

Анизотропия температурных зависимостей параметров решетки $\text{EuBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ в квазигармоническом пределе

В.В. Еременко, И.А. Господарев, В.В. Ибулаев, В.А. Сиренко,
С.Б. Феодосьев, М.Ю. Шведун

*Физико-технический институт низких температур НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: eremenko@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 16 февраля 2006 г., после переработки 2 марта 2006 г.

Проведен рентген-дифракционный анализ соединения $\text{EuBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ в интервале температур 20–300 К. При всех температурах измерений структура описывается орторомбической сингонией. Обнаружены немонотонный рост параметра кристаллической решетки c при понижении температуры в интервале 150–20 К и особенности температурных зависимостей линейного коэффициента теплового расширения существенно ниже температуры Дебая. Результаты эксперимента полностью согласуются с выводами микроскопического рассмотрения колебаний атомов слоев ВаО и европия, а также цепочек Си–О.

Проведено рентген-дифракційний аналіз сполуки $\text{EuBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ в інтервалі температур 20–300 К. При всіх температурах вимірів структура описується орторомбічною сингонією. Виявлено немонотонне зростання параметра кристалічної ґратки c при зниженні температури в інтервалі 150–20 К і особливості температурних залежностей лінійного коефіцієнта теплового розширення істотно нижче температури Дебая. Результати експерименту повністю узгоджуються з висновками мікроскопічного розгляду коливань атомів шарів ВаО й європію, а також ланцюжків Си–О.

PACS: 63.20.–e

Ключевые слова: анизотропия параметра решетки, температура Дебая, квазигармоническая динамики кристаллической решетки, фононный спектр.

1. Введение

Ранние обзоры исследований теплового расширения твердых тел приводят подробный анализ многообразия особенностей его температурных зависимостей [1], в частности, для различных классов материалов при низких, ниже 100 К, температурах [2]. Синтез новых соединений с уникальными низкотемпературными свойствами, отличающимися ярко выраженной анизотропией, привел к наблюдению, как правило дифракционными методами, совершенно новых особенностей термического сжатия в выделенных кристаллографических направлениях ([3–7] со ссылками) и определенным трудностям их описания в рамках традиционного термодинами-

ческого подхода в терминах параметра Грюнайзена. Основное состояние материалов, обнаруживающих увеличение размера вдоль оси c при понижении температуры, различно, так же как их низкотемпературное состояние (ферроэлектрик, сверхпроводник, зарядово-упорядоченный антиферромагнетик). Их общая черта — сильная анизотропия кристаллической структуры, состоящей из достаточно большого числа атомов различного радиуса и электронного заполнения, а следовательно, анизотропия межатомных взаимодействий. Исходя из этого в настоящей работе проведено целенаправленное исследование анизотропного термического сжатия и сопутствующих особенностей температурных зависимостей коэффициента линейного теплового расширения

(КЛТР) на примере соединения $\text{EuBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ с перовскитоподобной структурой.

2. Методика эксперимента

В работе измеряли температурные зависимости параметров решетки порошковых образцов $\text{EuBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, полученных описанным в [8] способом. Измерения проводили методом регистрации рентгеновской дифракции $\text{CuK}\alpha$ -излучения с помощью дифрактометра ДРОН-2, оснащенного проточным рентгеновским криостатом оригинальной конструкции, в интервале температур 20–300 К. Во всем интервале исследованных температур структура описывается пространственной группой $Pnma$ орторомбической сингонии. Результаты измерений параметров решетки при различных температурах приведены в табл. 1. Ошибка в определении параметра решетки составляла $5 \cdot 10^{-4}$ Å, стабильность поддержания температуры – не ниже $\pm 0,1$ К. Температура Дебая этого соединения, по данным [9] с использованием [10,11], составляет 327 К при температуре 250 К. Графическое представление результатов измерений (рис. 1) и их анализ сосредоточены на интервале температур ниже 150 К, где возможен строгий микроскопический анализ в рамках квазигармонического приближения динамики решетки.

