

Р.Р. Левицький<sup>1</sup>, І.Р. Зачек<sup>2</sup>, А.С. Вдович<sup>1</sup>

## Статичні діелектричні, п'єзоелектричні і пружні властивості сегнетоелектриків $\text{KH}_2\text{PO}_4$ і $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$

<sup>1</sup>Інститут фізики конденсованих систем НАН України,

бул. Свєнціцького, 1, Львів, 79011, Україна, E-mail: vas@ph.icmp.lviv.ua

<sup>2</sup>Національний університет "Львівська політехніка" бул. С. Бандери 12, 79013, Львів, Україна

У рамках модифікованої моделі протонного впорядкування сегнетоактивних сполук сім'ї  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  з врахуванням лінійних за деформаціями  $\varepsilon_6$  і  $\varepsilon_4$  внесків в енергію протонної системи, але без врахування тунелювання в наближенні чотиричастинкового кластера розраховано і досліджено статичні діелектричні, п'єзоелектричні і пружні характеристики сегнетоелектриків типу  $\text{KD}_2\text{PO}_4$ . При належному виборі мікропараметрів отримано в парафазі добрий кількісний опис відповідних експериментальних даних для  $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$  та  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ .

**Ключові слова:** сегнетоелектрики, кластерне наближення, діелектрична проникність, п'єзомодулі, пружна стала.

Стаття поступила до редакції 09.11.2010; прийнята до друку 15.15.2010.

### I. Вступ

Сегнетоелектрики сім'ї  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  у параелектричній фазі кристалізуються в класі  $\bar{4} \cdot m$  тетрагональної сингонії (просторова група  $\bar{I}\bar{4}2d$  з нецентральною точковою групою  $D_{2d}$ ) і тому вони володіють п'єзоелектричними властивостями. При прикладанні відповідних електричних полів і зсуvinих напруг певної симетрії є можливість вивчати роль п'єзоелектричних взаємодій у фазовому переході та їх вплив на фізичні характеристики цих кристалів. На жаль, цій проблемі тривалий час не приділялось належної уваги.

Фундаментальні результати для деформованих сегнетоелектриків типу  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  були отримані в роботах [1-13]. При цьому авторами робіт [1-2] вперше було модифіковано модель протонного впорядкування для цих кристалів шляхом врахування лінійного за деформацією  $\varepsilon_6$  внеску в енергію протонної системи. Однак, в отриманому в цих роботах гамільтоніані було враховано лише розщеплення енергій бічних протонних конфігурацій. Пізніше в роботах [3-6] було враховано всі можливі розщеплення енергій протонних конфігурацій, які зумовлені деформацією  $\varepsilon_6$ . У роботі [3,4] вперше досліджено фазовий перехід у деформованих кристалах  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$  і розраховано його термодинамічні, поздовжні діелектричні, п'єзоелектричні і пружні характеристики.

При належному виборі мікропараметрів було отримано добрий кількісний опис наявних для цих кристалів експериментальних даних. Дослідження термодинамічних, поздовжніх та поперечних діелектричних, п'єзоелектричних та пружних характеристик сегнетоелектриків  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  та анти-сегнетоелектриків  $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$  із врахуванням тунелювання проведено в роботах [5-7] в парафазі. В роботах [8-11] було вивчено вплив поздовжнього електричного поля на фізичні характеристики сегнетоелектриків  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  і  $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$  та отримано задовільний кількісний опис наявних для них експериментальних даних. В роботах [11-13] досліджувались динамічні характеристики сегнетоелектриків типу  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  в широкій частотній області, включаючи й область п'єзоелектричного резонансу. Було явно описано ефекти п'єзоелектричного резонансу, релаксаційної дисперсії в затиснутих кристалах та поведінку коефіцієнтів поглинання та швидкості ультразвуку.

Дана робота присвячена дослідженю в рамках модифікованої протонної моделі поздовжніх та поперечних статичних діелектричних, п'єзоелектричних і пружних характеристик сегнетоелектриків  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  і  $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$  без врахування тунелювання, що пов'язані з деформаціями  $\varepsilon_6$  і  $\varepsilon_4$ .

## ІІ. Гамільтоніан сегнетоелектриків типу $KD_2PO_4$

Будемо розглядати систему дейtronів з сегнетоелектриків типу  $KD_2PO_4$ , які рухаються на О-Д О зв'язках у системі координат  $(x,y,z)$ . Ця система координат збігається з тетрагональною ( $1\bar{4}2d$ ) кристалографічною системою координат  $(a,b,c)$ . Примітивна комірка гратки Браве цих кристалів складається з двох тетраедрів  $PO_4$  разом із чотирьома водневими зв'язками, що відносяться до одного з них (тетраедра типу "A"); водневі зв'язки, які підходять до другого тетраедра (типу "B") належать чотирьом найближчим структурним елементам, які його оточують. Повний модельний гамільтоніан дейtronної системи  $KD_2PO_4$  з врахуванням короткосяжних і далекосяжних взаємодій при прикладанні до кристалу механічних напруг  $\sigma_6 = \sigma_{xy}$ ,  $\sigma_4 = \sigma_{yz}$  та зовнішніх електричних полів  $E_3$ ,  $E_1$ , які направлені вздовж кристалографічних осей  $c$  і  $a$ , має такий вигляд:

$$\hat{H} = NU_{seed} + \hat{H}_{long} + \hat{H}_{short} - \sum_{qf} (\mu_{f1} E_1 + \mu_{f3} E_3) \frac{\sigma_{qf}}{2}, \quad (2.1)$$

