

Кинетика переключения в сегнетоэлектриках-сегнетоэластиках

© С.А. Кукушкин, М.А. Захаров*

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
199178 Санкт-Петербург, Россия

* Новгородский государственный университет,
173003 Великий Новгород, Россия

E-mail: ksa@math.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 24 января 2002 г.)

На основании классической теории зарождения–роста исследуется кинетика переключения одноосных сегнетоэлектриков-сегнетоэластиков (СС) во внешних электрических и механических полях. Изучены стадия массовой переполаризации-передеформации и заключительная стадия (оствальдовское созревание) процесса переключения в СС с учетом изменения переполаризации и передеформации в процессе фазового превращения. Получены выражения, определяющие изменение переполаризации и передеформации с течением времени. Выведены уравнения, позволяющие рассчитывать величины тока поляризации и потока деформации, а также их изменение во времени. На примере переключения монокристаллов сегнетовой соли осуществлено сравнение основных характеристик переключения СС с экспериментальными данными.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 02-03-32471, 02-02-17216 и 02-02-16071), Российского центра „Интеграция“ (проекты № А0151 и А0075), гранта „CONACYT“ (проект N 32208), Программ „Управление нелинейными механическими системами в условиях неопределенности и хаоса“ (проект № 19) и „Исследования в области естественных и гуманитарных наук. Университеты России“ (проект № 990019).

Процесс переключения сегнетоэлектриков и родственных им материалов во внешних полях, будучи фазовым переходом первого рода (см., например, [1]), может быть условно разделен на три характерные временные стадии [2–4]. На первой из них происходит флуктуационное образование зародышей новой фазы. При этом сама система еще не чувствует появления доменов с отличной от материнской среды ориентацией, и ее термодинамические параметры практически не изменяются. В связи с этим, как показано в [2], основной характеристикой начальной стадии переключения является стационарный поток, определяющий интенсивность процесса зародышеобразования. Вторая стадия фазового превращения отвечает массовому переключению структурных составляющих (элементарных ячеек) исходного монокристалла. Наконец, на третьей завершающей стадии происходит оствальдовское созревание, когда ансамбль зародышей увеличивает свой средний размер за счет своеобразного „поедания“ более крупными зародышами более мелких. При этом, в частности, происходит уменьшение поверхности раздела фаз (доменных вставок), что в свою очередь приводит к термодинамически выгодному уменьшению свободной энергии системы в целом.

Подобное разделение процесса фазового превращения на характерные стадии является ключевым моментом в классической теории зарождения–роста и применимо для описания фазовых переходов в любых метастабильных конденсированных системах, в том числе в пересыщенных растворах, переохлажденных расплавах или при переключении сегнетоэлектриков. Так, в частности,

в работах [2–4] построена кинетическая теория процессов переключения в одноосных сегнетоэлектрических кристаллах, а в работе [5] рассмотрены термодинамика и кинетика начальной стадии переключения одноосных сегнетоэлектриков-сегнетоэластиков (СС). Значительный прогресс в понимании и описании процессов, протекающих при переключении сегнетоэлектриков, достигнут в последнее время в работах [6–9].

Данная работа продолжает начатое в [5] теоретическое исследование кинетики переключения одноосных СС, помещенных в соответствующие внешние электрические и механические поля. Ее цель — описание второй и третьей стадий процесса переключения. В первой части работы рассматривается стадия массовой переполаризации и передеформации одноосных СС, выводится соответствующая система кинетических уравнений и находится ее решение. Во второй части исследуется кинетика заключительной стадии переключения СС и рассматриваются наиболее вероятные механизмы доменного роста. В третьей части определяется ток поляризации, а также находится поток деформации — характеристика переключения, возникающая исключительно в сегнетоэластиках и являющаяся прямым механическим аналогом тока поляризации в сегнетоэлектриках. Согласно [10], возникновение потока деформации в сегнетоэлектриках является следствием излучения волн напряжений (акустической эмиссии) при процессах обратимой пластичности кристалла. Наконец, четвертая часть работы посвящена сопоставлению основных характеристик переключения СС, найденных в данной работе, с экспериментальными данными на примере переключения монокристаллов классического одноосного СС — сегнетовой соли.

1. Кинетика массовой переполаризации и передеформации СС

Предваряя кинетическое описание переключения СС, напомним некоторые важные особенности, терминологию и обозначения, которые использовались в предыдущей работе [5] и будут полезны в дальнейшем. Как известно [11], параметр порядка η низкосимметричной фазы одноосного СС обладает трансформационными свойствами компоненты полярного вектора и компоненты симметричного тензора второго ранга одновременно. При этом он пропорционален как спонтанной поляризации ($P_x = a_1\eta$), так и спонтанной деформации ($U_{yz} = a_2\eta$). Здесь x — поляризационная ось кристалла, a_1 и a_2 — коэффициенты при перекрестных членах „параметр порядка η –компонента вектора напряженности электрического поля E_x “ и „параметр порядка η –компонента тензора механических напряжений σ_{yz} “ в термодинамическом потенциале данного СС, помещенного в указанные внешние поля. Отметим также, что в одноосных СС сегнетоэластические домены совпадают с сегнетоэлектрическими, поэтому в дальнейшем будем именовать их единым термином [5] — „сегнетоэлектрические–сегнетоэластические домены“. Вместе с тем процессы переполаризации сегнетоэлектрических и передеформации сегнетоэластических доменов, возникающие при переключении одноосных СС и протекающие одновременно, условимся называть „переполаризацией–передеформацией“. Наконец, наряду с параметром порядка η , поляризацией P_x и деформацией U_{yz} будем использовать соответствующие удельные величины $\eta_\omega = \eta\omega$, $p_x = P_x\omega = a_1\eta_\omega$ и $u_{yz} = U_{yz}\omega = a_2\eta_\omega$, приходящиеся на одну элементарную ячейку кристалла (ω — объем ячейки). В частности, для сегнетоэлектрического–сегнетоэластического домена размера n соответствующие величины параметра порядка, поляризации и деформации суть $\eta_n = \eta_\omega n$, $P_{xn} = p_x n = a_1\eta_n$, $U_{yz}^n = u_{yz} n = a_2\eta_n$.

Для описания кинетики переключения одноосных СС в рамках классической теории зарождения–роста воспользуемся уравнением Фоккера–Планка (Зельдовича) [12]

$$\frac{\partial f(n, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial n} [V_n f(n, t)] = \frac{\partial}{\partial n} \left[D_n \frac{\partial f(n, t)}{\partial n} \right], \quad (1)$$

где $f(n, t)$ — функция распределения переполаризованных и передеформированных доменов по числу элементарных ячеек в них, $V_n = (dn/dt)$ — скорость роста домена размера n в пространстве размеров, D_n — коэффициент диффузии зародышей переполаризации–передеформации в пространстве размеров.

Для дальнейшего анализа важно отметить, что (1) может рассматриваться как уравнение непрерывности в пространстве размеров, где соответствующий поток $J(n, t)$ состоит из двух частей: „гидродинамической“

$V_n f(n, t)$ и „флуктуационной“ $D_n (\partial f(n, t)/\partial n)$. Первая составляющая потока отвечает изменению функции распределения переполаризованных и передеформированных доменов за счет их роста со скоростью V_n , а вторая описывает флуктуационное изменение размеров домена.

