

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-05-06U

Р.Р.Левицький, І.Р.Зачек, А.С.Вдович

ВПЛИВ НАПРУГ ЗСУВУ σ_4 і σ_5 НА ФІЗИЧНІ
ВЛАСТИВОСТІ СЕГНЕТОЕЛЕКТРИКІВ ТИПУ KD_2PO_4

УДК: 532; 533; 533.9:530.182; 536.75; 536-12.01.

PACS: 05.60.+w, 05.70.Ln, 05.20.Dd, 52.25.Dg, 52.25.Fi

Вплив напруг зсуву σ_4 і σ_5 на фізичні властивості сегнетоелектриків типу KD_2PO_4

Р.Р.Левицький, І.Р.Зачек, А.С.Вдович

Анотація. В наближенні чотиричастинкового кластера в рамках моделі протонного впорядкування досліджується вплив зсувних напруг σ_4 і σ_5 на фазовий перехід, статичні діелектричні, пружні, п'єзоелектричні та теплові властивості дейтерованих сегнетоелектриків типу KD_2PO_4 . Розраховано термодинамічні потенціали при наявності напруги σ_4 . Проведено числовий аналіз отриманих результатів в параелектричній фазі, знайдено набір параметрів, які забезпечують хороший опис наявних експериментальних даних.

The influence of shear stresses σ_4 and σ_5 on physical properties of KD_2PO_4 type ferroelectrics

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

Abstract. Within the four-particle cluster approximation for the proton ordering model we study the influence of shear stresses σ_4 and σ_5 on the phase transition, static dielectric, elastic and thermal properties of deuterated KD_2PO_4 type ferroelectrics. Thermodynamic potentials of the crystals in the presence of stress σ_4 are calculated. Numerical analysis of the obtained results in paraelectric phase is performed, and the set of the theory parameters providing the best fit to the available experimental data is found.

Подається в Журнал фізичних досліджень
Submitted to Journal of Physical Studies

1. Вступ

Мікроскопічна модель деформованого сегнетоелектричного кристалу типу KD_2PO_4 , що знаходиться під дією тиску довільної симетрії, була запропонована в роботах [1–3]. В роботах [4, 5] на основі запропонованої моделі з урахуванням напруги $\sigma_{12} = \sigma_{xx} - \sigma_{yy}$ розраховано і досліджено діелектричні, п'єзоелектричні і пружні характеристики KD_2PO_4 , проведено числовий аналіз отриманих результатів.

Вплив гідростатичного і одновісного $p = -\sigma_z$ тисків на фізичні характеристики кристала KD_2PO_4 вивчено в працях [6–8]. В роботах [9–12] здійснено мікроскопічний опис поведінки типу KD_2PO_4 під дією напруги σ_6 . В цих роботах отримано добре узгодження теоретичних результатів з експериментальними даними, які пов'язані з деформацією ε_6 , а саме для п'єзоелектричних сталих d_{36} , e_{36} , h_{36} , g_{36} , пружних сталих c_{66}^E , c_{66}^P та діелектричних проникностей $\varepsilon_{33}^\varepsilon$ і ε_{33}^σ .

В даній роботі розглядається вплив зсувної напруги $\sigma_4 = \sigma_{yz}$ в площині YZ на фізичні властивості сегнетоелектриків типу KD_2PO_4 . При цьому виникає деформація $\varepsilon_4 = \varepsilon_{yz}$, яка перетворюється за незвідним зображенням B_2 . Розраховано термодинамічні потенціали, діелектричну сприйнятливість χ_{11}^ε , коефіцієнт п'єзоелектричної напруги e_{14} , пружну сталу c_{44}^E , теплові характеристики кристалу KD_2PO_4 . Проведено числовий розрахунок температурної поведінки в параелектричній фазі при $\sigma_4 = 0$ п'єзоелектричних сталих d_{14} , e_{14} , h_{14} , g_{14} , пружних сталих c_{44}^E , c_{44}^P , діелектричних проникностей $\varepsilon_{11}^\varepsilon$ і ε_{11}^σ і здійснено порівняння результатів розрахунку з експериментальними даними робіт [13–19].

2. Гамільтоніан кристалу

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

Гамільтоніан дейтронної системи ДСОФ з врахуванням коротко-сяжних і далекосяжних взаємодій при наявності одновісних стисків $\sigma_4 = \sigma_{yz}$ і $\sigma_5 = \sigma_{xz}$ кристалу відповідно в площинах (b, c) і (a, c) під кутом $\frac{\pi}{4}$ до осей, коли виникають деформації $\varepsilon_4 = \varepsilon_{yz}$ і $\varepsilon_5 = \varepsilon_{xz}$ і

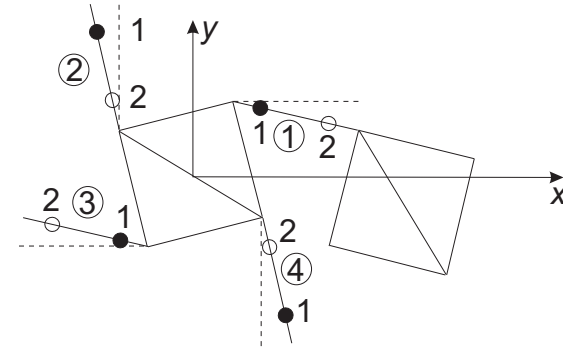


Рис. 1. Примітивна комірка Браве ДСОФ. Показано одну з числа можливих сегнетоелектричних протонних конфігурацій.

при прикладанні зовнішніх полів E_1 і E_2 , напрямлених вздовж кристалграфічних осей a і b , відповідно, має наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & N \frac{\bar{v}}{2} (c_{44}^{E0} \varepsilon_4^2 + c_{55}^{E0} \varepsilon_5^2) - N \bar{v} e_{14}^0 \varepsilon_4 E_1 - N \bar{v} e_{25}^0 \varepsilon_5 E_2 - \\ & - N \frac{\bar{v}}{2} \chi_{11}^{\varepsilon 0} E_1^2 - N \frac{\bar{v}}{2} \chi_{22}^{\varepsilon 0} E_2^2 + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{qq'} J_{ff'}(qq') \frac{\langle \sigma_{qf} \rangle}{2} \frac{\langle \sigma_{q'f'} \rangle}{2} - \sum_{qf} F_{qf}(4, 5) \frac{\sigma_{qf}}{2} + \hat{H}^{(4)}(4, 5). \end{aligned} \quad (2.1)$$

Перші два доданки в правій частині (2.1) – пружна енергія, яка не залежить від розміщення дейтронів на водневих зв'язках (c_{66}^{E0} , c_{44}^{E0} , c_{55}^{E0} – “затравочні” пружні сталі); четвертий і п'ятий доданки – енергія взаємодій між поляризаціями, що виникають за рахунок п'єзоелектричного ефекту при деформаціях ε_4 і ε_5 без врахування водневих зв'язків і полями E_1 і E_2 (e_{14}^0 , e_{25}^0 – “затравочні” коефіцієнти п'єзоелектричної напруги); шостий і сьомий доданки відповідають енергії, яка обумовлена поляризацією, що індукована зовнішніми електричними полями незалежно від конфігурацій дейтронів на водневих зв'язках ($\chi_{11}^{\varepsilon 0}$, $\chi_{22}^{\varepsilon 0}$ – “затравочні” діелектричні сприйнятливості), $\bar{v} = \frac{v}{k_B}$, v – об'єм примітивної комірки, k_B – стала Больцмана, N – кількість примітивних комірок. $F_f(4, 5)$ – внутрішні поля, які включають в себе, по-перше, ефективну далекосяжну взаємодію між дейтронами, що включає і непряму взаємодію дейтронів через коливання ґратки і яка врахована в наближенні молекулярного поля та, по-друге, додаткові внутрішні поля, зв'язані з деформаціями ε_4 ,

ε_5 і ε_6 :

$$\begin{aligned}
F_1(4,5) &= 2\nu_1\eta_1^{(1)}(i) + 2\nu_3\eta_3^{(1)}(i) + 2\nu_2\eta_2^{(1)}(i) + 2\nu_2\eta_4^{(1)}(i) + \\
&\quad + 2\psi_{06}\varepsilon_6 - 2\psi_{04}\varepsilon_4, \\
F_3(4,5) &= 2\nu_3\eta_1^{(1)}(i) + 2\nu_2\eta_3^{(1)}(i) + 2\nu_2\eta_2^{(1)}(i) + 2\nu_2\eta_4^{(1)}(i) + \\
&\quad + 2\psi_{06}\varepsilon_6 + 2\psi_{04}\varepsilon_4, \\
F_2(4,5) &= 2\nu_2\eta_1^{(1)}(i) + 2\nu_2\eta_3^{(1)}(i) + 2\nu_1\eta_2^{(1)}(i) + 2\nu_3\eta_4^{(1)}(i) + \\
&\quad + 2\psi_{06}\varepsilon_6 + 2\psi_{05}\varepsilon_5, \\
F_4(4,5) &= 2\nu_2\eta_1^{(1)}(i) + 2\nu_2\eta_3^{(1)}(i) + 2\nu_3\eta_2^{(1)}(i) + 2\nu_1\eta_4^{(1)}(i) + \\
&\quad + 2\psi_{06}\varepsilon_6 - 2\psi_{05}\varepsilon_5,
\end{aligned} \tag{2.2}$$

де $\eta_f^{(1)}(i) = \langle \sigma_{qf} \rangle$ – середнє значення ізінгівського псевдоспіна $\sigma_{qf} = \pm 1$, два власні значення якого відповідають двом рівноважним положенням дейтрона на f -ому зв'язку в q -ій комірці; $i = 4, 5$;

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

а $J_{ff'} = \sum_{R_q - R_{q'}} J_{ff'}(qq')$ – фур'є-образ константи далекоюсяжних взаємодій між дейтронами; $\psi_{04}, \psi_{05}, \psi_{06}$ – т. зв. деформаційні потенціали.

