펌핑 개념을 통한 위상절연체의 이해

DOI: 10.3938/PhiT.20.007

이 현 우

Toward the Understanding of Topological Insulators through the Concept of the Pumping

Hyun-Woo LEE

Topological insulators are a new class of matter, of which boundary surface allows gapless excitations and is thus metallic while interior has a finite energy gap and is insulating. This exotic class of matter arises because of its topological structure. This article aims to provide an intuitive picture of this topological structure by using the concept of pumping. Charge pumping in one-dimensional systems and two-dimensional quantum Hall systems is considered and spin pumping is also discussed in the context of graphene quantum spin Hall effect. Finally the concept of the Z_2 pumping is illustrated.

들어가는 글

최근 몇 년 사이에 위상절연체(topological insulator)에 대해 급속한 발전이 있었고 이에 대한 과학계 전반의 관심도 비례하여 높아졌다. 물질 내부는 전기가 흐르지 않는 절연체 인데도 불구하고 물질의 표면은 전류가 잘 흐르는 도체 성질을 가진 이 물질은 이제까지의 상식에서 벗어나는 독특한 물질로서 물질에 대한 학문적 이해를 한 단계 높은 수준으로 끌어 올렸다는 평가를 받고 있다. 또 위상절연체가 가지는 전

저자약력

이현우 교수는 1996년에 미국 MIT에서 물리학 박사학위를 받았다. 그 후부터 2001년까지 서울대학교와 고등과학원에서 연구원으로 재직하였고 2002년부터 포스텍 물리학과에서 교수로 재직하고 있으며 저차원계에서의 전자 수송, 자성 나노구조에서의 스핀동역학 등의 분야를 연구하고 있다. (hwl@postech.ac.kr)

Fig. 1. Pump.

자 산란에 관한 특이한 성질 때문에 기존의 다른 물질로는 구현하기 어려웠던 소자를 이 위상절연체를 사용해서 구현할 수도 있다는 가능성들도 제시되고 있다.

위상절연체의 독특한 성질은 이 물질이 가진 위상 구조(topological structure) 때문이다. 위상 구조에 대한 핵심적인 결과들은 본 호 2쪽에 실린 한정훈 교수의 글에 이미 잘 정리되어 있어 이 글에서 반복하지 않겠다. 이 글은 대신 펌핑(pumping)이라는 개념을 이용해서 독자들이 이 핵심적인 결과들을 좀 더 직관적으로 이해할 수 있도록 돕는 것이 목적이다.

그림 1은 땅속에 있는 물을 지상으로 끌어올리기 위해 예전에 많이 사용되던 펌프이다. 펌프의 손잡이를 한 번 위로 올렸다 내리면 펌프는 원래의 상태로 돌아가지만 이 과정에서

땅 속의 물이 땅 위로 끌려 올라온다. 이 글에서 다루려고 하는 펌핑은 이 펌프의 작용과 유사하게 해밀토니안(Hamiltonian)의 변수를 변화시킨 후 일정 시간 후 처음 상태로 돌아왔을 때 무엇인가가 끌려서 움직이는 작용을 말한다. 펌핑에 의해 전하가 움직이는 경우 전하 펌핑(charge pumping), 전하는 움직이지 않지만 전자의 스핀이 움직이는 경우 스핀 펌핑(spin pumping)이라고 불린다. 그리고 위상절연체의 성질은 스핀 펌핑의 변종인 Z_2 펌핑과 밀접한 관련이 있다.

1차원에서의 전하 펌핑

물리학에서 다루는 펌핑의 한 예제로 1차원 전자계를 고려하자. 이 예제는 1983에 Thouless가 처음 분석한 것으로^[1] 펌핑과 위상 구조의 관계를 보여주는 좋은 예제로 알려져 있다. 그림 2(a)에서와 같이 퍼텐셜 에너지 우물(potential energy well)이 공간적으로 주기적으로 배열되어 있고 각 퍼텐셜 에너지 우물마다 전자가 1개씩 속박되어 있다고 하자. 그리고 퍼텐셜 에너지 우물의 공간적 주기를 a 라고 하자. 논의의 편의상 전자 스핀은 일단 무시하면 각 퍼텐셜 우물의 기저상태에 1개씩의 전자가 들어가고 첫 번째 들뜬 상태는 전자가 채워지지 않고 비어 있다. 좀 더 정확히는, 전자들이 퍼텐셜 에너지 우물 사이의 에너지 장벽(energy barrier)을 양자투과(quantum tunneling)하기 때문에 퍼텐셜 에너지 우물의 각 에너지 준위들이 연결되어 에너지띠(energy band)를 형성한다. 그림 2(a)의 경우 2개의 에너지 준위로부터 2개의 에너지띠가 형성되고 전자들이 이 두 개의 에너지띠 중 에너지가 낮은 에너지띠를 꽉 채우고 에너지가 높은 에너지띠는 전혀 채워지지 않은 상태가 전체 계(system)의 바닥상태(ground state)가 되고 이 물질은 절연체가 된다.

