

ТЕОРЕТИКО-ГРУППОВОЙ ДИЗАЙН НОВЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ СО СТРУКТУРОЙ ПИРОХЛОРА

Таланов М.В.

*НИИ физики Южного федерального университета
344090 Ростов-на-Дону, Стачки 194, ЮФУ*

Создание сегнетоэлектриков – материалов с переключаемой электрическим полем поляризацией, стало одним из ключевых направлений в науках о материалах на протяжении большей части XX века. Сегнетоэлектрики со структурой пироклора отличаются относительно высокими значениями диэлектрической проницаемости и низкими диэлектрическими потерями, что делает их перспективной основой для создания конденсаторных материалов¹⁻³. Целью настоящего исследования стало установление всех возможных низкосимметричных фаз собственных и несобственных сегнетоэлектриков, образующихся из фазы-архетипа со структурой кубического пироклора в результате реальных или виртуальных фазовых переходов.

Показана возможность существования шести фаз собственных сегнетоэлектриков и 16 фаз несобственных сегнетоэлектриков. Для всех низкосимметричных фаз определены все несобственные параметры порядка, пространственные группы, увеличение объема и трансляции примитивных ячеек, расщепление позиций Уайкоффа исходной кубической фазы пироклора и вид смешанных инвариантов (для несобственных сегнетоэлектриков) в термодинамическом потенциале. Оценен вклад собственных и несобственных параметров порядка в величины атомных смещений известных сегнетоэлектриков со структурой пироклора, в частности $\text{Cd}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$. Полученные в работе результаты могут быть использованы в комбинации с расчетами из первых принципов для дизайна новых функциональных материалов со структурой пироклора для нужд электронной промышленности.

Литература

1. Weller M.T., Hughes R.W., Rooke J., Knee C.S., Reading J. Dalton. Trans., 2004, 19, 3032.
2. Исупов В. А. ЖТФ, 1997, 67, 47.
3. Giampaoli G., Siritanon T., Day B., Li J., Subramanian M.A. Prog. Solid State Ch., 2018, 50, 16.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-72-00030)