

Extraction of the Self-Energy from Simulated ARPES Data for High T_c Superconductors

Jin Mo Bok, Jae Hyun Yun, Han-Yong Choi*

SungKyunKwan University, Suwon, Korea

(Received 26 February 2009; revised 3 April 2009; accepted 7 April 2009)

고온초전도체 ARPES 시뮬레이션에서 자체에너지 추출

복진모, 윤재현, 최한용*

Abstract

For extraction of the self-energy from the angle resolved photoemission spectroscopy (ARPES) experiments for the cuprate superconductors, the momentum distribution curve (MDC) analysis is commonly used. There are two requirements for this method to work: the self-energy is momentum independent and the bare electron dispersion is known. Assuming that the first condition is satisfied in the cuprates, we checked the effects of the bare dispersion on the extracted self-energy. For this, we first generated the ARPES intensity using the tight-binding band of the B2212 by solving the Eliashberg equation. We then extracted the self-energy from the theoretically generated ARPES intensity using the linear and quadratic dispersions. By choosing the bare dispersion such that the Kramer-Kronig relation is best satisfied between the real and imaginary parts of the extracted self-energy, we confirmed that the quadratic dispersion is better for the bare electron band for Bi2212. The self-energy can be reasonably extracted from the ARPES experiments using the MDC analysis.

Keywords : ARPES, High T_c superconductor, Self-energy

I. 서론

ARPES 실험으로부터 자체에너지(self-energy)를 추출하는 방법은 간단하다. ARPES 실험의 운동량 분포 곡선(MDC, momentum distribution curve)를 로렌치안(Lorentzian) 함수로 맞추면(fitting) 된다.

하지만, 이렇게 얻은 자체에너지가 정답인지를 확인하기는 어렵다. 여기에는 중요한 문제가 두 가지 있는데, 한 가지는 원 분산식(bare dispersion)을 결정하는 문제이고 또 한 가지는 추출한 자체에너지가 크라머스-크로니히 관계(Kramers-Kronig relation)를 만족하는가의 문제이다. 정확한 원 분산식을 알면 정확한 자체에너지를 구해낼 수 있겠지만, 불행히도 우리는 원 분산식이 대충 어떠한 모양일 것이라 짐작할 뿐이다. 보통 일차 분산

*Corresponding author. Fax : +82 31 290 7092
e-mail : hychoi@skku.edu

식(linear dispersion)을 사용하지만, 이미 잘 알려져 있듯이 일차 분산식은 가장 단순한 가정일 뿐이다. 또한 자체에너지는 크라머스-크로니히 관계를 만족해야 하는데, 제한된 에너지 범위에서 추출한 자체에너지로는 이를 확인 하기 힘들다 [1, 2].

여러 논문이 이런 문제점을 해결하기 위해 여러 방법을 제시하였다 [2-4]. 하지만 복잡한 계산 과정은 원래의 정보를 왜곡할 가능성이 크다. 때문에 우리는 가장 단순한 방법인, 운동량 분포 곡선을 로렌치안 함수로 맞추어 자체에너지를 추출하는 방법을 선택하였다.

이 논문에서 우리는 불순물을 포함한 d-wave Eliashberg 방정식을 통해 얻은 자체에너지와 두 가지 분산식(일차 분산식과 꼭뭉음어림에 의한 분산식(tight binding approximation))를 이용하여 ARPES 스펙트럼을 만들고, 이렇게 얻은 ARPES 스펙트럼에서 다시 자체에너지를 추출할 것이다. 자체에너지를 추출할 때는 일차 분산식과 이차 분산식(quadratic dispersion)을 사용할 것인데, 이러한 과정을 통해 실제 실험에서 정확한 자체에너지를 추출할 수 있는 분산식은 무엇인지, 그리고 크라머스-크로니히 관계가 유용한지 확인해 볼 것이다.

II. 이론 및 계산

ARPES 실험에서 측정되는 강도(intensity)는 아래와 같이 쓸 수 있다.

$$I(\mathbf{k}, \omega) = M(\mathbf{k}, \nu) A(\mathbf{k}, \omega) f(\omega) + B(\omega) \quad (1)$$

여기서 $M(\mathbf{k}, \nu)$ 는 행렬원소(matrix element), $A(\mathbf{k}, \omega)$ 는 스펙트럼 함수(spectral function), $f(\omega)$ 는 페르미 함수(Fermi function) 이다. 그리고 마디(nodal) 방향에서 스펙트럼 함수는 식 (2)와 같이 주어진다 [1].

