김일성종합대학학보 (물리학)
주체107(2018)년 제64권 제1호

특이모드범함수재규격화군방법을 리용한 보존전파함수 계산에서 제기되는 적분분할방법

박위성, 오성진

특이모드범함수재규격화군방법은 범함수재규격화군방법의 *N*–patch계산도식을 개량한 것으로서 고온초전도체를 비롯한 강상관전자계의 유효호상작용을 계산하는 효과적인 방법으로 알려져있다.[1, 2] 이 방법을 리용하면 브릴루앵구역을 보다 세밀히 분할할 때 *N*–patch도식에 비하여 계산시간이 훨씬 줄어들며 소요되는 기억용량도 현저히 작아진다. 그러므로 이 방법은 철기지초전도체와 위상학적초전도체 등의 호상작용전자계에서 상관효과를 연구하는데 널리 리용되고있다.[3－5]

특이모드범함수재규격화군방법의 흐름방정식을 풀 때 대부분의 계산시간은 $\alpha_m^{\mathrm{SC}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l})$, $\alpha_m^{\mathrm{M}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l})$, $\alpha_m^{\mathrm{K}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l})$ 함수들을 구하기 위한 적분계산에 소비된다. 원리적으로 브릴루앵구역의 분해도를 높이면 계산결과는 더 정확해질수 있다. 그러나 계산시간은 분해도의 2제곱에 비례하여 커진다. 총체적인 계산시간중에서 이 적분계산시간이 기본몫을 차지하므로 정확도와 계산시간사이의 합리적인 균형을 보장해야 한다.

론문에서는 브릴루앵구역의 분해도에 따르는 계산결과의 분산성을 조사하고 계산결과에 그리 큰 차이를 주지 않는 최소분해도값을 확정하였다.

1. 특이모드범함수재규격화군방법

일반적으로 범함수재규격화군방법에서는 미적분방정식형태의 흐름방정식을 풀어 4개의 운동량변수를 포함하는 정점함수(유효호상작용)를 구한다. 종전의 *N*–patch계산도식에서는 3개의 운동량변수들이 페르미면을 횡단하도록 브릴루앵구역을 가늘고 긴 쪼각들인 *N*개의 patch들로 나타내며 흐름방정식은 N^3에 비례하는 개수의 미분방정식계로 된다.

특이모드범함수재규격화군방법에서는 흐름방정식이 나타내는 특이성에 대한 분석에 기초하여 *N*–patch도식에 비하여 훨씬 단순한 새로운 정점함수표시방법을 도입하였다.

2차원 $(t,\ t')$ 하바드모형

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{p},\,\sigma} e(\boldsymbol{p}) \hat{a}^{+}_{\boldsymbol{p},\,\sigma} \hat{a}_{\boldsymbol{p},\,\sigma} + U \sum_{\boldsymbol{p}_1,\,\boldsymbol{p}_2,\,\boldsymbol{p}_3} \hat{a}^{+}_{\boldsymbol{p}_1,\,\uparrow} \hat{a}^{+}_{\boldsymbol{p}_2,\,\downarrow} \hat{a}_{\boldsymbol{p}_3,\,\downarrow} \hat{a}_{\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2-\boldsymbol{p}_3,\,\uparrow}$$

$$e(\boldsymbol{p}) = -2t(\cos p_x + \cos p_y) - 4t' \cos p_x \cos p_y - \mu$$

의 경우에 특이모드범함수재규격화군방법의 절차를 설명하면 다음과 같다.

우선 변수 Ω에 대응되는 정점함수 즉 재규격화된 유효호상작용을 초전도, 자성 및 직접산란의 세 통로들로 분해한다.

$$V^{\Omega}(p_1,\, p_2;\, p_3,\, p_4) = U - \Phi^{\Omega}_{\mathrm{SC}}(p_1,\, p_4,\, p_1 + p_2) + \Phi^{\Omega}_{\mathrm{M}}(p_1,\, p_2,\, p_4 - p_1) +$$

$$+\Phi_{\mathrm{M}}^{\Omega}(p_1, p_2, p_2-p_4)/2-\Phi_{\mathrm{K}}^{\Omega}(p_1, p_2, p_2-p_4)/2 \tag{1}$$

여기서 $V^{\Omega}(p_1, p_2; p_3, p_4)$ 는 재규격화된 유효호상작용, U는 하바드모형의 꿀롱반발적분, $\Phi_{\mathrm{SC}}^{\Omega}$, $\Phi_{\mathrm{M}}^{\Omega}$, $\Phi_{\mathrm{K}}^{\Omega}$ 는 각각 초전도, 자성 및 직접산란통로의 유효호상작용이다.

