궤도 각운동량이 반전대칭성 깨짐을 만날 때

DOI: 10.3938/PhiT.23.042

김창영·박승룡

When Orbital Angular Momentum Meets Inversion Symmetry Breaking

Changyoung KIM and Seung Ryong PARK

Orbital angular momentum (OAM) in solids is usually quenched or very small due to the crystal field, resulting in a minimal role of OAM in the physical properties of solids. However, in some special cases, OAM is strong and does play an important role in the determination of the electronic structure in the presence of inversion symmetry breaking (ISB). In this article, we briefly discuss how the OAM of atomic orbitals in a Bloch state may lead to an asymmetric charge distribution. In the presence of ISB, such an asymmetric charge distribution couples to the electric field caused by the ISB and results in a new electric dipole energy term in the Hamiltonian. The new energy term may take the form of a Rashba Hamiltonian with the spin replaced by the OAM operator. This new term, in combination with atomic spin-orbit coupling, is found to explain all aspects of the Rashba phenomenon. We also briefly discuss how this new Hamiltonian can explain other phenomena, including the intrinsic spin Hall effect.

서론: 스핀에서 궤도 각운동량으로

인류는 이미 기원전부터 자성물질의 존재 및 자성물질 간의 자력을 알고 있었다. 그 후 자성물질(자성체)은 각종 기기에 쓰

저자약력

김창영 교수는 1995년 스탠포드대학교 물리학과에서 박사학위를 취득하였고 1995년부터 2001년까지 스탠포드 방사광 가속기 연구소(Stanford Synchrotron Radiation Lab.)에서 연구원으로 재직하였으며, 2001년부터 연세대학교 물리학과 교수로 재직 중이다.
(changyoung@yonsei.ac.kr)

박승룡 교수는 2009년 연세대학교 물리학과에서 박사학위를 취득하였고 2009-2010년 연세대학교 연구원, 2010-2013년 콜로라도 대학교 연구원으로 재직하였으며, 2013년부터 인천대학교 물리학과 교수로 재직 중이다.
(AbePark@incheon.ac.kr)

이는 자석 등을 통하여 우리 일상생활의 중요한 부분이 되었다. 이러한 자성체에 자성을 부여하는 가장 중요한 원인은 전자의 스핀임을 우리는 잘 알고 있으며, 이에 따라 고체의 자성 특성 등 고체 물성을 연구함에 있어서 전자의 스핀 상태를 연구하는 것은 고체물리학에서 매우 중요한 분야가 되었다. 대부분의 경우 자성 상태를 효율적으로 기술하기 위해서 스핀 연산자(spin operator)를 이용한 다양한 형태의 유효 해밀토니안(effective Hamiltonian)을 이용하며, 이러한 유효 해밀토니안에는 하이젠베르크(Heisenberg, $\hat{H}_H = -J \sum_i \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1}$), 라쉬바(Rashba, $\hat{H}_R = \alpha_R (\vec{\sigma} \times \vec{p}) \cdot \vec{z}$) 및 Dzyaloshinskii-Moriya(DM, $\hat{H}_{DM} = \vec{D} \cdot (\vec{\sigma}_1 \times \vec{\sigma}_2)$) 해밀토니안 등이 있다.

한편, 스핀과 같이 각운동량인 궤도 각운동량(orbital angular momentum or OAM)도 상대적으로 작기는 하지만, 자성을 줄 수 있다. 그럼에도 불구하고 궤도 각운동량이 자성에 그리 큰 영향을 미치지 못하는 이유는 잘 알려진 바와 같이 고체 내의 결정장(crystal field)에 의한 궤도 각운동량 꺼짐(OAM quenching) 현상 때문이다. 이는 스핀과는 달리 궤도 각운동량은 전자의 운동 때문에 생기는 각운동량이기 때문이다. 따라서 대부분의 물질에서 궤도 각운동량은 그 역할이 무시될 수 있을 정도로 작다.^[1]