$\hat{H}^{(4)}(4,5)$ – гамільтоніан короткоюсяжних конфігураційних взаємодій між дейтронами поблизу тетрадрів PO_4 . Враховуючи значення енергій конфігурацій дейтронів, які оточують тетраедр PO_4 , при наявності спонтанної деформації ε_6 , і деформацій ε_4 і ε_5 (табл.1) [20], отримуємо гамільтоніан короткоюсяжних взаємодій у наближенні чотиричастинкового кластера в наступному вигляді:

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{(4)}(5,6) &= \sum_q \left\{ -\frac{1}{4}(\delta_{s6}\varepsilon_6 + 2\delta_{16}\varepsilon_6) \left(\frac{\sigma_{q1}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \right. \\
&\quad + \frac{1}{2}(\delta_{a4}\varepsilon_4 + \delta_{14}\varepsilon_4) \left(-\frac{\sigma_{q1}}{2} + \frac{\sigma_{q3}}{2} \right) + \frac{1}{2}(\delta_{a5}\varepsilon_5 + \delta_{15}\varepsilon_5) \left(\frac{\sigma_{q2}}{2} - \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \\
&\quad + (-\delta_{s6}\varepsilon_6 + 2\delta_{16}\varepsilon_6) \left(\frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} + \right. \\
&\quad + \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \left. \right) + \\
&\quad + 2(\delta_{a4}\varepsilon_4 - \delta_{14}\varepsilon_4) \left(\frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} - \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \\
&\quad + 2(\delta_{a5}\varepsilon_5 - \delta_{15}\varepsilon_5) \left(\frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} - \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \right) +
\end{aligned} \tag{2.3}$$

Табл. 1.

i	$\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4$	E_i	i	$\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4$	E_i
1	++++	$\varepsilon_s - \delta_{s6}\varepsilon_6$	9	----+	$\varepsilon_1 + \delta_{16}\varepsilon_6 - \delta_{15}\varepsilon_5$
2	----	$\varepsilon_s + \delta_{s6}\varepsilon_6$	10	---+-	$\varepsilon_1 + \delta_{16}\varepsilon_6 + \delta_{14}\varepsilon_4$
3	+--+	ε_0	11	-+---	$\varepsilon_1 + \delta_{16}\varepsilon_6 + \delta_{15}\varepsilon_5$
4	-+-+		12	+----	$\varepsilon_1 + \delta_{16}\varepsilon_6 - \delta_{14}\varepsilon_4$
5	+-+-	$\varepsilon_a - \delta_{a6}\varepsilon_6 - \delta_{a4}\varepsilon_4 + \delta_{a5}\varepsilon_5$	13	+-+-+	$\varepsilon_1 - \delta_{16}\varepsilon_6 - \delta_{14}\varepsilon_4$
6	--++	$\varepsilon_a - \delta_{a6}\varepsilon_6 + \delta_{a4}\varepsilon_4 - \delta_{a5}\varepsilon_5$	14	++++	$\varepsilon_1 - \delta_{16}\varepsilon_6 + \delta_{15}\varepsilon_5$
7	-+++	$\varepsilon_a + \delta_{a6}\varepsilon_6 + \delta_{a4}\varepsilon_4 + \delta_{a5}\varepsilon_5$	15	++++	$\varepsilon_1 - \delta_{16}\varepsilon_6 + \delta_{14}\varepsilon_4$
8	+---+	$\varepsilon_a + \delta_{a6}\varepsilon_6 - \delta_{a4}\varepsilon_4 - \delta_{a5}\varepsilon_5$	16	+---+	$\varepsilon_1 - \delta_{16}\varepsilon_6 - \delta_{15}\varepsilon_5$

$$\begin{aligned}
&+(V - \delta_{a6}\varepsilon_6) \left(\frac{\sigma_{q1}\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q3}\sigma_{q4}}{2} \right) + \\
&+(V + \delta_{a6}\varepsilon_6) \left(\frac{\sigma_{q2}\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q4}\sigma_{q1}}{2} \right) + \\
&+U \left(\frac{\sigma_{q1}\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q2}\sigma_{q4}}{2} \right) + \Phi \frac{\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}}{2} \Big\} + \sum_q \sum_{f=1}^4 \frac{\tilde{x}_{f4,5}\sigma_{qf}}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2},
\end{aligned}$$

В (2.3) використані такі позначення:

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

де $\varepsilon = \varepsilon_a - \varepsilon_s$, $w = \varepsilon_1 - \varepsilon_s$, $w_1 = \varepsilon_0 - \varepsilon_s - \tau$ зв. слетерівські енергії,

$$\tilde{x}_{f4,5} = \beta[-\Delta_{4,5} + \mu_{f1}E_1 + \mu_{f2}E_2],$$

де $\Delta_{4,5}$ – кластерний параметр самоузгодження, μ_{f1} , μ_{f2} – ефективні дипольні моменти водневих зв'язків, які, як показано в [21], дорівнюють сумі дипольних моментів тетраедрів і водневих зв'язків, причому

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

Оскільки деформаційні параметри, якими визначаються фізичні характеристики ДСОФ, обумовлені полями E_j і деформаціями ε_i і ε_6 , входять в гамільтоніан (2.3) у вигляді не залежних між собою комбінацій, то можна зменшити число деформаційних параметрів, провівши такі заміни:

$$\begin{aligned}
\psi_6 = \psi_{06} + \frac{1}{8}(\delta_{s6} + 2\delta_{16}), & \quad \psi_i = \psi_{0i} + \frac{1}{4}(\delta_{ai} + \delta_{1i}), \\
\delta_6 = \frac{1}{4}(\delta_{s6} - 2\delta_{16}), & \quad \delta_i = \frac{1}{4}(\delta_{ai} - \delta_{1i}), \quad i = 4, 5.
\end{aligned}$$

Вихідний модельний гамільтоніан (2.1) запишемо тепер в такому вигляді:

$$\begin{aligned}
\hat{H} = N \frac{\bar{v}}{2} (c_{44}^{E0}\varepsilon_4^2 + c_{55}^{E0}\varepsilon_5^2) - N \bar{v} e_{14}^0 \varepsilon_4 E_1 - N \bar{v} e_{25}^0 \varepsilon_5 E_2 - \\
-N \frac{\bar{v}}{2} \chi_{11}^{\varepsilon_0} E_1^2 - N \frac{\bar{v}}{2} \chi_{22}^{\varepsilon_0} E_2^2 + \frac{1}{2} \sum_{qq'} J_{ff'}(qq') \frac{\langle \sigma_{qf} \rangle}{2} \frac{\langle \sigma_{q'f'} \rangle}{2} + \\
+ \sum_q \left\{ \frac{1}{4} (V - \delta_{a6}\varepsilon_6) (\sigma_{q1}\sigma_{q2} + \sigma_{q3}\sigma_{q4}) + \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&+ \frac{1}{4} (V + \delta_{a6}\varepsilon_6) (\sigma_{q2}\sigma_{q3} + \sigma_{q4}\sigma_{q1}) + \\
&+ \frac{1}{4} U (\sigma_{q1}\sigma_{q3} + \sigma_{q2}\sigma_{q4}) + \frac{1}{16} \Phi \sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4} - \\
&- \frac{1}{2} \delta_6 \varepsilon_6 (\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3} + \sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q4} + \sigma_{q1}\sigma_{q3}\sigma_{q4} + \sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}) + \\
&+ \frac{1}{2} \delta_4 \varepsilon_4 (\sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q4} - \sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4}) + \\
&+ \left. \frac{1}{2} \delta_5 \varepsilon_5 (\sigma_{q1}\sigma_{q4}\sigma_{q4} - \sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3}) + \sum_{f=1}^4 \frac{\tilde{x}_{f4,5}\sigma_{qf}}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2} \right\},
\end{aligned} \tag{2.4}$$

В (2.4) використані такі позначення:

$$\begin{aligned}
x_{34,5} = \beta[-\Delta_{4,5} + 2\nu_3\eta_1^{(1)}(i) + 2\nu_3\eta_3^{(1)}(i) + 2\nu_2\eta_2^{(1)}(i) + 2\nu_2\eta_4^{(1)}(i) + \\
+ 2\psi_6\varepsilon_6 \mp 2\psi_4\varepsilon_4 \mp \mu_1 \cos \gamma E_1 \pm \mu_1 \sin \gamma E_2], \\
x_{44,5} = \beta[-\Delta_{4,5} + 2\nu_2\eta_1^{(1)}(i) + 2\nu_2\eta_3^{(1)}(i) + 2\nu_3\eta_2^{(1)}(i) + 2\nu_3\eta_4^{(1)}(i) + \\
+ 2\psi_6\varepsilon_6 \pm 2\psi_5\varepsilon_5 \mp \mu_2 \sin \gamma E_1 \pm \mu_2 \cos \gamma E_2].
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Одночастинкові гамільтоніани дейтронів

$$\hat{H}_{qf}^{(1)}(4,5) = -\frac{\bar{x}_{f4,5}\sigma_{qf}}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2}, \tag{2.6}$$

де

$$\bar{x}_{f4,5} = -\beta\Delta_{4,5} + x_{f4,5}.$$

Унарні функції розподілу дейтронів на основі (2.4) отримуємо в такому вигляді:

$$\begin{aligned}
\eta_3^{(1)}(i) = \frac{1}{D_i} (\text{sh } A_{1i} + d \text{ sh } A_{2i} \pm \frac{a}{a_6} \text{ sh } A_{3i} \pm aa_6 \text{ sh } A_{4i} \pm \\
\pm b \text{ sh } A_{5i} \mp b \text{ sh } A_{6i} + b \text{ sh } A_{7i} + b \text{ sh } A_{8i}) = \frac{m_3(i)}{D_i}, \\
\eta_4^{(1)}(i) = \frac{1}{D_i} (\text{sh } A_{1i} - d \text{ sh } A_{2i} \pm \frac{a}{a_6} \text{ sh } A_{3i} \mp aa_6 \text{ sh } A_{4i} + \\
+ b \text{ sh } A_{5i} + b \text{ sh } A_{6i} \pm b \text{ sh } A_{7i} \mp b \text{ sh } A_{8i}) = \frac{m_4(i)}{D_i},
\end{aligned} \tag{2.7}$$

де

$$\begin{aligned}
D_i = \text{ch } A_{1i} + d \text{ ch } A_{2i} + \frac{a}{a_6} \text{ ch } A_{3i} + aa_6 \text{ ch } A_{4i} + \\
+ b \text{ ch } A_{5i} + b \text{ ch } A_{6i} + b \text{ ch } A_{7i} + b \text{ ch } A_{8i},
\end{aligned}$$

Тут використані наступні позначення:

$$a = e^{-\beta\varepsilon}, \quad b = e^{-\beta w}, \quad d = e^{-\beta w_1}, \quad a_6 = e^{-\beta\delta_{a6}\varepsilon_6},$$

$$A_{24} = \frac{1}{2}(x_{14} \pm x_{24} + x_{34} \pm x_{44}) + \beta\delta_6\varepsilon_6 \pm \beta\delta_6\varepsilon_6,$$

$$A_{34} = \frac{1}{2}(x_{14} \pm x_{24} - x_{34} \mp x_{44}) + \beta\delta_4\varepsilon_4,$$

$$A_{54} = \frac{1}{2}(\pm x_{14} + x_{24} \mp x_{34} + x_{44}) - \beta\delta_6\varepsilon_6 \mp \beta\delta_4\varepsilon_4,$$

$$A_{74} = \frac{1}{2}(x_{14} \pm x_{24} + x_{34} \mp x_{44}) - \beta\delta_6\varepsilon_6,$$

$$A_{25} = \frac{1}{2}(x_{15} \pm x_{25} + x_{35} \pm x_{45}) + \beta\delta_6\varepsilon_6 \pm \beta\delta_6\varepsilon_6,$$

$$A_{35} = \frac{1}{2}(x_{15} \pm x_{25} - x_{35} \mp x_{45}) \mp \beta\delta_5\varepsilon_5,$$

$$A_{55} = \frac{1}{2}(\pm x_{15} + x_{25} \mp x_{35} + x_{45}) - \beta\delta_6\varepsilon_6,$$

$$A_{75} = \frac{1}{2}(x_{15} \pm x_{25} + x_{35} \mp x_{45}) - \beta\delta_6\varepsilon_6 \pm \beta\delta_5\varepsilon_5.$$

