

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P17-87-444

В.Л.Аксенов, Н.М.Плакида, С.Флах

**МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ
СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА
В La_2CuO_4**

1987

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование перовскитоподобных соединений $\text{La}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}_{4-\delta}$ ($\text{M} = \text{Ba}, \text{Sr}$) ведется уже в течение ряда лет /см. /1//. В последнее время интерес к ним значительно возрос в связи с открытием в них высокотемпературной сверхпроводимости /^{2,3}/ . Как показывают структурные исследования /⁴⁻⁶/ , кристалл La_2CuO_4 при температурах $T < T_0 \approx 533 \text{ K}$ имеет орторомбическую структуру /пр. группа $D_{2h}^{18} - \text{Cmca}$, а при $T = T_0$ испытывает структурный фазовый переход /СФП/ в тетрагональную фазу со структурой типа K_2NiF_4 /пр. группа $D_{4h}^{17} - \text{I4/mmm}$). При введении примесей Sr температура СФП T_0 понижается почти линейно с концентрацией примесей x и обращается в ноль при $x \approx 0,2$ /⁷/ . Сильное влияние на значение T_0 оказывают также вакансии кислорода, концентрация которых δ зависит от способа приготовления образца /¹/ .

Интересно отметить, что максимальная температура сверхпроводящего перехода $T_c \approx 35 \text{ K}$ /⁸/ в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ также наблюдается при $x \approx 0,2$. Помимо изменения электронной зонной структуры при замене La^{3+} на Ba^{2+} или Sr^{2+} /см. /^{9,10}// , появление структурной неустойчивости при $T_0 \approx 0$ для $x = 0,2$ может также приводить к повышению T_c , как это неоднократно обсуждалось в литературе. В частности, в работах /¹¹/ было исследовано влияние СФП на температуру T_c в рамках ангармонической модели сверхпроводника. В работе /¹²/ на основе этой модели была проведена оценка T_c для соединений La-Ba-Cu-O и Y-Ba-Cu-O . В связи с этим представляет интерес более детально исследовать СФП в La_2CuO_4 и построить его модельное описание.

Как показывают экспериментальные /⁴⁻⁶/ и теоретические /¹³/ исследования, СФП $D_{4h}^{17} \rightarrow D_{2h}^{18}$ в La_2CuO_4 обусловлен конденсацией в точке X зоны Бриллюэна мягкой моды, связанной с вращением октаэдров CuO_6 . В настоящей работе, учитывая этот механизм фазового перехода, предложена микроскопическая модель СФП в La_2CuO_4 , основанная на представлении локальной нормальной координаты для мягкой моды. Подобная модельная теория для мягких мод симметрии R_{25} и M_3 для кубических перовскитов типа SrTiO_3 рассматривалась в /^{14,15}/.

В разд. 2 вводится гамильтониан модели и определяются локальные нормальные координаты для мягкой моды. В разд. 3 вычислена частота мягких фононов, температура СФП T_0 и получено

уравнение для параметра порядка. В разд. 4 вычисляется свободная энергия и находится ее разложение по параметру порядка. В разд. 5 дается оценка параметров модели и обсуждается влияние примесей на СФП, а также роль электронов в СФП.

2. МОДЕЛЬ

Известно большое число СФП в перовскитоподобных соединениях $(A'X)_n ABX_3/\text{см.}$, например, $^{18}/$ /, обусловленных мягкими ротационными модами на границе зоны Бриллюэна. Эти моды представляют собой вращение достаточно жестких октаэдров BX_6 в ячейке, образованной катионами сорта А. Для описания таких СФП достаточно рассмотреть только колебания анионов сорта X в жесткой решетке остальных ионов. В случае La_2CuO_4 тетрагональная структура может быть представлена как наложение смещенных слоев октаэдров CuO_6 . Один такой октаэдр в окружении ионов La представлен на рис. 1. Имеются два неэквивалентных положения ионов кислорода, обозначенных как $\text{O}^{1,2}$ и O^3 соответственно. Расстояние $r_1(\text{Cu}-\text{O}^{1,2})$ в плоскости xy, равно $a/2$, существенно меньше, чем расстояние $r_3(\text{Cu}-\text{O}^3)$ вдоль оси z ($r_1 \approx 1,9 \text{ \AA}$ и $r_3 \approx 2,4 \text{ \AA}$ соответственно). Ионы $\text{O}^{1,2}$ имеют связь с двумя ближайшими ионами Cu в плоскости xy, а ион O^3 связан с ионом Cu и ионом La из соседнего слоя. Тетрагональная ячейка La_2CuO_4 /пр. группа D_{4h}^{17} / определяется параметрами $a = b = 2r \approx 3,81 \text{ \AA}$, $c = 2r_z \approx 13,24 \text{ \AA}$, а примитивная ячейка /содержащая одну формульную единицу, $z = 1/$ задается векторами трансляций:

