

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ФГБОУ ВО «АмГУ»)

Факультет инженерно-физический

Кафедра физики

Направление подготовки 03.04.01 – Прикладные математика и физика

Направленность (профиль) образовательной программы Физика твердого тела

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ
Заф. кафедрой

 Е.В. Стукова
«dd» 06 2018 г.

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

на тему: Моделирование процесса переполаризации и определение параметров облученных электронами кристаллов ТГС

Исполнитель
студент 614-ом группы

 19.06.18
(подпись, дата)

Д.В. Бадяй

Руководитель
доцент, канд. физ.-мат. наук

 20.06.18
(подпись, дата)

И.Б. Копылова

Руководитель научного содержания
программы магистратуры

 20.06.18
(подпись, дата)

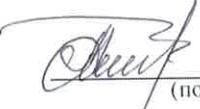
Е.В. Стукова

Нормоконтроль

 20.06.18
(подпись, дата)

О.А. Агапьятова

Рецензент

 21.06.18
(подпись, дата)

А.Г. Масловская

Благовещенск 2018

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ФГБОУ ВО «АмГУ»)

Факультет инженерно - физический
Кафедра физики

УТВЕРЖДАЮ

Зав. кафедрой



Е. В. Слукове

подпись

И.О. Фамилия

« 07 » 05 2018 г.

ЗАДАНИЕ

К магистерской диссертации студента Бадяй Дмитрия Владимировича

Тема магистерской диссертации: Моделирование процесса пере-поляризации и определение параметров облученных электронами кристаллов ТГС;

(утверждена приказом от 23.04.18 № 914-уч)

2. Срок сдачи студентом законченной работы (проекта) _____
3. Исходные данные к магистерской диссертации: исследование вопроса о моделировании процессов реполяризации сегнетоэлектриков, выбор наиболее оптимальной модели, моделирование реполяризации облученного электронами кристалла ТГС;
4. Содержание выпускной квалификационной работы (перечень подлежащих разработке вопросов): литературный обзор, выбор модели, применение модели для модели процесса реполяризации в необлученных и облученных кристаллах;
5. Перечень материалов приложения: (наличие чертежей, таблиц, графиков, схем, программных продуктов, иллюстративного материала и т.п.) _____
6. Консультанты по выпускной квалификационной работе (с указанием относящихся к ним разделов) _____
7. Дата выдачи задания « 7 » 05 2018 г.

Руководитель выпускной квалификационной работы: Копылова Ирина Борисовна, доцент, кандидат физ.-мат. наук.

(фамилия, имя, отчество, должность, ученая степень, ученое звание)

Задание принял к исполнению (дата): 07.05.18


(подпись студента)

РЕФЕРАТ

Магистерская работа содержит 48 страниц, 17 рисунков, 34 формулы, 3 таблицы, 45 источников.

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКИ, СЕГНЕТОКЕРАМИКА, ТИТАНАТ СВИНЦА, ПЬЕЗОКЕРАМИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ, ГИСТЕРОН, ДОМЕН, ДОМЕННАЯ СТЕНКА, ОРИЕНТА-ЦИОННАЯ ПОЛЯРИЗАЦИИ, ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТ, МОДЕЛИРОВАНИЕ, УНИПОЛЯРНОЕ СОСТОЯНИЕ, РАДИАЦИОННЫЙ ДИФЕКТ

Целью данной работы является поиск наиболее подходящей модели для изучения процесса переполаризации в облученных электронами кристалла ТГС.

Задачи, поставленные в данной работе это выбрать математическую модель и ввести в неё параметры облученного электронами кристалла ТГС и установить зависимости параметров облученного кристалла, полученные в результате эксперимента и моделирования.

По результатам проделанной работы можно сделать следующие выводы:

1) модель Джилла – Атертона может быть использована для моделирования процесса переполаризации облученных кристаллов ТГС, так как результаты моделирования согласуются с экспериментом;

2) установлено, что с увеличением дозы увеличивается толщина облученного слоя, величина переключаемого заряда. Однако величина спонтанной поляризации, и диэлектрической проницаемости уменьшаются.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	5
1 Литературный обзор	6
1.1 Основные свойства сегнетоэлектриков	6
1.2 Доменная структура сегнетоэлектриков	7
1.3 Основные свойства и структура триглицинсульфата	8
1.4 Влияние облучения на свойства сегнетоэлектриков	10
2 Обзор математических моделей переполяризации	14
2.1 Обзор математических моделей	14
2.2 Модель Прейзаха	14
2.3 Ориентационная модель Дудкевича – Турика	17
2.4 Модель Джилла-Атертона	20
2.5 Модель облученного кристалла	26
2.6 Расчет дозы облучения электронов в ТГС	27
2.7 Обоснование выбора модели	29
3 Реализация модели Джилла-Атертона	32
3.1 Программный комплекс	32
3.2 Параметры образцов	34
4 Результаты моделирования	36
4.1 Результаты эксперимента	36
4.2 Зависимости параметров	38
Заключение	42
Библиографический список	44

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

КМ – компьютерное моделирование;

КРД – крупномасштабные радиационные дефекты;

ОДУ – обыкновенное дифференциальное уравнение;

ПАК – программно-аппаратный комплекс;

РЭМ – растровый электронный микроскоп;

СК – сегнетокерамика;

ТГС – триглицинсульфат;

ТК – температура Кюри;

ТРД - точечные радиационные дефекты.

ВВЕДЕНИЕ

Современные направления физики сегнетоэлектрических материалов изучают явления, протекающие в сегнетоэлектриках, процессы образования и развития доменной структуры. Исследование сегнетоэлектрических материалов требует значительных затрат и сложного технического оборудования. До недавнего времени основным инструментом получения знаний являлся эксперимент. Однако в век современных технологий появляется ещё один способ исследования – это компьютерное моделирование.

Главными преимуществами моделирования перед экспериментом является время получения результата, а также возможность пойти от обратного из нужного результата получить непосредственно параметры сегнетоэлектрика, который нужно взять для достижения данного результата. Поэтому моделирование является перспективным направлением, позволяющие исследовать материалы для предсказания новых свойств и особенностей.

В настоящее время существует множества моделей, объясняющих процессы переполяризации в сегнетоэлектриках. Однако, эти модели чаще всего не приспособлены для изучения некоторых специальных вопросов касающихся способов воздействия на сегнетоэлектрик и создания в нем униполярной структуры. Поэтому использование уже существующих моделей для данных исследований требует введение дополнительных параметров и коррекций.

В последние несколько лет пьезоэлектрические и электрострикционные материалы стали ключевыми компонентами в смарт-системах, являясь основными рабочими элементами в структурах генерации и приема сигналов.

Целью данной работы является поиск наиболее подходящей модели для изучения процесса переполяризации в облученных электронами кристалла ТГС.

Задачи, поставленные в данной работе это выбрать математическую модель и ввести в неё параметры облученного электронами кристалла ТГС и установить зависимости параметров облученного кристалла, полученные в результате эксперимента и моделирования.

1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1 Основные свойства сегнетоэлектриков

Сегнетоэлектриками называются вещества, обладающие спонтанной электрической поляризацией, которая может быть обращена приложением электрического поля E подходящей величины и определенного направления. Этот процесс, называемый переполяризацией, сопровождается диэлектрическим гистерезисом. Сегнетоэлектрики во многих отношениях являются электрическим аналогами ферромагнетиков, в которых намагниченность I может быть обращена магнитным полем H . Однако по своей микроскопической природе сегнетоэлектрики и ферромагнетики совершенно различны [1].

Сегнетоэлектрики отличаются большой диэлектрической проницаемостью, наличием петли диэлектрического гистерезиса, интересными электрооптическими свойствами, и поэтому широко применяется во многих областях современной техники: радиотехнике, электроакустике, квантовой электронике и измерительной технике.

Сегнетоэлектрики являются твердыми телами, причем все они неметаллы. Свойства сегнетоэлектриков проще всего изучать, если вещество находится в монокристаллическом состоянии.

Тремя наиболее яркими особенностями сегнетоэлектриков являются обратимая поляризация, «аномальные» свойства и нелинейности. Большинство сегнетоэлектриков перестает быть сегнетоэлектриками выше некоторой температуры Кюри (T_K), называемой температурой перехода. Аномальное поведение вблизи T_K , вероятно не менее важно, чем обратимая поляризация, но оно не является достаточным определением сегнетоэлектрика. При температуре T_K диэлектрическая проницаемость резко возрастает до весьма больших значений; именно эти большие значения в окрестности T_K называют аномальными значениями.

Классифицировать сегнетоэлектрики можно по разным признакам. Наиболее распространена классификация сегнетоэлектриков в соответствии со

структурой и связанной с ней механизмом возникновения спонтанной поляризации при фазовом переходе. По этому признаку они подразделяются на сегнетоэлектрики типа «смещения», у которых переход в сегнетоэлектрическую фазу связан со смещением ионов, и сегнетоэлектрики типа «порядок-беспорядок», у которых при переходе в сегнетоэлектрическую фазу происходит упорядочение имевшихся в исходной фазе диполей [1].

1.2 Доменная структура сегнетоэлектриков

Многие свойства сегнетоэлектриков отличаются от свойств, которых следовало бы ожидать для однородных материалов. Это обусловлено наличием доменов точно также, как в ферромагнетиках. Так, например, характер тока переключения тесно связан с поведением доменов. Домены имеются как в монокристалле, так и в кристаллах керамического образца. Сегнетоэлектрический домен представляет собой макроскопическую область, в которой направление спонтанной поляризации одинаково и отличается от направления спонтанной поляризации в соседних доменах.

Разделяющие доменные стенки могут перемещаться внутри монокристалла; при этом одни домены увеличиваются, а другие уменьшаются. В кристалле всегда присутствуют небольшие домены с обратным направлением поляризации. При переполяризации эти домены растут либо за счет перемещения доменных стенок, либо за счет некоторого сходного процесса.

В монокристалле относительная ориентация электрических моментов доменов определяется симметрией кристаллической решетки.

Энергетически наиболее выгодной является такая структура, при которой обеспечивается электрическая нейтральность доменных границ, т. е. проекция вектора поляризации на границу со стороны одного домена должна быть равна по длине и противоположна по направлению проекции вектора поляризации со стороны соседнего домена. По этой причине электрические моменты доменов ориентируются по принципу «голова» к «хвосту». Установлено, что линейные размеры доменов составляют от 10^{-4} до 10^{-1} см. [2].

Внешнее электрическое поле изменяет направления электрических моментов доменов, что создает эффект очень сильной поляризации. Этим объясняются свойственные сегнетоэлектрикам сверхвысокие значения диэлектрической проницаемости (до сотен тысяч). Доменная поляризация связана с процессами зарождения и роста новых доменов за счет смещения доменных границ, которые в итоге вызывают переориентацию вектора спонтанной поляризованности в направлении внешнего электрического поля [2].

1.3 Основные свойства и структура триглицинсульфата

Кристаллы ТГС принадлежат к группе водородсодержащих сегнетоэлектриков. Большие кристаллы легко выращиваются из водного раствора. Химическая формула соединения: $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_3 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$ (рисунок 1).

