

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Роман Романович Левицький
Ігор Романович Зачек
Андрій Степанович Вдович

ПОПЕРЕЧНІ СТАТИЧНІ ДІЕЛЕКТРИЧНІ, П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНІ, ПРУЖНІ, ЕЛЕКТРОСТРИКЦІЙНІ ТА ДИНАМІЧНІ ДІЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ АНТИСЕГНЕТОЕЛЕКТРИКІВ ТИПУ $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$

Роботу отримано 30 грудня 2008 р.

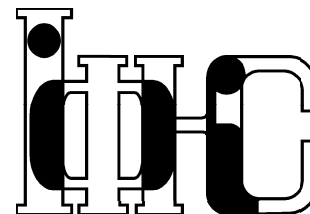
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом теорії модельних спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-08-20U

Р.Р.Левицький, І.Р.Зачек, А.С.Вдович

ПОПЕРЕЧНІ СТАТИЧНІ ДІЕЛЕКТРИЧНІ,
П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНІ, ПРУЖНІ, ЕЛЕКТРОСТРИКЦІЙНІ ТА
ДИНАМІЧНІ ДІЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ
АНТИСЕГНЕТОЕЛЕКТРИКІВ ТИПУ $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$

ЛЬВІВ

УДК: 538.951, 538.956, 537.9

PACS: 77.22.Ch, 77.22.Gm, 77.65.Bn 77.84.Fa, 77.65.Fs

Поперечні статичні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні, електрострикційні та динамічні діелектричні властивості антисегнетоелектриків типу $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$

Р.Р.Левицький, І.Р.Зачек, А.С.Вдович

Анотація. У рамках модифікованої моделі протонного впорядкування сегнетоактивних сполук сім'ї KN_2PO_4 з врахуванням лінійного за деформацією ε_4 вкладу в енергію протонної системи, але без врахування тунелювання в наближенні чотиричастинкового кластера досліджено поперечні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні та динамічні характеристики антисегнетоелектриків типу $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$. Розраховано також коефіцієнт поглинання та швидкість звуку в цих кристалах. При належному виборі параметрів теорії в параелектричній фазі отримано добрий кількісний опис наявних експериментальних даних для $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ та $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$.

Transverse static dielectric, piezoelectric, elastic, electrostrictive and dynamic dielectric properties of $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ type antiferroelectrics

R.R.Levitsky, I.R.Zachek, A.S.Vdovych

Abstract. Within modified proton ordering model of ferroelectric compounds of KN_2PO_4 family with taking into account linear on strain ε_6 contribution into energy of proton subsystem, but without taking into account tunneling, within the four-particle cluster approximation we study transverse dielectric, piezoelectric, elastic and dynamic characteristics of $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ type antiferroelectrics. Sound velocity and sound attenuation in crystals are calculated. At the proper set of the parameters of theory in paraelectric phase correct quantitative description of the available experimental data for $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ and $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ is obtained.

Подається в Журнал фізичних досліджень
Submitted to Journal of Physical Studies

© Інститут фізики конденсованих систем 2008
Institute for Condensed Matter Physics 2008

1. Вступ

В роботі [1] в рамках модифікованої моделі протонного впорядкування сегнетоактивних сполук сім'ї KN_2PO_4 з врахуванням лінійного за деформацією ε_6 внеску в енергію протонної системи, але без врахування тунелювання протонів на водневих зв'язках, в наближенні чотиричастинкового кластера досліджено фазовий перехід, термодинамічні та позовжні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні та динамічні властивості антисегнетоелектриків типу $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$. Розраховано їх квадратичні п'єзоелектричні і пружні характеристики, коефіцієнти електрострикції, а також швидкість та коефіцієнт поглинання звуку в цих кристалах. Проведено ґрунтовний числовий аналіз отриманих результатів. При належному виборі мікропараметрів отримано добрий кількісний опис відповідних експериментальних даних для $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ та $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ в параелектричній фазі.

В роботах [2,3] досліджена модифікована модель протонного впорядкування з врахуванням лінійних за деформаціями ε_4 і ε_5 внеску в енергію протонної системи. В роботі [2] в наближенні чотиричастинкового кластера з врахуванням короткосяжної і далекосяжної взаємодії та тунелювання в параелектричній фазі розраховано поперечні діелектричні, п'єзоелектричні та пружні характеристики сегнетоелектрика KN_2PO_4 і антисегнетоелектрика $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$. При належному виборі параметрів теорії досягнуто доброї згоди теоретичних результатів з відповідними експериментальними даними. Пізніше в роботі [3] на основі модифікованої моделі протонного впорядкування без врахування тунелювання була розвинена теорія поперечних діелектричних, п'єзоелектричних, пружних та динамічних властивостей сегнетоелектриків типу KN_2PO_4 . Розраховано також коефіцієнт поглинання та швидкість звуку в цих кристалах. Розрахунок фізичних характеристик частково дейтерованих кристалів $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ проведено в наближенні середнього кристалу. Знайдено оптимальні набори мікропараметрів, які забезпечують добрий кількісний опис наявних експериментальних даних для сегнетоелектриків типу $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$.

Дана робота присвячена дослідженню в рамках запропонованої в роботах [2, 3] модифікованої протонної моделі поперечних діелектричних, п'єзоелектричних, пружних та динамічних характеристик антисегнетоелектриків типу $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$. Розраховано також коефіцієнт поглинання та швидкість звуку в цих кристалах. Буде проведено ґрунтовний числовий аналіз отриманих результатів та порівняння їх з відповідними експериментальними результатами.

2. Гамільтоніан кристалу

Будемо розглядати систему дейтронів, що рухаються на O-D...O зв'язках у дейтерованих антисегнетоелектричних ортофосфатах (ДАСОФ). Примітивна комірка гратки Браве ДАСОФ складається з двох тетраедрів PO_4 з чотирма водневими зв'язками, що відносяться до одного з них (тетраедра типу "А"), а водневі зв'язки, що підходять до другого тетраедра (типу "В"), належать чотирьом найближчим структурним елементам, які його оточують. На рис. 1 ①, ②, ③ і ④ – водневі зв'язки, 1, 2 – положення дейтронів на зв'язках.

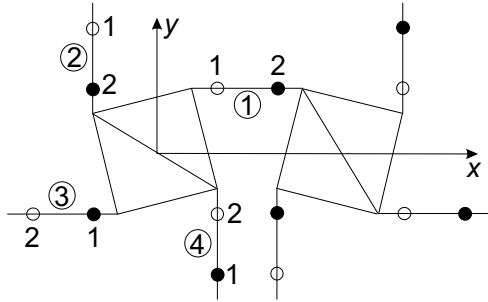


Рис. 1. ①, ②, ③, ④ нумерують водневі зв'язки, а 1, 2 – можливі положення дейтронів на цих зв'язках. Показано одну з числа можливих антисегнетоелектричних дейтронних конфігурацій.

В основному стані, який реалізується в DADP, у площині ab , має місце наступна конфігурація дейтронів (рис. 1). Спонтанна поляризація в кристалі дорівнює нулеві внаслідок антиполярного розміщення дипольних моментів зв'язків.

Гамільтоніан дейтронної системи ДАСОФ з врахуванням короткосяжних і далекосяжних взаємодій і при прикладанні зовнішнього поля E_1 вздовж a -осі кристалу і напруги $\sigma_{yz} = \sigma_4$ має такий вигляд:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= H_{11}^0 + H_{s1} = \\ &= N \frac{\bar{v}}{2} c_{11}^{E0} \varepsilon_1^2 + N \bar{v} c_{12}^{E0} \varepsilon_1 \varepsilon_2 + N \bar{v} c_{13}^{E0} \varepsilon_1 \varepsilon_3 + N \frac{\bar{v}}{2} c_{22}^{E0} \varepsilon_2^2 + N \bar{v} c_{23}^{E0} \varepsilon_2 \varepsilon_3 + \\ &+ N \frac{\bar{v}}{2} c_{11}^{E0} \varepsilon_3^2 + N \frac{\bar{v}}{2} c_{44}^{E0} \varepsilon_4^2 - N \bar{v} e_{14}^0 E_1 \varepsilon_4 - N \frac{\bar{v}}{2} \chi_{11}^{\varepsilon 0} E_1^2 + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{qq'} J_{ff'}(qq') \frac{\langle \sigma_{qf} \rangle}{2} \frac{\langle \sigma_{q'f'} \rangle}{2} + H_{\text{к.в.}}(4) - \sum_{qf} (2\mu F_{qf}(4) + \mu_{f1} E_1) \frac{\sigma_{qf}}{2}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

У (2.1) перші дев'ять доданків – це “затравочна” частина гамільтоніану, яка не залежить від конфігурації дейтронної підсистеми і відповідає гратці важких іонів. “Затравочна” енергія, що виражається через деформації $\varepsilon_4, \varepsilon_i$, та електричне поле E_1 , складається із пружної, п'єзоелектричної і діелектричної частин. $c_{ij}^{E0}, e_{14}^0, \chi_{11}^{\varepsilon 0}$ – “затравочні” пружні сталі, коефіцієнт п'єзоелектричної напруги і діелектрична сприйнятливність; $\bar{v} = \frac{v}{k_B}$, v – об'єм примітивної комірки, k_B – стала Больцмана, N – кількість примітивних комірок.

Вирази $2\mu F_{qf}(4)$ – внутрішні поля, які включають як враховану в наближенні молекулярного поля ефективну далекосяжну взаємодію між дейтронами, що включає і непряму взаємодію дейтронів через коливання гратки, так і додаткові внутрішні поля, які зв'язані з деформацією ε_4 ,

$$\begin{aligned} 2\mu F_{q_3^1}(4) &= \mp 2\nu_a(\mathbf{k}^z) \eta^{(1)} e^{i\mathbf{k}^z \mathbf{a}_q} \mp 2\nu_a(0) \eta_{13}^{(1)x} \mp 2\psi \varepsilon_4, \\ 2\mu F_{q_4^2}(4) &= \pm 2\nu_a(\mathbf{k}^z) \eta^{(1)} e^{i\mathbf{k}^z \mathbf{a}_q} \pm 2\nu_a(0) \eta_{24}^{(1)x}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

σ_{qf} – оператор z -компоненти псевдоспіна дейтрона, що знаходиться в q -ій комірці на f -ому зв'язку ($\sigma_{qf} = \pm 1$).

В (2.2) враховано, що унарні функції розподілу дейтронів можна записати у вигляді суми модульованої частини та однорідних доданків, що зумовлені зовнішнім полем E_1 , та використано наступні позначення:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{q1} \rangle &= -\eta^{(1)} e^{i\mathbf{k}^z \mathbf{a}_q} - \eta_{13}^{(1)x}, & \langle \sigma_{q2} \rangle &= \eta^{(1)} e^{i\mathbf{k}^z \mathbf{a}_q} + \eta_{24}^{(1)x}, \\ \langle \sigma_{q3} \rangle &= \eta^{(1)} e^{i\mathbf{k}^z \mathbf{a}_q} + \eta_{13}^{(1)x}, & \langle \sigma_{q4} \rangle &= -\eta^{(1)} e^{i\mathbf{k}^z \mathbf{a}_q} - \eta_{24}^{(1)x}. \end{aligned}$$

$$\nu_a(\mathbf{k}^z) = \nu_a^{(0)}(\mathbf{k}^z) + \sum_i \psi_{a_i}(\mathbf{k}^z) \varepsilon_i, \quad \nu_a(0) = \nu_a^{(0)}(0) + \sum_i \psi_{a_i}(0) \varepsilon_i,$$

де

$$\begin{aligned} 4\nu_a^{(0)}(\mathbf{k}^z) &= J_{11}(\mathbf{k}^z) - J_{13}(\mathbf{k}^z), & 4\psi_{a_i}(\mathbf{k}^z) &= \psi_{11}(\mathbf{k}^z) - \psi_{13}(\mathbf{k}^z), \\ J_{ff'}(\mathbf{k}^z) &= \sum_{\mathbf{a}_q - \mathbf{a}_{q'}} J_{ff'}(qq') e^{-i\mathbf{k}^z (\mathbf{a}_q - \mathbf{a}_{q'})}, \\ \psi_{ff'}(\mathbf{k}^z) &= \sum_{\mathbf{a}_q - \mathbf{a}_{q'}} \psi_{ff'}(qq') e^{-i\mathbf{k}^z (\mathbf{a}_q - \mathbf{a}_{q'})}, \end{aligned}$$

а $\mathbf{k}^z = 1/2(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3)$, $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ – вектори оберненої гратки, $e^{i\mathbf{k}^z \mathbf{a}_q} = \pm 1$, ψ_4, ψ_{4i} – деформаційні потенціали. В (2.2) далекосяжна взаємодія $J_{ff'}(qq')$ розкладена в ряд за деформаціями ε_i , обмежуючись

лінійними доданками:

$$J_{ff'}(qq') = J_{ff'}^0(qq') + \sum_i \psi_{ff'}(qq') \varepsilon_i.$$

У (2.1) $H_{к.в.}(4)$ – гамільтоніан короткосяжних конфігураційних взаємодій між дейтронами поблизу тетраедра PO_4 . При прикладанні до кристалу механічної напруги σ_4 і при деформаціях ε_i енергії конфігурацій дейтронів розщеплюються (табл. I) (див. [2]).

Гамільтоніан короткосяжних взаємодій представимо в наступному вигляді:

$$\begin{aligned} H_{к.в.}(4) = & \sum_q \left\{ \frac{1}{2} (\delta_{a4} \varepsilon_4 + \delta_{14} \varepsilon_4) \left(-\frac{\sigma_{q1}}{2} + \frac{\sigma_{q3}}{2} \right) + \right. \\ & + 2(\delta_{a4} \varepsilon_4 - \delta_{14} \varepsilon_4) \left(\frac{\sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q4}}{2} - \frac{\sigma_{q1} \sigma_{q3} \sigma_{q4}}{2} \right) + \\ & + V_a \left(\frac{\sigma_{q1} \sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q3} \sigma_{q4}}{2} - \frac{\sigma_{q2} \sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q4} \sigma_{q1}}{2} \right) + \\ & \left. + U_a \left(\frac{\sigma_{q1} \sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q2} \sigma_{q4}}{2} \right) + \Phi_a \frac{\sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q3} \sigma_{q4}}{2} \right. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Тут використані наступні позначення:

$$\begin{aligned} V_a &= \frac{1}{2} \varepsilon' - \frac{1}{2} w'_1 + \frac{1}{2} \sum_i \delta_{si} \varepsilon_i - \frac{1}{2} \sum_i \delta_{0i} \varepsilon_i, \\ U_a &= \frac{1}{2} \varepsilon' + \frac{1}{2} w'_1 + \frac{1}{2} \sum_i \delta_{si} \varepsilon_i + \frac{1}{2} \sum_i \delta_{0i} \varepsilon_i, \\ \Phi_a &= 2\varepsilon' - 8w'_1 + 2w'_1 + 2 \sum_i \delta_{si} \varepsilon_i - 8 \sum_i \delta_{1i} \varepsilon_i + 2 \sum_i \delta_{0i} \varepsilon_i. \end{aligned} \quad (2.4)$$

де

$$\begin{aligned} \varepsilon' &= \varepsilon_s - \varepsilon_a, \quad \delta_{si} = \bar{\delta}_{si} - \bar{\delta}_{ai}, \\ w'_1 &= \varepsilon_1 - \varepsilon_a, \quad \delta_{1i} = \bar{\delta}_{1i} - \bar{\delta}_{ai}, \\ w'_1 &= \varepsilon_0 - \varepsilon_a, \quad \delta_{1i} = \bar{\delta}_{1i} - \bar{\delta}_{ai}, \end{aligned}$$

де ε_s , ε_a , ε_1 , ε_0 – конфігураційні енергії дейтронів біля тетраедра PO_4 , а ε' , w'_1 , w'_1 – антисегнетоелектричні енергії розширеної моделі Слетера-Такагі [4].

Термодинамічні та динамічні характеристики ДАСОФ будемо розраховувати в наближенні чотиричастинкового кластера. Гамільтоніан (2.1) запишемо тепер у такому вигляді:

$$\hat{H} = N \frac{\bar{v}}{2} \left(\sum_{ij} c_{ij}^{0E} \varepsilon_i \varepsilon_j + c_{44}^{E0} \right) - N \bar{v} e_{14}^0 \varepsilon_4 E_1 - N \frac{\bar{v}}{2} \chi_{11}^{\varepsilon_0} E_1^2 +$$

Табл. 1. Енергії конфігурацій дейтронів поблизу тетраедра PO_4 кристалу типу $NH_4H_2PO_4$

i		$\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4$	E_{i4}	i		$\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4$	E_{i4}
1		++++	$\varepsilon_s + \sum_{i=1}^3 \bar{\delta}_{si} \varepsilon_i$	9		----+	$\varepsilon_1 + \sum_{i=1}^3 \bar{\delta}_{1i} \varepsilon_i$
2		----		10		---+-	$\varepsilon_1 + \sum_{i=1}^3 \bar{\delta}_{1i} \varepsilon_i + \bar{\delta}_{14} \varepsilon_4$
3		+--+	$\varepsilon_0 + \sum_{i=1}^3 \bar{\delta}_{0i} \varepsilon_i$	11		-+---	$\varepsilon_1 + \sum_{i=1}^3 \bar{\delta}_{1i} \varepsilon_i$
4		-+--		12		+----	$\varepsilon_1 + \sum_{i=1}^3 \bar{\delta}_{1i} \varepsilon_i - \bar{\delta}_{14} \varepsilon_4$
5		+-+-	$\varepsilon_a + \sum_{i=1}^3 \bar{\delta}_{ai} \varepsilon_i - \bar{\delta}_{a4} \varepsilon_4$	13		+++--	$\varepsilon_1 + \sum_{i=1}^3 \bar{\delta}_{1i} \varepsilon_i - \bar{\delta}_{14} \varepsilon_4$
6		---++		$\varepsilon_a + \sum_{i=1}^3 \bar{\delta}_{ai} \varepsilon_i + \bar{\delta}_{a4} \varepsilon_4$	14		+++-
7		-++-	$\varepsilon_a + \sum_{i=1}^3 \bar{\delta}_{ai} \varepsilon_i + \bar{\delta}_{a4} \varepsilon_4$		15		-+++
8		+-+-		$\varepsilon_a + \sum_{i=1}^3 \bar{\delta}_{ai} \varepsilon_i - \bar{\delta}_{a4} \varepsilon_4$	16		+--+

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{qq' \\ ff'}} J_{ff'}(qq') \frac{\langle \sigma_{qf} \rangle}{2} \frac{\langle \sigma_{q'f'} \rangle}{2} + \sum_q \hat{H}_q^{(4)}(4),$$

де

$$\begin{aligned} \hat{H}_q^{(4)}(4) &= \frac{1}{4}V_a(\sigma_{q1}\sigma_{q2} + \sigma_{q2}\sigma_{q3} + \sigma_{q3}\sigma_{q4} + \sigma_{q4}\sigma_{q1}) + \\ &+ \frac{1}{4}U_a(\sigma_{q1}\sigma_{q3} + \sigma_{q2}\sigma_{q4}) + \frac{1}{16}\Phi_a\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4} + \\ &+ \frac{1}{4}(\delta_{a4} - \delta_{14})\varepsilon_4(\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q4} - \sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}) + \\ &+ \frac{1}{4}(\delta_{a4} + \delta_{14})\varepsilon_4(-\sigma_{q1} + \sigma_{q3}) - \sum_{f=1}^4 \frac{x_{qf4}}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2} \end{aligned} \quad (2.5)$$

– чотиричастинковий кластерний гамільтоніан. Тут

$$\begin{aligned} x_{q13} &= -x_{q14} = x_{q34} = \\ &= \beta \left[-\Delta_{q13}^a + 2\nu_a(\mathbf{k})\eta_q^{(1)x} + 2\nu_a(0)\eta_{13}^{(1)x} + 2\psi_4\varepsilon_4 + \beta\mu_1 E_1 \right], \quad (2.6) \\ x_{q24} &= x_{q24} = -x_{q44} = \beta \left[-\Delta_{q24}^a + 2\nu_a(\mathbf{k})\eta_q^{(1)x} + 2\nu_a(0)\eta_{24}^{(1)x} \right], \end{aligned}$$

де Δ_{qf}^a – ефективні поля, створені сусідніми поза межами кластера зв'язками, причому

$$\Delta_{q13}^a = -\Delta_{q1}^a = \Delta_{q3}^a, \quad \Delta_{q24}^a = \Delta_{q2}^a = -\Delta_{q4}^a.$$

Одночастинкові гамільтоніани дейтронів

$$H_{qf}^{(1)}(4) = \frac{\bar{x}_{qf4}}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2}, \quad (2.7)$$

де $\bar{x}_{qf4} = -\beta\Delta_{qf}^a + x_{qf4}$.

