Физика низких температур, 1996, т. 22, № 5, с. 593–596

Локализованные и квазинизкоразмерные фононы в многослойных кристаллах типа ВТСП

И. А. Господарев, А. М. Косевич, Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины, Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47

На основе вычисления парциальных функций распределения частот колебаний многослойного кристалла типа Y-Ba-Cu-O показано наличие в его фононном спектре квазилокализованных колебаний и квазинизкоразмерных фононов. Анализируются причины присутствия квазиодно- и квазидвухмерных фононов в таком кристалле, далеком по своим упругим свойствам от квазинизкоразмерности.

За допомогою парціальних функцій розподілу частот коливань багатошарового кристала типу Y-Ba-Cu-O показано наявність у його фононному спектрі квазілокалізованих коливань та квазінизьковимірних фононів. З'ясовуються умови присутності квазіодно- та квазідвовимірних фононів у такому кристалі, який є далеким по своїм пружнім властивостям від квазінизьковимірності.

Квазичастичные спектры кристаллических структур, содержащих большое число атомов в элементарной ячейке, обладают рядом интересных отличительных особенностей. Например если период решетки хотя бы вдоль одного из кристаллографических направлений существенно превышает характерный радиус межатомного взаимодействия, то влияние регулярности кристаллической структуры на характер квазичастичных возбуждений в таких системах будет ослаблено и в спектральных характеристиках проявятся черты, свойственные неупорядоченным соединениям. В частности, для спектров будут характерны квазилокализованные (малодисперсионные) моды, и распространение возбуждений в таких многоатомных кристаллах будет затруднено по сравнению с кристаллами, содержащими в элементарной ячейке один или два атома. Такие особенности фононных спектров многослойных кристаллов обсуждались нами в работах [1,2].

Кроме того, в многоатомных решетках, даже таких, макроскопические характеристики которых не отличаются заметной анизотропией, взаимодействие между отдельными атомами может быть сильно анизотропным, а из-за «заторможенности» в распространении взаимодействия в веществах данного класса такая «локальная анизотропия» будет заметным образом проявляться в спектральных характеристиках.

Ярким примером многослойных кристаллов, в колебательных спектрах которых проявляются отмеченные отличительные особенности, являются высокотемпературные сверхпроводники. Невозможность объяснения температуры сверхпроводящего перехода в ВТСП на основе готовых формул теории БКШ или малость изотопического эффекта в этих материалах отнюдь не означают непричастности решеточных колебаний к возникновению высокотемпературной сверхпроводимости. На сегодняшний день определение роли колебаний кристаллической решетки (как гармонических, так и ангармонических) является необходимым и очень важным этапом выяснения механизма ВТСП. Это обусловливает актуальность работ по получению и интерпретации разнообразных данных о колебательных характеристиках ВТСП материалов. Особый интерес представляет информация о вкладе в колебательный спектр этих сложных многоатомных соединений от каждого из атомов, входящих в его состав. Такая информация требуется для понимания эволюции с изменением химического состава тепловых, оптических и других свойств высокотемпературных сверхпроводников, определяемых решеточными колебаниями, а возможно, и для определения аналогичной эволюции температуры сверхпроводящего перехода и синтеза новых ВТСП соединений.

В настоящей работе особенности фононных спектров многослойных систем исследуются на основе расчета и анализа парциальных функций распределения колебаний по частотам $\nu_i^s(\omega)$, которые характеризуют вклад в фононную плотность состояний $\nu(\omega)$ от колебаний атома подрешетки s в кристаллографическом направлении i:

$$\nu_i^s(\omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{2\omega}{3q} \left(h_i^s , G h_i^s \right) , \qquad (1)$$

© И. А. Господарев, А. М. Косевич, Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, 1996

где G — гриновский оператор системы; $3N$-мерный (N — число атомов в решетке) вектор h_i^s — смещение атома s в направлении i.

