04,06

Ферроэлектрика неоднородно деформированных кристаллов редкоземельных гранатов, возбуждаемая при распространении упругих волн

© А.И. Попов[1], Ч.К. Сабденов[2,¶], К.А. Звездин[2]

[1] Национальный исследовательский университет МИЭТ,
Москва, Россия
[2] Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН,
Москва, Россия

[¶] E-mail: sabdenovchingiz@gmail.com

(Поступила в Редакцию 26 апреля 2017 г.)

Проведен анализ влияния деформации на формирование электрических свойств редкоземельных соединений со структурой граната. Показано, что неоднородные деформации приводят к возникновению электрической поляризации у кристаллов гранатов. Эффект обусловлен наличием в структуре кубических кристаллов гранатов неэквивалентных низкосимметричных мест расположения редкоземельных ионов, симметрия окружения которых не содержит центра инверсии. Изучено поведение поляризации подсистемы редкоземельных ионов в кристаллах гранатов при распространении в них упругих волн.

Работа поддержана грантом РФФИ № 16-29-14005.

DOI: 10.21883/FTT.2017.11.45070.144

1. Введение

В настоящее время ведется активный поиск материалов и структур, обладающих магнитоэлектрическими свойствами. Классическими магнитоэлектриками являются мультиферроики (феррит висмута, манганиты, ферробораты, ...), в которых появление магнитоэлектрических свойств обусловлено наличием нечетных конфигураций магнитных моментов d-ионов (Fe, Mn, Cr). В последние годы значительно возрос интерес к исследованию редкоземельных мультиферроиков, магнитные свойства которых формируются за счет взаимодействия магнитных подрешеток редкоземельной (РЗ) (f-) и железной (d-). Конкуренция между магнитоэлектрическими подсистемами может приводить к нетривиальным физическим эффектам и усилению магнитоэлектрических свойств таких соединений [9,4].

Примером таких материалов, относящихся к новым мультиферроикам, являются РЗ ортоферриты [4]. В данных соединениях Fe-подрешетка является центросимметричной и магнитоэлектрически неактивной, а за возникновение магнитоэлектрических свойств отвечают РЗ-ионы, магнитные моменты которых могут упорядочиваться в ассиметричные, пространственно-нечетные моды.

К новому классу мультиферроиков с этой точки зрения можно отнести и РЗ-феррит-гранаты (РЗФГ), в которых РЗ-подсистема также находится под действием R-Fe-обменного взаимодействия. Большой интерес представляют и парамагнитные гранаты. В работе [6] показано, что в соединении $Mn_3Al_2Si_3O_{12}$ РЗ-подсистема образует антисимметричную антиферромагнитную структуру и в ней может возникнуть электрическая поляризация. В большинстве парамагнитных РЗ-гранатов ситуация иная. Они обладают четными АФМ-структурами, и в них магнитное поле индуцирует антисегнетоэлектрические структуры с нулевой электрической поляризацией [6].

Возникновение антисегнетоэлектрической структуры РЗ-гранатов обусловлено отсутствием пространственной инверсии окружения РЗ-иона, приводящим к индуцированию магнитным полем (порядком) электродипольного момента [6,7].

В настоящей работе показано, что деформация кристалла со структурой граната также приводит к возникновению электрических дипольных моментов у редкоземельных ионов, образующих в случае однородной деформации антисегнетоэлектрическую структуру. Выявлена возможность возникновения электрической поляризации кристаллов гранатов (и их пленок) под воздействием неоднородных механических напряжений. Явление представляет собой неоднородный пьезоэлектрический эффект в центросимметричных средах, содержащих ионы, локальная симметрия окружения которых не содержит пространственной инверсии. Оно может проявляться в пленках редкоземельных гранатов (благодаря неоднородности механических напряжений, образующихся при росте пленок вследствие не полного согласования структур подложки и пленки) и при распространении упругих волн. В настоящей работе проведен анализ электрической поляризации редкоземельных кристаллов гранатов, возникающей при распространении упругих волн.

