87-488

объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P17-87-488

Н.М.Плакида, В.С.Шахматов*

# СТРУКТУРНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В $La_2CuO_4$

Направлено в журнал "Кристаллография"

*Физико-энергетический институт, Обнинск

1987

Интерес к изучению свойств кристалла $La_2CuO_4$ возник в связи с открытием Беднорцем и Мюллером высокотемпературной сверхпроводимости в системе $Ba-La-Cu-O$ [I]. При температуре 533 К в $La_2CuO_4$ происходит структурный фазовый переход из орторомбической фазы в тетрагональную со структурой типа $K_2NiF_4$ [2]. Пространственная группа (пр.гр.) кристалла в орторомбической фазе, $Cmca$ ( $D_{2h}^{18}$ ), была определена методами дифракции рентгеновских лучей[3] и нейтронов[4]. В работе[5] для орторомбической фазы $La_2CuO_4$, синтезированной по определенной технологии, приводится другая пр.гр. - $Fmm2$ ($C_{2v}^{18}$). Кроме того, было отмечено, что соединения $La_{2-x}M_xCuO_4$ ( $M$ = = $Pr$ , $Nd$ ) в тетрагональной фазе изоструктурны и отличаются от $La_2CuO_4$ тетраэдрической координацией кислорода в лантановом слое. В работе[6] изучено влияние технологии приготовления образцов на их структуру и физические свойства.

Исследование сверхпроводника $La_{1.85}Ba_{0.15}CuO_4$, проведенное методом дифракции нейтронов[4], показало, что это соединение имеет пр. гр. $I4/mmm$ ( $D_{4h}^{17}$ ) и аналогично по структуре $K_2NiF_4$.

В работах[7,8] сделан расчет электронной зонной структуры $La_2CuO_4$. Сильное перекрытие орбиталей $Cu(3d)-O(2p)$ в базисной плоскости приводит к двумерному характеру зоны проводимости. Полупроводниковые свойства $La_2CuO_4$ при низких температурах были объяснены пайерлсовской неустойчивостью с волновым вектором на границе зоны Бриллюэна ( $X$ -точка). Согласно работе[7] в базисной плоскости $La_2CuO_4$ возможны два типа колебаний кислорода, которые изменяют расстояние $Cu-O$. Одно из них (колебание типа "breathing ") сильно связано с электронами проводимости и, вследствие пайерлсовской неустойчивости, может привести к структурному переходу с понижением точечной симметрии кристалла от тетрагональной $D_{4h}$ до орторомбической $D_{2h}$.

В работе[4] была также обсуждена природа фазового перехода, разделяющего сверхпроводник и полупроводник. Смещения ионов в мягкой фононной моде соответствуют наклону кислородного октаэдра (колебание типа " tilting"). Такие моды не связаны с электронными зонами, образованными из орбиталей $Cu(3d)-O(2p)$, однако могут взаимодействовать с электронами проводимости косвенно, через связь с электронными зонами, построенными из орбиталей лантана и кислорода в лантановом слое [4].

В настоящей работе проведен симметрийный анализ возможных структурных переходов из пр.гр. $I\,4/mmm$ с волновым вектором на границе зоны Бриллюэна ($X$ -точка). Представлена феноменологическая теория Ландау структурного фазового перехода в $La_2CuO_4$.

## I. СИММЕТРИЙНЫЙ АНАЛИЗ

### А. Разложение свободной энергии

Кристалл $La_2CuO_4$ имеет симморфную пр.гр. $I\,4/mmm$ ($D_{4h}^{17}$):

$$D_{4h}^{17}=\{E, C_4^2, U_{\bar{x}y}, U_{xy}, U_x, U_y, C_4, C_4^3, I, \sigma_z, \sigma_{\bar{x}y}, \sigma_{xy}, \sigma_x, \sigma_y, S_4^3, S_4\}\times T, \qquad (I)$$

