

동력학평균마당리론의 정밀대각화방법을 리용한 모르절연체의 스펙트르밀도

오성진, 박학철

동력학평균마당리론(DMFT)은 오늘날 강상관전자계의 각종 물리적성질들을 잘 설명하는 위력한 방법[1]으로 알려져있다. DMFT방정식풀이에서 가장 정확한 방법[2]으로 알려진것은 량자몬테-카를로방법(QMC)과 정밀대각화방법(ED)이다. 그런데 량자몬테-카를로방법[3]이 저온에서 적분구간이 길어져 계산량이 방대해지는것과 반대로 정밀대각화방법은 오히려 저온에서 정확한것으로 되고있다. 더우기 최근 상관궤도나 살창점의 수가 증가할수록 적은 개수의 육조살창점으로도 정확도를 높일수 있다는 연구결과[4]가 발표되어 정밀대각화방법이 널리 쓰이고있다. 그러나 정밀대각화방법에서는 살창계를 중심살창점과 그 주변의 몇개 살창점들로 근사시키므로 이 방법으로 구한 한립자스펙트르밀도함수[5]는 날카로운 몇개의 봉우리들로 이루어져있다. 특히 약한상관극한에서는 스펙트르밀도함수가 에네르기띠구조에 의해 결정되는 상태밀도와 정확히 일치하여야 하는데 정밀대각화방법으로 구한 스펙트르밀도는 이때에도 여전히 날카로운 봉우리특성을 나타낸다.

우리는 동력학평균마당리론의 정밀대각화방법을 리용하여 강상관전자계의 스펙트르밀도함수를 계산하는 새로운 계산방법을 제기하였다.

1. 동력학평균마당리론의 정밀대각화방법에 기초한 새로운 스펙트르밀도계산도식

정밀대각화방법에서는 강상관살창계를 중심의 호상작용이 존재하는 불순물살창점과 그 주변의 몇개 살창점들로 근사시킨다.

불순물살창점에 대한 지연그린함수는 다음과 같이 정의된다.

$$\tilde{G}_{\alpha\beta}^R(t) \equiv -i\theta(t)\text{Tr}\{\hat{\rho}_G[\hat{d}_{\alpha}^H(t)\hat{d}_{\beta}^{\dagger} + \hat{d}_{\beta}^{\dagger}\hat{d}_{\alpha}^H(t)]\} \quad (1)$$

여기서 $\hat{d}_{\alpha}, \hat{d}_{\beta}^{\dagger}$ 는 불순물살창점에 중심을 둔 α, β 스핀을 가진 d 궤도전자의 소멸, 발생연산자, $\hat{d}_{\alpha}^H(t) \equiv e^{i\hat{K}t}\hat{d}_{\alpha}e^{-i\hat{K}t}$ 는 큰정준하밀토니안 $\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N}$ 을 리용한 하이젠베르그표시이다.

외부자기마당이 존재하지 않을 때 상자성상에서 불순물지연그린함수는 $\tilde{G}_{\alpha\beta}^R(t) = \tilde{G}^R(t)\delta_{\alpha\beta}$ 의 형태를 가진다. 불순물지연그린함수 $\tilde{G}^R(t)$ 를 구하고 푸리에변환을 실시하면 다음식이 얻어진다.

$$\tilde{G}^R(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{i,j} (e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}) |\langle i | \hat{d}_{\uparrow}^{\dagger} | j \rangle|^2 \cdot \frac{1}{\omega + i\delta + E_j - E_i} \quad (2)$$

여기서 $\delta = 0^+$ 이다.

류사한 방법으로 불순물살창점에 대한 온도그린함수의 푸리에변환은 다음과 같다.

$$\tilde{G}(i\omega_n) = \frac{1}{Z} \sum_{i,j} (e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}) |\langle i | \hat{d}_{\uparrow}^{\dagger} | j \rangle|^2 \cdot \frac{1}{i\omega_n + E_j - E_i}$$

웃식을 식 (2)와 대비해보면 $\tilde{G}(i\omega_n)$ 의 오른쪽에서 $i\omega_n$ 자리에 $\omega + i\delta$ 를 갈아넣은것이 $\tilde{G}^R(\omega)$ 라는것을 알수 있다. 다시말하여 $\tilde{G}(i\omega_n)$ 을 복소수상반평면으로 해석연장하면 $\tilde{G}^R(\omega)$ 가 얻어진다.