하지만 몇 가지 특별한 경우에는 궤도 각운동량이 소멸되지 않고 크게 존재하게 되는데, 대표적인 것이 희토류 원자의 4f 궤도이다.^[1] 4f 궤도는 그 크기가 매우 작기 때문에 결정장의 영향을 매우 작게 받으며, 이로 인하여 스핀-궤도 결합(spin-orbit coupling, SOC) 효과 $\hat{H}_{SOC} = \alpha \vec{L} \cdot \vec{S}$ 의 역할이 상대적으로 커지게 되므로 궤도 각운동량이 살아남게 된다. 그렇지만 이러한 경우에도 궤도 각운동량의 역할은 주로 자기 모멘트에 대한 기여만으로 생각될 뿐, 그 이외의 특이 현상에 대한 논의는 되고 있지 않다.

그런데 특별한 경우 궤도 각운동량의 역할이 생각하지 못했던 이유로 살아나면서 고체 물성에서 중요한 역할을 할 수 있다는 것이 최근 몇 개의 논문을 통해서 밝혀졌다.^[2-5] 본 글에

REFERENCES

- [1] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin, *Solid State Physics* (BROOKS/COLE, 1976).

서는 궤도 각운동량의 상태가 가지고 있는 복소 파동 함수가 만드는 간섭효과가 고체 내부에서 어떤 특이한 파동함수를 만들 수 있는지에 대한 소개를 하고자 한다. 또한 이러한 특이 파동 함수가 지금까지 밝혀지지 않았던 라쉬바 효과의 미시적 원리를 어떻게 설명해 줄 수 있고, 스핀홀 효과에서 어떤 역할을 할 수 있는지에 대해서도 소개하려고 한다. 이러한 것들을 수식적으로 본다면 위에서 소개한 라쉬바 및 DM 해밀토니안의 스핀 연산자를 궤도 각운동량 연산자로 대체하는 결과를 가져오게 된다.

블로흐 상태의 궤도 각운동량, 비대칭적 전하분포, 그리고 새로운 에너지

고체물리학의 초창기 물리학자들은 전자가 어떻게 원자에 산란되지 않고 움직일 수 있는지에 대한 의문을 가지고 있었다. 이에 대해 블로흐(Bloch)는 푸리에 분석을 통하여 고체 결정 내부에 있는 전자의 파동함수는 특별한 모양을 가지고 있으며, 이러한 조건을 만족시킬 경우 전자는 원자에 의해 산란되지 않고 움직일 수 있다는 것을 보여 주었다.^[1] 양자역학적으로 보면 주기적 퍼텐셜에 의한 산란이 전자의 고유상태(eigen state)에 포함되는 것이며, 이러한 파동 함수를 블로흐 파동함수라고 한다. 수식적으로 보면 블로흐 파동함수는

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (1)$$

과 같은 모양을 가지고 있다. 여기서 $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T})$ 로서 ($\vec{T}$ 는 격자 벡터), 격자와 같이 주기적인 함수이다. $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ 는 근사적으로 원자 오비탈로 대체되어

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \sum_i \varphi(\vec{r} - \vec{R}_i) \quad (2)$$

와 같이 표현되는데, 여기서 $\varphi(\vec{r} - \vec{R}_i)$ 는 i 번째 원자의 위치 $\vec{R}_i$ 에 존재하는 원자 오비탈이다. 식 (2)와 같이 표현되는 파동 함수를 원자 오비탈의 선형 결합(linear combination of atomic orbital or LCAO)이라고 하며, tight binding 계산 등에서 사용된다.

여기서 원자 오비탈 $\varphi(\vec{r})$ 로서 무엇을 사용할 것인가를 결정해야 한다. 우리가 양자역학에서 배웠듯이 원자의 오비탈은 양자수 (n, l, m) 으로 표현되는 궤도 각운동량의 고유상태, 혹은 그들의 선형 결합으로 나타내어지는 실수 파동함수(real wave function, 예를 들어 p_x, p_y, p_z)로 표현할 수 있다. 다른 양자역학 문제와 마찬가지로 무엇을 선택할 것인가는 표현하고자 하는 시스템이 있는 환경에 따라 정해지는데, 단일 원자와 같

Fig. 1. (a) Schematic of a Bloch wave function as a linear combination of real atomic orbitals. p_z orbitals are used as the atomic orbitals in this example. The grey wavy curve represents the phase of the Bloch wave function at each atomic site and is determined by $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ factor in the Bloch wave function. (b) A Bloch wave function constructed from eigen-states of orbital angular momentum (OAM).

