

MnBi₂Te₄ KRİSTALLARINDA RAMAN AKTİV TEZLİKLƏRİNİN TEMPERATURDAN DƏYİŞMƏSİNDƏ İSTİDƏN GENİŞLƏNMƏNİN PAYI

¹Z.İ. BƏDƏLOVA, ²X.V. ƏLİQULİYEVƏ, ³A.X. RZAYEVƏ,
^{1,3}N.A. ABDULLAYEV

¹Fizika İnstitutu, Elm və Təhsil Nazirliyi, Bakı, Azərbaycan, AZ1143, H. Cavid pr., 131

²Sumqayıt Dövlət Universiteti, Sumqayıt, Azərbaycan, AZ5008, 43-cü m., Bakı küç., 1

³Bakı Dövlət Universiteti, Bakı, Azərbaycan, AZ1148, Z. Xəlilov küç., 23
abnadir@mail.ru

MnBi₂Te₄ monokristallarında Raman səpilməsi öyrənilmişdir. Raman tezliklərinin temperaturdan dəyişməsində fonon-fonon qarşılıqlı təsirin və istidən genişlənməsindən verdiyi paylar müəyyən olunub.

Açar sözlər: Raman səpilməsi, Raman-aktiv fononlar, istidən genişlənmə, anharmonizm, elastik modulu,

PACS: 63.20.kg, 64.70.kg, 65.40.De, 78.30._j

GİRİŞ

Məlum olduğu kimi, real kristallarda atomlar arasında qarşılıqlı təsir potensialı, bir qayda olaraq, qeyri-

harmonik formaya malikdir və buna görə də fonon tezlikləri ω temperaturla dəyişir. Bu dəyişiklik ümumi halda belə yazılır:

$$\frac{d\omega}{dT} = \left(\frac{\partial \omega}{\partial T} \right)_V + \left(\frac{\partial \omega}{\partial V} \right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = \left(\frac{\partial \omega}{\partial T} \right)_V + \alpha B \left(\frac{\partial \omega}{\partial p} \right) \quad (1)$$

burada α – istidən genişlənmə əmsalı, B - həcmi elastik modulu. (1)-dəki birinci toplanan fiksə olunmuş atomların tarazlıq vəziyyətində və güc sabitlərinin qiymətlərində fonon-fonon qarşılıqlı təsirin "aşkar" ("explicit") payını əks etdirir. İkinci toplanan, "dolaylı" ("implicit") pay, istidən genişlənməsi səbəbindən temperaturla bağlı olan atomlararası məsafənin və temperaturla güc sabitlərində dəyişikliklərlə bağlı olan tezlik qiymətlərinə təsirini əks etdirir. [1]-də göstərilmişdir ki, istidən genişlənmədən gələn kiçik bir pay kovalent kristallar və molekulyar kristallardakı "molekul daxili" rəqslər üçün xarakterikdir. [2]-də müəyyən edilmişdir ki, laylı GaS kristallarında Raman-aktiv fononların tezliklərinin temperaturdan asılılığına istidən genişlənməsinin payı kristal qəfəsdəki atomlararası rabitənin xarakterindən əhəmiyyətli dərəcədə asılıdır. Tezliyi vander-Vaals tipli təbəqələrarası zəif rabitə ilə müəyyən edilən fononlar üçün fonon tezliyinin temperaturda dəyişməsi əsasən (60-75%) istidən genişlənməsinin verdiyi pay ilə əlaqədardır. Laydaxili güclü rabitə ilə müəyyən edilən fonon tezliyinin temperaturda dəyişməsi əsasən (1)-dəki birinci toplanan payı ilə bağlıdır. Buna görə də, laylı MnBi₂Te₄ monokristallarında Raman-aktiv fononların ω tezliklərinin temperaturda ümumi dəyişməsində hər bir toplananın (1) rolunu müəyyən etmək maraqlı idi.