Таблица 1. Температурные зависимости параметров решетки

T , К	a , Å	b , Å	c , Å	V , Å ³
20	3,8212	3,8838	11,6865	173,4367
25	3,8213	3,8839	11,6862	173,4413
30	3,8216	3,8841	11,6860	173,4609
35	3,8221	3,8843	11,6855	173,4851
40	3,8226	3,8844	11,6850	173,5048
60	3,8229	3,8842	11,6849	173,5080
80	3,8230	3,8844	11,6850	173,5229
120	3,8249	3,8855	11,6838	173,6406
180	3,8289	3,8874	11,6791	173,8371
240	3,8305	3,8890	11,6764	173,9412
300	3,8316	3,8903	11,6699	173,9524

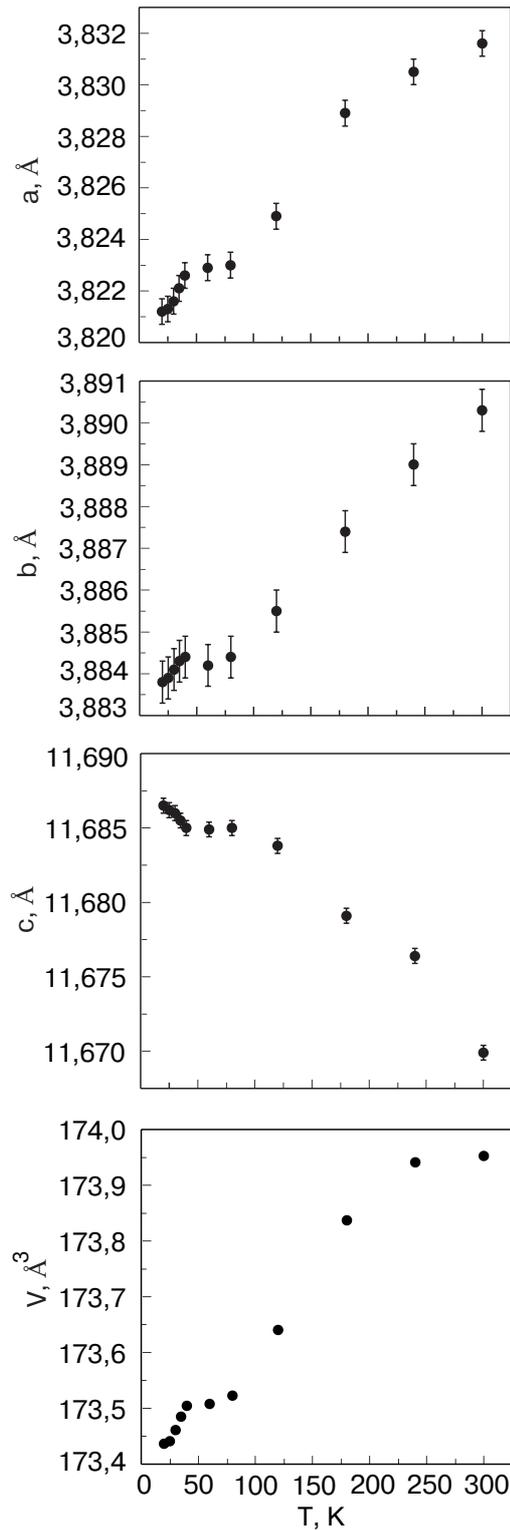


Рис. 1. Температурные зависимости параметров кристаллической решетки соединения $\text{EuBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$.

3. Обсуждение результатов

Измерения обнаруживают увеличение параметра решетки c при понижении температуры, а также немонотонность температурных зависимостей всех параметров решетки и объема элементарной ячейки.

