Archive of SID

بررسی لایه‌های فروالکتریک به وسیله مدل آیزینگ در یک میدان عرضی

صابر فرجامی شایسته و محمدعلی سلیمانی: دانشگاه گیلان

چکیده

فیلم‌های فروالکتریک را با استفاده از مدل آیزینگ در یک میدان عرضی، تحت تقریب میدان متوسط مورد بحث و بررسی قرار داده‌ایم. فیلمN لایه‌ای با تقارن مکعبی ساده و برهمکنش نزدیکترین همسایه را در نظر می‌گیریم، و چنان فرض می‌کنیم که قدرت تبادل شبه اسپین‌ها و میدان عرضی لایه‌های سطحی نسبت به لایه‌های کپه‌ای متفاوت باشد. ما با این مدل روابط واضحی برای دیاگرام‌های فاز، نیمرخ پارامتر نظم به دست می‌آوریم. در چنین فیلم‌هایی دمای کوری فیلم نسبت به دمای کوری کپه می‌تواند به هرمقدار بالاتر یا پائین‌تر منتقل شود. اگر قدرت تبادلی شبه اسپین‌های سطحی به اندازه کافی بزرگ باشد، حتی وقتی مقدار میدان عرضی بزرگتر از حالت بحرانی شود، هنوز گذار فاز به حالت فروالکتریک وجود دارد. در فیلم‌هایی با قطبش سطحی افزایش یافته و $N_s \geq 2$ ماکزیمم پارامتر نظم در لایه‌های مجاور بیرونی‌ترین لایه سطحی رخ می‌دهد.

مقدمه

اثرات اندازه و سطح روی گذارفاز فیلم‌های نازک فروالکتریک مدتهاست که مورد بررسی واقع شده است، اما به دلیل تنوع مواد فروالکتریک و دشواری آماده سازی نمونه‌های تک بلور با کیفیت بالا، تهیه گزارش‌های جامع و مفید سخت است. فروالکتریک‌های نوع پتاسیم دی هیدروژن فسفات (KDP) موضوع مطالعه ماست. این نوع فروالکتریک‌ها را می‌توان به وسیله یک مدل شبه اسپینی به نام مدل آیزینگ در یک میدان عرضی(TIM) بررسی کرد. اثرات سطوح روی دمای کوری و طیف برانگیخته موج شبه اسپین به وسیله «بلینک وزکس در ۱۹۷٤»[۱] و «کتام و همکاران در ۱۹۸٤»[۲] جستجو شده است و در اغلب این بحثها از سیستم نیمه متناهی استفاده کرده‌اند. تغییر شکل سطح، قدرت تبادلی سطح را نشان می‌دهد؛ اما درکارهای اخیر وابستگی دمای کوری به ضخامت (تعداد لایه های اتمی) یک فیلم نازک به خوبی با تغییر سطح و ثابت تبادلی و میدان عرضی، با استفاده از تئوری میدان متوسط[۳] و تئوری اثر میدان[٤] بررسی شده است.به عنوان مثال، خواص مغناطیسی فیلم‌های TIM روی یک شبکه مکعبی مرکز حجمی (BCC) به وسیله تئوری اثر میدان در

واژه های کلیدی : مدل آیزینگ ، تقریب میدان متوسط، دیاگرام فاز و پارامتر نظم، دمای کوری، قدرت تبادلی، میدان عرضی.

www.SID.ir

Archive of SID

۱۹۹۲ توسط ونگ تحقیق شده است[۵]. در این کارها فرض شده است که پارامترهای مدل (قدرت تبادلی و میدان عرضی)، تنها درخارجی‌ترین لایه‌های سطحی با مقادیرکپه‌ای تفاوت دارند. در اینجا بحث اصلی بررسی اثر تغییرات دمای کوری روی گذار فاز و نیمرخهای قطبش یک فیلم نازک فروالکتریک است.

