

Низкочастотный колебательный спектр $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$

В. И. Кутько

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины,
Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail: kutko@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 10 октября 1997 г., после переработки 11 ноября 1997 г.

Измерен спектр пропускания монокристалла $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ в длинноволновом ИК диапазоне спектра ($10\text{--}100\text{ см}^{-1}$) в поляризованном свете при низких температурах (6–40 К). Экспериментально установлены изменения колебательного спектра при структурном фазовом переходе первого рода ($T_c \approx 38\text{ К}$). Проведен анализ колебательного спектра $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ в рамках «квазиотщепленных» колебательных мод.

Виміряно спектр пропускання монокристалу $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ в довгохвильовому ІЧ діапазоні спектра ($10\text{--}100\text{ см}^{-1}$) в поляризованому світлі при низьких температурах (6–40 К). Експериментально виявлено зміни в коливальному спектрі при структурному фазовому переході першого роду ($T_c \approx 38\text{ К}$). Проведено аналіз коливального спектра $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ в рамках «квазівідщеплених» коливальних мод.

PACS: 71.70.Fk

Введение

Исследуемое соединение относится к ряду двойных щелочно-редкоземельных молибдатов ромбической сингонии, в которых наблюдаются низкотемпературные структурные фазовые переходы типа кооперативного эффекта Яна—Теллера (КЭЯТ) [1,2]. В этом соединении также был обнаружен структурный фазовый переход, сопровождающийся значительной перестройкой электронного спектра ионов Dy^{3+} [3]. Этот переход происходит скачком и сопровождается гистерезисом при прохождении вверх и вниз через T_c , поэтому он был идентифицирован как фазовый переход первого рода. Позже при изучении теплоемкости [4] было установлено, что при структурном фазовом переходе в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ происходит скачок энтальпии на величину $\Delta H = (0,64 + 0,02)\text{ кДж/моль}$. Значительными также оказались изменения других параметров, определяющих изменения структуры данного соединения при фазовом переходе. Энергия основного состояния f -электронов ионов Dy^{3+} понижалась на $\approx 80\text{ см}^{-1}$ [5]. Скачком изменялись частоты оптических фононов по данным измерений спектров КР и ИК отражения [6].

При изучении температурной зависимости параметров элементарной ячейки было установлено, что в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ в области структурного фазового перехода происходит значительный скачок параметра элементарной ячейки a на $\sim 0,67\%$ [7].

Такие скачкообразные изменения параметров были несвойственны фазовым переходам типа КЭЯТ в ранее исследованных ванадатах, а также в молибдатах, в которых они рассматривались как фазовые переходы второго рода с незначительной перестройкой энергетического спектра редкоземельных ионов [8]. Необычным также оказалось влияние внешнего магнитного поля на температуру структурного фазового перехода в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$. В [9] было показано, что до напряженности поля $\approx 7\text{ Тл}$ температура фазового перехода практически не изменяется, что не характерно для фазовых переходов типа КЭЯТ. Проведенный в [10] анализ показал, что изменение энтальпии электронной подсистемы ионов Dy^{3+} вносит незначительный вклад в скрытую теплоту перехода. Следует отметить, что в изоструктурном диамагнитном $\text{CsBi}(\text{MoO}_4)_2$ также был обнаружен структурный фазовый переход первого рода ($T_c \approx 135\text{ К}$), внешние

проявления которого аналогичны наблюдаемым в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ [11].

Таким образом, поведение физических свойств $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ отличается от наблюдавшегося при фазовых переходах типа КЭЯТ в ранее изученных соединениях, содержащих редкоземельные ионы. Поэтому возникают сомнения, что данный фазовый переход в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ является переходом типа КЭЯТ.

Динамическая теория структурных фазовых переходов, обусловленных кооперативным эффектом Яна—Теллера, базируется на анализе температурных зависимостей энергий низкочастотных электрон-фононных мод. В случае ферродисторсионного упорядочения обычно ограничиваются исследованием взаимосвязи одной электронной и одной акустической ветвей. Частота последней обращается в нуль при температуре структурного фазового перехода. В реальной ситуации число активных мод значительно больше. Анализ других ветвей спектра проводится, если в рамках одномодового поведения не удастся объяснить наблюдаемые особенности физических свойств при ферродисторсионном либо антиферродисторсионном упорядочении. Поэтому важна экспериментальная информация о низкочастотном фононном спектре этих систем.

