

© 1990

ОБ ИЗГИБНЫХ КОЛЕБАНИЯХ 90° ГРАНИЦ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ

В. Н. Нечаев

В результате совместного решения динамического уравнения Бельтрами, обобщенного на случай несовместных деформаций, уравнений электростатики и уравнения движения самих границ точно решена задача о длинноволновых колебаниях 90° доменных границ в сегнетоэлектриках. Показано, что частота упругих волн, локализованных на доменной границе, пропорциональна волновому вектору. Скорость этих волн зависит от модуля сдвига μ и коэффициента Пуассона ν , диэлектрических проницаемостей ϵ_{\parallel} , ϵ_{\perp} вдоль сегнетоактивной оси и в перпендикулярном направлении, от отношения спонтанной поляризации P_s и спонтанной деформации u_{ik}^s и направления распространения волны.

В работах [1, 2] исследовались изгибные колебания доменных границ в сегнетоэлектриках. В [3] точно решена задача о длинноволновых изгибных колебаниях двойниковых границ и доменных границ в сегнетоэластиках. Более общий случай, объединяющий две указанные выше возможности, рассмотрен в [4], где изучались колебания границ в сегнетоэлектриках—сегнетоэластиках.

90° границы в сегнетоэластиках типа перовскита разделяют домены различающиеся, так же как в сегнетоэлектриках—сегнетоэластиках, как спонтанной поляризацией P_s , так и спонтанной деформацией u_{ik}^s . В системе координат $x y z$, ось z которой перпендикулярна доменной границе, полученной в результате поворота главных осей контактирующих доменов вокруг y на 45 и 135°, это различие равно [5]

$$\begin{aligned} P_{sx}^{\text{II}} - P_{sx}^{\text{I}} &= [P_{sx}] = -P_s/\sqrt{2}, \quad u_{xz}^{s\text{II}} - u_{xz}^{s\text{I}} = \\ &= 2 \frac{q_{11} - q_{12}}{c_{11} - c_{12}} [P_{sx}] P_{sx} = \frac{q_{11} - q_{12}}{c_{11} - c_{12}} P_s^2, \end{aligned}$$

где $q_{\alpha\beta}$, $c_{\alpha\beta}$ — электрострикционные и упругие модули. Однако в отличие от случая сегнетоэлектрика—сегнетоэластика, где вектор пластического сдвига s , характеризующий относительное смещение атомных плоскостей, параллельных инвариантной плоскости, перпендикулярен $[P_s]$ [4], здесь $s \parallel P_s$. Цель настоящего сообщения — рассмотреть особенности спектра локализованных на доменной границе волн, обусловленных этим обстоятельством.

Исходная система уравнений включает динамическое уравнение теории упругости

$$\rho_0 \frac{\partial^2 U_i}{\partial t^2} = \lambda_{iklm} \frac{\partial^2 U_m}{\partial x_k \partial x_l} + f_i, \quad (1)$$

уравнение для скалярного потенциала электрического поля ($E = -\text{grad } \varphi$)

$$\epsilon_{ik} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_k} = -4\pi\rho \quad (2)$$

и уравнение движения доменной границы [6]

$$\{E\} [P_s] + \{\sigma_{ik}\} [u_{ik}^s] = 0, \quad (3)$$

представляющее собой обобщение на динамический случай условия равенства нулю конфигурационной силы $F = F_c + F_E$ в каждой точке границы. Здесь f_i — плотность объемных сил, обусловленная появлением при прогибе доменной границы ненулевой плотности двойникующих дислокаций; $\rho = -[P_s] \cdot n \delta(\zeta)$ — плотность электрических зарядов, также возникающих при прогибе границы; n — единичный вектор нормали к границе; ζ — координата, описывающая смещение границы вдоль нормали n . Фигурные скобки в выражении (3) обозначают полусумму значений стоящей в них величины по обе стороны от границы в непосредственной близости от нее. Остальные обозначения общепринятые.

В силу слабости в данном случае связи упругого и электрического полей через посредство электрострикции, упругую (1) и электростатическую (2) задачи можно решать независимо (общий случай рассмотрен в [4]). Решение упругой задачи при этом ничем не отличается от [3, 4], и в линейном приближении по смещению $u = (x, y, t)$ границы из равновесного положения для Фурье-образа F_c имеем

$$\begin{aligned} \bar{F}_c(k_x, k_y, \omega) = & -\mu [u_{xx}^s]^2 \left(\frac{k_y^2 - \omega^2/c_t^2}{\sqrt{k^2 - \omega^2/c_t^2}} + \right. \\ & \left. + \frac{2}{1-\nu} \frac{k_x^2}{\sqrt{k^2 - \omega^2/c_t^2} + \sqrt{k^2 - \omega^2/c_l^2}} \right) \bar{u}(k_x, k_y, \omega), \end{aligned} \quad (4)$$

где μ — модуль сдвига; ν — коэффициент Пуассона; c_t , c_l — скорости поперечного и продольного звука.