이 회전 대칭성(rotational symmetry)이 있는 경우는 궤도 각운동량의 고유상태가, 분자와 같이 회전 대칭성이 깨져있고 방향성 있는 결합이 중요한 경우에는 실수 파동함수를 쓰는 것이 적절하다. 고체 내부의 경우 서론에서 기술한 바와 같이 궤도 각운동량 꺼짐 현상으로 인하여 대부분의 경우 $\varphi(\vec{r})$ 로서 p_x, p_y, p_z 와 같은 실수 파동함수를 쓰게 된다(그림 1(a)에 있는 p_z 를 이용한 블로흐 파동함수 참조). 하지만 결정장에 의한 에너지를 극복할 수 있을 정도로 SOC가 매우 강한 경우는 $\varphi(\vec{r})$ 로서 궤도 각운동량의 고유 상태, 즉 궤도 각운동량을 지닌 원자 오비탈을 사용하는 것이 적절하다(그림 1(b) 참조). 고체에서의 파동함수가 가지는 궤도 각운동량은 이와 같이 블로흐 파동 함수를 이루는 원자 궤도가 가지는 궤도 각운동량을 의미한다.

궤도 각운동량을 가지는 원자 오비탈 $\varphi(\vec{r})$ 의 특징은 무엇인가? 그것은 운동량을 가지는 파동함수가 반드시 복소함수이어야만 하는 것처럼 $\varphi(\vec{r})$ 도 복소함수라는 것이다. $\varphi(\vec{r})$ 가 복소함수라는 것이 본 글에서 소개하려는 물리현상에서 결정적인 역할을 하게 되는데, 그 이유는 이웃하는 원자 오비탈간의 간섭 현상이 일어날 수 있기 때문이다. 이웃 원자 오비탈간 간섭 현상에 의해서 어떠한 현상이 일어날 수 있는지 알아보기 위하여, 그림 2(a)와 같이 이웃하는 원자의 오비탈이 $l=2, m=$

REFERENCES

- [2] S. R. Park *et al.*, Phys. Rev. Lett. **107**, 156803 (2011).
- [3] J. H. Park *et al.*, Phys. Rev. B **85**, 195401 (2012).
- [4] B. Y. Kim *et al.*, Phys. Rev. B **85**, 195402 (2012).
- [5] B. Y. Kim *et al.*, Phys. Rev. B **88**, 205408 (2013).

Fig. 2. (a) Schematic of two atomic orbitals with OAM. The two OAM vectors $\vec{L}_1$ and $\vec{L}_2$ form an angle of θ . $\vec{D}$ is the vector that connects the two atom sites. $\vec{p}$ is the electric dipole moment and grey dotted lines represent the electric field $\vec{E}$ caused by the inversion symmetry breaking. (b) A color scale plot of the resulting electron density for canted OAM vectors.^[6]

1인 상태를 생각해 보자. 두 원자의 OAM을 각각 $\vec{L}_1$, $\vec{L}_2$ 라고 하고, 두 OAM이 각도 θ 를 가지고 기울어져 있다고 생각해 보자. 이런 경우 윗부분의 오비탈들은 중첩이 되고, OAM 때문에 생기는 위상을 고려하면 서로 상쇄 간섭을 일으키게 된다. 반면 아래쪽의 오비탈은 서로 멀어지므로 간섭이 거의 일어나지 않는다. 결과적으로 위쪽은 전자의 밀도가 낮아지고, 아래쪽은 전자의 밀도가 상대적으로 높아지는 현상이 일어날 수 있다 (그림 2(b)). 즉, 전하 밀도가 $z=0$ 을 기준으로 비대칭적으로 분포하는 현상이 일어나게 된다. 이러한 전하의 비대칭 분포는 전기 쌍극자 모멘트를 가지게 되는데, 전기 쌍극자 모멘트 $\vec{p}$ 는 θ 가 크지 않는 경우 방향까지 고려하여 대략 $\vec{D} \times \vec{L}_1 \times \vec{L}_2$ 에 비례하는 것을 유추해 볼 수가 있다. 즉, γ 를 비례상수라 할 때,

$$\vec{p} = \gamma \vec{D} \times \vec{L}_1 \times \vec{L}_2 \quad (3)$$

이다.^[6]

