بررسي لايه‌هاي فروالكتريك به وسيله مدل آيزينگ در يك ميدان عرضي

صابر فرجامي شايسته و محمدعلي سليماني: دانشگاه گيلان

چكيده

فيلم‌هاي فروالكتريك را با استفاده از مدل آيزينگ در يك ميدان عرضي, تحت تقريب ميدان متوسط مورد بحث و بررسي قرار داده‌ايم. فيلمN لايه‌اي با تقارن مكعبي ساده و برهمكنش نزديكترين همسايه را در نظر مي‌گيريم, و چنان فرض مي‌كنيم كه قدرت تبادل شبه اسپين‌ها و ميدان عرضي لايه‌هاي سطحي نسبت به لايه‌هاي كپه‌اي متفاوت باشد. ما با اين مدل روابط واضحي براي ديا‌گرام‌هاي فاز, نيمرخ پارامتر نظم به دست مي‌آوريم. در چنين فيلم‌هايي دماي كوري فيلم نسبت به دماي كوري كپه مي‌تواند به هرمقدار بالاتريا پائين‌تر منتقل شود. اگر قدرت تبادلي شبه اسپين‌هاي سطحي به اندازه كافي بزرگ باشد, حتي وقتي مقدار ميدان عرضي بزرگتر از حالت بحراني شود, هنوز گذار فاز به حالت فروالكتريك وجود دارد. در فيلم‌هايي با قطبش سطحي افزايش يافته و $N_s \geq 2$ ماكزيمم پارامتر نظم در لايه‌هاي مجاور بيروني‌ترين لايه سطحي رخ مي‌دهد.

مقدمه

اثرات اندازه و سطح روي گذارفاز فيلم‌هاي نازك فروالكتريك مدتهاست كه مورد بررسي واقع شده است, اما به دليل تنوع مواد فروالكتريك و دشواري آماده سازي نمونه‌هاي تك بلور با كيفيت بالا, تهيه گزارش‌هاي جامع و مفيد سخت است. فروالكتريك‌هاي نوع پتاسيم دي هيدروژن فسفات (KDP) موضوع مطالعه ماست. اين نوع فروالكتريك‌ها را مي‌توان به وسيله يك مدل شبه اسپيني به نام مدل آيزينگ در يك ميدان عرضي(TIM) بررسي كرد. اثرات سطوح روي دماي كوري و طيف برانگيخته موج شبه اسپين به وسيله «بلينك وزكس در ۱۹۷٤»[۱] و «كتام و همكاران در ۱۹۸٤»[۲] جستجو شده است و در اغلب اين بحثها از سيستم نيمه متناهي استفاده كرده‌اند. تغيير شكل سطح، قدرت تبادلي سطح را نشان مي‌دهد؛ اما دركارهاي اخير وابستگي دماي كوري به ضخامت (تعداد لايه هاي اتمي) يك فيلم نازك به خوبي با تغيير سطح و ثابت تبادلي و ميدان عرضي، با استفاده از تئوري ميدان متوسط[۳] و تئوري اثر ميدان[٤] بررسي شده است.به عنوان مثال، خواص مغناطيسي فيلم‌هاي TIM روي يك شبكه مكعبي مركز حجمي (BCC) به وسيله تئوري اثر ميدان در

واژه هاي كليدي : مدل آيزينگ , تقريب ميدان متوسط, ديا‌گرام فاز و پارامتر نظم, دماي كوري, قدرت تبادلي, ميدان عرضي.

[Downloaded from jsci.khu.ac.ir on 2024-04-20]

۱۹۹۲ توسط ونگ تحقيق شده است[۵]. در اين كارها فرض شده است كه پارامترهاي مدل (قدرت تبادلي و ميدان عرضي)، تنها درخارجي‌ترين لايه‌هاي سطحي با مقاديركپه‌اي تفاوت دارند. در اينجا بحث اصلي بررسي اثر تغييرات دماي كوري روي گذار فاز و نيمرخهاي قطبش يك فيلم نازك فروالكتريك است.

