김일성종합대학학보 JOURNAL OF **KIM IL SUNG** UNIVERSITY
(자연과학) (NATURAL SCIENCE)
주체103(2014)년 제60권 제8호 Vol. 60 No. 8 JUCHE103(2014).

2차원위상학적절연체에서 모서리상태에 대한 연구

렴광일, 오성진

위대한 령도자 **김정일**동지께서는 다음과 같이 지적하시였다.

《모든 과학자, 기술자들이 과학기술발전의 추세에 맞게 첨단과학과 기초과학발전에 힘을 넣어 나라의 과학기술을 세계적수준에 올려세우도록 하여야 합니다.》(《**김정일**선집》 제20권 증보판 62페지)

위상학적절연체를 특징짓는 위상학적불변량과 모서리상태사이에는 밀접한 련관이 있다. 선행연구[1, 2]에서는 2차원위상학적(QSH)절연체의 매개 모서리에 있는 모서리상태들이 이루는 크라머스쌍의 개수의 짝홀성에 기초하여 Z_2 위상학적량자수를 정의하였다.

위상학적절연체를 특징짓는데서 모서리상태들은 스핀홀전도도의 량자화보다 더 본질적이다. 그것은 스핀이 보존되지 않는 경우에 스핀홀전도도는 의미를 잃게 되지만 모서리상태들은 여전히 존재하며 QSH상을 특징지어주기때문이다.

우리는 그라핀의 벌집형살창에서 강한 결합근사를 리용하여 이 모서리상태들을 계산하고 이것들이 위상학적절연체를 보통의 절연체와 구별해주는 일종의 위상학적불변량으로 된다는데 대하여 고찰하였다.

그라핀에서의 강한 결합모형하밀토니안은 다음과 같다.

$$H=-t\sum_{<ij>}c_i^{+}c_j+i\lambda_{SO}\sum_{<<ij>>}\nu_{ij}c_i^{+}s_zc_j+i\lambda_R\sum_{<ij>}c_i^{+}(\boldsymbol{s}\times\hat{\boldsymbol{d}}_{ij})_zc_j+\lambda_v\sum_i\xi_ic_i^{+}c_i$$

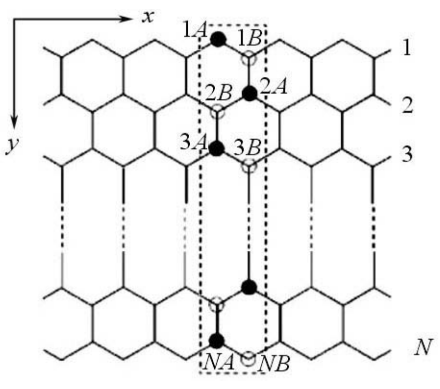

그림 1. 그라핀의 벌집형살창구조

모서리상태를 구하기 위하여 그림 1과 같이 x 축방향으로 무한하고 y 축방향으로 유한한 살창구조를 선택하였다. 이런 살창구조에서 x 축을 따라 푸리에변환 $c_\alpha^{+}(i)=\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_k e^{ikr_\alpha}c_k^{+}(i)$ 를 진행한다. 파동함수를 $\left|\Psi(k)\right\rangle=\sum_m[\psi_{mA}(k)c_{mA}^{+}(k)+\psi_{mB}(k)c_{mB}^{+}(k)]\left|0\right\rangle$ 으로 놓고 에네르기고유값에 대한 식 $H(k)\left|\Psi(k)\right\rangle=\varepsilon(k)\left|\Psi(k)\right\rangle$ 에 대입하면 다음의 방정식이 얻어진다.

$$\begin{aligned}\varepsilon\psi_{mA\sigma}=p_1\psi_{mB\sigma}+t\psi_{m-1B\sigma}+\mathrm{sign}(\sigma)p_3(\psi_{m+1A\sigma}+\\+\psi_{m-1A\sigma})+(\lambda_v-\mathrm{sign}(\sigma)p_2)\psi_{mA\sigma}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\varepsilon\psi_{mB\sigma}=p_1\psi_{mA\sigma}+t\psi_{m+1A\sigma}-\mathrm{sign}(\sigma)p_3(\psi_{m+1B\sigma}+\psi_{m-1B\sigma})+\\+(\mathrm{sign}(\sigma)p_2-\lambda_v)\psi_{mB\sigma}\end{aligned}$$

여기서 $p_1=2t\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ka\right)$, $p_2=2\lambda_{SO}\sin(\sqrt{3}ka)$, $p_3=2\lambda_{SO}\sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ka\right)$ 이다.

이 방정식들을 몇가지 경우에 풀어서 얻은 고유값들은 그림 2와 같다.

