

Моделирование динамики пространственной доменной структуры сегнетоэлектрического кристалла триглицинсульфата

© М.Б. Белоненко, А.С. Сасов

Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет,
400074 Волгоград, Россия

E-mail: mbelonenko@yandex.ru

Рассмотрена динамика доменной структуры сегнетоэлектриков типа порядок–беспорядок, подобных кристаллу триглицинсульфата. Исходя из гамильтониана задачи получено кинетическое уравнение для описания динамики поляризации сегнетоэлектриков. Проведен анализ результатов, а также их сравнение с экспериментальными данными.

PACS: 77.80.Dj, 64.60.Cn, 77.84.Fa

1. Современные направления физики сегнетоэлектрических явлений требуют не только понимания механизма процессов образования и развития доменной структуры, но и их математического описания с целью предсказания новых свойств и особенностей уже давно исследуемых экспериментально веществ [1,2]. В частности, в сегнетоэлектриках типа порядок–беспорядок периодические структуры доменного типа, напоминающие солитонные решетки, хорошо наблюдаются в экспериментах по визуализации доменной структуры методом нематических жидких кристаллов (рисунок, *a*) и нуждаются, на наш взгляд, в дополнительном теоретическом осмыслении.

2. Для кристаллов типа триглицинсульфата с учетом малости туннельных эффектов основной гамильтониан задачи будет иметь вид

$$H = -\frac{1}{2} \sum_j J_{ij} S_i^z S_j^z - E_0 \sum_j S_j^z + H_{sa} + H_T, \quad (1)$$

где S_j^z имеет смысл оператора электрического дипольного момента j -й ячейки, J_{ij} — обменный интеграл, перенормированный с учетом теплового движения атомов, E_0 — приложенное к образцу постоянное электрическое поле. Оператор H_{sa} представляет собой гамильтониан взаимодействия псевдоспиновой системы со звуком, возбуждаемым в образце вследствие пьезоэффекта. Конкретный вид H_{sa} зависит от направления распространения и вида звуковых колебаний по отношению к кристаллографическим осям x' , y' , z' . Ограничимся рассмотрением звуковых колебаний одного типа и запишем H_{sa} в предположении, что звук обусловлен линейным пьезоэффектом

$$H_{sa} = - \sum_j d \frac{\partial u(y'z', t)}{\partial y'} S_j^z, \quad (2)$$

где d — соответствующий пьезомодуль, u — величина вектора смещения. H_T — гамильтониан взаимодействия псевдоспиновой системы с термостатом, ответственный за поглощение энергии псевдоспиновой системой.

Отметим, что, поскольку поглощение энергии носит релаксационный характер, необходимо вывести соответствующие кинетические уравнения для данного случая.

Такие уравнения можно получить методом неравновесного статистического оператора Зубарева [3] и методом Глаубера [4]. Из уравнения для средних значений величин, составленных из произведений спинов

$$\prod_f \sigma_{qf} = \sum_{\{\sigma\}} \prod_f \sigma_{qf} P\{\dots, \sigma_{qf}, \dots, t\} \quad (3)$$

(сумма пробегает по всем 2^N состояниям системы), можно получить

$$-\alpha \frac{d}{dt} \left\langle \prod_f \sigma_{qf} \right\rangle = \sum_f \left\langle \prod_{f'} \sigma_{qf'} \left[1 - \sigma_{qf} \tanh \frac{1}{2} \beta E_{qf} \right] \right\rangle. \quad (4)$$

Здесь сумма пробегает только по спинам в произведении $\prod_{f'}$. Данное уравнение необходимо дополнить уравнением для звуковой волны, которое в заданных приближениях имеет вид

$$u_{tt} - v_0^2 u_{y'y'} - v_0^2 u_{z'z'} + d_1 \langle S^z \rangle_{y'} = 0, \quad (5)$$

