

## 벌집형살창의 전하밀도파질서화에 대한 절단사영범함수재규격화군연구

김영환, 오성진

경애하는 최고령도자 김정은동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

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

그라펜이 발견된 후 벌집형살창에서 일어날수 있는 각이한 질서화현상에 대한 연구 [1, 2]가 심화되였다. 그라펜은 반금속재료로서 페르미준위에서의 상태밀도가 령이고 전자에 의한 차폐가 불충분하므로 전자사이호상작용의 범위가 비교적 넓다.[3] 그러므로 그라펜의 바닥상태를 정확히 연구하려면 비교적 멀리 떨어져있는 원자궤도함수사이의 척력도 고려해야 하는데 이를 위해서는 운동량공간에서 유효호상작용의 분해도를 높여야 한다. 절단사영범함수재규격화군방법[1, 4]은 교환파라미터표시범함수재규격화군방법[5]과 특이 모드범함수재규격화군방법[6]을 개량하여 나온 방법으로서 이것을 리용하면 운동량에 따르는 고분해도의 유효호상작용을 계산할수 있다.

문에서는 절단사영범함수재규격화군방법으로 벌집형살창의 유효호상작용을 구하는데서 나서는 기술적인 문제들을 논의하고 반충만상태의 벌집형살창에서 전자사이호상작용에 의하여 발생할수 있는 전하밀도파질서화를 연구하였다.

### 1. 절단사영범함수재규격화군방법

범함수재규격화군방법의 흐름방정식을 풀면 3개의 독립적인 운동량변수를 포함하는 정점함수(유효호상작용)가 구해진다. 종전의  $N$ -patch계산도식에서는 브릴루앵구역을  $N$ 개의 patch들로 분할하고 1개 patch구역의 운동량변수에 대해서는 정점함수값이 다 같은것으로 보며 따라서 정점함수는  $N^3$ 에 비례하는 개수의 성분을 가진 수모임으로 근사된다. 결과 이에 소요되는 기억용량과 계산시간은 patch분할수의 3제곱에 비례하여 급격히 커진다.

절단사영범함수재규격화군(truncated unity functional renormalization group, TU-fRG)방법에서는 교환파라미터표시범함수재규격화군방법과 유사하게 정점함수를 각이한 특이운동량구조를 가지는 세가지 통로의 호상작용의 합으로 놓는다. 매 통로의 호상작용은 1개의 운동량변수에만 의존하는 교환전파함수행렬을 통해 표시되며 결국 3개의 운동량변수를 가지는 정점함수는 1개의 운동량변수를 가지는 3개의 교환전파함수들로 표시된다. 이와 같은 표시방법을 받아들이면 정점함수표시에 필요한 변수의 개수는 브릴루앵구역의 분해도  $N$ 에 비례하며  $N^3$ 에 비례하는  $N$ -patch계산도식의 경우보다 훨씬 적어진다. 따라서 주어진 계산조건에서 정점함수의 운동량분해도를 현저히 높일수 있다. 이제 띠도대표시의 경우[1]와는 달리 궤도도대표시에 기초하여 절단사영범함수재규격화군방법의 기본도식을 개괄하자.

궤도토대표시에서 유효호상작용은 다음과 같이 표시된다.(그림 1)

$$V_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{\Omega}(k_1', k_2'; k_1, k_2) = V_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{(0)}(k_1', k_2'; k_1, k_2) + \Phi_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{\text{SC}}(k_1' + k_2', -k_2', -k_2) + \\ + \Phi_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{\text{M}}(k_1' - k_2, k_2, k_2') + \Phi_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{\text{D}}(k_1' - k_1, k_1, k_2') \quad (1)$$

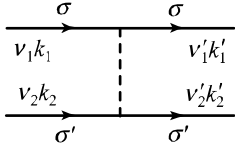


그림 1. 유효호상작용

$$V_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{\Omega}(k_1', k_2'; k_1, k_2)$$

여기서  $V^{(0)}$ 은 유효호상작용초기값,  $\Phi^{\text{SC}}, \Phi^{\text{M}}, \Phi^{\text{D}}$ 는 초전도, 자성, 전방산란통로의 호상작용,  $\Omega$ 는 척도변수,  $\nu_1', \nu_2', \nu_1, \nu_2$ 는 원자궤도함수종류를 나타내는 첨수,  $k$ 는 4차원변수로서  $k = (k_0, \mathbf{k})$ 이다. 이때 다음의 보존법칙이 성립한다.