۱ – مباني تئوري و هاميلتوني مدل آيزينگ

يك فيلم فروالكتريك با شبه اسپين‌هايي را كه روي شبكه‌اي مكعبي و ساده قرار گرفته و از N لايه اتمي در جهت محور Z تشكيل شده است در نظر مي‌گيريم. سيستم را مي‌توان به وسيله هاميلتوني آيزينگ در يك ميدان عرضي، به شكل زير توصيف كرد [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 اينجا S_i^x و S_i^z مولفه‌هاي عملگر اسپين $\frac{1}{2}$ در جايگاه i ام هستند كه قطبش موضعي P_i با متوسط گرمايي S_i^z متناسب است و Ω_i ميدان عرضي است كه براي فروالكتريك‌هايي كه داراي پيوند هيدروژني هستند، توانايي يك پروتون به تونل زني از وضعيتي به وضعيت ديگر را نشان مي‌دهد, و J_{ij} توانايي تبادل بين شبه اسپينهاي مكانهاي iام و j ام است كه i و j روي همه نقاط شبكه اعتبار دارند. فرض مي‌كنيم Ω_i براي لايه‌هاي اتمي سطحي Ω_s و در ساير جاها Ω باشد و قدرت برهمكنش نزديكترين همسايه براي هر دو شبه اسپين در لايه‌هاي سطحي J_s و در ساير جاها J باشد.

در شكل (۱) نمودار طرحوار قدرت تبادلي وميدان عرضي فيلم‌هاي با يك لايه سطحي (الف) و دو لايه سطحي (ب) نشان داده شده است، N_s تعداد لايه‌هاي سطحي در مرز و N تعداد كل لايه‌هاي فيلم را نشان مي‌دهد.

خواص آماري هاميلتوني رابطه (۱) را با استفاده از تقريب ميدان متوسط بررسي مي‌كنيم.با مشتق گيري از متوسط حرارتي رابطه (۱) متوسط حرارتي شبه اسپينها $R_i=<S_i>$ به صورت رابطه زير داده مي‌شود [۲]:

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

كه در اينجا ε_i ميدان متوسطي است كه روي اسپين i ام عمل مي‌كند.

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

براي يك فيلم نازك فروالكتريك با دو لايه سطحي متوسط حرارتي اسپين‌ها را از روابط زير به دست مي‌آوريم. براي لايه‌هاي سطحي داريم:

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

[Downloaded from jsci.khu.ac.ir on 2024-04-20]

$$R_2 = \frac{4J_sR_2 + J_sR_1 + JR_3}{2L_2}.\tanh\frac{L_2}{2k_BT} \qquad (٥)$$

و براي لايه‌هاي توده‌اي

$$R_n = \frac{4JR_n + JR_{n-1} + JR_{n+1}}{2L_n}.\tanh\frac{L_n}{2k_BT} \qquad (٦)$$

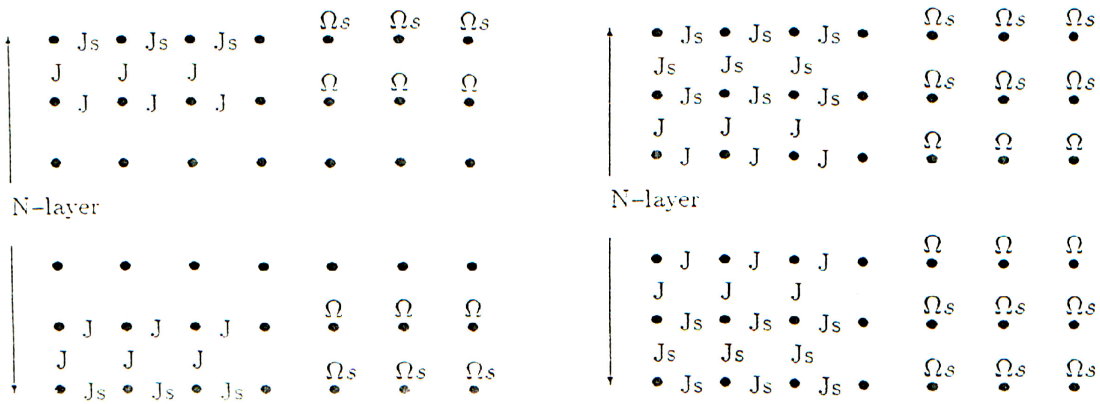
كه در روابط فوق داريم.

$$L_1 = \sqrt{\Omega_s^2 + (4J_sR_1 + J_sR_2)^2} \qquad (٧)$$

$$L_2 = \sqrt{\Omega_s^2 + (4J_sR_2 + J_sR_1 + JR_3)^2} \qquad (٨)$$

$$L_n = \sqrt{\Omega^2 + (4JR_n + JR_{n-1} + JR_{n+1})^2} \qquad (٩)$$

اغلب محاسبات بعدي برپايه، معادلات فوق، يا مشابه آنها، براي فيلم‌هايي با تعداد لايه‌هاي سطحي بيشتر از ٢ هستند. لازم به ذكر است كه قطبش سطحي متناسب با R_n است.



