강상관계 연구단 이론팀

DOI: 10.3938/PhiT.26.005

정석범·양범정·김충현

Theory Teams at the Center for Correlated Electron Systems

Suk Bum CHUNG, Bohm Jung YANG and Choong Hyun KIM

Theoretical studies are an essential component of serious research on correlated electron systems, both as a guide and a support for experimental research. Given the variety of approaches developed for theoretical study of correlated systems, it is advisable to maintain several independent teams for theoretical research. In this article on these theory teams, we aim to address both the breadth of theoretical research at the Center for Correlated Electron Systems and the way in which these teams work closely with both experimental groups and with one another.

강한 상관관계가 나타나는 양자 다체계 연구는 현대 이론 물리의 중요한 과제 중 하나입니다. 이 중 란다우의 현상론적 연구 이후 오랫동안 바닥상태에서 상호작용에 의한 자발적 대칭성 깨짐은 중요한 연구 주제로 자리 잡고 있었고, 각종 자성, 초전도, 전하밀도와 등의 현상이 이런 관점 하에서 연구되어 왔습니다. 최근에 들어서는 대칭성 깨짐으로 설명할 수 없

는 위상학적 물질 상태 연구가 활발하게 진행되고 있는데, 여기서도 상호 작용의 효과가 중요하게 작용할 수 있는 것으로 알려져 있습니다. 고체에서의 다체계 현상의 경우 이외에도 격자 구조가 항상 대칭성과 위상학적 물질 상태에 영향을 줍니다. 또한 최근에 들어 많이 연구되는 전이금속이나 희토류 원소를 포함한 물질에서는 스핀-궤도 결합도 물질 상태를 결정하는 중요한 요소로 작용합니다. 강상관계 연구단에서는 복잡 산화물과 디랙 물질에서의 격자 구조, 스핀-궤도 결합, 전자 간 상호작용이 복합적으로 작용해서 구현되는 각종 물질 상태를 연구하고 있습니다. 이런 물질들에서는 위상적 물질 상태가 상기한 여러 요소들의 결합으로 결정되기도 하고, 여러 가지 대칭성이 복합적으로 깨지는 물질 상태가 나오기도 합니다. 따라서 실험적으로 탐구할 대상을 제시하고, 실험 결과를 설명할 수 있는 이론적인 연구의 병행이 필수적입니다.

고체 물리 이론 연구에는 다양한 방법이 개발되어 서로 상호보완적 관계를 갖습니다. 일단 물질의 전자구조를 정확하게 파악하는 것이 매우 필수적입니다. 상호작용이 약한 경우 이런 계산을 통해서 물리계의 성질을 전반적으로 파악할 수 있고, 강상관계 계산도 출발점을 여기에 둡니다. 여기에 필요한 계산을 선입관 없이 처리하는 방법이 밀도범함수이론을 이용한 제일원리 계산입니다. 이와 더불어 보다 현상론적인 접근방식으로는 모트 절연체에 쓰이는 허바드 모델같이 물질의 가장 특징적인 성질을 포착하는 간단한 모델을 기반에 둔 연구가 있습니다. 이런 모델에서는 양자장론적 방법을 사용해서 여러 물질에서 보편적으로 나타나는 상전이나 위상학적 특징을 파악할 수 있다는 점에서 보다 폭넓은 물성 이해를 가져올 수 있는 방법론입니다. 이러한 방법론은 아직 발견되지 않은 물질 상태를 예측할 수 있습니다만, 여기서 쓰이는 낮은 에너지에서 발현되는 전자 대칭성에 맞는 모델과 실제 물질 사이의 관계를 밝히기 위해서는, 어떤 전자 궤도가 낮은 에너지를 갖는지를 밝혀주는 제일원리 계산의 도움이 필요합니다. 마지막으로 강상관계 계산을 위해서 몇 가지 적분 이론 외에 동력학적 평균장 이론, 범함수 재규격화 이론, 밀도행렬 재규격화 이론 등의 여러 가지 어림 방법들이 개발되어 쓰이고 있습니다.

