

铁电体 (BaTiO_3)极化特性解释

USTC

黄正化

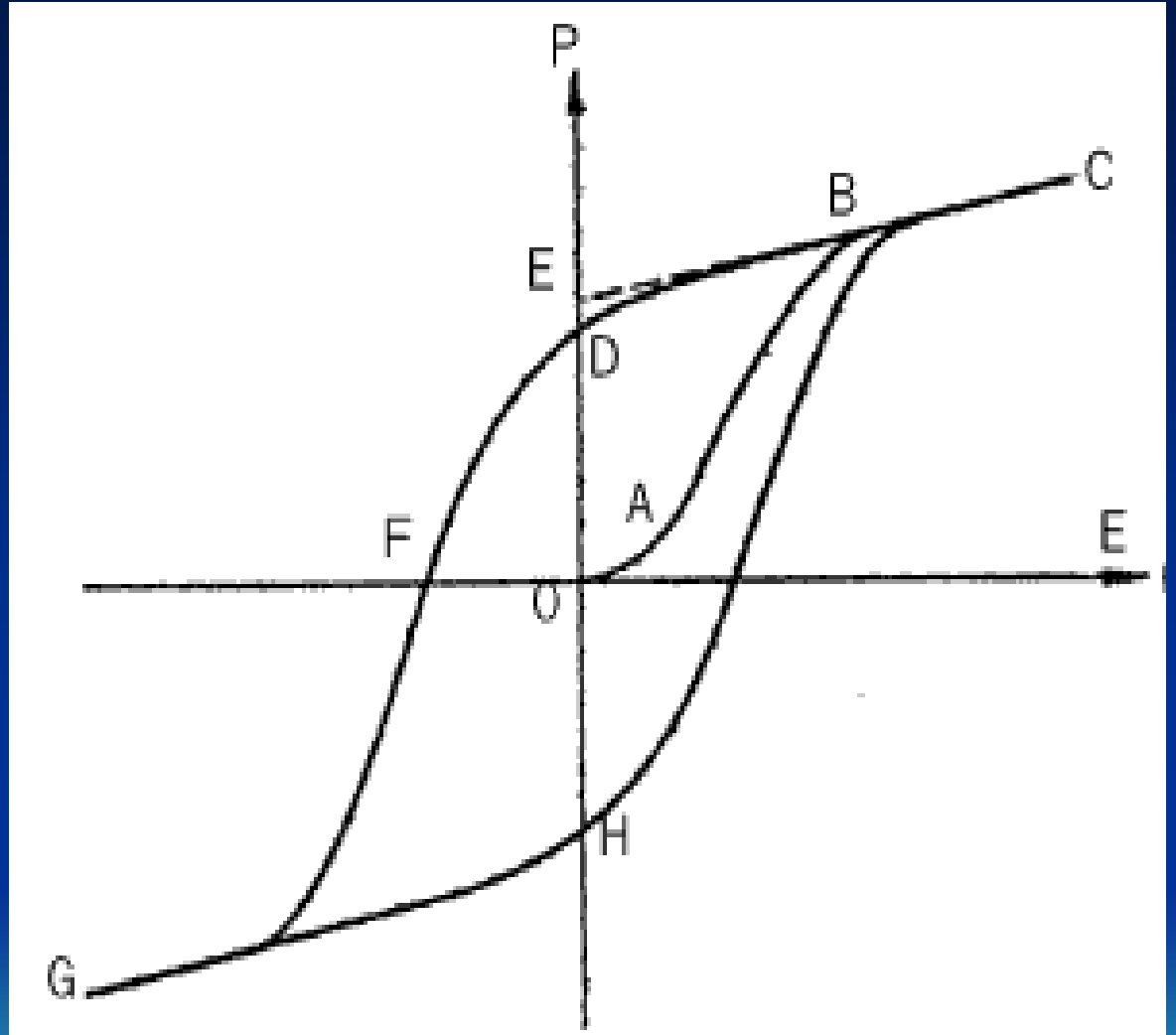
2003



铁电体的极化特性

- 一般铁电体的晶体结构和成键特点和电子分布
- BaTiO_3 的电子构型
- BaTiO_3 极化特性的解释
- 对居里点得解释
- 电滞出现的条件
- 外来离子的影响

