

Спектр комбинационного рассеяния, динамика решетки и фазовые переходы в эльпасолите Rb_2NaYF_6

*А.С. Орешонков, науч. рук. д.ф.-м.н. А.Н. Втюрин
Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН*

Перовскитоподобный кристалл Rb_2NaYF_6 относится к семейству эльпасолитов $A_2B^{(1)}B^{(2)}X_6$ где А,В – катионы металлов либо более сложные молекулярные ионы, X – анионы кислорода либо галогенов (пространственная группа $Fm\bar{3}m$, $Z = 4$). При понижении температуры Rb_2NaYF_6 испытывает последовательно два структурных фазовых перехода: при $T = 152K$ в тетрагональную фазу и при $T = 122K$ в ромбоэдрическую фазу. Изучение влияния гидростатического давления на структурные искажения в кристалле Rb_2NaYF_6 ранее не проводилось.

В данной работе была поставлена задача – исследовать спектры комбинационного рассеяния (КР) Rb_2NaYF_6 в широкой области температур и давлений, включающей точки фазовых переходов, произвести их интерпретацию с использованием численного моделирования динамики решетки.

Для получения спектров КР в качестве источника возбуждения было использовано поляризованное излучение 514.5 нм Ar^+ лазера (Spectra-Physics Stabilite 2017) мощностью 100 мВт (15 мВт на образце). Спектры в геометрии 180° были получены на спектрометре Horiba Jobin Yvon T64000 в частотном диапазоне от 10 до 1200 см^{-1} . Для температурных исследований использовался криостат ASR Closed Cycle Cryostat CS204-X1.SS. Диапазон температур, в котором проводилось исследование: 8–300 К. Эксперименты в условиях высокого (до 4.33 GPa) гидростатического давления при комнатной температуре проводились на установке с алмазными наковальнями.

Для расчета спектра колебаний решетки был использован известный программный продукт LADY[1]. Наилучшее согласие между экспериментальными частотами колебаний и расчетными было получено в рамках так называемой «гибридной» модели[2]. Данная модель является комбинацией модели валентно-силового поля (VFF) и модели «жестких» ионов (RIM). Моделирование динамики решетки Rb_2NaYF_6 производилось следующим образом: парные взаимодействия Rb – F, Na – F были описаны в рамках модели «жестких» ионов. В качестве потенциала межатомного взаимодействия использовался потенциал Борна-Майера. Для получения наилучшего согласия между экспериментальными и расчетными частотами колебаний взаимодействия в октаэдрических группах YF_6 описывались потенциальной функцией вида:

$$V(r_{ij}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{Z_i Z_j}{r_{ij}} + U(r_{ij}) + U_{VFF}$$

Для нахождения параметров расчетной модели была написана программа оптимизации значения модельных параметров с учетом устойчивости решетки при нормальном давлении. Используя полученные таким образом данные, был произведен расчет спектров исследуемого кристалла.

Эксперимент по комбинационному рассеянию света показал, что фазовые переходы при понижении температуры соответствуют фазовым переходам типа смещения. Вычисленные спектры колебаний решетки хорошо согласуются с результатами экспериментов. Численное моделирование показало, что вплоть до 10 ГПа в кристалле Rb_2NaYF_6 фазовых переходов не наблюдается.

Литература:

- [1] M.B. Smirnov, V.Yu. Kazimirov, LADY: software for lattice dynamics simulations. JINR communications. E14-2001-159, Dubna (2001)
- [2] E. M. Roginskii, A. A. Kvasov, Yu. F. Markov and M. B. Smirnov, Phys. Solid State; 54, 900 (2012)