

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

ДИЕЛЕКТРИЧНІ, П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНІ ТА ПРУЖНІ ВЛАСТИВОСТІ
СЕГНЕТОЕЛЕКТРИКІВ KN_2PO_4 І RbH_2PO_4 . МЕТОД РІВНЯНЬ
БЛОХА

Роботу отримано 23 грудня 2010р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії модельних
спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України
© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-10-18U

Р.Р.Левицький, І.Р.Зачек*, А.С.Вдович

ДИЕЛЕКТРИЧНІ, П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНІ ТА ПРУЖНІ
ВЛАСТИВОСТІ СЕГНЕТОЕЛЕКТРИКІВ KN_2PO_4 І RbH_2PO_4 .
МЕТОД РІВНЯНЬ БЛОХА

*Національний університет "Львівська Політехніка", 79013 Львів,
вул. Бандери, 12

ЛЬВІВ

УДК: 537.226.83/.86, 538.91

PACS: 77.84.-s, 64.60.Cn, 77.22.-d, 77.80.-e, 77.80.Bh, 77.65.Bn

Діелектричні, п'єзоелектричні та пружні властивості сегнетоелектриків KN_2PO_4 і RbH_2PO_4 . Метод рівнянь Блоха

Р.Р.Левицький, І.Р.Зачек, А.С.Вдович

Анотація. В рамках модифікованої моделі протонного впорядкування з врахуванням тунелювання протонів на водневих зв'язках та лінійних за деформаціями ε_6 , ε_4 і ε_5 внесків в енергію протонної системи в наближенні молекулярного поля розраховано термодинамічні, діелектричні, п'єзоелектричні, пружні, а в рамках методу Блоха і динамічні характеристики сегнетоелектриків типу KN_2PO_4 . Показано, що запропонована теорія дозволяє досягнути доброї згоди теоретичних результатів з експериментальними даними для KN_2PO_4 і RbH_2PO_4 лише в парафазі. Проведено ґрунтовний аналіз спектру елементарних збуджень сегнетоелектриків типу KN_2PO_4 в рамках досліджуваної моделі.

Dielectric, piezoelectric and elastic properties of KN_2PO_4 and RbH_2PO_4 ferroelectrics. Bloch equations method

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

Abstract. Within modified proton ordering model with taking into account tunneling of protons on hydrogen bonds and linear on strains ε_6 , ε_4 and ε_5 contributions into energy of proton system, within mean field approximation we calculated dielectric, piezoelectric, elastic, and within Bloch method also dynamic characteristics of KN_2PO_4 type ferroelectrics. It is shown, that proposed theory let us to obtain good agreement of theoretical results with experimental data for KN_2PO_4 and RbH_2PO_4 only in paraelectric phase. Thorough analysis of excitation spectrum of KN_2PO_4 type ferroelectrics within the model is carried out.

Подається в Журнал фізичних досліджень
Submitted to Journal of Physical studies

© Інститут фізики конденсованих систем 2010
Institute for Condensed Matter Physics 2010

1. Вступ

Сегнетоелектрики типу KN_2PO_4 у парафазі кристалізуються в класі $4 \cdot m$ тетрагональної сингонії (просторова група $I42d$ з нецентросиметричною точковою групою D_{2d}) і тому вони володіють п'єзоелектричними властивостями. При прикладанні відповідних електричних полів і зсувних напруг певної симетрії є можливість вивчати роль п'єзоелектричних взаємодій у фазовому переході та їх вплив на фізичні характеристики цих кристалів.

Фундаментальні результати для деформованих сегнетоактивних сполук типу KN_2PO_4 були отримані в роботах [1–10]. В цих роботах вперше було модифіковано модель протонного впорядкування для цих кристалів шляхом врахування лінійних за деформаціями ε_6 , ε_4 і ε_5 внесків в енергію протонної системи. В рамках цієї моделі в наближенні чотиричастинкового кластера за короткосяжними і середнього поля за далекосяжними взаємодіями розраховано поздовжні і поперечні діелектричні, п'єзоелектричні і пружні характеристики сегнетоелектриків типу KN_2PO_4 . Динамічні характеристики протонної підсистеми розраховано в межах глауберівського підходу з врахуванням динаміки п'єзоелектричних деформацій мовою класичних (ньютонівських) рівнянь руху. Отримані вирази для компонент тензора динамічної діелектричної проникності, модуля пружності, п'єзоелектричних модулів, а також швидкостей і коефіцієнтів поглинання звуку досліджуваних кристалів. Проведено ґрунтовний числовий аналіз отриманих результатів, знайдено оптимальні набори параметрів теорії, які забезпечують в наближенні середнього кристалу добрий кількісний опис відповідних експериментальних даних для сегнетоелектриків $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ навіть без явного врахування тунелювання протонів на водневих зв'язках.

З іншого боку в ряді робіт [11–15], використовуючи прості моделі з врахуванням тунелювання протонів на водневих зв'язках в рамках методу рівнянь Блоха в наближенні молекулярного поля (НМП) вивчалися динамічні властивості сегнетоелектриків типу KN_2PO_4 . Пізніше [16] на основі методу Блоха динамічні характеристики цих кристалів були розраховані з явним врахуванням їх реальної структури. Слід відзначити, що в згаданих вище роботах не була врахована п'єзоелектрична взаємодія, що ставить під сумнів можливості опису на належному рівні на основі отриманих в [11–16] результатів експериментальних даних для сегнетоелектриків типу KN_2PO_4 . У зв'язку з цим в даній роботі на основі запропонованої модифікованої моделі протонного впорядкування з врахуванням тунелювання протонів

на водневих зв'язках і їх реальної структури в НМП розраховано термодинамічні, а в рамках методу Блоха і динамічні характеристики сегнетоелектриків типу KN_2PO_4 . Встановлено, що запропонована теорія дозволяє досягнути доброї згоди теорії з експериментом лише для парафази. Розраховано і проведено детальний аналіз спектру елементарних збуджень протонної системи сегнетоелектриків типу KN_2PO_4 в рамках запропонованої моделі.

2. Постановка задачі. Наближення молекулярного поля

Будемо розглядати підсистему протонів сегнетоелектриків типу KN_2PO_4 , які рухаються на $O-H\dots O$ зв'язках. Примітивну комірку гратки Браве в сегнетоелектричних ортофосфатах (СОФ) утворюють два сусідніх тетраедри PO_4 з чотирьома водневими зв'язками ($f = 1, 2, 3, 4$), які відносяться до одного з них (тетраедра типу "А"); водневі зв'язки, що підходять до другого тетраедра (типу "В"), належать чотирьом найближчим структурним елементам, які його оточують (рис. 1).

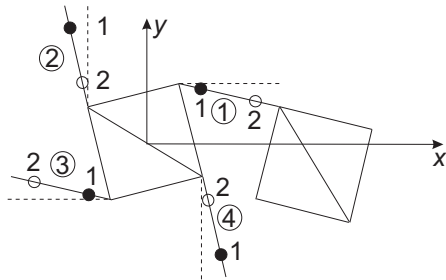


Рис. 1. Примітивна комірка кристалів сім'ї KN_2PO_4 . Цифри в кружечках нумерують водневі зв'язки; 1, 2 – положення рівноваги дейтонів на зв'язках.

Гамільтоніан протонної системи KN_2PO_4 з врахуванням зсувних напруг σ_j ($j = 4, 5, 6$), які викликають деформації ε_j , при прикладенні зовнішніх електричних полів E_i ($i = 1, 2, 3$), які направлені вздовж кристалографічних осей a, b, c , має наступний вигляд:

$$\hat{H} = Nk_B H^{(0)} + \hat{H}_{S1}, \quad (2.1)$$

де

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(0)} = & \frac{\bar{v}}{2} c_{44}^{E0} \varepsilon_4^2 + \frac{\bar{v}}{2} c_{55}^{E0} \varepsilon_5^2 + \frac{\bar{v}}{2} c_{66}^{E0} \varepsilon_6^2 - \\ & - \bar{v} e_{14}^0 \varepsilon_4 E_1 - \bar{v} e_{25}^0 \varepsilon_5 E_2 - \bar{v} e_{36}^0 \varepsilon_6 E_3 - \\ & - \frac{\bar{v}}{2} \chi_{11}^{\varepsilon 0} E_1^2 - \frac{\bar{v}}{2} \chi_{22}^{\varepsilon 0} E_2^2 - \frac{\bar{v}}{2} v \chi_{33}^{\varepsilon 0} E_3^2, \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{S1} = & -2\hbar\Omega \sum_{qf} \frac{\sigma_{qf}^x}{2} - \frac{1}{2} \sum_{\substack{qf \\ q'f'}} J_{ff'}(qq') \frac{\sigma_{qf}^z}{2} \frac{\sigma_{q'f'}^z}{2} - \\ & - \sum_{qf} \sum_{i=1}^3 (2\psi_{fi+3} \varepsilon_{i+3} + \mu_{fi} E_i) \frac{\sigma_{qf}^z}{2}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Доданки в (2.2) відповідають затравочній частині гамільтоніана, яка не залежить від псевдоспінової системи і відповідає гратці. "Затравочна" енергія включає в себе пружну, п'єзоелектричну і діелектричну частини, які виражаються через деформації ε_j та електричні поля E_i , а c_{jj}^{E0} , e_{ij}^0 , $\chi_{ii}^{\varepsilon 0}$ – так звані "затравочні" пружні сталі, коефіцієнти п'єзоелектричної напруги та діелектричної сприйнятливості, N – кількість примітивних комірок, $v = \bar{v}k_B$ – об'єм примітивної комірки, k_B – стала Больцмана. Перші два доданки в (2.3) описують ефекти тунелювання протонів на $O-H\dots O$ зв'язках та протон-протонні взаємодії. $\hbar\Omega$ – енергія тунелювання протонів, яка не залежить від деформацій зсуву ε_j ; σ_{qf}^x , σ_{qf}^z – оператори псевдоспіна протона, які відповідають протону, що знаходиться в q -ій комірці на f -му зв'язку. Наступні доданки описують п'єзоелектричний зв'язок і взаємодії псевдоспінів із зовнішніми електричними полями; ψ_{fi+3} – параметри деформаційного поля, причому

$$\begin{aligned} \psi_{14} = -\psi_{34} = \psi_4, \quad \psi_{24} = \psi_{44} = 0, \\ -\psi_{25} = \psi_{45} = \psi_5, \quad \psi_{15} = \psi_{35} = 0, \\ \psi_{16} = \psi_{26} = \psi_{36} = \psi_{46} = -\psi_6. \end{aligned}$$

В (2.3) μ_{fi} – ефективний дипольний момент водневого зв'язку, його компоненти задовольняють такі співвідношення:

$$\begin{aligned} \mu_{11} = -\mu_{31} = \mu_1 \cos \gamma, \quad \mu_{21} = -\mu_{41} = \mu_2 \sin \gamma, \\ -\mu_{12} = \mu_{32} = \mu_2 \sin \gamma, \quad -\mu_{22} = \mu_{42} = \mu_2 \cos \gamma, \\ \mu_{13} = \mu_{23} = \mu_{33} = \mu_{43} = \mu_3. \end{aligned}$$

Надалі при розрахунках фізичних характеристик сегнетоелектриків типу KN_2PO_4 обмежимося наближенням молекулярного поля. Здійснивши тотожне перетворення,

$$\sigma_{qf}^z = \eta_f^z + (\sigma_{qf}^z - \eta_f^z), \quad \eta_f^z = \langle \sigma_{qf}^z \rangle,$$

нехтуючи квадратичними флуктуаціями і враховуючи симетрійні властивості взаємодії $J_{ff'}$, представимо вихідний гамільтоніан (2.1) у вигляді:

$$\hat{H} = Nk_B U + \hat{H}_S, \quad (2.4)$$

де

$$\begin{aligned} U &= H^{(0)} - \frac{N}{2} \tilde{\nu}_1 \left[(\eta_1^z)^2 + (\eta_2^z)^2 + (\eta_3^z)^2 + (\eta_4^z)^2 \right] + \\ &+ N \tilde{\nu}_3 [\eta_1^z \eta_3^z + \eta_2^z \eta_4^z] + N \tilde{\nu}_2 [\eta_1^z \eta_2^z + \eta_2^z \eta_3^z + \eta_3^z \eta_4^z + \eta_4^z \eta_1^z], \\ \hat{H}_S &= - \sum_q \left[\left(H^x \frac{\sigma_q^x}{2} + H_1^z \frac{\sigma_q^z}{2} \right) + \left(\mathcal{H}^x \frac{\sigma_q^x}{2} + H_2^z \frac{\sigma_q^z}{2} \right) + \right. \\ &+ \left. \left(H^x \frac{\sigma_q^x}{2} + H_3^z \frac{\sigma_q^z}{2} \right) + \left(\mathcal{H}^x \frac{\sigma_q^x}{2} + H_4^z \frac{\sigma_q^z}{2} \right) \right] = - \sum_{qf} \vec{H}_f \cdot \vec{\sigma}_{qf}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

В (2.5)

$$\nu_1 = \frac{J_{11}}{4}, \quad \nu_2 = \frac{J_{12}}{4}, \quad \nu_3 = \frac{J_{13}}{4}, \quad \tilde{\nu}_i = \frac{\nu_i}{k_B},$$

а $J_{ff'} = \sum_{R_a - R'_a} J_{ff'}(qq')$ – Фур'є-образ константи взаємодії між протонами при $\vec{k} = 0$;

$$\begin{aligned} H^x &= 2\hbar\Omega = 2\bar{\Omega}, \\ H_1^z &= 2\nu_1 \eta_1^z + 2\nu_2 \eta_2^z + 2\nu_3 \eta_3^z + 2\nu_4 \eta_4^z - \\ &- 2\psi_6 \varepsilon_6 + 2\psi_4 \varepsilon_4 + \mu_3 E_3 + \mu_1 \cos \gamma E_1 - \mu_1 \sin \gamma E_2, \\ H_2^z &= 2\nu_2 \eta_1^z + 2\nu_1 \eta_2^z + 2\nu_2 \eta_3^z + 2\nu_3 \eta_4^z - \\ &- 2\psi_6 \varepsilon_6 - 2\psi_5 \varepsilon_5 + \mu_3 E_3 + \mu_2 \sin \gamma E_1 - \mu_2 \cos \gamma E_2, \\ H_3^z &= 2\nu_3 \eta_1^z + 2\nu_2 \eta_2^z + 2\nu_1 \eta_3^z + 2\nu_2 \eta_4^z - \\ &- 2\psi_6 \varepsilon_6 - 2\psi_4 \varepsilon_4 + \mu_3 E_3 - \mu_1 \cos \gamma E_1 + \mu_1 \sin \gamma E_2, \\ H_4^z &= 2\nu_2 \eta_1^z + 2\nu_3 \eta_2^z + 2\nu_2 \eta_3^z + 2\nu_1 \eta_4^z - \\ &- 2\psi_6 \varepsilon_6 + 2\psi_5 \varepsilon_5 + \mu_3 E_3 - \mu_2 \sin \gamma E_1 + \mu_2 \cos \gamma E_2. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Тепер розрахуємо в наближенні молекулярного поля середні значення псевдоспінів:

$$\eta_f^x = \frac{2\bar{\Omega}}{H_f} th \beta H_f, \quad \eta_f^y = 0, \quad \eta_f^z = \frac{H_f^z}{H_f} th \frac{\beta}{2} H_f, \quad (2.7)$$

де

$$H_f = \left\{ (2\bar{\Omega})^2 + (\mathcal{H}_f^z)^2 \right\}^{\frac{1}{2}}.$$

Відзначимо, що при $E_i = 0$ і $\sigma_j = 0$

$$\begin{aligned} \eta_s^x &= \eta_1^x = \eta_2^x = \eta_3^x = \eta_4^x = \frac{2\bar{\Omega}}{H_0} th \frac{\beta}{2} H_0, \\ \eta_s^z &= \eta_1^z = \eta_2^z = \eta_3^z = \eta_4^z = \frac{H_0^z}{H_0} th \frac{\beta}{2} H_0, \end{aligned} \quad (2.8)$$

де

$$H_0 = \{H^x + H_0^z\}^{\frac{1}{2}} = \left\{ (2\bar{\Omega})^2 + [2\nu_c \eta_s^z - 2\psi_6 \varepsilon_6]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad \nu_c = \nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3.$$

Така ж симетрія середніх значень псевдоспінів має місце і при прикладанні поля E_3 і напруги σ_6 :

$$\eta^x(3) = \frac{2\bar{\Omega}}{H(3)} th \frac{\beta}{2} H(3), \quad \eta^z(3) = \frac{H^z(3)}{H(3)} th \frac{\beta}{2} H(3), \quad (2.9)$$

$$H(3) = \left\{ (2\bar{\Omega})^2 + [2\nu_c \eta^z(3) - 2\psi_6 \varepsilon_6 + \mu_3 E_3]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}.$$

Аналогічні вирази для середніх значень псевдоспінів без врахування п'єзоелектричного зв'язку отримані в роботі [12] при $2\bar{\Omega} = \Omega_B$ і $\mu_3 = 2\mu_B$, а в роботах [17, 18] отримано дещо інші вирази. При прикладанні до кристалу поля E_1 і механічної напруги σ_4 отримано такі результати:

$$\begin{aligned} \eta_1^x &= \eta_3^x = \eta_{13}^x(1) = \frac{2\bar{\Omega}}{H_{13}(1)} th \frac{\beta}{2} H_{13}(1), \\ \eta_2^x &= \eta_4^x = \eta_{24}^x(1) = \frac{2\bar{\Omega}}{H_{24}(1)} th \frac{\beta}{2} H_{24}(1), \\ \eta_1^z &= -\eta_3^z = \eta_{13}^z(1) = \frac{H_{13}^z(1)}{H_{13}(1)} th \frac{\beta}{2} H_{13}(1), \\ \eta_2^z &= -\eta_4^z = \eta_{24}^z(1) = \frac{H_{24}^z(1)}{H_{24}(1)} th \frac{\beta}{2} H_{24}(1), \end{aligned} \quad (2.10)$$

де використано такі позначення:

$$H_1(1) = H_3(1) = H_{13}(1) = \left\{ (2\bar{\Omega})^2 + [2\nu_a \eta_{13}^z(1) + 2\psi_4 \varepsilon_4 + \mu_1 E_1]^2 \right\}^{\frac{1}{2}},$$

$$H_2(1) = H_4(1) = H_{24}(1) = \left\{ (2\bar{\Omega})^2 + [2\nu_a \eta_{24}^z(1)]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad \nu_a = \nu_1 - \nu_3.$$

Якщо до кристалу прикладено електричне поле E_2 або механічна напруга σ_5 , то

$$\begin{aligned}\eta_1^x = \eta_3^x = \eta_{13}^x(2) &= \frac{2\bar{\Omega}}{H_{13}(2)} th \frac{\beta}{2} H_{13}(2), \\ \eta_2^x = \eta_4^x = \eta_{24}^x(2) &= \frac{2\bar{\Omega}}{H_{24}(2)} th \frac{\beta}{2} H_{24}(2), \\ -\eta_1^z = \eta_3^z = \eta_{13}^z(2) &= \frac{H_{13}^z(1)}{H_{13}(1)} th \frac{\beta}{2} H_{13}(2), \\ -\eta_2^z = \eta_4^z = \eta_{24}^z(2) &= \frac{H_{24}^z(2)}{H_{24}(2)} th \frac{\beta}{2} H_{24}(2),\end{aligned}\quad (2.11)$$

де

$$H_1(2) = H_3(2) = H_{13}(2) = \left\{ (2\bar{\Omega})^2 + [2\nu_a \eta_{13}^z(2)]^2 \right\}^{\frac{1}{2}},$$

$$H_2(2) = H_4(2) = H_{24}(2) = \left\{ (2\bar{\Omega})^2 + [2\nu_a \eta_{24}^z(2) + 2\psi_5 \varepsilon_5 + \mu_2 E_2]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}.$$

3. Термодинамічні характеристики

Для розрахунку діелектричних, п'єзоелектричних та пружних характеристик кристалів типу KN_2PO_4 використаємо термодинамічний потенціал Гіббса в розрахунку на одну комірку, отриманий в наближенні молекулярного поля:

$$g = \frac{G}{Nk_B} = U - 4T \ln 2 - T \sum_{f=1}^4 \ln \cosh \frac{\beta}{2} H_f - \bar{v} \sum_{j=4}^6 \sigma_j \varepsilon_j. \quad (3.1)$$

Записуючи діелектричне і пружне рівняння стану

$$\frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g}{\partial E_i} \right)_{T, \varepsilon_j} = -P_i, \quad \frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g}{\partial \varepsilon_j} \right)_{T, E_i, \sigma_j} = 0$$

з термодинамічного потенціалу (3.1) отримуємо напруги σ_j (рівняння для деформацій ε_j)

$$\begin{aligned}\sigma_4 &= c_{44}^{E0} \varepsilon_4 - e_{14}^0 E_1 - \frac{\psi_4}{v} (\eta_1^z - \eta_3^z), \\ \sigma_5 &= c_{55}^{E0} \varepsilon_5 - e_{25}^0 E_2 - \frac{\psi_5}{v} (-\eta_2^z + \eta_4^z), \\ \sigma_6 &= c_{66}^{E0} \varepsilon_6 - e_{36}^0 E_3 + \frac{\psi_6}{v} (\eta_1^z + \eta_2^z + \eta_3^z + \eta_4^z),\end{aligned}\quad (3.2)$$

а також вирази для поляризацій P_i :

$$\begin{aligned}P_1 &= e_{14}^0 \varepsilon_4 + \chi_{11}^{\varepsilon 0} E_1 + \frac{1}{2} \left[\frac{\mu_1}{v} \cos \gamma (\eta_1^z - \eta_3^z) + \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma (\eta_2^z - \eta_4^z) \right], \\ P_2 &= e_{25}^0 \varepsilon_5 + \chi_{22}^{\varepsilon 0} E_2 + \frac{1}{2} \left[\frac{\mu_1}{v} \sin \gamma (-\eta_1^z + \eta_3^z) + \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma (-\eta_2^z + \eta_4^z) \right], \\ P_3 &= e_{36}^0 \varepsilon_6 + \chi_{33}^{\varepsilon 0} E_3 + \frac{1}{2} \frac{\mu_3}{v} (\eta_1^z + \eta_2^z + \eta_3^z + \eta_4^z).\end{aligned}\quad (3.3)$$

Зі співвідношень (3.3) отримуємо, що

$$\begin{aligned}E_1 &= -h_{14}^0 \varepsilon_4 + k_{11}^{\varepsilon 0} \left[P_1 - \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma (\eta_1^z - \eta_3^z) - \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma (\eta_2^z - \eta_4^z) \right], \\ E_2 &= -h_{25}^0 \varepsilon_5 + k_{22}^{\varepsilon 0} \left[P_2 - \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \sin \gamma (-\eta_1^z + \eta_3^z) - \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma (-\eta_2^z + \eta_4^z) \right], \\ E_3 &= -h_{36}^0 \varepsilon_6 + k_{33}^{\varepsilon 0} \left[P_3 - \frac{1}{2} \frac{\mu_3}{v} (\eta_1^z + \eta_2^z + \eta_3^z + \eta_4^z) \right],\end{aligned}\quad (3.4)$$

де

$$h_{ij}^0 = e_{ij}^0 (\chi_{ii}^{\varepsilon 0})^{-1}, \quad k_{ii}^{\varepsilon 0} = (\chi_{ii}^{\varepsilon 0})^{-1}.$$

Підставивши вирази (3.4) у (3.2), отримаємо:

$$\begin{aligned}\sigma_4 &= c_{44}^{p0} \varepsilon_4 - h_{14}^0 \left[P_1 - \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma (\eta_1^z - \eta_3^z) - \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma (\eta_2^z - \eta_4^z) \right] - \\ &\quad - \frac{\psi_4}{v} (\eta_1^z - \eta_3^z), \\ \sigma_5 &= c_{55}^{p0} \varepsilon_5 - h_{25}^0 \left[P_2 - \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \sin \gamma (-\eta_1^z + \eta_3^z) - \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma (-\eta_2^z + \eta_4^z) \right] - \\ &\quad - \frac{\psi_5}{v} (-\eta_2^z + \eta_4^z), \\ \sigma_6 &= c_{66}^{p0} \varepsilon_6 - h_{36}^0 \left[P_3 - \frac{1}{2} \frac{\mu_3}{v} (\eta_1^z + \eta_2^z + \eta_3^z + \eta_4^z) \right] + \\ &\quad + \frac{\psi_6}{v} (\eta_1^z + \eta_2^z + \eta_3^z + \eta_4^z),\end{aligned}\quad (3.5)$$

де $c_{jj}^{p0} = c_{jj}^{E0} + e_{ij}^0 h_{ij}^0$.