저자약력

정석범 교수는 현재 기초과학연구원 Young Scientist Fellow로, 2008년 일리노이에서 박사학위를 수여받고, 스탠퍼드와 UCLA에서 postdoc으로 위상적 물질 상태를 연구했으며, 2013년 재미 한국물리학회 협회에서 젊은 우수연구자상을 수상했다. (sbchung@snu.ac.kr)

양범정 교수는 2008년 서울대 물리천문학부에서 이학박사 학위를 취득했으며 2015년부터 서울대학교 물리천문학부 조교수로 재직 중이다. 양자 스핀 시스템, 위상 절연체, 위상 준금속 등에 대해 연구해 왔다. (bjyang@snu.ac.kr)

김충현 박사는 서울대학교 물리학과 이학박사(2012)로서, 코넬대학교 박사 후 연구원을 거쳐, 2015년부터 강상관계 물질 연구단에 재직 중이다. (chkim82@snu.ac.kr)

이렇게 이론 연구에 여러 방법들이 상호 보완적 관계를 갖는 만큼, 강상관계 연구단에서는 3개의 독립된 이론 팀들을 운영하고 있습니다. 이어지는 소개 글들을 통해서 다체계 이론을 연구하는 Young Scientist Team, 강상관계 양자 물질 이론 연구팀, 그리고 제일원리 계산팀을 차례로 소개하겠습니다.

Young Scientist Team: Many-body Theory

들어가는 글

위상적 물질 상태(topological state of matter)는 지난 10년간 국제 물리학계에 큰 관심을 끌면서 연구되어 왔습니다. 당초에 양자 홀 효과를 이해하기 위해 위상수학적 분류가 이론적으로 도입된 것이 위상 절연체가 발견되면서 물질 상태를 이해하는 하나의 기준으로 새롭게 정립될 수 있었습니다. 또한 위상적 물질 상태의 종류도 처음에 위상 절연체에서 시작한 것이, 그 이후로 위상 초전도체, 바일 준금속(Weyl semi-metal) 등으로 점점 확대되어 왔습니다. 특히 위상 초전도체의 경우, 여기서 나타나는 마요라나 페르미온(Majorana fermion)을 관측하기 위한 여러 실험 프로젝트들이 수행되어 왔습니다.

그러나 지금까지의 위상적 물질 상태의 이론적인 이해는 상호작용 효과를 완전히 포함하지 못하고, 대부분 상호작용 효과가 약한 물리계들에 바탕을 두어 왔습니다. 다체계의 물질 상태가 상호작용에 의해서 좌우되는 경우가 많은 점을 생각할 때, 상호작용 효과에 관한 이해는 위상적 물질 상태 이론의 완성을 위해서는 필수적이라고 말할 수 있습니다. 사실 상호작용 때문에 위상적 물질 상태가 되는 경우도 분명히 알려져 있습니다. SmB_6 와 같은 희토류에서의 위상 절연체도 여기에 포함되지만, 무엇보다도 모든 위상 초전도체는 전자들이 쿠퍼쌍을 이루어야 생기는 현상이므로 상호작용이 필수적입니다. 이러한 위상적 물질 상태에서 상호작용 연구가 우리 many-body theory team의 연구 목표입니다.

최근 연구: 위상적 물질 상태 간의 경쟁

위상 초전도체는 비정상 초전도체인 경우가 많아서 상호작용 효과가 특히 표면에 존재하는 마요라나 페르미온에 큰 영향을 줄 수 있습니다. 비정상 초전도체의 경우 쿠퍼쌍 응축이 두 가지 이상의 대칭성을 깨는 경우가 많아서, 쿠퍼쌍 내부 상태가 바닥상태에 고정되지 않고 요동을 치기도 합니다. 쿠퍼쌍이 완전히 바닥상태에 고정되어 있다면, 쿠퍼쌍이 깨지면서 생기는 준입자들 사이의 상호작용은 미미합니다. 하지만 반대로 쿠퍼쌍의 요동이 강하다면, 이를 통한 준입자간 상호작용이 강해집니다. 마요라나 페르미온은 가장 낮은 에너지의 준입자이기