Это, естественно, приводит к особенностям на температурных зависимостях коэффициентов теплового расширения. Учитывая многослойную кристаллическую структуру изучаемого соединения с параметром решетки c , значительно больше характерного радиуса межатомного взаимодействия, анизотропия соответствующих физических свойств определяется локальной анизотропией в отдельно взятых слоях или цепочках, а не макроскопической (упругой) анизотропией. В этом случае неприменимы рассуждения, аналогичные «пуассонову сжатию», использующие по умолчанию длинноволновые аппроксимации фононного спектра, т.е. без учета дискретности решетки. Корректное описание возможно только в рамках последовательного микроскопического рассмотрения.

Основанный на микроскопическом рассмотрении анализ причин, которые обуславливают отрицательность КЛТР вдоль направлений сильной связи в слоистых или цепочечных кристаллах с сильной анизотропией межатомного взаимодействия и упругих свойств, был предложен в [12,13]. В таких сильноанизотропных кристаллах амплитуды колебаний атомов вдоль направлений слабой связи (перпендикулярно слоям или цепочкам) значительно выше, чем в направлениях сильной связи. Смещение атома вдоль направления слабой связи приводит к увеличению расстояния между атомами внутри слоя (или цепочки) на величину Δl , пропорциональную квадрату этого смещения. В слое возникает сжимающая сила $\sim \Delta l$, которая и является причиной отрицательного КЛТР вдоль направления сильной связи. Предложенный механизм в чем-то аналогичен хорошо известному в теории упругости «пуассонову сжатию», т.е. обусловленному растяжением образца вдоль какого-нибудь направления сжатием его в направлениях, перпендикулярных направлению растяжения (см., например, [14]). Однако механизм, предложенный в [12,13], включает в себя все колебания решетки, а не только длинноволновые, которые могут быть описаны в рамках теории упругости.

Если разложить потенциальную энергию решетки Φ в ряд до кубического члена по величинам u_i (компонентам малого смещения атомов из положения равновесия), то для температурной зависимости главных значений тензора КЛТР $\alpha_{ii}(T)$ с учетом трансляционной инвариантности решетки получим следующее соотношение:

$$D_i \alpha_{ii}(T) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{r}, \mathbf{r}' \\ k, l}} \Phi_{ikl}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \langle u_k(\mathbf{r}) u_l(\mathbf{r}') \rangle_T = 0. \quad (1)$$

Здесь $D_i = \sum_{\mathbf{r}} \Phi_{ik}(\mathbf{r}) |x_k|$;

$$\Phi_{ik}(\mathbf{r}) = \Phi_{ik}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_i(\mathbf{r}) \partial u_k(\mathbf{r}')}$$

— компоненты матрицы силовых постоянных в гармоническом приближении;

$$\Phi_{ikl}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Phi_{ikl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'', \mathbf{r}' - \mathbf{r}'') = \frac{\partial^3 \Phi}{\partial u_i(\mathbf{r}) \partial u_k(\mathbf{r}') \partial u_l(\mathbf{r}'')}$$

— компоненты ангармонической силовой матрицы; x_i — декартовы координаты радиусов-векторов равновесных положений атомов \mathbf{r} ; символом $\langle \dots \rangle_T$ обозначено термодинамическое усреднение с гамильтонианом, описывающим гармонические колебания решетки.