Враховуючи вирази (2.7) і (3.3), розраховуємо компоненти ізотермічної статистичної діелектричної сприйнятливості СОФ у випадку механічно затиснутого кристалу. В сегнетоелектричній фазі отримано такі результати:

$$\chi_{11S}^{\varepsilon T}(0) = \chi_{11}^{\varepsilon 0} + \frac{\bar{v}}{v^2} \frac{1}{2} (\mu_1^2 \cos^2 \gamma + \mu_2^2 \sin^2 \gamma) f_{11S}^{T\varepsilon}(0),$$

$$\chi_{22S}^{\varepsilon T}(0) = \chi_{22}^{\varepsilon 0} + \frac{\bar{v}}{v^2} \frac{1}{2} (\mu_1^2 \sin^2 \gamma + \mu_2^2 \cos^2 \gamma) f_{22S}^{T\varepsilon}(0), \quad (3.6)$$

$$\chi_{33s}^{\varepsilon T}(0) = \chi_{33}^{\varepsilon 0} + 2\bar{v} \frac{\mu_3^2}{v^2} f_{33s}^{T\varepsilon}(0).$$

Тут використано такі позначення:

$$f_{11S}^{T\varepsilon}(0) = f_{22S}^{T\varepsilon}(0) = \frac{1}{T} \frac{2\mathcal{K}_0^\varepsilon}{1 - \beta 2\nu_a \mathcal{K}_0^\varepsilon},$$

$$f_{33s}^{T\varepsilon}(0) = \frac{1}{T} \frac{2\mathcal{K}_0^\varepsilon}{1 - \beta 2\nu_c \mathcal{K}_0^\varepsilon},$$

а

$$\mathcal{K}_0^\varepsilon = \rho_0 \sin^2 \vartheta_0 + \lambda_0 \cos^2 \vartheta_0,$$

$$\rho_0 = \frac{th \frac{\beta}{2} H_0}{\beta H_0}, \quad \lambda_0 = \frac{1}{2} \left[1 - th^2 \frac{\beta}{2} H_0 \right], \quad \sin \vartheta_0 = \frac{2\bar{\Omega}}{H_0}, \quad \cos \vartheta_0 = \frac{H_0^z}{H_0}.$$

В параелектричній фазі маємо:

$$\chi_{11P}^{T\varepsilon}(0) = \chi_{22P}^{T\varepsilon}(0) = \chi_{11}^{\varepsilon 0} + \bar{v} \frac{\mu_1^2}{v^2} \frac{1}{T} \frac{2th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta 2\nu_a th\beta\bar{\Omega}}, \quad (3.7)$$

$$\chi_{33P}^{T\varepsilon}(0) = \chi_{33}^{\varepsilon 0} + \bar{v} \frac{\mu_3^2}{v^2} \frac{1}{T} \frac{2th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta 2\nu_c th\beta\bar{\Omega}}.$$

Вираз для $\chi_{33P}^{T\varepsilon}(0)$ узгоджується з отриманим співвідношенням для поздовжньої статичної сприйнятливості роботи [12]. Структурно співпадають співвідношення (3.6) і (3.7) із результатами робіт [17, 18], але в цих роботах вираз для H_0 дещо інший.

На основі (2.7) і (3.3) знаходимо вирази для ізотермічних коефіцієнтів п'єзоелектричної напруги в сегнетоелектричній фазі:

$$\begin{aligned} e_{14S}^T &= e_{14}^0 + \frac{\mu_1 \cos \gamma}{v} \tilde{\psi}_4 f_{11S}^{T\varepsilon}(0), \\ e_{25S}^T &= e_{25}^0 + \frac{\mu_2 \cos \gamma}{v} \tilde{\psi}_5 f_{22S}^{T\varepsilon}(0), \\ e_{36S}^T &= e_{36}^0 - \frac{\mu_3}{v} 2\tilde{\psi}_6 f_{33s}^{T\varepsilon}(0), \quad \tilde{\psi}_j = \frac{\psi_j}{k_B}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

У параелектричній же фазі маємо такі результати:

$$\begin{aligned} e_{14P}^T &= e_{14}^0 + \frac{\mu_1}{v} \tilde{\psi}_4 \frac{1}{T} \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta 2\nu_a th\beta\bar{\Omega}}, \\ e_{25P}^T &= e_{25}^0 + \frac{\mu_2}{v} \tilde{\psi}_5 \frac{1}{T} \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta 2\nu_a th\beta\bar{\Omega}}, \\ e_{36P}^T &= e_{36}^0 - 2\frac{\mu_3}{v} \tilde{\psi}_6 \frac{1}{T} \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta 2\nu_c th\beta\bar{\Omega}}. \end{aligned}$$

Диференціюючи співвідношення (3.4) за деформаціями ε_j при сталій поляризації, отримуємо вирази для ізотермічних сталих п'єзоелектричної напруги

$$h_{14}^T = \frac{e_{14}^T}{\chi_{11}^{\varepsilon T}}, \quad h_{25}^T = \frac{e_{25}^T}{\chi_{22}^{\varepsilon T}}, \quad h_{36}^T = \frac{e_{36}^T}{\chi_{33}^{\varepsilon T}}. \quad (3.9)$$

Розрахуємо внесок протонної системи в ізотермічну пружну сталу, який зумовлений протонною підсистемою. Зі співвідношень (3.2) знаходимо, що в сегнетоелектричній фазі

$$\begin{aligned} c_{44S}^{ET} &= c_{44}^{E0} + \frac{2\tilde{\psi}_4^2}{\bar{v}} f_{11S}^{T\varepsilon}(0), \\ c_{55S}^{ET} &= c_{55}^{E0} + \frac{2\tilde{\psi}_5^2}{\bar{v}} f_{22S}^{T\varepsilon}(0), \\ c_{66S}^{ET} &= c_{66}^{E0} - \frac{4\tilde{\psi}_6^2}{\bar{v}} f_{33s}^{T\varepsilon}(0), \end{aligned} \quad (3.10)$$

а в параелектричній

$$\begin{aligned} c_{44P}^{ET} &= c_{44}^{E0} + \frac{2\tilde{\psi}_4^2}{\bar{v}} \frac{1}{T} \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta 2\nu_a th\beta\bar{\Omega}}, \\ c_{55P}^{ET} &= c_{55}^{E0} + \frac{2\tilde{\psi}_5^2}{\bar{v}} \frac{1}{T} \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta 2\nu_a th\beta\bar{\Omega}}, \\ c_{66P}^{ET} &= c_{66}^{E0} - \frac{4\tilde{\psi}_6^2}{\bar{v}} \frac{1}{T} \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta 2\nu_c th\beta\bar{\Omega}}. \end{aligned}$$

Пружні ізотермічні сталі при сталій поляризації легко розрахувати таким чином:

$$c_{jj}^{PT} = c_{jj}^{ET} + e_{ij}^T h_{ij}^T. \quad (3.11)$$

Визначаючи із виразів (3.2) деформації ε_j і підставляючи їх у (3.1), отримуємо електричну функцію Гіббса:

$$\begin{aligned} g_1 &= -\frac{1}{2} \bar{v} s_{44}^{E0} \sigma_4^2 - \frac{1}{2} \bar{v} s_{55}^{E0} \sigma_5^2 - \frac{1}{2} \bar{v} s_{66}^{E0} \sigma_6^2 - \\ &- \bar{v} d_{14}^0 \sigma_4 E_1 - \bar{v} d_{25}^0 \sigma_5 E_2 - \bar{v} d_{36}^0 \sigma_6 E_3 - \\ &- \frac{1}{2} \bar{v} \chi_{11}^{\sigma 0} E_1^2 - \frac{1}{2} \bar{v} \chi_{22}^{\sigma 0} E_2^2 - \frac{1}{2} \bar{v} \chi_{33}^{\sigma 0} E_3^2 + \\ &+ \frac{1}{2} \tilde{\nu}_1 [(\eta_1^z)^2 + (\eta_2^z)^2 + (\eta_3^z)^2 + (\eta_4^z)^2] + \\ &+ \tilde{\nu}_3 (\eta_1^z \eta_3^z + \eta_2^z \eta_4^z) + \tilde{\nu}_2 (\eta_1^z \eta_2^z + \eta_2^z \eta_3^z + \eta_3^z \eta_4^z + \eta_4^z \eta_1^z) - \\ &- 4T \ln 2 - T \sum_{f=1}^4 \ln ch \frac{\beta}{2} \bar{H}_f, \end{aligned} \quad (3.12)$$

де

$$s_{jj}^{E0} = (c_{jj}^{E0})^{-1}, \quad d_{ij}^0 = e_{ij}^0 s_{jj}^{E0}, \quad \chi_{ii}^{S0} = \chi_{ij}^0 + e_{ij}^0 d_{ij}^0,$$

$$\bar{H}_f = \sqrt{(2\bar{\Omega})^2 + (\bar{H}_1^z)^2},$$

а

$$\begin{aligned} \bar{H}_1^z &= \left(2\nu_1 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0} - \frac{2\psi_4^2}{v} s_{44}^{E0}\right) \eta_1^z + \left(2\nu_2 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0}\right) \eta_2^z + \\ &+ \left(2\nu_3 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0} + 2\frac{\psi_4^2}{v} s_{44}^{E0}\right) \eta_3^z + \left(2\nu_2 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0}\right) \eta_4^z - \\ &- 2\psi_6 s_{66}^{E0} \sigma_6 + 2\psi_4 s_{44}^{E0} \sigma_4 + \\ &+ (\mu_3 - 2\psi_6 d_{36}^0) E_3 + (\mu_1 \cos \gamma + 2\psi_4 d_{14}^0) E_1 - \mu_1 \sin \gamma E_2, \\ \bar{H}_2^z &= \left(2\nu_2 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0}\right) \eta_1^z + \left(2\nu_1 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0} - \frac{\psi_5^2}{v} s_{55}^{E0}\right) \eta_2^z + \\ &+ \left(2\nu_2 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0}\right) \eta_3^z + \left(2\nu_3 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0} + \frac{2\psi_5^2}{v} s_{55}^{E0}\right) \eta_4^z - \\ &- 2\psi_6 s_{66}^{E0} \sigma_6 + 2\psi_5 s_{55}^{E0} \sigma_5 + \\ &+ (\mu_3 - 2\psi_6 d_{36}^0) E_3 + \mu_2 \sin \gamma E_1 - (\mu_2 \cos \gamma + 2\psi_5 d_{25}^0) E_2, \\ \bar{H}_3^z &= \left(2\nu_3 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0} - \frac{2\psi_4^2}{v} s_{44}^{E0}\right) \eta_1^z + \left(2\nu_2 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0}\right) \eta_2^z + \\ &+ \left(2\nu_1 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0} + \frac{2\psi_4^2}{v} s_{44}^{E0}\right) \eta_3^z + \left(2\nu_2 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0}\right) \eta_4^z - \\ &- 2\psi_6 s_{66}^{E0} \sigma_6 - 2\psi_4 s_{44}^{E0} \sigma_4 + \\ &+ (\mu_3 - 2\psi_6 d_{36}^0) E_3 - (\mu_1 \cos \gamma + 2\psi_4 d_{14}^0) E_1 + \mu_1 \sin \gamma E_2, \\ \bar{H}_4^z &= \left(2\nu_2 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0}\right) \eta_1^z + \left(2\nu_3 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0} + \frac{2\psi_5^2}{v} s_{55}^{E0}\right) \eta_2^z + \\ &+ \left(2\nu_2 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0}\right) \eta_3^z + \left(2\nu_1 + \frac{2\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0} - \frac{2\psi_5^2}{v} s_{55}^{E0}\right) \eta_4^z - \\ &- 2\psi_6 s_{66}^{E0} \sigma_6 + 2\psi_5 s_{55}^{E0} \sigma_5 + \\ &+ (\mu_3 - 2\psi_6 d_{36}^0) E_3 - \mu_2 \sin \gamma E_1 + (\mu_2 \cos \gamma + 2\psi_5 d_{25}^0) E_2. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Пружне і діелектричне рівняння стану в цьому випадку мають такий вигляд:

$$\frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g_1}{\partial \sigma_j} \right)_{E_i, T} = -\varepsilon_j, \quad \frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g_1}{\partial E_i} \right)_{\sigma_j, T} = -P_i. \quad (3.14)$$

Звідси знаходимо, що

$$\begin{aligned} \varepsilon_4 &= s_{44}^{E0} \sigma_4 + d_{14}^0 E_1 + \frac{\psi_4}{v} s_{44}^{E0} (\eta_1^z - \eta_3^z), \\ \varepsilon_5 &= s_{55}^{E0} \sigma_5 + d_{25}^0 E_2 + \frac{\psi_5}{v} s_{55}^{E0} (-\eta_2^z + \eta_4^z), \\ \varepsilon_6 &= s_{66}^{E0} \sigma_6 + d_{36}^0 E_3 - \frac{\psi_6}{v} s_{66}^{E0} (\eta_1^z + \eta_2^z + \eta_3^z + \eta_4^z), \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} P_1 &= d_{14}^0 \sigma_4 + \chi_{11}^{\sigma 0} E_1 + \\ &+ \frac{1}{2v} (\mu_1 \cos \gamma + 2\psi_4 d_{14}^0) (\eta_1^z - \eta_3^z) + \frac{\mu_2}{2v} \sin \gamma (\eta_2^z - \eta_4^z), \\ P_2 &= d_{25}^0 \sigma_5 + \chi_{22}^{\sigma 0} E_2 + \\ &+ \frac{\mu_1}{2v} \sin \gamma (-\eta_1^z + \eta_3^z) + \frac{1}{2v} (\mu_2 \cos \gamma + 2\psi_5 d_{25}^0) (-\eta_2^z + \eta_4^z), \\ P_3 &= d_{36}^0 \sigma_6 + \chi_{33}^{\sigma 0} E_3 + \frac{1}{2v} (\mu_3 - 2\psi_6 d_{36}^0) (\eta_1^z + \eta_2^z + \eta_3^z + \eta_4^z). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Зі співвідношень (3.16) знаходимо, що

$$\begin{aligned} E_1 &= -g_{14}^0 \sigma_4 + k_{11}^{\sigma 0} P_1 - \\ &- \frac{1}{2v} (\mu_1 \cos \gamma k_{11}^{\sigma 0} + \psi_4 g_{14}^0) (\eta_1^z - \eta_3^z) - \frac{\mu_2}{2v} \sin \gamma k_{11}^{\sigma 0} (\eta_2^z - \eta_4^z), \\ E_2 &= -g_{25}^0 \sigma_5 + k_{22}^{\sigma 0} P_2 - \\ &- \frac{\mu_1}{2v} \sin \gamma k_{22}^{\sigma 0} (-\eta_1^z + \eta_3^z) - \left(\frac{\mu_2}{v} \cos \gamma k_{22}^{\sigma 0} + \psi_5 g_{25}^0 \right) (-\eta_2^z + \eta_4^z), \\ E_3 &= -g_{36}^0 \sigma_6 + k_{33}^{\sigma 0} P_3 - \frac{1}{2v} \left(\frac{\mu_3}{2} k_{33}^{\sigma 0} - 2\psi_6 g_{36}^0 \right) (\eta_1^z + \eta_2^z + \eta_3^z + \eta_4^z), \end{aligned} \quad (3.17)$$

де

$$g_{ij}^0 = d_{ij}^0 k_{ii}^{\sigma 0}, \quad k_{ij}^{\sigma 0} = (\chi_{ii}^{\sigma 0})^{-1}.$$

Використовуючи співвідношення (3.16), можна розрахувати компоненти ізотермічної статичної діелектричної сприйнятливості вільного кристалу, які в сегнетоелектричній фазі мають такий вигляд:

$$\begin{aligned} \chi_{11S}^{\sigma T}(0) &= \chi_{11}^{\sigma 0} + \frac{\bar{v}}{4v^2} \left[(\mu_1 \cos \gamma + 2\psi_4 d_{14}^0)^2 + \mu_2^2 \sin^2 \gamma \right] f_{11S}^{T\sigma}(0), \\ \chi_{22S}^{\sigma T}(0) &= \chi_{22}^{\sigma 0} + \frac{\bar{v}}{4v^2} \left[\mu_1^2 \sin^2 \gamma + (\mu_2 \cos \gamma + 2\psi_5 d_{25}^0)^2 \right] f_{22S}^{T\sigma}(0), \\ \chi_{33S}^{\sigma T}(0) &= \chi_{33}^{\sigma 0} + \frac{\bar{v}}{v^2} (\mu_3 - 2\psi_6 d_{36}^0)^2 f_{33S}^{T\sigma}(0). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Тут використані такі позначення:

$$\begin{aligned}
f_{11S}^{T\sigma}(0) &= \frac{1}{T} \frac{\varkappa_0^\sigma}{1 - \beta 2\bar{\nu}_{a4} \varkappa_0^\sigma}, \\
f_{22S}^{T\sigma}(0) &= \frac{1}{T} \frac{\varkappa_0^\sigma}{1 - \beta 2\bar{\nu}_{a5} \varkappa_0^\sigma}, \\
f_{33s}^{T\sigma}(0) &= \frac{1}{T} \frac{2\varkappa_0^\sigma}{1 - \beta 2\bar{\nu}_c \varkappa_0^\sigma}, \\
\bar{\nu}_{a4} &= 2\nu_a + 4 \frac{\psi_4^2}{v} s_{44}^{E0}, \quad \bar{\nu}_{a5} = 2\nu_a + 4 \frac{\psi_5^2}{v} s_{55}^{E0}, \quad 2\bar{\nu}_c = 2\nu_c + 8 \frac{\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0}, \\
\varkappa_0^\sigma &= \bar{\rho}_0 \sin^2 \bar{\vartheta}_0 + \bar{\lambda}_0 \cos^2 \bar{\vartheta}_0, \\
\bar{\rho}_0 &= \frac{th \frac{\beta}{2} \bar{H}_0}{\beta \bar{H}_0}, \quad \bar{\lambda}_0 = \frac{1}{2} \left[1 - th^2 \frac{\beta}{2} \bar{H}_0 \right], \quad \sin \bar{\vartheta}_0 = \frac{2\bar{\Omega}}{\bar{H}_0}, \quad \cos \bar{\vartheta}_0 = \frac{\bar{H}_0^z}{\bar{H}_0}. \\
\bar{H}_0 &= \sqrt{(2\bar{\Omega})^2 + \left\{ \left(2\nu_c + 8 \frac{\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0} \right) \eta_s^{(z)} \right\}^2}.
\end{aligned}$$

При температурі $T > T_c$ отримуємо такі результати:

$$\begin{aligned}
\chi_{11p}^{\sigma T}(0) &= \chi_{11}^{\sigma 0} + \frac{\bar{v}}{4v^2} (\mu_1 + 2\psi_4 d_{14}^0)^2 \frac{1}{T} \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta \left(2\nu_a + 4 \frac{\psi_4^2}{v} s_{44}^{E0} \right) th\beta\bar{\Omega}}, \\
\chi_{22p}^{\sigma T}(0) &= \chi_{22}^{\sigma 0} + \frac{\bar{v}}{4v^2} (\mu_2 + 2\psi_5 d_{25}^0)^2 \frac{1}{T} \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta \left(2\nu_a + 4 \frac{\psi_5^2}{v} s_{55}^{E0} \right) th\beta\bar{\Omega}}, \\
\chi_{33p}^{\sigma T}(0) &= \chi_{33}^{\sigma 0} + \frac{\bar{v}}{v^2} (\mu_3 - 2\psi_6 d_{36}^0)^2 \frac{1}{T} \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta (2\nu_c + 8 \frac{\psi_6^2}{v} s_{66}^{E0}) th\beta\bar{\Omega}}.
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Ізотермічні коефіцієнти п'єзоелектричної деформації d_{ij}^T знаходимо, продиференціювавши вирази (3.16) за напругами σ_j :

$$\begin{aligned}
d_{14S}^T &= d_{14}^0 + (\mu_1 \cos \gamma + 2\psi_4 d_{14}^0) \tilde{\psi}_4 s_{44}^{E0} f_{11S}^{T\sigma}(0), \\
d_{25S}^T &= d_{25}^0 + (\mu_2 \cos \gamma + 2\psi_5 d_{25}^0) \tilde{\psi}_5 s_{55}^{E0} f_{22S}^{T\sigma}(0), \\
d_{36S}^T &= d_{36}^0 - 2 (\mu_3 - 2\psi_6 d_{36}^0) \tilde{\psi}_6 s_{66}^{E0} f_{33s}^{T\sigma}(0).
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Із виразу (3.17) отримуємо співвідношення для ізотермічних сталей п'єзоелектричної деформації g_{ij}^T :

$$g_{ij}^T = \frac{d_{ij}^T}{\chi_{ii}^{\sigma T}}. \tag{3.21}$$

Диференціюючи вирази (3.15) за напругами σ_j , отримуємо наступні співвідношення для ізотермічних податливостей:

$$\begin{aligned}
s_{44S}^{ET} &= s_{44}^{E0} + 2 \frac{\tilde{\psi}_4^2}{v} (s_{44}^{E0})^2 f_{11S}^{T\sigma}(0), \\
s_{55S}^{ET} &= s_{55}^{E0} + 2 \frac{\tilde{\psi}_5^2}{v} (s_{55}^{E0})^2 f_{22S}^{T\sigma}(0), \\
s_{66S}^{ET} &= s_{66}^{E0} + 4 \frac{\tilde{\psi}_6^2}{v} (s_{66}^{E0})^2 f_{33s}^{T\sigma}(0),
\end{aligned} \tag{3.22}$$

$$\begin{aligned}
s_{44p}^{ET} &= s_{44}^{E0} + 2 \frac{\tilde{\psi}_4^2}{v} (s_{44}^{E0})^2 \frac{1}{T} \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta 2\bar{\nu}_{a4} th\beta\bar{\Omega}}, \\
s_{55S}^{ET} &= s_{55}^{E0} + 2 \frac{\tilde{\psi}_5^2}{v} (s_{55}^{E0})^2 \frac{1}{T} \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta 2\bar{\nu}_{a5} th\beta\bar{\Omega}}, \\
s_{66S}^{ET} &= s_{66}^{E0} + 4 \frac{\tilde{\psi}_6^2}{v} (s_{66}^{E0})^2 \frac{1}{T} \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta 2\bar{\nu}_c th\beta\bar{\Omega}}.
\end{aligned} \tag{3.23}$$

При температурі $T = T_c$ обернена діелектрична сприйнятливість вільного кристалу $(\chi_{33p}^{\sigma T}(0))^{-1} = 0$, що дозволяє отримати рівняння для температури фазового переходу T_c , яке має наступний вигляд:

$$\frac{2\tilde{\Omega}}{2\tilde{\nu}_c + 8 \frac{\tilde{\psi}_6^2}{v} s_{66}^{E0}} = th \frac{\tilde{\Omega}}{T_c}, \quad \left(\tilde{\Omega} = \frac{\bar{\Omega}}{k_B} \right). \tag{3.24}$$

Якщо не враховувати п'єзоелектричний зв'язок ($\tilde{\psi}_6 = 0$), то із виразу для T_c (3.24) випливає результат, який узгоджується із виразом, отриманим в роботі [12], і не співпадає із наведеним рівнянням в роботах [17, 18].

