

Leitende Oberflächen mit exotischen Eigenschaften

Topologische Isolatoren

PASCAL GEHRING | MARKO BURGHARD

Eine neue Materialklasse besitzt ein elektrisch isolierendes Inneres und zugleich leitfähige Oberflächen mit außergewöhnlichen Eigenschaften: Topologische Isolatoren versprechen interessante Anwendungen in der Quanteninformationsspeicherung und der Spintronik. Sogar in der Natur kann man sie entdecken.

In einem einzelnen Atom sind die Elektronen fest an den Atomkern gebunden und besetzen verschiedene Atomorbitale mit verschiedenen Energien. Bringt man ein zweites Atom in die Nähe des ersten Atoms, so können deren äußere Orbitale konstruktiv oder destruktiv überlappen, wodurch bindende oder antibindende Molekülorbitale entstehen. Dieses Spiel kann man nun mit beliebig vielen weiteren Atomen wiederholen. Dabei steuert jedes zusätzliche Atom ein weiteres Molekülorbital bei. Bei einer hinreichend großen Anzahl an Atomen besitzt das Ensemble so viele energetisch nah beieinander liegende Zustände, dass man von einem Kontinuum oder auch einem Energieband spricht.

Die genaue Form (Dispersion) und Besetzung dieser Bänder mit Elektronen bestimmt die elektronischen Eigenschaften fester Materie. Grundsätzlich hilft das einfache Bild eines energetisch tiefer liegenden Valenzbandes, das durch eine den Ladungsträgern verbotene Zone, die Bandlücke, von einem höher liegenden Leitungsband getrennt ist. Dies gestattet eine Klassifizierung in Metalle, bei denen sich immer frei bewegliche Elektronen im Leitungsband befinden, in Halbleiter, bei denen die Elektronen erst zum Sprung über die Bandlücke angeregt werden müssen, sowie Isolatoren, bei denen diese Bandlücke dafür zu groß ist.

Über lange Zeit hinweg war man in der Festkörperphysik davon überzeugt, dem isolierenden Zustand fester Materie alle Geheimnisse entlockt zu haben. Die Entdeckung topologischer Isolatoren im Jahr 2008 hat jedoch gezeigt, dass man dieses einfache Bild erweitern muss [1]. Ein topologischer Isolator ist ein Material, das den elektrischen Strom nur an seiner Oberfläche leitet, während sein Inneres ein Isolator ist. Man könnte sich das vereinfacht wie ein mit Alufolie umwickeltes Stück Holz vorstellen, nur dass ein topologischer Isolator diese Eigenschaft von sich aus zeigt.

Doch das ist noch nicht alles: Ein topologischer Isolator orientiert den Spin – also das magnetische Moment – aller Elektronen, die sich auf seiner Oberfläche bewegen. Genauer gesagt ist die Ausrichtung des Spins der Elektronen an ihre Bewegungsrichtung gekoppelt. Ein Elektron, das sich von links nach rechts bewegt, hat also den genau entgegengesetzten Spin eines Elektrons, welches sich von rechts nach links bewegt.

Diese Verknüpfung hat sehr nützliche Konsequenzen. Würde ein Elektron mit einer unmagnetischen Verunreinigung im Material zusammenstoßen, so wäre eine Rück-



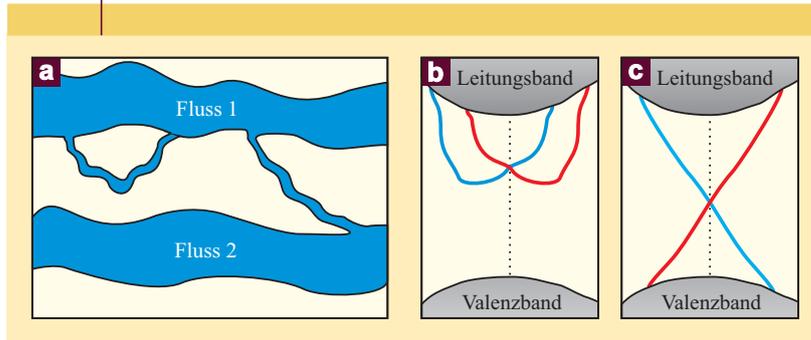
streuung, also quasi eine Kehrtwende, unmöglich. Bei dieser müsste nämlich der Spin umklappen, was jedoch bei diesen Materialien bei einem einfachen Zusammenstoß nicht möglich ist. Die unterbundene Rückstreuung führt dazu, dass der elektrische Transport auf der Oberfläche von topologischen Isolatoren nahezu verlustfrei ist. Diese Eigenschaft bietet wichtige Vorteile für alle Anwendungen, in denen ein ungestörter Ladungstransport über möglichst große Wegstrecken erforderlich ist.

Exotische Oberflächenzustände

Nun stellt sich die Frage, was der Ursprung dieser exotischen Oberflächenkanäle ist. Obige Betrachtung der Bandstruktur beschreibt „physikalische“, also unendlich ausgedehnte, Kristalle. Bricht man jedoch die Translationssymmetrie des Systems und macht es endlich, etwa durch

Topologische Isolatoren haben ihren Namen von ihren topologischen Eigenschaften. Ein Apfel hat kein Loch und unterscheidet sich damit von Kaffeetasse und Donut, die mit jeweils einem Loch gleiche Topologie besitzen, sowie einer Brezel mit drei Löchern (Foto: C.-M. Müller).

ABB. 1 | MÖGLICHE OBERFLÄCHENZUSTÄNDE



a) Die zwei möglichen Verläufe von Seitenarmen zwischen den großen Flüssen 1 und 2: Nur der beide Flüsse verbindende Seitenarm ist robust gegenüber jeglicher Art von Störungen oder Verzerrungen des Systems. b) Trivialer Isolator: Die Oberflächenzustände einer Spinsorte beginnen und enden im selben Volumenband, hier dem Leitungsband; rot: Spin up, blau: Spin down, gestrichelte Linie: $k = 0$. c) Topologischer Isolator: Die Oberflächenzustände verbinden das Volumenleitungs- mit dem Volumenvalenzband. Wie im Beispiel der Flüsse können die Oberflächenzustände nie durch kontinuierliche Veränderungen der Energielandschaft des Systems aus der Bandlücke geschoben werden.

