

# Электронная туннельная спектроскопия фононного спектра $\text{MgB}_2$

© В.Ю. Таренков, А.И. Дьяченко, С.Л. Сидоров, В.А. Бойченко, Д.И. Бойченко,  
 Š. Chromík\*, V. Štrbík\*, Š. Gaži\*, M. Španková\*, Š. Veřačka\*

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина Национальной академии наук Украины,  
 Донецк, Украина

\* Institute of Electrical Engineering, Slovak Academy of Sciences,  
 Bratislava, Slovak Republic

E-mail: Sidorovsl@bk.ru

(Поступила в Редакцию 14 октября 2008 г.)

Методом туннельной спектроскопии исследованы особенности фононного спектра  $\text{MgB}_2$  ( $T_c = 38$  К). Показано, что как положение, так и энергетическая ширина основной оптической  $E_{2g}$ -моды в фононном спектре хорошо согласуются с данными неупругой рентгеновской спектроскопии, но значительно расходятся с результатами комбинационного рассеяния света (Раман-спектроскопии). Среди возможных причин такого несоответствия обсуждаются эффекты ангармонизма и неадиабатичности, характерные для системы  $\text{MgB}_2$ .

Работа поддержана в рамках Украинско-Словацкого проекта (проект № М39-2008–2009).

PACS: 74.50.+r, 74.70.Ad, 72.10.-d

## 1. Введение

Открытие сверхпроводимости в  $\text{MgB}_2$  [1] показало, что высокие значения  $T_c = 39$  К достижимы не только в сильно коррелированных системах (купратах), но и в обычных Ферми-жидкостных металлах, причем даже без участия атомов переходных металлов. Вскоре было доказано, что сверхпроводимость в  $\text{MgB}_2$  имеет двухзонный характер и преимущественно обусловлена сильным электрон-фононным взаимодействием электронов ковалентной  $\sigma$ -зоны с оптическими упругими модами  $E_{2g}$ -фононов [2–7]. Однако детали этого механизма остаются до конца невыясненными. Например, расчеты из первых принципов показывают, что с учетом всех ангармонических поправок частота оптической  $E_{2g}$ -моды в точке  $\Gamma$  зоны Бриллюэна находится в районе 67 meV [8], тогда как многочисленные исследования Раман-спектров дают значение  $\omega_{E_{2g}} \approx 75$  meV ( $T = 300$  К) [9–13]. Еще большее значение  $\omega_{E_{2g}}$  было получено недавно при исследовании крупных кристаллов  $\text{MgB}_2$ . Согласно [14], положение пика в Раман-спектре, соответствующее  $E_{2g}$ -моду, смещается от 75 ( $T = 300$  К) до 81 meV ( $T < 20$  К). Неупругие нейтронные измерения дают так называемую обобщенную плотность состояний (generalized density of states — GDOS), которая в  $\text{MgB}_2$ , к сожалению, не показывает яркой особенности при  $\omega = \omega_{E_{2g}}$  [4,15,16]. Подробную информацию о дисперсии фононных частот в  $\text{MgB}_2$  дает неупругое рассеяние рентгеновских лучей (inelastic X-ray scattering — IXS) [17,18]. Результаты таких исследований лучше согласуются с расчетами, выполненными в адиабатическом приближении [8,17]. Однако, как утверждается в ряде работ [19,20], при строгом анализе взаимодействия  $\sigma$ -электронов с  $E_{2g}$ -фононами следует учитывать нарушение адиабатического приближения Борна–Кармана, которое является основой для расчета электрон-фононного механизма в простых металлах [21,22].

Таким образом, существенное различие в положении  $E_{2g}$ -моды, получаемое в Раман-эффекте и рентгеновском эксперименте, требует проведения независимых экспериментальных исследований, позволяющих однозначно выделить  $E_{2g}$ -моду и определить ее энергию с высокой точностью. Такую задачу может решить туннельная спектроскопия сверхпроводящего диборида магния ( $\text{MgB}_2$ ) в области энергий фононных частот [23]. Существенно, что такая методика позволяет однозначно выделить те фононные моды, которые действительно вносят определяющий вклад в  $T_c$   $\text{MgB}_2$ , так как фононные особенности в туннельном спектре возникают как следствие энергетической зависимости щели  $\Delta(\omega)$  сверхпроводника, т.е. они отсутствуют в нормальном состоянии. Известно, что при низких температурах проводимость  $dI/dV$  туннельного контакта типа  $N-I-S$  ( $N$  — нормальный металл,  $S$  — сверхпроводник) прямо пропорциональна плотности состояний квазичастиц [24]

$$\frac{dI}{dV} \sim \text{Re} \left( \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta(\omega)^2}} \right)_{\omega=E}, \quad (1)$$

