

Specific Heat and Dielectric Susceptibility of Ferroelectric Thin Films

Farjami Shayesteh, S., Soleimani, M. A.

Physics Department, Faculty of Science, University of guilan, Rasht, Iran.

E-mail: saber@guilan.ac.ir

Key words: *Ising model, mean- field approximation, specific heat, susceptibility, Curie temperature, exchange strength, transverse field.*

Abstract: In this paper, ferroelectric thin films, described by an ising model in a transverse field, have been studied under the mean-field approximation. We discuss a thin film composed of N-layer film of simple cubic symmetry with nearest-neighbor exchange in which the exchange strength and transverse field are assumed to be different from the bulk values in N_s surface layers, and we derive and illustrate expression for specific heat and susceptibility. In such films, the Curie temperature can shift to either lower or higher temperature compared with the corresponding bulk value. If the surface exchange strength is strong enough, there is still a phase transition to ferroelectricity even when the transverse field is larger than the bulk critical value. The bulk peak of the specific heat becomes a discontinuity at the film curie temperature. There is a rounded peak at the bulk curie temperature if the surface exchange strength is higher than the critical value.

The film susceptibility still diverges at the film Curie temperature, as does the bulk susceptibility, but its magnitude is reduced. Also there is a rounded peak at the bulk Curie temperature when the surface exchange strength exceeds the critical value. The bulk related character of the specific heat and susceptibility is less pronounced and the surface – related character is more pronounced when the film thickness is small, or the surface – layer number is large.

گرمای ویژه و پذیرفتاری الکتریکی لایه‌های نازک فروالکتریک

صابر فرجامی شایسته، محمد علی سلیمانی
رشت، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه گیلان

(دریافت مقاله ۱۳۸۰/۱۱/۲۰ دریافت نسخه نهایی ۱۳۸۱/۶/۱۲)

چکیده: لایه‌های فروالکتریک را با استفاده از مدل آیزینگ در یک میدان عرضی، با تقریب میدان میانگین، مورد بررسی قرار دادیم. یک فیلم N لایه‌ای با تقارن مکعبی ساده را در نظر بگیرید که با نزدیکترین همسایه خود برهم‌کنش دارد. فرض می‌کنیم که قدرت تبادل شبه اسپین‌ها و میدان عرضی لایه‌های سطحی آن نسبت به لایه‌های کپه‌ای متفاوت باشد. با این مدل می‌توان روابط مناسبی برای گرمای ویژه و پذیرفتاری الکتریکی به دست آورد. در این لایه‌ها، دمای کوری لایه نسبت به دمای کوری کپه می‌تواند به هر مقدار بالاتر یا پایینتر انتقال یابد. اگر قدرت تبدلی سطح به اندازه کافی بزرگ باشد، حتی وقتی که مقدار میدان عرضی به بزرگتر از حالت بحرانی برسد هنوز گذار فاز به حالت فروالکتریک صورت می‌گیرد. قله کپه‌ای گرمای ویژه در دمای کوری لایه ناپیوسته است. اگر قدرت تبدلی سطح از مقدار بحرانی بزرگتر شود، یک منحنی در دمای کوری کپه مشاهده می‌شود. چنانکه در مورد پذیرفتاری کپه داریم پذیرفتاری لایه نیز در دمای کوری واگرا خواهد شد، ولی با واگرایی کمتر. از طرف دیگر اگر قدرت تبدلی سطح به مقدار بحرانی افزایش یابد قله خمیده‌ای در دمای کوری کپه به وجود می‌آید. هنگامی که ضخامت لایه کوچک یا تعداد لایه‌های سطحی بزرگتر شود، مشخصات کپه‌ای گرمای ویژه و پذیرفتاری الکتریکی ضعیفتر و مشخصات سطحی محسوس‌تر خواهند شد.

واژه‌های کلیدی: مدل آیزینگ، تقریب میدان میانگین، گرمای ویژه، پذیرفتاری الکتریکی، دمای کوری، قدرت تبدلی، میدان عرضی.

مقدمه

آثار اندازه و سطح بر گذار فاز لایه‌های نازک فروالکتریک مدتهاست که مورد بررسی است، اما به دلیل تنوع مواد فروالکتریک و مشکل آماده سازی نمونه‌های تک بلور با کیفیت بالا، تهیه گزارشهای جامع و مفید دشوار است. مرور مختصری بر برخی از نتایج تجربی زمینه بسیار مفیدی است که در اینجا به برخی از مهمترین آنها اشاره خواهیم کرد. کانزیگ و همکارانش [۱] دریافتند که اگر اندازه ذرات ریز KDP (پتاسیم دی هیدروژن فسفات) که در یک محیط نارسانا فرورفته‌اند کمتر از ۱۵۰nm باشد، هیچ گذار فاز فروالکتریکی صورت نمی‌گیرد، در حالیکه دمای گذار ذرات ریز BaTiO₃ و ذرات ریز PbTiO₃ با کاهش اندازه کاهش می‌یابد.