В кластерному наближенні параметри $\Delta_{4,5}$ визначаються з умови самоузгодження: середнє значення квазіспіна $\eta_f^{(1)}(i)$ не повинно залежати від того, по якому розподілу Гіббса (з чотири- чи одно-частинковим гамільтоніаном) воно розраховане. Виключаючи з (2.5) параметр $\Delta_{4,5}$, отримуємо:

$$x_{34} = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta_3^{(1)}(4)}{1 - \eta_3^{(1)}(4)} + \beta\nu_3\eta_1^{(1)}(4) + \beta\nu_3\eta_3^{(1)}(4) + \beta\nu_2[\eta_2^{(1)}(4) + \eta_4^{(1)}(4)] + \beta\psi_6\varepsilon_6 \mp \beta\psi_4\varepsilon_4 \mp \frac{\beta\mu_1}{2} \cos \gamma E_1, \quad (2.8)$$

$$x_{24} = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta_2^{(1)}(4)}{1 - \eta_2^{(1)}(4)} + \beta\nu_2[\eta_1^{(1)}(4) + \eta_3^{(1)}(4)] + \beta\nu_3\eta_2^{(1)}(4) + \beta\nu_3\eta_4^{(1)}(4) + \beta\psi_6\varepsilon_6 \mp \frac{\beta\mu_2}{2} \sin \gamma E_1,$$

$$x_{35} = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta_3^{(1)}(5)}{1 - \eta_3^{(1)}(5)} + \beta\nu_3\eta_1^{(1)}(5) + \beta\nu_3\eta_3^{(1)}(5) + \beta\nu_2[\eta_2^{(1)}(5) + \eta_4^{(1)}(5)] + \beta\psi_6\varepsilon_6 \pm \frac{\beta\mu_1}{2} \sin \gamma E_2,$$

$$x_{45} = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta_2^{(1)}(5)}{1 - \eta_2^{(1)}(5)} + \beta\nu_2[\eta_1^{(1)}(5) + \eta_3^{(1)}(5)] + \beta\nu_3\eta_2^{(1)}(5) + \beta\nu_3\eta_4^{(1)}(5) + \beta\psi_6\varepsilon_6 \pm 2\psi_5\varepsilon_5 \pm \frac{\beta\mu_2}{2} \cos \gamma E_2.$$

3. П'єзоелектричні, пружні й діелектричні властивості ДСОФ за наявності механічної напруги σ_4

Для вивчення впливу механічної напруги σ_4 на п'єзоелектричні, пружні і діелектричні властивості ДСОФ використаємо електричний термодинамічний потенціал в розрахунку на одну комірку, отриманий в наближенні чотиричастинкового кластера:

$$g_{2E}(i) = \frac{\bar{v}}{2}(c_{66}^{E0}\varepsilon_6^2 + c_{ii}^{E0}\varepsilon_i^2) - \bar{v}e_{ji}^0\varepsilon_i E_j - \frac{\bar{v}}{2}\chi_{jj}^{\varepsilon 0}E_j^2 + 2T \ln 2 + \frac{1}{2}\nu_1[\eta_1^{(1)2}(i) + \eta_3^{(1)2}(i) + \eta_2^{(1)2}(i) + \eta_4^{(1)2}(i)] + \nu_3[\eta_1^{(1)}(i)\eta_3^{(1)}(i) + \eta_2^{(1)}(i)\eta_4^{(1)}(i)] + \nu_2[\eta_1^{(1)}(i)\eta_2^{(1)}(i) + \eta_2^{(1)}(i)\eta_3^{(1)}(i) + \eta_3^{(1)}(i)\eta_4^{(1)}(i) + \eta_4^{(1)}(i)\eta_1^{(1)}(i)] - \frac{1}{2}T \ln[1 - \eta_1^{(1)2}(i)] - \frac{1}{2}T \ln[1 - \eta_2^{(1)2}(i)] - \frac{1}{2}T \ln[1 - \eta_3^{(1)2}(i)] - \frac{1}{2}T \ln[1 - \eta_4^{(1)2}(i)] - 2T \ln D_i - \bar{v}\sigma_i\varepsilon_i. \quad (3.1)$$

де $i = 4, 5$; а $j = i - 3$.

З умов термодинамічної рівноваги

$$\frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g_{2E}(4)}{\partial \varepsilon_4} \right)_{E_1, \sigma_4} = 0, \quad \frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g_{2E}(4)}{\partial \varepsilon_6} \right)_{E_1} = 0, \\ \frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g_{2E}(5)}{\partial \varepsilon_5} \right)_{E_2, \sigma_5} = 0, \quad \frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g_{2E}(5)}{\partial \varepsilon_6} \right)_{E_2} = 0, \\ \frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g_{2E}(4)}{\partial E_1} \right)_{\sigma_4} = -P_1, \quad \frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g_{2E}(5)}{\partial E_2} \right)_{\sigma_5} = -P_2,$$

отримуємо

$$\sigma_4 = c_{44}^{E0}\varepsilon_4 - e_{14}^0 E_1 - \frac{2\tilde{\psi}_4 - \varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b}{\bar{v} D_4} - \frac{2\tilde{\delta}_4 \varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b}{\bar{v} D_4}, \quad (3.2) \\ 0 = c_{66}^{E0}\varepsilon_6 - \frac{4\tilde{\psi}_6 \operatorname{sh} A_{14} + \frac{1}{2}(\varkappa_{s14}^b + \varkappa_{s34}^b)}{\bar{v} D_4} -$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{4\tilde{\delta}_6 - \text{sh } A_{14} + \frac{1}{2}(\varkappa_{s14}^b + \varkappa_{s34}^b)}{\bar{v} D_4} + \frac{2\tilde{\delta}_{a6} \varkappa_{c24}^a}{\bar{v} D_4}, \\
P_1 &= e_{14}^0 \varepsilon_4 + \chi_{11}^{\varepsilon_0} E_1 + \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma \frac{-\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b}{D_4} + \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma \frac{-\varkappa_{s24}^a - \varkappa_{s44}^b}{D_4}, \\
\sigma_5 &= c_{55}^{E_0} \varepsilon_5 - e_{25}^0 E_2 - \frac{2\tilde{\psi}_5 \varkappa_{s25}^a + \varkappa_{s45}^b}{\bar{v} D_5} - \frac{2\tilde{\delta}_5 - \varkappa_{s25}^a + \varkappa_{s45}^b}{\bar{v} D_5}, \quad (3.3) \\
0 &= c_{66}^{E_0} \varepsilon_6 - \frac{4\tilde{\psi}_6 \text{sh } A_{15} + \frac{1}{2}(\varkappa_{s15}^b + \varkappa_{s35}^b)}{\bar{v} D_5} - \\
& - \frac{4\tilde{\delta}_6 - \text{sh } A_{15} + \frac{1}{2}(\varkappa_{s15}^b + \varkappa_{s35}^b)}{\bar{v} D_5} + \frac{2\tilde{\delta}_{a6} \varkappa_{s25}^a}{\bar{v} D_5}, \\
P_2 &= e_{25}^0 \varepsilon_5 + \chi_{22}^{\varepsilon_0} E_2 + \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma \frac{\varkappa_{s25}^a + \varkappa_{s45}^b}{D_5} + \frac{\mu_1}{v} \sin \gamma \frac{\varkappa_{s15}^a + \varkappa_{s25}^b}{D_5},
\end{aligned}$$

де використані наступні позначення:

$$\begin{aligned}
\varkappa_{s_2 i}^a &= \frac{a}{a_6} \text{sh } A_{3i} \pm a a_6 \text{sh } A_{4i}, & \varkappa_{s_2 i}^b &= b \text{sh } A_{5i} \pm b \text{sh } A_{6i}, \\
\varkappa_{c_2 i}^a &= \frac{a}{a_6} \text{ch } A_{3i} - a a_6 \text{ch } A_{4i}, & \varkappa_{s_3 i}^b &= b \text{sh } A_{7i} \pm b \text{sh } A_{8i}.
\end{aligned}$$

З (3.2) і (3.3) знаходимо вирази для електричних полів:

$$\begin{aligned}
E_1 &= -h_{14}^0 \varepsilon_4 + k_{11}^0 P_1 - k_{11}^0 \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma \frac{-\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b}{D_4} - \\
& - k_{11}^0 \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma \frac{-\varkappa_{s24}^a - \varkappa_{s44}^b}{D_4}, \\
E_2 &= -h_{25}^0 \varepsilon_5 + k_{22}^0 P_2 - k_{22}^0 \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma \frac{\varkappa_{s25}^a + \varkappa_{s45}^b}{D_5} - \\
& - k_{22}^0 \frac{\mu_1}{v} \sin \gamma \frac{\varkappa_{s15}^a + \varkappa_{s25}^b}{D_5}, \quad (3.4)
\end{aligned}$$

де

$$h_{14}^0 = \frac{c_{14}^0}{\chi_{11}^{\varepsilon_0}}, \quad h_{25}^0 = \frac{e_{25}^0}{\chi_{22}^{\varepsilon_0}}, \quad k_{11}^0 = \frac{1}{\chi_{11}^{\varepsilon_0}}, \quad k_{22}^0 = \frac{1}{\chi_{22}^{\varepsilon_0}}.$$

Вільна енергія кристалу в наближенні чотиричастинкового клас-тера в розрахунок на одну комірку при наявності механічної напруги σ_4 або σ_5 має наступний вигляд:

$$f(i) = \frac{\bar{v}}{2} (c_{66}^{P_0} \varepsilon_6^2 + c_{ii}^{P_0} \varepsilon_i^2) - \bar{v} h_{ji}^0 \varepsilon_i P_j + \frac{\bar{v}}{2} k_{jj}^{\varepsilon_0} P_j^2 -$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\bar{v}}{2} k_{11}^{\varepsilon_0} \left\{ \frac{\mu_{1,2}}{v} \cos \gamma \frac{m_i}{D_i} - \frac{\mu_{2,1}}{v} \sin \gamma \frac{\bar{m}_i}{D_i} \right\}^2 + 2T \ln 2 + \\
& + \frac{1}{2} \nu_1 [\eta_1^{(1)2}(i) + \eta_3^{(1)2}(i) + \eta_2^{(1)2}(i) + \eta_4^{(1)2}(i)] + \\
& + \nu_3 [\eta_1^{(1)}(i) \eta_3^{(1)}(i) + \eta_2^{(1)}(i) \eta_4^{(1)}(i)] + \quad (3.5) \\
& + \nu_2 [\eta_1^{(1)}(i) \eta_2^{(1)}(i) + \eta_2^{(1)}(i) \eta_3^{(1)}(i) + \eta_3^{(1)}(i) \eta_4^{(1)}(i) + \eta_4^{(1)}(i) \eta_1^{(1)}(i)] - \\
& - \frac{1}{2} T \ln [1 - \eta_1^{(1)2}(i)] - \frac{1}{2} T \ln [1 - \eta_2^{(1)2}(i)] - \\
& - \frac{1}{2} T \ln [1 - \eta_3^{(1)2}(i)] - \frac{1}{2} T \ln [1 - \eta_4^{(1)2}(i)] - 2T \ln D_4.
\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
m_4 &= -\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b, & m_5 &= \varkappa_{s25}^a + \varkappa_{s45}^b, \\
\bar{m}_4 &= -\varkappa_{s24}^a - \varkappa_{s44}^b, & \bar{m}_5 &= \varkappa_{s15}^a + \varkappa_{s25}^b.
\end{aligned}$$

Використовуючи співвідношення (3.2) – (3.5), можна дослідити вплив на п'єзоелектричні, діелектричні, пружні і теплові характеристики ДСОФ механічної напруги σ_4 (електричного поля E_1) або напруги σ_5 (поля E_2).