Данное кинетическое уравнение применимо на любых временных масштабах переключения СС. Однако на стадии массовой переполаризации и передеформации эволюционное уравнение (1) может быть существенно упрощено. Особенность стадии массового переключения, когда основной спектр зародышей достиг критического, состоит в том, что самопроизвольное образование закритических зародышей возможно только в результате макроскопической (и, следовательно, весьма маловероятной) флуктуации [12,13]. В этой связи, если на начальной стадии переключения СС основную роль в уравнении Фоккера–Планка играет флуктуационная часть потока, исследованная в работах [2,5], то на более поздних стадиях, как показано в [14], определяющей становится гидродинамическая составляющая. Поэтому, пренебрегая флуктуационным членом, перепишем основное кинетическое уравнение (1) в виде

$$\frac{\partial f(n, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial n} [V_n f(n, t)] = 0. \quad (2)$$

Для решения уравнения Фоккера–Планка (2) необходимо знать явное выражение для скорости роста зародыша в пространстве размеров V_n . Данное выражение для зародыша сегнетоэлектрического–сегнетоэластического домена цилиндрической формы было получено в [5]

$$\begin{aligned} V_n &= 2(\pi H \omega)^{1/2} \beta_0 \frac{2\eta_\omega (a_1 E_x + a_2 \sigma_{yz} - a_1 E_{xn} - a_2 \sigma_{yz}^n)}{k_B T} n^{1/2} \\ &= 2(\pi H \omega)^{1/2} \beta_0 \frac{2p_x (E_x - E_{xn}) + 2u_{yz} (\sigma_{yz} - \sigma_{yz}^n)}{k_B T} n^{1/2}, \end{aligned} \quad (3)$$

где H — высота зародыша, которую можно оценить как $H \sim \omega^{1/3}$; β_0 — равновесный поток элементарных ячеек; E_{xn} и σ_{yz}^n — электрическая и механическая составляющие внутреннего поля зародыша размера n ; k_B — постоянная Больцмана; T — температура кристалла.

Учтем, что на данной стадии переключения СС переполаризации и передеформации меняются незначительно и еще весьма велики [3]. Поэтому размер возникающих и растущих зародышей n значительно превышает критический ($n \gg n_c$) и, следовательно, выражение (3) можно записать в виде

$$V_n = 2 \text{const} (a_1 E_x(t) + a_2 \sigma_{yz}(t)) n^{1/2}, \quad (4)$$

где $\text{const} = 2\beta_0 (\pi H \omega)^{1/2} \eta_\omega / k_B T$.

Изменение переполаризации и передеформации в СС обусловлено образование большого количества зароды-

шей переполаризации-передерформации, меняющих внутреннее поле материнской среды. Однако общее число элементарных ячеек, являющихся „элементарными носителями“ удельного параметра порядка η_ω , удельной поляризации (дипольного момента) p_x и удельной деформации u_{yz} , при этом сохраняется. Поэтому, следуя [3], кинетическое уравнение (2) необходимо дополнить соответствующим уравнением баланса. Последнее в дифференциальной форме может быть представлено в виде

$$J(E_x^0, \sigma_{yz}^0) \frac{\eta_\omega}{\eta_{10}} = \frac{d\xi_\eta}{dt} + \frac{\eta_\omega}{\eta_{10}} \int_0^\infty V_n f(n, t) dn, \quad (5)$$

где ξ_η — относительная переполаризация-передерформация, определение которой было введено в работе [5]; η_{10} — равновесное значение параметра порядка; η_ω — удельный параметр порядка, приходящийся на элементарную ячейку объема ω ; $J(E_x^0, \sigma_{yz}^0)\eta_\omega/\eta_{10}$ — источник переполаризации и передерформации, создаваемых внешними электрическим и механическим полями; $(\eta_\omega/\eta_{10}) \int_0^\infty V_n f(n, t) dn$ — скорость „потребления поляризации и деформации“ доменами новой фазы.

Заметим, что уравнение баланса (5) эквивалентно двум законам сохранения. Действительно, поскольку в случае одноосного СС относительная переполаризация-передерформация ξ_η совпадает с относительной переполаризацией ξ_F и относительной передерформацией ξ_U [5], следовательно, соотношение (5) можно переписать в виде

$$J(E_x^0, \sigma_{yz}^0) \frac{p_x}{P_{x10}} = \frac{d\xi_P}{dt} + \frac{p_x}{P_{x10}} \int_0^\infty V_n f(n, t) dn \quad (6)$$

или

$$J(E_x^0, \sigma_{yz}^0) \frac{u_{yz}}{U_{yz}^{10}} = \frac{d\xi_U}{dt} + \frac{u_{yz}}{U_{yz}^{10}} \int_0^\infty V_n f(n, t) dn, \quad (7)$$

где P_{x10} и U_{yz}^{10} — равновесные значения поляризации и деформации соответственно. Соотношение (6) представляет собой закон сохранения полного дипольного момента в кристалле, введенный в работе [3], а выражение (7) является его прямой механической аналогией.

Следуя [3], определим источник переполаризации-передерформации $J(E_x^0, \sigma_{yz}^0)$, т.е. число элементарных ячеек материнской фазы, меняющих под воздействием внешнего поля свой параметр порядка η_ω на противоположный в единицу времени в единице объема кристалла. Другими словами, необходимо определить число переключающихся (т.е. и переполаризующихся, и передерформирующихся) структурных элементов СС в единицу времени в единице объема образца. Воспользовавшись результатами работ [2,5], полученными при вычислении

скорости роста доменов, имеем

$$J(E_x^0, \sigma_{yz}^0) = \beta_0'' \frac{2\eta_\omega(a_1 E_x^0 + a_2 \sigma_{yz}^0 - a_1 \bar{E}_x - a_2 \bar{\sigma}_{yz})}{k_B T} = \beta_0'' \frac{2p_x(E_x^0 - \bar{E}_x) + 2u_{yz}(\sigma_{yz}^0 - \bar{\sigma}_{yz})}{k_B T}, \quad (8)$$

где $\beta_0'' = N_\nu \nu \exp(-V_0/k_B T)$; V_0 — высота энергетического барьера для реориентации удельного параметра элементарной ячейки η_ω в отсутствие внешнего поля; N_ν — число элементарных ячеек в единице объема кристалла, которое можно оценить как $N_\nu \sim \omega^{-1}$, ν — частота колебаний атомов в ячейке; E_x^0 и σ_{yz}^0 — внешние электрическое и механическое поля источника к моменту начала процесса массовой переполаризации-передерформации; \bar{E}_x и $\bar{\sigma}_{yz}$ — электрическое и механическое поля, которые действовали на СС до момента начала действия источника.

При рассмотрении кинетики начальной стадии переключения СС в работе [5] были введены величины переполаризации-передерформации $\Delta\eta = |\eta - \eta_{10}|$ и относительной переполаризации-передерформации $\xi_\eta = (\Delta\eta/\eta_{10})$. Для описания данной стадии переключения СС введем аналогичные величины

$$\Delta\eta^0 = \eta^0 - \bar{\eta} = \Delta\eta^0 - \Delta\bar{\eta} \quad (9)$$

$$\xi_\eta^0 = \frac{\Delta\eta^0}{\eta_{10}} = \frac{\Delta\eta^0 - \Delta\bar{\eta}}{\eta_{10}}. \quad (10)$$

В случае достаточно слабых электрического и механического полей, приложенных к кристаллу, переполаризации-передерформации $\Delta\eta^0$ и $\Delta\bar{\eta}$, согласно [5], зависят от указанных полей следующим образом:

$$\Delta\eta^0 = \frac{a_1 E_x^0 + a_2 \sigma_{yz}^0}{2\alpha(T_c - T)}, \quad \Delta\bar{\eta} = \frac{a_1 \bar{E}_x + a_2 \bar{\sigma}_{yz}}{2\alpha(T_c - T)}, \quad (11)$$

где α — коэффициент при квадратичном члене η^2 в разложении неполного термодинамического потенциала СС в окрестности точки Кюри (T_c — температура Кюри).