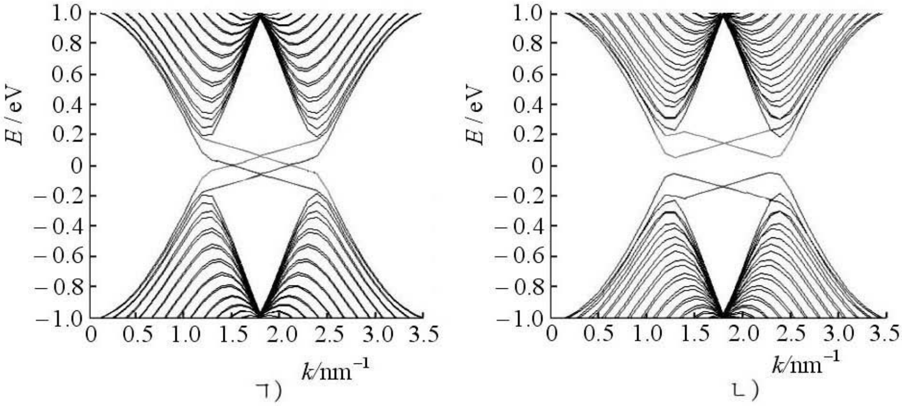

그림 2. 에네르기스펙트르

ㄱ) $\lambda_{SO}=0.02,\ \lambda_v=0.06,\ \lambda_R=0,\ t=1$, ㄴ) $\lambda_{SO}=0.02,\ \lambda_v=0.14,\ \lambda_R=0,\ t=1$

그림 2에서 보는바와 같이 ㄱ)의 경우에는 틈이 없는 모서리상태를 가지며 이때 계는 위상학적절연체로 된다는것을 알수 있다. 실지로 이 파라메터값들을 위상도표[1]와 비교하면 QSH상에 놓인다는것을 알수 있다. 한편 ㄴ)의 경우에는 틈이 존재하며 계는 보통의 절연체로 된다는것을 알수 있다. QSH절연체는 보통 시간반전대칭성과 스핀－궤도호상작용의 두가지 요인에 의해서 존재하는데 λ_v/λ_{SO} 값이 커진것은 스핀－궤도호상작용이 작아지기때문이다. 그러므로 ㄴ)의 경우는 보통의 절연체로 된다.

그림 2에서 보여준 틈없는 모서리상태들이 모서리에 국부화되여있는가를 고찰하기 위하여 이에 해당한 상태의 확률분포를 계산하였다.(그림 3)

그림 3에서 보는바와 같이 전자의 존재확률은 시편의 끌쪽에서 안쪽으로 들어오면서 급격히 감소하여 가운데부분에서는 령으로 된다는것을 알수 있다. 즉 이 상태들은 모서리에 국부화되였으며 그로 하여 모서리상태로 된다는것을 보여준다. 이 상태들은 틈이 없고 스핀이 반대인 상태들이 서로 반대방향으로 전파하기때문에 이것들을 틈없는 카이랄모서리상태라고 부른다. 이 모서리상태들은 틈이 없기때문에 시편의 모서리를 따라 스핀의 수송을 보장하며 정확히 량자화된 스핀홀전도도를 나타낸다. 또한 시간반전대칭성에 의하여 스핀수송은 불순물의 영향을 받지 않으며 물질상수나 시편의 기하학적구조에 관계없는 스핀홀전도도를 나타내게 된다.

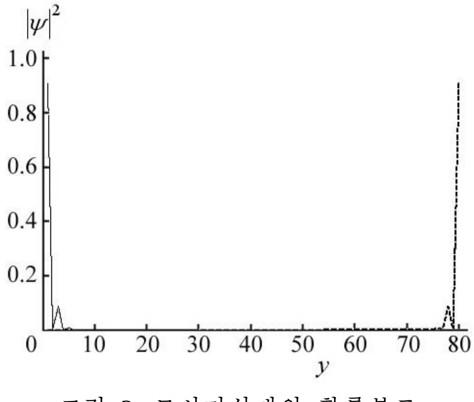

그림 3. 모서리상태의 확률분포

맺 는 말

매 모서리에 홀수쌍의 모서리상태가 존재하면 계는 위상학적절연체로 되고 짝수쌍의 모서리상태가 존재하면 보통의 절연체로 된다.

참 고 문 헌

[1] C. L. Kane et al.; Phys. Rev. Lett., 95, 146802, 2005.
[2] Qi Xiao Liang et al.; Phys. Today, 63, 1, 33, 2010.

주체103(2014)년 4월 5일 원고접수

On the Edge States of 2D Topological Insulators

Ryom Kwang Il, O Song Jin

We calculated band structure of edge states of 2D topological insulators by using tight-binding model of graphene and showed that edge states are the topological invariants which characterize topological insulating phase.

Key words: edge state, topological insulator