

## Heisenberg-Lanczos 방법을 통한 응집물질계의 이해\*

홍종배  
(물리교육과)

### I. 서론

현대물리학이 20세기 초반 양자역학과 상대성이론의 탄생으로 시작되었다 할 수 있듯이 현재의 물리학에서 관심있게 다루어지는 주제들은 대부분 양자역학과 상대성이론을 주로 사용한다. 현대물리학에서 커다란 가치를 이루고 있는 물질의 성질을 탐구하는 응집물질물리학은 구성 입자들의 속도가 빠르지 않아 그 대부분이 비상대론적 양자역학으로 연구된다. 이 연구에서는 응집물질물리학에서 현재 주된 관심의 대상이 되고 있는 몇 가지 주제들을 방법론과 함께 살펴 보고자 한다.

현재 응집물질물리학 분야에서 가장 많은 관심을 끌고 있는 주제는 역시 고온초전도체[1]에 관한 연구이다. 상온 정도의 높은 온도에서 저항이 없는 전도체를 연상시키는 고온초전도체는 인류 문명에 획기적인 변화를 가져올 수 있을 만큼 과학자들을 흥분시키는 주제이므로 단어 자체로도 많은 대중의 흥미를 끌며, 당연히 산업 기술쪽에서도 큰 흥미를 가질 수 밖에 없는 주제이다. 최근까지는 아직 초전도체가 되는 온도가 상온에는 미치지 못하지만, 값이 싼 액화 질소나 액화공기의 온도면 초전도체가 되기에 충분하므로, 고온초전도체를 실제에 응용하는 데 많은 노력을 기울이고 있다.[2] 한편 순수한 물리학적 관심사는 오히려 고온초전도체가 보이는 새로운 물리적 성질에 있다. 그것은 고온초전도체가 나타난 초기(1986년)에는 지금까지 발전된 응집물리학의 이론으로 모든 것이 금방 규명될 것으로 기대하였으나 실제로는 그렇지 못하였고 많은 새로운 문제들을 제기하였다. 따라서 사람들 특히 이론물리학자들의 관심사는 초전도 현상 그자체 보다도 고온초전도 물질의 보통 상태를 이해하고자 하는 데 우선적인 관심을 갖게되었으며, 따라서 고온 초전도체는 전자간에 강한 상관관계를 가지고 있는 물질임에 초점이 모아졌다. 이렇게 하여 강한 상관관계를 갖는 계에 대한 연구가 응집물질물리학계에 초미의 관심사로 등장하게 되었다. 고온초전도체외에도 무거운 페르미계, 양자 홀계, 콘도 효과를

\* 이 연구는 서울대학교 사범대학 발전기금의 지원으로 이루어졌음.

보이는 자성체등이 모두 강한 상관관계를 갖는 계이며, 이들은 모두 현재 많은 흥미를 끌고있는 주제들이다.

강한 상관관계를 갖는 대표적인 예로 초기 고온초전도체인  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ 를 보자. 이 물질의 도핑되지 않은 상태( $x=0$ )는 격자 하나당 하나의 외각 전자가 있는 것과 같은 계이다. 에너지 띠이론에 따르면 이 물질은 당연히 도체이어야 하나 실제로는 부도체이다. 그 이유는 이미 한 전자가 있는 격자점에 다른 하나가 들어갈 때 강한 쿨롱 반발력이 나타나기 때문이다. 이와같이 전자들이 이동하고자 하는 경향에 비해 격자점에서의 쿨롱 반발력이 더 강한 계를 강한 상관관계를 갖는 계라 한다. 이런 물질을 가장 단순히 기술하자면 격자점에 전자가 하나씩 있고 이 전자는 최근접한 다른 격자로 뛰어가는 운동에너지와 전자가 이미 있는 격자에 뛰어 들어가면 쿨롱반발력을 받는 간단한 모형으로 기술할 수 있다. 전자의 뒝을 나타내는 에너지를  $t$ 로, 격자내 쿨롱반발력을  $U$ 로 표기하면, 계의 해밀토니안은

$$H = -t \sum_{j,l,\sigma} (c_{j\sigma}^* c_{l\sigma} + h.c.) + U \sum_{j,\sigma} n_{j\sigma} n_{j,-\sigma} \quad (1)$$

로 나타낼 수 있으며, 이는 허바드 모형[3]으로 잘 알려져 있다. 허바드 모형은 아주 단순하면서도 격자상의 다전자계의 기본적인 물리를 포함하고 있어 현재까지는 완벽히 풀려져 있지 않은 모형이다.

이와 비슷한 모형으로는 전도전자인  $d$ -꺾질의 전자와 속박상태에 있는  $f$ -꺾질에 있는 전자들의 행위를 기술하는 앤더슨 격자 모형[4]이 있다. 앤더슨 격자 모형은 고온초전도가 나타나기 전까지 많은 관심을 끌었던 무거운 페르미계의 기본 모형으로 연구되어 왔던 것으로 허바드 모형과 다른 점은 같은 격자점에 들어온  $d$ -전자와  $f$ -전자는 파동함수가 중첩되는 상태에 있어 서로 결합이 가능하다. 이를 혼성된 (hybridized) 상태라 한다. 격자가 주기성을 가진 주기적 앤더슨 모형은

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (c_{i\sigma}^* c_{j\sigma} + h.c.) + V \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^* f_{i\sigma} + h.c.) \quad (2)$$

으로 나타낸다. 여기서 허바드 모형에 있는 쿨롱반발력 항은 쓰지 않았다.

허바드 모형에서는  $U$ 가 큰 경우를, 앤더슨 모형에서는  $V$ 가 큰 경우를 강한 상관관계를 가진다고 하며, 이들이 아주 커진 경우가 고온초전도체나 무거운 페르미계에 더 적합할 수 있으므로, 그 경우로 전환시킨 모형을 각각  $t$ - $J$  모형[5], 콘도

격자 모형[4]이라 한다.  $t$ - $J$ 모형은 격자점에서의 쿨롱 반발력  $U$ 가 너무 커서 한 격자점에 두 개의 전자가 동시에 들어갈 수 없는 제약을 가지며, 이 경우 유효한 쿨롱 반발력은 스핀간의 교환 상호작용으로 기술되어서 다음과 같은 해밀토니안을 갖는다.

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^* c_{j,\sigma} + h.c.) + J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \cdot \sigma_j, \quad (3)$$

이와 같은 맥락으로 앤더슨 모형을 변환하면  $d$ - $f$  전자간의 혼성은 그들의 스핀간의 교환상호작용으로 표현되어 콘도 격자 모형은 아래와 같이 기술된다.