شكل ١ نمودار طرحوار قدرت تبادلي و ميدان عرضي در (الف) مدل يك لايه سطحي (ب) دو لايه سطحي

٢ – دماي كوري و دياگرام‌هاي فاز

وقتي از دماهاي پايين به دماي كوري T_c نزديك مي‌شويم؛ متوسط حرارتي اسپين‌ها به صفر ميل مي‌كنند. از آنجا كه جملات مرتبه بالاتر R_n سريعتر صفر مي‌شوند، لذا در دماي T_c تنها جملات خطي R_n را نگه مي‌داريم. اگر روابط (٤) تا (٦) را براي T_c بنويسيم، به دستگاه معادلات زير مي‌رسيم.

$$(4\frac{J_s}{J} - X_s)R_1 + \frac{J_s}{J}R_2 = 0 \qquad (١٠)$$

$$\frac{J_s}{J}R_1 + (4\frac{J_s}{J} - X_s)R_2 + R_3 = 0 \qquad (١١)$$

$$R_{n-1} + (4 - X)R_n + R_{n+1} = 0 \qquad (١٢)$$

[Downloaded from jsci.khu.ac.ir on 2024-04-20]

كه در معادلات فوق

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

$$X_5 = \frac{2\Omega_s}{J} Coth(\frac{\Omega_s}{2K_B T_c}) \quad (۱٤)$$

دماي كوري فيلم T_c (J_s, Ω_s, Ω) را مي‌توان از اين شرط كه در دستگاه معادلات همگن براي داشتن جواب غيرصفر بايد دترمينان ضرايب صفر شود, به دست آورد. با دنبال كردن عبارات مي‌توان دماي كوري يك فيلم N لايه‌اي با تعداد لايه‌هاي سطحي متفاوت را به دست آورد.

براي يك لايه سطحي (N_s=1)

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

و براي دو لايه سطحي (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 اين معادلات براي فيلم‌هايي با تعداد لايه هاي زوج ($M = \frac{N}{2}$)

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

و براي فيلم‌هايي با تعداد لايه‌هاي فرد ($M = \frac{(N+1)}{2}$)

$$B_M = 2Cosh[M\Phi] \quad (۱۸)$$

كه در اين روابط داريم:

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

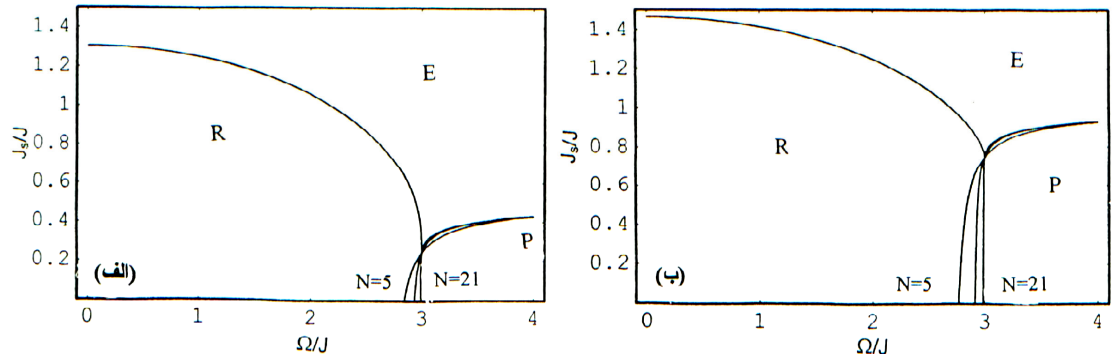
وقتي $2 > X-4$ باشد معادلات فوق هنوز حفظ مي‌شوند؛ اما توابع هيپربوليك به توابع مثلثاتي تبديل مي‌شوند.به منظور به دست آوردن ديدي كلي از دياگرام‌هاي فاز رهيافت سارمنتو و تاكر در ۱۹۹۳ را دنبال مي‌كنيم[٤].

