

Нелинейные свойства среды с эллипсоидальными сегнетоэлектрическими нановключениями

© О.Г. Вендик, Н.Ю. Медведева, С.П. Зубко

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет (ЛЭТИ),
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: NYuMedvedeva@mail.ru

Разработана модель, описывающая диэлектрические свойства композитного материала с эллипсоидальными сегнетоэлектрическими включениями. Определена зависимость эффективной диэлектрической проницаемости композитного материала от приложенного внешнего электрического поля при различных размерах сегнетоэлектрических включений. Оценена управляемость рассматриваемого композитного материала.

Работа является частью международного проекта „NanoStar“ 6-й Рамочной программы Еврокомиссии.

PACS: 77.84.-s, 77.22.Ch, 77.55.+f

Создание композитных материалов или метаматериалов, обладающих совершенно новыми свойствами по сравнению с уже имеющимися материалами, является одним из приоритетных направлений научных исследований последнего десятилетия. Особенное место занимают диэлектрик-сегнетоэлектрические структуры. Наиболее часто в литературе встречается описание сегнетоэлектрических сред с диэлектрическими включениями различной формы [1].

В настоящей работе рассматривается диэлектрическая среда с сегнетоэлектрическими эллипсоидальными включениями. Гранулы сегнетоэлектрического материала имеют размеры порядка десятков нанометров. На поверхности каждой гранулы имеется тонкий не обладающий сегнетоэлектрическими свойствами („мертвый“) слой, толщина которого по экспериментальным оценкам составляет приблизительно 2 нм, а диэлектрическая проницаемость 40 [2]. Структура рассматриваемой среды и ее элементарной составной ячейки представлена схематически на рис. 1.

Чтобы найти распределение электрического поля в каждой из трех рассматриваемых областей (1 — сегнетоэлектрик с диэлектрической проницаемостью $\epsilon_1 = \epsilon_f$, 2 — „мертвый“ слой с диэлектрической проницаемостью ϵ_2 , 3 — диэлектрик с диэлектрической проницаемостью ϵ_3), необходимо решить уравнение Лапласа в эллипсоидальных координатах

$$\Delta\psi(u, v) = 0. \tag{1}$$

Решение данного уравнения имеет вид

$$\psi_p(u, v) = \left[A_p \operatorname{ch}(v) + B_p \left(-\operatorname{ch}(v) \ln\left(\operatorname{th}\frac{v}{2}\right) - 1 \right) \right] \sin u, \tag{2}$$

где A_p, B_p — постоянные интегрирования ($p = 1, 2, 3$ — индекс, соответствующий одной из рассматриваемых областей).

Компоненты векторов электрического поля в эллиптической системе координат будут определяться следу-

ющими выражениями:

$$E_{pu}(u, v) = \sqrt{D(u, v)} [A_p \operatorname{ch}(v) + B_p cr(v)] \cos u, \tag{3}$$

$$E_{pv}(u, v) = \sqrt{D(u, v)} [A_p \operatorname{sh}(v) + B_p sr(v)] \sin u, \tag{4}$$

где

$$D(u, v) = 1/[\alpha^2(\operatorname{ch}^2 v - \sin^2 u)], \quad \alpha = \sqrt{b^2 - a^2},$$

$$sr(v) = -\operatorname{sh} v \ln(\operatorname{th}(v/2)) - 1/\operatorname{th} v,$$

$$cr(v) = -\operatorname{ch} v \ln(\operatorname{th}(v/2)) - 1.$$

Для решения поставленной задачи будем использовать стандартные граничные условия для электрического поля на границе раздела двух сред и два дополнительных граничных условия, приведенных далее,

$$B_2 = 0, \quad A_3 = \alpha E_{\text{ext}}, \tag{5}$$

где E_{ext} — однородное внешнее электрическое поле.

Зная распределение поля в заданной структуре, можно найти дипольные моменты гранулы D_1 , „мертвого“ слоя D_2 и окружающей диэлектрической среды D_3 и определить эффективную диэлектрическую проницаемость рассматриваемой среды с эллипсоидальными

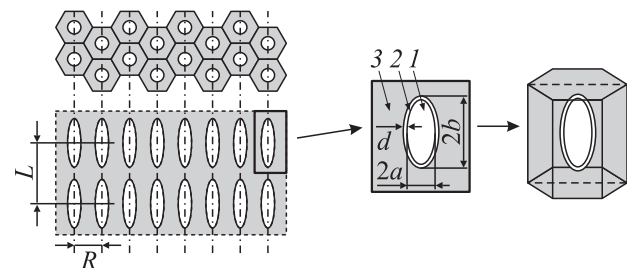


Рис. 1. Схематическая структура диэлектрической среды с эллипсоидальными нановключениями. 1 — сегнетоэлектрик, 2 — „мертвый“ слой, 3 — диэлектрик. L, R — расстояния между центрами нановключений вдоль большой и малой полуосей эллипсоида соответственно.