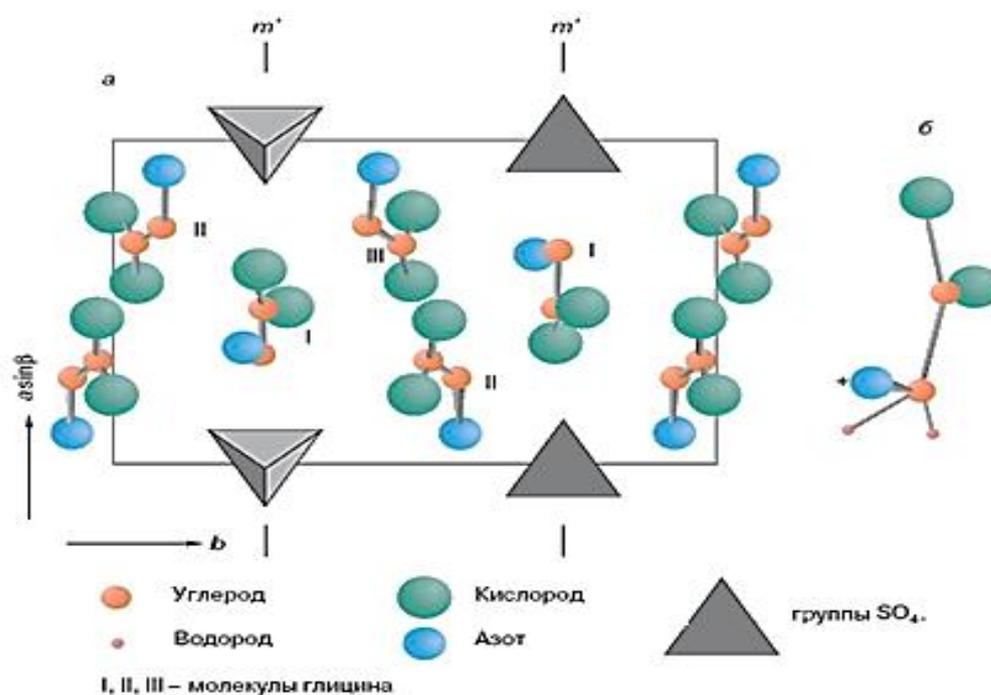


Рисунок 1 – Структура и образование диполей в ТГС

ТГС – бесцветный прозрачный кристалл, легко растворяется в воде. Его физические характеристики при температуре 297 К [1].

Физические характеристики триглицинсульфата:

пирокоэффициент $\gamma = 3 \cdot 10^{-4}$ Кл/(м²·К);

плотность $\rho = 1,6 \cdot 10^3$ кг/м³;

удельная теплоемкость	$c = 1,5 \cdot 10^3 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К});$
коэффициент тепловой диффузии	$a^2 = 3 \cdot 10^7 \text{ м}^2/\text{с};$
коэрцитивное поле	$E_c = 400 \text{ В}/\text{см};$
температура Кюри	$T_k = 49 \text{ }^\circ\text{C};$
удельное сопротивление при	$T_k = 49 \text{ }^\circ\text{C}$
спонтанная поляризованность при	$T = 20 \text{ }^\circ\text{C}$

Структура ТГС представляет собой сетку молекул глицина $\text{CH}_2\text{NH}_2\text{COOH}$ и тетраэдров SO_4 , связанных между собой водородными связями типа $\text{O} - \text{H} \dots \text{O}$ и $\text{N} - \text{H} \dots \text{O}$. Выше температуры Кюри $T_C = 49 \text{ }^\circ\text{C}$ кристалл имеет моноклинную симметрию и принадлежит к центросимметричному классу $2/t$. Ниже T_C зеркальная плоскость исчезает и кристалл принадлежит к полярной точечной группе 2 моноклинной системы. Полярная ось лежит вдоль моноклинной оси 2-го порядка.

Молекулярная группа $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$ обычно находится в кристалле в двух различных формах. Одна из них представляет собой структуру, в которой два углерода и два кислорода лежат приблизительно в одной плоскости, а атом азота значительно смещен относительно нее. В другой форме все атомы углерода, азота и кислорода лежат почти в одной плоскости. У ТГС, имеющего три глициновые группы, две (обозначенные II и III на рисунке 1) квазипланарны и одна (обозначенная I) непланарна.

Две планарные группы II и III расположены почти перпендикулярно полярной оси b и являются зеркальными отображениями. Они связаны водородной связью между атомами кислорода. Связь глицин II – глицин III особенно важна и, как считают некоторые исследователи, является определяющей для сегнетоэлектрического перехода.

Химически 2 протона из группы H_2SO_4 сильнее связаны с глицинами, и формула ТГС часто записывается в виде формулы глицин – диглициниевого сульфата $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}) \cdot (\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_2 + \text{SO}_4$. Отсюда следует, например, что глицин I более правильно рассматривать как ион глициния. Другой из упомянутых двух протонов можно рассматривать как протон связи $\text{OII} - \text{H} - \text{OIII}$,

резонирующий между глицином II и глицином III по крайней мере в параэлектрической фазе. Очевидно, что в кристалле имеются две области четко выраженной асимметрии: первая – в водородной связи глицин II – глицин III, вторая – в положении глицина I, особенно в положении азота.

1.4 Влияние облучения на свойства сегнетоэлектриков

Характерной особенностью сегнетоэлектриков является наличие доменной структуры. В отсутствие электрического поля монокристалл сегнетоэлектрика разбит на самопроизвольно поляризованные области, называемые доменами.

Доменная структура различных сегнетоэлектриков определяет в конечном счете все физические свойства макроскопических образцов. При размерах кристалла в несколько кубических миллиметров линейные размеры (ширина доменов) составляют величину порядка нескольких микрометров [1].

Одной из важнейших задач физики сегнетоэлектрических явлений является установление связи между свойствами сегнетоэлектрических кристаллов и факторами, оказывающими на них воздействие. Одним из удобных объектов такого исследования является кристалл триглицинсульфата (ТГС), свойства которого во многом определяется состоянием его подвижной доменной структуры. Выбор в качестве объекта исследования этого кристалла обусловлен также хорошей изученностью его основных свойств и невысоким значением температуры фазового перехода.

Создать устойчивое монодоменное (рисунок 2) состояние в кристалле можно введением в сегнетоэлектрическую матрицу полярных дефектов, создающих внутреннее смещающее поле, постоянно поляризующее кристалл.



Рисунок 2 – Монодоменное состояние кристалла

В таком случае монодоменное состояние будет сохраняться сколь угодно долгое время. Кроме того, современная технология выращивания сегнетоэлектрических кристаллов располагает методиками, позволяющими фиксировать монодоменное состояние уже в процессе роста кристаллов [3].

Другим фактором изменения физических свойств сегнетоэлектрических материалов является облучение различными частицами. Облучение закрепляет униполярную структуру кристалла, создавая в нем дополнительные радиационные дефекты, такие как точечные радиационные дефекты (ТРД) и крупномасштабные радиационные дефекты (КРД), которые представляют собой сложные конгломераты и содержат инородные включения и мелкодисперсные кристаллы, не имеющие четкой огранки. КРД состоят из «ядра», которое окружено облаком более мелких дефектов.

Рентгеновское облучение в кристалле ТГС создает дефекты, закрепляющие доменные стенки, а без движения доменных стенок не может происходить изменения макроскопической поляризации, а ее изменение определяет возникновение поля зарядов экранирования поляризации, выбрасывающее с поверхности кристалла электроны [3].

Облучение сегнетоэлектрического триглицинсульфата жестким электромагнитным излучением ввиду сложного структурного строения этого кристалла приводит к созданию в нем достаточно большого числа радиационных дефектов. Эти дефекты сложным образом влияют на свойства кристалла, в первую очередь на те, которые обусловлены особенностями поведения его доменной структуры [4].

Известно также, что сегнетоэлектрики чувствительны к воздействию магнитных полей. Сильные магнитные поля больше 10 Тл способны изменять фундаментальные характеристики сегнетоэлектриков: температуру Кюри, частоту мягкой моды. Меньшие поля меньше 1 Тл влияют на динамику доменной структуры, взаимодействуя с магнитными моментами движущихся доменных стенок.

В магнитных полях меняется характер взаимодействия подвижных заряженных дефектов с доменными стенками, что проявляется, например, в изменении характера диэлектрических потерь [5].

При увеличении дозы γ -облучения обуславливает рост параметра трикритичности кристалла ТГС, то есть “приближение” последнего в сторону фазового перехода 2 рода [6].

Прохождение электронов через вещество отличается от прохождения тяжёлых заряженных частиц. Главная причина – малая масса электрона. Это приводит к относительно большому изменению импульса электрона при каждом его столкновении с частицами среды, что вызывает заметное изменение направления движения электрона и как результат – электромагнитное радиационное излучение. Ионизационные потери энергии электронами в области низких энергий электронов определяющий вклад в потери энергии дают неупругие ионизационные процессы взаимодействия с атомными электронами, включающие ионизацию атомов. Передаваемая в одном столкновении энергия в среднем очень мала и при движении в веществе потери складываются из очень большого числа таких малых потерь. Статистические флуктуации в ионизационных процессах ведут к разбросу потерь и величин пробегов [7].

Облучение кристаллов ТГС низкоэнергетическими электронами или рентгеновскими лучами приводит к образованию точечных радиационных дефектов (ТРД) и крупномасштабных радиационных дефектов (КРД). Данные виды дефектов представляют собой сложные конгломераты и содержат инородные включения и мелкодисперсные кристаллы, не имеющие четкой огранки. КРД состоят из «ядра», которое окружено облаком более мелких дефектов. При увеличении дозы облучения от 0,04 до 2 Мрад. КРД, увеличиваются от долей микрометров до нескольких микрометров с плотностями от 10^4 до 10^7 см⁻² [8].

2 ОБЗОР МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПЕРЕПОЛЯРИЗАЦИИ

Современные направления физики сегнетоэлектрических явлений требуют не только понимания процессов образования и развития доменной структуры, но и их математического описания с целью предсказания новых свойств и особенностей в уже давно исследуемых веществах. [4]

Моделирование поведения сегнетокерамических элементов связано с режимом их эксплуатации, преследует вполне определенные цели и может осуществляться многими методами.

2.1 Обзор математических моделей

Основной подход к моделированию заключается в математическом описании одномерной модели. Одномерные модели описывают функциональную зависимость отдельных компонентов сопряжённых тензорных параметров системы. В экспериментах такие зависимости обычно имеют вид графиков для возрастающих, убывающих и циклических нагрузок. Как правило подобные графики сложны и представляют собой зависимость вектора поляризации от напряжённости электрического поля (сегнетоэлектрический гистерезис $P(E)$). Математические модели создаются для аналитического описания таких зависимостей.

2.2 Модель Прейзаха

Модель однородной поляризации пьезокерамических образцов, которая была предложена Ф. Прейзахом в 1935 г. Однако до сих пор она активно используется и постоянно совершенствуется. Все множество работ по использованию метода Прейзаха подразделяется на две группы: в одних в качестве независимых берутся коэрцитивные и внутренние поля, в других — границы гистерезиса [3].

Наиболее простой и естественный подход в моделировании переполяризации сегнетоэлектрика связан с представлением его в виде совокупности очень большого числа 180-градусных доменов. Неоднородность физических условий на различных участках порождает большой разброс доменов по коэрцитивным и внутренним полям. Поэтому переполяризацию каждого домена можно описать

прямоугольной петлей гистерезиса, называемой гистероном, со своими значениями коэрцитивного (E_c) и внутреннего (E_i) полей (рисунок 3).

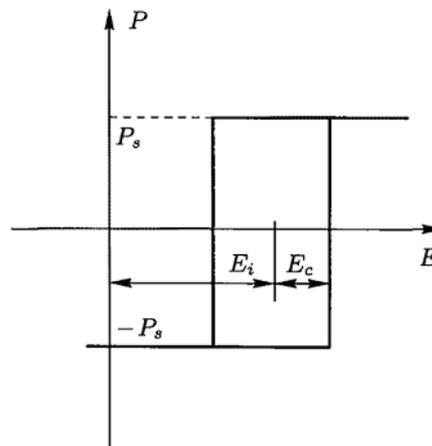


Рисунок 3 – Гистерон

При таком подходе E_i можно трактовать как эффективное поле, создаваемое в месте расположения данного домена всеми остальными доменами и свободными зарядами в сегнетоэлектрике, а E_c — как добавочное поле, при приложении которого поляризация изолированного домена может быть обращена. Согласно физическому смыслу E_i , может принимать любые значения, в то время как E_c — только положительные.

