

# ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПОВЫШЕНИЯ НАДЕЖНОСТИ И КАЧЕСТВА ИЗДЕЛИЙ

УДК 621.315.61

## К ПРОБЛЕМЕ ОБРАЗОВАНИЯ ДОМЕНОВ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И ТЕПЛОВЫХ ПОЛЕЙ

А. Т. Богорош, С. А. Воронов, А. Г. Шайко-Шайковский,  
С. В. Билык, Е. Н. Тимофеева, Д. З. Перчик

### Введение

Процесс образования домена под действием электрического поля, созданного внешним наноисточником и внутренними микроскопическими дефектами, рассмотрен в рамках термодинамического подхода в работе [1], где избыточная свободная энергия, возникающая при образовании домена, имеет вид

$$\begin{aligned}\Phi(r, l, y_0, U) &= \Phi_S(r, l) + \Phi_D(r, l) + \Phi_U(r, l, y_0, U) + \Phi_d(r, l, y_0), \\ \Phi_U(r, l, y_0, U) &= -2P_S \int_V dx E_3^q(\mathbf{x}) \approx -\frac{4\pi U P_S d r^2 l / \gamma}{\left(\sqrt{r^2 + d^2 + y_0^2} + d\right) \left(\sqrt{r^2 + d^2 + y_0^2} + d + l / \gamma\right)}, \\ \Phi_d &= -2P_S \int_V dx E_3^d(\mathbf{x}) \approx -2\pi r_d^2 h_d P_S E_S \left(1 - \exp\left(-\frac{l}{h_d}\right)\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{r^2}{r_d^2}\right)\right) \exp\left(-\frac{(x_{01} - y_0)^2}{r_d^2}\right),\end{aligned}\quad (1)$$

где  $\Phi_S$  – поверхностная энергия доменной стенки, пропорциональна плотности поверхностной энергии  $\psi_S$  и площади поверхности домена  $S$ ;  $U$  – электрическое напряжение, приложенное к источнику, который моделируется эффективным зарядом  $Q$ , который находится на расстоянии  $d$  над поверхностью сегнетоэлектрика;  $V$  – объем домена;  $r$  – радиус;  $l$  – длина домена;  $y_0$  – положение оси домена от начала координат  $Q$ ;  $\Phi_D$  – энергия поля деполяризации, рассчитана при условии полного экранирования спонтанной поляризации, когда на поверхности сегнетоэлектрика присутствует экранирующий заряд или отсутствующий диэлектрический слой между проводящим источником и поверхностью;  $\Phi_U$  – энергия взаимодействия домена с внешним электрическим полем  $E^q(\mathbf{x})$ ;  $\Phi_d$  – энергия взаимодействия домена с электрическим полем дефектов  $E^d(\mathbf{x})$ . Как правило, поля поверхностных дефектов хорошо локализованы [2, 3], поэтому поле  $E^d(\mathbf{x})$  может быть разложено по гауссовскому базису, а дальнейшее теоретическое рассмотрение сосредоточено на влиянии поверхностного дефекта, ближайшего до источника  $Q$ , который образует гауссово электрическое поле  $E_3^d(\mathbf{x}) \cong E_S \exp\left(-\left((x - x_{01})^2 + x_2^2\right) / r_d^2 - x_3 / h_d\right)$  с характерной шириной распре-

деления  $r_d$  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 отражает 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

$$u = D(C_1 - C_0)/x, \quad (2)$$

где  $C_1, C_0$  – концентрация пресыщения и насыщения среды у поверхности;  $x$  – путь диффундирования;  $D$  – коэффициент диффузии, который можно определить из уравнения Эйнштейна:

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

здесь  $\eta, k$  – вязкость среды и константа скорости реакции.

### Данные о методике исследования

Рассмотрим пространственное распределение температуры  $T$  и концентрации  $C$  вдоль грани кристалла, растущей со скоростью.