У кластерному наближенні ефективні поля Δ_{q13}^a і Δ_{q24}^a , які створюються сусідніми поза межами кластера зв'язками, визначаються з умови самоузгодження: середнє значення псевдоспіна $\langle\sigma_{qf}\rangle$ не повинно залежати від того, за яким розподілом Гіббса (з чотиричастинковим або одночастинковим гамільтоніаном) воно розраховано. Тобто,

$$Sp\{\sigma_{qf}\rho_q^{(4)}\} = Sp\{\sigma_{qf}\rho_{qf}\}, \quad (2.8)$$

де

$$\rho_q^{(4)} = \frac{e^{-\beta\hat{H}_q^{(4)}(4)}}{Sp e^{-\beta\hat{H}_q^{(4)}(4)}}, \quad \rho_{qf} = \frac{e^{-\beta\hat{H}_{qf}^{(1)}(4)}}{Sp e^{-\beta\hat{H}_{qf}^{(1)}(4)}}$$

Унарні функції розподілу псевдоспінів, розраховані на основі гамільтоніану (2.5), мають такий вигляд:

$$\begin{aligned} \langle\sigma_{q13}\rangle &= -\langle\sigma_{q1}\rangle = \langle\sigma_{q3}\rangle = \frac{1}{D_{q4}} \left\{ \text{sh}(x_{q13} + x_{q24} - \beta\delta_{a4}\varepsilon_4) + \right. \\ &\left. + \text{sh}(x_{q13} - x_{q24} - \beta\delta_{a4}\varepsilon_4) + 2bb_1 \text{sh}(x_{q13} - \beta\delta_{14}\varepsilon_4) \right\} = \frac{m_{q13}}{D_{q4}}, \\ \langle\sigma_{q24}\rangle &= \langle\sigma_{q2}\rangle = -\langle\sigma_{q4}\rangle = \frac{1}{D_{q4}} \left\{ \text{sh}(x_{q13} + x_{q24} - \beta\delta_{a4}\varepsilon_4) + \right. \\ &\left. + \text{sh}(x_{q13} - x_{q24} - \beta\delta_{a4}\varepsilon_4) + 2bb_1 \text{sh} x_{q24} \right\} = \frac{m_{q24}}{D_{q4}}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_{q4} &= \text{ch}(x_{q13} + x_{q24} - \beta\delta_{a4}\varepsilon_4) + \text{ch}(x_{q13} - x_{q24} - \beta\delta_{a4}\varepsilon_4) + \\ &+ 2bb_1 \text{ch}(x_{q13} - \beta\delta_{14}\varepsilon_4) + 2bb_1 \text{ch} x_{q24} + aa_s + dd_0, \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} a &= e^{-\beta\varepsilon'}, \quad b = e^{-\beta w'}, \quad d = e^{-\beta w'_1}, \\ a_s &= e^{-\beta \sum_i \delta_{si}\varepsilon_i}, \quad b_1 = e^{-\beta \sum_i \delta_{1i}\varepsilon_i}, \quad d_0 = e^{-\beta \sum_i \delta_{0i}\varepsilon_i}. \end{aligned}$$

Виключаючи з (2.6) параметри Δ_{q13}^a , Δ_{q24}^a , отримуємо

$$\begin{aligned} x_{q13} &= \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta_q^{(1)} + \eta_{13}^{(1)x}}{1 - \eta_q^{(1)} + \eta_{13}^{(1)}} + \\ &+ \beta\nu_a(\mathbf{k}^z)\eta_q^{(1)} + \beta\nu_a(0)\eta_{13}^{(1)x} + \beta\psi_4\varepsilon_4 + \frac{\beta\mu_1}{2} E_1, \\ x_{q24} &= \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta_q^{(1)} + \eta_{24}^{(1)x}}{1 - \eta_q^{(1)} - \eta_{24}^{(1)}} + \beta\nu_a(\mathbf{k}^z)\eta_q^{(1)} + \beta\nu_a(0)\eta_{24}^{(1)x}. \end{aligned}$$

Якщо до кристала не прикладено зовнішнього поля ($E_1 = 0$) і відсутні зовнішні напруги ($\sigma_4 = 0$), то

$$-\langle\sigma_1\rangle = \langle\sigma_2\rangle = \langle\sigma_3\rangle = -\langle\sigma_4\rangle = \eta^{(1)} = \frac{1}{D} (\text{sh} 2x + 2bb_1 \text{sh} x), \quad (2.9)$$

де

$$\begin{aligned} D &= aa_s + \text{ch} 2x + 4bb_1 \text{ch} x + dd_0 + 1, \\ x &= \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta^{(1)}}{1 - \eta^{(1)}} + \beta \left[\nu_a^0(\mathbf{k}^z) + \sum_i \tilde{\psi}_{ai}(\mathbf{k}^z)\varepsilon_i \right] \eta^{(1)}. \end{aligned}$$

3. П'єзоелектричні, діелектричні і пружні властивості ДАСОФ за наявності механічної напруги

σ_4

Діелектричні, п'єзоелектричні і пружні властивості ДАСОФ, які зв'язані з електричним полем E_1 і напругою σ_4 , будемо розглядати, використовуючи термодинамічний потенціал у розрахунку на одну примітивну комірку, який у наближенні чотиричастинкового кластера отримано в такому вигляді:

$$\begin{aligned}
g(4) = & \frac{\bar{v}}{2} c_{44}^{E0} \varepsilon_4^2 + \bar{v} \sum_{ij} c_{ij}^{E0} \varepsilon_i \varepsilon_j - \bar{v} e_{24}^0 \varepsilon_4 E_1 + \frac{\bar{v}}{2} \chi_{11}^{\varepsilon 0} E_1^2 + \\
& + 2T \ln 2 + \left(\tilde{\varepsilon}' + \sum_i \tilde{\delta}_{si} \varepsilon_i \right) - 2 \left(\tilde{w}' + \sum_i \tilde{\delta}_{1i} \varepsilon_i \right) + \quad (3.1) \\
& + 2 \left[\tilde{\nu}_a^{(0)}(\mathbf{k}^z) + \sum_i \tilde{\psi}_{ai}(\mathbf{k}^z) \varepsilon_i \right] \eta^{(1)z} + \\
& + \left[\tilde{\nu}_a^{(0)}(0) + \sum_i \psi_{ai}(0) \varepsilon_i \right] \left(\eta_{13}^{(1)xz} + \eta_{24}^{(1)xz} \right) + \\
& + \left[\tilde{\nu}_a^{(0)}(\mathbf{k}^z) + \sum_i \tilde{\psi}_{ai}(\mathbf{k}^z) \varepsilon_i \right] \eta_q^{(1)} \left(\eta_{13}^{(1)} + \eta_{24}^{(1)} \right) + \\
& + \left[\tilde{\nu}_a^{(0)}(0) + \sum_i \psi_{ai}(0) \varepsilon_i \right] \eta_q^{(1)} \left(\eta_{13}^{(1)x} + \eta_{24}^{(1)x} \right) - \\
& - T \ln \left[1 - \left(\eta_q^{(1)} + \eta_{13}^{(1)x} \right)^2 \right] - T \ln \left[1 - \left(\eta_q^{(1)} + \eta_{24}^{(1)x} \right)^2 \right] - \\
& - 2T \ln D_{q4} - \bar{v} \sigma_4 \varepsilon_4.
\end{aligned}$$

З умов термодинамічної рівноваги

$$\frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g(4)}{\partial \varepsilon_i} \right)_{E_1=0, \sigma_4=0} = 0, \quad \frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g(4)}{\partial \varepsilon_4} \right)_{E_1} = 0, \quad \frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g(4)}{\partial E_1} \right)_{\sigma_4} = -P_1 \quad (3.2)$$

отримуємо (в границі $w'_1 \rightarrow \infty$) наступні результати:

$$\begin{aligned}
0 = & \sum_j c_{ij}^{E0} \varepsilon_j + \frac{\tilde{\delta}_{si}}{\bar{v}} \left(1 + \frac{2aa_s}{D_{q4}} \right) - \frac{2\tilde{\delta}_{1i}}{\bar{v}} \left(1 - \frac{\varkappa_{s1}^b + \varkappa_{s2}^b}{D_{q4}} \right) - \\
& - \frac{2}{\bar{v}} \tilde{\psi}_{ai}(\mathbf{k}^z) \eta^{(1)z} - \frac{1}{\bar{v}} \tilde{\psi}_{ai}(0) \left(\eta_{13}^{(1)x} \right)^2 + \left(\eta_{24}^{(1)x} \right)^2 - \quad (3.3) \\
& - \frac{1}{\bar{v}} \tilde{\psi}_{ai}(\mathbf{k}^z) \eta_q^{(1)} \left(\eta_{13}^{(1)x} + \eta_{24}^{(1)x} \right) - \frac{1}{\bar{v}} \tilde{\psi}_{ai}(0) \eta_q^{(1)} \left(\eta_{13}^{(1)x} + \eta_{24}^{(1)x} \right),
\end{aligned}$$

$$\sigma_4 = c_{44}^{E0} \varepsilon_4 - e_{14}^0 E_1 - 2 \frac{\tilde{\psi}_4}{\bar{v}} \left(\eta_q^{(1)} + \eta_{13}^{(1)x} \right) + \frac{2\tilde{\delta}_{a4}}{\bar{v}} \frac{\varkappa_{qs1}}{D_{q4}} + \frac{2\tilde{\delta}_{14}}{\bar{v}} \frac{\varkappa_{qs1}^b}{D_{q4}}, \quad (3.4)$$

$$P_1 = e_{14}^0 \varepsilon_4 + \chi_{11}^{\varepsilon 0} E_1 + \frac{\mu_1}{\bar{v}} \left(\eta_q^{(1)} + \eta_{13}^{(1)x} \right), \quad (3.5)$$

де використані наступні позначення:

$$\begin{aligned}
\varkappa_{qs1} &= \text{sh}(x_{q13} + x_{q24} - \beta \delta_{a4} \varepsilon_4) \pm \text{sh}(x_{q13} - x_{q24} - \beta \delta_{a4} \varepsilon_4), \\
\varkappa_{qs1}^b &= 2bb_1 \text{sh}(x_{q13} - \beta \delta_{14} \varepsilon_4), \quad \varkappa_{qs2}^b = 2bb_1 \text{sh} x_{q24}.
\end{aligned}$$

За початковий стан кристалу виберемо такий стан, який при температурі $T = T_N + 0$ відповідає нульовій деформації ($\varepsilon_i = 0, \varepsilon_4 = 0$) при нульовому тиску і відсутності зовнішнього поля. Тоді з рівнянь (3.4) знаходимо зв'язок між параметрами $\tilde{\delta}_{si}$ і $\tilde{\delta}_{1i}$:

$$\tilde{\delta}_{1i}^+ = \tilde{\delta}_{si}^+ \frac{2 + 3e^{-\frac{\varepsilon_i^0}{T_N}} + 4e^{-\frac{\tilde{w}'_0}{T_N}}}{4 + 2e^{-\frac{\varepsilon_i^0}{T_N}}}. \quad (3.6)$$

При переході в антисегнетоелектричну фазу в напрямку осей a і b виникає деформація розтягу $\varepsilon_1(T_N) = 2, 7 \cdot 10^{-3}$ і $\varepsilon_2(T_N) = 4 \cdot 10^{-3}$, а в напрямку осі c – деформація стиску $\varepsilon_3(T_N) = -8 \cdot 10^{-3}$ [5]. Тоді із системи рівнянь (3.4) отримуємо рівняння для визначення параметрів $\tilde{\delta}_{1i}$, $\tilde{\delta}_{si}$, $\tilde{\psi}_{ai}(\mathbf{k}^z)$ при $T < T_N$:

$$\begin{aligned}
0 = & c_{i1}^{E0} \varepsilon_1(T_N) + c_{i2}^{E0} \varepsilon_2(T_N) + c_{i3}^{E0} \varepsilon_3(T_N) - \frac{2}{\bar{v}} \tilde{\psi}_{ai}(\mathbf{k}^z) \eta^{(1)2}(T_N) + \\
& + \frac{1}{\bar{v} [\text{ch } 2x(T_N) + 4e^{-\frac{1}{T_N}(\tilde{w}'_0 + \sum_i \tilde{\delta}_{1i} \varepsilon_i(T_N))} \text{ch } x(T_N) + e^{-\frac{1}{T_N}(\tilde{\varepsilon}'_0 + \sum_i \tilde{\delta}_{si} \varepsilon_i(T_N))}]}} \\
& \times \left\{ \tilde{\delta}_{si} [\text{ch } 2x(T_N) + 4e^{-\frac{1}{T_N}(\tilde{w}'_0 + \sum_i \tilde{\delta}_{1i} \varepsilon_i(T_N))}] + 3e^{-\frac{1}{T_N}(\tilde{\varepsilon}'_0 + \sum_i \tilde{\delta}_{si} \varepsilon_i(T_N))} + 1] \right. \\
& \left. - \tilde{\delta}_{1i} [\text{ch } 2x(T_N) + e^{-\frac{1}{T_N}(\tilde{\varepsilon}'_0 + \sum_i \tilde{\delta}_{si} \varepsilon_i(T_N))} + 1] \right\}. \quad (3.7)
\end{aligned}$$

При відсутності зовнішньої напруги σ_4 і при $E_1 = 0$ у ДАСОФ деформація ε_4 дорівнює нулю в пара- і сегнетоелектричних фазах.

Диференціюючи вираз (3.5) за E_1 , знаходимо співвідношення для ізотермічної статичної сприйнятливості ДАСОФ уздовж a -осі у випадку механічно затиснутого недеформованого ($E_1 = 0, \sigma_4 = 0$) кристалу в антисегнетоелектричній фазі:

$$\chi_{11}^{\varepsilon} = \chi_{11}^{\varepsilon 0} + \bar{v} \frac{\mu_1^2}{v^2} \frac{1}{2T} \left[\frac{\varkappa_1^b}{D - 2\varkappa_1^b \varphi_a^\eta(0)} + \frac{\varkappa_2}{D - 2\varkappa_2 \varphi_a^\eta(0)} \right]. \quad (3.8)$$

В параелектричній фазі для χ_{11P}^ε отримується наступний результат

$$\chi_{11P}^\varepsilon = \chi_{11}^{\varepsilon 0} + \bar{v} \frac{\mu_1^2}{v^2} \frac{1}{T} \frac{1+b}{a+2b - \frac{2}{T}(1+b)\bar{\nu}_a^{(0)}(0)}, \quad (3.9)$$

де використані наступні позначення:

$$\begin{aligned} \varkappa_1^b &= 1 + bb_1 \operatorname{ch} x, \\ \varkappa_2 &= \varkappa + \varkappa_2^b = \operatorname{ch} 2x - \eta^{(1)} \operatorname{sh} 2x + bb_1 \operatorname{ch} x - \eta^{(1)} 2bb_1 \operatorname{sh} x, \\ \varphi_a^\eta(0) &= \frac{1}{1 - \eta^{(1)} z} + \beta \nu_a^{(0)}(0). \end{aligned}$$

Відзначимо, що вираз (3.9) узгоджується з відповідним результатом роботи [6], а при $w \rightarrow \infty$ – із даними роботи [7].

Використовуючи вирази (3.5), можна розрахувати ізотермічний коефіцієнт п'єзоелектричної напруги e_{14} недеформованого кристалу при $T < T_N$:

$$e_{14} = e_{14}^0 + \frac{\mu_1}{v} \frac{1}{T} \left[\frac{\tilde{\psi}_4 \varkappa_1^b - \tilde{\delta}_{a4} - \tilde{\delta}_{14} \varkappa^b}{D - 2\varkappa_1^b \varphi_a^\eta(0)} + \frac{\tilde{\psi}_4 \varkappa_2 - \tilde{\delta}_{a4} \varkappa - \tilde{\delta}_{14} \varkappa_2^b}{D - 2\varkappa_2 \varphi_a^\eta(0)} \right], \quad (3.10)$$

де $\varkappa^b = bb_1 \operatorname{ch} x$.

У параелектричній

$$e_{14p} = e_{14}^0 + \frac{\mu_1}{v} \frac{2}{T} \frac{\tilde{\psi}_4(1+b) - \tilde{\delta}_{a4} - \tilde{\delta}_{14}b}{a+2b - \frac{2}{T}(1+b)\nu_a^{(0)}(0)}. \quad (3.11)$$

Із співвідношення (3.4) знаходимо ізотермічну пружну сталу при сталому полі недеформованого кристалу в антисегнетоелектричній фазі в такому вигляді:

$$\begin{aligned} c_{44}^E &= c_{44}^{E0} - \\ &- \frac{2\tilde{\psi}_4 \tilde{\psi}_4 \varkappa_1^b - (\tilde{\delta}_{a4} + \tilde{\delta}_{14} \varkappa^b)}{\bar{v}T} \frac{D - 2\varkappa_1^b \varphi_a^\eta(0)}{D - 2\varkappa_1^b \varphi_a^\eta(0)} - \frac{4\varphi_a^\eta(0)}{\bar{v}T} \frac{(\tilde{\delta}_{a4} + \tilde{\delta}_{14} \varkappa^b)(\tilde{\delta}_{a4} \varkappa + \tilde{\delta}_{14} \varkappa_2^b)}{D[D - 2\varkappa_1^b \varphi_a^\eta(0)]} - \\ &- \frac{2\tilde{\psi}_4 \tilde{\psi}_4 \varkappa_2 - (\tilde{\delta}_{a4} \varkappa + \tilde{\delta}_{14} \varkappa_2^b)}{\bar{v}T} \frac{D - 2\varkappa_2 \varphi_a^\eta(0)}{D - 2\varkappa_2 \varphi_a^\eta(0)} - \frac{4\varphi_a^\eta(0)}{\bar{v}T} \frac{(\tilde{\delta}_{a4} + \tilde{\delta}_{14} \varkappa^b)(\tilde{\delta}_{a4} \varkappa + \tilde{\delta}_{14} \varkappa_2^b)}{D[D - 2\varkappa_2 \varphi_a^\eta(0)]} - \\ &- \frac{2}{\bar{v}DT} \left[\tilde{\delta}_{a4}^2 (\operatorname{ch} 2x + 1) + \tilde{\delta}_{14}^2 2bb_1 \operatorname{ch} x \right] + \\ &+ \frac{2}{\bar{v}D^2T} (\tilde{\delta}_{a4} \operatorname{sh} 2x + \tilde{\delta}_{14} 2bb_1 \operatorname{sh} x)^2, \end{aligned} \quad (3.12)$$

а в параелектричній фазі

$$\begin{aligned} c_{44p}^E &= c_{44}^{E0} - \frac{4\tilde{\psi}_4 \tilde{\psi}_4(1+b) - 2(\tilde{\delta}_{a4} + \tilde{\delta}_{14}b)}{\bar{v}T} \frac{\tilde{\nu}_a^{(0)}(0)}{a+2b - 2(1+b)\frac{\tilde{\nu}_a^{(0)}(0)}{T}} - \\ &- \frac{8}{\bar{v}T} \frac{(\tilde{\delta}_{a4} + \tilde{\delta}_{14}b)^2 \left[1 + \frac{\tilde{\nu}_a^{(0)}(0)}{T} \right]}{(a+4b+2) \left[a+2b - 2(1+b)\frac{\tilde{\nu}_a^{(0)}(0)}{T} \right]} - \frac{4}{\bar{v}T} \frac{\tilde{\delta}_{a4}^2 + \tilde{\delta}_{14}^2 b}{a+4b+2}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Використовуючи вирази (3.8), (3.10) і (3.12) та відомі співвідношення між пружними, діелектричними і п'єзоелектричними характеристиками DADP, отримуємо:

$$\text{ізотермічну сталу п'єзоелектричної напруги} - h_{14} = \frac{e_{14}}{\chi_{11}^\varepsilon};$$

$$\text{ізотермічну пружну сталу при сталій поляризації} - c_{44}^E = c_{44}^E + e_{14}h_{14};$$

$$\text{ізотермічний коефіцієнт п'єзоелектричної деформації} - d_{14} = \frac{e_{14}}{c_{44}^E} = e_{14}s_{44}^E;$$

$$\text{ізотермічну сталу п'єзоелектричної деформації} - g_{14} = \frac{h_{14}}{c_{44}^E};$$

$$\text{ізотермічну діелектричну сприйнятливості при сталому тиску} - \chi_{11}^\sigma = \chi_{11}^\varepsilon + e_{14}d_{14}.$$

4. Квадратичні, пружні, п'єзоелектричні характеристики $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ і коефіцієнти електрострикції

Для розрахунку характеристик, які описують ефекти другого порядку в кристалі, до затравочної частини гамільтоніана (2.1) потрібно дописати такий доданок:

$$H_{21}^0 = N \left\{ \bar{v} \sum_{i=1}^3 c_{44i}^{E0} \varepsilon_4^2 \varepsilon_i - 2\bar{v} \sum_{i=1}^3 e_{14i}^0 E_1 \varepsilon_4 \varepsilon_i - 2\bar{v} \sum_{i=1}^3 H_{i11}^0 \varepsilon_i E_1^2 \right\}, \quad (4.1)$$

де c_{44i}^{E0} – “затравочні” пружні сталі, e_{14i}^0 – “затравочні” квадратичні коефіцієнти п'єзоелектричної напруги, H_{i11}^0 – “затравочні” коефіцієнти електрострикції.