Для выяснения особенностей динамики кристаллической решетки, а также природы структурного фазового перехода методами длинноволновой ИК спектроскопии были исследованы низкочастотные спектры поглощения кристалла $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$.

Методика эксперимента

Соединение $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ кристаллизуется в структуру ромбической сингонии (пространственная группа D_{2h}^3) с параметрами элементарной ячейки $a = 9,51 \text{ \AA}$, $b = 7,97 \text{ \AA}$, $c = 5,05 \text{ \AA}$, содержащей две формульные единицы вещества [12]. Структура образована слоями $[\text{Dy}(\text{MoO}_4)_2]_{\infty}^-$ и $[\text{Cs}]_{\infty}^+$, чередующимися вдоль параметра a . Внутри слоевого пакета $[\text{Dy}(\text{MoO}_4)_2]_{\infty}^-$ ионы Dy^{3+} образуют цепочечную структуру вдоль направления оси b . Ионы Dy^{3+} находятся внутри искаженных кислородных восьмигранников, так что их локальная симметрия довольно низкая (D_2). Поэтому нижайший мультиплет ${}^6H_{15/2}$ иона Dy^{3+} расщепляется кристаллическим полем на восемь крамеровских дублетов.

Кристаллы $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$, выращенные методом спонтанной кристаллизации из раствора

в расплаве, имеют бледно-желтый цвет, характерные размеры $10 \times 10 \times 1$ мм. Они легко расслаиваются по плоскости (100).

Исследования проводились на ИК спектрометре с охлаждаемым фотосопротивлением InSb , а также охлаждаемым германиевым болометром. Измерения проведены в диапазоне частот $10\text{--}100 \text{ см}^{-1}$ на образцах размерами $5 \times 10 \times 1$ мм. При повышении температуры образца выше температуры структурного фазового перехода пропускание значительно уменьшалось, поэтому температурные измерения проводили выборочно. Ориентацию по кристаллографическим осям осуществляли с помощью поляризационного микроскопа.

Экспериментальные результаты

На рис. 1 представлена зависимость пропускания ИК радиации от частоты при низкой температуре ($T \approx 6 \text{ К}$). Как видно на рисунке, и при поляризации излучения $\vec{E} \parallel \vec{b}$, и при $\vec{E} \parallel \vec{c}$ в спектре наблюдаются пять полос поглощения. Характерной особенностью измеренных спектров является то, что в них наблюдаются две полосы с дублетной структурой с частотами $56,2$ и $59,9 \text{ см}^{-1}$ при $\vec{E} \parallel \vec{c}$ и $84,5$ и 88 см^{-1} при $\vec{E} \parallel \vec{b}$.

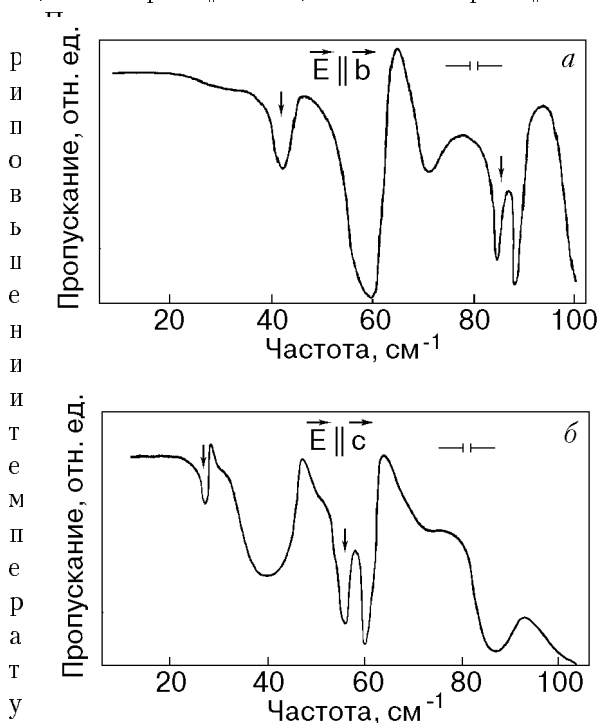


Рис. 1. Вид спектра пропускания кристалла $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ в области частот $10\text{--}100 \text{ см}^{-1}$ при температуре 6 К для двух поляризаций падающего света: $\vec{E} \parallel \vec{b}$ (а) и $\vec{E} \parallel \vec{c}$ (б). Стрелками обозначены полосы, возникающие при температуре ниже температуры структурного фазового