Пусть среда имеет температуру

$$T_0 = LC_0/pc, \quad (4)$$

где  $L$  – тепловой эффект реакции;  $p, c$  – плотность и теплоемкость среды, а грань кристалла во время экзотермической реакции роста – 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.

Однако поскольку реакция экзотермическая и теплота выделяется в процессе присоединения молекул, то 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:

$$T = T_0 + L(C_1 - C_0) / pc. \quad (7)$$

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.

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 вначале слой поверхности начинает нагреваться и изотермически нагревает прилегающий слой. Зона подогрева со временем растет. В нагретом слое начинается реакция, вследствие чего температура может кое-где даже превысить адиабатическую температуру  $T_1$ . Этот скачок температуры (неустойчивость системы) может возникнуть, если слой завихряется (например, аналогично турбулентному вихрю [4, 5], возникающему при физическом воздействии на среду потоком электронов).

В дальнейшем с течением времени будут нагреваться слои поверхности, находящиеся на достаточном расстоянии от кончика кантвелера. При распределении температуры вглубь в по-

следующие моменты времени могут наблюдать волновые процессы. Волна возникает у кончика зонда и движется в слой поверхности от фронта изотермы, при этом концентрация теплового потока от домена и скорость отражения от дефекта 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  $LC_0/\rho c$  энергии, и температура в волне равна  $T_1$ .

Если 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, 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  $2\pi$  по  $\Theta$ , запишем ее значение в виде

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

что соответствует описанию концентрации по сечению струи в турбулентном вихре [6]. Здесь  $(-1)$  – потеря тепла (охлаждение, вторичная эмиссия электронов);  $(+1)$  – подогрев слоя поверхности;  $f_m$  – целые рациональные функции своих аргументов, достаточно гладкие, т.е. непрерывно дифференцируемые по  $x$  на интервале  $(0, L)$ .

В математической постановке задачи отыскание неизвестной функции  $u$  (что соответствует  $\frac{dC}{dt}$ ) состоит в решении квазилинейной краевой задачи для уравнения

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

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

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

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  $b, p, \lambda_n$  – коэффициенты квантово-механической делокализации точечных дефектов поверхности квантового кристалла, пропорциональности и теплопроводности среды;  $\gamma, e, \sigma$  – 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,

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

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

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

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

где  $\varphi = \rho q^{-1}\Theta + \psi$ ;  $n$  – номер кривой;  $u_j - 2\pi$  – периодические функции скорости по  $\varphi$  и  $\Theta$ . Величины  $a, \psi$  определяются из системы уравнений

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

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

$$[\Omega_n(\partial/\partial\varphi) + \gamma(\partial/\partial\Theta)]^3u_1 + a[\Omega_n(\partial/\partial\varphi) + \gamma(\partial/\partial\Theta)]^2u_1 - b^2(\partial/\partial x)[\Omega_n(\partial/\partial\varphi) + \gamma(\partial/\partial\Theta)]u_1 - \gamma(\partial/\partial\Theta)u_1 - ab^2(\partial^2u_1/\partial x^2) = C_0(x, a, \varphi, \Theta) + 2(\Omega_nA_1 + abB_1)\Omega_nX_n(x)\cos\varphi + 2(aA_1 - \Omega_nabB_1)\Omega_nX_n\sin\varphi \quad (18)$$

с краевыми условиями

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

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

$$\begin{aligned} u(x, t) &= aX_n(x)\cos\varphi + eu_1(x, a, \varphi, \Theta), \\ u(x, t) &= aX_n(x)\cos\varphi + eu_1(x, a, \varphi, \Theta) + e^2u_2(x, a, \varphi, \Theta), \\ u(x, t) &= aX_n(x)\cos\varphi + eu_1(x, a, \varphi, \Theta) + e^2u_2(x, a, \varphi, \Theta) + e^3u_3(x, a, \varphi, \Theta), \dots \end{aligned} \quad (20)$$

