

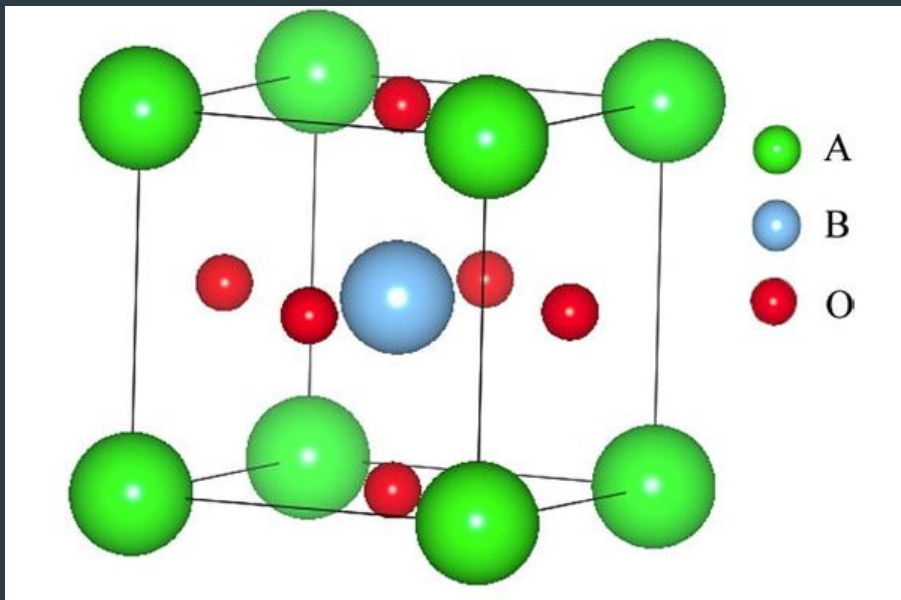
Низкочастотная релаксационная динамика $\text{Na}_{1/2}\text{V}_{1/2}\text{TiO}_3$

Королева Е.Ю., Вахрушев С.Б.

ФТИ им. А.Ф.Иоффе, Санкт-Петербург

Идеи и методы физики конденсированного состояния
г.Сочи, 11- 20 сентября 2015г.

$\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3$



A - Na или Bi
B - Ti

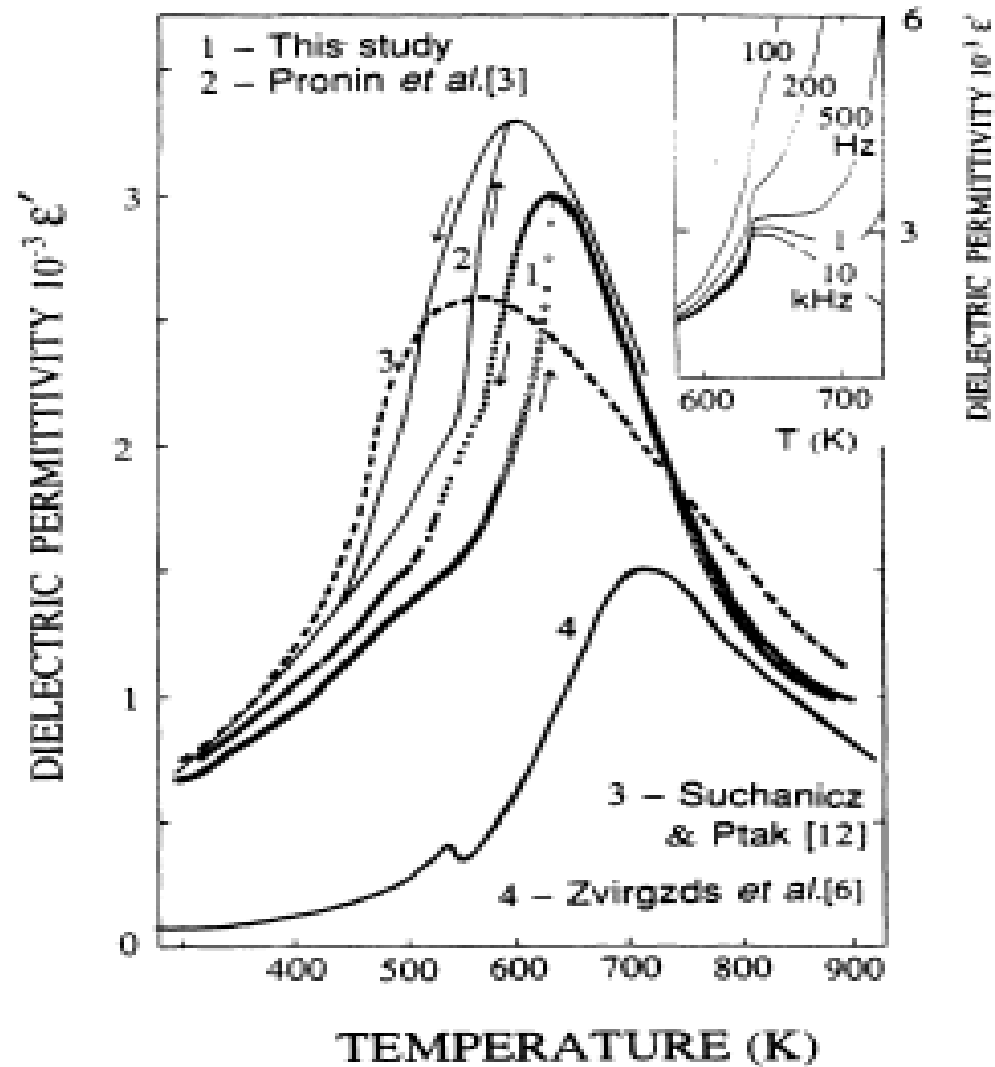
Выше 800К - кубическая фаза

~ 800К переход в тетрагональную фазу $P4bm$
 $Z=2$ с нестабильностью в M- точке $(1/2, 1/2, 0)$

~620 К появление ромбоэдрической фазы $R-3c$
с нестабильностью в R-точке $(1/2, 1/2, 1/2)$ и несоразмерной модуляции в Γ -точке вдоль тетрагональной оси

530-670 К область сосуществования двух фаз

400 К модуляция насыщается с ~6нм периодичностью, но сосуществует с ромбоэдрической фазой вплоть до криогенных температур



PHYSICAL REVIEW B

VOLUME 49, NUMBER 17

1 MAY 1994-I

Sequence of dielectric anomalies and high-temperature relaxation behavior in $\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3$

C.-S. Tu, I. G. Siny,* and V. H. Schmidt

Идеи и методы физики конденсированного состояния, г.Сочи, 11- 20 сентября 2015г.

