

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ КРИСТАЛЛА $\text{HoFe}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ *

Методом Рамановской спектроскопии были определены частоты колебания кристаллической решетки в центре зоны Бриллюэна. В рамках метода функционала плотности вычислены частоты колебания решетки, упругие модули, высокочастотная диэлектрическая проницаемость. Получена температурная зависимость решеточной теплоемкости.

Ключевые слова: динамика решетки.

Монокристаллы редкоземельных ферроборатов со структурой хантита в последние годы привлекают большое внимание, в первую очередь, как лазерные среды с однопозиционным распределением активных ионов.

В начале этого тысячелетия в кристаллах ферроборатов была обнаружена достаточно большая магнитоэлектрическая поляризация [1–3] и сильный магнитоэлектрический эффект [4]. Таким образом, эти соединения вызывают немалый интерес как объекты для изучения механизма формирования магнитоэлектрического взаимодействия и возможностей электрического управления локальным магнитным состоянием в структурах с квазиодномерным распределением магнитных катионов.

Исследование поляризованных спектров комбинационного рассеяния света было проведено при комнатной температуре (295 К) на спектрометре Horiba Jobin Yvon T64000 в геометрии рассеяния 90° . Спектрометр работал в режиме вычитания дисперсии со спектральным разрешением по входной щели 2 см^{-1} .

Для возбуждения спектра рассеяния использовался Ar^+ -лазер (длина волны $\lambda = 514 \text{ nm}$). Мощность излучения – 80 mW на образце, что соответствует плотности лазерного излучения 250 W/cm^2 . Полученные частоты приведены в таблице.

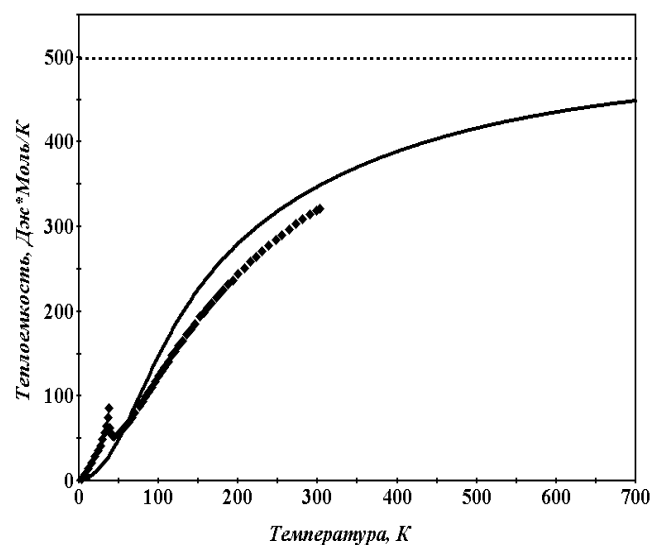
Расчет динамики решетки, высокочастотной диэлектрической проницаемости и упругих свойств проведен в рамках неэмпирической модели ионного кристалла с учетом дипольной и квадрупольной поляризуемостей ионов.

Детали модели рассмотрены в работе [5]. Все расчеты сделаны с помощью экспериментальных значений параметров решетки. Для вычисленных частот проведена классификация по неприводимым представлениям.

В центре зоны Бриллюэна имеется 57 оптических мод и колебательное представление имеет вид $7A_1 + 12A_2 + 19E$ и, соответственно, 3 акустических моды $A_2 + E$. Не все моды центра зоны удалось получить

экспериментально и классифицировать, поэтому прямого сравнения с рассчитанными данными провести не представляется возможным, однако, из таблицы можно видеть, что, вычисленные частоты, близкие по величине к экспериментальным, присутствуют.

Отличные от нуля компоненты тензора диэлектрической проницаемости составили следующие значения: $\epsilon_{xx} = 4,02, \epsilon_{yy} = 4,02, \epsilon_{zz} = 2,82$, полученные значения модулей упругости – $C_{11} = 357 \text{ ГПа}$, $C_{12} = 120 \text{ ГПа}$, $C_{13} = 69 \text{ ГПа}$, $C_{33} = 162 \text{ ГПа}$, $C_{14} = 29 \text{ ГПа}$, $C_{44} = 65 \text{ ГПа}$.



Температурная зависимость решеточной теплоемкости (сплошная линия), экспериментальная кривая теплоемкости (ромбики), закон Дюлонга-Пти (прерывистая линия)

На основе расчета динамики кристаллической решетки была вычислена плотность фононных состояний и получена температурная зависимость решеточной теплоемкости (см. рисунок). Экспериментальная кривая теплоемкости рассматриваемого соединения, получена в работе [6].

*Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение № 8365.

Частоты (см⁻¹) колебания решетки кристалла HoFe₃B₄O₁₂.

Эксперимент Раман	Расчет		
	A1	A2	E
11	151	59	31
84	253	131	133
122	353	174	171
160	452	204	203
181	784	218	222
199	807	224	238
229	1246	278	249
271		288	267
315		446	283
351		606	332
392		666	338
446		1283	426
474			443
590			465
634			665
675			795
737			1192
995			1247
1237			1305
1405			

Библиографические ссылки

1. Magnetoelectric interactions in rare-earth ferroborates / A. M. Kadomtseva, A. K. Zvezdin, A. P. Pyatakov et al. // Experimental and Theoretical Physics. 2007. Vol. 105. № 1. P. 116–119.

2. Mfgnetoelectric effect and spontaneous polarization in HoFe₃(BO₃)₄ and Ho_{0.5}Nd_{0.5}Fe₃(BO₃)₄ / R. P. Chaudhury, F. Yen. Lorenz B. et al. // Phys. Rev. B 80 (2009). 104424

3. Магнитоэлектрические и магнитоупругие свойства редкоземельных ферроборатов / М. Кадомцева, Ю. Ф. Попов, Г. П. Воробьев и др. // Физика низких температур. 2010. № 6 (36). 640 с.

4. Magnetoelectricity in the system RA₁₃(BO₃)₄ (R = Tb, Ho, Er, Tm / K.-C. Liang, R. P. Chaudhury, B. Lorenz et al. // Abstract of Low Temperature Conf. 2011. Benijne, China. CO234.

5. Максимов Е. Г., Зиненко В. И., Замкова Н. Г. Расчеты физических свойств ионных кристаллов из первых принципов // УФН. 2004. Т. 174, 11. 1145.

6. Low-temperature magnetic phase diagram of HoFe₃(BO₃)₄ holmium ferroborate: a magnetic and heat capacity study / A. Pankratsl, G. Petrakovskii, A. Kartashev et al. // Phys.Condens. Matter. 2009. № 21. P. 436001.

V. I. Zinenko, M. S. Pavlovskiy, A. S. Krylov

LATTICE DYNAMICS OF CRYSTAL HoFe₃B₄O₁₂

Crystal lattice vibrational frequencies in the center of the Brillouin zone have been determined with the Raman spectroscopy method. The lattice vibrational frequencies, elastic modulus, high frequency dielectric constant and temperature dependence of the lattice heat capacity have been calculated with the use of density functional method.

Keywords: lattice dynamics.

© Зиненко В. И., Павловский М. С., Крылов А. С., 2012