

06 Эффекты деполяризующего поля в перфорированной пленке двухосного сегнетоэлектрика

© А.П. Леванюк^{1,2}, I.B. Misirlioglu³, Е.Д. Мишина¹, А.С. Сигов¹

¹ Московский государственный технический университет радиотехники, электроники и автоматики, Москва, Россия

² Departamento de Fisica de la Materia Condensada, Universidad Autonoma de Madrid, Madrid, Spain

³ Faculty of Engineering and Natural Sciences, Sabanci University, Tuzla/Orhanli, Istanbul, Turkey

E-mail: mishina_elenas57@mail.ru

(Поступила в Редакцию 5 марта 2012 г.)

С помощью численного моделирования на основе феноменологической теории сегнетоэлектричества и уравнений электростатики в рамках итерационного метода Гаусса–Зайделя изучена доменная структура в слое двухосного сегнетоэлектрика, перфорированного цилиндрическими каналами. Обе полярные оси лежат в плоскости пленки, что характерно для тонких эпитаксиальных пленок BaTiO_3 и $(\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{TiO}_3$ на подложке MgO . В расчетах используются параметры BaTiO_3 , что не имеет принципиального значения ввиду сугубо качественного характера результатов: электростатическая задача считается двумерной и формально относится к бесконечно толстым, а не к тонким слоям. Основное внимание уделяется системам, содержащим шестнадцать каналов. Рассмотрены две различные ориентации полярных осей относительно решетки каналов. Показано, что характер доменной структуры для этих ориентаций различается: когда линия с минимальным расстоянием между каналами перпендикулярна биссектрисе угла между полярными осями, эта структура содержит один канал в повторяющемся мотиве и вихрь поляризации; когда одна из полярных осей перпендикулярна линии с минимальным расстоянием между каналами, ситуация менее ясна. Имеются указания на то, что повторяющийся мотив доменной структуры в системе очень многих каналов содержит два канала и не содержит вихрей. Отмечено сильное влияние электродов на доменную структуру в этом случае.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований и Министерством образования и науки (программы „Научно-педагогические кадры инновационной России“ и „Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2013 гг.“: Центр коллективного пользования „УНО Электроника“).

1. Введение

Фотонные кристаллы на основе сегнетоэлектрических материалов привлекают внимание многих исследователей. Одна из возможностей создания переключаемого двумерного фотонного кристалла состоит в использовании в качестве основного оптического материала сегнетоэлектрика со спонтанной поляризацией, лежащей в плоскости пленки. Создание фотонного кристалла достигается, например, перфорированием пленки для получения двумерной решетки отверстий. О проведении такого типа работы сообщалось в [1,2]. Конкретно изучались эпитаксиальные пленки $(\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2})\text{TiO}_3$ на подложке MgO , перфорированные ионным пучком, в результате чего была получена двумерная решетка отверстий с диаметром 300 nm и периодом 450 nm. Свойства полученного таким образом фотонного кристалла оказались, с одной стороны, многообещающими, а с другой — не вполне понятными. Это мотивирует нас начать теоретический анализ явлений, которые можно ожидать в подобных системах. В настоящей работе мы исследуем доменные структуры, которые относятся к ожидаемым структурам в перфорированных тонких

пленках двухосного сегнетоэлектрика, когда обе полярные оси лежат в плоскости пленки. Согласно [3], именно такая ситуация имеет место в пленках $(\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2})\text{TiO}_3$ на подложке MgO при толщинах, меньших 20 nm. Экспериментальные данные для таких пленок нам неизвестны: в работах [1,2] изучались более толстые пленки (толщиной около 70 nm), поэтому пока речь не идет об интерпретации экспериментальных результатов [1,2] на основе теоретических выводов, сделанных в настоящей работе.

Подчеркнем, что даже при наличии таких данных невозможно прямое сравнение теории с экспериментом на данном этапе как из-за сложности ожидаемой доменной структуры и ее зависимости от многих (в том числе неконтролируемых в настоящее время) факторов, так и ввиду иллюстративного характера теории. Сложность доменной структуры связана с тем, что неоднородности поляризации, лежащей в плоскости пленки, могут приводить к сильному деполяризующему полю, которое, будучи дальнедействующим, влияет на поляризацию в большей области. Даже для неоднородной поляризации, лежащей целиком в плоскости тонкой пленки, это поле трехмерно, что чрезвычайно усложняет расчеты, и

этим обстоятельством приходится пренебречь. Поэтому наш „двумерный“ расчет относится не к тонким, а к бесконечно толстым слоям, перфорированным очень длинными цилиндрическими каналами. Эта перфорация и есть то общее, что существует и в толстых, и в тонких пленках. Эффекты перфорации гораздо проще в толстых слоях; насколько нам известно, они не были изучены ранее, что заставляет нас начать именно с этого случая. Можно надеяться, что качественный характер результатов останется тем же и для тонких пленок, хотя, конечно, это вовсе не очевидно и заслуживает отдельного изучения.

Отметим, что переход к случаю тонких пленок был бы преждевременным в настоящее время, так как имеется ряд вопросов, которые остаются невыясненными и в более простом случае толстых слоев. Таков, например, вопрос о чувствительности деполяризующего поля к условиям его экранирования на поверхности отверстий. В некоторых работах убедительно продемонстрирована эффективность экранирования деполяризующего поля путем адсорбирования ионов на поверхности сегнетоэлектрических пленок [4]. О наличии и тем более об особенностях этого экранирования на поверхности отверстий, полученных методом травления ионным пучком, ничего не известно. Перед его изучением было бы полезно понять качественные особенности этого влияния хотя бы для толстых слоев. Еще одним важным обстоятельством являются эффекты твердотельной упругости, которые зачастую определяют возможные ориентации доменных стенок. Интерес представляет также эволюция доменной структуры при приложении внешнего электрического поля, включая переключение спонтанной поляризации. Все эти вопросы, представляющие в конечном счете интерес для тонких пленок, имеет смысл выяснять сначала для толстых слоев.

Ввиду непрактичности аналитического подхода даже к двумерной проблеме основным методом получения результатов в настоящей работе является численное решение уравнения состояния сегнетоэлектрика совместно с уравнениями электростатики. Применение этого метода к большим системам связано со значительными вычислительными трудностями, преодоление которых вряд ли разумно в настоящее время в силу отмеченного выше. Поэтому мы исследуем системы с отверстиями, диаметр которых гораздо меньше, чем в упомянутых экспериментах. Переход к большим размерам — еще одно возможное направление будущих исследований.

