

Bismut-Kristall mit künstlerischer Darstellung der Kantenmoden eines topologischen Isolators höherer Ordnung

TOPOLOGIE

Topologische Isolatoren 2.0

Materialien mit leitenden Kristallkanten eröffnen neue Möglichkeiten für zukünftige Elektronik.

Titus Neupert und Frank Schindler

Dass Isolatoren keinen Strom leiten, klingt nach einer Tautologie. Die vor über zehn Jahren entdeckten topologischen Isolatoren bilden hingegen eine Ausnahme. Diese sind nur im Volumen des Kristalls isolierend, während sich auf der Oberfläche leitende Zustände befinden. Die Existenz solcher Zustände lässt sich mit den mathematischen Mitteln der Topologie vorhersagen. Kürzlich wurde diese Materialfamilie durch topologische Isolatoren „höherer Ordnung“ erweitert, die im Idealfall leitende Zustände auf den Kristallkanten haben. Erste experimentelle Hinweise dafür fanden sich ausgerechnet in elementaren Bismut-Kristallen, die bis dahin als nichttopologische Materialien galten.

Topologische Zustände sind ein Paradebeispiel dafür, wie sich physikalische Phänomene durch elegante mathematische Beschreibung tiefgründig verstehen lassen. In der Mathematik beschreibt die Topologie Eigen-

schaften von Objekten, die bei kontinuierlichen Verformungen unverändert bleiben. Die Knotentheorie ist ein gutes Beispiel: Bleiben die Enden eines Seils fixiert, so sind bestimmte Knoten nicht aufzulösen, unabhängig davon, wie das Seil zwischen ihnen verformt wird. In Festkörpern geht es nicht um Seile und Knoten, aber die grundsätzlich selbe mathematische Beschreibung lässt sich nutzen, um die quantenmechanische Wellenfunktion von Elektronen in einem Kristall zu beschreiben. Dabei handelt es sich um die sogenannten Bloch-Wellen, die sich aus einer ebenen Welle im Kristallgitter und einer Modulation durch das periodische Gitter zusammensetzen. Sie sind durch den Gitterimpuls der Elektronen charakterisiert, der ihre Wellenlänge festlegt. Die gitterperiodische Modulation hängt ebenso vom Gitterimpuls ab, und es gibt abstrakte Analogie zu Knoten in ihrer funktionalen Abhängigkeit. Die Topologie manifestiert sich somit in der Wellenfunktion im Hilbert-Raum.

Am besten funktioniert diese Beschreibung für Isolatoren: Den kontinuierlichen Verformungen des Seils mit fixen Enden entsprechen beliebige hypothetische Veränderungen des Festkörpers, welche die elektronische Energielücke aufrechterhalten. Zwei Systeme, die durch solche Verformungen theoretisch ineinander überführbar sind, gelten als topologisch äquivalent, andernfalls gehören sie zu verschiedenen topologischen Klassen. Der Clou an dieser Klassifikation sind die physikalischen Implikationen der „Knoten“ in der Wellenfunktion, manifestiert in der „Volumen-Rand-Korrespondenz“: Auf der Oberfläche bzw. am Rand eines Kristalls mit nichttrivialer Wellenfunktion gibt es garantiert Zustände, die sich in der Energielücke des Volumens befinden. Die Oberfläche ist also leitend und das Volumen isolierend. Dies hängt nicht von der Form und Ausdehnung von Oberfläche oder Rand ab. Die topologischen Zustände sind daher robust gegenüber beliebig starken Verformungen und Unordnung auf dem Rand.

Topologische Phasen mit dieser Phänomenologie hielten mit dem Quanten-Hall-Effekt, entdeckt 1980 durch Klaus von Klitzing (Nobelpreis 1985), Einzug in die Festkörperforschung. So richtig an Fahrt gewann das Gebiet ab 2005: So zeigten Charles Kane und Eugene Mele theoretisch, dass es noch eine bis dahin unbekannte Klasse von topologischen Isolatoren in quasi-zweidimensionalen Systemen gibt, die im Gegensatz zum Quanten-Hall-Effekt zeitumkehrsymmetrisch sind. Laurens Molenkamp in Würzburg realisierte experimentell den eng verwandten Quanten-Spin-Hall-Effekt nach einer theoretischen Arbeit von Bernevig, Hughes und Zhang. Die Randzustände dieser topologischen Isolatoren sind nur stabil, solange die Zeitumkehrsymmetrie erhalten ist. Sie bestehen aus zwei gegenläufigen Strömen von Elektronen mit entgegengesetzter Spinausrichtung. Im Allgemeinen können sich diese Ströme

durch Rückstreuung gegenseitig aufheben, was aber für die Umkehrung des Spins magnetische Streuzentren erfordert. Da sich die Orientierung eines Magnetfelds bei rückwärtslaufender Zeit umdreht, brechen magnetische Streuzentren immer die Zeitumkehrsymmetrie. In zeitumkehrsymmetrischen, nichtmagnetischen Materialien hingegen sind die Randzustände gegen Rückstreuung geschützt. Auch in drei Dimensionen gelang es, topologische Zustände in zeitumkehrsymmetrischen Kristallen zu identifizieren – dank eines sehr erfolgreichen Wechselspiels von theoretischen Vorhersagen und experimentellen Befunden. Gute Kandidaten für solche Materialien sind Halbleiter mit starker Spin-Bahn-Kopplung [1].

