

Исследование индуцированных гидростатическим давлением фазовых переходов в кристалле Rb_2KScF_6 методом комбинационного рассеяния света

© А.Н. Втюрин, А.С. Крылов, С.В. Горайнов*, С.Н. Крылова, В.Н. Воронов

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, 660036 Красноярск, Россия

* Институт минералогии и петрографии Сибирского отделения Российской академии наук, 630090 Новосибирск, Россия

E-mail: slanky@iph.krasn.ru

Исследованы спектры комбинационного рассеяния света кристалла эльпасолита Rb_2KScF_6 в области давлений до 7 GPa. Обнаружен фазовый переход при давлении около 1 GPa. Анализ изменений спектральных параметров позволяет утверждать, что он сопровождается удвоением объема примитивной ячейки исходной кубической фазы. Судя по характеру изменений частотных зависимостей наблюдаемых колебаний от давления, предположительно существует еще один переход в более низкосимметричную фазу при давлении около 2.1 GPa.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда содействия отечественной науке, Красноярского краевого фонда науки (грант для молодых ученых) и гранта поддержки научных школ НШ-939.2003.2.

PACS: 77.80.Bh, 78.30.Hv

1. Введение

Кристалл Rb_2KScF_6 относится к семейству перовскитоподобных кристаллов со структурой эльпасолита $A_2B^{(1)}B^{(2)}X_6$, где А, В — катионы металлов либо более сложные молекулярные ионы, X — анионы кислорода либо галогенов [1].

Ранее в этом кристалле было исследовано влияние гидростатического давления на температуры фазовых переходов в области до 0.6 GPa [2] и показано, что в данном диапазоне приложение гидростатического давления повышает температуру фазового перехода из кубической фазы и расширяет область стабильности тетрагональной фазы, однако при комнатной температуре кубическая фаза остается стабильной. При давлениях свыше 0.6 GPa фазовые переходы в этом кристалле не исследовались.

В настоящей работе была поставлена задача изучить влияние гидростатического давления на спектр комбинационного рассеяния (КР) кристалла Rb_2KScF_6 .

2. Структура и симметрия кристалла

Структура элементарной ячейки кристалла Rb_2KScF_6 кубическая (пространственная группа $Fm\bar{3}m$, $Z = 4$). При понижении температуры при нормальном давлении кристалл Rb_2KScF_6 последовательно испытывает два структурных фазовых перехода [3]: при $T_1 = 252$ К из кубической в тетрагональную фазу (пространственная группа $I114/m$, $Z = 2$) и при $T_2 = 223$ К в моноклинную с удвоением объема ячейки (пространственная группа $P12_1/n1$, $Z=2$). В высокосимметричной кубической фазе разложение колебательного представления в цен-

тре зоны Бриллюэна имеет вид

$$\Gamma(Fm\bar{3}m) = A_{1g}(xx, yy, zz) + E_g(xx, yy, zz) + 2F_{2g}(xz, yz, xy) + F_{1g} + 5F_{1u} + F_{2u}. \quad (1)$$

В скобках показаны компоненты тензора КР, в которых активны соответствующие колебания.

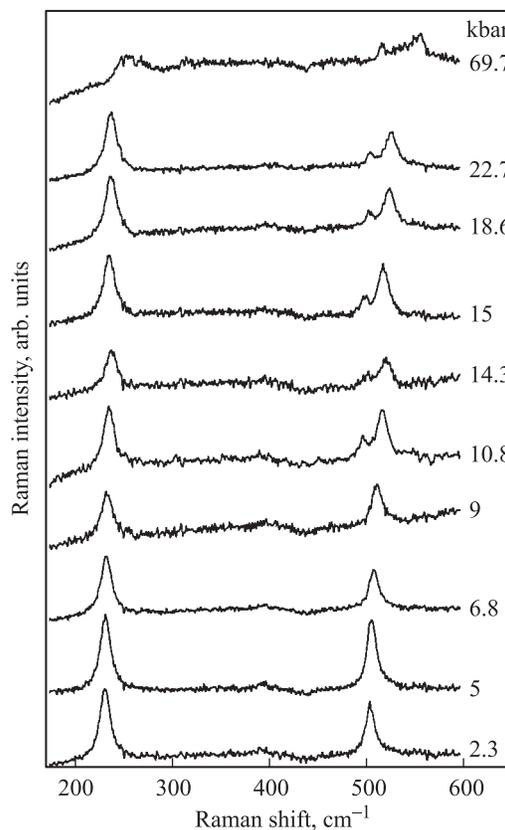


Рис. 1. Трансформация спектров КР с ростом давления.

3. Экспериментальные результаты и обсуждение

Эксперименты в условиях высокого (до 7 ГПа) гидростатического давления при комнатной температуре проводились на установке с алмазными наковальнями, аналогичной использованной в [4]; диаметр камеры с образцом 0.25 мм, высота 0.1 мм. Давление с точ-