де  $N$  – кількість примітивних комірок,  $\sigma_{qf}$  – оператор  $z$ -компоненти псевдоспіна, який описує стан дейтрана, що знаходиться в  $q$ -ій комірці на  $f$ -ому зв'язку. Власні значення оператора  $\sigma_{qf} = \pm 1$  відповідають двом можливим рівноважним положенням дейтрана на зв'язку.  $\mu_1$ ,  $\mu_3$  – ефективні дипольні моменти водневих зв'язків, які, як показано в [14], дорівнюють сумі дипольних моментів тетраедрів і водневих зв'язків, причому

$$\mu_{11} = -\mu_{31} = \mu_1 \cos \gamma, \quad \mu_{21} = -\mu_{41} = \mu_2 \sin \gamma,$$

$$\mu_{13} = \mu_{23} = \mu_{33} = \mu_{43} = \mu_3.$$

"Затравочна" енергія  $U_{seed}$  виражається через електричні поля  $E_1$  і  $E_3$  та деформації  $\varepsilon_4$  і  $\varepsilon_6$ . Вона складається із пружної, п'єзоелектричної та діелектричної частин:

$$U_{seed} = v \left( \frac{1}{2} c_{44}^{E0} \varepsilon_4^2 + \frac{1}{2} c_{66}^{E0} \varepsilon_6^2 - e_{14}^0 \varepsilon_4 E_1 - e_{36}^0 \varepsilon_6 E_3 - \frac{1}{2} \chi_{11}^{E0} E_1^2 - \frac{1}{2} \chi_{33}^{E0} E_3^2 \right), \quad (2.2)$$

де  $v$  – об'єм примітивної комірки,  $c_{44}^{E0}$ ,  $c_{66}^{E0}$ ,  $e_{14}^0$ ,  $e_{36}^0$ ,  $\chi_{11}^{E0}$ ,  $\chi_{33}^{E0}$  – "затравочні" пружні сталі, коефіцієнти п'єзоелектричної напруги та діелектричні сприйнятливості. "Затравочні" характеристики визначають температурну залежність відповідних фізичних характеристик далеко від температури фазового переходу  $T_c$ .

Гамільтоніан  $\hat{H}_{long}$  включає враховану в наближенні молекулярного поля далекосяжну взаємодію між дейtronами і непряму взаємодію дейtronів через

коливання гратки та лінійне за деформаціями  $\varepsilon_4$  і  $\varepsilon_6$  середнє поле [1-3], індуковане п'єзоелектричною взаємодією.  $\hat{H}_{short}$  – гамільтоніан короткосяжних взаємодій.

Діелектричні, п'єзоелектричні і пружні характеристики  $KD_2PO_4$  будемо вивчати на основі термодинамічного потенціалу. Враховуючи специфіку кристалічної структури  $KD_2PO_4$  для розрахунку термодинамічного потенціалу використаємо наближення чотиричастинкового кластера [15]. У цьому наближенні термодинамічний потенціал  $KD_2PO_4$  має такий вигляд:

$$G = NU_{seed} + \frac{1}{2} \sum_{qf} J_{ff'}(qq') \frac{\langle \sigma_{qf} \rangle \langle \sigma_{q'f'} \rangle}{2} - \frac{1}{2} T \sum_{f=1}^4 \ln Z_{1f} - T \ln Z_4 - Nv(\sigma_4 \varepsilon_4 + \sigma_6 \varepsilon_6), \quad (2.3)$$

де  $Z_{1f} = Spe^{-\beta \hat{H}_{qf}^{(1)}}, \quad Z_4 = Spe^{-\beta H_q^{(4)}}$  – одночастинкова і чотиричастинкова статистичні суми. Одночастинкові  $\hat{H}_{qf}^{(1)}$  і чотиричастинковий  $H_q^{(4)}$  гамільтоніани дейtronів деформованих  $KD_2PO_4$  даються виразами:

$$\hat{H}_{qf}^{(1)}(j) = \frac{\bar{x}_f}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2}, \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} H_q^{(4)} = & (-\delta_{s6} \varepsilon_6 - 2\delta_{16} \varepsilon_6) \left\{ \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} + \right. \\ & \left. \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right\} + \\ & + 2(\delta_{a4} \varepsilon_4 - \delta_{14} \varepsilon_4) \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} - \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \\ & + (V + \delta_{a6} \varepsilon_6) \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \\ & + (V - \delta_{a6} \varepsilon_6) \left( \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q4}}{2} \frac{\sigma_{q1}}{2} \right) + \\ & + U \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \Phi \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} - \\ & - \frac{1}{4} (\delta_{s6} \varepsilon_6 - 2\delta_{16} \varepsilon_6) \sum_{f=1}^4 \frac{\sigma_{qf}}{2} - \\ & - \frac{1}{2} (\delta_{a4} \varepsilon_4 + \delta_{14} \varepsilon_4) \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} - \frac{\sigma_{q3}}{2} \right) - \sum_{f=1}^4 \frac{\bar{x}_f}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

В (2.4), (2.5) використані такі позначення:

$$\begin{aligned} x_{13j} = & \beta [-\Delta_j + 2\nu_1 \eta_1^{(1)}(j) + 2\nu_3 \eta_3^{(1)}(j) + \\ & + 2\nu_2 \eta_2^{(1)}(j) + 2\nu_4 \eta_4^{(1)}(j) + \\ & - 2\psi_6 \varepsilon_6 \pm 2\psi_4 \varepsilon_4 \pm \mu_1 \cos \gamma E_1 + \mu_3 E_3], \quad (2.6) \\ x_{24j} = & \beta [-\Delta_j + 2\nu_2 \eta_1^{(1)}(j) + 2\nu_3 \eta_3^{(1)}(j) + \\ & + 2\nu_1 \eta_2^{(1)}(j) + 2\nu_4 \eta_4^{(1)}(j) + \\ & - 2\psi_6 \varepsilon_6 \pm \mu_1 \sin \gamma E_1 + \mu_3 E_3], \quad j = 4, 6. \end{aligned}$$

$$\bar{x}_f = -\beta \Delta + x_f.$$

Тут  $\eta_f^{(1)}(j) = \langle \sigma_{qj} \rangle$ ;

$$\nu_1 = \frac{J_{11}}{4}, \quad \nu_2 = \frac{J_{12}}{4}, \quad \nu_3 = \frac{J_{13}}{4},$$

а  $J_{ff'} = \sum_{R_q} J_{ff'}(qq')$  – фур'є-образ константи далекосижких взаємодій між дейtronами при  $k=0$ ;  $\psi_4$ ,  $\psi_6$  – т.зв. деформаційні потенціали;

$$V = -\frac{w_1}{2}, \quad U = \frac{w_1}{2} - \varepsilon, \quad \Phi = 4\varepsilon - 8w + 2w_1,$$

а  $\varepsilon = \varepsilon_a - \varepsilon_s$ ,  $w = \varepsilon_1 - \varepsilon_s$ ,  $w_1 = \varepsilon_0 - \varepsilon_s$  – т. зв. слетерівські енергії,  $\Delta$  – ефективне поле, яке створене сусідніми поза межами кластера зв'язками.

