

## Вплив одновісного стискання на інфрачервоні спектри кристала $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$

Б. Горон<sup>1</sup>, М. Рудиш<sup>1,2,3,4</sup>, В. Стадник<sup>1</sup>,  
Р. Брезвін<sup>1</sup>, П. Щепанський<sup>1,4</sup>, І. Матвіїшин<sup>5</sup>

<sup>1</sup> Львівський національний університет імені Івана Франка,  
вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, Україна, 79005  
e-mail: rudysh.myron@gmail.com

<sup>2</sup> Університет імені Яна Длугоша в Ченстохові,  
ал. Армії Крайової, 13/15, Ченстохова, Польща, 42-200

<sup>3</sup> Волинський національний університет імені Лесі Українки,  
вул. Потапова, 9, Луцьк, Україна, 43025

<sup>4</sup> Національний університет "Львівська Політехніка",  
вул. С. Бандери, 12, Львів, Україна, 79005

<sup>5</sup> Львівський національний університет імені Івана Франка,  
вул. Тарнавського, 107, Львів, Україна, 79017

Досліджено інфрачервоні спектри відбивання кристала  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  для трьох поляризацій світла в широкому спектральному діапазоні 500...4000  $\text{cm}^{-1}$ . Виявлено шість смуг відбивання, які відповідають коливним деформаційним та лібраційним модам тетраєдрів  $\text{BeF}_4^{2-}$  та  $\text{NH}_4^+$ . Досліджено вплив одновісного тиску на поведінку ІЧ-спектрів відбивання цього кристала. Виявлено значну зміну інтенсивностей та положення смуг відбивання, що відповідають за коливання тетраєдричної групи  $\text{BeF}_4^{2-}$ . Баричне зміщення смуг відбивання, які відповідають коливанням тетраєдричних груп  $\text{NH}_4^+$ , є незначним, що свідчить про визначальний вплив коливань тетраєдра  $\text{BeF}_4^{2-}$  на фізичні властивості кристала.

**Ключові слова:** інфрачервоні спектри, кристал, одновісний тиск, відбивання.

### 1. Вступ

Кристали фторберилату амонію (ФБА,  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ ) є класичними представниками широкої групи діелектричних кристалів типу  $\text{A}_2\text{BX}_4$ , що володіють двома фазовими переходами і, відповідно, мають три різні фази. У низькотемпературній області ( $T < 175$  K) вони перебувають у сегнетоелектричній фазі з просторовою

групою симетрії  $Pcn2_1$  [1–4]. Між 175 К і 182 К кристали володіють несумірною фазою з вектором модуляції  $\mathbf{q} = 0,5 \mathbf{a}^*$  [4, 5]. У високотемпературній області ( $T > 182$  К) кристал перебуває в параелектричній фазі. За кімнатної температури кристал належить до просторової групи симетрії  $Pnma$  і володіє незначною дисторсією тетраедричної групи  $\text{BeF}_4^{2-}$  [5–7].

Двопроменезаломлюючі властивості кристалів  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  раніше вивчали дослідники в роботах [8–10]. У парафазі двопроменезаломлення практично лінійно змінюється з температурою, лише для  $b$ -зрізу спостерігаються відхилення від лінійної залежності в районі 3 К вище  $T_i$ . В околі сегнетоелектричного фазового переходу (ФП)  $T_c$  не виявлено помітних аномалій  $\Delta n_i$ .

Вимірювання температурних залежностей кута між оптичними осями кристалу ФБА дало змогу встановити, що за кімнатної температури він – оптично від’ємний, бісектрисою гострого кута є вісь  $Y$ , площиною оптичних осей – площина  $XOY$ , кут між оптичними осями володіє слабкою спектральною залежністю і дорівнює  $16^\circ$  для 632,8 нм і  $16,5^\circ$  для 441 нм. При нагріванні зразка кут між оптичними осями зменшується і за температури 309 К кристал ФБА стає оптично одновісним практично в усьому досліджуваному спектральному діапазоні. За формою оптичної індикатриси кристала ФБА можна виділити три температурних діапазони: в першому  $n_z > n_x > n_y$ ; в другому:  $n_x > n_z > n_y$ ; при одновісних станах:  $n_x = n_z > n_y$ . Оптичний знак кристала при симетрійних перетвореннях не змінюється, кристал весь час залишається оптично від’ємним.

