Физика и материаловедение

УДК 537.226.4:004.942

Т.К. Барабаш, А.Г. Масловская

РАЗВИТИЕ ФРАКТАЛЬНОГО ПОДХОДА В ЗАДАЧАХ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФОРМИРОВАНИЯ ТОКА ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ПОЛЯРИЗАЦИИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ

В работе предложена модификация фрактального подхода для описания процесса формирования тока переключения поляризации сегнетоэлектриков на основе концепций дробно-дифференциального исчисления. Вычислительная схема реализации модели включает процедуру численной аппроксимации производной дробного порядка. Приведены результаты моделирования, демонстрирующие согласование с аналитическим представлением и с данными эксперимента.

Ключевые слова: сегнетоэлектрик, переключение поляризации, доменная структура, фрактальная модель, производная дробного порядка, вычислительная схема.

FRACTAL APPROACH DEVELOPING FOR THE MODEL PROBLEMS OF POLARIZATION SWITCHING CURRENT FORMING IN FERROELECTRIC CRYSTALS

The paper suggests a modification of fractal approach for describing the process for polarization switching current in ferroelectrics based on fractional differential calculus. The computational scheme of model implementation uses the numerical approximation procedure of fractional derivative. The simulation results are presented to demonstrate agreement with analytical solution as well as experimental data.

Key words: ferroelectrics, polarization switching, domain structure, fractal model, fractional derivative, computational scheme.

Введение

Практическое применение сегнетоэлектрических кристаллов и пленок в качестве ячеек памяти в интегральных устройствах и другой технике основано на способности таких материалов менять направление поляризации в неравновесных внешних условиях. Поэтому исследование эффектов в сегнетоэлектрических кристаллах, инициирующих процессы перестройки и динамики доменной структуры и, как следствие, переключение поляризации, представляет интерес и с точки зрения фундаментальной науки, и с точки зрения практических приложений. В многочисленные исследованиях отмечается [1-4], что геометрия доменных конфигураций типичных сегнетоэлектриков, являясь, по сути, результатом процесса самоорганизации, обладает фрактальными свойствами. Анализ кинетики переключения поляризации сегнетоэлектриков, а также процессов перестройки доменной структуры и движения доменных границ [5-6] также позволяет заключить, что указанные процессы проявляют фрактальные закономерности. Во многих случаях фрактальные свойства сегнетоэлектрических систем связывают с анизотропией сегнетоэлектрических кристаллов, со сложным характером движения доменных границ, стохастичностью процесса зародышеобразования, присутствием эффектов памяти [7].

Для описания геометрических характеристик доменных структур и закономерностей динамики доменных границ, определяющих процессы переполяризации в сегнетоэлектриках, в качестве теоретического базиса применимы концепции фрактальной теории, методологические основы которой получили динамичное развитие в последние годы [8]. Методы фрактальной теории позволяют описать нестабильные системы и процессы, самоподобные природные объекты, в которых присутствует некоторая нерегулярность, беспорядок.

Основная цель настоящей работы – развитие модельных представлений процесса формирования тока переключения поляризации в сегнетоэлектриках с использованием концепций дробно-дифференциального исчисления для описания фрактальной динамики доменных границ.

Моделирование тока переключения поляризации в сегнетоэлектриках: базовый подход

Известно большое количество результатов экспериментальных и теоретических исследований динамики доменов и процессов переключения поляризации. Экспериментальные данные включают как электрические изменения объемных кристаллов, так и результаты прямых микроскопических наблюдений доменов при переключении. На процессы переключения оказывают влияние многие факторы, – например, тип электродов, состояние поверхности, наличие дефектов, геометрия доменов и т.д. В настоящее время распространены два основных подхода к описанию кинетики переключения. Оба основаны на теории фазовых переходов первого рода, в результате которых в объеме сегнетоэлектрика происходит зарождение и рост новых антипараллельных доменов либо процесс роста существующих доменов, антипараллельных приложенному полю. При этом рост доменов может происходить вдоль полярного направления или путем бокового движения 180° стенок.