دياگرام فاز را در صفحه $(\frac{J_s}{J}, \frac{\Omega}{J})$ براي N_s و $\frac{\Omega_s}{J}$ مختلف به صورت پارامتري رسم مي‌كنيم. براي تشخيص سه ناحيه دياگرام‌هاي فاز, فاز پاراالكتريك را با P , فاز فروالكتريك با قطبش سطحي كاهش يافته را با R كه در اين حالت $T_c(film) < T_c(bulk)$ و فاز فروالكتريك با قطبش سطحي افزايش يافته را با E كه در اين حالت $T_c(film) > T_c(bulk)$ نشان مي‌دهيم. نمودارهاي دياگرام فاز به ازاي $T=T_c$ و براي تعداد لايه‌هاي سطحي N_s مختلف از معادلات (۱٥) و (۱٦) به دست مي‌آيند. اين نمودارها داراي دو شاخه هستند. شاخه اول كه مرز ميان R و E و مستقل از ضخامت فيلم (تعداد لايه‌هاي اتمي) است, به ازاي x=6 و

[Downloaded from jsci.khu.ac.ir on 2024-04-20]

$T_c(film)=T_c(bulk)$ و رابطه (۱), $\Phi=0$ مي شود و در نتيجه با توجه به معادلات (۱۷) و (۱۸) B_m ها مستقل از N مي‌شوند. بنابراين مرز R/E مستقل از ضخامت فيلم است؛ در حالي كه مرز R/P وابسته به ضخامت فيلم است وبا افزايش ضخامت به سمت ناحيه p جا به جا مي‌شود.

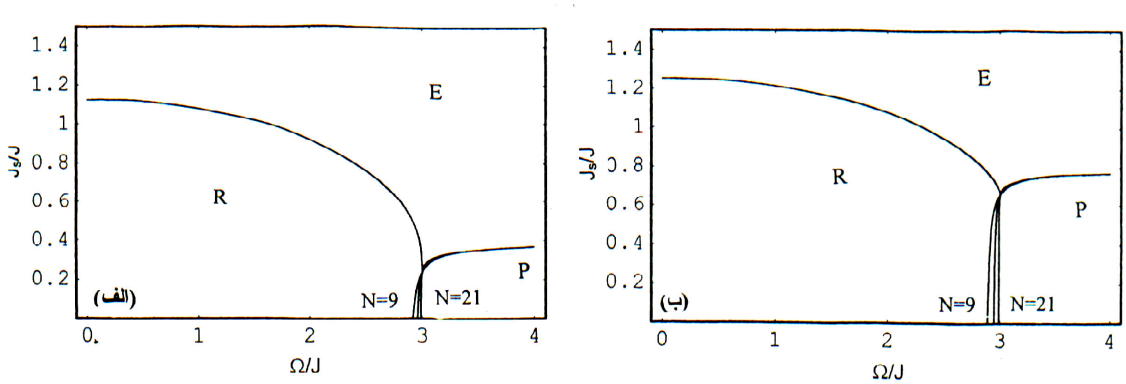
شكل (۲) ديا‌گرامهاي فاز فيلم‌هايي با يك لايه سطحي ($N_s=1$) را براي دو مقدار متفاوتΩ_s/J را نشان مي‌دهد. به منظور بحث در اين منحني‌ها معادله هاميلتوني (۱) را فراخواني مي‌كنيم. ميدان تونلي Ω اساساً يك عامل بي نظمي در سيستم است. از اين روچنانكه Ω افزايش مي‌يابد, دماي كوري T_c كم مي‌شود؛ به طوريكه براي $\frac{\Omega}{J}=3$ دماي كوري صفرخواهد شد. پس با توجه به اثر ميدان تونلي در ناحيه $\Omega > \Omega_s$ نظم سطحي بهتر از نظم كپه است و براي $\Omega < \Omega_s$ برعكس.با بزرگ شدن $\frac{J_s}{J}$ نظم سطحي بهتر مي‌شود, به طوري كه اگر $\frac{J_s}{J}$ به اندازه كافي بزرگ شود, اثر كاهش تعداد مختصات در لايه سطحي را جبران مي‌كند.