При построении элементарной нелинейной теории колебаний кристаллической решетки (см., например, [15]) следует учитывать ангармонизмы только в членах, связанных с наибольшими силами межатомного взаимодействия, а потенциальную энергию малых сил межслоевого (или межцепочечного) взаимодействия, а также нецентральных сил считать в гармоническом приближении. Поэтому в (1) можно пренебречь слагаемыми, содержащими корреляторы смещений атомов из различных слоев или цепочек, а также корреляторы вида $\langle u_{\perp}(\mathbf{r}) u_{\perp}(0) \rangle_T$ и $\langle u_{\perp}(\mathbf{r}) u_{\parallel}(0) \rangle_T$ для атомов из одного слоя или цепочки (символом u_{\parallel} обозначено смещение атомов в направлении слоев или цепочек, т.е. вдоль направления сильной связи; u_{\perp} — смещение вдоль направления слабой связи, перпендикулярно слоям или цепочкам). Данные корреляторы, в частности, характеризуют уменьшение с ростом температуры линейных размеров вдоль слоев при смещениях и поворотах слоя как целого (отмеченное выше «пуассонову сжатие» [14,15] и либрации [16] соответственно). Кроме того, поскольку центральное взаимодействие между атомами большинства кристаллов достаточно быстро убывает с расстоянием, в (1) можно пренебречь слагаемыми, содержащими корреляторы между вторыми и более удаленными соседями из одного слоя или цепочки. Корреляторы типа $\langle u_{\parallel}(\mathbf{r}) u_{\parallel}(0) \rangle_T$ для ближайших соседей растут с температурой не быстрее, чем среднеквадратичные смещения $\langle u_{\parallel}^2(\mathbf{r}) \rangle_T$, причем обе эти температурные зависимости ведут себя подобным образом, что следует, например, из выражений, приведенных в [17]. Поэтому поведение температурной зависимости КЛТР вдоль направления сильной связи слоистого или цепочечного кристалла можно описать достаточно простым выражением:

$$\alpha_{\parallel}(T) = A \frac{\partial}{\partial T} \langle u_{\parallel}^2 \rangle_T \left\{ \delta - \frac{\frac{\partial}{\partial T} \langle u_{\perp}^2 \rangle_T}{\frac{\partial}{\partial T} \langle u_{\parallel}^2 \rangle_T} \right\}. \quad (2)$$

Здесь $\langle u_{\perp}^2 \rangle_T$ — среднеквадратичное смещение атомов вдоль направления слабой связи, т.е. $\langle u_{\perp}^2 \rangle_T = \langle u_c^2 \rangle_T$ для слоистых кристаллов (если ab — плоскость слоев) и $\langle u_{\perp}^2 \rangle_T = \langle u_a^2 \rangle_T + \langle u_b^2 \rangle_T$ для цепочечных (цепочки вдоль оси \mathbf{c}). Входящие в (2) параметры A и δ очевидным образом выражаются через ангармонические постоянные $\Phi_{ikl}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, но явный вид соответствующих выражений мы не приводим из-за их громоздкости.

Проанализируем температурную зависимость величины

$$\Delta(T) \equiv \frac{\frac{\partial}{\partial T} \langle u_{\perp}^2 \rangle_T}{\frac{\partial}{\partial T} \langle u_{\parallel}^2 \rangle_T}. \quad (3)$$

Для сильноанизотропных кристаллов величины $\langle u_{\perp}^2 \rangle_T$ не только существенно превышают $\langle u_{\parallel}^2 \rangle_T$, но и выходят на классический предел ($\langle u^2 \rangle_T \sim T$) при более низких температурах ($T_{\perp} < T_{\parallel}$). Поэтому вблизи температуры T_{\perp} функция $\Delta(T)$ имеет максимум, величина которого $\sim \exp(\gamma^{-1/2})$, где γ — отношение слабого межслоевого или межцепочечного взаимодействия к сильному взаимодействию вдоль слоев или цепочек соответственно. Поэтому вблизи этой температуры α_{\parallel} существенно уменьшается и даже может принимать отрицательные значения.

Полученные в работах [12,13] значения температур максимумов на $\Delta(T)$ показали хорошее согласие с температурами минимумов на полученных экспериментально [18] зависимостях $\alpha_{\parallel}(T)$ сильноанизотропных слоистых кристаллов.

В работах [12,13,18] рассматривались кристаллические структуры, сильная анизотропия межатомного взаимодействия в которых сохраняется в дальнем порядке и проявляется, в частности, в анизотропии упругих модулей. В кристаллах типа ВТСП 1–2–3 анизотропия упругих модулей велика — скорости звука вдоль слоев выше, чем в перпендикулярном к слоям направлении [19]. В то же время мы видим, что отрицательные значения КЛТР наблюдаются как вдоль оси четвертого порядка (ось \mathbf{c}) — при всех температурах, кроме узкого температурного интервала вблизи $T \approx 60$ К, так и в направлении вдоль базисных плоскостей \mathbf{a} и \mathbf{b} — именно на этом узком температурном интервале вблизи $T \approx 60$ К.