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{\text{Im}\Sigma(\omega)}{[\omega - \xi(\mathbf{k}) - \text{Re}\Sigma(\omega)]^2 + \text{Im}\Sigma(\omega)^2} \quad (2)$$

식 (2)에서 알 수 있듯이 ARPES 시뮬레이션을 하기 위해선 자체에너지와 원 분산식[$\xi(\mathbf{k})$] 이렇게 두 가지 값을 알고 있어야 한다. 여기서 $\text{Re}\Sigma(\omega)$ 와 $\text{Im}\Sigma(\omega)$ 는 각각 자체에너지의 실수 부분과 허수 부분이다.

ARPES 시뮬레이션에 앞서 필요한 자체에너지 [$\Sigma(\omega)$]를 계산하기 위해 사용한 d-wave Eliashberg 방정식은 아래와 같다.

$$\Sigma(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{f(\varepsilon) - n(-\varepsilon')}{\varepsilon + \varepsilon' - \omega - i\delta} \langle \text{Re} g_0(\omega) \rangle_{\phi} F_0^+(\varepsilon') + \Sigma_{imp}(\omega) \quad (3)$$

$$\Phi(\omega) = \Delta(\omega) Z(\omega) = -\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{f(\varepsilon) - n(-\varepsilon')}{\varepsilon + \varepsilon' - \omega - i\delta} \langle \text{Re} g_1(\omega) \rangle_{\phi} F_2^-(\varepsilon') \quad (4)$$

여기서

$$g_0(\omega) \equiv \left\langle \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega) \cos^2(2\phi)}} \right\rangle_{\phi} \text{ 이고}$$

$$g_1(\omega) \equiv \left\langle \frac{\Delta(\omega) \cos^2(2\phi)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega) \cos^2(2\phi)}} \right\rangle_{\phi} \text{ 이다.}$$

$\Sigma_{imp}(\omega)$ 는 불순물에 의한 자체에너지로 아래와 같은 식으로 주어진다.

$$\Sigma_{imp}(\omega) = -\frac{\Gamma}{g_0^2 + c^2} [ig_0(\omega) - c\tau_3] \quad (5)$$

여기서 $\Gamma = n_{imp} / \pi N_F$, $c = (1 / \pi N_F V_{imp})$ 이고 n_{imp} 와 V_{imp} 는 각각 불순물 농도와 불순물 퍼텐셜이다. 이 시뮬레이션에서는 불순물 퍼텐셜을 무한대로 두었다 [5].

Fig. 1은 자체에너지를 계산하기 위해 사용된 Eliashberg 함수 $F_0^+(\varepsilon')$ 와 $F_2^-(\varepsilon')$, 그리고 계산된 자체에너지와 갭 함수(gap function)를 나타낸 것

이다.

다음으로 고려해야 할 것은 원 분산식이다. 이 논문에서는 두 가지 경우를 고려하였는데, 한 가지는 단순한 일차 분산식, 이고 다른 한 가지는 락뭉음어림에 의한 분산식이다.

$$\xi(k_x, k_y) = -2t(\cos ak_x + \cos ak_y) + 4t'\cos ak_x \cos ak_y - 2t''(\cos 2ak_x + \cos 2ak_y) - \mu \quad (6)$$

식 (6)는 락뭉음어림에 의한 분산식이고 각 매개변수는 $t = 0.40$, $t' = 0.090$, $t'' = 0.045$, $\mu = 0.43$ 로 두었다 [6].

