

Микро- и наноэлектроника. Физика конденсированного состояния
Micro- and nanoelectronics. Condensed matter physics

УДК 537.226.8

<https://doi.org/10.32362/2500-316X-2026-14-2-103-112>

EDN OEWULY



НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

Моделирование резонансного возбуждения терагерцевым излучением решеточной подсистемы сегнетоэлектрика в условиях неравновесного состояния

Н.Э. Шерстюк[®], К.А. Брехов, Е.Д. Мишина

МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, 119454 Россия

[®] Автор для переписки, e-mail: nesherstuk@mail.ru

• Поступила: 28.03.2025 • Доработана: 21.10.2025 • Принята к опубликованию: 16.02.2026

Резюме

Цели. Поиск принципиально нового наиболее быстрого и наименее диссипативного способа управления ферроидным параметром порядка является актуальной и весьма амбициозной задачей фундаментальных и прикладных исследований в области разработки малодиссипативных и быстродействующих функциональных элементов информационных систем, оперирующих на терагерцевых (ТГц) частотах, для сетевых технологий 6G¹. Целью работы является исследование условий модуляции поляризации сегнетоэлектрика при помощи короткого ТГц-импульса, в т.ч. изучение влияния дополнительных факторов на эффективность ТГц-индуцированной динамики ферроидного параметра порядка.

Методы. Численное моделирование резонансного возбуждения ТГц-излучением решеточной подсистемы проводилось для сегнетоэлектрической пленки титаната бария-стронция $Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO_3$ на основе системы уравнений, состоящей из уравнения Ландау – Халатникова и уравнения колебаний фононной моды, где в качестве вынуждающей силы выступает фонон-фононное взаимодействие. Новизна подхода заключается во взаимодействии ТГц-импульса с ранее когерентно возбужденной фононной модой, имеющей значительную амплитуду.

Результаты. Представлены временные зависимости поляризации, а также эффективной амплитуды колебаний инфракрасно-активной моды при варьировании параметров ТГц-поля и констант разложения термодинамического потенциала неравновесного состояния в виде ряда по степеням параметра порядка в разных режимах воздействия, включая изменение температуры и дополнительное воздействие внешнего электрического поля.

Выводы. Предложенный подход описывает переключение поляризации под действием ТГц-импульса при предварительном возбуждении когерентного фонона фемтосекундным оптическим импульсом. Наиболее важным параметром, определяющим пороговое воздействие ТГц-импульса на возбуждение фонона, является энергия (амплитуда) импульса. В области малых амплитуд увеличение температуры не приводит к ухудшению условий переключения.

¹ Sixth generation – шестое поколение мобильной связи. [Sixth generation of mobile communications technology].

Ключевые слова: терагерцевое излучение, сегнетоэлектрики, поляризация, резонансное возбуждение, фононные моды

Для цитирования: Шерстюк Н.Э., Брехов К.А., Мишина Е.Д. Моделирование резонансного возбуждения терагерцевым излучением решеточной подсистемы сегнетоэлектрика в условиях неравновесного состояния. *Russian Technological Journal*. 2026;14(2):103–112. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2026-14-2-103-112>, <https://www.elibrary.ru/OEWULY>

Прозрачность финансовой деятельности: Авторы не имеют финансовой заинтересованности в представленных материалах или методах.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

RESEARCH ARTICLE

Modeling of resonant excitation of ferroelectric lattice subsystem by terahertz radiation under nonequilibrium conditions

Natalia E. Sherstyuk[@], Kirill A. Brekhov, Elena D. Mishina

MIREA – Russian Technological University, Moscow, 119454 Russia

[@] Corresponding author, e-mail: nesherstuk@mail.ru

• Submitted: 28.03.2025 • Revised: 21.10.2025 • Accepted: 16.02.2026

Abstract

Objectives. The search for a fundamentally new, fast, and least dissipative method for controlling the ferroic order parameter is a pressing and ambitious task of basic and applied research on the development of low-dissipation and high-speed functional elements of information systems operating at terahertz (THz) frequencies for 6G² network technologies. The aim of the work is to study the conditions for modulating ferroelectric polarization using a short THz pulse. This will also include the influence of additional factors on the efficiency of the THz-induced dynamics of the ferroic order parameter, such as stationary heating and the application of an additional electric field to the ferroelectric.

Methods. The numerical simulation of resonant excitation of the lattice subsystem by THz radiation was performed for a Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO₃ ferroelectric film using the Landau–Khalatnikov equation system, and the equation of phonon mode oscillations with the phonon–phonon interaction as a driving force. The novelty of the proposed approach lies in the interaction of the THz pulse with a previously coherently excited phonon mode with a significant amplitude.

Results. The time dependencies were presented for the polarization and the effective amplitude of infrared-active mode oscillations with varying THz field parameters. The results also included constants of expansion of the thermodynamic potential of the nonequilibrium state in powers of order parameter in various exposure modes, including temperature changes and the application of an additional external electric field.

Conclusions. The approach proposed herein describes polarization switching under the action of a THz pulse with preliminary excitation of a coherent phonon by a femtosecond optical pulse. The most important parameter when determining the threshold effect of a THz pulse on phonon excitation is pulse energy (amplitude). In the region of small amplitudes, an increase in temperature does not exacerbate switching conditions.

Keywords: terahertz radiation, ferroelectrics, polarization, resonant excitation, phonon modes

² Sixth generation of mobile communications technology.

For citation: Sherstyuk N.E., Brekhov K.A., Mishina E.D. Modeling of resonant excitation of ferroelectric lattice subsystem by terahertz radiation under nonequilibrium conditions. *Russian Technological Journal*. 2026;14(2):103–112. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2026-14-2-103-112>, <https://www.elibrary.ru/OEWULY>

Financial disclosure: The authors have no financial or proprietary interest in any material or method mentioned.

The authors declare no conflicts of interest.