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^* c_{j,\sigma} + h.c.) - J \sum_i S_i \cdot \sigma_i, \quad (4)$$

위에서 소개한 4개의 모형들은 현재 응집물질 물리학계에서 많은 관심을 끌고 있는 모형들이다. 그러나 응집물리학에서 직면한 문제는 지금까지 개발된 방법으로는 위에서 소개한 바와 같은 강한 상관관계를 갖는 계는 잘 설명하지 못한다는 것이다. 지금까지 개발된 다체계를 다루는 방법의 근간은 섭동법으로 그것은 상호작용이 없는 계에 대한 해를 기본으로 하여 상관효과를 전개방법으로 근사하는 방법이었다. 따라서 상관효과가 큰 계를 취급하기 위해서는 비섭동적인 방법이 요구되고 있다.

비섭동적 방법들중의 한가지는 정확한 해를 얻는 것으로써 Bethe Ansatz 방법 [6]이며, 이방법으로 위 모형들의 정확한 해를 얻은 바 있다. 그러나, 이 방법은 정력학적인 연구에 제한된다는 점과 1차원 계에서만 성공적인 결과를 보이고 있는 한계점을 가지고 있다. 또다른 비섭동적 방법이 성공적으로 행해지는 경우는 공간적인 차원을 무한히 크게 하는 경우이다.[7] 무한 차원에서는 공간적인 상관효과에 대해 평균장 근사가 정확해 질 수 있어 문제가 쉬워진다. 물론 무한 차원의 물리학이 저차원의 물리를 얼마나 잘 기술할 것인가 하는 근본적인 의문을 제기할 수 있지만, 적어도 3차원 또는 공간적인 차원의 효과가 특이하지 않은 경우는 무한 차원의 물리학이 많은 것을 설명할 수 있다. 그밖에 여러 분야에서 비섭동적 방법에 대한 많은 연구가 진행되고 있다.

이 논문에서는 하나의 비섭동적 접근법이라 할 수 있는 무한연분수 표현법을 소개하고 그 결과를 논의하고자 한다. 여기서 소개하고자 하는 연분수 표현법은 동력

학의 연구에 한하며, 정력학 연구를 위한 방법은 Lanczos방법[8]으로 알려져 있다. 여기서 소개하는 방법은 동력학을 연구하는 방법이므로 동력학적 Lanczos방법이라고 할 수도 있겠다. 다체계의 동력학을 기술하기 위한 기본적인 연구는 한 입자의 운동을 보는 한입자 그린함수를 통해서 이루어질 수 있다. 또한 계가 격자 구조가 없는 유체라면 밀도 요동을 통해 주어지는 동력학 구조 혹은 모양인자[9]를 통해 모든 것을 알 수 있다. 따라서 다음 제 2 절에서는 한입자 그린함수와 동력학 구조인자를 간단히 소개하고, 여기에 나타나는 연산자의 동력학을 기술해내는 방법과 연분수 표현으로 전환되는 조건을 제 3 절에서 소개하고, 제 4 절에서는 실제계에 대한 적용 예를 소개한다. 끝으로 제 5 절에는 간단한 결론을 신는다.

## II. 다체계의 기본 동력학

### 1. 지연 그린함수 (Retarded Green's function)

지연 그린함수는 물질의 성질을 연구하는 데 기본이 되는 것으로 이로부터 여러 가지 물리량을 구할 수 있다. 여기서는 페르미계를 예로들어 보기로 한다. 위치  $j$  에서 스핀이  $\sigma$  인 페르미 입자의 생성과 소멸을 나타내는 연산자를  $c_{j\sigma}^*, c_{j\sigma}$  라 하면, 한입자 지연 그린함수는  $\langle \{c_{j\sigma}(t), c_{j\sigma}^*\} \rangle$ 이며, 물질의 전자분포 상태를 주는 한입자 상태밀도  $\rho_\sigma(w)$ 는 한입자 지연그린함수의 반쪽 후리에 변환에 의해 주어진다.[3] 즉,

$$\rho_\sigma(w) = -\frac{2}{N} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_j \text{Im} G_{jj}^{(+)}(w + i\eta) \quad (5)$$

이때

$$G_{jj}^{(+)}(w + i\eta) = \frac{i}{2\pi} \int_0^\infty \langle \{c_{j\sigma}(t), c_{j\sigma}^*\} \rangle e^{iwt - \eta t} dt \quad (6)$$

기호 (+)는 지연그린함수를 나타내는 보통 사용되는 표시이다. (6)식의 표현에서 우리가 계산해야 하는 양은  $\langle \{c_{j\sigma}(t), c_{j\sigma}^*\} \rangle$ 이며, 이는 곧 내적이

$$(A, B) = \langle \{A, B^*\} \rangle \quad (7)$$

로 정의되는  $c_{j\sigma}$  연산자 힐버트 공간에서  $t$  시간이 지난후의  $c_{j\sigma}(t)$ 를  $c_{j\sigma}$ 에 투영한

값임을 알 수 있다. 따라서 한입자 지연 그린함수의 계산은  $c_{j\sigma}$  힐버트 공간에서의 동력학을 고려해 봄으로써 얻어질 수 있다.

## 2. 동력학 구조인자 (Dynamic Structure Factor)

한입자 그린함수와 같은 맥락에서 계의 동력학적 성질을 나타내주는 물리량으로 동력학 구조인자 혹은 동력학 모양인자 (Dynamic Form Factor)를 들 수 있다. 이는 계의 동력학적 구조를 알기 위해 충돌 실험을 수행하였을 때 비탄성 산란단면적에 직접 비례하므로 이론적으로 비탄성 산란단면적을 해석해 주는 물리량이다.

