

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2} \alpha (T - T_K) (\eta_1^2 + \eta_2^2) + \frac{1}{4} \beta_1 (\eta_1^2 + \eta_2^2)^2 + \frac{1}{2} \beta_2 \eta_1^2 \eta_2^2 - a \eta_1 \eta_2 \mathcal{P}_z - E_z \mathcal{P}_z. \quad (2)$$

Здесь  $\eta_1, \eta_2$  — компоненты параметра порядка;  $a, \alpha, \beta, \beta_1, \beta_2$  — постоянные коэффициенты.

Равновесные свойства собственных и несобственных С. могут быть получены путём определения равновесных значений  $\eta_1, \eta_2, \mathcal{P}_z$  из условия минимума термодинамич. потенциала  $\Phi$  по отношению к этим величинам. Анализ приводит к зависимостям от темп-ры  $T$  компонент параметра порядка  $\eta$ , спонтанной поляри-

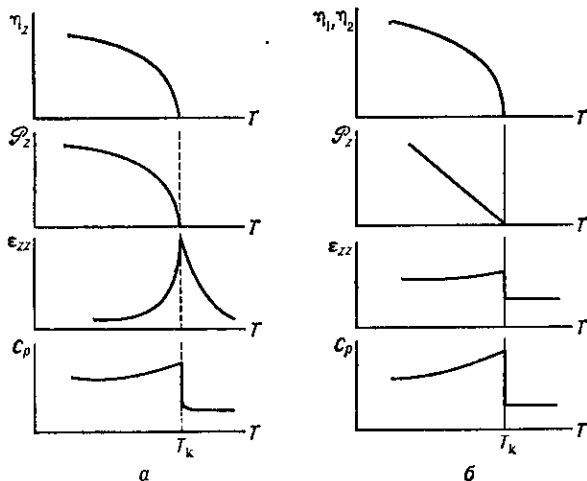


Рис. 1. Температурные зависимости компонент параметра порядка  $\eta_z$  спонтанной поляризации  $\mathcal{P}_z$ , диэлектрической проницаемости  $\epsilon_{zz}$  вдоль полярного направления  $z$ , теплоёмкости  $C_p$  для собственных (а) и несобственных (б) сегнетоэлектриков.

зации  $\mathcal{P}_z$ , диэлектрич. проницаемости  $\epsilon$ , теплоёмкости  $C_p$  (рис. 1). Так, спонтанная поляризация для собственных С.:

$$\mathcal{P}_z \sim \eta_z = \pm \left[ -\frac{\alpha(T - T_K)}{\beta} \right]^{1/2}, \quad (3)$$

для несобственных С.:

$$\mathcal{P}_z = \infty \eta_1 \eta_2; \quad (4)$$

$$\eta_1^2 = \eta_2^2 = -\frac{\alpha(T - T_K)}{2\beta_1 + \beta_2}. \quad (5)$$

«Вторичность» спонтанной поляризации в несобств. С. следует из того, что  $\mathcal{P}_z \sim \eta_1 \eta_2$ . Диэлектрич. проницаемость в собств. С. при фазовом переходе 2-го рода следует закону Кюри — Вейса:  $\epsilon_{zz} = C/(T - T_K)$ , где  $C$  — постоянная. В несобств. С.  $\epsilon$  испытывает скачок при  $T = T_K$ . В обоих случаях теплоёмкость  $C_p$  меняется в точке фазового перехода скачком.

Поведение С. в области  $T \sim T_K$ , следующее из теории Ландау, экспериментально (в основном) подтверждается; имеющиеся расхождения связываются с дефектами кристаллич. структуры и флуктуац. эффектами. С позиций совр. теории фазовых переходов 2-го рода, теория Ландау не полностью учитывает нарастание флуктуаций параметра порядка  $\eta$  при  $T \rightarrow T_K$ . Поэтому она неверна в непосредств. близости к  $T_K$ . В результате зависимости характеристик кристалла от  $T$  оказываются вблизи  $T_K$  неаналитическими. Область, где отклонения от предсказаний теории Ландау велики, в большинстве случаев узка, но тем не менее следует ожидать вблизи  $T_K$ , напр., отклонений от закона Кюри — Вейса (см. *Критические показатели*).