ВВЕДЕНИЕ

Разработка устройств терагерцевого (ТГц) диапазона является одним из наиболее актуальных направлений в области современной микро(нано)электроники и фотоники. Помимо получивших уже широкое распространение методов ТГц-спектроскопии и визуализации для диагностики материалов, в настоящее время все большее внимание исследователи уделяют системам и функциональным устройствам ТГц-диапазона, предназначенным для управления и контроля ТГц-сигналами [1, 2]. Показано, что использование ТГц-диапазона (0.1–10 ТГц) для передачи данных обеспечивает высокую пропускную способность и плотность данных и рассматривается как наиболее перспективный подход для сетевых технологий 6G³ [3, 4].

Одной из ключевых проблем в данном направлении является поиск новых материалов, обеспечивающих эффективный оптический и/или электрический контроль генерации, детектирования и распространения ТГц-излучения. Сегнетоэлектрические материалы играют важную роль в исследованиях функциональных устройств, работающих в ТГц-диапазоне, из-за их времени отклика, малых диэлектрических потерь и перестраиваемости. Продемонстрированная в ряде работ возможность оптической манипуляции диэлектрической проницаемостью тонких сегнетоэлектрических пленок позволяет ожидать значительную глубину модуляции в ТГц-области и имеет большое значение для разработки полностью оптических и гибридных чипов.

В связи с этим актуальной является задача о возбуждении мягкой моды сегнетоэлектрика и переключении за счет такого возбуждения поляризации сегнетоэлектрика коротким ТГц-импульсом. В первых работах по ТГц-возбуждению относительно малыми полями (до 100 кВ/см) сообщалось о когерентном возбуждении полярных мод малой амплитуды: в кристаллах титаната стронция SrTiO₃ [5], сегнетоэлектриках-релаксорах [6], органическом сегнетоэлектрике [7]. Достигнутый за последние годы прогресс в разработке ТГц-источников, позволяющих генерировать импульсы (в т.ч. одиночные) большой

мощности, позволил наблюдать не только возбуждение когерентных фононов, но и сверхбыстрое, за субпикосекундные времена, переключение поляризации. Такое переключение регистрировалось либо напрямую методами рентгеновской дифракции [8–11], либо оптическими методами [12–14]. В последних работах обсуждалось также, что воздействие сверхкороткого электромагнитного импульса может приводить к двум типам переключения поляризации: перманентному, при котором индуцированное внешним воздействием переключение в противоположное поляризационное состояние сохраняется после окончания воздействия, и динамическому, в результате которого после воздействия ТГц-импульса поляризационное состояние может несколько раз переключиться в противоположное и обратно, и в конце концов система релаксирует к исходному состоянию.

Если для прямого воздействия на мягкую моду задача в некотором смысле решена, то влияние фонон-фононного взаимодействия на рассматриваемые процессы активно обсуждается до настоящего времени. В ряде работ предложен подход, основанный на уравнении Ландау – Халатникова [15], в котором воздействие на мягкую моду обсуждается в рамках модели связи рамановской и инфракрасно-активной (ИК) моды [16, 17]. В работах [13, 18] для описания процессов сверхбыстрого переключения поляризации предложен подход, основанный на нелинейной связи между низкочастотной полностью симметричной фононной модой A_1 , которая включает движение катионов и анионов материала таким образом, что это изменяет электрическую поляризацию, и наиболее высокочастотной ИК-активной фононной модой. При этом процессы переключения обсуждаются в терминах смещения ионов кристаллической решетки, описываемых обобщенными координатами Q_P и Q_{IR} , а связь между модами пропорциональна произведению обобщенной координаты полярной моды на квадрат ИК-моды. Это позволяет предположить различные условия переключения для векторов поляризации, направленных до начала воздействия в противоположных направлениях. Однако в работе [19] указано на ошибочность такого представления в силу симметрии преобразования и предлагается рассматривать в качестве основного члена произведения квадратов обобщенных координат полярной и ИК-мод. При этом указано, что

³ Sixth generation – шестое поколение мобильной связи. [Sixth generation of mobile communications technology].

произведения первых степеней обобщенных координат полярной и ИК-мод также удовлетворяют условиям симметрии, однако, рассмотренные без квадратичного члена, они не объясняют экспериментальные зависимости, приведенные в работе [13].

Необходимо отметить, что упомянутые выше модели, описывающие модуляцию поляризации и ее перманентное переключение, дают нестабильные решения: при небольших изменениях любого параметра свойства системы меняются скачком, что описывается уравнением Ландау – Халатникова с учетом сильной нелинейности поляризации вблизи резонанса [20]. В связи с этим важно учитывать возможные дополнительные воздействия на сегнетоэлектрик: нагрев, электрическое поле, оптическую подсветку. Комплексное решение данной задачи, как представляется, будет возможным только при выявлении физических механизмов, способных обеспечить практическое достижение переключения поляризации при помощи электромагнитного импульса.

В настоящей работе рассматриваются процессы модуляции поляризации сегнетоэлектрика коротким ТГц-импульсом на примере титаната бария-стронция $Ba_{0.8}Sr_{0.2}TiO_3$ (BST). Представлено расширение теоретической модели [19] с использованием двух членов в разложении энергии фонон-фононного взаимодействия: сумма линейных и квадратичных членов по произведению обобщенных координат полярной и ИК-мод. Моделирование проводилось с учетом условий экспериментального наблюдения ТГц-индуцированной модуляции сегнетоэлектрической поляризации в геометрии оптической накачки – ТГц-зондирования.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Переключение поляризации под действием ТГц-импульса при предварительном возбуждении когерентного фонона фемтосекундным оптическим импульсом

Рассмотрим систему, состоящую из невозбужденных сегнетоэлектрических ячеек, обладающих двухминимумным потенциалом, и фонона, возбужденного оптическим излучением, в поле ТГц-импульса. В этом случае энергетически более выгодным является возбуждение мягкой моды за счет фонон-фононного взаимодействия. Поскольку поляризация сегнетоэлектрика определяется асимметричным смещением катионов и анионов в кристаллической структуре, при возбуждении когерентного оптического фонона увеличивается эффективная амплитуда колебаний соответствующей группы атомов. Именно эта амплитуда, возрастающая по мере увеличения интенсивности оптического импульса,

будет служить начальным условием в рассматриваемой задаче.

