

УДК 537.534.7:19.85

Д.А.Лесных (5 курс, каф. ФТТ), Ю.В.Трушин, д.ф.-м.н, проф.,
гл.н.с. ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН, чл.корр. РАЕН.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТНОЙ СИСТЕМЫ PLZT-КЕРАМИК НА ПОЛЯРИЗАЦИЮ ПРИ НЕЙТРОННОМ ОБЛУЧЕНИИ И ОТЖИГЕ

Изучение влияния жестких излучений на ферроэлектрические материалы представляет большой практический интерес вследствие их возможного применения, например, в термоядерных реакторах. В настоящей работе предложена физическая модель эволюции дефектов в PLZT-керамиках (структурная формула: $Pb_{1-x}La_xZr_{1-y}Ti_yO_3$) под воздействием нейтронного облучения и отжига. Изучалось влияние дефектной системы на поляризацию материала.

Влияние жестких облучений (нейтронов, электронов, гамма-лучей) на ферроэлектрические PLZT-керамики исследовалось в работах [1, 2]. Нейтронное облучение приводит к существенному понижению спонтанной поляризации и диэлектрической проницаемости.

Согласно результатам работы [3], существуют два типа кислородных вакансий в цепочках атомов Ti-O-Ti тетрагональной фазы ферроэлектрического материала $PbTiO_3$:

- 1) не оказывают ни какого влияния на поляризацию;
- 2) уменьшают ее.

Положение вакансии кислорода 1-го типа является энергетически выгодным по отношению к вакансиям 2-го типа. Предполагается, что при облучении нейтронами ферроэлектрической PLZT-керамики образуются вакансии 2-го типа, вследствие чего уменьшается поляризация. При отжиге вакансии 2-го типа могут рекомбинировать с межузлиями кислорода, или переходить в 1-й тип, что приводит к восстановлению поляризации. Для описания эволюции дефектов в кислородной подрешетке PLZT-керамики при отжиге облученного материала была составлена система балансных кинетических уравнений, учитывающая рассматриваемые процессы. Эта система решалась численно с помощью пакета программ MGEAR [4]. Начальные концентрации дефектов после облучения вычислены при помощи программы TRIRS [5]. Результаты расчетов для зависимости концентраций вакансий кислорода 2-го типа от времени отжига, которые, определяют изменение поляризации в PLZT-керамиках, представлены на рисунке (пунктирные кривые). Там же представлена экспериментально измеренная зависимость поляризации (см. работу [1]) как функция температуры отжига (сплошные кривые), для PLZT-керамик с содержанием La 4.5% и 7%, и дозой облучения нейтронами 10^{18} н/см². Для достижения удовлетворительного совпадения экспериментальных результатов и теоретических расчетов (см. рис.), варьировались значения энергий активации миграции межузлий и вакансий кислорода. В результате получено: величины энергий активации миграции различных кислородных вакансий $\epsilon_v^m = 1.45$ эВ для керамики с содержанием La 7%, $\epsilon_v^m = 1.7$ эВ для образца с содержанием La 4,5%, а также энергия активации миграции кислородных межузлий $\epsilon_i^m = 1.7$ эВ для обеих керамик.

Таким образом, предложена физическая модель эволюции дефектов в кислородной подсистеме ферроэлектрической PLZT-керамики с разным содержанием лантана. Эта модель учитывает влияние вакансий кислорода в различных состояниях на поляризационные свойства материала при нейтронном облучении и отжиге. Из удовлетворительного согласия между рассчитанными изменениями концентраций

вакансий кислорода и экспериментальным поведением поляризации при отжиге облученных образцов, оценены значения энергий активации миграции дефектов в кислородной подсистеме.

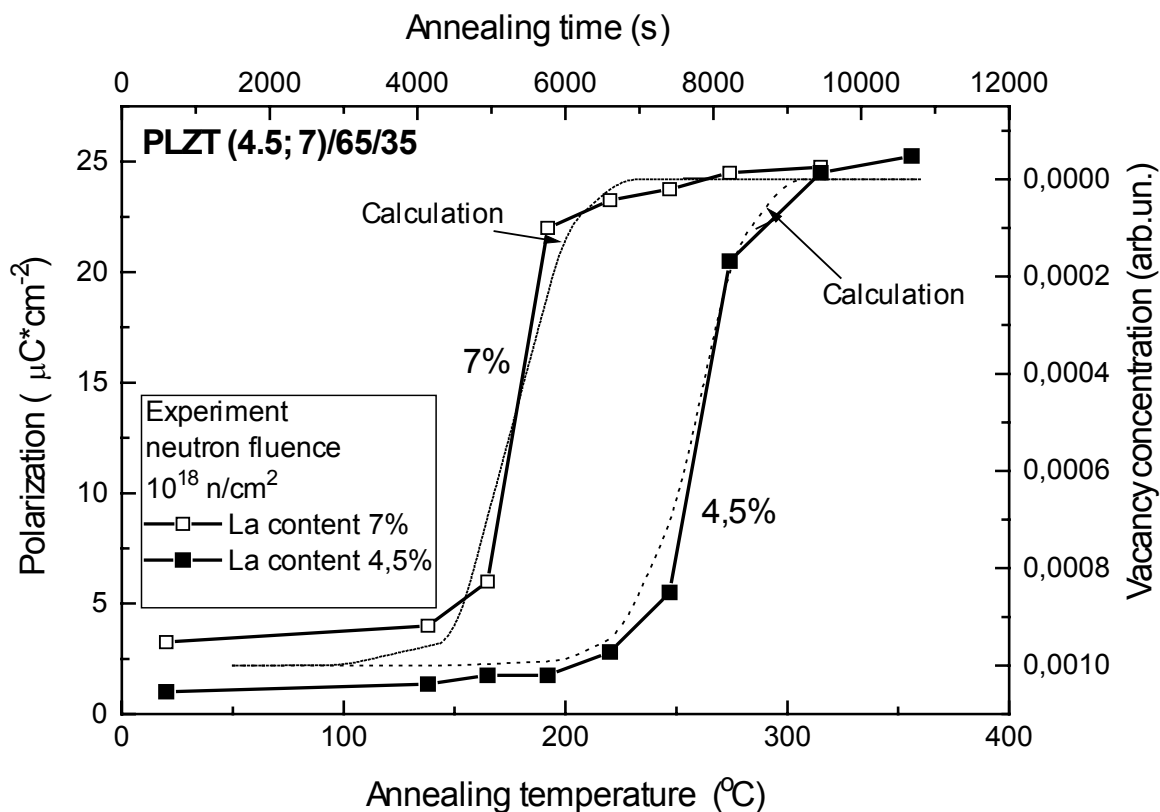


Рис. Рассчитанная зависимость концентраций вакансий кислорода 2-го типа от времени отжига, в сравнении с экспериментально измеренной зависимостью поляризации от температуры отжига

Работа поддержана РФФИ (проекты 99-02-17990 и 00-15-96812) и Австрийской Академией Наук.

ЛИТЕРАТУРА:

1. A.Sternberg, et al, *Ferroelectrics*, v.153, p.309, 1994
2. A.Sternberg, et al, *Fourth Euro Ceramics*, v.5, p.233
3. C.H.Park, D.J.Chadi, *Phys.Rev. B*, v57, N.22, p.R13961, 1998
4. D.V.Kulikov, R.A.Suris, Yu.V.Trushin., *Supercond.Sci.Technol.*, V.8, p.303, 1995
5. Yu.V.Trushin, B.J.Ber, V.S.Kharlamov, E.E.Zhurkin, *J. Nucl. Mater.* v.233-237, p.991, 1996