В работах [20–23] было показано, что в таких многослойных соединениях, как ВТСП типа 1–2–3,

существенное превышение величины периода кристаллической решетки вдоль оси \mathbf{c} над величиной характерного радиуса межатомного взаимодействия приводит к ослаблению влияния регулярности кристаллической структуры на характер квазичастичных возбуждений. В спектральных характеристиках таких кристаллов проявляются черты, свойственные неупорядоченным системам. В частности, для фононных спектров многослойных структур характерно наличие квазилокализованных (малодисперсионных) мод [20–22], благодаря чему распространение возбуждений вдоль оси \mathbf{c} в таких системах будет затруднено по сравнению с их распространением вдоль слоев.

В многослойных решетках, даже таких, макроскопические характеристики которых не отличаются заметной анизотропией (как, например, ВТСП типа 1–2–3), взаимодействие между отдельными атомами или атомными группами может быть сильноанизотропным. Присущая веществам данного класса «заторможенность» в распространении взаимодействий между слоями может привести к заметному проявлению такой локальной анизотропии в фононном спектре [23] и поведении ряда колебательных характеристик, в частности среднеквадратичных смещений вдоль различных кристаллографических направлений атомов отдельных слоев.

Некоторые многослойные ВТСП, например $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$, демонстрируют анизотропию упругих модулей, присущую слоистым кристаллам, и отрицательное тепловое расширение в направлении слоев [24], которое может быть описано формулой (2). В то же время для многослойных структур типа ВТСП 1–2–3, где межслоевое взаимодействие между всеми слоями одного порядка, а внутрислоевое взаимодействие существенно меняется от слоя к слою, для слоев со слабым внутрислоевым взаимодействием (слой атомов Cu и слой цепочек Cu–O) характерна локальная анизотропия «цепочечного типа», т.е. в этих слоях среднеквадратичные смещения атомов в направлении плоскости слоев заметно выше и выходят на классический предел при более низких температурах, чем среднеквадратичные смещения тех же атомов в перпендикулярном слоям направлении. Поэтому возможно существование температурных интервалов, на которых межслоевые промежутки $\text{Cu}_2\text{O} \leftrightarrow \text{R} \leftrightarrow \text{Cu}_2\text{O}$ и $\text{BaO} \leftrightarrow \text{CuO} \leftrightarrow \text{BaO}$ с ростом температуры сжимаются, что будет приводить к отрицательным значениям КЛТР вдоль оси \mathbf{c} .

Температурная зависимость изменения величины каждого из данных промежутков может быть описана некоторым локальным коэффициентом теплового расширения $\alpha_c^{(l)}(T)$, для которого справедливо соотношение типа (2):

$$\alpha_i^{(l)}(T) = A \frac{\partial}{\partial T} \langle (u_i^l)^2 \rangle_T \{ \delta^{(l)} - \Delta_i^{(l)}(T) \},$$

где индекс l нумерует атомные слои (R или CuO соответственно), индекс i – кристаллографические направления ($i = a, b, c$), а функции $\Delta_i^{(l)}(T)$ определяются аналогично (3) добавлением индекса l для соответствующих среднеквадратичных смещений. При этом под $\langle (u_i^l)^2 \rangle_T$ подразумеваем либо само среднеквадратичное смещение $\langle u_i^2 \rangle_T^R$ – для слоев редкоземельных элементов, либо полусумму $\{ \langle u_i^2 \rangle_T^{Cu} + \langle u_i^2 \rangle_T^{O4} \} / 2$ – для слоев CuO.

