[2] Gladkii V. V., Kirikov V. A., Zheludev I. S. // Ferroelectrics. 1988. V. 79. P. 577—580; Proc. 6th european meeting on ferroelectricity. Poznan, 1988. Pt II.
[3] Prelovšek P. // J. Phys. C: Sol. St. Phys. 1983. V. 16. N 17. P. 3257—3265.
[4] Sorge G., Maak H., Shuvalov L. A. // Phys. St. Sol. (a). 1986. V. 93. N 1. P. 315—320.
[5] Holakovský J., Dvořak V. // J. Phys. C: Sol. St. Phys. 1988. V. 21. N 31. P. 5449—5454.

Институт кристаллографии АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
18 апреля 1989 г.

УДК 537.226

Физика твердого тела, том 31, в. 9, 1989
Solid State Physics, vol. 31, N 9, 1989

ВЛИЯНИЕ ТУННЕЛИРОВАНИЯ НА СТРОЕНИЕ И ПОДВИЖНОСТЬ ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ ТИПА ПОРЯДОК—БЕСПОРЯДОК

А. С. Сидоркин

Влияние туннелирования на строение доменных границ в сегнетоэлектрических кристаллах рассматривалось до сих пор либо в рамках вариационного подхода [1, 2], либо с помощью численных расчетов [3]. Очевидно, что указанные подходы страдают, с одной стороны, ограниченной достоверностью, а с другой — отсутствием наглядности и необходимостью изначального проведения всей схемы расчетов для каждого нового объекта.

В настоящей работе проводится аналитическое рассмотрение указанной задачи для сегнетоэлектриков с фазовым переходом типа порядок—беспорядок. Используя гамильтониан модели Изинга в поперечном поле, нетрудно видеть, что поверхностная плотность энергии доменной стенки в рамках приближения среднего поля, в котором усреднение проводится отдельно для каждой атомной плоскости, параллельной плотности доменной стенки, имеет следующий вид [3]:

$$\gamma=\frac{1}{S}\sum_n\left\{\frac{J}{2}\left[Z_nS_n-Z_\infty S_\infty\right]-T\left[\ln 2\,\mathrm{ch}\left(\frac{J\sqrt{q^2+S_n^2}}{T}\right)-\ln 2\,\mathrm{ch}\left(\frac{J\sqrt{q^2+S_\infty^2}}{T}\right)\right]\right\},\quad (1)$$

Z_n — среднее значение квазиспина в атомной плоскости n; Z_∞ — его значение вдали от границы,

$$S_n=Z_n+\frac{A}{J}\left(Z_{n+1}+Z_{n-1}\right),\qquad S_\infty=Z_\infty\left(1+\frac{2A}{J}\right),\quad (2)$$

где J — суммарная константа взаимодействия любого квазиспина со всеми соседями в плоскости, параллельной границе; A — константа взаимодействия с соседним спином в направлении, перпендикулярном границе; $q=\Omega/J$; Ω — константа туннелирования; s — боковая поверхность элементарной ячейки, параллельная плоскости стенки. Самосогласованные значения Z_n и Z_∞ определяются из условий минимальности $\partial\gamma/\partial Z_n=0$ и $\partial\gamma/\partial Z_\infty=0$ и подчиняются соответственно следующим уравнениям:

$$Z_n\sqrt{q^2+S_n^2}=S_n\,\mathrm{th}\left(\frac{J\sqrt{q^2+S_n^2}}{T}\right),\qquad Z_\infty\sqrt{q^2+S_\infty^2}=S_\infty\,\mathrm{th}\left(\frac{J\sqrt{q^2+S_\infty^2}}{T}\right).\quad (3)$$

Разложение (1) в ряд по малым Z_n и Z_∞ до членов четвертой степени включительно с учетом разностного аналога для второй производной $(Z_{n+1}-2Z_n+Z_{n-1})/a^2=d^2Z/dx^2$, где a — размер элементарной ячейки вдоль нормального к границе x-направления, после перехода к континуальному пределу позволяет представить γ в виде

$$\gamma = \frac{1}{S} \int \left\{ \frac{\alpha}{2} (Z^2 - Z_\infty^2) + \frac{\beta}{4} (Z^4 - Z_\infty^4) + \frac{\varkappa}{2} \left(\frac{dZ}{dx} \right)^2 \right\} \frac{dx}{a}, \tag{4}$$

