

Рассеяние нейтронов и диффузная дифракция рентгеновских лучей на акустических модах в Nd_2CuO_4

Д. В. Филь, А. Л. Зазунов

Институт монокристаллов НАН Украины, Украина, 310001, г. Харьков, пр. Ленина, 60
E-mail: fil@isc.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 25 ноября 1996 г.

В рамках модели анизотропной упругой среды с дополнительной двумерной модой акустического типа, взаимодействующей с упругими деформациями, предложенной ранее для описания аномального поведения скоростей звука в Nd_2CuO_4 , рассчитаны дифференциальные сечения рассеяния тепловых нейтронов и рентгеновских лучей на акустических возбуждениях. Изучено влияние плоскостной моды на угловую зависимость интенсивности рассеяния нейтронов и на форму диффузионного пятна в дифракционной картине рентгеновских лучей.

У рамках моделі анізотропного пружного середовища з додатковою двовимірною модою акустичного типу, що взаємодіє з пружними деформаціями, запропонованою раніше для опису аномальної поведінки швидкостей звуку в Nd_2CuO_4 , розраховано диференціальні перерізи розсіяння теплових нейтронів та рентгенівських променів на акустичних збудженнях. Вивчено вплив площинної моди на кутову залежність інтенсивності розсіяння нейтронів та на форму дифузійної плями в дифракційній картині рентгенівських променів.

PACS: 63.20.Dj

Ранее в работах [1,2] сообщалось о наблюдении необычного поведения скоростей звука в монокристаллах Nd_2CuO_4 и Pr_2CuO_4 , которое заключалось в аномальной зависимости скорости квазипоперечной моды от направления волнового вектора при вращении последнего в плоскостях симметрии, параллельных оси c_4 . Была предложена феноменологическая модель, базирующаяся на предположении о существовании в изучаемых монокристаллах коллективной моды со звуковым законом дисперсии, распространяющейся вдоль CuO_2 -плоскостей. В такой модели взаимодействие решетки с дополнительными степенями свободы, отвечающими плоскостной моде, может приводить к зависимостям скоростей акустических колебаний системы от направления волнового вектора \mathbf{q} аналогичным наблюдаемым в экспериментах [1,2]. Для определенного выбора параметров модели гибридизация квазипоперечного упругого колебания с плоскостной модой приводит к появлению двух

собственных колебаний (быстрого и медленного), в основном ответственных за перенос упругого поперечного сигнала с \mathbf{q} , направленным под углом $\theta \neq 0, \pi/2$ к оси c_4 , и поляризацией, лежащей в плоскости, определяемой направлением \mathbf{q} и осью c_4 . При этом при θ близких к нулю основной вклад дает быстрая мода, при θ близких к $\pi/2$ — медленная, а в некотором достаточно малом интервале θ внутри области ($0 < \theta < \pi/2$) вклад обеих мод одного порядка. Этим объясняется наблюдаемое экспериментально скачкообразное изменение скорости поперечного сигнала в зависимости от θ и регистрация в области скачка двух поперечных сигналов с одинаковой поляризацией и сильно различающимися скоростями.

В связи с выдвигаемой гипотезой о существовании плоскостной моды, на наш взгляд, представляет интерес получение независимых экспериментальных подтверждений ее существования. Ранее в работах [3] нами была рассмотрена теория эффекта рассеяния света

Мандельштама–Бриллюэна для решетки с дополнительной плоскостной модой. Предметом настоящей работы является анализ эффектов, связанных с наличием плоскостной моды, которые могут проявиться в экспериментах по рассеянию нейтронов и диффузной дифракции рентгеновских лучей на акустических фонах.

Проведенное в работе рассмотрение выполнено в рамках феноменологического подхода к описанию дополнительной моды. Что касается ее микроскопической природы, то важным для рассматриваемой постановки задачи является, во-первых, то, что дополнительное колебание не связано с длинноволновыми флуктуациями электронной плотности, поскольку наличие кулоновского взаимодействия определило бы щелевой характер спектра таких колебаний. Во-вторых, так как воздействие сильного постоянного магнитного поля на образец не приводит к изменению характера поведения угловых зависимостей скоростей акустических сигналов [1,2], можно также утверждать, что дополнительная мода не связана с колебаниями спинов. Следовательно, степени свободы, отвечающие этой моде, не взаимодействуют непосредственно ни с нейтронами, ни с электромагнитным полем, т.е. механизм рассеяния последних определяется ядерным и электромагнитным потенциалами атомов решетки, а влияние плоскостной моды проявляется через ее взаимодействие с длинноволновыми упругими колебаниями. В рамках этого предположения и проведено дальнейшее рассмотрение.