Экспериментальное оборудование



Ультранизкополосный
диэлектрический спектрометр
с криосистемой
Novocontrol BDS80

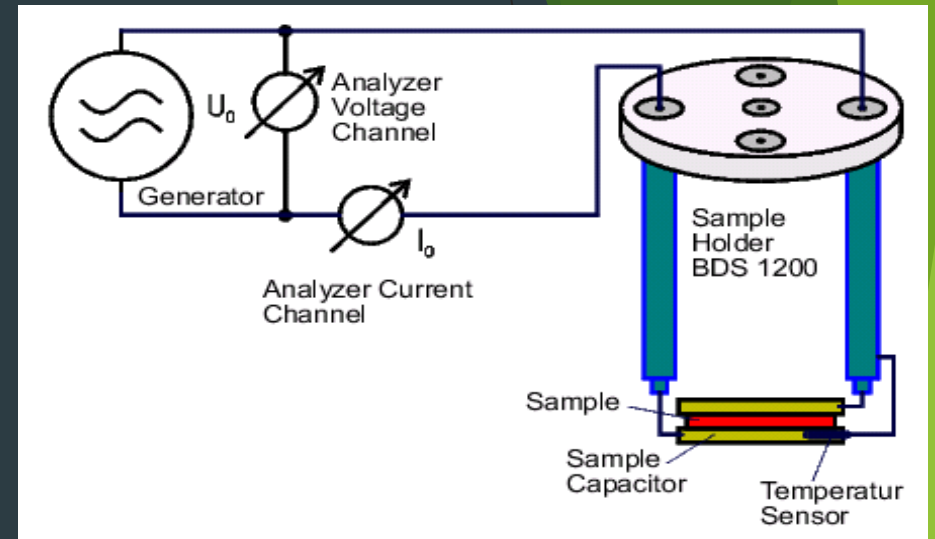


Схема электрических измерений

Параметры установки

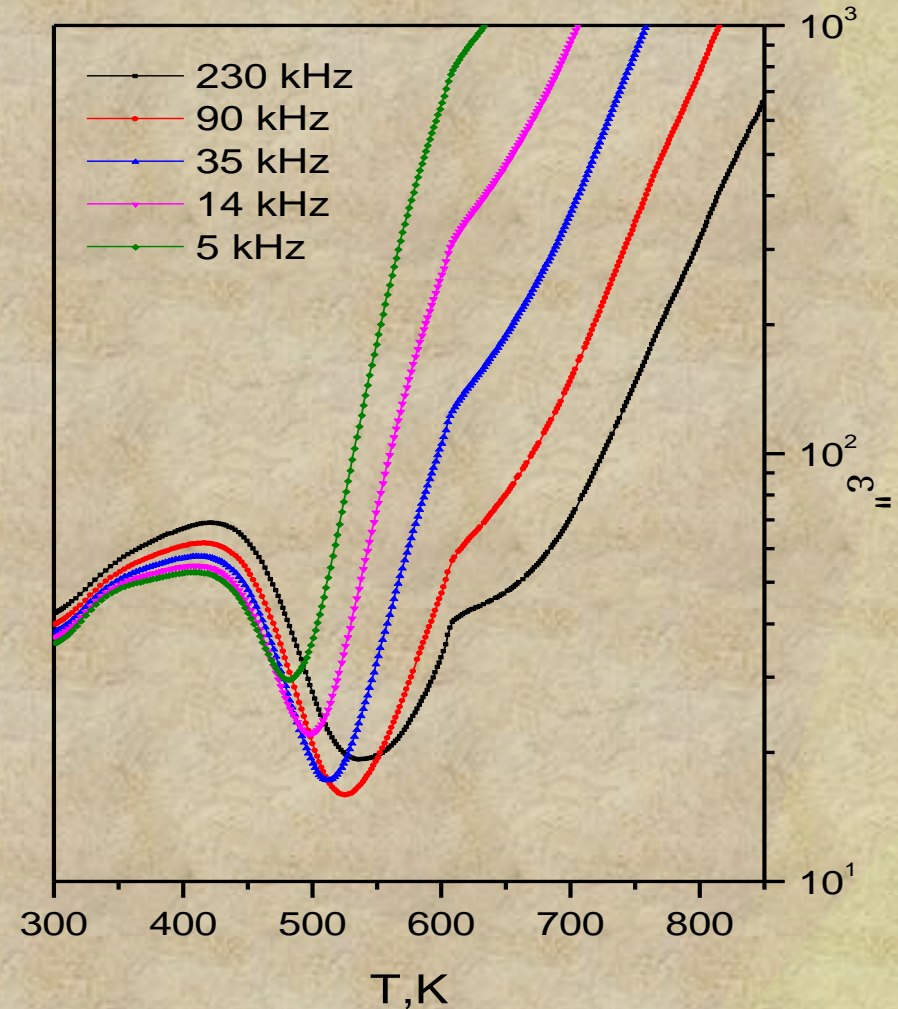
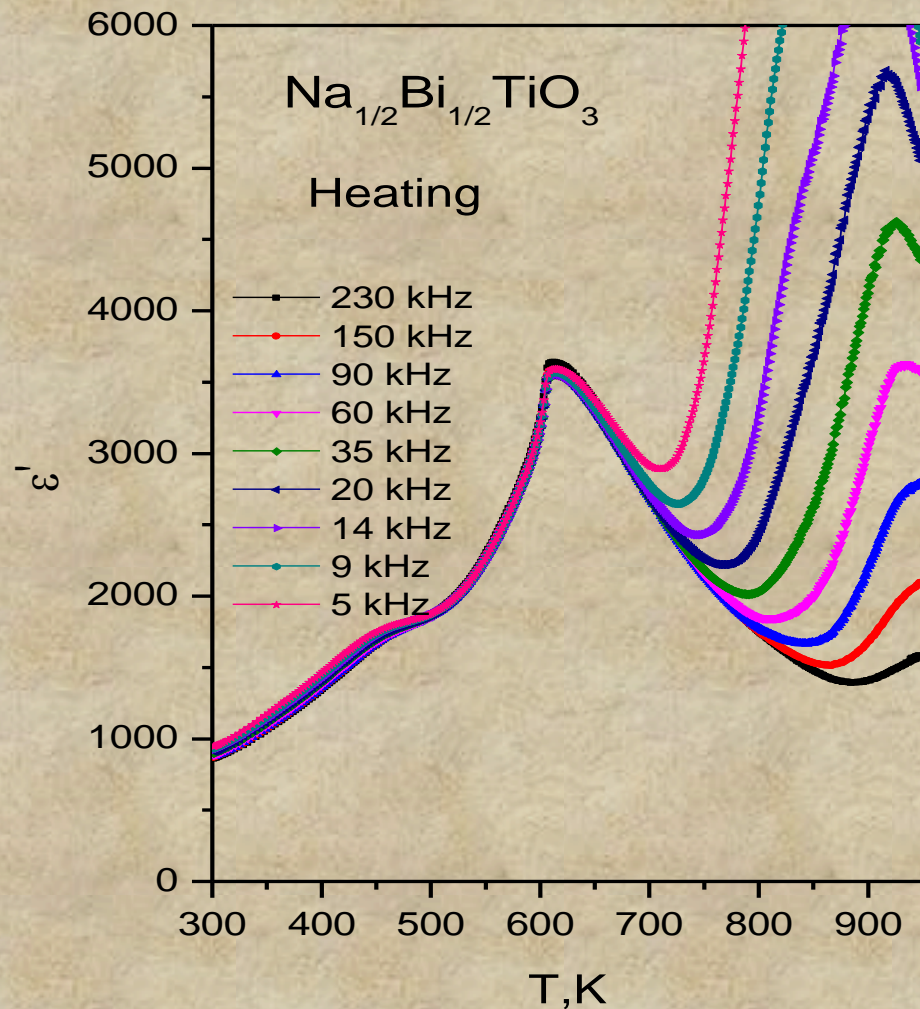
F : $10^{-6} .. 10^7$ Гц $T = 100 \div 1300$ К

