

5. Бордина Н. М., Васильев А. М., Зайцева А. К., Ландсман А. П.//Радиотехн. и электроника. 1965. 10. С. 727.
6. Кошелев О. Г., Морозова В. А., Барынова Э. Ю. и др.//Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1993. № 4. С. 87 (Moscow University Phys. Bull. 1993. N 4. P. 80).
7. Кошелев О. Г., Морозова В. А. Пат. 2019890 РФ, МКИ 5H01 L 21/66 (БИ № 17, 1994).
8. Нопта Н., Мипаката С., Itoh H.//Japan J. Appl. Phys. 1984. 23. P. L354.

Поступила в редакцию
25.03.96

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1996. № 6

УДК 537.226.33

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ИЗОМОРФНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

С. В. Павлов, М. Л. Акимов

(кафедра общей физики для естественных факультетов)

Рассмотрена феноменологическая модель изоморфных фазовых переходов (ИФП) в тонких пленках сегнетоэлектриков при учете пространственной неоднородности и размерных эффектов. Решение краевой задачи с помощью численных методов позволило сделать вывод о том, что размерные эффекты и неоднородность сегнетоэлектриков не подавляют ИФП и наблюдение этих переходов в тонких пленках сегнетоэлектриков принципиально возможно.

В работе [1] на основе оптических измерений в тонких пленках сегнетоэлектрика титаната свинца и сопоставления полученных результатов с данными для монокристаллов [2] сделан вывод о наличии в пленках изоморфных фазовых переходов (ИФП). Не рассматривая довольно сложной модели титаната свинца с двумя взаимодействующими многокомпонентными параметрами порядка [3], можно тем не менее на примере модели с одним однокомпонентным параметром порядка исследовать вопрос об особенностях проявления ИФП в тонких пленках собственных сегнетоэлектриков. Целью настоящей работы является построение и исследование феноменологической модели изоморфных переходов в тонких пленках сегнетоэлектриков с применением теории Ландау фазовых переходов второго рода для тонких пленок [4, 5].

В феноменологической теории ИФП [6] используется потенциал, учитывающий члены разложения свободной энергии по спонтанной поляризации вплоть до восьмой степени. Для тонких пленок сегнетоэлектриков в разложении необходимо учитывать также пространственную неоднородность спонтанной поляризации и влияние поверхностей тонкой пленки [4, 5]. Тогда функционал Ландау для тонких пленок толщиной L в модели ИФП имеет вид

$$\Phi = \int_{-L/2}^{L/2} \left\{ \frac{a}{2} P^2 + \frac{b}{4} P^4 + \frac{c}{6} P^6 + \frac{d}{8} P^8 + \frac{\kappa}{2} \left(\frac{dP}{dx} \right)^2 - EP \right\} dx + \frac{\kappa \delta^{-1}}{2} (P_-^2 + P_+^2), \quad (1)$$

где L — толщина пленки; P — спонтанная поляризация; $P_{\pm} = P(\pm L/2)$; a, b, c, d, κ и δ — феноменологические коэффициенты, причем $d > 0$, $\kappa > 0$; E — внешнее электрическое поле, с граничными условиями

$$\frac{dP(\pm L/2)}{dx} \pm \delta^{-1} P(\pm L/2) = 0.$$

Градиентный член в функционале (1) учитывает пространственную неоднородность спонтанной поляризации, последний член — энергию на поверхностях тонкой пленки.

Минимизация функционала (1) приводит к нелинейной краевой задаче для спонтанной поляризации

$$\kappa \frac{d^2 P}{dx^2} - aP - bP^3 - cP^5 - dP^7 + E + E_d = 0, \quad (2)$$

$$\frac{dP(\pm L/2)}{dx} \pm \delta^{-1} P(\pm L/2) = 0,$$

которую решить можно только численными методами [7]. Положим $y_1 = P$, $y_2 = dP/dx$. Тогда дифференциальное уравнение (2) второго порядка сводится к системе дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dx} = y_2, \\ \frac{dy_2}{dx} = \frac{1}{\kappa} (ay_1 + by_1^3 + cy_1^5 + dy_1^7 - E - E_d), \\ y_2(\pm L/2) \pm \delta^{-1} y_1(\pm L/2) = 0, \end{cases} \quad (3)$$

которая сводится к задаче Коши и решается одним из стандартных методов, например методом Эйлера или Рунге—Кутты [7].

