

# Dirac-halfmetalen met holografische wisselwerkingen

## Bruggen bouwen tussen vastestoffysica en snaartheorie

**Dirac-halfmetalen zijn nieuwe vormen van materie waarin de elektronen zich gedragen volgens de wetten van de relativistische quantummechanica. Dit leidt tot ongewone eigenschappen, interessant vanuit een fundamenteel oogpunt en voor technologische toepassingen. In mijn promotieonderzoek heb ik het effect van sterke wisselwerkingen in Dirac-halfmetalen bestudeerd met behulp van een nieuwe techniek die ontwikkeld is in de snaartheorie.**

Vivian Jacobs

### Elektronische bandenstructuur

Dit artikel gaat over driedimensionale Dirac-halfmetalen. Om beter te begrijpen wat deze materialen bijzonder maakt, is het nuttig om eerst kort te bespreken hoe de theoretische natuurkunde materie beschrijft. Materialen worden in de vastestoffysica vaak geclassificeerd naar de vorm van hun elektronische bandenstructuur. Deze kan sterk verschillen tussen materialen en heeft grote gevolgen voor de eigenschappen van materialen.

Vivian Jacobs (1988) studeerde theoretische natuurkunde in Utrecht. In 2011 begon ze met haar promotieonderzoek onder begeleiding van Henk Stoof en Stefan Vandoren naar toepassingen van snaartheorie in sterk gecorreleerde fermionische systemen.



vpj.jacobs@gmail.com

Een elektrische stroom kan gezien worden als een plas elektronen die zich vrijelijk kunnen voortbewegen door een materiaal, aangedreven door een elektrisch veld. Hoe komt deze plas geleidingselektronen tot stand? Elektronen zijn fermionen, identieke deeltjes met een antisymmetrische golf functie. Dit betekent dat een bepaalde energietoestand bezet kan zijn door slechts één elektron. Als dit de laagst mogelijke energietoestand is, zullen de overige elektronen een hogere energietoestand moeten innemen. Welke energietoestanden mogelijk zijn, wordt beschreven door de bandenstructuur. Niet elke energie is bereikbaar, er kan dus sprake zijn van een energiebarrière om een grote plas geleidingselektronen te creëren. De geleidings-eigenschappen van een materiaal hangen af van de grootte van deze energiebarrière, die bandkloof wordt genoemd.

In een geleider kunnen veel elektronen zonder benodigde extra ener-

gie aan de plas worden toegevoegd. Metalen zoals koper zijn hiervan een voorbeeld. Is de barrière om elektronen aan de stroom geleidende plas toe te voegen echter zeer groot, dan zal de poel leegstaan en is dit materiaal een isolator. Als de thermische energie zo groot is dat een niet verwaarloosbaar aantal elektronen de bandkloof kan overwinnen, is het een halfgeleider. Halfgeleiders worden veel gebruikt in de elektronica omdat hun geleidings-eigenschappen goed te beheersen zijn. De laatste mogelijkheid is een halfgeleider waarbij de bandkloof tot nul gekrompen is, maar waar desondanks nog steeds weinig elektronen de plas zullen vullen, we spreken hier van een kleine toestandsdichtheid. Zulke materialen hebben kenmerken van zowel metalen als halfgeleiders en worden daarom halfmetalen genoemd.