Z : $0,01..10^{14}$ Ом; C : $1\text{фФ}..1\text{Ф}$;

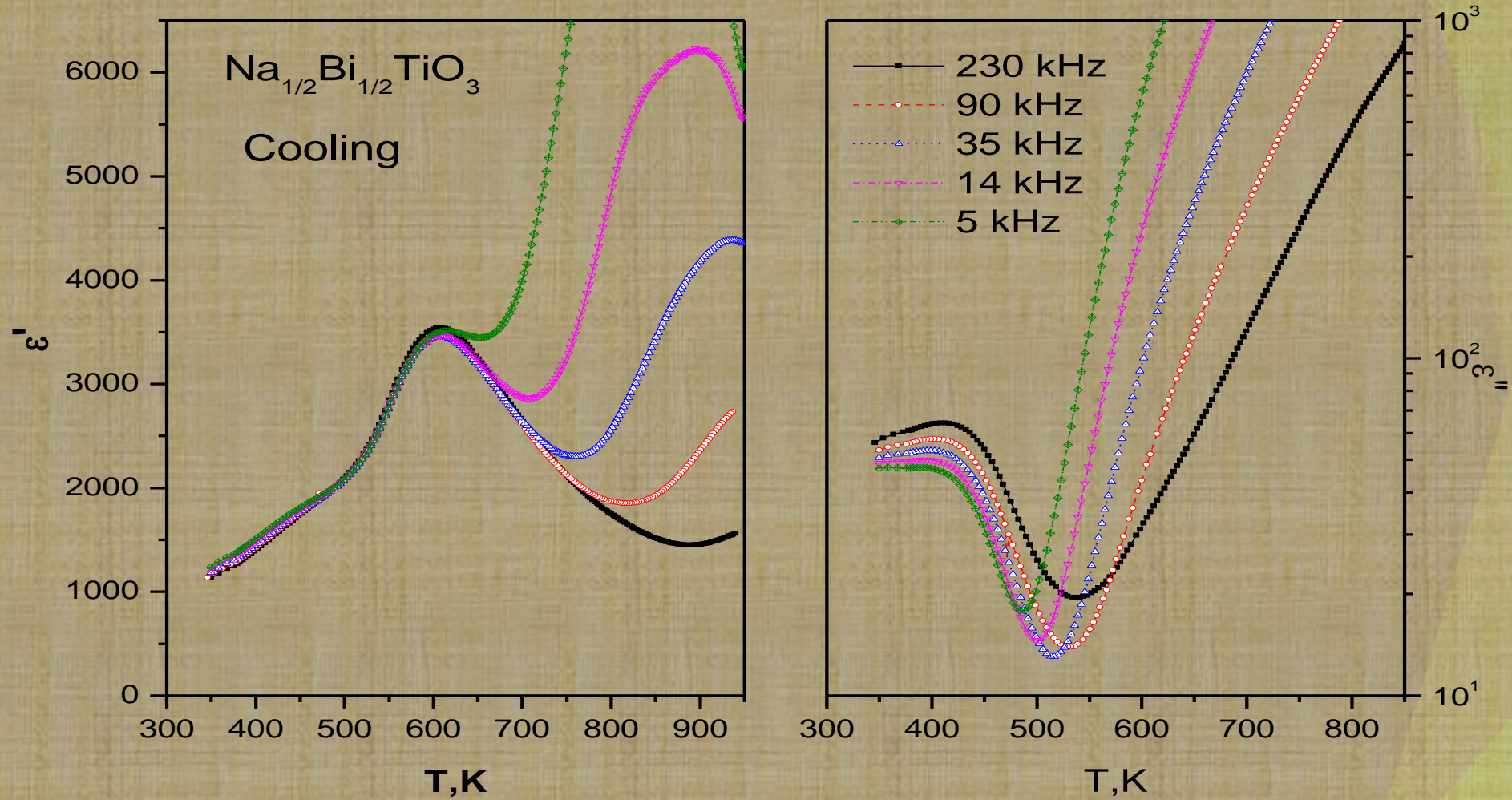
$\text{tg } \delta$: $10^{-5}..10^4$;

