

ТИОИДАТЫ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ: РТ-ЗАВИСИМАЯ РАМАНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ, КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

Панкрушина Е.А.^{1,2}, Чареев Д.А.³, Рогинский Е.М.⁴, Печурин М.С.¹, Вотяков С.Л.¹

¹ *Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого УрО РАН, Екатеринбург, Россия, pankrushina@igg.uran.ru*

² *ФИЦ КНЦ РАН, Апатиты, Россия*

³ *Институт экспериментальной минералогии РАН, Черноголовка, Россия*

⁴ *ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

Развитие концепции фононной инженерии ангармоничности (anharmonicity engineering) [Heremans, 2015] и ее подходов (описание фононных спектров, их зависимости от температуры, давления и других факторов), являются определяющими при объяснении механизмов теплового расширения, теплопроводности, при объяснении свойств материалов. Рамановская спектроскопия предоставляет ту же информацию о фононном ангармонизме, что и неупругое рассеяние нейтронов, но с рядом преимуществ: высокое разрешение и возможность изучения микронных образцов. Система $M_2S - In_2S_3$ давно вызывает интерес в химии твердого тела, однако о свойствах тионидатов щелочных металлов MIn_5S_8 (M – щелочной металл) практически нет информации в литературе. Цель работы – в рамках развития направления инженерии ангармоничности на примере синтетических KIn_5S_8 , $RbIn_5S_8$, $CsIn_5S_8$ изучить проявления динамических и термодинамических свойств

в рамановской спектроскопии за рамками гармонической модели. В данной работе представлены первые результаты экспериментального и теоретического исследования на кристаллах KIn_5S_8 , $RbIn_5S_8$, $CsIn_5S_8$ по данным РТ-зависимой рамановской спектроскопии и DFT. Рассмотрены вопросы электронных и фононных свойств. Полученные результаты позволят расширить представление о подобных материалах, предложить перспективы их применения, а также продвинуться в развитии концепций инженерии ангармоничности.

Работа выполнена в рамках з/б темы ИГГ УрО РАН №123011800012-9 и ФИЦ КНЦ РАН №122011300125-2.

ЛИТЕРАТУРА

1. Heremans J. P. The anharmonicity blacksmith. // Nature Physics. 2015. V. 11(12). P. 990–991.

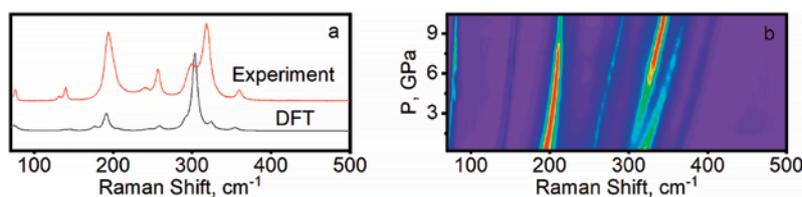


Рис. 1. Экспериментальный и расчетный рамановский спектр $RbIn_5S_8$ (a), 2D-диаграмма изменения рамановского спектра $RbIn_5S_8$ от 0 до 10 ГПа (b).