Schaffen einer Oberfläche, so bilden sich meist Zustände aus, in denen die Elektronen nahe der Oberfläche lokalisiert sind, sogenannte Oberflächenzustände. Typischerweise überlappen diese Zustände mit Volumenzuständen gleicher Energie, so dass man Oberflächen- von Volumenzuständen nicht mehr unterscheiden kann.

In Isolatoren oder Halbleitern können solche Zustände jedoch in die Bandlücke des Materials hineinreichen. Vereinfacht bedeutet dies, dass die Oberflächenzustände in einem Band beginnen, dann beliebig dispergieren, um schließlich wieder in einem Band zu enden. Veranschaulichen kann man dieses Verhalten, indem man die Volumenbänder als zwei parallel fließende Flüsse 1 und 2 betrachtet (Abbildung 1a). Im Prinzip gibt es nur zwei Möglichkeiten, wie kleine Seitenarme der Flüsse verlaufen können, wenn diese in einem großen Fluss beginnen und enden sollen. Einerseits kann ein Seitenarm in dem Fluss enden, dem er entspringt, andererseits kann er beispielsweise Fluss 1 entspringen und in Fluss 2 enden.

Lässt man nun zu, dass externe Parameter wie die Topographie der Landschaft variieren, so werden von Zeit zu Zeit die beiden kleinen Seitenarme der Flüsse etwas anders verlaufen. Der Verlauf des Seitenarms zum Beispiel von Fluss 1, der auch wieder in Fluss 1 endet, könnte sich dabei so stark ändern, dass er gänzlich aus der Lücke zwischen den beiden großen Flüssen gedrängt wird und in Fluss 1 verschwindet. Bei einem Seitenarm jedoch, der Fluss 1 mit Fluss 2 verbindet, kann dieser Fall grundsätzlich nicht eintreten. Anders ausgedrückt ist dieser Seitenarm robust gegenüber jeglichen gleichmäßigen Änderungen der Landschaft und kann somit nicht aus der Lücke zwischen den beiden Flüssen gedrängt werden.

Um unser Flussmodell nun auf topologische Isolatoren anwenden zu können, benötigen wir noch zwei weitere Zu-

taten, nämlich die Zeitumkehrsymmetrie und die Spin-Bahn-Kopplung. Erstere beschreibt veranschaulicht den Effekt, den das Drücken der Rücklauffaste auf die physikalischen Eigenschaften eines solchen Systems hat. Ein Elektron, das sich vorher in Richtung des Wellenvektors $+\mathbf{k}$ bewegt hat, wird sich danach in Richtung $-\mathbf{k}$ bewegen. Zugleich wird sich auch der Eigendrehimpuls des Elektrons, sein Spin, umkehren. Daher folgt für die Energie der Elektronen in einem zeitumkehrsymmetrischen System:

$$E(\mathbf{k}, \uparrow) = E(-\mathbf{k}, \downarrow). \quad (1)$$

Diese Gleichung folgt direkt aus dem sogenannten Kramers-Theorem, wonach jeder Zustand eines zeitumkehrsymmetrischen Systems mindestens zweifach entartet sein muss. Für „normale“ Materialien hat diese Forderung keine Auswirkung, da jeder elektronische Zustand zweifach entartet ist: Spin-up und Spin-down besitzen dieselbe Energie.

Ganz anders ist die Situation bei Festkörpern, die aus schweren Atomen bestehen. Hier kann das enorme Kernpotential die Elektronen auf so hohe, relativistische Geschwindigkeiten beschleunigen, dass der resultierende Bahndrehimpuls groß genug wird, um mit den Spins der Elektronen zu koppeln. Zeigen dabei der Spin des Elektrons und der Bahndrehimpuls in dieselbe Richtung, ist es energetisch günstiger als im umgekehrten Fall. Diese Spin-Bahn-Wechselwirkung hebt folglich die Entartung der Spin-up- und Spin-down-Zustände auf. Da Gleichung (1) nach wie vor erfüllt sein muss, sollte es jedoch für jedes Elektron, das sich in Richtung $+\mathbf{k}$ mit einer bestimmten Spinorientierung bewegt, einen weiteren Zustand bei $-\mathbf{k}$ mit entgegengesetztem Spin geben. Das ist in topologischen Isolatoren tatsächlich der Fall.

Nun können wir unser Bild der beiden Flüsse anwenden. Analog zu Abbildung 1a veranschaulicht es zunächst einen wichtigen Sachverhalt. So wie die kleinen Seitenarme nur auf zwei mögliche Weisen zwischen den Flüssen verlaufen können, gibt es auch nur zwei grundsätzliche Möglichkeiten, wie Oberflächenzustände innerhalb der Bandlücke des Volumenmaterials verlaufen können, wenn sie in dessen Bändern starten und enden sollen. Ein möglicher Fall ist in Abbildung 1b gezeigt. Das rote Spin-up-Oberflächenband startet und endet im Leitungsband und zeigt eine „parabolische“ Dispersion. Um Gleichung (1) zu erfüllen, kann die rote Parabel an $\mathbf{k} = 0$ gespiegelt werden, um die zugehörige Spin-down-Parabel (blau) zu erhalten. Abbildung 1c zeigt die zweite Möglichkeit, bei der das Oberflächenband mit Spin-up-Orientierung im Leitungsband startet und im Valenzband endet. Auch hier wurde das zugehörige Spin-down-Band durch Spiegelung an $\mathbf{k} = 0$ konstruiert.

