

08

Электрорезонансные волны решетки движущихся доменных границ сегнетоэлектрического кристалла

© Е.А. Вилков, С.Н. Марышев, Н.С. Шевяков

Ульяновский филиал института радиотехники и электроники
им. В.А. Котельникова РАН
Московский физико-технический институт
E-mail: e-vilkov@yandex.ru

Поступило в Редакцию 17 сентября 2008 г.

Рассмотрены дисперсионные свойства мод электрорезонансных волн, удерживаемых сверхрешеткой равномерно движущихся 180-градусных доменных границ в тетрагональном сегнетоэлектрическом кристалле. Показано, что множество мод парциальных электрорезонансных граничных волн решетки ограничено первой разрешенной зоной, конфигурация которой в плоскости спектральных переменных может существенно изменяться под влиянием движения доменных границ. Для парциальных электрорезонансных граничных волн с блоховскими волновыми числами $\chi \neq \pi/d$ (d — полупериод решетки) предсказывается расщепление мод статичной сверхрешетки движением доменных границ на пары, инвариантное к обращению направления движения.

PACS: 43.35.Pt, 68.65.Cd

Фононные спектры мод полидоменных сегнетоэлектрических кристаллов исследовались многими авторами. Для сдвиговых волн горизонтальной поляризации в сегнетоэлектриках типа BaTiO_3 с регулярной доменной структурой, образованной эквидистантными 180-градусными доменными границами (ДГ), соответствующие результаты представлены, например, в работах [1–3]. В этих и других работах периодическая доменная структура кристалла полагалась фиксированной. Спектральные свойства такого рода статичных доменных сверхрешеток изучались преимущественно для мод объемно распространяющихся волн.

В настоящем сообщении впервые рассмотрены фононные спектры динамических доменных сверхрешеток сегнетоэлектриков, образуемых 180-градусными ДГ, синхронно перемещающимися по кристаллу с по-

стоянной скоростью V_D . Кристаллическая симметрия, тип поляризации волн и геометрия их распространения приняты такими же, как в работах [1–3], с единственной оговоркой, что изучаются исключительно моды, локализуемые на ДГ решетки. До сих пор указанного типа моды (электрoзвукoвые граничные волны (ЭГВ)) рассматривались только при малых числах движущихся ДГ: одиночная движущаяся ДГ [4], движущийся полосовой домен (пара ДГ) [5] и пары движущихся, прилегающих друг к другу разнотолщинных полосовых доменов (тройка ДГ) [6].

Следуя [4–6], решение строим в попутной системе отсчета $\tilde{x}\tilde{y}\tilde{z}$, привязанной к ДГ решетки. С лабораторной (кристаллографической) системой координат $xOyz$, ось z которой совпадает с осью симметрии 4 сегнетоэлектрика класса 4mm и задает направление спонтанной поляризации в доменах, она связана преобразованием Галилея $\tilde{x} = x$, $\tilde{y} = y - V_D t$, $\tilde{z} = z$, $\tilde{t} = t$, где t и \tilde{t} — время, одинаковое в обеих системах отсчета. С учетом этого исходные уравнения для смещений $\mathbf{u}_j \parallel z$ и электрических потенциалов φ_j в сдвиговых волнах, распространяющихся в домене номера j решетки перпендикулярно оси z , примут вид [4–6]

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} - V_D \frac{\partial}{\partial \tilde{y}}\right)^2 u_j = c_t^2 \tilde{\nabla}^2 u_j, \quad \tilde{\nabla}^2 \Phi_j = 0. \quad (1)$$

В уравнениях (1) обозначено: $\tilde{\nabla} = \partial^2/\partial \tilde{x}^2 + \partial^2/\partial \tilde{y}^2$, u_j — величина сдвиговых смещений, Φ_j — часть полного потенциала

$$\varphi_j = \frac{4\pi e_j}{\varepsilon} u_j + \Phi_j, \quad (2)$$

представляющая собой электрическое поле, индуцированное с ДГ пьезополяризационными зарядами, $c_t = (\mu^*/\rho)^{1/2}$ — скорость сдвиговых волн в монодоменном кристалле с параметрами: ε — диэлектрическая проницаемость, μ^* — модуль сдвига с поправкой на пьезоэффект, ρ — плотность. Величины

$$e_j = (-1)^{j+1} e, \quad e > 0 \quad (3)$$

представляют собой чередующиеся по знаку пьезомодули доменов из-за инверсии полярных направлений на 180-градусных ДГ (рис. 1).

