

Eliashberg Calculation of the Momentum-Resolved Self-Energy for the Cuprate Superconductors Induced by the Spin Fluctuations

Seung Hwan Hong, Han-Yong Choi*

Department of physics, Sungkyunkwan University, Suwon, Korea

(Received 6 April 2012; accepted 11 April 2012)

구리 산화물 계열 초전도체에서의 스핀 요동에 의한 자체 에너지의 엘리야시버그 계산

홍승환, 최한용*

Abstract

We solve the momentum resolved d-wave Eliashberg equation employing the magnetic excitation spectrum from the inelastic neutron scattering on the LSCO superconductors reported by Vignolle et al. The magnetic excitation spectrum exhibits 2 peaks: a sharp incommensurate peak at 18 meV at momentum $(\pi, \pi \pm \delta)$ and $(\pi \pm \delta, \pi)$ and another broad peak near 40~70 meV at momentum (π, π) . Above 70 meV, the magnetic excitation spectrum has a long tail that is shaped into a circle centered at (π, π) with δ . The sign of the real part of the self-energy is determined by the momentum position of the peaks of the magnetic excitation spectrum and bare dispersion. We will discuss the effects of the each component of the magnetic excitation spectrum on the self-energy, the pairing self-energy.

Keywords : High T_c superconductor, Self-energy, Cuprate

I. 서론

구리 산화물 계열 고온 초전도체가 발견 [1] 된지도 이미 수십년이 지났으나 여전히 초전도의 매커니즘은 밝혀지지 않았다. 구리 산화물 계열 초전도체에는 BSCCO, LSCO, YBCO 등이 있는데 이들은 준 2차원 구조의 초전도 층이 있지만 물질에 따라 초전도 층이 단층인 경우

도 있고 여러 층인 경우도 있다. 물질마다 초전도 임계 온도나 구조는 다르지만 서로 비슷한 상도표를 보이고 있는 공통점이 있다. 전통적인 초전도체와 유사하게 어떠한 보존(boson)이 구리 산화물 계열 초전도체의 초전도를 매개할 것이라 추측하고 있으나 그 보존이 전통적인 경우처럼 포논인지, 아니면 스핀 요동 (spin fluctuation)인지, 아니면 또다른 보존인지에 대해서는 아직 정확히 밝혀진 바가 없다. 다만 초전도 틈(superconducting gap)이 d-wave 대칭성과 높은 상전이 온도를 가진다는 점으로부

*Corresponding author. Fax : +82 31 290 7371

e-mail : hychoi@skku.edu

터 스핀 요동이 고온 초전도를 매개하는 유력한 후보로 거론되고 있다. ARPES(angle-resolved photoemission spectroscopy) 실험으로는 초전도체 내의 전자의 분산을 측정하여 각도에 따른 초전도 틈을 확인할 수 있다 [2, 3, 4]. 따라서 고온 초전도체 연구에서 중요한 실험 중 한가지이다. 우리 연구의 목적은 실험적으로 측정된 스핀 요동으로부터 초전도 틈을 직접 계산하여 실험 결과와 비교하는 것이다. 또한 ARPES 실험으로부터 자체 에너지를 추출하여 상호작용을 매개하는 보존의 스펙트럼을 구하는 경우도 있다 [5]. 전자와 스핀 들뜸의 상호작용에 의한 자체 에너지와 짝짓기 자체 에너지는 다음 장에서 소개할 Eliashberg 방정식을 통하여 구할 수 있다. Eliashberg 방정식의 모델 계산은 고온 초전도체 연구에서 많이 사용되고 있으나 [6, 7, 8] 우리는 Vignolle et al. [9]이 LSCO에 대한 비탄성 중성자 산란실험으로부터 얻은 자기 여기 스펙트럼을 고려하였다. 실험적으로 측정된 스핀 요동의 스펙트럼에는 두 개의 봉우리(peak)가 있다. 첫번째는 운동량 공간에 대해서 이안맞는(incommensurate) 봉우리로 $\omega_b^m = 0.018$ eV 에서 나타나고, 두번째 봉우리는 운동량에 대하여 이맞는(commensurate) 봉우리로 $\omega_b^c = 0.045$ eV 근방에서 나타난다. 그리고 두번째 봉우리 이후의 에너지 영역에서는 운동량에 대하여 이안맞는 배경(background)이 나타난다. 이러한 스핀 들뜸은 에너지와 운동량에 대해서는 모래시계 구조를 보이고 있다. 구리 산화물계 고온 초전도체라도 봉우리의 위치나 유무는 물질에 따라서 다르다 [10, 11]. 우리는 이러한 스핀 요동이 전자와 상호작용을 할 경우 전자의 분산식이 어떻게 바뀌는지, 그리고 초전도 갭이 운동량 공간에 대하여 어떠한 구조를 나타내는지에 대하여 연구하였다