относительная погрешность $< 3 \cdot 10^{-5}$

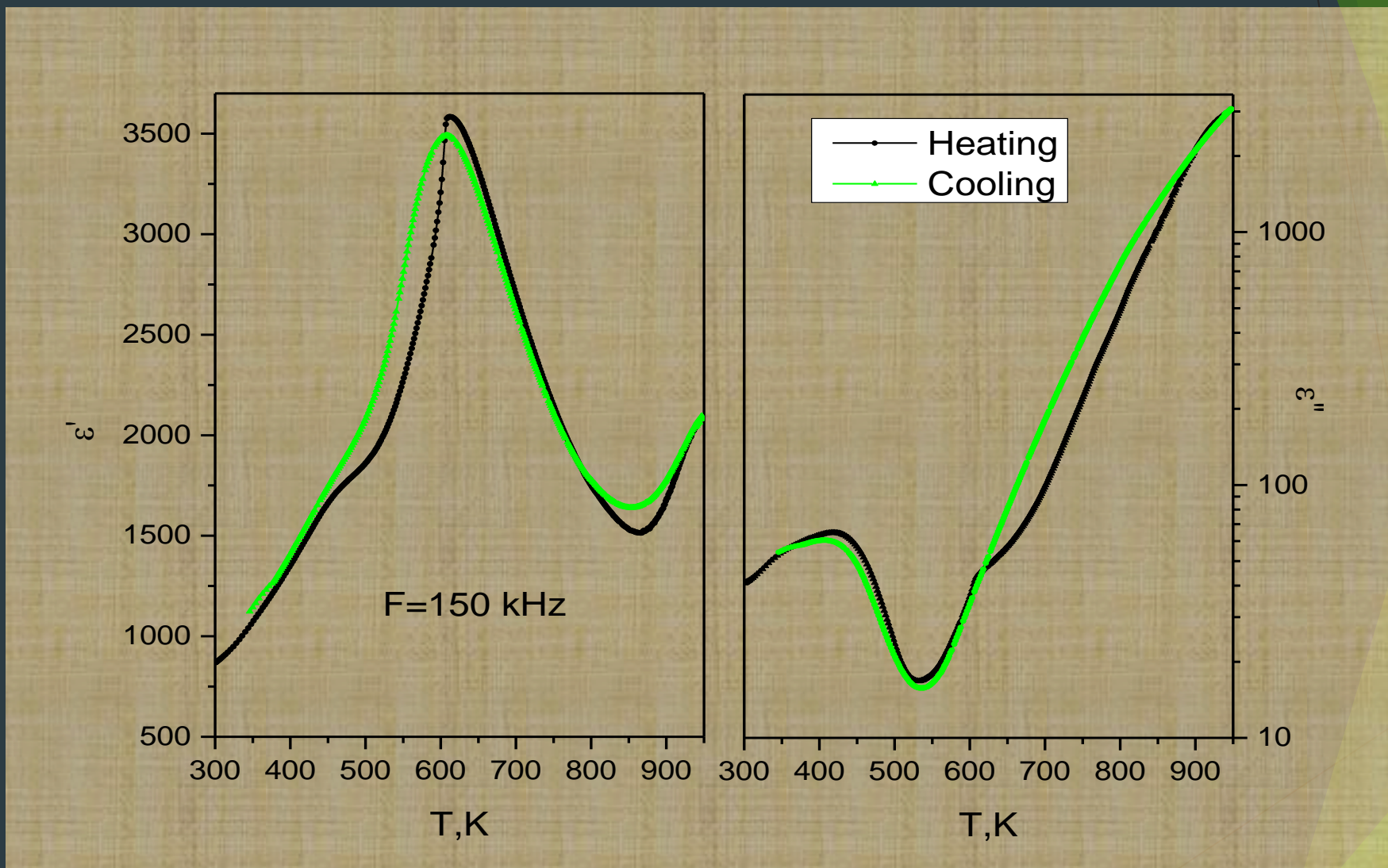
Диэлектрический отклик при нагреве



Диэлектрический отклик при охлаждении



Нагрев и охлаждение



Положение максимума на кривой $\epsilon(T)$ довольно хорошо совпадает с температурой, при которой начинается уменьшение интенсивности сверхструктурных отражений М-типа и возникают отражения R-типа.

Можно сделать предположение о том, что максимум диэлектрической проницаемости обусловлен взаимодействием поляризации и параметра порядка R-типа.

Идеи и методы физики конденсированного состояния,
г.Сочи, 11- 20 сентября 2015г.

Модельный термодинамический потенциал

$$\begin{aligned}
 F = & \frac{1}{2}A_P \sum_i P_i^2 + \frac{1}{4}B_P \sum_i P_i^4 + \frac{1}{2}B'_P \sum_{i,j} P_i^2 P_j^2 + \frac{1}{6}D_P \sum_i P_i^6 + \frac{1}{2}A_R \sum_i R_i^2 + \frac{1}{4}B_R \sum_i R_i^4 \\
 & + \frac{1}{2}B'_R \sum_{i,j} R_i^2 R_j^2 + \frac{1}{6}D_R \sum_i R_i^6 + \frac{1}{2}A_M \sum_i M_i^2 + \frac{1}{4}B_M \sum_i M_i^4 + \frac{1}{2}B'_M \sum_{i,j} M_i^2 M_j^2 + \\
 & \frac{1}{2}I_{PM} \sum_i P_i^2 M_i^2 + \frac{1}{2}J_{PM} \sum_{i,j} P_i^2 M_j^2 + \frac{1}{2}I_{PR} \sum_i P_i^2 R_i^2 + \frac{1}{2}J_{PR} \sum_{i,j} P_i^2 R_j^2 + K_{PR} \sum_{i,j} P_i P_j R_i R_j + \\
 & \frac{1}{2}I_{RM} \sum_i R_i^2 M_i^2 + \frac{1}{2}J_{RM} \sum_{i,j} R_i^2 M_j^2 + \frac{1}{2}C_{11} \sum_i \varepsilon_{ii}^2 + C_{12} \sum_{i,j} \varepsilon_{ii} \varepsilon_{jj} + \frac{1}{2}C_{44} \sum_{i,j} \varepsilon_{ij}^2 + \\
 & + g_{11} \sum_i \varepsilon_{ii} P_i^2 + g_{12} \sum_{i,j} \varepsilon_{ii} P_j^2 + g_{44} \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} P_i P_j + h_{11} \sum_i \varepsilon_{ii} M_i^2 + h_{12} \sum_{i,j} \varepsilon_{ii} M_j^2 + \\
 & + f_{11} \sum_i \varepsilon_{ii} R_i^2 + f_{12} \sum_{i,j} \varepsilon_{ii} R_j^2 + f_{44} \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} R_i R_j
 \end{aligned}$$