Використовуючи вираз (3.12), можна розрахувати квадратичні пружні сталі. В антисегнетоелектричній фазі співвідношення для c_{44i}^E досить громіздкі і тому наведемо лише результат розрахунку в параелектричній фазі:

$$c_{44i}^E = \left(\frac{\partial \sigma_{44}}{\partial \varepsilon_i} \right)_{E_1} = c_{44i}^{E0} +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{4}{\bar{v}T^2[a+2b-2\beta\nu_a^0(0)(1+b)]^2} \left\{ -\tilde{\psi}_4^2\tilde{\psi}_{ai}(0)(1+b)^2 - \right. \\
& - \tilde{\psi}_4^2 \left[\left(\tilde{\delta}_{si}a + \tilde{\delta}_{1i}2b \right) + \left(\tilde{\delta}_{si} - \tilde{\delta}_{1i} \right) ab \right] + \\
& + 2\tilde{\psi}_4\tilde{\psi}_{ai}(0)(\tilde{\delta}_{a4} + \tilde{\delta}_{14}b)(1+b) + 2\tilde{\psi}_4\beta\nu_a^0(0) \left(\tilde{\delta}_{a4} - \tilde{\delta}_{14} \right) \tilde{\delta}_{1i}b - \\
& - \tilde{\psi}_4 \left[\left(\tilde{\delta}_{si}a + \tilde{\delta}_{1i}2b \right) \tilde{\delta}_{a4} + \left(\tilde{\delta}_{si} - \tilde{\delta}_{1i} \right) ab \right] - 8\tilde{\psi}_{ai}(0)(\tilde{\delta}_{a4} + \tilde{\delta}_{14}b)^2 \left. \right\} + \\
& + \frac{16 \left[1 + \beta\nu_a^0(0) \right] \left(\tilde{\delta}_{a4} + \tilde{\delta}_{14}2b \right) \tilde{\delta}_{14}\tilde{\delta}_{1i}b}{\bar{v}T^2(a+4b+2)[a+2b-2\beta\nu_a^0(0)(1+b)]} - \\
& - \frac{16\beta\nu_a^0(0) \left[1 + \beta\nu_a^0(0) \right] \left(\tilde{\delta}_{a4} + \tilde{\delta}_{14}b \right)^2}{\bar{v}T^2(a+4b+2)^2[a+2b-2\beta\nu_a^0(0)(1+b)]^2} \times \\
& \times \left[\tilde{\delta}_{si}a(1+b) + \tilde{\delta}_{1i}b(6+a+8b) \right] - \\
& - \frac{16 \left[1 + \beta\nu_a^0(0) \right] \left(\tilde{\delta}_{a4} + \tilde{\delta}_{14}b \right)^2}{\bar{v}T^2(a+4b+2)^2[a+2b-2\beta\nu_a^0(0)(1+b)]^2} \times \\
& \times \left[\tilde{\delta}_{si}a(1+a+3b) + \tilde{\delta}_{1i}b(2+3a+3b) \right] + \\
& + \frac{4}{\bar{v}T^2(a+4b+2)^2} \left\{ -\tilde{\delta}_{a4}^2\tilde{\delta}_{si}a - \tilde{\delta}_{14} \left(\tilde{\delta}_{si} - \tilde{\delta}_{1i} \right) ab \right\}.
\end{aligned} \tag{4.2}$$

Взявши до уваги співвідношення (3.10), знаходимо квадратичні коефіцієнти п'єзоелектричної напруги e_{14i} . При $T > T_N$

$$\begin{aligned}
e_{14i} & = e_{14i}^0 + \frac{\mu_1}{v} \frac{1}{T^2[a+2b-2\beta\nu_a^0(0)(1+b)]} \left\{ 2\tilde{\psi}_4\tilde{\psi}_{ai}(0)(1+b)^2 - \right. \\
& - \tilde{\psi}_4 \left[\left(\tilde{\delta}_{si}a + \tilde{\delta}_{1i}2b \right) - \left(\tilde{\delta}_{si} - \left(\tilde{\delta}_{1i} \right) ab \right) \right] - \\
& - 2\tilde{\psi}_{ai}(0) \left(\tilde{\delta}_{a4} + \tilde{\delta}_{14}b \right) (1+b) + 2\beta\nu_a^0(0) \left(\tilde{\delta}_{a4} - \tilde{\delta}_{14} \right) \tilde{\delta}_{1i}b - \\
& - \left[\left(\tilde{\delta}_{si}a + \tilde{\delta}_{1i}2b \right) \tilde{\delta}_{a4} + \left(\tilde{\delta}_{si} - \tilde{\delta}_{1i} \right) \tilde{\delta}_{14}ab \right] \left. \right\}.
\end{aligned} \tag{4.3}$$

На основі співвідношення (3.8) можна розрахувати коефіцієнти електрострикції:

$$\begin{aligned}
H_{i11} & = H_{i11}^0 + \frac{1}{2\bar{v}} \frac{\mu_1^2}{v^2} \frac{1}{T^2[a+2b-2\beta\nu_a^0(0)(1+b)]} \left\{ 2\tilde{\psi}_{ai}(0)(1+b)^2 + \right. \\
& + \left[\left(\tilde{\delta}_{si}a + \tilde{\delta}_{1i}2b \right) + \left(\tilde{\delta}_{si} - \tilde{\delta}_{1i} \right) ab \right] \left. \right\}.
\end{aligned} \tag{4.4}$$

5. Поперечні, динамічні проникності механічно затиснутого і механічно вільного кристалу

Поперечні динамічні характеристики ДАСОФ будемо досліджувати, використовуючи динамічну модель дейтерованих антисегнетоактивних ортофосфатів, що ґрунтується на ідеях стохастичної моделі Глаубера [8]. У рамках цієї моделі часова залежність функцій розподілу дейтронів описується рівняннями такого вигляду:

$$-\alpha \frac{d}{dt} \langle \prod_f \sigma_{qf} \rangle = \sum_{f'} \langle \prod_f \sigma_{qf} \left[1 - \sigma_{qf'} \tanh \frac{1}{2} \beta \varepsilon_{qf}^x \right] \rangle, \tag{5.1}$$

де α – стала, що має розмірність часу і ефективно визначає часову шкалу динамічних процесів; ε_{qf}^x – локальне поле при наявності поля E_1 , що діє на дейтрон f -го зв'язку в q -й комірці, і яке отримуємо із гамільтоніану (2.5). Тоді

$$\begin{aligned}
\tanh \frac{\beta \varepsilon_{q1}^x}{2} & = \tanh \frac{\beta}{2} \left[-\frac{1}{2} V_a \sigma_{q2} - \frac{1}{2} V_a \sigma_{q4} - \frac{1}{2} U_a \sigma_{q3} - \frac{1}{8} \Phi_a \sigma_{q2} \sigma_{q3} \sigma_{q4} \right. \\
& - \frac{1}{2} (\delta_{a4} - \delta_{14}) \varepsilon_4 \sigma_{q2} \sigma_{q4} + \frac{1}{2} (\delta_{a4} + \delta_{14}) \varepsilon_4 - \frac{x_{q13}}{\beta} \left. \right], \\
\tanh \frac{\beta \varepsilon_{q2}^x}{2} & = \tanh \frac{\beta}{2} \left[-\frac{1}{2} V_a \sigma_{q3} - \frac{1}{2} V_a \sigma_{q1} - \frac{1}{2} U_a \sigma_{q4} - \frac{1}{8} \Phi_a \sigma_{q1} \sigma_{q3} \sigma_{q4} \right. \\
& - \frac{1}{2} (\delta_{a4} - \delta_{14}) \varepsilon_4 (\sigma_{q1} \sigma_{q4} - \sigma_{q3} \sigma_{q4}) + \frac{x_{q24}}{\beta} \left. \right], \\
\tanh \frac{\beta \varepsilon_{q3}^x}{2} & = \tanh \frac{\beta}{2} \left[-\frac{1}{2} V_a \sigma_{q4} - \frac{1}{2} V_a \sigma_{q2} - \frac{1}{2} U_a \sigma_{q1} - \frac{1}{8} \Phi_a \sigma_{q2} \sigma_{q3} \sigma_{q4} \right. \\
& + \frac{1}{2} (\delta_{a4} - \delta_{14}) \varepsilon_4 \sigma_{q2} \sigma_{q4} - \frac{1}{2} (\delta_{a4} + \delta_{14}) \varepsilon_4 + \frac{x_{q13}}{\beta} \left. \right], \\
\tanh \frac{\beta \varepsilon_{q4}^x}{2} & = \tanh \frac{\beta}{2} \left[-\frac{1}{2} V_a \sigma_{q1} - \frac{1}{2} V_a \sigma_{q3} - \frac{1}{2} U_a \sigma_{q2} - \frac{1}{8} \Phi_a \sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q3} \right. \\
& + \frac{1}{2} (\delta_{a4} - \delta_{14}) \varepsilon_4 (\sigma_{q2} \sigma_{q3} - \sigma_{q1} \sigma_{q2}) - \frac{x_{q24}}{\beta} \left. \right].
\end{aligned} \tag{5.2}$$

Праві частини кожного з чотирьох співвідношень (5.2) набувають восьми значень і можуть бути записані у такому вигляді:

$$\begin{aligned}
\tanh \frac{\beta}{2} \varepsilon_{q1}^x & = P_{q13}^x \sigma_{q3} + Q_{q13}^x (\sigma_{q2} + \sigma_{q4}) + R_{q13}^x \sigma_{q2} \sigma_{q3} \sigma_{q4} - \\
& - M_{q13}^x (\sigma_{q2} \sigma_{q3} + \sigma_{q3} \sigma_{q4}) - N_{q13}^x \sigma_{q2} \sigma_{q4} - L_{q13}^x,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tanh \frac{\beta}{2} \varepsilon_{q3}^x &= P_{q13}^x \sigma_{q1} + Q_{q13}^x (\sigma_{q2} + \sigma_{q4}) + R_{q13}^x \sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q4} + \\
&+ M_{q13}^x (\sigma_{q1} \sigma_{q2} + \sigma_{q1} \sigma_{q4}) + N_{q13}^x \sigma_{q2} \sigma_{q4} + L_{q13}^x, \\
\tanh \frac{\beta}{2} \varepsilon_{q2}^x &= P_{q24}^x \sigma_{q4} + Q_{q124}^x \sigma_{q1} + Q_{q224}^x \sigma_{q3} + R_{q24}^x \sigma_{q1} \sigma_{q3} \sigma_{q4} + \\
&+ M_{q124}^x \sigma_{q1} \sigma_{q4} + M_{q224}^x \sigma_{q3} \sigma_{q4} + N_{q24}^x \sigma_{q1} \sigma_{q3} + L_{q24}^x, \\
\tanh \frac{\beta}{2} \varepsilon_{q4}^x &= P_{q24}^x \sigma_{q2} + Q_{q124}^x \sigma_{q3} + Q_{q224}^x \sigma_{q1} + R_{q24}^x \sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q3} - \\
&- M_{q124}^x \sigma_{q2} \sigma_{q3} - M_{q224}^x \sigma_{q1} \sigma_{q2} - N_{q24}^x \sigma_{q1} \sigma_{q3} - L_{q24}^x.
\end{aligned} \tag{5.3}$$

Прирівнюючи праві сторони виразів (5.2) і (5.3) і враховуючи, що $\sigma_{qf} = \pm 1$, отримуємо вирази для коефіцієнтів $P_{q13}^x, \dots, L_{q24}^x$ у такому вигляді:

$$\begin{aligned}
P_{q13}^x &= \frac{1}{8} (l_{q113}^x - l_{q213}^x + n_{q113}^x - n_{q213}^x + 2m_{q113}^x - 2m_{q213}^x), \\
Q_{q13}^x &= \frac{1}{8} (l_{q113}^x - l_{q213}^x - n_{q113}^x + n_{q213}^x), \\
R_{q13}^x &= \frac{1}{8} (l_{q113}^x - l_{q213}^x + n_{q113}^x - n_{q213}^x - 2m_{q113}^x + 2m_{q213}^x), \\
N_{q13}^x &= \frac{1}{8} (l_{q113}^x + l_{q213}^x + n_{q113}^x + n_{q213}^x - 2m_{q113}^x - 2m_{q213}^x), \\
M_{q13}^x &= \frac{1}{8} (l_{q113}^x + l_{q213}^x - n_{q113}^x - n_{q213}^x), \\
L_{q13}^x &= \frac{1}{8} (l_{q113}^x + l_{q213}^x + n_{q113}^x + n_{q213}^x + 2m_{q113}^x + 2m_{q213}^x), \\
P_{q24}^x &= \frac{1}{8} (l_{q124}^x - l_{q224}^x + n_{q124}^x - n_{q224}^x + m_{q124}^x - m_{q224}^x + m_{q324}^x - m_{q424}^x), \\
Q_{q124}^x &= \frac{1}{8} (l_{q124}^x - l_{q224}^x - n_{q124}^x + n_{q224}^x + m_{q124}^x + m_{q224}^x - m_{q324}^x - m_{q424}^x), \\
Q_{q224}^x &= \frac{1}{8} (l_{q124}^x - l_{q224}^x - n_{q124}^x + n_{q224}^x - m_{q124}^x - m_{q224}^x + m_{q324}^x + m_{q424}^x), \\
R_{q24}^x &= \frac{1}{8} (l_{q124}^x - l_{q224}^x + n_{q124}^x - n_{q224}^x - m_{q124}^x + m_{q224}^x - m_{q324}^x + m_{q424}^x), \\
N_{q24}^x &= \frac{1}{8} (l_{q124}^x + l_{q224}^x + n_{q124}^x + n_{q224}^x - m_{q124}^x - m_{q224}^x - m_{q324}^x - m_{q424}^x), \\
M_{q124}^x &= \frac{1}{8} (l_{q124}^x + l_{q224}^x - n_{q124}^x - n_{q224}^x + m_{q124}^x - m_{q224}^x - m_{q324}^x + m_{q424}^x), \\
M_{q224}^x &= \frac{1}{8} (l_{q124}^x + l_{q224}^x - n_{q124}^x - n_{q224}^x - m_{q124}^x + m_{q224}^x + m_{q324}^x - m_{q424}^x), \\
L_{q24}^x &= \frac{1}{8} (l_{q124}^x + l_{q224}^x + n_{q124}^x + n_{q224}^x + m_{q124}^x + m_{q224}^x + m_{q324}^x + m_{q424}^x),
\end{aligned} \tag{5.4}$$

де використані наступні позначення:

$$\begin{aligned}
l_{q213}^x &= -l_{q21}^x = l_{q23}^x = \tanh \frac{1}{2} [\mp \beta (\varepsilon' - w') - \beta \delta_{14} \varepsilon_4 + x_{q13}], \\
n_{q213}^x &= -n_{q21}^x = n_{q23}^x = \tanh \frac{1}{2} [\mp \beta (w' - w'_1) - \beta \delta_{14} \varepsilon_4 + x_{q13}], \\
m_{q213}^x &= -m_{q21}^x = m_{q23}^x = \tanh \frac{1}{2} [\mp \beta w' - \beta \delta_{a4} \varepsilon_4 + x_{q13}], \\
l_{q224}^x &= l_{q22}^x = -l_{q24}^x = \tanh \frac{1}{2} [\mp \beta (\varepsilon' - w') + x_{q24}], \\
n_{q224}^x &= n_{q22}^x = -n_{q24}^x = \tanh \frac{1}{2} [\mp \beta (w' - w'_1) + x_{q24}], \\
m_{q224}^x &= m_{q22}^x = -m_{q24}^x = \tanh \frac{1}{2} [\mp \beta w' + \beta (\delta_{a4} - \delta_{14}) \varepsilon_4 + x_{q24}], \\
m_{q224}^x &= m_{q22}^x = -m_{q24}^x = \tanh \frac{1}{2} [\mp \beta w' - \beta (\delta_{a4} - \delta_{14}) \varepsilon_4 + x_{q24}].
\end{aligned}$$

При прикладанні до кристалів ДАСОФ електричного поля E_1 функціям розподілу дейтронів властива така симетрія:

$$\begin{aligned}
\eta_{q13}^{(3)x} &= -\langle \sigma_{q2} \sigma_{q3} \sigma_{q4} \rangle = \langle \sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q4} \rangle, \\
\eta_{q24}^{(3)x} &= \langle \sigma_{q1} \sigma_{q3} \sigma_{q4} \rangle = -\langle \sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q3} \rangle, \\
\eta_{q1}^{(2)x} &= \langle \sigma_{q1} \sigma_{q4} \rangle = \langle \sigma_{q2} \sigma_{q3} \rangle, \\
\eta_{q2}^{(2)x} &= -\langle \sigma_{q1} \sigma_{q2} \rangle = -\langle \sigma_{q3} \sigma_{q4} \rangle, \\
\eta_{q13}^{(2)x} &= -\langle \sigma_{q1} \sigma_{q3} \rangle, \\
\eta_{q24}^{(2)x} &= -\langle \sigma_{q2} \sigma_{q4} \rangle.
\end{aligned} \tag{5.5}$$

Підставляючи вирази (5.3) в систему рівнянь (5.1) і враховуючи симетрію функцій розподілу (5.5), отримуємо замкнену систему рівнянь для залежних від часу функцій розподілу дейтронів ДАСОФ при наявності поля E_1 в такому вигляді:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{q13}^{(1)x} \\ \eta_{q24}^{(1)x} \\ \eta_{q13}^{(3)x} \\ \eta_{q24}^{(3)x} \\ \eta_{q1}^{(2)x} \\ \eta_{q2}^{(2)x} \\ \eta_{q13}^{(2)x} \\ \eta_{q24}^{(2)x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{a}_{q11} & \bar{a}_{q12} & \dots & \bar{a}_{q18} \\ \bar{a}_{q21} & \bar{a}_{q22} & \dots & \bar{a}_{q28} \\ \bar{a}_{q31} & \bar{a}_{q32} & \dots & \bar{a}_{q38} \\ \bar{a}_{q41} & \bar{a}_{q42} & \dots & \bar{a}_{q48} \\ \bar{a}_{q51} & \bar{a}_{q52} & \dots & \bar{a}_{q58} \\ \bar{a}_{q61} & \bar{a}_{q62} & \dots & \bar{a}_{q68} \\ \bar{a}_{q71} & \bar{a}_{q72} & \dots & \bar{a}_{q78} \\ \bar{a}_{q81} & \bar{a}_{q82} & \dots & \bar{a}_{q88} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{q13}^{(1)x} \\ \eta_{q24}^{(1)x} \\ \eta_{q13}^{(3)x} \\ \eta_{q24}^{(3)x} \\ \eta_{q1}^{(2)x} \\ \eta_{q2}^{(2)x} \\ \eta_{q13}^{(2)x} \\ \eta_{q24}^{(2)x} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \bar{a}_{q1} \\ \bar{a}_{q2} \\ \bar{a}_{q3} \\ \bar{a}_{q4} \\ \bar{a}_{q5} \\ \bar{a}_{q6} \\ \bar{a}_{q7} \\ \bar{a}_{q8} \end{pmatrix}. \tag{5.6}$$