Будем считать также, что с некоторой задержкой на сегнетоэлектрик падает ТГц-импульс, находящийся в резонансе с мягкой модой сегнетоэлектрика. Таким образом, мягкая мода будет возбуждаться и напрямую ТГц-импульсом, и за счет фонон-фононного взаимодействия оптическим фононом, который, в свою очередь, был возбужден фемтосекундной оптической накачкой. Вопрос, на который ищется ответ: будет ли такое воздействие эффективнее, чем прямое воздействие единственно ТГц-импульсом, и приведет ли это с большей вероятностью к переключению поляризации сегнетоэлектрика?

Так как BST – многоосный сегнетоэлектрик, его параметр порядка является многокомпонентным. В соответствии с подходом, приведенным в работах [13, 18, 19], ограничимся рассмотрением изменения состояния поляризации, вызванного селективным возбуждением колебаний решетки электрическим полем короткого ТГц-импульса вдоль направления, заданного плоскостью поляризации ТГц-излучения. В начальном состоянии считаем поляризацию, обусловленную суммарным дипольным моментом рассматриваемого множества ячеек в области воздействия ТГц-импульса, равной нулю.

С учетом [19], запишем энергию взаимодействия полярной и ИК-мод в единице объема в виде:

$$W(\xi_P, \xi_{IR}) = j\xi_P\xi_{IR} + h\xi_P^2\xi_{IR}^2,$$

где ξ_P и ξ_{IR} – эффективные координаты полярной и высокочастотной фононной (ИК) мод, соответственно; j и h – коэффициенты разложения $W(\xi_P, \xi_{IR})$ по степеням координат.

В соответствии с [19] коэффициент связи между полярной и ИК-модами существенно зависит от эффективной координаты полярной моды. Для того чтобы потенциальная энергия, описывающая фонон-фононное взаимодействие, была физически значимой, смещение полярного иона относительно равновесного положения должно быть малым. В рамках рассматриваемой модели величина модуляции эффективных координат не превышает 5% от параметра решетки, однако для случая динамического переключения поляризации, т.е. перескока полярного иона из одной ямы в другую, данное ограничение накладывается на модуляцию эффективной координаты ξ_P после такого перескока.

Учитывая определение диэлектрической поляризации $P = \frac{q_P\xi_P}{V}$ (q_P – эффективный заряд, смещение которого определяет возбуждение полярной моды, V – объем ячейки), выражая полярную координату ξ_P через поляризацию и введя обозна-

чения $C_1 = j \frac{V}{q_P}$, $C_2 = h \left(\frac{V}{q_P} \right)^2$, запишем энергию взаимодействия в виде:

$$W(P, \xi_{\text{IR}}) = C_1 P \xi_{\text{IR}} + C_2 P^2 \xi_{\text{IR}}^2. \quad (1)$$

Уравнение колебаний эффективной координаты ИК-фононной моды представляет собой уравнение ангармонического осциллятора:

$$\ddot{\xi}_{\text{IR}} = 2\gamma_{\text{IR}} \dot{\xi}_{\text{IR}} + \omega_{\text{IR}}^2 \xi_{\text{IR}} = -\frac{V}{m_{\text{IR}}} F_{\text{IR}}, \quad (2)$$

где γ_{IR} – коэффициент затухания, а правая часть определяется производной свободной энергии (1) по соответствующей координате:

$$F_{\text{IR}} = -\frac{\partial W(\xi_P, \xi_{\text{IR}})}{\partial \xi_{\text{IR}}}.$$

В соответствии с уравнением Ландау – Халатникова, уравнение, описывающее динамику параметра порядка в условиях затухания, принимает вид [20]:

$$\begin{aligned} \ddot{P} + \gamma \dot{P} + \frac{1}{\mu} (a_1 P + a_{11} P^3 + a_{111} P^5 + a_{1111} P^7) = \\ = \frac{1}{\mu} F_P + \frac{1}{\mu} E(t), \end{aligned} \quad (3)$$

где $F_P = -\frac{\partial W(\xi_P, \xi_{\text{IR}})}{\partial \xi_P}$, $\mu = \frac{m_P V}{q_P^2}$, а $E(t) = E_{\text{ext}}(t) + E_1(t)$ – электрическое поле, действующее на сегнетоэлектрик, равное сумме внешнего $E_{\text{ext}}(t)$ и деполяризующего $E_1(t)$ полей.

Внешнее поле представляет собой зависящую от времени электрическую компоненту пикосекундного

ТГц-импульса $E_{\text{ext}}(t) = E_{\text{THz}} e^{-\frac{4t^2}{\tau^2}} \frac{\sin z}{z}$, $z = \omega_{\text{THz}} t$,

ω_{THz} и τ – центральная частота и обратное затухание ТГц-поля, соответственно. Эти параметры выбирались для совпадения временной формы расчетного импульса с экспериментальным и равны:

$\omega_{\text{THz}} = 2\pi \cdot 1.5 \frac{\text{рад}}{\text{с}}$, $\tau = 0.5$ пс. Деполяризующее поле прямо пропорционально поляризации

$$E_1(t) = E_{0,\text{dep}} \frac{P(t)}{P_S},$$

где P_S – спонтанная поляризация, соответствующая положению в одном из минимумов [21], а деполяризующее поле $E_{0,\text{dep}} = \frac{P_S}{\epsilon \epsilon_0}$.

Окончательно, с учетом введенных обозначений, получим систему уравнений:

$$\begin{aligned} \ddot{P} + \gamma_P \dot{P} + \frac{1}{\mu} (2a_1 P + 4a_{11} P^3 + 6a_{111} P^5 + 8a_{1111} P^7) = \\ = -\frac{1}{\mu} (C_1 \xi_{\text{IR}} + C_2 P \xi_{\text{IR}}^2) + \frac{1}{\mu} E(t), \end{aligned} \quad (4)$$

$$\ddot{\xi}_{\text{IR}} = 2\gamma_{\text{IR}} \dot{\xi}_{\text{IR}} + \omega_{\text{IR}}^2 \xi_{\text{IR}} = -\frac{V}{m_{\text{IR}}} (C_1 P + C_2 P^2 \xi_{\text{IR}}). \quad (5)$$

Эксперимент, для которого проводилось моделирование, может быть реализован методом ТГц-накачки-зондирования в геометрии «на просвет». В результате воздействия ТГц-накачки возможно развитие нескольких сценариев (рис. 1): 1) амплитуды ТГц-поля недостаточно для преодоления эффективным зарядом потенциального барьера, система осциллирует в окрестности исходного минимума и возвращается в начальное состояние; 2) эффективный заряд преодолевает потенциальный барьер, но затем возвращается в исходный минимум; 3) эффективный заряд преодолевает потенциальный барьер и остается в противоположном минимуме двухъямного потенциала в течение долгого времени. Первые два сценария описывают динамическое переключение поляризации, а последний – перманентное.

