

УДК 538.245:537.226.1

**И.И. МАКОЕД, И.Н. МЕЛЬНИКОВА, М.В. ЯРМОЛИЧ,
А.М. ПАНАСЕВИЧ**

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕТЕЛЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ГИСТЕРЕЗИСА ФЕРРИТА ВИСМУТА

Актуальность темы определяется интенсивностью использования сегнетоэлектриков в науке и технике. Параллельно с синтезом и экспериментальными измерениями ведется поиск новых соединений и теоретическое обоснование экспериментальных данных. Одной из важнейших задач в изучении материалов является установление связи «состав – структура – свойства». Наиболее интересны в этой связи соединения кислородно-октаэдрического типа. Сегнетоэлектрики кислородно-октаэдрического типа весьма схожи по структуре, но в то же время, по химическому составу класс этих соединений очень обширен, что дает основания для поиска новых перспективных материалов.

Перспективными материалами современной микроэлектроники являются сегнетомагнетики – вещества с повышенным взаимодействием магнитной и электрической подсистем, позволяющие создавать устройства на их основе, обладающие принципиально новыми возможностями. Одним из самых популярных соединений является феррит висмута BiFeO_3 , что в значительной мере связано с рекордно высокими температурами сегнетоэлектрического ($T_C = 1083 \text{ K}$) и магнитного ($T_N = 643 \text{ K}$) упорядочений.

В работе выполнено теоретическое исследование диэлектрического гистерезиса феррита висмута. Зависимость $P(E_f)$ была аппроксимирована следующими выражениями [1]: для восходящей ветви:

$$P(E_f) = P_s \operatorname{th} \left(\frac{E_f - E_c}{2d} \right) + P_r (1 - a), \quad (1)$$

для нисходящей ветви:

$$P(E_f) = -P_s \operatorname{th} \left(\frac{-E_f - E_c}{2d} \right) - P_r (1 - a), \quad (2)$$

где P_s – поляризация насыщения, P_r – остаточная поляризация, E_c – коэрцитивное поле, $0 < a < 1$ – интерполяционный параметр. При такой ап-

проксимации производная $\frac{dP(E_t)}{dE_t}$ не зависит от амплитуды переменного поля. При $a = 1$ выражения (1) и (2) переходят в формулы для насыщенной петли гистерезиса. Значения максимального электрического поля E_{\max} и параметра a связаны соотношением [1]:

$$2P_r(1 - a) = -P_s \operatorname{th}\left(\frac{E_{\max} - E_c}{2d}\right) - P_s \operatorname{th}\left(\frac{-E_{\max} - E_c}{2d}\right), \quad (3)$$

из которого определяли параметр a . Значение d находим из выражения

$$d = E_c \left[\ln \left(\frac{1 + \frac{P_r}{P_s}}{1 - \frac{P_r}{P_s}} \right) \right]^{-1} \quad (4)$$

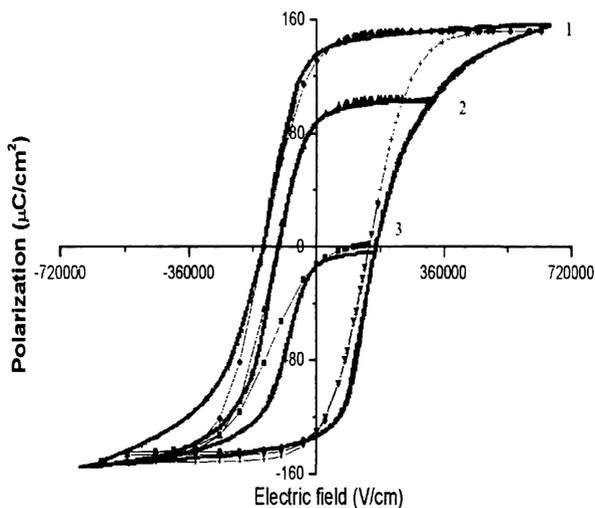
При тестовых расчетах использовали следующие значения параметров: спонтанная поляризация $P_s = 35$ мкКл/см², величина остаточной поляризации $P_r = 25$ мкКл/см², коэрцитивное поле $E_s = 2 \cdot 10^5$ В/см. Предварительно были проведены расчеты с изменяющимся параметром a , для изучения эволюции формы петли гистерезиса.

Результаты их сопоставления с известными экспериментальными данными [2] подтверждают возможность построения полуэмпирической модельной петли гистерезиса BiFeO_3 при следующих значениях параметров: спонтанная поляризация $P_s = 2,2$ мкКл/см², величина остаточной поляризации $P_r = 0,83$ мкКл/см², коэрцитивное поле $E_s = 2 \cdot 10^5$ В/см. Хорошее согласование модели и эксперимента наблюдается при значении параметра $0,4 < a < 0,7$.

Чтобы исследовать диэлектрический гистерезис, были использованы экспериментальные данные, полученные для феррита висмута. Результаты моделирования изображены на рисунке 1 в виде точек. Параметры расчетных формул представлены в таблице 1. Полученные результаты подтверждают возможность построения полуэмпирической модели диэлектрического гистерезиса BiFeO_3 . В то же время, так как диэлектрические свойства образцов существенно зависят от условий их получения, то в каждом конкретном случае данная модель будет работать только при использовании эмпирических данных, что является ее недостатком.

Таблица 1 – Параметры расчетных формул

№ петли	P_r , мкК/см ²	P_S , мкК/см ²	E_{max} , В/см
1	131,03	151,72	633103,45
2	108,28	125,52	322758,62
3	58,62	73,79	173793,10

Рисунок 1 – Экспериментальные (сплошные линии) [2] и теоретические (точки) петли диэлектрического гистерезиса BiFeO_3

Представляет интерес построение «первопринципной» модели, свободной от применения экспериментальных данных и учитывающей структуру и электронное строение атомов вещества.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Берман, Л.С. Структурные дефекты на границе раздела сегнетоэлектрик – полупроводник / Л.С. Берман, И.Е. Титков // Физ. и техн. п.п. – 2004. – Т 38, Вып. 6. – С. 710–715.
2. Wang, J. Epitaxial BiFeO_3 multiferroic thin film heterostructures / J. Wang, J.B. Neaton, H. Zheng [et al] // Science. – 2003. – V. 299. – P. 1719–1722.