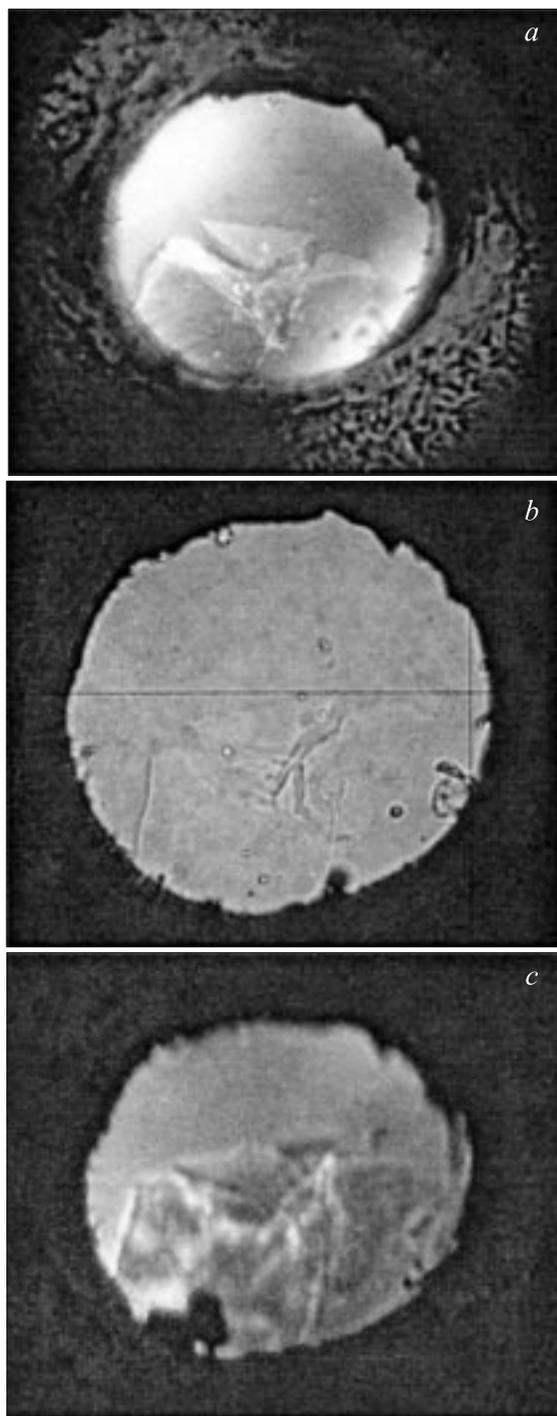


Рис. 2. Микрофотографии образца при давлении 0.1 (a), 0.6 (b), 1.04 ГПа (c).

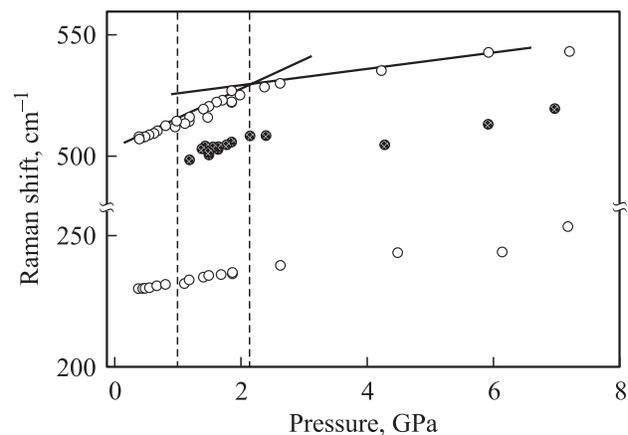


Рис. 3. Зависимость частот линий спектра КР от давления.

ностью 0.05 ГПа определялось по сдвигу полосы люминесценции рубина, микрокристалл которого помещался рядом с неориентированным образцом размером 50–70 μm . В качестве передающей давление среды использовалась тщательно обезвоженная смесь этилового и метилового спиртов. Спектры КР также возбуждались излучением лазера Ar^+ (514.5 nm, 500 mW) и регистрировались КР-спектрометром OMARS 89 (Dilor). В связи с малыми размерами образцов и сильным диффузным рассеянием регистрировалась высокочастотная (выше 200 cm^{-1}) часть спектра. Одновременно производилось наблюдение доменной структуры и эффектов двулучепреломления в образце с помощью поляризационного микроскопа.

Трансформация спектров в ростом давления показана на рис. 1. При давлениях ниже 1 ГПа и температуре 300 К образец оптически изотропен. На рис. 2, a представлена микрофотография кристалла при давлении 0.1 ГПа. При давлении 0.6 ГПа показатель преломления образца становится равным показателю преломления среды, микрофотография приведена на рис. 2, b. Спектры КР в диапазоне давлений от 0 до 1 ГПа имеют вид, характерный для кубической фазы кристалла. При более высоких давлениях в спектрах на рис. 1 появляется дополнительная линия в районе 500 cm^{-1} . Единственное наблюдаемое в этой области колебание в кубической фазе соответствует невырожденной (A_{1g} , см. (1)) внутренней моде октаэдрического иона ScF_6 , и возникновение здесь дополнительной линии не может быть обусловлено снятием вырождения. Появление этой линии может быть связано только с увеличением объема примитивной ячейки кубической фазы. Эффекты двулучепреломления в образце наблюдаются при давлении 1.04 ГПа. На рис. 2, c представлена микрофотография образца при этом давлении. Характер спектров еще раз резко меняется выше 2.1 ГПа (зависимость частот наблюдаемых колебаний от давления показана на рис. 3). Линии резко уширяются, изменяется скорость роста частот. Такие спектральные изменения могут быть связаны с еще одним фазовым переходом.

Авторы выражают глубокую благодарность К.С. Александрову, И.Н. Флерову за предоставленные образцы и полезное обсуждение результатов.

Список литературы

- [1] К.С. Александров, А.Т. Анистратов, Б.В. Безносиков, Н.В. Федосеева. Фазовые переходы в кристаллах галоидных соединений. Наука, Новосибирск (1981).
- [2] И.Н. Флеров, М.В. Горев, С.В. Мельников, С.В. Мисюль, В.Н. Воронов, К.С. Александров. ФТТ **34**, 2185 (1992).
- [3] С.Н. Крылова, А.Н. Втюрин, А. Белю, А.С. Крылов, Н.Г. Замкова. ФТТ **46**, 1271 (2004).
- [4] S.V. Goryainov, I.A. Belitsky. Phys. Chem. Minerals **22**, 443 (1995).