Таблица 1. Координаты и оси симметрии додекаэдрических c позиций

k	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$\mathbf{r}^{(k)}$	$0\,\frac{3}{4}\,\frac{3}{8}$	$0\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}\,0\,\frac{3}{4}$	$\frac{1}{8}\,0\,\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}\,\frac{3}{8}\,0$	$\frac{1}{4}\,\frac{1}{8}\,0$	$1\,\frac{1}{4}\,\frac{5}{8}$	$1\,\frac{3}{4}\,\frac{7}{8}$	$\frac{5}{8}\,1\,\frac{1}{4}$	$\frac{7}{8}\,1\,\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}\,\frac{5}{8}\,1$	$\frac{3}{4}\,\frac{7}{8}\,1$
$\mathbf{e}_x^{(k)}$	110	$1\bar{1}0$	011	$01\bar{1}$	101	$\bar{1}01$	110	$1\bar{1}0$	011	$01\bar{1}$	101	$\bar{1}01$
$\mathbf{e}_y^{(k)}$	$\bar{1}10$	110	$0\bar{1}1$	011	$10\bar{1}$	101	$1\bar{1}0$	$\bar{1}\bar{1}0$	$01\bar{1}$	$0\bar{1}\bar{1}$	$\bar{1}01$	$\bar{1}0\bar{1}$
$\mathbf{e}_z^{(k)}$	001	001	100	100	010	010	001	001	100	100	010	010

2. Кристаллическая структура РЗ-феррит-гранатов

Редкоземельные (РЗ) соединения со структурой граната в течение многих десятилетий являются объектом интенсивных научных исследований, поскольку обладают рядом уникальных магнитных, магнитоупругих и магнитооптических свойств, обусловленных в большинстве случаев наличием в их составе РЗ-ионов [3,8]. РЗ-кристаллы со структурой граната имеют общую химическую формулу $R_3M_5O_{12}$, где R означает РЗ-ион или ион иттрия (Y^{3+}). М — ион металла. Ионы металла могут быть двухвалентными (Co^{2+}, Ga^{2+}, Mn^{2+}, Fe^{2+}, Ni^{2+}), трехвалентными (Fe^{3+}, Ga^{3+}, Al^{3+}, Se^{3+}, V^{3+}, Cr^{3+}), четырехвалентными (Ge^{4+}, Si^{4+}, Zn^{4+}, Ni^{4+}, Sn^{4+}) и пятивалентными (Nb^{5+}, P^{5+}, As^{5+}) [1].

Условно гранаты принято разделять на магнитные, у которых М — ион переходной группы с незаполненной „d“ оболочкой (Fe^{3+}, Fe^{2+}, Mn^{2+}, Co^{2+}, Cr^{3+}), и немагнитные, у которых М — ионы Al^{3+}, Ga^{3+}, Ge^{4+}, S^{4+}.

Отметим, что структура граната допускает широкие возможности замещения одних ионов (как магнитных, так и немагнитных) на другие. РЗ-гранаты являются кубическими магнетиками, обладающими весьма сложной кристаллографической структурой, описываемой пространственной группой $O_h^{10} - Ia3d$. Элементарная ячейка, объемно-центрированная кубическая, включает в себя восемь формульных единиц $R_3M_5O_{12}$, т. е. 160 атомов. Сторона элементарной ячейки имеет длину ~ 12 Å. Важное значение для нас имеет тот факт, что РЗ-ионы в кристаллах гранатов размещены по 6 кристаллографически неэквивалентным местам, обладающим более низкой, чем кубическая симметрией окружения. Симметрия окружения РЗ-ионов в гранатах описывается точечной группой D_2, которая не содержит пространственной инверсии (что является принципиально важным обстоятельством для понимания магнитоэлектрики гранатов [3,4]). Для выяснения физических свойств редкоземельных гранатов достаточно ограничиться рассмотрением их примитивной ячейки, которая в два раза меньше элементарной, содержит 4 формульные единицы $R_3M_5O_{12}$ [8]. Координаты всех 12 РЗ-ионов в примитивной ячейке (в единицах ячейки) и ориентации их локальных осей симметрии приведены в табл. 1 (из [6]). Нумерация мест РЗ-ионов в ячейке выбрана такой, что окружение места $(k+6)$ $(k = 1, \ldots, 6)$ отличается от окружения k-го места операцией инверсии, что эквивалентно соотношению $\mathbf{e}_y^{(k+6)} = -\mathbf{e}_y^k$.