Тогда выражение (10) с учетом соотношений (8) и (9) примет вид

$$\xi_\eta^0 = \frac{\Delta\eta^0 - \Delta\bar{\eta}}{\eta_{10}} = \frac{1}{\eta_{10}} \frac{a_1 E_x^0 + a_2 \sigma_{yz}^0 - a_1 \bar{E}_x - a_2 \bar{\sigma}_{yz}}{2\alpha(T_c - T)} = \frac{J(E_x^0, \sigma_{yz}^0)\eta_\omega \tau}{\eta_{10}}, \quad (12)$$

где

$$\tau = \frac{k_B T}{4\alpha(T_c - T)\beta_0''\eta_\omega^2}. \quad (13)$$

С другой стороны, поскольку, согласно [11], ниже точки Кюри диэлектрическая восприимчивость $\chi_{xx}^{T, \sigma_{yz}} \varepsilon_0 = a_1^2/2\alpha(T_c - T)$ (ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума) и упругая податливость $s_{yz, yz}^{T, E_x} = a_2^2/2\alpha(T_c - T)$,

последнее выражение, определяющее временной параметр τ , можно переписать в двух других эквивалентных формах

$$\tau = \frac{k_B T \chi_{xx}^{T, \sigma_{yz}} \varepsilon_0}{2\beta_0'' p_x^2}, \quad (14)$$

$$\tau = \frac{k_B T s_{yz}^{T, E_x}}{2\beta_0'' u_{yz}^2}. \quad (15)$$

Подставляя выражение (12) в уравнение баланса (5), получим

$$\frac{\xi_\eta^0}{\tau} = \frac{d\xi_0}{dt} + \frac{\eta_\omega}{\eta_{10}} \int_0^\infty V_n f(n, t) dn. \quad (16)$$

Если время τ достаточно мало, то производной $d\xi_n/dt$ вследствие малости ее изменения на этой стадии переключения можно пренебречь. Тогда уравнение (16) запишем следующим образом:

$$\xi_\eta^0 = \tau \frac{\eta_\omega}{\eta_{10}} \int_0^\infty V_n f(n, t) dn. \quad (17)$$

При этом уравнения баланса (6) и (7) примут вид

$$\xi_p^0 = \tau \frac{p_x}{P_{x10}} \int_0^\infty V_n f(n, t) dn, \quad (18)$$

$$\xi_U^0 = \tau \frac{u_{yz}}{U_{yz}^{10}} \int_0^\infty V_n f(n, t) dn. \quad (19)$$

Кинетическое уравнение (2), где скорость роста домена в пространстве размеров определяется выражением (4), и уравнение баланса (17) представляют собой полную систему, описывающую стадию массовой переполаризации и передеформации одноосного СС, когда основной спектр зародышей достиг критического размера.

Отметим, что данная система в равной степени применима к описанию кинетики массового переключения одноосных сегнетоэлектриков, помещенных во внешние электрические поля, и кинетики массового переключения собственных сегнетоэластиков, помещенных во внешние поля механических напряжений. Так, для описания переключения одноосного сегнетоэлектрика, осуществленного в работе [3], необходимо в выражении для скорости роста зародыша (3) положить удельную деформацию $u_{yz} = 0$, а вместо уравнения баланса (17) следует пользоваться соотношением (18), где временной параметр τ определяется формулой (14). Второй частный случай — переключение собственного сегнетоэластика, который отдельно нами не рассматривался, — может быть описан аналогичным образом. В этом случае в выражении для скорости роста зародыша (3) следует положить удельную поляризацию (дипольный момент) $p_x = 0$, а вместо уравнения баланса (17) следует использовать соотношение (19), где временной параметр τ

определяется формулой (15). Очевидно, что само уравнение Фоккера–Планка (2) в обоих указанных частных случаях сохранит свою форму.

Полученная система, описывающая стадию массовой переполаризации и передеформации одноосного СС, может быть решена аналитически. Метод решения подобных систем применительно к одноосным сегнетоэлектрикам был предложен в работе [3], результатами которой мы и воспользуемся далее.

Следуя [3], выразим скорость роста зародышей (4) через относительную переполаризацию-передеформацию $\xi_n(t)$

$$V_n = 2 \frac{\xi_n(t)}{t_0} n^{1/2}, \quad (20)$$

где характерное время роста t_0 определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} t_0 &= \left(\frac{2\beta_0(\pi H \omega)^{1/2} \eta_\omega \eta_{10} 2\alpha(T_c - T)}{k_B T} \right)^{-1} \\ &= \left(\frac{2\beta_0(\pi H \omega)^{1/2} p_x P_{x10}}{k_B T \chi_{xx}^{T, \sigma_{yz}} \varepsilon_0} \right)^{-1} \\ &= \left(\frac{2\beta_0(\pi H \omega)^{1/2} u_{yz} U_{yz}^{10}}{k_B T s_{yz}^{T, E_x}} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (21)$$

Введем безразмерный радиус зародышей $\rho = n^{1/2}$. При этом от функции распределения доменов по числу элементарных ячеек в них $f(n, t)$ перейдем к функции распределения доменов по безразмерным радиусам $g(\rho, t)$. Используя соотношение $f(n, t) dn = g(\rho, t) d\rho$, перепишем кинетическое уравнение (2) и уравнение баланса (17) в новых переменных

$$\frac{\partial g(\rho, t)}{\partial t} + \frac{\xi_\eta(t)}{t_0} \frac{\partial}{\partial \rho} [g(\rho, t)] = 0, \quad (22)$$

$$\frac{\xi_\eta^0}{\xi_\eta(t)} - 1 = \lambda \int_0^\infty \rho g(\rho, t) d\rho, \quad (23)$$

где $\xi_\eta^0 = |\eta^0 - \eta_{10}|/\eta_{10}$ (т.е. $\xi_\eta(0) = \xi_\eta^0$) и

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{k_B T}{t_0 \beta_0'' 2\alpha(T_c - T) \eta_\omega \eta_{10}} \\ &= \frac{k_B T \chi_{xx}^{T, \sigma_{yz}} \varepsilon_0}{t_0 \beta_0'' p_x P_{x10}} = \frac{k_B T s_{yz}^{T, E_x}}{t_0 \beta_0'' u_{yz} U_{yz}^{10}}. \end{aligned} \quad (24)$$

Согласно [3], для однозначности решений системы (22)–(23) ее следует дополнить начальными и граничными условиями вида $g(\rho, 0) = 0$, ($\rho > \rho_c$) и $g(0, t) = I(\xi_\eta(t)) t_0 / \xi_\eta(t)$.

Данная система уравнений, описывающая кинетику переключения одноосных СС, является естественным обобщением уравнений, полученных при рассмотрении стадии массовой переполаризации в одноосных сегнетоэлектриках [3]. Ее решение позволяет определить такие основные характеристики данной стадии переключения, как поток доменов переполаризации-передоформации, плотность зародившихся переполаризованных и передоформированных сегнетоэлектрических-сегнетоэластических доменов, а также временную зависимость относительной переполаризации-передоформации и функцию распределения доменов. С этой целью воспользуемся результатами работы [3], полученными с помощью метода [12], и выпишем решение системы (22)–(23). Так, поток доменов переполаризации-передоформации к моменту времени t в первом приближении теории возмущений имеет вид

$$I(t) = \frac{I(\xi_{\eta 0}) \exp[-T^k(t)\varphi_k(T(t))]}{1 + (1/\Gamma)T^k(t)\varphi_k(T(t))}. \quad (25)$$