где $E$ ,..., $S_4$ - представители смежных классов. Нормальная подгруппа трансляций $T$ определяется объемноцентрированной тетрагональной (ОЦТ) решеткой Бравэ. Основные векторы трансляции прямой решетки [9]:

$$\vec{a}_1=(-\tau\ \ \tau\ \ \tau_z),\quad \vec{a}_2=(\tau\ \ -\tau\ \ \tau_z),\quad \vec{a}_3=(\tau\ \ \tau\ \ -\tau_z), \qquad (2)$$

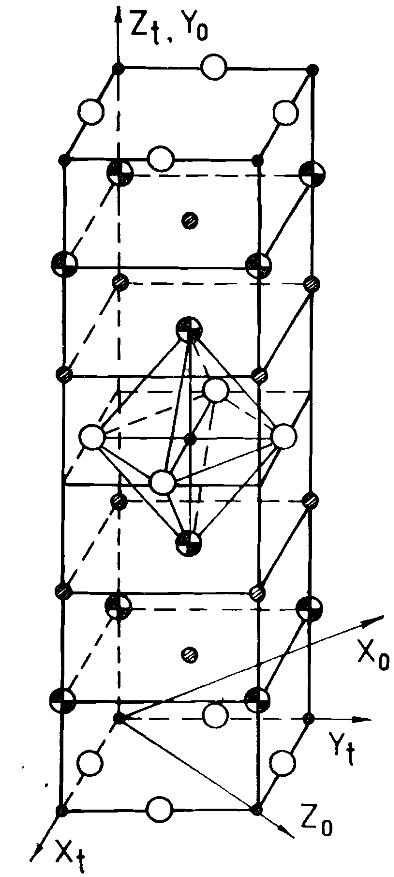
обратной решетки:

$$\vec{b}_1=\pi\left(0\ \ 1/\tau\ \ 1/\tau_z\right),\quad \vec{b}_2=\pi\left(1/\tau\ \ 0\ \ 1/\tau_z\right),\quad \vec{b}_3=\pi\left(1/\tau\ \ 1/\tau\ \ 0\right). \qquad (3)$$

Элементарная ОЦТ-ячейка содержит две формульные единицы $La_2CuO_4$ (см. рисунок). Атомы в примитивной ячейке занимают следующие позиции: $Cu$ - позиция Iа с локальной симметрией $D_{4h}$, координаты (000); $La_1$ - 2е, $C_{4v}$, ($00\,z_{La}$); $La_2$ - 2е, $C_{4v}$, ($00-z_{La}$); $O(I)_I$ - 2с, $D_{2h}$, (I/200); $O(I)_2$ - 2с, $D_{2h}$, (0I/20); $O(2)_I$ - 2е, $C_{4v}$, ($00\,z_o$); $O(2)_2$ - 2е, $C_{4v}$, ($00-z_o$), где $z_{La}$ = 0,36063(9) и $z_o$ = 0,I828(2) [4].

Структурный фазовый переход $D_{4h}^{17}\longleftrightarrow D_{2h}^{18}$ происходит с волновым вектором на границе зоны Бриллюэна ($X$ -точка), двухлучевая звезда волнового вектора в обозначениях Ковалева [9] - $\{\vec{k}_{13}=\vec{b}_3/2\}$. Группы волнового вектора для симморфных пр.гр. изоморфны точечным группам, а проективные (или нагруженные) представления совпадают с малыми представлениями. Группа волнового вектора $G_{\vec{k}_{13}}$ имеет восемь одномерных неприводимых представлений (НП): $\tau_i$, $i$ = I,...,8. В качестве элемента-представителя разложения пр.гр. $D_{4h}^{17}$ в смежные классы по подгруппе $G_{\vec{k}_{13}}$ выберем элемент $C_4$. Все НП $\tau_i$, $i$ = I,..., 8, группы






Элементарная ОЦТ-ячейка кристалла $La_2CuO_4$ [5]:
• - медь, ⊘ - лантан, ◐ , ○ -кислород. $X_tY_tZ_t$, $X_oY_oZ_o$ - декартовы системы координат в тетрагональной и орторомбической фазах.