Topologische Phasen waren so bahnbrechend, dass sie zu einem Hauptgebiet der Festkörperforschung geworden sind. Das hat zwei Gründe: Erstens stellen sie Quantenmaterialien mit revolutionären Transporteigenschaften dar. Die eindimensionalen Kanäle des Quanten-(Spin-)Hall-Effekts leiten Strom – zumindest theoretisch – nahezu verlustfrei, ohne dass dafür Supraleitung nötig ist. Die Zeitumkehrsymmetrie verhindert die Rückstreuung der Elektronen in diesen Kanälen, die gewöhnliche Ursache für elektrischen Widerstand in metallischen Leitern. Wie oben beschrieben garantiert die Zeitumkehrsymmetrie, dass vorwärts- und rückwärtslaufende elektronische Zustände nicht miteinander wechselwirken. Solche topologischen Materialien in die Halbleiterelektronik zu integrieren, könnte deren Energieverbrauch signifikant senken.

Eine zweite Motivation für die Untersuchung topologischer Phasen basiert auf einem viel weitreichenderen Konzept für zukünftige Elektronik: auf Quantencomputern. Der Theoretiker Alexei Kitaev hat gezeigt, dass Quantencomputer, die auf der Basis topologischer Phasen arbeiten, viel robuster gegen Fehler sein können. Der Schlüssel

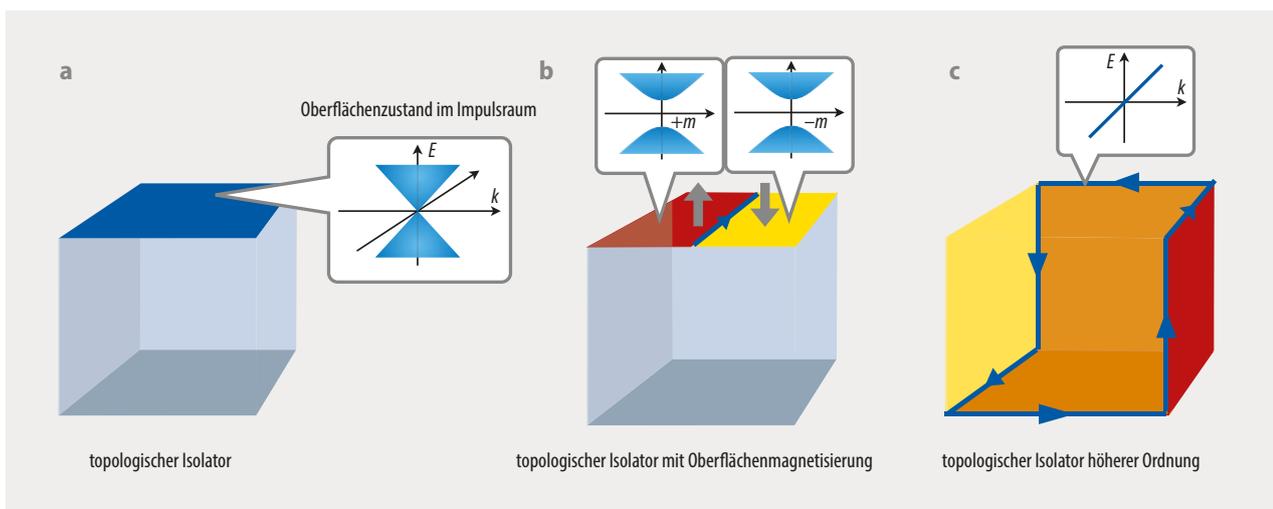


Abb. 1 Oberflächenzustand eines dreidimensionalen topologischen Isolators (a): Der lückenlose Dirac-Kegel, der die Zustandsenergie als Funktion der zwei Oberflächenimpulse beschreibt, ist äquivalent zur Lösung der zweidimensionalen Dirac-Gleichung für masselose Elektronen. Wird die Zeitumkehrsymmetrie gebrochen, etwa durch magnetische Dotierung, entwickelt der Oberflächenzustand eine Energielücke (b). In diesem Fall realisiert die Oberfläche des topologischen Isolatoren einen zweidimensionalen

Quanten-Hall-Effekt, der eindimensionale Moden an magnetischen Domänenwänden hat. Bei inversionssymmetrischen magnetischen Feldkonfigurationen haben alle Oberflächen eine Bandlücke (c). Der Vorzeichenwechsel der Projektion des Magnetfelds auf die Oberflächennormale entspricht einer Domänenwand. Die an ihr lokalisierten eindimensionalen Moden sind die Kantenzustände eines topologischen Isolatoren höherer Ordnung.

sind Anyonen – teilchenartige Anregungen, die Quanteninformation tragen können. Das vielleicht bekannteste Anyon heißt Majorana-Teilchen. Vor allem Microsoft hat stark in die Erforschung von eindimensionalen Quantendrähten investiert, bei denen es Hinweise auf die Existenz solcher Majorana-Teilchen als topologische Endzustände gibt.