۱- مبانی تئوری و هامیلتونی مدل آیزینگ

یک فیلم فروالکتریک با شبه اسپین‌هایی را که روی شبکه‌ای مکعبی و ساده قرار گرفته و از N لایه اتمی در جهت محور Z تشکیل شده است در نظر می‌گیریم. سیستم را می‌توان به وسیله هامیلتونی آیزینگ در یک میدان عرضی، به شکل زیر توصیف کرد [۱]:

$$H = -\sum_i \Omega_i S_i^x - \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z \qquad (۱)$$

در اینجا S_i^x و S_i^z مولفه‌های عملگر اسپین $\frac{1}{2}$ در جایگاه i ام هستند که قطبش موضعی P_i با متوسط گرمایی S_i^z متناسب است و Ω_i میدان عرضی است که برای فروالکتریک‌هایی که دارای پیوند هیدروژنی هستند، توانایی یک پروتون به تونل زنی از وضعیتی به وضعیت دیگر را نشان می‌دهد، و J_{ij} توانایی تبادل بین شبه اسپینهای مکانهای iام و j ام است که i و j روی همه نقاط شبکه اعتبار دارند. فرض می‌کنیم Ω_i برای لایه‌های اتمی سطحی Ω_s و در سایر جاها Ω باشد و قدرت برهمکنش نزدیکترین همسایه برای هر دو شبه اسپین در لایه‌های سطحی J_s و در سایر جاها J باشد.

در شکل (۱) نمودار طرحوار قدرت تبادلی ومیدان عرضی فیلم‌های با یک لایه سطحی (الف) و دو لایه سطحی (ب) نشان داده شده است، N_s تعداد لایه‌های سطحی در مرز و N تعداد کل لایه‌های فیلم را نشان می‌دهد.

خواص آماری هامیلتونی رابطه (۱) را با استفاده از تقریب میدان متوسط بررسی می‌کنیم.با مشتق گیری از متوسط حرارتی رابطه (۱) متوسط حرارتی شبه اسپینها $R_i=<S_i>$ به صورت رابطه زیر داده می‌شود [۲]:

$$R_i = < S_i > = \frac{1}{2}\frac{\varepsilon_i^z}{|\varepsilon_i|}\tanh[\frac{|\varepsilon_i|}{2K_B T}] \qquad (۲)$$

که در اینجا ε_i میدان متوسطی است که روی اسپین i ام عمل می‌کند.

$$|\varepsilon_i| = [\Omega_i^2 + (\sum_j J_{ij} < S_j^2 >)^2]^{1/2} \qquad (۳)$$

برای یک فیلم نازک فروالکتریک با دو لایه سطحی متوسط حرارتی اسپین‌ها را از روابط زیر به دست می‌آوریم. برای لایه‌های سطحی داریم:

$$R_1 = \frac{4J_s R_1 + J_s R_2}{2L_1}.\tanh\frac{L_1}{2k_B T} \qquad (۴)$$

www.SID.ir

Archive of SID

$$R_2 = \frac{4J_sR_2 + J_sR_1 + JR_3}{2L_2}.\tanh\frac{L_2}{2k_BT} \qquad (۵)$$

و برای لایه‌های توده‌ای

$$R_n = \frac{4JR_n + JR_{n-1} + JR_{n+1}}{2L_n}.\tanh\frac{L_n}{2k_BT} \qquad (۶)$$

