

УДК 348.35:539,125

## АНАЛІЗ ТРАНСФОРМАЦІЇ КУБІЧНА ФАЗА – ТЕТРАГОНАЛЬНА ФАЗА В КРИСТАЛІЧНИХ УТВОРЕННЯХ З $(2a \times 2a \times 2a)$ -НАДГРАТКОЮ

І.М. ШКИРТА<sup>1</sup>, І.І. НЕБОЛА<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Мукачівський державний університет 89600, Мукачево, вул. Ужгородська, 26

<sup>2</sup>Ужгородський національний університет 88000, Ужгород, вул. А.Волошина, 52

*Проведений детальний симетрійний аналіз модельних перетворень структур перовскитних кристалічних утворень типу  $ABC_3$  із врахуванням дефектностей типів I ( $ABCC \otimes$ ) та II ( $AB \otimes \otimes C$ ) (де  $\otimes$  - вакансія) при можливій трансформації кубічна фаза – тетрагональна фаза; розраховані дисперсійні залежності фононних спектрів кристалу  $BaTiO_3$  та похідних від нього кристалічних утворень з  $(2a \times 2a \times 2c')$ - надграткою із врахуванням дефектностей типів I і II, а також досліджені їх особливості.*

В лабораторіях світу щодня синтезується чимало нових матеріалів з особливими властивостями, які зумовлюють їх широке застосування в різноманітних областях сучасної техніки. До них відносяться високотемпературні надпровідники, сегнетоелектрики, сегнетоеластики, матеріали з характерним фазовим переходом типу метал-діелектрик, матеріали з комбінованими властивостями та інші, які раніше не можна було ні уявити, ні передбачити [1]. Саме виявлення багатьох нових структурних типів вищезгаданих матеріалів і стало поштовхом до активного пошуку їм подібних. Обширну групу складають кристали типу  $ABC_3$  (де  $A, B$  – катіони, а  $C$  - аніон), основними елементами яких є октаедри  $BC_6$ , а також похідні від  $ABC_3$  сполуки, які надзвичайно багаті “шаруватими” перовскитоподібними кристалами (ШПК), побудованими двомірними шарами, зв’язаними вершинами октаедрів  $BC_6$ , пірамід  $BC_5$ , квадратів  $BC_4$ , гантелей  $BC_2$  [2]. Ці утворення можуть бути представлені у вигляді систем проростання декількох типів пакетів, (наприклад. пакетів типів А, В, С або D [2]), які можуть містити  $n$  шарів ( $n = 1, 2, \dots$ ) октаедрів або їх залишків, з проміжними різнотипними блоками, що дає змогу шляхом кристалохімічного аналізу можливих комбінацій пакетів та блоків прогнозувати нові типи ШПК.

Дослідження сегнетоелектриків зі структурою типу  $BaTiO_3$  дало змогу з’ясувати ряд важливих питань стосовно природи фазових переходів, нелінійних ефектів, розвинути уявлення про нерозмірну структурну впорядкованість. Подібні кристалічні утворення володіють корисними електричними, магнітними, каталітичними властивостями і в останній час викликають значний інтерес у спеціалістів з фізики

твердого тіла та споріднених з нею розділів фізичної науки. Так, зокрема, сегнетоелектрики-напівпровідники [3], на основі складних оксидів титану, знаходять широкі застосування при виготовленні активних елементів датчиків температури (від криогенних до  $400\text{ }^{\circ}\text{C}$ ), елементів для високоефективного теплового та струмового захисту електрообладнання та електронних пристроїв, автотермостабілізуючих нагрівачів різного призначення, активних елементів генераторів інфранизьких частот, конденсаторних матеріалів з надвисокою діелектричною проникністю [4].

Серед широкої різноманітності структурних типів, відомих на даний час, без попереднього проведення детального симетричного аналізу коливних представлень розібратися не так легко. Це ускладнює виявлення і встановлення в них певних закономірностей. Такий аналіз проведемо, виходячи з концепції надпросторової симетрії, згідно якої коливні представлення отримаємо під кожну позицію атома структури.