طبیعی است که باید خواص لایه‌های نازک فروالکتریک با خواص بلورهای کپه‌ای متفاوت باشد، زیرا نیروهای کولنی که نقش اساسی را در خواص دی الکتریک دارند، بلند بردند. برای لایه‌های فروالکتریک TGS (تری گلیسین سولفات) هادنی و توماس [۲] به این نتیجه رسیدند که با افزایش ضخامت، دمای کوری کاهش می‌یابد، در حالیکه پیش از آنها بارتا و سیلورمن [۳] کاهش دمای کوری را با کاهش ضخامت نشان داده بودند.

برای لایه‌های نازک سرامیک KNO₃ اسکات و همکارانش [۴] دریافتند که برخی نمونه‌ها افزایش دمای کوری و برخی کاهش دمای کوری را با افزایش ضخامت لایه نشان می‌دهند. این نوع فروالکتریکها را می‌توان با یک مدل شبه اسپینی به نام مدل آیزینگ عرضی (TIM) بررسی کرد. در اغلب این مباحث از سیستم نمونه نیمه‌متناهی استفاده شد، که تغییر شکل سطح قدرت تبدلی سطح را نشان می‌دهد. اما در کارهای اخیر وابستگی دمای کوری به ضخامت یک لایه نازک فروالکتریک به خوبی با تغییر سطح و ثابت تبدلی و میدان عرضی با نظریه میدان میانگین [۵] و نظریه میدان موثر [۶] مطالعه شده است. در اغلب این کارها فرض این است که پارامترهای مدل (قدرت تبدلی و میدان عرضی) تنها در خارجی‌ترین لایه‌های سطحی با مقادیر کپه‌ای تفاوت دارد [۵]. هدف ما مطالعه خواص ترمودینامیکی و میکروسکوپی لایه‌های فروالکتریک

است. در این مقاله با معرفی هامیلتونی آیزینگ، گرمای ویژه و پذیرفتاری الکتریکی لایه‌های فروالکتریک را مورد بررسی قرار داده و نتایج حاصل را با نتایج مربوط به حالت کپه‌ای مقایسه خواهیم کرد.

نظریه و تحلیل نتایج

توصیف یک لایه فروالکتریک در مدل آیزینگ

هامیلتونی مدل آیزینگ عرضی را می‌توان به شکل زیر نوشت :

$$H = -\sum_i \Omega_i S_i^x - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z \quad (1)$$

در اینجا S_i^x و S_i^z مولفه‌های عملگر اسپین $1/2$ در جایگاه i هستند که قطبش موضعی P_i با گرمای میانگین S_i^z متناسب است و Q_i میدان عرضی است (که برای فروالکتریک‌هایی که دارای پیوند هیدروژنی هستند، توانایی یک پروتون به تونل زنی از حالتی به حالت دیگر را نشان می‌دهد) و J_{ij} توانایی تبادل بین شبه اسپینهای مکانهای i ام و j ام است که i و j روی همه نقاط شبکه اعتبار دارند. فرض می‌کنیم Ω_i در لایه‌های اتمی سطحی Ω_s و در مکانهای دیگر Ω باشد، و ثابت برهم‌کنش نزدیکترین همسایه برای هر دو شبه اسپین در لایه‌های سطحی J_s و در مکانهای دیگر J باشد. در شکل ۱ لایه‌های اتمی دیده می‌شوند که در آن میدان عرضی و برهم‌کنش بین شبه اسپین‌ها در لایه‌های سطحی با لایه‌های کپه‌ای تفاوت دارد.

میدان مولکولی در فضای شبه اسپین به صورت $A(A_x, A_y, A_z)$ است که با متغیرهای اسپین برهم‌کنش می‌کند. در این مدل میدان عرضی در راستای محور x فرض می‌شود، و لایه‌ها در امتداد محور z روی هم قرار دارند.

$$A_n = (\Omega_n, 0, \sum_j J_{nj} \langle S_j^z \rangle) \quad (2)$$

فرض می‌کنیم میانگین گرمایی اسپین در سراسر هر لایه اتمی یکسان باشد. قطبش موضعی با R_n^z متناسب است که برای سادگی در نوشتار آن را با R نمایش می‌دهیم :

[۷]

$$R_n = \langle S_n \rangle = \frac{1}{2} \frac{A_n^z}{|A_n|} \tanh \left[\frac{|A_n|}{2K_B T} \right] \quad (3)$$

Figure 1 consists of two 6x6 grids, (a) and (b), representing the N layer of a quantum circuit. The grids are labeled (a) and (b) at the bottom. Grid (a) shows a sequence of CNOT gates between qubits 0-1, 1-2, 2-3, 3-4, 4-5, and 5-0. Grid (b) shows a sequence of CNOT gates between qubits 0-1, 1-2, 2-3, 3-4, 4-5, and 5-0, followed by a layer of single-qubit rotation gates $R(2\pi/3)$ on each qubit.