Коефіцієнти п'єзоелектричної напруги

$$\begin{aligned}
e_{14} &= \left(\frac{\partial P_1}{\partial \varepsilon_4} \right)_{E_1} = e_{14}^0 + \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma (-e_{41} + e_{43}) + \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma (-e_{42} + e_{44}), \\
e_{25} &= \left(\frac{\partial P_2}{\partial \varepsilon_5} \right)_{E_2} = e_{25}^0 + \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \sin \gamma (e_{51} - e_{53}) + \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma (e_{52} - e_{54}), \quad (3.6)
\end{aligned}$$

де

$$e_{4f} = \left(\frac{\partial \eta_f^{(1)}(4)}{\partial \varepsilon_4} \right)_{E_1}, \quad e_{5f} = \left(\frac{\partial \eta_f^{(1)}(5)}{\partial \varepsilon_5} \right)_{E_2}.$$

А вирази для e_{if} задовільняють наступну систему рівнянь

$$\sum_{f=1}^4 N_{f'f}(i) e_{if} = N_f^{\varepsilon_i}, \quad (f' = 1, 2, 3, 4; i = 4, 5), \quad (3.7)$$

де використані наступні позначення:

$$\begin{aligned}
N_{ff}(i) &= D_i - \psi_{ff}(i), & N_{f'f}(i) &= -\psi_{f'f}(i), \\
\psi_{f1}(i) &= \frac{1}{2} (\varphi_1^\eta \varkappa_{f1i} + \beta \nu_3 \varkappa_{f3i} + \beta \nu_2 \varkappa_{f2i} + \beta \nu_2 \varkappa_{f4i}),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_{f2}(i) &= \frac{1}{2}(\beta\nu_2\kappa_{f1i} + \beta\nu_2\kappa_{f3i} + \varphi_2^\eta\kappa_{f2i} + \beta\nu_3\kappa_{f4i}), \\ \psi_{f3}(i) &= \frac{1}{2}(\beta\nu_3\kappa_{f1i} + \varphi_3^\eta\kappa_{f3i} + \beta\nu_2\kappa_{f2i} + \beta\nu_2\kappa_{f4i}), \\ \psi_{f2}(i) &= \frac{1}{2}(\beta\nu_2\kappa_{f1i} + \beta\nu_2\kappa_{f3i} + \beta\nu_3\kappa_{f2i} + \varphi_4^\eta\kappa_{f4i}),\end{aligned}$$

а

$$\begin{aligned}\kappa_{11i} &= l_{11i} - \eta_1^{(1)}(i)m_1(i), & \kappa_{13i} &= \kappa_{31i} = l_{13i} - \eta_1^{(1)}(i)m_3(i), \\ \kappa_{12i} &= \kappa_{21i} = l_{12i} - \eta_1^{(1)}(i)m_2(i), & \kappa_{14i} &= \kappa_{41i} = l_{14i} - \eta_1^{(1)}(i)m_4(i), \\ \kappa_{33i} &= l_{11i} - \eta_3^{(1)}(i)m_3(i), & \kappa_{32i} &= \kappa_{23i} = l_{23i} - \eta_3^{(1)}(i)m_2(i), \\ \kappa_{34i} &= \kappa_{43i} = l_{34i} - \eta_3^{(1)}(i)m_4(i), & \kappa_{44i} &= l_{11i} - \eta_4^{(1)}(i)m_4(i), \\ \kappa_{22i} &= l_{11i} - \eta_2^{(1)}(i)m_2(i), & \kappa_{24i} &= \kappa_{42i} = l_{24i} - \eta_2^{(1)}(i)m_4(i),\end{aligned}$$

де вирази $l_{f'f}$ мають такий вигляд:

$$\begin{aligned}l_{11i} &= \kappa_{c1i} + \kappa_{c1i}^a + \kappa_{c1i}^b + \kappa_{c3i}^b, & l_{12i} &= \kappa_{c2i} + \kappa_{c2i}^a + \kappa_{c2i}^b + \kappa_{c4i}^b, \\ l_{13i} &= \kappa_{c1i} - \kappa_{c1i}^a - \kappa_{c1i}^b + \kappa_{c3i}^b, & l_{14i} &= \kappa_{c2i} - \kappa_{c2i}^a + \kappa_{c2i}^b - \kappa_{c4i}^b, \\ l_{24i} &= \kappa_{c1i} - \kappa_{c1i}^a + \kappa_{c1i}^b - \kappa_{c3i}^b, & l_{23i} &= \kappa_{c2i} - \kappa_{c2i}^a - \kappa_{c2i}^b + \kappa_{c4i}^b, \\ & & l_{34i} &= \kappa_{c2i} + \kappa_{c2i}^a - \kappa_{c2i}^b - \kappa_{c4i}^b,\end{aligned}$$

а

$$\begin{aligned}\kappa_{c_2^1 i} &= \text{ch } A_{1i} \pm d \text{ ch } A_{2i}, & \kappa_{c_2^1 i}^a &= \frac{a}{a_6} \text{ch } A_{3i} \pm aa_6 \text{ch } A_{4i}, \\ \kappa_{c_2^1 i}^b &= b \text{ch } A_{5i} \pm b \text{ch } A_{6i}, & \kappa_{c_3^1 i}^b &= b \text{ch } A_{7i} \pm b \text{ch } A_{8i}, \\ \varphi_{fi}^\eta &= \frac{1}{1 - \eta_f^{(1)2}(i)} + \beta\nu_1.\end{aligned}$$

В системі рівнянь (3.7)

$$\begin{aligned}N_1^{\varepsilon_4} &= \beta\psi_4[-\kappa_{c14}^a - \kappa_{c14}^b - \eta_1^{(1)}(4)(-\kappa_{s14}^a - \kappa_{s24}^b)] + \\ &\quad + \beta\delta_4[\kappa_{c14}^a - \kappa_{c14}^b - \eta_1^{(1)}(4)(\kappa_{s14}^a - \kappa_{s24}^b)], \\ N_3^{\varepsilon_4} &= \beta\psi_4[\kappa_{c14}^a + \kappa_{c14}^b - \eta_3^{(1)}(4)(-\kappa_{s14}^a - \kappa_{s24}^b)] + \\ &\quad + \beta\delta_4[-\kappa_{c14}^a + \kappa_{c14}^b - \eta_3^{(1)}(4)(\kappa_{s14}^a - \kappa_{s24}^b)], \\ N_2^{\varepsilon_4} &= \beta\psi_4[-\kappa_{c24}^a - \kappa_{c24}^b - \eta_2^{(1)}(4)(-\kappa_{s14}^a - \kappa_{s24}^b)] + \\ &\quad + \beta\delta_4[\kappa_{c24}^a - \kappa_{c24}^b - \eta_2^{(1)}(4)(\kappa_{s14}^a - \kappa_{s24}^b)], \\ N_4^{\varepsilon_4} &= \beta\psi_4[\kappa_{c24}^a - \kappa_{c24}^b - \eta_4^{(1)}(4)(-\kappa_{s14}^a - \kappa_{s24}^b)] +\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}& + \beta\delta_4[-\kappa_{c24}^a - \kappa_{c24}^b - \eta_4^{(1)}(4)(\kappa_{s14}^a - \kappa_{s24}^b)]; \\ N_1^{\varepsilon_5} &= \beta\psi_5[\kappa_{c25}^a + \kappa_{c45}^b - \eta_1^{(1)}(5)(\kappa_{s25}^a + \kappa_{s45}^b)] + \\ &\quad + \beta\delta_5[-\kappa_{c25}^a + \kappa_{c45}^b - \eta_1^{(1)}(5)(-\kappa_{s25}^a + \kappa_{s45}^b)], \\ N_3^{\varepsilon_5} &= \beta\psi_5[-\kappa_{c25}^a + \kappa_{c45}^b - \eta_3^{(1)}(5)(\kappa_{s25}^a + \kappa_{s45}^b)] + \\ &\quad + \beta\delta_5[\kappa_{c25}^a + \kappa_{c45}^b - \eta_3^{(1)}(5)(-\kappa_{s25}^a + \kappa_{s45}^b)], \\ N_2^{\varepsilon_5} &= \beta\psi_5[\kappa_{c15}^a + \kappa_{c35}^b - \eta_2^{(1)}(5)(\kappa_{s25}^a + \kappa_{s45}^b)] + \\ &\quad + \beta\delta_5[-\kappa_{c15}^a + \kappa_{c35}^b - \eta_2^{(1)}(5)(-\kappa_{s25}^a + \kappa_{s45}^b)], \\ N_4^{\varepsilon_5} &= \beta\psi_5[-\kappa_{c15}^a - \kappa_{c35}^b - \eta_4^{(1)}(5)(\kappa_{s25}^a + \kappa_{s45}^b)] + \\ &\quad + \beta\delta_5[\kappa_{c15}^a - \kappa_{c35}^b - \eta_4^{(1)}(5)(-\kappa_{s25}^a + \kappa_{s45}^b)].\end{aligned}$$

