

УДК 621.315.61

Вилен Петрович РОЙЗМАН,
доктор технических наук, профессор,
заведующий кафедрой радиотехники и связи
Хмельницкого национального университета

Александр Терентьевич БОГОРОШ,
доктор технических наук, профессор,
Киевский национальный технический университет
“Киевский политехнический институт”

Сергей Александрович ВОРОНОВ,
доктор технических наук, профессор, заведующий кафедры
прикладной физики Киевского национального технического
университета “Киевский политехнический институт”

Александр Геннадиевич ШАЙКО-ШАЙКОВСКИЙ,
доктор технических наук, профессор,
Черновицкий национальный университет им. Юрия Федьковича

ОБРАЗОВАНИЕ ДОМЕНОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО И ТЕПЛОВОГО ПОЛЯ ДЕФЕКТОВ В ПРИБОРАХ НА ОСНОВЕ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

Предоставлены теоретические результаты исследования влияния заряженных дефектов на локальный реверс поляризации в сегнетоэлектриках.

Ключевые слова: домены, электрические и тепловые поля, дефекты, поляризация, сегнетоэлектрики.

Постановка задачи в общем виде. В процессе эксплуатации или модернизации вооружения для обеспечения национальной безопасности особое внимание конструкторы уделяют диагностическим приборам, которые позволяют модернизировать инженерно-технические устройства. Современные приборы создают на основе моно-и поликристаллов с многослойными нанопокрытиями на кремниевых, полупроводниковых, термочувствительных, сегнетоэлектрических и других материалах, без которых не работают тепловизоры и другие приборы, а особенно на основе сегнетоэлектриков. В электромагнитном поле или от действия тепла в таких кристаллах появляются дефекты, разрушающие приборы. Это и послужило изучением влияния заряженных дефектов на локальное реверсирование поляризации в сегнетоэлектриках.

Анализ последних исследований, на которые опираются авторы. В своих исследованиях авторы опираются на работы А. Н. Морозовской, С. В. Калинина, Е. А. Елисева и др. [1–3], посвященные образованию доменов под действием электрического поля от внешнего источника, а также с использованием термодинамического подхода в работах [4–8], где возникает избыточная свободная энергия при образовании домена.

Целью статьи является: изучение условий образования доменов под действием внешних физических полей в приборах на основе кристаллов (сегнетоэлектриков), массово распространенных в военной и гражданской технике, т. к. образование доменов в локальных точках способствует образованию механических дефектов, которые ведут к сбою показателей приборов, прогнозирующих катастрофические разрушения техники в целом.

Изложение основного материала исследований. Образование домена под действием электрического поля, созданного внешним источником и внутренними микроскопическими дефектами, рассмотрено в рамках термодинамического подхода в работе [1], где избыточная свободная энергия, возникающая при образовании домена, имеет вид:

$$\Phi(r, l, y_0, U) = \Phi_s(r, l) + \Phi_D(r, l) + \Phi_U(r, l, y_0, U) + \Phi_d(r, l, y_0), \quad (1)$$

$$\Phi_U(r, l, y_0, U) = -2P_s \int_V dx E_3^q(x) \approx -\frac{4\pi U P_s d r^2 l / \gamma}{\left(\sqrt{r^2 + d^2 + y_0^2} + d\right) \left(\sqrt{r^2 + d^2 + y_0^2} + d + l / \gamma\right)},$$

$$\Phi_d = -2P_s \int_V dx E_3^d(x) \approx -2\pi r_d^2 h_d P_s E_s \left(1 - \exp\left(-\frac{l}{h_d}\right)\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{r^2}{r_d^2}\right)\right) \exp\left(-\frac{(x_{01} - y_0)^2}{r_d^2}\right),$$

где Φ_s – поверхностная энергия доменной стенки, пропорциональная плотности поверхностной энергии ψ_s и площади поверхности домена S ; U – электрическое напряжение, приложенное к источнику, который моделируется эффективным зарядом Q , находящимися на расстоянии d над поверхностью кристалла; V – объем домена; r – радиус, l – длина домена; y_0 – положение оси домена от начала координат Q' (см. рис. 1, а).

