

Исследование изменения размеров доменов полимерной сегнетоэлектрической системы во внешнем электрическом поле

Т.О. Петрова¹, О.Г. Максимова², Р.А. Герасимов¹, А.В. Максимов²

¹Южный федеральный университет, 344006, Ростов-на-Дону, Россия
to_87@bk.ru

²Череповецкий государственный университет, 162600, Череповец, Россия

С помощью метода Монте-Карло проведено изучение влияния внешнего электрического поля на свойства фазовых переходов и размеров домена в полимерных сегнетоэлектрических системах. Показано, что включение поля приводит к изменению размеров домена, увеличению критической температуры T_C и «размытию» фазового перехода.

Investigation of the change in the dimensions of the domains of a polymer ferroelectric system in an external electric field

T.O. Petrova¹, O.G. Maksimova², R.A. Gerasimov¹, A.V. Maksimov²

¹Southern Federal University, 344006, Rostov-on-Don, Russia

²Cherepovets State University, 162600, Cherepovets, Russia

Using the Monte Carlo method carried out to study the influence of an external electric field on the properties of phase transitions and the domain sizes in the ferroelectric polymer systems. It is shown that the inclusion of the field leads to a change in the domain size, an increase in the critical temperature of the T_C , and a "blurring" of the phase transition.

Целью данной работы является исследование размеров домена во внешнем электрическом поле в полимерных сегнетоэлектрических системах.

В качестве модели использована модифицированная трехмерная решеточная модель Готлиба. Энергия взаимодействия сегментов описана потенциалом Штокмайера, представляющим собой потенциал Леннарда-Джонса с дополнительными слагаемыми, учитывающими как энергию ориентационных внутри- и межмолекулярных взаимодействий, так и взаимодействие сегментов макромолекул с внешним электрическим полем. Следует отметить, что значения потенциалов ориентационных взаимодействий зависят от температуры, в отличие от взаимодействий, описываемых потенциалом Леннарда-Джонса. Показано, что с ростом температуры вклад энергии ориентационных взаимодействий в общий потенциал системы становится все менее значительным, причем этот факт оказывает влияние на плотность расположения сегментов и, соответственно, на относительные размеры системы.

Рассчитаны температурные зависимости межцепного расстояния и дальнего ориентационного порядка при различных значениях глубины потенциальной ямы в потенциале Леннарда-Джонса и напряженности внешнего электрического поля. Увеличение внешнего электрического поля смещает точку фазового перехода в сторону более высоких температур и приводит к «размытию» этого перехода, что подтверждается расчетами температурных зависимостей восприимчивости. Показано, что введение электрического поля приводит к уменьшению поперечных и увеличению продольных размеров домена, причем в системах с меньшим значением глубины потенциальной ямы изменение размеров домена становится более значительным.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ «Методы микроструктурного нелинейного анализа, волновой динамики и механики композитов в исследовании и дизайне современных метаматериалов и элементов конструкций на их основе» (№ 15-19-10008).