한편 초전도통로의 유효호상작용 $\Phi_{\mathrm{SC}}^{\Omega}$ 는 적당히 설정한 표준직교토대함수 f_n을 통해 다음과 같이 전개한다.

$$\Phi_{\mathrm{SC}}^{\Omega}(q, q', l)=\sum_{m,\, n\in I} D_{mn}^{\Omega}(l) f_m(\boldsymbol{l}/2-\boldsymbol{q}) f_n(\boldsymbol{l}/2-\boldsymbol{q}')+R_{\mathrm{SC}}^{\Omega}(q, q', l) \tag{2}$$

웃식에서 전개는 유한한 수의 토대모임 I로 제한되며 나머지함수 R_{SC}^{Ω} 는 이와 같은 전개의 오차를 반영한다. 그리고 전개결수 $D_{mn}^{\Omega}(l)$ 을 초전도보존전파함수라고 부른다.

자성통로 및 직접산란통로의 유효호상작용도 자성보존전파함수 $M_{mn}^{\Omega}(l)$, 직접산란보존전파함수 $K_{mn}^{\Omega}(l)$ 을 통하여 류사한 형식으로 전개한다.

$$\Phi_{\mathrm{M}}^{\Omega}(q, q', l)=\sum_{m,\, n\in I} M_{mn}^{\Omega}(l) f_m(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{l}/2) f_n(\boldsymbol{q}'-\boldsymbol{l}/2)+R_{\mathrm{M}}^{\Omega}(q, q', l) \tag{3}$$

$$\Phi_{\mathrm{K}}^{\Omega}(q, q', l)=\sum_{m,\, n\in I} K_{mn}^{\Omega}(l) f_m(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{l}/2) f_n(\boldsymbol{q}'-\boldsymbol{l}/2)+R_{\mathrm{K}}^{\Omega}(q, q', l) \tag{4}$$

정점함수에 대한 재규격화군방정식에 우의 전개식들을 대입하면 보존전파함수들에 대한 흐름방정식이 얻어진다.

주파수무시근사(실례로 $D_{mn}^{\Omega}(l)=D_{mn}^{\Omega}(l_0, \boldsymbol{l}) \approx D_{mn}^{\Omega}(\boldsymbol{l})$ 로 놓는 근사)에서 흐름방정식은 다음과 같다.[2]

초전도통로

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\Omega} D_{mn}^{\Omega}(\boldsymbol{l}) = \sigma_m \frac{1}{\Omega_B} \int_{\Omega_B} d^2 p \left[\frac{d}{d\Omega}\left(\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_0 G(p) G(l-p)\right)\right] \cdot \\ \cdot\Big[\sum_{\beta\in I} D_{m\beta}(\boldsymbol{l}) f_\beta(\boldsymbol{l}/2-\boldsymbol{p}) - U\delta_{ms} - \alpha_m^{\mathrm{SC}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l})\Big] \cdot \\ \cdot\Big[\sum_{\beta\in I} D_{n\beta}(\boldsymbol{l}) f_\beta(\boldsymbol{l}/2-\boldsymbol{p}) - U\delta_{ns} - \alpha_n^{\mathrm{SC}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l})\Big]\end{aligned} \tag{5}$$

여기서 σ_m은 토대함수 f_m의 짝홀성을 나타내는 량으로서 $f_m(-\boldsymbol{p})=\sigma_m f_m(\boldsymbol{p})$ 로 정의되며 $G(p)=G(p_0, \boldsymbol{p})=\dfrac{1}{ip_0-(E(\boldsymbol{p})-\mu)/\hbar} \cdot \dfrac{p_0^2}{p_0^2+\Omega^2}$ 이다.

