

연차 보고서(1차)

사업명	KAIST Grand Challenge 30 Project		
과제명	(국문) 새로운 물리량을 찾아서		
	(영문) Search for new physical quantities		
연구책임자	한명준	소 속	물리학과
총수행기간 (1단계)	2018. 1. 1. ~ 2022. 12. 31. (5년)		
당해연도 협약기간	2018. 1. 1. ~ 2018. 12. 31. (1년)		
당해연도 사업비(원)	20,000,000		

자체연구협약서(KAIST Grand Challenge 30 Project)제5조에 의거하여
연차보고서 2부를 제출합니다.

2019 년 1월 14일

연구책임자: 한 명 준 (인)

한국과학기술원 총장 귀하

◇ 연차보고서 작성 요령

I. 해당 연도 추진 현황

I-1 기술개발 추진 내용

본 과제는 가장 근본적인 차원에서 물리학의 발전은 새로운 개념, 새로운 패러다임, 새로운 동역학 체계의 발견/고안과 함께 이루어진다는 생각에서 제안되었다. 물리학에는 여전히 많은 난제들이 남아 있는데 이들은 종종 전통적인 접근, 전통적인 관점에서의 이해에 한계가 있음을 보여준다. 따라서 통상적인 수준을 넘어서는 근본적인 차원의 연구가 필요하며, 새로운 관점과 방법론, 새로운 개념의 등장 가능성을 꾸준히 탐구할 필요가 있다. 본 과제에서는 새로운 직관(insight)을 담아내고 이를 정량화할 수 있는 새로운 물리량을 찾는 것을 목표로 하였다. 특별히 초기에는 다음의 두 가지 구체적인 아이디어를 검증하고 발전시키려 하였다.

(a) 유효 축퇴 (effective degeneracy)

이 새로운 물리량은 복잡한 전자구조를 갖는 다-오비탈 (multi-orbital) 강상관 전자계 (strongly correlated electron systems)에서의 도체-부도체 상전이 (metal-insulator transition) 현상을 이해하기 위한 것이다. 엔트로피 개념에서 힌트를 얻어 일반적인 축퇴 (degeneracy) 개념에 전자구조 정보를 반영하는 방식으로 ‘(가칭) 유효 축퇴’를 정의하고자 하였다. 이를 통해 하나의 숫자로서 페르미-준위에 있는 양자역학적 상태 밀도 (density of states), 전도성에 관여하는 밴드의 개수, 그리고 이들의 상대적 에너지 레벨을 모두 담아내며, 동시에 상전이와 관련된 정보는 가중치를 얻는다.

이 아이디어는 코드화 작업을 거쳐 몇몇 대표적인 사례들을 통해 검증을 마친 후 투고되었으며 2018년 10월 Physical Review B에 출판되었다. 이 과정에서 수차례 국내 관련 분야 전문가들을 초청하여 의견을 듣고 토론하는 기회를 가졌으며, 학술 대회를 통해서도 발표되었다.

(b) 오비탈-하이젠베르크 행렬 (orbital Heisenberg matrix)

하이젠베르크 상수 (Heisenberg constant)는 일반적으로 자성을 띠는 물질을 연구할 때 모멘트 간 상호작용 세기를 표현하기 위해 널리 사용된다. 이 물리량은 실제 물질에 있는 다양한 양자역학적 상호작용을 현상론적 차원에서 표현하

는 것이다. 그러나 복잡한 자성을 띠는 물질계가 꾸준히 등장하고 있고 또한 자성이 초전도성 등 다른 물성에 미치는 영향이 중요한 화두가 되면서, 간단한 모델에 기반하여 쉽게 이해될 수 없는 현상들이 보고되고 있다. 본 연구에서는 이러한 문제의식에서 출발하여 통상적인 하이젠베르크 상수에 오비탈-분해능 (orbital resolution)과 같은 새로운 정보를 동시에 담아내는 새로운 물리량의 가능성을 탐색하고자 하였다. 이 경우 하이젠베르크 상수는 오비탈 별로 분해되어 행렬의 형태로 정의되며 실공간 (real space)과 모멘텀 공간 (momentum k-space)을 오갈 수 있다. 이는 기존에 연구되던 자성 물질들, 특별히 다-오비탈 (multi-orbital) 자성 연구에 크게 기여할 수 있을 것으로 기대하였다.