$$\mathbf{a}_1 = (-\tau, \tau, \tau_z), \quad \mathbf{a}_2 = (\tau, -\tau, \tau_z), \quad \mathbf{a}_3 = (\tau, \tau, -\tau_z). \quad /1/$$

Как показывает симметричный анализ $^{18}/$, СФП $D_{4h}^{17} \rightarrow D_{2h}^{18}$ происходит с удвоением примитивной ячейки и определяется двухкомпонентным параметром порядка (c_1, c_2) компоненты которого соответствуют одномерному неприводимому представлению (τ_3) на двухлучевой звезде (\vec{q}_1, \vec{q}_2) волнового вектора в точке X зоны Бриллюэна:

$$\vec{q}_1 = \frac{\pi}{a}(1, 1, 0), \quad \vec{q}_2 = \frac{\pi}{a}(-1, 1, 0). \quad /2/$$

Физической реализацией параметра порядка является вращение октаэдра CuO_6 вокруг оси $[1, 1, 0]$ для луча \vec{q}_1 или $[1, 1, 0]$ для луча \vec{q}_2 в /2/. На рис. 2 показан поворот вокруг оси $[-1, 1, 0]$, который приводит к выходу ионов $\text{O}^{1,2}$ из базисной плоскости вдоль оси z и смещению иона O^3 в направлении $[1, 1, 0]$. Существенно отметить, что тепловые факторы для ионов кислорода в тет-

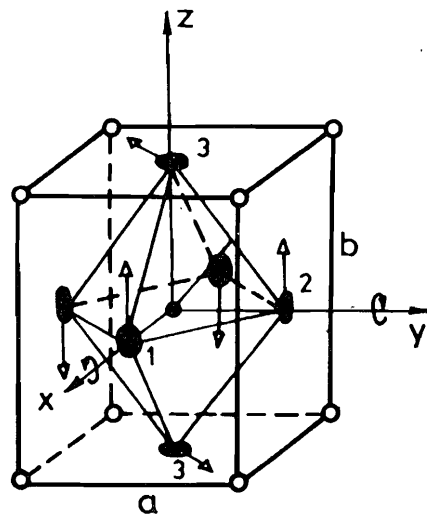
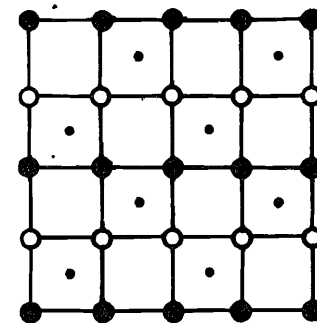


Рис. 1. Фрагмент тетрагональной структуры соединения La_2CuO_4 . В центре октаэдра CuO_6 помещен ион меди. Стрелками показаны смещения ионов кислорода при соответствующих вращениях октаэдра.

Рис. 2. Положение ионов кислорода в базисной плоскости при повороте октаэдра вокруг оси $[1, 1, 0]$. Черными точками показаны ионы меди, черными /светлыми/ кружками - ионы кислорода, смещенные по /против/ оси oz.



рагональной фазе имеют anomalно большие значения: $B = 1,5 \text{ \AA}^2/4/$ и сильно анизотропны: максимальные значения имеют $B_{zz}(\text{O}^{1,2})$ и $B_{xx}(\text{O}^3) = B_{yy}(\text{O}^3)$, что указывает на значительную амплитуду колебаний ионов кислорода в указанной мягкой моде.

