

01;05

Динамика 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

(Поступило в Редакцию 14 июня 2005 г.)

Рассмотрена динамика доменной структуры сегнетоэлектриков типа порядок–беспорядок, подобных кристаллу триглицинсульфата. Поляризационные свойства сегнетоэлектриков с релаксационным типом поглощения описаны с помощью псевдоспинового формализма. С помощью гамильтониана задачи получено кинетическое уравнение для описания динамики поляризации сегнетоэлектриков. Получены результаты динамики доменной структуры для различных параметров задачи и начальных условий. Проведен анализ результатов и их сравнение с экспериментальными данными.

PACS: 77.65.Bn, 77.80.Dj

Введение

Современные направления физики сегнетоэлектрических явлений требуют не только понимания процессов образования и развития доменной структуры, но и их математического описания с целью предсказания новых свойств и особенностей в уже давно исследуемых веществах [1–4]. В данной работе основное внимание сосредоточено на особенностях доменной динамики сегнетоэлектриков типа порядок–беспорядок с релаксационным типом поглощения при учете существенной роли акустической подсистемы кристалла. Подобная модель применима для описания кристалла триглицинсульфата $(\text{CH}_2\text{NH}_2\text{COOH})_3\text{H}_2\text{SO}_4$ и может быть также использована для ряда других сегнетоэлектриков типа порядок–беспорядок, в них периодические структуры доменного типа, напоминающие солитонные решетки, хорошо наблюдаются при экспериментах по визуализации доменной структуры методом нематических жидких кристаллов и нуждаются, на наш взгляд, в дополнительном теоретическом осмыслении.

Необходимо отметить, что возникающие при этом нелинейные акустические решетки будут тесно связаны с доменной структурой кристалла. Изучение возможности существования таких структур исходя из микроскопического псевдоспинового формализма без дополнительных предположений является весьма актуальной задачей.

Постановка задачи и основные уравнения

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 триглицинсульфата, с учетом малости туннельных эффектов, основной гамильтониан

задачи будет иметь вид [2]:

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

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. H_T — гамильтониан взаимодействия псевдоспиновой системы с термостатом, ответственный за поглощение энергии псевдоспиновой системой. Оператор H_{sa} представляет собой гамильтониан взаимодействия псевдоспиновой системы со звуком, возбуждаемым в образце благодаря пьезоэффекту. 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 [5]

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

где d — соответствующий пьезомодуль, u — величина вектора смещения.

Отметим, что поскольку поглощение энергии носит релаксационный характер, необходимо вывести соответствующие кинетические уравнения для данного случая. Такие кинетические уравнения можно вывести методом неравновесного статистического оператора Зубарева [6] и методом Глаубера [7]. Отметим, что, хотя результаты вывода кинетических уравнений с помощью этих методов различаются для параметров гамильтониана, соответствующих рассматриваемым кристаллам, данные уравнения совпадают с уравнениями Блоха для вектора псевдоспина, приведенными в [2]. Так, в подходе Глаубера, рассматриваемом здесь в силу его простоты,

рассмотрим вероятности $P\{\dots, \sigma_{qf}, \dots\}$ обнаружить псевдоспины в состояниях $\{\dots, \sigma_{qf}, \dots\}$ в момент времени t . Предполагается, что зависимость от времени этой функции вероятности задается основным кинетическим уравнением:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P\{\dots, \sigma_{qf}, \dots\} &= - \sum_q w_q\{\dots, \sigma_{qf}, \dots\} P\{\dots, \sigma_{qf}, \dots\} \\ &+ \sum_q w_q\{\dots, -\sigma_{qf}, \dots\} P\{\dots, -\sigma_{qf}, \dots\}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $w_q\{\dots, \sigma_{qf}, \dots\}$ — вероятность переверота псевдоспина из-за контакта с тепловым резервуаром, а псевдоспин с индексом qf переходит из состояния σ_{qf} в состояние $-\sigma_{qf}$ в течение единичного промежутка времени. Предположим, что теплоемкость термостата достаточно велика, и он всегда находится в равновесии. Исходя из условия детального баланса в равновесии

$$\frac{w_q\{\dots, \sigma_{qf}, \dots\}}{w_q\{\dots, -\sigma_{qf}, \dots\}} = \frac{P_0\{\dots, -\sigma_{qf}, \dots\}}{P_0\{\dots, \sigma_{qf}, \dots\}} \quad (4)$$