В работах наподобие настоящей естественно начинать с простейших систем, в которых закономерности, определяющие образование доменных структур, проявляются особенно ярко. Мы начинаем с рассмотрения квадратных таблеток (столбиков) с одним отверстием (каналом) и уже на этом этапе, вводя искусственно периодические граничные условия, пытаемся выявить равновесные доменные структуры, ожидаемые в больших системах. На следующем этапе мы изучаем доменные структуры в системе с шестнадцатью каналами. Нас интересуют

эффекты деполяризующих полей именно от каналов, а не от внешних поверхностей столбика-призмы, с этой целью мы используем только два вида электростатических граничных условий на границах систем — заданный электрический потенциал, что физически соответствует ее металлизации, или периодические граничные условия — с целью составить представление о поведении больших систем. Коль скоро мы учитываем градиенты поляризации в уравнениях состояния, необходимо задать дополнительные граничные условия для поляризации. Чтобы выявить именно электростатические эффекты, считаем поверхность нейтральной к поляризации, что означает равенство нулю производных компонент поляризации по нормали к поверхности (бесконечности так называемой экстраполяционной длины) и пренебрежение полярностью самой поверхности. В численных расчетах использовались параметры идеальных эпитаксиальных пленок BaTiO_3 на подложке MgO .

2. Постановка задачи и метод исследования

Рассмотрим столбик, имеющий форму цилиндра и окруженный вакуумом. Материал столбика — двухосный сегнетоэлектрик с полярными осями, перпендикулярными оси цилиндра. Фазовый переход в монокристаллическое состояние в этой системе невозможен из-за значительного деполяризующего поля. Для бесконечного цилиндра, поляризованного перпендикулярно своей оси, это поле равно

$$E_{\text{dep}} = -\frac{P}{2\epsilon_0}. \quad (1)$$

Подставляя в уравнение состояния сегнетоэлектрика

$$AP + BP^3 = E, \quad (2)$$

где пока достаточно учесть только одну компоненту поляризации, получаем

$$\left(A + \frac{1}{2\epsilon_0}\right)P + BP^3 = 0. \quad (3)$$

Это уравнение всегда дает результат $P = 0$, так как выражение в скобках всегда положительно из-за большой величины второго слагаемого.

Естественно ожидать поэтому, что распределение поляризации, возникающей в таком цилиндре при фазовом переходе, будет иметь форму вихря. Но при этом не возникает никакого электрического поля, что хорошо известно на примере магнетиков. Магнитным вихрям и другим беспольным доменным структурам („структурам с замкнутым магнитным потоком“) посвящена работа [5]. Здесь нам важно подчеркнуть, что магнитные вихри наблюдаются в основном в круглых таблетках, высота которых гораздо меньше их радиуса, что относится также и к вихрям поляризации [6]. Это еще раз

указывает на схожесть явлений в реальных системах малых размеров и в „математически двумерных“ системах, изучаемых в настоящей работе.

Особенностью магнитных систем является неизменность абсолютной величины вектора спонтанной намагниченности практически при всех температурах ниже точки Кюри. Однако это вовсе не так для поляризации в сегнетоэлектрике. Поэтому в случае сегнетоэлектриков приобретают интерес некоторые вопросы, не являющиеся актуальными для ферромагнетиков, в частности распределение поляризации в упомянутом выше вихре сразу после фазового перехода [7]. Особенностью этого распределения, которую имеет смысл отметить здесь, является обращение в нуль поляризации в центре вихря. Если цилиндр, в котором происходит фазовый переход, не сплошной, а с цилиндрическим каналом в центре, это обращение в нуль уже не имеет места, хотя, конечно, величина поляризации меньше вблизи внутренней поверхности, чем вблизи поверхности наружной. Это видно из распределений поляризации, полученных численно, но мы не будем обращать внимания на это обстоятельство, так как оно тем менее существенно, чем больше радиус отверстия, который довольно велик (около 300 nm) в фотонных кристаллах, представляющих конечную цель наших исследований.

Если внешняя поверхность цилиндра металлизирована, деполяризующее поле образуется только из-за наличия внутреннего канала, и простейшим способом избежать образования поля также является вихрь. При малом радиусе внутреннего канала этого может и не произойти, и образуется монодоменное состояние, которое, однако, не представляет собой состояние с однородной поляризацией, так как последняя в любом случае стремится иметь нулевую компоненту, нормальную к поверхности канала, вблизи этой поверхности. Векторное поле поляризации при этом как бы обтекает канал. Вращение вектора поляризации вокруг оси канала в этом случае происходит в одном направлении (например, по часовой стрелке) вблизи одной полуокружности контура поверхности канала и в противоположном направлении (против часовой стрелки) вблизи другой полуокружности. В отличие от вихря будем называть такое распределение обтеканием. Плавное распределение поляризации вблизи точки перехода превращается в доменную структуру с ясно выраженными доменными стенками при удалении от точки перехода, поскольку наиболее энергетически выгодными являются только четыре направления поляризации и энергетический проигрыш от невыгодной ориентации увеличивается при понижении температуры. Именно эта доменная структура в системах с решетками каналов является основным предметом нашего рассмотрения, и поэтому явления в малых системах интересуют нас здесь лишь в той мере, в которой они помогают понять происходящее в системах больших.

Мы начинаем с изучения „элементарного кирпичика“ большой системы, т. е. квадратной призмы с отверстием

в центре. Соотношение радиуса канала и стороны квадрата то же, что и для упоминавшихся выше фотонных кристаллов, хотя абсолютные размеры гораздо меньше из-за вычислительных ограничений и нашего стремления рассматривать на этом этапе простейшие случаи. Отметим, что уже характер распределения поляризации в этой простейшей системе при разных температурах и граничных условиях проливает определенный свет на то, что будет наблюдаться в системах с шестнадцатю каналами. Такие системы представляются уже достаточно большими, чтобы иллюстрировать в какой-то степени свойства решеток, представляющих экспериментальный интерес.

Двухосный сегнетоэлектрик, который мы рассматриваем, описывается уравнениями состояния

$$AP_x + B_1P_x^3 + B_2P_xP_y^2 - G\left[\frac{\partial^2 P_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P_x}{\partial y^2}\right] = E_x \quad (4)$$

и вторым подобным уравнением с заменой x на y и наоборот. Мы используем коэффициенты, близкие по величине к соответствующим коэффициентам BaTiO_3 на подложке MgO [8]:

$$A = A_1(T - T_c) = 7 \cdot 10^5 \text{ C}^{-2} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{N},$$

$$B_1 = 20 \cdot 10^8 \text{ m}^5/\text{F} \cdot \text{C}^2, \quad B_2 = -1 \cdot 10^8 \text{ m}^5/\text{F} \cdot \text{C}^2,$$

$$G = 6.2 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3/\text{F},$$

но делается это в целях иллюстрации и не более того. Поэтому мы не учитываем члены более высоких порядков в уравнениях состояния. Вместе с этими уравнениями мы используем уравнения электростатики: $\text{div } \mathbf{D} = 0$ и $\text{rot } \mathbf{E} = 0$. Как уже отмечалось, электрическое поле считается двумерным.

