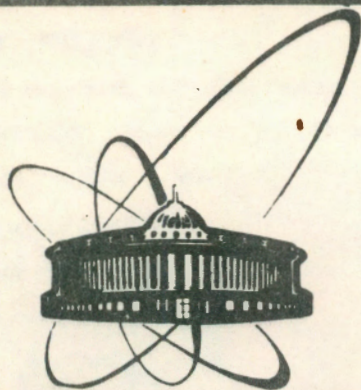


90-324



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

К 78

P17-90-324

С. Е. Красавин, Е. И. Корнилов

НЕЭРГОДИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ В МОДЕЛИ
СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА
В КУПРАТЕ ЛАНТАНА

Направлено в журнал "Сверхпроводимость: физика,
химия, техника"

1990

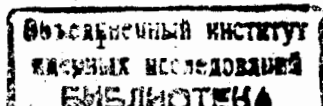
1. ВВЕДЕНИЕ

В широком спектре исследований по ВТСП вновь приобрела актуальность проблема связи решёточной неустойчивости и сверхпроводимости. Известно, что оксидные сверхпроводники типа купрата лантана имеют структурно-неустойчивую решетку, что может влиять на температуру сверхпроводящего перехода [1,2], как это было продемонстрировано на примере соединения $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_{4-\delta}$. Поэтому представляет интерес более детальное изучение особенностей структурного фазового перехода как в соединениях с примесями, так и в чистом La_2CuO_4 .

Одним из проявлений структурных аномалий является наличие узкого центрального пика (ЦП) в сечении неупругого рассеяния нейтронов [3,4]. В недавней работе [5] был обнаружен динамический ЦП на монокристаллах $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, аналогичный наблюдаемым ранее в перовскитах типа титаната стронция. Обычно ЦП связывают с наличием кластеров ближнего порядка или с существованием дефектов в кристалле [6,7]. Возникновение таких кластеров обусловлено долговременными корреляциями локальных атомных смещений $u_1(t) = x_1(t) - \langle x_1 \rangle$:

$$L_{11} = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle u_1(t) u_1(0) \rangle \neq 0. \quad (1)$$

Здесь $\langle \dots \rangle$ - термодинамическое усреднение, L_{11} - параметр неэргодичности [8], отличный от нуля при наличии локализованных состояний, характеризующих кластеры ближнего порядка. В связи с этим принято связывать существование ЦП с переходом системы от эргодической к неэргодической динамике. Возможность взаимосвязи ВТСП с неэргодическим поведением системы обсуждалась в работе [9]. В ней было отмечено, что присутствие в системе локализованных состояний ($L_{11} \neq 0$)



приводит к увеличению константы электрон-фононного взаимодействия и, следовательно, к увеличению T_c .

Цель данной работы состоит в рассмотрении вопроса о возможности проявления неэргодического поведения системы типа La_2CuO_4 вблизи структурного фазового перехода (СФП) из тетрагональной в орторомбическую фазу с учетом реальных параметров кристалла. В рамках самосогласованной теории [7] вычисляется T_g - температура перехода в неэргодическую область. Показано, что в области $T_0 < T < T_g$ существуют решения $L_{11'} \neq 0$ при заданных параметрах модели (T_0 - температура СФП). В п.2 рассматривается модель мягкой ротационной моды [10]. В рамках этой модели с помощью функций релаксации [11] выводятся уравнения для расчета параметра неэргодичности. П.3 посвящен анализу зависимости параметра неэргодичности от температуры. Обсуждение проблемы выбора параметров модели и основные выводы приведены в п.4.

2. МОДЕЛЬ

СФП в La_2CuO_4 обусловлен конденсацией мягкой ротационной моды в точке X зоны Брюллюэна, связанной с вращением октаэдра CuO_6 . Проведенный в работе [12] симметричный анализ показал, что СФП $D_{4h}^{17} \rightarrow D_{2h}^{18}$ происходит с удвоением примитивной ячейки и определяется двухкомпонентным параметром порядка (η_1, η_2) , компоненты которого соответствуют неприводимому представлению на двухлучевой звезде (q_1, q_2) волнового вектора в точке X с

$$q_1 = \pi/a(1, 1, 0) \text{ и } q_2 = \pi/a(1, -1, 0).$$

Компонента η_1 параметра порядка характеризует вращение октаэдра CuO_6 относительно оси $[1, -1, 0]$ с волновым вектором q_1 , а η_2 - относительно оси $[1, 1, 0]$ с q_2 .