$$k_{10}' + k_{20}' = k_{10} + k_{20}, \quad \mathbf{k}_1' + \mathbf{k}_2' = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$$

주파수무시근사에서 세 통로의 호상작용함수를 교환전과함수행렬  $P, C, D$ 와 직교규격화된 토대함수  $f_m(\mathbf{k})$ 를 리용하여 다음과 같이 표시할수 있다.

$$\left. \begin{aligned} \Phi_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{\text{SC}}(q, p, k) &\approx \Phi_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{\text{SC}}(q, p, k) = \sum_{m, n} P_{\nu_1\nu_2'm, \nu_1\nu_2'n}(q) f_m^*(p) f_n(k) \\ \Phi_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{\text{M}}(q, p, k) &\approx \Phi_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{\text{M}}(q, p, k) = \sum_{m, n} C_{\nu_1\nu_2'm, \nu_1\nu_2'n}(q) f_m^*(p) f_n(k) \\ \Phi_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{\text{D}}(q, p, k) &\approx \Phi_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{\text{D}}(q, p, k) = \sum_{m, n} D_{\nu_1\nu_2'm, \nu_1\nu_2'n}(q) f_m^*(p) f_n(k) \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

식 (2)를 식 (1)에 대입하고 토대함수들에로의 절단사영근사를 적용하면 유효호상작용의 재규격화군흐름방정식으로부터 교환전과함수행렬에 대한 다음의 흐름방정식이 얻어진다.

$$\begin{aligned} \dot{P}(q) &= W^P(q) \cdot \chi'^{\text{PP}}(q) \cdot W^P(q), \quad \dot{C}(q) = W^C(q) \cdot \chi'^{\text{PH}}(q) \cdot W^C(q), \\ \dot{D}(q) &= (W^C(q) - W^D(q)) \cdot \chi'^{\text{PH}}(q) \cdot W^D(q) + W^D(q) \cdot \chi'^{\text{PH}}(q) \cdot (W^C(q) - W^D(q)) \end{aligned} \quad (3)$$

여기서 실례로  $\dot{P}(q) = \frac{d}{d\Omega} P(q)$ 이며

$$\begin{aligned} W_{\nu_1\nu_2'm, \nu_1\nu_2'n}^P(q) &= \frac{1}{\Omega_B^2} \int dp \int dp' f_m(p) f_n^*(p') V_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{\Omega}(p+q, -p; p'+q, -p'), \\ W_{\nu_1\nu_2'm, \nu_1\nu_2'n}^C(q) &= \frac{1}{\Omega_B^2} \int dp \int dp' f_m(p) f_n^*(p') V_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{\Omega}(p+q, p'; p'+q, p), \\ W_{\nu_1\nu_2'm, \nu_2\nu_2'n}^D(q) &= \frac{1}{\Omega_B^2} \int dp \int dp' f_m(p) f_n^*(p') V_{\nu_1\nu_2', \nu_1\nu_2}^{\Omega}(p+q, p'; p, p'+q) \end{aligned} \quad (4)$$

이다. 또한  $\Omega_B$ 는 브릴루앵구역의 면적이며  $\chi'^{\text{PP}}(q), \chi'^{\text{PH}}(q)$ 는 다음과 같이 표시된다.

$$\begin{aligned} \chi_{\mu\mu'm, \nu\nu'n}^{\text{PP}}(q) &= -\frac{1}{\beta\hbar^2} \frac{1}{\Omega_B} \sum_{l_0} \int dl \frac{d}{d\Omega} (g_{\mu\nu}^{0, \Omega}(l+q) g_{\mu'\nu'}^{0, \Omega}(-l)) f_m(l) f_n^*(l), \\ \chi_{\mu\mu'm, \nu\nu'n}^{\text{PH}}(q) &= -\frac{1}{\beta\hbar^2} \frac{1}{\Omega_B} \sum_{l_0} \int dl \frac{d}{d\Omega} (g_{\mu\nu}^{0, \Omega}(l+q) g_{\nu'\mu'}^{0, \Omega}(l)) f_m(l) f_n^*(l) \end{aligned} \quad (5)$$

$\Omega$  도식[5]에서는 옷식의 한립자전과함수  $g_{\mu\nu}^{0, \Omega}(l)$ 을 다음과 같이 놓는다.

$$g_{\mu\nu}^{0,\Omega}(l) \equiv g_{\mu\nu}^{0,\Omega}(l_0, l) = g_{\mu\nu}^0(l_0, l) \cdot \frac{l_0^2}{l_0^2 + \Omega^2} \quad (6)$$

식 (4)의  $V_{\nu_1\nu_2}^\Omega$ 에 식 (1)을 대입하면  $W^P, W^C, W^D$ 를 교환전파함수행렬  $P, C, D$ 로 표시할수 있으며 결국  $P, C, D$ 행렬에 대한 닫힌 방정식계가 얻어진다.