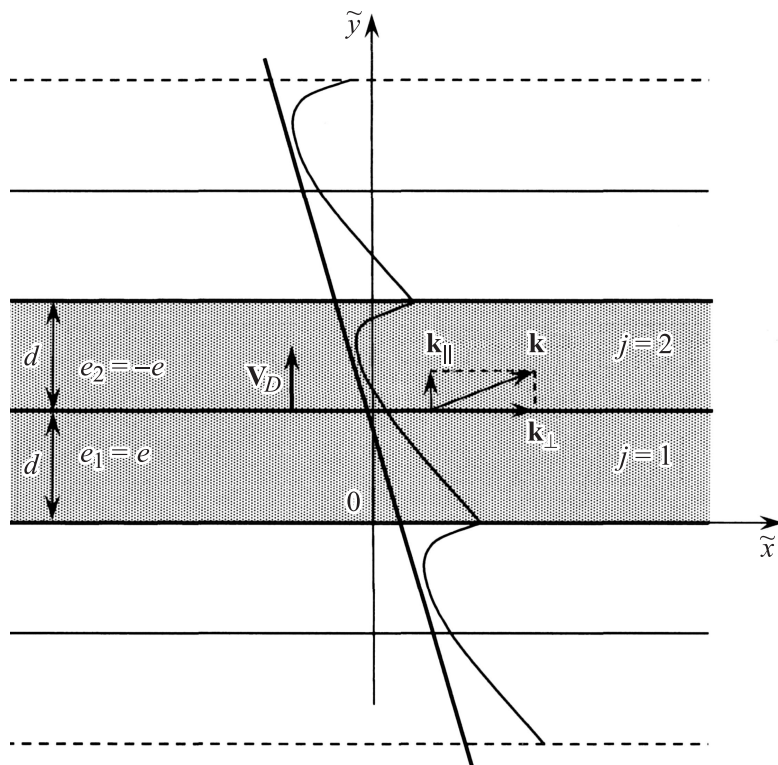


Рис. 1. Геометрия задачи и схематическая картина распределения сдвиговых смещений вдоль наклонного фронта частичной ЭГВ при $\chi = \pi/d$.

При избранном подходе ДГ решетки принимаются геометрически тонкими, а их скорости — дозвуковыми ($V_D < c_t$). Кроме того, полагается, что сегнетоэлектрик находится вдали от фазового перехода. Структурообразующим элементом решетки выберем пару примыкающих полосовых доменов сегнетоэлектрика с границами $\tilde{y} = 0, d, 2d$, выделенную на рис. 1 темным фоном. Полагая, что распространение волн происходит в плоскости $\tilde{x}0\tilde{y}$ в положительном направлении оси \tilde{x} , в силу пропорциональности смещений u_j и потенциалов Φ_j экспоненциальным множителям $\exp[i(k_{\parallel}\tilde{x} - \Omega t)]$, на основании (1) можно сделать

вывод о типичной (см. [4–6]) неколлинеарности ЭГВ: $\mathbf{k} = (k_{\parallel}, k_{\perp}, 0)$, $k_{\perp} \neq 0$. Отклонение фронта ЭГВ (показан на рис. 1 наклонной прямой линией) от ортогонального положения задается поперечной составляющей волнового вектора k_{\perp} по первой из формул

$$k_{\perp} = \frac{\Omega}{c_t} \frac{\beta}{1 - \beta^2}, \quad s = \frac{1}{1 - \beta^2} \sqrt{k_{\parallel}^2 (1 - \beta^2) - \frac{\Omega^2}{c_t^2}}, \quad \beta = \frac{V_D}{c_t}. \quad (4)$$