В терминах регулярной кристаллической решетки данная функция была введена в [1] как

$$\nu_i^s(\omega) = \frac{V_0}{3(2\pi)^3} \sum_p^{3q} \oint_{\omega_p(k)=\omega} \frac{dS_p}{|\nabla\omega_p|} \left| e_i^s(p, \mathrm{k}) \right|^2, \qquad (2)$$

где V_0 — объем элементарной ячейки; $\mathbf{k}$ — квазиволновой вектор; индекс p нумерует колебательные моды, с законами дисперсии $\omega_p(\mathbf{k})$; интегрирование проводится по изочастотной поверхности, элемент которой dS_p ; $e^s(p, \mathrm{k})$ — вектор поляризации атома s-й подрешетки в p-й колебательной моде.

При практическом вычислении парциальных функций распределения использование формулы (2) не является конструктивным, так как вывод дисперсионных соотношений и нахождение векторов поляризации сложных многоатомных кристаллических решеток, а тем более расчет изочастотных поверхностей и интегрирование по ним, являются сложными даже для современных компьютеров. Более конструктивный способ нахождения решения этой проблемы, основанный на непосредственном использовании формулы (1), предлагается в методе якобиевых матриц [3]. Мы будем использовать ту версию данного метода, которая опирается на аппарат цепных дробей (см., например, [4,5]). Подробно этот метод рассмотрен в книге [5]; применительно к вычислению парциальных функций распределения по частотам колебаний атомов многослойного кристалла типа ВТСП метод якобиевых матриц достаточно детально изложен нами в [1]. С его использованием были рассчитаны полная и парциальные функции распределения по частотам для модели кристаллической решетки, соответствующей не содержащей кислородных вакансий структуре ВТСП типа $YBa_2Cu_3O_7$. При этом учитывалось центральное взаимодействие между ближайшими атомами следующих сортов, а именно: Cu1 — O1; Ba — Cu1; Ba — O1; O4 — Cu1; O4 — O1; Ba — O4; Cu2 — Ba; Cu2 — O4; O2 — Ba; O2 — O4; O3 — Ba; O3 — O4; Cu2 — O2; Cu2 — O3; O2 — O3; Y — Cu2; Y — O2; Ba — O3. Величины силовых постоянных выбраны в соответсвии с данными работы [6].

На рис. 1 представлены парциальные функции распределения колебаний по частотам (1) атомов Cu2 (сплошные линии), а также вклад в полную фононную плотность от всех атомов меди (штриховая линия). Направления координатных осей выбраны следующим образом: ось $0x$ — вдоль направления цепочек Cu1 — O1; ось $0z$ — вдоль направления c-оси кристалла; максимальное значение частоты ω_m , согласно работам [6–9], находится

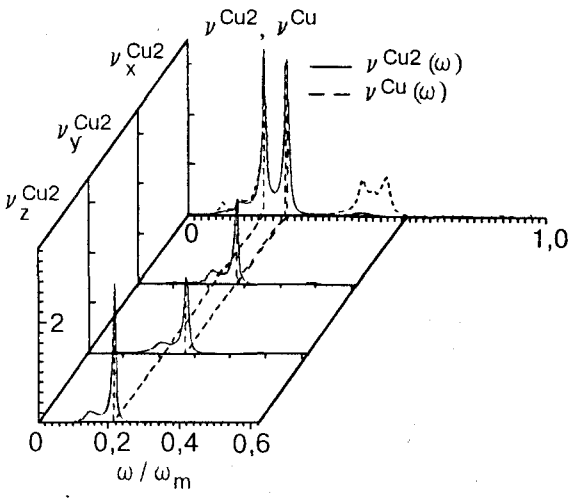

Рис. 1. Парциальные функции распределения колебаний по частотам и локальная плотность состояний для атомов Cu2 (сплошные линии), вклад всех атомов меди в фононную плотность $YBa_2Cu_3O_7$ (штриховая линия).