При моделировании при помощи системы уравнений (4)–(5) рассчитывались временные зависимости поляризации, а также эффективной амплитуды колебаний ИК-моды, параллельных кристаллографической оси c . Варьировались следующие параметры: амплитуда ТГц-поля E_{THz} , величины констант фонон-фононного взаимодействия C_1 и C_2 , коэффициент затухания ИК-моды γ_{IR} .

Важнейшим варьируемым параметром являлось также начальное условие для амплитуды ИК-моды, определяемое интенсивностью оптического излучения. При моделировании использовались параметры разложения термодинамического потенциала в виде ряда по степеням параметра порядка (далее – разложения Ландау) для пленки $\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3$ из работы [22]: $a_1 = -0.13 \cdot 10^8$ Дж·м/Кл², $a_{11} = -1.33 \cdot 10^8$ Дж·м⁵/Кл⁴, $a_{111} = 1.03 \cdot 10^9$ Дж·м⁹/Кл⁶, $a_{1111} = 3.09 \cdot 10^{10}$ Дж·м¹³/Кл⁸.

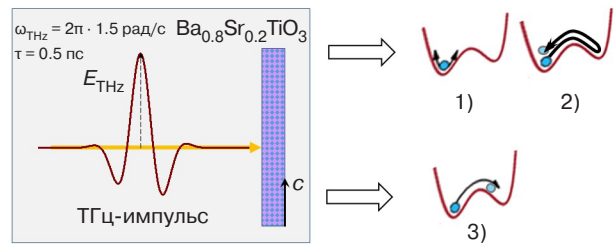


Рис. 1. Схема эксперимента, для которого выполняется моделирование, и схематичное представление ТГц-индуцированных процессов рассматриваемых сценариев переключения поляризации

В качестве резонансной частоты ИК-фонона выбиралась частота $\omega_{\text{IR}}/2\pi = 7.55$ ТГц, что соответствует частоте моды $A_1(\text{TO}^4)$ [23]. Результаты моделирования представлены на рис. 2.

Первый расчет был сделан при изменении начальных условий для ИК-моды ($A_{\text{IR}} = 0.1\text{--}0.23$ Å), при этом величина амплитуды ТГц-поля была незначительной (неспособной привести к переключению поляризации, см. нижнюю кривую на рис. 2б). В расчетах принимается, что в начальный момент суммарная поляризация рассматриваемого массива ячеек равна нулю. Остальные параметры выбирались следующими: $\gamma_{\text{IR}} = 0.5$ пс⁻¹, $\gamma_{\text{P}} = 2$ пс⁻¹, $C_1 = 5 \cdot 10^{17}$ Дж/(Кл·м²), $C_2 = 5 \cdot 10^{29}$ Дж/(Кл²·м).

Соответствующие временные зависимости амплитуды самой ИК-моды и сегнетоэлектрической поляризации представлены на рис. 2а и б. На нижнем графике на рис. 2б показана временная зависимость ТГц-поля (бордовая тонкая линия). На вставках: спектры поляризации (б) для $A_{\text{IR}} = 0.23$ Å, (в) для $E_{\text{THz}} = 0.8$ МВ/см. Графики смещены по вертикальной оси для наглядности. Динамическое переключение поляризации происходит уже при начальной амплитуде колебаний ИК-моды $A_{\text{IR}} = 0.13$ Å.

При увеличении A_{IR} динамическое переключение поляризации наблюдается на всех кривых. Однако в силу стохастичности решения уравнения Ландау – Халатникова при малых изменениях варьируемых параметров перманентное переключение, т.е. переход из одного из минимумов потенциальной ямы в другой без обратного перехода на больших временах, возможно не для всех значений параметров (на рис. 2. перманентного перехода нет при $A_{\text{IR}} = 0.17$ Å).

В спектре поляризации (вставка на рис. 2б) проявляются частоты обеих мод: полярной – в области 1–2 ТГц и ИК – в области 7.55 ТГц. Поскольку в момент времени задержки, соответствующей воздействию ТГц-импульса (2 пс), никаких особенностей на временных зависимостях поляризации не наблюдается, то можно утверждать, что наблюдаемые эффекты связаны только с воздействием когерентного оптического фонона.

Рассмотрим теперь случай слабого начального ИК-колебания ($A_{\text{IR}} = 0.125$ Å), неспособного вызвать динамическое переключение поляризации, но будем увеличивать ТГц поле. Переключение появляется при $E_{\text{THz}} \geq 0.8$ МВ/см. При этом в спектрах

