

1. Cherepy N. J. Strontium and Barium Iodide High Light Yield Scintillators / N. J. Cherepy, G. Hull, A. D. Drobshoff et al. // Appl. Phys. Lett. — 2008. — V. 92. — P. 083508. 2. Cherepy N. J. Scintillators With Potential to Supersede Lanthanum Bromide / N. J. Cherepy, S. A Payne, S. J. Asztalos et al. // IEEE Transactions on Nuclear Science. — 2009. — V. 56. — P. 873–880. 3. Globus M. Inorganic Scintillators for Modern and Traditional Applications. Institute for Single Crystals / M. Globus, B. Grinov, J. K. Kim — X., 2005. 4. Loef van E. V. Crystal Growth and Scintillation Properties of Strontium Iodide Scintillators / E. V. van Loef, C. M. Wilson, N. J. Cherepy et al. // IEEE Transactions on Nuclear Science. — 2009. — V. 56. — P. 869–872. 5. Urusovskaya A. A. Influence of Impurities on the Mechanical Properties of CsI Crystals / A. A. Urusovskaya, N. L. Sizova, I. A. Rachkov et al. // Phys. Stat. Sol. (a). — 1977. — V. 41. — P. 443–450.

## ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ CsI-BaCl<sub>2</sub>-Eu

*Для системы CsI-BaCl<sub>2</sub>(1%)-EuCl<sub>3</sub>(0.02%) показано возможность формирования микрокристаллов BaCl<sub>2</sub>-Eu диспергированных в матрице CsI. Исследуются спектрально-люминесцентные свойства кристаллов CsI-Eu(0,1%), BaCl<sub>2</sub>-Eu(0,1%) и CsI-BaCl<sub>2</sub>(1%)-EuCl<sub>3</sub>(0,02%) при возбуждении квантами синхротронного излучения.*

## LUMINESCENCE OF CsI-BaCl<sub>2</sub>-Eu CRYSTALLINE SYSTEM

*The formation of the BaCl<sub>2</sub>-Eu microcrystals embedded in CsI host has been demonstrated for CsI-BaCl<sub>2</sub>(1 mol.%) -EuCl<sub>3</sub>(0,02 mol.%) composition. The spectral-luminescent properties of CsI-Eu(0,1 mol.%), BaCl<sub>2</sub>-Eu(0,1 mol.%) and CsI-BaCl<sub>2</sub>(1 mol.%) -EuCl<sub>3</sub>(0,02 mol.%) crystals have been studied upon the synchrotron radiation.*

*Стаття надійшла 06.11.2014*

УДК 548.0:535

**О. В. Семотюк**

*Українська академія друкарства*

**І. В. Карпа, С. А. Свелеба, І. М. Катеринчук**

*Львівський національний університет ім. Івана Франка*

## МОДЕЛЮВАННЯ ДИНАМІКИ НЕОДНОРІДНИХ СТАНІВ У ТОНКОШАРОВИХ КРИСТАЛАХ З НЕСПІВМІРНОЮ НАДСТРУКТУРОЮ

*Проводиться чисельне моделювання змін параметра порядку в неспівмірії фази сегнетоелектричних кристалів залежно від товщини зразка. Показується вплив параметра анізотропної взаємодії на порушення просторової періодичності надструктури.*

**Мікрокристали, тонкошарові кристали, неспівмірна надструктура**

Сегнетоелектричні кристали групи A<sub>2</sub>BX<sub>4</sub> уже широко застосовуються як сенсори температури, тиску, механічних напружень у ряді пристроїв промисловості. Досліджувані у праці кристали [N(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>]<sub>2</sub>CuCl<sub>4</sub> мають складну

послідовність фазових переходів, включаючи неспівмірну фазу в температурному діапазоні 280÷296,6 К. У цій фазі відбувається модуляція кристалічної комірки з періодом, що є неспівмірним з періодом основної решітки (інакше — неспівмірна модуляція, надструктура).

