

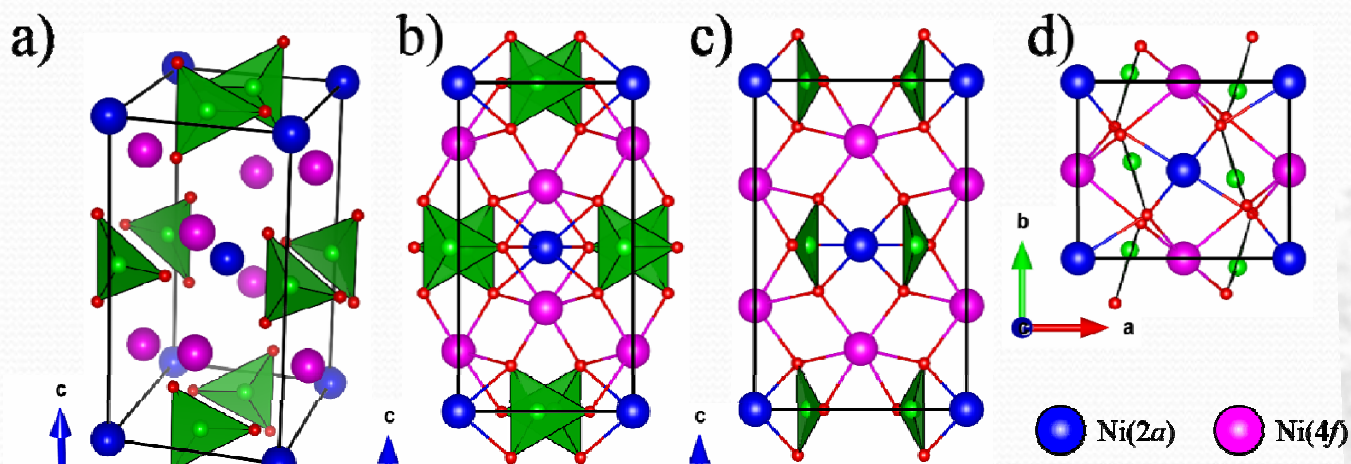
ДИНАМИКА РЕШЁТКИ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$

А.Д. Молчанова

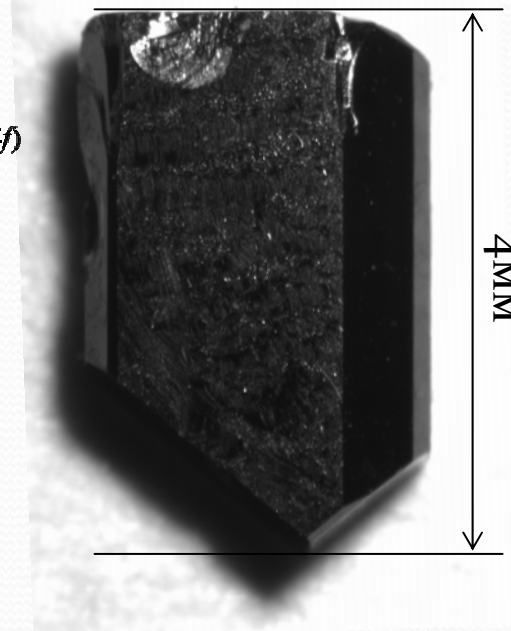
Институт спектроскопии Российской академии наук, Москва

Исследуемый объект

Пространственная группа $R\bar{3}m$ (ромбическая сингония)
центросимметричная, две оптические оси



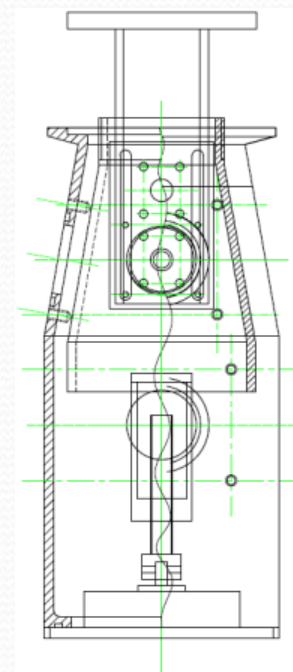
Элементарная ячейка
котоита $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$.



Особенности соединений $\text{Me}_3\text{B}_2\text{O}_6$ ($\text{Me} = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mn}$):

- Наличие в структуре треугольных или тетраэдрических групп, которые образуют цепочки или ленты;
- Все ионы металлов локализованы внутри кислородных октаэдров;
- Антиферромагнитное упорядочение (для $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$ - при $T_N = 46 \text{ K}$).