С учетом (4) решения уравнений (1) в пределах нумерованной индексом $j = 1, 2$ пары доменов элементарной ячейки можно представить в виде

$$u_1(\tilde{y}) = [A_1 \exp(-s\tilde{y}) + A_2 \exp(s\tilde{y})] \exp(ik_{\perp}\tilde{y}) \exp[i(k_{\parallel}\tilde{x} - \Omega\tilde{t})],$$

$$\Phi_1 = [C_1 \exp(k_{\parallel}\tilde{y}) + C_2 \exp(-k_{\parallel}\tilde{y})] \exp[[i(k_{\parallel}\tilde{x} - \Omega\tilde{t})], \quad (0 < \tilde{y} < d), \quad (5)$$

$$u_2(\tilde{y}) = [B_1 \exp(-s\tilde{y}) + B_2 \exp(s\tilde{y})] \exp(ik_{\perp}\tilde{y}) \exp[i(k_{\parallel}\tilde{x} - \Omega\tilde{t})],$$

$$\Phi_2 = [D_1 \exp(k_{\parallel}\tilde{y}) + D_2 \exp(-k_{\parallel}\tilde{y})] \exp[i(k_{\parallel}\tilde{x} - \Omega\tilde{t})], \quad (d < \tilde{y} < 2d). \quad (6)$$

Здесь $\Omega = \omega(1 - \beta^2)$ и ω — частота ЭГВ в попутной и лабораторной системах отсчета, s — коэффициент граничной локализации колебаний ЭГВ.

Чтобы сшить поля доменов на внутренней границе $\tilde{y} = d$, воспользуемся стандартными требованиями [7] непрерывности сдвиговых смещений, потенциалов, сдвиговых компонент тензора напряжений $T_{yz}^{(j)}$ и y — компонент электрических индукций. Аналогичные граничные условия следует также применить для внешних границ ячейки: $\tilde{y} = 0$ и $\tilde{y} = 2d$ ($\tilde{y} = nd, \tilde{y} = (n + 1)2d$, если иметь в виду ячейку произвольного номера n), а затем наложить требования трансляционной инвариантности решения: $u(\tilde{y}) = u(\tilde{y} + 2d)$, $\varphi(\tilde{y}) = \varphi(\tilde{y} + 2d)$, $\Phi(\tilde{y}) = \Phi(\tilde{y} + 2d)$. Другими словами, опираясь на свойство цикличности решения, сформулированного применительно к выделенной элементарной ячейке решетки в виде теоремы Блоха [7]:

$$u_1(0) = u_2(2d) \exp(i\chi 2d), \quad \varphi_1(0) = \varphi_2(2d) \exp(i\chi 2d) \quad \text{и}$$

$$\Phi_1(0) = \Phi_2(2d) \exp(i\chi 2d), \quad (7)$$

где χ — блоховское волновое число, можно не использовать явным образом внешние граничные условия. С этой целью необходимо определить матрицу перехода, связывающую значения поля (или сцепленных

между собой полей) „на входе“ слоя с его значениями „на выходе“. Для полей со структурой типа (5), (6), следуя изложенной в [7] процедуре построения матрицы перехода \mathbf{M}_j , получим

$$\mathbf{M}_j = \begin{pmatrix} \frac{m}{\delta} & -\frac{m_1}{\mu^* s \delta} & 0 & \frac{e_j m_1}{\mu^* s \delta} \\ -\frac{\mu^*(s^2 + k_{\perp}^2)}{s \delta} m_1 + K^2 \mu^* k_{\parallel} \text{sh} \xi & \frac{m'}{\delta} & -e_j \text{sh} \xi & e_j (-m'/\delta + \text{ch} \xi) \\ \frac{K^2 \mu^*}{e_j} (m/\delta - \text{ch} \xi) & \frac{-K^2 m_1}{e_j s \delta} & \text{ch} \xi & \frac{-K^2 m_1}{e_j s \delta} - \frac{\text{sh} \xi}{k_{\parallel}} \\ \frac{K^2 \mu^* k_{\parallel} \text{sh} \xi}{e_j} & 0 & -k_{\parallel} \text{sh} \xi & \text{ch} \xi \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Здесь обозначено $m = [\text{ch}(sd) - \frac{k_{\perp}}{s} \text{sh}(sd)] \exp(-ik_{\perp}d)$, $m' = [\text{ch}(sd) + \frac{k_{\perp}}{s} \text{sh}(sd)] \exp(-ik_{\perp}d)$, $m_1 = \text{sh}(sd) \exp(-ik_{\perp}d)$, $\delta = \exp(-2ik_{\perp}d)$, $\xi = k_{\parallel}d$, $K^2 = 4\pi e^2/(\epsilon\mu^*)$ — квадрат коэффициента электромеханической связи монодоменного сегнетоэлектрика.