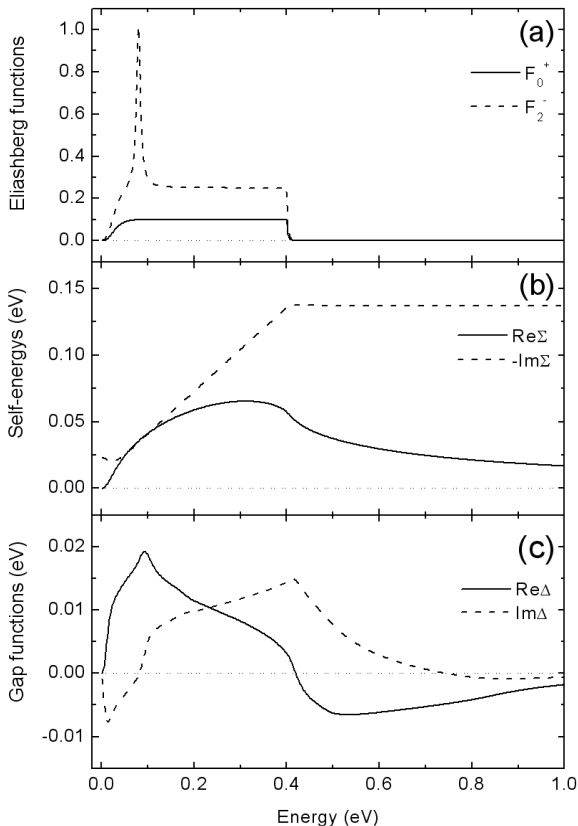


Fig. 1. (a) Input Eliashberg functions. (b)(c) calculated self-energies and gap functions.

Eliashberg 방정식을 통해 얻은 자체에너지를 가지고 일차 분산식과 락뭉음어림에 의한 분산식

두 가지 경우의 ARPES 스펙트럼을 만들어 내었다. 이 때 식 (1)에 나오는 행렬원소와 페르미 함수는 무시하였다.

만들어진 ARPES 스펙트럼으로부터 자체에너지의 추출은 MDC를 $-0.6 \sim 0.0$ eV 범위에서 로렌치안 함수로 맞추었다. 이 때 사용한 식의 형태는 식 (2)와 같다. 원 분산식은 일차 분산식(식 (7))과 이차 분산식(식 (8))을 사용하였다 [3].

$$\xi(k) = v_F(k - k_F) \quad (7)$$

$$\xi(k) = \omega_0 \left(1 - \frac{k^2}{k_F^2}\right), v_F = -2\omega_0 / k_F \quad (8)$$

MDC를 로렌치안 함수로 맞추는 때에는 자체에너지의 실수 부분과 허수 부분이 서로 크라머스-크로니히 관계를 만족하도록 페르미 속도 v_F 를 조정하였다.

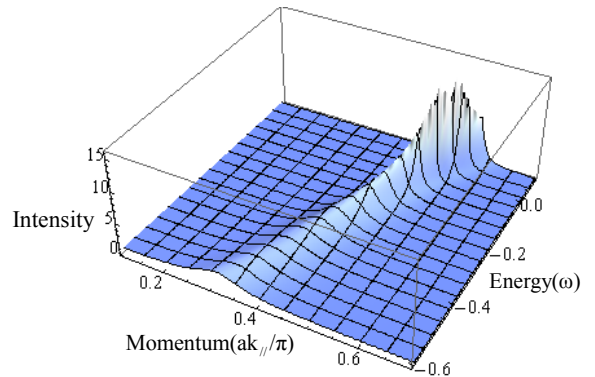


Fig. 2. Generated ARPES intensity with tight-binding bare dispersion.

III. 결과

MDC를 분석할 때 가장 중요한 것은 적절한 원 분산식을 가정하는 것이다. 실제 실험에서 그 시료의 정확한 원 분산식은 알 수 없기 때문에 정확한 원 분산식에 가까운 것을 가정해야 한다.

실제 실험에서 원 분산식은 락뭉음어림에 의한 원 분산식과 잘 맞는다고 알려져있다 [6]. 그러나

MDC를 로렌치안 함수로 맞출 때 꼭뭉음어림에 의한 원 분산식을 사용하려면 4개 이상의 매개변수를 도입해야 하는 어려움이 있다.

Fig. 3은 일차, 이차, 꼭뭉음어림에 의한 원분산식을 비교해 본 것이다. 그림에서 알 수 있듯이 실제 실험에서 측정되는 0이하의 에너지 영역에서는 일차 분산식보다 이차 분산식이 꼭뭉음어림에 의한 분산식과 잘 맞음을 알 수 있다. 즉, 실제 실험 데이터를 로렌치안 함수로 맞출 때에 한 개의 매개변수만을 가지는 이차 분산식을 사용하면 꼭뭉음어림에 의한 분산식을 사용한 것만큼 정확한 자체에너지를 추출할 수 있을 거라 예측할 수 있다.

