

# DESCRIPCION MEDIANTE UN MODELO DE CAPAS DE LA DISPERSION FONONICA DEL $\text{La}_2\text{CuO}_4$

S.Koval\*, R.Migoni\*\*

Instituto de Física Rosario, Facultad de Ingeniería,  
Universidad Nacional de Rosario, Br. 27 de Febrero 210 Biss, 2000 Rosario.

H.Bonadeo\*\*

División Física del Sólido, Comisión Nacional de Energía Atómica,  
Av. Libertador 8250, 1429,  
Buenos Aires.

La dispersión fonónica en el  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , compuesto base de los superconductores de alta  $T_c$ , es analizada utilizando un modelo de capas. Las cargas de las capas y las interacciones capa-carozo- son consideradas anisotrópicamente. Potenciales de corto rango del tipo Born-Mayer simulan la interacción entre capas de los distintos iones. El apantallamiento anisotrópico de la interacción Coulombiana es incorporado para describir la degeneración observada en los modos LO y TO polarizados paralelamente al plano  $\text{CuO}_2$ . Las energías fonónicas observadas a lo largo de las tres principales direcciones de simetría son ajustadas por primera vez con un modelo de capas y una buena simulación es lograda con un número relativamente pequeño de parámetros. Las interacciones Cobre-Oxígeno y Lantano-Oxígeno son de magnitud comparable y más fuertes que la interacción Oxígeno-Oxígeno. El modo blando que lleva a la transición estructural tetragonal-ortorrómbica es más sensible a la interacción La-O. Esto sugiere que la anarmonicidad en esa interacción puede ser responsable de la inestabilidad de la red.

## I. INTRODUCCION

A pesar de resultados teóricos y experimentales que indican la importancia de fuertes correlaciones electrónicas en los superconductores de alta temperatura<sup>1</sup> (SAT), hay indicaciones de que la dinámica de red puede ser importante<sup>2</sup>. Un valor de  $T_c$  para  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$  tan alto como en  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  sugiere que un mecanismo de interacción electrón-fonón<sup>4</sup> o de dinámica no lineal<sup>5-7</sup> no debería descartarse. La dinámica de red es también importante en transiciones estructurales producidas por ablandamientos de fonones anarmónicos<sup>8,9</sup> y anomalías observadas en el espectro fonónico del  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ <sup>10-12</sup>.

Se han realizado varios cálculos del espectro fonónico del  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ <sup>13-15</sup>, algunos de primeros principios<sup>16,17</sup>, pero en ninguno se ha analizado los datos experimentales fuera del centro de la zona de Brillouin. Esta información se obtuvo recientemente por scattering de neutrones<sup>12</sup>.

En la dinámica de compuestos iónicos, las polarizabilidades electrónicas juegan un rol importante (en particular  $\text{O}^{2-}$ ), por esta razón usaremos un modelo de capas.

Experimentalmente<sup>12</sup>, no se observa el desdoblamiento LO-TO en  $T$  característico de cristales iónicos, para los modos con momento dipolar paralelo a los planos  $\text{CuO}_2$ . Si se observa para los modos polarizados paralelamente al eje  $z$ . Consideraremos este efecto introduciendo apantallamiento anisotrópico de las car-

gas iónicas. Este tipo de comportamiento no ha sido considerado en cálculos previos<sup>13-15</sup>.

Analizaremos los datos de scattering de neutrones medidos a temperatura ambiente<sup>12</sup> ( $\text{La}_2\text{CuO}_4$  fase ortorrómbica). La distorsión con respecto a la fase tetragonal es muy pequeña<sup>18</sup>, luego consideraremos una estructura pseudotetragonal con parámetros

$$a = \frac{(a_0 + b_0)}{\sqrt{8}} = 3.81 \text{ \AA} \text{ y } c = 13.17 \text{ \AA}$$

( $a_0, b_0$  parámetros basales ortorrómbicos). Además, consideramos  $z(\text{O}_z) = 0.182c$  (con respecto al plano basal) y  $z(\text{La}_z) = 0.362c$ <sup>(18)</sup> (ver Fig. 1).