Отсутствие пространственной инверсии окружения РЗ-иона приводит к индуцированию магнитным полем (порядком) электродипольного момента иона, а, следовательно, и к возникновению структуры электродипольных моментов РЗ-ионов [6]. Однако при суммировании по местам, занимаемым РЗ-ионами в примитивной ячейке граната, электрический дипольный момент ячейки в однородном магнитном поле обращается в нуль благодаря операции инверсии, „связывающей“ места $(k+6)$ с k. Отличный от нуля электрический дипольный момент $\mathbf{P}$-ячейки может возникнуть либо у пленок гранатов, либо в случае неоднородного магнитного поля, действующего на РЗ-ионы, на что было указано в [6].

В настоящей работе рассмотрим влияние неоднородных механических напряжений на формирование ферроэлектрических свойств редкоземельных гранатов.

3. Неоднородная деформация и электрическая поляризация редкоземельных ионов

Представим взаимодействие редкоземельного иона с деформацией, вызванной механическими напряжениями, в виде инвариантного относительно операций симметрии группы D_2 выражения, представляющего собой произведения компонент тензора деформации $U_{\alpha\beta}$ на компоненты координат f-электронов i-го иона. В линейном по $\mathbf{r}_i$ приближении в локальных осях иона

$$V_u = q\sum_{i=1}^{N}(U_{xy}z_i + U_{xz}y_i + U_{yz}x_i)$$
$$= qr\Big[U_{xy}C_0^1 + \frac{U_{xz}}{\sqrt{2}}\,i(C_{-1}^1 + C_1^1) + \frac{U_{yz}}{\sqrt{2}}\,i(C_{-1}^1 - C_1^1)\Big], \tag{1}$$

где q — константа взаимодействия (в модели точечных зарядов при учете ионов ближайшего окружения $q = -6eQ\sum_{k=1}^{8}\frac{R_{kx}R_{ky}R_{kz}}{R^5}$, где $Q = 2e$ — заряд иона O^{2-}, $\mathbf{R}_k$ — радиусы-векторы ионов O^{2-}, окружающих редкоземельный ион), N — число f-электронов иона,

Таблица 2. Компоненты тензора деформации локального окружения редкоземельных ионов в кристаллографической системе координат

k	$U_{xy}^{(k)}$	$U_{xz}^{(k)}$	$U_{yz}^{(k)}$
$1; 2; 7; 8$	$(-1)^k(U_{XX} - U_{YY})/2$	$(U_{XZ} - (-1)^k U_{YZ})/\sqrt{2}$	$(U_{YZ} + (-1)^k U_{XZ})/\sqrt{2}$
$3; 4; 9; 10$	$(-1)^k(U_{YY} - U_{ZZ})/2$	$(U_{XY} - (-1)^k U_{XZ})/\sqrt{2}$	$(U_{XZ} + (-1)^k U_{XY})/\sqrt{2}$
$5; 6; 11; 12$	$(-1)^k(U_{ZZ} - U_{XX})/2$	$(U_{YZ} - (-1)^k U_{XY})/\sqrt{2}$	$(U_{XY} + (-1)^k U_{YZ})/\sqrt{2}$

