

# MgB<sub>2</sub> 各向异性光学性质的第一性原理研究\*

尚学府 陶向明† 陈文斌 陈会贤 王 森 谭明秋

(浙江大学物理系 杭州 310027)

(2007 年 11 月 22 日收到 2008 年 1 月 24 日收到修改稿)

使用密度泛函第一性原理研究了超导体 MgB<sub>2</sub> 单晶各向异性的光学性质. 在描述光学性质的基本理论和计算方法的基础上, 计算了 MgB<sub>2</sub> 的光电导谱、反射谱以及电子能量损失谱, 并通过 MgB<sub>2</sub> 的各个原子分解态密度图对所得到的反射谱和损失谱的各个谱峰做了详尽地分析. 从光电导谱上来看, *x* 方向与 *z* 方向有着很大差别, 而在反射谱与电子能量损失谱中, *x* 方向与 *z* 方向的特征峰位置都是相互符合的. 从光导谱来看, 沿 *x* 方向的第一个带间吸收峰出现在 20000 cm<sup>-1</sup> 处, 而沿 *z* 方向出现在 40000 cm<sup>-1</sup> 处. 考虑到温度效应对其光学性质的影响, 在计算光学矩阵元时加入 Lorentz 展宽  $\delta = 0.10$  eV. 计算结果和最近实验结果有比较好的一致, 只是带间吸收谱峰位置和实验之间存在约 1000 cm<sup>-1</sup> (~0.124 eV) 的差别. 总体上该研究的计算结果从定性上和定量上都与最新各向异性光电导实验结果在误差范围内符合很好.

关键词: 超导体, 电子结构, 光学性质

PACC: 7120, 7420F, 7470E

## 1. 引 言

转变温度高达 39 K 的超导体 MgB<sub>2</sub> 一直都受到研究人员的广泛关注<sup>[1]</sup>. MgB<sub>2</sub> 的结构是石墨状硼原子层面间插入镁原子. 有同位素效应研究显示 MgB<sub>2</sub> 与声子中介的 BCS 理论相符<sup>[2]</sup>; 也有理论计算得出 MgB<sub>2</sub> 为金属型的能带结构, 费米面的态密度为 0.72 (states/eV), 推导出 MgB<sub>2</sub> 不完全符合 BCS 机理<sup>[3]</sup>, 因此 MgB<sub>2</sub> 还有很多问题有待研究. 理论<sup>[4,5]</sup>和实验<sup>[6-8]</sup>证实了 MgB<sub>2</sub> 具有双能隙结构. 较小的能隙  $\Delta_{\pi}$  来源于由硼原子沿 *z* 轴的 p<sub>z</sub> 轨道形成的三维 (3D)  $\pi$  键, 较大的能隙  $\Delta_{\sigma}$  来源于硼原子的 sp<sup>2</sup> 杂化轨道形成二维 (2D)  $\sigma$  键. 不同的实验<sup>[6-8]</sup>测量得到的  $\Delta_{\pi}$  和  $\Delta_{\sigma}$  能隙大小分别为 1.5—3.5 meV 和 6.0—7.5 meV.

光学性质的研究是了解 MgB<sub>2</sub> 物理性质的重要手段, 它是通过用光的探针作用来研究固体电子结构的实验. 其基本思想是通过光和电子的相互作用, 把导带电子激发到各种低能量的末态, 用光学测量

和数据反演来研究固体电子能带结构. 研究固体的光吸收可以直接获得有关电子能带结构、杂质缺陷态、原子振动等多方面的信息. 当光入射到固体表面时, 部分光被反射, 若入射光强为  $J_0$ , 反射光强为  $J'$ , 则有反射系数  $R = J'/J_0$ . 反射系数对频率的依赖关系定义为反射谱  $R(\omega)$ . 当光进入固体以后, 由于部分被吸收, 所以光强随进入固体的深度  $x$  而衰减,  $I(x) = J_0(1 - R)e^{-\alpha x}$ , 其中  $\alpha$  为吸收系数, 吸收系数  $\alpha$  随  $\omega$  的依赖关系  $\alpha(\omega)$  称为吸收谱.