Учитывая приведенные экспериментальные данные, для описания динамики ионов кислорода в мягкой ротационной моде можно воспользоваться модельным гамильтонианом

$$H = \sum_{\ell, k} \frac{m}{2} \dot{X}^2(\ell, k) + \frac{1}{2} \sum_{\ell, \ell', k, k'} \Phi_{kk}(\ell, \ell') X(\ell, k) X(\ell', k') + \frac{1}{4} \sum_{\ell, k} V X^4(\ell, k). \quad /3/$$

Здесь $X(\ell, k)$ - z-компоненты смещений ионов O^k ($k = 1, 2$) в примитивной ячейке ℓ . Движение ионов типа O^3 в ротационной моде учитывается с помощью перенормировки массы: $m = m_0 (1 + (r_3/r_1)^2) = 2,6 m_0$, где m_0 - масса кислорода. Взаимодействие смещений $\text{O}^{1,2}$ в примитивных ячейках $\ell \neq \ell'$ учитывается в гармоническом приближении с помощью силовой постоянной $\Phi_{kk}(\ell, \ell')$.

Ангармоническое взаимодействие взято в локальном приближении и описывается константой В.

Введем далее локальные нормальные координаты $R_\lambda(\ell)$, описывающие поворот октаэдра CuO_8 вдоль оси $\lambda = x, y$ /ср. с /14,15//

$$X(\ell, k) = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2m}} [\xi_k^\rightarrow X(R(\ell + a\xi_k^\rightarrow) - R(\ell))^\rightarrow]_z, \quad /4/$$

где $\xi_1^\rightarrow = (1, 0, 0)$, $\xi_2^\rightarrow = (0, 1, 0)$. Следовательно,

$$X(\ell, 1) = \frac{1}{2\sqrt{2m}} (R_y(\ell + a\xi_1^\rightarrow) - R_y(\ell)), \quad /4a/$$

$$X(\ell, 2) = \frac{1}{2\sqrt{2m}} (R_x(\ell + a\xi_2^\rightarrow) - R_x(\ell)).$$

Гамильтониан в новых координатах запишется в виде

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\ell, \ell', \lambda} \frac{1}{2} K_{\lambda\lambda}(\ell, \ell') P_\lambda(\ell) P_\lambda(\ell') + \\ & + \sum_{\ell, \ell', \lambda} \frac{1}{4} \Gamma_{\lambda\lambda}(\ell, \ell') (R_\lambda(\ell) - R_\lambda(\ell'))^2 + \\ & + \sum_{\ell, \ell', \lambda, \lambda'} \frac{1}{2} U_{\lambda\lambda'}(\ell, \ell') R_\lambda(\ell) R_{\lambda'}(\ell'), \end{aligned} \quad /5/$$

где

$$K_{\lambda\lambda}(q) = 1/\Theta_{\lambda\lambda}(q), \quad \Theta_{\lambda\lambda}(q) = \frac{1}{4} (1 - F_\lambda(q)),$$

$$\Gamma_{\lambda\lambda}(q) = \Gamma_0 \cdot F_\lambda(q), \quad F_x(q) = \cos q_y a, \quad F_y(q) = \cos q_x a, \quad /6/$$

$$\Gamma_0 = B/64m^2, \quad P_\lambda = \sum_{\ell'} \Theta_{\lambda\lambda}(\ell, \ell') R_\lambda(\ell').$$

Матрица $U_{\lambda\lambda'}(\ell - \ell')$ непосредственно связана с $\Phi_{kk'}(\ell - \ell')$ и имеет свойства:

$$U_{\lambda\lambda'}(q = 0) = \sum_{\ell'} U_{\lambda\lambda'}(\ell - \ell') = 0, \quad /7/$$

что позволяет рассматривать эту ротационную моду как акустическую моду, подобную моде R_{25} или M_3 в кубических перовскитах /см. /14,15//. При этом будем считать, что

$$U_{\lambda\lambda'}(q_1) = U_{\lambda\lambda'}(q_2) = -A \delta_{\lambda\lambda'} < 0. \quad /7a/$$

