

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/>)

Андрій Степанович Вдович
Ігор Романович Зачек
Роман Романович Левицький

ПОПЕРЕЧНІ СТАТИЧНІ ДІЕЛЕКТРИЧНІ, П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНІ І ПРУЖНІ
ХАРАКТЕРИСТИКИ КВАЗІОДНОВИМІРНИХ СЕГНЕТОЕЛЕКТРИКІВ
ТИПУ CsH_2PO_4

Роботу отримано 28 грудня 2011р.

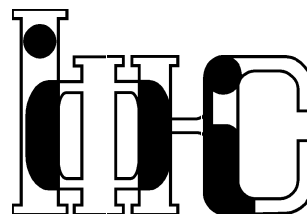
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом теорії модельних спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-11-19U

А.С.Вдович, І.Р.Зачек*, Р.Р.Левицький

ПОПЕРЕЧНІ СТАТИЧНІ ДІЕЛЕКТРИЧНІ,
П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНІ І ПРУЖНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ
КВАЗІОДНОВИМІРНИХ СЕГНЕТОЕЛЕКТРИКІВ
ТИПУ CsH_2PO_4

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

ЛЬВІВ

УДК: 537.226.83/.86, 538.91

PACS: 77.22.Ch, 77.84.-s, 77.80.-e, 77.80.Bh, 77.65.Bn, 77.22.Ej

Поперечні статичні діелектричні, п'єзоелектричні і пружні характеристики квазіодновимірних сегнетоелектриків типу CsH_2PO_4

А.С.Вдович, І.Р.Зачек, Р.Р.Левицький

Анотація. У рамках модифікованої моделі протонного впорядкування квазіодновимірних сегнетоелектриків з водневими зв'язками типу CsH_2PO_4 з врахуванням лінійних за деформаціями ε_i і $\varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6$ внесків в енергію протонної системи, але без врахування тунелювання в наближенні двочастинкового кластера розраховано і досліджено їх поперечні термодинамічні характеристики і швидкість поширення звукових хвиль. При належному виборі мікропараметрів отримано задовільний кількісний опис наявних експериментальних даних для CsH_2PO_4 .

Transverse static dielectric, piezoelectric and elastic characteristics of quasi-one-dimensional CsH_2PO_4 type ferroelectrics

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

Abstract. Within modified proton ordering model of quasi-one-dimensional CsH_2PO_4 type ferroelectrics with hydrogen bonds with taking into account linear on strains ε_i and $\varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6$ contributions into energy of proton system, but without taking into account tunneling, within the two-particle cluster approximation their transverse thermodynamic characteristics and sound attenuation are studied and calculated. At the proper set of the parameters satisfying quantitative description of the available experimental data for CsH_2PO_4 is obtained.

Подається в Фізика і хімія твердого тіла
Submitted to Physics and Chemistry of Solid State

© Інститут фізики конденсованих систем 2011
Institute for Condensed Matter Physics 2011

1. Вступ

В роботі [1] в рамках модифікованої моделі протонного впорядкування квазіодновимірних сегнетоелектриків з водневими зв'язками типу CsH_2PO_4 з врахуванням лінійних за деформаціями ε_i і ε_5 внесків в енергію протонної системи, але без врахування тунелювання в наближенні двочастинкового кластера розраховано і досліджено їх поздовжні термодинамічні і динамічні характеристики. При належному виборі мікропараметрів отримано добрий кількісний опис відповідних експериментальних даних для частково дейтерованих кристалів $\text{Cs}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$. На основі цієї моделі в роботі [2] вивчено вплив гідростатичного і одновісних тисків на термодинамічні і динамічні характеристики цих кристалів. В даній роботі на основі розширеної протонної моделі роботи [1] шляхом врахування лінійних за деформаціями $\varepsilon_4, \varepsilon_6$ внесків в енергію протонної системи розраховано поперечні термодинамічні характеристики і швидкості поширення звукових хвиль.

2. Гамільтоніан кристалу CsH_2PO_4

Розглянемо систему протонів у кристалі CsH_2PO_4 , що рухаються на О-Н...О зв'язках, що утворюють зигзагоподібні ланцюги вздовж b -осі кристалу. В ролі примітивної комірки ґратки Браве виберемо елементарну комірку, проекція атомів якої у площині [001] наведена на рис.1, що є розширеною відносно природних комірок. Цю комірку

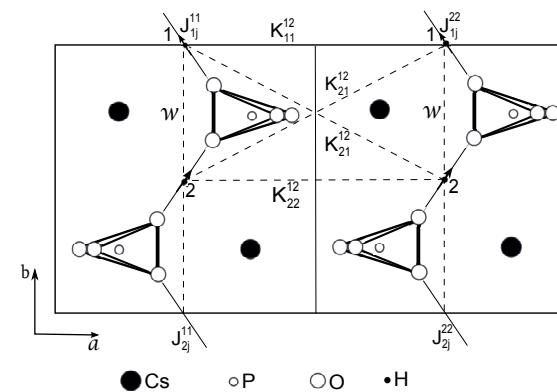


Рис. 1. Примітивна комірка кристалу CsH_2PO_4 .

ку утворюють два ланцюжки, кожний з яких містить два сусідні тетраедри PO_4 разом із двома короткими водневими зв'язками, що відносяться до одного з них (тетраедра типу "А"). Водневі зв'язки, які підходять до другого тетраедра (типу "В"), належать двом найближчим структурним елементам, які його оточують.

