بررسی ساختار الکترونی، پراکندگی فونون و برهمکنش الکترون- فونون در ابررسانای MgB_2

مرشدلو ، تکتم[1] ؛ رضایی رکن آبادی ، محمود[1] ؛ مدرسی ، محسن[1]

[1]گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد ، میدان آزادی ، مشهد

چکیده

در این مقاله ساختار نواری الکترونی حالت پایه، چگالی حالت کلی (DOS) و جزئی(PDOS) الکترونی، پراکندگی فونونی، برهمکنش الکترون- فونون و تابع الیشبرگ همسانگرد $\alpha^2F(\omega)$ در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی (DFT) با استفاده از محاسبات اصول اولیه محاسبه و نمودارهای آنها رسم و آنالیز شده است. نتایج ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی و جزئی نشان می‌دهند که حفره‌های بالای نوار σ ناشی از اربیتال‌های P_x و P_y اتم بور به میزان زیاد و حفره‌های نوار π ناشی از اربیتال P_z این اتم به میزان جزئی، زوج حفره‌های حالت ابررسانایی را تشکیل می‌دهند. بر اساس طیف تابع الیشبرگ همسانگرد محاسبه شده، بخش بزرگی از جفت شدگی، بین حفره‌های بالای نوار σ مربوط به اتم‌های B با مدهای فونونی اپتیکی با تقارن E_{2g} در نقطه‌ی Γ (ناشی از نوسانات داخل صفحه‌ای پیوندهای B-B) رخ می‌دهد. ثابت جفت شدگی الکترون- فونون (λ) محاسبه و ۰/۷۴ بدست آمد. با استفاده از فرمول مک میلان، دمای گذار K ۴۰ تخمین زده شد.

The investigation of the electronic structure, phonon dispersion and electron-phonon coupling in MgB_2 superconductor

Morshedloo, Toktam1; Rezaei Roknabadi, Mahmood[1]; Modarresi, Mohsen[1]

[1] Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad

Abstract

In this paper, ground-state electronic band structure, total and partial density of states (DOS and PDOS), phonon dispersion, electron-phonon coupling and isotropic Eliashberg function $\alpha^2F(\omega)$ have been calculated within the framework of density functional theory (DFT) by using first-principles calculations and their curves drown and analyzed. The results of the electronic band structure, total and partial density of states show that holes at top of σ bands, resulting from the boron P_x and P_y orbitals, sizably and holes of π band, resulting from the P_z orbital of this atom, partially consist coupled holes in superconductivity state. Based on isotropic Eliashberg function, a large part of coupling takes place between holes on the top of the boron σ bands with a optical phonon mode with E_{2g} symmetry at the Γ point (from in-plain vibrations of the B-B bonds). The electron-phonon coupling constant was calculated and obtained 0.74. By using McMillan formula, superconducting transition temperature TC was estimated 40K.

PACS No.74

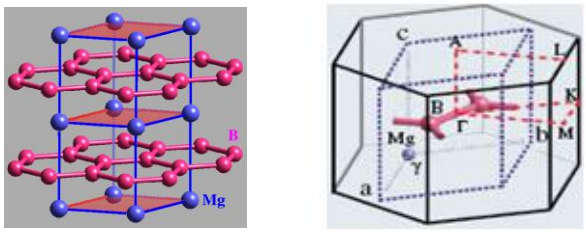
مقدمه

پس از کشف ابررسانایی در ترکیب MgB_2 با دمای گذار K $T_C \approx$ ۳۹ در سال ۲۰۰۱، تحقیقات گسترده‌ی تجربی و تئوری جهت فهم منشاء این T_C نسبتاً بالا انجام شده است[۱]. اندازه-گیری‌هایی از قبیل اثر ایزوتوپ اتم B روی دمای‌گذار، تونل‌زنی، ترابرد، خصوصیات ترمودینامیک و چگالی حالت‌های فونونی تأیید می‌کنند که به احتمال زیاد MgB_2 یک ابررسانای فونون- واسطه‌ی با تقارن نوع s وجفت‌شدگی متوسط و قوی است[۲]. محاسبه و بررسی ساختار نواری الکترونی، پراکندگی فونونی، جفت‌شدگی الکترون- فونون و حل معادلات الیشبرگ برای تعیین دمای گذار،

