

Исследование динамики доменной структуры в сегнетоэлектриках с несоразмерной фазой

© М.Б. Белоненко, А.С. Сасов

Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет,
400074 Волгоград, Россия

E-mail: mbelonenko@yandex.ru

Рассмотрена динамика доменной структуры сегнетоэлектриков с несоразмерной фазой, представителем которых является нитрит натрия. Поляризационные свойства таких сегнетоэлектриков описаны с помощью псевдоспинового формализма. Это уравнение численно решалось совместно с уравнением для звуковых колебаний. Проведен анализ полученных результатов при различных параметрах кристалла и начальных условиях. Показано, что при достаточно больших временах доменная структура кристалла является локализованной.

PACS: 64.70.Rh, 77.80.Dj, 77.84.Bw

1. Необходимость предсказания новых свойств и особенностей уже давно исследуемых экспериментально веществ делает актуальным вопрос о математическом описании процессов развития доменной структуры различных кристаллов. Ярким представителем сегнетоэлектриков с несоразмерной фазой является NaNO_2 — теоретически и экспериментально наиболее хорошо изученное соединение, проявляющее ярко выраженные полупроводниковые свойства и обнаруживающее характерную последовательность фазовых переходов. В настоящей работе уделяется внимание динамике доменной структуры данного кристалла, а именно нахождению долгоживущих состояний солитонного типа.

2. Модель описывалась системой уравнений для псевдоспиновых переменных (для поляризации учитывалось влияние ближайших восьми ячеек) и эффективной компоненты вектора смещений. Поляризационные свойства сегнетоэлектриков во всех диапазонах температур и приложенных внешних электрических полей с высокой степенью точности можно описать с помощью псевдоспинового формализма. Для кристаллов типа NaNO_2 гамильтониан задачи будет иметь вид

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

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; символы i, j нумеруют узлы решетки в двух взаимно перпендикулярных направлениях.

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 [1]

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

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 [2] и методом Глаубера [3]. 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

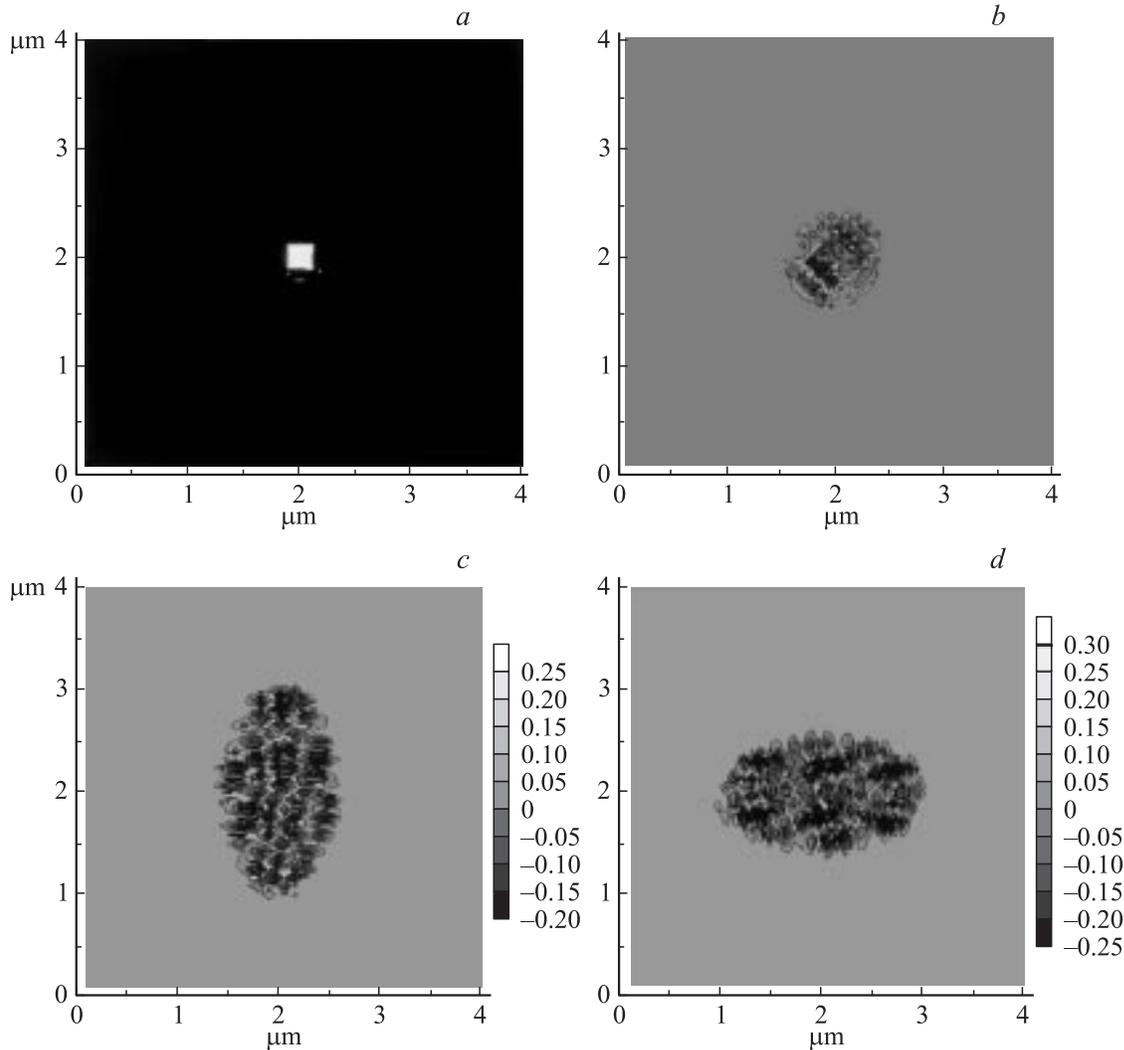
$$-\alpha \frac{d}{dt} \left\langle \prod_f \sigma_{qf} \right\rangle = \sum_f \left\langle \prod_{f'} \sigma_{qf'} \left[1 - \sigma_{qf} \tanh \frac{1}{2} \beta E_{qf} \right] \right\rangle. \quad (4)$$