Оборудование



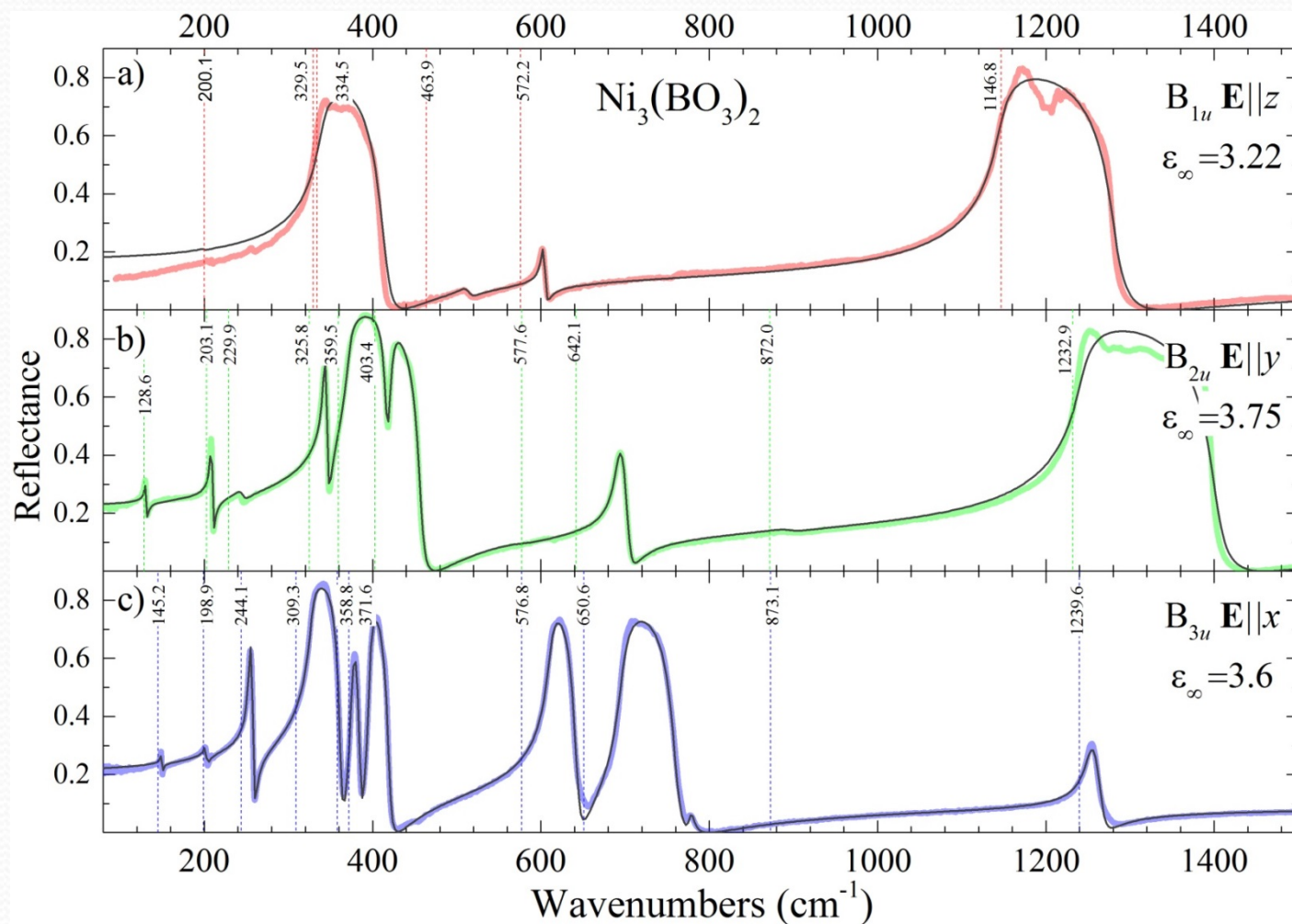
- Широкодиапазонный ($5 - 50000 \text{ cm}^{-1}$) вакуумный Фурье-спектрометр высокого разрешения (до $0,001 \text{ cm}^{-1}$) Bruker IFS 125 HR;
- Криостат замкнутого гелиевого цикла Cryomech ST403;
- Высокочувствительный болометр, работающий при температуре 1.6 К.

Описание эксперимента

- Зарегистрирована температурная зависимость спектров отражения от граней монокристалла $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$ с направлениями поляризации падающего света $E||a$, $E||b$ и $E||c^*$ в спектральном диапазоне 30-2000 см^{-1} .
- Проведено измерение спектров пропускания $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$ в терагерцовом диапазоне (13 – 300 см^{-1}) при различных температурах и для двух направлений поляризации ($E||a$ и $E||b$).
- Были получены спектры пропускания $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$ в ближнем ИК и оптическом диапазонах (6000-20000 см^{-1}).