#### **Об'єкти та методи дослідження**

Об'єкт досліджень – вивчення розкладів нормальних зміщень базової структури типу  $ABC_3$  (на прикладі кристалу  $BaTiO_3$ ). Аналіз трансформації кубічна фаза - тетрагональна фаза при переходах до похідних структур від  $BaTiO_3$  із врахуванням дефектностей типів I та II.

#### **Постановка задачі**

Мета досліджень – виявлення, опис та врахування наслідків узагальненої кольорової симетрії будови кристалічних утворень з  $(2a \times 2a \times 2a)$ -надграткою для аналізу розкладів нормальних зміщень в різних точках зони Бриллюєна та для ліній симетрії.

#### **Результати та обговорення**

Узагальнена симетрія в складних кристалах проявляється через додаткову трансляційну інваріантність, що реалізується між позиціями природних надграток. Подальше узагальнення точкової симетрії реалізується через побудову модуляційних функцій масового, векторного та тензорного типу [5].

Структура багатокомпонентного кристалу  $BaTiO_3$  - представника оксидних систем складу  $ABO_3$ , моделюється як природна надгратка  $(2a \times 2a \times 2a)$  (рис.1) [5].

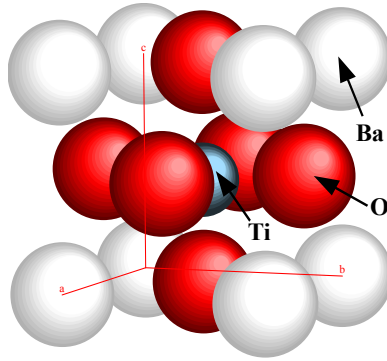


Рис.1. Кристалічна структура  $BaTiO_3$ .

Кристал  $BaTiO_3$  є одним з основних компонентів сегнетоелектричних матеріалів, оскільки його електричні властивості можна змінювати шляхом введення в кристалічну ґратку легуючих домішок. Опис кубічного кристалу  $BaTiO_3$  з  $(2a \times 2a \times 2a)$ -надґраткою закладено в  $(3+3)$  – вимірному прямому та оберненому базисах, відповідно:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{a}_1 &= (a, 0, 0, -b/2, 0, 0) & \mathbf{a}_1^* &= (2\pi/a, 0, 0, 0, 0, 0) \\
 \mathbf{a}_2 &= (0, a, 0, 0, -b/2, 0) & \mathbf{a}_2^* &= (0, 2\pi/a, 0, 0, 0, 0) \\
 \mathbf{a}_3 &= (0, 0, a, 0, 0, -b/2) & \mathbf{a}_3^* &= (0, 0, 2\pi/a, 0, 0, 0) \\
 \mathbf{a}_4 &= (0, 0, 0, b, 0, 0) & \mathbf{a}_{3+1}^* &= (\pi/a, 0, 0, 2\pi/b, 0, 0) \\
 \mathbf{a}_5 &= (0, 0, 0, 0, b, 0) & \mathbf{a}_{3+2}^* &= (0, \pi/a, 0, 0, 2\pi/b, 0) \\
 \mathbf{a}_6 &= (0, 0, 0, 0, 0, b) & \mathbf{a}_{3+3}^* &= (0, 0, \pi/a, 0, 0, 2\pi/b)
 \end{aligned} \quad . \quad (1)$$

Трьохмірні компоненти векторів  $\mathbf{a}_{3+1}^*$ ,  $\mathbf{a}_{3+2}^*$ ,  $\mathbf{a}_{3+3}^*$  оберненого базису визначають елементарні вектори модуляції, тобто,

$$\mathbf{q}_1 = (\pi/a, 0, 0), \mathbf{q}_2 = (0, \pi/a, 0), \mathbf{q}_3 = (0, 0, \pi/a). \quad (2)$$

Оскільки структура ідеального  $BaTiO_3$  є кубічною, то елементи точкової групи об'єднують позиції іонів в елементарній комірці складного кристалу в орбіти. В оберненому просторі сукупність векторів модуляції об'єднуються в зірки.

Повний набір векторів модуляції визначається сукупністю лінійних комбінацій елементарних векторів модуляції (2) в межах об'єму зони Бриллюєна (ЗБ) і містить 8 векторів модуляції, що розпадаються на 4 зірки, з яких: дві одновекторні -  $(0, 0, 0)$  та  $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$  і дві трьохвекторні -  $(\pi/a, \pi/a, 0)$  та  $(\pi/a, 0, 0)$ .