이제 퍼텐셜 에너지의 모양을 천천히 변화시켜 보자. 우선 간단하게 퍼텐셜 에너지 윤곽(profile)이 시간 $t = 0$ 에서부터 천천히 오른쪽으로 이동한 경우를 고려해 보자 [그림 2(b)]. 그리고 시간 $t = T$ 가 되었을 때 퍼텐셜 에너지가 이동한 거리가 Na 가 되어 (N 은 정수) 처음의 퍼텐셜 에너지 모양이 다시 회복되었다고 하면 이 시간 T 동안 무엇인가가 펌핑이 되었을까? 이 경우 정답은 “모든 전자들이 오른쪽으로 Na 만큼 이동하였다”이다. 또는 좀 더 수학적으로 표현하면 “이 1차원 시스템에 흐르는 전류 $I(t)$ 를 시간 0부터 T 까지 적분한 값이 Ne 가 된다”이다. 여기서 $e(<0)$ 는 각 전자가 가지는 전하를 나타내고 답이 Ne 가 되는 것은 각 퍼텐셜 에너지 우물마다 있는 전자들이 각각 Na 만큼 움직였기 때문이다. 퍼텐셜 에너지 우물 사이의 에너지 장벽이 충분히 높은 경우라면 전자들은 각 우물에 갇힌 상태로 보아도 무방하므로 모든

Fig. 2. One-dimensional periodic system as an example of the pumping.

퍼텐셜 에너지 우물이 Na 만큼 오른쪽으로 천천히 이동하면 전자들도 따라서 같은 거리만큼 이동할 것이므로 이 경우 이것이 정답이라는 것은 직관적으로 자명하다. 그리고 이 답은 에너지 장벽이 그리 높지 않은 경우에도 여전히 성립한다.

좀 더 일반적인 상황에서는 얼마나 펌핑이 이루어질까? 예를 들어 주기 a 는 유지되지만 퍼텐셜 에너지의 모양이 그림 2(c)에 있는 것처럼 임의의 모양으로 바뀌었다가 시간 T 후에 처음 퍼텐셜 에너지 모양이 회복되는 상황에서는 어떨까? 1983년 Thouless 논문^[1]에 의하면 (i) 퍼텐셜 에너지 변화가 충분히 천천히 일어나 전자들이 항상 바닥상태에 머물러 있고 (ii) 퍼텐셜 에너지가 변화하는 과정 내내 이 시스템이 절연체로 남아있다면 (즉 두 개 에너지띠의 에너지가 서로 겹쳐지지 않는다면) 임의의 퍼텐셜 에너지 변화에 대해 전류 $I(t)$ 를 시간 0부터 T 까지 적분한 값은 항상 e 의 정수배(en)가 된다고 한다. 즉 퍼텐셜 에너지에 의해 펌핑된 전하량이 양자화(quantization)된다. 앞서 고려한, 퍼텐셜 에너지 윤곽이 좌우로 이동했을 경우는 일반적인 경우의 특수한 경우에 해당한다.

퍼텐셜 에너지에 의해 펌핑된 전하량이 왜 양자화될까? 양자역학에서 양자화 현상이 상당히 빈번히 나타나긴 하지만 펌핑된 전하량이 양자화되는 이유는 퍼텐셜 에너지 우물에 속박된 전자의 에너지 준위가 양자화되는 이유와는 다르고 이 1차원 계가 가진 위상 구조(topological structure) 때문이다. 이해의 편의를 위해 퍼텐셜 에너지 우물 간의 에너지 장벽이 충분히 높아 전자들이 퍼텐셜 에너지 우물에 갇혀 있다고 봐도 무방한 경우를 고려해 보자. 시간 t 에서 특정 전자의 위치를 $x(t)$ 라고 할 때 $x(t)$ 는 그 순간 t 에서의 퍼텐셜

REFERENCES

- [1] D. J. Thouless, Phys. Rev. B **27**, 6083 (1983).

에너지의 모양과 밀접한 관련이 있고 시간 $t=0$ 과 $t=T$ 에서의 퍼텐셜 에너지 모양이 같다는 조건은 $\exp[i2\pi x(t=0)/a]$ 와 $\exp[i2\pi x(t=T)/a]$ 가 같다는 제한 조건을 만들어 낸다. 그런데 복소수 $\exp[i2\pi x(t)/a]$ 가 시간 T 후에 원래 값으로 돌아온다는 조건은 이 복소수의 위상(phase) $2\pi x(t)/a$ 이 시간 T 동안 변화한 값에 위상적(topological) 제한을 가해 결국 펌핑된 거리 $x(T)-x(0)$ 를 a 의 정수배로 양자화시킨다. 즉 펌핑된 전하량이 양자화되는 것은 복소수의 위상(phase)이 가지는 위상 구조(topological structure) 때문이다.