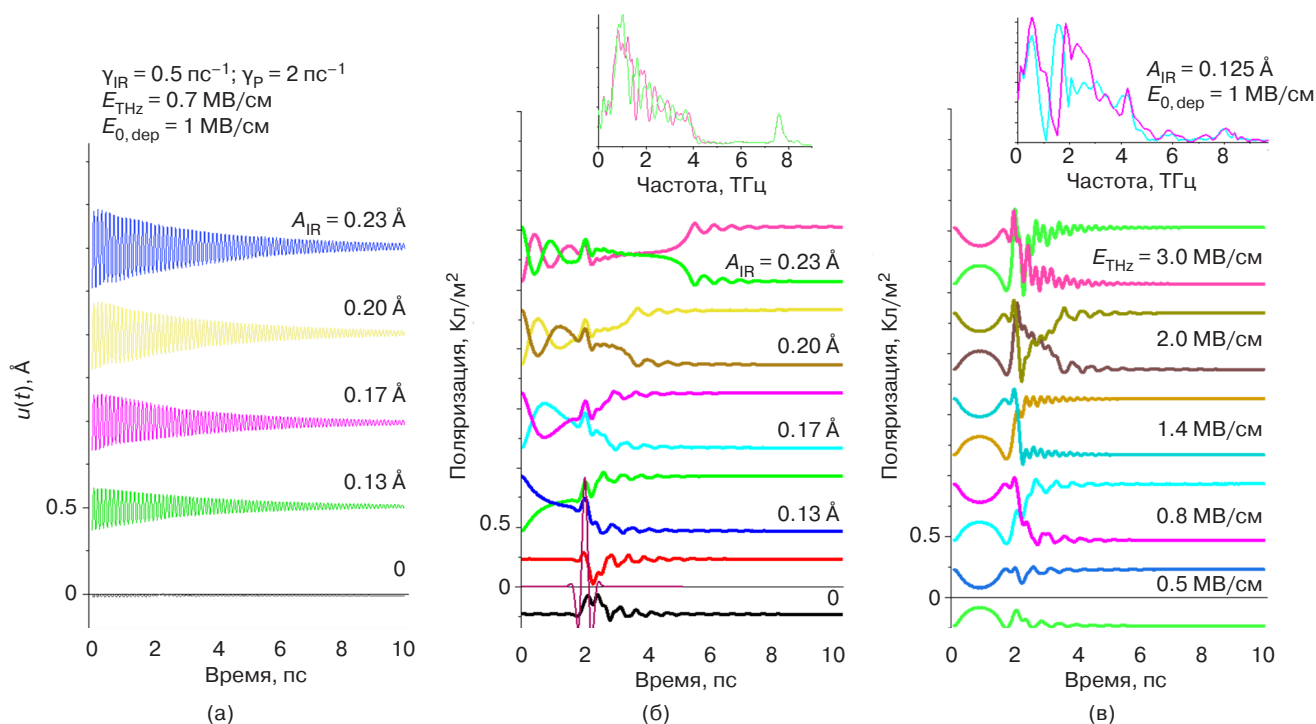


Рис. 2. Временные зависимости:

- (а) временные зависимости эффективной координаты $u(t)$ ИК-моды, рассчитанные при варьировании начальной эффективной амплитуды ИК-моды при малом поле ТГц-импульса A_{IR} (значения констант фонон-фононного взаимодействия приняты равными $C_1 = 5 \cdot 10^{17}$ Дж/(Кл·м²), $C_2 = 5 \cdot 10^{29}$ Дж/(Кл²·м));
- (б), (в) временные зависимости поляризации в ячейках с противоположным начальным положением эффективного заряда, рассчитанные в рамках рассматриваемой модели при варьировании A_{IR} (б) и поля ТГц-импульса при малой начальной амплитуде ИК-моды (в)

⁴ TO (transverse optical mode) – поперечная колебательная мода.

поляризации ИК-мода проявляется слабо (вставка на рис. 2в). Увеличивая амплитуду ТГц-поля, получаем устойчивое переключение поляризации.

В целом, рассмотренная система уравнений действительно описывает переключение поляризации под действием ТГц-импульса при предварительном возбуждении когерентного фона фемтосекундным оптическим импульсом. Критическое воздействие ТГц-импульса, приводящее к возбуждению фона, наступает при условии, когда ТГц-импульс имеет энергию, несколько меньшую (в наших расчетах – максимум на 20%) энергии, требуемой для переключения без оптического воздействия. Тогда совместное действие этих двух возбуждений приводит к переключению поляризации.

Влияние дополнительного внешнего электрического поля

Рассмотрим влияние дополнительно приложенного к образцу электрического поля E_0 , направленного параллельно полю ТГц-импульса E_{THz} в плоскости поверхности материала. В обоих случаях напряженности поля выбираются такими, чтобы одно поле в отсутствие другого не вызывало переключения поляризации. В первом случае это условие соответствует $E_{\text{THz}} = 0.7 \text{ МВ/см}$ ($E_0 = 0$), во втором: $E_0 = 0.5 \text{ МВ/см}$ ($E_{\text{THz}} = 0$). На рис. 3 представлены результаты моделирования. Графики смещены по вертикальной оси для наглядности.

При одном и том же поле ТГц-импульса (рис. 3а) постоянное поле с $E_0 \geq 0.1 \text{ МВ/см}$ ($E_0/E_{\text{THz}} = 0.14$) приводит к переключению поляризации. При этом

также при некоторых значениях постоянного поля ($E_0 = 1 \text{ МВ/см}$) оба иона возвращаются в исходное состояние. При полях $E_0 \geq 0.1 \text{ МВ/см}$ во время, предшествующее ТГц-импульсу, наблюдаются колебания, вызванные воздействием только постоянного поля. Совместное воздействие постоянного и ТГц-полей приводит к динамическому переключению поляризации в обеих ячейках вплоть до $E_0 = 1.5 \text{ МВ/см}$ ($E_0/E_{\text{THz}} = 2.14$). Далее воздействие ТГц-импульса практически не сказывается, вся система переключается под действием постоянного поля, что приводит к однородной поляризации в направлении постоянного поля.

При увеличении амплитуды ТГц-поля и сохранении величины напряженности постоянного поля (рис. 3б) динамическое переключение наблюдается, начиная с $E_{\text{THz}} = 0.5 \text{ МВ/см}$ ($E_0/E_{\text{THz}} = 1$). При некоторых значениях ТГц-поля перманентное переключение отсутствует в обоих ветвях ($0.9 \text{ МВ/см} < E_{\text{THz}} < 1.2 \text{ МВ/см}$), причем поведение системы при положительном (сонаправленном с полем ТГц-импульса в точке его максимальной амплитуды) и отрицательном значениях постоянного поля различно. На рис. 3б приведены зависимости при $E_0 = -1 \text{ МВ/см}$, в которых отсутствует даже динамическое переключение (поляризация не пересекает ось координат). Дальнейшее увеличение поля ТГц-импульса приводит к преобладанию отклика на этот импульс, хотя постоянное поле и оказывает небольшое влияние на зависимость поляризации от времени.