1. Рассеяние нейтронов на акустических модах

Следуя подходу [3], запишем гамильтониан модели в виде

$$H = H_u + H_a + H_{\text{int}}. \quad (1)$$

Упругая часть (1) имеет стандартный вид

$$H_u = \frac{1}{2} \int d^3r \left(\rho \dot{u}_i^2 + \lambda_{iklm} u_{ik} u_{lm} \right), \quad (2)$$

где u_i — компоненты вектора упругих смещений; u_{ik} — компоненты тензора деформации; ρ — плотность упругой среды; λ_{iklm} — тензор модулей упругости. Поскольку нас интересует спектроскопия акустических мод системы, в рассматриваемом подходе не учитываем оптические колебания. Для моделирования акустической плоскостной моды введем

дополнительную степень свободы как (2+1)-мерное калибровочное поле (\mathbf{a}_n, a_{n0}) в слое n (слои перпендикулярны оси c_4). Такое поле характеризуется одной независимой компонентой, что отвечает предположению о существовании одной дополнительной моды в системе. Гамильтониан H_a имеет вид

$$H_a = \frac{1}{8\pi} \sum_n \int d^2r \left(\dot{\mathbf{e}}_n^2 + v_a^2 b_n^2 \right), \quad (3)$$

где $e_i = -\partial_t a_0 - \partial_t a_i$; $b = e_{ik} \partial_i a_k$; v_a — скорость плоскостной моды вдоль слоев. С учетом тетрагональной симметрии системы гамильтониан взаимодействия запишем в виде

$$H_{\text{int}} = \sum_n \int d^2r b_n \left(g_z u_{zz} + g_x (u_{xx} + u_{yy}) \right), \quad (4)$$

где g_z, g_x — константы взаимодействия. Выбор H_a и H_{int} в виде (3) и (4) соответственно может быть обоснован, например, в модели упругой среды, содержащей двумерные слои сверхтекучих энионов, в которой имеется взаимодействие между флуктуациями плотности энионов и компонентами тензора упругой деформации [3–5]. Поскольку в настоящей работе мы не ставим задачу микроскопического описания эффекта, гамильтониан (1) рассматриваем лишь как удобную феноменологическую модель. При этом, так как (4) не инвариантен относительно замены правовинтовой системы координат на левовинтовую, мы неявно предполагаем, что наличие дополнительной степени свободы связано с появлением в системе соответствующего параметра порядка, нарушающего эту симметрию для данного слоя.

Дифференциальное сечение неупругого рассеяния нейтронов в борновском приближении в расчете на единицу энергии рассеянного нейтрона и на единичный телесный угол имеет вид [6,7]

$$\frac{d^2\sigma}{Ed\Omega} = \frac{1}{2\pi} \frac{k'}{k} a_u^2 \sum_{lm} \exp(-iq(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)) \times \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle e^{-iqu(l,t)} e^{iqu(m,0)} \rangle. \quad (5)$$

В (5) a_u — длина рассеяния нейтрона на атоме решетки (для простоты примем ее одинаковой для всех атомов); \mathbf{k}, \mathbf{k}' — волновые векторы падающего и рассеянного нейтронов;

($\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$, $\omega = (2m_n)^{-1}(k^2 - k'^2)$ (m_n — масса нейтрона).

