

01;05;06

## Решетки поляризации в модельном сегнетоэлектрике, аналоге дейтерированной сегнетовой соли, как следствие взаимодействия с акустической подсистемой

© М.Б. Белоненко, А.С. Сасов

Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет,  
400074 Волгоград, Россия  
e-mail: mbelonenko@yandex.ru, asasov@yandex.ru

(Поступило в Редакцию 29 июня 2006 г.)

Исследована динамика доменной структуры сегнетоэлектриков с двумя диполями на сегнетоэлектрическую ячейку, аналогичных кристаллу сегнетовой соли. Исходя из гамильтониана задачи получены кинетические уравнения для средних значений операторов псевдоспина. На основе данных уравнений проведено численное исследование эволюции поляризации сегнетоэлектрика для различных параметров задачи в случае прозрачной и заполяризованной границы.

PACS: 75.60.Ch

### Введение

Модулированные структуры, которые широко изучаются в последнее время, имеют важное теоретическое и практическое значение. Отметим, например, что популярные в приложениях фотонные кристаллы [1,2] представляют собой пример таких структур. Несомненно, что технологически проще получать модулированные структуры в таких веществах, где они могут возникать „естественным“ образом, аналогичным, к примеру, возникновению доменов в ферроактивных материалах [3]. В рамках солитоновой теории доменной структуры подобные модулированные образования можно рассматривать как солитонные решетки. Типичный пример такого подхода приведен, например, в [4]. Отметим, что возникновение модулированных структур рассматривалось в последнее время преимущественно в материалах, где можно явно выделить только одну подрешетку [5].

Обобщению подобного подхода на случай антисегнетоэлектриков с двумя электрическими диполями на одну элементарную сегнетоэлектрическую ячейку и посвящена данная работа. Ярким представителем таких веществ является сегнетовая соль  $\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ . Также заметим, что все нижеизложенное может быть применимо и к ряду других кристаллов, таких как  $\text{NaN}_3(\text{SeO}_3)_2$ ,  $\text{NH}_4\text{HSO}_4$  и т.д. Как широко известно, сегнетова соль является антисегнетоэлектриком с двумя точками Кюри и двумя взаимопроникающими подрешетками на элементарную ячейку с локальными потенциалами, противоположными друг другу. Хотя для каждой подрешетки электрическая поляризация при температуре ниже верхней точки Кюри является ненулевой, общая поляризация при определенных температурах может отсутствовать.

Согласно современным представлениям, фазовые переходы в сегнетовой соли являются переходами типа порядок–беспорядок [6,7], а сама соль является типич-

ным представителем сегнетоэлектриков с водородными связями. Такие сегнетоэлектрики являются одним из наиболее распространенных объектов для изучения структурных фазовых переходов, так как на их примере можно изучать роль кристаллической решетки в фазовых переходах в случае, не осложненном электронными процессами, и, кроме того, удобно осуществлять внешнее воздействие на фазовый переход. Так как данные кристаллы испытывают фазовый переход второго рода типа „порядок–беспорядок“, то представляется возможным управлять их линейными и нелинейными свойствами в достаточно широких пределах посредством изменения температуры. Это, очевидно, является достаточно перспективным с точки зрения практических применений.

В настоящей работе основное внимание уделяется нахождению модулированных структур, обладающих той или ионной периодичностью, с учетом звуковых колебаний в веществе. Обнаружение и исследование подобных модулированных структур является важной задачей, так как они могут вносить сложный вклад в отклик образца, особенно при совпадении их квазипериода с периодом внешнего воздействия. Такие образования также могут представлять большой интерес для использования в устройствах памяти, а периодический характер изменения поляризации, влекущий за собой периодическое изменение диэлектрической проницаемости, делает данные вещества перспективными для использования в приложениях, где активно используются фотонные кристаллы.

### Подстановка задачи и основные уравнения

Для дейтерированных антисегнетоэлектриков типа сегнетовой соли гамильтониан задачи имеет стандартную

де Женновскую форму для двух подрешеток

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} [J_{ij}(S_{i,1}^z S_{j,1}^z + S_{i,2}^z S_{j,2}^z) + L_{i,j} S_{i,1}^z S_{j,2}^z] - \Delta \sum_j (S_{j,1}^z - S_{j,2}^z) - \sum_j (-2d\varepsilon_4(\xi) + E_0)(S_{j,1}^z + S_{j,2}^z) + H_T, \quad (1)$$