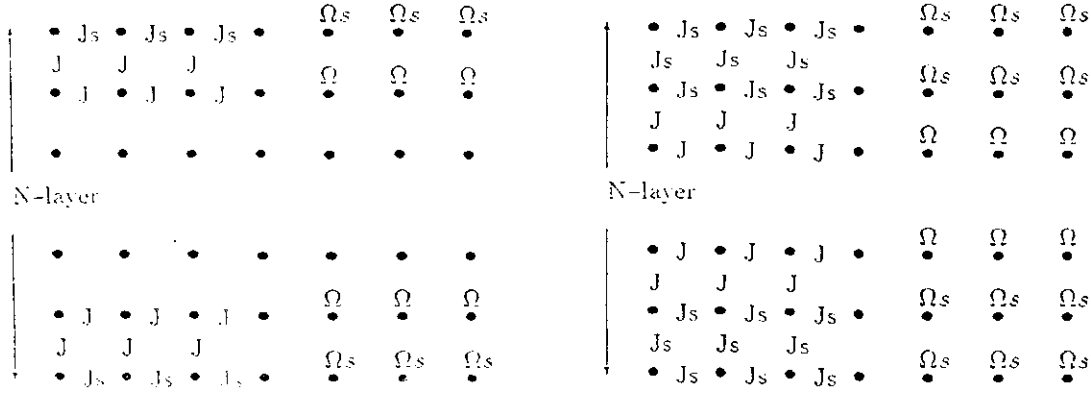
که در روابط فوق داریم.

$$L_1 = \sqrt{\Omega_s^2 + (4J_sR_1 + J_sR_2)^2} \qquad (۷)$$

$$L_2 = \sqrt{\Omega_s^2 + (4J_sR_2 + J_sR_1 + JR_3)^2} \qquad (۸)$$

$$L_n = \sqrt{\Omega^2 + (4JR_n + JR_{n-1} + JR_{n+1})^2} \qquad (۹)$$

اغلب محاسبات بعدی بر پایه، معادلات فوق، یا مشابه آنها، برای فیلم‌هایی با تعداد لایه‌های سطحی بیشتر از ۲ هستند. لازم به ذکر است که قطبش سطحی متناسب با R_n است.



شکل ۱ نمودار طرحوار قدرت تبادلی و میدان عرضی در (الف) مدل یک لایه سطحی (ب) دو لایه سطحی

۲ ـ دمای کوری و دیاگرام‌های فاز

وقتی از دماهای پایین به دمای کوری T_c نزدیک می‌شویم؛ متوسط حرارتی اسپین‌ها به صفر میل می‌کنند. از آنجا که جملات مرتبه بالاتر R_n سریعتر صفر می‌شوند، لذا در دمای T_c تنها جملات خطی R_n را نگه می‌داریم. اگر روابط (٤) تا (٦) را برای T_c بنویسیم، به دستگاه معادلات زیر می‌رسیم.

$$(4\frac{J_s}{J} - X_s)R_1 + \frac{J_s}{J}R_2 = 0 \qquad (۱۰)$$

$$\frac{J_s}{J}R_1 + (4\frac{J_s}{J} - X_s)R_2 + R_3 = 0 \qquad (۱۱)$$

$$R_{n-1} + (4 - X)R_n + R_{n+1} = 0 \qquad (۱۲)$$

www.SID.ir

Archive of SID

که در معادلات فوق

$$X = \frac{2\Omega}{J} Coth(\frac{\Omega}{2K_B T_c}) \quad (۱۳)$$

$$X_S = \frac{2\Omega_s}{J} Coth(\frac{\Omega_s}{2K_B T_c}) \quad (۱٤)$$

دمای کوری فیلم T_c (J_s, Ω_s, Ω) را می‌توان از این شرط که در دستگاه معادلات همگن برای داشتن جواب غیرصفر باید دترمینان ضرایب صفر شود، به دست آورد. با دنبال کردن عبارات می‌توان دمای کوری یک فیلم N لایه‌ای با تعداد لایه‌های سطحی متفاوت را به دست آورد.

برای یک لایه سطحی (N_S=1)

$$(X_s - \frac{4J_s}{J})B_{M-1} - B_{M-2} = 0 \quad (۱٥)$$

و برای دو لایه سطحی (N_S=2)

$$[(X_s - \frac{4J_s}{J})^2 - (\frac{J_s}{J})^2]B_{M-2} - (X_s - \frac{4J_s}{J})B_{M-3} = 0 \quad (۱٦)$$

