

Особенности фононной моды E_{2g} в соединении MgB_2

В. В. Ржевский

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики низких температур и сверхпроводимости. 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.
E-mail: rzhevski@mig.phys.msu.ru

Получена модельная оценка собственных значений энергии фононной моды E_{2g} колебаний ионов в плоскости атомов бора. Показано, что ангармонический вклад в энергию E_{2g} монотонно растет с увеличением $z = A_4/A_2^2$, где A_4 — ангармонический коэффициент 4-го порядка, A_2 — гармоническая константа. Результаты согласуются с оценкой по методу Хартри–Фока, вместе с тем расхождение с данными рамановской спектроскопии указывает на необходимость более детального учета влияния электрон-фононного взаимодействия на энергию E_{2g} .

PACS: 74.70.Ad.

Ключевые слова: бинарное соединение MgB_2 , фононные моды, электрон-фононное взаимодействие, ангармонизм 4-го порядка.

Статья поступила 24.09.2008, подписана в печать 16.10.2008.

Известно, что фононы в плоскости атомов бора вблизи центра зоны Γ (с симметрией E_{2g}) обладают заметной ангармоничностью и сильно взаимодействуют с электронами частично заполненной квазидвумерной σ зоны проводимости в окрестности уровня Ферми, что принято считать причиной высокой сверхпроводящей критической температуры $T_c \approx 40$ К в MgB_2 [1, 2]. Вместе с тем в вопросе происхождения и величины ангармоничности моды E_{2g} остается много неясностей, которые являются предметом интенсивных исследований. В частности, особый интерес вызывает роль E_{2g} фононов в снятии вырождения в точке Γ , которое приводит к образованию двух подзон σ вместо одной прежней [3]; имеются трудности в объяснении заметного отличия в энергии, примерно на 15%, расчетного и наблюдаемого пика интенсивности моды E_{2g} в рамановском спектре [4].

Характер смещений ионов бора вблизи центра зоны Γ , отвечающих вырожденным фононным модам $E_{2g}(a)$, $E_{2g}(b)$, изображен на рис. 1. В работе [2] было найдено, что потенциальная яма для колебаний в случае моды $E_{2g}(b)$ довольно точно соответствует потенциалу ангармонического осциллятора 4-го порядка. В настоящей работе получена модельная оценка величин собственных значений энергии фононной моды E_{2g} ангармонических колебаний ионов в плоскости атомов бора в соединении MgB_2 как функции отношения ангармони-

ческой константы 4-го порядка и квадрата гармонической постоянной $z = \frac{A_4}{A_2^2}$.

Воспользуемся известным приемом записи энергии фононных мод вблизи симметричных точек зоны Бриллюэна в виде энергии одиночного осциллятора, приходящейся на элементарную ячейку [2]. Тогда энергию стационарных состояний фононной моды E_{2g} , для которой расчеты из первых принципов [2, 5] в приближении «замороженных» фононов обнаруживают сильную ангармоничность 4-го порядка, можно оценить из условия, что характерный размер области, в которой может двигаться ион бора в плоскости атомов бора, содержит целое число n полуволен де Бройля [6]:

$$E_{2g}(u) = \frac{(n + \frac{1}{2})^2}{2Ma^2} \left(\frac{\hbar}{l}\right)^2 + A_2 a^2 l^2 + A_4 a^4 l^4, \quad (1)$$

где l — линейный размер области, в которой может двигаться ион бора в единицах постоянной решетки a атомов бора, M — масса ионов бора. Отметим, что здесь рассматривается $E_{2g}(b)$ (см. рис. 1), т.е. та из двух вырожденных мод E_{2g} , которую принято считать ответственной за сильное электрон-фононное взаимодействие с электронами σ -зоны и которая не содержит ангармоничности 3-го порядка [2, 3, 5]. Задача нахождения стационарных состояний сводится к минимизации выражения (1), что соответствует квантовомеханическому вариационному принципу. Основному состоянию отвечает $n = 0$. Кинетическая энергия основного состояния в (1) выбрана так, чтобы получалось точное выражение для энергии гармонического осциллятора¹. Действительно, минимизация (1) приводит к уравнению

$$\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 = \frac{2Ma^4}{\hbar^2} l^4 (A_2 + 2A_4 a^2 l^2). \quad (2)$$

Пренебрегая в (2) слагаемым с A_4 (чисто гармонический случай), находим l . Тогда уровни энергии E_{2g} (1) приобретают стандартный вид: $E_{2g_n} = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_0$, где $\omega_0 = \left(\frac{2A_2}{M}\right)^{1/2}$. При $A_4 \neq 0$ и условии, что первое слагаемое в скобках правой части (2) значительно превосходит

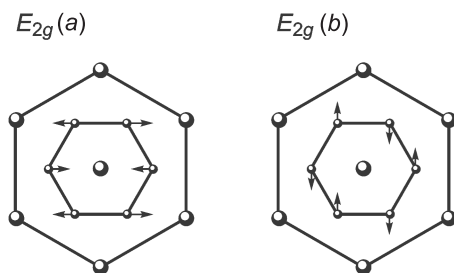


Рис. 1. Различные типы движений ионов бора (показаны стрелками), отвечающие вырожденным фононным модам $E_{2g}(a)$ и $E_{2g}(b)$ вблизи центра Γ зоны Бриллюэна в соединении MgB_2 , согласно работе [5]. Светлые кружки обозначают расположение ионов Mg в соседнем слое

¹ Такой выбор, вообще говоря, исключает случай «чистого» ангармонического потенциала 4-го порядка: $A_2 = 0$, $A_4 \neq 0$.