由于 MgB<sub>2</sub> 晶体为六角密排结构, 其 *c* 轴与 *a* 轴长度非常接近, 所以生长出具有取向的 MgB<sub>2</sub> 单晶是非常困难的工作. 因此长期以来, 由于单晶生长的难度, 对于 MgB<sub>2</sub> 光学性质的实验研究进展缓慢, 而对于多晶的测量包含了各个晶体方向的贡献, 其实实验结果对于基础理论研究缺乏重要性. 相对而言, 由于现代计算机科学和技术的进步和程序水平的提高, 在基本物理性质的研究上, 基于密度泛函理论电子结构计算在预言某些物理性质方面具有明显的优势. 事实上, 正确可靠的理论计算可以指导实验顺利快捷地进行, 也可以为实验提供强有力的理论佐证. 为了对更进一步在了解 MgB<sub>2</sub> 的性质, 能为实验

\* 国家自然科学基金(资助号:10204018)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: taoxmm@tom.com

寻找出更好的条件,我们用第一性原理全面地计算研究了 MgB<sub>2</sub> 的光学性质,得到了光电导谱、光反射谱以及电子能量损失谱的系列结果.根据我们计算所得数据,我们发现计算得到的数据与其他计算方法所得到的较为接近,和实验数据有些微差别,由于这些差别是偏向一个方向的,所以我们认为这样的差别可能来自系统误差.在 MgB<sub>2</sub> 的各向异性光学性质方面,我们通过计算给出了非常全面的详尽的数据.我们也曾经通过理论计算成功得到 MgCNi<sub>3</sub> 的电子结构、光学性质与超导电性方面的性质<sup>[9]</sup>,后来在 MgCNi<sub>3</sub> 的多晶样品上的光学测量基本上得到了验证<sup>[10]</sup>.

## 2. 计算方法

本文包含的所有计算都使用了密度泛函理论的全电势线性化缀加平面波方法(full-potential linearized augmented plane wave, FLAPW)的计算代码 WIEN2k<sup>[11]</sup>. FLAPW 方法以 Kohn-Sham 密度泛函理论为基础,将晶胞划分为非重叠的以原子为中心的 muffin-tin 原子球和剩余的球间区域.在 muffin-tin 球区域,电荷密度与势函数按球谐函数展开,基函数为原子径向和球谐部分的乘积.在球间区,由于势场变化比较平缓,采用平面波来展开其电荷密度、势函数和基函数.交换关联能部分的计算包含了由 Perdew, Burke 和 Ernzerhof 提出的广义梯度近似<sup>[12]</sup>(文献中称为 GGA 96 或 GGA-PBE).波矢  $k$  空间(也就是布里渊区)的求和采用线性四面体积分法.在自洽计算过程中,使用的  $k$  空间的取样点的网格化密度  $k$ -mesh 为  $20 \times 20 \times 16$ .平面波展开到  $K_{\max} R = 8$ ,其中  $K_{\max}$  为最大展开波矢量的大小, $R$  为最小的原子球半径.计算中使用的 Mg 和 B 原子的非接触原子球半径分别为 2.34 a.u. 和 1.67 a.u..在计算光学矩阵元时把自洽计算中的  $k$  空间网格密度加倍,以提高计算精度.

MgB<sub>2</sub> 的结构模型如图 1 所示,属于六角密堆的结构,Mg 原子和 B 原子分别占据  $1a(0,0,0)$  和  $2d(1/3, 2/3, 1/2)$  位置,重复单元数  $Z = 1$ ,即每个元胞含有一个分子式的 MgB<sub>2</sub>.MgB<sub>2</sub> 空间群代码是  $191(P6/mmm)$ <sup>[13]</sup>.由 X 射线及早期的结构分析得出的晶格参数分别为  $a = 0.3086 \text{ nm}$ ,  $c = 0.3524 \text{ nm}$ <sup>[14]</sup>.