또한 Ω_B는 2차원브릴루앵구역의 면적이며 α_m^{SC} 함수는 다음과 같이 정의된다.

$$\begin{aligned}\alpha_m^{\mathrm{SC}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l}) = \frac{1}{2\Omega_B} \int_{\Omega_B} d^2 q\, f_m^*(\boldsymbol{l}/2-\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}) \cdot \sum_{\alpha,\beta\in I} [(2+\sigma_m) M_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q}) - \sigma_m K_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q})] \cdot \\ \cdot f_\alpha(\boldsymbol{l}-\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}/2) f_\beta(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}/2)\end{aligned} \tag{6}$$

자성통로

$$\frac{d}{d\Omega} M_{mn}^{\Omega}(\boldsymbol{l}) = -\frac{1}{\Omega_B} \int_{\Omega_B} d^2 p \left[\frac{d}{d\Omega}\left(\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_0 G(p) G(l-p)\right)\right] \cdot$$

$$\cdot[\sum_{\beta\in I} M_{m\beta}(\boldsymbol{l}) f_\beta(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{l}/2) + U\delta_{ms} + \alpha_m^{\mathrm{M}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l})]\cdot$$

$$\cdot[\sum_{\beta\in I} M_{n\beta}(\boldsymbol{l}) f_\beta(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{l}/2) + U\delta_{ns} + \alpha_n^{\mathrm{M}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l})] \tag{7}$$

$$\alpha_m^{\mathrm{M}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l}) = \frac{1}{2\Omega_B}\int_{\Omega_B} d^2q f_m^*(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{l}/2-\boldsymbol{q})\cdot \sum_{\alpha,\,\beta\in I}(M_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q}) - K_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q}) - 2\sigma_m D_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q}))\cdot$$

$$\cdot f_\alpha(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}/2) f_\beta(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{l}-\boldsymbol{q}/2) \tag{8}$$

직접산란통로

$$\frac{d}{d\Omega}K_{mn}^{\Omega}(\boldsymbol{l}) = -\frac{1}{\Omega_B}\int_{\Omega_B} d^2p\left[\frac{d}{d\Omega}\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dp_0 G(p)G(l-p)\right)\right]\cdot$$

$$\cdot[\sum_{\beta\in I} K_{m\beta}(\boldsymbol{l}) f_\beta(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{l}/2) - U\delta_{ms} - \alpha_m^{\mathrm{K}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l})]\cdot$$

$$\cdot[\sum_{\beta\in I} K_{n\beta}(\boldsymbol{l}) f_\beta(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{l}/2) - U\delta_{ns} - \alpha_n^{\mathrm{K}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l})] \tag{9}$$

$$\alpha_m^{\mathrm{K}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l}) = \frac{1}{2\Omega_B}\int_{\Omega_B} d^2q f_m^*(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{l}/2-\boldsymbol{q})\cdot \sum_{\alpha,\,\beta\in I}(3M_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q}) + K_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q}) + 2\sigma_m(1-2\sigma_\alpha) D_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q}))\cdot$$

$$\cdot f_\alpha(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}/2) f_\beta(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{l}-\boldsymbol{q}/2) \tag{10}$$

절단변수 Ω를 $+\infty$ 로부터 시작하여 로그척도로 감소시키면서 우의 흐름방정식들을 련립시켜 수값적분하면 보존전파함수들이 얻어진다. 보존전파함수들의 초기값은 $\Omega=+\infty$ 일 때 령으로 놓으며 어느 한 보존전파함수값이 턱값 $V_{최대}$를 초과하면 수값적분을 끝내고 얻어진 보존전파함수값들에 기초하여 계의 질서화를 분석평가한다.

2. α함수들의 적분계산에서 합리적인 브릴루앵구역분할방법

보존전파함수들의 흐름방정식을 수값적분하는데서 시간이 가장 많이 소비되는 부분은 주어진 운동량 $\boldsymbol{l}$에 대하여 브릴루앵구역전반에 걸쳐 운동량 $\boldsymbol{p}$를 변화시키면서 $\alpha_m^{\mathrm{SC}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l})$, $\alpha_m^{\mathrm{M}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l})$, $\alpha_m^{\mathrm{K}}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l})$ 함수들을 구하는것이다. 이를 위해서는 식 (6), (8), (10)에 따라 수값적분을 진행해야 하는데 여기에서 제기되는 문제는 적분 $\frac{1}{\Omega_B}\int_{\Omega_B} d^2q$ 를 실시할 때 브릴루앵구역에서 변수 $\boldsymbol{q}$를 어느 정도 세밀히 분할해야 하는가 하는것이다. 구체적으로 α함수들은 다음의 계차도식에 따라 수값적분한다.

$$\alpha(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{l}) = \frac{1}{\Omega_B}\int_{\Omega_B} d^2q F(\boldsymbol{q}; \boldsymbol{p}, \boldsymbol{l}) \approx \frac{1}{N_\alpha^2}\sum_{i=1}^{N_\alpha}\sum_{j=1}^{N_\alpha} F(\boldsymbol{q}_{ij}; \boldsymbol{p}, \boldsymbol{l}) \tag{11}$$

여기서 $\boldsymbol{q}_{ij} = (-\pi, -\pi) + (i/N_\alpha)\cdot(0, 2\pi) + (j/N_\alpha)\cdot(0, 2\pi)$ 이다. 이때 N_α를 브릴루앵구역의 분해도라고 부른다.