### Dirac-halfmetalen

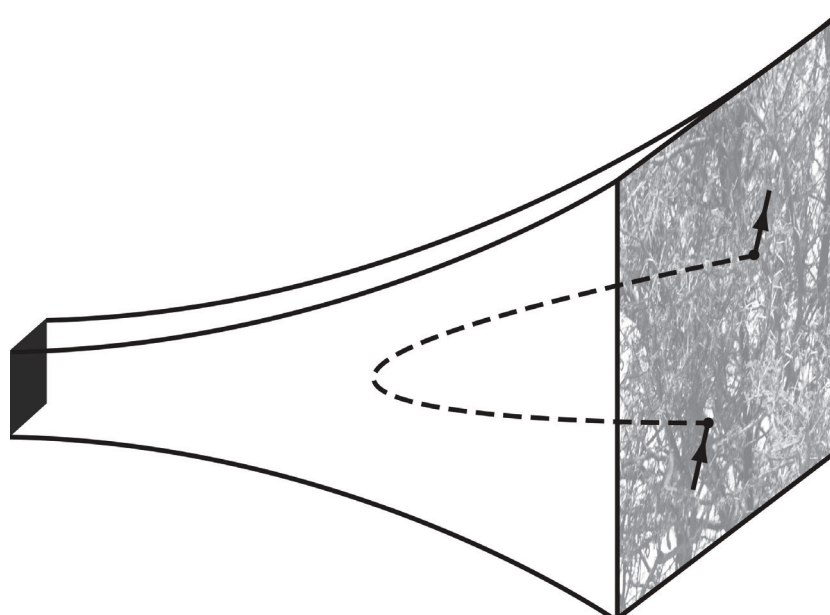
Een Dirac-halfmetaal is een halfmetaal waarbij de elektronen zich gedragen als massaloze oplossingen van de

Diracvergelijking. De Diracvergelijking beschrijft relativistische fermionen. De energie van deze deeltjes is lineair in de impuls, in tegenstelling tot de kwadratische dispersierelatie van niet-relativistische deeltjes. Het punt in de impulsruimte waar de energie nul is, wordt het Diracpunt genoemd. Het bekendste Dirac-halfmetaal is grafeen, een koolstofmembraan van één atoom dik dat daarom een tweedimensionaal materiaal genoemd wordt. In dit onderzoek behandelen we echter uitsluitend het driedimensionale zusje van grafeen, Dirac-halfmetalen in drie ruimtelijke dimensies. Hoewel al voorspeld in de jaren dertig van de vorige eeuw, zijn driedimensionale Dirac-halfmetalen pas in 2013 voor het eerst in een laboratorium waargenomen, in onder andere het kristal  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  [1].

Het bestaan van Diracpunten is bijzonder, want de energiebanden die bij het verdwijnen van de bandkloof dicht bij elkaar komen te liggen, stoten elkaar meestal af als gevolg van quantumfluctuaties. Het blijkt dat de relativistische fysica rond het Diracpunt een emergente eigenschap is die voortkomt uit het samenspel tussen de vele elektronen en atomen in het kristalrooster. Zoals vaak in de natuurkunde speelt de onderliggende symmetrie hierbij een grote rol, in dit geval de ruimtelijke symmetrie van het kristalrooster. In materialen zoals  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  blijkt de totstandkoming van Diracpunten het gevolg te zijn van de invariantie van de kristalstructuur onder een specifieke tetragonale symmetrie. Deze legt beperkingen op aan de bandenstructuur waaronder de eis dat er banden zijn die elkaar bij een Diracpunt moeten kruisen [2]. Als deze discrete rotatiesymmetrie gebroken wordt, kan er een bandkloof ontstaan op het Diracpunt, waardoor het ophoudt te bestaan.

### Fundamenteel en toepassingsgericht onderzoek

Driedimensionale Dirac-halfmetalen zijn net als grafeen erg interessant voor zowel theoretici als voor experimentatoren, omdat ze een nieuwe toepassing van de Diracvergelijking vormen in de vastestoffysica, naast de deeltjesfysica. Ze bieden de mogelijkheid om fundamenteel onderzoek te verrichten aan relativistische fysica in het vastestofflaboratorium.



**Figuur 1** Voorstelling van de holografische techniek. Het vierdimensionale Anti-de Sitter-universum is schematisch afgebeeld, de gekromde lijnen geven de kromming van de ruimtetijd aan. Helemaal links, diep in het universum bevindt zich een zwart gat. Op de driedimensionale, vlakke rand van het universum, helemaal rechts, leeft de 'quantumsoep', de sterk gecorreleerde quantumveldentheorie. De berekening van een correlatiefunctie in dit systeem (zwarte pijlen) wordt vereenvoudigd door de vierde dimensie in te gaan (stippellijn), alwaar de effecten van zwaartekracht de gewenste beschrijving geven.