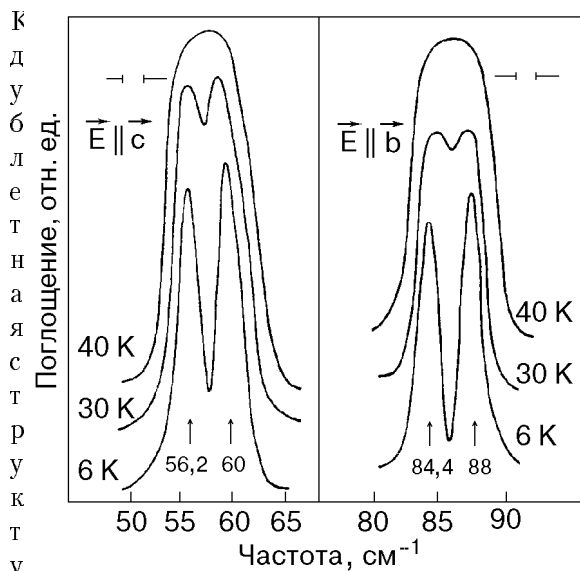


Рис. 2. Вид полос поглощения кристалла $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$, имеющих дублетную структуру при различных температурах.

Полно исчезает (см. рис. 2). Чтобы убедиться, что эта структура обусловлена фазовым переходом, а не исходной высокотемпературной фазой, измеряли спектр поглощения кристалла $\text{CsTb}(\text{MoO}_4)_2$ (изоструктурного $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$), в котором структурный фазовый переход не наблюдается. При этом дублетная структура на соответствующих полосах не была обнаружена (см. рис. 3). Этот факт позволил однозначно

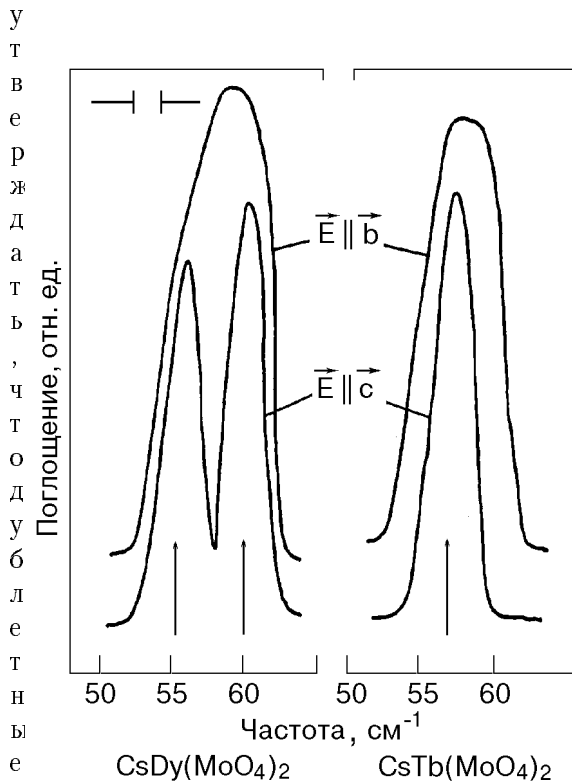


Рис. 3. Полосы поглощения кристаллов $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ и $\text{CsTb}(\text{MoO}_4)_2$ при низких температурах.

уктуры, возникающие на полосах $\approx 57 \text{ см}^{-1}$ при поляризации $\mathbf{E} \parallel \mathbf{c}$ и $\approx 87 \text{ см}^{-1}$ при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$, обусловлены структурным фазовым переходом в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$. При повышении температуры образца пропускание ИК радиации значительно уменьшалось, поэтому записи спектров осуществлялись при спектральных щелях, сравнимых с полушириной полос поглощения. Это не позволяло корректно анализировать форму и интенсивности полос поглощения. По этой причине мы не определяли температуру фазового перехода.

