ДИНАМІКА ДОМЕННИХ ГРАНИЦЬ У СЕГНЕТОЕЛЕКТРИЧНИХ КРИСТАЛАХ

А.А.Горват, Д.І.Кайнц, Ю.С.Наконечний

Фізичний факультет УжДУ, вул. Волошина, 54, Ужгород, 88000,Україна.

Для опису руху доменної границі у слабому змінному вимірному полі пропонується модель при якій доменна стінка в одній або декількох точках вважається жорстко закріпленою дефектами кристалу. Вважається, що зберігається паралельність доменної стінки напрямку спонтанної поляризації. Виходячи з даної моделі розраховані вклади у дійсну та умовну частини комплексної діелектричної проникливості $\varepsilon_W^{'}$ і $\varepsilon_W^{''}$, обумовлені осциляцією доменних границь, а також явний вид температурних залежностей $\varepsilon_W^{'}$ і $\varepsilon_W^{''}$ у випадку низьких та високих температур. Різке зменшення діелектричної проникливості у області 200К і відповідний максимум $\varepsilon^{''}$ обумовлений зменшенням рухливості, тобто "заморожуванням" доменної структури.

Розбиття сегнетоелектричних кристалів на домени нижче температури фазового переходу приводить з одного боку до п'єзоелектричного зажаття кристалу, і, як наслідок цього, зменшення його комплексної діелектричної проникливості, а з іншого боку, з'являється додатковий вклад у ε^*, обумовлений осциляцією доменних границь у вимірному полі. Можна припустити, що діелектрична проникність полідоменного кристалу $\varepsilon_p^{'}$ є сумою

$$\varepsilon_p^{'} = \varepsilon_i^{'} + \varepsilon_d^{'} + \varepsilon_w^{'}, \quad (1)$$

де $\varepsilon_i^{'}$ - діелектрична проникність монодоменного зажатого кристалу, $\varepsilon_d^{'}$ і $\varepsilon_w^{'}$ - вклади, обумовлені п'єзоелектричною деформацією і наявністю доменних стінок. Величина $\varepsilon_i^{'}$ може бути оцінена із значення проникності монодоменного зразка $\varepsilon_{md}^{'}$ з врахуванням п'єзоелектричного зажаття

$$\varepsilon_i^{'} = \varepsilon_{md}^{'}(1-k_{33}^2), \quad (2)$$

де k_{33} - коефіцієнт електромеханічного зв'язку.

Оцінка величини додаткового вкладу для сегнетоелектричних кристалів показує, що цей вклад може бути суттєвим. Наприклад, для ТГС – 8, $BaTiO_3$ – 57, КДП – 10000, $Sn_2P_2S_6$ - ~200-300, що становить для різних типів кристалів 10-1000% у порівнянні з діелектричною проникністю монодоменного зразку.

Оскільки п'єзоелектрична деформація сусідніх доменів для одновісних кристалів протилежна, то у суттєво полідоменних неуніполярних зразках $\varepsilon_d^{'}$ прямує до нуля, тому

$$\varepsilon_w^{'} = \varepsilon_p^{'} - \varepsilon_i^{'} = \varepsilon_p^{'} - \varepsilon_{md}^{'}(1-k_{33})^2 \quad (3)$$

Знайдений по формулі (3) вклад осциляції доменних границь у слабому вимірному полі у діелектричну проникність полідоменного кристалу SbSJ, досить значний і досягає 50% при 200К, що свідчить про високу рухомість доменних стінок навіть у слабих вимірних полях при температурах, менших температури фазового переходу.

Оцінка величини зміщення доменної границі у полях $\cong 10^3$ В\м із формули

$$\varepsilon_w^{'} \cong \frac{2P_s \Delta x S_w}{\varepsilon_0 E} \quad (4)$$

при середніх розмірах доменів 5÷20 мкм [1] дає значення порядку розмірів елементарної комірки ($\cong 10^{-10}$м), що є досить розумною величиною і свідчить про адекватність приведеного розгляду фізичним явищам у кристалі SbSJ.

Для опису руху доменної границі у слабому змінному вимірному полі пропонується наступна модель. Доменна стінка в одній або декількох точках вважається жорстко закріпленою дефектами кристалу. Вважається, що зберігається паралельність доменної стінки напрямку спонтанної поляризації. Тому розподіл поляризації у рухомій доменній границі буде таким самим як і у нерухомій: $P = P_s th\frac{x - x_0}{\xi}$, де x_0 – залежна від часу координата середини граничного шару. У цьому випадку доменній стінці можна поставити у відповідність квазічастинку, яка рухається у потенціальному рельєфі, що є суперпозицією послідовності періодично розміщених потенціальних ям однакової глибини і плавного параболічного потенціалу. Періодичні потенціальні ями відображають близькодіючу взаємодію доменної границі з кристалічною граткою, в якій енергія доменної границі є періодичною функцією її положення в гратці. Градієнт параболічного потенціалу відповідає відновлюючій силі, обумовленій лінійним натягом доменної стінки при її прогині внаслідок жорсткого закріплення окремих її ділянок. У силу більшої ефективної в'язкості руху такої стінки має релаксаційний, а не резонансний, і тому інерційними ефектами можна нехтувати. Тоді рівняння руху частинки еквівалентної доменній границі може бути апроксимована простим лінійним диференціальним рівнянням

