

УДК 537.226

©1993

ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПЛАСТИНЕ КОСОГО СРЕЗА

Б.М. Даринский, А.П. Лазарев, А.С. Сидоркин

Рассматривается образование доменной структуры вблизи точки фазового перехода в сегнетоэлектрической пластине для среза произвольной ориентации оси спонтанной поляризации относительно плоскости поверхности пластины. Определены геометрия возникающей доменной структуры и условия ее образования.

Картина фазового перехода в сегнетоэлектрическую фазу оказывается зависящей от формы образца, внешних электрических полей, градиента температуры и свободных зарядов, расположенных на электродах, поверхности и в объеме сегнетоэлектрика [1-4]. Температура перехода в полидоменное состояние и ширина доменов сегнетоэлектрической пластины в зависимости от ее толщины найдены в [1,2], а от величины градиента температуры — в [3]. Условия перехода в однодоменное состояние указаны в [1,4]. При этом считалось, что ось спонтанной поляризации перпендикулярна плоскости пластины.

В настоящей работе такая задача решается для среза произвольной ориентации. Интерес исследованию вызван как желанием приблизиться к пониманию фазового перехода в более сложных системах (например, сегнетоэлектрическая керамика), так и возможной важностью сегнетоэлектрических пластин косоугольного среза для практического использования в радио- и оптоэлектронике [5].

Расположим лабораторную систему координат xuz таким образом, что ось z перпендикулярна плоскости пластины одноосного сегнетоэлектрика, ось y перпендикулярна оси спонтанной поляризации. Угол между осью z и осью спонтанной поляризации или сегнетоэлектрической осью обозначим через ψ . Кристаллографическая система координат $x'y'z'$ имеет ось z' , параллельную оси спонтанной поляризации P_s ; направления осей y и y' совпадают.

Свободная энергия Φ пластины в кристаллографической системе координат представляется интегралом по ее объему

$$\Phi = \int_V \left[\frac{\alpha_{\perp}}{2} P_{\perp}^2 - \frac{\alpha_{\parallel}}{2} P_{\parallel}^2 + \frac{\kappa}{2} \left(\frac{\partial P_{\parallel}}{\partial x'} \right)^2 + \frac{E^2}{8\pi} \right] dV. \quad (1)$$

Здесь P_{\parallel} и P_{\perp} — проекции вектора поляризации на направление сегнетоэлектрической оси и перпендикулярное ему соответственно. (В нашем

случае $P_y = 0$). Коэффициенты α_{\perp} , α_{\parallel} , κ — параметры термодинамического разложения, причем $\alpha_{\parallel} = \alpha_0(T_c - T)$, T_c — температура Кюри и $\alpha_{\parallel} > 0$ соответствует сегнетоэлектрической фазе, $\mathbf{E} = (E_{\parallel}, E_{\perp})$ — деполяризующее поле. В рамках рассматриваемого механизма возникновения доменной структуры происходит по механизму потери устойчивости исходной параэлектрической фазы, поэтому в (1) нелинейные слагаемые не учитываются.

В интеграле (1) оставлено одно корреляционное слагаемое, отражающее связь значений вектора P_{\parallel} в соседних точках, различающихся координатами x' . Такое приближение оправдано в условиях, когда ширина доменов значительно меньше толщины пластины. Последняя ситуация является типичной для рассматриваемой системы [1,2].

Решение данной задачи удобно проводить в лабораторной системе координат, переход к которой от кристаллографической системы координат определяется следующими выражениями:

$$\begin{aligned}x' &= x \cos \psi - z \sin \psi, \\z' &= x \sin \psi + z \cos \psi, \\y' &= y,\end{aligned}\tag{2}$$

Откуда следует, что

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x'} &= \frac{\partial}{\partial x} \cos \psi - \frac{\partial}{\partial z} \sin \psi, \\ \frac{\partial}{\partial z'} &= \frac{\partial}{\partial x} \sin \psi + \frac{\partial}{\partial z} \cos \psi, \\ \frac{\partial}{\partial y'} &= \frac{\partial}{\partial y}.\end{aligned}\tag{3}$$

Аналогично осуществляется обратный переход к кристаллографической системе координат от лабораторной.

Минимизация термодинамического потенциала по компонентам вектора поляризации приводит к следующей системе уравнений:

$$\alpha_{\perp} P_{\perp} = E'_{\perp} = -\frac{\partial \varphi}{\partial x'} = -\frac{\partial \varphi}{\partial x} \cos \psi + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \sin \psi,\tag{4}$$

$$-\alpha_{\parallel} P_{\parallel} - \kappa \frac{\partial^2 P_{\parallel}}{\partial x'^2} = E'_{\parallel} = -\frac{\partial \varphi}{\partial z'} = -\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \sin \psi + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \cos \psi \right),\tag{5}$$

которая дополняется уравнением электростатики

$$\Delta \varphi = 4\pi \nabla \mathbf{P}.\tag{6}$$

Решение системы уравнений (4)–(6) будем проводить в лабораторной системе координат. Поскольку система уравнений (4)–(6) линейна по компонентам вектора поляризации \mathbf{P} и потенциала φ , решение этой системы

для образца рассматриваемой геометрии может быть представлено через экспоненты в виде

$$\varphi = \varphi_0 \exp(ikx) \exp(i\lambda z). \quad (7)$$

Здесь k — вещественное волновое число, определяющее периодичность волны поляризации в направлении оси x , параллельной плоскости пластины; λ определяет изменение φ по толщине пластины и в общем случае может быть комплексным.