비탄성 산란단면적은 에너지  $E_i$ , 운동량  $\vec{p}_i$ 를 가진 탐침 입자를 계에 쏘아 보낸 후 입체각  $d\Omega$ 에 놓인 검출기에서 에너지  $E_f$ , 운동량  $\vec{p}_f$ 를 가진 동일입자 (양자역학에서는 탐침입자와 검출입자는 동일하므로 구분할 수 없다)를 검출하는 실험으로서 운동량이 전이되는 양을 벡터  $\vec{q}$ 로 고정하여 측정한다고 할 때, 비탄성 산란단면적은 양자역학의 페르미 황금률[9]에 의해

$$\sigma(q, w) = 2\pi \sum_f \delta\left(\frac{\epsilon_f - \epsilon_i}{\hbar} - w\right) \hat{v}(q)^2 |\langle \Psi_f | p_q^* | \Psi_i \rangle|^2 \quad (8)$$

으로 주어진다. 여기서  $\epsilon_i$ 와  $\epsilon_f$ 는 각각 에너지 고유함수  $|\Psi_i\rangle$ 와  $|\Psi_f\rangle$ 의 고유값이며,  $p_q$ 는  $\vec{q}$ -성분의 밀도요동 연산자로서  $p_q = \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} p(\vec{r}) d\vec{r}$ 이며,  $\hat{v}(q)$ 는 탐침 입자와 계의 구성입자간의 상호작용을 Fourier변환한 것으로 고정된  $\vec{q}$ 에 대해서는 상수이므로 특별한 의미를 주지 않는다. 위의 산란단면적은  $\delta$ -함수를 적분형으로 쓰고 에너지 고유값에 대한 완전성을 이용하면 아래 형태로 쓸 수 있다. 즉,

$$\sigma(q, w) = \hat{v}(q)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iwt} \langle p_q(t) p_q^* \rangle \equiv \hat{v}(q)^2 2\pi\hbar S(q, w) \quad (9)$$

여기서  $S(q, w)$ 가 동력학 구조인자이며 이는 밀도요동 연산자의 상관함수로 주어짐을 알 수 있다.

실험을 수행해 보면 계가 전이 가능한 모든 에너지  $E = E_i - E_f$ 와 모든 운동량  $\vec{q} = \vec{p}_i - \vec{p}_f$ 를 흡수할 수 있는 것이 아니고 특정한  $E$ 와  $\vec{q}$ 만 흡수할 수 있다. 이는 실험의 결과로부터 알 수 있다. 즉, 실험에서 가능한 모든  $E$ 와  $\vec{q}$ 에 대해 조사해보면 어떤 특정한  $E$ 와  $\vec{q}$ 에서 강한 산란을 보임을 경험한다. 이 사실은 계가 에너지  $E$  운동량  $\vec{q}$ 를 흡수하였다는 것을 말한다. 즉 우리가 고려하고 있는 계는 충돌을 통하여 진동수  $w = E/\hbar$  파벡터  $\vec{k} = \vec{q}/\hbar$ 를 갖는 파동이 일어났다고 생각할

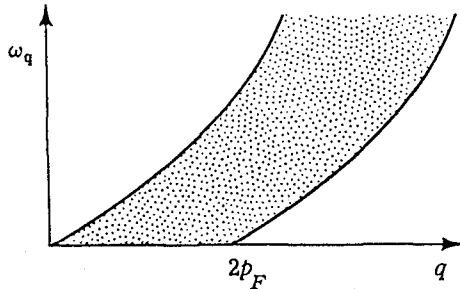
수 있을 것이며, 이를 양자화하여 말하면 이 파에 해당하는 에너지  $E$  운동량  $\vec{q}$ 를 갖는 입자가 하나 생겨났다고 할 수 있다. 이 파동이 격자 진동이면 우리는 그것을 포논(phonon)이라 부르고, 전자 밀도의 진동이면 플라즈몬(plasmon), 스핀 진동이면 스핀파(spin wave) 혹은 마그논(magnon)이라 부른다. 이와같은 가상입자를 collective mode라 하며, 계를 구성하는 입자들의 협동적 현상(cooperative phenomena)으로 나타나는 것이다.

한편, 계가 에너지와 운동량을 받아들이는 방법에는 위와 같이 계의 협동적 현상 뿐아니라 입자끼리 단순한 충돌에 의해서도 가능하다. 탐침입자에 대한 운동량 보존법칙은  $\vec{p}_f = \vec{p}_i - \vec{q}$ 이나, 이제는 계안에 있는 한 입자에 대해 관심을 두자. 이 입자는 충돌하기전에  $\vec{q}_i$  운동량을 가지고 있다가 충돌후  $\vec{q}_f$ 로 바뀐다고 하자. 계가 받은 운동량은  $\vec{q}$ 이며 계가 받은 에너지를  $\hbar\omega$ 라 할 때, 에너지 보존법칙은

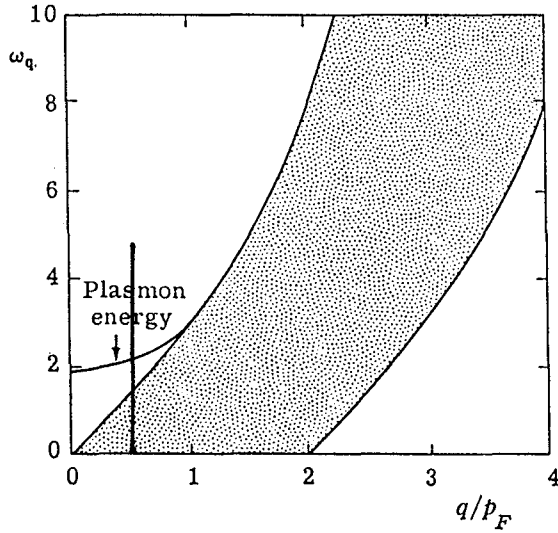
$$\begin{aligned} \omega &= (\vec{q}_i + \vec{q})^2/2m - q_i^2/2m \\ &= (\vec{q}_i \cdot \vec{q})/m + q^2/2m \end{aligned} \tag{10}$$

으로 주어진다. 여기서  $\hbar=1$ 로 놓았다. 이를 한입자 여기(single-particle excitation)에서의 분산관계(dispersion relation)라 한다. 위 식에서 내적  $\vec{q}_i \cdot \vec{q} = q_i q \cos\theta$ 에서  $\cos\theta$ 가 연속적인 값을 가지므로 충돌에 의해 가질 수 있는 가능한 상태는 연속적인 분포를 갖는다. 그림 1은 이를 그림으로 나타낸 것이다. 이와같이 계가 가질 수 있는 충돌상태는 연속적인 분포와 격리된 분포를 모두 가질 수 있다. 대표적인 양자 다체계인 3차원 전자 기체의 경우의 분산관계는 그림 2와 같다.

