

위상학적절연체상과 보통절연체상경계특성에 대한 연구

박명철, 박학철

경애하는 최고령도자 김정은동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《첨단돌파전을 힘있게 벌려야 나라의 과학기술전반을 빨리 발전시키고 지식경제의 토대를 구축해나갈수 있습니다.》(《조선로동당 제7차대회에서 한 중앙위원회사업총화보고》 단행본 39페이지)

보통절연체와 위상학적절연체상경계특성문제는 상경계에서 위상불변성이 파괴되는것으로 하여 제기되는 중요한 문제[1-4]인데 이것은 위상학적절연체인 스핀홀절연체[5]와도 밀접히 련관되어있다.

본문에서는 2차원홀데인모형을 리용하여 위상학적절연체의 하나인 첸절연체와 보통절연체상경계근방에서 몇가지 전자상태특성들을 논의하였다.

1. 첸불변량과 홀데인모형

한립자하밀토니안 H 가 블로흐고유값 ε_{nk} 와 고유상태 $|\psi_{nk}\rangle$ 를 가지고있는 경우로 국한시켜 취급하자.

블로흐함수는 유효하밀토니안 $H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} H e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ 의 고유함수이다. 전자들의 스핀을 고려하지 않았기때문에 호상작용하지 않는 전자들을 묘사하기 위하여서는 2라는 인수를 넣어야 한다.

절연체는 점유된 상태들과 점유되지 않은 상태들이 상태밀도틈으로 분리되어있는 계이다. 즉 첸불변량은

$$C = \frac{i}{2\pi} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k} \sum_n^{\text{occ}} \langle \partial_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} | \times | \partial_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \rangle.$$

여기서 적분은 브릴루앙구역에 대해서 취해지며 $\partial_{\mathbf{k}} = \partial / \partial \mathbf{k}$ 이다.

호상작용하지 않는 전자들에 대하여 첸불변량은 거꼴살창벡토르를 단위로 하여 량자화된다. 하나의 띠만을 가진 2차원계인 경우에 웃식은 $C = \frac{i}{2\pi} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k} \langle \partial_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} | \times | \partial_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \rangle$ 로 된다.

2차원에서 첸불변량은 첸수라고 불리우는 의스칼라량으로서 이것은 오직 옹근수값만을 가질수 있다. 첸불변량의 값은 첸절연체에서 령이 아니며 보통절연체에서 령으로 된다. 보통절연체/첸절연체상이행은 첸불변량이 0으로부터 비령값으로 변화되는 과정으로 볼수 있다.

본문에서는 상경계문제를 2차원홀데인모형을 가지고 취급하였다.

홀데인모형은 단위포당 2개의 강한 결합마디들을 가지는 벌집살창이다.(그림 1)

이때 마디에네르기는 각각 $\pm\Delta$ 이고 실수인 제1린접호핑적분은 t_1 , 복소수인 제2린접

호핑적분은 $t_2 e^{\pm i\varphi}$ 이다.

이 모형을 에너지가 $+\Delta$ 와 $-\Delta$ 인 마디들에 대응하는 2개의 부분살창 A와 B로 이루어졌다고 볼수도 있다.

이제 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 을 B부분살창의 한 마디로부터 A부분살창의 가장 가까운 3개의 마디점들을 가리키는 벡토르들이라고 가정하자.

이때 $\hat{\mathbf{z}}_1 \cdot \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 > 0$, $\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{a}_1 > 0$ 으로 된다. 더우기 벡토르들을 $\mathbf{b}_1 = \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3$, $\mathbf{b}_2 = \mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1$, $\mathbf{b}_3 = \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$ 로 놓으면 홀데인모형의 하밀토니안은

$$H(\mathbf{k}) = 2It_2 \cos \varphi \sum_i \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_i) + \sigma_1 t_1 \sum_i \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i) + \sigma_2 t_1 \sum_i \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i) + \sigma_3 \left(\Delta - 2t_2 \sin \varphi \sum_i \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_i) \right). \quad (1)$$

여기서 σ_i 는 파울리행렬이고 \mathbf{I} 는 단위행렬이다.

이제 살창상수를 1로 놓고 $t_1 = 1$, $t_2 = 1/3$ 로 취한다. 만약 바닥띠의 채수를 나머지 모형파라미터 φ 와 Δ/t_2 의 함수로 놓으면 홀데인상도표를 얻을수 있다. 위상 φ 를 $\pi/4$ 로 고정시키고 Δ/t_2 를 6에서부터 2까지 감소시키면서 수직선을 그어 림계값을 결정[6]하면 상경계와 사귀는 Δ/t_2 의 값은 $3\sqrt{3} \sin(\pi/4) \approx 3.67$ 이다.