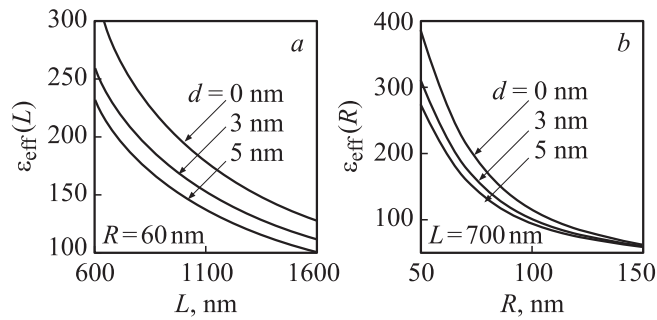


Рис. 2. Зависимость эффективной диэлектрической проницаемости среды от расстояния L между центрами включений вдоль большой полуоси эллипсоида (а) и от расстояния R между центрами включений вдоль малой полуоси эллипсоида (b) при различных значениях толщины „мертвого“ слоя.

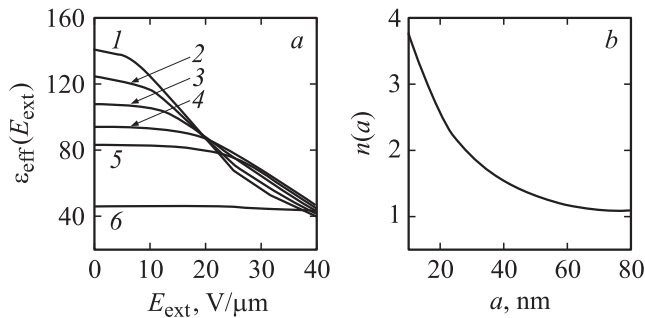


Рис. 3. а) Зависимость эффективной диэлектрической проницаемости среды от внешнего электрического поля при разных значениях малой полуоси эллипсоида, a , nm: 1 — 10, 2 — 15, 3 — 20, 4 — 25, 5 — 30, 6 — 75. б) Зависимость управляемости среды от размера малой полуоси эллипсоида.

нановключениями

$$\epsilon_{\text{eff}} = \frac{D_1 + D_2 + D_3}{\epsilon_0 E_{\text{ext}} V}, \quad (6)$$

где ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость свободного пространства, V — полный объем элементарной ячейки среды.

Подробное описание всех вычислений приведено в работе [3].

На рис. 2, а, б представлены графики зависимости эффективной диэлектрической проницаемости среды от расстояний между центрами эллипсоидов при разных значениях толщины „мертвого“ слоя. Все расчеты производились при следующих заданных параметрах: $a = 25$ nm, $b = 300$ nm, $\epsilon_1 = 1500$, $\epsilon_2 = 40$, $\epsilon_3 = 20$.

Далее была определена зависимость эффективной диэлектрической проницаемости диэлектрической среды с эллипсоидальными сегнетоэлектрическими включениями от приложенного внешнего однородного электрического поля при разных значениях малой полуоси эллипсоида (рис. 3, а). С учетом полученных данных была найдена управляемость моделируемой среды (рис. 3, б). Под

управляемостью понималось следующее отношение:

$$n_{\text{eff}} = \frac{\epsilon_{\text{eff}}(0)}{\epsilon_{\text{eff}}(E_{\text{ext}}^{\text{max}})}, \quad (7)$$

где $\epsilon_{\text{eff}}(0)$ — значение эффективной диэлектрической проницаемости при $E_{\text{ext}} = 0$, $\epsilon_{\text{eff}}(E_{\text{ext}}^{\text{max}})$ — значение эффективной диэлектрической проницаемости при $E_{\text{ext}} = E_{\text{ext}}^{\text{max}} = 40$ V/ μm . В расчет принимались следующие параметры: $d = 2$ nm, $b = 100$ nm, $\epsilon_1 = 500$, $\epsilon_2 = 40$, $\epsilon_3 = 20$, $\gamma = 2$ (γ — мера заполненности среды, определяемая как отношение объема элементарной ячейки к объему эллипсоида).

Чем меньше малая полуось эллипсоида, тем выше управляемость и больше эффективная диэлектрическая проницаемость рассматриваемой диэлектрической среды с нановключениями.

Список литературы

- [1] A.K. Tagantsev, V.O. Sherman, K.F. Astafiev, J. Vencatesh, N. Setter. *J. Electroceram.* **11**, 3 (2004).
- [2] B. Chen, H. Yang, L. Zhao, J. Miao, B. Xu, X.G. Qiu, B.R. Zhao, X.Y. Qi, X.F. Duan. *Appl. Phys. Lett.* **84**, 4, 583 (2004).
- [3] О.Г. Вендик, Н.Ю. Медведева, С.П. Зубко. *Письма в ЖТФ* **34**, 8, 13 (2008).