Дослідження впливу механічного навантаження на двопроменезаломлюючі властивості кристалів ФБА показало, що спонтанні прирости  $\delta(\Delta n_i)$  лінійно залежать від навантаження, причому гістерезис  $\delta(\Delta n_i)$  відсутній. [11, 12]. Ці ж залежності, проміряні в парафазі за тих самих умов експерименту проявляють лінійний характер і відсутність гістерезису. Дослідження спектральних залежностей  $\Delta n_i$  кристала ФБА для різних за величиною і напрямів тисків показало, що напруження  $\sigma_m$  ведуть до різних за величиною змін  $\Delta n_i$ . Криві  $\Delta n_i(\lambda)$  під дією тиску якісно не змінюються, однак їхня дисперсія змінюється.

Раніше інфрачервоні спектри кристалів ФБА в спектральному діапазоні 300...4000  $\text{cm}^{-1}$  вже були досліджені. Виявлено смуги, які відповідають різним внутрішнім коливанням іонів  $\text{NH}_4^+$  і  $\text{BeF}_4^{2-}$  ( $\sim 370 \text{ cm}^{-1}$  і  $\sim 100 \text{ cm}^{-1}$ ), а також декілька смуг, зумовлених комбінацією цих мод [13].

Однак досліджень впливу одновісного навантаження на поведінку ІЧ-спектрів цих кристалів не проведено. Тому мета роботи – дослідити вплив тиску на ІЧ-спектри відбивання кристалів ФБА і порівняння її з баричними змінами двоприменезаломлення.

## 2. Методика досліджень

Досліджувані у роботі кристали ФБА отримувались шляхом вирощування з водного розчину методом повільного випаровування розчинника при заданих умовах (сталій температурі росту  $t_p$ , пересичення  $\delta$ ,  $pH$  середовища та гідростатичних умовах) [14]. Середня швидкість росту становила  $0,1 \pm 0,05$  мм/добу. Впродовж 30–40 діб виростали оптично однорідні кристали ФБА об’ємом приблизно  $4 \times 5 \times 5 \text{ cm}^3$ .

Зразки вирізали з великих монокристалів і орієнтували відносно кристалофізичних осей за допомогою поляризаційного мікроскопа та за видом коноскопічних картин. Для дослідження ІЧ-спектрів відбивання необхідні зразки у вигляді паралелепіпеда з довжинами ребер приблизно 2–5 мм з високим ступенем паралельності граней. Для досліджень впливу зовнішніх тисків характерні розміри зразків становили 3–5 мм.

Експериментальне дослідження ІЧ-спектрів дзеркального відбивання кристалів ФБА в умовах одновісних тисків проводили за допомогою ІЧ-спектрофотометра UR-20. Для вимірювання спектрів відбивання використано приставку ATR-2, яка побудована на основі дзеркально-лінзової оптики. Замість призми повного внутрішнього відбивання у приставці встановлено тримач, в якому розміщувався досліджуваний зразок. Для індукування одновісних тисків уздовж вибраних напрямів використано спеціальний кристалотримач. Як диспергуючий елемент використані призми, виготовлені з KBr, NaCl і LiF. Комбінування цих призм дає змогу працювати у діапазоні хвильових чисел 400 – 5000  $\text{cm}^{-1}$  (25 – 2 мкм). Для запису спектрів використано саморобний узгоджувальний пристрій, який давав можливість виводити результати вимірювань одразу на комп'ютер.

Перевірку градування відлікового пристрою хвильових чисел ( $\text{cm}^{-1}$ ) здійснювали за спектрами поглинання відомого матеріалу. Для цього записували спектр поглинання плівки полістиролу і порівнювали його з літературними даними. Перевірка показала зміщення усього спектра в бік зростання хвильового числа на 14  $\text{cm}^{-1}$ . Зміщення, отримане в результаті такої перевірки, враховано під час дослідження спектрів відбивання кристалів ФБА.