Гамильтониан, описывающий динамику плоскостных ионов кислорода в мягкой ротационной моде, имеет вид [10,13]:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{11'\lambda} K_{\lambda\lambda'}(1, 1') P_\lambda(1) P_{\lambda'}(1') + \frac{1}{4} \sum_{11'\lambda} \Gamma_{\lambda\lambda'}(1, 1') [R_\lambda(1) - R_{\lambda'}(1')]^4 + \frac{1}{2} \sum_{11'\lambda\lambda'} U_{\lambda\lambda'}(1, 1') R_\lambda(1) R_{\lambda'}(1'), \quad (2)$$

где

$R_\lambda(1)$ - локальные нормальные координаты (ЛНК) плоскостных ионов кислорода, описывающие поворот октаэдра CuO_6 в ячейке 1 вдоль оси $\lambda=1,2$ и связанные с углом поворота ϕ соотношением $R_\lambda(1) = \sqrt{I} \text{tg } \phi$, где I - момент инерции октаэдра; колебания вершинного кислорода октаэдра CuO_6 учитываются перенормировкой массы $m = m_0(1 + (r_3/r_1)^2) \approx 2,6 m_0$, где m_0 - масса кислорода;

$P_\lambda(1) = \dot{R}_\lambda(1)$ - канонически сопряженный локальной координате импульс,

$K_{\lambda\lambda'}(1, 1') = \theta_{\lambda\lambda'}^{-1}(1, 1')$ - обратный тензор масс,

$\Gamma_{\lambda\lambda'}(1, 1')$ - константа ангармонизма,

$U_{\lambda\lambda'}(1, 1')$ - динамическая матрица, описывающая взаимодействие ионов кислорода в гармоническом приближении, которая удовлетворяет свойству:

$$U_{\lambda\lambda'}(1, 1') = -\omega_0^2 \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{11'} \quad (3)$$

а ω_0^2 - квадрат частоты нормальной моды в гармоническом приближении.

Конденсация данной ротационной моды приводит к статическим

смещениям :

$$\begin{aligned} \langle R_1(1) \rangle &= \eta_1 e^{iq_1 1}, \\ \langle R_2(1) \rangle &= \eta_2 e^{iq_2 1}, \end{aligned} \quad (4)$$

что соответствует общему представлению ЛНК, записанному как

$$R_\lambda(1) = \langle R_\lambda(1) \rangle + u_1, \quad (5)$$

где u_1 - динамический оператор смещения. В дальнейшем нас будут интересовать только динамические смещения вблизи положения равновесия, когда $\langle R_\lambda(1) \rangle = 0$, что соответствует случаю парафазы. Для упрощения дальнейших вычислений мы положим недиагональные элементы матрицы $U_{\lambda\lambda'}(1,1')$ равными нулю.

В этом случае в локальном приближении вблизи точки $q=q_1$ (или $q=q_1$) взаимодействие компонент параметра порядка отсутствует, что позволяет записать гамильтониан (2) в простейшем представлении:

$$H_{loc} = \frac{1}{2} \sum_1 u_1^2 - \frac{\omega_0^2}{2} \sum_1 u_1^2 + \frac{\Gamma_0}{4} \sum_1 u_1^4. \quad (6)$$

Для изучения критических явлений в системе La_2CuO_4 мы применим метод, который был развит в работах [11], [14]. Изотермическая функция релаксации имеет вид:

$$\Phi_{11'}(t) = \int_0^\beta d\tau \langle u_1(t-i\tau) u_1(0) \rangle, \quad (7)$$

где $\beta = (k_B T)^{-1}$ - обратная температура. Начальное значение (7) определяет статическую изотермическую восприимчивость

$$\chi_{11'}^T = \Phi_{11'}(0). \quad (8)$$

Для вычисления функции релаксации удобно применить метод Церковникова [15]. Используя преобразование Лапласа функции (7)

$$\Phi_{11'}(z) = -i \int_0^\infty dt e^{izt} \dot{\Phi}_{11'}(t) = ((u_1 | u_1'),), \quad \text{Im } z > 0, \quad (9)$$

разложим (9) в виде цепной дроби до второго порядка. После преобразования Фурье получается выражение [7]:

$$\Phi_q(z) = \chi_q^T \frac{z - M_q(z)}{z^2 - z M_q(z) - (\chi_q^T)^{-1}}, \quad (10)$$

где

$$\Phi_{1k}(z) = \frac{1}{N} \sum_q e^{iq(1-k)} \Phi_q(z), \quad (11)$$

а χ_q^T - Фурье-образ изотермической восприимчивости. Релаксационное ядро определяется неприводимой частью второго порядка:

$$M_{11'}(z) = ((u_1 | u_1'),)_2 = \Gamma_0^2 ((u_1^3 | u_1^3),)_2, \quad (12)$$

где значок 2 указывает на вычисление (9) во втором порядке приближения [15].