단, 꼭뭉음어림에서 계산된 v_F 는 3.28eV인데, 이차 분산식의 v_F 를 3.5eV로 두어야 -0.6eV ~ 0.0eV영역에서 두 원 분산식이 잘 일치했다.

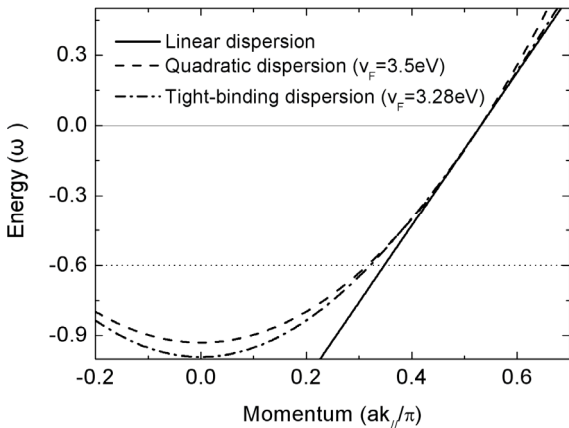


Fig. 3. Three bare dispersions. Linear, quadratic and tight-binding bare dispersions.

이론적으로 자체에너지의 실수부분과 허수부분이 크라머스-크로니히 관계를 만족해야 한다. 하지만 실험에서 추출한 자체에너지는 이론에서처럼 무한대 영역의 에너지범위를 가지지 못하기 때문에 크라머스-크로니히 관계를 잘 만족하지 못한다 [2].

크라머스-크로니히 관계가 만족함을 확인하기 위해 추출된 자체에너지의 허수부분($\text{Im}\Sigma_{fit}$)을 크라머스-크로니히 변환을 하여($\text{Re}\Sigma_{kk}$) 추출된 자

체에너지의 실수부분과 비교하였다($\text{Re}\Sigma_{fit}$). 이때 추출된 $\text{Im}\Sigma_{fit}$ 는 -0.6~0.4eV범위에서 거의 일정한 값을 가지는데, -0.6eV 이후의 값을 이와 같은 값으로 꼬리(tail)을 붙일 수 있다.(Fig. 4) 이렇게 하면 제한된 범위 보다 많은 데이터를 가질 수 있다 [3]. 그리고 이러한 과정이 크라머스-크로니히 관계를 더 잘 만족시켜줄 수 있을 것이라 기대한다.

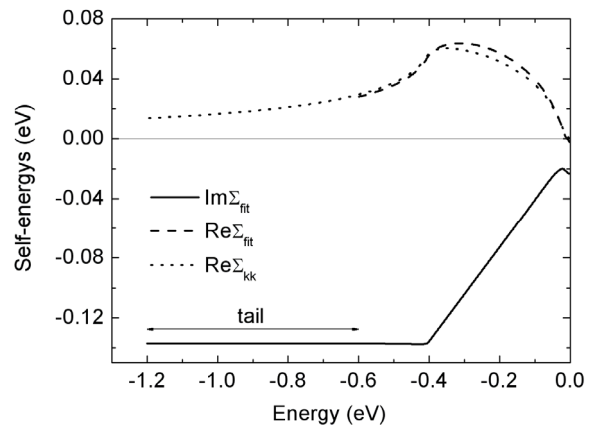


Fig. 4. Tail of $\text{Im}\Sigma_{fit}$. We expect tail can satisfy KK relation.

일차 분산식을 사용한 ARPES 시뮬레이션에서 같은 일차 분산식을 사용하여 자체에너지를 추출한 경우, (Fig. 5) 자체에너지의 크라머스-크로니히 관계는 잘 맞는다. 단 처음에 넣은 자체에너지(Σ_{input})의 범위가 -1.2~0.0eV일 때, 자체에너지를 -0.6~0.0eV에서만 추출하면 크라머스-크로니히 관계가 잘 맞지 않는데 이는 자체에너지의 추출을 모든 범위에서 하지 않았기 때문에 발생하였다. 즉 우리가 정확한 원 분산식을 사용한다 해도 제한된 데이터에 의해, 크라머스-크로니히 관계는 만족하지 않을 수도 있다.