x_i, y_i, z_i — координаты i-го электрона, $C_q^k = \sum_{i=1}^{N} C_q^k(i)$, $C_q^k(i)$ — одноэлектронный неприводимый тензорный оператор, определяемый приведенным матричным элементом $\langle l' \| C^p \| l \rangle = \sqrt{2l+1} C_{l0p0}^{l'0}$, l' и l — орбитальные квантовые числа состояний электрона, $C_{a\alpha b\beta}^{c\gamma}$ — коэффициент Клебша–Гордана. Пусть на редкоземельный ион воздействует внешнее электрическое поле $\mathbf{E}$. Актуальный гамильтониан возмущения запишем в виде

$$V = -\mathbf{dE} + V_u, \tag{2}$$

где $\mathbf{d} = -e \sum_{i=1}^{N} \mathbf{r}_i$ — оператор дипольного момента редкоземельного иона.

Линейные по величине E напряженности приложенного электрического поля поправки к уровням энергии иона возникают во втором порядке теории возмущений с соответствующим малым параметром $\|V\|/W$, где $\|V\|$ — норма оператора V, а W — разность энергий основных уровней и центра тяжести уровней возбужденных электронных конфигураций иона (для редкоземельных ионов $W \sim 10^5 \text{см}^{-1}$), и имеют вид

$$E_g^{(2)} = \sum_{l', e_{l'}} \frac{1}{W_{l'}} \big(\langle g | \mathbf{dE} | e_{l'} \rangle \langle e_{l'} | V_u | g \rangle + \langle g | V_u | e_{l'} \rangle \langle e_{l'} | \mathbf{dE} | g \rangle \big). \tag{3}$$

Здесь $|g\rangle$ — состояния редкоземельного иона, принадлежащие основной l^N-конфигурации (l — символ, обозначающий орбитальное квантовое число электронов, для редкоземельного ионов $l = 3$), $|e_{l'}\rangle$ — состояния, принадлежащие возбужденной $l^{N-1}l'$-конфигурации с $l' = l \pm 1$, $W_{l'}$ — разность энергий состояний $|e_{l'}\rangle$ и $|g\rangle$. При записи (3) мы пренебрегли расщеплением уровней $l^{N-1}l'$-конфигурации. К основным уровням ближе расположена конфигурация с $l' = l - 1 = 2 (W_{l-1} \sim 10^5\, \text{см}^{-1})$, конфигурация с $l' = l + 1 = 4$ лежит выше.

Ограничимся учетом возбужденной конфигурации с $l' = l - 1$. Используем далее процедуру получения эффективных гамильтонианов, изложенную в [3], и после несложных, но громоздких выкладок найдем, что пьезоэлектрические поправки к уровням энергии (3) могут быть представлены оператором пьезоэлектрического взаимодействия редкоземельного иона (в локальных осях k-го места)

$$\begin{aligned} H_{pe}^{(k)} = -A\Bigg(& E_x^{(k)} \Bigg[U_{yz}^{(k)} \Bigg(C_{-2}^2 + C_2^2 - \sqrt{\frac{2}{3}} C_0^2 \Bigg) \\ & + U_{xz}^{(k)} i (C_{-2}^2 - C_2^2) + U_{xy}^{(k)} (C_{-1}^2 - C_1^2) \Bigg] \\ & + E_y^{(k)} \Bigg[U_{yz}^{(k)} i (C_{-2}^2 - C_2^2) - U_{xz}^{(k)} \Bigg(C_{-2}^2 + C_2^2 + \sqrt{\frac{2}{3}} C_0^2 \Bigg) \\ & + U_{xy}^{(k)} i (C_{-1}^2 + C_1^2) \Bigg] + E_z^{(k)} \Bigg[U_{yz}^{(k)} (C_{-1}^2 - C_1^2) \\ & + U_{xz}^{(k)} i (C_{-1}^2 + C_1^2) + U_{xy}^{(k)} 2 \sqrt{\frac{2}{3}} C_0^2 \Bigg] \Bigg), \end{aligned} \tag{4}$$

где $A = \frac{e(r_{fd})^2}{W} \frac{3\sqrt{3}}{2\sqrt{70}} q$.