При анализе кинетики токов переполяризации сегнетоэлектриков широкое применение нашли модели аппроксимационного типа, развивающие кинетическую теорию фазовых переходов и основанные на статистической теории кристаллизации Колмогорова-Аврами. В базовой модели Колмогорова-Аврами и ее более поздних модификациях ток переключения определяется долей переключенного объема $V(t)$ к полному объему сегнетоэлектрического кристалла [7, 9-11]:

$$I(t) = 2P_S \cdot S \cdot \frac{dV(t)}{dt}, \tag{1}$$

где P_S – спонтанная поляризация образца, Кл/м^2; S – площадь электрода образца, м^2.

Такое представление тока переключения основано на упрощенных представлениях о динамике доменной структуры, при этом, отмечают многие авторы [11], не учитываются такие важные факторы как стохастические изменения диэлектрических свойств, внутренняя экранировка, эффекты анизотропии и запаздывания взаимодействий, особенности энергетического спектра системы и пр. Как следствие, модель оказывается адекватной и удовлетворяет условию согласия с данными эксперимента только при дробных значениях размерности кинетического процесса, причем в ряде случаев не удается удовлетворительно аппроксимировать спадающую часть импульса тока, соответствующую заключительному этапу процесса переключения поляризации.

Фрактальная модификация модели Колмогорова-Аврами и вычислительная схема для ее реализации

Известно, что процессы зародышеобразования и динамики сегнетоэлектрических доменных структур характеризуются самоподобием и в целом носят фрактальный характер. На рис. 1 приведена модельная схема фрактального приграничного бокового роста доменов.

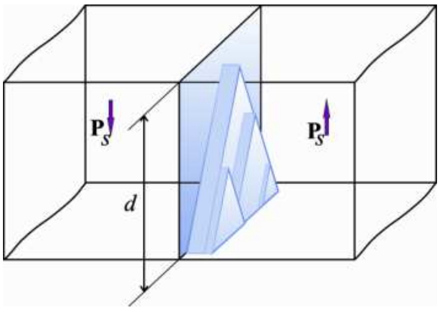


Рис. 1. Геометрическая схема самоподобного роста доменов в сегнетоэлектрике.

В работе [7] предложен альтернативный подход к описанию тока переключения поляризации в сегнетоэлектриках, основанный на испотьзовании концепций дробного дифференциального исчисления. Теория дробного дифференцирования применяется для описания процессов и явлений, обладающих фрактальными характеристиками [12-13]. Чтобы указать на то, что рассматриваемый процесс обладает особым свойством – памятью, используют дробную производную по времени. Концептуальная постановка задачи моделирования тока переключения поляризации сегнетоэлектриков [7] строится на гипотезе, согласно которой предполагается, что механизмы перестройки доменных структур сегнетоэлектриков обладают фрактальными свойствами, а сам процесс переключения обладает памятью. Математическая постановка задачи описания тока переключения поляризации в этом случае строится на основе модификации подхода (1) с использованием производной по времени дробного порядка и имеет следующий вид [7]:

$$\bar{I}(\xi)=\frac{2P_S\cdot S}{t_0}\frac{d^\alpha}{d\xi^\alpha}V(\xi), \tag{2}$$

где $\xi = t/t_0$ – безразмерное время; t_0 – время переключения, с; α – динамическая фрактальная размерность ($\alpha \in (0,1]$, при этом $\alpha = 1$ соответствует отсутствию эффектов памяти); $2P_S \cdot S \cdot V(\xi)$ – заряд переключения, Кл.