Для исследования температурной зависимости спонтанной поляризации в тонкой пленке при наличии ИФП сначала рассмотрим сечение a — b фазовой диаграммы равновесного потенциала

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2} aP^2 + \frac{1}{4} bP^4 + \frac{1}{6} cP^6 + \frac{1}{8} dP^8 \quad (4)$$

при $c < 0$ [6] для однородного распределения спонтанной поляризации (рис. 1).

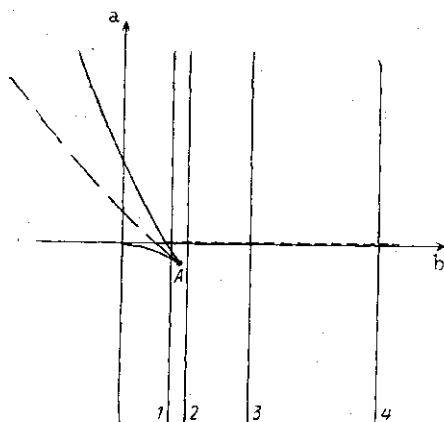


Рис. 1. Сечение a — b фазовой диаграммы модели (4). Штриховая линия — граница фазовых переходов второго рода, штрихпунктирная — граница переходов первого рода, сплошные линии — кривые равновесия фаз, A — критическая точка типа жидкость—газ изоморфных фазовых переходов, 1—4 — термодинамические пути

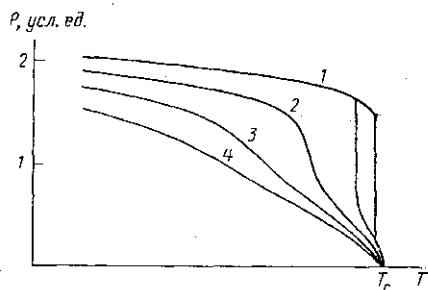


Рис. 2. Температурные зависимости спонтанной поляризации для термодинамических путей 1—4 в модели (4)

Штриховой линией на рис. 1 показана граница фазовых переходов второго рода ($a=0$), штрихпунктирной — граница фазовых переходов первого рода, определяемая из условия равенства потенциалов в низкосимметричной и высокосимметричной фазах, сплошные линии ограничивают метастабильные области сосуществования высокосимметричной и низкосимметричной фаз. Точка A на фазовой диаграмме является критической точкой типа жидкость—газ.

Если предположить, что феноменологические коэффициенты слабо зависят от температуры, кроме $a=a'(T-T_c)$, то термодинамический путь на фазовой диаграмме будет изображаться прямой линией, параллельной оси a (линии 1—4 на рис. 1). На рис. 2 представлены температурные зависимости спонтанной поляризации P для термодинамических путей 1—4. Термодинамический путь 1 пересекает линию ИФП (см. рис. 1), и на температурных зависимостях P имеют место аномалии, характерные для фазового перехода первого рода (скачок параметра порядка, температурный гистерезис). Термодинамические пути 2 и 3 проходят в ближней и дальней закритических областях ИФП, что приводит к аномалиям, характерным для размытого фазового перехода. Термодинамический путь 4, проходящий вдали от закритической области ИФП, пересекает линию фазовых переходов второго рода, и температурные зависимости спонтанной поляризации имеют вид, характерный для этих фазовых переходов.