II. 이론 및 계산

전자와 스핀 요동의 상호작용에 의한 자체 에너지는 아래와 같은 Eliashberg 방정식을 통하여 구할 수 있다.

$$\begin{aligned}\tilde{\Sigma}(\vec{k}, \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{f(\varepsilon) + n(-\varepsilon')}{\varepsilon + \varepsilon' - \omega - i\delta} \sum_{k'} A_S(\vec{k}', \varepsilon) \alpha^2 F_{sp}(\vec{k} - \vec{k}', \varepsilon') \\ X(\vec{k}, \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{f(\varepsilon) + n(-\varepsilon')}{\varepsilon + \varepsilon' - \omega - i\delta} \sum_{k'} A_X(\vec{k}', \varepsilon) \alpha^2 F_{sp}(\vec{k} - \vec{k}', \varepsilon') \\ \phi(\vec{k}, \omega) &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{f(\varepsilon) + n(-\varepsilon')}{\varepsilon + \varepsilon' - \omega - i\delta} \sum_{k'} A_\phi(\vec{k}', \varepsilon) \alpha^2 F_{sp}(\vec{k} - \vec{k}', \varepsilon')\end{aligned}\quad (1)$$

여기서 $\Sigma(\vec{k}, \omega) = \tilde{\Sigma}(\vec{k}, \omega) + X(\vec{k}, \omega)$ 는 자체 에너지(self-energy), X 는 준 입자 분포의 재규격화(renormalization of the quasi-particle dispersion), ϕ 는 짝짓기 자체 에너지(pairing self-energy), $f(\omega)$ 는 페르미 함수(Fermi function), $n(\omega)$ 는 보즈 함수(Bose function)이다. 전자의 스펙트럼 함수는 대칭성에 따라서 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{aligned}A_S(\vec{k}, \varepsilon) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{W}{W^2 - Y^2 - \phi^2} = A_S(\vec{k}, -\varepsilon), \\ A_X(\vec{k}, \varepsilon) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{Y}{W^2 - Y^2 - \phi^2} = -A_X(\vec{k}, -\varepsilon), \\ A_\phi(\vec{k}, \varepsilon) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{\phi}{W^2 - Y^2 - \phi^2} = -A_\phi(\vec{k}, -\varepsilon), \\ A(\vec{k}, \varepsilon) &= A_S(\vec{k}, \varepsilon) + A_X(\vec{k}, \varepsilon).\end{aligned}\quad (2)$$

여기서 $W = \omega - \Sigma$, $Y = \xi + X$ 이고 ξ 는 상호작용이 없을 시의 전자의 분산이다. 자체 에너지의 실수부는 분산식이 상호작용이 없을 경우와 비교하여 얼마나 변하는가를 의미하고 허수부는 수명(life time)을 의미한다. 짝짓기 자체 에너지는 초전도의 전자쌍과 연관되어 있다. 재규격화 함수(renormalization function)은 자체 에너지로부터 다음과 같이 주어진다.

$$Z(\vec{k}, \omega) = 1 - \frac{\Sigma(\vec{k}, \omega)}{\omega}\quad (3)$$

초전도 틈(gap)은 다음과 같다.

$$\Delta(\vec{k}, \omega) = \frac{\phi(\vec{k}, \omega)}{Z(\vec{k}, \omega)}\quad (4)$$

$\alpha^2 F_{sp}(\varepsilon')$ 는 스핀 요동의 스펙트럼 함수로 에너지에 대하여 반대칭이다.

식 (1)에서 온도가 0 K인 경우 각각의 자체

에너지의 허수부는 다음과 같이 적을 수 있다.