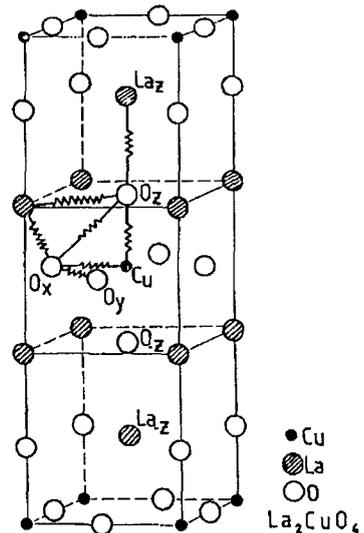


Fig. 1: Celda convencional unitaria del  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  tetragonal centrado en el cuerpo. Por simplicidad, pequeños desplazamientos a lo largo del eje  $z$  de los iones La y O son despreciados. Los resortes unen iones vecinos que interactúan a través del potencial de Born-Mayer.

\*Becario CONICET

\*\*Investigador CONICET

## II. MODELO

Consideramos un modelo de capas con constante de acoplamiento capa-carozo y cargas de capas anisotrópicas  $K_{\alpha\beta}(\kappa) = \delta_{\alpha\beta}K_{\alpha}(\kappa)$ ,  $Y_{\alpha\beta}(\kappa) = \delta_{\alpha\beta}Y_{\alpha}(\kappa)$  y cargas iónicas isotrópicas  $Z_{\alpha\beta}(\kappa) = \delta_{\alpha\beta}Z(\kappa)$ . Por consideraciones de simetría y por la estructura que ve el ión  $\kappa$  a su alrededor, tenemos: para  $O_z$ ,  $K_{\perp}(O_z) \equiv K_x(O_z) = K_y(O_z) \neq K_z(O_z) \equiv K_{\parallel}(O_z)$ ; para  $O_x$ ,  $K_y(O_x) = K_z(O_x)$ .

Obviamente, para  $O_y$ ,  $K_x(O_y) = K_z(O_y) \equiv K_{\perp}(O_y)$  y  $K_y(O_y) = K_x(O_y) \equiv K_{\parallel}(O_y)$ . Además  $K_{\parallel}(O_z) \neq K_{\parallel}(O_x)$  y  $K_{\perp}(O_z) \neq K_{\perp}(O_x)$ . Lo mismo para las cargas de capas.

Los pares Cu-O, La-O y O-O interactúan entre capas vía el potencial de Born-Mayer  $V_{\kappa\kappa'} = a_{\kappa\kappa'}e^{-rb_{\kappa\kappa'}}$  hasta 4Å de alcance. Consideramos también interacciones coulombianas entre capas a carozos de cada ión. El campo eléctrico macroscópico es apantallado anisotrópicamente<sup>19</sup> asumiendo un potencial:

$$\varphi(r, \theta) = \frac{e^2}{r} \text{Exp}[-K(\theta)r] \quad (1)$$

donde  $K(\theta) = K_s \sin^2 \theta$ ,  $\theta$  es el ángulo entre el eje  $z$  y el momento dipolar del modo.

Los parámetros iniciales fueron tomados de Ref. 14. En el ajuste se consideró la desviación cuadrática media total y del centro de zona

(valores finales:  $\Delta\sqrt{\langle(\Delta\nu)^2\rangle} = 0.8\text{Thz}$  y  $\Delta(\Gamma) = 0.6\text{Thz}$ ).

## III. RESULTADOS Y DISCUSIONES

El procedimiento de ajuste llevó a significantes anisotropías para  $K_{\alpha\beta}$ ,  $Y_{\alpha\beta}$  de iones O y  $K_{\alpha\beta}$  de iones La. Los otros tensores fueron considerados isotrópicos (ver Tabla 1).

Los parámetros del potencial son mostrados en Tabla 1. Al analizar las constantes de fuerza  $A_{\kappa\kappa'} = V''_{\kappa\kappa'}(r_{\kappa\kappa'})$  y  $B_{\kappa\kappa'} = V'_{\kappa\kappa'}(r_{\kappa\kappa'}) / (r_{\kappa\kappa'})$  (ver Tabla 1 y resortes en Fig. 1) vemos que las interacciones Cu- y La-O son comparables y mucho más grandes que la interacción O-O. Comparamos las curvas de dispersión con los datos experimentales en Fig. 2. La descripción completa de las curvas de dispersión es buena. Arribamos a estos resultados con 22 parámetros independientes. Esto es satisfactorio comparado con 34 variables necesarias para obtener un ajuste de

calidad similar con un modelo de ión rígido en  $\text{La}_2\text{NiO}_4$ <sup>19</sup>. El mismo modelo aplicado a  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , envolvió aún más dificultades<sup>12</sup>.

