

УКРАЇНА

UKRAINE



ПАТЕНТ

НА КОРИСНУ МОДЕЛЬ

№ 27169

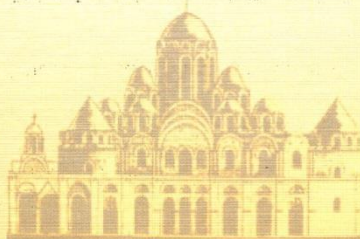
СПОСІБ ВИЗНАЧЕННЯ ТЕМПЕРАТУРНОЇ ОБЛАСТІ  
ІСНУВАННЯ НЕСПІВМІРНОЇ ФАЗИ В ФЕРОЇКАХ

Видано відповідно до Закону України "Про охорону прав на винаходи і корисні моделі".

Зареєстровано в Державному реєстрі патентів України на корисні моделі **25 жовтня 2007 р.**

Голова Державного департаменту  
інтелектуальної власності

М.В. Паладій





УКРАЇНА

(19) UA (11) 27169 (13) U  
(51) МПК (2006)  
G01J 3/00

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ  
І НАУКИ УКРАЇНИ

ДЕРЖАВНИЙ ДЕПАРТАМЕНТ  
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ  
ВЛАСНОСТІ

ОПИС  
ДО ПАТЕНТУ  
НА КОРИСНУ МОДЕЛЬ

видається під  
відповідальність  
власника  
патенту

(54) СПОСІБ ВИЗНАЧЕННЯ ТЕМПЕРАТУРНОЇ ОБЛАСТІ ІСНУВАННЯ НЕСПІВМІРНОЇ ФАЗИ В ФЕРОЇКАХ

1

2

(21) u200704295

(22) 18.04.2007

(24) 25.10.2007

(72) СЛИВКА ОЛЕКСАНДР ГЕОРГІЙОВИЧ, UA,  
СТУДЕНЯК ІГОР ПЕТРОВИЧ, UA

(73) УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕР-  
СИТЕТ, UA

(57) Спосіб визначення температурної області існування неспівмірної фази в фероїках, що включає експериментальні дослідження оптичних властивостей фероїків, який відрізняється тим, що проводять температурні дослідження краю оптичного поглинання в фероїках і представляють енергетичну ширину  $w$  краю оптичного поглинання у вигляді

$$w = w_T + (w_x)_{stat} + (w_x)_{dyn},$$

після чого визначають внески температурного  $w_T$ , статичного структурного розупорядкування  $(w_x)_{stat}$  та динамічного структурного розупорядкування  $(w_x)_{dyn}$  при певній температурі  $T$  за отриманими при описі температурної залежності в параметрах  $w_0$ ,  $w_1$  та температурою Ейнштейна  $\theta_E$  як

$$w_T = w_1 / [\exp(\theta_E / T) - 1], \quad (w_x)_{stat} = w_0, \quad (w_x)_{dyn} = w - w_T - (w_x)_{stat}.$$

де  $w_0$  та  $w_1$  - деякі постійні величини, а далі за температурною областю, для якої справджується умова  $(w_x)_{dyn} \neq 0$ , а також має місце паралельне довгохвильове зміщення краю оптичного поглинання та температурна незмінність енергетичної ширини краю оптичного поглинання, визначають область існування неспівмірної фази в фероїках.

Корисна модель належить до області фізики твердого тіла, зокрема до способів дослідження фазових переходів в фероїках, і може бути використана як ефективний та надійний спосіб визначення області існування неспівмірної фази шляхом температурних досліджень краю оптичного поглинання в фероїках.

Відомо, що для багатьох твердих тіл поглинання поблизу краю оптичного поглинання зростає за експоненціальним законом. Більше того, для ряду твердих тіл було встановлено, що температурно-спектральна залежність коефіцієнта поглинання  $\alpha$  описується правилом Урбаха [1]:

$$\alpha(h\nu, T) = \alpha_0 \cdot \exp\left[\frac{h\nu - E_0}{w(T)}\right], \quad (1)$$

де  $w$  - енергетична ширина краю оптичного поглинання;  $\alpha_0$  та  $E_0$  - координати точки збіжності урбахівського "віяла";  $h\nu$  - енергія кванта падаючого світла;  $T$  - температура. Температурна поведінка енергетичної ширини  $w$  в моделі Ейнштейна описується за допомогою співвідношення [2]:

$$w = w_0 + w_1 \left[ \frac{1}{\exp(\theta_E / T) - 1} \right], \quad (2)$$

де  $w_0$  та  $w_1$  - деякі постійні величини,  $\theta_E$  - температура Ейнштейна, яка відповідає усередненій частоті фононних збуджень системи невзаємодіючих осциляторів.

