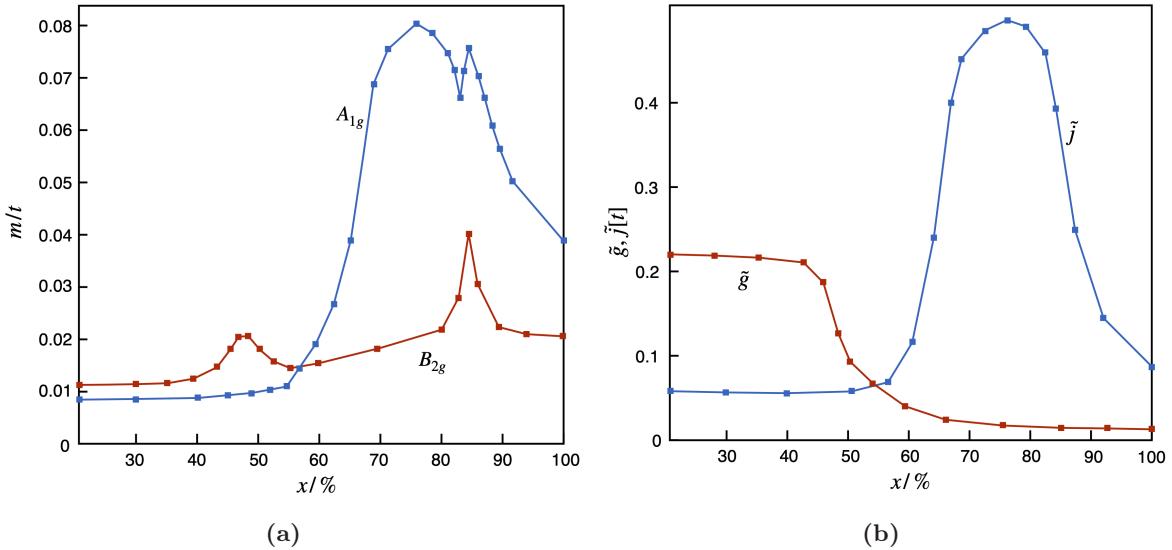


Abbildung 3.34.: a) Berechnete Beiträge des A_{1g} - (blau) und des B_{2g} -Kanals (rot) zum Elastowiderstand in Abhängigkeit der Dotierung. b) Berechnete Werte der effektiven Wechselwirkungen in Abhängigkeit von der Dotierung. In rot ist die nematische Wechselwirkung \tilde{g} und in blau die Spin-Spin-Wechselwirkung \tilde{j} abgebildet.

das Signal im B_{2g} -Kanal zwei leicht ausgeprägte Maxima bei $x \approx 0.48$ und $x \approx 0.85$. Damit stimmen die berechneten Verläufe des B_{2g} - und des A_{1g} -Kanals qualitativ gut mit den experimentell bestimmten Verläufen überein. Das zweite Maximum im B_{2g} -Kanal liegt in dem gleichen Dotierungsbereich wie die Anomalie des A_{1g} -Kanals. Dieses Verhalten lässt sich, wie von Hong et al. [120] gezeigt, durch den Lifshitz-Übergang erklären. Demnach wird durch den Lifshitz-Übergang die Lindhard-Funktion (Gleichung 3.22) groß, was sich in allen Antwortfunktionen wie der Leitfähigkeit widerspiegelt und deshalb auch im Elastowiderstandssignal nachweisbar ist. Aufgrund der groben Dotierungsschritte ist es jedoch nicht möglich, die Maxima im B_{2g} -Kanal und die Anomalie im A_{1g} -Kanal in den experimentellen Daten aufzulösen. In den theoretischen Berechnungen wurden zwei effektive Wechselwirkungen bestimmt, nämlich die nematische Wechselwirkung \tilde{g} , die mit der Ausbildung einer nematischen Ordnung verknüpft ist, sowie die Spin-Spin-Wechselwirkung \tilde{j} , die die Kopplung der Spins in verschiedenen Orbitalen beschreibt. Dabei entsprechen \tilde{g} und \tilde{j} den Parametern aus Gleichung 3.44 für $\lambda = 0$ und summiert über alle Orbitalindizes m und m' . Es ist zu beachten, dass das Modell die nematische Wechselwirkung ausschließlich aus elektronischen Korrelationen zwischen den Orbitalen ableitet. Eine zusätzliche Berücksichtigung der Kopplung an das Gitter, die in dieser Arbeit nicht betrachtet wurde, kann dann einen strukturellen Phasenübergang beschreiben. In Abbildung 3.34b sind \tilde{g} und \tilde{j} in Abhängigkeit der Dotierung gezeigt. Die nematische Wechselwirkung \tilde{g} ist im Dotierungsbereich bis $x \lesssim 0.6$ dominant. Dabei ist diese bis etwa $x = 0.45$ konstant und fällt danach deutlich ab und spielt oberhalb von $x = 0.6$ nur noch eine untergeordnete Rolle. Daraus lässt sich aus dem Modell ableiten, dass das System im unterdotierten Bereich eine deutliche Tendenz zur Ausbildung der nematischen Ordnung aufweist, was durch die experimentellen Ergebnisse bestätigt wird. Oberhalb von $x = 0.45$ geht diese Tendenz jedoch stark zurück. Dieser Verlauf deckt sich mit dem Verhalten des b -Parameters im B_{2g} -Kanal, der ein ähnliches Muster zeigt und damit die Interpretation unterstützt, dass dieser als Maß für die Tendenz zur Ausbildung einer nematischen Ordnung herangezogen werden kann. Das erste Maximum im B_{2g} -Kanal lässt sich demnach auf den deutlichen Rückgang von \tilde{g} zurückführen, wodurch verstärkte nematische Quantenfluktuationen entstehen könnten. Die Spin-Spin-Wechselwirkung \tilde{j} bleibt im unterdotierten Bereich vergleichsweise gering, steigt jedoch im überdotierten Bereich deutlich an. Bei etwa $x \approx 0.75$ erreicht diese ein ausgeprägtes

Maximum, bevor es bei noch höherer Dotierung wieder zurückgeht.

In Abbildung 3.35a und 3.35b sind die zu der Gesamtsumme von \tilde{g} und \tilde{j} beitragenden Orbitalbeiträge einzeln dargestellt. Bei der Berechnung wurde dafür die Kopplung des betrachteten Orbitals mit einem Referenzband untersucht, welches für alle Rechnungen gleich ist. Dabei zeigt sich, dass unter den Beiträgen von \tilde{g} ausschließlich $\tilde{g}_{xz/yz}$ signifikant von Null abweicht. Dies bedeutet, dass im Wesentlichen nur die d_{xz} - und d_{yz} -Orbitale zur nematischen Kopplung beitragen, was im Einklang mit der etablierten Theorie der nematischen Ordnung in eisenbasierten Supraleitern steht (siehe Unterabschnitt 2.2.1). Die analoge Berechnung für \tilde{j} zeigt, dass nahezu ausschließlich \tilde{j}_{xy} signifikant von Null abweicht. Dies unterstreicht die orbitalselektive Natur der elektronischen Korrelationen und hebt die besondere Rolle des d_{xy} -Orbitals hervor.

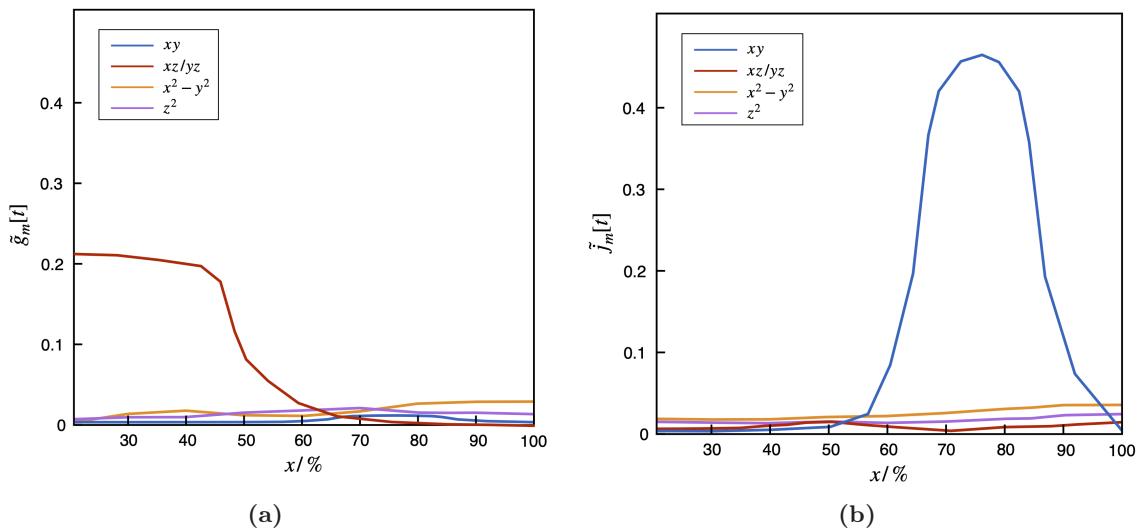


Abbildung 3.35.: a) Orbitaler Einfluss der nematischen Wechselwirkung \tilde{g} . b) Orbitaler Einfluss der Spin-Spin-Wechselwirkung \tilde{j} . Für die Berechnung wurde in beiden Fällen die Kopplung des betrachteten Orbitals mit einem Referenzband untersucht.

In Abbildung 3.36a und 3.36b sind die orbitalaufgelösten Beiträge zu den berechneten Signalen im B_{2g} - und A_{1g} -Kanal dargestellt. Dabei zeigt sich, dass das Signal im B_{2g} -Kanal überwiegend durch die $d_{xz/yz}$ -Orbitale getragen wird, während im A_{1g} -Kanal vor allem das d_{xy} -Orbital dominiert. Diese Zuordnung fügt sich nahtlos in das etablierte Verständnis der nematischen Ordnung ein, wonach die nematischen Fluktuationen primär im B_{2g} -Kanal auftreten und maßgeblich mit den $d_{xz/yz}$ -Orbitalen verknüpft sind. Auch die orbitale Abhängigkeit des Signals im A_{1g} -Kanal bestätigt die Annahme, dass dieser Kanal insbesondere auf elektronische Korrelationen sensitiv ist und daher maßgeblich vom d_{xy} -Orbital beeinflusst wird.

Physikalisch können die elektronischen Korrelationen als Kondo-artiges Verhalten interpretiert werden. Die theoretischen Berechnungen zeigen, dass ein Band mit überwiegenden d_{xy} -Charakter in der Nähe der Fermi-Energie stark abflacht. Dies führt zu einem System quasiklassifizierter d_{xy} -Elektronen, was konsistent mit den Vorhersagen des orbital-selektiven Mott-Übergangs ist [15]. Der Term der Spin-Spin-Wechselwirkung im effektiven Hamiltonoperator (Gleichung 3.44) beschreibt die Kopplung zwischen den Spins der Leitungselektronen in verschiedenen Orbitalen. Eine wesentliche Relevanz erhält dieser Beitrag jedoch nur bei der Wechselwirkung der Leitungselektronen mit den lokalisierten d_{xy} -Elektronen, was den charakteristischen Bedingungen eines Kondo-artigen Verhaltens entspricht. Die lokalisierten Elektronenstarts können als magnetische Streuzentren dienen und mit den Spins der mobilen Elektronen in den übrigen, delokalisierten Orbitalen wechselwirken. Im vorliegenden Fall liefert dieser Kondo-artige Mechanismus eine plausible Erklärung für das berechnete Maximum des Elastowiderstands im A_{1g} -Kanal bei hoher Dotierung. Ist die Dotierung hingegen

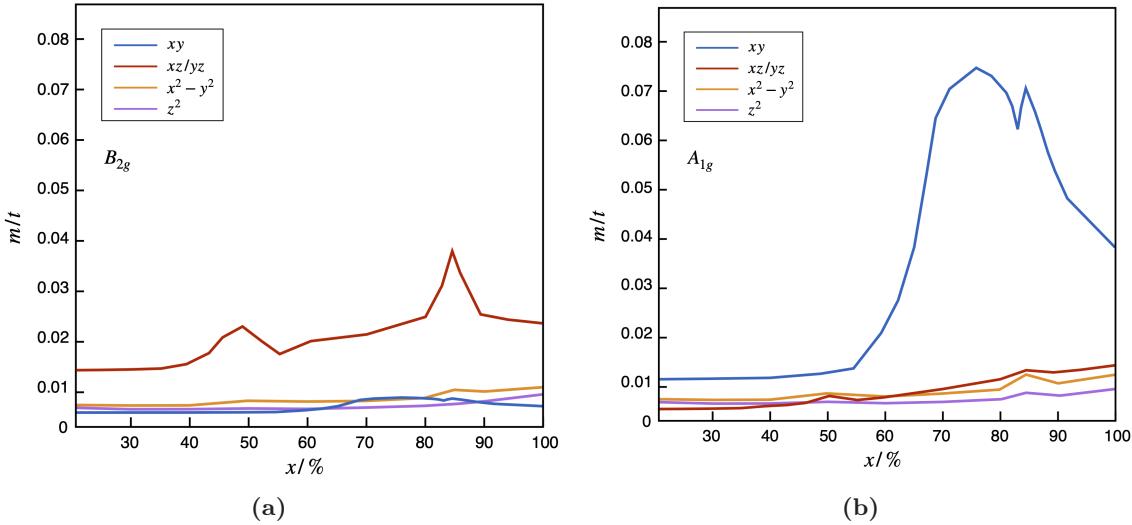


Abbildung 3.36.: a) Orbitalaufgelöste Beiträge zum berechneten Signal im B_{2g} -Kanal. b) Orbitalaufgelöste Beiträge zum berechneten Signal im A_{1g} -Kanal. Zur Berechnung wurden \tilde{g} und \tilde{j} aus Abbildung 3.35 verwendet.

zu gering oder zu hoch, so liegt das flache Band nicht mehr an der Fermi-Energie und der Kondo-artige Effekt bleibt aus.

Darüber hinaus lassen sich die Resultate in einen Zusammenhang mit dem Sommerfeldkoef- fizienten γ_n , der supraleitenden Sprungtemperatur T_c sowie dem Wechsel des supraleitenden Ordnungsparameters bringen. Der Sommerfeldkoeffizient γ_n ist direkt proportional zur elektronischen Zustandsdichte am Fermi-Niveau $N(E_F)$ [16]:

$$\gamma_n = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 N(E_F), \quad (3.52)$$

wobei k_B die Boltzmann-Konstante ist. Die Bestimmung von γ_n erlaubt somit Rückschlüsse auf die Verteilung elektronischer Zustände in einem Festkörper sowie auf die Stärke elektronischer Wechselwirkungen. Dies liegt daran, dass die Zustandsdichte am Fermi-Niveau nicht ausschließlich durch die Bandstruktur bestimmt wird, sondern durch elektronische Korrelatio- nen erheblich beeinflusst werden kann. Da $N(E_F)$ zudem proportional zur effektiven Masse m^* der Quasiteilchen ist, führt eine Massenrenormierung infolge starker Korrelationen zu einem Anstieg von γ_n . In Abbildung 3.37 ist die Dotierungsabhängigkeit des Sommerfeldkoeffizienten γ_n für zwei unterschiedliche Probenserien von $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ dargestellt. Beide Datensätze zeigen einen vergleichbaren Verlauf. Während Abbildung 3.37a sowohl die elektron- als auch die lochdotierte Seite abbildet, beschränken sich die Messungen in Abbildung 3.37b auf den Bereich $0.4 < x < 1$. Auch Abbildung 3.37b ist für eine bessere Vergleichbarkeit der Daten nochmals gezeigt.

Für geringe Lochdotierungen im Bereich $0 < x < 0.4$ steigt der Sommerfeldkoeffizient γ_n kontinuierlich an. Diese Zunahme wird auf die fortschreitende Unterdrückung der SDW-Ordnung zurückgeführt, welche im unterdotierten Bereich die elektronische Zustandsdichte am Fermi-Niveau reduziert [14]. Im mittleren Dotierungsbereich $0.4 < x < 0.7$ bleibt γ_n weitgehend konstant und liegt bei typischen Werten von etwa $50 \text{ mJ mol}^{-1} \text{ K}^{-2}$. Dies entspricht einer elektronischen Massenverstärkung um den Faktor 4-5 gegenüber einem unkorrelierten Referenzsystem. Für höhere Dotierungen steigt γ_n erneut an und erreicht bei $x = 1$ Werte von etwa $100 \text{ mJ mol}^{-1} \text{ K}^{-2}$. Zwischen den beiden zugrunde liegenden Datensätzen zeigen sich dabei gewisse Unterschiede im Verlauf. Während Abbildung 3.37a einen gleichmäßigen, nahezu linearen Anstieg von γ_n im Bereich $0.7 < x < 1$ zeigt, ist in Abbildung 3.37b eine steile Zunahme im Intervall $0.7 < x < 0.8$ erkennbar, gefolgt von einem flacheren Verlauf bis

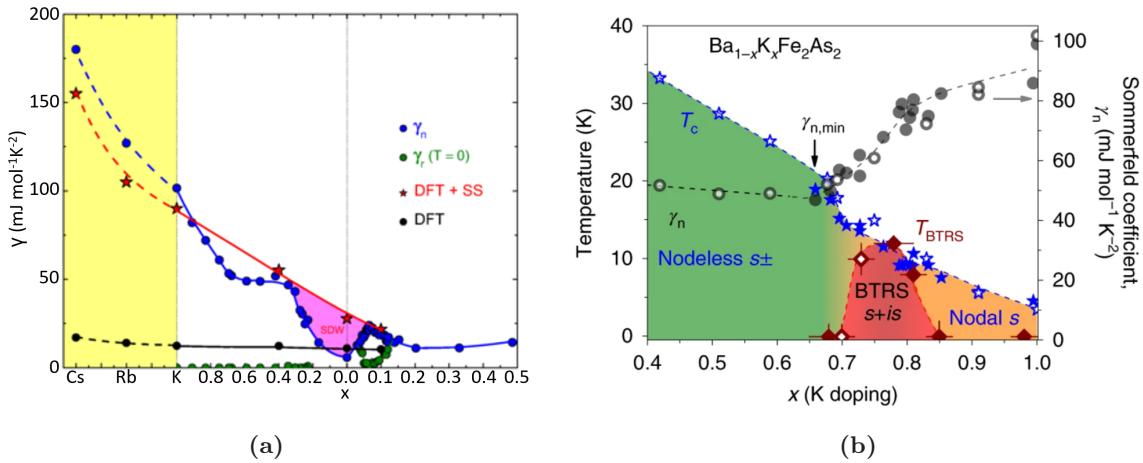


Abbildung 3.37.: a) Sommerfeld-Koeffizient γ_n (blaue Symbole) für $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$, $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ sowie AFe_2As_2 mit $A = Rb$ und Cs . Die roten Sterne stellen Ergebnisse aus Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen mit Slave-Spin-Korrektur (DFT+SS) für die tetragonale, paramagnetische Phase dar. Die Linien dienen lediglich der Veranschaulichung. Entnommen aus Ref. [14]. b) Phasendiagramm von $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ mit den unterschiedlichen supraleitenden Ordnungsparametern, der supraleitenden Sprungtemperatur T_c (blaue Sterne) und dem Sommerfeld-Koeffizienten (schwarze Kreise). Entnommen aus Ref. [65]

$x = 1$. Die Abweichung im Kurvenverlauf lässt sich vermutlich auf die geringere Anzahl an Datenpunkten in diesem Dotierungsintervall in Abbildung 3.37a zurückführen.

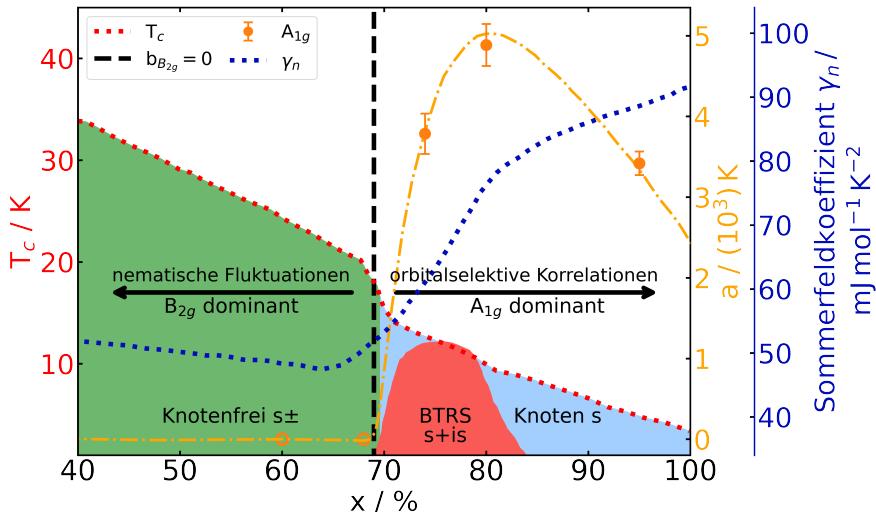


Abbildung 3.38.: Erweitertes Phasendiagramm erstellt aus den Daten des Phasendiagramms aus Abbildung 3.37b, welches aus Ref. [65] entnommen wurde. Diese Daten wurden um den a -Parameter des Signals im A_{1g} -Kanal (gelbe Linie und Punkte) und der Lage des Nulldurchgangs des b -Parameters im B_{2g} -Kanal (senkrechte, schwarz gestrichelte Linie) ergänzt. Für eine bessere Übersicht wurden die Daten der supraleitenden Sprungtemperatur und des Sommerfeldkoeffizienten nur durch eine Hilfslinie und nicht durch die Messwerte dargestellt.

Der Verlauf des Sommerfeldkoeffizienten zeigt dabei auffällige Parallelen zur Dotierungsabhängigkeit des Elastowiderstandssignals im A_{1g} -Kanal. Zur Verdeutlichung dieses Verhaltens sind in Abbildung 3.38 die bereits mehrfach gezeigten und diskutierten Daten des Phasendiagramms von $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ (siehe Abbildung 3.37b) unter anderem um das A_{1g} -Signal ergänzt worden. Zur besseren Übersicht wird der Verlauf des Sommerfeldkoeffizienten nur durch die Hilfslinie (blau) dargestellt. Die orangefarbene Linie sowie die zugehörigen Datenpunkte

zeigen den Verlauf des A_{1g} -Signals. Auffällig ist, dass das Einsetzen des A_{1g} -Signals mit einem raschen Ansteigen des Sommerfeldkoeffizienten zusammenfällt. Das Maximum des A_{1g} -Signals liegt zudem in einem Dotierungsbereich, in dem sich die Änderungsrate des Sommerfeldkoeffizienten deutlich verändert. Wie die Modellrechnung zeigt, lässt sich das beschriebene Ansteigen des Sommerfeldkoeffizienten durch die zunehmenden elektronischen Korrelationen im d_{xy} -Orbital erklären. Sie führen zu einer erhöhten Zustandsdichte an der Fermi-Energie. Der Sommerfeldkoeffizient wurde mit Hilfe des Tieftemperaturlimes $\lim_{T \rightarrow 0} C(T)/T$ aus der spezifischen Wärme $C(T)$ bestimmt, welche ebenfalls mit dem Modell (Gleichung 3.37) berechnet wurde. Dieser ist in Abbildung 3.39 in Abhängigkeit der Dotierung gezeigt. Der berechnete Sommerfeldkoeffizient zeigt dabei ebenfalls eine starke Zunahme ab einer Dotierung von $x > 0.6$, was dem Verlauf der gemessenen Sommerfeldkoeffizienten entspricht. Für höhere Dotierungen bildet sich allerdings ein Maximum bei etwa $x = 0.75$ dem ein deutlicher Abfall folgt. Der berechnete Sommerfeldkoeffizient folgt im Wesentlichen dem Verlauf der Spin-Spin-Wechselwirkung j . Bei sehr hoher Dotierung weicht er jedoch deutlich vom experimentellen Verhalten ab. Diese Diskrepanz deutet darauf hin, dass das zugrunde liegende Modell in diesem Bereich nicht mehr ausreicht und eine Erweiterung für eine korrekte Beschreibung der Hochdotierungsregion notwendig ist.

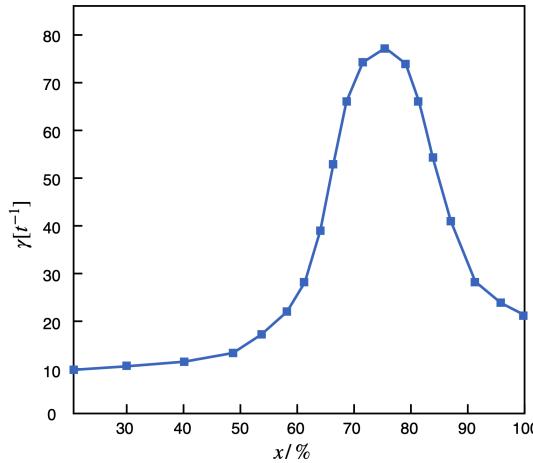


Abbildung 3.39.: Berechneter Sommerfeldkoeffizient in Abhängigkeit der Dotierung. Dieser wurde aus dem Temperaturverhalten der modellierten spezifischen Wärme $C(T)/T$ bestimmt.

Das erweiterte Phasendiagramm zeigt neben dem Verlauf des A_{1g} -Signals weitere auffällige Zusammenhänge. Zusätzlich zum A_{1g} -Signal ist der Nulldurchgang des b -Parameters aus dem B_{2g} -Kanal als senkrechte, schwarz gestrichelte Linie eingezeichnet. Auffällig ist, dass dieser Punkt in den selben Dotierungsbereich fällt, in dem der Sommerfeldkoeffizient erstmals deutlich ansteigt. Zusätzlich ist in der Abbildung die supraleitende Sprungtemperatur T_c als rote Hilfslinie dargestellt, wobei ebenfalls für eine bessere Übersicht auf die genauen Messwerte verzichtet wurde. Auch hier zeigt sich ein Zusammenhang, da die stufenförmige Abnahme von T_c mit dem Anstieg des A_{1g} -Signals sowie dem Nulldurchgang des b -Parameters zusammenfällt. Der Bereich, in dem der BTRS-Ordnungsparameter auftritt, beginnt zudem ungefähr an derselben Stelle, an der sowohl der Nulldurchgang des b -Parameters als auch der Anstieg des A_{1g} -Signals beobachtet werden. Gleichzeitig geht beim Einsetzen des A_{1g} -Signals der supraleitende Ordnungsparameter von einer knotenfreien s_{\pm} -Symmetrie zu einer s -Symmetrie mit Knoten über. Diese auffällige Übereinstimmung im Dotierungsverlauf des A_{1g} -Signals, des Sommerfeldkoeffizienten, der supraleitenden Sprungtemperatur sowie des Auftretens der BTRS-Phase und der generellen Änderung des supraleitenden Ordnungsparameters deutet darauf hin, dass die Supraleitung durch die auftretenden elektronischen Korrelationen beeinflusst wird. Dies fügt sich in das Bild ein, dass die Supraleitung bei geringer Lochdotierung vor

allem durch Spin-Fluktuationen gebildet wird, die aus den guten Nesting-Eigenschaften zwischen Elektronen- und Loch-Fermi-Taschen resultieren. Experimentell kann dies beispielsweise durch eine ausgeprägte Spin-Resonanz nachgewiesen werden [138]. Diese Spin-Fluktuationen vermitteln primär eine vorzeichenwechselnde s_{\pm} -Paarbildung, welche eine vollständige Energielücke ohne Knoten erzeugt. Mit zunehmender Lochdotierung verändert sich die Topologie der Fermi-Oberfläche, wobei die Elektronentaschen schrumpfen und schließlich vollständig verschwinden, sodass die Nesting-Bedingungen stark geschwächt werden. In diesem Bereich finden sich Hinweise auf eine Änderung des supraleitenden Ordnungsparameters, die insbesondere auf die Ausbildung einer BTRS-Phase mit einem komplexen Ordnungsparameter und einer möglichen s -Symmetrie mit Knoten hindeuten. Grinenko et al. [139] interpretieren die Bildung der BTRS-Phase als Folge der Konkurrenz zweier nahezu entarteter s -Wellen-Paarungskanäle, die im hochdotierten Bereich durch die veränderte Fermi-Oberfläche gleichzeitig wirksam werden. Die daraus resultierende Überlagerung beider Beiträge mit einer nichttrivialen Phasenbeziehung führt zu dem beobachteten komplexen Ordnungsparameter, der die Zeitumkehrsymmetrie bricht.

Ein alternativer Erklärungsansatz für die beobachtete BTRS-Phase und die Änderung der supraleitenden Eigenschaften in hochdotierten $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ ergibt sich aus der Analogie zu Schwerfermionen-Supraleitern, in denen es stark korrelierte $4f$ - oder $5f$ -Elektronen gibt, etwa in $CeCu_2Si_2$ oder UPt_3 [140]. Diese Elektronen koppeln über den Kondo-Effekt mit den Leitungselektronen und bilden bei tiefen Temperaturen einen kohärenten Zustand aus schweren Quasiteilchen mit stark erhöhter effektiver Masse, sogenannte Schwerfermionen. Die Supraleitung in solchen Systemen unterscheidet sich dabei deutlich von konventionellen Supraleitern, da diese ebenfalls nicht durch Phononen vermittelt wird. In Schwerfermionen-Supraleitern wird davon ausgegangen, dass die Cooper-Paarbildung durch magnetische Fluktuationen erfolgt, die aus den stark korrelierten f -Elektronen hervorgehen [140]. Eine weitere Parallelie ergibt sich aus der Struktur des supraleitenden Ordnungsparameters. In klassischen Schwerfermionen-Supraleitern wie $CeCu_2Si_2$, UPt_3 oder $CeCoIn_5$ wurde ebenfalls ein supraleitender Ordnungsparameter mit Knoten im Impulsraum nachgewiesen [140]. In den meisten Fällen weist dieser eine d -Wellensymmetrie auf. Darüber hinaus deuten Untersuchungen insbesondere an UPt_3 auf komplexe, mehrkomponentige Ordnungsparameter hin, die ebenfalls die Zeitumkehrsymmetrie brechen [141]. Auf Grundlage der Daten lässt sich dieser Mechanismus nicht eindeutig belegen, jedoch stellt er eine plausible Interpretation dar, die sowohl durch das Modell als auch durch die experimentellen Beobachtungen gestützt wird. Demnach könnten die stark korrelierten Elektronen des d_{xy} -Orbitals selbst dynamische magnetische Wechselwirkungen erzeugen, die als Kopplungsmechanismus zur Bildung von Cooper-Paaren wirken. Unterstützend könnten dabei auch die nematischen Fluktuationen wirken, die im stark lochdotierten Bereich zwar abgeschwächt, aber weiterhin nachweisbar sind. Die Analogie zu den Schwerfermion-Supraleitern legt nahe, dass zusätzlich zu den lokalen Korrelationen auch langreichweitige Wechselwirkungen berücksichtigt werden müssten, um das System theoretisch adäquat zu beschreiben. Eine solche Erweiterung des Modells könnte die im stark lochdotierten Bereich beobachtete Abweichung zwischen dem berechneten und dem gemessenen Sommerfeldkoeffizienten verringern. Die Erweiterung stellt dann eine RKKY-Wechselwirkung dar, bei der die Leitungselektronen eine langreichweitige, effektive Kopplung zwischen den lokalen Spins vermitteln [142]. In Schwerfermionen-Systemen kann dies zur Ausbildung einer antiferromagnetischen Ordnung führen [143]. Dass eine solche Ordnung im stark lochdotierten $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ nicht beobachtet wird, könnte darauf hindeuten, dass eine mögliche RKKY-Wechselwirkung nur schwach ausgeprägt ist. Dies wird gestützt durch die Beobachtung von niederenergetischen Spinflektuationen in KFe_2As_2 [144], welche auf das generelle Vorhandensein von schwach ausgeprägten magnetischen Korrelationen in überdotierten Systemen hinweist.

Vergleich mit $\text{Ba}_{1-x}\text{Rb}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$

In Abbildung 3.40a ist das Phasendiagramm von $\text{Ba}_{1-x}\text{Rb}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ dargestellt. Dieses System gehört genau wie $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ zur Familie der lochdotierten 122-Eisenpniktide und zeigt ein qualitativ ähnliches Phasenverhalten. Mit zunehmender Lochdotierung entwickelt sich eine supraleitende Phase, deren Sprungtemperatur ein Maximum bei einer Dotierung von $x = 0.4$ erreicht und bei weiterer Dotierung kontinuierlich abnimmt [145]. Zusätzlich zur supraleitenden Phase ist in das Phasendiagramm die Übergangstemperatur T_0 eingezeichnet, die aus Curie-Weiss-Anpassungen an Elastowiderstandsmessungen entlang der [110]- und [100]-Kristallrichtungen extrahiert wurde. Diese entspricht dem in dieser Arbeit bestimmten b -Parameter der unseparierten Daten. Die zugehörigen Messdaten sind in Abbildung 3.41 dargestellt. Der Temperaturverlauf von T_0 entlang der [110]-Richtung zeigt eine auffallende Ähnlichkeit zum in dieser Arbeit bestimmten Anpassungsparameter b aus den nicht-separierten longitudinalen Elastowiderstandsmessungen (vgl. Abbildung 3.24b). In beiden Fällen nimmt der Parameter mit steigender Dotierung zunächst monoton ab, erreicht ein Minimum im Bereich $x = 0.8$ und steigt anschließend wieder an. Auch entlang der [100]-Richtung wurde eine ausgeprägte Curie-Weiss-artige Divergenz des Elastowiderstands beobachtet. Die daraus bestimmte Übergangstemperatur T_0 zeigt ebenfalls ein Minimum bei $x = 0.74$ mit nachfolgendem Anstieg. Diese Beobachtungen wurden durch einen Wechsel in der Ausrichtung der nematischen Fluktuationen erklärt [107]. Im unterdotierten Bereich treten wie in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ nematische Fluktuationen im B_{2g} -Kanal auf. Der Anstieg des Elastowiderstands entlang der [100]-Richtung bei hoher Dotierung wird auf eine Umlagerung der nematischen Fluktuationen in den B_{1g} -Kanal zurückgeführt. Zwischen beiden Regimen wird ein intermediärer Bereich angenommen, in dem isotrope, XY-artige nematische Fluktuationen vorherrschen.

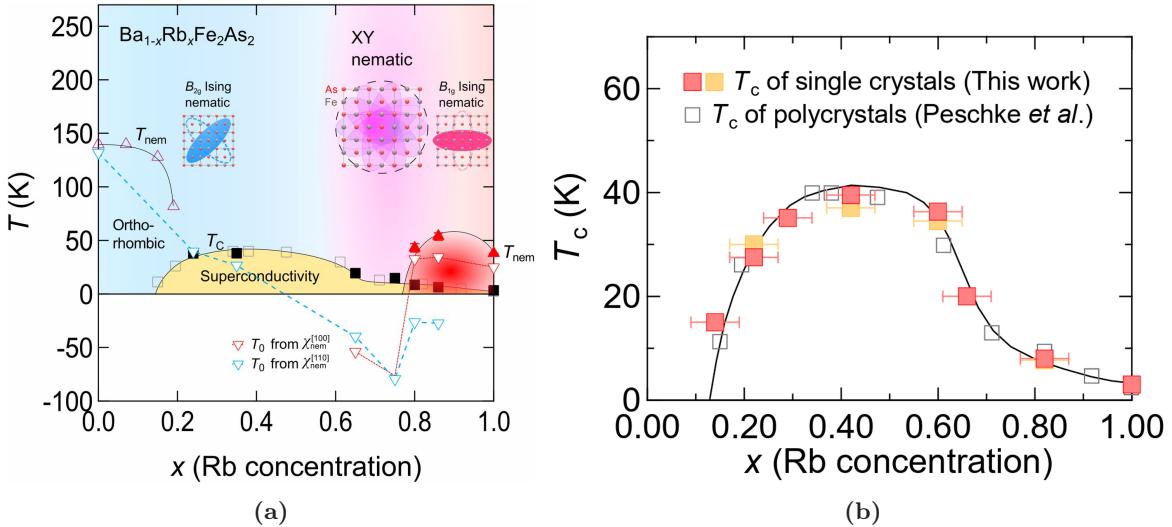


Abbildung 3.40.: a) Phasendiagramm von $\text{Ba}_{1-x}\text{Rb}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$. Die Curie-Weiss-Temperaturen T_0 wurden durch Anpassung der Elastowiderstandsdaten in [100]- (rote umgekehrte Dreiecke) und [110]-Richtung (blaue umgekehrte Dreiecke) bestimmt. Die dafür verwendeten Elastowiderstandsmessungen sind in Abbildung 3.41 gezeigt. Die Daten zur supraleitenden Sprungtemperatur T_c entsprechen den in Abbildung 3.40b dargestellten Werten. Abbildung entnommen aus [107]. b) Supraleitendes Phasendiagramm von $\text{Ba}_{1-x}\text{Rb}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$. Die gelben Quadrate stellen die Einschalttemperaturen der in Suszeptibilitätsmessungen beobachteten diamagnetischen Signale dar, während die roten Quadrate den supraleitenden Übergang T_c angeben, definiert durch das Erreichen des Nullwiderstands. Zum Vergleich sind zusätzlich Daten für polykristalline Proben aus Ref. [146] als schwarze Quadrate dargestellt. Entnommen aus Ref. [145].

In der zugrunde liegenden Arbeit wurde jedoch keine Separation des Elastowiderstandssignals in die unterschiedlichen Symmetriekanäle vorgenommen. Nach Gleichung 3.25 kann ein Anstieg des Beitrags im A_{1g} -Kanal auch zu einer Verstärkung des gemessenen Elastowiderstands entlang der [100]-Richtung führen. Darüber hinaus nimmt die Amplitude des Elastowiderstandssignals entlang der [110]-Richtung im untersuchten Dotierungsbereich nicht ab, sondern steigt zwischen $x = 0.74$ und $x = 0.86$ deutlich an, von etwa 25 auf rund 40 bei 40 K. Dieses Verhalten ist nicht konsistent mit einem Wechsel der dominanten nematischen Fluktuationen vom B_{2g} - in den B_{1g} -Kanal, wie er zur Erklärung der Daten vorgeschlagen wurde, was ebenfalls in Ref. [123] diskutiert wurde. Für gering dotierte Proben mit $x = 0.24$ und $x = 0.35$, bei denen aufgrund der Analogie zu $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ nematische Fluktuationen im B_{2g} -Kanal zu erwarten sind, zeigt sich entlang der [100]-Richtung kein oder nur ein sehr schwach divergierendes Elastowiderstandssignal. Diese Beobachtung legt eine alternative Interpretation nahe. Die Divergenz des Elastowiderstands entlang der [100]- und [110]-Richtung könnte auch durch einen zunehmenden Beitrag im A_{1g} -Kanal verursacht werden. Eine abschließende Klärung dieser Hypothese ist jedoch nicht möglich, da getrennte Messungen des longitudinalen und transversalen Elastowiderstands entlang beider Kristallrichtungen fehlen.

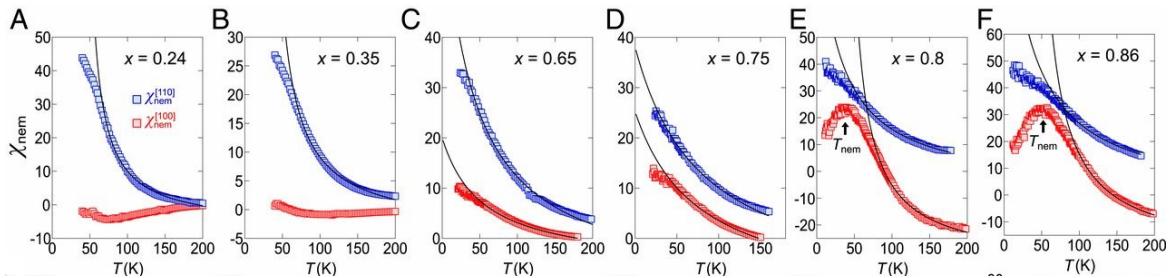


Abbildung 3.41.: Dotierungsabhängigkeit der nematischen Suszeptibilität im überdotierten $Ba_{1-x}Rb_xFe_2As_2$ gemessen entlang der [100]- (rot) und [110]-Richtung (blau) für $24\% < x < 86\%$. Entnommen aus [107].

Im Hinblick auf die Ergebnisse von Wiecki et al. [123] wäre ein wachsender Beitrag des A_{1g} -Kanals nicht überraschend. Dort wurde gezeigt, dass das A_{1g} -Signal in $RbFe_2As_2$ stärker ausgeprägt ist als in KFe_2As_2 (siehe Abbildung 3.31b). Dies weist auf stärkere elektronische Korrelationen in $RbFe_2As_2$ hin, was auch durch den Vergleich der Sommerfeldkoeffizienten gestützt wird. Für $RbFe_2As_2$ beträgt dieser $127\text{ mJ mol}^{-1}\text{K}^{-2}$, während er für KFe_2As_2 nur etwa $100\text{ mJ mol}^{-1}\text{K}^{-2}$ beträgt [14]. Durch den Anstieg des Elastowiderstands entlang der [110]-Richtung in $Ba_{1-x}Rb_xFe_2As_2$ kann in Analogie zu den Beobachtungen im K-System angenommen werden, dass auch hier die Korrelationseffekte mit wachsendem Rb-Gehalt zunehmen. Aufgrund der bereits in $RbFe_2As_2$ stärker ausgeprägten Korrelationen könnten diese im Vergleich zum K-System schon bei geringerer Lochdotierung dominieren. Unterstützt wird diese Annahme durch den Verlauf der aus Elastowiderstandsmessungen extrahierten Übergangstemperatur T_0 . In $Ba_{1-x}Rb_xFe_2As_2$ tritt das Minimum von T_0 bereits bei $x \approx 0.74$ auf, während es im K-System bei etwa $x \approx 0.8$ liegt. Aufgrund der begrenzten Anzahl an Messpunkten im überdotierten Bereich kann das genaue Dotierungsniveau allerdings nicht präzise bestimmt werden.

Ein weiteres Indiz für die Zunahme elektronischer Korrelationen mit zunehmender Dotierung ergibt sich aus dem Vergleich der supraleitenden Eigenschaften beider Systeme. In Abbildung 3.40b und Abbildung 3.37b ist der Verlauf der supraleitenden Sprungtemperatur T_c in Abhängigkeit der Dotierung dargestellt. Beide Systeme weisen eine typische „Kuppelstruktur“ auf, mit einem Maximum bei $x \approx 0.4$. Die maximale Sprungtemperatur liegt dabei bei 38 K für $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ und bei 37 K für $Ba_{1-x}Rb_xFe_2As_2$ [10, 145]. Während in beiden Systemen Supraleitung bis $x = 1$ beobachtet wird, zeigt sich ein deutlicher Unterschied im Abfall der Sprungtemperatur im überdotierten Bereich. In $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ beginnt dieser bei etwa

$x = 0.7$, in $\text{Ba}_{1-x}\text{Rb}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ hingegen bereits bei $x = 0.6$. Dieses Verhalten legt nahe, dass sich die zunehmenden elektronischen Korrelationen im Rb-System schon bei geringerer Dotierung auf die Supraleitung auswirken.

Die wesentlichen Erkenntnisse der Elastowiderstandsmessungen lassen sich wie folgt zusammenfassen: Der in der Arbeit von Hong et al. [120] beschriebene nicht-monotone Verlauf in der Intensität des Elastowiderstandssignals mit einem Maximum bei etwa $x = 0.8$ kann durch die in dieser Arbeit durchgeführten Messungen reproduziert werden. Durch die höhere Dotierungsauflösung in diesem Bereich lässt sich darüber hinaus ein ausgeprägtes Minimum des b -Parameters nachweisen, das in der Arbeit von Hong et al. nicht beobachtet wurde. Die durchgeführte Zerlegung des Elastowiderstandssignals in den A_{1g} - und den B_{2g} -Kanal, analog zu der Arbeit von Wiecki et al. [123], zeigt, dass der Anstieg des Elastowiderstands auf einen Anstieg des Signals im A_{1g} -Kanal zurückzuführen ist. Der Vergleich mit Literaturdaten belegt darüber hinaus, dass ein Signal im A_{1g} -Kanal für Dotierungen mit $x < 0.68$ nicht nachgewiesen werden kann. Das Einsetzen und die Zunahme des Signals im A_{1g} -Kanal lassen sich mit dem Einsetzen von elektronischen Korrelationen erklären. Theoretische Berechnungen des Elastowiderstandssignals in beiden Kanälen, basierend auf einem effektiven Mehrbandmodell, zeigen, dass eine Kondo-artige Korrelation auftritt, bei der insbesondere die Elektronen des d_{xy} -Orbitals lokalisiert werden. Dies steht im Einklang mit dem vermuteten orbital-selektiven Mottverhalten [15]. Dennoch zeigt auch das Elastowiderstandssignal im B_{2g} -Kanal bei hohen Lochdotierungen ein schwach divergentes Verhalten, was als Überbleibsel nematischer Fluktuationen interpretiert werden kann, die insbesondere im schwach dotierten Bereich eine dominante Rolle spielen [11].

