

Linear in drei Dimensionen

In zwei Verbindungen wurde eine Bandstruktur nachgewiesen, die relativistischen Dirac-Fermionen in drei Dimensionen entspricht.

Dr. Kai P. Schmidt,
Lehrstuhl für Theoretische Physik 1, TU Dortmund

Die Beziehung zwischen Energie und Impuls ist eine grundlegende Relation in der Physik. Während bei massiven Teilchen die Energie quadratisch vom Impuls abhängt (abgesehen von einer Ruheenergie), ist sie für masselose relativistische Teilchen eine lineare Funktion vom Impuls. Die Proportionalitätskonstante zwischen Energie und Impuls entspricht der Lichtgeschwindigkeit. In der Physik der kondensierten Materie übersetzen sich diese Bezeichnungen nahezu völlig analog auf das Energie-Anregungsspektrum von Festkörpern. Kollektive Anregungen mit Energielücke und parabolischer Energie-Impuls-Dispersion entsprechen massiven Teilchen. Anregungen mit linearer Dispersion stellen masselose relativistische Teilchen dar, die sich mit der Fermi-Geschwindigkeit bewegen. Klarerweise hängen die Materialeigenschaften zentral von der realisierten Phase und den Eigenschaften ihrer elementaren Anregungen ab. Daher ist die Suche nach neuartigen Anregungen ein integraler Bestandteil der moder-

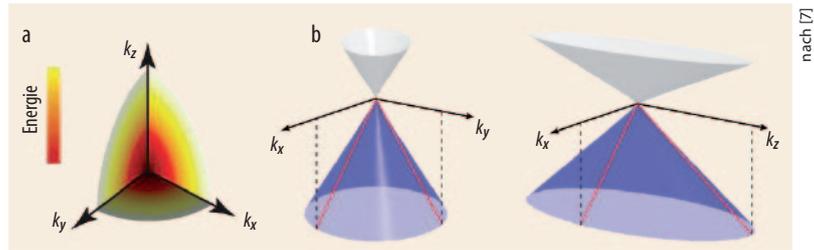


Abb. 1 Die Flächen konstanter Energie eines dreidimensionalen Dirac-Fermions bilden Oberflächen im vierdimensionalen Energie-Impuls-Raum $E = V_x k_x + V_y k_y + V_z k_z$, die sich entweder mit den drei Impulsrichtungen k_x , k_y und k_z und

einer Farbskala für die Energie E (a) oder durch Projektion auf zwei zweidimensionale Dirac-Fermionen (b) mit den für Graphen typischen Dirac-Kegeln visualisieren lassen. Die Dirac-Punkte liegen jeweils im Ursprung.

nen Physik, auch im Hinblick auf technologische Entwicklungen.

In diesem Zusammenhang spielt Graphen eine besondere Rolle, da es aus einatomigen Kohlenstoffschichten besteht, deren (zweidimensionale) elektronische Bandstruktur eine lineare Dispersion zeigt [1]. Damit einher gehen in sehr guter Näherung masselose relativistische Teilchen (Dirac-Elektronen), wobei die Fermi-Geschwindigkeit ungefähr 300-mal kleiner ist als die Lichtgeschwindigkeit. Viele der faszinierenden physikalischen Eigenschaften von Graphen wie die hohe Ladungsträger-Mobilität

sind auf die lineare Energie-Impuls-Dispersion zurückzuführen. Da Graphen ein zweidimensionales Material ist, stellt sich die natürliche Frage, ob auch Materialien mit einer linearen Dispersion in drei Dimensionen existieren. Eine entsprechende Bandstruktur wurde bereits vor mehr als 75 Jahren vorgeschlagen [2], die zugehörigen physikalischen Eigenschaften sind aber erst seit Kurzem bekannt [3–6]. Dabei berühren sich die Valenz- und Leitungsbänder nur in einer diskreten Anzahl an Punkten, so dass eine relativistische lineare Dispersion in allen drei Impulsrichtungen an diesen Dirac-Punkten vorliegt (Abb. 1). Da dort die Energielücke verschwindet, zählen entsprechende Materialien ebenso wie Graphen zu den Halbmetallen.

