



АКТУАЛЬНЫЯ ПРАБЛЕМЫ

ФІЗІКІ,
МАТЭМАТЫКІ,
ІНФАРМАТЫКІ



С. М. Барайшук, В. И. Януть

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕПОЛЯРИЗАЦИИ ФТОРСОДЕРЖАЩИХ
КРИСТАЛЛОВ TGS

Замещение сульфатной и глициновой групп в триглицинсульфате TGS группами $[PO_3F]^{2-}$ и \angle - α аланином приводит к существенному различию физических свойств кристаллов TGSPF, ATGS и ATGSPF [1]. Исследуемые кристаллы TGSPF и ATGSPF в значительной степени монодоменизированы. Поэтому мы предприняли попытку микроскопического анализа состояния их структуры и объяснения на этой основе некоторых полученных закономерностей. В первую очередь это относится к зависимостям внутренних полей смещения от содержания модификатора в кристаллах, а также к элементарным процессам переполяризации, во вторых – к закономерностям, полученным в области фазового перехода. Анализ структуры ячейки чистого и легированного \angle - α аланином триглицинсульфата [2], а также иона $[PO_3F]^{2-}$ дает основание предположить существенное влияние последнего на физическое состояние микроструктуры кристаллов TGSPF и ATGSPF. Известно, что несвязанный ион $[PO_3F]^{2-}$, в отличие от $[SO_4]^{2-}$, характеризуется высокими значениями показателей искажения по сравнению с идеальной симметрией и, вследствие перераспределения электронной плотности, обладает дипольным моментом $P_F = 1,3$ Д, направленным вдоль связи ($P - F$). В процессе изоморфного замещения сульфатной группы в ячейке TGS диполь \vec{P}_F , казалось бы, может ориентироваться вдоль любого из направлений связи ($S - O$) незамещенных групп SO_4 . Однако, вероятность его ориентации вдоль возможных направлений зависит от условий выращивания. При выращивании кристаллов в параэлектрической фазе наиболее вероятным направлением связи ($P - F$) иона $[PO_3F]^{2-}$, входящего в ячейку, является направление, перпендикулярное сегнетоэлектрическому. Сила взаимодействия диполей \vec{P}_F и \vec{P}_i оказывает определяющее действие на направление указанной связи. При выращивании кристаллов в сегнетоэлектрической фазе процесс замещения происходит в поле спонтанной поляризации, которое ориентирует диполь \vec{P}_F вдоль сегнетоэлектрической оси. Однако, в соответствии со структурой кристалла связь ($P - F$) совпадает по направлению с дипольным моментом незамещенного деформированного тетраэдра $[SO_4]^{2-}$ данной стехиомет-

рической единицы. Изменение направления поляризации на противоположное не может переориентировать диполь \vec{P}_F в связи со спецификой расположения анионных групп в ячейке кристалла. Таким образом, ион $[PO_3F]^{2-}$ входит в решетку TGS в качестве неполяризуемого диполя.

Зная содержание \bar{x} групп $[PO_3F]^{2-}$ в кристалле [3], можно рассчитать их концентрацию

$$N = \frac{\bar{x} \cdot \rho}{\mu} \cdot N_A. \quad (1)$$

Здесь $\rho = 1,68 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ – плотность кристалла;

$\mu = 323,3 \text{ кг/кмоль}$ – его молярная масса;

$N_A = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$ – число Авогадро.

Расчет дает значения $N = (4 - 11) \cdot 10^{-24} \text{ м}^3$, соответствующие кристаллам, выращенным из растворов с $x = 0,1$ и $0,6$. Наличие такого количества неполяризующихся диполей эквивалентно возникновению эффективного внутреннего поля

$$E_{BH} = P_F \cdot N. \quad (2)$$

С учетом направления вектора \vec{P}_F для кристаллов TGSPF, выращенных в сегнетоэлектрической фазе из растворов с $x = 0,1$ и $0,6$ получим значения $E_{BH} = (1,2 \text{ } 3,3) \text{ кВ/см}$.