С целью построить аналитическое решение модельной задачи в ряде случаев принимают в рассмотрение следующую аппроксимацию для $V(\xi)$:

$$V(\xi)=1-\exp(-\xi)\;. \tag{3}$$

Тогда из (2) с учетом (3) можно получить следующее представление:

$$I(\xi)=\frac{1}{\Gamma(2-\alpha)}\cdot\xi^{1-\alpha}\cdot\exp(-\xi)\cdot M(1-\alpha,2-\alpha,\xi), \tag{4}$$

где $I(\xi)=\dfrac{\bar{I}(\xi)\cdot t_0}{2P_S\cdot S}$ – ток переключения, выраженный в безразмерном виде; $\Gamma(\alpha)$ – гамма-функция Эйлера; $M(a;b;z)$ – вырожденная гипергеометрическая функция Куммера.

Функция Куммера в аналитическом виде может быть выражена как:

$$M(a_1,b_1,z)=1+\frac{az}{b}+\frac{(a)_2 z^2}{(b)_2 2!}+\ldots+\frac{(a)_n z^n}{(b)_n n!}+\ldots,$$

где $(a)_n = a(a+1)(a+2)\ldots(a+n-1)$, $(a)_0 = 1$, $(b)_n = b(b+1)(b+2)\ldots(b+n-1)$, $(b)_0 = 1$.

Однако широко применяемая в практике формализации процесса переключения сегнетоэлектриков зависимость $V(\xi)$ вида (3) часто не отвечает особенностям экспериментальных данных. Для математического моделирования токов переключения поляризации типичных сегнетоэлектриков различными авторами были предложены модификации выражения $V(\xi)$ в теории Колмогорова-Аврами. В частности, используется выражение вида:

$$V(\xi)=1-\exp(-\xi^n), \tag{5}$$

где параметр n определяет параметр (размерность) доменного роста.

Параметр α характеризует форму функциональной зависимости тока переключения от времени и является важным характеристическим параметром, определяющим степень быстроты реакции системы на внешнее воздействие. При этом α зависит как от собственных свойств системы, так и от способа воздействия на нее, причем этот параметр отражает преимущественно величину интенсивности взаимодействия доменов в электрическом поле.

Таким образом, аналитическое представление (4) может быть построено для ограниченного класса задач. В общем же случае (например, при использовании зависимости (5)) применение аналитического подхода к вычислению дробной производной будет затруднено.

Для построения обобщенной фрактальной модели тока переключения поляризации сегнетоэлектриков введем в рассмотрение новый подход, основанный на построении численной схемы решения задачи на основе конечно-разностной аппроксимации дробной производной по времени.

Рассмотрим идею построения явной конечно-разностной схемы численной аппроксимации дробной производной. Формула Грюнвальда-Летникова для производной дробного порядка для задачи (5) на сетке $\omega = \left\{\xi_i = \xi_0 + ih,\ i = \overline{0, N}\right\}$ может быть записана в следующей форме [13]:

$$\frac{d^{\alpha}V(\xi)}{d\xi^{\alpha}} = \lim_{h\to 0}\frac{1}{\Gamma(-\alpha)}\cdot\frac{1}{h^{\alpha}}\cdot\sum_{i=0}^{k}\frac{\Gamma(i-\alpha)}{\Gamma(i+1)}V(\xi - ih),$$

где h – шаг по времени.

Тогда последовательная конечно-разностная аппроксимация производной для i-го узла $V(\xi_i) \approx V_i$ может быть получена следующим образом:

$$\frac{d^{\alpha}V(\xi_0)}{d\xi^{\alpha}} = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)}\cdot\frac{1}{h^{\alpha}}\cdot\frac{\Gamma(-\alpha)}{\Gamma(1)}V_0,\ j=0;$$

$$\frac{d^{\alpha}V(\xi_1)}{d\xi^{\alpha}} = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)}\cdot\frac{1}{h^{\alpha}}\cdot\left(\frac{\Gamma(1-\alpha)}{\Gamma(2)}V_0 + \frac{\Gamma(-\alpha)}{\Gamma(1)}V_1\right),\ j=1;$$

...

$$\frac{d^{\alpha}V(\xi_i)}{d\xi^{\alpha}} = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)}\cdot\frac{1}{h^{\alpha}}\cdot\sum_{j=1}^{i}\frac{\Gamma(j-1-\alpha)}{\Gamma(j)}V(\xi_i - (j-1)\cdot h),\ j=i; \quad i=\overline{0,N}. \tag{6}$$

Таким образом, предложенная модификация математической модели формирования тока переключения поляризации сегнетоэлектрического кристалла включает выражение для тока переключения модели Колмогорова-Аврами, представленного в форме (2), аппроксимирующую зависимость вида (5) и схему численного вычисления производной дробного порядка (6).

