주사터널링 현미경을 이용한 위상 절연체의 수송현상 연구

DOI: 10.3938/PhiT.20.009

조두희·김민성·여인환

STM Studies of Transport Properties of Topological Insulators

Doohee CHO, Minseong KIM and In-Whan LYO

Strong spin-orbit coupling (SOC) can induce a novel insulating state (topological insulators or TIs) with metallic surface states that have a linear band dispersion of massless Dirac Fermions with spin-helicity. Quasi-particle interference (QPI) patterns from scanning tunneling microscopy and spectroscopy reveal that electrons in the surface states are spin-textured. A consequence is that back-scattering of a surface electron by non-magnetic impurities is strongly suppressed as predicted by the spin selection rule. In addition, the band dispersion of the non-trivial surface states obtained from dI/dV spectra in a magnetic field coincides with ARPES results. These results suggest that TIs can provide fertile grounds to study electron-spin interactions at the nano-scale as magnetic impurities enable spin-flip back-scattering and open up gaps by destroying the time-reversal symmetry.

저자약력

조두희 연구원은 2005년 연세대학교 물리학과를 졸업하고 현재 연세대학교 나노물리 연구실에서 주사터널링 현미경을 이용하여 위상 절연체에 관련된 연구를 진행 중이다.

김민성 연구원은 2008년 연세대학교 물리학과를 졸업하고 현재 연세대학교 나노물리 연구실에서 주사터널링 현미경을 이용하여 위상 절연체에 관련된 연구를 진행 중이다.

여인환 교수는 Univ. of Pennsylvania 물리학 박사(1988)로서 IBM T. J. Watson Research Center 연구원을 거쳐(1988-1996) 현재 연세대학교 물리학과 정교수(1996-현재)로 재직 중이다.
(lyo@yonsei.ac.kr)

들어가는 글

최근 응집물리 분야에서 많은 관심을 받고 있는 위상절연체(topological insulator: TI)는 내부 전자 구조는 일반적인 절연체와 같이 에너지 띠틈(energy band gap)을 가지고 있지만 위상적 조건의 충족에 의해서 그 표면은 금속성을 갖는 물질그룹에 속하는 절연체이다. 3차원 위상절연체는 강한 스핀 궤도 상호작용에 의해 가능하며 이러한 표면의 전자들은 거의 선형적인 에너지 운동량 분산관계를 보여 그래핀과 유사하게 무질량의 페르미온처럼 거동하는데, 그래핀과는 달리 실제 스핀이 운동량과 연계되어서 스핀 나선성(spin-helicity)을 갖게 된다.

초기에 이론적 연구가 주를 이루다가 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 의 구성비(x)에 따른 전자 구조의 변화를 광전자 분광학(Angle Resolved Photoemission Spectroscopy: ARPES) 실험을 통해 약 8% ($x=0.08$)의 비율 이상일 때 위상절연체 전자구조를 갖는다는 것이 처음으로 밝혀졌다.^[1,2] 그 후로 Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 와 같은 위상절연체들과 Sb와 같은 유사 위상절연체의 표면 전자 구조에 대한 실험적 연구가 활발히 진행되었다. 일차적으로 표면의 전자띠 구조를 직접적으로 측정이 가능한 ARPES 실험이 이 분야에 큰 기여를 하였다. 하지만 최근에는 표면에 존재하는 다양한 결점 구조로부터 산란되어 나온 전자들의 간섭 무늬를 주사 터널링 현미경(Scanning Tunneling Microscopy: STM)을 이용하여 원자 수준으로 관찰하고 분석하는 방법으로 위상절연체에 대한 연구가 활발하게 진행 중이다. 특히 위상절연체에 다양한 물질을 도핑하여 나타나는 에너지 띠틈 열림, 초전도 현상, 또는 강자성 특성들을 원자 수준에서 밝혀 내려는 연구와 강한 자기장 내에서 나타나는 란다우 준위에 대한 분광학적 연구 등으로 연구 범위를 확대해 나가고 있다.

REFERENCES

- [1] D. Hsieh *et al.*, Nature **452**, 970 (2008).
- [2] D. Hsieh *et al.*, Science **323**, 919 (2009).

Fig. 1. (color) Comparison between spin-degenerate and spin helical surface states. To do this, we consider a 2 dimensional square lattice. (a) The parabolic energy-momentum dispersion with spin-degenerate states. (b) The isotropic Fermi surface. (c) Its joint density of states(JDOS).^[3] (d) The fast Fourier transformation(FFT) of JDOS. This corresponds to the quasi-particle interference (QPI) pattern induced by a point defect on a noble metal. (e) The linear band dispersion of spin filtered surface states. (f) The spin texture (colors) added to (b). (g) Its spin-dependent scattering probability (SSP).^[3] (h) The FFT of (g). The image doesn't show any QPI pattern, because the spin-flip back-scattering is suppressed on the TI surface.