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

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

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

Величины  $a$  и  $\psi$  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

$$\begin{aligned} A_1(a, \psi) &= K \sum_r \exp(irq\psi) \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^L C_0 X_n(x) (\Omega_n \cos\varphi + a \sin\varphi) [-irq\psi] d\varphi d\theta dx; \\ B_1(a, \psi) &= K \sum_r \exp(irq\psi) \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^L C_0 X_n(x) (a \cos\varphi - \Omega_n \sin\varphi) \exp[-irq\psi] d\varphi d\theta dx; \end{aligned}$$

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

Если продольное колебание локальной субмикрповерхности 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  $\psi$  определяются из системы уравнений

$$\begin{aligned} da/dt_1 &= -\beta^* ab - E^* \cos \psi, \\ d\psi/dt &= 1 - \eta^* + \Omega_1 \beta^* - b^* a^2 + (E^*/a) \sin \psi, \end{aligned} \quad (24)$$

где

$$\begin{aligned} t_1 &= \Omega_1 t; \beta^* = e\beta\lambda_1^2/2\Omega_1(a^2 + \Omega_1^2); E^* = eEc^* h_1/2\Omega_1^2; \eta^* = \gamma\Omega_1; h_1 = h\Phi; \\ b^* &= 3e(1 + Q)b_1^2\lambda_1^4/32\Omega_1^2; Q = -4\lambda_1^2 h_1 / \{(h_1^2 + \lambda_1^2)[(h_1^2 + \lambda_1^2)L] + h_1\}; \\ c^* &= 2(1 - \cos\lambda_1 L)(h_1^2 + \lambda_1^2) / \lambda_1[L(h_1^2 + \lambda_1^2) + h_1], \end{aligned}$$

$h$  – постоянная Планка (квант действия), равная  $6,625 \cdot 10^{-34}$  Дж·с;  $h_1$  – расстояние между «нулевыми» поверхностными дефектами на поверхности квантового кристалла, зависимое от фактора неустойчивости  $\Phi$  [4]. При этом частота волновых колебаний  $\eta$  связана с амплитудой  $a$  зависимостью

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

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

Численное решение (25) с учетом параметров, приведенных в (9)–(24), в том числе:  $f_m$  – объемной плотности энергии физического воздействия в среде, равной разности между объемными плотностями энергии среды в возмущенном и невозмущенном состоянии, описываемой целыми рациональными функциями своих аргументов, достаточно гладких на интервале  $(0, L)$ ;  $b$  – коэффициента пропорциональности кинетической и потенциальной энергии деформируемой среды от  $\Phi$  и  $i$  – коэффициента конверсии, равного отношению вероятностей действия  $\Phi$  при испускании и поглощении кванта энергии новой волной за промежуток времени  $\tau$ ;  $l$  – длины фронта волны;  $p = 1/N_A$ ; где  $N_A$  – число Авогадро;  $q$  – величины тангенциального смещения гребня волны от оси резонансной кривой, характерной для вещества с валентностью  $m$ ;  $r$  – массового количества дефектов при критической концентрации доменов  $S$  и различных числах Шервуда  $Sh$ ;  $a$  – коэффициента квантово-механической делокализации точечных дефектов;  $e$  – параметров амплитуды;  $\Theta$  – угла рассогласования скорости реакции и падения концентрации;  $\Omega$  – перестройки параметра атомной шероховатости квантового кристалла;  $\sigma$  – параметра расстройки частоты от  $\Phi$ ;  $\bar{\Phi}$  и  $\phi$  – мгновенного и устойчивого значений углов атаки фронта тепловой волны, а также угла наклона турбулентного вихря к продольной оси волны  $\psi$ .

### Экспериментальная часть

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 магнитострикторе 1,86 Вт/см<sup>2</sup> через 0,01 с и 0,05 – 1с аperiodически  $\beta^* = 0,1$ .

