

P17-2003-217

Н. М. Плакида, В. С. Шахматов

МЯГКАЯ МОДА В КРИСТАЛЛАХ ТИПА CsHSO_4

Направлено в журнал «Кристаллография»

Введение

Кристаллы типа $MeHAO_4$ (и их дейтерированные аналоги), где $Me=Cs, Rb, NH_4$; $A=S, Se$, при температуре $T \geq T_c$ обладают высокой электрической проводимостью, обусловленной трансляционным движением ионов водорода (или дейтерия) [1]. Температура фазового перехода T_c в разных соединениях находится в области от ~ 400 до ~ 450 К. Проводимость в точке фазового перехода скачком изменяется от трех до четырех порядков по величине и достигает в высокотемпературной фазе значений $\sim 10^{-2} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$. В $CsHSO_4$ высокая электропроводность наблюдается в суперионных фазах I, VI и VII (см. рис. 1).

Для объяснения высокой проводимости по ионам водорода необходимо исследовать водородную подсистему. Исследования, проведенные методом рассеяния медленных нейтронов [9], дают основную информацию о физических свойствах водородной подсистемы. В работе [10] водородная подсистема в $CsHSO_4$ была описана с помощью модели Слэтера и использован симметричный подход для описания суперионного фазового перехода. Феноменологическая теория фазовых переходов в $CsHSO_4$ была развита в работах [11, 12], и на основе симметричного анализа построены структуры водородных связей во всех фазах высокого давления [13].

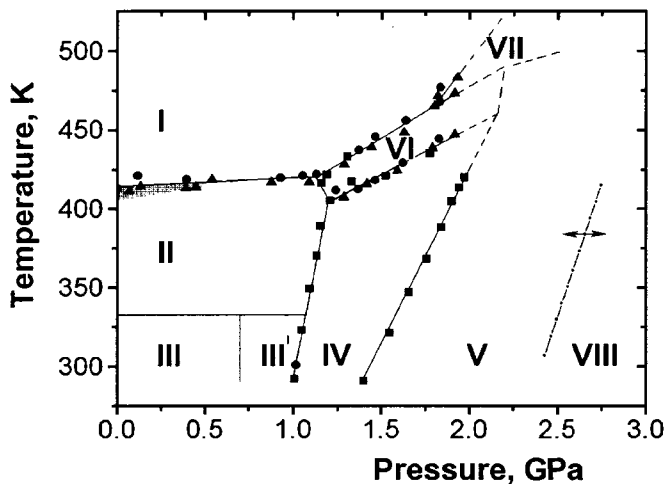


Рис. 1. Фазовая диаграмма кристалла CsHSO_4 в переменных давление-температура. Различные фазы обозначены римскими цифрами I,...,VIII. Непрерывными линиями показаны экспериментально определенные границы фаз [2-4]. Прерывистыми линиями указана возможная экстраполяция границ фаз. Штрихпунктирной линией обозначена граница возможной новой фазы VIII [5]. Выделена область низких давлений и температур $T \sim 410$ K, где возможно появление новой суперионной фазы [6-8]

Однако экспериментальные данные по проводимости [14], ядерному магнитному резонансу [15], нейтронные структурные данные [16] и исследования механических свойств в суперионной фазе [17] указывают на важность учета поворотов тетраэдров SO_4 на большие углы. Для правильного описания суперионного фазового перехода в CsHSO_4 необходимо исследовать не только водородную подсистему, но и подсистему тетраэдров SO_4 , а также возможные взаимодействия между этими подсистемами. В связи с этим возникает вопрос о физической природе мягкой моды суперионного фазового перехода в CsHSO_4 . Ясно, что мягкая мода должна быть связана с изменениями в водородной подсистеме [12, 13], в подсистеме тетраэдров SO_4 [16] (повороты на большие углы) и в фоновой подсистеме. Под

изменениями в фононной подсистеме понимаются небольшие смещения атомов, либрации тетраэдров SO_4 как целого [18] и деформации тетраэдров SO_4 при суперионном фазовом переходе.

В данной работе с помощью симметричного анализа исследована мягкая мода суперионного фазового перехода фаза I \rightarrow фаза II (изменение симметрии $I4_1 / amd \rightarrow P2_1 / c$) в кристалле CsHSO_4 .