Trotz der breiten Forschungsaktivität auf dem Gebiet topologischer Zustände sind längst noch nicht alle möglichen Spielarten topologischer Phasen gefunden oder zumindest theoretisch durchdacht. Das zeigt die Entdeckung topologischer Isolatoren höherer Ordnung vor wenigen Jahren [2, 3]. Diese haben topologische Zustände auf Randsegmenten mit einer Kodimension¹⁾ höher als 1, also auf Kristallkanten und -ecken, anstatt der Oberflächen- und Randzustände konventioneller topologischer Isolatoren erster Ordnung. Die Ordnung des topologischen Isolators entspricht in dieser Nomenklatur der Kodimension der Randzustände. So ist ein dreidimensionaler Kristall dieser Art isolierend im Inneren und auf den Oberflächen, kann aber auf den Kanten die gleichen eindimensionalen leitenden Zustände zeigen, wie sie am Rand eines zweidimensionalen Quanten-(Spin-)Hall-Effekts auftreten (Abb. 1). Die Existenz dieser topologischen Kantenzustände lässt sich wiederum aus den Eigenschaften der Bloch-Wellenfunktionen im Volumen vorhersagen, ohne jemals Oberflächen oder Kanten zu betrachten. Für topologische

Isolatoren höherer Ordnung sind Kristallsymmetrien wie Reflexion, Rotation oder Inversion (Punktspiegelung) entscheidend, während herkömmliche topologische Isolatoren Zeitumkehrsymmetrie benötigen. Die räumlichen Symmetrien schützen die topologischen Zustände, deren Existenz nur dann garantiert ist, wenn der Kristall als ganzer die entsprechend benötigte Symmetrie besitzt.

Der Weg zur Topologie höherer Ordnung

Als erstes wollen wir in einem Gedankenexperiment einen topologischen Isolator höherer Ordnung mit Kantenkanälen konstruieren, die nur in eine Richtung Elektronen propagieren lassen. Als solche sind sie analog zu den Randkanälen im zweidimensionalen Quanten-Hall-Effekt.

Startpunkt für unsere Überlegung ist ein dreidimensionaler topologischer Isolator erster Ordnung. Wir wollen zeigen, dass man solch ein System durch Anlegen eines Magnetfelds in einen topologischen Isolator zweiter Ordnung überführen kann. Die schützende Symmetrie soll die Inversion sein, das heißt, weder der Kristall noch das Magnetfeld soll Inversionssymmetrie brechen (dies ist nur eine milde Forderung, viele bekannte topologische Materialien sind in der Tat inversionssymmetrisch und ein homogenes Magnetfeld ist dies ohnehin). Die leitenden topologischen Oberflächenzustände dieser Materialien haben die Dispersion von relativistischen, masselosen Teilchen, gegeben durch einen „Dirac-Kegel“ (Abb. 2). Wie schon im zweidimensionalen Fall garantiert die Zeitumkehrsymmetrie, dass diese Oberflächenzustände leitfähig, also metallisch sind. Wenn die Zeitumkehrsymmetrie gebrochen wird, sei es durch ein externes Magnetfeld oder ferromagnetische Ordnung, sei es lokal auf der Oberfläche oder gleich im ganzen Kristall, so werden diese topologischen Oberflächenzustände isolierend. Dies liegt daran, dass ohne Zeitumkehrsymmetrie elektronische Zustände mit verschiedenen Orientierungen miteinander wechselwirken und hybridisieren können.

In Analogie zu Dirac-Fermionen entspricht das einer nichtverschwindenden Masse. Die Analogie besteht darin, dass die Oberflächenzustände die Dispersion von Dirac-Fermionen haben. Das heißt, der Hamiltonian, der die Elektronen auf der Oberfläche beschreibt, hat dieselbe Form wie ein Dirac-Hamiltonian, der die emergenten Quasiteilchen auf der Oberfläche eines topologischen Isolators beschreibt. Dabei entspricht der freie Parameter m der Masse der Quasiteilchen. Diese Masse ist direkt proportional zur Bandlücke zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen. In einem generischen Festkörper gibt es normalerweise keinen Grund dafür, dass m exakt null sein sollte. Jedoch verletzt eine nichtverschwindende Masse die Zeitumkehrsymmetrie, und dadurch gilt in zeitumkehrsymmetrischen Festkörpern $m=0$. Ein Magnetfeld B bricht die Zeitumkehrsymmetrie und erlaubt daher eine nichtverschwindende Masse, die in erster Näherung direkt proportional zum Magnetfeld ist.