## 2. 벌집형살창의 전하밀도파질서화

본문에서는 벌집형살창의 호상작용전자계에 대한 확장된 하바드모형을 리용하여 계의 질서화문제를 연구하였다. 이 모형의 한전자부분은 최린접호핑만을 고려한 반충만상태( $\mu=0$ )의 강한결합하밀토니안으로 근사된다.

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} (\hat{c}_{i, \sigma}^+ \hat{c}_{j, \sigma} + \text{h.c.}) \quad (7)$$

여기서 연산자  $\hat{c}_{i, \sigma}^+, \hat{c}_{i, \sigma}$ 는 부분살창  $O$ 의  $i$ 번째 살창점원자궤도에 놓이는 스핀이  $\sigma$ 인 전자의 발생, 소멸연산자이며  $\langle i, j \rangle$ 는 최린접원자쌍을 의미한다.

호상작용하밀토니안은 다음과 같다.

$$\hat{H}_1 = U \sum_{i, O} \hat{n}_{i, \uparrow, O} \hat{n}_{i, \downarrow, O} + V_1 \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma, \sigma'} \hat{n}_{i, \sigma, A} \hat{n}_{j, \sigma', B} + V_2 \sum_{\langle\langle i, j \rangle\rangle, \sigma, \sigma', O} \hat{n}_{i, \sigma, O} \hat{n}_{j, \sigma', O} \quad (8)$$

여기서  $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ 는 다음린접원자쌍을 의미한다.

웃식의 호상작용하밀토니안을 운동량공간에서 표시하면 초기유효호상작용  $V^{(0)}$ 이 얻어진다. 이 모형하밀토니안에 기초하여 위에서 설명한 TU-IRG방법으로 파라메터  $V_1, V_2$ 를 변화시키면서 질서화가능성을 연구하였다. 한원자반발적분값은  $U=3.0t$ 로 놓았다.

그림 2-4에는 최린접반발적분값을  $V_1=2.5t$ 로 놓고 다음린접반발적분  $V_2$ 를 변화시킬 때 척도변수  $\Omega$ 에 따르는 유효호상작용최대값의 변화곡선과 전방산란통로교환전파함수  $D_{AAs, AAs}(q_x, q_y)$ 의 그래프를 보여주었다. 여기서 최린접원자사이의 거리를 길이의 단위로 놓았다.

파라메터  $V_2$ 가 증가할 때 벌집형살창은 정합전하밀도파질서상-반금속상-비정합전하밀도파질서상의 순서로 변한다. 정합전하밀도파질서상에서는 부분살창 A에서 부분살창 B으로(혹은 그 반대로) 전자가 일부 이동한다.

중간에 나타난 반금속상은 파라메터  $V_1$ 과  $V_2$ 가 서로 제약하며 경쟁하는 관계에 있다는것을 보여준다. 파라메터  $V_1$ 은 이온결합형태의 정합전하밀도파질서화를 일으키며 파라메터  $V_2$ 는 비정합전하밀도파질서화를 일으킨다.

호상작용파라메터  $V_2$ 를  $V_2=1.5t$ 로 놓은 상태에서  $V_1$ 을 증가시킬 때 벌집형살창은 반금속상으로부터 비정합전하밀도파질서상으로 변한다. 또한 비정합전하밀도파의 파수는  $V_1$ 이 커지는데 따라 브릴루앵구역의 모서리점(K점)으로부터 안쪽으로 옮겨진다.