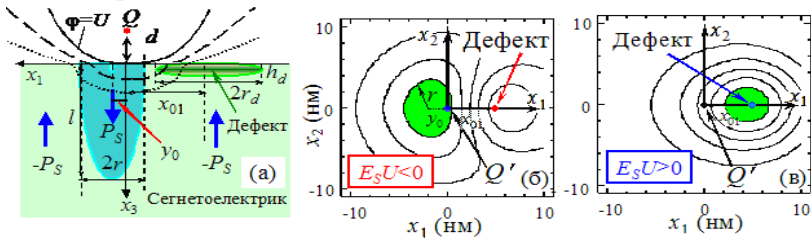


Рис. 1. Схема образования домена возле поверхности заряженного дефекта. Электрическое поле дефекта E_S , которое противодействует (б) или способствует (в) зарождению домена

Контуры ϕ на рис. 1, а соответствуют изотермам T_i и концентрациям C_i в сечении перпендикулярной к поверхности и вдоль оси зондовой иглы контивелера. Все остальные контуры отвечают эквипотенциальным линиям. Φ_D – энергия поля деполяризации, рассчитанная при условии полного экранирования спонтанной поляризации, когда на поверхности сегнетоэлектрика присутствует экранирующий заряд или отсутствующий диэлектрический слой между проводящим источником и поверхностью. Φ_U – энергия взаимодействия домена с внешним электрическим полем $E^q(x)$. Φ_d – энергия взаимодействия домена с электрическим полем дефектов $E^d(x)$. Как правило, поля поверхностных дефектов хорошо локализованы [2, 3], поэтому поле $E^d(x)$ может быть разложено по гауссовскому базису, а дальнейшее теоретическое

рассмотрение сосредоточено на влиянии поверхностного дефекта, ближайшего к источнику Q , который образует гауссовское электрическое поле $E_3^d(x) \cong E_s \exp\left(-\left((x-x_{01})^2 + x_2^2\right)/r_d^2 - x_3/h_d\right)$ с характерной шириной распределения r_d и глубиной проникновения $h_d \ll r_d$. Максимум поля дефекта располагается в точке $\mathbf{x}_0 = \{x_{01}, 0, 0\}$ относительно проекции Q' .

Приведенная модель и рис. 1 отражают процесс зарождения домена вблизи дефекта под действием гауссовского электрического поля. Вместе с тем на зарождение домена вблизи дефекта действует изменение температуры и концентрации вдоль поверхности, что не учитывает модель [1]. Поэтому дополнительно рассмотрены пространственные распределения температуры T и концентрации C движущегося со скоростью u зонда электронного микроскопа при сканировании поверхности сегнетоэлектрика

$$u = D(C_i - C_0)/x, \quad (2)$$

где C_p , C_0 – концентрация пресыщения и насыщения среды у поверхности; x – путь диффузии с коэффициентом D , который определяется из уравнения Эйнштейна:

$$D = kT/\eta, \quad (3)$$

где η – вязкость среды, k – константа скорости реакции.

Рассмотрим пространственное распределение температуры T и концентрации C вдоль грани кристалла, растущей, если среда имеет температуру

$$T_0 = LC_0/\rho c, \quad (4)$$

где L – тепловой эффект реакции; ρ , c – плотность и теплоемкость среды), а грань кристалла во время экзотермической реакции роста имеет более высокую температуру T_1 .

Если эффективная константа скорости реакции k не зависит от температуры, то уменьшение концентрации можно записать в виде

$$\frac{dC_0}{dt} = \frac{1}{t} \exp\left[-\frac{E}{RT}\right] \sum_{i=1}^N C_i, \quad (5)$$

где E – энергия активации; R – газовая постоянная; $\sum_{i=1}^N C_i$ – сумма концентраций всех N веществ, участвующих в реакции, где его экзотермическая реакция и те-

плота выделяются в процессе присоединения молекул, тогда температура будет повышаться пропорционально скорости падения концентрации:

$$\rho C \frac{dT}{dt} = \frac{1}{t} \exp\left[-\frac{E}{RT}\right] L \sum_{i=1}^N C_i. \quad (6)$$

Поэтому температура повышается пропорционально количеству вещества, осевшего на растущей грани:

$$T = T_0 + L(C_i - C_0) / \rho c, \quad (7)$$

т. е. приобретает вид кривых 1—5 на рис. 2.