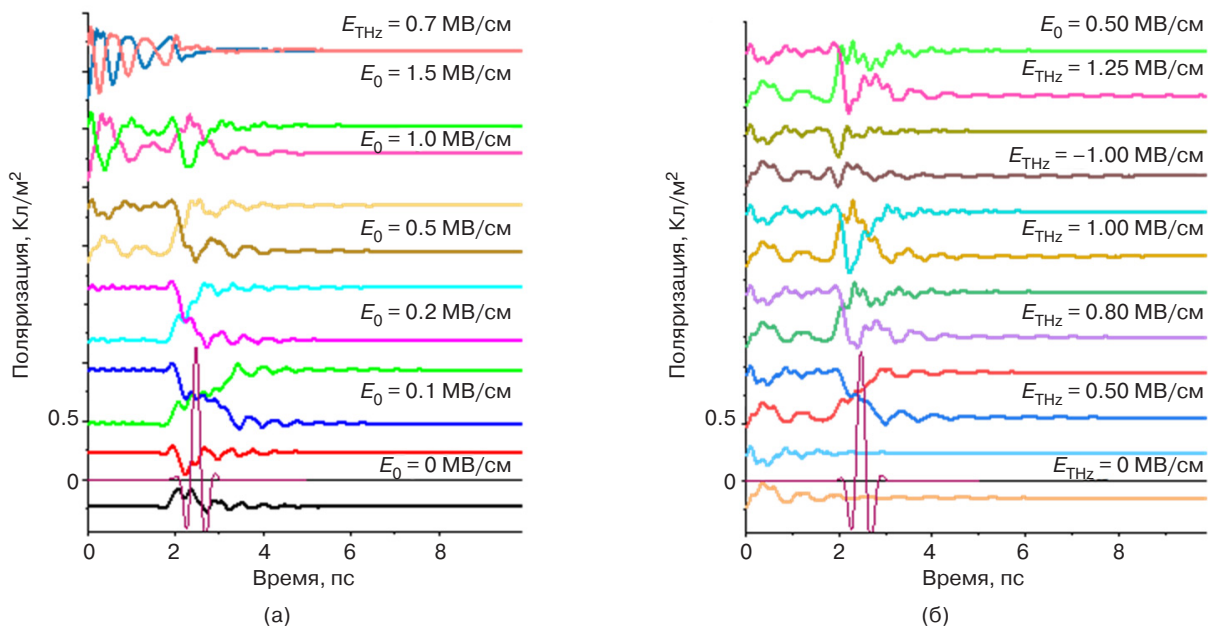


Рис. 3. Временные зависимости поляризации при приложении дополнительного постоянного электрического поля: (а) увеличение напряженности постоянного поля при сохранении амплитуды ТГц-импульса, (б) увеличение амплитуды ТГц-импульса при сохранении напряженности постоянного поля

Следует отметить, что все представленные зависимости иллюстративны. Временное поведение поляризации зависит от многих параметров (констант разложения Ландау и связанной с ними частотой, а также коэффициента мягкой моды).

Тем не менее, важным результатом этих расчетов является установление того факта, что даже небольшое постоянное поле может эффективно способствовать переключению поляризации. Этот результат крайне важен для экспериментального наблюдения переключения поляризации. Большие значения ТГц-поля, во-первых, не всегда достижимы, а во-вторых, могут приводить к необратимым изменениям физических свойств сегнетоэлектрических образцов [24]. Отметим также, что эффект усиления влияния ТГц-поля наблюдался ранее в магнитных материалах при исследовании переключения намагниченности в постоянном магнитном поле.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложен новый подход к описанию системы с поляризацией в качестве параметра порядка, предварительно подвергшейся воздействию фемтосекундного оптического импульса, вызвавшего возбуждение фононной моды, взаимодействующей впоследствии с мощным ТГц-импульсом. Подход основан на системе уравнений, состоящей из уравнения Ландау – Халатникова, где в качестве вынуждающей силы выступают электрическое поле ТГц-импульса и фонон-фононное взаимодействие, и уравнения колебаний фононной моды, где в качестве вынуждающей силы выступает фонон-фононное взаимодействие. Новизна подхода заключается во взаимодействии ТГц-импульса с ранее когерентно возбужденной фононной модой, имеющей значительную амплитуду.

Показано, что во временном интервале существования фононных колебаний высокой амплитуды (что определяется константой затухания этой моды) переключение происходит в момент прихода ТГц-импульса. Возбуждение фонона оказывает критическое воздействие при условии, когда ТГц-импульс имеет энергию, несколько меньшую (в наших расчетах максимум на 20%) энергии,

требуемой для переключения без оптического воздействия. Тогда совместное действие этих двух возбуждений приводит к переключению поляризации. Если же поле большое (когда поляризация может переключаться единственно ТГц-импульсом), увеличение амплитуды фононных колебаний не влияет на процесс переключения. Таким образом, предварительное оптическое воздействие способно вызывать переключение поляризации при меньших ТГц-полях, чем порог переключения, что имеет важнейшее значение для применений, поскольку позволяет использовать ТГц-источники меньшей мощности.

В той же модели рассматривалась дополнительная вынуждающая сила в уравнении Ландау – Халатникова. Показано, что эффективно могут способствовать переключению только небольшие, далекие от насыщающих постоянные поля. Результат важен с точки зрения его использования в эксперименте. Ранее был получен экспериментальный негативный результат: приложение значительного по величине поля не влияло на переключение поляризации. Представленная модель может служить объяснением этого результата.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при частичном финансировании Российским научным фондом, грант № 25-19-00575 (моделирование) и Министерством науки и высшего образования РФ, государственное задание для университетов № FSFZ-2023-0005 (разработка кода, начальные этапы моделирования, экспериментальная часть).

ACKNOWLEDGMENTS

The work was partially supported by the Russian Science Foundation, grant No. 25-19-00575 (modeling) and the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, State Assignment for Universities No. FSFZ-2023-0005 (code development, initial stages of modeling, experimental section).

Вклад авторов

Все авторы в равной степени внесли свой вклад в исследовательскую работу.