[здесь $P_0\{\dots, \sigma_{qf}, \dots\}$ — функция равновесного распределения, пропорциональная фактору Максвелла–Больцмана $\exp(-\beta H)$], выражение для вероятности спинового перехода $w_q\{\dots, \sigma_{qf}, \dots\}$ может быть записано следующим образом:

$$w_q\{\dots, \sigma_{qf}, \dots\} = \frac{1}{2\alpha} \left[1 - \sigma_{qf} \tanh \frac{1}{2} \beta E_{qf} \right]. \quad (5)$$

Параметр α описывает временной масштаб, на котором в системе происходят все переходы, E_{qf} обозначает оператор поля, действующего на спин qf . В приближении среднего поля данный оператор заменяется его средним значением. Для средних значений величин, составленных из произведений спинов

$$\prod_f \sigma_{qf} = \prod_{\{\sigma\}} \prod_f \sigma_{qf} P\{\dots, \sigma_{qf}, \dots, t\} \quad (6)$$

(сумма пробегает по всем 2^N состояниям системы), используя уравнения (5), легко получить:

$$-\alpha \frac{d}{dt} \left\langle \prod_f \sigma_{qf} \right\rangle = \sum_f \left\langle \prod_{f'} \sigma_{qf'} \left[1 - \sigma_{qf} \tanh \frac{1}{2} \beta E_{qf} \right] \right\rangle. \quad (7)$$

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

$$\begin{aligned} u_{tt} - v_0^2 u_{y'y'} - v_0^2 u_{z'z'} + d_1 \langle S^z \rangle_{y'} &= 0, \\ \langle S^z \rangle_{y'} &= \frac{\partial \langle S^z \rangle}{\partial y'}, \end{aligned} \quad (8)$$

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

Основные результаты и их обсуждение

В одномерном случае, соответствующем наличию трансляционной симметрии в направлении, перпендикулярном направлению изменения поляризации, кинетическое уравнение для описания динамики поляризации $\langle S^z \rangle$ можно записать следующим образом:

$$\langle \dot{S}^z \rangle = - \left[\langle S^z \rangle - \frac{1}{2} \text{th} (\beta (J \langle S^z \rangle + A \langle S^z \rangle_{y'y'} + du_{y'} + E)) \right] / T_1, \quad (9)$$

где J — интеграл обмена, E — внешнее электрическое поле, β — обратная температура, $\langle S^z \rangle$ — неравновесное среднее оператора электрического дипольного момента, T_1 — время релаксации. Данное уравнение необходимо решать совместно с уравнением для звуковых колебаний

$$u_{tt} - v_0^2 u_{y'y'} + \frac{d}{\rho} z_{y'} = 0, \quad (10)$$

где u — эффективная компонента вектора смещений, d — соответствующий пьезомодуль, ρ — плотность образца.

Так, типичные решения в виде бегущих волн (т.е. зависящие только от $(y' - vt)$) имеют вид, представ-

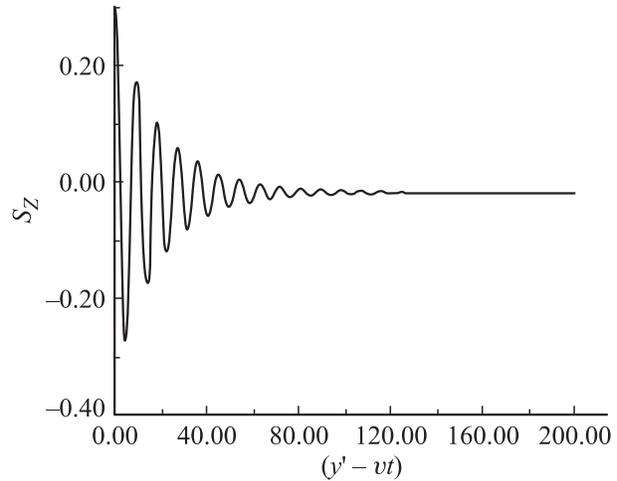


Рис. 1. Типичное решение в виде бегущей волны. $\beta = 4, J = 1, d = 0.1, v_0 = 1, v = 0.2, A = 1, E = 0.01, \rho = 1, T_1 = 1$.