Наличие огромного числа доменов позволяет говорить об их вероятностном распределении, а соответствие с гистеронами дает возможность ввести в рассмотрение функцию плотности вероятности $\mu(E_i, E_c)$ определенную на полуплоскости $\{|E_i| < \infty, E_c > 0\}$ и описывающую распределение гистеронов в указанной полуплоскости. Для определения поляризованного состояния рассматриваемого образца достаточно подсчитать результирующую спонтанную поляризацию всех гистеронов.

Введенная функция плотности вероятности позволяет свести этот процесс к вычислению интеграла вероятности от данной функции по указанной выше полуплоскости. Для каждого состояния (в том числе и неполяризованного) в полуплоскости имеется граница, разделяющая домены двух противоположных направлений. При наложении электрического поля того или иного знака эта

граница перемещается за счет вовлечения в процесс переключений новых гистеро-ронов. Если электрическое поле меняет направление роста, то изменяется и направление движения границы. В деполяризованном состоянии векторы спонтанной поляризации доменов ориентируются вдоль направления внутреннего поля E_i , а тепловое движение способствует тому, что ровно половина доменов имеет одно направление, а другая половина — противоположное. Для наглядности интегрирования вводится прейзаховская диаграмма поляризации, где по оси абсцисс откладываются значения E_c , а по оси ординат — E_i (рисунки 4-6). В деполяризованном состоянии граница проходит по оси $E_i = 0$.

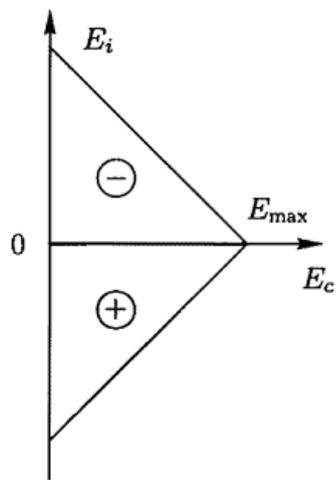


Рисунок 4 – Диаграмма Прейзаха

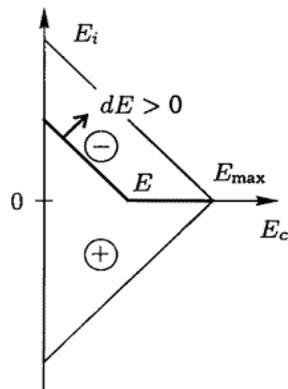


Рисунок 5 – Диаграмма Прейзаха при $dE > 0$

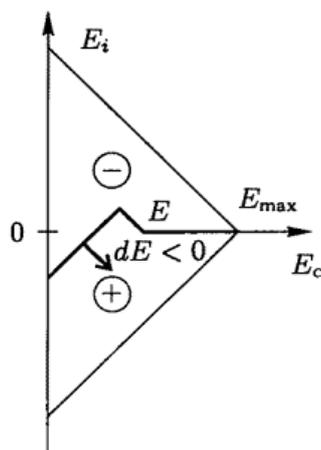


Рисунок 6 – Диаграмма Прейзаха при $dE < 0$

При приложении электрического поля граница смещается. На рисунках (5,6) стрелкой показано движение границы, разделяющей домены разных знаков, для двух возможных случаев изменения электрического поля: $E \geq E_i + E_c$, $dE > 0$ и $E_i - E_c$, $dE < 0$. Через E_{max} обозначено максимальное значение электрического поля, прикладываемого к пьезокерамическому образцу (в качестве такой верхней границы может рассматриваться, например, пробивное поле).

Для удобства представления формул обозначается $E_i \equiv y$ и $E_c \equiv x$. В самом общем случае функция распределения может зависеть не только от значений интенсивного и коэрцитивного полей, но и от интенсивности внешнего электрического поля: $\mu(x, y, E)$. Данная функция должна быть симметричной по переменной y и удовлетворять основному вероятностному соотношению:

$$\iint_{x \geq 0} \mu(x, y) dx dy = 1. \quad (1)$$

Используя введенную ранее функцию $\mu(x, y)$ распределения гистеронов и оператор реле, поляризацию можно определить интегралом:

$$P(t) = p_s^* \iint_{x \geq 0} \mu(x, y) (\gamma_{xy} E)(t) dx dy, \quad (2)$$

где p_s^* — максимальное значение поляризации, достижимое в процессе поляризации однородным электрическим полем. γ_{xy} — оператор реле.

Предложенный алгоритм позволяет использовать для оценки влияния параметров распределений на характер поведения петель гистерезиса различные функции плотности вероятности. Полученная в результате проведенных вычислений петля Рэлея показана на рисунке 7.

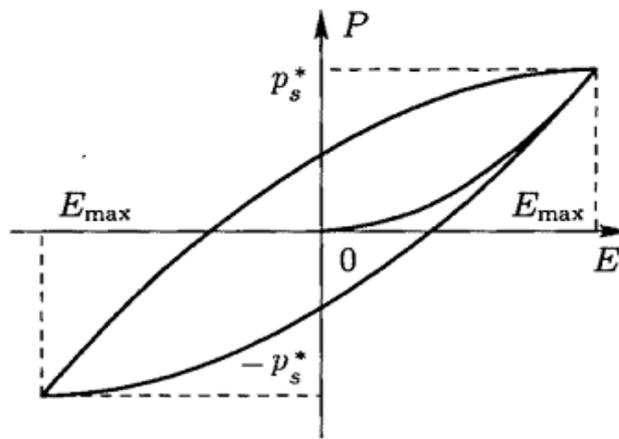


Рисунок 7 – Малая петля Рэлея

Использование других функций плотности распределения гистерононов составляет для разработанного алгоритма чисто техническую задачу замены одной программы-функции на другую.

К минусам данной модели относится то, что она учитывает только 180-градусный поворот доменов, невозможность добавления параметров, связанных с поглощенной дозой при облучении кристалла. Так же стоит отметить сложность реализации модели вследствие невозможности связать некоторые математические параметры модели и физические параметры кристалла.

2.3 Ориентационная модель Дудкевича – Турика

Ориентационными называются модели, в которых вычисляется распределение доменов в представительном объеме под действием электрического поля и механического напряжения, а поляризация находится с помощью операции усреднения. Если влиянием механических напряжений на процесс переполаризации можно пренебречь, используется ориентационная модель переключений

только под действием электрического поля. По своей сути она примыкает к микромеханическому направлению в изучении процессов переполаризации, поскольку имеет дело с основными элементами, составляющими переполаризацию представительного объема, — доменами и использует пороговые значения коэрцитивных полей переключений как 180-, так и 90-градусных доменов.

Любая модель строится на некоторых предположениях и допущениях. В данном случае принимаются следующие ограничения: влияние границ кристаллитов на процесс переключений отсутствует; изменение линейных размеров при 90-градусных поворотах не вызывает коэрцитивных напряжений; движение доменных стенок, рост и зарождение доменов не учитываются.

Введем в представительном объеме совокупность ориентационных направлений доменов, условно выбрав в качестве точки приведения любую точку этого объема. Проведя вокруг центра приведения единичную сферу S , введем сферическую систему координат с центром в данной точке (рисунок 8). Направление поляризации отдельного домена совпадает с радиусом-вектором сферы, представляющим собой единичный вектор r_0 .

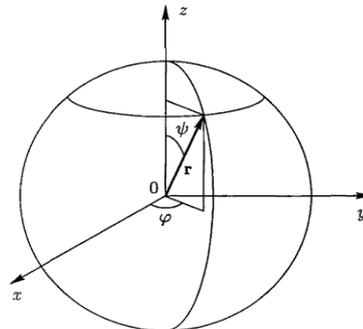


Рисунок 8 – Плотность ориентационных направлений

Плотность же распределения таких векторов будет зависеть от поляризованного состояния. В связи с этим удобно ввести векторную функцию плотности ориентационных распределений доменов $f(\varphi, \psi)$ так, чтобы поляризация элемента поверхности dS между углами $(\varphi, \varphi+d\varphi)$ и $(\psi, \psi+d\psi)$ находилась по формуле $dP_0 = f(\varphi, \psi) dS$. Остаточная поляризация всей частицы может быть вычислена с помощью операции интегрирования по сфере:

$$P_0 = \int f(\varphi, \psi) dS. \quad (3)$$

Для неполяризованного сегнетоэлектрика естественно ввести постоянную функцию плотности ориентационных направлений, равную спонтанной поляризации кристалла, деленной на площадь поверхности единичной сферы:

$$f_0(\varphi, \psi) = \frac{p_s}{4\pi} r_0. \quad (4)$$

В этом случае остаточная поляризация будет равна нулю:

$$P_0 = \frac{p_s}{4\pi} \int r_0(\varphi, \psi) dS = 0. \quad (5)$$

Основными условиями ориентационной модели являются условия 180- и 90-градусного поворота доменов, которые записываются в виде системы неравенств. Разделив сферу на две части экваториальной плоскостью, перпендикулярной вектору электрического поля E , и часть, которая относится к концу вектора E , будет верхней, а другая ее часть — нижней. Векторы, лежащие в плоскости деления, относятся к верхней части. Отмечается, что 180-градусные повороты возможны только для векторов c , лежащих в нижней полусфере.

Условие 180-градусного поворота имеет вид

$$E c \cos \gamma_c \geq E_{cc}; \quad \frac{E c \cos \gamma_c}{E_{cc}} - \frac{E c \cos \gamma_\alpha}{E_{c\alpha}} \geq 0. \quad (6)$$

Для 90-градусного поворота, если ось c домена находится в верхней части сферы, необходимо выполнение условия:

$$\frac{E c \cos \gamma_\alpha}{E_{c\alpha}} - \frac{E c \cos \gamma_c}{E_{cc}} \geq 1. \quad (7)$$

Если же ось с домена находится в нижней части сферы ориентаций, то:

$$E \cos_{\gamma\alpha} \geq E_{c\alpha}; \frac{E \cos_{\gamma\alpha}}{E_{c\alpha}} - \frac{E \cos_{\gamma c}}{E_{cc}} \geq 0. \quad (8)$$

Основной задачей ориентационной модели является построение функции плотности ориентационных распределений доменов $f(\varphi, \psi)$ на основании условий (6-8).

Модель ориентационной поляризации позволяет осветить некоторые проблемы поляризации. Первая из них связана с вопросом о том, какого процента спонтанной поляризации можно достичь в состоянии насыщения. Вместе с тем рассматриваемая модель имеет несколько существенных недостатков.

Во-первых, она разработана для сегнетоэлектриков типа перовскита.

Во-вторых, модель имеет лишь два параметра, E_{cc} и $E_{c\alpha}$, строго регламентированных типом сегнетоэлектрика. Эти параметры могут принимать только фиксированные значения, и поэтому с их помощью практически невозможно управлять формой петли гистерезиса.

В-третьих, модель не учитывает возникающих вследствие 90-градусного поворота доменов механических напряжений. Такие механические напряжения могут достигать больших величин и способны повлиять на процесс поляризации.

В-четвертых, необходимо отметить, что при первом нагружении (при $E = E_{max}$) кривая не достигает своего максимума. Он достигается лишь после того, как поле поменяет знак.

По-видимому, указанные недостатки и привели к тому, что модель ориентационной поляризации редко используется и практически никогда не была реализована в программных комплексах, что еще раз указывает на недостаток . [1].