한편 한립자스펙트르밀도함수는 다음과 같이 표시된다.

$$A(\omega) \equiv -\frac{1}{\pi} \text{Im} \tilde{G}^R(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{i,j} (e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}) |\langle i | \hat{d}_{\uparrow}^{\dagger} | j \rangle|^2 \delta(\omega + E_j - E_i) \quad (3)$$

그린함수에 대한 일반리론에 의하면 한립자스펙트르밀도함수는 비호상작용살창계의 경우에 에네르기띠구조에 따르는 상태밀도를 주게 된다.

$$U=0\text{일 때 } A(\omega) = D(\omega + \mu)$$

한립자스펙트르밀도함수에 대한 이전의 계산방법[5]에서는 동력학평균마당리론의 자체모순없는 반복계산이 끝난 후 정밀대각화로 얻어진 $E_i, |i\rangle$ 를 리용하여 식 (2)에 따라 불순물지연그린함수 $\tilde{G}^R(\omega)$ 를 구하고 식 (3)에서와 같이 그것의 허수부를 직접 취하는 방법으로 스펙트르밀도함수 $A(\omega)$ 를 얻었다. 그런데 정밀대각화방법에서는 계산용량상 육조살창점수를 크게 할수 없으며 대체로 4~9개 정도의 작은 값으로 한다. 이때 우와 같은 방법으로 구한 스펙트르밀도함수 $A(\omega)$ 는 몇개의 날카로운 봉우리들로 이루어진다. 지어 비호상작용계에서도 $A(\omega)$ 에는 날카로운 봉우리들이 여전히 존재하게 된다.

이러한 부족점을 퇴치하여 우리는 한립자스펙트르밀도함수 $A(\omega)$ 를 구하는 새로운 계산도식을 제기하였다. 그 계산도식은 다음과 같다.

① 자체모순없는 반복계산이 끝난 후 우선 식 (2)에 따라 $\tilde{G}^R(\omega)$ 를 구한다.

② 다음

$$g^R(\omega) = \frac{1}{\omega + i\delta + \mu - \sum_{p=2}^{n_s} \frac{V_p^2}{\omega + i\delta - \tilde{\epsilon}_p}} \quad (4)$$

을 구한다. 이것은 평균마당전파함수

$$g^{n_s}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \sum_{p=2}^{n_s} \frac{V_p^2}{i\omega_n - \tilde{\epsilon}_p}} \quad (5)$$

에서 $i\omega_n$ 대신에 $\omega + i\delta$ 를 갈아넣은것이다. 다시말하여 $g^{n_s}(i\omega_n)$ 를 복소수상반평면으로 해석연장한것에 대응된다.

③ 다음으로 지연고유에네르기를 구한다.

$$\Sigma^R(\omega) = [g^R(\omega)]^{-1} - [\tilde{G}^R(\omega)]^{-1} \quad (6)$$

지연고유에네르기 $\Sigma^R(\omega)$ 는 온도그린함수에서의 고유에네르기

$$\Sigma(i\omega_n) = [g^{n_s}(i\omega_n)]^{-1} - [\tilde{G}(i\omega_n)]^{-1} \quad (7)$$

을 복소수상반평면으로 해석연장한것에 대응된다.

④ 다음의 적분식에 따라 살창자연그린함수를 구한다.

$$G^R(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\omega + i\delta - \varepsilon_k + \mu - \Sigma^R(\omega)} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{\omega + i\delta + \mu - \Sigma^R(\omega) - \varepsilon} \quad (8)$$

살창자연그린함수 $G^R(\omega)$ 는 살창그린함수 $G(i\omega_n)$ 을 복소수상반평면으로 해석연장한 것에 대응된다.

⑤ 마지막으로 한립자스펙트르밀도함수를 구한다.

$$A(\omega) = -(1/\pi) \text{Im} G^R(\omega) \quad (9)$$

이렇게 구한 스펙트르밀도는 약한상관극한에서 정확히 에네르기띠의 상태밀도로 다가간다.