Как видно из системы (2), значение спонтанной поляризации зависит не только от феноменологических коэффициентов, входящих в разложение свободной энергии (4), но также от параметров: δ^{-1} , определяющего долю свободной энергии на поверхностях тонкой пленки; κ , учитывающего пространственную неоднородность распределения спонтанной поляризации, а также от толщины тонкой пленки L . Исследование температурных зависимостей спонтанной поляризации в центре пленки ($x=0$) и в отсутствие внешнего поля ($E=0$) от коэффициентов δ^{-1} и κ , а также от толщины L , проведенное численным моделированием на ЭВМ, в том числе и для линеаризованной задачи, когда значение P в центре пленки не сильно отличается от равновесного значения поляризации, определяемой минимумом потенциала (4), показало, что критерием отличия тонкой пленки от массивного образца является безразмерная величина $\delta L/(2r_c^2)$, где $r_c = \sqrt{\kappa(d^2\Phi/dP^2)_{P=P_0}^{-1}}$ — радиус корреляции поляризации. При всех температурах, исключая узкие интервалы вблизи фазовых переходов, значения $\delta L/(2r_c^2) \gg 1$ соответствуют массивному образцу, а $\delta L/(2r_c^2) \ll 1$ — тонкой пленке. Следует отметить, что, поскольку величина r_c температурно-зависима, приведенный критерий в известной степени приближен.

На рис. 3 приведена эволюция температурных зависимостей спонтанной поляризации, которая происходит при уменьшении параметра $\delta L/2r_c^2$ от 20 на рис. 3, а до 0,01 на рис. 3, д. Температурные зависимости P на рис. 3, а фактически совпадают с зависимостью рис. 2, т. е. влияние размерных эффектов еще не сказывается. Дальнейшая эволюция приводит к тому, что при некоторых «критических» значениях параметров происходит постепенное подавление размерными эффектами как ИФП, так и структурных переходов (рис. 3, г, д).

Таким образом, аномалии спонтанной поляризации, а следовательно, и аномалии других физических свойств могут наблюдаться в тонких пленках не только при ИФП, но и при прохождении термодинамического пути в закритической области. Все это указывает на то, что

размерные эффекты в веществах, испытывающих ИФП, не подавляют эти переходы, и наблюдение изоморфного перехода, а также закритического поведения ИФП в тонких пленках принципиально возможно.

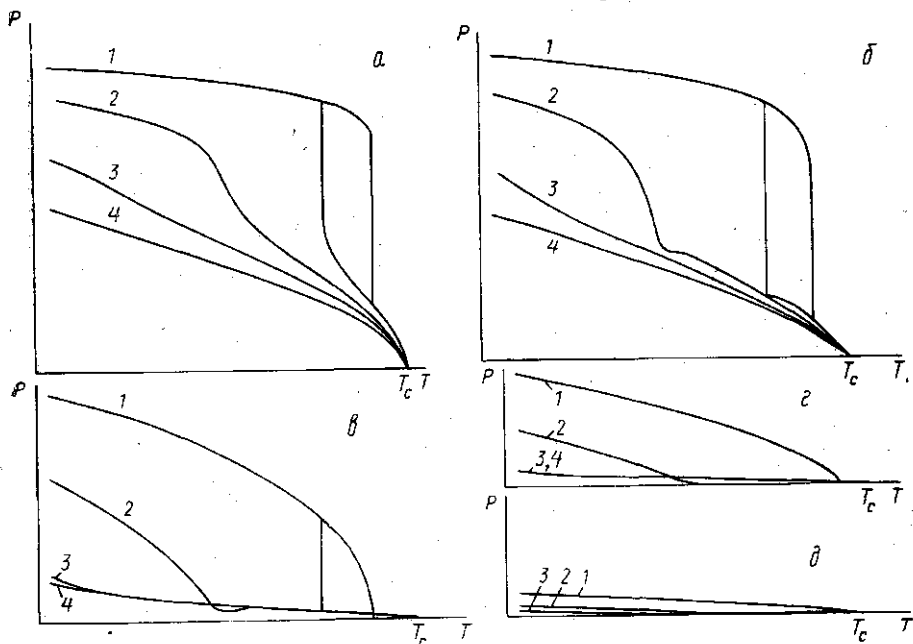


Рис. 3. Температурные зависимости спонтанной поляризации в центре тонкой пленки при наличии ИФП для различных средних значений величины $\delta L / (2r_c^2)$: 20 (а); 1 (б); 0,1 (в); 0,05 (г) и 0,01 (д). Линии 1—4 соответствуют термодинамическим путям на рис. 1