в интервале 90–100 мэВ. Из рисунка видно, что большая часть колебаний атомов Cu2 достаточно сильно локализована. Частоты квазилокализованных колебаний относительно низкие (~ 20 мэВ для колебаний вдоль оси c и ~ 25 мэВ для колебаний вдоль плоскости слоя). Частоты большей части делокализованных колебаний (т.е. достаточно высокодисперсных фононов, соответствующих колебаниям атомов Cu2) ниже частот квазилокализованных колебаний. Это главным образом акустические фононы. Большая часть колебаний атомов Cu1 имеет существенно более высокие частоты (~ 50–70 мэВ), и степень их локализации невелика. Полученные зависимости $\nu_i^{Cu}(\omega)$ находятся в хорошем согласии с результатами ряда работ, посвященных восстановлению фононных плотностей, с использованием различных экспериментальных данных (см., например, [7–9]), особенно в области относительно низких частот (< 40–50 мэВ). Отметим, что наиболее детальная информация о фононном спектре $YBa_2Cu_3O_7$ (дисперсионные соотношения и т.п.) обычно дается именно для этого частотного диапазона (см., например, [8]).

Делокализованные колебания решетки, т. е. обычные достаточно высокодисперсионные фононы, обусловлены в данной структуре главным образом движением атомов кислорода в различных позициях. На рис. 2 представлены функции $\nu_i^s(\omega)$ для колебаний атомов O1, O2 и O3.

Бросается в глаза сильная локализация колебаний атомов O1 вдоль оси $0y$. Это характерно для колебаний легких атомов (атомов легких подрешеток или легких примесей) вдоль направления сла-