Усредним (4) по состояниям редкоземельных ионов и найдем вклад пьезоэлектрического взаимодействия k-го иона в свободную энергию системы

$$E_{pe}^{(k)} = \langle H_{pe}^{(k)} \rangle = \frac{\sum_n \langle \Psi_n^{(k)} | H_{pe}^{(k)} | \Psi_n^{(k)} \rangle \exp(-E_n^{(k)}/(kT))}{\sum_n \exp(-E_n^{(k)}/(kT))}, \tag{5}$$

где $E_n^{(k)}, \Psi_n^{(k)}$ — уровни энергии и волновые функции k-го иона. Из (5) легко найти электродипольный момент k-го иона (в локальных осях): $P_\alpha^{(k)} = -\frac{\partial E_{pe}^{(k)}}{\partial E_\alpha^{(k)}}$, $\alpha = x, y, z$. Очевидно, что в случае однородной деформации $P_\alpha^{k+6} = -P_\alpha^k$, $k = 1, \ldots, 6$, так что в данном случае возникают антисегнетоэлектрические конфигурации моментов с нулевым результирующим дипольным моментом.

В кристаллографической системе координат $X = [100]$, $Y = [010]$, $Z = [001]$ компоненты тензора деформации $U_{\alpha\beta}^{(k)}$ имеют вид, представленный в табл. 2.

Средние значения операторов $H_{pe}^{(k)}$ (см. (4), (5)) зависят от состояний ионов в кристалле. Спектр редкоземельных ионов, входящих в состав гранатов, формируется под влиянием кристаллического поля и поля обменного R-Fe-взаимодействия (для редкоземельных феррит-гранатов). При этом основным взаимодействием является взаимодействие иона с кристаллическим полем, а обменное R-Fe-взаимодействие (как и взаимодействие с внешним магнитным полем) можно рассматривать в качестве возмущения. Исходя их этой иерархии взаимодействий основной вклад в (5) дадут инвариантные относительно операции симметрии группы D_2 комбинации неприводимых тензорных операторов $C^2_{-2}+C^2_{-2}$ и C^2_0 в (4), средние от которых отличны от нуля в отсутствие магнитного поля (исключение — ионы Eu^{3+}, Gd^{3+}).

Просуммируем (5) по ионам в ячейке, используя соотношения $U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_k)-U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_{k'})=\nabla U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_k-\mathbf{r}_{k'})$, и получим пьезоэлектрическую энергию ячейки E_{pe}. Далее найдем электрическую поляризацию материала как дипольный момент ячейки, деленный на её объем

$$P_\alpha=-\frac{1}{a^3}\frac{\partial E_{pe}}{\partial E_\alpha},\ \alpha=X,Y,Z, \tag{6}$$

где $a\sim 12\,\text{Å}$ — размер ячейки.

В результате получим

$$\begin{aligned}
P_X={}&C_1\left(\frac{\partial U_{YZ}}{\partial Y}+\frac{\partial U_{YZ}}{\partial Z}-2\,\frac{\partial U_{YZ}}{\partial X}\right)\\
&+C_2\left[\left(\frac{1}{2}\frac{\partial U_{XZ}}{\partial Z}+\frac{\partial U_{XZ}}{\partial Y}\right)-\left(\frac{1}{2}\frac{\partial U_{XY}}{\partial Y}+\frac{\partial U_{XY}}{\partial X}\right)\right.\\
&\left.+\left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial}{\partial Z}\right)(U_{ZZ}-U_{YY})\right],\\
P_Y={}&C_1\left(\frac{\partial U_{XZ}}{\partial Z}+\frac{\partial U_{XZ}}{\partial X}-2\,\frac{\partial U_{XZ}}{\partial Y}\right)\\
&+C_2\left[\left(\frac{1}{2}\frac{\partial U_{XY}}{\partial X}+\frac{\partial U_{XY}}{\partial Z}\right)-\left(\frac{1}{2}\frac{\partial U_{YZ}}{\partial Z}+\frac{\partial U_{YZ}}{\partial Y}\right)\right.\\
&\left.+\left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial Y}+\frac{\partial}{\partial X}\right)(U_{XX}-U_{ZZ})\right],\\
P_Z={}&C_1\left(\frac{\partial U_{XY}}{\partial X}+\frac{\partial U_{XY}}{\partial Y}-2\,\frac{\partial U_{XY}}{\partial Z}\right)\\
&+C_2\left[\left(\frac{1}{2}\frac{\partial U_{YZ}}{\partial Y}+\frac{\partial U_{YZ}}{\partial X}\right)-\left(\frac{1}{2}\frac{\partial U_{XZ}}{\partial X}+\frac{\partial U_{XZ}}{\partial Z}\right)\right.\\
&\left.+\left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial Z}+\frac{\partial}{\partial Y}\right)(U_{YY}-U_{XX})\right],
\end{aligned} \tag{7}$$