Плотность зародившихся переполаризованных и передоформированных доменов к моменту времени t определяется следующим образом:

$$N(t) = I(\xi_{\eta 0})t_k\varphi_k(T(t)). \quad (26)$$

Наконец, временная зависимость относительной переполаризации-передоформации определяется следующим образом

$$\xi_{\eta}(t) = \frac{\xi_{\eta 0}}{1 + (1/\Gamma)T^k(t)\varphi_k(T(t))}, \quad (27)$$

а функция распределения доменов по безразмерным радиусам может быть представлена в виде

$$f(\rho, t) = \begin{cases} \frac{I(\xi_{\eta 0})t_0}{\xi_{\eta 0}} \exp\left[-\left(T(t) - \frac{t_0\rho}{t_k\xi_{\eta 0}}\right)^k \varphi_k\left(T(t) - \frac{t_0\rho}{t_k\xi_{\eta 0}}\right)\right] & \text{при } \rho \leq \frac{\xi_{\eta 0}t_k}{t_0} T(t), \\ 0 & \text{при } \rho > \frac{\xi_{\eta 0}t_k}{t_0} T(t). \end{cases} \quad (28)$$

Рассмотрим величины, встречающиеся в выражениях (25)–(28). Так, согласно [12], параметр теории аналитического решения систем типа (22)–(23) определяется формулой

$$\Gamma = -\frac{\xi_{\eta 0}}{k_B T} \left(\frac{dR_{\min}}{d\xi_{\eta}} \right)_{\xi_{\eta}=\xi_{\eta 0}},$$

причем предполагается, что $\Gamma \gg 1$, поскольку метод основан на разложениях по малому параметру $\epsilon = \Gamma^{-1}$; R_{\min} — минимальная работа образования зародышей новой фазы в СС. Можно отметить, что по своему

физическому смыслу параметр Γ пропорционален числу частиц в критическом зародыше в момент максимальной переполаризации-передоформации [12]. Выражение для минимальной работы образования зародыша было найдено в работе [2]: $R_{\min}(n_c) = (\pi H \omega)^{1/2} \sigma n_c^{1/2}$, где H — высота домена цилиндрической формы, σ — поверхностное натяжение доменной стенки, $n_c^{1/2} = (\pi H \omega)^{1/2} \sigma / (2[p_x E_x + u_{yz} \sigma_{yz}])$ (см. [5]). Отсюда

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{\pi H \sigma^2 \omega}{2\eta_{\omega} \eta_{10} 2\alpha (T_c - T) \xi_{\eta 0} k_B T} \\ &= \frac{\pi H \sigma^2 \omega \chi_{xx}^{T, \sigma_{yz}} \epsilon_0}{2p_x P_{x10} \xi_P k_B T} = \frac{\pi H \sigma^2 \omega s_{yz}^{T, E_x}}{2u_{yz} U_{yz}^{10} \xi_U k_B T}. \end{aligned}$$

Величина $I(\xi_{\eta 0})$ есть поток переполаризации-передоформации в начальный момент времени стадии массового переключения СС. Она была найдена в предыдущей работе [5]

$$\begin{aligned} I(\xi_{\eta 0}) &\sim (a_1 E_x^0 + a_2 \sigma_{yz}^0) \\ &= \frac{N_v \beta_0 (H \omega)^{1/2} (\eta_{\omega} [a_1 E_x^0 + a_2 \sigma_{yz}^0])^{1/2}}{\sqrt{k_B T}} \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{\pi H \omega \sigma^2}{2k_B T \eta_{\omega} [a_1 E_x^0 + a_2 \sigma_{yz}^0]}\right) \\ &= \frac{N_v \beta_0 (H \omega)^{1/2} (p_x E_x^0 + u_{yz} \sigma_{yz}^0)^{1/2}}{\sqrt{k_B T}} \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{\pi H \omega \sigma^2}{2k_B T (p_x E_x^0 + u_{yz} \sigma_{yz}^0)}\right). \end{aligned} \quad (29)$$

Отсюда получаем выражение для перенормированного времени

$$T = \frac{t}{t_k} - \frac{1}{\Gamma} \int_0^T x^k \varphi_k(x) dx,$$

где

$$t_k = \frac{t_0}{\xi_{\eta 0}} \left[\frac{\xi_{\eta 0}}{(k+1)\omega\Gamma(\xi_{\eta 0})\tau} \right]^{\frac{1}{k+1}}, \quad (30)$$

а $\varphi_k(x)$ — вспомогательная функция, определяемая из решения уравнения $(d\varphi_k/dx) = \exp(-x^k)\varphi_k$ при условии $\varphi_k(0) = 0$ [12]. Коэффициент k зависит от механизма роста зародышей и совпадает с показателем степени безразмерной переменной ρ в уравнении баланса (23), т. е. в данном случае $k = 1$.

Подчеркнем, что аналогичным образом с помощью выражений (25)–(28) могут быть определены величины, характеризующие стадию массовой переполаризации одноосных сегнетоэлектриков во внешних электрических полях [3], а также характеристики стадии массовой передоформации собственных сегнетоэластиков в полях внешних механических напряжений.

Перейдем теперь к исследованию поздней стадии эволюции ансамбля переполаризованных и передиформированных областей СС и рассмотрению некоторых возможных механизмов доменного роста.

2. Оствальдовское созревание и механизмы роста доменов

Оствальдовское созревание (ОС) переполаризованных и передиформированных доменов завершает фазовое превращение, протекающее при переключении СС во внешних полях. Суть этого процесса состоит в следующем. Достигший данной стадии ансамбль зародышей новой фазы увеличивает свой средний размер, причем рост больших зародышей с реориентированным по полю параметром порядка $\eta_n = n\eta_\omega$ (где n — число структурных элементов в зародыше) происходит за счет „растворения“ мелких зародышей, т. е. имеет место своеобразное „поедание“ более крупными зародышами более мелких. Термодинамическая выгодность данного процесса обусловлена уменьшением поверхности межфазной границы (т. е. доменных стенок), следствием чего является уменьшение средней величины переполаризации-передиформации в СС. При этом характер взаимодействия между переполаризованными и передиформированными доменами определяется некоторым самосогласованным полем, создаваемым всем ансамблем доменов.

Для описания заключительной стадии переключения СС с помощью соответствующих уравнения Фоккера–Планка и уравнения баланса необходимо знать скорость роста доменов V_n , которая существенным образом зависит от конкретного механизма роста. В этой связи можно воспользоваться аналогией между механизмами роста доменов и механизмами роста кристаллов.

Из теории роста кристаллов [14–17] известны три основных механизма, определяющих этот процесс. К их числу относятся нормальный механизм роста, реализующийся для так называемых „шероховатых“ на атомном уровне межфазных поверхностей, механизм послыонного роста и механизм роста кристаллов за счет движения ступеней, возникающих либо двумерным зарождением на гранях, либо вследствие выхода винтовых дислокаций на поверхность кристалла. При выводе выражения для скорости роста доменов (3) предполагался нормальный механизм роста доменов, поскольку на стадиях начального зародышеобразования и массовой переполаризации-передиформации домены имеют малые размеры и, следовательно, их поверхность еще не сформирована. Поэтому реализация двух других механизмов роста доменов на ранней и промежуточной стадиях переключения СС весьма маловероятна.

Следуя [3], исключим из скорости роста доменов (3) явную зависимость от полей E_x , σ_{yz} , E_{xn} , σ_{yz}^n . Согласно [5], указанные поля связаны с числом структурных элементов доменов: $n^{1/2} = (\pi H \omega)^{1/2} \sigma / [2\eta_\omega \times (a_1 E_{xn} + a_2 \sigma_{yz}^n)]$ и $n_c^{1/2} = (\pi H \omega)^{1/2} \sigma / [2\eta_\omega (a_1 E_x + a_2 \sigma_{yz})]$.