В слоях BaO среднеквадратичные смещения атомов бария вдоль оси c существенно выше, чем в базисной плоскости. Для атомов кислорода O1 выполняется несколько иное соотношение: $\langle u_c^2 \rangle_T^{O1} \sim \langle u_a^2 \rangle_T^{O1} > \langle u_b^2 \rangle_T^{O1}$ (ось b выбрана вдоль цепочек Cu–O). Но поскольку барий тяжелее кислорода более чем в восемь раз, максимум при $T \approx 60$ К наблюдается на величине

$$\Delta_{ab}^{BaO}(T) \equiv \frac{2 \left(\frac{\partial}{\partial T} \langle u_c^2 \rangle_T^{Ba} + \frac{\partial}{\partial T} \langle u_c^2 \rangle_T^{O1} \right)}{\frac{\partial}{\partial T} \langle u_b^2 \rangle_T^{Ba} + \frac{\partial}{\partial T} \langle u_b^2 \rangle_T^{O1} + \frac{\partial}{\partial T} \langle u_a^2 \rangle_T^{Ba} + \frac{\partial}{\partial T} \langle u_a^2 \rangle_T^{O1}},$$

что соответствует уменьшению КЛТР вдоль базисной плоскости, вплоть до отрицательных значений.

Вычисление температурных зависимостей $\Delta^{(l)}(T)$ произведено методом **J**-матриц (см., например, [25–27]). Необходимые сведения о силовых постоянных получены на основе данных работ [28–31]. Результаты расчета представлены на рис. 2. На этом же рисунке приведены значения КЛТР, рассчитанные по данным эксперимента (см. табл. 1 и рис. 1) по формуле

$$\bar{\alpha}_c(T \in [T_i, T_{i+1}]) = \frac{2}{T_{i+1} - T_i} \frac{c(T_{i+1}) - c(T_i)}{c(T_{i+1}) + c(T_i)},$$

а затем сглаженные.

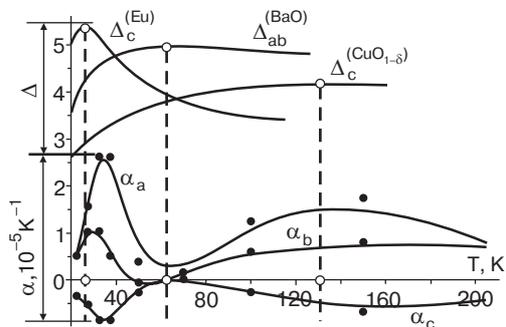


Рис. 2. Температурные зависимости коэффициента линейного теплового расширения вдоль различных кристаллографических направлений, рассчитанные на основании экспериментальных данных (табл. 1 и рис. 1), а также теоретические расчетные кривые $\Delta_i^{(l)}(T)$.

Температуры максимумов и минимумов на кривых $\alpha_i(T_i)$ в направлениях вдоль базисной плоскости и перпендикулярно ей хорошо коррелируют между собой. Это свидетельствует в пользу того, что обусловивший их механизм – чисто решеточный. Более чем удовлетворительное совпадение этих экстремумов с максимумами на температурных зависимостях $\Delta_i^{(l)}(T)$ позволяет сделать вывод о том, что минимум на температурной зависимости $\alpha_c(T)$ (и, соответственно, максимумы на $\alpha_a(T)$ и $\alpha_b(T)$) при $25 \text{ K} \leq T \leq 40 \text{ K}$ обусловлен высокими амплитудами атомов Eu вдоль кристаллографических направлений **a** и **b**, что приводит к сжатию вдоль оси **c** межслоевых промежутков $\text{Cu}_2\text{O} \leftrightarrow \text{Eu} \leftrightarrow \text{Cu}_2\text{O}$. При $50 \text{ K} \leq T \leq 70 \text{ K}$ происходит сжатие слоев BaO, причиной которого является сильная локальная анизотропия взаимодействия атомов Ba (амплитуда колебаний вдоль оси **c** существенно выше, чем в базисной плоскости). При $120 \text{ K} \leq T \leq 150 \text{ K}$ вдоль оси **c** сжимаются межслоевые промежутки $\text{BaO} \leftrightarrow \text{CuO} \leftrightarrow \text{BaO}$.