4. Konstruktion eines neuen Aufbaus für dehnungsabhängige Transportmessungen

Wie im ersten Teil dieser Arbeit gezeigt werden konnte, ist die uniaxiale Dehnung ein effektiver Tuningparameter, um die elektronischen Eigenschaften von Materialien zu modulieren und diese zu untersuchen. Im Vergleich zum hydrostatischen Druck besteht der grundlegende Unterschied darin, dass durch die uniaxiale Dehnung die Rotationssymmetrie des Kristalls direkt gebrochen werden kann. Das ist der Grund, warum sich uniaxiale Dehnung und hydrostatischer Druck oftmals unterschiedlich auf die elektronischen Eigenschaften eines Systems auswirken. Beispieldsysteme hierfür sind Sr_2RuO_4 und $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$. Während hydrostatischer Druck in Sr_2RuO_4 zu einer langsamen Abnahme der supraleitenden Sprungtemperatur führt [147], bewirkt uniaxialer Druck eine schnelle Erhöhung derselben [148, 149]. In $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$ hingegen verstärkt hydrostatischer Druck die Supraleitung [150], während uniaxiale Dehnung entlang der a-Achse die Supraleitung schwächt und gleichzeitig statische Ladungsordnungen induzieren kann [151].

Die einfachste Möglichkeit zur Erzeugung uniaxialer Dehnungen besteht in der Verwendung mechanischer Federn und Schraubmechanismen, was in verschiedenen Aufbauten realisiert wurde [58, 152, 153]. Der Nachteil dieser Methode liegt in der nur eingeschränkten Möglichkeit, die Dehnung *in situ* einzustellen. Eine weitere Möglichkeit besteht in der Verwendung gasgefüllter Bälge, die eine *in situ*-Abstimmung der erzeugten Dehnung erlauben, indem sie zwei Probenhalter auseinanderdrücken [154]. Alternativ können Biegevorrichtungen eingesetzt werden, bei denen durch die Biegung des Probensubstrats die gewünschte Probenbelastung erzeugt wird [155, 156].

Das direkte Aufkleben von Proben auf Piezoaktuatoren, wie es im ersten Teil dieser Arbeit durchgeführt wurde (siehe Kapitel 3), ermöglicht eine kompakte Bauweise bei gleichzeitig *in situ* einstellbarer Dehnung. Ein Nachteil dieser Methode besteht jedoch darin, dass sowohl die laterale Ausdehnung des Piezoaktuators als auch seine thermische Ausdehnung auf die Probe übertragen werden. Zudem ist die maximal erreichbare Dehnung durch die mechanischen Eigenschaften des Aktuators begrenzt. Die am weitesten verbreiteten Piezoaktuatoren bestehen aus Blei-Zirkonat-Titanat. Innerhalb des typischen Spannungsbereichs von -30 V bis $+90\text{ V}$ beträgt die maximale relative Längenänderung bei Raumtemperatur lediglich etwa 0.06 %. Zudem nimmt diese Spanne mit sinkender Temperatur stark ab. Die temperaturabhängige maximale Dehnung und Stauchung eines PSt 150/5x5/7-Piezoaktuators der Firma Piezomechanik GmbH, welcher für die Messungen in Kapitel 3 verwendet wurde, ist für angelegte Piezospansungen zwischen -30 V und $+90\text{ V}$ in Abbildung 4.1 abgebildet.

Ziel ist es, eine Dehnungszelle zu entwickeln, die eine möglichst große, *in-situ* einstellbare uniaxiale Dehnung und Stauchung in einem großen Temperaturbereich erzeugen kann. Dafür wird ein Ansatz bestehend aus drei Piezoaktuatoren aufgegriffen, der von Hicks et al. [157] entwickelt wurde. Um einen möglichst großen Temperaturbereich für die Messungen zugänglich zu machen, wurde zusätzlich ein spezieller Messstab konstruiert und gefertigt. Das Design orientiert sich an dem in Unterabschnitt 3.4.1 beschriebenen Aufbau, welcher für die Elastowiderstandsmessungen verwendet wurde und wurde hinsichtlich des Durchmessers modifiziert, um ausreichend Platz für die neu entwickelte Dehnungszelle zu schaffen.

Im folgenden Abschnitt werden zunächst die Konstruktion und der Aufbau des neuen Mess-

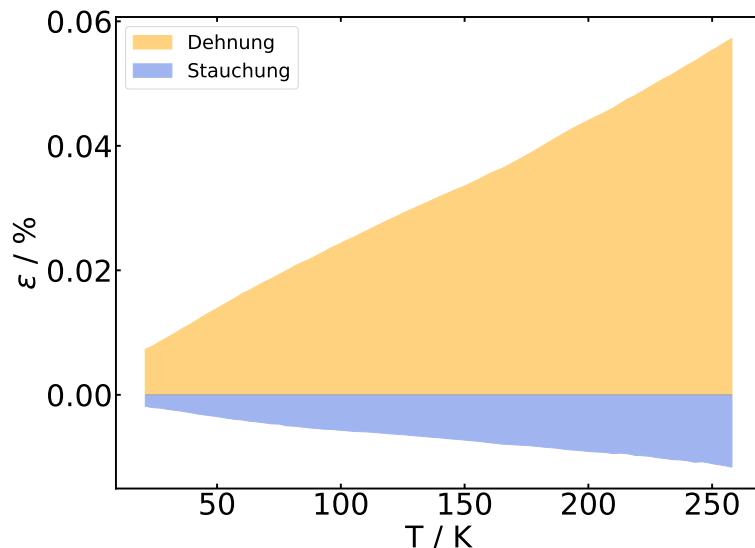


Abbildung 4.1.: Temperaturabhängige maximale Dehnung und Stauchung für angelegte Piezospannungen zwischen -30 V und +90 V eines PSt 150/5x5/7-Piezoaktuators der Firma Piezomechanik GmbH, welcher für die Messungen in Kapitel 3 verwendet wurde.

stabs detailliert beschrieben und dessen Funktionsweise demonstriert. Anschließend folgt eine Beschreibung der Dehnungszelle, gefolgt von einer exemplarischen Anwendung in Form von Elastowiderstandsmessungen an BaFe_2As_2 .

4.1. Konstruktion eines Messstabs

Wie bereits erläutert, soll der Messstab im Wesentlichen zwei Anforderungen erfüllen. Die Probentemperatur soll in einem möglichst großen Bereich von tiefen Temperaturen bis hin zu Raumtemperatur präzise einstellbar sein, und es soll ausreichend Platz für die entwickelte Dehnungszelle zur Verfügung stehen.

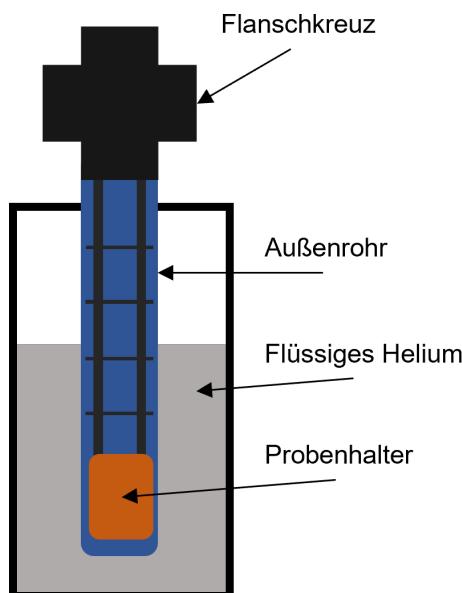


Abbildung 4.2.: Skizze des Versuchsaufbaus von Tieftemperaturmessungen mit einem Messstab.

In Abbildung 4.2 ist ein typischer Versuchsaufbau für Tieftemperaturexperimente schematisch dargestellt. Der Probenhalter befindet sich am unteren Ende eines sich im Vakuum befindenden Stabs, welcher in ein Kältebad getaucht wird. Je nach angestrebter Minimaltemperatur besteht dieses aus flüssigem Stickstoff oder flüssigem Helium. Auf diese Weise kann die Probe auf die jeweilige Siedetemperatur des Kühlmittels abgekühlt werden. Diese beträgt 77.4 K für flüssigen Stickstoff und 4.2 K für flüssiges Helium bei Normaldruck [125].

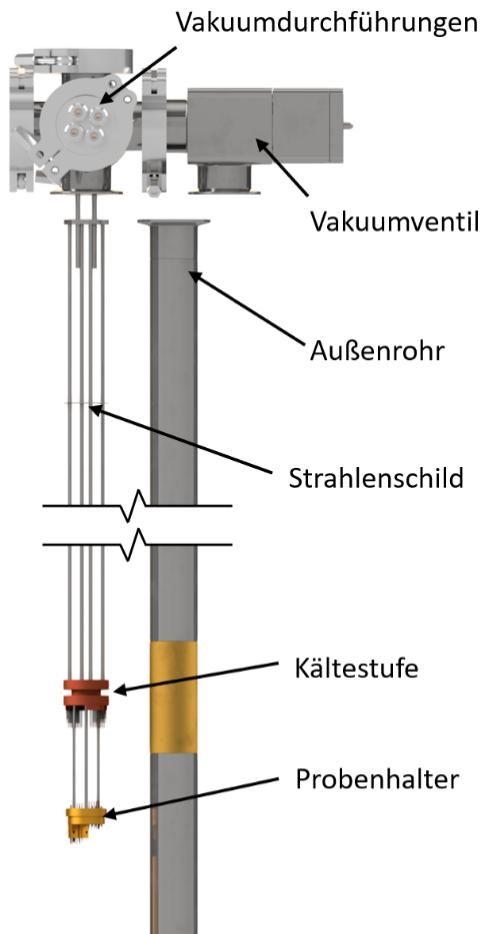


Abbildung 4.3.: Rendering des gebauten Messstabs. Zur besseren Übersicht ist nicht die ganze Länge des Stabs dargestellt. Zur Durchführung der Messung wird der Stab in das Vakuum-Außenrohr gesteckt. Für eine bessere Übersicht ist dieses auf dem Bild neben dem Innenteil des Stabs dargestellt.

In Abbildung 4.3 ist ein Rendering des gebauten Messstabs abgebildet. Das Herzstück bildet ein Probenhalter, der über Edelstahlkapillaren an einem ISO-KF-50-Flanschkreuz montiert ist. Der Probenhalter wird in ein vakuumdichtes Edelstahlrohr eingesetzt, welches in dem Rendering zur besseren Übersicht neben dem Stab abgebildet ist. Durch die geringen Temperaturen ist es notwendig, das Innere des Außenrohrs zu evakuieren, da sonst die unterschiedlichen Bestandteile der Luft bei der jeweiligen Siedetemperatur kondensieren würden, was sich negativ auf die Messung auswirken kann. Um den Probenhalter, welcher auf eine möglichst geringe Temperatur abgekühlt werden soll, vor der Wärmestrahlung des oberen Teils des Messstabs zu schützen, welcher permanent bei Raumtemperatur ist, sind zwischen den Edelstahlkapillaren Strahlenschilder montiert, welche die Wärmestrahlung reflektieren.

Zum Erreichen einer möglichst niedrigen Basistemperatur ist ein möglichst guter thermischer Kontakt zum Kältebad notwendig. Der dafür wesentliche Mechanismus ist dabei die Wärmeleitung. Dabei kommt es zur Übertragung von Wärme durch Gitterschwingungen und Elektronendiffusion innerhalb eines Körpers oder zwischen Körpern im direkten Kontakt.

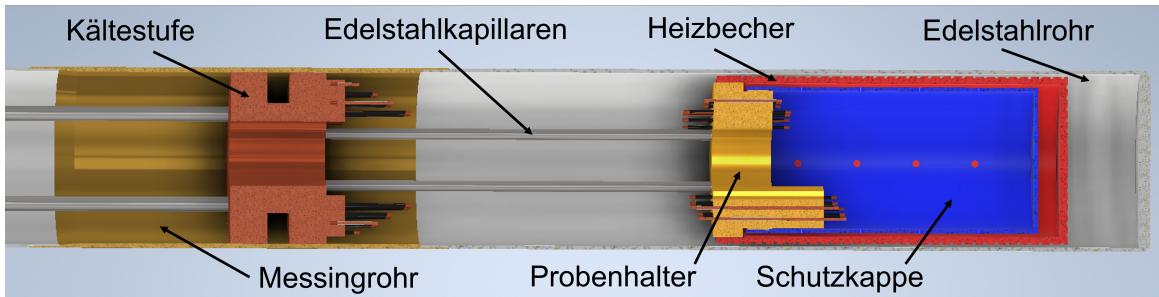


Abbildung 4.4.: Skizze der wesentlichen Bauteile des unteren Teils des Messstabs.

Um die Probe effektiv abkühlen zu können, muss das Innere des Stabs einen möglichst guten mechanischen Kontakt mit dem Außenrohr haben. Dies wird durch den in Abbildung 4.4 skizzierten Aufbau erreicht. Oberhalb des Probenhalters ist die sogenannte Kältestufe zwischen die Kapillaren gelötet, die im Wesentlichen aus einer Kupferscheibe besteht. Auf der Höhe der Kältestufe ist in das Außenrohr aus Edelstahl ein Zwischenstück aus Messing eingelötet. Beim Abkühlen zieht sich das Messingrohr stärker zusammen als die Kältestufe, wodurch ein guter thermischer Kontakt entsteht.

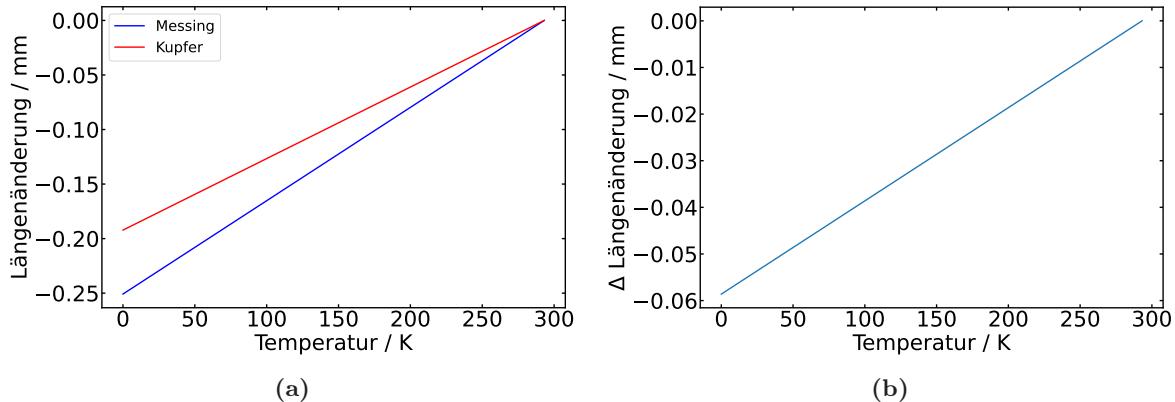


Abbildung 4.5.: Die durch die Abkühlung verursachte Längenänderung des Innen- und Außenradius des Messingrohrs und der Kältestufe. a) Temperaturabhängige Längenänderung für Kupfer und Messing bei einem Durchmesser von 46.5 mm. b) Relative Längenänderung der Durchmesser bestimmt aus den Daten aus a.).

Mit

$$\Delta L = \alpha_0 \cdot L_0 \cdot \Delta T \quad (4.1)$$

kann die thermische Längenänderung bestimmt werden [158]. Im hier skizzierten Fall entspricht dies dem Außen- bzw. Innendurchmesser der Kältestufe und des Messingrohrs. α_0 ist der materialspezifische Ausdehnungskoeffizient, L_0 der Anfangsdurchmesser des Werkstücks bei der Starttemperatur und ΔT die Temperaturdifferenz zwischen der Starttemperatur und der betrachteten Temperatur. In Abbildung 4.5a sind die temperaturabhängigen Längenänderungen für Kupfer und Messing nach der oben angegebenen Formel abgebildet. Dabei wurde als Starttemperatur 300 K und für $\alpha_{\text{Messing}} = 18.4 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$ bzw. $\alpha_{\text{Kupfer}} = 14.1 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$ verwendet [159]. Der Innendurchmesser des Messingrohrs und der Außendurchmesser der Kältestufe betrugen jeweils 46.5 mm. Grundlage des Mechanismus ist eine passgenaue Fertigung der Bauteile. Dabei sind die Maße so gewählt, dass sich die aus Kupfer gefertigte Kältestufe beim Zusammenbau des Stabs möglichst spielfrei in das Messingrohr einschieben lässt. Aufgrund des höheren Wärmeausdehnungskoeffizienten zieht sich das Messingrohr beim Abkühlen stärker zusammen als die Kältestufe. Durch den dadurch entstehenden festen mechanischen

Kontakt zwischen den beiden Bauteilen entsteht ein guter thermischer Kontakt zwischen der Kältestufe und dem Heliumbad, wodurch in Folge auch der Probenhalter abgekühlt wird. In Abbildung 4.5b ist die aus Abbildung 4.5a abgeleitete Differenz der Längenänderung der Durchmesser abgebildet. Da das Außenrohr durch den direkten Kontakt mit dem flüssigen Helium eine Temperatur von etwa 4.2 K hat, darf das Spiel zwischen Kältebrücke und Messingrohr maximal 0.05 mm betragen, um die Funktion des Mechanismus zu gewährleisten. Da die Ausdehnungskoeffizienten temperaturabhängig sind, stellt dieser Wert jedoch nur eine grobe Abschätzung dar. Gegenüber dem Edelstahlrohr hat das Messingrohr zwei Vorteile. Der Ausdehnungskoeffizient für die verwendete Edelstahllegierung 1.4301 ist mit $\alpha_{\text{Edelstahl}} = 16.0 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ kleiner als der von Messing, was die Anforderung an die Fertigungstoleranzen nochmals erhöhen würde [159]. Da der Ausdehnungskoeffizient der Edelstahllegierung größer als die des Kupfers ist, würde der Mechanismus allerdings prinzipiell funktionieren. Allerdings ist die Wärmeleitfähigkeit der Edelstahllegierung mit $15 \text{ W} (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$ bei Raumtemperatur deutlich kleiner als der verwendeten Messinglegierung mit $67 \text{ W} (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$, was den thermischen Kontakt zwischen Kältestufe und Heliumbad deutlich reduzieren würde [160]. Die geringere Wärmeleitfähigkeit von Edelstahl ist jedoch der Grund dafür, dass es als Material für das Außenrohr verwendet wird. Da sich der obere Teil des Messstabs während des Experiments bei Raumtemperatur befindet, wird so der Wärmeeintrag durch das Rohr auf den Probenhalter reduziert. Aus diesem Grund wird beispielsweise kein durchgehendes Messingrohr verwendet, da so der Wärmeeintrag signifikant steigen würde. Ein weiterer Me-

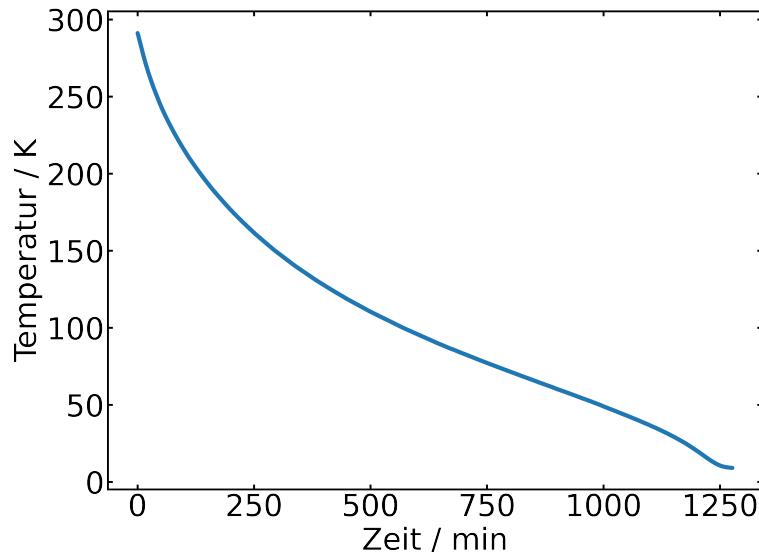


Abbildung 4.6.: Temperaturverlauf des Probenhalters während des Abkühlvorgangs in einem vollständig evakuierten Messstab ohne Austauschgas unter Verwendung von flüssigem Helium als Kühlmittel. Die Basistemperatur von etwa 9 K wird nach rund 1250 min erreicht.

chanismus, der zur Abkühlung des Probenhalters beitragen kann, ist die Wärmeübertragung über das im Inneren des Messstabs verbleibende Restgas. Aufgrund des Vakuums innerhalb des Rohrs spielt dieser Effekt unter normalen Bedingungen eine untergeordnete Rolle. In Abbildung 4.6 ist der Temperaturverlauf des Probenhalters während des Abkühlprozesses in einem vollständig evakuierten Messstab ohne Austauschgas dargestellt. Die Basistemperatur beträgt in diesem Fall etwa 9 K und wird nach rund 1250 min erreicht. Durch die Verwendung von Helium als Austauschgas kann der thermische Kontakt deutlich verbessert und der Abkühlvorgang erheblich beschleunigt werden. Auf diese Weise lässt sich nicht nur die Abkühlzeit beliebig verkürzen, sondern auch eine niedrigere Basistemperatur von 4.2 K realisieren. Im Hinblick auf den Heliumverbrauch sollte der Messstab möglichst langsam abgekühlt werden, da es durch ein zu schnelles Abkühlen zu einem großen Wärmefluss in das Heliumbad kommt,

was dessen Verdampfung erheblich beschleunigt und so den Verbrauch erhöht. Aus experimenteller Sicht ist daher ein Kompromiss zwischen einer angemessenen Abkühlzeit und einem effizienten Einsatz des flüssigen Heliums anzustreben.

Tieftemperaturexperimente werden typischerweise in Kryostaten durchgeführt, die über eine integrierte Magnetspule verfügen, um Messungen in Abhängigkeit eines äußeren Magnetfelds zu ermöglichen [161]. Solche Magnetspulen weisen standardmäßig einen Innenraumdurchmesser von 40 mm oder 52 mm auf. Da für die in dieser Arbeit durchgeführten Messungen kein Magnetfeld benötigt wird, kann auf einen solchen Kryostaten verzichtet und der Messstab auch direkt in eine Transportkanne eingesetzt werden. Die entscheidende Einschränkung dabei ist der Durchmesser des Öffnungsflansches, der bei den meisten Kannen mit einer lichten Weite von 50 mm den tatsächlich nutzbaren Innendurchmesser vorgibt. Um den Stab möglichst vielseitig einsetzen zu können, wurde der Außendurchmesser des Außenrohres so gewählt, dass er gerade durch eine Öffnung mit 50 mm lichter Weite passt. Dadurch kann der Stab sowohl in einer Transportkanne für Messungen ohne äußeres Magnetfeld als auch in einem Kryostaten mit Magnetspule und einem Innendurchmesser von 52 mm verwendet werden. Als Ausgangsmaterial wird ein 50 mm x 1.5 mm Edelstahlrohr der Legierung 1.4301 verwendet, welches um etwa 0.2 mm abgedreht wurde.

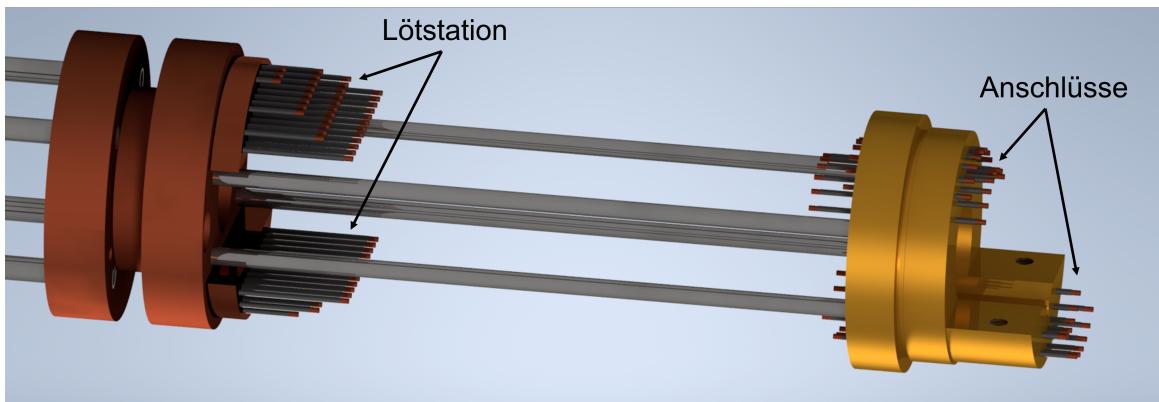


Abbildung 4.7.: An die Kältestufe angeschlossene Lötstation, über welche die vom Flanschkopf kommenden Kupferdrähte thermisch angebunden und anschließend zum Probenhalter weitergeführt werden.

Um die Durchführung der Messungen zu ermöglichen, sind am Probenhalter insgesamt 32 Anschlüsse angebracht (siehe Abbildung 4.7). Diese bestehen aus 0.75 mm dicken, isolierten Kupferdrähten, die in passende Bohrungen im Probenhalter eingeklebt sind. Da die bis zu 30 mm tiefen Bohrungen schwer in das aus Kupfer gefertigte Bauteil eingebracht werden können, wurden sie mithilfe von Funkenerosion gefertigt. Bei der Funkenerosion handelt es sich um ein abtragendes Fertigungsverfahren, bei dem elektrische Entladungen zwischen einer Elektrode und dem Werkstück das Material punktuell und sehr präzise abtragen. Dieses Verfahren eignet sich besonders gut für harte oder schwer zerspanbare Metalle wie es für Kupfer der Fall ist.

Die Anschlüsse am Probenhalter sind über 50 µm dicke, isolierte Kupferdrähte mit Vakuumdurchführungen am Flanschkopf verbunden. An jeder Durchführung sind vier Drähte angeschlossen. So kann beispielsweise mit den Drähten eines Anschlusses eine Vier-Punkt-Widerstandsmessung durchgeführt werden. Die Kupferdrähte sind paarweise verdrillt, um elektromagnetische Störeinflüsse zu minimieren. Durch die Verdrillung heben sich induzierte Störsignale weitgehend gegenseitig auf, was die Signalqualität deutlich verbessert. Zur zusätzlichen Abschirmung verlaufen die Drähte durch die Edelstahlkapillaren und sind zum mechanischen Schutz zusätzlich in Gewebebeschläuchen geführt. Da im Falle eines Kabelbruchs ein einzelner Draht nicht ersetzt werden kann, wurde pro Anschluss ein zusätzliches, verdrilltes

Kupferdrahtpaar als Reserve verlegt. Ein Grund für die Wahl von nur 50 µm dicken Kupferdrähten ist, dass diese am Flanschkopf dauerhaft bei Raumtemperatur verbleiben. Aufgrund der guten Wärmeleitfähigkeit von Kupfer würde sonst ein erheblicher Wärmeeintrag zum Probenhalter erfolgen. Um dies zu minimieren, wurden möglichst dünne Drähte verwendet. Zusätzlich ist jeder Kupferdraht über eine Lötstation thermisch mit der Kältestufe verbunden (siehe Abbildung 4.7). Auf diese Weise wird der Wärmeeintrag auf die Probe reduziert und eine hohe thermische Stabilität gewährleistet, wodurch unerwünschte Temperaturgradienten und damit verbundene Thermospannungen vermieden werden. Die Lötstation besteht aus einem Kupferblock, in den 0.75 mm dicke, voneinander isolierte Kupferdrähte eingeklebt sind. Insgesamt besteht die Lötstation aus zwei solchen Kupferblöcken, die fest mit der Kältestufe verbunden sind. Jeder vom Flanschkopf kommende Draht ist an einem Anschluss der Lötstation verlötet und über einen weiteren Kupferdraht mit dem entsprechenden Anschluss am Probenhalter verbunden.

Die minimale Probentemperatur ergibt sich aus dem thermischen Gleichgewicht zwischen der Kühlleistung des beschriebenen Aufbaus und dem parasitären Wärmeeintrag. Letzterer erfolgt hauptsächlich über das Außenrohr, die Kapillaren und die Messleitungen, die vom Flanschkopf, welcher sich stets auf Raumtemperatur befindet, Wärme in Richtung des Probenhalters leiten. Um den Wärmeeintrag möglichst gering zu halten, sind, neben möglichst dünnen Kupferdrähten zudem möglichst dünne Kapillaren verwendet worden. Diese haben einen Außendurchmesser von 4 mm und eine Wandstärke von 0.5 mm. Als Material für die Kapillaren wurde wegen seiner geringen Wärmeleitfähigkeit Edelstahl gewählt, um so den parasitären Wärmeeintrag zu reduzieren. Zum Schutz des Probenhalters vor Wärmestrahlung sind zwischen den Kapillaren reflektierende Schutzschilde eingebaut, welche die Strahlung wirksam abschirmen und so das untere Ende des Stabs vor direktem Strahlungseintrag schützen. Damit auch die Kältestufe als Strahlungsschutz dienen kann, verfügt diese in der Mitte über eine umlaufende Nut (siehe Abbildung 4.4). Damit die Drähte durch die Kapillaren zur Kältestufe geführt und auf der Unterseite mit der Lötstation verbunden werden können, sind auf der Oberseite der Kältestufe durchgehende Bohrungen bis zur Nut vorhanden. Auf der Unterseite befinden sich zwei separate Öffnungen, durch die die ankommenden Leitungen zur Lötstation verlegt sind. Diese sind so versetzt angeordnet, dass kein direkter Strahlungsweg zum unteren Teil des Stabs besteht.

4.1.1. Temperaturregelung

Der Messstab soll nicht nur Messungen bei möglichst tiefen Temperaturen ermöglichen, sondern auch eine präzise Einstellung beliebiger Temperaturen im erreichbaren Temperaturbereich erlauben. Hierfür wird ein aus Kupfer gefertigter und vergoldeter Heizbecher verwendet, der auf den Probenhalter aufgeschraubt werden kann (siehe Abbildung 4.4, rot). Um die abgestrahlte Wärme zusätzlich zu homogenisieren, ist unter dem Heizbecher eine Schutzkappe montiert, die ebenfalls aus Kupfer besteht und vergoldet ist (siehe Abbildung 4.4, blau). Eine zusätzliche Darstellung des Heizbechers und der Schutzkappe ist in Abbildung 4.8 zu sehen. Der Außendurchmesser des Heizbechers beträgt 45.5 mm bei einer Länge von 114 mm. Die Wandstärke beträgt 2 mm. In die Außenwand sowie die Unterseite ist eine doppelte, spiralförmige Einkerbung eingefräst. Diese hat eine Breite von 1 mm, eine Tiefe von 0.62 mm und eine Steigung von 6 mm. Zur Erzeugung der Heizleistung ist ein Manganindraht in diese Kerbe des Heizbechers eingeklebt. Beim Anlegen eines elektrischen Stroms erwärmt sich der Draht und erzeugt so die gewünschte Heizleistung. Für einen möglichst guten thermischen Kontakt zwischen Heizbecher und Probenhalter wurde an der Oberseite des Heizbechers ein 8 mm langes M42x0.5-ISO-Sondergewinde eingebracht, das in ein entsprechendes Gegengewinde am Rand des Probenhalters eingeschraubt werden kann. Die Schutzkappe besitzt einen Durchmesser von 39.5 mm, eine Länge von 99 mm und eine Wandstärke von 1 mm. Zur Befestigung ist an der Oberkante ebenfalls ein M38x0.5-ISO-Sondergewinde angebracht, das in das entspre-

chende Gegengewinde am Rand des Probenhalters eingeschraubt werden kann. Heizbecher und Schutzkappe verfügen zudem über Bohrungen, sodass auch das Innenvolumen evakuiert werden kann.

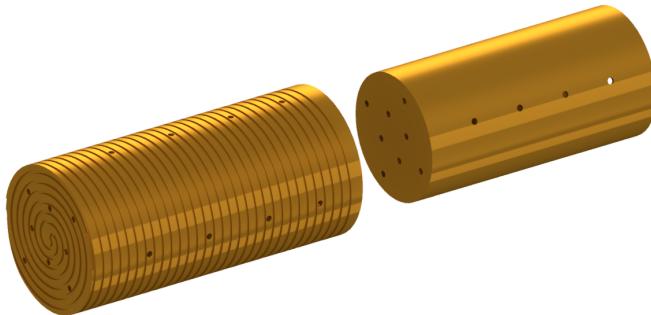


Abbildung 4.8.: Vergoldete Heizkappe aus Kupfer mit spiralförmiger Aufnahme für den Heizdraht aus Manganin. Um die so entstehende Wärme zusätzlich zu homogenisieren sitzt in der Heizkappe eine ebenfalls vergoldete und aus Kupfer gefertigte Schutzkappe. Beide Bauteile verfügen zudem über Bohrungen, die es ermöglichen, ihr Inneres zu evakuieren und können über ein Gewinde auf den Probenhalter gedreht werden.

Vergoldete Oberflächen haben viele Vorteile. Dazu gehören die Korrosionsbeständigkeit, die Ermöglichung eines guten thermischen Kontakts und geringe Neigung zur Ausgasung. Im Vergleich zu unbehandelten Kupfer weist eine vergoldete Oberfläche zudem eine geringere Emissivität auf, wodurch die unerwünschte Wärmestrahlung reduziert wird [161]. Dies ist der Hauptgrund, warum vergoldete Oberflächen häufig in Tieftemperaturexperimenten eingesetzt werden und ist auch der Grund dafür, dass neben dem Heizbecher und der Schutzkappe auch der komplette Probenhalter mit einem galvanischen Verfahren vergoldet wurden.

Da die Kupferoberflächen schon nach wenigen Tagen sehr stark oxidieren (siehe Abbildung 4.9a), wurde dafür die Oxidschicht der Bauteile mit einem elektrochemischen Verfahren vor dem Vergolden entfernt. Dafür wurden die Bauteile in eine 1.25 mol/L starke Natronlauge getaucht und zwischen Bauteil und einer weiteren Elektrode für etwa ein bis zwei Minuten ein Strom von etwa 1 A angelegt. Durch diesen Prozess wird die oberste, oxidierte Materialschicht abgetragen, sodass eine saubere, reine Kupferoberfläche freigelegt wird.

Anschließend wurden die Bauteile zusätzlich entfettet und gründlich mit destilliertem Wasser abgespült. Die so vorbereiteten Oberflächen konnten anschließend mittels Goldelektrolyt vergoldet werden. Dazu wurde ein Baumwollpad über eine Platinelektrode gestülpt und mit Goldelektrolyt getränkt. Zwischen der Platinelektrode und dem Bauteil wurde eine Spannung von etwa 6 V angelegt, wobei die Elektrode positiv und das Bauteil negativ geladen war. Durch leicht kreisende Bewegungen des Pads wurde eine gleichmäßige Goldschicht auf der Oberfläche abgeschieden. Dieser Vorgang wurde so lange wiederholt, bis sich eine durchgehende Goldschicht mit einer Dicke von einigen μm gebildet hat. Wobei dies durch die Prozessparameter und einer optischen Beurteilung abgeschätzt wurde.

Im ersten Versuch wurde ein 100 μm dicker Manganindraht mit DeltaBOND 152 in die spiralförmige Vertiefung des Heizbechers eingeklebt. Bei einer Drahtlänge von etwa 2 m ergibt sich ein Widerstand von $R_{\text{heiz}} = 360 \Omega$ [125]. Damit die Wärmeentwicklung ausschließlich im Manganindraht und nicht in den Zuleitungen erfolgt, sollte das Verhältnis zwischen Leitungs-widerstand und Heizerwiderstand so gewählt werden, dass der Beitrag der Leitungen vernach-lässigbar ist (typischerweise kleiner als etwa 1 %). Aus diesem Grund und um die Stromtragfähigkeit der Zuleitungen zu erhöhen, wurden isolierte Kupferdrähte mit einem Durchmesser von 150 μm für die Verbindung zum Heizer verwendet. Diese weisen bei einer Länge von 2 m einen Widerstand von $R_{\text{leit}} = 1.9 \Omega$ auf. Damit ergibt sich ein Verhältnis von $R_{\text{leit}}/R_{\text{heiz}} = 0.5 \%$,

was deutlich unter dem geforderten Grenzwert liegt. Beim Einkleben des Manganindrahts ist darauf zu achten, dass dieser vollständig innerhalb der Vertiefung im Heizbecher verlegt ist. Andernfalls könnte der Draht aufgrund seiner geringen Wärmeleitfähigkeit bei Stromfluss überhitzen und durchbrennen. An seinen Enden sind jeweils $100\text{ }\mu\text{m}$ dicke Kupferdrähte angelötet, über die der Heizer beim Einbau mit den zugehörigen Anschlüssen an der Rückseite des Probenhalters verbunden wird.

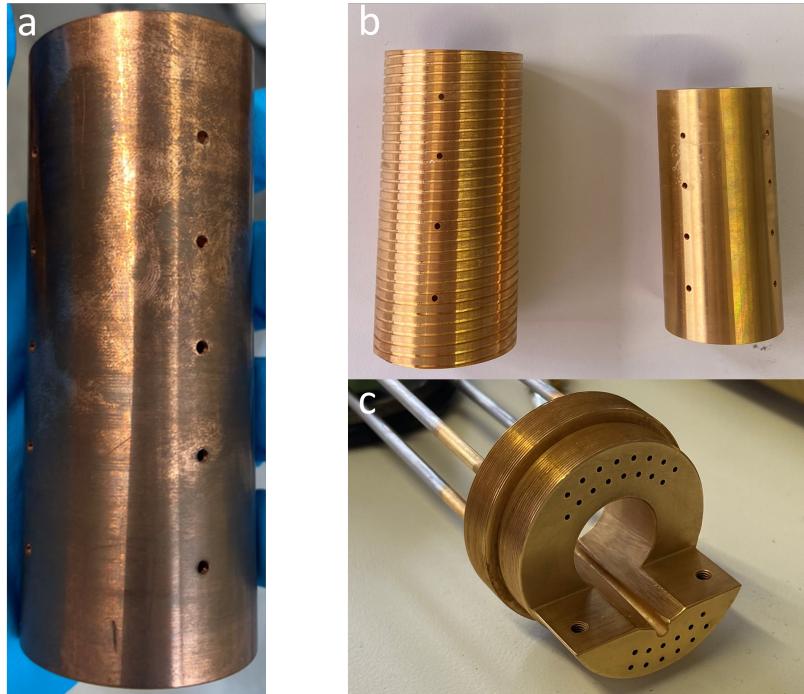


Abbildung 4.9.: a) Stark oxidierte Kupferoberfläche der Schutzkappe, welche vor dem Vergolden entfernt werden muss. b) Vergoldeter Heizbecher mit spiralförmiger Aufnahme (links) sowie vergoldete Schutzkappe (rechts) c) Vergoldeter Probenhalter.

Konfiguration des Heizbechers

Für die Temperaturregelung wird ein LakeShore 340 Temperaturregler verwendet, welcher eine maximale Ausgangsleistung von 100 W , bei einer maximalen Spannung von 50 V und einem maximalen Strom von 2 A hat [128]. Nach dem Ohmschen Gesetz wird die maximale Leistung bei einem Heizwiderstand von 25Ω erreicht, was deutlich kleiner als die 360Ω des Heizers ist. Bei 360Ω erreicht der LakeShore bei einer maximalen Spannung von 50 V einen maximalen Strom von etwa 0.14 A .

Für die elektrische Leistung gilt:

$$P = U \cdot I = R \cdot I^2, \quad (4.2)$$

wodurch sich in diesem Fall eine maximale Leistung von 6.95 W ergibt. Aufgrund eingeschränkten Zugangs zu flüssigem Helium wurden die ersten Tests des Heizers mit flüssigem Stickstoff durchgeführt. In Abbildung 4.10a ist der zeitliche Temperaturverlauf des Probenhalters bei einer konstanten Heizleistung von 6.95 W dargestellt. Die Starttemperatur betrug bei dieser Messung etwa 158 K . Trotz kontinuierlicher Heizung mit der maximalen Leistung konnte die Temperatur innerhalb von über 2500 s nur geringfügig auf etwa 164 K erhöht werden, wobei die Temperaturänderungsrate sehr klein blieb. Dies zeigt, dass die in dieser Konfiguration erzielbare Heizleistung des Systems, bestehend aus dem eingesetzten Heizer und dem LakeShore 340, nicht ausreicht, um die Probe effektiv auf Raumtemperatur zu erwärmen. Um die

erreichbare Endtemperatur zu erhöhen, wurde der Heizbecher mit einem vergoldeten Aluminiumklebeband umwickelt. Ziel war es, den Wärmeverlust durch abgestrahlte Energie zu reduzieren. Der Strahlungsverlust lässt sich näherungsweise mit der Stefan-Boltzmann-Gleichung berechnen [158]. Diese lautet:

$$P_{Strahlung} = \sigma \cdot \epsilon \cdot A \cdot (T^4 - T_{Umgebung}^4) . \quad (4.3)$$

Dabei ist $P_{Strahlung}$ der Wärmeverlust durch Strahlung, σ die Stefan-Boltzmann-Konstante, ϵ der Emissionsgrad der Oberfläche, welcher für polierte Metalle Werte zwischen 0.1 und 0.3 und für matte Oberflächen etwa 0.9 beträgt, A die Oberfläche des Heizers, T die Temperatur des Heizbechers und $T_{Umgebung}$ die Temperatur der Umgebung um den Heizbecher, welche im Fall des mit flüssigen Stickstoff gekühlten Stabs etwa 77 K betragen sollte [161, 162]. Daraus wird ersichtlich, dass die Wärmestrahlung des Heizers mit zunehmender Temperatur zu einem dominanten Verlustmechanismus wird, der die maximal erreichbare Endtemperatur begrenzt. Dies liegt daran, dass die abgestrahlte Leistung gemäß der Stefan-Boltzmann-Gleichung proportional zur vierten Potenz der Temperatur ansteigt. Das verwendete Klebeband reflektiert einen Teil dieser Wärmestrahlung zurück zum Heizer und trägt somit zur Reduktion der Strahlungsverluste bei.

Abbildung 4.10b zeigt den zeitlichen Verlauf der Probentemperatur bei einer konstanten Heizleistung von 6.95 W. Auch nach über 7000 s erreicht die Temperatur lediglich 184 K, wobei die Änderungsrate bereits zu diesem Zeitpunkt sehr gering ist. Eine weitere signifikante Temperaturerhöhung ist daher auch bei längerer Heizdauer nicht zu erwarten. Dies zeigt zum einen, dass das verwendete Klebeband durchaus einen Einfluss auf die maximale Probentemperatur hat, dieser jedoch nicht ausreicht, um die Temperatur auf die angestrebten 300 K zu erhöhen, weshalb der Heizer weiter optimiert werden muss.

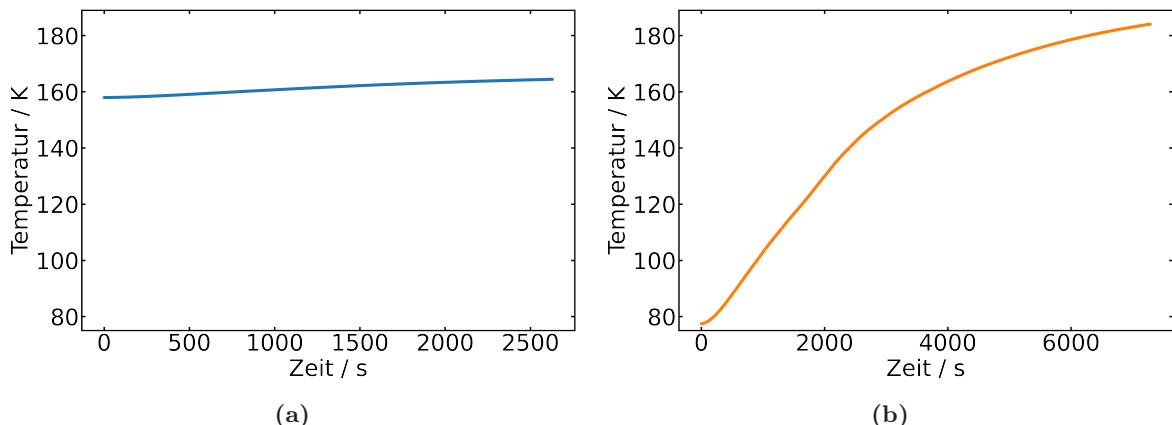


Abbildung 4.10.: a) Probentemperatur in Abhängigkeit der Zeit für einen Heizdraht und einer konstanten Heizleistung von 6.95 W. b) Probentemperatur in Abhängigkeit der Zeit für die gleiche Heizbecherkonfiguration wie in a), welche zusätzlich mit einer Lage vergoldeten Klebeband umwickelt wurde. Für die komplette Messung wurde eine konstante Heizleistung von 6.95 W angelegt.