Соответствующая двукратно вырожденная мода колебаний с отрицательной гармонической частотой $\omega_0^2 = -A/m$ и определяет СФП в точке X для волновых векторов /2/. Конденсация этой моды при $T < T_0$ приводит к статическим смещениям

$$\langle R_x(\ell) \rangle = \langle R_y(\ell) \rangle = c_1 e^{i\vec{q}_1 \cdot \vec{\ell}}, \quad /8/$$

или

$$\langle R_x(\ell) \rangle = -\langle R_y(\ell) \rangle = c_2 e^{i\vec{q}_2 \cdot \vec{\ell}},$$

где (c_1, c_2) - компоненты параметра порядка в феноменологической теории /18/. Согласно /18/ возможны решения $c_1 \neq 0, c_2 = 0$ или $c_1 = 0, c_2 \neq 0$, которые соответствуют двум возможным доменам в орторомбической фазе.

3. МЯГКАЯ ФОНОННАЯ МОДА И ПАРАМЕТР ПОРЯДКА

Для определения частоты мягкой фононной моды в модели /5/ рассмотрим уравнение для функции Грина

$$G_{\lambda\lambda'}(\ell - \ell', t - t') = \langle\langle r_\lambda(\ell, t); r_{\lambda'}(\ell', t') \rangle\rangle, \quad /9/$$

где $r_\lambda(\ell) = R_\lambda(\ell) - \langle R_\lambda(\ell) \rangle$ и приняты обычные обозначения в методе двухвременных запаздывающих функций Грина /см., например, /17//. Учитывая уравнения для операторов $R_\lambda(\ell, t)$ в представлении Гейзенберга с гамильтонианом /5/ для функции Грина в (\vec{q}, ω) -представлении, получим

$$\begin{aligned} \omega^2 G_{\lambda\lambda'}(\vec{q}, \omega) = & K_{\lambda\lambda'}(\vec{q}) [\delta_{\lambda\lambda'} + \sum_{\lambda''} U_{\lambda\lambda''}(\vec{q}) G_{\lambda''\lambda'}(\vec{q}, \omega) + \\ & + 12\Gamma_0 (D_\lambda + 2R^2) (1 - F_\lambda(\vec{q})) \cdot G_{\lambda\lambda'}(\vec{q}, \omega) \}. \end{aligned} \quad /10/$$

Здесь было использовано приближение

$$\langle\langle r_\lambda^3(\ell); r_{\lambda'}(\ell') \rangle\rangle_\omega \approx 3 \langle r_\lambda^2 \rangle G_{\lambda\lambda'}(\ell - \ell', \omega)$$

и введена корреляционная функция

$$D_\lambda = \langle r_\lambda(\vec{\ell}) \cdot [r_\lambda(\vec{\ell}) - r_\lambda(\vec{\ell} + a\xi_\lambda^\rightarrow)] \rangle (\lambda' \neq \lambda). \quad /11/$$

При этом $R^2 = |\langle R_\lambda(\ell) \rangle|^2$. Смещения ионов $O^{1,2}$ связаны согласно /4/ с функцией /11/ соотношением

$$\langle u^2(\ell, k) \rangle = \frac{1}{4m} D_\lambda, \quad u(\ell, k) = X(\ell, k) - \langle X(\ell, k) \rangle, \quad /12/$$

Вводя собственные векторы $e_\lambda^\mu(q)$ и частоты $\Omega_\mu(q)$ согласно уравнению

$$\Omega_\mu^2(q) e_\lambda^\mu(q) = \sum_{\lambda'} \Phi_{\lambda\lambda'}(q) e_{\lambda'}^\mu(q), \quad /13/$$

где

$$\Phi_{\lambda\lambda'}(q) = U_{\lambda\lambda'}(q) + \delta_{\lambda\lambda'} \cdot 12\Gamma_0 (D_\lambda + 2R^2)(1 - F_\lambda(q)),$$

для функции Грина в /10/ получим выражение

$$G_{\lambda\lambda'}(q, \omega) = \sum_{\mu} e_\lambda^\mu(q) e_{\lambda'}^{\mu*}(q) \cdot (\omega^2 - \Omega_\mu^2(q))^{-1}. \quad /14/$$