روابط زیر به دست می‌آیند. برای لایه‌های سطحی

$$R_2 = \frac{4J_s R_2 + J_s R_1 + J R_3}{2L_2} \cdot \tanh \frac{L_2}{2K_R T} \quad (6)$$

$$R_n = \frac{4J R_n + J R_{n-1} + J R_{n+1}}{2L_n} \cdot \tanh \frac{L_n}{2K_R T} \quad (7)$$
$$L_1 = \sqrt{\Omega_s^2 + (4J_s R_1 + J_s R_2)^2} \quad (V)$$

$$L_2 = \sqrt{\Omega_s^2 + (4J_s R_2 + J_s R_1 + J R_3)^2} \quad (\Lambda)$$

$$L_n = \sqrt{\Omega^2 + (4JR_n + jR_{n-1} + JR_{n+1})^2} \quad (9)$$

محاسبه گرمای ویژه و تحلیل نتایج

در اینجا روش عددی میدان میانگین را برای محاسبه گرمای ویژه لایه‌های نازک فروالکتریک به کار می‌بریم. با میانگین‌گیری از هامیلتونی آیزینگ عرضی و مشتق آن نسبت به دما، گرمای ویژه را برای پارامترهای مختلف سیستم بر حسب دما رسم می‌کنیم، سپس پذیرفتاری الکتریکی یک لایه نازک فروالکتریک را محاسبه کرده و تاثیر سطح و ضخامت را روی رفتار ایستایی آن بررسی می‌کنیم.

با استفاده از میدان میانگین عددی، رهیافت کاریکو و کاملی [۸] در ۱۹۹۲ را برای محاسبه گرمای ویژه از انرژی داخلی $\langle H \rangle$ دنبال می‌کنیم. انرژی داخلی را می‌توان با میانگین‌گیری از هامیلتونی (۱) به دست آورد.

$$\langle H \rangle = - \sum_i \Omega_i \langle S_i^x \rangle - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle \quad (10)$$

گرمای ویژه در یاخته یک، از مشتق عددی انرژی داخلی بدست می‌آید.

$$C_v = \frac{\partial \langle H \rangle}{N \partial T} \quad (11)$$

در اینجا N تعداد کل لایه‌هاست. به عنوان مثال برای یک فیلم دوازده لایه‌ای با دو لایه سطحی، میانگین گرمایی S_i^z در فاز فروالکتریک در لایه‌های سطحی به شکل زیر است:

$$R_1^x = \frac{\Omega_x}{2L_1} \tanh \frac{L_1}{2K_B T} = \frac{\Omega_s}{4J_s R_1 + J_s R_2} R_1 \quad (12)$$

$$R_2^x = \frac{\Omega_s}{4J_s R_2 + J_s R_1 + J R_3} R_2 \quad (13)$$

و برای لایه‌های کپه به صورت زیر است:

$$R_n^x = \frac{\Omega}{4J R_n + J R_{n-1} + J R_{n+1}} R_s \quad (14)$$

در روابط بالا $R_n = R_n^z = \langle S_n^z \rangle$ است. با نشان دادن این عبارتها به جای میانگین اسپین‌ها در انرژی داخلی (۹) می‌توان گرمای ویژه را از رابطه (۱۰) به دست آورد. در دماهای بالاتر از دمای کوری لایه از فاز فروالکتریک به فاز پارالکتریک تغییر فاز می‌دهد که در فاز پارالکتریک $R_n^z = 0$ است، و از آنجا که در دمای گذار L_n ها به سمت

میدان عرضی میل می‌کنند، مولفه‌های عرضی میانگین اسپین‌ها از روابط زیر به دست می‌آیند:

$$R_1^x = R_2^x = \frac{1}{2} \tanh \frac{\Omega_s}{2K_B T} \quad (15)$$

$$R_n^x = \frac{1}{2} \tanh \frac{\Omega}{2K_B T} \quad (16)$$

که در این روابط $n \geq 3$ است. لذا در فاز پارالکتریک انرژی داخلی دارای شکل کلی زیر است:

$$\langle H \rangle = -N_s \Omega_s \tanh \left(\frac{\Omega_s}{2K_B T} \right) - \frac{(N - 2N_s)}{2} \Omega \tanh \left(\frac{\Omega}{2K_B T} \right) \quad (17)$$

که گرمای ویژه از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$\frac{C_V}{K} = \frac{N_s}{2N} \left(\frac{\Omega_s}{K_B T \cosh \left(\frac{\Omega_s}{2K_B T} \right)} \right)^2 + \frac{N - 2N_s}{4N} \left(\frac{\Omega}{K_B T \cosh \left(\frac{\Omega}{2K_B T} \right)} \right)^2 \quad (18)$$

