

ФОНОНЫ 3D КРИСТАЛЛА, ИНДУЦИРОВАННЫЕ 2D КРИСТАЛЛОМ

В.Н. Кушнир

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

Аннотация. В данной работе представлена концепция “сгущения” фононных мод сверхпроводящего материала с покрытием из графена. Двуслойный и твистированный заданным образом графен может обладать спектром акустических фононов, поляризованных ортогонально поверхности, почти полностью перекрывающимся с фононным спектром сверхпроводящего материала. В результате взаимодействия сверхпроводника (ниобия) с акустической ортогонально-поляризованной ветвью графена частотный спектр всей структуры модифицируется, но при этом сохраняется полное число фононных мод, распространяющихся как в ниобии, так и в графене. Ввиду слабого взаимодействия 3D и 2D кристаллов полагаем, что частотный диапазон нормальных колебаний кристаллической решетки ниобия изменяется достаточно слабо. Это приводит к увеличению числа нормальных колебаний в ниобии за счет привнесенных мод. В итоге имеем увеличение эффективной константы электрон-фононного взаимодействия, что означает увеличение критической температуры.

Ключевые слова: сверхпроводимость; ниобий; графен; динамическая матрица; секулярное уравнение; собственные частоты; нормальные колебания; поляризация; критическая температура; электрон-фононное взаимодействие.

PHONONS IN 3D CRYSTAL INDUCED BY 2D CRYSTAL

V.N. Kushnir

Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus

Abstract. In this paper, we present a concept of “thickening” the phonon modes of a graphene-coated superconducting material. Bilayer graphene twisted in a given manner can have a spectrum of acoustic phonons polarized orthogonally to the surface, which almost completely overlaps with the phonon spectrum of the superconducting material. As a result of the interaction of the superconductor (niobium) with the acoustic orthogonally polarized branch of graphene, the frequency spectrum of the entire structure is modified, but the total number of phonon modes propagating in both niobium and graphene is preserved. Due to the weak interaction of 3D and 2D crystals, we believe that the frequency range of normal vibrations of the niobium crystal lattice changes quite weakly. This leads to an increase in the number of normal vibrations in niobium due to the introduced modes. As a result, we have an increase in the effective constant of the electron-phonon interaction, which means an increase in the critical temperature.

Keywords: superconductivity; niobium; graphene; dynamic matrix; secular equation; eigen frequencies; normal vibrations; polarization; critical temperature; electron-phonon interaction.

Введение

Очевидно, элементы устройств сверхпроводниковой наноэлектроники и спинтроники должны обладать стабильными характеристиками. Между тем, как раз

для рабочих (нанометровых) толщин сверхпроводящих пленок наблюдаются наибольшие вариации критической температуры [1]. В связи с этим трудно переоценить значение обнаруженного эффекта стабилизации критической температуры тонкой пленки Nb при нанесении на нее графенового (G) покрытия [2]. Природа этого эффекта, казалось бы, очевидна: акустические фононные моды графена распространяются в ниобии; в результате плотность числа фононных состояний увеличивается; это приводит к увеличению эффективной константы электрон-фононного взаимодействия в сверхпроводнике (S), что, в свою очередь, влечет рост критической температуры. Между тем последовательное объяснение эффекта с позиции динамической теории кристаллической решетки оказывается крайне сложным. Здесь мы систематизируем основные положения нашей трактовки эффекта.

Основная часть

Пленку Nb с графеновым покрытием можно рассматривать как структуру S/I/G, где I – разупорядоченный диэлектрик, образованный различными окислами Nb. I-прослойка играет как пассивную роль, увеличивая расстояние между атомами углерода и ниобия, так и создает хаотические воздействия на них. В итоге рассматриваем структуру как слабо взаимодействующие 3D и 2D кристаллы. Полагаем, что воздействие 2D кристалла реализуется посредством распространения фононов, поляризованных в ортогональном поверхности направлении [2,3] (см. также ссылки в [2,3]). В результате такой редукции динамика кристалла Nb с графеновым покрытием будет определяться задачей на собственные векторы и собственные значения

$$\begin{pmatrix} D_{Nb} & D_{Nb,G} \\ D_{G,Nb} & D_G \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{Nb} \\ X_G \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} X_{Nb} \\ X_G \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где D_{Nb} – динамическая матрица Nb, и D_G – *редуцированная* матрица 2-мерного кристалла, $D_{Nb,G}$ – матрица взаимодействия, X_{Nb} и X_G – соответствующие вектор-столбцы отклонений от положений равновесия, λ – собственные значения, определяемые из секулярного уравнения.