$D_{4h}^{17}$ являются двумерными представлениями. Группа образа НП $\tau_i$, $i$ = 2,...,8, изоморфна двумерной точечной группе $C_{4v}$ [10]. Таким образом, для всех НП $\tau_i$, $i$ = 2,...8, целый рациональный базис инвариантов (ЦРБИ) [11] имеет вид

$$I_1 = \eta_1^2 + \eta_2^2 \quad , \qquad I_2 = \eta_1^2 \cdot \eta_2^2 , \tag{4}$$

где $\{\eta_i\}$ -двухкомпонентный параметр порядка. Разложение свободной энергии по параметру порядка удобно записать в следующем виде:

$$F_\eta = \frac{\tau}{2}\left(\eta_1^2+\eta_2^2\right) + \frac{u_1}{2}\eta_1^2\eta_2^2 + \frac{u_2}{4}\left(\eta_1^4+\eta_2^4\right)+\cdots , \tag{5}$$

где многоточием обозначены члены более высокого порядка. Деформационный вклад в свободную энергию записывается в обычном виде:

$$F_\varepsilon = \frac{1}{2} C_{11}\left(\varepsilon_1^2+\varepsilon_2^2\right) + C_{12}\,\varepsilon_1\varepsilon_2 + C_{13}\left(\varepsilon_1\varepsilon_3+\varepsilon_2\varepsilon_3\right) + \frac{1}{2}C_{33}\,\varepsilon_3^2 + \frac{1}{2}C_{44}\left(\varepsilon_4^2+\varepsilon_5^2\right) + \frac{1}{2}C_{66}\,\varepsilon_6^2 , \tag{6}$$

здесь использованы обозначения Фойгта и опущены члены более высокого порядка, $C_{ij}$ - коэффициенты жесткости кристалла.

Построим смешанные инварианты. Симметризованный квадрат НП $\tau_i$, $i$ = I,..., 8, для звезды $\{\vec{k}_{14}=0\}$ раскладывается в прямую сумму НП точечной группы $D_{4h}$ :

$$\tau_1(A_{1g}) \oplus \tau_7(B_{2g}) . \tag{7}$$

В скобках указаны обозначения НП по Ландау - Лифшицу/I2/. По этим НП преобразуются следующие симметризованные величины:

$$\tau_1 : \ \eta_1^2+\eta_2^2 ; \qquad \tau_7 : \ \eta_1^2-\eta_2^2 . \tag{8}$$

Симметризованный квадрат векторного представления имеет состав

$$2\,\tau_1(A_{1g}) \oplus \tau_5(B_{1g}) \oplus \tau_7(B_{2g}) \oplus \tau_9(E_g) . \tag{9}$$

Соответствующие базисные функции:

$$2\,\tau_1 : zz,\ xx+yy ; \quad \tau_5 : xx-yy ; \quad \tau_7 : xy ; \quad \tau_9 : \begin{pmatrix} yz \\ xz \end{pmatrix} . \tag{10}$$

Члены взаимодействия низших порядков по параметрам $\eta_i$ и $\varepsilon_i$ возникают из НП $\tau_1$ и $\tau_7$ :



$$F_{\eta\varepsilon} = \{\alpha(\varepsilon_1+\varepsilon_2) + \beta\,\varepsilon_3\}\left(\eta_1^2+\eta_2^2\right) + \gamma\,\varepsilon_6\left(\eta_1^2-\eta_2^2\right) . \tag{11}$$

Следовательно, полное разложение свободной энергии принимает вид

$$F = F_\eta + F_{\eta\varepsilon} + F_\varepsilon . \tag{12}$$

Согласно критерию Бирмана/I3/ ответственное НП, по которому происходит фазовый переход, совместно с единичным представлением низкосимметричной группы. Условие инвариантности функции плотности $\delta\rho = \sum_{i=1}^{2}\eta_i\varphi_i$ относительно группы $D_{2h}^{18}$ для ответственного НП $\tau_3$ приводит к следующему типу решения:

$$\eta_1 \neq 0 , \qquad \eta_2 = 0 , \tag{13}$$

при этом сохраняются элементы симметрии

$$E,\ u_{\bar{x}y},\ (u_{xy}|\vec{a}_3),\ (C_4^2|\vec{a}_3),\ I,\ \sigma_{\bar{x}y},\ (\sigma_{xy}|\vec{a}_3),\ (\sigma_z|\vec{a}_3). \tag{14}$$

Фазовый переход по второму лучу звезды (тип решения $\eta_1 = 0$, $\eta_2 \neq 0$, НП $\tau_5$ ) приводит к возникновению другого домена, при этом сохраняются те же элементы симметрии (I4).