이제 동일한 문제를 좀 더 수학적으로 접근해 보자. 1차원 계에서의 이 위상 구조가 2차원 양자홀 효과나 2,3차원 위상 절연체에 대해 가지는 심오한 파급 효과를 제대로 이해하기 위해서는 약간의 수학적 논의를 피할 수 없을 것 같다. 펌핑되는 전하를 엄밀하게 계산하기 위해 우선 전자들의 속도를 조사해 보자. 1차원 시스템에서 n 번째 에너지띠에 있는 결정 운동량(crystal momentum) $\hbar k$ 를 가지는 전자의 속도 $v_n(k, t)$ 는 $v_n(k, t) = \frac{\partial \epsilon_n(k, t)}{\hbar \partial k} - \Omega_n(k, t)$ 로 주어진다. 여기서 $\epsilon_n(k, t)$ 는

시간 t 의 해밀토니안 $H(t)$ 이 만들어내는 n 번째 에너지띠의 결정운동량 $\hbar k$ 에 대한 고유에너지(eigen-energy)를 나타낸다. $v_n(k, t)$ 의 첫 번째 항은 전자의 파동성 측면에서 전자 파동의 군속도(group velocity)에 해당하고 $\Omega_n(k, t)$ 는 $H(t)$ 가 시간의 함수로 계속 변화하기 때문에 발생하는 항으로 $H(t)$ 가 시간에 따라 변하지 않는 상황에서는 이 항이 존재하지 않는다. 전자가 꼭 찬 에너지띠가 만들어 내는 총 전류를 구하기 위해서는 $v_n(k, t)$ 를 허용된 모든 k 값 ($-\pi/a < k < +\pi/a$)에 대해 적분해야 하는데 $\epsilon_n(k=+\pi/a, t) = \epsilon_n(k=-\pi/a, t)$ 이므로 $v_n(k, t)$ 의 첫 번째 항은 k 에 대해 적분할 경우 사라지고 따라서 총 전류에 기여하지 않는다. 즉 펌핑되는 전하량을 결정하는 것은 두 번째 항인 $\Omega_n(k, t)$ 이다. 섭동 이론을 사용한 약간의 계산에 의하면^[1] $\Omega_n(k, t)$ 은 $\Omega_n(k, t) = 2 \operatorname{Re} \left[i \left\langle \frac{\partial u_n(k, t)}{\partial k} \right| \frac{\partial u_n(k, t)}{\partial t} \right]$ 로 주어진다. 여기서 $\exp(ikx) |u_n(k, t)\rangle$ 는 $H(t)$ 의 에너지 고유상태(eigenstate)이다. $\Omega_n(k, t)$ 는 시간에 따라 에너지 고유상태가 변화하는 양상과 k 에 따라 에너지 고유상태가 변화하는 양상이 얼마나 일치하는지에 대한 척도로서 베리 곡률(Berry curvature)에^[2] 해당한다. 그러면 시간 $t=0$ 부터 T 까지 펌핑된 총 전하량 Q 는 $Q = \sum_{\text{occupied } n} Q_n$ 로 주어진다. 여기서 n 에 대한 합은 전자가 꼭 찬 에너지띠들에 대한 합으로 Q_n 은 n 번째 에너지띠가 꼭 찼을

경우 만들어 내는 펌핑 전하량을 나타내고 $Q_n = \frac{e}{2\pi} \int_0^T dt$

Fig. 3. Two dimensional electron system where the quantum Hall effect occurs. (a) Plane geometry and (b) cylinder geometry.

$\int_{-\pi/a}^{+\pi/a} dk \Omega_n(k, t)$ 로 주어진다. 마지막으로 이전의 직관적인 논의와 이 수학적 논의를 합칠 경우 Q_n 에 대한 이 수학적 표현은 항상 e 의 정수배가 되는 위상수(topological number)임을 알 수 있다. 이 위상수 개념은 양자홀 효과와 위상절연체 이론에서 중요한 역할을 한다.

2차원 양자홀 효과와 전하 펌핑

이제 대표적인 위상 물질(topological matter)인 2차원 양자홀 시스템을 고려해 보자. 그림 3(a)와 같이 2차원 전자계에 수직 자기장이 걸린 상태에서 x 방향으로 전기장 E_x 를 걸어주면 로렌츠힘(Lorentz force) 때문에 y 방향으로 전류 밀도 J_y 가 생성된다. 충분히 강한 수직 자기장이 걸렸을 때의 홀 전도도(Hall conductivity) $\sigma_{xy} = J_y/E_x$ 는 e^2/h 의 정수배로 양자화된다.^[3] 즉 2차원 전자계에 생기는 홀 전기전도도의 양자화와 1차원 전자계에서 펌핑된 전하량의 양자화가 아주 유사한 구조를 가진다. 서로 차원이 다른 이 두 전자계에서의 양자화가 같은 구조를 가지는 것은 우연일까?