Якщо до кристалу не прикладені зовнішні електричні поля і напруги, то для середнього значення псевдоспіна  $\eta^{(1)}$  маємо наступне рівняння:

$$\eta^{(1)} = \frac{(2x + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) + 2b(x - \beta\delta_{16}\varepsilon_6)}{(2x + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) + 4b(x - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) + 2a + d},$$

а

$$x = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta^{(1)}}{1 - \eta^{(1)}} + \beta\nu_c\eta^{(1)} - \beta\psi_6\varepsilon_6 = z_6,$$

$$\nu_c = \nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3.$$

$$a = e^{-\beta\varepsilon}, \quad b = e^{-\beta\varepsilon}, \quad d = e^{-\beta\varepsilon}$$

### III. Статичні діелектричні, п'єзоелектричні й пружні характеристики сегнетоелектриків типу $KD_2PO_4$

Розрахувавши власні значення чотирьох одночастинкових гамільтоніанів, знаходимо термодинамічні потенціали на елементарну комірку у випадку прикладання окремо напруг  $\sigma_4$ ,  $\sigma_6$ . Використовуючи діелектричне і пружне рівняння стану, із термодинамічних потенціалів отримаємо вирази для поляризацій  $P_1$ ,  $P_3$ , і напруг  $\sigma_4$ ,  $\sigma_6$  [4,16]. На основі цих виразів ми отримаємо такі термодинамічні характеристики кристалів типу  $KD_2PO_4$ :

ізотермічна діелектрична сприйнятливість затиснутого кристалу:

$$\chi_{33}^{\varepsilon} = \chi_{33}^{e0} + \frac{\mu^2}{v^2} \frac{1}{T} \frac{2\kappa_6}{D_6 - 2\kappa_6\phi_6^{\eta}}, \quad (3.1)$$

$$\chi_{11}^{\varepsilon} = \chi_{11}^{e0} + \frac{(\mu_1 \cos \gamma + \mu_2 \sin \gamma)^2}{v} \frac{\beta}{2} \frac{aa_6 + \kappa^b}{D - 2(aa_6 + \kappa^b)\phi_a^{\eta}} + \quad (3.2)$$

$$+ \frac{(\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma)^2}{v} \frac{\beta}{2} \frac{aa_6 + \kappa^b}{D - 2(\frac{a}{a_6} + \kappa^b)\phi_a^{\eta}}.$$

де

$$\kappa_6 = (2z_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) + b(z_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) - \eta^{(1)}(6)m_6,$$

$$\phi_6^{\eta} = \frac{1}{1 - (\eta^{(1)}(6))^2} + \beta\nu_c; \quad \kappa^b = b(x - \beta\delta_{16}\varepsilon_6),$$

$$\phi_a^{\eta} = \frac{1}{1 - \eta^{(1)2}} + \beta\nu_a \quad \nu_a = \nu_1 - \nu_3.$$

ізотермічний коефіцієнт п'єзоелектричної напруги

$$e_{36} = e_{36}^0 + \frac{2\mu_3}{v} \frac{\beta\theta_6}{D_6 - 2\phi_6^{\eta}\kappa_6}, \quad (3.3)$$

$$e_{14} = e_{14}^0 + \quad (3.4)$$

$$+ \beta \frac{\mu_1 \cos \gamma + \mu_2 \sin \gamma}{v} \frac{\psi_4(aa_6 + \kappa^b) - \delta_{a4}aa_6 - \delta_{14}\kappa^b}{D - 2(aa_6 + \kappa^b)\phi_a^{\eta}} +$$

$$+ \beta \frac{\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma}{v} \frac{\psi_4(\frac{a}{a_6} + \kappa^b) - \delta_{a4}\frac{a}{a_6} - \delta_{14}\kappa^b}{D - 2(\frac{a}{a_6} + \kappa^b)\phi_a^{\eta}},$$

де

$$\theta_6 = -2\kappa_6^c\psi_6 + f_6,$$

$$f_6 = \delta_{s6}(2z_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) - 2b\delta_{16}(z_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) +$$

$$+ \eta^{(1)2}(6)(-\delta_{s6}M_{s6} + \delta_{a6}M_{a6} + \delta_{16}M_{16});$$

ізотермічна пружна стала при постійному полі

$$c_{66}^E = c_{66}^{E0} + \frac{8\psi_6}{v} \cdot \frac{\beta(-\psi_6\kappa_5^c + f_6)}{D_6 - 2\phi_6^{\eta}\kappa_6} -$$

$$- \frac{4\beta\phi_6^{\eta}f_6^2}{vD(D_6 - 2\phi_6^{\eta}\kappa_6)} - \quad (3.5)$$

$$- \frac{2\beta}{vD} [\delta_{s6}^2(2z_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) + \delta_{a6}^2 2a\beta\delta_{a6}\varepsilon_6 +$$

$$+ \delta_{16}^2 4b(z_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6)] +$$

$$+ \frac{2\beta}{vD^2} (-\delta_{s6}M_{s6} + \delta_{a6}M_{a6} + \delta_{16}M_{16})^2.$$

$$c_{44}^E = c_{44}^{E0} - \frac{2\psi_4}{v} \beta \left[ \frac{\psi_4(aa_6 + \kappa^b) - \delta_{a4}aa_6 - \delta_{14}\kappa^b}{D - 2(aa_6 + \kappa^b)\phi_a^{\eta}} + \right.$$

$$\left. + \frac{\psi_4(\frac{a}{a_6} + \kappa^b) - \delta_{a4}\frac{a}{a_6} - \delta_{14}\kappa^b}{D - 2(\frac{a}{a_6} + \kappa^b)\phi_a^{\eta}} \right] + \quad (3.6)$$

$$+ \frac{4\phi_a^{\eta}}{vD} \beta(\delta_{a4}aa_6 + \delta_{14}\kappa^b) \frac{\psi_4(aa_6 + \kappa^b) - \delta_{a4}aa_6 - \delta_{14}\kappa^b}{D - 2(aa_6 + \kappa^b)\phi_a^{\eta}}$$

$$+ \frac{4\phi_a^{\eta}}{vD} \beta(\delta_{a4}\frac{a}{a_6} + \delta_{14}\kappa^b) \frac{\psi_4(\frac{a}{a_6} + \kappa^b) - \delta_{a4}\frac{a}{a_6} - \delta_{14}\kappa^b}{D - 2(\frac{a}{a_6} + \kappa^b)\phi_a^{\eta}} +$$

$$+ \frac{2\psi_4}{vD} \beta(\delta_{a4}\kappa_1^a + \delta_{14}\kappa^b) - \frac{2}{vD} \beta(\delta_{a4}^2\kappa_1^a + \delta_{14}^2\kappa^b).$$