Енергетична ширина урбахівського краю оптичного поглинання в твердих тілах, як відомо, визначається не тільки температурним, але й структурним розупорядкуванням [3]:

$$w(T, X) = K \left( \langle u^2 \rangle_T + \langle u^2 \rangle_X \right), \quad (3)$$

де  $K$  - константа,  $\langle u^2 \rangle_T$  та  $\langle u^2 \rangle_X$  - середньоквадратичні відхилення (зміщення) атомів від їх рівноважних позицій, викликані відповідно температурним та структурним розупорядкуванням твердотільної системи. Оскільки зміщення атомів від рівноважних позицій веде до зміни електричного потенціалу системи, то формулу (3) записують як

$$w = k_0 (W_T^2 + W_X^2) = w_T + w_X, \quad (4)$$

де  $k_0$  - константа,  $W_T^2$  та  $W_X^2$  - середньоквадратичні відхилення від електричного потенціалу ідеально впорядкованої структури, викликані відповідно температурним та структурним розупорядкуванням, а внески температурного  $w_T$  та струк-

UA (11) 27169 (13) U

турного  $w_X$  розупорядкування в  $w$  вважаються незалежними, еквівалентними та адитивними. Структурне розупорядкування у твердих тілах можна представити у вигляді суми двох складових - статичного структурного розупорядкування  $(w_X)_{stat}$  та динамічного структурного розупорядкування  $(w_X)_{dyn}$ , причому внесок температурно-незалежного статичного структурного розупорядкування  $(w_X)_{stat}$  викликаний наявністю різного роду дефектів, домішок та неоднорідностей кристалічної структури, тоді як внесок температурно-залежного динамічного структурного розупорядкування  $(w_X)_{dyn}$  викликаний наявністю, наприклад, міграційного руху іонів в твердих електролітах або модуляцією структури в фероїках.

Однак, в деяких твердих тілах спостерігається відхилення від урбахівської поведінки краю поглинання. Так, наприклад, при дослідженні краю оптичного поглинання сегнетоелектрика  $Sn_2P_2Se_6$  виявлено три характерні температурні області: область урбахівської поведінки краю поглинання при  $T < 195K$ , область паралельного довгохвильового зміщення краю оптичного поглинання в інтервалі температур  $195 \leq T \leq 220K$  та область урбахівської поведінки краю поглинання при  $T > 220K$  [4]. Паралельне зміщення краю оптичного поглинання в  $Sn_2P_2Se_6$  пов'язується з наявністю модуляції структури в неспівмірній фазі у вказаній температурній області.

Найбільш близьким до запропонованого способу визначення температурної області існування неспівмірної фази в фероїках є рентгенодифракційний метод, який полягає у вимірюванні дифрак-

тограм рентгенівського випромінювання при різних температурах та послідовному аналізі положень, півширин та інтенсивностей основних і сателітних рефлексів [5].

Недоліком методу є його трудомісткість та складність, пов'язані з проведенням низькотемпературних рентгеноструктурних досліджень та необхідністю забезпечення високоточних прецизійних вимірювань.

Завданням корисної моделі є створення способу визначення температурної області існування неспівмірної фази в фероїках, який дозволяв би надійно та ефективно ідентифікувати наявність неспівмірної фази в фероїках шляхом температурних досліджень краю оптичного поглинання.

Поставлене завдання досягається таким чином, що запропоновано спосіб визначення температурної області існування неспівмірної фази в фероїках шляхом температурних досліджень краю оптичного поглинання, який включає експериментальні дослідження оптичних властивостей фероїків, який відрізняється тим, що, проводять температурні дослідження краю оптичного поглинання в фероїках і представляють енергетичну ширину  $w$  краю оптичного поглинання у вигляді

$$w = w_T + (w_X)_{stat} + (w_X)_{dyn} \quad (5)$$

після чого визначають внески температурного  $w_T$ , статичного структурного розупорядкування  $(w_X)_{stat}$  та динамічного структурного розупорядкування  $(w_X)_{dyn}$  за отриманими при описі температурної залежності  $w$  параметрами  $w_0$ ,  $w_X$  та температурою Ейнштейна  $\theta_E$

$$w_T = w_0 / [\exp(\theta_E / T) - 1], \quad (w_X)_{stat} = w_0, \quad (w_X)_{dyn} = w - w_T - (w_X)_{stat}, \quad (6)$$

а далі за температурною областю, для якої справджується умова  $(w_X)_{dyn} \neq 0$ , а також має місце паралельне довгохвильове зміщення краю оптичного поглинання та температурна незмінність енергетичної ширини краю оптичного поглинання, визначають область існування неспівмірної фази в фероїках.

Запропонований спосіб визначення температурної області існування неспівмірної фази в фероїках, у порівнянні зі способом-прототипом, є менш трудомістким та більш інформативним, який на основі температурних досліджень краю оптичного поглинання дозволяє надійно та ефективно ідентифікувати існування неспівмірної фази в фероїках.