Здесь сумма пробегает только по спинам в произведении $\prod_{f'}$.

Данное уравнение необходимо дополнить уравнением для звуковой волны, которое в заданных приближениях имеет вид

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

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



Эволюция начального состояния (*a*) при $E = 10^5$ V/m, $\beta = \frac{0.7}{438}$ K $^{-1}$, $J = 438$ K для различных значений параметров: *b* — $J_1 = 219$ K, $J_2 = 219$ K; *c* — $J_1 = 131.4$ K, $J_2 = 306.6$ K; *d* — $J_1 = 306.6$ K, $J_2 = 131.4$ K ($k = \hbar = c = 1$). Единицы шкалы яркости соответствуют величине поляризации, нормированной на величину поляризации насыщения.

Полученная система уравнений решалась численно. В качестве затравочных состояний выбиралось несколько видов поляризации. Типичная эволюция одного из затравочных состояний поляризации приведена на рисунке.

3. Сформулируем основные выводы.

1) Исследование динамики доменной структуры кристалла показало, что при достаточно больших временах доменная структура является локализованной. Это позволяет сделать вывод о том, что данные образования представляют собой долгоживущие состояния солитонного типа.

2) Устойчивые состояния солитонного типа существуют в достаточно широком диапазоне параметров кристалла и обусловлены, по всей видимости, дипольными взаимодействиями сегнетоэлектрических ячеек из второй координационной сферы.

3) Локализованные устойчивые состояния могут являться центрами образования „кластеров-предшествен-

ников“, ответственных за наблюдаемые аномалии в поведении комплексной диэлектрической проницаемости в параэлектрической фазе [4].

Список литературы

- [1] Р. Блинц, Б. Жекш. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. Мир, М. (1975).
- [2] М.Б. Белоненко, И.С. Донская, А.Р. Кессель. ТМФ **88**, 1, 222 (1991).
- [3] R.R. Levitskii, I.R. Zachek, T.M. Verkholyak, A.P. Moina. Phys. Rev. B **67**, 10, 1103 (2003).
- [4] А.В. Шильников, Е.Г. Надолинская, В.А. Федорихин, С.В. Родин. Кристаллография **39**, 1, 84 (1994).