Гамільтоніан протонної системи CsH_2PO_4 з врахуванням короткоосяжних і далекоосяжних взаємодій, спонтанних деформацій $\varepsilon_i, \varepsilon_5$ [3] та при прикладанні зовнішніх електричних полів E_1 і E_3 вздовж кристаліграфічних осей a і c і одновісних напруг $\sigma_4 = \sigma_{yz}, \sigma_6 = \sigma_{xy}$ у площинах [100] або [001] під кутом $\frac{\pi}{4}$ до осей і які індують деформації $\varepsilon_4 = \varepsilon_{yz}, \varepsilon_6 = \varepsilon_{xy}$, має наступний вигляд:

$$\hat{H} = Nv_2U_{13seed} + \hat{H}_{13short} + \hat{H}_{13MF} - \sum_q (\mu_1 E_1 + \mu_3 E_3) \left(-\frac{\sigma_{q1}^{(1)}}{2} + \frac{\sigma_{q2}^{(1)}}{2} - \frac{\sigma_{q1}^{(2)}}{2} + \frac{\sigma_{q2}^{(2)}}{2} \right), \quad (2.1)$$

де v_2 – об'єм розширеної примітивної комірки, N – загальна кількість примітивних комірок ґратки Браве, $\sigma_{qf}^{(l)}$ – z -компонента оператора псевдоспіна, що відповідає протону, який знаходиться в q -ій комірці на f -ому зв'язку ($f = 1, 2$) l -го ланцюжка. Власні значення оператора $\sigma_{qf}^{(l)} = \pm 1$ відповідають двом можливим положенням протона на водневому зв'язку, μ_1, μ_3 – проекції ефективного дипольного моменту на осі a і c , причому $\mu_1 = -\mu_{11} = \mu_{12}, \mu_3 = -\mu_{31} = \mu_{32}$. Ланцюжки $l = 1$ утворюють підґратку "а", а ланцюжки $l = 2$ – підґратку "б".

"Затравочна" енергія виражається через деформації $\varepsilon_i, \varepsilon_j$ ($j = 4, 5, 6$) та електричні поля E_1 і E_3 і складається із пружної, п'єзоелектричної і діелектричної частин:

$$U_{13seed} = \frac{1}{2} \sum_{i,i'} c_{ii'}^{E0} \varepsilon_i \varepsilon_{i'} + \sum_{i=1}^3 c_{i5}^{E0} \varepsilon_i \varepsilon_5 + \frac{1}{2} c_{55}^{E0} \varepsilon_5^2 + \frac{1}{2} c_{44}^{E0} \varepsilon_4^2 + \frac{1}{2} c_{66}^{E0} \varepsilon_6^2 + \frac{1}{2} c_{46}^{E0} \varepsilon_4 \varepsilon_6 - e_{14}^0 \varepsilon_4 E_1 - e_{16}^0 \varepsilon_6 E_1 - e_{34}^0 \varepsilon_4 E_3 - e_{36}^0 \varepsilon_6 E_3 - \frac{1}{2} \chi_{11}^{\varepsilon 0} E_1^2 - \frac{1}{2} \chi_{33}^{\varepsilon 0} E_3^2 - \frac{1}{2} \chi_{13}^{\varepsilon 0} E_1 E_3, \quad (2.2)$$

де $c_{ii'}^{E0}, c_{i5}^{E0}, c_{55}^{E0}, c_{jj}^{E0}, e_{13}^0, \chi_{11}^{E0}$ – "затравочні" пружні сталі, коефіцієнт п'єзоелектричної напруги і діелектрична сприйнятливність механічно затиснутого кристалу.

Гамільтоніан короткоосяжних взаємодій

$$\hat{H}_{13short} = -2w_{13} \sum_{qq'} \left(\frac{\sigma_{q1}^{(1)}}{2} \frac{\sigma_{q2}^{(1)}}{2} + \frac{\sigma_{q1}^{(2)}}{2} \frac{\sigma_{q2}^{(2)}}{2} \right) (\delta_{\mathbf{R}_q \mathbf{R}_{q'}} + \delta_{\mathbf{R}_q + \mathbf{r}, \mathbf{R}_{q'}}). \quad (2.3)$$

Перший символ Кронекера відповідає взаємодії протонів взаємодії протонів у ланцюжках поблизу тетраедрів типу "А", а другий – поблизу тетраедрів типу "В", \mathbf{r} – радіус-вектор відносного положення протонного зв'язку в комірці. Величина w_1 отримується в результаті розкладу короткоосяжної взаємодії w в ряд за деформаціями $\varepsilon_i, \varepsilon_j$, обмежуючись лінійними доданками:

$$w_{13} = w + \sum_{i=1}^3 \delta_{2i} \varepsilon_i + \delta_5 \varepsilon_5 + \delta_4 \varepsilon_4 + \delta_6 \varepsilon_6 = w_2 + \delta_4 \varepsilon_4 + \delta_6 \varepsilon_6. \quad (2.4)$$

\hat{H}_{13MF} – гамільтоніан середнього поля за далекоосяжними диполь-дипольними взаємодіями та непрямими (через коливання ґратки) міжпротонними взаємодіями:

$$\hat{H}_{13MF} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{qq' \\ ff'}}^2 \sum_{l=1}^2 J_{ff'}^{ll'}(qq') \frac{\langle \sigma_{qf}^{(l)} \rangle \langle \sigma_{q'f'}^{(l')} \rangle}{2} - \sum_{\substack{qq' \\ ff'}}^2 \sum_{l=1}^2 J_{ff'}^{ll'}(qq') \frac{\langle \sigma_{q'f'}^{(l')} \rangle \sigma_{qf}^{(l)}}{2} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{qq' \\ ff'}}^2 \sum_{l=1}^2 K_{ff'}^{ll'}(qq') \frac{\langle \sigma_{qf}^{(l)} \rangle \langle \sigma_{q'f'}^{(l')} \rangle}{2} - \sum_{\substack{qq' \\ ff'}}^2 \sum_{ll'} K_{ff'}^{ll'}(qq') \frac{\langle \sigma_{q'f'}^{(l')} \rangle \sigma_{qf}^{(l)}}{2}, \quad (2.5)$$

де перші два доданки описують ефективну далекоосяжну взаємодію між протонами підґратки "а" або "б", а два наступні – між протонами підґраток "а" і "б".