При виборі базису (1) зірки відповідають восьми орбітам, які визначені радіус-векторами:  $(0, 0, 0)$ ,  $(a, 0, 0)$ ,  $(0, a, 0)$ ,  $(0, 0, a)$ ,  $(a, a, a)$ ,  $(a, a, 0)$ ,  $(a, 0, a)$ ,  $(0, a, a)$ . Очевидно, що період мультиплікації композиційної надґратки дорівнює двом.

Рівність потужностей множин векторів модуляції і позицій атомів дозволяє записати для кристалів кубічної сингонії з  $(2a \times 2a \times 2a)$ -надграткою систему рівнянь відносно амплітуд масових модуляційних функцій  $\rho(q_j) = \rho_j$  ( $j=1, 2, \dots, s; s=8$ ) [5-7] у вигляді:

$$M(r_k) = \sum_{j=1}^s \rho(q_j) \exp\{iq_j r_k\}, \quad (3)$$

де  $M(r_k)$  - маса атомів у позиціях  $r_k$ ;  $q_j$  - вектори модуляції ( $j, k = \overline{1, s}$ ).

Функція масової модуляції  $M(r_k)$  визначена на дискретній множині точок кристалічного простору, що задаються радіус-вектором вузлів базової структури  $r_k$ .

(3+3)-вимірні базиси (1,2) із врахуванням масових співвідношень:

$$M_1 = m_{Ba}, M_5 = m_{Ti}, M_6 = M_7 = M_8 = m_o, M_2 = M_3 = M_4 = 0, \quad (4)$$

дозволяють записати мотив кристалу  $BaTiO_3$  через мотив протокристалу

$$\rho_1 = \frac{m_{Ba} + m_{Ti} + 3m_o}{8} \quad (5)$$

та модулюючі добавки

$$\begin{aligned} \rho_2 = \rho_3 = \rho_4 &= \frac{m_{Ba} + m_{Ti} - m_o}{8}; \\ \rho_5 &= \frac{m_{Ba} - m_{Ti} + 3m_o}{8}; \\ \rho_6 = \rho_7 = \rho_8 &= \frac{m_{Ba} - m_{Ti} - m_o}{8}. \end{aligned} \quad (6)$$

Узагальнена динамічна матриця складного кристалу  $BaTiO_3$  визначається композиційним складом його елементарної комірки, симетрією ґратки та характером моделей силових постійних. Врахування узагальненої надпросторової симетрії накладає ряд фундаментальних обмежень на фононні спектри складних кристалів [9-12].

Комбінації елементарних модуляційних векторів (2) приводять до системи восьми трьохмірних рівнянь руху, що виражається в узагальненій динамічній матриці розмірності  $(24 \times 24)$ . Закони дисперсії фононного спектру  $\omega^2(\mathbf{k})$  є розв'язками задачі на власні значення:

$$|D^{cl}(\mathbf{k}) - \omega^2(\mathbf{k})M| = 0, \quad (7)$$

де  $M$  - діагональна матриця, елементами якої є відповідні маси атомів, а динамічна матриця складного кристалу традиційно [8] записується у вигляді:

$$D_{\alpha\beta}^{cl}(k, k' | \mathbf{k}) = -\sum_{l'} K_{\alpha\beta}(lk, l'k') \exp\{i\mathbf{k}[\mathbf{x}(l') - \mathbf{x}(l)]\}. \quad (8)$$

Повний набір векторів модуляції разом з амплітудами модуляційних векторів (5,6) дозволяє записати рівняння руху в надпросторовому підході [5-7], в якому квадрати фононних частот також є розв'язками секулярного рівняння:

$$|D^{sp}(\mathbf{k}) - \omega^2(\mathbf{k})M| = 0, \quad (9)$$

де  $M$  - матриця оператора дефекту мас [5], а  $D^{sp}(\mathbf{k})$  - узагальнена динамічна матриця (УДМ), побудована на динамічних матрицях одноатомної базової структури, визначених у точках  $(\mathbf{k} + \mathbf{q}_i)$  ЗБ. Власні значення матриці  $D^{sp}(\mathbf{k})$  визначають енергетично вироджений стан протокристалу [5,6].