Для вычисления среднего в (5) перейдем в гамильтониане (1) к представлению вторичного

квантования. Выбирая калибровку $a_0 = 0$, $\nabla_2 \mathbf{a} = 0$ ($\nabla_2 = \mathbf{i}_x \partial_x + \mathbf{i}_y \partial_y$) и переходя к фурье-компонентам полей $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{a}_n(\mathbf{r})$, запишем гамильтониан (1) в виде

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \left[\rho \dot{u}_i^+(\mathbf{q}) \dot{u}_i(\mathbf{q}) + \lambda_{ilm} q_l q_m u_m^+(\mathbf{q}) u_m(\mathbf{q}) + \frac{1}{4\pi d} [\dot{Q}^+(\mathbf{q}) \dot{Q}(\mathbf{q}) + v_a^2 q_{pl}^2 Q^+(\mathbf{q}) Q(\mathbf{q})] + \frac{1}{d} (i q_{pl} Q^+(\mathbf{q}) \{g_z q_z u_z(\mathbf{q}) + g_x(q_x u_x(\mathbf{q}) + q_y u_y(\mathbf{q}))\} + \text{h.c.}) \right], \quad (6)$$

(d — расстояние между слоями; $q_{pl} = (q_x^2 + q_y^2)^{1/2}$). Переход в (6) к нормальным координатам дает

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\chi} \left(\dot{\alpha}_{\chi}^+(\mathbf{q}) \dot{\alpha}_{\chi}(\mathbf{q}) + \omega_{\chi}^2(\mathbf{q}) \alpha_{\chi}^+(\mathbf{q}) \alpha_{\chi}(\mathbf{q}) \right), \quad (7)$$

где $\omega_{\chi}^2(\mathbf{q})$ — собственные значения матрицы

$$\begin{pmatrix} (\tilde{c}_{11} q_x^2 + \tilde{c}_{66} q_y^2 + \tilde{c}_{44} q_z^2) & (\tilde{c}_{12} + \tilde{c}_{66}) q_x q_y & (\tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44}) q_x q_z & i \tilde{g}_x q_x q_{pl} \\ (\tilde{c}_{12} + \tilde{c}_{66}) q_x q_y & \tilde{c}_{11} q_y^2 + \tilde{c}_{66} q_x^2 + \tilde{c}_{44} q_z^2 & (\tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44}) q_y q_z & i \tilde{g}_x q_y q_{pl} \\ (\tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44}) q_x q_z & (\tilde{c}_{13} + \tilde{c}_{44}) q_y q_z & \tilde{c}_{44} q_{pl}^2 + \tilde{c}_{33} q_z^2 & i \tilde{g}_z q_z q_{pl} \\ -i \tilde{g}_x q_x q_{pl} & -i \tilde{g}_x q_y q_{pl} & -i \tilde{g}_z q_z q_{pl} & v_a^2 q_{pl}^2 \end{pmatrix} \quad (8)$$

с $\tilde{c}_{ik} = c_{ik}/\rho$, $\tilde{g}_{z(x)} = g_{z(x)} \sqrt{4\pi/d\rho}$. В (8) учтена симметрия компонент тензора упругостей для решетки Nd_2CuO_4 . Направления осей x, y выбраны вдоль Cu-O связей в CuO_2 -плоскостях. Гамильтониан (7), записанный через операторы вторичного квантования, имеет вид

$$H = \sum_{\chi} \omega_{\chi}(\mathbf{q}) \left(\beta_{\chi}^+(\mathbf{q}) \beta_{\chi}(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \right), \quad (9)$$

где β^+, β — бозонные операторы рождения и уничтожения. Величины $\mathbf{u}(l, t)$ выражаются через операторы β как

$$u_i(l, t) = \frac{1}{(2\rho V)^{1/2}} \times$$

$$\times \sum_{\chi} \frac{\xi_{\chi i}(\mathbf{q})}{(\omega_{\chi}(\mathbf{q}))^{1/2}} \left(\beta_{\chi}(\mathbf{q}) + \beta_{\chi}^+(-\mathbf{q}) \right) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_l - i\omega_{\chi}(\mathbf{q})t), \quad (10)$$

где $\xi_{\chi i}$ — компоненты собственных векторов оператора, определяемого матрицей (8).