где

$$\alpha = (J + 2A) - \frac{(J + 2A)^2}{\Omega} \operatorname{th} \frac{\Omega}{T}, \tag{5}$$

$$\beta = \frac{(J + 2A)^4}{2T_c \Omega^2} \left[\frac{T_c}{\Omega} \operatorname{th} \frac{\Omega}{T_c} - \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \Omega / T_c} \right], \tag{6}$$

$$\varkappa = A a^2 \left[2 \operatorname{th} \frac{\Omega}{T_c} \frac{(J + 2A)}{\Omega} - 1 \right] \equiv a^2 A. \tag{7}$$

При записи (5)—(7) предполагалось, что от температуры явным образом зависит только коэффициент α. Для небольших удалений от T_c

$$\alpha \simeq \alpha_0 (T - T_c), \qquad \alpha_0 = \frac{(J + 2A)^2}{\operatorname{ch}^2 \Omega / T_c} \frac{1}{T_c^2}, \tag{8}$$

где сама величина T_c определяется обычным соотношением $\Omega/(J+2A) = \operatorname{th} \Omega/T_c$ [4]. В этом случае ширина доменной стенки

$$\delta = a \sqrt{\frac{2A}{T - T_c} \frac{T_c \operatorname{ch} \Omega / T_c}{(J + 2A)}}. \tag{9}$$

При малых Ω

$$\delta \simeq a \left(\frac{2A}{T - T_c} \right)^{1/2} + a \left(\frac{2A}{T - T_c} \right)^{1/2} \frac{\Omega^2}{2 (J + 2A)^2}. \tag{10}$$

Поверхностная плотность энергии доменной стенки в соответствии с (4) и (5)—(7) равна

$$\gamma = \frac{2}{3} Z^2 \delta a^{-3} = \frac{2\sqrt{2}}{3} \alpha^{3/2} \varkappa^{1/2} \beta^{-1} a^{-3} =$$

$$= \frac{4\sqrt{2}}{3} \frac{A^{1/2} (T - T_c)^{3/2} \Omega^2}{a^2 (J + 2A) T_c^2 \operatorname{ch}^3 \Omega / T_c} \left[\frac{T_c}{\Omega} \operatorname{th} \frac{\Omega}{T_c} - \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \Omega / T_c} \right]^{-1}. \tag{11}$$

При малых Ω

$$\gamma = \sqrt{2}\, \Delta T^{3/2} A^{1/2} (J + 2A)^{-1} \Big/ a^2 \operatorname{ch}^3 \frac{\Omega}{(J + 2A)}, \qquad \Delta T = T - T_c. \tag{12}$$

Из (9)—(12) при $\Omega = 0$, $(J+2A)_D = T_c^D = 213$ K [4], $A \sim 20$ K [3], $\Delta T \sim 10$ K, $a \sim 10^{-7}$ см ширина доменной стенки в типичном сегнетоэлектрике типа порядок—беспорядок KD_2PO_4 имеет величину $\delta_D \simeq 2 \cdot 10^{-7}$ см и поверхностную плотность энергии доменных стенок $\gamma_D \simeq 1.5 \times 10^{-2}$ эрг/см^2.

Отличное от нуля туннелирование в соответствии с (9)—(12) увеличивает ширину доменной стенки δ и уменьшает плотность ее поверхностной энергии γ. Замена дейтерия на водород в структуре KD_2PO_4, вызывая туннелирование сегнетоактивных ионов на водородных связях, характеризуемое $\Omega = 86$ K [5], при $(J+2A)_H \simeq 140$ K [3] и том же удалении от T_c дает $\delta_H \simeq 2.5 \cdot 10^{-7}$ см и $\gamma_H \simeq 10^{-2}$ эрг/см^2, что хорошо согласуется с результатами численных расчетов [3], проведенных для этих же кристаллов в рамках исходных выражений (1)—(3). Указанное согласие обусловлено успешной применимостью здесь континуального приближения, переход к которому, в частности, для γ дает, как показывают оценки, относительную погрешность $\Delta\gamma/\gamma \simeq 1/2a^2/\delta^2$.