УДМ для кристалів типу  $BaTiO_3$  має вигляд:

$$D_N^{sp}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} D_1^1(\mathbf{k}) & D_1^2(\mathbf{k}) & D_1^3(\mathbf{k}) & D_1^4(\mathbf{k}) & D_1^5(\mathbf{k}) & D_1^6(\mathbf{k}) & D_1^7(\mathbf{k}) & D_1^8(\mathbf{k}) \\ D_2^2(\mathbf{k}) & D_2^1(\mathbf{k}) & D_2^6(\mathbf{k}) & D_2^8(\mathbf{k}) & D_2^7(\mathbf{k}) & D_2^3(\mathbf{k}) & D_2^5(\mathbf{k}) & D_2^4(\mathbf{k}) \\ D_3^3(\mathbf{k}) & D_3^6(\mathbf{k}) & D_3^1(\mathbf{k}) & D_3^7(\mathbf{k}) & D_3^8(\mathbf{k}) & D_3^2(\mathbf{k}) & D_3^4(\mathbf{k}) & D_3^5(\mathbf{k}) \\ D_4^4(\mathbf{k}) & D_4^8(\mathbf{k}) & D_4^7(\mathbf{k}) & D_4^1(\mathbf{k}) & D_4^6(\mathbf{k}) & D_4^5(\mathbf{k}) & D_4^3(\mathbf{k}) & D_4^2(\mathbf{k}) \\ D_5^5(\mathbf{k}) & D_5^7(\mathbf{k}) & D_5^8(\mathbf{k}) & D_5^6(\mathbf{k}) & D_5^1(\mathbf{k}) & D_5^4(\mathbf{k}) & D_5^2(\mathbf{k}) & D_5^3(\mathbf{k}) \\ D_6^6(\mathbf{k}) & D_6^3(\mathbf{k}) & D_6^2(\mathbf{k}) & D_6^5(\mathbf{k}) & D_6^4(\mathbf{k}) & D_6^1(\mathbf{k}) & D_6^8(\mathbf{k}) & D_6^7(\mathbf{k}) \\ D_7^7(\mathbf{k}) & D_7^5(\mathbf{k}) & D_7^4(\mathbf{k}) & D_7^3(\mathbf{k}) & D_7^2(\mathbf{k}) & D_7^8(\mathbf{k}) & D_7^1(\mathbf{k}) & D_7^6(\mathbf{k}) \\ D_8^8(\mathbf{k}) & D_8^4(\mathbf{k}) & D_8^5(\mathbf{k}) & D_8^2(\mathbf{k}) & D_8^3(\mathbf{k}) & D_8^7(\mathbf{k}) & D_8^6(\mathbf{k}) & D_8^1(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (10)$$

В запропонованому підході розраховано фононний спектр кристалу  $BaTiO_3$  (рис.2).

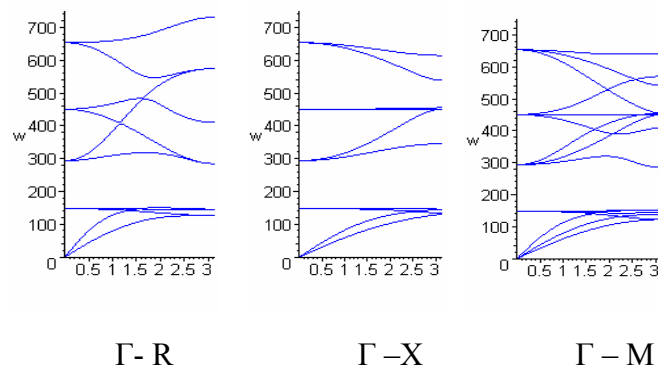


Рис.2. Фононний спектр кристалу  $BaTiO_3$

$$\alpha_1(Ti - O) = 28.5 \text{ Н/м}, \quad \alpha_2(Ba - O) = 50.15 \text{ Н/м},$$

$$\alpha_2(O - O) = 75.8 \text{ Н/м}, \quad \alpha_3(Ba - Ti) = 8.19 \text{ Н/м}.$$

При цьому мають місце як модуляція маси, так і модуляція силових постійних. Відмічається хороше узгодження розрахованих дисперсійних кривих з експериментом [13].

