



УКРАЇНА

(19) UA

(11) 85054

(13) C2

(51) МПК (2006)
G01N 25/02МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ
І НАУКИ УКРАЇНИДЕРЖАВНИЙ ДЕПАРТАМЕНТ
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ
ВЛАСНОСТІОПИС
ДО ПАТЕНТУ НА ВІНАХІД(54) СПОСІБ ВИЗНАЧЕННЯ КРИТИЧНОГО ІНДЕКСА ПАРАМЕТРА ПОРЯДКУ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДУ У
ТВЕРДИХ ТІЛАХ

1

2

(21) а200512222

(22) 19.12.2005

(24) 25.12.2008

(46) 25.12.2008, Бюл.№ 24, 2008 р.

(72) СТУДЕНЯК ІГОР ПЕТРОВИЧ, UA

(73) УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ, UA

(56) UA 33019 від 15.05.2003

UA 44584 від 15.02.2002

SU 817545 від 30.03.1981

Рассеяние света вблизи точек фазовых переходов / Под. ред. Г.З. Камминза, А.П. Леванюка: Пер. с англ. - М:Наука, 1990. - 414с.

Студеняк І.П., Ковач Д.Ш., Орлюка А.С., Ковач Е.Т. Температурные изменения диэлектрических и оптических свойств в области фазовых переходов в супериониках-сегнетоэластиках Cu6PS(Se)5Hal // Изв. Ан: сер. физ. - 1992. - Т.56, №10. - С.86-93

(57) Спосіб визначення критичного індекса параметра порядку фазового переходу у твердих тілах, який включає температурні ізоабсорбційні дослідження краю оптичного поглинання, який **відрізняється** тим, що із експериментально отриманої температурної залежності ширини псевдозабороненої зони $E_g^\alpha(T)$ спочатку розраховують приріст ширини псевдозабороненої зони $\Delta E_g^\alpha(T)$ у низькотемпературній фазі відносно високотемпературної фази як

$$\Delta E_g^\alpha(T) = E_{g,l}^\alpha(T) - E_{g,h}^\alpha(T),$$

де $E_{g,l}^\alpha(T)$ - значення ширини псевдозабороненої зони у низькотемпературній фазі, а значення ширини псевдозабороненої зони у високотемпературній фазі $E_{g,h}^\alpha(T)$ отримуються екстраполяцією експериментальної залежності для високотемпературної фази у низькотемпературну за допомогою формули

$$E_{g,h}^\alpha(T) = E_g^\alpha(0) - S_g^\alpha k \theta_E \left[\frac{1}{\exp(\theta_E / T) - 1} \right],$$

де S_g^α - безрозмірна константа взаємодії, θ_E - температура Ейнштейна, k - стала Больцмана, $E_g^\alpha(0)$ - значення ширини псевдозабороненої зони при температурі 0 градусів по шкалі Кельвіна, T - температура твердого тіла, після чого представляють $\Delta E_g^\alpha(T)$ у вигляді розкладу в ряд по парних степенях параметра порядку як $\Delta E_g^\alpha(T) = a\tau^2(T)$, при цьому обмежуються першим членом розкладу, отримують співвідношення $\Delta E_g^\alpha \sim \tau^{2\beta}$ при $\tau = (T - T_c) / T_c$, де T_c - температура фазового переходу, і будують залежність $\log(\Delta E_g^\alpha) = f(\log \tau)$, по якій визначають з тангенса кута нахилу степеневий показник, а відповідно і значення критичного індекса β .

Винахід відноситься до області фізики твердого тіла, зокрема до способів дослідження фазових переходів в твердих тілах, і може бути використаний як ефективний та надійний спосіб визначення критичного індекса параметра порядку фазового переходу шляхом ізоабсорбційних досліджень краю оптичного поглинання твердих тіл.

Відомо, що для опису фазових переходів вводиться параметр порядку η , рівний нулеві при температурах T , вищих за температуру фазового

переходу T_c ($T > T_c$) та відмінний від нуля при $T < T_c$. Частіше всього під параметром порядку фазового переходу розуміють деяку внутрішню деформацію, яка характеризує величину такого зміщення атомів або ступеня їх упорядкування, які і складають перебудову структури при фазовому переході [1]. Рівноважне значення параметра порядку η_e може бути представлене як

$$\eta_e \sim |\tau|^\beta \quad (1)$$

(13) C2

(11) 85054

(19) UA

де $\tau = (T - T_c)T_c$, β - критичний індекс параметра порядку. Як правило, критичний індекс β визначають за температурними залежностями фізичних величин, які пропорційні параметру порядку фазового переходу.