Враховуючи, що унарні функції протонів

$$\langle \sigma_{q1}^{(1)} \rangle = \langle \sigma_{q1}^{(2)} \rangle = \eta_1^{(1)}, \quad \langle \sigma_{q2}^{(1)} \rangle = \langle \sigma_{q2}^{(2)} \rangle = \eta_2^{(1)} \quad (2.6)$$

і розкладаючи константи далекоосяжних взаємодій між протонами в ряд за деформаціями ε_i , обмежуючись лінійними доданками:

$$J_{ff'}^{ll'} = J + \sum_{i=1}^3 \psi_i \varepsilon_i + \psi_5 \varepsilon_5 + \psi_4 \varepsilon_4 + \psi_6 \varepsilon_6, \\ K_{11}^{ll'} = K_1 + \sum_{i=1}^3 \varphi_{1i} \varepsilon_i + \varphi_{15} \varepsilon_5 + \varphi_{14} \varepsilon_4 + \varphi_{16} \varepsilon_6,$$

$$\begin{aligned}
K_{12}^{ll'} &= K_2 + \sum_{i=1}^3 \varphi_{2i} \varepsilon_i + \varphi_{25} \varepsilon_5 - \varphi_{24} \varepsilon_4 - \varphi_{26} \varepsilon_6, \\
K_{21}^{ll'} &= K_2 + \sum_{i=1}^3 \varphi_{2i} \varepsilon_i + \varphi_{25} \varepsilon_5 + \varphi_{24} \varepsilon_4 + \varphi_{26} \varepsilon_6, \\
K_{22}^{ll'} &= K_1 + \sum_{i=1}^3 \varphi_{1i} \varepsilon_i + \varphi_{15} \varepsilon_5 - \varphi_{14} \varepsilon_4 - \varphi_{16} \varepsilon_6,
\end{aligned}$$

де $J_{ff'}^{ll'} = \sum_{\mathbf{R}_q - \mathbf{R}_{q'}} J_{ff'}^{ll'}(qq')$, $K_{ff'}^{ll'} = \sum_{\mathbf{R}_q - \mathbf{R}_{q'}} K_{ff'}^{ll'}(qq')$ – фур'є-образи

констант далекосяжних взаємодій, отримуємо гамільтоніан \hat{H}_{13MF} у такому вигляді:

$$\hat{H}_{13MF} = NH_{13MF}^0 + \hat{H}_{13}. \quad (2.7)$$

де

$$\hat{H}_{13MF}^{(0)} = \nu_{1+} (\eta_1^{(1)})^2 + \nu_{1-} (\eta_2^{(1)})^2 + (\nu_{2+} + \nu_{2-}) \eta_1^{(1)} \eta_2^{(1)}, \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{13} &= -[2\nu_{1+} \eta_1^{(1)} + 2\nu_{2-} \eta_2^{(1)}] \left(\frac{\sigma_1^{(1)}}{2} + \frac{\sigma_1^{(2)}}{2} \right) - \\
&- [2\nu_{2+} \eta_1^{(1)} + 2\nu_{1-} \eta_2^{(1)}] \left(\frac{\sigma_1^{(1)}}{2} + \frac{\sigma_1^{(2)}}{2} \right).
\end{aligned}$$

Тут використані такі позначення

$$\begin{aligned}
\nu_{1+} &= \nu_1 + \frac{1}{4}(\psi_4 + \varphi_{14})\varepsilon_4 + \frac{1}{4}(\psi_6 + \varphi_{16})\varepsilon_6, \\
\nu_{1-} &= \nu_1 + \frac{1}{4}(\psi_4 - \varphi_{14})\varepsilon_4 + \frac{1}{4}(\psi_6 - \varphi_{16})\varepsilon_6, \\
\nu_{2+} &= \nu_2 + \frac{1}{4}(\psi_4 + \varphi_{24})\varepsilon_4 + \frac{1}{4}(\psi_6 + \varphi_{26})\varepsilon_6, \\
\nu_{2-} &= \nu_2 + \frac{1}{4}(\psi_4 - \varphi_{24})\varepsilon_4 + \frac{1}{4}(\psi_6 - \varphi_{26})\varepsilon_6,
\end{aligned} \quad (2.9)$$

де

$$\begin{aligned}
\nu_1 &= \frac{1}{4} \left[(J + K_1) + \sum_i (\psi_i + \varphi_{1i})\varepsilon_i + (\psi_5 + \varphi_{15})\varepsilon_5 \right], \\
\nu_2 &= \frac{1}{4} \left[(J + K_2) + \sum_i (\psi_i + \varphi_{2i})\varepsilon_i + (\psi_5 + \varphi_{25})\varepsilon_5 \right].
\end{aligned}$$

При розрахунку термодинамічних і динамічних характеристик сегнетоактивних сполук типу CsH_2PO_4 використаємо наближення двочастинкового кластера (НДК). Термодинамічний потенціал у наближенні двочастинкового кластера:

$$\begin{aligned}
G_{13} &= N\nu_2 U_{13seed} + NH_{13MF}^0 - \\
&- k_B T \sum_q \left\{ \frac{1}{2} \ln \text{Spe}^{-\beta \hat{H}_{qA13}^{(2)}} + \frac{1}{2} \ln \text{Spe}^{-\beta \hat{H}_{qB13}^{(2)}} - \right. \\
&- \left. \frac{1}{2} \ln \text{Spe}^{-\beta \hat{H}_{q13}^{(1)1}} - \frac{1}{2} \ln \text{Spe}^{-\beta \hat{H}_{q13}^{(1)2}} \right\} - N\nu_2 \sum_i \sigma_j \varepsilon_j,
\end{aligned} \quad (2.10)$$

а двочастинковий і одночастинковий гамільтоніани мають наступний вигляд:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{qA13}^{(2)} &= -2w_{13} \left(\frac{\sigma_{q1}^{(1)} \sigma_{q2}^{(1)}}{2} + \frac{\sigma_{q1}^{(2)} \sigma_{q2}^{(2)}}{2} \right) - \\
&- \frac{y_{11}}{\beta} \left(\frac{\sigma_{q1}^{(1)}}{2} + \frac{\sigma_{q1}^{(2)}}{2} \right) - \frac{y_{21}}{\beta} \left(\frac{\sigma_{q2}^{(1)}}{2} + \frac{\sigma_{q2}^{(2)}}{2} \right),
\end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\hat{H}_{q13}^{(1)1} = -\frac{\bar{y}_{11}}{\beta} \left(\frac{\sigma_{q1}^{(1)}}{2} + \frac{\sigma_{q1}^{(2)}}{2} \right), \quad \hat{H}_{q13}^{(1)2} = -\frac{\bar{y}_{21}}{\beta} \left(\frac{\sigma_{q2}^{(1)}}{2} + \frac{\sigma_{q2}^{(2)}}{2} \right), \quad (2.12)$$

де використані такі позначення:

$$\begin{aligned}
y_{11} &= -\beta \Delta_{11} + 2\beta \nu_{1+} \eta_1^{(1)} + 2\beta \nu_{2-} \eta_2^{(1)} + \beta \mu_1 E_1 + \beta \mu_3 E_3, \\
y_{21} &= -\beta \Delta_{21} + 2\beta \nu_{2+} \eta_1^{(1)} + 2\beta \nu_{1-} \eta_2^{(1)} - \beta \mu_1 E_1 - \beta \mu_3 E_3, \\
\bar{y}_{11} &= -\beta \Delta_{11} + y_{11}, \quad \bar{y}_{21} = -\beta \Delta_{21} + y_{21}.
\end{aligned}$$