2.4 Модель Джилла-Атертона

Модель Джилла-Атертона представляет собой одномерную модель для математического описания зависимости вектора намагниченности от магнитного

поля (магнитный гистерезис $J(H)$). Зависимость $J(H)$ представляется в виде обыкновенного дифференциального уравнения (ОДУ):

$$\frac{dJ}{dH} = \frac{1}{1+c} \frac{J_{an}-J}{\delta k - \alpha(J_{an}-J)} + \frac{c}{1+c} \frac{dJ_{an}}{dH}, \quad (9)$$

где J_{an} – ангистерическая намагниченность; δ – направление изменений намагничивающего поля H ; c , k , α – параметры модели, имеющие определённый физический смысл, связанные с параметрами материала.

Её главным преимуществом является то, что эта модель позволяет установить связь с физическими параметрами магнитного материала. Однако данную модель можно использовать и для описания зависимости спонтанной поляризации от напряженности электрического поля $P(E)$.

Модель для $P(E)$ представляет собой двухуровневую модель, в которой вначале определяется функция распределения доменов и находится предельная зависимость поляризации от электрического поля, а затем осуществляется ее коррекция с учетом механизмов запираания доменных стенок, приводящая к обыкновенному дифференциальному уравнению для зависимости полной поляризации от электрического поля [1].

В основе модели лежит положение о так называемой предельной (или ангистерезисной) кривой, выводимой аналитически на базе теории Вейсса и статистики Больцмана. Если бы в поликристаллическом сегнетоэлектрическом материале отсутствовали механизмы запираания стенок доменов, то после снятия электрического поля поляризация представительного объема была бы равна нулю. С большими допущениями можно сказать, что такой материал вел бы себя подобно полярным жидкостям типа жидких кристаллов (нематиков), где электрическое поле пытается выстроить диполи вдоль одного направления, а тепловые поля препятствуют этому: столкновения стремятся разрушить картину выстраивания, и после снятия электрического поля тепловые поля нейтрализуют поляризацию. В поликристаллических сегнетоэлектриках наблюдается другой

механизм переключения доменов, однако модель переключений заимствована из полярных жидкостей [4].

Согласно теории Вейсса поле сил, действующих на домен диэлектрика, может быть сведено к сумме электрического поля E и некоторого «молекулярного поля», учитывающего воздействие на него смежных доменов и пропорционального поляризации диэлектрика p_0 . Таким образом, «эффективное» электрическое поле E_{ef} в диэлектрике определяется как

$$E_{ef} = E + \alpha p_0, \quad (10)$$

где E — истинное электрическое поле, αp_0 — молекулярное поле; α — некоторая положительная постоянная, характеризующая свойства данного диэлектрика.

Для сегнетоэлектриков постоянная α может принимать большие по сравнению с обычными диэлектриками значения. Свойства сегнетоэлектриков зависят от его структуры, которая определяется видом доменов и ориентация доменных стенок.

Для характеристики ориентации доменных стенок можно ввести некоторый коэффициент пропорциональности c^* , который позволяет определить количество доменов в единице объема. В таком случае коэффициент пропорциональности c^* можно определить из условия равенства количества всех доменов в единице объема числу N :

$$N = \int dN = c^* \int_0^\pi \exp(b \cos \psi) \sin \psi \, d\psi = \frac{c^*}{b} (e^b - e^{-b}), \quad (11)$$

где c^* — коэффициент пропорциональности, ψ — угол между ориентацией домена и направлением внешнего электрического поля.

Решая это уравнение относительно c^* получим:

$$c^* = \frac{bN}{e^b - e^{-b}}. \quad (12)$$

Следовательно, поляризация равна:

$$P = \frac{1}{N} \int \mathbf{p}_s \cdot \mathbf{k} dN = \frac{1}{N} \int p_s \cos\psi dN = \frac{c^* p_s}{N} \left(\frac{e^b + e^{-b}}{b} - \frac{e^b - e^{-b}}{b^2} \right), \quad (13)$$

где k – единичный вектор оси, N – количество доменов.

В сегнетоэлектриках связь между поляризуемостью сегнетоэлектрика и его температурой T в неполярной фазе вблизи точки Кюри, также может быть описана формулой, выраженной из закона Кюри — Вейса [2]:

$$n = \frac{k_* T}{p_s}. \quad (14)$$

Подставляя значение c^* и соотношение (14) в уравнение (13) получим:

$$P_{max} = P_s \left[\operatorname{cth} \left(\frac{E + \alpha P_0}{n} \right) - \frac{n}{E + \alpha P_0} \right], \quad (15)$$

где P_{max} – максимальное значение поляризации, α – поляризуемость материала, k_* – постоянная Больцмана, T – температура при проведении измерения, P_s – остаточная поляризация.

Величина P_{max} , называется «предельной поляризацией», которая показывает максимально возможную поляризацию.

При некотором значении поля все домены будут поляризованы в направлении поля, и поляризация будет иметь значение P_s . Дальнейшее увеличение поля приведет к линейному росту поляризации за счет индуцированной поляризации (рисунок 9).

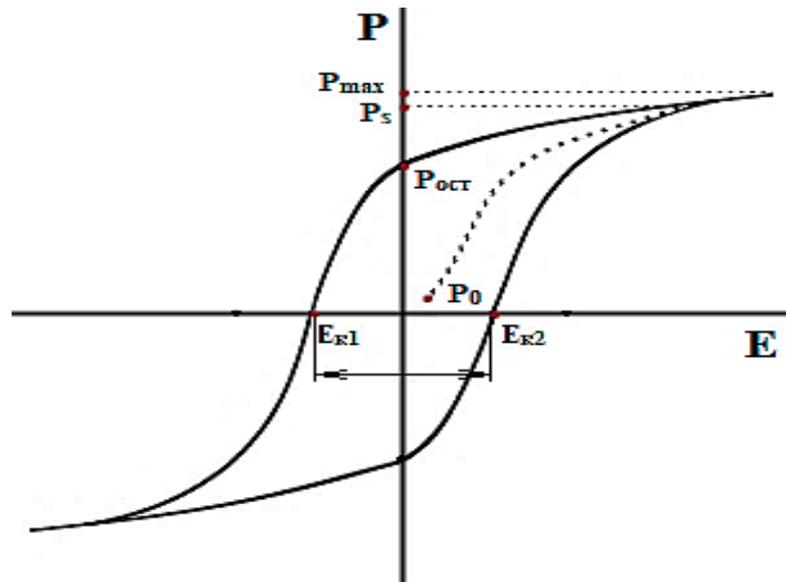


Рисунок 9 – Зависимость вектора поляризации от напряженности электрического поля $P(E)$

При некотором значении поля все домены будут поляризованы в направлении поля, и поляризация будет иметь значение P_s . Дальнейшее увеличение поля приведет к линейному росту поляризации за счет индуцированной поляризации.

При построении модели проводится анализ полной поляризации представительного объема, которая состоит из 2 частей, обратимой и необратимой части [2].

Принято считать, что скорость роста необратимой поляризации пропорциональна скорости роста эффективного электрического поля. Необратимая часть поляризации – это так называемый «идеально заполяризованный объем», то есть при снятии внешнего электрического поля, поляризация сохраняется по всему объему. Обратимая часть, та часть объема, которая при снятии внешнего электрического поля возвращается в исходное положение.

В случае монодоменного состояния эффективное электрическое поле пропорционально внешнему электрическому полю (полю переполаризации) [3].

Однако поскольку необратимая поляризация выходит на уровень насыщения, в качестве параметра пропорциональности между скоростями поляризации и изменения поля естественно ввести разность предельной поляризации и остаточной ее частью:

$$P_0 = P_\infty - \delta k \frac{dP_0}{dE_{ef}}. \quad (16)$$

При численном решении для того, чтобы избежать ошибок округления, дополнительно введем коэффициент, ограничивающий рост поляризации в том случае, когда прирост поляризации по полю уже невозможен. Этот коэффициент вводится перед правой частью уравнения:

$$\tilde{\delta} = \begin{cases} 1 & \text{при } \{dE > 0 \cup P_0 > P_{max}\} \\ 0 & \text{в любом другом случае} \end{cases}. \quad (17)$$

Таким образом, корректировка уравнения заключается во введении добавочного множителя, связанного с приращением внешнего электрического поля [4].

Учитывая все условия выше, получим уравнение для $P(E)$ аналогичное для $J(H)$ уравнение (9), которое является обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка с неаналитической правой частью:

$$\frac{dP}{dE} = c \frac{dP_{max}}{dE} + \tilde{\delta} \frac{P_{max} - P_0}{\delta m - [\frac{\alpha}{(1-c)}](P_{max} - P_0)}, \quad (18)$$

где c , m , α – параметры модели, связанные с физическими параметрами. δ - коэффициент, зависящий от полярности поля ($\delta = 1$ – поле возрастает, $\delta = -1$ – поле убывает)

Параметр c пропорционален полю внутри кристалла:

$$c = E_{вн}. \quad (19)$$

Параметр m пропорционален величине коэрцитивному полю:

$$m = E_K. \tag{20}$$

Параметр α пропорционален коэффициенту поляризованности образца и берется для каждого материала отдельно из таблицы.

Главными преимуществами модели являются её простота реализации, возможностью связать физические параметры кристалла с математическими параметрами модели. Ещё одним преимуществом модели является возможность изменять параметр δ , который отвечает за угол поворота доменов, в диапазоне (от 0 до 2π), что в свою очередь позволяет увеличить возможности исследования сегнетоэлектриков с различными углами поворота доменов. Так же есть возможность учесть как обратимую часть поляризации так и необратимую.

2.5 Модель облученного кристалла

Схематично облученный образец можно представить как структуру, изображенную на рисунке 10. На данном рисунке через l и E_1 обозначены соответственно толщина и поле в облученном слое, через L и E_2 – толщина и поле в необлученной части кристалла, s_1 и s_2 – толщины верхнего и нижнего электродов соответственно, q_1 и q_2 – заряды в облученной и необлученной частях кристалла.

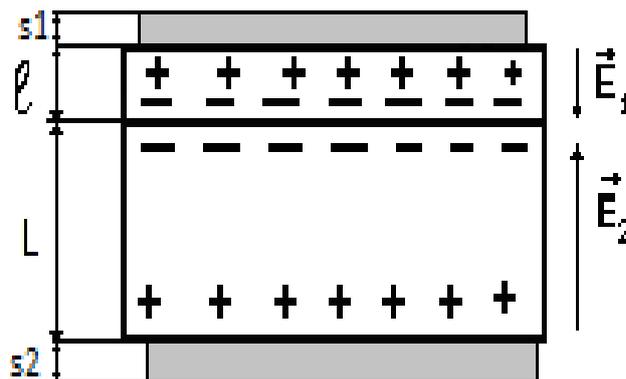


Рисунок 10 – Облучённый образец с напыленными электродами

Накопление заряда q в подповерхностном слое будет индуцировать на электродах положительные заряды q_1 и q_2 , что приведет к возникновению между

слоем и электродами электрических полей E_1 и E_2 . Из условия короткозамкнутости следует:

$$E_1 l = E_2 L, \quad (21)$$

где q_1 и q_2 – положительные заряды на электродах, E_1 и E_2 – электрическое поля, l – толщина облученного слоя, L – толщина образца.

Размер пятна электронов велик по сравнению с толщиной кристалла, то для расчета полей можно использовать выражение для поля заряженной плоскости.