Расшифровка структуры NBT

I. $T > 820 \text{ K}$ O'_h - кубическая фаза

$$M_i = 0, R_i = 0, P_i = 0$$

II. $570 \text{ K} < T < 820 \text{ K}$ - при нагреве $470 \text{ K} < T < 820 \text{ K}$ - при охлаждении

$P4/m\bar{3}m$ тетрагональная фаза

$$M_1 = M_2 = 0, M_3 \neq 0, R_i = 0, P_i = 0$$

III. $450 \text{ K} < T < 610 \text{ K}$ $R-3C$ - ромбоэдрическая неполярная

$$M_i = 0, P_i = 0, R_i = R \neq 0$$

III'. $T < 450 \text{ K}$ $R3C$ - ромбоэдрическая сегнетоэлектрическая

$$M_i = 0, P_i = P \neq 0$$

Расчетные диэлектрические проницаемости

$$\varepsilon_{ij} \approx \chi_{ij} \quad \chi_{ij}^{-1} = \frac{\partial^2 F}{\partial P_i \partial P_j} \quad A_P = \alpha_P (T - T_P) \quad A_R = \alpha_R (T - T_R)$$

Кубическая фаза

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon \delta_{ij} = \frac{1}{\alpha_P (T - T_p)} \quad A_M = \alpha_M (T - T_M)$$

Тетрагональная фаза

$$\varepsilon_{ZZ} = \frac{1}{\alpha_P (T - T_p) + I_{PM} M^2} \quad \varepsilon_{XX} = \varepsilon_{YY} = \frac{1}{\alpha_P (T - T_p) + J_{PM} M^2} \quad \varepsilon_T = \frac{1}{3} (\varepsilon_{ZZ} + 2\varepsilon_{XX})$$

Ромбоэдрическая неполярная фаза

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{1}{\alpha_P (T - T_p) + R^2 (I_{PR} + 2J_{PR} + 2K_{PR})} \quad \varepsilon_{\perp} = \frac{1}{\alpha_P (T - T_p) + R^2 (I_{PR} + 2J_{PR} - K_{PR})}$$

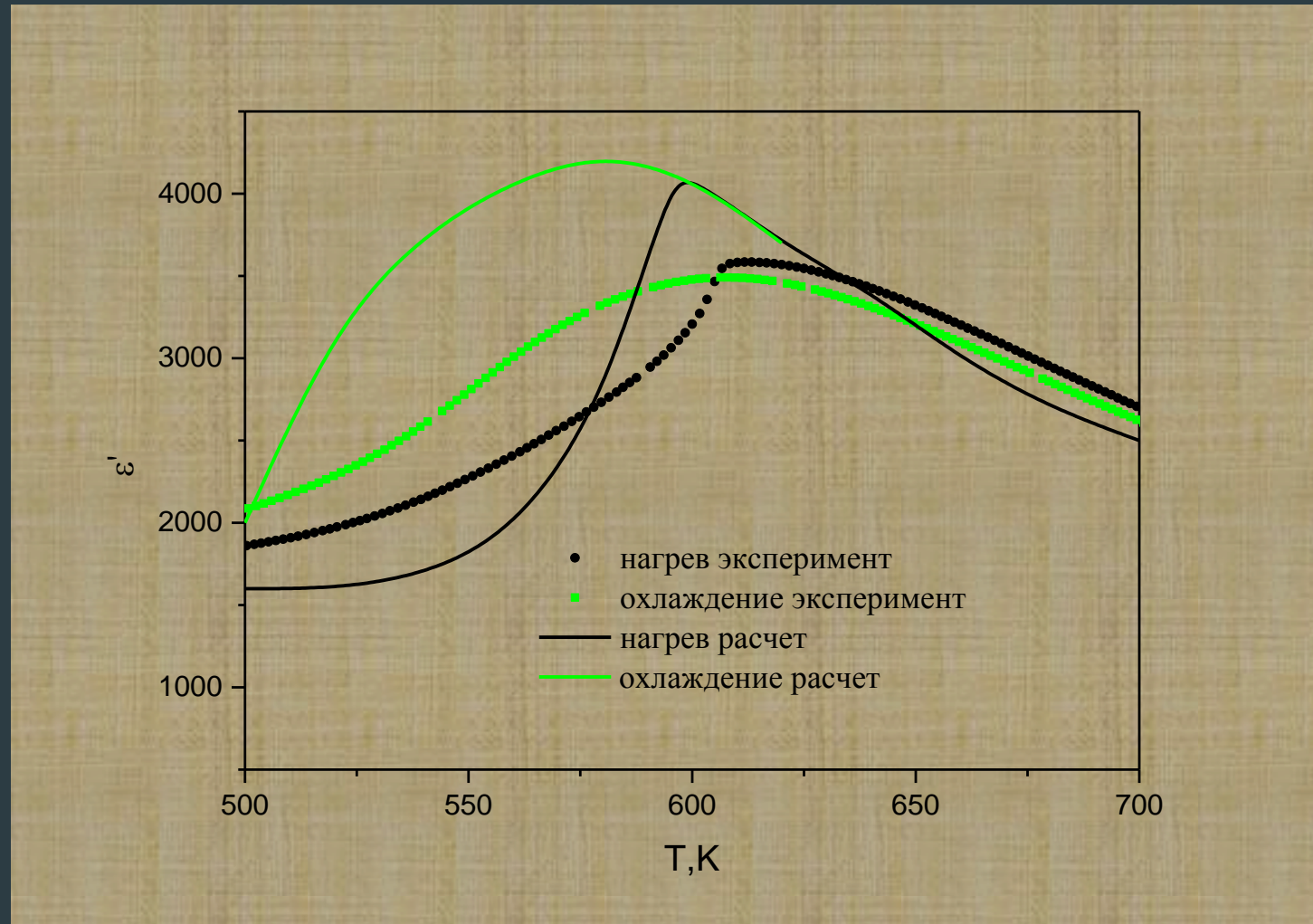
$$\varepsilon_R = \frac{1}{3} (\varepsilon_{\parallel} + 2\varepsilon_{\perp})$$