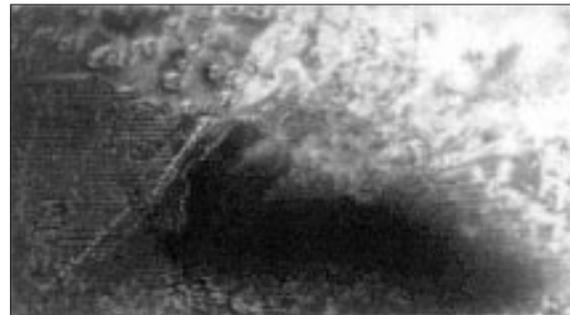


Рис. 2. Визуализация методом нематических жидких кристаллов. Структура решеток доменов слева в средней части рисунка.

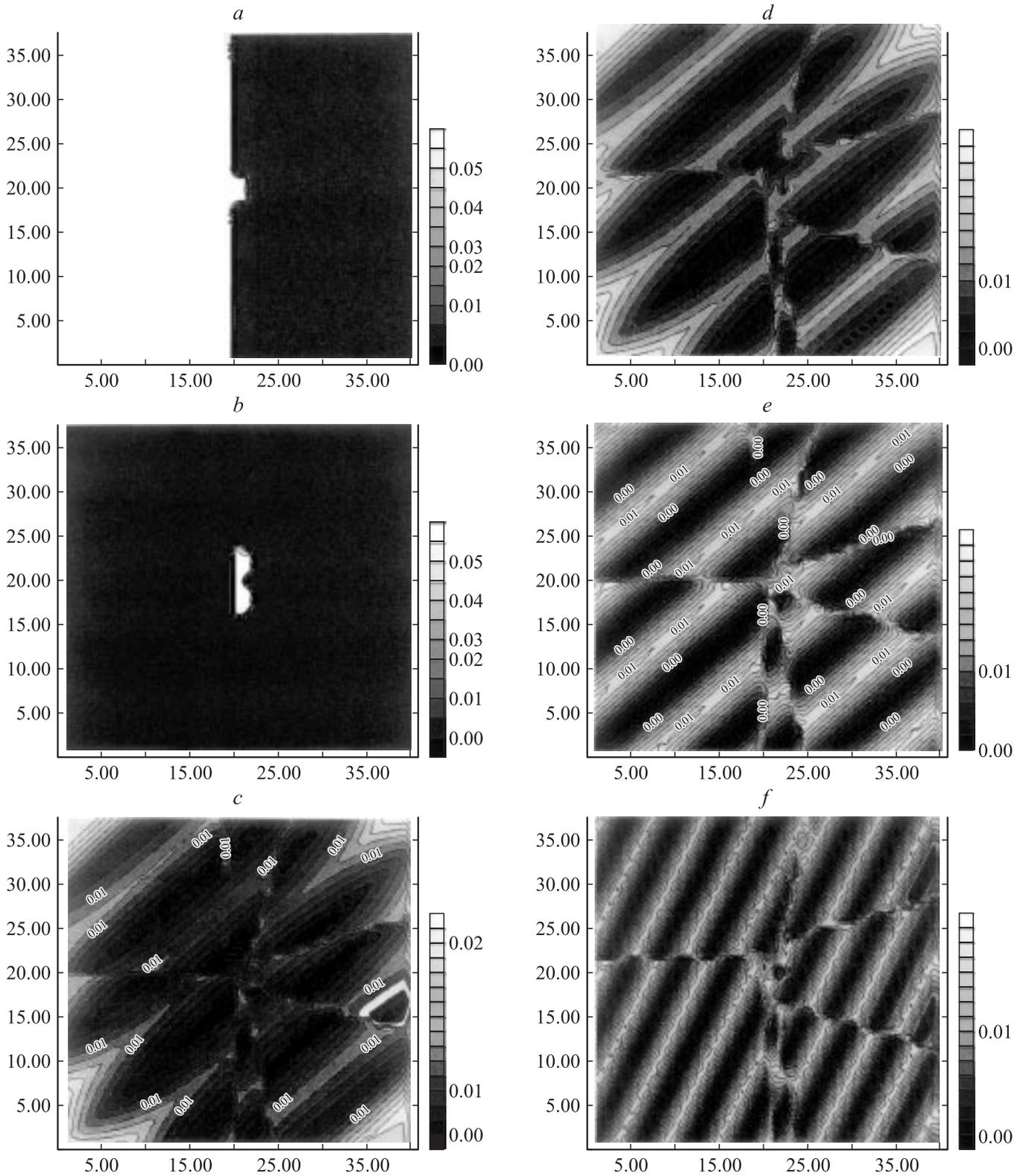


Рис. 3. Типичные начальные условия (*a, b*) и их эволюция (*c, e*) и (*d, f*) соответственно.