На рис. 4 показана эволюция температурных зависимостей диэлектрической проницаемости, рассчитанных численными методами из значений спонтанной поляризации на рис. 3. Как видно из рис. 3, 4,

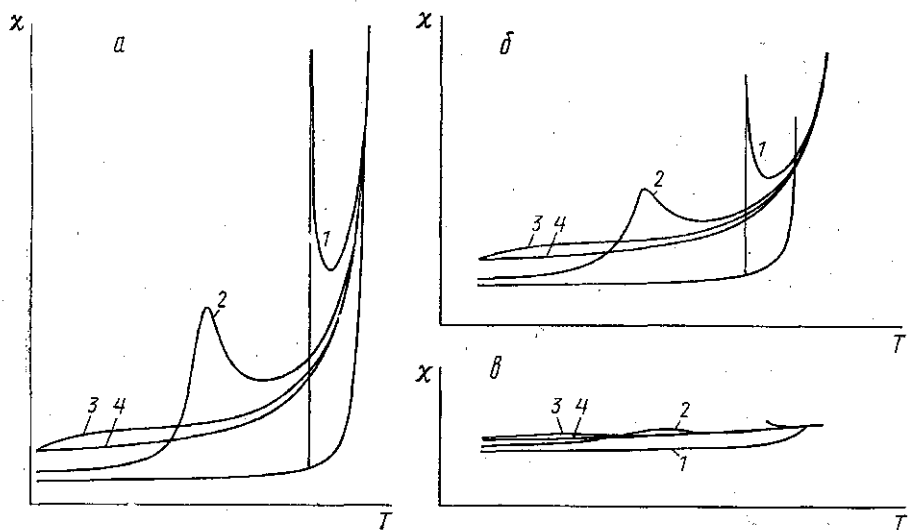


Рис. 4. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости в центре тонкой пленки (все обозначения соответствуют рис. 3)

подавление аномалий диэлектрических проницаемостей в тонкой пленке происходит раньше, чем подавление спонтанной поляризации. Рис. 4, в, на котором аномалии проницаемости уже практически не наблюдаются, соответствует по значениям феноменологических коэффициентов рис. 3, в, на котором еще ясно видны аномалии спонтанной поляризации в районе как структурного перехода, так и изоморфного упорядочения. Это говорит о том, что диэлектрическая проницаемость раньше «чувствует» пространственную неоднородность и размерные эффекты в тонких пленках.

Рассмотрим также влияние деполяризующего поля E_d на ИФП в тонких пленках. В первом приближении значение E_d можно считать однородным, хотя фактически это поле пространственно неоднородно и его неоднородность может быть описана формулой [5]

$$E_d(x) = -4\pi \left(P(x) - \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} P(x) dx \right). \quad (6)$$

Подстановка (6) в функционал (1) приводит к нелинейному интегродифференциальному уравнению

$$\kappa \frac{d^2 P}{dx^2} = \frac{d\Phi}{dP} + 4\pi P - E - \frac{4\pi}{L} \int_{-L/2}^{L/2} P(x) dx,$$

решить которое можно только численными методами. В работе [5] исследовано влияние деполяризующего поля вида (6) на фазовые переходы первого и второго рода в сегнетоэлектрических тонких пленках и показано, что деполяризующее поле немного изменяет количественные значения физических свойств, не меняя качественного вида их температурных зависимостей. Нет никаких оснований отрицать, что такое же влияние неоднородное деполяризующее поле будет оказывать на ИФП. Тем не менее нами исследовано воздействие на ИФП постоянного поля ($E = \text{const}$ в формуле (2)). Оказалось, что постоянные внешнее и деполяризующее электрические поля также не оказывают сильного влияния на качественную картину температурных зависимостей спонтанной поляризации и диэлектрической проницаемости.