причем особенности, связанные с взаимодействием электронов с фононами, отражаются благодаря зависимости от энергии  $\omega$  щели  $\Delta(\omega)$  сверхпроводника. Например, взаимодействие электрона с оптическим фононом с частотой  $\omega_0$  приводит к резкому изменению параметра  $\Delta(\omega)$  при  $\omega = \omega_0$ , что непосредственно отражается на проводимости  $N-I-S$ -контакта (1), причем в производной  $-d^2I/dV^2$  появится пик при энергии  $E = \Delta_0 + \omega_0$ , измерение положения которого можно выполнить с точностью, превышающей 0.1 meV. Поэтому туннельные исследования позволяют выявить тонкую структуру фононной плотности состояний сверхпроводников  $F(\omega)$ . Точнее, в спектре  $d^2I/dV^2$  отражается не сама функция  $F(\omega)$ , а комбинация  $g(\omega) = \alpha^2(\omega)F(\omega)$ , где  $\alpha^2(\omega)$  характеризует эффективность взаимодействия фонона с

энергией  $\omega$  с электронами. Функция  $\alpha^2(\omega)F(\omega)$  является интегральной характеристикой. Но если по каким-то причинам выделено взаимодействие электронов с определенными фононными модами (оптические моды, а также края зоны Бриллюэна [24]), то анализ туннельных спектров  $d^2I/dV^2$  позволяет определить положение этих мод с высокой точностью. Такая ситуация имеет место для  $MgB_2$ , в котором, согласно современным представлениям, основной вклад в функцию электрон-фононного взаимодействия  $\alpha^2(\omega)F(\omega)$  вносит взаимодействие электрона с оптическими  $E_{2g}$ -фононами [2–6].

Еще более точную информацию об энергии оптических фононных мод можно получить, исследуя контакты  $S_1-I-S_2$  (сверхпроводник–диэлектрик–сверхпроводник), так как в этом случае потенциал приложен непосредственно к туннельному барьеру, поэтому нет вариации потенциала вдоль поверхности контакта, неизбежной в контактах  $N-I-S$ -типа [24]. При туннелировании в  $S_1-I-S_2$ -контактах особенности в  $d^2I/dV^2$  при  $E = \Delta_1 + \Delta_2 + \omega_0$  возникают в результате согласования положения корневых особенностей в плотностях состояний  $N_1(\omega)$ ,  $N_2(\omega)$  сверхпроводников при  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  с энергией  $\omega_0$  виртуального фонона [24]. Такая „резонансная“ ситуация вносит наиболее ощутимый вклад в проводимость  $S_1-I-S_2$ -контакта.

В настоящей работе для исследования фононного спектра  $MgB_2$  разработана технология, позволяющая получать туннельные контакты  $S_1-I-S_2$ -типа, где  $S_1$  и  $S_2$  — микрокристаллы  $MgB_2$ , причем удалось выполнить туннельные измерения не только в направлении оси  $c$   $MgB_2$ , но и вдоль плоскостей  $ab$ . Полученные экспериментальные данные показали, что энергия  $E_{2g}$ -моды  $\omega_{E_{2g}} = 64–67$  meV хорошо согласуется с данными рентгеновской спектроскопии [17], но не согласуется с результатами комбинационного рассеяния света [9–13], особенно с последними результатами, выполненными при низких температурах [14], когда наблюдается Раман-пик при 81 meV. Обсуждаются возможные причины такого несоответствия.

## 2. Эксперимент

Образцы в форме прямоугольных пластинок были приготовлены с помощью одноосного сжатия чистого порошка диборида магния (99 wt.%) при давлении 30–40 kbar между стальными наковальнями. Порошок  $MgB_2$  засыпался между двумя тонкими ( $d \sim 0.2$  mm) медными проволочками, приклеенными на поверхность наковальни. Проволочки задавали толщину и форму образца, а их деформация при сжатии обеспечивала однородное распределение давления по объему пластинок. После первичного сжатия на поверхность сформированных пластинок наносились токовые и потенциальные контакты из порошка коллоидного серебра, которое после второго прессования внедрялось в поверхность пластины  $MgB_2$ , образуя низкоомные ( $R \sim 10^{-5} \Omega \cdot \text{cm}^2$ ) контакты. Принятая технология

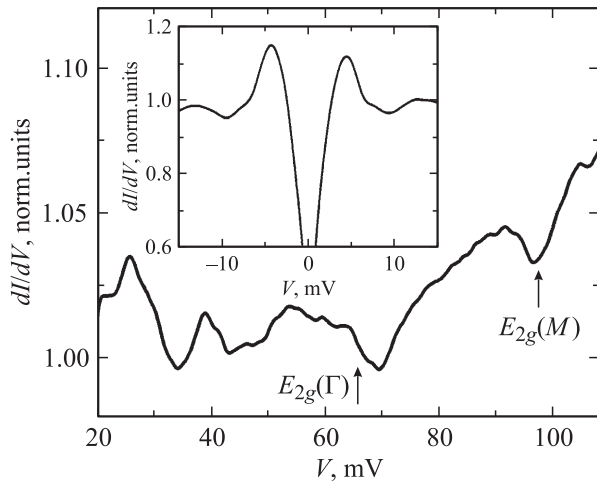
позволяла получить тонкие ( $\sim 0.1$  mm) однородные пластинки площадью  $1 \times 10$  mm с высокой плотностью исследуемого материала. Транспортные характеристики образцов  $MgB_2$  измерялись стандартным четырехзондовым методом. Образцы показывали температуру начала сверхпроводящего перехода при  $T_c = 38$  K и плотность критического тока  $J_c > 10^5$  A/cm<sup>2</sup> ( $T = 4.2$  K).