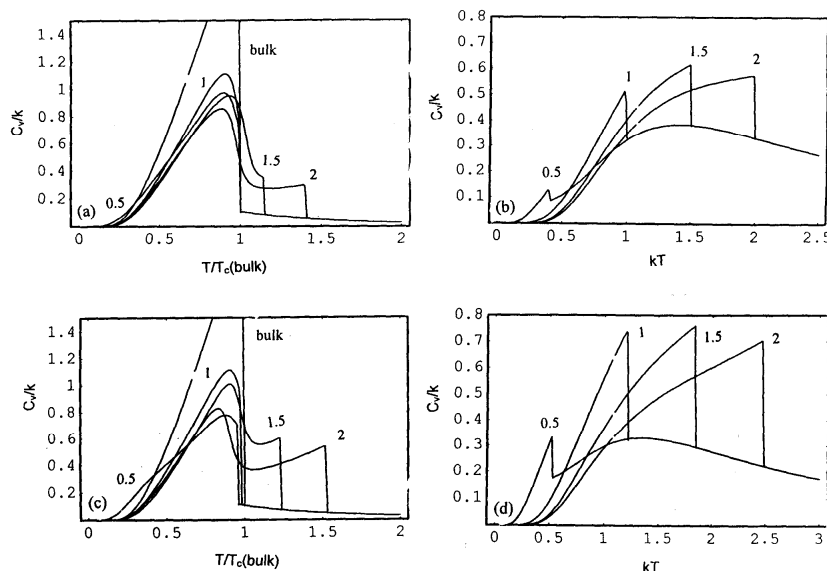
در روابط بالا N_s تعداد لایه‌های سطحی است. با توجه به این معادلات، برای فاز پارالکتریک ثابتهای تبدیلی J_s و J دیده نمی‌شوند، لذا در این فاز تنها مولفه عرضی R_n^x است، که به وسیله میدان عرضی Ω و Ω_s منظم می‌شود.

برای محاسبه گرمای ویژه در فاز فروالکتریک باید معادلات (۱۲) تا (۱۴) را در هامیلتونی سیستم معادله (۱) قرارداد و با استفاده از روش مشتق‌گیری عددی از معادله (۱۱) گرمای ویژه را برای دماهای مختلف بدست آورد. در شکل (۲) گرمای ویژه بر حسب دما برای یک فیلم دوازده لایه‌ای با یک لایه سطحی و پارامترهای مختلف رسم شده است، که هر منحنی برای Ω/J و Ω_s/J ثابت است. و مقدار J_s/J به صورت برجسته روی هر منحنی مشخص شده است. آشکارترین وجه اشتراک منحنیهای گرمای ویژه، خمیدگی و جابه‌جایی ناپیوسته قله‌هاست.

منحنی $J_s/J = 1$ شکل ۲-الف مربوط به لایه‌ای است که پارامترهای سطح و کپه آن مساوی هستند. در دمای بحرانی T_c لایه (دمای کوری سطحی) یک ناپیوستگی در C_V وجود دارد، به

دلیل کم بودن تعداد همسایه‌های هر شبه اسپین در سطح نسبت به همسایه‌ها درون کپه است که این عامل باعث کاهش شدید ارتفاع قله در مقایسه با حالت کپه‌ای می‌شود. زیر دمای T_c (دمای کوری) منحنی‌های مربوط به لایه در مقایسه با منحنی کپه به طور قابل ملاحظه‌ای عریض می‌شوند، که این عامل به دلیل اندازه محدود لایه است. منحنی $J_s/J = 0.5$ شبیه منحنی $J_s/J = 1$ است، اما مقدار آن در T_c کمی پایینتر است. منحنیهای $J_s/J = 2$ و $J_s/J = 1.5$ در T_c لایه که بزرگتر از T_c کپه است، ناپیوستگی نشان می‌دهند. این به دلیل تفاوت برهم‌کنش شبه اسپین‌ها و میدان عرضی در سطح کپه است. قله‌های منحنی‌های شکل ۲-الف در حوالی ناپیوستگی‌هایی که در یک نمونه نیمه متناهی رخ می‌دهند، شکل می‌گیرد. در فاز پاراکتریک همه منحنیهای شکل ۲-الف و شکل‌های بعدی صرفاً با Ω و Ω_s تعیین می‌شوند. شکل ۲-ب برای $\Omega/J = 3.5$ بالاتر از مقدار بحرانی ۳ رسم شده است که در این حالت کپه هیچ گذار فازی را نشان نمی‌دهد و در فاز پاراکتریک است. لذا منحنیهای این حالت بر حسب KT رسم شده‌اند. اما از آنجا Ω_s/J و Ω/J هر دو کمتر از ۳ هستند. گذار فاز سطحی در همه منحنیها دیده می‌شود. شکل‌های ۲-پ و ۲-ت گرمای ویژه بر حسب دما را برای یک فیلم دوازده لایه‌ای با دو لایه سطحی نشان می‌دهد که پارامترها همان پارامترهای قبل هستند.