$$\begin{aligned}\tilde{\Sigma}_2(\vec{k}, \omega) &= -\int_0^\infty d\varepsilon' \sum_{\vec{k}'} [\theta(\omega - \varepsilon') A_3(\vec{k}', \omega - \varepsilon') \\ &\quad + \theta(-\omega - \varepsilon') A_3(\vec{k}', -\omega - \varepsilon')] \alpha^2 F_{\text{sp}}(\vec{k} - \vec{k}', \varepsilon') \\ X_2(\vec{k}, \omega) &= -\int_0^\infty d\varepsilon' \sum_{\vec{k}'} [\theta(\omega - \varepsilon') A_X(\vec{k}', \omega - \varepsilon') \\ &\quad + \theta(-\omega - \varepsilon') A_X(\vec{k}', -\omega - \varepsilon')] \alpha^2 F_{\text{sp}}(\vec{k} - \vec{k}', \varepsilon') \\ \phi_2(\vec{k}, \omega) &= \int_0^\infty d\varepsilon' \sum_{\vec{k}'} [\theta(\omega - \varepsilon') A_\phi(\vec{k}', \omega - \varepsilon') \\ &\quad + \theta(-\omega - \varepsilon') A_\phi(\vec{k}', -\omega - \varepsilon')] \alpha^2 F_{\text{sp}}(\vec{k} - \vec{k}', \varepsilon')\end{aligned}\quad (5)$$

각각의 실수부는 허수부로부터 크라머스-크로니히 관계(Kramers - Kronig relation)를 이용하여 구할 수 있다.

우리는 식 (2)와 (3)을 수치적인 반복(numerical iteration)을 통하여 자체 모순이 없게(self-consistent) 풀었다.

III. 결과

우리는 스핀과 상호작용이 없을 때의 전자의 분산식으로 다음과 같은 팍뭉음 분산식(tight binding dispersion)을 사용하였다.

$$\begin{aligned}\xi(k_x, k_y) &= -2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) + 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a) \\ &\quad - 2t''(\cos(2k_x a) + \cos(2k_y a)) - \mu\end{aligned}\quad (6)$$

이 때 각각의 팍뭉음 매개변수로는 LSCO에 해당되는 $t = 0.42$ eV, $t' = 0.073$ eV, $t'' = 0.036$ eV, $\mu = -0.32$ eV를 사용하였다. 자기 들뜸 스펙트럼은 $\omega_c = 0.4$ eV에서 절단(cut-off)하였다.

식 (5)으로부터 얻은 자체 에너지의 허수부(Fig. 1. bottom)는 각도에 따라 다른 모습을 나타낸다. 이때 0도는 anti-nodal 방향이고 45도는 nodal 방향이다. $-\Sigma_2$ 는 45도 방향에서는 -0.03 eV 부근에서 작은 언덕이 나타나고 그 후에 거의 선형으로 값이 증가하다가 -0.4 eV 근방에서부터 값이 감쇠(decay)한다. 이러한 $-\Sigma_2$ 의 선형적인 증가는 스핀 들뜸의 높은 에너지의 이

안맞는 배경에 의한 것으로 스핀 들뜸 스펙트럼이 ω_c 에서 절단되었기 때문에 이후에는 더 이상 값이 증가하지 않는다. 또한 이 효과를 가져오는 스핀 들뜸의 에너지 영역은 운동량에 대하여 상당히 폭이 넓기 때문에 45도 뿐만이 아니라 전 각도에 대해서 비슷한 영향을 미친다. 두번째로 고려할 것은 $-0.03 \sim -0.04$ eV에서 나타나는 봉우리나 어깨 구조이다.

식 (3)에서부터 자기 들뜸의 특정 에너지 영역은 자신보다 절대값이 큰 에너지 영역의 자체 에너지에만 영향을 줄 수 있음을 알 수 있다. 따라서 $-0.03 \sim -0.04$ eV 정도의 에너지 영역에 나타난 봉우리는 자기 들뜸의 낮은 에너지의 이안맞는 영역에 의해 나타난 것이다. 봉우리를 각도에 따라 비교해보면 각도에 따라 단조롭게 증가하지 않음을 볼 수 있다. 이것은 자기 들뜸의 낮은 에너지의 이안맞는 영역이 운동량에 대해 날카롭기 때문이다.

