

СЛОЕВЫЕ ФОНЫ В СИСТЕМАХ ТИПА А-Ва-Сu – О

Л.А.Чернозатонский

Показано, что в системах $АВa_2Cu_3O_7$ существуют слабодисперсионные слоевые фоны, сопровождающиеся электрической поляризацией вдоль проводящих плоскостей $CuOII$.

Открытие высокотемпературной сверхпроводимости в $La - ^1 Y - Ba - ^2 Cu - O$ -системах подняло много вопросов о роли CuO -слоев в появлении высокой T_c . Покажем, что в слоевой системе $АВa_2Cu_3O_7$ ($A = Y, Ho, Eu$ и др. ³) существуют оптические фоновые моды, распространяющиеся вдоль слоев, поперечные колебания в которых происходят симметрично относительно плоскостей зеркальной симметрии A и $CuOI$ (рис. 1). Особенности таких фононов – сопровождающая их электрическая поляризация P вдоль "металлических" плоскостей $CuOII$ и слабая дисперсия, приводящая к большому значению фоновой плотности состояний (рис. 2) – дают основание говорить о значительном слоевом электрон-фононном взаимодействии (ЭФВ), которое может служить причиной существования высокой T_c в подобных слоевых системах.

Рассмотрим колебания решетки, распространяющиеся вдоль слоев системы с волновым вектором $q = (q_x, q_y)$, основываясь на аналогии со *slab*-фононами в сверхрешетке (СР) из двух материалов ⁴: здесь "материалов" $CuOII - A$ и $CuOII - (BaO - CuOI - BaO)$ с толщинами $d_1 \approx a, d_2 \approx 2a/c = d_1 + d_2, a \approx b$ ³ – размеры элементарной ячейки системы). Интересуемся симметричными модами, в которых колебания атомов в слоях $CuOII$ и BaO квазипоперечны и противофазны относительно средних плоскостей A и $CuOI$, где колебания атомов происходят в самой плоскости (рис. 1). Такой выбор связан с однонаправленностью вектора P во всех слоях $CuOII$. Действительно, используя решение задачи о поляризации $P(z, \rho, t)$ в СР ⁴ получим, что на частоте продольного (вдоль z) оптического фона в первом материале (проницаемость $\epsilon_1 (\nu = \nu_{L1}) = 0$) вектор электрической поляризации имеет компоненты:

$$\begin{Bmatrix} P_{1\rho} \\ P_{1z} \end{Bmatrix} = B \begin{Bmatrix} iq \cos 2\pi z' / d_1 \\ 2\pi / d_1 \sin 2\pi z' / d_1 \end{Bmatrix} e^{i(q\rho - 2\pi\nu t)}, \quad |z'| \leq d_1 / 2; \quad (1)$$

$$P_{2z} = 0, \quad P_{2\rho} = Biq e^{i(q\rho - 2\pi\nu t)} |z'| < d_2 / 2. \quad (2)$$

При малых волновых числах $qa \ll 1$ такое колебание имеет характер поперечной оптической моды: $|P_{1z} / P_{1\rho}| \gg 1$, но осциллирует на частоте ν_{L1} . Последняя может определять

ся частотами колебаний вдоль z атомов кислорода O2, O3 $-\nu_O$ или меди Cu2 $-\nu_{Cu}$ в слое CuOII. Здесь поляризация $P_{1\rho}$ максимальна и пропорциональна смещению атома u_z^α ($\alpha = O, Cu; B \sim u_z^\alpha$):

$$P_{1\rho}^\alpha (z' = \pm d_1/2, \rho \in \text{CuOII}) = e^\alpha q i u_z^\alpha. \quad (3)$$

Этот факт следует и из симметрии структуры $\text{ABa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$: плоскость CuOII в окружении слоев A и BaO (локальная симметрия $4mm$) не обладает зеркальной симметрией. Поэтому при поперечной деформации слоя возможно появление локальной продольной поляризации — эффект, аналогичный пьезоэлектрическому: константу e в (3) можно сопоставить с компонентами пьезотензора локальной структуры $4mm$: $e_{15}^\Pi = e_{24}^\Pi \sim e$. Величину e можно оценить по $e_{15} = 18 \cdot 10^{-12}$ Кл/Н для кристалла подобной симметрии $\text{Ba}_2\text{SiTiO}_6$, что сравнимо с той же константой сильного пьезоэлектрика CdS. Более точное ее определение требует расчета поперечного эффективного заряда⁷.