쿠보 공식(Kubo formula)을 사용하면 어렵지 않게 홀 전도도에 대한 수학적 표현을 얻을 수 있다. 1982년에 발표된 논문^[4]에 의하면 홀 전도도 σ_{xy} 는 전자가 차 있는 에너지띠 n 이 홀 전도도에 대한 기여하는 값 $(\sigma_{xy})_n$ 들의 합으로 주어지고

$$\sigma_{xy} = \sum_{\text{occupied } n} (\sigma_{xy})_n, (\sigma_{xy})_n \text{ 은 } (\sigma_{xy})_n = \frac{e^2/h}{2\pi} \iint_{BZ} dk_x dk_y A_n \text{가}$$

REFERENCES

- [2] M. V. Berry, Proc. R. Soc. London Ser. A **392**, 45 (1984).
- [3] K. V. Klitzing, G. Dorda and M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980).
- [4] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).

된다는 결과를 얻었다. 여기서 BZ는 브릴루앙 영역(Brillouin zone)을 나타내고 A_n 은 $A_n = 2Re \left[i \left\langle \frac{\partial u_n(k_x, k_y)}{\partial k_x} \middle| \frac{\partial u_n(k_x, k_y)}{\partial k_y} \right\rangle \right]$ 이다. 이전과 유사하게 $\exp[i(k_x x + k_y y)] |u_n(k_x, k_y)\rangle$ 는 해밀토니안 H 의 에너지 고유상태이다. 이 결과는 1차원 전자계에서 펌핑된 전하량에 대한 수학적식과 놀랍도록 유사하다. 1차원 전자계에서 펌핑된 전하량에 대한 수학적식에서 k , t 를 k_x , k_y 로 바꾸고 e 를 e^2/h 로 바꾸면 2차원 전자계에 대한 홀 전도도가 얻어진다. 또한 1차원 전자계에 대한 식에서 t 가 T 만큼 바뀌거나 k 가 π/a 만큼 바뀌면 동일한 상태로 돌아가는 것처럼 k_x , k_y 가 BZ의 한쪽 끝에서 다른 쪽 끝으로 바뀌면 동일한 상태가 얻어지기 때문에 차원이 다른 이 두 전자계 사이의 관계는 단순히 모양이 비슷한 것이 아니라 수학적으로 완전히 동일하다. 즉 2차원 전자계에서 홀 전도도가 e^2/h 의 정수배로 양자화되는 이유와 1차원 전자계에서 펌핑된 전하량이 e 의 정수배로 양자화되는 이유가 동일하고 따라서 2차원 전자계의 양자홀 효과를 1차원 전자계의 펌핑 개념을 통해 이해할 수 있다.

이제 한 걸음 더 나아가 펌핑 개념을 2차원에 직접 적용해 보자. 펌핑 개념을 적용하기 위해 그림 3(a)에 있는 2차원 전자계를 말아서 오른쪽 끝과 왼쪽 끝을 연결시킨 원기둥 모양의 2차원 전자계를 [그림 3(b)] 고려해 보자. 원기둥의 반지름이 충분히 커서 2차원 전자계가 휘어져 있는 효과를 무시할 수 있고 또 원기둥의 옆면에 수직으로 자기장이 투과하고 있으면 그림 3(b)에 있는 원기둥의 옆면은 그림 3(a)에 2차원 평면과 수학적으로 완전히 동일한 계이다. 이제 원기둥의 중심축 부근에 자기전속(magnetic flux) Φ 를 아래 방향으로 가하자. 양자역학의 기본 원리에 의하면 Φ 를 자기전속의 양자 기본 단위인 $\Phi_0 = h/e$ 의 정수배만큼 바꾸면 바뀐 후의 해밀토니안은 바뀌기 전의 해밀토니안과 수학적으로 동일하다. 즉 $t=0$ 에서 Φ 가 0인 상황부터 출발해서 시간이 지나면서 Φ 를 천천히 올려 $t=T$ 에서 Φ 가 $N\Phi_0$ 가 되게 만드는 것은 1차원 전자계에서 퍼텐셜 에너지 우물을 Na 만큼 수평 이동시킨 것과 유사한 펌핑에 해당한다.