У випадку недеформованого кристалу ($\sigma_i = 0$, $E_j = 0$) системи рівнянь (3.7) зводяться до наступних систем:

$$\begin{aligned}(D - \kappa\varphi_1)\frac{1}{2}(-e_{41} + e_{43}) - \kappa_a\varphi_1\frac{1}{2}(-e_{42} + e_{44}) &= \beta\psi_4\kappa - \beta\delta_4\kappa_1, \\ -\kappa_a\varphi_1\frac{1}{2}(-e_{41} + e_{43}) + (D - \kappa\varphi_1)\frac{1}{2}(-e_{42} + e_{44}) &= \beta\psi_4\kappa_a - \beta\delta_4\kappa_a; \\ (D - \kappa\varphi_1)\frac{1}{2}(e_{51} - e_{53}) - \kappa_a\varphi_1\frac{1}{2}(e_{52} - e_{54}) &= \beta\psi_5\kappa_a - \beta\delta_5\kappa_a, \\ -\kappa_a\varphi_1\frac{1}{2}(-e_{41} + e_{43}) + (D - \kappa\varphi_1)\frac{1}{2}(e_{52} - e_{54}) &= \beta\psi_4\kappa - \beta\delta_5\kappa_1,\end{aligned}\quad (3.8)$$

де використані наступні позначення:

$$\begin{aligned}\kappa &= \frac{a}{a_6} + aa_6 + 2b \text{ch}(x + \beta\delta_6\varepsilon_6), & \varphi_1 &= \frac{1}{1 - \eta^{(1)2}} + \beta(\nu_1 - \nu_3), \\ \kappa_a &= \frac{a}{a_6} - aa_6, \\ \kappa_1 &= \frac{a}{a_6} + aa_6 - 2b \text{ch}(x + \beta\delta_6\varepsilon_6), \\ D &= \text{ch } 2(x + \beta\delta_6\varepsilon_6) + d + aa_6 + \frac{a}{a_6} + 4b \text{ch}(x + \beta\delta_6\varepsilon_6), \\ x &= \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta^{(1)}}{1 - \eta^{(1)}} + \beta(\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3)\eta^{(1)} + \beta\psi_6\varepsilon_6,\end{aligned}$$

В результаті, коефіцієнт п'єзоелектричної напруги недеформованого кристалу у сегнетоелектричній фазі має такий вигляд:

$$e_{14} = e_{14}^0 +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma \frac{1}{T} \frac{\tilde{\psi}_4[(D - \kappa\varphi_1)\kappa + \kappa_a^2\varphi_1] - \tilde{\delta}_4[(D - \kappa\varphi_1)\kappa_1 + \kappa_a^2\varphi_1]}{(D - \kappa\varphi_1)^2 - \kappa_a^2\varphi_1^2} + \\
& + \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma \frac{1}{T} \frac{\tilde{\psi}_4 D \kappa_a - \tilde{\delta}_4[(D - \kappa\varphi_1)\kappa_a + \kappa_a \kappa_1 \varphi_1]}{(D - \kappa\varphi_1)^2 - \kappa_a^2\varphi_1^2}, \quad (3.9)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
e_{25} &= e_{25}^0 + \\
& + \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma \frac{1}{T} \frac{\tilde{\psi}_5[(D - \kappa\varphi_1)\kappa + \kappa_a^2\varphi_1] - \tilde{\delta}_5[(D - \kappa\varphi_1)\kappa_1 + \kappa_a^2\varphi_1]}{(D - \kappa\varphi_1)^2 - \kappa_a^2\varphi_1^2} + \\
& + \frac{\mu_1}{v} \sin \gamma \frac{1}{T} \frac{\tilde{\psi}_5 D \kappa_a - \tilde{\delta}_5[(D - \kappa\varphi_1)\kappa_a + \kappa_a \kappa_1 \varphi_1]}{(D - \kappa\varphi_1)^2 - \kappa_a^2\varphi_1^2}. \quad (3.10)
\end{aligned}$$

В параелектричній фазі:

$$e_{14} = e_{25} = e_{14}^0 + \frac{\mu}{vT} \frac{\tilde{\psi}_{45} 2(a+b) - \tilde{\delta}_{45} 2(a-b)}{1+d+2b - \frac{(\tilde{\nu}_1 - \tilde{\nu}_3)}{T} 2(a+b)}.$$

Статичні поперечні діелектричні сприйнятливості при $\varepsilon_i = const$

$$\begin{aligned}
\chi_{11}^\varepsilon &= \left(\frac{\partial P_1}{\partial E_1} \right)_{\varepsilon_4} = \chi_{11}^0 + \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma (-\chi_{41} + \chi_{43}) + \\
& + \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma (-\chi_{42} + \chi_{44}), \quad (3.11)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{22}^\varepsilon &= \left(\frac{\partial P_2}{\partial E_2} \right)_{\varepsilon_5} = \chi_{22}^0 + \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \sin \gamma (\chi_{51} - \chi_{53}) + \\
& + \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma (\chi_{52} - \chi_{54}),
\end{aligned}$$

$$\text{де } \chi_{4f} = \left(\frac{\partial \eta_f^{(1)(4)}}{\partial E_1} \right)_{\varepsilon_4}, \quad \chi_{5f} = \left(\frac{\partial \eta_f^{(1)(5)}}{\partial E_2} \right)_{\varepsilon_5}.$$

Вирази для χ_{4f}^a і χ_{5f}^b знайдемо із систем рівнянь

$$\sum_{f=1}^4 N_{f'f}(i) \chi_{if} = N_f^{E_j}, \quad (3.12)$$

де

$$\begin{aligned}
N_{\frac{1}{3}}^{E_1} &= \frac{\beta\mu_1}{2} \cos \gamma [\mp \kappa_{c14}^a + \kappa_{c14}^b - \eta_{\frac{1}{3}}^{(1)}(4)m_4] + \\
& + \frac{\beta\mu_2}{2} \sin \gamma [\mp \kappa_{c24}^a - \kappa_{c44}^b - \eta_{\frac{1}{3}}^{(1)}(4)\overline{m}_4],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N_{\frac{2}{4}}^{E_1} &= \frac{\beta\mu_1}{2} \cos \gamma [\mp \kappa_{c24}^a - \kappa_{c24}^b - \eta_{\frac{2}{4}}^{(1)}(4)m_4] + \\
& + \frac{\beta\mu_2}{2} \sin \gamma [\mp (\kappa_{c14}^a + \kappa_{c34}^b) - \eta_{\frac{2}{4}}^{(1)}(4)\overline{m}_4], \\
N_{\frac{1}{3}}^{E_2} &= \frac{\beta\mu_2}{2} \cos \gamma [\pm \kappa_{c25}^a + \kappa_{c45}^b - \eta_{\frac{1}{3}}^{(1)}(5)m_5] + \\
& + \frac{\beta\mu_1}{2} \sin \gamma [\pm (\kappa_{c15}^a + \kappa_{c15}^b) - \eta_{\frac{1}{3}}^{(1)}(5)\overline{m}_5], \\
N_{\frac{2}{4}}^{E_2} &= \frac{\beta\mu_2}{2} \cos \gamma [\pm (\kappa_{c15}^a + \kappa_{c35}^a) - \eta_{\frac{2}{4}}^{(1)}(5)m_5] + \\
& + \frac{\beta\mu_1}{2} \sin \gamma [\pm \kappa_{c25}^a + \kappa_{c25}^b - \eta_{\frac{2}{4}}^{(1)}(5)\overline{m}_5].
\end{aligned}$$

При $\sigma_i = 0$, і $E_j = 0$ системи рівнянь (3.12) набувають наступного вигляду:

$$\begin{aligned}
(D - \kappa\varphi_1)(\chi_{43} - \chi_{41}) - \kappa_a \varphi_1 (\chi_{44} - \chi_{42}) &= \beta\mu_1 \cos \gamma \kappa - \beta\mu_2 \sin \gamma \kappa_a, \\
-\kappa_a \varphi_1 (\chi_{43} - \chi_{41}) + (D - \kappa\varphi_1)(\chi_{44} - \chi_{42}) &= \beta\mu_1 \cos \gamma \kappa_a - \beta\mu_2 \sin \gamma \kappa,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(D - \kappa\varphi_1)(\chi_{51} - \chi_{53}) - \kappa_a \varphi_1 (\chi_{52} - \chi_{54}) &= \beta\mu_2 \cos \gamma \kappa_a + \beta\mu_1 \sin \gamma \kappa, \\
-\kappa_a \varphi_1 (\chi_{51} - \chi_{53}) + (D - \kappa\varphi_1)(\chi_{52} - \chi_{54}) &= \beta\mu_2 \cos \gamma \kappa + \beta\mu_1 \sin \gamma \kappa_a,
\end{aligned}$$

В результаті, в сегнетоелектричній фазі діелектрична сприйнятливість недеформованого кристалу

$$\begin{aligned}
\chi_{11}^\varepsilon &= \chi_{11}^{\varepsilon_0} + \bar{v} \left[\frac{(\mu_1 \cos \gamma)^2}{v^2} + \frac{(\mu_1 \sin \gamma)^2}{v^2} \right] \frac{1}{2T} \frac{(D - \kappa\varphi_1)\kappa + \kappa_a^2\varphi_1}{(D - \kappa\varphi_1)^2 - \kappa_a^2\varphi_1^2} + \\
& + \bar{v} \frac{\mu_1 \mu_2 \sin 2\gamma}{v^2} \frac{1}{2T} \frac{D \kappa_a}{(D - \kappa\varphi_1)^2 - \kappa_a^2\varphi_1^2}, \quad (3.13) \\
\chi_{22}^\varepsilon &= \chi_{22}^{\varepsilon_0} + \bar{v} \left[\frac{(\mu_2 \cos \gamma)^2}{v^2} + \frac{(\mu_1 \sin \gamma)^2}{v^2} \right] \frac{1}{2T} \frac{(D - \kappa\varphi_1)\kappa + \kappa_a^2\varphi_1}{(D - \kappa\varphi_1)^2 - \kappa_a^2\varphi_1^2} + \\
& + \bar{v} \frac{\mu_1 \mu_2 \sin 2\gamma}{v^2} \frac{1}{2T} \frac{D \kappa_a}{(D - \kappa\varphi_1)^2 - \kappa_a^2\varphi_1^2},
\end{aligned}$$

а в параелектричній фазі

$$\chi_{11}^\varepsilon = \chi_{22}^\varepsilon = \chi_{11}^{\varepsilon_0} + \bar{v} \frac{\mu^2}{v^2} \frac{1}{2T} \frac{2(a+b)}{1+d+2b - \beta(\nu_3 - \nu_1)2(a+b)}. \quad (3.14)$$

Сталі п'єзоелектричної напруги

$$h_{14} = - \left(\frac{\partial E_1}{\partial \varepsilon_4} \right)_{P_1} = h_{14}^0 - k_{11}^0 \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma (-h_{41} + h_{43}) -$$

$$-k_{11}^0 \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma(-h_{42} + h_{44}), \quad (3.15)$$

$$h_{25} = - \left(\frac{\partial E_2}{\partial \varepsilon_5} \right)_{P_2} = h_{25}^0 - k_{22}^0 \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \sin \gamma(h_{51} - h_{53}) - \\ - k_{22}^0 \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma(h_{52} - h_{54}),$$

$$\text{де } h_{4f} = \left(\frac{\partial \eta_f^{(1)}(4)}{\partial \varepsilon_4} \right)_{P_1}, \quad h_{5f} = \left(\frac{\partial \eta_f^{(1)}(5)}{\partial \varepsilon_5} \right)_{P_1}.$$

