

УДК 537.226.4

ЗАРЯЖЕННЫЕ ДИСЛОКАЦИИ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ

Н. А. Перцев

Впервые установлено, что в кристаллах, обладающих спонтанной поляризацией, дислокации определенных типов имеют собственный электрический заряд. Выведена формула, позволяющая рассчитать линейную плотность заряда произвольной дислокации в сегнетоэлектрике, и показано, что для краевых дислокаций эта плотность может достигать значительных величин. Предсказан и теоретически описан ряд физических эффектов, связанных с движением заряженных дислокаций в сегнетоэлектриках.

Известно, что заряженные дислокации существуют в ионных кристаллах [1] и полупроводниках [2]. В первом случае дислокационный электрический заряд обусловлен либо геометрией расположения ионов в ядре, либо захватом дислокацией заряженных точечных дефектов. Во втором случае появление заряда связано с присутствием в ядре некомпенсированных оборванных связей, захватывающих электроны.

В настоящей работе с помощью теоретического анализа выявлена новая причина возникновения дислокационных зарядов. Впервые показано, что эти заряды образуются также из-за наличия у кристалла спонтанной поляризации. Определены типы дислокаций, являющихся заряженными в сегнетоэлектриках, и рассчитана линейная плотность дислокационного заряда. При этом установлена возможность существования заряженных дислокаций в органических полимерных кристаллах. Предсказан ряд физических явлений в сегнетоэлектриках, обусловленных заряженными дислокациями, в том числе электропластический эффект, возникновение электрического тока при пластической деформации, зависимость предела текучести кристалла от его доменной структуры и влияние дислокаций на процесс переключения поляризации.

1. Поляризационный заряд дислокации

Начнем с качественного анализа влияния спонтанной поляризации на свойства дислокаций. Для этого рассмотрим модельный кристалл (типа полимерного сегнетоэлектрика — поливинилиденфторида), поляризация которого обусловлена упорядоченной системой молекулярных электрических диполей, не разрывающихся при пластической деформации и имеющих в кристалле дипольный момент p . Образует в нем прямолинейную краевую дислокацию путем введения лишней атомной полуплоскости таким образом, чтобы линия дислокации и ее вектор Бюргерса \mathbf{b} были перпендикулярны \mathbf{p} (рис. 1). При этом часть цепочек диполей, непрерывных в совершенном кристалле, будет обрываться на линии дислокации. Цепочка, состоящая из конечного числа $N \gg 1$ диполей, несет эффективные заряды $\pm q_0$ на своих концах (подобно цепочке ионов, чередующихся по знаку [3]). Величину q_0 можно найти из следующих соображений. На расстоянии $R \gg L$ электрическое поле цепочки длиной $L \approx Na$ пропорционально ее суммарному дипольному моменту Np . Для устранения этого поля достаточно поместить на концах цепочки заряды $\mp q_0$ такой величины, чтобы $q_0 Na = Np$. Поэтому эффективный заряд q_0 , определяющий дальнедействующую

щее поле конца цепочки (при $R \gg a$), равен p/a . Краю же экстраплоскости (рис. 1) необходимо приписать линейную плотность $q = p/ac$ электрического заряда (c — расстояние между соседними диполями вдоль края).

В исследуемом частном случае молекулярного сегнетоэлектрика типа порядок—беспорядок спонтанную поляризацию P_s можно отождествить с плотностью дипольного момента (в отличие от общей ситуации [4]). Поэтому, выразив q через величину $P_s = p/abc$, окончательно получим, что краевая дислокация на рис. 1 обладает зарядом с линейной плотностью $q = P_s b$. Отметим, что цепочки диполей, изгибающиеся вблизи линии дислокации, не дают вклада в заряд q . Они влияют только на итоговое распределение электрического поля в кристалле, что можно учесть через пьезоэффект (см. ниже).

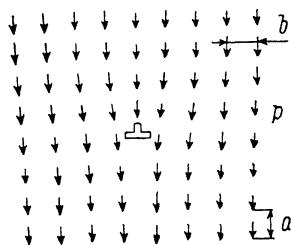


Рис. 1. Расположение электрических диполей в модельном кристалле, содержащем краевую дислокацию с вектором Бюргерса b .