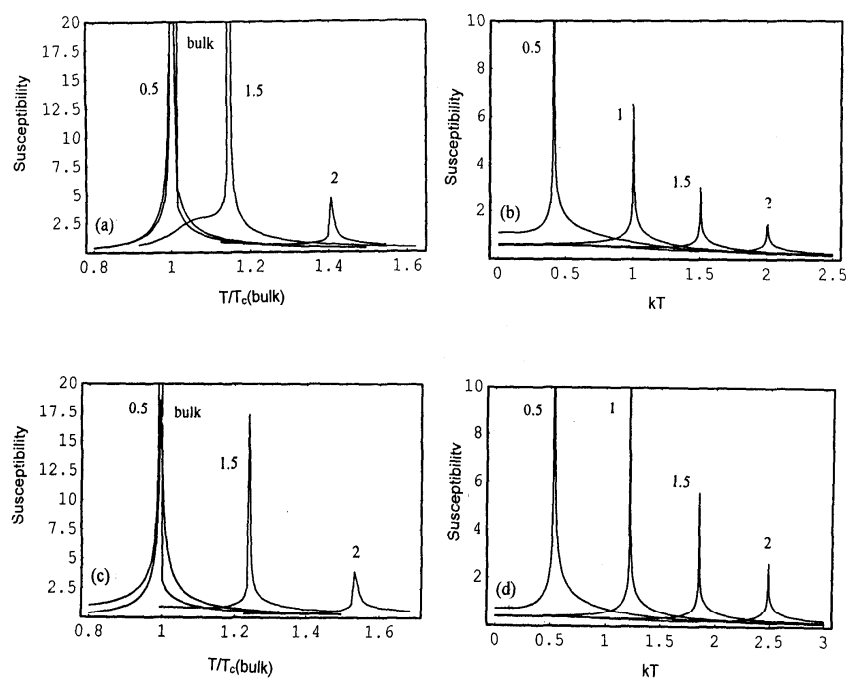
منحنیهای گرمای ویژه این پارامترها یک ناپیوستگی در دمای کوری لایه $T_c(\text{film})$ نشان می‌دهند، که بلندی قله این ناپیوستگی‌ها با افزایش J_s/J افزایش می‌یابد. تفاوت کلی شکل‌های ۲-الف و ۲-ب، با ۲-پ و ۲-ت در افزایش ویژگیهای سطحی و



شکل ۲ گرمای ویژه بر حسب دما برای یک فیلم دوازده لایه‌ای. (الف) $\Omega_s/J = 1, \Omega/J = 1, N_s = 1$

(ب) $\Omega_s/J = 1, \Omega/J = 3.5, N_s = 1$ (پ) $\Omega_s/J = 1, \Omega/J = 1, N_s = 2$

(ت) $\Omega_s/J = 1, \Omega/J = 3.5, N_s = 2$



شکل ۳ گرمای ویژه بر حسب دما برای فیلم بیست لایه‌ای با $\Omega/J=1, \Omega_s/J=1$

(الف) $N_s=1$ (ب) $N_s=2$

کاهش ویژگیهای کپهای است. در شکل ۲-الف ناپیوستگیهای $T_c(\text{bulk})$ کاهش یافته و نیز ناپیوستگیهای شکل ۲-ت بزرگتر از شکل ۲-ب است. گرمای ویژه لایه در فاز پارالکتریک با آن بخش از مقدار کپهای که در همه شکلهای حضور دارد منطبق است، و دلیل آن قراردادن $\Omega_s = \Omega$ در محاسبات است.

به سادگی میتوان از معادله (۱۶) دریافت که این حالت برای $\Omega_s \neq \Omega$ صادق نیست و گرمای ویژه فاز پارالکتریک میتواند به هر مقدار بالاتر یا پایتتر از مقادیر کپهای مربوطه جابه‌جا شود. شکل ۳ نمودارهای گرمای ویژه را برای یک فیلم بیست لایه‌ای به ترتیب برای $N_s=1$ و $N_s=2$ نمایش می‌دهد. در این نمودارها به دلیل افزایش ضخامت،

آثار سطحی (خمش و جابه‌جایی) در مقایسه با نمودارهای ۲-الف و ۲-ب به طور چشمگیری کمتر است.