Коефіцієнти системи (5.6) мають такий вигляд:

$$\begin{aligned}
\bar{a}_{q11} &= -\frac{1}{\alpha}(1 + P_{q13}^\gamma), \quad \bar{a}_{q12} = 0, \quad \bar{a}_{q13} = \frac{1}{\alpha}R_{q13}^\gamma, \quad \bar{a}_{q14} = 0, \\
\bar{a}_{q15} &= \frac{1}{\alpha}M_{q13}^\gamma, \quad \bar{a}_{q16} = -\frac{1}{\alpha}M_{q13}^\gamma, \quad \bar{a}_{q17} = 0, \quad \bar{a}_{q18} = -\frac{1}{\alpha}N_{q13}^\gamma, \\
\bar{a}_{q21} &= 0, \quad \bar{a}_{q22} = -\frac{1}{\alpha}(1 + P_{q24}^\gamma), \quad \bar{a}_{q23} = 0, \quad \bar{a}_{q24} = \frac{1}{\alpha}R_{q24}^\gamma, \\
\bar{a}_{q25} &= \frac{1}{\alpha}M_{q24}^\gamma, \quad \bar{a}_{q26} = -\frac{1}{\alpha}M_{q24}^\gamma, \quad \bar{a}_{q27} = -\frac{1}{\alpha}N_{q24}^\gamma, \quad \bar{a}_{q28} = 0, \\
\bar{a}_{q31} &= -\frac{1}{\alpha}(2P_{q24}^\gamma - 2R_{q24}^\gamma - R_{q13}^\gamma), \quad \bar{a}_{q32} = 0, \\
\bar{a}_{q33} &= -\frac{1}{\alpha}(3 + P_{q13}^\gamma), \quad \bar{a}_{q34} = 0, \\
\bar{a}_{q35} &= -\frac{1}{\alpha}(M_{q13}^\gamma + N_{q24}^\gamma - L_{q24}^\gamma), \\
\bar{a}_{q36} &= -\frac{1}{\alpha}(-M_{q13}^\gamma + N_{q24}^\gamma - L_{q24}^\gamma), \quad \bar{a}_{q37} = 0, \quad \bar{a}_{q38} = \frac{1}{\alpha}L_{q13}^\gamma, \\
\bar{a}_{q41} &= 0, \quad \bar{a}_{q42} = -\frac{1}{\alpha}(2P_{q13}^\gamma - 2R_{q13}^\gamma - R_{q24}^\gamma), \\
\bar{a}_{q43} &= 0, \quad \bar{a}_{q44} = -\frac{1}{\alpha}(3 + P_{q24}^\gamma), \\
\bar{a}_{q45} &= -\frac{1}{\alpha}(N_{q13}^\gamma - L_{q13}^\gamma + M_{q24}^\gamma), \\
\bar{a}_{q46} &= -\frac{1}{\alpha}(N_{q13}^\gamma - L_{q13}^\gamma - M_{q24}^\gamma), \quad \bar{a}_{q47} = \frac{1}{\alpha}L_{q24}^\gamma, \quad \bar{a}_{q48} = 0, \\
\bar{a}_{q51} &= -\frac{1}{\alpha}(M_{q13}^\gamma + N_{q24}^\gamma - L_{q24}^\gamma), \\
\bar{a}_{q52} &= -\frac{1}{\alpha}(N_{q13}^\gamma - L_{q13}^\gamma + M_{q24}^\gamma), \quad \bar{a}_{q53} = \frac{1}{\alpha}M_{q13}^\gamma, \quad \bar{a}_{q54} = \frac{1}{\alpha}M_{q24}^\gamma, \\
\bar{a}_{q55} &= -\frac{1}{\alpha}(2 - R_{q13}^\gamma - R_{q24}^\gamma), \quad \bar{a}_{q56} = -\frac{1}{\alpha}(P_{q13}^\gamma + P_{q24}^\gamma), \\
\bar{a}_{q57} &= -\frac{1}{\alpha}Q_{q24}^\gamma, \quad \bar{a}_{q58} = -\frac{1}{\alpha}Q_{q13}^\gamma, \\
\bar{a}_{q61} &= \frac{1}{\alpha}(M_{q13}^\gamma - N_{q24}^\gamma + L_{q24}^\gamma), \quad \bar{a}_{q62} = \frac{1}{\alpha}(-N_{q13}^\gamma + L_{q13}^\gamma + M_{q24}^\gamma), \\
\bar{a}_{q63} &= -\frac{1}{\alpha}M_{q13}^\gamma, \quad \bar{a}_{q64} = -\frac{1}{\alpha}M_{q24}^\gamma, \quad \bar{a}_{q65} = -\frac{1}{\alpha}(P_{q13}^\gamma + P_{q24}^\gamma), \\
\bar{a}_{q66} &= -\frac{1}{\alpha}(2 - R_{q13}^\gamma - R_{q24}^\gamma), \quad \bar{a}_{q67} = \frac{1}{\alpha}Q_{q24}^\gamma, \quad \bar{a}_{q68} = -\frac{1}{\alpha}Q_{q13}^\gamma, \\
\bar{a}_{q71} &= \frac{1}{\alpha}2L_{q13}^\gamma, \quad \bar{a}_{q72} = 0, \quad \bar{a}_{q73} = -\frac{1}{\alpha}2N_{q13}^\gamma, \quad \bar{a}_{q74} = 0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{a}_{q75} &= -\frac{1}{\alpha}2Q_{q13}^\gamma, \quad \bar{a}_{q76} = \frac{1}{\alpha}2Q_{q13}^\gamma, \quad \bar{a}_{q77} = -\frac{1}{\alpha}2, \quad \bar{a}_{q78} = \frac{1}{\alpha}2R_{q13}^\gamma, \\
\bar{a}_{q81} &= 0, \quad \bar{a}_{q82} = \frac{1}{\alpha}2L_{q24}^\gamma, \quad \bar{a}_{q83} = 0, \quad \bar{a}_{q84} = -\frac{1}{\alpha}2N_{q24}^\gamma, \\
\bar{a}_{q85} &= -\frac{1}{\alpha}2Q_{q24}^\gamma, \quad \bar{a}_{q86} = \frac{1}{\alpha}2Q_{q24}^\gamma, \quad \bar{a}_{q87} = \frac{1}{\alpha}2R_{q24}^\gamma, \quad \bar{a}_{q88} = -\frac{2}{\alpha}, \\
\bar{a}_{q91} &= \frac{1}{\alpha}L_{q13}^\gamma, \quad \bar{a}_{q92} = \frac{1}{\alpha}L_{q24}^\gamma, \quad \bar{a}_{q93} = -\frac{1}{\alpha}N_{q13}^\gamma, \quad \bar{a}_{q94} = -\frac{1}{\alpha}N_{q24}^\gamma, \\
\bar{a}_{q95} &= \frac{1}{\alpha}(Q_{q13}^\gamma + Q_{q24}^\gamma), \quad \bar{a}_{q96} = -\frac{1}{\alpha}(Q_{q13}^\gamma + Q_{q24}^\gamma), \\
\bar{a}_{q97} &= -\frac{1}{\alpha}2P_{q13}^\gamma, \quad \bar{a}_{q98} = -\frac{1}{\alpha}2P_{q24}^\gamma.
\end{aligned}$$

В одночастинковому наближенні на основі (5.1) отримуємо

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\eta_{q13}^{(1)z} &= -\frac{1}{\alpha}\eta_{q13}^{(1)z} + \frac{1}{\alpha}\tanh\frac{1}{2}\bar{x}_{q13}, \\
\frac{d}{dt}\eta_{q24}^{(1)x} &= -\frac{1}{\alpha}\eta_{q24}^{(1)x} + \frac{1}{\alpha}\tanh\frac{1}{2}\bar{x}_{q24}.
\end{aligned} \tag{5.7}$$

Розглянемо тепер випадок малих відхилень від стану рівноваги і вважатимемо, що кристал механічно вільний. Виділимо в системах (5.6) і (5.7) статичну і динамічну частини. Для того представимо функції розподілу, ефективні поля і деформацію ε_4 у вигляді суми двох доданків: рівноважних частин і їх відхилень від стану рівноваги. Для простоти розгляду динамічних характеристик діагональні деформації ε_i вважатимемо незалежними від часу. Отже,

$$\begin{aligned}
\eta_{q13}^{(1)x} &= \eta_q^{(1)} + \eta_{24t}^{(1)x}, \quad \eta_{q13}^{(3)x} = \eta_q^{(3)} + \eta_{24t}^{(3)x}, \quad \varepsilon_4 = \varepsilon_{4t} \\
x_{q13} &= \tilde{x}_{q13} + x_{13t} + \beta\psi_4\varepsilon_{4t} = -\beta\tilde{\Delta}_{q13}^a + 2\beta\nu_a(\mathbf{k}^z)\eta_q^{(1)} - \\
&\quad -\beta\Delta_{13t}^a + 2\beta\nu_a(0)\eta_{13t}^{(1)x} + \beta\mu_1 E_{1t} + 2\psi_4\varepsilon_{4t}, \\
x_{q24} &= \tilde{x}_{q24} + x_{24t} = -\beta\tilde{\Delta}_{q24}^a + 2\beta\nu_a(\mathbf{k}^z)\eta_q^{(1)} - \\
&\quad -\beta\Delta_{24t}^a + 2\beta\nu_a(0)\eta_{24t}^{(1)x}.
\end{aligned} \tag{5.8}$$

Розкладемо коефіцієнти $P_{q13}^x, \dots, L_{q24}^x$ у ряди за часозалежними доданками. В результаті отримуємо

$$\begin{aligned}
P_{q13}^x &= P^{(0)} + \frac{x_{13t}}{2}P_q^{(1)} + \left(\beta\psi_4P_q^{(1)} - \beta\delta_{14}P_{q14}^{(1)} - \beta\delta_{a4}Q_{qa}^{(1)}\right)\varepsilon_{4t}, \\
Q_{q13}^x &= Q^{(0)} + \frac{x_{13t}}{2}Q_q^{(1)} + \left(\beta\psi_4Q_q^{(1)} - \beta\delta_{14}Q_{q14}^{(1)}\right)\varepsilon_{4t}, \\
R_{q13}^x &= R^{(0)} + \frac{x_{13t}}{2}R_q^{(1)} + \left(\beta\psi_4R_q^{(1)} - \beta\delta_{14}P_{q14}^{(1)} + \beta\delta_{a4}Q_{qa}^{(1)}\right)\varepsilon_{4t},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N_{q13}^x &= N_q^{(0)} + \frac{x_{13t}}{2} N^{(1)} + \left(\beta \psi_4 N^{(1)} - \beta \delta_{14} N_{q14}^{(1)} + \beta \delta_{a4} M_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
M_{q13}^x &= M_q^{(0)} + \frac{x_{13t}}{2} M^{(1)} + \left(\beta \psi_4 M^{(1)} - \beta \delta_{14} M_{q14}^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
L_{q13}^x &= L_q^{(0)} + \frac{x_{13t}}{2} L^{(1)} + \left(\beta \psi_4 L^{(1)} - \beta \delta_{14} N_{q14}^{(1)} - \beta \delta_{a4} M_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
P_{q24}^x &= P^{(0)} + \frac{x_{24t}}{2} P_q^{(1)}, \\
Q_{q124}^x &= Q^{(0)} + \frac{x_{24t}}{2} Q_q^{(1)} + \left(-\beta \delta_{14} Q_{qa}^{(1)} + \beta \delta_{a4} Q_{qa}^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
Q_{q224}^x &= Q^{(0)} + \frac{x_{24t}}{2} Q_q^{(1)} + \left(\beta \delta_{14} Q_{qa}^{(1)} - \beta \delta_{a4} Q_{qa}^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
R_{q24}^x &= R^{(0)} + \frac{x_{24t}}{2} R_q^{(1)}, \\
N_{q24}^x &= N^{(0)} + \frac{x_{24t}}{2} N^{(1)}, \\
M_{q124}^x &= M_q^{(0)} + \frac{x_{24t}}{2} M^{(1)} + \left(-\beta \delta_{14} M_a^{(1)} + \beta \delta_{a4} M_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
M_{q224}^x &= M_q^{(0)} + \frac{x_{24t}}{2} M^{(1)} + \left(\beta \delta_{14} M_a^{(1)} - \beta \delta_{a4} M_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
L_{q24}^x &= L_q^{(0)} + \frac{x_{24t}}{2} L^{(1)}.
\end{aligned} \tag{5.9}$$

Тут використані такі позначення:

$$\begin{aligned}
P^{(0)} &= l_-^{(0)} + n_-^{(0)} + 2m_-^{(0)}, \quad N_q^{(0)} = l_{q+}^{(0)} + n_{q+}^{(0)} - 2m_{q+}^{(0)}, \\
Q^{(0)} &= l_-^{(0)} - n_-^{(0)}, \quad M_q^{(0)} = l_{q+}^{(0)} - n_{q+}^{(0)}, \\
R^{(0)} &= l_-^{(0)} + n_-^{(0)} - 2m_-^{(0)}, \quad L_q^{(0)} = l_{q+}^{(0)} + n_{q+}^{(0)} + 2m_{q+}^{(0)}, \\
P_q^{(1)} &= l_{q-}^{(1)} + n_{q-}^{(1)} + 2m_{q-}^{(1)}, \quad N^{(1)} = l_+^{(1)} + n_+^{(1)} - 2m_+^{(1)}, \\
Q_q^{(1)} &= l_{q-}^{(1)} - n_{q-}^{(1)}, \quad M^{(1)} = l_+^{(1)} - n_+^{(1)}, \\
R_q^{(1)} &= l_{q-}^{(1)} + n_{q-}^{(1)} - 2m_{q-}^{(1)}, \quad L^{(1)} = l_+^{(1)} + n_+^{(1)} + 2m_+^{(1)}, \\
P_{q14}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left(l_{q-}^{(1)} + n_{q-}^{(1)} \right), \quad N_{q14}^{(1)} = \frac{1}{2} \left(l_{q+}^{(1)} + n_{q+}^{(1)} \right), \\
Q_{q14}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left(l_{q-}^{(1)} - n_{q-}^{(1)} \right), \quad M_{q14}^{(1)} = \frac{1}{2} \left(l_{q+}^{(1)} - n_{q+}^{(1)} \right), \\
Q_{qa}^{(1)} &= m_{q-}^{(1)}, \quad M_a^{(1)} = m_+^{(1)},
\end{aligned}$$

де

$$l_{q\mp}^{(0)} = \frac{1}{8} \left\{ \tanh \frac{\beta}{2} \left[-(\varepsilon' - w') + \frac{1}{\beta} x_q \right] \mp \tanh \frac{\beta}{2} \left[(\varepsilon' - w') + \frac{1}{\beta} x_q \right] \right\},$$

$$\begin{aligned}
n_{q\mp}^{(0)} &= \frac{1}{8} \left\{ \tanh \frac{\beta}{2} \left[-(w' - w'_1) + \frac{1}{\beta} x_q \right] \mp \tanh \frac{\beta}{2} \left[(w' - w'_1) + \frac{1}{\beta} x_q \right] \right\}, \\
m_{q\mp}^{(0)} &= \frac{1}{8} \left\{ \tanh \frac{\beta}{2} \left[-w' + \frac{1}{\beta} x_q \right] \mp \tanh \frac{\beta}{2} \left[w' + \frac{1}{\beta} x_q \right] \right\}, \\
l_{q\mp}^{(1)} &= \frac{1}{8} \left\{ \cosh^{-2} \frac{\beta}{2} \left[-(\varepsilon' - w'_1) + \frac{1}{\beta} x_q \right] \mp \cosh^{-2} \frac{\beta}{2} \left[(\varepsilon' - w'_1) + \frac{1}{\beta} x_q \right] \right\}, \\
n_{q\mp}^{(1)} &= \frac{1}{8} \left\{ \cosh^{-2} \frac{\beta}{2} \left[-(w' - w'_1) + \frac{1}{\beta} x_q \right] \mp \cosh^{-2} \frac{\beta}{2} \left[(w' - w'_1) + \frac{1}{\beta} x_q \right] \right\}, \\
m_{q\mp}^{(1)} &= \frac{1}{8} \left\{ \cosh^{-2} \frac{\beta}{2} \left[-w' + \frac{1}{\beta} x_q \right] \mp \cosh^{-2} \frac{\beta}{2} \left[w' + \frac{1}{\beta} x_q \right] \right\}.
\end{aligned}$$

З урахуванням (5.8) і (5.9) із системи рівнянь (5.6) отримуємо дві системи для рівноважних функцій розподілу дейтронів і їх флуктуаційних частин. Перша із них при $E_1 = 0$ має розв'язок:

$$\begin{aligned}
\eta^{(1)} &= \frac{1}{D} (\sinh 2x + 2b \sinh x), \quad \eta^{(3)} = \frac{1}{D} (\sinh 2x - 2b \sinh x), \\
\eta_1^{(2)} &= \frac{1}{D} (\cosh 2x - 1 + a - d), \quad \eta_2^{(2)} = \frac{1}{D} (\cosh 2x - 1 - a + d), \\
\eta_3^{(2)} &= \frac{1}{D} (\cosh 2x + 1 - a - d).
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Вирази (5.10) є внутрікластерними функціями розподілу дейтронів ДАСОФ.

Розглянемо тепер систему рівнянь для залежних від часу функцій розподілу дейтронів механічно вільного кристалу. Підставляючи (5.8) і (5.9) в системи рівнянь (5.6) і (5.7) і виключаючи Δ_{q13t}^a і Δ_{q24t}^a , отримуємо у випадку поля вздовж a -осі наступну систему рівнянь:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{13t}^{(1)x} \\ \eta_{24t}^{(1)x} \\ \eta_{13t}^{(3)x} \\ \eta_{24t}^{(3)x} \\ \eta_{q1t}^{(2)x} \\ \eta_{q2t}^{(2)x} \\ \eta_{q13t}^{(2)x} \\ \eta_{q24t}^{(2)x} \end{pmatrix} = -\frac{\mu_1 E_{1t}}{2k_B T} \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_{q5} \\ a_{q6} \\ a_{q7} \\ 0 \end{pmatrix} - \beta \psi_4 \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_{q5} \\ a_{q6} \\ a_{q7} \\ 0 \end{pmatrix} -$$

$$\begin{aligned}
& -\beta\delta_{14}\varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{141}^{(1)} \\ 0 \\ a_{141}^{(3)} \\ a_{142}^{(1)} \\ a_{q141}^{(2)} \\ a_{q142}^{(2)} \\ a_{q143}^{(2)} \\ 0 \end{pmatrix} - \beta\delta_{a4}\varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{a41}^{(1)} \\ 0 \\ a_{a41}^{(3)} \\ a_{qa42}^{(1)} \\ a_{qa41}^{(2)} \\ a_{qa42}^{(2)} \\ a_{qa43}^{(2)} \\ 0 \end{pmatrix} + \quad (5.11) \\
& + \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} & 0 & a_{q15} & -a_{q15} & 0 & a_{q18} \\ 0 & a_{11} & 0 & a_{13} & a_{q15} & -a_{q15} & a_{q18} & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{q35} & a_{q36} & a_{q37} & a_{q38} \\ a_{32} & a_{31} & a_{34} & a_{33} & a_{q35} & a_{q36} & a_{q38} & a_{q37} \\ a_{q51} & a_{q51} & a_{q53} & a_{q53} & a_{55} & a_{56} & a_{57} & a_{57} \\ a_{q61} & a_{q61} & a_{q63} & a_{q63} & a_{65} & a_{66} & a_{67} & a_{67} \\ a_{q71} & 0 & a_{q73} & 0 & a_{75} & -a_{75} & a_{77} & a_{78} \\ 0 & a_{q71} & 0 & a_{q73} & a_{75} & -a_{75} & a_{78} & a_{77} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{13t}^{(1)x} \\ \eta_{24t}^{(1)x} \\ \eta_{13t}^{(3)x} \\ \eta_{24t}^{(3)x} \\ \eta_{q1t}^{(2)x} \\ \eta_{q2t}^{(2)x} \\ \eta_{q13t}^{(2)x} \\ \eta_{q24t}^{(2)x} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Коефіцієнти системи (5.11) мають такий вигляд:

$$\begin{aligned}
a_{11} &= \frac{1}{\alpha} \left[-(1 + P^{(0)}) + \beta\nu_a(0)X^{(1)} + K^{(1)}\Phi_1 \right], \\
a_{13} &= \frac{1}{\alpha} \left[R^{(0)} - K^{(1)}R^{(0)} \right], \\
a_{q15} &= \frac{1}{\alpha} \left[M_q^{(0)} - K^{(1)}M_q^{(0)} \right], \quad a_{q18} = \frac{1}{\alpha} \left[-N_q^{(0)} - K^{(1)}N_q^{(0)} \right], \\
a_{31} &= \frac{1}{\alpha} \left[-(2P^{(0)} - 3R^{(0)}) + \beta\nu_a(0)X_1^{(3)} + K_1^{(3)}\Phi_1 \right], \\
a_{32} &= \frac{1}{\alpha} \left[\beta\nu_a X_2^{(3)} + K_2^{(3)}\Phi_1 \right], \\
a_{33} &= \frac{1}{\alpha} \left[-(3 + P^{(0)}) - K_1^{(3)}R^{(0)} \right], \quad a_{34} = \frac{1}{\alpha} \left[-K_2^{(3)}R^{(0)} \right], \\
a_{q35} &= \frac{1}{\alpha} \left[-(N_q^{(0)} + M_q^{(0)} - L_q^{(0)}) - (K_1^{(3)} + K_2^{(3)})M_q^{(0)} \right], \\
a_{q36} &= \frac{1}{\alpha} \left[-(N_q^{(0)} - M_q^{(0)} - L_q^{(0)}) + (K_1^{(3)} + K_2^{(3)})M_q^{(0)} \right], \\
a_{q37} &= \frac{1}{\alpha} \left[K_2^{(3)}N_q^{(0)} \right], \quad a_{q38} = \frac{1}{\alpha} \left[L_q^{(0)} + K_1^{(3)}N_q^{(0)} \right], \\
a_{q51} &= \frac{1}{\alpha} \left[-(N_q^{(0)} + M_q^{(0)} - L_q^{(0)}) + \beta\nu_a(0)X_1^{(2)} + K_{q1}^{(2)}\Phi_1 \right],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_{q53} &= \frac{1}{\alpha} \left[M_q^{(0)} - K_{q1}^{(2)}R^{(0)} \right], \quad a_{55} = \frac{1}{\alpha} \left[-2(1 - R^{(0)})2K_{q1}^{(2)}M_q^{(0)} \right], \\
a_{56} &= \frac{1}{\alpha} \left[-2P^{(0)} + 2K_{q1}^{(2)}M_q^{(0)} \right], \quad a_{57} = \frac{1}{\alpha} \left[-Q^{(0)} + K_{q1}^{(2)}N_q^{(0)} \right], \\
a_{q61} &= \frac{1}{\alpha} \left[-(N_q^{(0)} - M_q^{(0)} - L_q^{(0)}) + \beta\nu_a(0)X_2^{(2)} + K_{q2}^{(2)}\Phi_1 \right], \\
a_{q63} &= \frac{1}{\alpha} \left[-M_q^{(0)} - K_{q2}^{(2)}R^{(0)} \right], \quad a_{65} = \frac{1}{\alpha} \left[-2P^{(0)} - 2K_{q2}^{(2)}M_q^{(0)} \right], \\
a_{66} &= \frac{1}{\alpha} \left[-2(1 - R^{(0)}) + 2K_{q2}^{(2)}M_q^{(0)} \right], \quad a_{67} = \frac{1}{\alpha} \left[Q^{(0)} + 2K_{q2}^{(2)}N_q^{(0)} \right], \\
a_{q71} &= \frac{1}{\alpha} \left[2L_q^{(0)} + \beta\nu_a(0)X_3^{(2)} + K_{q3}^{(2)}\Phi_1 \right], \\
a_{q73} &= \frac{1}{\alpha} \left[-2N^{(0)} - K_3^{(2)}R^{(0)} \right], \quad a_{75} = \frac{1}{\alpha} \left[-2Q^{(0)} - K_{q3}^{(3)}M_q^{(0)} \right], \\
a_{77} &= -\frac{2}{\alpha}, \quad a_{78} = \frac{1}{\alpha} \left[2R^{(0)} + K_{q2}^{(3)}N_q^{(0)} \right], \\
a_1 &= \frac{1}{\alpha} K^{(1)}\varphi, \quad a_3 = \frac{1}{\alpha} K_1^{(3)}\varphi, \quad a_4 = \frac{1}{\alpha} K_2^{(3)}\varphi, \\
a_{q5} &= \frac{1}{\alpha} K_{q1}^{(2)}\varphi, \quad a_{q6} = \frac{1}{\alpha} K_{q2}^{(2)}\varphi, \quad a_{q7} = \frac{1}{\alpha} K_{q3}^{(3)}\varphi, \\
a_{141}^{(1)} &= \frac{1}{\alpha} \left[X_{141}^{(1)}(K^{(1)} - 1) \right], \quad a_{a41}^{(1)} = \frac{1}{\alpha} \left[X_{a41}^{(1)}(K^{(1)} - 1) \right], \\
a_{141}^{(3)} &= \frac{1}{\alpha} \left[X_{141}^{(3)}(K_1^{(3)} - 1) \right], \quad a_{a41}^{(3)} = \frac{1}{\alpha} \left[X_{a41}^{(3)}(K_1^{(3)} - 1) \right], \\
a_{142}^{(3)} &= \frac{1}{\alpha} \left[X_{142}^{(3)}(K_2^{(3)} - 1) \right], \quad a_{a42}^{(3)} = \frac{1}{\alpha} \left[X_{a42}^{(3)}(K_2^{(3)} - 1) \right], \\
a_{q141}^{(2)} &= \frac{1}{\alpha} \left[X_{141}^{(2)}(K_{q1}^{(2)} - 1) \right], \quad a_{qa41}^{(2)} = \frac{1}{\alpha} \left[X_{a41}^{(2)}(K_{q1}^{(2)} - 1) \right], \\
a_{q142}^{(2)} &= \frac{1}{\alpha} \left[X_{142}^{(2)}(K_{q2}^{(2)} - 1) \right], \quad a_{qa42}^{(2)} = \frac{1}{\alpha} \left[X_{a42}^{(2)}(K_{q2}^{(2)} - 1) \right], \\
a_{q143}^{(2)} &= \frac{1}{\alpha} \left[X_{143}^{(2)}(K_{q3}^{(2)} - 1) \right], \quad a_{qa43}^{(2)} = \frac{1}{\alpha} \left[X_{a43}^{(2)}(K_{q3}^{(2)} - 1) \right],
\end{aligned}$$

a

$$\begin{aligned}
K^{(1)} &= X^{(1)}(X^{(1)} - 2\varphi)^{-1}, \quad K_1^{(3)} = X_1^{(3)}(X^{(1)} - 2\varphi)^{-1}, \\
K_2^{(3)} &= X_2^{(3)}(X^{(1)} - 2\varphi)^{-1}, \quad K_{q1}^{(2)} = X_{q1}^{(2)}(X^{(1)} - 2\varphi)^{-1}, \\
K_{q2}^{(2)} &= X_{q2}^{(2)}(X^{(1)} - 2\varphi)^{-1}, \quad K_{q3}^{(2)} = X_{q3}^{(2)}(X^{(1)} - 2\varphi)^{-1}, \\
\Phi_1 &= P^{(0)} - \beta\nu_a(0)(X^{(1)} - \varphi), \quad \varphi = \cosh^2 \left(\frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta^{(1)}}{1 - \eta^{(1)}} \right), \\
X^{(1)} &= -P_q^{(1)}\eta_q^{(1)} + R_q^{(1)}\eta_q^{(3)} + M^{(1)}\eta_1^{(2)} - M^{(1)}\eta_2^{(2)} - N^{(1)}\eta_3^{(2)} + L^{(1)},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
X_1^{(3)} &= R_q^{(1)}\eta_q^{(1)} - P_q^{(1)}\eta_q^{(3)} - M^{(1)}\eta_1^{(2)} + M^{(1)}\eta_2^{(2)} + L^{(1)}\eta_3^{(2)} - N^{(1)}, \\
X_2^{(3)} &= -(2P_q^{(1)}2R_q^{(1)})\eta_q^{(1)} - (N^{(1)} - L^{(1)})\eta_1^{(2)} - (N^{(1)} - L^{(1)})\eta_2^{(2)}, \\
X_{q_2}^{(2)} &= (-N^{(1)} - M^{(1)} + L^{(1)})\eta_q^{(1)} + M^{(1)}\eta_q^{(3)} + \\
&+ R_q^{(1)}\eta_1^{(2)} - P_q^{(1)}\eta_2^{(2)} - Q_q^{(1)}\eta_3^{(2)} + Q_q^{(1)}, \\
X_{q_2}^{(2)} &= (-N^{(1)} + M^{(1)} + L^{(1)})\eta_q^{(1)} - M^{(1)}\eta_q^{(3)} - \\
&- P_q^{(1)}\eta_1^{(2)} + R_q^{(1)}\eta_2^{(2)} + Q_q^{(1)}\eta_3^{(2)} - Q_q^{(1)}, \\
X_{q_3}^{(2)} &= 2L^{(1)}\eta_q^{(1)} - 2N^{(1)}\eta_q^{(3)} - 2Q_q^{(1)}\eta_1^{(2)} + \\
&+ 2Q_q^{(1)}\eta_2^{(2)} + 2R_q^{(1)}\eta_3^{(2)} - 2P_q^{(1)}, \\
X_{141}^{(1)} &= P_{q14}\eta_q^{(1)} - P_{q14}\eta_q^{(3)} - M_{14}^{(1)}\eta_1^{(2)} + M_{14}^{(1)}\eta_2^{(2)} + N_{14}^{(1)}\eta_3^{(2)} - N_{14}^{(1)}, \\
X_{141}^{(3)} &= -(P_{q14} - 2Q_{qa}^{(1)})\eta_q^{(1)} + (P_{q14} - Q_{qa}^{(1)})\eta_q^{(3)} + M_{14}^{(1)}\eta_1^{(2)} - \\
&- M_{14}^{(1)}\eta_2^{(2)} - (N_{14}^{(1)} + 2M_a^{(1)})\eta_2^{(3)} + (N_{14}^{(1)} + 2M_a^{(1)}), \\
X_{142}^{(3)} &= 2Q_{qa}^{(1)}\eta_q^{(1)} - M_a^{(1)}\eta_1^{(2)} - M_a^{(1)}\eta_2^{(2)}, \\
X_{q141}^{(2)} &= (M_{14}^{(1)} - M_a^{(1)})\eta_q^{(1)} - (M_{14}^{(1)} + M_a^{(1)})\eta_q^{(3)} - P_{q14}\eta_1^{(2)} + \\
&+ P_{q14}\eta_2^{(2)} + (Q_{q14}^{(1)} + Q_{qa}^{(1)})\eta_2^{(3)} - (Q_{q14}^{(1)} - Q_{qa}^{(1)}), \\
X_{q142}^{(2)} &= -(M_{14}^{(1)} + M_a^{(1)})\eta_q^{(1)} + (M_{14}^{(1)} - M_a^{(1)})\eta_q^{(3)} + P_{q14}\eta_1^{(2)} - \\
&- P_{q14}\eta_2^{(2)} - (Q_{q14}^{(1)} - Q_{qa}^{(1)})\eta_2^{(3)} + (Q_{q14}^{(1)} + Q_{qa}^{(1)}), \\
X_{q143}^{(2)} &= -2N_{14}^{(1)}\eta_q^{(1)} + 2N_{a4}^{(1)}\eta_q^{(3)} + 2Q_{q14}^{(1)}\eta_1^{(2)} - 2Q_{q14}^{(1)}\eta_2^{(2)} - \\
&- 2P_{q14}^{(1)}\eta_2^{(3)} + 2P_{q14}^{(1)}, \\
X_{a41}^{(1)} &= -X_{a41}^{(3)} = Q_{qa}^{(1)}\eta_q^{(1)} + Q_{qa}^{(1)}\eta_q^{(3)} - M_a^{(1)}\eta_3^{(2)} - M_a^{(1)}, \\
X_{a42}^{(3)} &= 2Q_{qa}^{(1)}\eta_q^{(1)} - M_a^{(1)}\eta_1^{(2)} - M_a^{(1)}\eta_2^{(2)}, \\
X_{qa41}^{(2)} &= X_{qa42}^{(2)} = -M_a^{(1)}\eta_q^{(1)} + M_a^{(1)}\eta_{q1}^{(3)} + Q_{qa}^{(1)}\eta_1^{(2)} + \\
&+ Q_{qa}^{(1)}\eta_2^{(2)} - Q_{qa}^{(1)}\eta_3^{(2)} - Q_{qa}^{(1)}, \\
X_{qa43}^{(2)} &= -2M_a^{(1)}\eta_q^{(1)} - 2M_a^{(1)}\eta_q^{(3)} + 2Q_{qa}^{(1)}\eta_3^{(2)} + 2Q_{qa}^{(1)}.
\end{aligned}$$

У параелектричній фазі система рівнянь (5.11) має наступний вигляд:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{13t}^{(1)x} \\ \eta_{13t}^{(3)x} \\ \eta_{13t}^{(3)x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}^P & a_{13}^P \\ a_{31}^P & a_{33}^P \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{13t}^{(1)x} \\ \eta_{13t}^{(3)x} \\ \eta_{13t}^{(3)x} \end{pmatrix} -$$

$$\begin{aligned}
&- \frac{\mu_1 E_{1t}}{2k_B T} \begin{pmatrix} a_1^P \\ a_3^P + a_4^P \end{pmatrix} - \beta \psi_4 \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_1^P \\ a_3^P + a_4^P \end{pmatrix} - \\
&- \beta \delta_{14} \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{141}^{(1)P} \\ a_{141}^{(3)P} \end{pmatrix} - \beta \delta_{a4} \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{a41}^{(2)P} \\ a_{a42}^{(3)P} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \quad (5.12)$$

Перейдемо в системі рівнянь (5.11) до таких величин: $\eta_{\pm t}^{(1)x} = \frac{1}{2}(\eta_{13t}^{(1)x} \pm \eta_{24t}^{(1)x})$, $\eta_{\pm}^{(3)x} = \frac{1}{2}(\eta_{13t}^{(3)x} \pm \eta_{24t}^{(3)x})$, $\eta_{\pm t}^{(2)x} = \frac{1}{2}(\eta_{q13t}^{(2)x} \pm \eta_{q24t}^{(2)x})$. В результаті отримуємо такі дві системи рівнянь:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{+t}^{(1)x} \\ \eta_{+t}^{(3)x} \\ \eta_{1t}^{(2)x} \\ \eta_{2t}^{(2)x} \\ \eta_{+t}^{(2)x} \end{pmatrix} &= - \frac{\mu_1 E_{1t}}{4k_B T} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 + a_4 \\ a_{q5} \\ a_{q6} \\ a_{q7} \end{pmatrix} - \frac{\beta}{2} \psi_4 \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 + a_4 \\ a_{q5} \\ a_{q6} \\ a_{q7} \end{pmatrix} - \\
&- \frac{\beta}{2} \delta_{14} \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{141}^{(1)} \\ a_{141}^{(3)} + a_{142}^{(3)} \\ a_{q141}^{(2)} \\ a_{q142}^{(2)} \\ a_{q143}^{(2)} \end{pmatrix} - \frac{\beta}{2} \delta_{a4} \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{a41}^{(1)} \\ a_{qa41}^{(3)} + a_{qa42}^{(3)} \\ a_{qa41}^{(2)} \\ a_{qa42}^{(2)} \\ a_{qa43}^{(2)} \end{pmatrix} + \\
&+ \begin{pmatrix} a_{11} & a_{13} & a_{q15} & -a_{q15} & a_{q18} \\ a_{31} + a_{32} & a_{33} + a_{34} & a_{q35} & a_{q36} & a_{q37} + a_{q38} \\ a_{q51} & a_{q53} & a_{55} & a_{56} & a_{57} \\ a_{q61} & a_{q63} & a_{65} & a_{66} & a_{67} \\ a_{q71} & a_{q73} & a_{75} & -a_{75} & a_{77} + a_{78} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{+t}^{(1)x} \\ \eta_{+t}^{(3)x} \\ \eta_{1t}^{(2)x} \\ \eta_{2t}^{(2)x} \\ \eta_{+t}^{(2)x} \end{pmatrix},
\end{aligned} \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{-t}^{(1)x} \\ \eta_{-t}^{(3)x} \\ \eta_{-t}^{(2)x} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{13} & a_{q18} \\ a_{31} - a_{32} & a_{33} - a_{34} & a_{q37} - a_{q38} \\ a_{q71} & a_{q73} & a_{77} - a_{78} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{-t}^{(1)x} \\ \eta_{-t}^{(3)x} \\ \eta_{-t}^{(2)x} \end{pmatrix} - \\
&- \frac{\mu_1 E_{1t}}{4k_B T} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 - a_4 \\ a_{q7} \end{pmatrix} - \frac{\beta}{2} \psi_4 \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 - a_4 \\ a_{q7} \end{pmatrix} - \\
&- \frac{\beta}{2} \delta_{14} \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{141}^{(1)} \\ a_{141}^{(3)} - a_{142}^{(3)} \\ a_{q143}^{(3)} \end{pmatrix} - \frac{\beta}{2} \delta_{a4} \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{a41}^{(1)} \\ a_{a41}^{(3)} - a_{a42}^{(3)} \\ a_{qa43}^{(3)} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \quad (5.14)$$

У випадку механічно затиснутого кристалу ($\varepsilon_{4t} = 0$) система рівнянь (5.11) набуває вигляду:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{13t}^{(1)x} \\ \eta_{24t}^{(1)x} \\ \eta_{13t}^{(3)x} \\ \eta_{24t}^{(3)x} \\ \eta_{q1t}^{(2)x} \\ \eta_{q2t}^{(2)x} \\ \eta_{q13t}^{(2)x} \\ \eta_{q24t}^{(2)x} \end{pmatrix} = -\frac{\mu_1 E_{1t}}{2k_B T} \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_{q5} \\ a_{q6} \\ a_{q7} \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} & 0 & a_{q15} & -a_{q15} & 0 & a_{q18} \\ 0 & a_{11} & 0 & a_{13} & a_{q15} & -a_{q15} & a_{q18} & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{q35} & a_{q36} & a_{q37} & a_{q38} \\ a_{32} & a_{31} & a_{34} & a_{33} & a_{q35} & a_{q36} & a_{q38} & a_{q37} \\ a_{q51} & a_{q51} & a_{q53} & a_{q53} & a_{55} & a_{56} & a_{57} & a_{57} \\ a_{q61} & a_{q61} & a_{q63} & a_{q63} & a_{65} & a_{66} & a_{67} & a_{67} \\ a_{q71} & 0 & a_{q73} & 0 & a_{75} & -a_{75} & a_{77} & a_{78} \\ 0 & a_{q71} & 0 & a_{q73} & a_{75} & -a_{75} & a_{78} & a_{77} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{13t}^{(1)x} \\ \eta_{24t}^{(1)x} \\ \eta_{13t}^{(3)x} \\ \eta_{24t}^{(3)x} \\ \eta_{q1t}^{(2)x} \\ \eta_{q2t}^{(2)x} \\ \eta_{q13t}^{(2)x} \\ \eta_{q24t}^{(2)x} \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

Систему рівнянь (5.15) зводимо до неоднорідного диференціального рівняння восьмого порядку відносно $\eta_{13E_1}^{(1)}(t)$, розв'язок якого має наступний вигляд:

$$\eta_{13E_1}^{(1)}(t) = \sum_{i=1}^8 C_i^x \exp\left(-\frac{t}{\tau_i^x}\right) + \frac{\mu_1 E_1(t)}{2k_B T} \frac{p}{\sum_{n=1}^8 (i\omega)^n p_n}, \quad (5.16)$$

де C_i^x – постійні коефіцієнти, τ_i^x – часи релаксації, які визначаються співвідношенням

$$\tau_i^x = -\frac{1}{q_i^x},$$

а q_i^x – корені характеристичного рівняння

$$(q^x)^8 + p_7(q^x)^7 + p_6(q^x)^6 + p_5(q^x)^5 + p_4(q^x)^4 + p_3(q^x)^3 + p_2(q^x)^2 + p_1(q^x) + p_0 = 0. \quad (5.17)$$

У (5.16)

$$p = -\left[(i\omega)^7 p^{(7)} + (i\omega)^6 p^{(6)} + (i\omega)^5 p^{(5)} + (i\omega)^4 p^{(4)} + (i\omega)^3 p^{(3)} + \right.$$

$$\left. + (i\omega)^2 p^{(2)} + (i\omega) p^{(1)} + p^{(0)}\right]. \quad (5.18)$$

Коефіцієнти P_n і $p^{(n)}$ ($n = 1, \dots, 8$) є сумами детермінантів, які отримуються при переході від системи рівнянь (5.15) до диференціального рівняння відносно $\eta_{13}^{(1)}(t)$.

Динамічну сприйнятливість ДАСОФ вздовж a -осі розрахуємо наступним чином:

$$\chi_{11}^\varepsilon(\omega, T) = \lim_{E_1(t) \rightarrow 0} \frac{\mu_1}{v} \frac{d\eta_{13E_1}^{(1)}(t)}{dE_1(t)}. \quad (5.19)$$

У результаті отримаємо

$$\chi_{11}^\varepsilon(\omega, T) = \frac{p}{\sum_{n=1}^8 (i\omega)^n p_n} = \frac{\mu_1^2}{v k_B} \frac{p}{2T} \prod_{n=1}^8 \frac{\tau_n^x}{(1 + i\omega \tau_n^x)} = \sum_{n=1}^8 \frac{\chi_1(n)}{1 + i\omega \tau_n^x}.$$

Комплексна діелектрична проникність дейтронної системи ДАСОФ дорівнює:

$$\varepsilon_{11}^\varepsilon(\omega, T) = 1 + 4\pi \chi_1(\omega, T) = \varepsilon_{11}^{\varepsilon'}(\omega, T) - i\varepsilon_{11}^{\varepsilon''}(\omega, T),$$

де

$$\varepsilon_{11}^{\varepsilon'}(\omega, T) = \varepsilon_{\infty 1} + \sum_{n=1}^8 \frac{4\pi \chi_1(n)}{1 + (\omega \tau_n^x)^2}, \quad \varepsilon_{11}^{\varepsilon''}(\omega, T) = \sum_{n=1}^8 \frac{4\pi \chi_1(n) \omega \tau_n^x}{1 + (\omega \tau_n^x)^2}. \quad (5.20)$$

Тут $\varepsilon_{\infty 1}$ – високочастотний вклад у діелектричну проникність.