در این معادلات برای فیلم‌هایی با تعداد لایه های زوج ($M = \frac{N}{2}$)

$$B_M = \frac{Sinh[(M+1)\Phi] - Sinh[M\Phi]}{Sinh\Phi} \quad (۱۷)$$

و برای فیلم‌هایی با تعداد لایه‌های فرد ($M = \frac{(N+1)}{2}$)

$$B_M = 2Cosh[M\Phi] \quad (۱۸)$$

که در این روابط داریم:

$$Cosh\Phi = \frac{X-4}{2} \quad (۱۹)$$

وقتی X-4 < 2 باشد معادلات فوق هنوز حفظ می‌شوند؛ اما توابع هیپربولیک به توابع مثلثاتی تبدیل می‌شوند.به منظور به دست آوردن دیدی کلی از دیاگرام‌های فاز رهیافت سارمنتو و تاکر در ۱۹۹۳ را دنبال می‌کنیم[٤].

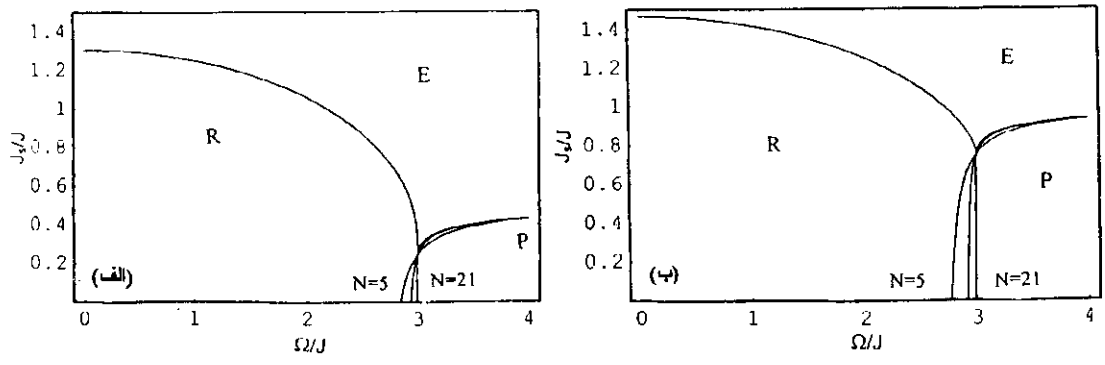
دیاگرام فاز را در صفحه $(\frac{J_s}{J}, \frac{\Omega}{J})$ برای N_S و $\frac{\Omega_s}{J}$ مختلف به صورت پارامتری رسم می‌کنیم. برای تشخیص سه ناحیه دیاگرام‌های فاز، فاز پارالکتریک را با P ، فاز فروالکتریک با قطبش سطحی کاهش یافته را با R که در این حالت $T_c(film) < T_c(bulk)$ و فاز فروالکتریک با قطبش سطحی افزایش یافته را با E که در این حالت $T_c(film) > T_c(bulk)$ نشان می‌دهیم. نمودارهای دیاگرام فاز به ازای $T=T_c$ و برای تعداد لایه‌های سطحی N_S مختلف از معادلات (۱٥) و (۱٦) به دست می‌آیند. این نمودارها دارای دو شاخه هستند. شاخه اول که مرز میان R و E و مستقل از ضخامت فیلم (تعداد لایه‌های اتمی) است، به ازای x=6 و

www.SID.ir

Archive of SID

$T_c(film)=T_c(bulk)$ و رابطه (۱)، $\Phi=0$ می شود و در نتیجه با توجه به معادلات (۱۷) و (۱۸) B_m ها مستقل از N می‌شوند. بنابراین مرز R/E مستقل از ضخامت فیلم است؛ در حالی که مرز R/P وابسته به ضخامت فیلم است وبا افزایش ضخامت به سمت ناحیه p جا به جا می‌شود.