На поверхности образцов всегда имелись отдельные кристаллики  $MgB_2$ , ориентация кристаллографических осей которых носила случайный характер. Они использовались для приготовления туннельных контактов. В качестве верхнего электрода использовались сверхпроводники (Nb, Pb). Нижним электродом служил остальной массив пластины, функционально работающий как электрод. Четкие спектры квазичастичных возбуждений были получены также на контактах типа „break junction“, которые получались изломом пластинки  $MgB_2$  на гибкой подложке. В случае образования внутреннего контакта сопротивление между внешним электродом и микрокристаллом  $MgB_2$  было пренебрежимо малым, поскольку положение пиков на зависимости  $dI/dV$  не менялось при  $T > T_c^{(Pb,Nb)}$ . Как это принято в туннельной (контактной) [23] спектроскопии, тип образованного контакта определялся из сравнения его проводимости с теоретическими моделями [24]. Контакты туннельного типа ( $N-I-S$ ,  $S-I-S$ ) характеризуются провалом проводимости  $dI/dV$  при  $E < \Delta_0$  и ее ростом при  $E \gg \Delta_0$ . Для андреевских ( $N-S$ ) контактов при  $E < \Delta$  проводимость  $dI/dV$  возрастает, а при  $E \gg \Delta_0$  убывает [25]. Для проведения детальных исследований фононного спектра отбирались туннельные контакты  $S_1-I-S_2$ -типа, где  $S_1$  и  $S_2$  — кристаллы  $MgB_2$ . Как известно, именно на  $S_1-I-S_2$ -контактах были получены наиболее четкие спектры, отражающие фононную структуру сверхпроводников [24], чему способствовала БКШ-особенность в плотности состояний  $N(\omega)_{\omega=\Delta_0}$  (1).

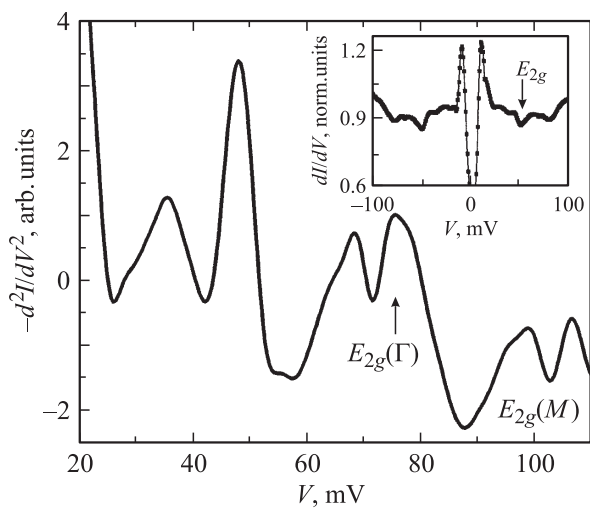
В настоящее время надежно установлено, что двухзонный сверхпроводник  $MgB_2$  характеризуется двумя существенно различающимися энергетическими щелями  $\Delta_\pi = 2–3$  meV и  $\Delta_\sigma = 6.5–7.5$  meV, которые соответствуют  $\pi$ - и  $\sigma$ -зонам, что доказано не только контактными (туннельными) исследованиями [26], но и независимыми данными ARPES [27]. Это позволяет однозначно определить направление туннелирования в исследуемых туннельных контактах просто по величине суммы энергетических щелей  $\Delta_1 + \Delta_2$ . Обработка большого числа измерений показала, что чаще возникали контакты, в которых туннелирование реализовывалось вдоль оси  $c$  (рис. 1). Тогда симметричные пики в туннельной проводимости  $dI/dV$  контакта  $S_1-I-S_2$  наблюдались при  $E = \Delta_{\text{sum}} = \Delta_\pi + \Delta_\pi = 2\Delta_\pi \approx 4–5$  meV (рис. 1). Но примерно в 20% случаев оси  $c$  контактирующих микрокристаллов оказывались перпендикулярными друг другу, тогда сумма энергетических щелей  $\Delta_{\text{sum}} = \Delta_\sigma + \Delta_\pi \approx 9.5–10$  meV. Зависимость  $dI/dV-V$  таких  $S_1-I-S_2$ -контактов демонстрирует наиболее яркую структуру, обусловленную особенностями спектра

$\alpha^2 F(\omega)$  сверхпроводника  $\text{MgB}_2$  (вставка к рис. 2). По характеру своего проявления эта структура аналогична ступенчатой фононной структуре, наблюдаемой при туннелировании в обычные сверхпроводники [24]. Отметим наиболее яркое проявление особенности (показана стрелкой на рис. 2), связанной с  $E_{2g}$ -оптической фононной модой, которая, согласно [2–6], вносит наиболее значительный вклад в сверхпроводимость  $\text{MgB}_2$ .