Використовуючи співвідношення для унарних функцій (2.8), отримуємо системи рівнянь для h_{if} :

$$\sum_{f=1}^4 N_{f'f}(i) h_{if}^c = N_f^{Ej} + N_f^{\varepsilon j}. \quad (3.16)$$

Звідси,

$$h_{14} = \frac{e_{14}}{\chi_{11}^\varepsilon}, \quad h_{25} = \frac{e_{25}}{\chi_{22}^\varepsilon}.$$

Коефіцієнти п'єзoeлектричної деформації

$$d_{14} = \left(\frac{\partial P_1}{\partial \sigma_4} \right)_{E_1} = e_{14}^0 s_{44}^{E0} + \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma(-d_{41} + d_{43}) + \\ + \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma(-d_{42} + d_{44}), \quad (3.17)$$

$$d_{25} = \left(\frac{\partial P_2}{\partial \sigma_5} \right)_{E_2} = e_{25}^0 s_{55}^{E0} + \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \sin \gamma(d_{51} - d_{53}) + \\ + \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma(d_{52} - d_{54}),$$

де

$$d_{4f} = \left(\frac{\partial \eta_f^{(1)}(4)}{\partial \sigma_4} \right)_{E_1} = \left(\frac{\partial \eta_f^{(1)}(4)}{\partial \varepsilon_4} \right)_{E_1} \left(\frac{\partial \varepsilon_4}{\partial \sigma_4} \right)_{E_1} = \left(\frac{\partial \eta_f^{(1)}(4)}{\partial \varepsilon_4} \right)_{E_1} s_{44}^E,$$

$$d_{5f} = \left(\frac{\partial \eta_f^{(1)}(5)}{\partial \sigma_5} \right)_{E_2} = \left(\frac{\partial \eta_f^{(1)}(5)}{\partial \varepsilon_5} \right)_{E_2} s_{55}^E,$$

Вирази d_{if} задовільняють наступні системи рівнянь

$$\sum_{f=1}^4 N_{f'f}(i) d_{if} = N_f^{\varepsilon j} s_{44}^E.$$

В результаті,

$$d_{14} = e_{14} s_{44}^E, \quad d_{25} = e_{25} s_{55}^E,$$

Розрахуємо вклад у пружну сталу, зумовлену впорядкуванням дейтронів при наявності механічної напруги σ_i . З (3.3) отримуємо вираз для пружної сталі c_{44}^E :

$$c_{44}^E = \left(\frac{\partial \sigma_4}{\partial \varepsilon_4} \right)_E = c_{44}^{E0} - \\ - \frac{\tilde{\psi}_4}{\bar{v} D_4} \{ [\varphi_{14}(\varkappa_{314} - \varkappa_{114}) + \beta \nu_3(\varkappa_{334} - \varkappa_{134}) + \\ + \beta \nu_2(\varkappa_{324} - \varkappa_{124}) + \beta \nu_2(\varkappa_{344} - \varkappa_{144})] e_{41} + \\ + [\beta \nu_3(\varkappa_{314} - \varkappa_{114}) + \varphi_{34}(\varkappa_{334} - \varkappa_{134}) + \\ + \beta \nu_2(\varkappa_{324} - \varkappa_{124}) + \beta \nu_2(\varkappa_{344} - \varkappa_{144})] e_{43} + \\ + [\beta \nu_2(\varkappa_{314} - \varkappa_{114}) + \beta \nu_2(\varkappa_{334} - \varkappa_{134}) + \\ + \varphi_{24}(\varkappa_{324} - \varkappa_{124}) + \beta \nu_3(\varkappa_{344} - \varkappa_{144})] e_{42} + \\ + [\beta \nu_2(\varkappa_{314} - \varkappa_{114}) + \beta \nu_2(\varkappa_{334} - \varkappa_{134}) + \\ + \beta \nu_3(\varkappa_{324} - \varkappa_{124}) + \varphi_{44}(\varkappa_{344} - \varkappa_{144})] e_{44} \} - \\ - \frac{\tilde{\delta}_4}{\bar{v} D_4} \{ [\varphi_{14} r_{114} + \beta \nu_3 r_{124} + \beta \nu_2 r_{134} + \beta \nu_2 r_{144}] e_{41} + \\ + [\beta \nu_3 r_{114} + \varphi_{34} r_{124} + \beta \nu_2 r_{134} + \beta \nu_2 r_{144}] e_{43} + \\ + [\beta \nu_2 r_{114} + \beta \nu_2 r_{124} + \varphi_{24} r_{134} + \beta \nu_3 r_{144}] e_{42} + \\ + [\beta \nu_2 r_{114} + \beta \nu_2 r_{124} + \beta \nu_3 r_{134} + \varphi_{44} r_{144}] e_{44} \} + \\ - \frac{2\tilde{\psi}_4}{\bar{v} D_4 T} \{ \tilde{\psi}_4 [\varkappa_{c14}^a + \varkappa_{c14}^b - \frac{1}{D_4} (-\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b)^2] + \\ + \tilde{\delta}_4 [-\varkappa_{c14}^a + \varkappa_{c14}^b - \frac{1}{D_4} (-\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b)(\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b)] \} \\ - \frac{2\tilde{\delta}_4}{\bar{v} D_4 T} \{ \tilde{\psi}_4 [-\varkappa_{c14}^a + \varkappa_{c14}^b - \frac{1}{D_4} (-\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b)(\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b)] + \\ + \tilde{\delta}_4 [\varkappa_{c14}^a + \varkappa_{c14}^b - \frac{1}{D_4} (\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b)^2] \},$$

де

$$r_{114} = \varkappa_{c14}^a - \varkappa_{c14}^b - \eta_1^{(1)}(4)(\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b), \\ r_{124} = -\varkappa_{c14}^a + \varkappa_{c14}^b - \eta_3^{(1)}(4)(\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b), \\ r_{134} = \varkappa_{c24}^a - \varkappa_{c24}^b - \eta_2^{(1)}(4)(\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b), \\ r_{144} = -\varkappa_{c24}^a - \varkappa_{c24}^b - \eta_4^{(1)}(4)(\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b).$$

У випадку недеформованого кристалу ($\sigma_4 = 0$) в сегнетоелектричній фазі

$$c_{44}^E = c_{44}^{E0} - \frac{2}{\bar{v}T} \frac{\tilde{\psi}_4^2 [(D - \kappa\varphi_1)\kappa + \kappa_a^2\varphi_1] - 2\tilde{\psi}_4\tilde{\delta}_4 [(D - \kappa\varphi_1)\kappa_1 + \kappa_a^2\varphi_1]}{(D - \kappa\varphi_1)^2 - \kappa_a^2\varphi_1^2} - \frac{2}{\bar{v}T} \frac{\tilde{\delta}_4^2 [(D - \kappa\varphi_1)(\kappa_1^2 + \kappa_a^2)\varphi_1 + 2\kappa_1\kappa_a^2\varphi_1^2]}{D[(D - \kappa\varphi_1)^2 - \kappa_a^2\varphi_1^2]} - \frac{2\tilde{\delta}_4^2 \kappa}{\bar{v}T D}. \quad (3.19)$$

В параелектричній фазі

$$c_{44}^E = c_{44}^{E0} - \frac{2}{\bar{v}T} \frac{\tilde{\psi}_4^2 2(a+b) - \tilde{\psi}_4\tilde{\delta}_4 4(a-b)}{1 + 2b + d - \beta(\nu_1 - \nu_3)2(a+b)} - \frac{2}{\bar{v}T} \frac{\tilde{\delta}_4^2}{1 + 2a + 4b + d} \left\{ \frac{4(a-b)^2(1 + \beta(\nu_1 - \nu_3))}{1 + 2b + d - \beta(\nu_1 - \nu_3)2(a+b)} + 2(a+b) \right\}.$$

Аналогічно можна отримати вираз для пружної сталої c_{55}^E .

Підставляючи вирази для поля E_j (3.6) у співвідношення $\sigma_i(\varepsilon_i, E_j)$, отримуємо вирази для напруги $\sigma_i(\varepsilon_i, P_j)$, на основі яких можна розрахувати пружні сталі при $P_j = const$. В результаті,

$$\begin{aligned} c_{44}^P &= c_{44}^E + e_{14}h_{14}, \\ c_{55}^P &= c_{55}^E + e_{25}h_{25}. \end{aligned}$$

Отже, вирази (3.3), (3.4) можна записати в наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \sigma_4 &= c_{44}^E \varepsilon_4 - e_{14}E_1, & P_1 &= e_{14}\varepsilon_4 + \chi_{11}^\varepsilon E_1, \\ \sigma_4 &= c_{44}^P \varepsilon_4 - h_{14}P_1, & E_1 &= -h_{14}\varepsilon_4 + k_{11}^\varepsilon P_1, \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \sigma_5 &= c_{55}^E \varepsilon_5 - e_{25}E_2, & P_2 &= e_{25}\varepsilon_5 + \chi_{22}^\varepsilon E_2, \\ \sigma_5 &= c_{55}^P \varepsilon_5 - h_{25}P_2, & E_2 &= -h_{25}\varepsilon_5 + k_{22}^\varepsilon P_2. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Із систем рівнянь (3.20) і (3.21) при $E_j = const$ отримуємо:

$$\begin{aligned} c_{ii}^P \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \sigma_i} \right)_{E_j} - h_{ji} \left(\frac{\partial P_j}{\partial \sigma_i} \right)_{E_j} &= 1, \\ -h_{ji} \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \sigma_i} \right)_{E_j} + k_{jj}^\varepsilon \left(\frac{\partial P_j}{\partial \sigma_i} \right)_{E_j} &= 0. \end{aligned}$$

Звідси вираз для коефіцієнта п'єзоелектричної деформації має наступний вигляд:

$$d_{ji} = \left(\frac{\partial P_j}{\partial \sigma_i} \right)_{E_j} = \frac{h_{ji}}{c_{ii}^P k_{jj}^\varepsilon - h_{ji}^2} = \frac{e_{ji}}{c_{ii}^P - e_{ji}h_{ji}} = \frac{e_{ji}}{c_{ii}^E}, \quad (3.22)$$

а податливість при сталому полю

$$s_{ii}^E = \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \sigma_i} \right)_{E_j} = \frac{k_{jj}^\varepsilon}{c_{ii}^P k_{jj}^\varepsilon - h_{ji}^2} = \frac{1}{c_{ii}^E}. \quad (3.23)$$