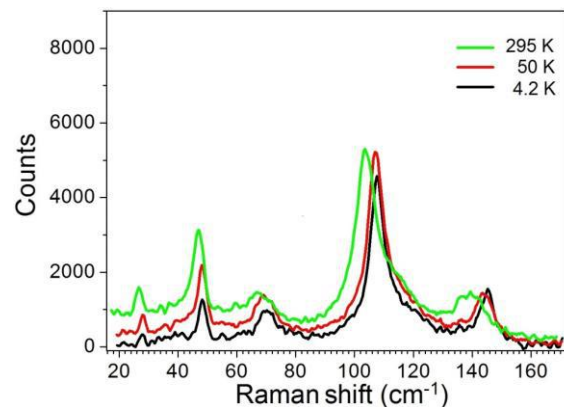
NƏTİCƏLƏR VƏ MÜZAKİRƏ

Şəkil 1-də 4.2, 50 və 295K [3] temperaturlarda MnBi₂Te₄ monokristallarının raman səpilməsi spektrləri göstərilib. Şəkil 2-də görüldüyü kimi, lay müstəvisində (E_g^1 , E_g^2 və E_g^3) və laylara perpendikulyar (A_{1g}^1 ,

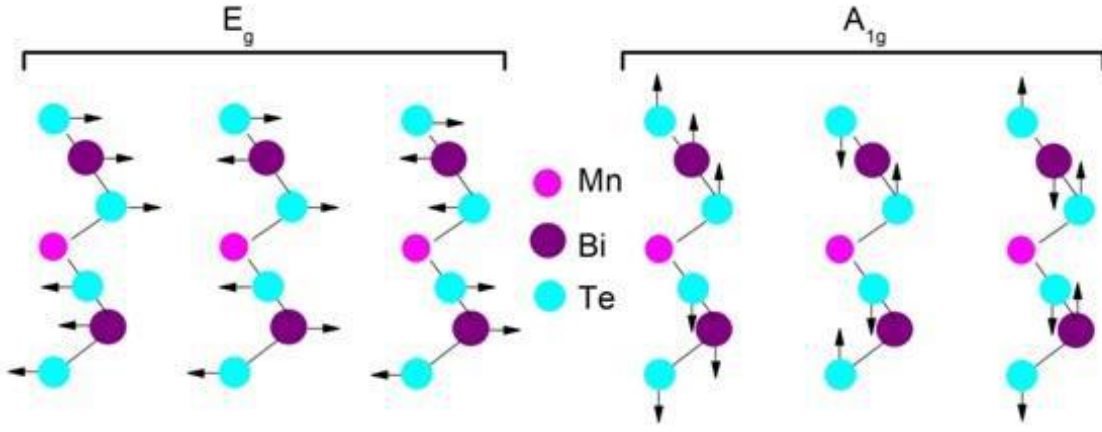
A_{1g}^2 və A_{1g}^3) olaraq atom yerdəyişmələri ilə bağlı olan altı raman aktiv fonon müşahidə olunur. $\Delta T=290K$ temperatur diapazonunda Raman-aktiv fononların tezliklərindəki dəyişikliklər $\Delta\omega/\omega$ Cədvəl 1-də verilmişdir.

Həcmi istidən genişlənmə əmsalının α qiyməti MnBi₂Te₄ monokristalları ilə izostruktur olan Bi₂Te₃ monokristallarının [4] həcmi istilik genişlənmə əmsalına bərabər götürülə bilər.

[4]-ə əsasən, laylar boyu xətti genişlənmə əmsalının qiyməti 300 K temperaturda $\beta_{||}=1.5 \cdot 10^{-5} K^{-1}$, laylara perpendikulyar olan xətti genişlənmə əmsalının qiyməti isə $\beta_{\perp}=2.17 \cdot 10^{-5} K^{-1}$ bərabərdir. Bu halda $\alpha=2\beta_{||}+\beta_{\perp}=5.17 \cdot 10^{-5} K^{-1}$. Həcmi elastik modulunun B və $\partial\omega/\partial p$ əmsallarının qiymətləri [5]-dən götürülüb.



Şəkil 1. $T=4.2K$, $50K$ və $295K$ temperaturlarda MnBi₂Te₄ monokristallarında Raman səpilmə spektrləri [3].



Şəkil 2. MnBi₂Te₄ monokristallarında Raman-aktiv modalarında atomların yerdəyişməsi.

