

B. F. ТИЛЛЕС

Россия, Пензенский государственный университет
E-mail: micro@diamond.stup.as.ru

Дата поступления в редакцию
20.12.2000 г.

Оппоненты к. т. н. В. П. ВЛАСОВ,
к. т. н. Н. М. ВАКИВ

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В СЕГНЕТОКЕРАМИКЕ

Рассматривается методика определения функции распределения релаксаторов по спектру диэлектрической проницаемости образцов сегнетокерамики в области низких частот.

Применение сегнетокерамики в качестве материалов активных элементов пьезодатчиков, работающих при воздействии облучений, требует подробного изучения влияния возникающих при этом дефектов на ее свойства [1]. Обычно изучают влияние облучения на форму петли гистерезиса, эффект Барггаузена или переключательную характеристику [2]. При этом полагают, что изменение этих характеристик связано с влиянием дефектов на движение доменных стенок, как 180-градусных, так и 90-градусных. Известно, что энергии активации 180- и 90-градусных стенок различны, поэтому представляет интерес влияние дефектов на время релаксации доменной стенки в слабых полях в низкочастотном и инфракрасном диапазонах (далее НЧ, ИНЧ) диапазонах, т. к. именно при таком воздействии движение доменных стенок носит релаксационный характер и описывается уравнениями дебаевского типа [3].

При определении времени релаксации по диаграммам Коула — Коула невозможно разделить релаксационные процессы с временами релаксации, различающимися менее чем на порядок (**рис. 1**, где ϵ' , ϵ'' — действительная и мнимая части комплексной диэлектрической проницаемости). Для определения потенциальных барьеров или энергий активации движения доменных стенок по частотным зависимостям диэлектрической проницаемости необходимо использовать модель, учитывающую распределение доменных стенок по временам релаксации.

Модель, которая рассматривает функцию плотности распределения релаксаторов по временам релаксации $f(\tau)$ в диапазоне времени от τ_a до τ_b , предложена Г. Фрелихом [4]:

$$\epsilon^*(\omega) = \epsilon_\infty + (\epsilon_\infty - \epsilon_0) \int_{\tau_a}^{\tau_b} \frac{f(\tau) d\tau}{1 + i\omega\tau}, \quad \int_0^\infty f(\tau) d\tau = 1, \quad (1)$$

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта Минобразования РФ ТОО.1.5.-1746.

Автор приносит искреннюю благодарность А. М. Метальнику за предоставленную возможность проведения экспериментов и полезные дискуссии.

где ϵ^* , ϵ_∞ , ϵ_0 — комплексная, статическая и оптическая диэлектрические проницаемости, соответственно.

Однако задача решения интегрального уравнения Фрелиха относительно $f(\tau)$ является некорректной, т. к. даже очень малые относительные ошибки определения $\epsilon^*(\omega)$ могут приводить к настолько большим ошибкам, что численное решение не будет иметь ничего общего с точным. Для решения этой существенно некорректной задачи может быть применен метод регуляризации Тихонова [5, с. 71] с выбором параметра регуляризации α по методу обобщенной невязки как наиболее универсальный. Метод не требует никакой другой априорной информации, кроме выполнения требования гладкости получаемого решения.

Точность расчета $f(\tau)$ по экспериментальным зависимостям оказывается удовлетворительной, если погрешность последних не превышает 2% [6]. При использовании данных с большими ошибками ($\geq 5\%$) метод регуляризации, как и традиционные графические методики, недостаточно эффективен. Повышение точности расчета $f(\tau)$ путем увеличения количества экспериментальных точек или проведение нескольких серий экспериментов в области НЧ- и ИНЧ-спектроскопии приводят к неприемлемому увеличению времени эксперимента. В [6] предлагается математическое сглаживание экспериментальных результатов, при этом функция распределения рассчитывается *исключительно* по зависимости $\epsilon''(\omega)$.

