

Институт

физики



ИМ. Л.В.Киренского

Мисюль С.В., Батуринец Е.Е.,
Александров К.С.

**АТОМНЫЕ СМЕЩЕНИЯ В
КРИСТАЛЛАХ С
ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППОЙ
 O_h^5 -Fm $\bar{3}m$, ВОЗНИКАЮЩИЕ ПРИ
ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ.
1. АНАЛИЗ ПЕРЕСТАНОВОЧНОГО
ПРЕДСТАВЛЕНИЯ**

Препринт 841 Ф
Красноярск, 2007

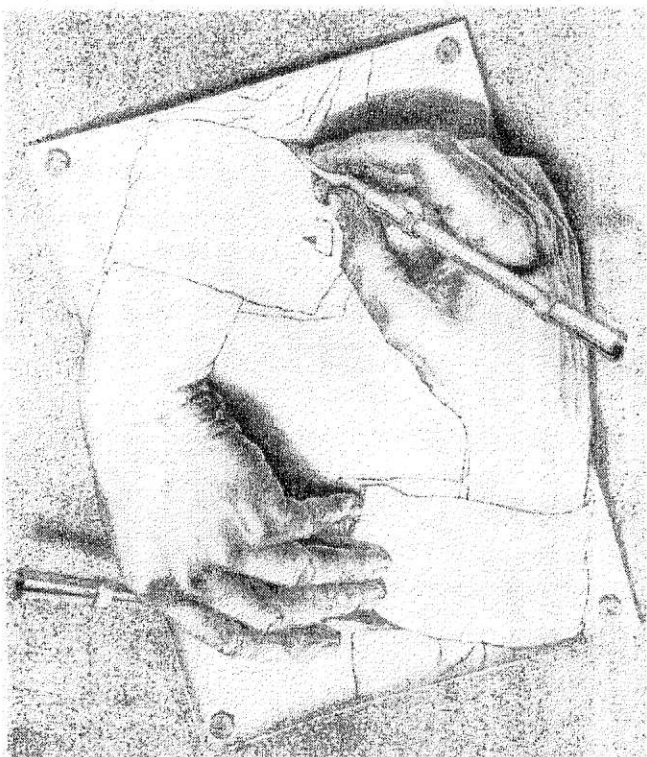
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМ. Л.В.КИРЕНСКОГО

Препринт № 841 ф

**АТОМНЫЕ СМЕЩЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ С ПРОСТРАНСТВЕННОЙ
ГРУППОЙ O_h^3 -Fm $\bar{3}m$, ВОЗНИКАЮЩИЕ ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ.**

1. АНАЛИЗ ПЕРЕСТАНОВОЧНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

С.В. Мисюль, Е.Е. Батуринец, К.С. Александров



Красноярск 2007

Построены базисные функции неприводимых представлений пространственной группы O_h^3 для всех Лифшицевских точек зоны Бриллюэна кубической гранцентрированной решетки, входящих в перестановочное представление, реализованного на всех позициях правильных систем точек группы O_h^3 . Такие функции позволяют анализировать изменение структуры любого кристалла, высокосимметричная фаза которого есть O_h^3 , при фазовых переходах типа порядок-беспорядок. Все результаты приведены в табличной форме, удобной для пользования.

Оглавление

1. Введение	стр. 3
2. Теоретико-групповые методы исследования фазовых переходов	4
3. Описание таблиц	9
4. Таблицы	12
5. Литература	41

1. ВВЕДЕНИЕ

В пространственной группе O_h^3 -Fm3m кристаллизуется большое число соединений, часть из которых имеет важные в практическом отношении свойства. Особый интерес вызывают многочисленные перовскитоподобные соединения, пространственная группа кубической фазы которых есть O_h^3 , испытывающие при изменении внешних воздействий многочисленные фазовые переходы (ФП) [1,2]. К таким соединениям относятся, например, интенсивно изучаемые в настоящее время кристаллы эльпасолиты с общей формулой $A_2BV_2X_6$ (A, B, V' - катионы, X - анион). Такие соединения встречаются среди галогенидов, оксидов, оксигалогенидов, цианидов, гидридов. Катионами A и B могут быть так же аммонийные группы NH_4 .

В отличие от простых перовскитов ABX_3 , где все октаэдры эквивалентны, в эльпасолитах, называемых также упорядоченными перовскитами, имеется два сорта ионных групп VX_6 и $V'X_6$, которые чередуются вдоль трех осей четвертого порядка. Таким образом, эльпасолитная кубическая ячейка может рассматриваться как перовскитная с удвоенным параметром элементарной ячейки. Частным случаем эльпасолитной структуры является криолит $A_3BV_2X_6$, в котором атомы A и B из эльпасолита $A_2BV_2X_6$ химически эквивалентны.

Большинство ФП, наблюдаемых в данных соединениях, описываются как ротационные искажения, связанные с малыми поворотами октаэдрических групп VX_6 и $V'X_6$ [1,2]. Многочисленные исследования (см. [1,2]) показывают, что модель жестких связанных октаэдрических ионов хорошо подходит для эльпасолитных соединений с атомарными катионами. Сравнительно недавно исследование аммонийных эльпасолитов $(NH_4)_2KCaF_6$ [3] и $(NH_4)_2KWO_3F_4$, твердых растворов аммонийных криолитов $(NH_4)_3Ga_{1-x}Sc_xF_6$ [5,6], оксифторидов $(NH_4)_3WO_3F_5$, $(NH_4)_3TiOF_5$ [7] показали, что при ФП помимо поворотов октаэдрических групп вероятно происходит упорядочение других структурных элементов - атомов и целых групп.

При изучении ФП в эльпасолитных соединениях хорошо зарекомендовала себя схема, на первом этапе которой приводятся теоретико-групповой анализ возможных искажений структуры кристаллов [8]. Такой анализ позволяет перечислить возможные группы искаженных фаз, правильно выбрать модель структуры низкосимметричной фазы, описать поведение физических свойств.

Симметричному анализу кристаллов с пространственной группой O_h^3 -Fm3m посвящено немало работ [9, 10, 11, 12]. Так в ранней работе по теоретико-групповому анализу ФП в кристаллах с пространственной