### 3. Результати досліджень

На рисунку 1 зображено ІЧ-спектри відбивання кристала ФБА в спектральному діапазоні 500–4000  $\text{cm}^{-1}$  для X-поляризації світла. З рисунка видно декілька чітких смуг. У цьому діапазоні в спектрах відбивання кристала ФБА для трьох поляризацій світла існує шість чітких смуг з максимумами при 3386  $\text{cm}^{-1}$  (смуга I), 2208  $\text{cm}^{-1}$  (смуга II), 1646  $\text{cm}^{-1}$  (смуга III, найбільш інтенсивна), 800  $\text{cm}^{-1}$  (смуга IV), 675  $\text{cm}^{-1}$  (смуга V) і 593  $\text{cm}^{-1}$  (смуга VI). Смуги I, II і III відповідають коливанням тетраедра  $\text{NH}_4^+$ , а смуги IV, V і VI – коливанням тетраедра  $\text{BeF}_4^{2-}$ .

З попередніх досліджень відомо, що ділянка спектра 10–400  $\text{cm}^{-1}$  відповідає ґратковим коливанням  $\text{NH}_4^+$ , які є визначальними для сегнетоактивного стану цього кристалу, а ділянка спектра 400–4000  $\text{cm}^{-1}$  відповідає внутрішнім коливанням іонів  $\text{NH}_4^+$  і  $\text{BeF}_4^{2-}$  [13].

Згідно з теорією груп вільний радикал тетраедричної структури має симетрію  $T_d$  і 9 внутрішніх мод: одну поздовжню ( $\nu_1$ ), подвійну поперечну ( $\nu_2$ ), потрійну поздовжню ( $\nu_3$ ) і потрійну поперечну ( $\nu_4$ ), серед яких лише  $\nu_3$  і  $\nu_4$  є активними в ІЧ ділянці спектра. Моді  $\nu_1$  і  $\nu_2$  в кристалі зазнають розщеплення на невироджені моди і стають також активними в ІЧ ділянці.

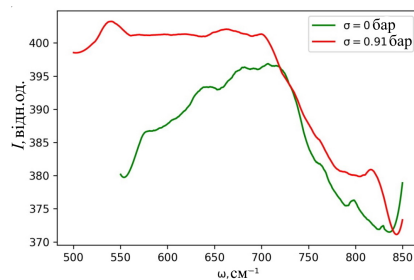
Широка смуга в районі 3386  $\text{cm}^{-1}$ , яка відповідає деформаційним коливанням зв'язку N–H тетраедричної групи  $\text{NH}_4^+$ , формується модами  $\nu_3$  і  $\nu_4$ . Смуга II формується  $2\nu_2$  обертонами. Мода  $\nu_4$  проявляє себе інтенсивною смугою в околі

1646  $\text{cm}^{-1}$  (смуга III).

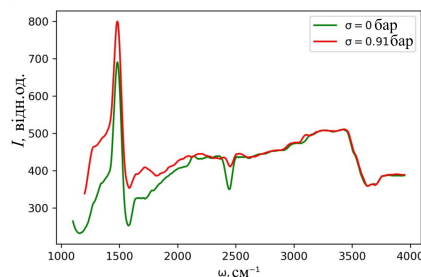
Смуга IV формується комбінацією мод  $\nu_1 + \nu_4$ , смуга V – мод  $\nu_2 + \nu_4$ , тоді як смуга VI визначається комбінацією поперечної  $\nu_4$  і лібраційної  $l$  мод  $\nu_4 + l$ .

На цьому ж рисунку показано ІЧ-спектри відбивання одновісно затиснутого кристала  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  за кімнатної температури. Найбільш чутливими до дії тисків є смуги, що відповідають за коливання тетраедра  $\text{BeF}_4^{2-}$ . Так смуги VI і V зміщуються у високоенергетичний бік до 558  $\text{cm}^{-1}$  і 626  $\text{cm}^{-1}$ , а смуга IV – в низькоенергетичний бік до 822  $\text{cm}^{-1}$ . Баричне зміщення смуг VI і V становить  $d\nu/d\sigma \sim 0,4 \dots 0,54 \text{ cm}^{-1}/\text{бар}$ .

Подібні зміни в інтенсивностях та баричних зміщеннях положення основних піків зафіксовані й для Y та Z-поляризацій світла.



