

## Strain Induced Topological Phase Transition in $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ : First-Principles Study

Dameul JEONG<sup>†</sup> · Seungwoo YOO<sup>†</sup> · Junyeop JEON<sup>†</sup> · Seung jun LEE · Young-Kyun KWON\*

Department of physics, Kyung Hee University, Seoul 02447, Korea

(Received 25 January 2021 : revised 2 February 2021 : accepted 2 February 2021)

We studied the electronic structure of  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$  through a first-principles calculation based on the density functional theory.  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ , a van der Waals layered structure, which possesses an in-plane  $C_3$  rotational and time-reversal symmetries as well as inversion, exhibits metallic characteristics in equilibrium. Intriguingly, its electronic band structure reveals Dirac cones existing near the Fermi level. In addition, we observed that  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$  could undergo a phase transition from metallic to topological insulating phases due to in-plane compressive strains, either uniaxial or biaxial. In particular, its band structure evolution under the uniaxial compressive strain along the zigzag direction revealed that a band inversion had occurred. Our hybrid Wannier charge center calculation confirmed that this material, indeed, becomes a topological insulator. Finally, we constructed its topological phase diagram in the parameter space of the in-plane strain fields, which revealed how to control the in-plane strain to realize the topologically different phases of  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ .

Keywords: Layered materials, Density functional theory, Electronic structures, Topological phase transition, In-plane strain

### 변형에 따른 $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ 의 위상 상변이 : 제일 원리 계산

정다물<sup>†</sup> · 유승우<sup>†</sup> · 전준엽<sup>†</sup> · 이승준 · 권영균\*

경희대학교 이과대학 물리학과, 서울 02447, 대한민국

(2021년 1월 25일 받음, 2021년 2월 2일 수정본 받음, 2021년 2월 2일 게재 확정)

밀도 범함수 이론을 토대로 한 제일 원리 계산을 통해,  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ 의 전자구조에 관한 연구를 수행하였다. 반데르발스 결합으로 쌓아 만든 층상구조인  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ 는 수직 방향으로  $C_3$  회전 대칭을 가지고 있으며, 반전 대칭과 시간 역전 대칭도 가지고 있어 변형이 가해지지 않은 안정적인 구조에서 금속의 성질을 띤다. 흥미롭게도  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ 의 밴드 구조를 보면, 디랙 콘이 페르미 레벨 인근에 존재하는 것과, 수평 쌍축 및 단축 압축 변형을 통해 이 물질은 금속에서 위상 절연체로의 상변이가 가능한 것을 발견하였다. 특히, 지그재그 방향으로 단축 압축 변형을 시켰을 경우 전자구조에서 밴드 역전 현상을 관찰하였다. 하이브리드 와니어 차지센터 계산을 통하여 이 물질이 위상 절연체가 될 수 있음을 확인하였다. 최종적으로, 평면 변형을 표현된 공간에서  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$  물질이 가질 수 있는 위상학적으로 구별될 수 있는 상공간을 얻었고, 이를 통하여 수평 방향 변형을 조절함으로써  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ 의 위상학적 상태를 바꿀 수 있다는 것을 보였다.

Keywords: 층상물질, 밀도 범함수 이론, 전자 구조, 위상 상변이, 평면 변형

<sup>†</sup> These authors contributed equally to this work.

\*E-mail: [ykkwon@khu.ac.kr](mailto:ykkwon@khu.ac.kr)



## I. 서론

주기적인 격자를 가지고 있는 고체 물질에서, 주어진 밴드 (Band)에서의 에너지-운동량 분산 관계식은  $\epsilon_\sigma(\mathbf{k})$ 로 주어진다.  $\mathbf{k}$ 는 파수 인데, 파동-입자 이중성에 따라 운동량을 나타내며  $\sigma$ 는 스핀-업, 스핀-다운을 나타낸다. 시간 역전 대칭 (Time reversal symmetry)은  $\mathbf{k}$ 를  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ ,  $\sigma$ 를  $\sigma \rightarrow -\sigma$ 로 만든다. 이를 분산관계식에 적용시키면  $\epsilon_\uparrow(\mathbf{k}) = \epsilon_\downarrow(-\mathbf{k})$ 이 성립한다. 반면에 반전 대칭 (Inversion symmetry)은  $\mathbf{k}$ 를  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ 로 만든다. 다시 분산관계식에 적용시키면  $\epsilon_\uparrow(\mathbf{k}) = \epsilon_\uparrow(-\mathbf{k})$ 이 성립한다. 따라서 물질의 구조에 시간 역전 대칭과 반전 대칭이 있다면  $\epsilon_\uparrow(\mathbf{k}) = \epsilon_\downarrow(-\mathbf{k}) = \epsilon_\downarrow(\mathbf{k})$ 이 성립하게 된다. 즉 스핀-업과 스핀-다운이 축퇴된다. 만약 둘 중 하나의 대칭이 없다면 강한 스핀 궤도 결합 (Spin-Orbit-Coupling)은 상대론적 자기장효과에 의해 스핀-업과 스핀-다운의 에너지를 갈라지게 만든다.