우리는 위에서 궤도 각운동량으로부터 비대칭적 전하밀도 분포가 생길 수 있다는 것을 알아보았다. 그런데 이것이 왜 중요한가? 그 이유는 전하의 비대칭적 분포에 의한 전기쌍극자가 전기장 $\vec{E}$ 와 결합해서 전기 쌍극자 에너지를 만들 수 있기 때문이다. 그림 2의 예에서 전기 쌍극자 모멘트는 식 (3)에 주어진 것과 같이 표현되므로, 전기장 하에서의 에너지는

$$\hat{H}_{ODM} = -\vec{p} \cdot \vec{E} = -\gamma (\vec{D} \times \vec{L}_1 \times \vec{L}_2) \cdot \vec{E} \quad (4)$$

와 같이 표현된다. 그런데 위 해밀토니안의 모양은 서론에서 언급된 DM 해밀토니안 $\hat{H}_{DM}$ 에서 스핀을 궤도 각운동량으로 치환한 모양과 비슷하다. 다만 $\hat{H}_{ODM}$ 의 경우 $\hat{H}_{DM}$ 과는 다르게 전기장이 있는 경우에만 존재한다.

그렇다면 이제 질문은 어떤 경우에 물질에 전기장 $\vec{E}$ 가 존재하는가이다. 그 답은 반전 대칭성 깨짐에 있다. 많은 고체들은 결정 구조에 반전 대칭성을 가지고 있지만, 몇 가지 경우에는 반전 대칭성이 깨져 있다. 가장 대표적이고 이해하기 쉬운 경우가 고체의 표면이다. 고체 표면의 한쪽은 고체이고 다른 쪽은 진공이므로, 뒤집었을 때 모양이 다른 반전 대칭성이 없는 상태이다. 그 결과 고체의 표면에는 언제나 강한 전기장이 존재한다 (사실 그 전기장이 고체에서 전자가 고체 밖으로 나가는 것을 막아주고 있다). 또한 이러한 전기장은 계면에도 존재할 수 있는데, 이는 계면의 양쪽이 다른 물질로 이루어져 있어 반전 대칭성이 깨져 있기 때문이다. 여기에 더하여 결정구조 자체에서 반전 대칭성이 깨진 물질이 있으며, 그 물질이 부도체라면 물질의 내부에도 전기장이 존재할 수 있다.

위에서 설명한 대로 궤도 각운동량에 의한 비대칭적 전하분포와 반전 대칭성 깨짐에 의해서 전기장이 존재하는 경우 식 (4)에 주어진 것과 같이 해밀토니안에 새로운 전기 쌍극자 에너지 항이 나타나게 된다. 주목할 것은 이러한 새로운 해밀토니안이 SOC가 커서 원래부터 OAM이 존재하는 계에서 나타날 뿐만 아니라, OAM이 없던 경우라도 OAM을 유도한다는 것이다.^[3] 따라서 반전 대칭성이 깨져서 전기장이 존재하는 계라면 항상 작더라도 유한한 크기의 OAM이 존재하게 된다. 그리고 이렇게 생긴 새로운 해밀토니안이 얼마나 크냐에 따라서 고체의 물성에 어느 정도의 영향을 줄 것인가를 결정하게 된다.