Кроме указанных полос, в спектре пропускания наблюдаются полосы поглощения в поляризации $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$: интенсивная полоса частотой $\approx 59 \text{ см}^{-1}$, которая фактически является деполяризованной компонентой полосы 57 см^{-1} ($\mathbf{E} \parallel \mathbf{c}$), слабая полоса $\approx 41 \text{ см}^{-1}$, а также полоса 70 см^{-1} . При поляризации $\mathbf{E} \parallel \mathbf{c}$ наблюдается довольно интенсивная и широкая полоса частотой 40 см^{-1} , а также сильная полоса поглощения в области 87 см^{-1} , которая является деполяризованной компонентой расщепленной полосы в поляризации $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$.

Обсуждение экспериментальных результатов

Исследуемый кристалл $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ по кристаллографической структуре является слоистым. Силы межслойного взаимодействия внутри слоев $[\text{Dy}(\text{MoO}_4)_2]_{\infty}^-$ больше сил связи этих слоев с подрешеткой Cs^+ , которая также образует слой. Это обусловлено тем, что ионы Cs^+ являются одновалентными.

Представим кристалл $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ в виде пакета чередующихся слоев, имеющих противоположные заряды и различные массы: слой $[\text{Dy}(\text{MoO}_4)_2]_{\infty}^-$ с массой M и слой Cs^+ с массой $m < M$ (рис. 4). Эти слои чередуются

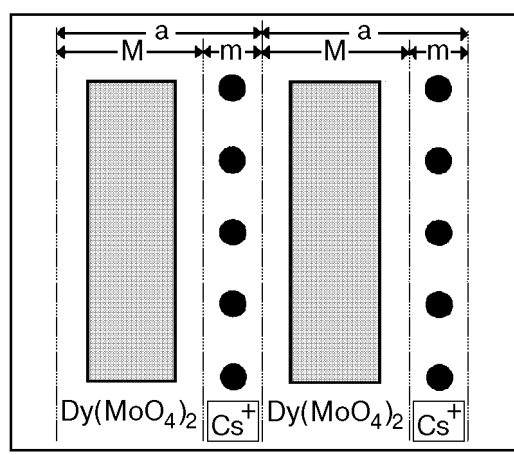


Рис. 4. Схематическое изображение структуры $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$, в которой слои имеют разные массы и противоположно заряжены (слои ограничены пунктирными линиями).

тствующей максимальному параметру элементарной ячейки. Такая система является многослойником с периодом решетки вдоль одного из кристаллографических направлений, превышающим характерный радиус межионного взаимодействия [13], что приводит к уменьшению влияния дальнего порядка кристаллической регулярности расположения ионов на фоннный спектр и колебательные характеристики.

Как было показано в [14], в таких решетках под влиянием локальной анизотропии межионного взаимодействия возможно так называемое «квазиотщепление» одной или нескольких колебательных мод, вектор поляризации которых направлен вдоль одного кристаллографического направления. Это «квазиотщепление» аналогично квазиотщеплению фоннных ветвей слоистого кристалла, поляризованных перпендикулярно его слоям [15].

Предположим, что в данном кристалле квазиотщепившимися являются две связанные между собой фоннные моды, соответствующие синфазным и противофазным сдвиговым смещениям двух слоев относительно друг друга: первый слой образуют ионы Cs^+ , второй — $[\text{Dy}(\text{MoO}_4)_2]^-$.

Если полностью пренебречь взаимодействием этих двух ветвей с остальными колебательными модами, то данные колебания можно описать следующей системой уравнений:

$$\begin{aligned} m\omega^2 Y_{\text{Cs}} &= \alpha \{ 2Y_{\text{Cs}} - [Y_{\text{Dy}(\text{MoO}_4)_2}^{(+)} + Y_{\text{Dy}(\text{MoO}_4)_2}^{(-)}] \} \\ m\omega^2 Y_{\text{Dy}(\text{MoO}_4)_2} &= \alpha \{ 2Y_{\text{Dy}(\text{MoO}_4)_2} - [Y_{\text{Cs}}^{(+)} + Y_{\text{Cs}}^{(-)}] \} \end{aligned} \quad (1)$$

где α — эффективная силовая константа, соответствующая возвращающей силе при смещении какого-либо слоя ионов параллельно остальным слоям; Y_{Cs} и $Y_{\text{Dy}(\text{MoO}_4)_2}$ — смещения слоев Cs и $\text{Dy}(\text{MoO}_4)_2$ соответственно.

