

более сильно отличаются и величины σ образцов разного состава. Интересными представляются и температурные зависимости магнитной восприимчивости, полученные впервые для CuFeSe_2 . Характерным является наличие максимума при температурах 120—130 К. В целом зависимости $\chi(T)$ подобны таковым для антиферромагнетиков, в которых положение максимума указывает температуру магнитного упорядочения. Значения температур Кюри—Вейсса, полученных экстраполяцией линейной зависимости $\chi^{-1}(T)$ при температурах, больших 150 К, являются отрицательными и составляют для различных образцов —600÷—700 К, что дополнительно указывает на возможность антиферромагнитного упорядочения в исследованных образцах при низких температурах.

Учитывая близость химического состава и возможное родство кристаллических структур CuFeS_2 и CuFeSe_2 , можно предполагать, что характер взаимодействий, приводящих к магнитоупорядоченному состоянию в CuFeSe_2 , может быть в основном подобен обменным взаимодействиям в халькопирите. Увеличение средних межкатомных расстояний, вызванное заменой серы селеном, делает эти взаимодействия более слабыми, в результате чего понижается и температура магнитного упорядочения.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Жузе В. П., Сергеева В. М., Штрум Е. Л. // ЖТФ. 1958. Т. 28. № 2. С. 233—238.
- [2] Жузе В. П., Сергеева В. М., Штрум Е. Л. // ЖТФ. 1958. Т. 28. № 10. С. 2098—2108.
- [3] Teranisci T. // J. Phys. Soc. Jap. 1961. V. 16. P. 1881—1887.
- [4] Bernardini G. P., Corsini F., Mazzetti G. // Mater. Res. Bull. 1982. V. 17. N 8. P. 981—991.
- [5] Плещев В. Г., Крушатина Н. А., Тюрина И. В. // Деп. в ВИНТИ. 1987. № 8810-В87.
- [6] Neumann H. // Cryst. Res. and Technol. 1983. V. 18. N 4. P. 483—490.

Уральский государственный университет
им. А. М. Горького
Свердловск

Поступило в Редакцию
7 июля 1989 г.
В окончательной редакции
4 декабря 1989 г.

УДК 537.312.62

© Физика твердого тела, том 23, № 5, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 5, 1990

ВЛИЯНИЕ СЛОИСТОСТИ СТРУКТУРЫ НА КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ В ВИСМУТОВЫХ И ТАЛЛИЕВЫХ ВТСП

И. П. Ипатова, Ю. Э. Китаев, В. Г. Малышкин, Р. А. Эварестов

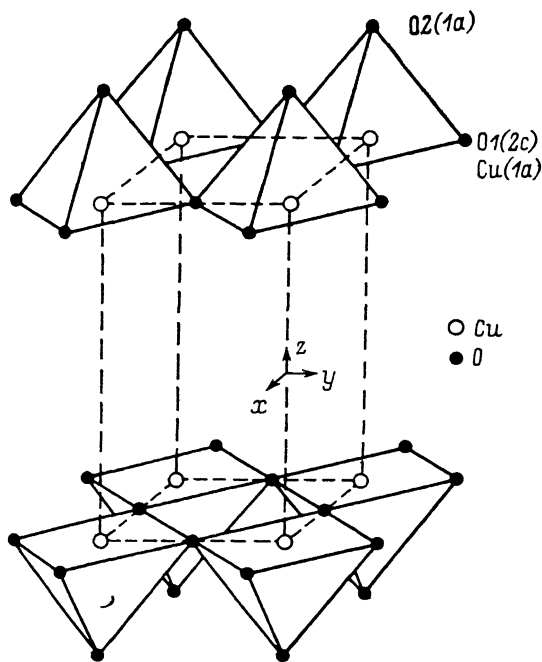
Теоретические и экспериментальные исследования фононов в монокристаллических висмутовых и таллиевых ВТСП ведутся очень интенсивно [1—4]. В данной работе изучаются соединения класса $(\text{Tl/Bi})_2(\text{Ba/Sr})_2\text{Ca}_{n-1}\text{CuO}_{2n+4}$, обладающие пространственной симметрией $I4/m\bar{m}$ (D_{4h}^{17}) [5, 6].

Поскольку эти кристаллы содержат большое число атомов в примитивной ячейке, расшифровка оптических спектров в таких объектах является весьма сложной задачей. При ее решении, проводя теоретико-групповой анализ фононов в кристаллах ВТСП, обычно изучают объемный кристалл как систему, периодичную в трех измерениях [1—4].

Можно, однако, исходя только из симметричного рассмотрения, получить дополнительную информацию о колебательных спектрах, если учесть,

что рассматриваемые соединения имеют четко выраженную слоистую структуру. При этом внутрислоевые взаимодействия имеют ковалентную природу, а межслоевое взаимодействие определяется в основном слабыми ван-дер-ваальсовыми силами [3, 7].