$$\varepsilon_{ДФ} = C_T \varepsilon_T + (1 - C_T) \varepsilon_R$$

Оценка температурных зависимостей C_T , R^2 и M^2 была сделана на основании данных по рассеянию нейтронов из подгонки температурных зависимостей интенсивностей сверхструктурных отражений .

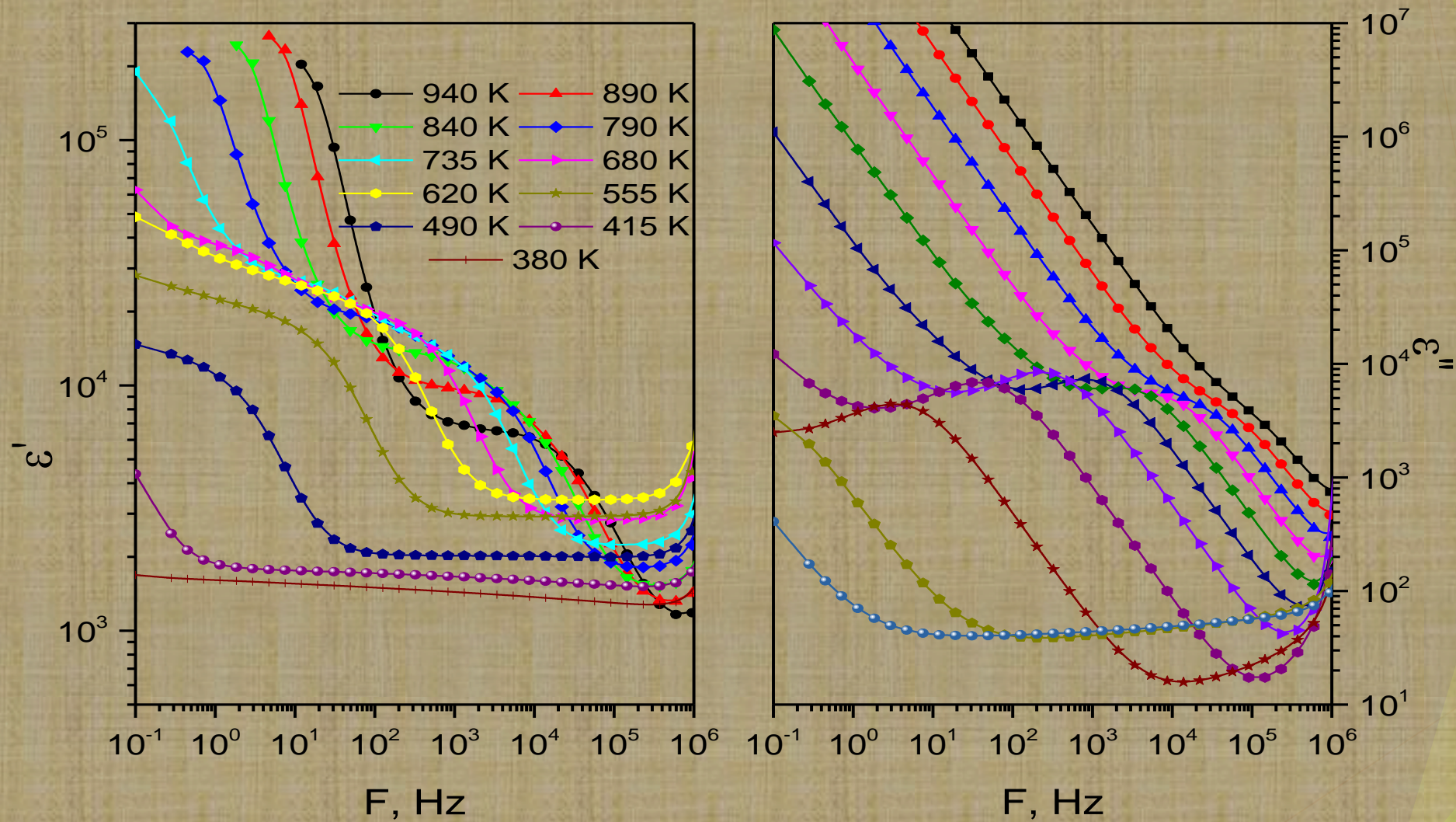
Из полученных зависимостей вычислялась температурная зависимость диэлектрической проницаемости в двухфазной области.

Экспериментальная и расчетная температурные зависимости диэлектрической проницаемости кристалла NBT



$$I_{PM} = J_{PM}, K_{PR} = 0, I_{PR} = J_{PR}$$
$$T_c = 490 \text{ K}$$
$$1/\alpha_P = 5,44 \cdot 10^5$$
$$I_{PM} = 25 \cdot \alpha_P$$
$$I_{PR} = 167 \cdot \alpha_P$$

Дисперсионные зависимости



Модельный спектр

$$\varepsilon^* = \frac{i\sigma}{\varepsilon_0\omega} + \sum_i \frac{\Delta\varepsilon_i}{(1 + (i\omega\tau_i)^{\alpha_i})} + \varepsilon_\infty$$