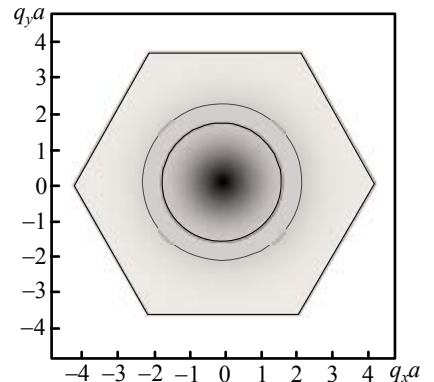


그림 2.  $V_1=2.5t, V_2=0.5t$  일 때  $D_{AAs, AAs}(q_x, q_y)$ 의 그래프  
 $a$ -최린접원자사이거리

이와 같이 궤도도대표시에 기초하여 특이모드범함수재규격화군방법으로 각이한 호상 작용파라미터에 대응하는 벌집형살창의 유효호상작용을 구하고 질서화형태를 판정하였다. 논문에서 얻어진 결과들은 띠도대표시에 기초하여 절단사영범함수재규격화군방법으로 얻은 결과[1]와 비교적 잘 일치한다.

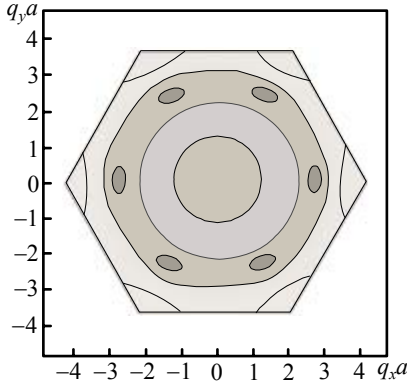


그림 3.  $V_1 = 2.5t$ ,  $V_2 = 1.0t$  일 때  
 $D_{AAs, AAs}(q_x, q_y)$ 의 그래프  
 $a$ -최린접원자사이거리

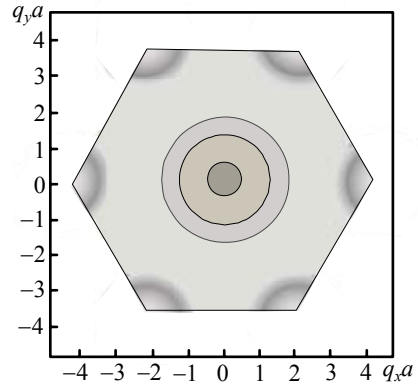


그림 4.  $V_1 = 2.5t$ ,  $V_2 = 2.0t$  일 때  
 $D_{AAs, AAs}(q_x, q_y)$ 의 그래프  
 $a$ -최린접원자사이거리

## 맺는 말

절단사영범함수재규격화군방법을 리용하여 반충만상태의 벌집형살창에서 호상작용전자계의 전하밀도파질서화가능성을 연구하였다. 우리가 연구한 파라미터영역에서 계는 호상작용파라미터의 상대적크기에 따라 정합전하밀도파 및 비정합전하밀도파질서화를 일으키며 비정합전하밀도파의 파수도 변한다. 최린접반발적분은 이온결합형태의 정합전하밀도파질서화를 일으키며 다음린접반발적분은 비정합전하밀도파질서화를 일으킨다. 서로 다른 질서화경향성을 가지는 두 파라미터의 영향이 비슷할 때에는 경쟁효과에 의하여 전하밀도파질서화가 억제되며 계는 반금속상으로 된다.

## 참고 문헌

- [1] D. S. de la Pena et al.; Phys. Rev., B 95, 085143, 2017.
- [2] M. Bijelic et al.; Phys. Rev., B 97, 125142, 2018.
- [3] A. H. Castro Neto et al.; Rev. Mod. Phys., 81, 109, 2009.
- [4] J. Lichtenstein et al.; Comput. Phys. Commun., 213, 100, 2017.
- [5] C. Husemann et al.; Phys. Rev., B 79, 195125, 2009.
- [6] W. S. Wang et al.; Phys. Rev., B 85, 035414, 2012.

# **Truncated Unity Functional Renormalization Group Study on Charge Density Wave Ordering in Honeycomb Lattice**

*Kim Yong Hwan, O Song Jin*

We have studied the charge density wave instabilities for interacting electrons on the honeycomb lattice at half-filling using recently developed truncated unity functional renormalization group method. In the parameter region studied, the system exhibits commensurate or incommensurate charge density wave instabilities with different modulations for different values of parameters  $V_1$  and  $V_2$ . The first nearest neighbor repulsive interaction produces the commensurate charge density wave instability similar to ionic bond while the second nearest neighbor repulsive interaction produces the incommensurate charge density wave instability. When the effects of these two parameters with different ordering tendencies are comparable, the charge density wave ordering is suppressed due to competition effect and the system is in the semi-metallic phase.

Key words: functional renormalization group, graphene, charge density wave