라쉬바 효과 근본원리의 발견 및 검증

라쉬바 현상은 궤도 각운동량에 의한 비대칭적 전하분포와 반전 대칭성 깨짐에 의해서 생긴 전기장의 결합으로 만들어진 해밀토니안으로 설명할 수 있는 중요한 물리현상이다.^[2-5] 라쉬바 효과는 고체의 표면과 같이 반전 대칭성 깨짐으로 인하여 전기장이 존재하는 경우 고체의 에너지 밴드의 스핀 축퇴(spin degeneracy)가 없어지면서 밴드가 갈라지는 현상이다. 라쉬바 현상은 밴드가 두 개의 스핀 상태로 갈라지는 것과 갈라진 밴드에서 스핀이 특정한 방향으로 정렬하는 두 가지 특징을 가지고 있다(그림 3 참조). 대칭성의 분석을 통하여 E. Rashba는 유효 해밀토니안 $\hat{H}_R = \alpha_R (\vec{\sigma} \times \vec{p}) \cdot \vec{z}$ 에 의해서 설명될 수 있는 라쉬바 효과가 있음을 제안하였다.^[7] 이 유효 해밀토니안은 그림 3에 설명된 라쉬바 효과의 특성을 잘 설명할 수 있는 듯 보여 지금까지 많은 연구자들이 이용하고 있다. 하지만 라

REFERENCES

- [6] J. Y. Kwon, in preparation.
- [7] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, JETP Lett. **39**, 78 (1984).

Fig. 3. (a) The band structure with Rashba spin-band splitting. Spin degeneracy is lifted except at the Γ point which is a time reversal invariant momentum point. (b) Spin structures (red arrows) of the Rashba band at a constant energy. Spin chirality of the inner band is opposite to that of the outer band.

쉬바의 제안은 미시적 이론이 아니므로, 유효 해밀토니안이 어떻게 얻어질 수 있는가에 대한 이슈가 있다.

이후, 전기장 내에서 움직이는 전자의 상대론적 효과를 기반으로 $a_R = (\hbar/4mc^2)|\vec{E}|$ 이라고 제안되었다. 그런데 상대론을 기반으로 하는 라쉬바 효과의 이해에는 몇 가지 문제가 있다. 가장 먼저 불거진 문제는 갈라진 밴드의 에너지 차이가 실제 실험에서 관측된 값과 비교하여 보았을 때 10만 배 정도 작다는 것이다.^[8] 여기에 더하여, 실험적으로 관측된 에너지 차이가 일반적으로 물질의 원자간에 비례하여 커지는 현상을 상대론을 기반으로 하는 이론에서는 설명할 수가 없다. 이를 해결하기 위하여 tight binding 계산 등 다양한 시도가 있었는데,^[9] 에너지 크기 및 원자간에 비례하여 커지는 에너지 등의 현상을 설명할 수는 있지만, 라쉬바 효과의 다양한 현상을 완전히 설명하지는 못하였다. 더욱 중요한 것은, 이러한 것들이 계산일 뿐이지 미시적 이론은 아니라는 것이다.

그런데 최근 라쉬바 현상을 궤도 각운동량에 기인하는 비대칭적 전하분포와 전기장의 결합으로 설명할 수 있다는 이론이 제안되었다.^[2-5] 이 이론의 가장 중심적 아이디어는 고체의 블로흐 상태가 궤도 각운동량 $\vec{L}$ 과 운동량 $\vec{k}$ 를 동시에 가질 때 비대칭적 전하 분포가 $\vec{L} \times \vec{k}$ 에 비례하여 나타난다는 것이다. 비대칭적 전하분포가 발생하는 자세한 과정은 본 글의 목적에서 벗어나는 것이어서 소개는 하지 않겠지만, 그림 4의 모사 결과와 같이 $\vec{L}$ 과 $\vec{k}$ 에 따라서 변하게 된다.^[2] 좀 더 자세한 과정에 관심있는 독자는 참고문헌 [5]를 참고할 수 있다. 결과적인 전기 쌍극자 모멘트는

$$\vec{p} = \alpha_K (\vec{L} \times \vec{k}) \quad (5)$$

로 주어진다. 여기서 α_K 는 원자 오비탈의 중첩에 의해서 정해지는 비례 상수이다.

