Поляризационный шум в сегнетоэлектриках. Компьютерное моделирование.

Л.В. Жога, П.А.Бакулин, В.В. Коренева, В.В. Жога

Волгоградский государственный технический университет

Аннотация: В рамках теории фазовых переходов Ландау с учетом тепловых флуктуаций проведено компьютерное моделирование поляризационных шумов в сегнетокерамике. На основе спектрального анализа исследованы тепловой и поляризационный шумы. Обнаружено наличие 1/f шума в поляризационном спектре.

Ключевые слова: сегнетоэлектрик, моделирование, поляризационный шум, тепловой шум, преобразование Фурье.

Исследование явления поляризационного шума в сегнетокерамических датчиках проводится в рамках общей теории фазовых переходов второго рода Ландау. Согласно теории, при снижении температуры до температуры Кюри $T = T_0$ происходит фазовый переход [1]. При этом в качестве параметра порядка принимают вектор диэлектрической поляризации вещества p. Его величина обуславливает степень отклонения структуры кристаллической решетки симметричной фазы от несимметричной [2,3]. В этом случае p рассматривается в качестве независимой термодинамической переменной, фактическое значение которой (как функции температуры, поля и т.п.) определяется из условия минимальности термодинамического потенциала, то есть условия теплового равновесия [4].

Общая теория основывается на представлении свободной энергии кристалла в виде ряда, разложенного по четным степеням p, в связи с возможностью использования малости параметра порядка вблизи T_0 . Тогда полная внутренняя энергия будет определяется уравнением (1).

$$U(p) = \frac{\alpha}{2} p^2 + \frac{\beta}{4} p^4,$$
 (1)

где α – температурная зависимость, выраженная как

$$\alpha = a(T - T_0), \quad a > 0, \tag{2}$$

здесь T_0 - температура Кюри; α , β - постоянные коэффициенты разложения, принимающие значения в пределах α <0, β >0 в сегнетоэлектрической фазе.

Равновесное значение параметра порядка p_{θ} (в нашем случае поляризации), при любой температуре выше или ниже T_{θ} , определяется из условия минимальности функции U(p):

$$\left(\frac{\partial U}{\partial p}\right)_{p_0} = \left(a\left(T - T_0\right)p + \beta p^3\right) = 0, \quad \left(\frac{\partial^2 U}{\partial p^2}\right)_{p_0} = 0, \quad (3)$$

тогда имеем

$$P = 0, npu \ T > T_0$$
 (4.1)

$$P_s = \pm \left(\frac{a(T - T_0)}{\beta}\right)^{12} npu \ T < T_0, \qquad (4.2)$$

где P_s – спонтанная поляризация [5].

Проводилось компьютерное моделирование временной зависимости поляризации сегнетокерамики путем релаксации к ее равновесной конфигурации. Временную эволюцию изменения p(t) можно получить из уравнения Ландау-Халатникова [6] (5)

$$\gamma \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial p},\tag{5}$$

где γ — коэффициент вязкости. Путем подстановки U(p) из уравнения (1) в уравнение (5) получают значение поляризации [6]. Решая уравнение (5) и исходя из графика временной эволюции p(t) без учета тепловых флуктуаций (рис.1), определяют время релаксации τ , принимая как начальное условие $P(0)=0,01P_s[7]$.

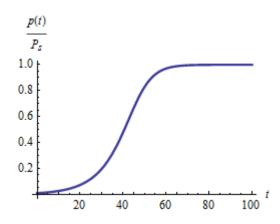


Рис. 1. График нормированных значений временной эволюции поляризации p(t) без учета тепловых флуктуаций.

Тепловой шум[8] (рис. 2) определяется уравнением (6)

$$\Delta T(t) = \frac{A}{n} \sum_{i=1}^{n} \sin(i\omega_{i}t + \varphi_{i}), \qquad (6)$$

где n — количество гармоник, ω_0 — первая гармоника, ϕ_i — набор из случайных величин, распределенных равномерно на интервале $\left[-\frac{\pi}{6},\frac{\pi}{6}\right]$.

Тогда тепловой шум в себя будет включать функцию температуры α , и как следствие спонтанную поляризацию P_s :

$$P_{s} = \pm \left(\frac{a\left(T - T_{0} + \Delta T(t)\right)}{\beta}\right)^{1/2},\tag{7}$$

Амплитуда A подбирается из условия изменения P_s в пределах $\{P_s$ -0,01 P_s ; P_s +0,01 $P_s\}$ при максимальной величине теплового шума ΔT = $\pm A$.

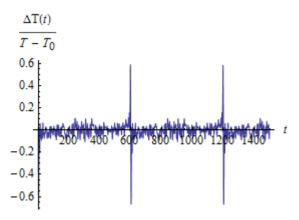


Рис. 2. График нормированных значений временной эволюции теплового шума $\Delta T(t)$.

Решая уравнение Ландау-Халатникова (5) с учетом теплового шума, можно получить зависимость поляризации от времени p(t) (рис. 3).

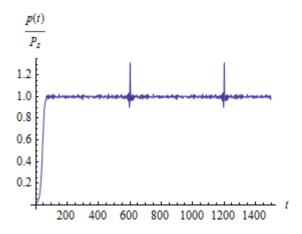


Рис. 3. График нормированных значений временной эволюции поляризации поляризации p(t) с учетом теплового шума $\Delta T(t)$.

Для тепловой флуктуации $\Delta T(t)$ и временной эволюции поляризации p(t) с помощью быстрого преобразования Фурье получены спектры теплового $\Delta T(f)$ и поляризационного шума соответственно p(f).

Спектр теплового шума $\Delta T(f)$ имеет вид белого шума, то есть равномерно распределен по частотам (рис. 4).

