

## ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПАРАМЕТРОВ РЕШЕТКИ $Ba_{1-x}Ce_xTiO_3$

Брайловский В.В.

Черновицкий национальный университет

58000, г. Черновцы, ул. Коцюбинского 2, кафедра радиотехники.

Исследование структуры образцов системы твердых растворов  $Ba_{1-x}Ce_xTiO_3$  производилось в  $CuK_{\alpha}$  излучении.

Температурная зависимость параметров решетки титанита бария синтезированного на воздухе, рис.1, кривая 1, с достаточной степенью точности совпадает с данными исследований многих авторов. Отличие состоит лишь в величине температуры при которой наблюдается фазовый переход. По данным некоторых авторов температура перехода составляет 386 К, а согласно других – 392 К. В нашем случае переход наблюдается при 410 К. Такое отличие величины температуры сегнетоэлектрического фазового перехода может быть обусловлено в первую очередь чистотой исходного материала, однако не исключено и влияние технологии изготовления образцов.

Увеличение концентрации церия приводит к снижению температуры перехода от 410 К до 383 К соответственно для образцов  $BaTiO_3$  и  $Ba_{0,995}Ce_{0,005}TiO_3$  синтезированных на воздухе с последующим медленным охлаждением. Обращает на себя внимание отклонение от монотонности концентрационной зависимости параметров кубической решетки, степени тетрагональности исследуемой системы. На рис.2 приведены температурные зависимости постоянной решетки кубической модификации образцов системы  $Ba_{1-x}Ce_xTiO_3$  синтезированных на воздухе с последующим медленным охлаждением. При малых концентрациях церия постоянная решетки уменьшается, кривые 1 и 2 рис.2, а потом увеличивается, кривые 3,4. Такая экстремальная концентрационная зависимость может быть обусловлена изменением типа твердого раствора. При малых концентрациях ион бария (ионный радиус 1,43 Å) замещается ионом церия (ионный радиус 1,18 Å). Дальнейшее

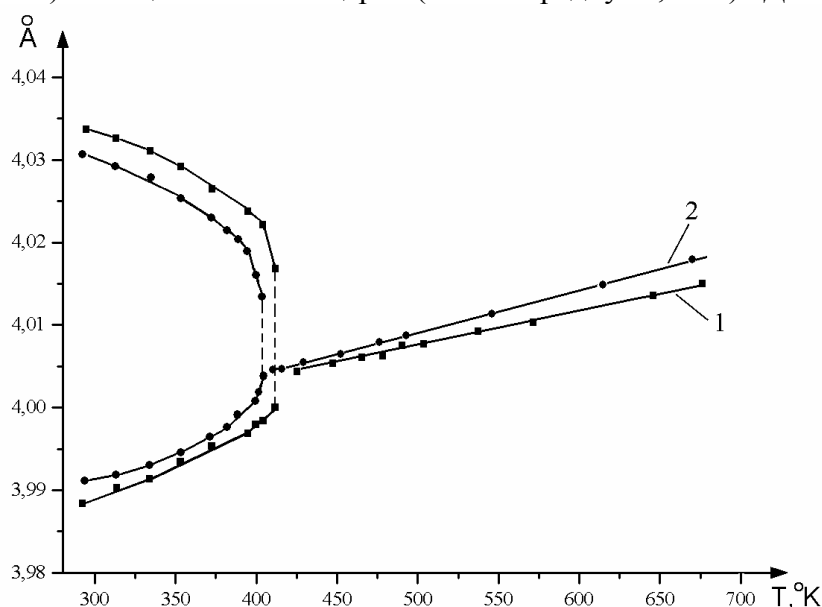


Рис.1. Температурная зависимость параметров решетки образцов  $Ba_{1-x}Ce_xTiO_3$  синтезированных на воздухе с последующим медленным охлаждением: 1-X=0; 2 – 0,003