라쉬바 효과는 반전 대칭성이 깨진 경우에 나타나므로, 밴드

Fig. 4. Simulation results for asymmetric charge distribution. A Bloch state constructed as a linear combination of atomic orbitals with OAM (upper figure) and its resulting electron density for various momentum and OAM values (lower figure). In the lower figure, charge distribution is plotted for (left) a small momentum, (middle) large momentum, and (right) opposite OAM. One can see that the asymmetric behavior becomes severe as the momentum increases, and the direction of the asymmetric distribution changes with that of the OAM.^[2]

시 전기장이 있는 경우에 해당된다.

따라서 식 (5)의 전기 쌍극자가 그 전기장과 결합하여 에너지를 만들 수 있고, 그 에너지는

$$\hat{H}_L = -\vec{p} \cdot \vec{E} = -\alpha_K (\vec{L} \times \vec{k}) \cdot \vec{E} \quad (6)$$

가 될 것이다. 여기서 주목할 것은, 식 (6)에서 주어진 해밀토니안의 모양이 라쉬바 해밀토니안 $\hat{H}_R = \alpha_R (\vec{\sigma} \times \vec{p}) \cdot \vec{z}$ 와 모양이 매우 유사하다는 것이다. 단지 라쉬바 해밀토니안에서 스핀 $\vec{\sigma}$ 를 궤도 각운동량 $\vec{L}$ 로 대체한 모양이다. 위에서 기술하였듯이 라쉬바는 대칭성의 분석을 통하여 라쉬바 해밀토니안을 얻게 되었는데, 스핀을 궤도 각운동량으로 대체하여도 이에 아무런 문제가 없다는 것을 알 수 있다.^[3] 따라서, 식 (6)의 유효 해밀토니안은 위에서 설명한 미시적 이해를 통해서 뿐 아니라, 대칭성만을 고려해서도 얻을 수 있는 것이다. 하지만 서론에서 언급한 바와 같이 궤도 각운동량은 일반적으로 무시되어져 왔기 때문에 이러한 새로운 가능성에 도달하지 못하였을 것으로 생각된다.

실제 라쉬바 효과에서는 식 (6)의 유효 해밀토니안뿐 아니라 SOC 해밀토니안 $\hat{H}_{SOC} = \alpha \vec{L} \cdot \vec{S}$ 가 중요한 역할을 하게 된다

REFERENCES

- [8] S. LaShell *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 3419 (1996).
- [9] L. Petersen and P. Hedegård, Surf. Sci. **459**, 49 (2000).

Fig. 5. (a) Asymmetric charge distribution (electric dipole moment) required for low energy states and the OAM configuration to achieve such distribution. The spin direction is determined by the direction of the OAM through atomic SOC. (b) Spin and OAM textures of Rashba bands in the strong SOC limit.^[2]

($\hat{H}_{SOC}$ 가 원자번호에 따라 라쉬바 효과가 증가하는 현상을 생기게 한다). 따라서 라쉬바 효과를 설명하는 유효 해밀토니안은

$$\hat{H}_{Eff} = \alpha \vec{L} \cdot \vec{S} - \alpha_K (\vec{L} \times \vec{k}) \cdot \vec{E} \quad (7)$$

가 될 것이다. 이를 통하여 알 수 있는, SOC가 큰 경우의 라쉬바 상태 개략도는 그림 5와 같다. 그림에서 궤도 각운동량은 비대칭적 전하분포와 전기장의 결합 에너지가 작아지는 방향으로 정렬한다는 것(그림 5(a))과, 그 결과 스핀뿐 아니라 궤도 각운동량도 chiral한 구조를 가진다는 것(그림 5(b))을 볼 수 있다. 식 (7)의 유효 라쉬바 해밀토니안은 라쉬바 효과에 나타나는 알려진(밴드 갈라짐, 원자번호에 따라 커짐, chiral 스핀) 혹은 이전에 알려지지 않았던(chiral 스핀의 방향, 비대칭적 전하 분포, 궤도 각운동량의 존재 등) 현상을 정확히 기술한다.^[3-5] 이로써, 라쉬바 효과의 미시적 원리에 대한 이슈는 궤도 각운동량에 의한 비대칭적 전하 분포를 고려함으로써 완전히 해결되었다.