Таким образом, фазовый переход $D_{4h}^{17} \longrightarrow D_{2h}^{18}$ связан с удвоением объема примитивной ячейки кристалла. Ниже температуры фазового перехода возможно появление двух доменов, обусловленных фазовым переходом по одному из двух лучей звезды $\{\vec{k}_{13} = \vec{b}_3/2\}$.

## Б **Микроскопический параметр порядка** (МП)

Примитивная ячейка в высокотемпературной фазе содержит одну формульную единицу $La_2CuO_4$, таким образом, декартовы смещения семи атомов составляют базис механического представления. Разложение механического представления по НП группы волнового вектора $G_{\vec{k}_{13}}$ имеет вид

$$4\tau_1 \oplus 3\tau_3 \oplus 3\tau_4 \oplus 3\tau_5 \oplus 3\tau_6 \oplus 2\tau_7 \oplus 3\tau_8 . \tag{15}$$

Базисные функции для различных НП приведены в таблице. Для луча $\vec{k}_{13}$ смещение атома сорта $\varkappa$ в примитивной ячейке $\vec{R}_\ell$ определяется по формуле

$$\vec{u}\binom{\ell}{\varkappa} = \vec{u}\binom{0}{\varkappa}\cdot\exp\left(-i\,\vec{k}_{13}\cdot\vec{R}_\ell\right) . \tag{16}$$

**Т а б л и ц а.** Базисные функции механического представления в $X$ -точке. Ионам $Cu$, $La_1$, $La_2$, $O(1)_1$, $O(1)_2$, $O(2)_1$ и $O(2)_2$ присвоены номера I,...,7 соответственно

| НП | Низкосимметричная фаза | Базисные функции |
|---|---|---|
| $\tau_1$ | $D_{2h}^{19}$, $Cmmm$ | $2_z - 3_z$; $4_x + 5_y$; $4_y + 5_x$; $6_z - 7_z$ |
| $\tau_2$ | $D_{2h}^{22}$, $Ccca$ | |
| $\tau_3$ | $D_{2h}^{18}$, $Cmca$ | $2_x + 2_y - 3_x - 3_y$; $4_z + 5_z$; $6_x + 6_y - 7_x - 7_y$ |
| $\tau_4$ | $D_{2h}^{17}$, $Cmcm$ | $1_x - 1_y$; $2_x - 2_y + 3_x - 3_y$; $6_x - 6_y + 7_x - 7_y$ |
| $\tau_5$ | $D_{2h}^{18}$, $Cmca$ | $2_x - 2_y - 3_x + 3_y$; $4_z - 5_z$; $6_x - 6_y - 7_x + 7_y$ |
| $\tau_6$ | $D_{2h}^{17}$, $Cmcm$ | $1_x + 1_y$; $2_x + 2_y + 3_x + 3_y$; $6_x + 6_y + 7_x + 7_y$ |
| $\tau_7$ | $D_{2h}^{20}$, $Cccm$ | $4_x - 5_y$; $4_y - 5_x$ |
| $\tau_8$ | $D_{2h}^{21}$, $Cmma$ | $1_z$; $2_z + 3_z$; $6_z + 7_z$ |



Из базисных функций ответственного НП $\tau_3$ видно, что смещения ионов в мягкой моде обусловлены поворотом кислородных октаэдров вокруг оси, параллельной направлению $[\bar{1}10]$ .

