

포톤위상학적절연체에서 분산관계의 위상기하학적특성

박명철, 박학철, 리국섭

위대한 령도자 김정일동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《우리는 과학기술분야에서 이룩한 성과에 만족하지 말고 나라의 과학기술을 새로운 높은 단계으로 발전시키기 위하여 적극 투쟁하여야 합니다.》(《김정일선집》 증보판 제11권 133페이지)

응축상태계에서 전자기파의 전파에 대한 연구는 지금까지 주로 구조적변화 혹은 물질의 유전률이나 투자률과 같은 매질상수특성을 조절하는 방법으로 진행되어왔다. 최근에는 응축상태물질의 위상기하학적특성[1]을 조절하는 방법으로 물질의 광학적성질을 변화시키는 연구사업이 벌어지고있다. 대표적으로 위상기하학적특성을 리용하여 이질구조환경 속에서도 오직 한방향으로만 전자기파를 전파하도록 하고 거울산란을 차폐하는 물질 및 구조체에 대한 연구가 진행되고있다. 이것을 포톤위상학적절연체(Photonic Topological Insulator: PTI)라고 한다.[2, 3] 포톤위상학적절연체는 일반적으로 홀상태 및 카이랄모서리 상태를 보존하는 특성을 가지고있다. 대체로 이 물질들에서는 시간반전대칭성이 파괴된다. 공간반전대칭성이 파괴되고 시간반전대칭성이 파괴되지 않는 물질도 있다. 전자계와 광학계를 련관시킨 포톤위상학적절연체를 리해하고 응용하자면 주파수분산관계의 베리곡률이나 체수와 같은 위상기하학적특성을 알아야 한다.

본문에서는 홀데인모형[1]과 유사한 포톤위상학적절연체의 주파수분산관계를 결정하고 그것의 위상기하학적특성인 체수분포를 논의하였다.

홀데인모형과 유사하게 룩방살창모양으로 공기구멍원기둥이 주기적으로 배열된 유전률이 ε 인 유전체를 고찰하자.(그림 1의 Γ) 이때 살창상수를 a 라고 하면 원기둥의 반경은 $r_1 = \alpha_1 a$ 이다. 유전체가 반경이 다른 구멍을 가지고있거나 구멍이 다른 물질로 채워진 결함을 가지고있으면 띠틈안의 주파수를 가지는 공진기를 만들수 있다. 결함들을 주기적으로 배열하면 원래의 띠틈속에 띠구조를 만들수 있다. 여기서 결함들의 배열은 반경이 $r_2 = \alpha_2 a$ 인 자기광학적물질을 리용하여 형성할수 있는데 결함물질의 유전률은

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_r & -i\varepsilon_i & 0 \\ i\varepsilon_i & \varepsilon_r & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_r \end{bmatrix} \quad (1)$$

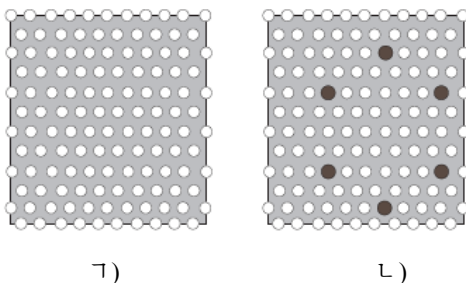


그림 1. 기본절연매질과 공기구멍으로 형성된 포톤결정(Γ)과 공기-구멍매질속에 룩방결함으로 배열된 자기광학적원기둥(Γ)

이다. 이것들을 그림 1의 Γ 에서 보여준것처럼 살창상수 $a' = \alpha_3 a$ 인 룩방살창으로 배열한다. 룩방대칭성에 의하여 편극되지 않은 결함($\varepsilon_i = 0$)들에 대하여서는 Γ 점과 K 점모드들에서 축퇴가 생긴다. 시간반전대칭성은 원기둥들에 평행인 편극($\varepsilon_i \neq 0$)을 적용하여 파괴시킬수 있는데 그러면 축퇴가 풀리게 된다.