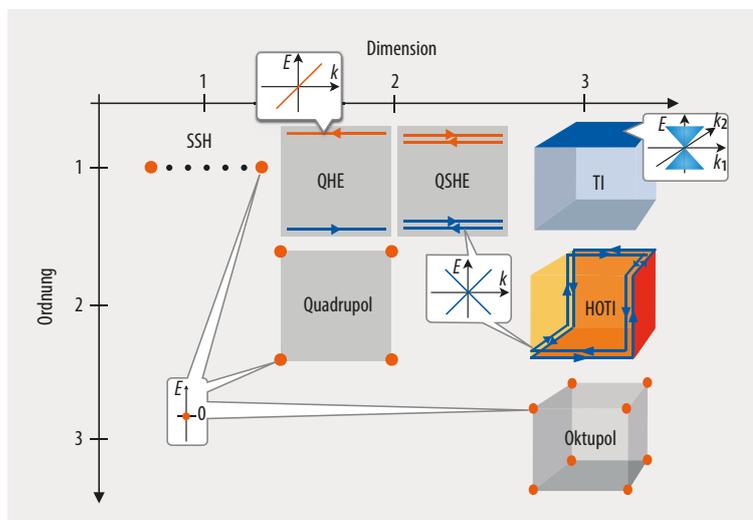


Abb. 2 Übersicht zu topologischen Phasen der Materie: Die Su-Schrieffer-Heeger-Kette (SSH, Infokasten) hat punktförmige, also nulldimensionale, Null-Energie-Moden an ihrem Ende. Beim Quanten-Hall-Effekt (QHE) ist das zweidimensionale Volumen isolierend, während der Rand eindimensionale leitende Zustände aufweist, die ihn unidirektional, also entweder im oder gegen den Uhrzeigersinn, umkreisen. Im Impulsraum entspricht dies einer linearen Dispersionsrelation. Der Quanten-Spin-Hall-Effekt (QSHE) ist die zeitumkehrsymmetrische Version des Quanten-Hall-Effekts, er besitzt zwei entgegengesetzt laufende Randmoden, deren Dispersionskurven sich im Impulsraum kreuzen. Der dreidimensionale topologische Isolator (TI) ist zeitumkehrsymmetrisch und leitet nur auf seinen zweidimensionalen Oberflächen. Im Impulsraum realisiert die Dispersion seiner Oberflächenzustände einen „Dirac-Kegel“. Beim dreidimensionalen topologischen Isolator zweiter Ordnung (HOTI) sind sowohl das Volumen als auch die Oberflächen isolierend. In der hier gezeigten zeitumkehrsymmetrischen Version realisieren die Kanten stattdessen die gleichen Randzustände, die wir vom zweidimensionalen Quanten-Spin-Hall-Effekt kennen. Weitere Beispiele für topologische Phasen höherer Ordnung sind Quadrupol- und Oktupolzustände in 2D und 3D, die punktförmige Eckmoden haben [2].

1) Für ein N -dimensionales Material oder Objekt ist die Kodimension einer n -dimensionalen Region durch $(N - n)$ definiert. Beispiel: Ein Würfel ($N=3$) hat $(n=1)$ -dimensionale Kanten und $(n=0)$ -dimensionale Ecken. Deren Kodimension ist 2 bzw. 3.

Man kann argumentieren, dass die Masse proportional zur Projektion des Magnetfeldvektors auf die Oberflächennormale des Materials ist. Hier gibt es eine bemerkenswerte Freiheit: Das Vorzeichen der Masse kann entweder positiv oder negativ sein, abhängig von der Richtung der ferromagnetischen Ordnung. Unter Inversion bleibt die Richtung des Magnetfeldes erhalten, da seine Komponenten einen Pseudovektor bilden, genau wie ein Drehmoment. In einem inversionssymmetrischen Ferromagnet zeigt die Magnetisierung daher auf entgegengesetzten Oberflächen in dieselbe globale Richtung – was der umgekehrten Orientierung hinsichtlich der Oberflächennormalen entspricht. Für den ferromagnetischen topologischen Isolator hat das eine wichtige Konsequenz: Die Masse der Oberflächenzustände hat auf entgegengesetzten Oberflächen ein unterschiedliches Vorzeichen, solange das ganze System inversionssymmetrisch ist. Das impliziert, dass es auf der Oberfläche mindestens eine geschlossene Linie geben muss, entlang derer die Masse verschwindet. Alle Teile der Oberfläche hängen ja miteinander zusammen (so sind in einer kubischen Geometrie die Oberflächen oben und unten über die Seiten miteinander verbunden). Die obere und untere Oberfläche haben eine entgegengesetzte Masse, das heißt, die Masse muss ihr Vorzeichen ändern, wenn wir an der Oberfläche von oben nach unten entlang gehen. Diese Vorzeichenänderung entspricht einer Nullstelle, an der die

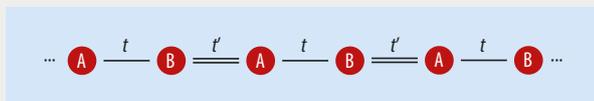
Masse verschwindet. Da dieses Argument auf einem beliebigen Pfad von oben nach unten funktioniert, müssen die Nullstellen selbst eine geschlossene Linie bilden, die um das gesamte Material herumführt.