Auf entsprechende Weise erhält man die zwei grundsätzlichen Arten von Oberflächenzuständen in einem isolierenden Material mit sowohl Zeitumkehrsymmetrie als auch starker Spin-Bahn-Wechselwirkung. Wie im Beispiel der Flüsse ist der Fall in Abbildung 1b „trivial“, da die Oberflächenzustände durch gleichmäßige Änderungen der Ener-

gielandschaft aus der Bandlücke geschoben werden könnten, woraus ein herkömmlicher Isolator resultieren würde. Abbildung 1c zeigt hingegen die nichttrivialen Zustände eines topologischen Isolators. Dieser zeichnet sich durch spinpolarisierte lineare Energiebänder, sogenannte Dirac-Zustände, auf der Oberfläche des Materials aus. Sie haben die faszinierende Eigenart, dass weder unmagnetische Verunreinigungen noch sonstige Deformationen der Energielandschaft des Systems sie zerstören können. Nur magnetische Verunreinigungen, die lokal die Spinorientierung der Elektronen verändern, können sich zerstörerisch auswirken.

Die Rolle der Topologie

Nun kennen wir die grundlegenden physikalischen Eigenschaften topologischer Isolatoren. Aber welche Materialien sind topologische und welche triviale Isolatoren? Dieser kleine aber feine Unterschied wird einzig durch die Topologie der Bandstruktur bestimmt, daher auch der Name dieser Materialklasse.

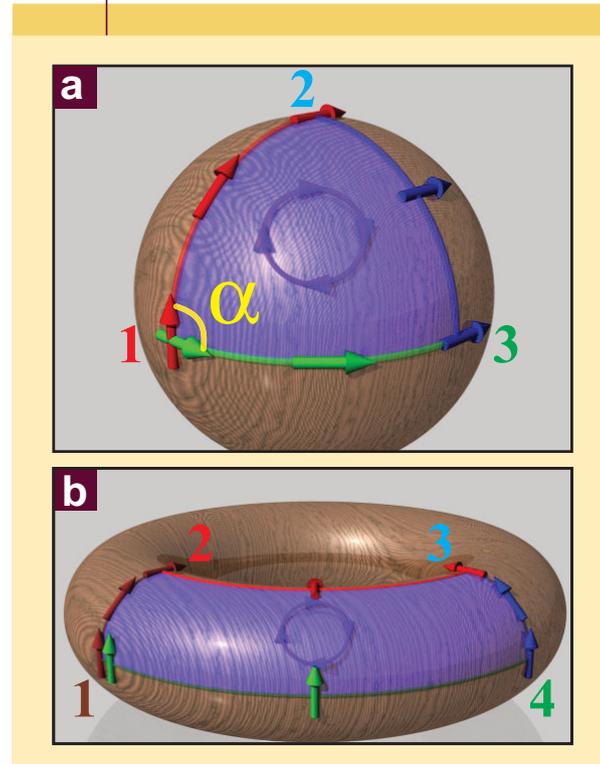
Die Topologie ist ein Bereich der Mathematik, der sich mit stetiger Deformation von Objekten befasst. Sie beschreibt Objekte durch eine Euler-Charakteristik $\chi = 2 - 2g$, wobei g die Zahl der Löcher im Objekt angibt. Körper mit gleicher Euler-Charakteristik haben die gleiche Topologie, sind damit homöomorph und können stetig ineinander überführt werden. Es ist zum Beispiel möglich, einen Würfel durch stetige Deformation in eine Kugel zu verwandeln. Ebenso kann eine Kaffeetasse durch „Auffüllen“ und Verformen in ein Donut verwandelt werden, da beide die gleiche Zahl an Löchern besitzen ($g = 1$). In der Abbildung auf S. 299 sind einige Objekte mit verschiedener Topologie zusammengestellt: Ein Apfel hat keine Löcher ($g = 0$), Donut und Kaffeetasse besitzen jeweils ein Loch ($g = 1$) und eine Brezel drei Löcher ($g = 3$).

Die Topologie eines Objekts hat interessante Konsequenzen für den Paralleltransport von Vektoren auf dessen Oberfläche. Transportiert man beispielsweise in Abbildung 2a einen Pfeil entlang des geschlossenen Pfades 1-2-3-1 auf einer Kugeloberfläche, so wird er nach einer Runde in eine andere Richtung zeigen als anfangs. Er hat eine sogenannte geometrische Phase oder auch Berry-Phase aufgenommen. Wiederholt man das gleiche Gedankenexperiment für einen geschlossenen Pfad auf einem Donut, ändert sich die Richtung des Pfeils nicht (Pfad 1-2-3-4-1 in Abbildung 2b). Der Zusammenhang zwischen der geometrischen Phase und der Topologie ist durch den berühmten Satz von Gauß-Bonnet gegeben:

$$\gamma = \int_S K \, dA = 2\pi\chi. \quad (2)$$

Er besagt einerseits, dass die geometrische Phase γ dem Integral der lokalen Krümmung K des Flächenstücks dA über die gesamte Oberfläche S entspricht. Andererseits ist dieses Integral für eine abgeschlossene Fläche – unabhängig von ihrer genauen Form – eindeutig durch die Euler-Charakteristik χ gegeben. Anschaulich zeigt Abbildung 2a diesen Zusammenhang: Umkreist der Pfeil ein Achtel der Kugeloberfläche, so dreht er sich um $\pi/2$. Für die gesamte Kugeloberfläche folgt somit eine geometrische Phase von $8(\pi/2) = 4\pi$. Dieses Ergebnis hätte man auch direkt mit Hilfe von Gleichung (2) berechnen können, da für eine Kugel $g = 0$ und daher die Euler-Charakteristik $\chi = 2$ ist. Für den Donut ($g = 1$) hingegen wäre nach derselben Operation die geometrische Phase Null.