2. 강상관전자계에서의 모트상변화

동력학평균마당리론의 정밀대각화방법은 계산과정이 아주 단순하고 명백하므로 이 방법에 기초한 스펙트르밀도계산도식까지 확립하면 하나의 완비된 계산체계가 구축된다.

우리는 새롭게 제기한 스펙트르밀도계산방법을 리용하여 한띠하바드모형의 한립자스펙트르밀도함수를 평가하고 강상관전자계에서의 모트상변화를 연구하였다.

간단히 최린점호핑만을 고려한 2차원정방살창을 고찰하였다. 이때 정방살창의 하밀토니안은 다음과 같다.

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma}) + \sum_{i, \sigma} (\varepsilon_d - \mu) \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (10)$$

여기서 $\sum_{\langle ij \rangle}$ 는 최린점살창점쌍들에 대한 합을 의미하며 t 는 최린점호핑파라미터, U 는

한살창점끼리호상작용에네르기, ε_d 는 d 궤도준위, μ 는 화학포텐살이다.

에네르기기준점을 d 궤도준위 ε_d 에 놓으면 반충만하바드모형의 경우에 $\mu = U/2$ 이므로 식 (10)은 다음과 같이 된다.

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma}) + U \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(\hat{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2}) - \frac{N}{4} U \quad (11)$$

웃식의 운동에네르기부분을 푸리에변환하면 다음식이 얻어진다.

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(\hat{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2}) - \frac{N}{4} U \quad (12)$$

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) \quad (13)$$

여기서 \mathbf{k} 는 2차원파수벡토르이며 살창상수를 길이의 단위로 놓았다.

우리의 계산에서는 호핑파라미터의 값을 $t = 0.25\text{eV}$ 로 놓았다. 이 경우에 에네르기띠너비는 $W = 8t = 2.00\text{eV}$ 이다. 정밀대각화방법에서 유한살창점계의 살창점개수 n_s 를 6으로 설정하였다.(육조살창점수 $n_b = n_s - 1 = 5$)

호상작용이 존재하지 않을 때($U = 0$) 동력학평균마당리론의 정밀대각화방법에 기초하여 계산한 스펙트르밀도는 그림 1과 같다.

식 (13)의 분산관계에 대응한 상태밀도를 그림 1에 함께 보여주었다.

그림 1에서 보는바와 같이 우리의 방법으로 계산한 스펙트르밀도는 상태밀도와 거의

일치한다. 약간한 차이는 자연그린함수를 구할 때 주파수의 허수부를 $\delta=0^+$ 가 아니라 유한한 정수(우리의 계산에서는 $\delta=0.05t$ 로 놓았다.)로 하였기때문이다. 그러나 선행방법[5]으로 계산한 스펙트르밀도는 호상작용이 없음에도 불구하고 상태밀도와 완전히 다른 형태를 취하며 델타함수에 대응한 몇개의 뾰족봉우리들로 이루어져있다.

우리는 온도를 $kT=t/16=15.625\text{meV}$ 로 고정시킨 상태에서 쿨롱호상작용 U 를 0으로부터 점차 증가시키면서 스펙트르밀도함수를 구하였다.

쿨롱호상작용에 따르는 스펙트르밀도는 그림 2와 같다.

그림 2에서 보는바와 같이 쿨롱호상작용이 $U=9t$ 로부터 $U=10t$ 로 커질 때 계가 금속으로부터 절연체로 이행한다는것을 알수 있다. 그러나 선행계산[5]결과는 전령역에서 뾰족봉우리구조를 취하며 이로부터 상변화점을 확정하기 어렵다.

우리의 방법으로 얻은 스펙트르밀도는 약한상관의 경우에 기본봉우리에 잔봉우리들이 겹쳐진 형태를 취한다. 그러나 강상관계로 이행하면서 잔봉우리들은 없어지고 구획이 명백한 몇개의 기본봉우리들로 갈라진다. 특히 금속에서 절연체로 이행할 때 원래의 5개의 봉우리구조에서 맨 가운데의 준립자봉우리가 둘로 갈라지면서 6개의 봉우리구조로 되었다가 안쪽에 놓인 2개의 가는 봉우리가 찾아들면서 4개의 봉우리로 된다.