Wo diese Linie genau verläuft, hängt von Details wie der Magnetfeldorientierung ab, ihre Existenz aber ist garantiert – sie ist topologisch geschützt. Eine genauere Untersuchung zeigt, dass an dieser Linie ein eindimensionaler, unidirektionaler „Kanal“ gebunden ist, der Elektronentransport ermöglicht. Dies ist der Kantenzustand des topologischen Isolators höherer Ordnung. Materialien, die diese neue topologische Phase realisieren könnten, basieren auf topologischen Isolatoren, die mit magnetischen Atomen dotiert sind [5].

Überlagerte topologische Isolatoren

Unser zweites Beispiel ist als Gedankenexperiment etwas abstrakter, mündet aber in einen Zustand, der schon experimentell realisiert wurde. Startpunkt ist die Überlagerung zweier gleicher zeitumkehr- und inversionssymmetrischer topologischer Isolatoren. „Überlagerung“ bedeutet hier, dass sie sich im gleichen räumlichen Bereich befinden, sich also durchdringen. Denkbar ist etwa ein Kristall, in dem Elektronen an zwei verschiedenen atomaren Gitterplätzen in der Kristall-Einheitszelle jeweils für sich die Bandstruktur eines topologischen Isolators realisieren. Wir nehmen

Das Su-Schrieffer-Heeger-Modell



Das Su-Schrieffer-Heeger Modell (SSH) für Polyethin-Ketten [4] realisiert eine der einfachsten topologischen Phasen. Es beschreibt Elektronen auf einem eindimensionalen Kristallgitter mit einer zweiatomigen Einheitszelle und Gitterkonstante a . Die Elektronen tunneln zwischen zwei nichtäquivalenten Gitterplätzen A und B mit einer Amplitude, die zwischen t und t' alterniert (**Abb.** oben). Der dazugehörige Bloch-Hamiltonian ist eine Funktion des Gitterimpulses:

$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & t + t'e^{ika} \\ t + t'e^{-ika} & 0 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Diese Matrix wirkt im Hilbert-Raum ebener Wellen mit Impuls k auf den Gitterplätzen A und B. Das Modell hat die Inversionssymmetrie $I\mathcal{H}(k)I^{-1} = \mathcal{H}(-k)$, wobei der Inversionsoperator I durch die Matrix

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

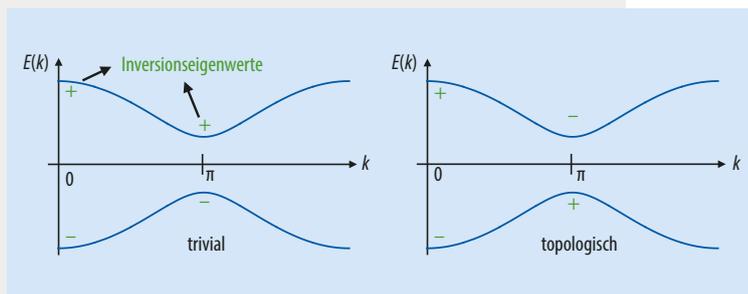
dargestellt ist, er vertauscht also die Gitterplätze A und B. Das Energiespektrum ist im Allgemeinen isolierend und durch $E = \pm \sqrt{t^2 + t'^2 + 2tt' \cos ka}$ gegeben, die Energielücke schließt sich jedoch bei $|t| = |t'|$. Wir betrachten zunächst den speziellen Fall $(t, t') = (1, 0)$, in dem die Eigenvektoren zu den Energien -1 und $+1$ konstant sind:

$$|u_{k,1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, |u_{k,2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

Für $(t, t') = (0, 1)$ lauten die Eigenvektoren der Energien -1 und $+1$:

$$|u_{k,1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{ika} \\ 1 \end{pmatrix}, |u_{k,2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{ika} \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Diese funktionale Abhängigkeit hat einen „Knoten“: Sie lässt sich bei Beibehaltung der Inversionssymmetrie nicht kontinuierlich zum trivialen Fall verformen. Man kann dies folgendermaßen sehen: Zum einen zeugt die funktionale Abhängigkeit des ersten Vektoreintrags von einer Windung in der komplexen Ebene, wenn k von 0 nach $2\pi/a$ den Impulsraum durchläuft. Zum anderen haben die Eigenzustände $u_{k,1}$ bei $k=0$ und $k=\pi/a$ unterschiedliche Inversionseigenwerte, nämlich -1 und $+1$ (**Abb.** unten). Diese Eigenwerte lassen sich nicht kontinuierlich zu denen im vorherigen Fall $(t, t') = (1, 0)$ verformen. Diese Unterscheidung liegt nicht nur für $(t, t') = (0, 1)$ vor, sondern auch für alle Parameterwerte $|t| < |t'|$. Wir sprechen daher von einer topologischen Phase. Tatsächlich realisiert das SSH-Modell in diesem Regime einen eindimensionalen topologischen Isolator erster Ordnung mit nulldimensionalen (punktförmigen) Endzuständen.