ABB. 2 | TOPOLOGIE UND GEOMETRISCHE PHASE

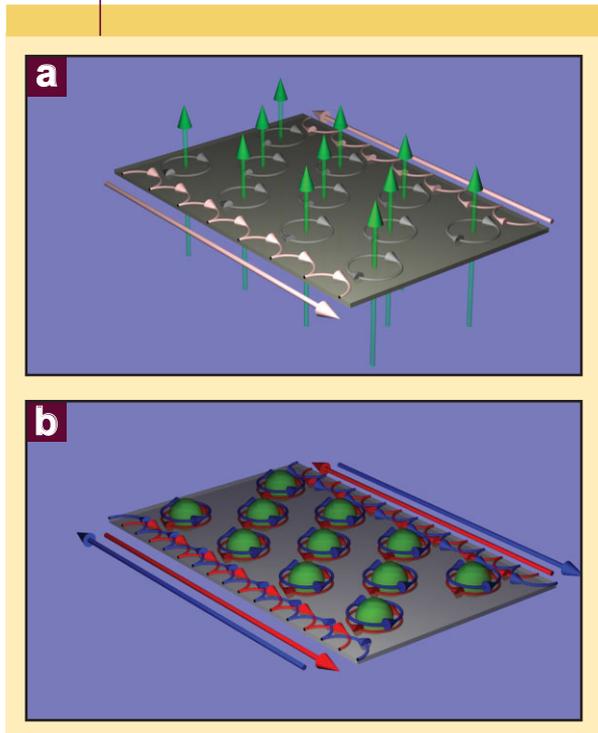


a) Wird ein Vektor auf einer Kugeloberfläche entlang des Pfades 1-2-3 bewegt, so dreht er sich um den Winkel α .
b) Wird ein Vektor dagegen auf einem geschlossenen Pfad über eine Donut-Oberfläche geführt, verdreht er sich nicht.

rakteristik χ gegeben. Anschaulich zeigt Abbildung 2a diesen Zusammenhang: Umkreist der Pfeil ein Achtel der Kugeloberfläche, so dreht er sich um $\pi/2$. Für die gesamte Kugeloberfläche folgt somit eine geometrische Phase von $8(\pi/2) = 4\pi$. Dieses Ergebnis hätte man auch direkt mit Hilfe von Gleichung (2) berechnen können, da für eine Kugel $g = 0$ und daher die Euler-Charakteristik $\chi = 2$ ist. Für den Donut ($g = 1$) hingegen wäre nach derselben Operation die geometrische Phase Null.

Das Konzept der Berry-Phase lässt sich problemlos auch auf quantenmechanische Systeme anwenden. In diesem Fall geht es allerdings nicht um echte geometrische Objekte, sondern Flächen im weniger anschaulichen Zustandsraum. Wird beispielsweise der Spin eines Elektrons adiabatisch um 360° im Kreis gedreht, so befindet sich das Elektron im Anschluss zwar wieder im gleichen Zustand wie zuvor, seine quantenmechanische Wellenfunktion wird jedoch eine zusätzliche Phase gewonnen haben. Diese ist einzig und allein eine Konsequenz aus der Tatsache, dass ein Zustand adiabatisch entlang einer geschlossenen Bahn im Zustandsraum in sich selbst überführt wurde – analog dem Pfeil, der auf einer geschlossenen Fläche auf der Kugel verschoben wurde. Um nun eine Beziehung zu den topologischen Isolatoren herzustellen, ist ein weiterer kleiner Exkurs in die Quantenphysik notwendig.

ABB. 3 | **QUANTEN-HALL-EFFEKT UND TOPOLOGISCHE ISOLATOREN**



a) Im Quanten-Hall-Effekt zwingt ein starkes äußeres Magnetfeld (grüne Pfeile) Elektronen auf Kreisbahnen. An den Begrenzungen können diese Elektronen keine Kreisbahn vollziehen und „hüpfen“ stattdessen entlang der Kanten. Da ihr Drehsinn durch das externe Magnetfeld gegeben ist, ist auch die Richtung vorgegeben, in die sie sich entlang der Kanten bewegen. Das ergibt einen Transportkanal pro Kante. **b)** In einem topologischen Isolator übernimmt der hohe Bahndrehimpuls der Elektronen, den die schweren Atomkerne im Material induzieren, die Rolle des äußeren Magnetfeldes. Dieser Bahndrehimpuls orientiert den Spin der Elektronen abhängig von deren Drehsinn um die Kerne (rot: Spin down, blau: Spin up). Dies führt pro Kante zu zwei Randkanälen mit entgegengesetztem Spin.

Seit der Entdeckung des Quanten-Hall-Effekts im Jahr 1980 wurde in der Physik nach einer Theorie gesucht, die die Genauigkeit und Robustheit des dabei gemessenen quantisierten Leitwertes von $n \cdot e^2/h$ erklären kann. In einem einfachen Modell des Quanten-Hall-Effekts zwingt ein starkes externes Magnetfeld die Elektronen in einem zweidimensionalen Elektronensystem auf Kreisbahnen (Abbildung 3a). Jede dieser Kreisbahnen hat, vergleichbar dem Bohrschen Atommodell, einen eigenen Energiezustand (Landau-Niveau). Die Elektronen sind somit im Inneren des Systems lokalisiert und können nicht zum Transport beitragen. An den Kanten können die Elektronen jedoch keine vollständige Kreisbahn vollziehen, was in einer sogenannten Skipping-orbit-Bewegung entlang der Kante resultiert. Ein Quanten-Hall-System ist also ein Isolator im Inneren und besitzt präzise quantisierte Leitungskanäle an seinen Begrenzungen.

Der Durchbruch in der Erklärung dieser quantisierten Kanäle gelang 1982 dem internationalen Theoretikerteam David James Thouless, Mahito Kohmoto, M. Peter Nightingale und Marcel den Nijs (TKNN). Es fand, dass die Zahl der quantisierten Leitungskanäle, die zum Ladungstransport beitragen, aus der geometrischen Phase berechnet werden kann, welche die Elektronen auf ihren Kreisbahnen aufnehmen. Mit dem „Füllfaktor“, wie diese Zahl auch heißt, konnten sie einen direkten Zusammenhang zur Topologie herstellen.