Тогда получим

$$V_n = \frac{dn}{dt} = \frac{2\pi H \omega \beta_0 \sigma}{k_B T} \left(\frac{n^{1/2}}{n_c^{1/2}} - 1 \right). \quad (31)$$

Таким образом, уравнение Фоккера–Планка (2), уравнение баланса (5) и выражение (31) представляют собой замкнутую систему, решение которой полностью описывает процесс переключения одноосного сегнетоэлектрического-сегнетоэластического кристалла на стадии ОС посредством нормального механизма роста.

При описании поздней стадии переключения СС с помощью указанных уравнений удобно перейти от переменных $\{n, t\}$ к новым переменным $\{R, t\}$, где R — радиус переполаризованной и передиформированной области кристалла. Тогда основное кинетическое уравнение (2) примет вид

$$\frac{\partial f(R, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial R} [V_R f(R, t)] = 0, \quad (32)$$

где скорость роста домена посредством нормального механизма с учетом (31) определяется формулой [3]

$$V_R = \frac{dR}{dt} = \frac{\beta_0 \omega^2 \sigma}{k_B T R} \left(\frac{R}{R_c} - 1 \right). \quad (33)$$

Наконец, уровень баланса (5) на стадии ОС можно представить в виде

$$Q_0 + \int_0^t \xi_{\eta_0}(t') dt' = \frac{\bar{\eta}(t) - \eta_{10}}{\eta_{10}} + \frac{\pi H \eta_\omega}{\eta_{10} \omega} \int_0^\infty f(R, t) R^2 dR, \quad (34)$$

где

$$Q_0 = \frac{\eta^0 - \eta_{10}}{\eta_{10}} + \frac{\pi H \eta_\omega}{\eta_{10} \omega} \int_0^\infty f_0(R) R^2 dR.$$

Полученная система (32)–(34) является типичной для фазовых превращений первого рода на стадии ОС и описывает позднюю стадию переключения одноосного СС с нормальным механизмом доменного роста.

Наряду с нормальным механизмом роста доменов на стадии ОС могут в принципе реализовываться и два других механизма, отмеченные выше. Однако механизм двумерного зарождения требует детального знания структуры поверхностей доменных стенок, поскольку существенную роль в этом случае играют дефекты граней, которые заметно ускоряют процесс образования двумерных зародышей. К тому же образовавшийся двумерный зародыш далее все равно растет посредством послыонного механизма, причем предыстория его зарождения особого влияния на характер роста не оказывает. В силу указанных обстоятельств дальнейшее рассмотрение ограничим механизмом послыонного роста.

Следуя [3], нетрудно показать, что скорость роста доменной стенки при послойном механизме определяется формулой

$$V_n = \frac{dn}{dt} = \frac{\pi^{1/2} H^{3/2}}{\eta_c} \omega^{1/2} \beta_{st0} \times \frac{2\eta\omega(a_1 E_x + a_2 \sigma_{yz} - a_1 E_{xn} - a_2 \sigma_{yz}^n)}{k_B T} n^{1/2}. \quad (35)$$

Здесь r_c — радиус дискообразного двумерного зародыша; $\beta_{st0} = N_{st} v_{st} \exp(-V_{st0}/k_B T)$, N_{st} — число элементарных ячеек у ступени, v_{st} — частота колебаний атомов в ячейках у ступени, V_{st0} — высота энергетического барьера для реориентации параметра порядка у ступени в отсутствие внешнего поля.

Выразим скорость роста доменов (35) через радиус R . В результате получим

$$V_R = \frac{dR}{dt} = \frac{H\omega^2 \beta_{st0} \sigma^2}{2k_B T \sigma_{st} R_c R} \left(\frac{R}{R_c} - 1 \right), \quad (36)$$

где σ_{st} — поверхностное натяжение ступени.

Таким образом, в зависимости от механизма роста доменов на заключительной стадии переключения одноосного СС уравнение Фоккера–Планка (32) и уравнение баланса (34) следует дополнить либо выражением для скорости роста доменов (33), либо формулой (36).

Проводя параллель между кинетикой переключения одноосных СС и кинетикой переключения одноосных сегнетоэлектриков и собственных сегнетоэластиков, следует отметить, что на поздней стадии фазового превращения всех трех указанных типов кристаллов выражения для скорости доменного роста имеют одинаковый вид (33) или (36).

Для решения системы уравнений (32), (34) со скоростью роста, определяемой выражением (33) или соотношением (36), необходимо сделать предположения, касающиеся явного вида источника $\int_0^t \xi_{\eta 0}(t') dt'$. Положим, что источник равномерно распределен в образце и затухает во времени. Монотонные во времени источники могут быть представлены на бесконечности полиномами вида $\xi_{\eta 0}(t) = (\xi_{\eta 0}/\tau) t^{n-1}$ аналогично [18,19], где $n \geq 0$ — показатель роста поля. Отметим, что предполагаемое затухание во времени источника требует выполнения условия $n < 1$. Необходимость затухания источника во времени обусловлена тем, что в противном случае, согласно классической теории зарождения–роста [14], в системе возникает вторичное зарождение, которое в свою очередь препятствует наступлению стадии ОС.

Таким образом, как показано в [19], стадия ОС может наступить только в том случае, если внешнее поле после образования доменов переполаризации-передеформации либо выключается, либо изменяется во времени, так чтобы показатель n , входящий в уравнение (34), был бы $n < 2/p$ (при $p \leq 2$), где различные значения параметра p отвечают различным механизмам роста зародышей.

В данном случае величина p определяется из условий: $p = 2$ при росте зародышей посредством „шероховатого“ роста и $p = 3$ при послойном росте зародышей. Тогда средний размер зародыша, согласно [3,19], будет эволюционировать во времени по закону

$$R(t) \rightarrow \text{const}' \cdot t^{1/p}. \quad (37)$$

При этом плотность зародышей изменяется со временем по следующему закону:

$$N(t) \rightarrow \text{const}'' \cdot t^{\left(\frac{2}{p} - n\right)}. \quad (38)$$

Наконец, поскольку средний и критический размеры на стадии ОС изменяются со временем по закону (37), то временное поведение переполаризации-передеформации имеет вид

$$\xi_n(t) \rightarrow \text{const}''' \cdot t^{-1/p}. \quad (39)$$

В заключение отметим, что функции распределения зародышей по размерам, записанные в безразмерных координатах, имеют одинаковый вид для всех фазовых переходов на стадии ОС (см., например, [12,18,19]) и мы их не приводим.

Таким образом, эволюционные уравнения, описывающие случаи диффузионного ОС, „теплового“ ОС или „электромеханического“ ОС, имеют формально общую структуру и соответствующие решения. Однако, и это особо следует подчеркнуть, природа движущих сил в указанных процессах совершенно различна: разность концентраций при диффузионном ОС, разность температур при „тепловом“ ОС, разность электрических полей при „электрическом“ ОС и т.д.

3. Ток поляризации и поток деформации

Временная зависимость плотности тока поляризации в одноосном СС может быть определена, как и в случае чистого сегнетоэлектрика, соотношением [20]

$$J_P = -2P_{x10} \frac{dQ}{dt}, \quad (40)$$

где dQ/dt — скорость изменения доли объема Q кристалла, который еще не успел переключиться; P_{x10} — исходное равновесное значение спонтанной поляризации СС.

С другой стороны, особенность переключения одноосных СС состоит в том, что вызванная внешними электрическими или механическими полями (в общем случае суперпозицией указанных полей) реориентация параметра порядка η приводит к реориентации как поляризации, так и деформации. При этом наряду с током поляризации, обусловленным переполаризацией сегнетоэлектрических доменов, с неизбежностью возникает „поток деформации“, вызванный передеформацией сегнетоэластических доменов (упругих двойников).