Из ур-ний (3) — (5) и рис. 1 следует, что в полярной фазе (при  $T < T_K$ ) равновесные значения спонтанной поляризации  $\mathcal{P}_z$ , отвечающие минимуму термодинамич. потенциала  $\Phi$ , могут быть положительными («+») и отрицательными («-»). Это означает, что в полярной фазе есть неск. направлений для вектора  $\mathcal{P}$ : для одноосных С. — 2, для трёхосных С. — 6 (по два вдоль каждой из эквивалентных кристаллографич. осей).

Доменная структура. Из сказанного следует, что существует неск. энергетически эквивалентных вариантов структуры полярной фазы (к-рые могут быть переведены одна в другую теми преобразованиями симметрии, к-рые исчезают при фазовом переходе). Это объясняет возможность разбиения С. на домены — области с разл. направлениями  $\mathcal{P}$ . В несобств. С. возможны, кроме того, домены с одним направлением  $\mathcal{P}$ , но различающиеся др. структурными характеристиками, т. е. знаком  $\eta$  (т. н. антифазные домены). Характер равновесной доменной структуры определяется требованием минимума полной энергии кристалла. В полярной фазе идеального С. при полной компенсации однородных по объёму электр. и упругих полей (т. е. в электрически закороченном и механически свободном образце) доменная структура энергетически невыгодна, т. к. образование границы между доменами (доменной стенкой) увеличивает энергию кристалла (поверхностная энергия доменной стенки положительна). Однако обычно С. разбиты на домены.

В незакороченных образцах разбиение на домены энергетически выгодно, т. к. возрастание энергии доменных стенок компенсируется уменьшением энергии электростатич. взаимодействия между разл. частями кристалла. Ввиду дальнегодействующего характера электростатич. поля его значение в данной точке определяется распределением поляризации во всём объёме образца, его формой и размерами, условиями на границах. Поэтому расчёт равновесной доменной структуры в С., даже для образцов простейших форм, представляет собой сложную задачу, пока окончательно не решённую. Сложен и ожидаемый характер доменной структуры, согласно теории, она должна измельчаться («ветвиться») вблизи поверхности кристалла.

Однако доменная структура, отвечающая предсказаниям теории для идеального С., практически никогда не наблюдается. При образовании доменной структуры важную роль играет предыстория образца, напр. условия прохождения через точку Кюри  $T_K$  в неравновесных условиях при первом охлаждении кристалла после его выращивания при повыш. темп-рах (см. *Гистерезис сегнетозлектрический*), а также дефекты кристаллич. структуры. Кроме того, во многих С. на характер доменной структуры сильное влияние оказывает экранирование электр. поля за счёт перераспределения свободных носителей заряда и перезарядки локальных центров (см. *Сегнетополупроводники*).

Влияние внешнего электрического поля на доменную структуру. В С. доменные стенки могут смещаться под действием электр. поля, причём объём доменов, поляризованных по полю, увеличивается за счёт доменов, поляризованных против поля. Возможно также и зарождение новых доменов, поляризация в к-рых ориентирована вдоль  $E$ . В реальных кристаллах доменные стенки обычно закреплены на дефектах и неоднородностях, т. е., для того чтобы перейти из одного положения в другое, доменной стенке нужно преодолеть энергетич. барьеры. В сильных электр. полях эти барьеры сглаживаются и стенка может перемещаться по образцу относительно быстро. Возможно и перемещение стенок в слабых полях за счёт термоактив. преодоления барьера, это перемещение может быть очень медленным. Энергетич. барьеры для перемещения стенок существуют и в бездефектных кристаллах благодаря дискретности атомной структуры, аналогично т. н. барьеру Пайерлса для перемещения дислокаций.