



УКРАЇНА

(19) UA

(11) 85678

(13) C2

(51) МПК (2009)

G01N 25/02

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ
І НАУКИ УКРАЇНИ

ДЕРЖАВНИЙ ДЕПАРТАМЕНТ
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ
ВЛАСНОСТІ

ОПИС ДО ПАТЕНТУ НА ВІНАХІД

(54) СПОСІБ ВИЗНАЧЕННЯ ТЕМПЕРАТУРНОЇ ЗАЛЕЖНОСТІ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКУ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДУ У ТВЕРДИХ ТІЛАХ

1

2

(21) а200512240

(22) 19.12.2005

(24) 25.02.2009

(46) 25.02.2009, Бюл.№ 4, 2009 р.

(72) СТУДЕНЯК ІГОР ПЕТРОВИЧ, UA

(73) УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ, UA

(56) Струков Б.А., Леванюк А.П. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах. - М.:Наука, 1983. - 240 с.

SU 1430848 від 15.10.1988

SU 1778791 від 30.11.1992

SU 646795 від 15.08.1979

SU 890083 від 15.12.1981

SU 817545 від 30.03.1981

SU 536422 від 20.05.1977

US 6149999 від 21.11.2000

US 5889756 від 30.03.1999

SU 1831967 від 09.08.1995

SU 423217 від 16.09.1974

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

(57) Спосіб визначення температурної залежності параметра порядку фазового переходу у твердих тілах, який включає визначення параметра порядку $\eta(T)$ шляхом температурних ізоабсорбційних досліджень краю оптичного поглинання, який **відрізняється** тим, що із експериментально отриманої температурної залежності оптичної ширини забороненої зони $\Delta E_g^*(T)$, спочатку розраховують

приріст $\Delta E_g^*(T)$ у низькотемпературній фазі відносно високотемпературної фази як

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

де $E_{g,l}(T)$ - значення оптичної ширини забороненої зони в низькотемпературній фазі, а значення оптичної ширини забороненої зони у високотемпературній фазі $E_{g,h}(T)$ визначають екстраполяцією експериментальної залежності для високотемпературної фази у низькотемпературну за допомогою формули

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

де S_g^* - безрозмірна константа взаємодії, θ_E - температура Ейнштейна, k - стала Больцмана, $E_g^*(0)$ - значення ширини оптичної ширини забороненої зони при $T = 0$ K, T - температура твердого тіла, потім представляють $\Delta E_g^*(T)$ у вигляді розкладу в ряд по парних степенях параметра порядку $\eta(T)$, при цьому для розрахунків використовують перший член розкладу і знаходять параметр порядку за допомогою співвідношення

$$\eta(T) = \sqrt{\frac{\Delta E_g^*(T)}{a}}, \text{ де } a - \text{ коефіцієнт розкладу в ряд.}$$

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 температурної залежності 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 пе-

(13) C2

(11) 85678

(19) UA

ребудову структури при фазовому переході. Ця внутрішня деформація відповідає одному із незвідних представлень групи симетрії симетричної фази і саме вона називається параметром порядку [1]. Як правило, температурну залежність параметра порядку фазового переходу визначають за температурною залежністю фізичної величини, яка пропорційна їй. Так, наприклад, в сегнетоелектриках температурну залежність ϵ отримують з температурної залежності спонтанної поляризації або частоти поперечної оптичної моди, яку називають "м'якою модою".

Найбільш близьким до запропонованого способу визначення температурної залежності параметра порядку фазового переходу є спосіб визначення температурної залежності параметра порядку фазового переходу $\eta(T)$ шляхом температурних ізоабсорбційних досліджень краю оптичного поглинання [2]. Згідно цього методу досліджуються спектри комбінаційного розсіювання світла при різних температурах, за якими визначається частота ω "м'якої моди", яка при $T \rightarrow T_c$ різко зменшується за законом $\omega \sim (T - T_c)^{1/2}$ і є пропорційною параметру порядку фазового переходу.

Недоліком цього методу є те, що він не може бути застосований на інші класи твердотільних речовин, які не є сегнетоелектриками і для яких не можна застосовувати концепцію "м'якої моди".

Завданням винаходу є створення способу визначення температурної залежності параметра порядку фазового переходу, який би не залежав від типу твердотільної системи і дозволяв би надійно та ефективно визначати температурну залежність параметра порядку фазового переходу твердих тіл шляхом ізоабсорбційних досліджень краю оптичного поглинання.