시스템이 시간 역전 대칭, 반전 대칭과 더불어 회전 대칭 ( $C_2$  제외)을 가지고 있다면 회전 대칭 축 상에서 총 4개의 전자가 축퇴 될 수 있다. [1] 이러한 시스템의 회전 축 상에서 전자가 마치 광자 (Photon)와 같이 움직인다. 즉 에너지-운동량 분산관계에서 디랙 콘 (Dirac cone)을 기대할 수 있다. 회전 대칭이 깨지면 더 이상 전자 4개는 축퇴될 수 없고, 디랙 콘을 이루고 있던 두 밴드는 서로 기피 (Avoided band crossing)하게 된다. 이때 스핀 궤도 결합이 강하게 작용하면 아래 쪽 밴드에 있던 스핀-업이 위 쪽 밴드로, 위 쪽밴드에 있던 스핀-다운이 아래 쪽 밴드로 가게되면서 밴드 역전 (Band inversion)이 발생한다. 이때 밴드가 서로 꼬이면 위상 절연체 (Topological insulator)가 된다. [2-4]

이러한 흥미로운 위상학적 성질을 가지는 물질을 찾아보기 위해, 우리는 삼차원 층상 구조인 Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>의 전자구조에 대해 연구하였다. 한장의 얇은 2차원 Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub> 대칭성에 따라  $\mathcal{M}$ -Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub> 그리고  $\mathcal{I}$ -Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub> 두가지 구조를 가지며, 두 구조 모두 안정적이며 반도체 라는것이 앞선 연구 결과들을 통해 알려져 있다 [5,6]. 이 물질을 쌓아 올려 삼차원 층상 구조를 만들게 되면, 반전 대칭, 회전 대칭, 그리고 시간 역전 대칭을 모두 가지는 물질을 만들 수 있고, Bi는 강한 스핀 궤도 상호작용을 나타내는 원소 이기 때문에 위상학적 특성을 기대할 수 있다.

Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub> 구조에서 나타나는 위상학적 특성에 대해 연구하기 위해, 제일 원리 밀도 범함수 이론을 바탕으로  $\mathcal{I}$ -Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub> 구조를 AA 방식으로 쌓으며 삼차원 층상구조를 만들어 전자구조를 계산하였다. 한장의  $\mathcal{I}$ -Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub> 구조와 달리, 이 구조는 금속이며, 흥미롭게도  $C_3$  회전 대칭성에 의해 디랙

콘이 존재 존재한다는 것을 확인하였다. 하지만 다른 밴드에서 생긴 전자/홀 포켓에 의해 이 디랙콘은 페르미 레벨에서 조금 떨어진 곳에 존재함을 알 수 있었고, 이를 조절하기 위해 우리는 수평방향으로 쌍축 및 단축 변형을 가해 전자구조의 변화를 확인하였다. 흥미롭게도 대칭성이 유지되는 수평 쌍축 압축 변형에서는  $\mathcal{I}$ -Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>가 금속에서 디랙 준금속으로 상전이 함을 확인할 수 있었다. 또한 단축 압축 변형을 시켰을 때  $C_3$  회전 대칭성이 깨지면서 디랙콘의 밴드 갭이 열리는 것을 확인하였고, 이때 강한 강한 스핀 궤도 상호작용에 의해 밴드 역전이 일어나 이 구조가 위상학적 절연체로 상전이 함을 확인하였다. 변형에 따른 상전이 효과를 효율적으로 알아보기 위해 위상상변이 다이어그램을 그렸고, 이를 통해 삼차원 (three dimensional, 3D) Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>가 넓은 변형 영역에서 안정적인 위상학적 특성을 보임을 확인할 수 있었다.