Система уравнений (1) аналогична системе уравнений, описывающей колебания линейной цепочки с двумя ионами в элементарной ячейке, но в данном случае поляризация колебаний будет поперечной, так как колебания распространяются перпендикулярно слоям.

Для этой модели имеются две колебательные ветви — оптическая и акустическая. Значения предельных частот этих ветвей равны:

оптическая ветвь

$$\omega_o = [2\alpha(1/m + 1/M)]^{1/2} \quad \text{для } k = 0, \quad (2)$$

$$\omega_o = [2\alpha/m]^{1/2} \quad \text{для } k = \pi/a; \quad (3)$$

акустическая ветвь

$$\omega_a = [2\alpha k^2(a/2)^2/(M + m)]^{1/2} \quad \text{для } k \approx 0, \quad (4)$$

$$\omega_a = (2\alpha/M)^{1/2} \quad \text{для } k = \pi/a, \quad (5)$$

где $\omega = 2\pi\nu$ — циклическая частота; k — квазиволновой вектор.

Используя экспериментальные значения частот $\nu_1 \approx 58,1 \text{ см}^{-1}$ для $\mathbf{E} \parallel \mathbf{c}$ и $\nu_2 \approx 86,1 \text{ см}^{-1}$ для $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$ при температуре $T \approx 40 \text{ К}$, определяем упругие сдвиговые модули из формулы (2) для разных поляризаций ($\mathbf{E} \parallel \mathbf{c}$ и $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$). Затем по формулам (3) и (5) находим частоты оптических и акустических ветвей на границе зоны Бриллюэна. На основании этой же модели были определены скорости поперечного звука и сопоставлены с данными, полученными ультразвуковыми методами [16]. Все численные расчеты выполнены для высокотемпературной фазы, так как скорость звука определяли при комнатной температуре. Предельные частоты колебательных ветвей, а также скорости звука приведены в таблице.

Таблица

Значения сдвиговых постоянных α , предельных частот оптических ω_o и акустических ω_a ветвей, а также рассчитанные и экспериментально полученные значения скорости звука [13]

Поляризация	α , Н/м	Энергия, см^{-1}		Скорость звука v , м/с		
		$k = 0$	$k = \pi/a$	расчет	эксперимент	
		ω_o	ω_a			
$\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$	22,8	86,1	76,2	40	$3,17 \cdot 10^3$	$(2,71 \pm 0,1) \cdot 10^3$
$\mathbf{E} \parallel \mathbf{c}$	10,4	58,1	51,5	27	$2,15 \cdot 10^3$	$(1,74 \pm 0,1) \cdot 10^3$

П р и м е ч а н и е: ИК излучением с поляризациями $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$ и $\mathbf{E} \parallel \mathbf{c}$ возбуждаются смещения, соответствующие звуковым волнам с поляризациями вектора смещений $\mathbf{u} \parallel \mathbf{b}$ и $\mathbf{u} \parallel \mathbf{c}$.

Используя найденные величины α и формулу для дисперсии оптической и акустической ветвей в рамках одномерной модели

$$\begin{aligned} \omega^2 &= \alpha(1/m + 1/M) + \alpha[(1/m + 1/M)^2 - \\ &- 4 \sin^2(ka/2)/mM]^{1/2}, \end{aligned} \quad (6)$$

можно рассчитать дисперсию акустической и оптической ветвей по всей зоне Бриллюэна.

