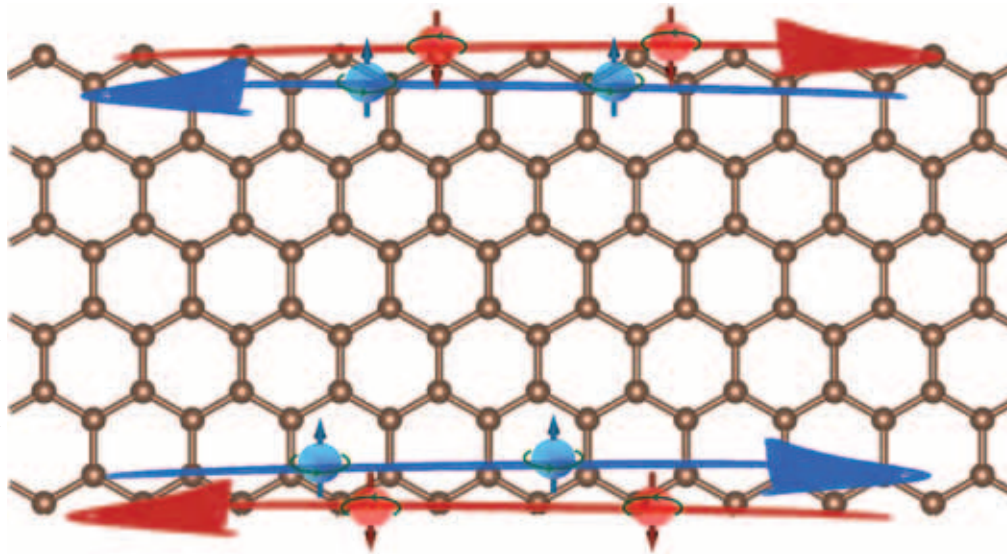


# Korrelierte topologische Isolatoren: Alte Materialien mit neuen Eigenschaften

## *Correlated Topological Insulators: Old Materials with New Properties*

Markus Aichhorn



© Robert Triebel, Master Thesis, TU Graz, 2014

**Abbildung 1:**  
Graphen-Nanobänder mit Zickzackrändern. An diesen Rändern fließt der Oberflächenstrom, in entgegengesetzte Richtungen für Up-Spins (blaue Pfeile und Symbole) und Down-Spins (rote Pfeile und Symbole).

*Figure 1:*  
Graphene nano-ribbon with zig-zag edges. The current flows through these edges in opposite directions depending on whether the spin polarisation is up (blue arrow and symbols) or down (red arrow and symbols).

Seit einigen Jahren sind sogenannte topologische Isolatoren ein Hauptforschungsgebiet in der Festkörperphysik. Diese Materialien sind deswegen interessant, weil sie Strom nur an der Oberfläche leiten, aber in ihrem Inneren isolieren. Ein neues Forschungsprojekt, finanziert durch das START-Programm des FWF, wird den Einfluss von elektronischen Wechselwirkungen auf diesen Materiezustand untersuchen.

Bei der Klassifizierung von Materialien unterscheidet man normalerweise zwischen Metallen, Halbleitern und Isolatoren, wobei nur Erstere Strom leiten können. Vor etwa 10 Jahren wurde allerdings eine weitere Klasse vorgeschlagen, ein Hybrid mit isolierendem Inneren und metallisch leitenden Oberflächen. Dieser Zustand ist topologisch geschützt, das heißt, er kann nicht durch externe Störungen des Systems, wie z. B. Fehlstellen oder Einschlüsse, zerstört werden. Dadurch ergeben sich faszinierende neue Möglichkeiten für neue funktionelle Bauteile.

### Ein einfaches Beispiel

Wir wollen das Auftreten von topologischen Zuständen am Beispiel von Graphen illustrieren. Das Kristallgitter dieses zweidimensionalen Systems >

*Topological insulators are one of the leading research topics in modern solid state physics. These materials are interesting because they can only conduct electrical current at their surface, but otherwise insulate in the bulk. A new research project funded by the START program of the FWF is going to investigate the effects of electronic correlations on these new states of matter.*

*Materials are normally classified into three different kinds: metals, semiconductors, and insulators, with only metals conducting electrical current. However, about ten years ago researchers postulated yet another class of materials – a hybrid class with insulating bulk and conducting surfaces. This state is topologically protected, which means that it cannot be destroyed by external perturbations such as dislocations or impurities. This property opens up very interesting new possibilities for new functional materials.*

