

УДАЛОВ Артур Рудольфович

**НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА И ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ
НЕУСТОЙЧИВОСТИ ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ
В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена на кафедре физики конденсированного состояния и наноразмерных систем и в лаборатории сегнетоэлектриков отдела оптоэлектроники и полупроводниковой техники НИИ физики и прикладной математики Института естественных наук и математики ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»

Научный руководитель: **Шур Владимир Яковлевич**
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: **Сидоркин Александр Степанович**,
доктор физико-математических наук, профессор,
ФГБОУ ВО «Воронежский государственный
университет», г. Воронеж, профессор кафедры
экспериментальной физики;

Втюрин Александр Николаевич,
доктор физико-математических наук, старший
научный сотрудник, Институт физики им. Л.В. Ки-
ренского Сибирского отделения Российской акаде-
мии наук – обособленное подразделение ФГБНУ
«Федеральный исследовательский центр «Красно-
ярский научный центр Сибирского отделения
Российской академии наук», г. Красноярск, глав-
ный научный сотрудник лаборатории молекуляр-
ной спектроскопии.

Ведущая организация: ФГБОУ ВО «Уральский государственный лесотех-
нический университет», г. Екатеринбург.

Защита состоится «31» мая 2019 г. в 15 ч 00 мин на заседании диссертационного совета Д **212.285.02** на базе ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по адресу: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19, ауд. И-420 (зал Ученого совета).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», <http://lib.urfu.ru/mod/data/view.php?rid=289389>

Автореферат разослан «___» _____ 2019 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

Ищенко Алексей Владимирович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования и степень её разработанности

Нелинейная динамика и неустойчивость формы сегнетоэлектрических доменных границ в сильнонеравновесных условиях переключения поляризации представляет собой фундаментальную проблему физики конденсированного состояния, поскольку эволюцию сегнетоэлектрической доменной структуры принято рассматривать как аналог фазового перехода первого рода. Поэтому получаемые теоретические результаты могут быть использованы для изучения общих закономерностей кинетики фазовых превращений.

Изменение формы доменных границ сегнетоэлектриков определяется процессами внешнего и объемного экранирования деполяризующего поля, создаваемого связанными зарядами. Сильнонеравновесные условия переключения поляризации характеризуются неэффективным экранированием деполяризующего поля (запаздыванием объемного экранирования), приводят к изменению формы движущихся доменных границ. Изучение влияния запаздывания экранирования деполяризующих полей на эволюцию доменной структуры [1-3], приводящего к нелинейной динамике и усложнению формы доменных границ (топологической неустойчивости), представляет значительный интерес для решения фундаментальных проблем физики сегнетоэлектриков.

Растущий интерес к эволюции доменной структуры сегнетоэлектриков во многом вызван бурным развитием в последние годы новой отрасли науки и технологии – «доменной инженерии», которая занимается разработкой и усовершенствованием методов создания в сегнетоэлектрических монокристаллах доменных структур с заданной геометрией для различных применений. Основной задачей доменной инженерии на данный момент является создание стабильных регулярных доменных структур для улучшения нелинейно-оптических, электрооптических и акустических характеристик, в частности для изготовления эффективных преобразователей частоты когерентного излучения. Наиболее широко используемыми материалами для таких применений являются монокристаллы семейства ниобата лития и танталата лития. Периодические доменные структуры создают приложением пространственно неоднородного электрического поля, создаваемого системой периодических полосовых электродов, нанесенных на полярную поверхность сегнетоэлектрической пластины. Для оптимального подбора технологических параметров необходимо понимание закономерностей эволюции формы доменных границ. Таким образом, проводимые исследования имеют важное фундаментальное и прикладное значение.

Цель работы заключается в исследовании нелинейной динамики и неоднородности пространственного распределения электрического поля, ведущего к изменению формы движущихся нейтральных 180° доменных границ в сегнетоэлектриках в однородном внешнем электрическом поле при сильнонеравновесных условиях переключения поляризации.

Основные задачи:

- 1) Исследовать **немонотонное движение** плоской доменной границы под действием **постоянного напряжения** в сегнетоэлектрическом конденсаторе с поверхностным диэлектрическим слоем и **последовательным сопротивлением**, с экспоненциальным распределением поверхностного экранирующего заряда.

- 2) Исследовать **скачкообразное движение плоской доменной границы** под действием **гармонического напряжения** в сегнетоэлектрическом конденсаторе с поверхностным диэлектрическим слоем и **последовательным сопротивлением**, с экспоненциальным пространственным распределением поверхностного экранирующего заряда.
- 3) Исследовать особенности пространственного распределения полярной компоненты электрического поля на движущейся **доменной границе синусоидальной формы** в сегнетоэлектрике с поверхностным диэлектрическим слоем при воздействии **постоянного внешнего поля**, при равномерном пространственном распределении поверхностного экранирующего заряда, которые приводят к изменению формы доменной границы.
- 4) Разработать аналитический подход к определению пространственного распределения электрического поля в сегнетоэлектрическом конденсаторе с поверхностными диэлектрическими слоями и движущейся **доменной границей произвольной формы** под действием **постоянного напряжения**.
- 5) Исследовать пространственное распределение полярной компоненты электрического поля вблизи равномерно движущейся **доменной границы синусоидальной формы** в сегнетоэлектрическом конденсаторе с поверхностными диэлектрическими слоями под действием **постоянного напряжения** при экспоненциальном распределении поверхностного экранирующего заряда.

Объекты исследования. Проводилось теоретическое исследование немонотонного бокового движения и неоднородного распределения электрического поля, приводящего к изменению формы 180° нейтральной доменной границы в сегнетоэлектрическом конденсаторе с поверхностными диэлектрическими слоями при учете запаздывания процессов внешнего и объемного экранирования деполяризующего поля.

Научная новизна представленных в диссертационной работе результатов и выводов заключается в следующем:

- 1) Предложен оригинальный полуаналитический метод описания немонотонного бокового движения плоской доменной границы в сегнетоэлектрическом конденсаторе с последовательным сопротивлением во внешней цепи под действием постоянного напряжения с учётом запаздывания экранирования деполяризующего поля. Впервые показано, что боковое движение доменной границы может быть описано одномерным обобщённым уравнением Релея с введением эффективных массы и силы трения доменной границы, зависящих от скорости движения.
- 2) Предсказан эффект захвата частоты скачкообразного бокового движения плоской доменной границы в сегнетоэлектрическом конденсаторе с последовательным сопротивлением во внешней цепи под действием гармонического напряжения.
- 3) Разработан оригинальный аналитический подход для решения граничной электростатической задачи, соответствующей трехслойному конденсатору (диэлектрик-сегнетоэлектрик-диэлектрик), для движущейся доменной границы произвольной формы с учётом запаздывания процессов экранирования деполяризующего поля. Он позволяет получить выражение для пространственного распределения электрического поля за счёт анализа комплексных свойств функции g_2 , характерной для рассмотренного сегнетоэлектрического конденсатора, и применения основной теоремы о вычетах.

4) Впервые получено аналитическое выражение для пространственного распределения полярной компоненты электрического поля равномерно движущейся синусоидальной доменной границы в сегнетоэлектрическом конденсаторе с поверхностными диэлектрическими слоями при запаздывании объемного экранирования остаточного деполяризующего поля.

Теоретическая и практическая значимость работы. Полученные результаты представляют основу для дальнейших исследований нелинейной динамики и устойчивости формы доменных границ, а также для интерпретации экспериментальных результатов. Развитый подход к исследованию неоднородности пространственного распределения поля, ведущей к изменению формы движущихся сегнетоэлектрических доменных границ, может представлять интерес для развития методов доменной инженерии.

Методология и методы исследования.

В диссертации используется совокупность методов математического анализа, теории обобщённых функций, асимптотического анализа, гармонического анализа, теории функций комплексного переменного, теории динамических систем и ряд вычислительных методов.

Для моделирования нелинейной динамики бокового движения доменных границ при постоянном и гармоническом напряжении использовался алгоритм Рунге-Кутты 5 порядка с самосогласованной подстройкой шага численного интегрирования через критерий Мерсона.

Система дифференциальных уравнений в частных производных, определяющих граничную электростатическую задачу, была приведена к системе обыкновенных дифференциальных уравнений симметричным Фурье-преобразованием по пространственным координатам x и y . Решение граничной задачи, зависящее от координат (k_x, k_y, z) , обратным Фурье-преобразованием было приведено к несобственным интегралам, которые были вычислены с использованием основной теоремы о вычетах и леммы Жордана. Указанные вычисления стали возможными за счёт детального анализа комплексных свойств функций, входящих в несобственные интегралы. Были определены типы и расположение всех наборов бесконечных комплексных полюсов.

Компьютерные алгоритмы для численного решения уравнений, процедуры автоматизации работы с аналитическими выражениями, содержащими вложенные бесконечные суммы, а также процедуры визуализации геометрии рассматриваемых задач и полученных результатов были написаны на языке Wolfram.

Положения, выносимые на защиту:

- 1) Немонотонное движение плоской доменной границы в сегнетоэлектрическом конденсаторе с диэлектрическим слоем при запаздывании экранирования деполяризующего поля может быть описано одномерным обобщённым уравнением Релея.
- 2) Предсказан эффект захвата частоты скачкообразного движения плоской доменной границы в сегнетоэлектрическом конденсаторе с диэлектрическим слоем и учётом запаздывания процессов экранирования деполяризующего поля при воздействии гармонического напряжения.
- 3) Изменение формы доменной границы вызвано запаздыванием объёмного экранирования остаточного деполяризующего поля.

- 4) Основной вклад в выражение для пространственного распределения поля в сегнетоэлектрическом конденсаторе для движущихся доменных границ произвольной формы определяется вычетами в полюсах функции g_2 , характерной для рассмотренной граничной электростатической задачи.
- 5) Аналитическое выражение для пространственного распределения полярной компоненты поля в сегнетоэлектрическом конденсаторе с диэлектрическими слоями для движущейся синусоидальной доменной границы с учётом запаздывания процессов экранирования деполяризующего поля.
- 6) Повышение скорости и рост амплитуды синусоидальной доменной границы приводят к увеличению неоднородности поля, ведущей к изменению формы доменной границы.

Достоверность полученных результатов обеспечивается применением надежных численных и аналитических методов, обоснованностью допущений в решении поставленных задач, сравнением получаемых результатов с результатами других авторов и непротиворечивостью известным физическим моделям, а также согласованностью с экспериментальными результатами.

Апробация результатов. Основные результаты были представлены на шести международных конференциях: 1) 13th European Meeting on Ferroelectricity (EMF) (Porto, Portugal, 2015), 2) International Workshop “Modern Nanotechnologies” (IWMN 2015) (Ekaterinburg, 2015), 3) The Eighth International Seminar on Ferroelastic Physics (ISFP 8) (Voronezh, 2015), 4) International Workshop “Modern Nanotechnologies” (IWMN 2016) (Ekaterinburg, 2016), 5) III Международной молодежной научной конференции «Физика. Технологии. Инновации» (ФТИ-2016) (Ekaterinburg, 2016), 6) International Conference Scanning Probe Microscopy (SPM-2017) (Ekaterinburg, 2017).