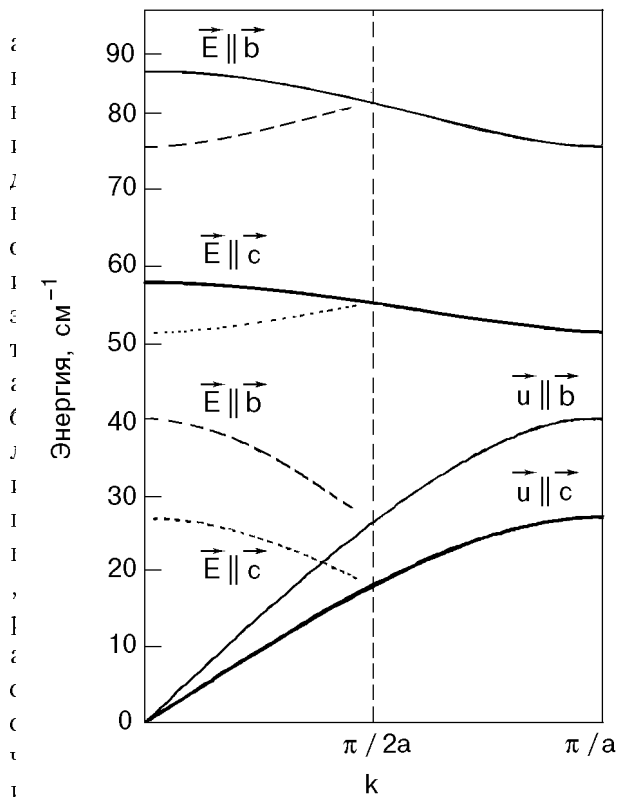


Рис. 5. Дисперсионные кривые низкочастотного спектра кристалла $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$, рассчитанные по формуле (6) предложенной модели.

ные значения скоростей звука удовлетворительно согласуются с результатами ультразвуковых измерений [16]. Небольшое несовпадение значений, на наш взгляд, обусловлено следующими обстоятельствами: при температурах выше структурного фазового перехода первое возбужденное электронное состояние ионов Dy^{3+} ($\approx 30 \text{ см}^{-1}$) оказывается в области акустического спектра [5], что приводит к их взаимодействию с образованием квазищели (по оценке $\Delta \approx 6 \text{ см}^{-1}$) и в итоге к уменьшению скорости звука [17]. Однако не исключено, что это уменьшение может быть обусловлено ангармонизмом межслоевых колебаний.

О том, что предложенная модель удовлетворительно описывает механизм формирования низкочастотного колебательного спектра кристалла $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$, свидетельствует наличие расщепления полос поглощения $\nu_1 = 58,1 \text{ см}^{-1}$ в поляризации $\mathbf{E} \parallel \mathbf{c}$ и $\nu_2 = 86,1 \text{ см}^{-1}$ в поляризации $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$ ниже температуры структурного фазового перехода.

При возникновении сверхструктуры в перпендикулярном слоям Cs_{∞}^+ и $[\text{Dy}(\text{MoO}_4)_2]_{\infty}^-$ направлении в спектре происходит расщепление полос поглощения ν_1 и ν_2 в соответствующих

поляризациях вследствие сворачивания зоны Бриллюэна. Согласно приведенной на рис. 5 схеме, в спектре также появляются полосы с частотами 40 см^{-1} при поляризации $\mathbf{E} \parallel \mathbf{b}$ и 27 см^{-1} при поляризации $\mathbf{E} \parallel \mathbf{c}$. На рис. 1 они отмечены стрелками и проявляются в спектре поглощения как слабые полосы. Появление этих полос в спектре и хорошее совпадение их частот с рассчитанными значениями (см. таблицу) является доказательством правильности выбранной модели. Если рассчитанные значения частот на границе зоны Бриллюэна в точке π/a на акустических ветвях довольно хорошо подтверждаются экспериментально, то экспериментально полученные величины соответствующих расщеплений на оптических ветвях несколько меньше рассчитанных в предложенной модели. Это может быть обусловлено тем, что частоты оптических ветвей близки к частотам внутрислоевых колебаний слоя $[\text{Dy}(\text{MoO}_4)_2]_{\infty}^-$, поэтому колебания цезиевой подрешетки являются более локализованными, чем в предложенной модели.

Таким образом, сравнение низкочастотных спектров поглощения при температурах ниже и выше фазового перехода позволило установить основную особенность их формирования.

Оценим упругую энергию однородной деформации в области структурного фазового перехода в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ ($T_c \approx 38 \text{ К}$), а также энергию превращения при этом фазовом переходе.