محاسبه پذیرفتاری الکتریکی و تحلیل نتایج

خواص دی الکتریکی لایه‌های فروالکتریک در عمل مهم هستند. در این بخش تاثیر سطح و ضخامت را روی رفتار ایستایی پذیرفتاری الکتریکی محاسبه می‌کنیم و نمودارهای پذیرفتاری را بر حسب دما رسم کرده و آنها را تفسیر خواهیم کرد. گذار فاز معمولاً با یک ناهنجاری در پذیرفتاری الکتریکی آشکار می‌شود. برای بررسی پذیرفتاری الکتریکی، یک میدان الکتریکی یکنواخت ضعیف را در سرتاسر لایه فروالکتریک اعمال می‌کنیم. لذا به هامیلتونی رابطه (۱) جمله‌ای به صورت زیر اضافه می‌شود.

$$H_{\text{ext}} = -2\mu E \sum_i^m S_i^z \quad (19)$$

این جمله برهم‌کنش قطبش را با میدان الکتریکی یکنواخت E توصیف می‌کند. در این رابطه m تعداد پیوندهای هیدروژنی در واحد سطح و μ ضریبی است که گشتاور جابه‌جایی یونی را با عملگر شبه اسپین S_i^z مربوط می‌کند.

برای محاسبه پذیرفتاری الکتریکی از روابط بخش قبل استفاده می‌کنیم، با این تفاوت که اکنون میدان متوسطی که روی صفحه i ام عمل می‌کند به صورت زیر است:

$$A_i = \left(\Omega_i, O, \sum_j J_{ij} R_j^z + 2\mu E \right) \quad (20)$$

قطبش لایه n ام از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$P_n = 2m\mu R_n^z \quad (21)$$

و پذیرفتاری ایستای لایه n ام از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\epsilon_0 \chi_n = \left. \frac{\partial P_n}{\partial E} \right|_{E=0} = 2m\mu \left. \frac{\partial R_n}{\partial E} \right|_{E=0} \quad (22)$$

با استفاده از معادلات فیلمی با دو لایه سطحی می‌توان پذیرفتاری الکتریکی را در هر لایه محاسبه کرد. با مشتق‌گیری از رابطه (۲۱) نسبت به E و با استفاده از معادلات جبری (۳) تا (۵) به دستگاه معادلات خطی زیر می‌رسیم:

$$\left[\left(\frac{df}{dx} \right)^{-1} - 4J_s \right] K_1 - J_s K_2 = 1 \quad (23)$$

$$-J_s K_1 + \left[\left(\frac{df}{dx} \right)^{-1} - 4J_s \right] K_2 - JK_3 = 1 \quad (24)$$

$$-J_s K_{n-1} + \left[\left(\frac{df}{dx} \right)^{-1} - 4J \right] K_n - JK_{n+1} = 1 \quad (25)$$

که در معادله (۲۵) $3 \geq n$ است و $\chi_i = \left(\frac{4m\mu^2}{\epsilon_0} \right) K_i$ و تابع $f(x)$ به صورت زیر

تعریف می‌شود:

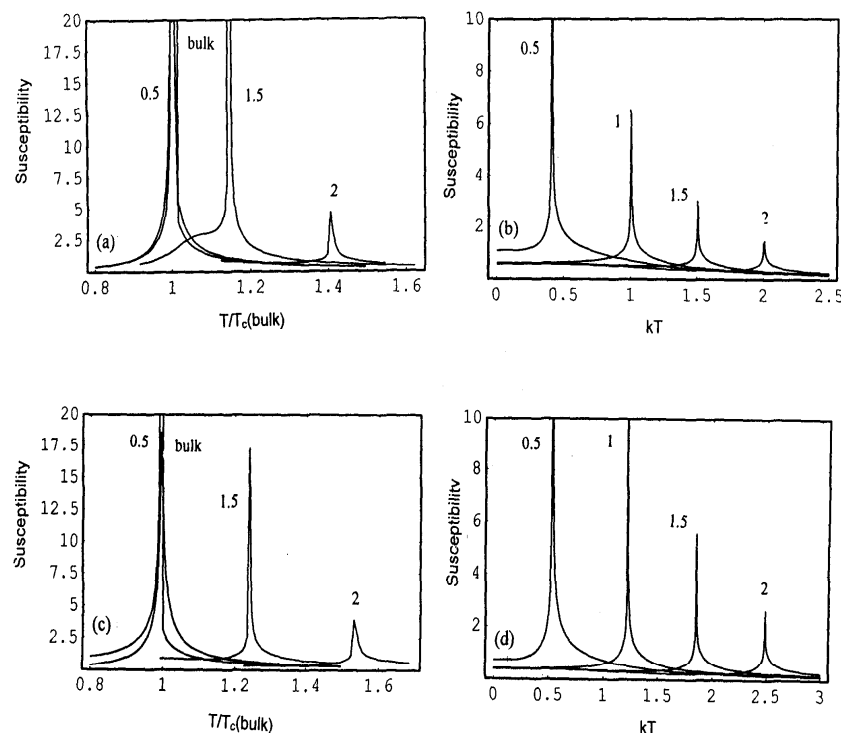
$$f(x) = \frac{x}{2\sqrt{a^2 + x^2}} \tanh \frac{\sqrt{a^2 + x^2}}{2K_B T} \quad (26)$$