光电导率张量计算的基本公式由 Wang 等<sup>[15]</sup>在 Kubo 的线性响应理论<sup>[16]</sup>基础上提出的,它将电子贡

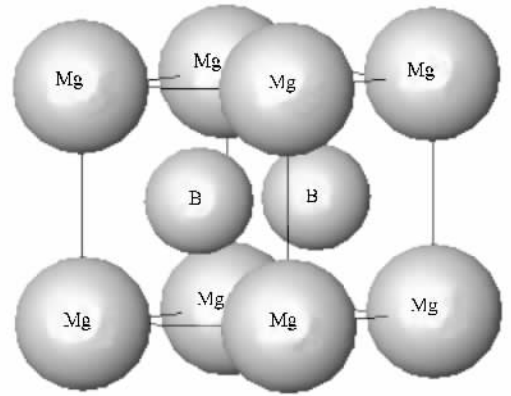


图 1 MgB<sub>2</sub> 的原子结构模型

献的光电导率张量分解为带间跃迁和带内跃迁两部分,分别用  $\sigma_{\text{inter}}$  和  $\sigma_{\text{intra}}$  表示.其中带间部分  $\sigma_{\text{inter}}$  可以表示为

$$\begin{aligned}
 (\sigma_{\text{inter}})_{xx}(\omega) &= \frac{ie^2}{m^2 \hbar} \sum_k \sum_{l\sigma_1}^{\text{occ}} \sum_{n\sigma_2}^{\text{unocc}} \frac{1}{\omega_{n\sigma_2/l\sigma_1}(k)} \\
 &\times \left( \frac{|\Pi_{l\sigma_1 n\sigma_2}^x(k)|^2}{\omega - \omega_{n\sigma_2/l\sigma_1}(k) + i\delta} + \frac{|\Pi_{l\sigma_1 n\sigma_2}^x(k)|^2}{\omega + \omega_{n\sigma_2/l\sigma_1}(k) + i\delta} \right), \\
 (\sigma_{\text{inter}})_{xy}(\omega) &= \frac{ie^2}{m^2 \hbar} \sum_k \sum_{l\sigma_1}^{\text{occ}} \sum_{n\sigma_2}^{\text{unocc}} \frac{1}{\omega_{n\sigma_2/l\sigma_1}(k)} \\
 &\times \left( \frac{\Pi_{l\sigma_1 n\sigma_2}^x(k) \Pi_{n\sigma_2/l\sigma_1}^y(k)}{\omega - \omega_{n\sigma_2/l\sigma_1}(k) + i\delta} + \frac{(\Pi_{l\sigma_1 n\sigma_2}^x(k) \Pi_{n\sigma_2/l\sigma_1}^y(k))^*}{\omega + \omega_{n\sigma_2/l\sigma_1}(k) + i\delta} \right),
 \end{aligned}$$

$\Pi_{l\sigma_1/n\sigma_2}$  是正则动量算符在 Bloch 态  $(l, \sigma_1)$  和  $(n, \sigma_2)$  之间的跃迁矩阵元:

$$\begin{aligned}
 \Pi_{n\sigma_2/l\sigma_1}(k) &= \int \psi_{n\sigma_2}^*(r) \\
 &\times \left[ \mathbf{p} + \left( \frac{\hbar}{4mc^2} \right) [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(r)] \right] \\
 &\times \psi_{l\sigma_1}(r) dr,
 \end{aligned}$$

其中  $\psi_{n\sigma_2}(r)$  是 Bloch 态波函数,可以由密度泛函计算得到,而  $(l, \sigma_1)$  和  $(n, \sigma_2)$  分别为占据态(occ)和非占据态(unocc)的能带指标和自旋指标.式中出现的  $\delta$  就是通常数学中的  $0^+$ ,数学上表示从正方向趋近于 0 的极限过程,实际计算中  $\delta$  通常取一足够小的

正数. 带内部分项通常用如下形式的 Drude 项表示:

$$\sigma_{\text{intra}}(\omega) = \frac{1}{4\pi} \frac{\omega_p^2 / \tau_D}{1 - i\omega\tau_D},$$