Не слишком значительное изменение ширины доменной стенки при $\Omega \neq 0$ оказывает, однако, чрезвычайно сильное влияние на ее подвижность. Действительно, скорость доменных границ на участке термофлуктуационного режима в поле E, согласно [6], есть

$$v = v_\infty \exp(-\Delta/E), \qquad \Delta \simeq 2(\gamma V_0 a^2)^{3/4}/(\varepsilon_c\varepsilon_a)^{1/4}T. \tag{13}$$

Здесь Δ — так называемое поле активации, в котором V_0 — решеточный энергетический барьер для доменной стенки, связанный с координатной зависимостью плотности поверхностной энергии доменной стенки; $\varepsilon_c = (2\pi/\alpha)(p^2/a^3)$; ε_a — диэлектрические проницаемости монодоменного кристалла вдоль и перпендикулярно полярному направлению; температурно-зависящий коэффициент разложения свободной энергии α определяется выражением (5); p — дипольный момент элементарной ячейки, расположенной вдали от границы.

В квазиконтинуальном приближении [7] зависимость барьера V_0 от ширины доменной стенки δ имеет вид

$$V_0 = 4\pi^4\gamma(\delta/a)^3 \exp(-\pi^2\delta/a). \tag{14}$$

Таким образом, скорость стенки

$$v = v_\infty \exp\left[-W \exp\left(-\frac{3\pi^2}{4}\frac{\delta}{a}\right)\right]. \tag{15}$$

$$W = 2^8\pi^{3/2}a^{3/2}\gamma^{3/2}(\delta/a)^{9/4}/3E\,(\varepsilon_c\varepsilon_a)^{1/4}T, \tag{16}$$

и, следовательно, как видно из (15), даже небольшое увеличение δ за счет туннелирования должно привести к существенному росту скорости стенки v.

Указанное увеличение, по-видимому, может быть одной из причин наблюдаемого в эксперименте [8] увеличения подвижности доменных границ при замене дейтерия на водород в структуре KD_2PO_4 сразу на шесть порядков величины. Действительно, при вышеуказанных значениях констант $(J+2A)_D \simeq 213$ K, $(J+2A)_H \simeq 140$ K, $A \simeq 20$ K, $\Omega_D = 0$, $\Omega_H \simeq 86$ K, $a \sim 10^{-7}$ см при $\Delta T \sim 20$ K, где $\gamma_D \simeq 4.2 \cdot 10^{-2}$ эрг/см^2, $\gamma_H \simeq 3.5 \cdot 10^{-2}$ эрг/см^2, $(\delta/a)_D \simeq 1.4$, $(\delta/a)_H \simeq 2$ и $\varepsilon_c^H \sim 10^3$, $\varepsilon_c^D \sim 10^2$, $\varepsilon_a^H \sim 10$, $\varepsilon_a^D \sim 5$ при $E \sim 1$ В/см значение постоянной W для дейтерированного и недейтерированного кристаллов равно соответственно $W_D \simeq 5 \cdot 10^5$, $W_H \simeq 7.7 \cdot 10^5$.

Предполагая, что предэкспоненциальный множитель в (15) не меняется при замене $H \to D$, для отношения скоростей доменных границ в дейтерированном и недейтерированном кристалле имеем $v_D/v_H \sim 10^5 \div 10^{-6}$.

Список литературы

[1] Федосов В. Н., Сидоркин А. С. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1975. Т. 39. № 4. С. 682—685.
[2] Bishop A. R., Domany E., Krumhansl J. A. // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. N 7. P. 2966—2971.
[3] Федосов В. Н., Сидоркин А. С. // ФТТ. 1977. Т. 19. № 8. С. 1322—1326.
[4] Вакс В. Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М.: Наука, 1973. 327 с.
[5] Samara G. A. // Ferroelectrics. 1973. V. 5. P. 25—37.
[6] Darinskii B. M., Sidorkin A. S. // Ferroelectrics. 1987. V. 71. P. 269—279.
[7] Кан Дж. // УФН. 1967. Т. 91. № 4. С. 677—689.
[8] Bjorkstam J. L., Oettel R. E. // Proc. Intern. Mect. Ferroclectricity. Prague, 1966. V. 2. P. 91—96.

Воронежский государственный университет им. Ленинского комсомола
Воронеж

Поступило в Редакцию 10 февраля 1989 г.
В окончательной редакции 20 апреля 1989 г.