Матрица перехода на полном периоде структуры $\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 \times \mathbf{M}_2$ в соответствии с циклическими условиями Блоха (7) своими собственными числами $\lambda = \exp(2i\chi d)$ определяет дисперсионное соотношение для ЭГВ вида $\text{Det}[\mathbf{M} - \lambda \mathbf{E}] = 0$, где \mathbf{E} — единичная матрица размером 4×4 , χ — блоховское волновое число, выражающее собой степень фазового синхронизма электрорезонансных колебаний на ДГ по периоду решетки. После определения на основании (8) матрицы \mathbf{M} и элементарных преобразований дисперсионное соотношение для ЭГВ можно представить равенством

$$\begin{aligned} & a^2 + a[4 \cos(k_{\perp}d) + 4 \cos(2\chi d - k_{\perp}d) - 8 \text{ch}(sd) \text{ch}(k_{\parallel}d)] \\ & + \cos(4\chi d - 2k_{\perp}d) - 4 \cos(2\chi d) \text{ch}(2sd) \\ & - \cos(2\chi d - 2k_{\perp}d) \text{ch}(2k_{\parallel}d) + 2 \cos(k_{\perp}d) + 4 \text{ch}(sd) \text{ch}(k_{\parallel}d) = 0, \quad (9) \end{aligned}$$

где $a = 8k_{\parallel}K^2 \text{sh}(sd) \text{sh}(k_{\parallel}d)/s$. Отсюда, разрешая (9) относительно величины a , можно получить дисперсионное соотношение, более удобное для анализа и численного счета.

Анализ уравнения (9) показывает, что за исключением случая $\chi = \pm\pi/d$, когда электрорезонансные колебания ДГ, отстоящих друг от друга на период решетки, строго синфазны,¹ движение ДГ расщепляет

¹ Этому случаю соответствует условная картина профиля сдвиговых смещений на рис. 1

каждую дисперсионную ветвь парциальной ЭГВ статичной решетки на пару ветвей, соответствующих двум различным модам. Это расщепление можно рассматривать как снятие имеющего место при $\beta = 0$ вырождения взаимодействия акустоэлектрических колебаний ДГ элементарной ячейки. Данный факт удобнее всего продемонстрировать на примере парциальных ЭГВ при $\chi = \pi/(2d)$, когда (9) приводится к виду

$$s = K^2 k_{\parallel} \left\{ \text{th}(k_{\parallel} d) \text{th}(sd) \frac{[2 \pm \sin(k_{\perp} d) / \text{ch}^2(sd)]}{1 + [1 - 2 \sin^2(k_{\perp} d) / \text{ch}^2(sd)]} \right\} \quad (10)$$

и для статичной решетки имеется только один корень.² В результате движения ДГ ($k_{\perp} \neq 0$) он расщепляется, по выбору знаков „+“ и „-“ в уравнении (10), на два корня, соответствующих двум различным, но близким по характеру поперечного (квазиантисимметричного) распределения профиля смещений модам.

В общем случае $\chi \neq \pm\pi/d, \pm\pi/(2d)$ уравнение (9) имеет при $\beta = 0$ два корня и соответственно расщеплению на парные ветви за счет движения ДГ подвергнутся обе моды вырожденного спектра. Характерно, что при снятии вырождения акустоэлектрических колебаний ДГ их движением не отмечается изменений дисперсионных спектров парциальных ЭГВ обращением направления движения. Так, согласно (10), преобразование $V_D \rightarrow -V_D$ вызывает только перестановку корней, не меняющую картину спектра мод рис. 2. Таким образом, для динамической решетки соблюдается свойство взаимности поперечного распределения полей и распространения ГЭВ вдоль удерживающих границ.

Блоховские волновые числа $\chi = \pm\pi/d$ устанавливают границы первой разрешенной зоны. Поэтому, с учетом отмеченного для них нерасщепления дисперсионных спектров движением ДГ, именно с ними следует связывать ограничительные дисперсионные ветви ЭГВ в спектральной плоскости (ω, k_{\parallel}) , очерчивающие для избранной скорости V_D область расположения всех остальных дисперсионных ветвей парциальных мод с $|\chi| < \pi/d$. На рис. 3 такие ограничительные ветви показаны

² Здесь наличие только одной — антисимметричной моды (показана на рис. 2 штриховой кривой) представляет, как и в [6], следствие пьезоэлектрической несовместимости симметрично распределенных смещений и вызываемых ими сдвиговых напряжений на внутренней ДГ элементарной ячейки из-за перемены знака пьезомодуля.