其中  $\omega_p$  为等离子体频率,  $\tau_D$  为载流子寿命.  $\sigma_0 = \omega_p^2 / 4\pi\tau_D$  为零频直流电导, 通常可以由输运测量外推到绝对零温度得到.  $\tau_D$  也称为 Drude 展宽, 在计算时可以适当选取. 根据电磁学理论, 光电导率  $\alpha(\omega)$  和复介电函数  $\epsilon(\omega)$  通过下式联系起来:

$$\alpha(\omega) = -\frac{i\omega}{4\pi} (\epsilon(\omega) - 1),$$

同时, 复介电函数  $\epsilon(\omega)$  和复折射率  $N(\omega)$  满足简单的平方关系  $\epsilon(\omega) = N^2(\omega)$ . 实验上能够直接测量的物理量是反射率  $R$ , 由反射光的强度和入射光强度之比率决定, 理论上它是复反射系数振幅  $\chi(\omega)$  的平方. 复反射系数  $\chi(\omega) e^{i\theta(\omega)}$  (其中  $\theta(\omega)$  为复反射系数的位相) 和复折射率  $N(\omega)$  之间存在下面的关系:

$$\chi(\omega) e^{i\theta(\omega)} = \frac{N(\omega) - 1}{N(\omega) + 1}.$$

也就是说, 根据第一性原理得到的 Bloch 态, 由矩阵元的求和可以逐步得到代表固体的各种光学性质的物理量. 同时, 根据由因果律导致的 Kramers-Kronig 关系, 可以得到同一个复光学系数, 例如复反射系数的振幅和位相之间就有如下的色散关系:

$$\theta(\omega) = \frac{\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\ln R(s) - \ln R(\omega)}{\omega^2 - s^2} ds,$$

其中  $R(\omega) = \chi^2(\omega)$ , 其中积分号前的  $P$  表示主值积分.

### 3. 计算结果

图 2、图 3 和图 4 分别给出了由密度泛函第一性原理计算得出的  $\text{MgB}_2$  的光电导谱、反射谱和电子能量损失谱. 由光电导谱可以看出:  $z$  方向的等离子体吸收峰从零频快速衰减到几乎为零, 而此时的带间吸收还没有出现. 和  $\text{MgB}_2$  在  $z$  方向的能带结构<sup>[3]</sup> 相对应, 该方向的带内吸收和带间吸收的转换出现在  $20000 \text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 2.5 \text{ eV}$ ) 左右. 而  $x$  方向的光电导谱却和  $z$  方向表现出完全不同的行为: 等离子体吸收还是从零频开始下降到  $20000 \text{ cm}^{-1}$  时出现了一个和带间吸收相联系的光电导谱峰.  $40000 \text{ cm}^{-1}$  右方又出现第二个  $x$  方向的带间吸收, 超过  $50000 \text{ cm}^{-1}$  时带间吸收迅速增强, 大量的由占据态到空的  $\text{Mg } 3s$  和  $\text{B } 2p$  态的光吸收出现. 事实上, 对于  $z$  方向的光

电导, 在  $40000 \text{ cm}^{-1}$  以后强度增大, 然后迅速下降以至于在  $50000 \text{ cm}^{-1}$  以后低于  $x$  方向的光电导. 从图 3 反射谱可以看出: 由反射谱的等离子体频率边缘和光电导谱的 Drude 峰指示着  $\text{MgB}_2$  存在着类金属性质. 沿平面  $x$  方向的反射率可以观察到, 反射率随着入射光的波数增加逐渐减小, 在  $32000 \text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 4.0 \text{ eV}$ ) 左右降为最低, 而后反射率渐渐增强至 50%. 在波数为  $16000 \text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 2.0 \text{ eV}$ ) 附近出现一个较弱带内吸收, 带内吸收与带间吸收的转换出现在  $32000 \text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 4.0 \text{ eV}$ ) 附近.  $46000 \text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 5.7 \text{ eV}$ ) 附近有一个强的带间吸收峰, 与  $x$  方向相对应的沿  $z$  方向, 带间吸收峰明显少于  $x$  方向, 从零频开始直到  $10000 \text{ cm}^{-1}$  左右几乎不存在吸收, 尔后反射率迅速降低, 在  $21000 \text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 2.6 \text{ eV}$ ) 附近出现低谷, 带内吸收与带间吸收发生转换. 在  $21000 \text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 2.6 \text{ eV}$ ) 以后反射率渐渐变大, 直至  $40000 \text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 5.0 \text{ eV}$ ) 左右. 从  $40000 \text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 5.0 \text{ eV}$ ) 之后, 光反射率  $R$  保持平稳, 约为 50%.