где  $J$  и  $L$  — эффективные константы взаимодействия диполей, принадлежащие к одной и той же подрешеткам и к различным решеткам соответственно;  $\Delta$  — мера асимметричности одночастичного потенциала;  $E_0$  — внешнее постоянное электрическое поле;  $d$  — соответствующий пьезомодуль;  $\varepsilon_4(\xi)$  — тензор сдвиговой деформации (в данном случае электрическое поле, действующее на псевдоспин, будет являться суперпозицией поля, возникшего в результате деформации, и внешнего поля  $E_0$  [8]);  $\xi$  — координата, описывающая смещения атомов в нашей системе;  $S^x$  и  $S^z$  — операторы туннелирования и электрического дипольного момента для протона на водородной связи соответственно;  $H_T$  — гамильтониан взаимодействия псевдоспиновой системы с термостатом, ответственный за поглощение энергии псевдоспиновой системой.

Так как поглощение энергии носит релаксационный характер, то необходимо вывести соответствующие кинетические уравнения для данного случая. Такие кинетические уравнения можно вывести методом неравновесного статистического оператора Зубарева и методом Глаубера [5,9,10]. Отметим, что хотя результаты вывода кинетических уравнений этими методами различаются, в случаях для параметров гамильтониана, соответствующих рассматриваемым кристаллам, данные уравнения совпадают с уравнениями Блоха для вектора псевдоспина.

Поскольку обсуждаемые в данной работе антисегнетоэлектрики являются квазидвумерными, необходимо для адекватного рассмотрения их свойств решать пространственно-двумерную задачу. Кинетические уравнения для описания динамики поляризации  $\langle S_1^z \rangle$ ,  $\langle S_2^z \rangle$  (для первой и второй подрешеток соответственно) можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \dot{\langle S_1^z \rangle} &= -\frac{\langle S_1^z \rangle - \frac{1}{2} \tanh[\beta(S_{11}^J + S_{12}^J + d \cdot u + E + \Delta)]}{T_1}, \\ \dot{\langle S_2^z \rangle} &= -\frac{\langle S_2^z \rangle - \frac{1}{2} \tanh[\beta(S_{21}^J + S_{22}^J + d \cdot u + E - \Delta)]}{T_2}, \end{aligned} \quad (2)$$

где

$$S_{11}^J = J \cdot \langle S_1^z \rangle + A \cdot \langle S_1^z \rangle_{\xi\xi} + A \cdot \langle S_1^z \rangle_{\eta\eta} + L \cdot \langle S_2^z \rangle,$$

$$S_{12}^J = B \cdot \langle S_2^z \rangle_{\xi\xi} + B \cdot \langle S_2^z \rangle_{\eta\eta},$$

$$S_{21}^J = J \cdot \langle S_2^z \rangle + A \cdot \langle S_2^z \rangle_{\xi\xi} + A \cdot \langle S_2^z \rangle_{\eta\eta} + L \cdot \langle S_1^z \rangle,$$

$$S_{22}^J = B \cdot \langle S_1^z \rangle_{\xi\xi} + B \cdot \langle S_1^z \rangle_{\eta\eta},$$

$$U = u_{\xi\xi} + u_{\eta\eta}; \quad A = Ja^2; \quad B = La^2,$$

$a$  — расстояние между сегнетоэлектрическими ячейками. Данные уравнения необходимо дополнить уравнением на звуковые волны

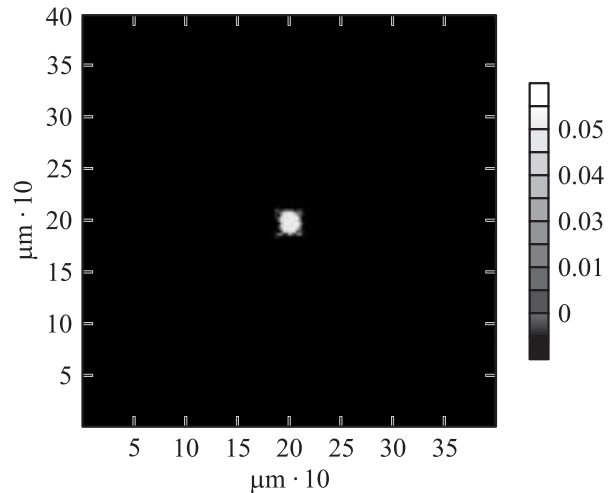
$$u_{tt} + d_1(\langle S_1^z \rangle_{\xi} + \langle S_1^z \rangle_{\eta}) + d_1(\langle S_2^z \rangle_{\xi} + \langle S_2^z \rangle_{\eta}) - v^2(u_{\xi\xi} + u_{\eta\eta}) = 0, \quad (3)$$

где  $d_1 = \frac{d}{\rho}$ ,  $u$  — эффективная компонента вектора смещений,  $d$  — соответствующий пьезомодуль,  $\rho$  — плотность образца.