در فهم نقش بر همکنش الکترون- فونون در این ماده کمک می-کند[۳]. از این رو در کار حاضر به محاسبه‌ی این کمیت‌ها و تابع الیشبرگ همسانگرد در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی با استفاده از نرم‌افزارQUANTUM-ESPRESSO پرداخته شده است. تابع الیشبرگ همسانگرد که از معادلات الیشبرگ با اعمال تقریب همسانگردی گاف ابررسانایی بدست می‌آید، قدرت برهمکنش جفت‌کننده‌ی فونون- واسطه را توصیف می‌کند[۴]. سپس با استفاده از نتایج بدست آمده، ثابت جفت‌شدگی الکترون- فونون کل محاسبه و در نهایت با به کارگیری فرمول تقریبی مک‌میلان (آلن- دنیس) دمای‌گذار MgB_2 محاسبه می‌شود.

تئوری و جزئیات محاسبات

محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با بکارگیری تقریب GGA برای تابعی همبستگی– تبادلی انجام شده است. ساختار هگزاگونال گرافیت مانند MgB_2 از لایه‌های لانه زنبوری اتم B که اتم‌های Mg در بین این لایه‌ها قرار دارند تشکیل شده است. ثابت‌های شبکه بعد از بهینه‌سازی شبکه ۳/۰۸۳= a و c/a=۱/۱۴۶ بدست آمد که این مقادیر تطابق خوبی با نتایج تجربی a=۳/۰۸۳ و c/a=۱/۱۴۲ دارند[۲]. ساختار بلوری MgB_2 ، یاخته بسیط شبکه‌ی هگزاگونال فضای حقیقی و شبکه‌ی وارون آن که هگزاگونال است در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱ : ساختار بلوری MgB_2 (در سمت چپ)، یاخته‌ی بسیط شبکه‌ی هگزاگونال فضای حقیقی (منشور با قاعده‌ی لوزی با خطوط نقطه چین در سمت راست) و شبکه وارون آن (هگزاگونال با خطوط سیاه در شکل سمت راست).

شبه پتانسیل‌های فوق‌العاده نرم که به روش واندربیلت (Vanderbilt) ساخته شده‌اند برای Mg و B بکاربرده شد. انرژی قطع امواج- تخت بعد از بهینه‌سازی نسبت به کمینه انرژی و نیروهای روی اتم‌ها ۴۵ Ry در نظر گرفته شد. در محاسبه ساختار نواری الکترونی حالت پایه، انتگرال‌گیری روی ناحیه‌ی اول بریلوئن با استفاده از روش منخورست- پک و بکارگیری شبکه نقاط-k ۲۴×۲۴×۲۴ و پهن‌شدگی ۰/۰۱ از نوع Gaussian انجام شد. چگالی حالت‌های کلی و جزئی الکترونی برای بررسی بهتر ساختار الکترونی محاسبه شد. محاسبه‌ی فرکانس‌های فونونی با استفاده از روش پاسخ – خطی بر روی شبکه بردارهای موج فونونی q ۶×۶×۶ صورت گرفت. تابع الیشبرگ همسانگرد که بر همکنش جفت‌کننده‌ی فونون – واسطه را توصیف می‌کند از رابطه-ی زیر محاسبه شد:

$$\alpha^2F(\omega)=\frac{1}{N(0)N_kN_q}\sum_{nk,mq,\nu}\left|g^{\nu}_{nk,mk+q}\right|^2 \times\delta(\varepsilon_{nk})\delta(\varepsilon_{mk+q})\delta(\omega-\omega^{\nu}_q) \qquad (۱)$$

که در آن N(0) چگالی حالت‌های الکترونی بر اتم و اسپین در انرژی فرمی و N_k و N_q به ترتیب کل تعداد نقاط k و q هستند. ویژه مقادیر الکترونی با اندیس نوار(n و m) و بردار موج‌های(k و k+q) مشخص می‌شوند در حالی که فرکانس‌های فونونی با اندیس مد ν و بردار موج q تعیین شده‌اند. $g^{\nu}_{nk,mk+q}$ عناصر ماتریس ضرایب برهمکنش الکترون – فونون را نمایش می‌دهند. ثابت جفت‌شدگی الکترون – فونون کل توسط رابطه‌ی زیر بدست می‌آید[۵]:

$$\lambda=2\int_0^{\infty}d\omega'\frac{\alpha^2F(\omega')}{\omega'} \qquad (۲)$$