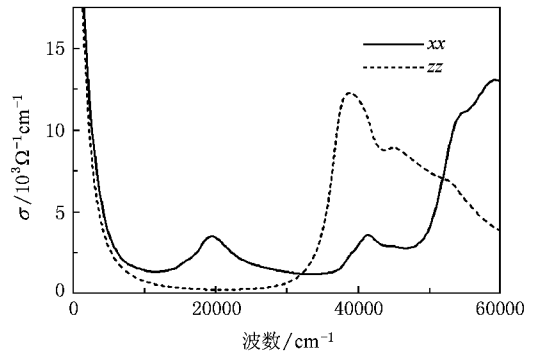


图 2  $\text{MgB}_2$  的光电导谱

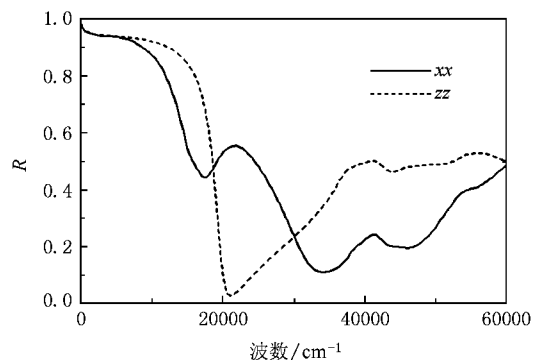
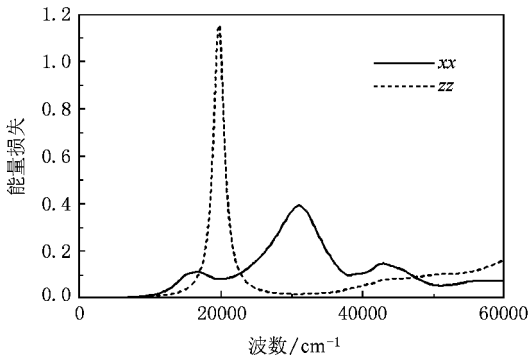