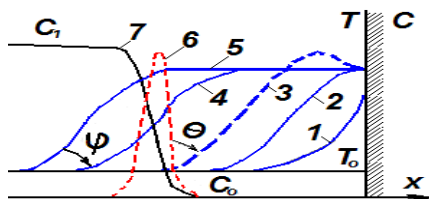


Рис. 2. Приповерхностное распределение температуры (1—5), скорости реакции (6) и концентрации (7) поверхности сегнетоэлектрика в ходе зондового исследования

При этом величина, пропорциональная скорости реакции $|dC/dt|$ (кривая 6), имеет резкий максимум; вначале скорость реакции мала, поскольку температура незначительна, а в конце реакции, по закону Фика–Нернста, она стремится к нулю вследствие падения концентрации (кривая 7).

Таким образом, если температура поверхности T_1 равна T_0 по уравнению (3), то она равна температуре, до которой среда нагрелась бы и сама. Поэтому в начале слой поверхности начинает нагреваться и изотермически нагревает прилегающий слой. Зона подогрева со временем растет (кривые 1 и 2). В нагретом слое начинается реакция, вследствие чего температура может кое-где даже превысить адиабатическую температуру T_1 (кривая 3). Этот скачок температуры (неустойчивость системы) может возникнуть, если слой нагреть (например, аналогично турбулентному вихрю [4, 5] при физическом воздействии на среду потоком электронов).

С течением времени будут нагреваться слои поверхности, находящиеся на достаточном расстоянии от кончика кантивелера. Распределение температуры вглубь в последующие моменты времени могут соответствовать изотермам кривых 4 и 5, т. е. наблюдаются волновые процессы. Волна возникает у кончика зонда и движется в слой поверхности от фронта изотермы, при этом концентрация теплового потока от домена (кривая 7) и скорость отражения от дефекта (штриховая кривая 6') резко падают непосредственно у фронта двух изотерм. Теплота прореагировавших слоев проникает в холодные области, постепенно затухая. При этом каждый макрообъем слоя вначале забирает энергию от соседних, прореагировавших микрослоев, а затем отдает такое же количество теплоты более холодному микрослою. Таким образом, волна кристаллизации, зародившись у острия зонда, перемещается самостоятельно в объем сегнетоэлектрика, выделяя $LC_j/\rho c$ энергии, и температура в волне равна T_1 .

Выберем систему координат, связанную с фронтом такой волны. Тогда, с одной стороны, во фронт будет поступать холодный микрослой со скоростью u , с другой стороны — выходить. Если плотности их принять равными, то фронт волны будет двигаться также со скоростью u и разность концентраций C в двух соседних сечениях $x + dx$ и x можно описать кинетическим уравнением

$$u[C(x+dx) - C(x)] = -kC. \quad (8)$$

Левая часть уравнения (8) выражает объем сегнетоэлектрика, прореагировавшего в единицу времени в рассматриваемом слое. Предполагая C функцией периода 2π по θ , запишем ее значение в виде

$$C = \sum_{m=-1}^l \exp[im\theta] f_m(x, \varphi, u, \frac{\partial u}{\partial t}, \frac{\partial u}{\partial x}, \dots), \quad (9)$$

что соответствует описанию концентрации по сечению струи в турбулентном вихре [6]. Здесь $(-I)$ — потеря тепла (охлаждение, эмиссия электронов); $(+I)$ — подогрев слоя поверхности, f_m — целые функции своих аргументов, т. е. непрерывно дифференцируемые по x на интервале $(0, L)$.

В постановке задачи отыскание неизвестной функции $u = \frac{dC}{dt}$ состоит в решении квазилинейной краевой задачи для уравнения

$$\frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} - ab^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \in C(\varphi, \Theta, x, x, u, \frac{\partial u}{\partial t}, \frac{\partial u}{\partial x}, \dots) \quad (10)$$

типа резонансного случая при $\theta \neq 0$ с линейными однородными краевыми условиями

$$L\left(u, \frac{\partial u}{\partial x}, \dots\right)\Big|_{x=C} = 0, C \in (0, L). \quad (11)$$

Допустим, что имеет место резонансное соотношение с учетом атомной шероховатости в виде

$$\Omega_n \equiv b \lambda_n = pq^{-1}\gamma + e\sigma, \quad (12)$$

где b, p, λ_n – коэффициенты квантово-механической делокализации точечных дефектов поверхности квантового кристалла, пропорциональности и теплопроводности среды; γ, e, σ – коэффициент кинематической вязкости, параметры амплитуды волны и расстройки частоты),

и что нет равновесия в системе, т.е.