Используя приближение факторизации [7] с учетом представления

$$\begin{aligned} \langle u_1(t) u_1(0) \rangle &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega d\omega}{1 - e^{-\beta\omega}} e^{-i\omega t} \text{Im } \Phi_{11'}(\omega) = \\ &= \langle u_1(t) u_1 \rangle^{\text{reg}} + L_{11'} \end{aligned} \quad (13)$$

а также выражение (12), имеем :

$$z M_{11'}^{\text{irreg}}(z) = \frac{6\beta\Gamma_0^2}{1} \int_0^\infty dt e^{1zt} L_{11'}^3 = 6\beta\Gamma_0^2 L_{11'}^3. \quad (14)$$

В этих выражениях выделена регулярная часть корреляционных функций, для которой в q -представлении $\lim_{z \rightarrow 10} z \langle \dots \rangle^{\text{reg}} = 0$.

Введем параметр

$$S_{11'} = \lim_{z \rightarrow 10} z M_{11'}(z) = 6\beta\Gamma_0^2 L_{11'}^3. \quad (15)$$

Пространственный фурье-образ для $S_{11'}$, в локальном приближении имеет вид $S_{11'} = S \delta_{11'}$, поэтому

$$S_q = \sum_{1-1'} e^{-1q(1-1')} S_{11'} = S = 6\beta\Gamma_0^2 L_q^3. \quad (16)$$

В этом же приближении константу неэргодичности можно записать как

$$\begin{aligned} \beta L = \beta L_{11} &= \beta \frac{1}{N} \sum_q L_q = \frac{1}{N} \sum_q (\chi_q^T - \chi_q^K) = \\ &= \frac{1}{N} \sum_q \left(\chi_q^T - \frac{1}{(\chi_q^T)^{-1} + S_q} \right). \end{aligned} \quad (17)$$

Изотермическую восприимчивость χ_q^T при $\tau = T/T_0 \rightarrow 0$ вблизи точки СФП запишем следующим образом:

$$(\chi_q^T)^{-1} = a\tau + b_1 q_x^2 + b_2 q_y^2 + b_3 q_z^2, \quad (18)$$

и, соответственно, кубовскую восприимчивость

$$(\chi_q^K)^{-1} = a\tau + b_1 q_x^2 + b_2 q_y^2 + b_3 q_z^2 + S_q, \quad (19)$$

где S_q определяется выражением (16), b_1, b_2, b_3 - коэффициенты анизотропии вдоль осей x, y, z соответственно, $\tau = T/T_0 - 1$ - приведенная температура, T_0 - температура СФП.

Применим рассмотренный выше формализм к конкретной системе La_2CuO_4 .

3. НЕЭРГОДИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ СИСТЕМЫ ТИПА La_2CuO_4

Выполняя в уравнении (17) интегрирование по q_x и q_y , аппроксимируя зону Брюллюэна в виде цилиндра диаметром $2q_0$ и высотой $2q_0$, получаем

$$l = \frac{1+\tau}{3} \frac{g(\Delta_0) - g(\Delta_1)}{g(0)} \quad (20)$$

с

$$g(\Delta) = \frac{6}{f_0 \epsilon_1 \epsilon_2} \int_0^1 dz \ln \left(\frac{\epsilon_2 \sqrt{\Delta^2 + z^2 + \epsilon_1^2} + \epsilon_1 \sqrt{\Delta^2 + z^2 + \epsilon_2^2}}{\sqrt{\Delta^2 + z^2} (\epsilon_1 + \epsilon_2)} \right), \quad (21)$$

где введены следующие обозначения :

$l = L \Gamma_0 / a$ - приведенная константа неэргодичности,
 f_0 - относительная константа связи, которая определяется как $f_0 = \omega_m^2 / \omega_0^2$,
 ω_m - максимальная частота дисперсии,
 ω_0 - затравочная частота,

ϵ_1, ϵ_2 - приведенные коэффициенты анизотропии,
 θ_0 - безразмерная температура СФП, которая определяется
 самосогласованным образом и имеет вид $\theta_0 = g^{-1}(0)$,

$$\theta = \theta_0(1+\tau), \Delta_0^2 = \tau/f_0, \Delta_1^2 = \Delta_0^2 + 6 I^2/\theta f_0.$$

В отличие от работы [7] мы получили вместо алгебраического интегрального уравнения на I , что связано с учетом трехосной анизотропии. Для численного решения уравнения (20) была проведена оценка основных параметров модели на основе экспериментальных данных по неупругому рассеянию нейтронов [16]. Мы получили :

$$\omega_m^2 = 146 \text{ мЭВ}^2, \epsilon_1^2 = 0.2, \epsilon_2^2 = 0.5 \quad (22)$$

Представленных данных недостаточно для определения всех параметров модели. Поэтому для расчета затравочной частоты мы использовали данные теоретических работ [17,18].