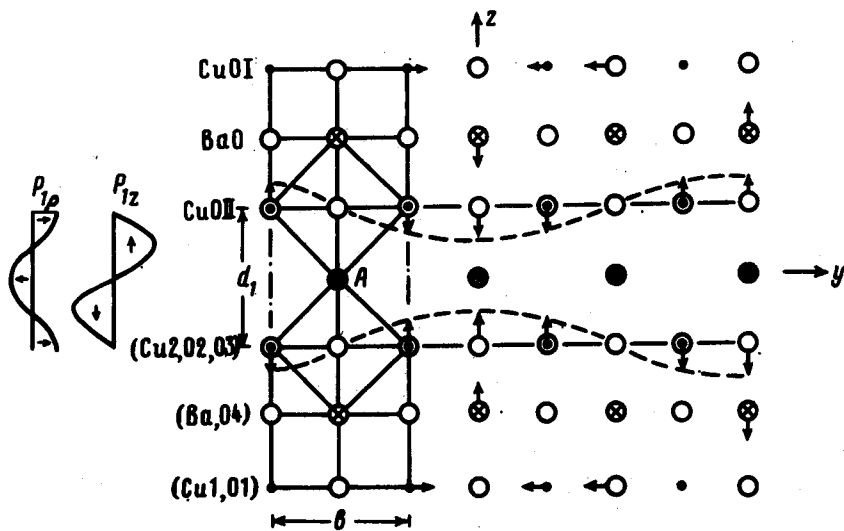


Рис. 1. Схема структуры $\text{ABa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ и ее симметричных слоев колебаний: ● — A, ⊙ — Ba, ● — Cu, ○ — O

Для слоевого ЭФВ важно, что поляризация (3) изотропна в плоскости CuOII. Поляризация аналогичная (3), возникает и при смещениях u_z атомов Ba и O4 в слое BaO второго материала на частотах $\nu_{L2} = \nu_{\text{Ba}, \text{O}4}$, а также на частотах ν_F колебаний группы атомов кислорода, например, "рамы" O1—O4—O1—O4⁸, когда $\epsilon_2(\nu = \nu_{L2}) = 0$.

Интересуемся теперь особенностями спектра $\nu(q)$ слоевых фононов. Опираясь на значения силовых констант^{8, 9}, которые говорят о более сильной связи атомов в слоях CuO и BaO, чем между ними, выделим из полной системы уравнений для амплитуд колебаний всех атомов элементарной ячейки блок с уравнениями для смещений вдоль z атомов: Cu2— U , O2 (O3) — $v_{x,y}$ с учетом связи с атомом A и через него — $sv'_{x,y}$; соседнего Ba — V с учетом его связи с другим Ba— V' через слой CuOI. Здесь амплитуды симметричных колебаний атомов в нижней и верхней (индекс') половинах ячейки (рис. 1) связаны соотношениями:

$$U' = -U, \quad V' = -V, \quad v'_{x,y} = -v_{x,y}. \quad (4)$$

Такое выделение возможно, поскольку: а) смещение U_ρ^A мало из-за большой массы M_A по сравнению с массами соседних по связи атомов O2, O3 и $U^A = 0$ при переходе ($q \rightarrow 0$) слоевых мод в моды A_z на частотах ν_α ⁸; б) моды на $\nu_{\text{Ba}, \text{Cu}, \text{O}} \approx 130, 200$,

330 см^{-1} далеки от мод $\nu_{\text{O}_4, \text{F}} \cong 450, 600 \text{ см}^{-1}$.^{8, 9} Малое различие $T_c = 88 \pm 6 \text{ К}$ с вариацией в системе атома А: $M_A = 89 - 170 \text{ а. е.}$ ³ также указывает на определяющую роль слоевых мод колебаний атомов Ва, Сu, О.