Учитывая известные соотношения между корреляционными функциями и функциями Грина /см. /17/, для /11/ получаем

$$D_\lambda = \frac{1}{N} \sum_{q, \mu} (1 - F_\lambda(q)) e_\lambda^\mu(q) e_\lambda^\mu(-q) \frac{1}{2\Omega_\mu(q)} \coth \frac{\Omega_\mu(q)}{2T}. \quad /15/$$

Согласно /7а/ в уравнении /13/ $e_\lambda^\mu(q_1) = \delta_{\lambda, \mu}$. Поэтому в /15/ удобно перейти к новым волновым векторам $k = (q - q_1)$, полагая $e_\lambda^\mu(q) \approx e_\lambda^\mu(q_1)$ и $F_\lambda(q) \approx F_\lambda(q_1) = -1$. В этом приближении для /15/ получаем

$$D_\mu \approx \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\Omega_\mu(k)} \coth \frac{\Omega_\mu(k)}{2T}. \quad /15а/$$

При этом для частоты мягкой моды при $|\vec{k}| \rightarrow 0$ можем воспользоваться разложением

$$\Omega_\mu^2(k) = \Omega_0^2 + s_1 k_\mu^2 + s_2 k_{\lambda \neq \mu}^2 + s_3 k_z^2, \quad /16/$$

где $\mu = x(y)$, $\lambda = y(x)$. Дисперсия фононов вдоль оси вращения октаэдров μ обычно мала: $s_1 \ll s_2$. В силу слоистой структуры кристалла мала также дисперсия и вдоль оси z : $s_3 \ll s_2$. Частота мягкой моды в точке X определяется величиной

$$\Omega_0^2 = 24\Gamma_0 (D_\lambda + 2R^2) - A. \quad /17/$$

Для определения температуры СФП T_0 воспользуемся условием $\Omega_0(T_0) = 0$, которое приводит к уравнению

$$\frac{A}{24\Gamma_0} = D_\lambda(T_0) \approx \frac{2T_0}{N} \sum_k \Omega_\mu^{-2}(T_0, k) \equiv 2T_0 \left(\frac{3}{\omega_D^2} \right), \quad /18/$$

где приближенное равенство записано в классическом пределе для /15а/ и введена средняя /дебаевская/ частота ω_D , определяющая среднюю дисперсию мягкой моды /16/.

Уравнение для параметра порядка R можно получить из условия равновесия: $(d/dt) \langle F_\lambda(\ell, t) \rangle = 0$, которое приводит к уравнению:

$$16R^2 \Gamma_0 + 24\Gamma_0 D_\lambda - A = 0 \quad /19/$$

при $T < T_0$. Для $T > T_0$ имеем $R = 0$. Температурная зависимость параметра порядка при $T < T_0$ определяется согласно /19/ соотношением:

$$R^2(T) = R_0^2 \left(1 - \frac{24\Gamma_0}{A} D_\lambda(T) \right) \approx R_0^2 (1 - T/T_0), \quad /20/$$

где $R_0^2 = (A/16\Gamma_0)$ характеризует максимальное смещение ионов кислорода: $x_0 \approx R_0/\sqrt{2m}$ при $T \rightarrow 0$.

4. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ

Согласно феноменологической теории СФП в La_2CuO_4 /13/ свободная энергия F имеет вид:

$$F = F_c + F_{c\epsilon} + F_\epsilon \quad /21/$$

$$F_c = \frac{1}{2} (c_1^2 + c_2^2) + \frac{1}{2} u_1 c_1^2 c_2^2 + \frac{1}{4} u_2 (c_1^4 + c_2^4),$$

где $F_{c\epsilon}$ и F_ϵ - вклад деформации, которая здесь не рассматривается.