Тут Δ_{f1} – ефективне поле, створене сусідніми зв'язками поза границями кластера. У кластерному наближенні поля Δ_{f1} визначаємо з умови самоузгодження: середнє значення псевдоспіна не повинно залежати від того, за яким розподілом Гіббса (з двочастинковим або одночастинковим гамільтоніаном) воно розраховано:

$$\frac{\text{Sp} \sigma_{qf}^{(l)} e^{-\beta \hat{H}_{qA13}^{(2)}}}{\text{Sp} e^{-\beta \hat{H}_{qA13}^{(2)}}} = \frac{\text{Sp} \sigma_{qf}^{(l)} e^{-\beta \hat{H}_{q13}^{(1)l}}}{\text{Sp} e^{-\beta \hat{H}_{q13}^{(1)l}}}. \quad (2.13)$$

Тоді з (2.13) і враховуючи (2.11) і (2.12), отримуємо вирази для унарних функцій розподілу протонів:

$$\eta_1^{(1)} = \frac{1}{D_{13}} [\text{sh}(y_{11} + y_{21}) + a_{13}^2 \text{sh}(y_{11} - y_{21}) + 2a_{13} \text{sh}y_{11}] = \text{th} \frac{\bar{y}_{11}}{2},$$

$$\eta_2^{(1)} = \frac{1}{D_{13}} [\text{sh}(y_{11} + y_{21}) - a_{13}^2 \text{sh}(y_{11} - y_{21}) + 2a_{13} \text{sh}y_{21}] = \text{th} \frac{\tilde{y}_{21}}{2}, \quad (2.14)$$

Тут використані такі позначення:

$$\begin{aligned} D_{13} &= \text{ch}(y_{11} + y_{21}) + a_{13}^2 \text{ch}(y_{11} - y_{21}) + 2a_{13} (\text{ch}y_{11} + \text{ch}y_{21}) + \\ &+ 1 + a_{13}^2, \\ a_{13} &= e^{-\beta w_{13}}. \end{aligned}$$

Виключаючи параметр Δ_{f1} , маємо

$$\begin{aligned} y_{11} &= \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta_1^{(1)}}{1 - \eta_1^{(1)}} + 2\beta\nu_+ \eta_1^{(1)} + 2\beta\nu_- \eta_2^{(1)} + \beta\mu_1 E_1 + \beta\mu_3 E_3, \\ y_{21} &= \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta_2^{(1)}}{1 - \eta_2^{(1)}} + 2\beta\nu_+ \eta_1^{(1)} + 2\beta\nu_- \eta_2^{(1)} - \beta\mu_1 E_1 - \beta\mu_3 E_3. \end{aligned}$$

При $E_1 = 0$ і $\sigma_j = 0$

$$\tilde{\eta}^{(1)} = \eta_{13j}^{(1)x} = \eta_{24j}^{(1)x} = \frac{\text{sh}\tilde{y}}{a_2 + \text{ch}\tilde{y}},$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{y} &= \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \tilde{\eta}^{(1)}}{1 - \tilde{\eta}^{(1)}} + \beta(\nu + \sum_i \psi_i \varepsilon_i + \psi_5 \varepsilon_5) \tilde{\eta}^{(1)}, \\ \nu &= \frac{1}{4} (2J + K_1 + K_2), \quad \psi_i = \frac{1}{4} [2\psi_{1i} + (\varphi_{1i} + \varphi_{2i})], \\ \psi_5 &= \frac{1}{4} [2\psi_{15} + (\varphi_{15} + \varphi_{25})]. \end{aligned}$$

3. Статичні поперечні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні характеристики CsH_2PO_4

Розрахувавши власні значення дво- і одночастинкових гамільтоніанів, запишемо термодинамічний потенціал (2.10) в розрахунок на одну примітивну комірку в такому вигляді:

$$\begin{aligned} g_{13} &= v_2 U_{13} - 2k_B T \ln 2 - 2(w + \sum_{i=1}^3 \delta_i \varepsilon_i + \sum_{j=4}^6 \delta_j \varepsilon_j) + \\ &+ \nu_{1+} (\eta_1^{(1)})^2 + \nu_{1-} (\eta_2^{(1)})^2 + (\nu_{2+} + \nu_{2-}) \eta_2^{(1)} \eta_1^{(1)} - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &- T \ln [1 - (\eta_1^{(1)})^2] - T \ln [1 - (\eta_2^{(1)})^2] - \\ &- 2T \ln D_{13} - v_2 \left(\sum_{i=1}^3 \sigma_i \varepsilon_i + \sum_{j=4}^6 \sigma_j \varepsilon_j \right). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Використовуючи рівняння рівноваги

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_2} \left(\frac{\partial g_{13}}{\partial \varepsilon_i} \right)_{E_1} &= 0, \quad \frac{1}{v_2} \left(\frac{\partial g_{13}}{\partial \varepsilon_j} \right)_{E_1} = 0, \\ \frac{1}{v_2} \left(\frac{\partial g_{13}}{\partial \varepsilon_i} \right)_{E_3} &= 0, \quad \frac{1}{v_2} \left(\frac{\partial g_{13}}{\partial \varepsilon_j} \right)_{E_3} = 0, \\ \frac{1}{v_2} \left(\frac{\partial g_{13}}{\partial E_1} \right)_{\varepsilon_i} &= -P_1, \quad \frac{1}{v_2} \left(\frac{\partial g_{13}}{\partial E_3} \right)_{\varepsilon_i} = -P_3, \end{aligned} \quad (3.2)$$