한편 피적분식 $F(\boldsymbol{q}; \boldsymbol{p}, \boldsymbol{l})$ 에는 토대함수와 보즈전파함수들이 있는데 이것들은 브릴루앵구역에 분포된 유한개의 마디점들에 대한 함수값들로 주어져있으며 다른 점들에서의 값은 주변마디점값들로부터 2차원선형보간하여 얻는다.

특히 토대함수값들은 브릴루앵구역을 x, y축방향으로 N_{BZ}등분하여 얻어진 마디점들에 대하여 주어져있다. 그러므로 α함수계산에서 분해도 N_α를 토대함수의 분해도 N_{BZ}보다 크게 할 필요는 없다. 총체적인 계산시간을 줄이기 위해서는 정확도를 보장하는 한도에서 분해도를 될수록 낮추어야 한다.

합리적인 분해도값을 찾기 위하여 우리는 다음과 같은 시험계산을 계획하였다.

우선 $N_\alpha = N_{\mathrm{BZ}}$로 놓고 주어진 운동량 $\boldsymbol{l}$에 대하여 운동량 $\boldsymbol{p}$는 브릴루앵구역을 가로세로 N_{L}등분(N_{L}은 N_{BZ}보다 1/4정도로 작게 설정함)하여 얻어진 마디점값 $\boldsymbol{p}_{kl}$들로 변화시키면서 α함수값들을 구한다.

$$\alpha_0(\boldsymbol{p}_{kl}, \boldsymbol{l}) = \frac{1}{N_{\mathrm{BZ}}^2}\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{BZ}}}\sum_{j=1}^{N_{\mathrm{BZ}}} F(\boldsymbol{q}_{ij}; \boldsymbol{p}_{kl}, \boldsymbol{l}) \tag{12}$$

다음 N_α를 $N_{\mathrm{BZ}}-1$부터 $N_{최소}$까지 하나씩 줄이면서 α함수값들을 구한다.

$$\alpha(\boldsymbol{p}_{kl}, \boldsymbol{l}) = \frac{1}{N_\alpha^2}\sum_{i=1}^{N_\alpha}\sum_{j=1}^{N_\alpha} F(\boldsymbol{q}_{ij}; \boldsymbol{p}_{kl}, \boldsymbol{l}) \tag{13}$$

다음으로 다음식에 따라 보존전파함수의 크기를 나타내는 파라메터 D, M, K와 편차량을 나타내는 파라메터 dD, dM, dK들을 구한다.

$$D = \sum_m \sum_{k,\,l} |\alpha_{0m}^{\mathrm{SC}}(\boldsymbol{p}_{kl}, \boldsymbol{l})|,\ M = \sum_m \sum_{k,\,l} |\alpha_{0m}^{\mathrm{M}}(\boldsymbol{p}_{kl}, \boldsymbol{l})|,\ K = \sum_m \sum_{k,\,l} |\alpha_{0m}^{\mathrm{K}}(\boldsymbol{p}_{kl}, \boldsymbol{l})| \tag{14}$$

$$dD = \sum_m \sum_{k,\,l} |\alpha_m^{\mathrm{SC}}(\boldsymbol{p}_{kl}, \boldsymbol{l}) - \alpha_{0m}^{\mathrm{SC}}(\boldsymbol{p}_{kl}, \boldsymbol{l})|,\ dM = \sum_m \sum_{k,\,l} |\alpha_m^{\mathrm{M}}(\boldsymbol{p}_{kl}, \boldsymbol{l}) - \alpha_{0m}^{\mathrm{M}}(\boldsymbol{p}_{kl}, \boldsymbol{l})|,$$

$$dK = \sum_m \sum_{k,\,l} |\alpha_m^{\mathrm{K}}(\boldsymbol{p}_{kl}, \boldsymbol{l}) - \alpha_{0m}^{\mathrm{K}}(\boldsymbol{p}_{kl}, \boldsymbol{l})| \tag{15}$$

우리는 $N_{\mathrm{BZ}} = 64$, $N_{\mathrm{L}} = 64$, $N_{최소} = 10$으로 놓았다. 그리고 하바드모형의 파라메터들을 $t = 1.0$, $t' = -0.3$, $U = 3.0$, $\mu = 4t'$로 놓고 시험계산을 진행하였다.