Чтобы получить микроскопическое выражение для параметров разложения в /21/, вычислим свободную энергию F_1 для гамильтониана /5/ с помощью вариационного принципа /18/.

$$F_1 = F_0 + \langle H - H_0 \rangle, \quad /22/$$

где H_0 - пробный гармонический гамильтониан, $F_0 = -T \ln \{ \text{Sp} \{ e^{-H_0/T} \} \}$. H_0 выберем в следующем виде:

$$H_0 = \sum_{\ell, \ell', \lambda} \frac{1}{2} K_{\lambda\lambda}(\ell, \ell') P_{\lambda}(\ell) P_{\lambda}(\ell') +$$

$$+ \sum_{\ell, \ell', \lambda, \lambda'} \frac{1}{2} U_{\lambda\lambda'}(\ell, \ell') r_{\lambda}(\ell) r_{\lambda'}(\ell') +$$

$$+ \sum_{\ell, \ell', \lambda} \frac{1}{2} T_{\lambda\lambda}(\ell, \ell') r_{\lambda}(\ell) r_{\lambda}(\ell').$$

/23/

где $T_{\lambda\lambda}(k) = \Delta \cdot (1 - F_{\lambda}(k))$. Для F_0 получим

$$F_0 = 2T/N \sum_k \ln \left\{ 2 \sinh \frac{\Omega_{\mu}(k)}{2T} \right\},$$

/24/

$$\Omega_{\mu}^2(k) = -A + 2\Delta + s_1 k_{\mu}^2 + s_2 k_{\lambda \neq \mu}^2 + s_3 k_z^2.$$

Расчет $\langle H - H_0 \rangle$ дает

$$\langle H - H_0 \rangle = 8\Gamma_0 R^4 + 6\Gamma_0 D_{\lambda}^2 + 24\Gamma_0 R^2 D_{\lambda} - \Delta \cdot D_{\lambda}.$$

/25/

Из вариационного условия $\partial F_1 / \partial \Delta = 0$ следует

$$\Delta = 12\Gamma_0 (D_{\lambda} + 2R^2),$$

/26/

$$F_1(R^2) = \frac{2T}{N} \sum_k \ln \left\{ 2 \sinh \frac{\Omega_{\mu}(k)}{2T} \right\} + 8\Gamma_0 R^4 - AR^2 - 6\Gamma_0 D_{\lambda}^2.$$

Проведем разложение $F_1(R^2)$ по R^2 :

/27/

$$F_1(R^2) = a(T)R^2 + \frac{1}{2}b(T)R^4 + \dots$$

С помощью /26/ определим $a(T)$ и $b(T)$:

$$a(T) = 24\Gamma_0 D_{\lambda} - A = \Omega_0^2(R=0),$$

/28/

$$b(T) = 16\Gamma_0 + 24\Gamma_0 \cdot \frac{2\nu}{1-\nu},$$

где

$$\nu(T) = 24\Gamma_0 / N \sum_k \left[\frac{1}{4T\Omega_{\mu}^2(k)} (1 - \coth^2 \frac{\Omega_{\mu}(k)}{2T}) - \frac{1}{2\Omega_{\mu}^3(k)} \coth \frac{\Omega_{\mu}(k)}{2T} \right]_{R=0} / 29/$$

Как видно, $a(T_0) = 0$, что согласуется с определением T_0 из условия /18/ $\Omega_0(T_0) = 0$. Параметр $\nu(T)$ в /28/ описывает вклад длинноволновых флуктуаций и при $T \rightarrow T_0$ $\nu(T \rightarrow T_0) \approx (T - T_0)^{-1/2}$ /см. /18/ /Учет этих флуктуаций /в отличие от приближения молекулярного поля в /14/ / приводит к СФП 1 рода: $b(T_0) = -32\Gamma_0 < 0$, что связано с принятым приближением самосогласованных фононов. С помощью /27/, /28/ можно выразить феноменологические параметры разложения через параметры модели:

$$\frac{1}{2}r = 24\Gamma_0 D_{\lambda} - A, \quad \frac{1}{2}u_2 = 16\Gamma_0 + 24\Gamma_0 \frac{2\nu}{1-\nu}. \quad /30/$$