Приведенные результаты свидетельствуют о возможности управлять процессом образования доменов в сегнетоэлектриках внешними физическими воздействиями. Решение задачи указывает также на связь распределения концентраций и температуры в прилежащем к изотермическому объему и перемещение фронта волны  $T$  или  $C$  с волновыми колебаниями частотой  $\eta$  и амплитудой  $a$ . Эти колебания можно вызвать различными физическими воздействиями, а следовательно, управлять (интенсифицировать или подавлять) процессами образования дефектов, что подтверждено многочисленными экспериментами [4, 5].

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  $b$  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 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.

Затухание колебаний какой-либо системы обычно характеризуется величиной, называемой декрементом затухания, который, как и собственная частота, является внутренней характеристикой энергии системы, например, с ее диссипацией вследствие трения. Обычно декремент определяется производными скорости процесса и температуры зоны реакции по начальной температуре.

Учет неустойчивости системы приводит к появлению интересных физических явлений, возбуждаемых и гасимых внешними физическими воздействиями, например, турбулентных вихрей, предсказанных в работах [6].

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.

Неустойчивость послышного 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 невозможен 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 [6].

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 температура;  $u$  – скорость реакции;  $E$  – энергия активации роста дефекта (в пределах  $E \approx (5,9...48,2) \cdot 10^3$  Дж/моль при Дб  $\approx 80$ – $100$  % и  $30$ – $80$  °С по данным В. Ван-Гука, М. С. Жигалова и И. С. Гулого), или неустойчивости, физический смысл которого рассмотрен в [4].

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. Увеличение  $\Phi$  ведет к росту амплитуды колебаний и деформации формы кривой. При этом переход через предельное значение  $\Phi_1$ , которое значительно отличается от  $\Phi_0$ , соответствующего потере устойчивости плоского фронта, сопровождается превращением плоского фронта в двух- или трехмерную структуру, т.е. охватывает весь домен.

При решении этой задачи численным методом можно обнаружить следующее. Наиболее простая форма такой структуры – гофрированная поверхность, когда некоторые участки фронта фазового перехода обгоняют соседние. В пространстве эти участки расположены периодически. Следовательно, при потере устойчивости наиболее неустойчивой формой является гармоника с определенной длиной волны (неустойчивость плоского фронта, которую мы рассматриваем, соответствует длине волны  $\lambda \leq \infty$ ).

При потере устойчивости и переходе  $\Phi$  в  $\Phi$ -фронт кристаллизации приобретает форму гармоника с длиной полуволны, равной отрезку  $\lambda / 2$ .

Исследования В. В. Кафарова, Д. А. Франк-Каменецкого, Б. В. Новожилова, Я. Б. Зельдовича и других показали, что картина фронта химической реакции изменяется во времени. Фронт представляет собой ячеистую структуру, в которой периодически расположены квантовые возвышения и впадины, причем последние могут перемещаться по поверхности фронта. На возвышениях наблюдаются более высокие значения температуры и концентрации для веществ прямой растворимости (и наоборот, для веществ обратной растворимости), а следовательно, и большая скорость реакции. Однако эти возвышения не обгоняют впадины (квантовые ямы в гетероструктурах), поскольку между всеми элементами фронта при неплоской его структуре существует тепло- и массообмен, который и обуславливает движение фронта как целого вдоль своей оси. Если реакция во впадинах затухает, фронт изотермы может распасться на ряд не связанных между собой ячеек, имеющих определенные размеры и довольно сложную слоисто-вихревую или скалено-эдрическую структуру. Микрофотографии таких поверхностей приведены в работах [4–7, 8–10]. Кроме того, в этих впадинах происходит скопление и захват примесных кластеров, которые меняют свойства веществ.

### **Выводы**

Сочетание термодинамической теории образования нанодоменов в сегнетоэлектрических материалах аналитической теории их локального пьезоэлектрического отклика на возбуждение внешним электрическим полем открывает возможности самосогласованного количественного анализа экспериментальных данных.

Установлено, что поверхностные дефекты имеют формы петель локального пьезоэлектрического гистерезиса, как прыжки пьезовидугу и асимметрия коэрцитивных напряжений. Полученные аналитические зависимости энергии активации зародыша, его размеров и радиуса устойчивого домена от конфигурации электрических и тепловых полей внутренних дефектов и внешнего наноразмерного источника позволяют определить размеры нанодоменов, образующихся вблизи дефектов путем деконволюции экспериментальных петель гистерезиса локального пьезоэлектрического отклика.