Мягкая мода суперионного фазового перехода

$$I4_1 / amd \rightarrow P2_1 / c$$

Кристаллическая структура CsHSO_4 в фазах I и II показана на рис.2. (Кристаллические структуры CsHSO_4 и CsDSO_4 в фазах I и II совпадают.) Симметрия суперионной фазы I была определена в работах [16, 19, 20], а симметрия фазы II в работах [16, 18, 19, 21, 22].

Разложение свободной энергии, которое описывает фазовый переход $I4_1 / amd \rightarrow P2_1 / c$, имеет вид [11]

$$F_1 = F_\varphi + F_{\varphi,\psi,\theta} + F_{\psi,\theta}, \quad (1)$$

где

$$F_\varphi = \frac{1}{2} r (\varphi_1^2 + \varphi_2^2 + \varphi_3^2 + \varphi_4^2) + \frac{1}{4} u_1 (\varphi_1^2 + \varphi_2^2 + \varphi_3^2 + \varphi_4^2)^2 + \frac{1}{6} u_2 (\varphi_1^2 + \varphi_2^2 + \varphi_3^2 + \varphi_4^2)^3 + \frac{1}{4} v_1 (\varphi_1^2 \varphi_2^2 + \varphi_3^2 \varphi_4^2) + \frac{1}{4} v_2 (\varphi_1^2 \varphi_3^2 + \varphi_2^2 \varphi_4^2) + \frac{1}{4} v_3 (\varphi_1^2 \varphi_4^2 + \varphi_2^2 \varphi_3^2) + \dots,$$

$$F_{\varphi,\psi,\theta} = \alpha (\varphi_1^2 + \varphi_2^2 - \varphi_3^2 - \varphi_4^2) \psi + \beta (\varphi_1 \varphi_2 \theta_1 + \varphi_3 \varphi_4 \theta_2),$$

$$F_{\psi,\theta} = \frac{1}{2} r_1 \psi^2 + \frac{1}{2} r_2 (\theta_1^2 + \theta_2^2), \quad (2)$$

где $r = a(T - T_c)$, константы a , u_1 , u_2 , v_1 , v_2 , v_3 , α , β , r_1 и r_2 не зависят от температуры. Здесь $\{\varphi_i\}$, $i = 1, \dots, 4$, является четырехкомпонентным параметром порядка, а ψ и $\{\theta_i\}$, $i = 1, 2$, – вторичные параметры порядка. Переход из фазы I в одно из четырех моноклинных состояний

фазы II описывается следующими отличными от нуля компонентами параметров порядка: $\varphi_1 = \varphi_2 \neq 0$, $\psi \neq 0$ и $\theta_1 \neq 0$. Компоненты параметров порядка $\varphi_3 = \varphi_4 \neq 0$, $\psi \neq 0$ и $\theta_2 \neq 0$ описывают фазовый переход в другой домен. Моноклинные оси этих двух доменов лежат в плоскости (001) (см. рис. 2а) и перпендикулярны друг другу.

