

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСНОВНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК LiNbO₃ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Сулейменов А.Ж.

Сулейменов Азат Жексенбайұлы – магистрант,
кафедра нанотехнологий и наноматериалов,

Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, г. Астана, Республика Казахстан

Аннотация: в настоящей работе рассматриваются методы создания и механизмы образования регулярной доменной структуры в кристаллах LiNbO₃ изучаются особенности переполаризации при создании РДС методом ТЭО и устанавливается взаимосвязь характера доменных границ с дефектами структуры кристаллов.

Исходными заготовками для формирования РДС в монокристаллах ниобата лития в настоящей методике являются элементы типа ЛН-9-01-ЛН-9-06. Доменные границы в процессе формирования РДС формируются параллельно базовым плоскостям исходных элементов.

Монокристаллы ниобата лития с регулярной доменной структурой предназначены для использования в устройствах квантовой электроники, акустооптики и акустоэлектроники.

Ключевые слова: ниобат лития, температура Кюри, регулярная доменная структура, доменные границы, переполаризация, термоэлектрическая обработка, дефекты.

Введение

Полидоменные кристаллы – результат структурных фазовых переходов, связанных с изменением симметрии. При охлаждении кристалла через точку фазового перехода или в результате приложения внешних электрических полей обычно формируется тот или иной вид неупорядоченный доменной структуры. Хотя часто в процессе роста наблюдается относительное упорядочение доменов, действительно регулярные доменные структуры (далее РДС) могут быть получены только за счет точного выбора и контроля внешних воздействий, которые формируют РДС с заданными параметрами. При этом под влиянием упорядоченно расположенных доменных границ с заданными периодами, связанных с ними примесных и собственных точечных дефектов и внутренних электрических полей модулируются свойства по объему: электрооптические, акустооптические, линейные и нелинейные диэлектрические восприимчивости-и другие физические свойства, характеризующие материал.

РДС в одноосном сегнетоэлектрике - ниобате лития – образованы антипараллельными или 180 – градусными доменами, у которых вектора спонтанной поляризации \vec{P}_s имеют противоположные направления вдоль поляной оси.

Возможность применения кристаллов с РДС в различных областях техники известна давно. Предлагалось использование различных сегнетоэлектриков в акустоэлектронике, электрооптике, акустооптике, нелинейной оптике для преобразования частоты лазерного излучения и т.д.

Вопрос применения кристаллов ниобата лития с РДС тесно связан с совершенствованием технологии их получения, так как эффективность устройств зависит от параметров доменной структуры. Для получения совершенных доменных структур необходимо преодолеть серьезные технологические препятствия, связанные с особенностями фазовых переходов в этих кристаллах: высокой температурой Кюри, близкой к температуре плавления, зависимостью температуры Кюри от состава, наличием сильных пирополей в кристалле и др.

Различаются технологии получения волноводных, поверхностных доменных структур при температурах далеких от фазовых переходов и объемных структур при температурах близких к температуре Кюри. К первым относятся электронно–лучевой метод, переполаризация кристаллов приложением полей с использованием электродов – масок. Ко вторым относятся методы выращивания кристаллов в асимметричном тепловом поле, метод послеростовой термоэлектрической обработки и др. Эти методы имеют свои достоинства недостатки, но только объемные структуры наиболее перспективны для применения при преобразовании частоты достаточно мощного лазерного излучения неодим – содержащих лазеров. Для разных методов существуют ограничения по эффективной длине, стабильности периодов доменов, объему кристалла и минимальному получаемому периоду РДС.

Для оптимизации режимов формирования РДС необходимо определить влияния параметров технологического процесса на совершенство структур и найти комплексные параметры управления.

Одним из наиболее разработанных способов получения РДС является метод высокой электротермической обработки. Имеющееся технологическое оборудование позволяет получать РДС с периодом в несколько десятков микрон при различной ориентации вектора \vec{P}_s относительно доменных границ. Однако дальнейшее уменьшение размеров доменов требует как технологического изменения

конструкции тепловой зоны установки, так и дополнительного изучения кинетики процессов прорастания доменов в объеме кристалла ниобата лития при воздействии импульсных знакопеременных полей малой напряженности и влияния исходной однородности кристаллов на эти процессы.

Основная часть

Образование периодической доменной структуры обуславливается двумя типами физических процессов:

Возникновение поляризации определенной ориентации \bar{P}_s в процессе фазового перехода под действием электрического поля, которое может быть внешним, приложенным к кристаллу, или иметь внутреннее происхождение;

Переполяризация кристалла в сегнетоэлектрической фазе при приложении электрического поля, большего, чем коэрцитивное поле E_c .

Фазовый переход из пара - в сегнетоэлектрическое состояние в ниобате лития является переходом второго рода типа смещения. В процессе охлаждения кристалла при достижении температуры Кюри T_c

$=1150^{\circ}\text{C}$, являющейся очень высокой и близкой к температуре плавления $T_{пл}=1250^{\circ}\text{C}$, происходит смещение подрешетки катионов Li^+ и Nb^{5+} относительно анионной подрешетки кислорода.