де

$$M_{a6} = 2a\beta\delta_{a6}\varepsilon_6, M_{s6} = (2z_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6),$$

$$M_{16} = 4b(z_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6), \quad \kappa_1^a = aa_6 + \frac{a}{a_6}.$$

Таблиця 1

Оптимальні набори параметрів для кристалів  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ 

$x$	$T_c$	$\frac{\varepsilon}{k_B}$	$\frac{w}{k_B}$	$\frac{v_c}{k_B}$	$\frac{v_a}{k_B}$	$\mu_{3-}, 10^{-18}$	$\mu_{3+}, 10^{-18}$	$\mu_1^{(0)}, 10^{-18}$	$k_\mu, 10^{-21}$	$\chi_{33}^0$	$\chi_{11}^0$
	(K)	(K)	(K)	(K)	(K)	(esu·cm)	(esu·cm)	(esu·cm)	( $\frac{esu\cdot cm}{K}$ )		
0.00	122.5	56.00	422.0	17.91	7.00	1.46	1.71	4.27	5.7	0.73	0.80
0.88	211.0	88.60	815.0	34.90	17.00	1.79	2.05	5.52	4.2	0.39	0.65

$x$	$\frac{\psi_6}{k_B}$	$\frac{\delta_{36}}{k_B}$	$\frac{\delta_{a6}}{k_B}$	$\frac{\delta_{16}}{k_B}$	$\frac{\psi_4}{k_B}$	$\frac{\delta_{a4}}{k_B}$	$\frac{\delta_{14}}{k_B}$	$c_{66}^0 \cdot 10^{-10}$	$c_{44}^0 \cdot 10^{-10}$	$e_{36}^0$	$e_{14}^0$
	(K)	(K)	(K)	(K)	(K)	(K)	(K)	(dyn/cm <sup>2</sup> )	(dyn/cm <sup>2</sup> )	(esu/cm <sup>2</sup> )	(esu/cm <sup>2</sup> )
0.00	-150	82	-500	-400	124.0	92.0	80.0	7.10	13.00	1000	500
0.88	-140	50	-1000	-400	188	95	300	6.40	12.85	2000	500

Використовуючи відомі співвідношення між пружними, діелектричними і п'єзоелектричними характеристиками, знаходимо:

ізотермічну сталу п'єзоелектричної напруги:

$$h_{36} = \frac{e_{36}}{\chi_{33}^\varepsilon}, \quad h_{14} = \frac{e_{14}}{\chi_{11}^\varepsilon}; \quad (3.7)$$

ізотермічну пружну сталу при постійній поляризації:

$$c_{66}^P = c_{66}^E + e_{36}h_{36}; \quad c_{44}^P = c_{44}^E + e_{14}h_{14}; \quad (3.8)$$

ізотермічний коефіцієнт п'єзоелектричної деформації:

$$d_{36} = \frac{e_{36}}{c_{66}^E}; \quad d_{14} = \frac{e_{14}}{c_{44}^E}; \quad (3.9)$$

ізотермічну сталу п'єзоелектричної деформації:

$$g_{36} = \frac{h_{36}}{c_{66}^P}; \quad g_{14} = \frac{h_{14}}{c_{44}^P}; \quad (3.10)$$

ізотермічну діелектричну сприйнятливість при  $\sigma = const$ :

$$\chi_{33}^\sigma = \chi_{33}^\varepsilon + e_{36}d_{36}; \quad \chi_{11}^\sigma = \chi_{11}^\varepsilon + e_{14}d_{14}. \quad (3.11)$$

#### IV. Порівняння результатів числових розрахунків з експериментальними даними. Обговорення отриманих результатів

Перейдемо тепер до аналізу результатів числових розрахунків діелектричних, п'єзоелектричних та пружних характеристик кристалів  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$  і порівняємо їх з відповідними експериментальними даними для цих кристалів. Відзначимо, що розвинена в попередніх розділах теорія, строго кажучи, справедлива для кристалів типу  $KD_2PO_4$ . Встановлений експериментальним шляхом релаксаційний характер дисперсії  $\varepsilon_{33}^*(\nu, T)$  [17-21] у цього типу кристалах, слідує за все пов'язаний з ефектом подавлення тунелювання короткосяжними взаємодіями. У зв'язку з цим ефектами тунелювання протонів на водневих зв'язках надалі будемо нехтувати.

Для числових розрахунків температурних характеристик кристалів  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ , отриманих в попередньому розділі, необхідно задати значення таких ефективних параметрів:

- енергій протонних і дейtronних конфігурацій  $\varepsilon(x)$ ,  $w(x)$ ,  $w_1(x)$ ;
- параметрів далекосяжних взаємодій  $v_c(x)$ ,  $v_a(x)$ ;
- ефективних дипольних моментів  $\mu_3(x)$ ,  $\mu_1(x)$ ;
- деформаційних потенціалів  $\psi_6(x)$ ,  $\psi_4(x)$ ,  $\delta_{36}(x)$ ,  $\delta_{a6}(x)$ ,  $\delta_{16}(x)$ ;
- "затравочних" діелектричних сприйнятливостей  $\chi_{33}^{\varepsilon 0}$ ,  $\chi_{11}^{\varepsilon 0}$ ;
- "затравочних" коефіцієнтів п'єзоелектричної напруги  $e_{36}^0(x)$ ,  $e_{14}^0(x)$ ;
- "затравочних" пружних сталих  $c_{66}^{E0}$ ,  $c_{44}^{E0}$ .

Об'єм примітивної комірки кристалів  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ , яка складається з двох тетраедрів  $PO_4$ , нами прийнято при  $x = 0$  рівним  $v = 0,1936 \cdot 10^{-21} \text{ см}^3$ , а при  $x = 0,88 - v = 0,1936 \cdot 10^{-21} \text{ см}^3$ . Енергія  $w_1(x)$ , яка відповідає двом протонним конфігураціям – чотири біля кисневого тетраедра і жодного протона є значно більшою за енергії  $\varepsilon$  і  $w$ . І тому ми приймаємо  $w_1 = \infty$  і  $d = 0$ .