где

$$C_1=\frac{\langle C^2_{-2}+C^2_2\rangle A}{a^2},\ C_2=\sqrt{\frac{2}{3}}\,\frac{\langle C^2_0\rangle A}{a^2}.$$

Из (7) следует, что неоднородные деформации кристаллов редкоземельных гранатов могут индуцировать электрическую поляризацию у подсистемы РЗ-ионов. В частном случае источником неоднородной деформации являются упругие волны.

4. Упругие волны и волны поляризаций в кристаллах гранатов

Проведем анализ электрической поляризации, возбуждаемой упругими волнами. Ограничимся рассмотрением объемных волн, распространяющихся вдоль кристаллографических осей симметрии [100], [110], [111]; при этом собственными модами являются одна продольная и две поперечные упругие волны. Рассмотрим также и случай поверхностных волн (волны Рэлея).

Прежде всего отметим, что, как следует из (7), объемные упругие продольные волны, распространяющиеся вдоль высокосимметричных направлений $\langle 100\rangle$ и $\langle 111\rangle$ не приводят к возникновению волн поляризации.

Упругая поперечная волна, распространяющаяся вдоль оси [100] с вектором деформации вдоль направления [001] и амплитудой U_0 имеет вид $U_Z = U_0\cos(kX-\omega t)$. Закон дисперсии для этой волны: $k^2(w)=\rho\omega^2/c_{44}$, где ρ — плотность, c_{ik} — упругие константы. Искажение описывается компонентой $U_{XZ}(X)$ тензора деформации. В этом случае из (7) получим

$$\begin{aligned}
P_X&=0,\\
P_Y&=\frac{1}{4}C_1U_0k^2\cos(kX-\omega t),\\
P_Z&=\frac{1}{2}C_2U_0k^2\cos(kX-\omega t).
\end{aligned} \tag{8}$$

Для направления [110] рассмотрим последовательно продольную и две поперечные волны. Продольная волна имеет следующие ненулевые компоненты вектора деформации $U_X=U_Y=\frac{U_0}{\sqrt{2}}\cos\left(\frac{k(w)}{\sqrt{2}}(X+Y)-\omega t\right)$, где $k^2(w)=\rho\omega^2/(c_{11}+c_{12}+2c_{44})$, что приводит к результату

$$\begin{aligned}
P_X&=-P_Y=C_2k^2(w)\,\frac{U_0}{\sqrt{2}}\cos\left(\frac{k(w)}{\sqrt{2}}\,(X+Y)-\omega t\right),\\
P_Z&=\frac{C_1}{2}k^2(w)\,\frac{U_0}{\sqrt{2}}\cos\left(\frac{k(w)}{\sqrt{2}}\,(X+Y)-\omega t\right).
\end{aligned} \tag{9}$$