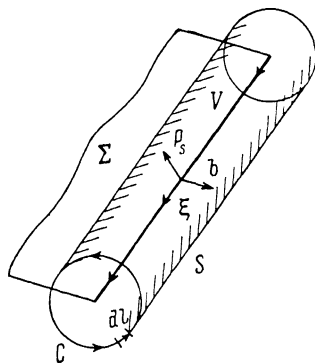


Рис. 2. Геометрическая схема, иллюстрирующая процедуру расчета эффективного заряда дислокации в сегнетоэлектрике.

ξ — единичный вектор, направленный вдоль дислокационной линии; S — поверхность пластических смещений, возникающих при образовании дислокации. Направление обхода замкнутого контура C , охватывающего ядро, согласовано с ориентацией ξ по правилу правого винта.

Рассматривая аналогичным образом другие краевые и винтовые дислокации, можно показать, что дислокационный заряд возникает тогда, когда дефект создает в кристалле дивергенцию вектора P_s .

Перейдем к строгому расчету эффективного заряда прямолинейной дислокации в произвольном сегнетоэлектрике. В общем случае интересующий нас «поляризационный» заряд q дислокации представляет собой разность между собственным дислокационным зарядом в сегнетоэлектрической фазе и зарядом этой же дислокации в параэлектрической фазе. Поэтому для вычисления q необходимо исследовать его изменение в процессе перехода кристалла в полярное состояние. Проведем такой анализ для дислокации, образующейся при температуре выше точки Кюри T_c в кристалле, охлаждаемом затем до температуры $T < T_c$, а потом обобщим результат на случай дислокации, зарождающейся непосредственно в сегнетоэлектрической фазе.

Вычислим сначала приращение dq поляризационного заряда, приходящегося на единицу длины дефекта, обусловленное изменением dT температуры кристалла. Исходя из первичного определения поляризации [4], можно записать следующее интегральное соотношение для dq :

$$dq = - \int_V \text{div} [dP(\mathbf{r})] dV, \quad (1)$$

где $dP(\mathbf{r})$ — отклик поляризации кристалла с дефектом на изменение температуры dT ; V — объем прямого цилиндра единичной длины, соосного с дислокацией (рис. 2). Поскольку средняя плотность зарядов в действительности отлична от нуля в некоторой области вокруг линии дисло-

кации, боковая поверхность S этого цилиндра должна быть расположена вне ядра дефекта в той части кристалла, где $dP(\mathbf{r})$ слабо отличается от отклика поляризации dP^0 бездефектного сегнетоэлектрика.

Рассчитывая дислокационный заряд, необходимо учесть в (1) только дивергенцию $dP(\mathbf{r})$, непосредственно связанную с пластическим полем, описывающим дефект (а не с его упругими и электрическими полями). Как известно [5], свойства кристалла с дислокациями определяются тензором пластической дисторсии β_{ij}^p ($i, j=1, 2, 3$). Прямое влияние β_{ij}^p на поляризацию можно найти, анализируя в континуальном приближении совокупность операций [3] по формированию дислокации с бесконечно малым вектором Бюргера $\delta\mathbf{b}$.

Пусть в сплошной среде v вырезан некоторый объем Δv и материал в нем подвергнут жесткой трансляции на вектор $\delta\mathbf{b}$ [5]. Отклик поляризации в этой ситуации имеет вид

$$dP^{(1)}(\mathbf{r}) = dP^0 [\delta(v - \Delta v) + \delta(\Delta v^*)], \quad (2)$$

где Δv^* — область расположения смещенного материала и использована δ -функция Дирака для объема. Здесь и далее мы не учитываем возмущающее влияние поверхностей разреза на dP , так как после завершения операций по созданию дислокации оно локализуется в ядре дефекта и не сказывается на величине интеграла в (1). Дифференцируя (2) и пользуясь теоремой о дивергенции для δ -функций [5], получим

$$dP_{,i}^{(1)}(\mathbf{r}) = dP^0 \int_{\Sigma} [\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \delta\mathbf{b})] d\Sigma'_i, \quad (3)$$

где Σ — замкнутая поверхность, ограничивающая Δv . Следуя [5], положим далее, что (3) справедливо и в случае незамкнутой поверхности Σ , опирающейся на некоторую линию L . Тогда (3) будет описывать, в частности, поле $dP_{,i}(\mathbf{r})$ в среде с плоским разрезом Σ , берега которого взаимно смещены на вектор $\delta\mathbf{b}$.