отримуємо рівняння для деформацій ε_i , ε_j і поляризацій P_1 і P_2 :

$$\begin{aligned} \sigma_i &= c_{i1}^{E0} \varepsilon_1 + c_{i2}^{E0} \varepsilon_2 + c_{i3}^{E0} \varepsilon_3 + c_{i5}^{E0} \varepsilon_5 - \\ &- \frac{2\delta_i}{v_2} + \frac{4\delta_i a_{13}}{v_2 D_{13}} [a_{13} \text{ch}(y_{11} - y_{21}) + \text{ch}y_{11} + \text{ch}y_{21}] + a_{13} - \\ &- \frac{1}{4v_2} (\psi_i + \varphi_{1i}) [(\eta_1^{(1)})^2 + (\eta_2^{(1)})^2] - \frac{1}{2v_2} (\psi_i + \varphi_{2i}) \eta_1^{(1)} \eta_2^{(1)}, \\ \sigma_5 &= c_{15}^{E0} \varepsilon_1 + c_{25}^{E0} \varepsilon_2 + c_{35}^{E0} \varepsilon_3 + c_{55}^{E0} \varepsilon_5 - \\ &- \frac{2\delta_5}{v_2} + \frac{4\delta_5 a_{13}}{v_2 D_{13}} [a_{13} \text{ch}(y_{11} - y_{21}) + \text{ch}y_{11} + \text{ch}y_{21}] + a_{13} - \\ &- \frac{1}{4v_2} (\psi_5 + \varphi_{15}) [(\eta_1^{(1)})^2 + (\eta_2^{(1)})^2] - \frac{1}{2v_2} (\psi_5 + \varphi_{25}) \eta_1^{(1)} \eta_2^{(1)}, \\ \sigma_4 &= c_{44}^{E0} \varepsilon_4 + c_{46}^{E0} \varepsilon_6 - e_{14}^0 E_1 - e_{16}^0 E_3 - \\ &- \frac{2\delta_4}{v_2} + \frac{4\delta_4 a_{13}}{v_2 D_{13}} [a_{13} \text{ch}(y_{11} - y_{21}) + \text{ch}y_{11} + \text{ch}y_{21}] + a_{13} - \\ &- \frac{1}{4v_2} (\psi_4 + \varphi_{14}) \eta_1^{(1)2} - \frac{1}{4v_2} (\psi_4 - \varphi_{14}) \eta_2^{(1)2} - \\ &- \frac{1}{2v_2} [(\psi_4 - \varphi_{24}) + (\psi_4 + \varphi_{24})] \eta_1^{(1)} \eta_2^{(1)}, \\ \sigma_6 &= c_{46}^{E0} \varepsilon_4 + c_{66}^{E0} \varepsilon_6 - e_{34}^0 E_1 - e_{36}^0 E_3 - \\ &- \frac{2\delta_6}{v_2} + \frac{4\delta_6 a_{13}}{v_2 D_{13}} [a_{13} \text{ch}(y_{11} - y_{21}) + \text{ch}y_{11} + \text{ch}y_{21}] + a_{13} - \\ &- \frac{1}{4v_2} (\psi_6 + \varphi_{16}) \eta_1^{(1)2} - \frac{1}{4v_2} (\psi_6 - \varphi_{16}) \eta_2^{(1)2} - \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2v_2} [(\psi_6 - \varphi_{26}) + (\psi_6 + \varphi_{26})] \eta_1^{(1)} \eta_2^{(1)}, \\
P_1 &= e_{14}^0 \varepsilon_4 + e_{16}^0 \varepsilon_4 + \chi_{11}^{\varepsilon 0} E_1 + \chi_{13}^{\varepsilon 0} E_3 + \frac{\mu_1}{v_2} (\eta_1^{(1)} - \eta_2^{(1)}), \\
P_3 &= e_{34}^0 \varepsilon_4 + e_{36}^0 \varepsilon_4 + \chi_{13}^{\varepsilon 0} E_1 + \chi_{33}^{\varepsilon 0} E_3 + \frac{\mu_3}{v_2} (\eta_1^{(1)} - \eta_2^{(1)}), \quad (3.4)
\end{aligned}$$

На основі виразів (3.3)–(3.4) розрахуємо поперечні термодинамічні характеристики кристалу CsH_2PO_4 .

Ізотермічні статичні сприйнятливості механічно затиснутого кристалу мають такий вигляд:

$$\begin{aligned}
\chi_{11}^{\varepsilon T}(0) &= \chi_{11}^{\varepsilon 0} + \frac{\mu_1^2}{v_2} \beta \frac{a_2}{a_2 + \text{ch}\tilde{y} - a_2 \varphi_a^\eta}, \\
\chi_{33}^{\varepsilon T}(0) &= \chi_{33}^{\varepsilon 0} + \frac{\mu_3^2}{v_2} \beta \frac{a_2}{a_2 + \text{ch}\tilde{y} - a_2 \varphi_a^\eta}, \quad (3.5)
\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
\varphi_a^\eta &= \frac{1}{1 - (\tilde{\eta}^{(1)})^2} + \beta(\nu_a + \sum_i \varphi_{ia} \varepsilon_i + \varphi_{5a} \varepsilon_5), \\
\nu_a &= \frac{1}{4}(K_1 - K_2), \quad \varphi_{ia} = \frac{1}{4}(\varphi_{1i} - \varphi_{2i}), \quad \varphi_{ja} = \frac{1}{4}(\varphi_{1j} - \varphi_{2j}).
\end{aligned}$$

Ізотермічні коефіцієнти п'єзоелектричної напруги отримані в такому вигляді:

$$\begin{aligned}
e_{14}^T &= e_{14}^0 + \frac{\mu_1}{v_2} \beta \frac{\varphi_{4a} a_2}{a_2 + \text{ch}\tilde{y} - a_2 \varphi_a^\eta} \tilde{\eta}^{(1)}, \\
e_{16}^T &= e_{16}^0 + \frac{\mu_1}{v_2} \beta \frac{\varphi_{6a} a_2}{a_2 + \text{ch}\tilde{y} - a_2 \varphi_a^\eta} \tilde{\eta}^{(1)}, \\
e_{34}^T &= e_{34}^0 + \frac{\mu_3}{v_2} \beta \frac{\varphi_{4a} a_2}{a_2 + \text{ch}\tilde{y} - a_2 \varphi_a^\eta} \tilde{\eta}^{(1)}, \quad (3.6) \\
e_{36}^T &= e_{36}^0 + \frac{\mu_3}{v_2} \beta \frac{\varphi_{6a} a_2}{a_2 + \text{ch}\tilde{y} - a_2 \varphi_a^\eta} \tilde{\eta}^{(1)}.
\end{aligned}$$