논문에서는 Δ/t_2 의 값 3.67근방에서 분산범함수와 밀도행렬원소들에 대하여 논의하였다.

2. 분산범함수와 밀도행렬원소

상경계에서 중요한 물리적량으로서는 분산범함수 Ω 가 있는데 이것은 다음과 같이 정의된다.[7]

$$\Omega = \sum_n [\langle 0n | r^2 | 0n \rangle - \langle 0n | \mathbf{r} | 0n \rangle^2] \quad (2)$$

여기서 $|0n\rangle$ 은 $\mathbf{R}=0$ 인 단위포에서 띠 n 에 해당하는 와니에함수 $|Rn\rangle$ 을 의미하며 합은 절연체의 점유된 띠에 대하여 진행한것이다. 분산범함수는 와니에함수의 분산정도 혹은 국부성 파괴정도를 나타낸다. 여기서는 2차원이면서 1개 띠인 간단한 경우만을 보기로 한다. 이때 $\Omega = \langle 0 | r^2 | 0 \rangle - \langle 0 | \mathbf{r} | 0 \rangle^2$ 으로 된다.

분산범함수를 $\Omega = \Omega_1 + \Omega_2$ 로 분해할수 있다.[7] 여기서

$$\Omega_1 = \langle 0 | r^2 | 0 \rangle - \sum_{\mathbf{R}} \langle 0 | \mathbf{r} | \mathbf{R} \rangle^2, \quad (3)$$

$$\Omega_2 = \sum_{\mathbf{R} \neq 0} \langle 0 | \mathbf{r} | \mathbf{R} \rangle^2. \quad (4)$$

이때 Ω_1 은 물리적으로 측정가능한 게이지불변량이지만 Ω_2 는 게이지의존량이다.

계량텐소르 $g_{\mu\nu} = \text{Re} \langle \partial_\mu u_k | Q_k | \partial_\nu u_k \rangle$ [7]를 리용하면

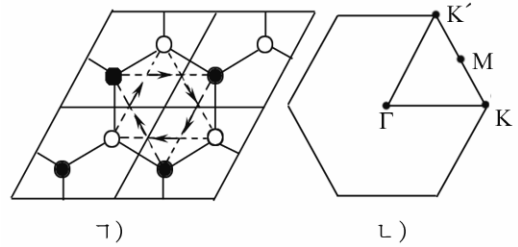


그림 1. 홀데인모형

1) 홀데인모형에서의 4개의 단위포,
2) 거울살창공간에서 홀데인모형의 대표점

$$\Omega_1 = \frac{A}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} dk \text{Tr}[g(\mathbf{k})], \quad (5)$$

$$\Omega_2 = \frac{A}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} dk \text{Tr}[A(\mathbf{k}) - \bar{A}]^2. \quad (6)$$

여기서 $Q_k = 1 - |u_k\rangle\langle u_k|$ 이고 $\partial_\mu = \partial/\partial k_\mu$, A 는 단위포면적, $\text{Tr}[g] = g_{xx} + g_{yy}$, \bar{A} 는 브릴루앙구역에서 베리접속 $A(\mathbf{k}) = -i\langle u_k | \partial_{\mathbf{k}} | u_k \rangle$ 에 대한 평균값이다.

철크연체인 경우에는 잘 국부화된 와니에함수를 구성할수 없기때문에 실공간에 대한 식 (3)과 (4)를 리용하면 계산이 복잡하다. 이 난관은 거울공간에 대한 식 (5)와 (6)을 리용하면 극복될수 있다. 그러므로 실지계산은 제차도식을 리용하여 식 (5)와 (6)으로 하였다. 게이지의존량인 Ω_2 를 계산할 때 단위포의 낮은 에너르기마디에 대하여 모든 \mathbf{k} 의 $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$ 가 실수로 되도록 게이지를 설정하였다.

여러 \mathbf{k} 점그물밀도에 따르는 홀데인모형에 대한 분산범함수의 게이지불변량 Ω_1 과 게이지의존량 Ω_2 의 변화를 그림 2에 보여주었다.