Среду с разрезом Σ нетрудно превратить в среду с дислокацией. Для этого достаточно заполнить материалом пространство между берегами разреза (если возник свободный объем) или удалить из него лишний материал (если произошло наложение). Такая операция создает дополнительный вклад в отклик поляризации, который описывается формулой, аналогичной (2). Выполняя очевидные преобразования, можно представить поле $dP_{,i}^{(2)}(\mathbf{r})$, соответствующее этому вкладу, в виде

$$dP_{,i}^{(2)}(\mathbf{r}) = -dP^0 \left\{ \varepsilon_{ijk} n_m \delta b_m n_j \delta_k(L) + \int_{\Sigma} [\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - n_m \delta b_m \mathbf{n})] d\Sigma'_i \right\},$$

где ε_{ijk} — символ Леви—Чивиты; \mathbf{n} — единичная нормаль к полуплоскости Σ ; $\delta_k(L)$ — дельта-функция для линии L , являющейся границей Σ ; по повторяющимся индексам проводится суммирование. Складывая $dP_{,i}^{(1)}$ и $dP_{,i}^{(2)}$ и применяя далее теорему Стокса для δ -функций [5], для среды с рассматриваемой дислокацией получим

$$dP_{,i}(\mathbf{r}) = -dP^0 \varepsilon_{ijk} \delta b_j \delta_k(L) = dP^0 \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} \delta b_j \delta_l(\Sigma),$$

где $\delta_l(\Sigma)$ — дельта-функция Дирака для поверхности Σ . Поскольку тензор пластической дисторсии в случае дислокации с бесконечно малым вектором Бюргера равен $\beta_{ij}^p = -\delta_l(\Sigma) \delta b_j$ [5], выведенное соотношение можно записать так:

$$dP_{,i}(\mathbf{r}) = -dP^0 \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} \beta_{ij}^p(\mathbf{r}). \quad (4)$$

Из результатов [5] следует, что с помощью непрерывного распределения дислокаций с бесконечно малыми векторами Бюргера может быть смоделировано любое поле пластической дисторсии. Поэтому выраже-

ние (4) остается справедливым и в случае отклика поляризации кристалла с реальными дислокациями. Подставляя (4) в формулу (1) и пользуясь теоремой Гаусса—Остроградского, приведем (1) к виду

$$dq = \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} dP_i^0 \int_S \beta_{lj}^p(\mathbf{r}) dS_m.$$

Полученный поверхностный интеграл удобно заменить на интеграл по замкнутому контуру C , являющемуся линией пересечения S с плоскостью, перпендикулярной дислокации (рис. 2)

$$dq = -\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} \varepsilon_{nmp} dP_i^0 \xi_n \oint_C \beta_{lj}^p(\mathbf{r}) dL_p = -\varepsilon_{ijn} dP_i^0 \left[\xi_n \oint_C \beta_{lj}^p(\mathbf{r}) dL_l - \oint_C \xi_l \beta_{lj}^p(\mathbf{r}) dL_n \right], \quad (5)$$

где ξ — орт дислокационной линии. Вне ядра дислокации с вектором Бюргерса \mathbf{b} пластическая дисторсия кристалла равна $\beta_{lj}^p(\mathbf{r}) = -\delta_l(\Sigma) b_j$ [5]. Для прямолинейной дислокации отсюда вытекает, что на контуре C $\xi_l \beta_{lj}^p \equiv \equiv 0$, т. е. второй интеграл в (5) обращается в нуль. Первый же интеграл дает [5]

$$\oint_C \beta_{lj}^p(\mathbf{r}) dL_l = -b_j.$$

Итак, приращение дислокационного заряда при изменении температуры кристалла задается соотношением

$$dq = \varepsilon_{ijn} b_j \xi_n dP_i^0.$$

Интегрируя это выражение по температуре с учетом замены $dP_i^0 = = (\partial P_i^0 / \partial T) dT$, для заряда $q(T)$ дислокации при температуре $T < T_c$ получим

$$q(T) = \varepsilon_{ijn} b_j \xi_n \int_{T_c}^T \frac{\partial P_i^0}{\partial T} dT = \varepsilon_{ijn} b_j \xi_n P_{si}(T).$$

Здесь спонтанная поляризация \mathbf{P}_s сегнетоэлектрика введена в соответствии с ее экспериментальным определением при пирозлектрических измерениях [4]. Таким образом, поляризационный заряд дислокации в сегнетоэлектрике рассчитывается по следующей векторной формуле:

$$q = \mathbf{P}_s \cdot (\mathbf{b} \times \xi), \quad (6)$$

где знак вектора Бюргерса \mathbf{b} определяется по правилу, принятому в [3]. Отметим, что в пирозлектрике, не являющемся сегнетоэлектриком, можно вычислить аналогичным способом разность между поляризационными зарядами дислокации при различных температурах, однако в этом случае нельзя найти абсолютную величину дислокационного заряда.