Fig. 1. Schematic representation of interaction in the topological Majorana surface state of topological superconductor. This interaction is mediated by the bulk pairing gap fluctuation.^[1]

상호작용 효과도 가장 크게 나타나야 합니다. 이런 마요라나 페르미온 간의 상호작용이 나타날 수 있는 물리계로 헬륨-3 초유체를 연구했습니다.^[1] 이 초유체는 쿠퍼쌍 응축으로 생성되며, 표면에 마요라나 페르미온을 갖는 위상 초유체이면서,^[2] 일찍부터 쿠퍼쌍의 요동에 의한 스핀파가 관측되었습니다. 이후 추가 연구에서는 스핀-궤도 결합이 강한 물리계의 경우, 위상초전도체 상태와 일반적 BCS 초전도체 상태 사이의 경합에 의한 상호작용으로 마요라나 페르미온 표면 상태 자성화 가능성을 탐구하고 있습니다.^[1]

이렇게 스핀-궤도 결합이 위상적 물질 상태를 결정하는데 큰 영향을 미치므로, 이 효과를 극대화 시킬 방법을 이해할 필요가 생겼습니다. 위상적 물질 상태에 결정적으로 영향을 미칠 수 있는 라쉬바(Rashba) 스핀-궤도 결합에서는 시간 역전 대칭성(time-reversal symmetry)이 보존되게 운동량에 따라서 스핀의 에너지 차이가 생깁니다. 이런 스핀-궤도 결합을 위해서는 물질을 구성하는 원자들에 의한 상대론적 효과 외에 반전 대칭성의 깨짐(parity symmetry breaking)이 중요하게 작용할 필요가 있습니다. 실제로 산화물 2차원 전자계를 연구한 결과 반전 대칭성 깨짐 효과를 극대화함으로써 같은 전이금속 원소로 된 물질에서도 라쉬바 스핀-궤도 결합을 10배 증폭시킬 수 있다는 계산 결과를 얻었습니다.^[3]

위상적 물질 상태 간의 경쟁은 상호작용 외의 전자와 광자의 결합에도 작용할 수 있습니다. 특히 그래핀과 유사한 구조를

REFERENCES

- [1] Y.J. Park, S. B. Chung and J. Maciejko, Phys. Rev. B **91**, 054507 (2015); S. B. Chung, Y.J. Park and J. Maciejko (in preparation 2017).
- [2] S. B. Chung and S.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **103**, 235301 (2009).
- [3] M. Kim, J. Ihm and S. B. Chung, Phys. Rev. B **94**, 115431 (2016).

Fig. 2. Scheme for obtaining topological superconductivity from ferroelectric fluctuation, with figures taken from [6,7].

갖는 MoS_2 나 WTe_2 같은 2차원 디랙 물질들에서는 베리 위상 (Berry phase)의 효과로 전자-광자 결합과 전자간의 상호작용이 전자와 구멍(hole)이 짝을 이루는 들뜸알(exciton)이 생성될 때 경쟁관계를 가질 수 있습니다. 전자-광자 결합은 전자와 구멍이 붙어 있는 들뜸알을 선호하는데 비해서, 전자 간 상호작용은 전자와 구멍이 상호 공전(mutually revolving)하는 들뜸알을 선호할 수 있습니다. 우리 연구팀에서는 이런 경쟁관계로 생기는 위상적 물질 상태 사이의 상전이를 연구하고 있습니다.^[4]