Спосіб здійснюється наступним чином: спектрометричним методом досліджують спектральні залежності коефіцієнтів поглинання в фероїках при різних температурах. Потім розраховують енергетичну ширину краю оптичного поглинання  $w$ , а її температурну залежність апроксимують співвідношенням (2). За отриманими при описі експериментальної залежності  $w(T)$  параметрами  $w_0$ ,  $w_1$  та  $\theta_E$  за допомогою співвідношень (2) і (6) визначають внески температурного  $w_T$ , статичного  $(w_X)_{stat}$  та динамічного  $(w_X)_{dyn}$  структурного розупорядкування. Температурна область, для якої справджується умова  $(w_X)_{dyn} \neq 0$ , має місце пара-

лельне довгохвильове зміщення краю оптичного поглинання та температурна незмінність енергетичної ширини краю поглинання, являється областю існування неспівмірної фази в фероїках.

Приклад конкретного використання запропонованого способу.

За допомогою запропонованого способу ідентифіковано область існування неспівмірної фази в сегнетоелектрику  $Sn_2P_2Se_6$ . Відомо, що в цьому кристалі реалізуються два низькотемпературні фазові переходи, один з яких є фазовим переходом із параелектричної фази в неспівмірну при  $T = T_i$ , другий - фазовим переходом із неспівмірної в сегнетоелектричну при  $T = T_c$  [4]. Спектральні залежності коефіцієнтів пропускання  $T$  та відбивної здатності  $r$  досліджувалися за допомогою ґраткового монохроматора МДР-3, а значення коефіцієнтів поглинання  $\alpha$  розраховувалися за формулою

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \left[ \frac{(1-r)^2 + \sqrt{(1-r)^4 + 4T^2 r^2}}{2T} \right], \quad (7)$$

де  $d$  - товщина зразка. Характерне урбахівське „віяло" для кристала  $Sn_2P_2Se_6$  наведено на Фіг.1. Потім розраховувалися значення енергетичної ширини експоненціального краю поглинання як  $w = \Delta(\ln v) / \Delta(\ln \alpha)$ , температурна залежність якої наведена на Фіг.2. Одержана температурна зале-

жність  $w$  апроксимувалася за формулою (2) і визначалися внески температурного  $w_T$ , статичного  $(w_x)_{\text{stat}}$  та динамічного  $(w_x)_{\text{dyn}}$  структурного розпорядкування за формулами (2) і (6). За результатами досліджень встановлено, що в  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{Se}_6$  неспівмірна фаза існує в інтервалі температур  $195 \leq T \leq 220\text{K}$ , тобто у вказаному інтервалі температур справджується умова  $(w_x)_{\text{dyn}} \neq 0$ , має місце паралельне довгохвильове зміщення краю оптичного поглинання та температурна незмінність енергетичної ширини краю поглинання (Фіг.2). Наявність динамічного структурного розпорядкування  $(w_x)_{\text{dyn}}$  у неспівмірній фазі сегнетоелектрика  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{Se}_6$  зумовлена хвилею модуляції, параметри модуляції якої залежні від температури.

Корисна модель може бути використана у науково-дослідних лабораторіях при дослідженні параметрів краю оптичного поглинання в фероїках з метою їх використання у ролі функціональних елементів для оптоелектроніки.

Джерела інформації:

1) Kurik M.V. Urbach rule (Review) // Phys. Stat. Sol. (a). - 1971. - Vol.8, №1. - P.9-30.

2) Yang Z., Homewood K.P., Finney M.S., Harry M.A., Reeson K.J. Optical absorption study of ion beam synthesized polycrystalline semiconducting  $\text{FeSi}_2$  // J. Appl. Phys. - 1995. - Vol.78, №3. - P.1958-1963.

3) Cody G.D., Tiedje T., Abeles B., Brooks B., Goldstein Y. Disorder and the optical-absorption edge of hydrogenated amorphous silicon // Phys. Rev. Lett. - 1981. - Vol.47, №20. - P.1480-1483.

4) Сливка А.Г., Герзанич Е.И., Шуста В.С., Гуранич П.П. Влияние изоморфного замещения и внешнего давления на фундаментальное поглощение света кристаллами  $\text{Sn}(\text{Pb})_2\text{P}_2\text{S}(\text{Se})_6$  // Изв. Вузов. Сер.Физика. - 1999.-№9.-С. 23-28.

5) Парсамян Т.К., Хасанов С.С., Шехтман В.Ш, Высочанский Ю.М., Сливка В.Ю. Несоразмерная фаза в собственном сегнетоэлектрике  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{Se}_6$  // Физика твердого тела. - 1985. - Т.27, №11.-С.3327-3331. - прототип