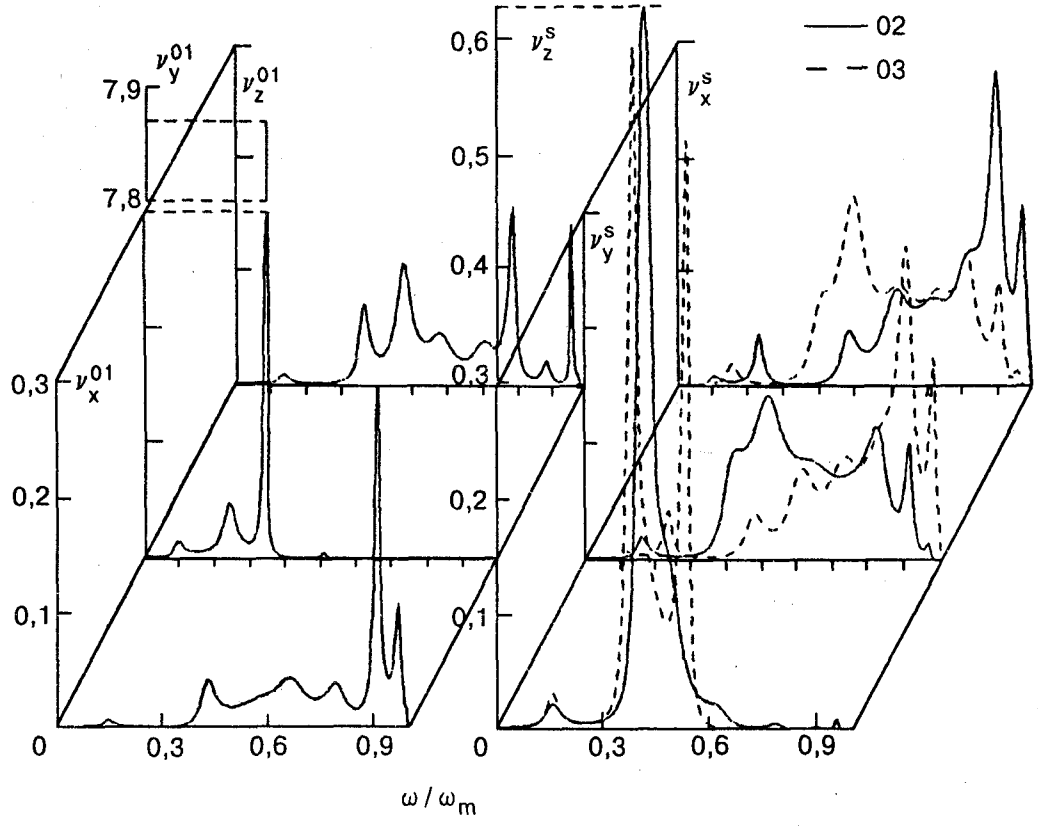

Рис. 2. Парциальные функции распределения колебаний по частотам для кислородных атомов в позициях O1, O2 и O3.

бой связи [10,11]. При замещении кислорода более тяжелым изотопом высота квазилокализованного пика на фононной плотности существенно уменьшается. При центральном взаимодействии между атомами скорость распределения продольных волн всегда больше, чем поперечных, следовательно, сильная локализации колебаний, поляризованных вдоль некоторого кристаллографического направления, обусловливает малую скорость распространения данных колебаний в этом направлении. Распространение соответствующих колебаниям O1 высокодисперсионных фононов, поляризованных перпендикулярно оси $0y$ (см. зависимости $\nu_x^{O1}(\omega)$ и $\nu_z^{O1}(\omega)$), имеет поэтому двухмерный характер (данные фононы распространяются в плоскости $x0z$).

На этом же рисунке соответственно сплошными и штриховыми линиями изображены функции $\nu_i^{O2}(\omega)$ и $\nu_i^{O3}(\omega)$, соответствующие колебаниям кислородных атомов в слоях CuO_2 (через атомы O2 и O1 проходит прямая, параллельная оси c). Вид функции $\nu_z^{O2}(\omega)$ указывает на то, что колебания атомов O2 вдоль направления оси c квазилокализованы, вследствие чего распространение связанных с колебаниями данных атомов фононов преимущественно происходит в плоскости купратных слоев $x0y$, т.е. имеет квазидвухмерный характер. Но из рис. 2 видно, что функции $\nu_x^{O2}(\omega)$ и $\nu_y^{O3}(\omega)$, а также $\nu_y^{O2}(\omega)$ и $\nu_x^{O3}(\omega)$ практически совпадают друг с другом, что согласуется с симметрией слоев CuO_2, т. е. фононы, связанные с колебаниями атомов O3, также квазидвухмерны и распространяются в плоскости $x0y$. Относительно высокая частота этих колебаний дает им возможность взаимодействовать с другими (более высокоэнергетическими) квазичастичными возбуждениями, например акустическими плазмонами [12] (наши результаты подтверждают сделанное в этой работе предположение о квазидвухмерном характере распространения фононов в купратных слоях).

Из квазидвухмерного распространения колебаний атомов O3 в плоскости $x0y$ следует, что колебания этих атомов вдоль оси c должны быть либо также квазилокализованы, либо распространяться квазиодномерно. Действительно, функция $\nu_z^{O3}(\omega)$ аналогична плотности состояний в одномерной линейной цепочке, в которой для сколь угодно малого смещения какого-либо атома необходима некоторая энергия активации. Отметим, что ква-

зиодномерный характер можно усмотреть и в распространении колебаний атомов O4 вдоль оси 0*y*.

В работе [13] мы отмечали, что в слоистом (квазидвухмерном) кристалле колебательные моды, поляризованные вдоль плоскости слоев и перпендикулярно ей, слабо взаимодействуют между собой. В данном соединении, далеком по своим упругим характеристикам от квазидвухмерности, ослабление взаимодействия между колебательными модами различной поляризации и квазинизкоразмерность фононов обусловлены локальной анизотропией межатомного взаимодействия и большим периодом кристаллической решетки, который значительно ослабляет влияние дальнего порядка на колебательные характеристики.