향후 연구 방향

앞으로 중요한 연구 과제는 위상적 물질 상태에서 상호작용의 세기를 조절할 수 있는 물리계를 구현하는 것입니다. 우리 연구팀에서 생각하는 방법 하나는 강유전 요동을 이용한 것입니다. 강유전-상유전의 상전이는 격자에 스트레인을 가하거나 두께를 조절하는 등의 다양한 방법으로 조절할 수 있으므로, 이를 통해서 강유전 요동의 세기를 조절할 수 있습니다. 강유전체는 반전대칭성을 깨기 때문에, 강유전체를 기판으로 하는 2차원 전자계의 입장에서 이러한 요동은 곧 라쉬바 스핀-궤도 결합의 요동으로도 이어지는데, 최근에 이런 요동에 의해서 위상 초전도 상태와 BCS 초전도 상태가 모두 구현될 수 있음이 밝혀졌습니다.^[7] 따라서 강유전 요동을 가장 큰 라쉬바 스핀-궤도 결합 요동으로 연결시킬 수 있는 이성접합체를 구현한다면,^[5] 단순히 위상 초전도 현상을 구현할 새로운 물질을 찾는 것을 넘어서, 마요라나 페르미온 간에 강한 상호작용을 볼 수 있는 물리계를 구현할 수 있을 것으로 기대됩니다.

[정성범(IBS 강상관계 물질 연구단)]

Correlated Quantum Matter Theory Research Team

들어가는 글

지난 10년 간 위상절연체(topological insulator)에 대한 연구가 전 세계적으로 활발하게 진행되어 왔는데, 대부분의 연구 대상이 전자 간 상호작용이 없는 절연체로 국한되어 있습니다. 하지만 많은 위상 물질에서는 전자 간 상호작용이 언제나 존재하고 경우에 따라서 상호작용 효과가 아주 중요합니다. 예를 들어 Ir 산화물과 같은 전자계의 경우에는 강한 스핀궤도 결합으로 다양한 위상상태가 예측이 되었는데,^[8] 실제로 이 시스템에서는 전자 간 상호작용도 충분히 강하여서 많은 물질에서 스핀궤도 결합과 전자 간 상호작용을 동시에 고려해야만 그 성질을 이해할 수가 있습니다. 일반적으로 전자 간 상호작용을 고려하면 상호작용이 없는 시스템에서는 존재할 수 없는 새로운 위상상태가 유도될 수 있는데 이런 새로운 상태들의 일반적인 성질을 이해하고 이런 상태를 체계적으로 분류하는 방법을 찾는 것이 굉장히 중요한 문제입니다. 이와 같이 스핀-궤도 결합과 전자 간 상호작용이 큰 전자계에서 생길 수 있는 새로운 위상상태를 발견하고 그 물성을 밝히는 것이 우리 correlated quantum matter theory research team의 연구 목표입니다.

최근 연구 주제

최근 위상물질 연구에서 한 가지 주목할 점은 위상물질 연구의 중심이 절연체에서 준금속으로 옮겨오게 되었다는 사실입니다. 위상 성질이 에너지 간격(energy gap)이 없는 (준)금속 시스템에서도 나올 수 있다는 사실 자체가 새로운 발상인데다가 실제로 준금속의 저에너지 들뜸을 기술하는 준입자가 상대론 방정식을 만족시키는 디랙(Dirac) 혹은 바일(Weyl) 입자라는 사실이 많은 연구자들의 관심을 끌고 있습니다. 특히 최근에 수행된 일련의 실험들이 실제 여러 고체물질들에서 다양한 형태의 디랙/바일 같은 준입자가 존재함을 증명하였습니다. 특히 시스템의 시간 역전 대칭성(time-reversal symmetry)이나 공간 반전 대칭성(inversion symmetry)이 깨진 경우에는 전도띠

REFERENCES

- [4] K. Lee, C. Lee, H. Min and S. B. Chung (in preparation 2017).
- [5] R. Kim, C.-H. Kim and S. B. Chung (in preparation, 2017).
- [6] Z. Zhong *et al.*, Adv. Mater. Interfaces 2, 1400445 (2015).
- [7] Y. Wang, G.-Y. Cho, T. Hughes and E. Fradkin, Phys. Rev. B 93, 134512 (2016).
- [8] B. -J. Yang and Y. B. Kim, Phys. Rev. B 82, 085111 (2010).