در نهایت دمای‌گذار ابررسانایی MgB_2 از طریق فرمول مک‌میلان (آلن – دنیس) تخمین‌زده شد:

$$T_C=\frac{\omega_{\log}}{1.2}\exp\left[\frac{-1.04(1+\lambda)}{\lambda(1-0.62\mu^*)-\mu^*}\right] \qquad (۳)$$

که

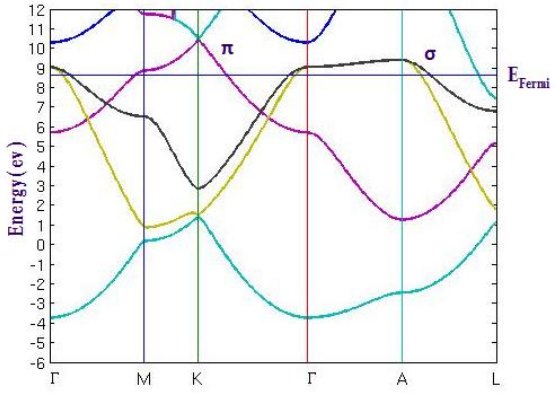
$$\omega_{\log}=\exp\left[\frac{2}{\lambda}\int_0^{\infty}\frac{d\omega}{\omega}\alpha^2F(\omega)\log(\omega)\right] \qquad (۴)$$

و μ^* ثابت برهمکنش الکترون – الکترون مؤثر است. μ^* به صورت یک پارامتر آزاد جهت تطابق T_C تئوری و تجربی در رابطه

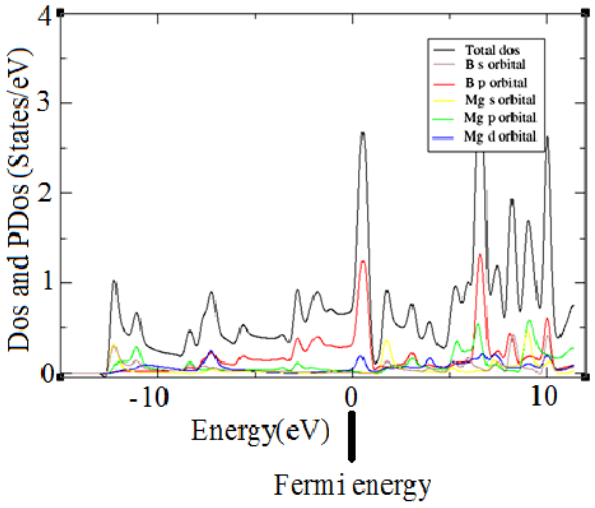
رفتار می‌کنند. همانطور که از رابطه T_C واضح است برای داشتن دمای‌گذار بالا نیاز به λ و ω_{log} بزرگ است[۴].

نتایج و بحث

ساختار نواری الکترونی حالت پایه MgB_2 درشکل ۲ نشان داده شده است که در توافق خوبی با نتایج دیگران است[۶،۷]. برای مشخص شدن اینکه کدام یک از نوارهای انرژی، تراز فرمی را قطع حالت‌های می‌کند، نمودار چگالی کلی (DOS) و جزئی (PDOS) محاسبه و در شکل ۳ نشان داده شد. انرژی فرمی در صفر تنظیم شده است. همان طور که دیده می‌شود چگالی حالت-های جزئی مربوط به اربیتال‌های P_x و P_y ($N(0)_\sigma/N(0) = ۰/۶۰$) و P_z ($N(0)_\pi/N(0) = ۰/۲۹$) اتم B در انرژی فرمی سهم غالب را در چگالی حالت‌های کل دارند. این دلالت دارد بر اینکه سطح فرمی توسط نوارهای σ و π قطع شده است. چگالی حالت‌های جزئی مربوط به اربیتال‌های اتم Mg در انرژی فرمی سهم کمی در چگالی حالت‌های کل دارند که علت آن یونیزه شدن Mg به Mg^{2+} و جاگزیدگی الکترون‌های باقیمانده در مکان این اتم‌ها است. این نشان می‌دهد که اتم‌های B در ایجاد ابررسانایی نقش اساسی را بازی می‌کنند. با توجه به نتایج اثر هال که حامل‌های ابررسانایی را زوج حفره‌ها تعیین کرده است [۸] حفره‌های بالای نوار σ (به میزان زیاد) و نوار π (به میزان جزئی) مربوط به اتم B، زوج حفره‌های حالت ابررسانایی را ایجاد می‌کنند.