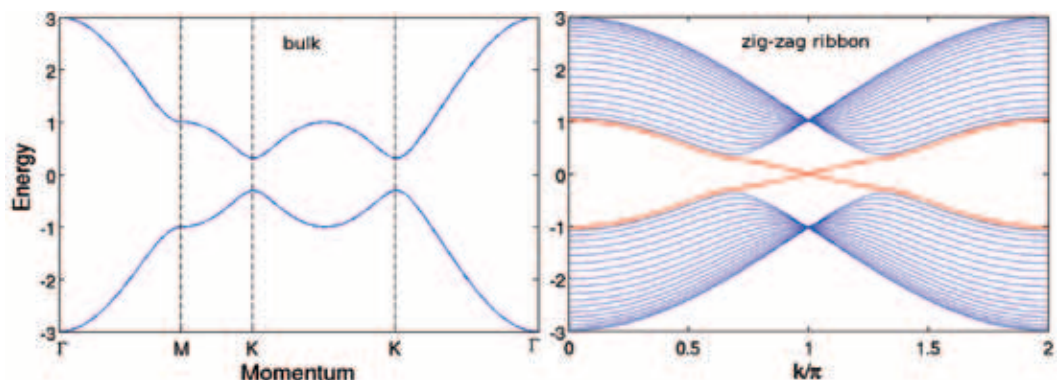
### A simple example

*Let's illustrate the occurrence of a topological insulating state using the example of graphene. The crystal structure of this two-dimensional material is built up by a honeycomb lattice, on which the electrons can move (see Fig. 1). This system has recently attracted a lot of interest because it >*



Markus Aichhorn ist theoretischer Physiker und beschäftigt sich mit der Modellierung von Materialien am Computer.

*Markus Aichhorn, theoretical physicist, is working on the modelling of materials on the computer.*



**Abbildung 2:**  
Bandstruktur von Graphen mit Spin-Orbit-Kopplung im Bulk (links) und im Nanoribbon (rechts). Im Bulk ist eine Anregungslücke erkennbar, während im Ribbon leitende Oberflächenzustände auftreten (rote Linien).

*Figure 2:*  
*Band structure of graphene with spin-orbit coupling in the bulk (left) and in the nano-ribbon (right). A clear excitation gap is visible in the bulk, whereas conducting edge states occur in the ribbon (red lines).*

besteht aus einer Honigwabenstruktur, auf der sich Elektronen bewegen können (siehe Abb. 1). Dieses System hat große Aufmerksamkeit auf sich gezogen, weil es sogenannte masselose Dirac-Fermionen mit ganz speziellen Transporteigenschaften realisiert. Verantwortlich für das Auftreten von topologischen Zuständen ist die Spin-Orbit-Kopplung, die den magnetischen mit dem Bahndrehimpuls des Elektrons koppelt. Lässt man diese Kopplung zu, so öffnet sich eine Lücke im Anregungsspektrum des Materials, was zu einem isolierenden Zustand führt (Abb. 2 links). Betrachtet man nun aber die Oberflächenzustände am Rande eines Graphen-Nanobandes (Abb. 1), so sieht man sofort, dass zwei Randzustände auftreten, die das Leitungsband mit dem Valenzband verbinden und somit metallische Eigenschaften besitzen (Abb. 2 rechts). Diese Ambiguität – Isolator im Bulk, Metall an der Oberfläche – ist gerade die zentrale Eigenschaft von topologischen Isolatoren. Darüber hinaus ist der Transport am Rand auch noch spinabhängig. Wie in Abb. 1 dargestellt, werden Spin-up-Elektronen (blaue Pfeile) in die entgegengesetzte Richtung von Spin-down-Elektronen geleitet. Das führt zur Leitung von Strom im Wesentlichen ohne Wärmeentwicklung, was für technologische Entwicklungen sehr interessant ist.