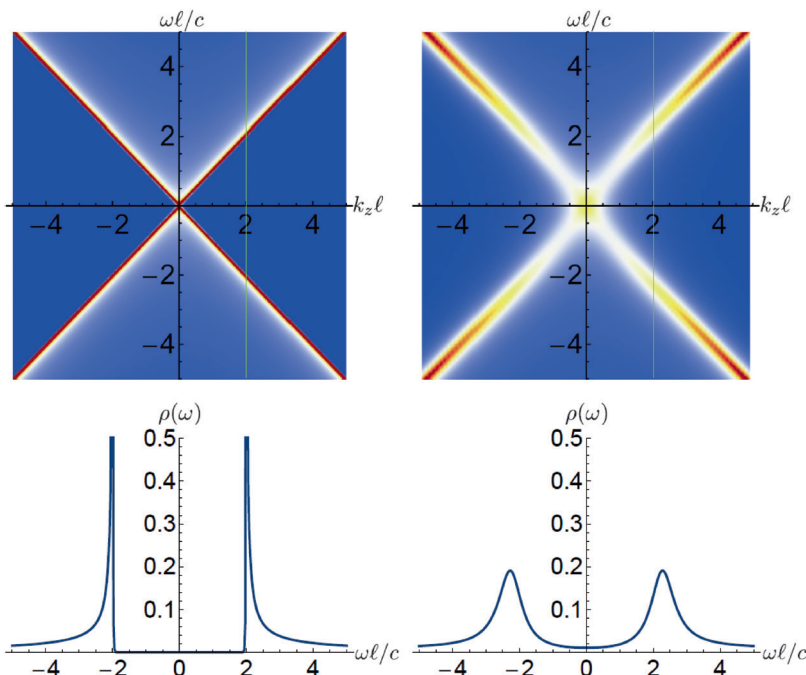
Vanwege de specifieke geleidingseigenschappen bieden deze materialen ook perspectief op nieuwe technologische toepassingen. Dirac-halfmetalen zijn de basis voor een gelijkend type materiaal, de zogenaamde Weyl-halfmetalen, die zeer recent experimenteel bevestigd zijn [3]. Weyl-halfmetalen hebben in plaats van Diracpunten zogenaamde Weylpunten. De excitaties rond een Weylpunt gedragen zich als chirale fermionen, waardoor deze punten beschermd zijn tegen verstoringen van buitenaf, oftewel, ze zijn topologisch beschermd. Als gevolg hiervan vindt nog een andere vorm van ladingstransport plaats, waarbij een stroom kan lopen zonder warmteontwikkeling in de richting loodrecht op het aangelegde elektrische veld [4]. Het is deze eigenschap die Weyl-halfmetalen interessant maakt voor praktische toepassingen. Het transport van elektronen in conventionele materialen leidt tot opwarming en daardoor tot een grens aan bijvoorbeeld de rekensnelheid van computers. Het verliesloos transport in Weyl-halfmetalen lost dit probleem op en maakt dus in theorie snellere computers mogelijk. Voordat dit zover is, is er meer fundamenteel begrip nodig van het effect van elektronische wisselwerkingen op ladingstransport

in deze materialen, en dat is precies waar we nu naar zullen kijken.

### Effect van wisselwerkingen

Tot zover hebben we alleen vrije elektronen besproken, maar vaak spelen wisselwerkingen een rol in deze materialen. Deze worden theoretisch beschreven door de elektronen te koppelen aan andere vrijheidsgraden die hun eigen dynamica hebben. Een voorbeeld hiervan zijn elektronen die gekoppeld worden aan fotonen, de overbrengers van de elektromagnetische kracht, wat uiteindelijk leidt tot de Coulombwisselwerking tussen elektronen. Maar ook het gedrag in de buurt van een faseovergang kan op deze manier beschreven worden.