Согласно [5], в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ нижайшее электронное состояние ионов Dy^{3+} при T_c скачкообразно понижается на $\Delta\nu \approx 80 \text{ см}^{-1}$. При этом происходит изменение энергии электронной подсистемы ионов Dy^{3+} на величину $\Delta E \approx 1 \text{ кДж/моль}$. Эта энергия уходит на изменение энтальпии в области структурного фазового перехода, которое экспериментально определено в [4], и равно $\Delta H = (0,64 + 0,02) \text{ кДж/моль}$, а также на энергию упругой деформации кристаллической решетки.

По рентгеноструктурным данным [7] при T_c в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ параметр a претерпевает скачок на $0,068\%$, что соответствует увеличению a на величину $\approx 0,064 \text{ \AA}$, тогда как другие параметры практически не изменяются. Это приводит к однородной деформации кристалла вдоль этого направления. Можно оценить упругую энергию этой деформации, используя силовые константы, полученные в рамках приведенной выше модели.

Из данных [16] о скорости продольного звука при $\mathbf{k} \parallel \mathbf{a}$ и $\mathbf{u} \parallel \mathbf{a}$ (где \mathbf{u} — вектор смещения ионов)

в этом соединении можно оценить упругий модуль α на межслоевых связях, рассматривая продольные звуковые волны как колебания слоев $[\text{Dy}(\text{MoO}_4)_2]_{\infty}^-$ как целое вдоль направления оси a в кристалле, т.е. перпендикулярно слоям. По оценкам, $\alpha = 24$ Н/м. Используя эту величину и величину скачка параметра a в области структурного фазового перехода, оценим упругую энергию однородной деформации кристалла: $\Delta U = 0,3$ кДж/моль. Таким образом, $\Delta U + \Delta H \approx 0,94$ кДж/моль, что приблизительно соответствует изменению энергии нижайшего электронного состояния ионов Dy^{3+} ($\Delta E \approx 1$ кДж/моль). Исходя из изложенного выше можно с определенной долей уверенности сказать, что в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ структурный фазовый переход реализуется без изменения свободной энергии кристаллической решетки и определяется только изменением энергии электронной подсистемы ионов Dy^{3+} , т.е. является кооперативным эффектом Яна–Теллера.

Поскольку фазовый переход в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$, обусловленный КЭЯТ, сопровождается возникновением равновесной однородной спонтанной деформации кристалла, гамильтониан системы, кроме электрон-фононного, должен содержать электрон-деформационное взаимодействие. Константа связи с однородной деформацией решетки может рассматриваться как предельное значение константы связи электронов с акустической модой при волновом векторе $\mathbf{k} = 0$. Исходя из вида однородной деформации в нашем случае такой модой является продольная акустическая мода с $\mathbf{k} \parallel \mathbf{a}$ и $\mathbf{u} \parallel \mathbf{a}$.

Таким образом, в динамике структурного фазового перехода в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ электрон-деформационное взаимодействие играет приоритетную роль, однако нельзя исключать и электрон-фононное взаимодействие, ответственное за возникновение сверхструктуры в кристалле. Согласно нашим представлениям, эта сверхструктура возникает вдоль направления a в кристалле, поэтому, по-видимому, заметную роль в электрон-фононном взаимодействии в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ также должно играть взаимодействие с акустическими или оптическими модами с волновым вектором $\mathbf{k} \parallel \mathbf{a}$ вблизи границы зоны Бриллюэна. Здесь, по-видимому, важен тот факт, что энергия первого возбужденного электронного состояния ионов Dy^{3+} в высокосимметричной фазе близка к энергии соответствующих акустических мод на границе зоны Бриллюэна. Близость энергии

первого возбужденного электронного состояния ионов Dy^{3+} ($\nu \approx 30$ см⁻¹) к энергии поперечных акустических мод с $\mathbf{k} \parallel \mathbf{a}$ на границе зоны Бриллюэна порождает их динамическую связь, по-видимому, ответственную за удвоение параметра элементарной ячейки ниже температуры фазового перехода в этом соединении и возникновение неоднородной деформации. Согласно нашим оценкам, энергетически неоднородная деформация существенно меньше однородной. Это утверждение согласуется с температурной зависимостью дублетной структуры полос поглощения. При повышении температуры структура дублета размывается ниже температуры фазового перехода в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ ($T_c \approx 38$ К) (см. рис. 2).