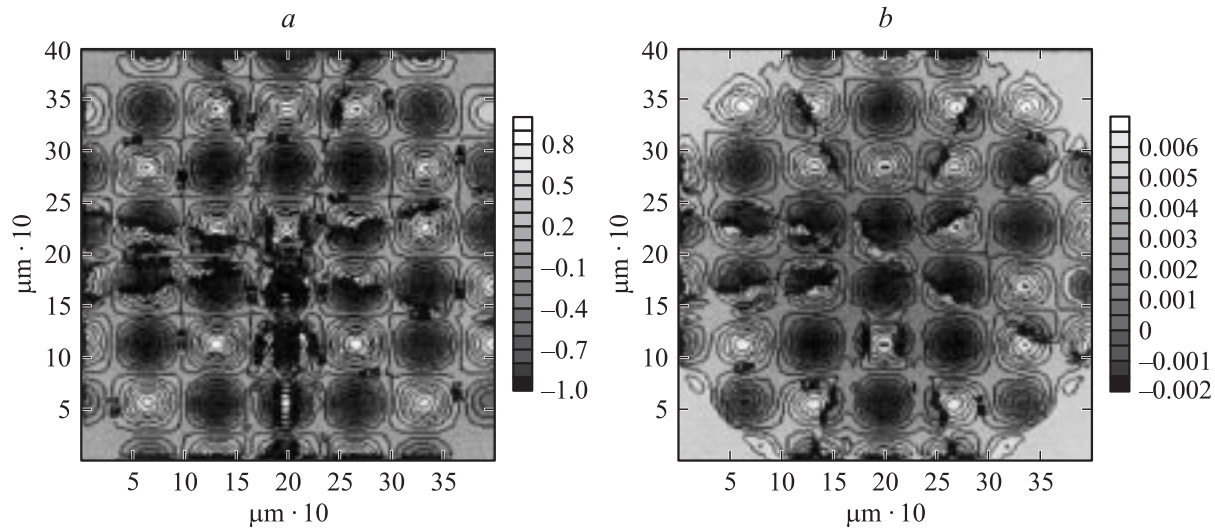
## Основные результаты численного моделирования

Система уравнений (2), (3) решалась численно с использованием явной численной схемы. В качестве затравочного выбиралось состояние, приведенное на рис. 1. Все расчеты проводились для случаев, когда модельный сегнетоэлектрик — аналог сегнетовой соли — находился в сегнетоэлектрической фазе между верхней и нижней точками Кюри. Величина обменного взаимодействия  $J$  нормировалась на величину данного взаимодействия в кристаллах сегнетовой соли  $J = 1.7 \cdot 10^{-21}$  J [9]. Значения всех остальных констант приводятся в подписях к рисункам. Единица измерения расстояний выбиралась так, что скорость звука равна единице.

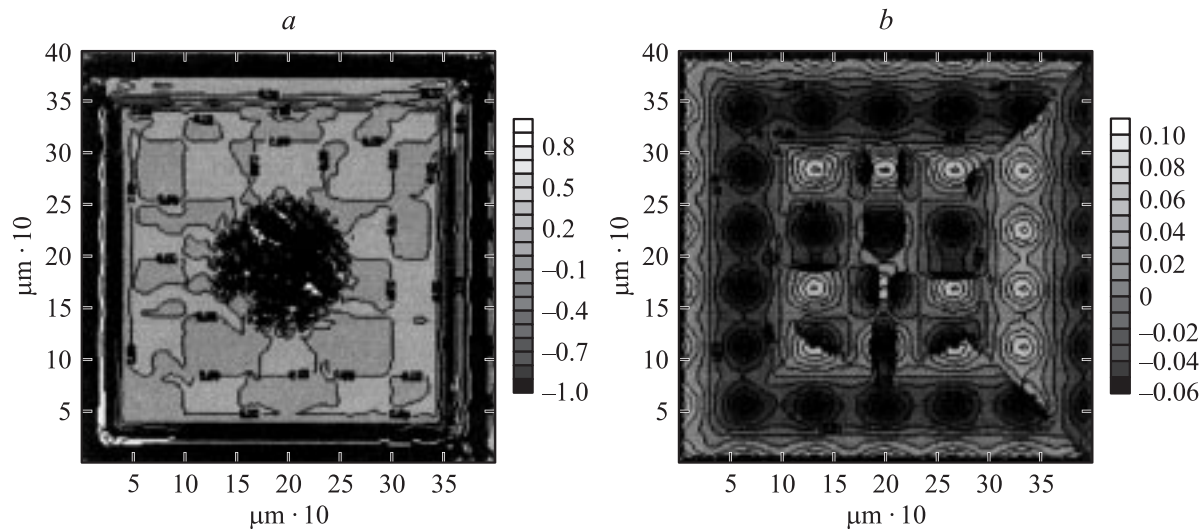
Типичные состояния поляризации рассматриваемой системы, достигаемые в результате ее эволюции, представлены на рис. 2.