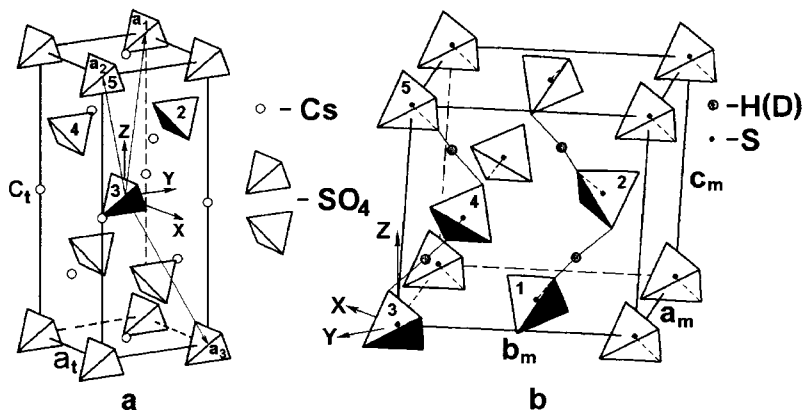


Рис. 2. Кристаллическая структура CsDSO₄ [16]: а) фаза I, симметрия $I4_1/amd(D_{4h}^{19})$, $a_i = 5.74147(9) \text{ \AA}$, $c_i = 14.31513(3) \text{ \AA}$. Тетраэдры SO₄ показаны в наиболее симметричном положении. Примитивная ячейка, построенная на основных векторах трансляции a_i , содержит две формульные единицы CsHSO₄. Два трансляционно неэквивалентных тетраэдра SO₄ выделены; б) фаза II, симметрия $P2_1/c(C_{2h}^5)$, $a_m = 7.78013(9) \text{ \AA}$, $b_m = 8.13916(2) \text{ \AA}$, $c_m = 7.72187(9) \text{ \AA}$, $\beta = 110.8720(4)^\circ$. Примитивная ячейка содержит четыре формульные единицы CsHSO₄. Неэквивалентные тетраэдры SO₄ выделены и обозначены цифрами 1, ..., 4. (Тетраэдр под номером 5 является трансляционно-эквивалентным.) Пунктиром указана длинная связь S-O. Атомы цезия не показаны

Параметры порядка $\{\varphi_i\}$, $i = 1, \dots, 4$, ψ и $\{\theta_i\}$, $i = 1, 2$, описывают ориентационное упорядочение тетраэдров SO₄. На рис. 3 показаны различные по симметрии ориентационные состояния тетраэдра SO₄. В

группе $I4_1/amd$ возможны четыре различных по симметрии ориентационных базиса. Это три специальных базиса, которые имеют внутреннюю симметрию и один общий базис. Специальными базисами являются один двухкратный (рис. 3а) и два четырехкратных ориентационных базиса (рис. 3б, 3с и рис. 3д, 3е). Ориентационное состояние общего восьмикратного базиса можно получить из ориентационного состояния любого специального базиса на рис. 3 с помощью дополнительного поворота на некоторый произвольный небольшой угол вокруг оси, ортогональной к осям симметрии специального базиса.

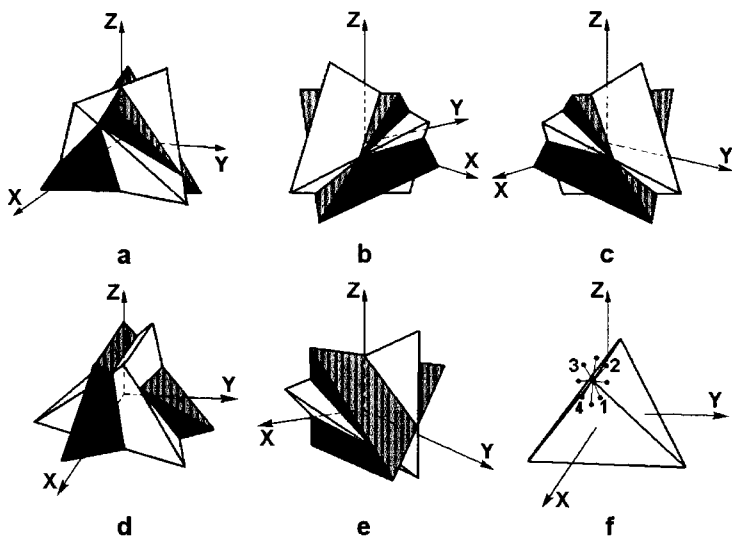


Рис. 3. Ориентационные состояния тетраэдра SO_4 в фазе I: а) двухкратный ориентационный базис. Ориентационные состояния соответствуют поворотам тетраэдра SO_4 вокруг оси Z; б) и с) первый четырехкратный ориентационный базис. Различные ориентационные состояния тетраэдра SO_4 получаются с помощью поворотов вокруг кристаллических направлений $[-1,1,0]$ и $[1,1,0]$; д) и е) второй четырехкратный ориентационный базис. Ориентационные состояния получаются с помощью поворота тетраэдра вокруг осей X и Y; ф) положение одной из вершин тетраэдра SO_4 в ориентационных состояниях двух четырехкратных базисов. Цифрами обозначены четыре ориентационных состояния из первого четырехкратного базиса

В примитивной ячейке фазы I (см. рис. 2а) содержатся два неэквивалентных тетраэдра SO_4 . Ориентационные состояния на рис. 3 приведены только для одного из тетраэдров SO_4 , причем для представления всех ориентационных состояний был выбран угол $\pi/12$. Реальный угол поворота тетраэдра SO_4 в фазе II определяется из эксперимента (см. ниже).