2차원 전자계에서 자기전속에 의한 펌핑은 어떤 결과를 만들까? 1981년에 발표된 Laughlin 논문의^[5] 방법론을 따라 펌핑의 효과를 두 가지 방법으로 분석해 보자. 우선 전자기학 측면에서 분석을 해보자. 패러데이 전자기유도법칙(Faraday's law of electromagnetic induction)에 의하면 자기전속 Φ 가 증가할 경우 원기둥 옆면을 감싸고 도는 전기장이 형성된다. 그런데 2차원 전자계의 홀 전도도가 0이 아닌 값을 가지면(예를 들어 양수(positive number)라고 하면) 원기둥 축인 $+y$ 방향으로 전류 성분이 생겨난다. 따라서 시간 T 가 되었

을 때 전자는 원기둥 옆면의 바닥 부분에 싸여 있어야 하고 원기둥 옆면의 윗 부분에는 전자가 모자라 양(positive)의 전하가 대전되어 있어야 한다. 즉 자기전속에 의해서 원기둥 옆면의 윗부분으로부터 바닥 부분으로 전하 펌핑이 일어나야 한다.

자기전속에 의한 펌핑을 이제 양자역학의 점진 정리(adiabatic theorem) 측면에서 분석해 보자.^[6] 이 정리에 의하면, 해밀토니안에 등장하는 변수를 변화시킬 때 변수 변화가 충분히 천천히 일어나고 또 변화 과정 내내 에너지 틈(energy gap)이 유지가 된다면 변수가 처음 값으로 환원되었을 때 이 계의 전자들은 처음 상태로 돌아가야 한다. 2차원 양자홀 효과가 생기는 전자계에서는 란다우 에너지 준위(Landau energy level)가 생기고 페르미 준위(Fermi level)가 란다우 에너지 준위 사이에 있으므로 에너지 틈이 존재한다. 그리고 Φ 의 변화는 이 에너지 틈을 사라지게 할 수가 없다. 따라서 원기둥 옆면에 생성된 2차원 전자계에 점진 정리를 적용하는 것은 자연스러워 보인다. 그런데 점진 정리에 의하면 시간 $t=T$ 가 되었을 때 전자가 시간 $t=0$ 의 처음 상태로 돌아가야 하므로 원기둥 윗부분으로부터 바닥 부분으로의 전하 펌핑이 일어날 수가 없다. 즉 점진 정리에 의한 분석 결과는 전자기학에 의한 분석 결과와 모순된다. 무엇이 잘못 되었을까?

이 모순은 2차원 전자계의 경계(boundary)의 성질을 2차원 전자계의 내부(interior)의 성질과 혼용했기 때문에 발생했다. 란다우 에너지 준위에 의한 에너지 틈은 2차원 전자계 내부의 성질이고 2차원 전자계의 경계에서 일반적으로 성립하는 것이 아니다. 그런데 점진 정리를 적용하기 위해서는 2차원 전자계 내부뿐 아니라 경계에서도 에너지 틈이 존재해야 한다. 따라서 만약에 2차원 전자계의 경계에서 에너지 틈이 사라진다면 점진 정리는 성립하지 않는다. 반면 전자기학에 의한 분석의 경우는 상황이 좀 다르다. 비록 홀 전도도가 2차원 전자계 내부의 성질을 기술하는 양이고 경계의 성질에 적용되는 양은 아니지만 전하가 보존된다는 전하보존법칙(charge conservation law) 때문에 2차원 전자계의 경계가 전하 펌핑에 미칠 수 있는 효과가 상당히 제약된다. 즉, 2차원 전자계의 내부 성질 때문에 전하가 원기둥의 위에서 바닥으로 쏠리는 상황에서는 전하량 보존법칙 때문에 이 전하는 무조건 원기둥의 바닥 부분에 쌓일 수밖에 없다. 즉 전자기학

REFERENCES

- [5] R. B. Laughlin, Phys. Rev. B **23**, 5632 (1981).
- [6] A. Messiah, *Quantum Mechanics* (Dover Publications, 1999), Chap. XVII.

에 근거한 분석 과정에서 경계의 성질을 제대로 고려하지 않았지만 그럼에도 불구하고 결과가 달라지는 것을 전하보존법칙이 막아줘서 앞에서 언급한 전하 펌핑이 일어난다는 결과는 올바른 결과이다.

이제 전자기학에 의한 분석과 점진 정리에 의한 분석 결과가 모순을 주었던 이유가 명확하다. 이는 위 분석 과정에서 경계의 성질을 제대로 고려하지 않았기 때문이다. 그리고 제대로 분석했을 경우 두 분석 방법 간에 모순이 없어야 한다는 점을 감안하면 2차원 양자홀 효과가 나타나는 전자계의 경계에서는 에너지 틈이 사라져야 한다는 결과를 얻게 된다. 즉 2차원 전자계 내부의 성질인 홀 전도도가 (이 양은 1차원 전하 펌핑 분석을 통해서 밝혀진 것과 같은 위상 구조를 가지고 있다) 2차원 전자계 경계(boundary)에서의 에너지 틈이 사라지게 만들고 있다. 그리고 이 분석에서 한 걸음 더 나아가 자기선속이 x 방향 결정운동량(crystal momentum) k_x 를 $k_x + (2\pi/L)(\Phi/\Phi_0)$ 로 변화시켜주는 역할을 한다는 양자역학의 게이지 불변성(gauge invariance)의 결과를 활용하면 (L 은 원기둥의 둘레 길이) 양자 홀 효과가 나타나는 2차원 전자계의 경계에서는 전자가 한쪽 방향으로만 움직이고 전자가 움직이는 이 방향은 위쪽 경계와 아래쪽 경계에서 서로 반대여야 한다는 결과가 얻어진다. 이처럼 위상 구조를 가진 내부의 성질 때문에 경계에서 에너지 틈이 사라지는 현상은 양자 스핀 홀 효과와 위상절연체에서도 동일하게 적용된다.