Das erklärt zugleich, warum dieser Effekt so robust ist [2]. Die Kernaussage ist, dass ein System unter beliebiger Deformation seine Leitfähigkeit bewahrt, solange man die Topologie nicht ändert – beispielsweise durch Erhöhen des angelegten Magnetfeldes, was zur Umbesetzung der Landau-Niveaus führt. Dieses Modell kann auch erklären, wo sich die Transportkanäle befinden – nämlich überall dort, wo sich die Topologie des Systems ändert. Wenn beispielsweise im Inneren des Materials die ersten drei Landau-Niveaus besetzt sind, dann bilden sich an der Grenzfläche zum umgebenden Vakuum, in dem null Landau-Niveaus besetzt sind, exakt $3 - 0 = 3$ Kantenkanäle aus.

Obiges Prinzip gilt analog für topologische Isolatoren. Dabei übernimmt nun der Bahndrehimpuls, der durch die schweren Atomkerne induziert wird, die Rolle des magnetischen Feldes. Elektronen können sich sowohl im als auch gegen den Uhrzeigersinn um die Atomkerne bewegen, der daraus resultierende Spin unterscheidet sich dann aber wegen der Spin-Bahn-Kopplung. Deshalb liegen grundsätzlich zwei Transportkanäle mit unterschiedlichem Spin pro Systembegrenzung vor (Abbildung 3b) – im Gegensatz zu einem Transportkanal beim Quanten-Hall-Effekt.

Die genaue Topologie des Inneren eines topologischen Isolators zu beschreiben ist leider wenig anschaulich und gelingt nur rein mathematisch. Eine Besonderheit aller topologischen Isolatoren ist jedoch, dass sie sogenannte invertierte Bandstrukturen besitzen. Dies bedeutet, dass Leitungs- und Valenzband ihre Plätze getauscht haben, wobei das Material immer noch ein Isolator mit einer entsprechenden Bandlücke bleibt. Die invertierte Bandstruktur besitzt nun eine andere Topologie als normale Isolatoren wie das Vakuum. Im Übergangsbereich zwischen invertierter und normaler Bandstruktur ändert sich aber die Topologie, die Bandlücke öffnet und schließt sich also. Deshalb bildet sich wie beim Quanten-Hall-Effekt ein Leitungszustand aus (Abbildung 4). Dieselbe Argumentation gilt auch für dreidimensionale Systeme, bei denen dieser Übergang an der Oberfläche auftritt, also an der Grenzfläche zum umgebenden trivialen Vakuum.

Experimenteller Nachweis

Die Existenz zweidimensionaler Oberflächenzustände in dreidimensionalen topologischen Isolatoren wurde eindrucksvoll mit winkelaufgelöster Photoemissions-Spektroskopie (ARPES, Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy) nachgewiesen. Dies gelang erstmalig 2008 für Antimon

dotiertes Bismut ($\text{Bi}_{0,9}\text{Sb}_{0,1}$) [3] und kurz danach für die Bismut-Chalkogenide Bi_2Se_3 und Bi_2Te_3 [4].

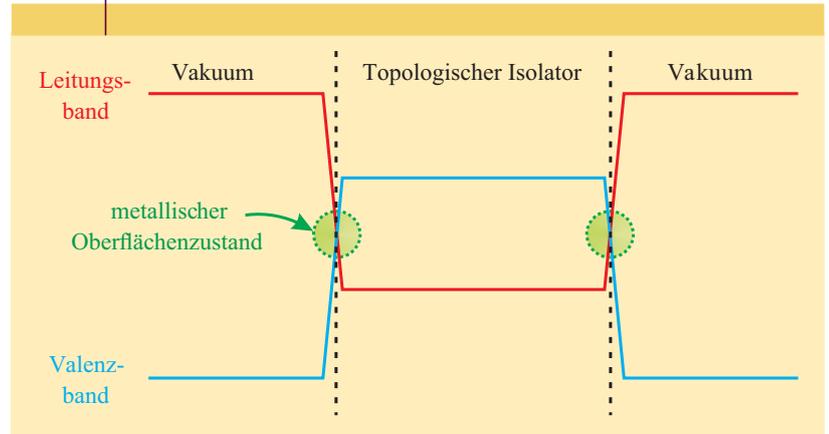
In ARPES-Experimenten bestrahlt man die Probe mit Photonen und misst sowohl die Energie als auch die Winkelverteilung der emittierten Photoelektronen. Auf diese Weise erhält man ganz direkt die Bandstruktur der Oberfläche kombiniert mit einer Projektion der Energiebänder des Volumens. Zur Auswertung solcher Spektren zählt man die Schnittpunkte der Oberflächenbänder mit der Linie der Fermi-Energie in einer beliebigen Richtung des Wellenvektors \mathbf{k} . Die Fermi-Energie beschreibt die höchste Energie der Elektronen im Festkörper, wenn dieser im quantenmechanischen Grundzustand ist. Ist die abgezählte Anzahl für alle möglichen Positionen der Fermi-Energie gerade (Abbildung 5a), so handelt es sich um einen trivialen Isolator (vergleiche Abbildung 1b). Bei ungerader Anzahl hingegen (Abbildung 5b) liegt ein topologischer Isolator vor (vergleiche Abbildung 1c).

Aufgrund ihrer exotischen Eigenschaften sind topologische Isolatoren vielversprechende Komponenten für elektronische Bauelemente. Daher unternahm man zahlreiche Versuche, die Oberflächenzustände auch in Ladungstransport-Experimenten zu beobachten. Dieses Ziel erwies sich jedoch als sehr schwer erreichbar. Der Hauptgrund hierfür ist die Vielzahl intrinsischer struktureller Defekte, die sich während des Kristallwachstums ausbilden. Diese führen zu einer nennenswerten Dotierung und somit elektrischer Leitfähigkeit des Kristallvolumens [5]. Dadurch entsteht ein zusätzlicher elektrischer Transportkanal neben den Oberflächenzuständen, der in der Regel die Gesamtleitfähigkeit dominiert.