Den ersten theoretischen Postulaten folgten schnell experimentelle Nachweise dieser topologischen Eigenschaft.<sup>1</sup> Allerdings wurden diese topologischen Zustände in Materialien gefunden, in denen Wechselwirkungen zwischen den Elektronen vernachlässigt werden können. Wie bereits gesagt, ist die Spin-Orbit-Kopplung eine zentrale Größe bei topologischen Isolatoren. Weil der Einfluss dieser Kopplung mit der vierten Potenz der Ordnungszahl steigt, sind Materialien mit schweren Elementen wie Bismut prädestiniert für topologische Phasen. Theoretische Modelle für diese Systeme sind problemlos zu behandeln, weil ohne elektronische Wechselwirkungen eine Einteilchenbeschreibung möglich ist.

#### Korrelierte topologische Isolatoren

Erst kürzlich sind auch Übergangsmetalloxide in den Fokus der Forschung gerückt. Mehrere Verbindungen, die teilweise schon vor einigen Jahr-

hosts so-called massless Dirac fermions, with very special and peculiar transport properties. The reason for the occurrence of topological states is the spin-orbit coupling, which couples the magnetic spin of the electron to its orbital momentum. This additional term opens a gap in the single-particle excitation spectrum of the material, leading to an insulating state (Fig. 2 left). Considering now surface states on a graphene nano-ribbon as depicted in Fig. 1, we immediately see that two edge states occur that connect the valence band with the conduction band, and therefore are metallic (Fig. 2 right). This ambiguity – insulating in the bulk, but conducting at the surface – is the central and most important property of topological insulators. Moreover, the transport properties at these edges are spin-dependent. As is shown in Fig. 1, electrons with up-spin (blue arrows) move in the opposite direction to electrons with down-spin (red arrows). This leads to electrical conductance basically without creating heat, which makes this effect very promising for technological applications.

Soon after the first theoretical proposals, topological properties of materials were achieved in experiments.<sup>1</sup> However, these properties have been found in materials where the interaction between the electrons can be neglected. As mentioned above, the driving force for topological states is the spin-orbit coupling. Since the influence of this coupling increases with the fourth power of the atomic number, materials with heavy elements such as bismuth are optimally suited to show topological phases. Theoretical models for these systems are easy to handle and solve because the complete absence of electronic correlations allows for a single-particle description.

#### Correlated Topological Insulators

Transition metal oxides have entered the field of topological materials only recently. Several compounds which were synthesized and characterized many years ago have been proposed to show these special properties of surface conductance. Many of these materials are based on iridium-oxide compounds. Compared to the materials mentioned above, oxides have a big advantage in that they are very flexible and can be changed easily by chemi-

**Abbildung 3:**  
Phasendiagramm von wechselwirkendem Graphen als  
Funktion von Wechselwirkungsstärke  $U$  und Kristallfeld  $\lambda_V$ .

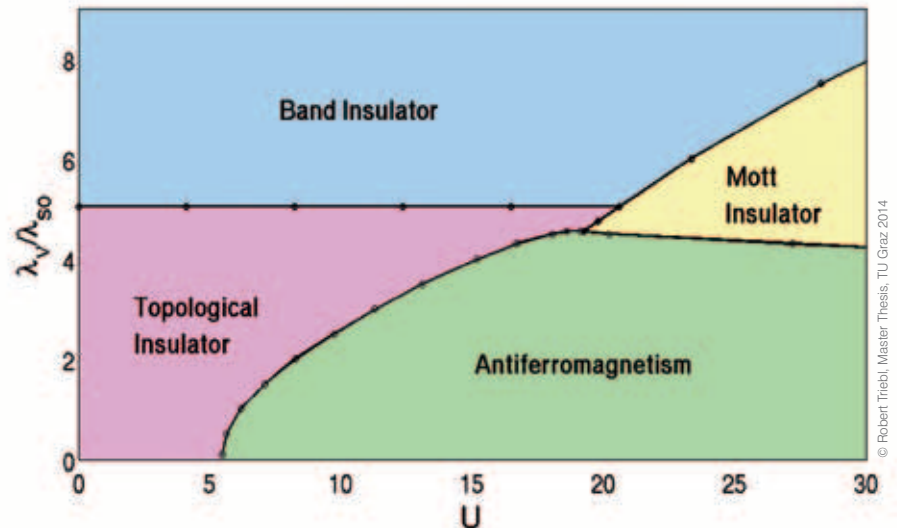
Figure 3:

Phase diagram of interacting graphene as function  
of interaction strength  $U$  and crystal field  $\lambda_V$ .