Публикации и личный вклад автора. Основные результаты исследований опубликованы в 4 статьях в рецензируемых научных журналах из перечня ВАК и в 8 тезисах международных конференций.

Диссертационная работа выполнена в лаборатории сегнетоэлектриков отдела оптоэлектроники и полупроводниковой техники Института естественных наук и математики УрФУ в рамках исследований, проводимых при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 13-02-01391-а, 15-52-06006-МНТИ_а, 17-52-80116-БРИКС), Минобрнауки РФ (грант 14.513.12.0006) и Российского научного фонда (грант 14-12-00826), а также стипендии Президента РФ по приоритетным направлениям модернизации и технологического развития российской экономики (приказ № 419 от 22.04.2015).

Основные результаты работы были получены лично автором. Выбор направлений исследований и обсуждение результатов проводились с научным руководителем д.ф.-м.н., профессором В.Я. Шуром. Исследование нелинейной динамики бокового движения плоской доменной границы в рамках постановки задач и выбора аналитических приближений проводились совместно с д.ф.-м.н. А.Л. Корженевским. Исследование подходов к вычислению пространственного распределения электрического поля в рамках анализа комплексных свойств функций проводилось совместно с к.ф.-м.н. У.А. Алексеевой.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, 5 глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, благодарностей,

списка цитируемой литературы и 2-х приложений. Общий объем работы составляет 142 страницы, включая 51 рисунок, 139 формул, список сокращений и условных обозначений и список литературы из 81 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы основные цели и задачи работы, определен объект исследований, показаны научная новизна и практическая значимость полученных результатов. Кратко изложены основные научные положения, выносимые на защиту. Приведены сведения об апробации работы, личном вкладе автора, структуре и объеме диссертации.

Первая глава является обзорной. В ней представлены основные свойства сегнетоэлектриков, современные представления о переключении поляризации и кинетике доменной структуры. Подробно рассмотрены исследования процессов переключения поляризации в сегнетоэлектриках. Приведены основные физические параметры и особенности доменной структуры ниобата лития и танталата лития.

Согласно кинетическому подходу [1,4] движущей силой процесса зародышеобразования является превышение над порогом пространственного распределения электрического поля, которое складывается из нескольких слагаемых:

$$\vec{E}_{loc}[\vec{r}, t] = \vec{E}_{ext}[\vec{r}, t] + \vec{E}_{dep}[\vec{r}, t] + \vec{E}_{ex.sc}[\vec{r}, t] + \vec{E}_{b.sc}[\vec{r}, t], \quad (1)$$

где $\vec{E}_{ext}[\vec{r}, t]$ – внешнее поле, $\vec{E}_{dep}[\vec{r}, t]$ – деполяризующее поле, $\vec{E}_{ex.sc}[\vec{r}, t]$ – поле внешнего экранирования и $\vec{E}_{b.sc}[\vec{r}, t]$ – поле объемного экранирования.

Скорость бокового движения определяется уравнением [6–9]:

$$\begin{cases} v[E_{loc}] = \mu \left(E_{loc}^{(z)} - E_{th} \right), & \text{для } E_{loc}^{(z)} > E_{th} \\ v[E_{loc}] = 0, & \text{для } E_{loc}^{(z)} < E_{th} \end{cases}, \quad (2)$$

где $E_{loc}^{(z)}$ – z-компонента пространственного распределения электрического поля $\vec{E}_{loc}[\vec{r}, t]$ на доменной границе вблизи поверхности сегнетоэлектрика, E_{th} – значение порогового поля, μ – подвижность доменной границы.

При этом быстрое внешнее экранирование за счет тока внешней цепи является неполным благодаря наличию поверхностных диэлектрических слоев. Объемное экранирование остаточного деполяризующего поля является сравнительно медленным. Отмечается, что существенную роль в кинетике доменной структуры играет запаздывание экранирования деполяризующего поля. При **переключении в сильно-неравновесных условиях** (при неэффективном экранировании) качественно изменяется форма и динамика доменных границ. Наблюдается немонотонное изменение скорости и скачкообразное движение доменных границ, а также появление выступов на доменной границе.

Движение плоских доменных границ при переключении поляризации в кристаллах семейства LN и LT реализуется при температуре менее 200°C, когда преобладает анизотропная примесная проводимость. В работе [2] показано, что детерминированное зародышеобразование (локализация центров генерации элементарных ступеней на вершинах доменов в форме многоугольников) и анизотропия движения кинков вдоль доменной границы (обусловленная анизотропией проводимости в XY) приводят к формированию гексагональных доменов с плоскими границами [2].

Изменение формы доменов и доменных границ, наблюдающееся в LN и LT *при температурах более 200°C* [2], обусловлено переходом от детерминированного зародышеобразования *к стохастическому* за счет изменения механизма проводимости к изотропной ионной.

Отмечено, что ранее не производилось теоретическое описание нелинейной динамики доменной границы и не было получено аналитическое выражение для пространственного распределения электрического поля для объяснения изменения характера движения и формы движущихся доменных границ.

Вторая глава посвящена исследованию немонотонного движения под действием постоянного напряжения плоской доменной границы в сегнетоэлектрическом конденсаторе с поверхностным диэлектрическим слоем и последовательным сопротивлением во внешней цепи [A1]. Учитывается запаздывание объёмного экранирования остаточного деполяризующего поля, возникающего при движении доменной границы. Предполагается, что экранирование приводит к компенсации связанных зарядов на полярной границе сегнетоэлектрика и формированию шлейфа остаточного заряда объёмного экранирования за движущейся границей с экспоненциальным распределением заряда. Учтено, что наличие внешнего сопротивления замедляет внешнее экранирование деполяризующего поля, что обеспечивает возникновение отрицательной обратной связи по току переключения и приводит к немонотонному движению доменной границы. Экспериментальные условия, отвечающие рассматриваемой модели, соответствуют переключению поляризации при большом сопротивлении внешней цепи. Плоская форма доменной границы соответствует переключению в слабых полях при детерминированном зародышеобразовании [4]. Результаты, представленные в данной главе, являются обобщением результатов работы [5] для изменяющейся скорости движения доменной границы.

Теоретическое рассмотрение немонотонного движения плоской доменной границы основано на кинетическом подходе (1) и феноменологическом уравнении (2), определяющем скорость движения $v[E_{loc}]$ доменной границы.

Электрическая цепь и геометрия конденсатора. Напряжение $U[t]$ на конденсаторе с ёмкостью C , находящемся в цепи с источником постоянного напряжения и сопротивлением R (Рис. 1а):

$$U[t] = U_0 - I[t]R, \quad (3)$$

где U_0 – постоянное напряжение, приложенное к цепи, $I[t]$ – ток переключения:

$$I[t] = C \frac{dU[t]}{dt} - 2P_s^{(0)} v[t] l_{DW}, \quad (4)$$

где $P_s^{(0)}$ – величина спонтанной поляризации, l_{DW} – длина плоской доменной границы (вдоль Y направления), $v[t]$ – скорость бокового движения доменной границы.

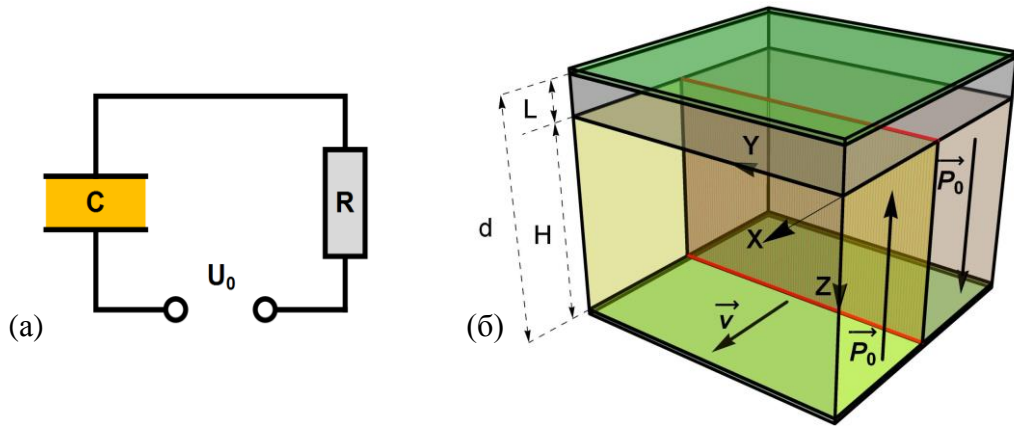


Рисунок 1 (а) Схема электрической цепи с сегнетоэлектрическим конденсатором и последовательным сопротивлением. (б) Сегнетоэлектрический конденсатор с диэлектрическим слоем и плоской доменной границей.

Толщина сегнетоэлектрического конденсатора равна d (Рис. 1б). Учтено наличие одного собственного либо искусственного поверхностного диэлектрического слоя толщиной L и диэлектрической проницаемостью ϵ . Пластина одноосного сегнетоэлектрика толщиной d вырезана перпендикулярно полярной оси, полярные поверхности покрыты сплошными электродами. Диэлектрические проницаемости сегнетоэлектрической пластины в X, Y направлениях и Z направлении ϵ_1 и ϵ_3 соответственно. Плоская одиночная доменная граница движется под действием электрического поля в X -направлении.

Запоздывание экранирования и поле в конденсаторе. Рассматривался неизменяющийся профиль пространственного распределения поляризации движущейся доменной границы $P_0[x, t]$. Деполяризующее поле частично экранируется зарядами, локализованными под поверхностью сегнетоэлектрика с поверхностной плотностью $\sigma[x, t]$. Соответствующая задача Коши для уравнения релаксации заряда $\sigma[x, t]$ может быть записана в форме [5], где τ – характерное время экранирования:

$$\begin{cases} \tau \frac{\partial \sigma[x, t]}{\partial t} = P_0[x, t] - \sigma[x, t] \\ \sigma[x, -\infty] = P_0[x, -\infty] \end{cases} \quad (5)$$

Решение уравнения (5):

$$\sigma[x, t] = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} P_0[x, t'] e^{\frac{t'-t}{\tau}} \theta[t - t'] dt', \quad (6)$$

где $\theta[\dots]$ – функция Хэвисайда.