Поля E_1 и E_2 будут создаваться слоем инжектированного заряда q с учетом площади образца S :

$$E_1 = \frac{q_1}{2\varepsilon\varepsilon_0 S_1}. \quad (22)$$

$$E_2 = \frac{q_2}{2\varepsilon\varepsilon_0 S_2}. \quad (23)$$

Тогда из формул (22) и (23) следуют выражения для наведенных зарядов и электрических полей, которые возникают в облученных и необлученных кристаллах:

$$q_{1,2} = q \frac{L}{L+l}, \quad (24)$$

$$E_1 = \frac{q_1}{2\varepsilon\varepsilon_0 S_1} \left(\frac{L}{L+l} \right), \quad (25)$$

$$E_2 = \frac{q_2}{2\varepsilon\varepsilon_0 S_2} \left(\frac{l}{L+l} \right), \quad (26)$$

где ε_0 – диэлектрическая постоянная; ε – диэлектрическая проницаемость кристалла; S – площадь облученного кристалла, см²; l – толщина облученного слоя; q – накопленный заряд в слое при облучении; L – толщина необлученной части кристалла.

2.6 Расчет дозы облучения и глубины проникновения электронов в ТГС

Так как кристаллы облучались в течение различного времени, то доза, полученная образцами при облучении, была различной и определялась соотношением [5]:

$$D = \frac{\sigma U \cdot 10^5}{l \rho}, \quad (27)$$

где D – доза облучения, Мрад; U – ускоряющее напряжение, В; I – ток зонда (луча), А; $\rho = 1,6$ г/см³; t – время облучения кристалла, с; S – площадь облучённого кристалла, м²; l – глубина проникновения заряда.

В процессе облучения, падающие на поверхность ТГС электроны, проникают на некоторую глубину. Проникая в кристалл, электроны испытывают различного рода рассеяния. Неупругое рассеяние происходит путем множественных дискретных процессов, но во многих случаях полезно рассматривать все неупругие процессы, создающие непрерывные потери энергии, сгруппированные вместе. Соотношение для непрерывной потери энергии, учитывающее все потери энергии dE на единицу длины dl в твердом теле дается уравнением Бете:

$$\frac{dE}{dl} = -7,85 * 10^4 \frac{Z\rho}{AE_m} \ln\left(\frac{1,166E_m}{J}\right), \quad (28)$$

где Z – зарядовое число; A – атомный вес; ρ – плотность вещества; E_m – средняя энергия электрона на пути dl ; J – Средний потенциал ионизации:

$$J = (9,76Z + 58,5Z^{-0,19}) * 10^{-3}. \quad (29)$$

Из уравнения Бете можно найти полный траекторный путь, проходимый частицей до полной потери энергии:

$$l_B = \int_{E=E_0}^{E=0} \left(\frac{\partial E}{\partial l}\right)^{-1} dE. \quad (30)$$

Эта величина приблизительно в 1,5 раза больше глубины проникновения электронов в мишень R_0 .

$$l = \frac{0,0276\rho^{0.67}VD^{1.67}}{Z^{0,889}}. \quad (31)$$

Из соотношения (31) видно, что глубина проникновения заряда в образец зависит от дозы облучения.

Для исследуемых образцов были рассчитаны глубины проникновения электронов в образец по формуле (31).

2.7 Обоснование выбора модели

Анализ существующих моделей показал, что наиболее приемлемой моделью для описания процесса переполаризации кристалла ТГС является модель Джила-Атертона.

В качестве объекта моделирования был выбран кристалл ТГС, так как он является модельным кристаллом для исследования сегнетоэлектриков.

Для создания устойчивой монокломенной структуры кристалла ТГС проводилось облучение кристалла высокоэнергетическими электронами в режиме короткого замыкания [6].

Создание устойчивой поляризации в кристалле объясняется наличием облученного слоя, который связан с полем, образованным внутри кристалла:

$$E_{\text{вн}} = \frac{q}{2\varepsilon\varepsilon_0S} \left(\frac{l}{L} \right), \quad (32)$$

где q – накопленный заряд, l – толщина облученного слоя, L – толщина необлученного слоя, ε - диэлектрическая проницаемость образца, ε_0 - диэлектрическая постоянная.

Облученный слой является дефектом кристаллической структуры, приводящим к запираанию стенок доменов. Именно поэтому в кристаллах, которые

имеют облученный слой, поляризация не возвращаются в исходное состояние, а сохраняется на протяжении длительного времени.

В облученных кристаллах наблюдается упругая стабилизация спонтанной поляризации, существовавшей в образце до облучения. Уменьшение в сегнето-фазе обусловлено уменьшением вклада движения доменных границ, однако при действии внешнего смещающего поля происходит уменьшение их площади при монодоменизации, а при облучении образца – закрепление доменных стенок на дефектах при неизменной доменной структуре. Дефекты эффективно подавляют колебания доменных границ вплоть до полного их выключения. [8]

Особенностью облучённых кристаллов является несимметричность зависимости $P(E)$. Связанно это прежде всего с наличием облучённого слоя, имеющего отличные от основного объёма кристалла свойства. Для энергий 30-40 кэВ толщина облучённого слоя составляет 1.3-1,6 мкм (при толщине кристалла 1-1.2 мм).

В итоге, выражая математические параметры (19-26) уравнения (18) через физические параметры кристалла, а также учитывая толщину полученного облученного слоя (32) и величину поглощенной дозы облучения (27), получим:

$$\frac{dP}{dE} = \frac{q}{\varepsilon\varepsilon_0} \left(\frac{D\rho}{\sigma U \cdot 10^5} \right) \frac{dP_{max}}{dE} + \tilde{\delta} \frac{P_{max} - P_0}{\alpha} \frac{1}{\delta E_k - \left[\frac{P_{max} - P_0}{\alpha} \right] (P_{max} - P_0)}, \quad (33)$$

$$\left(1 - \frac{q}{\varepsilon\varepsilon_0} \left(\frac{D\rho}{\sigma U \cdot 10^5} \right) \right)$$

где q – накопленный заряд, L – толщина необлученного слоя, ε - диэлектрическая проницаемость образца, ε_0 - диэлектрическая постоянная, E_k – коэрцитивное поле, P_{max} – максимальное значение поляризации.

Максимальное значение поляризации можно определить по формуле:

$$P_{max} = P_s \left[cth \left(\frac{E + \alpha P_0}{\frac{k_* T}{p_s}} \right) - \frac{\frac{k_* T}{p_s}}{E + \alpha P_0} \right], \quad (34)$$

где α – поляризуемость материала, k_* - постоянная Больцмана, T – температура при проведении измерения, P_s – остаточная поляризация.

Выражение (33) представляет собой модельное уравнение для нахождения полной поляризации кристалла, который был подвержен воздействию высокоэнергетических электронов. Данное выражение позволяет устанавливать зависимости различных параметров модели от величины дозы облучения кристалла.

На основе выражения (33) и (34) был разработан программный комплекс для моделирования переполаризации кристалла триглицинсульфата (ТГС) после воздействия на него электронами с высокой энергией, порядка 30-40кэВ. [8]

3 РЕАЛИЗАЦИЯ МОДЕЛИ ДЖИЛЛА-АТЕРТОНА

3.1 Программный комплекс

Для моделирования процесса переполяризации сегнетоэлектрического кристалла ТГС был разработан программный комплекс на основе уравнений (18-34) модели Джилла-Атертона.

Программный комплекс был написан на языке программирования, высокого уровня, Python (версия 3). Высокоуровневый язык программирования позволяет нам изолировать семантику выполнения компьютерной архитектуры от спецификации программы, что делает процесс разработки программы более простым и понятным.

Блок схема разработанного программного комплекса представлен на рисунке 11.

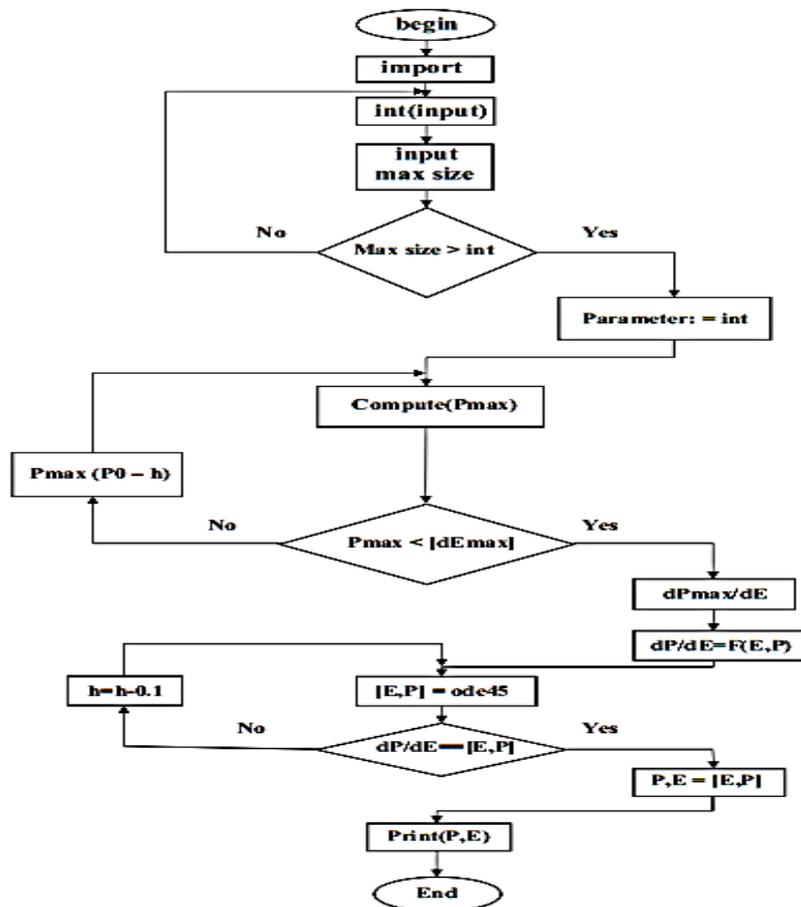


Рисунок 11 – Блок–схема программного комплекса

Данный программный комплекс условно можно разделить на 3 блока. Первый блок — это блок ввода данных, для него был также разработан пользовательский интерфейс (GUI), который представлен на рисунке 12. С помощью данного блока могут вводиться два разных набора начальных данных. Первый набор, через физические параметры кристалла. Используется в том случае, когда у вас есть все исходные данные по эксперименту. Второй набор, через математические параметры кристалла. Используется, когда исходные данные отсутствуют, но есть конечные зависимости $P(E)$. Второй блок — это расчет данных согласно уравнениям (18-24), в данном блоке используется итерационный метод расчета Рунге -Кутты. Третий блок — это блок вывода и визуализации результатов. Данный блок позволяет получать численные значения поляризации и графики зависимостей $P(E)$ полученных результатов.

