

Уравнения доменных стенок в системе координат сегнетофазы

© В.А. Непочатенко, А.Ю. Кудзин*

Белоцерковский государственный аграрный университет,
09117 Белая Церковь, Киевская обл., Украина

* Днепропетровский национальный университет,
49050 Днепропетровск, Украина

E-mail: aaa@btsau.kiev.ua

Предложено два метода определения уравнений доменных стенок в системе координат сегнетофазы в сегнетоэластиках и многоосных сегнетоэлектриках. Получены уравнения доменных стенок в сегнетоэлектрике титанате бария и сегнетоэластике ортофосфате свинца. Показано, что в этих кристаллах возможны субориентационные состояния. Предложенные методы расчета позволяют определить матрицы преобразования из системы координат парафазы в систему координат сегнетофазы для каждого ориентационного состояния.

PACS: 77.80.Dj, 77.80.Bh, 77.84.Dy

Известно [1–3], что при фазовом переходе типа смещения в сегнетофазе наблюдается поворот кристаллографических осей по отношению к доменной стенке, пропорциональный величине спонтанной деформации. Ориентация оси, знак угла поворота зависят от вида и ориентации стенки, что приводит к формированию близких ориентационных состояний (субориентационных) [4]. Следовательно, уравнения доменных стенок различаются в системах координат (СК) парафазы и сегнетофазы, причем уравнения последних нельзя получить из [5]. В настоящей работе предложен метод расчета этих уравнений с использованием тензора теплового расширения или тензора спонтанной деформации.

В основе предлагаемого метода лежит утверждение, что уравнение доменной стенки стабильно в СК парафазы [5,6]. Если в парафазе в плоскости доменной стенки выбрать два неколлинеарных вектора $\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0$ и действовать на них тензором теплового расширения, получим в сегнетофазе соответствующие им векторы $\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1$. Их векторное произведение даст нормаль к плоскости доменной стенки \mathbf{n}_1 , а следовательно, и искомое уравнение СК сегнетофазы. Аналогично можно получить уравнения доменных стенок, подействовав на $\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0$ тензором спонтанной деформации.

В предлагаемой работе рассмотрены два описанных выше способа на примере многоосного сегнетоэлектрика ВаТiО₃ и чистого сегнетоэластика Рb₃(РО₄)₂.

Введем следующие обозначения: C_i — ориентационные состояния; W_{ij} или W'_{ij} — доменные стенки, разделяющие C_i и C_j ; X_{0i} и X_{ji} — кристаллофизические оси в парафазе и сегнетофазе соответственно (в зависимости от числа субориентационных состояний $j = 1-4$).

1. Уравнения 90° доменных стенок в ВаТiО₃ в системе координат тетрагональной фазы

Поскольку в кристалле ВаТiО₃ две взаимно перпендикулярные 90° стенки принадлежат одному типу, предлагаются следующие их обозначения: если произве-

дение коэффициентов в соответствующих им уравнениях меньше нуля, то используется обозначение W_{ij} , если больше нуля, то W''_{ij} .

Рассмотрим 90° доменную стенку W_{12} . Ее уравнение в СК парафазы, соответствующей C_1 , имеет вид [5]

$$X_{01} - X_{02} = 0. \quad (1)$$

В плоскости (1) выберем следующие неколлинеарные векторы: $\mathbf{a}_0(0, 0, 1), \mathbf{b}_0(1, 1, 0)$. В сегнетофазе в результате теплового расширения они преобразуются в $\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1$. Учитывая, что при однородной деформации изменение любого вектора соответствует формуле

$$\Delta \mathbf{r}_i = \mathbf{e}_{ij} \mathbf{r}_j, \quad (2)$$

получаем следующие координаты векторов: $\mathbf{a}_1(0, 0, 1 + e_{13}), \mathbf{b}_1(1 + e_{11}, 1 + e_{22}, 0)$. Нормаль к плоскости доменной стенки в сегнетофазе определяется из векторного произведения

$$\mathbf{n}_1 = \mathbf{a}_1 \times \mathbf{b}_1, \quad (3)$$

ей соответствует уравнение доменной стенки

$$X_{11} - B_1 X_{12} = 0, \quad (4)$$

где $B_1 = \frac{1+e_{11}}{1+e_{22}} = \frac{c_1}{a_1}$; a_1, c_1 — параметры тетрагональной фазы. Аналогично определяем уравнения, отвечающие $W''_{12}, W_{13}, W''_{13}$,

$$X_{21} + B_1 X_{22} = 0, \quad (5)$$

$$X_{31} - B_1 X_{33} = 0, \quad (6)$$

$$X_{41} + B_1 X_{43} = 0. \quad (7)$$

Из анализа уравнений, полученных в двух СК, видно, что при формировании W_{12}, W''_{12} в сегнетоэлектрической тетрагональной фазе наблюдается поворот кристаллографических осей вокруг X_{03} на угол $\pm \alpha_1$

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \arccos \left(\frac{2 + e_{11} + e_{22}}{\sqrt{2} \sqrt{(1 + e_{11})^2 + (1 + e_{22})^2}} \right) \\ &= \arccos \left(\frac{a_1 + c_1}{\sqrt{2} \sqrt{a_1^2 + c_1^2}} \right), \end{aligned} \quad (8)$$

а для W_{13}, W''_{13} — на аналогичные углы вокруг X_{02} .