Вычисляя средние в (5) и выполняя интегрирование по t и суммирование по узлам решетки, имеем

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} = \frac{1}{2} \frac{k'}{k} \frac{a_u^2 N}{M} \sum_{\chi} \frac{1}{\omega_{\chi}(\mathbf{q})} |\mathbf{q}\xi_{\chi}(\mathbf{q})|^2 e^{-2W(\mathbf{q})} \times$$

$$\times \left\{ (N(\omega_{\chi}(\mathbf{q}) + 1)\delta(\omega - \omega_{\chi}(\mathbf{q})) + N(\omega_{\chi}(\mathbf{q}))\delta(\omega + \omega_{\chi}(\mathbf{q}))) \right\}, \quad (11)$$

где

$$W(\mathbf{q}) = \frac{1}{2\rho V} \times$$

$$\times \sum_{\chi} \frac{1}{\omega_{\chi}(\mathbf{q})} |\mathbf{q}\xi_{\chi}(\mathbf{q})|^2 \left(N(\omega_{\chi}(\mathbf{q})) + \frac{1}{2} \right) \quad (12)$$

— показатель экспоненты в факторе Дебая–Валлера; $N(\omega)$ — функция распределения Бозе; M — масса элементарной ячейки; N — число ячеек; $\xi_{\chi} = (\xi_{\chi 1}, \xi_{\chi 2}, \xi_{\chi 3})$. В пределе $T \gg \omega_{\chi}(\mathbf{q})$ выражение (11) сводится к виду

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} = \frac{1}{2} \frac{k'}{k} \frac{T a_u^2 N}{M} \times$$

$$\times \sum_{\chi} I_{\chi}(\mathbf{q}) \left\{ \delta(\omega - \omega_{\chi}(\mathbf{q})) + \delta(\omega + \omega_{\chi}(\mathbf{q})) \right\}, \quad (13)$$

где

$$I_{\chi}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\omega_{\chi}^2(\mathbf{q})} |\mathbf{q}\xi_{\chi}(\mathbf{q})|^2 e^{-2W(\mathbf{q})}. \quad (14)$$

Наличие плоскостной моды, как следует из (13), приводит к появлению дополнительного пика в дифференциальном сечении рассеяния.

Основываясь на выражении (14), проведем анализ интенсивностей пиков в зависимости от геометрии эксперимента. Рассмотрим сначала случай $\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{q}'$ с $\mathbf{k} \neq 0$ (\mathbf{k} — вектор обратной решетки) и $|\mathbf{q}'|/|\mathbf{k}| \ll 1$, имея в виду, что нас интересует спектроскопия длинноволновой части спектра. Тогда $W(\mathbf{q}) \approx W(\mathbf{k})$, т.е. фактор Дебая-