شکل (۲) دیاگرامهای فاز فیلم‌هایی با یک لایه سطحی ($N_s=1$) را برای دو مقدار متفاوتΩ_s/J را نشان می‌دهد. به منظور بحث در این منحنی‌ها معادله هامیلتونی (۱) را فراخوانی می‌کنیم. میدان تونلی Ω اساسا یک عامل بی نظمی در سیستم است. از این روچنانکه Ω افزایش می‌یابد، دمای کوری T_c کم می‌شود؛ به طوریکه برای $\frac{\Omega}{J}=3$ دمای کوری صفرخواهد شد. پس با توجه به اثر میدان تونلی در ناحیه $\Omega > \Omega_s$ نظم سطحی بهتر از نظم کپه است و برای $\Omega < \Omega_s$ برعکس.با بزرگ شدن $\frac{J_s}{J}$ نظم سطحی بهتر می‌شود، به طوری که اگر $\frac{J_s}{J}$ به اندازه کافی بزرگ شود، اثر کاهش تعداد مختصات در لایه سطحی را جبران می‌کند.

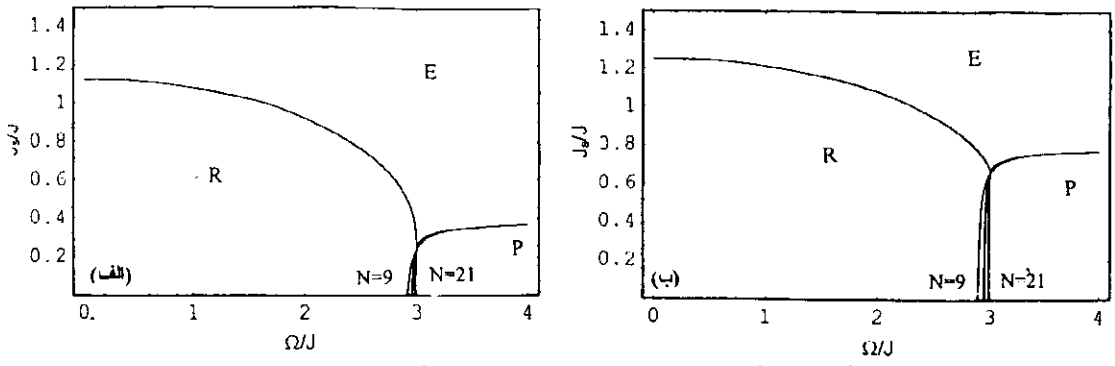


شکل ۲. دیاگرامهای فاز در صفحه $(\Omega_s/J,J_s/J)$ برای فیلم‌های با یک لایه سطحی ($N_s=1$) که در آن R مربوط به فاز گاهش یافته ($T_c(film) < T_c(bulk)$) و E مربوط به فاز افزایش یافته($T_c(film) > T_c(bulk)$) و P فاز پاراالکتریک است. (الف) $\Omega_s/J=1$ (ب) $\Omega_s/J=2$

افزایش تعداد لایه باعث جا به جایی مرز R/P به سمت ناحیه پارالکتریک می‌شود. در شکل (الف-۲) برای Ω های کوچک مقدار $\frac{J_s}{J}$ در مرز R/E به گونه‌ای است که کاهش تعداد مختصات در لایه سطحی و همچنین کوچکی Ω_s را برآورد می‌کند. با افزایش Ω و در نتیجه گاهش $T_c(bulk)$، مرز R/E به سمت مقادیر کوچک $\frac{J_s}{J}$ جابجا می‌شود و برآمدگی جزئی آن از این حقیقت که Ω_s ثابت نگه داشته شده ناشی می‌شود، درشکل(ب-۲) دیده می‌شود که برای Ω های کوچک با بزرگ شدن Ω_s، مقدار $\frac{J_s}{J}$ برای گذار R/E افزایش می‌یابد. همانطور که انتظار می‌رود، افزایش Ω_s باعث کاهش نظم سطحی شده و در نتیجه تمام منحنی مرزی R/E به سمت مقادیر بزرگتر $\frac{J_s}{J}$ جا به جا می‌شود.نمودارهای مربوط به فیلمهای دو لایه سطحی درشکل (۳) نشان داده شده است.با مقایسه با شکل(۲) از آنجا که تعداد لایه‌های سطحی کسر بزرگتری از حجم کل فیلم را تشکیل می‌دهند، منحنی‌های مرزی به سمت مقادیر کوچکتر $\frac{J_s}{J}$ حرکت می‌کنند.