У параелектричній фазі система рівнянь для флуктуаційних частин функцій розподілу (5.15) розпадається на три системи рівнянь. Зокрема,

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{13E_1}^{(1)}(t) \\ \eta_{13E_1}^{(3)}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{011}^+ & a_{013}^+ \\ a_{031}^+ & a_{033}^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{13E_1}^{(1)}(t) \\ \eta_{13E_1}^{(3)}(t) \end{pmatrix} - \frac{\mu_1 E_1(t)}{2k_B T} \begin{pmatrix} a_{01}^+ \\ a_{03}^+ \end{pmatrix}. \quad (5.21)$$

Розв'язок системи (5.21) представимо у вигляді

$$\eta_{13E_1}^{(1)}(t) = \sum_{i=1}^2 c_i^x \exp\left(-\frac{t}{\tau_i^{x+}}\right) + \frac{\mu_1 E_1(t)}{2k_B T} \frac{k^x}{(i\omega)^2 + i\omega k_1^x + k_0^x}, \quad (5.22)$$

де

$$\begin{aligned} (\tau_i^{x+})^{-1} &= \frac{1}{2} \left\{ +k_1^x \pm \sqrt{(k_1^x)^2 - 4k_0^x} \right\}, \\ k_1^x &= -(a_{011}^+ + a_{033}^+), \quad k_0^x = \begin{vmatrix} a_{011}^+ & a_{013}^+ \\ a_{031}^+ & a_{033}^+ \end{vmatrix}, \quad k^x = -(i\omega k^{x(1)} + k^{x(0)}), \\ k^{x(1)} &= a_{01}^+, \quad k^{x(0)} = \begin{vmatrix} a_{011}^+ & a_{01}^+ \\ a_{031}^+ & a_{03}^+ \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Діелектрична сприйнятливність у парафазі має такий вигляд

$$\begin{aligned} \chi_{11}^\varepsilon(\omega, T) &= \frac{\mu_1^2}{k_B v} \frac{1}{2T} \frac{k^x}{(i\omega)^2 + i\omega k_1^x + k_0^x} = \quad (5.23) \\ &= \frac{\mu_1^2}{k_B v} \frac{1}{2T} \frac{\tau_1^{x+} \tau_2^{x+} k^x}{(i + i\omega \tau_1^{x+})(1 + i\omega \tau_2^{x+})} = \frac{\chi_1(1)}{1 + i\omega \tau_1^{x+}} + \frac{\chi_1(2)}{1 + i\omega \tau_2^{x+}}. \end{aligned}$$

Тут використані наступні позначення:

$$\begin{aligned} \chi_1(1) &= \frac{\mu_1^2}{k_B v} \frac{1}{2T} \frac{\tau_1^{x+} \tau_2^{x+}}{\tau_2^{x+} - \tau_1^{x+}} \left(-k^{x(1)} + \tau_1^{x+} k^{x(0)} \right), \\ \chi_1(2) &= -\frac{\mu_1^2}{k_B v} \frac{1}{2T} \frac{\tau_1^{x+} \tau_2^{x+}}{\tau_2^{x+} - \tau_1^{x+}} \left(-k^{x(1)} + \tau_2^{x+} k^{x(0)} \right). \quad (5.24) \end{aligned}$$

Тепер запишемо вирази для комплексної діелектричної проникності

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^{\varepsilon'}(\omega, T) &= \varepsilon_{\infty 1} + \frac{4\pi \chi_1(1)}{1 + (\omega \tau_1^{x+})^2} + \frac{4\pi \chi_1(2)}{1 + (\omega \tau_2^{x+})^2}, \\ \varepsilon_1^{\varepsilon''}(\omega, T) &= \frac{4\pi \chi_1(1) \omega \tau_1^{x+}}{1 + (\omega \tau_1^{x+})^2} + \frac{4\pi \chi_1(2) \omega \tau_2^{x+}}{1 + (\omega \tau_2^{x+})^2}, \quad (5.25) \end{aligned}$$

Чисельний аналіз показує, що вирішальний внесок у дисперсію $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$ дає лише одна релаксаційна мода ($\chi_1(1) \gg \chi_1(2)$ при $T < T_N$ і $\chi_1(1) \gg \chi_1(2)$ при $T > T_N$). При цьому з восьми характерних часів в ДАСОФ лише τ_1^x , що відповідає збудженню з максимальним діелектричним вкладом, суттєво залежить від температури.

Розглянемо коливання тонкої квадратної пластинки кристалу ДСОФ, яка вирізана в площині $[1,0,0]$ зі сторонами завдовжки l під дією зовнішніх змінних електричного поля $E_{1t} = E_1 e^{i\omega t}$ або зсувної напруги $\sigma_{4t} = \sigma_4 e^{i\omega t}$. Такі зовнішні поля, окрім зсувної деформації ε_4 , індуюють у кристалі ще й діагональні компоненти тензора деформації ε_i . Однак для простоти розгляду динамічних характеристик будемо нехтувати діагональними деформаціями.

Оскільки зсувна деформація ε_4 визначається зміщеннями u_2 і u_3 , а саме

$$\varepsilon_4 = \frac{\partial u_2}{\partial z} + \frac{\partial u_3}{\partial y}, \quad (5.26)$$

то динаміку деформаційних процесів у кристалі будемо описувати мовою класичних рівнянь руху елементарного об'єму кристалу, які мають наступний вигляд:

$$\rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_4}{\partial z}, \quad \rho \frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_4}{\partial y}, \quad (5.27)$$

де $\rho = 1,804 \text{ г/см}^3$ – густина кристалу $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$.

Враховуючи вираз (3.4) для механічної напруги σ_4 , маємо

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} &= c_{44}^{E0} \frac{\partial \varepsilon_4}{\partial z} - 2 \frac{\tilde{\psi}_4}{\bar{v}} \frac{\partial \eta_{13}^{(1)x}}{\partial z} + \frac{2\tilde{\delta}_{a4}}{\bar{v}} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\varkappa_{qs1}}{D_{q4}} \right) + \frac{2\tilde{\delta}_{14}}{\bar{v}} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\varkappa_{qs1}^b}{D_{q4}} \right), \\ \rho \frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2} &= c_{44}^{E0} \frac{\partial \varepsilon_4}{\partial y} - 2 \frac{\tilde{\psi}_4}{\bar{v}} \frac{\partial \eta_{13}^{(1)x}}{\partial y} + \frac{2\tilde{\delta}_{a4}}{\bar{v}} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\varkappa_{qs1}}{D_{q4}} \right) + \frac{2\tilde{\delta}_{14}}{\bar{v}} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\varkappa_{qs1}^b}{D_{q4}} \right). \quad (5.28) \end{aligned}$$

Оскільки $\varepsilon_4 = \varepsilon_{4t} = \frac{\partial u_{2t}}{\partial z} + \frac{\partial u_{3t}}{\partial y}$, то

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_{2t}}{\partial t^2} &= c_{14} \frac{\partial \varepsilon_{4t}}{\partial z} + c_{24} \frac{\partial}{\partial z} \eta_{13}^{(1)x} + c_{34} \frac{\partial}{\partial z} \eta_{24}^{(1)x}, \\ \rho \frac{\partial^2 u_{3t}}{\partial t^2} &= c_{14} \frac{\partial \varepsilon_{4t}}{\partial y} + c_{24} \frac{\partial}{\partial y} \eta_{13}^{(1)x} + c_{34} \frac{\partial}{\partial y} \eta_{24}^{(1)x}, \quad (5.29) \end{aligned}$$

де використані такі позначення:

$$\begin{aligned} c_{14} &= c_{44}^{E0} + \frac{2\tilde{\psi}_4}{\bar{v}DT} \left[\tilde{\delta}_{a4}(\varkappa + 1) + \tilde{\delta}_{14}(\varkappa_2^b + \varkappa^b) \right] + \\ &+ \frac{2}{\bar{v}D^2T} \left(\tilde{\delta}_{a4} \sinh 2x + \tilde{\delta}_{14} 2bb_1 \sinh x \right)^2 - \\ &- \frac{2}{\bar{v}DT} \left[\tilde{\delta}_{a4}^2 (\cosh + 1) + \tilde{\delta}_{14}^2 2bb_1 \cosh x \right], \\ c_{24} &= -\frac{2\tilde{\psi}_4}{\bar{v}} + \frac{2\varphi_a^\eta(0)}{\bar{v}D} \left[\tilde{\delta}_{a4}(\varkappa + 1) + \tilde{\delta}_{14}(\varkappa_2^b + \varkappa^b) \right], \\ c_{34} &= \frac{2\varphi_a^\eta(0)}{\bar{v}D} \left[\tilde{\delta}_{a4}(\varkappa - 1) + \tilde{\delta}_{14}(\varkappa_2^b - \varkappa^b) \right]. \end{aligned}$$

Розв'язки систем (5.13), (5.11) і (5.29) шукаємо у вигляді гармонічних хвиль:

$$\begin{aligned} \eta_{24t}^{(1)x} &= \eta_{24E}^{(1)x}(y, z)e^{i\omega t}, & \eta_{24t}^{(3)x} &= \eta_{24E}^{(3)x}(y, z)e^{i\omega t}, \\ \eta_{q\frac{1}{2}t}^{(2)x} &= \eta_{q\frac{1}{2}E}^{(2)x}(y, z)e^{i\omega t}, & \eta_{q\frac{13}{24}t}^{(2)x} &= \eta_{q\frac{13}{24}E}^{(2)x}(y, z)e^{i\omega t}, \\ \varepsilon_{4t} &= \varepsilon_{4E}(y, z)e^{i\omega t}, & u_{3t} &= u_{3E}\begin{pmatrix} z \\ y \end{pmatrix} e^{i\omega t}. \end{aligned} \quad (5.30)$$

В результаті отримуємо

$$\begin{aligned} \eta_{24t}^{(1)x} &= \frac{\beta\mu_1}{4} [F_+^{(1)}(\omega) \pm F_-^{(1)}(\omega)] E_1 + \left\{ \frac{\beta\psi_4}{2} [F_+^{(1)}(\omega) \pm F_-^{(1)}(\omega)] + \right. \\ &\left. + \frac{\beta\delta_{14}}{2} [F_{14+}^{(1)}(\omega) \pm F_{14-}^{(1)}(\omega)] + \frac{\beta\delta_{a4}}{2} [F_{a4+}^{(1)}(\omega) \pm F_{a4-}^{(1)}(\omega)] \right\} \varepsilon_{4E}(y, z). \end{aligned} \quad (5.31)$$

Тут використані наступні позначення:

$$\begin{aligned} F_+^{(1)}(\omega) &= \frac{(i\omega)^4 n^{(4)} + (i\omega)^3 n^{(3)} + (i\omega)^2 n^{(2)} + (i\omega) n^{(1)} + n^{(0)}}{(i\omega)^5 + (i\omega)^4 n_4 + (i\omega)^3 n_3 + (i\omega)^2 n_2 + (i\omega) n_1 + n_0}, \\ F_-^{(1)}(\omega) &= \frac{(i\omega)^2 m^{(2)} + (i\omega) m^{(1)} + m^{(0)}}{(i\omega)^3 + (i\omega)^2 m_2 + (i\omega) m_1 + m_0}, \\ F_{14+}^{(1)}(\omega) &= \frac{(i\omega)^4 n_{14}^{(4)} + (i\omega)^3 n_{14}^{(3)} + (i\omega)^2 n_{14}^{(2)} + (i\omega) n_{14}^{(1)} + n_{14}^{(0)}}{(i\omega)^5 + (i\omega)^4 n_4 + (i\omega)^3 n_3 + (i\omega)^2 n_2 + (i\omega) n_1 + n_0}, \\ F_{14-}^{(1)}(\omega) &= \frac{(i\omega)^2 m_{14}^{(2)} + (i\omega) m_{14}^{(1)} + m_{14}^{(0)}}{(i\omega)^3 + (i\omega)^2 m_2 + (i\omega) m_1 + m_0}, \\ F_{a4+}^{(1)}(\omega) &= \frac{(i\omega)^4 n_{a4}^{(4)} + (i\omega)^3 n_{a4}^{(3)} + (i\omega)^2 n_{a4}^{(2)} + (i\omega) n_{a4}^{(1)} + n_{a4}^{(0)}}{(i\omega)^5 + (i\omega)^4 n_4 + (i\omega)^3 n_3 + (i\omega)^2 n_2 + (i\omega) n_1 + n_0}, \\ F_{a4-}^{(1)}(\omega) &= \frac{(i\omega)^2 m_{a4}^{(2)} + (i\omega) m_{a4}^{(1)} + m_{a4}^{(0)}}{(i\omega)^3 + (i\omega)^2 m_2 + (i\omega) m_1 + m_0}. \end{aligned}$$

Враховуючи співвідношення (5.29) і (5.30), отримуємо хвильові рівняння для u_{2E} і u_{3E} у такому вигляді:

$$c_{44}^E(\omega) \frac{\partial^2 u_{2E}}{\partial z^2} + \rho\omega^2 u_{2E} = 0, \quad c_{44}^E(\omega) \frac{\partial^2 u_{3E}}{\partial y^2} + \rho\omega^2 u_{3E} = 0, \quad (5.32)$$

де

$$c_{44}^E(\omega) = c_{44}^{E0} + \frac{2\tilde{\psi}_4}{\bar{v}DT} \left[\tilde{\delta}_{a4}(\varkappa + 1) + \tilde{\delta}_{14}(\varkappa_2^b + \varkappa^b) \right] +$$

$$\begin{aligned} &+ \left\{ -\frac{2\tilde{\psi}_4}{\bar{v}T} + \frac{2\varphi_a^\eta(0)}{\bar{v}DT} \left[\tilde{\delta}_{14}(\varkappa_2^b + \varkappa^b) + \tilde{\delta}_{a4}(\varkappa + 1) \right] \right\} \times \\ &\times \frac{1}{2T} \left\{ \tilde{\psi}_4 \left[F_+^{(1)}(\omega) + F_-^{(1)}(\omega) \right] + \tilde{\delta}_{14} \left[F_{14+}^{(1)}(\omega) + F_{14-}^{(1)}(\omega) \right] + \right. \\ &+ \tilde{\delta}_{a4} \left[F_{a4+}^{(1)}(\omega) + F_{a4-}^{(1)}(\omega) \right] \left. \right\} + \\ &+ \frac{2\varphi_a^\eta(0)}{\bar{v}D} \left[\tilde{\delta}_{a4}(\varkappa - 1) + \tilde{\delta}_{14}(\varkappa_2^b - \varkappa^b) \right] \times \\ &\times \frac{1}{2T} \left\{ \tilde{\psi}_4 \left[F_+^{(1)}(\omega) - F_-^{(1)}(\omega) \right] + \tilde{\delta}_{14} \left[F_{14+}^{(1)}(\omega) - F_{14-}^{(1)}(\omega) \right] + \right. \\ &+ \tilde{\delta}_{a4} \left[F_{a4+}^{(1)}(\omega) - F_{a4-}^{(1)}(\omega) \right] \left. \right\} + \\ &+ \frac{2}{\bar{v}D^2T} \left(\tilde{\delta}_{a4} \sinh 2x + \tilde{\delta}_{14} 2bb_1 \sinh x \right)^2 - \\ &- \frac{2}{\bar{v}DT} \left[\tilde{\delta}_{a4}^2 (\cosh 2x + 1) + \tilde{\delta}_{14}^2 2bb_1 \cosh x \right]. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Рівняння (5.32) перепишемо в такому вигляді:

$$\frac{\partial^2 u_{2E}}{\partial z^2} + k_{4E}^2 u_{2E} = 0, \quad \frac{\partial^2 u_{3E}}{\partial y^2} + k_{4E}^2 u_{3E} = 0, \quad (5.34)$$

де хвильове число

$$k_{4E} = \frac{\omega\sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{44}^E(\omega)}}. \quad (5.35)$$

Шукаючи розв'язки рівнянь (5.34) у вигляді

$$\begin{aligned} u_{2E} &= A_{2E} \cos k_{4E}z + B_{2E} \sin k_{4E}z, \\ u_{3E} &= A_{3E} \cos k_{4E}y + B_{3E} \sin k_{4E}y, \end{aligned}$$

знаходимо, що

$$\begin{aligned} \varepsilon_{4E}(y, z) &= k_{4E} \left[-\left(A_{2E} \sin k_{4E}z + A_{3E} \sin k_{4E}y \right) + \right. \\ &\left. + \left(B_{2E} \cos k_{4E}z + B_{3E} \cos k_{4E}y \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Граничні умови задаємо у такому вигляді:

$$\varepsilon_{4E}(0, 0) = \varepsilon_{4E}(l, l) = \varepsilon_{4E}(0, l) = \varepsilon_{4E}(l, 0) = \varepsilon_{4E}^{(0)}. \quad (5.37)$$

Значення $\varepsilon_{4E}^{(0)}$ отримуємо із виразу (3.4), враховуючи (5.31). В результаті

$$\varepsilon_{4E}^{(0)} = \frac{e_{14}(\omega)}{c_{44}^E(\omega)} E_1, \quad (5.38)$$

де

$$e_{14}(\omega) = e_{14}^0 + \frac{\mu_1}{v} \frac{1}{2T} \left\{ \tilde{\psi}_4 \left[F_+^{(1)}(\omega) + F_-^{(1)}(\omega) \right] + \tilde{\delta}_{14} \left[F_{14+}^{(1)}(\omega) + F_{14-}^{(1)}(\omega) \right] + \tilde{\delta}_{a4} \left[F_{a4+}^{(1)}(\omega) + F_{a4-}^{(1)}(\omega) \right] \right\}. \quad (5.39)$$

Враховуючи граничні умови (5.38), отримуємо, що

$$\varepsilon_{4E}(y, z) = \frac{\varepsilon_{4E}^{(0)}}{2} \left[-\frac{\cos k_{4E}l - 1}{\sin k_{4E}l} (\sin k_{4E}z + \sin k_{4E}y) + (\cos k_{4E}z + \cos k_{4E}y) \right]. \quad (5.40)$$

Використовуючи вираз (3.5), знаходимо, що

$$P_{1t}(x, y) = P_{1E}(y, z) e^{i\omega t}, \quad (5.41)$$

де

$$P_{1E}(y, z) = \tilde{e}_{14}(\omega) \varepsilon_{4E}(y, z) + \chi_{11}^\varepsilon(\omega) E_1,$$

а динамічна сприйнятливість механічно затиснутого кристалу

$$\chi_{11}^\varepsilon(\omega) = \chi_{11}^{\varepsilon 0} + \tilde{v} \frac{\mu_1}{v^2} \frac{1}{4T} \left[F_+^{(1)}(\omega) + F_-^{(1)}(\omega) \right].$$

Оскільки

$$\chi_{11}^\sigma(\omega) = \frac{1}{l^2} \frac{\partial}{\partial E_1} \int_0^l \int_0^l P_{1E}(y, z) dy dz,$$

то динамічна сприйнятливість механічно вільного кристалу

$$\chi_{11}^\sigma(\omega) = \chi_{11}^\varepsilon(\omega) + \frac{1}{R_4(\omega)} \frac{e_{14}^2(\omega)}{c_{44}^{E1}(\omega)}, \quad (5.42)$$

де

$$R_4(\omega) = \frac{2}{k_{4E}} \tanh \frac{k_{4E}l}{2}.$$

Слід відзначити, що при $\omega \rightarrow \infty$ $R_4(\omega) \rightarrow \infty$ і $\chi_{11}^\sigma(\omega) \rightarrow \chi_{11}^\varepsilon(\omega)$.