Рассмотрим теперь дислокации, образующиеся непосредственно в сегнетоэлектрической фазе в результате пластической деформации кристалла. Используя вышеизложенный метод, можно показать, что при переключении поляризации кристалла электрическим полем полный заряд дислокации изменяется на величину, равную удвоенному поляризационному заряду (6). В процессе переполяризации кристалл проходит через параэлектрическое состояние [4], по отношению к которому начальное и конечное состояния абсолютно равноправны, так как отличаются друг от друга только направлением вектора спонтанной поляризации \mathbf{P}_s . Следовательно, если рассматривать поляризационный заряд дислокации, зарождающейся в сегнетоэлектрической фазе, как дополнительный к заряду этой же дислокации в параэлектрической фазе, то он также будет определяться соотношением (6).

Из (6) следует, что поляризационным зарядом обладают только дислокации, имеющие краевую компоненту и линию, не параллельную век-

тору P_s . При этом краевые дислокации разных механических знаков несут заряды противоположного знака. Отметим, что соответствующие перегибы и ступеньки на краевых и винтовых дислокациях также являются заряженными.

Зная величину поляризационного заряда, можно рассчитать дальнедействующее электрическое поле, создаваемое в сегнетоэлектрике прямой дислокацией. Это поле определяется по известным формулам дислокационной теории [1, 7], учитывающим пьезоэффект и записанным для случая дислокации с вектором Бюргерса \mathbf{b} , совмещенной с линейным зарядом плотности q .

Обсудим теперь дислокационные заряды в конкретных кристаллах на примере BaTiO_3 (сегнетоэлектрик типа смещения), NaNNO_2 и β -модификации поливинилиденфторида (β -ПВДФ) (сегнетоэлектрики типа порядок—беспорядок). На микроскопическом уровне природа поляризационного заряда, естественно, та же, что и у спонтанной поляризации. Следовательно, ответственными за его возникновение являются: в BaTiO_3 — взаимное смещение ионных подрешеток кристалла; в NaNNO_2 — полярные группы NO_2^- с ионно-ковалентными связями; в β -ПВДФ — поляризованные ковалентные связи C—F [8]. Подчеркнем, что последний пример позволяет нам впервые указать на существование заряженных дислокаций в органических полимерных кристаллах.

Примеры заряженных дислокаций в сегнетоэлектрических кристаллах

Кристалл	P_s , Кул/м ²	\mathbf{b}	ξ	$\frac{qa\xi}{e}$	$10^{-10} q$, Кул/м	$10^{-10} q_I$, Кул/м
NaNNO_2	0.12 <010>	<100>	<001>	0.145	0.43	0
NaNNO_2	0.12 <010>	$\frac{1}{2}$ <111>	<11 $\bar{1}$ >	0.09	0.34	± 1.88
BaTiO_3	0.26 <001>	<100>	<010>	0.26	1.04	0
β -ПВДФ	0.2 <010>	$\frac{1}{2}$ <111>	<001>	0.14	0.86	—

Примечание. В случае BaTiO_3 и NaNNO_2 используются экспериментальные значения поляризации P_s при температуре $T \approx 300$ К [14, 15]. Для P_s кристаллитов β -ПВДФ принята теоретическая оценка, приведенная в [16]. Существование дислокаций в NaNNO_2 и BaTiO_3 подтверждается экспериментальными данными, полученными в работах [16–18]. $a\xi$ — межатомное расстояние, измеренное в направлении вектора ξ .

Основные типы заряженных дислокаций в рассматриваемых сегнетоэлектриках описаны в таблице. Согласно (6), численные значения их зарядов зависят от температуры T , так как $P_s = P_s(T)$. Как видно из таблицы, при $T \sim 300$ К плотность q поляризационного заряда достигает значительных величин, сравнимых с плотностью дислокационных зарядов в полупроводниках [2]. Следовательно, поляризационные заряды могут оказывать существенное влияние на физические процессы, протекающие в реальных кристаллах.

