

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ФІЗИКА, ЕЛЕКТРОНІКА,
ЕЛЕКТРОТЕХНІКА

ФЕЕ: 2016

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 18–22 квітня 2016 року)



Суми
Сумський державний університет
2016

Дослідження домішкових кристалів літію амонію сульфатуШамшин О.П., *доцент*

Національна академія Національної гвардії України, м. Харків

Відомо, що кристали літію амонію сульфату (ЛАС) LiNH_4SO_4 у фазі II, яка являє собою неправильну похідну структури тридиміту (SiO_2), із шестичленими кільцями, що чергуються, SO_4 і LiO_4 – тетрадрів, перпендикулярних псевдогексагональній осі a , можуть утворювати неперервний ряд твердих розчинів при ізоморфному заміщенні одного катіона іншим. Введення навіть невеликої кількості домішки суттєво змінює властивості ЛАС: збільшується константа Кюри-Вейса, змінюється величина спонтанної поляризації і вид її температурної залежності, змінюється температура переходу, при досягненні певних концентрацій фазові переходи (ФП) в змішаних кристалах не спостерігалися.

Використовуючи метод локальних нормальних координат у наближенні віртуального кристалу, придбана залежність температури переходу від концентрації домішок:

$$T_c = T_c^0 \cdot s(p) \cdot [1 + p \cdot (\gamma - 1)] / [1 + p(\chi - 1)], \quad (1)$$

де $T_c^0 = f_0^{11} A_1 / 9B_1$ - температура переходу в ідеальній системі при $p = 0$, A_1 , A_2 , B_1 – параметри термодинамічного потенціалу, $s(p)$ - силова стала, p - концентрація домішок, і параметри γ і χ - визначаються відношенням параметрів одно частинних потенціалів основної ґратки і дефектів. Зменшення чи збільшення температури переходу залежить від того чи має дефектна ґратка більш мілкий або більш глибокий одно частинний потенціал в зрівнянні з потенціалом основної ґратки. У граничному випадку жорстких дефектів ($A_2 < 0$), що стабілізують високосиметричну фазу, ФП при певній концентрації зовсім зникає.

В роботі проведений розрахунок параметрів $s(p)$, γ , χ і знайдено теоретичні залежності для домішкових кристалів ЛАС у випадку заміщення як катіонного так і аніонного комплексу: $\text{Me}_x\text{NH}_4\text{SO}_4 - \text{Li}_{1-x}\text{NH}_4\text{SO}_4$, де $\text{Me} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$, і $[\text{LiNH}_4\text{SO}_4]_{1-x} - [\text{LiNH}_4\text{SeO}_4]_x$. Придбані теоретичні залежності порівнюються з експериментальними даними для цих кристалів.