In den letzten Jahren wurden unterschiedliche Strategien verfolgt, um den Volumenbeitrag zur Leitfähigkeit zu minimieren. Eine Möglichkeit besteht im Anlegen einer elektrischen Gate-Spannung, die das elektrochemische Potential (Fermi-Energie) aus dem Leitungsband in die Bandlücke verschiebt. Damit senkt man die Dichte freier Ladungsträger im Volumen stark ab, wodurch dieses ein Isolator wird und somit der Ladungsträgertransport bevorzugt über die Oberflächenzustände erfolgt. Wegen der geringen Eindringtiefe des elektrischen Felds funktioniert diese Methode umso besser, je dünner die topologische Isolatorschicht ist. Gut geeignet sind etwa 10 nm dicke Plättchen [6].

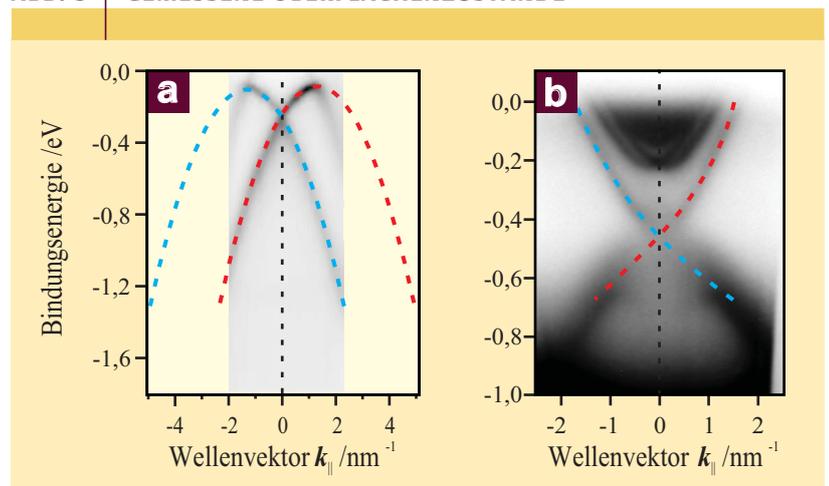
Eine zweite Strategie besteht in einer Verringerung der Verunreinigungen und einem möglichst geordneten Wachstum der dünnen Schichten, um die Defektkonzentration zu minimieren. Hierfür eignet sich neben klassischer Molekularstrahlepitaxie (MBE, Molecular Beam Epitaxy) der Einsatz von chemischer Gasphasenabscheidung (CVD, Chemical Vapor Deposition) auf bestimmten Substraten. Beide Verfahren erlauben ein Kristallwachstum, bei dem sich jede neue Schicht über Van-der-Waals-Bindungen anlagert. Geeignete Substrate sind in der Regel ebenfalls Van-der-Waals-Materialien. Die Van-der-Waals-Epitaxie ermöglicht so ein spannungsfreies Wachstum ohne viele Defekte, selbst wenn die Gitterkonstanten und thermischen Ausdehnungskoeffizienten beider Materialien sehr verschieden sind [7].

ABB. 4 | ÄNDERN DER TOPOLOGIE



Am Übergangsbereich zwischen einem topologischen Isolator mit invertierter Bandstruktur und dem umgebenden Vakuum ändert sich die Topologie der Bandstruktur. Dies hat ein Öffnen und Schließen der Bandlücke an der Grenzfläche zur Folge, weshalb sich dort ein metallischer Zustand ausbildet.

ABB. 5 | GEMESSENE OBERFLÄCHENZUSTÄNDE



a) *Trivialer Isolator: Winkelaufgelöstes Photoemissions-Spektrum (ARPES) einer Bi/Ag(111)-Oberflächenlegierung (111: Miller-Indizes der entsprechend orientierten Kristallfläche). Die parabelförmigen Oberflächenzustände sind wegen der Spin-Bahn-Wechselwirkung aufgespalten. Im rot gestrichelten Band orientieren sich die Spins entgegengesetzt zu Spins im blau gestrichelten Band. b) Topologischer Isolator: ARPES-Spektrum eines großflächig auf einem Glimmersubstrat gewachsenen Bismutselenidfilms (Bi_2Se_3). Die zwei sich schneidenden Bänder der Oberflächenzustände (rot und blau gestrichelt) besitzen wiederum entgegengesetzte Spinorientierung.*

Abbildung 6 zeigt ein Beispiel aus unserer Gruppe am Max-Planck-Institut für Festkörperforschung in Stuttgart, das beide Strategien vereint. Die nur wenige 10 nm dicken Plättchen des topologischen Isolators $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ wurden mit Van-der-Waals-Epitaxie auf dünnen Flocken aus hexagonalem Bornitrid (h-BN) gewachsen [8]. Dank der guten Qualität dieser Proben konnten wir an den Plättchen bei tiefen Temperaturen sogenannte Shubnikov-de-Haas-Oszillationen in Abhängigkeit von einem äußeren Magnetfeld beobachten (Abbildung 7a). Diese sind eine Folge der unter dem senk-

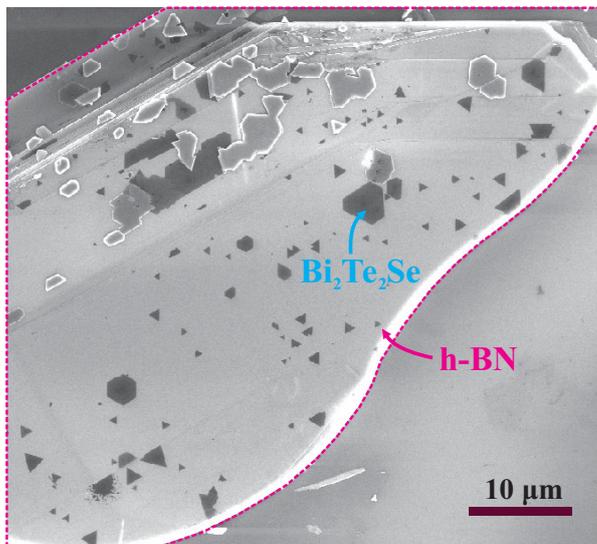


Abb. 6 Rasterelektronenmikroskop-Aufnahme von $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ -Plättchen auf einer dünnen Schicht aus hexagonalem Bornitrid.