Для описания изменения симметрии $I4_1/amd \rightarrow P2_1/c$ при фазовом переходе фаза I \rightarrow фаза II формально подходят все ориентационные базисы. Однако для описания последовательности фазовых переходов (подробнее см. [5, 23, 24])

$$I4_1/amd \text{ (фаза I)} \rightarrow Pnma \text{ (фаза VI)} \Rightarrow \begin{cases} \rightarrow P2_1/c \\ \rightarrow P2_1/m \end{cases} \text{ (фазы III и IV)} \quad (3)$$

двухкратный базис не подходит из-за своей внутренней симметрии. Дальнейший выбор ориентационного базиса основан на экспериментальных данных. Из рис. 2b видно, что ориентации тетраэдров 1 и 3 соответствуют ориентациям 1 и 3 рис. 3f, причем угол поворота равен $\sim 13^\circ$. Ориентации тетраэдров 2 и 4 на рис. 2b соответствуют ориентациям 2 и 4 на рис. 3f, но с дополнительным поворотом на угол $\pi/2$ из-за трансляционной неэквивалентности двух тетраэдров в фазе I, см. рис. 2а. Кроме поворотов на угол $\sim 13^\circ$ вокруг кристаллических направлений $[-1,1,0]$ и $[1,1,0]$ для точной ориентации тетраэдров 1, ..., 4 на рис. 2b необходимо дополнительно повернуть эти тетраэдры на угол $\sim 6^\circ$ вокруг оси Z. Такой дополнительный поворот тетраэдра, как отмечено выше, приводит к тому, что четырехкратный ориентационный базис (рис. 3b и 3c) становится общим восьмикратным.

Таким образом, анализ экспериментальных данных [16] показывает, что ориентационное упорядочение тетраэдров SO_4 в фазе II (рис. 2b) связано с общим восьмикратным базисом. Конкретные

численные значения углов поворота ($\sim 13^\circ$ вокруг кристаллических направлений $[-1,1,0]$ и $[1,1,0]$ и $\sim 6^\circ$ вокруг оси Z) указывают на то, что основной вклад в ориентацию тетраэдров SO_4 дают состояния из первого четырехкратного ориентационного базиса, который показан на рис. 3б и 3с.

Параметры порядка, описывающие пространственное упорядочение ионов водорода, имеют точно такую же симметрию, что и параметры порядка, описывающие ориентационное упорядочение тетраэдров SO_4 . В работе [12] построена структура водородных связей в фазе II (см. рис. 2б). В фазе II имеются две неэквивалентные цепочки водородных связей, которые переходят друг в друга с помощью моноклинной винтовой оси симметрии второго порядка. Обе цепочки водородных связей (тетраэдры 1, 2 и тетраэдры 3- 5) направлены вдоль оси кристалла C_m . Отметим, что тетраэдры 3- 5 на рис. 2а соответствуют тетраэдрам 3- 5 на рис. 2б, а два тетраэдра под номером 2 являются трансляционно-эквивалентными.

Обозначим параметры порядка, описывающие пространственное упорядочение ионов водорода, следующим образом: $\{\varphi'_i\}$, $i = 1, \dots, 4$; $\{\theta'_i\}$, $i = 1, 2$; ψ' . Разложение свободной энергии, которое описывает оба типа упорядочений, имеет вид

$$F_2 = F_1 + F_{\varphi\varphi} + F_{\varphi\psi\theta} + F_{\varphi'\psi'\theta'}, \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} F_{\varphi\varphi} &= \gamma(\varphi_1\varphi'_1 + \varphi_2\varphi'_2 + \varphi_3\varphi'_3 + \varphi_4\varphi'_4), \\ F_{\varphi\psi\theta} &= \alpha_1(\varphi_1^2 + \varphi_2^2 - \varphi_3^2 - \varphi_4^2)\psi' + \beta_1(\varphi_1\varphi_2\theta'_1 + \varphi_3\varphi_4\theta'_2), \\ F_{\varphi'\psi'\theta'} &= \frac{1}{2}r_3\varphi'^2 + \frac{1}{2}r_4\psi'^2 + \frac{1}{2}r_5(\theta_1'^2 + \theta_2'^2). \end{aligned} \quad (5)$$