а)



б)

Рис. 1: ІЧ-спектри відбивання механічно вільного та одновісно затиснутого кристала  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  за кімнатної температури у спектральному діапазоні: а) 500-850  $\text{cm}^{-1}$ ; б) 1100-4000  $\text{cm}^{-1}$ .

Смуги I і III практично не чутливі до дії одновісних навантажень, тоді як смуга III зміщується в низькоенергетичний бік до 2214  $\text{cm}^{-1}$ .

Така поведінка, на нашу думку, зумовлена впливом одновісного навантаження на структуру кристала. Відомо, що за кімнатної температури структура описується просторовою групою симетрії  $Pnma$  [3, 4]. При цьому тетраедричні групи  $\text{BeF}_4^{2-}$  дещо спотворені, а спотворення двох нееквівалентних амонійних іонів відрізняються досить сильно. Зокрема,  $\text{NH}_4^+$  (1), в околі якого п'ять  $\text{BeF}_4^{2-}$  - іонів, спотворений

порівняно слабо, тоді як в  $\text{NH}_4^+$  (2) (з шістьма  $\text{VeF}_4^{2-}$  - групами в найближчому оточенні) спотворення суттєво сильніші. Загалом структуру кристала ФБА в парафазі можна розглядати як частково розупорядкований стан відносно малих поворотів груп  $\text{VeF}_4^{2-}$  переважно навколо псевдогексагональної осі  $X$  [3–5].

Очевидно, що прикладання одновісного навантаження приводить до поворотів та зміщень тетраедричних груп  $\text{NH}_4^+$  та  $\text{VeF}_4^{2-}$ . Значна чутливість до одновісного навантаження положення та інтенсивностей смуг IV, V і VI зумовлена, очевидно, значним впливом на розупорядкування малих поворотів групи  $\text{VeF}_4^{2-}$ . Оскільки великі баричні зміни як по інтенсивності, так і по частоті виявлені для смуги  $\nu_6$ , яка відповідальна за коливання тетраедра  $\text{VeF}_4^{2-}$ , то можна припустити, що ці коливання значною мірою визначають фізичні властивості цього кристала. Хоча не можна зменшити роль коливань тетраедричних груп  $\text{NH}_4^+$ .

Раніше подібна поведінка в баричній зміні ІЧ-спектрів відбивання була виявлена для ізоморфних кристалів  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$  та  $\text{LiNH}_4\text{SO}_4$  [15, 16]. Положення максимумів смуг відбивання  $\nu_3$  і  $\nu_4$  в  $X$ -напрямку кристала  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$  зміщуються на  $5 \text{ cm}^{-1}$  і  $4 \text{ cm}^{-1}$  в довгохвильову ділянку спектра, відповідно. Для кристала  $\text{LiNH}_4\text{SO}_4$  положення смуги  $\nu_3$  зміщується на  $14 \text{ cm}^{-1}$  в довгохвильову, а положення смуги  $\nu_4$  на  $3 \text{ cm}^{-1}$  в короткохвильову ділянку спектра. Положення максимумів смуг відбивання  $\nu_3$  і  $\nu_4$  в  $Y$ -напрямі кристала  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$  зміщуються на  $4 \text{ cm}^{-1}$  і  $3 \text{ cm}^{-1}$  в короткохвильову ділянку, відповідно, тоді як для кристала ЛАС положення смуги  $\nu_3$  зміщується на  $23 \text{ cm}^{-1}$  і  $1 \text{ cm}^{-1}$  в довгохвильову, відповідно. У  $Z$ -напрямі кристала  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$  смуги  $\nu_3$  і  $\nu_4$  зміщуються на  $3 \text{ cm}^{-1}$  і  $4 \text{ cm}^{-1}$  в короткохвильову ділянку, відповідно, а для кристала  $\text{LiNH}_4\text{SO}_4$  смуга  $\nu_3$  зміщується на  $17 \text{ cm}^{-1}$  в довгохвильову, а смуга  $\nu_4$  — на  $6 \text{ cm}^{-1}$  в короткохвильову ділянку спектра, відповідно.

