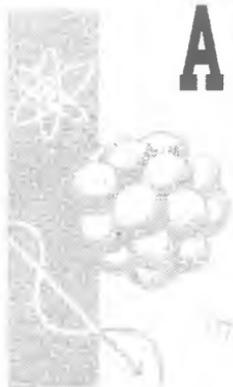


# АКТУАЛЬНЫЯ ПРАБЛЕМЫ

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  $\angle$ - $\alpha$  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  $\angle$ - $\alpha$  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  $\vec{P}_F$ ;  $\varphi$  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 (С Н);  $\alpha$  коэффициент упругости валентного угла связи (С – Н).

Из (6) можно выразить величину деформации  $\Delta l$  связи (С – Н) 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., Януть В.И. // Сегнетоэлектрики: Сб. науч. Тр. Мн., 1986. С. 72-76.
4. Василевский С.А., Марголин Л.Н., Януть 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