Fig. 3. (a) Structure of the pyrochlore lattice. (b) Local spin structure of the all-in all-out antiferromagnet. (c) Schematic 3D bulk phase diagram as a function of local Coulomb interaction. (d) Distribution of Weyl points for Weyl semimetal phase.^[9]

(conduction band)와 원자가띠(valence band)의 교차점에 바일 입자(Weyl fermion)가 존재할 수 있습니다. 이런 바일 입자는 운동량 공간에 존재하는 자기홀극(magnetic monopole)과 같은 역할을 하기 때문에 여러 가지 흥미로운 위상현상을 유발할 수 있어서 많은 연구자들이 관심을 가지고 있습니다.

이러한 바일 입자의 성질을 연구하기 위한 한 가지 중요한 물질로서 본 연구팀은 파이로클로어(pyrochlore) 구조를 가지는 이리듐 산화물 $R_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ ($R = \text{a rare earth element such as Nd, Sm, Eu, Y etc.}$)의 성질을 집중적으로 연구하고 있습니다. $R_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 물질은 사실 바일 입자의 존재 가능성이 처음으로 예견되었던 물질로 많은 연구자들의 관심을 받고 있는 물질입니다. 이 물질의 단위날칸(unit cell)에는 네 개의 이리듐 원자가 사면체 구조를 이루고 있습니다. (그림 3) 이 물질의 기저상태는 소위 말하는 all-in all-out 구조로 단위날칸 안의 네 개의 이리듐 스핀이 사면체의 중심방향 혹은 그 반대 방향을 향하고 있게 됩니다. 최근 일련의 이론 연구에 따르면, 각 이리듐 사이트에서의 국소 자기 모멘트(local magnetic moment)의 크기가 증가하면서 기저상태가 금속에서 바일 준금속, 또 절연체로 순차적으로 상전이가 일어날 것이 예상되고 있습니다. 이중 연구자들이 가장 관심이 많은 바일준금속 상은 국소 자기 모멘트 변화에 아주 민감해서 실제로 상그림(phase diagram)에서 아주 좁은 영역에서만 존재가능하다는 것이 이론적으로 알려지게 되었는데 이런 민감성으로 인해 실제 실험에서 바일 준금속상을 직접적으로 관찰하는 것이 아주 어렵게 됩니다.

이러한 문제점을 해결하는 한 가지 중요한 방법으로 본 연구팀은 물질에 자기장을 걸어서 바일 준금속 상을 유도하는 방법에 대한 연구를 수행하고 있습니다. 실제로 최근의 자기저항(magnetoresistance) 실험에 따르면 특정 방향의 자기장의 크기가 커질수록 저항의 크기가 크게 바뀌고 비정상 홀효과

Fig. 4. Schematic phase diagram as a function of magnetic field and all-in all-out order parameter.^[11,12]

(anomalous Hall effect)도 크게 나오는 재미있는 결과가 관측이 되었습니다.^[10] 이러한 측정 결과는 자기장에 의해 새로운 형태의 바일 준금속 상태가 유도될 수 있음을 보여주는 강력한 증거가 됩니다. 이러한 결과를 이해하기 위해서 본 연구팀은 $R_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 시스템에서 자기장이 유도할 수 있는 새로운 위상 준금속 상태에 대해서 연구를 수행하였고 그 결과 시스템의 대칭성과 상호작용 효과로 인해 다양한 형태의 위상 준금속 상태가 나타날 수 있음을 이론적으로 증명하였습니다.^[11,12] (그림 4) 뿐만 아니라 이러한 새로운 형태의 위상 준금속 상태가 특이한 수송현상(transport phenomena)을 유도할 수 있다는 사실도 확인을 하였습니다.