图 3  $\text{MgB}_2$  沿  $x$  方向与沿  $z$  方向的反射谱

图 4 所示为  $xx$  和  $zz$  方向的电子能量损失谱 (electron energy loss spectrum, EELS). 理论上电子能

图4 MgB<sub>2</sub> 沿  $x$  方向与沿  $z$  方向的电子能最损失谱

量损失函数定义为负的复介电函数倒数虚部,即

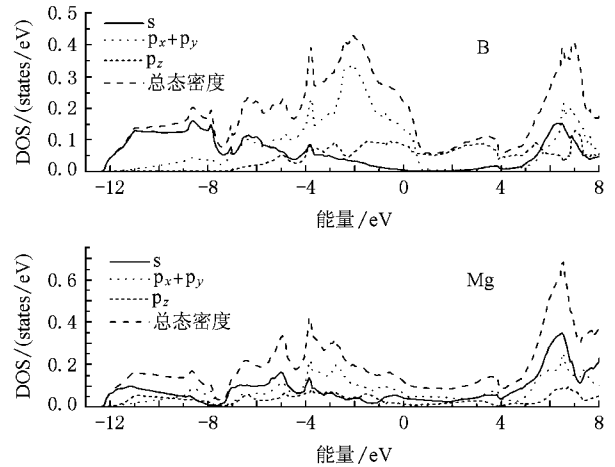
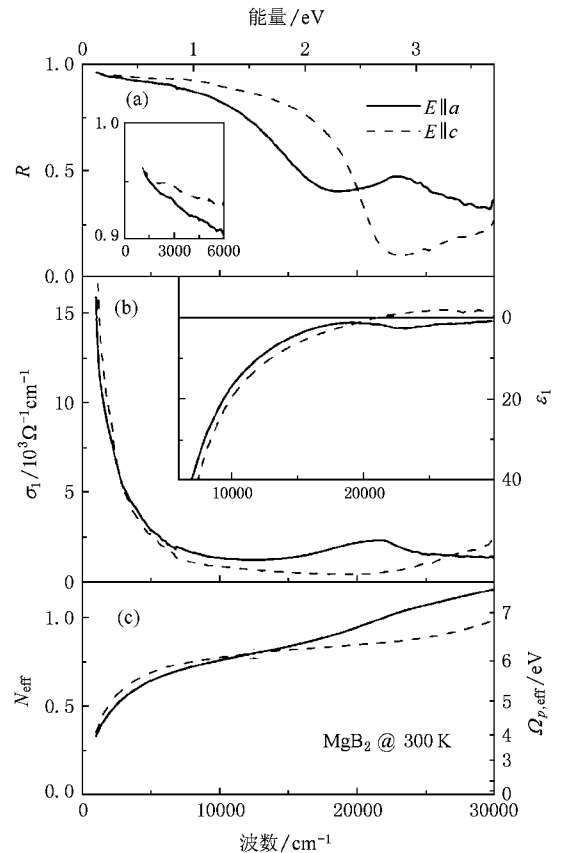
$$\text{EELS}(\omega) = -\text{Im}\left(\frac{1}{\epsilon(\omega)}\right) \\ = \frac{\epsilon''(\omega)}{(\epsilon'(\omega))^2 + (\epsilon''(\omega))^2}$$

EELS 物理上代表了荷电粒子以一定速度通过固体时的能量损失.由图可以看出:电子能量损失谱与反射谱是对应的,反射率小的地方,带间吸收作用比较强烈,从而电子能量的损失也就严重.所以由电子能量损失谱,我们可以得到和反射谱同样的结论. MgB<sub>2</sub> 是极性晶体,对称性分析表明具有 3 支具有红外活性的晶格振动模式,可以预见它们对 MgB<sub>2</sub> 晶体的光学性质有一定的贡献,可是我们目前的密度泛函理论计算尚无法将其纳入到最后的光电导谱的结果之中.事实上,这些模式的波数和强度都非常有限,其贡献往往是淹没在等离子体吸收中而无法辨认,因此本文暂时忽略其作用和影响.看起来计算结果与实验观测数据以及其他理论数据<sup>[17]</sup>符合得比较好,从而在理论上进一步验证了实验结果.

## 4. 讨论与结论

计算中,我们用  $20 \times 20 \times 16$  的  $k$ -mesh 做了一个自洽计算,从而得到 MgB<sub>2</sub> 的电荷密度以及波函数.这些结果导致的能带和电子态密度和我们先前的工作完全符合.而光学性质的计算显得比较繁复,其中牵涉到大量的光学跃迁矩阵元的计算.为了提高计算精度,在计算光学跃迁矩阵元时使用的  $k$ -mesh 密度比自洽计算时的加倍.按照我们自洽计算的结果,沿  $x$  方向和沿  $z$  方向的 Drude 等离子频率  $\omega_p$  分别为 7.12 eV 和 6.80 eV,  $1/\tau_D$  取为 0.20 eV.这个选取和通常对这个问题的处理是一致的<sup>[18]</sup>,可以

得到比较可信的计算结果.为了描述温度效应对这些谱的影响,通常的做法是做一个 Lorentz 展宽,具体处理就是在前面计算光学跃迁矩阵元对于  $\delta$  取适当大小的数值.本文计算所取的  $\delta = 0.10$  eV.