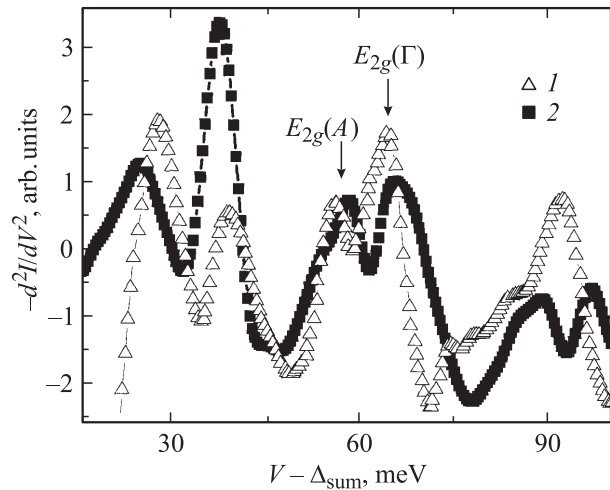
Двухзонный характер  $\text{MgB}_2$  [7,26] приводит к тому, что при инжекции заряда вдоль оси  $c$  преобладают туннельные процессы, обусловленные  $\pi$ -участками поверхности Ферми, а при инжекции заряда вдоль плоскости  $ab$  — процессы, связанные как с  $\pi$ -(66%), так



**Рис. 1.** Фононная структура в проводимости контакта  $S-I-S$  ( $S = \text{MgB}_2$ ) (направление оси  $c$ ). На вставке — проводимость этого контакта в области суммы энергетических щелей. По вертикальным осям рисунка и вставки отложены нормированные единицы.



**Рис. 2.** Детали фононной структуры в производной  $-d^2I/dV^2$  контакта  $S-I-S$  ( $S = \text{MgB}_2$ ) (направление  $c-ab$ , сумма энергетических щелей  $\Delta_{\text{sum}} = \Delta_{\sigma} + \Delta_{\pi} = 9.5 \text{ meV}$ ). На вставке — проводимость контакта (в нормированных единицах).



**Рис. 3.** Сравнение особенностей фононного спектра  $\text{MgB}_2$  в производных  $-d^2I/dV^2$  при туннелировании в направлении оси  $c$  (1) и в плоскости  $ab$  (2).

и с  $\sigma$ -(33%) поверхностями [28]. Фононная структура наблюдалась в производной  $-d^2I/dV^2$  (рис. 2, 3). Отметим расщепление пика, соответствующего  $E_2$ -фонону. Пик с большей энергией  $E_{2g}(\Gamma)$  соответствует точке  $\Gamma$  зоны Бриллюэна  $\text{MgB}_2$ . А пик с меньшей энергией  $E_{2g}(A)$ , по-видимому, связан с точкой  $A$  этой зоны [7]. Это согласуется с данными неупругой рентгеновской спектроскопии [17].

### 3. Обсуждение результатов

Как известно, для контакта  $S_1-I-S_2$ -типа пики в спектре  $\alpha^2 F(\omega)$  при  $\omega = \omega_i$  отражаются как характерные „ступени“ в  $dI/dV$  и пики во второй производной туннельного тока  $-d^2I/dV^2$  (взятой со знаком минус). Положение пиков в  $-d^2I/dV^2$  по оси напряжений  $V$  удовлетворяет условию  $E_i = \Delta_1 + \Delta_2 + \omega_i$  [24]. Условие  $E_i = \Delta_1 + \Delta_2 + \omega_i$  выполнялось для всех исследованных нами контактов. Поэтому, если интересоваться только энергией  $\omega_i$  характерных фононных мод, можно ограничиться измерением положения пиков в производной  $-d^2I/dV^2$ , не беспокоясь об их амплитуде. Однако об эффективности моды  $\omega_i$  в механизме сверхпроводимости можно все же судить по относительной крутизне „ступенек“ проводимости  $dI/dV$  при  $E_i = \Delta_{\text{sum}} + \omega_i$  (рис. 1, 2);  $\Delta_{\text{sum}} = \Delta_1 + \Delta_2$ . Сравнивая особенности в  $dI/dV$  (рис. 1, 2), получаем, что при инжекции электронов в направлении оси  $c$  относительный вклад  $E_{2g}$ -моды в проводимость  $dI/dV$  существенно меньше, чем при инжекции заряда вдоль плоскости  $ab$ , что качественно согласуется с теоретическими расчетами [28].