Учитывая, что точность измерения $\epsilon'(\omega)$ практически на порядок выше, чем $\epsilon''(\omega)$, произведем замену переменных. Пусть

$$s = -\log_g(\tau); x = \log_g(\omega), \quad (2)$$

тогда частотная зависимость комплексной диэлектрической проницаемости примет вид

$$\epsilon^*(b^*) = \epsilon_\infty + (\epsilon_\infty - \epsilon_0) \int_{\log_g \tau_a}^{\log_g \tau_b} \frac{f(g^s) g^s ds}{1 + ig^{-(x-s)} (-\ln g)} \quad (3)$$

где основание логарифма выбирается так, чтобы количество точек, выбранных из спектра диэлектрической проницаемости, было, с одной стороны, максимальным для повышения точности, с другой — таким, чтобы не переполнять ресурсы ЭВМ при решении системы линейных уравнений.

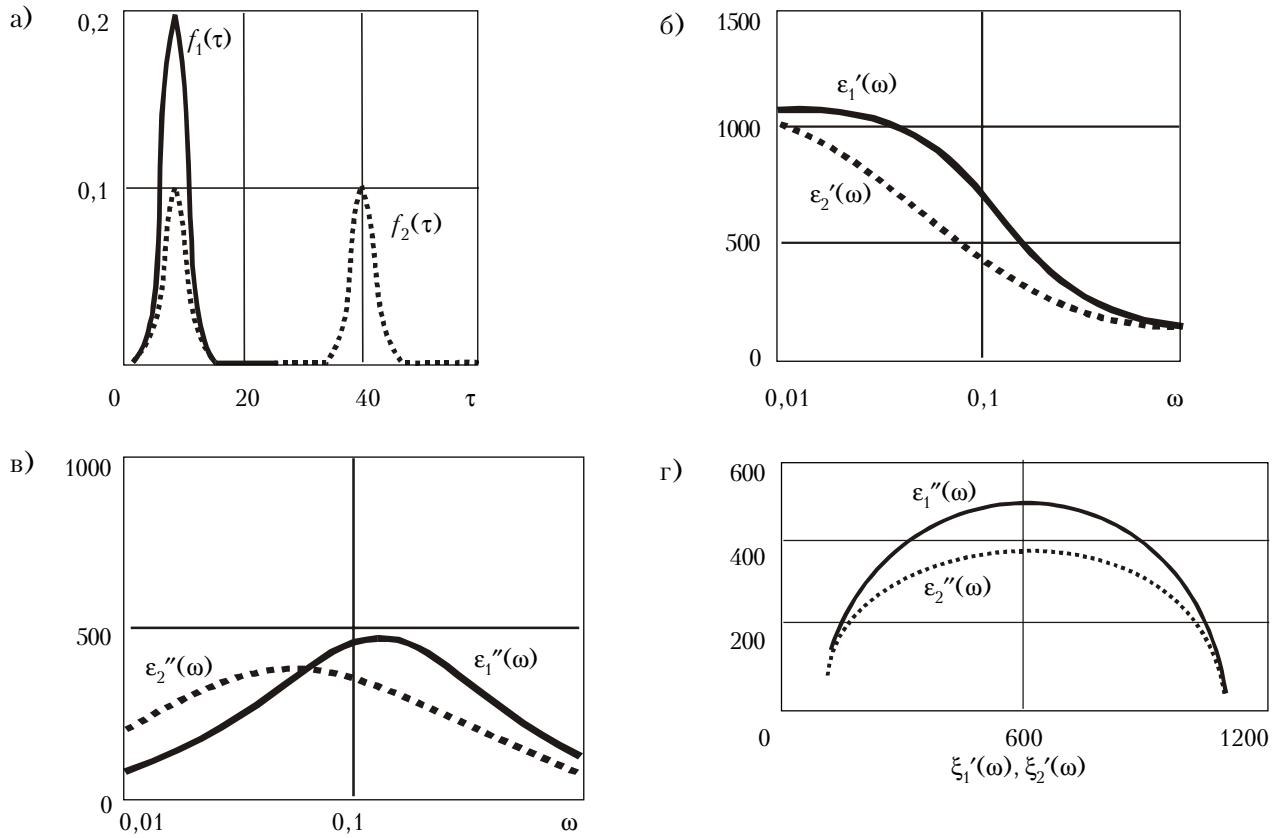


Рис. 1. Диэлектрические характеристики для двух функций распределения релаксаторов:
а — функции распределения; б — действительные части диэлектрических проницаемостей; в — мнимые части диэлектрических проницаемостей; г — диаграммы Коула—Коула

Данная трансформация имеет полезные для решения обратной задачи следствия. Во-первых, ядро становится симметричным и самосопряженным; во-вторых, производная обрабатываемой функции на концах области определения стремится к нулю.