* За исключением спектра отражения $E||c$, все результаты получены для температурного диапазона (3-300 K)

Спектры отражения $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$



Всего в кристалле $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$ формируется 66 фононных мод, из них

- 30 КРС-активны
- 26 ИК –активны
- 3 акустические
- 7 оптически неактивны

Анализ спектров отражения



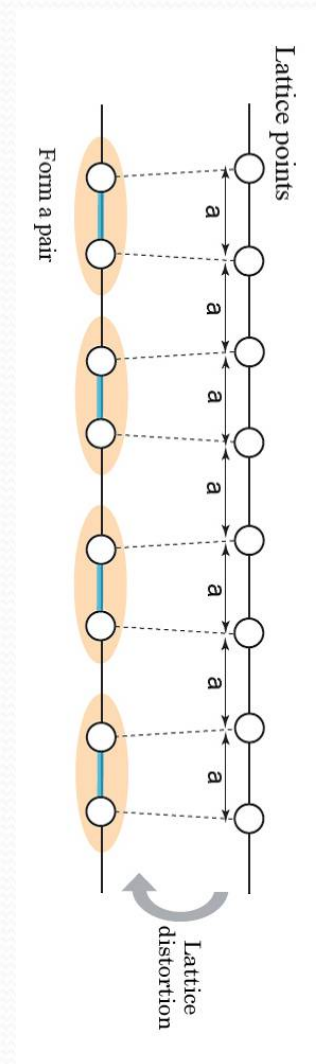
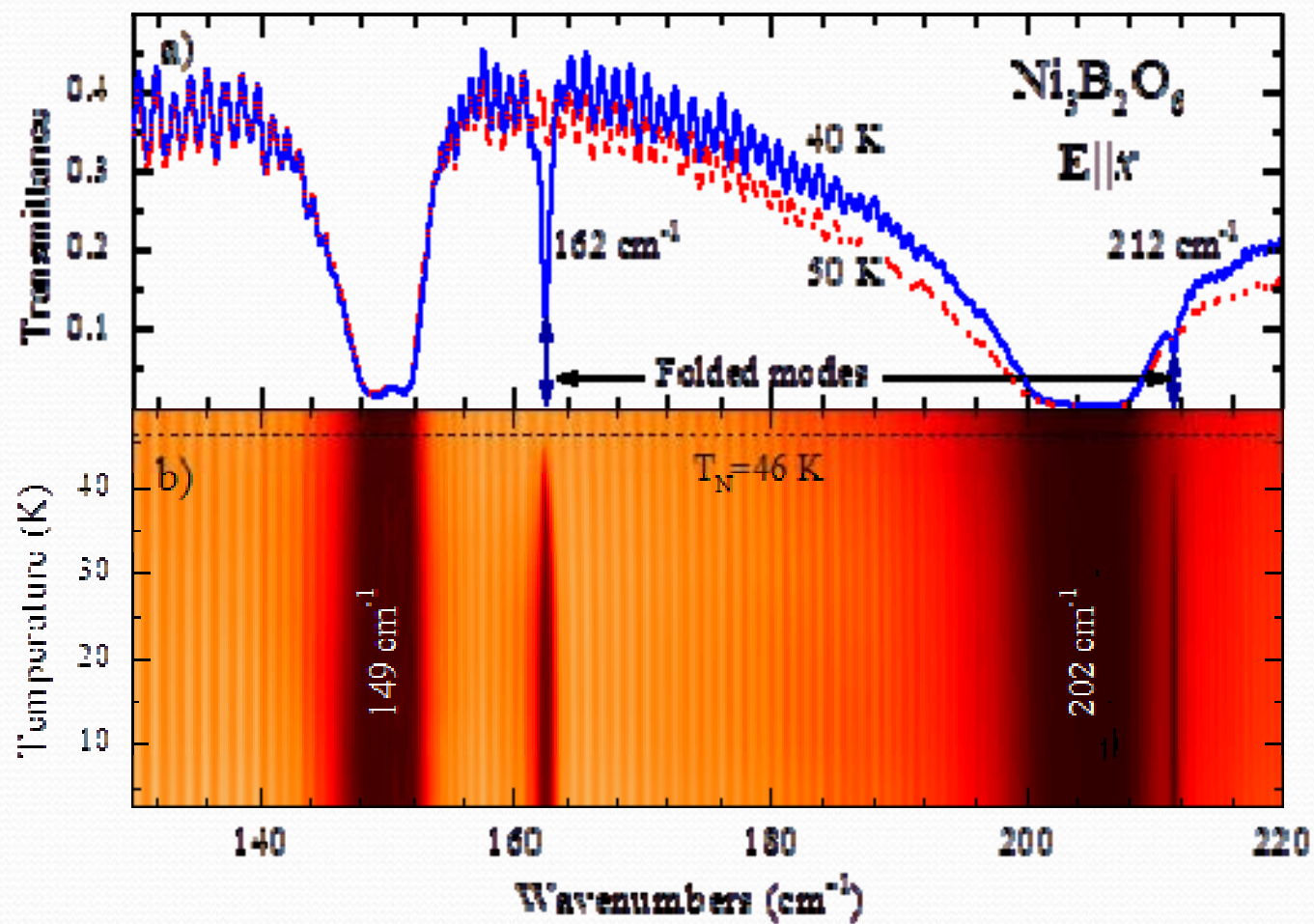
$$\text{Фононы в } \Gamma = \begin{cases} 8A_g (xx,yy,zz) + 7B_{1g}(xy) + 8B_{2g}(xz) + 7B_{3g}(yz) & - \text{активны в КР} \\ + 11B_{1u}(z) + 7B_{2u}(y) + 11B_{3u}(x) & - \text{активны в ИК} \\ + 7A_u & - \text{оптически не активны} \end{cases}$$

$$R = \left| \frac{n - 1}{n + 1} \right|^2 \quad - \text{связь коэффициента отражения с показателем преломления для нормального падения света}$$