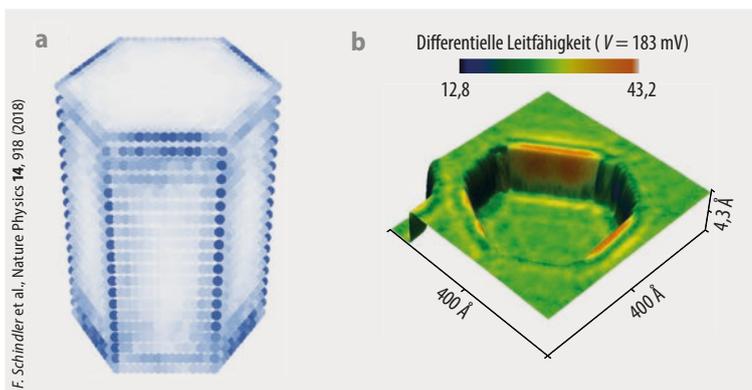


Abb. 3 Eine Modellrechnung liefert das Betragsquadrat der Kantenzustände eines Bismut-Kristalls (a). Mit einem Rastertunnelmikroskop lässt sich ein Bismut-Präparat mit dem gleichen hexagonalen Querschnitt vermessen.

vereinfachend an, dass die zwei „Sorten“ von Elektronen im Volumen des Kristalls nicht wechselwirken. Das erleichtert unser Gedankenexperiment, ist aber für die Definition der Phase, die wir letztlich konstruieren, in keiner Weise notwendig. Jeder dieser zwei topologischen Isolatoren hat nun seinen eigenen masselosen Dirac-Oberflächenzustand. Eine Kopplung der zwei Systeme an der Oberfläche ermöglicht es, dass die zwei Dirac-Kegel miteinander hybridisieren und so eine Energielücke entsteht, die einem Masseterm entspricht. Während die Masse für einen einzelnen Dirac-Kegel durch Zeitumkehrsymmetrie verboten ist, gibt es so eine zeitumkehrsymmetrische Masse für die Überlagerung von zwei Dirac-Kegeln. Abermals impliziert die Inversionssymmetrie, dass auch diese Masse auf entgegengesetzten Oberflächen entgegengesetztes Vorzeichen hat, es also einen eindimensionalen masselosen Pfad auf der Oberfläche geben muss. Dieser Pfad bindet in diesem zeitumkehrsymmetrischen System ein Paar von entgegengesetzt propagierenden Elektronenkanälen, die topologischen Kantenzustände dieses Systems. Sie sind vergleichbar mit den Randzuständen im zweidimensionalen Quanten-Spin-Hall-Effekt.

Bismut ist das erste Material, in dem sich Hinweise auf solche Kantenzustände fanden [6]. Dabei ist Bismut ein Metall mit elektronen- und lochartigen Ladungsträgern. Während es diese erschweren, die topologischen Zustände experimentell zu untersuchen, haben die theoretischen Aussagen zur Topologie auch in Gegenwart solcher unerwünschter Ladungsträger Bestand. Praktisch überlagern sich die topologischen Kantenzustände mit nicht-topologischen Zuständen, aber ihre Präsenz zeigt sich dennoch deutlich in den Materialeigenschaften. So untersuchte die Gruppe von Ali Yazdani (Princeton) mit Rastertunnelmikroskopie die elektronische

Struktur der Kristallkanten (**Abb. 3**) und fand so Hinweise auf topologische Kantenmoden. Die Gruppe von Hélène Bouchiat und Sophie Guéron (Paris-Orsay) hat in Bismut-Nanodrähten Supraleitung induziert und auf diese Weise gezeigt, dass Strom vorzugsweise auf deren Kanten fließt.

Wie man topologische Materialien vorhersagt

Bislang gehen unsere Überlegungen davon aus, dass wir ein Material kennen, das ein topologischer Isolator ist. Aber wie lässt sich dies vorhersagen? Wie findet man unter tausenden bekannten kristallinen Verbindungen die interessantesten? Das theoretische Wundermittel, welches das Feld der topologischen Isolatoren seit Jahren befeuert, ist die Dichtefunktionaltheorie. Durch sie lassen sich Bandstrukturen und Bloch-Wellenfunktionen für eine große Klasse von Materialien akkurat berechnen, solange die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen keine allzu große Rolle spielt. Die Frage ist dann, wie man von diesen Informationen ausgehend effektiv schlussfolgern kann, dass es sich tatsächlich um einen topologischen Isolator handelt. Dazu gibt es mit „topologischen Invarianten“ Größen, die genau solch eine Aussage zulassen.