$$n_j \Omega_j + n_k \Omega_k \neq 0, j \neq k. \quad (13)$$

При $e=0$ краевая задача (10) – (11) имеет двухпараметрическое семейство кривых (решений)

$$u_{on}(x, t) = a_n x_n(x) \cos(\Omega_n t + \psi_n), n = 1, 2, \dots, \quad (14)$$

где $\Omega_n = b \lambda_n$; $x_n(x)$ – собственные функции краевой задачи Штурма-Лиувилля,

$$X''(x) + \lambda^2 X(x) = 0, L(X, \frac{dx(x)}{dx}, \dots)\Big|_{x=C} = 0, C \in (0, L), \quad (15)$$

соответствующих собственному значению λ_n , причем функции $x_n(x)$ попарно ортогональны на интервале $(0, L)$; a_n, ψ_n – постоянные.

Применяя асимптотический метод малого параметра, решение квазилинейной краевой задачи (10)-(11) будем искать в виде разложения

$$u(x, t) = aX_n(x) \cos \varphi + eu_1(x, a, \varphi, \theta) + e^2 u_2(x, a, \varphi, \theta) + \dots, \quad (16)$$

где $\varphi = \rho q^{-1}\theta + \psi$; n – номер кривой на рис. 2; $u_j - 2\pi$ – периодические функции скорости по φ и θ .

Величины a, ψ определяются из системы уравнений

$$\begin{aligned} da/dt &= eA_1(a, \psi) + e^2A_2(a, \psi) + \dots, \\ d\psi/dt &= eB_1(a, \psi) + e^2B_2(a, \psi) + \dots \end{aligned} \tag{17}$$

С учетом (11) и (17) подставим (16) в (10) и приравняем коэффициенты при одинаковых степенях e . При этом получим краевую задачу для неизвестной функции u , пригодной для описания атомной шероховатости поверхности сегнетоэлектрика с учетом волновых процессов и резонансных всплесков $|dC/dt|$ (неустойчивости системы), в виде

$$\begin{aligned} &[\Omega_n(\partial/\partial\varphi) + \gamma(\partial/\partial\theta)]^3 u_1 + a[\Omega_n(\partial/\partial\varphi) + \gamma(\partial/\partial\theta)]^2 u_1 - \\ &- b^2(\partial/\partial x)[\Omega_n(\partial/\partial\varphi) + \gamma(\partial/\partial\theta)] u_1 - ab^2(\partial^2 u_1/\partial x^2) = \end{aligned} \tag{18}$$

$$C_0(x, a, \varphi, \theta) + 2(\Omega_n A_1 + abB_1)\Omega_n X_n(x) \cos\varphi + 2(aA_1 - \Omega_n aB_1)\Omega_n X_n \sin\varphi$$

с краевыми условиями

$$L_c(u_1, (\partial u_1/\partial x), \dots)|_{x=c} = 0; \quad C \in (0, L), \tag{19}$$

где $C_0(x, a, \varphi, \theta) = C(\theta, x, a, X_n \cos \varphi_1 - \Omega_n a X_n \sin \varphi_1, \dots)$.

Приближенные решения задачи (18) – (19) находим в виде

$$\begin{aligned} u(x, t) &= aX_n(x) \cos\varphi + e u_1(x, a, \varphi, \theta); \\ u(x, t) &= aX_n(x) \cos \varphi + e u_1(x, a, \varphi, \theta) + e^2 u_2(x, a, \varphi, \theta), \end{aligned} \tag{20}$$

$$u(x, t) = aX_n(x) \cos \varphi + e u_1(x, a, \varphi, \theta) + e^2 u_2(x, a, \varphi, \theta) + e^3 u_3(x, a, \varphi, \theta),$$

где $\varphi = \rho q^{-1}\theta + \psi$;

$$u_1 = 0,025 \sum_{j=1}^N \sum_{m,s=-1}^l \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^L \int_0^L C_0 X_j(x) \exp[-i(m\varphi + s\theta)] dx d\varphi d\theta \exp[i(m\varphi + s\theta)] X_j(x)}{D_j [i(m\Omega_n + s\gamma) \int_0^L X_j^2(x) dx]}; \tag{21}$$

$$i=1,2,3,\dots; \quad j=1,2,3,\dots$$

Величины a и ψ определяются по системе уравнений

$$\begin{aligned} da/dt &= eA_1(a, \psi), \\ d\psi/dt &= e\sigma + eB_1(a, \psi), \end{aligned} \quad (22)$$