Чтобы осуществить численные расчеты, мы дискретизируем дифференциальные уравнения на решетке с ячейкой $0.5 \times 0.5 \text{ nm}$. Поскольку уравнения состояния нелинейны, мы используем итерационную процедуру Гаусса–Зайделя: начинаем с „угаданных“ или „начальных“ величин P_x, P_y и электрического потенциала ϕ на каждом узле решетки и, последовательно рассматривая в элементарной операции один или два узла (около границ), находим поправки к этим величинам. Типичное число итераций составляло 10 000, при этом типичная разница величин поляризации в последовательных итерациях для данной точки составляла порядка 10^{-8} от самой величины. Мы отдельно оговариваем те случаи, когда число итераций было другим. Граничные условия для дифференциальных уравнений были уже упомянуты. Численные расчеты проводятся для двух случаев: „вблизи перехода“ при $T_c - T = 10^\circ \text{C}$ и „вдали от перехода“ при $T_c - T = 150^\circ \text{C}$. В качестве начальной конфигурации вблизи перехода принималось состояние с однородной поляризацией. Полученная конфигурация использовалась затем как начальная для симуляций вдали от перехода. Мы попытались выявить доменную структуру в условиях закороченных электродов, по-разному ориентированных относительно полярных осей. Выяснение ее поведения при наложении внешнего поля осталось за рамками настоящей работы.

3. Квадратная призма с одним каналом

Мы будем рассматривать для этой системы два типа граничных условий: 1) металлизированную боковую поверхность призмы (нулевой потенциал на всех поверхностях); и 2) не имеющие прямого физического смысла для изолированной призмы периодические граничные условия для всех величин. Как уже отмечалось, границы с нулевым потенциалом считаются нейтральными к поляризации, т. е. производные по нормальям к границам от обеих компонент равны нулю. Принимая во внимание периодические условия, мы пытаемся предсказать структуру в таком квадрате, входящем в состав решетки и окруженном другими подобными квадратами. Мы будем анализировать два варианта ориентации полярных осей относительно сторон квадрата.

Рассмотрим сначала случай полярных осей, параллельных/перпендикулярных диагоналям квадрата. Распределение поляризации при металлизированной поверхности призмы вблизи точки перехода показано на рис. 1, *a*. Здесь возникает распределение типа обтекания с преимущественным направлением, совпадающим с одним из направлений спонтанной поляризации. Вдали от точки перехода общий характер распределения становится более сложным: с восьмью доменными стенками, отходящими от отверстия (рис. 1, *b*). Еще менее тривиальная ситуация возникает при задании периодических граничных условий. Вблизи точки перехода распределение поляризации похоже на предыдущий случай (рис. 2, *a*), что вполне естественно, поскольку кристаллическая анизотропия, отраженная в нелинейных членах уравнений состояния, не сказывается на распределении поляризации в непосредственной близости от перехода. Она, однако, становится существенной вдали от перехода, в результате чего получается распределение, показанное на рис. 2, *b*. Обращает на себя внимание вихрь поляризации в левом верхнем углу рисунка. Легко видеть, что можно получить другой вариант той же структуры при отражении в плоскости, перпендикулярной плоскости рисунка и проходящей через диагональ квадрата, соединяющую левый нижний и правый верхний его углы. Вместо того чтобы находиться вверху слева от отверстия, вихрь будет находиться внизу справа от отверстия, при этом средняя поляризация остается прежней. Будет показано, что в большой (с шестнадцатью каналами в нашем случае) системе могут осуществляться обе структуры. Другой особенностью рассматриваемого случая вдали от перехода является то, что при меньшем числе итераций (1000) получается другая (также „регулярная“) структура, не содержащая вихря, которая осуществляется и в системе с шестнадцатью отверстиями. Она показана на рис. 2, *c*. Соблазнительно интерпретировать эту структуру как долгоживущую неравновесную, хотя в рамках нашего подхода такое заключение не имеет достаточных оснований.

Теперь обратимся к случаю, когда полярные оси параллельны/перпендикулярны сторонам квадрата. На

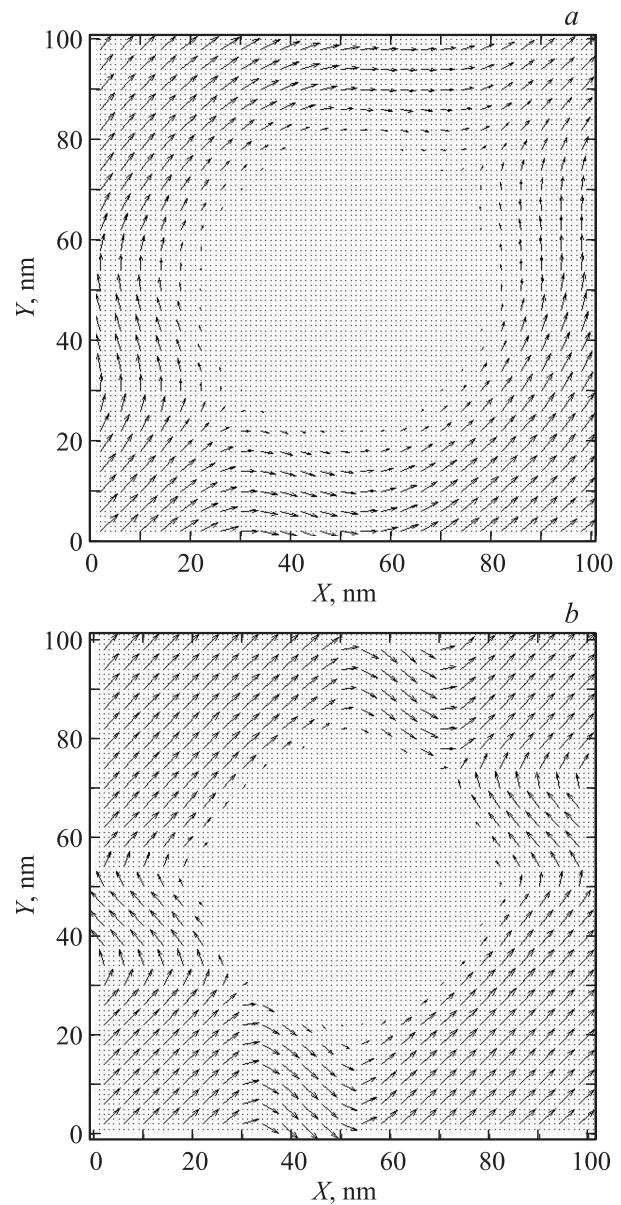


Рис. 1. Векторная карта поляризации в бесконечной квадратной призме с центральным каналом и металлизированной поверхностью вблизи фазового перехода (*a*) и вдали от перехода (*b*). Полярные оси параллельны/перпендикулярны диагоналям квадрата. На этом и остальных рисунках векторы проведены из небольшой части узлов решетки, дискретизирующей вычислительную проблему. Максимальная амплитуда вектора поляризации равна 0.01 C/m^2 вблизи фазового перехода и 0.17 C/m^2 вдали от перехода.