$$\frac{1}{\mu}\frac{d\Delta x}{dt} = -q\Delta x + E, \tag{5}$$

де μ - рухливість доменної границі, E - напруженість прикладеного електричного поля, q - коефіцієнт жорсткості закріпленої границі. Рівняння (5) співпадає з рівнянням затухаючого осцилятора , тобто осцилятора, для якого член, що відповідає в'язкому тертю, набагато перевищує інерційний член. Такий осцилятор не буде коливатись без вимушуючої сили, він релаксує до положення рівноваги без яких-небудь зміщень. Для оцінки рухливості (швидкості бокового зміщення у одиничному електричному полі) доменної границі розглянемо рух цієї границі у ідеальному бездефектному кристалі ($q = 0$) і без прикладеного поля, а також у полі напруженістю E.

Швидкість зміщення доменної границі визначається імовірністю прямих $a \to b$ і обернених $b \to a$ переходів частинки через потенціальний бар'єр

$$\dot{x} = v_0^*\left\{exp\left(-\frac{H - e^*E}{kT}\right) - exp\left(\frac{H + e^*E}{kT}\right)\right\} = \\ = 2v^* sh\frac{e^*E}{kT}exp\left(-\frac{H}{kT}\right). \tag{6}$$

У випадку слабих полів ($e^*E << kT$)

$$\dot{x} = 2v^*\frac{e^*E}{kT}\exp\left(-\frac{H}{kT}\right). \tag{7}$$

Звідси

$$\mu = 2v^*\frac{e^*}{kT}exp\left(-\frac{H}{kT}\right) = \mu_0\, exp\left(-\frac{H}{kT}\right). \tag{8}$$

При суперпозиції далеко діючого параболічного потенціалу і періодичних потенціальних бар'єрів рухливість μ дещо зміниться, але загальний характер її температурної залежності залишиться незмінним. Встановлення рівноважного значення Δx_0 , а, отже, і поляризації у постійному полі E буде проходити по закону

$$\Delta x = x_0 F(t) = \frac{E}{q}\left(1 - e^{-\mu q t}\right), \tag{9}$$

де $F(t)$ - функція релаксації з постійною часу

$$\tau = \frac{1}{\mu q}, \tag{10}$$

а рівноважне значення зміщення $\Delta x_0 = E/q$.

Рух границі при динамічному впливі, тобто при $E = E_0 \sin \omega t$, описується рівнянням

$$\frac{1}{\mu}\frac{d\Delta x}{dt} = -qx + E_0 \sin \omega t, \quad (11)$$

А його розв'язок має вигляд

$$\Delta x = \left(\Delta x_l + \frac{E_0\omega\mu}{\omega^2 + (\mu q)^2}\right)e^{-\mu q t} + + E_0\mu\left(\frac{q\mu \sin\omega t}{\omega^2 + (q\mu)^2} - \frac{\omega^2 \cos\omega t}{\omega^2 + (q\mu)^2}\right) \quad (12)$$

Для стійкого процесу ($t \to \infty$) перший член виразу (12) прямує до нуля і тому з врахуванням (10)

$$\Delta x = \frac{E_0}{q_0}\left(\frac{\sin\omega t}{(\omega\tau)^2 + 1} - \frac{\omega\tau\cos\omega t}{(\omega\tau)^2 + 1}\right). \quad (13)$$

У більш загальному випадку у (11) слід врахувати також інерційний член і тоді рівняння руху доменної границі має вигляд

$$m\frac{d^2\Delta x}{dt^2} + \frac{1}{\mu}\frac{d\Delta x}{dt} + q\Delta x = E\sin\omega t, \quad (14)$$

а його стандартний розв'язок

$$\Delta x = \frac{E_0}{q'}\left(\frac{\sin\omega t}{(\omega\tau')^2 + 1} - \frac{\omega\tau'\cos\omega t}{(\omega\tau')^2 + 1}\right), \quad (15)$$

де $q' = q(1 + \frac{\omega^2}{\omega_0^2}), \tau' = \frac{1}{\mu q'}, \omega_0 = \sqrt{q/m}$.

Із співвідношень (14-15) видно, що зміщення доменної границі у змінному вимірному полі можна розглядати як суму двох доданків, один з яких співпадає по фазі з полем E, а другий зсунутий на $\pi/2$.