Authors' contribution

All authors contributed equally to the research work.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ / REFERENCES

1. Leitenstorfer A., Moskalenko A.S., Kampftrath T., Kono J., Castro-Camus E., Peng K., Qureshi N., Turchinovich D., Tanaka K., Markelz A.G., Havenith M., Hough C., Joyce H.J., Padilla W.J., Zhou B., Kim K.-Y., Zhang X.-C., Uhd Jepsen P., Dhillon S., Vitiello M., Linfield E., Davies A.G., Hoffmann M.C., Lewis R., Tonouchi M., Klarskov P., Seifert T.S., Gerasimenko Y.A., Mihailovic D., Huber R., Boland J.L., Mitrofanov O., Dean P., Ellison B.N., Huggard P.G., Rea S.P., Walker C., Leisawitz D.T., Gao J.R., Li C., Chen Q., Valúsis G., Wallace V.P., Pickwell-MacPherson E., Shang X., Hesler J., Ridler N., Renaud C.C., Kallfass I., Nagatsuma T., Zeitler J.A., Arnone D., Johnston M.B., Cunningham J. The 2023 terahertz science and technology roadmap. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2023;56:223001(67 p.). <https://doi.org/10.1088/1361-6463/acbe4c>

2. Brekhov K., Bilyk V., Ovchinnikov A., Chefonov O., Mukhortov V., Mishina E. Resonant Excitation of the Ferroelectric Soft Mode by a Narrow-Band THz Pulse. *Nanomaterials*. 2023;13(13):1961. <https://doi.org/10.3390/nano13131961>
3. Monnai Y., Lu X., Sengupta K. Terahertz Beam Steering: from Fundamentals to Applications. *J. Infrared, Milli. Terahz Waves*. 2023;44(3):169–211. <https://doi.org/10.1007/s10762-022-00902-1>
4. Quy V.K., Chehri A., Quy N.M., Han N.D., Ban N.T. Innovative Trends in the 6G Era: A Comprehensive Survey of Architecture, Applications, Technologies, and Challenges. *IEEE Access*. 2023;11:39824–39844. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2023.3269297>
5. Katayama I., Aoki H., Takeda J., Shimosato H., Ashida M., Kinjo R., Kawayama I., Tonouchi M., Nagai M., Tanaka K. Ferroelectric Soft Mode in a SrTiO₃ Thin Film Impulsively Driven to the Anharmonic Regime Using Intense Picosecond Terahertz Pulses. *Phys. Rev. Lett.* 2012;108(9):097401(5 p.). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.097401>
6. Hoffmann M.C., Hwang H.Y., Brandt N.C., et al. Terahertz-induced Kerr-effect in Relaxor Ferroelectrics. *MRS Online Proceedings Library*. 2009;1230:408. <https://doi.org/10.1557/PROC-1230-MM04-08>
7. Yamakawa H., Miyamoto T., Morimoto T., Takamura N., Liang S., Yoshimochi H., Terashige T., Kida N., Suda M., Yamamoto H.M., Mori H., Miyagawa K., Kanoda K., Okamoto H. Terahertz-field-induced polar charge order in electronic-type dielectrics. *Nat. Commun.* 2021;12:953(11 p.). <https://doi.org/10.1038/s41467-021-20925-x>
8. Hamm P., Meuwly M., Johnson S.L., Beaud P., Staub U. Perspective: THz-driven nuclear dynamics from solids to molecules. *Struct. Dyn.* 2017;4(6):061601(19 p.). <https://doi.org/10.1063/1.4992050>
9. Chen F., Zhu Y., Liu S., Qi Y., Hwang H.Y., Brandt N.C., Lu J., Quirin F., Enquist H., Zalden P., Hu T., Goodfellow J., Sher M.-J., Hoffmann M.C., Zhu D., Lemke H., Glownia J., Chollet M., Damodaran, Park J., Cai Z., Jung I.W., Highland M.J., Walko D.A., Freeland J.W., Evans P.G., Vailionis A., Larsson J., Nelson K.A., Rappe A.M., Sokolowski-Tinten K., Martin L.W., Wen H., Lindenberg A.M. Ultrafast terahertz-field-driven ionic response in ferroelectric BaTiO₃. *Phys. Rev. B*. 2016;94(18):180104(6 p.). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.180104>
10. Kozina M., Pancaldi M., Bernhard C., van Driel T., Glownia J.M., Marsik P., Radovic M., Vaz C.A.F., Zhu D., Bonetti S., Staub U., Hoffmann M.C. Local terahertz field enhancement for time-resolved x-ray diffraction. *Appl. Phys. Lett.* 2017;110(8):081106. <https://doi.org/10.1063/1.4977088>
11. Kozina M., van Driel T., Chollet M., Sato T., Glownia J.M., Wandel S., Radovic M., Staub U., Hoffmann M.C. Ultrafast X-ray diffraction probe of terahertz field-driven soft mode dynamics in SrTiO₃. *Struct. Dyn.* 2017;4(5):054301(7 p.). <https://doi.org/10.1063/1.4983153>
12. Grishunin K.A., Ilyin N.A., Sherstyuk N.E., Mishina E.D., Kimel A., Mukhortov V.M., Ovchinnikov A.V., Chefonov O.V., Agranat M.B. THz Electric Field-Induced Second Harmonic Generation in Inorganic Ferroelectric. *Sci. Rep.* 2017;7(1):687. <https://doi.org/10.1038/s41598-017-00704-9>
13. Mankowsky R., von Hoegen A., Först M., Cavalleri A. Ultrafast Reversal of the Ferroelectric Polarization. *Phys. Rev. Lett.* 2017;118:197601(5 p.). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.197601>
14. Bilyk V., Mishina E., Sherstyuk N., Bush A., Ovchinnikov A., Agranat M. Transient polarization reversal using intense THz pulse in silicon-doped lead germanate. *Physica Status Solidi (RRL). Rapid Research Letters*. 2021;15(1):2000460(5 p.). <https://doi.org/10.1002/pssr.202000460>
15. Ландау Л.Д., Халатников И.М. Об аномальном поглощении звука вблизи точек фазового перехода второго рода. *Доклады АН СССР*. 1954;96:469–472.
[Landau L.D., Khalatnikov I.M. On anomalous absorption of sound near a second order phase transition point. *Doklady Akademii Nauk SSSR*. 1954;96:469–472 (in Russ.).]
16. Juraschek D.M., Fechner M., Spaldin N.A. Ultrafast Structure Switching through Nonlinear Phononics. *Phys. Rev. Lett.* 2017;118:054101(5 p.). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.054101>
17. Radaelli P.G. Breaking symmetry with light: Ultrafast ferroelectricity and magnetism from three-phonon coupling. *Phys. Rev. B*. 2018;97:085145(9 p.). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.085145>
18. Subedi A. Proposal for ultrafast switching of ferroelectrics using midinfrared pulses. *Phys. Rev. B*. 2015;92:214303(6 p.). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.214303>
19. Mertelj T., Kabanov V.V. Comment on “Ultrafast Reversal of the Ferroelectric Polarization”. *Phys. Rev. Lett.* 2019;123:129701. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.123.129701>
20. Блинц Р., Жекш Б. *Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. Динамика решетки*: пер. с англ. под ред. Л.А. Шувалова. М.: Мир; 1975, 398 с.
[Blinc R., Žekš B. *Soft Modes in Ferroelectrics and Antiferroelectrics*: transl. from Engl. Moscow: Nauka; 1975, 398 p. (In Russ.).]
[Blinc R., Žekš B. *Soft Modes in Ferroelectrics and Antiferroelectrics*. Amsterdam: North-Holland Publishing Company; 1974, 317 p.]
21. Abalmasov V.A. Ultrafast reversal of the ferroelectric polarization by a midinfrared pulse. *Phys. Rev. B*. 2020;101:014102(8 p.). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.014102>
22. Широков В.Б., Юзюк Ю.И., Калинин В.В., Леманов В.В. Материальные константы твердых растворов (Ba,Sr)TiO₃. *Физика твердого тела*. 2013;55(4):709–714. <https://elibrary.ru/rcsvjh>
[Original Russian Text: Shirokov V.B., Yuzyuk Yu.I., Kalinchuk V.V., Lemanov V.V. Material constants of (Ba,Sr)TiO₃ solid solutions. *Fizika tverdogo tela*. 2013;55(4):709–714 (in Russ.). <https://elibrary.ru/rcsvjh>]
[Shirokov V.B., Yuzyuk Yu.I., Kalinchuk V.V., Lemanov V.V. Material constants of (Ba,Sr)TiO₃ solid solutions. *Phys. Solid State*. 2013;55:773–779. <https://doi.org/10.1134/S1063783413040276>]

