

## 위상학적절연체의 세로전도도에 미치는 불순물의 영향

럼 광 일

경애하는 김정은동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《과학기술부문에서 첨단돌파전을 힘있게 벌려야 하겠습니다.》(《조선로동당 제7차대회에서 한 중앙위원회사업총화보고》 단행본 39페이지)

위상학적절연체[1]의 모서리상태를 통하여 흐르는 전류는 산일이 없으며 그 전도도[2]는 양자화된다. 위상학적절연체가 가지는 이러한 특성은 양자컴퓨터의 실현[3]에 응용할 수 있다.

논문에서는 강한결합하밀토니안을 리용하여 위상학적절연체의 한 종류인 HgTe/CdTe 양자우물의 세로전도도에 미치는 불순물의 영향을 밝혔다.

### 1. 모형하밀토니안과 세로전도도의 계산도식

논문에서는 HgTe/CdTe 양자우물의 양쪽에 전극을 붙이고 직류전압을 걸어주었을 때 흐르는 정상전류를 켈디쉬비평형그린함수리론으로 계산하였다. 전극들은 깨끗한 HgTe/CdTe 양자우물시편으로 모형화하고 전자들사이의 호상작용은 무시한다.

세로전도도[4]는 다음과 같이 표시된다.

$$G = J_L / (V_L - V_R) = \frac{e^2}{h} \text{Tr} \{ \Gamma^R(\varepsilon) G^r(\varepsilon) \Gamma^L(\varepsilon) G^a(\varepsilon) \} \Big|_{\varepsilon} \quad (1)$$

여기서  $G^r(\varepsilon)$ ,  $G^a(\varepsilon)$  은 중심구역의 지연 및 선행그린함수행렬,  $\Gamma^R(\varepsilon)$ ,  $\Gamma^L(\varepsilon)$  은 각각 오른쪽 및 왼쪽전극에서의 선폭함수들이다. 선폭함수는 고유에너르기에 의하여 다음과 같이 표시된다.

$$\Gamma^{L(R)} = i[\Sigma^{L(R)} - (\Sigma^{L(R)})^+]$$

식 (1)을 계산하기 위해서는 HgTe/CdTe 양자우물에서의 구체적인 모형하밀토니안이 필요하다.

강한결합근사에서의 모형하밀토니안[5]은 다음과 같다.

$$H = \sum_{ij} (\xi c_{ij}^+ c_{ij} + \tau_y c_{ij}^+ c_{ij+1} + \tau_y^+ c_{ij+1}^+ c_{ij} + \tau_x c_{ij}^+ c_{i+1j} + \tau_x^+ c_{i+1j}^+ c_{ij}) \quad (2)$$

여기서  $\xi = [C - 4D]\Gamma^0 + [M - 4B]\Gamma^5$ ,  $\tau_y = D\Gamma^0 + \frac{iA}{2}\Gamma^2 + B\Gamma^5$ ,  $\tau_x = D\Gamma^0 + \frac{iA}{2}\Gamma^1 + B\Gamma^5$ ,

$\Gamma^1 = \sigma^x \otimes I$ ,  $\Gamma^2 = \sigma^z \otimes I$ ,  $\Gamma^5 = \sigma^y \otimes s^z$ ,  $\Gamma^0$  은  $4 \times 4$  형단위행렬,  $A = 364.5a^{-1} \text{meVnm}$ ,

$B = -686a^{-2} \text{meVnm}^2$ ,  $C = 0$ ,  $D = -512a^{-2} \text{meVnm}^2$ ,  $M = -10 \text{meV}$ ,  $a = 5 \text{nm}$  이다.

이 파라메터값들은 양자우물의 두께가  $7.0 \text{nm}$ 일 때의 값들[5]이다.

우리는 한 살창점에 에너지  $\xi$  에 우연적인 불순물포텐셜에 에너지를 더해 주는 방법으로 불순물의 영향을 하밀토니안에 반영하였다.

모형하밀토니안 (2)로부터 해당한 그린함수행렬들과 고유에 에너지행렬들을 계산한 다음 각이한 페르미에너지와 시편크기에 대하여 불순물의 세기를 변화시키면서 세로전도도를 계산하였다.

## 2. 계산용량을 줄이기 위한 한가지 방도

실지 세로전도도  $G$  의 계산은 아주 작은 시편에서조차 거대한 기억용량과 시간이 요구된다. 특히 거꿀행렬을 계산하는데 아주 큰 기억용량과 시간이 요구된다.

론문에서는 매우 큰 차수를 가진 행렬의 거꿀행렬을 계산하기 위하여 알고리즘[7]을 적용하였다. 그 착상은 다음과 같다.

$P_{ij}$  를 다음과 같은 성질을 가지는 치환행렬이라고 하자.