Підставляючи (14) у (4) легко знайти вклади у дійсну та умовну частини комплексної діелектричної проникливості ε_W' і ε_W'', обумовлені осциляцією доменних границь

$$\varepsilon_W' = \frac{2P_sS_W}{q\varepsilon_0}\frac{1}{1 + \omega^2\tau^2} = \frac{\varepsilon_W^s}{1 + (\omega\tau)^2},$$

$$\varepsilon_W'' = \frac{2P_sS_W}{q\varepsilon_0}\frac{\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2} = \frac{\varepsilon_W^s\omega\tau}{1\_(\omega\tau)^2}. \quad (16)$$

Одержані вирази характерні для релаксаційної поляризації[2,3].

Явний вид температурних залежностей ε_W' і ε_W'' має вигляд:

$$\varepsilon_W' = \frac{2P_sS_W}{q\varepsilon_0}\frac{1}{1 + \omega^2\tau_0^2 \exp\frac{2H}{kT}},$$

$$\varepsilon_W'' = \frac{2P_sS_W}{q\varepsilon_0}\frac{\omega\tau\ \exp\frac{H}{kT}}{1 + \omega^2\tau_0^2 \exp\frac{2H}{kT}}. \quad (17)$$

У випадку низьких температур, тобто коли час релаксації великий ($\omega\tau >> 1$), зміщення доменної границі не встигає за зміною електричного поля і

$$\varepsilon_W' = \frac{2P_sS_W}{q\varepsilon_0(\omega\tau)^2}exp(-\frac{2H}{kT}),$$

$$\varepsilon_W'' = \frac{2P_sS_W}{q\varepsilon_0\omega\tau}\exp(-\frac{H}{kT}). \quad (18)$$

Залежності (18) передбачають експоненціальний ріст ε_W' і ε_W'' у області температур, де $kT \cong H$.

При високих температурах ($\omega\tau < 1$) зміщення доменних границь встигає встановитися за період зміни поля. У цьому випадку

$$\varepsilon_W' = \frac{2P_sS_W}{q\varepsilon_0},$$

$$\varepsilon_W'' = \frac{2P_sS_W\omega\tau_0}{q\varepsilon_0}\exp\frac{H}{kT}. \quad (19)$$

Очевидно, що співвідношення (16-19) дають якісні пояснення експериментальним результатам, але кількісного узгодження не спостерігається, що обумовлено широким спектром розподілу часів релаксації (коефіцієнта q) у вихідному рівнянні (11). Тим не менше можна зробити висновок про те , що різке зменшення діелектричної проникливості у області 200К і відповідний максимум ε'' обумовлений зменшенням рухливості, тобто "заморожуванням"[4] доменної структури.

1. Наконечный Ю.С., Горват А.А., Ляховицкая В.А., и др. Исследование низкотемпературных диэлектрических аномалий и доменной структуры кристаллов

SbSJ.// Кристаллография, 1978, т.24, вып.4, с.793-797.

2. Поплавко Ю.М. Физика диэлектриков. - Киев: Вища школа,1980.-398 с.

3. Богородицкий Н.П., Волокобинский Ю.М., Воробьов А.А., Тареев Б.А. Физика диэлектриков.-М.-Л.: Энергия, 1965.- 343с.

4. Горват А.А., Наконечный Ю.С., Ляховицкая В.А. Эффекты "замораживания" доменной структуры в SbSJ. – В кн.: IX Всесоюзное совещание по сегнетоэлектричеству, ч.II. Ростов-на-Дону, 1979, с.8.

DYNAMICS OF FERROELECTRIC CRYSTAL DOMAIN WALLS

A.A. Horvat , D.I. Kaynts, Yu.S. Nakonechnyy

Department of Semiconductors Physics, Uzhgorod National University, 88000,Ukraine,Uzhgorod, Voloshin str., 54.

For the description of domain boundary in weak external electric field is offered model at which domain wall in one or several points is considered fixed by defects of a crystal. Domain wall is saved parallel to a direction of spontaneous polarization. Outgoing from this model the contributions to true and imaginary parts of complex dielectric susceptibility $\varepsilon_W^{'}$ i $\varepsilon_W^{''}$, stipulated oscillation of domain boundaries, and obvious kind of temperature relations $\varepsilon_W^{'}$ i $\varepsilon_W^{''}$ are calculated in cases of low and high temperatures. Sharp decreasing of dielectric susceptibility in the field near 200K and appropriate maximum $\varepsilon^{''}$ stipulated by reduction of mobility, i.e. by "freezing" of domain structure.

	**Андрій Андрійович Горват** – заступник декану фізичного факультету УжНУ, доцент кафедри фізики напівпровідників УжНУ Народився в 1952 р. Закінчив фізичний факультет УжДУ у 1974 р. Кандидатську дисертацію захистив у
	**Діана Іванівна Кайнц** – м.н.с. НДІ ФХТТ Народилась в 1974 р. Закінчила фізичний факультет УжДУ у 1996 р.
	**Юрій Сергійович Наконечний** – доцент кафедри фізики напівпровідників УжНУ Народився