양자 스핀 홀 효과와 스핀 펌핑

스핀 홀 효과(spin Hall effect)는 전기장이 걸렸을 때 이에 수직한 방향으로 스핀전류(spin current)가 생성되는 현상으로 이 효과는 스핀-궤도 결합(spin-orbit coupling) 때문에 발생한다. 스핀 홀 효과는 오래 전부터 이론적으로 논의되어 왔지만 스핀 홀 효과가 양자화된 경우인 양자 스핀 홀 효과(quantum spin Hall effect)는 2000년대 중반에 들어서야 논의되기 시작했고 양자 스핀 홀 효과를 보이는 2차원 전자계가 2차원 위상 절연체에 해당된다. 미국 펜실베이니아 대학의 Kane 교수는 외부 자기장이 없는 상황에서 스핀-궤도 결합이 그래핀(graphene)에 미치는 영향을 이론적으로 분석하는 과정에서 양자 스핀 홀 효과(quantum spin Hall effect)가 그래핀에서 생겨난다는 것을 발견하고 2005년에 논문으로 발표한다.^[7] 스핀-궤도 결합을 기술하는 해밀토니안의 구체적 모양과 스핀-궤도 결합의 크기는 물질에 따라 많이 달라지는데 이 논문에서는 그래핀에 수직 방향의 스핀 성분만 궤도 자유도와 결합해서 수직 방향 스핀 성분이 보존되는 양자수(quantum number)가 되는 특별한 경우를 자세히 분석해서

양자 스핀 홀 효과에 대한 중요한 결과들을 얻게 되고 이 결과들은 장차 위상절연체 이론의 발전에 중요한 역할을 하게 된다. Kane 논문에서는 이 스핀-궤도 결합이 그래핀 전자 구조에 미치는 영향을 분석해 그래핀 내부의 전자 구조에 대한 다음 몇 가지 결과를 얻는다; (i) 흔히들 그래핀은 에너지 틈이 없는 도체라고 하는데 스핀-궤도 결합의 효과 때문에 전도띠(conduction band)와 원자가띠(valence band)가 만나는 디랙점(Dirac point)에서 에너지 틈(energy gap)이 생기고, (ii) 페르미 준위가 에너지 틈에 있는 경우 스핀 업(spin-up) 전자들과 스핀 다운(spin-down) 전자들은 크기는 e^2/h 로 똑 같지만 부호가 서로 반대인 홀 전도도를 가지게 된다. 외부 자기장이 없는 상황에서 각 스핀에 대한 홀 전도도가 유한한 값을 가지는 것은 스핀-궤도 결합 때문에 전자들이 마치 자기장이 걸려 있는 것처럼 느끼기 때문이고 또 두 스핀이 가지는 홀 전도도가 정확히 반대인 것은 자기장이 없는 상황에서는 시간반전 대칭성이 성립해 홀 전도도의 총합이 0이 되어야 하기 때문이다.

결과 (i), (ii)는 모두 2차원 전자계인 그래핀의 내부에서 성립하는 성질들로 이 성질들이 그래핀의 경계(boundary)에 암시하는 바를 펌핑을 통해 조사해 보자. 2차원 평면 모양으로 있는 그래핀을 말아서 그림 3(b)처럼 원기둥 구조를 만들고 원기둥의 축을 따라 자기선속을 가해준 경우를 고려하자. 이 상황은 2차원 전자계에 수직으로 걸린 외부 자기장이 없다는 것을 제외하고는 양자홀 효과에서 자기선속에 의한 전하 펌핑이 일어나던 상황과 동일하다. 시간 $t = 0$ 에서부터 $t = T$ 까지 자기선속을 천천히 증가시킬 경우 이 효과를 전자기학 측면에서 분석하면 스핀업인 전자와 스핀다운인 전자는 각각 각자의 홀 전도도의 부호에 따라 원기둥 옆면의 바닥쪽과 위쪽에 쌓이게 된다. 그런데 스핀업인 전자와 스핀다운인 전자의 홀 전도도가 크기는 같고 부호가 반대이기 때문에 스핀업인 전자가 만들어내는 전하 펌핑량과 스핀다운인 전자가 만들어 내는 전하 펌핑량이 크기는 같고 부호는 반대가 되어 전하 펌핑 측면에서는 스핀업인 전자와 스핀다운인 전자의 영향이 서로 상쇄한다. 즉 전하 펌핑은 이 경우 일어나지 않는다. 그런데 스핀 펌핑 측면에서는 스핀업인 전자가 원기둥 옆면의 바닥쪽에 쌓일 때 스핀다운인 전자는 원기둥 옆면의 위쪽으로 쏠리기 때문에 원기둥 옆면의 바닥쪽과 위쪽에 서로 반대 부호의 스핀이 쌓이게 된다. 즉 자기선속에 의한 펌핑을 그래핀에 적용시킬 경우 전하 펌핑은 없이 스핀 펌핑만