Теоретико-груповий аналіз фазових переходів в кристалах типу  $BaTiO_3$  проводився в ряді робіт [9-12]. Однак, опис фаз в термінах теорії фєдорівських просторових груп, не можна вважати вичерпним. В зв'язку з цим проведено розділення коливань за типами симетрії, використовуючи метод класифікації коливних мод в надпросторовому підході.

Суть методу класифікації коливних мод полягає в знаходженні повного коливного зображення, яке для кристалу  $BaTiO_3$  має розмірність 15 з послідовним його розкладом за незвідними зображеннями фактор-групи кристалу.

Для отримання розкладу повного коливного зображення за незвідними зображеннями в надпросторовому підході достатньо знати характери, які визначаються наступним чином:

$$\chi(g_3, g_d) = \chi(R_3) \sum_{\substack{j, j' \\ R_d b^* = b^*}} \exp\{i(k - \Delta^* b^*)u(j)\}, \quad (11)$$

де  $(g_3, g_d)$  – просторові елементи,  $(R_3, R_d)$  – точкові елементи,  $\Delta^* b^* = q$ ,  $b^*$  – обернений базовий вектор фазового простору,  $u(j)$  служить для узгодження трансляційних та точкових операцій симетрії при їх дії на модуляційні функції.

Проведений теоретико-груповий аналіз особливостей поведінки фононних віток в околі точки  $\Gamma$ . Коливне зображення при цьому має вигляд:

$$\Gamma_{vibr}(O_h^1) = \tau_{10}(Ba) + \tau_{10}(Ti) + \tau_8(O) + 2\tau_{10}(O) = \tau_8 + 4\tau_{10} \quad (12)$$

При переході з кубічної фази в тетрагональну в центрі та на границі зони Бриллюєна спостерігається зняття трьохкратного виродження для незвідного зображення  $\tau_{10}$  (таблиця 1) з розщепленням його на однократне  $\tau_4$  та двохкратне  $\tau_{10}$  і незвідного зображення  $\tau_8$  з розщепленням його на однократні  $\tau_4$  та  $\tau_8$ .

При цьому (12) набуде вигляду:

$$\Gamma_{vibr}(D_{4h}^1) = \tau_4(Ba) + \tau_{10}(Ba) + \tau_4(Ti) + \tau_{10}(Ti) + \tau_8(O) + 2\tau_{10}(O) = 4\tau_4 + \tau_8 + 5\tau_{10} \quad (13)$$

Таблиця 1.

Атоми (позиції)	Розклади за незвідними зображеннями	
	$O_h^1$	$D_{4h}^1$
$Ba(0,0,0)$	$\tau_{10}$	$\tau_4 + \tau_{10}$
$Ti(a, a, a)$	$\tau_{10}$	$\tau_4 + \tau_{10}$
$O_1(a, a, 0)$	$1/3\tau_8 + 2/3\tau_{10}$	$\tau_4 + \tau_{10}$
$O_2(a, 0, a)$	$1/3\tau_8 + 2/3\tau_{10}$	$1/2\tau_4 + 1/2\tau_8 +$ $+\tau_{10}$
$O_3(0, a, a)$	$1/3\tau_8 + 2/3\tau_{10}$	$1/2\tau_4 + 1/2\tau_8 +$ $+\tau_{10}$

Таблиця 2.

Атоми (позиції)	Розклади за незвідними зображеннями	
	для лінії $\Lambda$	для лінії $\Delta$
$Ba(0,0,0)$	$\tau_1 + \tau_3$	$\tau_1 + \tau_5$
$Ti(a, a, a)$	$\tau_1 + \tau_3$	$\tau_1 + \tau_5$
$O_1(a, a, 0)$	$\frac{2}{3}\tau_1 + \frac{1}{3}\tau_2 + \tau_3$	$\tau_1 + \tau_5$
$O_2(a, 0, a)$	$\frac{2}{3}\tau_1 + \frac{1}{3}\tau_2 + \tau_3$	$\frac{1}{2}\tau_1 + \frac{1}{2}\tau_3 + \tau_5$
$O_3(0, a, a)$	$\frac{2}{3}\tau_1 + \frac{1}{3}\tau_2 + \tau_3$	$\frac{1}{2}\tau_1 + \frac{1}{2}\tau_3 + \tau_5$

Це характерно для похідних дефектних типів I [тип A ( $BaTiOO\otimes$ )] та II [тип B ( $BaTi\otimes\otimes O$ )], де  $\otimes$  - вакансія у відповідних позиціях атомів кисню. При подібних перетвореннях структур з кубічної в одну з тетрагональних фаз, спостерігається складна перебудова вироджень фононного спектру.