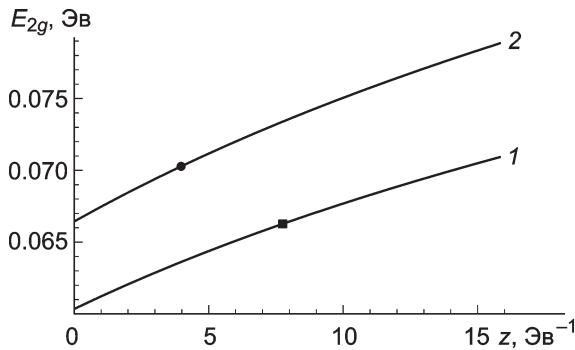


Рис. 2. Собственные значения энергии моды E_{2g_n} как функции отношения ангармонической и гармонической констант $z = \frac{A_4}{A_2^2}$ при $n = 1$ за вычетом энергии нулевых колебаний. Цифры 1, 2 обозначают кривые, построенные с использованием значений A_2 из работ [2] и [5] соответственно. Выделенные точки на кривых 1, 2 отвечают величинам $z = 7.81 \text{ эВ}^{-1}$ [2] и $z = 4.0 \text{ эВ}^{-1}$ [5], полученным с помощью расчетов из первых принципов в приближении «замороженных» фононов

второе, ангармоническая поправка может быть учтена по теории возмущений: $\Delta E_{2gn}^{anharm} = (n + \frac{1}{2})^2 \frac{A_4}{A_2} \frac{\hbar^2}{2M}$. Решение кубического относительно l^2 уравнения (2) позволяет получить оценку собственных значений энергии фононной моды E_{2g_n} в промежуточном случае, при сопоста-

вимых величинах гармонического и ангармонического слагаемых в правой части уравнения (2). Результаты в виде зависимостей собственных значений энергии моды E_{2g_n} от характерного параметра $z = \frac{A_4}{A_2^2}$ при $n = 1$ без учета нулевых колебаний представлены на рис. 2 (сами решения кубического уравнения (2) и вид E_{2g_n} (1) как функций z из-за их громоздкости не приводим). Из графика на рис. 2 видно, что с увеличением z ангармонический вклад в энергию E_{2g} монотонно возрастает. Количественно полученные значения энергии согласуются с оценкой E_{2g} по методу Хартри–Фока [2], в то же время упомянутый рамановский сдвиг, на наш взгляд, требует дополнительного исследования роли электрон-фононного взаимодействия в формировании энергии моды E_{2g} .

Список литературы

1. Kortus J., Mazin I.I., Belashchenko K.D. et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. **86**, N 20. P. 4656.
2. Yildirim T., Guelsesen O., Lynn J.W. et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. **87**, N 3. P. 037001.
3. Boeri L., Bachelet G. B., Cappelluti E. et al. // Phys. Rev. B. 2002. **65**. P. 214501.
4. d'Astuto M., Calandra M., Reich S. et al. // Phys. Rev. B. 2007. **75**. P. 174508.
5. Kunc K., Loa I., Syassen K. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2001. **13**. P. 9945.
6. Мигдал А.Б. Качественные методы в квантовой теории. М., 1975.

Features of phononic mode E_{2g} in MgB_2

V. V. Rzhetskii

Department of Low Temperature Physics and Superconductivity, Faculty of Physics, Moscow State University, Moscow 119991, Russia.

E-mail: rzhetskii@mig.phys.msu.ru.

A model estimation of eigenvalues energy of in-plane boron phonon mode E_{2g} is obtained. It is shown that anharmonic contribution to the energy E_{2g} increases monotonically with increasing $z = A_4/A_2^2$, where A_4 and A_2 are the anharmonic and harmonic constants, respectively. The results quantitatively fit the estimate in the Hartree–Fock approach, however, the discrepancy with the data of the Raman spectroscopy indicates the need for a more detailed account of the influence of electron-phonon coupling on energy E_{2g} .

PACS: 74.70.Ad.

Keywords: binary compound MgB_2 , phonon modes, electron–phonon interaction, 4th order anharmonicity.

Received 24 September 2008.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 1(2009)

Сведения об авторе

Ржевский Владимир Васильевич — к. ф.-м. н., доцент; тел.: 939-43-76, e-mail: rzhetskii@mig.phys.msu.ru.