Учитывая, что действительная и мнимая части комплексной диэлектрической проницаемости однозначно связаны соотношением Крамерса—Кронига, решение уравнения (3) относительно \$y(s)=g^s f(g^s)\$ сводится к решению любого из уравнений

$$\xi'(x) = \int_a^b \frac{y(s)ds}{1+g^{-2(x-s)}}, \quad (4)$$

или

$$\xi''(x) = \int_a^b \frac{g^{-(x-s)} y(s)ds}{1+g^{-2(x-s)}}, \quad (5)$$

где \$\xi'(x)=(\varepsilon'(g^x)-\varepsilon_0)/[(\varepsilon_\infty-\varepsilon_0)(-\ln(g))], \xi''(x)=\varepsilon''(g^x)/[(\varepsilon_\infty-\varepsilon_0)(-\ln(g))], a=\log_g \tau_a, b=\log_g \tau_b\$.

Далее решается уравнение общего вида

$$Ay = \int_a^b K(x, y) y(s)ds = \xi(x), \quad c \leq x \leq d, \quad (6)$$

где для действительной части комплексной диэлектрической проницаемости

$\xi(x)=\xi'(x)$ и ядро $K(x, y)=(1+g^{-2(x-y)})^{-1}$, (7)
а для мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости

$$\xi(x)=\xi''(x) \text{ и ядро } K(x, y)=g^{-(x-y)}(1+g^{-2(x-y)})^{-1}. \quad (8)$$

Программа, разработанная в системе Turbo-Pascal, реализует решение способом конечных сумм и разностей уравнения Тихонова:

$$\begin{aligned} & \alpha[f_\alpha(t) - qf_\alpha''(t)] + \int_{\tau_a}^{\tau_b} \left[\int_{\omega_c}^{\omega_d} \tilde{K}(\omega, t) \tilde{K}(\omega, \tau) d\omega \right] f_\alpha(\tau) d\tau = \\ & = \int_{\omega_c}^{\omega_d} \tilde{K}(\omega, t) \tilde{\xi}(\omega) d\omega, \end{aligned} \quad (9)$$

где α — параметр регуляризации;
 $f_\alpha(t)$ и $f_\alpha''(t)$ — частное решение и его вторая производная при конкретном α ;

t — переменная, $\tau_a < t < \tau_b$;

q — порядок регуляризации;

$\tilde{K}(\omega, \tau)$ — неточно определенное ядро;

$\tilde{\xi}=\xi'(\omega)$ — нормированный экспериментальный спектр действительной части комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon^*(\omega)$, измеренный в диапазоне частот $\omega_c - \omega_d$.

МАТЕРИАЛЫ ЭЛЕКТРОНИКИ

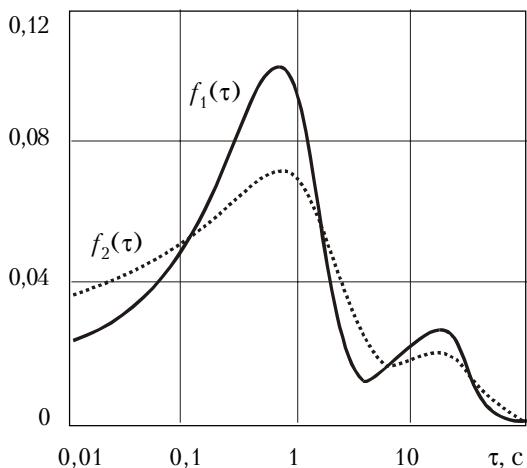


Рис. 2. Распределения релаксаторов по времени релаксации, рассчитанные по экспериментальным спектрам: $f_1(\tau)$ – по спектру $\epsilon'(\omega)$; $f_2(\tau)$ – по спектру $\epsilon''(\omega)$

Тестирование программы проводилось на модельных спектрах при внесении погрешности в виде белого шума на уровне 3% от среднего значения $\psi(x)$. Уширение функции распределения релаксаторов при расчете по уравнению (7) составило 25%, в то время как расчет по уравнению (8) привел к уширению спектра релаксаторов на 60%.