Найбільш близьким до запропонованого способу визначення критичного індекса параметра порядку фазового переходу є метод, який полягає у визначенні критичного індекса шляхом температурних досліджень величини двоприменезаломлення світла $|\Delta n|$ [2]. Згідно цього методу досліджуються температурні залежності двоприменезаломлення світла Δn , за якими визначається приріст двоприменезаломлення $\delta(|\Delta n|)$ у низькотемпературній фазі відносно високотемпературної, будуються залежності $\ln \delta(|\Delta n|) \sim f(\ln |\tau|)$ і за тангенсом кута нахилу визначається степеневий коефіцієнт, а відповідно і критичний індекс β .

Недоліком цього методу є те, що він обмежується технічними можливостями температурного вимірювання величини двоприменезаломлення при строго фіксованій довжині хвилі, що зменшує надійність та викликає певні труднощі при дослідженні кристалів з вузькою шириною забороненої зони.

Завданням винаходу є створення такого способу визначення критичного індекса параметра порядку фазового переходу, який би не обмежувався фіксованою довжиною хвилі і дозволяв би надійно та ефективно визначати критичний індекс параметра порядку фазового переходу твердих тіл шляхом ізоабсорбційних досліджень краю оптичного поглинання.

Поставлене завдання досягається таким чином, що запропоновано спосіб визначення критичного індекса параметра порядку фазового переходу у твердих тілах, який включає температурні ізоабсорбційні дослідження краю оптичного поглинання твердих тіл, який відрізняється тим, що, із експериментально отриманої температурної залежності ширини псевдозабороненої зони $E_g^\alpha(T)$, спочатку розраховують приріст $\Delta E_g^\alpha(T)$ у низькотемпературній фазі відносно високотемпературної фази як

$$\Delta E_g^\alpha(T) = E_{gl}^\alpha(T) - E_{gh}^\alpha(T) \quad (2)$$

де $E_{gl}^\alpha(T)$ - значення ширини псевдозабороненої зони в низькотемпературній фазі, а значення ширини псевдозабороненої зони у високотемпературній фазі $E_{gh}^\alpha(T)$ отримуються екстраполяцією експериментальної залежності для високотемпературної фази у низькотемпературну за допомогою формули

$$E_{gh}^\alpha(T) = E_g^\alpha(0) - S_g^\alpha k \theta_E \left[\frac{1}{\exp(\theta_E / T) - 1} \right] \quad (3)$$

де S_g^α - безрозмірна константа взаємодії, θ_E - температура Ейнштейна, k - стала Больцмана, $E_g^\alpha(0)$ - значення ширини псевдозабороненої зони при температурі 0 градусів по шкалі Кельвіна, T -

температура твердого тіла, після чого представляють $\Delta E_g^\alpha(T)$ у вигляді розкладу в ряд по парних степенях параметра порядку як $\Delta E_g^\alpha(T) = a\tau^2(T)$, при цьому обмежуються першим членом розкладу, отримують співвідношення $\Delta E_g^\alpha \sim \tau^{2\beta}$ при $\tau = (T - T_c)/T_c$ і будують залежність $\log(\Delta E_g^\alpha) = f(\log \tau)$, по якій визначають з тангенса кута нахилу степеневий показник, а відповідно і значення критичного індекса β .

Запропонований спосіб визначення критичного індекса параметра порядку фазового переходу твердих тіл, у порівнянні зі способом-прототипом, дозволяє надійно та ефективно визначати критичний індекс параметра порядку фазового переходу твердих тіл шляхом ізоабсорбційних досліджень краю оптичного поглинання.

Спосіб здійснюється наступним чином: спектрометричним методом проводять температурні ізоабсорбційні дослідження краю поглинання твердих тіл. В результаті отримують температурну залежність ширини псевдозабороненої зони, яку у високотемпературній та низькотемпературній фазах апроксимують співвідношенням (3), потім за допомогою формули (2) визначають приріст ширини псевдозабороненої зони при переході в низькотемпературну фазу, після чого будують залежність $\log(\Delta E_g^\alpha) = f(\log \tau)$, по якій визначають з тангенса кута нахилу значення критичного індекса β .