Поставлене завдання досягається таким чином, що запропоновано спосіб визначення температурної залежності параметра порядку фазового переходу у твердих тілах, який включає визначення параметра порядку $\eta(T)$ шляхом температурних ізоабсорбційних досліджень краю оптичного поглинання, який відрізняється тим, що, із експериментально отриманої температурної залежності ширини оптичної псевдощілини $E_g^*(T)$, спочатку

розраховують приріст $\Delta E_g^*(T)$ у низькотемпературній фазі відносно високотемпературної фази як

$$\Delta E_g^*(T) = E_{g,l}^*(T) - E_{g,h}^*(T) \quad (1)$$

де $E_{g,l}^*(T)$ - значення ширини оптичної псевдощілини в низькотемпературній фазі, а значення ширини оптичної псевдощілини у високотемпературній фазі $E_{g,h}^*(T)$ визначають екстраполяцією експериментальної залежності для високотемпературної фази у низькотемпературну за допомогою формули

$$E_{g,h}^*(T) = E_g^*(0) - S_g k \theta_E \left[\frac{1}{\exp(\theta_E / T) - 1} \right] \quad (2)$$

де S_g^* - безрозмірна константа взаємодії, θ_E - температура Ейнштейна, k - стала Больцмана, $E_g^*(0)$ - значення ширини оптичної псевдощілини при $T=0$ К, T - температура, потім представляють $\Delta E_g^*(T)$ у вигляді розкладу в ряд по парних степенях параметра порядку $\eta(T)$, при цьому для розрахунків використовують перший член розкладу і знаходять параметр порядку за допомогою співвідношення

$$\eta(T) = \sqrt{\frac{\Delta E_g^*(T)}{a}} \quad (3)$$

де a - коефіцієнт розкладу в ряд.

Запропонований спосіб визначення температурної залежності параметра порядку фазового переходу у твердих тілах, у порівнянні зі способом-прототипом, дозволяє надійно та ефективно визначати параметр 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 оптичної псевдощілини, яку у високотемпературній та низькотемпературній фазах апроксимують співвідношенням (2), а потім за допомогою формули (1) визначають приріст ширини оптичної псевдощілини при переході в низькотемпературну фазу, а за формулою (3) - температурний хід параметра порядку фазового переходу.

Приклад конкретного використання запропонованого способу.

За допомогою запропонованого способу визначено температурну залежність параметра порядку фазового переходу для суперіонного провідника $\text{Cu}_6\text{PSe}_5\text{I}$. Для суперіонних провідників параметр порядку є

$$\eta = (n_A - n_B) / (n_A + n_B), \quad (4)$$

де n_A та n_B - відносна кількість порожніх та зайнятих позицій. З метою визначення величини

$\Delta E_g^{\alpha}(T)$, яка виникає при суперіонному фазовому переході ($T < T_c$), експериментальна температурна залежність E_g^{α} (фіг.1) у суперіонній фазі ($T > T_c$) була апроксимована за допомогою (2). Значення

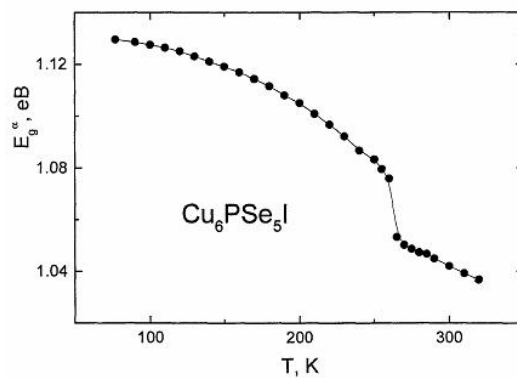
$\Delta E_g^{\alpha}(T)$, які наведені на фіг.2, були розраховано за формулою (1). На фіг.3 наведено температурну залежність параметра порядку фазового переходу, яка отримана за допомогою формули (3).

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.

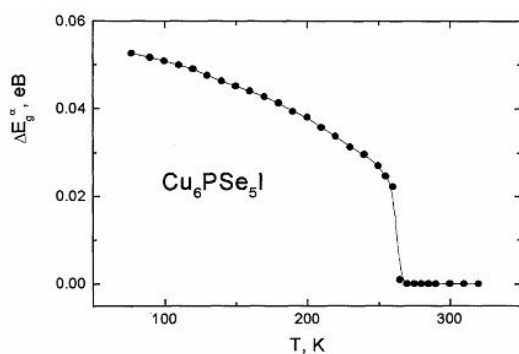
Джерела інформації:

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

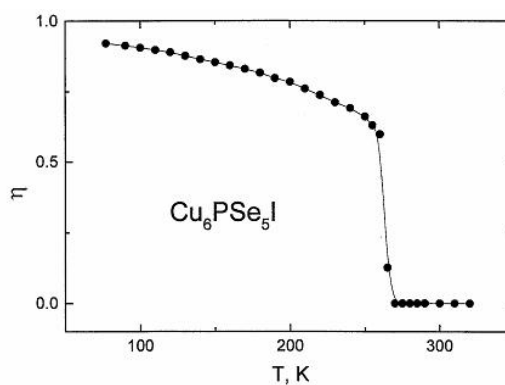
2. Струков Б.А., Леванюк А.П. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах. - М.: Наука, 1983. - 240с. - прототип.



Фиг. 1



Фиг. 2



Фиг. 3