Виходячи з принципів концепції надпросторової симетрії, одержані розклади для всіх можливих векторів  $\vec{k}_i$  для випадків кубічної симетрії (табл.2-3), а також повні коливні зображення (табл.4):

Таблиця 3.

Атоми (позиції)	Розклади за незвідними зображеннями	
	для лінії $\Sigma$	для випадку точки X або M
$Ba(0,0,0)$	$\tau_1 + \tau_3 + \tau_4$	$\tau_4 + \tau_{10}$
$Ti(a, a, a)$	$\tau_1 + \tau_3 + \tau_4$	$\tau_4 + \tau_{10}$

$O_1(a, a, 0)$	$\tau_1 + \tau_3 + \tau_4$	$\tau_4 + \tau_{10}$
$O_2(a, 0, a)$	$\tau_1 + \frac{1}{2}\tau_2 +$ $+ \tau_3 + \frac{1}{2}\tau_4$	$\tau_4 + \tau_6 + \tau_8$
$O_3(0, a, a)$	$\tau_1 + \frac{1}{2}\tau_2 +$ $+ \tau_3 + \frac{1}{2}\tau_4$	$\tau_4 + \tau_6 + \tau_8$

Таблиця 4

Вектор $k_i$	Повне коливне зображення
$k_{12}, k_{13} (\Gamma, R)$	$\tau_8 + 4\tau_{10}$
$k_{10}, k_{11} (M, X)$	$4\tau_4 + \tau_8 + 5\tau_{10}$
$k_9 (\Lambda)$	$4\tau_1 + \tau_2 + 5\tau_3$
$k_8 (\Delta)$	$4\tau_1 + \tau_3 + 5\tau_5$
$k_4 (\Sigma)$	$5\tau_1 + \tau_2 + 5\tau_3 + 4\tau_4$

В зв'язку з цим проведено розділення коливань за типами симетрії, використовуючи метод класифікації коливних мод в надпросторовому підході.

Для дослідження генезису фононних спектрів складних кубічних кристалів з надграткою  $(2a \times 2a \times 2a)$  проводились чисельні розрахунки фононних спектрів в нееквідистантному наближенні для високосиметричних напрямків ЗБ.

Розрахунки фононних спектрів кристалу  $BaTiO_3$  проведено для випадків кубічної та тетрагональних (I і II) фаз. Високочастотні коливання характерні для атому кисню, а низькочастотні – для атомів барію та титану. В точці  $\Gamma$  для випадку кубічної фази наявні трьохкратні виродження фононних частот, а саме:  $653.59(3) \text{ cm}^{-1}$ ,  $450.47(3) \text{ cm}^{-1}$ ,  $293.49(3) \text{ cm}^{-1}$ ,  $147.82(3) \text{ cm}^{-1}$ . По мірі появи дефектності спостерігаються розщеплення фононних частот, зокрема,

- для випадку тетрагональної фази I:  $577.48(2) \text{ cm}^{-1}$ ,  $450.47 \text{ cm}^{-1}$ ,  $343.36 \text{ cm}^{-1}$ ,  $320.28(2) \text{ cm}^{-1}$ ,  $147.97(2) \text{ cm}^{-1}$ ,  $147.97 \text{ cm}^{-1}$ ;

- для випадку тетрагональної фази II:  $394.74 \text{ cm}^{-1}$ ,  $382.07(2) \text{ cm}^{-1}$ ,  $148.12 \text{ cm}^{-1}$ ,  $148.10(2) \text{ cm}^{-1}$ , де в дужках показані степені виродження фононних частот.