4. Вплив механічних напруг на теплові властивості KN_2PO_4

Молярна ентропія кристалів типу KN_2PO_4 , що обумовлена протонною системою, має наступний вигляд:

$$S_\mu = -R \left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)_{E_i, \sigma_i} = 2R \left\{ \ln 2 + \ln ch \frac{\beta}{2} H_0 - \frac{\beta}{2} H_0 th \frac{\beta}{2} H_0 \right\}, \quad (4.1)$$

Молекулярну теплоємність кристалу, яка обумовлена його протонною системою, при сталій напрузі обчислимо, безпосередньо диференціюючи ентропію:

$$\Delta C_6^\sigma = T \left(\frac{\partial S_\mu}{\partial T} \right)_\sigma = \Delta C_6^\varepsilon + q_6^p \alpha_6, \quad (4.2)$$

де ΔC_6^ε – молярна теплоємність при сталій деформації і

$$\Delta C_6^\varepsilon = q_6^{p,\varepsilon} + q_6^\varepsilon p_6^\sigma. \quad (4.3)$$

Використовуючи співвідношення (4.1), знаходимо

$$q_6^{p,\varepsilon} = T \left(\frac{\partial S_\mu}{\partial T} \right)_{p_3, \varepsilon_6} = \frac{R}{2} [\beta H_0]^2 \left[1 - th^2 \frac{\beta}{2} H_0 \right],$$

$$q_6^\varepsilon = T \left(\frac{\partial S_\mu}{\partial P_3} \right)_{\varepsilon_6, E_3} = -\frac{R}{2} \frac{v}{\mu_3} \beta \nu_c H_0^z \left[1 - th^2 \frac{\beta}{2} H_0 \right]$$

– теплота поляризації при заданому ε_6 ,

$$q_6^P = T \left(\frac{\partial S_\mu}{\partial \varepsilon_6} \right)_{P_3, T} = \frac{R}{2} 2\tilde{\psi}_6 \beta H_0^z \left[1 - th^2 \frac{\beta}{2} H_0 \right]$$

– теплота деформації при заданому P_3 .

У виразах (4.2) і (4.3) $p_6^\sigma = \left(\frac{\partial P_3}{\partial T} \right)_{\sigma_6, E_3}$ – піроелектричний коефіцієнт, а $\alpha_6 = \left(\frac{\partial \varepsilon_6}{\partial T} \right)_{\sigma_6, E_3}$ – “коефіцієнт теплового розширення” – величина, яка пов’язана з температурною залежністю зсувної деформації ε_6 . Тут не розглядаються істинні коефіцієнти теплового розширення, які зв’язані з діагональними компонентами тензора деформації.

На основі виразу (3.3) отримуємо, що

$$p_6^\sigma = p_6^\varepsilon + e_{36}^T \alpha_6, \quad (4.4)$$

де

$$p_6^\varepsilon = -2 \frac{\mu_3}{v} \beta^2 \frac{\tilde{H}_0^z \frac{1}{2} \left[1 - th^2 \frac{\beta}{2} H_0 \right]}{1 - \beta 2 \nu_c \varkappa_0}.$$

А “коефіцієнт теплового розширення”

$$\alpha_6 = \frac{-q_6^P + h_{36} p_6^\varepsilon}{c_{66}^E}. \quad (4.5)$$

5. Динаміка псевдоспінів механічно затиснутого кристалу KN_2PO_4 в наближенні хаотичних фаз

Будемо розглядати рух псевдоспінів відносно молекулярного поля в наближенні хаотичних фаз (НХФ), коли ефективним загасанням можна знехтувати. Слід відзначити, що НХФ є узагальненням НМП на випадок задач із часовою залежністю. Надалі при розгляді динаміки KN_2PO_4 будемо використовувати методику, яка розвинута в [12].

Розглянемо відгук псевдоспінової системи на мале зовнішнє електричне поле $E_{iqt} = E_{iq} e^{i\omega t}$, яке залежить від часу і просторових координат. Тоді гамільтоніан \hat{H}_S також залежить від часу, і будуть часозалежними середні значення псевдоспінових операторів.

Гейзенберівське рівняння руху для середніх значень псевдоспінових операторів в НХФ має такий вигляд:

$$\hbar \frac{d\langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle}{dt} = -i \langle [\vec{\sigma}_{qf}, \hat{H}_S] \rangle, \quad (5.1)$$

де

$$\hat{H}_S = - \sum_{qf} \vec{H}_{qf} \frac{\vec{\sigma}_{qf}}{2}.$$

Тут використано такі позначення:

$$H_{q1}^z = \frac{1}{2} \sum_{q'f'} J_{ff'}(qq') \langle \sigma_{q'f'}^z \rangle - 2\psi_6 \varepsilon_6 + 2\psi_4 \varepsilon_4 + \mu_3 E_{3q} + \mu_1 \cos \gamma E_{1q} - \mu_1 \sin \gamma E_{2q},$$

$$H_{q2}^z = \frac{1}{2} \sum_{q'f'} J_{ff'}(qq') \langle \sigma_{q'f'}^z \rangle - 2\psi_6 \varepsilon_6 - 2\psi_5 \varepsilon_5 + \mu_3 E_{3q} + \mu_2 \sin \gamma E_{1q} - \mu_2 \cos \gamma E_{2q},$$

$$H_{q3}^z = \frac{1}{2} \sum_{q'f'} J_{ff'}(qq') \langle \sigma_{q'f'}^z \rangle - 2\psi_6 \varepsilon_6 - 2\psi_4 \varepsilon_4 + \mu_3 E_{3q} - \mu_1 \cos \gamma E_{1q} + \mu_1 \sin \gamma E_{2q},$$

$$H_{q4}^z = \frac{1}{2} \sum_{q'f'} J_{ff'}(qq') \langle \sigma_{q'f'}^z \rangle - 2\psi_6 \varepsilon_6 + 2\psi_5 \varepsilon_5 + \mu_3 E_{3q} - \mu_2 \sin \gamma E_{1q} + \mu_2 \cos \gamma E_{2q}. \quad (5.2)$$

Із врахуванням (5.2) рівняння руху (5.1) набувають вигляду:

$$\hbar \frac{d\langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle}{dt} = \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle \times \vec{H}_{qf}. \quad (5.3)$$

Представимо $\langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle$ у вигляді суми двох доданків: сталого члена $\vec{\eta}_f$, що дорівнює середньому значенню псевдоспіна в НМП, і залежного від часу малого відхилення від згаданого результату в НМП, тобто

$$\langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle = \vec{\eta}_f + \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle_t. \quad (5.4)$$

Аналогічно запишемо і гамільтоніан

$$\vec{H}_{qf} = \vec{H}_f + \vec{H}_{qft}, \quad (5.5)$$

де

$$\begin{aligned} \vec{H}_{q_3^z t} &= \{0, 0, \frac{1}{2} \sum_{q'f'} J_{ff'}(qq') \langle \sigma_{q'f'}^z \rangle_t + \\ &\quad + \mu_3 E_{3qt} \pm \mu_1 \cos \gamma E_{1qt} \mp \mu_1 \sin \gamma E_{2qt} \}, \\ \vec{H}_{q_3^z t} &= \{0, 0, \frac{1}{2} \sum_{q'f'} J_{ff'}(qq') \langle \sigma_{q'f'}^z \rangle_t + \\ &\quad + \mu_3 E_{3qt} \pm \mu_2 \sin \gamma E_{1qt} \mp \mu_2 \cos \gamma E_{2qt} \}. \end{aligned}$$

Рівняння руху (5.3) з врахуванням виразів (5.4) і (5.5) можуть бути лінеаризовані, якщо залишити лише члени, які лінійні за відхиленнями $\langle \vec{\sigma}_{qf}^z \rangle_t$ і \vec{H}_{qft} :

$$\hbar \frac{d}{dt} \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle_t = \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle_t \times \vec{H}_f + \vec{\eta}_f \times \vec{H}_{qft}. \quad (5.6)$$

Доданок $\vec{\eta}_f \times \vec{H}_{qft}$ тотожно дорівнює нулю, оскільки середнє значення псевдоспіна орієнтоване вздовж напрямку молекулярного поля.

В результаті, враховуючи вирази \vec{H}_f і \vec{H}_{qft} , отримуємо наступну систему рівнянь:

$$\begin{aligned} \hbar \frac{d}{dt} \langle \sigma_{qf}^x \rangle_t &= H_f^z \langle \sigma_{qf}^y \rangle_t, \\ \hbar \frac{d}{dt} \langle \sigma_{qf}^y \rangle_t &= -H_f^z \langle \sigma_{qf}^x \rangle_t + 2\bar{\Omega} \langle \sigma_{qf}^z \rangle_t - \eta_f^x H_{qft}^z, \\ \hbar \frac{d}{dt} \langle \sigma_{qf}^z \rangle_t &= -2\bar{\Omega} \langle \sigma_{qf}^y \rangle_t. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Таким чином, ми отримали систему $12N$ лінійних рівнянь, які зв'язують амплітуди флуктуацій псевдоспінів відносно молекулярного поля з амплітудами зовнішніх електричних полів, які залежать від часу. Ця система може бути зведена до N систем 12 рівнянь для заданого хвильового вектора \vec{k} за допомогою перетворення Фур'є:

$$\begin{aligned} \langle \vec{\sigma}_f(\vec{k}) \rangle_t &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle_t e^{-i\vec{k}\vec{R}_q}, \\ E_{it}(\vec{k}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q E_{iqt} e^{-i\vec{k}\vec{R}_q}, \\ J_{ff'}(\vec{k}) &= \sum_q J_{ff'}(q - q') e^{-i\vec{k}(\vec{R}_q - \vec{R}_{q'})}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Із системи рівнянь (5.7) з врахуванням (5.8) знаходимо для KN_2PO_4 при $\vec{k} = 0$ при прикладанні поздовжнього електричного поля $E_3(0)$ наступну систему рівнянь:

$$\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \langle \sigma_{33}^x(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^y(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & c_{12} & 0 \\ c_{21} & 0 & c_{23} \\ 0 & c_{32} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \sigma_{33}^x(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^y(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} - \mu_3 E_{3t}(0) \begin{pmatrix} 0 \\ c_2 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

Тут використані такі позначення:

$$\begin{aligned} c_{12} &= 2\nu_c(0)\eta_s^z - 2\psi_6\varepsilon_6, \\ c_{21} &= -[2\nu_c(0)\eta_s^z - 2\psi_6\varepsilon_6], \quad c_{23} = 2\bar{\Omega} - 2\nu_c(0)\eta_s^x, \quad c_2 = \eta_s^x, \\ c_{32} &= -2\bar{\Omega}. \end{aligned}$$

Розв'язуючи систему рівнянь (5.9), отримаємо диференціальне рівняння зі сталими коефіцієнтами для $\langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t$:

$$\hbar^3 \frac{d^3}{dt^3} \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t + m_1 \hbar \frac{d}{dt} \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t = \mu_3 E_{3t}(0) m^{(1)}, \quad (5.10)$$

де

$$\begin{aligned} m_1 &= [2\nu_c(0)\eta_s^z - 2\psi_6\varepsilon_6]^2 + 2\bar{\Omega} [2\bar{\Omega} - 2\nu_c(0)\eta_s^x], \\ m^{(1)} &= 2\bar{\Omega}\eta_s^x. \end{aligned}$$

Звідси часозалежне середнє значення псевдоспіна $\langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t$, яке дорівнює сумі загального і частинного розв'язку рівняння (5.9), має наступний вигляд:

$$\langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t = C_1 + C_2 \cos \sqrt{m_1'} t + C_3 \sin \sqrt{m_1'} t + \mu_3 E_{3t}(0) f_{33s}^{\text{HX}\Phi}(\bar{\omega}),$$

де

$$f_{33s}^{\text{HX}\Phi}(\bar{\omega}) = \frac{(i\bar{\omega})m^{(1)}}{(i\bar{\omega})^2 + (i\bar{\omega})m_1} = \frac{1}{T} \frac{\rho_0 \sin^2 \vartheta_0 H_0^2}{(i\bar{\omega})^2 + [1 - \beta 2\nu_c(0)\rho_0 \sin^2 \vartheta_0] H_0^2},$$

C_1, C_2, C_3 – сталі, а $\bar{\omega} = \hbar\omega$.

В результаті, поздовжня динамічна діелектрична сприйнятливість механічно затиснутого кристалу в НХФ має наступний вигляд:

$$\begin{aligned}\chi_{33s}^{\varepsilon\text{HX}\Phi}(\bar{\omega}) &= \chi_{33}^{\varepsilon_0} + \bar{v} \frac{\mu_3^z}{v^2} f_{33s}^{\text{HX}\Phi}(\bar{\omega}) = \\ &= \chi_{33}^{\varepsilon_0} + \bar{v} \frac{\mu_3^z}{v^2} \frac{f_{33s}^{\text{HX}\Phi}(0)}{1 + (i\bar{\omega}\tau_{3\text{HX}\Phi}^{\varepsilon})^2},\end{aligned}\quad (5.11)$$

де

$$\begin{aligned}f_{33s}^{\text{HX}\Phi}(0) &= \frac{1}{T} \frac{\rho_0 \sin^2 \vartheta_0}{1 - \beta 2\nu_c(0) \rho_0 \sin^2 \vartheta_0}, \\ \tau_{3\text{HX}\Phi}^{\varepsilon} &= \frac{1}{\{[1 - \beta 2\nu_c(0) \rho_0 \sin^2 \vartheta_0] H_0^2\}^{\frac{1}{2}}}.\end{aligned}\quad (5.12)$$

Видно, що розрахований в НХФ вираз $f_{33}^{\text{HX}\Phi}(0)$ відрізняється від $f_{33}^{T\varepsilon}(0, \sigma_3)$, який визначає ізотермічну статичну діелектричну сприйнятливість.

В параелектричній фазі із системи рівнянь (5.7), враховуючи (5.8), маємо:

$$\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \langle \sigma_{33}^x(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^y(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_{23} \\ 0 & c_{32} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \sigma_{33}^x(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^y(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} - \mu_3 E_{3t}(0) \begin{pmatrix} 0 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}.\quad (5.13)$$

Звідси легко отримати

$$\hbar^2 \frac{d^2}{dt^2} \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t + k_0 \hbar \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t = \mu_3 E_{3t}(0) k^{(0)},\quad (5.14)$$

де

$$k_0 = 2\bar{\Omega} [2\bar{\Omega} - 2\nu_c(0)\eta_s^x], \quad k^{(0)} = 2\bar{\Omega}\eta_s^x.$$

Розв'язок рівняння (5.14) має наступний вигляд:

$$\langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t^p = C_1 \cos \sqrt{k_0^p} + C_2 \sin \sqrt{k_0^p} + \frac{\mu_3}{2k_B} E_{3t}(0) f_{33p}^{\text{HX}\Phi}(\bar{\omega}),\quad (5.15)$$

де

$$f_{33p}^{\text{HX}\Phi}(\bar{\omega}) = \frac{1}{T} \frac{2\bar{\Omega} th(\beta\bar{\Omega})}{(i\bar{\omega})^2 + 2\bar{\Omega} [2\bar{\Omega} - 2\nu_c(0) th(\beta\bar{\Omega})]}.$$

В результаті динамічна діелектрична сприйнятливість в НХФ в парафазі має такий вигляд:

$$\chi_{33p}^{\varepsilon\text{HX}\Phi}(\bar{\omega}) = \chi_{33}^{\varepsilon_0} + \bar{v} \frac{\mu_3^z}{v^2} \frac{f_{33p}^{\text{HX}\Phi}(0)}{1 - (\bar{\omega}\tau_{3p\text{HX}\Phi}^{\varepsilon})^2},\quad (5.16)$$

де

$$\begin{aligned}f_{33p}^{\text{HX}\Phi}(0) &= \frac{1}{T} \frac{th(\beta\bar{\Omega})}{\beta 2\bar{\Omega} - \beta 2\nu_c(0) th(\beta\bar{\Omega})}, \\ \tau_{3\text{HX}\Phi}^{\varepsilon} &= \frac{1}{\{2\bar{\Omega} [2\bar{\Omega} - 2\nu_c(0) th(\beta\bar{\Omega})]\}^{\frac{1}{2}}}.\end{aligned}$$

Якщо до кристалу прикладено поле E_{1qt} , то із системи рівнянь (5.7) з врахуванням (5.8) отримуємо наступні дві системи рівнянь:

$$\begin{aligned}\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \langle \sigma_1^x(0) \rangle_t - \langle \sigma_3^x(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_1^y(0) \rangle_t - \langle \sigma_3^y(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_1^z(0) \rangle_t - \langle \sigma_3^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} &= \\ &= \begin{pmatrix} 0 & c_{12} & 0 \\ c_{21} & 0 & a_{23} \\ 0 & c_{32} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \sigma_1^x(0) \rangle_t - \langle \sigma_3^x(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_1^y(0) \rangle_t - \langle \sigma_3^y(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_1^z(0) \rangle_t - \langle \sigma_3^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} - \mu_1 \cos \gamma E_{1t}(0) \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{c}_2 \\ 0 \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (5.17)$$

$$\begin{aligned}\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} -\langle \sigma_2^x(0) \rangle_t + \langle \sigma_4^x(0) \rangle_t \\ -\langle \sigma_2^y(0) \rangle_t + \langle \sigma_4^y(0) \rangle_t \\ -\langle \sigma_2^z(0) \rangle_t + \langle \sigma_4^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} &= \\ &= \begin{pmatrix} 0 & c_{12} & 0 \\ c_{21} & 0 & a_{23} v \\ 0 & c_{32} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\langle \sigma_2^x(0) \rangle_t + \langle \sigma_4^x(0) \rangle_t \\ -\langle \sigma_2^y(0) \rangle_t + \langle \sigma_4^y(0) \rangle_t \\ -\langle \sigma_2^z(0) \rangle_t + \langle \sigma_4^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} - \mu_2 \sin \gamma E_{1t}(0) \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{c}_2 \\ 0 \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (5.18)$$

де

$$\begin{aligned}c_{12} &= 2\nu_c(0)\eta_s^z - 2\psi_6\varepsilon_6, \\ c_{21} &= -[2\nu_c(0)\eta_s^z - 2\psi_6\varepsilon_6], \\ a_{23} &= 2\bar{\Omega} - 2\nu_a(0)\eta_s^x.\end{aligned}$$

В результаті поперечну динамічну діелектричну сприйнятливість механічно затиснутого кристалу в наближенні хаотичних фаз отримуємо в такому вигляді:

$$\chi_{11p}^{\varepsilon\text{HX}\Phi}(\bar{\omega}) = \chi_{11}^{\varepsilon_0} + \frac{1}{2} \bar{v} \left(\frac{\mu_1^2 \cos^2 \gamma}{v^2} + \frac{\mu_2^2 \sin^2 \gamma}{v^2} \right) f_{11}^{\text{HX}\Phi}(\bar{\omega}),\quad (5.19)$$

Тут використано позначення:

$$f_{11}^{\text{HX}\Phi}(\bar{\omega}) = \frac{1}{T} \frac{\rho_0 \sin^2 \vartheta_0 H_0^z}{[1 - \beta 2\nu_a(0)\rho_0 \sin^2 \vartheta_0] H_0^2 + (i\bar{\omega})^2} = \frac{f_{11}^{\text{HX}\Phi}(0)}{1 + (i\bar{\omega}\tau_{1\text{HX}\Phi}^\varepsilon)^2},$$

де

$$f_{11}^{\text{HX}\Phi}(0) = \frac{1}{T} \frac{\rho_0 \sin^2 \vartheta_0}{1 - \beta 2\nu_a(0)\rho_0 \sin^2 \vartheta_0},$$

$$\tau_{1\text{HX}\Phi}^\varepsilon = \frac{1}{\{[1 - \beta 2\nu_a(0)\rho_0 \sin^2 \vartheta_0] H_0^2\}^{\frac{1}{2}}}.$$

Для механічно затиснутого кристалу власні частоти протонної системи кристалів типу KN_2PO_4 мають вигляд:

$$(\bar{\omega}_{2,3}^\varepsilon \text{HX}\Phi)_s^2 = [2\nu_c(0)\eta_s^z - 2\psi_6\varepsilon_6]^2 + 2\hbar\Omega [2\hbar\Omega - 2\nu_c(0)\eta_s^x],$$

$$(\bar{\omega}_{4,5}^\varepsilon \text{HX}\Phi)_s^2 = [2\nu_c(0)\eta_s^z - 2\psi_6\varepsilon_6]^2 + 2\hbar\Omega [2\hbar\Omega - 2\nu_a(0)\eta_s^x];$$

$$(\bar{\omega}_{2,3}^\varepsilon \text{HX}\Phi)_p^2 = 2\hbar\Omega [2\hbar\Omega - 2\nu_c(0)th(\beta\hbar\Omega)],$$

$$(\bar{\omega}_{4,5}^\varepsilon \text{HX}\Phi)_p^2 = 2\hbar\Omega [2\hbar\Omega - 2\nu_a(0)th(\beta\hbar\Omega)].$$

6. Рівняння Блоха для руху псевдоспінів механічно затиснутого кристалу

У сегнетоелектриках типу лад-безлад, а отже і в KN_2PO_4 , важливим є ефект загасання і рух псевдоспіна в напрямку молекулярного поля, які не враховані в НХФ. Ці фактори ми беремо до уваги, додаючи феноменологічні релаксаційні члени в рівняннях руху в НХФ [12]. Ця методика аналогічна використанню рівняння Блоха в теорії магнітного резонансу.

Допустимо існування двох різних часів релаксації T_1 і T_2 , які описують релаксацію компонент паралельних ($\langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle''$) і перпендикулярних ($\langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle^\perp$) до напрямку миттєвого молекулярного поля

$$\vec{s}_{qf} = \frac{\vec{H}_{qf}}{H_{qf}}. \quad (6.1)$$

Рівняння руху “блохівського” типу мають такий вигляд:

$$\hbar \frac{d}{dt} \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle = \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle \times \vec{H}_{qf} - \frac{1}{T_1} [\langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle'' - \langle \overline{\vec{\sigma}_{qf}} \rangle''] - \frac{1}{T_2} [\langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle^\perp - \langle \overline{\vec{\sigma}_{qf}} \rangle^\perp], \quad (6.2)$$

а компоненти паралельних та перпендикулярних псевдоспінів визначені рівнянням:

$$\begin{aligned} \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle'' &= \vec{P}_q'' \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle = \vec{s}_{qf} \left\{ \vec{s}_{qf} \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle \right\} = \\ &= \vec{i} \left\{ \frac{(H^x)^2}{H_{qf}} \langle \sigma_{qf}^x \rangle + \frac{H^x H_{qf}^z}{H_{qf}} \langle \sigma_{qf}^z \rangle \right\} + \dots \\ &+ \vec{k} \left\{ \frac{H^x H_{qf}^z}{H_{qf}} \langle \sigma_{qf}^x \rangle + \frac{(H_{qf}^z)^2}{H_{qf}} \langle \sigma_{qf}^z \rangle \right\}, \quad (6.3) \\ \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle^\perp &= \vec{P}_q^\perp \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle = \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle - \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle'', \end{aligned}$$

де $H^x = 2\bar{\Omega}$, $H_{qf}^z = H^z + H_{qft}^z$, а \vec{P}_q'' і \vec{P}_q^\perp – оператори проекції, паралельної і перпендикулярної до напрямку миттєвого молекулярного поля.

Вважатимемо, що псевдоспіни релаксують до залежної від часу квазірівноваги, що визначається миттєвим значенням молекулярного поля. Квазірівноважне середнє $\langle \overline{\vec{\sigma}_{qf}} \rangle$ при цьому дається таким виразом

$$\langle \overline{\vec{\sigma}_{qf}} \rangle = \frac{\vec{H}_{qf}}{H_{qf}} th \frac{\beta}{2} H_{qf}. \quad (6.4)$$

Рівняння (6.2) описує прецесію псевдоспінів навколо миттєвого молекулярного поля і релаксацію взовж цього поля.