rechten Magnetfeld gebildeten, quantisierten Energiezustände, den schon erwähnten Landau-Niveaus. Aus der Dämpfung der Widerstandsoszillationen konnten wir die Ladungsträgermobilität für den Transport durch die Oberflächenzustände abschätzen. Es zeigt sich, dass die Plättchen auf dem h-BN eine dreimal höhere Mobilität von etwa $5000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ aufweisen als vergleichbare Plättchen auf einem Si/SiO_2 -Substrat.

Die geringe Dicke der Plättchen gestattet es zudem, die Position der Fermi-Energie mit einer negativen Gate-Spannung um 150 meV in die Bandlücke hinein zu verschieben (Abbildung 7b). Obwohl dies ein beachtlicher Wert ist, reicht diese Verschiebung nicht ganz aus, um den Ladungsneutralitätspunkt zu durchfahren, den Abbildung 5b als Schnittpunkt der Oberflächen-Zustandsbänder zeigt. Die

ser Punkt würde sich durch sogenanntes ambipolares Verhalten verraten, wobei der elektrische Widerstand der Probe ein Maximum als Funktion der Gate-Spannung zeigt. Tatsächlich gilt beim derzeitigen Forschungsstand die Beobachtung dieses Effekts als bestmöglicher Hinweis auf einen Ladungstransport durch die Oberflächenzustände [9].

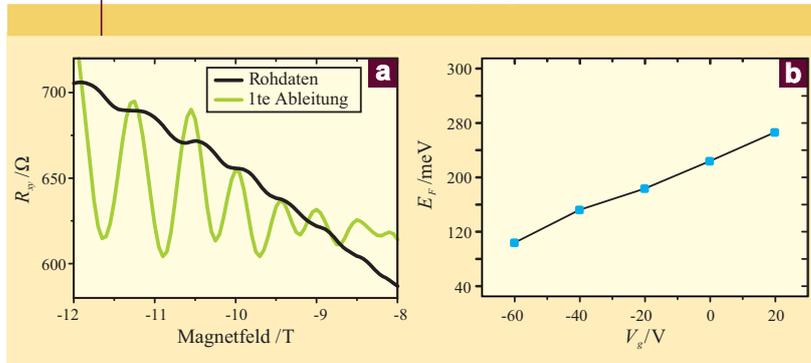
Vorkommen in der Natur

Die bislang am besten untersuchten topologischen Isolatoren sind Bismut-Chalkogenide, die zur Kristallklasse der sogenannten Tetradymiten gehören. Sie besitzen rhomboedrische Kristallstruktur, und ihre Bandlücke liegt in der Größenordnung von $0,3 \text{ eV}$. Die ersten auf topologische Eigenschaften untersuchten Verbindungen wurden im Labor synthetisiert, doch auch in der Natur gibt es Gegenstücke.

Kürzlich gelang es uns in Stuttgart, das natürliche Mineral Kawazulit (Abbildung 8a) als topologischen Isolator zu identifizieren [10]. Es findet sich in manchen Goldminen und besteht im Wesentlichen aus den Elementen Bismut, Antimon, Tellur, Selen und Schwefel. Wir untersuchten kleine, aus dem Mineral extrahierte Kristallite mit ARPES und fanden die charakteristischen, linear verlaufenden elektronischen Bänder topologischer Isolatoren (Abbildung 8b). Zudem ergaben Magnetotransport-Messungen, dass der Ladungstransport in den Kristallplättchen zu einem nennenswerten Teil über deren Oberfläche verläuft. Dass natürliches Kawazulit ungeachtet zahlreicher Verunreinigungen ein den synthetischen Verbindungen vergleichbares Verhalten zeigt, ist ein eindrucksvoller Hinweis auf den „topologischen Schutz“ der Oberflächenzustände.

Inzwischen zeichnet sich ab, dass neben dem Kawazulit weitere topologische Isolatoren in der Natur vorkommen. Hierzu zählt Aleksit, das als metallische Komponente neben Bismut das noch schwerere Blei enthält. Ladungstransport-Messungen ergaben, dass auch dieses Mineral eine gute Ladungsträgermobilität besitzt

ABB. 7 TOPOLOGISCHER ISOLATOR $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$



a) Shubnikov-de-Haas-Oszillationen des elektrischen Widerstands eines einzelnen $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ -Plättchens auf h-BN unter Anlegen eines äußeren Magnetfelds bei $1,5 \text{ K}$. Die Oszillationen sind in der ersten Ableitung besser sichtbar (grüne Kurve).
b) Verschieben der Fermi-Energie in einem $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ -Plättchen über eine Gate-Spannung.

Anwendungsperspektiven

Die Oberflächenzustände machen topologische Isolatoren besonders interessant für elektronische Anwendungen, in denen die Spinorientierung der Ladungsträger zur Informationsverarbeitung ausgenutzt wird. Die Spintronik ist ein intensiv untersuchtes Forschungsgebiet, in deren Fokus bislang Halbleiterstrukturen standen [11]. Topologische Isolatoren sind als Komponenten von spintronischen Prozessoren und Speicherelementen besonders vielversprechend, weil die Bewegungs- und Spinrichtung in den Oberflächenzuständen intrinsisch gekoppelt sind.