Die maximale Leistung des Heizers kann über Gleichung 4.2 bestimmt werden. Dabei bezeichnet I den Strom, der durch den Heizer fließt. Dieser ergibt sich zu $I = U/R_{Heizer}$, wobei U die Ausgangsspannung des Netzteils und R_{Heizer} der Widerstand des Heizers ist. Wird dieser Zusammenhang in Gleichung 4.2 eingesetzt, ergibt sich:

$$P = R \cdot \left(\frac{U}{R_{Heizer}} \right)^2 = \frac{U^2}{R_{Heizer}} . \quad (4.4)$$

Das bedeutet, dass eine Verringerung des Heizwiderstands bei konstanter Spannung zu einem größeren Stromfluss führt und somit die Heizleistung erhöht. Eine Halbierung des Heizwider-

stands führt gemäß Gleichung 4.4 bei gleicher Spannung U zu einer Verdopplung der Heizleistung. Um den Widerstand zu halbieren, wurde ein zweiter, baugleicher Manganindraht in die Nut des Heizers eingeklebt und parallel zum ersten Heizdraht geschaltet, wodurch sich der Gesamtwiderstand auf 170Ω reduziert. Damit ergibt sich ein neues Verhältnis von $R_{leit}/R_{heiz} \approx 1\%$, was gerade im Bereich der geforderten 1 % liegt.

Durch die Kupferdrähte, die vom Flanschkreuz zum Heizer führen, fließt bei maximaler Leistung ein Strom von etwa 0.294 A. Da diese Drähte lediglich einen Durchmesser von 150 μm aufweisen und im Vakuum verlegt sind, besteht die Gefahr, dass sie durch den Strom überhitzen und durchbrennen könnten. Um dies auszuschließen, wurde ein etwa 10 cm langes Stück des Kupferdrahts in einer Vakuumkammer mit verschiedenen Stromstärken belastet. Dabei wurde darauf geachtet, dass der Draht keinen Kontakt zur Wand der Vakuumkammer hatte. Bei einem Strom von 2 A zeigte der Draht auch nach über 8 Stunden keine Schädigung. Bei 4 A hingegen brannte der Draht nach etwa 5 Minuten durch. Dies zeigt, dass ein Dauerstrom von ca. 0.3 A für den eingesetzten Kupferdraht unkritisch ist und keinen Schaden verursacht. Mit der finalen Version des Heizbechers, bestehend aus zwei parallel geschalteten Manganindrähten und einer Schicht vergoldetes Klebeband, ist es möglich, auch unter Verwendung des LakeShore 340 eine Probentemperatur von über 300 K zu erreichen.

Optimierung der Temperaturregelung

Um die Temperatur möglichst präzise einstellen zu können, verfügt der LakeShore 340 über einen Proportional-Integral-Differential-Regler (PID-Regler), welcher die Leistung des Heizers in Abhängigkeit von der Probentemperatur regelt. Ein PID-Regler ist ein weit verbreitetes Regelungssystem, das in der Automatisierungstechnik zur Steuerung dynamischer Prozesse eingesetzt wird. Die Stellgröße $u(t)$ des PID-Reglers setzt sich aus drei Anteilen zusammen, die jeweils auf unterschiedliche Eigenschaften des Regelfehlers $e(t)$ reagieren [163]. Der Fehler ergibt sich dabei aus der Differenz zwischen dem gewünschten Sollwert $w(t)$ und dem gemessenen Istwert $y(t)$:

$$e(t) = w(t) - y(t). \quad (4.5)$$

Die resultierende Stellgröße $u(t)$ des Reglers ergibt sich als Summe der drei Anteile:

$$u(t) = K_P e(t) + K_I \int_0^t e(\tau) d\tau + K_D \frac{d}{dt} e(t), \quad (4.6)$$

wobei K_P , K_I und K_D die Regelparameter sind. Der proportionale Anteil (P-Anteil) ist direkt proportional zum momentanen Fehler. Ein größerer Proportionalfaktor K_P führt zu einer stärkeren Reaktion auf Abweichungen, kann jedoch zu Instabilität und Überschwingen führen. Der integrale Anteil (I-Anteil) berücksichtigt die gesamte bisherige Fehlerhistorie und ist besonders wichtig für Systeme, bei denen eine dauerhafte Regelabweichung vermieden werden muss. Allerdings kann ein zu hoher Integralfaktor K_I zu langsamem Schwingungen und schlechter Dynamik führen. Der differentielle Anteil (D-Anteil) reagiert auf die Änderungsrate des Fehlers und trägt dazu bei, plötzliche Schwankungen oder Störungen auszugleichen. Zu hohe Werte für K_D können jedoch zu einer verstärkten Empfindlichkeit gegenüber Messrauschen führen. Für eine präzise Temperaturregelung ist es essenziell, die PID-Parameter richtig zu wählen.

Dafür wurde der Regler im ersten Schritt als P-Regler betrieben und der P-Wert variiert. Das bedeutet, dass die I- und D-Anteile null sind. In Abbildung 4.11 ist die geregelte Probentemperatur in Abhängigkeit von der Zeit für verschiedene P-Werte dargestellt. Die Solltemperatur beträgt dabei entweder 85 K (Abbildung 4.11a) oder 90 K (Abbildung 4.11b) und ist jeweils durch eine gestrichelte Linie markiert. Es ist deutlich zu erkennen, dass ein größerer P-Anteil zu einer stärkeren Sprungantwort führt. Ab einem P-Wert von über 70 kommt es zu einem leichten Überschwingen über die eingestellte Solltemperatur. Zudem zeigen alle betrachteten

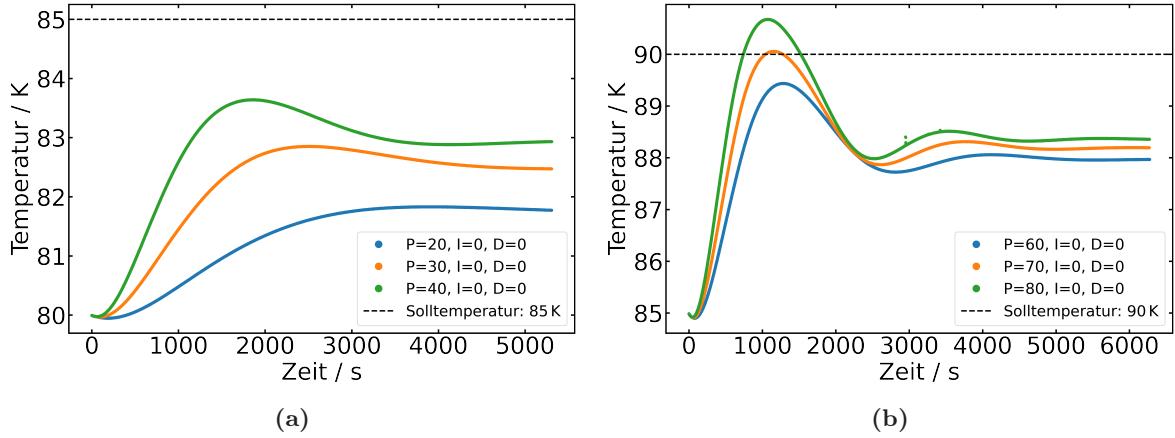


Abbildung 4.11.: Geregelte Probentemperatur in Abhängigkeit der Zeit für verschiedene P-Anteile. Die Solltemperatur ist durch die horizontale Linie gekennzeichnet. In a) beträgt die Solltemperatur 85 K und in b) 90 K.

P-Werte auch nach mehr als 5000s eine signifikante Abweichung zwischen Soll- und Istwert, was charakteristisch für einen reinen P-Anteil ist [163].

Um diese Abweichung zu korrigieren, wird im nächsten Schritt ein PI-Regler eingesetzt, wobei der D-Anteil gleich null gesetzt wird. Da der zusätzliche I-Anteil die bleibende Regelabweichung verringert, wurde ein konstanter P-Wert von 70 gewählt, also genau jener, bei dem erstmals ein leichtes Überschwingen über die Solltemperatur beobachtet wurde. Die zeitabhängigen Temperaturverläufe für verschiedene I-Werte bei konstantem P-Wert von 70 sind in Abbildung 4.12a dargestellt.

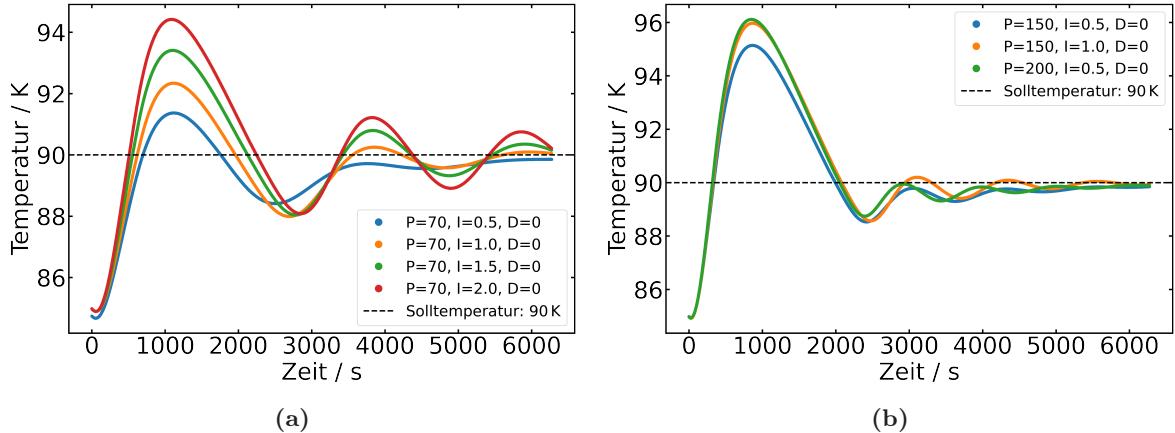


Abbildung 4.12.: Geregelte Probentemperatur in Abhängigkeit der Zeit für verschiedene I-Anteile. Die Solltemperatur beträgt 90 K und ist durch die horizontale Linie gekennzeichnet. Der P-Wert beträgt in a) 10 und in b) 150 und 200.

Mit einem geringen I-Wert von 0.5 nähert sich der Istwert langsam dem Sollwert. Für I-Werte über 1 kommt es zu einer Schwingung um den Sollwert, welche mit steigenden I-Wert zunimmt. In Abbildung 4.12b ist die Reaktion des Heizers mit größeren P-Werten und kleinen I-Werten abgebildet. Auch dabei kommt es zu den Schwingungen um den Sollwert, wobei diese etwas geringer ausfallen und nicht so stark von dem I-Wert abhängig sind.

Durch den D-Anteil können diese Schwingungen beseitigt werden. In Abbildung 4.13a wurde die Regelung für einen P-Wert von 70 und verschiedene Kombinationen von I und D gemessen. Dabei zeigt sich, dass nach etwa 4000 s für jeden Parametersatz die Solltemperatur sehr genau eingestellt werden kann. Für große I-Werte kommt es jedoch zu starken Überschwingen. Abbildung 4.13b zeigt eine Variation des D-Anteils für einen P-Anteil von 150 und einen

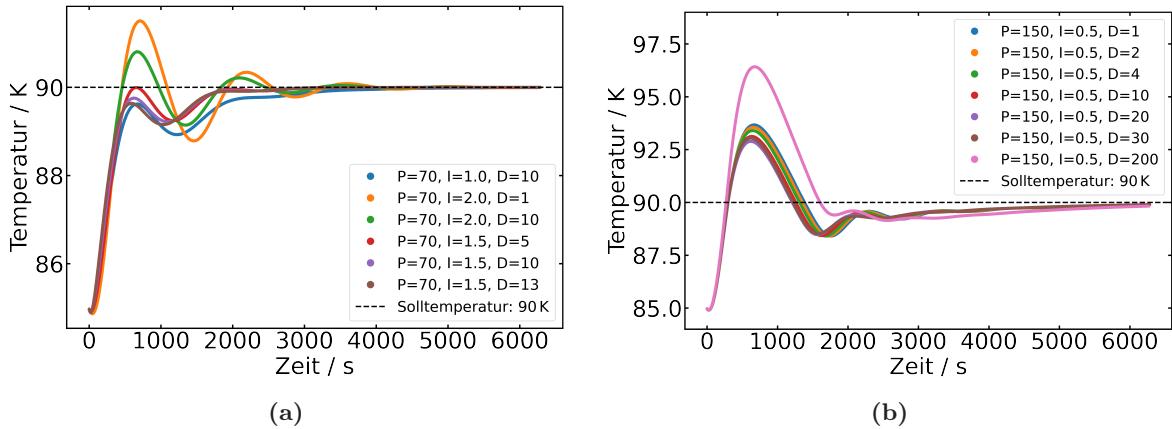


Abbildung 4.13.: Geregelte Probentemperatur in Abhängigkeit der Zeit für verschiedene D-Anteile. Die Solltemperatur beträgt 90 K und ist durch die horizontale Linie gekennzeichnet. Der P-Wert beträgt in a) 10 und in b) 150.

I-Anteil von 0.5. Dabei fällt auf, dass der D-Anteil nur einen sehr geringen Einfluss auf die Regelung hat, da die Unterschiede zwischen den Kurven sehr gering sind. Im Vergleich zu den Parametern in Abbildung 4.13a ist im gesamten Zeitbereich eine signifikante Abweichung zwischen Soll- und Istwert sichtbar.

Um die Güte der Regelung quantifizierbar zu machen, wird die Standardabweichung der Temperatur betrachtet. In Abbildung 4.14 ist die Standardabweichung gegen die Zeit für die Temperaturverläufe in Abbildung 4.13a abgebildet. Die Standardabweichung zum Zeitpunkt t entspricht dabei der Standardabweichung der Temperaturwerte im Zeitintervall $6200\text{ s} - t$. Dadurch repräsentiert dieser Wert, wie gut die Temperaturregelung ab diesem Zeitpunkt sein wird. Für alle PID-Konfigurationen nimmt die Standardabweichung mit der Zeit stark ab, und die Schwingungen der Temperatur in Abbildung 4.13a sind auch als Schwingungen in der Standardabweichung deutlich erkennbar. Für PID-Konfigurationen mit einem I-Anteil von 1.5 ergibt sich nach etwa 4000 s eine konstante Standardabweichung von 10^{-3} , was die präzise Temperaturregelung für diese Parametersätze verdeutlicht. Für eine gute Messung sollte die Standardabweichung der Temperatur kleiner als 10^{-2} K sein, damit Schwankungen temperaturabhängiger Messgrößen möglichst gering ausfallen. Dieser Grenzwert ist mit der horizontalen Linie markiert, wonach die Temperatur für einen I-Anteil von 1.5 nach etwa 3000 s präzise genug eingestellt ist. Für die weiteren Messungen werden als Regelungsparameter $P=70$, $I=1.5$ und $D=13$ verwendet.

Für einen abschließenden Test der Temperaturregelung mit den ermittelten PID-Parametern wurden die Regelung verschiedener Solltemperaturen im kompletten Temperaturbereich ausprobiert. Anders als in den vorherigen Messungen wurde dabei flüssiges Helium als Kühlmittel verwendet, um auch geringere Temperaturen als 77 K einstellen zu können. In Abbildung 4.15 ist die Temperaturregelung für ausgewählte Solltemperaturen über ein Zeitintervall von 3000 s dargestellt. Zur besseren Vergleichbarkeit wurde dabei die Temperaturabweichung zur jeweiligen Solltemperatur in Abhängigkeit von der Zeit aufgetragen. In den ersten 1000 s zeigen sich leichte Unterschiede im Sprungverhalten, wobei es für $T_{\text{soll}} = 14\text{ K}$ und $T_{\text{soll}} = 20\text{ K}$ zu stärkeren Überschwingen kommt als bei den anderen Solltemperaturen. Ab etwa 2000 s sind jedoch bei allen verglichenen Solltemperaturen keine signifikanten Abweichungen mehr erkennbar. In der Legende ist zusätzlich zur jeweiligen Solltemperatur die Durchschnittstemperatur und die Standardabweichung im Zeitintervall zwischen 2500 s und 3000 s angegeben. Diese beträgt für alle dargestellten Temperaturen maximal 0.002 K und unterstreicht die hohe Qualität der Temperaturregelung über den gesamten Temperaturbereich. Auch bei der Durchschnittstemperatur gibt es nur leichte Abweichungen, welche im Fall von einer Solltemperatur von 270 K maximal 5 mK beträgt.

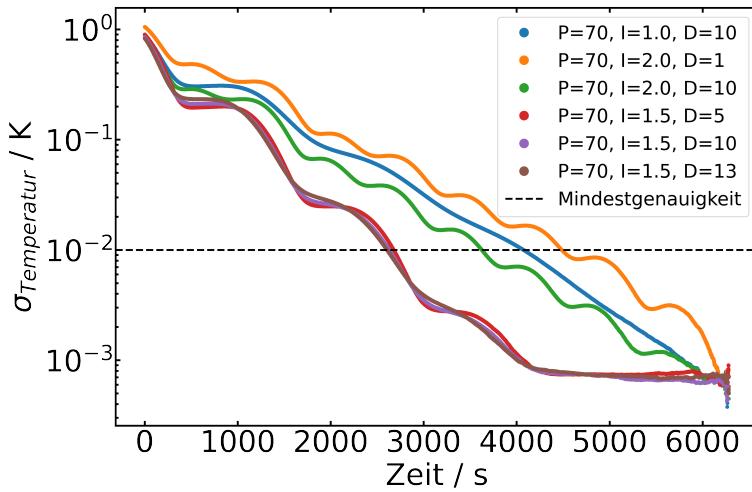


Abbildung 4.14.: Standardabweichung der Temperatur im Zeitintervall $t_{End} - t$ für verschiedene PID-Parametersätze. Damit gibt die Standardabweichung an wie gut die Temperaturregelung bis zum Ende der Temperaturmessung gewesen sein wird. Für präzise Messungen sollte die Standardabweichung der Temperatur kleiner als 10^{-2} K sein, was durch die horizontale Linie eingezeichnet ist.

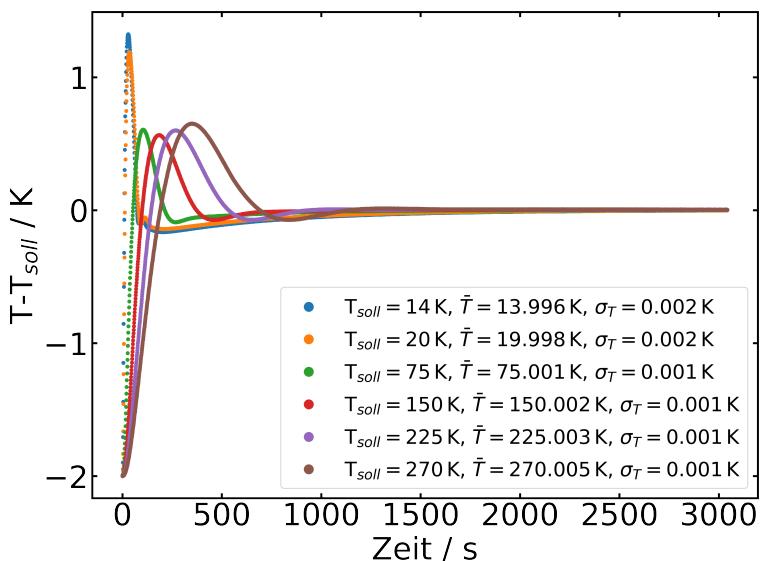


Abbildung 4.15.: Temperaturregelung für verschiedene Solltemperaturen in einem Zeitintervall von 3000 s. Für eine bessere Vergleichbarkeit ist die Differenz zwischen Ist- und Solltemperatur gegen die Zeit aufgetragen.

4.1.2. Vakuumtest

Damit der Messstab für längere Messungen verwendet werden kann, muss er möglichst vakuumdicht ausgeführt sein. Dies ist gegeben, wenn die Leckrate kleiner als 10^{-3} mbar · l/s ist [164]. Da die Vakuumdurchführungen mit Gummidichtungen versehen sind und die restlichen Anschlüsse am Flanschkopf über ISO-KF-Dichtungen verbunden werden, ist nicht davon auszugehen, dass diese Komponenten eine signifikante Leckage verursachen.

Das entscheidende Bauteil für die Dichtheit des Messstabs ist das Vakuumrohr, welches insgesamt vier Lötverbindungen aufweist. An der Oberseite ist ein ISO-KF-75-Flansch auf das Rohr aufgelötet. Auf Höhe der Kältestufe ist das Messingstück über zwei Lötverbindungen integriert und am unteren Ende ist das Rohr durch eine weitere Lötverbindung mit einem Deckel verschlossen.

Besonders kritisch sind dabei die Lötverbindungen zwischen den unterschiedlichen Materialien Messing und Kupfer, da sie aufgrund der großen Temperaturunterschiede im Betrieb stark belastet werden. Um dennoch eine vakuumdichte Verbindung zu gewährleisten, sind die Enden des Messing- und Edelstahlrohrs so gefertigt, dass sie sich mit einem Spiel von 0.05 mm über eine Länge von etwa 18.5 mm ineinander stecken lassen (siehe Abbildung 4.16). Durch die verbleibende Nut wird das flüssige Lot durch die Kapillarwirkung in den Spalt zwischen den Bauteilen gezogen und erzeugt so eine dauerhaft vakuumdichte Verbindung. Da sich das Messingrohr beim Abkühlen stärker als das Edelstahlrohr zusammenzieht bildet das Messingrohr die Außenseite der Verbindung. Dadurch sollte die Verbindung zwischen Messing- und Edelstahlrohr beim Abkühlen noch stabiler werden.

Durch die geringe Differenz zwischen dem Innendurchmesser des Messingrohrs und dem Außendurchmesser der Kältestufe besteht die Gefahr, dass sich beide Bauteile beim Zusammenbau verkeilen. Um ein sauberes Einfügen der Kältestufe in den Messingteil des Außenrohrs zu gewährleisten, wurde der Innendurchmesser des Messingrohrs an der Oberkante an den des Edelstahlrohrs angepasst und eine Verjüngung von 3° eingearbeitet. Diese Verjüngung unterstützt das saubere Einführen der Kältestufe in das Messingrohr. Dies ist ebenfalls in Abbildung 4.16 dargestellt.

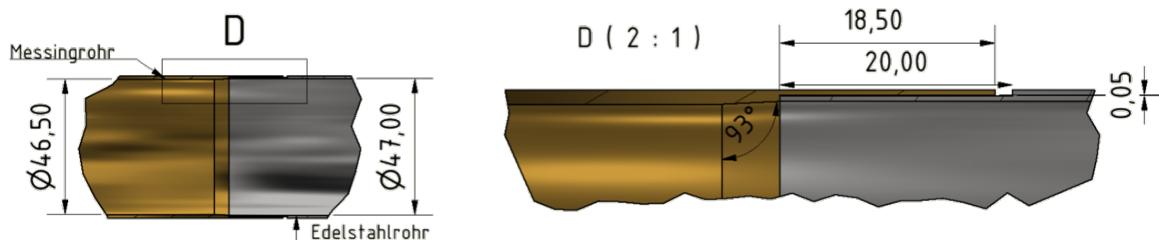


Abbildung 4.16.: Skizze der Lötverbindung zwischen Messing- und Edelstahlrohr. In der vergrößerten Ansicht sind sowohl der Überlapp der beiden Rohre als auch die Verjüngung des oberen Endes des Messingrohrs deutlich erkennbar.

Bevor die Leckrate des Messstabs bestimmt wurde, wurde das Rohr fünfmal mit flüssigem Stickstoff abgekühlt und wieder auf Raumtemperatur erwärmt, um eine thermische Belastung zu erzeugen, die sich negativ auf die Dichtigkeit auswirken könnte. In Abbildung 4.17a ist der Versuchsaufbau für die Bestimmung der Leckrate abgebildet. An den für das Evakuieren vorgesehene Flansch des Flanschkreuzes wurde eine Turbomolekularpumpe über ein Vakuumventil angeschlossen. Um den Druck zu messen, ist ein zusätzliches T-Stück mit einem Drucksensor zwischen Flanschkopf und Ventil angeschlossen.

Nachdem ein Basisdruck von $(1.91 \pm 0.01) \cdot 10^{-6}$ mbar erreicht wurde, wurde das Ventil geschlossen und der Druckverlauf in Abhängigkeit von der Zeit aufgezeichnet. Dieser ist in Abbildung 4.17b dargestellt. Es zeigt sich ein annähernd linearer Druckanstieg, dessen Steigung über eine lineare Anpassung bestimmt wurde, die ebenfalls in der Abbildung eingezeichnet

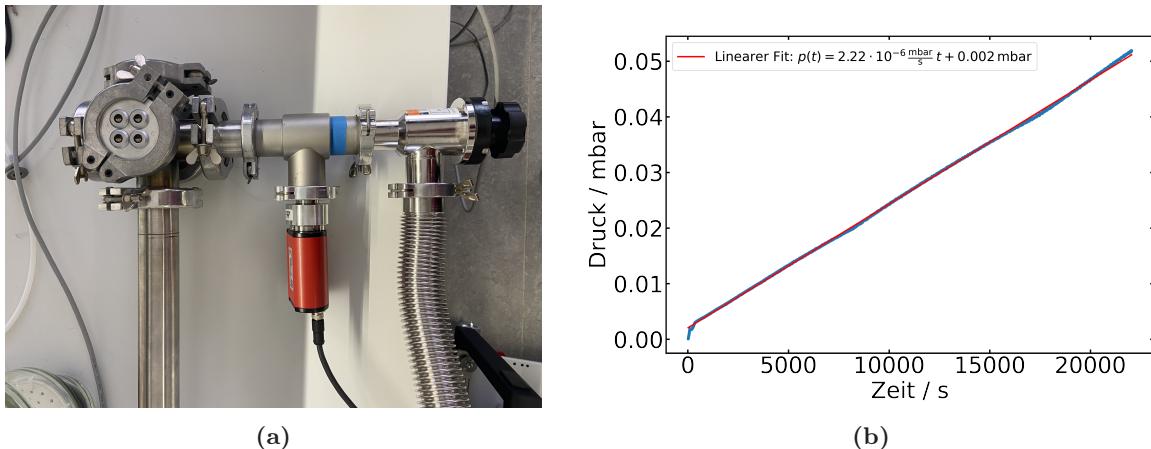


Abbildung 4.17.: a) Zur Bestimmung der Leckrate des Messstabs wurde zwischen dem Flanschkopf und dem Vakuumventil ein T-Stück mit Drucksensor angebracht. Nach Erreichen des Basisdrucks wurde das Ventil verschlossen und die Messung der Druckänderung über die Zeit gestartet. b) Zeitabhängiger Druck im Messstab nachdem das Ventil geschlossen wurde.

net ist. Über das evakuierte Volumen kann aus der durchschnittlichen Drucksteigerung von $2.22 \cdot 10^{-6} \text{ mbar/s}$ die Leckrate berechnet werden. Die Standardabweichung der so ermittelten Drucksteigerung beträgt $5.6 \cdot 10^{-10} \text{ mbar/s}$ und kann somit vernachlässigt werden. Inklusive des angeschlossenen T-Stücks wurde das evakuierte Volumen großzügig mit 71 abgeschätzt, woraus sich eine Leckrate von $1.55 \cdot 10^{-5} \text{ mbar} \cdot \text{l/s}$ ergibt. Diese liegt etwa zwei Größenordnungen unterhalb der definierten Zielvorgabe, sodass der Messstab als ausreichend vakuumdicht bewertet werden kann.

4.1.3. Anschlüsse

In Abbildung 4.18 ist der Anschlussplan der Anschlüsse am Probenhalter abgebildet. Die Vakuumdurchführungen am Flanschkreuz sind entsprechend beschriftet. Die Anschlüsse A bis D stehen bei der Verwendung des Messstabs zur freien Verfügung und können beispielsweise für Widerstandsmessungen verwendet werden. Der nicht sichtbare Anschluss E ist für den Kontakt zum Heizer bestimmt und mit den $150 \mu\text{m}$ dicken Kupferdrähten verbunden. Anschluss F ist in Ausblick auf die Konstruktion der Dehnungszelle für die Steuerung der dafür verwendeten Piezoaktuatoren bestimmt, kann aber ohne Verwendung der Dehnungszelle frei benutzt werden. An Anschluss G ist ein Pt100 Klasse A Temperatursensor angeschlossen, welcher auf die Stirnseite des Probenhalter geklebt ist. An Anschluss H ist ein Cernox-1050-Sd-HT-Temperatursensor angeschlossen, welcher sich besonders für das Messen sehr tiefer Temperaturen eignet. Anders als der Pt100 muss dieser mit einem weiteren Temperatursensor kalibriert werden. Dies wurde mit einem bereits kalibrierten Temperatursensor in einem Physical Property Measurement System von Quantum Design durchgeführt. Auch der Cernox-Sensor klebt auf der Stirnseite des Probenhalters. Die Verwendungszwecke der einzelnen Anschlüsse ist in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Da die Leitungen der unterschiedlichen Anschlüsse durch ihre verschiedenen Aufgaben unterschiedlich stark belastet werden, werden diese in Gruppen sortiert durch die Kapillaren gelegt, um die gegenseitige Beeinflussung zu reduzieren. Aus diesem Grund wurden die Heizdrähte und die Drähte, welche für die Steuerung der Piezoaktuatoren der Dehnungszelle benutzt werden, zusammen durch eine Kapillare verlegt, da diese die größte Strom- und Spannungsbelastung erfahren. Durch die zweite Kapillare verlaufen die Drähte der beiden Anschlüsse für die Temperatursensoren. Die Messanschlüsse A bis D werden auf die verbliebenen Kapillaren verteilt. In Abbildung A.19 ist zudem der Anschlussplan der Lötstation abgebildet.

Abbildung 4.19 zeigt eine bemaßte Nahaufnahme des Probenhalters. Um Proben oder die

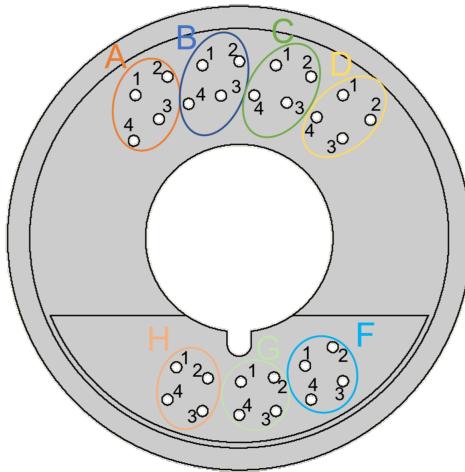


Abbildung 4.18.: Anschlussplan des Probenhalters.

Tabelle 4.1.: Verwendungszweck der Anschlüsse am Probenhalter. Abbildung 4.18 kann die Zuordnung der einzelnen Anschlüsse entnommen werden.

Anschluss	Verwendung	Anschluss	Verwendung
A	Messanschluss	E	Heizer
B	Messanschluss	F	Piezoaktuatoren
C	Messanschluss	G	Pt100
D	Messanschluss	H	Cernox-1050-SD-HT

später entwickelte Dehnungszelle zu befestigen, besitzt dieser am Ende ein Plateau mit einer Fläche von 14 mm x 34.25 mm. Die maximale Breite resultiert aus der Limitierung des Außenrohrdurchmessers auf maximal 50 mm und den Dicken des Heizbechers und der Schutzkappe. Proben können direkt auf die Plattform geklebt werden und zur Befestigung von größeren Aufbauten wie der Dehnungszelle gibt es zwei Löcher mit einem M3-Gewinde. Insgesamt ist so ein sehr flexibler Einsatz des Messstabs möglich. Es stehen genug Platz und genügend Anschlüsse bereit, um beispielsweise von fünf Proben gleichzeitig den temperaturabhängigen Widerstand messen zu können oder größere Experimente anzubringen. Durch die Länge der Schutzkappe ergibt sich eine maximale Länge von 90 mm für diese Experimente.

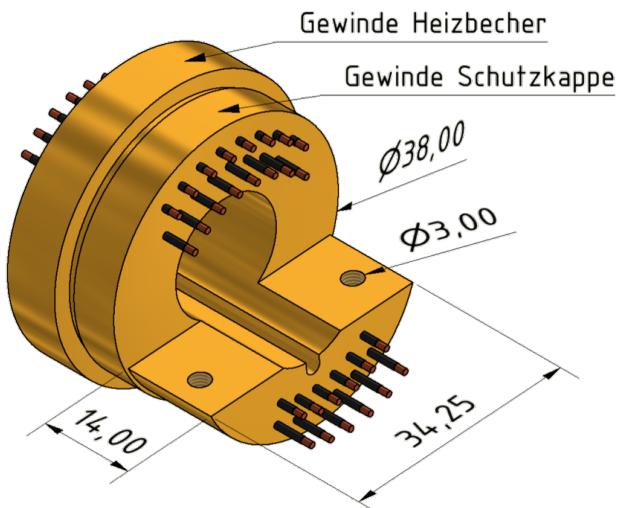


Abbildung 4.19.: Bemaßte Nahaufnahme des Probenhalters.

Für eine optimale Handhabung und einen langlebigen Einsatz des Messstabs muss im geöffneten Zustand, beispielsweise beim Wechsel der Probe, darauf geachtet werden, die offenen Drähte an der Kältestufe nicht zu beschädigen. Um dies sicherzustellen, wurde mittels 3D-Druck eine Schutzkappe angefertigt, die den gesamten Bereich zwischen Probenhalter und Kältestufe vor mechanischen Einflüssen schützt und im offenen Zustand auf das Unterteil des Stabes aufgesetzt werden kann. Diese ist in Abbildung 4.20 dargestellt. Vor dem Zusammenbau muss diese wieder entfernt werden.

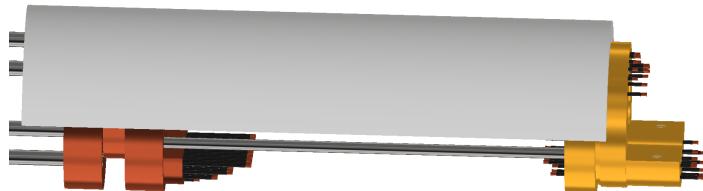


Abbildung 4.20.: 3D-gedruckte Schutzabdeckung für die Kältestufe und offen liegende Drähte.

Ein weiterer kritischer Punkt bei der Benutzung des Stabs ist der Ein- und Ausbau des Innenteils in bzw. aus dem Vakuumrohr. Auch hierbei muss darauf geachtet werden, die offenen Drähte nicht zu beschädigen, die Oberfläche der Kältestufe nicht zu verkratzen und den Stab nicht zu verbiegen. Am einfachsten erfolgt dieser Schritt, indem der Stab senkrecht ein- bzw. ausgebaut wird. Dafür kann idealerweise ein Deckenkran verwendet werden. Zu diesem Zweck wurde das in Abbildung 4.21 links dargestellte Gestell konstruiert. In dieses kann der Stab eingehängt und unter den Laborkran gefahren werden. Mit einer um den Flanschkopf gewickelten Kranschlaufe kann anschließend das Innenteil des Stabs aus dem Vakuumrohr herausgezogen werden. Zur Lagerung des Stabs bei Nichtbenutzung wurde zudem das in Abbildung 4.21 rechts abgebildete Gestell angefertigt, das zusätzlich Platz für weitere Messstäbe bietet.



Abbildung 4.21.: Montagegestell für die Messstäbe (links) und Lagerungsgestell (rechts).

4.2. Konstruktion einer Dehnungszelle

Ziel ist die Entwicklung einer Dehnungszelle, welche eine möglichst große in situ einstellbare uniaxiale Dehnung und Stauchung in einem großen Temperaturbereich erzeugen kann. Dafür wird ein Ansatz bestehend aus drei Piezoaktuatoren verwendet, der von Hicks et al. [157] entwickelt wurde. Aufbau und Funktion dieses Ansatzes sind in Abbildung 4.22 abgebildet. Die Idee ist die Probe (grün) zwischen zwei Probenhaltern zu montieren, welche sich durch die drei Piezoaktuatoren (orange) relativ zueinander verschieben lassen, um so die Probe zu belasten. Werden die beiden äußeren Piezoaktuatoren ausgedehnt, wirkt auf die Probe eine Dehnung (Mitte). Soll die Probe gestaucht werden, wird der innere Piezoaktuator ausgedehnt (rechts).

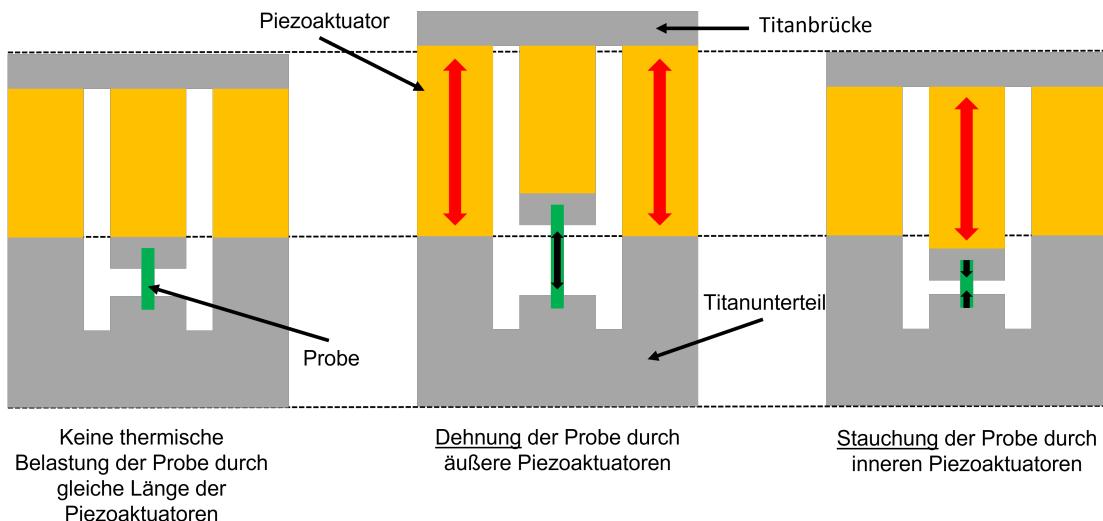


Abbildung 4.22.: Funktion der Dehnungszelle, bestehend aus drei Piezoaktuatoren. Für eine Probendehnung werden die äußeren beiden Piezoaktuatoren ausgedehnt (Mitte). Für eine Stauchung der Probe wird der innere Piezoaktuator ausgedehnt (rechts). Durch die Verwendung dreier gleich langer Piezoaktuatoren wird die thermische Belastung der Probe beim Abkühlen reduziert.

Die Belastung der Probe kann durch Gleichung 4.7 berechnet werden. Dabei ist ΔL die Abstandsänderung durch die Belastung der Piezoaktuatoren und L_0 der Abstand zwischen den Probenhaltern im unbelasteten Zustand.

$$\epsilon = \frac{\Delta L}{L_0} \quad (4.7)$$

Da die maximale Längenänderung der Piezoaktuatoren von der Länge dieser abhängt, können für eine möglichst große Belastung der Probe möglichst lange Piezoaktuatoren verwendet werden, um ΔL zu maximieren. Zudem kann der Abstand zwischen den Probenhaltern möglichst klein gemacht werden. Dieser Ansatz hat den Vorteil, dass die gesamte von den Piezoaktuatoren erzeugte Längenänderung zur Probenbelastung verwendet werden kann. Die Verwendung dreier gleich langer Piezoaktuatoren hat zwei Vorteile. Zum einen kann die Probe dadurch sowohl gleich stark gedehnt als auch gestaucht werden und zum anderen wird so die thermische Ausdehnung der Piezoaktuatoren ausgeglichen, wodurch die thermische Belastung der Probe reduziert wird [165, 166].

In Abbildung 4.23 ist die obere Seite der finalen Version der Zelle abgebildet. In dieser Ausführung hat die Zelle eine Größe von 22 mm x 88.5 mm x 34 mm, wobei Piezoaktuatoren mit einer Länge von 50 mm und einer Querschnittsfläche von 7 mm x 7 mm verbaut wurden, welche ihre Länge um etwa 40 μm ändern können. Ausgenommen der Piezoaktuatoren ist die Dehnungszelle aus Titan Grade 2 gefertigt, da dieses stark belastbar ist und die thermische Kontraktion ähnlich zu der transversalen thermischen Kontraktion der Piezoaktuatoren ist [165, 167].

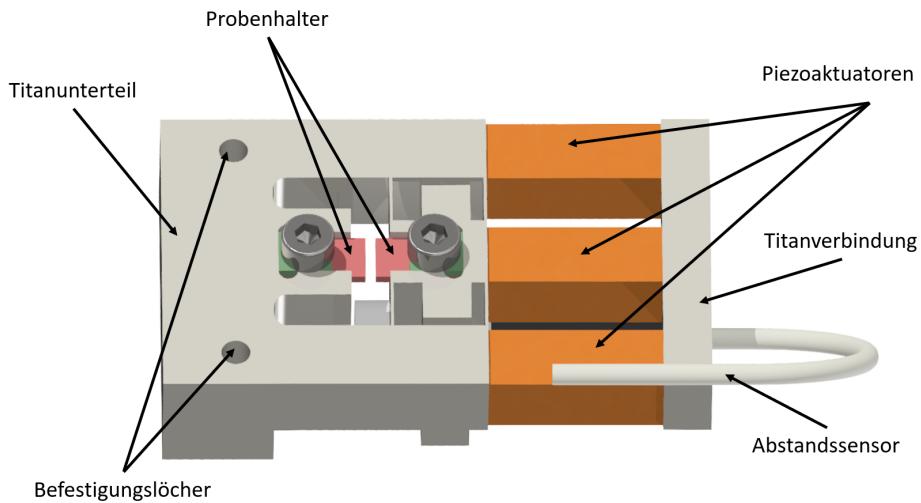


Abbildung 4.23.: Rendering der Oberseite der entwickelten Dehnungszelle mit beschrifteten Bau- teilen.

Abbildung 4.24 zeigt das Titanunterteil. Über die zwei Befestigungslöcher kann die Dehnungszelle an den Messstab befestigt werden. Der obere und untere Probenhalter besteht jeweils aus einer ausgefrästen Tasche in die unterschiedlich lange Probenplatten (rot) aus Titan eingesetzt werden können, wodurch entweder die belastete Probenlänge an die zu untersuchende Probe angepasst oder die maximal zu erreichende Probenbelastung variiert werden kann. Diese werden durch Schrauben mit dem Titanunterteil verbunden. Durch die unterschiedlich langen Probenplatten kann die belastete Probenlänge beliebig zwischen 0 mm bis maximal 4 mm eingestellt werden, wobei der maximale Probenabstand aus dem Abstand der Probenhalter des Titanunterteils resultiert. Die maximale Probenbreite beträgt 5 mm. Um die Dehnung möglichst homogen auf die Probe zu übertragen, wird diese nicht nur auf die unteren Probenplatten geklebt, sondern zusätzlich auf jeder Seite mit einer oberen Probenplatte versehen. Dadurch ergibt sich eine vollflächige Klebung der Probe von oben und unten, was eine gleichmäßige mechanische Ankopplung und eine verbesserte Kraftübertragung gewährleistet [157]. Damit die Kraft der Schrauben auf eine möglichst große Fläche verteilt wird, werden zusätzlich Unterlegscheiben (grün) verwendet.

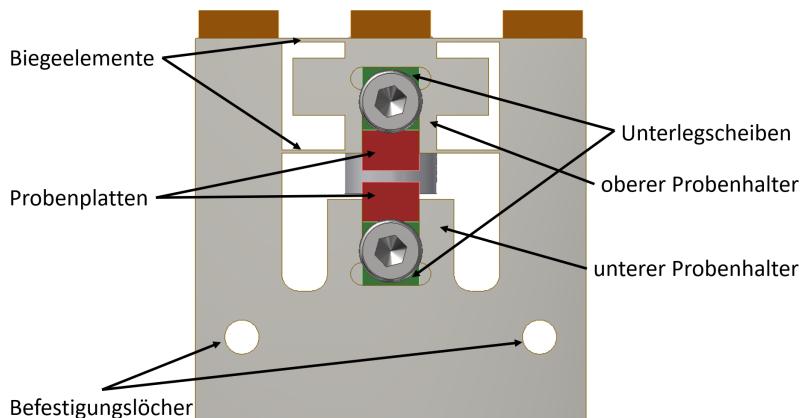


Abbildung 4.24.: Titanunterteil der entwickelten Dehnungszelle mit Beschriftung der wesentlichen Elementen.