Вычислялась величина полярной компоненты электрического поля на поверхности сегнетоэлектрика $E_z^{(2)}[x = X_w[t], z = 0, t]$, которое является решением квазистационарной граничной электростатической задачи, и записывается как:

$$E_z^{(2)}[x = X_w[t], z = 0, t] = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ikX_w[t]}}{\sqrt{2\pi}} (\tilde{P}_0[k, t] - \tilde{\sigma}[k, t]) \check{g}_2[k, 0] dk, \quad (7)$$

где $\tilde{P}_0[k, t]$, $\tilde{\sigma}[k, t]$ – Фурье-образы пространственного распределения поляризации и экранирующего заряда; \check{g}_2 – функция, зависящая от толщин и диэлектрических проницаемостей сегнетоэлектрика и поверхностного диэлектрического слоя; $X_w[t]$ – координата доменной границы в момент времени t .

Пренебрегая ускорениями высших порядков, полученное аналитически выражение для комбинации $(\tilde{P}_0[k, t] - \tilde{\sigma}[k, t])$ содержало лишь вклады пропорциональные

$X_w[t]$, $\frac{dX_w[t]}{dt}$ и $\frac{d^2X_w[t]}{dt^2}$. Такое приближение позволило рассматривать немонотонное движение доменной границы. Выражение (7) было получено аналитически в приближении тонкого диэлектрического слоя $L \ll d$ и $kL \ll 1$. Вклад в поле отрицательной обратной связи в приближении медленного внешнего экранирования ($t \ll \tau_{ex}$) из (3) и (4) определяется как:

$$E_{nf}[h[t]] = \frac{U_0}{d} - \frac{2l_{DW}RP_s^{(0)}}{d\tau_{ex}} h[t], \quad (8)$$

где $h[t] \equiv (X_w[t] - v_0 t)$ – смещение доменной границы относительно равномерного движения со средней скоростью v_0 , $\tau_{ex} \equiv RC$ – время внешнего экранирования.

В результате было получено уравнение движения доменной границы:

$$M[v[t]] \frac{d^2h[t]}{dt^2} + \frac{2l_{DW}RP_s^{(0)}}{d\tau_{ex}} h[t] + F[v[t]] + \frac{1}{\mu} v[t] + E_{th} - E_0 = 0, \quad (9)$$

где $M[v[t]]$, $F[v[t]]$ – эффективные масса и сила трения доменной границы, которые зависят от скорости движения; $E_0 \equiv U_0/d$ – вклад в поле в конденсаторе, определяющийся напряжением на источнике U_0 .

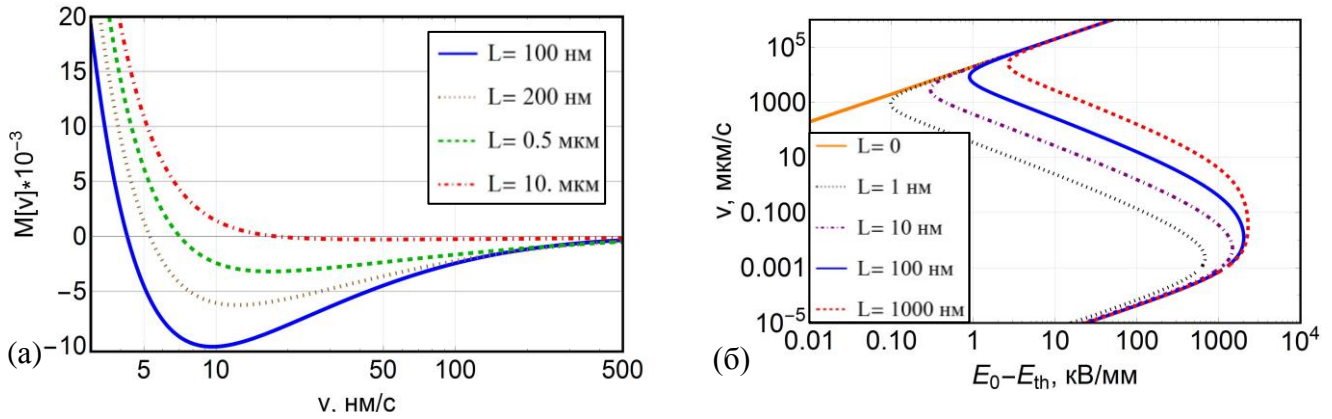


Рисунок 2. (а) Зависимости эффективной массы $M[v]$ от скорости для нескольких толщин диэлектрического слоя. (б) Зависимости скорости от превышения поля над порогом при нескольких толщинах диэлектрического слоя.

На рисунке 2а приведены зависимости M от скорости при нескольких значениях толщины диэлектрического слоя.

Решение уравнения движения доменной границы. Численное решение уравнения (9) проводилось с помощью алгоритма Рунге-Кутты 5 порядка с самосогласованной подстройкой шага интегрирования через критерий Мерсона при следующих значениях параметров, соответствующих пластине танталата лития с поверхностным диэлектрическим слоем и плоской доменной границей: $P_s^{(0)} = 65$ мкКл/см², $d = 0.8$ мм, $L = 100$ нм, $U_0 = 800$ В, $E_{th} = 50$ В/см, $\epsilon = 20$, $\epsilon_1 = 80$, $\epsilon_3 = 30$, $\tau = 1$ с, $\mu = 20$ мм²/(кВ с), $l_{DW} = 2$ мм, а также параметрам внешней цепи $R = 10$ МОм, $C = 3.5$ мкФ.

Динамика доменной границы описывалась в соответствии с (9). Удобно ввести следующее определение $v[t] \equiv \frac{dX_w[t]}{dt} \equiv v_0 + \frac{dh[t]}{dt}$, в котором значение средней скорости v_0 определяется алгебраическим уравнением:

$$F[v_0] + \frac{1}{\mu} v_0 + E_{th} - E_0 = 0 \quad (10)$$

Уравнение (9) относительно отклонения положения доменной границы X_w от координаты $v_0 t$ в форме обобщенного уравнения Релея представляется как:

$$M \left[v_0 + \frac{dh[t]}{dt} \right] \tilde{w} \frac{d^2 h[t]}{dt^2} + \tilde{w} \tilde{F} \left[v_0 + \frac{dh[t]}{dt} \right] + h[t] = 0, \quad (11)$$

где $\tilde{F} \left[v_0 + \frac{dh[t]}{dt} \right] \equiv F \left[\frac{dx_w[t]}{dt} \right] - F[v_0] + \frac{1}{\mu} \left(\frac{dx_w[t]}{dt} - v_0 \right)$, и множитель $\tilde{w} \equiv \frac{\tau_{ex} d}{2l_{DW} P_s^{(0)} R}$.

Анализ возможных режимов бокового движения может быть проведен на основании анализа производной $\frac{d\tilde{F} \left[\frac{dx_w}{dt} \right]}{d \left(\frac{dx_w}{dt} \right)}$, вычисленной при $\frac{dx_w}{dt} = v_0$. В соответствии с (10)

выражение $F[v] + \frac{1}{\mu} v = E_0 - E_{th}$ играет роль эффективной силы трения. Как можно

видеть на рисунке 2б, имеется область скоростей, при которой значение $\frac{d\tilde{F} \left[\frac{dx_w}{dt} \right]}{d \left(\frac{dx_w}{dt} \right)}$ отри-

цательно, что обеспечивает возникновение устойчивых самоподдерживающихся осцилляций $h[t]$ и скорости движения доменной границы (скачкообразного движения) относительно среднего значения v_0 . Характерной особенностью осцилляций является сильное отличие от гармонических колебаний. Отклонение скорости движения от средней происходит в короткие интервалы времени (Рис. 3).

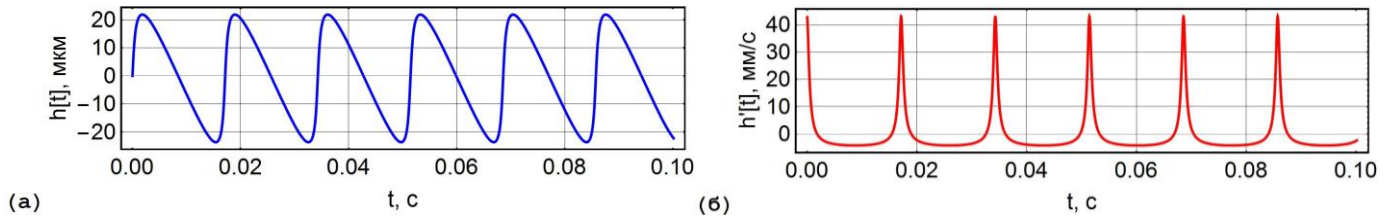


Рисунок 3. Зависимости от времени координаты $h[t]$ (а) и скорости $\dot{h}[t]$ (б) при $L = 100$ нм и средней скорости движения $v_0 = 5.85$ мм/с при $h[0] = 0$, $\dot{h}[0] = 42.8$ мм/с.

Третья глава посвящена исследованию скачкообразного движения плоской доменной границы под действием гармонического напряжения в сегнетоэлектрическом конденсаторе с поверхностным диэлектрическим слоем и последовательным сопротивлением во внешней цепи [A2], что является обобщением результатов главы 2. Учет внешнего и объёмного экранирования производился аналогично предыдущей главе. Экспериментальные условия, отвечающие рассматриваемой модели бокового движения доменной границы, соответствуют переключению поляризации при воздействии переменного напряжения и запаздывании внешнего экранирования. Плоская форма доменной границы соответствует детерминированному зародышеобразованию.

Электрическая цепь и геометрия конденсатора. Проанализирована электрическая цепь (Рис. 1а), состоящая из сегнетоэлектрического конденсатора (Рис. 1б) ёмкостью C , большого последовательного сопротивления R и источника напряжения $U_a[t]$, изменяющегося по гармоническому закону:

$$U_a[t] = U_0 + U_f \sin[\omega_f t], \quad (12)$$

где U_0 – постоянный вклад в напряжение, U_f – амплитуда переменной компоненты напряжения, изменяющаяся с частотой ω_f .

Аналитический вывод уравнения движения доменной границы производился аналогичными методами и приближениями, использованными в Главе 2. Полученное уравнение является обобщением уравнения (9) для переменного напряжения:

$$M[v[t]] \frac{d^2 h[t]}{dt^2} + \frac{2l_{DW} R P_s^{(0)}}{d \tau_{ex}} h[t] + F[v[t]] + \frac{1}{\mu} v[t] + E_{th} - \frac{U_0 + U_f \sin[\omega_f t]}{d} = 0 \quad (13)$$

Значение средней скорости движения доменной границы может быть вычислено с помощью уравнения (10), либо уравнения (13) при $h[t] = 0$ и $U_f = 0$. Уравнение (13) представляет собой обобщённое уравнение (9), дополненное зависящим от времени напряжением. В отсутствие переменной составляющей напряжения зависимость скорости от превышения поля над пороговым значением ($E_0 - E_{th}$) имеет вид S-образной кривой (Рис. 2б). Подобная зависимость указывает на существование предельного цикла с собственной частотой колебаний ω_0 . При постоянном внешнем напряжении движение доменной границы представляет собой суперпозицию равномерного движения со скоростью v_0 и периодического движения с частотой ω_0 .