Розкладемо вираз (6.4) на статичну частину, яка визначається температурним середнім, і флюктуаційну частину:

$$\begin{aligned} \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle'' &= \vec{\eta}_f + \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle_t'', \\ \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle^\perp &= \vec{\eta}_f + \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle_t^\perp, \quad (6.5) \\ \langle \overline{\vec{\sigma}_{qf}} \rangle &= \vec{\eta}_f + \langle \overline{\vec{\sigma}_{qf}} \rangle_t. \end{aligned}$$

Підставляючи вираз (5.4), (5.5) і (6.5) в (6.2) і обмежуючись лінійними за відхиленнями доданками отримуємо, що:

$$\begin{aligned} \hbar \frac{d}{dt} \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle_t &= \langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle_t \times \vec{H}_{qf} + \vec{\eta}_f \vec{H}_{qft} - \\ &- \frac{1}{T_1} [\langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle_t'' - \langle \overline{\vec{\sigma}_{qf}} \rangle_t''] - \frac{1}{T_2} [\langle \vec{\sigma}_{qf} \rangle_t^\perp - \langle \overline{\vec{\sigma}_{qf}} \rangle_t^\perp]. \quad (6.6) \end{aligned}$$

Флюктуаційні частини псевдоспінів в (6.6) мають наступний вигляд:

$$\langle \sigma_{qf}^x \rangle_t'' - \langle \overline{\sigma_{qf}^x} \rangle_t'' = \sin^2 \vartheta_f \xi_{qft}^x + \sin \vartheta_f \cos \vartheta_f \xi_{qft}^z,$$

$$\langle \sigma_{qf}^y \rangle_t'' - \langle \bar{\sigma}_{qf}^y \rangle_t'' = 0, \quad (6.7)$$

$$\langle \sigma_{qf}^z \rangle_t'' - \langle \bar{\sigma}_{qf}^z \rangle_t'' = \sin \vartheta_f \cos \vartheta_f \xi_{qft}^x + \cos^2 \vartheta_f \xi_{qft}^z,$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{qf}^x \rangle_t^\perp - \langle \bar{\sigma}_{qf}^x \rangle_t^\perp &= \cos^2 \vartheta_f \xi_{qft}^x - \sin \vartheta_f \cos \vartheta_f \xi_{qft}^x, \\ \langle \sigma_{qf}^y \rangle_t^\perp - \langle \bar{\sigma}_{qf}^y \rangle_t^\perp &= 0, \\ \langle \bar{\sigma}_{qf}^z \rangle_t^\perp - \langle \sigma_{qf}^z \rangle_t^\perp &= -\sin \vartheta_f \cos \vartheta_f \xi_{qft}^x + \sin^2 \vartheta_f \xi_{qft}^z, \end{aligned} \quad (6.8)$$

де

$$\begin{aligned} \xi_{qft}^\alpha &= \langle \sigma_{qf}^\alpha \rangle_t - \langle \bar{\sigma}_{qf}^\alpha \rangle_t, \quad \alpha = x, z, \\ \langle \bar{\sigma}_{qf}^x \rangle_t &= \beta \sin \vartheta_f \cos \vartheta_f (\lambda_f - \rho_f) H_{qft}^z, \\ \langle \bar{\sigma}_{qf}^z \rangle_t &= \beta (\rho_f \sin^2 \vartheta_f + \lambda_f \cos^2 \vartheta_f) H_{qft}^z. \end{aligned}$$

Підставляючи вирази (6.7) і (6.8) в рівняння Блоха (6.6) і проводячи перетворення Фур'є (5.8), отримуємо при $\vec{k} = 0$ для часозалежних функцій $\langle \bar{\sigma}_{33}^z(0) \rangle_t$ наступну систему рівнянь при прикладенні до кристалу сталого поздовжнього електричного поля:

$$\begin{aligned} \hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \langle \sigma_{33}^x(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^y(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \sigma_{33}^x(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^y(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} - \\ &- \beta \mu_3 E_{3t}(0) \begin{pmatrix} c_1 \\ \bar{c}_2 \\ c_3 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (6.9)$$

де коефіцієнти c_{ij} мають наступний вигляд:

$$\begin{aligned} c_{11} &= -\frac{1}{T_1} \sin^2 \vartheta_0 - \frac{1}{T_2} \cos^2 \vartheta_0, \\ c_{13} &= -\frac{1}{T_1} [1 - \beta 2\nu_c(0)\lambda_0] \sin \vartheta_0 \cos \vartheta_0 + \frac{1}{T_2} [1 - \beta 2\nu_c(0)\rho_3] \sin \vartheta_0 \cos \vartheta_0, \\ c_1 &= -\frac{1}{T_1} \lambda_0 \sin \vartheta_0 \cos \vartheta_0 + \frac{1}{T_2} \rho_0 \sin \vartheta_0 \cos \vartheta_0, \\ c_{22} &= -\frac{1}{T_2}, \quad \bar{c}_2 = \frac{1}{\beta} c_2, \\ c_{31} &= -\frac{1}{T_1} \sin \vartheta_0 \cos \vartheta_0 + \frac{1}{T_2} \sin \vartheta_0 \cos \vartheta_0, \\ c_{33} &= -\frac{1}{T_1} [1 - \beta 2\nu_c(0)\lambda_0] \cos^2 \vartheta_0 - \frac{1}{T_2} [1 - \beta 2\nu_c(0)\rho_0] \sin^2 \vartheta_0, \\ c_3 &= -\frac{1}{T_1} \lambda_0 \cos^2 \vartheta_0 - \frac{1}{T_2} \rho_0 \sin^2 \vartheta_0. \end{aligned}$$

Систему рівнянь (6.9) зведемо до диференціального рівняння зі сталими коефіцієнтами $\langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t$:

$$\begin{aligned} \hbar^3 \frac{d^3}{dt^3} \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t + m_2^\varepsilon \hbar^2 \frac{d^2}{dt^2} \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t + m_1^\varepsilon \hbar \frac{d}{dt} \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t + m_0^\varepsilon \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t = \\ = \beta \mu_3 E_{3t}(0) \left[(i\bar{\omega})^2 m^{(2)} + (i\bar{\omega}) m^{(1)} + m^{(0)} \right]. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Тут використані наступні позначення:

$$\begin{aligned} m_2^\varepsilon &= -[c_{11} + c_{22} + c_{33}], \\ m_1^\varepsilon &= \begin{vmatrix} c_{33} & c_{32} \\ c_{23} & c_{22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{33} & c_{31} \\ c_{13} & c_{11} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{22} & c_{21} \\ c_{12} & c_{11} \end{vmatrix}, \\ m_0^\varepsilon &= - \begin{vmatrix} c_{33} & c_{32} & c_{31} \\ c_{23} & c_{22} & c_{21} \\ c_{13} & c_{12} & c_{11} \end{vmatrix}, \\ m^{(2)} &= -c_3, \quad m^{(1)} = - \left(\begin{vmatrix} c_{32} & c_3 \\ c_{22} & \bar{c}_2 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{31} & c_3 \\ c_{11} & c_1 \end{vmatrix} \right), \\ m^{(0)} &= - \begin{vmatrix} c_{32} & c_{31} & c_3 \\ c_{22} & c_{21} & \bar{c}_2 \\ c_{12} & c_{11} & c_1 \end{vmatrix}. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Розв'язок рівняння (6.10) має наступний вигляд:

$$\langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t = \sum_{i=1}^3 C_i e^{-\frac{t}{\tau_{i3}^\varepsilon}} + \beta \mu_3 E_{3t}(0) f_{33s}^\varepsilon(\bar{\omega}), \quad (6.12)$$

де $\tau_{i3}^\varepsilon = -\frac{1}{q_{i3}^\varepsilon}$ - часи релаксації, а q_{i3}^ε - корені характеристичного рівняння

$$(q_3^\varepsilon)^3 + m_2^\varepsilon (q_3^\varepsilon)^2 + m_1^\varepsilon (q_3^\varepsilon) + m_0^\varepsilon = 0. \quad (6.13)$$

В (6.11)

$$f_{33s}^\varepsilon(\bar{\omega}) = \frac{1}{T} \frac{(i\bar{\omega})^2 m^{(2)} + (i\bar{\omega}) m^{(1)} + m^{(0)}}{(i\bar{\omega})^3 + (i\bar{\omega})^2 m_2^\varepsilon + (i\bar{\omega}) m_1^\varepsilon + m_0^\varepsilon}.$$

В результаті, поздовжню динамічну діелектричну сприйнятливість механічно затиснутого кристалу KH_2PO_4 знаходимо в наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \chi_{33s}^\varepsilon(\bar{\omega}) &= \chi_{33}^{\varepsilon_0} + \bar{v} \frac{\mu_3}{v^2} \frac{1}{T} f_{33s}^\varepsilon(\bar{\omega}) = \\ &= \chi_{33}^{\varepsilon_0} + \frac{\chi_{133}^\varepsilon}{1 + i\bar{\omega}\tau_{13}^\varepsilon} + \frac{\chi_{233}^\varepsilon}{1 + i\bar{\omega}\tau_{23}^\varepsilon} + \frac{\chi_{333}^\varepsilon}{(1 + i\bar{\omega}\tau_{23}^\varepsilon)^2}, \end{aligned} \quad (6.14)$$

оскільки числовий аналіз рівняння (6.13) показує, що воно має такі розв'язки: $\tau_1, \tau_2 = \tau_3$.

Вирази для χ_{i33}^ε знаходимо із такої системи рівнянь

$$\begin{pmatrix} (\tau_{23}^\varepsilon)^2 & \tau_{13}^\varepsilon \tau_{23}^\varepsilon & 0 \\ 2\tau_{23}^\varepsilon & \tau_{13}^\varepsilon + \tau_{23}^\varepsilon & \tau_{13}^\varepsilon \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_{133}^\varepsilon \\ \chi_{233}^\varepsilon \\ \chi_{333}^\varepsilon \end{pmatrix} = \bar{\nu} \frac{\mu_3^\varepsilon \tau_{13}^\varepsilon (\tau_{23}^\varepsilon)^2}{v^2 T} \begin{pmatrix} m^{(2)} \\ m^{(1)} \\ m^{(0)} \end{pmatrix}.$$

А дійсна і уявна частини комплексної діелектричної проникності механічно затиснутого кристалу мають такий вигляд: KN_2PO_4

$$\varepsilon'_{33s}(\bar{\omega}) = \varepsilon_{33}^{\varepsilon_0} + \frac{4\pi\chi_{133}^\varepsilon}{1 + (\bar{\omega}\tau_{13}^\varepsilon)^2} + \frac{4\pi\chi_{233}^\varepsilon}{1 + (\bar{\omega}\tau_{23}^\varepsilon)^2} + \frac{4\pi[1 - (\bar{\omega}\tau_{13}^\varepsilon)^2]\chi_{333}^\varepsilon}{1 + 3(\bar{\omega}\tau_{23}^\varepsilon)^2},$$

$$\varepsilon''_{33s}(\bar{\omega}) = \frac{4\pi\chi_{133}^\varepsilon\omega\tau_{13}^\varepsilon}{1 + (\bar{\omega}\tau_{13}^\varepsilon)^2} + \frac{4\pi\chi_{233}^\varepsilon\omega\tau_{23}^\varepsilon}{1 + (\bar{\omega}\tau_{23}^\varepsilon)^2} - \frac{4\pi\chi_{333}^\varepsilon 2\omega\tau_{23}^\varepsilon}{1 + 3(\bar{\omega}\tau_{23}^\varepsilon)^2}.$$

У випадку, якщо $\frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_2} = \frac{1}{T_{12}}$, коефіцієнти диференціального рівняння (5.10) набувають наступного вигляду:

$$\bar{m}_2^\varepsilon = \frac{3}{T_{12}} \left[1 - \frac{2}{3}\nu_c(0)\varkappa_0 \right] = \frac{1}{T_{12}} \left\{ 2 + \frac{[\bar{\omega}_{2,3}^\varepsilon]^2}{H_0^2} \right\},$$

$$\bar{m}_1^\varepsilon = \frac{2}{T_{12}^2} [1 - \beta_c 2\nu_c(0)\varkappa_0] + \frac{1}{T_{12}^2} [1 + H_0^2 T_{12}^2 \beta_2 \nu_c(0) \rho_0 \sin^2 \vartheta_0] =$$

$$= \frac{1}{T_{12}^2} \left\{ 1 + [\bar{\omega}_{2,3}^\varepsilon]^2 \frac{2 + T_{12}^2 H_0^2}{H_0^2} + T_{12}^2 \beta_2 \nu_c(0) \lambda_0 \cos^2 \vartheta_0 \right\},$$

$$\bar{m}_0^\varepsilon = [1 - \beta_c 2\nu_c(0)\varkappa_0] \left[\frac{1}{T_{12}^2} + H_0^2 \right] \frac{1}{T_{12}} = [\bar{\omega}_{2,3}^\varepsilon]^2 \frac{1 + T_{12}^2 H_0^2}{-3 \sin^2 \vartheta_0},$$

$$\bar{m}^{(2)} = \frac{1}{T_{12}} \varkappa_0,$$

$$\bar{m}^{(1)} = \rho_0 \sin^2 \vartheta_0 \frac{2 + T_{12}^2 H_0^2}{T_{12}^2} + \lambda_0 \cos^2 \vartheta_0 \frac{2}{T_{12}^2},$$

$$\bar{m}^{(0)} = \varkappa_0 \frac{1 + T_{12}^2 H_0^2}{T_{12}^3},$$

де $[\bar{\omega}_{2,3}^\varepsilon]^2$ – власні частоти коливань протонної підсистеми:

$$\begin{aligned} [\bar{\omega}_{2,3}^\varepsilon]^2 &= H_0^2 [1 - \beta_2 \nu_c(0)(\rho_0 \sin^2 \vartheta_0 + \lambda_0 \cos^2 \vartheta_0)] = \\ &= [2\nu_c(0)\eta_s^\varepsilon - 2\psi_6 \varepsilon_6]^2 \left[1 - \beta_2 \nu_c(0) \frac{1}{2} (1 - th^2 \frac{\beta H_0}{2}) \right] + \\ &+ 2\hbar\Omega [2\hbar\Omega - 2\nu_c(0)\eta_s^\varepsilon]. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Відзначимо, що у цьому випадку

$$\bar{f}_{33}^\varepsilon(0, E_3) = f_{33}^{T\varepsilon}(0, \sigma_6, E_3) = \frac{\bar{m}^{(0)}}{\bar{m}^{(0)\varepsilon}}.$$

В параелектричній фазі системи “блохівських” рівнянь для механічно затиснутого кристалу KN_2PO_4 має наступний вигляд:

$$h \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \langle \sigma_{33}^x(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^y(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11}^p & 0 & 0 \\ 0 & c_{22} & c_{23} \\ 0 & c_{32} & c_{33}^p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \sigma_{33}^x(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^y(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} - \beta\mu_3 E_{3t}(0) \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{c}_2 \\ c_3^p \end{pmatrix}, \quad (6.16)$$

де

$$c_{11}^p = -\frac{1}{T_1}, \quad c_{33}^p = -\frac{1}{T_2} \left[1 - \beta_2 \nu_c(0) \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta_2\bar{\Omega}} \right], \quad c_3^p = -\frac{1}{T_2} \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta_2\bar{\Omega}}.$$

Перше рівняння в (6.16) описує релаксацію псевдоспіна вздовж σ^x -осі, тобто вздовж напрямку молекулярного поля:

$$(i\bar{\omega} + \frac{1}{T}) \langle \sigma_1^x(0) \rangle = 0.$$

Відповідна власна частота руху псевдоспіна в цьому напрямку по суті уявна:

$$\bar{\omega}_1 = \frac{i}{T_1}.$$

У парафазі цей рух не викликає флуктуацій поляризації. З двох інших рівнянь, які описують прецесію відносно молекулярного поля при наявності загасання і характеризують флуктуації поляризації, отримуємо:

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t + k_1^\varepsilon \frac{d}{dt} \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t + k_0^\varepsilon \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t = \beta\mu_3 E_{3t}(0) \left[(i\bar{\omega})k^{(1)} + k^{(0)} \right]. \quad (6.17)$$

Тут використані такі позначення:

$$\begin{aligned} k_1^\varepsilon &= \frac{2}{T_2} \left[1 - \beta_2 \nu_c(0) \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta_2\bar{\Omega}} \right] = \frac{1}{T_2} \left\{ 1 + \frac{[\bar{\omega}_{2,3}^\varepsilon \text{HX}\Phi]^2}{\bar{\Omega}^2} \right\} = 2\gamma_p^\varepsilon(0), \\ k_0^\varepsilon &= \left[\frac{1}{T_2^2} + \bar{\Omega}^2 \right] \left[1 - \beta_2 \nu_c(0) \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta_2\bar{\Omega}} \right] = [\bar{\omega}_{2,3p}^\varepsilon \text{HX}\Phi]^2 \frac{1 + (2\bar{\Omega})^2 T_2^2}{(2\bar{\Omega})^2 T_2^2} = (\omega_p^\varepsilon(0))^2, \\ k^{(1)} &= \frac{1}{T_2} \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta_2\bar{\Omega}}, \quad k^{(0)} = \left[\frac{1}{T_2^2} + (2\bar{\Omega})^2 \right] \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta_2\bar{\Omega}}. \end{aligned}$$

Із рівняння (6.17) отримаємо, що

$$\langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t^p = \sum_{i=1}^2 C_i e^{-\frac{t}{\tau_{ip}^\varepsilon}} + \beta \mu_3 E_{3t}(0) f_{33p}(\bar{\omega}, 0) \quad (6.18)$$

де

$$f_{33p}(\bar{\omega}, 0) = \frac{(i\bar{\omega})k^{(1)} + k^{(0)}}{(i\bar{\omega})^2 + (i\bar{\omega})2\gamma_p^\varepsilon(0) + (\bar{\omega}_p^\varepsilon(0))^2} = \frac{(i\bar{\omega})k^{(1)} + k^{(0)}}{(i\bar{\omega})^2 + (i\bar{\omega})k_1^\varepsilon + k_0^\varepsilon},$$

а τ_{ip}^ε – часи релаксації, причому

$$(\tau_{ip}^\varepsilon)^{-1} = \frac{1}{2} \left(k_1^\varepsilon \mp \sqrt{(k_1^\varepsilon)^2 - 4k_0^\varepsilon} \right) = \frac{1}{2T_2} \left\{ \left[2 - \beta 2\nu_c(0) \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega}} \right] \mp \sqrt{\left(\beta 2\nu_c(0) \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega}} \right)^2 - 4(2\bar{\Omega})^2 \left(1 - \beta 2\nu_c(0) \frac{th\beta\bar{\Omega}}{\beta 2\bar{\Omega}} \right)^2} T_2^2 \right\}.$$

Динамічна поздовжня діелектрична сприйнятливість механічно затиснутого кристалу KN_2PO_4 в параелектричній фазі отримана в такому вигляді:

$$\begin{aligned} \chi_{33p}^\varepsilon(\bar{\omega}, 0) &= \chi_{33}^{\varepsilon_0} + \bar{v} \frac{\mu_3^2}{v^2} \frac{1}{T} f_{33p}(\bar{\omega}, 0) = \\ &= \chi_{33}^{\varepsilon_0} + \chi_{33p}^\varepsilon(0) (\bar{\omega}_0^\varepsilon(0))^2 \frac{1 + \frac{1+i\bar{\omega}T_2}{1+(2\bar{\Omega})^2T_2^2}}{-\bar{\omega}^2 + 2i\gamma_p^\varepsilon(0)\bar{\omega} + (\bar{\omega}_p^\varepsilon(0))^2} = \\ &= \chi_{33}^{\varepsilon_0} + \sum_{i=1}^2 \frac{\chi_{i3p}^\varepsilon}{1 + i\bar{\omega}\tau_{i3p}^\varepsilon}. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Тут використані такі позначення:

$$\begin{aligned} \chi_{13p}^\varepsilon &= \bar{v} \frac{\mu_3^2}{v^2} \frac{1}{T} \frac{\tau_{1p}^\varepsilon \tau_{2p}^\varepsilon}{\tau_{1p}^\varepsilon - \tau_{2p}^\varepsilon} \left(-k^{(1)} + \tau_{1p}^\varepsilon k^{(0)} \right), \\ \chi_{23p}^\varepsilon &= \bar{v} \frac{\mu_3^2}{v^2} \frac{1}{T} \frac{\tau_{1p}^\varepsilon \tau_{2p}^\varepsilon}{\tau_{1p}^\varepsilon - \tau_{2p}^\varepsilon} \left(k^{(1)} - \tau_{2p}^\varepsilon k^{(0)} \right). \end{aligned}$$

Дійсна і уявна частини динамічної діелектричної проникності KN_2PO_4 , отримані з (6.19), мають такий вигляд:

$$\begin{aligned} \varepsilon'_{33p}(\bar{\omega}) &= \varepsilon_{33}^{\varepsilon_0} + \sum_{i=1}^2 \frac{4\pi\chi_{i3p}^\varepsilon}{1 + (\bar{\omega}\tau_{ip}^\varepsilon)^2}, \\ \varepsilon''_{33p}(\bar{\omega}) &= \sum_{i=1}^2 \frac{4\pi\chi_{i3p}^\varepsilon \omega \tau_{ip}^\varepsilon}{1 + (\bar{\omega}\tau_{ip}^\varepsilon)^2}. \end{aligned}$$

Вираз (6.19) узгоджується зі співвідношенням, отриманим авторами роботи [12].

Для розрахунку поперечної діелектричної сприйнятливості $\chi_{11}^\varepsilon(\bar{\omega})$ використовуємо системи рівнянь, які отримані із системи рівнянь (5.7) з врахуванням (5.8) при $\vec{E}_1 = 0$ і $\vec{k} = 0$:

$$\begin{aligned} \hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \langle \sigma_1^x(0) \rangle_t - \langle \sigma_3^x(0) \rangle \\ \langle \sigma_1^y(0) \rangle_t - \langle \sigma_3^y(0) \rangle \\ \langle \sigma_1^z(0) \rangle_t - \langle \sigma_3^z(0) \rangle \end{pmatrix} &= \\ &= \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & a_{13} \\ c_{21} & c_{22} & a_{23} \\ c_{31} & c_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \sigma_1^x(0) \rangle_t - \langle \sigma_3^x(0) \rangle \\ \langle \sigma_1^y(0) \rangle_t - \langle \sigma_3^y(0) \rangle \\ \langle \sigma_1^z(0) \rangle_t - \langle \sigma_3^z(0) \rangle \end{pmatrix} - \mu_1 \cos \gamma E_{1t} \begin{pmatrix} c_1 \\ \bar{c}_2 \\ c_3 \end{pmatrix}, \\ \hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} -\langle \sigma_2^x(0) \rangle_t + \langle \sigma_4^x(0) \rangle \\ -\langle \sigma_2^y(0) \rangle_t + \langle \sigma_4^y(0) \rangle \\ -\langle \sigma_2^z(0) \rangle_t + \langle \sigma_4^z(0) \rangle \end{pmatrix} &= \\ &= \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & a_{13} \\ c_{21} & c_{22} & a_{23} \\ c_{31} & c_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\langle \sigma_2^x(0) \rangle_t + \langle \sigma_4^x(0) \rangle \\ -\langle \sigma_2^y(0) \rangle_t + \langle \sigma_4^y(0) \rangle \\ -\langle \sigma_2^z(0) \rangle_t + \langle \sigma_4^z(0) \rangle \end{pmatrix} - \mu_2 \sin \gamma E_{1t} \begin{pmatrix} c_1 \\ \bar{c}_2 \\ c_3 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (6.20)$$

де

$$\begin{aligned} a_{13} &= -\frac{1}{T_1} [1 - \beta 2\nu_a(0)\lambda_0] \sin \vartheta_0 \cos \vartheta_0 + \frac{1}{T_2} [1 - \beta 2\nu_a(0)\rho_0] \sin \vartheta_0 \cos \vartheta_0, \\ a_{33} &= -\frac{1}{T_1} [1 - \beta 2\nu_a(0)\lambda_0] \cos^2 \vartheta_0 - \frac{1}{T_2} [1 - \beta 2\nu_a(0)\rho_0] \sin^2 \vartheta_0. \end{aligned}$$

В результаті поперечну динамічну діелектричну сприйнятливість механічно затиснутого кристалу на основі “блківських рівнянь руху” отримуємо в наступному вигляді:

$$\chi_{11}^\varepsilon(\bar{\omega}) = \chi_{33}^{\varepsilon_0} + \frac{1}{2} \bar{v} \left(\frac{\mu_1^2 \cos^2 \gamma}{v^2} + \frac{\mu_2^2 \sin^2 \gamma}{v^2} \right) f_{11}^\varepsilon(\bar{\omega}), \quad (6.21)$$

де

$$f_{11}^\varepsilon(\bar{\omega}) = \frac{1}{T} \frac{(i\bar{\omega})^2 n^{(2)} + (i\bar{\omega})n^{(1)} + n^{(0)}}{(i\bar{\omega})^3 + (i\bar{\omega})^2 n_2^\varepsilon + (i\bar{\omega})n_1^\varepsilon + n_0^\varepsilon},$$

а вираз $n_2^\varepsilon, \dots, n^{(0)}$ аналогічний $m_2^\varepsilon, \dots, m^{(0)}$ (6.11).