Добавляя к разложению свободной энергии (4) слагаемые, содержащие параметры порядка, которые описывают изменения в фононной подсистеме, в частности повороты тетраэдров как целого [18], получаем:

$$F_3 = F_2 + F_{\varphi\varphi} + F_{\varphi\psi\theta} + F_{\varphi\psi\theta}, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} F_{\varphi\varphi} &= \gamma_1 (\varphi_1 \varphi_1'' + \varphi_2 \varphi_2'' + \varphi_3 \varphi_3'' + \varphi_4 \varphi_4''), \\ F_{\varphi\psi\theta} &= \alpha_2 (\varphi_1^2 + \varphi_2^2 - \varphi_3^2 - \varphi_4^2) \psi'' + \beta_2 (\varphi_1 \varphi_2 \theta_1'' + \varphi_3 \varphi_4 \theta_2''), \\ F_{\varphi\psi\theta} &= \frac{1}{2} r_6 \varphi''^2 + \frac{1}{2} r_7 \psi''^2 + \frac{1}{2} r_8 (\theta_1''^2 + \theta_2''^2). \end{aligned} \quad (7)$$

Все феноменологические константы в (5) и (7) не зависят от температуры.

Разложение свободной энергии (6) описывает все изменения в кристалле CsHSO_4 при суперионном фазовом переходе $I4_1 / amd \rightarrow P2_1 / c$.

Обсуждение результатов и выводы

Сформулируем полученные результаты. Суперионный фазовый переход в CsHSO_4 , фаза I \rightarrow фаза II, приводит к изменению пространственной симметрии $I4_1 / amd (D_{4h}^{19}) \rightarrow P2_1 / c (C_{2h}^5)$. Разложение свободной энергии, которое описывает этот фазовый переход, имеет вид (1), (2). Фазовый переход в моноклинное состояние описывается следующими компонентами параметров порядка: $\varphi_1 = \varphi_2 \neq 0$, $\psi \neq 0$ и $\theta_1 \neq 0$. Следовательно, все изменения, связанные с фазовым переходом $I4_1 / amd \rightarrow P2_1 / c$, также должны описываться этими параметрами порядка. Действительно, с помощью указанных параметров порядка в данной работе построено ориентационное упорядочение тетраэдров SO_4 в фазе II (см. рис. 2b). В работах [12, 13] с помощью аналогичных

параметров порядка было описано пространственное упорядочение ионов водорода в фазе II. В данной работе это штрихованные параметры порядка. Изменения в фононной подсистеме (небольшие повороты тетраэдров SO_4 и деформации тетраэдров) описываются параметрами порядка с двумя штрихами. Таким образом, с помощью разложения свободной энергии (6) можно описать основные изменения, которые происходят в кристалле $CsHSO_4$ при суперионном фазовом переходе $I4_1/amd \rightarrow P2_1/c$.

Симметричный анализ показывает, что ориентационное упорядочение тетраэдров SO_4 , пространственное упорядочение ионов водорода, а также небольшие повороты тетраэдров SO_4 [18] в равной мере могут играть роль мягкой моды в кристалле $CsHSO_4$. Основываясь на нейтронных данных [16, 25], можно считать, что «мягкость» возникает в подсистеме тетраэдров SO_4 . Под мягкой модой понимают основные изменения в кристалле, обусловленные фазовым переходом. Поэтому, принимая во внимание линейное взаимодействие между упорядочениями, с мягкой модой суперионного перехода необходимо связывать как ориентационное упорядочение тетраэдров SO_4 , так и пространственное упорядочение ионов водорода. Тем более, что с явлением ионной проводимости, а это основное физическое свойство суперионного фазового перехода, связаны обе подсистемы. Отметим, что фазовый переход $I4_1/amd \rightarrow P2_1/c$ в $CsHSO_4$ сопровождается большими деформациями кристаллической решетки и для построения структуры водородных связей в фазе II необходимо учитывать деформации e_{xz} и e_{yz} (взаимодействия параметра порядка с компонентами тензора деформации см. в [11]).