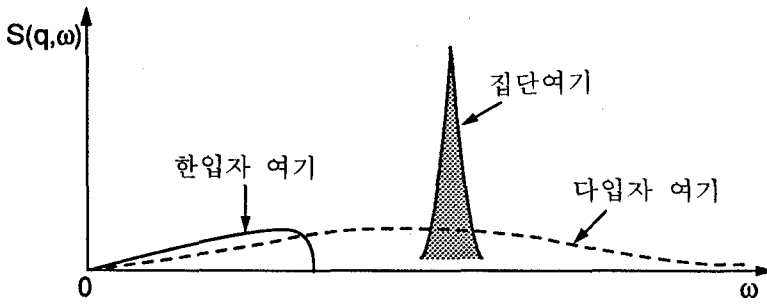
이러한 분산관계는 동력학 구조인자에서 그대로 반영된다. 실험에서 정해진 운동량 전이(그림 2의 수직선)에 대한 동력학 구조인자의 이론적인 예상은 그림 3과



<그림 1> 3차원 전자기체에서 한입자 여기의 분산관계  $P_F$ 는 페르미 운동량



<그림 2> 상호작용이 있는 3차원 전자기체의 분산관계, 수직선은 정해진 운동량 전이를 나타냄.



<그림 3> 동력학 구조인자의 일반적인 행태

같다. 그림에서 넓은 에너지 영역에 분포되는 것은 여러 입자들이 충돌에 동시에 기여하는 다입자 여기로서 한입자 여기의 일반화된 형태로 이해하면 된다. 즉, 집단여기는 대부분의 에너지를 흡수하며 에너지 상태가 확실한  $\delta$ -함수 형태의 뾰족한 모습을 주며, 한입자 여기나 다입자 여기는 집단여기에 비해 에너지 흡수도는 미약하나 연속적인 분포를 가지는 것이 특징이다.

### III. 하이젠베르크 표현에서의 동력학

위에서 논의한 한입자 지연 그린함수와 동력학 구조인자는 각각 페르미 연산자  $c_{j\sigma}$ 와 밀도요동 연산자  $\rho_q$ 의 동력학으로부터 얻어짐을 알았다. 우리는 여기서 연산자의 동력학을 연구하는 방법을 제시하고자 한다.

쉬뢰딩거 표현에서는 파동함수의 동력학을 고려하므로 보통 얘기되는 힐버트 공간이라 함은 그곳의 기저벡터들이 고유함수로 구성되는 경우이다. 여기서는 쉬뢰딩거 표현에 대응되는 하이젠베르크 표현에서의 양자역학을 사용한다. 하이젠베르크 표현에서는 연산자의 동력학을 생각하므로, 연산자로 이루어지는 기저벡터를 가지는 힐버트 공간을 생각한다. 이를 앞의 경우와 구별하기 위하여 루빌 공간[4]이라 부른다.

이 절에서는 일반성을 유지하기 위해 일반적인 연산자  $f_0$ 의 동력학을 생각하자.  $f_0$ 의 동력학을 기술하는 루빌 공간이 직교하는 기저벡터  $\{f_\nu | \nu=0, 1, 2, \dots\}$ 로 짜여진다고 가정하면,

$$f_0(t) = \sum a_\nu(t) f_\nu \quad (11)$$

로 쓰여진다. 한편 연산자  $f_0$ 의 운동방정식은 하이젠베르크 운동방정식  $\partial f_0(t)/\partial t = iL f_0(t)$ 를 따르므로, 우리는

$$\sum \dot{a}_\nu(t) = \sum a_\nu(t) iL f_\nu \quad (12)$$

와 같은 관계식을 얻는다. 우리는 기저벡터  $f_\nu$ 가 서로 직교하는 벡터들이므로  $a_\nu(t) = (f_0(t), f_\nu) / (f_0, f_\nu)$ 임을 알 수 있고,  $f_0 = c_j$ 로 취하고 위에서 정의한 내적을 생각하면  $a_\nu(t)$ 가 곧 한입자 그린함수임을 알 수 있으며,  $f_0 = \rho_q$ 로 취하여 계산한  $a_\nu(t)$ 로부터 동력학 구조인자를 얻을 수 있다[10]. 식 (6)과 (9)에서와 같이 물리학에서는 보통 시간에 대해 푸리에 혹은 라플라스 변환을 취한 형태가 더 유용하므로, 우리는  $a_\nu(t)$ 의 라플라스 변환된 형태를 얻는 데 주안점을 둔다.

이제 (12)식의 양변에 벡터  $f_0$ 와의 내적을 취하고  $(f_0, f_0)$ 를 나누면,

$$\dot{a}_0(t) = \frac{(iL f_0, f_0)}{(f_0, f_0)} a_0(t) + \frac{(iL f_1, f_0)}{(f_0, f_0)} a_1(t) + \frac{(iL f_2, f_0)}{(f_0, f_0)} a_2(t) + \dots \quad (13)$$



으로 쓰여지고,  $f_1$ 으로 내적을 취하고  $(f_1, f_1)$ 을 나누면,

$$\dot{a}_1(t) = \frac{(iL f_0, f_1)}{(f_1, f_1)} a_0(t) + \frac{(iL f_1, f_1)}{(f_1, f_1)} a_1(t) + \frac{(iL f_2, f_1)}{(f_1, f_1)} a_2(t) + \dots \quad (14)$$

을 얻는다. 이와같은 방법으로 얻어지는 연립방정식의 일반적 표현은

$$\dot{a}_k(t) = \sum_j M_{kj} a_j(t) \quad (15)$$

이며, 이를 행렬을 사용하여 나타내면 다음과 같다.

$$d/dt A_c(t) = M A_c(t) \quad (16)$$

이때  $A_c(t)$ 와  $M$ 은 각각 열행렬, 사각행렬로서 그 형태는

$$A_c(t) = \begin{pmatrix} a_0(t) \\ a_1(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (17)$$

이며, 행렬  $M$ 의 요소는  $M_{\mu\nu} = (iL f_\nu, f_\mu) / (f_\mu, f_\mu)$ 이다.

이제 식 (15) 또는 (16)에 대해, 경계조건  $a_0(0) = 1$ 와  $a_j(0) = 0, j \geq 1$ 을 이용하는 라플라스 변환을 취하면, (16)의 행렬식은

$$z A_c(z) - I_c = M A_c(z) \quad (18)$$

이되며, 이때  $I_c$ 는 열행렬로서 그것의 요소들은  $(1000 \dots)$ 이다. 이제 (18)식을 다시 쓰면

$$(zI - M) A_c(z) = I_c \quad (19)$$

이며, 대수학의 크래머의 규칙 (Cramer's rule)[11]을 사용하면  $a_0(z)$ 는 다음과 같은 행렬식으로 주어진다.

$$a_0(z) = \frac{\det(zI - M)_{00}}{\det(zI - M)} \quad (20)$$

여기서 행렬식  $\det(zI - M)_{00}$ 은 행렬식  $\det(zI - M)$ 의 1행, 1열의 요소의 cofactor를 뜻한다.