www.SID.ir

Archive of SID



شکل ۳. دیاگرامهای فاز در صفحه $(\Omega_s/J, J_s/J)$ برای فیلم های با دو لایه سطحی $(N_s= ۲)$. (الف) $\Omega_s/J=۱$ (ب) $\Omega_s/J=۲$

۳ – بررسی نیمرخ‌های قطبش در لایه‌های نازک فروالکتریک

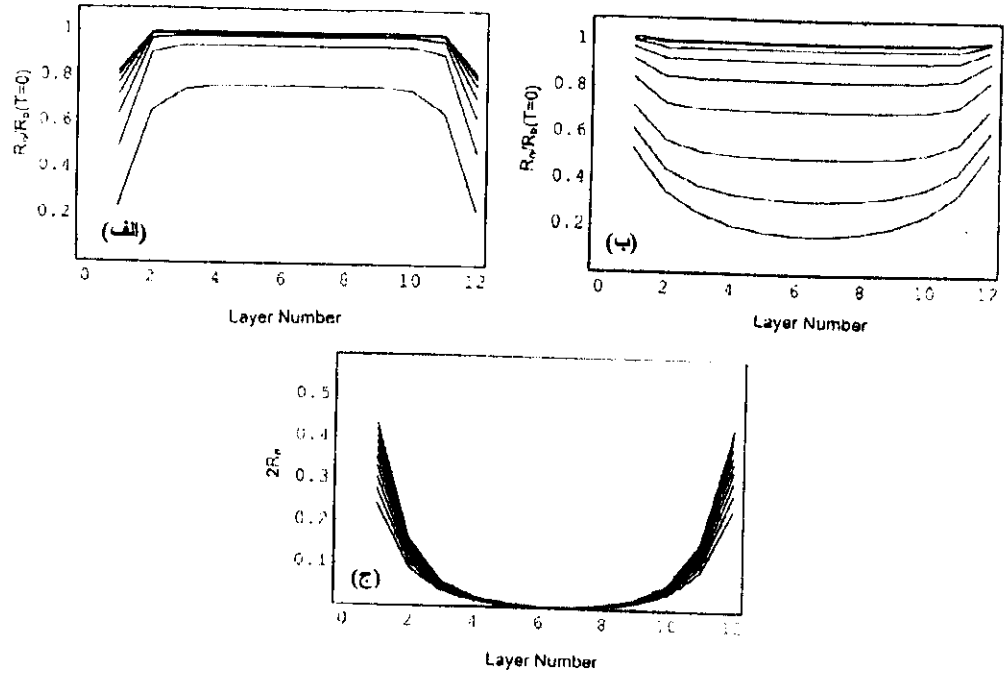
مقدارموضعی قطبش در فیلم‌های فروالکتریک با کمیت بدون بُعد R_n که درمعادله (۲) تعریف شده، متناسب است و معادلات (٤) تا (۹) را برای $N_s=2$ برآورد می‌کند. این معادلات را می‌توان به طور عددی حل کرده و نمودارهای R_n بر حسب n را رسم کرد. این جواب‌ها معادل منفصل نیمرخ‌های پارامتر نظم هستند، که از تئوری پیوستگی کتام و همکارانش [۵] در ۱۹۸۴ و تیلی[۶] در ۱۹۹۳ به دست آمده‌اند. برای رسم نیمرخ‌های قطبش به روش عددی، حل تقریبی معادلات (٤) تا (۹) را از طریق الگوریتم نیوتون - رافسون به دست می‌آوریم. در این روش شروع حل در پایین‌ترین دم حدس زده می شود و متعاقباً در دمای داده شده حل خود سازگاری از دمای پیشین به دست می‌آید . تغییرات دما را به صورت نسبت $\frac{T}{T_c(film)}$ در نظر می‌گیریم.