띠구조를 결정하기 위하여 고유값방정식 $Hf_{nk}(\mathbf{r}) = E_{nk}f_{nk}(\mathbf{r})$ 와 막스웰방정식을 적용하여 문제를 간단히 풀수 있다. 이때 TE 모드들은 무한원기둥에 평행인 자기마당성분 H_z 를 가지며 전기마당은 자기마당에 수직인 면에 놓이게 된다. 이때 하밀토니안은

$$H(\hat{z}H_z) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 (\hat{z}H_z) \quad (2)$$

로서 연산자 $H = \nabla \times \varepsilon^{-1} \nabla \times$ 는 매질손실이 없을 때 에르미트연산자로 된다. 이렇게 하면 H_z 에 대한 스칼라방정식을 풀수 있다.

일반적으로 벌집살창은 2개의 비등가위치 A, B를 가지고있는데 매개가 서로 다른 상태 $p_{x,y}$ 를 가지고있다. 그러면 문제는 유효4띠하밀토니안을 푸는 문제로 넘어간다. 다음 블로흐정리를 리용하면 파동함수 $f_{nk}(\mathbf{r}) = H_z(\mathbf{r})$ 는

$$f_{nk}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \sum_{\beta=A, B} \sum_{\alpha=x, y} c_{\alpha}^{\beta} \phi_{p\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_{\beta} - \mathbf{R}) \quad (3)$$

로 전개된다. 이때 \mathbf{R} 는 살창벡토르이고 ϕ 는 매 모드에 대한 함수이다.

고유값방정식에 $\phi_{p\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_{\gamma})$ 를 곱하고 적분을 실시한 다음 직교성을 고려하면 다음과 같은 유효4띠에르미트하밀토니안행렬을 얻을수 있다.

$$H = \begin{bmatrix} \omega_0 & g_{xy}^{AA}(\mathbf{k}) & g_{xx}^{AB}(\mathbf{k}) & g_{xy}^{AB}(\mathbf{k}) \\ g_{xy}^{AA*}(\mathbf{k}) & \omega_0 & g_{yx}^{AB}(\mathbf{k}) & g_{yy}^{AB}(\mathbf{k}) \\ g_{xx}^{AB*}(\mathbf{k}) & g_{yx}^{AB*}(\mathbf{k}) & \omega_0 & g_{xy}^{BB}(\mathbf{k}) \\ g_{xy}^{AB*}(\mathbf{k}) & g_{yy}^{AB*}(\mathbf{k}) & g_{xy}^{BB*}(\mathbf{k}) & \omega_0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

여기서

$$g_{\gamma\delta}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} H_{\gamma\delta}^{\alpha\beta}(\mathbf{R}) \quad (5)$$

이며 $H_{\gamma\delta}^{\alpha\beta}(\mathbf{R})$ 는

$$H_{\gamma\delta}^{\alpha\beta}(\mathbf{R}) = \int d\mathbf{r} \phi_{p\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_{\gamma}) H \phi_{p\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_{\delta} - \mathbf{R}) \quad (6)$$

의 형태를 가진 포갠 및 호핑적분들이다. 그리고 $H_{\gamma\gamma}^{\alpha\alpha}$ 는 행렬의 대각선성분들이며 고유에너지와 관련되어있다.

$$\begin{aligned} H_{\gamma\gamma}^{\alpha\alpha}(\mathbf{R}) &= \int d\mathbf{r} \phi_{p\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_{\gamma}) H \phi_{p\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_{\gamma} - \mathbf{R}) \approx \int d\mathbf{r} \phi_{p\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_{\gamma}) H_{\gamma} \phi_{p\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_{\gamma} - \mathbf{R}) = \\ &= \omega_0 \int d\mathbf{r} \phi_{p\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_{\gamma}) \phi_{p\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_{\gamma} - \mathbf{R}) = \begin{cases} \omega_0, & \mathbf{R} = 0 \\ 0, & \mathbf{R} \neq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (7)$$

여기서 H_{γ} 는 고립된 결함모드의 하밀토니안이다. 비대각선성분들을 계산할 때 기여몫을 고려하여 오직 최린접성분들만을 취급한다.