## 2. СТРУКТУРНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД

Параметры кристаллической решетки $La_2CuO_4$ в тетрагональной фазе /2/: $a_t = b_t = 3{,}81(1)$, $c_t = 13{,}24(5)$ Å (при 693 К), в орторомбической фазе /3-6/: $a_o = 5{,}36$, $b_o = 5{,}40$, $c_o = 13{,}16$ Å, $\gamma_o = 90{,}43°$ (при 294 К). Экстраполируя параметры решетки тетрагональной фазы на комнатную температуру, можно оценить значения спонтанных деформаций:

$$\varepsilon_1^c = \varepsilon_2^c = \frac{(a_o + b_o)/\sqrt{8} - a_t}{a_t} = 6{,}4 \cdot 10^{-3},$$
$$\varepsilon_3^c = \frac{c_o - c_t}{c_t} \approx 0, \qquad (17)$$
$$\varepsilon_6^c = -\frac{1}{2}\, tg\, 0.43° = -3{,}7 \cdot 10^{-3}.$$

Рассмотрим фазовый переход в монодоменное состояние по лучу $\vec{k}_{13}$. Учитывая тип решения (I3), из выражения (I2) получаем эффективный потенциал для однокомпонентного ПП, связанного с деформациями:

$$F_{эфф.} = \frac{1}{2}\tau\eta^2 + \frac{1}{4}u\eta^4 + \frac{1}{6}v\eta^6 + \alpha(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\eta^2 + \beta\varepsilon_3\eta^2 + \gamma\varepsilon_6\eta^2 + F_\varepsilon. \qquad (18)$$

Из энергетических соображений и экспериментальных значений спонтанных деформаций (I7) следуют ограничения на феноменологические константы: $\alpha < 0$, $\gamma > 0$. Из уравнений состояния $\partial F/\partial \varepsilon_i = 0$ для потенциала (I8) получаем равновесные значения деформаций:

$$а)\quad C_{11} \neq C_{12},\ \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = A\eta^2,\ \varepsilon_3 = -\beta\eta^2/C_{33} - 2C_{13}A\eta^2/C_{33},\ \varepsilon_6 = -\gamma\eta^2/C_{66}, \qquad (19)$$
$$б)\quad C_{11} = C_{12},\ \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = B\eta^2,\ \varepsilon_3 = -\beta\eta^2/C_{33} - C_{13}B\eta^2/C_{33},\ \varepsilon_6 = -\gamma\eta^2/C_{66},$$

где $A = \dfrac{\beta C_{13} - \alpha C_{33}}{C_{33}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{13}^2}$, $B = \dfrac{\beta C_{13} - \alpha C_{33}}{C_{11}C_{33} - C_{13}^2}$. Отметим, что в случае б независимой деформацией является сумма $\varepsilon_1 + \varepsilon_2$. Уравнение для ПП имеет вид

$$\tau\eta + \tilde{u}\eta^3 + v\eta^5 = 0, \qquad (20)$$

где $\tilde{u}$ -перенормированная за счет взаимодействия ПП с деформациями константа $u$. Для случая а имеем

$$\tilde{u} = u + 4\alpha A + 2\beta\left(-\beta/C_{33} - 2C_{13}A/C_{33}\right) - 2\gamma^2/C_{66}. \qquad (21)$$

Перенормировка уменьшает константу $u$. Для $\tilde{u} < 0$ эффективный потенциал (18) описывает фазовый переход первого рода. При температуре фазового перехода $T_c$ возникает скачок ПП: $\delta\eta^2 = -3\tilde{u}/4v$. Из формул (19) видно, что будут происходить аналогичные скачки деформаций $\varepsilon_1$, $\varepsilon_2$, $\varepsilon_3$ и $\varepsilon_6$. Для $\tilde{u} > 0$ эффективный потенциал описывает переход второго рода. В этом случае ПП и спонтанные деформации будут непрерывно зависеть от температуры.