2. Полный заряд дислокации в сегнетоэлектрике

Полный электрический заряд дислокации в сегнетоэлектрике может сильно отличаться от ее поляризационного заряда. Во-первых, в ионных кристаллах некоторые дислокации будут иметь собственный заряд и в параэлектрической фазе ионный заряд q_I , который суммируется с q . Примером является смешанная дислокация с вектором Бюргерса $\frac{1}{2}$ <111> в кристалле NaNNO_2 (см. таблицу). Абсолютная величина q_I , найденная по обычному правилу [1, 3], в этом случае почти в 6 раз превышает поляризационный заряд. Однако роль q_I должна снижаться вследствие того,

что среди дислокаций заданного механического знака присутствуют дефекты как с положительным, так и с отрицательным ионным зарядом [1].

Во-вторых, дислокационный заряд может изменяться из-за присоединения к ядру заряженных точечных дефектов. Для движущихся дислокаций определяющим, по-видимому, будет кинетический процесс заметания вакансий, известный в щелочно-галоидных кристаллах [1]. Этим процессом управляют главным образом короткодействующие межатомные силы [1]. Поэтому разность между неравновесными полными зарядами дислокаций противоположного механического знака в первом приближении остается равной удвоенному поляризационному заряду. В случае покоящейся дислокации, находящейся в кристалле с подвижными точечными дефектами, с течением времени формируется равновесный дислокационный заряд. Этот заряд не равен нулю, так как существует энергия связи точечного дефекта с ядром [1], и его величина зависит от исходного поляризационного заряда (поскольку в данной ситуации важную роль играют электростатические взаимодействия). Отметим, что в равновесии ядро дислокации будет окружено экранирующим пространственным зарядом, создаваемым точечными дефектами противоположного знака.

В сегнетоэлектриках—полупроводниках основное значение приобретает электрическое взаимодействие дислокаций с носителями заряда — электронами и дырками. В равновесных условиях в зависимости от знака поляризационного заряда и типа подвижных носителей вокруг дислокации образуется ридовский цилиндр [9] или происходит захват носителей ядром, компенсирующий исходный заряд. В результате дальнедействующее электрическое поле дислокации устраняется. Величина полного заряда ядра зависит, в частности, от наличия дислокационного энергетического уровня в запрещенной зоне [2, 9]. Из вышесказанного следует, что заряженные дислокации должны влиять на электропроводность сегнетоэлектриков—полупроводников.

Необходимо подчеркнуть, что при переключении поляризации P знак поляризационного заряда q дислокации изменяется на противоположный. Поэтому после реполяризации сегнетоэлектрика экранирование дальнедействующего электрического поля дислокации исчезает на период порядка времени релаксации, причем в первый момент поле соответствует плотности дислокационного заряда, равной $2q$. Это означает, в частности, что заряженные дислокации могут существенно влиять на процесс переключения поляризации (см. раздел 4).

В β -ПВДФ дислокации с положительным зарядом служат одним из видов глубоких ловушек [10] для инжектированных электронов. Действительно, вблизи таких дислокаций, находящихся в приповерхностных слоях, резко возрастает вероятность торможения электронов. При этом захваченные дислокацией электроны будут иметь значительную электростатическую энергию связи с ядром. Следовательно, дислокации должны играть определенную роль в процессе образования гомозаряда в ПВДФ.

3. Электропластический эффект и дислокационные токи в монокристаллах

Рассмотрим электрические явления, связанные с пластической деформацией сегнетоэлектриков.¹ Плоскости скольжения, не параллельные вектору P_s , назовем «электрически активными», поскольку движущиеся по ним краевые дислокации несут поляризационный заряд. Очевидно, что при деформации монокристалла сегнетоэлектрика, осуществляющейся по таким плоскостям, должен наблюдаться электропластический эффект (ЭПЭ), подобный тому, который существует в полупроводниках и щелочно-галоидных кристаллах [1, 2].

¹ В разделах 3 и 4 при описании движущихся дислокаций принимается, что они имеют только поляризационный заряд.