모드 $\phi_{p_{xy}}$ 당 2개의 궤도들이 존재하기때문에 $g_{\gamma\delta}^{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ 값을 직접 평가하기는 힘들다. 그래서 논문에서는 다음과 같은 두중심호상작용적분을 리용하여 이 문제를 해결하였다.

$$H_{\gamma\delta}^{\alpha\beta}(\mathbf{R}) = \int d\mathbf{r} \phi_{p\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_{\gamma}) H \phi_{p\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_{\delta} - \mathbf{R}) = \begin{cases} l_{\alpha}^2 V_{\sigma} + (1 - l_{\beta}^2) V_{\pi} & (\alpha = \beta = x, y) \\ l_{\alpha} l_{\beta} (V_{\sigma} - V_{\pi}) & (\alpha \neq \beta) \end{cases} \quad (8)$$

여기서 l_x, l_y 는 방향코시누스로서 $l_\alpha = \alpha \cdot \mathbf{R} / |\mathbf{R}|$ 이다. $\mathbf{R} = \mathbf{R}_1$ 에 대하여서는 $l_x = 1, l_y = 0$, $\mathbf{R} = \mathbf{R}_2$ 에 대하여서는 $l_x = -1/2, l_y = \sqrt{3}/2$, $\mathbf{R} = \mathbf{R}_3$ 에 대하여서는 $l_x = -1/2, l_y = -\sqrt{3}/2$ 이다. 따라서

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{R}} e^{ik \cdot \mathbf{R}} H_{ABxx}(\mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{R}} e^{ik \cdot \mathbf{R}} \int d\mathbf{r} \phi_{px}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_A) H \phi_{px}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_B - \mathbf{R}) = \\ &= e^{-ik_x a / \sqrt{3}} V_\sigma + \cos(k_y a / 2) e^{-ik_x a / (2\sqrt{3})} \left(\frac{1}{2} V_\sigma + \frac{3}{2} V_\pi \right) \end{aligned} \quad (9)$$

이다. 다른 성분에 대해서는

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{R}} e^{ik \cdot \mathbf{R}} H_{AByy}(\mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{R}} e^{ik \cdot \mathbf{R}} \int d\mathbf{r} \phi_{px}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_A) H \phi_{py}(\mathbf{r} - \mathbf{d}_B - \mathbf{R}) = \\ &= -2i \sin(k_y a / 2) e^{-ik_x a / (2\sqrt{3})} \frac{\sqrt{3}}{4} (V_\sigma - V_\pi) \end{aligned} \quad (10)$$

이다. 다른 원소들도 유사한 형식으로 평가할수 있다. 선행연구[4]의 파라메터를 리용하면 $\varepsilon_r = 16$ 이고 $r_1 = 0.35a$, $r_2 = 0.5a$, $a' = 6a$ 이다. 살창상수 a 에 의하여 행렬원소들을 표시하면 최종행렬은 다음과 같다.(행렬이 에르미트행렬이므로 주대각선아래원소들은 생략하였다.)

$$H = \begin{bmatrix} \omega_0 & -iV_p & (3V_\pi/2 + V_\sigma/2) \cos(3k_y a) e^{-i\sqrt{3}k_x a} + & -i\sqrt{3}/2 \sin(k_y a/2) \cdot \\ & & + V_\sigma e^{i2\sqrt{3}k_x a} & \cdot e^{-ik_x a / (2\sqrt{3})} (V_\sigma - V_\pi) \\ & & -i\sqrt{3}/2 \sin(k_y a/2) \cdot & (3V_\sigma/2 + V_\pi/2) \cos(3k_y a) e^{-i\sqrt{3}k_x a} + \\ \omega_0 & & \cdot e^{-ik_x a / (2\sqrt{3})} (V_\sigma - V_\pi) & + V_\pi e^{-i2\sqrt{3}k_x a} \\ & & \omega_0 & -iV_p \\ & & & \omega_0 \end{bmatrix} \quad (11)$$

결합적분 V_σ, V_π 는 모의코드에서 얻은 띠구조와 맞추어 평가할수 있다. 우선 자화가 없을 때(시간반전불변성이 존재하는 경우) $V_\sigma = -0.01185$, $V_\pi = 0.000085$, $V_p = 0$ 이다. (V_p 는 동일한 원자에 대한 x 궤도와 y 궤도사이의 포갠이다.) 또한 자화가 존재하는 경우(시간반전대칭성이 파괴될 때($\varepsilon_i = 1$)) $V_\sigma = -0.01192$, $V_\pi = 0.000092$, $V_p = 0.0007$ 이다. 여기서 모든 항들은 라디안주파수 $2\pi c/a$ 단위로 평가되었다.