Для визначення оптимальних параметрів теорії використаємо температурні залежності фізичних характеристик кристалів  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ , які отримані експериментально. Отримані таким чином оптимальні набори параметрів наведені у табл. 1.

$$x = \frac{1}{2} \ln \frac{1+\eta^{(1)}}{1-\eta^{(1)}} + \beta v_c \eta^{(1)} - \beta \psi_6 \varepsilon_6 = z_6, \quad v_c = v_1 + 2v_2 + v_3.$$

Для адекватного опису температурних залежностей діелектричної проникності  $\varepsilon_{11}^{T\sigma}$  [25] слід прийняти, що величина  $\mu_1(x)$  слабо зростає з ростом температури, а саме:  $\mu_1(x) = \mu_1^0(x) + k(T-T_c)$ . Для опису температурного ходу поляризації і статичної діелектричної проникності в парафазі значення ефективного дипольного моменту  $\mu_3$  слід вибирати різними, причому  $\mu_3^+ > \mu_3^-$ . У роботі [26] відмінність

від одиниці відношення  $\frac{\mu_3^+}{\mu_3^-}$  пояснено існуванням у кристалі недодемпфованої м'якої моди.

Тепер перейдемо до аналізу результатів числових розрахунків фізичних характеристик  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$  на основі знайдених параметрів теорії і порівняння отриманих теоретичних результатів з відповідними експериментальними даними.

На рис. 1 представлена температурні залежності

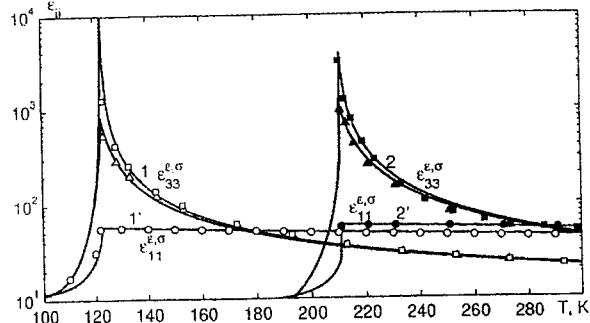


Рис. 1. Температурна залежність діелектричних проникностей затиснутого  $\epsilon_{ii}^E$  і вільного  $\epsilon_{ii}^\sigma$  кристалів  $KH_2PO_4$  (1) і  $K(H_{0.12}D_{0.88})_2PO_4$  (2):  $\square$ ,  $\Delta$  [27],  $\blacksquare$  [28],  $\blacktriangle$   $((\epsilon_{33}^\sigma - 1)/4\pi [29] - d_{36}^2 [29]/s_{66}^E)4\pi + 1$ ,  $\circ$ ,  $\bullet$  [30].

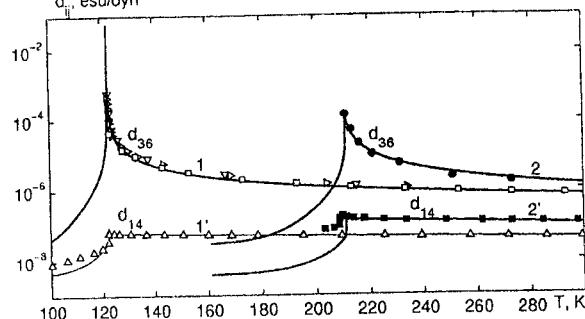


Рис. 2. Температурні залежності коефіцієнтів п'єзоелектричних деформацій  $d_{ij}$   $KH_2PO_4$  (1) і  $K(H_{0.12}D_{0.88})_2PO_4$  (2):  $\square$  [27],  $\nabla$  [31],  $\triangleright$  [32],  $\bullet$  [28],  $\Delta$  [33],  $\blacksquare$  [28].

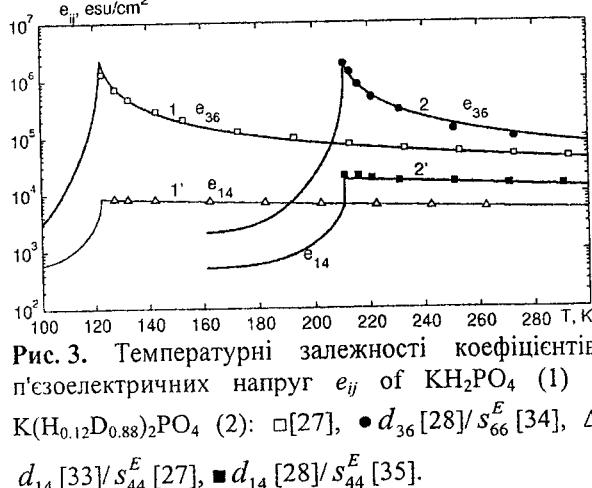


Рис. 3. Температурні залежності коефіцієнтів п'єзоелектричних напруг  $e_{ij}$  of  $KH_2PO_4$  (1) і  $K(H_{0.12}D_{0.88})_2PO_4$  (2):  $\square$  [27],  $\bullet$   $d_{36}/s_{66}^E$  [34],  $\Delta$   $d_{14}/s_{44}^E$  [33]/ $s_{44}^E$  [27],  $\blacksquare$   $d_{14}/s_{44}^E$  [28]/ $s_{44}^E$  [35].

розрахованих ізотермічних статичних діелектричних проникностей вільного  $\epsilon_{ii}^\sigma$  ( $i=1, 3$ ) і затиснутого  $\epsilon_{ii}^E$  кристалів  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$  при  $x = 0.00$  і  $x = 0.88$ ; а

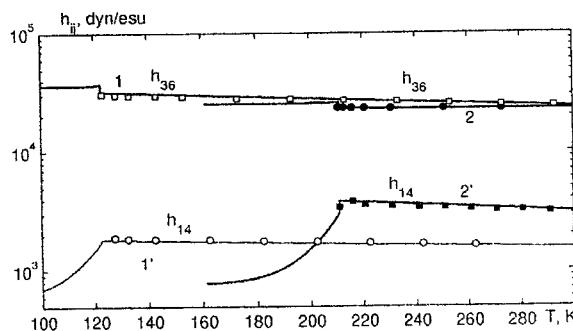


Рис. 4. Температурні залежності констант п'єзоелектричних напруг  $h_{ij}$   $KH_2PO_4$  (1) і  $K(H_{0.12}D_{0.88})_2PO_4$  (2):  $\square$  [27],  $\bullet$   $d_{36}/(s_{66}^E \chi_{33}^\sigma - d_{36}^2)$  [28],  $\circ$   $d_{14}/(s_{44}^E [27] \chi_{11}^\sigma [25] - d_{14}^2 [33])$ ,  $\blacksquare$   $d_{14}/(s_{44}^E [34] \chi_{11}^\sigma [28] - d_{14}^2 [28])$ .