### 1. Gram-Schmidt 직교화 과정

우리는 잘알려진 Gram-Schmidt 직교화 과정[12]을 통해 직교화된 기저벡터들을 구할 수 있다. 즉, 첫 번째 벡터  $f_0$ 를 원하는 연산자로 선택하고, 두 번째 벡터  $f_1$ 을 구할 때는 서로 1차 독립인 벡터  $iLf_0 = i[H, f_0]$ , 여기서  $H$ 는 해밀토니안임, 를 가지고 Gram-Schmidt 직교화과정을 수행한다. 즉,  $f_1 = iLf_0 + \alpha_0 f_0$ 이라 놓고  $(f_1, f_0) = 0$ 의 직교화 조건을 적용하면  $\alpha_0 = (iLf_0, f_0) / (f_0, f_0)$ 임을 알 수 있다. 세 번째 벡터  $f_2$ 는  $f_2 = iLf_1 + \alpha_1 f_1 + \Delta_1 f_0$ 라 놓고, 직교화 조건  $(f_2, f_0) = (f_2, f_1) = 0$ 을 사용하면,  $\alpha_1 = (iLf_1, f_1) / (f_1, f_1)$ ,  $\Delta_1 = (f_1, f_1) / (f_0, f_0)$ 를 얻는다. 우리는  $\Delta_1$ 을 얻을 때 관계식  $(iLf_1, f_0) = -(f_1, iLf_0)$ 을 사용하였으며, 이 관계식은 내적 (7)이 평형상태에 대한 평균값으로 주어지는 형태면 항상 성립한다. 그 이유는  $iLf_1 = df_1(t)/dt|_{t=0}$ 임과 평형상태는 시간의 이동에 따라 무관하다는 사실로부터, 먼저 시간에 대한 미분을 내적 앞으로 뽑아낸 다음, 시간을  $-t$ 만큼 이동하고 미분을 수행하면, (-)부호와 함께 시간 미분은  $f_0$ 로 이동한다.  $f_3$ 을 얻는 과정만 보이면 그 다음은 쉽게 일반화된다. 전과 같이  $f_3 = iLf_2 + \alpha_2 f_2 + \Delta_1 f_1 + \beta_0 f_0$ 로 놓고 직교화 조건을 적용하여,  $\alpha_2$ ,  $\Delta_1$ ,  $\beta_0$ 를 구한다. 우리는 여기서  $\beta_0 = 0$ 임을 보이고자 한다. 이는  $(f_3, f_0) = 0$ 으로부터  $\beta_0 = (iLf_2, f_0) / (f_0, f_0)$ 으로 주어지며,  $(iLf_2, f_0) = -(f_2, iLf_0)$ 이고  $f_1 = iLf_0 + \alpha_0 f_0$ 에서  $iLf_0$ 를 앞식에대입하면,  $f_2$ 가  $f_1$ 과  $f_0$ 와 직교하므로  $\beta_0 = 0$ 임을 알 수 있다. 따라서 우리는 4-항 관계식을 얻는다. 그 다음의 벡터에 대해서도 같은 종류의 작업의 직교화 과정을 수행해 나가면 우리는 다음과 같은 4-개항으로 된 순환관계를 얻는다 [13]. 즉,

$$f_{v+1} = iLf_v - \alpha_v f_v + \Delta_v f_{v-1} \quad (21)$$

여기서  $v \geq 0$ 이며  $f_{-1} = 0$ 으로 정의한다.

2. 그린함수와 동력학 구조인자의 연분수 표현

위에서 우리는 연산자  $f_0$ 의 선택에 따라 한입자 지연그린함수와 동력학 구조인자를 주는  $a_0(z)$ 가 (20)식과 같이 행렬식의 비로 주어짐을 보았다. 그러나 이제 (21)식의 순환관계를 적용하면 (20)식의 행렬식들은 3줄대각행렬 (tridiagonal matrix)로 바뀐다. 즉, 요소  $M_{\nu\mu} = (iLf_\mu, f_\nu)/(f_\nu, f_\nu)$ 에서  $(iLf_\mu, f_\nu)$ 는 아래 첨자들이 2이상 차이 아니면 즉,  $|\mu - \nu| \geq 2$ 이면 0 이 되므로 (20)식의 행렬식은 3줄대각행렬

$$a_0(z) = \frac{\begin{vmatrix} z - \alpha_{00} & -M_{01} & \circ & \circ & \circ & \dots \\ -M_{10} & z - \alpha_{11} & -M_{12} & \circ & \circ & \dots \\ \circ & -M_{21} & z - \alpha_{22} & \cdot & \circ & \dots \\ \circ & \circ & \cdot & \cdot & \cdot & \dots \\ \circ & \circ & \cdot & \cdot & \cdot & \dots \\ \vdots & \circ & \cdot & \cdot & \cdot & \dots \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} z - \alpha_{11} & -M_{12} & \circ & \circ & \dots \\ -M_{21} & z - \alpha_{22} & -M_{23} & \circ & \dots \\ \circ & -M_{32} & z - \alpha_{33} & \cdot & \dots \\ \circ & \circ & \cdot & \cdot & \dots \\ \circ & \circ & \cdot & \cdot & \dots \end{vmatrix}} \quad (22)$$

로 된다. 이 사실은 (21)식에서  $iLf_0$ 가 아래첨자가 하나 차이 나는 연산자들로 이루어짐을 주목하면 금방 알 수 있다.

이 3줄대각행렬로 된 (22)식은 다음과 같은 연분수 형태로 표현된다.

$$a_0(z) = \frac{1}{z - \alpha_0 + \frac{\beta_1}{z - \alpha_1 + \frac{\beta_2}{z - \alpha_2 + \dots}}} \quad (23)$$

여기서  $\alpha_\nu = M_{\nu\nu}$ 이며  $\beta_\nu = \Delta_\nu = (iLf_{\nu-1}, f_\nu)^2 / [(f_{\nu-1}, f_{\nu-1})(f_\nu, f_\nu)] = (f_\nu, f_\nu) / (f_{\nu-1}, f_{\nu-1})$  이다.