- ①  $\tilde{A} = P_{ij}A$  는  $i$  째 행과  $j$  째 행이 교환된것을 제외하고는  $A$  와 똑 같다.
- ②  $\tilde{A} = AP_{ij}$  는  $i$  째 열과  $j$  째 열이 교환된것을 제외하고는  $A$  와 똑 같다.
- ③  $P_{ij}^T = P_{ij} = P_{ji}$
- ④  $P_{ij} \cdot P_{ij}^T = I$  ,  $P_{ij} = P_{ij}^{-1}$

$P = P_{i_n, j_n} \cdots P_{i_1, j_1}$  을 치환행렬들의 적이라고 하면  $P^{-1} = P^T$  가 성립한다. 이제 어떤 행렬  $A$  에 행들의 교환과 열들의 치환조작을 동시에 실시하면  $\tilde{A} = PAP^T$  는 다음과 같은 식을 만족시킨다.

$$\tilde{A}^{-1} = (PAP^T)^{-1} = P^{-T}A^{-1}P^{-1} = PA^{-1}P^T$$

웃식으로부터 어떤 행렬  $A$  의 웃블록  $A_{l, N}$  의 거꿀행렬을 아래와 같은 방법으로 계산할수 있다.

먼저 행렬  $A$  에 행 및 열에 관한 치환조작들을 실시하며 오른쪽 웃블록  $A_{l, N}$  을 다른 위치로 옮긴다. 이때 생긴 새로운 행렬의 거꿀행렬의 같은 위치에 바로  $A_{l, N}^{-1}$  이 나타난다. 이 방법을 도식적으로 그림 1과 같이 나타낼수 있다.

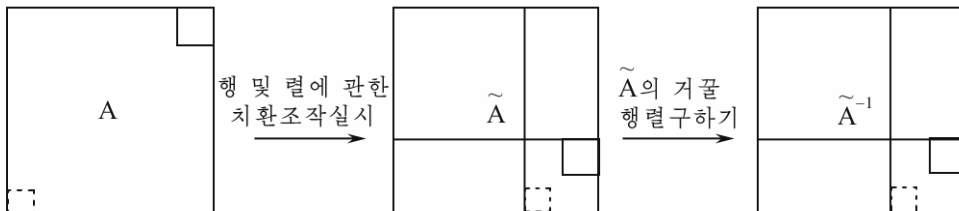


그림 1.  $A_{l, N}^{-1}$  을 구하는 한가지 계산도식

$A$  를 일반적인  $2 \times 2$  형블록구조를 가진 임의의 행렬

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$$

이라고 할 때  $A$ 의 거꿀행렬은 블록형식으로 다음과 같이 주어진다.[7]

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} A_{11}^{-1} + A_{11}^{-1}A_{12}S^{-1}A_{21}A_{11}^{-1} & -A_{11}^{-1}A_{12}S^{-1} \\ S^{-1}A_{21}A_{11}^{-1} & S^{-1} \end{pmatrix}$$

여기서  $S = A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$ 이다.

이상의 논의로부터 다음과 같은 결론을 내릴 수 있다.

만일 블록  $A_{1,N}$ 을 치환조작에 의하여 블록  $A_{22}$ 으로 이동시킨다면 거꿀행렬의 블록  $A_{1,N}^{-1}$ 은  $S$ 의 거꿀행렬  $S^{-1}$ 로부터 얻을 수 있다.  $S$ 를 계산하자면 또다시 3중블록 대각행렬의 거꿀행렬을 구하여야 하므로 위의 방법을 반복적으로 적용하여 충분히 작은 차수를 가진 행렬의 거꿀행렬을 구하는 조작으로 귀착시킬 수 있다.

### 3. 수값계산결과와 물리적해석

각이한 페르미에너지와 위상학적질량, 불순물포텐셜에 따르는 세로전도도는 그림 2와 같다.

이때 시편(살창)크기는  $200 \times 80$ 이며 180개의 우연배치에 대하여 전도도를 평균하였다.

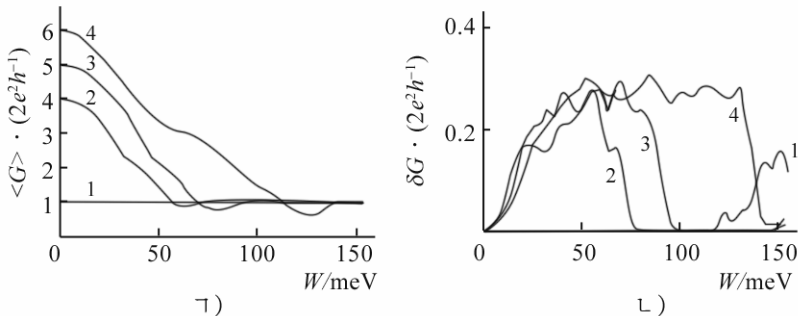


그림 2. 각이한 페르미에너지와 위상학적질량에서 불순물포텐셜에 따르는 평균전도도( $\Gamma$ )와 표준편차( $L$ )

1-4는  $E_f$ 와  $M$ 이 각각 7meV, -10, 15meV, -10, 18meV, -10, 18meV, 2인 경우

그림 2에서 보는바와 같이 페르미준위가 띠틈안에 놓일 때에는 세로전도도가 정확히  $2e^2/h$ 로 양자화된다. 그리고 불순물세기가 증가해도 이 값은 달라지지 않는다.