Обратная восприимчивость по полю $X_\eta$, сопряженному ПП $\eta$, находится по формуле

$$\chi^{-1} = \frac{\partial X_\eta}{\partial \eta} = \begin{cases} \tau, & T > T_c, \\ \tau + 3u\eta_s^2 + 5v\eta_s^4 + 2\alpha(\varepsilon_1+\varepsilon_2)_s + 2\beta(\varepsilon_3)_s + 2\gamma(\varepsilon_6)_s, & T < T_c. \end{cases} \qquad (22)$$

Индекс $s$ указывает на то, что ПП и компоненты тензора спонтанной деформации определяются из уравнений состояния при $T < T_c$. В случае фазового перехода второго рода имеем

$$\chi^{-1} = -2\tau\left[(3u - \tilde{u})/(2\tilde{u}) + 2\alpha A/\tilde{u} - \beta^2/(C_{33}\tilde{u}) - \right. \\ \left. -2\beta C_{13}A/(C_{33}\tilde{u}) - \gamma^2/(C_{66}\tilde{u})\right]. \qquad (23)$$

Из формул (22) и (23) следует, что температурные зависимости восприимчивостей выше и ниже $T_c$ подчиняются закону Кюри-Вейсса, однако из-за взаимодействия ПП с деформациями отношение констант Кюри - Вейсса не равно двум.

Вычислим аномалии коэффициентов жесткости кристалла $C_{ij}$ в точке фазового перехода. Согласно определению имеем

$$C_{ij}(T) = \left(\frac{\partial X_i}{\partial \varepsilon_j}\right)_s, \qquad (24)$$

где $X_i$ -внешнее поле, сопряженное деформации $\varepsilon_i$. Индекс $s$ имеет тот же смысл, что и выше. Таким образом, получаем



$$\begin{aligned} C_{11}(T) &= C_{11} - 2\alpha^2\Delta, & C_{12}(T) &= C_{12} - 2\alpha^2\Delta, \\ C_{13}(T) &= C_{13} - 2\alpha\beta\Delta, & C_{33}(T) &= C_{33} - 2\beta^2\Delta, \\ C_{66}(T) &= C_{66} - 2\gamma^2\Delta, & C_{44}(T) &= C_{44}, \end{aligned} \qquad (25)$$

где

$$\Delta = \begin{cases} 1/u & \text{- для фазового перехода второго рода,} \\ 1/(u + 2v\eta_s^2) & \text{- для фазового перехода первого рода.} \end{cases} \qquad (26)$$

Из формул (25) и (26) следует, что коэффициенты жесткости кристалла в тетрагональной фазе $C_{11}$, $C_{12}$, $C_{33}$, $C_{66}$ при $T < T_c$ скачком уменьшают свою величину. Коэффициент $C_{44}$ остается постоянным, а $C_{13}$, по-видимому, скачком увеличивается. Для фазового перехода первого рода, обусловленного взаимодействием ПП с деформациями, скачок $\Delta$ зависит от температуры.

## 3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Из таблицы видно, что структурные переходы из пр.гр. $I4/mmm$ с волновым вектором в $X$ -точке происходят только в фазы с орторомбической симметрией. Согласно разложению (15) четыре фононные моды преобразуются по НП $\tau_1$, причем одна мода определяет колебания ионов кислорода в базисной плоскости и сильно связана с электронами проводимости /7/. Замораживание смещений ионов в мягкой моде приводит к пр.гр. $D_{2h}^{19}$. Отметим, что в данном случае симметрия допускает существование инварианта третьей степени по ПП. Другое колебание ионов кислорода, изменяющее расстояние $Cu - O$ в базисной плоскости, преобразуется по НП $\tau_7$ (имеется еще одна мода этой же симметрии). Структурный переход по НП $\tau_7$ приводит к пр.гр. $D_{2h}^{20}$. В кристаллах, изоструктурных $K_2NiF_4$, нет фононных мод симметрии $\tau_2$, следовательно, переход $D_{4h}^{17} \longleftrightarrow D_{2h}^{22}$ не связан с конденсацией фононной моды.