## IV. 물리계에의 적용

라플라스 변환된 공간 ( $z$ -평면)에서 연분수 표현으로된 한입자 지연 그린함수나 동력학 구조인자를 주는 (23)식의 해석적인 성질은 극점(poles)들의 분포로 나타난다. 한입자 그린함수에서의 극점의 물리적 의미는 그 입자가 가질 수 있는 상태 또는 가상입자(quasiparticle) 상태를 나타낸다. 한 입자의 동력학이 유한 차원의 루빌 공간으로 기술되는 경우 (예로서 단진자의 경우) 우리가 가지는  $a_0(z)$ 는 유한한 연분수로 주어지며, 이를 계산하면  $z$ -평면에 유한개의 극점을 허수축상에 가진다. 단진자의 경우는 단진동 주파수에 해당하는 곳, 즉  $z = \pm i\omega$ 에 극점이 나타나며 이는 곧 단진자의 양자상태이다. 그러나 대부분의 의미있는 계를 다룰 때, 우리는 무한 차원의 루빌 공간을 맞는다. 무한 차원의 경우에는  $z$ -평면에 무한 개의 극점을 허수축상에 가지게 되는데, 이때 우리는 극점의 분포에 대해 두가지 경우를 상상해 볼 수 있다. 그 하나는 극점들이 띠엄 띠엄 분포하는 경우이며, 다른 하나는 유한한 길이의 허수축에 무한 개의 극점이 들어가는 경우이다. 두 번째 경우가 특히 의미가 있는데 이 유한한 길이는 연속적인 에너지 분포를 가지는 것을 의미하며, 바로 에너지 띠(energy band)를 나타낸다. 수학적으로 이 에너지 띠는 함수  $a_0(z)$ 의 branch cut로 나타난다. 일반적으로 branch cut와 격리된 극점들을 동시에 가질 수 있으며 이때 격리된 극점은 가상입자 상태를 준다. 이 절에서는 위에서 기술한 수학적 형태들이 실제 물리계에서 나타남을 몇가지 예를 들어 보여주고 극점과 branch cut의 의미를 설명하고자 한다.

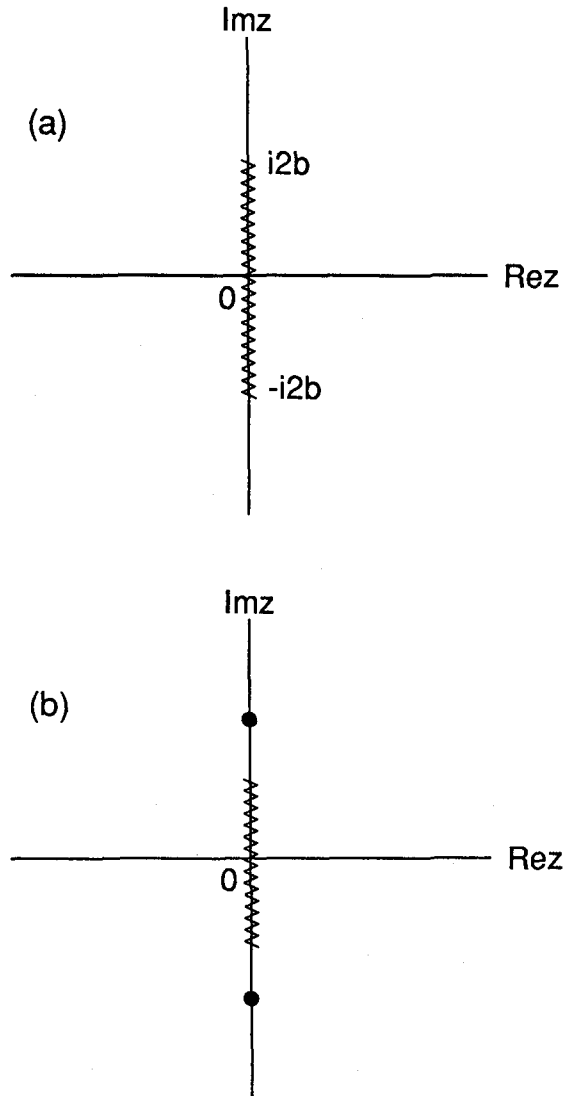
## 1. 전자기체

식 (23)의 무한연분수의 가장 단순한 수학적 형태는  $\alpha_v$ 와  $\beta_v$ 가 모두 같은 경우일 것이다. 따라서  $z - \alpha_v$ 를 새로운  $z$ 로 놓고,  $\beta_v = b^2$ 로 놓으면, 이 경우는

$$a_0(z) = \frac{1}{z + b^2 a_0(z)} \quad (24)$$

으로 쓸 수 있어,  $a_0(z)$ 에 대해 풀면

$$a_0(z) = \frac{-z \pm \sqrt{z^2 + 4b^2}}{2b^2} \quad (25)$$



<그림 4> (a) 복소수 평면에서 (25)식이 가지는 branch cut  
 (b) 복소수 평면에서 (27)식이 가지는 branch cut와 극점

를 얻는다. (25)식은 그림 4(a)에서 처럼  $z$ -평면에서  $z=-i2b$ 에서  $z=i2b$ 까지 branch cut를 가지는 함수이다. 흥미있는 사실은 실제로 이와 비슷한 경우가 2차원 전자계

에서 긴과장의 밀도 요동을 가지는 경우에 나타난다는 것이다.[14] 쿨롱 상호작용이 없는 경우는  $\beta_1 = 2b^2$ ,  $v \geq 2$  일 때는  $\beta_v = b^2$ 으로 주어지며, 쿨롱 상호작용

이 들어오면  $\beta_1 = w_p^2 + 2b^2$ ,  $v \geq 2$  일 때는 변함없이  $\beta_v = b^2$ 를 준다. 각각의 경우  $a_0(z)$ 를 계산하는 것은 쉬운 일이며 그들은 다음과 같다.

쿨롱 상호작용이 없는 경우는

$$a_0(z) = \frac{1}{\sqrt{z^2 + 4b^2}} \quad (26)$$

이며, 상호작용이 있는 경우는

$$a_0(z) = \frac{1}{\left(1 - \frac{\beta_1}{2b^2}\right)z + \frac{\beta_1}{2b^2}(\sqrt{z^2 + 4b^2})} \quad (27)$$

으로 주어진다. (26)식에서는 연속적인 스펙트럼을 주는 branch cut만 있으며, (27)식에는 그림 4(b) 처럼 이 branch cut와 함께  $z = \pm i \frac{\beta_1}{\sqrt{\beta_1 - b^2}}$ , 즉 branch cut 밖에 격리된 극점이 추가로 나타난다. 이 극점이 바로 집단여기를 나타내는 플라즈몬이다.