图5 MgB<sub>2</sub> 晶体中 B 原子和 Mg 原子的分解态密度以及总态密度图6 分光镜椭圆分光法测量的光电导谱以及反射谱<sup>[17]</sup>

从 Mg 原子与 B 原子的分解态密度和总态密度图(图 5)可知:  $xx$  方向,反射谱在  $18000 \text{ cm}^{-1}$

(2.2 eV)附近的一个较小的吸收峰和损失谱在  $18000\text{ cm}^{-1}$  (2.2 eV)附近的损失峰可以归结为主要由 Mg 原子的 s 态的贡献,以及 B 原子  $p_x$  态和  $p_y$  态的一些影响;反射谱在  $33000\text{ cm}^{-1}$  (4.2 eV)附近的吸收峰和损失谱在  $31000\text{ cm}^{-1}$  (3.8 eV)附近的损失峰主要是由于 Mg 原子中的电子在 s 态以及  $p_x$  态和  $p_y$  态的跃迁造成的,B 原子的贡献非常的有限;对于  $46000\text{ cm}^{-1}$  (5.7 eV)以及  $43000\text{ cm}^{-1}$  (5.3 eV)处反射谱和损失谱又出现一个较微弱的峰,Mg 原子和 B 原子的 s 态、 $p_x$  态和  $p_y$  态都有贡献,由态密度分解图分析,认为 B 原子的  $p_x$  态和  $p_y$  态的贡献较大.对于  $zz$  方向,谱峰数目较  $xx$  方向的少,是由于在  $z$  方向的态密度的波动要小于  $xy$  方向.反射谱中出现在  $21000\text{ cm}^{-1}$  (2.6 eV)处的吸收峰和损失谱中出现在  $20000\text{ cm}^{-1}$  (2.5 eV)处的损失峰,主要是由 B 原子中的电子在  $p_z$  态内的跃迁所造成的.

我们的计算可以达到很高的能量,为了和实验对比,更高的波数是没有实际意义的,所以文中只列出  $0\text{--}60000\text{ cm}^{-1}$  区间的数.通过与实验数据(图 6)的对比,发现在所有的特征峰之间,计算和实验数

据存在着大约  $1000\text{ cm}^{-1}$  ( $\sim 0.124\text{ eV}$ )的差别.我们同时注意到,这个差别是朝向一个方向的,所以这样的差别应该可以看做是实验系统误差.在光电导谱中,我们看出实验<sup>[17]</sup>中在波数为  $2500\text{ cm}^{-1}$ 处, $x$  方向与  $z$  方向上的光电导率有一个交叉,而理论计算结果, $z$  方向的光电导率始终低于  $x$  方向上的光电导率.实验数据中, $z$  方向上从  $25000\text{ cm}^{-1}$ 波数时,光电导率开始上升;在  $27000\text{ cm}^{-1}$ 波数时, $z$  方向的光电导率超过了  $x$  方向上的光电导率.理论计算的结果,在  $15000\text{--}30000\text{ cm}^{-1}$ 之间的光电导率十分平稳.理论计算的结果与实验的反射谱比较,同样存在着系统的误差,但差别要小于光电导谱的差别.从相互结果的对比,可以看出理论与实验相差不大,符合得很好.

本文使用密度泛函第一性原理,研究了  $\text{MgB}_2$  的光电导谱、反射谱以及电子能量损失谱等光学性质,结果与实验符合得很好,并且给出了更加丰富的细节.理论计算使用以及都得到的各种参数得以成功地模拟以及预言了  $\text{MgB}_2$  的光学性质,这些参数和结果对于实验研究有着很好的参考作用.