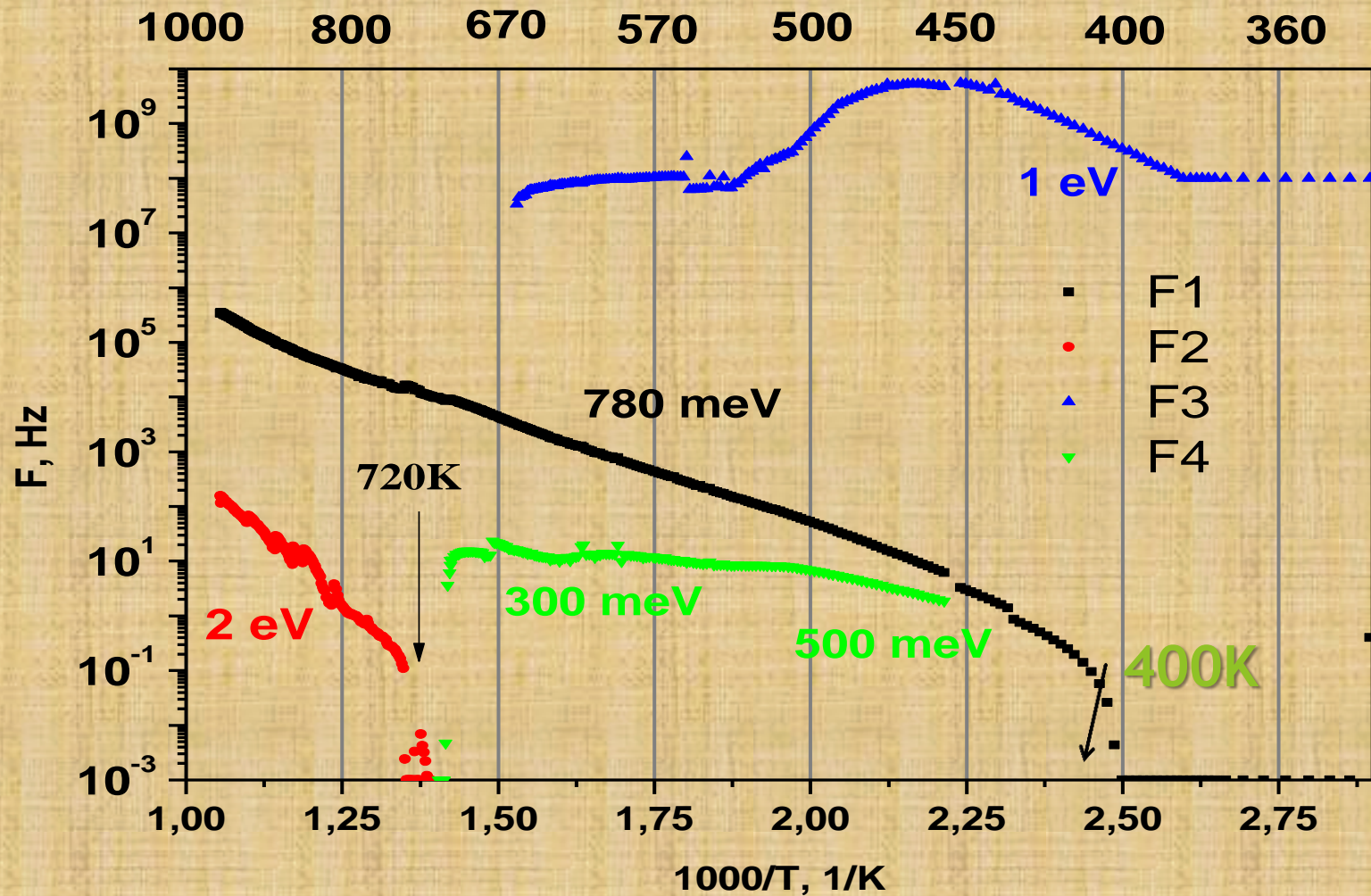
σ - DC- проводимость

ε_∞ - высокочастотная восприимчивость

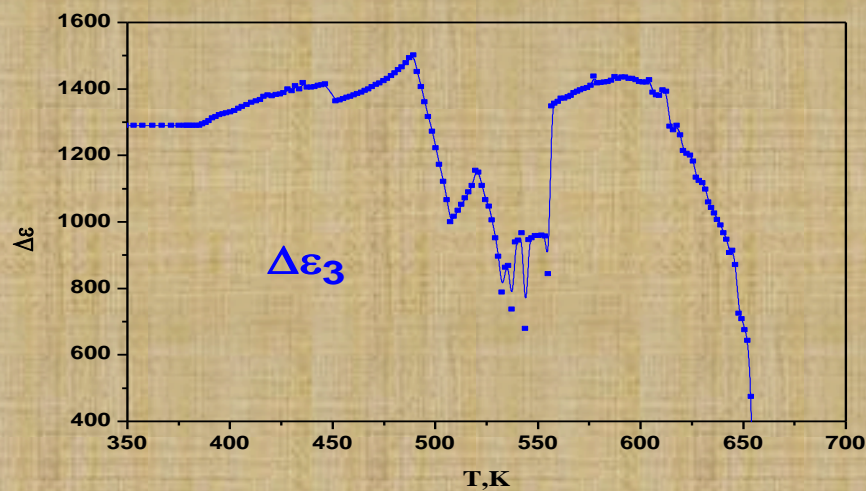
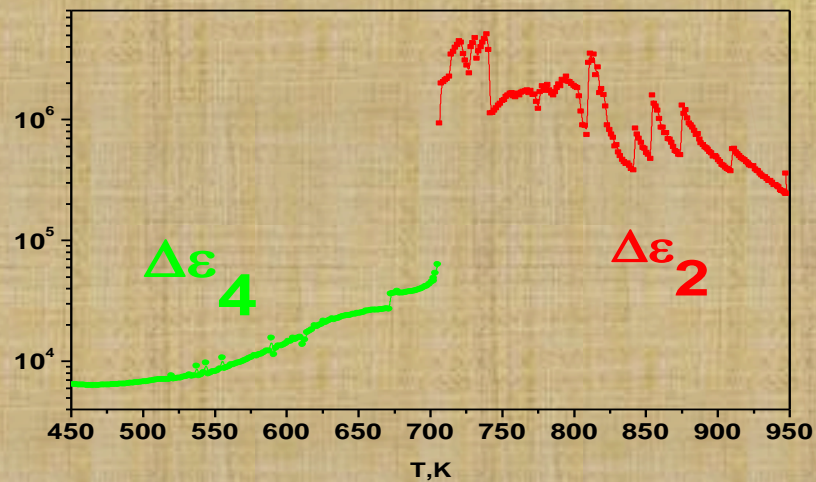
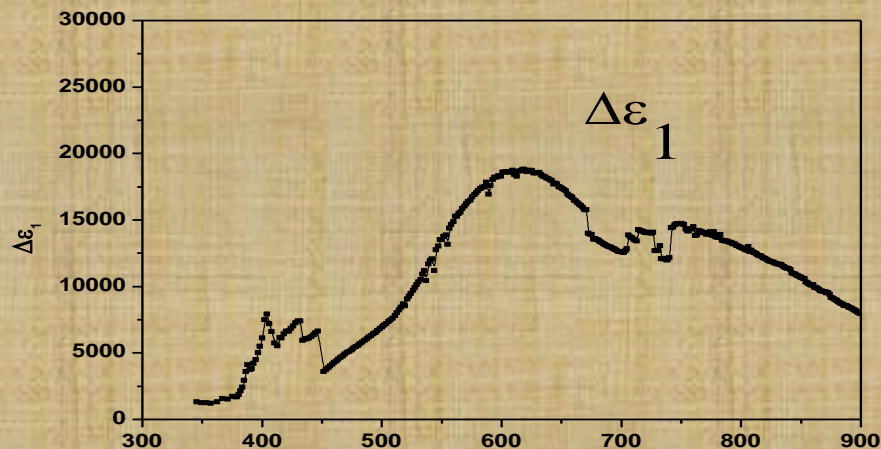
$$\frac{\Delta\varepsilon}{(1 + (i\omega\tau)^\alpha)}$$