Um die Bewegung des oberen Probenhalters gegen Dreh- und Querbewegungen und den mittleren Piezoaktuator vor unbeabsichtigten Querkräften, beispielsweise bei der Probenmontage, zu schützen, ist dieser über vier Biegelemente mit dem Titanunterteil verbunden. Diese weisen eine niedrige Federkonstante für Längsbewegungen und eine deutlich höhere Federkonstante für Dreh- oder Querbewegungen auf.

4.2.1. Dehnungsmessung

Durch die große Verschiebung des oberen Probenhalters ist es nicht möglich, die Dehnung über einen Dehnungsmessstreifen zu messen. Die im Experiment auf die Probe wirkende Dehnung wird mit dem kapazitiven Abstandssensor CSH05 der Firma MicroEpsilon bestimmt [168]. Dabei misst dieser die relative Verschiebung der beiden Probenhalter zueinander, woraus bei Kenntnis des Abstands im unbelasteten Zustand ΔL bestimmt werden kann.

Das Messprinzip basiert auf der Wirkungsweise eines idealen Plattenkondensators, wobei die beiden Plattenelektroden durch den Sensor und einem gegenüberliegenden Messobjekt gebildet werden. In Abbildung 4.25 ist das Unterteil der Dehnungszelle dargestellt. Der Abstandssensor kann dort mithilfe einer Zentrierschraube am oberen Probenhalter befestigt werden. Als Messobjekt für die Abstandsmessung dient ein Titansteg, der Teil des unteren Probenhalters ist. Durch diese Anordnung kann der Sensor die relative Verschiebung zwischen oberen und unteren Probenhalter messen, woraus die Probendehnung bestimmt werden kann.

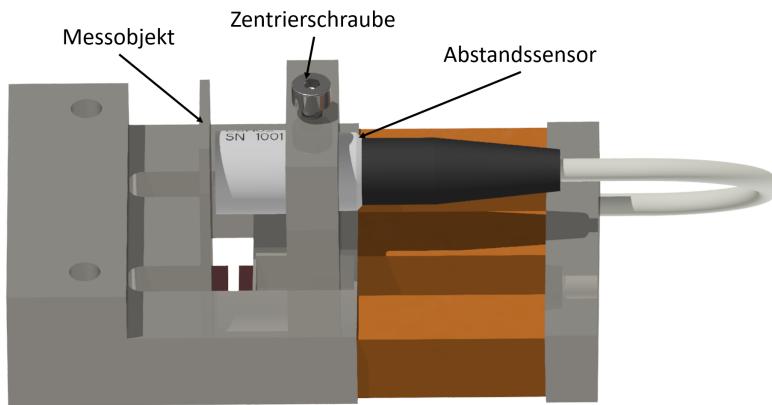


Abbildung 4.25.: Unterseite der entwickelten Dehnungszelle mit Beschriftung der wesentlichen Elemente.

Ein konstanter Wechselstrom, welcher den Sensorkondensator durchfließt, erzeugt eine Wechselspannung am Sensor, wobei die Amplitude der Wechselspannung direkt proportional zum Abstand der Kondensatorelektroden ist. Der Blindwiderstand X_C des Plattenkondensators ergibt sich durch [168] :

$$X_C = \frac{1}{i \cdot \omega \cdot C} \text{ mit } C = \epsilon_0 \cdot \frac{A}{d}. \quad (4.8)$$

Dabei ist i die imaginäre Einheit, ω die Kreisfrequenz und C die Kapazität. Diese lässt sich aus der Permittivität des Vakuums ϵ_0 , der Fläche der Kondensatorplatten A und dem Abstand zwischen den Kondensatorplatten d berechnen, wodurch sich ein proportionaler Zusammenhang zwischen dem Blindwiderstand und dem Abstand der Kondensatorplatten ergibt. Da alle weiteren Parameter während der Messung konstant sind, liefert diese Messvariante ein präzises Verfahren zur Abstandsmessung.

Für möglichst präzise Messungen ist der Sensor als Schutzzringkondensator konzipiert (siehe Abbildung 4.26). Um die eigentliche Messelektrode, welche die eine Platte des Plattenkondensator darstellt, ist eine zusätzliche Schirmelektrode angebracht, welche die Feldverzerrung

am Rand der Kondensatorplatten unterdrückt. In der Praxis ist es zudem wichtig darauf zu achten, dass das Messobjekt aus einem elektrisch leitenden Werkstoff besteht und dieses weder zu klein noch gekrümmmt oder uneben ist. Der als Messobjekt dienende Titansteg hat eine Größe von 11 mm x 14 mm, womit er die Mindestanforderung von einem Durchmesser von 7 mm übertrifft [168].

Der verwendete CSH05-Sensor besitzt einen Messbereich von maximal 1 mm bei einer maximalen Auflösung von 10 nm und einer Abtastrate von maximal 8.5 kHz und ist auf die Abstandsmessung bei Raumtemperatur kalibriert. Für Messungen bei unterschiedlichen Temperaturen muss der gemessene Wert korrigiert werden, da sich infolge der Abkühlung die Fläche der Kondensatorplatten reduziert und dadurch die Messwerte zu klein angezeigt werden. Die Temperaturkorrektur beträgt 6 nm/K. Für eine optimale Messung muss der Messschirm zudem mit dem Sensor geerdet werden. Andernfalls lädt sich der Messschirm mit der Zeit auf, was zu einem Drift der Messwerte führt.

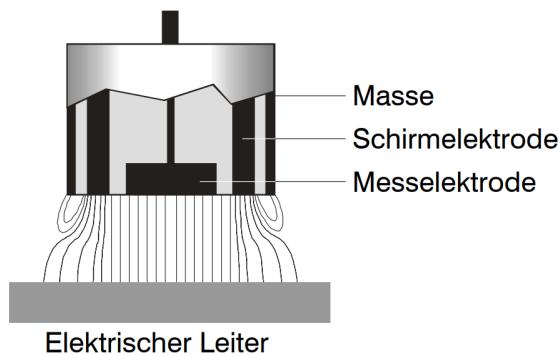


Abbildung 4.26.: Aufbau des verwendeten Abstandssensors. Entnommen aus Ref. [168].

4.2.2. Finite-Elemente-Analyse

Zur genauen Dimensionierung der Biegeelemente zwischen dem oberen Probenhalter und dem Titanunterteil wurde eine Finite-Elemente-Analyse (FEA) durchgeführt. Dabei wurden die Dicke d , der Innenradius R_i und der Außenradius R_a der Biegeelemente ermittelt, welche in Abbildung 4.27 dargestellt sind. Diese Parameter müssen so gewählt werden, dass die durch die Piezoaktuatoren erzeugte Belastung lediglich eine elastische Verformung der Dehnungsführungen hervorruft und keine plastische Deformation eintritt. Die Breite der Dehnungszelle und damit auch der Biegeelemente ergibt sich aus der Breite der eingesetzten Piezoaktuatoren sowie der maximal verfügbaren Breite im Inneren des Messstabs. Aus diesem Grund wurde dieser Parameter in der FEA nicht gesondert betrachtet.

Mit einer Reihe von Simulationen des quasistatischen Deformationsverhaltens wird untersucht, welche Bereiche des Bauteils bei einer Verschiebung des oberen Probenhalters besonders stark beansprucht werden. Dieses Szenario bildet die reale Anwendung in der Dehnungszelle ab, da die Verschiebung der Piezoaktuatoren in gleicher Weise auf das Bauteil wirkt. In Abbildung 4.28 sind die Startkonfiguration der Simulation und das verwendete Netz abgebildet. Dabei ist die Unterseite des Bauteils fixiert, was in Abbildung 4.28 durch die blauen Punkte dargestellt ist. Die simulierte Verschiebung wirkt auf den oberen Probenhalter, was durch die orangen Pfeile verdeutlicht ist.

Die Simulation wurde mit Abaqus durchgeführt, wobei ein kontinuierliches Netz aus Hexaeder-Elementen mit jeweils acht Knotenpunkten und reduzierter Integration verwendet wurde [169]. In besonders interessanten Bereichen, insbesondere im oberen Teil des Bauteils sowie in den Übergangsradien, in denen mit der höchsten Belastung gerechnet wird, wurde das Netz zusätzlich verfeinert, um genauere Ergebnisse zu erhalten. Je nach spezifischer Geometriekonfi-

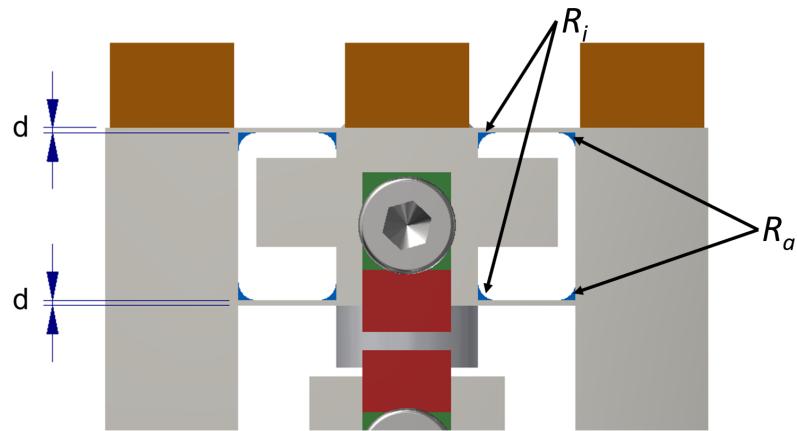


Abbildung 4.27.: Titanunterteil der Dehnungszelle mit den durch die FEA zu bestimmenden Größen Innenradius R_i , Außenradius R_a und Dicke d .

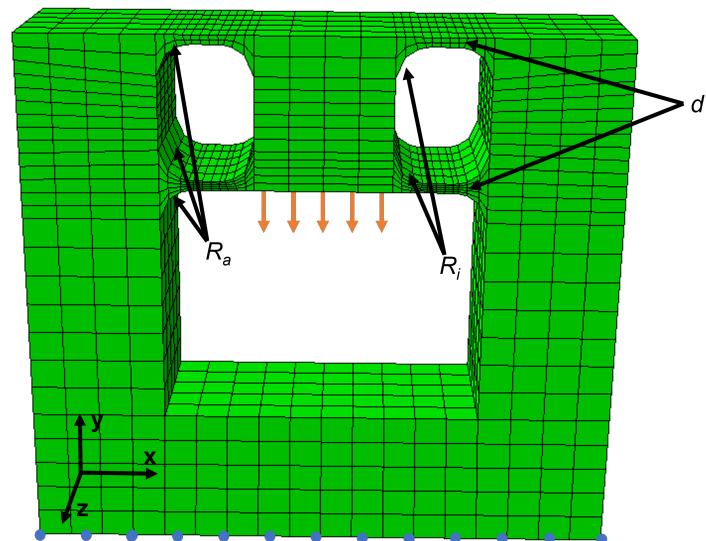


Abbildung 4.28.: Startkonfiguration der Simulation. Die untere Seite des Bauteils ist fixiert, was durch die blauen Punkte angedeutet ist. Das obere Mittelteil wird bei der Simulation verschoben. Dies wird durch die orangen Pfeile verdeutlicht. Zudem ist das für die Simulation verwendete Netz gezeigt, das in den relevanten Bereichen, wie den Radien und dem gesamten oberen Teil, eine höhere Elementdichte aufweist.

guration des Bauteils umfasst das Netz bis zu 2690 Elemente. Für die Materialdefinition wird der Elastizitätsmodul 103 GPa sowie die Poissonzahl 0.33 für Titan Grade 2 verwendet [167]. Zur Bestimmung der optimalen Bauteilkonfiguration wurden sämtliche Kombinationen von Innen- und Außenradien R_i und R_a im Bereich von 0.2 mm bis 2 mm in einer Schrittweite von 0.2 mm untersucht. Gleichzeitig wurde die Dicke der Biegelemente im Bereich von 0.1 mm bis 1 mm in 0.1 mm-Schritten variiert. Die Simulationen wurden jeweils für eine maximale Verschiebungen von 50 μm durchgeführt. Dies entspricht einer realistischen Verschiebung, welche von Piezoaktuatoren erzeugt werden kann.

Ergebnisse der FEA

Durch die FEA kann für jedes Element der resultierende Spannungstensor aus der aufgebrachten Verschiebung berechnet werden. Um die Ergebnisse verschiedener Bauteilkonfigurationen besser vergleichen zu können, wird aus dem Spannungstensor die von-Mises-Spannung ermittelt. Die von-Mises-Spannung ist eine skalare Größe, die aus den Komponenten des Spannungstensors berechnet wird und die Äquivalenz zu einer einachsigen Zugbelastung herstellt. Sie dient als Vergleichsspannung und ermöglicht die Beurteilung eines mehrachsigen Spannungszustands hinsichtlich plastischer Verformung, indem sie komplexe Spannungsverteilungen auf einen einzigen Wert reduziert [170]. Anhand eines Versagenskriteriums lässt sich abschätzen, ob das Bauteil der mechanischen Belastung standhält. Dafür wird die berechnete von-Mises-Spannung mit der Fließgrenze des Materials verglichen. Die Fließgrenze ist definiert als diejenige Spannung, ab der ein Material beginnt, sich plastisch zu verformen [171]. Überschreitet die von-Mises-Spannung diesen Wert, wird angenommen, dass das Bauteil lokal plastisch deformed wird. Für Titan Grade 2 beträgt die Fließgrenze bei Raumtemperatur 275 MPa [167].

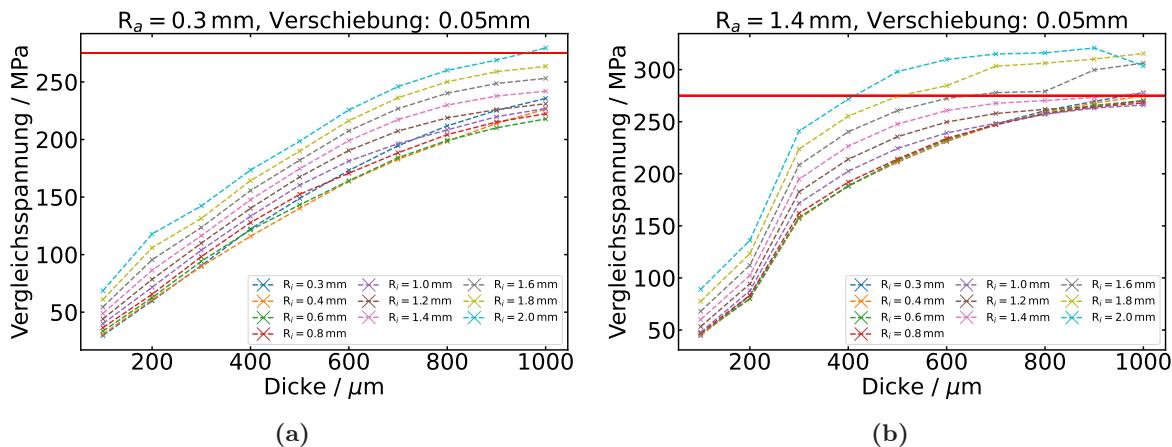


Abbildung 4.29.: a) Von-Mises-Vergleichsspannung für Bauteilkonfigurationen mit einem konstanten Außenradius von 0.3 mm und einer Verschiebung von 50 μm . In rot ist die Fließspannung von Titan Grade 2 eingezeichnet. b) Von Mises Vergleichsspannung für Bauteilkonfigurationen mit einem konstanten Außenradius von 1.4 mm und einer Verschiebung von 50 μm . In rot ist in beiden Diagrammen die Fließspannung von Titan Grade 2 eingezeichnet.

In Abbildung 4.29a und Abbildung 4.29b sind exemplarisch die berechneten maximalen von-Mises-Spannungen für verschiedene Bauteilkonfigurationen in Abhängigkeit von der Dicke d der Biegelemente dargestellt. Der Außenradius wurde dabei jeweils konstant gehalten und beträgt 0.3 mm in Abbildung 4.29a sowie 1.4 mm in Abbildung 4.29b. Alle übrigen Ergebnisse sind im Anhang aufgeführt (siehe Abbildung A.10 - Abbildung A.18). In allen Fällen wurde eine Verschiebung von 50 μm aufgebracht.

Sowohl für einen Außenradius von 0.3 mm als auch für einen von 1.4 mm zeigt sich mit zunehmendem Innenradius und steigender Dicke der Biegelemente eine Zunahme der berechneten von-Mises-Spannung. Dabei liegen die Spannungen für den kleineren Außenradius durchgän-

gig unterhalb der Werte, die bei gleicher Konfiguration mit größerem Außenradius auftreten. Für alle Konfigurationen mit einem Außenradius von 0.3 mm bleibt die von-Mises-Spannung unterhalb der Fließgrenze von 275 MPa, welche in den Abbildungen durch eine rote Linie markiert ist. Lediglich bei einem Innenradius von 2 mm und einer Dicke von 1000 μm wird dieser Grenzwert überschritten. Bei einem Außenradius von 1.4 mm wird die Fließspannung ab einer Dicke von 400 μm für Innenradien zwischen 2.0 mm und 1.6 mm überschritten. In Abbildung 4.30 ist die deformierte Bauteilgeometrie abgebildet, wobei der Betrag der von-Mises-Spannung über die Farbskala gegeben ist. Dabei entspricht rot einer hohen Spannung und blau einer kleinen Spannung. Die größte Spannung ergibt sich dabei im Bereich der Radien, wodurch sich die Abhängigkeit der maximalen Spannung von den Radien erklären lässt. Die Ergebnisse zeigen, dass es eine Vielzahl an Bauteilkonfigurationen gibt, bei denen die maximale von-Mises-Spannung die Fließgrenze des Materials nicht überschreitet, wenn der obere Probenhalter um 50 μm verschoben wird. Dies bedeutet, dass sich die Dehnungszelle in diesen Fällen rein elastisch verhält und keine plastische Verformung auftritt. Es ist zu beobachten, dass die maximale Spannung mit zunehmenden Radien R_i und R_a und größerer Dicke d der Biegelemente ansteigt. Neben der mechanischen Belastbarkeit muss jedoch zusätzlich geprüft werden, ob die eingesetzten Piezoaktuatoren in der Lage sind, die dafür notwendige Kraft aufzubringen. Die gesamte Kraft, die zur Erzeugung der gewünschten Verschiebung erforderlich ist, kann ebenfalls aus der FEA bestimmt werden.

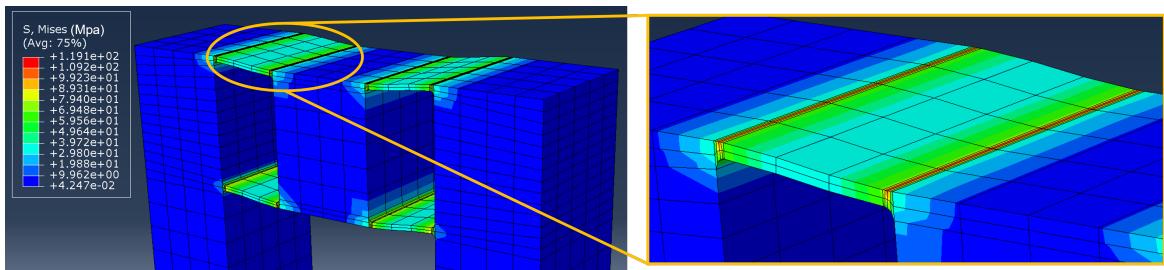


Abbildung 4.30.: Verformung des Titanunterteils in Folge der simulierten Verschiebung. Durch die Farbskala wird der Betrag der Vergleichsspannung angegeben, wobei rot einer hohen Spannung und blau einer kleinen Spannung entspricht. Die maximale Vergleichsspannung tritt dabei im Bereich der Radien auf.

In Abbildung 4.31 sind die Ergebnisse der Kraftberechnungen für die gleichen Bauteilkonfigurationen wie bei den Spannungsanalysen in Abbildung 4.29 dargestellt. Der Einfluss unterschiedlicher Innenradien R_i bei konstantem Außenradius R_a auf die benötigte Kraft ist deutlich geringer als auf die Spannung. Analog zur Spannungsverteilung führen jedoch sowohl ein größerer Innen- als auch Außenradius zu einem Anstieg der benötigten Kraft. Der entscheidende Parameter hinsichtlich der aufzubringenden Kraft ist die Dicke d der Biegelemente, da sie einen überproportionalen, näherungsweise quadratischen, Einfluss auf die Kraftentwicklung hat.

Die maximal von der Dehnungszelle auf die Probe übertragbare Kraft ist durch die verwendeten Piezoaktuatoren limitiert. Diese bestehen aus gesinterten Schichten aus Blei-Zirkonat-Titanat, die zwar große Druckkräfte aufbringen können, jedoch nur begrenzt zugbelastbar sind. Eine zu hohe Zugbelastung kann zur Bildung von Mikrorissen in der Keramik führen, was letztlich zur Zerstörung des Piezoaktuators führt. Aufgrund des Designs der Dehnungszelle kommt es sowohl bei der Dehnung als auch bei der Stauchung der Probe bei mindestens einem der Piezoaktuatoren zu einer Zugbelastung. Die stärkste Zugbelastung wirkt dabei auf den mittleren Piezoaktuator, wenn die Probe durch die äußeren Aktuatoren gedehnt wird. Im umgekehrten Fall, bei der Stauchung der Probe durch den mittleren Piezoaktuator, verteilt sich die resultierende Zugbelastung auf die beiden äußeren Aktuatoren, sodass diese jeweils nur die Hälfte der Belastung erfahren.

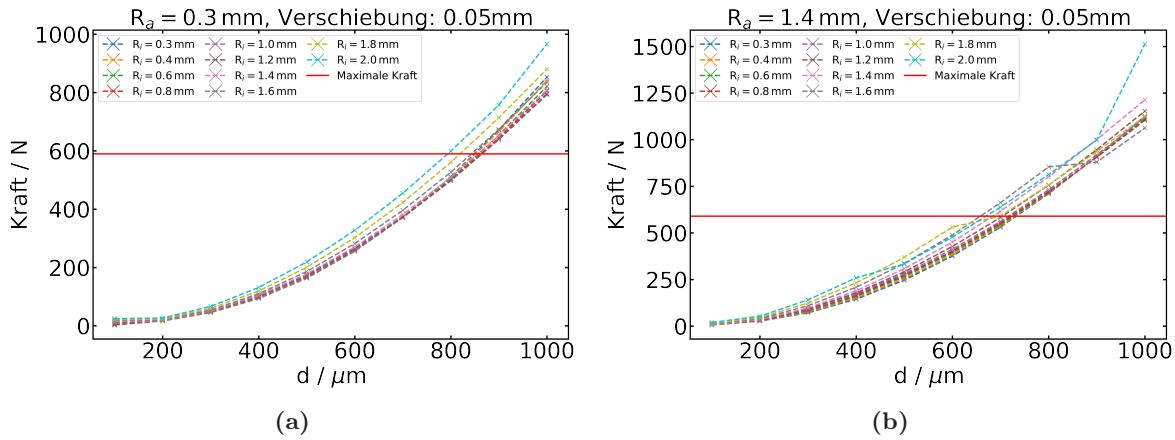


Abbildung 4.31.: a) Aufzubringende Kraft für Bauteilkonfigurationen mit einem konstanten Außenradius von 0.3 mm und einer Verschiebung von $50 \mu\text{m}$. b) Aufzubringende Kraft für Bauteilkonfigurationen mit einem konstanten Außenradius von 1.4 mm und einer Verschiebung von $50 \mu\text{m}$. Die horizontale rote Linie in beiden Diagrammen markiert die maximale Belastbarkeit der Dehnungszelle von 590 N .

In einem Zugversuch wurde untersucht, bei welcher maximalen Kraft die verwendeten Piezoaktuatoren versagen. Der dafür eingesetzte Testaufbau ist in Abbildung 4.32a dargestellt. Der Piezoaktuator wurde mit Styccast 2850FT zwischen zwei Titanstäbe mit eckigem Ende geklebt und anschließend in das für den Zugversuch verwendete Prüfgerät (siehe Abbildung 4.32b) über zwei Spannfutter eingespannt. Material und Kleber dieses Versuchsaufbaus entsprechen damit so genau wie möglich den Bedingungen in der eingebauten Dehnungszelle, da dort der gleiche Kleber und ebenfalls Titanteile verwendet werden.

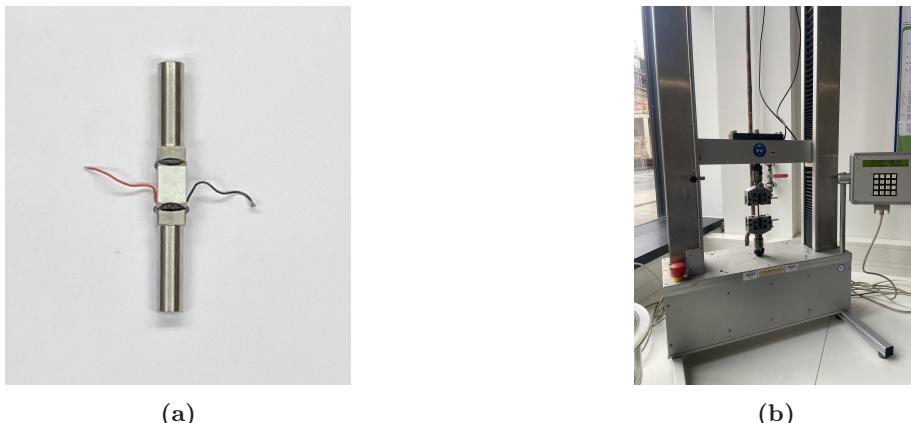


Abbildung 4.32.: a) Zwischen die Titanstücke geklebter Piezoaktuator, der im Zugversuch vermessen wurde. b) Versuchsaufbau des Zugversuchs.

Da es beim händischen Verkleben der Einzelteile zu einer leichten Verdrehung der Titanstäbe gegeneinander kommen kann, wurden die Titanstäbe im Bereich der Klemmung rund ausgeführt. Dadurch soll das Risiko von Scherkräften reduziert werden, die das Messergebnis verfälschen könnten. Während der Messung wurde der Abstand zwischen den Spannfuttern mit einer konstanten Geschwindigkeit von 1 mm/min , der niedrigsten am Gerät einstellbaren Geschwindigkeit, vergrößert und die dafür aufgebrachte Kraft kontinuierlich aufgezeichnet. Das Ergebnis des Versuchs ist in Abbildung 4.33 dargestellt. Bei dem Versuch konnte eine maximale Kraft von 590 N auf das Testobjekt aufgebracht werden, wobei nicht der Piezoaktuator, sondern die Klebeverbindung gebrochen ist. Dies zeigt, dass die maximale mechanische Belastbarkeit der Dehnungszelle nicht ausschließlich durch die Piezoaktuatoren begrenzt ist, sondern

auch von der Klebeverbindung abhängt. Dabei ist jedoch zusätzlich zu berücksichtigen, dass die Piezoaktuatoren auch unterhalb der Kraft, bei der sie brechen, durch die Bildung von Mikrorissen irreversibel geschädigt werden können und die dauerhafte Zugbelastung während der Verwendung der Dehnungszelle die Lebensdauer der Piezoaktuatoren reduzieren kann. Dies wird jedoch bewusst in Kauf genommen, da die Vorteile dieses Konzepts überwiegen. Die Piezoaktuatoren sind in diesem Sinne als Verschleißteile anzusehen, die nach längerem Gebrauch ausgetauscht werden müssen. Durch den modularen Aufbau der Dehnungszelle ist dies jedoch möglich, ohne die komplette Dehnungszelle neu bauen zu müssen.

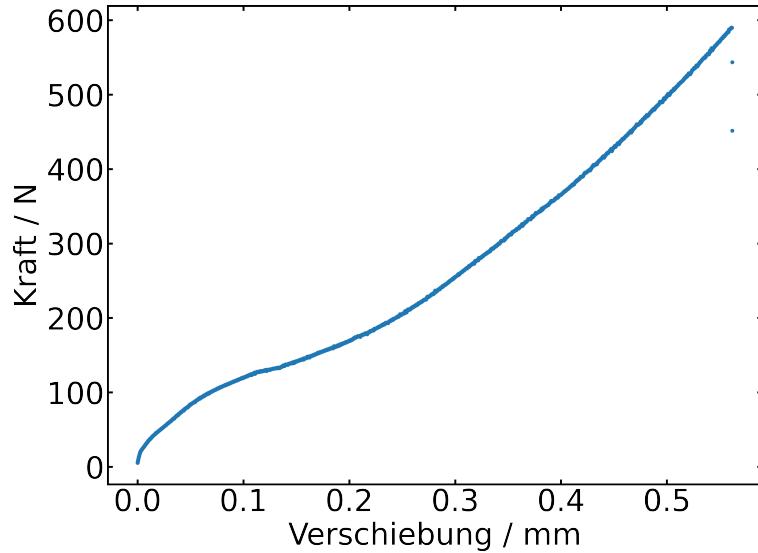


Abbildung 4.33.: Ergebnis des Zugversuchs. Die Klebeverbindung zwischen Piezoaktuator und Titanstück ist bei einer maximalen Kraft von 590 N gebrochen.

Zur Bestimmung optimaler Werte für die Radien und die Dicke der Biegeelemente müssen verschiedene Faktoren berücksichtigt werden. Die Simulationsergebnisse zeigen, dass sich die maximale von-Mises-Spannung im Bauteil durch kleine Innen- und Außenradien deutlich reduzieren lässt. Daher sollten die Radien idealerweise so klein wie möglich gefertigt werden. Bei herkömmlichen Bearbeitungsverfahren wie dem Fräsen ist der minimale Radius jedoch durch den verwendeten Fräser begrenzt. Aus diesem Grund wurde das Titanteil im finalen Bearbeitungsschritt mithilfe der Drahterosion gefertigt, wodurch ein minimaler Radius von 0.3 mm realisiert werden konnte.

Im Hinblick auf die Dicke der Biegeelemente muss ein Kompromiss zwischen mechanischer Funktionalität und der aufbringbaren Kraft gefunden werden. Wie in Abbildung 4.31 gezeigt, steigt die zur Verschiebung des oberen Probenhalters benötigte Kraft mit zunehmender Dicke quadratisch an. Die durch den Zugversuch maximal aufbringbare Kraft beträgt 590 N und ist in Abbildung 4.31 durch die rote horizontale Linie eingezzeichnet. Dabei zeigt sich, dass es eine Vielzahl an Konfigurationen gibt, bei denen die maximale Kraft für eine Verschiebung des oberen Probenhalters von 50 μm nicht überschritten wird. Eine möglichst große Dicke der Biegeelemente verbessert die Steifigkeit der Biegeelemente und führt zu einem besseren Schutz des inneren Piezoaktuators. Allerdings wird ein Teil der Kraft auch benötigt, um die Probe selbst zu dehnen. Vor diesem Hintergrund wurde eine Dicke von 300 μm gewählt, da die Biegeelemente so erfahrungsgemäß stabil genug für den Einsatzzweck sind. Für eine Verschiebung von 50 μm und Radien von 0.3 mm ergibt sich bei dieser Dicke eine erforderliche Kraft von etwa 97 N. Dadurch verbleiben theoretisch etwa 490 N, um eine Belastung auf die Probe aufzubringen. Durch diese Konfiguration ist die Funktion der Biegeelemente gewährleistet und es bleibt genügend Kraft, um die Probe dehnen zu können.

4.2.3. Verhalten der Piezoaktuatoren

Beim Betrieb von Piezoaktuatoren sind das Hystereseverhalten sowie Kriecheffekte zu berücksichtigen, die beim Anlegen einer elektrischen Spannung auftreten können. In Abbildung 4.34 ist die mit einem Abstandssensor gemessene Längenänderung eines Piezoaktuators dargestellt, wobei die Spannung schrittweise von 0 V auf 90 V, anschließend auf -30 V und schließlich zurück auf 0 V variiert wurde. Die Messung zeigt deutlich eine Hysterese in der Längenänderung, wie sie typisch für Piezoaktuatoren ist. Das bedeutet, dass die Dehnung nicht nur von der aktuell anliegenden Spannung, sondern auch vom Verlauf der zuvor angelegten Spannungen abhängt. Diese Hysterese entsteht durch die ferroelektrische Natur des Piezomaterials. Beim Anlegen einer elektrischen Spannung kommt es zur Orientierung von Domänen im Kristallgitter, die sich bei Änderung der Spannung verzögert oder nicht vollständig zurückbilden. Dies führt zu einer nichtlinearen, pfadabhängigen Ausdehnung und damit zu einer bleibenden Differenz zwischen der Hin- und Rückbewegung bei gleicher Spannung. Aufgrund der Hysterese und der Nichtlinearität des piezoelektrischen Effekts ist es erforderlich, die Verschiebung des Probenhalters aktiv zu erfassen, da eine Ableitung aus der angelegten Piezospnung nicht ausreichend genau wäre.

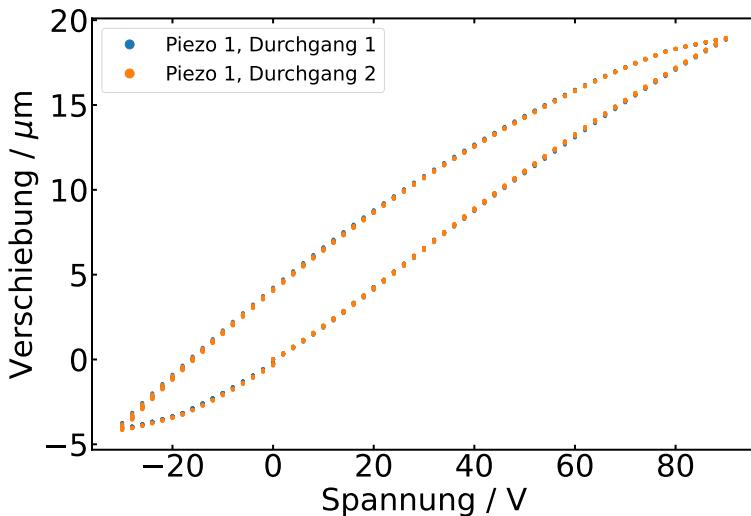


Abbildung 4.34.: Beispielhaftes Hystereseverhalten der verwendeten Piezoaktuatoren. Für diese Messung wurden baugleiche aber kürzere Piezoaktuatoren als in der finalen Dehnungszelle verwendet, weshalb die maximale Verschiebung bei 90 V lediglich etwa $19\text{ }\mu\text{m}$ beträgt. Um das Hystereseverhalten zu verdeutlichen, wurde der Dehnungszyklus zweimal hintereinander durchlaufen.

Der Kriecheffekt ist in Abbildung 4.35 dargestellt. In Abbildung 4.35a sind in blau die mit dem Abstandssensor gemessene Längenänderung des Piezoaktuators und in rot die angelegte Piezospnung gegen die Zeit aufgetragen. Dabei wurde die Spannung alle 20 s in Schritten von 1 V von 0 V bis 4 V erhöht. Es zeigt sich bei jeder Spannungsänderung eine sprunghafte Längenänderung, gefolgt von einer zeitlich konstant bleibenden Auslenkung. In Abbildung 4.35b ist die gleiche Messung für größere Spannungen zwischen 75 V und 79 V dargestellt. Auch hier tritt bei jeder Spannungsänderung ein abrupter Längensprung auf. Im Gegensatz zu den kleinen Spannungen zeigt sich jedoch zusätzlich ein deutliches zeitabhängiges Verhalten. Nach dem Spannungssprung nimmt die Längenänderung weiter langsam zu, ein Effekt, der als Kriechen bezeichnet wird. Dieses Kriechverhalten ist typisch für Piezoaktuatoren und beruht auf viskoelastischen Effekten sowie dielektrischen Relaxationsprozessen im keramischen Material [172]. Nach dem Anlegen einer Spannung dauert es eine gewisse Zeit, bis sich die vollständige mechanische Reaktion im Material ausbildet. Dies führt dazu, dass sich der Aktuator nach der eigentlichen Spannungsänderung noch langsam weiter verformt.

Die durch das Kriechen verursachte zusätzliche Verschiebung beträgt im Fall einer angeleg-

ten Spannung von 78 V, gemessen als Differenz zwischen dem Anfangswert und dem Wert nach 20 s, etwa $0.035 \mu\text{m}$. Als Anfangswert wurde dabei der erste Messpunkt direkt nach der sprunghaften Längenänderung verwendet. Die Standardabweichung der Abstandswerte im Zeitraum 16 s nach der Spannungsänderung beträgt lediglich $0.002 \mu\text{m}$ und stimmt damit mit der Standardabweichung der Messwerte bei kleinen Spannungen überein. Dies zeigt, dass das Kriechen bei kleinen Spannungen vernachlässigbar ist, während es bei höheren Spannungen eine messbare zeitabhängige Verschiebung verursacht, die aber mit der Zeit abnimmt.

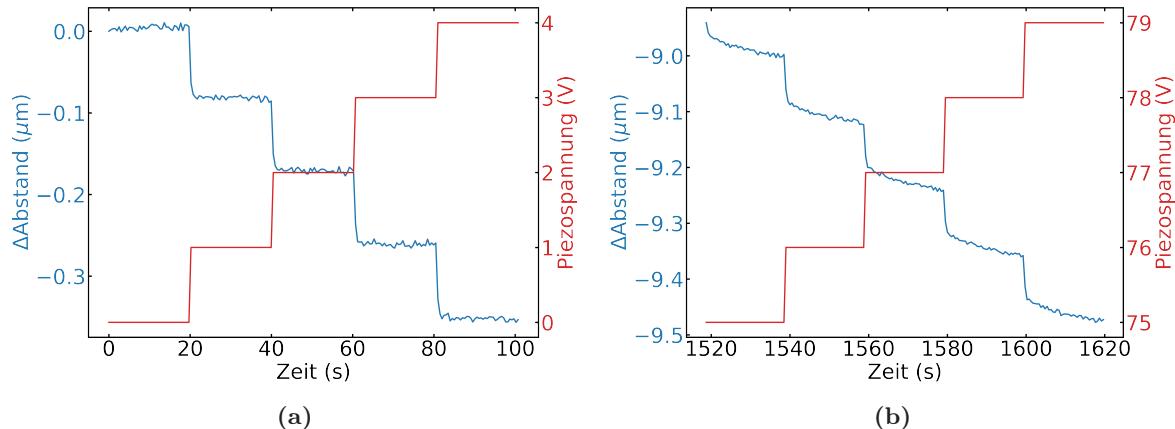


Abbildung 4.35.: Abstandsänderung der Dehnungszelle durch eine angelegte Piezospnung. Für kleine angelegte Spannungen (a) und große angelegte Spannungen (b). Für große Spannungen ist deutlich das Kriechen der Piezoaktuatoren zu beobachten, wodurch sie erst nach einer gewissen Zeit eine konstante Ausdehnung erreichen.

Die maximale Verschiebung der Dehnungszelle ergibt sich aus den verwendeten Piezoaktuatoren. In der finalen Ausführung der Zelle wurden PST 150/7x7/40 Piezoaktuatoren der Firma Piezomechanik GmbH verwendet, die für eine maximale Betriebsspannung von 150 V ausgelegt sind. Die daraus in der Zelle resultierende maximale Verschiebung in Abhängigkeit von der Temperatur ist in Abbildung 4.36 dargestellt. Bei Raumtemperatur beträgt die Verschiebung etwa $37 \mu\text{m}$, wobei sie infolge des temperaturabhängigen Verhaltens der Piezoaktuatoren mit sinkender Temperatur deutlich abnimmt. Bei 5 K erreicht die maximale Verschiebung nur noch etwa $4 \mu\text{m}$. Da die Durchschlagsfestigkeit der Piezoaktoren bei tiefen Temperaturen ansteigt und damit die Gefahr eines elektrischen Durchbruchs geringer ist, kann die angelegte Spannung im tiefen Temperaturbereich erhöht werden. Aus diesem Grund wurde bei Messungen bei 45 K und 5 K eine Piezospnung von bis zu 200 V verwendet, um die mechanische Auslenkung zu maximieren. Dadurch lässt sich die verringerte Effizienz der Piezoaktuatoren bei tiefen Temperaturen geringfügig kompensieren.

Die daraus resultierende maximale Dehnung bzw. Stauchung berechnet sich gemäß Gleichung 4.7 aus der Längenänderung ΔL , die im Fall der maximalen Verschiebung entspricht, sowie der unbelasteten Probenlänge L_0 . Je kürzer die Probe, desto größer ist die maximal erzeugbare Dehnung. Für Elastowiderstandsmessungen, bei denen die Probe im Vier-Punkt-Verfahren kontaktiert wird, ist die minimale Probenlänge durch den Platzbedarf für die Kontaktierung begrenzt. Bei der Verwendung von $50 \mu\text{m}$ dicken Drähten ist, je nach Geschick, eine minimale Probenlänge von etwa $600 \mu\text{m}$ ausreichend. Daraus ergibt sich bei Raumtemperatur eine maximale Dehnung bzw. Stauchung von etwa 6 %, bei 5 K hingegen nur noch etwa 0.7 %. Im Vergleich zum direkten Aufkleben der Probe auf einen Piezoaktuator (siehe Abbildung 4.1) ist die erzeugbare Dehnung in dieser Zelle bei 5 K etwa um den Faktor 70 und bei Raumtemperatur sogar um den Faktor 100 größer.

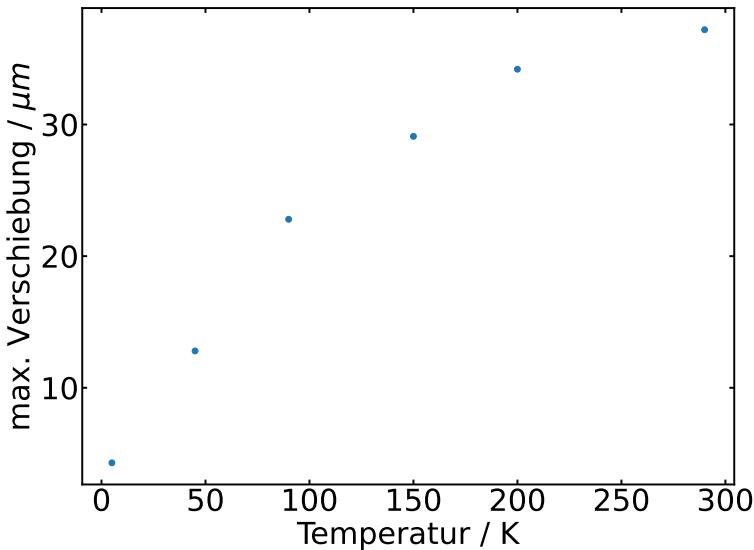


Abbildung 4.36.: Maximale Verschiebung des oberen Probenhalters in Abhängigkeit der Temperatur der finalen Dehnungszelle.

4.2.4. Einfluss der Vakuumpumpe auf die Messungen

Nicht alle Messungen erfordern den Einsatz von flüssigem Helium als Kühlmittel, da die zu untersuchenden Effekte bereits bei höheren Temperaturen auftreten. Ein Beispiel hierfür ist der Eintritt in die nematische Phase von BaFe_2As_2 , welcher bereits bei etwa 139 K stattfindet. Für diese Untersuchungen genügt der Einsatz von flüssigem Stickstoff, was die Experimente erheblich kosteneffizienter macht. Der Messstab wurde daher so konzipiert, dass er sowohl mit flüssigem Helium als auch mit flüssigem Stickstoff betrieben werden kann.

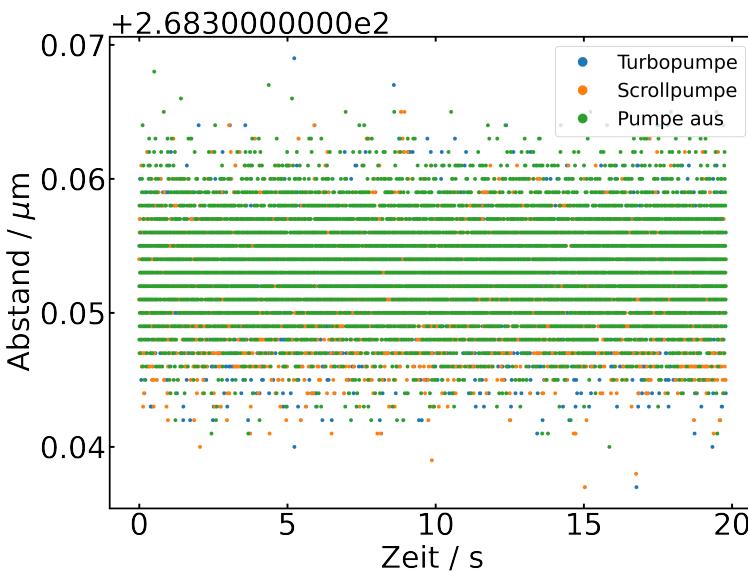


Abbildung 4.37.: Zeitabhängige Abstandsmessung der Dehnungszelle mit Turbopumpe, Scrollpumpe und ohne Pumpe bei 138 K.