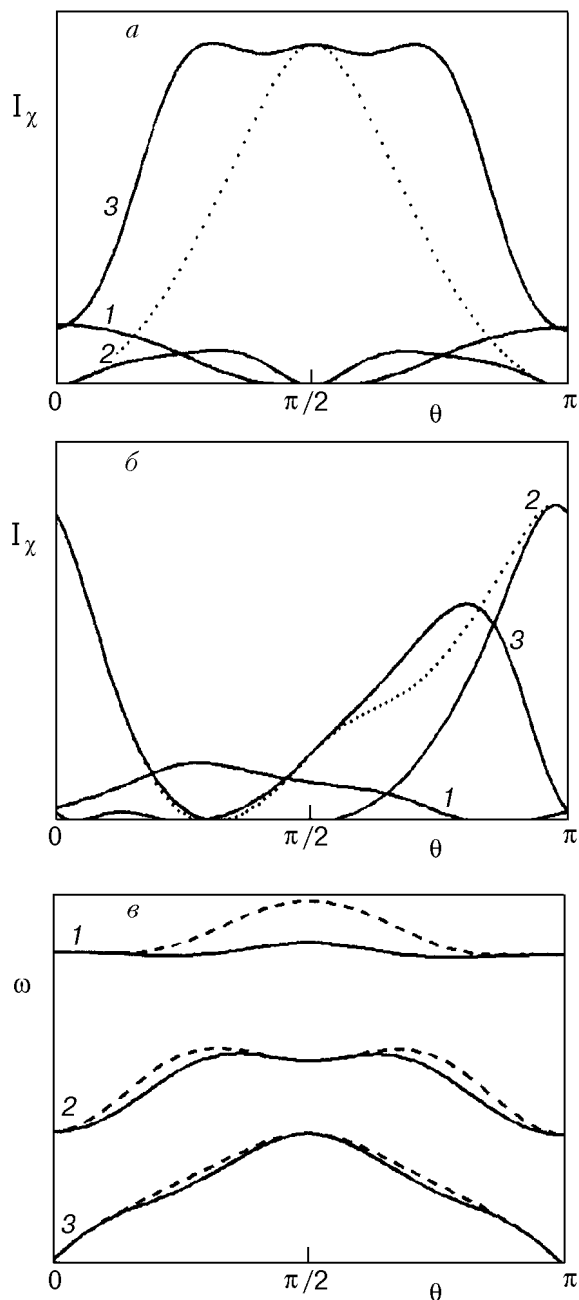


Рис. 1. Зависимости интенсивностей рассеяния нейтронов I_χ от θ при $\mathbf{k} = (0, 0, 2\pi/c)$, $\mathbf{q}' \perp [010]$ (а); $\mathbf{k} = (2\pi/a, 2\pi/a, 2\pi/c)$, $\mathbf{q}' \perp [1\bar{1}0]$ (б); отвечающие им сдвиги энергии рассеянного нейтрона (сплошные линии — $\mathbf{q}' \perp [010]$, пунктирные линии — $\mathbf{q}' \perp [1\bar{1}0]$) (в). На (а), (б) пунктирными линиями показаны интенсивности рассеяния на квазиперечном звуке в системе без плоскостной моды. Цифрами на графиках обозначены номера собственных мод.

Валлера определяет анизотропию интенсивностей в зависимости от направления \mathbf{k} (величина этой анизотропии обсуждается ниже), а для заданного \mathbf{k} является постоянной величиной. Примем параметры модели такими, как следуют из анализа наблюдаемых в [2] экспериментальных величин скоростей звука в Nd_2CuO_4 , а именно $(\tilde{c}_{11})^{1/2} = 6,05$; $(\tilde{c}_{33})^{1/2} = 5,85$; $(\tilde{c}_{12})^{1/2} = 4,59$; $(\tilde{c}_{13})^{1/2} = 4,19$; $(\tilde{c}_{44})^{1/2} = 2,46$; $(\tilde{c}_{66})^{1/2} = 4,22$; $v_a = 3,83$; $(\tilde{g}_z)^{1/2} = 3,95$ (все $\times 10^5$ см/с), $g_z = 0$. Угловые зависимости $I_\chi(\theta)$ для $\mathbf{k} = (0, 0, 2\pi/c)$ и $(2\pi/a, 2\pi/a, 2\pi/c)$, где a, c — параметры решетки, и \mathbf{q}' , лежащих в плоскостях (010) и $(1\bar{1}0)$, приведены на рис. 1, а, б (здесь θ — угол между \mathbf{q}' и осью z). На рис. 1, в показаны соответствующие угловые зависимости сдвига энергии рассеянного нейтрона. Для выбранной геометрии интенсивность, соответствующая чисто поперечной упругой моде с поляризацией, лежащей в плоскости (001) , тождественно равна нулю. Для сравнения на рис. 1 показана также интенсивность, отвечающая квазиперечному колебанию для системы без плоскостной моды (с теми же значениями компонент тензора упругости). Для квазипродольной моды соответствующая зависимость практически совпадает с кривой 1 на рис. 1, а, б. Как следует из приведенных зависимостей, для \mathbf{q}' , лежащих в плоскости (x, y) , наличие дополнительной моды не влияет на спектры рассеяния. Для остальных \mathbf{q}' взаимодействие с плоскостной модой приводит к расщеплению пика, соответствующего квазиперечному акустическому фону. Для $\theta \rightarrow 0$ вклад дополнительной моды определяет отличную от нуля интенсивность почти упругого рассеяния с $\mathbf{q} \neq \mathbf{k}$. Случай $\theta = 0$ необходимо рассматривать отдельно. Для такого направления волнового вектора вклад плоскостной моды исчезает и на зависимости $I_\chi(\theta)$ имеется скачок.

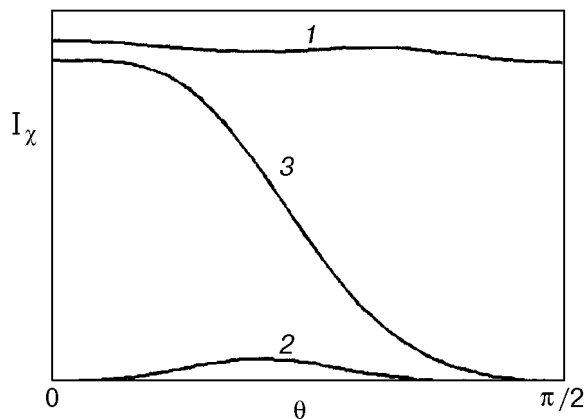


Рис. 2. Зависимости I_χ от θ при $\mathbf{k} = 0$, $\mathbf{q}' \perp [010]$.