Проведенный в данной работе анализ экспериментальных данных [16] (см. рис. 2b) показывает, что для описания ориентационного упорядочения тетраэдров SO_4 в фазе II необходимо использовать восьмикратный ориентационный базис. Для ориентации тетраэдра под

номером 3 на рис. 2b необходимо повернуть этот тетраэдр на угол $\sim 13^\circ$ вокруг кристаллического направления $[-1,1,0]$ (это ориентационное состояние под номером 3 на рис. 3f), а затем дополнительно повернуть тетраэдр на угол $\sim 6^\circ$ вокруг оси Z по часовой стрелке. (Ориентации остальных неэквивалентных тетраэдров под номерами 1, 2 и 4 на рис. 2b получаются из ориентации тетраэдра 3 с помощью операций поворота вокруг оси симметрии второго порядка, инверсии и отражения в плоскости соответственно.) Если считать, что повороты тетраэдров SO_4 на угол $\sim 6^\circ$ вокруг оси Z можно отнести к фоновым степеням свободы и описывать их дважды штрихованными параметрами порядка (см. (6)), то получаем четырехкратный ориентационный базис (см. рис. 3b и 3c), который был обнаружен в работе [16]. Однако такой вывод наталкивается на следующие возражения. Во-первых, в соединении $CsHSeO_4$ [26], в котором также наблюдается суперионный фазовый переход $I4_1/amd \rightarrow P2_1/c$ [19], изменение энтропии при фазовом переходе равно $\Delta S = 16.1 \text{ Дж}\cdot\text{моль}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}$. Такое изменение энтропии связано с восьмикратным базисом. Во-вторых, поворот тетраэдра SO_4 в четырехкратном ориентационном базисе [16] равен $\sim 22^\circ$, а не $\sim 13^\circ$, как это следует из кристаллической структуры фазы II. Таким образом, даже если в $CsHSO_4$ имеет место четырехкратный ориентационный базис (и изменение энтропии при суперионном фазовом переходе равно $R \cdot 1.32$, где R - газовая постоянная), экспериментальные данные [16] относительно фазы I необходимо заново проанализировать. (Заметим здесь, что в $CsHSO_4$ возможно появление новой суперионной фазы (заштрихованная область на рис. 1). Так как при фазовом переходе между суперионными фазами число ориентационных состояний изменяется минимум в два раза, полное изменение энтропии при двух фазовых переходах, фаза I \rightarrow промежуточная суперионная фаза \rightarrow фаза II, равно $\Delta S = 16.1 \text{ Дж}\cdot\text{моль}^{-1}\cdot\text{К}^{-1} \approx R \cdot \ln 2 + R \cdot 1.32$. Это также указывает на существование восьмикратного ориентационного базиса в $CsHSO_4$.)

Можно предположить, что дифракционные данные [16] в фазе I должны подгоняться с помощью восьмикратного ориентационного базиса с поворотами тетраэдра на $\sim 13^\circ$ и $\sim 6^\circ$ градусов, как обсуждено выше. Также можно допустить, что в дополнение к указанному ориентационному базису, в суперионной фазе I, вдали от температуры фазового перехода T_c , могут наблюдаться и другие ориентационные базисы, например, ориентационный базис, связывающий так называемые 8e позиции [16]. В этом случае фазовый переход в CsHSO_4 происходит по схеме, предложенной для описания фазовых переходов в фуллеренах [27].

В заключение отметим, что для полного понимания физических явлений, связанных с обсуждаемым суперионным фазовым переходом, необходимы дальнейшие экспериментальные исследования. Отметим здесь, что симметрия фаз высокого давления, теоретически предсказанная в работах [5, 23], экспериментально проверена только для фаз IV и V [24] (см. рис. 1). В работе [13] теоретически построены структуры водородных связей во всех фазах высокого давления. Экспериментальные исследования кристаллической структуры CsHSO_4 в фазах высокого давления в настоящее время отсутствуют.

Авторы выражают благодарность А.В. Белушкину за подробное обсуждение результатов данного исследования. Работа выполнена в рамках Ведущей научной школы, НШ 1514.2003.2, и при поддержке РФФИ, грант 04-02-16817.