где

$$A_1(a, \psi) = K \sum_r \exp(irq\psi) \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^L C_0 X_n(x)(\Omega_n \cos\varphi + a \sin\varphi) [-irq\psi] d\varphi d\theta dx;$$

$$B_1(a, \psi) = K \sum_r \exp(irq\psi) \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^L C_0 X_n(x)(a \cos\varphi - \Omega_n \sin\varphi) \exp[-irq\psi] d\varphi d\theta dx;$$

$$\text{где } K = - [0,025 a \Omega_n (a^2 + \Omega_n^2) \int_0^L X_n^2 dx]^{-1}.$$

Если продольное колебание локальной субмикроскопической сегнетоэлектрика с учетом физико-химических свойств среды представить в виде соотношения (20) и допустить, что имеет место соотношение (12), то асимптотическое решение можно получить в виде

$$u(x,t) = a \sin \lambda_1 x \cos(\theta + \varphi). \quad (23)$$

Здесь a и ψ определяются из системы уравнений

$$da/dt_1 = -\beta^* ab - E^* \cos \psi; \quad d\psi/dt = 1 - \eta^* + \Omega_1 \beta^* - b_1^* a^2 + (E^*/a) \sin \psi; \quad (24)$$

где $t_1 = \Omega_1 t$; $\beta^* = e\beta \lambda_1^2 / 2 \Omega_1 (a^2 + \Omega_1^2)$; $E^* = eE c^* h_1 / 2 \Omega_1^2$; $\eta^* = \gamma \Omega_1$; $h_1 = h\Phi$; $b^* = 3e(1+Q) b_1^2 \lambda_1^4 / 32 \Omega_1^2$; $Q = -4 \lambda_1^2 h_1 / \{(h^2 + \lambda_1^2) [(h^2 + \lambda_1^2)L + h_1]\}$; $c^* = 2(1 - \cos \lambda_1 L) (h^2 + \lambda_1^2) / \lambda_1 [L (h^2 + \lambda_1^2) + h_1]$; h – постоянная Планка ($6,625 \cdot 10^{-34}$ Джс); h_1 – расстояние между “нулевыми” поверхностными дефектами на поверхности квантового кристалла, зависимое от фактора неустойчивости Φ [7].

При этом частота волновых колебаний η связана с амплитудой a зависимостью

$$\eta = 1 + \Omega_1 \beta^* - b_1^* a^2 \pm E^* [a^2 - (\beta^* a E^*)^2]^{1/2}. \quad (25)$$

Зависимость (25) указывает на изменения скорости реакции $|dC/dt|$ с учетом кристаллизационных волн на квантово-шероховатых поверхностях, вызванных Φ , соизмеримым со значением потока энергии с единицей измерения Джоуль · секунда, в противоположность безразмерной величине Φ .

При $E^* = 0,1$; $b_1^* = 0,5$; $a = \Omega = 1$ и механическом перемещении зонда, вибрации (пульсациях и др.), $\beta^* = 0,15$ резонансная кривая имеет явно выраженный максимум, отклоненный в сторону C_1 .

Экспериментальная проверка показала, что при импульсном электрофизическом воздействии на образец сегнетоэлектрика энергии потребляется меньше, но эффект получается выше. Например, при импульсном воздействии ультразвуком частотой 22,4 кГц и интенсивностью на магнитоотрикате 1,86 Вт/см² через 0,01 с и 0,05 – 1 с аperiodически $\beta^* = 0,1$. Это позволяет управлять процессом образования доменов в сегнетоэлектриках внешними физическими воздействиями, что подтверждено многочисленными экспериментами [6, 7].

Предлагаемая теория приповерхностного волнового распределения T и C подтверждает зависимость скорости реакции в гетерогенных системах от неустойчивости при кристаллизации, что ранее не учитывалось при изучении кинетики роста дефектов в сегнетоэлектриках. Именно этим можно объяснить, почему на кривой скорости реакции существует острый пик, совпадающий с пиком тепловыделения (штриховая линия б на рис. 2), отклоняющийся в сторону максимальной концентрации дефектов.

В химической кинетике к большой количественной точности обычно не стремятся в силу сложности элементарных атомно-молекулярных процессов, вызывающих реакцию, и кинетические константы обычно известны с меньшей точностью, чем полученные решением уравнений (5)–(10). Это обстоятельство позволит в дальнейшем решить задачи устойчивости и автоколебаний в гетерогенных системах при зародышеобразовании и росте дефекта или домена у поверхности сегнетоэлектрика, а также задачу перемещения теплового изотермического фронта с захватом дефектов и примесных кластеров на уровне квантового аналога классического атомно-шероховатого состояния.