Заметим, что отклонение спектра плоскостной моды от чисто двумерного обусловлено бы конечную ширину скачка.

На рис. 2 приведены угловые зависимости $I_{\chi}(\theta)$ при $\kappa = 0$ и \mathbf{q} , лежащем в плоскости (x, z) . Для системы без плоскостной моды интенсивность рассеяния, соответствующая квазипродольной моде, практически совпадает с кривой 1 рис. 2, а вклад квазипоперечной моды слишком мал, чтобы быть показанным в данном масштабе. Как видно из рис. 2, наличие плоскостной моды определяет заметный вклад в общую интенсивность рассеяния наряду с квазипродольной модой двух других собственных колебаний системы.

2. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей на акустических модах

Рассмотрим теперь диффузное рассеяние рентгеновских лучей на акустических модах. Дифференциальное сечение рассеяния с учетом смещений атомов решетки имеет вид [7,8]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 (1 + \cos^2 \alpha) |f_{\mathbf{q}}|^2 \times \\ \times \sum_{lm} \exp(-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)) \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega t} \langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{u}(l,t)} e^{i\mathbf{q}\mathbf{u}(m,0)} \rangle, \quad (15)$$

где $f_{\mathbf{q}}$ — фурье-компонента атомного формфактора рассеяния (считаем, для простоты, его одинаковым для всех атомов); α — угол между \mathbf{k} и \mathbf{k}' (волновые векторы падающей и рассеянной электромагнитной волны). Подставляя разложение (10) в формулу (15), в пределе $T \gg \omega_{\chi}(\mathbf{q})$ имеем для сечения диффузного рассеяния рентгеновских лучей

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 (1 + \cos^2 \alpha) \frac{|f_{\mathbf{q}}|^2 TN}{M} \times \\ \times \sum_{\chi} \frac{|\mathbf{q}\xi_{\chi}(\mathbf{q})|^2}{\omega_{\chi}^2(\mathbf{q})} e^{-2W(\mathbf{q})}. \quad (16)$$

В (16) $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}' = \kappa + \mathbf{q}'$. Исходя из (16), рассмотрим влияние плоскостной моды на форму диффузного пятна вблизи структурных максимумов. Кривые, соответствующие равной