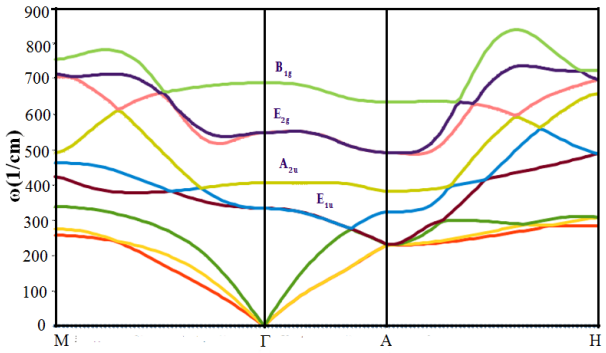


شکل ۲ : ساختار نواری الکترونی حالت پایه‌ی MgB_2



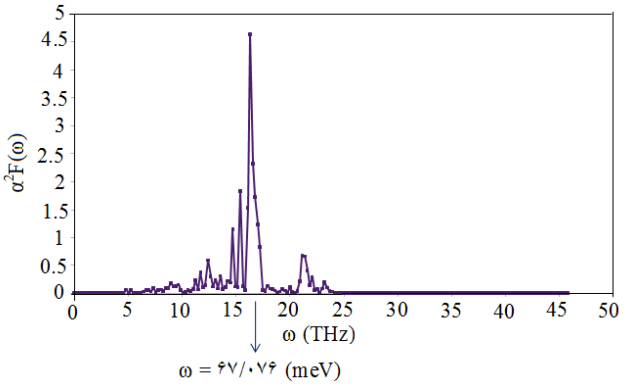
شکل۳ : چگالی حالت‌های کلی وجزئی الکترونی MgB_2

در شکل ۴ طیف پراکندگی فونونی محاسبه شده را نشان می‌دهد که در آن نام شاخه‌های اپتیکی مشخص شده است. در نقطه‌ی Γ چهار مد اپتیکی وجود دارد. به علت جرم سبک اتم B و پیوند کوالانسی قوی بین آنها، دو مد فرکانس– بالا، مربوط به نوسانات اتم‌های B می‌باشند. یکی مربوط به نوسانات کششی داخل صفحه-ای پیوندی B-B (E_{2g}) و دیگری مربوط به نوسانات خارج صفحه‌ای اتم‌های B (B_{1g}) است. دو مد اپتیکی با فرکانس پایین‌تر مربوط به نوسانات داخل – صفحه‌ای اتم‌های Mg (E_{1u}) و حرکت خارج از صفحه‌ی این اتم‌های (A_{2u}) می‌باشد[۴]. طیف پراکندگی فونونی پس از محاسبه در شکل ۴ نشان داده و نام شاخه‌های اپتیکی مشخص شده است. در نقطه‌ی Γ چهار مد اپتیکی وجود دارد.



شکل۴ : طیف پراکندگی فونونی MgB_2

برای بررسی خصوصیات ابررسانایی و عامل جفت‌کنندگی حفره‌ها یعنی بر همکنش الکترون – فونون، طیف تابع الیشبرگ همسانگرد محاسبه و نتیجه در شکل ۵ نشان داده شد. همانطور که در نمودار دیده می‌شود، پیک غالب در فرکانس $\omega = ۶۷$ meV قرار دارد که در محدوده‌ی مد اپتیکی $E_{۲g}$ است. از آنجا که این تابع مشخص کننده‌ی قدرت برهمکنش الکترون – فونون است، بنابراین این نشان می‌دهد که مد اپتیکی $E_{۲g}$ مسئول جفت‌شدگی قوی حفره‌ها در بالای نوار σ می‌باشد. ثابت جفت‌شدگی الکترون – فونون کل نیز محاسبه و ۰/۷۳ بدست آمد که در تطابق با نتیجه-ی بدست آمده توسط ک. پ. بُهِنِن و همکارانش است[۳]. دمای-گذار با قراردادن μ^*=۰/۰۵, ۴۰K تخمین زده شد که مشابه کار ک. پ. بُهِنِن می‌باشد[۳]. مقدار μ^* در اکثر مقالات پس از محاسبه در حدود ۰/۱ در نظر گرفته شده است. این تفاوت در مقدار پارامتر μ^* به علت به کارگیری تقریب همسانگردی گاف ابررسانایی واستفاده از تابع الیشبرگ همسانگرد می‌باشد. به طوری که دیگران با حل معادلات الیشبرگ به صورت ناهمسانگرد در مدل دو نواری با μ^*=۰/۱ به نتایجی که با تجربه تطابق بیشتری دارند دست یافتند[۳].