## 2. 허바드 모형

최근 많은 관심의 대상이 되고 있는 (1)식의 허바드 모형에서는 전자들이 얼마나 잘 뛰어 다니는가를 나타내는  $t$ 와 두 전자가 한 격자점에 동시에 있을 때의 쿨롱 반발력  $U$ 간의 경쟁에 의해 각 격자점에 평균적으로 하나의 전자가 있는 경우 (half-filling)의 계는 도체-부도체 상전이를 일으킨다. 이는 극한의 경우를 생각해 보면 쉽게 상상할 수 있다. 즉,  $U$ 에 비해  $t$ 가 아주 커다면 전자들은 자유롭게 뛰어 다닐 수 있어 도체일 것이고, 반면에  $U$ 가 아주 커면 전자들은 동시에 한 격자점에 있을 수 없어 뛰어 다닐 수 없는 부도체가 된다. 따라서  $U/t$ 가 적절한 값 어딘가에 도체-부도체 전이점이 있을 것이란 것을 예상할 수 있다.

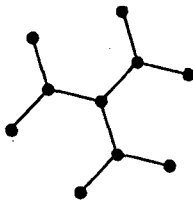
도체-부도체 전이는 계의 한입자 상태밀도에서 분명히 나타난다. 부도체는 에너지 간격을 가지며 화학퍼텐셜이 에너지 간격내에 놓여 있어 전자가 이동하는 에너지를 갖기 위해서는 유한한 크기의 에너지가 필요하며, 도체는 화학퍼텐셜이 에너지 상태가 연속적인 분포를 갖는 띠안에 놓여 있는 경우로서 아주 작은 에너지로

도 전자의 이동이 가능하다. 따라서 우리가 예상할 수 있는 것은  $U/t$ 가 커면  $a_0(z)$ 는 분리된 두 개의 branch cuts를 가질 것이며, 화학퍼텐셜은 branch cut가 분리된 가운데 놓일 것이라는 것과  $U/t$ 가 작아지면서 branch cut간의 간격이 좁아져 마침내 특정한 값에서는 두 branch cut가 합쳐질 것이라는 것이다. 그러나 허바드 모형에서는 도체 상태에서 페르미 액체를 예상하므로 페르미 액체를 나타내는 가상입자의 존재가  $a_0(z)$ 에서 극점으로 나타날 것을 기대하고 있다. 기존의 이론에서는 이러한 전이현상을 잘 보여주지 못하여 여기서 보여주는 방법이 흥미를 끈다.

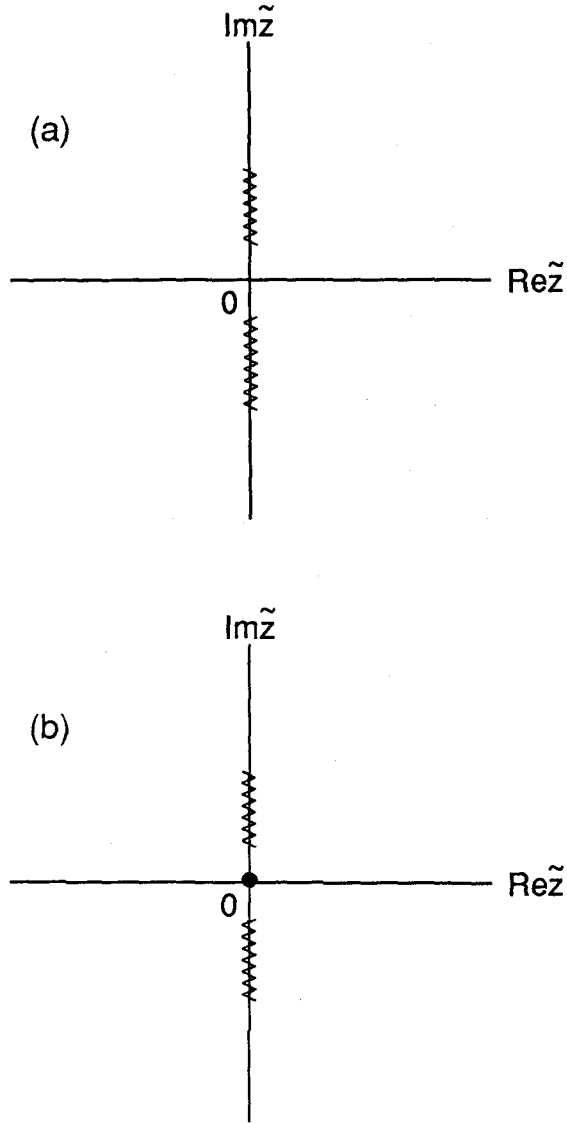
제3절에서 소개한 방법을 Bethe lattice (그림 5) 상에서 허바드 모형에 적용하면  $\alpha_v = -iU/2, \beta_{2v+1} = U^2/4 = a, \beta_{2v+2} = t_* = b$ 를 얻으며[15], 여기서  $t_* = \sqrt{2qt}$ 이며  $q$ 는 Bethe lattice의 연결수(coordination number)를 말한다.  $\alpha_v$ 와  $\beta_v$ 를 사용한 무한연분수를 얻으면  $a_0(z)$ 는

$$a_0(\tilde{z}) = \frac{(b-a) - \tilde{z}^2 \pm \sqrt{(\tilde{z}^2 + a - b)^2 + 4b\tilde{z}^2}}{2b\tilde{z}} \quad (28)$$

여기서  $\tilde{z} = z + i\frac{U}{2}$ 을 말하며 에너지의 기준점을 제시하는 것이므로 화학퍼텐셜의 선택으로 기준점을 이동할 수 있으므로 특별한 의미는 없다. 우리의 관심사는  $a_0(z)$ 의 해석적인 성질에 있으므로 그 성질만 논의하고자 한다. 위 표현은  $a$ 가  $b$ 보다 클 때 그림 6(a)처럼 두 개의 branch cut가  $i(\sqrt{a}-\sqrt{b}) \leq z \leq i(\sqrt{a}+\sqrt{b})$ 와  $-i(\sqrt{a}+\sqrt{b}) \leq z \leq -i(\sqrt{a}+\sqrt{b})$ 에 있으며 그 간격은  $2(\sqrt{a}-\sqrt{b})$ 이다. 이제  $a$ 가 점점 작아져  $b$ 에 가까워져 가면 branch cut간의 간격이 점차 줄어드는 것을 알 수 있으며,  $a=b$  즉,  $U=2t_*$ 에서 간격이 없어진다. 흥미를 끄는 것은  $a$ 가  $b$ 보다 작아지면 어떤 일이 일어날 것인가이다. (20)식의 표현에서 분자의 앞부분에 있는  $(b-a)$ 를 염두에 두며  $a$ 가  $b$ 보다 작은 경우를 보면 그림 6(b)처럼  $\tilde{z}=0$ 에 극점이 나타남을 볼 수 있다. 이 극점이 바로 페르미 액체를 기술하는 가상입자를 준다.