꼭뭉음어림에 의한 분산식을 사용한 ARPES 시뮬레이션에서 이차 분산식을 이용하여 자체에너지를 추출한 경우, 앞에서 보인 것처럼 v_F 를 3.5eV로 두어도 자체에너지의 크라머스-크로니히 관계는 정확하게 만족시키기는 어려웠다. 그러나 v_F 를 3.2~3.7eV까지 변화 시켜본 결과 v_F 를

3.5eV로 두었을 때의 결과가 Σ_{input} 과 비교적 잘 일치했고, 크라머스-크로니히 관계 또한 비교적 잘 일치했다.

또한 여기서도 마찬가지로 $\text{Im}\Sigma_{fit}$ 에 꼬리를 붙인 경우 크라머스-크로니히 관계가 더 잘 만족하였다.

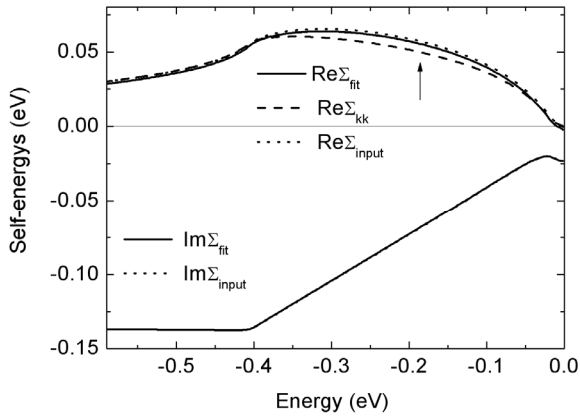


Fig. 5. Extracted self-energy using linear dispersion from simulated ARPES with linear dispersion.

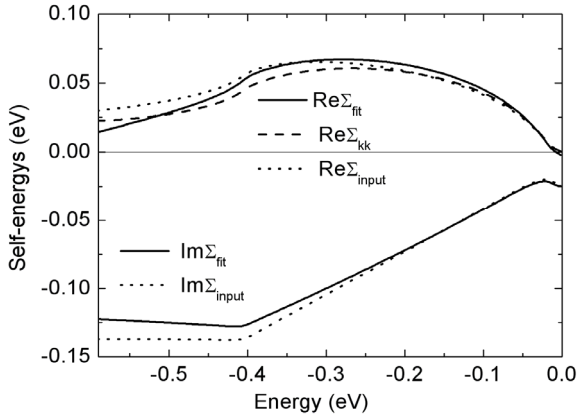


Fig. 6. Extracted self-energy using quadratic bare dispersion from simulated ARPES with tight-binding bare dispersion. ($v_F = 3.5eV$)

IV. 결론

지금까지 ARPES 시뮬레이션을 통해 자체에너지를 추출해 보았다. 여기서 우리는 정확한 자체에너지 추출에 몇 가지 힌트를 얻을 수 있었다. 우선 실제 실험에서 원 분산식은 꺾뚱음어림과 잘 일치하기 때문에 그것에 가까우면서도 간단한 이차 분산식을 사용하는 것이 좋다. 그리고, 크라머스-크로니히 관계를 잘 만족시킬 때 추출한 자체에너지와 Eliashberg 방정식에서 얻은 자체에너지가 잘 맞는 것으로 보아 크라머스-크로니히 관계는 추출한 자체에너지를 확인하기에 유효하다.

References

- [1] A. Damascelli, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, Rev. Mod. Phys. 75, 473 (2003).
- [2] W. Meevasana, F. Baumberger, K. Tanaka, F. Schmitt, W. R. Dunkel, D. H. Lu, S. -K. Mo, H. Eisaki, Z. -X. Shen, Phys. Rev. B 77, 104506 (2008).
- [3] A. A. Kordyuk, S. V. Borisenko, A. Koitzsch, J. Fink, M. Knupfer, H. Berger, Phys. Rev. B 71, 214513 (2005).
- [4] M. R. Norman, H. Ding, H. Fretwell, M. Randeria, J. C. Campuzano, Phys. Rev. B 60, 7585 (1999).
- [5] Han-Yong Choi, Synthetic Metals 141, 203-209 (2004).
- [6] A. A. Kordyuk, S. V. Borisenko, M. Knupfer, J. Fink, Phys. Rev. B 67, 064504 (2003).