Анализ математической модели полностью подтверждает эти соображения. Как и для случая обычных механических колебаний, кривые имеют резонансный характер (рис. 2, кривая б) с максимумом при частоте, близкой к частоте собственных колебаний системы. Ширина резонансной кривой и величина максимума связаны с наличием затухания свободных колебаний системы: чем больше затухание, тем слабее выражен резонанс и тем шире резонансная кривая.

При этом от амплитуды колебаний концентрации или температуры начинает зависеть не только собственная частота системы, что хорошо известно из теории нелинейных колебаний квантовомеханических систем с сосредоточенными параметрами, но и декремент затухания самой системы. Все это приводит к вынужденным колебаниям скорости, в частности, к возможности появления автоколебательного режима.

В зависимости от природы сегнетоэлектрика декремент затухания может либо возрастать с увеличением амплитуды колебаний, либо уменьшаться, что ближе к нашему случаю и требует более подробного рассмотрения.

Пусть сила внешнего физического воздействия имеет частоту, близкую к собственной частоте колебаний системы, т. е. осуществляется резонансный режим. При достаточно большой величине амплитуды внешнего физического воздействия резонансная кривая изогнется, например, влево, чем и будет отличаться от обычного линейного резонанса. Характерной чертой этой кривой является неоднозначность зависимости амплитуды скорости процесса от частоты: при некоторых частотах имеем только один режим, при других – несколько. Например, численное решение задачи показывает, что, если плавно уменьшать амплитуду внешних колебаний, резонансная кривая сжимается неравномерно.

Средняя ее часть становится тонкой, так что резонансная кривая самопересекается, образуя петлю в виде турбулентного вихря. Подобие таких вихрей, соответствующих повышению концентрации потока электронов в момент зарождения домена или дефекта, подобно кинетике, описанной в работах [6–9].

При уменьшении амплитуды внешнего физического воздействия кривая отклика скорости процесса на колебания неустойчивости разделяется на две ветви. Одна из них имеет вид замкнутого неправильного круга, оторванного от кривой обычного линейного резонанса, вытягивающейся и приближающейся к оси η или x . При дальнейшем уменьшении амплитуды внешних воздействий и сведении их к нулю кривая сливается с абсциссой, а круг сжимается в точку. Это и есть режим автоколебаний, имеющий для конкретного сегнетоэлектрика определенную амплитуду (ордината выявленной точки) и частоту (абсцисса точки).

Возможность колебаний с конечной амплитудой при отсутствии внешних физических воздействий объясняется тем, что декремент затуханий падает с ростом амплитуды. Так, в выявленной точке амплитуда колебаний скорости процесса такова, что декремент затухания равен нулю, а колебания с нулевым декрементом не должны затухать. Следовательно, в выявленной точке образуется дополнительный термодинамически устойчивый домен. Для возбуждения такого автоколебательного режима достаточно наложить на систему внешнее физическое воздействие в виде фактора неустойчивости Φ [6]:

$$\Phi = 1 + \eta \sum_{j=1}^{\infty} \frac{u(y, \tau)}{u(x, y)} - u(y) + C(y). \quad (26)$$

Рассекая прямыми, параллельными оси ординат, кривую по абсциссе от 0,5 до 0,75, можно обнаружить три различные амплитуды вынужденных колебаний. Согласно теории нелинейных колебаний, из трех возможных режимов устойчивы те, у которых амплитуда колебаний наибольшая или наименьшая. Это отвечает определенным точкам. Следовательно, участок кривой соответствует неустойчивым режимам, вызванным действием фактора неустойчивости в локальной области. Таким образом, в некоторой локальной области частот должны быть колебания с различными амплитудами. Оба эти режима должны иметь место при зондовом исследовании локальной точки сегнетоэлектрика, вызывая локальный приток или отток электронов.

Например, при увеличении частоты внешнего физического воздействия можно получить ветвь резонансной кривой. Затем в некоторой точке амплитуда колебаний скачкообразно увеличивается до значения в определенной точке. Участок резонансной кривой может быть получен при плавном увеличении или уменьшении частоты фактора неустойчивости при движении от определенной точки, происходит срыв амплитуды колебаний к соответствующему значению.