하밀토니안행렬 H_{nm} 을 리용하여 쉽게 고유값문제 $Hf_n = \omega_n f_n$ 을 풀수 있다. 결과들을 그림 2에서 보여주었는데 1)는 자기적편극이 없을 때이고 2)는 자기적편극이 존재하여 축퇴가 풀린 경우이다. 그림 2에서의 대표점들을 a' 살창에 관하여 표시하면

$$\Gamma = (0, 0), K = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a'}, \frac{2\pi}{3a'} \right), M = \left(\frac{2\pi}{3a'}, 0 \right). \quad (12)$$

베리곡률에 관한 식을 리용하여 체수를 결정하기 위하여서는 유효4띠하밀토니안의 도함수를 해석적으로 계산하는것이 편리하다.[1, 5] 행렬 H_{nm} 의 고유값 $\omega_n = E_n$ 은 기호풀이법을 리용하여 해석적으로 찾을수 있으며 고유함수 $|n\rangle$ 은 수값적으로 계산할수 있다. 거울살창의 제1브릴루앵구역에 대한 적분결과는 다음과 같은 체수로 결정된다.

$$C_n = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{BZ}} F_{xy}^n dk_x dk_y \quad (13)$$

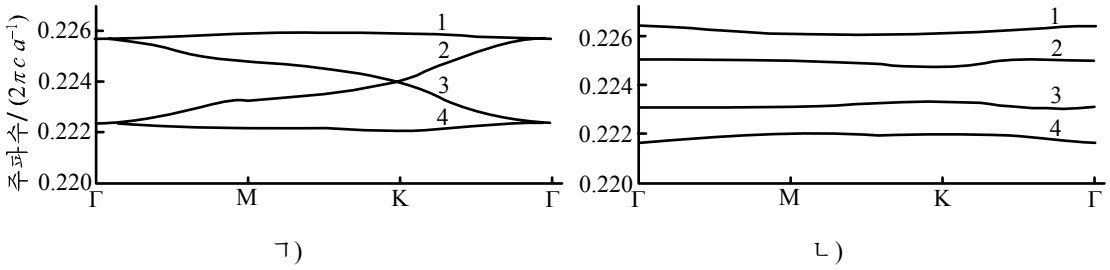


그림 2. 주파수분산관계

ㄱ) $V_p = 0$ 인 경우, ㄴ) $V_p \neq 0$ 인 경우

$V_p \neq 0$ 인 경우 띠 1, 4에 대하여 채수는 $C_{1,4} = \pm 1$ 이며 가운데 2개 띠에 대하여 채수는 $C_{2,3} = 0$ 이다. $V_p = 0$ 인 경우 모든 띠들에서 채수 $C_n = 0$ 이다. 모든 경우 때 띠들의 채수합은 0으로 되므로 계산결과는 위상기하학적성질을 원만히 설명한다.

$V_p = 0$ 인 경우 선행연구[1]의 식을 리용하여 수값계산을 진행할 때 베리곡률이 0으로 된다.

$V_p \neq 0$ 인 경우 때 띠의 베리곡률을 그림 3에서 k_x 와 k_y 의 함수로 표시하였다. 그림 3에서 보는바와 같이 $C_{2,3} = 0$ 인 두 띠에 대하여 베리곡률은 0을 가지므로 그것들을 적분하면 0으로 된다. $C_{1,4} = \pm 1$ 인 두 띠에 대하여서는 베리곡률이 짝성 즉 시누소이드 함수모양을 가지므로 적분하면 0이 아닌 옹근수로 된다.