Solch ein dreidimensionales Dirac-Halbmetall zu realisieren ist aber eine große Herausforderung, da jede Wechselwirkung zwischen den Bändern typischerweise eine Energielücke öffnet und somit die Dirac-Punkte nicht stabil sind. Ein analoger Effekt ist auch für Graphen bekannt, das aufgrund der vorhandenen Spin-Bahn-Wechselwirkung eine kleine Energielücke besitzt. Die exotische Bandstruktur eines dreidimensionalen Dirac-Halbmetalls lässt sich aber durch bestimmte Raumgruppensymmetrien schützen, da Zustände mit Energien über- bzw. unterhalb der Dirac-Punkte nicht koppeln können, wenn sie verschiedene durch

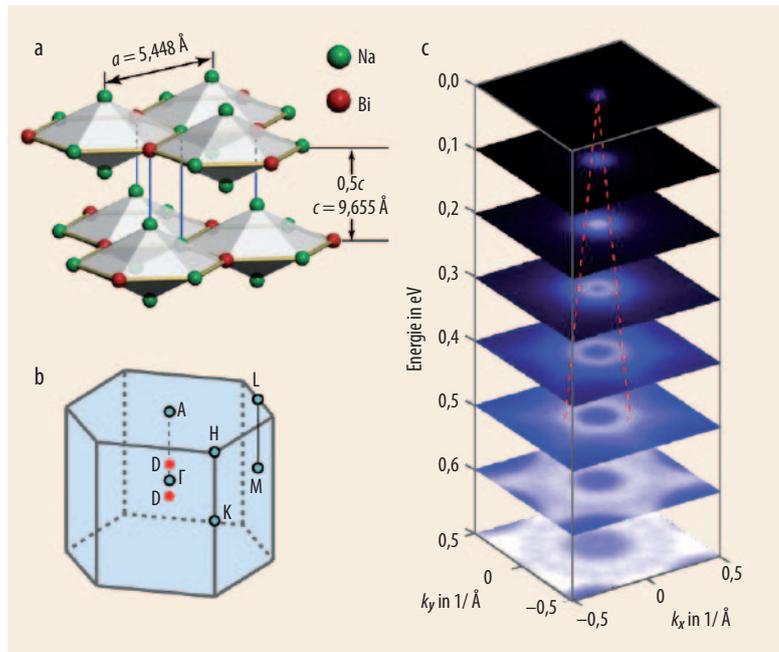


Abb. 2 Aufgrund der Kristallstruktur von Na_3Bi (a) entstehen Dirac-Punkte (D) in der Brillouin-Zone (b). Die ARPES-Intensi-

tätsverteilungen zeigen die schwache Anisotropie in der k_x - k_y -Ebene (c).

die Symmetrie erhaltene Quantenzahlen tragen [5]. Auf der Grundlage von Ab-initio-Rechnungen wurden verschiedene Kandidaten für solchermaßen geschützte dreidimensionale Dirac-Halbmatalle vorgeschlagen [6].

Nun ist es drei experimentellen Gruppen, darunter Physikern vom IFW Dresden [9], gelungen, mittels winkelaufgelöster Photoemissionspektroskopie (ARPES) erste Evidenzen dafür zu finden, dass in Na_3Bi [7] und Cd_3As_2 [8,9] dreidimensionale Dirac-Halbmatalle realisiert sind. Hierbei ist es entscheidend, ARPES-Messungen für verschiedene Photonenenergien durchzuführen, um die lineare Dispersion entlang aller drei Impulsrichtungen aufzulösen.