شکل ۵ : طیف تابع الیشبرگ همسانگرد $MgB_۲$

نتیجه‌گیری

با استفاده از محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی، ساختار نواری الکترونی حالت پایه، چگالی حالت‌های کلی و جزئی الکترونی، طیف پراکندگی فونونی و ضرایب برهمکنش الکترون – فونون محاسبه شد. با استفاده از نمودار ساختار نواری و چگالی حالت‌های کلی و جزئی الکترونی مشخص شد که حفره‌های بالای نوار σ به میزان زیاد و نوار π به میزان کم، زوج حفره‌های حالت ابررسانا را تشکیل می‌دهند. سپس با محاسبه‌ی تابع الیشبرگ همسانگرد که مشخص کننده‌ی قدرت برهمکنش الکترون – فونون در فرکانس‌های فونونی مختلف است مشخص شد که فونون‌های $E_{۲g}$ ناشی از نوسانات کششی داخل صفحه‌ای اتم‌های B باعث جفت‌شدگی حفره‌های بالای نوار σ مربوط به اتم‌های B و بروز ابررسانایی در $MgB_۲$ شده‌اند.

سپاسگزاری

از همکاری خانم راضیه کارگر و کمک‌های علمی خانم شهین براتی و پشتیبانی معنوی خانم‌ها بتول ریوندی، زهرا مرشدلو و نرگس قشونی صمیمانه تشکر می‌کنیم.

مرجع‌ها

[۱] O. De la Pena-Seaman, R. de Coss, R. Heid and K. –P. Bohnen; "Electron-phonon Coupling and Two-band Superconductivity of Al- and C-doped MgB_2 "; *Phys. Rev. B* **82** (2010) 224508.

[۲] Y. Kong, O. V. Dolgov, O. Jepsen and O. K. Andersen; "Electron-Phonon Interaction in the Normal and Superconducting State of MgB_2"; *Phys. Rev. B* **63** (2001) 020501.

[۳] K. –P. Bohnen, R. Heid and B. Renker; "Phonon Dispersion and Electron-Phonon Coupling in MgB_2 and AlB_2"; *Phys. Rev. Lett* **86**, No. 25 (2001) 5771-5774.

[۴] R. Heid, K. –P. Bohen and B. Renker; "Electron-phonon Coupling and Superconductivity in MgB_2 and Related Diborides"; *Adv. in Solid State Phys* **42** (2002) 293-305.

[۵] G. Profeta, M. Calandra and F. Mauri; "Phonon-Mediated Superconductivity in Graphene by Lithium Deposition"; *Nature Physics* **8** (2012) 131-134.

[۶] O. De la Pena-Seaman, R. De Coss, R. Heid and K. –P. Bohnen; "Supercooled and Glassy Water"; *Phys. Rev. B* **79** (2009) 134523.

[۷] J. Kortus, I. I. Mazin, K. D. Belashchenko, V. P. Antropov and L. L. Boyer; "Superconductivity of Metallic Boron in MgB_2"; *Phys. Rev. Lett* **86**, No. 20 (2001) 4656.

[۸] T. S. Kayed; "Magnetoresistance, Voltage-current Characteristics and Hall Effect Measurements of Bulk MgB_2 Superconductors"; Cryst. Res. Technol. **39**, No. 1 (2004) 50-55.

[۹] I. I. Mazin, O. K. Andersen, O. Jepsen, A. A. Golubov, O. V. Dolgov and J. Kortus; "Comment on 'First-Principles Calculation of the Superconducting Transition in MgB2 within the Anisotropic Eliashberg Formalism"; *Phys. Rev. B* **69** (2004) 056501.