Мы рассматриваем одномерный случай, когда все возмущения зависят от одной координаты x . Соответственно этому, поверхность кристалла или зона химической реакции остаются плоскими. Неустойчивость послойного перемещения изотермического фронта, приводящая к автоколебательному режиму, наступает при зависимости скорости реакции от температуры. Количественно это выражается в критическом значении константы реакции. Возникновение автоколебаний — своего рода защитная реакция процесса затухания. Если не возможен стационарный режим, то наступает депрессия, когда происходит период накопления энергии (нагревание или охлаждение значительного микрообъема вокруг растущего домена (дефекта) перед решающим захватом близко расположенных кластеров и термодинамически устойчивых вновь сформировавшихся центров образования доменов. Эти этапы экспериментально обнаружены при скоростной киносъемке под микроскопом по методу, описанному в работе [10].

Иногда предел устойчивости процесса возникает одновременно с искажением формы фронта изотермы. При этом точное решение задачи приводит к простому критерию фактора устойчивости в виде

$$\Phi \equiv [(T_1 - T_0)/u(T_0)] du/dT_1 = (T_1 - T_0)E / 2RT_1^2, \quad (27)$$

где T_0 , T_1 — начальная и текущая температуры; u — скорость реакции; E — энергия активации роста дефекта в пределах $E \approx (5,9 \dots 48,2) \cdot 10^3$ Дж/моль при $D_0 \approx 80-100$ % и $30-80$ °С, физический смысл которого рассмотрен в [6].

Если $\Phi_0 > \Phi$, то режим устойчив, а при $\Phi_0 < \Phi$ реакция носит автоколебательный характер. При небольшом превышении критической величины $\Phi_0 \approx 4,37$ скорость процесса имеет слабые и почти синусоидальные колебания. При потере устойчивости и переходе Φ в Φ фронт

кристаллизации приобретает форму гармоника с длиной полуволны, равной отрезку $\lambda / 2$.

Численные расчеты, проведенные для типовых параметров дефекта $r_d \sim (5-50)$ нм, $h_d \sim (1-2)$ нм и $E_s = (10^8-10^9)$ В/м, показали, что приближение к сдвигу домена как целого на расстояние y_0 под действием электрического поля к дефекту оправданы. Так, на рис. 1, б-в показано, что зарождение домена вблизи заряженного дефекта создает гауссовское электрическое поле $E^d(x)$, где суммарное электрическое поле аксиально-симметричного источника Q и дефекта максимальное. Результаты исследования влияния параметров дефекта при критическом напряжении, размеры домена и высота активационного барьера E_a , что разделяет состояние сегнетоэлектрика с однородной поляризацией и состояние, содержащее домен (дефектообразователь). Выведены приближенные аналитические зависимости высоты активационного барьера E_a , положения y_0 и размеров зародыша l_s и r_s от электрического напряжения и характеристик дефекта:

$$E_a(U) \approx \frac{2\pi\psi_s^3}{3} \left(\frac{3P_s d \cdot U}{\gamma(\sqrt{d^2 + y_0^2} + d)^2} - \frac{P_s^2}{3\epsilon_0\epsilon_{11}} + \frac{3}{2} P_s E_s^* \exp\left(-\frac{(x_{01} - y_0)^2}{r_d^2}\right) \right)^{-2}, \quad (28)$$

$$y_0(U) \approx \frac{x_{01} E_s \exp(-x_{01}^2/r_d^2)}{E_s \exp(-x_{01}^2/r_d^2) + U r_d^2 (d + h_d) / 2d^3 h_d}, \quad l_s(U) \sim r_s(U) \cong \sqrt{\frac{3E_a(U)}{2\pi\psi_s}}.$$

Амплитуда $E_s^*(h_d) = E_s \exp(-9\epsilon_0\psi_s/8h_d P_s^2)$. $E_a = 2-20 k_B T$ – активационные напряжения определяются из равенства высоты барьера (28), которые зависят от расстояния x_{01} к дефекту. Особенности тонкой структуры петель гистерезиса локального пьезоотклика обусловлены близостью дефектов и даны в работе [11], а влияние дефектов обуславливает немонотонность в виде скачков максимумов и минимумов пьезооткликов, а также горизонтальной асимметрии петель гистерезиса по напряжению U .

Выводы. Сочетание термодинамической теории образования нанодоменов в сегнетоэлектрических материалах аналитической теории их локального пьезоэлектрического отклика на возбуждение внешним электрическим полем открывает возможности самосогласования с экспериментальными данными.