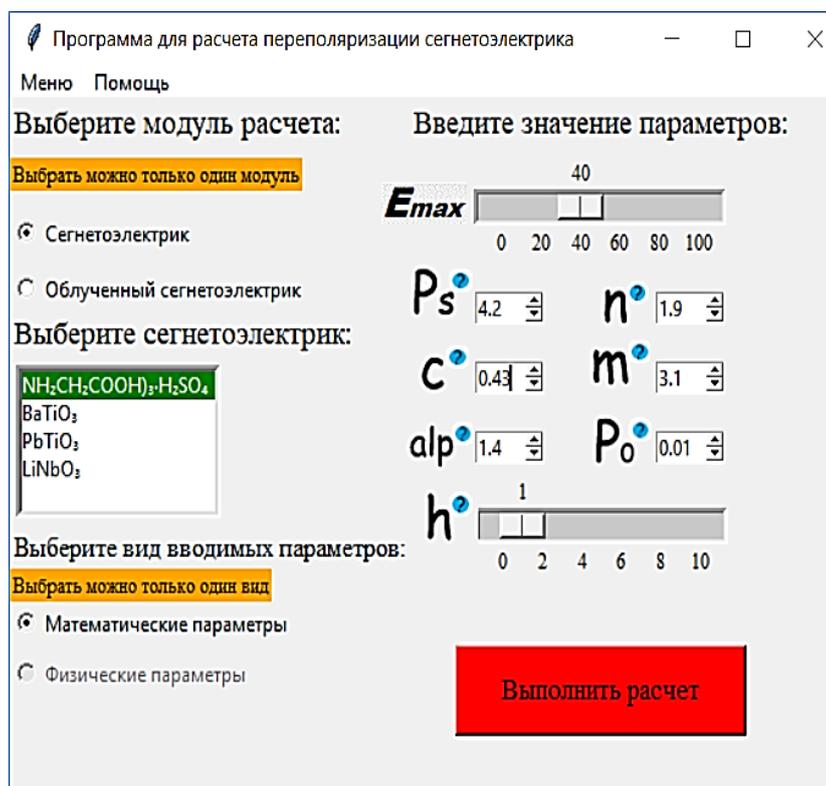


Рисунок 12 – Графический интерфейс пользователя

Введение параметров облученного кристалла в модель Джила-Атертона позволяет получить результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными

данными, что позволяет использовать разработанный программный комплекс для определения параметров облученного кристалла.

Использование программного комплекса увеличивает возможности для воссоздания свойств и исследования поведения сегнетоэлектрических материалов после различного воздействия на них.

3.2 Параметры образцов

Параметры сегнетоэлектрических образцов, использовавшихся в эксперименте приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Параметры образцов

Площадь образца $S, \text{мм}^2$	Толщина образца $L, \text{мм}$	Толщина облученного слоя $l, \text{мкм}$	Мощность поглощенной дозы $D, \text{Мрад}$
138	1.39	1.121	1
146	1.30	1.210	2.8
143	1.41	1.272	3.25
134	1.32	1.324	4.59
132	1.34	1.393	5.61

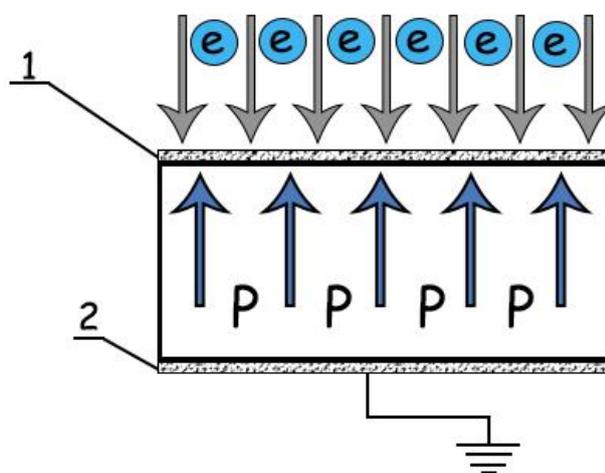
Образцы имеют одинаковый размер и форму. Толщина облученного слоя зависит от дозы облучения и параметров облученных образцов согласно соотношению (27).

Облучение кристалла ТГС проводилось с помощью расфокусированного электронного луча РЭМ 100У, который имеет следующие характеристики: разрешающая способность 7 нм, длительность строки 0,625 – 200 мс, число строк в кадре 125 – 1000, ускоряющее напряжение 5 -40 кэВ.

Для облучения кристаллов при повышенных ускоряющих напряжениях на противоположные стороны кристалла методом термического распыления в вакууме наносились металлические электроды толщиной около 50 нм.

За счет ускоряющего напряжения удавалось создать облученный слой вблизи верхнего электрода и не позволяло дефектом пройти в глубь объема.

Исследование эффектов, которые возникают при облучении кристаллов электронным зондом осуществлялось по схеме, изображенной на рисунке 13.



1 – верхний электрод; 2 – нижний электрод (заземлен);

Рисунок 13 – Облучение кристалла

Один электрод заземлялся, со второго через усилитель, который имеет малое входное сопротивление и высокое сопротивление обратной связи, регистрировался сигнал тока переполаризации. Малое входное сопротивление усилителя обеспечивало режим короткого замыкания электродов.

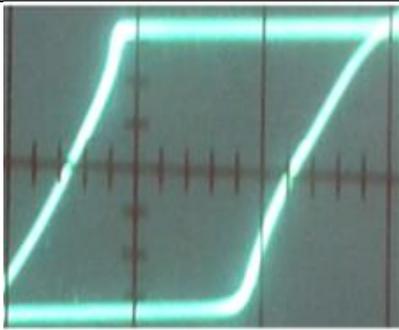
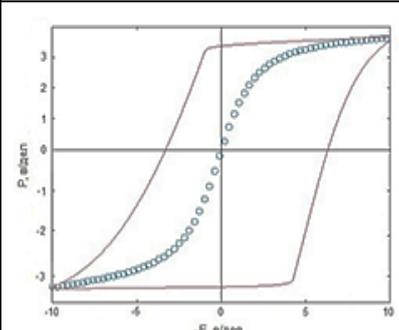
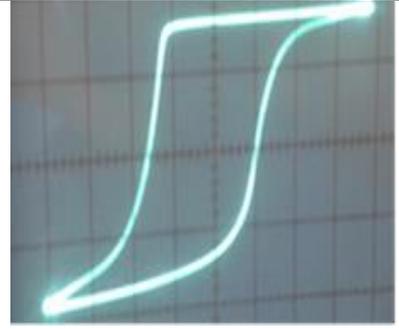
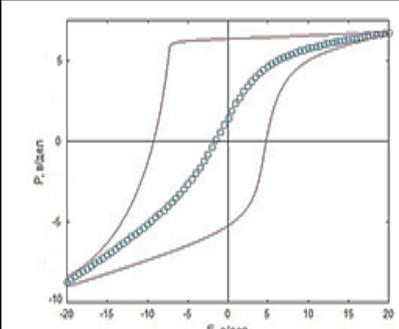
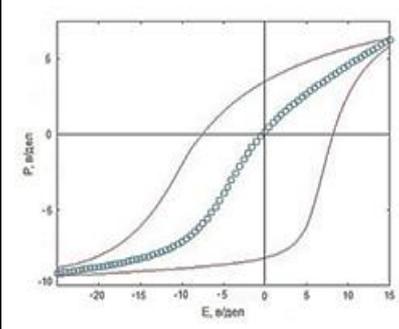
При переполаризации в образце возникает ток смещения, который замыкается через внешнюю цепь и приводит к изменению емкостей слоев и, следовательно, электрических полей в обеих частях кристалла, а также к изменению токов в цепях верхнего и нижнего электродов.

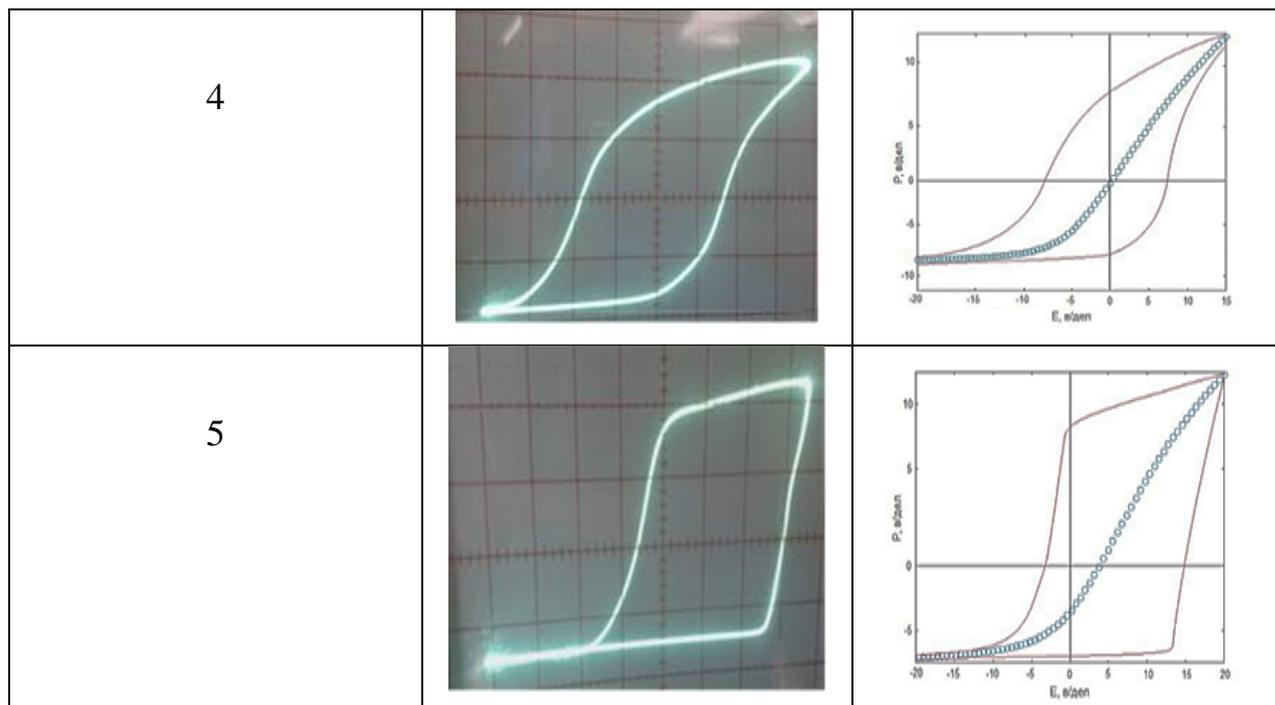
4 РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

4.1 Результаты эксперимента

Параметры образцов и мощности поглощенной дозы, указанные в таблице 1, вводились в программный комплекс для построения зависимости вектора поляризации от напряженности электрического поля $P(E)$. В таблице 2 приведены зависимости, полученные в ходе эксперимента на осциллографе и зависимости, полученные в ходе моделирования. Результат моделирования практически полностью согласуется с экспериментальными зависимостями.

Таблица 2 – Экспериментальные и модельные зависимости $P(E)$ для облученных образцов.

№ образца	Экспериментальные зависимости	Результат моделирования
1		
2		
3		



Для более точного сравнения результатов эксперимента и моделирования можно рассчитать площадь, ограниченную зависимостью $P(E)$, в условных единицах. Переход от математического формализма к параметрам переполяризации в переменном электрическом поле позволит определить заряд, переключаемый в процессе переполяризации. Значения площадей, ограниченных зависимостями $P(E)$ представлены в таблице 3.

Таблица 3 – Экспериментальные и модельные площади зависимости $P(E)$

Площади экспериментальных фигур S , дел.	Площади модельных фигур S , дел.	Переключаемый заряд до облучения q , мкКл	Переключаемый заряд после облучения q , мкКл
$3,7 \pm 0,1$	$3,4 \pm 0,1$	53,6	78,4
$10,3 \pm 0,2$	$10,3 \pm 0,2$	57,3	92,5
$10,5 \pm 0,2$	$10,6 \pm 0,2$	89,1	108,3
$12,1 \pm 0,2$	$12,0 \pm 0,2$	152,2	178,4
$13,2 \pm 0,2$	$13,4 \pm 0,2$	214,5	265,2

При облучении кристалла наблюдается резкое изменение симметрии зависимости $P(E)$, вызванное появлением неравномерного распределения диполей в объеме кристалла, вызванное появлением облученного слоя.

Введение параметров облученного кристалла в модель Джила-Атертона позволяет получить результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными, что позволяет использовать разработанный программный комплекс для дальнейших исследований.

