

УДК 537.226.4

СПЕКТР ВРЕМЕН РЕЛАКСАЦИИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ТГС

В.В. Иванов, В.В. Макаров, Е.А. Клевцова

Кафедра физики сегнето- и пьезоэлектриков

Изучались релаксационные временные зависимости диэлектрической проницаемости, возникающие при переключении внешнего постоянного электрического поля. Установлено, что релаксация диэлектрической проницаемости в кристаллах ТГС описывается эмпирическим законом Кольрауша. По экспериментальным данным с помощью метода регуляризации Тихонова был восстановлен спектр распределения времен релаксации. Рассчитана ширина энергетических барьеров ΔU .

Введение. Неэкспоненциальные временные процессы, протекающие в дипольных стеклах, сегнетоэлектрических кристаллах и других сложных структурах при различного рода воздействиях, подтверждают существование в таких системах набора времен релаксации. Поэтому существенным и весьма интересным является поиск функции распределения времен релаксации.

Функция распределения времен релаксации обычно получается из анализа частотных зависимостей диэлектрического отклика. Для упорядоченных систем диэлектрический отклик в пространстве частоты описывается законом Дебая с единственным временем релаксации, тогда как в пространстве времени функция затухания, описывающая поведение диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрического кристалла при наложении на него постоянного электрического поля напряженностью E в самом простом случае (для закона Дебая, с одним временем релаксации) имеет вид обычной экспоненты $\Phi(t) = \exp(-t/\tau_0)$, где $\Phi(t) = [\varepsilon(t) - \varepsilon_0]/(\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty)$.

Методика расчета. В наших предыдущих работах [1-3] было установлено, что спадающие участки релаксационных кривых диэлектрической проницаемости в монокристаллах ТГС, наблюдаемых при коммутации внешнего электрического поля, хорошо аппроксимируются эмпирическим законом Кольрауша:

$$\Phi(t) = \exp(-t/\tau_0)^\alpha. \quad (1)$$

Для набора времен релаксации получаем

$$\Phi(t) = \exp(-t/\tau_0)^\alpha = \int_0^\infty G(\tau) \cdot \exp(-t/\tau), \quad (2)$$

где τ - время, соответствующее элементарному экспоненциальному процессу диэлектрической релаксации; $G(\tau)$ – функция распределения, соответствующая условию нормировки

$$\int_0^\infty G(\tau) d\tau = 1. \quad (3)$$

Для нахождения функции распределения $G(\tau)$ необходимо решить

интегральное уравнение (2). Задача его решения является некорректной, т.е. бесконечно малые вариации функции $\Phi(t)$ приводят к значительным изменениям решения – функции распределения $G(\tau)$ [5].

Запишем (2) в виде операторного уравнения:

$$AG = \int_0^{\infty} G(\tau) \cdot \exp(-t/\tau) d\tau = \Phi(t) \quad (4)$$

Для нахождения устойчивого решения $G(\tau)$ с помощью метода регуляризации Тихонова вводится сглаживающий функционал

$$\Psi_{\alpha} = \int_c^d [AG(\tau) - \Phi(t)]^2 dx + \beta \int_a^b G^2(\tau) d\tau \quad (5)$$

где $\beta > 0$ – параметр регуляризации, причем $\beta = F(\Delta\Phi)$, а $\Delta\Phi$ - ошибка задания $\Phi(t)$, равная

$$\Delta\Phi = \|\tilde{\Phi}(t) - \bar{\Phi}(t)\| = \sqrt{\int_c^d [\tilde{\Phi}(t) - \bar{\Phi}(t)]^2 dt} \quad (6)$$

Из условия минимума функционала Ψ_{α} следует уравнение Эйлера

$$\beta G(t) + \int K(t, \tau) G(\tau) d\tau = \omega(x) \quad (7)$$

где $K(t, \tau) = \int_c^d \exp(-f/\tau) \cdot \exp(-f/t) df$, $\omega(t) = \int \exp(-f/t) \Phi(f) df$.