рис. 3, *a* показано распределение поляризации вблизи точки перехода в таком квадрате при металлизированной боковой поверхности призмы. Видно, что распределение поляризации вблизи отверстия — распределение типа обтекания. Таков же тип распределения поляризации и вдали от перехода (рис. 3, *b*) с уменьшенной долей областей с невыгодной поляризацией. Для периодических граничных условий распределение поляризации

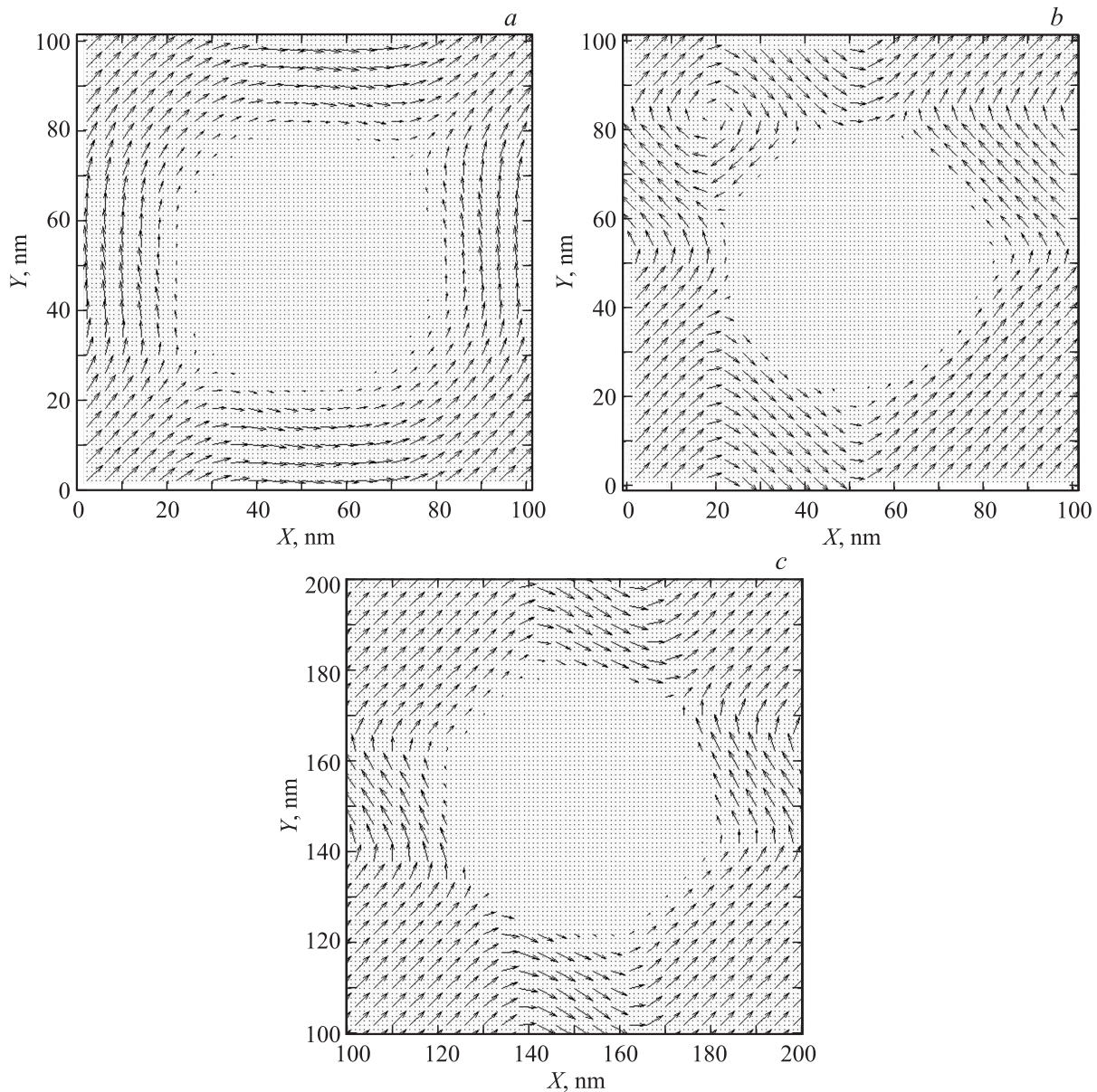


Рис. 2. Векторная карта поляризации в бесконечной квадратной призме с центральным каналом при периодических граничных условиях на поверхности призмы вблизи фазового перехода (*a*) и вдали от перехода (*b*). *c* — то же меньшего числа итераций (см. текст). Полярные оси параллельны/перпендикулярны диагоналям квадрата. Максимальная амплитуда вектора поляризации равна 0.01 C/m^2 вблизи фазового перехода и 0.17 C/m^2 вдали от перехода.

вблизи (вдали) от точки перехода показано на рис. 4, *a, b*. Здесь, как и в случае другой ориентации, можно получить иной (эквивалентный) вариант при отражении распределения в плоскости, перпендикулярной плоскости рисунка и проходящей через диагональ квадрата. Такие распределения наблюдаются и в системе с шестнадцатью каналами, но этим дело не ограничивается: доменная структура в системе многих каналов при обсуждаемой ориентации полярных осей, по-видимому, довольно сложная, и выбранная система из шестнадцати каналов оказывается недостаточной, чтобы ее надежно выявить (в отличие от другой ориентации полярных осей).