향후 연구 방향

이러한 연구 성과를 바탕으로 앞으로 우리 이론팀은 자기장이 만드는 위상효과의 연구를 얇은 필름(thin film) 상태의 $R_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 물질로 확장할 계획입니다. 실제로 얇은 필름 상태에서는 덩치(bulk) 상태의 위상 성질과 관련된 금속상태가 표면에 존재할 수 있는데 이런 표면상태 간의 상호작용이 새로운 위상 현상을 만들어낼 수 있어서 덩치상태에는 존재하지 않는

REFERENCES

- [9] B.-J. Yang and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. 112, 246402 (2014).
- [10] K. Ueda, J. Fujioka, B.-J. Yang, J. Shiogai, A. Tsukazaki, S. Nakamura, S. Awaji, N. Nagaosa and Y. Tokura, Phys. Rev. Lett. 115, 056402 (2015).
- [11] K. Ueda, T. Oh, B.-J. Yang, R. Kaneko, J. Fujioka, N. Nagaosa and Y. Tokura (to be published, 2017).
- [12] Taekoo Oh and B.-J. Yang (in preparation 2017).

새로운 위상현상을 관측할 가능성이 큼니다.^[9,13] 또한 여러 위상 준금속 상태가 만들어내는 위상 성질을 중성자 산란이나 자기 감수율(magnetic susceptibility) 측정을 통해서 확인할 수 있는 방법도 고안할 계획입니다.

뿐만 아니라 앞으로는 연구 대상을 $R_2Ir_2O_7$ 물질에 국한하지 말고 스핀-궤도 결합과 전자 간 상호작용이 모두 중요한 다른 시스템으로 그 범위를 확장하고자 합니다. 예를 들어서, Sr_2IrO_4 와 같이 페로브스카이트 구조를 가지는 이리듐 산화물의 경우는 스핀-궤도 결합과 전자 간 상호작용 효과로 인하여 새로운 형태의 스핀-궤도 모트 절연체(spin-orbit Mott insulator) 상태가 구현된 유명한 물질입니다. 최근 우리 연구팀의 연구 결과에 따르면 이 물질에서는 시스템이 가지는 특이한 대칭성 때문에 비자성 상태의 에너지 띠구조에 겹침이 생기게 되고 이러한 에너지띠의 겹침이 시스템의 자성 기저상태에 중요한 영향을 준다는 사실을 확인하였습니다.^[14] 이렇게 시스템의 대칭성과 자성, 그리고 그로 인한 위상성질의 상관관계를 이해할 수 있는 일반적인 방법론을 만들어 내는 것이 우리 연구팀이 앞으로 풀어야 할 중요한 연구 과제 중의 하나입니다.

[양범정(서울대학교 물리학과)]

강상관계 물질의 제일원리 계산

들어가는 글

강상관계 물질의 전자구조, 기저 상태 혹은 들뜸 상태들의 성질을 제일원리로부터 계산해내는 것은 최근 자성 이론 연구에 매우 중요한 부분이다. 지난 30여 년간 산화물 분야에서의 가장 중요한 주제들이었던 고온 초전도 구리 산화물의 모호함물 혹은 거대자기저항 물질인 망간 산화물 등의 자성은 모트 절연체 상으로 설명되어지는 전자구조와 밀접하게 연관되어 있다. 이러한 강상관 전자계의 자성을 이해하기 위한 표준적인 접근 방법은 몇 가지의 물리적인 파라미터들(전자들의 운동에너지, 상호작용 에너지)로 만들어진 모델 해밀토니언을 이용한 것이다. 모트 절연체에서의 도체-부도체 상전이 현상은 간단한 허버드 모델을 통해 많은 부분이 이해되었다. 모델에 기반을 둔 연구의 어려움은 계산 파라미터들을 어떻게 알아낼 것인가에 있다. 이 파라미터들을 결정하기 위해서 이미 알려진 실험값 등을 이용하여 파라미터들을 정하고 이렇게 세운 모델들을 통하여 물성들을 분석하고 새로운 현상을 예측하게 된다. 이때 어떤 모델을 어떻게 세웠느냐에 따라 계산 결과는 달라질 수밖에 없다.

그렇다면 복잡한 격자구조와 많은 수 원자를 포함하는 실제 시스템에서의 전자구조를 이해하고 예측하기 위해서는 이러한

파라미터들이 필요 없는, 소위 제일원리(first-principles) 계산의 중요성 및 필요성은 굳이 부연 설명이 필요하지 않을 것이다. 밀도범함수이론은 이러한 필요를 채워줄 수 있는 제일원리 이론이다.