Локальный реверс поляризации в поликристаллах вблизи заряженных дефектов показал, что поверхностные дефекты имеют формы петель локального пьезоэлектрического гистерезиса, как скачки пьезоотклика и асимметрии коэрцитивного напряжения. Аналитическая связь энергии активации зародыша домена, его размеров и радиуса, конфигурации электрических и тепловых полей внутренних дефектов и внешнего наноразмерного источника позволяют определить размеры нанодоменов, образующих вблизи дефектов.

Перспектива дальнейших исследований в данном направлении открывает возможности для уменьшения приборов военного назначения, что имеет практическое значение.

Список использованной литературы

1. Local Polarization Switching in the Presence of Surface Charged Defects: Microscopic Mechanisms and Piezoresponse Force Spectroscopy Observations / A. N. Morozovska, S. V. Svechnikov, E. A. Eliseev, B. J. Rodriguez, S. Jesse, S. V. Kalinin // *Phys. Rev. B* – 2008. – Vol. 78, № 5. – P. 054101-1–17.
2. Probing the role of single defects on thermodynamics of electric-field induced phase transitions / S. V. Kalinin, S. Jesse, B. J. Rodriguez, R. Ramesh, E. A. Eliseev, A. N. Morozovska // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – Vol. 100, № 15. – P. 155703-1-4.
3. Direct Imaging of the Spatial and Energy Distribution of Nucleation Centers in Ferroelectric Materials / S. Jesse, B. J. Rodriguez, S. Choudhury, A. P. Baddorf, I. Vrejoiu, D. Hesse, M. Alexe, E. A. Eliseev, A. N. Morozovska, J. Zhang, L. – Q. Chen, S. V. Kalinin // *Nature Materials*. – 2008. – Vol. 7, № 3. – P. 209–215.
4. Управляемый синтез игольчатых кристаллов / А. Т. Богорош, Н. В. Белов, И. М. Федоткин и др. // *ДАН СССР*. – 1976. – (224), № 3. – С. 928–931.
5. The Effect of Elastik Vibrations on Monodispersity and Kinetics Crystallization. / A. T. Bogorosh // *The Allerton Press Ins.: J. Program*, 1983, 150, Ins., 150; Fifth Avenue, N. Y., 10011, P. 49–52.
6. Богорош А.Т. Возможности управления свойствами кристаллических отложений и их прогнозирование. // -К., Вища школа, 1987. – 247 с.
7. Богорош А. Т. Возможности управления свойствами кристаллических отложений и их прогнозирование / А. Т. Богорош // -К. : Вища школа, 1987. – 247 с.

8. Богорош А. Т. Формирование приповерхностного слоя растущего монокристалла при имплантации примесей / А. Т. Богорош // ДННУ. – 1999. – №2, С. 80-91.
9. Богорош А. Т. Кристаллизационные волны при зарождении и росте монокристаллов / А. Т. Богорош // Доповіді НАНУ. – 1999. – № 12. – С. 82-90.
10. Богорош О. Т. Фізико-хімічна інформатика: народження нового наукового напрямку / О. Т. Богорош // Вісник НАН України. – 1999. – № 10. – С. 15–19.
11. Влияние колебаний на монодисперсность и кинетику кристаллизации CaCO_3 -А, CaCO_3 -К. // УХЖ, т. 47, № 4, 1981. – С. 384–388.
12. Diagnostics of mechanical defects in navigation electronic devices / A. Bogorosh, S. Voronov, N. Višniakov, J. Novickij // ISSN 1392–1320 MATERIALS SCIENCE, Vol.12, № 4, 2006. P. 30–39.

Стаття надійшла до редакції 20.11.2015.

Ройзман В. П., Богорош О. Т., Воронов С. О., Шайко-Шайковський О. Г.
Створення доменів під впливом електричного і теплового полів дефектів у приладах на основі сегнетоелектриків

Подані теоретичні результати дослідження впливу заряджених дефектів на локальний реверс поляризації в сегнетоелектриках.

Ключові слова: домени, електричне і теплове поля, дефекти, поляризація, сегнетоелектрики.

Royzman V. P., Bogorosh A. T., Voronov S. O., Shayko-Shaykovskya A. O.
Domain formation under the influence of electric and thermal field defects in devices based on ferroelectrics

Polarizes the presented results of theoretical research of influencing of the charged defects on local reversirovanie in segnetoelectricians.

Keywords: domains, electrical and thermal field, defects, polarization, ferroelectrics.