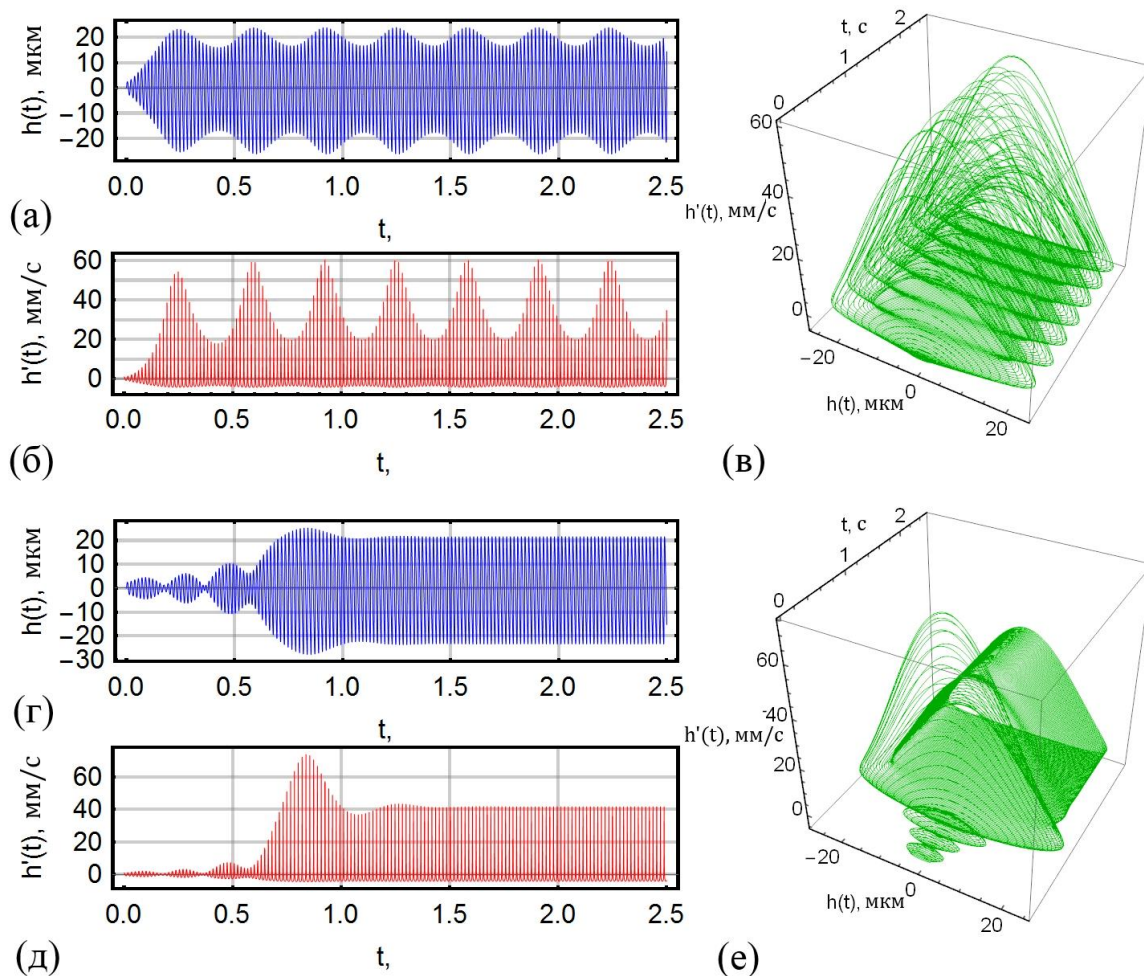


Рисунок 4. Зависимости от времени (а,г) координаты $h[t]$, (б,д) скорости $h'[t]$ и (в,е) фазового портрета. Амплитуда $U_f = 400$ В для частот внешнего переменного напряжения (а,б,в) $\omega_f = 390$ Гц и (г,д,е) $\omega_f = 370$ Гц.

Если гармонические изменения напряжения происходят с малой амплитудой U_f на частоте ω_f достаточно близкой к собственной частоте ω_0 , то общая теория нелинейной динамики предсказывает эффект «захвата частоты». При этом частота осциллирующей скорости должна совпадать с внешней частотой [6,7]. И наоборот, если при фиксированной амплитуде U_f разница частот ($\omega_f - \omega_0$) выходит за пределы полосы захвата частоты, то обе частотные компоненты должны быть представлены в зависимости от времени $X[t]$ в виде «биений».

Численное моделирование производилось методами, указанными в Главе 2, с аналогичным набором значений параметров, за исключением толщины диэлектрического слоя $L = 100$ нм. Начальные условия: $h[0] = 0$ и $h'[0] = 1$ мм/с. При указанных значениях параметров средняя скорость движения доменной границы и собственная частота предельного цикла без периодической составляющей напряжения составили $v_0 = 5,8$ мм/с и $\omega_0 = 366$ Гц соответственно. Под действием периодического напряжения при $U_f = 400$ В и $\omega_f = 390$ Гц наблюдаются «биения» $h[t]$ и $\dot{h}[t]$ (Рис. 4 а,б,в). Подавление биений происходит на частоте $\omega_f = 370$ Гц (Рис. 4 г,д,е).

На рисунке 5а представлена зависимость собственной частоты ω_0 от частоты внешнего напряжения ω_f при амплитуде переменной составляющей напряжения $U_f = 400$ В.

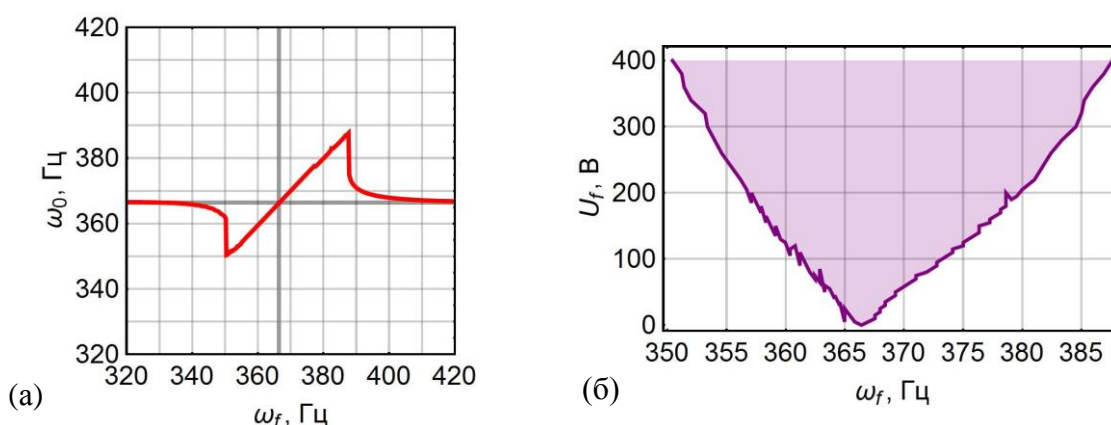


Рисунок 5. (а) Зависимость собственной частоты ω_0 от частоты внешнего напряжения ω_f . (б) Расчётный амплитудно-частотный диапазон существования эффекта захвата частоты. $U_f=400$ В.

На рисунке 5б представлен амплитудно-частотный диапазон существования эффекта захвата частоты известный как «язык Арнольда» [8,9]. Результаты вычислений могут быть использованы для наблюдения эффекта в сегнетоэлектрическом конденсаторе посредством анализа Фурье спектра токов переключения.

Четвертая глава посвящена исследованию особенностей пространственного распределения полярной компоненты электрического поля на движущейся доменной границе синусоидальной формы в сегнетоэлектрике с поверхностным диэлектрическим слоем при воздействии постоянного внешнего поля, которая должна приводить к изменению формы доменной границы [А3]. Синусоидальная форма доменной границы соответствует переключению в сильных полях при стохастическом зародышеобразовании [4].

Деполаризующее поле формируется связанными зарядами в сегнетоэлектрическом конденсаторе с поверхностными диэлектрическими слоями, которые частично экранированы быстрым внешним экранированием [1,4]. Остаточное деполаризующее поле в рассмотренной модели сформировано разницей между связанными зарядами и зарядами внешнего экранирования.

Напряженность электростатического поля вычислялась для непрерывного распределения заряда шлейфа объёмного экранирования, которое определялось связанными и экранирующими зарядами ($P_0[x, y] - \sigma[x, y, t]$), где $\sigma[x, y, t]$ – поверхностная

плотность зарядов объёмного экранирования, $P_0[x, y]$ – разница между связанными зарядами и зарядами внешнего экранирования. $P_s \approx \frac{L}{H} P_s^{(0)}$.

Модель запаздывания объёмного экранирования предполагала равномерное пространственное распределение поверхностного экранирующего заряда для фиксированной формы доменной границы $P_0[x, y]$ (Рис. 6).

Боковое движение доменной границы определяется пространственным распределением полярной компоненты электрического поля на границе между сегнетоэлектриком и поверхностным диэлектрическим слоем.

Функция плотности заряда синусоидальной полосы (шлейфа) задавалась как:

$$\rho[x, y, z] = \frac{P_0 \delta[z]}{2} \left(\theta[x - (X_w - A - a)] + \theta \left[X_w + A \sin \left[\frac{2\pi}{\Lambda} y \right] - x \right] \right), \quad (14)$$

где $\delta[\dots]$ – дельта функция Дирака, X_w – координата среднего положения доменной границы, A и Λ – амплитуда и период синусоидального шлейфа остаточного экранирующего заряда соответственно; a – длина шлейфа остаточного экранирующего заряда.

Аналитический вывод выражения для z-компоненты остаточного деполяризующего поля, создаваемого заряженным шлейфом, проводился в пределе $A/z \rightarrow 0$.

В частности, полярные компоненты электрического поля в точках *максимума* ($x = X_w + A, y = \frac{\Lambda}{4}$) и *минимума* ($x = X_w - A, y = \frac{3\Lambda}{4}$) на доменной границе в зависимости от координаты z (max и min на Рис. 6б) представляются в виде:

$$E_{max} \approx \frac{P_0}{4\pi\epsilon_0} \left(\arctg \left[\frac{2A+a}{z} \right] - \frac{A}{z} + \operatorname{sgn}[z] \frac{2\pi A}{\Lambda} K_1 \left[\frac{2\pi}{\Lambda} |z| \right] \right), \quad (15)$$

$$E_{min} \approx \frac{P_0}{4\pi\epsilon_0} \left(\arctg \left[\frac{a}{z} \right] + \frac{A}{z} - \operatorname{sgn}[z] \frac{2\pi A}{\Lambda} K_1 \left[\frac{2\pi}{\Lambda} |z| \right] \right), \quad (16)$$

где $K_1[\dots]$ – модифицированная функция Бесселя второго рода первого порядка, $\operatorname{sgn}[\dots]$ – функция знака действительного аргумента.