В заключение следует отметить, что в настоящее время нам неизвестны экспериментальные данные, которые можно сопоставить с полученными температурными зависимостями, так что выводы работы носят в основном предсказательный характер. Однако в последнее время появились работы, в которых наблюдаются аномалии диэлектрических свойств в керамике, в частности, в титанате-цирконате свинца PZT [8–10] в сегнетоэлектрической фазе. Но ни в одной из этих работ не указывается на то, что эти аномалии обусловлены структурным или изоморфным переходом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мясникова Т. П., Гах С. Г., Бородин В. З. и др. // Изв. РАН, сер. физ. 1992. 56, № 10. С. 83.
2. Фесенко Е. Г., Гавриляченко В. Г., Зароченцев Е. В. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1970. 34. С. 2541.
3. Гуфан Ю. М., Кутыин Е. И., Лорман В. Л., Сидоренко Е. Н. // ФТТ. 1987 29. С. 756.
4. Tilley D. R., Zeks B. // Solid State Commun. 1984. 49. P. 823.
5. Zhong W. L., Qu B. D., Zhang P. L., Wang Y. G. // Phys. Rev. 1994. B50. P. 12375.

6. Гуфан Ю. М., Ларин Е. С. // ДАН. 1978. 242. С. 1311.
7. Мудров А. Е. Численные методы для ПЭВМ на языках Бейсик, Фортран и Паскаль. Томск, 1991.
8. Ujma Z., Handerek J., Hassan H. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 1995. 7. P. 895.
9. Handerek J., Ujma Z. // Ibid. P. 1721.
10. Xunhu Dai, Jie-Fang Li, Dwight Viehland // J. Appl. Phys. 1995. 77. P. 3354.

Поступила в редакцию
03.04.96

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1996. № 6

ГЕОФИЗИКА

УДК 532.5

О ПОРОГОВО-КРИТИЧЕСКИХ НЕЛИНЕЙНЫХ ЭФФЕКТАХ ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ СЕЙСМОВОЛН В ВЯЗКОУПРУГИХ ГЕОСРЕДАХ

С. А. Арсеньев, М. М. Вахрушев, Н. К. Шелковников

(кафедра физики моря и вод суши)

В рамках вязкоупругой модели геосреды с реологией Максвелла получены и исследованы нелинейно-диссипативные эффекты, возникающие при распространении сейсмических волн с большими числами Маха.

В последнее время в связи с развернувшимися исследованиями нелинейных явлений в сейсмологии подробно изучается связь между нелинейными и другими факторами, определяющими процесс распространения сейсмических волн через геосреду. Наиболее важным является баланс между поглощением (диссипацией) волн и нелинейностью, для характеристики которого в работах [1, 2] предложено ввести два масштаба:

$$L_n = \frac{\lambda}{20\pi NM}, \quad L_* = \frac{1}{\beta}. \quad (1)$$

Первый из них называют характерной длиной нелинейности, определяя как $1/10$ от расстояния, на котором вследствие действия нелинейности формируется вертикальный фронт нелинейной волны: $L_b = 10 L_n$. Масштабы L_n и L_b зависят от длины волны λ , коэффициента нелинейности N и числа Маха M . Вторым масштаб в (1) — это масштаб затухания L_* , обратный амплитудному коэффициенту затухания β . Согласно [1, 2], при $L_n \gg L_*$ доминирует диссипация и нелинейные эффекты не успевают развиться. При $L_n \ll L_*$ нелинейные эффекты преобладают. Оценки, сделанные в [1], показывают, что в реальных геосредах $L_n \gg L_*$, и на этом основании делается вывод о том, что при распространении сейсмических волн преобладают эффекты поглощения, а нелинейностью можно пренебречь.

По нашему мнению, однако, дело обстоит не так просто, поскольку нелинейные эффекты могут накапливаться по мере распространения волны. В настоящей статье на примере вязкоупругой среды показано, что на самом деле соотношения между нелинейностью и диссипацией намного сложнее, так как нелинейность приводит к порогово-критическим эффектам при распространении сейсмических волн. Вязкоупругие модели привычны для геофизиков [3—5], потому что они достаточно ра-