zehnten zum ersten Mal synthetisiert und charakterisiert wurden, sind plötzlich in diesem Zusammenhang wieder von großem Interesse. Das Gros dieser Materialien basiert auf Iridium-Oxid-Verbindungen. Verglichen mit den oben beschriebenen Materialien haben Oxide als großen Vorteil ihre Flexibilität, weil sie durch chemische Substitution oder externe Parameter leicht verändert werden können. Allerdings ist bei diesen Oxiden die theoretische Beschreibung nicht so einfach wie in den zuvor genannten Fällen, weil es eine neue wichtige Einflussgröße gibt: die Coulombwechselwirkung. Elektronen in offenen d-Schalen wie in Iridium spüren diese Wechselwirkung verstärkt, weshalb verschiedenste Energieskalen wie Wechselwirkung, Spin-Orbit-Kopplung oder kinetische Energie in geeigneter Weise berücksichtigt werden müssen. Als Resultat können isolierende Zustände erreicht werden, die ohne dieses Zusammenspiel nicht möglich wären.<sup>2</sup>

Zur Diskussion eines Phasendiagramms mit elektronischen Wechselwirkungen dienen als Beispiel wiederum Graphen. In Abb. 3 sind unterschiedliche Phasen dargestellt, abhängig von zwei Parametern im System, der Coulombwechselwirkung und einem (fiktiven) Kristallfeld. Man kann leicht erkennen, dass jetzt zusätzliche Phasen auftreten können. Wird die Coulombwechselwirkung stark genug (großes  $U$ ), so geht das System von einem topologischen Isolator in einen magnetischen Zustand über. Auf der anderen Seite wird der topologische Isolator zu einem normalen Bandisolator, wenn das Kristallfeld einen gewissen Schwellwert übersteigt.

Unsere aktuelle Forschung zielt darauf ab, das Zusammenspiel von topologischen Zuständen mit elektronischen Korrelationen besser zu verstehen und Phasendiagramme wie in Abb. 3 für konkrete Systeme zu untersuchen. Dafür ist es notwendig, von so wenigen Inputparametern wie möglich auszugehen. Das Ziel soll nämlich sein, mittels computerunterstützter Simulationen das Verhalten von korrelierten topologischen Isolatoren vorhersagen zu können. Durch dieses Materials-Design-Verfahren wird das Auffinden von neuen Materialien stark vereinfacht. ■



© Robert Tiedl, Master Thesis, TU Graz 2014

cal substitution or external driving parameters, such as pressure. The drawback is that the theoretical description of these materials is much more complicated and involved because we have to deal with a new player in the game: Coulomb interaction. Electrons in open d shells as in iridium are particularly susceptible to this interaction, which means that we have to include several different energy scales (Coulomb interaction, spin-orbit coupling, kinetic energy) on an equal footing. As a result, insulating states can be realized in these materials which would otherwise be impossible without the cooperation of all these effects.<sup>2</sup>

For an illustration of a phase diagram including electronic correlations, let's take the example of graphene again. In Fig. 3 we show the different phases that can occur as a function of two parameters in the system: the Coulomb interaction and a (fictitious) crystal field. As can be easily seen, we have additional phases due to interactions which are not present at  $U=0$ . For large enough interactions (large  $U$ ) the topological phase is replaced by a magnetic one. On the other hand, the topological insulator is transformed into a normal band insulator as soon as the crystal field is larger than a certain threshold.

Our present research focuses on the question as to how the topological properties are modified by electronic correlations and vice versa, and we want to investigate phase diagrams like the one in Fig. 3 for real materials. For this purpose it is necessary to work basically without input parameters for the calculations. The final goal is to use computer-aided methods in order to predict the properties of correlated topological materials. This approach to materials design will substantially simplify the procedures to find new materials with new properties. ■

#### Literatur/References:

<sup>1</sup> Ein ausführlicher Review zu diesem Thema/ For an extensive review, see Colloquium: Colloquium: Topological insulators, M. Z. Hasan and C. L. Kane, Reviews of Modern Physics 82, 3045 (2010).

<sup>2</sup> Reduced Effective Spin-Orbital Degeneracy and Spin-Orbital Ordering in Paramagnetic Transition-Metal Oxides:  $Sr_2IrO_4$  versus  $Sr_2RhO_4$ , C. Martins, M. Aichhorn, L. Vaugier, and S. Biermann, Physical Review Letters 107, 266404 (2011).