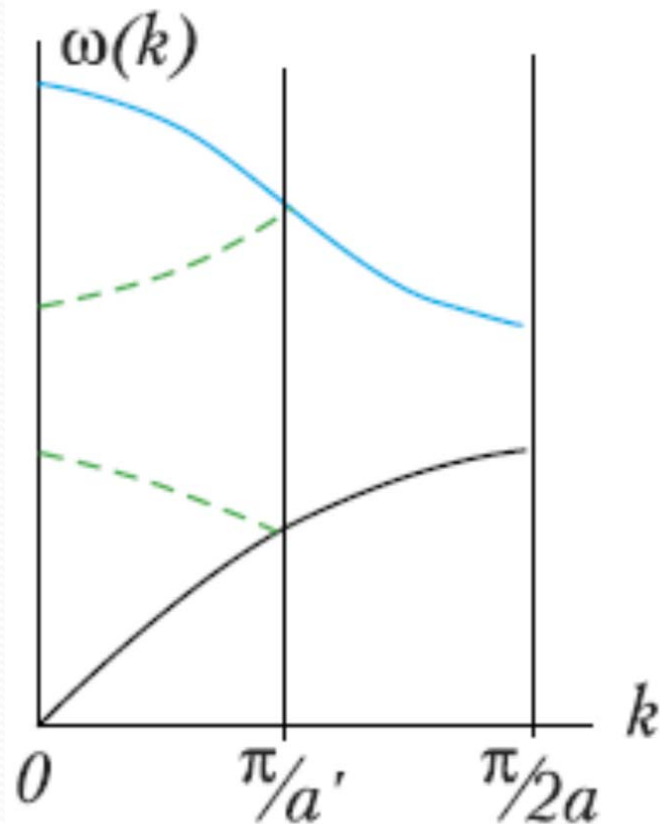
$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} + \sum_{j=1}^J \frac{f_j \omega_j^2}{\omega_j^2 - \omega^2 + i\gamma^2 \omega}$$

Моделирование спектров отражения позволило установить ТО-частоты всех ИК-активных фононов $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$, их затухание (γ) и силу осцилляторов (f_j), а также диэлектрическую проницаемость на бесконечности ϵ_{∞} по различным направлениям распространения света

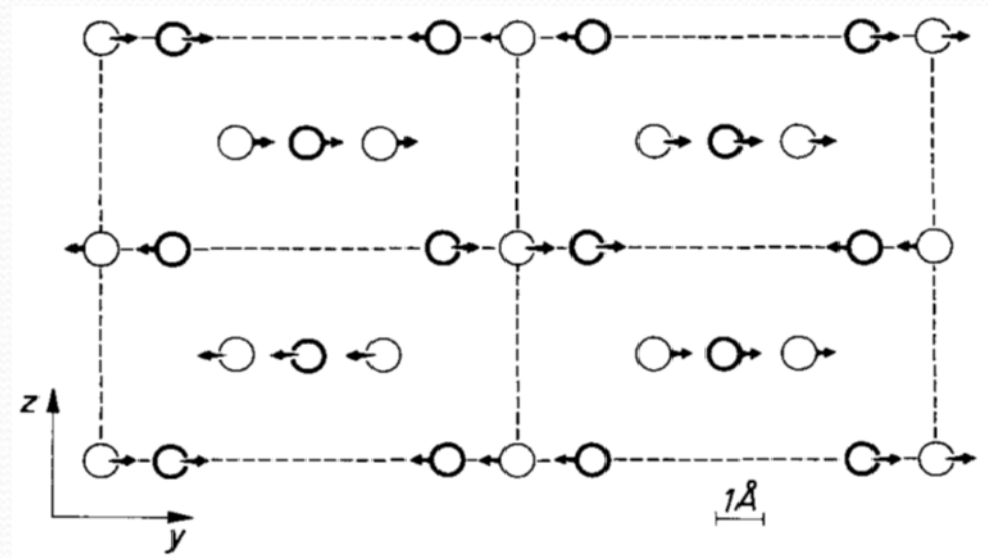
Структурный фазовый переход в $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$