Приклад конкретного використання запропонованого способу. За допомогою запропонованого способу визначено критичні індекси параметра порядку фазового переходу для суперіонних провідників типу $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{X}$ (X-I, Br).

На Фіг.1 наведені температурні залежності ширини псевдозабороненої зони E_g^α , визначеної на рівні коефіцієнта поглинання $\alpha = 550 \text{ cm}^{-1}$, для кристалів $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{I}$ (крива 1) та $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ (крива 2). З метою визначення величини $\Delta E_g^\alpha(T)$, яка виникає при сегнетоеластичному фазовому переході ($T < T_c$), експериментальна температурна залежність E_g^α (Фіг.1) у параеластичній фазі ($T > T_c$) була апроксимована за допомогою (3).

Значення приросту $\Delta E_g^\alpha(T)$, які наведені на Фіг.2 для кристалів $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{I}$ (а) та $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$ (б), були розраховані за формулою (2). Через T_s на Фіг.1 та 2 позначена температура суперіонного фазового переходу. На вставках до Фіг.2 наведено залежності $\log(\Delta E_g^\alpha) = f(\log \tau)$, на основі яких отримані значення критичних індексів $\beta = 0.431 \pm 0.003$ для $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{I}$ та $\beta = 0.428 \pm 0.003$ для $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}$.

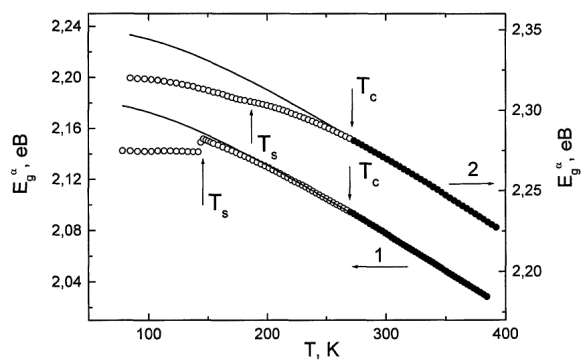
Винахід може бути використаний у науково-дослідних лабораторіях при оптичних дослідженнях фазових переходів в твердих тілах з метою їх використання у ролі функціональних елементів для оптоелектроніки.

Джерела інформації:

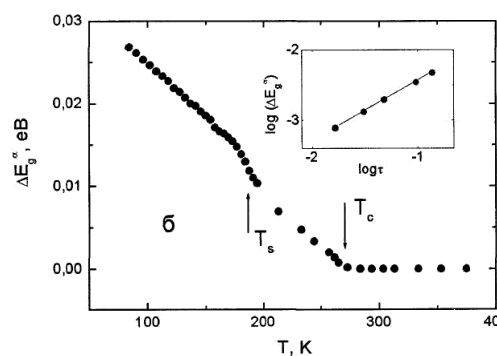
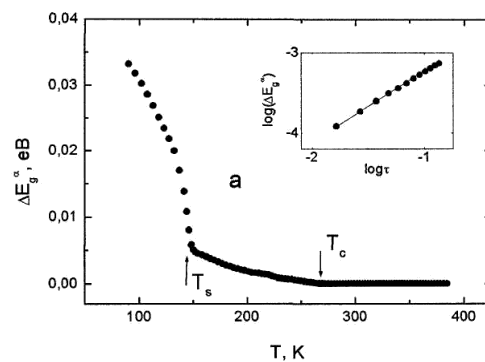
1. Рассеяние света вблизи точек фазовых переходов / Под ред. Г.З.Камминза, А.П.Леванюка: Пер. с англ.- М: Наука, 1990. - 414с.

2. Студеняк І.П., Ковач Д.Ш., Орлюкас А.С., Ковач Е.Т. Температурные изменения диэлектри-

ческих и оптических свойств в области фазовых переходов в супериониках-сегнетоэластиках $\text{Cu}_6\text{PS}(\text{Se})_5\text{Hal}$ // Изв. АН: сер.физ. -1992. - Т.56, №10. - С.86-93-прототип.



Фиг.1.



Фиг.2.