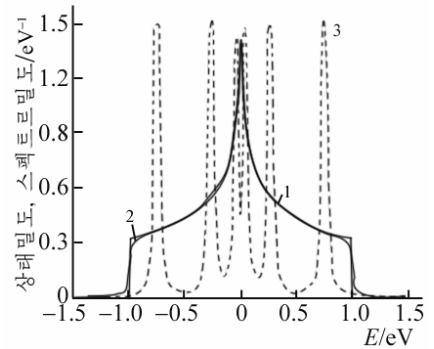


그림 1. 2차원정방살창의 상태밀도와 스펙트르밀도

1-상태밀도, 2-우리 방법으로 계산한 스펙트르밀도, 3-선행방법[5]으로 계산한 스펙트르밀도

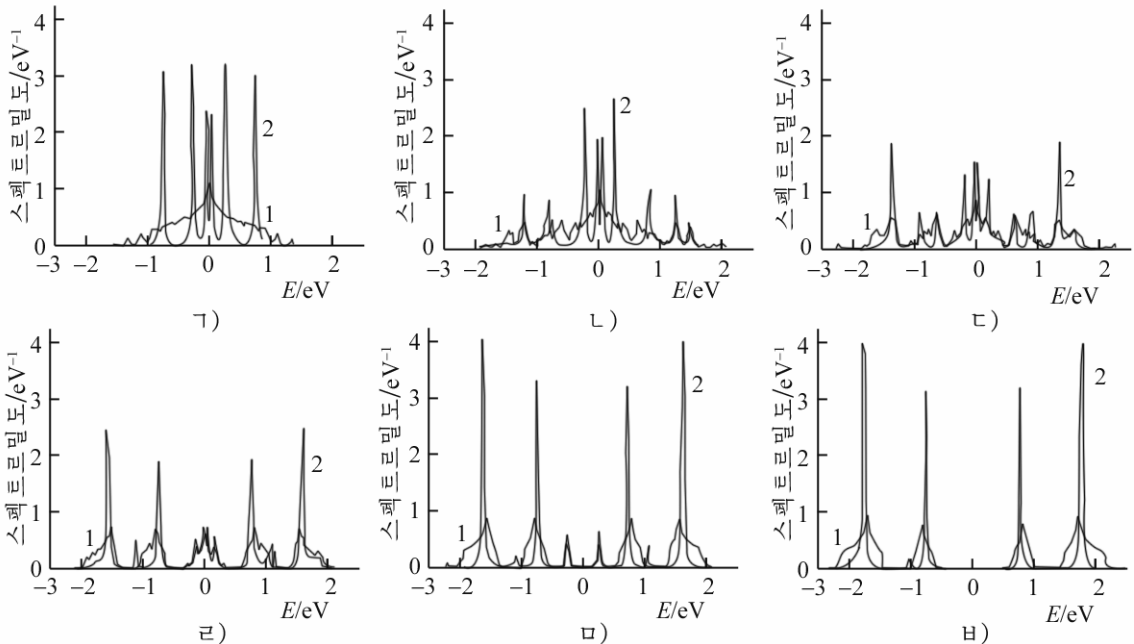


그림 2. 쿨롱호상작용에 따르는 스펙트르밀도

㉠)-㉦)는 U 가 $2t, 5t, 7t, 9t, 10t, 12t$ 인 경우

1-우리의 계산방법, 2- 선행계산방법[5]

모트상변화점 부근에서 스펙트르밀도의 변화과정은 그림 3과 같다.