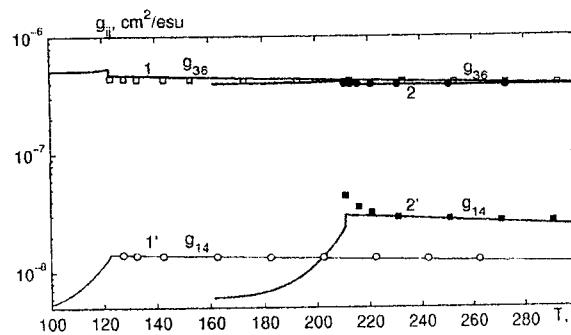


Рис. 5. Температурні залежності констант п'єзоелектричних деформацій  $g_{ij}$   $KH_2PO_4$  (1) і  $K(H_{0.12}D_{0.88})_2PO_4$  (2):  $\square$  [27],  $\bullet$   $d_{36}/\chi_{33}^\sigma$  [28],  $\circ$   $d_{14}/(s_{33}^\sigma [25]$ ,  $\blacksquare$   $d_{14}/\chi_{11}^\sigma [28]$ .

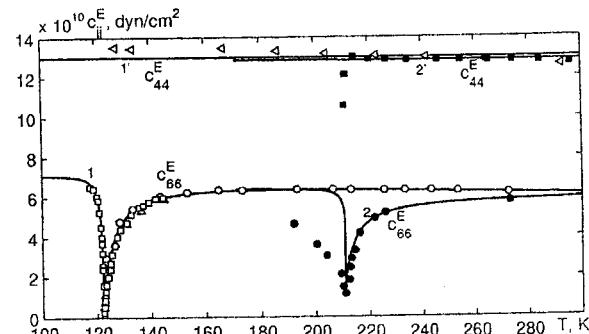


Рис. 6. Температурні залежності пружних сталих  $c_{jj}^E$   $KH_2PO_4$  (1) і  $K(H_{0.12}D_{0.88})_2PO_4$  (2):  $\circ$  [27],  $\square$  [36],  $\Delta$  [37],  $\bullet$   $1/s_{66}^E$  [34],  $\triangleleft$  [27],  $\blacksquare$  [34].

також результати експериментальних вимірювань, які добре узгоджуються з розрахованими значеннями  $\epsilon_{ii}^{\sigma,E}$ . При наближенні в параелектричній фазі до температури переходу  $T_c$  величина  $\epsilon_{33}^\sigma$  зростає за гіперболічним законом, досягаючи при  $T = T_c$  дуже великих значень. При рості  $x$  величина  $\epsilon_{33}^{\sigma,\max}$  зменшується. Нижче температури переходу  $\epsilon_{33}^\sigma$  зменшується дуже швидко. Різниця між значеннями

$\varepsilon_{33}^{\sigma}$  і  $\varepsilon_{33}^{\epsilon}$  при збільшенні  $\Delta T = T - T_c$  швидко зменшується. Для температурного ходу  $(\varepsilon_{33}^{\sigma})^{-1}$  при  $x=0.88$  виконується закон Кюрі–Вейса в широкому температурному інтервалі. При  $x=0,00$  область температур, в яких справедливий закон Кюрі–Вейса, звужується і проявляється помітна нелінійність в температурній залежності  $(\varepsilon_{33}^{\sigma})^{-1}$ . Розрахована без врахування п'єзоелектричної взаємодії діелектрична проникність  $\varepsilon_{33}$  кристалу  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  при  $\Delta T < 50 \text{ K}$  співпадає зі значеннями  $\varepsilon_{33}^{\sigma}$ , а при більших  $\Delta T$  крива  $\varepsilon_{33}(T)$  йде нижче, ніж  $\varepsilon_{33}^{\sigma}(T)$ .

Отримано добрий опис температурного ходу  $\varepsilon_{11}^{\sigma,\epsilon}$  для кристалів  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$  роботи [25], хоча теорія не описує куполоподібної поведінки проникності  $\varepsilon_{11}^{\sigma,\epsilon}$  при малих значеннях  $\Delta T$ . Має місце дуже слаба залежність значень  $\varepsilon_{11}^{\sigma}$  від концентрації  $x$ . В точці фазового переходу спостерігається стрибок  $\varepsilon_{11}^{\sigma}$ , який з ростом  $x$  збільшується. Розрахована різниця  $\varepsilon_{11}^{\sigma}(+) - \varepsilon_{11}^{\sigma}(-)$  при  $x=0$  рівна 3.25, а для  $x=0.88 - 30.9$ , що узгоджується з 4.0 і 34.6 [25]. Для  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$  значення поперечних проникностей механічно вільного і затиснутого кристалів практично співпадають.

Розраховані температурні залежності п'єзоелектричних деформацій  $d_{ij}$  і напруг  $e_{ij}$  зображені на рис. 2 і рис. 3, а залежності від температури констант п'єзоелектричних напруг  $h_{ij}$  і деформацій  $g_{ij}$  – на рис. 4 і рис. 5. На рис. 2 приведені і експериментально отримані значення  $d_{ij}$  при різних температурах. Використовуючи експериментальні дані для  $d_{ij}$ ,  $\varepsilon_{ii}^{\sigma}$  і  $c_{jj}^E$  ( $s_{jj}^E$ ), ми отримали значення  $e_{ij}$ ,  $h_{ij}$  і  $g_{ij}$ , які і наведені на рис. 3, 4, 5. Експериментальні і перераховані п'єзомодулі кількісно добре описуються на основі мікротеорії. При  $T \rightarrow T_c$  значення  $d_{36}$  і  $e_{36}$  зменшуються. З ростом температури  $\Delta T$  в межах від 0 до 170 K для кристалу  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  значення  $d_{36}$  зменшується в 88 раз, а  $e_{36}$  – в 44,5 рази.