Литература

1. Баранов А.И., Шувалов Л.А., Щагина Н.М. *Письма в ЖЭТФ*, **36**, 381 (1982).
2. Понятовский Е.Г., Ращупкин В.И., Сеницын В.В., Баранов А.И., Шувалов Л.А., Щагина Н.М. *Письма в ЖЭТФ*, **41**, 114 (1985).
3. Сеницын В.В., Понятовский Е.Г., Баранов А.И., Трегубченко А.В., Шувалов Л.А. *ЖЭТФ*, **100**, 693 (1991).
4. Lunden A., Baranowski B., Friesel M. *Ferroelectrics*, **167**, 33 (1995).
5. Shakhmatov V.S. *High Pressure Research*, **14**, 67 (1995).
6. Баранов А.И., Сеницын В.В., Понятовский Е.Г., Шувалов Л.А. *Письма в ЖЭТФ*, **44**, 186 (1986).
7. Кирпичникова Л.Ф., Поломска М., Воляк Я., Хильчер Б. *Письма в ЖЭТФ*, **63**, 871 (1996).
8. Shekhtman V.Sh., Dilanyan R.A. *Ferroelectrics*, **167**, 115 (1995).
9. Belushkin A.V., Natkaniec I., Plakida N.M., Shuvalov L.A., Wasicki J. *Journ. Phys. C: Solid State Phys.* **20**, 671 (1987).
10. Плакида Н.М. *Письма в ЖЭТФ*, **41**, 95 (1985).
11. Плакида Н.М., Шахматов В.С. *Изв. АН СССР, серия физ.* **51**, 2107 (1987).
12. Plakida N.M., Shakhmatov V.S. *Ferroelectrics*, **167**, 73 (1995).
13. Beskrovnyi A.I., Shakhmatov V.S. *Crystallogr. Reports*, **47**, 94 (2002).
14. Баранов А.И. *Изв. АН СССР, серия физ.* **51**, 2146 (1987).
15. Arcon D., Blinc R., Dolinsek J., Shuvalov L.A. *Phys. Rev.* **B55**, 8961 (1997).
16. Belushkin A.V., David W.I.F., Ibberson R.M., Shuvalov L.A. *Acta Crystallogr.* **B47**, 167 (1991).
17. Кирпичникова Л.Ф., Урусовская А.А., Мозговой В.И. *Письма в ЖЭТФ*, **62**, 616 (1995).

19. Балагуров А.М., Белушкин А.В., Бескровный А.И., Вратислав С., Вонсицки Я., Датт И.Д., Длоуга М., Ирак З., Натканец И., Савенко Б.Н., Шувалов Л.А. *Краткие сообщения ОИЯИ*, N13-85. Дубна, 1985.
20. Меринов Б.В., Баранов А.И., Шувалов Л.А. *Кристаллография*, **32**, 86 (1987).
21. Yokota S. *Journ. Phys. Soc. Japan*, **51**, 1884 (1982).
22. Меринов Б.В., Баранов А.И., Максимов Б.А., Шувалов Л.А. *Кристаллография*, **31**, 450 (1986).
23. Шахматов В.С. *Кристаллография*, **38**, 176 (1993).
24. Belushkin A.V., Adams M.A., Hull S., Kolesnikov A.I., Shuvalov L.A. *Physica*, **B 213&214**, 1034 (1995).
25. Belushkin A.V., Carlile C.J., Shuvalov L.A. *Ferroelectrics*, **167**, 21 (1995).
26. Yokota S. Takanohashi N., Osaka T., Makita Y. *Journ. Phys. Soc. Japan*, **51**, 199 (1982).
27. Аксенов В.Л., Осипьян Ю.А., Шахматов В.С. *ЖЭТФ*, **113**, 1081 (1998).

Получено 4 декабря 2003 г.

Плакида Н. М., Шахматов В. С.
Мягкая мода в кристаллах типа CsHSO_4

P17-2003-217

Показано, что мягкая мода суперионного фазового перехода в кристаллах типа CsHSO_4 связана с ориентационным упорядочением тетраэдров SO_4 и с пространственным упорядочением ионов водорода. Указан конкретный ориентационный базис суперионного фазового перехода. Обсуждены дальнейшие эксперименты по проверке теоретических предсказаний.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2003

Перевод авторов

Plakida N. M., Shakhmatov V. S.
Soft Mode in CsHSO_4 Type Crystals

P17-2003-217

It is shown that the soft mode of the superionic phase transition in the CsHSO_4 type crystals is associated with both an orientational ordering of SO_4 tetrahedra and an ordering of hydrogen ions in the crystal lattice. The specific orientational basis of the superionic phase transition is determined. The experimental verification of the theoretical predictions is proposed.

The investigation has been performed at the Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2003

Редактор *О. Г. Андреева*
Макет *Е. В. Сабанеевой*

Подписано в печать 28.01.2004.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 0,94. Уч.-изд. л. 0,76. Тираж 305 экз. Заказ № 54278.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@pds.jinr.ru

www.jinr.ru/publish/