Der entscheidende Unterschied zwischen beiden Kühlmitteln liegt im Kryopumpeneffekt, der durch das Außenrohr verursacht wird. Obwohl die Leckrate mit etwa $1.55 \cdot 10^{-5} \frac{\text{mbar}\cdot\text{l}}{\text{s}}$ sehr gering ist, kann es bei längeren Messzeiten dennoch zu einer deutlichen Verschlechterung des Vakuums im Inneren des Messstabs kommen. Dies führt zu einer Zunahme des konvektiven Anteils des Wärmeaustauschs, sodass eine höhere Heizleistung erforderlich ist. Verschlechtert

sich das Vakuum weiterhin, reicht die verfügbare Heizleistung irgendwann nicht mehr aus, um hohe Temperaturen zu erreichen, was schlimmstenfalls zum Abbruch der Messung führt. Dieses Problem ist bei der Verwendung von Stickstoff aufgrund des weniger stark ausgeprägten Kryopumpeneffekts akuter als bei Helium.

Beim Kryopumpeneffekt kondensiert oder adsorbiert das im Vakuum verbliebene Restgas an tiefgekühlten Oberflächen [173]. In dem verwendeten Aufbau stellt die Innenseite des Außenrohrs eine solche tiefgekühlte Fläche dar. Aufgrund des Temperaturunterschieds zwischen flüssigem Stickstoff und flüssigem Helium ist der Kryopumpeneffekt unterschiedlich stark ausgeprägt. Dadurch kann bei Verwendung von Helium über längere Zeit ein niedrigerer Druck aufrechterhalten werden, was zu einer geringeren benötigten Heizleistung führt. Im Falle von flüssigem Stickstoff kann der Heizstab daher nach etwa zwei Wochen Standzeit die Probe nicht mehr auf Raumtemperatur erwärmen. Um die mögliche Messzeit zu verlängern, kann während der Messungen zusätzlich mit einer Vakuumpumpe der Messstab evakuiert werden. Dabei ist jedoch zu überprüfen, ob diese Maßnahme einen negativen Einfluss auf die Messergebnisse hat. Dafür wurde sowohl eine zeitabhängige Abstandsmessung als auch eine Messung des dehnungsabhängigen Widerstands einer BaFe_2As_2 -Probe bei konstanter Temperatur jeweils mit und ohne Betrieb der Pumpe durchgeführt. Als Vakuumpumpen kamen dabei sowohl ein Turbopumpstand als auch eine Scrollpumpe zum Einsatz, welche über einen Wellenschlauch mit dem Messstab verbunden wurden. In Abbildung 4.37 sind die Ergebnisse der zeitabhängigen Abstandsmessungen bei einer Probentemperatur von 138 K dargestellt, durchgeführt mit Turbopumpe, Scrollpumpe sowie ohne Pumpe. Tabelle 4.2 fasst die Mittelwerte und Standardabweichungen der jeweils 20 s langen Messungen zusammen.

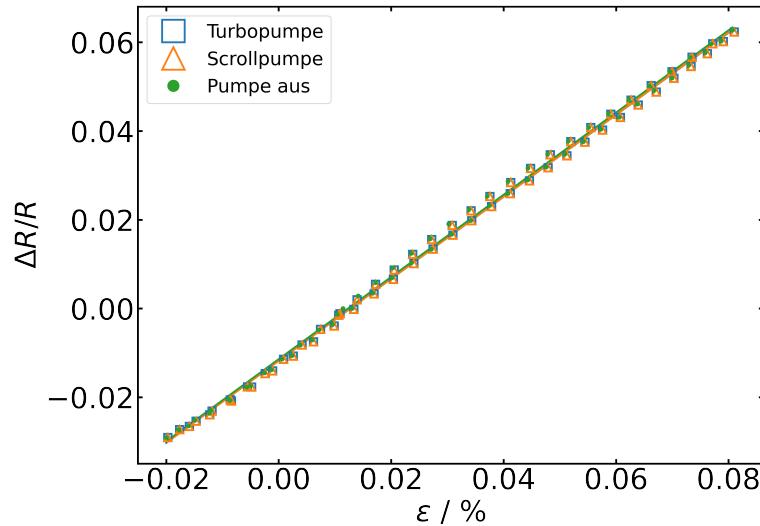


Abbildung 4.38.: Dehnungsabhängige Widerstandsmessung einer BaFe_2As_2 -Probe bei 138 K bei den verschiedenen Pumpenkonfigurationen und einer durchgeföhrten linearen Anpassung.

Dabei stimmen die Mittelwerte innerhalb der jeweiligen Standardabweichung überein und die Standardabweichung erhöht sich durch den Einsatz der Pumpen nur geringfügig von $0.0037 \mu\text{m}$ auf $0.0038 \mu\text{m}$, wobei zwischen den beiden Pumpentypen kein Unterschied festgestellt werden kann. Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass sich der Einsatz einer Vakuumpumpe nicht auf die Abstandsmessung auswirkt. Im nächsten Schritt wurde überprüft, ob der Pumpeneinsatz andere Messparameter beeinflusst. Hierzu wurde der dehnungsabhängige Probenwiderstand einer BaFe_2As_2 -Probe bei einer Temperatur von 138 K für die verschiedenen Konfigurationen gemessen und die Steigung bestimmt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.38 dargestellt und ebenfalls in Tabelle 4.2 aufgelistet. Auch in diesem Fall ergeben sich keine signifikanten Veränderungen für die unterschiedlichen Pumpenkonfigurationen und die bestimmten Werte

stimmen innerhalb des Fehlers überein. Dies zeigt, dass sich die Pumpen auch nicht auf die Widerstandsmessung oder die Einstellung der Piezospansnung auswirken.

Tabelle 4.2.: Mittelwerte und Standardabweichungen der Abstandsmessung bei verschiedenen Pumpenzuständen bei 138 K und die Steigung der dehnungsabhängigen Widerstandsmessung bei 138 K an einer BaFe₂As₂-Probe.

	Mittelwert / μm	Standardabweichung / μm	Steigung
Turbopumpe	268.3518	0.0038	-92.4 ± 0.5
Scrollpumpe	268.3519	0.0038	-92.4 ± 0.5
Pumpe aus	268.3520	0.0037	-92.5 ± 0.5

4.2.5. Abkühlvorgang der Dehnungszelle

Als erster Test der fertigen Dehnungszelle wird diese ohne montierte Probe abgekühlt. Während des Abkühlprozesses wird die Temperatur und der Abstand zwischen den Probenhaltern kontinuierlich gemessen. Abbildung 4.39a zeigt den zeitlichen Verlauf der Probentemperatur nach Beginn des Abkühlvorgangs, der das typische Abkühlverhalten aufweist. Die temperaturabhängige Längenänderung des Abstands der Probenhalter ist in Abbildung 4.39b dargestellt. Die Längenänderung beträgt bei 77 K etwa $-0.7 \mu\text{m}$ im Vergleich zur Raumtemperatur, was auf die thermische Kontraktion des Titanunterteils zurückzuführen ist. Um eine Probe in der Dehnungszelle spannungsfrei abzukühlen zu können, muss diese Längenänderung durch die Piezoaktuatoren kontinuierlich ausgeglichen werden.

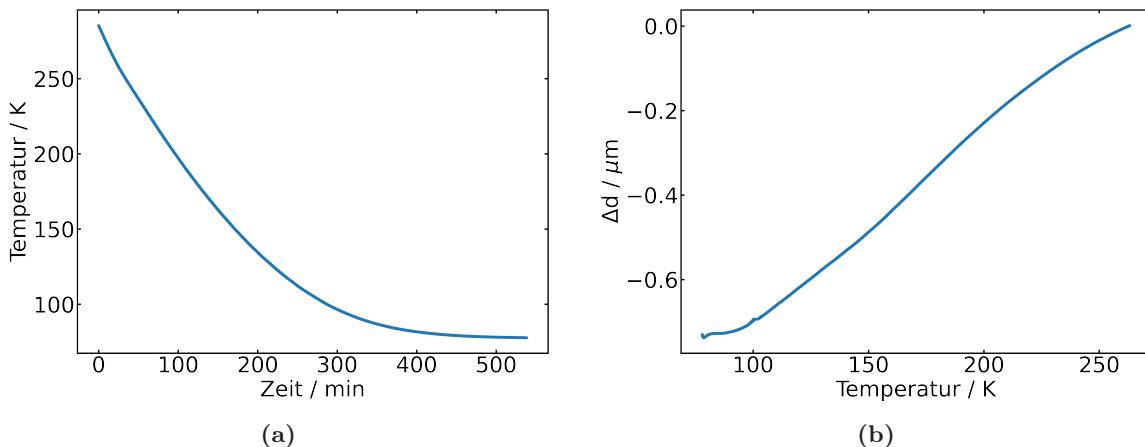


Abbildung 4.39.: a) Zeitabhängige Temperaturmessung während des Abkühlvorgangs des Stabs. b) Temperaturabhängige Abstandsänderung der Probenplatten.

4.2.6. Messprogramm

Zur Durchführung von Elastowiderstandsmessungen mit der entwickelten Dehnungszelle wurde ein benutzerfreundliches Programm mit grafischer Oberfläche (GUI) erstellt, um mit den notwendigen Messgeräten kommunizieren zu können und die Messdaten zu visualisieren. Um eine möglichst breite Kompatibilität zu gewährleisten, wird dafür die Programmiersprache Python in Kombination mit dem Paket PyQt5 für die grafische Darstellung verwendet. Das Programm ermöglicht nicht nur das Senden der erforderlichen Parameter an die verwendeten Messgeräte und das Auslesen der Messergebnisse, sondern bietet auch eine simultane Visualisierung der erfassten Daten. Dadurch lassen sich laufende Messungen in Echtzeit überwachen, sodass potenzielle Probleme sofort erkannt und behoben werden können.

Der Ablauf und die Anforderungen an das Programm sind sehr ähnlich zu der in Abschnitt 3.4 beschriebenen Durchführung von Elastowiderstandsmessungen bei denen die Probe direkt auf

den Piezoaktuator geklebt wird. Änderungen gibt es bei einigen Details, wie z.B. der Dehnungsmessung, da bei der Dehnungszelle dafür ein Abstandssensor und kein Dehnungsmessstreifen verwendet wird. Zudem wurde versucht, die Bedienbarkeit an einigen Stellen weiter zu verbessern. Abbildung 4.40 zeigt den Programmablauf in Form eines Blockdiagramms. Zu Beginn werden die eingegebenen Parameter verarbeitet. Dazu gehört im Wesentlichen die Herstellung der Kommunikation mit den verwendeten Messgeräten und die Erstellung einer Liste mit den Temperaturwerten bei denen die Dehnungsvariation durchgeführt werden soll. Für jeden Temperaturwert soll die Temperatur stabilisiert und der Probenabstand währenddessen konstant gehalten werden. Danach folgt die eigentliche Dehnungsvariation mit der simultanen Parametermessung und Datenspeicherung.

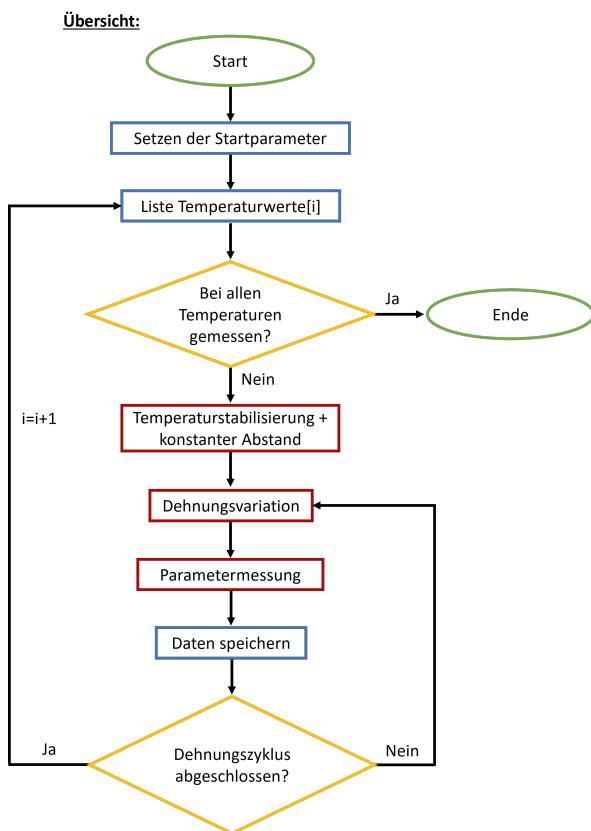


Abbildung 4.40.: Blockdiagramm des Ablaufs der Elastowiderstandsmessung mit den für die Dehnungszelle geschriebenen Programm. Die in rot eingerahmten Programmteile sind in Abbildung 4.41 und Abbildung 4.42 genauer beschrieben.

Um die Messung zu steuern, wird ein Computer benötigt, der über GPIB-Kabel mit den Strom- und Spannungsquellen sowie dem Temperaturregler verbunden ist. Die Piezospannung sowie der Strom für die Vier-Punkt-Widerstandsmessung der Probe werden mithilfe von drei Keithley 3400 SourceMetern erzeugt. Um die äußeren und den mittleren Piezoaktuator unabhängig voneinander ansteuern zu können, sind zwei separate SourceMeter erforderlich. Die Spannungsmessung der Vier-Punkt-Widerstandsmessung erfolgt mit einem Keithley 2182A Nanovoltmeter. Für die Temperaturmessung und -regelung kommt ein Lakeshore 340-Temperaturregler zum Einsatz. Die Ansteuerung des Abstandssensors erfolgt über eine Ethernet-Verbindung unter Verwendung einer IP-Adresse. Durch die geräteinternen unterschiedlichen Funktionen der verschiedenen Geräte funktioniert das geschriebene Programm nur korrekt, wenn auch die richtigen Geräte verwendet werden. Es ist nicht möglich diese beliebig mit Modellen anderer Hersteller zu tauschen.

Bei den in Abbildung 4.40 rot umrandeten Kästen handelt es sich um Funktionen welche in Abbildung 4.41 und Abbildung 4.42 ebenfalls als Blockdiagramme dargestellt sind. Abbil-

dung 4.41a zeigt den Ablauf der Temperaturstabilisierung. Durch den verwendeten Temperaturregler kann die Probentemperatur bei der richtigen Wahl der PID-Parameter beliebig genau eingestellt werden. Da die optimale Wahl der PID-Parameter temperaturabhängig ist und die Zeit bis zur stabil eingestellten Zieltemperatur variieren kann, entscheidet das Programm selbstständig, wann die Temperaturregelung als abgeschlossen gilt. Dafür bestimmt es die Standardabweichung der Temperaturmessungen der letzten 200 s. Ist diese kleiner als die vorgegebene Standardabweichung ist die Temperaturregelung abgeschlossen. Um sicherzustellen, dass es bei einer neu gesetzten Solltemperatur keine Beeinflussung von alten Temperaturmesswerten kommt, wird nach jeder Änderung der Solltemperatur eine neue temporäre Liste erzeugt, in die die Temperaturmesswerte gespeichert werden. Um eine aussagekräftige Standardabweichung bilden zu können, wartet das Programm mit der Berechnung der Standardabweichung so lange, bis die Temperatur 200 s lang gemessen wurde. Da die Temperatur pro Sekunde einmal gemessen wird, ist dies der Fall, wenn die temporäre Liste eine Länge von 200 Elementen hat. Damit die Berechnung der Standardabweichung nicht durch Temperaturwerte unmittelbar nach einer Solltemperaturänderung verfälscht wird, etwa in der Phase mit den größten Temperaturschwankungen, wird nach Erreichen einer temporären Listenlänge von 200 Einträgen bei jedem neuen Messwert der älteste Eintrag entfernt. Auf diese Weise wird die Standardabweichung der Temperatur stets über die letzten 200 s bestimmt.

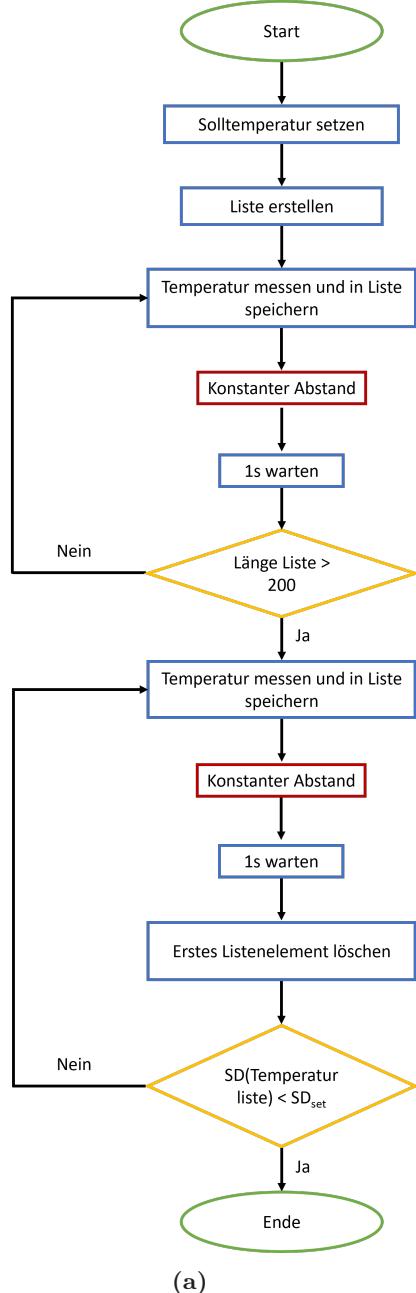
Da die Probe durch das Abkühlen der Dehnungszelle und dem daraus resultierenden Zusammenziehen des Titanunterteils leicht gestaucht wird, muss der Probenabstand über die Piezospaltung geregelt werden. Das entsprechende Blockdiagramm dieses Prozesses ist in Abbildung 4.42a abgebildet. Als Sollwert wird der gemessene Abstand bei Raumtemperatur zu Beginn der Messung verwendet. Der Probenabstand wird kontinuierlich gemessen. Ist er kleiner als der Startabstand, wird die Piezospaltung der beiden äußeren Piezoaktuatoren um 0.002 V erhöht. Ist er größer, wird sie um 0.002 V verringert. Da es nur während der Temperaturstabilisierung zu einer temperaturabhängigen Änderung des Probenabstands kommen kann, muss der Abstand auch nur währenddessen konstant gehalten werden.

In Abbildung 4.42a ist das Blockdiagramm der Dehnungsvariation dargestellt, das nach erfolgreicher Temperaturstabilisierung ausgeführt wird. Um die Probe sowohl maximal dehnen als auch stauchen zu können, wird für die Dehnung die Spannung an den beiden äußeren Piezoaktuatoren erhöht, während für die Stauchung die Spannung des inneren Piezoaktuators gesteigert wird.

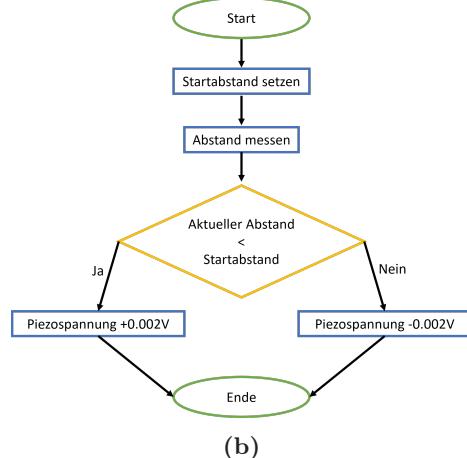
Ein vollständiger Dehnungszyklus beginnt im mechanisch spannungsfreien Anfangszustand. Zunächst wird die elektrische Spannung der äußeren Piezoaktuatoren in Schritten von 1 V so lange erhöht, bis die vorgegebene maximale Dehnung erreicht ist. Anschließend wird die Spannung in denselben Schritten reduziert, bis der spannungsfreie Zustand wiederhergestellt ist. Danach wird die Spannung des inneren Piezoaktuators in 1 V-Schritten erhöht, um die maximale Stauchung zu erreichen und schließlich erneut in derselben Schrittweite gesenkt, um zur Ausgangslage zurückzukehren.

Nach jeder Spannungsänderung werden die relevanten Probenparameter gemessen, um den Elastowiderstand zu bestimmen. Dabei ist eine kurze Wartezeit erforderlich, um sicherzustellen, dass sich die Spannung stabil eingestellt hat. Damit wird der beobachtete Kriecheffekt der Piezoaktuatoren berücksichtigt und sichergestellt, dass sich die Länge der Piezoaktuatoren während der Messung möglichst wenig ändert.

Das Blockdiagramm der Parametermessung, welche für den Elastowiderstand relevant sind, ist in Abbildung 4.42b abgebildet. Wie in Unterabschnitt 3.4.3 besprochen, wird für die Widerstandsmessung ein Strom an die Probe angelegt und der daraus resultierende Spannungsabfall über der Probe gemessen, was für beide Polarisationsrichtungen des Stroms durchgeführt wird. Damit sich der Strom richtig stabilisieren kann, wird nach jeder Änderung der Polarisationsrichtung des Stroms 0.5 s gewartet, bis die Messungen durchgeführt werden. Neben der Spannung wird für jede Polarisationsrichtung zusätzlich der Probenabstand und die Tem-

Temperaturstabilisierung:


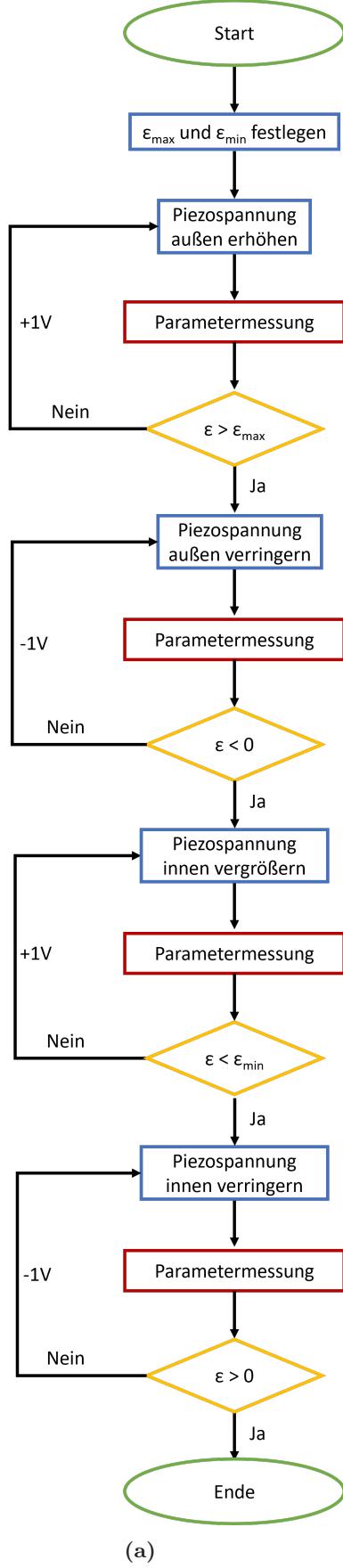
(a)

Konstanter Abstand:


(b)

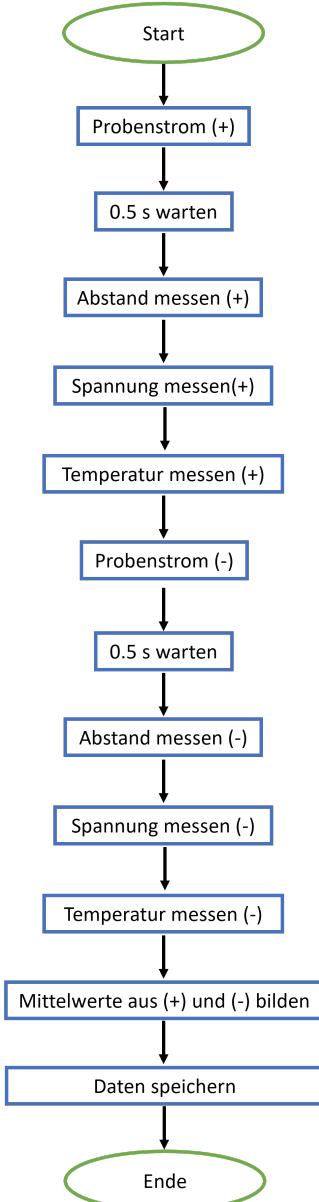
Abbildung 4.41.: a) Programmseitiger Ablauf der Temperaturstabilisierung, welche vor jeder Dehnungsvariation durchgeführt wird. b) Abstandsregelung des Probenabstands bei Veränderung der Probenstemperatur, welche zu einer mechanischen Belastung der Probe führt und kompensiert werden muss.

Dehnungsvariation:



(a)

Parametermessung



(b)

Abbildung 4.42.: a) Blockdiagramm der Dehnungsvariation. b) Blockdiagramm der Parametermessung zur Berechnung des Elastowiderstands. Dafür werden die Probenspannung der Probenabstand und die Temperatur gemessen.

peratur gemessen. Dies ist zum einen notwendig, um die Probendehnung zu bestimmen und um sicherzustellen, dass die Temperatur während der Messung wirklich konstant ist. Für jede Messgröße wird anschließend der Mittelwert aus den Messwerten der zwei verschiedenen Polarisationsrichtungen gebildet und gespeichert.

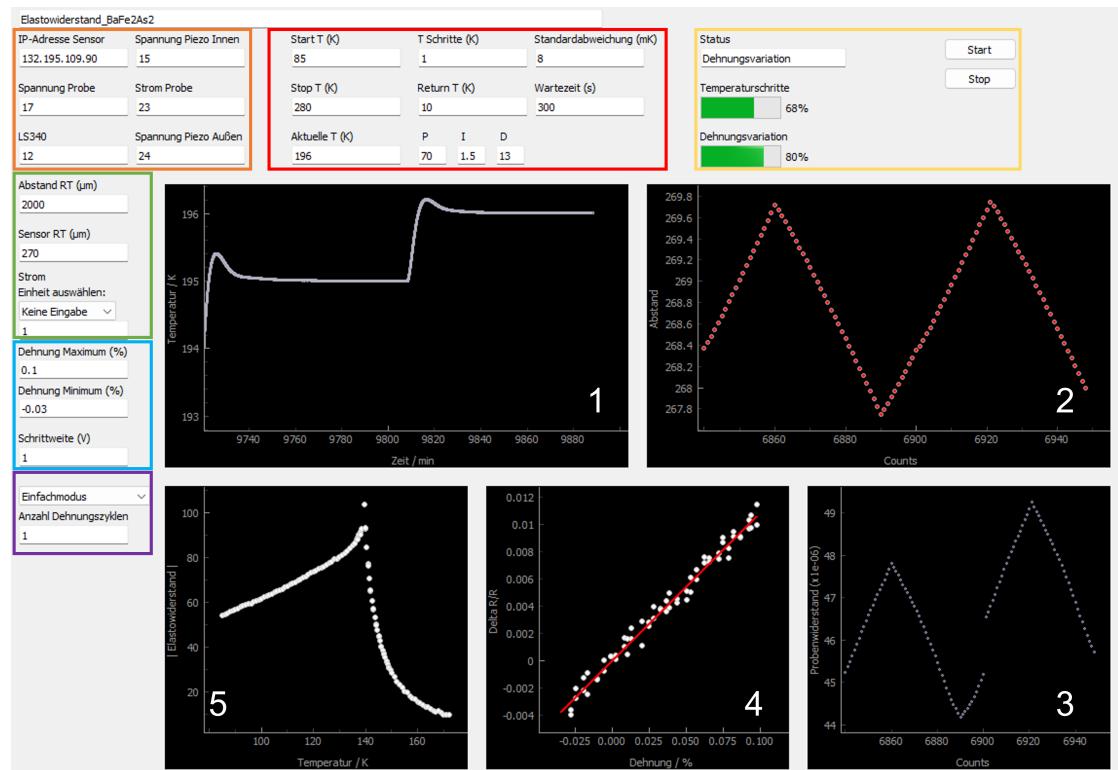


Abbildung 4.43.: GUI des entwickelten Messprogramms. In den farbig umrandeten Kästen können die für die Messung benötigten Parameter eingegeben werden. In den gelb eingerahmten Kasten wird der Status der der Messung angezeigt und das Programm kann gestartet und gestoppt werden. In Diagramm 1 wird kontinuierlich die Probentemperatur gegen die Zeit aufgetragen. Diagramm 2 und 3 zeigen die Abstandsmessung bzw. die Messung des Probenwiderstands gegen Counts, welche den Variationsschritten der angelegten Piezospannung entsprechen. Diagramm 4 zeigt die Widerstandsänderung gegen die Probendehnung für eine konstante Temperatur, welche aus der Messung des Probenabstands und der Widerstandsmessung berechnet werden. Um den Elastowiderstand zu bestimmen wird ein linearer Fit durchgeführt. Der Elastowiderstand entspricht der Steigung der Geraden und wird in Abhängigkeit der Probentemperatur in Diagramm 5 aufgetragen.

Eine Abbildung der grafischen Benutzeroberfläche ist in Abbildung 4.43 dargestellt. Die aufgenommenen Daten werden in den verschiedenen Diagrammen dargestellt und weiter verarbeitet. Als Rohdaten werden von dem Programm die Temperatur, der Abstand und der Probenwiderstand gemessen. Im Diagramm 1 wird die Temperatur während der kompletten Messung kontinuierlich gegen die Zeit aufgetragen. Die Diagramme 2 und 3 zeigen die Abstands- und Widerstandsmessung. Da diese nicht kontinuierlich gemessen werden, sondern nur wenn die Dehnung variiert wird, werden diese Werte gegen Counts aufgetragen. Damit ist die Anzahl an Messpunkten gemeint. So können auch die Abstands- und Widerstandsmessungen kontinuierlich und ohne größere Lücken, die es z.B. gäbe, wenn diese Werte gegen die Zeit aufgetragen werden würden, abgebildet werden. Da der Probenwiderstand mit der Temperatur zunimmt ergibt sich dadurch zwischen zwei Dehnungszyklen ein Sprung im Probenwiderstand, da sich die Probentemperatur ändert. In Diagramm 2 und 3 endet nach etwa 6900 Counts ein Dehnungszyklus, weshalb dort ein Sprung im Probenwiderstand sichtbar ist. Für das Diagramm 4 bestimmt das Programm für die letzte durchlaufene Dehnungsvariation die Widerstandsänderung und die aufgebrachte Dehnung. Anschließend wird ein linearer Fit

durchgeführt. Die Steigung entspricht dabei dem Elastowiderstand. Die so berechneten Elastowiderstandswerte werden in Diagramm 5 gegen die Probentemperatur aufgetragen.

Um dem Programm die verschiedenen Startparameter zu übergeben, stehen mehrere Eingabefelder zur Verfügung. Die Adressen der einzelnen Geräte werden in den orange markierten Feldern eingegeben. Das Programm ist so geschrieben, dass so wenig wie möglich per Hand an den Geräten eingestellt werden muss. So werden die SourceMeter beispielsweise automatisch in den richtigen Strom- oder Spannungsmodus versetzt und der passende Wertebereich wird in Abhängigkeit von den eingegebenen Parametern eingestellt.

In dem roten Kasten befinden sich alle temperaturspezifischen Parameter. Für die Erzeugung der Temperaturwerte bei denen der Elastowiderstand gemessen werden soll, muss eine Start- und Stopptemperatur [Start T(K), Stop T(K)] und die Schrittweite [T Schritte(K)] in Kelvin angegeben werden. Für den Fall, dass die Messung bei der tiefsten Temperatur beginnt, muss zudem noch eine Schlusstemperatur [Return T(K)] angegeben werden, damit die Probe nach Beenden der kompletten Messung nicht unnötig geheizt wird. Zudem muss ein Schwellenwert für die Standardabweichung der Temperatur gesetzt werden [Standardabweichung (mK)]. Für eine optimale Temperaturregelung braucht der Regler die passenden PID-Werte. Diese werden in den gleichnamigen Feldern eingegeben. Um sicherzustellen, dass sich die Temperatur vor Beginn der Dehnungsvariation vollständig stabilisiert hat, kann zusätzlich eine Wartezeit [Wartezeit (s)] in Sekunden eingestellt werden, die zwischen dem Abschluss der Temperaturregelung und dem Start der Dehnungsvariation liegt. Die aktuelle Probentemperatur wird im Feld „Aktuelle T(K)“ angezeigt.

Grün eingerahmt sind die Eingabefelder für den Abstand der Probenhalter bei Raumtemperatur [Abstand RT (μm)], welcher benötigt wird, um die Dehnung berechnen zu können und die Stromstärke für die Widerstandsmessung. Da der verwendete Strom in Abhängigkeit der verwendeten Probe stark variieren kann, gibt es ein zusätzliches Dropdown-Menü, um die Einheit der Stromstärke auszuwählen. So wird sichergestellt, dass es bei der Eingabe der Stromstärke zu keinen Fehlern in der Größenordnung kommt, was im schlimmsten Fall die Probe zerstören könnte. In den blau umrahmten Eingabefeldern befinden sich die Einstellungen für die Piezoaktuatoren. Für die Dehnungsvariation muss die maximale Dehnung [Dehnung Maximum (%)] und Stauchung [Dehnung Minimum (%)] und die Schrittweite der Spannungsänderung [Schrittweite (V)] eingegeben werden. In dem lila eingerahmten Dropdown-Menü kann aus drei verschiedenen Messmodi ausgewählt werden. Im „Einfachmodus“ wird pro Temperaturschritt ein Dehnungszyklus durchlaufen. In dem Modus „Benutzerdefiniert“ kann durch das Eingabefeld [Anzahl Dehnungszyklen] die Anzahl der zu messenden Dehnungszyklen erhöht werden. Im Messmodus „Fitbasiert“ wird auf Grundlage des χ^2 des linearen Fits zur Bestimmung des Elastowiderstands die Dehnungsvariation so lange wiederholt bis dieses klein genug ist, was ein Indiz für eine erfolgreiche und ausreichend gute Messung ist. Die Eingabe der „Anzahl Dehnungszyklen“ entspricht in diesem Fall der maximalen Anzahl an Dehnungszyklen. Ist das χ^2 nach dieser Anzahl an Zyklen nicht klein genug wird die Messung trotzdem bei der nächsten Temperatur weiter fortgesetzt. Auf Grundlage der Erfahrung, welche bei der Messung des Elastowiderstands an $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ gesammelt wurde, sollte das reduzierte χ^2 bei einer guten Messung nicht viel größer als 2 sein.

Über die Knöpfe in den gelb eingerahmten Feldern kann das Programm gestartet und gestoppt werden. Über die Statusanzeige zeigt das Programm an in welchem Zustand es sich gerade befindet. Vor der Messung zeigt es „Messung nicht gestartet“ an, während der Temperaturstabilisierung zeigt es „Messung T vorher“ und während der Dehnungsvariation „Dehnungsvariation“ an. Die Statusleisten zeigen an, wie viel Prozent der Messung schon absolviert sind. Die Statusleiste „Dehnungsvariation“ bezieht sich dabei nur auf die Dehnungsvariation bei der aktuellen Temperatur. Die Statusanzeige „Temperaturschritte“ bezieht sich auf die komplette Messung. Je nach Auswahl des Messmodus kann der ausgegebene Wert von dem realen Wert abweichen, da die Messdauer im Modus „Fitbasiert“ von der Güte der Messungen abhängig

ist. Als grobe Einschätzung der Dauer ist es aber ausreichend.

Abgespeichert werden die aufgenommenen Daten in drei Dateien. In der Datei „Dateiname_Zeit_Temperatur_Datum+Zeit.txt“ werden kontinuierlich die Temperatur und die Zeit abgespeichert, welche in Diagramm 1 abgebildet sind. In der Datei „Dateiname_Log_File_AktuelleTemperatur_Datum+Zeit.txt“ werden zum einen alle Eingabeparameter und die aufgenommenen Rohdaten während der Dehnungsvariation für die konstante Probentemperatur abgespeichert. Diese Datei wird für jede Probentemperatur neu angelegt. Als Rohdaten werden die Temperatur, der Probenwiderstand, die Dehnung, der gemessene Abstand, die gemessene Spannung bei I_+ , die gemessene Spannung bei I_- und die angelegte Piezospaltung abgespeichert. In der Datei „Dateiname_Datum+Zeit.txt“ werden zu jeder gemessenen Temperatur die Ergebnisse der linearen Anpassung der Daten aus Diagramm 4 gespeichert, welche dem Elastowiderstand entspricht. Die Temperatur und die Steigung der Anpassung sind die relevanten Daten, die durch die Messung bestimmt werden sollen. Mithilfe der abgespeicherten Rohdaten ist es jederzeit möglich, alle Berechnungen des Programms zu wiederholen und nachzuvollziehen zu können. Damit die Dateien bei mehrfacher Verwendung desselben Dateinamens nicht überschrieben werden, wird jeder Dateiname um das aktuelle Datum und die aktuelle Uhrzeit zum Zeitpunkt der Erstellung ergänzt.

4.2.7. Elastowiderstandsmessung mit der Dehnungszelle

Um die entwickelte Dehnungszelle abschließend testen zu können, wurde eine Elastowiderstandsmessung an einer BaFe_2As_2 -Probe durchgeführt. Da zu Beginn des Tests kein flüssiges Helium zur Verfügung stand, stellt dieses Material ein ideales Testsystem dar, da das Einsetzen der nematischen Ordnung in BaFe_2As_2 , wie bereits ausführlich in Abschnitt 2.2 diskutiert, zu einem divergenten Anstieg des Elastowiderstands bei etwa 139 K führt.

Für die Messung wurde ein Probenstück auf etwa 3 mm Länge, 1 mm Breite und 50 μm Dicke entlang der [110]-Richtung zugeschnitten. Um ausreichend Platz für die Kontaktierung auf der Probe zu gewährleisten, wurden die Probenhalter so dimensioniert, dass der Abstand zwischen diesen 2 mm beträgt. Als elektrische Kontakte wurde 50 μm dicker Silberdraht verwendet, welcher mithilfe von Hans Wolbring Leitsilber 200N auf die Probe geklebt wurde. Die Probe wurde anschließend mit 5-Minute Epoxy auf die Probenhalter befestigt, wobei die Klebeschicht oberhalb und unterhalb der Probe jeweils etwa 30 μm dick war.

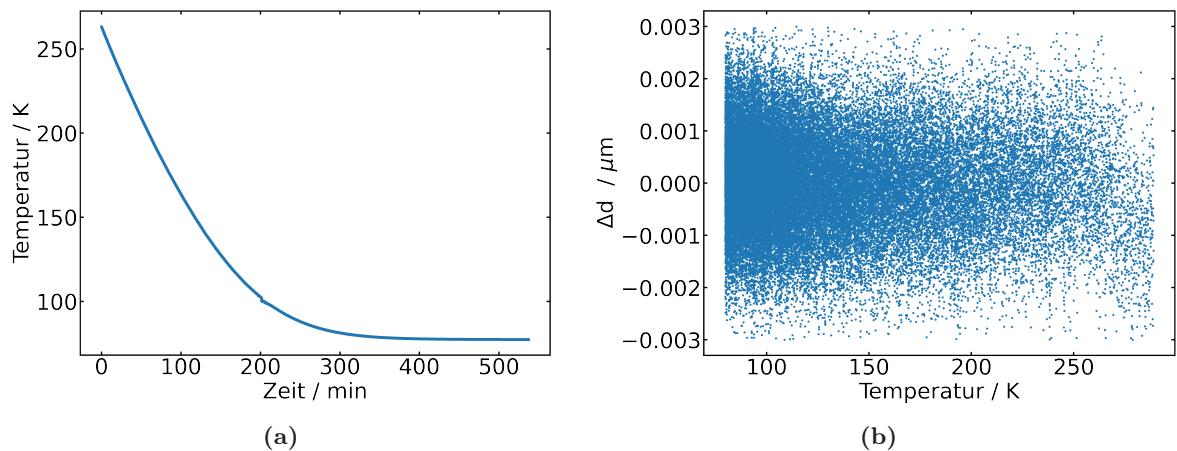


Abbildung 4.44.: a) Zeitabhängige Temperaturmessung während des Abkühlvorgangs der BaFe_2As_2 -Probe. b) Temperaturabhängige Längenänderung des Probenabstands.

Vor Beginn der Messung wurde das Innere des Messstabs auf etwa $1 \cdot 10^{-5}$ mbar evakuiert und anschließend in einen mit flüssigem Stickstoff gefüllten Kryostaten eingesetzt. Während des Abkühlprozesses wurden Temperatur, Probenabstand und Widerstand kontinuierlich ge-

messen. Um die Probe während des Abkühlvorgangs spannungsfrei zu halten, wurde der Probenabstand über die angelegte Spannung der Piezoaktuatoren konstant gehalten.

Abbildung 4.44a zeigt den zeitlichen Verlauf der Probentemperatur beim Abkühlvorgang, welcher dem Abkühlvorgang aus Abbildung 4.39a ohne Probe gleicht. Abbildung 4.44b zeigt die temperaturabhängige Abstandsänderung der Probenplatten, welcher durch den Einsatz der Abstandsregelung über den kompletten Temperaturbereich konstant ist. Die maximale Schwankung des Abstands beträgt lediglich $\pm 0.003 \mu\text{m}$.

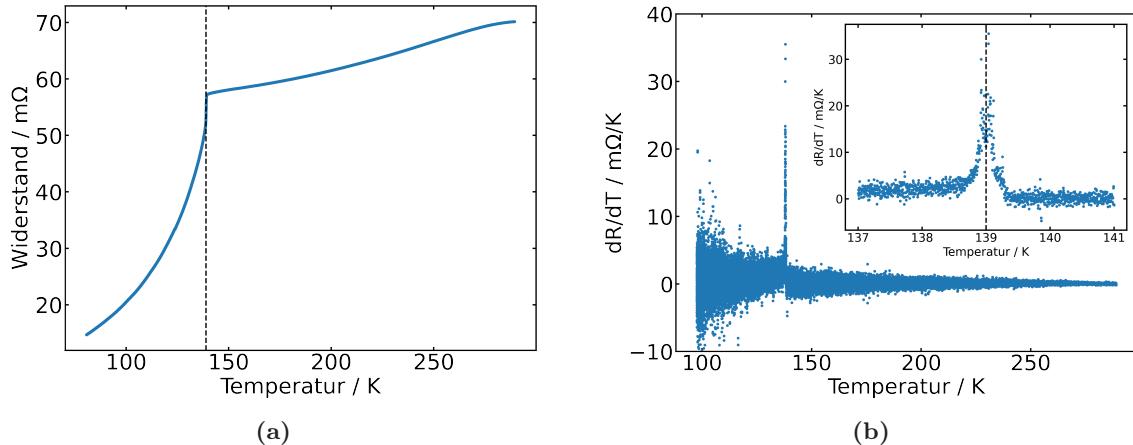


Abbildung 4.45.: a) Zeitabhängige Temperaturmessung während des Abkühlvorgangs der BaFe_2As_2 -Probe. b) Temperaturabhängige Längenänderung des Probenabstands.

In Abbildung 4.45a ist der temperaturabhängige Widerstand der Probe gezeigt. Dieser zeigt bei hohen Temperaturen ein metallisches Verhalten mit einem nahezu linear abnehmenden Widerstand. Bei der nematischen Übergangstemperatur kommt es zu einem abrupten Abfall des Widerstands. Der abrupte Abfall des Widerstands wurde durch den Peak der Ableitung des Widerstands nach der Temperatur auf 139 K bestimmt (siehe Abbildung 4.45b), womit dieser Wert dem in Abschnitt 2.2 besprochenen Wert entspricht und damit die Funktion und Relevanz der Abstandsregelung untermauert, da eine Probenbelastung zu einer Verschiebung dieser Temperatur führen würde [174].