4. Прямоугольная призма со многими каналами

В этом разделе перейдем к исследованию систем более близких к изучаемым экспериментально, а именно к пленкам, в которых создана правильная решетка каналов. Конкретно мы промоделировали систему 4×4 канала в квадратной призме. На поверхности этой призмы (границах квадрата) задаем два типа граничных условий. Чтобы промоделировать системы с закороченными электродами, мы задаем нулевой потенциал (и нейтральность по отношению к поляризации) на горизонтальных сторонах квадрата и периодические граничные условия на

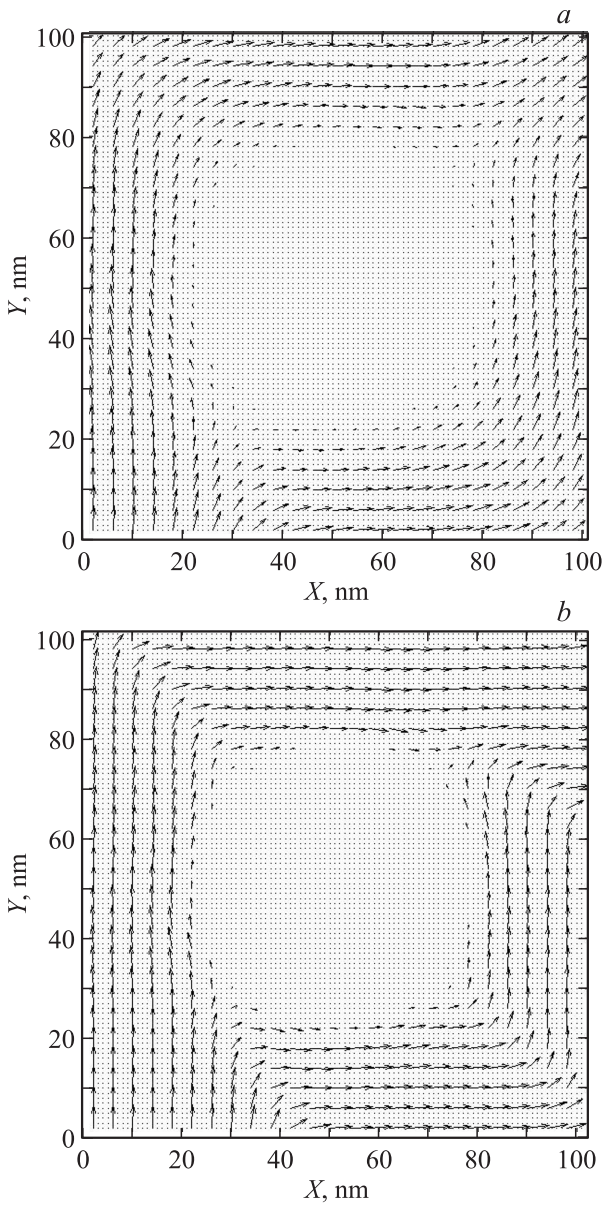


Рис. 3. Векторная карта поляризации в бесконечной квадратной призме с центральным каналом и металлизированной поверхностью вблизи фазового перехода (a) и вдали от перехода (b). Полярные оси параллельны/перпендикулярны сторонам квадрата. Максимальная амплитуда вектора поляризации равна 0.01 C/m^2 вблизи фазового перехода и 0.17 C/m^2 вдали от перехода.

его вертикальных сторонах. Кроме того, мы используем чисто периодические граничные условия с целью понять характер распределения поляризации, когда наша система является частью другой, гораздо большей системы.

Рассмотрим сначала случай, когда полярные оси параллельны/перпендикулярны диагоналям квадрата. Для периодических граничных условий и вблизи точки перехода распределение поляризации периодически (рис. 5). Вдали от точки перехода доменная структура также периодична с повторяющимся мотивом, содержащим

одно отверстие (рис. 6). Распределение поляризации в повторяющемся квадрате такое же, как на рис. 2, b. При меньшем числе итераций (1000) получается также периодическая, но другая структура с распределением поляризации в каждом квадрате, показанным на рис. 2, c. Для смешанных граничных условий распределение поляризации вблизи точки перехода почти такое же, как и в предыдущем случае, с небольшой модификацией вблизи электродов. Эта модификация в нашем численном эксперименте оказалась несколько различной для верхнего и нижнего электродов, что, по-видимому, привело к

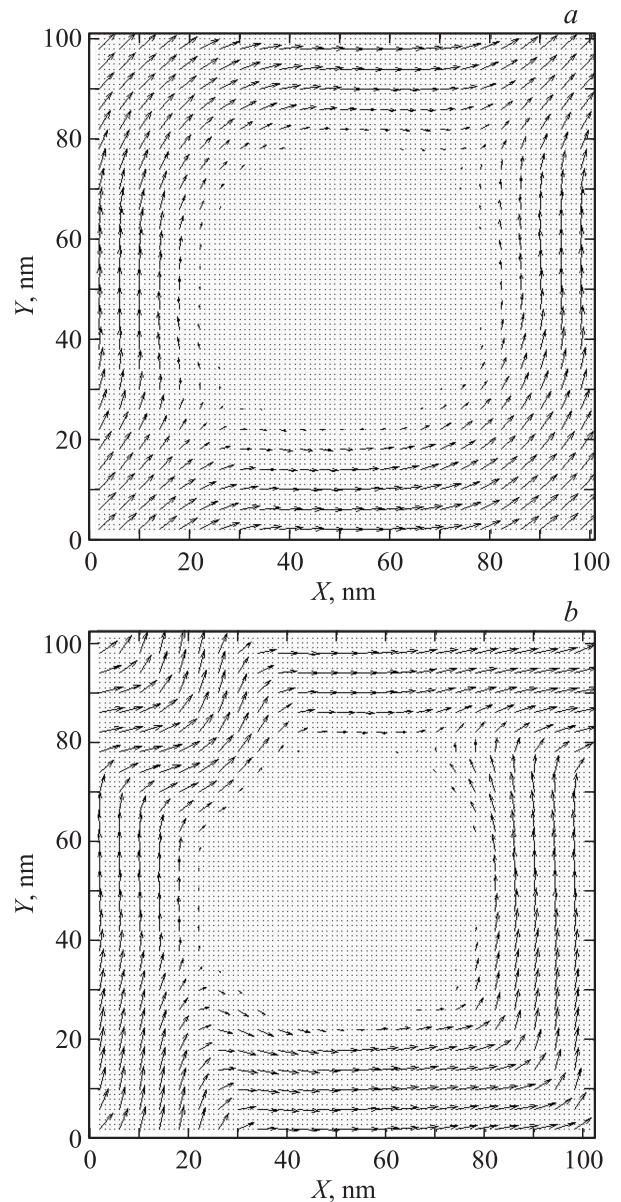


Рис. 4. Векторная карта поляризации в бесконечной квадратной призме с центральным каналом при периодических граничных условиях на поверхности призмы вблизи фазового перехода (a) и вдали от перехода (b). Полярные оси параллельны/перпендикулярны сторонам квадрата. Максимальная амплитуда вектора поляризации равна 0.01 C/m^2 вблизи фазового перехода и 0.17 C/m^2 вдали от перехода.