В связи с этим по аналогии с определением плотности тока поляризации (40) введем выражение для плотности потока деформации

$$J_U = -2U_{yz}^{10} \frac{dQ}{dt}, \quad (41)$$

где U_{yz}^{10} — исходное равновесное значение спонтанной деформации СС. Тогда явная связь плотности тока поляризации и плотности потока деформации имеет вид

$$J_P = \lambda J_U, \quad (42)$$

где $\lambda = P_{x10}/U_{yz}^{10}$.

На начальной стадии переключения, согласно классической теории зарождения-роста [14], система еще не чувствует появления зародышей новой фазы и ее термодинамические параметры практически не меняются. При этом доля объема кристалла, вовлеченная в фазовый переход, весьма мала, а скорость ее изменения равна нулю. В связи с этим, как отмечалось в [3], на начальной стадии переключения СС ток поляризации и поток деформации отсутствуют. Указанные потоки возникают только на втором этапе фазового превращения, когда система входит в стадию массовой переполаризации-передоформации. При этом время начала и продолжительности этой стадии можно оценить по формуле (30).

Для вычисления тока поляризации и потока деформации на стадии массовой переполаризации-передоформации одноосного СС, следуя [3], обратимся к кинетическим уравнениям (1)–(24).

Введем степень заполнения объема кристалла доменами переполаризации-передоформации $Z = 1 - Q = \omega \int_0^\infty n f(n, t) dn$. С учетом введенной величины Z соответствующие граничное и начальное условия основного кинетического уравнения (2) примут вид

$$f(n_0, t) = I(t)[1 - Z(t)]V_n^{-1}|_{n=n_0}, \quad f(n, 0) = 0, \quad (43)$$

где $I(t)$ — скорость зародышеобразования.

Поскольку часть единичного объема кристалла занята уже переполаризованными и передоформированными областями, а зарождение происходит только на свободных местах, уравнение баланса (16) следует переписать в виде [3]

$$\frac{d\xi_n}{dt} = \frac{\xi_{n0}}{\tau} - \frac{\xi_n}{\tau} - \frac{\left(\frac{\eta}{\eta_{10}} - 1 - \xi_n\right)}{(1-Z)} \frac{dZ}{dt}, \quad (44)$$

где отношение (η/η_{10}) учитывает различие в доле объема, занятого переполаризованными и передоформированными ячейками в равновесном и в полностью переключенном состояниях при наличии поля.

Решение кинетического уравнения (2) с граничным и начальным условиями (43) и уравнением баланса (44) позволяет найти все основные характеристики процесса переключения. С этой целью запишем выражение для

$Z(t)$ в переменных ρ и t , учитывая, что $\rho = n^{1/2}$, $f(n, t)dn = q(\rho, t)d\rho$. Дифференцируя $Z(t)$ по времени и используя соотношения (20) и (22), а также условие $q(\rho, t)|_{\rho \rightarrow \infty} = 0$, получим

$$\left(\frac{Z'}{\xi_\eta}\right)' = \frac{2\omega\xi_\eta}{t_0^2} N, \quad (45)$$

где t_0 — характерное время роста (21), N — число родившихся доменов. В последнем выражении штрихом обозначена производная по времени. Дифференцируя соотношение (45) еще раз по времени, получим

$$\left[\frac{1}{\xi_\eta} \left(\frac{Z'}{\xi_\eta}\right)'\right]' = \frac{2\omega}{t_0^2} I(\xi_\eta(t)), \quad (46)$$

где $I(\xi_\eta(t))$ — поток зародышей.

Отсюда с учетом определений (40) и (41) ток поляризации и поток деформации равны

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{\xi_\eta} \left(\frac{J_P}{\xi_\eta}\right)'\right]' &= -\frac{4\omega P_{x10}}{t_0^2} I(\xi_\eta), \\ \left[\frac{1}{\xi_\eta} \left(\frac{J_U}{\xi_\eta}\right)'\right]' &= -\frac{4\omega U_{yz}^{10}}{t_0^2} I(\xi_\eta). \end{aligned} \quad (47)$$

Таким образом, уравнения (47) совместно с уравнением баланса (44) составляют полную систему, позволяющую вычислить зависимость тока поляризации и потока деформации от времени и приложенных внешних полей.

Преобразуем уравнение (44) к виду

$$J_P = -\frac{2P_{x10} \left(\frac{\xi_{n0}}{\tau} - \xi'_\eta - \frac{\xi_n}{\tau}\right) (1-Z)}{\left(\frac{\eta}{\eta_{10}} - 1 - \xi_\eta\right)}. \quad (48)$$

Подставляя уравнение (48) в первое из соотношений (47), получим

$$\left[\frac{1}{\xi_\eta} \left(\frac{\left(\frac{\xi_{n0}}{\tau} - \xi'_\eta - \frac{\xi_n}{\tau}\right) (1-Z)}{\left(\frac{\eta}{\eta_{10}} - 1 - \xi_\eta\right)}\right)'\right]' = -\frac{2\omega}{t_0^2} I(\xi_\eta). \quad (49)$$

Это уравнение определяет зависимость переполаризации-передоформации от времени. При этом начальными условиями являются нулевые условия для тока поляризации и потока деформации, а также их производных по времени и переполаризации-передоформации.

Зависимость потока зародышей от переполаризации-передоформации определена в работах [2,5] и может быть представлена в виде

$$I(\xi_n) = I_0 \xi_n^{1/2} e^{-\alpha/\xi_n}, \quad (50)$$

где

$$\begin{aligned} I_0 &= \frac{N_v \beta_0 \sqrt{H \omega p_x P_{x10}}}{\sqrt{k_B T \chi_{xx}^{T, \sigma_{yz}} \epsilon_0}} = \frac{N_v \beta_0 \sqrt{H \omega u_{yz} U_{yz}^{10}}}{\sqrt{k_B T s_{yz}^{T, E_x}}}, \\ \alpha &= \frac{\pi H \omega \sigma_{xx}^{T, \sigma_{yz}} \epsilon_0}{2k_B T p_x P_{x10}} = \frac{\pi H \sigma_{yz}^{T, E_x}}{2k_B T u_{yz} U_{yz}^{10}}. \end{aligned}$$

Отметим некоторые особенности уравнений (2), (44)–(50), определяющих кинетику переключения одноосных СС во внешних полях. Во-первых, данные уравнения применимы к описанию переключения как одноосных сегнетоэлектриков, что было осуществлено в работах [2,3], так и собственных сегнетоэластиков. В первом случае возникает ток поляризации, а поток деформации отсутствует. Во втором случае возникает поток деформации, а ток поляризации равен нулю. Во-вторых, при выводе уравнений (2), (44)–(50) мы не учли возможную коалесценцию доменов переполаризации-передоформации. Для подобного учета, который в принципе возможен с помощью введения в правую часть кинетического уравнения (2) интеграла столкновений с соответствующим ядром коагуляции, необходимо знать конкретные механизмы слияния доменов. В-третьих, в работе отсутствует учет возможных дефектов кристалла. Следовательно, для учета тока утечки или наличия центров пиннинга данная теория требует соответствующего обобщения. Наконец, представляется весьма интересной обратная задача, когда путем сравнения теоретических зависимостей тока поляризации с экспериментальными данными можно определять ряд констант сегнетоэлектриков и родственных им материалов, которые затруднительно найти экспериментально.

В заключение сделаем некоторые оценки полученных теоретических зависимостей.

4. Обсуждение результатов и сравнение с экспериментом

В качестве иллюстрации применения данной теории к конкретным кристаллам проведем сопоставление некоторых характеристик переключения с экспериментальными данными классического СС — сегнетовой соли. При этом следует отметить, что в силу высокой погрешности как экспериментальных, так и теоретических данных полное количественное сравнение трудноосуществимо. Поэтому дальнейшее рассмотрение будет носить качественный характер.

