

## Моделирование процессов экранирования заряда в сегнетоэлектриках

П.В. Юдин<sup>1,2</sup>, А. Дейнека<sup>1</sup>, М.Ю. Хребтов<sup>2</sup>, М.С. Бобров<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт Физики, АНЧР, 18221 Прага, Чехия  
e-mail: yudin@fzu.cz

<sup>2</sup>Институт Теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Процессы переключения и фазовые переходы в сегнетоэлектриках сопровождаются резким изменением значения (спонтанной) поляризации. Пространственное распределение поляризации при этом как правило выстраивается таким образом, чтобы избежать заряженных границ, где  $\text{div}P \neq 0$ . Если поверхностный заряд порядка величины спонтанной поляризации (до Кл/м<sup>2</sup>) все же возникает, например, на поверхности сегнетоэлектрика, энергетически целесообразно его практически полное экранирование свободными зарядами. Деполяризующие электрические поля, которые возникают при не скомпенсированных связанных зарядах активируют процессы переноса свободного заряда как внутри сегнетоэлектрика, так и на его поверхности. Эти процессы редко подчиняются простому моделированию, но мы рассмотрим несколько примеров, где экранирование удастся описать простыми математическими формулами [1]. Будут изложены общие подходы к моделированию процессов экранирования, и рассмотрены конкретные примеры.

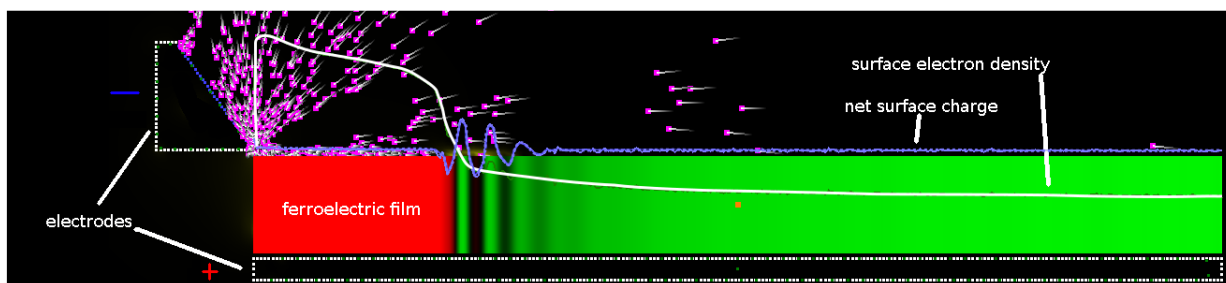


Рисунок 1. Движение доменной стенки в условиях экранирования поверхностного заряда путем эмиссии электронов с катода. Сиреневым цветом показаны электроны, стрелкой указано направление их движения. По мере накопления заряда электронов (белая линия) происходит переключение из состояния с поляризацией вниз (зеленый цвет) в состояние с поляризацией вверх (красный цвет). Суммарный заряд (фиолетовая линия) существенно отличен от нуля лишь в зоне переключения. Расчет проведен для параметров BaTiO<sub>3</sub>.

На Рисунке 1 представлены результаты расчета сопряженной задачи с динамикой экранирующего заряда (электроны в вакууме) над поверхностью сегнетоэлектрика и динамикой поляризации в сегнетоэлектрике. Переключение происходит по мере подвода электронов, эмитированных электрическим полем с верхнего электрода. Расчет подтверждает, что суммарный заряд (фиолетовая линия) существенно отличен от нуля лишь в ограниченной области переключения. По мере продвижения стенки поле вблизи верхнего электрода уменьшается, эмиссия ослабевает, и стенка замедляется. Получены зависимости координаты стенки от времени для ряда значений приложенного напряжения.

Применительно к процессам компенсации связанного заряда внутри сегнетоэлектрика, будут обсуждаться механизмы экранирования заряженных доменных стен и фазовых границ. К таким механизмам относятся: ионизация дефектов; создание электрон-дырочных пар, в том числе под действием ультрафиолетового излучения, миграция заряженных дефектов таких как кислородные вакансии [2]. Следует подчеркнуть, что ввиду недостатка достоверных сведений о процессах экранирования заряда многие механизмы имеют характер гипотез. Дальнейшие исследования в данной области имеют высокую актуальность в том числе для применений сегнетоэлектриков в электронике.

1. P.V. Yudin *et al.*, *Physical Review Applied* **13**, 014006 (2020).
2. P.S. Bednyakov *et al.*, *npj Computational Materials* **4**, 65 (2018).