- [ 1 ] Nagamatsu J , Nakagawa N , Muranaka T , Zenitani Y , Akimitsu J 2000 *Nature* **410** 63
- [ 2 ] Bud'ko S L , Lapetot G , Petrovic C , Cunningham C E , Anderson N , Canfield P C 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 1877
- [ 3 ] Tan M Q , Tao X M 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** R1193 ( in Chinese ) [ 谭明秋、陶向明 2001 物理学报 **50** R1193 ]
- [ 4 ] Liu A Y , Mazin I I , Kortus J 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 087005
- [ 5 ] Choi H J , Roundy D , Sun H , Cohen M L , Louis S G 2002 *Phys. Rev. B* **66** 020513 ( R )
- [ 6 ] Bouquet F , Wang Y , Fisher R A , Hinks G , Jorgensen J D , Junod A , Philips N E 2001 *Europhys. Lett.* **56** 856
- [ 7 ] Gonnelli R S , Daghero D , Ummarino G A , Stepanov V A , Jun J , Kazakov S M , Karpinski J 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 247004
- [ 8 ] Quilty J W , Lee S , Tajima S , Yamanaka A 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 207006
- [ 9 ] Tan M Q , Tao X M , Xu X J , He J H , Ye G X 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 463 ( in Chinese ) [ 谭明秋、陶向明、徐小军、何军辉、叶高翔 2003 物理学报 **52** 463 ]
- [ 10 ] Zheng P , Luo J L , Liu G T , Zhang Y L , Yu R C , Jin C Q , Wang N L , Tan M Q 2005 *Phys. Rev. B* **72** 92509
- [ 11 ] <http://www.wien2k.at>
- [ 12 ] Perdew J P , Burke K , Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865  
Perdew J P , Burke K , Ernzerhof M 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1396
- [ 13 ] Hahn T ( edited ) 1983 *International Tables for Crystallography* , Vol. A , D. Reidel Publishing Company , Dordrecht
- [ 14 ] Jones M , Marsh R 1954 *J. Amer. Chem. Soc.* **76** 2434
- [ 15 ] Wang C S , Callaway J 1974 *Phys. Rev. B* **9** 4897
- [ 16 ] Kubo R 1957 *J. Phys. Soc. Jpn.* **12** 570
- [ 17 ] Guritanu V , Kuzmenko A B , van der Marel D , Kazakov S M , Zhigadlo N D , Karpinski J 2006 *Phys. Rev. B* **73** 104509
- [ 18 ] Cai J Q , Tao X M , Chen W B , Zhao X X , Tan M Q 2005 *J. Mag. Mater.* **292** 476

# *Ab-initio* investigation of anisotropic optical properties of $\text{MgB}_2$ \*

Shang Xue-Fu Tao Xiang-Ming<sup>†</sup> Chen Wen-Bin Chen Hui-Xian

Wang Miao Tan Ming-Qiu

( Department of Physics , Zhejiang University , Hangzhou 310027 , China )

( Received 22 November 2007 ; revised manuscript received 24 January 2008 )

## Abstract

The density functional theory and full-potential linearized augmented plane wave ( FLAPW ) method are used to study the anisotropic optical properties of superconductor  $\text{MgB}_2$ . The optical conductivity spectra ,the reflectivity spectra and electron energy loss spectra have been calculated. The calculated optical conductivity spectra along  $xx$ -axis display quite different features in comparison with that along the  $zz$ -axis ,while the reflectivity spectra coincide well with the corresponding electron energy loss spectra ,especially with respect to the characteristic peaks. In the optical conductivity spectra ,the first intra-band absorption peak along  $xx$ -axis appears at  $20000 \text{ cm}^{-1}$  while along  $zz$ -axis it appears at a high frequency of about  $40000 \text{ cm}^{-1}$ . In order to simulate the temperature effect in these spectra ,the Lorentz expansion (  $\delta = 0.10 \text{ eV}$  ) is added to the optical matrix elements in the calculation for 0 K. In comparison with existing experimental data ,a minor discrepancy of  $1000 \text{ cm}^{-1}$  (  $\sim 0.124 \text{ eV}$  ) has been found in the calculated optical spectra.

**Keywords** : superconductor , electronic structure , optical property

**PACC** : 7120 , 7420F , 7470E

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10204018 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail taoxmm@tom.com