شكل ۲. ديا‌گرامهاي فاز در صفحه (Ω_s/J,J_s/J) براي فيلم‌هاي با يك لايه سطحي ($N_s=1$) كه در آن R مربوط به فاز گاهش يافته ($T_c(film) < T_c(bulk)$) و E مربوط به فاز افزايش يافته($T_c(film) > T_c(bulk)$) و P فاز پاراالكتريك است. (الف) Ω_s/J=۱ (ب) Ω_s/J=۲

افزايش تعداد لايه باعث جا به جايي مرز R/P به سمت ناحيه پارالكتريك مي‌شود. در شكل (الف-۲) براي Ω هاي كوچك مقدار $\frac{J_s}{J}$ در مرز R/E به گونه‌اي است كه كاهش تعداد مختصات در لايه سطحي و همچنين كوچكي Ω_s را برآورد مي‌كند. با افزايش Ω و در نتيجه گاهش $T_c(bulk)$, مرز R/E به سمت مقادير كوچك $\frac{J_s}{J}$ جابجا مي‌شود و برآمدگي جزئي آن از اين حقيقت كه Ω_s ثابت نگه داشته شده ناشي مي‌شود, درشكل(ب-۲) ديده مي‌شود كه براي Ω هاي كوچك با بزرگ شدن Ω_s, مقدار $\frac{J_s}{J}$ براي گذار R/E افزايش مي‌يابد. همانطور كه انتظار مي‌رود, افزايش Ω_s باعث كاهش نظم سطحي شده و در نتيجه تمام منحني مرزي R/E به سمت مقادير بزرگتر $\frac{J_s}{J}$ جا به جا مي‌شود.نمودارهاي مربوط به فيلمهاي دو لايه سطحي درشكل (۳) نشان داده شده است.با مقايسه با شكل(۲) از آنجا كه تعداد لايه‌هاي سطحي كسر بزرگتري از حجم كل فيلم را تشكيل مي‌دهند، منحني‌هاي مرزي به سمت مقادير كوچكتر $\frac{J_s}{J}$ حركت مي‌كنند.

[Downloaded from jsci.khu.ac.ir on 2024-04-20]



شكل ۳. دياگرامهاي فاز در صفحه $(\Omega_s/J,J_s/J)$ براي فيلم هاي با دو لايه سطحي (N_S= ۲) . (الف) Ω_s/J=۱ (ب) Ω_s/J=۲

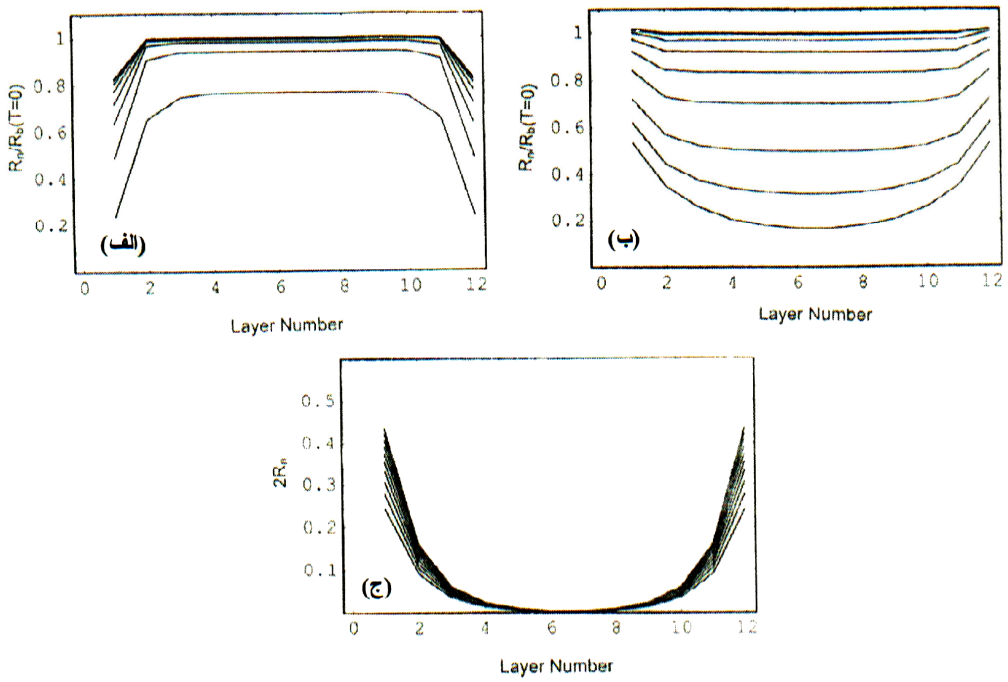
۳ – بررسي نيمرخ‌هاي قطبش در لايه‌هاي نازك فروالكتريك