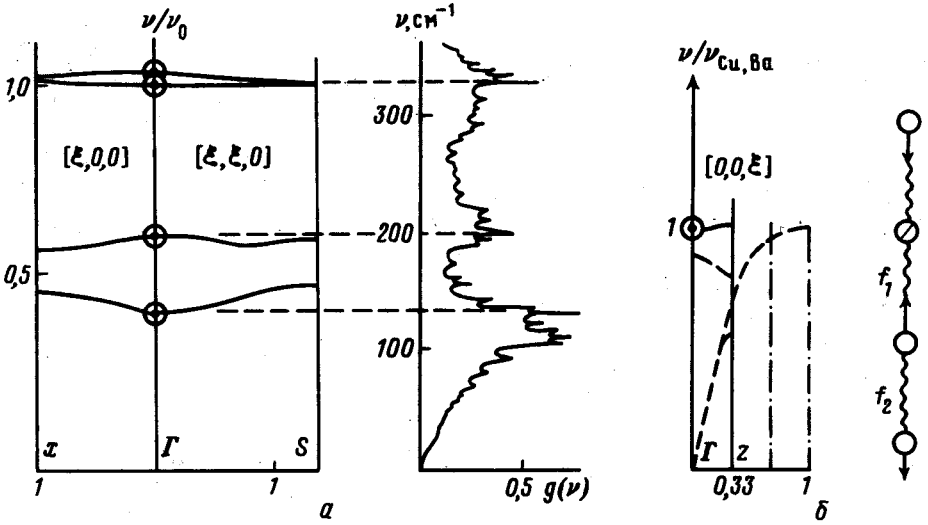


Рис. 2. Дисперсионные кривые: а – слоевых фононов $\nu_\alpha(q)$ по направлениям $[\xi, 0, 0]$ и $[\xi, \xi, 0]$ ($\nu_{\text{Cu}}/\nu_0 = 0,6$, $\nu_{\text{Ba}}/\nu_0 = 0,4$), справа – вычисленная фононная плотность состояний в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ¹⁰; б – "свернутых" по $[0, 0, \xi]$ фононов в линейной цепочке $\text{Cu}_2 - \text{Cu}_2 - \text{Cu}_1$, $f_2 > f_1$, $\nu_{\text{Cu}} = \sqrt{3f_2/M_{\text{Cu}}}$ (или $\text{Ba}-\text{Ba}-\text{A}$, $f_{1,2} = f$, $\nu_{\text{Ba}} = \sqrt{3f/M_{\text{Ba}}}$, f – силовая константа), справа – ее колебание на частоте ν_α . $\xi = qa/\pi$, \odot – начало слоевой моды – $\nu_\alpha(q=0) \equiv \nu_\alpha$.

Решения укороченной динамической матрицы уравнений для амплитуд U, v_x, v_y, V представлены на рис. 2а для направлений $[100]$ и $[110]$. Видно, что ветви $\nu_\alpha(q)$ обладают малой дисперсией, что говорит об их большой спектральной плотности состояний и сосредоточении максимума амплитуды колебания α -ной моды на слое α . Слабую дисперсию такого фонона можно объяснить его принадлежностью к самой высокой ветви моды, относящейся к колебаниям слоев однотипных атомов – это иллюстрирует кривая $\nu(q_z)$ на рис. 2б, соответствующая второй "свернутой" фононной моде в модели трехатомной линейной цепочки (ср.⁴). Дисперсию слоевого фонона можно наблюдать в 90° -ной (ZX или ZY)-геометрии комбинационного рассеяния света, такой же как и для *slab*-мод CP ⁴.