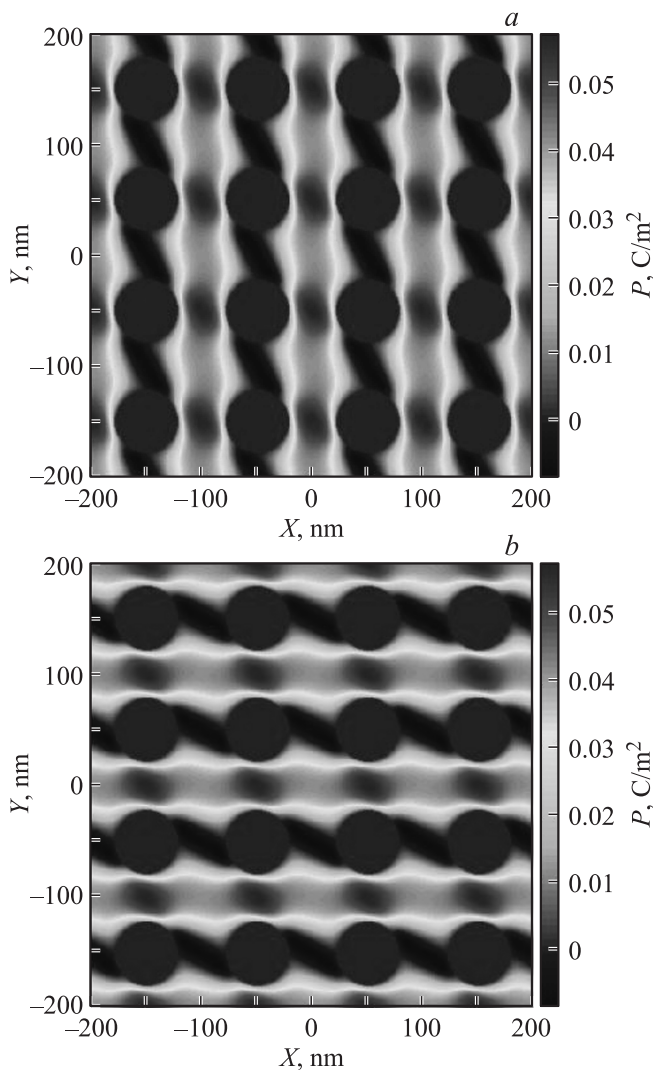


Рис. 5. Распределение компонент поляризации в бесконечной квадратной призме с шестнадцатью каналами вблизи фазового перехода. Граничные условия периодические. Полярные оси совпадают с биссектрисами углов между координатными осями. *a* — карта компоненты поляризации вдоль вертикальной оси, *b* — карта компоненты поляризации вдоль горизонтальной оси.

существенно другой, чем для периодических граничных условий, структуре (рис. 7). Естественно интерпретировать ее как содержащую два „домена“ с „доменной границей“, проходящей по второму сверху ряду отверстий. Структура одного из „доменов“ (верхний ряд) соответствует повторению распределения, представленного на рис. 2, *b*, тогда как структура другого — второму варианту этого распределения (вихрь справа и снизу от отверстия), обсуждавшемуся в предыдущем разделе.

В случае полярных осей, перпендикулярных/параллельных сторонам квадрата, наиболее простая ситуация обнаруживается для смешанных граничных условий, поэтому обсудим сначала этот вариант. Вблизи точки перехода распределение поляризации очень близко к показанному на рис. 5 распределению для другой

ориентации полярных осей, что, как уже отмечалось в предыдущем разделе, вполне естественно. Вдали от перехода получается почти периодическая структура с нарушением периодичности вблизи нижнего электрода (рис. 8, *a, b*). Распределение поляризации вблизи отверстия „в глубине“ показано на рис. 8, *c*. Видно, что структура не содержит вихрей. Это же относится и к окрестности отверстий, соседних с электродами.

Для периодических граничных условий ситуация вдали от перехода оказывается качественно отличной от описанной выше. Даже после 30 000 итераций нам не удалось получить регулярное распределение с ясно выраженной периодичностью. Распределение поляризации в окрестности отверстий вблизи верхнего края системы содержит вихри (рис. 9). Обращает на себя внимание конфигурация системы вблизи четырех внут-

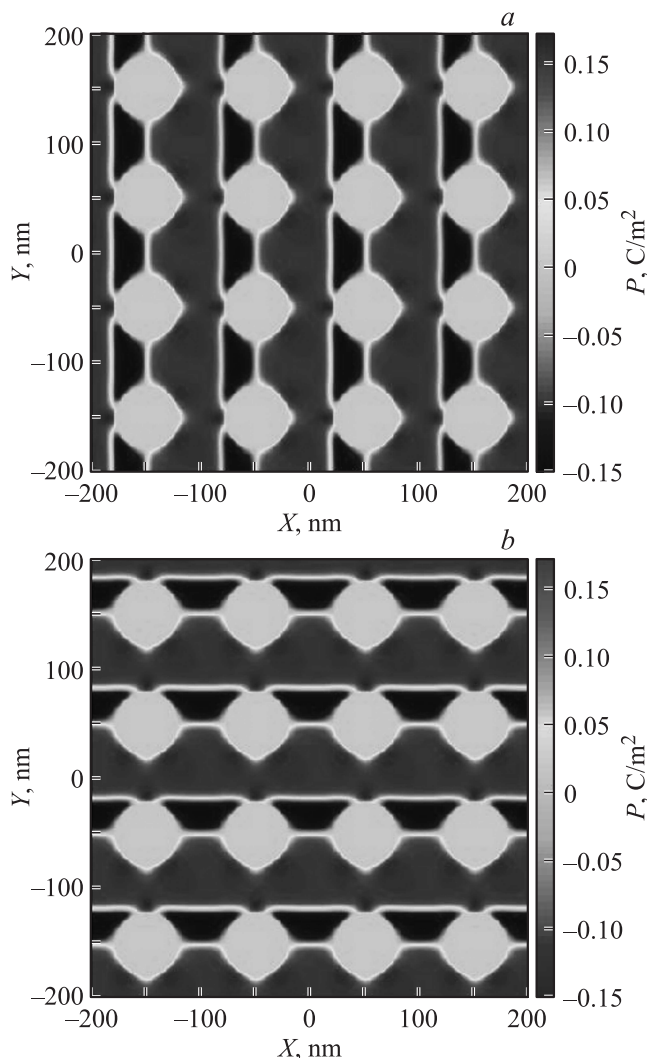


Рис. 6. Распределение компонент поляризации в бесконечной квадратной призме с шестнадцатью каналами вдали от фазового перехода. Граничные условия периодические. Полярные оси совпадают с биссектрисами углов между координатными осями. *a* — карта компоненты поляризации вдоль вертикальной оси, *b* — карта компоненты поляризации вдоль горизонтальной оси.