Рассмотрим область LiNbO_3 с РДС, состоящую из двух соседних доменов, отличающихся знаком Ps. Будем называть их домен "+" и домен "-". Так как при переходе от домена + к домену - направление Ps меняется на противоположное, следовательно также меняется направление кристаллофизической оси X_3 . Поскольку для класса симметрии 3m отсутствует энантиоморфизм, то для сохранения правой тройки координат ось X_2 также должна сменить направление на противоположное (рис.1). Поэтому матрица перехода системы координат домена "+" к домену "-" имеет вид, показанный на рис. 2. Используя выражение для изменения компонент тензора при переходе к новой системе координат, можно записать соотношения:

$$\begin{aligned} C_{1jkl}^+ &= C_{mnpq}^- \\ e_{1jk}^+ &= -e_{mnp}^- \\ r_{1jk}^+ &= r_{mnp}^- \end{aligned} \quad (1)$$

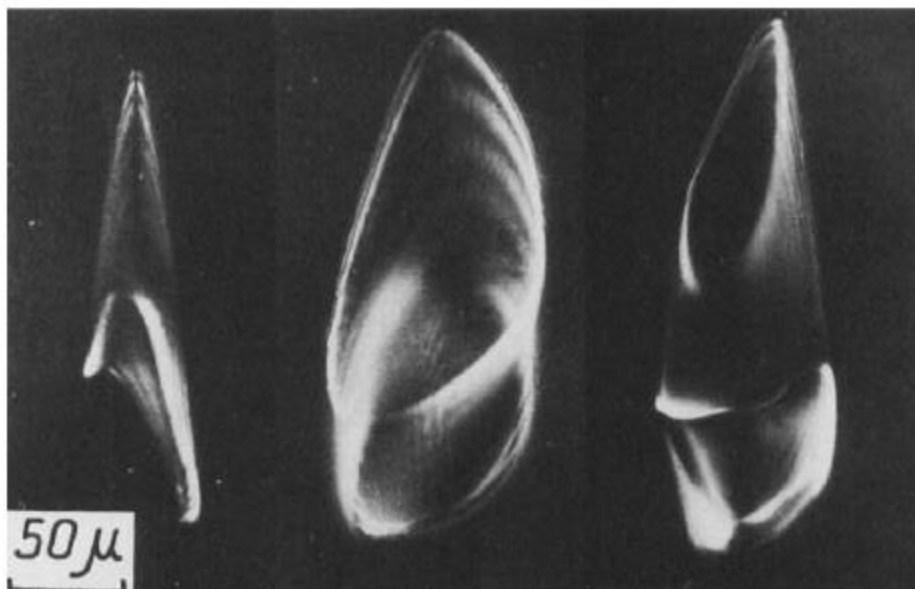


Рис. 1. Визуализация доменов LiNbO_3

Анализ литературы показал, что среди нескольких альтернативных методов получения РДС в LiNbO_3 только при ТЭО можно формировать объемные структуры с заданными периодами, ограниченными несколькими десятками микрометров. Динамика переполяризации отдельных доменов, влияние на эти процессы дефектов структуры кристаллов и технологических режимов изучено недостаточно для

выработки оптимальных условий получения структур с высокой регулярностью периодом в несколько микрон.

Рассмотрены технологические условия проведения переполаризации при температуре близкой к температуре Кюри и показано, что величина $\text{grad } T$ в зоне переполаризации определяет постоянство размера доменов по длине кристалла и их минимальный период. Для сохранения постоянного $\text{grad } T$ печи добавлен дополнительный керамический полученных структур [2, с. 322].

Изучено влияние дефектов на характер доменных границ. Определены технические требования к РДС. Показана связь между качеством РДС и исходной однородностью кристаллов. Основными дефектами, определяющими характер доменных структур, является изменение состава и объемные дефекты, на которых происходит закрепление доменов, искажение их плоской формы, вплоть до полного разрушения доменных структур.

Список литературы

1. *Abrahams S.C., Reddy J.M.* // J. Phys. Sol-1966. V. 27. № 6-7. P. 997-1012.
2. *Кузьминов Ю.С.* Электрооптический и нелинейнооптический кристалл ниобата лития. М.: наука, гл. ред. физ-мат. лит, 1987. 322 с.
3. *Ahrens L.* Geochem. Cosmochem. Asta, 1952. P. 155.
4. *Стуков Б.А.* Сегнетоэлектричество. М.: наука, гл. ред.-мат. лит., 1979. 96 с.
5. *Niizeki N.* Jap J. Appl Phys., 1967. V. 6. № 3. P. 318-327.
6. *Boyd G.D., Nassau K.* Appl. Phys.Lett., 1964. P. 234.
7. *Nassau K.* Appl. Phys. Lett., 1966. P. 228, 983.
8. *Reisman A., Holzberg F.* Heterogeneous Equilibria in Systems $\text{Li}_2\text{O-Ag}_2\text{O-Nb}_2\text{O}_5$ and Oxide Models.-J.Am. Chem. Soc., 1958. V.80. № 24. P. 6503-6507.
9. *Блистанов А.А., Бондаренко В.С. Чкалова В.В.* под ред. Шаскольской // Акустические кристаллы. Справочник. М.: наука, 1982. 632 с.
10. *Кузьминов Ю.С.* Ниобат и танталат лития. Материалы для нелинейной оптики. М.: наука, гл. ред. физ-мат. лит. 223 с.