Неоднородность пространственного распределения электрического поля, ведущая к изменению формы доменной границы, характеризовалось разницей полей в max и min точках $\Delta E \equiv E_{max} - E_{min}$:

$$\Delta E = \frac{P_0}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{2A}{z} + \operatorname{sgn}[z] \frac{2\pi A}{\Lambda} K_1 \left[\frac{2\pi}{\Lambda} |z| \right] + \left(\arctg \left[\frac{2A+a}{z} \right] - \arctg \left[\frac{a}{z} \right] \right) \right) \quad (17)$$

Принимая во внимание, что слагаемое, содержащее функцию K_1 , было получено в пределе $A/z \rightarrow 0$, то и разница арктангенсов в (17) была упрощена в этом же приближении разложением в ряд Тейлора так, что выражение (17) приняло форму:

$$\Delta E = \frac{P_0}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{2A}{z} + \frac{2A}{z} \frac{2\pi}{\Lambda} |z| K_1 \left[\frac{2\pi}{\Lambda} |z| \right] + \frac{2A}{z} \frac{1}{1 + \left(\frac{a}{z} \right)^2} \right) \quad (18)$$

После вынесения множителя $\frac{2A}{z}$ знак ΔE для $(A, z, P_0, \Lambda) > 0$ определяется как:

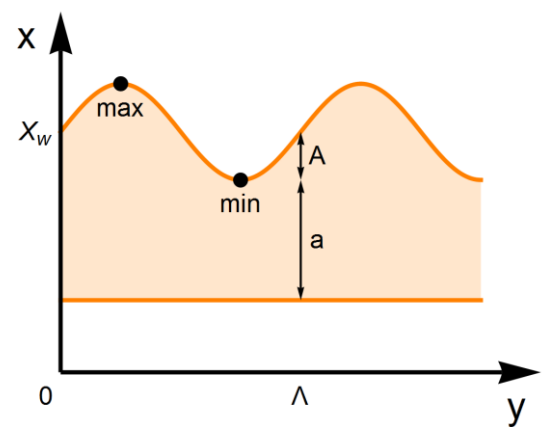


Рисунок 6. Заряженный шлейф остаточного экранирующего заряда.

$$\text{sgn}[\Delta E] = \text{sgn} \left[-\frac{\left(\frac{a}{z}\right)^2}{1+\left(\frac{a}{z}\right)^2} + \frac{2\pi z}{\Lambda} K_1 \left[\frac{2\pi z}{\Lambda} \right] \right] \quad (19)$$

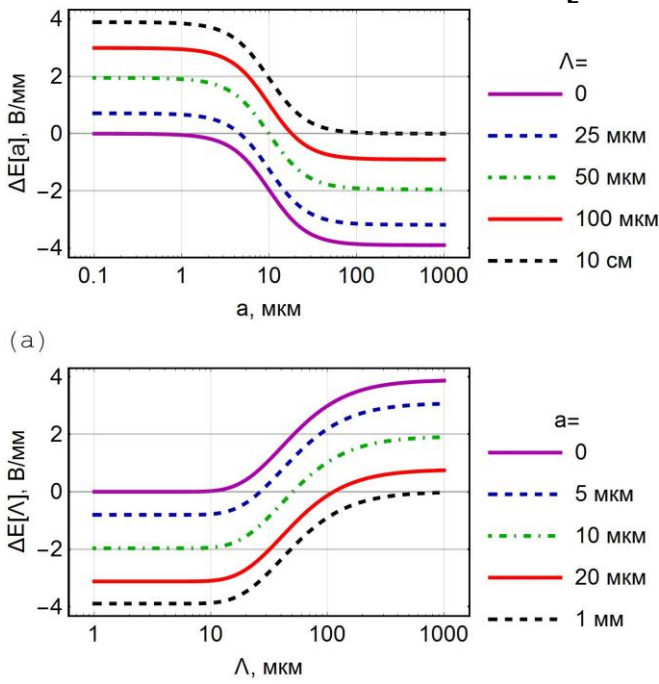


Рисунок 7. Зависимость ΔE (а) от длины шлейфа a и (б) от периода Λ при $z = 10$ мкм.

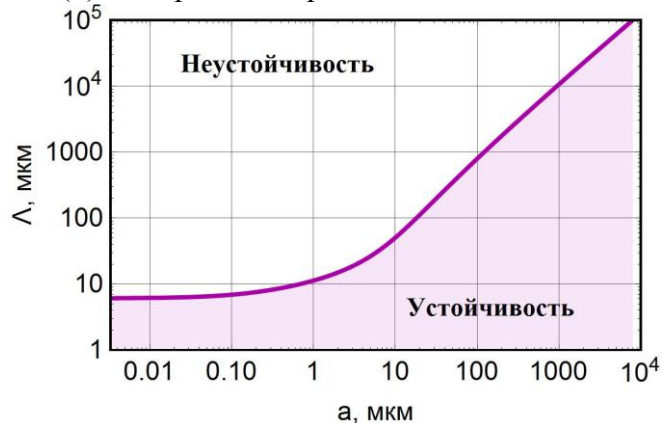


Рисунок 8. Фазовая диаграмма устойчивости формы от параметров a и Λ при фиксированном значении амплитуды $A = 100$ нм.

вызвано запаздыванием объёмного экранирования остаточного деполаризующего поля.

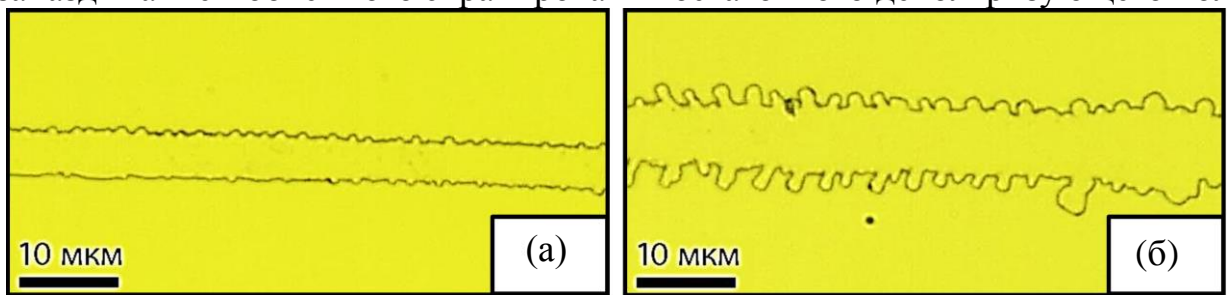


Рисунок 9. Экспериментально наблюдаемая синусоидальная доменная граница и регулярная система выступов, сформированные в конгруэнтном ниобате лития при импульсном переключении пьезоэлектрическим полем при различном количестве импульсов (а) 10 и (б) 20.

Изменению формы доменной границы в сторону **увеличения амплитуды** синусоидальной доменной границы соответствует случай, когда $E_{max} > E_{min}$ (**неустойчивость**). Особенность рассмотренной модели шлейфа в том, что при малых значениях длины ($a \rightarrow 0$) суммарный экранирующий заряд в шлейфе не исчезает, что объясняет сохранение неустойчивости при отсутствии шлейфа.

Для анализа пространственного распределения поля использованы параметры, соответствующие пластине ниобата лития: $P_s^{(0)} = 73$ мкКл/см², $L = 1$ мкм, $H = 1$ мм, $z = 10$ мкм, $A = 100$ нм.

Изменение формы должно происходить при малом шлейфе, то есть малых скоростях доменной границы или быстром экранировании, что видно на рисунке 7.

Значения длины шлейфа a и периода Λ , лежащие **ниже** линии $\Delta E = 0$ (Рис. 8), соответствуют **устойчивости** формы доменной границы ($\Delta E < 0$).

Таким образом, установлена природа экспериментально наблюдаемого изменения формы плоской доменной границы с образованием регулярных выступов (Рис. 9) при переключении поляризации пьезоэлектрическим полем [10]. С помощью упрощённой модели показано, что изменение формы доменной границы вызвано запаздыванием объёмного экранирования остаточного деполаризующего поля.

Пятая глава посвящена разработке аналитического подхода к вычислению пространственного распределения электрического поля в сегнетоэлектрическом конденсаторе с поверхностными диэлектрическими слоями для движущихся доменных границ произвольной формы под действием постоянного напряжения, для изучения неоднородности поля, которая приводит к изменению формы доменных границ. На примере равномерно движущейся доменной границы синусоидальной формы в модели процесса запаздывания объёмного экранирования, приводящей к экспоненциальному распределению поверхностного экранирующего заряда, аналитически было получено пространственное распределение z-компоненты электрического поля [A4]. Представленные результаты являются существенным обобщением работ [5,11].

Синусоидальная форма доменной границы соответствует переключению в сильных полях при стохастическом зародышеобразовании [4].

Рассмотрен бесконечный по XY сегнетоэлектрический конденсатор с поверхностными диэлектрическими слоями толщиной L на полярных поверхностях (Рис. 10). Напряжение U между верхним и нижним электродами создавало однородное электрическое поле \vec{E}_{ex} . Синусоидальная сегнетоэлектрическая доменная граница движется с постоянной скоростью v вдоль X направления.

Внешнее экранирование значительно быстрее ($\tau_{ex} \ll \tau$) процессов объёмного экранирования деполаризующего поля, по завершении которого остаточное деполаризующее поле определяется величиной эффективной остаточной поверхностной плотности заряда P_S .

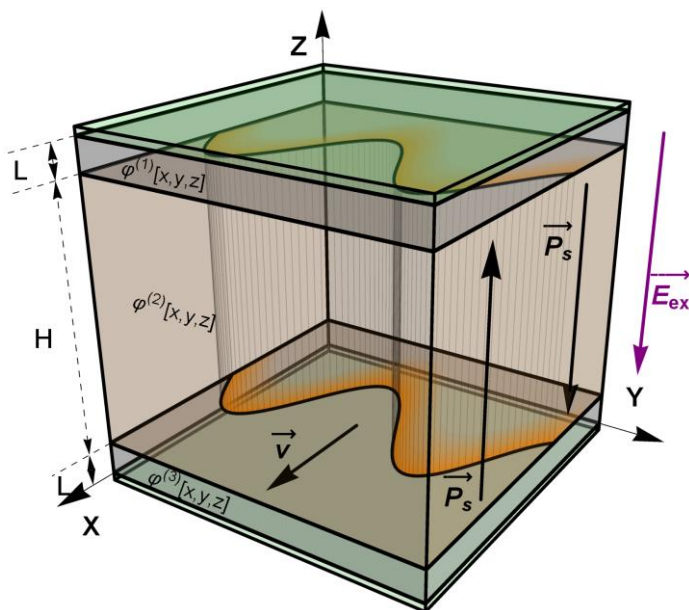


Рисунок 10. Сегнетоэлектрический конденсатор с синусоидальной доменной границей, движущейся в X-направлении, где оранжевым цветом выделен экспоненциально спадающий шлейф остаточного экранирующего заряда. Отмечено соответствие функций $\varphi^{(j)}[\dots]$ областям.

