

Сегнетоэлектрическое упорядочение молекул воды, расположенных в нанопорах минералов

Ferroelectric ordering of water molecules singly confined in mineral nanopores

Автор: Абалмасов В.А.

Author: Abalmasov V.A.

С помощью метода Монте Карло, ранее опробованного на диэлектриках с водородными связями [1], получены термодинамически равновесные конфигурации диполей молекул воды в нанопорах кордиерита при разных температурах (рис. 1.1) и зависимость термодинамических величин от температуры (рис. 1.2). На основании этих данных сделано заключение, что особенности в диэлектрической проницаемости и теплоёмкости при температуре около 5 и 20–30 К, наблюдаемые в эксперименте, связаны с упорядочением проекций диполей вдоль оси a и b соответственно, при этом угол между направлением диполя и осью b должен быть равен примерно 20 градусам. Несмотря на то что (анти) сегнетоэлектрический параметр порядка практически равен нулю, ниже некоторой температуры оказывается отличным от нуля стекольный параметр порядка и, согласно результатам моделирования, возрастают размеры кластеров сонаправленных диполей. Это может указывать на переход системы молекул воды в кордиерите с коэффициентом заполнения пор 0.75 в состояние дипольного стекла с элементами ближнего порядка при низкой температуре [2].

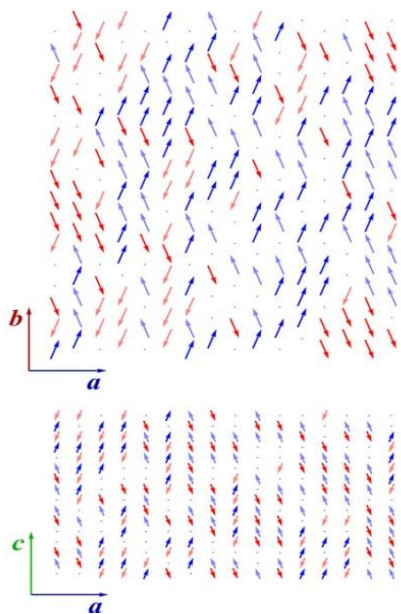


Рис. 1.1. Конфигурация диполей молекул воды в кордиерите при $T = 0$

Fig. 1.1. Configuration of dipoles of water molecules confined in cordierite pores at temperature $T = 0$

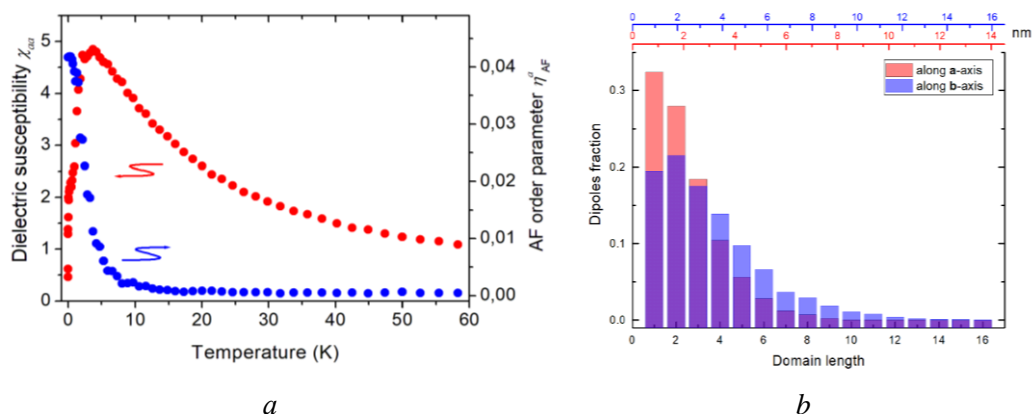


Рис. 1.2. Диэлектрическая проницаемость и антисегнетоэлектрический параметр порядка (а) и доля диполей в кластерах различной длины, образованных диполями, сонаправленными вдоль оси b (рис. 1.1), при T = 0 (b)

Fig. 1.2. Dielectric susceptibility and antiferroelectric order parameter (a) and fraction of dipoles in clusters of different lengths of dipoles parallel to the b (Fig. 1.1) axis at T = 0 (b)

Thermodynamically equilibrium dipole configurations of water molecules in cordierite nanopores (Fig. 1.1) as well as their thermodynamic quantities at different temperatures (Fig. 1.2) were obtained using the Monte Carlo method, which was previously successfully applied to hydrogen-bonded ferroelectrics [1]. Based on these results, it was concluded that the experimentally observed anomalies of the dielectric susceptibility and heat capacity at temperatures of 5 and 20–30 K are due to the ordering of the dipole components along the a and b axes, respectively, while the angle between the dipole and the b axis should be approximately 20 degrees. At low temperature, with the antiferroelectric order parameter being always close to zero, a nonzero glass order parameter appears, and the length of clusters of parallel dipoles increases, according to the calculations (Fig. 1.2, b). This indicates a dipole glass transition of the subsystem of water molecules in cordierite with a pore filling factor of 0.75 and the appearance of the dipole short-range order at low temperature [2].

Публикации/References:

1. Abalmassov V.A. Monte Carlo studies of the ferroelectric phase transition in KDP // Ferroelectrics. – 2019. – Vol. 538, is.1. – P. 1–5. – DOI:10.1080/00150193.2019.1569978.
2. Belyanchikov M.A., Savinov M., Bedran Z.V., Bednyakov P., Proschek P., Prokleska J., Abalmassov V.A., Petzelt J., Zhukova E.S., Thomas V.G., Dudka A., Zhugayevych A., Prokhorov A.S., Anzin V.B., Kremer R.K., Fischer J.K.H., Lunkenheimer P., Loidl A., Uykur E., Dressel M., Gorshunov B. Dielectric ordering of water molecules arranged in a dipolar lattice // Nature communications. – 2020. – Vol. 11, is. 1. – P. 3927 (9 p.). – DOI 10.1038/s41467-020-17832-y.