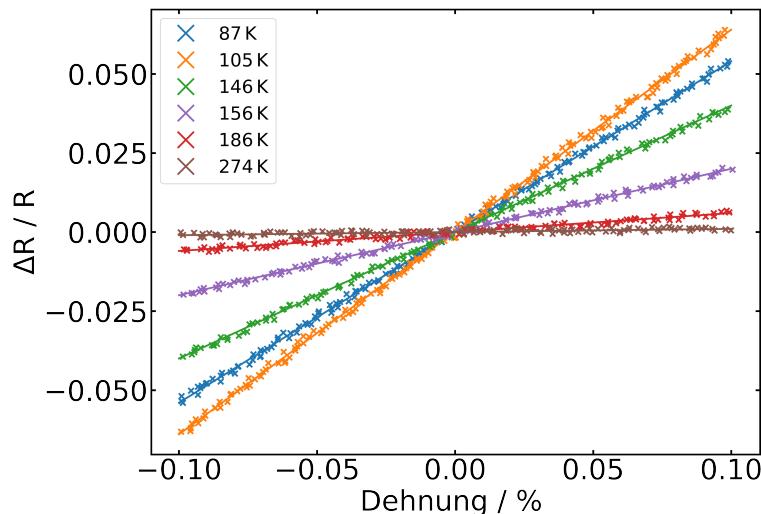


Abbildung 4.46.: Relative Widerstandsänderung in Abhängigkeit der Dehnung für exemplarische Temperaturen von BaFe_2As_2 .

Der Elastowiderstand wird in einem Temperaturbereich von 80 K bis 280 K gemessen. Dabei wird die Spannung der Piezoaktuatoren für jede Temperatur so variiert, dass eine Dehnung von $\pm 0.1\%$ erreicht wird. In Abbildung 4.46 ist die relative Widerstandsänderung für ausgewählte Temperaturen in Abhängigkeit von der Dehnung dargestellt. Für alle Temperaturen zeigt sich das erwartete lineare Verhalten zwischen relativer Widerstandsänderung und Dehnung. Daraus, dass dieses lineare Verhalten auch bei großen Dehnungen beobachtet wird, kann geschlossen werden, dass die Dehnung auch bei hohen Verschiebungen vollständig auf die Probe übertragen wird und nicht etwa durch den Kleber absorbiert wird.

Aus der Steigung der in Abbildung 4.46 gezeigten Daten resultiert der Elastowiderstand, welcher in Abhängigkeit der Temperatur in Abbildung 4.47 in Kombination mit einer durchgeführten Curie-Weiss-Anpassung gezeigt ist. Die senkrechten Striche markieren dabei den benutzen Anpassungsbereich. Wie zu sehen ist, lassen sich die Daten im betrachteten Bereich sehr gut durch das Curie-Weiss-Verhalten beschreiben. Die Anpassungsparameter können Tabelle 4.3 entnommen werden.

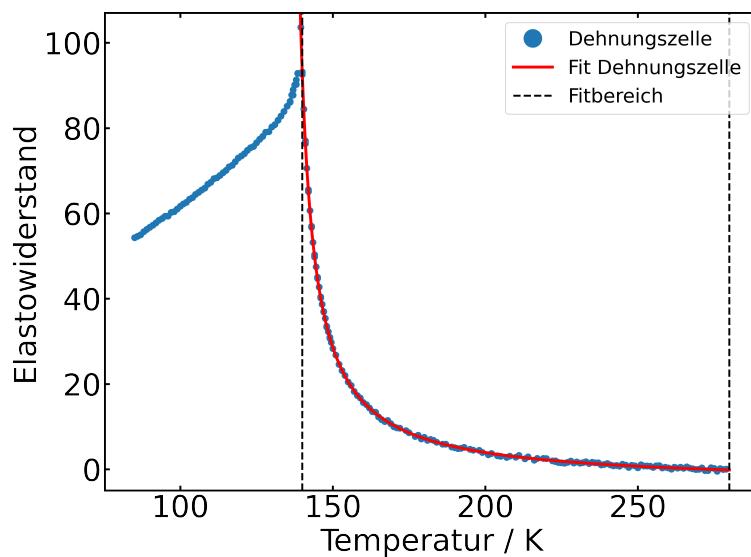


Abbildung 4.47.: Elastowiderstand entlang der [110]-Richtung der BaFe₂As₂-Probe in Abhängigkeit der Temperatur.

Um die Richtigkeit des mit der Dehnungszelle bestimmten Elastowiderstands zu überprüfen, wurde dieser zusätzlich mit der herkömmlichen Methode bestimmt, bei der die Probe direkt auf den Piezoaktuator geklebt wird und die Dehnung mittels Dehnungsmessstreifen gemessen wird. Diese Messung ist im eingebetteten Diagramm von Abbildung 4.48 abgebildet. Auch diese Daten lassen sich gut durch eine Curie-Weiss-Anpassung beschreiben. Die berechneten Anpassungsparameter sind ebenfalls in Tabelle 4.3 aufgelistet. Zum besseren Vergleich sind in Abbildung 4.48 die Elastowiderstandsmessungen und durchgeführten Curie-Weiss-Anpassungen beider Methoden zusammen dargestellt.

Augenscheinlich weisen die Verläufe beider Messmethoden eine große Übereinstimmung auf, wobei das Rauschen der Messwerte der Dehnungszelle deutlich kleiner ist als bei der herkömmlichen Methode. Dies gilt vor allem für die Messwerte bei einer Temperatur unter 140 K. Der Vergleich der Amplituden zeigt unterhalb von etwa 210 K leicht höhere Werte bei der herkömmlichen Methode im Vergleich zur Dehnungszelle. Auch der Vergleich der Fitparameter spiegelt diesen Verlauf wider. Da die Signale oberhalb von 210 K etwa die gleiche Amplitude aufweisen, liegt der \tilde{n}_0 -Parameter bei beiden Methoden mit 4.1 ± 0.4 bei der herkömmlichen Methode und 3.46 ± 0.04 mit der Dehnungszelle in der gleichen Größenordnung, wobei die Abweichung etwa 12 % beträgt. Da der b-Parameter die Lage der Divergenz angibt und diese bei beiden Methoden etwa an der gleichen Stelle liegt, ist auch der Unterschied zwischen diesen

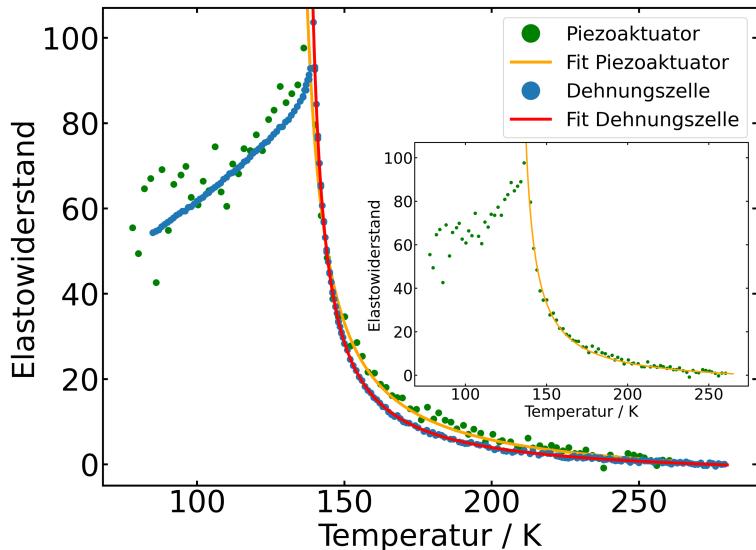


Abbildung 4.48.: Vergleich der Elastowiderstandsmessungen mit der herkömmlichen Methode (grün, Anpassung gelb) und mit der entwickelten Dehnungszelle (blau, Anpassung rot). Das kleine Diagramm zeigt die Messung und Anpassung der herkömmlichen Methode separat.

klein. Bei der herkömmlichen Methode beträgt dieser (131.9 ± 0.4) K und mit der Dehnungszelle (135.43 ± 0.01) K. Die relative Abweichung beider Werte beträgt lediglich etwa 3 %. Eine betragsmäßig etwas größere Abweichung ergibt sich für den a-Parameter. Dieser beträgt für die herkömmliche Methode (521 ± 29) K und für die Dehnungszelle (481 ± 3) K, wodurch sich eine relative Abweichung von etwa 8 % ergibt. Da der a-Parameter ein Maß für die Amplitude und der Steigung des Anstiegs ist, zeigt sich die Abweichung durch die leicht unterschiedlichen Verläufe des Elastowiderstands im Temperaturbereich zwischen 143 K und 210 K.

Die Ergebnisse zeigen, dass mit beiden Messmethoden weitgehend übereinstimmende Resultate erzielt werden können. Die Messung mit der konstruierten Dehnungszelle liefert jedoch ein deutlich rauschärmeres Elastowiderstandssignal, wodurch die Unsicherheiten der abgeleiteten Größen signifikant reduziert werden. Die geringen Abweichungen könnten durch mehrere Faktoren erklärt werden. Zum einen ist die Geometrie der Dehnungsübertragung bei beiden Methoden unterschiedlich. Während bei der herkömmlichen Methode die Dehnung über die komplette Unterseite auf die Probe übertragen wird, wird die Dehnung bei der Messzelle lediglich über die Probenenden auf die Probe übertragen, was geringfügige Unterschiede erklären könnte. Darüber hinaus wird bei der herkömmlichen Methode auch eine laterale Dehnung auf die Probe übertragen, was sich ebenfalls auf die Messung auswirken könnte. Wie der Vergleich beider Messmethoden miteinander zeigt, sind diese Auswirkungen jedoch gering. Ein absoluter Vergleich von Elastowiderstandsmessungen, die mit unterschiedlichen Methoden durchgeführt wurden, sollte dennoch mit Vorsicht erfolgen [122].

Tabelle 4.3.: Fitparameter der durchgeführten Curie-Weiss-Anpassungen an die Elastowiderstandsmessung der BaFe₂As₂-Probe durchgeführt mit der Dehnungszelle und dem herkömmlichen Ansatz mit Piezoaktuator. Die angegebenen Fehler entsprechen der geschätzten Standardabweichung (1σ) des jeweiligen Parameters, basierend auf der Kovarianzmatrix der Anpassung.

Methode	a / K	b / K	\tilde{n}_0
Dehnungszelle (Stickstoff)	481 ± 3	135.43 ± 0.01	3.46 ± 0.04
Dehnungszelle (Helium)	499 ± 4	134.75 ± 0.04	2.47 ± 0.06
Piezoaktuator	521 ± 29	131.9 ± 0.4	4.1 ± 0.4

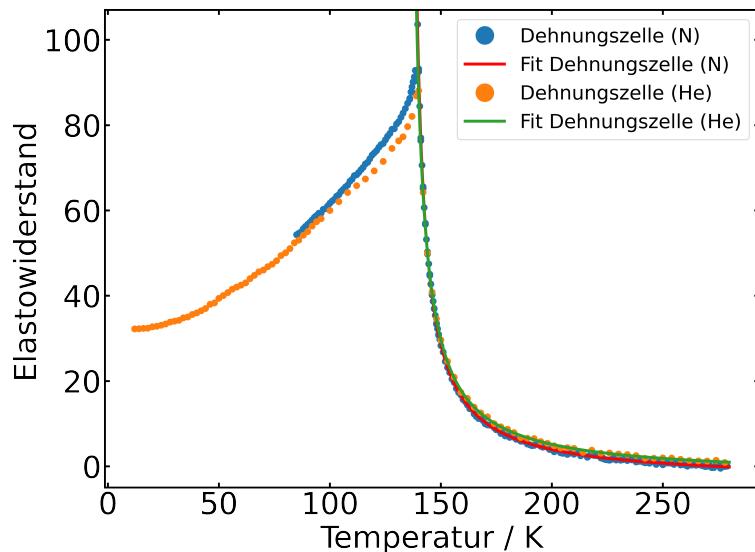


Abbildung 4.49.: Vergleich der Elastowiderstandsmessungen mit der Dehnungszelle von BaFe_2As_2 mit Stickstoff (blau) und Helium (orange) als Kühlmittel mit den zusätzlich durchgeführten Curie-Weiss-Anpassungen. Die große Übereinstimmung der Daten untermauert die Reproduzierbarkeit der Messungen mit der Dehnungszelle, da sich ein anderes Kühlmittel nicht signifikant auf die Messung auswirken sollte.

Abschließend wurde der Elastowiderstand mit Helium als Kühlmittel gemessen. Diese Messung ist in Abbildung 4.49 in orange zusammen mit der schon gezeigten Elastowiderstandsmessung mit Stickstoff in blau abgebildet. Zudem sind die entsprechenden Curie-Weiss-Anpassungen gezeigt. Die Fitparameter sind ebenfalls in Tabelle 4.3 aufgelistet. Beide Messungen zeigen dabei eine hohe Übereinstimmung die sich auch in den ermittelten Anpassungsparametern zeigt. Der a -Parameter ist bei der Heliummessung mit (499 ± 4) K nur etwa 4 % größer als bei der Stickstoffmessung. Der b -Parameter ist mit (134.75 ± 0.04) K lediglich etwa 0.5 % kleiner. Die größte prozentuale Abweichung liegt bei \tilde{n}_0 der bei der Heliummessung 2.47 ± 0.06 beträgt und somit um 21 % kleiner ist. Die glatte Abnahme der Messwerte bei Temperaturen unter 77 K zeigt, dass die Dehnungszelle auch bei tiefen Temperaturen funktioniert und es kein Problem durch ein verrausches Messsignal gibt. Der Vergleich beider Messungen für Temperaturen über 77 K und die hohe Übereinstimmung beider Messungen verdeutlicht zudem die Reproduzierbarkeit der Messungen mit der Dehnungszelle und belegt die Funktionstüchtigkeit der Dehnungszelle bei sehr tiefen Temperaturen mit dem Einsatz von flüssigem Helium als Kühlmittel.

4.2.8. Ausblick

Die modulare Konstruktion der Dehnungszelle sowie der großzügig dimensionierte Aufbau des Messstabs ermöglichen die Verwendung verschiedener Varianten der Dehnungszelle und erlauben darüber hinaus die Dehnungszelle für verschiedene Messmethoden verwenden zu können.

Weitere Dehnungszellenversionen

Eine alternative Ausführung der Dehnungszelle ist in Abbildung 4.50 dargestellt. Diese Version ist weitgehend identisch zur zuvor beschriebenen Standardausführung, unterscheidet sich jedoch dadurch, dass zusätzlich der untere Probenhalter über eine Mikrometerschraube verschoben werden kann. Bei der verwendeten Mikrometerschraube handelt es sich um ein Modell mit drehfreier Spindel spitze. Dadurch können Vorschubkräfte präzise und ohne Torsionsbelastung auf den Probenhalter übertragen werden. Die maximale manuell einstellbare Verschiebung

des unteren Probenhalters beträgt 3 mm. Dies ermöglicht es, die Probe bereits vor Beginn der Messung mechanisch vorzuspannen, um größere effektive Dehnungen zu realisieren.

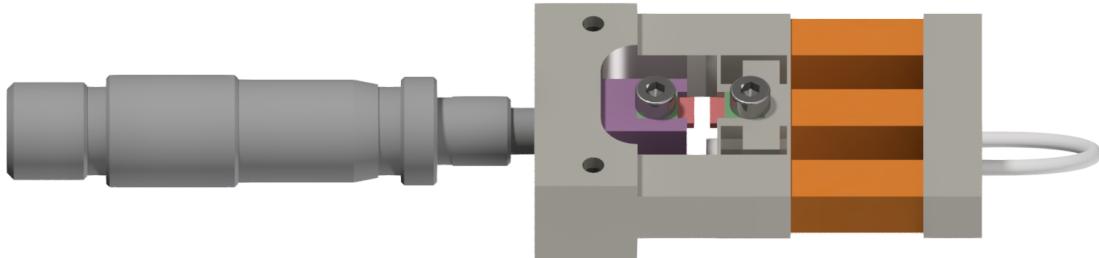


Abbildung 4.50.: Weitere Version der Dehnungszelle bei der der untere Probenhalter (lila) durch eine Mikrometerschraube verstellt werden kann. Dadurch ist es möglich die Probe vorzuspannen, um größere Dehnungen zu erreichen. Der obere Probenhalter kann weiterhin durch die Piezoaktuatoren verschoben werden, um eine die Dehnung für Messungen leicht variieren zu können.

Da diese Version der Dehnungszelle zu groß für den Probenhalter im Messstab ist, wurde im Messstab eine zusätzliche Bohrung vorgesehen, durch die die Mikrometerschraube eingeführt werden kann, wie in Abbildung 4.51 dargestellt ist.

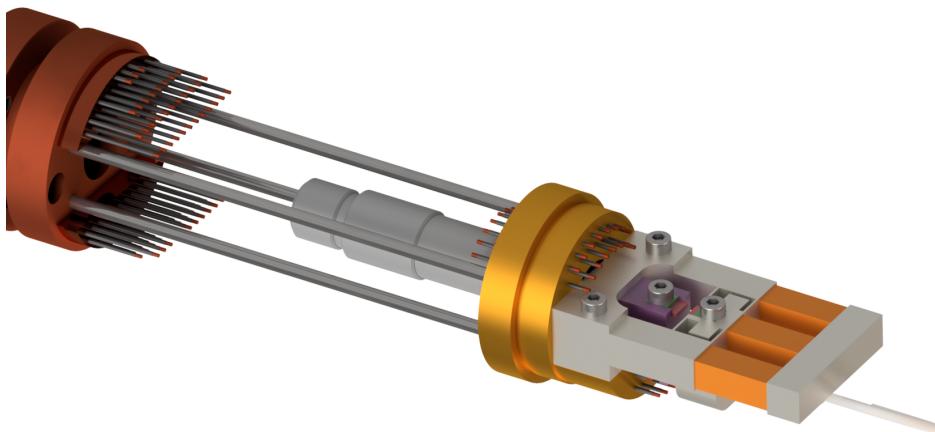


Abbildung 4.51.: Montierte Dehnungszelle mit Mikrometerschraube für welche durch eine Bohrung im Probenhalter des Messstabs genug Platz ist.

Darüber hinaus befinden sich in der Kältestufe sowie in den Abstandshaltern entsprechende Durchgangsbohrungen, sodass eine Stange durch den gesamten Messstab geführt werden kann. Diese kann über eine geeignete Vakuumdurchführung am oberen Flansch des Flanschkreuzes eingebracht werden und erlaubt das Verstellen der Mikrometerschraube auch im eingebauten Zustand. Dadurch ist es prinzipiell möglich, die Probendehnung über die Mikrometerschraube zumindest bedingt *in situ* einzustellen. Dabei ist die Verwendung einer speziellen Vakuumdurchführung entscheidend, die nicht nur eine Rotation, sondern auch eine begrenzte Längsbewegung der Stange zulässt. Dies ermöglicht es, die Stange nach der Verstellung von der Mikrometerschraube zu entkoppeln, um während der Messung einen ungewollten Wärmeeintrag über die mechanische Verbindung zu vermeiden. Wird die Dehnungszelle ohne Mikrometerschraube betrieben, ist darauf zu achten, dass alle axialen Bohrungen mit geeigneten Abdeckungen verschlossen sind, um den Probenhalter vor zusätzlicher Wärmestrahlung zu schützen. Obwohl diese alternative Version der Dehnungszelle bislang nicht experimentell erprobt wurde und die Einstellung der Probendehnung über die Stange noch nicht realisiert

ist, verdeutlicht sie das Potenzial und die Flexibilität des Messstabs für zukünftige Messkonfigurationen und Erweiterungen.

Verwendung der Dehnungszelle für elastokalorische Messungen

Eine weitere dehnungsabhängige Messmethode ist die Messung des elastokalorischen Effekts. Bei dieser Methode wird die Änderung der Probentemperatur, verursacht durch die Verformung der Probe, unter adiabatischen Bedingungen gemessen [175]. Dadurch wird insbesondere die Analyse von Entropieänderungen in Abhängigkeit von der Temperatur und der Dehnung ermöglicht, wodurch sich Phasenübergänge mit hoher Empfindlichkeit nachweisen lassen. Im Gegensatz zur Wärmekapazitätsmessung ermöglicht die Untersuchung des elastokalorischen Effekts die gezielte Analyse elektronischer Beiträge zur Entropie vor einem vergleichsweise geringen phononischen Hintergrund, selbst bei hoher Temperatur, und liefert darüber hinaus symmetrieabhängige Informationen über die zugrundeliegenden Ordnungsparameter [175].

Um diesen zu messen gibt es verschiedenen Ansätze. Eine Möglichkeit besteht darin die auf eine Probe wirkende Kraft schnell zu erhöhen und die Temperaturreaktion auf einer Zeitskala zu messen, die einem quasi-adiabatischen Zustand entspricht. Die Herausforderung besteht dabei, die sich schnell ändernden Signale präzise zu messen [176]. Ein weiterer, indirekter Ansatz besteht darin die elastokalorische Entropieänderung isotherm zu messen, indem die Spannungs-Dehnungs-Beziehung eines gegebenen Materials bestimmt wird [177].

Ein neuer von Ikeda et al. [175] vorgestellter Ansatz basiert auf der Messung des elastokalorischen Effekts unter oszillierender einachsiger Spannung. Ziel der Messung ist es, die durch eine oszillierende uniaxiale Spannung induzierte Temperaturänderung zu messen. Der Versuchsaufbau ist in Abbildung 4.52 abgebildet. Zur Erzeugung der oszillierenden Spannung wird ebenfalls eine aus drei Piezoaktuatoren bestehende Dehnungszelle verwendet, wobei die äußeren beiden Piezoaktuatoren (rot) durch Anlegen einer Wechselspannung eine oszillierende Dehnung erzeugen. Durch den inneren Piezoaktuator (blau) kann eine zusätzliche DC-Offsetspannung angelegt werden. Um die Abstandsänderung der Probenplatten zu messen, ist die Dehnungszelle ebenfalls mit einem kapazitiven Abstandssensor ausgestattet. Zur Messung der elastokalorischen Temperaturschwingung wird ein Thermoelement Typ E verwendet, bestehend aus einem Thermoelementdraht aus Chromel und Konstantan mit einem Durchmesser von $12.5 \mu\text{m}$. Zur Referenzierung auf die Zellkörpertemperatur sind die Enden des Thermoelements auf wärmeleitende Pads am Zellkörper aufgelötet.

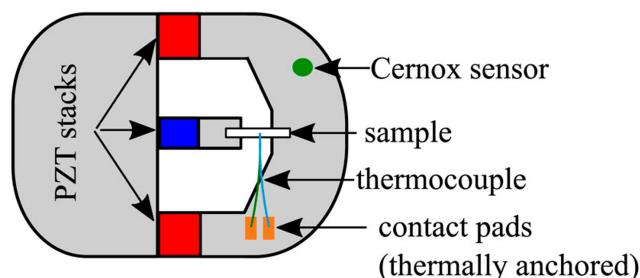


Abbildung 4.52.: Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus. Die äußeren roten Piezoaktuatoren dienen zur Anlegung einer Wechselspannung zur Erzeugung einer oszillierenden Probendehnung. Der innere blaue Piezoaktuator ermöglicht das Anlegen einer zusätzlichen DC-Vorspannung. Der Zellkörper wird mit einem Cernox-1050-Temperatursensor gemessen. Die Probentemperatur wird über ein auf die Probe aufgeklebtes Thermoelement gemessen. Entnommen aus Ref. [175].

Durch die mechanische Kopplung zwischen Probe und Zelle und der daraus resultierenden thermischen Kopplung, kann im Experiment keine vollständig adiabatische Bedingung erreicht werden. Aus diesem Grund wird eine quasi-adiabatische Messung angestrebt. Dafür muss die Frequenz der Dehnung hoch genug sein, um Wärmeabflüsse während eines Zyklus

zu minimieren und gleichzeitig niedrig genug, um eine thermische Kopplung zwischen Probe und Temperatursensor zu gewährleisten. Um eine quasi-adiabatische Messung durchführen zu können, hat sich eine Frequenz zwischen 20 Hz und 30 Hz etabliert [175, 178]. Da der in dieser verwendeten Dehnungszelle verbaute kapazitive Abstandssensor nicht schnell genug ausgelesen werden kann, wird die Dehnung indirekt bestimmt, in dem im DC-Modus die Längenänderung der Piezoaktuatoren pro Volt gemessen wird. Daraus kann anschließend aus der Peak-to-Peak-Spannung des AC-Signals die erzeugte Dehnung bestimmt werden.

Auch die in dieser Arbeit entwickelte Dehnungszelle ist für elastokalorische Messungen prinzipiell geeignet. Der verwendete Abstandssensor stellt dabei einen Vorteil dar, da dieser mit einer maximalen dynamischen Auflösung von 8.5 kHz schnell genug ist, um die Dehnung im Experiment kontinuierlich messen zu können. Im aktuellen Aufbau wird die Piezospaltung durch ein Keithley 2400 SourceMeter erzeugt. Dieses ist nicht für die Erzeugung schnell oszillierender Spannungsverläufe konzipiert, weshalb dafür ein anderes Gerät wie z.B. ein SR860 Lock-In-Verstärker von Stanford Research verwendet werden könnte.

Zudem nimmt die Resonanzfrequenz der Piezoaktuatoren mit zunehmender Länge ab, weshalb kürzere Aktuatoren schneller schwingen können. Bei den in Ref. [175] durchgeführten Messungen wurde eine maximale Dehnung von 0.01 % verwendet, welche auch mit deutlich kürzeren Piezoaktuatoren erreicht werden kann. Der modulare Aufbau der Zelle und besonders der flexible Einsatz des Abstandssensors würden es leicht ermöglichen, kostengünstig eine weitere Version der Zelle aufzubauen, die kleine Piezoaktuatoren verwendet und so für elastokalorische Messungen optimiert ist.

5. Zusammenfassung

Ziel der vorliegenden Arbeit war die Untersuchung von korrelierten Elektronensystemen unter dem Einfluss uniaxialer Dehnung als äußerer Störung. Im Fokus standen dabei insbesondere nematische Fluktuationen und elektronische Korrelationen im lochdotierten Eisenpniktid-Supraleiter $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$. Im ersten Teil der Arbeit wurden hierfür longitudinale und transversale Elastowiderstandsmessungen durchgeführt, während im zweiten Teil eine flexibel einsetzbare Tieftemperatur-Dehnungszelle entwickelt und gebaut wurde, die eine präzise kontrollierte uniaxiale Dehnung der Probe ermöglicht.

Ziel der Elastowiderstandsmessungen im ersten Teil dieser Arbeit war die Untersuchung des Zusammenspiels von nematischen Fluktuationen und elektronischen Korrelationen in $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$, insbesondere im Dotierungsbereich $0.6 < x < 1$. In einer früheren Arbeit von Hong et al. [120] wurde in diesem Bereich ein Maximum im Elastowiderstandssignal beobachtet, das auf einen Lifshitz-Übergang zurückgeführt wurde. Da in KFe_2As_2 nachgewiesen starke elektronische Korrelationseffekte vorliegen, wurde in der vorliegenden Arbeit untersucht, ob das beobachtete Verhalten in diesem Dotierungsbereich alternativ oder ergänzend durch elektronische Korrelationen erklärt werden kann. Dafür wurde der longitudinale Elastowiderstand von neun stark lochdotierten $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ -Proben mit $0.63 < x < 0.98$ entlang der [110]-Richtung gemessen. Dabei konnte der von Hong et al. [120] beschriebene nicht-monotone Verlauf der Signalintensität mit einem Maximum bei etwa $x = 0.8$ reproduziert werden. Darüber hinaus ermöglichte die höhere Dotierungsauflösung in diesem Bereich den Nachweis eines ausgeprägten Minimums im b -Parameter, das von Hong et al. nicht beobachtet wurde.

Zur genaueren Analyse des Elastowiderstands wurden für drei ausgewählte Proben ($x = 0.74, 0.8$ und 0.95) zusätzlich transversale Elastowiderstandsmessungen durchgeführt. Diese Proben repräsentieren jeweils die ansteigende Flanke, das Maximum sowie die abfallende Flanke des Signals in der longitudinalen Konfiguration. Auf Basis dieser ergänzenden Messungen konnte das Elastowiderstandssignal in die irreduziblen Symmetriekanäle A_{1g} und B_{2g} zerlegt werden. Es zeigt sich, dass der Anstieg des longitudinalen Signals maßgeblich auf einen Beitrag im A_{1g} -Kanal zurückzuführen ist, der im selben Dotierungsbereich ebenfalls ein Maximum ausbildet. Ein Vergleich mit Literaturdaten zeigt zudem, dass für $x < 0.68$ kein signifikanter A_{1g} -Beitrag nachgewiesen werden kann, sodass das Signal in diesem Bereich ausschließlich durch den B_{2g} -Kanal dominiert wird.

Mit Hilfe theoretischer Berechnungen des Elastowiderstands basierend auf einem Tight-Binding-Modell mit Wechselwirkungen lassen sich beide Beiträge interpretieren. Hierbei entsteht der Beitrag im B_{2g} -Kanal durch nematische Fluktuationen, wohingegen der divergierende Verlauf im A_{1g} -Kanal auf das Einsetzen elektronischer Korrelationen hindeutet. Die mit dem Modell berechneten Signalverläufe stimmen qualitativ gut mit den experimentellen Beobachtungen überein. Aus dem Modell ergeben sich dabei zwei effektive Parameter. Die nematische Wechselwirkung \tilde{g} , welche mit der Ausbildung einer nematischen Ordnung verknüpft ist, sowie die Spin-Spin-Wechselwirkung \tilde{j} , die die Kopplung von Spins in verschiedenen Orbitalen beschreibt. Das Modell zeigt, dass der dominante Wechselwirkungsparameter in Abhängigkeit der Dotierung wechselt. Im Dotierungsbereich bis etwa $x < 0.6$ dominiert \tilde{g} , was im Einklang mit dem etablierten Verständnis der nematischen Fluktuationen in eisenbasierten Supraleitern steht. Für höhere Dotierungen wird hingegen \tilde{j} dominant, was die Interpretation stützt, dass der Anstieg des A_{1g} -Signals primär auf elektronische Korrelationen zurückzuführen ist. Zusätzlich zeigt das Modell sowohl im A_{1g} - als auch im B_{2g} -Kanal die Ausbildung eines lo-

kalen Maximums bei einer Dotierung von etwa $x = 0.85$, welches sich auf den Einfluss eines Lifshitz-Übergangs zurückführen lässt und somit die Erklärung von Hong et al. bestätigt. Darüber hinaus konnte mithilfe des Modells der orbitale Ursprung beider Wechselwirkungen identifiziert werden. Während \tilde{g} im Wesentlichen auf Beiträge der $d_{xz/yz}$ -Orbitale zurückgeht, was mit dem bekannten Mechanismus der nematischen Ordnung übereinstimmt, zeigt \tilde{j} einen deutlichen Schwerpunkt im d_{xy} -Orbital. Diese orbital-selektive Korrelation steht im Einklang mit dem Konzept des orbital-selektiven Mott-Übergangs, wonach das d_{xy} -Orbital aufgrund seiner schnellen Annäherung an die Halbfüllung bevorzugt lokalisiert wird. Die Berechnungen zeigen dabei ein flach verlaufendes Band mit überwiegendem d_{xy} -Charakter in der Nähe des Fermi-Niveaus, was zu einer erhöhten Zustandsdichte führt. Die Elektronen in diesem Orbital werden somit lokalisiert und können als magnetische Streuzentren für die mobilen Elektronen in den anderen Orbitalen agieren. Dies kann als orbitalselektiver Kondo-Effekt aufgefasst werden. Dieser Mechanismus liefert eine plausible Erklärung für das berechnete und gemessene Maximum im A_{1g} -Kanal bei hoher Dotierung. Für zu geringe oder zu hohe Dotierungen liegt das flache Band außerhalb des relevanten Energiebereichs, sodass der Kondo-Effekt dementsprechend abgeschwächt ist.

Die durch die Korrelationen bedingten Änderungen zeigen zudem Parallelen zu anderen physikalischen Größen, wobei der Verlauf des Sommerfeldkoeffizienten γ_n qualitativ dem des A_{1g} -Signals entspricht. Der Anstieg von γ_n lässt sich als Folge der erhöhten effektiven Masse interpretieren, wie sie durch den Kondo-Effekt zu erwarten ist. Ebenso fällt der Anstieg des A_{1g} -Signals mit einer Abnahme der supraleitenden Sprungtemperatur T_c , dem Wechsel des supraleitenden Ordnungsparameters sowie dem Auftreten der BTRS-Phase zusammen. Diese Koinzidenzen deuten darauf hin, dass die elektronischen Korrelationen die Supraleitung wesentlich beeinflussen könnten. Dieses Verhalten erinnert an Schwerfermionen-Supraleiter, in denen eine Kondo-artige Kopplung zur Ausbildung stark korrelierter, schwerer Quasiteilchen führt [140]. Die supraleitende Paarung in diesen Systemen wird dabei nicht direkt durch den Kondo-Effekt, sondern durch magnetische Fluktuationen vermittelt, die aus den stark korrelierten Elektronenzuständen hervorgehen. Auch im untersuchten System deutet vieles darauf hin, dass bei niedriger Dotierung Spinfluktuationen die supraleitende Paarung dominieren. Bei hoher Dotierung hingegen gewinnen elektronische Korrelationen zunehmend an Bedeutung. Diese könnten wiederum magnetische Korrelationen hervorrufen, die als alternativer Kopplungsmechanismus für die Supraleitung in Frage kommen könnten. Zusätzlich zeigen die Messungen, dass nematische Fluktuationen auch im hochdotierten Bereich nicht vollständig verschwinden, denn trotz des dominanten Beitrags im A_{1g} -Kanal lässt sich ein verbleibendes, schwach divergierendes Signal im B_{2g} -Kanal nachweisen. Diese Überbleibsel nematischer Fluktuationen könnten ebenfalls zur Modifikation der Paarungsbildung beitragen und die supraleitenden Eigenschaften ergänzend beeinflussen.

Die Ergebnisse verdeutlichen das Potenzial von Elastowiderstandsmessungen zur Untersuchung von eisenbasierten Supraleitern, da sie nicht nur Aufschluss über nematische Fluktuationen, sondern auch wertvolle Einblicke in elektronische Korrelationseffekte ermöglichen. Dabei zeigt sich, wie entscheidend die Kombination aus longitudinalen und transversalen Messungen ist, da nur so eine Zerlegung des GesamtSignals in die unterschiedlichen Symmetriekanäle möglich ist, die den Zugang zu den verschiedenen Effekten liefert.

Mit dieser Erkenntnis erscheinen auch aktuelle Resultate aus der Literatur in neuem Licht. Insbesondere die von Ishida et al. [107] gemessenen Elastowiderstandsdaten an $\text{Ba}_{1-x}\text{Rb}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ welche als Hinweis auf eine XY-Nematisch interpretiert wurden. Auf Grundlage der hier präsentierten Ergebnisse erscheint jedoch auch eine alternative Interpretation im Sinne eines Einsetzens elektronischer Korrelationen denkbar, wie sie bereits von Wiecki et al. [123] diskutiert wurde. Da in der Studie allerdings keine transversalen Messungen vorliegen, lässt sich diese Möglichkeit nicht eindeutig überprüfen.

Für ein noch tieferes Verständnis des Zusammenspiels zwischen nematischen Fluktuationen,

elektronischen Korrelationen und Supraleitung in lochdotierten eisenbasierten Supraleitern wäre eine feinere Dotierungsauflösung der Elastowiderstandsmessungen an $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ -Kristallen wünschenswert. Dies könnte nicht nur zur besseren Bestätigung der hier gewonnenen Ergebnisse beitragen, sondern könnte auch die schmalen Strukturen im Signalverlauf, etwa infolge des Lifshitz-Übergangs, besser auflösen. Darüber hinaus könnten analoge Messungen an $\text{Ba}_{1-x}\text{Rb}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ - und $\text{Ba}_{1-x}\text{Cs}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ -Kristallen dabei helfen, systematische Gemeinsamkeiten innerhalb dieser Materialfamilie zu identifizieren.

Im zweiten Teil der Arbeit konnte erfolgreich ein Messstab konstruiert und gebaut werden, der Messungen in einem Temperaturbereich von 4.2 K beziehungsweise 77 K bis Raumtemperatur ermöglicht, je nachdem ob Helium oder Stickstoff als Kühlmittel gewählt wird. Für längere Standzeiten kann das Innere des Stabes mit einer Vakuumpumpe evakuiert werden, was sich nicht signifikant auf die Messqualität auswirkt. Mit einem Außendurchmesser von 49.5 mm kann der Messstab sowohl in Stickstoff- und Heliumtransportkannen mit einer lichten Weite von 50 mm oder in einen Kryostaten mit einem Magnetfeld mit einem Innendurchmesser von 52 mm eingesetzt werden. Dadurch wird eine flexible Verwendung und Messungen mit und ohne Magnetfeld ermöglicht und zusätzlich das Probenvolumen maximiert. Die Temperatur bei beiden Kühlmittelvarianten kann über den kompletten Temperaturbereich durch einen Heizbecher in Kombination mit einem PID-Regler präzise geregelt werden. Durch das große Probenvolumen von 34 mm x 90 mm (Breite x Länge) kann der Messstab als universelle Plattform für verschiedene Messzellen fungieren, die in Tieftemperaturexperimenten eingesetzt werden sollen. Mit insgesamt über 20 frei konfigurierbaren Messleitungen können mit dem Stab eine Vielzahl unterschiedlicher Messungen durchgeführt werden.

In erster Anwendung dient der Messstab als Plattform für eine ebenfalls eigens konstruierte und gebaute Dehnungszelle, welche es ermöglicht die eingebaute Probe uniaxial zu verspannen. Als Grundlage dafür diente ein bereits existierendes Konzept, das auf drei Piezoaktuatoren basiert, wodurch die eingebaute Probe symmetrisch gedehnt und gestaucht werden kann [157]. Durch die Verwendung dreier gleich langer Piezoaktuatoren wird zudem die thermische Längenänderung der Piezoaktuatoren ausgeglichen, wodurch sich die Probe fast belastungsfrei abkühlen lässt. Die erzeugte Probendehnung wird mit einem präzisen kapazitiven Abstandssensor bestimmt, der über eine hohe Abtastrate von 8.5 kHz verfügt und über eine modulare Klemmverbindung an die Dehnungszelle montiert wird. Konzeptioniert ist die Dehnungszelle für Elastowiderstandsmessungen, bei denen die Änderung des Probenwiderstands in Abhängigkeit der Dehnung und der Temperatur gemessen wird. Die maximal erreichbare Dehnung bzw. Stauchung hängt von der Probenlänge ab. Für Elastowiderstandsmessungen beträgt diese mindestens etwa 600 μm , um genug Platz für eine Vier-Punkt-Widerstandsmessung zu haben. Daraus resultiert eine maximale Dehnung bzw. Stauchung von über 6 % bei Raumtemperatur und etwa 0.7 % bei 5 K, was eine über 70 mal größere Belastung als bei herkömmlichen Elastowiderstandsmessungen, bei denen die Probe direkt auf einen Piezoaktuator geklebt wird, ist. Durch variable Probenplatten kann der Abstand der Probenhalter auf die zu untersuchende Probe angepasst werden. Durch die Größe der Zelle ist es möglich, Proben mit einer Größe von etwa 8 mm x 5 mm zu untersuchen. Zudem konnten Piezoaktuatoren mit einer Querschnittsfläche von 7 mm x 7 mm verwendet werden, welche zum einen eine hohe Kraft erzeugen und zum anderen eine gewisse Langlebigkeit versprechen. Durch die Bauweise der Zelle wird immer mindestens ein Piezoaktuator einer Zugbelastung ausgesetzt, welche zu Mikrorissen und zum Defekt der Aktuatoren führen kann. Durch die große Querschnittsfläche sollten diese einer höheren Belastung im Vergleich zu Piezoaktuatoren mit kleineren Querschnittsflächen standhalten und die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Mikrorissen reduziert werden. Durch die modulare Bauweise der Zelle ist zudem ein Wechsel im Fall eines Defekts problemlos möglich, ohne die komplette Zelle neu aufbauen zu müssen.

Für die Verwendung der Dehnungszelle für Elastowiderstandsmessungen wurde ein Messpro-

gramm entwickelt, welches den gesamten Ablauf der Messung automatisiert und über eine grafische Benutzeroberfläche die Steuerung und eine fortlaufende Überwachung der Messung erlaubt.

Die Funktionalität der Dehnungszelle wurde durch Testmessungen des Elastowiderstands einer BaFe_2As_2 -Probe entlang der [110]-Kristallrichtung überprüft, wobei sowohl Helium als auch Stickstoff als Kühlmittel verwendet wurden. Dabei wurde über den gesamten Temperaturbereich ein lineares Verhalten zwischen Widerstandsänderung und Dehnung gemessen, was ein Indiz für eine gute Dehnungsübertragung auf die Probe ist. Der Vergleich mit einer herkömmlichen Messung, bei der die Probe direkt auf einen Piezoaktuator geklebt und die Dehnung mit einem Dehnungsmessstreifen erfasst wurde, bestätigt die Leistungsfähigkeit der neu entwickelten Dehnungszelle. Die relevanten Anpassungsparameter der durchgeführten Curie-Weiss-Anpassung beider Messmethoden haben dabei eine Abweichung von maximal 8 %. Darüber hinaus konnte ein Ausblick auf weitere Versionen der Dehnungszelle aufgezeigt werden. Der modulare Aufbau der Dehnungszelle, insbesondere der flexible Einsatz des Abstandssensors machen dies in Kombination mit dem flexiblen Messstab möglich. So ist es ebenfalls möglich, eine alternative Version der Dehnungszelle zu verwenden, bei der eine mechanische Vorspannung über einen Schraubmechanismus am unteren Probenhalter aufgebracht werden kann. Darüber hinaus eignet sich die Dehnungszelle nicht nur zur Messung des Elastowiderstands, sondern könnte prinzipiell auch für die Untersuchung des elastokalorischen Effekts sowie für temperaturabhängige Transportuntersuchungen unter konstanter Dehnung und Stauchung verwendet werden.

Die Ergebnisse dieser Arbeit verdeutlichen, dass sich Elastowiderstandsmessungen nicht nur zur Untersuchung nematischer Fluktuationen eignen, sondern auch ein leistungsfähiges Werkzeug zum Nachweis elektronischer Korrelationen darstellen. Entscheidend hierfür ist die Zerlegung des gemessenen Signals in seine Symmetriekanäle, die es ermöglicht, verschiedene Beiträge klar zu trennen. Für das lochdotierte System $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ zeigte sich ein klarer dotierungsabhängiger Wechsel von einem durch nematische Fluktuationen geprägten Verhalten zu einer Dominanz elektronischer Korrelationen. Diese Dominanz bei hoher Dotierung liefert eine Erklärung für das dort beobachtete Maximum im longitudinalen Elastowiderstand. Obwohl elektronische Korrelationseffekte in diesem Bereich dominieren, lassen sich dennoch schwache Anzeichen nematischer Fluktuationen nachweisen. Darüber hinaus wurde eine flexibel einsetzbare Tieftemperatur-Dehnungszelle entwickelt, die eine präzise kontrollierte uniaxiale Dehnung in einem großen Temperaturbereich ermöglicht und damit vielseitige Perspektiven für künftige Tieftemperaturexperimente an korrelierten Elektronensystemen eröffnet.

A. Anhang

Widerstandsmessung an den $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ -Proben

In Abbildung A.1 bis Abbildung A.9 sind die temperaturabhängigen Widerstandsmessungen, welche während des Abkühlens vor der Elastowiderstandsmessung aufgenommen wurden, zur besseren Übersicht einzeln abgebildet. Dabei zeigt a) jeweils den kompletten Temperaturbereich und b) den vergrößerten Temperaturbereich bei dem der Widerstand stark abfällt und die supraleitende Phase einsetzt.

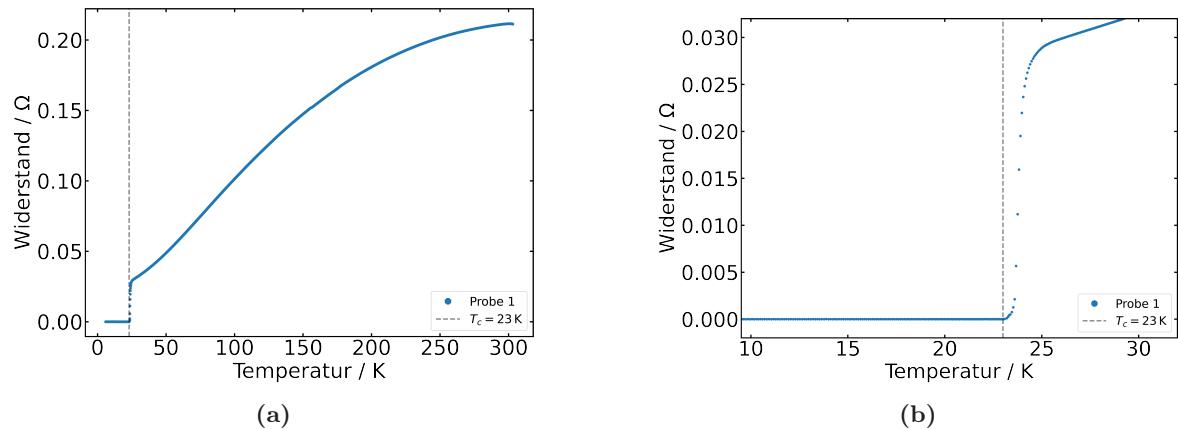


Abbildung A.1.: a) Temperaturabhängige Widerstandsmessung von Probe 1 im kompletten Temperaturbereich. b) Vergrößerter Temperaturbereich mit dem Sprung des Widerstands unterhalb der Sprungtemperatur T_c . Die bestimmt Sprungtemperatur ist mit der senkrechten Linie eingezeichnet. Die Sprungtemperatur wurde auf $T_C = 23$ K bestimmt.