Наблюдаемые по петлям гистерезиса значения смещающих полей E_{CM} довольно близки к рассчитанным E_{BH} , немного превышая их. Это указывает на возможность участия в процессе формирования полей смещения молекул глицина за счет их деформации [4]. Произведем оценку ее величины. Вошедший в ячейку кристалла диполь \vec{P}_F будет оказывать вращающее действие на ион NH_3^+ молекулы глицина, деформируя валентный угол связи $(C - H)$. В случае кристалла, выращенного в сегнетоэлектрической фазе, это должно сказаться на увеличении, а выращенного в паразлектрической фазе на уменьшении компоненты вектора \vec{P}_F на сегнетоэлектрическое направление. Численное значение момента M силы дипольного взаимодействия можно найти по формуле

$$M = P_F \cdot E_F \cdot \sin \varphi, \quad (3)$$

где E_F напряженность электрического поля диполя \vec{P}_F ; φ угол между направлениями векторов \vec{P}_F и \vec{E}_F .

Подставив в (3) выражение для расчета E_F , получим

$$M = \frac{P_F \cdot P_F}{2\pi\epsilon_0 r^3} \cdot \sin \varphi \quad (4)$$

(r половина постоянной a ячейки TGS). Записав условие равновесия группы глицина и представив момент M_F составляющей силы связи $(C - H)$ в виде

$$M_F = a \cdot \Delta l \cdot d, \quad (5)$$

получим

$$\frac{4P_F \cdot P_F}{\pi\epsilon_0 a^3} \sin \varphi = \alpha \Delta l d, \quad (6)$$

где d длина связи ($C-H$); α коэффициент упругости валентного угла связи ($C-H$).

Из (6) можно выразить величину деформации Δl связи ($C-H$) молекулы глицина в сегнетоэлектрическом направлении:

$$\Delta l = \frac{4P_F \cdot P_T \cdot \sin \varphi}{\pi \epsilon_0 a^3 d \alpha} \quad (7)$$

Воспользовавшись данными об элементарной ячейке TGS и приняв $a = 9,94$ нм, $\alpha = 10^2$ Н/м, $P_F = 1,33$ Д, $P_T = 2,26$ Д, получим $\Delta l \approx 10^{-12}$ м. Эта деформация эквивалентна возникающему внутреннему полю $E_{ВН} = N \cdot \Delta l \cdot e^+$, где N рассчитанная нами ранее концентрация ионов $[PO_3F]^{2-}$, а e^+ эффективный заряд, который мы принимаем равным заряду электрона. Расчет дает значение $E_{ВН} = (100 - 200)$ В/см для кристаллов с наибольшей концентрацией N . Таким образом, вычисленное суммарное внутреннее поле $E_{ВН} + E_{СМ}$ все же несколько ниже, чем наблюдаемое по петлям гистерезиса $E_{СМ}$. Следовательно, можно предположить, что $E_{СМ}$ формируется и определенным числом молекул глицина за счет их стабилизации. Подтверждением этому являются различия в значениях $E_{СМ}$ кристаллов ATGSPF, выращенных в сегнетоэлектрической и паразлектрической фазах, а также закономерности, наблюдаемые при импульсной переполаризации.

Литература

1. Цедрик М.С. Физические свойства семейства кристаллов триглицинсульфата. – Мн.: Наука и техника, 1986. 216 с.
2. Галстян Г.Т., Рез И.С., Рейзер М.Ю. О природе примесной униполярности кристаллов триглицинсульфата // Физика твердого тела. – 1982. – Т. 24, вып.7. – С. 2186 – 2190.
3. Василевский С.А., Янчук В.И. // Сегнетоэлектрики: Сб. науч. Тр. Мн., 1986. С. 72-76.
4. Василевский С.А., Марголин Л.Н., Янчук В.И. // Весці БДПУ. 2001 № 2. С.159-165.

С. Н. Малюченко, В. М. Добрянский

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОПТИЧЕСКОГО МАГНИТНОГО ПЕРЕХОДА В АРСЕНИДЕ МАРГАНЦА

В последнее время в связи с разработкой магнитных полупроводниковых приборов на основе пленочных структур, включающих ферромагнитный слой арсенида марганца и полупроводниковые слои арсенида индия и галлия [1], особый интерес представляет обнаруженное ранее явление оптического магнитного перехода в арсениде марганца [24]. Для понимания природы и механизма явления оптического магнитного перехода важно исследовать его динамические характеристики. Результаты этих исследований, выполненных на ферромагнитных пленках