

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПАРАМЕТРОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ И СПОНТАННОЙ ДЕФОРМАЦИИ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ $m3m - 4mm$

Из условия сохранения макросимметрии параэлектрической фазы в полидоменном кристалле предложен метод определения температурных зависимостей параметров кристаллической решетки сегнетоэлектриков при структурном фазовом переходе из кубической в тетрагональную фазы. На основе известных параметров решетки при двух произвольных температурах в каждой фазе, получено кубическое уравнение, которое имеет три аналитических решения для фазовых переходов второго рода или гипотетических фазовых переходов второго рода. Анализ полученных решений сделан на примере  $\text{BaTiO}_3$  [1]

Получено, что температурная зависимость параметров тетрагональной решетки соответствует одному из полученных решений и зависит от температуры гипотетического фазового перехода второго рода ( $t_0 = 136,4^\circ\text{C}$ ) (рис.1).

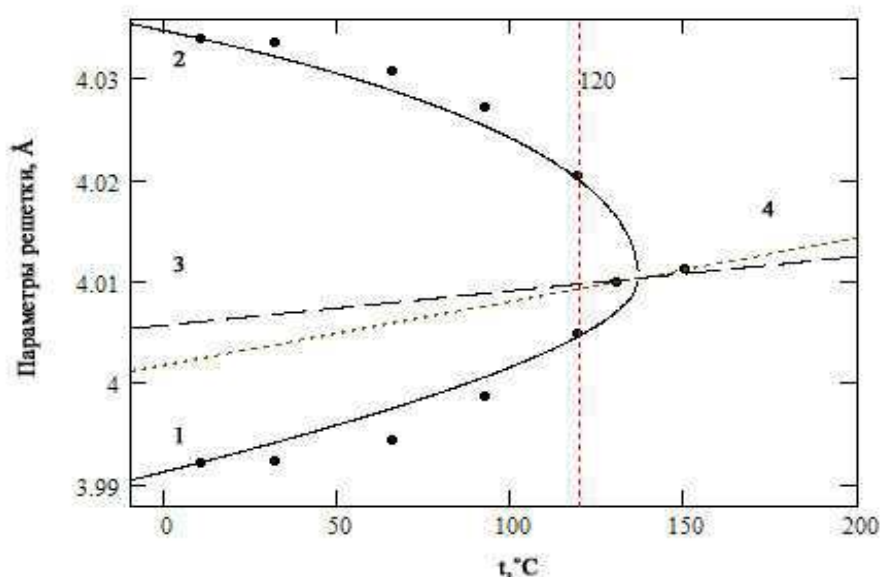
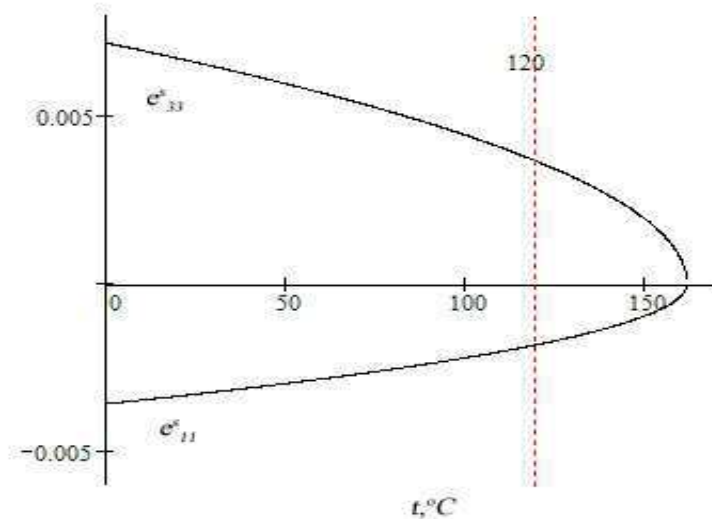


Рисунок 1 - Температурная зависимость параметров решетки  $a_t(1)$ ,  $c_t(2)$ ,  $a_u(3)$ ,  $a_c(4)$  в  $\text{BaTiO}_3$ .

Из этих зависимостей определены компоненты тензора спонтанной деформации [2] (рис. 2)

$$E_s(t) = \begin{pmatrix} e_{11}^s(t) & 0 & 0 \\ & e_{11}^s(t) & 0 \\ & & e_{33}^s(t) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где  $e_{11}^s(t) = \frac{e_{11}(t) - e_{33}(t)}{3}$ ;  $e_{33}^s(t) = \frac{2}{3}(e_{33}(t) - e_{11}(t))$ ;  $e_{11}(t) = \frac{a_t(t)}{a_c} - 1$ ;  
 $e_{33}(t) = (c_t(t)/a_c(t) - 1)$ .



**Рисунок 2 - Температурная зависимость спонтанной деформации**

Сделан вывод, что гипотетический фазовый переход второго рода определяет величину параметров решетки тетрагональной фазы и ее зародышей. Структурный фазовый переход первого рода реализуется в кристалле, когда удельная плотность новой и индуцированной фаз в зародыше равна удельной плотности исходной фазы.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Kay H.F, Vousden P. Symmetry Changes in Barium Titanate at Low Temperatures and their Relation to its Ferroelectric Properties // *Philos. Mag. ser.7. V.40. P. 1019–1039 (1949)*.
2. K. Aizu. Determination of state parameters and formulation of spontaneous strain for ferroelastics. *Phys. Soc. Japan. 28, 706–716 (1970)*.