## 4. Висновки

У роботі досліджено ІЧ-спектри відбивання кристала ФБА для трьох поляризацій світла в широкому спектральному діапазоні  $500 \dots 4000 \text{ cm}^{-1}$ . Виявлено шість смуг відбивання, що відповідають коливним деформаційним та вібраційним модам тетраедрів  $\text{VeF}_4^{2-}$  та  $\text{NH}_4^+$ . Досліджено вплив одновісного тиску на поведінку ІЧ-спектрів відбивання кристала. Виявлено значну зміну інтенсивностей та положення смуг VI, V (у високоенергетичний бік) та смуги IV (у низькоенергетичний бік), що відповідають за коливання тетраедра  $\text{VeF}_4^{2-}$ . Баричне зміщення смуг I, II і III, які відповідають коливанням тетраедричних груп  $\text{NH}_4^+$ , є незначним. Це свідчить про те, що коливання тетраедра  $\text{VeF}_4^{2-}$  головно визначають фізичні властивості кристала.

**Подяки.** Робота виконана в рамках проєкту “Preludium 15” грант № 2018/29/N/ST3/02901, “Теоретичне дослідження фізичних властивостей халькопідних напівпровідників для застосувань у фотоелектричних комірках” (This work was supported by Polish National Science Center, “Preludium 15” program, grant No. 2018/29/N/ST3/02901, “Theoretical investigation of physical properties of chalcoprite semiconductors for solar cell applications”).

1. Konak C. Changes of optical properties at an incommensurate-commensurate phase transition in  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  crystals / C. Konak // *Phys. Stat. Sol. (a)*. – 1979. – Vol. 54. – P. 99–104. doi: 10.1002/pssa.2210540112.
2. Konak C. Birefringente and electrooptical properties of  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  / C. Konak, J. Matras // *Czech. J. Phys(a)*. – 1976. – Vol. B26. – P. 577–584. doi: 10.1007/BF01586889.
3. Strukov B.A. The order of the commensurate-incommensurate phase transition in  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  crystals / B.A. Strukov, P.S. Smirnow // *Ferroelectrics*. – 1986. – Vol. 66. – P. 85–88. doi: 10.1080/00150198608227875.
4. Onodera A. The crystal structure of paraelectric ammonium fluoroberyllate at room temperature / A. Onodera, Y. Shiozaki // *Ferroelectrics*. – 1981. – Vol.31, no. 1–2. – P. 27–36. doi: 10.1080/00150198108201973.
5. Hoshino S. Dielectric and thermal study of  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$  and  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  transition / S. Hoshino, K. Vegam, Y. Okaya, R. Pepinsky // *Phys. Rev.* – 1958. – Vol. 112, no.2. – P. 405–413. doi: 10.1103/PHYSREV.112.405.
6. Uesu Y. X-ray dilatometric study of phase transition of ferroelectric  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  / Y. Uesu, J. Ogawa, N. Hanami, B. A. Strukov // *Phys. St. Sol. (a)*. – 1981. – Vol. 67, no. 4. – P. 693–699. doi: 10.1002/pssa.2210670241.
7. Rudysh M. First principles calculation of band structure and physical properties of ferroelectric  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  crystal / M. Rudysh, B. Horon, P. Shchepanskyi, V. Stadnyk, R. Brezvin // 2021 IEEE 12th Inter. Conf. Elect. and Inform. Techn., ELIT 2021 – Proceedings, – 2021. – P. 310–314. doi: 10.1109/ELIT53502.2021.9501145.
8. Romanyk M. O. The action of mechanical stress and other influences on birefringence inversion of  $\text{LiKSO}_4$  and  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  crystals / M. O. Romanyk, V. Yo. Stadnyk // *Ferroelectrics* – 1997. – Vol. 192 (1–4). – P. 235–241. doi: 10.1080/00150199708216194.
9. Stadnyk V. Yo. Piezooptic properties of  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  crystals / V. Yo. Stadnyk, M. O. Romanyk // *Physica Status Solidi (A) Applied Research* – 1996. – Vol. 158(1). – P. 289–296. doi: 10.1002/pssa.2211580131.
10. Stadnyk V. Yo. Effect of uniaxial pressures on the phase transitions in  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  crystals / V. Yo. Stadnyk // *Crystallography Reports*. – 2000. – Vol. 45(6). – P. 968–970.
11. Gesi K. Effect of hydrostatic pressure on the phase transitions in ferroelectric  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  / K. Gesi, K. Ozawa // *J. Phys. Soc. Japan*. – 1974. – Vol. 36.– P. 1496–1499. doi: 10.1143/JPSJ.36.1496.
12. Hikita T. Ultrasonic study of ferroelectric  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  under hydrostatic high pressure / T. Hikita, T. Tsukahara, T. Ikeda // *J. Phys. Soc. Japan*. – 1982. – Vol. 51, no. 9. – P. 2900–2909. doi: 10.1143/JPSJ.51.2900.
13. Jain Y.S. Infrared spectra of  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  crystals / Y.S. Jain // *Proc.Indian Acad. Sci.* – 1978. – Vol. 87 A. – No.1. – P. 45–48.
14. Романюк М. О. Практикум з кристалооптики і кристалофізики / М. О. Романюк. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. – 362 с.