Das Material Na_3Bi besteht aus gestapelten dreilagigen Schichten aus Na-(Na/Bi)-Na, wobei sich die Orientierung benachbarter Schichten um 60° ändert (Abb. 2a). Ab-initio-Rechnungen sagen voraus, dass sich in der Nähe des zentralen Punkts (Γ) der Brillouin-Zone dreidimensionale Dirac-Punkte befinden (Abb. 2b). Zu den Vorhersagen zählen auch eine kleine Anisotropie innerhalb der Ebenen $V_x \approx V_y$, sowie eine signifikante Anisotropie aus den Ebenen heraus (Abb. 1b). Letzteres bestätigen die ARPES-Messungen, so dass sich alle Daten mit einem Satz an Parametern beschreiben lassen [7]. Die schwache Anisotropie innerhalb der Ebenen ist direkt in den ARPES-Daten zu erkennen (Abb. 2c). Durch Aufdampfen von Kalium-Atomen auf die Probe untermauern die Autoren von [7] zudem die These, dass die Kristallsymmetrie im Inneren des Materials die dreidimensionalen Dirac-Fermionen stabilisiert und sie nicht von den Details der Oberfläche abhängen.

Das zweite Material, Cd_3As_2 , ist ein wohlbekannter Halbleiter mit hoher Ladungsträgerbeweglichkeit, der unterhalb von 225°C eine raum-zentrierte tetragonale, nicht-punktsymmetrische Einheitszelle aufweist. Die Theorie sagt wiederum ein durch die C_4 -Kristallsymmetrie geschütztes dreidimensionales Dirac-Halbmatalle voraus

[6], was die Messungen eindrucksvoll bestätigen [8, 9]. Insbesondere lässt sich die hohe Ladungsträgermobilität durch die hohe Fermi-Geschwindigkeit der linearen Dispersion gut verstehen.

Aus theoretischer Sicht weckt der Nachweis dreidimensionaler Dirac-Halbmatalle einige Erwartungen an zukünftige Experimente. Zuerst erscheinen diese Materialien als ideal, um neuartige Physik relativistischer Dirac-Fermionen in einem Festkörper zu finden. Weiterhin gilt das Dirac-Halbmatalle als eine Art Muttersubstanz, um noch exotischere Quantenphasen zu realisieren. In der Tat besteht das dreidimensionale Dirac-Fermion in einem Dirac-Halbmatalle aus zwei überlappenden chiralen masselosen Teilchen, wie sie zuerst in der Hochenergiephysik zur Beschreibung von Neutrinos diskutiert wurden [10]. Diese beiden „Weyl-Fermionen“ lassen sich im Impulsraum trennen, falls es gelingt, die Zeitumkehrinvarianz oder die Inversionssymmetrie des Systems zu brechen [3, 4]. Dann würde man ein topologisches Weyl-Halbmatalle erhalten, ein bislang nicht realisierter topologischer Quantenzustand mit einzigartigen Fermi-Bögen und exotischen elektronischen Eigenschaften [3, 4]. Die Tür zu weiteren spannenden Entdeckungen in dreidimensionalen elektronischen Systemen ist demnach gerade erst aufgestoßen worden.

Kai P. Schmidt

- [1] A. K. Geim und K. S. Novoselov, *Nat. Mater.* **6**, 183 (2007)
- [2] C. Herring, *Phys. Rev.* **52**, 365 (1937)
- [3] X. Wan et al., *Phys. Rev. B* **83**, 205101 (2011)
- [4] A. A. Burkov und L. Balents, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 127205 (2011)
- [5] S. M. Young et al., *Phys. Rev. Lett.* **108**, 140405 (2012)
- [6] Z. Wang et al., *Phys. Rev. B* **88**, 125427 (2013)
- [7] Z. K. Liu et al., *Science* **343**, 864 (2014)
- [8] M. Neupane et al., arXiv:1309.7892 (2013)
- [9] S. Borisenko et al., arXiv:1309.7978 (2013)
- [10] G. E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet*, Charendon Press, Oxford (2003)