4.2 Зависимости параметров

Так как в модель вносится значение поглощенной дозы, то можно построить график зависимости толщины облученного слоя от величины поглощенной дозы облучения (рисунок 14).

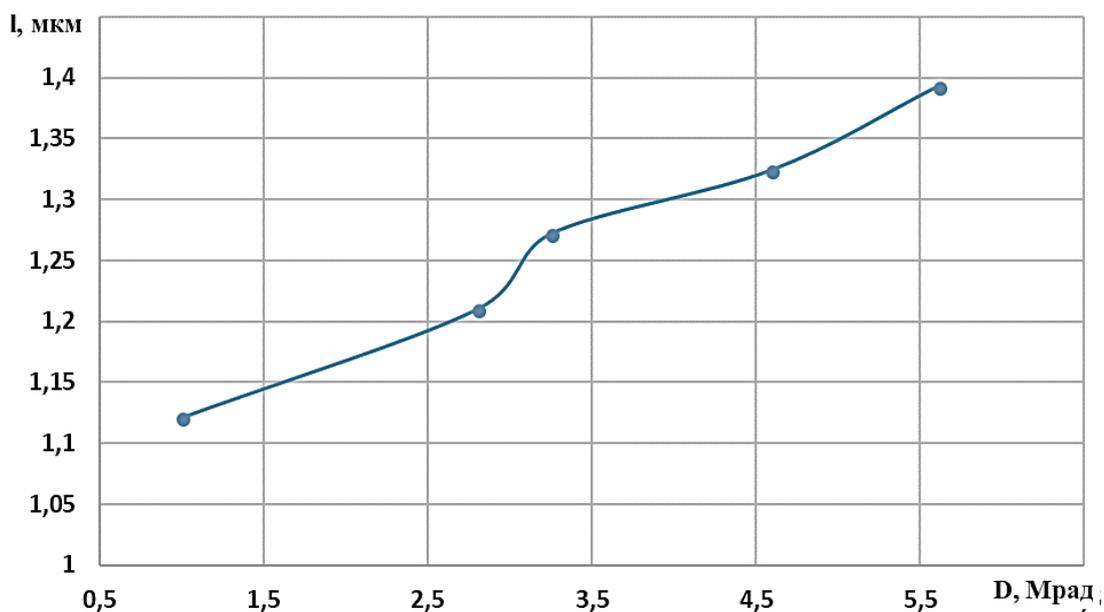


Рисунок 14 - Зависимость толщины облученного слоя от величины поглощенной дозы

На графике видно, что толщина облученного слоя увеличивается с ростом поглощенной дозы облучения. Согласно соотношению (22) зависимость толщины облученного слоя от величины поглощенной дозы облучения должна быть линейна. Однако из полученного графика видно, что зависимость не совсем

линейна. При дозах (от 2,81 до 3,25 Мрад.) наблюдается резкое увеличение количества дефектов, а графике наблюдается скачок.

Полученные результаты позволяют установить зависимость между величиной переключаемого заряда и поглощенной дозой (рисунок 15), а также между поглощенной дозой и спонтанной поляризацией (рисунок 16).

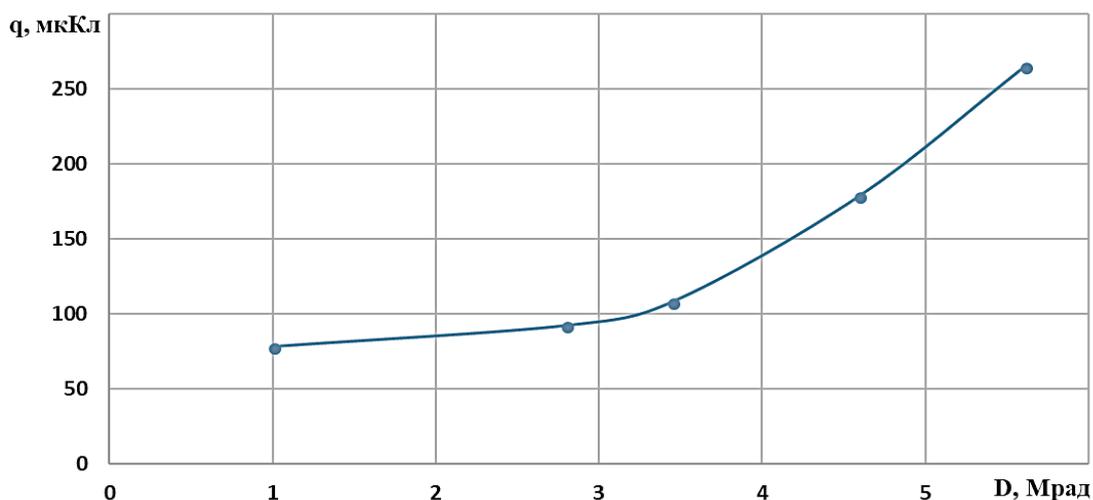


Рисунок 15 – Зависимость величины переключаемого заряда от поглощенной дозы облучения

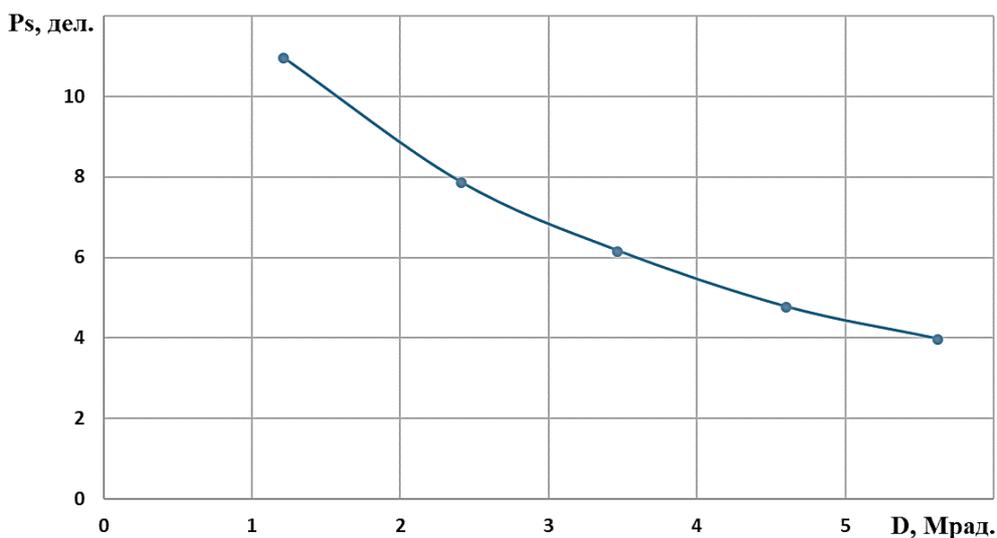


Рисунок 16 - Зависимость спонтанной поляризации от величины поглощенной дозы облучения

Согласно полученным результатам, зависимость спонтанной поляризации от поглощенной дозы облучения имеет нелинейный характер, при величине поглощенной дозы облучения наблюдается падение спонтанной поляризации. Однако, в то же время величина переключаемого заряда возрастает при увеличении поглощенной дозы облучения.

Полученные результаты позволяют построить и проследить изменение зависимости диэлектрической проницаемости от поглощенной дозы (рисунок 17).

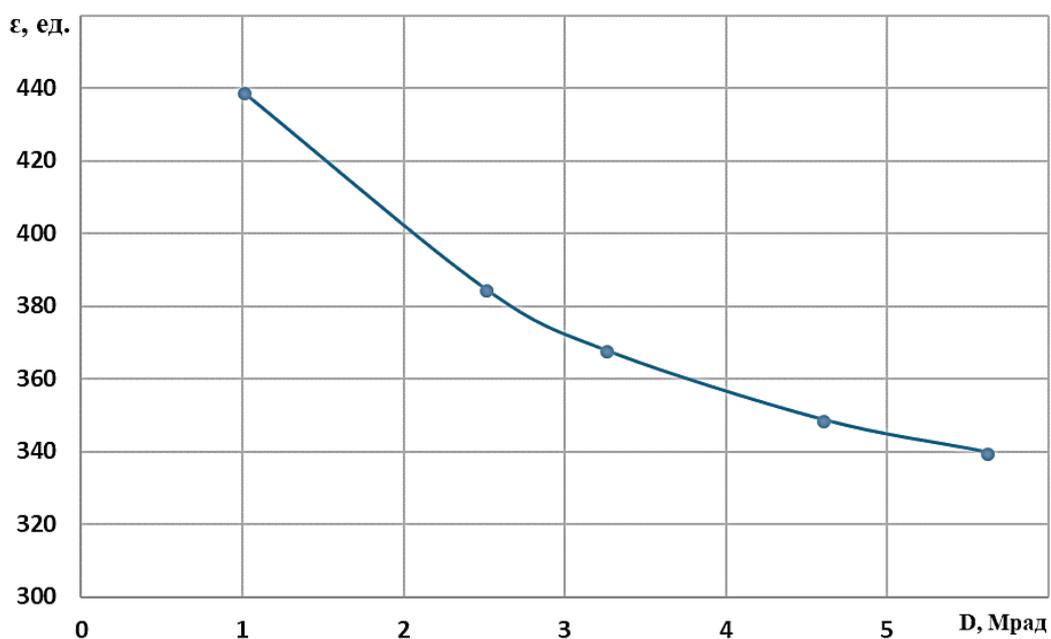


Рисунок 17 – Зависимость диэлектрической проницаемости от величины поглощенной дозы

Зависимость диэлектрической проницаемости от толщины облученного слоя имеет нелинейный характер, что указывает на присутствие одного вида переполаризации в кристалле – релаксационная.

Снижение значений диэлектрической проницаемости при увеличении дозы облучения можно объяснить увеличением накапливающихся радиационных дефектов.

Введение параметров облученного кристалла в модель Джила-Атертона позволяет получить результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными

данными, что позволяет использовать разработанный программный комплекс для дальнейших исследований.

Программный комплекс увеличивает возможности для воссоздания свойств и исследования поведения сегнетоэлектрических материалов после различных видов воздействия.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучение процесса переполаризации облученного электронами кристалла ТГС с использованием модели Джилла – Атертона показывает, что экспериментальные зависимости хорошо согласуются с зависимостями полученными в данной модели. Это можно объяснить тем, что модель создавалась на основании теории Кюри-Вейса, описывающей процессы переполаризации сегнетоэлектриков. Модель предусматривает построение петель диэлектрического гистерезиса при условии изменения поглощенной дозы облучения образцов электронами. Следовательно, данная модель может быть использована для прогнозирования результатов при воздействии на сегнетоэлектрики электронного облучения. Однако для других видов сегнетоэлектриков параметры модели n , m , c , a будут принимать другие значения. Это связано с тем, что каждый из вышеприведенных параметров определяет параметры переполаризации кристалла.

Можно прогнозировать так же результаты воздействия на сегнетоэлектрик других видов излучения. Для этого необходимо знать прежде всего энергию излучения и влияние конкретного вида излучения на изменение параметров облучаемого кристалла.

Имеется возможность не только воссоздать зависимость $P(E)$, но и определить и построить графики зависимости толщины облученного слоя, переключаемого заряда, спонтанной поляризации и диэлектрической проницаемости от поглощенной дозы. Построение графиков позволяет установить величину поглощенной дозы, при которой достигается необходимое значение спонтанной поляризации.

Коррекция в определении параметров модели по экспериментальным значениям дает возможность прогнозировать результаты облучения для других энергий электронов. Так как в результате облучения возникает униполярная структура, которая сохраняется длительное время, выбор режимов облучения является необходимым условием создания образцов с наиболее устойчивыми параметрами.