15. Stadnyk V. Yo. Effect of uniaxial pressure on the infrared spectra of  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$  crystals / V. Yo. Stadnyk, M. O. Romanyuk, N. R. Tuzyak // *Physics of the Solid State*. – 2007. – Vol. 49, No. 4. – P. 696–700. doi: 10.1134/S1063783407040166.
16. Stadnyk V. Y. The effect of uniaxial pressures on the infrared spectra of  $\text{LiNH}_4\text{SO}_4$  single crystals / V. Y. Stadnyk, M. Ya. Rudysh, P. A. Shchepanskii, I. M. Matviishyn, V. M. Gaba, O. M. Gorina // *Optics and spectroscopy*. – 2018. – Vol. 124. – P. 216–220. doi: 10.1134/S0030400X18020169.

## References

1. C. Konak, *Phys. Stat. Sol. (a)*. **54**, 99–104 (1979). doi: 10.1002/pssa.2210540112.
2. C. Konak, J. Matras, *Czech. J. Phys(a)*. **B26**, 577–584 (1976). doi: 10.1007/BF01586889.
3. B. A. Strukov, P. S. Smirnow, *Ferroelectrics*. **66**, 85–88 (1986). doi: 10.1080/00150198608227875.
4. A. Onodera, Y. Shiozaki, *Ferroelectrics*. **31**, 27–36 (1981). doi: 10.1080/00150198108201973.
5. S. Hoshino, K. Vegam, Y. Okaya, R. Pepinsky, *Phys. Rev.* **112**, 405–413 (1958). doi: 10.1103/PHYSREV.112.405.
6. Y. Uesu, J. Ogawa, N. Hanami, B.A. Strukov, *Phys. St. Sol. (a)*. **67**, 693–699 (1981). doi:10.1002/pssa.2210670241.
7. M. Rudysh, B. Horon, P. Shchepanskyi, V. Stadnyk, R. Brezvin, 2021 IEEE 12th Inter. Conf. Elect. and Inform. Techn., ELIT 2021 – Proceedings. 310–314 (2021). doi: 10.1109/ELIT53502.2021.9501145.
8. M. O. Romanyk, V. Yo. Stadnyk, *Ferroelectrics*. **192** 235–241 (1997). doi:10.1080/00150199708216194.
9. V. Yo. Stadnyk, M. O. Romanyk, *Physica Status Solidi (A) Applied Research*. **158** 289–296 (1996). doi: 10.1002/pssa.2211580131.
10. V. Yo. Stadnyk, *Crystallography Reports*. **45**, 968–970.(2000).
11. K. Gesi, K. Ozawa, *J. Phys. Soc. Japan*. **36**, 1496–1499 (1974). doi: 10.1143/JPSJ.36.1496.
12. T. Hikita, T. Tsukahara, T. Ikeda, *J. Phys. Soc. Japan*. **51**, 2900–2909 (1982). doi:10.1143/JPSJ.51.2900.
13. Y. S. Jain, *Proc.Indian Acad. Sci.* **87 A**, 45–48 (1978).
14. M. O. Romaniuk, *Lviv, Ivan Franko LNU*, 362 (2012).
15. V. Yo. Stadnyk, M. O. Romanyuk, N. R. Tuzyak, *Physics of the Solid State*. **49**, 696–700 (2007). doi:10.1134/S1063783407040166.
16. V. Y. Stadnyk, M. Ya. Rudysh, P. A. Shchepanskii, I. M. Matviishyn, V. M. Gaba, O. M. Gorina, *Optics and spectroscopy*. **124**, 216–220 (2018). doi: 10.1134/S0030400X18020169.