Подставляя (7) в (4) и (5), находим

$$P_{\perp} = \frac{i}{\alpha_{\perp}} (-k \cos \psi + \lambda \sin \psi) \varphi_0 \exp(ikx) \exp(i\lambda z), \quad (8)$$

$$P_{\parallel} = \frac{i(k \sin \psi + \lambda \cos \psi)}{\alpha_{\parallel} - \kappa k^2 \cos^2 \psi} \varphi_0 \exp(ikx) \exp(i\lambda z). \quad (9)$$

Подставляя затем (8) и (9) в (6) с учетом выражений (3), получаем следующее выражение для связи λ с k :

$$\lambda_{1,2} = \frac{4\pi \sin \psi \cos \psi (\alpha_{\perp} + \tilde{\alpha}_{\parallel}) \pm \alpha_{\perp} \tilde{\alpha}_{\parallel} \sqrt{\left(\frac{4\pi}{\tilde{\alpha}_{\parallel}} - 1\right) \left(\frac{4\pi}{\alpha_{\perp}} + 1\right)}}{\alpha_{\perp} \tilde{\alpha}_{\parallel} \left[1 + 4\pi \left(\frac{\sin^2 \psi}{\alpha_{\perp}} - \frac{\cos^2 \psi}{\tilde{\alpha}_{\parallel}}\right)\right]} k, \quad (10)$$

где

$$\tilde{\alpha}_{\parallel} = \alpha_{\parallel} - \kappa k^2 \cos^2 \psi.$$

Выражения (10) получены в приближении $\psi < 1$, что позволяет опустить члены типа $\lambda \sin \psi$ в (5) при переходе к лабораторной системе координат в градиентном члене $\kappa(\partial^2 P_{\parallel} / \partial x^2)$. Учет указанных слагаемых сильно усложняет решение задачи, поэтому рассмотрение образования доменной структуры для углов ψ , близких к $\pi/2$, будет проведено в отдельной работе.

В частном случае $\psi = 0$ из (10) получается ранее известная формула [4]

$$\lambda = \pm \sqrt{\frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\parallel}}} k, \quad (11)$$

где

$$\varepsilon_{\perp} = 1 + \frac{4\pi}{\alpha_{\perp}}, \quad \varepsilon_{\parallel} = \frac{4\pi}{\tilde{\alpha}_{\parallel}} - 1. \quad (12)$$

Отметим также, что корни $\lambda_{1,2}$ здесь являются вещественными.

Решение системы уравнений равновесия для поляризации с потенциалом (7), записанным с учетом двух корней (11) в виде

$$\varphi = A \exp(ikx) \exp(i\lambda_1 z) - B \exp(ikx) \exp(i\lambda_2 z), \quad |z| < L, \quad (13)$$

$$\varphi = C \exp(ikx) \exp(-kz), \quad |z| > L, \quad (14)$$

должно удовлетворять граничным условиям на поверхности пластины при $z = \pm L$

$$\varphi(x, z)|_{z=L-0} = \varphi(x, z)|_{z=L+0}, \quad (15)$$

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=L-0} - \left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=L+0} = 4\pi P|_{z=L-0}, \quad (16)$$

где $P = P_{\parallel} \cos \psi - P_{\perp} \sin \psi$ — нормальная к поверхности пластины проекция возникающей при фазовом переходе поляризации. Выражение для потенциала (13) в пластине выбрано таким образом, что при $\psi = 0$ $\varphi(-z) = -\varphi(z)$ и $A = B$, что соответствует расположению начала координат в центре домена.