شکل (۴) نیمرخ‌های قطبش را برای یک فیلم دوازده لایه‌ای و برای $N_s=1$ (فیلم‌هایی با یک لایه سطحی) نشان می‌دهد هرسه نمودار برای $\frac{\Omega_s}{J}=1$ که مربوط به دیاگرام فاز(۲-الف) می‌شود، رسم شده‌اند. پارامترهای نمودار(٤-الف) مربوط به نقطه‌ای درناحیهR (قطبش سطحی کاهش یافته) دیاگرام فاز شکل(۲-الف) است، با توجه به شکل (۴) قطبش درسطح فیلم در همه دماها به پایین منحرف شده است. انحنای قطبش مرکز فیلم تنها درنزدیکی دمای کوری قابل تشخیص است. نمودار(٤-ب) برای نقطه‌ای درناحیه E (قطبش سطحی افزایش یافته) دیاگرام فاز است، که مقدار R_n در نزدیکی سطح افزایش یافته است. نمودار(٤-ج) نیز برای نقطه دیگری درناحیه E دیاگرام فازکه درآنجا $\frac{\Omega}{J}>3$ است، رسم شده است، که دراین مورد در کپه فاز پاراالکتریک محسوس است. اثرافزایش تعداد لایه‌های سطحی باعث انتقال ماکزیمم قطبش به زیرلایه‌های n=2 و n=11 می‌شود. کاهش قطبش در لایه‌های سطحی n=1 و n=12 مربوط به اثر کاهش تعداد مختصات در سطح است. درفیلم‌های با دو لایه سطحی انحنای قطبش مرکزفیلم از مقادیر توده‌ای بیشتر است. مشاهده می‌شود و R_n تنها در نزدیکی سطوح مقدار قابل توجهی دارد.نمودارهای مربوط به حالت دو لایه سطحی $N_s=2$ درشکل (۵) نشان

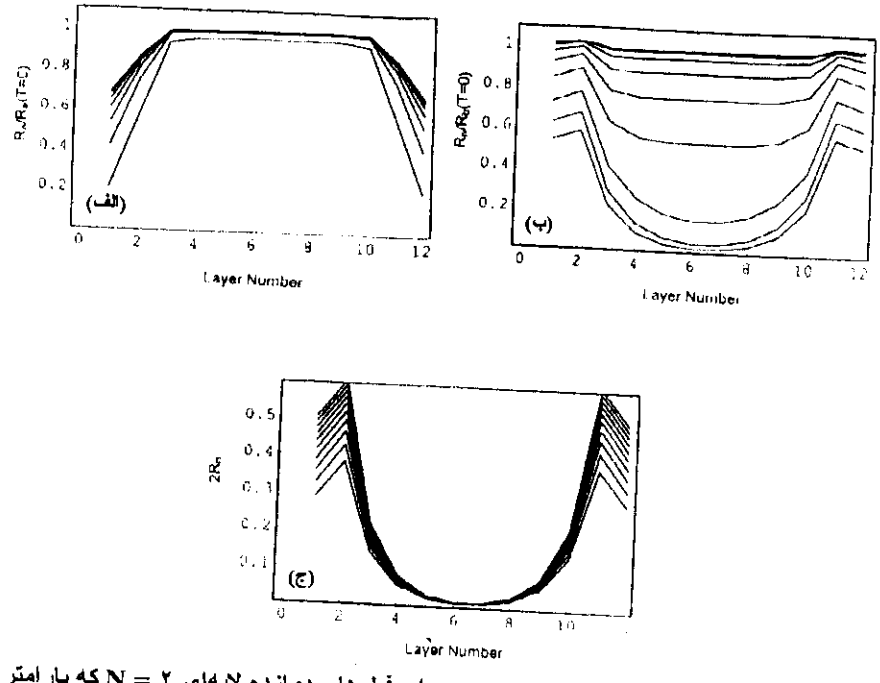
www.SID.ir

Archive of SID

داده شده است. تفاوت شکل (۵) با شکل (۴) بیشتر در منحنی ناحیه E (شکل ۵-الف و ب) منعکس است.