Cədvəl 1.

MnBi₂Te₄ kristallarında Raman aktiv tezliklərinin A_{1g}^1 (48,3 sm⁻¹), E_g^3 (107.9 sm⁻¹) və A_{1g}^3 (144.6 sm⁻¹) qiymətlərinin ümumi (Total) dəyişməsinə istidən genişlənməsinin (TE) və fonon-fonon qarşılıqlı təsirinin (PPI) verdiyi paylar.

ω, cm^{-1} 300K	$\frac{\partial \omega}{\partial p}, \frac{\text{cm}^{-1}}{\text{GPa}}$	$B, [\text{GPa}]$	$\alpha, 10^{-5} \text{K}^{-1}$	$10^3 \frac{ \Delta \omega }{\omega}$ Total	$10^3 \frac{ \Delta \omega }{\omega}$ TE	$10^3 \frac{ \Delta \omega }{\omega}$ PPI	$\eta, \%$
48.3	1.44	51	5.17	31	18	13	58
107.9	1.63	51	5.17	37	11.6	15.4	31
144.6	1.94	51	5.17	39	10,2	28.8	26

Cədvəl 1-də MnBi₂Te₄ monokristallarında üç Raman tezliyinin temperatur asılılığı haqqında məlumat verilir: aşağı tezlikli E_g^2 (48,3 sm⁻¹) və yüksək tezlikli E_g^3 (107,9 sm⁻¹) və A_{1g}^3 (144,6 sm⁻¹). Cədvəl 1-dən göründüyü kimi, istidən genişlənməsinin tezliklərin temperatur asılılığına 58% aşağı tezlikli E_g^2 (48,3 sm⁻¹) moda

üçün verdiyi pay daha böyükdür. Yüksək tezlikli E_g^3 (107,9 sm⁻¹) və A_{1g}^3 (144,6 sm⁻¹) modalar üçün güclü laydaxili qarşılıqlı təsirlə bağlı olan pay əhəmiyyətli dərəcədə aşağıdır, bu da [1, 2]-dəki məlumatlara uyğundur.

[1] R. Zallen, E.M. Conwell. The effect of temperature on libron frequencies in molecular crystals: Implications for TTF-TCNQ. Solid State Communications, 1979, vol. 31, is. 8, pp. 557-561.

[2] N.A. Abdullayev, L.N. Alieva, R.A. Suleimanov. Thermal expansion and temperature dependence of Raman active modes in layer semiconductors. Phys. stat. sol. (b), 1985, vol. 129, is. 1, pp. K13-K16.

[3] A.A. Maksimov, I.I. Tartakovskii, Z.S. Aliev, I.R. Amiraslanov, N.A. Abdullayev, V.N. Zverev, Z.A.

Jahangirli, I.Yu. Sklyadneva, M.M. Otrokov, N.T. Mamedov and E.V. Chulkov. JETP Letters, 2023, vol. 118, № 5, pp. 357-362.

[4] L.M. Pavlova, Yu.I. Shtern, and R.E. Mironov. Thermal Expansion of Bismuth Telluride. High Temperature, 2011, vol. 49, № 3, pp. 369-379.

[5] C. Pei, Y. Xia, J. Wu, Y. Zhao, L. Gao, T. Ying, B. Gao, N. Li, W. Yang, D. Zhang, H. Gou, Y. Chen, H. Hosono, G. Li, Y. Qi. Pressure-Induced Topological and Structural Phase Transitions in an Antiferromagnetic Topological Insulator. Chin. Phys. Lett., 2020, vol. 37, № 6, p. 066401.

Z.I. BADALOVA, Kh.V. ALIQLIYEVA, A.X. RZAYEVA, N.A. ABDULLAYEV

CONTRIBUTION OF THERMAL EXPANSION IN THE CHANGE OF THE RAMAN ACTIVE FREQUENCIES WITH TEMPERATURE IN MnBi₂Te₄ CRYSTALS

Raman scattering in MnBi₂Te₄ single crystals was studied. The contributions of phonon-phonon interaction and thermal expansion in the change of Raman frequencies with temperature have been determined.

Qəbul olunma tarixi: 01.12.2023