Рассчитаем величину ЭПЭ в случае деформации по одной системе скольжения, реализующейся при сжатии кристалла с постоянной скоростью деформирования $\dot{\epsilon}$ (рис. 3). При включении в ходе опыта внешнего электрического поля с напряженностью E сила F , действующая на единицу длины заряженной краевой дислокации в направлении ее движения, становится равной сумме упругой и электрической сил. Если дислокации обладают только поляризационными зарядами $\pm q$, то абсолютная величина F не зависит от механического знака дефекта

$$F = b(\tau \sin \psi \cos \psi - \tau^i) + q(E \sin \psi - E^i), \quad (7)$$

где σ — приложенное напряжение сжатия; τ^i , E^i — внутренние поля, создаваемые дислокационной структурой; ψ — угол, задающий ориентацию плоскостей скольжения (рис. 3). В свою очередь винтовые дислокации не имеют собственного заряда, но движутся за счет выбрасывания заряженных перегибов, при перемещении которых поле E совершает определенную работу. В результате

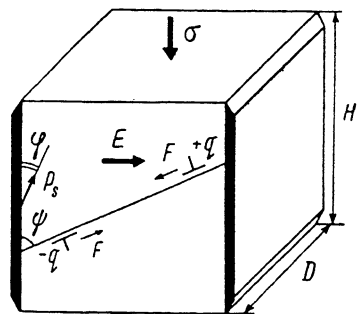


Рис. 3. Схема исследования электропластического эффекта и дислокационных электрических токов при одноосном сжатии сегнетоэлектрика.

Вектор напряженности E внешнего электрического поля перпендикулярен оси сжатия и линиям заряженных краевых дислокаций; D , H — размеры граней кристалла, на которые нанесены электроды.

оказывается, что со стороны электрического поля на винтовую дислокацию действует обобщенная сила, величина которой также описывается вторым членом в (7).

Суммарная сила F задает скорости движения v_e и v_s краевых и винтовых дислокаций, от которых зависит скорость пластической деформации $\dot{\epsilon} = ab(\rho_e v_e + \rho_s v_s)$ [8]. Поскольку плотности ρ_e и ρ_s подвижных дислокаций не изменяются при включении поля, не вызывающего переполаризации кристалла, в случае $\dot{\epsilon} = \text{const}$ сила F должна оставаться постоянной. Следовательно, приложение электрического поля сопровождается скачком $\Delta \sigma(E)$ напряжения течения сегнетоэлектрика, равным $\Delta \sigma(E) = qE/b \cos \psi$. При этом в зависимости от ориентации плоскости скольжения ЭПЭ может приводить как к упрочнению (при $\psi < \varphi$), так и к разупрочнению (при $\psi > \varphi$) кристалла в поле (φ — угол между P_s и осью сжатия; рис. 3)

Данный эффект существует в течение всего времени действия электрического поля и качественно отличается от обнаруженного ранее ЭПЭ в NaNO_2 [11], обусловленного взаимодействием дислокаций с движущимися доменными стенками при переключении поляризации. ЭПЭ силового происхождения должен проявляться, в частности, при деформировании NaNO_2 по системе скольжения (010) [100], а также при поперечном сжатии ориентированного и поляризованного волокна ПВДФ [8], когда работает система $(1\bar{1}0) \frac{1}{2} [111]$. Численные оценки, выполненные на основе (6), показывают, что в этих случаях эффект может быть обнаружен экспериментально.

Другое явление, характерное для пластичных сегнетоэлектриков, заключается в возникновении электрического тока при деформации по электрически активным плоскостям скольжения. Дислокационный ток формируется за счет потоков заряженных краевых дислокаций и переноса поляризационных зарядов перегибами вдоль движущихся винтовых дислокаций. В монокристалле, деформирующемся по одной системе скольжения, полный дислокационный ток $I(t)$, протекающий между гранями с нанесенными электродами (рис. 3), дается выражением $I(t) = (qDH/b \cos \psi) \dot{\epsilon}(t)$, где $\dot{\epsilon}(t)$ — скорость пластической деформации в мо-

мент времени t ; D , H — ширина и высота образца. Подчеркнем, что направление тока изменяется на обратное при переключении поляризации.

4. Взаимодействие заряженных дислокаций с доменными стенками

В полидоменных сегнетоэлектриках движущиеся заряженные дислокации будут сильно взаимодействовать со стенками доменов. Поэтому предел текучести кристалла должен зависеть от его доменной структуры. Рассчитаем упрочнение, создаваемое стенками, в случае кристалла, не являющегося сегнетоэластиком.