Стаття надійшла до редколегії: 24.10.2022

Прийнята до друку: 18.11.2022

## Effect of uniaxial stress on the infrared spectra of (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>BeF<sub>4</sub> crystal

B. Horon<sup>1</sup>, M. Rudysh<sup>1,2,3,4</sup>, V. Stadnyk<sup>1</sup>, R. Brezvin<sup>1</sup>,  
P. Shchepanskyi<sup>1,4</sup>, I. Matvijishyn<sup>5</sup>

<sup>1</sup> Ivan Franko National University of Lviv,  
8 Kyrylo and Mefodiy Str., Lviv, Ukraine, 79005  
e-mail: rudysh.myron@gmail.com

<sup>2</sup> Jan Dlugosz University in Czestochowa,  
13/15 Armii Krajowej Al., Czestochowa, Poland, 42-200

<sup>3</sup> Lesya Ukrainka Volyn National University,  
9 Potapova Str., Lutsk, Ukraine, 43025

<sup>4</sup> Lviv Polytechnic National University,  
12 Bandera Str., Lviv, Ukraine, 79005

<sup>5</sup> Ivan Franko National University of Lviv,  
107 Tarnavskoho Str., Lviv, Ukraine, 79017

Crystals of ammonium fluoroberylate (AFB, (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>BeF<sub>4</sub>) are typical representatives of a wide group of dielectric crystals of A<sub>2</sub>BX<sub>4</sub> type, which have two phase transitions and, accordingly, possess three different phases. In the high-temperature region ( $T > 182$  K) AFB is in the paraelectric phase. At room temperature, the crystal belongs to the  $Pnma$  spatial symmetry group and has a slight distortion of the BeF<sub>4</sub><sup>2-</sup> tetrahedral group. Previously, IR spectra of FBA crystal were studied in the spectral range of 300–4000 cm<sup>-1</sup>. Bands corresponding to different internal vibrations of NH<sub>4</sub><sup>+</sup> and BeF<sub>4</sub><sup>2-</sup> ions ( $\sim 370$  cm<sup>-1</sup> and  $\sim 100$  cm<sup>-1</sup>) were detected, as well as several bands caused by a combination of these modes. However, studies of the influence of uniaxial loading on the behavior of the IR spectra of these crystals have not been conducted. A preliminary study of the effect of mechanical loading on the birefringent properties of AFB crystals showed that the spontaneous increments of birefringence depend linearly on the load, and hysteresis of changes was not detected. Study of spectral dependences of birefringence of the AFB crystal for pressures of different magnitudes and directions showed that stresses  $\sigma_m$  lead to changes in  $\Delta n_i$  of different magnitudes. Dispersion curves of birefringence do not change qualitatively under pressures applied, but their absolute values are altered. In this work, the IR reflection spectra of the AFB crystal were investigated for three polarizations of light in a wide spectral range of 500–4000 cm<sup>-1</sup>. Six reflection bands corresponding to vibrational deformation and librational modes of BeF<sub>4</sub><sup>2-</sup> and NH<sub>4</sub><sup>+</sup> tetrahedra were detected. The effect of uniaxial pressure on the behavior of the IR reflection spectra of this crystal was investigated. A significant change in the intensities and positions of the reflection bands responsible for the oscillations of the BeF<sub>4</sub><sup>2-</sup> tetrahedral group was revealed. The baric displacement of the reflection bands, which correspond to the vibrations of the NH<sub>4</sub><sup>+</sup> tetrahedral groups, is insignificant, indicating the determining influence of the vibrations of the BeF<sub>4</sub><sup>2-</sup> tetrahedron on the physical properties of the crystal.

**Key words:** infrared spectra, crystal, uniaxial stress, reflection.