Диференціюючи перші рівняння систем (3.20) і (3.21) по напрузі σ_i , при $P_j = const$, отримуємо:

$$\begin{aligned} c_{ii}^P \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \sigma_i} \right)_{P_j} - e_{ji} \left(\frac{\partial E_j}{\partial \sigma_i} \right)_{P_j} &= 1, \\ -e_{ji} \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \sigma_i} \right)_{P_j} + \chi_{ii}^\varepsilon \left(\frac{\partial E_j}{\partial \sigma_i} \right)_{P_j} &= 0, \end{aligned}$$

де $g_{ji} = \left(\frac{\partial E_j}{\partial \sigma_i} \right)_{P_j}$ – стала п'єзоелектричної деформації, а $s_{ii}^P = -\left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \sigma_i} \right)_{P_j}$ – податливість при $P_j = const$. Звідси

$$g_{ji} = \frac{h_{ji}}{c_{ii}^E + e_{ji}h_{ji}^2} = \frac{h_{ji}}{c_{ii}^P}, \quad s_{ii}^P = \frac{1}{c_{ii}^P} \quad (3.24)$$

Взявши похідну по полю E_j , при $\sigma_i = const$ від перших рівнянь систем (3.20) і (3.21), отримуємо:

$$\begin{aligned} c_{ii}^E \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial E_j} \right)_{\sigma_i} - e_{ji} &= 0, \\ -e_{ji} \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial E_j} \right)_{\sigma_i} + \left(\frac{\partial P_j}{\partial E_j} \right)_{\sigma_i} &= \chi_{jj}^\varepsilon. \end{aligned}$$

Оскільки $\left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial E_j} \right)_{\sigma_i} = d_{ji}$, то діелектрична сприйнятливість при $\sigma_i = const$

$$\chi_{jj}^\sigma = \left(\frac{\partial P_j}{\partial E_j} \right)_{\sigma_i} = \chi_{jj}^\varepsilon + e_{ji}d_{ji}. \quad (3.25)$$

Отже, ми отримали мікроскопічні вирази для e_{ji} , χ_{jj}^ε і c_{ii}^E , а всі інші характеристики виражаються через них.

4. Теплові властивості ДСОФ при наявності механічної напруги σ_4

Молярна ентропія кристалів типу ДСОФ, що обумовлена дейтронною підсистемою при прикладанні механічної напруги σ_4 , має насту-

пний вигляд:

$$S_4 = -R \left(\frac{\partial f(4)}{\partial T} \right)_{P_1, \varepsilon_4} = R \left\{ 2 \ln 2 + \frac{1}{2} \sum_{f=1}^4 \ln[1 - \eta_f^{(1)2}(4)] + \right. \quad (4.1)$$

$$\left. + 2 \ln D_4 + T \sum_{f=1}^4 \varphi_{4f}^T \eta_f^{(1)}(4) + 2 \frac{M_4}{D_4} \right\},$$

де R – універсальна газова стала,

$$\varphi_{41}^T = -\frac{1}{T^2} [\nu_1 \eta_1^{(1)}(4) + \nu_3 \eta_3^{(1)}(4) + \nu_2 \eta_2^{(1)}(4) + \nu_2 \eta_4^{(1)}(4) - \psi_6 \varepsilon_6 - \psi_4 \varepsilon_4],$$

$$\varphi_{43}^T = -\frac{1}{T^2} [\nu_3 \eta_1^{(1)}(4) + \nu_1 \eta_3^{(1)}(4) + \nu_2 \eta_2^{(1)}(4) + \nu_2 \eta_4^{(1)}(4) - \psi_6 \varepsilon_6 + \psi_4 \varepsilon_4],$$

$$\varphi_{42}^T = -\frac{1}{T^2} [\nu_2 \eta_1^{(1)}(4) + \nu_2 \eta_3^{(1)}(4) + \nu_1 \eta_2^{(1)}(4) + \nu_3 \eta_4^{(1)}(4) - \psi_6 \varepsilon_6],$$

$$\varphi_{44}^T = -\frac{1}{T^2} [\nu_2 \eta_1^{(1)}(4) + \nu_2 \eta_3^{(1)}(4) + \nu_3 \eta_2^{(1)}(4) + \nu_1 \eta_4^{(1)}(4) - \psi_6 \varepsilon_6],$$

$$M_4 = \frac{1}{T} [\tilde{w}_1 d \operatorname{ch} A_{24} + \tilde{\varepsilon} \varkappa_{c14}^a + \tilde{w}(\varkappa_{c14}^b + \varkappa_{c34}^b) -$$

$$- \tilde{\delta}_4 \varepsilon_4 (\varkappa_{s14}^a + \varkappa_{s24}^b) - \tilde{\delta}_6 \varepsilon_6 (2 \operatorname{sh} A_{14} - \varkappa_{s14}^b - \varkappa_{s24}^b) - \tilde{\delta}_{a6} \varepsilon_6 \varkappa_{c24}^a].$$

Молярну теплоємність DKDP, яка обумовлена дейтронною підсистемою при постійній напрузі, обчислимо безпосередньо диференціюючи ентропію (4.1):

$$\Delta C_4^\sigma = T \left(\frac{\partial S_4}{\partial T} \right)_\sigma = \Delta C_4^\varepsilon + q_4^P \alpha_4 + q_6^P \alpha_6, \quad (4.2)$$

де ΔC_4^ε – молярна теплоємність при постійній деформації

$$\Delta C_4^\varepsilon = q_4^{P, \varepsilon} + q_{41}^\varepsilon p_{41}^\sigma + q_{43}^\varepsilon p_{43}^\sigma + q_{42}^\varepsilon p_{42}^\sigma + q_{44}^\varepsilon p_{44}^\sigma. \quad (4.3)$$

Тут використані наступні позначення:

$$q_4^{P, \varepsilon} = T \left(\frac{\partial S_4}{\partial T} \right)_{P_1, \varepsilon_4} =$$

$$= \frac{2R}{D_4} \left\{ T \varphi_{41}^T [\gamma_{41} + q_{41} - \eta_1^{(1)}(4) M_4] + T \varphi_{43}^T [\gamma_{43} + q_{43} - \eta_3^{(1)}(4) M_4] + \right.$$

$$\left. + T \varphi_{42}^T [\gamma_{42} + q_{42} - \eta_2^{(1)}(4) M_4] + T \varphi_{44}^T [\gamma_{44} + q_{44} - \eta_4^{(1)}(4) M_4] + N_4 - \frac{M_4^2}{D_4} \right\};$$

$$q_{41}^\varepsilon = T \left(\frac{\partial S_4}{\partial \eta_1^{(1)}(4)} \right)_{\varepsilon_4, T} = \frac{2RT}{D_4} (\varphi_1^\eta \gamma_{41} + \beta \nu_3 \gamma_{43} + \beta \nu_2 \gamma_{42} + \beta \nu_2 \gamma_{44}),$$

$$q_{43}^\varepsilon = T \left(\frac{\partial S_4}{\partial \eta_3^{(1)}(4)} \right)_{\varepsilon_4, T} = \frac{2RT}{D_4} (\beta \nu_3 \gamma_{41} + \varphi_3^\eta \gamma_{43} + \beta \nu_2 \gamma_{42} + \beta \nu_2 \gamma_{44}),$$

$$q_{42}^\varepsilon = T \left(\frac{\partial S_4}{\partial \eta_2^{(1)}(4)} \right)_{\varepsilon_4, T} = \frac{2RT}{D_4} (\beta \nu_2 \gamma_{41} + \beta \nu_2 \gamma_{43} + \varphi_2^\eta \gamma_{42} + \beta \nu_3 \gamma_{44}),$$

$$q_{44}^\varepsilon = T \left(\frac{\partial S_4}{\partial \eta_4^{(1)}(4)} \right)_{\varepsilon_4, T} = \frac{2RT}{D_4} (\beta \nu_2 \gamma_{41} + \beta \nu_2 \gamma_{43} + \beta \nu_3 \gamma_{42} + \varphi_4^\eta \gamma_{44});$$

$$q_4^P = T \left(\frac{\partial S_4}{\partial \varepsilon_4} \right)_{\eta^{(1)}, T} =$$

$$= \frac{2R}{D_4} \left\{ T \varphi_{41}^T [\tilde{\psi}_4 (-\varkappa_{c14}^a - \varkappa_{c14}^b - \eta_1^{(1)}(4) (-\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b)) + \right.$$

$$+ \tilde{\delta}_4 (\varkappa_{c14}^a - \varkappa_{c14}^b - \eta_1^{(1)}(4) (\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b))] +$$

$$+ T \varphi_{43}^T [\tilde{\psi}_4 (\varkappa_{c14}^a + \varkappa_{c14}^b - \eta_3^{(1)}(4) (-\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b)) +$$

$$+ \tilde{\delta}_4 (-\varkappa_{c14}^a + \varkappa_{c14}^b - \eta_3^{(1)}(4) (\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b))] +$$

$$+ T \varphi_{42}^T [\tilde{\psi}_4 (-\varkappa_{c24}^a - \varkappa_{c24}^b - \eta_2^{(1)}(4) (-\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b)) +$$

$$+ \tilde{\delta}_4 (\varkappa_{c24}^a - \varkappa_{c24}^b - \eta_2^{(1)}(4) (\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b))] +$$

$$+ T \varphi_{44}^T [\tilde{\psi}_4 (\varkappa_{c24}^a - \varkappa_{c24}^b - \eta_4^{(1)}(4) (-\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b)) +$$

$$+ \tilde{\delta}_4 (-\varkappa_{c24}^a - \varkappa_{c24}^b - \eta_4^{(1)}(4) (\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b))] -$$

$$- \tilde{\psi}_4 \frac{2}{T} [\tilde{\varepsilon} \varkappa_{s14}^a + \tilde{w} \varkappa_{s24}^b - \tilde{\delta}_4 \varepsilon_4 (\varkappa_{c14}^a + \varkappa_{c14}^b) +$$

$$+ \tilde{\delta}_6 \varepsilon_6 \varkappa_{c24}^b + \tilde{\delta}_{a6} \varepsilon_6 \varkappa_{s24}^a + T \frac{M_4}{D_4} (-\varkappa_{s14}^a - \varkappa_{s24}^b)] +$$

$$+ \tilde{\delta}_4 \frac{2}{T} [\tilde{\varepsilon} \varkappa_{s14}^a - \tilde{w} \varkappa_{s24}^b - \tilde{\delta}_4 \varepsilon_4 (\varkappa_{c14}^a - \varkappa_{c14}^b) -$$

$$- \tilde{\delta}_6 \varepsilon_6 \varkappa_{c24}^b + \tilde{\delta}_{a6} \varepsilon_6 \varkappa_{s24}^a - T (\varkappa_{s14}^a + \varkappa_{s24}^b) (1 + \frac{M_4}{D_4})] \left. \right\},$$

$$q_6^P = T \left(\frac{\partial S_4}{\partial \varepsilon_6} \right)_{\eta^{(1)}, T} =$$