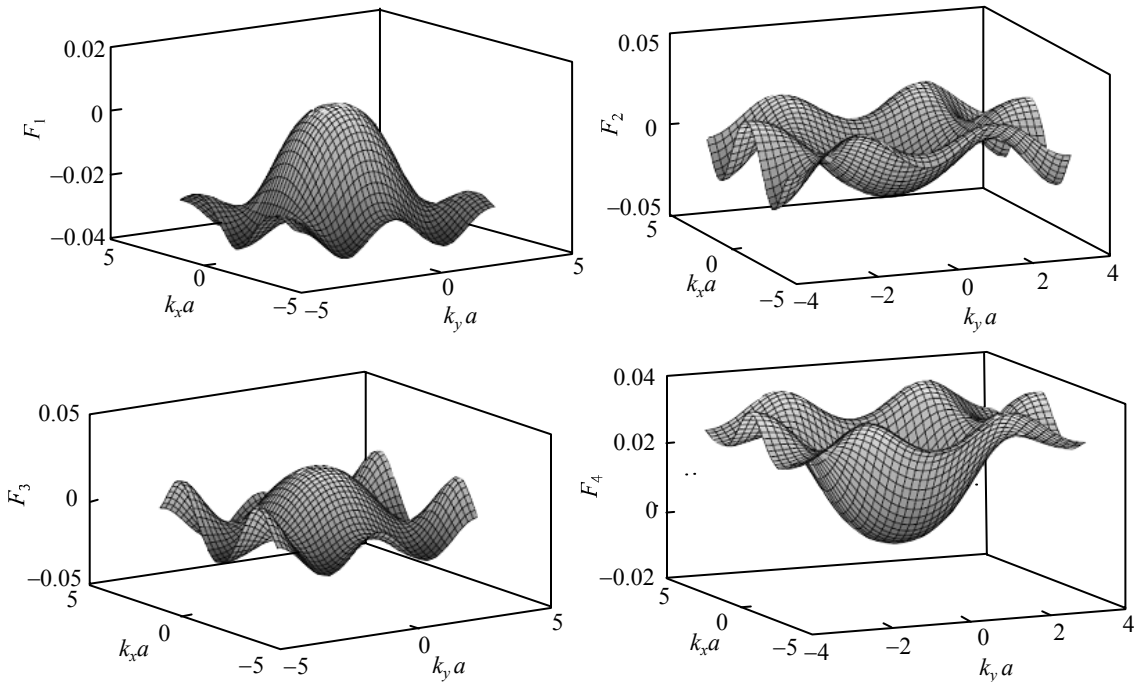


그림 3. 4개 띠에 해당하는 베리곡률

맺는 말

두중심호상작용적분을 리용하여 룡방구조를 가진 포톤위상학적절연체의 주파수분산 관계를 계산할수 있는 방법론을 제기하였다. 또한 자화가 존재할 때와 존재하지 않을 때 주파수분산관계에서 축퇴특성이 달라지고 위상기하학적특성인 체수분포가 달라진다는것을 알아내었다. 이것은 앞으로 포톤위상학적절연체속에서 전자기파의 전파특성을 연구하는데서 중요한 의의를 가지게 된다.

참고 문헌

- [1] 김일성종합대학학보(자연과학), 63, 2, 60, 주체106(2017).
- [2] M. C. Rechtsman et al.; Nature, 496, 196200, 2013.
- [3] M. C. Rechtsman et al.; Phys. Rev. Lett., 111, 103901, 2013.
- [4] Long-Hua Wu et al.; Phys. Rev. Lett., 114, 223901, 2015.
- [5] S. A. Skirlo et al.; Phys. Rev. Lett., 113, 113904, 2014.

주체106(2017)년 9월 5일 원고접수

Topological Properties of the Dispersion Relation in Photonic Topological Insulator

Pak Myong Chol, Pak Hak Chol and Ri Kuk Sop

We calculated the frequency dispersion relation in photonic topological insulator(PTI) and investigated its distribution of Chern number. By using the two-center interaction integrals we discussed a method for calculating the frequency dispersion relation in PTI with hexagonal structure. Also we found that the property of degeneration in the dispersion relation and the distribution of Chern number in the presence of the magnetization are different from the case in the absence of the magnetization.

Key words: photonic topological insulator, Chern number, dispersion relation