최신 밀도범함수이론 계산 프로그램과 슈퍼컴퓨터 파워의 발전은 국소밀도근사법이라는 일반화된 방법론 아래 많은 물질들의 전자구조를 성공적으로 계산할 수 있게 해주었다. 하지만 국소밀도근사법은 우리 연구단의 주된 관심사인 강상관계 물질들에서는 전자들의 다체계 상호작용을 제대로 다루지 못해서 발생하는 한계점들이 있고, 따라서 많은 부분에 있어서 이 근사법이 가지는 한계를 유의하여 계산을 수행해야 하며, 이에 따른 해석 또한 마찬가지이다. 이러한 문제를 보다 근본적으로 해결하기 위해서 도입된 국소밀도근사법 더하기 U 이론이나 동적 평균장 이론 등을 좀 더 개선하고 적용하는 것은 제일원리계산을 통해 강상관계 문제를 접근하는 데에 있어서 중요한 숙제이다.

스트레인을 통한 $Sr_3Ir_2O_7$ 에서의 스핀-플립 전이

최근 여러 연구결과들을 통해 이리듐 산화물 Sr_2IrO_4 에서 새로운 $J_{\text{eff}} = 1/2$ 상태가 나타난다는 것이 밝혀졌다.^[15,16] 더구나 Sr_2IrO_4 은 그것의 결정 구조적, 자기적 특성의 유사성 때문에 구리 산화물 고온 초전도체에서 보여지는 상태도와 유사한 물리 현상을 기대하게 되었다.

Sr_2IrO_4 의 이층구조에 해당하는 이리듐 산화물인 $Sr_3Ir_2O_7$ 은 c축을 향해 이리듐의 스핀 모멘트들이 평행하게 반자성 형태로 정렬되어 있는 자기 기저 상태를 가지고 있는 것으로 알려져 있다.^[17] 이는 Sr_2IrO_4 의 경우와 매우 대조적인 것인데, Sr_2IrO_4 의 경우에는 스핀 모멘트들이 ab 평면 위에 있는 틀어진 반자성 형태의 자기 기저 상태를 가진다. 이러한 자기 비등방성의 차이는 스핀 웨이브 갭에서도 크게 나타나서, Sr_2IrO_4 에서는 거의 0에 가까운 마그논 갭이 $Sr_3Ir_2O_7$ 에서는 매우 크게 나타나는 것으로 엑스선 산란 실험을 통해 밝혀졌다.^[18] 마그논 갭은 스핀 들뜸에 크게 영향을 미치기 때문에, 두 물질의 마그논 갭의 차이는 스핀 들뜸이 중요한 역할을 하는 현상에 크게 차이를 보일 것으로 기대된다.

REFERENCES

- [13] R. Schaffer, E. K.-H. Lee, B. -J. Yang and Y. B. Kim, Rep. Prog. Phys. **79**, 9, 094504 (2016).
- [14] J. H. Park, H. Jin and B.-J. Yang (in preparation 2017).
- [15] B. J. Kim *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 076402 (2008).
- [16] B. J. Kim *et al.*, Science **326**, 1329 (2009).
- [17] J. W. Kim *et al.*, Phys. Rev. Lett. **109**, 037204 (2012).
- [18] J. Kim *et al.*, Phys. Rev. Lett. **109**, 157402 (2012).

Fig. 5. Schematic diagram of two possible magnetic ground states in $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$.