Если спектры  $-d^2I/dV^2$  сдвинуть (по оси абсцисс) на величину  $\Delta_{\text{sum}}$ , определяемую из проводимостей  $dI/dV$  контактов (вставка к рис. 1, 2), то (нормированные) спектры  $-d^2I/dV^2$  разных контактов демонстрируют удивительное подобие (рис. 3). Как видим, фононная

структура в  $-d^2I/dV^2$  вначале проявляется в виде двух пиков при  $\omega_1 = 25\text{--}30\text{ meV}$  и  $\omega_2 = 37\text{--}38\text{ meV}$  („звуковые моды“), затем наблюдаются глубокий провал и пики, связанные с  $E_{2g}$ -модой. Далее спектр обрывается в районе максимальной частоты фононного спектра  $MgB_2$   $\omega_{\max} \sim 95\text{ meV}$ . За исключением  $E_{2g}$ -моды, эти данные согласуются с нейтронными измерениями [15], согласно которым в спектре  $F(\omega)$   $MgB_2$  имеются два „звуковых“ пика при  $\omega_1 \approx 32\text{ meV}$  и  $\omega_2 \approx 39\text{ meV}$ , а конец спектра находится при  $95\text{ meV}$ . Еще лучшее согласие положений пиков при  $\omega_1, \omega_2$  наблюдается с данными рентгеновской IXS-спектроскопии  $\omega_1 = 26\text{--}30\text{ meV}$ ,  $\omega_2 = 37\text{ meV}$  [14,17]. По данным IXS низкочастотная мода  $\omega_1 = 26\text{ meV}$  распространяется в направлении  $AL$  зоны Бриллюэна  $MgB_2$  и, согласно рис. 3, достаточно сильно взаимодействует с электронами. Наблюдается также значительное подавление спектра  $-d^2I/dV^2 \sim F(\omega)$  в области между 45 и 50 meV; нижняя часть спектра  $-d^2I/dV^2$  соответствует преимущественно звуковым колебаниям, а верхняя — только оптическим модам. Этот результат полностью соответствует данным нейтронной спектроскопии функции GDOS  $\sim F(\omega)$  [15,16] и расчетам фононной плотности состояний  $F(\omega)$  [4].

Но обычные расчеты фононной структуры недостаточны для определения положения  $E_{2g}$ -моды, которая вносит основной вклад в  $T_c$   $MgB_2$  [2–6]. Эта мода является ангармонической [2,4]; кроме того, при взаимодействии электрона с  $E_{2g}$ -модой в определенной мере нарушается критерий адиабатичности [3,14,19]. Основным критерий адиабатичности — отсутствие в электронном спектре возбуждений с энергией порядка частот колебаний ионов. На первый взгляд, в металлах этот критерий заведомо нарушен, поскольку вблизи поверхности Ферми существуют электронные возбуждения со сколь угодно малой энергией. Однако при низких температурах число таких возбуждений в металлах весьма мало по сравнению с полным объемом сферы Ферми. Это дает возможность использовать адиабатическое приближение при определении интегральных по электронному спектру величин [21,22]. В рамках адиабатического приближения поправки от электрон-фононного взаимодействия к фононным частотам имеют порядок величины  $\Delta\omega_{q\lambda} = \text{Re}\delta\omega_{q\lambda} \approx \omega_{q\lambda}(\omega_0/E_F)^2$ ,  $\Gamma_{q\lambda} = \text{Im}\delta\omega_{q\lambda} \approx \omega_{q\lambda}(\omega_0/E_F)$ . Здесь  $\omega_0$  — величина порядка средних фононных частот. Как известно, в пределе  $\omega_0/E_F \ll 1$  затуханием фононных частот можно пренебречь, что обычно и делается. В обычных металлах  $E_F = 5\text{--}10\text{ eV}$ ,  $\omega_0 \leq 40\text{ meV}$ , поэтому  $\omega_0/E_F < 0.01$ . Для дырочной  $\sigma$ -зоны  $MgB_2$  в области  $A\text{--}\Gamma\text{--}A$  энергия Ферми  $E_F^\sigma \sim 0.4\text{--}0.5\text{ eV}$ , а  $\omega_{E_{2g}} = 60\text{--}70\text{ meV}$ , тогда параметр  $\omega_{E_{2g}}/E_F^\sigma > 0.1$ . В результате в  $MgB_2$  появляется существенное уширение  $E_{2g}$ -моды, которое можно оценить по формуле [17]

$$\gamma_m(\mathbf{q}) = 2\pi N(0)\omega_m^2\lambda_m(\mathbf{q}). \quad (2)$$

Здесь индекс  $m$  относится к точкам  $\Gamma$  и  $A$  зоны Бриллюэна,  $N(0)$  — плотность электронных состояний (на

ячейку  $MgB_2$ ),  $\lambda_1$  и  $\lambda_A$  — соответствующие этим участкам константы электрон-фононного взаимодействия.

Кроме того, при взаимодействии  $\sigma$ -электронов с  $E_{2g}$ -модой нарушается условие  $v_F\mathbf{q} \gg \omega_{E_{2g}}$  [3,20], которое, в частности, используется при выводе теоремы Мигдала [29]. Здесь  $v_F$  — вектор скорости электрона, направленный перпендикулярно цилиндрической  $\sigma$ -поверхности Ферми, а  $\mathbf{q}$  — импульс  $E_{2g}$ -фонона, распространяющегося в направлении  $\Gamma\text{--}A$ , т.е. вдоль оси симметрии  $\sigma$ -поверхностей. В результате векторы  $\mathbf{q}$  и  $v_F$  почти ортогональны, поэтому условие  $v_F\mathbf{q} \gg \omega_{E_{2g}}$  нарушается (особенно для частот  $\omega_{E_{2g}}$  в точке  $A$  зоны Бриллюэна). Но это не касается точки  $\Gamma$ , где  $q = 0$ , что позволяет проводить расчеты электрон-фононного взаимодействия в приближении замороженных фононов (см., например, [2,4]).