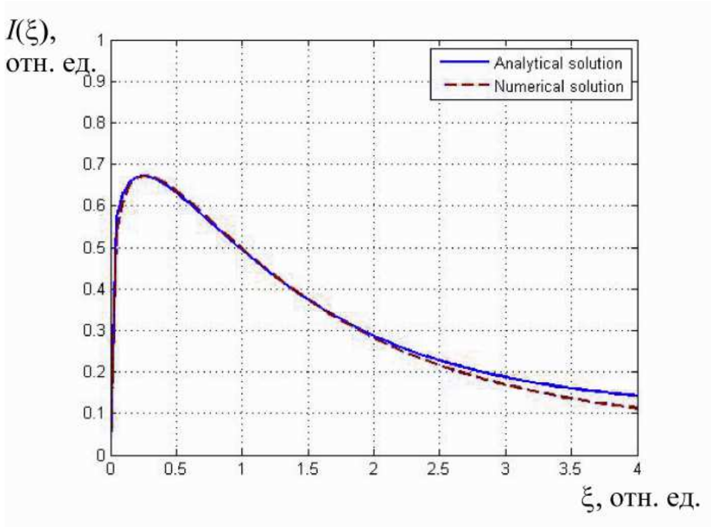


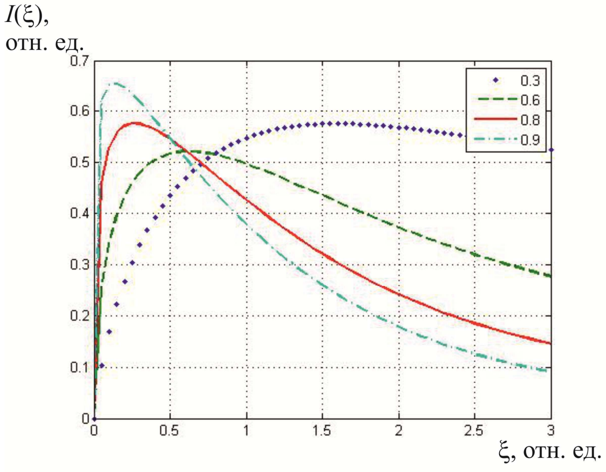
Рис. 2. Сравнение аналитического и численного представлений тока переключения $I(\xi)$ (при значениях модельных параметров: $S=1$ отн. ед., $2P_s=1$ отн. ед., $t_0=1$ отн. ед., $\alpha=0.8$, n=1).

Модельный расчет и анализ результатов моделирования

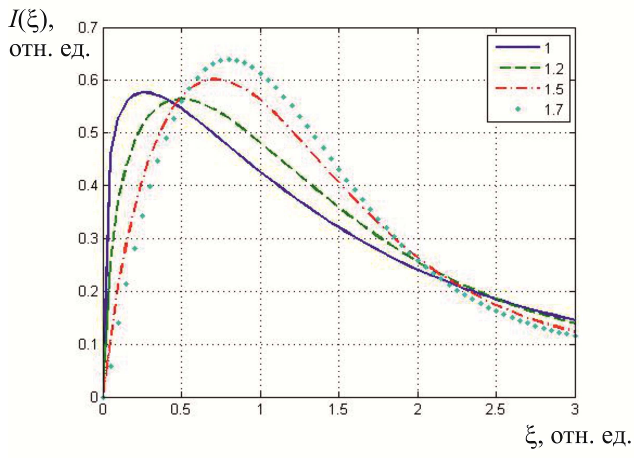
С целью верификации введенной схемы моделирования проведем сопоставление аналитического (4) и численного (с использованием зависимости (5) при n=1 и схемы (6)) представлений тока переключения $I(\xi)$. На рис. 2 приведены соответствующие зависимости.