При температурах выше 200 К наблюдается еще более быстрое линейное по температуре уменьшение параметра c , которое не может быть объяснено в рамках предложенной модели, поскольку в данном температурном диапазоне гармоническая динамика кристаллической решетки становится неприменимой. Отметим, что из экспериментальных кривых следует, что при $T \sim 180 \text{ K}$ величина КЛТР весьма невелика (вдоль направлений **b** и **c** она практически обращается в нуль). Это свидетельствует в пользу независимости механизмов отрицательного теплового расширения при высоких температурах (более 200 К) и температурах $T \leq 140 \text{ K}$, рассмотренных нами.

Выводы

Обнаружено увеличение параметра решетки c (в направлении вдоль оси четвертого порядка) соединения $\text{EuBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ при понижении температуры и особенности коэффициента линейного теплового расширения в области температур ниже 150 К. Хорошее совпадение температур максимумов и минимумов на температурных зависимостях КЛТР, измеренных вдоль взаимно ортогональных кристаллографических направлений, а также согласие положений соответствующих экстремумов с максимумами на рассчитанных на микроскопическом уровне отношениях производных от среднеквадратичных смещений позволяют утверждать, что наблюдаемый эффект может быть интерпретирован как чисто решеточное явление и объяснен в рамках квазигармонической динамики кристаллической решетки.

Причиной отрицательных значений КЛТР являются особенности фононного спектра, обусловленные сильной анизотропией межатомного взаимодействия в слоях Eu и BaO, а также цепочках Cu–O. Данная анизотропия не сохраняется в дальнем порядке и не соответствует анизотропии упругих свойств данного соединения.

Работа выполнена при поддержке грантов МОН Украины М 257 и Ф10/50.