## II. 계산 방법

Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>의 변형에 따른 위상학적 변화를 연구하기 위해 밀도 범함수 이론을 기반으로 하는 제일 원리 계산 (First principle study)을 하였다 [7,8]. 유사 퍼텐셜 방법 (Pseudopotential method)과 평면파 기저 (Plane wave basis)를 기반으로 하는 VASP 코드를 [9,10] 사용하였다. 평면파의 차단 에너지 (Cutoff energy)는 520 eV을 사용하였다. 교환-상관 퍼텐셜 (exchange-correlation potential)은 전자 기체의 공간적인 변화율을 고려한 근사인 GGA (Generalized Gradient Approximation)를 사용하였다. 유사 퍼텐셜은 PAW (projector augmented wave method)를 사용하였으며 [11,12], 층상 구조에서 나타나는 반 데르 발스 상호작용을 고려하기 위해, DFT-d3 방법을 사용하였다 [13]. 안정된 구조를 찾는 과정에서는  $8 \times 8 \times 2 k$  점 샘플링 방법을 사용하였으며, 안정된 구조를 찾은 후  $20 \times 20 \times 5 k$  점 샘플링 방법을 통해 정확한 전하 밀도를 계산하였다. 또한 스핀-궤도 결합을 고려해 주기 위해 비공선형 계산 (Non-collinear calculation)을 수행하였다. Z2 지표는 복합 와니어 함수를 이용한 와니어 전하 중심 (WCC) 계산을 통해 확인하였으며, 이를 위해 WANNIER90 코드 [14] 및 WannierTools [15]를 사용하였다. 위상 다이어그램을 그릴 때, 수평 방향의 격자 상수를 고정한 뒤 수직 방향을 완화하여 구조를 찾았다. 그 구조의 위상을 구하고 gnuplot을 활용한 색 보 간법으로 다이어그램에 표기하였다.

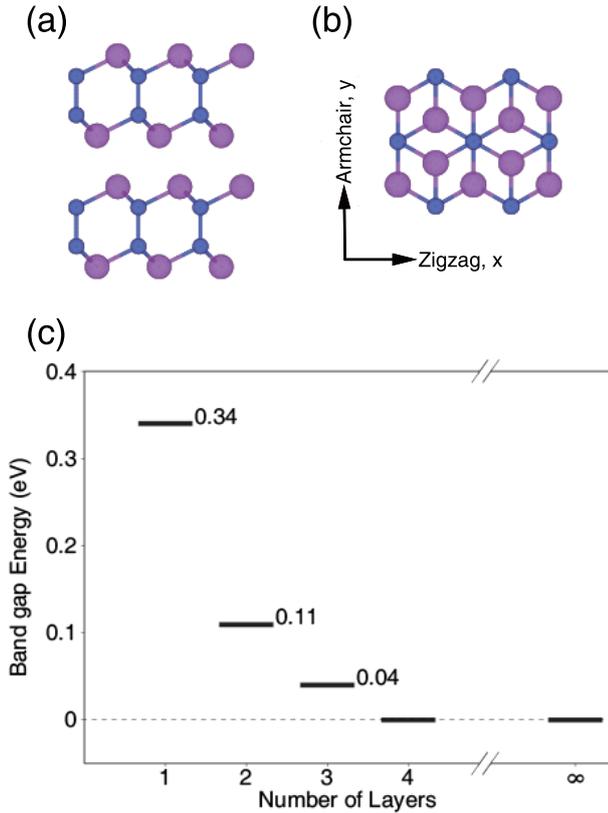


Fig. 1. (Color online) Equilibrium structure of  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$  shown in side (a) and top (b) views. Si and Bi atoms are represented with blue and purple spheres. (c) Layer dependence of the band gap of  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$

### III. 결과 및 토의

Fig 1 (a) 와 (b) 는 3D  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$  의 안정적인 구조를 보여 준다. 이 구조는 반전 대칭성과 원자층에 수직한 방향으로  $C_3$  회전 대칭성을 가지는 것을 알 수 있다. 본 논문에서 Fig. 1(a)에서 화면을 뚫고 나오는 방향과 (b)에서  $x$  축 방향이 지그재그 방향이다. 3D  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$  의 수평, 수직 방향 격자 상수는  $a = 4.24 \text{ \AA}$ ,  $c = 15.53 \text{ \AA}$ 로 계산 되었으며, 한층의  $\mathcal{I}\text{-Si}_2\text{Bi}_2$  구조와 비교하였을 때 ( $a = 4.18 \text{ \AA}$ ) [6] 3차원 구조의 격자상수가 1.44% 더 큰 것으로 확인되었다. 3차원 구조의 전자구조를 논의하기 전에 반도체인 2차원 한층 구조가 [6] 3차원 구조가 되면서 전자 특성이 어떻게 변하는지를 알아보기 위하여  $\mathcal{I}\text{-Si}_2\text{Bi}_2$  를 한장씩 쌓으면서 밴드 갭을 계산하였다. Figure 1 (c)에서 알 수 있듯이 밴드 갭이 줄어들다가 네 장부터 밴드갭이 없어지며 금속이 됨을 확인하였다.