При $\frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_2} = \frac{1}{T_{12}}$ маємо:

$$\begin{aligned}\bar{n}_2^\varepsilon &= \frac{3}{T_{12}} \left[1 - \frac{2}{3} \beta \nu_a(0) \varkappa_0 \right] = \frac{1}{T_{12}} \left\{ 2 + \frac{[\bar{\omega}_{4,5}^\varepsilon(0)]^2}{H_0^2} \right\}, \\ \bar{n}_1^\varepsilon &= \frac{2}{T_{12}} \left[1 - \beta 2 \nu_a(0) \varkappa_0 \right] + \frac{1}{T_{12}} \left[1 + H_0^2 T_{12}^2 \beta 2 \nu_a(0) \rho_0 \sin^2 \vartheta_0 \right] = \\ &= \frac{1}{T_{12}} \left\{ 1 + [\bar{\omega}_{4,5}^\varepsilon(0)]^2 \frac{2+T_{12}^2 H_0^2}{H_0^2} + T_{12}^2 \beta 2 \nu_a(0) \lambda_0 \cos^2 \vartheta_0 \right\}, \\ \bar{n}_0^\varepsilon &= [1 - \beta 2 \nu_a(0) \varkappa_0] \left[\frac{1}{T_{12}} + H_0^2 \right] \frac{1}{T_{12}} = [\bar{\omega}_{5,6}^\varepsilon(0)]^2 \frac{1+T_{12}^2 H_0^2}{T_{12}^3 H_0^2}, \\ \bar{n}^{(2)} &= \frac{1}{T_{12}} \varkappa_0, \\ \bar{n}^{(1)} &= \rho_0 \sin^2 \vartheta_0 \frac{2+T_{12}^2 H_0^2}{T_{12}^2} + \lambda_0 \cos^2 \vartheta_0 \frac{2}{T_{12}}, \\ \bar{n}^{(0)} &= \varkappa_0 \frac{1+T_{12}^2 H_0^2}{T_{12}^2},\end{aligned}$$

де власні частоти мають такий вигляд:

$$\begin{aligned}[\bar{\omega}_{4,5}^\varepsilon(0)]^2 &= [2\nu_c(0)\eta_s^z - \psi_6 \varepsilon_6]^2 \left[1 - \beta 2 \nu_a(0) (1 - th^2 \frac{\beta}{2} H_0) \right] + \\ &+ 2\hbar\Omega (2\hbar\Omega - 2\nu_a(0)\eta_s^x).\end{aligned}\quad (6.22)$$

7. Динаміка механічно затиснутих дейтерованих кристалів типу KD_2PO_4

У дейтерованому кристалі KD_2PO_4 поле тунелювання Ω дуже мале і ним можна знехтувати. В цьому випадку ми маємо справу з динамічною моделлю Ізінга.

Враховуючи, що

$$\sin \vartheta_{s0} = 0, \quad \cos \vartheta_{s0} = 1,$$

$$\lambda_s = \frac{1}{2} [1 - (\eta_s^z)^2], \quad \eta_s^z = th [\beta \nu_c(0) \eta_s^z - \beta \psi_6 \varepsilon_6],$$

із системи рівнянь (6.9) знаходимо наступне рівняння Блоха для z -компоненти псевдоспіна в сегнетоелектричній фазі:

$$\begin{aligned}\hbar \frac{d}{dt} \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t + \frac{1}{T} \{ 1 - \beta \nu_c(0) [1 - (\eta_s^z)^2] \} \sigma_{33}^z(0) \rangle_t = \\ = \frac{1}{T} [1 - (\eta_s^z)^2] \beta \mu_3 E_{3t}(0).\end{aligned}\quad (7.1)$$

Із даного рівняння легко отримати такий результат: (7.1)

$$\langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t = C e^{-\frac{t}{\tau}} + \frac{\beta \mu_3}{2} \frac{\frac{1}{T_1} [1 - (\eta_s^z)^2]}{i\bar{\omega} + \frac{1}{T_1} [1 - \beta \nu_c(0)] [1 - (\eta_s^z)^2]}$$

Звідси легко отримати поздовжню динамічну діелектричну сприйнятливість кристалів типу KD_2PO_4

$$\chi_{33s}^\varepsilon(\bar{\omega}) = \chi_{33}^{\varepsilon_0} + \bar{v} \frac{\mu_3^2}{v^2} \frac{1}{T} \frac{\frac{1}{T_1} [1 - (\eta_s^z)^2]}{i\bar{\omega} + \frac{1}{T_1} [1 - \beta \nu_c(0)] [1 - (\eta_s^z)^2]} = \chi_{33}^{\varepsilon_0} + \frac{\chi_{33s}^\varepsilon(0)}{1 + i\bar{\omega}\tau_s^\varepsilon},\quad (7.2)$$

де

$$\chi_{33}^\varepsilon(0) = \bar{v} \frac{\mu_3^2}{v^2} \frac{1}{T} \frac{1 - (\eta_s^z)^2}{[1 - \beta \nu_c(0)] [1 - (\eta_s^z)^2]} = \bar{v} \frac{\mu_3^2}{v^2} \frac{1}{T} f_{s1}(0, \xi_s^z),$$

а час релаксації має такий вигляд:

$$\tau_s^\varepsilon = \frac{T_1}{[1 - \beta \nu_c(0)] [1 - (\eta_s^z)^2]}.$$

8. Динамічні характеристики механічно вільних кристалів типу KN_2PO_4

Розглянемо випадок коливань тонкої квадратної пластинки кристалів типу KN_2PO_4 , яка вирізана в площині (001), зі сторонами l під дією зовнішнього змінного електричного поля $E_{q3t} = E_{q3} e^{i\omega t}$. В сегнетоелектричній фазі такий зовнішній вплив буде індукувати, крім зсувної деформації ε_6 , ще і діагональні компоненти тензора деформації ε_i , якими для простоти надалі будемо нехтувати.

Використаємо класичне рівняння руху елементарного об'єму кристалу типу KN_2PO_4 .

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j},\quad (8.1)$$

де ρ – густина кристалу, u_i – зміщення елементарного об'єму вздовж осі x_i , а σ_{ij} – механічна напруга. У випадку, який ми розглядаємо, відмінна від нуля зсувна напруга $\sigma_{12} = \sigma_6$, яка індукує зсувну деформацію

$$\varepsilon_6 = \frac{\partial u_1}{\partial y} + \frac{\partial u_2}{\partial x}.\quad (8.2)$$

Тому розглянемо на основі (8.1) динаміку зміщень u_1 і u_2 . Вирази (8.1) з врахуванням співвідношення (3.2) мають такий вигляд:

$$\begin{aligned}\rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} &= c_{66}^{E_0} \frac{\partial \varepsilon_6}{\partial y} + \frac{4\psi_6}{v} \frac{\partial \langle \sigma_{qs}^z \rangle}{\partial y}, \\ \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} &= c_{66}^{E_0} \frac{\partial \varepsilon_6}{\partial x} + \frac{4\psi_6}{v} \frac{\partial \langle \sigma_{qs}^z \rangle}{\partial x}.\end{aligned}\quad (8.3)$$

Використовуючи (8.1) і нехтуючи діагональними компонентами тензора деформації ε_2 і ε_3 , отримуємо хвильові рівняння для u_1 і u_2 :

$$\begin{aligned}\rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} &= c_{66}^{E_0} \frac{\partial^2 u_1}{\partial y^2} + \frac{4\psi_6}{v} \frac{\partial \langle \sigma_{qs}^z \rangle}{\partial y}, \\ \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} &= c_{66}^{E_0} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + \frac{4\psi_6}{v} \frac{\partial \langle \sigma_{qs}^z \rangle}{\partial x}.\end{aligned}\quad (8.4)$$

Як і раніше, виділимо при малих відхиленнях від стану рівноваги в рівняннях (5.2) і (8.4) статичну і часозалежну частини, враховуючи (5.4):

$$\varepsilon_6 = \varepsilon_{60} + \varepsilon_{6t} = \varepsilon_{60} + \frac{\partial u_{1t}}{\partial y} + \frac{\partial u_{2t}}{\partial x}.\quad (8.5)$$

Тепер

$$\vec{H}_{q0} = \vec{H}_0 + \vec{H}_{q0t},$$

де

$$\begin{aligned}\vec{H}_{q0} &= \left\{ \Omega, 0, \sum_{q'} 2\nu_c(qq') \eta_s^z - 2\psi_6 \varepsilon_{60} \right\}, \\ \vec{H}_{q0t} &= \left\{ 0, 0, \sum_{q'} 2\nu_c(qq') \langle \sigma_{qs}^z \rangle_t - 2\psi_6 \varepsilon_{6t} + \beta \mu_3 E_{3qt} \right\}.\end{aligned}$$

В результаті для часозалежних частин отримуємо в сегнетоелектричній фазі наступну систему рівнянь:

$$\begin{aligned}\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \langle \sigma_{33}^x(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^y(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \sigma_{33}^x(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^y(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} + \\ &+ \beta 2\psi_6 \varepsilon_6 \begin{pmatrix} c_1 \\ \frac{1}{\beta} c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} - \beta \mu_3 E_{3t}(0) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (8.6)$$

$$\begin{aligned}\rho \frac{\partial^2 u_{1t}}{\partial t^2} &= c_{66}^{E_0} \frac{\partial^2 u_{1t}}{\partial y^2} + \frac{4\psi_6}{v} \frac{\partial \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t}{\partial y}, \\ \rho \frac{\partial^2 u_{2t}}{\partial t^2} &= c_{66}^{E_0} \frac{\partial^2 u_{2t}}{\partial x^2} + \frac{4\psi_6}{v} \frac{\partial \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t}{\partial x}.\end{aligned}\quad (8.7)$$

Розв'язки системи (8.6) і (8.7) шукаємо у вигляді гармонічних хвиль, тобто

$$\langle \sigma_{33}^\alpha(0) \rangle_t = \langle \sigma_{33}^\alpha(0, x, y) \rangle_t e^{i\omega t}, \quad (\alpha = x, y, z)\quad (8.8)$$

$$\begin{aligned}\varepsilon_{6t} &= \varepsilon_{6t}(x, y) e^{i\omega t}, \\ u_{1t} &= u_1(y) e^{i\omega t}, \\ u_{2t} &= u_2(x) e^{i\omega t}.\end{aligned}\quad (8.9)$$

Підставляючи співвідношення (8.8) в систему рівнянь (8.6), знаходимо, що

$$\langle \sigma_{33}^\alpha(0, x, y) \rangle = \frac{\beta \mu_3}{2} f_{33s}^\varepsilon(\omega) E_3(0) - \beta \psi_6 f_{33s}^\varepsilon(\omega) \varepsilon_6(x, y).\quad (8.10)$$

Системи рівнянь (8.7), враховуючи співвідношення (8.9) і (8.10), тепер можна записати у такому вигляді:

$$\begin{aligned}c_{66}^E(\omega) \frac{\partial^2 u_1}{\partial y^2} + \omega^2 \rho u_1 &= 0, \\ c_{66}^E(\omega) \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + \omega^2 \rho u_2 &= 0,\end{aligned}\quad (8.11)$$

де

$$c_{66}^E(\omega) = c_{66}^{E_0} - \frac{4\tilde{\psi}_6^2}{\tilde{v}T} f_{33}^\varepsilon(\bar{\omega}).$$

Перепишемо рівняння (8.11) в наступному вигляді:

$$\frac{\partial^2 u_1}{\partial y^2} + k^2 u_1 = 0, \quad \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + k^2 u_2 = 0,\quad (8.12)$$

де хвильове число

$$k = \frac{\omega \sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{66}^E(\omega)}}.\quad (8.13)$$

Розв'язок рівнянь (8.12) шукаємо у такому вигляді

$$\begin{aligned}u_1 &= A_1 \cos ky + B_1 \sin ky, \\ u_2 &= A_2 \cos kx + B_2 \sin kx.\end{aligned}$$

В результаті отримуємо:

$$\varepsilon_6(x, y) = k [-(A_1 \cos ky + A_2 \cos kx) + (B_1 \sin ky + B_2 \sin kx)].\quad (8.14)$$

Граничні умови задаємо в наступному вигляді:

$$\varepsilon_6(0) = \varepsilon_6(l, l) = \varepsilon_6(0, l) = \varepsilon_6(l, 0) = \varepsilon_0.\quad (8.15)$$

А значення ε_0 отримаємо із виразу (3.10), враховуючи співвідношення (8.11)

$$\varepsilon_0 = \frac{e_{36}^0 - 2\frac{\tilde{\mu}_3}{\tilde{v}} \frac{\tilde{\psi}_6}{T} f_{33s}^\varepsilon(\bar{\omega})}{c_{66}^0 - \frac{4\tilde{\psi}_6}{\tilde{v}T} f_{33s}^\varepsilon(\bar{\omega})} E_3(0).$$

Враховуючи граничні умови (8.15), зі співвідношення (8.14) отримуємо, що

$$\varepsilon_6(x, y) = \frac{\varepsilon_0}{2} \left[-\frac{\cos kl - 1}{\sin kl} (\sin ky + \sin kx) + (\cos ky + \cos kx) \right]. \quad (8.16)$$

На основі виразу (3.3) між поляризацією $P_3(0)$ і $\langle \sigma_{33}^z(0, x, y) \rangle$ і враховуючи співвідношення (8.10), отримуємо, що

$$P_{3t}(0, x, y) = P_{3E}(x, y)e^{i\omega t},$$

де

$$P_{3E}(x, y) = e_{36}(\omega)\varepsilon_6(x, y) + \chi_{33}^\varepsilon(\omega)E_3(0), \quad (8.17)$$

а

$$e_{36}(\omega) = e_{36}^0 - 2\frac{\mu_3}{v} \frac{\tilde{\psi}_6}{T} f_{33s}^\varepsilon(\bar{\omega}).$$

Тепер можемо розрахувати діелектричну сприйнятливість $\chi_{33}^\sigma(\omega, 0)$ вільного кристалу, яку визначаємо наступним чином:

$$\chi_{33}^\sigma(\bar{\omega}) = \frac{1}{l^2} \frac{\partial}{\partial E_3(\omega)} \int_0^l \int_0^l P_{3E}(x, y) dx dy. \quad (8.18)$$

Оскільки

$$\frac{1}{l^2} \int_0^l \int_0^l dx dy \varepsilon_6(x, y) = \frac{2\varepsilon_0}{k} tg \frac{kl}{2} = \frac{\varepsilon_0}{R(\omega)},$$

де

$$\frac{1}{R(\bar{\omega})} = \frac{2}{kl} tg \frac{kl}{2},$$

то із (8.18) знаходимо, що

$$\chi_{33}^\sigma(\bar{\omega}) = \frac{R(\omega) - 1}{R(\bar{\omega})} \left[\chi_{33}^{\varepsilon 0} + \bar{v} \frac{\mu_3^2}{v^2} \frac{1}{T} f_{33s}^\varepsilon(\bar{\omega}) \right] + \frac{1}{R(\bar{\omega})} \left[\chi_{33}^{\sigma 0} + \bar{v} \frac{\mu_3^2}{v^2} \frac{1}{T} f_{33s}^\sigma(\bar{\omega}) \right]. \quad (8.19)$$

Тут використані наступні позначення

$$\chi_{33}^{\sigma 0} = \chi_{33}^{\varepsilon 0} + e_{36}^0 d_{36}^0, \quad \bar{\mu}_3 = \mu_3 - 2\psi_6 d_{36}^0,$$

$$f_{33s}^\sigma(\bar{\omega}, 0) = \frac{(i\bar{\omega})^2 m^{(2)} + (i\bar{\omega}) m^{(1)} + m^{(0)}}{(i\bar{\omega})^3 + (i\bar{\omega})^2 m_2^\sigma + (i\bar{\omega}) m_1^\sigma + m_0^\sigma},$$

а

$$\begin{aligned} m_2^\sigma &= m_2^\varepsilon - 4 \frac{\tilde{\psi}_6^2}{v} \frac{s_{66}^{E0}}{T} m^{(2)}, \\ m_1^\sigma &= m_1^\varepsilon - 4 \frac{\tilde{\psi}_6^2}{v} \frac{s_{66}^{E0}}{T} m^{(1)}, \\ m_0^\sigma &= m_0^\varepsilon - 4 \frac{\tilde{\psi}_6^2}{v} \frac{s_{66}^{E0}}{T} m^{(0)}. \end{aligned}$$

Часи релаксації вільного кристалу $\tau_{i0}^\sigma = -\frac{1}{q_{i0}^\sigma}$, де q_{i0}^σ – корені наступного рівняння:

$$(q_{i0}^\sigma)^3 + m_2^\sigma (q_{i0}^\sigma)^2 + m_1^\sigma (q_{i0}^\sigma) + m_0^\sigma = 0. \quad (8.20)$$

Проаналізуємо отримане співвідношення (8.19). При частотах $\omega \rightarrow \infty$ вираз $R(\omega) \rightarrow \infty$ і із (8.19) отримаємо динамічну сприйнятливість механічно затиснутого кристалу. У випадках $\omega \rightarrow 0$ $R(\bar{\omega}) \rightarrow 1$ і отримуємо при $\frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_2} = \frac{1}{T_{12}}$ статичну сприйнятливість $\chi_{33}^\sigma(0)$.

У проміжній області в частотній залежності співвідношень $\chi_{33}^\sigma(\omega)$ спостерігається дисперсія резонансного виду з численними піками цих характеристик на частотах, для яких $Re\left(\frac{kl}{2}\right) = \frac{\pi}{2}(2n+1)$. Враховуючи співвідношення для хвильового числа (8.13), отримуємо рівняння для резонансних частот

$$\omega_n = \frac{\pi(2n+1)}{l} \sqrt{\frac{c_{66}^E(\omega_n)}{\rho}}. \quad (8.21)$$

В області частот п'зоелектричного резонансу, а саме 10^4 - 10^5 Гц, залежно від температури і розмірів зразка кристалу, частотною залежністю $c_{66}^E(\omega)$ можна знехтувати, оскільки помітна залежність $c_{66}^E(\omega)$ від частоти спостерігається лише при частотах $\omega > 10^8$ Гц. Отже,

$$\omega_n = \frac{\pi(2n+1)}{l} \sqrt{\frac{c_{66}^E}{\rho}}.$$

Динамічна проникність механічно вільного кристалу KN_2PO_4 із (8.19) має наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{33s}'^\sigma(\bar{\omega}, c) &= \frac{ReR(\bar{\omega}) - 1}{ReR(\omega)} \left[\varepsilon_{33}^{\varepsilon 0} + \sum_{i=1}^3 \frac{4\pi\chi_{i3s}^\varepsilon}{1 + (\bar{\omega}\tau_{i6}^\varepsilon)^2} \right] + \\ &+ \frac{1}{ReR(\omega)} \left[\varepsilon_{33}^{\sigma 0} + \sum_{i=1}^3 \frac{4\pi\chi_{i3s}^\sigma}{1 + (\bar{\omega}\tau_{i8}^\sigma)^2} \right], \end{aligned} \quad (8.22)$$

$$\varepsilon_{33s}^{\sigma}(\bar{\omega}, c) = \frac{ImR(\bar{\omega}) - 1}{ImR(\bar{\omega})} \sum_{i=1}^3 \frac{4\pi\chi_{i30}^{\varepsilon}\bar{\omega}\tau_{is}^{\varepsilon}}{1 + (\bar{\omega}\tau_{i6}^{\varepsilon})^2} + \frac{1}{ImR(\bar{\omega})} \sum_{i=1}^3 \frac{4\pi\chi_{i38}^{\sigma}\bar{\omega}\tau_{i8}^{\sigma}}{1 + (\bar{\omega}\tau_{i6}^{\varepsilon})^2},$$

χ_{i30}^{σ} визначається із системи рівнянь при $\varepsilon \rightarrow \sigma$, $\mu_3 \rightarrow \bar{\mu}_3$ і $\tilde{E}_3 = 0$.
У параелектричній фазі

$$f_{33p}^{\sigma}(\bar{\omega}) = \frac{(i\bar{\omega})k^{(1)} + k^{(0)}}{(i\bar{\omega})^2 + (i\bar{\omega})k_1^{\sigma} + k_0^{\sigma}},$$

де використані наступні позначення:

$$k_1^{\sigma} = k_1^{\varepsilon} - 4 \frac{\tilde{\psi}_6^2 s_{66}^{E0}}{\bar{v} T} k^{(1)} = \frac{2}{T_2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[\beta 2\nu_c(0) + 8 \frac{\tilde{\psi}_6^2 s_{66}^{E0}}{\bar{v} T} \right] \frac{th\beta\Omega}{\beta 2\Omega} \right\},$$

$$k_0^{\sigma} = k_0^{\varepsilon} - 4 \frac{\tilde{\psi}_6^2 s_{66}^{E0}}{\bar{v} T} k^{(0)} = \left[\frac{1}{T_2^2} + (2\bar{\Omega})^2 \right] \left\{ 1 - \left[\beta 2\nu_c(0) + 8 \frac{\tilde{\psi}_6^2 s_{66}^{E0}}{\bar{v} T} \right] \frac{th\beta\Omega}{\beta 2\Omega} \right\}.$$

В результаті отримуємо:

$$\varepsilon_{33p}^{I\sigma}(\bar{\omega}, 0) = \frac{ReR(\bar{\omega}) - 1}{ReR(\omega)} \left[\varepsilon_{33}^{\varepsilon 0} + \sum_{i=1}^2 \frac{4\pi\chi_{i3p}^{\varepsilon}}{1 + (\bar{\omega}\tau_{iP}^{\varepsilon})^2} \right] +$$

$$+ \frac{1}{ReR(\omega)} \left[\varepsilon_{33}^{\sigma 0} + \sum_{i=1}^2 \frac{4\pi\chi_{i3p}^{\sigma}}{1 + (\bar{\omega}\tau_{iP}^{\sigma})^2} \right], \quad (8.23)$$

$$\varepsilon_{33p}^{II\sigma}(\bar{\omega}, 0) = \frac{ImR(\bar{\omega}) - 1}{ImR(\bar{\omega})} \sum_{i=1}^2 \frac{4\pi\chi_{i3p}^{\varepsilon}\bar{\omega}\tau_{iP}^{\varepsilon}}{1 + (\bar{\omega}\tau_{iP}^{\varepsilon})^2} + \frac{1}{ImR(\bar{\omega})} \sum_{i=1}^2 \frac{4\pi\chi_{i3p}^{\sigma}\bar{\omega}\tau_{iP}^{\sigma}}{1 + (\bar{\omega}\tau_{iP}^{\varepsilon})^2},$$

де

$$\chi_{13p}^{\sigma} = \bar{v} \frac{\bar{\mu}_3^2}{v^2} \frac{1}{T} \frac{\tau_{1p}^{\sigma}\tau_{2p}^{\sigma}}{\tau_{1p}^{\sigma}\tau_{2p}^{\sigma}} \left(-k^{(1)} + \tau_{1p}^{\sigma}k^{(0)} \right),$$

$$\chi_{23p}^{\sigma} = \bar{v} \frac{\bar{\mu}_3^2}{v^2} \frac{1}{T} \frac{\tau_{1p}^{\sigma}\tau_{2p}^{\sigma}}{\tau_{1p}^{\sigma}\tau_{2p}^{\sigma}} \left(k^{(1)} - \tau_{2p}^{\sigma}k^{(0)} \right),$$

а часи релаксації

$$(\tau_{1p}^{\sigma})^{-1} = \frac{1}{2} \left[k_1^{\sigma} \mp \sqrt{(k_1^{\sigma})^2 - 4k_0^{\sigma}} \right].$$

Для механічно вільних кристалів типу KN_2PO_4 власні частоти мають наступний вигляд:

$$\omega_1 = 0,$$

$$(\bar{\omega}_{23s}^{\sigma})^2 = \bar{H}_0^2 \left\{ 1 - \left[\beta 2\nu_c(0) + 8 \frac{\tilde{\psi}_6^2 s_{66}^{E0}}{\bar{v} T} \right] (\bar{\rho}_0 \sin^2 \bar{\vartheta}_0 + \bar{\lambda}_0 \cos^2 \bar{\vartheta}_0) \right\} =$$

$$= \left[2\nu_c(0) + 8 \frac{\tilde{\psi}_6^2 s_{66}^{E0}}{\bar{v} T} \right]^2 (\eta_S^z)^2 \left\{ 1 - \left[\beta 2\nu_c(0) + 8 \frac{\tilde{\psi}_6^2 s_{66}^{E0}}{\bar{v} T} \right] \frac{1}{2} \left[1 - th^2 \frac{\beta}{2} \bar{H}_0 \right] \right\} +$$

$$+ (2\bar{\Omega}) \left\{ (2\bar{\Omega}) - \left[2\nu_c(0) + 8 \frac{\tilde{\psi}_6^2 s_{66}^{E0}}{\bar{v} T} \right] \eta_S^x \right\}, \quad (8.24)$$

$$(\bar{\omega}_{23p}^{\sigma})^2 = (2\bar{\Omega}) \left\{ (2\bar{\Omega}) - \left[2\nu_c(0) + 8 \frac{\tilde{\psi}_6^2 s_{66}^{E0}}{\bar{v} T} \right] th\beta\hbar\Omega \right\}.$$