Воспользуемся следующими исходными экспериментальными данными сегнетовой соли [11,21,22]: температура Кюри (верхняя) $T_c \sim 297$ К; молекулярная масса $M \sim 0.282$ кг · моль⁻¹; плотность $\rho \sim 1.77 \cdot 10^3$ кг · м⁻³; при температуре $T \sim 277$ К равновесная спонтанная поляризация $P_{x10} \sim 0.25 \cdot 10^{-2}$ С · м⁻², поверхностное натяжение доменной стенки $\sigma \sim 5 \cdot 10^{-5}$ Дж · м⁻², диэлектрическая восприимчивость $\chi_{xx}^{T,\sigma_{yz}} \sim 250$, пьезомодуль $d_{xyz} \sim 4.44 \cdot 10^{-10}$ С · Н⁻¹. Тогда объем элементарной ячейки кристалла сегнетовой соли можно оценить как $\omega \sim M/\rho N_A = 2.65 \cdot 10^{-28}$ м³ (N_A — постоянная Авогадро). Поскольку, согласно [11], $\epsilon_0 \chi_{xx}^{T,\sigma_{yz}}/d_{xyz} = a_1/a_2$ и $d_{xyz}/s_{yzyz}^{T,E_x} = a_1/a_2$, следовательно, упругую податливость можно оценить как $s_{yzyz}^{T,E_x} \sim d_{xyz}^2/\epsilon_0 \chi_{xx}^{T,\sigma_{yz}} = 5.34 \cdot 10^{-11}$ м² · Н⁻¹. Отсюда $a_1/a_2 \equiv \lambda = 6.432$ С · м⁻² и величина равновесной

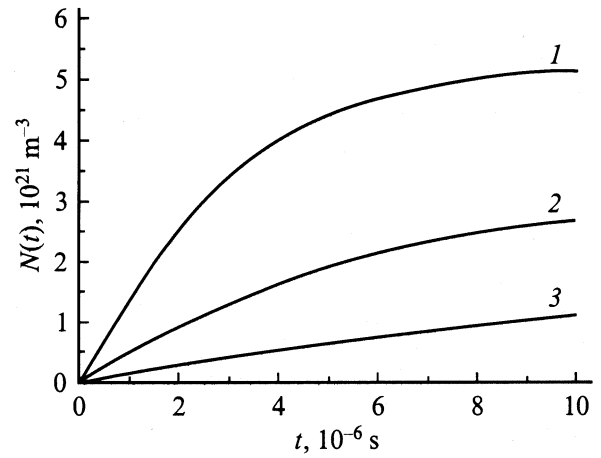


Рис. 1. Зависимости плотности переполаризованных и передоформированных доменов $N(t)$ от времени и величины поля: 1 — $E_x = 1.13 \cdot 10^4$ В · м⁻¹, $\sigma_{yz} = 0.73 \cdot 10^4$ Н · м⁻² или $E_x = 1.2 \cdot 10^3$ В · м⁻¹, $\sigma_{yz} = 7.27 \cdot 10^4$ Н · м⁻²; 2 — $E_x = 1.13 \cdot 10^4$ В · м⁻¹, $\sigma_{yz} = 0.37 \cdot 10^4$ Н · м⁻² или $E_x = 0.6 \cdot 10^3$ В · м⁻¹, $\sigma_{yz} = 7.27 \cdot 10^4$ Н · м⁻²; 3 — $E_x = 1.13 \cdot 10^4$ В · м⁻¹, $\sigma_{yz} = 0$ или $E_x = 0$, $\sigma_{yz} = 7.27 \cdot 10^4$ Н · м⁻².

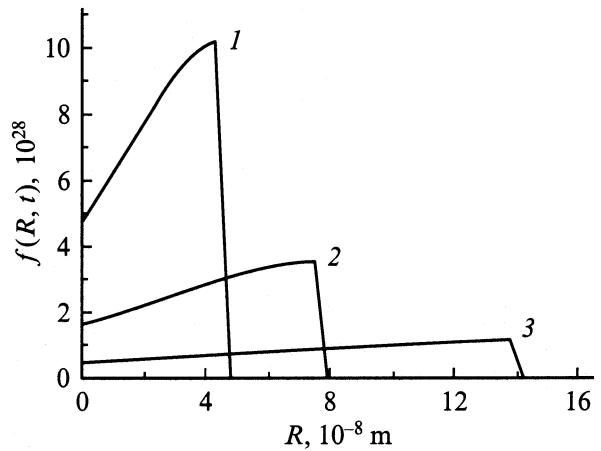


Рис. 2. Зависимости функции распределения переполаризованных и передоформированных доменов по размерам $f(R, t)$ от величины поля в момент времени $t = t_k$: 1 — $t_k = 3.3 \cdot 10^{-6}$ с, 2 — $t_k = 5.8 \cdot 10^{-6}$ с, 3 — $t_k = 1.1 \cdot 10^{-5}$ с. Кривые 1–3 соответствуют тем же значениям E_x и σ_{yz} , что и на рис. 1.

спонтанной деформации есть $U_{yz}^{10} = \lambda^{-1} P_{x10} = 3.887 \cdot 10^{-4}$. Будем также в дальнейшем считать, что $H \sim \omega^{1/3}$, $N_v \sim \omega^{-1}$ и $\beta_0 \sim 10^{31}$ м⁻² · с⁻¹.

С помощью приведенных выше данных оценим размер критического зародыша R_c , время установления стационарного потока t_0 и параметры I_0 и α для кристалла сегнетовой соли. Так, в полях $E_x = 1.13 \cdot 10^4$ В · м⁻¹, $\sigma_{yz} = 0.73 \cdot 10^4$ Н · м⁻² размер критического зародыша, рассчитанный по формулам предыдущих работ [2,5], $R_c \sim 10^{-7}$ м что соответствует типичным экспериментальным значениям [23]. В этих же полях время установления стационарного потока $t_0 = 2.88 \cdot 10^{-10}$, а па-