В результате вместо уравнения первого рода нужно решать уравнение второго рода. При оптимальном выборе значения β решение уравнения (2) будет устойчивым. Параметр β определялся способом невязки, согласно которому значение β выбирается из условия

$$\|AG_{\alpha} - \Phi\| = \Delta\Phi,$$

или

$$\left| \|AG_{\alpha} - \Phi\| - \Delta\Phi \right| = \left| \sqrt{\int_c^d \left[\int_a^b \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \cdot G_{\alpha}(\tau) d\tau - \Phi(t) \right]^2 dt} - \Delta\Phi \right| = \min. \quad (8)$$

Здесь $\Delta\Phi = \sqrt{\int_c^d [\tilde{\Phi}(t) - \bar{\Phi}(t)]^2 dt} = \Delta\Phi_{a\delta c} \sqrt{d-c}$.

Результаты расчета. Для расчета спектров распределения времен релаксации были проведены необходимые расчеты. Функция распределения (рис. 1) является несимметричной по отношению к наиболее вероятному времени релаксации со средним временем, смещенным в сторону больших времен. Из этих зависимостей следует, что уменьшение значения α приводит к увеличению ширины спектра распределения времен релаксации.

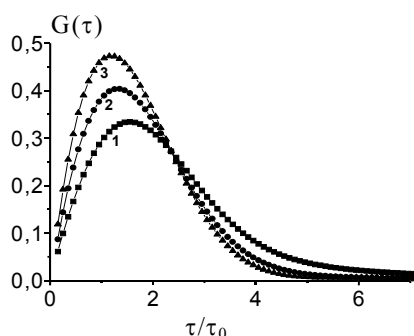


Рис. 1. Вид функции распределения $G(\tau)$ при различных значениях параметра α для кристалла ТГС. $\alpha = 0,2$ (1), $0,5$ (2) и $0,8$ (3)

Из известной функции распределения можно определить еще одну важную характеристику - ширину распределения энергии. Энергия потенциального барьера U , который необходимо преодолеть доменной стенке во время переполяризации образца, согласно закону Аррениуса связана со временем релаксацией формулой $\tau = \tau_0 \cdot \exp(U/kT)$, где τ_0 - кинетический коэффициент; k - постоянная Больцмана; T - абсолютная температура. Из-за отсутствия данных о кинетическом коэффициенте τ_0 мы не можем рассчитать конкретное значение потенциального барьера, отвечающего данному времени релаксации при определенной температуре, однако возможно вычислить ширину распределения энергии $\Delta U = kT \cdot \ln(\tau_2/\tau_1)$, где τ_2 , τ_1 - соответственно максимальное и минимальное значения времени релаксации, при которых функция распределения $G(\tau)$ принимает одинаковые значения, составляющие $0.2 \cdot G_{\max}(\tau)$. Оценка ΔU показала, что ширина распределения энергии в пределах погрешности эксперимента остается практически постоянной для любых значений внешнего коммутируемого поля и равной $\Delta U = 0.080 \pm 0.002$ эВ, что хорошо согласуется с данными, приведенными в работе [4], полученными с помощью другой методики расчета спектров времен релаксации. В связи с этим можно сделать вывод, что величина ΔU является характеристикой степени неоднородности кристалла. Хотя ΔU является величиной, не зависящей от внешнего поля, сам спектр смещается под воздействием поля в сторону малых времен релаксации.

Литература

1. Иванов В.В., Колышева М.В., Макаров В.В. Диэлектрическая релаксация в кристаллах ТГС и ДТГС при коммутации внешнего электрического поля // Тез. докл. межд. конф. "Релаксационные явления в твердых телах". Воронеж, 1998. С. 260-261.
2. Иванов В.В., Макаров В.В., Колышева М.В. Диэлектрическая релаксация в кристаллах триглицинсульфата (ТГС) // Тез. докл. VI Всерос. научной конф. студентов-физиков и молодых ученых. Томск, С. 168-170.
3. Ivanov V.V., Kolyshcheva M.V., Klevtsova E.A. On the Relaxation of Macroscopic Polarization in DTGS Crystals // Ferroelectrics. 2000. P. 65.
4. Гладкий В.В., Кириков В.А., Иванова Е.С. Медленная релаксация полидоменного сегнетоэлектрика в слабых электрических полях // ФТТ. 1997. Т. 39. С. 353-357.
5. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М., 1986.