В настоящей работе основное внимание уделено анализу положения  $E_{2g}$ -моды, как наиболее чувствительной к неадиабатическим и ангармоническим эффектам. Для контактов, приготовленных в  $c$ - ( $\pi$ -контакты) и  $ab$ - ( $\sigma$ -контакты) направлениях, наблюдается практическое полное согласование двух пиков на зависимости  $-d^2I/dV^2$ , соответствующих энергии оптического  $E_{2g}$ -фонона в точках  $\Gamma$  (64–66 meV) и  $A$  (56–58 meV) (рис. 3). Эти результаты (с учетом погрешности  $\delta\omega \approx 1\text{ meV}$ ) также соответствуют данным IXS, согласно которым  $\omega(A) = 57\text{--}58\text{ meV}$ ,  $\omega(\Gamma) = 67\text{ meV}$  [14,17], и расчетам, выполненным в ангармоническом приближении [8]. Основная погрешность  $\delta\omega$  при определении энергии фононов по положению пиков в  $-d^2I/dV^2$  возникает при определении значения суммы энергетических щелей ( $\sim 0.5\text{ meV}$ ) и численном дифференцировании ( $\sim 0.5\text{ meV}$ ). В области проявления  $E_{2g}$ -моды вкладом остальных колебаний в спектр можно пренебречь [28]. В таком случае  $E_{2g}$ -мода аналогична локальному колебанию [24], поэтому „туннельная“ ширина „ $E_{2g}$ “ пиков в  $-d^2I/dV^2$  (измеренная на половине амплитуды) при  $\omega(A)$  и  $\omega(\Gamma)$  (рис. 3) практически соответствует ширине  $\gamma$  оптической моды  $E_{2g}$  в точках  $A$  и  $\Gamma$  зоны Бриллюэна. В таком случае, используя формулу (2), можно оценить парциальные константы электрон-фононного взаимодействия  $\lambda_\Gamma$  и  $\lambda_A$ . Здесь  $N(0) = 0.354\text{ states/eV} \cdot \text{spin}$  [2]. Для точки  $\Gamma$   $\omega_1 \approx 64\text{ meV}$ ,  $\gamma(\Gamma) = 11\text{ meV}$ , например  $\lambda_\Gamma = 1.27 \pm 0.05$ ; для точки  $A$   $\omega_A \approx 58\text{ meV}$ ,  $\gamma(A) = 9.5\text{ meV}$ ,  $\lambda_A = 1.21 \pm 0.05$ . Эти данные близки к результатам, полученным из эффекта де Газа–Ван Альфена [30], согласно которым  $\lambda_1 = 1.18\text{--}1.2$ ,  $\lambda_A = 0.96 \pm 0.03$ . В этом же интервале находятся теоретические значения „локальных“  $\lambda_0 = 1.16\text{--}1.25$  [31].

Имеется, однако, большое расхождение наших результатов с данными комбинационного рассеяния света (Раман-спектроскопии) [9–13], согласно которым энергия  $E_{2g}(\Gamma) \approx 75\text{ meV}$ , что на  $10\text{ meV}$  превышает измеренное нами значение  $E_{2g}(\Gamma) \approx 65\text{ meV}$ . Заметное расхождение с данными Раман-спектров показывает также и рентгеновская IXS-спектроскопия [14,17]. Но, пожалуй,

еще более примечательно то, что  $E_{2g}(\Gamma)$ -мода, наблюдаемая в Раман-спектрах  $\text{MgB}_2$ , имеет аномально большую ширину ( $\gamma = 30\text{--}40\text{ meV}$ ), что намного превышает наблюдаемую ширину  $E_{2g}(\Gamma)$ -пика в спектре  $-d^2I/dV^2$  ( $\gamma = 11\text{ meV}$ , рис. 3).