Из (15), (16) в приближении $4\pi/\tilde{\alpha}_{\parallel} \gg 1$ находим уравнение, описывающее связь α_{\parallel} и k для определения перехода в сегнетофазу

$$\sqrt{\varepsilon_{\perp} \frac{4\pi}{\tilde{\alpha}_{\parallel}}} \operatorname{tg}[(\lambda_1 - \lambda_2)L] = 2. \quad (17)$$

Так как вблизи фазового перехода $\tilde{\alpha}_{\parallel}$ мало, решение уравнения (17) представляется в виде

$$(\lambda_1 - \lambda_2)L = \pi n, \quad (18)$$

где n — любое целое число. Из (10) находим

$$\sqrt{\varepsilon_{\perp} \tilde{\alpha}_{\parallel}} = -\frac{\pi^{3/2} n \cos^2 \psi}{kZ}. \quad (19)$$

Отсюда следует, что $n < 0$, а значение $n = 0$ соответствует зарождению однородного состояния сегнетоэлектрической фазы. Устойчивому состоянию зарождающейся неоднородной сегнетоэлектрической фазы будет соответствовать $n = -1$. Из (19) искомая зависимость α_{\parallel} от k в приближении $kL \gg 1$ есть

$$\alpha_{\parallel} = \varkappa k^2 \cos^2 \psi + \frac{\pi^2 \cos^4 \psi}{\varepsilon_{\perp} (kL)^2}. \quad (20)$$

Таким образом, температура $T = T_c - \Delta T$ фазового перехода, определяемая соотношением $\alpha_{\parallel} = \alpha_0 \Delta T$, оказывается зависящей от периода изменения вектора спонтанной поляризации.

Минимальное смещение ΔT от температуры фазового перехода T_c в условиях отсутствия деполяризующего электрического поля определяется из условия минимума $\alpha_{\parallel}(k)$, т.е. из выражения $\partial \alpha_{\parallel} / \partial k = 0$, что приводит к следующему выражению для волнового вектора k возникающей при фазовом переходе волны поляризации:

$$k = \frac{\pi^{3/4}}{(\varepsilon_{\perp} \varkappa)^{1/4} L^{1/2}} \cos^{1/2} \psi. \quad (21)$$

При $\psi = 0$ выражение (21) переходит в известное ранее выражение [1,2]

$$k = \frac{\pi^{3/4}}{(\varepsilon_{\perp} \varkappa)^{1/4} L^{1/2}}. \quad (22)$$

В рамках рассматриваемой в данной работе модели период d доменной структуры определяется значением волнового вектора k (22), т.е.

$$d = \frac{\pi}{k} = \frac{(\varepsilon_{\perp} \kappa \pi)^{1/4} L^{1/2}}{\cos^{1/2} \psi}. \quad (23)$$

Для указанного выше минимального смещения ΔT при значении k из (21) получается выражение

$$\Delta T = \frac{2\pi^{3/2} \kappa^{1/2}}{\alpha_0 \varepsilon_{\perp}^{1/2} L} \cos^3 \psi. \quad (24)$$

Аналогичный расчет был проведен для случая, когда вектор $\mathbf{k} \perp \mathbf{P}_s$. В этом случае смещение температуры фазового перехода дается выражением

$$\Delta T' = \frac{2\pi^{3/2} \kappa^{1/2}}{\alpha_0 \varepsilon_{\perp}^{1/2} L} \cos \psi, \quad (25)$$

где $\varepsilon'_{\perp} = 1 + 4\pi/\alpha_y$. Выражение (25) получено в предположении изотропных свойств пластины в плоскости xy , т.е. для случая, когда $\alpha_x = d_y$. В этом случае, как видно из (24) и (25), структура первого типа реализуется раньше, чем второго, поскольку $\Delta T < \Delta T'$ и структура с $\mathbf{k} \perp \mathbf{P}_s$ практически не реализуется. Лучшие условия для зарождения устойчивой неоднородной структуры с $\mathbf{k} \perp \mathbf{P}_s$ возможны в случае, если в пластине выполняется соотношение

$$\alpha_y > \alpha_x \cos^{-4} \psi, \quad (26)$$

причем с ростом угла ψ анизотропия свойств материала по осям x и y должна расти.

Во внешнем электрическом поле характер перехода не меняется. Однако коэффициенты α_{\perp} и α_{\parallel} несколько перенормируются из-за наличия в термодинамическом потенциале слагаемого $(1/4)\beta P^4$. При этом

$$\alpha'_{\parallel} \rightarrow \alpha_{\parallel} + 3\beta P^3 > \alpha_{\parallel}, \quad \alpha'_{\perp} \rightarrow \alpha_{\perp} + 3\beta P^3 > \alpha_{\perp}.$$

Таким образом, наличие поля приводит к смещению температуры фазового перехода в область низких температур без существенного изменения периода доменной структуры.

Список литературы

- [1] Ченский Е.В., Тарасенко В.В. // ЖЭТФ. 1982. Т. 83. № 3 (9). С. 1083-1099.
- [2] Федосов В.Н., Лазарев А.П. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1989. Т. 48. № 6. С. 1193-1195.
- [3] Darinskii V.M., Lazarev A.P., Sidorkin A.S. // Ferroelectrics. 1989. V. 98. P. 241-243.
- [4] Даринский В.М., Лазарев А.П., Сидоркин А.С. // Кристаллография. 1991. Т. 36. № 3. С. 757-758.
- [5] Ярив А., Юх П. Оптические волны в кристаллах. М.: Мир, 1987. С. 616.