[3] Alexandrov A., Ranninger J. // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. N 3. P. 1164—1169.
[4] Alexandrov A. S. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 1. P. 925—927.

Московский инженерно-физический институт
Москва
Институт металлофизики АН УССР
Киев

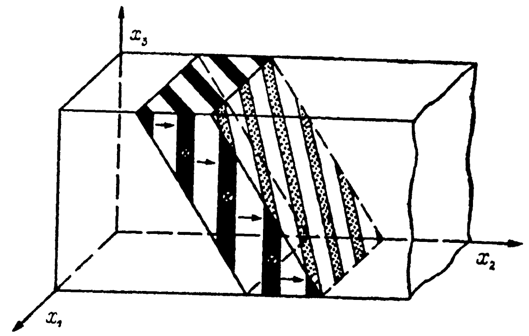
Поступило в Редакцию
20 июля 1989 г.

УДК 548.31 : 537.226.33

УСЛОВИЕ ДВОЙНИКОВАНИЯ СЕГНЕТОФАЗЫ ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ В МНОГООСНЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ

В. Г. Гавриляченко, А. Ф. Семенчев, Е. Г. Фесенко

Фазовые переходы (ФП) в многоосных сегнетоэлектрических кристаллах имеют общие черты с мартенситными превращениями. Это обусловлено тем, что дальнодействие сил электростатической природы снимается образованием в сегнетофазе (СФ) 180°-ных доменов и экранированием поляризации $\mathbf{P}_s$ свободными носителями зарядов[1], поэтому форму равновесных зародышей новой фазы и кинетику ФП определяют процессы релаксации внутренних механических напряжений. Из теории гетерофазных структур [2] следует, что наилучшему согласованию фаз отвечает пластинчатый зародыш СФ, оптимально ориентированный и сдвойникованный. Однако для того, чтобы зародыш был сдвойникован, он должен испытывать механические напряжения, достаточные для преодоления предела упругости. Найдем условие двойникования пластинчатого зародыша тетрагональной СФ в матрице кубической парафазы (ПФ), схематически представленного на рисунке.



Полидоменная сегнетоэлектрическая пластина в параэлектрической матрице. Направления $\mathbf{P}_s$ показаны стрелками.

Согласно [3, 4] на такой зародыш действуют электрострикционные механические напряжения, обусловленные влиянием матрицы

$$\sigma_n = c_{np}\xi_p \quad (n,\ p = 1 \ldots 6), \tag{1}$$

где c_{np} — модули упругости ПФ, ξ_p — индуцированная деформация. Все компоненты тензора σ_n, кроме σ_4 и σ_6, отличаются от нуля. Индуцированные деформации, испытываемые зародышем, связаны со скачком спонтанной поляризации при ФП ΔP_s следующим образом:

$$\xi_p = A_{pm}(\Delta P_s)^2_m \quad (p,\ m = 1 \ldots 6). \tag{2}$$

В (2) A_{pm} — перенормированные упругим взаимодействием электрострикционные коэффициенты. Они являются сложной функцией модулей упругости и коэффициентов электрострикции кристалла, а также зависят от концентрации двойников и ориентации пластины [3, 4].

Двойникование можно представить как потерю устойчивости СФ с одним направлением $\mathbf{P}_s$ (по x_2) по отношению к СФ с другим направлением $\mathbf{P}_s$ (по x_1) в поле механических напряжений. Запишем разложение термодинамического потенциала по поляризации в полярных координатах [5], где компоненты $\mathbf{P}_s$ составляют $P_1=P_s \sin\omega$, $P_2=P_s \cos\omega$, $P_3=0$, а ω — угол между $\mathbf{P}_s$ и x_2

$$\Phi = \Phi_0 + \alpha_1 P_s^2 \sin^2\omega + \alpha_2 P_s^2 \cos^2\omega + (\beta_1 P_s^4/2) + (\gamma_1 P_s^6/3) + \\ + (\beta_2 + \gamma_2 P_s^2) P_s^4 \sin^2\omega \cos^2\omega, \tag{3}$$

где

$$\alpha_1 = \alpha - (Q_{11}\sigma_1 + Q_{12}\sigma_2), \quad \alpha_2 = \alpha - (Q_{11}\sigma_2 + Q_{12}\sigma_1).$$

В (3) α, β_1, β_2, γ_1, γ_2 — коэффициенты разложения $\Phi(P)$ по [5]; Q_{11}, Q_{12} — коэффициенты электрострикции.