ленный на рис. 1. Данное решение будет соответствовать решеткам доменов разной ориентации, плоским в перпендикулярном направлении. Отметим, что подобные доменные структуры наблюдались в эксперименте (рис. 2) [8]. Поскольку обсуждаемые в данной работе сегнетоэлектрики являются квазидвумерными, необходимо для более адекватного рассмотрения их свойств решать пространственно-двумерную задачу. В этом случае система уравнений будет иметь вид

$$\langle S^z \rangle = - \left[\langle S^z \rangle - \frac{1}{2} \operatorname{th} \left(\beta \left(J \langle S^z \rangle + A \langle S^z \rangle_{y'y'} + A \langle S^z \rangle_{z'z'} + du_{y'} + E \right) \right) \right] / T_1, \quad (11)$$

$$u_{tt} - v_0^2 u_{y'y'} - v_0^2 u_{z'z'} + \frac{d}{\rho} z_{y'} = 0. \quad (12)$$

Уравнения (11) и (12) решались численно. Для параметров были выбраны следующие значения: $E = 0.1$, $d/\rho = 0.1$, $\beta = 1$, $v_0 = 1$, $J = 1$. В качестве затравочных состояний выбиралось несколько видов поляризации. Типичная эволюция затравочных состояний поляризации приведена на рис. 3. Отметим, что и в этом случае образуется периодическая доменная структура, аналогичная солитонным решеткам [9]. Так же обратим внимание на сходство полученной расчетной доменной структуры с наблюдаемой экспериментально.

Выводы

На основании микроскопического псевдоспинового формализма в рамках системы связанных уравнений, описывающих поглощение энергии псевдоспиновой системой и распространение акустических волн, установлено существование квазиодномерных солитонных решеток поляризации. Данные решетки обязаны своим появлением нелинейному характеру релаксационного поглощения.

Установлено, что с учетом квазидвумерности реальных сегнетоэлектриков типа порядок-беспорядок с релаксационным типом поглощения и учетом пьезоэффекта, в образце также возникает разбиение на домены поляризации, образующие квазирегулярную структуру.

Выявлено, что образующаяся квазирегулярная двумерная доменная структура поляризации практически не зависит от начальных условий в широких диапазонах для параметров задачи. Распад первоначальной структуры проходит через одинаковые стадии, и в итоге устанавливается регулярная структура из „одномерных“ солитонных решеток.

Полученные в результате расчета доменные структуры согласуются с фотографиями реальной доменной структуры триглицинсульфата, полученными методом нематических жидких кристаллов.

Список литературы

- [1] Лайнс М., Гласс А. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. М.: Мир, 1981. 736 с.
- [2] Блинц Р., Жеки Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. М.: Мир, 1975. 398 с.
- [3] Смоленский Г.А., Крайник Н.Н. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. М.: Наука, 1968. 183 с.
- [4] Shil'nikov A.V., Pozdnyakov A.P., Nesterov V.N., Fedorikhin V.A., Uzakov R.H. The analysis of dynamic domain boundaries of TGS crystals in low and infralow frequencies electrical fields / *Ferroelectrics*. 1999. Vol. 223. P. 149.
- [5] Белоненко М.Б., Шакирзянов М.М. // ЖЭТФ. 1991. Т. 99. № 3. С. 860–873.
- [6] Белоненко М.Б., Донская И.С., Кецсель А.Р. // ТМФ. 1991. Т. 88. № 1. С. 222–236.
- [7] Livitskii R.R., Zachek I.R., Verkholyak T.M., Moina A.P. // *Phys. Rev. B* 67. 2003. N 17. P. 174 112.
- [8] Поздняков А.П. Влияние некоторых дефектов структуры на процессы поляризации и переполяризации одноосных модельных сегнетоэлектриков, принадлежащих к различным кристаллографическим классификационным типам. Канд. дис. Волгоград: ВолГАСУ. 2003.
- [9] Нагаев Э.Л. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. М.: Наука, 1988. 232 с.