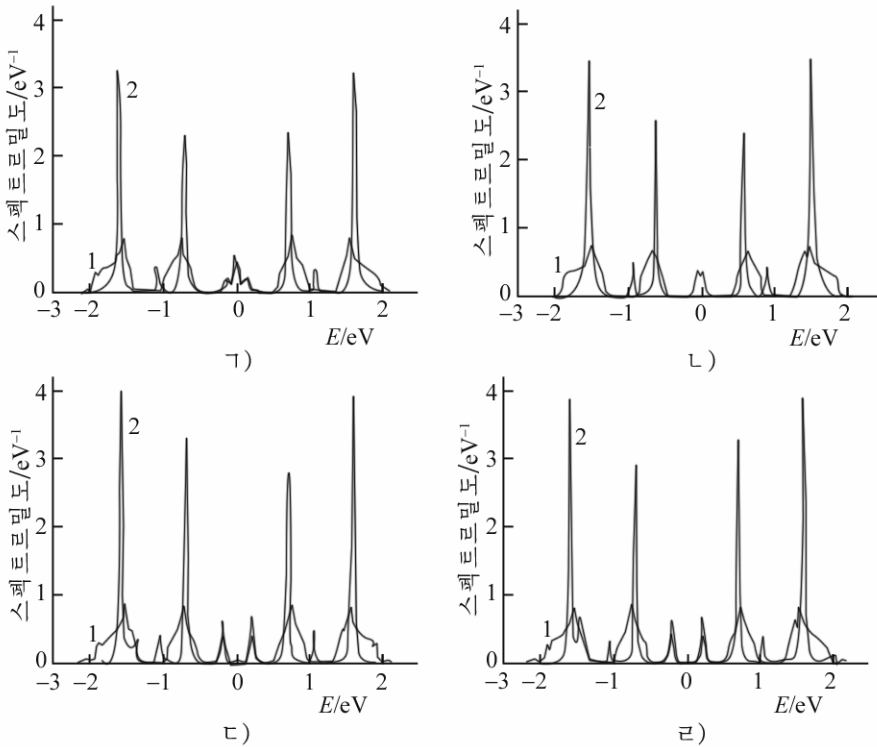


그림 3. 모트상변화점 부근에서 스펙트르밀도함수의 변화

㉠)–㉡)는 U 가 9.55t, 9.57t, 9.58t, 9.70t인 경우,

1과 2는 그림 2에서와 같음

그림 3에서 보는바와 같이 모트상변화는 $U_c = 9.58t$ 에서 일어난다. 또한 $U = 9.57t$ 로부터 $U = 9.58t$ 로 커질 때 스펙트르밀도가 급격히 변한다.

이로부터 이 점에서의 모트상변화가 제1종의 상변화라는것을 알수 있다. 이것은 선행연구결과[6]와 일치된다.

이상의 계산과정을 통하여 우리는 새로운 스펙트르밀도계산방법이 약한상관극한에서 정확한 결과를 주며 모트상변화에 대한 실험적사실을 원만히 설명한다는 결론을 얻는다.

맺 는 말

1) 동력학평균마당리론의 정밀대각화방법을 리용하여 호상작용전자계의 스펙트르밀도를 계산하는 한가지 방법을 제기하였다. 이 방법은 약한상관극한에서 정확한 값을 주며 강상관극한에서도 종전방법보다 더 믿음성있는 결과를 준다.

2) 꼴롱호상작용이 커지는데 따라 도체가 절연체로 이행하는 모트상변화과정을 스펙트르밀도함수에 대한 계산결과를 통하여 직관적으로 보여주었다. 우리의 스펙트르밀도계산방법을 리용하면 이전의 계산방법보다 더 정밀하게 모트상변화점을 찾을수 있다.

참 고 문 헌

- [1] H. Lee et al.; Phys. Rev., B **85**, 165103, 2012.
- [2] D. Vollhardt; arXiv:1004.5069, 2010.
- [3] E. Gull et al.; Rev. Mod. Phys., **83**, 349, 2011.
- [4] A. Liebsch et al.; Journal of Physics:Cond. Matter, **24**, 053201, 2012.
- [5] A. Georges et al.; Rev. Mod. Phys., **68**, 13, 1996.
- [6] G. Kotliar et al.; Phys. Today, **57**, 53, 2004.

주체105(2016)년 6월 5일 원고접수

Spectral Density of Mott Insulator using Exact Diagonalization Method of Dynamical Mean-Field Theory

O Song Jin, Pak Hak Chol

An approach for calculating the spectral density functions of strongly correlated electron systems is proposed using the exact diagonalization method of dynamical mean-field theory (DMFT). This approach is based on the analytic continuation of spectral density function obtained by conventional exact diagonalization method of DMFT and its result is more reasonable in shape.

As an application example of this new method, the Mott transition in a strongly correlated electron system is investigated.

Key words: spectral density function, DMFT, exact diagonalization, Mott transition