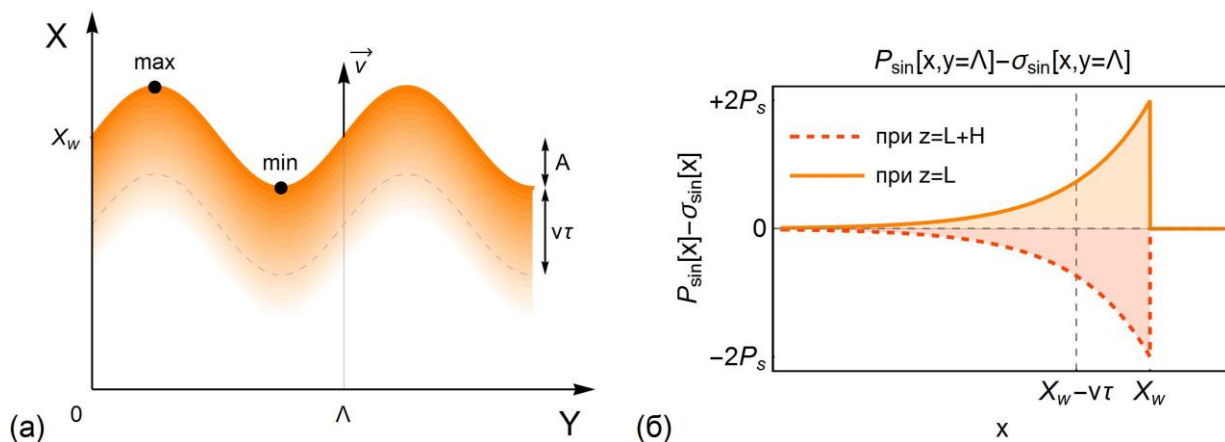


Рисунок 11. Экспоненциальный шлейф остаточного заряда с характерной длиной vt : (а) плотность заряда отмечена насыщенностью цвета, (б) зависимость плотности заряда от расстояния до доменной границы на противоположных полярных поверхностях сегнетоэлектрика ($z = L$ и $z = L + H$) для $y = 0$.

Запаздывание объёмного экранирования, происходящее за счёт зарядов, локализованных на границах между сегнетоэлектриком и диэлектрическими слоями, приводит к формированию шлейфа остаточного заряда ($P_{sin}[x, y] - \sigma_{sin}[x, y, t]$). Позади движущейся синусоидальной доменной границы плотность заряда в шлейфе спадает экспоненциально при увеличении расстояния от доменной границы (Рис. 10 и 11).

Аналитическое решение квазистационарной граничной задачи (20) для сегнетоэлектрического конденсатора (Рис. 10) было использовано для вычисления пространственного распределения $\vec{E}^{(2)} \equiv \vec{E}_{loc}$.

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi^{(1)}[x, y, z; t] = 0 \\ \left(\varepsilon_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \varepsilon_1 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \varepsilon_3 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi^{(2)}[x, y, z; t] = 0 \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi^{(3)}[x, y, z; t] = 0 \\ \varphi^{(1)}[x, y, z = 2L + H; t] = U \\ \varphi^{(3)}[x, y, z = 0; t] = 0 \\ \varphi^{(1)}[x, y, z = L + H; t] = \varphi^{(2)}[x, y, z = L + H; t] \\ \varphi^{(3)}[x, y, z = L; t] = \varphi^{(2)}[x, y, z = L; t] \\ \varepsilon_3 \frac{\partial \varphi^{(2)}[x, y, z; t]}{\partial z} \Big|_{z=L} - \varepsilon \frac{\partial \varphi^{(3)}[x, y, z; t]}{\partial z} \Big|_{z=L} = \frac{1}{\varepsilon_0} (P_{sin}[x, y, t] - \sigma_{sin}[x, y, t]) \\ \varepsilon_3 \frac{\partial \varphi^{(2)}[x, y, z; t]}{\partial z} \Big|_{z=L+H} - \varepsilon \frac{\partial \varphi^{(1)}[x, y, z; t]}{\partial z} \Big|_{z=L+H} = \frac{1}{\varepsilon_0} (P_{sin}[x, y, t] - \sigma_{sin}[x, y, t]), \end{array} \right. \quad (20)$$

где $\varphi^{(1,3)}[x, y, z; t]$ пространственное распределение электрического потенциала в диэлектрических слоях с диэлектрической проницаемостью ε ; $\varphi^{(2)}[x, y, z; t]$ – электрический потенциал в сегнетоэлектрике с тензором диэлектрической проницаемости с диагональными компонентами по XY равными ε_1 , по Z равной ε_3 .

После прямого симметричного Фурье-преобразования по x и y граничной задачи (20) удалось получить аналитическое решение для электрических потенциалов $\tilde{\varphi}^{(j)}[k_x, k_y, z; t]$ – при произвольной функции $(\tilde{P}[k_x, k_y, t] - \tilde{\sigma}[k_x, k_y, t])$, определяющей форму движущейся доменной границы, входящей в последние два граничных условия задачи (20). Пространственное распределение z-компоненты электрического поля в общем виде в сегнетоэлектрике определяется выражением (21), в котором $g_2[\sqrt{k_x^2 + k_y^2}, z]$ – функция, характерная для рассматриваемой граничной задачи и зависящая только от толщин слоёв конденсатора и диэлектрических проницаемостей.

$$\begin{aligned} E_z^{(2)}[x, y, z, t] &= \\ &= - \frac{\varepsilon U}{\varepsilon H + \varepsilon_3 2L} + \\ &+ \frac{1}{2\pi} \iint_{-\infty}^{+\infty} g_2 \left[\sqrt{k_x^2 + k_y^2}, z \right] (\tilde{P}[k_x, k_y, t] - \tilde{\sigma}[k_x, k_y, t]) e^{ik_x x} e^{ik_y y} dk_x dk_y \end{aligned} \quad (21)$$

Аналитическое выражение для функции g_2 :

$$g_2[k, z] = - \frac{\operatorname{ch} \left[\frac{k}{\gamma} \left(L + \frac{H}{2} - z \right) \right]}{\varepsilon_0 \left(\gamma \varepsilon \operatorname{cth}[kL] \operatorname{sh} \left[k \frac{H}{2\gamma} \right] + \varepsilon_3 \operatorname{ch} \left[k \frac{H}{2\gamma} \right] \right)} \quad (22)$$

Функция g_2 имеет бесконечное количество особых точек, координаты которых определяются трансцендентным уравнением:

$$\gamma \varepsilon \operatorname{ctg}[qL] \sin \left[q \frac{H}{2\gamma} \right] + \varepsilon_3 \cos \left[q \frac{H}{2\gamma} \right] = 0, \quad (24)$$

которое может быть решено аналитически введением рационального соотношения толщин сегнетоэлектрика и поверхностных диэлектрических слоёв.

$$H = 2pL\gamma, \quad (25)$$

где p – произвольное натуральное число ($p \in \mathbb{N}$).

Выбор рационального соотношения слоёв позволяет привести трансцендентное уравнение (24) к алгебраическому уравнению степени p :

$$\gamma \varepsilon \sum_{k=0}^{\langle \frac{p-1}{2} \rangle} \left[(-1)^k \binom{p}{2k+1} b^{p-2k} (1-b^2)^k \right] + \varepsilon_3 \sum_{k=0}^{\langle \frac{p}{2} \rangle} \left[(-1)^k \binom{p}{2k} b^{p-2k} (1-b^2)^k \right] = 0, \quad (26)$$

где введено обозначение $b \equiv \cos[qL]$; $\binom{p}{2k} \equiv C_p^{2k}$ – биномиальный коэффициент; $\langle \frac{p}{2} \rangle$ – целая часть числа $\frac{p}{2}$.

Особые точки функции g_2 являются полюсами 1-порядка и расположены исключительно на мнимой оси в соответствии с последовательностями:

$$q = iQ_{jd}^{(+)} = \frac{i}{L} \left(+\arccos[\tilde{b}_d] + 2\pi j \right), \quad (27)$$

$$q = iQ_{jd}^{(-)} = \frac{i}{L} \left(-\arccos[\tilde{b}_d] + 2\pi j \right), \quad (28)$$

где d – изменяется от 1 до p ; j – принимает произвольные целые значения; совокупность значений $\{\tilde{b}_d\}_{d=1}^p$ представляет собой все корни уравнения (26).

На основании решения граничной задачи (20) для произвольной формы доменной границы, а также анализа комплексных свойств функции g_2 был сформулирован универсальный аналитический подход для вычисления пространственного распределения электрического поля движущейся доменной границы произвольной формы в рассмотренном сегнетоэлектрическом конденсаторе (Рис. 10), который заключается в использовании основной теоремы о вычетах для вычисления интеграла (21) в смысле главного значения, за счёт учёта полного набора особых точек функции g_2 (27,28) (при рациональном соотношении толщин (25) слоёв H и L), которые определяют основной вклад в выражение для пространственного распределения электрического поля, а также указание на необходимость анализа особых точек функции $(\tilde{P}[k_x, k_y] - \tilde{\sigma}[k_x, k_y, t])$, определяющей форму доменной границы.

Подход был применён для вычисления пространственного распределения z -компоненты электрического поля равномерно движущейся доменной границы синусоидальной формы, для которой пространственное распределение поверхностной плотности эффективного остаточного заряда определяется выражением:

$$P_{sin}[x, y, t] = 2P_s \theta \left[x - \left(A \sin \left[\frac{2\pi}{\Lambda} y \right] + X_w[t] \right) \right] - P_s, \quad (29)$$

где P_s – величина плотности эффективного остаточного заряда, A – амплитуда синусоидальной доменной границы, Λ – период синусоидальной доменной границы, $X_w[t] = v(t - t_0)$ – закон движения доменной границы, v – постоянная скорость доменной границы, t – момент времени, t_0 – начальный момент времени; $\theta[\dots]$ – функция Хэвисайда.

Была использована динамическая модель запаздывания объёмного экранирования поля \vec{E}_{rd} , и решено соответствующее уравнение (22) для синусоидальной формы доменной границы (21) и скорости v для вычисления $\sigma_{b.scr}[x, y, t]$.

$$\begin{cases} \tau \frac{\partial \sigma_{sin}[x, y, t]}{\partial t} = P_{sin}[x, y, t] - \sigma_{sin}[x, y, t], \\ \sigma_{sin}[x, y, t_0] = P_{sin}[x, y, t_0], \end{cases} \quad (30)$$

где τ – характерное время объёмного экранирования.

Заряженные шлейфы на противоположных полярных поверхностях $z = L$ и $z = L + H$ имеют разные знаки (Рис. 11б), что было учтено в последних двух граничных условиях (20).