**Рис. 1.** Затравочное состояние поляризации, используемое при расчетах. В шкале яркости — поляризация, нормированная на поляризацию насыщения.



**Рис. 2.** Типичные результаты эволюции поляризации затравочного состояния, представленного на рис. 1. *a* —  $J = L = 100\Delta = 1.7 \cdot 10^{-21}$  J;  $T = 278$  K,  $T_1 = T_2 = 10^{-12}$  s; *b* — значение пьезомодуля уменьшено в 100 раз. В шкале яркости — поляризация, нормированная на поляризацию насыщения.



**Рис. 3.** Типичные результаты эволюции поляризации затравочного состояния, представленного на рис. 1, в случае „заполяризованной“ границы. *a* —  $J = L = 100\Delta = 1.7 \cdot 10^{-21}$  J;  $T = 278$  K,  $T_1 = T_2 = 10^{-12}$  s; *b* — значение времен релаксации уменьшено в 100 раз.

Возникновение подобной структуры связано, на наш взгляд, с тем, что релаксационные процессы как бы „замораживают“ распад первоначального состояния, имеющий волновой характер вследствие связи с акустической подсистемой. Фактически происходит совместное действие двух процессов. Первоначальное состояние распадается вследствие связи с акустической подсистемой волновым образом, в то время как процессы релаксации в псевдоспиновой системе „замораживают“ волны. В конечном состоянии представлена двумерная квазипериодическая структура с эффективным наименьшим коэффициентом затухания. Отметим, что подобные

структуры сохраняются, и когда граница нашей области „заполяризована“. „Заполяризация“ достигалась прикладыванием к границе образца внешнего постоянного поля (рис. 3).

Отметим, что представленное на рис. 3 различие в виде конечного состояния связано с уменьшением времен релаксации и явно иллюстрирует определяющую роль в появлении квазипериодической структуры именно процессов релаксации поляризации, описываемых уравнениями (2). Отметим также более регулярный характер конечного состояния поляризации в случае заполяризованной границы.

## Выводы

1. Поляризация дейтерированных антисегнетоэлектриков типа сегнетовой соли на больших (в сравнении со временем релаксации псевдоспиновой подсистемы) временах принимает вид квазирегулярной пространственно-периодической структуры.

2. Данные состояния поляризации существуют в достаточно широком диапазоне изменения параметров задачи и возникают вследствие совместного действия двух процессов: распада первоначального состояния, носящего волновой характер, и „замораживания“ волн процессами релаксации.

3. Процессы „заполяризации“ границы области не оказывают существенного влияния на характер образующегося состояния, но приводят к более регулярному его характеру.

## Список литературы

- [1] *Кившарь Ю.С., Агравал Г.П.* Оптические солитоны. М.: Физматлит, 2005.
- [2] *Johnson S.G., Joannopoulos J.D.* Photonic Crystals: The Road from Theory to Practice. Boston: Kluwer Academic, 2002.
- [3] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982.
- [4] *Нагаев Э.Л.* Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. М.: Наука, 1988.
- [5] *Белоненко М.Б., Сасов А.С.* // ФТТ. 2006. Т. 48. Вып. 6. С. 1069–1070.
- [6] *Блинц Р., Жекии Б.* Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. М.: Мир, 1975.
- [7] *Сакс В.Г.* Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М.: Наука, 1973. 328 с.
- [8] *Белоненко М.Б., Сасов А.С.* // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 4. С. 74–77.
- [9] *Levitskii R.R., Zachek I.R., Verkholyak T.M., Moina A.P.* // Phys. Rev. 2003. N 67.
- [10] *Glauber R.J.* // J. Math. Phys. 1963. Vol. 4. P. 294.