В работе [17] использовалось приближение локальной плотности для расчета энергии фононов, соответствующей определенной моде, в зависимости от смещения атома. Была оценена энергия ротационной моды как функция смещения атомов кислорода O_2 . Принимая во внимание представление о колебании октаэдра CuO_6 как целого, можно распространить полученные в цитируемой работе частотные характеристики на случай движения расположенных в плоскостях атомов кислорода. Тогда для оставшихся неопределенными численные значения параметров будут равны:

$$\omega_0^2 = 121 \text{ мЭВ}^2, \Gamma_0 = 270 \text{ мЭВ}^3, f_0 = 1.2 \quad (23)$$

Наряду с предложенным существует альтернативный способ вычисления ω_0 и f_0 , основанный на определении изменения энергии Маделунга при конденсации ротационной моды, ответственной за вращение октаэдра CuO_6 . Используя результаты расчетов из работы [18], мы получили

$$\omega_0^2 = 225 \text{ мЭВ}^2, \Gamma_0 = 675 \text{ мЭВ}^3, f_0 = 0.6 \quad (24)$$

Решения уравнения (20) с параметрами (22)-(24) показаны на рисунке 1, где представлена зависимость безразмерного параметра неэргодичности I от приведенной температуры τ . Видно, что неэргодическое поведение системы существует в области $0 \leq \tau \leq \tau_g$. В данной области уравнение (20) имеет два ненулевых решения $I_1 < I_2$. Как было показано в работе [11], решение I_1 - физически неустойчивое. Оно изображено на рисунке 1 пунктирной линией. Критическое значение τ_g , выше которого параметр неэргодичности $I=0$, определяется при значении $I = I_1(\tau_g) = I_2(\tau_g)$.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Одним из проявлений неэргодического поведения системы является возникновение динамического центрального пика. Как известно, феноменологическое выражение функции рассеяния, соответствующее центральному пику, имеет вид [5] :

$$S_{CP} = \frac{\Gamma}{\pi} \frac{\delta^2(\Gamma)}{\omega_{\infty}^2(q, \Gamma) \omega_0^2(q, \Gamma)} \frac{\gamma}{\omega^2 + \gamma^2} \quad (25)$$

где

$\omega_0^2 = a\tau + \sum_j b_j q_j^2$ - квадрат частоты мягкой моды, которая определяется статической восприимчивостью (18),

$\omega_{\infty}^2 = \omega_0^2(q, \Gamma) + \delta^2(\Gamma)$ - квадрат частоты возбуждения в высокочастотном пределе,

γ - ширина центрального пика,

$\delta^2(\Gamma)$ - феноменологическая константа связи, допускающая выражения через параметры модели следующим образом :

ТАБЛИЦА 1. Сравнение модельных параметров, рассчитанных по данным работ [17] и [18].

Параметры	работа [17]	работа [18]
ω_0^2 , мэВ ²	121	225
f_0	1.2	0.6
τ_g	0.0084	0.031
l_g	0.17	0.13
$\frac{\delta^2(T)}{a}$	1.77	4.7

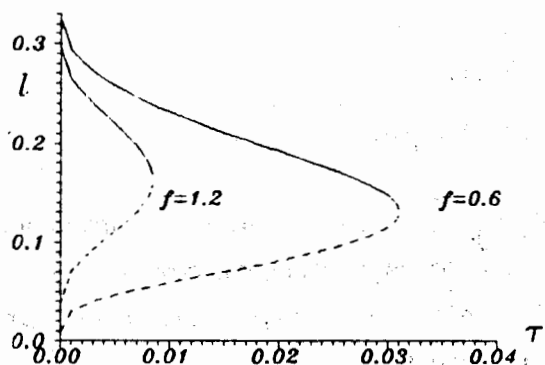


РИСУНОК 1. Зависимость безразмерного параметра неэргодичности l от приведенной температуры τ при разных значениях модельных параметров.

