

Fāžu pārejas $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ un $0.95\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3\text{-}0.05\text{CaTiO}_3$

Marija Duncce¹, Ēriks Birks¹, Līga Bikše¹, Reinis Ignatāns¹, Armin Fuith², Heinz Kabelka²,
Edgars Nitišs¹, Māris Kundziņš¹, Andris Šternbergs¹

¹ *Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

² *Vīnes Universitātes Eksperimentālās fizikas institūts*

Pēdējos gados $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ un tā cietie šķīdumi tiek intensīvi pētīti kā vieni no perspektīvākiem svīnu nesaturošiem segnetoelektriķiem. Lielu interesi izraisa ne tikai šo savienojumu fizikālās īpašības, bet arī struktūra un fāžu pāreju raksturs, tā kā to izpētē radušās daudzas neskaidrības. Šajā pētījumā ir salīdzināti $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ un $0.95\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3\text{-}0.05\text{CaTiO}_3$, pamatā pievēršot uzmanību elastiskām un termiskās izplešanās īpašībām un to korelācijai ar izmaiņām kristāliskā režģa struktūrā. Abiem aplūkotajiem sastāviem novērotas līdzīgas dielektriskās caurlaidības temperatūras-frekvenču atkarības. Tajā pašā laikā termiskās izplešanās un Junga moduļa temperatūras atkarības $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ un $0.95\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3\text{-}0.05\text{CaTiO}_3$ uzrāda nepārprotamas atšķirības novēroto un vai paredzēto ($\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ gadījumā) fāžu pāreju rajonā. Rentgenstaru difrakcijas ainas ir aproksimētas, izmantojot Pnma simetriju. Tas sniedz iespēju nošķirt temperatūras apgabalus ar dažādu režģa parametru uzvedību, kas korelē ar novēroto termiskās izplešanās un Junga moduļa uzvedību. Novērota otrās optiskās harmonikas intensitātes pakāpeniska samazināšanās, pieaugot temperatūrai visā pētītajā temperatūras apgabalā, kas noved pie jaunas dielektriskās caurlaidības temperatūras atkarības interpretācijas.

Phase Transitions in $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ and $0.95\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3\text{-}0.05\text{CaTiO}_3$

Marija Duncce¹, Eriks Birks¹, Līga Bikše¹, Reinis Ignatāns¹, Armin Fuith², Heinz Kabelka²,
Edgars Nitišs¹, Māris Kundziņš¹, Andris Šternbergs¹

¹ *Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

² *Institute for Experimental Physics, University of Vienna*

Recently, $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ and its solid solutions are intensively studied as ones of the most perspective lead-free ferroelectrics. Not only physical properties, but also structure and nature of phase transitions of these compositions are of great interest, as its previous studies contain many uncertainties. In the present research, $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ and $0.95\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3\text{-}0.05\text{CaTiO}_3$ solid solution were thoroughly studied focusing on comparison of elastic and thermal expansion characteristics, as well as their correlation with changes of crystalline structure. Temperature-frequency dependences of dielectric permittivity were observed to be similar for the both compositions. In spite of this, the experimentally obtained temperature dependences of thermal expansion and Young's modulus in $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ and $0.95\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3\text{-}0.05\text{CaTiO}_3$ reveal unambiguous differences in the temperature range of the observed or expected (as in the case of $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$) phase transitions. X-ray diffraction patterns are fitted using Pnma symmetry. This allows us to distinguish temperature regions with different behaviour of lattice parameters, which correlates with the observed behaviour of thermal expansion and Young's modulus. Continuous reducing of intensity of second optical harmonic was observed upon increasing of temperature in the whole studied temperature range. This encourages us to reconsider the mechanism responsible for temperature dependence of dielectric permittivity.

The work has been funded by the European Regional Development Fund in the framework of the postdoctoral research project No. 1.1.1.2/VIAA/3/19/558.