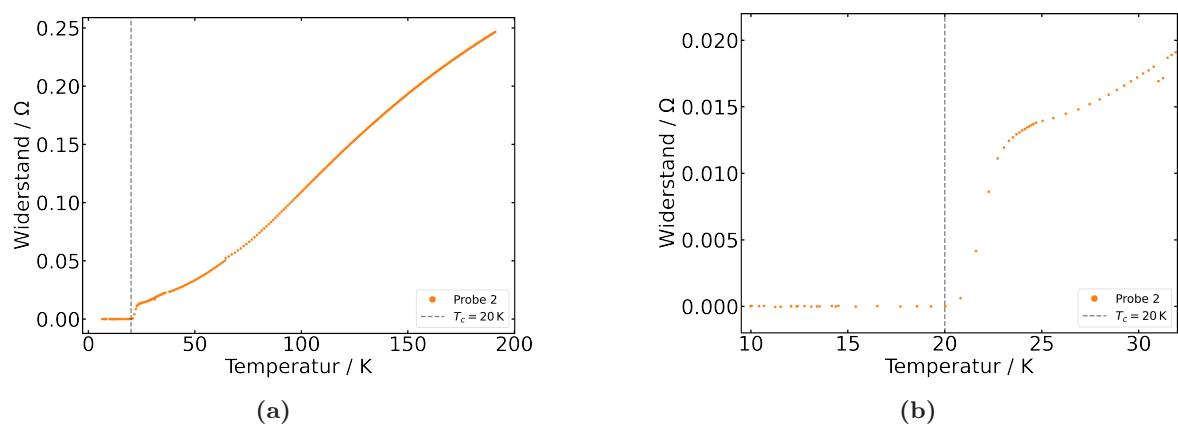


Abbildung A.2.: a) Temperaturabhängige Widerstandsmessung von Probe 2 im kompletten Temperaturbereich. b) Vergrößerter Temperaturbereich mit dem Sprung des Widerstands unterhalb der Sprungtemperatur T_c . Die bestimmt Sprungtemperatur ist mit der senkrechten Linie eingezeichnet. Die Sprungtemperatur wurde auf $T_C = 20$ K bestimmt.

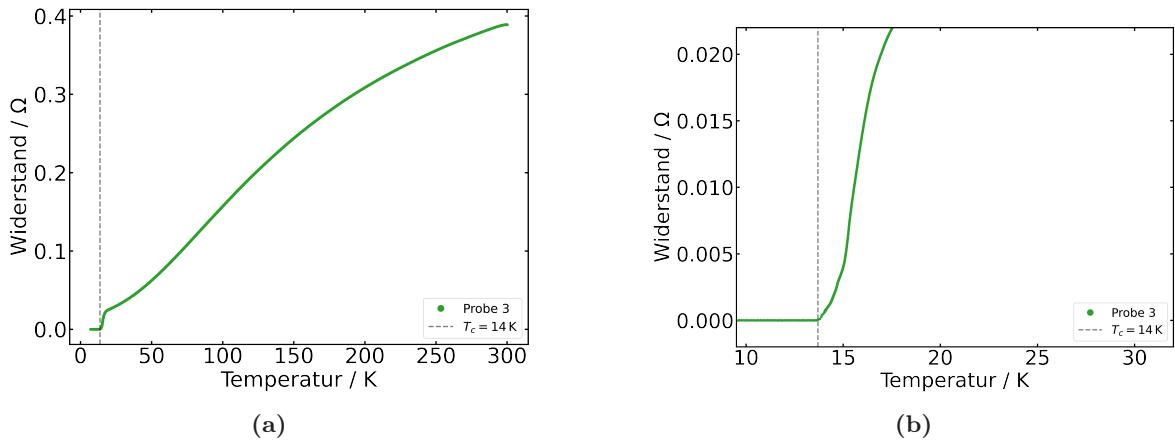


Abbildung A.3.: a) Temperaturabhängige Widerstandsmessung von Probe 3 im kompletten Temperaturbereich. b) Vergrößerter Temperaturbereich mit dem Sprung des Widerstands unterhalb der Sprungtemperatur T_c . Die bestimmt Sprungtemperatur ist mit der senkrechten Linie eingezeichnet. Die Sprungtemperatur wurde auf $T_C = 14$ K bestimmt.

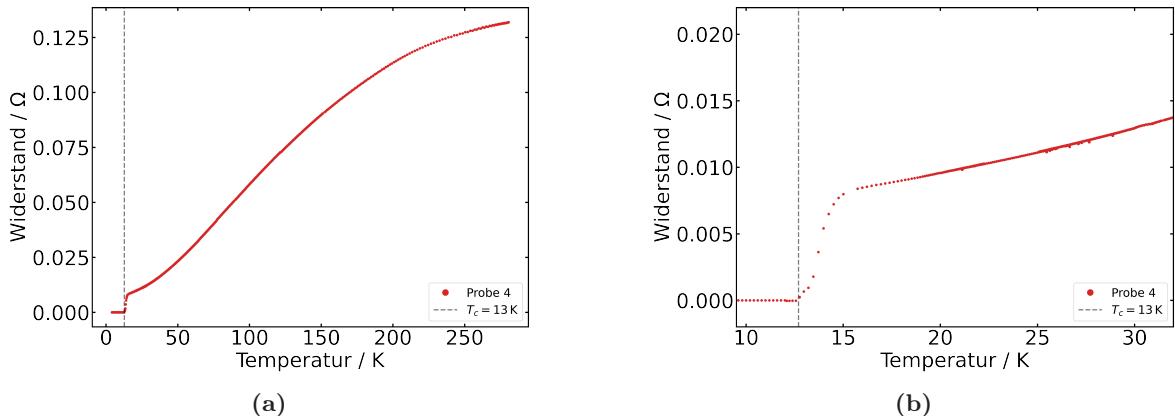


Abbildung A.4.: a) Temperaturabhängige Widerstandsmessung von Probe 4 im kompletten Temperaturbereich. b) Vergrößerter Temperaturbereich mit dem Sprung des Widerstands unterhalb der Sprungtemperatur T_c . Die bestimmt Sprungtemperatur ist mit der senkrechten Linie eingezeichnet. Die Sprungtemperatur wurde auf $T_C = 13$ K bestimmt.

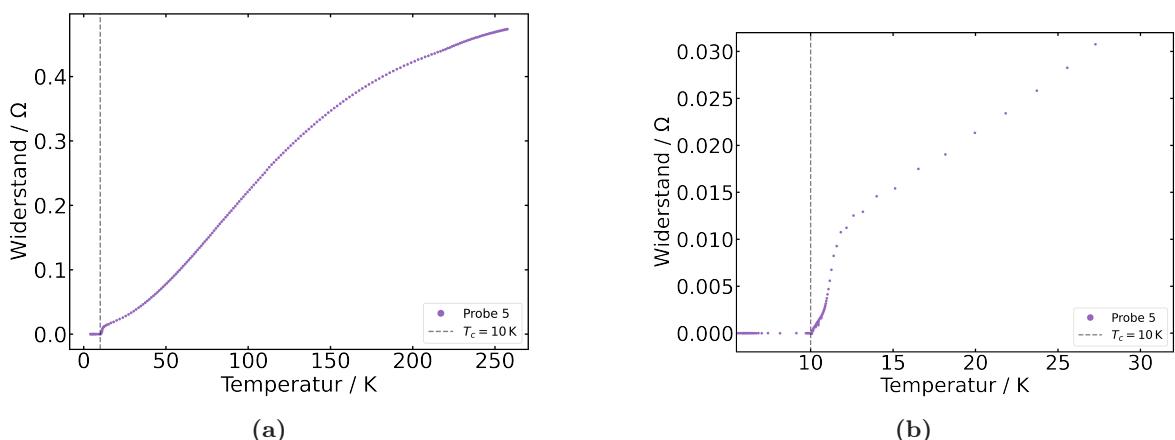


Abbildung A.5.: a) Temperaturabhängige Widerstandsmessung von Probe 5 im kompletten Temperaturbereich. b) Vergrößerter Temperaturbereich mit dem Sprung des Widerstands unterhalb der Sprungtemperatur T_c . Die bestimmt Sprungtemperatur ist mit der senkrechten Linie eingezeichnet. Die Sprungtemperatur wurde auf $T_C = 10$ K bestimmt.

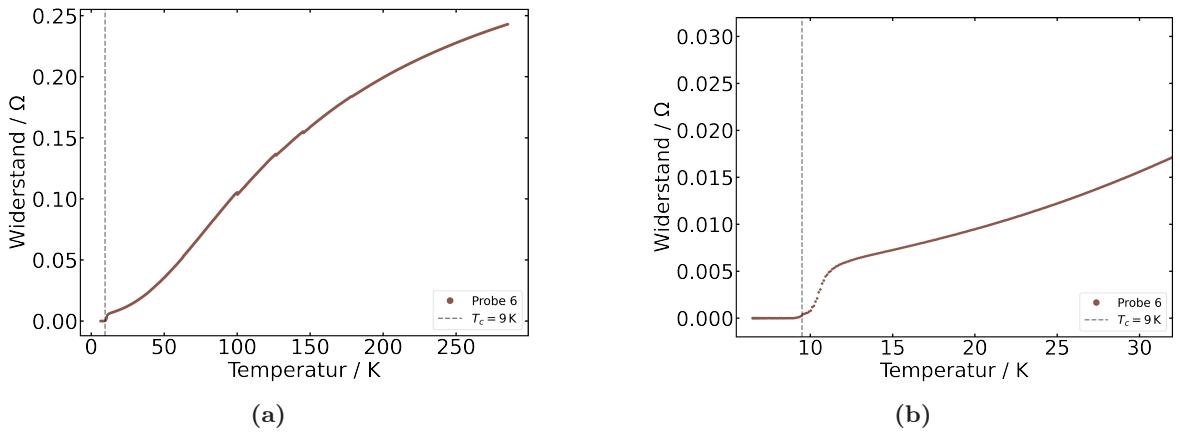


Abbildung A.6.: a) Temperaturabhängige Widerstandsmessung von Probe 6 im kompletten Temperaturbereich. b) Vergrößerter Temperaturbereich mit dem Sprung des Widerstands unterhalb der Sprungtemperatur T_c . Die bestimmt Sprungtemperatur ist mit der senkrechten Linie eingezeichnet. Die Sprungtemperatur wurde auf $T_C = 9$ K bestimmt.

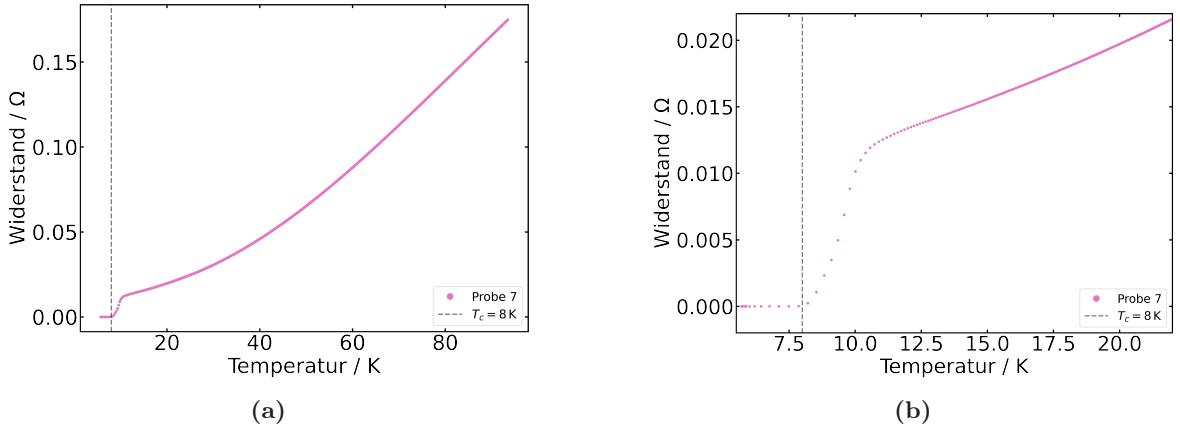


Abbildung A.7.: a) Temperaturabhängige Widerstandsmessung von Probe 7 im kompletten Temperaturbereich. b) Vergrößerter Temperaturbereich mit dem Sprung des Widerstands unterhalb der Sprungtemperatur T_c . Die bestimmt Sprungtemperatur ist mit der senkrechten Linie eingezeichnet. Die Sprungtemperatur wurde auf $T_C = 8$ K bestimmt.

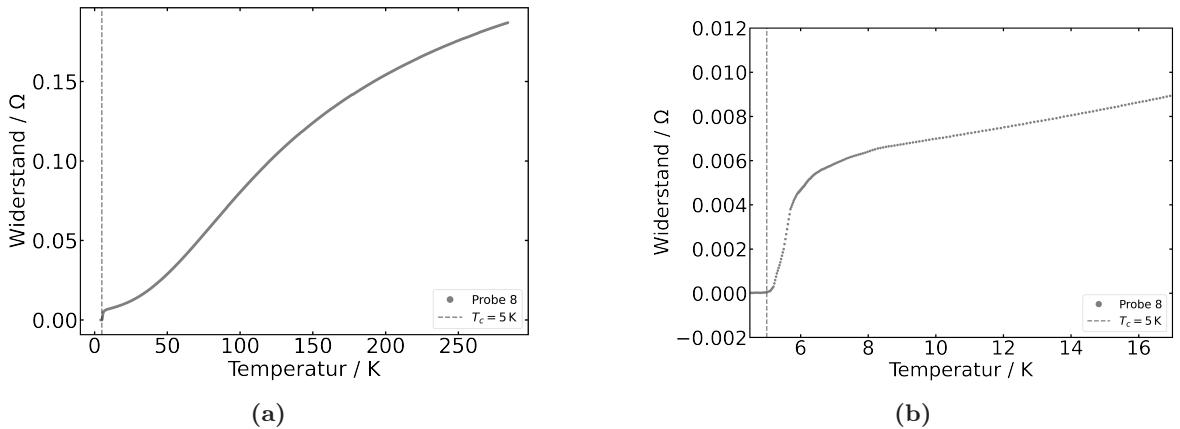


Abbildung A.8.: a) Temperaturabhängige Widerstandsmessung von Probe 8 im kompletten Temperaturbereich. b) Vergrößerter Temperaturbereich mit dem Sprung des Widerstands unterhalb der Sprungtemperatur T_c . Die bestimmt Sprungtemperatur ist mit der senkrechten Linie eingezeichnet. Die Sprungtemperatur wurde auf $T_C = 5$ K bestimmt.

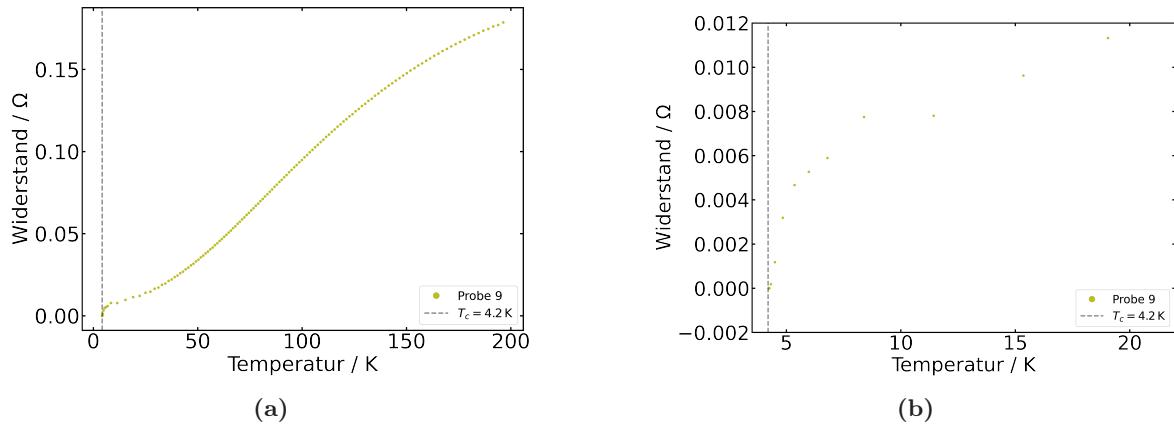


Abbildung A.9.: a) Temperaturabhängige Widerstandsmessung von Probe 9 im kompletten Temperaturbereich. b) Vergrößerter Temperaturbereich mit dem Sprung des Widerstands unterhalb der Sprungtemperatur T_c . Die bestimmt Sprungtemperatur ist mit der senkrechten Linie eingezeichnet. Die Sprungtemperatur wurde auf $T_C = 4 \text{ K}$ bestimmt.

Weitere Ergebnisse der FEA

In den folgenden Abbildung sind für die weiteren betrachteten Bauteilkonfigurationen die Ergebnisse der FEA dargestellt. Abbildung a) zeigt die berechnete Vergleichsspannung, Abbildung b) die berechnete erforderliche Kraft.

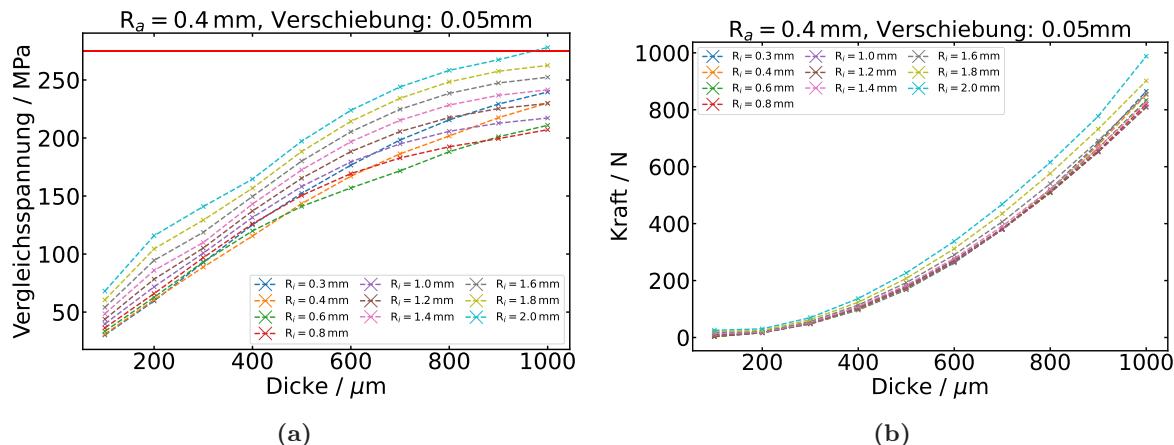


Abbildung A.10.: Ergebnisse der FEA für einen festen Außenradius von 0.4 mm und eine Verschiebung von 50 μm bei Variation des Innenradius und der Dicke der Biegelemente. In a) sind die berechneten Vergleichsspannungen dargestellt, in b) die jeweils erforderliche Kraft zur Erzeugung der Verschiebung.

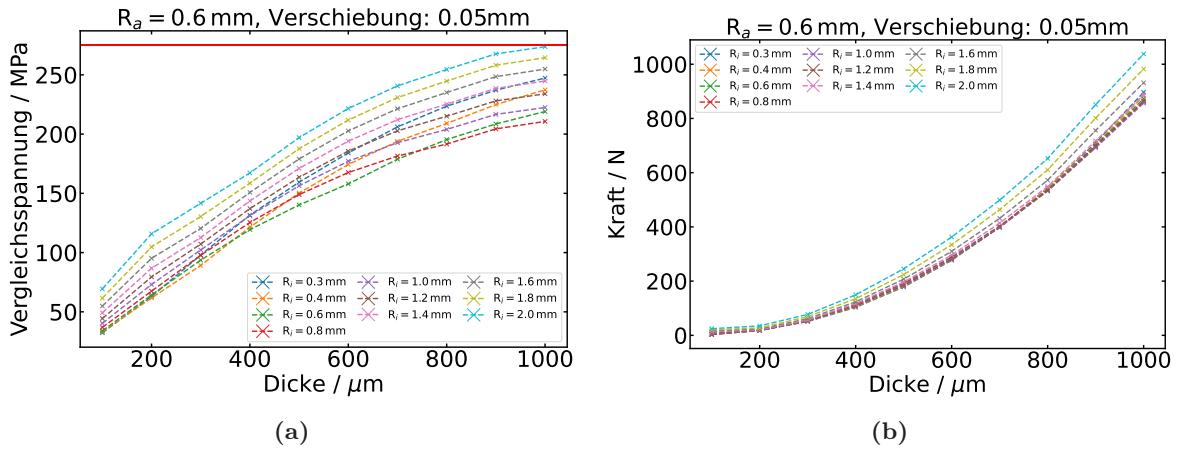


Abbildung A.11.: Ergebnisse der FEA für einen festen Außenradius von 0.6 mm und eine Verschiebung von 50 μm bei Variation des Innenradius und der Dicke der Biegeelemente. In a) sind die berechneten Vergleichsspannungen dargestellt, in b) die jeweils erforderliche Kraft zur Erzeugung der Verschiebung.

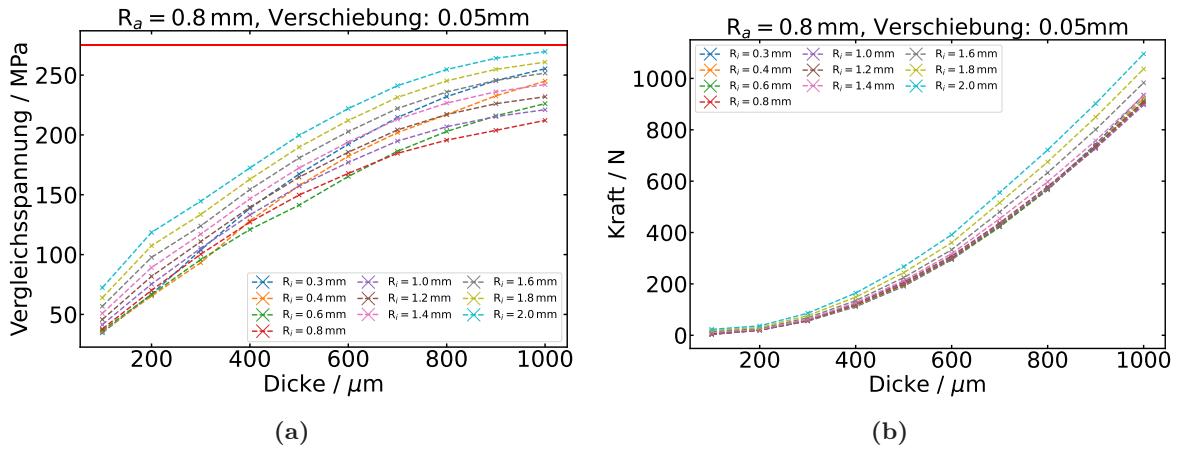


Abbildung A.12.: Ergebnisse der FEA für einen festen Außenradius von 0.8 mm und eine Verschiebung von 50 μm bei Variation des Innenradius und der Dicke der Biegeelemente. In a) sind die berechneten Vergleichsspannungen dargestellt, in b) die jeweils erforderliche Kraft zur Erzeugung der Verschiebung.

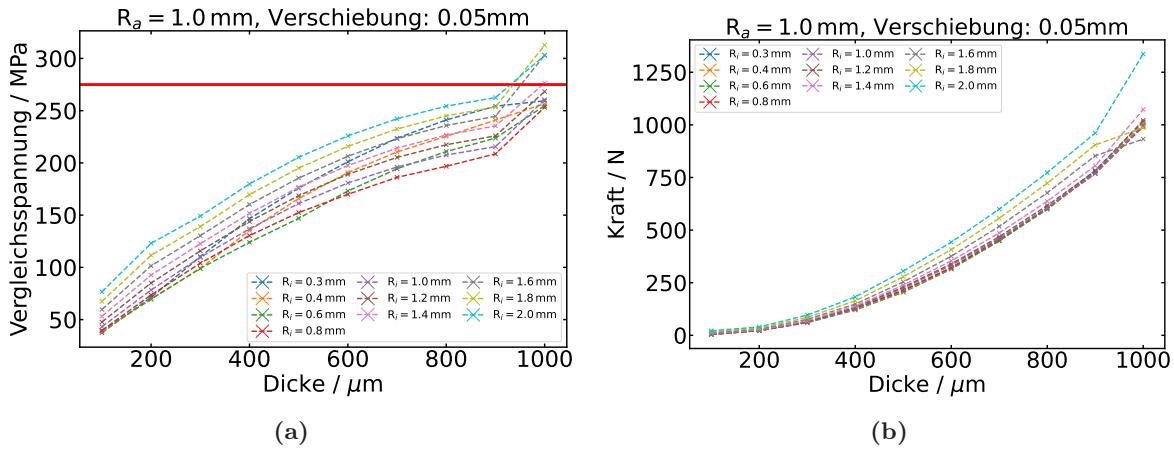


Abbildung A.13.: Ergebnisse der FEA für einen festen Außenradius von 1.0 mm und eine Verschiebung von 50 μm bei Variation des Innenradius und der Dicke der Biegeelemente. In a) sind die berechneten Vergleichsspannungen dargestellt, in b) die jeweils erforderliche Kraft zur Erzeugung der Verschiebung.

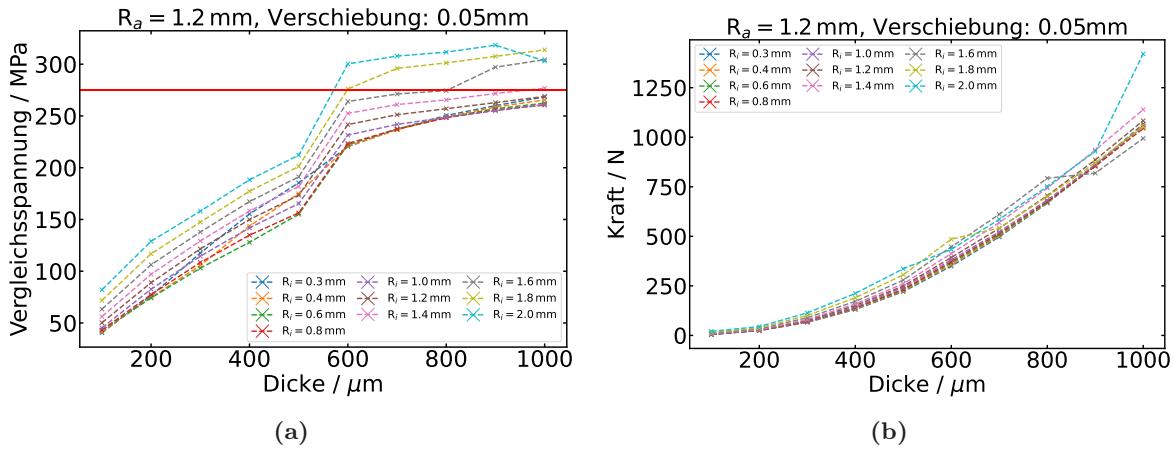


Abbildung A.14.: Ergebnisse der FEA für einen festen Außenradius von 1.2 mm und eine Verschiebung von 50 μm bei Variation des Innenradius und der Dicke der Biegeelemente. In a) sind die berechneten Vergleichsspannungen dargestellt, in b) die jeweils erforderliche Kraft zur Erzeugung der Verschiebung.

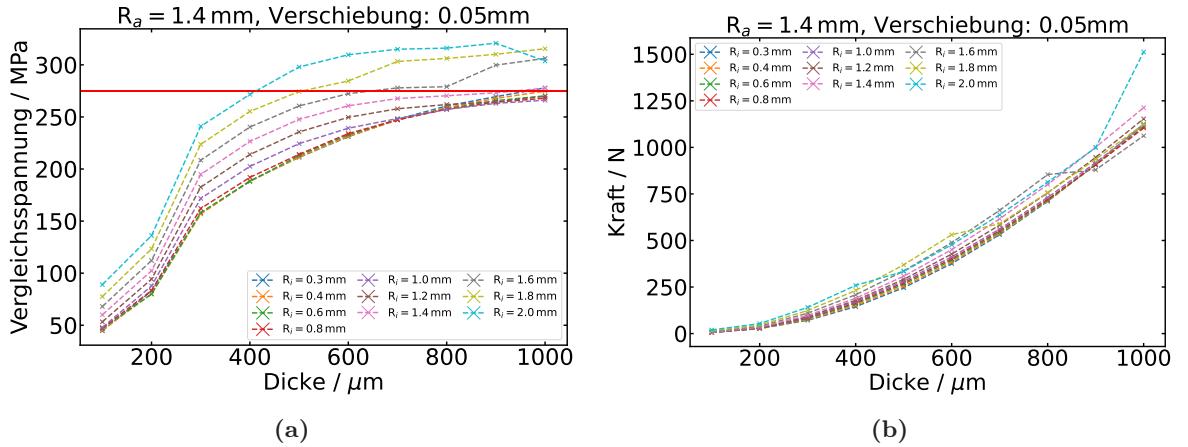


Abbildung A.15.: Ergebnisse der FEA für einen festen Außenradius von 1.4 mm und eine Verschiebung von 50 μm bei Variation des Innenradius und der Dicke der Biegelemente. In a) sind die berechneten Vergleichsspannungen dargestellt, in b) die jeweils erforderliche Kraft zur Erzeugung der Verschiebung.

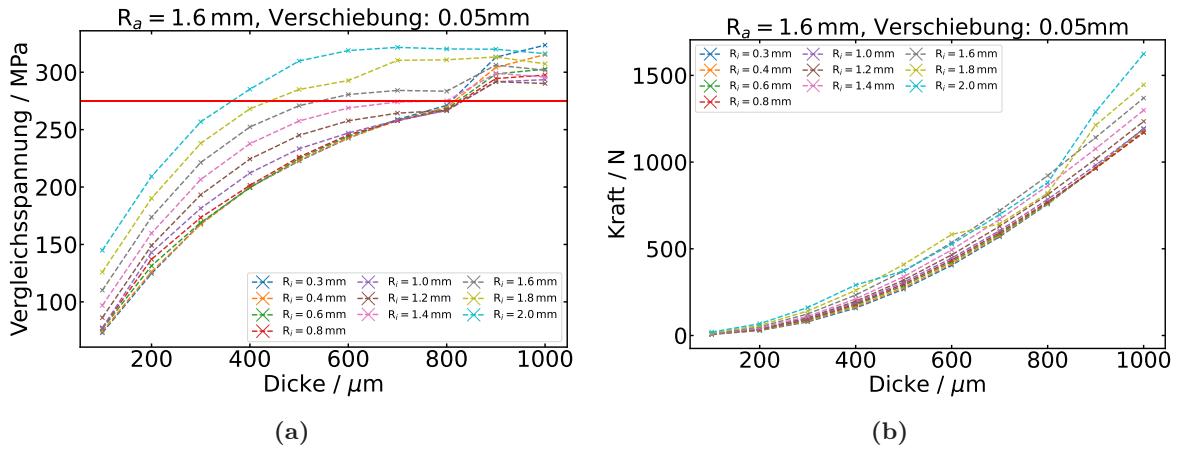


Abbildung A.16.: Ergebnisse der FEA für einen festen Außenradius von 1.6 mm und eine Verschiebung von 50 μm bei Variation des Innenradius und der Dicke der Biegelemente. In a) sind die berechneten Vergleichsspannungen dargestellt, in b) die jeweils erforderliche Kraft zur Erzeugung der Verschiebung.

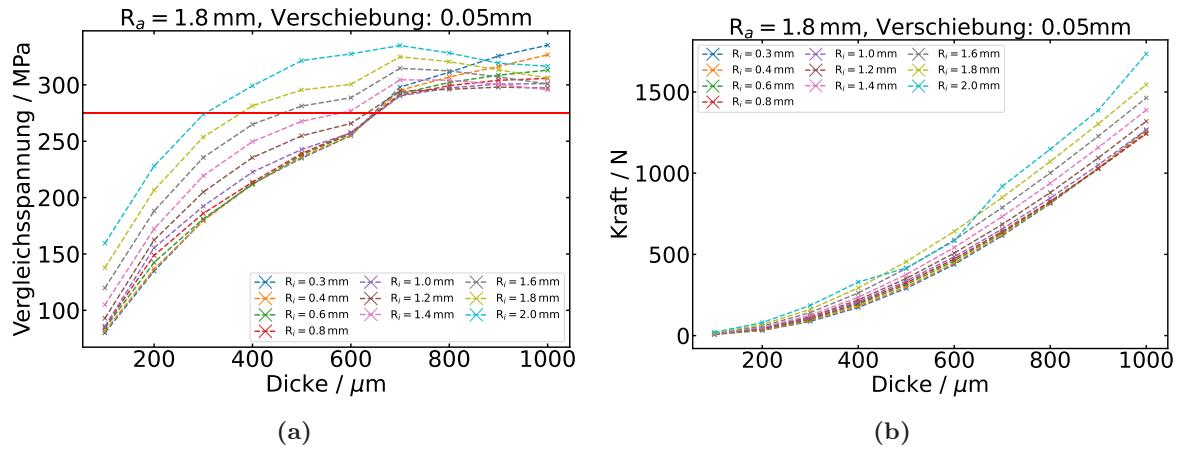


Abbildung A.17.: Ergebnisse der FEA für einen festen Außenradius von 1.8 mm und eine Verschiebung von 50 μm bei Variation des Innenradius und der Dicke der Biegelemente. In a) sind die berechneten Vergleichsspannungen dargestellt, in b) die jeweils erforderliche Kraft zur Erzeugung der Verschiebung.

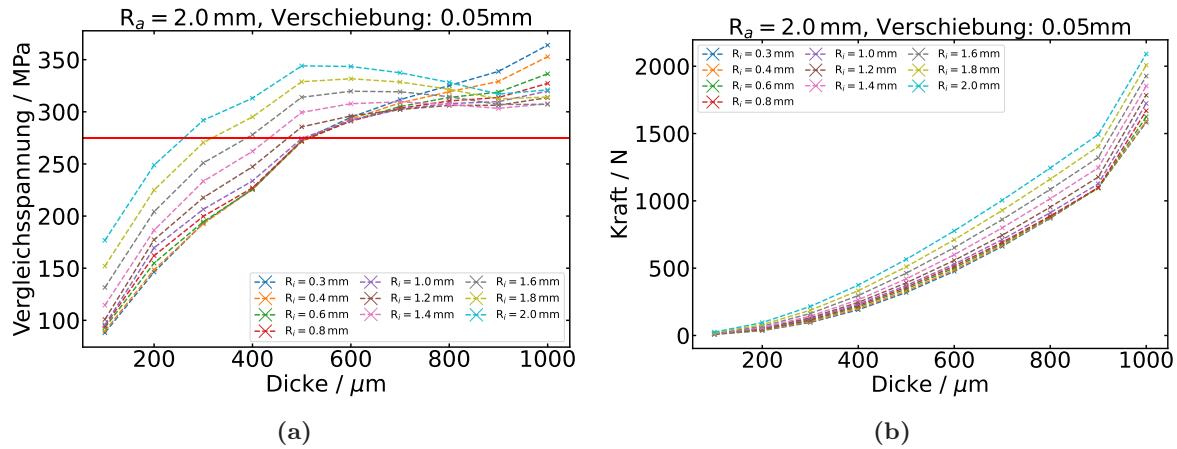


Abbildung A.18.: Ergebnisse der FEA für einen festen Außenradius von 2.0 mm und eine Verschiebung von 50 μm bei Variation des Innenradius und der Dicke der Biegelemente. In a) sind die berechneten Vergleichsspannungen dargestellt, in b) die jeweils erforderliche Kraft zur Erzeugung der Verschiebung.

Anschlussplan Lötstation

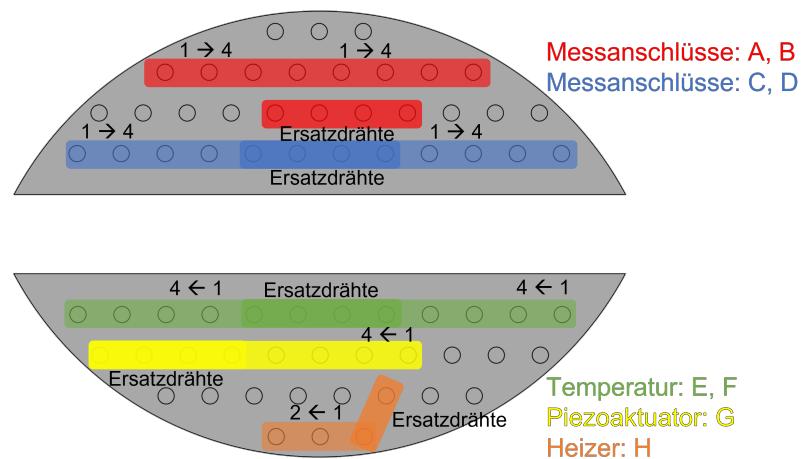


Abbildung A.19.: Anschlussplan der Lötstationen an der Kältestufe.

Literaturverzeichnis

- [1] N. F. Mott. Metal-Insulator Transition. *Rev. Mod. Phys.*, 40:677–683, 1968.
- [2] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A*, Vol: 276, 1963.
- [3] J. G. Bednorz and K. A. Mueller. Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 64:1175–1204, 1986.
- [4] A. Schilling, M. Cantoni, J. D. Guo, and H. R. Ott. Superconductivity above 130K in the Hg-Ba-Ca-Cu-O system. *Nature*, 363(6424):56–58, 1993.
- [5] R. Gross and A. Marx. *Festkörperphysik*. Oldenbourg Verlag, 2012.
- [6] W. Meissner and R. Ochsenfeld. Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit. *Naturwissenschaften*, 21(44):787–788, 1933.
- [7] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of Superconductivity. *Phys. Rev.*, 108:1175–1204, 1957.
- [8] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono. Iron-Based Layered Superconductor $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$ ($x = 0.05\text{--}0.12$) with $T_c = 26\text{ K}$. *Journal of the American Chemical Society*, 130(11):3296–3297, 2008.
- [9] A. E. Böhmer, J.-H. Chu, S. Lederer, and M. Yi. Nematicity and nematic fluctuations in iron-based superconductors. *Nature Physics*, 18(12):1412–1419, 2022.
- [10] S. Avci, O. Chmaissem, D. Y. Chung, S. Rosenkranz, E. A. Goremychkin, J. P. Castellan, I. S. Todorov, J. A. Schlueter, H. Claus, A. Daoud-Aladine, D. D. Khalyavin, M. G. Kanatzidis, and R. Osborn. Phase Diagram of $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$. *Phys. Rev. B*, 85:184507, 2012.
- [11] A. E. Böhmer, P. Burger, F. Hardy, T. Wolf, P. Schweiss, R. Fromknecht, M. Reinecker, W. Schranz, and C. Meingast. Nematic Susceptibility of Hole-Doped and Electron-Doped BaFe_2As_2 Iron-Based Superconductors from Shear Modulus Measurements. *Phys. Rev. Lett.*, 112:047001, 2014.
- [12] M. Rotter, M. Tegel, D. Johrendt, I. Schellenberg, W. Hermes, and R. Pöttgen. Spin-Density-Wave Anomaly at 140K in the Ternary Iron Arsenide BaFe_2As_2 . *Phys. Rev. B*, 78:020503, 2008.
- [13] P. C. Canfield and S. L. Bud'ko. FeAs-Based Superconductivity: A Case Study of the Effects of Transition Metal Doping on BaFe_2As_2 . *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 1(1):27–50, 2010.
- [14] F. Hardy, A. E. Böhmer, L. de' Medici, M. Capone, G. Giovannetti, R. Eder, L. Wang, M. He, T. Wolf, P. Schweiss, R. Heid, A. Herbig, P. Adelmann, R. A. Fisher, and C. Meingast. Strong correlations, strong coupling, and s -wave superconductivity in hole-doped BaFe_2As_2 single crystals. *Phys. Rev. B*, 94:205113, 2016.

- [15] L. de' Medici, G. Giovannetti, and M. Capone. Selective Mott Physics as a Key to Iron Superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 112:177001, 2014.
- [16] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Holt-Saunders, 1976.
- [17] A. Jayaraman. Diamond anvil cell and high-pressure physical investigations. *Rev. Mod. Phys.*, 55:65–108, 1983.
- [18] B. Lorenz and C. W. Chu. High pressure effects on superconductivity. In *Frontiers in Superconducting Materials*, pages 459–497. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2005.
- [19] X. Lu, K.-F. Tseng, T. Keller, W. Zhang, D. Hu, Y. Song, H. Man, J. T. Park, H. Luo, S. Li, A. H. Nevidomskyy, and P. Dai. Impact of uniaxial pressure on structural and magnetic phase transitions in electron-doped iron pnictides. *Phys. Rev. B*, 93:134519, 2016.
- [20] J.-H. Chu, H.-H. Kuo, J. G. Analytis, and I. R. Fisher. Divergent Nematic Susceptibility in an Iron Arsenide Superconductor. *Science*, 337(6095):710–712, 2012.
- [21] J. P. Lorenz, J. F. Linnartz, A. Kool, M. R. van Delft, W. Guo, I. Aguilera, R. Singha, L. M. Schoop, N. E. Hussey, S. Wiedmann, and A. de Visser. Uniaxial strain effects on the Fermi surface and quantum mobility of the Dirac nodal-line semimetal ZrSiS. *Phys. Rev. B*, 109:235114, 2024.
- [22] H. Kamerlingh Onnes. Further Experiments with Liquid Helium: The Resistance of Pure Mercury at Helium Temperatures. *Communications from the Physical Laboratory of the University of Leiden*, XIV(120b), 1911.
- [23] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, and J. Akimitsu. Superconductivity at 39 K in magnesium diboride. *Nature*, 410(6824):63–64, 2001.
- [24] D. J. Scalapino. A common thread: The pairing interaction for unconventional superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 84:1383–1417, 2012.
- [25] I. I. Mazin. Superconductivity gets an iron boost. *Nature*, 464(7286):183–186, 2010.
- [26] N. M. Plakida. Spin fluctuations and high-temperature superconductivity in cuprates. *Physica C: Superconductivity and its Applications*, 531:39–59, 2016.
- [27] C. Wang, L. Li, S. Chi, Z. Zhu, Z. Ren, Y. Li, Y. Wang, X. Lin, Y. Luo, S. Jiang, X. Xu, G. Cao, and Z. Xu. Thorium-doping-induced superconductivity up to 56 K in $\text{Gd}_{1-x}\text{Th}_x\text{FeAsO}$. *Europhysics Letters*, 83(6):67006, 2008.
- [28] G. Wu, Y. L. Xie, H. Chen, M. Zhong, R. H. Liu, B. C. Shi, Q. J. Li, X. F. Wang, T. Wu, Y. J. Yan, J. J. Ying, and X. H. Chen. Superconductivity at 56 K in samarium-doped SrFeAsF . *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(14):142203, 2009.
- [29] I. I. Mazin, D. J. Singh, M. D. Johannes, and M. H. Du. Unconventional Superconductivity with a Sign Reversal in the Order Parameter of $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$. *Phys. Rev. Lett.*, 101:057003, 2008.
- [30] K. Kuroki, H. Usui, S. Onari, R. Arita, and H. Aoki. Pnictogen height as a possible switch between high- T_c nodeless and low- T_c nodal pairings in the iron-based superconductors. *Phys. Rev. B*, 79:224511, 2009.
- [31] C. W. Chu. Alive and kicking. *Nature Physics*, 5(11):787–789, 2009.

[32] J. Shimoyama. Potentials of iron-based superconductors for practical future materials. *Superconductor Science and Technology*, 27(4):044002, 2014.

[33] J. R. Jeffries, N. P. Butch, H. Cynn, S. R. Saha, K. Kirshenbaum, S. T. Weir, Y. K. Vohra, and J. Paglione. Interplay between magnetism, structure, and strong electron-phonon coupling in binary FeAs under pressure. *Phys. Rev. B*, 83:134520, 2011.

[34] A. E. Boehmer and F. Hardy. Superconductivity-Induced Re-entrance of the Orthorhombic Distortion in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$. *Nature Communications*, 6(2):7911, 2015.