Розрахунок пружних сталей при сталому полі дає наступний результат:

$$\begin{aligned}
c_{ij}^E &= c_{ij}^{E0} - \frac{4\beta\delta_i\delta_j}{v_2} \frac{a_2 \text{ch}\tilde{y}}{(a_2 + \text{ch}\tilde{y})^2} - \\
& - \frac{4\beta\tilde{\eta}^{(1)2}}{v_2(a_2 + \text{ch}\tilde{y} - \varphi_c^\eta \varkappa)} \left\{ \delta_i\delta_j \frac{2a_2^2 \varphi_c^\eta}{a_2 + \text{ch}\tilde{y}} - \frac{1}{2} \psi_i \psi_j^2 \varkappa + (\delta_j \psi_i + \delta_i \psi_j) a_2 \right\} - \\
& - \varphi_{ia} \varphi_{ja} \frac{\beta}{2v_2} \frac{a_2 \tilde{\eta}^{(1)2}}{a + \text{ch}\tilde{y} - \varphi_a^\eta},
\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
\varkappa &= \text{ch}\tilde{y} - \tilde{\eta}^{(1)} \text{sh}\tilde{y}, \\
\varphi_c^\eta &= \frac{1}{1 - \tilde{\eta}^{(1)2}} + \beta(\nu + \sum_i \psi_i \varepsilon_i + \psi_5 \varepsilon_5).
\end{aligned}$$

Інші діелектричні, п'єзоелектричні і пружні характеристики CsH_2PO_4 отримуюмо на основі розрахованих вище співвідношень. Зокрема, ізотермічні податливості при сталому полі

$$s_{44}^E = \frac{1}{c_{44}^E}, \quad s_{66}^E = \frac{1}{c_{66}^E}; \quad (3.7)$$

ізотермічні сталі п'єзоелектричної деформації

$$d_{14}^T = s_{44}^E e_{14}^T, \quad d_{16}^T = s_{66}^E e_{16}^T; \quad (3.8)$$

ізотермічні сталі п'єзоелектричної напруги

$$\begin{aligned}
h_{14}^T &= \frac{e_{14}^T}{\chi_{11}^{\varepsilon T}}, \quad h_{16}^T = \frac{e_{16}^T}{\chi_{11}^{\varepsilon}}, \\
h_{34}^T &= \frac{e_{34}^T}{\chi_{22}^T}, \quad h_{36}^T = \frac{e_{36}^T}{\chi_{22}^{\varepsilon}}; \quad (3.9)
\end{aligned}$$

ізотермічні коефіцієнти п'єзоелектричної деформації

$$\begin{aligned}
g_{14}^T &= s_{44}^P h_{14}^T, \quad g_{16}^T = s_{44}^P h_{16}^T, \\
g_{34}^T &= s_{66}^P h_{34}^T, \quad g_{36}^T = s_{66}^P h_{36}^T; \quad (3.10)
\end{aligned}$$

ізотермічні діелектричні сприйнятливості вільного кристалу

$$\begin{aligned}
\chi_{11}^{\sigma T} &= \chi_{11}^{\varepsilon T} + e_{14}^T d_{14}^T + e_{16}^T d_{16}^T, \\
\chi_{33}^{\sigma T} &= \chi_{33}^{\varepsilon T} + e_{34}^T d_{34}^T + e_{36}^T d_{36}^T. \quad (3.11)
\end{aligned}$$

Використовуючи рівняння Крістофеля [4–6], яке описує поширення ультразвукових хвиль в анізотропних середовищах, тензор пружних коефіцієнтів для точкових груп $2/m$ та 2 , можна отримати секулярні рівняння для випадків поширення ультразвукових хвиль вздовж осей X та Y . Корені цих рівнянь визначають зв'язок між швидкостями v_i та модулями пружності c_{ij} [7, 8]:

$$2\rho v_1^2(E \parallel X, k \parallel X) = c_{11} + c_{55} + \sqrt{(c_{11} - c_{55})^2 + 4c_{15}^2},$$

$$\begin{aligned}\rho v_2^2(E \parallel Y, k \parallel X) &= c_{66}, \\ 2\rho v_3^2(E \parallel Z, k \parallel X) &= c_{11} + c_{55} - \sqrt{(c_{11} - c_{55})^2 + 4c_{15}^2}, \\ \rho v_4^2(E \parallel Y, k \parallel Y) &= c_{22}, \\ \rho v_8^2(E \parallel Y, k \parallel Z) &= c_{44}, \\ 2\rho v_{10}^2(E \parallel XZ, k \parallel Y) &= c_{44} + c_{66} - \sqrt{(c_{44} - c_{66})^2 + 4c_{46}^2}, \\ 2\rho v_{11}^2(E \parallel XZ, k \parallel Y) &= c_{44} + c_{66} + \sqrt{(c_{44} - c_{66})^2 + 4c_{46}^2}.\end{aligned}$$

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

Перед тим, як перейти до обговорення на основі розвиненої теорії експериментальних даних, відзначимо, що ця теорія, строго кажучи, справедлива для дейтерованих квазіодновимірних сегнетоелектриків. Термодинамічні і динамічні властивості сегнетоелектриків з водневими зв'язками з врахуванням тунелювання Ω суттєво визначаються ефектним параметром тунелювання $\bar{\Omega}$, який перенормований короткосяжними взаємодіями [9]. При цьому $\bar{\Omega} \ll \Omega$, тобто має місце суттєве пригнічення тунелювання короткодіючими взаємодіями. Далі вважатимемо, що запропонована нами теорія справедлива і для кристалу CsH_2PO_4 .

Для кількісної оцінки температурних залежностей відповідних фізичних характеристик кристалу CsH_2PO_4 , отриманих у рамках запропонованої теорії, необхідно задати значення таких параметрів:

- параметрів двочастинкового кластера w ;
- параметрів далекосяжних взаємодій ν , ν_a ;
- ефективних дипольних моментів μ_1 , μ_3 ;
- деформаційних потенціалів δ_i , δ_j , ψ_i , ψ_j , φ_i , φ_j ;
- “затравочних” діелектричних сприйнятливостей $\chi_{11}^{\varepsilon_0}$, $\chi_{33}^{\varepsilon_0}$;
- “затравочних” пружних сталей c_{ij}^{E0} ;

Серед наведених вище параметрів є і параметри, які описують поздовжні фізичні характеристики кристалу CsH_2PO_4 . Їх значення

приведено в [1]. Параметри, які необхідні для опису поперечних характеристик, визначаються з умови найкращого узгодження отриманих нами теоретичних результатів з відповідними експериментальними даними.