Figure 2 (a) 와 (b) 는  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$  의 밴드 구조와  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$  단위 셀의 브릴루앙 영역(Brillouin zone)을 보여준다. 한장의  $\mathcal{I}\text{-Si}_2\text{Bi}_2$  구조와 달리  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$  는 금속이며 다수의 전자/홀

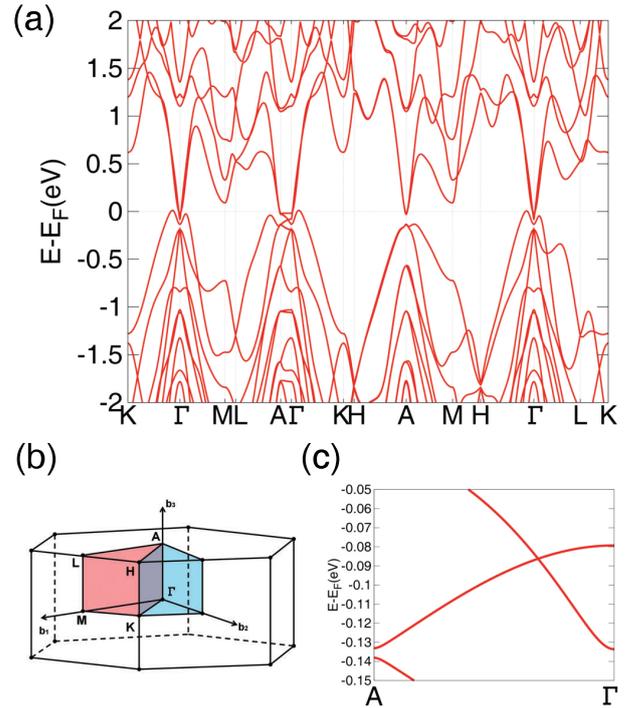


Fig. 2. (Color online) (a) Electronic band structure and (b) Brillouin zone of  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ . In (b), irreducible Brillouin zone is marked by red and blue shades. The k-point paths for drawing the band structure are taken from the red zone. (c) Energy band dispersion zoomed in just below the Fermi level along A- $\Gamma$  line. The four-fold degenerate Dirac point is topologically protected by the  $C_3$  rotational symmetry.

포켓이 페르미 레벨 근처에 존재함을 알 수 있다. 이는 다른 층상 구조에서도 흔히 발견되는 현상으로, 원자 층간의 반데르발스 상호작용에 의해 밴드 갭이 작아져서 금속으로 변한 것임을 알 수 있다. 흥미롭게도 우리는  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$  의 전자 구조에 4개의 전자가 축퇴되어 있는 디랙 콘이 있는 것을 확인하였다. Figure 2 (c) 는 페르미 레벨 조금 아래 영역의 A- $\Gamma$  방향의 밴드 구조를 보여주는데, 교차하는 두개의 밴드 사이가 벌어지지 않고 교차하면서 디랙 콘이 존재함을 명확히 확인할 수 있다. Figure 2 (b) 에서 보여주듯이 A- $\Gamma$  방향은 층상 구조의 수직방향임을 알 수 있고, 따라서 이 디랙 콘은 앞서 언급한  $C_3$  회전 대칭성에 의해 보호받는 위상학적 구조임을 알 수 있다.

디랙콘의 흥미로운 성질을 이용하기 위해서는 이 디랙콘을 페르미 레벨에 위치시켜야 하고, 또한 다른 전자/홀 포켓으로부터 분리시켜야 한다. 이러한 변형을 만들어 내기 위해 우리는  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$  에 기계적 변형을 가해 전자구조가 어떻게 변하는지를 확인하였다. 먼저  $C_3$  회전대칭성을 유지하기 위해 수평 방향 쌍축 인장 변형(Bi-axial tensile strain)을 가해 전자 구조를 계산하였다. Fig 3을 보면 수평 방향 인장

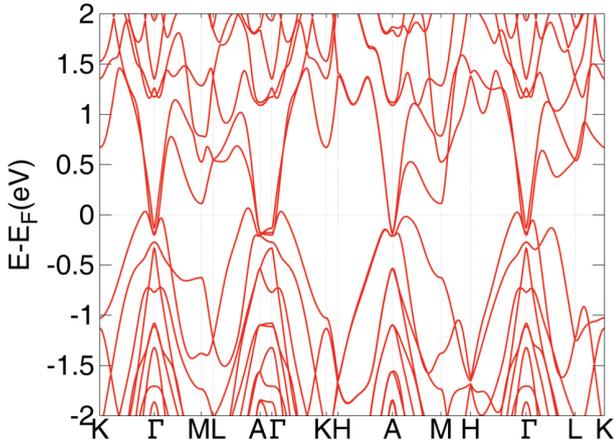


Fig. 3. (Color online) Electronic band structure of Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub> under 1.5% bi-axial in-plane tensile strain.

변형은 Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>의 전자 포켓과 홀 포켓을 더 크게 만든다. 또한 A-Γ 방향에 존재하는 디랙 콘이 오히려 페르미 레벨에서 멀어지는 것을 확인할 수 있다. 따라서 디랙 콘과 위상학적 현상을 보다 명확히 나타나게 하기 위해 우리는 인장 변형이 아닌 압축 변형의 효과를 집중적으로 연구하였다.