В металлах смещение частоты Раман-пика обычно объясняется эффектом Фано [32–34], который возникает в результате взаимодействия дискретного состояния (оптического фонона) с континуумом (спектром электронов). При этом смещение положения пика Раман-спектра всегда сопровождается его значительным уширением. Однако эффект Фано приводит к существенному перекосу (асимметрии) Раман-спектров, что в  $\text{MgB}_2$  обычно не наблюдается [9–13,35]. Возможно, эффект Фано маскируется сильным электронным фоном, характерным для Раман-спектров в  $\text{MgB}_2$  [35]. С другой стороны, как и в купратах, строгий расчет эффекта Фано в  $\text{MgB}_2$  — непростая задача, особенно если учесть наличие электронного фона и то, что  $E_{2g}$ -мода является ангармонической, тогда как классическая теория Раман-спектров в металлах базируется на гармоническом приближении [32–34]. Поэтому наблюдаемое расхождение туннельных данных с Раман-спектрами, возможно, обусловлено тем, что при туннелировании в сверхпроводники исследуются только фононы, задействованные в виртуальных процессах, обуславливающих механизм сверхпроводимости. Для таких фононов соотношение  $E = \Delta_{\text{sum}} + \omega_{E_{2g}}$  строго выполняется, что позволяет определить энергию  $\omega_{E_{2g}}$  с погрешностью  $\delta\omega$ , не превышающей  $1\text{ meV}$ . В Раман-спектроскопии участвуют реальные фононы, поэтому дополнительное уширение линии может возникать в результате распада оптического фонона на комбинацию двух фононов (ангармонический процесс) [12,18,34]. Однако в работе [14] отмечено, что при росте температуры смещение  $E_{2g}$ -пика в Раман-спектре направлено к меньшей энергии, тогда как распад фонона на два фонона [12,18] должен приводить к противоположному результату. Это поведение объясняется в [20] неадиабатическими эффектами. К сожалению, температурный диапазон, на котором можно проследить изменение частоты  $E_{2g}$ -фонона методом туннельной спектроскопии, ограничен интервалом  $T \leq T_c/2 \sim 20\text{ K}$ , где, согласно данным [14], ожидаемое изменение частоты  $E_{2g}$ -моды с температурой еще слишком мало. Это не позволяет однозначно выявить, в какой мере сдвиг частоты  $E_{2g}$ -фонона, наблюдаемый в Раман-эффекте [14], в действительности обусловлен внутренними процессами в  $\text{MgB}_2$ . Здесь следует еще раз подчеркнуть, что все характерные особенности фононного спектра, наблюдаемые в туннельном спектре  $-d^2I/dV^2$  (рис. 3), хорошо согласуются с данными нейтронной [4] и рентгеновской [14,17,18,36,37] спектроскопии, причем с результатами рентгеновской спектроскопии согласуется также энергия  $E_{2g}(\Gamma)$ -моды. Поэтому усомниться в оправданности адиабатического приближения для этой моды нет оснований, а проблема несоответствия данных Раман-спектроскопии [9–13] с туннельными и рентгеновскими исследованиями [14,17,18,23] остается открытой.

## 4. Заключение

Таким образом, анализ спектров туннельных  $S_1\text{--}I\text{--}S_2$ -контактов позволил уточнить энергию  $E_{2g}$ -фононов в  $\text{MgB}_2$ . С учетом ангармонизма [8] полученное значение ( $64\text{--}66\text{ meV}$ ) полностью объяснимо в рамках адиабатической теории. Наблюдаемая в туннельных спектрах ширина  $\gamma_{E_{2g}}$  моды  $E_{2g}(\Gamma)$  также согласуется с обычной (адиабатической) теорией сильного электрон-фононного взаимодействия. Однако остается нераскрытой причина аномально большой ширины  $\gamma_{E_{2g}} \sim 30\text{--}40\text{ meV}$  моды  $E_{2g}(\Gamma)$ , наблюдаемой в спектрах комбинационного рассеяния  $\text{MgB}_2$ . Не исключено, что неадиабатические эффекты в  $\text{MgB}_2$  [19,20] в сочетании с ангармонизмом [38–41] и рассеянием на примесях оказывают существенное влияние на спектр комбинационного рассеяния, приводя, в частности, к аномальному электронному фону [35] и эффективной большой ширине  $E_{2g}(\Gamma)$ -моды.

## Список литературы

- [1] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, J. Akimitsu. *Nature (London)* **410**, 63 (2001).
- [2] A.Y. Liu, I.I. Mazin, J. Kortus. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 087 005 (2001).
- [3] J. Kortus, I.I. Mazin, K.D. Belashchenko, V.P. Antropov, L.L. Boyer. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4656 (2001).
- [4] T. Yildirim, O. Gulseren, J.F. Lynn, C.M. Brown, T.J. Udovic, Q. Huang, N. Rogado, A. Regan, M.A. Hayward, J.S. Slusky, T. He, M.K. Haas, P. Khalifah, K. Inumaru, R.J. Cava. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 037 001 (2001).
- [5] H.J. Choi, D. Roundy, H. Sun, M.L. Cohen, S.G. Louie. *Nature (London)* **418**, 758 (2002).
- [6] A. Floris, G. Profeta, N.N. Lathiotakis, M. Lüders, M.A.L. Marques, C. Franchini, E.K.U. Gross, A. Continenza, S. Massidda. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 037 004 (2005).
- [7] А.Л. Ивановский. *ФТТ* **45**, 10, 1742 (2003).
- [8] M. Lazzeri, M. Calandra, F. Mauri. *Phys. Rev. B* **68**, 220 509 (2003).
- [9] K. Kunc, I. Loa, K. Syassen, R.K. Kremer, K. Ahn. *J. Phys.: Cond. Matter* **13**, 9945 (2001).
- [10] J. Hlinka, I. Gregora, J. Pokorny, A. Plecenik, P. Kus, L. Satrapinsky, S. Benacka. *Phys. Rev. B* **64**, 140 503 (2001).
- [11] X.K. Chen, M.J. Konstantinovic, J.C. Irwin, D.D. Lawrie, J.P. Franck. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 157 002 (2001).
- [12] H. Martinho, C. Rettori, P.G. Pagliuso, A.A. Martin, N.O. Moreno, J.L. Sarrao. *Solid State Commun.* **125**, 499 (2003).
- [13] D. DiCastro, E. Cappelluti, M. Lavagnini, A. Sacchetti, A. Palenzona, M. Putti, P. Postorino. *Phys. Rev. B* **74**, 100 505 (2006).
- [14] M. d’Astuto, M. Calandra, S. Reich, A. Shukla, M. Lazzeri, F. Mauri, J. Karpinski, N.D. Zhigadlo, A. Bossak, M. Krisch. *Phys. Rev. B* **75**, 174–508 (2007); *Cond-mat/0703126*.
- [15] B. Renker, K.B. Bohnen, R. Heid, D. Ernst, H. Schober, M. Koza, P. Adelman, P. Schweiss, T. Wolf. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 067 001 (2002).
- [16] R. Osborn, E.A. Goremychkin, A.I. Kolesnikov, D.G. Hinks. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 017 005 (2001).