مقدارموضعي قطبش در فيلم‌هاي فروالكتريك با كميت بدون بُعد R_n كه درمعادله (۲) تعريف شده, متناسب است و معادلات (٤) تا (۹) را براي N_S=2 برآورد مي‌كند. اين معادلات را مي‌توان به طور عددي حل كرده و نمودارهاي R_n بر حسب n را رسم كرد. اين جواب‌ها معادل منفصل نيمرخ‌هاي پارامتر نظم هستند, كه از تئوري پيوستگي كتام و همكارانش [۵] در ۱۹۸۴ و تيلي[۶] در ۱۹۹۳ به دست آمده‌اند. براي رسم نيمرخ‌هاي قطبش به روش عددي, حل تقريبي معادلات (٤) تا (۹) را از طريق الگوريتم نيوتون - رافسون به دست مي‌آوريم. در اين روش شروع حل در پايينترين دم حدس زده مي شود و متعاقباً در دماي داده شده حل خود سازگاري از دماي پيشين به دست مي‌آيد . تغييرات دما را به صورت نسبت $\frac{T}{T_c(film)}$ در نظر مي‌گيريم.

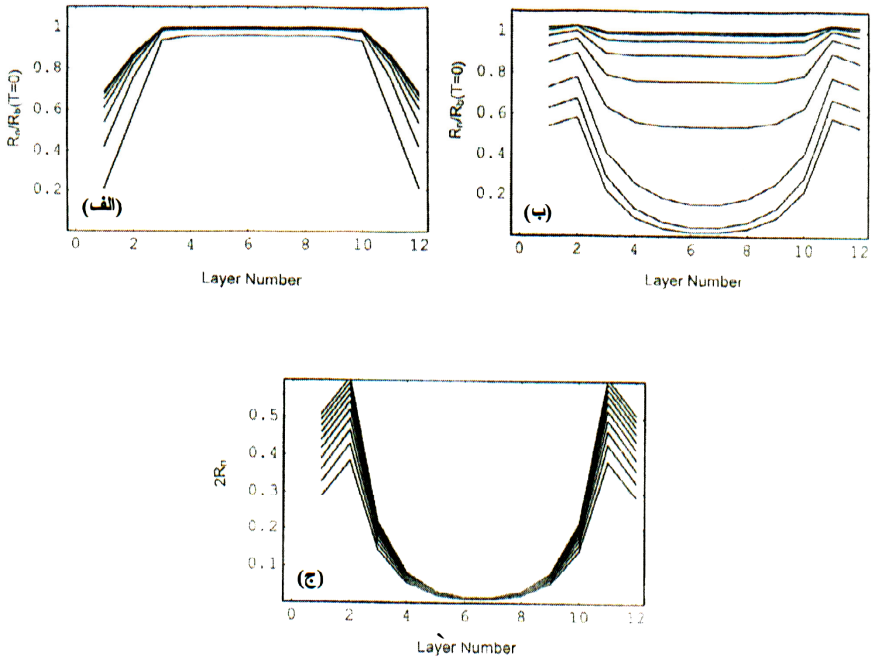
شكل (۴) نيمرخ‌هاي قطبش را براي يك فيلم دوازده لايه‌اي و براي N_S=1 (فيلم‌هايي با يك لايه سطحي) نشان مي‌دهد هرسه نمودار براي $\frac{\Omega_s}{J}=1$ كه مربوط به دياگرام فاز(۲-الف) مي‌شود, رسم شده‌اند. پارامترهاي نمودار(٤-الف) مربوط به نقطه‌اي درناحيهR (قطبش سطحي كاهش يافته) دياگرام فاز شكل(۲-الف) است, با توجه به شكل (۴) قطبش درسطح فيلم در همه دماها به پايين منحرف شده است. انحناي قطبش مركز فيلم تنها درنزديكي دماي كوري قابل تشخيص است. نمودار(٤-ب) براي نقطه‌اي درناحيه E (قطبش سطحي افزايش يافته) دياگرام فاز است, كه مقدار R_n در نزديكي سطح افزايش يافته است. نمودار(٤-ج) نيز براي نقطه ديگري درناحيه E دياگرام فازكه درآنجا $\frac{\Omega}{J}>3$ است, رسم شده است، كه دراين مورد در كپه فاز پاراالكتريك محسوس است. اثرافزايش تعداد لايه‌هاي سطحي باعث انتقال ماكزيمم قطبش به زيرلايه‌هاي n=2 و n=11 مي‌شود. كاهش قطبش در لايه‌هاي سطحي n=1 و n=12 مربوط به اثر كاهش تعداد مختصات در سطح است. درفيلم‌هاي با دو لايه سطحي انحناي قطبش مركزفيلم از مقادير توده‌اي بيشتراست. مشاهده مي‌شود و R_n تنها در نزديكي سطوح مقدار قابل توجهي دارد.نمودارهاي مربوط به حالت دو لايه سطحي N_S=2 درشكل (۵) نشان