- 電滯迴線



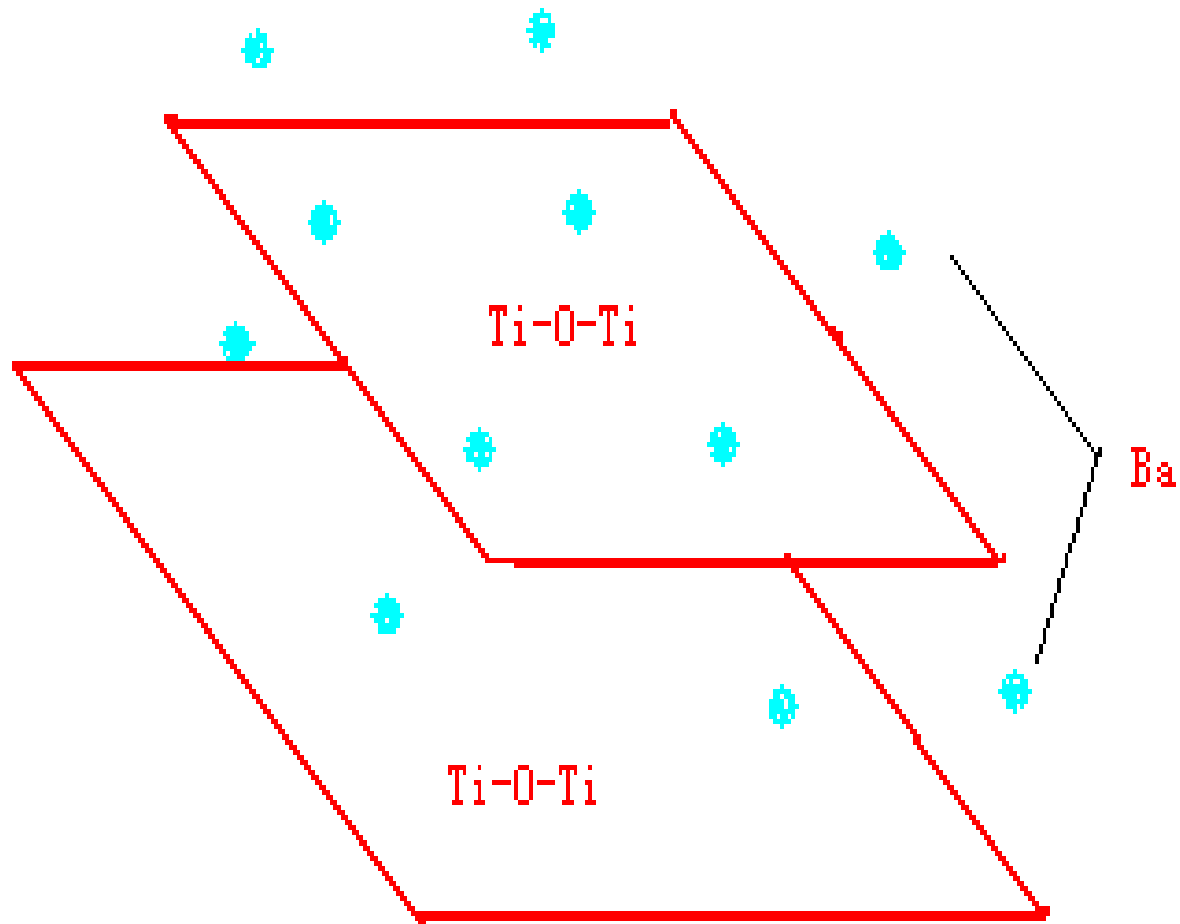
■ Nikon 偏光顯微鏡



一般铁电体的晶体结构和成键特点和电子分布

- 一般铁电体的晶体结构：一般为层状钙钛矿型。
- 铁电体的成键特点和电子分布：正离子一般为多层多电子型，以较弱的离子键成键。
- Ti-O-Ti以网格状分布与一层中，Ba离子单独于一层中。（见图）

- BaTiO₃
晶体结构



BaTiO₃ 的电子构型

- Ba正离子: $1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^6 3d^{10} 4S^2 4P^6 4d^{10} 5S^2 5P^6$
- Ti正离: $1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^6$
- O负离子: $1S^2 2S^2 2P^6$



BaTiO₃极化特性的解释

- E作用下电子的偏移
- Ba离子核外空轨道：4f.5p.5d.6S。能量均较低，可以比较容易地容纳电子。
- Ti-O-Ti层电子的丢失：Ba外层电子轨道俘获从Ti-O-Ti层偏移来电子
- 电滞（Pr）出现：电子在Ba层中的滞留

- 正反电滞的出现： BaTiO_3 晶体层状对称性，反向电场(-E)使电子偏向Ti-O-Ti层另一侧的Ba层，表现为反向的电滞（-Pr）。
- Pr的出现使电滞回线不再沿开始的极化曲线返回原点