Удвоение элементарной ячейки



Складывание зоны Бриллюэна

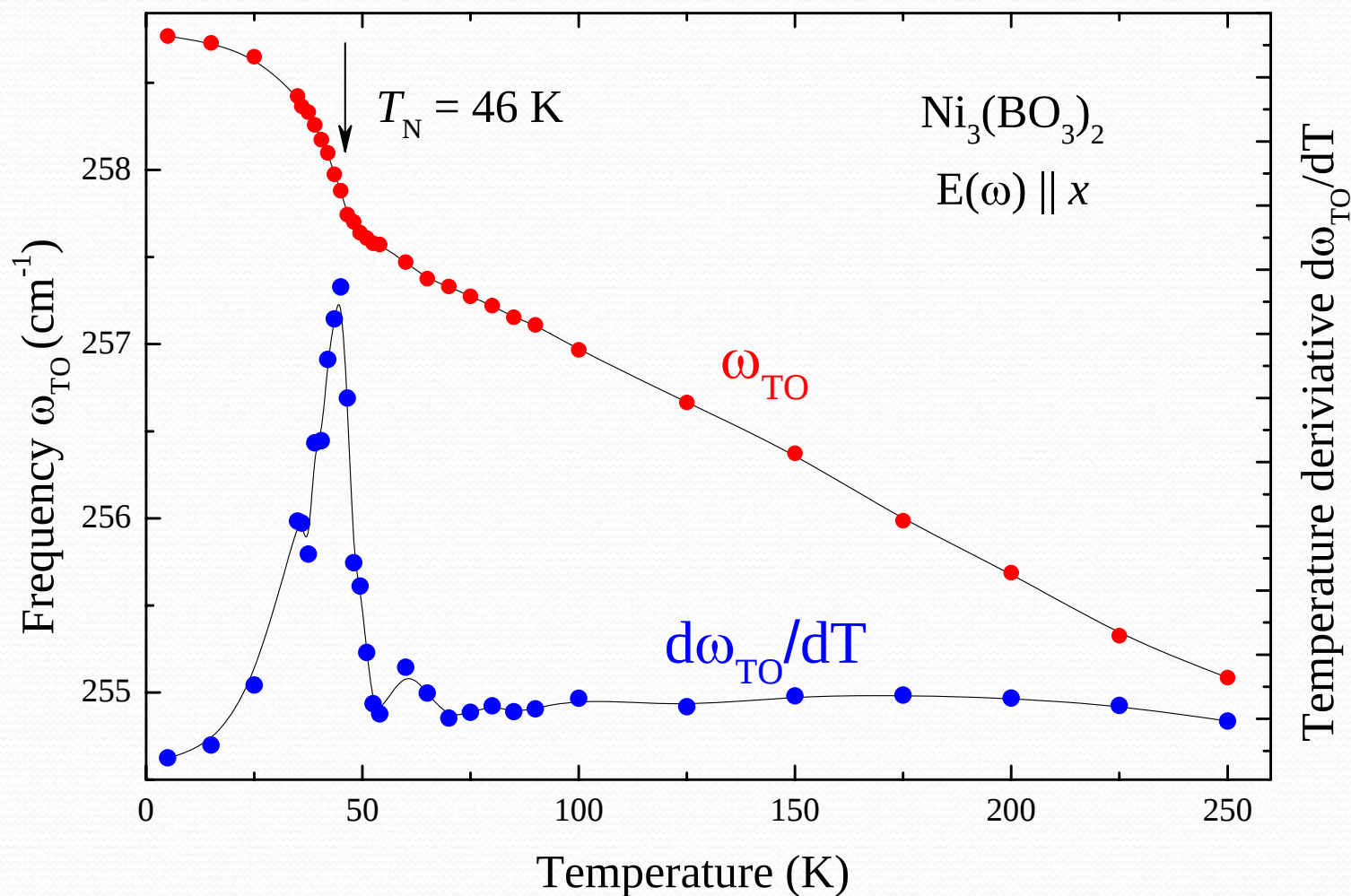


Возможное направление спинов в $\text{Co}_3\text{V}_2\text{O}_6$ при антиферромагнитном упорядочении (учетверение магнитной ячейки) из статьи [2]. Аналогичное учетверение наблюдалось в статье [3] для $\text{Ni}_3(\text{BO}_3)_2$ по данным нейтронного рассеяния.