그림 1에 N_α에 따르는 상대편차량 dD/D, dM/M, dK/K의 변화곡선을 보여주었다.

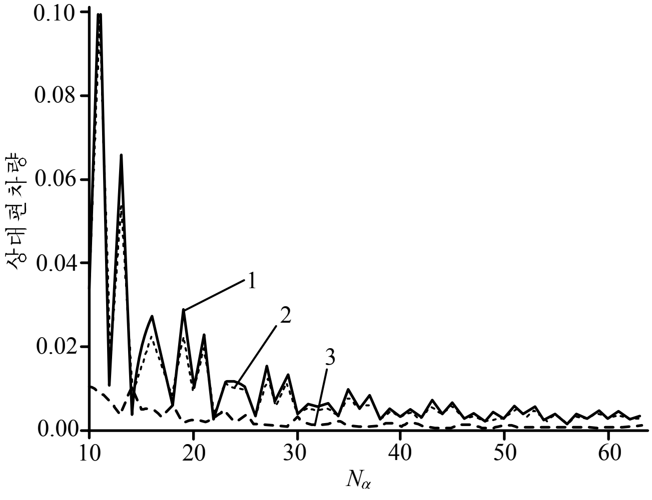

그림 1. N_α에 따르는 상대편차량의 변화곡선(1−dD/D, 2−dM/M, 3−dK/K)

그림 1에서 알수 있는것처럼 $N_\alpha \geq 30$ 일 때에는 세가지 상대편차량들이 전부 0.01미만이다. 그러므로 우리는 분해도를 $N_\alpha = N_{\mathrm{BZ}}/2 = 32$ 로 설정하였다.

분해도를 64 및 32로 놓은 경우에 얻어진 두가지 보존전파함수 $M_{11}^{\Omega}(\boldsymbol{l})$ 과 $D_{33}^{\Omega}(\boldsymbol{l})$ (이 두가지는 그중 큰 값을 가지는 보존전파함수이다.)의 최종계산결과를 그림 2와 3에 대비적으로 보여주었다.

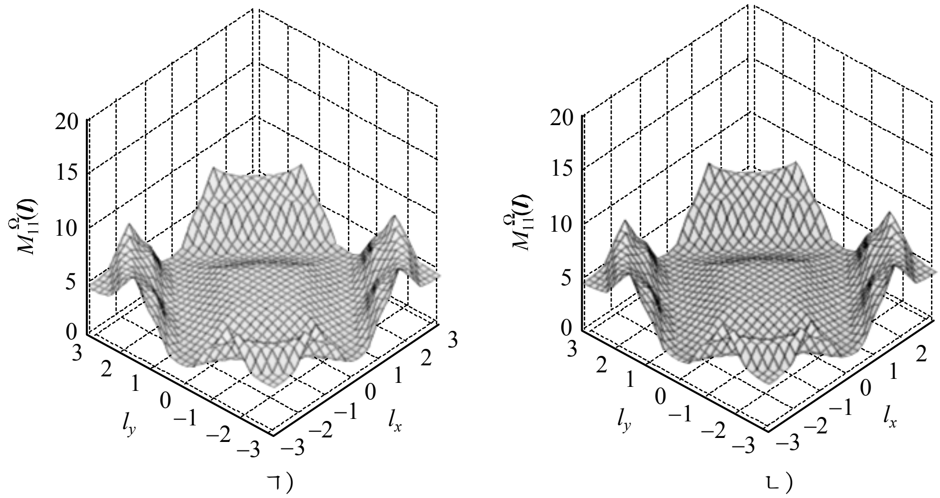

그림 2. 보존전파함수 $M_{11}^{\Omega}(\boldsymbol{l})$ 의 계산결과
ㄱ) N_α=64의 경우, ㄴ) N_α=32의 경우

그림 2와 3에서 보다싶이 두가지 분해도에 기초하여 얻어진 계산결과는 거의 일치한다. 이것은 분해도를 $N_\alpha = N_{\mathrm{BZ}}/2 = 32$ 로 설정한 우리의 선택이 합리적이라는것을 보여준다.