우리 팀에서는 $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$ 박막에서 일어날 수 있을 것으로 기대되는 스트레인에 의한 자성 성전이를 제일 원리 계산을 통해 연구하였다. 3%에서 0% 범위의 에피탁살 압축 스트레인에 의해서 시스템이 가질 수 있는 자기 기저 상태는 2가지로 기대될 수 있는데, 하나는 본래 $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$ 에서처럼 c축에 평행하게 정렬되어 있는 상태(c-AFM)이고, 다른 하나는 ab 평면에 평행하게 정렬되어 있는 상태(a-wFM)이다(그림 5 참조). 이 두 가지 상태는 스트레인에 의해 조절이 가능하며, 곧 대략 1% 정도 전후의 스트레인을 통하여 스핀-플립 전이를 볼 수 있게 된다(그림 6). 더구나 a-wFM 상태에서는 스핀의 캔팅 모멘트에 의한 강자성 모멘트가 생기는 상황까지 기대할 수 있게 된다.

우리가 제일 원리 계산을 통하여 예측한 결과는 결국 스트레인을 통해 자기 비등방성을 조절한 것이고, 결국 이러한 자기 비등방성 조절을 통해서 이층 이리듐 산화물에서의 마그논 갭 등에도 크게 영향을 미칠 것으로 보여진다.

향후 연구 방향

제일 원리 계산을 통해 전이금속 산화물의 자기 기저상태를 계산하고 예측하는 것은 매우 강력하고 유용한 작업이다. 우리 연구팀은 이층 이리듐 산화물에서 예측한 스핀-플립 현상과 같이 다양한 결정 구조 상황 속에서 자기 상전이를 예측하고 관련된 실험을 제안하는 일들을 계속해서 수행할 예정이다. 특히 이리듐 산화물은 스핀-궤도가 얽혀 있는 전자구조로 인해 초전도, 스핀 리퀴드 등과 같은 희귀한 현상들이 논의되고 있으므로 이리듐 산화물에 대한 제일원리 계산은 매우 유용할 것이다. 또한 서문에서 밝힌 바와 같이 동적 평균장 이론과 같은 방법론을 개선, 적용하여 보다 다양한 강상관계 문제를 연구할 수 있도록 하는 것은 장기적으로 진행되어야 할 연구 방향이다.

[김충현(IBS 강상관계 물질 연구단)]

Fig. 6. Strain dependence of the magnetic structure stability and net spin polarization for (001) $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$ films.

이론팀 맺음말

이제까지 살펴본 강상관계 연구단 이론팀의 제 연구들은 두 가지 측면에서 공동 연구가 중요하게 작용합니다. 하나는 실험 그룹들과의 공동 연구로 한편으로는 새로운 연구의 방향을 제시하고 다른 한편으로는 기존 실험 결과를 분석하는데 도움을 주는 것입니다. 실제로 제1그룹의 이리듐 산화물 이성접합체 라만(Raman) 실험이나 제3그룹의 루테튬(ruthenium) 산화물 실험에는 제일원리 계산팀의 기여가 매우 중요하게 작용했습니다. 또 루테튬 산화물에서의 강자성체-초전도체 이성접합체나 이리듐 산화물 준금속에서의 수송현상 분석에도 다체계 이론 연구팀과 강상관 양자 물질 이론 연구팀이 기여하고 있습니다. 한편 실험그룹의 새로운 연구 방향을 제시하는 데 있어서는 이론팀들 간의 공동연구가 매우 중요한 요소로 작용하고 있습니다. 강유전 요동에 의한 위상초전도체 구현 연구는 우선 강유전 요동을 갖는 기판을 포함하는 이성접합체의 전자구조 분석이 필요하므로 다체계 이론 연구팀과 제일원리 계산팀의 공동연구가 필수적입니다. 또 강상관 양자 물질 이론 연구팀의 페로브스카이트 이리듐 산화물 바닥상태 연구에도 제일원리 계산은 중요한 요소로 포함되어 있습니다. 그리고 위상적 준금속에서의 초전도 현상 연구는 현재 강상관 양자 물질 이론 연구팀과 다체계 이론 연구팀이 공동으로 진행 중입니다.

앞으로 연구단이 더 자리를 잡으면서 이론팀 간의 공동 연구와 실험 연구에 이론팀 참여는 더욱 더 활발해질 것으로 기대됩니다. 이러한 이론팀의 활동이 연구단 전체의 연구 역량을 증진시키는 데 크게 기여할 것으로 기대됩니다.