Обращаясь затем к (2), необходимо учесть, что тензор диэлектрической проницаемости ϵ_{ik} в соседних доменах в выбранной системе координат имеет разные компоненты. В этом случае удобно решать задачу отдельно для области I ($z < 0$) и II ($z > 0$), предварительно проведя Фурье-преобразование по переменным x, y, t

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon_{\parallel} + \epsilon_{\perp}}{2} \frac{\partial^2 \bar{\varphi}^I}{\partial z^2} - i(\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) k_x \frac{\partial \bar{\varphi}^I}{\partial z} - \left(\frac{\epsilon_{\parallel} + \epsilon_{\perp}}{2} k_x^2 + \epsilon_{\perp} k_y^2 \right) \bar{\varphi}^I = 0 \quad (z < 0), \\ \frac{\epsilon_{\parallel} + \epsilon_{\perp}}{2} \frac{\partial^2 \bar{\varphi}^{II}}{\partial z^2} + i(\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) k_x \frac{\partial \bar{\varphi}^{II}}{\partial z} - \left(\frac{\epsilon_{\parallel} + \epsilon_{\perp}}{2} k_x^2 + \epsilon_{\perp} k_y^2 \right) \bar{\varphi}^{II} = 0 \quad (z > 0), \end{aligned} \quad (5)$$

где ϵ_{\parallel} , ϵ_{\perp} — диэлектрические проницаемости вдоль сегнетоактивной оси и в перпендикулярном направлении с граничными условиями на плоскости $z=0$

$$\bar{\varphi}^I(0) = \bar{\varphi}^{II}(0), \quad \frac{d\bar{\varphi}^{II}}{dz}(0) - \frac{d\bar{\varphi}^I}{dz}(0) = 4\pi i k_x [P_{sx}] \bar{u}.$$

Решая систему уравнений (5), находим вклад в конфигурационную силу F_E , связанный с кулоновским отталкиванием зарядов, возникающих при изгибе границы,

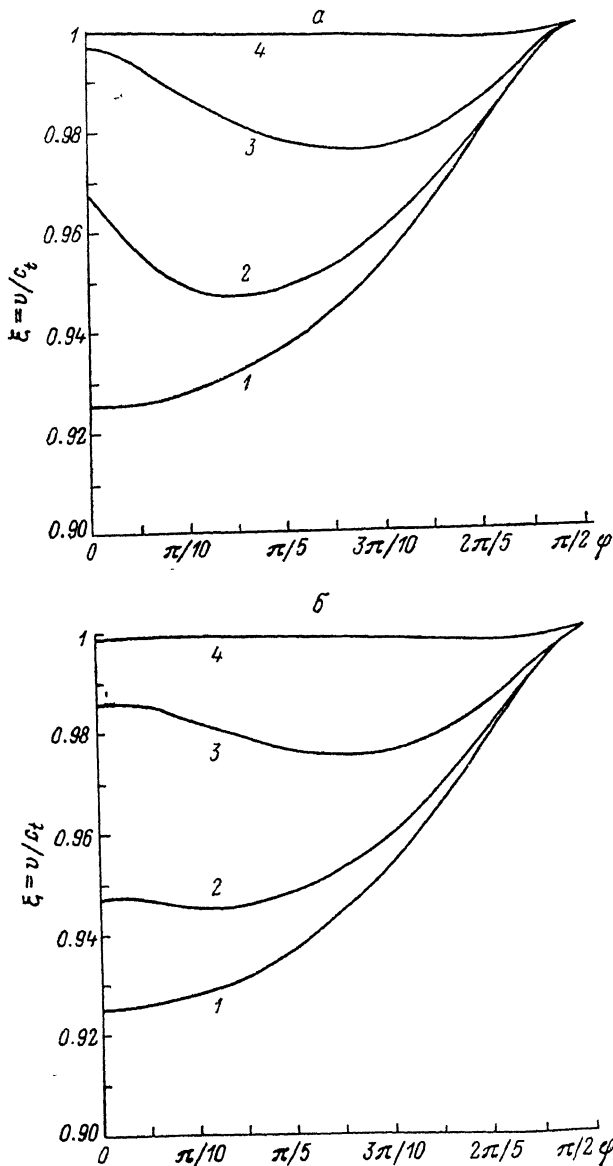
$$\bar{F}_E = -4\pi k_x^2 [P_{sx}]^2 \bar{u} / \sqrt{\epsilon_{\parallel} \epsilon_{\perp}} \sqrt{k_x^2 + 1/2 (1 + \epsilon_{\perp}/\epsilon_{\parallel}) k_y^2}. \quad (6)$$