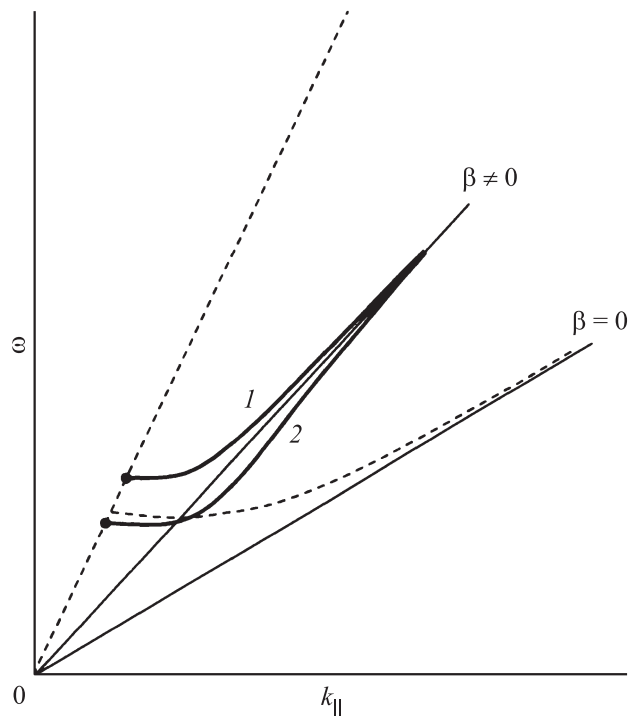


Рис. 2. Спектр мод частичной ЭГВ для блоховского волнового числа $\chi = \pi(2d)$: 1 и 2 — дисперсионные ветви, полученные расщеплением ветви статической решетки (штриховая кривая) из-за движения ДГ.

схематически штриховыми ($V_D = 0$) и толстыми сплошными кривыми ($V_D \neq 0$). Очерченная ими область расположения дисперсионных ветвей всех остальных частичных ЭГВ для случая $V_D \neq 0$ выделена затененным фоном. В частности, в нее попадают расщепленные спектры 1, 2 рис. 2.

Тонкие прямые линии рис. 2, 3 представляют собой линейные спектры моды Марфелда–Турнуа, т. е. спектры ЭГВ на одиночной, соответственно неподвижной ($\beta = 0$, [8]) или движущейся ($\beta \neq 0$, [4]) ДГ. Штриховая прямая изображает линейный спектр объемных волн, распространяющихся в монодоменном кристалле.

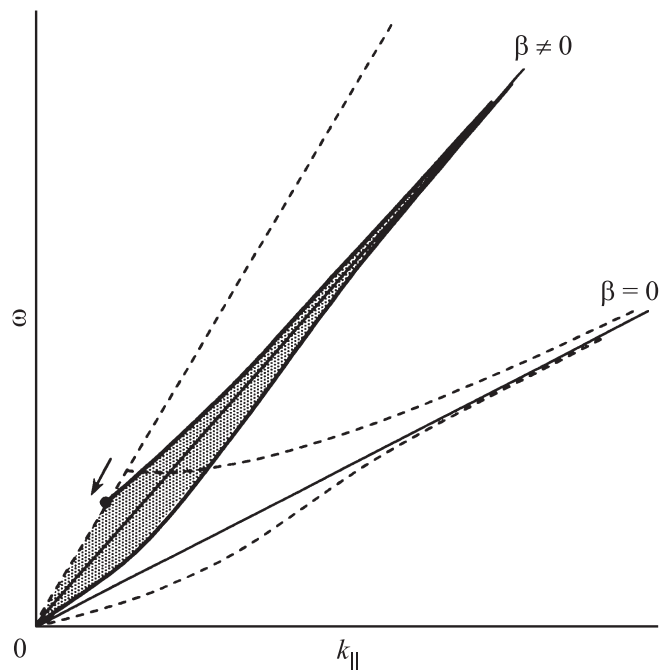


Рис. 3. Спектр мод парциальной ЭГВ при $\chi = \pi/d$ в случае статичной (штриховые кривые) и динамической (сплошные кривые) решетки. Область расположения дисперсионных ветвей парциальных ЭГВ при $|\chi| < \pi/d$ и заданной скорости движения ДГ выделена фоном.