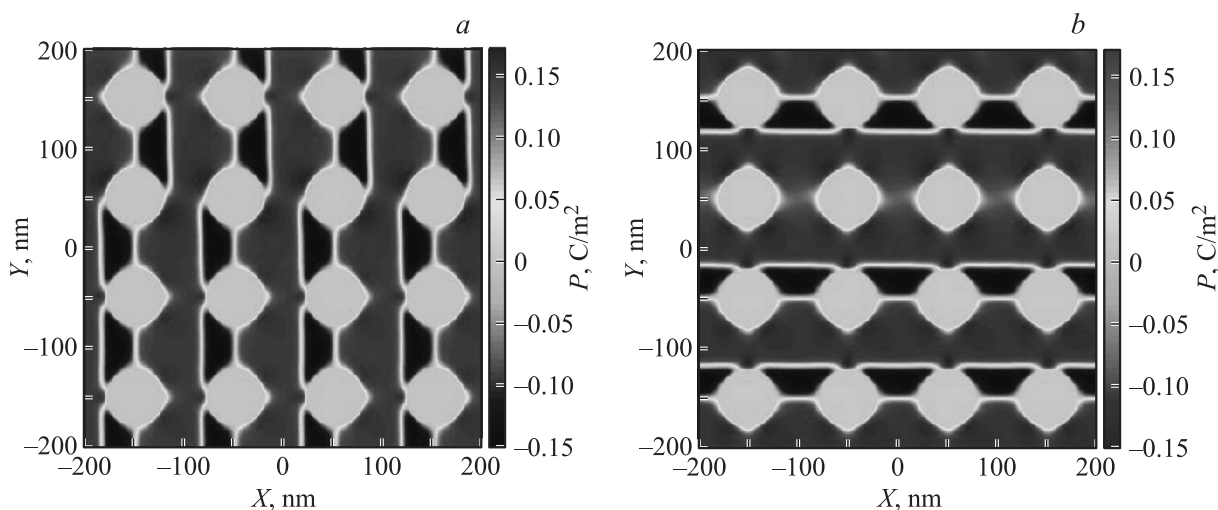


Рис. 7. Распределение компонент поляризации в бесконечной квадратной призме с шестнадцатью каналами вдали от фазового перехода. Граничные условия смешанные, горизонтальные стороны квадрата при нулевом потенциале. Полярные оси совпадают с биссектрисами углов между координатными осями. *a* — карта компоненты поляризации вдоль вертикальной оси, *b* — карта компоненты поляризации вдоль горизонтальной оси.

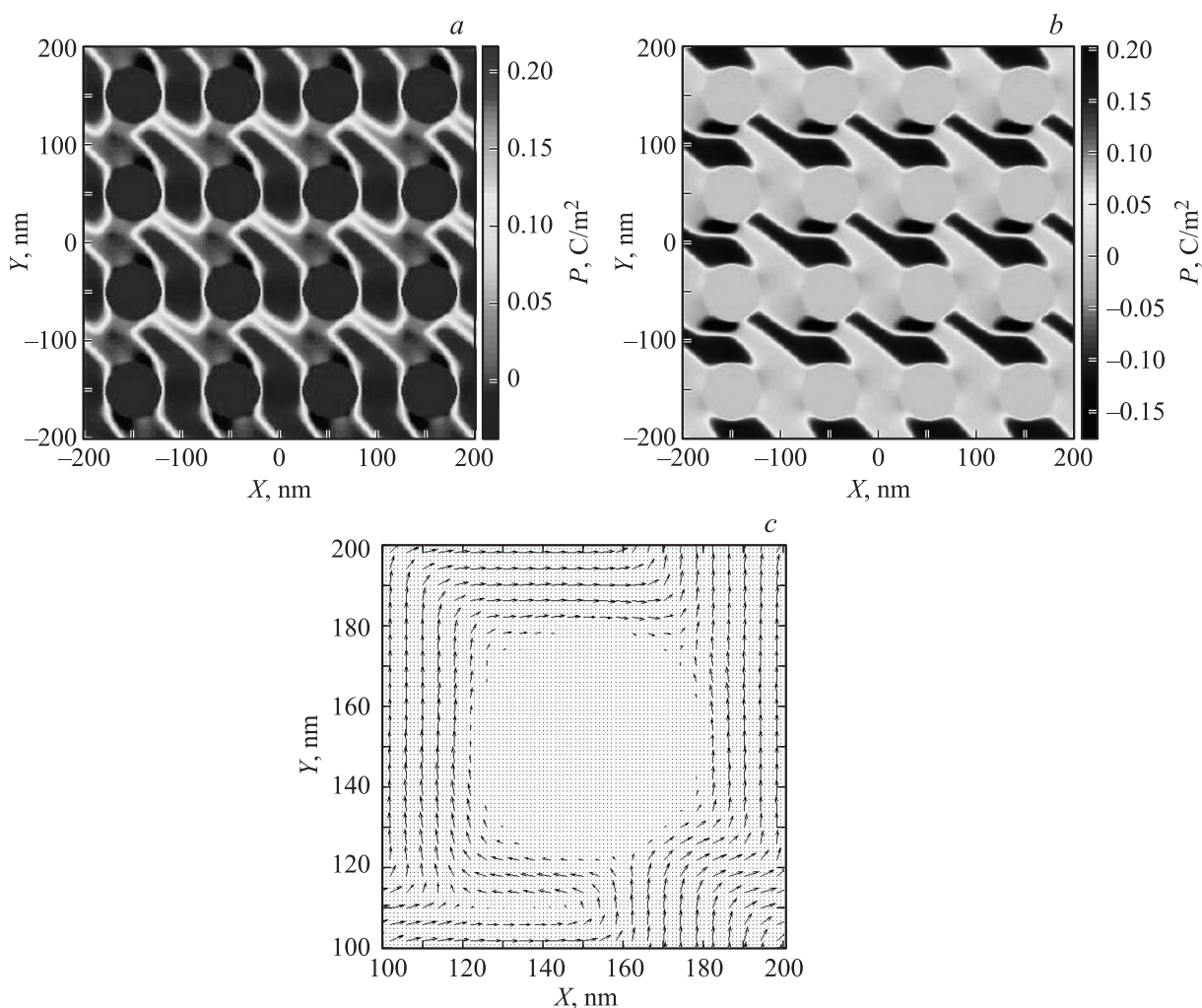


Рис. 8. Распределение компонент поляризации в бесконечной квадратной призме с шестнадцатью каналами вдали от фазового перехода. Граничные условия смешанные, горизонтальные стороны квадрата при нулевом потенциале. Полярные оси параллельны/перпендикулярны сторонам квадрата. *a* — карта компоненты поляризации вдоль вертикальной оси, *b* — карта компоненты поляризации вдоль горизонтальной оси, *c* — векторная карта поляризации вблизи одного из внутренних каналов.