REFERENCES

- [7] C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005).

일어난다.

이제 점진 정리(adiabatic theorem) 측면에서 분석을 해보자. 그래핀의 내부와 경계(boundary) 모두에서 에너지 틈이 없다면 자기전속이 Φ_0 의 정수배만큼 증가한 후 전자계의 상태는 처음과 동일해야 한다. 즉 전자 펌핑도, 스핀 펌핑도 일어나면 안 된다. 그런데 스핀 펌핑이 일어났다는 것은 그래핀의 경계에서 에너지 틈이 사라져야 한다는 것을 의미한다. 또 경계에서의 전자 운동 방향을 고려해 보면, 스핀업인 전자와 스핀다운 전자가 원기둥의 바닥쪽 또는 위쪽에서 어느 특정 방향으로만 움직이게 되는데 스핀업인 전자와 스핀다운인 전자의 홀 전도도가 서로 반대이기 때문에 스핀업인 전자가 움직이는 방향과 스핀다운인 전자가 움직이는 방향이 서로 반대가 되어야 한다. 즉 양자홀 효과의 경계에서 전자가 한 방향으로 도는 1차원 채널을 만든 것과 유사하게 양자 스핀 홀 효과가 나타나는 경우 전자계의 경계에서 스핀에 따라 서로 반대 방향으로 전자가 도는 1차원 채널이 형성되어야 한다는 결론에 도달하게 된다.

위상 절연체와 Z_2 펌핑

위상절연체(topological insulator)의 성질은 Z_2 펌핑이라는 독특한 펌핑과 연관되어 있다.^[8] 2차원 절연체가 일반절연체인지 위상절연체인지는 Z_2 펌핑의 성질을 기술하는 위상수(topological number) 하나에 의해 결정되고 3차원 절연체가 일반절연체인지 위상절연체인지, 위상절연체 중에서도 소위 강한 위상절연체(strong topological insulator)인지 아니면 약한 위상절연체(weak topological insulator)인지는 Z_2 펌핑을 기술하는 4개의 위상수에 의해 결정된다.^[9] 강한 위상절연체는 이 물질의 모든 표면(surface)에서 에너지 틈이 사라지는 진정한 의미의 3차원 위상절연체인 반면 약한 위상절연체는 일부 방향의 표면에서는 에너지 틈이 사라지지 않아서 2차원 위상절연체를 여러 층 쌓아 놓은 것에 해당한다.

위상절연체의 성질 이해에 중요한 역할을 하는 Z_2 펌핑은 전하 펌핑이나 스핀 펌핑보다 직관적 이해가 난해한 양으로 직관적 이해를 목표로 하는 이 글에서는 비교적 이해하기 쉬운 2차원 위상절연체에 국한해 가능한 수식 없이 논의를 진행하겠다. Z_2 펌핑의 정확한 수학적 기술 방법,^[10] 또는 3차원 위상절연체에 대한 기술에서 등장하는 4개 Z_2 위상수의^[9] 의미에 대해서는 원 문헌을 참고하기 바란다.

2차원 위상절연체 중 전자의 특정 방향 스핀이 보존되는 특수한 경우에 대한 논의는 앞에서 논의한 스핀 펌핑을 통해 이해할 수 있었다. 이제 스핀의 어느 성분도 보존되지 않아 스핀 펌핑을 통한 분석이 불가능한 일반적인 상황을 고려하

Fig. 4. Electronic configurations of electrons at the bottom boundary of the cylinder in Fig. 3(b).