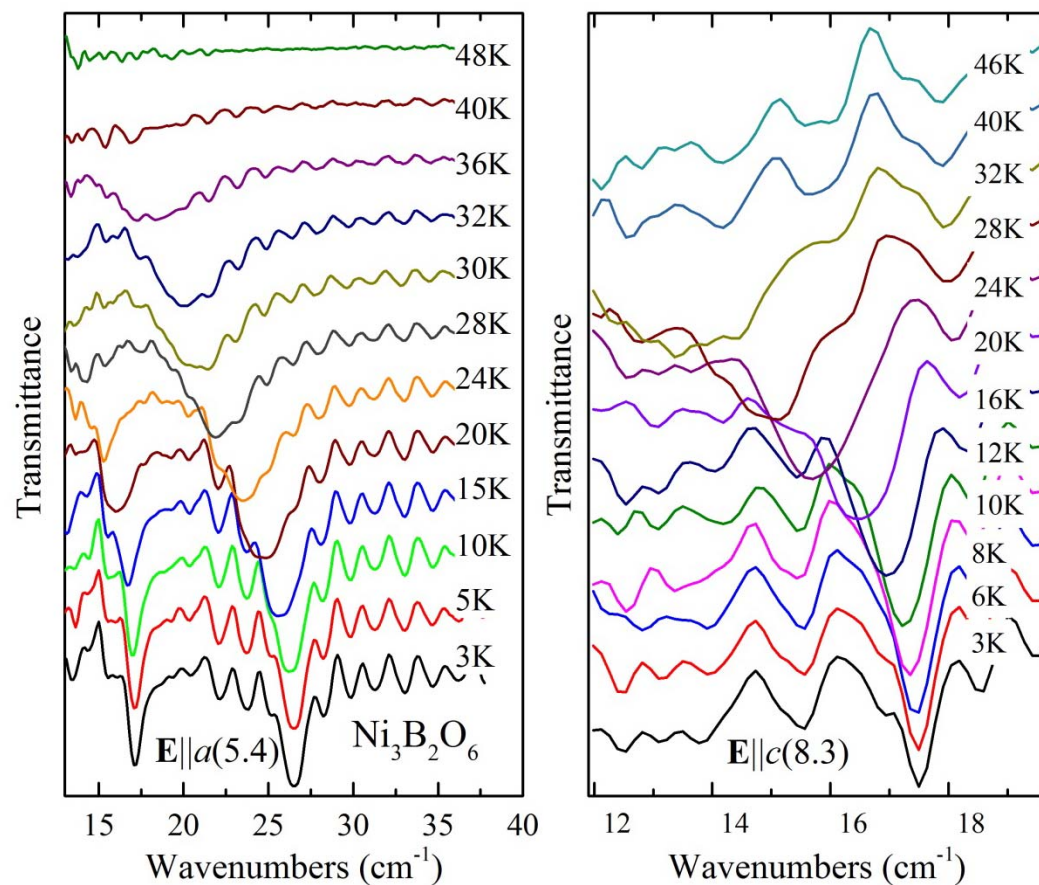
[2] R. E. Newnham M. J. Redman, P. Santoro, Z. Kristallogr. **121**, 418 (1965);

[3] R. E. Newnham, R. P. Santoro, P. F. Seal, G. R. Sallings, Phys. Status Solidi **16**, K17 (1966).