[35] F.-C. Hsu, J.-Y. Luo, K.-W. Yeh, T.-K. Chen, T.-W. Huang, P. M. Wu, Y.-C. Lee, Y.-L. Huang, Y.-Y. Chu, D.-C. Yan, and M.-K. Wu. Superconductivity in the PbO-Type Structure α -FeSe. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 105(38):14262–14264, 2008.

[36] O. Heyer, T. Lorenz, V. B. Zabolotnyy, D. V. Evtushinsky, S. V. Borisenko, I. Morozov, L. Harnagea, S. Wurmehl, C. Hess, and B. Büchner. Resistivity and Hall effect of LiFeAs: Evidence for electron-electron scattering. *Phys. Rev. B*, 84:064512, 2011.

[37] G. R. Stewart. Superconductivity in iron compounds. *Rev. Mod. Phys.*, 83:1589–1652, 2011.

[38] D. C. Johnston. The puzzle of high temperature superconductivity in layered iron pnictides and chalcogenides. *Advances in Physics*, 59(6):803–1061, 2010.

[39] Q. Huang, Y. Qiu, W. Bao, M. A. Green, J. W. Lynn, Y. C. Gasparovic, T. Wu, G. Wu, and X. H. Chen. Neutron-Diffraction Measurements of Magnetic Order and a Structural Transition in the Parent BaFe_2As_2 Compound of FeAs-Based High-Temperature Superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 101:257003, 2008.

[40] H. Chen, Y. Ren, Y. Qiu, Wei Bao, R. H. Liu, G. Wu, T. Wu, Y. L. Xie, X. F. Wang, Q. Huang, and X. H. Chen. Coexistence of the spin-density wave and superconductivity in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$. *Europhysics Letters*, 85(1):17006, 2009.

[41] M. Rotter, M. Pangerl, M. Tegel, and D. Johrendt. Superconductivity and Crystal Structures of $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ ($x=0-1$). *Angewandte Chemie International Edition*, 47(41):7949–7952, 2008.

[42] J.-H. Chu, J. G. Analytis, C. Kucharczyk, and I. R. Fisher. Determination of the phase diagram of the electron-doped superconductor $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$. *Phys. Rev. B*, 79:014506, 2009.

[43] X. F. Wang, T. Wu, G. Wu, R. H. Liu, H. Chen, Y. L. Xie, and X. H. Chen. The peculiar physical properties and phase diagram of $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ single crystals. *New Journal of Physics*, 11(4):045003, 2009.

[44] T. Sato, K. Nakayama, Y. Sekiba, P. Richard, Y.-M. Xu, S. Souma, T. Takahashi, G. F. Chen, J. L. Luo, N. L. Wang, and H. Ding. Band Structure and Fermi Surface of an Extremely Overdoped Iron-Based Superconductor KFe_2As_2 . *Phys. Rev. Lett.*, 103:047002, 2009.

[45] R. M. Fernandes, A. V. Chubukov, and J. Schmalian. What drives nematic order in iron-based superconductors? *Nature Physics*, 10:1745–2481, 2014.

[46] J. Fink, S. Thirupathaiah, R. Ovsyannikov, H. A. Dürr, R. Follath, Y. Huang, S. de Jong, M. S. Golden, Yu-Zhong Zhang, H. O. Jeschke, R. Valentí, C. Felser, S. Dastjani Farahani, M. Rotter, and D. Johrendt. Electronic structure studies of BaFe_2As_2 by angle-resolved photoemission spectroscopy. *Phys. Rev. B*, 79:155118, 2009.

[47] M. D. Watson, P. Dudin, L. C. Rhodes, D. V. Evtushinsky, H. Iwasawa, S. Aswartham, S. Wurmehl, B. Büchner, M. Hoesch, and T. K. Kim. Probing the reconstructed Fermi surface of antiferromagnetic BaFe_2As_2 in one domain. *npj Quantum Materials*, 4(1):36, 2019.

[48] P. J. Hirschfeld, M. M. Korshunov, and I. I. Mazin. Gap symmetry and structure of Fe-based superconductors. *Reports on Progress in Physics*, 74(12):124508, 2011.

[49] D. J. Singh. Electronic structure and doping in BaFe_2As_2 and LiFeAs : Density functional calculations. *Phys. Rev. B*, 78:094511, 2008.

[50] P. Dai, J. Hu, and E. Dagotto. Magnetism and its microscopic origin in iron-based high-temperature superconductors. *Nature Physics*, 8(10):709–718, 2012.

[51] L. Pan, J. Li, Y.-Y. Tai, M. J. Graf, J.-X. Zhu, and C. S. Ting. Evolution of the Fermi surface topology in doped 122 iron pnictides. *Phys. Rev. B*, 88:214510, 2013.

[52] M. Yi, D. Lu, J.-H. Chu, J. G. Analytis, A. P. Sorini, A. F. Kemper, B. Moritz, S.-K. Mo, R. G. Moore, M. Hashimoto, W.-S. Lee, Z. Hussain, T. P. Devereaux, I. R. Fisher, and Z.-X. Shen. Symmetry-breaking orbital anisotropy observed for detwinned $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ above the spin density wave transition. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 108(17):6878–6883, 2011.

[53] S. Avci, O. Chmaissem, J. M. Allred, S. Rosenkranz, I. Eremin, A. V. Chubukov, D. E. Bugaris, D. Y. Chung, M. G. Kanatzidis, J.-P. Castellan, J. A. Schlueter, H. Claus, D. D. Khalyavin, P. Manuel, A. Daoud-Aladine, and R. Osborn. Magnetically driven suppression of nematic order in an iron-based superconductor. *Nature Communications*, 5(1):3845, 2014.

[54] V. B. Zabolotnyy, D. S. Inosov, D. V. Evtushinsky, A. Koitzsch, A. A. Kordyuk, G. L. Sun, J. T. Park, D. Haug, V. Hinkov, A. V. Boris, C. T. Lin, M. Knupfer, A. N. Yaresko, B. Büchner, A. Varykhalov, R. Follath, and S. V. Borisenko. (π, π) electronic order in iron arsenide superconductors. *Nature*, 457(7229):569–572, 2009.

[55] C. Timm. Theory of Superconductivity. Lecture notes, Institute of Theoretical Physics, TU Dresden, 2025. Wintersemester 2017/2018, Version 7 Apr 2025.

[56] J.-H. Chu, J. G. Analytis, K. De Greve, P. L. McMahon, Z. Islam, Y. Yamamoto, and I. R. Fisher. In-Plane Resistivity Anisotropy in an Underdoped Iron Arsenide Superconductor. *Science*, 329(5993):824–826, 2010.

[57] S. Jiang, H. S. Jeevan, J. Dong, and P. Gegenwart. Thermopower as a Sensitive Probe of Electronic Nematicity in Iron Pnictides. *Phys. Rev. Lett.*, 110:067001, 2013.

[58] M. A. Tanatar, E. C. Blomberg, A. Kreyssig, M. G. Kim, N. Ni, A. Thaler, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, A. I. Goldman, I. I. Mazin, and R. Prozorov. Uniaxial-strain mechanical detwinning of CaFe_2As_2 and BaFe_2As_2 crystals: Optical and transport study. *Phys. Rev. B*, 81:184508, 2010.

[59] E. C. Blomberg, M. A. Tanatar, A. Kreyssig, N. Ni, A. Thaler, Rongwei Hu, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, A. I. Goldman, and R. Prozorov. In-plane anisotropy of electrical resistivity in strain-detwinned SrFe_2As_2 . *Phys. Rev. B*, 83:134505, 2011.

[60] M. Matusiak and M. Babij. Thermoelectric signature of the nematic phase in hole-doped iron-based superconductors. *Phys. Rev. B*, 99:174507, 2019.

[61] C. Lester, Jiun-Haw Chu, J. G. Analytis, S. C. Capelli, A. S. Erickson, C. L. Condron, M. F. Toney, I. R. Fisher, and S. M. Hayden. Neutron scattering study of the interplay between structure and magnetism in $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$. *Phys. Rev. B*, 79:144523, 2009.

[62] S. Kasahara, H. J. Shi, K. Hashimoto, S. Tonegawa, Y. Mizukami, T. Shibauchi, K. Sugimoto, T. Fukuda, T. Terashima, Andriy H. Nevidomskyy, and Y. Matsuda. Electronic nematicity above the structural and superconducting transition in $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$. *Nature*, 486(7403):382–385, 2012.

[63] C. Fan and M. J. Stephen. Isotropic-Nematic Phase Transition in Liquid Crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 25:500–503, 1970.

[64] S. A. Kivelson, E. Fradkin, and V. J. Emery. Electronic liquid-crystal phases of a doped Mott insulator. *Nature*, 393(6685):550–553, 1998.

[65] V. Grinenko, R. Sarkar, K. Kihou, C. H. Lee, I. Morozov, S. Aswartham, B. Büchner, P. Chekhonin, W. Skrotzki, K. Nenkov, R. Hühne, K. Nielsch, S.-L. Drechsler, V. L. Vadimov, M. A. Silaev, P. A. Volkov, I. Eremin, H. Luetkens, and H.-H. Klauss. Superconductivity with broken time-reversal symmetry inside a superconducting s-wave state. *Nature Physics*, 16(7):789–794, 2020.

[66] Y. Ota, K. Okazaki, Y. Kotani, T. Shimojima, W. Malaeb, S. Watanabe, C.-T. Chen, K. Kihou, C. H. Lee, A. Iyo, H. Eisaki, T. Saito, H. Fukazawa, Y. Kohori, and S. Shin. Evidence for excluding the possibility of *d*-wave superconducting-gap symmetry in Ba-doped KFe_2As_2 . *Phys. Rev. B*, 89:081103, 2014.

[67] D. Watanabe, T. Yamashita, Y. Kawamoto, S. Kurata, Y. Mizukami, T. Ohta, S. Kasahara, M. Yamashita, T. Saito, H. Fukazawa, Y. Kohori, S. Ishida, K. Kihou, C. H. Lee, A. Iyo, H. Eisaki, A. B. Vorontsov, T. Shibauchi, and Y. Matsuda. Doping evolution of the quasiparticle excitations in heavily hole-doped $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$: A possible superconducting gap with sign-reversal between hole pockets. *Phys. Rev. B*, 89:115112, 2014.

[68] K. Cho, M. Konczykowski, S. Teknowijoyo, M. A. Tanatar, and R. Prozorov. Using electron irradiation to probe iron-based superconductors. *Superconductor Science and Technology*, 31(6):064002, 2018.

[69] J. Garaud and E. Babaev. Domain Walls and Their Experimental Signatures in *s + is* Superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 112:017003, 2014.

[70] S.-Z. Lin, S. Maiti, and A. Chubukov. Distinguishing between *s + id* and *s + is* pairing symmetries in multiband superconductors through spontaneous magnetization pattern induced by a defect. *Phys. Rev. B*, 94:064519, 2016.

[71] V. L. Vadimov and M. A. Silaev. Polarization of the spontaneous magnetic field and magnetic fluctuations in *s + is* anisotropic multiband superconductors. *Phys. Rev. B*, 98:104504, 2018.

[72] A. Bhattacharyya, D. Adroja, N. Kase, A. Hillier, J. Akimitsu, and A. Strydom. Unconventional superconductivity in $\text{Y}_5\text{Rh}_6\text{Sn}_{18}$ probed by muon spin relaxation. *Scientific Reports*, 5(1):12926, 2015.

[73] A. D. Hillier, J. Quintanilla, and R. Cywinski. Evidence for Time-Reversal Symmetry Breaking in the Noncentrosymmetric Superconductor LaNiC_2 . *Phys. Rev. Lett.*, 102:117007, 2009.

[74] S. L. Bud'ko, N. Ni, and P. C. Canfield. Jump in specific heat at the superconducting transition temperature in $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ and $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x)_2\text{As}_2$ single crystals. *Phys. Rev. B*, 79:220516, 2009.

[75] Y. Bang and G. R. Stewart. Superconducting properties of the $s\pm$ -wave state: Fe-based superconductors. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29(12):123003, 2017.

[76] M. Hesani, K. Rahimi, and A. Yazdani. Charge-doping-induced variation of the superconducting BaFe_2As_2 electronic structure and the emerging physical effects: a DFT+DMFT study. *Journal of Materials Science*, 56(25):14157–14169, 2021.

[77] W. Malaeb, T. Shimojima, Y. Ishida, K. Okazaki, Y. Ota, K. Ohgushi, K. Kihou, T. Saito, C. H. Lee, S. Ishida, M. Nakajima, S. Uchida, H. Fukazawa, Y. Kohori, A. Iyo, H. Eisaki, C.-T. Chen, S. Watanabe, H. Ikeda, and S. Shin. Abrupt change in the energy gap of superconducting $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ single crystals with hole doping. *Phys. Rev. B*, 86:165117, 2012.

[78] K. Nakayama, T. Sato, P. Richard, Y.-M. Xu, T. Kawahara, K. Umezawa, T. Qian, M. Neupane, G. F. Chen, H. Ding, and T. Takahashi. Universality of superconducting gaps in overdoped $\text{Ba}_{0.3}\text{K}_{0.7}\text{Fe}_2\text{As}_2$ observed by angle-resolved photoemission spectroscopy. *Phys. Rev. B*, 83:020501, 2011.

[79] D. V. Evtushinsky, D. S. Inosov, V. B. Zabolotnyy, A. Koitzsch, M. Knupfer, B. Büchner, M. S. Viazovska, G. L. Sun, V. Hinkov, A. V. Boris, C. T. Lin, B. Keimer, A. Varykhalov, A. A. Kordyuk, and S. V. Borisenko. Momentum dependence of the superconducting gap in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$. *Phys. Rev. B*, 79:054517, 2009.

[80] J. T. Park, D. S. Inosov, Ch. Niedermayer, G. L. Sun, D. Haug, N. B. Christensen, R. Dinnebier, A. V. Boris, A. J. Drew, L. Schulz, T. Shapoval, U. Wolff, V. Neu, Xiaoping Yang, C. T. Lin, B. Keimer, and V. Hinkov. Electronic Phase Separation in the Slightly Underdoped Iron Pnictide Superconductor $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 102:117006, 2009.

[81] X. Zhang, Y. S. Oh, Y. Liu, L. Yan, S. R. Saha, N. P. Butch, K. Kirshenbaum, K. H. Kim, J. Paglione, R. L. Greene, and I. Takeuchi. Evidence of a universal and isotropic $2\Delta/k_B T_c$ ratio in 122-type iron pnictide superconductors over a wide doping range. *Phys. Rev. B*, 82:020515, 2010.

[82] Y. Liu and T. A. Lograsso. Crossover in the magnetic response of single-crystalline $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ and Lifshitz critical point evidenced by Hall effect measurements. *Phys. Rev. B*, 90:224508, 2014.

[83] H. Hodovanets, Y. Liu, A. Jesche, S. Ran, E. D. Mun, T. A. Lograsso, S. L. Bud'ko, and P. C. Canfield. Fermi surface reconstruction in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ ($0.44 \leq x \leq 1$) probed by thermoelectric power measurements. *Phys. Rev. B*, 89:224517, 2014.

[84] S. N. Khan and D. D. Johnson. Lifshitz Transition and Chemical Instabilities in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ Superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 112:156401, 2014.

[85] L. de' Medici, S. R. Hassan, M. Capone, and X. Dai. Orbital-Selective Mott Transition out of Band Degeneracy Lifting. *Phys. Rev. Lett.*, 102:126401, 2009.

[86] T. Misawa, K. Nakamura, and M. Imada. Ab Initio Evidence for Strong Correlation Associated with Mott Proximity in Iron-Based Superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 108:177007, 2012.

[87] P. Fazekas. *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*. WORLD SCIENTIFIC, 1999.

[88] F. Hardy, P. Burger, T. Wolf, R. A. Fisher, P. Schweiss, P. Adelmann, R. Heid, R. Fromknecht, R. Eder, D. Ernst, H. v. Löhneysen, and C. Meingast. Doping evolution of superconducting gaps and electronic densities of states in $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ iron pnictides. *Europhysics Letters*, 91(4):47008, 2010.

[89] M. Abdel-Hafiez, S. Aswartham, S. Wurmehl, V. Grinenko, C. Hess, S.-L. Drechsler, S. Johnston, A. U. B. Wolter, B. Büchner, H. Rosner, and L. Boeri. Specific heat and upper critical fields in KFe_2As_2 single crystals. *Phys. Rev. B*, 85:134533, 2012.

[90] P. Popovich, A. V. Boris, O. V. Dolgov, A. A. Golubov, D. L. Sun, C. T. Lin, R. K. Kremer, and B. Keimer. Specific Heat Measurements of $\text{Ba}_{0.68}\text{K}_{0.32}\text{Fe}_2\text{As}_2$ Single Crystals: Evidence for a Multiband Strong-Coupling Superconducting State. *Phys. Rev. Lett.*, 105:027003, 2010.

[91] A. K. Pramanik, M. Abdel-Hafiez, S. Aswartham, A. U. B. Wolter, S. Wurmehl, V. Kataev, and B. Büchner. Multigap superconductivity in single crystals of $\text{Ba}_{0.65}\text{Na}_{0.35}\text{Fe}_2\text{As}_2$: A calorimetric investigation. *Phys. Rev. B*, 84:064525, 2011.

[92] G. Mu, H. Luo, Z. Wang, Lei Shan, C. Ren, and H.-H. Wen. Low temperature specific heat of the hole-doped $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ single crystals. *Phys. Rev. B*, 79:174501, 2009.

[93] J. S. Kim, E. G. Kim, G. R. Stewart, X. H. Chen, and X. F. Wang. Specific heat in KFe_2As_2 in zero and applied magnetic field. *Phys. Rev. B*, 83:172502, 2011.

[94] L. Degiorgi. Electronic correlations in iron-pnictide superconductors and beyond: lessons learned from optics. *New Journal of Physics*, 13(2):023011, 2011.

[95] G. Li, W. Z. Hu, J. Dong, Z. Li, P. Zheng, G. F. Chen, J. L. Luo, and N. L. Wang. Probing the Superconducting Energy Gap from Infrared Spectroscopy on a $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ Single Crystal with $T_c = 37$ K. *Phys. Rev. Lett.*, 101:107004, 2008.

[96] J. Yang, D. Huvonen, U. Nagel, T. Rööm, N. Ni, P. C. Canfield, S. L. Bud'ko, J. P. Carbotte, and T. Timusk. Optical Spectroscopy of Superconducting $\text{Ba}_{0.55}\text{K}_{0.45}\text{Fe}_2\text{As}_2$: Evidence for Strong Coupling to Low-Energy Bosons. *Phys. Rev. Lett.*, 102:187003, 2009.

[97] N. L. Wang, W. Z. Hu, Z. G. Chen, R. H. Yuan, G. Li, G. F. Chen, and T. Xiang. High energy pseudogap and its evolution with doping in Fe-based superconductors as revealed by optical spectroscopy. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 24(29):294202, 2012.

[98] H. Ding, K. Nakayama, P. Richard, S. Souma, T. Sato, T. Takahashi, M. Neupane, Y.-M. Xu, Z.-H. Pan, A. V. Fedorov, Z. Wang, X. Dai, Z. Fang, G. F. Chen, J. L. Luo, and N. L. Wang. Electronic structure of optimally doped pnictide $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$: a comprehensive angle-resolved photoemission spectroscopy investigation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 23(13):135701, 2011.

[99] M. Yi, D. H. Lu, J. G. Analytis, J.-H. Chu, S.-K. Mo, R.-H. He, R. G. Moore, X. J. Zhou, G. F. Chen, J. L. Luo, N. L. Wang, Z. Hussain, D. J. Singh, I. R. Fisher, and Z.-X. Shen. Electronic structure of the BaFe_2As_2 family of iron-pnictide superconductors. *Phys. Rev. B*, 80:024515, 2009.

[100] T. Terashima, M. Kimata, N. Kurita, H. Satsukawa, A. Harada, K. Hazama, M. Imai, A. Sato, K. Kihou, C.-H. Lee, H. Kito, H. Eisaki, A. Iyo, T. Saito, H. Fukazawa, Y. Kohori, H. Harima, and S. Uji. Fermi Surface and Mass Enhancement in KFe_2As_2 from de Haas-van Alphen Effect Measurements. *Journal of the Physical Society of Japan*, 79(5):053702, 2010.

[101] L. de' Medici, J. Mravlje, and A. Georges. Janus-Faced Influence of Hund's Rule Coupling in Strongly Correlated Materials. *Phys. Rev. Lett.*, 107:256401, 2011.

[102] J. Kondo. Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys. *Progress of Theoretical Physics*, 32(1):37–49, 1964.

[103] P. Coleman. Heavy Fermions: Electrons at the Edge of Magnetism. In H. Kronmüller and S. Parkin, editors, *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*, chapter 1, pages 95–148. John Wiley & Sons, Ltd, 2007.

[104] A. C. Hewson. *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, volume 2 of *Cambridge Studies in Magnetism*. Cambridge University Press, Cambridge, 1993.

[105] M. A. Blachly and N. Giordano. Kondo effect in one-dimensional $Au(Fe)$. *Phys. Rev. B*, 46:2951–2957, 1992.

[106] X. Hong, F. Cagliulis, R. Kappenberger, S. Wurmehl, S. Aswartham, F. Scaravaggi, P. Lepucki, A. U. B. Wolter, H.-J. Grafe, B. Büchner, and C. Hess. Evolution of the Nematic Susceptibility in $LaFe_{1-x}Co_xAsO$. *Phys. Rev. Lett.*, 125:067001, 2020.

[107] K. Ishida, M. Tsujii, S. Hosoi, Y. Mizukami, S. Ishida, A. Iyo, H. Eisaki, T. Wolf, K. Gruber, H. v. Löhneysen, R. M. Fernandes, and T. Shibauchi. Novel electronic nematicity in heavily hole-doped iron pnictide superconductors. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 117(12):6424–6429, 2020.

[108] H.-H. Kuo, M. C. Shapiro, S. C. Riggs, and I. R. Fisher. Measurement of the elastoresistivity coefficients of the underdoped iron arsenide $Ba(Fe_{0.975}Co_{0.025})_2As_2$. *Phys. Rev. B*, 88:085113, 2013.

[109] H.-H. Kuo, J.-H. Chu, J. C. Palmstrom, S. A. Kivelson, and I. R. Fisher. Ubiquitous signatures of nematic quantum criticality in optimally doped Fe-based superconductors. *Science*, 352(6288):958–962, 2016.

[110] J.-H. Chu. *BROCKEN ROTATIONAL SYMMETRY IN IRON BASED SUPERCONDUCTORS*. Ph.d. thesis, Stanford University, 2012.

[111] S. Lederer, Y. Schattner, E. Berg, and S. A. Kivelson. Enhancement of Superconductivity near a Nematic Quantum Critical Point. *Phys. Rev. Lett.*, 114:097001, 2015.

[112] A. V. Chubukov, A. Abanov, Y. Wang, and Y.-M. Wu. The interplay between superconductivity and non-Fermi liquid at a quantum-critical point in a metal. *Annals of Physics*, 417:168142, 2020.

[113] D. Labat and I. Paul. Pairing instability near a lattice-influenced nematic quantum critical point. *Phys. Rev. B*, 96:195146, 2017.

[114] W. Metzner, D. Rohe, and S. Andergassen. Soft Fermi Surfaces and Breakdown of Fermi-Liquid Behavior. *Phys. Rev. Lett.*, 91:066402, 2003.

[115] M. A. Metlitski and S. Sachdev. Quantum phase transitions of metals in two spatial dimensions. I. Ising-nematic order. *Phys. Rev. B*, 82:075127, 2010.

[116] W.-C. Lee and P. W. Phillips. Non-Fermi liquid due to orbital fluctuations in iron pnictide superconductors. *Phys. Rev. B*, 86:245113, 2012.

[117] T. Shibauchi, A. Carrington, and Y. Matsuda. A Quantum Critical Point Lying Beneath the Superconducting Dome in Iron Pnictides. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 5(Volume 5, 2014):113–135, 2014.

[118] J. G. Analytis, H.-H. Kuo, R. D. McDonald, M. Wartenbe, P. M. C. Rourke, N. E. Hussey, and I. R. Fisher. Transport near a quantum critical point in $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$. *Nature Physics*, 10(3):194–197, 2014.

[119] S. Licciardello, J. Buhot, J. Lu, J. Ayres, S. Kasahara, Y. Matsuda, T. Shibauchi, and N. E. Hussey. Electrical resistivity across a nematic quantum critical point. *Nature*, 567(7747):213–217, 2019.

[120] X. Hong, S. Sykora, F. Caglieris, M. Behnami, I. Morozov, S. Aswartham, V. Grinenko, K. Kihou, C.-H. Lee, B. Büchner, and C. Hess. Elastoresistivity of Heavily Hole-Doped 122 Iron Pnictide Superconductors. *Frontiers in Physics*, 10, 2022.

[121] R. M. Fernandes, L. H. VanBebber, S. Bhattacharya, P. Chandra, V. Keppens, D. Mandrus, M. A. McGuire, B. C. Sales, A. S. Sefat, and J. Schmalian. Effects of Nematic Fluctuations on the Elastic Properties of Iron Arsenide Superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 105:157003, 2010.

[122] P. Wiecki, A.-A. Haghaghirad, F. Weber, M. Merz, R. Heid, and A. E. Böhmer. Dominant In-Plane Symmetric Elastoresistance in CsFe_2As_2 . *Phys. Rev. Lett.*, 125:187001, 2020.

[123] P. Wiecki, M. Frachet, A.-A. Haghaghirad, T. Wolf, C. Meingast, R. Heid, and A. E. Böhmer. Emerging symmetric strain response and weakening nematic fluctuations in strongly hole-doped iron-based superconductors. *Nature Communications*, 12(1):4824, 2021.

[124] K. Kihou, T. Saito, K. Fujita, S. Ishida, M. Nakajima, K. Horigane, H. Fukazawa, Y. Kohori, S. Uchida, J. Akimitsu, A. Iyo, C.-H. Lee, and H. Eisaki. Single-Crystal Growth of $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ by KAs Self-Flux Method. *Journal of the Physical Society of Japan*, 85(3):034718, 2016.

[125] CRC Handbook. *CRC Handbook of Chemistry and Physics, 88th Edition*. CRC Press, 88 edition, 2007.

[126] C. Hess. *Thermischer Transport in Übergangsmetalloxiden mit niedrigdimensionalen Ladungs- und Spinstrukturen*. Dissertation, Universität zu Köln, 2002.

[127] Lake Shore Cryotronics, Inc. *Cernox RTDs Temperature Sensors*. Technical datasheet.

[128] Lake Shore Cryotronics, Inc. *Users Manual Model 340 Temperature Controller*. Lake Shore Cryotronics, Westerville, OH, USA, 2009. Rev. 3.3.

[129] Keithley Instruments. Series 2400 SourceMeter User's Manual, 2011.

[130] Keithley Instruments. Model 2182A Nanovoltmeter User's Manual, 2017.

[131] Vishay Precision Group (VPG), Micro-Measurements. *Linear Patterns-Single Grid*, 2021.

[132] T. Terashima, Y. Matsushita, H. Yamase, N. Kikugawa, H. Abe, M. Imai, S. Uji, S. Ishida, H. Eisaki, A. Iyo, K. Kihou, C.-H. Lee, T. Wang, and G. Mu. Elastoresistance measurements on $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$ and $\text{KCa}_2\text{Fe}_4\text{As}_4\text{F}_2$ with the Fe site of C_{2v} symmetry. *Phys. Rev. B*, 102:054511, 2020.

[133] S. Avci, O. Chmaissem, E. A. Goremychkin, S. Rosenkranz, J.-P. Castellan, D. Y. Chung, I. S. Todorov, J. A. Schlueter, H. Claus, M. G. Kanatzidis, A. Daoud-Aladine, D. Khalyavin, and R. Osborn. Magnetoelastic coupling in the phase diagram of $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ as seen via neutron diffraction. *Phys. Rev. B*, 83:172503, 2011.

[134] D. Johrendt and R. Pöttgen. Superconductivity, magnetism and crystal chemistry of $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$. *Physica C: Superconductivity*, 469(9):332–339, 2009.

[135] Y. P. Wu, D. Zhao, A. F. Wang, N. Z. Wang, Z. J. Xiang, X. G. Luo, T. Wu, and X. H. Chen. Emergent Kondo Lattice Behavior in Iron-Based Superconductors AFe_2As_2 ($\text{A}=\text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$). *Phys. Rev. Lett.*, 116:147001, 2016.

[136] M. Yi, Y. Zhang, Z.-X. Shen, and D. Lu. Role of the orbital degree of freedom in iron-based superconductors. *npj Quantum Materials*, 2(1):57, 2017.

[137] S. Sykora, A. Hübsch, and K. W. Becker. Generalized diagonalization scheme for many-particle systems. *Phys. Rev. B*, 102:165122, 2020.

[138] T. Böhm, F. Kretzschmar, A. Baum, M. Rehm, D. Jost, R. Hosseinian Ahangharnejhad, R. Thomale, C. Platt, T. A. Maier, W. Hanke, B. Moritz, T. P. Devereaux, D. J. Scalapino, S. Maiti, P. J. Hirschfeld, P. Adelmann, T. Wolf, H.-H. Wen, and R. Hackl. Microscopic origin of Cooper pairing in the iron-based superconductor $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$. *npj Quantum Materials*, 3(1):48, 2018.

[139] V. Grinenko, D. Eston, F. Caglieris, C. Wuttke, C. Hess, T. Gottschall, I. Maccari, D. Gorbunov, S. Zherlitsyn, J. Wosnitza, A. Rydh, K. Kihou, C.-H. Lee, R. Sarkar, S. Dengre, J. Garaud, A. Charnukha, R. Hühne, K. Nielsch, B. Büchner, H.-H. Klauss, and E. Babaev. State with spontaneously broken time-reversal symmetry above the superconducting phase transition. *Nature Physics*, 17(11):1254–1259, 2021.

[140] M. Smidman, O. Stockert, E. M. Nica, Y. Liu, H. Yuan, Q. Si, and F. Steglich. Colloquium: Unconventional fully gapped superconductivity in the heavy-fermion metal CeCu_2Si_2 . *Rev. Mod. Phys.*, 95:031002, 2023.

[141] E. R. Schemm, W. J. Gannon, C. M. Wishne, W. P. Halperin, and A. Kapitulnik. Observation of broken time-reversal symmetry in the heavy-fermion superconductor UPt_3 . *Science*, 345(6193):190–193, 2014.

[142] W. Simeth, Z. Wang, E. A. Ghioldi, D. M. Fobes, A. Podlesnyak, N. H. Sung, E. D. Bauer, J. Lass, S. Flury, J. Vonka, D. G. Mazzone, C. Niedermayer, Yusuke Nomura, Ryotaro Arita, C. D. Batista, F. Ronning, and M. Janoschek. A microscopic Kondo lattice model for the heavy fermion antiferromagnet CeIn_3 . *Nature Communications*, 14(1):8239, 2023.

[143] E. Schuberth, S. Wirth, and F. Steglich. Nuclear-Order-Induced Quantum Criticality and Heavy-Fermion Superconductivity at Ultra-low Temperatures in YbRh_2Si_2 . *Frontiers in Electronic Materials*, Volume 2 - 2022, 2022.

[144] K. Horigane, K. Kihou, K. Fujita, R. Kajimoto, K. Ikeuchi, S. Ji, J. Akimitsu, and C. H. Lee. Spin excitations in hole-overdoped iron-based superconductors. *Scientific Reports*, 6(1):33303, 2016.

[145] M. Tsujii, K. Ishida, S. Ishida, Y. Mizukami, A. Iyo, H. Eisaki, and T. Shibauchi. Charge Transport in $\text{Ba}_{1-x}\text{Rb}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ Single Crystals. *Journal of the Physical Society of Japan*, 91(10):104706, 2022.

[146] S. Peschke, T. Stürzer, and D. Johrendt. $\text{Ba}_{1-x}\text{Rb}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ and generic phase behavior of hole-doped 122-type superconductors. *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 640(5):830–835, 2014.

[147] N. Shirakawa, K. Murata, S. Nishizaki, Y. Maeno, and T. Fujita. Pressure dependence of superconducting critical temperature of Sr_2RuO_4 . *Phys. Rev. B*, 56:7890–7893, 1997.

[148] C. W. Hicks, D. O. Brodsky, E. A. Yelland, A. S. Gibbs, J. A. N. Bruin, M. E. Barber, S. D. Edkins, K. Nishimura, S. Yonezawa, Y. Maeno, and A. P. Mackenzie. Strong Increase of T_c of Sr_2RuO_4 Under Both Tensile and Compressive Strain. *Science*, 344(6181):283–285, 2014.

[149] Taniguchi ,H. and Nishimura ,K. and Goh ,S. K. and Yonezawa ,S. and Maeno ,Y. Higher- T_c superconducting phase in Sr_2RuO_4 induced by in-plane uniaxial pressure. *Journal of the Physical Society of Japan*, 84(1):014707, 2015.

[150] S. Sadewasser, J. S. Schilling, A. P. Paulikas, and B. W. Veal. Pressure dependence of T_c to 17 GPa with and without relaxation effects in superconducting $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$. *Phys. Rev. B*, 61:741–749, 2000.

[151] H.-H. Kim, S. M. Souliou, M. E. Barber, E. Lefrançois, M. Minola, M. Tortora, R. Heid, N. Nandi, R. A. Borzi, G. Garbarino, A. Bosak, J. Porras, T. Loew, M. König, P. J. W. Moll, A. P. Mackenzie, B. Keimer, C. W. Hicks, and M. Le Tacon. Uniaxial pressure control of competing orders in a high-temperature superconductor. *Science*, 362(6418):1040–1044, 2018.

[152] C. Dhital, Z. Yamani, W. Tian, J. Zeretsky, A. S. Sefat, Z. Wang, R. J. Birgeneau, and S. D. Wilson. Effect of Uniaxial Strain on the Structural and Magnetic Phase Transitions in BaFe_2As_2 . *Phys. Rev. Lett.*, 108:087001, 2012.

[153] X. Ren, L. Duan, Y. Hu, J. Li, R. Zhang, H. Luo, P. Dai, and Y. Li. Nematic Crossover in BaFe_2As_2 under Uniaxial Stress. *Phys. Rev. Lett.*, 115:197002, 2015.

[154] L. Degiorgi. Optical Fingerprints of Nematicity in Iron-Based Superconductors. *Frontiers in Physics*, 10, 2022.

[155] H. J. Conley, B. Wang, J. I. Ziegler, R. F. Haglund Jr., S. T. Pantelides, and K. I. Bolotin. Bandgap Engineering of Strained Monolayer and Bilayer MoS_2 . *Nano Letters*, 13(8):3626–3630, 2013.

[156] T. M. G. Mohiuddin, A. Lombardo, R. R. Nair, A. Bonetti, G. Savini, R. Jalil, N. Bonini, D. M. Basko, C. Galiotis, N. Marzari, K. S. Novoselov, A. K. Geim, and A. C. Ferrari. Uniaxial strain in graphene by Raman spectroscopy: G peak splitting, Grüneisen parameters, and sample orientation. *Phys. Rev. B*, 79:205433, 2009.

[157] C. W. Hicks, M. E. Barber, S. D. Edkins, D. O. Brodsky, and A. P. Mackenzie. Piezoelectric-based apparatus for strain tuning. *Review of Scientific Instruments*, 85(6):065003, 2014.

[158] F. Eder. *Arbeitsmethoden der Thermodynamik*. Springer Berlin, Heidelberg, 1983.

[159] W. Martienssen and H. Warlimont. *Springer Handbook of Condensed Matter and Materials Data: CD-ROM*. Springer Handbook of Condensed Matter and Materials Data. Springer, 2005.

- [160] W.D. Callister and D.G. Rethwisch. *Materials Science and Engineering*. Wiley, 2014.
- [161] G. White and P. Meeson. *Experimental Techniques in Low-Temperature Physics: Fourth Edition*. Monographs on the Physics and Chemistry of Materials. OUP Oxford, 2002.
- [162] J. R. Howell, M. Pinar Mengüç, and R. Siegel. *Thermal Radiation Heat Transfer*. CRC Press, 5 edition, 2010.
- [163] J. Lunze. *Regelungstechnik 1: Systemtheoretische Grundlagen, Analyse und Entwurf einschleifiger Regelungen*. Springer Vieweg, Berlin, Heidelberg, 12 edition, 2020.
- [164] C. Hess. Persönliche Mitteilung zur maximal tolerierbaren Leckrate in Vakuumsystemen, 2025. Bergische Universität Wuppertal.
- [165] A. M. Simpson and W. Wolfs. Thermal expansion and piezoelectric response of PZT Channel 5800 for use in low-temperature scanning tunneling microscope designs. *Review of Scientific Instruments*, 58(11):2193–2195, 1987.
- [166] PI Ceramic GmbH. PI Ceramic Material Data, 2024. Materialdatenblatt, Stand August 2024.
- [167] C. Leyens and M. Peters. *Titanium and Titanium Alloys*. John Wiley & Sons, Ltd, 2003.
- [168] Micro-Epsilon Messtechnik GmbH & Co. KG. *capaNCDT – Kapazitive Sensoren für Weg, Abstand und Position*. Micro-Epsilon Messtechnik GmbH & Co. KG, Ortenburg, Germany, 2024.
- [169] Dassault Systèmes. *Abaqus 2022 Documentation*. Dassault Systèmes Simulia Corp., Providence, RI, USA, 2022.
- [170] J. Sauter and N. Wingerter. Neue und alte statische Festigkeitshypothesen. Technical Report 191, VDI Verlag, 1990.
- [171] W. Weißbach, M. Dahms, and C. Jaroschek. *Werkstoffkunde: Strukturen, Eigenschaften, Prüfung*. Springer Vieweg, Berlin, 19 edition, 2015.
- [172] X. Zhou, S. Wu, X. Wang, Z. Wang, Q. Zhu, J. Sun, P. Huang, X. Wang, W. Huang, and Q. Lu. Review on piezoelectric actuators: materials, classifications, applications, and recent trends. *Frontiers of Mechanical Engineering*, 19(1):6, 2024.
- [173] M. H. Hablanian. *High-Vacuum Technology: A Practical Guide*. Routledge, 2nd edition, 1997.
- [174] T. Liang, M. Nakajima, K. Kihou, Y. Tomioka, T. Ito, C.H. Lee, H. Kito, A. Iyo, H. Eisaki, T. Kakeshita, and S. Uchida. Effects of uniaxial pressure and annealing on the resistivity of $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 72(5):418–419, 2011.
- [175] M. S. Ikeda, J. A. W. Straquadine, A. T. Hristov, T. Worasaran, J. C. Palmstrom, M. Sorensen, P. Walmsley, and I. R. Fisher. AC elastocaloric effect as a probe for thermodynamic signatures of continuous phase transitions. *Review of Scientific Instruments*, 90(8):083902, 2019.
- [176] H. Ossmer, F. Lambrecht, M. Gültig, C. Chluba, E. Quandt, and M. Kohl. Evolution of temperature profiles in TiNi films for elastocaloric cooling. *Acta Materialia*, 81:9–20, 2014.

- [177] E. Bonnot, R. Romero, L. Mañosa, E. Vives, and A. Planes. Elastocaloric Effect Associated with the Martensitic Transition in Shape-Memory Alloys. *Phys. Rev. Lett.*, 100:125901, 2008.
- [178] L. Ye, Y. Sun, V. Sunko, J. F. Rodriguez-Nieva, M. S. Ikeda, T. Worasaran, M. E. Sorensen, M. D. Bachmann, J. Orenstein, and I. R. Fisher. Elastocaloric signatures of symmetric and antisymmetric strain-tuning of quadrupolar and magnetic phases in DyB_2C_2 . *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 120(35):e2302800120, 2023.

Publikationsliste

- [1] **F. Eckelt**, I. Cavallaro, R. Wagner, A.-A. Haghimirad, T. Wolf, J. Wilmers, S. Bargmann und C. Hess, A Cryogenic Uniaxial Strain Cell for Strain-Dependent Measurements, *AIP Advances* **15**, 125015 (2025). DOI: 10.1063/5.0291096. URL: <https://doi.org/10.1063/5.0291096>.
- [2] **F. Eckelt**, S. Sykora, X. Hong, V. Koscis, V. Grinenko, B. Büchner, K. Kihou, C.-H. Lee und C. Hess, Nematic Fluctuations and Electronic Correlations in Heavily Hole-Doped $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ Probed by Elastoresistance, *arXiv:2510.09151*, 2025. URL: <https://arxiv.org/abs/2510.09151>.

Danksagung

An erster Stelle gilt mein besonderer Dank Prof. Dr. Christian Hemker-Heß für die Möglichkeit, an seinem Lehrstuhl mit diesem interessanten und aktuellen Forschungsthema zu promovieren. Die fachliche Betreuung, die Unterstützung und das mir entgegengebrachte Vertrauen habe ich sehr geschätzt.

Prof. Dr. Dirk Lützenkirchen-Hecht danke ich für die langjährige fachliche Begleitung während meiner Studienzeit und die Übernahme des Zweitgutachtens. Die hilfreichen Gespräche sowie die stets offene Tür waren mir eine große Hilfe.

Ich danke darüber hinaus Prof. Dr. Aixer und Prof. Dr. Klümper für ihre Zeit und ihr Engagement in der Prüfungskommission sowie für die hilfreichen Rückmeldungen.

Mein besonderer Dank gilt außerdem Dr. Xiaochen Hong, der mich mit seiner fachlichen Expertise und großer Geduld in die Durchführung von Elastowiderstandsmessungen eingearbeitet hat. Von der Kontaktierung der Proben über die Bedienung der Messprogramme bis zur Unterstützung während der Messreihen stand er mir stets zur Seite.

Für die Bereitstellung der verschiedenen Proben möchte ich mich bei Kunihiro Kihou, Chul-Ho Lee, Vadim Grinenko und Amir-Abbas Haghaghirad bedanken.

Prof. Dr. Jana Wilmers danke ich für ihre Unterstützung bei der Durchführung der Finite-Elemente-Analyse.

Für die theoretischen Berechnungen zu den Elastowiderstandsmessungen sowie die hilfreichen fachlichen Diskussionen danke ich Dr. Steffen Sykora.

Für die Fertigung der zahlreichen Bauteile, die für den Aufbau des Messstabs und der Dehnungszelle erforderlich waren, möchte ich mich herzlich bei allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern der feinmechanischen Werkstatt der Universität Wuppertal, insbesondere bei Isidoro Cavallaro, bedanken. Die vielen Gespräche, die fachkundige Beratung zu den unterschiedlichsten Fertigungstechniken und Materialien und die Geduld bei den zahlreichen Lötversuchen haben wesentlich zum Gelingen des Versuchsaufbaus beigetragen.

Bei Jan Lino Kricke möchte ich mich für die Hilfe bei der Durchführung der Zugversuche an den Piezoaktuatoren bedanken.

Für die Möglichkeit, meine Messungen am Leibniz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung (IFW) Dresden durchführen zu können, danke ich Prof. Dr. Bernd Büchner. Mein besonderer Dank gilt außerdem allen Mitgliedern der Gruppe „Thermal Transport“. Insbesondere danke ich Dr. Vilmos Kocsis für die Unterstützung während meiner Messaufenthalte und die Möglichkeit, in seinem Labor arbeiten zu dürfen. Zudem danke ich Christian Blum für die Hilfe bei der Orientierung der Kristalle. Für ihre technische Hilfe bedanke ich mich bei Dr. Danny Baumann und Tino Schreiner. Darüber hinaus danke ich Dr. Sebastian Schimmel und Julia Besproswanny für den fachlichen Austausch während meiner Zeit am IFW.

Für die Unterstützung bei meiner Arbeit im Labor in Wuppertal möchte ich mich bei allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe „Experimentelle Festkörperphysik“ bedanken, insbesondere bei Ralph Wagner, Dr. Benjamin Bornmann und Birit Fiebig.

Ein besonderer Dank gilt Florian, Freddy, Lena und Lukas für ihre vielseitige Unterstützung und die schöne gemeinsame Zeit während der Promotion. Unsere gemeinsamen Mittagessen, die regelmäßigen Spaziergänge zur Baustelle von Gebäude X und die Messzeiten am DESY gehören zu den Momenten, die mir besonders in Erinnerung bleiben und die diese Zeit für mich sehr bereichert haben.

Darüber hinaus danke ich allen Mitgliedern des MSC Gevelsberg e.V. für den Ausgleich zum Promotionsalltag und die vielen Momente abseits der Universität.

Ein ganz besonderer Dank gilt meinen Eltern Regina und Michael sowie meinen Geschwistern Paul und Carla. Durch ihre ständige Unterstützung und Aufmunterung haben sie mir stets den Rücken gestärkt. Mein größter Dank gilt meiner Verlobten Miriam, deren Bedeutung für mich in dieser Zeit größer ist, als Worte ausdrücken können.