Константи  $h_{36}$  і  $g_{36}$  слабо зменшуються з ростом температури, в тій області температур  $\Delta T$  величина  $h_{36}$  зменшується в 1,4 раза, а  $g_{36}$  – в 1,2 раза. П'єзоелектричні модулі  $d_{14}$ ,  $e_{14}$ ,  $h_{14}$ , і  $g_{14}$  не мають аномальної температурної залежності. При збільшенні дійтерування  $x$  значення поздовжніх

п'єзомодулів зменшуються, а поперечних – збільшуються.

Температурні залежності ізотермічних пружних сталих  $c_{jj}^E$  кристалів  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ , які розраховані на основі мікротеорії, добре кількісно узгоджуються з експериментальними даними (рис.6). При температурі фазового переходу пружна сталь  $c_{66}^E$  сегнетоелектрика  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  прямує до нуля, а для  $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$  має мінімальне значення. Температурний хід  $c_{44}^E$  не має аномалій при проходженії температури фазового переходу. При збільшенні  $x$  значення пружних сталих дещо зменшуються.

## Заключні зауваження

У даній статті на основі модифікованої моделі протонного впорядкування без врахування тунелювання в наближенні чотиричастинкового кластера розвинена теорія поздовжніх і поперечних діелектричних, п'єзоелектричних та пружних властивостей сегнетоелектриків типу  $\text{KD}_2\text{PO}_4$ . Проведено грунтovanий числовий аналіз залежності розрахованих фізичних характеристик сегнетоелектриків типу  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  від параметрів теорії і деформаційних потенціалів. Знайдено оптимальні набори цих параметрів і "затравочних" характеристик для кристалів, що досліджуються, які дали можливість описати наявні для них відповідні експериментальні дані.

Встановлено, що врахування п'єзоелектричної взаємодії приводить до появи відмінності між діелектричними проникностями механічно затиснутого і механічно вільного кристалів, особливо для поздовжньої проникності. Крім того показано, що в рамках розвиненої теорії п'єзоелектрична взаємодія суттєво впливає на різницю температур фазових переходів та Кюрі–Вейса вільних кристалів. Тунелювання практично невпливає на п'єзоелектричні та пружні характеристики кристалів, які досліджуються.

**Левицький Р.Р.** – доктор фізико-математичних наук, професор, провідний науковий співробітник;

**Зачек І.Р.** – кандидат фізико-математичних наук, доцент;

**Вдович А.С.** – кандидат фізико-математичних наук, молодший науковий співробітник.

- [1] И.В. Стасюк, И.Н. Билецкий. Влияние всестороннего и одноосного давления на сегнетоэлектрический фазовый переход в кристаллах типа  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  // Изв. АН СССР, сер. физ., 47, с.705 (1983).
- [2] И.В. Стасюк, И.Н. Билецкий, О.Н. Стягар. Индуцированные внешним давлением фазовые переходы в кристаллах  $\text{KD}_2\text{PO}_4$ . // УФЖ, 31(4), с. 567-571 (1986).
- [3] I.V. Stasyuk, R.R. Levitskii, I.R. Zacheck, A.P. Moina. The  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  ferroelectrics in external fields conjugate to the order parameter: Shear stress  $\sigma_6$ . // Phys. Rev. B, 62(10), pp. 6198-6207 (2000).
- [4] R.R. Levitskii, I.R. Zacheck, A.S. Vdovych, A.P. Moina. Longitudinal dielectric, piezoelectric, elastic, and thermal characteristics of the  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  type ferroelectrics // J. Phys. Stud. 14, N 1 1701(17 p.) (2010)