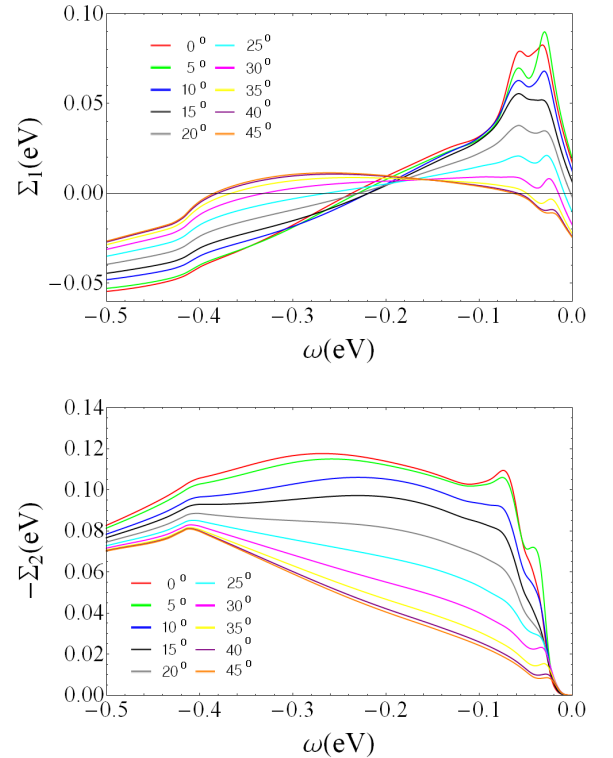


Fig. 1. The real part(top) and the imaginary part(bottom) of the self-energy at the Fermi surface. Each color is different angle. The origin of the angle is anti-nodal direction.

$-\Sigma_2$ 의 -0.07 eV부근에 나타난 봉우리와 더 낮은 에너지에서 나타난 언덕 구조는 자기 들뜸의 이맞는 영역에 의해서 나타난 것이다. 이 구조는 단조로운 각도 의존성을 보이는데 45도에서는 이러한 구조가 잘 나타나지 않고 0도에서 가장 잘 나타난다.

자체 에너지의 허수부에 미치는 각각의 에너지 영역에서의 자기 들뜸 스펙트럼은 자체 에너지의 실수부에도 비슷한 각도 의존성을 만들어준다(Fig. 1. Top). 먼저 45도에서의 자체 에너지의 실수부(Σ_1)는 높은 에너지의 자기 들뜸의 영향에 의해 ω_c 부근에서 0점 교차(zero-crossing)가 나타난다. 그리고 점점 각도가 감소할수록 자기 들뜸의 이맞는 영역의 효과가 커지면서 0점 교차 에너지는 증가한다. 그러나 각도가 10도 정도로 줄어든 후에는 각도가 감소함에 따라 오히려 0점 교차 에너지는 감소한다. 이러한 각도 의존성의 변화는 자기 들뜸의 낮은 에너지의 이안맞는 영역의 효과이다.

Fig. 2는 전자와 자기 들뜸의 상호작용으로 인하여 유도된 짝짓기 자체 에너지이다. 짝짓기 자체 에너지는 d-wave의 대칭성을 가진다. 짝짓기 자체 에너지의 허수부는 두개의 봉우리를 가지고 있다. 자체 에너지와 마찬가지로 낮은 에너지의 봉우리는 자기 들뜸의 낮은 에너지의 이안맞는 영역에 의한 효과이고 높은 에너지의 봉우리는 자기 들뜸의 이맞는 영역에 의한 효과이다. 자기 들뜸의 높은 에너지 영역의 이안맞는 배경 영역의 효과는 d-wave 대칭과는 맞지 않아 상쇄된다. 허수부의 높은 에너지의 봉우리는 각도에 따라 단조롭게 감소하는데 비해 낮은 에너지의 봉우리는 각도 의존성이 단조롭지 않다. 특히 실수부나 허수부 모두 5도의 값이 0도에서의 값보다 크게 나타난다.

이러한 각도 의존성은 에너지 틈에서도 나타난다. (Fig. 3.) 우리가 계산을 통하여 구한 에너지 틈의 각도 의존성은 단조로운 코사인 형태의 d-wave 대칭성과는 차이가 있다. 코사인 형태에 7도 부근에서 언덕을 더해준 모양으로 나타난다. 이때 코사인 형태의 꺾을 만드는 것은 자기 들뜸의 이맞는 영역이다. 언덕이 나타난 각도는 이안맞는 hot-spot 부근이다. 7도 부근의 언덕은 자기 들뜸의 낮은 에너지의 이안맞는 영역에 의해서 생겨난다.