Проблема розмірних ефектів у сегнетоелектриках становить значний практичний інтерес, який зумовлений різноманітною можливістю використання сегнетоелектричних нанорозмірних пристроїв [2]. Вагома частина експериментів у цій галузі спрямована на дослідження сегнетоелектричних оксидів як матеріалу для комірок пам'яті. При цьому процеси перемикання спонтанної поляризації в тонких плівках і супутні явища привертають найбільшу увагу [1]. Широке використання тонких сегнетоелектричних шарів у пристроях сегнетоелектричної пам'яті зумовлює потребу розробки модельного опису їх діелектричних властивостей. При використанні тонких плівок сегнетоелектриків слід враховувати залежність їх властивостей від товщини зразка. Ця залежність зумовлена впливом двох факторів: кореляційним ефектом (називатимемо його розмірним) і механічними напруженнями, що наявні у тонкій плівці [1].

Завданням цієї праці є теоретичне дослідження впливу товщини мікрокристалів на просторовий розподіл параметра порядку в неспівмірній фазі кристалів  $[N(CH_3)_4]_2MeCl_4$ .

У нанорозмірних об'єктах найбільш яскраво проявляються всі особливості поверхневих станів. Поверхня є одним з основних дефектів структури кристала.

Оскільки період неспівмірної модуляції значно більший за розміри елементарної комірки ( $\sim 100$  елементарних комірок), то можна очікувати зміну коефіцієнта анізотропної взаємодії ( $K$ ) для мікрокристалів, при зміні їх товщини вздовж напрямку осі неспівмірної модуляції. За умов існування механічних напружень у мікрокристалі внаслідок зменшення їх розмірів, також спостерігатиметься зміна величини амплітуди параметра порядку.

Залежно від геометрії експерименту можна передбачити вплив різних чинників на зміну коефіцієнта анізотропної взаємодії. А саме, якщо зміна товщини монокристала відбуватиметься в напрямку існування спонтанної поляризації ( $P_s$ ) ( $P_s$  перпендикулярна до площини підкладки, в якій лежать дві інші кристалофізичні осі), то зміна просторового розподілу параметра порядку може бути зумовлена як ефектом електрострикції, так і механічними напруженнями. Для мікрокристалів на підкладці, завжди буде характерне існування механічних напружень, обумовлених невідповідністю параметрів комірки кристала та підкладки, і їх коефіцієнтів лінійного розширення. За умови, якщо зміна товщини відбуватиметься в напрямку існування неспівмірної модуляції параметра порядку, то варто спостерігати залежність коефіцієнта анізотропної взаємодії від товщини. Отже, зміна величини  $K$  може відображати зміну товщини кристала.

Розглянемо функціонал вільної енергії для модульованих структур, який у полярних координатах  $\eta_1 = \eta \cos \varphi$ ,  $\eta_2 = \eta \sin \varphi$  має вигляд:

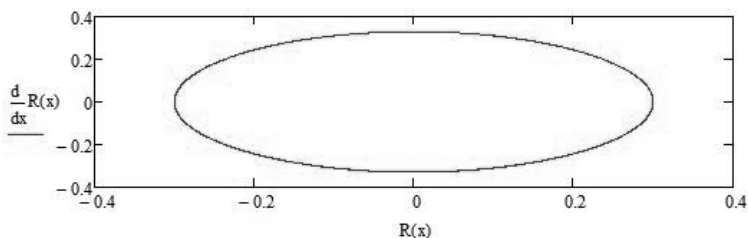
$$\Phi = \int dz \left( -r\eta^2 + u\eta^4 + \omega\eta^n(1 + \cos n\varphi) - \sigma\eta^2 \frac{\partial\varphi}{\partial z} + \frac{\gamma}{4} \left[ \left( \frac{\partial\eta}{\partial z} \right)^2 + \eta^2 \left( \frac{\partial\varphi}{\partial z} \right)^2 \right] + \omega_1 \eta^{\frac{n}{2}} E_1 \cos \frac{n}{2} \varphi - \frac{E_1^2}{2\chi_1} \right), \quad (1)$$

де  $z$  — координата,  $E_1$  — напруженість електричного поля вздовж напрямку існування спонтанної поляризації.