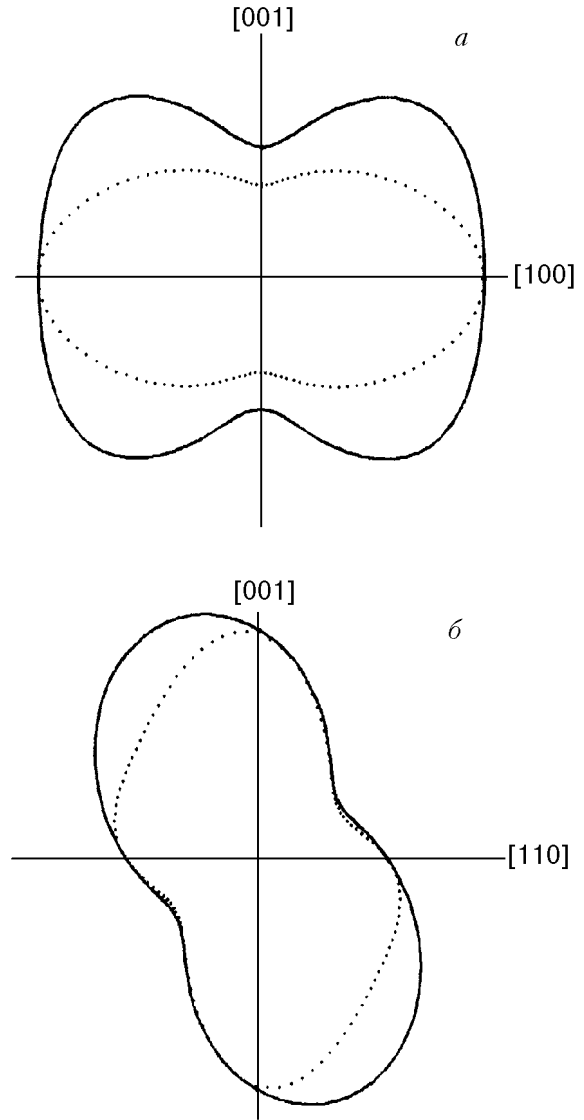


Рис. 3. Форма диффузного пятна для рассеяния рентгеновских лучей (сплошными и пунктирными линиями показаны результаты для системы с дополнительной модой и без нее соответственно). $\kappa = (0, 0, 2\pi/c)$, проекция на плоскость (010) (а); $\kappa = (2\pi/a, 2\pi/a, 2\pi/c)$, проекция на плоскость (110) (б).

интенсивности диффузного рассеяния, полученные из условия

$$\sum_{\chi} \frac{|\mathbf{q}\xi_{\chi}(\mathbf{q})|^2}{\omega_{\chi}^2(\mathbf{q})} = \text{const},$$

приведены на рис. 3,а ($\kappa = (0, 0, 2\pi/c)$, проекция на плоскость (010)) и рис. 3,б ($\kappa = (2\pi/a, 2\pi/a, 2\pi/c)$, проекция на плоскость (110)), где также показаны соответствующие кривые для системы без дополнительной моды. Как видно из рис. 3, наличие плоскостной моды приводит к

существенному изменению формы диффузного пятна для рассмотренной геометрии рассеяния.

3. Анизотропия фактора Дебая–Валлера

В заключение обсудим влияние дополнительной моды на зависимость фактора Дебая–Валлера от направления волнового вектора рассеяния и температуры. Ограничим рассмотрение моделью Дебая. В этой модели суммирование по \mathbf{q}' в (12) выполним внутри сферы радиусом q_D и будем считать, что в области суммирования справедлива линейная зависимость частот колебаний от волнового вектора. Тогда для величины $W(\mathbf{k})$ имеем

$$W(\mathbf{k}) = W_0(\mathbf{k}) + T^2 W_1(\mathbf{k}), \quad (17)$$

где

$$W_0(\mathbf{k}) = \frac{q_D^2}{8(2\pi)^3 \rho} \sum_{\chi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d \cos \theta \frac{|\mathbf{k} \xi_{\chi}(\theta, \varphi)|^2}{s_{\chi}^3(\theta, \varphi)}, \quad (18)$$

$$W_1(\mathbf{k}) = \frac{1}{2(2\pi)^3 \rho} \times$$

$$\times \sum_{\chi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d \cos \theta \frac{|\mathbf{k} \xi_{\chi}(\theta, \varphi)|^2}{s_{\chi}^3(\theta, \varphi)} \int_0^{s_{\chi} q_D / T} dx \frac{x}{e^x - 1} \quad (19)$$

(s_{χ} — скорости акустических мод). Как можно показать, в пределе низких температур $W_1(\mathbf{k})$ не зависит от T . Действительно, верхний предел в интеграле по x в (19) можно устремить к ∞ для всех χ, θ и φ за исключением малой области θ вблизи $\theta = 0$ для одной из мод. В этой области интеграл по x в (19) $\sim T^{-1}$, а фазовый объем указанной области $\sim T$, т.е. вклад этой области также не зависит от температуры. Следовательно, качественное поведение температурной зависимости фактора Дебая–Валлера сохраняется. Влияние взаимодействия решетки с плоскостной модой тем не менее проявляется в изменении характера зависимости $W_0(\mathbf{k})$ и $W_1(\mathbf{k})$ от направления \mathbf{k} . На рис. 4 приведены зависимости $W_0(\mathbf{k})$ и $W_1(\mathbf{k})$ от угла $\theta_{\mathbf{k}}$ между \mathbf{k} и осью c_4 для $\mathbf{k} \perp [010]$, а также для сравнения показаны аналогичные зависимости для системы без дополнительной моды. Оценка численных значений W_0 и W_1 при $\mathbf{k} \parallel z$ и $\mathbf{k} \sim 10^7 \text{ см}^{-1}$ дает $W_0 \sim 10^{-1}$, $W_1 \sim 10^{-5} \text{ К}^{-2}$.