شکل ٤. نیمرخ های پارامتر نظم R_n بر حسب n برای یک فیلم دوازده لایه ای با $N_s=1$ که پارامترها به صورت (الف) $J_S/J=0.5, \Omega_S/J=1$ ، (ب) $J_S/J=1, \Omega_S/J=1$ و (ج) $J_S/J=1.5, \Omega_S/J=1$ است. در (الف) و (ب) R_oمقدار R برای مواد کپه ای در دمای صفر است و در (ج) محور قائم $2R_n$ است. منحنی ها مربوط به تسبت دماهای ۹/. و ۸/. و غیره $(\frac{T}{T_c(film)})$ است. پائین ترین منحنی مربوط به بالاترین نسبت دما است.



شکل ٥. نیمرخ‌های پارامتر نظم و R_n بر حسب n برای فیلم‌های دوازده لایه‌ای ۲ $=N_s$ که پارامترهای شکل‌های (الف، ب و ج) همان پارامترهای شکل (٤) است

www.SID.ir

Archive of SID

نتیجه گیری

ما تئوری میدان متوسط را برای فیلم‌های نازک فروالکتریک که با استفاده از مدل آیزینگ توصیف شده‌اند، بسط داده‌ایم و عبارات کلی دمای کوری را برای پارامترهای مختلف مدل به دست آورده‌ایم. در اینجا مشاهده می‌شود که دیاگرام‌های فازدارای سه ناحیه هستند. فار فروالکتریک با قطبش سطحی کاهش یافته R، فاز فروالکتریک با قطبش سطحی افزایش یافته E و فاز پاراالکتریک که مرزی بین R و E مستقل از ضخامت فیلم است. اما مرز بین فاز فروالکتریک و پاراالکتریک وابسته به ضخامت است و با افزایش ضخامت به سمت ناحیه پارالکتریک جا به جا می‌شود. وقتی قدرت تبادل سطحی خیلی قوی است، حتی جایی که هیچ گذار فاز کپه‌ای وجود ندارد هنوز گذار فاز در فیلم‌ها دیده می‌شود. برای فاز فروالکتریک با قطبش سطحی کاهش یافته همواره قطبش در سطح به سمت پایین خمیده می‌شود و همانطور که تعداد لایه‌های سطحی افزایش می‌یابد قطبش لایه‌های داخلی‌تربه پایین خمیده می‌شود. برای فاز فروالکتریک با قطبش سطحی افزایش یافته درفیلمی با یک لایه سطحی ماکزیمم قطبش درخارجی‌ترین لایه سطحی دیده می‌شود، اما وقتی که تعداد لایه‌های سطحی بیشتر از یکی می‌شود این ماکزیمم قطبش به لایه دوم منتقل می‌شود. دلیل آن رقابت تعداد مختصات و قدرت تبادلی شبه اسپین‌ها است.

تشکر و قدر دانی

بدینوسیله از زحمات جناب آقای دکتر نجفی معاونت محترم پژوهشی دانشکده علوم در رابطه با پی گیرهای لازم جهت تهیه امکانات برای انجام تحقیقات تشکر و قدردانی به عمل می‌آید.

مراجع

1. R. Blinc and B. Zeks, Soft Modes in Ferroelectrics and Antiferroelectris (Amsterdam: North-Holland) (1974).
2. M.G. Cottam, D. R. Tilley and B. Zeks, J.Phys. C: Solid State Phys. Vol.17, (1984) 1793.
3. H. K. Sy, J.Phys.: Condens. Matter 5, (1993) 1213
4. E. F. Sarmento and J.W. Tucker, J.Magen.Magen.Mater.118, (1993) 133.
5. Wang Xuan-Zhang, Jian Xiv-Ye and Wang Jaing-Jv, J. Phys.:Condens.Matter 4 (1992) 3651.
6. D.R. Tilley, Ferroelectric Ceramics de N Setter and E L Colla (Basel: Birkhauser) (1993)163.

www.SID.ir