$$\frac{\delta^2(T)}{a} = \frac{S_q(T)}{a} = \frac{6I^3}{\theta} \quad (26)$$

Численные значения безразмерной константы связи (26), полученные для различных наборов параметров (23)–(24), приведены в таблице 1. Как видно из табл. 1 и из рис. 1, для обоих наборов параметров имеется критическая область $T_0 \leq T \leq T_g$, в которой существует неэргодическое поведение. Величина T_g характеризует температурный интервал выше $T_0 \approx 500$ К, в котором наблюдается ЦП. Отметим, что результаты расчетов для двух наборов параметров, соответствующих разным теоретическим представлениям, довольно сильно отличаются друг от друга. Так, для параметров (23) и (24) интервал существования ЦП определяется в 4 К и 15 К соответственно.

В работе [5] для соединения $\text{La}_{1.97}\text{Sr}_{0.03}\text{Cu}_{0.95}\text{Li}_{0.05}\text{O}_{4-\delta}$ с $T_0 = 351 \pm 1$ К наблюдали слабый, но хорошо разрешимый ЦП вплоть до 400 К. Поэтому представляет интерес более детальное изучение поведения мягкой моды и ЦП данной структуры с учетом примесей, которые вносят существенный вклад в критическую динамику системы.

Авторы считают своим приятным долгом поблагодарить В. Л. Аксенова и Н. М. Плакиду за формулировку задачи и постоянное внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Axe J.D. et al. - Phys. Rev. Lett., 1989, vol. 62, p. 2751.
2. Suzuki T., Fujita T. - Physica C, 1989, vol. 159, p. 111.
3. Müller K.A. - Lectures Notes in Phys., 1979, vol. 104, p. 210.
4. Rousseau M., Nonet J., Almairac R. - J. Physique, 1977, vol. 38, p. 1423.

5. Böni et al. - Phys. Rev. B, 1988, vol. 38, p. 185.
6. Брус А., Каули Р. Структурные фазовые переходы. - М.: Мир, 1984.
7. Aksenov V. L. et al. - J. Phys. C: Solid State Phys., 1987, vol. 20, p. 375.
8. Suzuki M. - Physica, 1971, vol. 51, p. 277.
9. Schreiber J., Flach S. - Physica C, 1988, vol. 153-155, p. 277.
10. Аксенов В. Л., Плакида Н. М., Флах С. - Сообщение ОИЯИ P17-87-444, 1987.
11. Götze W. - Z. Phys. B: Condensed Matter, 1984, vol. 56, p. 139.
12. Плакида Н. М., Шахматов В. С. - Сообщение ОИЯИ P17-87-243, 1987.
13. Feder J., Pytte E. - Phys. Rev. B, 1969, vol. 187, p. 1077.
14. Forster D. Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry and Correlation Functions. - Benjamin, 1975.
15. Tserkovnikov Y. A. - Theor. Math. Phys., 1981, vol. 49, p. 219.
16. Thurston T. R. et al. - Phys. Rev. B, 1989, vol. 39, p. 4327.
17. Cohen R. E. et al. - Phys. Rev. Lett, 1989, vol. 62, p. 831.
18. Barisic S., Batistic I. - Europhys. Lett., 1989, vol. 8, p. 765.

Рукопись поступила в издательский отдел
11 мая 1990 года.

Красавин С.Е., Корнилов Е.И. P17-90-324
Неэргодическое поведение в модели
структурного фазового перехода в купрате
лантана

В рамках модели мягкой ротационной моды рассчитана зависимость параметра неэргодичности от температуры для купрата лантана с учетом анизотропии восприимчивости. Численные значения параметров модели определялись из двух альтернативных теоретических подходов к вычислению затравочной частоты: из приближения локальной плотности и определения изменения энергии Маделунга. Получены оценки величины интервала существования центрального пика /4 и 15 К соответственно/ выше точки структурного фазового перехода $T_0 \approx 500$ К.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1990

Перевод авторов

Krasavin S.E., Kornilov E.I. P17-90-324
Nonergodic Behaviour in the Model
of Structural Phase Transition in La_2CuO_4

A dependence of a nonergodic parameter on a temperature is calculated for La_2CuO_4 including an anisotropy of a susceptibility. The numerical values of the model parameters have been determined from two alternative theoretical approaches to the estimation of the attempt frequency. Namely, from local density approximation and from determination of the variation of the Madelung energy. The values of the temperature interval above the structural phase transition temperature $T_0 \approx 500$ K for the central peak are found.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1990