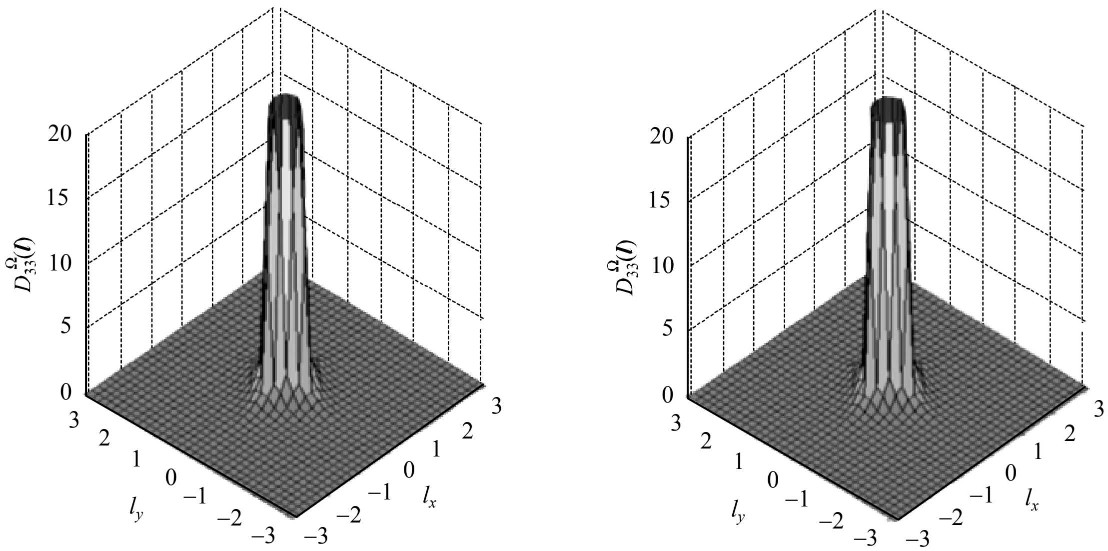

그림 3. 보존전파함수 $D_{33}^{\Omega}(\boldsymbol{l})$ 의 계산결과
ㄱ) N_α=64의 경우, ㄴ) N_α=32의 경우

맺 는 말

보존전파함수들의 흐름방정식풀이과정에 시간이 제일 많이 걸리는 α함수들의 적분계산에서 합리적인 브릴루앵구역분할방법을 탐색하였다. 시험계산결과에 의하면 α함수들의 적분계산에서 브릴루앵구역의 분해도 N_α를 토대함수에 대한 마디점분할수 N_{BZ}의 절반정도로 놓는것이 좋다. 이 경우에 보존전파함수계산결과는 거의 같으나 계산시간은 1/4정도로 작아진다. 시험계산에서 N_α=64로 놓았을 때 전체 계산시간은 115 072s이지만 N_α=32로 놓았을 때에는 29 196s로 훨씬 단축된다.

참 고 문 헌

[1] C. Husemann et al.; Phys. Rev., B 79, 195125, 2009.

[2] C. Husemann et al.; arXiv:0812.3824.

[3] W. S. Wang et al.; Phys. Rev., B 85, 035414, 2012.

[4] Y. Y. Xiang et al.; Phys. Rev., B 86, 024523, 2012.

[5] Y. Y. Xiang et al.; Phys. Rev., B 88, 104516, 2013.

주체106(2017)년 9월 5일 원고접수

On Integral Resolution for Calculation of Boson Propagator using Singular Mode Functional Renormalization Group

Pak Wi Song, O Song Jin

A reasonable division of Brillouin zone is investigated for integration of α functions which is the most time-consuming process in solving the flow equation for boson propagators. By our test calculation, we strongly recommend that the integral resolution for the α functions–N_α has to be about half a resolution for base functions–$N_{BZ.}$

Using this resolution, we get nearly equal values of the boson propagators as for N_α=N_{BZ}, yet consume only a quarter of the time elapse.

In our test calculation, the whole elapsed time is 115 072seconds for N_α=64, while 29 196seconds for N_α=32. Nevertheless both results are in good agreement.

Key words: strongly correlated electron system, Hubbard model