При температурі $T = T_c$ частоти $(\bar{\omega}_{23}^{\sigma})^2$ перетворюються в нуль.
У випадку дейтерованого кристалу KD_2PO_4

$$f_{33s}^{\sigma d}(\omega) = \frac{\frac{1}{T_1} \left[1 - (\eta_S^z)^2 \right]}{(i\omega) + \frac{1}{T_1} \left\{ 1 - \left[\beta 2\nu_c(0) + 8 \frac{\tilde{\psi}_6^2 s_{66}^{E0}}{\bar{v} T} \right] \right\} \left[1 - (\eta_S^z)^2 \right]},$$

$$f_{33s}^{\sigma d}(\omega) = \frac{\frac{1}{T_1}}{(i\omega) + \frac{1}{T_1} \left\{ 1 - \left[\beta 2\nu_c(0) + 8 \frac{\tilde{\psi}_6^2 s_{66}^{E0}}{\bar{v} T} \right] \right\}}. \quad (8.25)$$

В результаті для кристалів типу KD_2PO_4 отримуємо такі вирази:

$$\varepsilon_{33p}^{I\sigma}(\bar{\omega}) = \frac{ReR(\omega) - 1}{ReR(\omega)} \left[\varepsilon_{33}^{\varepsilon 0} + \frac{4\pi\chi_3^{\varepsilon}(0)}{1 + (\omega\tau_3^{\varepsilon})^2} \right] +$$

$$+ \frac{1}{ReR(\omega)} \left[\varepsilon_{33}^{\sigma 0} + \frac{4\pi\chi_3^{\sigma}(0)}{1 + (\omega\tau_3^{\sigma})^2} \right], \quad (8.26)$$

$$\varepsilon_{33p}^{II\sigma}(\bar{\omega}) = \frac{ImR(\omega) - 1}{ImR(\omega)} \frac{4\pi\chi_3^{\varepsilon}(0)\omega\tau_{3s}^{\varepsilon}}{1 + (\bar{\omega}\tau_3^{\varepsilon})^2} + \frac{1}{ImR(\omega)} \frac{4\pi\chi_3^{\sigma}(0)\omega\tau^{\sigma}}{1 + (\omega\tau_3^{\varepsilon})^2}.$$

9. Швидкість і поглинання ультразвуку в KN_2PO_4

Ефективним методом вивчення поведінки сегнетоактивних кристалів є проходження через них ультразвукових хвиль, довжина яких набагато менша від лінійних розмірів зразка. При цьому усі динамічні змінні, а саме елементарні зміщення, середні значення квазідиполів, залежать лише від координати напрямку поширення хвилі. Якщо тонкі бруски кристалу вирізані вздовж напрямку $[001]$, то вздовж бруска поширюється поперечна ультразвукова хвиля, яка поляризована вздовж $[010]$. Серед похідних $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ відмінною від нуля є

лише $\frac{\partial u_x}{\partial x}$, і тому замість системи рівнянь (8.6) і (8.7) матимемо наступні рівняння:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \langle \sigma_S^x(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_S^y(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_S^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \sigma_S^x(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_S^y(0) \rangle_t \\ \langle \sigma_S^z(0) \rangle_t \end{pmatrix} + \beta 2\psi_6 \varepsilon_{6t} \begin{pmatrix} c_1 \\ \bar{c}_2 \\ c_3 \end{pmatrix},$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_{2t}}{\partial t^2} = c_{66}^{E_0} \frac{\partial u_{2t}}{\partial x^2} + \frac{4\psi_6}{\vartheta} \frac{\partial \langle \sigma_{33}^z(0) \rangle_t^S}{\partial x}. \quad (9.1)$$

Розв'язуючи системи рівнянь (9.1), отримуємо хвильове число

$$k = \frac{\bar{\omega} \sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{66}^E(\bar{\omega})}}, \quad (9.2)$$

яке співпадає із (4.14).

На основі співвідношення (9.2) можна знайти швидкість поширення ультразвукової хвилі в кристалах типу KN_2PO_4 , а саме

$$v_8 = \frac{\bar{\omega}}{Rek} = Re \frac{\sqrt{c_{66}^E(\bar{\omega})}}{\sqrt{\rho}} \quad (9.3)$$

і внесок протонної підсистеми у коефіцієнт поглинання звуку:

$$\alpha_8(\bar{\omega}) = \alpha_0 - Imk = \alpha_0 - Im \left[\frac{\omega \sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{66}^E(\bar{\omega})}} \right], \quad (9.4)$$

де α_0 – сталий доданок, частотно і температурно незалежний, і описує внески інших механізмів у поглинання, що спостерігаються на експерименті.

10. Обговорення отриманих результатів. Порівняння числових розрахунків з експериментальними даними

Перейдемо тепер до аналізу результатів числових розрахунків, отриманих у рамках запропонованої моделі діелектричних, теплових, п'єзоелектричних, пружних і динамічних діелектричних характеристик кристалів KN_2PO_4 і RbH_2PO_4 та порівняємо їх з відповідними експериментальними даними для цих сполук. Наведемо також для порівняння результати розрахунку температурних і частотних залежностей перерахованих нижче характеристик кристалів KN_2PO_4 і

RbH_2PO_4 , отриманих у рамках модифікованої моделі протонного впорядкування в НЧК [2–8, 10].

Для числових розрахунків температурних і частотних залежностей фізичних характеристик кристалів KN_2PO_4 і RbH_2PO_4 , які отримані в попередніх розділах, необхідні такі ефективні параметри:

- енергія тунелювання протонів на водневих зв'язках $\bar{\Omega} = \hbar\Omega$;
- енергії взаємодії між протонами ν_c і ν_a ;
- ефективні дипольні моменти μ_3 і μ_1 ;
- деформаційні потенціали ψ_6 і ψ_4 ;
- "затравочні" діелектричні сприйнятливості $\chi_{33}^{\varepsilon_0}$, $\chi_{11}^{\varepsilon_0}$;
- "затравочні" пружні сталі $c_{66}^{E_0}$, $c_{44}^{E_0}$;
- "затравочні" коефіцієнти п'єзоелектричної напруги e_{36}^0 , e_{14}^0 ;
- параметри $T_{12}^{(3)}$, $T_{12}^{(1)}$, які визначають часову шкалу динамічних процесів.

Об'єм v примітивної комірки, в яку входять два тетраедри PO_4 , для кристалу KN_2PO_4 взято рівним $0,1936 \cdot 10^{-21} \text{ см}^3$, а для RbH_2PO_4 – $0,2090 \cdot 10^{-21} \text{ см}^3$.

Для визначення оптимальних параметрів мікротеорії ми використали температурні залежності фізичних характеристик кристалів KN_2PO_4 і RbH_2PO_4 , які отримані експериментально.

Затравочні величини $\chi_{33}^{\varepsilon_0}$, $\chi_{11}^{\varepsilon_0}$, e_{36}^0 , e_{14}^0 , $c_{66}^{E_0}$, $c_{44}^{E_0}$ визначаються з умови найкращого узгодження теорії з відповідними експериментальними даними у температурних областях, які значно віддалені від температури фазового переходу T_c .

Задаючи значення параметра тунелювання $\bar{\Omega}$, величини параметрів ν_c , μ_3 і ψ_6 знаходимо, використовуючи рівняння для температури переходу, вирази для статичної проникності механічно затиснутого кристалу $\varepsilon_{33}^{\varepsilon}(0)$ і коефіцієнта п'єзоелектричної напруги e_{36} , а також відповідні експериментальні дані для цих характеристик. Аналогічно знаходимо і значення параметрів ν_a , μ_1 , ψ_4 .

Отримані набори оптимальних параметрів на основі "прив'язки" розрахованих характеристик кристалів KN_2PO_4 і RbH_2PO_4 до даних експериментів наведені в таблиці 1. Для порівняння в таблиці 1 приведені набори параметрів теорії, які отримані в роботах [3–6], в яких фізичні характеристики цих кристалів розраховані в наближенні чотиричастинкового кластера.

Табл. 1. Оптимальні набори параметрів для кристалів KN_2PO_4 і RbH_2PO_4

	KDP	KDP [5, 6]	KDP [3, 4]	RDP	RDP [5, 6]	RDP
T_c, K	122.5	122.5	122.5	147.6	147.6	147.6
$\frac{\Omega}{k_B}, \text{K}$	70		138	83.4		10
$\frac{\varepsilon}{k_B}, \text{K}$		56	55		60	
$\frac{w}{k_B}, \text{K}$		422	600		440	
$\frac{\nu_c}{k_B}, \text{K}$	132.42	17.91	25.38	160.85	29.13	145.60
$\frac{\nu_a}{k_B}, \text{K}$	7	7	10	5	28	5
$\frac{\psi_6}{k_B}, \text{K}$	-280	-150	368.25	-210	-130	-220
$\frac{\psi_4}{k_B}, \text{K}$	39	124	30	110	152	100
$\mu_{3-}, 10^{-18}, \text{CGSEq}\cdot\text{cm}$	1.71	1.46	1.51	1.74	1.50	1.5
$\mu_{3+}, 10^{-18}, \text{CGSEq}\cdot\text{cm}$	2.2	1.71	1.68	2.5	2.00	2.5
$\mu_1^0, 10^{-18}, \text{CGSEq}\cdot\text{cm}$	5.3	4.27	3.92	5.1	3.68	4.95
$k_\mu, 10^{-18}, \frac{\text{CGSEq}\cdot\text{cm}}{\text{K}}$	0.0080	0.0057		0.0070	0.0057	0.0080
χ_{33}^0	0.65	0.73	0.63	0.40	0.40	0.40
χ_{11}^0	0.60	0.80	2.04	1.10	1.25	1.1
$e_{36}^0, 10^4, \frac{\text{CGSEq}\cdot\text{cm}}{\text{cm}^2}$	0.12	1.0	0.3	0.35	0.3	0.3
$e_{14}^0, 10^4, \frac{\text{CGSEq}\cdot\text{cm}}{\text{cm}^2}$	0.02	0.05	0.195	0.1	0.2	0.2
$c_{66}^0, 10^{10}, \frac{\text{дин}}{\text{см}^2}$	7.1	7.1	7.2	5.75	5.9	5.75
$c_{44}^0, 10^{10}, \frac{\text{дин}}{\text{см}^2}$	13.00	13.00	13.51	10.60	10.60	10.6
$T_{1,2-}, 10^{-14}, \text{с}$	7.0			6.5		6.0
$T_{1,2+}, 10^{-14}, \text{с}$	9.5			10.7		12
$T_{1,2}, 10^{-14}, \text{с}$	8.0			7.5		7.5

Перейдемо тепер до аналізу отриманих результатів числових розрахунків фізичних характеристик кристалів KN_2PO_4 і RbH_2PO_4 на основі отриманих параметрів теорії і порівняємо їх з відповідними експериментальними даними.

На рис.2 наведено температурну залежність унарної функції роз-

поділу $\eta^{(1)}$. Крива $\eta^{(1)}(T)$, розрахована в НМП, відповідає фазовому

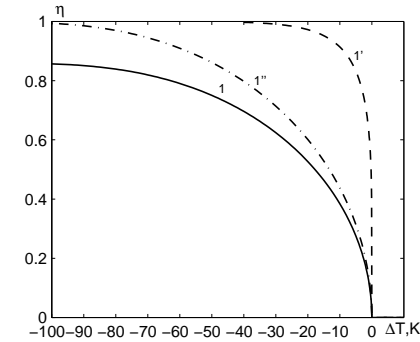


Рис. 2. Температурна залежність параметра порядку $\eta_s^z(T)$ для кристалу $\text{RbH}_2\text{PO}_4 - 1$ (НМП), 1' (НЧК), 1'' (НМП при $\Omega = 10\text{K}$).

переходу другого роду. В той же час отримана в НЧК крива $\eta^{(1)}(T)$ у точці переходу має стрибок, що відповідає фазовому переходу першого роду. Значно відрізняється крива $\eta^{(1)}(T)$ в НМП і за формою і числовими значеннями від отриманої в НЧК. Це призводить до того, що температурні залежності всіх розрахованих нами фізичних характеристик кристалів KN_2PO_4 і RbH_2PO_4 в НМП в сегнетоелектричній фазі будуть суттєво відрізнятися від експериментальних даних і результатів, отриманих в НЧК.

Так, значення спонтанної поляризації кристалів KN_2PO_4 і RbH_2PO_4 (рис.3) і теплоємності ΔC_p (рис.4), розраховані в НМП, суттєво відрізняються від отриманих експериментально і розрахованих в НЧК. Відзначимо, що зміна параметра тунелювання Ω слабо впливає на величини розрахованих характеристик в НМП.

На рис.5 представлені температурні залежності обернених статичних діелектричних проникностей затиснутого $(\varepsilon_{33}^\varepsilon)^{-1}$ і вільного $(\varepsilon_{33}^\sigma)^{-1}$ кристалів RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 , а на рис.6 – поперечних проникностей ε_{11} для цих кристалів. Відзначимо, що $\varepsilon_{11}^\sigma \approx \varepsilon_{11}^\varepsilon$. З цих рисунків видно, що нами в НМП отримано хороший кількісний опис температурних залежностей $(\varepsilon_{33}^\varepsilon)^{-1}$ і $\varepsilon_{11}^\varepsilon$ кристалів RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 (за винятком $\Delta T < 10\text{K}$) в параелектричній фазі, як у випадку НЧК, так і в НМП. Аналогічний температурний хід ε_{11} в НМП для KN_2PO_4 в сегнетоелектричній фазі було отримано і авторами роботи [18].

При наближенні в параелектричній фазі до температури фазо-

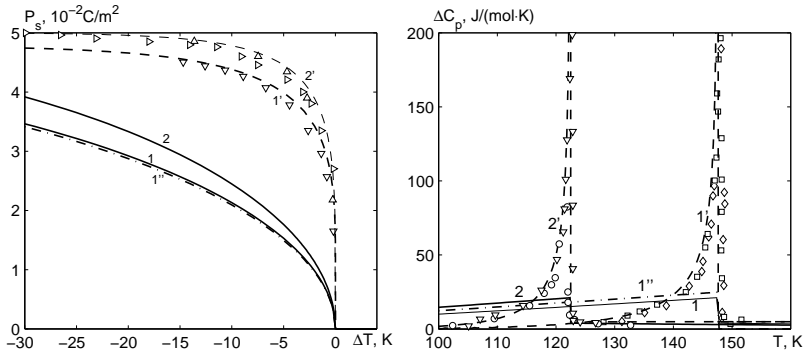


Рис. 3. Температурна залежність спонтанної поляризації для кристалів: RbH_2PO_4 – 1 (НМП), 1' (НЧК), 1'' (НМП при $\Omega = 10\text{K}$), ∇ [19]; KN_2PO_4 – 2 (НМП), 2' (НЧК), Δ [20], \triangleright [21]; Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

Рис. 4. Температурна залежність теплоємності RbH_2PO_4 – 1 (НМП), 1' (НЧК), 1'' (НМП при $\Omega = 10\text{K}$), \diamond [22], \square [23]; KN_2PO_4 – 2 (НМП), 2' (НЧК), \circ [24], \blacktriangledown [25]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

вого переходу T_c величина ε_{33}^σ зростає за гіперболічним законом, досягаючи при $T = T_c$ дуже великих значень. Різниця між значеннями ε_{33}^σ і $\varepsilon_{33}^\varepsilon$ при збільшенні $\Delta T = T - T_c$ швидко зменшується. Для кристалів RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 область температур, в якій справедливий закон Кюрі-Вейса і проявляється помітна нелінійність у температурній залежності $(\varepsilon_{33}^\sigma)^{-1}$, є $\Delta T \sim 30\text{K}$. Розрахована без врахування п'єзоелектричної взаємодії діелектрична проникність ε_{33} при $\Delta T < 50\text{K}$ збігається із значеннями ε_{33}^σ , а при більших ΔT крива $\varepsilon_{33}(T)$ іде нижче, ніж $\varepsilon_{33}^\sigma(T)$.

Температурні залежності коефіцієнтів п'єзоелектричної деформації d_{36} і п'єзоелектричної напруги e_{36} кристалів RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 наведено на рис.7, а коефіцієнтів d_{14} і e_{14} – на рис.8.

На рис. 9 і 10 зображено температурні залежності констант п'єзоелектричних напруг h_{36} і h_{14} та деформацій g_{36} і g_{14} кристалів RbH_2PO_4 та KN_2PO_4 .

На рис.7 і 8 наведено експериментальні значення d_{36} , d_{14} при різних температурах. Використовуючи дані експериментів для d_{ij} , ε_{ii}^σ і c_{jj}^E , отримано значення e_{ij} , h_{ij} і g_{ij} , які і наведені на рис.7-10. Екс-

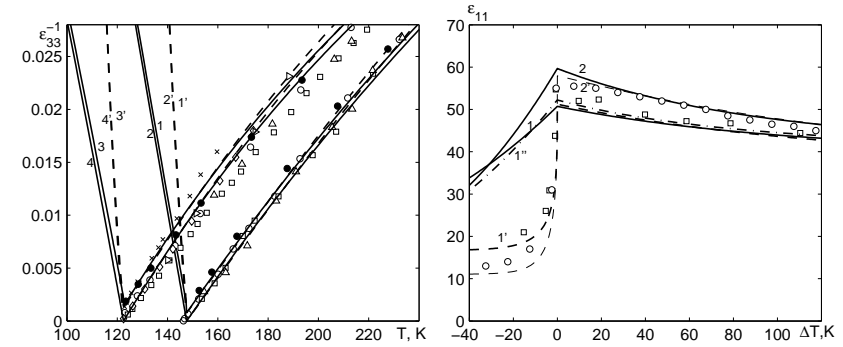


Рис. 5. Температурна залежність обернених статичних діелектричних проникностей затиснутого $(\varepsilon_{33}^\varepsilon)^{-1}$ (1,3(НМП), 1',3'(НЧК)) і вільного $(\varepsilon_{33}^\sigma)^{-1}$ (2,4(НМП), 2',4'(НЧК)) кристалів RbH_2PO_4 – 1, 1', 2, 2', \circ [26], \bullet $((\varepsilon_{33}^\sigma - 1)/4\pi$ [27]- d_{36}^2 [27]/ s_{66}^E) $4\pi + 1$, \square [28], Δ [29]; KN_2PO_4 – 3, 3', 4, 4', \circ , \bullet [30], \square [31], \diamond [21], \triangleright [29], \triangleleft [32], ∇ [33], Δ [34], \times [35]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

Рис. 6. Температурна залежність поперечної проникності $\varepsilon_{11}^\varepsilon$ кристалів: RbH_2PO_4 – 1 (НМП), 1' (НЧК), 1'' (НМП при $\Omega = 10\text{K}$), \square [26]; KN_2PO_4 – 2 (НМП), 2' (НЧК), \circ [34]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

периментальні і перераховані п'єзомодулі в парафазі кількісно добре описуються як в НЧК, так і в НМП з врахуванням тунелювання протонів на зв'язках. При $T \rightarrow T_c$ значення d_{36} і e_{36} зростають. З ростом ΔT в парафазі від 0 до 170 K для KN_2PO_4 значення d_{36} зменшується у 88 разів, а e_{36} – у 44,5 раза. Константи h_{36} і g_{36} незначно зменшуються з ростом температури. П'єзомодулі d_{14} , e_{14} , h_{14} і g_{14} не мають аномальної температурної залежності.

Температурні залежності пружних сталей c_{66}^E кристалів RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 наведена на рис.11, а c_{44}^E – на рис.12. Отримано добрий кількісний опис відповідних експериментальних даних в параелектричній фазі для кристалів RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 в НЧК [5, 6], і на основі моделі, запропонованої в цій роботі.

Перейдемо до аналізу результатів дослідження релаксаційних явищ у сегнетоелектриках RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 . У роботах [5–8, 10] динамічні явища розглядалися на основі моделі, в якій враховано

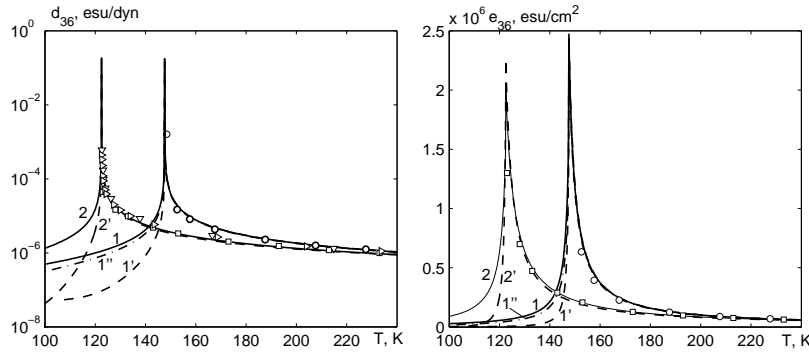


Рис. 7. Температурна залежність коефіцієнта п'єзоелектричної деформації d_{36} кристалів RbH_2PO_4 – 1 (НМП), 1' (НЧК), 1'' (НМП при $\Omega = 10\text{K}$), \circ [26]; KH_2PO_4 – 2 (НМП), 2' (НЧК), \square [30], ∇ [36], \triangleright [37]; і температурна залежність коефіцієнта п'єзоелектричної напруги e_{36} кристалів RbH_2PO_4 – 1 (НМП), 1' (НЧК), 1'' (НМП при $\Omega = 10\text{K}$), \circ $-d_{36}$ [26]/ s_{66}^E [38]; KH_2PO_4 – 2 (НМП), 2' (НЧК), \square [30]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

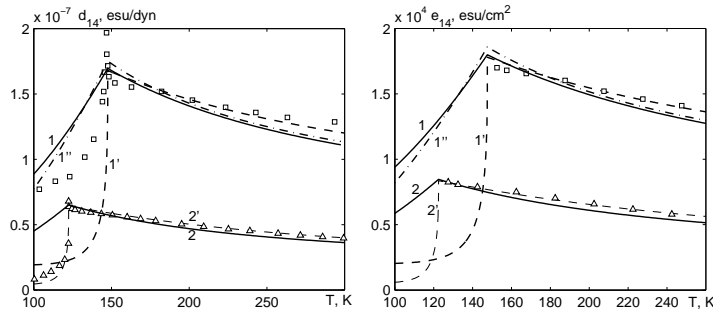


Рис. 8. Температурна залежність коефіцієнта п'єзоелектричної деформації d_{14} кристалів RbH_2PO_4 – 1 (НМП), 1' (НЧК), 1'' (НМП при $\Omega = 10\text{K}$), \square [26]; KH_2PO_4 – 2, 2', Δ [39] і температурна залежність коефіцієнта п'єзоелектричної напруги e_{14} кристалів RbH_2PO_4 – 1 (НМП), 1' (НЧК), 1'' (НМП при $\Omega = 10\text{K}$), \square $-d_{14}$ [26]/ s_{44}^E [28]; KH_2PO_4 – 2 (НМП), 2' (НЧК), Δ $-d_{14}$ [39]/ s_{44}^E [30]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

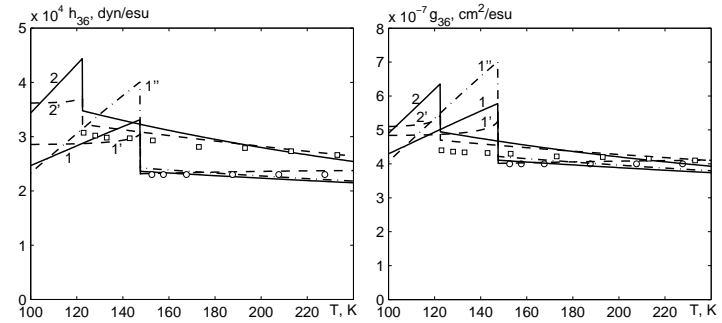


Рис. 9. Температурна залежність константи п'єзоелектричної напруги h_{36} кристалів RbH_2PO_4 – 1 (НМП), 1' (НЧК), 1'' (НМП при $\Omega = 10\text{K}$), \circ [26]; KH_2PO_4 – 2, 2', \square [30] і температурна залежність константи п'єзоелектричної деформації g_{36} кристалів RbH_2PO_4 – 1 (НМП), 1' (НЧК), 1'' (НМП при $\Omega = 10\text{K}$), \circ – [26]; KH_2PO_4 – 2 (НМП), 2' (НЧК), \square [30]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