Как видно из рис. 4, взаимодействие решетки с плоскостной модой проявляется в

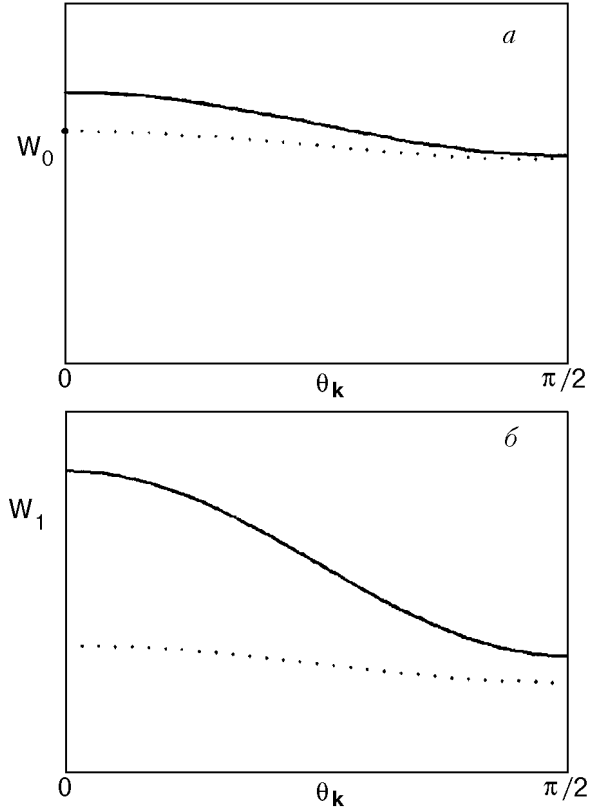


Рис. 4. Зависимости W_0 (а), W_1 (б) от $\theta_{\mathbf{k}}$ при $\mathbf{k} \perp [010]$ (сплошными и пунктирными линиями показаны результаты для систем с дополнительной модой и без нее соответственно).

дополнительной анизотропии фактора Дебая–Валлера и его температурной зависимости. Что касается W_0 , то необходимо отметить, что, хотя качественный вывод о том, что наличие плоскостной моды определяет дополнительную анизотропию W_0 верен, численное ее значение чувствительно к выбору приближения и оно может оказаться существенно иным при учете вклада оптических фононов и интегрированию по всей зоне Бриллюэна. При этом эффект, связанный с плоскостной модой, может быть меньшим, чем следует из рассмотренной модели. Напротив, анизотропию температурной зависимости фактора Дебая–Валлера при низких температурах рассматриваемая модель описывает количественно.

1. I. G. Kolobov, V. D. Fil, D. V. Fil, S. N. Barilo, and D. I. Zhigunov, *Phys. Rev.* **B49**, 744 (1994).
2. Д. В. Филь, И. Г. Колобов, В. Д. Филь, С. Н. Барило, Д. И. Жигунов, *ФНТ* **21**, 1225 (1995); D. V. Fil, I. G. Kolobov, V. D. Fil, S. N. Barilo, and D. I. Zhigunov, *Czech. J. Phys.* **46**, 2155 (1996).
3. D. V. Fil and A. L. Zazunov, *Preprint Int. Centre. Theor. Phys.* IC/85/96, Trieste (1996); Д. В. Филь, А. Л. Зазунов, *ФНТ* **22**, 1442 (1996).

4. О. И. Токарь, Д. В. Филь, *ФНТ* **19**, 928 (1993).
5. D. V. Fil and O. I. Tokar, *Physica* **C230**, 207 (1994).
6. L. Van Hove, *Phys. Rev.* **89**, 1189 (1954).

7. А. Марадудин, Э. Монролл, Дж. Вейсс, *Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении*, Мир, Москва (1965).
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).

Neutron scattering and diffusive x-ray
diffraction by acoustic modes in Nd_2CuO_4

D. V. Fil and A. L. Zazunov

The differential cross-sections of thermal neutron and x-ray scattering by acoustic excitations are computed using the model of anisotropic elastic medium

with an additional acoustic-type two-dimensional mode which was earlier proposed to describe the anomalous behavior of sound velocities in Nd_2CuO_4 . The influence of the plane mode on the angle dependence of the neutron scattering intensity and on the shape of the diffusive spot in the x-ray diffraction pattern is studied.