In dit onderzoek beschrijven we zulke wisselwerkingen in Diracpunten door middel van een sterk gecorreleerde quantumveldentheorie, een complex systeem waarmee het lastig rekenen is. Dit komt doordat we in dit geval rekening moeten houden met veel ingrediënten tegelijk die allemaal alle andere ingrediënten voelen. Toch is het mogelijk om dit systeem indirect te beschrijven, via de zogenaamde holografische techniek. Het gaat hier dus over holografische wisselwerkingen, en dit verklaart het tweede deel van de titel.



**Figuur 2** Spectrale dichtheidsfunctie  $\rho$  voor twee waarden van de dimensieloze temperatuur  $T^* = k_B T l / c$ , met  $l$  de AdS-straal. Links:  $T^* = 1/30$ , rechts:  $T^* = 1$ . Bovenste rij: dichtheidsplots als functie van frequentie  $\omega$  en component van de golfvector  $k_z$ . Onderste rij: spectrale dichtheidsfunctie voor  $k_z l = 2$ .

Ons onderzoek spitst zich toe op het berekenen van de spectrale dichtheidsfunctie en elektrische conductiviteit van sterk gekoppelde Dirac-halfmetalen. Deze correlatiefuncties zijn experimenteel meetbaar, de spectrale dichtheidsfunctie bijvoorbeeld kan gemeten worden via foto-emissie-experimenten. Dit onderzoek levert dus naast inzicht in de interacties in Dirac-halfmetalen, mogelijk een belangrijke bijdrage om holografische technieken in contact te brengen met de experimentele wereld. Voordat we onze belangrijkste resultaten bespreken, vertellen we iets meer over de holografische techniek.

### Holografie

Een hologram is een tweedimensionaal object waarmee een driedimensionaal beeld gevormd kan worden door er licht op te schijnen. Met de term holografie bedoelen we in dit artikel net iets anders, namelijk het holografische principe. Dit principe zegt dat de natuurkundige beschrijving van een volume in de ruimtetijd versleuteld is in het oppervlak, dus een gebied met een dimensie lager, dat dit volume omgeeft. Dit idee komt voort uit de zoektocht van vele wetenschappers naar de hereniging van de quantummechanica met de algemene relativiteitstheorie van Einstein en is

uiteindelijk door Gerard 't Hooft geformuleerd in 1993.

Gecombineerd met oudere aanwijzingen over de overeenkomsten tussen een bepaalde theorie van quantumzwaartekracht – de zogenaamde snaartheorie – en de quantumchromodynamica – de theorie die quarks beschrijft – was dit de opmaat voor de doorbraak die in 1998 gemaakt werd door Juan Maldacena: de AdS/CFT-correspondentie [5]. Dit is een dualiteit, een exacte wiskundige overeenkomst tussen twee ogenschijnlijk verschillende theorieën. Maldacena liet zien dat dit eigenlijk twee manieren zijn om naar hetzelfde systeem te kijken. Net zoals bij een hologram gaat het om een natuurkundig systeem dat een zustertheorie heeft in één dimensie meer.

De sterk gecorreleerde quantumveldentheorie die de interacties tussen Dirac-fermionen beschrijft, heeft een zustertheorie waarin zwaartekracht een rol speelt. Het is een Anti-de Sitter-universum in vier ruimtelijke dimensies, een oplossing van de Einsteinvergelijking in de algemene relativiteitstheorie, met negatieve kromming en een zwart gat in het midden. Het cruciale aan de Anti-de Sitter-geometrie is dat dit universum een driedimensionale rand heeft, waarop de veldentheorie leeft. In de analogie met

het hologram is de veldentheorie dus de holografische plaat en het Anti-de Sitter-universum het driedimensionale holografische beeld.