Таким образом, предложенная нами модель позволяет рассмотреть и термодинамические характеристики системы при СФП.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенная в настоящей работе динамическая модель /3/, /5/ СФП $D_{4h}^{17} \rightarrow D_{2h}^{18}$ в La_2CuO_4 позволяет самосогласованным образом определить зависимость частоты мягкой ротационной моды /17/ и параметра порядка /20/ от температуры при небольшом числе модельных параметров. Используя экспериментальные данные /4,6,7/ для температуры СФП $T_0 \approx 530$ К и характерного значения смещений ионов 0 в низкотемпературной фазе $x_0 = R_0 / \sqrt{2m} \approx \approx 0,2 \pm 0,3 / \text{Å}$, можем оценить среднюю величину дисперсии фононов в /18/ $\omega_D^2 = 9/2 (T_0 / m x_0^2)$, что дает $\omega_D \approx 100$ мэВ. Эта оценка указывает на значительное увеличение частоты мягкой моды при удалении от точки X в зоне Бриллюэна, которое согласно /16/ должно происходить только в определенных направлениях.

Обсудим влияние примесей Ba, Sr на СФП. Поскольку введение примесей не приводит к линейным по $R_{\lambda}(\ell)$ членам в гамильтониане /5/, что непосредственно следует из симметрии мягкой ротационной моды и локальной симметрии для узлов La /см. рис.1, 2/, то следует ожидать, что наибольшее влияние при замене La^{3+} на Ba^{2+} /или Sr^{2+} / будут испытывать квадратичные члены по $R_{\lambda}(\ell)$ в /5/. Поскольку, согласно экспериментальным данным /7/, $T_0(x) \approx T_0(1 - \alpha x)$, где $\alpha \approx 4$, то, учитывая соотношение /18/ /в классической области/, можем принять $A(x) \approx A_0(1 - \alpha x)$, предполагая, что как ангармоническое взаимодействие В /обусловленное короткодействующим отталкиванием/, так и взаимодействие смещений ионов 0 в различных ячейках (ω_D) слабо зависят от введения примесей. При этом уменьшение $T_0(x)$ с ростом x приводит к росту частоты мягкой моды $\Omega_0(x) \approx \Omega_0(1 + \beta x)$ и усилению роли нулевых колебаний, стабилизирующих решетку. Такая зависимость частоты мягкой моды позволяет качественно

объяснить и зависимость температуры сверхпроводящего перехода $T_c(x)$ в $La_{2-x}Sr_xCuO_{4-\delta}$ /8/. Согласно /1/ наиболее сильно металлические свойства это соединение проявляет при $0,16 \leq x \leq 0,5$, а $T_c(x)$ достигает своего максимума при $x = 0,2$, когда $T_c(x) \approx 0$. Помимо ряда особенностей в электронном спектре этого соединения при $x = 0,2$ /см.¹⁰/, значительное увеличение T_c согласно ангармонической модели /12/ может происходить за счет сильно ангармонических колебаний в структурно-неустойчивой решетке. При $x > 0,25$ эта неустойчивость быстро исчезает ($-A(x > 0,25) > 0$), что приводит к росту частоты мягкой моды $\Omega_0(x)$ и резкому уменьшению константы связи $\lambda \approx 1/\Omega_0(x)$.

Интересной особенностью рассматриваемой системы является возможность появления в ней кластеров ближнего порядка и неэргодического поведения вблизи СФП /19, 20/. Появлению таких кластеров способствует высокая степень анизотропии мягкой моды /16/ и наличие примесей в системе. Подчеркнем, что стеклоподобное поведение в такой неэргодической системе не связано с наличием примесей типа "случайное поле".