6. Поглинання і швидкість ультразвуку в кристалах $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$

Дослідимо особливості проходження через кристал $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ ультразвукової хвилі, довжина якої набагато менша від лінійних розмірів зразка. При цьому всі динамічні змінні, а саме параметр порядку, елементарні зміщення залежать лише від координати напрямку поширення хвилі. Якщо тонкі бруски кристалу вирізані вздовж напрямку [100], то вздовж бруска поширюється поперечна ультразвукова хвиля, яка поляризована вздовж [001]. Серед похідних $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ відмінною від нуля є лише $\frac{\partial u_2}{\partial x}$, і тому замість рівнянь (5.13) і (5.14) можна записати наступні рівняння:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{+t}^{(1)x} \\ \eta_{+t}^{(3)x} \\ \eta_{1t}^{(2)x} \\ \eta_{2t}^{(2)x} \\ \eta_{+t}^{(2)x} \end{pmatrix} = -\frac{\beta}{2} \psi_4 \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 + a_4 \\ a_{q5} \\ a_{q6} \\ a_{q7} \end{pmatrix} - \quad (6.1)$$

$$-\frac{\beta}{2} \delta_{14} \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{141}^{(1)} \\ a_{141}^{(3)} + a_{142}^{(3)} \\ a_{q141}^{(2)} \\ a_{q142}^{(2)} \\ a_{q143}^{(2)} \end{pmatrix} - \frac{\beta}{2} \delta_{a4} \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{qa41}^{(1)} \\ a_{qa41}^{(3)} + a_{qa42}^{(3)} \\ a_{qa41}^{(2)} \\ a_{qa42}^{(2)} \\ a_{qa43}^{(2)} \end{pmatrix} +$$

$$+ \begin{pmatrix} a_{11} & a_{13} & a_{q15} & -a_{q15} & a_{q18} \\ a_{31} + a_{32} & a_{33} + a_{34} & a_{q35} & a_{q36} & a_{q37} + a_{q38} \\ a_{q51} & a_{q53} & a_{55} & a_{56} & a_{57} \\ a_{q61} & a_{q63} & a_{65} & a_{66} & a_{67} \\ a_{q71} & a_{q73} & a_{75} & -a_{75} & a_{77} + a_{78} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{+t}^{(1)x} \\ \eta_{+t}^{(3)x} \\ \eta_{1t}^{(2)x} \\ \eta_{2t}^{(2)x} \\ \eta_{+t}^{(2)x} \end{pmatrix},$$

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{-t}^{(1)x} \\ \eta_{-t}^{(3)x} \\ \eta_{-t}^{(2)x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{13} & a_{q18} \\ a_{31} - a_{32} & a_{33} - a_{34} & a_{q37} - a_{q38} \\ a_{q71} & a_{q73} & a_{77} - a_{78} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{-t}^{(1)x} \\ \eta_{-t}^{(3)x} \\ \eta_{-t}^{(2)x} \end{pmatrix} -$$

$$-\frac{\beta}{2} \psi_4 \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 - a_4 \\ a_{q7} \end{pmatrix} - \quad (6.2)$$

$$-\frac{\beta}{2}\delta_{14}\varepsilon_{4t}\begin{pmatrix} a_{141}^{(1)} \\ a_{141}^{(3)} - a_{142}^{(3)} \\ a_{q143}^{(3)} \end{pmatrix} - \frac{\beta}{2}\delta_{a4}\varepsilon_{4t}\begin{pmatrix} a_{a41}^{(1)} \\ a_{a41}^{(3)} - a_{a42}^{(3)} \\ a_{qa43}^{(3)} \end{pmatrix}.$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_{2t}}{\partial t^2} &= c_{14} \frac{\partial \varepsilon_{4t}}{\partial z} + c_{24} \frac{\partial}{\partial z} \eta_{13}^{(1)x} + c_{34} \frac{\partial}{\partial z} \eta_{24}^{(1)x}, \\ \rho \frac{\partial^2 u_{3t}}{\partial t^2} &= c_{14} \frac{\partial \varepsilon_{4t}}{\partial y} + c_{24} \frac{\partial}{\partial y} \eta_{13}^{(1)x} + c_{34} \frac{\partial}{\partial y} \eta_{24}^{(1)x}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Розв'язуючи систему рівнянь (6.1)-(6.3), отримуємо хвильове число, що збігається зі знайденим вище, а саме:

$$k_4 = \frac{\omega \sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{44}^E(\omega)}}. \quad (6.4)$$

Використовуючи вираз (6.4), можна розрахувати швидкість ультразвукової хвилі

$$v_{44}(\omega) = \frac{\omega}{\operatorname{Re}|k_4|} = \operatorname{Re} \frac{\sqrt{c_{44}^E(\omega)}}{\sqrt{\rho}} \quad (6.5)$$

і внесок псевдоспінової системи у коефіцієнт поглинання звуку:

$$\alpha_4(\omega) = \alpha_{04} - \operatorname{Im}|k_4| = \alpha_{04} - \operatorname{Im} \left| \frac{(\omega)\sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{44}^E(\omega)}} \right|, \quad (6.6)$$

де α_{04} – сталий, частотно і температурно незалежний доданок, який описує внесок інших механізмів у поглинання, що спостерігається на експерименті.

7. Порівняння результатів числових розрахунків з відповідними експериментальними даними

Тепер перейдемо до порівняння результатів числових розрахунків поперечних діелектричних, п'єзоелектричних і пружних характеристик кристалів $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ і $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ з відповідними експериментальними даними. Відзначимо, що розвинена в попередніх розділах теорія, строго кажучи, справедлива для кристалів $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$. Але встановлений експериментальним шляхом релаксаційний характер дисперсії $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$ [9, 10] у кристалах цього типу, слідуючи [6, 11, 12],

пов'язаний, напевно, з ефектом пригнічення тунелювання короткосяжними взаємодіями. У зв'язку з цим ефектами тунелювання протонів на водневих зв'язках будемо нехтувати.

Для числової оцінки температурних і частотних залежностей фізичних характеристик кристалів $\text{N}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_4(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$, розрахованих нижче, необхідно задати значення таких параметрів:

- енергій протонних і дейтронних конфігурацій $\varepsilon_H^0, w_H^0, w_{1H}^0, \varepsilon_D^0, \varepsilon_{1D}^0$, відповідно;
- параметрів далекоюсяжної взаємодії $\nu_{OH}^a(0)$ і $\nu_{OD}^a(0)$;
- ефективних дипольних моментів μ_{1H}, μ_{1D} ;
- деформаційних потенціалів $\psi_4, \delta_{a4}, \delta_{14}$;
- “затравочних” статичної діелектричної сприйнятливості $chi_{11}^{\varepsilon=0}$, коефіцієнта п'єзоелектричної напруги e_{14}^0 , пружної сталої c_{44}^E ;
- параметрів α_H і α_D , що визначають часову шкалу релаксаційних процесів.

При розрахунках значення об'єму примітивної комірки v кристалу ADP взято рівним $0,2110 \cdot 10^{-21} \text{ см}^3$ [13], а DADP – $v = 0,213 \cdot 10^{-21} \text{ см}^3$ [5].

Для визначення перерахованих нижче параметрів використовуються температурні залежності фізичних характеристик кристалів ADP і DADP, які отримані в результаті експерименту. Зокрема, для DADP $\varepsilon_{11}^r(0, T)$ [14, 15], $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$ [9, 10], $d_{14}(T)$ [14], $s_{44}^E(T)$ [14], а для ADP $\varepsilon_{11}^r(0, T)$ [15, 16], $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$ [10]. Значення e_{14}, d_{14}, c_{44}^E для ADP наведені лише при температурі 293 К [17]. Крім цього, використовуючи формули, що зв'язують діелектричні, п'єзоелектричні і пружні характеристики ADP і DADP, в роботі розраховані на основі даних робіт [14, 16, 17] температурні залежності $c_{44}^{E,P}, e_{14}, \varepsilon_{11}^e, h_{14}, g_{14}$. У зв'язку з тим, що більшість експериментальних вимірювань виконані лише у випадку параелектричної фази, то й числові розрахунки відповідних характеристик проведемо для температур $T > T_N$.

Значення енергій протонної і дейтронної конфігурацій ε^0 і w^0 для опису поперечних характеристик кристалів вибираємо такими, як і для розрахунку поздовжніх характеристик [1].

Аналіз експериментальних даних показує, що для визначення ефективного дипольного моменту μ_1 треба враховувати не лише дані експерименту для поперечної статичної проникності $\varepsilon_{11}^e(0, T)$, але і результати вимірювань $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$.

“Затравочні” величини $\chi_{11}^{\varepsilon=0}, e_{14}^0, c_{44}^{E0}$ визначаються з умови найкращого узгодження теорії з відповідними експериментальними даними у температурних областях, які значно віддалені від температури переходу T_N .

Для вибору оптимального набору деформаційних параметрів ψ_4 , δ_{a4} , δ_{14} проведено ґрунтовне дослідження їх впливу на температурну залежність розрахованих п'єзоелектричних характеристик d_{14} , e_{14} , h_{14} , g_{14} і пружної сталі c_{44}^E . В результаті отримано такий набір деформаційних потенціалів, при якому розраховані характеристики найбільш адекватно описують дані експериментів.

Оптимальний набір параметрів, який використаний для числових характеристик, наведено в табл.2.

Табл. 2. Набори оптимальних модельних параметрів для кристалів ADP і DADP

	T_N (K)	$\frac{\varepsilon^{\prime 0}}{k_B}$ (K)	$\frac{w^{\prime 0}}{k_B}$ (K)	$\frac{\nu_a^0(0)}{k_B}$ (K)	$\mu_1, 10^{-18}$ (esu·cm)	$\chi_{11}^{0\varepsilon}$	P (S)	R (S/K)
ADP	148	20	490,0	-40,00	6,45	0,70	0,95	0,0110
DADP	240	78,8	715,4	-54,70	7,29	0,58	5,90	0,0032

	$\frac{\psi_4}{k_B}$ (K)	$\frac{\delta_{a4}}{k_B}$ (K)	$\frac{\delta_{14}}{k_B}$ (K)	$e_{14}^0, 10^4$ (esu·cm ²)	$c_{44}^{E0} \cdot 10^{-10}$ (dyn/cm ²)
ADP	120	94	82	250	8.9
DADP	225	100	100	3000	9.0

Перейдемо тепер до результатів числового розрахунку фізичних характеристик кристалів ADP і DADP на основі запропонованої теорії і порівняння результатів теорії з експериментальними даними.

На рис.2 наведено температурні залежності поперечних статичних діелектричних проникностей кристалів ADP (а) і DADP (б), які розраховані теоретично й отримані експериментально. Штриховою лінією на рис.2 і на наступних, які стосуються кристалу ADP, наведено температурну залежність $\varepsilon_{11}(0, T)$, яка отримана на основі теорії, в якій враховано тунелювання [2] і “прив’язка” виконувалась лише до статичної проникності. Значення різниці теоретичних температурних залежностей діелектричних проникностей механічно вільного $\varepsilon_{11}^{\sigma}(0, T)$ і механічно затиснутого $\varepsilon_{11}^{\varepsilon}(0, T)$ кристалів ADP і DADP є дуже малі, вони складають не більше 0,02%. Експериментально ця різниця не відчутна і не спостерігається.

Максимальне значення $\varepsilon_{11}^{\sigma}(0, T)$ у кристалах $N(H_{1-x}D_x)_4(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ при $T = T_N$ є порядку 95, а в кристалах $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ при $T = T_c$ $\varepsilon_{11}^{\sigma}(0, T) \approx 60$ і при збільшенні температури зменшується значно повільніше, ніж проникність

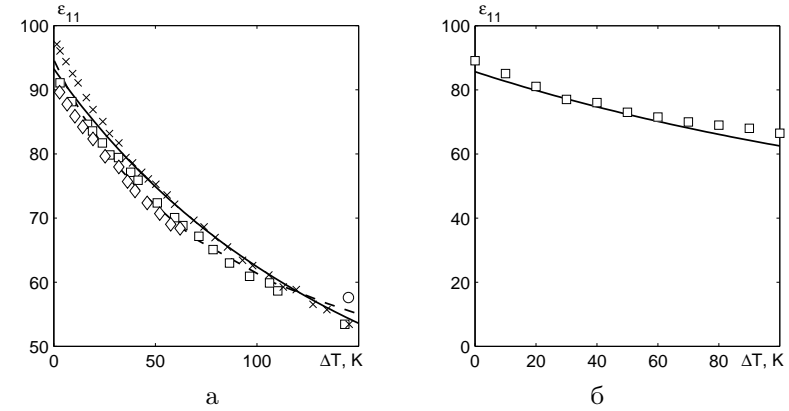


Рис. 2. Температурна залежність статичної діелектричної проникності ADP (а) – \diamond [18], \square – [19], \times – [15] і DADP (б) – \square [14]. Штрихова лінія – результат роботи [2].

$N(H_{1-x}D_x)_4(H_{1-x}D_x)_2PO_4$.

Нагамія [20] встановив, що температурну залежність оберненої діелектричної сприйнятливості $\chi_{11}^{-1}(0)$ кристалу ADP у високотемпературній фазі можна апроксимувати за допомогою закону Кюрі-Вейсса з від’ємним значенням температури Кюрі-Вейсса:

$$(\chi_{11}^{\sigma}(0))^{-1} = 0,48 + \frac{1430}{T - (-55)}.$$

На рис.3 і 4 наведено розраховані температурні залежності коефіцієнтів п'єзоелектричної деформації d_{14} і коефіцієнтів п'єзоелектричної напруги e_{14} і дані експерименту, які кількісно добре описуються на основі мікротеорії. При $T = T_N$ d_{14} і e_{14} набувають скінчених значень і при збільшенні температури незначно зменшуються. Дейтерування приводить до зростання значення коефіцієнтів d_{14} і e_{14} . Однак, ці коефіцієнти є значно меншими від коефіцієнтів d_{36} і e_{36} . Зокрема, для кристалу DADP величина d_{14} менша від d_{36} приблизно у 8 разів, а значення e_{14} приблизно у 5 разів менше від e_{36} . Одного порядку є величини коефіцієнтів d_{14} і e_{14} кристалів $N(H_{1-x}D_x)_4(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ із значеннями цих коефіцієнтів кристалів $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$.

Розраховані температурні залежності констант п'єзоелектричної напруги h_{14} і деформації g_{14} та експериментальні значення цих величин для кристалів ADP і DADP наведені на рис.5 і 6. Отримано до-

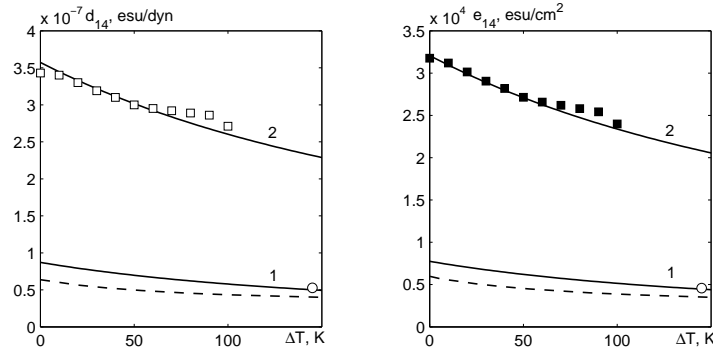


Рис. 3. Температурна залежність коефіцієнта п'єзоелектричної деформації d_{14} кристалів ADP – 1 \circ [17], DADP – 2 \square [14]. Штрихова лінія – результат роботи [2].

Рис. 4. Температурна залежність коефіцієнта п'єзоелектричної напруги e_{14} кристалів ADP – 1 \circ [17], DADP – 2 \blacksquare – $\frac{d_{14}}{s_{44}}$ [14]. Штрихова лінія – результат роботи [2].

брий кількісний опис на основі теорії експериментальних даних. При зміні температури значення h_{14} і g_{14} не змінюються. При збільшенні дейтерію у кристалі значення h_{14} і g_{14} зростають. Значення константи h_{14} DADP приблизно у 18 разів менше від значення h_{36} , а константи g_{14} приблизно у 22 рази менше від величини g_{36} . Одного порядку є величини констант h_{14} і g_{14} кристалів $N(H_{1-x}D_x)_4(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ із значеннями цих констант кристалів $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$.

Відзначимо, що хоча поперечні статичні діелектричні проникності кристалів ADP і DADP є досить великими, п'єзоелектричні коефіцієнти і константи по цьому напрямку дуже малі. У тому п'єзоелектричний ефект проявляється дуже слабо.

На рис.7 наведено розраховані та отримані експериментально температурні залежності пружних сталей c_{44}^E кристалів ADP і DADP. Дейтерування не приводить до помітної зміни значення c_{44}^E . Внаслідок малих значень п'єзоелектричних коефіцієнта e_{14} і константи h_{14} майже не відрізняються значення пружних сталей c_{44}^E і c_{44}^P . Значення c_{44}^E для кристалів $N(H_{1-x}D_x)_4(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ приблизно в 1,4 раза менші від величини c_{44}^E кристалів $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$.

На рис.8, 9 наведено розраховані та експериментально отримані температурні залежності дійсних і уявних частин поперечної дина-

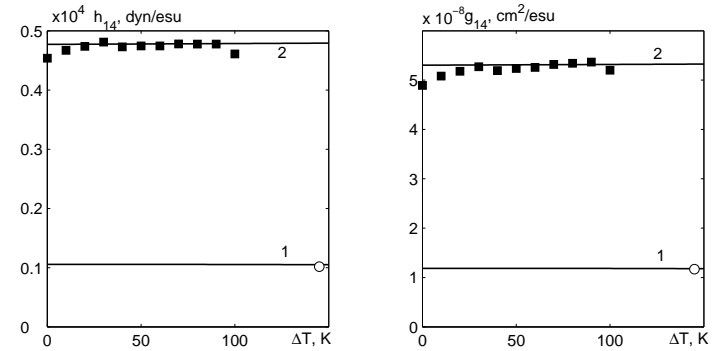


Рис. 5. Температурна залежність константи п'єзоелектричної напруги h_{14} кристалів ADP – 1, \circ $\frac{e_{14}}{\chi_{11}}$ [17], DADP – 2, \blacksquare $\frac{d_{14}}{\chi_{11} s_{44}^E - d_{14}^2}$ [14].

Рис. 6. Температурна залежність константи п'єзоелектричної деформації g_{14} кристалів ADP – 1, \circ $\frac{e_{14}}{\chi_{11}^{\sigma} c_{44}^E}$ [17], DADP – 2, \blacksquare $\frac{d_{14} s_{44}^0}{\chi_{11}^{\sigma} s_{44}^E - d_{14}^2}$ [14].

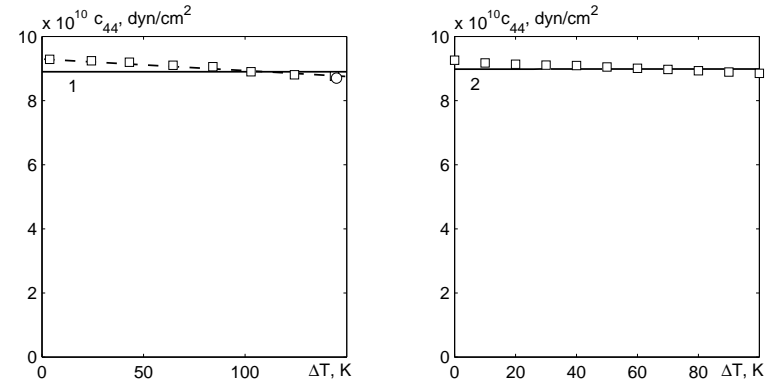


Рис. 7. Температурні залежності пружних сталей кристалів ADP – 1, \square $1/s_{44}^E$ [16] і DADP – 2, \square $1/s_{44}^E$ [14]. Штрихова лінія – результат роботи [2].

мічної діелектричної проникності $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$ кристалів ADP і DADP. Як видно, кількісно добре описуються експериментальні дані ро-

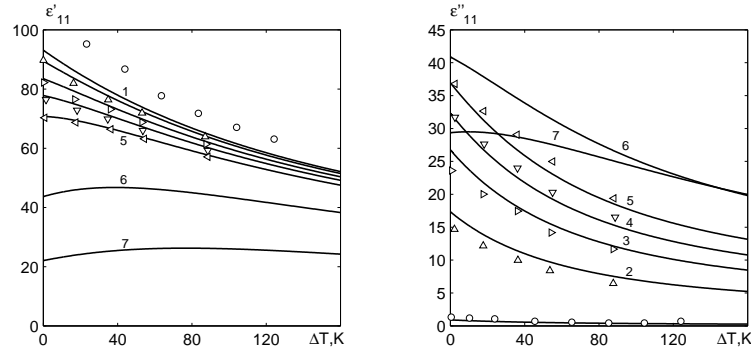


Рис. 8. Температурна залежність ε'_{11} і ε''_{11} $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ при різних частотах ν (ГГц): 9.2 – 1, \circ [21]; 180.0 – 2, \triangle [10]; 300.0 – 3, \triangleright [10]; 393.0 – 4, ∇ [10]; 501.0 – 5, \triangleleft [10]; 1000.0 – 6; 2000.0 – 7. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

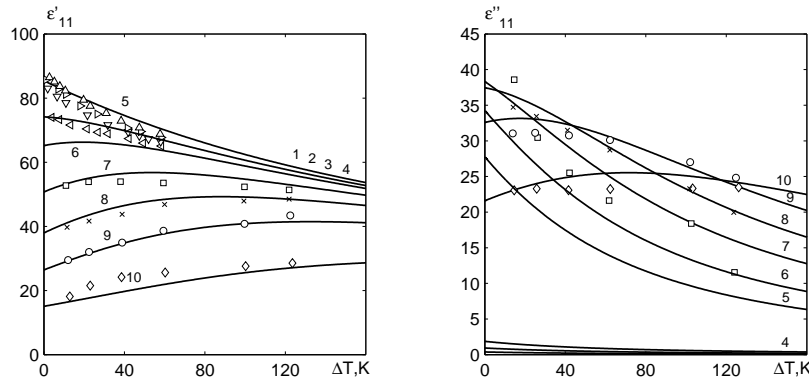


Рис. 9. Температурна залежність ε'_{11} і ε''_{11} $\text{N}(\text{H}_{0.02}\text{D}_{0.98})_4(\text{H}_{0.02}\text{D}_{0.98})_2\text{PO}_4$ при різних частотах ν (ГГц): 0.1 – 1, \triangle [22]; 0.8 – 2, \triangleright [22]; 2.0 – 3, ∇ [22]; 4.0 – 4, \triangleleft [22]; 70.0 – 5; 100.0 – 6; 150.0 – 7, \square [9, 10]; 210.0 – 8, \times [9, 10]; 300.0 – 9, \circ [9, 10]; 540.0 – 10, \diamond [9, 10]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

біт [9, 10]. Експериментальні ж дані робіт [21, 22] не корелюють із даними, отриманими в [9, 10]. Зокрема, значення $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$ [21] при

$\nu = 9,2$ ГГц є більшими від статичної діелектричної проникності $\varepsilon_{11}(0, T)$ [15] кристалу ADP. Дисперсія ж $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$ кристалу DADP у роботі [22] отримується на частотах $\sim 10^{10}$ Гц, а у роботах [9, 10] – на частотах $\sim 10^{11}$ Гц.