쌍축 압축 변형 (Bi-axial tensile strain)이 전자구조에 미치는 영향을 확인하기 위해, 우리는 먼저 변형 정도에 따른 밴드 갭의 변화를 계산하여 Fig. 4 (a)에 나타내었다. 흥미롭게도  $-1.497\%$ 보다 더 강한 압축 변형이 가해지면 Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>의 밴드 갭이 열리고, 그 후 압축 변형이 커짐에 따라 선형적으로 증가하는 것을 알 수 있다. 따라서 밴드 갭이 정확히 0이 되는 지점에서 디랙 콘이 페르미 레벨에 위치할 것이라 추측할 수 있다. 이를 명확히 확인하기 위해  $-1.497\%$ 에서 A-Γ-A 방향으로 밴드 구조를 계산하여 Fig. 4 (b)에 나타내었다. 우리의 예상과 마찬가지로 두 밴드가 정확히 Γ 점에서 만나는 것을 알 수 있고, 이 때 다른 전자/홀 포켓이 없기 때문에 Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>는 디랙 준금속 (Dirac semimetal) 상태를 알 수 있다. 이러한 디랙 준금속 상태는 다른 전자/홀 포켓이 페르미 레벨이 존재하게 되면 일반적인 금속으로 변하는 것을 알 수 있다. 따라서 디랙 준금속이 안정적으로 존재할 수 있는 영역을 알아보기 위해, 디랙 콘과 페르미 레벨의 위치의 차이를 변형 정도에 따라 Fig. 4 (c)에 나타내었다. 디랙 준금속 상태를 유지하는 동안 디랙 콘은 정확히 페르미 레벨에 위치하기 때문에 0을 나타내게 되고, 변형이  $-1.296\%$ 보다 약해지게 되면 디랙 콘의 위치가 페르미 레벨보다 낮아지며 다른 전자 포켓이 생겨 Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>가 일반적인 금속으로 변하는 것을 알 수 있다. Figure 4 (d)는  $-1.296\%$ 에서의 A-Γ-A 방향 밴드 구조를 나타내는데, 감마 점에 위치했던 디랙 콘이 A 방향으로 약간 이동했지만, 여전히 페르미 레벨이 정확히 디랙 콘에 위치하는 것을

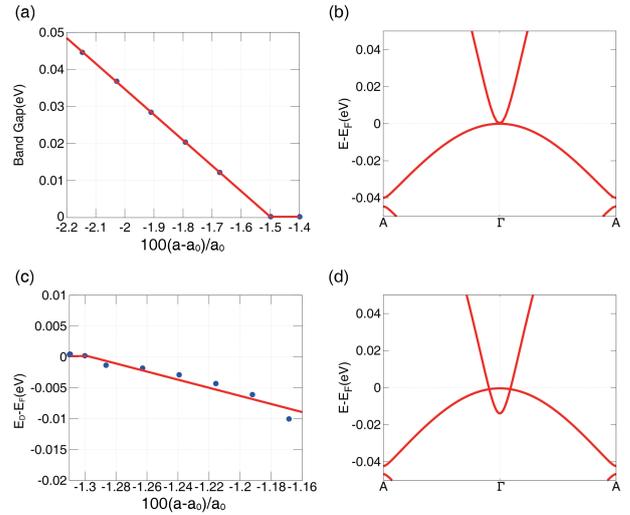


Fig. 4. (Color online) (a) Evolution of the band gap of Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub> as a function of bi-axial strain.  $a_0$  and  $a$  indicate respectively the pristine and strained in-plane lattice constants. (b) Electronic band structure along the A-Γ-A direction at  $(a - a_0)/a_0 = -1.497\%$ . (c) Energy differences between the Dirac point  $E_D$  and Fermi level  $E_F$  as a function of strain. (d) Electronic band structure along the A-Γ-A direction at  $(a - a_0)/a_0 = -1.296\%$ . For strain of  $(a - a_0)/a_0 > -1.296\%$ , Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub> becomes a trivial conductor.

알 수 있다. 따라서 쌍축 압축 변형하에서 Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>는 금속-디랙 준금속-반도체 순으로 상전이 함을 알 수 있고, 변형 정도가  $-1.497\% - 1.296\%$  사이에서 안정된 디랙 준금속 상을 가짐을 알 수 있다.