Первая попытка учесть влияние слоистости структуры на оптические спектры была сделана в [8] для кристаллов As_2S_3 , где вначале рассматривался отдельный изолированный слой с симметрией дупериодической трехмерной (слоевой) пространственной группы [9], после чего учитывалось влияние межслоевого взаимодействия как малое возмущение. При таком учете часть нормальных мод кристалла как целого получается из внутрислоевых колебаний, что в ряде случаев может привести к слабому давидовскому расщеплению спектральных линий. Вместе с тем межслое-



Кристаллическая структура медь-кислородных слоев LIII с симметрией $P4mm$ в кристаллах $(Tl/Bi)_2(Ba/Sr)_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+4}$ (нумерация атомов соответствует $n=2$).

вое взаимодействие может изменить и правила отбора: моды, не являющиеся оптически активными в приближении слоя, могут стать разрешенными при переходе к объемному кристаллу, но интенсивность соответствующих линий в спектре должна быть очень слабой.

Представляется разумным использовать аналогичный подход и для слоистых ВТСП. При этом наибольший интерес представляют медь-кислородные слои, поскольку, по-видимому, именно они играют важную роль в возникновении сверхпроводимости. Из рассмотрения структуры соединений $(Tl/Bi)_2(Ba/Sr)_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+4}$ вытекает, что имеются медь-кислородные слои трех типов: слой LI (при $n=1$) и $(n-2)$ слоев LII (при $n \geq 3$) с симметрией слоевой группы $P4/mmm$ (DG61 в обозначениях [9]) и два слоя LIII ($n \geq 2$) с симметрией $P4mm$ (DG55).

В качестве примера рассмотрим слой типа LIII (см. рисунок) для $n=2$. Для установления симметрии фононов в приближении слоя используем метод зонных представлений (ЗП) пространственных групп [10, 11] и учтем то обстоятельство, что слоевая группа DG55 является подгруппой соответствующей федоровской группы $F=C_{4v}^1$ ($P4mm$), а их ЗП связаны определенным образом [10]. Симметрия фононов рассматриваемого медь-кислород-

$n = 2$	$n = 3$	$P4mm (DG55)$		Γ	M
1	2	3	4	5	6
Cu O2	Cu2 O3	1a (0 0 z) C_{4v}	$a_1(z)$ $e(x, y)$	1 5	1 5
O1	O2	2c (0 1/2 z) C_{2v}	$a_1(z)$ $b_2(y)$ $b_1(x)$	1,2 5 5	5 1,2 3,4

ного слоя для точек Γ и M зоны Бриллюэна квадратной решетки приведена в таблице, где указано размещение атомов Cu и O (нумерация атомов соответствует объемным кристаллам) по соответствующим позициям Уайкофа (a, c). В таблице наряду с координатами позиций в единицах векторов основных трансляций квадратной решетки и их локальными группами симметрии (стб. 3). перечислены те неприводимые представления (НП) локальной группы, по которым преобразуются компоненты векторов локальных атомных смещений (стб. 4): стб. 5, 6 содержат индексы в k -базисе зонных представлений, полученных индуцированием с соответствующих НП локальной группы, т. е. индексы НП группы волнового вектора, однозначно связанных с НП слоевой группы и определяющих симметрию фононов в соответствующих точках симметрии зоны Бриллюэна. (Для обозначения НП слоевых групп использованы символы НП соответствующих федоровских групп из [12]).

Проведем теперь сопоставление с результатами теоретико-группового анализа для объемного кристалла из [2-4]. Так как в рассматриваемом случае группа симметрии слоя DG является подгруппой федоровской группы F объемного кристалла, то для определения симметрии объемных фононов, порожденных данным слоевым, представление $I(D)$ группы F , полученное индуцированием с НП D слоевой подгруппы DG , надо разложить по НП группы F . При этом, поскольку волновой вектор объемного колебания k_v и слоевого k_l связаны соотношением $k_v = k_l + b_l$ (b_l — вектор обратной решетки слоевой группы), в разложении могут встретиться НП группы F с волновыми векторами из разных звезд.

Зная симметрию слоевых фононов в точках Γ и M (см. таблицу), мы определили симметрию соответствующих им объемных фононов. При этом слоевому колебанию с $k_l = \Gamma$ соответствуют объемные колебания с $k_v = \Gamma$ и $k_v = M$, а слоевому колебанию с $k_l = M$ соответствуют объемные колебания с $k_v = X$. Для отдельных представлений это соответствие имеет вид

$$\Gamma_1 \rightarrow \Gamma_1^+ + \Gamma_3^- + M_1^+ + M_3^-, \quad \Gamma_2 \rightarrow \Gamma_2^+ + \Gamma_4^- + M_2^+ + M_4^-,$$

$$\Gamma_5 \rightarrow \Gamma_5^+ + \Gamma_5^- + M_5^+ + M_5^-,$$

$$M_{1,3} \rightarrow 2(X_1^+ + X_2^-), \quad M_{2,4} \rightarrow 2(X_1^- + X_2^+).$$

Из приведенных соотношений следует, например, что частоты объемных фононов с симметрией Γ_1^+ и Γ_3^- (а также Γ_2^+ и Γ_4^- , Γ_5^+ и Γ_5^-), порожденных соответствующими слоевыми колебаниями, должны быть близки. Причем, так как группа симметрии слоя не содержит инверсию, а группа симметрии кристалла ее содержит, слоевые колебания (Γ_1 и Γ_5) активны в ИК поглощении, активны и в КРС первого порядка, а в порождаемых ими давидовских дублетах четные компоненты (Γ_1^+ , Γ_5^+) активны только в КРС, а нечетные (Γ_3^- , Γ_5^-) — в ИК поглощении.