Совпадение аналитического и численного представлений при n=1 свидетельствует об адекватности численного подхода к моделированию тока переключения. Следует отметить, что применение последнего позволяет строить решения в более широком классе прикладных задач с использованием выражения (5), аппроксимирующего временную зависимость поляризационного заряда $V(\xi)$, принимая во внимание размерность доменного роста n.

Для анализа поведения модели была проведена серия вычислительных экспериментов с учетом варьирования значений параметров моделирования. Результаты модельных расчетов приведены на рис. 3.



а



б

Рис. 3. Зависимость тока переключения $I(\xi)$ от времени (в отн. ед.): *а* – при значениях порядка дробной производной α=0.3; 0.6; 0.8 и 0.9 и размерности доменного роста n=1; *б* – $\alpha = 0.8$ и $n = 1$; 1.2; 1.5; 1.7.

На рис. 3*а* представлен вид временной зависимости тока при фиксированном значении $n = 1$ в выражении (5) для $V(\xi)$, вычисленный согласно фрактальной модели при значении порядка производной α, соответственно равного: 0.3; 0.6; 0.8 и 0.9. На рис. 3*б* изображен вид кривой тока при различных значениях параметра роста n = 1; 1.2; 1.5; 1.7 и при фиксированном значении фрактального параметра $\alpha = 0.8$.

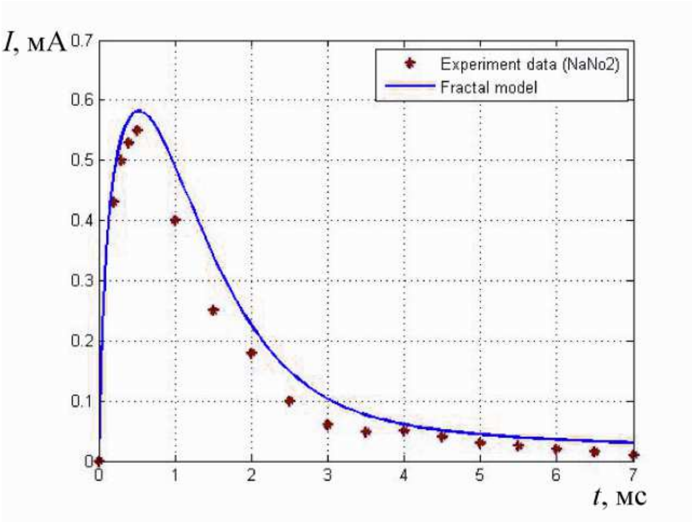


Рис. 4. Экспериментальные данные тока переключения $NaNO_2$ [14] (точечный массив) и модельная зависимость (сплошная кривая) при значениях параметров: $\alpha = 0.9$; $P_S = 10.9 \cdot 10^{-3}$ Кл/м^2; $t_0 = 1.27 \cdot 10^{-3}$ с; $n = 1.3$).

Покажем, что построенная численная аппроксимация модели (3) с учетом зависимости для $Q(\xi)$ (4) имеет хорошее согласование с данными эксперимента, описанными, например, в работе [14]. Для этого в одной системе координат построим соответствующую зависимость тока переключения для сегнетоэлектрического кристалла нитрита натрия ($NaNO_2$) от времени и его модельное представление на основе численной аппроксимации дробной производной согласно (6).

На рис. 4 представлен график экспериментальной зависимости (точечный массив), построенный по данным [14], и модельное представление тока переключения для модифицированной модели Колмогорова-Аврами (2), (5) (6).

Модельная и экспериментальная кривые обнаруживают приемлемое согласование при следующих значениях параметров модели: $\alpha = 0.9$ и $n = 1.3$.