В результаті розроблена процедура модельних розрахунків дисперсії фононних спектрів кристалічних структур сімейства кристалів з  $(2a \times 2a \times 2a)$  природною надграткою, в якій досліджено їх трансформацію, в залежності від композиційних і силових варіацій в системах  $ABC_3$  з  $(2a \times 2a \times 2c)$ -надграткою (рис.3).

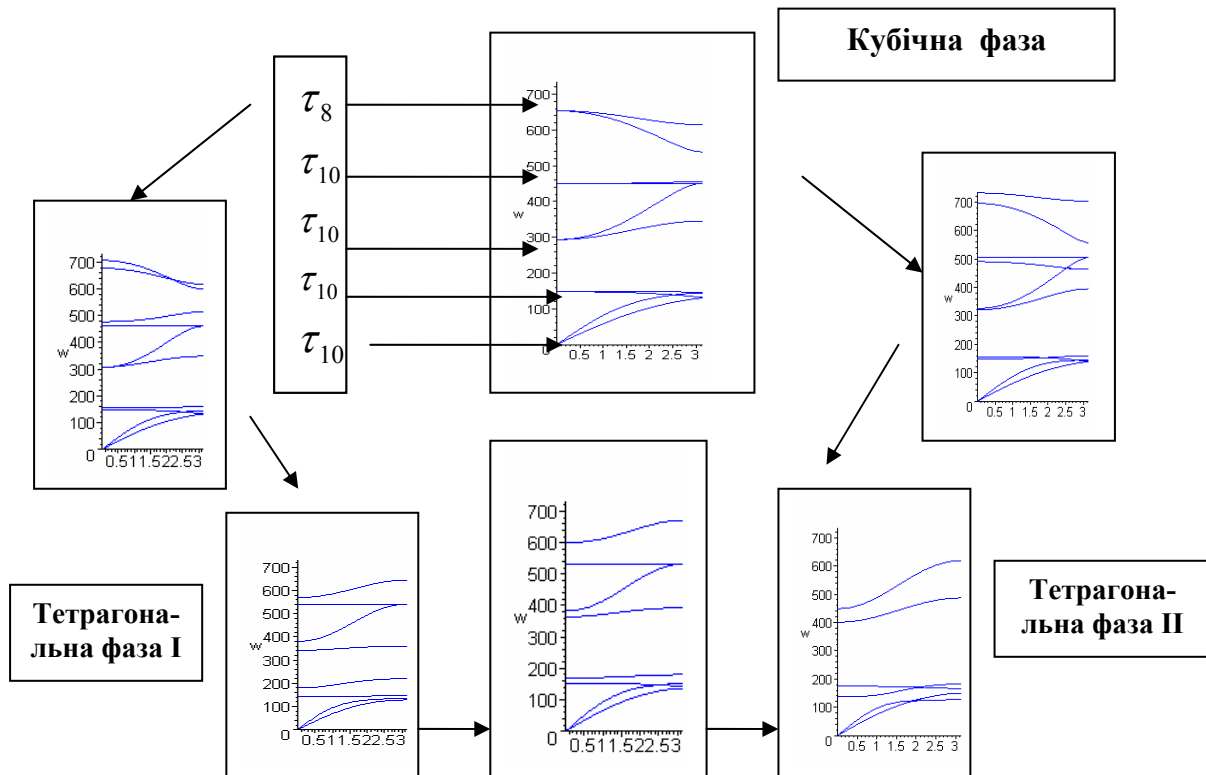


Рис. 3. Модифікація фононного спектру кристалу  $BaTiO_3$  для напрямку  $\Gamma$ -Z при фазових перетвореннях типів: кубічна фаза – тетрагональна фаза I, кубічна фаза – тетрагональна фаза II, тетрагональна фаза I - тетрагональна фаза II.

### Висновки

Дана методика дозволяє проводити детальний симетрійний аналіз по вивченню особливостей структур нових високотемпературних надпровідників, сегетоелектриків, сегнетоеластиків та інших нових матеріалів, похідних від структури  $BaTiO_3$ , а також вивчати особливості їх фононних спектрів при структурних перетвореннях.