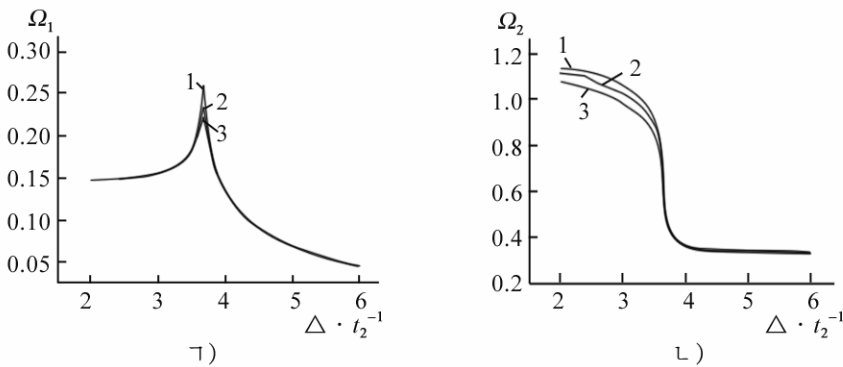


그림 2. 여러 \mathbf{k} 점그물밀도에 따르는 홀데인모형에 대한 분산범함수의 게이지불변량(Ω_1)과 게이지의존량(Ω_2)

1-3은 \mathbf{k} 점그물밀도가 각각 600×600 , 500×500 , 400×400 인 경우

그림 2에서 보는바와 같이 Ω_1 은 보통철크연체구역에서와 마찬가지로 철크연체구역안에서도 유한하다. 경계값인 $\Delta/t_2 \approx 3.67$ 에서 Ω_1 은 \mathbf{k} 점의 수에 따라서 로그적으로 발산한다. 또한 Ω_2 는 보통철크연체구역에서는 유한하지만 철크연체에서 \mathbf{k} 점의 수에 따라서 증가한다. 따라서 전체 분산 Ω 는 보통철크연체에 대하여 유한하지만 철크연체에 대하여서는 발산한다.

밀도행렬원소는 계의 기초적특성의 하나이며 전자의 국부화와 밀접히 연관되어있다.[8] 주기적표본에 대하여 밀도행렬은

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{A}{(2\pi)^3} \sum_{n=1}^{\text{occ}} \int_{\text{BZ}} dk \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \quad (7)$$

로 정의된다. 여기서 파동함수 $\psi_{n\mathbf{k}}$ 는 1개 단위포면적 A 로 규격화된다.

만일 파동함수들을 일부 토대함수 $\phi_\alpha^{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 에 의하여 표시한다면

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} C_{n\alpha}^{\mathbf{k}} \phi_\alpha^{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (8)$$

로 되며 따라서 식 (7)은 다음과 같이 표시된다.

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{A}{(2\pi)^3} \sum_{n=1}^{occ} \int_{BZ} d\mathbf{k} C_{n\alpha}^{k*} C_{n\beta}^{k*} \phi_{\alpha}^{k*}(\mathbf{r}) \phi_{\beta}^k(\mathbf{r}') \quad (9)$$

$C_{n\alpha}^k$ 는 모형하밀토니안을 대각화하여 얻어진다. 강한결합근사에서 토대함수 $\phi_{\alpha}^k(\mathbf{r})$ 는 \mathbf{r}_{α} 위치에 국부화된 궤도함수 ϕ 로 이루어졌다.

$$\phi_{\alpha}^k(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}_{\alpha})} \phi(\mathbf{r} - (\mathbf{R} + \mathbf{r}_{\alpha})) \quad (10)$$

식 (10)을 식 (9)에 넣으면

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \xi_{\alpha\beta}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{r}_{\alpha}) \phi(\mathbf{r}' - \mathbf{R}' - \mathbf{r}_{\beta}) \quad (11)$$

로 된다. 여기서

$$\xi_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) = \frac{A}{(2\pi)^3} \sum_{n=1}^{occ} \int_{BZ} d\mathbf{k} C_{n\alpha}^{k*} C_{n\beta}^{k*} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}_{\beta} - \mathbf{r}_{\alpha})}. \quad (12)$$

밀도행렬원소는 궤도 ϕ 를 정확히 알지 않고서는 양적으로 평가할수 없지만 $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 대신 $\xi_{\alpha\beta}(\mathbf{R})$ 의 감소를 평가할수 있다. 이것은 본질에 있어서 강한결합근사로 표시된 밀도행렬로 해석할수 있다는것이다.

$\xi_{\alpha\beta}(\mathbf{R})$ 는 수값적으로 많은 계산을 요구한다. 높은 정확도를 담보하기 위하여 800×800 점의 매우 치밀한 \mathbf{k} 점그물을 리용하여 계산하였다. 이때 $\ln|\xi_{\alpha\beta}|$ 에 대하여 최소두제곱법을 적용하였다.