Об'єм примітивної комірки $\text{Cs}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ взято рівним $v_2 = 0,467 \cdot 10^{-21} \text{ см}^3$, а $\rho = 3.22 \text{ г/см}^3$.

Отриманий таким чином оціночний набір параметрів наведено в табл. 1.

Табл. 1. Набір параметрів теорії для кристалів CsH_2PO_4

T_c (K)	$\frac{w}{k_B}$ (K)	$\frac{\nu}{k_B}$ (K)	$\frac{\nu_a}{k_B}$ (K)	$\mu_1, 10^{-18}$ (esu · cm)	$\mu_3, 10^{-18}$ (esu · cm)	$\chi_{11}^{\varepsilon_0}$	$\chi_{33}^{\varepsilon_0}$
156	660	2.19	100	0.54	0.54	2.6	1.1

$\frac{\delta_1}{k_B}$ (K)	$\frac{\delta_2}{k_B}$ (K)	$\frac{\delta_3}{k_B}$ (K)	$\frac{\delta_5}{k_B}$ (K)	$\frac{\psi_1}{k_B}$ (K)	$\frac{\psi_2}{k_B}$ (K)	$\frac{\psi_3}{k_B}$ (K)	$\frac{\psi_5}{k_B}$ (K)
108	-1450	350	-450	129.6	69.4	189	26

“Затравочні” $e_{14}^0 = e_{16}^0 = e_{34}^0 = e_{36}^0 = 0 \frac{\text{esu}}{\text{cm}^2}$,
 $c_{11}^{E0} = 28,83 \cdot 10^{10} \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$, $c_{12}^{E0} = 11,4 \cdot 10^{10} \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$, $c_{13}^{E0} = 42,87 \cdot 10^{10} \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$,
 $c_{22}^{E0} = 26,67 \cdot 10^{10} \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$, $c_{23}^{E0} = 14,5 \cdot 10^{10} \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$, $c_{33}^{E0} = 65,45 \cdot 10^{10} \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$,
 $c_{15}^{E0} = 5,13 \cdot 10^{10} \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$, $c_{25}^{E0} = 8,4 \cdot 10^{10} \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$, $c_{35}^{E0} = 7,50 \cdot 10^{10} \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$,
 $c_{55}^{E0} = 5,20 \cdot 10^{10} \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$, $c_{44}^{E0} = 8,10 \cdot 10^{10} \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$, $c_{66}^{E0} = 9,17 \cdot 10^{10} \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$,
 $c_{46}^{E0} = -2,25 \cdot 10^{10} \frac{\text{dyn}}{\text{cm}^2}$.

$$\frac{\delta_4}{k_B} = \frac{\delta_6}{k_B} = \frac{\psi_4}{k_B} = \frac{\psi_6}{k_B} = \frac{\varphi_1}{k_B} = \frac{\varphi_2}{k_B} = \frac{\varphi_3}{k_B} = \frac{\varphi_4}{k_B} = \frac{\varphi_5}{k_B} = \frac{\varphi_6}{k_B} = 100\text{K}.$$

На рис.2 наведені розраховані температурні залежності діелектричних проникностей ε_{11} і ε_{33} кристалу CsH_2PO_4 і експериментальні дані [10]. Як видно з цього рисунка, ці проникності зі зміною температури практично не змінюються. Відзначимо, що внесок у поперечну діелектричну проникність від впорядкування протонів на зв'язках є значно менший, порівняно із затравочним.

Розрахунок показує, що п'єзоелектричні коефіцієнти e_{14} , e_{16} , e_{34} , e_{36} зростають в сегнетоелектричній фазі при рості температури, досягаючи максимуму і різко зменшуються до нуля при $T = T_c$. Однак, максимальне значення $e_{14} - e_{14}^0$ дуже мале ($\approx 5 \frac{\text{esu}}{\text{cm}^2}$).

На рис. 3 зображено температурну залежність пружних сталей c_{44}^E , c_{66}^E , c_{46}^E . Слід відзначити, що протонний вклад в ці характеристики є дуже малий. В сегнетофазі при наближенні до температури переходу c_{ij}^E зменшується, досягаючи мінімуму при $T = T_c$ і при цій температурі стрибкоподібно значення c_{ij}^E зростає і при наступному рості температури c_{ij}^E незначно зменшується.

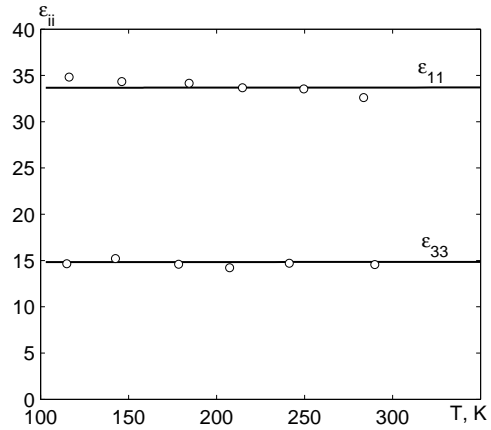


Рис. 2. Температурна залежність діелектричних проникностей ϵ_{11} і ϵ_{33} кристалу CsH_2PO_4 , \circ – [10].

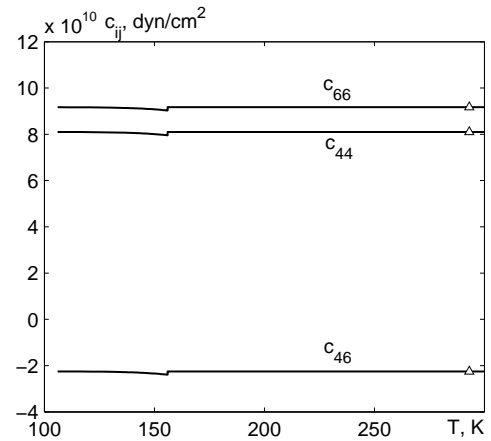


Рис. 3. Температурна залежність пружних сталей c_{44}^E , c_{66}^E , c_{46}^E кристалу CsH_2PO_4 , Δ – [7].