- Релаксационные вклады, α - уширение спектра по сравнению с Дебаевским

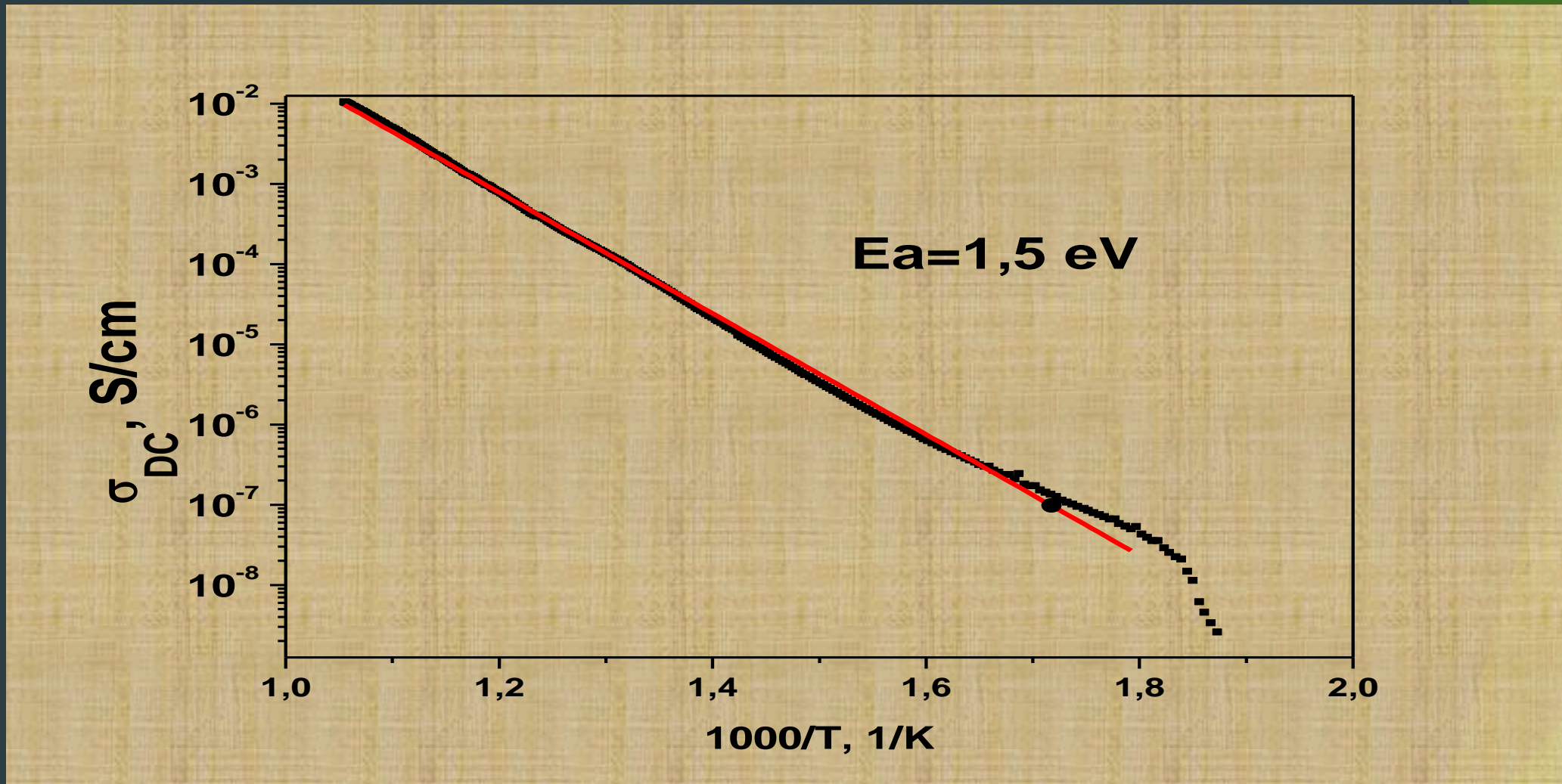
Характерные частоты релаксации



Диэлектрические силы процессов



DC - проводимость



ВЫВОДЫ:

Максимум температурной зависимости диэлектрической проницаемости NBT при 600К является «несобственным» и может быть объяснен наличием взаимодействия между поляризацией и R-параметром порядка.

Рассчитанная из нейтронных данных температурная зависимость ϵ в двухфазной области достаточно хорошо описывает наблюдаемую экспериментальную зависимость.

Анализ низкочастотных диэлектрических спектров в рамках феноменологических моделей выявил четыре релаксационных процесса. Никаких особенностей вблизи 600 К также не наблюдается.

При температуре ниже 400К в системе наблюдается фризинг.