

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ СОСТОЯНИЙ И СТРУКТУР НИЗКОСИММЕТРИЧНЫХ ФАЗ LiCoO_2

Таланов В.М., *Широков В.Б., *Торгашев В.И, Бергер Г.А., Бурцев В.А.

Южно-Российский государственный технический университет,

**Южный федеральный университет.*

Особый интерес в семействе кристаллов MCoO_2 обладающих необычными физическими свойствами (сверхпроводимость, фазовые переходы полупроводник-металл и др.), представляет LiCoO_2 , который используется в качестве катодного материала в химических источниках тока. В данной работе предпринята попытка построить диаграммы фазовых состояний и рассчитать структуры низкосимметричных фаз LiCoO_2 .

Структуры всех фаз LiCoO_2 можно рассмотреть как результат упорядочения атомов в прафазе со структурой поваренной соли: в позиции 4(а) беспорядочно распределены атомы лития и кобальта, а позиции 4(в) занимает кислород. Симметричный анализ экспериментального материала показывает, что возможными критическими неприводимыми представлениями (НП), индуцирующими все многообразие фаз, являются четырехмерные представления $k_9(\tau_1)$ - и $k_9(\tau_4)$ группы $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$. Эти представления связаны внешним автоморфизмом; они генерируют низкосимметричные фазы с попарно одинаковыми пространственными группами.

Термодинамический потенциал феноменологической теории, инвариантный относительно группы симметрии прафазы, заданной НП $k_9(\tau_1)$ и $k_9(\tau_4)$ пространственной группы $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$, представим в виде ряда по четырем инвариантам

$$\Phi = a_1 J_1 + a_2 J_1^2 + b_1 J_2 + c_1 J_3 + a_3 J_1^3 + c_{12} J_1 J_2 + d_1 J_4 \quad , \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} J_1 &= \eta_1^2 + \eta_2^2 + \eta_3^2 + \eta_4^2, & J_2 &= \eta_1^2 \eta_2^2 + \eta_1^2 \eta_3^2 + \eta_1^2 \eta_4^2 + \eta_2^2 \eta_3^2 + \eta_2^2 \eta_4^2 + \eta_3^2 \eta_4^2, \\ J_3 &= \eta_1 \eta_2 \eta_3 \eta_4, & J_4 &= \eta_1^2 \eta_2^2 \eta_3^2 + \eta_1^2 \eta_2^2 \eta_4^2 + \eta_1^2 \eta_3^2 \eta_4^2 + \eta_2^2 \eta_3^2 \eta_4^2 \end{aligned} \quad (2)$$

составляют целый рациональный базис инвариантов (неприводимые представления четырехмерны). В результате анализа потенциала (1) построены различные типы фазовых диаграмм, проведено моделирование структурных механизмов образования низкосимметричных фаз, рассчитаны структуры возможных модификаций LiCoO_2 .