У температурному ході $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$ і $\varepsilon''_{11}(\omega, T)$ обох кристалів при частотах менших від дисперсійних при $T = T_N$ спостерігається максимум, а при більших – неглибокий мінімум. При збільшенні температури в області дисперсії значення $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$ і $\varepsilon''_{11}(\omega, T)$ зростають, досягаючи максимуму, який при збільшенні частоти зменшується і зміщується в область більших ΔT .

Частотні залежності $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$, які отримані на основі запропонованої мікротеорії, а також в результаті експерименту, для кристалу ADP наведені на рис.10, а для DADP – на рис.11. Отримано добрий кількісний опис експериментальних даних робіт [9, 10]. При

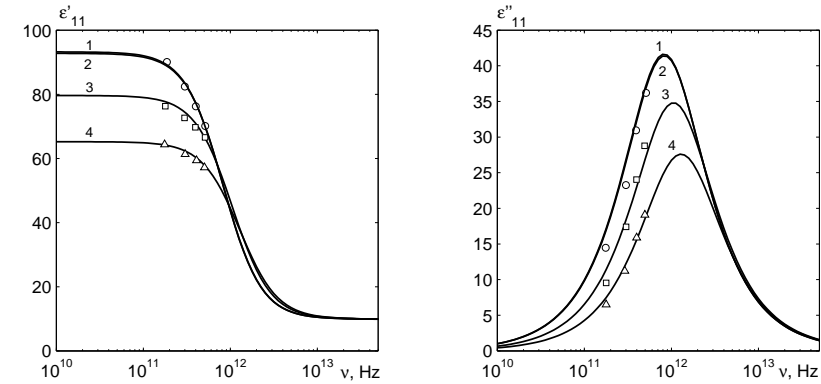


Рис. 10. Частотна залежність ε'_{11} і ε''_{11} $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ при різних температурах ΔT (К) [10]: 0.0 – 1; 1.0 – 2, \circ ; 35.0 – 3, \square ; 87.0 – 4, \triangle . Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

$\Delta T = 0$ К дисперсійна частота для ADP поперечної динамічної проникності дорівнює 824,8 ГГц. При дейтеруванні частота дисперсії зменшується і для DADP дорівнює 165,4 ГГц. При збільшенні температури ΔT максимальні значення $\varepsilon''_{11}(\omega, T)$ зменшуються і переміщуються в область більших ΔT .

Проаналізуємо тепер температурні і частотні залежності розрахованих динамічних характеристик механічно вільних кристалів ADP і DADP, які вирізані у вигляді квадратної пластинки зі сторонами

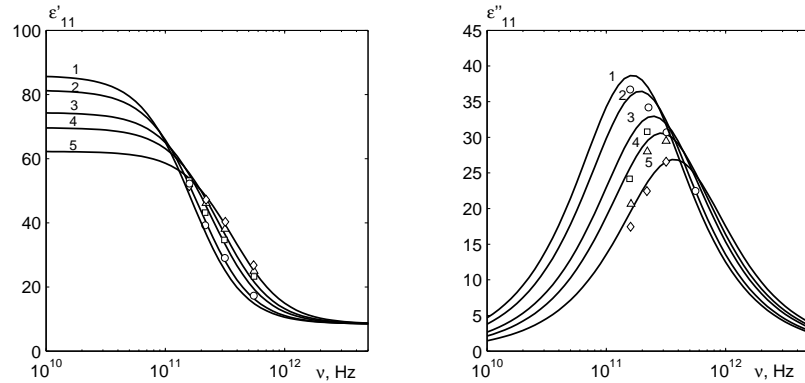


Рис. 11. Частотна залежність ε'_{11} і ε''_{11} $N(\text{H}_{0.02}\text{D}_{0.98})_4(\text{H}_{0.02}\text{D}_{0.98})_2\text{PO}_4$ при різних температурах $\Delta T(\text{K})$ [9,10]: 0.0 – 1; 14.0 – 2, \circ ; 41.0 – 3, \square ; 62.0 – 4, \triangle ; 101.0 – 5, \diamond . Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

$l = 1$ мм у площині $[1,0,0]$. Для числових розрахунків у цьому випадку треба задати значення тих же параметрів теорії, які були використані при описі статичної і динамічної діелектричної проникності механічно затиснутого кристалу і п'єзоелектричних коефіцієнтів і констант.

Ми, на жаль, не можемо провести кількісне порівняння теоретично отриманих температурних і частотних динамічних характеристик механічно вільного кристалу в області п'єзоелектричного резонансу із експериментальними даними, оскільки нам не відомі такі вимірювання.

На рис.12 і 13 наведені частотні залежності дійсної та уявної частин динамічної діелектричної проникності ε^*_{11} кристалів ADP при температурі $\Delta T = 35$ K і DADP при $\Delta T = 62$ K. В області частот $10^6 - 10^8$ Гц спостерігається дисперсія резонансного типу. При $\omega \rightarrow 0$ отримуємо статичну діелектричну проникність вільного кристалу. Штрихова лінія відповідає низькочастотному ходу проникності затиснутого кристалу. Резонансні піки для ε''_{11} є також дуже малими. Вище від резонансних частот спостерігається затискання кристалу високочастотним полем і для діелектричної проникності затиснутого кристалу вище частот 10^9 Гц має місце дисперсія релаксаційного типу.

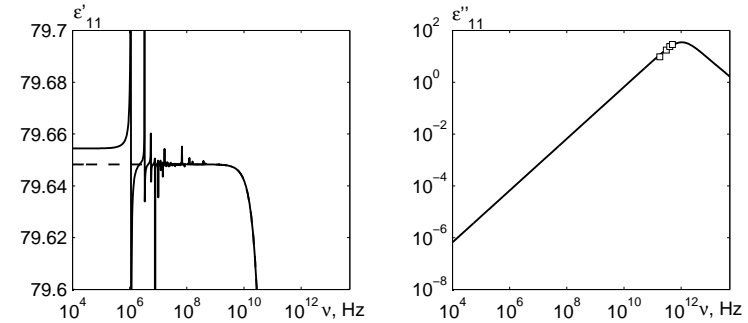


Рис. 12. Частотні залежності дійсної та уявної частин динамічної діелектричної проникності ε^*_{11} вільного і затиснутого кристалу (штрихова лінія) ADP при температурі $\Delta T = 35$ K, \square [10].

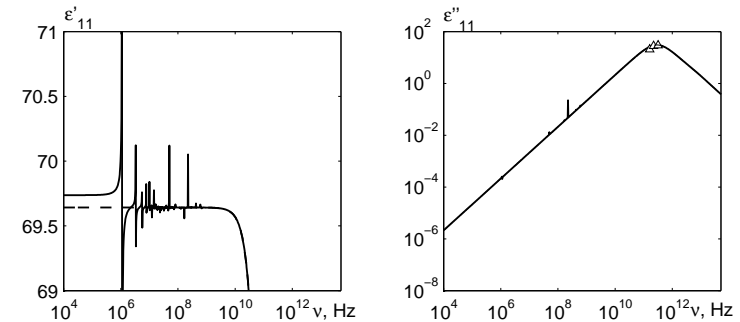


Рис. 13. Частотні залежності дійсної та уявної частин динамічної діелектричної проникності ε^*_{11} вільного і затиснутого кристалу (штрихова лінія) DADP при $\Delta T = 62$ K, \triangle [9,10].

На рис.14 наведені частотні залежності динамічної п'єзоелектричної напруги e_{14} , а на рис.15 – пружної сталої c_{44}^E кристалів ADP і DADP. При частотах, менших від 10^{11} Гц значення дійсних частин $e'_{14}(\omega)$ і $c_{44}^{E'}(\omega)$ є незмінними, а при збільшенні частот до 10^{12} Гц величина $e'_{14}(\omega)$ зменшується, а $c_{44}^{E'}(\omega)$ зростає. При наступному рості ν ці величини знову не змінюються. В інтервалі частот $10^{10} - 10^{12}$ Гц $e''_{14}(\omega)$ і $c_{44}^{E''}(\omega)$ зростають, досягаючи максимуму і зменшуються.

Температурні залежності розрахованих коефіцієнтів поглинання

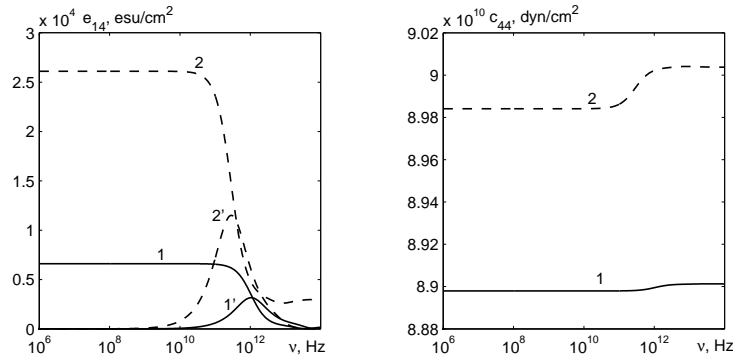


Рис. 14. Частотна залежність динамічної п'єзоелектричної напруги ϵ_{14} кристалів ADP (1) при температурі $\Delta T = 35$ K і DADP (2) – при $\Delta T = 62$ K.

Рис. 15. Частотна залежність динамічної пружної сталості c_{44}^E кристалів ADP (1) при температурі $\Delta T = 35$ K і DADP (2) – при $\Delta T = 62$ K.

звуку α_4 при різних частотах показані для кристалів ADP і DADP на рис.16, а на рис.17 – частотні залежності α_4 при температурі $\Delta T = 35$ K для ADP і $\Delta T = 62$ K для DADP. При $T = T_N$ коефіцієнт поглинання α_4 набуває скінченного значення, яке зростає зі збільшенням частоти. При збільшенні ΔT величина α_4 незначно зменшується. При збільшенні частоти зовнішнього поля, починаючи від частот $\sim 10^9$ Гц, результати розрахунків показують, що коефіцієнт поглинання звуку α_4 різко лінійно зростає і виходить на насичення в області частот $2 \cdot 10^{11}$ Гц (рис.17). При дейтеруванні величина обрізаючої частоти зменшується.

Швидкість звуку v_{44} кристалів ADP і DADP при збільшенні температури не змінюється (рис.18). Не впливає на швидкість v_{44} і ступінь дейтерування.

При частотах, де спостерігається дисперсія діелектричної проникності затиснутого кристалу, швидкість звуку зростає і виходить на насичення при частотах $\sim 10^{12}$ Гц (рис.19).

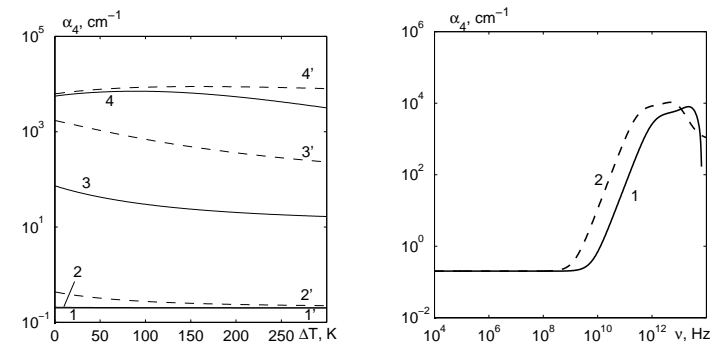


Рис. 16. Температурна залежність коефіцієнта поглинання звуку α_4 ADP на різних частотах ν , Гц: 1,1' – 10^6 , 2,2' – 10^9 , 3,3' – 10^{11} , 4,4' – 10^{13} і DADP при тих же частотах.

Рис. 17. Частотна залежність коефіцієнта поглинання звуку α_4 кристалів ADP (1) і DADP (2) при температурах $\Delta T=35$ K і 62K відповідно.

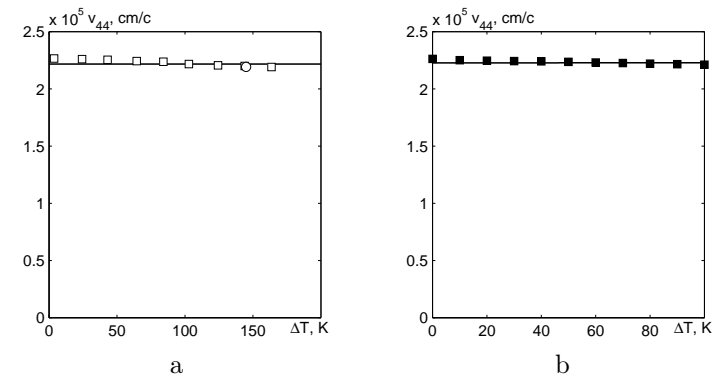


Рис. 18. Температурна залежність швидкості звуку кристалів ADP (a) і DADP (b). \square – $\frac{\sqrt{c_{44}^E}}{\sqrt{\rho}}$ [16], \blacksquare – $\frac{\sqrt{c_{44}^E}}{\sqrt{\rho}}$ [14].

8. Завершальні зауваження

У даній роботі на основі модифікованої моделі протонного впорядкування сегнетоактивних сполук сім'ї KN_2PO_4 з врахуванням лі-

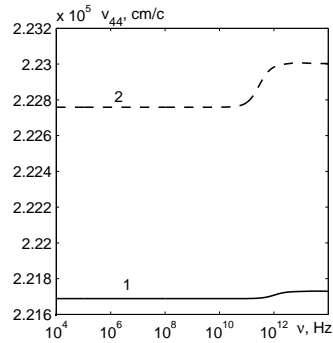


Рис. 19. Частотна залежність швидкості звуку v_{44} для кристалів ADP (1) і DADP (2).

нийного за деформацією ε_4 внеску в енергію протонної системи без врахування тунелювання в наближенні чотирьохчастинкового кластера розвинена теорія термодинамічних і поперечних діелектричних, пружних та динамічних властивостей антисегнетоелектриків типу $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$. Розраховано також квадратичні п'єзоелектричні і пружні характеристики, коефіцієнти електрострикції, а також швидкість та коефіцієнт поглинання звуку в цих кристалах. Проведено ґрунтовний числовий аналіз залежності розрахованих фізичних характеристик від параметрів теорії і деформаційних потенціалів антисегнетоелектриків $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ і $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$. Знайдено оптимальні набори цих параметрів і "заправочні" характеристики для кристалів, що досліджуються. Вони дали можливість на належному рівні описати наявні для $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ і $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ відповідні експериментальні дані.

Отримані в даній роботі результати для ADP детально порівнюються з аналогічними результатами роботи [3] для сегнетоелектрика KH_2PO_4 .

Література

1. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Вдович А.С. Поздовжні статичні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні, електрострикційні та динамічні діелектричні властивості антисегнетоелектриків типу $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$. - Львів, 2008. - 61с. (Препр. / НАН України. Ін-т фіз. конденс. систем; ICMP-08-19U).

2. Lisnii B.M., Levitskii R.R. Theory of physical properties of ferro- and antiferroelectrics of the KH_2PO_4 family related to strains u_4 and u_5 // Ukr. J. Phys., 2004, v. 49, №7, p.701-709.
3. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Вдович А.С. Поперечні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні та динамічні властивості сегнетоелектриків типу KH_2PO_4 . - Львів, 2007. - 80 с. (Препр. / НАН України. Ін-т фіз. конденс. систем; ICMP-07-24U).
4. Левицький Р.Р., Кориневский Н.А., Стасюк И.В. Теория протонного упорядочения в сегнето- и антисегнетоэлектриках типа ортофосфатов // Укр.физ.журн. - 1974. -Т.19, №8. - С.1289-1297.
5. Кенциг В. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. - М.: ИЛ, 1960. - 234 с.
6. Levitsky R.R., Korinevsky N.A., Stasjuk I.V. Distribution function and thermodynamical properties of KD_2PO_4 , and $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ type crystals // Phys. Stat. Sol. b. - 1978. - Vol. 88, №1. - P. 51-63.
7. Havlin S., Litov E., Sompolinsky H. Unified model for the transverse electric susceptibility in KH_2PO_4 and $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ - type crystals // Phys. Rev. B. -1976. - Vol. 14, №3. -P.1297-1302.
8. Glauber J. Time-dependent statistics of the Ising model // J. Math. Phys. - 1963. - Vol. 4, №2. - P. 294-307.
9. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Миц Е.В., Волков А.А., Козлов Г.В., Лебедев С.П. Продольная и поперечная релаксация в $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$. - Киев, 1982. - 30 с. - (Препр. / АН УССР. Ін-т теор.фіз.; ИТФ-82-2Р).
10. Kozlov G.V., Lebedev S.P., Prokhorov A.M., Volkov A.A. Investigation of ferroelectric excitations in hydrogen-bond crystals using the method of submillimeter spectroscopy // J.Phys.Soc.Japan. - 1980. - Vol. 49, Suppl. - P. 188-190.
11. Levitskii R.R., Stasjuk I.V., Korinevsky N.A. Dynamics of ferroactive crystals of orthophosphate type // Ferroelectrics. - 1978. - Vol. 21. - P. 481-483.
12. Кориневский Н.А., Левицкий Р.Р. Динамическая теория ортофосфатов в кластерном приближении // Теорет. и мат. физика. - 1980. - Т. 42, №3. - С. 416-429.
13. Fukami T. X-ray Study of crystal structure of $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ in the antiferroelectric phase // J. Phys. Soc. Jpn. - 1988. - Vol. 57, №4. - P. 1287-1290.
14. Mason W.P., Mattias B.T. The piezoelectric, dielectric and elastic properties at $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ (deuterated ADP) // Phys. Rev. - 1952. - Vol. 88, №3. - P. 477-479.
15. Волкова Е.Н., Израиленко А.Н. Некоторые физические свой-

- ства твердых растворов ADP - DADP // Кристаллография. - 1983. - Т.28, №6. - С. 1217-1219.
16. Мэзон У. Пьезоэлектрические кристаллы и их применение в ультразвуке. - М.: ИЛ, 1952. - 447 с.
 17. Желудев И.С. Физика кристаллических диэлектриков. - М.: Наука, 1968. - 463 с.
 18. Ono Y., Hikita T., Ikeda T. Phase transitions in mixed crystal system $K_{1-x}(NH_4)_xH_2PO_4$ // J. Phys. Soc. Jpn. - 1987. - Vol. 56, №2. - P. 577-588.
 19. K.S. Lee, K.T. Kim, J.J. Kim. KDP impurity effects on antiferroelectric phase transition of ADP crystal // Jpn. J. of Appl. Phys. - 1985. - Vol. 24, Suppl. 24-2. - P. 969-971.
 20. Nagamiya T. On the theory of the dielectric piezoelectric, and elastic properties of $NH_4H_2PO_4$ // Prog. Theor. Phys. - 1952. - Vol. 7, №3. - P. 275-284.
 21. Kaminov I.P. Microwave dielectric properties of $NH_4H_2PO_4$, KH_2AsO_4 and partially deuterated KH_2PO_4 // Phys. Rev. -1965, Vol. 138, №5A. - p. 1539-1543.
 22. Jakubas R., Narewski E., Sobczyk L. Dielectric dispersion in d-ADP // Sol.St.Comm. -1983. - Vol. 45, №8. - P. 729-732.
-

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- "Referativnyi Zhurnal"
- "Dzherelo"

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk, *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Freiburg*; R. Folk, *Linz*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch, *Lviv*; M. Holovko, *Lviv*; O. Ivankiv, *Lviv*; W. Janke, *Leipzig*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; H. Krienke, *Regensburg*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod, *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; N. Plakida, *Dubna*; G. Röpke, *Rostock*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; M. Vavruk, *Lviv*; A. Zagorodny, *Kyiv*

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2760908; Fax: +38(032)2761978
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>