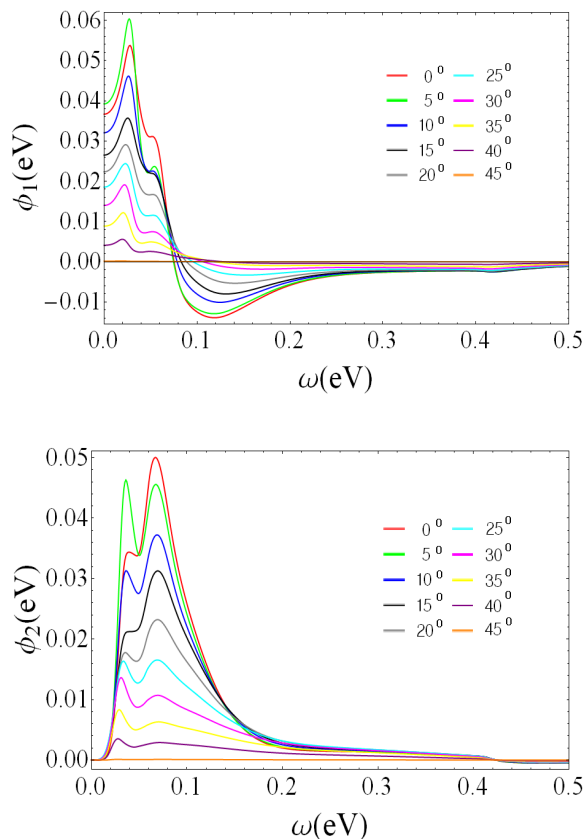


Fig. 2. The real part(top) and the imaginary part(bottom) of the pairing self-energy at the Fermi surface. All parameters are same with Fig. 1.

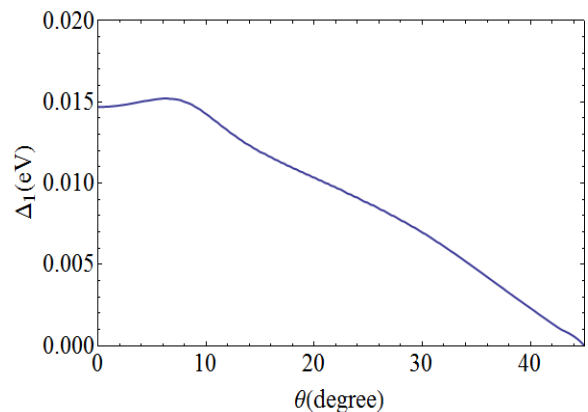


Fig. 3. The real part of the superconducting gap at the Fermi surface. Where $\Delta(\theta) = \Delta(\theta, \omega)|_{\omega=\Delta}$. All parameters are same with Fig. 1.

IV. 결론

본 연구에서 우리는 전자-스핀 들뜸의 상호 작용에 의한 자체 에너지와 짝짓기 자체 에너지를 계산하였다. 실험으로부터 측정된 스핀 들뜸 스펙트럼은 두 개의 봉우리를 가지고 있다. 각각의 영역이 자체 에너지에 미치는 영향은 다음과 같다. 첫째로 자기 들뜸의 낮은 에너지의 이안맞는 봉우리는 자체 에너지나 짝짓기 자체 에너지에 단조롭지 않은 운동량 의존성을 만들어준다. 이러한 의존성을 만드는 이유는 낮은 에너지의 이안맞는 봉우리의 운동량 의존성이 비교적 날카롭기 때문이다. 둘째로 자기 들뜸 에너지의 이안맞는 영역이 자체 에너지와 짝짓기 자체 에너지에 미치는 효과의 크기는 각도에 따라 단조롭게 감소한다. 이러한 점은 **d-wave** 대칭성과 일치한다. 자기 들뜸의 두 봉우리 이후의 높은 에너지 영역의 이안맞는 배경은 운동량 의존성이 넓기 때문에 이 영역에 의한 자체 에너지는 각도 의존성이 크지 않다. 또한 이 영역은 **d-wave** 대칭성을 주기

어렵기 때문에 짝짓기 자체 에너지에 미치는 영향은 상쇄된다.

References

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Mueller, *Z. Phys. B* 64, 189-193 (1986).
- [2] T. Yoshida et al., *Phys. Rev. B* 74, 224510 (2006).
- [3] X. J. Zhou et al., *Phys. Rev. Lett.* 92, 187001 (2004).
- [4] J. M. Bok et al., *Phys. Rev. B* 81, 174516 (2010).
- [5] K. Terashima et al., *Phys. Rev. Lett* 99, 017003 (2007).
- [6] A. W. Sandvik et al., *Phys. Rev. B* 69, 094534 (2004).
- [7] G. Levy De Castro et al., *Phys. Rev Lett.* 101, 267004 (2008).
- [8] M. Eschrig et al., *Phys. Rev. B.* 67, 144503 (2003).
- [9] B. Vignolle et al., *Nature Physics* 3, 163 (2007).
- [10] T. Dahm et al., *Nature Physics* 3, 163 (2007).
- [11] E. Schachinger., *Phys. Rev. B* 77, 094524 (2008).