که در این رابطه برای لایه‌های سطحی $a = \Omega_s$ و برای لایه‌های کپه‌ای $a = \Omega$ است. X معرف برهم‌کنش هر شبه اسپین با نزدیکترین همسایه‌هایش خواهد بود، که برای اولین لایه سطحی $X = 4J_s R_1 + J_s R_2$ و برای دومین لایه سطحی $X = JR_{n-1} + 4JR_n + JR_{n+1}$ و برای لایه‌های کپه‌ای $X = J_s R_1 + 4J_s R_2 + JR_3$ است. در این حالت لایه‌ها به صورت خازنهایی عمل می‌کنند که متوالی متصل شده‌اند. میانگین پذیرفتاری لایه از رابطه زیر تعیین می‌شود:

$$(1 + \chi)^{-1} = N^{-1} \sum_{n=1}^N (1 + \chi_n)^{-1} \quad (27)$$

که در آن N تعداد کل لایه‌های فیلم است. وابستگی دمایی پذیرفتاری دی‌الکتریک در شکل ۴-الف و ۴-ب برای یک فیلم دوازده لایه‌ای با یک لایه سطحی و Ω/J و Ω_s/J ثابت رسم شده‌اند، که مقدار J_s/J به صورت برجستگی روی هر منحنی مشخص شده است. با توجه به روابط (۲۱) تا (۲۳) مشاهده می‌شود که پذیرفتاری دی‌الکتریک در

دمای کوری واگرا می‌شود. در شکل ۴-الف وقتی قدرت تبادلی سطح از مقدار بحرانی کوچکتر است $(J_s/J)_c = 1.25$ ، منحنی شبیه به حالت کپه است، به استثناء اینکه قله به سمت دماهای پایینتر منتقل می‌شود، و مقدار آن نیز چنانکه، در منحنی مربوط به $J_s/J = 0.5$ دیده می‌شود، کاهش می‌یابد. نسبت J_s/J کوچکتر به انتقال بیشتر قله به دماهای پایینتر و کاهش مقدار آن می‌انجامد. هنگامی که قدرت تبادلی سطح به سمت مقدار بحرانی افزایش می‌یابد، قله به دماهای بالاتر جابه جا می‌شود، افزایش قدرت تبادلی به مقادیر بزرگتر از مقدار بحرانی $(J_s/J)_c$ باعث انتقال بیشتر و کاهش ارتفاع قله می‌شود. نکته دیگری که در شکل ۴-الف دیده می‌شود، وجود یک برآمدگی در منحنی $J_s/J = 1.5$ است، که در مورد منحنی $J_s/J = 2$ این برآمدگی خیلی مشهود نیست. این برآمدگی در حوالی دمای کوری کپه دیده می‌شود. در واقع قله‌های کپه‌ای خمیده هنگامی مشاهده می‌شوند، که یک تغییر قابل توجهی در قطبش جایگاه‌های دور از سطح (عمق) روی دهد، به طوریکه قله خمیده به شدت به وسیله قله‌های مربوط به سطح فرونشانده شده و به شکل یک برآمدگی در منحنی $J_s/J = 1.5$ دیده می‌شود. مقدار $J_s/J = 3.5$ در شکل ۴-ب بزرگتر از مقدار بحرانی 3 است. به این دلیل در این



شکل ۴ پذیرفتاری بر حسب دما برای فیلمهای دوازده لایه‌ای.

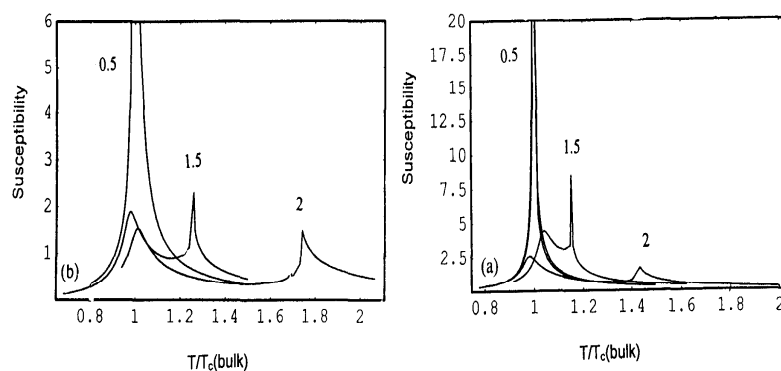
(الف) $\Omega_s/J = 1, \Omega/J = 1, N_s = 1$ (ب) $\Omega_s/J = 1, \Omega/J = 3.5, N_s = 1$

(پ) $\Omega_s/J = 1, \Omega/J = 1, N_s = 2$ (ت) $\Omega_s/J = 1, \Omega/J = 3.5, N_s = 2$

بامقادیر J_s/J مربوطه برچسب زده شده‌اند

حالت گذار فازی در کپه وجود ندارد. واگرایی‌های پذیرفتاری الکتریکی در دمای کوری با افزایش J_s/J بزرگ می‌شوند و مقدار آنها در مقایسه با مقدار کپه‌ای مربوطه کاهش می‌یابد.