Электростатическое взаимодействие, наиболее важное в данной ситуации, возникает только между дислокациями и стенками, не параллельными вектору Бюргера \mathbf{b} . Для упрощения анализа будем считать, что действующие плоскости скольжения перпендикулярны вектору \mathbf{P}_s , а интересующие нас стенки перпендикулярны \mathbf{b} . Рассмотрим вначале процесс движения краевых дислокаций. После прохождения дислокации с зарядом $q = P_s b$ через стенку на последней образуется ступенька с линейной плотностью

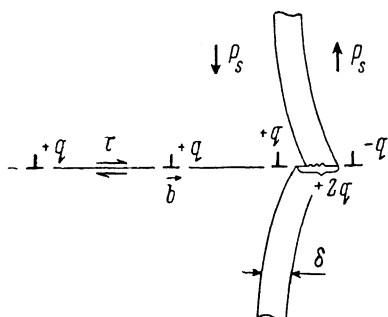


Рис. 4. Скопление заряженных краевых дислокаций, заторможенное доменной стенкой в нагруженном сегнетоэлектрике.

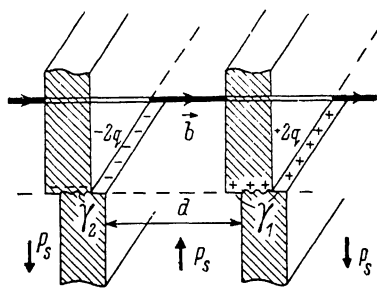


Рис. 5. Образование заряженных ступенек на доменных стенках, пересекаемых винтовой дислокацией, движущейся по электрически активной плоскости скольжения.

заряда $+2q$, а заряд дислокации становится равным $-q$ (рис. 4). Дислокация оказывается связанной со стенкой электрической силой f . Это приводит к образованию с течением времени скопления N дислокаций в плоскости скольжения, заторможенного силами «поверхностного натяжения» изогнутой стенки (рис. 4). Отрыв головной дислокации от стенки происходит только при достаточно большом N , когда разность упругой и электрической сил, действующих на эту дислокацию со стороны скопления, достигнет уровня, необходимого для преодоления силы связи f .

Таким образом, искомое упрочнение можно найти на основе непрерывной теории дислокационных скоплений [3, 12]. В первом приближении можно пренебречь влиянием анизотропии кристалла и пьезоэффектом. Будем также считать, что поперечный размер домена d много больше ширины стенки δ . Тогда для полной длины L скопления, состоящего из N дислокаций, при $L \gg \delta$ получим

$$L \approx (1 + \nu) G b N / \pi (1 - \nu) \Delta \tau,$$

где $\nu = (1 - \epsilon) q^2 / G \epsilon b^2$; G — модуль сдвига; ν — коэффициент Пуассона; ϵ — диэлектрическая проницаемость; $\Delta \tau = \tau - \tau_0$ — разность между внешними касательными напряжениями, действующими в плоскостях скольжения полидоменного и монодоменного кристалла. Из этой формулы можно определить максимальное число N_{\max} дислокаций в скоплении, так как L_{\max} задается размером домена ($L_{\max} \approx d/2$). В свою очередь от N_{\max} зависит полная сила F , действующая на головную дислокацию со стороны скопления и внешнего поля

$$F \approx \tau b + \frac{(1-x)}{(1+x)} (N_{\max} - 1) \Delta \tau b. \quad (8)$$

Используя силовой критерий $F = \tau_0 b + f$ отрыва от стенки, из (8) получаем квадратное уравнение

$$\pi (1-\nu) (1-x) d \Delta \tau^2 + 4x (1+x) b G \Delta \tau - 2 (1+x)^2 f G = 0, \quad (9)$$

позволяющее рассчитать упрочнение $\Delta \tau$. В типичном случае $x \ll 1$ $\Delta \tau \sim d^{-1/2}$, что аналогично формуле Петча для упрочнения за счет границ в поликристаллах [13]. Силу связи f можно грубо оценить как $f \sim (q^2/\pi \varepsilon \delta) \ln(1+\delta/b)$. Строгий расчет f является сложной задачей и требует учета прогиба стенки.