23. Anokhin A.S., Yuzyuk Yu.I., Lyanguzov N.V., Razumnaya A.G., Stryukov D.V., Bunina O.A., Golovko Yu.I., Shirokov V.B., Mukhortov V.M., El Marssi M. Direct transition from the rhombohedral ferroelectric to the paraelectric phase in a (Ba,Sr)TiO₃ thin film on a (111)MgO substrate. *Europhysics Letters*. 2015;112(4):47001(6 p). <https://doi.org/10.1209/0295-5075/112/47001>
24. Kwaaitaal M., Lourens D.G., Davies C.S., Kirilyuk A. Disentangling thermal birefringence and strain in the all-optical switching of ferroelectric polarization. *Sci. Rep.* 2024;14:24956(9 p.). <https://doi.org/10.1038/s41598-024-75670-0>

Об авторах

Шерстюк Наталия Эдуардовна, д.ф.-м.н., доцент, профессор кафедры нанoeлектроники, Институт перспективных технологий и промышленного программирования, ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119454, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 78). E-mail: nesherstuk@mail.ru. Scopus Author ID 6602267129, ResearcherID A-3460-2014, SPIN-код РИНЦ 9016-8296, <https://orcid.org/0000-0002-7068-4028>

Брехов Кирилл Алексеевич, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник, лаборатория физики нейроморфных вычислительных систем, Институт перспективных технологий и промышленного программирования, ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119454, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 78). E-mail: brekhov_ka@mail.ru. Scopus Author ID 55452447100, ResearcherID: Q-1014-2017, SPIN-код РИНЦ 9957-7662, <https://orcid.org/0000-0001-9091-2609>

Мишина Елена Дмитриевна, д.ф.-м.н., профессор, заведующий лабораторией фемтосекундной оптики для нанотехнологий, кафедра нанoeлектроники, Институт перспективных технологий и промышленного программирования, ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119454, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 78). E-mail: mishina_elena57@mail.ru. Scopus Author ID 7005350309, ResearcherID D-6402-2014, SPIN-код РИНЦ 9352-8339, <https://orcid.org/0000-0003-0387-5016>

About the Authors

Natalia E. Sherstyuk, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Professor, Department of Nanoelectronics, Institute for Advanced Technologies and Industrial Programming, MIREA – Russian Technological University (78, Vernadskogo pr., Moscow, 119454 Russia). E-mail: nesherstuk@mail.ru. Scopus Author ID 6602267129, ResearcherID A-3460-2014, RSCI SPIN-code 9016-8296, <https://orcid.org/0000-0002-7068-4028>

Kirill A. Brekhov, Cand. Sci. (Phys.–Math.), Senior Researcher, Laboratory of Physics for Neuromorphic Computing Systems, Institute for Advanced Technologies and Industrial Programming, MIREA – Russian Technological University (78, Vernadskogo pr., Moscow, 119454 Russia). E-mail: brekhov_ka@mail.ru. Scopus Author ID 55452447100, ResearcherID: Q-1014-2017, RSCI SPIN-code 9957-7662, <https://orcid.org/0000-0001-9091-2609>

Elena D. Mishina, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Professor, Head of the Laboratory of Femtosecond Optics for Nanotechnology, Department of Nanoelectronics, Institute for Advanced Technologies and Industrial Programming, MIREA – Russian Technological University (78, Vernadskogo pr., Moscow, 119454 Russia). E-mail: mishina_elena57@mail.ru. Scopus Author ID 7005350309, ResearcherID D-6402-2014, RSCI SPIN-code 9352-8339, <https://orcid.org/0000-0003-0387-5016>