쌍축 변형이 아닌 단축 변형을 가하게 되면, 이 물질의 회전대칭성이 깨지기 때문에 다른 위상학적 효과가 나타남을 예상할 수 있다. 이를 확인해 보기 위해 우리는 단축 변형의 효과 또한 계산해 보았다. 이 논문에서는 지그재그 방향의 단축 변형과 그에 수직인 압축 방향의 단축 변형을  $x$ 축 단축 변형과  $y$ 축 단축 변형으로 표기하였다. Figure 5 (a)와 (b)는 각각  $x$ 축 단축 변형  $-2.63\%$  및  $-2.75\%$  일 때의 A-Γ-A 방향 전자 구조를 보여준다.  $x$ 축 단축 변형의 경우  $-2.63\%$ 일 때 페르미 레벨이 전도 띠 (Conduction band)에 위치하고  $-2.75\%$ 일 때 페르미 레벨이 가전자 띠 (Valance band)에 위치한다. 이는 앞선 쌍축 변형과 달리 단축 변형을 가한 구조에는  $C_3$  회전대칭성이 존재하지 않기 때문에 A-Γ 방향에 존재하던 디랙 콘의 밴드 갭이 열리고 그 사이에 페르미 영역이 존재함을 알 수 있다. 이때 Bi의 강한 스핀-궤도 상호 작용에 의해 밴드역전이 일어나게 되고, 따라서 단축 변형에서는 금속-위상 절연체-반도체 순으로 상전이가 일어남을 예상할 수 있다.

$-2.63\% \sim -2.75\%$  사이에서 나타나는 전자 구조가 정말 위상 절연체 상태인지를 확인하기 위해, 우리는 복잡

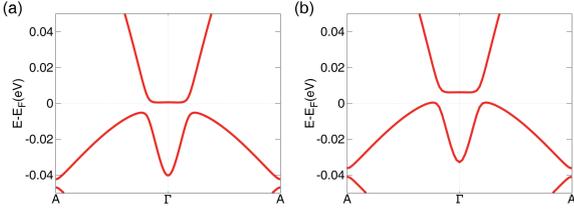


Fig. 5. (Color online) Electronic band structures of Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub> along the A-Γ-A direction under the  $x$ -direction uniaxial compressive strains of  $-2.63\%$  (a) and  $-2.75\%$  (b), respectively.

와니어 함수를 활용하여 WCC를 계산하였다 [14,15]. 복합 와니어 함수는 블로흐 함수를 한 축 방향으로만 와니어화 (Wannierization) 하고, 나머지 두 축을 그대로 블로흐 함수로 정의한다 [17]. 3D에서 최대 국소화 와니어 함수를 한 방향으로 선택하면 나머지 방향으로 정의할 수 없기 때문이다. 복합 와니어 함수의 고유값은 WCC로 주어지고 WCC는 표면 밴드 구조와 대칭성을 공유한다. [18,19] 따라서 위상 절연체를 판단하기 위한 물리량으로 사용된다. Figure 6는  $x$  축 단축 변형  $-2.75\%$ 에서 계산한 WCC의 변화이다. 6개의 그래프는 각각 (a)  $k_1 = 0$ , (b)  $k_1 = 0.5$ , (c)  $k_2 = 0$ , (d)  $k_2 = 0.5$ , (e)  $k_3 = 0$ , (f)  $k_3 = 0.5$  인 경우에서 나타내었다. Figure 6 (a)에서  $k_2(k_y) = 0$ 에서  $k_2 = 0.5$ 로 갈 때 꼬임이 있으므로 Z2 숫자가 1임을 확인할 수 있다. 같은 방식으로 나머지 그래프를 확인해보면, (a), (c), (e)에서는 Z2 숫자가 1이고, (b), (d), (f)에서는 Z2 숫자가 0으로 최종 Z2 숫자는 (1,000)임을 알 수 있으며, 이는 강한 3D 위상 절연체를 의미한다 [20]. 따라서 반전 Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>에서 강한 스핀-궤도 상호작용에 의해 밴드 역전이 발생하고, 이 구조는  $x$  축  $-2.75\% \sim -2.64\%$ 에서 강한 3D 위상 절연체임을 알 수 있었다. 이러한 상전이는 지그재그 방향 단축 변형에서만 나타나며 압축 방향 단축 압축 변형에서는 항상 전자/홀 포켓이 같이 존재하여 반도체-금속으로 상전이함을 확인하였다.