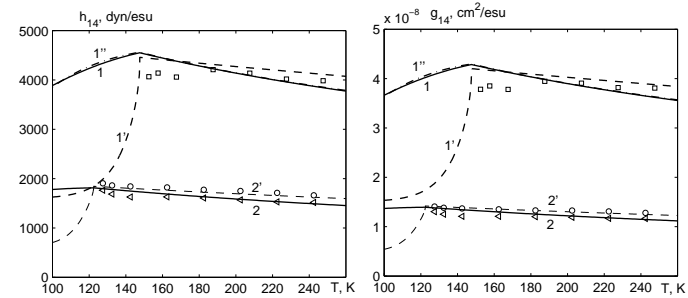


Рис. 10. Температурна залежність константи п'єзоелектричної напруги h_{14} RbH_2PO_4 – 1 (НМП), 1' (НЧК), 1'' (НМП при $\Omega = 10\text{K}$), \square $-d_{14}$ [26]/(s_{44}^E [38] χ_{11}^σ [26] $- d_{14}^2$ [26]); KH_2PO_4 – 2 (НМП), 2' (НЧК), \triangleleft $-d_{14}$ [39]/(s_{44}^E [30] $- d_{14}^2$ [39]), \circ $-d_{14}$ [39]/(s_{44}^E [30] χ_{11}^σ [34] $- d_{14}^2$ [39]) і температурна залежність константи п'єзоелектричної деформації g_{14} RbH_2PO_4 – 1 (НМП), 1' (НЧК), 1'' (НМП при $\Omega = 10\text{K}$), \square $-d_{14}$ [26]/ χ_{11}^σ [26]; KH_2PO_4 – 2 (НМП), 2' (НЧК), \triangleleft $-d_{14}$ [39]/ χ_{11}^σ [30], \circ $-d_{14}$ [39]/ χ_{11}^σ [34]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

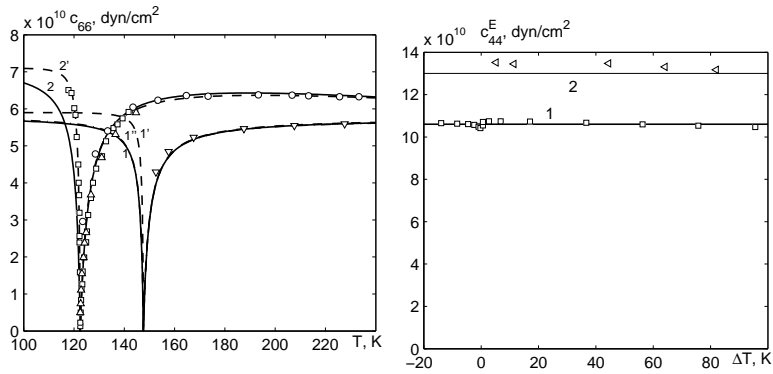


Рис. 11. Температурна залежність пружних сталей c_{66}^E кристалів RbH_2PO_4 – 1 (НМП), 1' (НЧК), 1'' (НМП при $\Omega = 10\text{K}$), \circ – $1/s_{66}^E$ [38]; KN_2PO_4 – 2 (НМП), 2' (НЧК), \circ [30], \square [40], \triangle [41]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

Рис. 12. Температурна залежність пружної сталої c_{44}^E кристалів RbH_2PO_4 – 1, \square – [38]; KN_2PO_4 – 2, \triangleleft – [30]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

як далекосяжні, так і короткосяжні взаємодії між протонами, але без врахування їх тунелювання на водневих зв'язках. У даній роботі використовується модель, в якій тунелювання та взаємодії протонів враховано лише в НМП, а динаміка протонів досліджується на основі методу Блоха. Надалі на рисунках будемо наводити криві для порівняння динамічних характеристик, які розраховані на основі згаданих вище двох підходів. Відзначимо відразу, що в сегнетоелектричній фазі адекватний опис таких експериментів отримується лише на базі першого методу, як це мало місце при розгляді статичних характеристик.

На рис.13 і 14 наведено температурні залежності проникностей $\epsilon'_{33}(\omega, T)$ і $\epsilon''_{33}(\omega, T)$ при різних частотах зовнішнього електричного поля для кристалів RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 . Починаючи з частоти ν_k , замість низькочастотного максимуму $\epsilon'_{33}(\omega, T)$ виникає гострий провал – мінімум при $\Delta T = 0\text{ K}$, який при збільшенні частоти розширюється і поглиблюється, досягаючи при $\nu \sim 10^{12}$ Гц величини ϵ_{33}^∞ . Збільшення частоти призводить до зменшення значень $\epsilon'_{33}(\omega)$ при зміні ΔT . При рості ΔT у параелектричній фазі значення $\epsilon''_{33}(\omega)$ зменшується.

При збільшенні частоти зменшується величина максимуму проникності $\epsilon''_{33}(\omega, T)$ та її швидкість зміни з ростом ΔT . При врахуванні п'єзоелектричної взаємодії при $\Delta T = 0$ мінімальні значення $\epsilon'_{33}(\omega)$ на різних частотах є більшими, ніж при нехтуванні п'єзо ефектом.

Як видно з рисунків, отримано хороший кількісний опис цих експериментів на основі обох методів в парафазі.

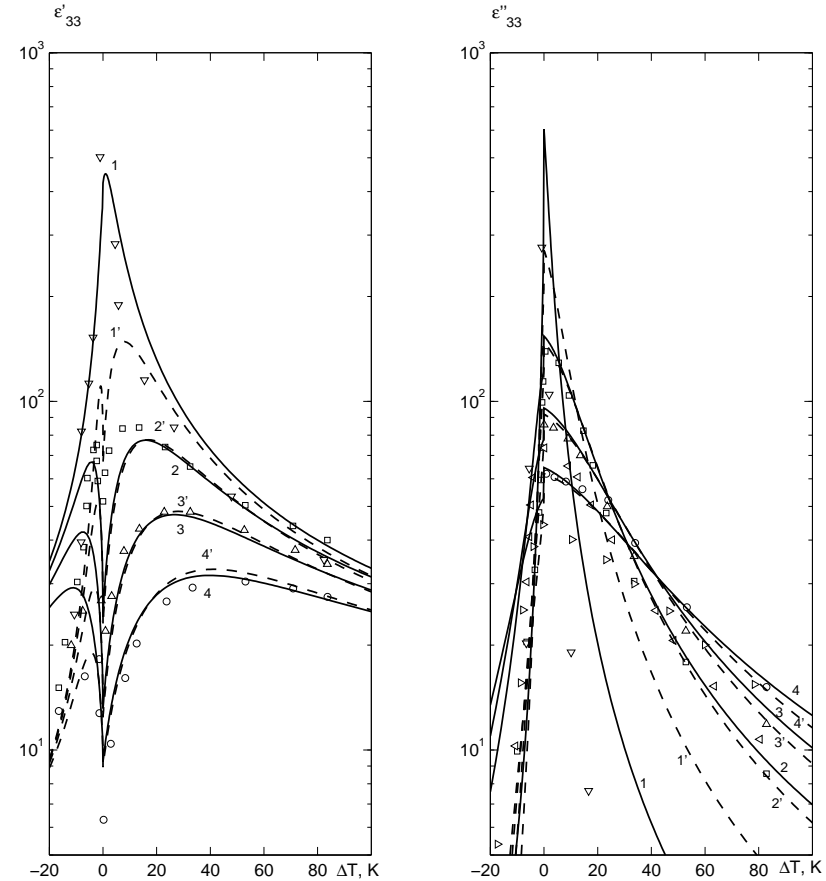


Рис. 13. Температурна залежність ϵ'_{33} і ϵ''_{33} RbH_2PO_4 при різних частотах ν (ГГц): 27.0 – 1, 1', ∇ [28]; 154.2 – 2, 2', \square [47]; 250.2 – 3, 3', \triangle [47]; 372.0 – 4, 4', \circ [47]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення; 1, 2, 3, 4 – НМП, 1', 2', 3', 4' – НЧК [5].

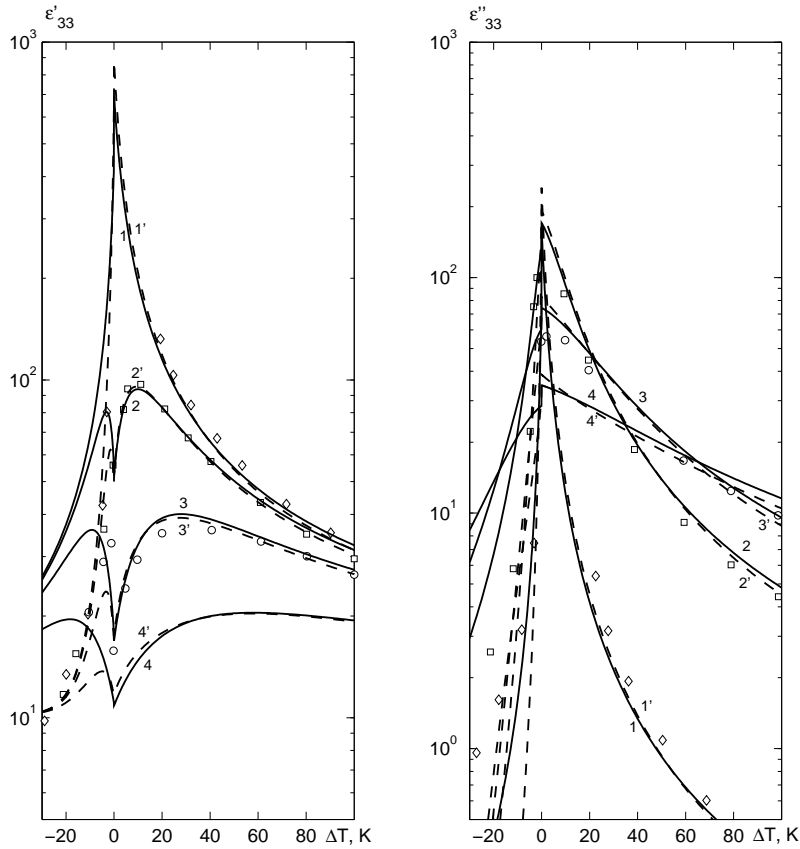


Рис. 14. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{KН}_2\text{PO}_4$ при різних частотах ν (ГГц): 9.2 – 1, 1', \diamond [42]; 154.2 – 2, 2', \square [43]; 372 – 3, 3', \circ [43]; 800 – 4, 4'. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення; 1, 2, 3, 4 – НМП, 1', 2', 3', 4' – НЧК [5].

Температурні залежності проникностей $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$ і $\varepsilon''_{11}(\omega, T)$ при різних значеннях частот ω для кристалів RbH_2PO_4 і $\text{KН}_2\text{PO}_4$ наведено на рис. 15 і 16. Розраховані значення $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$ RbH_2PO_4 добре описують дані експерименту [47]. Частоти, при яких проводились вимірювання в [47] відповідають лише початку дисперсії $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$. Експериментальні криві $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$ [47] порівняно з теоретичними розмиті при різних частотах значно сильніше.

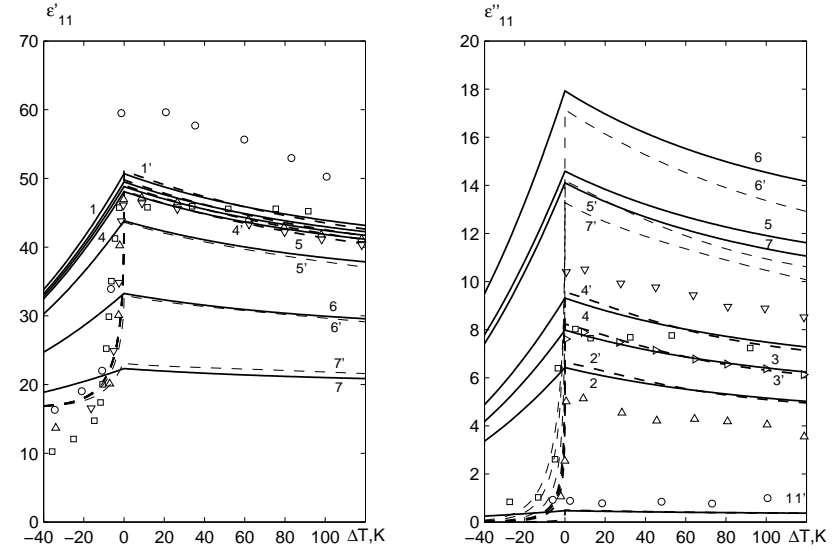


Рис. 15. Температурна залежність ε'_{11} і ε''_{11} RbH_2PO_4 при різних частотах ν (ГГц): 27.0 – 1, 1', \circ [28]; 342.0 – \square [45]; 381.0 – 2, 2', \triangle [47]; 483.0 – 3, 3', \triangleright [47]; 576.0 – 4, 4', ∇ [47]; 1000.0 – 5, 5'; 2000.0 – 6, 6'; 4000.0 – 7, 7'. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення; 1-7 – НМП, 1'-7' – НЧК [5].

Температурний хід $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$ характеризується в параелектричній фазі при $T = T_c$ неглибоким мінімумом, який при збільшенні частоти зменшується. При рості температури величина $\varepsilon'_{11}(\omega)$ повільно зростає, досягаючи максимуму, яка при підвищенні частоти зміщується в область вищих температур.

У параелектричній фазі при частотах субміліметрового діапазону для $\varepsilon''_{11}(\omega)$ при $T = T_c$ властивий мінімум. При збільшенні температури величина $\varepsilon''_{11}(\omega)$ зростає, досягаючи максимуму.

Розраховані частотні залежності $\varepsilon'_{33}(\omega)$, $\varepsilon''_{33}(\omega)$, $\varepsilon'_{11}(\omega)$ та $\varepsilon''_{11}(\omega)$ при різних значеннях ΔT для RbH_2PO_4 і $\text{KН}_2\text{PO}_4$, а також експериментальні дані наведені на рис. 17-20. При низьких частотах ($\nu < 10^7$ ГГц) $\varepsilon'_{ii}(\omega) = \varepsilon'_{ii}(0)$, а при високих ($\nu > 10^{13}$ ГГц) – $\varepsilon'_{ii}(\omega) = \varepsilon'_{ii}(\infty)$. При збільшенні ΔT в області дисперсії значення $\varepsilon'_{ii}(\omega)$ зменшується, а також зменшується швидкість зміни $\varepsilon'_{ii}(\omega)$ з ростом частоти. Величина $\varepsilon''_{ii}(\omega) = 0$, як при низьких частотах ($\omega \rightarrow 0$), так і

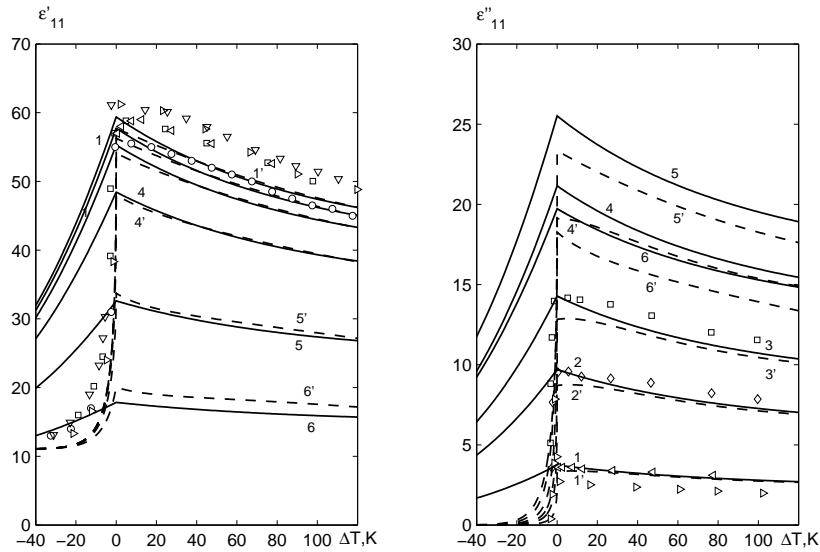


Рис. 16. Температурна залежність ε'_{11} і ε''_{11} KN_2PO_4 при різних частотах ν (ГГц): 0 – \circ [34]; 9.2 – ∇ [42]; 138.6 – 1, 1', \triangleleft [43], \triangleright [44]; 372.0 – 2, 2', \diamond [43]; 576.0 – 3, 3', \square [43]; 1000.0 – 4, 4'; 2000.0 – 5, 5'; 4000.0 – 6, 6'. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення; 1-6 – НМП, 1'-6' – НЧК [5].

при високих ($\omega \rightarrow \infty$). В області дисперсії $\varepsilon''_{ii}(\omega)$ досягає максимального значення, яке при збільшенні частоти зменшується.

Задовільним є опис експериментальних даних для $\varepsilon'_{33}(\omega)$ і $\varepsilon''_{33}(\omega)$, які для RbH_2PO_4 отримані в роботах [28, 45, 47]. У випадку KN_2PO_4 значення $\varepsilon'_{33}(\omega)$ і $\varepsilon''_{33}(\omega)$ добре узгоджуються з даними робіт [43, 44]. Розраховані на основі запропонованої теорії частотні залежності $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$ і $\varepsilon''_{11}(\omega, T)$ при різних температурах ΔT добре описують експериментальні дані робіт [43, 47] для RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 . Дещо гірше узгодження теорії і даних експериментів [44] для частотного ходу $\varepsilon'_{11}(\omega)$, отриманого для KN_2PO_4 і для $\varepsilon^*_{11}(\omega)$ [28, 45] кристалу RbH_2PO_4 .

Перейдемо до обговорення розрахованих динамічних характеристик механічно вільних кристалів RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 , які вирізані у вигляді квадратної пластинки зі сторонами $l = 1$ мм у площині (001). Відзначимо, що ми не можемо провести кількісне порівняння теоре-

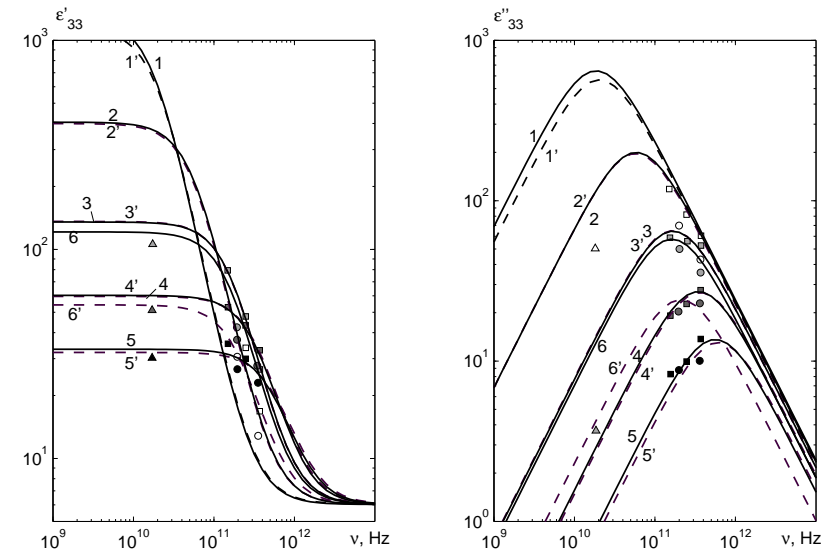


Рис. 17. Частотна залежність ε'_{33} і ε''_{33} RbH_2PO_4 при різних температурах ΔT (К): 0 – 1, 1'; 5 – 2, 2', \circ [45], \square [47], \triangle [28]; 20 – 3, 3', \bullet [45], \blacksquare [47], \blacktriangle [28]; 50К – 4, 4', \bullet [45], \blacksquare [47], \blacktriangle [28]; 100 – 5, 5', \bullet [45], \blacksquare [47], \blacktriangle [28]; -5 – 6, 6'. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення; 1-6 – НМП, 1'-6' – НЧК [5].

тично отриманих і частотних динамічних характеристик механічно вільного кристалу в області п'єзоелектричного резонансу з експериментальними даними, оскільки нам не відомі такі вимірювання.

На рис.21 і 22 представлено температурні залежності дійсної $\varepsilon'_{33}(\omega, T)$ та уявної $\varepsilon''_{33}(\omega, T)$ частин діелектричної проникності механічно вільних кристалів RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 на частоті $10 \cdot 10^6$ Гц.

У діапазоні резонансних частот на кривій температурної залежності проникності виникають резонансні піки, кількість яких зі збільшенням частоти зростає, а їх амплітуда зменшується. При наступному збільшенні частоти численні резонансні піки малої амплітуди накладаються на криву температурної залежності динамічної проникності затиснутого кристалу. При ще вищих частотах резонансні піки зникають взагалі.

Частотні залежності дійсної та уявної частин динамічної діелектричної проникності кристалів RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 при температу-

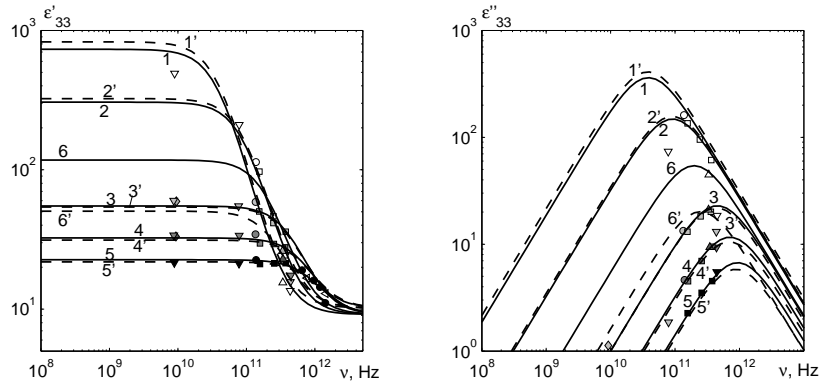


Рис. 18. Частотна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{KН}_2\text{PO}_4$ при різних температурах $\Delta T(\text{K})$: 0 – 1, 1'; 5 – 2, 2', \circ [44], \square [43], \diamond [42], \triangle [45], ∇ [46]; 50 – 3, 3', \circ [44], \square [43], \diamond [42], \triangle [45], ∇ [46]; 100 – 4, 4', \bullet [44], \blacksquare [43], \blacklozenge [42], \blacktriangle [45], \blacktriangledown [46]; 173 – 5, 5', \blacksquare [43], \blacklozenge [42], \blacktriangle [45], \blacktriangledown [46]; -5 – 6, 6'. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення; 1-6 – НМП, 1'-6' – НЧК [5].

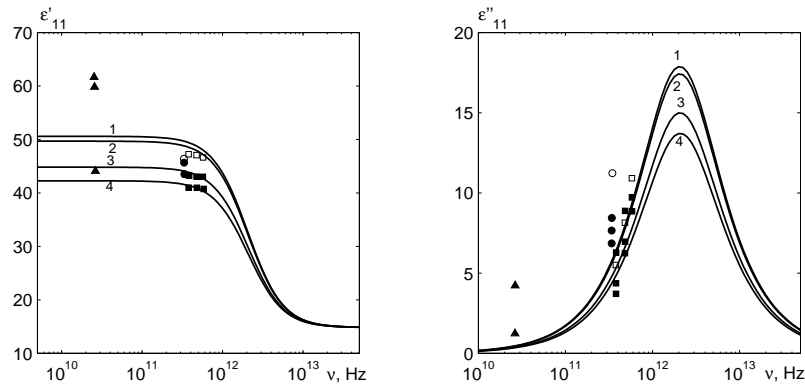


Рис. 19. Частотна залежність ε'_{11} і ε''_{11} RbH_2PO_4 при різних температурах $\Delta T(\text{K})$: 1 – 1, \square [47], \circ [45], \triangle [28]; 10 – 2, \square [47], \circ [45], \triangle [28]; 80 – 3, \square [47], \bullet [45], \blacktriangle [28]; 150 – 4, \square [47], \bullet [45], \blacktriangle [28]. Точки – експериментальні, лінії – НМП.