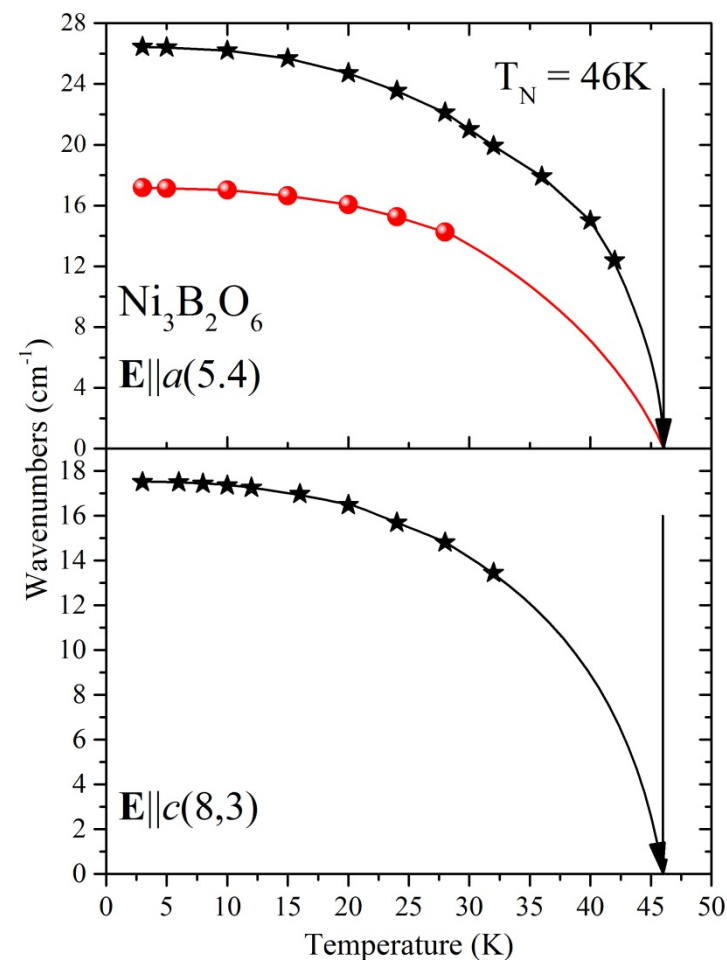
Температурная зависимость ТО-фононов



ДАЛЕКОЙ ИНФРАКРАСНОЙ ОБЛАСТИ

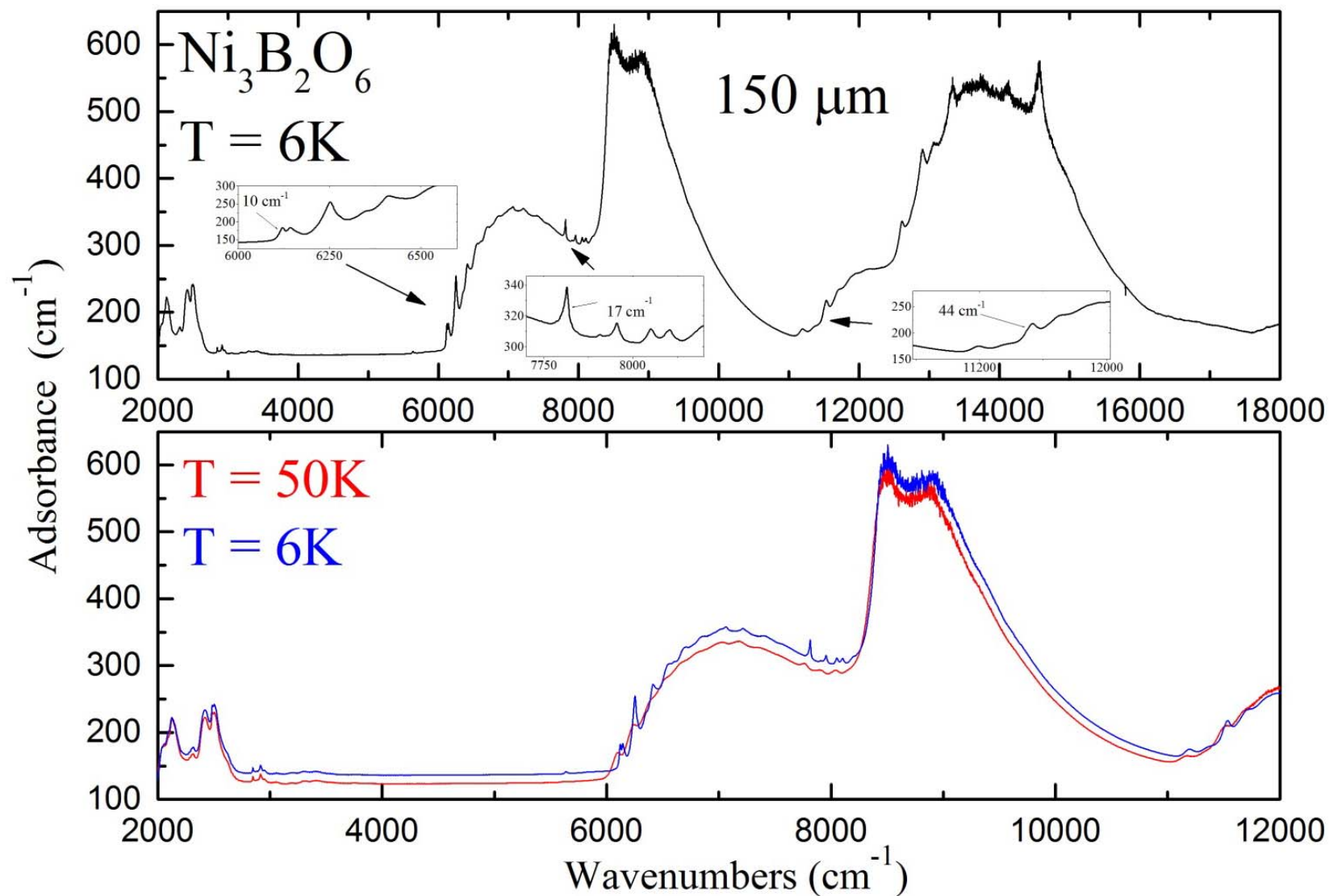


Поляризованные ($E||a$, $E||c$) спектры пропускания $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$ в далёкой ИК-области (13 - 40 cm^{-1}).