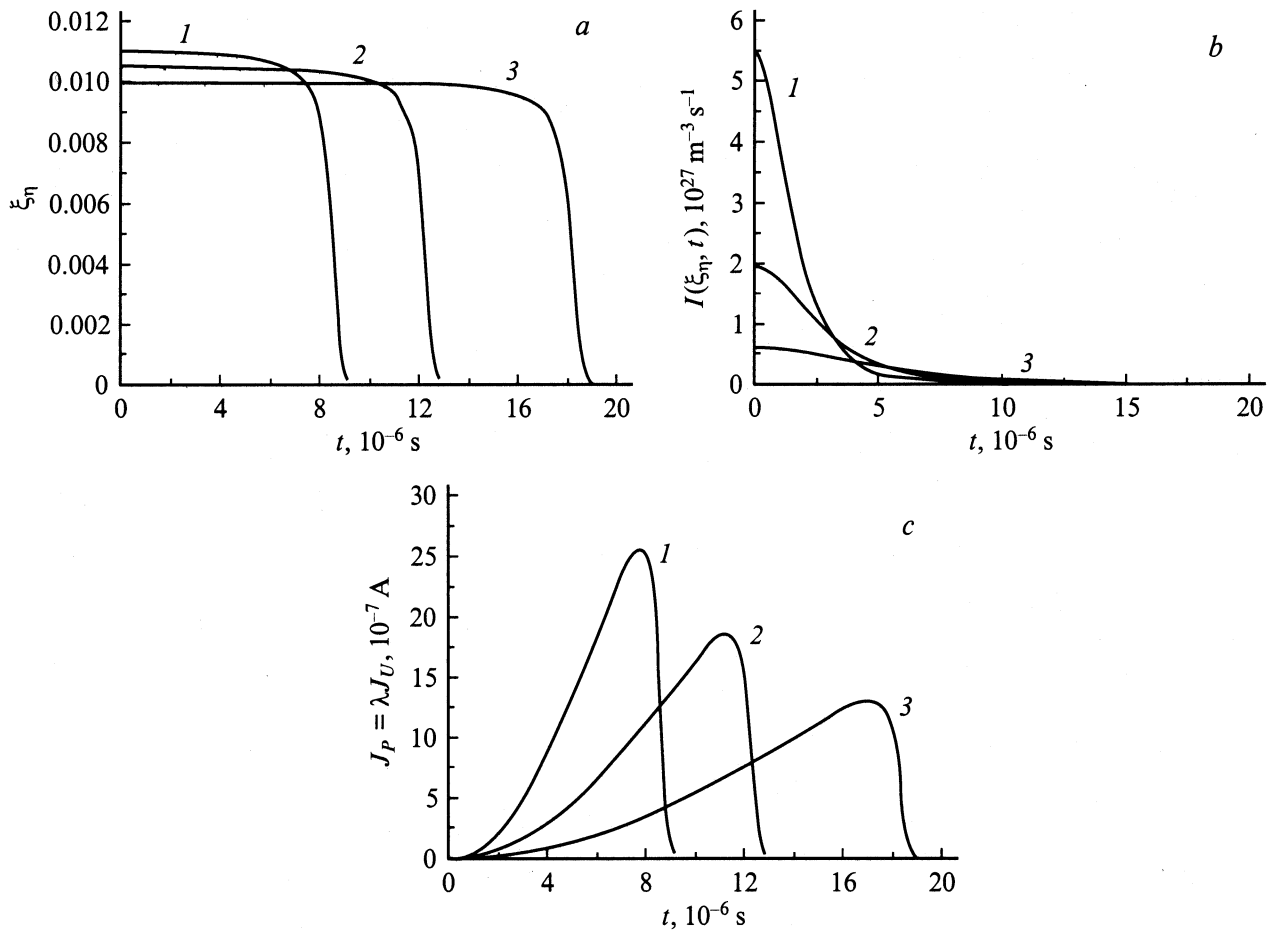


Рис. 3. Зависимости переполаризации-передоформации ξ_n (a), скорости зародышеобразования $I(\xi_n, t)$ (b), а также тока поляризации J_p и потока деформации J_U (c) от времени и величины поля при $I_0 = 2.64 \cdot 10^{38}$, $\alpha = 0.234$, $t_0 = 2.9 \cdot 10^{-10}$ s, $P_x/P_{x10} \sim 1.12$, площадь образца $S \sim 10^{-9}$ m². Кривые 1–3 соответствуют тем же значения E_x и σ_{yz} , что и на рис. 1.

параметры $I_0 = 2.64 \cdot 10^{38}$ и $\alpha = 0.234$. На рис. 1 и 2 приведены графики временных зависимостей плотности переключившихся доменов $N(t)$ и функции распределения доменов по размерам $f(R, t)$, вычисленных с помощью уравнений (26) и (28). Кривые переполаризации-передоформации, скорости зародышеобразования, а также тока поляризации и потока деформации, полученные на основании решения системы (48)–(50), представлены на рис. 3. Обратим внимание на важные особенности указанных зависимостей. Прежде всего отметим, что полученные кривые тока поляризации качественно хорошо отражают ход тока поляризации в реальных сегнетоэлектриках [24,25]. Во-вторых, поскольку переключение одноосных СС возможно как электрическим, так и механическим полем, следовательно, каждую из кривых тока можно получить двумя способами — либо путем варьирования электрической составляющей внешнего поля при фиксированном внешнем механическом напряжении, либо, наоборот, фиксируя электрическое поле и меняя при этом механическое напряжение. Указанный факт нашел отражение в приведенных графиках, где для каждой кривой тока поляризации, как, впрочем, и для остальных характеристик переключения СС, приведены

две из бесконечного множества возможных линейных комбинаций внешних полей. Наконец, временное поведение потока деформации качественно сходно с поведением импульса акустической эмиссии, сопровождающего выход упругого двойника из кристалла [10].

В заключение отметим, что начатое в [2–5] и продолженное в настоящей работе построение кинетической теории переключения сегнетоэлектриков и родственных им материалов, описываемых однокомпонентным параметром порядка, допускает нетривиальное обобщение на случай многокомпонентного параметра порядка. Таким образом, открывается перспектива исследования многоосных сегнетоэлектриков, которые, как известно, являются одновременно и несобственными сегнетоэластиками. Указанные вопросы будут исследованы в дальнейшем.

Список литературы

- [1] М. Molotskii, R. Kris, G. Rosenmann. J. Appl. Phys. **88**, 9, 5318 (2000).
- [2] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. ФТТ **43**, 1, 80 (2001).

- [3] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. ФТТ **43**, 1, 88 (2001).
- [4] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. ФТТ **43**, 2, 312 (2001).
- [5] С.А. Кукушкин, М.А. Захаров. ФТТ **44**, 2, 332 (2002).
- [6] V.Ya. Shur. In: *Ferroelectric Thin Films. Ferroelectricity and Related Phenomena*. Vol. 10. Part 1. Gordon and Breach, Amsterdam (1996). P. 153.
- [7] В.Я. Шур, Е.Л. Румянцев, В.П. Куминов, А.Л. Субботин, Е.В. Николаева. ФТТ **41**, 1, 126 (1999).
- [8] H.M. Duiker, P.D. Beal. *Phys. Rev.* **B41**, 490 (1990).
- [9] А.М. Bratkovsky, А.Р. Levanyuk. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3177 (2000).
- [10] В.С. Бойко, Р.И. Гарбер, А.М. Косевич. *Обратимая пластичность кристаллов*. Наука, М. (1991). 280 с.
- [11] Б.А. Струков, А.П. Леванюк. *Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах*. Наука, М. (1995). 304 с.
- [12] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. УФН **168**, 10, 1083 (1998).
- [13] И.М. Фишман. УФН **155**, 2, 329 (1988).
- [14] С.А. Кукушкин, В.В. Слезов. *Дисперсионные системы на поверхности твердых тел (эволюционный подход): Механизмы образования тонких пленок*. Наука, СПб (1996). 312 с.
- [15] Р. Лодиз, Р. Паркер. *Рост монокристаллов*. Мир, М. (1974). 540 с.
- [16] А.А. Чернов. В кн.: *Современная кристаллография*. Т. 3. Наука, М. (1980). С. 7.
- [17] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov. *Progr. Surf. Sci.* **56**, 1, 1 (1996).
- [18] V.V. Slezov. *Phys. Rev.* **17**, 1 (1995).
- [19] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. ЖЭТФ **113**, 6, 2197 (1998).
- [20] I. Ishibashi, Y. Takagi. *J. Phys. Soc. Jpn.* **31**, 506 (1971).
- [21] Ф. Иона, Д. Ширане. *Сегнетоэлектрические кристаллы*. Мир, М. (1965).
- [22] Дж. Барфут. *Введение в физику сегнетоэлектрических явлений*. Мир, М. (1979). 352 с.
- [23] Г.А. Смоленский, Н.Н. Крайник. *Сегнетоэлектрики и анти-сегнетоэлектрики*. Наука, М. (1968). 184 с.
- [24] C.L. Wang, L. Zhang, W.L. Zhong, P.L. Zhang. *Phys. Lett.* **A254**, 297 (1999).
- [25] Н.Н. Крайник, Л.С. Камзина. ФТТ **37**, 4, 999 (1995).