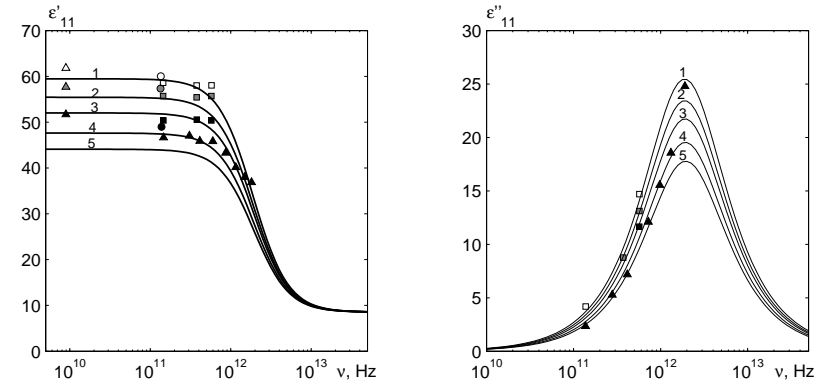


Рис. 20. Частотна залежність ε'_{11} і ε''_{11} $\text{KН}_2\text{PO}_4$ при різних температурах $\Delta T(\text{K})$: 1 – 1, \circ [44], \square [43], \triangle [42]; 50 – 2, \circ [44], \blacksquare [43], \blacktriangle [42]; 100 – 3, \bullet [44], \blacksquare [43], \blacktriangle [42]; 173 – 4, \bullet [44]. Точки – експериментальні, лінії – НМП.

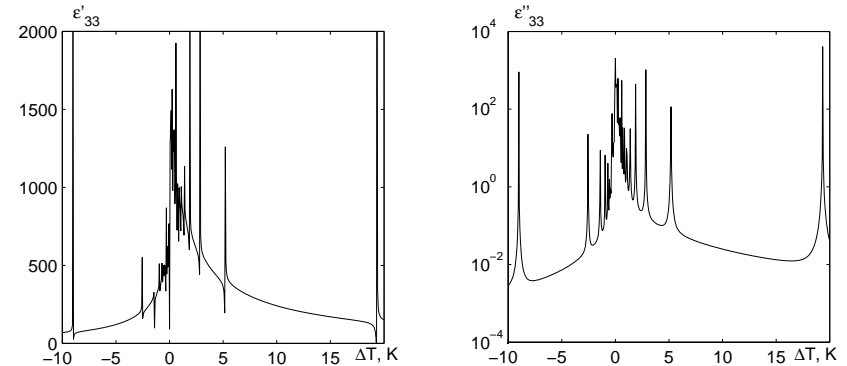


Рис. 21. Температурні залежності дійсної та уявної частини діелектричної сприйнятливості вільного кристалу RbH_2PO_4 на частоті $\nu=10\text{МГц}$.

рі $\Delta T = 50\text{ K}$ наведено на рис.23, 24. В області частот $3 \cdot 10^5 - 3 \cdot 10^8\text{ Гц}$ спостерігається дисперсія резонансного типу.

При $\omega \rightarrow 0$ отримуємо статичну діелектричну проникність вільного

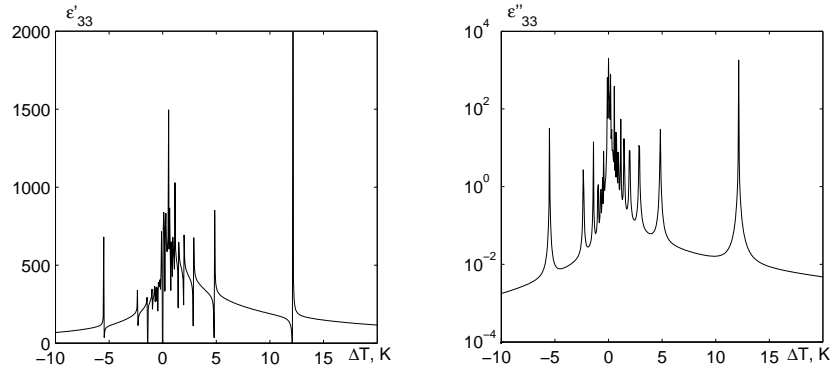


Рис. 22. Температурні залежності дійсної та уявної частини діелектричної сприйнятливості вільного кристалу KN_2PO_4 на частоті $\nu=10\text{МГц}$.

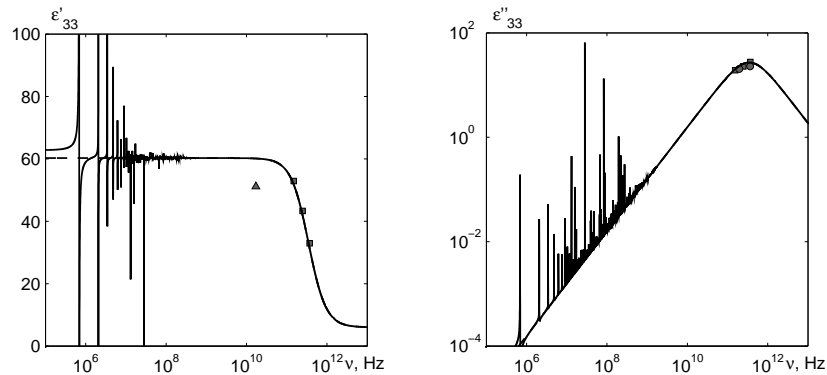


Рис. 23. Частотні залежності дійсної та уявної частини діелектричної сприйнятливості вільного і затиснутого кристалу RbH_2PO_4 при $\Delta T=50\text{К}$.

кристалу. Штрихова лінія на рис.23, 24 відповідає низькочастотному ходу проникності затиснутого кристалу. Вище від резонансної частоти спостерігається затискання кристалу високочастотним полем і для проникності затиснутого кристалу вище частоти 10^9 Гц спостерігається дисперсія релаксаційного типу. Криві частотних за-

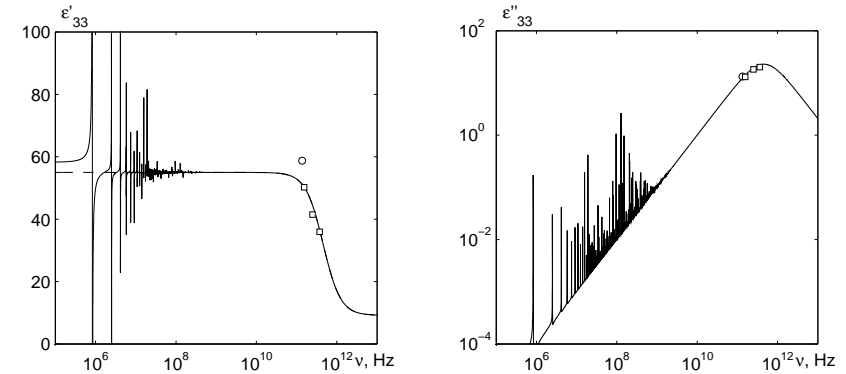


Рис. 24. Частотні залежності дійсної та уявної частини діелектричної сприйнятливості вільного і затиснутого кристалу KN_2PO_4 при $\Delta T=50\text{К}$.

лежностей $\varepsilon_{33}^*(\omega)$, які розраховані на основі запропонованої теорії, добре узгоджуються з даними експериментів.

На рис.25 наведено температурні залежності частот збуджень $\bar{\omega}_{2,3}$, які отримані в наближенні хаотичних фаз ($\bar{\omega}_{2,3}^{RPA}$) і в методі рівнянь Блоха для механічно затиснутого ($\bar{\omega}_{2,3}^\varepsilon$) і вільного ($\bar{\omega}_{2,3}^\sigma$) кристалів RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 , а на рис.26 – температурні залежності частот збуджень $\bar{\omega}_{4,5}$.

Частота збуджень ($\bar{\omega}_{2,3}^\sigma$) механічно вільного кристалу при $T = T_c$ дорівнює нулю. В параелектричній фазі $\bar{\omega}_{2,3}^{\varepsilon RPA} = \bar{\omega}_{2,3}^\varepsilon$, і при $T = T_c$ вони відмінні від нуля.

На рис.27 зображено розраховані температурні залежності коефіцієнта поглинання звуку α_8 кристалів RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 при різних частотах і дані вимірювань α_8 , які наведені в роботі [48]. В околі температури переходу T_c спостерігається різке зростання поглинання звуку α_8 . У випадку RbH_2PO_4 розраховані значення α_8 в НМП і НЧК дуже близькі між собою, а для KN_2PO_4 – відмінності між ними є суттєвими.

Температурна залежність швидкості звуку v_8 кристалів RbH_2PO_4 і KN_2PO_4 зображена на рис. 28.

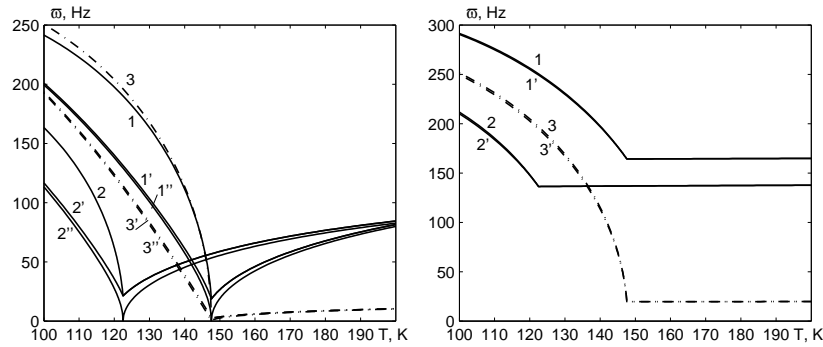


Рис. 25. Температурні залежності частот збуджень $\bar{\omega}_{2,3}$ кристалів RbH_2PO_4 (1, 3 при $\Omega = 10K$) і KNH_2PO_4 (2): $\bar{\omega}_{2,3}^{\varepsilon, RPA}$ – 1, 2, 3; $\bar{\omega}_{2,3}^{\varepsilon}$ – 1', 2', 3'; $\bar{\omega}_{2,3}^{\sigma}$ – 1'', 2'', 3''.

Рис. 26. Температурні залежності частот збуджень $\bar{\omega}_{4,5}$ кристалів RbH_2PO_4 (1, 3 при $\Omega = 10K$) і KNH_2PO_4 (2): $\bar{\omega}_{4,5}^{\varepsilon, RPA}$ – 1, 2, 3; $\bar{\omega}_{4,5}^{\varepsilon}$ – 1', 2', 3'.

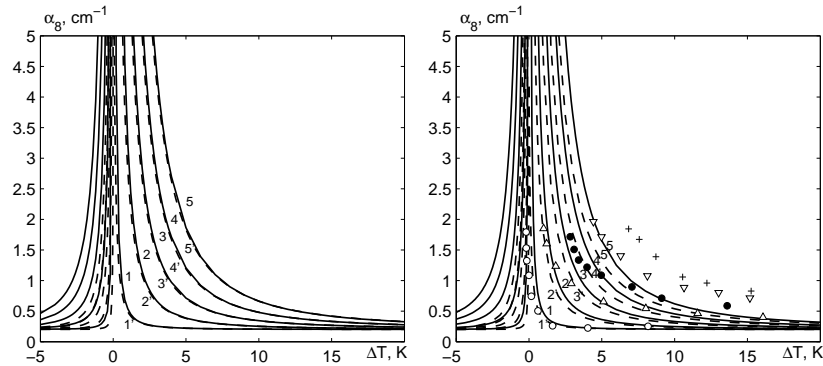


Рис. 27. Температурні залежності коефіцієнта поглинання кристалів RbH_2PO_4 (а), KNH_2PO_4 (б) при різних частотах ν , 10^6Гц : 1, 1' – 10, \circ [48], 2, 2' – 30, Δ [48], 3, 3' – 50, \bullet [48], 4, 4' – 70, ∇ [48], 5, 5' – 90, $+$ [48]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення; 1-5 – НМП, 1'-5' – НЧК [5].

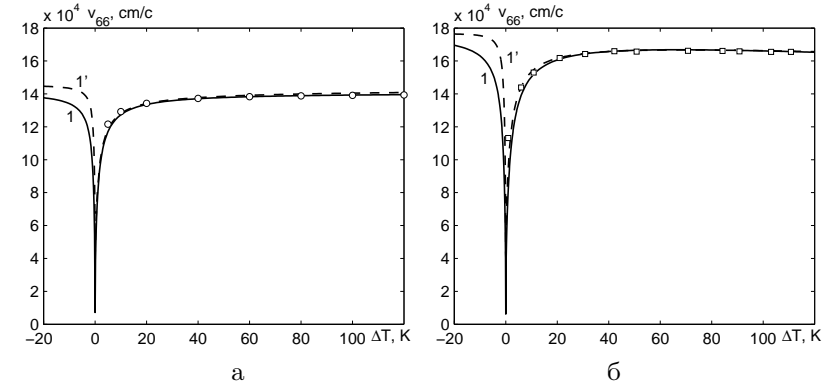


Рис. 28. Температурні залежності швидкості звуку кристалів RbH_2PO_4 (а), KNH_2PO_4 (б). Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення; 1 – НМП, 1' – НЧК [5].

11. Висновки

В цій роботі вперше показано, що на основі запропонованої модифікованої моделі протонного впорядкування з врахуванням тунелювання протонів на водневих зв'язках в наближенні молекулярного поля при належному виборі параметрів теорії досягнуто доброї кількісної згоди отриманих теоретичних результатів для фізичних характеристик сегнетоелектриків KNH_2PO_4 і RbH_2PO_4 з наявними експериментальними даними лише в парафазі. Встановлено, що розраховані в НХФ фізичні характеристики цих кристалів слабо залежать від тунелювання. В той же час в наближенні чотиричастинкового кластера [2, 5–10], нехтуючи тунелюванням, досягнуто доброї кількісної згоди отриманих теоретичних результатів з наявними експериментальними даними в параелектричній та сегнетоелектричній фазах.

Слід однак відзначити, що в даній роботі вперше розраховано спектр елементарних збуджень сегнетоелектриків типу KNH_2PO_4 з врахуванням тунелювання та п'єзоелектричного зв'язку. Встановлено, що в режимі механічно вільного кристалу в спектрі збуджень цих кристалів має місце сегнетоелектрична м'яка мода. Розрахунок же спектру елементарних збуджень п'єзоелектричних кристалів типу KNH_2PO_4 в наближенні чотиричастинкового кластера пов'язаний зі значними математичними труднощами.

Література

1. Стасюк І.В., Билецкий І.Н., Стягар О.Н. Индуцированные внешним давлением фазовые переходы в кристаллах KD_2PO_4 . // УФЖ, 1986, т. 31, № 4, с. 567–571.
2. Stasyuk I.V., Levitskii R.R., Zachek I.R., Moina A.P. The KD_2PO_4 ferroelectrics in external fields conjugate to the order parameter: Shear stress σ_6 . // Phys. Rev. B, 2000, v. 62, №. 10, p. 6198–6207.
3. Levitskii R.R., Lisnii B.M. Theory of related to shear strain u_6 physical properties of ferroelectrics and antiferroelectrics of the KH_2PO_4 family // phys. stat. sol. (b). - 2004. - Vol.241, №6.-P.1350-1368.
4. Левицький Р.Р., Лісний Б.М., Теорія п'єзоелектричних, пружних та діелектричних властивостей кристалів сім'ї KH_2PO_4 при деформації u_6 . Фазовий перехід та п'єзоелектр у кристалі KH_2PO_4 // Журн. фіз. досліджень, 2003, т. 7, №4, с. 431-445.
5. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Вдович А.С. Повздовжні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні, динамічні та теплові властивості сегнетоелектриків типу KH_2PO_4 // Препринт ICMP-06-08U, Львів, 2006, 116 с.
6. 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).
7. Levitsky R.R., Zachek I.R., Moina A.P., Vdovych A.S. Longitudinal relaxation of mechanically free KH_2PO_4 type crystals. Piezoelectric resonance and sound attenuation // Condens. Matter Phys. - 2008. - Vol. 11, No 3(55). - P. 555-570.
8. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Вдович А.С. Поперечна релаксація в сегнетоелектриках з водневими зв'язками сім'ї KH_2PO_4 // Фізика і хімія твердого тіла. - 2009. - Т. 10, № 2. - С. 377-388.
9. Levitsky R.R., Zachek I.R., Vdovych A.S., Moina A.P. Longitudinal dielectric, piezoelectric, elastic, and thermal characteristics of the KH_2PO_4 type ferroelectrics // J. Phys. Study. - 2010. - Vol. 14, No 1. - P. 1701(17p.)
10. Стасюк І.В., Левицький Р.Р., Моїна А.П., Сливка О.Г., Величко О.В. Польові та деформаційні ефекти у складних сегнетоактивних сполуках. – Ужгород: Гражда, 2009. – 392с.
11. Y. Takagi, T. Shigenavi. Transverse Susceptibility and E-Mode Raman Spectra of a KH_2PO_4 Crystal // J. of Phys. Soc. Japan, 1975, v. 39, №2, p. 440-447.
12. Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики

- // Москва, “Мир”, 1975, 398 с.
13. S. Halvin, E. Litov, H. Sompolinsky. The anomalous temperature dependence of the protonic E-mode in KDP-type crystals // Phys. Letters, 1975, v. 53A, №1, p. 41-42.
 14. S. Halvin, H. Sompolinsky. Coupling Between Protonic E-Mode and Lattice Vibrations in KDP-Type Crystals // Ferroelectrics, 1976, v. 14, p. 617-618.
 15. S. Halvin, H. Sompolinsky. Central E-Mode and Transverse Dynamical Properties of KDP-Type Crystals // Phys. Letters, 1976, v. 57A, №2, p. 171-172.
 16. Левицький Р.Р., Зачек І.Р. Релаксационные явления в ортофосфатах. Метод уравнений Блоха // Препринт ИТФ-80-106Р, Киев, 1980, 33 с.
 17. S. Havlin, E. Litov, E.A. Uehling. Transverse Susceptibility in KH_2PO_4 -type crystals // Phys. Rev. B, 1974, v. 9, №3, p. 1024-1028.
 18. S. Halvin. Longitudinal and transverse dielectric constants of KDP-type ferro- and antiferroelectrics // Ferroelectrics, 1987, v. 71, p. 183-223.
 19. F. Gilletta, M. Chabin. Longitudinal and transverse dielectric properties of KDP Type Crystals // Phys. stat. sol. (b), 1980, v. 100, p. K77-K82.
 20. Wiseman G.G. Electrocaloric effect on potassium dihydrogen phosphate // Iee Transactions on Electron Devices. - 1969 - V. ED-16, №6. - P. 588-593.
 21. Samara G.A. The effects of deuteration on the static ferroelectric properties of KH_2PO_4 (KDP) // Ferroelectrics. - 1973. - v.5. - P. 25-37.
 22. Струков Б.А., Баддур А., Зиненко В.Н., Мищенко А.В., Кошчик В. Изотопический эффект в кристаллах RbH_2PO_4 // Физ. твердого тела. - 1973. - Т.15, №6. - С. 1388-1394.
 23. Амин М., Струков Б.А. Теплоемкость монокристаллического RbH_2PO_4 // Физ.твердого тела. - 1968. - Т.10, №10. - С.3158 - 3160.
 24. Струков Б.А., Баддур А., Кошчик В.А., Величко И.А. Электрические и тепловые свойства смешанных сегнетоэлектрических кристаллов $KH_{2(1-x)}D_{2x}PO_4$ // Физ.твердого тела. - 1972. - Т.14, №4. - С. 1034-1039.
 25. Strukov B.A., Amin M., Kopsik V.A. The specific heat of some KDP - type crystals // J. Phys. Soc. Japan. - 1970. - V.28, Suppl. - P. 207-209.

26. Шувалов Л.А., Желудев И.С, Мнацакян А.В., Лупудов Ц.Ж., Фиала И. Сегнетоэлектрические аномалии диэлектрических и пьезоэлектрических свойств кристаллов RbH_2PO_4 и KD_2PO_4 // Изв. АН СССР, сер.физ. - 1967. - Т.31, №11. - С.1919-1922.
27. Струков Б.А., Баддур А., Величко И.А. О фазовом переходе первого рода в кристаллах KD_2PO_4 // Физ. твердого тела. - 1971.- Т.13, №8. - С. 2484-2485.
28. Переверзева Л.П. Особенности дисперсии ε в сегнетоэлектриках с фазовым переходом типа порядок-беспорядок // Изв. АН СССР, сер. физ. - 1971. - Т.35, №12. - С. 2613-2614.
29. Василевская А.С., Сонин А.С Связь диэлектрических и электрооптических свойств сегнетоэлектрических кристаллов группы KDP в параэлектрической фазе // Физ.твердого тела. - 1971. -Т.13, №6. - С. 1550-1556.
30. Мэзон У. Пьезоэлектрические кристаллы и их применение в ультразвуке. - М.: ИЛ, 1952. - 447 с.
31. Deguchi K., Nakamura E. Deviation from the Curie-Weiss law in KH_2PO_4 // J.Phys.Soc.Japan.-1980.-V.49, №5.-P. 1887-1891.
32. Chabin M., Gilletta P. Polarization and dielectric constant of KDP - type crystals // Ferroelectrics. - 1977. - V.15, №3-4 - P. 149-154.
33. Mayer R.J., Bjorkstam J.L. Dielectric properties of KD_2PO_4 // J.Phys.Chem.Solids. - 1962. - V.23. - P. 619-620.
34. Волкова Е.Н. Физические свойства сегнетоэлектрических твердых растворов $\text{K}(\text{D}_x\text{H}_{1-x})_2\text{PO}_4$ // Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Москва, 1991г, с.152.
35. Kobayashi J., Uesu Y., Mizutani I., Enomoto Y. X-ray study on thermal expansion of ferroelectric KH_2PO_4 . // Phys. stat. sol. (a), 1970, vol. 3, p. 63-69.
36. Bantle W., Cafilish C. // Helv. Phys. Acta, 1943, vol. 16, p. 235.
37. Von Arx A., Bantle W. // Helv. Phys. Acta, 1943, vol. 16, p. 211.
38. Shuvalov L.A., Mnatsakanyan A.V. The elastic properties of KD_2PO_4 crystals over a wide temperature range. // Sov. Phys. Crystall., 1966, vol. 11, №2, p. 210-212.
39. Иона Ф., Ширанэ Д. Сегнетоэлектрические кристаллы. - М.: Мир, 1965. - 555 с.
40. Brody E.M., Cummins H.Z. // Phys. Rev. Lett., 1968, vol. 21, p. 1263.
41. Garland C.W., Novotny D.B. Ultrasonic velocity and attenuation in KH_2PO_4 // Phys.Rev. -1969.-V.177, №2. -P. 971-975.
42. Kaminov I.P. Microwave dielectric properties of $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$,

- KH_2AsO_4 and partially deuterated KH_2PO_4 // Phys. Rev. -1965, v. 138, №5A. - p. 1539-1543.
43. Волков А.А., Козлов Г.В., Лебедев С.П., Величко И.А. Диэлектрические спектры смешанных кристаллов KDP-DKDP в субмиллиметровом диапазоне волн // ФТТ, 1979, т. 21, №11, с. 3304-3309.
44. Gauss K.E., Happ H., Rother G. Millimeter wave and far-infrared investigation on KDP with assymetric interferometers // Phys. Stat. Sol. B. - 1975.-V.72, №2. - P. 623-630.
45. Мериакри В.В., Ушаткин Е.Ф. Исследование неорганических материалов методами субмиллиметровой спектроскопии // В сб.: Физические методы исследования неорганических материалов. М.: Наука, 1981. - С. 195-205.
46. Мериакри В.В., Поплавко Ю.М., Ушаткин Е.Ф. Дисперсия диэлектрической проницаемости в кристаллах KH_2PO_4 на частотах, близ ких к частоте мягкой моды // Журн. техн. физ. - 1974. - Т.44, №5. - С.1111-1113.
47. Volkov A.A., Kozlov G.V., Lebedev S.P., Prokhorov A.M. Proton modes in the crystals of KH_2PO_4 family // Ferroelectrics. - 1980. - V.25, №1-4 - P. 531-534.
48. Litov E., Garland CM. Ultrasonic investigation of the ferroelectric transition region in KH_2PO_4 // Phys. Rev. B. - 1970. - V. 2, №11. - P. 4597-4602.

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>