Результаты численного моделирования и аналитические выражения для зависимости пьезоотклика и размеров доменов от внешнего электрического поля и параметров сегнетоэлектрического материала хорошо согласуются как с экспериментальными зависимостями для тонких пленок и монокристаллов типичных сегнетоэлектриков, так и с многочисленными результатами, полученными независимо методом моделирования фазовых полей других авторов, обеспечивает достоверность полученных результатов.

Полученные результаты открывают возможности моделирования петель гистерезиса локального пьезоэлектрического отклика и самосогласованного количественного анализа экспериментальных данных пьезоэлектрической силовой микроскопии, петель сегнетоэлектрического, диэлектрического и пироэлектрического гистерезиса в полярно-активных кристаллических и керамических материалах, имеет практическое значение для миниатюризации приборов нанoeлектроники.

### **Список 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, Y. H. Chu, 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. The Effect of Elastic Vibrations on Monodispersity and Kinetics Crystallization. / A. T. Bogorosh // J. Program. – 1983, Vol. 10011. – P. 49–52.
5. Богорош, А. Т. Кристаллизационные волны при зарождении и росте монокристаллов / А. Т. Богорош // Доповіді НАНУ. – 1999. – № 12. – С. 82–90.
6. Diagnostics of mechanical defects in navigation electronic devices / A. Bogorosh1, S. Voronov, N. Višniakov, J. Novickij // Materials science. – 2006. – Vol. 12, № 4, P. 30–39.

7. Северцев, Н. А. Проблема оценивания измеряемых параметров технических систем / Н. А. Северцев, А. В. Мухин, Л. В. Логинова // Труды Междунар. симп. Надежность и качество. – 2003. – С. 313–317.
8. Туганова, Г. Ф. Нейросетевая модель прогнозирования состояния технических систем / Г. Ф. Туганова // Труды Междунар. симп. Надежность и качество. – 2002. – С. 330–331.
9. Слюсарев, Г. В. Энергетические методы оценки физико-механических свойств упругих конструкций при вибрационных испытаниях / Г. В. Слюсарев // Труды Междунар. симп. Надежность и качество. – 2002. – С. 412–415.
10. Кинетика образования доменов под воздействием электрических и тепловых полей дефектов в приборах и устройствах на основе сегнетоэлектриков / А. Т. Богорош, С. А. Воронов, А. Г. Шайко-Шайковский, С. В. Билык, Е. Н. Тимофеева, Д. З. Перчик // Труды Междунар. симп. Надежность и качество. – 2015. – Т. 2. – С. 157–160.

***Богорош Александр Терентьевич***

доктор технических наук, профессор,  
кафедра прикладной физики,  
Киевский политехнический институт,  
Национальный технический университет Украины  
(03056, Украина, г. Киев, пр-т Победы, 37)

***Воронов Сергей Александрович***

доктор технических наук, профессор,  
заведующий кафедрой прикладной физики,  
Киевский политехнический институт,  
Национальный технический университет Украины  
(03056, Украина, г. Киев, пр-т Победы, 37)

***Шайко-Шайковский Александр Григорьевич***

доктор технических наук, профессор,  
кафедра профессионального и технологического  
образования и общей физики,  
Черновицкий национальный университет  
им. Юрия Федьковича  
(58012, Украина, г. Черновцы, ул. Коцюбинского, 2)  
E-mail: shayko@bk.ru

***Билык Сергей Викторович***

кандидат медицинских наук,  
врач высшей категории, ассистент,  
кафедра ортопедии и травматологии,  
Буковинский государственный  
медицинский институт  
(58000, Украина, г. Черновцы, Театральная пл. 2)