- [5] Р.Р. Левицький, Б.М. Лісний. Теорія п'єзоелектричних, пружних та діелектричних властивостей кристалів сім'ї  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  при деформації  $u_6$ . Фазовий перехід та п'єзоэффект в кристалі  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  // *Журн. фіз. досл.*, 7, с. 431 (2003).
- [6] R.R. Levitskii, B.M. Lisnii. Theory of related to shear strain  $u_6$  physical properties of ferroelectrics and antiferroelectrics of the  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  family // *Phys. Status Solidi B*, **241**, p. 1350 (2004).
- [7] B.M. Lisnii, R.R. Levitskii. Theory of physical properties of ferro- and antiferro- electrics of the  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  family related to strains  $u_4$  and  $u_5$  // *Ukr. J. Phys.*, **49**, p. 701 (2004).
- [8] I.V. Stasyuk, R.R. Levitskii, A.P. Moina, B.M. Lisnii. Longitudinal field influence on phase transition and physical properties of the  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  family ferroelectrics // *Ferroelectrics*, **254**, p. 213 (2001).
- [9] B.M. Lisnii, R.R. Levitskii, O.R. Baran. Influence of electric field  $E_3$  and mechanical shear stress  $\sigma_6$  on  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  crystal ferroelectric phase transition // *Phase Transitions*, **80**, p. 25 (2007).
- [10] I.B. Стасюк, Р.Р. Левицький, А.П. Моїна, О.В. Величко. Вплив зовнішнього електричного поля на сегнетоелектрики типу порядок-непорядок // *Укр. фіз. журн.: Огляды*, (1), 3 (2008).
- [11] I.B. Стасюк, Р.Р. Левицький, А.П. Моїна, О.Г. Сливка, О.В. Величко. *Польові та деформаційні ефекти у складних сегнетоактивних сполуках*. Гражда, Ужгород. 392с. (2009).
- [12] R.R. Levitsky, I.R. Zacheck, A.P. Moina, A.S. Vdovych. Longitudinal relaxation of mechanically free  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  type crystals. Piezoelectric resonance and sound attenuation // *Condens. Matter Phys.*, **11**(3), (55), pp. 555-570 (2008).
- [13] Р.Р. Левицький, І.Р. Зачек, А.С. Вдович. Поперечна релаксація в сегнетоелектриках з водневими зв'язками сім'ї  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  // *Фізика і хімія твердого тіла*, **10**(2), сс. 377-388 (2009).
- [14] Р.Р. Левицький, А.П. Моїна, Б.М. Лісний. Вплив поздовжнього електричного поля на фазовий перехід і фізичні властивості сегнетоелектриків сім'ї  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  // Препринт НАН України. Ін-т фіз. конд. систем; ICMP-00-12U, Львів, 36 с. (2000).
- [15] Р.Р. Левицький, Н.А. Кориневский, И.В. Стасюк. Теория протонного упорядочения в сегнето- и антисегнетоэлектриках типа ортофосфатов // Укр. физ. журн., **19**(8), сс. 1289-1297 (1974).
- [16] Р.Р. Левицький, І.Р. Зачек, А.С. Вдович. Поперечні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні та динамічні властивості сегнетоелектриків типу  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  // Препринт НАН України. Ін-т фіз. конд. систем; ICMP-07-24U, Львів, 80 с. (2007).
- [17] А.А. Волков, Г.В. Козлов, С.П. Лебедев, И.А. Величко. Диэлектрические спектры смешанных кристаллов KDP-DKDP в субмиллиметровом диапазоне волн // *ФТТ*, **21**(11), сс. 3304-3309 (1979).
- [18] I.P. Kaminov. Microwave dielectric properties of  $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ ,  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$  and partially deuterated  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  // *Phys. Rev.*, **138**, 5A, pp. 1539-1543 (1965).
- [19] R.M. Hill, S.K. Ichiki. High-frequency behaviour of hydrogen- bonded ferroelectrics: triglycine sulphate and  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  // *Phys. Rev.*, **132**(4), pp. 1603-1608 (1963).
- [20] Л.П. Переверзева, Ю.М. Поплавко, И.С. Рез, Л.И. Кузнецова. Высокочастотная динамика сегнетоэлектриков порядок-беспорядок (на примере кристалла  $\text{KD}_2\text{PO}_4$ ) // *Кристаллография*, **21**(5), сс. 981-984 (1976).
- [21] A.A. Volkov, G.V. Kozlov, S.P. Lebedev, A.M. Prokhorov. Proton modes in the crystals of  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  family // *Ferroelectrics*, **25**(1-4), pp. 531-534 (1980).
- [22] I.V. Stasyuk, R.R. Levitskii, N.A. Korinevskii. Collective vibrations of protons in compounds of  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ -type. The cluster approximation // *Phys. Stat. Sol. (b)*, **91**(2), pp. 541-550 (1979).
- [23] [23] R.R. Levitskii, I.V. Stasyuk, N.A. Korinevskii. Dynamics of ferroactive crystals of orthophosphate type // *Ferroelectrics*, **21**, pp. 481-483 (1978).
- [24] Н.А. Кориневский, Р.Р. Левицкий. Динамическая теория ортофосфатов в кластерном приближении // *Теорет. и мат. Физика*, **42**(3), сс. 416-429 (1980).
- [25] Е.Н. Волкова Физические свойства сегнетоэлектрических твердых растворов  $\text{K}(\text{D}_x\text{H}_{1-x})_2\text{PO}_4$  // *Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук*. Москва, с.152. (1991),
- [26] M. Tokunaga Two different mechanismus of the Curie-Weiss dielectric susceptibility in dispeasive-type ferroelectrics // *J. Phys. Soc. Jpn.*, **56**, pp. 1653-1656 (1987).
- [27] У. Мэзон. *Пьезоэлектрические кристаллы и их применение вуль траакустике*. ИЛ, М. 447 с. (1952).
- [28] Л.А. Шувалов, И.С. Желудев, А.В. Мнацаканян, Ц.Ж. Лупудов, И. Фиала. Сегнетоэлектрические аномалии диэлектрических и пьезоэлектрических свойств кристаллов  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  и  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  // *Изв. АН СССР. сер. физ.*, **31**(11), сс. 1919-1922 (1967).
- [29] Б.А. Струков, А. Баддур, И.А. Величко. О фазовом переходе первого рода в кристаллах  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  // *Физ. твердого тела*, **13**(8), сс. 2484-2485 (1971).
- [30] В. Кенциг. *Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики*. ИЛ, М. 234 с. (1960).
- [31] W. Bantle, C. Caflish. // *Helv. Phys. Acta*, **16**, p. 235 (1943).

- [32] Arx A. Von, W. Bantle. // *Helv. Phys. Acta*, **16**, p. 211 (1943).
- [33] Ф. Иона, Д. Ширанэ. Сегнетоэлектрические кристаллы. - Мир, М. 555 с. (1965).
- [34] L.A. Shuvalov, A.V. Mnatsakanyan. The elastic properties of KD<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> crystals over a wide temperature range. // *Sov. Phys. Crystall.*, **11**(2), pp. 210-212 (1966).
- [35] Л.П. Переверзева. Особенности дисперсии  $\epsilon$  в сегнетоэлектриках с фазовым переходом типа порядок-беспорядок // *Изв. АН СССР, сер. физ.*, **35**(12), сс. 2613-2614 (1971).
- [36] E.M. Brody, H.Z. Cummins. Brillouin-Scattering Study of the Ferroelectric Transition in KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> // *Phys. Rev. Lett.*, **21**, p. 1263 (1968).
- [37] C.W. Garland, D.B. Novotny. Ultrasonic velocity and attenuation in KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> // *Phys. Rev.*, **177**(2), pp. 971-975 (1969).

R.R. Levitsky<sup>1</sup>, I.R. Zacheck<sup>2</sup>, A.S. Vdovych<sup>1</sup>

## Static Dielectric, Piezoelectric and Elastic Properties of Ferroelectrics KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> and K(H<sub>0.12</sub>D<sub>0.88</sub>)<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>

<sup>1</sup>Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, 1 Svientsitskii Str., 79011, Lviv, Ukraine  
<sup>2</sup>National University "Lvivska Politechnika" 12 S. Bandera Str., 79013, Lviv, Ukraine

Within modified proton ordering model of KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> family ferroactive compounds with taking into account linear on strains  $\epsilon_6$  and  $\epsilon_4$  contributions into energy of proton system, but without taking into account tunneling, within the four-particle cluster approximation static dielectric, piezoelectric and elastic characteristics of KD<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> type ferroelectrics are studied and calculated. At the proper set of the parameters good quantitative description of the corresponding experimental data for K(H<sub>0.12</sub>D<sub>0.88</sub>)<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> and KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> is obtained.

**Key words:** ferroelectrics, cluster approximation, dielectric permittivity, piezoelectric modules, elastic constant.