Таким образом, продольная упругая волна при $\mathbf{k}\parallel\langle 110\rangle$ порождает поперечную волну поляризации. Для поперечной упругой волны, „лежащей" в плоскости OXY, у которой $U_X=-U_Y=\frac{U_0}{\sqrt{2}}\times\cos\left(i\left(\frac{k(w)}{\sqrt{2}}(X+Y)-\omega t\right)\right)$

$$\begin{aligned}
P_X&=P_Y=C_2k^2(w)\,\frac{U_0}{2\sqrt{2}}\cos\left(\frac{k(w)}{\sqrt{2}}\,(X+Y)-\omega t\right),\\
P_Z&=0,\ k^2(w)=\rho\omega^2/(c_{11}-c_{12}).
\end{aligned} \tag{10}$$

В случае поперечной волны, вектор деформации которой перпендикулярен плоскости OXY, $U_Z=U_0\times\cos\left(\frac{k(w)}{\sqrt{2}}(X+Y)-\omega t\right)$

$$\begin{aligned}
P_X&=P_Y=-\frac{1}{8}C_1k^2(w)U_0\cos\left(\frac{k(w)}{\sqrt{2}}(X+Y)-\omega t\right),\\
P_Z&=0,\quad k^2(w)=\rho\omega^2/c_{44}.
\end{aligned} \tag{11}$$

Из (10) и (11) следует, что поперечные упругие волны, распространяющиеся в направлениях $\langle 110\rangle$, порождают продольные волны поляризации.

При $\mathbf{k} \parallel [111]$ поперечная упругая волна, для которой
$$U_X = -U_Y = \frac{U_0}{\sqrt{2}} \cos\left(\frac{k(w)}{\sqrt{3}}\,(X+Y+Z) - \omega t\right), \ U_Z = 0,$$
где $k^2(w) = \rho\omega^2/(c_{11} - c_{12} + c_{44})$, возбуждает поляризацию
$$P_X = P_Y = -P_Z/2$$
$$= -C_2 k^2(w)\,\frac{U_0}{2\sqrt{2}}\,\cos\left(\frac{k(w)}{\sqrt{3}}(X+Y+Z) - \omega t\right). \quad (12)$$
И, наконец, поперечная волна с вектором деформации, направленным вдоль $[11\bar{2}]$, возбуждает поляризацию
$$P_X = -P_Y = \frac{3}{2\sqrt{6}}C_2$$
$$\times \cos\left(\frac{k(w)}{\sqrt{3}}\,(X+Y+Z) - \omega t\right)k^2(\omega)U_0, \ P_Z = 0. \quad (13)$$
Данное направление характерно тем, что три вектора $\mathbf{P}$, $\mathbf{k}$, $\mathbf{U}$ перпендикулярны друг другу.

Перейдем теперь к рассмотрению поверхностных упругих волн. Пусть поверхность лежит в плоскости (001), а в направлении [100] распространяется поверхностная волна $\mathbf{U} = \mathbf{U}_l + \mathbf{U}_t$, являющаяся суперпозицией продольной ($\mathbf{U}_l$) и поперечной ($\mathbf{U}_t$) компонент, связанных следующими соотношениями (см., например, [9])
$$U_{tx} = \chi_t a\cos(kx - \omega t)\exp(\chi_t z),$$
$$U_{tz} = ka\sin(kx - \omega t)\exp(\chi_t z),$$
$$U_{lx} = kb\cos(kx - \omega t)\exp(\chi_l z),$$
$$U_{lz} = \chi_l b\sin(kx - \omega t)\exp(\chi_l z),$$
$$\chi_{l,t} = \left(k^2 - \frac{\omega^2}{c_{l,t}^2}\right)^{\frac{1}{2}},$$
$$2a\chi_t k + b(k^2 + \chi_t^2) = 0, \ (k^2 + \chi_t^2)^2 = 4k^2\chi_t\chi_l. \quad (14)$$
Воспользуемся формулой (7) и вычислим отдельно компоненты вектора поляризации, произведенные поперечной и продольной составляющими. В результате получим
$$P_X^{(t)} = \frac{1}{2}\,aC_2\chi_t(3k^2 + \chi_t^2)\cos(kx - \omega t)\exp(\chi_t z),$$
$$P_Y^{(t)} = -\frac{1}{4}\,aC_1(k^2 + \chi_t^2)(\chi_t\cos(kx - \omega t)$$
$$- k\sin(kx - \omega t))\exp(\chi_t z),$$
$$P_Z^{(t)} = \frac{1}{2}\,aC_2 k(k^2 + 3\chi_t^2)\sin(kx - \omega t)\exp(\chi_t z), \quad (15)$$
$$P_X^{(l)} = 2bC_2 k\chi_l^2\cos(kx - \omega t)\exp(\chi_l z),$$
$$P_Y^{(l)} = -\frac{1}{2}\,bC_1 k\chi_l(\chi_l\cos(kx - \omega t)$$
$$- k\sin(kx - \omega t))\exp(\chi_l z),$$
$$P_Z^{(l)} = 2bC_2 k^2\chi_l\sin(kx - \omega t)\exp(\chi_l z). \quad (16)$$

