

СТРУКТУРНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СЛОЖНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ

Лыках В.А.¹, Сыркин Е.С.², Троцкий Е.Н.³

¹ *Национальный технический университет*

«Харьковский политехнический институт»,

² *ФТИНТ имени Б. И. Веркина НАН Украины,*

³ *Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина, г. Харьков*

Рассмотрим одномерную модель кристалла, в которой плоские органические молекулы соприкасаются широкими плоскостями. Считаем, что плоскость молекул перпендикулярна направлению одномерной цепочки. Примером такого кристалла является молекулярный кристалл BEDT [1], в котором возможно зарядовое упорядочение при добавлении малых молекул другого сорта. Считаем, что взаимодействие между плоскостями больших молекул определяется потенциалом Леннарда-Джонса в форме:

$$U(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где r_0 – равновесное расстояние между большими молекулами, а ε – глубина потенциальной ямы. Пусть малая молекула занимает положение между большими. Для взаимодействия малых молекул между собой и с большой молекулой используем формулу (1) с заменой r_0 на r_s .

Показано, что при варьировании параметра $s = r_s / r_0$ малая молекула находится в изменяющемся двухямном потенциале. С возрастанием s от 0 до 0.44 барьер между ямами сужается, а при $s > 0.44$ барьер между ямами исчезает. Высота барьера в двухямном потенциале определяет температуру структурного фазового перехода в кристалле. В настоящем сообщении анализируется зависимость высоты барьера от параметра s .

Показано также, что при наличии малых молекул равновесное расстояние между большими уменьшается, то есть при внедрении малой молекулы происходит сближение больших молекул, период молекулярной цепочки уменьшается по сравнению с однородным кристаллом, состоящим только из больших молекул. В случае, когда все молекулы электронейтральны и малые молекулы заполняют каждый промежуток между большими, то при низких температурах происходит структурный фазовый переход: малые молекулы группируются попарно вблизи большой молекулы, период решетки удваивается. В случае переноса заряда между большой и малой молекулами при низких температурах возникает зарядово-упорядоченное состояние.

Литература:

[1]. Kagawa F. Quenching of charge and spin degrees of freedom in condensed matter / Kagawa F., Oike H. // *Advanced Materials*. – 2017. – Vol. 29. – №. 25. – P. 1601979