Далее выполним «частичную» диагонализацию матрицы в левой части уравнения (1). А именно, представим матрицы слоев в виде

$$D_{Nb} = S_{Nb} \Lambda_{Nb} S_{Nb}^+, \quad (2)$$

$$D_G = S_G \Lambda_G S_G^+, \quad (3)$$

где $\Lambda_{Nb(G)}$ – диагональные матрицы из собственных значений для слоя Nb(G), а $S_{Nb(G)}$ – соответствующие унитарные матрицы из собственных векторов.

После этого система (1) преобразуется к виду

$$\begin{pmatrix} \Lambda_{Nb} - \lambda & V_{Nb,G} \\ V_{G,Nb} & \Lambda_G - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_{Nb} \\ Y_G \end{pmatrix} = 0, \quad (4)$$

где вектор-столбцы Y_{Nb} и Y_G получены из вектор-столбцов X_{Nb} и X_G соответствующими унитарными преобразованиями, преобразованные матрицы взаимодействия заданы формулами

$$V_{Nb,G} = S_{Nb}^+ D_{Nb,G} S_G, \quad (5)$$

$$V_{G,Nb} = S_G^+ D_{G,Nb} S_{Nb}. \quad (6)$$

Легко видеть, что уравнения (4) сводятся к уравнениям Дайсона, однако здесь мы акцентируем внимание на следующих элементарных фактах. Из структуры (4) следует: во-первых, число мод в 3D-кристалле увеличивается на число колебательных степеней свободы в ортогональном направлении 2D-кристалла плюс трансляционные моды (их количество равно числу слоев графена); во-вторых, следует полагать, что процесс генерации дополнительных мод оказывается не затухающим, поскольку амплитуда колебаний атомов углерода в графене содержит фактор $(M_{Nb}/M_C)^{1/2}$, где M_{Nb} и M_C – массы соответствующих атомов. Совсем не очевидным, между тем, является факт увеличения плотности числа фононных состояний. Здесь играют роль два обстоятельства: во-первых, спектр акустических мод графена, поляризованных в ортогональном направлении почти полностью перекрывается с фононным спектром ниобия; во-вторых, существенна (что, на первый взгляд, достаточно странно) слабость взаимодействия 3D и 2D кристаллов – следует полагать, что максимальные возмущенная и невозмущенная частоты в 3D кристалле мало отличаются друг от друга [3]. Этим как раз и следует объяснить эффект, полученный численно в [2] для одномерной цепочки, дополненной легкими атомами.

Заключение

Таким образом, в рамках представленной концепции «сгущения фононных мод» сверхпроводника вполне приемлемо объясняются экспериментальные данные, приведенные в [2].

Список использованных источников

1. Кушнир В.Н. (2010) *Сверхпроводимость слоистых структур*. Минск, Издательство БНТУ.
2. Prischepa S.L., Kushnir V.N., Cirillo C., Granata V., Komissarov I.V., Kovalchuk N.G., et al. (2021) Superconducting Critical Temperature and Softening of the Phonon Spectrum in Ultrathin Nb and NbN/Graphene Hybrids. *Superconductor Science and Technology*. IOP. 34, 115021-1–15.
3. Prischepa S.L., Kushnir V.N. (2023) Phonon softening in nanostructured phonon-mediated superconductors (review). *Journal of Physics: Condensed matter*. IOP. 35, 313003-1–54.

References

1. Kushnir V.N. (2010) *Superconductivity of Layered Structures*. Minsk, BNTU Publishing (in Russian).
2. Prischepa S.L., Kushnir V.N., Cirillo C., Granata V., Komissarov I.V., Kovalchuk N.G., et al. (2021) Superconducting Critical Temperature and Softening of the Phonon Spectrum in Ultrathin Nb and NbN/Graphene Hybrids. *Superconductor Science and Technology*. IOP. 34, 115021-1–15.
3. Prischepa S.L., Kushnir V.N. (2023) Phonon softening in nanostructured phonon-mediated superconductors (review). *Journal of Physics: Condensed matter*. IOP. 35, 313003-1–54.

Сведения об авторе

Кушнир В.Н., д-р физ.-мат наук, доц., проф., Белорусский государственный университет, vnkushnir@gmail.com.

Information about the author

Kushnir V.N., Dr. Sci. (Phys. Mat.), Associate Professor, Professor, Belarusian State University, vnkushnir@gmail.com.