مباحث قبل را می‌توان برای شکل‌های ۴-پ و ۴-ت مربوط به فیلمی با دو لایه سطحی است به کاربرد، جز اینکه در این منحنی‌ها انتقال و کاهش قله‌ها نسبت به منحنی مربوط به کپه کمتر است و از قله خمیده حوالی دمای کوری در این حالت خیلی کوچکتر از قبل است. شکل ۵ پذیرفتاری الکتریکی فیلم بیست لایه‌ای را به ترتیب برای $N_s = 1$ و $N_s = 2$ نشان می‌دهد. قله‌های خمیده حوالی دمای کوری در مقایسه با نمودارهای ۴-الف و ۴-ب برجسته‌تر است. به سادگی می‌توان دید که چگونه کوچک بودن ضخامت فیلم و بزرگ بودن تعداد لایه‌های سطحی باعث افزایش ویژگی‌های سطحی اعم از خمش، انتقال و کاهش قله‌های منحنی‌های پذیرفتاری الکتریکی می‌شوند.



شکل ۵ پذیرفتاری بر حسب دما برای فیلم بیست لایه‌ای با $\Omega/J = 1, \Omega_s/J = 1$

(الف) $N_s = 1$ (ب) $N_s = 2$

نتیجه

نظریه میدان میانگین را برای لایه‌های نازک فروالکتریک که با استفاده از مدل آیزینگ توصیف شده‌اند بسط داده‌ایم و با توصیفی از انرژی داخلی سیستم، گرمای ویژه و پذیرفتاری الکتریکی لایه‌های نازک فروالکتریک را بر حسب دما بررسی کردیم. قله‌های طرح گرمای ویژه در دمای کوری دارای خمش و جابه‌جایی هستند، وقتی قدرت تبدلی پایتتر از مقدار بحرانی است، قله‌های خمیده به سمت دماهای پایتتر منتقل می‌شوند و برعکس وقتی قدرت تبدلی از مقدار بحرانی بیشتر می‌شود، این قله‌ها به دماهای بالاتر جابه‌جا می‌شوند. با افزایش تعداد لایه‌های سطحی که در حقیقت عمق نفوذ آثار سطحی را نشان می‌دهد، زیر دمای کوری قله‌های گرمای ویژه به مقادیر پایتتر افت می‌کنند. در بالای دمای کوری برای مقادیر تبدلی نسبی (J_s/J) فراتر از مقدار بحرانی $1/25$ ، قله‌ها به مقادیر بزرگتر منتقل می‌شوند.

پذیرفتاری الکتریکی لایه‌های فروالکتریک در دمای کوری نامتناهی می‌شوند، اما اگر قله آن از حالت کپه‌ای جابه‌جا شود مقدار آن خیلی کوچکتر خواهد شد. اگر قدرت تبدلی سطح بزرگتر از مقدار بحرانی شود یک قله خمیده در حوالی دمای کوری کپه وجود خواهد داشت. خلاصه این که هر چه لایه ضخیم‌تر شود، ویژگیهای مربوط به سطح ضعیفتر و مشخصات کپه محسوستر می‌شوند.

مراجع

1. Jacord A., Kanzig W., Peter M., *Helv. Phys. Acta* **26** (1953) 521-44.
2. Hadni A., Thomas A., *Thin Solid Films* **81** (1981) 247-56, and, *Ferroelectrics* **59** (1984) 221-32.
3. Barta I.P., Silverman G.D., *Solid State Commun.* **11** (1972) 291-4.
4. Scott J.F., Duiker H.M., Beal P.D., Pouligny B., Dimmer K., Darris M., Butler D., Eatons J., *Physica B.* **150** (1988) 160-7.
5. Wang C.L., Zhong W.L., Zhang P.L., *J. of Phys.: Condens Matter* **3** (1992b) 4743-9.
6. Wang Xuan – Zhang, Zhao Yan, *Physica A* **193** (1993) 133-40.
7. Cottam M.G., Tilley D.R., Zeks B., *J. Phys. C: Solid State Phys.* **17** (1984) 1793-823.
8. Carrico A.S., Camley R.E., *Phys. Rev. B* **45** (1992) 13117-20.