Внешне спектр мод рис. 3 напоминает картину спектра мод полосового домена (ПД) [5]: существуют только две моды, из них высокочастотная имеет снизу выделенную жирно точку отсечки; низкочастотная мода присутствует во всем диапазоне частот; изменение высокочастотной асимптоты спектра из-за движения ДГ такое же, как для одиночной ДГ [4] или полосового домена [5]. Присутствуют, однако, принципиальные отличия.

Во-первых, с повышением скорости ДГ точка отсечки высокочастотной моды рис. 3 смещается (показано стрелкой) вдоль спектра объемных волн в сторону низких частот — противоположно тому, что

имело место для движущегося ПД [5]. Следствием этого, например, является предельная при $\beta \rightarrow 1$ ситуация,³ когда высокочастотная ветвь вместе с низкочастотной сливаются с линейным спектром объемных волн (асимптота Марфельда–Турнуа [8] при $\beta \rightarrow 1$ приближается к спектру объемных волн) и область существования ЭГВ вытягивается в указанную спектральную прямую. Такое вырождение всех парциальных ЭГВ в объемную сдвиговую волну, распространяющуюся строго по направлению движения ДГ, соответствует отмеченному в [4,5] „расщеплению“ сдвиговых волн с движущимися ДГ из-за исчезновения пьезополяризационных зарядов. Этот результат вполне ожидаем, поскольку с фактическим прекращением при $\beta \rightarrow 1$ акустодоменного взаимодействия безразлично количество участвующих в движении со звуковой скоростью ДГ.

Во-вторых, низкочастотная ветвь имеет качественно отличный характер дисперсии. Именно, для ПД на низких частотах дисперсионная ветвь лежит ниже спектра объемных волн, но выше асимптоты моды Марфельда–Турнуа. Иначе говоря, фазовая скорость волны лежит в промежутке значений скорости ЭГВ на одиночной ДГ и скорости объемной моды. В спектре решетки дисперсионная ветвь предельно низкочастотной моды полностью лежит ниже асимптоты моды Марфельда–Турнуа. Этот тип ЭГВ для статичной решетки уже отмечался ранее в работе [2], где указывалось на сходство их дисперсии с дисперсией изгибных волн в тонких пластинах.

В-третьих, для ПД спектры мод соответствуют различным типам поперечного распределения смещений: симметричному (низкочастотная ветвь) или антисимметричному. В случае же решетки, согласно расчетам по формулам (5), (6) с найденными из уравнения (9) дисперсионными показателями ЭГВ, распределения смещений поперек элементарной ячейки качественно одинаковы для обеих предельных мод и соответствуют симметричному типу. Естественно, что движение ДГ выступает причиной искажения симметрии распределения смещений. На рис. 1 подобный „квазисимметричный“ профиль одной из мод показан в преувеличенном, для удобства восприятия, виде.

³ Точка отсечки высокочастотной ветви „скатывается“ в начало спектра.

Список литературы

- [1] *Nougaoui A., Djafary Rouhani B.* // Surf. Sci. 1987. V. 185. N 1–2. P. 154–174.
- [2] *Xingjiao Li, Yibing Lei, Cross L.E.* // Journ. Appl. Phys. 1991. V. 70. N 1. P. 3209–3214.
- [3] *Shivalov A.L., Gorkunova A.S.* // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. N 14. P. 9070–9077.
- [4] *Гуляев Ю.В., Ельмешкин О.Ю., Шевяхов Н.С.* // РЭ. 2000. Т. 45. № 3. С. 351–356.
- [5] *Ельмешкин О.Ю., Шевяхов Н.С.* // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. В. 9. С. 14–19.
- [6] *Бугаев А.С., Марышев С.Н., Шевяхов Н.С.* // РЭ. 2005. Т. 50. № 9. С. 1114–1120.
- [7] *Басс Ф.Г., Булгаков А.А., Тетеревов А.П.* Высоочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками. М.: Наука, 1989. 288 с.
- [8] *Maerfeld C., Tournois P.* // Appl. Phys. Lett. 1971. V. 19. N 4. P. 117–121.