Die am einfachsten zu berechnenden topologischen Invarianten sind „Symmetrieindikatoren“, die sich aus dem Transformationsverhalten der Bloch-Wellenfunktionen unter den relevanten Symmetrien ergeben. Als Beispiel orientieren wir uns an der Inversionssymmetrie, die wir zur Definition der Phasen in unseren zwei Gedankenexperimenten benötigten. Bloch-Wellenfunktionen mit Gitterimpuls von entweder $k=0$ oder $k=\pi/a$ in jede Raumrichtung sind invariant unter Inversion, wobei a die Gitterkonstante ist.²⁾ Diese Wellenfunktionen sind entweder gerade (Eigenwert 1) oder ungerade (Eigenwert -1) unter Inversion. Der Symmetrie-Indikator κ ist nun nichts weiter als die Anzahl von Bloch-Eigenzuständen im

Valenzband mit Eigenwert -1 [7, 8] (bei Zeitumkehrsymmetrie werden Eigenzustände, die durch Zeitumkehr gepaart sind, einfach gezählt). Diese Größe ist modulo 4 eine topologische Invariante, sie ändert sich also nicht durch Deformationen des Systems. Aus einer Bandstrukturrechnung ist κ sehr leicht zu bestimmen. Fu und Kane haben gezeigt, dass $\kappa=1$ oder 3 für zeitumkehrsymmetrische Kristalle einem topologischen Isolator mit Dirac-Oberflächenzuständen entspricht. $\kappa=2$ (modulo 4) indiziert hingegen einen topologischen Isolator höherer Ordnung mit Kantenmoden [7, 8]. Ein aktuelles Forschungsprogramm zielt darauf ab, solche topologischen Invarianten für alle bekannten Kristallverbindungen zu berechnen. So wurden nominell bereits tausende neue topologische Verbindungen vorhergesagt [9].

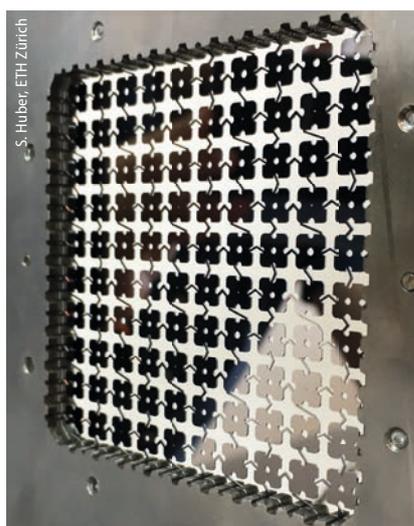


Abb. 4 Ein zweidimensionaler topologischer Isolator höherer Ordnung lässt sich in einem mechanischen Metamaterial realisieren [13]. Bei einer bestimmten Schwingungsfrequenz gibt es nur topologische Anregungen an den Ecken.

Topologische Ecken

Bis hierhin haben wir uns vor allem auf dreidimensionale Materialien mit Kantenzuständen konzentriert, weil diese für natürlich vorkommende Kristalle am relevantesten sind. Theoretisch lässt sich Topologie höherer Ordnung aber auch für zweidimensionale Systeme definieren, die dann geschützte Moden an ihren Ecken aufweisen. Wo aber finden sich diese? Eine Forschungsrichtung, die aus der Quantenmaterie bekannte Phasen in klassischen Systemen zu realisieren sucht, hat darauf jüngst überraschend vielfältige Antworten gefunden. Sie basiert auf der Einsicht, dass insbesondere topologische Zustände nicht untrennbar mit der Quantenmechanik verbunden sein müssen. Vielmehr ist die ihnen zugrundeliegende Berry-Phase, welche in der Quantenmechanik die anfangs erwähnten „Knoten in der Wellenfunktion“ zählt, auch in der klassischen Physik zu finden. In der jüngeren Vergangenheit hat dies zu Entsprechungen topologischer Isolatoren verschiedener Dimensionalität in mechanischen Systemen (gekoppelten Pendeln und Metamaterialien) [10], photonischen Kristallen [11], elektrischen Schaltkreisen [12] und anderem mehr geführt. Für jede dieser Plattformen gibt es mittlerweile auch topologische Isolatoren höherer Ordnung mit Eckmoden [13–16] (**Abb. 4**). Diese sind z. B. durch eine Spiegelsymmetrie geschützt.

Topologische Eckmoden können aber auch in quantenmechanischen Systemen von großer Bedeutung sein, wenn sie in Supraleitern auftreten. Obwohl sie Strom leiten, sind die meisten Supraleiter im Volumen durch eine Energielücke für Quasiteilchen-Anregungen ausgezeichnet. In diesem Sinne sind Supraleiter wie „Isolatoren“ und lassen sich unter topologischen Gesichtspunkten untersuchen. Topologische Supraleiter sind selten, aber theoretisch sehr gut verstanden. Sie besitzen auf dem Rand oder der Oberfläche geschützte Anregungen, die mit Majorana-Teilchen verwandt sind. Ein zweidimensionaler Supraleiter höherer Ordnung im Speziellen hat Majorana-Zustände an den Ecken. Diese könnten sich für die von Kitaev vorgeschlagene Vision topologischer Quantencomputer eignen. Ihr experimenteller Nachweis steht aber noch aus.