Заключение

Таким образом, представлены результаты математического моделирования формирования тока переключения поляризации сегнетоэлектрических кристаллов. Предложена модификация базовой модели Колмогорова-Аврами с использованием фрактального подхода и численной аппроксимации дробной производной по времени. Такой подход позволяет моделировать процесс переключения с учетом нецелого значения показателя степени доменного роста. Показано согласование численного представления тока переключения с аналитической аппроксимацией, полученной с помощью гипергеометрической функции Куммера. Общая схема (6) отражает идейный смысл использования дробной производной для моделирования физических систем с памятью: расчет тока в каждый последующий момент времени учитывает все предыдущие состояния. В качестве недостатка численной схемы можно отметить ресурсоемкость выполняемых вычислительных процессов. Проведено сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными тока переключения поляризации кристалла нитрита натрия. Постановка и реализация компьютерного эксперимента позволяют установить значения параметров, определяющих законы фрактальной динамики доменной структуры.

1. Ozaki, T., Fujii, K., Ohgami, J. Fractal Aspects of Lamellar Ferroelectric Domain Structures Formed under the Influence of Depolarization Fields in CsH_2PO_4 and $(NH_2CH_2COOH)_3H_2SO_4$ // Journal of the physical Society of Japan. – 1995. – V. 64, № 7. – P. 2282-2285.

2. Пелегов, Д.В. Использование фрактального формализма для описания кинетики фазовых превращений в конечных системах: Дис. …канд. физ.-мат. наук. – Екатеринбург, 2000. – 133 с.

3. Galiyarova, N.M., Bey, A.B., Kuznetzov, E.A., Korchmariyuk, Y.I. Fractal dimensionalities and microstructural parameters of piezoceramics PZTNB-1 // Ferroelectrics. – 2004. – V. 307. – P. 205-211.

4. Барабаш, Т.К., Масловская, А.Г. Расчет скейлинговых характеристик РЭМ-изображений доменных структур сегнетоэлектриков методом фрактальной параметризации двумерных структур // Вестник АмГУ. – 2011. – № 55. – С. 35-42.

5. Maslovskaya, A.G., Barabash, T.K. Multifractal analysis of electron beam stimulated process of polarization reversal in ferroelectrics // Physics Procedia. – 2012. – V. 23. – P. 81-85.

6. Масловская, А.Г., Барабаш, Т.К. Исследование фрактальных закономерностей процессов переключения поляризации сегнетоэлектрических кристаллов в инжекционном режиме // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2012. – № 1. – С. 42-49.

7. Мейланов, Р.П., Садыков, С.А. Фрактальная модель кинетики переключения поляризации в сегнето-электриках // Журнал технической физики. – 1999. – Т. 69, № 5. – С. 128-129.

8. Божокин, С.В., Паршин, Д.А. Фракталы и мультифракталы. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. – 128 с.

9. Araujo, C., Scott, J.F., R.Bruce, Godfrey, McMillan, L. Analysis of switching transients in KNO_3 ferroelectric memories // Applied Physics Letters. – 1986. – V. 48. – P.1439-1440.

10. Кукушкин, С.А., Осипов, А.В. Термодинамика и кинетика начальных стадий переключения в сегнетоэлектриках // ФТТ. – 2001. – С. 80-87.

11. Шур, В.Я., Румянцев, Е.Л., Макаров, С.Д. Кинетика переключения поляризации в сегнетоэлектриках конечных размеров // ФТТ. – 1995. – Т. 37, вып. 6. – С. 1687–1692.

12. Петухов, А.А., Ревизников, Д.Л. Алгоритмы численного решения дробно-дифференциальных уравнений // Вестник МАИ. – 2009. – С. 228-234.

13. Васильев, В.В., Симак, Л.А. Дробное исчисление и аппроксимационные методы в моделировании динамических систем. Научное издание. – Киев: НАН Украины, 2008. – 256 с.

14. Sekhar, K.C., Nautiyal, A., Nath, R. Polarization switching in ferroelectric sodium nitrite thick film // Appl. Phys. Express. – 2008. – V. 1. – P. 091601-091604.