Полученные в настоящее время численным расчетом фононные дисперсионные кривые по главным направлениям $[\xi, 0, 0]$, $[0, \xi, 0]$ и $[0, 0, \xi]$ ¹⁰ подтверждают нашу качественную модель – на перечисленных выше частотах наблюдаются слабо дисперсионные моды, и на них же возникают пики в фононной плотности состояний (рис. 2а). Однако детальная интерпретация спектра фононов и возможность их вкладов в ЭФВ не проводилась.

Таким образом в многослойных структурах, где "металлические" слои (CuO_2 в $\text{ABa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ или BiO_2 в $\text{K}_{0,4}\text{Ba}_{0,6}\text{BiO}_3$ ¹¹, см. также новые Bi - и Tl -системы¹²) находятся в обкладках слоев с различающимися атомами, сильное ЭФВ может осуществляться через сопровождающее слоевые фононы электрическое поле, которое имеет заметную составляющую вдоль этих слоев.

В настоящее время появились следующие экспериментальные данные, которые могут быть интерпретированы в рамках рассмотренной модели: 1. Обнаружена сильная анизотропия термальных колебаний, соответствующая схеме слоевых фононов (рис. 1): преимущественное колебание атомов $\text{Cu}_2, \text{O}_2(\text{O}_3), \text{O}_4$ в z -направлении и атомов Cu_1, O_1 – в плоскости (x, y) ^{13, 14}. 2. Фононная плотность состояний, полученная по неупругому рассеянию нейтронов

¹⁵, имеет сильные пики на частотах, близких к $\nu_{\text{Ba, Cu}_2, \text{O}_2(\text{O}_3), \text{F}}$ (ср. рис. 2), что подтверждает вывод о сильном концентрировании фононов по слоям. 3. При исследовании поляризационного комбинационного рассеяния в кристаллах ¹⁶, ИК отражения и динамической проводимости ¹⁷ обнаружены колебания на $\nu_{\text{Ba, Cu}_2, \text{O}_2(3)}$, в которые переходят частоты слоевых мод ν_{α} ($q \rightarrow 0$). 4. Отсутствие ВТСП в металлических структурах, содержащих те же атомы, что и в сверхпроводящих, но не имеющих слоевого порядка ¹⁸, а значит, и слоевых фононов.

Автор благодарен за обсуждение и ценные замечания Л.П. Питаевскому, В.И. Пустовойту, Г.М. Элиашбергу, а также Д.А. Киржницу и участникам его семинара.

Литература

1. Bednorz J.G., Müller K.A. Z. Phys. B, 1986, 64, 189.
2. Wu M.K. et al. Phys. Rev. Lett., 1987, 58, 908.
3. Hor P.H., Meng R.L., Wang Y.Q. et al. Phys. Rev. Lett., 1987, 58, 1888.
4. Klein M.Y. IEEE J. Quant. El., 1986, QE-22, 1760.
5. Onoda M. et al. Jap. J. Appl. Phys., 1987, 26, L876.
6. Kimura M. J. Appl. Phys., 1977, 48, 2850.
7. Харрисон У. Электронная структура и свойства тв. тел. 1. М.: Мир, 1983, с. 382.
8. Bates F.E., Eldridge J.E. Sol. St. Comm., 1987, 64, 1435.
9. Stavola M. et al. Phys. Rev. B, 1987, 36, 850.
10. Kress W., Schröder U., Prade J. et al. Physica C, 1988, 153, 221.
11. Cava R.J. et al. Nature, 1988, 332, 814.
12. Creaves C. Nature, 1988, 334, 193.
13. Klamut J. et al. Physica C, 1988, 153, 288.
14. Marsh P. et al. Phys. Rev. B, 1988, 38, 874.
15. Strobel P. et al. Physica C, 1988, 153, 282.
16. Feile R., Kowalewski J., Assmus W. Physica C, 1988, 152, 491.
17. Ose W. et al. Physica C, 1988, 153, 639.
18. Torrance J.B. et al. Phys. Rev. Lett., 1988, 60, 542.

Поступила в редакцию

23 ноября 1988 г.

После переработки

24 января 1989 г.

Научно-производственное
объединение ВНИИФТРИ