Parámetros Potencial			
Pares	a [eV]	b [Å <sup>-1</sup> ]	
Cu-O	437.93	2.45	
O-O	399.82	3.27	
La-O	18967.35	3.87	
Cargas [e]		Acopl. capa-carozo [(e <sup>2</sup> )/(v <sub>a</sub> )]	
Z(Cu)	2.00	K(Cu)	3007.20
Z(O)	-1.94	K <sub>∥</sub> (O <sub>z</sub> )	360.75
Z(La)	2.84	K <sub>∥</sub> (O <sub>xy</sub> )	110.87
Y(Cu)	2.00	K <sub>⊥</sub> (O <sub>z</sub> )	115.38
Y <sub>∥</sub> (O <sub>xy</sub> )	-3.43	K <sub>⊥</sub> (O <sub>xy</sub> )	35.24
Y <sub>⊥</sub> (O <sub>xy</sub> )	-2.03	K <sub>∥</sub> (La)	105.83
Y <sub>∥</sub> (O <sub>z</sub> )	-1.30	K <sub>⊥</sub> (La)	550.95
Y <sub>⊥</sub> (O <sub>z</sub> )	-2.20		
Y(La)	3.19		

Tabla 1: Parámetros del modelo de capas derivados del ajuste a los datos experimentales en Fig. 2  $v_a$  es el volumen de la celda primitiva.

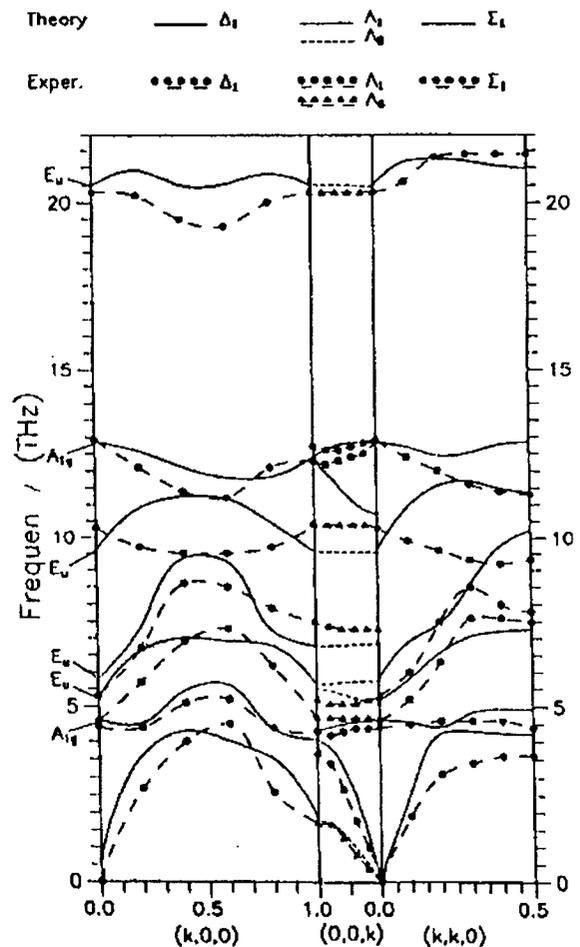


Fig. 2 a)