<그림 5> q=3인 Bethe lattice의 모양



<그림 6> (a) 복소수 평면에서 (28)식이 가지는 branch cut(a가 b보다 큰 경우)  
 (b) 복소수 평면에서 (28)식이 가지는 branch cut와 극점(a가 b보다 작은 경우)



### 3. 앤더슨 모형

일반적인 앤더슨 모형은 현재까지 어떤 방법으로도 풀리지 않은 모형이므로 여기서는 비교적 취급하기 쉬운 모형으로 (2)식에서 보인 쿨롱 반발력  $U=0$ 인 경우를 다룬다. (2)식의 해밀토니안에 대해 우리는 전도전자인  $d$ -전자의 경우를 예를 들어 보면,  $V$ 가  $t$ 보다 큰 경우  $\alpha_v=0$ , 그리고  $v \geq 0$ 인데 대해  $\beta_{2v+1} = V^2 + qt^2$ ,  $\beta_{2v+2} = qt^2$ 을 얻는다. 이들이 주는  $a_0(z)$ 는

$$a_0(z) = \frac{-(z^2 + V^2) \pm \sqrt{(z^2 + V^2)^2 + 4qt^2 z^2}}{2qt^2 z} \quad (29)$$

이다. 이 함수 역시 두 개의 분리된 branch cuts를  $a = V^2 + qt^2$ ,  $b = qt^2$ 라 놓으면, 허바드 모형의 경우 처럼  $i(\sqrt{a} - \sqrt{b}) \leq z \leq i(\sqrt{a} + \sqrt{b})$ 와  $-i(\sqrt{a} + \sqrt{b}) \leq z \leq -i(\sqrt{a} - \sqrt{b})$ 에 가지며 그 간격은  $2(\sqrt{a} - \sqrt{b}) = \sqrt{4V^2 + 1} - 1$ 이 된다. 여기서 흥미 있는 사실은  $d$ - $f$ -전자간 혼성의 크기를 주는  $V$ 가 계를 부도체로 만드는 역할을 하고 있음을 알 수 있다. 사실  $V$ 는 콘도 모형으로 전환시 반강자성 결합을 주는 역할을 하므로 전도전자인  $d$ -준위의 전자는 구속 상태에 있는  $f$ -전자와 반강자성 결합 (antiferromagnetic coupling)을 이루어 더 낮은 에너지 상태가 되므로 격자점에 묶여 부도체가 됨을 보여주고 있다.

## V. 결 론

우리는 서론에서 최근 응집물질 물리학에서 많은 관심을 보이고 있는 계들을 소개하였고 그들이 모두 풀기 어려운 강한 상관관계를 갖는 계임을 말하였다. 여기서 소개한 하이젠베르크 그적 동력학 이론을 통한 동력학의 연분수 표현 방법은 이들 계의 동력학을 새로운 감각으로 비교적 잘 보여주고 있다. 우리는 계의 차원을 크게 함으로써 물론 계산에 필요한 정력학적 정보에 대해 평균장 근사를 사용하는 것을 정당화하여 연분수 표현법의 해석적인 취급이 가능하도록 하였다. 그 결과 기존의 해석적 방법으로는 잘 다룰 수 없었던 강한 상관관계를 갖는 계에도 성공적으로 적용될 수 있음을 보여 주었으며, 특히 허바드 모형으로 설명 가능한 계에서 나타나는 부도체-도체 전이에서 에너지 간격의 줄어듦과 도체상에서 페르미 액체 가상입자의 존재를 한꺼번에 보여줄 수 있었다.

이 논문의 주된 목적은 새로운 하이젠베르크적인 동력학이론을 소개하고, 한입자

그린함수와 동력학 구조인자를 주는 연분수 표현에서 수학적으로 나타나는 극점이  
나 branch cut의 물리적 의미를 보여주는 것을 주된 목적으로 삼았으므로 자세한  
계산이나 물리량의 계산은 보여주지 않았다. 비록 몇가지 예에서 연분수 표현법이  
성공적으로 적용됨을 볼 수 있으나 이 방법 역시 아직도 더 많은 적용성을 가질  
수 있도록 계속적인 연구를 필요로 하고있다.

### 참 고 문 헌

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Muller, Z. Phys. B 64, 189 (1986).
- [2] G. B. Lubkin, Physics Today, 49, 48 (1996).
- [3] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London A 276, 238 (1963).
- [4] P. Fulde, Electron Correlations in Molecules and Solids (Springer-Verlag, Berlin, 1993) ; A. C. Hewson, The Kondo Problem to Heavy Fermions (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1993).
- [5] F. C. Zhang and T. M Rice, Phys. Rev. B 36, 381 (1987).
- [6] H. Bethe, Z. Phys. 71, 205 (1931).
- [7] W. Metzner and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. 59, 121 (1987) ; A. Georges and G. Kotliar, Phys. Rev. B 45, 6479 (1992).
- [8] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. 66, 763 (1994).
- [9] D. Pines and P. Nozieres, The Theory of Quantum Liquids, vol. 1 (W. A. Benjamin, N. Y., 1966).
- [10] J. Hong and M.H. Lee, Phys. Rev. Lett. 70, 1972 (1993).
- [11] D. T. Finkbeiner, Introduction to Matrices and Linear Transformations (W. H. Freeman Co., San Francisco, 1966).
- [12] G. Arfken, Mathematical Methods for Physicists (Academic Press, N. Y., 1970).
- [13] J. Hong, J. Kor. Phys. Soc. 20, 174 (1987).
- [14] M. H. Lee and J. Hong, Phys. Rev. Lett. 48, 634 (1982).
- [15] J. Hong and H.-Y. Kee, Phys. Rev. B 52, 2416 (1995).

<Abstract>

## Understanding of Condensed Matter Systems via the Heisenberg-Lanczos Method

Hong, Jongbae

Department of Physics Education

Recent interests in condensed matter physics are introduced and the dynamics of the interesting systems are studied through the Heisenberg-Lanczos method. The latter method gives rise to the continued fraction representation when the bases vectors satisfy a recurrence relation. We show the corresponding types of the continued fraction for the typical models in condensed matter physics such as electron gas, Hubbard, and Anderson models and appreciate the meanings of isolated poles and branch cuts in the analytic forms of the retarded Green's function for the models.