Выводы

Проведенный анализ низкочастотного края фононного спектра $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ позволил установить основную особенность его формирования. Низкочастотные оптические и акустические моды обусловлены сдвиговыми колебаниями слоевых пакетов как целого вдоль соответствующих осей кристалла. Предложенная модель удовлетворительно описывает низкочастотный колебательный спектр.

Численные оценки преобразований энергии при структурном фазовом переходе в $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ позволили установить, что этот переход, по-видимому, является кооперативным эффектом Яна–Теллера.

В изученном материале электрон-деформационное взаимодействие электронной подсистемы ионов Dy^{3+} с кристаллической решеткой преобладает над электрон-фононным взаимодействием.

В $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$ структурный фазовый переход типа КЭЯТ сопровождается удвоением параметра элементарной ячейки в направлении перпендикулярном плоскости слоевых пакетов.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда INTAS (грант № 94-935). Автор выражает благодарность Н. Ф. Харченко, Н. М. Нестеренко, В. И. Фомину, Е. С. Сыркину, С. Б. Феодосьеву за плодотворное обсуждение результатов работы.

1. А. И. Звягин, Т. С. Стеценко, В. Г. Юрко, Р. А. Вайшнорас, *Письма в ЖЭТФ* **17**, 190 (1973).
2. И. В. Скоробогатова, А. И. Звягин, *ФНТ* **4**, 800 (1978).
3. А. И. Звягин, С. Д. Ельчанинова, Т. С. Стеценко, Л. Н. Пелих, Е. Н. Хацько, *ФНТ* **1**, 79 (1975).
4. Э. Е. Андерс, А. И. Звягин, Л. С. Шестаченко, *ФНТ* **6**, 1356 (1980).

-
5. С. Д. Ельчанинова, А. И. Звягин, *ФНТ* **9**, 1200 (1983).
 6. Н. М. Нестеренко, В. И. Фомин, В. И. Кутько, А. И. Звягин, *Исследование структурного фазового перехода с CsDy(MoO₄)₂ по фоновым спектрам*, Препринт № 26-82, Харьков (1982).
 7. С. Д. Ельчанинова, А. И. Звягин, З. А. Козей, *ФНТ* **8**, 303 (1982).
 8. G. A. Gehring and K. A. Gehring, *Rep. Progr. Phys.* **38**, 1 (1975).
 9. С. Д. Ельчанинова, А. И. Звягин, Ю. Г. Литвиненко, *ФТТ* **22**, 3171 (1980).
 10. Э. Е. Андерс, А. И. Звягин, С. В. Старцев, Л. С. Шестаченко, *ФНТ* **9**, 1218 (1983).
 11. Л. Н. Пелих, А. И. Звягин, *ФТТ* **20**, 1912 (1978).
 12. В. А. Винокуров, П. В. Клевцов, *Кристаллография* **17**, 127 (1972).
 13. С. В. Старцев, Э. Е. Андерс, А. И. Звягин, Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *Кристаллография* **37**, 772 (1992).
 14. S. V. Feodosyev, I. A. Gospodarev, A. M. Kosevich, and E. S. Syrkin, *Phys. Low-Dim. Struct.* **10/11**, 209 (1995).
 15. A. M. Kosevich, E. S. Syrkin, and S. V. Feodosyev, *Phys. Low-Dim. Struct.* **3**, 47 (1994).
 16. G. A. Zvyagina, S. V. Zherlitsyn, V. D. Fill, and A. A. Gurskas, *Ferroelectrics* **110**, 35 (1990).
 17. В. И. Кутько, Ю. Н. Харченко, Н. М. Нестеренко, А. А. Гурскас, *ФНТ* **22**, 785 (1996).

Low-frequency vibrational spectrum of CsDy(MoO₄)₂

V. I. Kuřko

The polarized light spectrum of the single crystal CsDy(MoO₄)₂ is measured in a longwave IR region (10–100 cm⁻¹) at low temperatures (6–40) K. The vibrational spectrum of the CsDy(MoO₄)₂ crystal is found to vary at the first-order structural phase transition ($T_c \approx 38$ K). This spectrum is considered in terms of the model of «quasichipped off» vibration modes.