

**Экспериментальные данные и расчёт фононных спектров соединений семейства лангасита****Научный руководитель – Болдырев Кирилл Николаевич****Кузьмин Николай Николаевич***Студент (магистр)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

*E-mail: kolyanfclm@gmail.com*

Кристаллы семейства лантан-галлиевого силиката (лангасит) представляют собой группу кристаллов, изоструктурных кальций-галлиевому германату ( $\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{GeO}_{14}$ ) с пространственной группой  $P321$  [1]. Они впервые были синтезированы и исследованы в 80-х годах прошлого века в нашей стране. На сегодняшний день в России отлажена технология промышленного выращивания кристаллов лангасита (LGS) методом Чохральского, также этим методом были получены некоторые другие соединения с данной структурой [2]. Соединения LGS наиболее известны своими уникальными пьезоэлектрическими свойствами (до трех раз более сильными, чем у кварца). Кроме последних, были открыты другие интересные свойства лангаситов и кристаллов с их структурой. Так  $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$  был предложен в качестве матрицы для создания лазерно-активных сред [3]. Другим примером является  $\text{Nd}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ , в котором ионы  $\text{Nd}^{3+}$  образуют решетку типа кагомэ [4]. Соединение  $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ , в котором находится магнитный ион  $\text{Fe}^{3+}$  в тетраэдрической координации, является мультиферроиком [5].

Представленная работа дает характеристику фононных спектров соединений семейства лангасита. В их числе имеются представители, имеющие как одну магнитную подсистему ( $3d$  ионы), так и две (редкоземельная,  $3d$  ионы). Для соединений  $\text{Ba}_3M\text{Fe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  ( $M = \text{Sb}, \text{Ta}, \text{Nb}$ ),  $\text{Ba}_3\text{SbFe}_3X_2\text{O}_{14}$  ( $X = \text{Si}, \text{Ge}$ ),  $\text{PbTeZ}_3\text{P}_2\text{O}_{14}$  ( $Z = \text{Co}, \text{Mn}$ ),  $R_3\text{CrGe}_3\text{Be}_2\text{O}_{14}$  ( $R = \text{La}, \text{Pr}, \text{Nd}$ ),  $R_3\text{AlGe}_3\text{Be}_2\text{O}_{14}$  ( $R = \text{Pr}, \text{Nd}$ ) были зарегистрированы колебательные спектры в дальней и средней ИК областях при комнатной температуре. Полученные спектры характеризуются большой сложностью, которая связана с большим числом атомов в элементарной ячейке и тем, что исследуемые соединения являются неупорядоченными. На основании DFT расчета проведена идентификация колебательных мод рассматриваемых соединений. Для соединений  $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  и  $\text{Ba}_3\text{SbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$  была получена температурная зависимость от комнатной температуры до 6К. Из нее видно, что при температуре приблизительно 27К в спектре появляются новые линии. Их появление, возможно, указывает на наличие структурного фазового перехода.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 17-02-00603.

**Источники и литература**

- 1) Белоконева Е.Л., Симонов М.А., Бутапин А.В., Милль Б.В. и др. ДАН 255(5), 1099 (1980)
- 2) Mill B., Pisarevsky Y. Proceedings of the Annual IEEE International Frequency Control Symposium, 2000, pp. 133-140
- 3) Kaminskii A.A., Mill B.V., Khodzhabagyan G.G. et al. Phys. Stat. Sol. (a). – 1983. – Vol. 80. – pp. 387-398
- 4) Zorko A., Bert F., Mendels P., Borde P. et al. Phys. Rev. Lett. 100, 147201 (2008)
- 5) Toulouse C. et al. Physical Review B. – 2015. – V. 92. – №. 10. – P. 104302