На рис.4 і в збільшеному масштабі на рис.5, 6 наведені розраховані температурні залежності швидкостей поширення звукових хвиль в кристалі CsH_2PO_4 , а також експериментальні дані для кристалу

$\text{Cs}(\text{H}_{0.06}\text{D}_{0.94})_2\text{PO}_4$. Отримано якісно подібний температурний хід швидкостей звукових хвиль v_i цих кристалів.

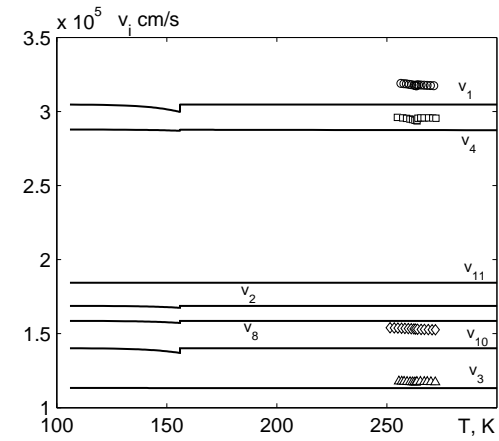


Рис. 4. Температурна залежність швидкостей звуку v_i кристалу CsH_2PO_4 . Експериментальні дані [8]: \circ – v_1 , \square – v_4 , \diamond – v_{11} , Δ – v_3 .

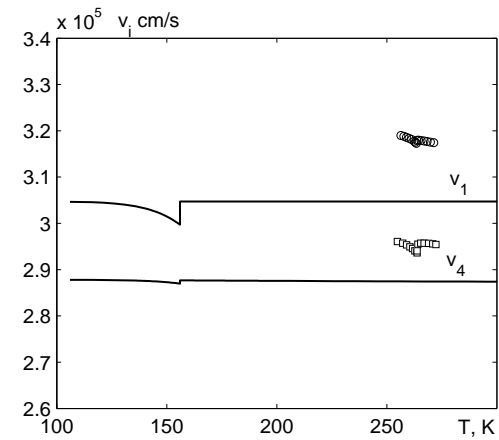


Рис. 5. Температурна залежність швидкостей звуку v_i кристалу CsH_2PO_4 . Експериментальні дані [8]: \circ – v_1 , \square – v_4 .

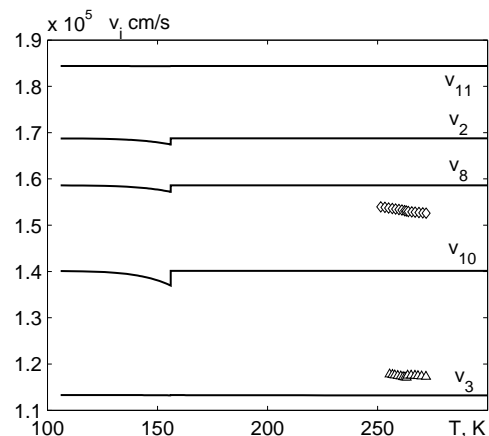


Рис. 6. Температурна залежність швидкостей звуку v_i кристалу CsH_2PO_4 . Експериментальні дані [8]: $\diamond - v_{11}$, $\triangle - v_3$.

5. Висновки

В цій роботі на основі запропонованої моделі отримані вирази для поперечних статичних діелектричних, п'єзоелектричних та пружних характеристик кристалів типу CsH_2PO_4 . Проведено ґрунтовний числовий аналіз отриманих характеристик. Встановлено, що протонна підсистема дає малий внесок у ці характеристики сегнетоелектриків типу CsH_2PO_4 . Накладання внеску у пружні сталі від впорядкування протонів на "затравочні"сталі призводить до появи мінімуму в точці переходу, існування якого непрямо підтверджується температурним ходом швидкостей поширення звукових хвиль.

Для порівняння розрахованих швидкостей поширення звукових хвиль з експериментальними даними [8] необхідна інформація про "затравочні"пружні сталі c_{ij}^E для частково дейтерованих кристалів типу CsH_2PO_4 .

Література

1. Зачек І.Р., Левицький Р.Р., Вдович А.С. Поздовжні статичні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні, динамічні та теплові властивості квазіодновимірних сегнетоелектриків з водневими зв'язками типу CsH_2PO_4 . - Львів, 2011. - 41 с. (Препр. / НАН України. Ін-т фіз. конденс. систем; ICMP-11-17U).
2. Вдович А.С., Левицький Р.Р., Зачек І.Р. Вплив гідростатичного та одновісних тисків на фазовий перехід та фізичні характеристики квазіодновимірних сегнетоелектриків типу CsH_2PO_4 . - Львів, 2011. - 32 с. (Препр. / НАН України. Ін-т фіз. конденс. систем; ICMP-11-18U).
3. Deguchi K., Okaue E., Ushio S., Nakamura E., Abe K. Dilatometric Study of the Phase Transition of Quasi-One-Dimensional Ferroelectric CsH_2PO_4 // J. Phys. Soc. Japan. - 1984. - Vol. 53, N 9. - P.3074-3080.
4. Федоров Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах. Москва: Наука, 1965. - 367с.
5. Лямов В.Е. Поляризационные эффекты и анизотропное взаимодействие акустических волн в кристаллах. Москва: Изд. Моск. у-та, 1983. - 223с.
6. Балакирев М.К., Гилинский И.А. Волны в пьезокристаллах. Новосибирск: Наука, 1982. - 239с.
7. Praver S., Smith T.F., Finlaypon T.R. The Room Temperature Plastic Behaviour of CsH_2PO_4 // Aust. J. Phys. - 1985. - Vol. 38, p.63-83.
8. Kityk A.V., Shchur Ya.I., Lutsiv-Shumskii L.R., Vloch O.G. On the acoustic properties of CsH_2PO_4 and RbD_2PO_4 crystals near phase transitions under hydrostatic pressure // J. Phys. Condens. Matter. - 1994. - Vol. 6. - p.699-712.
9. Stasyuk I.V., Levitskii R.R., Korinevskii N.A. Collective vibrations of protons in compounds of KH_2PO_4 -type. The cluster approximation // Phys. Stat. Sol. (b). - 1979. - Vol. 91, N 2. - P. 541-550.
10. Uesu Y., Kobayashi J. Crystal Structure and Ferroelectricity of Cesium Dihydrogen Phosphate CsH_2PO_4 // Phys. Stat. Sol. (a). - 1976. - Vol. 34. - p.475-481.

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. Vavrukh, *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>