

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОИСТЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ С РАЗЛИЧНОЙ ТОЛЩИНОЙ ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ СЛОЕВ*

Исследована зависимость температуры Кюри слоистого сегнетоэлектрика от числа перовскитоподобных слоев. Моделирование проводилось в рамках решетчатой модели с предположением, что узлы решетки перовскитоподобных слоев и висмутокислородных слоев по отношению друг к другу играют роль дефектов типа «случайная температура фазового перехода». Полученная зависимость относительной величины температуры Кюри от числа перовскитоподобных слоев хорошо согласуется с экспериментальными данными.

The dependence of Curie temperature from number perovskite-like layers in layered ferroelectrics is investigated. The modeling was carried out within the framework of lattice model with the hypothesis, that the units of a lattice perovskite-like layers and bismuth-oxygen layers under the relation to each other play a role of defects of a type “casual temperature of phase transition”. The received dependence of relative amount of temperature Curie from number perovskite-like layers is well coordinated to experimental data.

Слоистый перовскитоподобный сегнетоэлектрик типа $A_{m-1}Bi_2M_mO_{3m+3}$ состоит из чередующихся по оси висмутокислородных (ВК) слоев $[BiO_3]^{3-}$ и перовскитоподобных (ПП) слоев $[(Bi_{0,5}A_{m-1}Bi_{0,5})M_mO_{3m}]^{3+}$ [1]. Толщина последних определяется величиной m . Чем больше m , тем большее число слоев толщиной в один октаэдр MO_6 входит в ПП-слой.

Исследовалась зависимость температуры Кюри слоистого сегнетоэлектрика $T_c(m)$ от числа ПП-слоев m . Моделирование производилось в рамках решетчатой модели [2], где слоистые сегнетоэлектрики имеют следующую структуру (рис. 1).

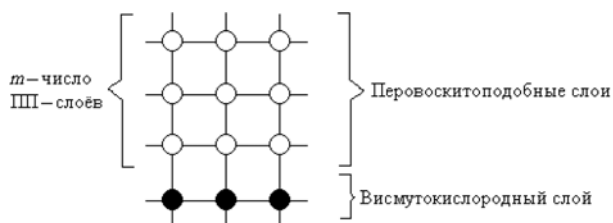


Рис. 1. Двухмерная решетчатая модель слоистого сегнетоэлектрика

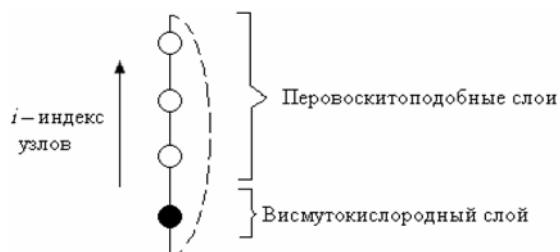


Рис. 2. Одномерная решетчатая модель слоистого сегнетоэлектрика

* Работа выполнена при поддержке гранта «Ведущие научные школы» (НШ 1514.2003.2).

В силу трансляционной симметрии вдоль плоскостей слоев вместо 2-мерной решетки (рис. 1) можно использовать одномерную (рис. 2) с числом узлов $m+1$ и циклически замкнутыми последними узлами (т.е. первый узел замыкается с последним узлом).

Общая свободная энергия одномерной решетки слоистого сегнетоэлектрика (рис. 2) [2]

$$f = \sum_{i=1}^{m+1} \left(\frac{\alpha}{2} P_i^2 + \frac{\beta}{4} P_i^4 + \frac{\chi}{2} (P_i - P_{i-1})^2 \right), \quad (1)$$

где P_i — дипольный момент i -го узла решетки; χ — коэффициент взаимодействия соседних атомов, определяется корреляцией параметра порядка соседних атомов; α и β — коэффициенты разложения свободной энергии Ландау [3].

В общем случае вклад в общую свободную энергию (1) перовскитоподобных и висмутокислородных слоев различен и определяется, в рамках нашей модели, значениями коэффициентов α и β .

В настоящей работе нас интересуют температурозависимые величины, поэтому наиболее интересно различие узлов перовскитоподобных и висмутокислородных слоев, связанное с различием коэффициентов α , характеризующих соответствующие узлы решетки. В этом случае узлы решетки перовскитоподобных и висмутокислородных слоев по отношению друг к другу играют роль дефектов типа «случайная температура фазового перехода» [4] и характеризуются соответствующей локальной температурой фазового перехода [4]: $T_{\text{пп}}$ — для узлов перовскитоподобных слоев и $T_{\text{вк}}$ — для узлов висмутокислородных слоев.

Релаксация дипольных моментов P_i описывается уравнением [2]

$$\gamma \frac{\partial P_i}{\partial t} = - \frac{\partial f}{\partial P_i}, \quad (2)$$

где γ — коэффициент, определяющий «вязкостные» характеристики диполя.