Экспериментально наблюдаемый в $La_2CuO_4$ переход в пр.гр. $D_{2h}^{18}$ обусловлен конденсацией мягкой моды, которая преобразуется по $\tau_3$ или $\tau_5$. Двум НП $\tau_3$ и $\tau_5$ соответствуют смещения ионов, приводящие к двум доменам, которые могут образоваться ниже температуры фазового перехода. В соответствии с работой /10/ структурный переход является несобственным сегнетоэластическим переходом и приводит к скачкам коэффициентов жесткости кристалла. Отметим также, что возможна связь между колебаниями симметрии $\tau_1$ и $\tau_3$. Симметризованное произведение НП $\tau_1$ и $\tau_3$ для звезды $\{\vec{k}_{14}=0\}$ преобразуется по НП $\tau_9(E_g)$: $[\tau_1 \otimes \tau_5] \sim \tau_9(E_g)$. Следовательно, имеется ангармоническое взаимодействие, связывающее колебания симметрии $\tau_1$ и $\tau_3$ с оптической модой симметрии $E_g$ или компонентами тензора деформации ( $\varepsilon_4$ , $\varepsilon_5$ ). При этом конденсация мягкой моды симметрии $\tau_3$ может приводить к сопутствующим смещениям ионов кислорода симметрии $\tau_1$ и смещениям ионов $La$ и O(2) в базисной плоскости (оптическая мода симметрии $E_g$ ) или появлению компонент тензора спонтанной деформации ( $\varepsilon_4$ , $\varepsilon_5$ ), которые понижают симметрию кристаллической решетки до моноклинной.

Представляют интерес экспериментальные измерения скачков коэффициентов жесткости и параметров решетки кристалла вблизи фазового перехода. Существенный вклад в понимание природы фазового перехода могли бы внести экспериментальные исследования мягкой моды методом неупругого рассеяния нейтронов. Так, определение смещений ионов в мягкой моде методом динамической нейтронографии позволяет проверить гипотезу об ангармоническом взаимодействии мод симметрии $\tau_1$ и $\tau_3$.

## ЛИТЕРАТУРА


1. J.G.Bednorz, K.A.Muller. Z.Phys.B, 1986, v.64, No.2, p.189-193.
2. J.M.Longo, P.M.Raccah. J. Solid State Chem., 1973, v.6, p.526-531.
3. V.B.Grande, Hk.Muller-Buschbaum, M.Schweizer. Z.Anorg. Allg.Chem., 1977, v.428, p.120-124.
4. J.D.Jorgensen et al.Phys.Rev.Lett., 1987, v.58, No.10, p.1024-1027.
5. K.K.Singh, P.Ganguly, J.B.Goodenough. J.Solid State Chem., 1984, v.52, No.3, p.254-273.
6. C.Michel, B.Raveau. Rev.Chim.Miner., 1984, v.21, No.4, p.407-425.
7. L.F.Mattheiss. Phys.Rev.Lett., 1987, v.58, No.10, p. 1028-1030.
8. J.Yu, F.J.Freeman, J.-H.Xu. Phys.Rev.Lett., 1987, v.58, No.10, p.1035-1037.
9. О.В. Ковалев. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. М.: Наука, 1986.
10. J.C.Toledano, P.Toledano. Phys.Rev.B, 1980, v.21, No.3, p.1139-1172.
11. Ю.А.Изюмов, В.Н.Сыромятников. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М.: Наука, 1984.
12. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
13. J.L.Birman. Phys.Rev.Lett., 1966, v.17, No.24, p. 1216-1219.



Рукопись поступила в издательский отдел
29 июня 1987 года.




Плакида Н.М., Шахматов В.С. P17-87-488
Структурный фазовый переход в $La_2CuO_4$


На основе симметрийного анализа рассмотрены возможные фазовые переходы $D_{4h}^{17} \to D_{2h}$, индуцированные мягкой модой в точке X зоны Бриллюэна. Обсуждается структурный переход в высокотемпературном сверхпроводнике типа $La_2CuO_4$.



Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

**Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987**

Перевод авторов


Plakida N.M., Shakhmatov V.S. P17-87-488
Structural Phase Transition in $La_2CuO_4$


On the basis of symmetry analysis possible phase transitions $D_{4h}^{17} \to D_{2h}$ induced by soft mode at the X-point of Brillouin zone are considered. The structural phase transition in high - $T_c$ superconductor of $La_2CuO_4$ type is discussed.



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

**Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987**