Obwohl weltweit viele Forschungsgruppen daran arbeiten, konnte diese Verknüpfung noch nicht in elektrischen Experimenten nachgewiesen werden. Ein möglicher Beweis der spinfilternden Eigenschaften topologischer Isolatoren wäre die Detektion von Spinströmen mithilfe von ferromagnetischen Elektroden. Eine wesentliche Herausforderung hierbei ist die Kontrolle der Grenzfläche zwi-

schen den beiden Materialien. In der Regel dürfen die Elektroden nur schwach an das elektrisch aktive Material gekoppelt sein, um eine effiziente Spininjektion und -detektion zu gewährleisten.

Beim gegenwärtigen Stand der Forschung ist jedoch über die Oberflächenchemie topologischer Isolatoren nur wenig bekannt. Die Bestimmung der Beschaffenheit und Dicke von Oxidschichten auf diesen Materialien und deren Reaktivität gegenüber typischen ferromagnetischen Metallen wie etwa Kobalt wird daher einen wichtigen Schwerpunkt der zukünftigen Forschung bilden.

Zusammenfassung

Topologische Isolatoren besitzen ein elektrisch isolierendes Inneres und zugleich sehr gut leitfähige Oberflächen. Verantwortlich dafür sind Eigenschaften, die sich mit Hilfe der Topologie beschreiben lassen. Besonderheiten ihrer Oberflächenzustände sind die Unempfindlichkeit der Leitfähigkeit gegenüber Defekten sowie die Verknüpfung der Bewegungs- und Spinrichtung der Ladungsträger. Mittlerweile sind topologische Isolatoren aus unterschiedlichen Kristallklassen gut dokumentiert. Auch in der Natur kommen sie vor. In der Grundlagenforschung liefern sie wertvolle Impulse zur Entdeckung neuer Quasiteilchen und Quantenphänomene. Jüngste Fortschritte beim Wachstum wohlgeordneter dünner Schichten eröffnen Anwendungsperspektiven in der Informationstechnologie und Spintronik.

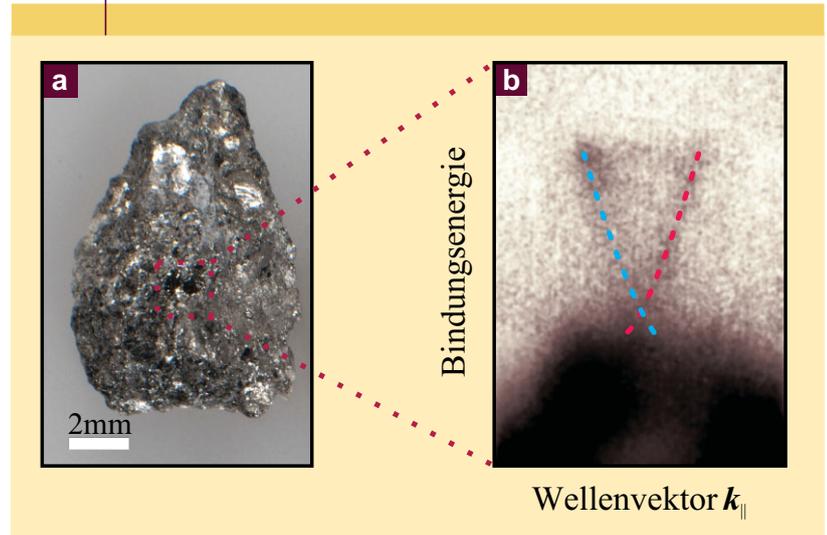
Stichworte

Topologische Isolatoren, Spin-Bahn-Kopplung, Quanten-Hall-Effekt, Dirac-Materialien, Spintronik, Magnetotransport.

Literatur

- [1] G. Brumfiel, *Nature* **2010**, 466, 310.
- [2] J. E. Avron, D. Osadchy, R. Seiler, *Phys. Today* **2003**, 56, 38.
- [3] D. Hsieh et al., *Nature* **2008**, 452, 970.
- [4] Y. L. Chen et al., *Science* **2009**, 325, 178.
- [5] Y. S. Hor et al., *Phys. Rev. B* **2009**, 79, 195208.
- [6] B. F. Gao et al., *App. Phys. Lett.* **2012**, 100, 212402.
- [7] A. Koma, *Thin Solids Films* **1992**, 216, 72.
- [8] P. Gehring et al., *Nano Letters* **2012**, 12, 5137.
- [9] X. Y. He et al., *App. Phys. Lett.* **2012**, 101, 123111.
- [10] P. Gehring et al., *Nano Letters* **2013**, 13, 1179.
- [11] S. Steinmüller, K. Lee, T. Bland, *Phys. Unserer Zeit* **2008**, 39, 274.
- [12] C. R. Ast et al., *Phys. Rev. Lett.* **2007**, 98, 186807.

ABB. 8 | NATÜRLICHER TOPOLOGISCHER ISOLATOR



Das Mineral Kawazulit als natürlicher topologischer Isolator. a) Lichtmikroskopische Aufnahme von Kawazulit, das aus einer Goldmine nahe Prag stammt. b) Das Photoemissions-Spektrum eines kleinen Kawazulit-Kristallits zeigt die typischen Oberflächenbänder eines topologischen Isolators (vergleiche Abbildungen 1c und 5b).

Die Autoren



Pascal Gehring studierte Materialwissenschaften an der Universität Stuttgart und promovierte an der Eidgenössischen Technischen Hochschule Lausanne (CH) und dem Max-Planck-Institut für Festkörperforschung in Stuttgart. Seit 2014 erforscht er als Postdoktorand am MPI für Festkörperforschung die Ladungstransporteigenschaften topologischer Isolatoren.



Marko Burghard promovierte in Physikalischer Chemie an der Universität Tübingen. Seitdem forscht er am Max-Planck-Institut für Festkörperforschung in Stuttgart. Seine Arbeitsgruppe untersucht die elektrischen und optischen Eigenschaften zweidimensionaler Nanostrukturen.

Anschrift

Dr. Pascal Gehring, Dr. Marko Burghard,
Max-Planck-Institut für Festkörperforschung
Heisenbergstrasse 1, D-70569 Stuttgart.
p.gehring@fkf.mpg.de, m.burghard@fkf.mpg.de