***Тимофеева Елизавета Николаевна***

кандидат физико-математических наук, доцент,  
кафедра профессионального и технологического  
образования и общей физики,  
Черновицкий национальный университет  
им. Юрия Федьковича  
(58012, Украина, г. Черновцы, ул. Коцюбинского, 2)  
E-mail: shayko@bk.ru

***Перчик Дмитрий Захарович***

инженер-исследователь,  
кафедра профессионального и технологического  
образования и общей физики,  
Черновицкий национальный университет  
им. Юрия Федьковича  
(58012, Украина, г. Черновцы, ул. Коцюбинского, 2)

***Bogorosh Aleksandr Terent'evich***

doctor of technical sciences, professor,  
sub-department of applied physics,  
Kiev Polytechnic Institute,  
National Technical University of Ukraine  
(03056, 37 Pobedy avenue, Kiev, Ukraine)

***Voronov Sergey Aleksandrovich***

doctor of technical sciences, professor,  
head of sub-department of applied physics,  
Kiev Polytechnic Institute,  
National Technical University of Ukraine  
(03056, 37 Pobedy avenue, Kiev, Ukraine)

***Shayko-Shaykovskiy Aleksandr Grigor'evich***

doctor of technical sciences, professor,  
sub-department of professional and technological  
education and general physics,  
Chernovitsky National University  
named after Yuriya Fedkovych  
(58012, 2 Kotsyubinskogo street, Chernovtsy, Ukraine)

***Bilyk Sergey Viktorovich***

candidate of medical sciences,  
doctor of higher category, assistant,  
sub-department of orthopedics and traumatology,  
Bukovina State Medical University  
(58000, 2 Teatral'naya square, Chernovtsy, Ukraine)

***Timofeeva Elizaveta Nikolaevna***

candidate of physical and mathematical sciences,  
associate professor,  
sub-department of professional and technological  
education and general physics,  
Chernovitsky National University  
named after Yuriya Fedkovych  
(58012, 2 Kotsyubinskogo street, Chernovtsy, Ukraine)

***Perchik Dmitriy Zakharovich***

engineer-researcher,  
sub-department of professional and technological  
education and general physics,  
Chernovitsky National University  
named after Yuriya Fedkovych  
(58012, 2 Kotsyubinskogo street, Chernovtsy, Ukraine)

E-mail: shayko@bk.ru

**Аннотация.** Представлены результаты исследования процесса образования доменов в сегнетоэлектрических материалах при воздействии на них электрических и тепловых полей, рассмотрена кинетика процессов образования доменов, показаны механизмы изменения параметров сегнетоэлектрических материалов, их характеристик, взаимосвязь между параметрами образования доменов и воздействующих полей, показаны возможные пути регулирования параметров этих процессов, возможности минимизации нежелательных параметров процессов образования доменов или практически полного их устранения в зависимости от реальных требований практики и возможностей современных технологий. Статья может быть полезной специалистам, работающим в области электронного материаловедения, аспирантам и студентам соответствующих специальностей, производственникам, технологам и разработчикам новой техники.

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

**Abstract.** The results of the study of the formation of domains in ferroelectric materials when exposed to electric and thermal fields, examine the kinetics of the formation of domains are shown mechanisms of parameters of ferroelectric materials and their characteristics, the relationship between the parameters affecting the formation of domains and fields, possible ways of regulating the parameters of these processes opportunities to minimize undesirable processes parameters owls formation of domains or substantially complete their elimination depending on the actual requirements of practice and the capabilities of modern technology. The article can be useful for professionals working in the field of electronic materials science and students in related disciplines, production workers, technologists and developers of new technology.

**Key words:** ferroelectric domains, defects, thermal and electric fields.

**УДК 621.315.61**

**К проблеме образования доменов в сегнетоэлектриках при воздействии электрических и тепловых полей** / А. Т. Богорош, С. А. Воронов, А. Г. Шайко-Шайковский, С. В. Билык, Е. Н. Тимофеева, Д. З. Перчик // Надежность и качество сложных систем. – 2015. – № 4 (12). – С. 56–64.