

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ И СТРУКТУРНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ТИПА СМЕЩЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ Sr_2CaWO_6 и Sr_2MgWO_6 СО СТРУКТУРОЙ ЭЛЬПАСОЛИТА

В.И. Зиненко

Институт физики им. Л. В. Киренского, Красноярск, Россия

E-mail: zvi@iph.krasn.ru

Окислы со структурой эльпасолита, также как и представители семейства перовскита, интенсивно изучаются в течение последних лет. Внимание обусловлено тем, что многие соединения испытывают разнообразные структурные фазовые переходы и обладают интересными электрическими и магнитными свойствами. Структура эльпасолита A_2BWX_6 является производной от структуры перовскита. В противоположность простым перовскитам ABX_3 , в которых все октаэдры эквивалентны, в эльпасолитах существует два типа неэквивалентных ионных групп BX_6 и $B'X_6$, чередующихся вдоль трех осей четвертого порядка куба и связанных между собой через общий атом X, расположенный в вершине октаэдра. Таким образом, кубическую ячейку эльпасолита можно представить как перовскит с удвоенными параметрами элементарной ячейки. Пространственная группа этой структуры: $Fm\bar{3}m (O_h^5)$ с гранецентрированной решеткой. Элементарная ячейка содержит одну молекулу. В данной работе вычислен спектр колебаний кристаллической решетки для кристаллов Sr_2CaWO_6 , Sr_2MgWO_6 построен эффективный гамильтониан, описывающий фазовый переход $Fm\bar{3}m-I4/m$, параметры которого вычислены из собственных значений силовой матрицы и методом Монте-Карло описана термодинамика этого фазового перехода.

Таблица 1. Вычисленные и экспериментальные значения координат ионов и параметров ячейки

Кристалл	$a_{\text{рас}}, \text{Å}$	$a_{\text{экс}}, \text{Å}$
Sr_2CaWO_6	8,05	8,19[]
Sr_2MgWO_6	7,89	7,9[]

	полож.	запол.	$x/a_{\text{рас}}$	$y/a_{\text{рас}}$	$z/a_{\text{рас}}$	$x/a_{\text{экс}}$	$y/a_{\text{экс}}$	$z/a_{\text{экс}}$
Sr	8c	1	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
Ca, Mg	4b	1	0,50	0,50	0,50	0,50	0,50	0,50
W	4a	1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
O(Ca)	24e	1	0,23	0,0	0,0	0,225	0,0	0,0
O(Mg)	24e	1	0,23	0,0	0,0	0,235	0,0	0,0

Таблица 2. Диэлектрическая проницаемость (ϵ_∞),
 эффективные заряды Борна (Z), упругие модули ($C_{ij}(10^2\text{GPa})$)

	ϵ_∞	Z_{Sr}	$Z_{\text{Ca(Mg)}}$	Z_{W}	Z_{O1}	Z_{O3}	C_{11}	C_{12}	C_{44}
Sr_2CaWO_6	2.93	2.51	2.34	4.15	-1.93	-1.89	2,7	0,73	0,74
Sr_2MgWO_6	2.61	2.47	2.34	4.22	-1.95	-1.90	2,4	0,66	0,80

Таблица 3. Частоты колебаний (cm^{-1}) при $q=0$.
 В скобках указано вырождение мод.

Sr_2CaWO_6		Sr_2MgWO_6	
расчет	эксперимент	расчет	эксперимент
202i(3) (T_{1g})		186i (3) (T_{1g})	
107i(2) (T_{1u})		74i (2) (T_{1u})	
76i(3) (T_{2g})		41i (3) (T_{2g})	
138 (T_{1u})		147 (T_{1u})	
208(2) (T_{1u})		160(3) (T_{2u})	
127(3) (T_{2u})		227(2) (T_{1u})	
240 (T_{1u})		295(3) (T_{2g})	
275(3) (T_{2g})		236 (T_{1u})	
270(2) (T_{1u})		273(2) (T_{1u})	
337 (T_{1u})		381 (T_{1u})	
710(2) (E_g)		672(2) (E_g)	
664(2) (T_{1u})		738(2) (T_{1u})	
690 (A_{1g})	900	726 (A_{1g})	740 (A_{1g})
738 (T_{1u})		763 (T_{1u})	