De holografische techniek is een toepassing van de AdS/CFT-correspondentie die we in mijn promotieonderzoek verkend hebben. Het mooie hiervan is dat de thermodynamica van zwarte gaten en de fysica in de bijbehorende gekromde ruimtetijd een eenvoudiger beschrijving vormen van de quantumveldentheorie op de rand van het universum. Zoals uitgebeeld is in figuur 1, kan dit gebruikt worden als een werktuig om resultaten te krijgen in de complexe veldentheorie, door te rekenen aan de gravitationele kant.

### Kortlevende excitaties

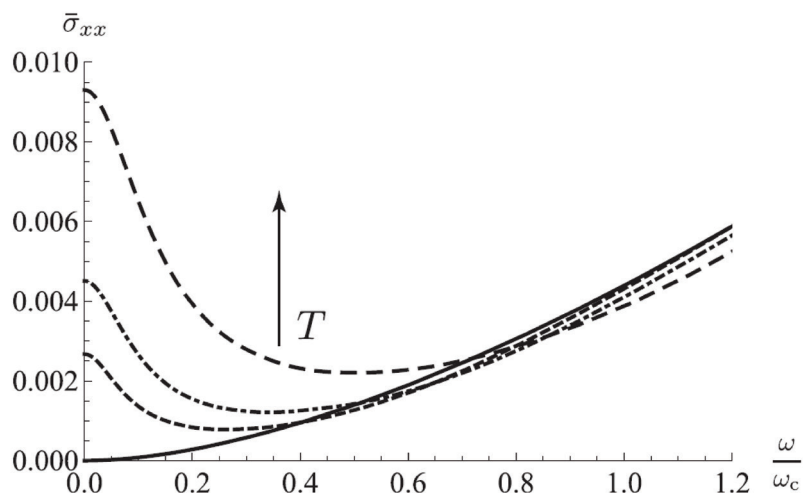
De resultaten voor de spectrale dichtheidsfunctie in de aanwezigheid van holografische wisselwerkingen zijn te zien in figuur 2. Het belangrijkste effect van holografische wisselwerkingen is dat de stroomgeleiding niet meer door vrije elektronen gebeurt. In plaats hiervan ontstaat een nieuw soort excitaties, die snel vervallen en daarom niet meer te beschrijven zijn als elektronen. In onze resultaten in figuur 2 zien we deze exotische excitaties terug als relatief brede pieken in de spectrale dichtheidsfunctie, in plaats van een deltafunctie van het kwadraat van de vierimpuls, zoals voor Dirac-halfmetalen zonder wisselwerkingen het geval zou zijn. Deze brede pieken gedragen zich voor lage energie en temperatuur als een machtswet in de vierimpuls. De macht is een parameter in het holografische model en hangt van het specifieke materiaal af.

De elektrische soortelijke geleidbaarheid als functie van de frequentie van het aangelegde elektrische veld is te zien in figuur 3. Het effect van de wisselwerkingen is dominant bij lage frequentie, wat onder andere leidt tot een piek in de geleidbaarheid die schaal met een fractionele macht van de temperatuur. Naarmate de frequentie van het elektrische veld toeneemt, verandert het karakter van de ladingsdragers steeds meer in de richting van vrije elektronen.

### Tot slot

De holografische techniek is sinds 1998 door veel wetenschappers ge-

bruikt voor toepassingen in onder andere de gecondenseerde materie [6] en de quantumchromodynamica. We laten zien dat het mogelijk is om deze techniek ook in sterk gecorreleerde Dirac-halfmetalen toe te passen, door deze te koppelen aan een veldentheorie met een duale gravitationele beschrijving. De resultaten voor de spectrale dichtheidsfunctie en de conductiviteit zijn theoretische voorspellingen die in experimenten met Dirac-halfmetalen getest kunnen worden. Ten eerste leiden onze resultaten tot beter inzicht in het gedrag van deze materialen wanneer ze sterk gecorreleerd zijn, zoals bij een faseovergang het geval is. Vooral begrip van de effecten op ladingstransport kan bijdragen aan de ontwikkeling van nieuwe technologie. Er is nog veel werk te doen voor we een complete theoretische beschrijving hebben. De resultaten die hier gepresenteerd zijn, moeten gezien worden als een eerste stapje in een nieuwe onderzoeksrichting. We zijn in het bijzonder geïnteresseerd in de effecten van sterke wisselwerkingen op topologische eigenschappen zoals het verliesvrije transport in Weyl-halfmetalen, dit is dan ook het onderwerp van actueel onderzoek.