### ЛІТЕРАТУРА

1. К.С.Александров, Б.В.Безносиков. Иерархия перовскитоподобных кристаллов (Обзор). // ФТТ. – 1997. – Т.39, №5. – с.785-808.
2. X.L.Zhang. Research and Development of Electronic Ceramics in China /Proc. Conf. Electroceramics V.1996. – Sept. 2-4, Aveiro, Portugal, Book 1. - P.91-96.
3. Полупроводники на основе титаната бария/Пер. с японского И.Б.Реута. – М.:Энергоиздат.1982. – 325 с.

4. И.И.Небола, А.Ф.Иваняс, В.Я.Киндрат. Генезис структуры и колебательных спектров кристаллов с  $(sa \times sa \times sa)$ -сверхрешеткой. // ФТТ. – 1993. – Т.35, №7. – с.1852-1866.
5. Небола И.И., Хархалис Н.Р., Копцик А.В. Дисперсия фононного спектра сложных кристаллов типа NaCl в концепции сверхпространственной симметрии // ФТТ. – 1987. – Т. 29, № 11. – С. 3223–3232.
6. Небола І.І. Композиційні особливості складних кристалів та їх прояв у динаміці ґратки// Вісник Ужгородського університету, Серія Фізика №2, – 1998. – С. 54-57.
7. Janner A., Janssen T. Symmetry of incommensurate crystal phases. 2. Incommensurate basic structures.// Acta. Cryst. – 1980. – Vol. A36. – p. 408-415.
8. Janssen T., Janner A. Superspace groups and representations of ordinary space groups: alternative approaches to the symmetry of incommensurate crystal phases. // Physica.-1984.-Vol. 126A.- p.163-176.
9. P.M. de Wolff, Janssen T., Janner A. The superspace groups of incommensurate crystal structures with a one-dimensional modulation. // Acta. Cryst. – 1981. – Vol. A37. – p. 625-636.
10. Janssen T. On the lattice dynamics of incommensurate crystal phases. // J. Phys. C: Solid State Phys. – 1979. – Vol.12. – p. 1534 – 1543.
11. Janner A., Janssen T. Symmetry of incommensurate crystal phases. 1. Commensurate basic structures.// Acta. Cryst. – 1980. – Vol. A36. – p. 399-408.
12. D.Khatib, R.Migoni, G.E.Kugel and L.Godefroy. Lattice dynamics of BaTiO<sub>3</sub> in the cubic phase.// J.Phys.:Condens. Matter. – 1989. – Vol.1. – p.9811-9822.

### АННОТАЦИЯ

#### АНАЛИЗ ТРАНСФОРМАЦИИ КУБИЧЕСКАЯ ФАЗА – ТЕТРАГОНАЛЬНАЯ ФАЗА В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗОВАНИЯХ С $(2a \times 2a \times 2a)$ -СВЕРХРЕШЕТКОЙ

Проведен детальный симметричный анализ модельных преобразований структур перовскитных кристаллических образований типа  $ABC_3$ , с учетом дефектностей типов I ( $ABCC \otimes$ ) и II ( $AB \otimes \otimes C$ ) (где  $\otimes$  - вакансия) при возможной трансформации кубическая фаза – тетрагональная фаза; проведен расчет дисперсионных зависимостей фононных спектров кристалла  $BaTiO_3$  и производных от него кристаллических образований с  $(2a \times 2a \times 2c')$ - сверхрешеткой с учетом дефектностей типов I и II, а также исследованы их особенности.

### THE SUMMARY

#### ANALYSIS OF TRANSFORMATION CUBE PHASE IS TETRAGONAL PHASE IN CRYSTALLINE FORMATIONS WITH $(2a \times 2a \times 2a)$ - SUPERLATTICE

The detailed symmetry analysis of models transformations of structures of perovskite of crystalline formations of type  $ABC_3$  is conducted  $ABC_3$  with the recognition defects of types I ( $ABCC \otimes$ ) but II ( $AB \otimes \otimes C$ ) (where  $\otimes$  is vacancy) during possible transformation a cube phase is a tetragonal phase; dispersion dependences of phonon spectrums are expected to the crystal  $BaTiO_3$  and derivates from him crystalline formations from  $(2a \times 2a \times 2c')$ - superlattice recognition defects of types I and II, and also their features are investigated.