Развитая модель может быть обобщена для рассмотрения взаимодействия электронов с мягкими модами, что предполагается сделать в отдельной работе. Отметим здесь лишь, что согласно /13/ мягкая ротационная мода, рассмотренная в данной модели, может взаимодействовать с полносимметричной "дыхательной" (breathing) модой только при учете ангармонических членов. Поэтому СФП $D_{4h}^{17} \rightarrow D_{2h}^{18}$, обусловленный ротационной модой, не связан с пайерлсовским структурным переходом в точке X /см. /19, 10/ /с продольной волной зарядовой плотности, имеющей симметрию "дыхательной" моды. При конденсации ротационной моды может, однако, возникнуть поперечная волна зарядовой плотности в результате перераспределения электронов в базисной плоскости на орбиталях p_z для $O_g(x)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Michel C., Raveau B. - Rev.Chim.Miner., 1984, 21, p.407.
2. Bednorz J.G., Müller K.A. - Z.Phys.B., 1986, 64, p.189; Bednorz J.G., Takashige M., Müller K.A. - Europhys.Lett., 1987, 3, p.379.
3. Cava R.J., van Dover R.B., Batlogg B., Rietmann E.A. - Phys.Rev.Lett., 1987, 58, p.408.
4. Longo J.M., Raccah P.M. - J.Solid State Chem., 1973, 6, p.526.
5. Grande B., Müller-Buschbaum H.R., Schweizer M. - Z.anorg. allg. Chem., 1977, 428, p.120.

6. Jorgensen J.D. et al. - Phys.Rev.Lett., 1987, 58, p.1024.
7. Fleming R.M., Batlogg B., Cava R.J., Rietmann E.A. - Phys. Rev., B, 1987, 35, p.7191.
8. van Dover R.B., Cava R.J., Batlogg B., Rietmann E.A. - Phys.Rev.Lett., 1987, 35, p.5337.
9. Mattheiss L.F. - Phys.Rev.Lett., 1987, 58, p.1024.
10. Yu.J., Freeman A.J., Xu J.-H. - Phys.Rev.Lett., 1987, 58, p.1035; Xu J.-H., Watson - Jang T.J., Yu J., Freeman A.J. - Phys.Lett., 1987, A120, p.489.
11. Vujičić G.M., Aksenov V.L., Plakida N.M., Stamenkovic S. - Phys.Lett., 1979, 73A, p.439; - J.Phys. C., 14, p.2377.
12. Plakida N.M., Aksenov V.L., Drechsler S.L. JINR, E17-87-198, Dubna, 1987.
13. Плакида Н.М., Шахматов В.С. ОИЯИ, P17-87-243, Дубна, 1987.
14. Pytte E., Feder J. - Phys.Rev., 1969, 187, p.1077.
15. Konwent H., Plakida N.M. - Acta Phys.Pol., 1983, A63, p.755.
16. Александров К.С. и др. Фазовые преходы в кристаллах галлоидных соединений АВХ₃. М.: Наука, 1981.
17. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. - Докл. АН СССР, 1959, 126, с.53; Зубарев Д.Н. - УФН, 1960, 71, с.71.
18. Аksenov В.Л., Плакида Н.М., Стаменкович С. Рассеяние нейтронов сегнетоэлектриками. М.: Энергоатомиздат, 1984.
19. Aksenov V.L., Bobeth M., Plakida N.M., Schreider J. - J.Phys. C., 1987, 20, p.375.
20. Flach S., Schreiber J. - phys. stat.sol. b, 1987, 140, K1.

Рукопись поступила в издательский отдел
19 июня 1987 года.

ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Аксенов В.Л., Плакида Н.М., Флах С.
Микроскопическая модель структурного
фазового перехода в La_2CuO_4

P17-87-444

Предложена динамическая модель структурного фазового перехода в La_2CuO_4 . Модель основана на представлении мягкой ротационной моды. Получена согласованная система уравнений для определения частоты мягкой моды и параметра порядка. Вычислено разложение свободной энергии по параметру порядка и получены выражения для параметров этого разложения через параметры модели. Обсуждается влияние примесей на фазовый переход и связь структурного фазового перехода с переходом в сверхпроводящее состояние.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики и Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод авторов

Aksenov V.L., Plakida N.M., Flach S.
A Microscopical Model of Structural
Phase Transition in La_2CuO_4

P17-87-444

A dynamical model of structural phase transition $D_{4h}^{17} - D_{2h}^{18}$ in La_2CuO_4 is proposed. It is based on the representation of a soft rotational mode associated with CuO_6 -octahedra rotations. A self-consistent system of equations determining the soft mode frequency, the order parameter and the free energy is obtained. The connection between the structural phase transition and the superconducting transition in $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4$ is discussed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics and at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987