Все проведенные в настоящей работе расчеты выполнены в гармоническом приближении. Поэтому для колебаний металлических атомов (достаточно тяжелых и находящися в симметричном окружении) результаты данных расчетов могут претендовать на адекватность описания реальной ситуации. Что же касается колебаний легких атомов кислорода, окружение которых не всегда симметрично, то в их спектральные характеристики существенный вклад может вносить ангармонизм. Следовательно, наши расчеты спектральных характеристик атомов кислорода (а именно связанных с ними *фононов*) могут служить только «линейной основой» для описания реальных колебаний кислорода в ВТСП типа 1-2-3. Так, полученное нами в гармоническом приближении квазиодномерное поведение колебаний атомов O3 и O4 может являться некоторым обоснованием для примененной в работах [14,15] «одномерной аппроксимации» при описании нелинейныых возбуждений решетки.

Работа выполнена при поддержке Международного научного фонда (грант U21000) и Фонда фундаментальных исследований ГКНТ Украины (проекты «Слои» и «Двойник»).

1. A. M. Kosevich, E. S. Syrkin, and S. B. Feodosyev, *Phys. Lett.* A167, 94 (1992).
2. Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФНТ* **17**, 1055 (1991).
3. В. И. Пересада, *Физика конденсированного состояния* **2**, 172 (1968).
4. И. И. Пересада, В. Н. Афанасьев, В. С. Боровиков, *ФНТ* **1**, 461 (1975).
5. R. Haydock, in: *Solid State Physics* **35**, 129, H. Ehrenreich, F. Seitz, and D. Turnbull, (eds.), Academic press, New York (1980).
6. S. Mass, T. Jasuda, Y. Horie, M. Kusada, and T. Fikami, *J. Phys. Soc. Jpn.* **57**, 1024 (1988).
7. В. К. Федотов, А. И. Колесников, В. И. Кулаков, Е. Г. Понятовский, И. Натканец, Я. Майер, Я. Кравчик, *ФТТ* **35**, 310 (1993).
8. L. Pintschovius, N. Pyka, W. Reichardt, A. Yu. Rumiantsev, N. L. Mitrofanov, A. S. Ivanov, G. Golin, and P. Bourges, *Phisica* B174, 323 (1991).
9. J. J. Rhyne, D. A. Neumann, J. A. Gotaas, and F. Beech, *Phys. Rev.* B36, 2294 (1987).
10. Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, О. Я. Шамфарова, *ФНТ* **17**, 746 (1991).
11. М. А. Иванов, А. М. Косевич, Е. С. Сыркин, И. А. Господарев, Ю. В. Скрипник, С. Б. Феодосьев, *ФНТ* **19**, 434 (1993).
12. Е. А. Пашицкий, *УФЖ* **37**, 1872 (1992).
13. A. M. Kosevich, E. S. Syrkin, and S. B. Feodosyev, *Phys. Low-Dimensional Structures* **3**, 47 (1994).
14. N. M. Plakida, V. L. Aksenov, and S. L. Drecsler, *Europhys. Lett.* **4**, 1309 (1987).
15. J. Mustre de Leon, S. D. Conradson, I. Batistic, A. R. Bishop, I. D. Raistrick, M. C. Aronson, and F. H. Garzon, *Phys. Rev.* B45, 2447 (1992).

Localized and quasi-low-dimensional phonons in multilayered crystals of HTSC type

I. A. Gospodarev, A. M. Kosevich, E. S. Syrkin, and S. B. Feodosyev

The localized and quasi-low-dimensional phonons in the vibrational spectrum of the multilayered crystal like Y-Ba-Cu-O are shown on the base of the calculation of the partial frequency distribution functions. The considerations of the appearance of such quasi-1*D*- and quasi-2*D*-phonons in the compound with elastic properties far from quasi-low-dimensional behavior are analyzed.