Равновесное значение дипольных моментов P_i определяется системой уравнений

$$\frac{\partial f}{\partial P_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m+1. \quad (3)$$

В результате моделирования получены температурные зависимости относительной величины спонтанной поляризации $P_s/P_s(T \rightarrow 0, m \rightarrow \infty)$ слоистых сегнетоэлектриков с числом ПП-слоев $m = 1, 2, \dots, 10$ (рис. 3), здесь $P_s(T \rightarrow 0, m \rightarrow \infty)$ — спонтанная поляризация слоистых сегнетоэлектриков при температуре $T \rightarrow 0$ °K и числе ПП-слоев $m \rightarrow \infty$:

$$P_s(T \rightarrow 0, m \rightarrow \infty) = \sqrt{\frac{\alpha T_{\text{пп}}}{\beta}}; \quad (4)$$

$T_c(m \rightarrow \infty)$ — температура Кюри слоистых сегнетоэлектриков с числом ПП-слоев $m \rightarrow \infty$:

$$T_c(m \rightarrow \infty) = T_{\text{пп}}. \quad (5)$$

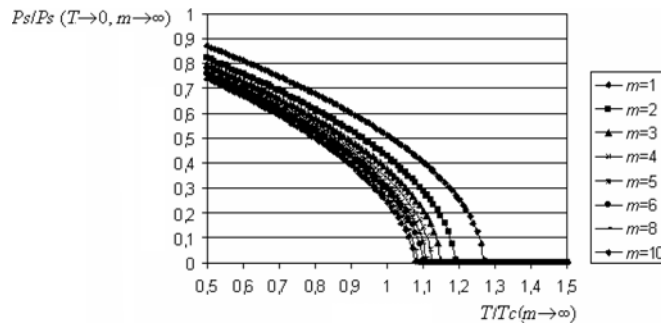


Рис. 3. Температурные зависимости относительной величины спонтанной поляризации $P_s/P_s(T \rightarrow 0, m \rightarrow \infty)$ слоистых сегнетоэлектриков с числом перовскитоподобных слоев $m=1, 2, \dots, 10$

По полученным данным построена зависимость относительной величины температуры Кюри $T_c/T_c(m \rightarrow \infty)$ от числа ПП-слоев m (рис. 4). Полученная зависимость хорошо согласуется с отмеченной в работе [5] экспериментальной закономерностью: увеличение толщины ПП-слоя при m , возрастающем до 3,5, понижает верхнюю границу T_c . При большей величине m положение этой границы стабилизируется [5].

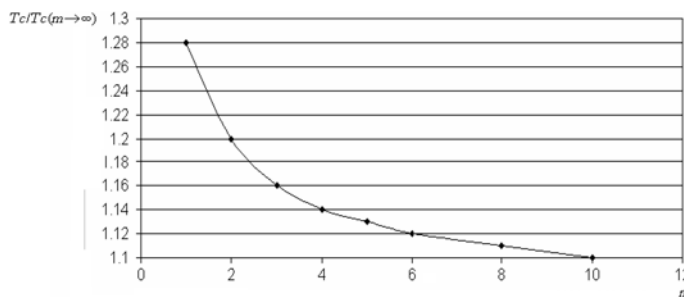


Рис. 4. Зависимость относительной величины температуры Кюри $T_c/T_c(m \rightarrow \infty)$ от числа перовскитоподобных слоев m

Таким образом, компьютерное моделирование подтвердило предположение о том, что «температуру Кюри слоистого соединения определяет прежде всего состав ПП-слоев (по крайней мере, при большой их толщине). При больших m , сколь бы активными ни были ВК-слои, им не удастся «включить» спонтанную поляризацию в ПП-слоях и во всем кристалле, пока ПП-слои при понижении температуры не «созреют» для этого» [5].

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Физика сегнетоэлектрических явлений // Г.А. Смоленский, В.А. Боков, Н.Н. Крайник и др. Л.: Наука, 1985. 396 с.
2. Omura M. Simulations of ferroelectric characteristics using a one-dimensional lattice model / M. Omura, H. Adachi, Y. Ishibashi // Jap. Appl. Phys. Pt. 1. 1991. V. 30. № 9B. С. 2384—2387.
3. Ландау Л.Д. Электродинамика сплошных сред / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц // М.: Наука, 1982. С. 624.
4. Levanyuk A.P. Defects and structural phase transitions / A.P. Levanyuk, A.S. Sigov // New York: Gordon and Breach science publishers, 1988. P. 208.
5. Исупов В.А. Некоторые особенности слоистых сегнетоэлектриков типа $A_{m-1}Bi_2M_mO_{3m+3}$ // Физика твердого тела. 1997. Т. 39. № 1. С. 135—136.

© Нестеров В.Н., 2006