스핀 궤도 상호작용과 라쉬바 효과

3차원 위상절연체가 갖는 특이한 전자 구조의 근원은 바로 강한 스핀 궤도 상호작용이다. 위상절연체의 전자구조를 스핀-궤도 상호작용의 측면에서 접근하여 볼 수도 있다. 전자가 물질 내부에서 속도 v 로 전기장 $\vec{E}$ 내에서 움직인다면, 자기장 $\vec{B}$ 를 다음과 같은 크기로 느끼게 된다.

$$\vec{B} = \frac{\gamma(\vec{v} \times \vec{E})}{c^2}$$

여기서 $\gamma = (1 - \frac{v^2}{c^2})^{-1/2}$ 이고 c 는 빛의 속도이다.

이때의 자기장 $\vec{B}$ 와 전자의 스핀 사이의 제만(Zeeman) 상호 작용을 스핀 궤도 상호 작용이라 한다. 이러한 상호 작용은 일반적인 해밀토니안에 다음과 같은 섭동을 만들어낸다.

$$H_{SOC} = \frac{\mu_B}{2c^2} (\vec{v} \times \vec{E}) \cdot \vec{\sigma}$$

이렇게 스핀 $\vec{\sigma}$ 가 연관된 섭동은 축퇴되어 있는 두 개의 스핀 상태를 서로 분리시킨다.

일반적으로 스핀 1/2인 페르미온이 시간 역전 대칭성과 공간 반전 대칭성을 다음과 같이 동시에 만족하는 경우 각각의 전자 상태는 스핀 상태가 축퇴된다 (Kramer's degeneracy).

$$\text{시간 역전 대칭성 : } E(\vec{k}, \uparrow) = E(-\vec{k}, \downarrow)$$

$$\text{공간 반전 대칭성 : } E(\vec{k}, \uparrow) = E(-\vec{k}, \uparrow)$$

$$\text{스핀 축퇴상태 : } E(\vec{k}, \uparrow) = E(\vec{k}, \downarrow)$$

하지만 3차원 물질의 표면과 같이 반전 대칭성이 깨지는 곳에서는 축퇴된 스핀 상태가 분리될 수 있다. 그러나 여전히 시간 역전 대칭성이 있기 때문에 같은 에너지 준위에서 운동량의 방향에 따라 서로 다른 스핀 방향을 갖게 되는 스핀 나선성 전자 구조가 만들어진다. 이를 고체 표면에서 라쉬바 효과(Rashba effect)라고 한다. 그런데 브릴루앙존 중앙에서는 모멘텀 크기가 0이기 때문에 이 스핀 분리된 전자띠가 서로 축퇴되며 이는 3차원 위상절연체 표면의 선형적 띠구조에서 디랙점(Dirac point)에 해당한다. 이런 라쉬바 효과가 발생하려면 당연히 강한 스핀-궤도 상호작용이 존재하여야 하기 때문에 라쉬바 효과는 필요조건은 되지만 위상절연체가 되는 충분조건은 아니다.

표면 전자구조와 전자 산란에 의한 간섭

위상절연체 표면에서 전자의 거동은 디랙-와일(Dirac-Weyl) 방정식으로 기술이 되기 때문에 스핀과 운동량의 곱인 손지기(helicity)가 보존되며 이로 말미암아 산란이 제한되게 된다. 그래핀의 경우와 유사하게, 산란이 제한되면 평균자유경로가 길어지게 되어 전자 이동도가 높아지며 양자현상이 쉽게 발현되게 된다. 이로 인한 발현되는 독특한 물성은 위상절연체가 미래에 양자 효과를 이용한 소자로 응용될 가능성을 제시하여주고 있다. 이러한 소자로서의 가능성은 원칙적으로 표면 상태의 전자 수송 현상을 측정하면 파악할 수 있다. 그러나 아직까지 발견된 위상절연체들은 그 에너지 틈이 크지 않아서 덩치(bulk)의 전기 전도도가 상대적으로 높으며, 이로 인하여 표면상태만에 의한 수송 현상을 측정하는 것을 현실적으로 매우 어렵게 하고 있다. 이를 해결하기 위하여 덩치의 전도도를 크게 낮추거나 도핑을 통하여 페르미 준위 부근에서 덩치상태가 존재하지 않도록 하는 연구가 진행되고 있다. 그럼에도 불구하고 위상절연체 표면에서의 산란 현상을 직접 측정하게 되면 그 표면 전자상태에 대한 많은 정보를 얻을 수 있다. 전자들은 인위적인 또는 자연스럽게 형성된 결점 구조들에 의해서 산란이 일어난다. 입사된 전자와 산란되어 나오는 전자의 파동 함수의 중첩으로 간섭무늬가 만들어진다. 이렇게 만들어진 간섭무늬는 주사터널링 분광법(Scanning Tunneling Spectroscopy: STS)을 이용하여 원자 수준으로 관찰할 수 있으며, 산란 전후의 전자 상태를 알아낼 수 있는 정보를 담고 있다.