Совокупность использованных математических методов [12] позволила получить точное аналитическое выражение для пространственного распределения z -компоненты электрического поля в сегнетоэлектрике $E_z^{(2)}[x, y, z, t]$ с использованием лишь условия (25) для рационального соотношения толщин слоев.

$$\begin{aligned} E_z^{(2)}[x, y, z, t] = & \\ = E_{ext} - \frac{2P_s L}{\epsilon_0(H\epsilon + 2L\epsilon_3)} & \left(\text{sgn}[x - X_w[t]] - \text{sgn}[x] e^{-\frac{t-t_0}{\tau}} \right) - \\ - \frac{2P_s}{v\tau} \sum_{m=0}^{\infty} & \left[\left(\frac{A}{2} \right)^{2m} \binom{2m}{m} \frac{T[0, (2m), x, z, t]}{(2m)!} + \right. \\ + \left(\frac{A}{2} \right)^{2m} & \frac{2(-1)^m}{(2m)!} \sum_{l=0}^{m-1} \left[(-1)^l T \left[\frac{4\pi(m-l)}{\Lambda}, (2m), x, z, t \right] \binom{2m}{l} \cos \left[\frac{4\pi(m-l)}{\Lambda} y \right] \right] \\ + \left(\frac{A}{2} \right)^{2m+1} & \frac{2}{(2m+1)!} \sum_{l=0}^m \left[(-1)^{l+1} T \left[\frac{2\pi(2m-2l+1)}{\Lambda}, (2m+1), x, z, t \right] \cdot \right. \\ \cdot \left. \left. \binom{2m+1}{l} \sin \left[\frac{2\pi(2m-2l+1)}{\Lambda} y \right] \right] \right], & \quad (31) \end{aligned}$$

где $E_{ext} \equiv -\frac{\epsilon U}{H\epsilon + 2L\epsilon_3}$ – обозначение для z -компоненты однородного внешнего поля, создаваемого приложенным напряжением U на конденсаторе. Функция $T[\omega_{ml}, m, x, z, t]$ представлена ниже:

$$\begin{aligned}
& T[\omega_{ml}, m, x, z, t] = \\
& = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \sum_{d=1}^p \left[\operatorname{sgn}[x - X_w[t]] B_{mljd}[x - X_w[t], z] - \operatorname{sgn}[x] B_{mljd}[x, z] e^{-\frac{t-t_0}{\tau}} \right] + \\
& + \left(\frac{-1}{v\tau} \right)^{m-1} (\operatorname{sgn}[x - X_w[t]] \theta[X_w[t] - x] - \\
& - \operatorname{sgn}[x] \theta[-x]) e^{\frac{x-X_w[t]}{v\tau}} g_2 \left[\sqrt{\omega_{ml}^2 - \frac{1}{(v\tau)^2}}, z \right],
\end{aligned} \tag{32}$$

в котором $\omega_{ml} \equiv \frac{2\pi}{\Lambda} (2l - m)$; а функции $B_{mljd}[x, z]$ являются вычетами в полюсах функций под интегралом по k_x , которые были получены вычислением интеграла по k_y в выражении (21). Указанные полюса аналогичны полюсам (27,28), но для более сложного аргумента функции $g_2 \left[\sqrt{k_x^2 + \omega_{ml}^2}, z \right]$, где $k_x \in \mathbb{C}$, $\omega_{ml} \in \mathbb{R}$.

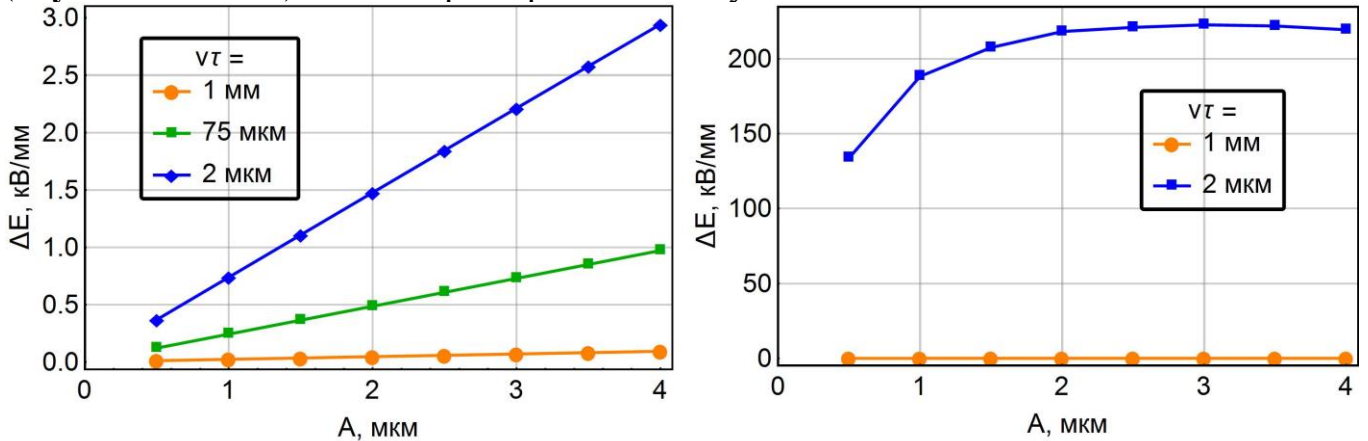
Исследование зависимости электрического поля $E_z^{(2)}$ от амплитуды A , глубины z , характерной длины $v\tau$ шлейфа остаточного экранирующего заряда, вдоль доменной границы проводилось для значений: $P_s/P_s^{(0)} = 10^{-3}$; $t_0 = -10^3$ сек; $t = 0$; $\Lambda = 1$ мкм; $\tau = 1$ сек; $\varepsilon = 20$; $\varepsilon_1 = 80$; $\varepsilon_3 = 30$; при различных наборах параметров:

Набор 1: $L = 0.1$ мкм; $p = 500$; $H \approx 61.24$ мкм; амплитуда A синусоидальной доменной границы в диапазоне от 0.5 мкм до 4 мкм.

Набор 2: $L = 1$ мкм; $p = 50$; $H \approx 61.24$ мкм; $A = 2$ мкм; длина шлейфа остаточного экранирующего заряда $v\tau$ изменялась в диапазоне от 10^{-3} мкм до 10^5 мкм.

Точность вычисления значений поля $E_z^{(2)}$ составляла ± 0.1 кВ/мм.

Неоднородность пространственного распределения электрического поля синусоидальной доменной границы можно характеризовать разностью электрических полей в точках **max** и **min** $\Delta E \equiv (E_{max} - E_{min})$, где $E_{max} \equiv E_z^{(2)} \left[x = X_w[t] + A, y = \frac{\Lambda}{4} \right]$ и $E_{min} \equiv E_z^{(2)} \left[x = X_w[t] - A, y = \frac{3\Lambda}{4} \right]$. Условие $\Delta E > 0$ согласно уравнению (2) соответствует положительному значению разности скоростей $(v_{max} - v_{min}) > 0$, что должно приводить к увеличению амплитуды A синусоидальной доменной границы (**неустойчивости**). И наоборот при $\Delta E < 0$ к устойчивости.



(а) (б)
Рисунок 12. Зависимость ΔE от амплитуды синусоидальной доменной границы для нескольких $v\tau$: (а) $z = L + H/2$ и (б) $z = L$. Параметры соответствуют Набору 1.

На рисунке 12 показано, что увеличение амплитуды синусоидальной доменной границы (для значений параметров Набора 1) приводит к повышению неоднородности электрического поля. Параметр ΔE стремится к нулю при увеличении характерной длины шлейфа экранирующего заряда ($\nu\tau$), что ведёт к сохранению формы синусоидальной доменной границы.

Распределение величины $(E_z^{(2)}[y] - E_{ext})$ на синусоидальной доменной границе вблизи диэлектрического слоя $z=L+0.1$ мкм вычислено в соответствии со значениями параметров Набора 1 (Рис. 13) и демонстрирует наличие существенной пространственной неоднородности поля вдоль доменной границы, которая должна приводить к качественному изменению формы равномерно движущейся синусоидальной границы.

Построена зависимость ΔE от характерной длины шлейфа экранирующего заряда $\Delta E[\nu\tau]$ (Рис. 14) вблизи границы сегнетоэлектрика и поверхностного диэлектрического слоя в соответствии со значениями параметров Набора 2. В пределах малого ($\nu\tau \rightarrow 0$) и широкого ($\nu\tau \rightarrow \infty$) шлейфа должно происходить сохранение формы доменной границы ($\Delta E \rightarrow 0$). Режим неустойчивости формы доменной границы расположен в диапазоне значений $\nu\tau$, соответствующих положительным значениям ΔE и имеющих максимум $\Delta E[\nu\tau]$, который плавно уменьшается при переходе к середине конденсатора ($z \rightarrow L + H/2$). Полученные результаты свидетельствуют, что увеличение длины шлейфа остаточного экранирующего заряда $\nu\tau$ приводит сначала к росту неоднородности пространственного распределения электрического поля, ведущей к изменению формы доменной границы, а при дальнейшем увеличении $\nu\tau$ к её сохранению.

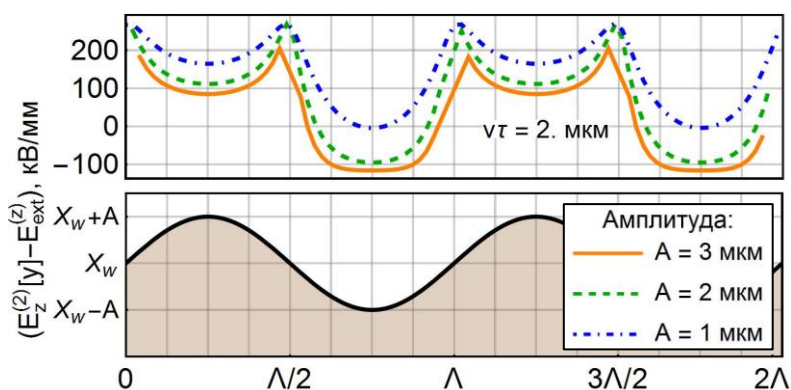


Рисунок 13. Форма синусоидальной доменной границы и пространственная зависимость $(E_z^{(2)}[y] - E_{ext})$ на синусоидальной доменной границе при нескольких амплитудах A при $z = L + 0.1$ мкм и параметрах Набора 1.