[Downloaded from jsci.khu.ac.ir on 2024-04-20]

داده شده است. تفاوت شكل (٥) با شكل (٤) بيشتر در منحني ناحيه E (شكل ٥-الف و ب) منعكس است.



شكل٤. نيمرخ هاي پارامتر نظم R_n بر حسب n براي يك فيلم دوازده لايه اي با $N_s=1$ كه 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 براي مواد كپه اي در دماي صفر است و در (ج) محور قائم $2R_n$ است. منحني ها مربوط به تسبت دماهاي ٩/. و ٨/. و غيره ($\frac{T}{T_c(film)}$) است. پائين ترين منحني مربوط به بالاترين نسبت دما است.



شكل ٥. نيمرخ‌هاي پارامتر نظم و R_n بر حسب n براي فيلم‌هاي دوازده لايه‌اي ٢ =N_s كه پارامترهاي شكل‌هاي (الف، ب و ج) همان پارامترهاي شكل (٤) است

[Downloaded from jsci.khu.ac.ir on 2024-04-20]

نتيجه گيري

ما تئوري ميدان متوسط را براي فيلم‌هاي نازك فروالكتريك كه با استفاده از مدل آيزينگ توصيف شده‌اند، بسط داده‌ايم و عبارات كلي دماي كوري را براي پارامترهاي مختلف مدل به دست آورده‌ايم. در اينجا مشاهده مي‌شود كه دياگرام‌هاي فازداراي سه ناحيه هستند. فار فروالكتريك با قطبش سطحي كاهش يافته R, فاز فروالكتريك با قطبش سطحي افزايش يافته E و فاز پاراالكتريك كه مرزي بين R و E مستقل از ضخامت فيلم است. اما مرز بين فاز فروالكتريك و پاراالكتريك وابسته به ضخامت است و با افزايش ضخامت به سمت ناحيه پارالكتريك جا به جا مي‌شود. وقتي قدرت تبادل سطحي خيلي قوي است، حتي جايي كه هيچ گذار فاز كپه‌اي وجود ندارد هنوز گذار فاز در فيلم‌ها ديده مي‌شود. براي فاز فروالكتريك با قطبش سطحي كاهش يافته همواره قطبش در سطح به سمت پايين خميده مي‌شود و همانطور كه تعداد لايه‌هاي سطحي افزايش مي‌يابد قطبش لايه‌هاي داخلي‌تربه پايين خميده مي‌شود. براي فاز فروالكتريك با قطبش سطحي افزايش يافته درفيلمي با يك لايه سطحي ماكزيمم قطبش درخارجي‌ترين لايه سطحي ديده مي‌شود, اما وقتي كه تعداد لايه‌هاي سطحي بيشتر از يكي مي‌شود اين ماكزيمم قطبش به لايه دوم منتقل مي‌شود. دليل آن رقابت تعداد مختصات و قدرت تبادلي شبه اسپين‌ها است.

تشكر و قدر داني

بدينوسيله از زحمات جناب آقاي دكتر نجفي معاونت محترم پژوهشي دانشكده علوم در رابطه با پي گيرهاي لازم جهت تهيه امكانات براي انجام تحقيقات تشكر و قدرداني به عمل مي‌آيد.

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.

[Downloaded from jsci.khu.ac.ir on 2024-04-20]