Взаимодействие винтовых дислокаций с доменной структурой также обусловлено образованием заряженных ступенек на стенках, пересекаемых движущимися дислокациями (рис. 5). В этом случае электрические поля ступенек создают добавочное сопротивление зарождению и перемещению заряженных перегибов, обеспечивающих скольжение винтовой дислокации. Нижнюю оценку величины соответствующего упрочнения $\Delta \tau$ можно найти из критерия $A(\Delta \tau) \geq \Delta W + \Delta \Gamma$ энергетической выгодности движения дислокации в полидоменном кристалле. Здесь $A(\Delta \tau) = \Delta \tau b d l$ — работа напряжения $\Delta \tau$, совершаемая при перемещении на расстояние l отрезка дислокации длиной d ; ΔW — электростатическая энергия периодической системы параллельных заряженных ступенек (в расчете на одну ступеньку длиной l); $\Delta \Gamma = [2b\gamma_1 + (\delta - b)\gamma_2] l$ — поверхностная энергия ступеньки длиной l (γ_1, γ_2 — удельные энергии границы между стенкой и доменом и дефекта упаковки внутри стенки; рис. 5). Рассчитывая ΔW в предположении, что заряд ступеньки равномерно распределен по ширине $\delta + b$ зоны пересечения стенки и плоскости скольжения, получим $\Delta \tau$ в виде (при $d \geq \delta$)

$$\Delta \tau = \frac{P_s^2 b}{\pi \varepsilon d} \left[\ln \left(\frac{d}{\delta + b} \right) + 1 \right] + \frac{2b\gamma_1 + (\delta - b)\gamma_2}{bd}. \quad (10)$$

Из (10) следует, что для винтовых дислокаций $\Delta \tau \sim d^{-1}$. Объединяя результаты расчетов, проведенных для краевых и винтовых дислокаций, можно заключить, что при достаточно малом параметре d доменная структура может создавать заметное упрочнение сегнетоэлектрика.

Электрическое взаимодействие между заряженными дислокациями и ступеньками на доменных стенках должно играть важную роль и в процессах переключения поляризации реальных кристаллов. Это связано с тем, что термоактивированное движение доменных стенок при реполяризации осуществляется за счет образования и расширения треугольных выступов, содержащих заряженные ступеньки [14]. Влияние дислокаций на характеристики процесса реполяризации будет проанализировано нами в следующей работе.

Автор выражает свою благодарность А. К. Таганцеву за ценные замечания, высказанные при обсуждении настоящей статьи.

Л и т е р а т у р а

- [1] Whitworth R. W. Adv. Phys., 1975, vol. 24, N 2, p. 203—304.
- [2] Осипьян Ю. А., Петренко В. Ф. В кн.: Проблемы прочности и пластичности твердых тел. Л., 1979, с. 118—128.
- [3] Хирт Дж., Лоте Й. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
- [4] Таганцев А. К. УФН, 1987, т. 152, № 3, с. 423—448.
- [5] Де Вит П. Континуальная теория дисклинаций. М.: Мир, 1977. 208 с.
- [6] Faivre G., Saada G. Phys. St. Sol. (b), 1972, vol. 52, N 1, p. 127—140.
- [7] Barnett D. M., Lothe J. Phys. St. Sol. (b), 1975, vol. 67, N 1, p. 105—111.
- [8] Lovinger A. J. Science, 1983, vol. 220, N 4602, p. 1115—1121.
- [9] Read W. T. Philos. Magaz., 1954, vol. 45, N 367, p. 775—796.
- [10] Луцкейкин Г. А. Полимерные электреты. М.: Химия, 1984. 184 с.
- [11] Николаев В. И., Смирнов Б. И. ФТТ, 1985, т. 27, № 11, с. 3369—3372.
- [12] Тялин Ю. И., Финкель В. М., Гурова О. В., Копылов Н. В. ФТТ, 1985, т. 27, № 10, с. 3005—3009.

- [13] *Владимиров В. И.* Физическая теория пластичности и прочности. Л., 1975. 152 с.
[14] *Иона Ф., Ширани Д.* Сегнетоэлектрические кристаллы. М.: Мир, 1965. 556 с.
[15] *Hamano K. J.* Phys. Soc. Japan, 1973, vol. 35, N 1, p. 157—163.
[16] *Takagi Y., Gesi K.* Japan. J. Appl. Phys., 1966, vol. 5, N 11, p. 1118.
[17] *Николаев В. И., Смирнов Б. И., Иванцов В. А.* ФТТ, 1985, т. 27, № 8, с. 2519—2521.
[18] *Bradt R. C., Ansell G. S. J.* Appl. Phys., 1967, vol. 38, N 13, p. 5407—5408.
[19] *Забара Ю. В., Кудзин А. Ю., Фомичев О. И.* ФТТ, 1973, т. 15, № 9, с. 2783—2785.

Физико-технический институт
им А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
8 февраля 1988 г.
В окончательной редакции
14 апреля 1988 г.