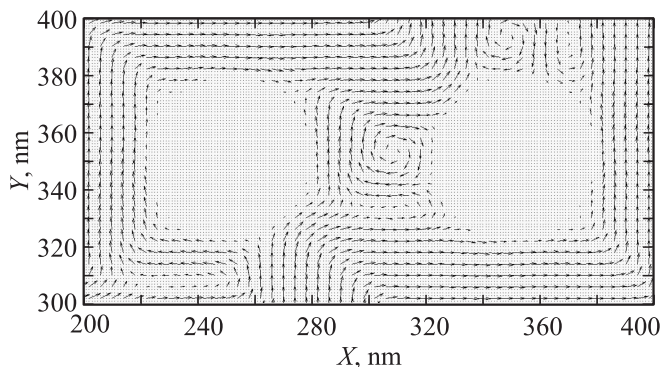


Рис. 9. Векторная карта поляризации вблизи каналов у верхней границы квадрата. Граничные условия периодические, число итераций 30 000. Полярные оси параллельны/перпендикулярны сторонам квадрата. Максимальная амплитуда вектора поляризации равна 0.17 C/m^2 .

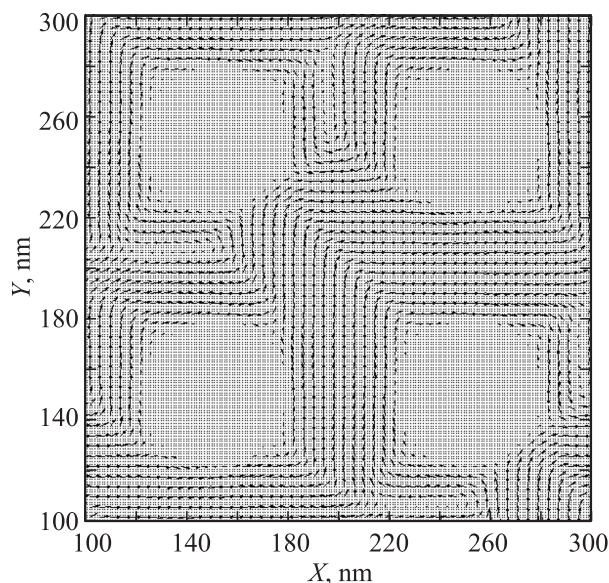


Рис. 10. Векторная карта поляризации вблизи внутренних каналов. Граничные условия периодические, число итераций 30 000. Полярные оси параллельны/перпендикулярны сторонам квадрата. Максимальная амплитуда вектора поляризации равна 0.17 C/m^2 .

ренных отверстий (рис. 10). Она наводит на мысль, что большая система имеет тенденцию упорядочиваться с периодичностью, в $\sqrt{2}$ раз большей, чем минимальное расстояние между каналами. Вихрей подобная структура не содержит, они появились в нашем эксперименте из-за неудачного способа „вырезания куска“ с шестнадцатью каналами из большой системы. При другом способе вырезания, т.е. при другой ориентации границ системы относительно линий с минимальным расстоянием между каналами, наш численный эксперимент мог бы, возможно, оказаться более успешным. Мы, однако, не смогли продолжить численные эксперименты. Показательны также существенные различия результатов для смешанных и чисто периодических граничных условий.

Они свидетельствуют о гораздо большей области влияния закороченных электродов на доменную структуру, чем при другой ориентации полярных осей, которая рассматривалась в настоящей работе.

5. Заключение

Наиболее примечательным результатом настоящей работы мы считаем существенное различие доменных структур для двух рассмотренных ориентаций полярных осей по отношению к решетке каналов. Некоторые результаты указывают на дополнительное влияние ориентации электродов относительно решетки каналов, однако этот вопрос по существу не изучен. Можно ожидать значительных различий переключательных и других характеристик для разных ориентаций полярных осей и электродов относительно решетки, хотя это предположение должно быть подтверждено дальнейшими исследованиями. Теоретическая задача о доменной структуре в двухосном сегнетоэлектрике с каналами, оси которых перпендикулярны полярной плоскости, оказывается сложной и многоплановой, и путь к ее решению представляется довольно длинным. Однако для понимания свойств переключаемых фотонных кристаллов на основе двухосных сегнетоэлектриков не видно другого пути. Настоящая работа является только первым шагом. Конечно, представляют большой интерес экспериментальные исследования, в частности изучение влияния ориентации электродов и полярных осей относительно решетки каналов на свойства фотонных кристаллов. Однако в настоящий момент трудно однозначно интерпретировать результаты таких исследований. Например, отсутствие зависимости от ориентации в эксперименте может означать как неприменимость результатов этой работы к системам с большим числом каналов в тонких пленках, так и эффективность компенсации деполяризующего поля благодаря абсорбции ионов из воздуха или другим процессам на поверхности каналов.

Список литературы

- [1] E. Mishina, A. Zaitsev, N. Ilyin, N. Sherstyuk, A. Sigov, Yu. Golovko, V. Muhortov, A. Kolesnikov, Yu. Lozovik, M. Yemtsova, Th. Rasing. *Appl. Phys. Lett.* **91**, 041 107 (2007).
- [2] Е.Д. Мишина, Н.Э. Шерстюк, А.А. Зайцев, В.М. Мухортов, А.С. Сигов. *Изв. РАН. Сер. физ.* **71**, 10, 1424 (2007).
- [3] В.М. Мухортов, Ю.И. Головкин, В.В. Колесников, С.В. Бирюков. *Письма в ЖТФ* **31**, 23, 75 (2005).
- [4] D.D. Fong, A.M. Kolpak, J.A. Eastman, S.K. Streifer, P.H. Fuoss, G.B. Stephenson, C. Thomson, D.M. Kim, K.J. Choi, C.B. Eom, I. Grinberg, A.M. Rappe. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 127 601 (2006).
- [5] A. Hubert, R. Schafer. *Magnetic domains: the analysis of magnetic microstructures*. Springer, Berlin (2009).
- [6] I. Naumov, L. Bellaiche, H. Fu. *Nature (London)* **432**, 737 (2004).
- [7] A.P. Levanyuk, R. Blinc, R. Pirc. Private communication.
- [8] N.A. Pertsev, A.G. Zembilgotov, A.K. Tagantsev. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1988 (1998).