对居里点得解释

- 电子的能量也可以依靠热运动来获得。一定的温度使得Ba的外层电子轨道无法再俘获外来的电子，使得极化不再出现，这一温度叫居里点。利用经典的方法：

$$mv^2 = \frac{56e^2}{4\pi\epsilon_0 r_G} = \frac{14e^2}{\pi\epsilon_0 r_G}$$

可见 $\frac{n}{r}$ 越大居里点越高。当然这只是一
种趋向，不能由此计算居里点（经典理论
不适用于原子尺寸）。

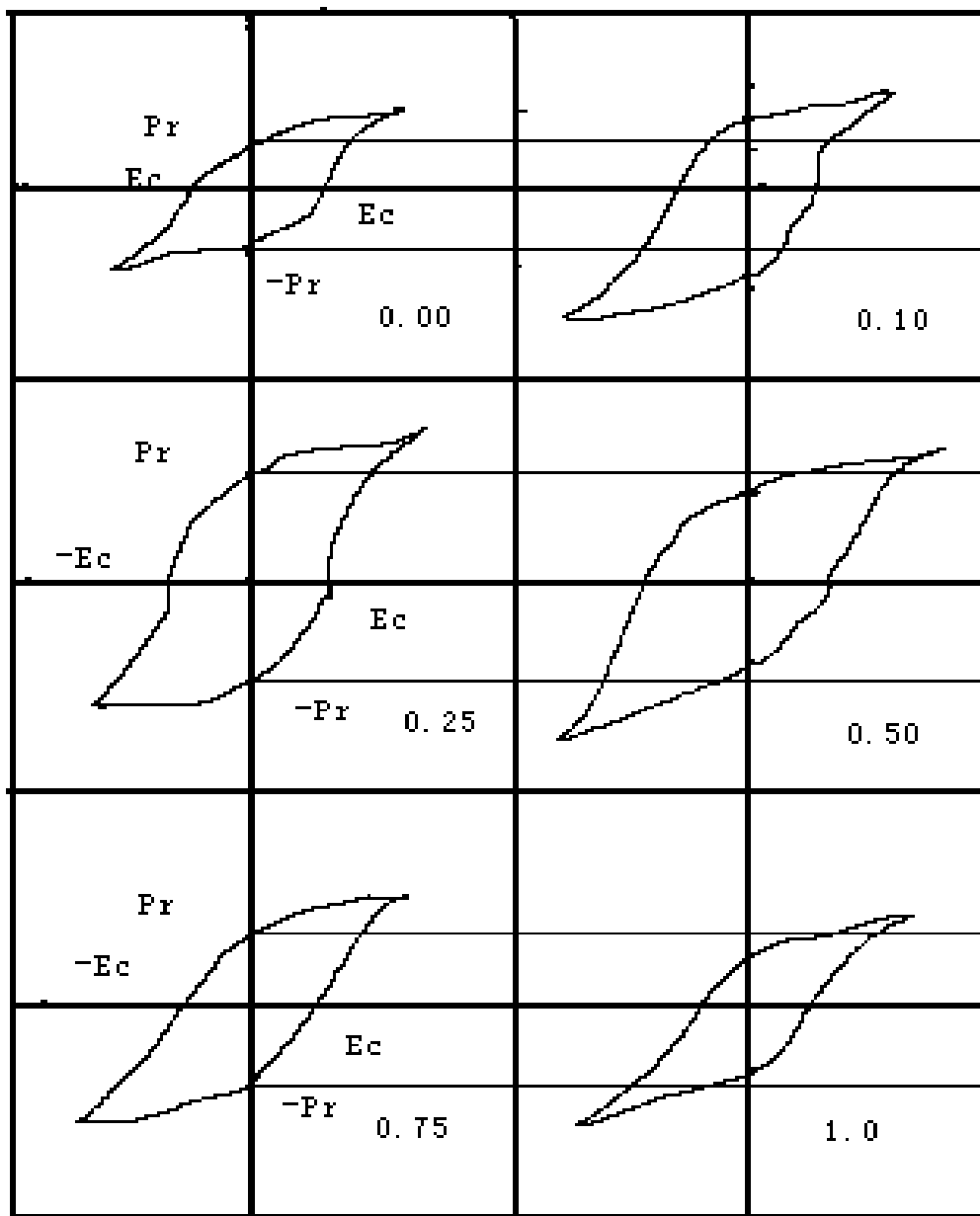
电滞出现的条件

- 温度在居里点以下
- 正离子为多质子核，且 n/r 足够大
- 正离子核外有空的且能级比较低的轨道
- 负离子为非强电负性
- 晶体结构为对称的层状结构

外来离子的影响

- 如在Ba层中引入结构比较复杂的离子如：La系，由于La系有 $(n-2)f, (n-1)d$ 等能级更低的轨道，故电滞Pr较大；若在Ti-O-Ti层中引入La等，则电子不易偏向Ba层，从而使Pr更小。（图）。

•SBLT-x样品电滞回线



Thank you