**Figuur 3** Elektrische conductiviteit als functie van de frequentie van het elektrische veld, dimensionieloos gemaakt met de frequentieschaal  $\omega_c$  uit het holografische model. Bij lage frequentie ontstaat een piek in de conductiviteit die schaal met de temperatuur.

Ten tweede biedt dit onderzoek nieuwe mogelijkheden voor een experimentele test van de holografische techniek. Hieruit kunnen we leren of en hoe deze techniek geoptimaliseerd kan worden voor realistischer resultaten. Het is mooi om te zien dat het fundamentele natuurkundige onderzoek naar de eenwording van quantummechanica en zwaartekracht leidt tot onverwachte toepassingen zoals deze holografische techniek, die uiteindelijk zullen leiden tot een beter

begrip van de complexe fysica van sterk gecorreleerde systemen.

### Referenties

- 1 S. Borisenko et al., *Phys.Rev.Lett.* **113**, 027603 (2013).
- 2 Z. Wang et al., *Phys. Rev. B* **88**, 125427 (2013).
- 3 S.-Y. Xu et al., *Science* **349**, 613 (2015).
- 4 A.A. Zyuzin et al., *Phys. Rev. B* **86**, 115133 (2012).
- 5 J.M. Maldacena, *Adv. Theor. Math. Phys.* **2**, 231 (1998).
- 6 M. Cubrovic et al., *Science* **325**, 439 (2009).

## Reactie

### Laagste temperatuur

Met plezier heb ik het artikel van Peruzzi en Van den Brom in NTvN 82-02 gelezen (*Opwarming van de aarde, hoe meet je dat?*). Op een gegeven moment kreeg ik echter toch de indruk dat er een stukje informatie ontbrak.

Onder het kopje *Historie* wordt eerst gemeld dat met ouderwetse kwikthermometers de maximum- en minimum

temperaturen in de logboeken werden bijgehouden. Kort daarop wordt verteld dat het Russische station Oymyakon in 1933 de laagste temperatuur in bewoond gebied gemeten heeft en wel  $-67,7^\circ\text{C}$ .

Dat deze twee zinnen kort op elkaar volgen, suggereert dat in 1933 die extreem lage temperatuur óók met een

kwikthermometer gemeten zou zijn. Echter, kwik wordt vast bij  $-39^\circ\text{C}$  zodat een dergelijke thermometer bij lagere temperaturen onbruikbaar wordt. Het zou interessant zijn om te weten wat voor thermometer er dan wel in Oymyakon gebruikt is.

Peter Steur

### Laagste temperatuur

De heer Steur merkt terecht op dat de temperatuur van  $-67,7^\circ\text{C}$  in Oymyakon niet met een kwikthermometer kan zijn gemeten vanwege het smeltpunt van kwik bij  $-39^\circ\text{C}$ . Hoewel dat ook niet in het artikel staat, zou

het inderdaad uit de context kunnen worden geconcludeerd. De metingen in Oymyakon zijn waarschijnlijk gedaan met een toluen- of alcoholthermometer. De smeltpunten van toluen en alcohol zijn respectievelijk

$-93^\circ\text{C}$  en  $-114^\circ\text{C}$ , en de thermometers gebaseerd op deze vloeistoffen werken typisch tot respectievelijk  $-80^\circ\text{C}$  en  $-100^\circ\text{C}$ .

Andrea Peruzzi en Helko van den Brom