Fig. 2. (color) Suppressed spin-flip backscattering on $\text{Bi}_{0.92}\text{Sb}_{0.08}$ (111) surface. (a) The spin textures from ARPES measurements are shown with arrows. (b) Spatially resolved conductance map of the $\text{Bi}_{0.92}\text{Sb}_{0.08}$ (111) surface obtained at 0 mV. (c) The JDOS calculated at the Fermi energy (E_F). (d) The FFT power spectrum of dI/dV map at E_F . (e) The SSP at E_F .^[3]

일반적으로 스핀 상태가 축퇴되어 있는 경우의 산란은 산란 전후의 스핀 상태가 영향을 끼치지 않는다. 하지만 스핀 상태가 분리되어 스핀 나선성 구조를 갖는 경우에는 스핀 선택 규칙이 중요한 역할을 한다. 특히 입사파와 산란파의 각이 180° 가 되는 후방산란(back-scattering)은 산란체에 의해서 스핀 반전이 일어나지 않는 한 불가능하다. 이렇게 제한된 산란에 의한 간섭무늬는 일반적인 도체 표면의 것과는 차이가 있다. 따라서 위상절연체와 같이 라쉬바효과가 나타나는 물질의 표면에서의 산란 무늬를 이용하면 스핀을 직접 검출하지 않고도 스핀 분리된 전자구조를 직접 측정할 수 있는 새로운 방법을 얻을 수 있다.

Figure 1을 참고하여 스핀 나선성 전자 구조에서의 간섭무늬가 일반적인 경우와 어떻게 다른지 알아보자. 우선 간단한 정사각 격자를 가지는 표면이 이상적으로 등방적인 페르미면을 가지고 있다고 가정하자. 이러한 정보는 광전자 분광법으로 측정이 가능할 것이다. 이에 대한 접합 밀도 함수를 통해 산란 반경이 $2k_F$ 인 원형 무늬를 얻을 수 있게 된다. 이는 파장 $\lambda = 2\pi/2k_F$ 인 간섭무늬가 점과 같은 0차원 결점구조에 대해서 등방적으로 생기게 된다는 것을 의미한다. 하지만 위상절연체와 같이 스핀 나선성을 가지고 있는 표면 전자 구조에서는 스핀 선택 규칙이 적용되어 등방적인 간섭무늬가 나타나지 않는다.

최근 위상절연체의 표면 연구에서 주사 터널링 분광법을 이용해서 얻은 다양한 간섭무늬를 푸리에(Fourier) 변환을 해

Fig. 3. (color) QPI pattern induced by Ag-trimmers on Bi_2Te_3 (111) surface. (a) STM image of a region with four Ag trimmers adsorbed on Bi_2Te_3 (111) surface. (b) dI/dV map at 50 meV. (c) The FFT power spectrum of (b). (d) The constant energy contour of Bi_2Te_3 (111). k_i and k_f denote the wave vectors of incident and scattered states. q_1 , q_2 , and q_3 are three possible scattering wave vectors. Only q_2 can generate the QPI pattern. (e) The linear energy dispersion with $v_F \sim 4.8 \times 10^5$ m/s.^[4]

보면 위에서 언급한 제한된 산란만 나타남을 알 수 있다. 최초로 위상절연체의 표면을 주사 터널링 현미경으로 관찰한 논문에서는 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 표면에서 나타나는 복잡한 간섭무늬에 대한 푸리에 스펙트럼이 스핀을 고려한 산란 확률과 일치하는 결과를 통해 스핀 반전 후방산란이 존재하지 않음을 보였다^[3](Fig. 2). $\text{Ag}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ 에 대한 측정에서도 인위적으로 인가된 전하 결점 구조도 시간 반전 대칭성을 깨지 못하여 제한된 방향으로만 산란이 가능함을 보였다.^[4] 또한 에너지 준위에 따른 간섭무늬의 파수 변화는 선형적인 에너지 운동량 간의 분산 관계를 보여주었다(Fig. 3). 최근에는 페르미 표면이 거의 등방적인 Bi_2Se_3 에 대한 연구에서 표면에 결점 구조가 있음에도 불구하고 표면 전체적으로 전도도가 거의 일정함을 보여, 위상절연체 표면의 전자 상태가 자연적으로 형성된 결점 구조에 대해서 매우 잘 보호됨을 밝혔다.^[5]