$$\langle S^z \rangle_{y'} = \frac{\partial \langle S^z \rangle}{\partial y'},$$

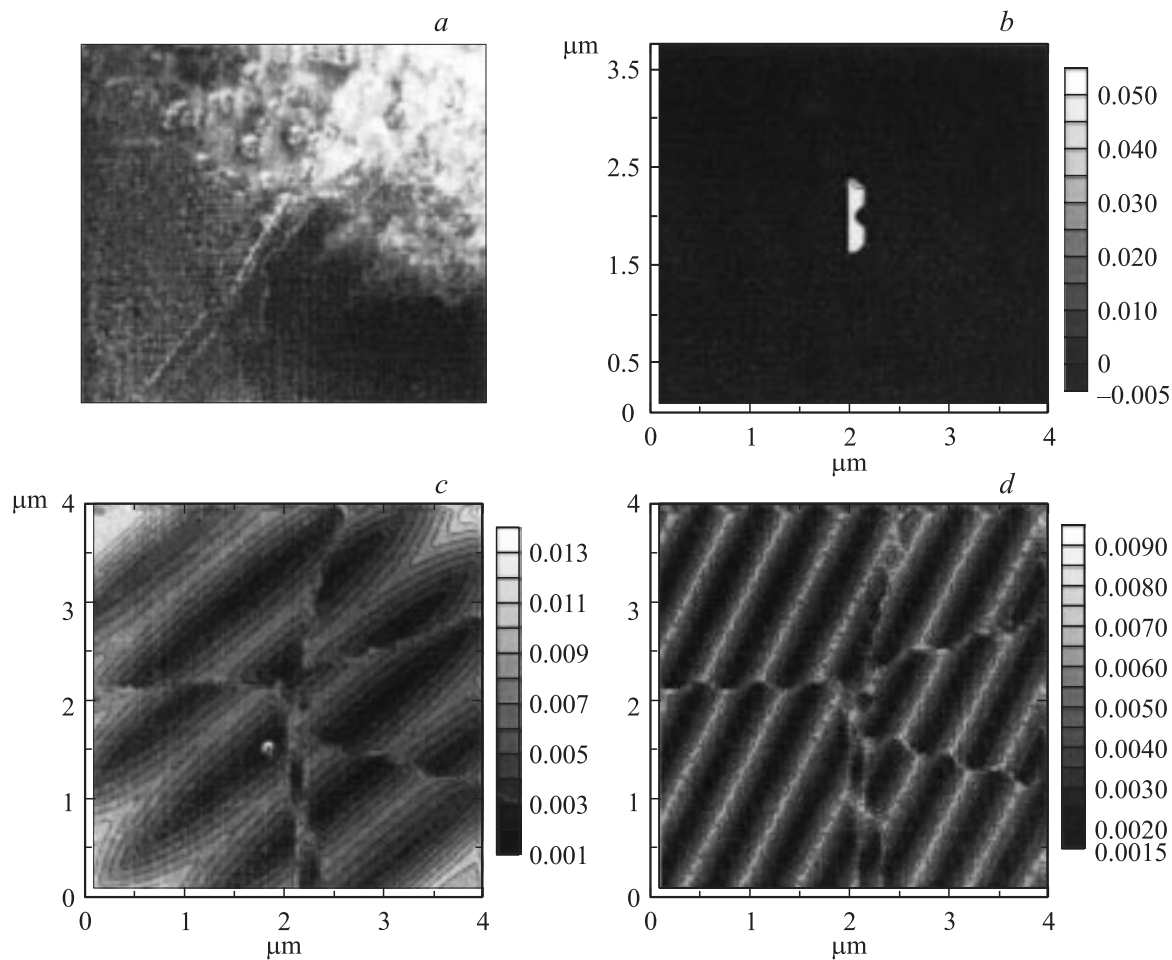
где v_0 — скорость звука, $d_1 = d/\rho$, ρ — плотность образца.

Полученная система уравнений решалась численно. В качестве затравочных состояний выбиралось несколько видов поляризации. Типичная эволюция одного из затравочных состояний поляризации приведена на рисунке (части *b–d*). Отметим, что и в этом случае образуется периодическая доменная структура, аналогичная солитонным решеткам [2]. Также обратим внимание на сходство полученной расчетной доменной структуры с наблюдаемой экспериментально.

3. Сформулируем основные выводы.

1) Установлено, что вследствие квазидвумерности реальных сегнетоэлектриков типа порядок–беспорядок с релаксационным типом поглощения и наличия пьезоэффекта в образце также возникает разбиение на домены поляризации, образующие квазирегулярную структуру.

2) Выявлено, что образующаяся квазирегулярная двумерная доменная структура поляризации практически не



Структура решеток доменов слева в средней части рисунка (*a*), визуализация методом нематических жидких кристаллов. *b* — начальное состояние, *c, d* — его эволюция при значениях параметров $E = 10^5$ В/м, $\beta = 1/320$ К $^{-1}$, $J = 320$ К ($k = \hbar = c = 1$). Единицы шкалы яркости соответствуют величине поляризации, нормированной на величину поляризации насыщения.

зависит от начальных условий в широких диапазонах параметров задачи. Распад первоначальной структуры проходит через одинаковые стадии, и в итоге устанавливается регулярная структура из „одномерных“ солитонных решеток.

3) Рассчитанные доменные структуры согласуются с изображениями реальной доменной структуры триглицинсульфата на фотографиях, полученных методом нематических жидких кристаллов.

Список литературы

- [1] Р. Блинц, Б. Жекш. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. Мир, М. (1975).
- [2] A.V. Shil'nikov, A.P. Pozdnyakov, V.N. Nesterov, V.A. Fedorikhin, R.H. Ezakov. *Ferroelectrics* **223**, 1, 149 (1999).
- [3] М.Б. Белоненко, И.С. Донская, А.Р. Кессель. *ТМФ* **88**, 1, 222 (1991).
- [4] R.R. Levitskii, I.R. Zachek, T.M. Verkholyak, A.P. Moina. *Phys. Rev. B* **67**, 10, 1103 (2003).