이후 식 (7)의 유효 해밀토니안이 옳다는 것에 대한 다양한 증거들이 나오게 되는데,^[10-12] 제안된 이론의 가장 중요한 증명은 아마도 궤도 각운동량이 실제로 존재하고, chiral한 모양을 이루는 것을 보여주는 것이 될 것이다. 이러한 증명은 이론적 및 실험적 방법이 모두 가능한데, 여기서 간단히 소개하려고 한다. 먼저 이론적 방법을 살펴보면, 해당 시스템에 대한 제일 원리 계산에서 궤도 각운동량이 존재하는가를 보면 될 것이다. 그림 6(a)에서는 Bi_2Se_3 및 $\text{Au}(111)$ 표면 상태에 대한 제일 원리 계산으로부터 얻어진 결과이다. 왼쪽의 그림은 Bi_2Se_3 의 전류 밀도를 그린 것인데, 전류의 흐름이 원자 근처에서 소용돌이치는 것을 볼 수 있는데, 이는 원자 오비탈이 궤도 각운동량을 가지고 있기 때문이다. 오른쪽의 그림은 $\text{Au}(111)$ 표면 라쉬바 상태의 바깥쪽 밴드의 궤도 각운동량 및 스핀을 그려놓은 것인데, 식 (7)이 예측하는 것처럼 모두 chiral한 모

Fig. 6. (a) First principles calculation results for current density near the surface of Bi_2Se_3 (left)^[13] and spin/OAM configuration of the outer $\text{Au}(111)$ surface Rashba band.^[4] The lower figure plots the ARPES data of Bi_2Se_3 surface states Fermi surface taken with (b) left- and (c) right-circularly polarized light. Plotted in (d) is the difference between the two polarizations.^[13]

습을 하고 있는 것을 알 수 있다. 이밖에 SrTiO_3 는 비교적 가벼운 원소로 이루어져 있고 SOC가 작음에도 불구하고, 제일원리 계산을 통해서 그 표면 상태에 최대 $0.7\hbar$ 에 이르는 궤도 각운동량이 존재함이 밝혀졌다. 또한 식 (7)의 첫 번째 항($\alpha \vec{L} \cdot \vec{S}$)에 의해서 SrTiO_3 의 표면 상태의 밴드 갈라짐의 크기가 결정됨이 보고되었다.^[12]

실험적으로는 원편광 이색성 각분해 광전자 분광법(circular dichroism angle resolved photoemission or CD-ARPES)을 이용하여 궤도 각운동량의 존재를 확인해 볼 수 있다. CD-ARPES는 ARPES를 왼손 및 오른손-원편광된 빛을 이용하여 수행한 후, 그 차이를 보는 실험 기법이다. 궤도 각운동량이 존재할 경우 CD-ARPES에 반영된다는 것이 알려져 있다.^[3,13] 따라서 연구하고자 하는 시스템에 대하여 두 원편광 빛을 이용하면 궤도 각운동량의 존재 여부 및 방향에 대한 정보를 얻을 수 있다. 그림 6(b), 6(c)는 오른손, 왼손-편광을 이용하여 얻은 Bi_2Se_3 표면 상태의 페르미면 ARPES 데이터이고, 그림 6(d)는 그 차이이다. 그림에서 두 데이터 사이에서 확연한 차이가 보이며, 그림 6(d)에서 보듯이 위쪽은 왼손-편광의 경우가, 아래쪽은 오른손-편광의 경우가 더 밝은 것을 알 수가 있

REFERENCES

- [10] S. Jakobs *et al.*, Phys. Rev. B **87**, 235438 (2013).
- [11] A. Tamai *et al.*, Phys. Rev. B **87**, 075113 (2013).
- [12] P. D. C. King *et al.*, Nature Communications **5**, 3414 (2014).
- [13] S. R. Park *et al.*, Phys. Rev. Lett. **108**, 046805 (2012).