수평 방향 쌍축 압축 변형과 단축 압축 변형을 통해, 금속의 성질을 띠었던 Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>는 디락 준금속과 위상 절연체로 상이 변화하였다. 이러한 변화는 단축 혹은 쌍축 변형 뿐 아니라 임의의 변형 아래에도 동일한 물리적 기작으로 나타날 수 있다. 이를 명확히 확인하기 위해 변형에 따른 Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>의 위상학적 상태를 위상 변화를 다이어그램을 통해 Fig. 7에 나타내었다. 변형에 있어서 앞선 과정과 마찬가지로 지그재그 방향을  $x$  축으로, 압축 방향을  $y$  축으로 하였다. 이 다이어그램의 각 축은 격자 상수에 대한  $x$  축 변형 비율을  $x$  축으로,  $y$  축 변형 비율을  $y$  축으로 하였다. Figure 7에서 일반 절연체인 경우는 파란색, 위상 절연체인 경우는 빨간색, 도체인 경우를 초록색으로 나타내었다. 이를 바탕으로

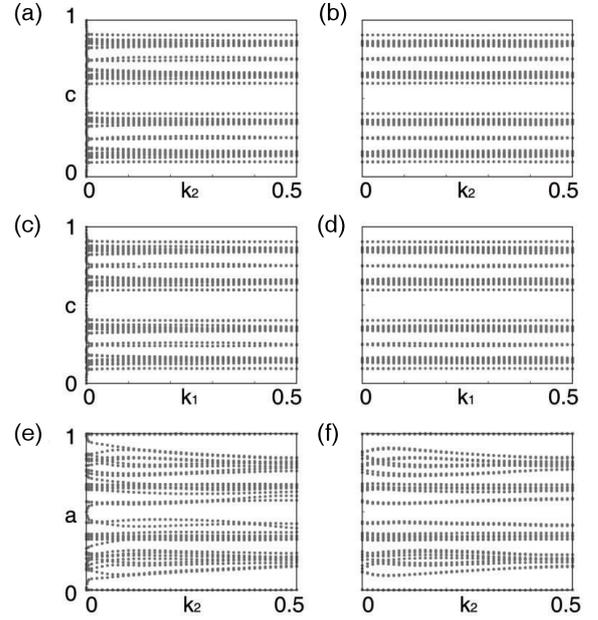


Fig. 6. Evolution of the wannier charge center of Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub> under the  $x$ -axis uniaxial compressive strain of  $-2.75\%$  at (a)  $k_1=0.0, Z_2=1$ ; (b)  $k_1=0.5, Z_2=0$ ; (c)  $k_2=0.0, Z_2=1$ ; (d)  $k_2=0.5, Z_2=0$ ; (e)  $k_3=0.0, Z_2=1$ ; and (f)  $k_3=0.5, Z_2=0$ .  $k_1, k_2$ , and  $k_3$  indicate crystal momenta in the corresponding reciprocal lattice. With these results, the Z2 value of Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub> was verified to be 1.

우리는 넓은 영역에서 Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>가 위상 절연체 상태로 존재할 수 있음을 확인하였다. 위상 다이어그램 내에서 비대칭적인 강한 압축 변형이 가해진 경우, ( $x$  축 변형  $-2.9\%$ 와  $y$  축 변형  $-2.4\%$  영역) 각각  $y, x$  압축 비율에 의존하지 않고 급격히 위상 절연체에서 도체로 변하는 것을 알 수 있는데 이는 전자/홀 포켓이  $x/y$  비율에 크게 의존하여 내려오기 때문이다. 위 다이어그램에서  $y = x$  라인은 검은색 선으로 표현하였고 이는 쌍축 변형을 의미한다. 쌍축 변형은 Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>가 가지는 C<sub>3</sub> 회전 대칭을 보존하므로 A-Γ 경로에서 4개의 전자는 축퇴될 수 있다. 따라서 빨간색 영역과 검은색 선이 만나는 부분은 밴드 크로싱이 일어났으나 겹을 만들지 않는 부분으로, 디락 콘을 보이는 디락 준금속이라고 할 수 있다. 검은색 점에서는 디락 콘이 Γ점에서 생기며, 일반 절연체와 위상 절연체 사이 영역 또한 Γ점에 디락 콘이 생기는 디락 준금속상태임을 알 수 있다.

#### IV. 결론

밀도 범함수 이론을 바탕으로 한 제일원리 계산을 통해, 우리는 Si<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>의 전자 구조 및 변형에 따른 위상학적 상태를

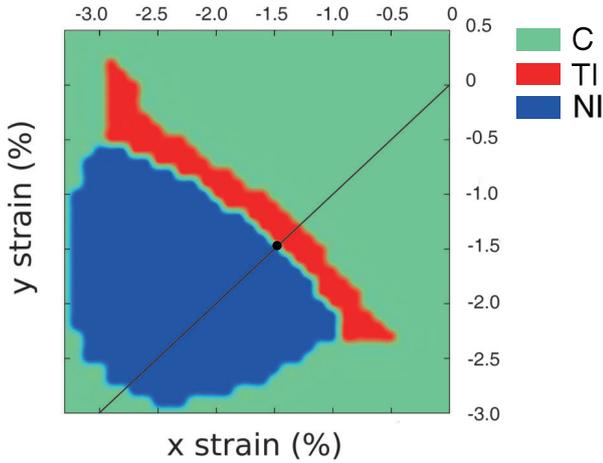


Fig. 7. (Color online) Topological phase diagram of  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$  in the parameter space of the in-plane strain fields. Green, red, and blue area represent three phases of conductor (C), topological insulator (TI) and normal insulator (NI), respectively. The  $x$ - and  $y$ - directions indicate the zigzag and armchair directions.