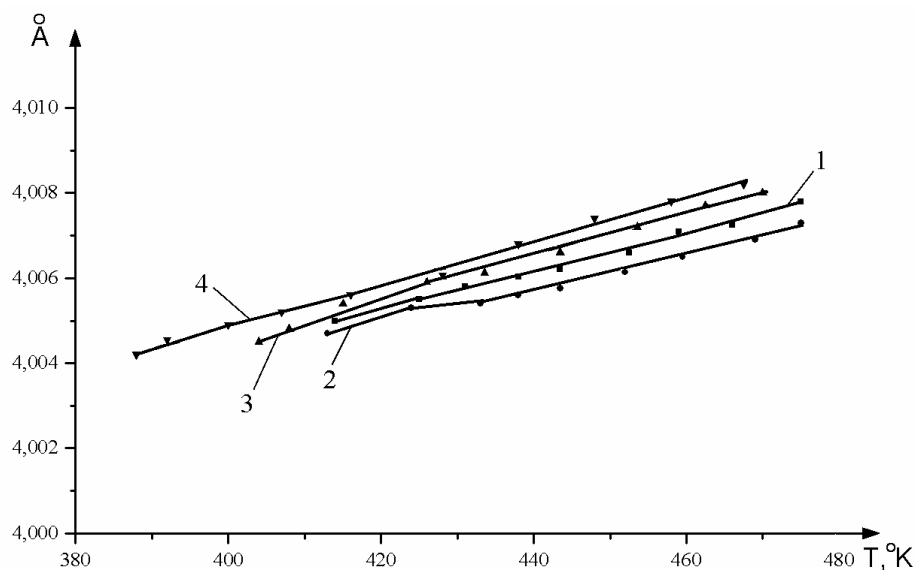


Рис.2. Температурная зависимость постоянной решетки кубической модификации образцов  $Ba_{1-x}Ce_xTiO_3$  синтезированных на воздухе с последующим медленным охлаждением: 1- $X=0$ : 2 – 0,002: 3 – 0,003: 4 – 0,005

увеличение концентрации церия приводит к изменению типа твердого раствора от замещения к твердому раствору внедрения. Это предположение в значительной мере подтверждает предположение о механизме экстремальной концентрационной зависимости электропроводности, заключающемся в изменении типа твердого раствора.

Приведенные на рис.2 температурные зависимости параметра решетки свидетельствуют, что превращения тетрагональной модификации в кубическую происходит не непосредственно, а через некоторую неустойчивую кубическую модификацию, обладающую значительной нелинейностью температурной зависимости параметров решетки. Рядом авторов отмечалось наличие нелинейности температурной зависимости параметров ячейки  $BaTiO_3$  именно в указанной области температур  $T_c \div T_c + 40$  К. Здесь же есть данные подтверждающие наличие искажений структуры при температурах даже на 70 и более градусов превышающих температуру перехода. Авторы объясняют наблюдаемые явления флуктуационными нарушениями структуры динамического характера, образованием “кластеров” с отличной от нуля поляризацией в кубической фазе.

Сравнение кривых температурной зависимости теплоемкости, теплового расширения и параметров решетки свидетельствуют о достаточно хорошем совпадении температур появления дополнительной высокотемпературной теплоемкости  $C$  в первом, изменения величины теплового расширения  $\alpha$  неполярной фазы во втором случае и температуры линеаризации температурной зависимости параметров решетки  $a$  в третьем. Известно, что первые две величины  $C$ ,  $\alpha$  взаимосвязаны и эта зависимость описывается уравнением Грюнайзена. Поэтому правильно предположить, что наблюдаемые аномалии температурного хода  $C$ ,  $\alpha$  и  $a$  следует обусловить единым механизмом доупорядочения структуры образца претерпевшего фазовый переход. Утверждение о том, что происходит именно доупорядочение, а не прекращение возникновения флуктуационных “кластеров” подтверждается тем, что указанная аномалия не наблюдается при дилатометрических измерениях проводимых в режимах охлаждения. В то же время она не исчезает после достаточно длительной выдержки при промежуточных температурах меньших температуры перехода  $K'-K$ , но больших температуры тетрагонально кубического фазового  $T-K'$  перехода.