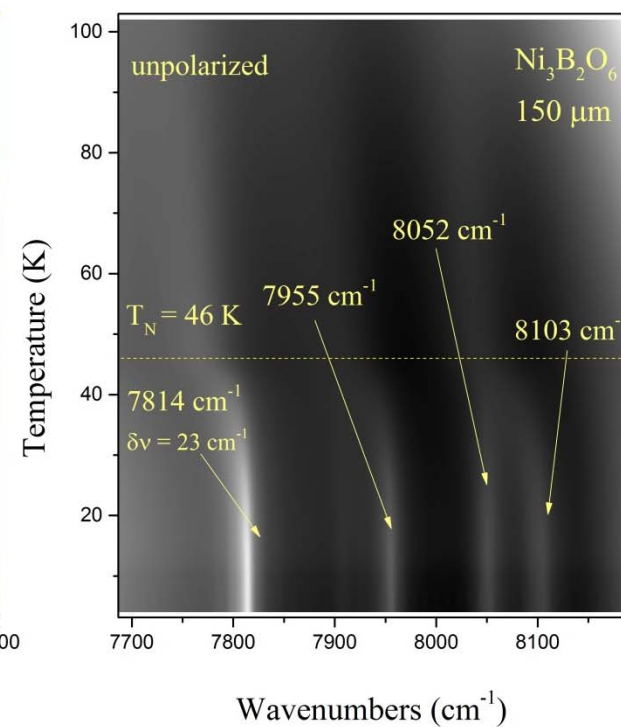
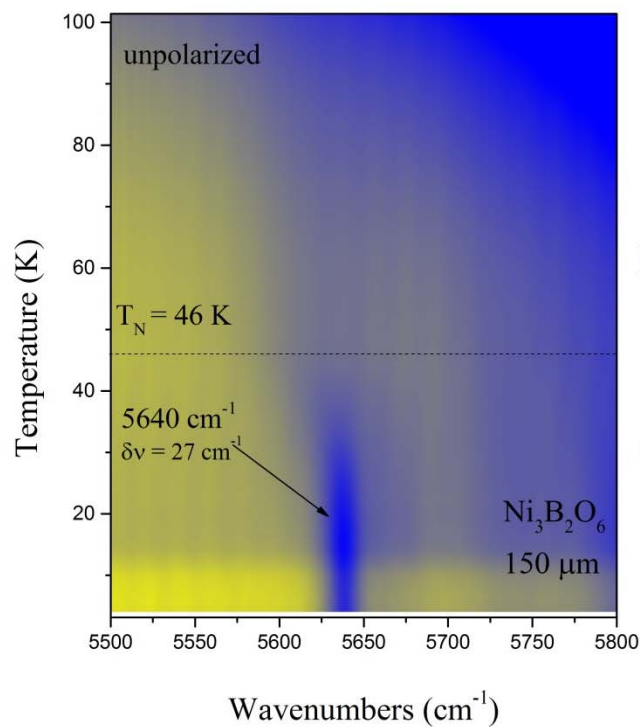
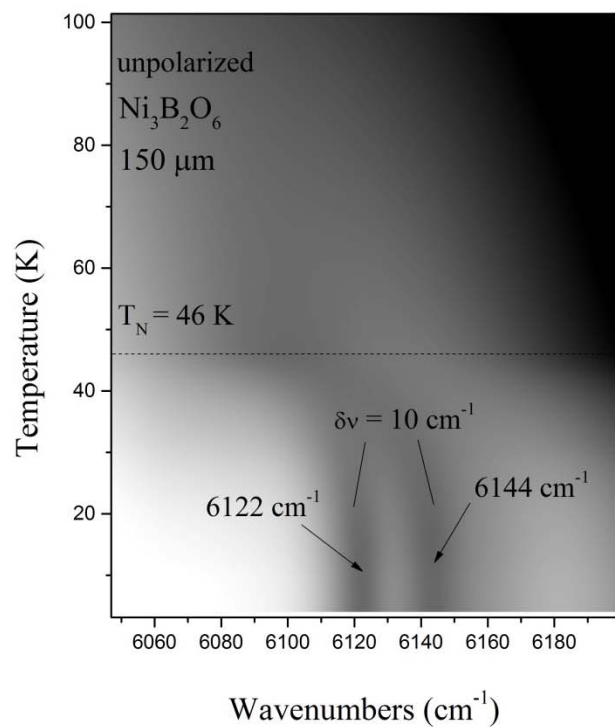


Температурная зависимость положения низкочастотных возбуждений.

Оптические спектры Ni²⁺



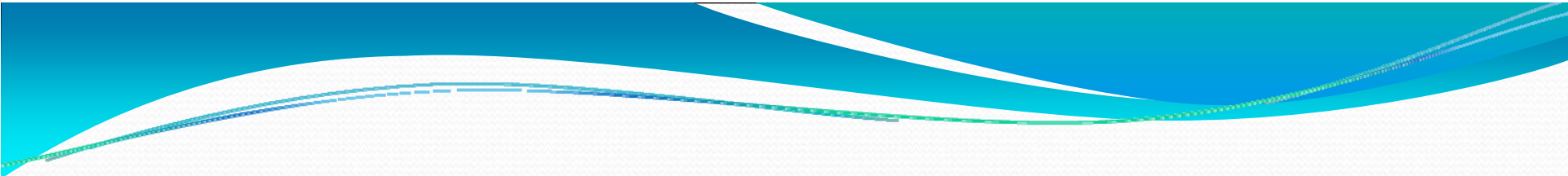
Температурные зависимости бесфононных линий в спектрах Ni^{2+}



ВЫВОДЫ

Впервые проведено исследование оптических спектров кристаллов $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_6$ и $\text{Co}_3\text{V}_2\text{O}_6$

- Найдены частоты и параметры всех ИК-активных фононных мод $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_6$ по спектрам отражения и поглощения; определены диэлектрические константы кристалла по всем трем направлениям распространения света;
- По спектрам ИК-поглощения $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_6$ и $\text{Co}_3\text{V}_2\text{O}_6$ в длинноволновой области наблюдается **удвоение периода кристаллической решетки**, происходящим одновременно с **магнитным фазовым переходом**;
- В спектрах пропускания $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_6$ найдены низкочастотные возбуждения, отнесенные к **магнонам**;
- В спектрах пропускания $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_6$ наблюдались **узкие линии**, связанные с d-d переходами в ионе Ni^{2+} .



Спасибо за внимание!