

Рентгеновский естественный круговой дихроизм в железосодержащих лангаситах

Орешко А.П.

МГУ имени М.В.Ломоносова, Ленинские горы, 1, стр. 2, Москва, 119991, Россия

e-mail: oreshko@mail.ru

Овчинникова Е.Н.

МГУ имени М.В.Ломоносова, Ленинские горы, 1, стр. 2, Москва, 119991, Россия

e-mail: ovtchin@gmail.com

Дмитриенко В.Е.

ИК им. А.В.Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Ленинский пр-т, 59,

Москва, 119333, Россия

e-mail: dmitrien@crys.ras.ru

Поиск новых многофункциональных материалов с необыкновенными, но важными для практического применения свойствами является основной тенденцией современного материаловедения. Одним из таких материалов являются кристаллы семейства лантан галлиевого силиката (**лангасит**) с общей формулой $A_3BC_3D_2O_{14}$, способные содержать катионы различных элементов [1]. В настоящий момент времени наибольший интерес представляют их пьезоэлектрические и нелинейно-оптические свойства [2]. Вместе с этим, соединения, содержащие катионы $3d$ -элементов, могут обладать удивительной магнитной структурой, а также и свойствами мультиферроиков [3, 4]. Тогда как кристаллическая симметрия большинства лангаситов описывается одной и той же группой, физические свойства зависят от точечной симметрии отдельных атомов и деталей геометрии решетки [5]. Таким образом, важной задачей становится изучение электронных свойств, соответствующих каждой позиции атома в структуре лангасита. Для решения этой задачи мы применяем совместно метод рентгеновского естественного кругового дихроизма (*XNCD*) и *ab initio* квантово-механическое моделирование.

В качестве объектов для исследования были выбраны кристаллы железосодержащих лангаситов $Ba_3Ta(Nb)Fe_3Si_2O_{14}$. В этих структурах ионы Ba^{3+} занимают позицию Уайкова $3e$, $O^{2-} - 2d$ и $6g$, $Ta^{2+}/Nb^{2+} - 1a$, $Si^{4+} - 2d$ и $Fe^{3+} - 3f$. Расчет спектров поглощения и *XNCD* вблизи K -края поглощения Fe, проведенный с помощью программы *FDMNES* [6], показал, что сигнал *XNCD*, в основном, лежит в предкраевой области спектра. В спектре поглощения железа ему соответствует предпик, который обычно ассоциируется с квадрупольным переходом электрона из $1s$ состояния в незанятые локализованные состояния $3d$ – оболочки железа. Наличие сигнала *XNCD* в этой области означает, что присутствует гибридизация $4p-3d$ электронных локализованных состояний. Это существенно отличает железосодержащие лангаситы от классического лангасита, где вклад в *XNCD* сигнал дают не локализованные электронные состояния.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (16-02-00887, 13-02-00760) с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ.

Литература

1. Mill B.V., Butashin A.V., Khodzhabagyan G.G., Belokoneva E.L., Belov N.V., "Modified rare-earth gallates with the structure of $Ga_3Ga_2Ge_4O_{14}$ ", *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 264, 1385-1389 (1982).
2. Ohsato H., Iwataki T., Morikoshi H., "Crystal structure and piezoelectric properties of four component langasite $A_3BGa_3Si_2O_{14}$ ($A = Ca$ or Sr , $B = Ta$ or Nb)", *Transactions on Electrical and Electronic Materials*, 13, 171-176 (2012).
3. Marty K., Bordet P., Simonet V., Loire M., Ballou R., Darie C., Kljun J., Bonville P., Isnard O., Lejay P., Zawilski B., Simon Ch., "Magnetic and dielectric properties in the langasite-type compounds: $A_3BFe_3D_2O_{14}$ ($A = Ba, Sr, Ca$; $B = Ta, Nb, Sb$; $D = Ge, Si$)", *Phys. Rev. B*, 81, 054416 (2010).
4. Pikin S.A., Lyubutin I.S. "Phenomenological model of multiferroic properties in langasite-type crystals with a triangular magnetic lattice", *Phys. Rev. B*, 86, 064414 (2012).
5. Takeda H., Yamaura J., Hoshina T., Tsusumi T., "Growth, structure and electrical properties of aluminum substituted langasite family crystals", *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, 18, 092020 (2011).
6. www.neel.cnrs.fr/fdmnes