Из приведенных соотношений следует также близость частот соответствующих объемных колебаний в точках Γ и M зоны Бриллюэна, что указывает на наличие слабодисперсионных слоевых мод и коррелирует с выводами работы [7].

Межслоевое взаимодействие изменяет также и правила отбора. Проведенный нами анализ показывает, что в рассматриваемых слоях часть неактивных в процессах второго порядка двухфононных слоевых состояний (например, обертон $[M_1]_2^2$) порождает объемные состояния $[X_1^+]_2^2$ и $[X_2^-]_2^2$, активные в КРС второго порядка в (xx) , (yy) , (zz) и (xy) геометриях рассеяния, и состояние $X_1^+ \times X_2^-$, активное в ИК поглощении второго порядка в z -поляризации [2, 3]. Интенсивность соответствующих линий в спектрах, однако, должна быть слабой.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Гаспаров Л. В., Кулаковский В. Д., Мисочко О. В. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1989. Т. 49. № 1. С. 58—61.
- [2] Китаев Ю. Э., Эварестов Р. А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 6. С. 76—79.
- [3] Верязов В. А., Китаев Ю. Э., Смирнов В. П., Эварестов Р. А. // Высокотемпературная сверхпроводимость. Фундаментальные и прикладные исследования. В. 1 / Под ред А. А. Киселева. Л.: Машиностроение, 1989. С. 504.
- [4] Буш А. А., Гладышев И. В., Голуб А. А. и др. // Сверхпроводимость. 1989. Т. 2. № 9. С. 104—113.
- [5] Torrance J. B., Tokura Y., La Placa S. J. e. a. // Sol. St. Comm. 1988. V. 66. N 7. P. 703—706.
- [6] Liang J. K., Zhang Y. I., Huang J. Q. e. a. // Physica C. 1988. V. 156. N 4. P. 616—624.
- [7] Чернозатонский Л. А. // Письма в ЖЭТФ. 1989. Т. 49. № 5. С. 280—283.
- [8] Zallen R., Slade M. L., Ward A. T. // Phys. Rev. B. 1971. V. 3. N 12. P. 4257—4273.
- [9] Wood E. A. // Bell System Monograph 4680. 1964.
- [10] Эварестов Р. А., Смирнов В. П. Методы теории групп в квантовой химии твердого тела. Л.: Изд-во ЛГУ, 1987. 375 с.
- [11] Ковалев О. В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. М.: Наука, 1986. 368 с.
- [12] Miller S. C., Love W. F. Tables of irreducible representations of space groups and corepresentations of magnetic space groups. Boulder: Pruett Press, 1967. 1095 p.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
8 декабря 1989 г.

УДК 535.371

© Физика твердого тела, том 32, № 5, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 5, 1990

ЗАВИСИМОСТЬ СИЛЫ ЛИНИЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ДИПОЛЬНЫХ f — f ПЕРЕХОДОВ ОТ ЭНЕРГИИ МУЛЬТИПЛЕТОВ ИОНА Pr^{3+} В YAIO_3

Е. Б. Дунина, А. А. Каминский, А. А. Корниенко,
К. Курбанов, К. К. Пухов

Известно, что применение приближения [1, 2] для описания интенсивных спектроскопических характеристик иона Pr^{3+} наталкивается на трудности [3, 4], главная из которых — отрицательное значение параметра Ω_2 . Возможная причина этого заключается в том, что не учитывается зависимость силы линий межмультиплетных электрических дипольных переходов от энергии мультиплетов. Появление подобной зависимости можно продемонстрировать, используя эффективный оператор дипольного момента в простейшей форме

$$\langle n | \mathbf{D}_{\text{эфф}} | n' \rangle = - \sum_b \frac{\langle n | \mathbf{D} | b \rangle \langle b | \hat{H} | n' \rangle}{E_b - E_{n'}} - \sum_b \frac{\langle n | \hat{H} | b \rangle \langle b | \mathbf{D} | n' \rangle}{E_b - E_n}. \quad (1)$$

Здесь $|n\rangle = |4f^N \Psi J M\rangle$; $|n'\rangle = |4f^N \Psi' J' M'\rangle$; $|b\rangle$ введено для обозначения состояний возбужденных конфигураций противоположной четности типа