연구하였다. 변형이 없을 때  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ 는 금속이며, 시간 역전 대칭, 반전 대칭 및  $C_3$  회전 대칭 덕분에 페르미 레벨 근처에 디락 콘을 가지고 있다. 위상학적 전자 구조를 효과적으로 이용하기 위해서는, 페르미 레벨을 디락 콘에 위치시키는 것이 필요하다. 우리는 수평 방향 쌍축 압축 변형을 통해, 디락 콘을 유지하면서  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ 의 페르미 레벨을 조절 할 수 있었으며,  $-1.497\%$ 에서  $-1.296\%$ 까지 변형범위 내에서  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ 가 디락 준금속으로의 상전이 함을 확인하였다. 또한 우리는 수평 방향 단축 압축 변형이  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ 의 회전 대칭성을 깨어 디락 콘이 열리고 밴드 갭이 생기는 것을 확인하였다. 이때 강한 강한 스핀-궤도에 상호 작용에 의해 밴드 역전이 일어나는 것을 알 수 있었고, 복합 와니어 함수를 활용한 WCC계산을 통해 이 물질이 강한 3D 위상 절연체임을 확인하였다. 변형에 따른 위상학적 변화를 좀 더 명확히 확인하기 위해 우리는 넓은 영역에서 위상상변이 다이어그램을 확인하였다. 이를 바탕으로 우리는 쌍축 및 단축 압축 변형을 통해 다른 밴드에서 생성 되는 전자/홀 포켓을 효과적으로 제거 할 수 있음을 확인하였고,  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ 는 넓은 변형 영역에서 안정적인 위상학적 특징을 보인다는 것을 확인하였다. 따라서  $\text{Si}_2\text{Bi}_2$ 는 물질은 강한 3D 위상 절연체 및 디락 준금속으로 실현 가능할 것을 기대할 수 있으며, 다양한 소자로 응용될 수 있는 잠재력을 가지고 있다는 것을 확인하였다.

## 감사의 글

이 논문은 2020년도 경희대학교 “[2020 대학혁신] 학부생 연구지원사업”의 지원을 받아 수행된 연구입니다. 또한 이 논문은 정부(과학기술정보통신부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 기초연구사업입니다 (No.2019R1A2C1005417).

## REFERENCES

- [1] B.-j. Yang and N. Nagaosa, *Nature Communications* **5**, 4898 (2014).
- [2] C.-L. Kane and E. J. Mele, *Physical Review Letters* **95**, 146802 (2005).
- [3] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Reviews of modern physics* **82**, 3045 (2010).
- [4] J. Seo, *Physics and High Technology* **20**, 11 (2011).
- [5] B. Özdamar *et al.*, *Physical Review B* **98**, 045431 (2018).
- [6] S. Lee and Y.-K. Kwon, *npj 2D Materials and Applications* **4**, 45 (2020).
- [7] P. Hohenberg and W.Kohn, *Physical Review* **136**, B864 (1964).
- [8] W. Kohn and L. -J. Sham, *Physical Review* **140**, A1133 (1965).
- [9] G. Kresse and J. Hafner, *Physical Review B* **47**, 558 (1993).
- [10] G. Kresse and J. Furthmüller, *Physical Review B. Condens. Matter* **54**, 11169 (1996).
- [11] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Physical Review Letters* **77**, 3865 (1996).
- [12] P. E. Blöchl, *Physical Review B* **50**, 17953 (1994).
- [13] S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, and H. Krieg, *The Journal of Chemical Physics* **132**, 154104 (2010).
- [14] G. Pizzi *et al.*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **32**, 165902 (2020).
- [15] Q. Wu, S. Zhang, H.-f. Song, M. Troyer, and A. A. Soluyanov, *Computer Physics Communications* **224**, 405 (2018).
- [16] H.-J. Cui, X.-L. Sheng, Q.-B. Yan, Q.-R. Zheng, and G. Su, *Physical Chemistry Chemical Physics* **15**, 8179 (2013).
- [17] A. A. Soluyanov and D. Vanderbilt, *Physical Review B* **83**, 035108 (2011).

- [18] N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, and D. Vanderbilt, [Reviews of Modern Physics](#) **84**, 1419 (2012).
- [19] N. Marzari and D. Vanderbilt, [Physical Review B](#) **56**, 12847 (1997).
- [20] L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, [Physical review letters](#) **98**, 106803 (2007).