По результатам проделанной работы можно сделать следующие выводы:

1) модель Джилла – Атертона может быть использована для моделирования облученных кристаллов ТГС, так как результаты моделирования согласуются с экспериментом;

2) установлено, что с увеличением дозы увеличивается толщина облученного слоя, величина переключаемого заряда. Однако величина спонтанной поляризации, и диэлектрической проницаемости уменьшаются.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

- 1 Барфут, Дж. Полярные диэлектрики и их применения / Дж. Барфут, Дж. Тейлор. – М.: Мир, 2008. – 526 с.
- 2 Струков, Б.А. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах / Б.А. Струков, А.П. Леванюк. – М.: Наука, 2005. – 304с.
- 3 Ferroelectrics – Applications: Edited by Mickaël Lallart. – Publisher: InTech, 2011. – 250 p.
- 4 Дрождин, С.Н. Релаксация доменной структуры кристаллов ТГС и ДТГС в процессе статической переполяризации / С.Н. Дрождин, О.М. Голицина, А.И. Никишина, Ф.А. Тума, Д.П. Тарасов // Физика твердого тела, 2006. – Т.48. – № 3. – С. 497-500
- 5 Донцова, Л.И. Закономерности динамики доменов в процессе переполяризации кристаллов ТГС / Л.И. Донцова, Л.Г. Булатова, Э.С. Попов, А.В. Шильников, А.А. Чеботарев, Н.А. Тихомирова, А.И. Баранов, Л.А. Шувалов // Кристаллография, 2008. – Т. 27. – Вып. 2. – С. 305-312.
- 6 Масловская, А.Г. Взаимодействие электронных пучков средних энергий с сегнетоэлектрическими материалами: моногр. / А.Г. Масловская, И.Б. Копылова. – Владивосток: Изд-во Дальнаука, 2010. – 204 с.
- 7 Юрин, В.А. Доменная структура гамма-облученных кристаллов триглицинсульфата / В.А. Юрин, Н.В. Белугина, В.А Мелешина // Изв. АН СССР. Сер. физич. – 1971. – Т. 19. № 4. – С. 873-875.
- 8 Бадяй Д.В., Копылова И.Б. Исследование модели Джилла – Атертона для определения параметров облученного электронами кристалла ТГС Вестник АмГУ. – 2018. – Вып. 81. – С. 34-38.
- 9 Бадяй Д.В. Возможности моделирования переполяризации сегнетоэлектрического кристалла, облученного электронами / Д.В. Бадяй, И.Б. Копылова // В кн.: Материалы XV региональной научной конференции «Физика, фундаментальные и прикладные исследования, образование». – Благовещенск, 2017. – С. 6-8.

- 10 Эланго, М.А. Элементарные неупругие радиационные процессы / М.А. Эланго. – М.: Наука 1998. – 152 с.
- 11 Юрин, В.А. Сегнетоэлектрические свойства кристаллов триглицинсульфата, облученных гамма-квантами / В.А. Юрин, И.М. Сильвестрова, И.С. Желудев // Кристаллография, 1992. – Т. 7. – Вып. 2. – С. 1334-1336.
- 12 Малышкина, Г. Д. Пространственное распределение поляризации в сегнетоактивных материалах / Г.Д. Малышкина. – 2-е изд., доп. – М.: Мир, 2010. – 408 с.
- 13 Копылова, И.Б. Инжекция электронного зонда растрового электронного микроскопа в монокристаллы триглицинсульфата: дис.... канд. физ.-мат. наук. / И.Б. Копылова; АмГУ. – Благовещенск, 1996. – 180 с.
- 14 Камышева, Л.Н. Влияние малых доз рентгеновского излучения на свойства триглицинсульфата, легированного хромом / Л.Н. Камышева, С.Н. Дрождин, О.М. Голицина // ФТГ. – 2002. – Т. 44, №. 2. – С. 347 – 350.
- 15 Ефимов, В.В. Оптические и структурные исследования кристалла ТГС, облученного импульсным сильноточным пучком электронов / В.В. Ефимов, В.В. Иванов, Е.А. Клевцова // Известия РАН. – 2003. – Т. 67, №. 8. – С. 1201 – 1205.
- 16 Сегнетоэлектрические кристаллы / под ред. И. Н. Липунова, Ф. Иона. – М.: Научный мир, 2009. – 296 с.
- 17 Еловииков, С.С. Электронно-стимулированные процессы поверхности монокристаллов нитрита бора / С.С. Еловииков, Р.С. Гвоздовер, А.Н. Смирнов. – М.: Наука, 2009. – 280 с.
- 18 Масловская, А.Г. Моделирование взаимодействий электронных пучков с полярными диэлектриками: дис.... канд. физ.-мат. наук. / А.Г. Масловская; АмГУ. – Благовещенск, 2004. – 155 с.
- 19 Дистлер, Г.И. Дефектная структура кристаллов триглицинсульфата в сегнетоэлектрическом и параэлектрическом состоянии / Г.И. Дистлер, В.П. Константинова, Ю.М. Герасимов. – М.: Наука, 2011. – 236 с.

- 20 Мамонтов, А.П. Эффект малых доз ионизирующего излучения: моногр. / А. П. Мамонтов, И.П. Чернов. – 2-е изд., перераб. и доп. – Томск: Дельтаплан, 2009. – 286 с.
- 21 Голицина, О.М. Релаксация радиационных дефектов в облученном триглицинсульфате: моногр. / О.М. Голицина, Л.Н. Камышева. – 1-е изд. – Томск: Дельтаплан, 2008. – 226 с.
- 22 Гаврилова, Н.Д. Пироэлектричество: моногр. / Н.Д. Гаврилова. – 2-е изд. – М.: Наука, 2011. – 463 с.
- 23 Шаламов, И.В. Электрический метод контроля жидкодисперсных систем: моногр. / И. В. Шаламов, И. Ю. Ухарцева. – 3-е изд., перераб. и доп. – М: Наука, 2002. – 182 с.
- 24 Шаламов, И.В. Исследование электрофизических свойств жидкодисперсных систем методом изотермической деполяризации / И. В. Шаламов, И. Ю. Ухарцева, Е.А. Цветкова // Материалы. Технологии. Инструменты. – 2003. – Т. 6, №. 2. – С. 22 – 26.
- 25 Шаламов, И.В. Программно-аппаратный комплекс АИР-1 для контроля процесса переполяризации // И. В. Шаламов, И. Ю. Ухарцева, Е.А. Цветкова. – 2-е изд., – М: Наука, 2011. – 206 с.
- 26 Васильев, В.В. Дробное исчисление и аппроксимационные методы в моделировании динамических систем. Научное издание. / В.В. Васильев, Л.А. Симак – Киев: НАН Украины, 2008. – 256 с.
- 27 Шишкин, Е.И. Моделирование и анализ пространственных и временных фрактальных объектов / Е.И. Шишкин. – Екатеринбург: УГУ им. Горького, 2004. – 88 с.
- 28 Шур, В.Я. Скачки Баркгаузена при движении одиночной сегнетоэлектрической доменной стенки / В.Я. Шур, В.Л. Кожевников, Д.В. Пелегов, Е.В. Николаева, Е.И. Шишкин // Физика твердого тела, 2001. – Т. 43. – Вып. 6. – С. 1089-1092.

29 Хмелевская, В.С. Компьютерный анализ процессов самоорганизации в металлических материалах / Н.В. Куликова, В.С. Хмелевская, В.В. Бондаренко / Математическое моделирование. – 2006. – Т. 18. – № 1. – С. 88–98.

30 Донцова, Л.И. Кинетика процесса переключения локально облученных образцов триглицинсульфата / Л.И. Донцова, Н.А. Тихомирова, А.В. Гинзберг // Физика твердого тела, 1988. – Т. 30. – Вып. 9. – С. 2692-2697.

31 Евстафьева, Е.Н. Механизм зарядки диэлектрических мишеней при облучении электронными пучками с энергией 1-50 кэВ: дис. ...канд. физ.-мат. наук / Е.Н. Евстафьева. – М., 2009. – 121 с.

32 Масловская, А.Г. Математическое моделирование процессов взаимодействия электронных пучков с полярными материалами: автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук / А.Г. Масловская – Санкт-Петербург, 2014. – 32 с.

33 Коханчик, Л.С. Формирование регулярных доменных структур и особенности переключения спонтанной поляризации в кристаллах танталата лития при дискретном облучении электронами / Л.С. Коханчик, Д.В. Иржак // Физика твердого тела, 2010. – Т. 52. – № 2 – С. 285-289.

34 Li, D.V. Polarization reorientation in ferroelectric lead zirconate titanate thin films with electron beams / D.V. Li, J.H. Ferris, D.R. Strachan, D.A. Bonnell // J. Mater. Res., 2006. – V. 21. – 935-941.

35 Барабаш, Т.К. Применение дробно-дифференциального исчисления в задачах моделирования фрактальной динамики сегнетоэлектрических доменных структур / Т.К. Барабаш, А.Г. Масловская, М.А. Колесник // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование: материалы XII региональной научной конференции. – Хабаровск, 2013. – С. 17-23.

36 Барабаш, Т.К. Применение дробно-дифференциального исчисления в задачах моделирования фрактальной динамики сегнетоэлектрических доменных структур / Т.К. Барабаш, А.Г. Масловская, М.А. Колесник // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование: материалы XII региональной научной конференции. – Хабаровск, 2013. – С. 17-23.

- 37 Кукушкин, С.А. Кинетика переключения в сегнетоэлектриках / С.А. Кукушкин, А.В. Осипов // Физика твердого тела, 2001. – Т. 43. – С. 88-98.
- 38 Ouyang, K-Q. Simulation on the Hysteresis of ferroelectric thin films / K-Q. Ouyang, T-L. Ren, L-T. Liu, D. Wei // Integrated Ferroelectrics, 2004. – V. 64. – P. 69-75.
- 39 Шильников, А.В. Некоторые диэлектрические свойства полидоменных монокристаллов сегнетовой соли, триглицинсульфата и дигидрофосфата калия / А.В. Шильников: дис. ... канд. физ.-мат. наук: Воронеж, 1972. – 224 с.
- 40 Miller, R.C. Motion of 180° domain walls in metal electroded barium titanate crystals as a function of electron field and sample thickness / R.C. Miller, A. Savage // J. Appl. Phys., 1960. – V. 31. – P. 662-669.
- 41 Sekhar, K.C. Polarization switching in ferroelectric sodium nitrite thick film / K.C. Sekhar, A. Nautiyal, R. Nath // Appl. Phys. Express, 2008. – . 1. – P. 091601-091604.
- 42 Донцова, Л.И. Закономерности динамики доменов в процессе переполяризации кристаллов ТГС / Л.И. Донцова, Л.Г. Булатова, Э.С. Попов, А.В. Шильников, А.А. Чеботарев, Н.А. Тихомирова, А.И. Баранов, Л.А. Шувалов // Кристаллография, 1982. – Т. 27. – Вып. 2. – С. 305-312.
- 43 Донцова, Л.И. Закономерности динамики доменов в процессе переполяризации кристаллов ТГС / Л.И. Донцова, Л.Г. Булатова, Э.С. Попов, А.В. Шильников, А.А. Чеботарев, Н.А. Тихомирова, А.И. Баранов, Л.А. Шувалов // Кристаллография, 1982. – Т. 27. – Вып. 2. – С. 305-312.
- 44 Белугина, Н.В. Доменная структура, неоднородность поляризации и некоторые физические свойства кристаллов ТГС с различной степенью дефектности: автореф. дис.... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07 / Н.В. Белугина. – Москва, 1997. – 24 с
- 45 Филиппов, М.Н. Количественный микронзондовый анализ фазово-устойчивых объектов: автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук. – М.: МИТХТ, 1992. – 48 с.