각이한 Δ/t_2 값에서 홀데인모형에 대한 밀도행렬의 거리에 따르는 핵 $|\xi|$ 의 로그수변화를 그림 3에 보여주었다.

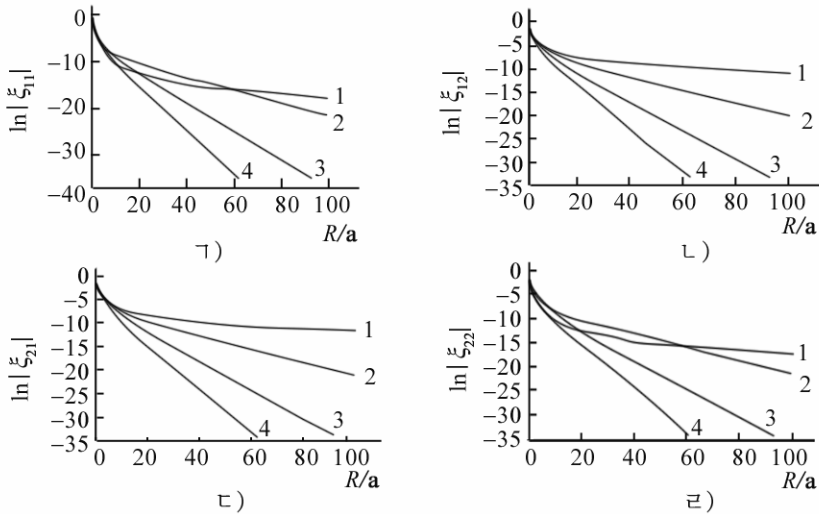


그림 3. 밀도행렬의 거리에 따르는 핵 $|\xi|$ 의 로그수변화

㉠)~㉡)는 핵 $|\xi|$ 의 로그수가 $\ln|\xi_{11}|$, $\ln|\xi_{12}|$, $\ln|\xi_{21}|$, $\ln|\xi_{22}|$ 인 경우

1~4는 Δ/t_2 값이 각각 3.67, 4.00, 3.00, 2.00인 경우

그림 3에서 보는바와 같이 밀도행렬은 대체로 지수함수적으로 감소하지만 오직 상경계에서만은 제곱함수적으로 감소한다. 보간식을 리용하여 고찰을 심화시키면 밀도행렬원소는 보통절연체와 철펙연체상경계에서 정확히 R^{-2} 형태로 감소되며 보통절연체 혹은 철펙연체상안에서는 지수함수적으로 감소한다.

맺는 말

1) 분산범함수는 보통절연체에서는 유한하지만 철펙연체에서는 발산한다. 철펙연체에서 분산범함수를 게이지불변인 항과 게이지의존인 항으로 분해할 때 게이지불변인 항에 대해서는 분산범함수값이 유한하며 게이지의존인 항에 대해서는 이 값이 발산한다.

2) 밀도행렬원소들이 보통절연체와 철펙연체상안에서 지수함수적으로 감소되지만 상경계근방에서는 정확히 제곱범칙감소거동을 나타낸다.

참고 문헌

- [1] M. C. Pak et al.; arXiv1307.5598.
- [2] Y. Hatsugai et al.; J. Phys. Soc. Jpn, **74**, 1374, 2005.
- [3] X. G. Wen; Adv. Phys., **44**, 405, 1995.
- [4] X. G. Wen; Phys. Rev. Lett., **84**, 3950, 2000.
- [5] C. Day; Phys. Today, **58**, 17, 2005.
- [6] D. Ceresoli et al.; Phys. Rev., B **74**, 024408, 2006.
- [7] N. Marzari et al.; Phys. Rev., B **56**, 12847, 1997.
- [8] J. Shi et al.; Phys. Rev. Lett., **99**, 197202, 2008.

주체105(2016)년 10월 5일 원고접수

Characteristics of Phase Boundary of Topological Insulator and Normal Insulator

Pak Myong Chol, Pak Hak Chol

We investigated the characteristics of the spread functional and the elements of density matrix in phase boundary of topological insulator and normal insulator by using the two dimensional Haldane model. We found that the spread functional is finite in normal insulator and divergent in Chern insulator. And we found that the density matrix has exponential decay in both insulating phases, while having power-law decay at the phase boundary.

Key words: Chern insulator, spread functional, density matrix