- С.И. Новикова, *Тепловое расширение твердых тел*, Наука, Москва (1974), с. 92.
- T.H.K. Barron, J.G. Collins, and G.K. White, *Adv. Phys.* **29**, 609 (1980).
- A.W. Sleight, *Thermal contraction*, Elsevier Science (1995), p. 64.
- J.D. Jorgensen, D.C. Hinks, P.G. Radelli, W.I.F. David, and R.M. Ibberson, *cond-mat/0205486* (2001).
- V.V. Eremenko, S.B. Feodosyev, I.A. Gospodarev, V.A. Sirenko, M.Yu. Shvedun, W. McCallum, and M. Tovar, *Fiz. Nizk. Temp.* **31**, 350 (2005).
- Y. Xue, S. Asada, A. Hosomichi, S. Naher, J. Xue, H. Kaneko, H. Suzuki, T. Muranaka, and J. Akimitsu, *J. Low Temp. Phys.* **138**, 1105 (2005).
- Seongsu Lee, A. Pirogov, Jung Hoon Han, J.G. Park, A. Hoshikawa, and T. Kamiyama, *Phys. Rev.* **B71**, 180413(R) (2005).
- Youven Xu, M.J. Kramer, K.W. Dennis, H. Wu, A. O'Connor, R.W. McCallum, S.K. Malik, and W.B. Yelon, *Physica* **C333**, 195 (2000).
- A. Del Moral, M.R. Ibarra, P.A. Algarabel, and J.I. Arnaudus, *Physica* **C161**, 48 (1989).
- H.P. Vander Meulen, J.J.M. Franse, Z. Tarnawski, K. Kadowaki, J.C.P. Klaase, and A.A. Menousky, *Physica* **C152**, 65 (1988).
- D.J. Bishop, A.P. Ramirez, P.L. Gammel, B. Batlogg, E.A. Rietman, R.J. Cava, and A.J. Millis, *Phys. Rev.* **B36**, 2408 (1987).
- S.B. Feodosyev, I.A. Gospodarev, and E.S. Syrkin, *Phys. Status Solidi* **B150**, K19 (1988).
- С.Б. Феодосьев, Е.С. Сыркин, И.А. Господарев, В.П. Попов, А.А. Гурскас, Н.М. Нестеренко, *ФТТ* **31**, 186 (1989).
- Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1987).
- A.M. Kosevich, *The Crystal Lattice (Phonons, Solitons, Dislocations)*, WILEY-VCH Verlag Berlin GmbH, Berlin (1999).
- J.L. van Smaalen de Boer, J. Haas, and C. Kommandeur, *Phys. Rev.* **B31**, 3496 (1985).
- S.B. Feodosyev, I.A. Gospodarev, M.A. Strzhemechny, and R.J. Hemley, *Physica* **B300**, 186 (2001).
- Г.Л. Бельский, Р.А. Сулейманов, Н.А. Абдуллаев, В.Я. Штейншрайбер, *ФТТ* **26**, 3560 (1984).
- Ming Lei, J.L. Sarrao, W.M. Visssher, T.M. Bell, J.D. Thompson, A. Migliory, U.W. Welp, and B.W. Veal, *Phys. Rev.* **B47**, 6154 (1993).
- Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **17**, 1055 (1991).
- A.M. Kosevich, E.S. Syrkin, and S.B. Feodosyev, *Phys. Lett.* **A167**, 94 (1992).
- И.А. Господарев, А.М. Косевич, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **22**, 593 (1996).
- S.B. Feodosyev, I.A. Gospodarev, A.M. Kosevich, and E.S. Syrkin, *Phys. Low Dim. Str.* **10/11**, 209 (1995).
- И.А. Господарев, А.П. Исакина, А.И. Прохвятилов, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **16**, 673 (1990).
- В.И. Пересада, в кн.: *Физика конденсированного состояния*, Б.И. Веркин (ред.), т. 2 (1968), с. 172.
- В.И. Пересада, В.Н. Афанасьев, В.С. Боровиков, *ФНТ* **1**, 461 (1975).
- R. Haydock, in *Solid State Physics*, vol. **35**, 129, H. Ehrenreich, F. Seitz, and D. Turnbull (eds.), Academic Press, New York (1980).
- S. Mass, T. Jasuda, Y. Horie, M. Kusada, and T. Fukami, *J. Phys. Soc. Jpn.* **57**, 1024 (1988).
- В.К. Федотов, А.И. Колесников, В.И. Кулаков, Е.Г. Понятовский, И. Натканец, Я. Майер, Я. Кравчик, *ФТТ* **35**, 310 (1993).
- L. Pintschovius, N. Pyka, W. Reichard, A.Yu. Rumiantssev, N.L. Mitrifanov, A.S. Ivanov, G. Golin, A. Bourges, *Physica* **B174**, 323 (1991).
- J.J. Rhyne, D.A. Neumann, J.A. Gitaas, and F. Beech, *Phys. Rev.* **B36**, 2294 (1991).

Anisotropy of $\text{EuBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ lattice parameters variation with temperature in quasi-harmonic limit

V.V. Eremenko, I.A. Gospodarev, V.V. Ibulaev, V.A. Sirenko, S.B. Feodosyev, and M.Yu. Shvedun

The x-ray diffraction study of the compound $\text{EuBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ is carried out in the temperature interval 20–300 K. The results are described by the orthorhombic symmetry group at each of experimental temperatures. A nonmonotonic increase of the crystal lattice parameter a is observed with decreasing temperature from 150 to 20 K as well as features of temperature dependences of linear thermal expansivity are below the Debye temperature. The measurements perfectly agree with the microscopic approach results on atomic vibrations of BaO, europium layers, and Cu–O chains.

Keywords: crystal lattice parameter anisotropy, Debye temperature, quasi-harmonic dynamics of the crystal lattice, phonon spectrum.