자. Z_2 펌핑의 물리적 의미를 쉽게 파악하기 위해 다음과 같은 한 가지 가정을 하자. 즉 스핀-궤도 결합에 등장하는 전자의 스핀 성분 중 어느 특정 성분, 예를 들어 z 성분은 강한 스핀-궤도 결합을 느끼고 다른 성분은 훨씬 약한 스핀-궤도 결합을 느낀다고 하자. 이 경우 스핀 x 또는 y 성분에 대한 스핀-궤도 결합을 약한 건드림(perturbation)으로 간주할 수 있다. 우선 건드림이 없는 상황에 대한 결과를 정리하면 그림 4와 같다. 그림 3(b)에서처럼 원기둥 모양의 2차원 전자계에 자기전속 Φ 를 가해서 Φ 를 0부터 $\Phi_0/2$, Φ_0 , $3\Phi_0/2$ 로 천천히 증가시키면 원기둥 옆면 바닥 경계에 있는 전자들의 에너지 준위는 그림 4(a), (b), (c), (d)와 같이 상태(configuration) 1, 2, 3, 4로 차례로 변해간다. 그림 4(e)는 원기둥 바닥 경계에 있는 전자들의 총에너지가 Φ_0 의 변화에 따라 어떻게 변해 가는지를 나타낸다. $\Phi = \Phi_0/2$ 일 경우 그림 4(b)에 있는 상태 2는 그림 4(g)에 있는 상태 2-1과 같은 에너지를 가지고 $\Phi = \Phi_0$ 일 경우 그림 4(c)에 있는 상태 3은 그림 4(h)에 있는 상태 3-1과 같은 에너지를 가진다. 스핀 z 성분이 보존되는 경우 상태 2와 2-1은 서로 다른 스핀 z 성분 값을 가지기 때문에 서로 섞일 수 없고 상태 3과 3-1도 마찬가지로 섞일 수 없다. 따라서 Φ 를 0부터 천천히 증가시킬 때 초기에 상태 1에서 있었다면 상태 2, 3, 4로 차례로 변해가게 된다.

이제 스핀 x 또는 y 성분에 대한 스핀-궤도 결합 효과를 고려하자. 이 건드림이 존재하는 상황에서는 스핀 z 성분이

REFERENCES

- [8] C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005).
- [9] L. Fu, C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **98**, 106803 (2007).
- [10] L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. B **74**, 195312 (2006).

더 이상 보존되지 않고 따라서 스핀 보존은 상태 2와 2-1, 상태 3과 3-1이 섞이는 것을 막지 못한다. 이 경우 그림 4(e)에 있는 총에너지 그래프가 어떻게 바뀔까? 상태 2와 2-1이 섞여서 $\phi = \phi_0/2$ 에서 에너지 틈이 형성될까? 상태 3과 3-1이 섞여서 $\phi = \phi_0$ 에서 에너지 틈이 형성될까? 보존 법칙이나 대칭성이 방해할 하지 않는 경우 서로 섞일 수 있는 모든 상태들은 거의 항상 실제로 섞인다. 그런데 지금 스핀 보존은 성립하지 않지만 시간역전 대칭성(time reversal symmetry)은 여전히 성립하고 이 대칭성이 상태들이 섞일지의 여부에 영향을 준다. 시간역전 대칭성에 대한 크레이머 정리(Kramer's theorem)를 활용하면 상태 2와 2-1은 전자 한 개의 상태만 차이 나고 이 상태들이 서로에 대한 시간역전(time reversal) 관계이기 때문에 섞일 수가 없다. 그림 4(f)는 건드림에 의한 상태 섞임 효과를 감안한 총 에너지 그래프이고 이 그래프의 붉은 색 선은 ϕ 를 0부터 천천히 증가시킬 때 초기에 상태 1에서 있었다면 이후의 상태를 나타낸다. 그림에서 나타난 것과 같이 상태 2와 2-1은 섞이지 않지만 상태 3과 3-1은 섞이기 때문에 ϕ 가 $2\phi_0$ 만큼 변할 때마다 처음 상태로 되돌아가는 독특한 형태의 펌핑이 구현된다. 즉 ϕ 가 ϕ_0 일 때

는 원기둥 바닥 경계에 있는 전자들이 하나의 전자-홀(hole) 짝을 만들며 들뜬 상태가 되었다가 ϕ 가 ϕ_0 만큼 더 증가해 $2\phi_0$ 가 되면 바닥상태로 돌아간다. ϕ 가 $2\phi_0$ 만큼 변할 때마다 두 가지 상태가 번갈아 구현되기 때문에 이 과정을 Z_2 펌핑이라고 부른다.

맺음말

물질에 대한 이제까지의 이론은 어떤 종류의 질서(order)가 형성되었는지에 기반을 두고 있다. 그런데 양자홀 효과가 등장하면서 질서가 아닌 위상구조에 의한 물질 분류의 가능성이 제기되었고 최근 몇 년 사이에 위상절연체에 대한 이론과 실험이 급속히 발전하면서 위상구조가 물질의 특성에 큰 영향을 미칠 수 있는 요인임이 밝혀졌다. 위상구조가 물성에 미치는 영향에 대한 이해는 이론, 실험에서의 최근 급속한 발전에도 불구하고 아직 많이 부족한 실정이다. 위상구조의 역할에 대해서 많은 연구가 진행되고 있으니 앞으로 놀라운 발견들이 계속되기를 기대해 본다.