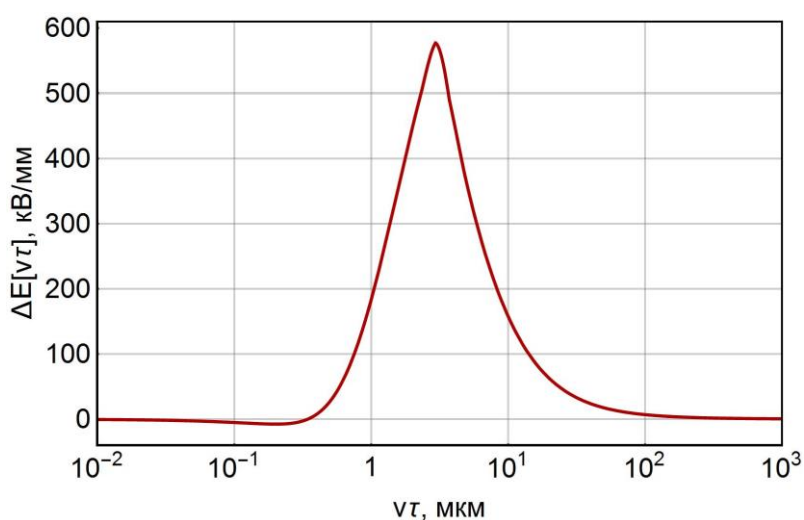


Рисунок 14. Зависимость ΔE от характерной длины шлейфа $\nu\tau$: на границе сегнетоэлектрика для параметров Набора 2, где $\Lambda = 1$ мкм.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ РАБОТЫ

Результаты теоретического исследования нелинейной динамики и неоднородности пространственного распределения электрического поля, ведущей к изменению формы движущихся доменных границ в однородном внешнем поле при сильнонеравновесных условиях переключения поляризации, позволили сделать следующие основные выводы:

1) Разработан полуаналитический метод описания немонотонного бокового движения плоской доменной границы в сегнетоэлектрическом конденсаторе с последовательным сопротивлением под действием постоянного напряжения с учётом запаздывания экранирования деполяризующего поля.

2) Показано, что динамика бокового движения доменной границы может быть описана одномерным обобщённым уравнением Релея с введением эффективных массы и силы трения, зависящих от скорости движения.

3) Предсказано возникновение устойчивых самоподдерживающихся осцилляций скорости движения доменной границы в области скоростей с отрицательным значением эффективной силы трения.

4) Установлен амплитудно-частотный диапазон существования предсказанного эффекта захвата частоты скачкообразного бокового движения плоской доменной границы в сегнетоэлектрическом конденсаторе с последовательным сопротивлением под действием гармонического напряжения.

5) Показано, что экспериментально наблюдаемое изменение формы плоской доменной границы с образованием регулярных выступов вызвано запаздыванием объёмного экранирования остаточного деполяризующего поля.

6) Построена фазовая диаграмма устойчивости формы синусоидальной доменной границы в зависимости от длины и периода шлейфа остаточного экранирующего заряда.

7) Разработан оригинальный аналитический подход для вычисления пространственного распределения электрического поля в сегнетоэлектрическом конденсаторе с движущимися доменными границами произвольной формы с учётом запаздывания объёмного экранирования деполяризующего поля.

8) Показано, что особые точки функции g_2 , характерной для рассмотренного сегнетоэлектрического конденсатора, расположены исключительно на мнимой оси и представляют собой полюса 1-го порядка, что позволяет аналитически провести обратное Фурье-преобразование.

9) Получено точное аналитическое выражение для пространственного распределения z -компоненты электрического поля равномерно движущейся синусоидальной доменной границы в сегнетоэлектрическом конденсаторе с диэлектрическими слоями с учётом запаздывания экранирования деполяризующего поля.

10) Показано, что увеличение длины шлейфа остаточного экранирующего заряда приводит сначала к росту неоднородности пространственного распределения электрического поля, ведущей к изменению формы доменной границы, а при дальнейшем увеличении длины шлейфа – к уменьшению неоднородности вплоть до исчезновения эффекта изменения формы.

Перспективы дальнейшей разработки темы

Полученные в ходе выполнения работы результаты могут быть использованы для продолжения теоретических исследований эволюции формы доменных границ с учётом анизотропии процессов объёмного экранирования остаточного деполяризующего поля. Целесообразно продолжить развитие аналитического подхода для исследования доменных границ сложных форм в динамике. Кроме того, актуальной задачей является исследование влияния заряженных доменных границ на нелинейную динамику и эволюцию их формы.

ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Shur, V.Ya. Kinetics of ferroelectric domains: application of general approach to LiNbO_3 and LiTaO_3 / V.Ya. Shur // *Frontiers of Ferroelectricity: A Special Issue of the Journal of Materials Science* – 2007. – V. 41. – № 1. – P. 199–210.
2. Shur, V. Ya. Nano- and micro-domain engineering in normal and relaxor ferroelectrics / V. Ya. Shur // *Handbook of Advanced Dielectric, Piezoelectric and Ferroelectric Materials: Synthesis, Properties and Applications* / ed. Ye Z.-G. – Woodhead, 2008. – P. 622–669.
3. Interaction of domain walls with defects in ferroelectric materials / D. Schrade et al. // *Mech. Mater.* – 2007. – V. 39. – № 2. – P. 161–174.
4. Shur, V.Ya. Correlated nucleation and self-organized kinetics of ferroelectric domains / Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., 2005. – P.178–214.
5. Screening and retardation effects on 180° -domain wall motion in ferroelectrics: Wall velocity and nonlinear dynamics due to polarization- screening charge interactions / E.A. Eliseev et al. // *Phys. Rev. B* – 2008. – V. 78. – P. 245409.
6. Guckenheimer, J. Nonlinear oscillations, dynamical systems, and bifurcations of vector fields, Volume 42 / J. Guckenheimer, P. Holmes – New York: Springer, 1983. – 462 pp.
7. Hilborn, R.C. Chaos and nonlinear dynamics: an introduction for scientists and engineers / R. C. Hilborn, J. C. Sprott – Oxford: University Press, 1994. – 654 pp.
8. Arnold, V.I. Ordinary differential equations / V. I. Arnold – MIT Press, 1973. – 280 pp.
9. Katok, A. Introduction to the modern theory of dynamical systems / A. Katok, B. Hasselblatt – Cambridge: University Press, 1995. – 824 pp.
10. Self-assembled formation of nano-domain structure in lithium niobate by multiple IR laser pulse irradiation / V.Ya. Shur et al. // *J. Appl. Phys.* – 2019. – Vol. 125. – P. 091430.
11. Drougard, M.E. On the dependence of the switching time of barium titanate crystals on their thickness / M.E. Drougard, R. Landauer // *J. Appl. Phys.* – 1959. – V. 30. – P. 1663–1668.
12. Лаврентьев, М.А. Методы теории функций комплексного переменного / М.А. Лаврентьев, Б.В. Шабат. – 4-е изд., исп. – Москва: Наука, 1973. – 736 с.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК РФ:

- A1. **Udalov, A.R.** Origin of jump-like dynamics of the plane domain wall in ferroelectrics / A.R. Udalov, A.L. Korzhenevskii, V.Ya. Shur // *Ferroelectrics* – 2015. – V. 476. – № 1. – P. 17–23. 0.7 п.л./0.3 п.л. (Web of science/Scopus)
- A2. **Udalov, A.R.** Frequency locking effect at polarization reversal of the ferroelectric capacitor / A.R. Udalov, A.L. Korzhenevskii, V.Ya. Shur // *Ferroelectrics* – 2016. – V. 496. – № 1. – P. 85–91. 0.8 п.л./0.2 п.л. (Web of science/Scopus)

A3. **Udalov, A.R.** Topological instability of the ferroelectric domain wall caused by screening retardation / A.R. Udalov, A.L. Korzhenevskii, V.Ya. Shur // *Ferroelectrics* – 2017. – V. 508. – № 1. – P. 65–73. 1.0 п.л./0.4 п.л. (Web of science/Scopus)

A4. **Udalov, A.R.** Shape instability of the moving wavy domain wall in uniaxial ferroelectric / A.R. Udalov, V.Ya. Shur, U.A. Alekseeva // *Ferroelectrics* – 2018. – V. 525. – № 1. – P.123–131. 1.0 п.л./0.4 п.л. (Web of science/Scopus)

Другие публикации:

- I. Jerky domain wall motion induced by retardation of screening process / **A.R. Udalov**, A.L. Korzhenevskii, V.Ya. Shur // Abstract book of the international Conference “Piezoresponse Force Microscopy and Nanoscale Phenomena in Polar Materials” (PFM-2014). – Ekaterinburg, Russia. – 14-17 July 2014. – P. 79. – 0.1 п.л./0.05 п.л.
- II. The theoretical study of the jump-like motion of the 180° plane domain wall in ferroelectric / **A.R. Udalov**, V.Ya. Shur, A.L. Korzhenevskii // Abstracts of 13th European Meeting on Ferroelectricity (EMF). – Porto, Portugal – June 28-July 3 2015. – P.12. – 0.1 п.л./0.05 п.л.
- III. Dynamics of domain wall in relaxational crystal / A.L. Korzhenevskii, **A.R. Udalov**, V.Ya. Shur // Abstracts of international Workshop “Modern Nanotechnologies” (IWMN 2015). – Ekaterinburg, Russia. – August 27-29 2015. – I.06. – 0.1 п.л./0.05 п.л.
- IV. About lack of the shape of plane domain wall in uniaxial ferroelectric / **A.R. Udalov**, V.Ya. Shur, A.L. Korzhenevskii // Abstracts of international Workshop “Modern Nanotechnologies” (IWMN 2015). – Ekaterinburg, Russia. – August 27-29 2015. – P.09. – 0.1 п.л./0.05 п.л.
- V. The theoretical study of the jump-like motion of the 180° plane domain wall in ferroelectric / **A.R. Udalov**, V.Ya. Shur, A.L. Korzhenevskii // Abstracts of The Eighth International Seminar on Ferroelastic Physics (ISFP 8). – Voronezh, Russia.– September 13-16 2015. – P.72. – 0.1 п.л./0.05 п.л.
- VI. The theoretical study of the jump-like motion of the 180° plane domain wall in ferroelectric / **A.R. Udalov**, V.Ya. Shur, A.L. Korzhenevskii // Сборник тезисов Третьей Международной молодежной научной конференции «Физика. Технологии. Инновации.» (ФТИ-2016) – Ekaterinburg, Russia. – May 16-20 2016. – P.288. – 0.1 п.л./0.05 п.л.
- VII. Field distribution in the vicinity of the perturbations at the moving plane domain wall / **A.R. Udalov**, V.Ya. Shur, A.L. Korzhenevskii // Abstracts of Second International Workshop Modern Nanotechnology (IWMN-2016) – Ekaterinburg, Russia. – August 27-29 2016. – P.06. – 0.1 п.л./0.05 п.л.
- VIII. The velocity dependence of the electrical field near the moving ferroelectric domain wall / **A.R. Udalov**, V.Ya. Shur // Abstract book of the International Conference “Scanning Probe Microscopy 2017” (SPM-2017). – Ekaterinburg, Russia. – August 28-30 2017. – P-94. – 0.1 п.л./0.05 п.л.