이 연구 역시 코드와 과정을 거쳐 물성 연구에 활발히 사용되고 있다. 현재로서는 오비탈 행렬만이 갖는 물리적 의미에 대한 이해가 더 이루어질 필요가 있고, 특별히 이 정보가 두드러지게 중요해지는 중요한 사례를 찾기 위한 노력이 여전히 필요해 보인다. 그러나 오비탈 정보를 모두 합하여 얻는 숫자는 전통적인 의미의 하이젠베르크 상수로 소급된다는 점은 이를 실제 물성연구에 적용할 때 일종의 안전 장치가 되고 있는 상황이다. 따라서 다양한 방법론과 코드 자체는 관련 물성 연구에 활발히 응용되고 있다. 또한 이 방법론의 확장 연구 역시 시도하고 있다.

이 방법론 자체를 제시하는 논문은 2018년 Physical Review B를 통해 발표되었으며, 이를 응용하여 세 편의 물성 연구 논문을 발표하였다. 두 편은 Physical Review B에 출판되었으며 한 편은 Physical Review Letters에서 심사 중에 있다. 또한 관련 내용은 다수의 국내 외 학회에서 발표되었으며, 이 가운데에는 동경대가 주관한 국제 워크샵에서의 초청발표도 포함된다.

1-2 해당 연도 추진 실적

본래 계획이 첫 5년 기간 동안 위의 두 가지 아이디어를 정립하고 그 가능성을 확인하며, 물리적으로 의미있는 것으로 판단되는 경우 그 확장 가능성 등을 탐색하는 것이었음을 생각할 때, 첫 해에는 이 목표를 조기 달성한 것으로 평가한다. 이는 부분적으로 최초 아이디어를 검증하는 과정을 최소화하는 대신 논문 투고와 그 심사 과정을 통해 해외 학자들의 의견을 들어보고자 한 전략에 기인하는 면이 있다. 그런데 생각보다 학자들의 반응이 호의적이었으며 이는 우리의 본래 아이디어가 상당히 의미있는 것으로 볼 여지가 많았다는 것을 증명해 준다고 본다. 동시에 남은 과제 기간은 이들의 확장과 응용에 초점을 맞출 수 있을

것으로 생각한다.

II. 기술개발결과

본 과제와 관련하여 산출된 주요 연구 결과는 주로 학술 논문을 통해 확인되며 이론 연구의 특성 상 특허, 시제품 등은 없다. 이미 발표된 논문은 아래와 같다.

- (1) “Quantified degeneracy and metal-insulator transition in complex transition-metal oxides”

저널 및 세부 정보: Physical Review B 98, 165114 (2018), American Physical Society

저자: J.-H. Sim, S. Ryee, H. Lee, M. J. Han (본 과제 연구 책임자)

유효 축퇴 아이디어를 구현하고 이를 적용하여 그 의미와 유용성을 논함.

- (2) “Reliability and applicability of magnetic force linear response theory: Numerical parameters, predictability and orbital resolution”

저널 및 세부 정보: Physical Review B 97, 125132 (2018), American Physical Society

저자: H. Yoon, T.J. Kim, J.-H. Sim, S.W. Jang, T. Ozaki, M. J. Han (본 과제 연구 책임자)

오비탈 하이젠베르크 행렬 아이디어를 구현하고 그 의미와 유용성을 논함.

- (3) “Calculating magnetic interactions in organic electrides”

저널 및 세부 정보: Physical Review B 97, 214431 (2018), American Physical Society

저자: T.J. Kim, H. Yoon, M. J. Han (본 과제 연구 책임자)

하이젠베르크 상수 계산법을 유기 전자화물에 적용하여 그 유용성을 보임.

- (4) “Charge density functional plus U theory of LaMnO₃: Phase diagram, electronic structure and magnetic interaction”

저널 및 세부 정보: Physical Review B 98, 125126 (2018).

저자: S. W. Jang, S. Ryee, H. Yoon, M. J. Han (본 과제 연구 책임자)

하이젠베르크 상수 계산법을 LaMnO_3 에 적용하여 그 유용성을 보임.

III. 결론 및 차년도 계획

과제 수행 첫 해에는 목표를 조기 달성한 것으로 평가한다. 본래 아이디어가 상당히 의미있는 것으로 보이는 만큼 남은 기간은 이의 확장과 응용에 초점을 맞추는 것이 좋을 것으로 생각한다. 필요한 부분을 다듬고 보다 넓은 응용성을 보임으로써 학계에 유용한 통찰과 자료, 그리고 코드 등을 제공하여 학문 발전에 이바지 한다.

IV. 기타

특이 사항 없음