Устойчивость выбранного нами состояния, где $P_2=P_s$, а $P_1=P_3=0$, нарушается при таком соотношении между σ_2 и σ_1, которое соответствует условию

$$\partial^2\Phi/\partial\omega^2 = 0, \tag{4}$$

откуда следует, что

$$\sigma_2 - \sigma_1 = -(\beta_2 + \gamma_2 P_s^2) P_s^2/(Q_{11} - Q_{12}). \tag{5}$$

Используем выражение для диэлектрической проницаемости механически свободного кристалла, определяемой поперек полярной оси ε_{11}^σ [5], и упростим (5)

$$\sigma_2 - \sigma_1 = -2\pi/\varepsilon_{11}^\sigma (Q_{11} - Q_{12}). \tag{6}$$

Перейдем от (6) с учетом (1) к соотношению между индуцированными деформациями

$$\xi_2 - \xi_1 = -2\pi/\varepsilon_{11}^\sigma (Q_{11} - Q_{12}) (c_{11} - c_{12}). \tag{7}$$

Из (7) можно определить условие двойникования зародышей СФ, которое накладывается на величину скачка спонтанной деформации при ФП $\Delta\xi_s$. Для этой цели используем связь между $\Delta\xi_s$ и ΔP_s: $\Delta\xi_{si}=Q_{ik}(\Delta P_s)_k^2$ (i, $k=1\ldots6$) и выразим индуцированные деформации ξ_2 и ξ_1 с учетом (2) через $\Delta\xi_s$, A_{pm} и Q_{ik}. Далее введем коэффициент $r=A_{22}/A_{12}$ и учтем, что $A_{12}=-Q_{12}$ [4]. В результате для компонент $\Delta\xi_s^0$ поперек и вдоль полярной оси получим

$$\Delta\xi_{s1}^0 = -2\pi/\varepsilon_{11}^\sigma (1-r)(c_{11}-c_{12})(Q_{11}-Q_{12}), \\ \Delta\xi_{s3}^0 = \Delta\xi_{s1}^0 (Q_{11}/Q_{12}). \tag{8}$$

Таким образом, если в кристалле $\Delta\xi_s \geqslant \Delta\xi_s^0$, то СФ должна двойниковаться, а при $\Delta\xi_s < \Delta\xi_s^0$ двойники не будут возникать.

Для оценок выберем кристаллы $PbTiO_3$ (ТС), $BaTiO_3$ (ТБ) и $KTa_{0.65}Nb_{0.35}O_3$ (КТН), в которых перекрывается широкий интервал значений $\Delta\xi_s$ ($\Delta\xi_{s1}=-3.7\cdot10^{-3}$ в ТС, $-1.33\cdot10^{-3}$ в ТБ, $-5.4\cdot10^{-5}$ в КТН). Вычисления $\Delta\xi_{s1}^0$ по данным, приведенным в [1, 3, 4], дают следующие значения величин: $-7.8\cdot10^{-4}$ в ТС, $-2.75\cdot10^{-4}$ в ТБ, $-1.37\cdot10^{-4}$ в КТН. Из сравнения $\Delta\xi_{s1}$ и $\Delta\xi_{s1}^0$ следует, что в ТС и ТБ $\Delta\xi_{s1} > \Delta\xi_{s1}^0$, а в КТН $\Delta\xi_{s1} < \Delta\xi_{s1}^0$. Это объясняет опытные данные о двойниковании СФ выбранных кристаллов при ФП.

Список литературы

[1] Фесенко Е. Г., Гавриляченко В. Г., Семенчев А. Ф., Юфатова С. М. // ФТТ. 1985. Т. 22. № 5. С. 1194—1200.
[2] Ройтбурд А. Л. // УФН. 1974. Т. 113. № 1. С. 69—104.
[3] Турик А. В., Чернобабов А. И., Тополов В. Ю. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 12. С. 3618—3621.
[4] Турик А. В., Тополов В. Ю., Чернобабов А. И. // Деп. в ВИНИТИ. 1986. № 269-В86.
[5] Холоденко Л. П. Термодинамическая теория сегнетоэлектриков типа титаната бария. Рига: Зинатне, 1971. 227 с.

Ростовский государственный университет
НИИФ
Ростов-на-Дону

Поступило в Редакцию
14 марта 1989 г.
В окончательной редакции
21 июля 1989 г.