자기장 내에서의 위상절연체

위상절연체의 표면 전자는 스핀 나선성 구조와 선형적 에

REFERENCES

- [3] P. Roushan *et al.*, Nature **460**, 1106 (2009).
- [4] T. Zhang *et al.*, Phys. Rev. Lett. **103**, 266803 (2009).
- [5] T. Hanaguri *et al.*, Phys. Rev. B **82**, 081305 (2010).

Fig. 4. (color) Landau levels on $\text{Bi}_2\text{Se}_3(111)$ surface. (a) The parabolic energy dispersion of conventional free electrons. (b) The Landau levels (LL) of 2D free electrons. (c) The linear energy dispersion of massless Dirac fermions. (d) The LLs of 2D massless Dirac fermions. The dashed lines show the DOS without a magnetic field in (b) and (d). (e) Magnetic-field dependence of tunneling spectra on Bi_2Se_3 . The spectra are shifted vertically for clarity. Note that there is a field-independent $n=0$ LL at DP indicated by a dotted line. (f) Energy of LLs E_n scaled by $\sqrt{nB}$. The scaling parameter $\sqrt{nB}$ (top axis) can be converted into the momentum k (bottom axis) and the scaling function represents linear band dispersion. The inset shows the n dependence of E_n before the scaling.^[5]

너지 운동량 분산을 보인다. 즉 무질량 디랙 페르미온으로 거동하며, 디랙점을 제외하면 스핀 상태가 축퇴되어있지 않다는 것을 의미한다. 2차원 탄소 구조체인 그래핀 또한 선형적 에너지 운동량 분산 관계를 보여주지만 전자의 스핀이 축퇴되어있다는 점에서 차이가 있다.

무질량 디랙 페르미온의 전자 구조를 갖는 물질은 강한 자기장 안에서 일반적인 전자 구조를 갖는 물질과는 확연히 다른 결과를 보여준다. 대표적인 것은 디랙점 부분에 자기장의 변화와는 무관한 란다우 준위가 존재한다는 것이다. 이는 자유전자와 같은 분산관계에서 나타나지 않는 란다우 준위이다. 이외에도 디랙 페르미온에 대한 보어-쑤머펠트(Bohr-Sommerfeld) 양자화 조건

$$S_n = \pi k_n^2 = |n| \frac{2\pi eB}{\hbar} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

을 이용하면 자기장 세기에 따른 란다우 준위의 변화를 통해

에너지 운동량 분산관계를 얻어낼 수 있다 (Fig. 4).

이러한 란다우 준위는 강한 자기장 내에서 주사 터널링 분광법을 이용하여 측정이 가능하다. 최근 Bi_2Se_3 에서 나타나는 란다우 준위와 관련하여 발표된 2편의 연구 결과에서는 광전자 분광법을 통해 밝혀진 위상절연체의 표면 전자 구조와 일치하는 선형적 분산관계를 보여주었다.^[5,6] 하지만 디랙점 이하의 준위에서는 란다우 준위가 거의 발견되고 있지 않으며, 페르미 준위근방에서 나타나는 미세구조 스펙트럼은 메커니즘이 확실하게 규명되지 않고 있다. 이는 위상절연체의 디랙 페르미온의 독특한 특성이 자기저항과 같은 자기장 내에서의 전자 수송 특성을 이해하는데 중요한 것으로 기대되는 만큼 앞으로의 추가 연구가 필요한 부분이다.