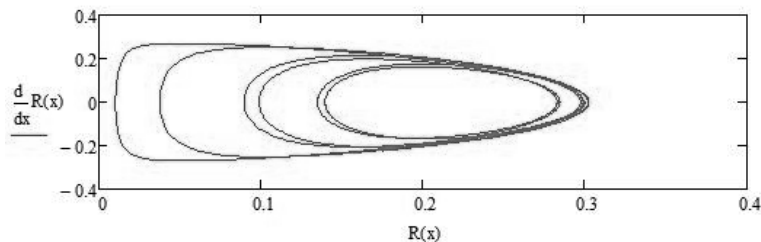
Розв'язуючи даний функціонал шляхом прирівнювання до нуля його першої похідної, отримуємо рівняння

$$R'' - R^3 + (1 + T\varphi' - (\varphi')^2)R - KR^{n-1}(1 + \cos(n\varphi)) - \frac{B}{2} E_1 K \cos\left(\frac{n}{2}\varphi\right) = 0. \quad (2)$$

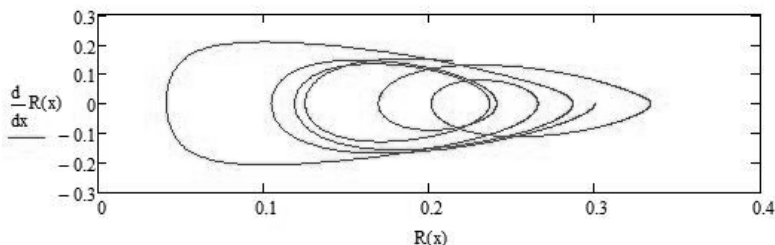
Далі проводилося чисельне моделювання розв'язку цього рівняння шляхом побудови фазових кривих  $\frac{d}{dx}R(x)$  від  $R(x)$ .



а)  $K=0$



б)  $K=1,0$



в)  $K=1,6$

Фазові портрети при  $R(0)=0,3, R'(0)=0; \varphi(0)=0; \varphi'(0)=0,5; T=1; n=3$ ,  
для різних значень параметра анізотропної взаємодії  $K$

Згідно з проведеним чисельним розрахунком, при  $K=0$  атракторами нашої системи будуть стійкі граничні цикли достатньо простої однотактної

структури (див. рисунок, а). При збільшенні параметра  $K$ , спостерігається каскад біфуркаційних подвоєнь періодів циклів. Такий нескінченний каскад подвоєнь періоду закінчується виникненням хаотичного атратора при  $K=1$  (див. рисунок, б). Траєкторії, які належать до хаотичного атратора, здійснюють непередбачувані блукання вздовж вітки атратора, і завжди повертаються в деякий малий окіл будь-якої його точки. У міру подальшого збільшення параметра  $K$ , хаос стає більш розвинений. Тобто траєкторії починають заповнювати «просвіт» у структурі атратора (див. рисунок, в).

Отже, параметр анізотропної взаємодії призводить до порушення просторової періодичності з появою амплітудної і частотної модуляції просторових структур. Збільшення величини параметра анізотропної взаємодії зумовлює перехід системи від синусоїдального до солітонного та стохастичного режимів неспівмірної надструктури, з появою хаотичного напрямку стрибків амплітудної модуляції.

1. Зубко С. П. Модель размерного эффекта в тонкой сегнетоэлектрической пленке в условиях фазового перехода / С. П. Зубко. // ФТТ. — 2010. — Т. 52, № 12. — С. 2401–2404. 2. Ishikawa K. Size effect on the ferroelectric phase transition in  $\text{PbTiO}_3$  ultrafine particles / K. Ishikawa, K. Yoshikawa, N. Okada. // Phys. Rev. B. — 1988. — V.37, N 10. — P. 5852–5855.

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ НЕОДНОРОДНЫХ СОСТОЯНИЙ В ТОНКОСЛОЙНЫХ КРИСТАЛЛАХ С НЕСОРАЗМЕРНОЙ НАДСТРУКТУРОЙ**

*Проводится численное моделирование изменений параметра порядка в несо-размерной фазе сегнетоэлектрических кристаллов в зависимости от толщины образца. Показано влияние параметра анизотропного взаимодействия на нарушение пространственной периодичности надструктуры.*

## **MODELLING OF DYNAMICS OF INHOMOGENEOUS STATES IN THIN LAYER CRYSTALS WITH INCOMMENSURATE SUPERSTRUCTURE**

*A numerical simulation of order parameter in the incommensurate phase of ferroelectric crystals depending on the thickness of the sample was provided. The influence of the anisotropic interaction parameter on the breach of the spatial periodicity superstructure was shown.*

*Стаття надійшла 10.11.2014*