Следовательно, в тетрагональной фазе возможно формирование четырех субориентационных состояний. Применяя к ним F -операции симметрии парафазы, получаем 12 ориентационных состояний и 24 электрических домена. Этот вывод и величина угла α_1 ($t = 22^\circ\text{C}$, $\alpha_1 = 0.314^\circ$) хорошо согласуются с данными [3] ($\alpha_1 = 0.27 \pm 0.02^\circ$).

Если воздействовать на $\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0$ тензором спонтанной деформации, получаем уравнения, которые отличаются от (4)–(7) коэффициентом B_1

$$B_1 = \frac{1 - 2b}{1 + b} = \frac{3a_0 - 2(a_1 - c_1)}{3a_0 + a_1 + c_1}, \quad (9)$$

где a_0, a_1, c_1 — параметры пара- и сегнетофаз.

Однако численные значения B_1 в (4), (9) близки (отличие в шестом знаке после запятой).

2. Уравнения доменных стенок в $\text{Pb}_3(\text{PO}_4)_2$ в системе координат сегнетоэластической фазы

Аналогично, воздействуя тензором теплового расширения на векторы $\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0$, расположенные в плоскостях доменных стенок $W_{12}, W_{13}, W'_{12}, W'_{13}$ в ортофосфате свинца, получаем следующие уравнения в СК сегнетоэластической фазы:

$$X_{11} - B_2 X_{12} - C_2 X_{13} = 0, \quad (10)$$

$$X_{21} + B_2 X_{22} - C_2 X_{23} = 0, \quad (11)$$

$$X_{31} - B_3 X_{32} - C_3 X_{33} = 0, \quad (12)$$

$$X_{41} + B_3 X_{42} - C_3 X_{43} = 0, \quad (13)$$

где

$$B_2 = \frac{-(1 + e_{33})(1 + e_{11}) - e_{13}^2}{\sqrt{3}(1 + e_{33})(1 + e_{22})}, \quad C_2 = \frac{-e_{13}}{1 + e_{33}},$$

$$B_3 = \frac{\sqrt{3}((1 + e_{11})(1 + e_{33}) - e_{13}^2)}{(1 + e_{22})(1 + e_{33} - 4me_{13})},$$

$$C_3 = \frac{4m(1 + e_{11}) - e_{13}}{1 + e_{33} - 4me_{13}},$$

$$m = \frac{e_{13}(2 + e_{11} + e_{33})}{(1 + e_{11})^2 - (1 + e_{22})^2 + e_{13}^2}.$$

Из анализа уравнений в СК парафазы [5,7] и сегнетоэластической фазы (10)–(13) следует, что в ортофосфате свинца возможно два субориентационных состояния. Из уравнений, полученных в двух СК, можно определить матрицы преобразования СК из пара- в сегнетофазу и между двумя смежными доменами.

Если воздействовать на $\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0$ тензором спонтанной деформации, получаем следующие выражения для коэффициентов уравнений (10)–(13):

$$B_2 = \frac{\sqrt{3}(1 - a - c^2)}{3(1 + a)}, \quad C_2 = c, \quad B_3 = \frac{\sqrt{3}a(c^2 - 1 + a)}{(1 + a)(a + 2c^2)},$$

$$C_3 = \frac{2c(1 - a/2)}{a + 2c^2},$$

где a и c — компоненты спонтанной деформации.

Однако численные значения соответствующих коэффициентов, определенные двумя способами, различаются несущественно и хорошо согласуются с экспериментальными результатами [1] и параметрами, полученными из модели тонкой сегнетоэластической доменной стенки [4].

Таким образом, на основе проведенного анализа можно сделать вывод, что два предложенных метода определения уравнений доменных стенок в СК сегнетофазы различаются незначительно и соответствуют известным экспериментальным результатам. Помимо уравнений эти методы позволяют определить число субориентационных состояний, матрицы преобразования из СК парафазы в СК сегнетофазы, матрицы преобразования между СК смежных ориентационных состояний, разделенных доменной стенкой.

Список литературы

- [1] M. Chabin, F. Gilletta. *J. Appl. Cryst.* **10**, 247 (1977).
- [2] L.S. Wainer, R.F. Baggio, H.L. Dussel. *Ferroelectrics* **31**, 3–4, 121 (1981).
- [3] Л.Г. Шабельников, В.Ш. Шехтман, О.М. Царев. *ФТТ* **18**, 6, 1529 (1976).
- [4] В.А. Непочатенко, Е.Ф. Дудник. *ФТТ* **45**, 10, 1870 (2003).
- [5] J. Sapriel. *Phys. Rev. B* **12**, 11, 5128 (1975).
- [6] Л.А. Шувалов. *Изв. АН СССР. Сер. физ.* **43**, 8, 1554 (1979).
- [7] В.А. Непочатенко. *Кристаллография* **49**, 5, 917 (2004).