다. 이러한 원편광 이색성은 궤도 각운동량이 chiral 구조를 가지고 있을 때 보여주는 패턴이다.^[3,13] 이와 같이, 이론적, 실험적 방법을 통하여 궤도 각운동량이 실제 존재하고 chiral한 구조를 가진다는 것이 증명되었다. 이 사실은 광전스핀소자 (optospintronics) 분야 등으로의 응용적인 측면에서도 중요하다. 고체의 표면 상태의 궤도 각운동량이 chiral한 구조를 갖는다는 사실로부터 원편광 빛에 의해 스핀전류 (spin current) 를 유도할 수 있음이 제안되었다.^[13]

맺음말: 다른 현상에 대한 적용 및 패러다임 변화

앞 장에서 논의한 새로운 해밀토니안의 적용 범위는 라쉬바 효과에만 국한되지 않는다. 실제로 최근 식 (6)의 해밀토니안이 고유 스핀홀효과 (intrinsic spin Hall effect)에서 결정적인 역할을 한다는 것이 제안되었다.^[14] 스핀홀효과는 자기장이 없는 상태에서 전류가 흐를 때 전류의 방향에 수직인 방향으로 스핀전하가 흐르는 현상인데, 근래에 위상 절연체 및 스핀트로닉스 분야에서의 중요한 역할 때문에 많은 연구가 되고 있다. 하지만, 많은 연구에도 불구하고 스핀홀효과의 정확한 미시적 원리에 대한 이해는 없었다. 스핀홀효과는 기본적으로 전류가 흐를 때 나타나는 현상이므로 도체 내부에 미약하기는 하지만 전류를 흐르게 하는 전기장이 존재하게 된다(이 상황을 앞서의 논의와 연결시켜 본다면, 바이어스 전압이 도체의 반전 대칭성을 깨는 것이라 볼 수 있다). 도체 내부에 전기장이 존재하게 되므로 식 (6)의 궤도 각운동량 기반 해밀토니안에 의해서 밴드가 서로 다른 궤도 각운동량을 가지는 밴드로 갈라지게 된

다. 이는 SOC를 통해서 스핀 전류로 변환되어, 결과적으로 스핀홀효과를 가져오게 된다. 자세한 내용은 참고문헌 [14]를 참조하기 바란다.

또한, 참고문헌 [13]에서 이미 식 (6)이 결정 구조에서 반전 대칭성이 깨진 고체에서 나타나는 Dresselhaus 효과에도 적용될 것이라는 제안이 있었다. 실제로 반전 대칭성이 깨진 III-V 족 반도체인 InSb와 같은 시스템에서 상당히 큰 궤도 각운동량이 존재함이 실험적 및 이론적으로 확인되고 있다.^[15] 이러한 결과는 Dresselhaus 효과(역시 스핀 연산자로 표현되는 해밀토니안에 의해서 기술됨)에서도 역시 궤도 각운동량이 매우 중요한 역할을 한다는 것을 의미한다.

지금까지 논의한 궤도 각운동량에 의하여 생기는 물리적 현상은 (에너지가 크기 때문에) 매우 중요하지만 많은 물리학자들이 간과했던 것이다. 위에서 논의한 바와 같이 새로운 현상은 많은 적용분야가 있고, 앞으로도 더 발견될 것으로 생각된다. 이는 지금까지 우리의 관심사였던 스핀에서 궤도 각운동량으로의 패러다임 변환을 의미하기도 한다. 크게 보면 이미 중요한 분야로 자리잡고 있는 강한 SOC 물리 분야의 일부분으로서 볼 수 있기도 한 이러한 궤도 각운동량 기반 연구는 이제 막 시작하는 분야이므로, 어렵지 않게 선도 연구를 할 수 있는 분야이다. 따라서 국내의 많은 연구자들이 이 분야의 선도적인 연구를 할 수 있기를 기대해 본다.

REFERENCES

- [14] W. Jung *et al.*, arXiv:1407.3446 (2014).
- [15] W. Jung *et al.*, in preparation.