

ПОЛИМОРФНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В BiFeO_3 *М.В. Ярмолич, А.М. Панасевич, 4 курс**Е.И. Котова, 3 курс**Научный руководитель – И.И. Макоед, к.физ.-мат.н, доцент
Брестский государственный университет имени А.С. Пушкина*

Физика сегнетоэлектриков и родственных материалов в настоящее время является одним из ведущих разделов физики твердого тела. Это связано, с одной стороны, с фундаментальным характером физических идей, возникающих при изучении сегнетоэлектричества, многогранностью и общностью проблем и путей их решения, и, с другой стороны, – быстро растущим практическим применением сегнетоэлектриков. В последние годы центр тяжести исследований, проводимых в физике твердого тела, в том числе в физике сегнетоэлектриков, все более смещается от изучения свойств идеальных кристаллов к изучению физики явлений в системах, обладающих структурным беспорядком. В частности, в сегнетоэлектрических кристаллах структурный беспорядок связан, прежде всего, с доменными и межфазными границами, являющимися двумерными дефектами кристаллической решетки.

Особый класс материалов, обладающих одновременно сегнетоэлектрическим и магнитным упорядочением, представляют мультиферроики на основе феррита висмута. Долгое время исследование мультиферроиков представляло теоретический интерес, что объясняется сравнительно

небольшими величинами магнитоэлектрических эффектов, наблюдаемых в объемных образцах при низких температурах. Однако в последнее время получены тонкопленочные материалы с гигантским магнитоэлектрическим эффектом при комнатных температурах.

Отличительной чертой феррита висмута является наличие ряда его структурных модификаций, обладающих разнообразными физическими свойствами. Явление кристаллизации одного и того же соединения в нескольких структурных формах, в зависимости от условий синтеза, носит название полиморфизма. Полиморфизм – одно из основных свойств кристаллического вещества, выражающееся в приспособлении его структуры к изменяющимся условиям окружающей среды. Различные полиморфные модификации одного и того же соединения имеют одинаковый химический состав, а следовательно, и схожие химические свойства. В то время же время, физические свойства, зависящие от расположения атомов в структуре, могут сильно различаться.

Среди сегнетомагнитных материалов семейства перовскитов, в которых наблюдают полиморфные превращения, одним из самых привлекательных с точки зрения практического применения, является феррит висмута, для которого получены убедительные экспериментальные доказательства наличия сегнетоэлектрических и магнитных свойств. Данное соединение, благодаря относительно простой химической и кристаллической структуре, интересно как модельный объект для исследования из первых принципов. Целью работы является изучение полиморфных превращений в феррите висмута.

Структурные состояния оксидов со структурой перовскита обладают большой чувствительностью к качеству и количеству разного рода дефектов, в том числе к нарушениям стехиометрии. Варьирование структурного беспорядка в масштабах элементарной ячейки, кристаллитов и, наконец, в объеме поликристалла в целом, приводит к значительному изменению физических свойств. В силу особенностей синтеза BiFeO_3 может иметь различную пространственную структуру: кубическую, ромбоэдрическую, тетрагональную, орторомбическую, гексагональную [1, 2]. При получении тонкопленочных образцов обнаруживают структурное разнообразие, в зависимости от типа подложки, её ориентации, процесса осаждения пленки.

Стабильность кристаллической структуры относительно изменения внешних условий определяется степенью соответствия кристаллохимических параметров компонент вещества. Для структурной устойчивости ионных кристаллов определяющими факторами являются размеры и степень окисления ионов. Обычно в качестве критерия, определяющего стабильность перовскитной структуры, используют фактор толерантности $t = (r_A + r_O) / (\sqrt{2}(r_B + r_O))$, где величины r_A , r_B и r_O – радиусы ионов А, В и О. Чем более близко его значение к единице, тем более устойчивым является соединение. Отклонение значения t в ту или иную сторону (больше или меньше единицы), указывает на возможность реализации в соединении особых физических свойств, определяемых неустойчивостью структуры: сегнетоэлектричество, фазовые переходы.

С использованием программы SPuDS [3] теоретически исследованы структурные особенности перовскитов-мультиферроиков, синтезированных на основе феррита висмута, допированного редкоземельными элементами. Изучена структурная устойчивость кристаллов, оценены факторы, определяющие стабильность кристаллических решеток. Рассчитаны глобальные индексы неустойчивости (GI – global instability index) исследуемых структур. На основании полученных результатов рассчитаны рентгенограммы кристаллов с использованием программ GSAS, PowderCell, Endeavour, которые позволяют восстанавливать структуру вещества на основе порошковой дифрактограммы путем нахождения и машинной оптимизации разности между расчетной и эмпирической порошковыми дифрактограммами.

Список использованных источников

1. Tütüncü, H. M. Electronic structure and lattice dynamical properties of different tetragonal phases of BiFeO_3 / H. M. Tütüncü, G. P. Srivastava // Phys. Rev. – 2008. – В.78. – P. 235209-1 – 235209-10.
2. Wang, J. Epitaxial BiFeO_3 multiferroic thin film heterostructure / J. Wang, H. Zheng, J. Nagarajan // – Science.: 2003. – 299 с.
3. Lufaso, M.W. The Prediction of the Crystal Structures of Perovskites Using the Software Program SPuDS / M.W. Lufaso, P.M. Woodward // Acta Cryst. – 2001. – Vol. B57, – P. 725–738.