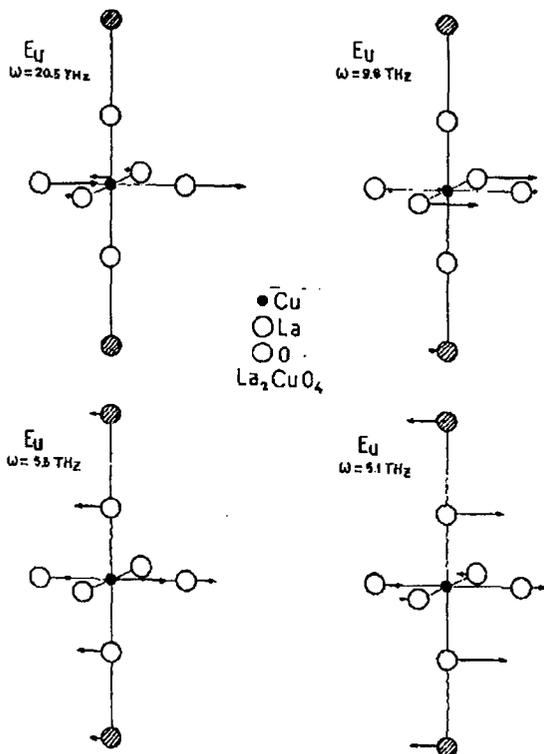


Fig. 3: Autovectores de los modos ópticos  $E_u$ . Todos ellos presentan una degeneración LO-TO.

Pares	A [ $\frac{e^2}{V_a}$ ]	B [ $\frac{e^2}{V_a}$ ]	r [Å]
Cu-O <sub>xy</sub>	163.80	-35.08	1.905
Cu-O <sub>z</sub>	49.05	-8.35	2.397
O <sub>x</sub> -O <sub>y</sub>	4.27	-0.49	2.694
O <sub>z</sub> -O <sub>xy</sub>	1.28	-0.13	3.062
La-O <sub>z</sub>	195.88	-21.36	2.371
La-O <sub>xy</sub>	71.00	-6.97	2.633
La-O <sub>z</sub>	44.15	-4.14	2.756

Tabla 2: Constantes de fuerza para los iones vecinos unidos por resortes en Fig. 1 y distancias correspondientes r.

B (La-O)	B (Cu-O)	A (La-O)	A (Cu-O)	$K_{\perp}(O_z)$
+0.0067	-0.0212	+0.0214	-0.0977	-0.3036

Tabla 3: Variaciones relativas de parámetros que llevan a la inestabilidad del modo blando relacionado con la transición tetragonal-ortorrómbica.

## REFERENCIAS

1. Como "reviews" ver "High Temperature Superconductivity", Ed. Lynn J.W. (Springer Verlag, 1990) y "Theories of High Temperature Superconductivity", Ed. Woods Halley J. (Addison-Wesley Publ.Co., 1988).
2. Barisic S. Int.J.Mod.Phys. B **5**, 2439.
3. Mattheiss L.F. et al, Phys.Rev. B **37**, 3745 (1988); Cava R.J. et. al, Nature **332**, 814 (1988).
4. Shirai M. et al, J.Phys.: Condens. Matter **2**, 3553 (1990); Liechtenstein A.I. et al, Phys.Rev. B **44**, 5388 (1991).
5. Hardy J.R. y Flocken J.W. Phys.Rev.Lett. **60**, 2191, (1988).
6. Plakida N.M. Physica Scripta **T29**, 77, (1989).
7. Frick M. et al Z.Phys. B **81**, 327 (1990).
8. Birgeneau R.J. et al, Phys. Rev. Lett. **59**, 1329 (1987).
9. Böni P. et al, Phys. Rev. B **38**, 185 (1988).
10. Rietschel H. et al Physica C **162-164**, 1705 (1989).
11. Pintschovius L., "Proceedings of the Third International Conference on Phonon Physics", Ed. Hunklinger S., Ludwig W., Weiss G. (World Sci., Singapore, 1990), p.217.
12. Pintschovius L. et al, "Proceedings Int. Seminar on High Temperature Superconductors", Ed. Aksenov V.L., Bogolubov N.N., Plakida N.M. (World Sci., Singapore, 1990), p. 36.
13. Como "review" ver Feile R., Physica C **159**, 1 (1989).
14. Prade J. et al, Sol. St.Comm. **64**, 1267, (1987).
15. Monstoller M. et al, Phys. Rev. B **41**, 6488 (1990).
16. Cohen R.E. et al, Physica B **150**, 61, (1988).
17. Cohen R.E. et al, Phys. Rev. Lett. **62**, 831, (1989).
18. Longo J.M. y Raccach P.M., J.Sol.St.Chem. **6**, 526, (1973).
19. Pintschovius L. et al, Phys. Rev. B **40**, 2229, (1989).
20. Bussmann-Holder A. et al, Phys.Rev. Lett **67**, 512 (1991).
21. Migoni R. et al, Phys. Rev. Lett. **37**, 1155, (1976).
22. Heid R. y Rietschel H. Phys. Rev. B **44**, 734, (1991).