Viele Publikationen widmen sich der mathematischen Klassifikation topologischer Isolatoren und Supraleiter unter Beachtung von Kristallsymmetrien [17, 18]. Für längst nicht alle dieser Phasen ist klar, wie ihre Volumen-Rand-Korrespondenz genau aussieht – etwa ob sie von höherer Ordnung sind. Genauso offen ist die Frage, in welchen Materialien viele dieser Phasen realisiert sind.

Topologie ohne Ende

Die Forschungsergebnisse zur Topologie in der Festkörperphysik haben ein vielfältiges Feld aufgespannt und mit immer neuen Entdeckungen überrascht. Vom Quanten-Hall-Effekt über topologische Isolatoren und topologische Halbmetalle haben sich die Erkenntnisse fundamental

weiterentwickelt. Für schwach korrelierte Systeme brachte das ein neues Verständnis der Bandtheorie mit sich und krepelte damit eine der Grundlagen der Festkörpertheorie um. Topologische Isolatoren höherer Ordnung, mit ihrer speziellen Volumen-Rand-Korrespondenz, sind ein weiterer Hinweis darauf, dass es hier noch viel zu entdecken gibt.

Literatur

- [1] M. Z. Hasan und C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010)
- [2] W. A. Benalcazar, B. A. Bernevig und T. L. Hughes, *Science* **357**, 61 (2017)
- [3] F. Schindler et al., *Sci. Adv.* **4** (2018), 10.1126/sciadv.aat0346
- [4] W. P. Su, J. R. Schrieffer und A. J. Heeger, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1698 (1979)
- [5] Y. Xu et al., *Phys. Rev. Lett.* **122**, 256402 (2019)
- [6] F. Schindler et al., *Nat. Phys.* **14**, 918 (2018)
- [7] L. Fu und C. L. Kane, *Phys. Rev. B* **76**, 045302 (2007)
- [8] E. Khalaf et al., *Phys. Rev. X* **8**, 031070 (2018)
- [9] Die Ergebnisse sind in den Datenbanken *topologicalquantumchemistry.com* und *materiae.iphy.ac.cn* abruf- und durchsuchbar.
- [10] R. Süsstrunk und S. D. Huber, *Science* **349**, 47 (2015)
- [11] M. Hafezi et al., *Nat. Photonics* **7**, 1001 (2013)
- [12] Ch. Hua Lee et al., *Commun. Phys.* **1**, 39 (2018)
- [13] M. Serra-Garcia et al., *Nature* **555**, 342 (2018)
- [14] Ch. W. Peterson et al., *Nature* **555**, 346 (2018)
- [15] J. Noh et al., *Nat. Photonics* **12**, 408 (2018)
- [16] S. Imhof et al., *Nat. Phys.* **14**, 925 (2018)
- [17] K. Shiozaki und M. Sato, *Phys. Rev. B* **90**, 165114 (2014)
- [18] M. Geier et al., *Phys. Rev. B* **97**, 205135 (2018)

Die Autoren



Titus Neupert (FV Magnetismus) studierte Physik an der TU Dresden und Universität Zürich. 2013 promovierte er an der ETH Zürich und am Paul-Scherrer-Institut. Es folgte ein Postdoc-Aufenthalt am Princeton Center for Theoretical Science in den USA. Seit 2016 ist er Professor für theoretische Festkörperphysik an der Universität Zürich. Für seine Arbeiten wurde

er mit dem Klung-Wilhelmy-Wissenschafts-Preis 2019 für Physik ausgezeichnet. Wenn der Kopf vom Nachdenken über Physik raucht, greift der Hobbymaler gern zum Pinsel.

Frank Schindler studierte Physik an der LMU München und Mathematik an der Universität Cambridge. Während seiner Promotion in der Gruppe von Titus Neupert begründete er das Feld der topologischen Isolatoren höherer Ordnung mit und gab ihm seinen Namen. Seine Arbeiten wurden von der Universität Zürich mit dem Mercator-Sonderpreis gewürdigt. Das Frühjahr 2019 verbrachte er als Graduate Fellow am Kavli Institute for Theoretical Physics in Santa Barbara, USA. In seiner Freizeit spielt er Violoncello.



Prof. Dr. Titus Neupert, Physik-Institut, Universität Zürich, Winterthurerstrasse 190, 8057 Zürich, Schweiz; **Dr. Frank Schindler**, Princeton Center for Theoretical Science, Princeton University, Princeton, NJ 08544, USA

2) Bei $k = \pi/a$ ist dies der Fall, weil dieser Gitterimpuls unter inversion zwar zu $-\pi/a$ abgebildet wird, aber insgesamt nur modulo einem reziproken Gittervektor $2\pi/a$ definiert ist. Darum sind $k = \pi/a$ und $k = -\pi/a$ zu identifizieren.