- [17] A. Shukla, M. Calandra, M. d'Astuto, M. Lazzeri, F. Mauri, C. Bellin, M. Krisch, J. Karpinski, S.M. Kazakov, J. Jun, D. Dagero, K. Parlinski. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 095 506 (2003).
- [18] Q.R. Baron, H. Uchiyama, Y. Tanaka, S. Tsutsui, D. Ishikawa, S. Lee, R. Heid, K.-P. Bohnen, S. Tajima, T. Ishikawa. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 197 004 (2004).
- [19] L. Boeri, E. Cappelluti, L. Pietronero. *Phys. Rev.* **B71**, 012 501 (2005).
- [20] A.M. Saitta, M. Lazzeri, M. Calandra, F. Mauri. *Condmat/08024426* (2008).
- [21] S. Baroni, S. de Gironcoli, A.D. Corso, P. Giannozzi. *Rev. Mod. Phys.* **73**, 515 (2001).
- [22] Е.Г. Бровман, Ю.М. Каган. *УФН* **112**, 369 (1974).
- [23] Yu.G. Naidyuk, I.K. Yanson, O.E. Kvitnitskaya, S. Lee, S. Tajima. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 197001 (2003).
- [24] E.L. Wolf. *Principles of electron tunneling spectroscopy*. Oxford University Press, N.Y. (1985). 456 p.
- [25] С.Л. Сидоров, В.Ю. Таренков, А.И. Дьяченко, Т.А. Хачатурова. *ФТТ* **49**, 5, 769 (2007).
- [26] D.M. Buzea, T. Yamashita. *Semicond. Sci. Technol.* **14**, R 115 (2001).
- [27] S. Tsuda, T. Yokoya, Y. Takano, H. Kito, A. Matsushita, F. Yin, J. Itoh, H. Harima, S. Shin. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 127 001 (2003).
- [28] O.V. Dolgov, R.S. Gonnelli, G.A. Ummarino, A.A. Golubov, S.V. Shulga, J. Kortus. *Phys. Rev.* **B68**, 132 503 (2003).
- [29] А.А. Абрикосов, А.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. Физматгиз, М. (1963). 443 с.
- [30] A. Carrington, P.J. Meeson, J.R. Cooper, L. Balicas, N.E. Hussey, E.A. Yelland, S. Lee, A. Yamamoto, S. Tajima, S.M. Kazakov, J. Karpinski. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 3, 037 003 (2003).
- [31] I.I. Mazin, J. Kortus. *Phys. Rev.* **B65**, 180 510(R) (2002).
- [32] T.P. Devereaux, D. Einzel. *Phys. Rev.* **B51**, 16 336 (1995).
- [33] R. Zeyher. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 107 002 (2003).
- [34] J. Menendez, M. Cardona. *Phys. Rev.* **B29**, 2051 (1984).
- [35] J.W. Quilty, S. Lee, S. Tajima, A. Yamanaka. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 207 006 (2003).
- [36] Q.R. Baron, H. Uchiyama, R. Heid, K.P. Bohnen, Y. Tanaka, S. Tsutsui, D. Ishikawa, S. Lee, S. Tajima. *Phys. Rev.* **B75**, 020 505(R) (2007).
- [37] I.I. Mazin, O.K. Andersen, O. Jepsen, A.A. Golubov, O.V. Dolgov, J. Kortus. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 107 002 (2002).
- [38] E. Maksimov, S. Shulga. *Solid State Commun.* **97**, 553 (1995).
- [39] Y.S. Ponomov, G.A. Bolotin, C. Thomsen, M. Cardona. *Phys. Status Solidi B* **208**, 257 (1998).
- [40] N. Caudal, A.M. Saitta, M. Lazzeri, F. Mauri. *Phys. Rev.* **B75**, 115 423 (2007).
- [41] A. Das, A.K. Sood, A. Govindaraj, A.M. Saitta, M. Lazzeri, F. Mauri, C.N. Rao. *Phys. Rev. Lett.* **99**, 136 803 (2007).