Результаты обработки спектров $\xi'(\omega)$ и $\xi''(\omega)$, снятых в диапазоне частот 10^{-3} – 10^3 Гц на образце кера-

мики титаната бария, представлены на рис. 2. Видно, что спектр релаксаторов, определенный по $\xi'(\omega)$, уже приблизительно на 30%, чем спектр релаксаторов, определенный по $\xi''(\omega)$. Погрешность измерения $\xi'(\omega)$ не превышает 2%, погрешность измерения $\xi''(\omega)$ – около 10%.

Таким образом, при соответствующем соотношении погрешностей измерения $\xi'(\omega)$ и $\xi''(\omega)$ методику определения функции распределения релаксаторов по спектру $\xi'(\omega)$ можно считать более эффективной, чем по спектру $\xi''(\omega)$.

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Печерская Р. М., Тиллес В. Ф. К расчету сечений радиационного дефектообразования в первоскитоподобных сегнетоэлектриках // Изв. АН. Сер. Физ. – 2000. – Т. 64, № 6. – С. 1084–1087.

2. Пешиков Е. В. Радиационные эффекты в сегнетоэлектриках. – Ташкент: ФАН, 1986.

3. Галиярова Н. М. Эволюция диэлектрических спектров при изменении соотношения определяющих движение доменных стенок упругих вязких и инертных сил / В сб.: Сегнетоэлектрики и пьезоэлектрики. – Тверь: Изд-во Тверс. гос. ун-та, 1993. – С. 54–70.

4. Фрелих Г. Теория диэлектриков. – М.: Наука, 1960.

5. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1979.

6. Усманов С. М. Релаксационная поляризация диэлектриков: Расчет спектров времен диэлектрической релаксации. – М.: Наука, 1966.

ТРЕТЬЯ МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «МИКРОЭЛЕКТРОННЫЕ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛИ И ПРИБОРЫ НА ИХ ОСНОВЕ»

МЭПП-2001
Баку–Сумгайт

Баку–Сумгайт 16–19 октября 2001 г.

**Министерство образования Азербайджанской Республики
Сумгайтский государственный университет (СГУ)
Национальная авиационная академия (НАА)
Азербайджанское национальное аэрокосмическое агентство (АНАКА)**

Проблематика

- ◆ Разработка и производство материалов электронной техники
- ◆ Проектирование и конструирование микроэлектронных изделий
- ◆ Современные технологические процессы изготовления микроэлектронных изделий
- ◆ Негатронные приборы и элементы
- ◆ Микроэлектронная сенсорика
- ◆ Оптоэлектроника
- ◆ Медицинская электроника
- ◆ Экологическое приборостроение
- ◆ Космическое и авиационное приборостроение
- ◆ Компьютерные технологии и защита информации
- ◆ Информационные и измерительные преобразователи и системы

Рабочие языки конференции — азербайджанский, русский

Место проведения конференции

Азербайджанская Республика, города Баку и Сумгайт (берег Каспийского моря)

Адреса оргкомитета конференции

Азербайджанская Республика, 370106, г. Баку, пр-т Азадлыг, 159, ОКБ АНАКА.
Тел. (994-12) 62-19-91.

E-mail: anasa.ssddb@azeuro.net
373208, г. Сумгайт, 43-й квартал,
Сумгайтский государственный университет,
Оргкомитет МЭПП-2001.
Тел. (994-164) 2-12-63;
факс (994-164) 2-02-70.

Председатель программного комитета

проф. Касимов Fuad Djalafovich

Ученый секретарь конференции
доц. Оруджев Kamal Djamalovich

На вопросы по подготовке тезисов
Вам ответят по тел. (994-164) 4-89-05