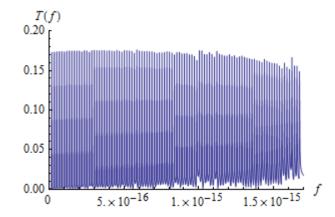


Рис. 4. Спектр теплового шума $\Delta T(f)$, полученный с помощью быстрого преобразования Фурье.

В спектре поляризационного шума p(f) наблюдаются четкие локальные всплески (рис. 5).

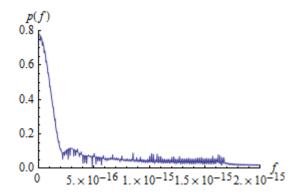


Рис. 5. Спектр поляризационного шума p(f), полученный с помощью быстрого преобразования Фурье

Полученный спектр p(f) проанализирован с помощью функции (8)

$$S(f) = \frac{S(0)}{1 + (2\pi f T_0)^b} + C.$$
 (8)

Здесь S(0), T_0 и b — феноменологические параметры, которые позволяют различать исследуемые сложные структуры или эволюцию открытых диссипативных систем[9]. Скорость «потери» корреляционных связей в последовательности импульсов на временных интервалах характеризует параметр b; параметр T_0 определяется временем корреляции; S(0) — спектральная плотность на средних частотах.

Уравнение (8), после определения параметров, с достаточной точностью аппроксимирует поляризационный спектр (рис. 6). В результате обнаружен 1/f шум.

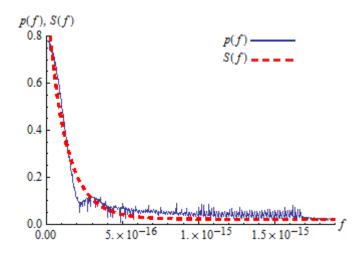


Рис. 6. Спектр поляризационного шума p(f), полученный с помощью быстрого преобразования Фурье и спектральная плотность мощности фликкер — шума S(f)

Следовательно сопоставление значений феноменологических параметров, полученных при анализе временных рядов, с их значениями, определенными для частных практических случаев[10]дает возможность реально представить характер сложных процессов исследуемой эволюции доменной структуры.

Литература

- 1. Яффе Б., Кук У., Яффе Г. Пьезоэлектрическая керамика // М: Мир, 1974. С. 288
- 2. Панич А.А., Мараховский М.А., Мотин Д.В. Кристаллические и керамические пьезоэлектрики // Инженерный вестник Дона, 2011, №1 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2011/325
- 3. Жога Л.В., Коренева В.В., Бакулин П.А., Жога В.В. Фликкер-шум во временных зависимостях силы тока при поляризации сегнетоэлектриков // Инженерный вестник Дона. 2016. №4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2017/4423
- 4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. Т.8. Теоретическая физика. Москва: «Наука» 1982. М., С. 118

- 5. Струков Б.А. Сегнетоэлектричество в кристаллах и жидких кристаллах: природа явления, фазовые переходы, нетрадиционные состояния вещества // Соросовский образовательный журнал. 1996. №12. С. 95 (1996)
- 6. Л. Д. Ландау, И.М. Халатников. Об аномальном поглощении звука вблизи точек фазового перехода второго рода // ДАН СССР 1954. №96. С. 469.
- 7. Sawaguchi E. Ferroelectricity versus Antiferroelectricity in the Solid Solutions of PbZrO3 and PbTiO3 // J. Phys. Soc. Japan. 1953. V. 8. pp. 615-629.
- 8. Nyquist H. Thermal Agitation of Electric Charge in Conductors // Phys. Rev. 1928. 32. pp. 110–113.
- 9. Жога В.В., Жога Л.В., Нестеров В.Н., Терех В.В., Дмитрук М.И. Исследование скачков случайного характера, возникающих при электромеханическом нагружении сегнетокерамики // Нелинейный мир. 2012. № 9. С. 585-590.
- 10. Колодий З.А., Крук О.Г., Саноцкий Ю.В., Голынский В.Д., Колодий А.З. Связь параметров спектральной плотности фликкер-шума с особенностями внутренней структуры системы // Технология и конструирование в электронной структуре. 2009. №1, С.10-14

References

- 1. Jaffe B., Cook W. Jr., Jaffe H. New York: Academic Press, 1971. p. 317
- 2. Panich A.A., Marahovskij M.A., Motin D.V. Inženernyj vestnik Dona (Rus), 2011, №1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2011/325
- 3. Joga L.V., Koreneva V.V., Bakulin P.A., Joga V.V. Inženernyj vestnik Dona (Rus), 2017. №4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2017/4423
- 4. Landau L.D., Lifshic E.M. Jelektrodinamika sploshnyh sred. T.8. Teoreticheskaja fizika. Moskva: «Nauka» 1982. M., 118
 - 5. Strukov B.A. Sorosovskij obrazovatel'nyj zhurnal. 1996. №12. p. 95 (1996)
 - 6. L. D. Landau, I.M. Halatnikov. DAN SSSR 1954. №96. pp. 469.

- 7. Sawaguchi E. J. Phys. Soc. Japan. 1953. V. 8. pp. 615-629.
- 8. Nyquist H. Phys. Rev. 1928. 32. pp. 110–113.
- 9. Zhoga V.V., Zhoga L.V., Nesterov V.N., Tereh V.V., Dmitruk M.I. Nelinejnyj mir. 2012. № 9. pp. 585-590.
- 10. Kolodij Z.A., Kruk O.G., Sanockij Ju.V., Golynskij V.D., Kolodij A.Z. Tehnologija i konstruirovanie v jelektronnoj strukture. 2009. №1, pp.10-14