한편 페르미준위가 전도띠에 놓일 때에는 전도도값이 커지는데 이것은 모서리상태의 전자들뿐만아니라 체적전자들도 전기전도에 참가하기때문이다.

불순물세기가 증가할 때 이 전도도는 감소하여 어떤 림계값에서부터는 전도도가  $2e^2/h$ 로 양자화된다. 이것은 불순물에 의하여 체적전자들이 산란되어 전도에 참가하지 못하기때문에 일어나는 효과이다. 이를 통하여 모서리상태전자들은 불순물에 의하여 산란되지 않으며 산일이 없다는것을 알 수 있다.

각이한 시편크기에서 불순물포텐셜에 따르는 세로전도도는 그림 3과 같다.

이때 페르미에너지는  $E_f = 15\text{meV}$ 로 고정하고 150개의 우연배치에 대하여 전도도를 평균하였다.

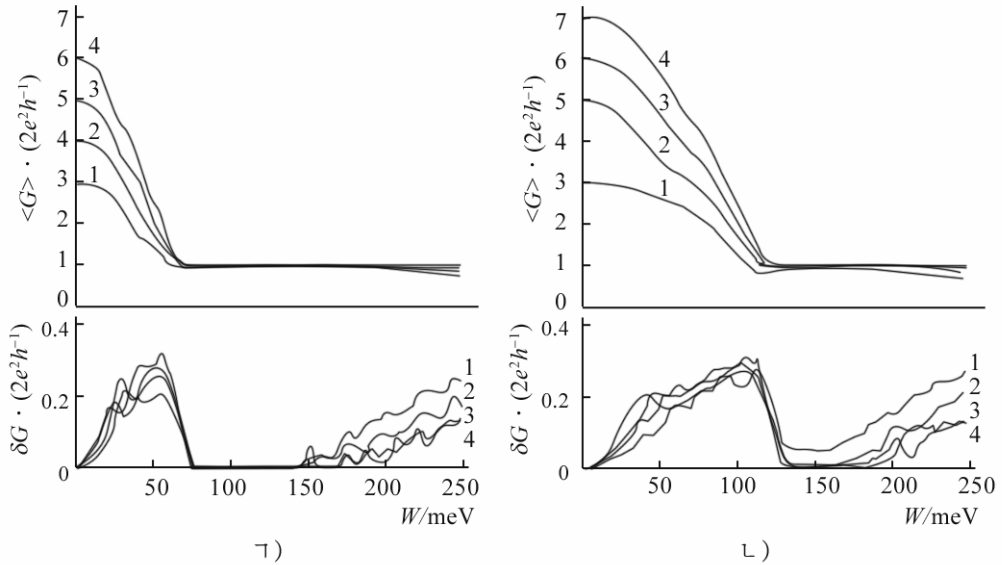


그림 3. 각이한 시편크기에서 불순물포텐셜에 따르는 세로전도도

ㄱ)  $M = -10$  인 경우, ㄴ)  $M = 2$  인 경우

1-4는 시편크기가 각각  $100 \times 60$ ,  $100 \times 80$ ,  $100 \times 100$ ,  $100 \times 120$ 인 경우

그림 3에서 보는바와 같이 시편의 크기를 변화시켜도 전도도값은 여전히  $2e^2/h$ 로 양자화되며 불순물의 세기를 증가시켜도 달라지지 않는다. 이러한 결과는 선행실험결과[6]와 정성적으로 일치한다.

## 맺 는 말

위상학적절연체 HgTe/CdTe량자우물에서의 강한결합하밀토니안을 리용하여 이 재료의 세로전도도가  $2e^2/h$ 로 양자화되며 이 값은 시편의 크기를 변화시키거나 불순물을 추가할 때 달라지지 않는다.

## 참 고 문 헌

- [1] M. Z. Hasan; Rev. Mod. Phys., **82**, 3045, 2010.
- [2] X. L. Qi et al.; Rev. Mod. Phys., **83**, 1057, 2011.
- [3] J. Dufouleur et al.; Phys. Rev. Lett., **110**, 186806, 2013.
- [4] A. P. Jauho; Phys. Rev., **B 50**, 8, 5528, 1994.
- [5] B. A. Bernevig et al.; Phys. Rev. Lett., **96**, 106802, 2006.
- [6] M. Konig et al.; Science, **318**, 766, 2007.
- [7] P. S. Drouvelis; J. Comp. Phys., **215**, 741, 2006.

주제105(2016)년 7월 5일 원고접수

## Effects of Impurities on Longitudinal Conductance of Topological Insulators

*Ryom Kwang Il*

We showed that the longitudinal conductivity of the material is quantized in units of  $2e^2/h$  using tight-binding Hamiltonian of a topological insulator HgTe/CdTe quantum well. In addition, its stability against the sample size and impurities tested directly.

Key word: topological insulator