자성 결점 구조의 영향

위상절연체의 표면 전자 구조는 시간 반전 대칭성에 의해 강하게 유지된다. 이러한 표면에 자성 결점 구조가 있는 상황에 대한 이론적 계산 결과에 따르면 디랙점 부분에 에너지 띠 틈이 형성되고 스핀 반전 후방산란이 가능하게 된다.^[7] 자성 결점 구조는 시간 반전 대칭성을 깨는 섭동으로 작용하기 때문이다. 최근 광전자 분광법을 이용한 실험에서는 Fe 또는 Mn과 같이 자기모멘트가 큰 원소들을 Bi_2Se_3 에 첨가하여 표면 전자구조에 최대 50 meV 정도의 에너지 띠 틈이 형성됨을 발견하였다.^[8]

위와 같은 연구 결과를 나노 수준, 즉 주사터널링 현미경을 이용해 측정한 결과는 아직까지 많지 않다. Mn이 1.8% 첨가된 Bi_2Te_3 에서는 결점 구조가 존재하는 깊이 에 따라 표면에 다양한 크기의 결점 모양이 관찰되었으며 분광학적 측정 결과에서는 평균적으로 홀 도핑이 된 결과를 보여 주었을 뿐, 띠 틈 열림이나 스핀 반전 후방산란은 관찰되지 않았다.^[9] 최근에 Fe를 0.25% 첨가된 Bi_2Te_3 에서 스핀 반전 뒤 산란이 관찰되었다는 연구 결과가 발표된 바 있으나 여전히 에너지 띠 틈 열림이 측정되지 않았다.^[10] (Fig. 5)

광전자 분광학적 방법으로 띠 틈 열림을 관찰한 결과를 살펴보면 상당히 많은 양의 자성 불순물을 첨가하여야 한다.^[8] 이러한 시료의 표면을 STM으로 관찰한다면 거의 대부분 결

REFERENCES

- [6] P. Cheng *et al.*, Phys. Rev. Lett. **105**, 076801 (2010).
- [7] Q. Liu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 156603 (2009).
- [8] Y. L. Chen *et al.*, Science **329**, 659 (2010).
- [9] Y. S. Hor *et al.*, Phys. Rev. B **81**, 195203 (2010).
- [10] Y. Okada *et al.*, arXiv 1011.4913 (2010).

Fig. 5. (color) STM images of magnetic impurities-doped TI surfaces. (a) STM topography (250 meV, 40 pA) of the $\text{Bi}_{1.91}\text{Mn}_{0.09}\text{Te}_3$ (001) surface over a $100 \times 100 \text{ nm}^2$ area.^[9] (b) STM topography (10 meV, 100 pA) of Mn-doped(0.5%) Sb(111) surface. These images show that there are various subsurface impurities induced by Mn impurities. (c),(d) dI/dV map at 140 meV and 240 meV Fe-doped(0.25%) Bi_2Te_3 . (e),(f) The FFT spectrum divided by FFT spectra at 60 meV for a clarity. (g) Calculated FFT spectra with and without spin matrix elements.^[10]

점 모양들만 보일 것이며 이는 스핀 반전 산란에 의한 간섭 무늬를 명확하게 관찰할 수 없는 수준이 될 것이다. 또한 표면 전자 구조의 디랙점의 위치를 물질의 에너지 띠틈 사이에

위치시킬 수 없다면 에너지 띠틈이 열린다 하더라도 그 현상이 분명하게 나타나지 않을 가능성이 크다. 하지만 이상적으로 잘 만들어진 시료의 표면에 섬 구조의 자성 결점을 형성시킬 수 있다면 위에서 제기한 두 가지 문제를 해결할 수도 있을 것이다. 이러한 문제 해결은 위상 절연체의 표면 전자 상태가 시간 반전 대칭성에 의해 강하게 보호된다는 것을 입증하는 것뿐만 아니라, 스핀 상호작용을 나노차원에서 연구하는데 있어 매우 중요한 것이다.

맺는 글

지금까지 주사 터널링 현미경을 이용한 위상절연체에 대한 연구들은 표면 간섭무늬 분석이나 자기장 내에서 란다우 준위에 대한 연구를 통해 표면 전자들이 스핀 나선성과 선형적 분산관계를 갖는다는 것을 원자 수준에서 밝혀주었다. 이는 광전자 분광법을 이용한 실험 결과와 매우 잘 일치하는 결과이다. 하지만 아직까지 자성 결점 구조에서 나타날 것으로 예상되는 에너지 띠틈 열림이나 스핀 반전 산란 현상은 원자 수준에서 명확하게 측정된 연구 결과가 없다. 이러한 연구들은 표면의 상태에 매우 민감하므로 이상적인 위상절연체의 표면을 확인함과 동시에 결점 구조의 영향을 원자 수준에서 측정하는 것이 매우 중요하다. 또한 위상절연체는 주사터널링 현미경을 이용하여 0차원 자성 결점과 위상절연체의 표면 사이에서 나타날 수 있는 Kondo 효과, 2차원 초전도 또는 자성 영역과 위상절연체 표면 사이의 전자 산란 또는 상호작용 등에 관련된 연구에 매우 이상적인 환경을 제공할 것으로 기대되고 있다.