Приравняв сумму выражений (4), (6) к нулю, получим дисперсионное уравнение, определяющее зависимость частоты ω собственных изгибных колебаний доменной границы от волнового вектора k . Эту зависимость удобно представить в виде $\omega = \xi c_l k$, где ξ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\sin^2 \varphi - \xi^2}{\sqrt{1 - \xi^2}} + \frac{2}{1 - \nu} \frac{\cos^2 \varphi}{\sqrt{1 - \xi^2} + \sqrt{1 - c_l^2/c_t^2 \xi^2}} + \frac{\alpha \cos^2 \varphi}{\sqrt{\sin^2 \varphi + \delta \cos^2 \varphi}} = 0. \quad (7)$$

Здесь введены обозначения: $\alpha = 4\pi P_{sx}^2 / \mu [u_{rx}^s]^2 \sqrt{\epsilon_{\parallel} \epsilon_{\perp}}$, $\delta = (1 + \epsilon_{\perp}/\epsilon_{\parallel})/2$, $\varphi = \arctg(k_y/k_x)$. Характер зависимости относительной скорости изгибной

волны ξ от φ , δ , α показан на рисунке, где представлены результаты численного анализа уравнения (7) для $\nu=0.3$. Параметры ϵ_1 , ϵ_{\perp} , α являются температурозависящими. В частности, при $T=298$ К в BaTiO_3 они принимают значения [5]: $\epsilon_1=160$, $\epsilon_{\perp}=4100$, $\alpha \approx 1.57$. Если изгибная волна распространяется вдоль оси y (перпендикулярно вектору относительного



Зависимость скорости изгибной волны v , нормированной на скорость поперечного звука c_t , от угла, образуемого направлением распространения волны с осью x .

α : 1 — 0, 2 — 0.1, 3 — 1, 4 — 10.

сдвига s), то колебание не чувствует границу; так же как и в [3, 4], $\xi=1$. При любом другом направлении распространения изгибной волны колебания локализованы вблизи границы ($\xi < 1$). Однако по сравнению со случаем чистого сегнетоэластика [3] и сегнетоэлектрика—сегнетоэластика [4] имеются два существенных отличия: во-первых, зависимость ξ от угла φ в общем случае уже не является монотонной функцией (см. рисунок); во-вторых, ни при каком направлении распространения волны вследствие влияния добавочной жесткости границ электростатического

происхождения не образуются чисто рэлеевские локализованные волны. Скорость изгибных волн, локализованных на 90° границе, всегда больше для тех же значений μ , ν , φ скорости аналогичных волн в чистом сегнетоэластике (кривая 1 на рисунке).

В заключение заметим, что такая, как для 90° границ, ситуация возникает при помещении сегнетоэлектрика, не являющегося пьезоэлектриком в парафазе со 180° доменной структурой, в электрическое поле, перпендикулярное сегнетоактивной оси, вследствие зависимости знака пьезомодулей $d_{\alpha\beta}$ от направления вектора \mathbf{P}_s [5]. Для того чтобы скорость локализованных на доменных границах волн в этом случае существенно отличалась от c_t , необходима значительная деформация доменов и, следовательно, достаточно сильные электрические поля. Так, например, в BaTiO_3 [5] при $T=298$ К, $d_{35} = -7.8 \cdot 10^{-11} \text{ sgn } P_{sx}$ (М/В) и в электрическом поле $E_x = 3 \cdot 10^7$ В/М имеем $[u_{xz}^{\text{in}}] = +4.68 \cdot 10^{-3}$, что соответствует $\alpha \approx 5.34$ (см. рисунок). Изменяя напряженность электрического поля E в данной системе, можно заданным образом менять характеристики волн, локализованных на границе.

В представленном здесь расчете, так же как и в [4], не учитывалась локальная масса границы. Поэтому полученные результаты, строго говоря, применимы только для описания длинноволновых колебаний границы. Соответствующие оценки, справедливые и в этом случае, приведены в [2].

Список литературы

- [1] Лайхтман Б. Д. // ФТТ. 1973. Т. 15. № 1. С. 93—102.
- [2] Нечаев В. Н., Рошупкин А. М. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 6. С. 1908—1910.
- [3] Нечаев В. Н., Рошупкин А. М. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 77—82.
- [4] Нечаев В. Н., Рошупкин А. М. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 11. С. 243—247.
- [5] Холоденко Л. П. Термодинамическая теория сегнетоэлектриков типа титана бария. Рига: Знание, 1971. 227 с.
- [6] Нечаев В. Н., Рошупкин А. М. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 8. С. 2286—2291.

Воронежский политехнический институт

Поступило в Редакцию
7 сентября 1989 г.
В окончательной редакции
15 января 1990 г.