

# Динамика решетки, упругие и пьезоэлектрические свойства кристаллов $\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$ и $\text{HoAl}_3(\text{VO}_3)_4$

Виктор Зиненко, Максим Павловский

*Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Россия, 660036 г. Красноярск  
Академгородок, 50, строение № 38, zvi@iph.krasn.ru*

В рамках неэмпирической модели ионного кристалла с учетом дипольной и квадрупольной поляризуемостей ионов проведен расчет динамики решетки, высокочастотной диэлектрической проницаемости, упругих и пьезоэлектрических свойств кристаллов  $\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$  и  $\text{HoAl}_3(\text{VO}_3)_4$  с пространственной группой симметрии  $R32$ . Вычисленные частоты в центре зоны Бриллюэна хорошо согласуются с данными, полученными методом Рамановской спектроскопии для этих соединений. Во внутренней точке зоны Бриллюэна кристалла  $\text{HoFe}_3(\text{VO}_3)_4$  была найдена нестабильная мода колебаний, конденсация которой приводит к структурному фазовому переходу в фазу с утроенной примитивной ячейкой и симметрией  $R3_121$ , наблюдаемому экспериментально в данном соединении.