5. Заключение

Таким образом, в работе показано, что деформации редкоземельных кристаллов со структурой граната вызывают появление электрических дипольных моментов у редкоземельных ионов. Данное обстоятельство обусловлено наличием в структуре кубических кристаллов гранатов неэквивалентных мест для редкоземельных ионов, симметрия окружения которых не содержит центра инверсии. В случае однородных деформаций дипольные моменты редкоземельных ионов образуют антисегнетоэлектрические структуры с нулевым результирующим электрическим дипольным моментом ячейки. В то время, как неоднородные деформации в общем случае служат источником возникновения электрической поляризации. Явление представляет собой неоднородный пьезоэффект. Простейшей возможностью реализации неоднородных деформаций являются упругие волны. В настоящей работе исследована электрическая поляризация редкоземельных кристаллов гранатов, возникающая при распространении в них упругих волн. Установлено, что продольные упругие волны, распространяющиеся в объеме в высокосимметричных направлениях $\langle 100\rangle$ и $\langle 111\rangle$ не приводят к возникновению поляризации, в то время как продольные волны, распространяющиеся вдоль осей $\langle 110\rangle$ индуцируют поперечные волны поляризации. Поперечные упругие волны в случае $\mathbf{k} \parallel \langle 110\rangle$ порождают продольные волны поляризации. При $\mathbf{k} \parallel \langle 100\rangle$ и $\mathbf{k} \parallel \langle 111\rangle$ поперечные упругие волны в объеме возбуждают поперечные волны поляризации, причем для $\mathbf{k} \parallel \langle 111\rangle$ все три вектора $\mathbf{k}, \mathbf{U}, \mathbf{P}$ взаимно перпендикулярны. В случае поверхностных волн подобные простые закономерности отсутствуют.

Список литературы

[1] Y. Tokunaga, Y. Taguchi, T.-h. Arima, Y. Tokura. Nature Phys. **8**, *1*, 838 (2012).
[2] А.К. Звездин, А.А. Мухин. Письма в ЖЭТФ **88**, *8*, 505 (2008).
[3] A.I. Popov, D.I. Plokhov, A.K. Zvezdin. Phys. Rev. B **90**, *21*, 4427 (2014).
[4] A.I. Popov, Z.V. Gareeva, A.K. Zvezdin. Phys. Rev. B **92**, *14*, 4420 (2015).
[5] А.К. Звездин, В.М. Матвеев, А.А. Мухин, А.И. Попов. Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах. (1985). 296 с.
[6] A.K. Zvezdin, V.A. Kotov. Modern magnetooptics and magnetooptical materials. CRC Press (1997). 404 c.
[7] К.П. Белов, Н.А. Белянчикова, Р.З. Левитин, С.А. Никитин. Редкоземельные ферро и антиферромагнетики. Наука, М. (1965). 449 с.
[8] Ю.А. Изюмов, Р.П. Озеров, В.Е. Найш. Нейтронография магнетиков. Атомиздат, М. (1981). 311 с.
[9] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. Теория упругости. Наука, М. (1989). Т. 7. 264 с.