$$= \frac{2R}{D_4} \left\{ T \varphi_{41}^T [\tilde{\psi}_6 (2 \operatorname{ch} A_{14} + \varkappa_{c24}^b + \varkappa_{c14}^b - \eta_1^{(1)}(4) (2 \operatorname{sh} A_{14} + \varkappa_{s14}^b + \varkappa_{s34}^b)) + \right.$$

$$+ \tilde{\delta}_6 (2 \operatorname{ch} A_{14} - \varkappa_{c24}^b - \varkappa_{c14}^b - \eta_1^{(1)}(4) (2 \operatorname{sh} A_{14} - \varkappa_{s14}^b - \varkappa_{s34}^b)) -$$

$$\begin{aligned}
& -\tilde{\delta}_{a6}(\varkappa_{s24}^a - \eta_1^{(1)}(4)\varkappa_{c24}^a)] + \\
& + T\varphi_{43}^T[\tilde{\psi}_6(2\text{ch } A_{14} - \varkappa_{c24}^b + \varkappa_{c14}^b - \eta_3^{(1)}(4)(2\text{sh } A_{14} + \varkappa_{s14}^b + \varkappa_{s34}^b)) + \\
& + \tilde{\delta}_6(2\text{ch } A_{14} + \varkappa_{c24}^b - \varkappa_{c14}^b - \eta_3^{(1)}(4)(2\text{sh } A_{14} - \varkappa_{s14}^b - \varkappa_{s34}^b)) + \\
& + \tilde{\delta}_{a6}(\varkappa_{s24}^a - \eta_3^{(1)}(4)\varkappa_{c24}^a)] + \\
& + T\varphi_{42}^T[\tilde{\psi}_6(2\text{ch } A_{14} + \varkappa_{c14}^b + \varkappa_{c34}^b - \eta_2^{(1)}(4)(2\text{sh } A_{14} + \varkappa_{s14}^b + \varkappa_{s34}^b)) + \\
& + \tilde{\delta}_6(2\text{ch } A_{14} - \varkappa_{c14}^b - \varkappa_{c34}^b - \eta_2^{(1)}(4)(2\text{sh } A_{14} - \varkappa_{s14}^b - \varkappa_{s34}^b)) - \\
& - \tilde{\delta}_{a6}(\varkappa_{s24}^a - \eta_2^{(1)}(4)\varkappa_{c24}^a)] + \\
& + T\varphi_{44}^T[\tilde{\psi}_6(2\text{ch } A_{14} + \varkappa_{c14}^b - \varkappa_{c34}^b - \eta_4^{(1)}(4)(2\text{sh } A_{14} + \varkappa_{s14}^b + \varkappa_{s34}^b)) + \\
& + \tilde{\delta}_6(2\text{ch } A_{14} - \varkappa_{c14}^b + \varkappa_{c34}^b - \eta_4^{(1)}(4)(2\text{sh } A_{14} - \varkappa_{s14}^b - \varkappa_{s34}^b)) + \\
& + \tilde{\delta}_{a6}(\varkappa_{s14}^a - \eta_4^{(1)}(4)\varkappa_{c24}^a)] + \\
& + \tilde{\psi}_6 \frac{2}{T}[\tilde{w}(\varkappa_{s14}^b + \varkappa_{s34}^b) - \tilde{\delta}_4\varepsilon_4\varkappa_{c24}^a - \tilde{\delta}_6\varepsilon_6(4\text{ch } A_{14} - \varkappa_{c14}^b - \varkappa_{c34}^b) - \\
& - T\frac{M_4}{D_4}(2\text{sh } A_{14} + \varkappa_{s14}^b + \varkappa_{s34}^b)] + \\
& + \tilde{\delta}_6 \frac{2}{T}[-\tilde{w}(\varkappa_{s14}^b + \varkappa_{s34}^b) + \tilde{\delta}_4\varepsilon_4\varkappa_{c24}^a + \tilde{\delta}_6\varepsilon_6(4\text{ch } A_{14} + \varkappa_{c14}^b + \varkappa_{c34}^b) - \\
& - T(1 + \frac{M_4}{D_4})(2\text{sh } A_{14} - \varkappa_{s14}^b - \varkappa_{s34}^b)] - \\
& - \tilde{\delta}_{a6} \frac{2}{T}[-\tilde{\varepsilon}\varkappa_{c24}^a + \tilde{\delta}_4\varepsilon_4\varkappa_{s24}^a + \tilde{\delta}_6\varepsilon_6\varkappa_{s14}^a + T(1 + \frac{M_4}{D_4})\varkappa_{c24}^a] \Big\},
\end{aligned}$$

де використані такі позначення:

$$\begin{aligned}
\gamma_{4f} &= \frac{1}{2}T \sum_{f'=1}^4 \varphi_{4f'}^T \varkappa_{ff'} + q_{4f} - \eta_f^{(1)}(4)M_4, \\
q_{4_3} &= \frac{1}{T}[\tilde{w}_1 d \text{sh } A_{24} \pm \tilde{\varepsilon}\varkappa_{s14}^a \pm \tilde{w}\varkappa_{s24}^b + \tilde{w}\varkappa_{s34}^b \mp \tilde{\delta}_{a6}\varepsilon_6\varkappa_{s24}^a - \\
& - \tilde{\delta}_6\varepsilon_6(2\text{ch } A_{14} \mp \varkappa_{c24}^b - \varkappa_{c34}^b) \mp \tilde{\delta}_4\varepsilon_4(\varkappa_{c14}^a - \varkappa_{c24}^a)], \\
q_{4_4} &= \frac{1}{T}[-\tilde{w}_1 d \text{sh } A_{24} \pm \tilde{\varepsilon}\varkappa_{s24}^a + \tilde{w}\varkappa_{s24}^b \pm \tilde{w}\varkappa_{s44}^b \mp \tilde{\delta}_{a6}\varepsilon_6\varkappa_{s14}^a - \\
& - \tilde{\delta}_6\varepsilon_6(2\text{ch } A_{14} - \varkappa_{c24}^b \mp \varkappa_{c34}^b) - \tilde{\delta}_4\varepsilon_4(\pm\varkappa_{c24}^a - \varkappa_{c24}^a)], \\
N_4 &= \left(\frac{\tilde{w}_1}{T}\right)^2 d \text{ch } A_{24} + \left(\frac{\tilde{\varepsilon}}{T}\right)^2 \varkappa_{c14}^a + \left(\frac{\tilde{w}}{T}\right)^2 (\varkappa_{c14}^b + \varkappa_{c34}^b) + \\
& + \left(\frac{\tilde{\delta}_4\varepsilon_4}{T}\right)^2 (\varkappa_{c14}^a - \varkappa_{c24}^a) + \left(\frac{\tilde{\delta}_6\varepsilon_6}{T}\right)^2 (4\text{ch } A_{14} + \varkappa_{c14}^b + \varkappa_{c34}^b) +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{\tilde{\delta}_{a6}\varepsilon_6}{T}\right)^2 \varkappa_{c14}^a - 2\frac{\tilde{\varepsilon}}{T}\frac{\tilde{\delta}_4\varepsilon_4}{T}\varkappa_{s14}^a - 2\frac{\tilde{\varepsilon}}{T}\frac{\tilde{\delta}_{a6}\varepsilon_6}{T}\varkappa_{c24}^a - 2\frac{\tilde{w}}{T}\frac{\tilde{\delta}_4\varepsilon_4}{T}\varkappa_{s24}^b + \\
& + 2\frac{\tilde{w}}{T}\frac{\tilde{\delta}_6\varepsilon_6}{T}(\varkappa_{s14}^b + \varkappa_{s34}^b) - 2\frac{\tilde{\delta}_4\varepsilon_4}{T}\frac{\tilde{\delta}_6\varepsilon_6}{T}\varkappa_{c24}^b + 2\frac{\tilde{\delta}_4\varepsilon_4}{T}\frac{\tilde{\delta}_{a6}\varepsilon_6}{T}\varkappa_{s24}^a - \\
& - 2\frac{\tilde{\delta}_6\varepsilon_6}{T}\frac{\tilde{\delta}_{a6}\varepsilon_6}{T}\varkappa_{s24}^a.
\end{aligned}$$

Вирази для $p_{4f}^\sigma = \left(\frac{\partial \eta_f^{(1)}(4)}{\partial T}\right)_{\sigma_4 E_1}$, $\alpha_4 = \left(\frac{\partial \varepsilon_4}{\partial T}\right)_{\sigma_4 E_1}$ і $\alpha_6 = \left(\frac{\partial \varepsilon_6}{\partial T}\right)_{\sigma_4 E_1}$ знаходимо із наступної системи рівнянь

$$\sum_{f=1}^4 N_{f'f}(4)p_{4f}^\sigma - N_f^{\varepsilon_4}\alpha_4 - N_f^{\varepsilon_6}\alpha_6 = \gamma_{4f}. \quad (4.4)$$

На основі цієї системи можна розрахувати і піроелектричний коефіцієнт

$$\left(\frac{\partial P_1}{\partial T}\right)_{\sigma_4 E_1} = e_{14}^0\alpha_4 + \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma \frac{1}{2}(p_{43}^\sigma - p_{41}^\sigma) + \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma \frac{1}{2}(p_{44}^\sigma - p_{42}^\sigma). \quad (4.5)$$

5. Порівняння з експериментом. Обговорення отриманих результатів.

Перш ніж перейти до обговорення запропонованої в попередніх розділах теорії, відзначимо, що ця теорія справедлива лише для повністю дейтерованих кристалів сім'ї KN_2PO_4 . Водночас експериментальні дані стосуються і частково дейтерованих кристалів. Однак, як свідчить установлений на експерименті релаксаційний характер дисперсії компонент тензора діелектричної проникності в кристалах цього типу, мабуть тут має місце суттєве приглушення ефектів тунелювання короткосяжними взаємодіями [22,23]. Надалі будемо вважати, що, принаймні у випадку високих ступенів дейтерування, запропонована в попередніх розділах теорія справедлива і для частково дейтерованих кристалів $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$.

В роботах [24, 25] шляхом порівняння теоретичних результатів з експериментальними для кристалів $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ було знайдено параметри теорії, які забезпечують добре узгодження теоретичних результатів з даними експериментів для спонтанної поляризації, теплоємності, статичної і динамічної проникностей при атмосферному тиску.

В даній роботі обмежимося числовими розрахунками характеристик кристалу $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ у випадку параелектричної фази і, як в [9–12], будемо розглядати високодейтерований кристал з $x=0,89$ і $T_{c0}=210,8K$. У ролі мікропараметрів виберемо ті, що були знайдені в [24,25]. Отже, $\frac{\epsilon}{k_B} = 88, 3K$, $\frac{\omega}{k_B} = 788K$, $\omega_1 = \infty$, $\nu_a = \nu_1 - \nu_3 = 17K$, $\mu_1 = 5, 19 \cdot 10^{-18} \text{CGSEq}\cdot\text{cm}$, $\chi_{11}^0 = 1, 5$.

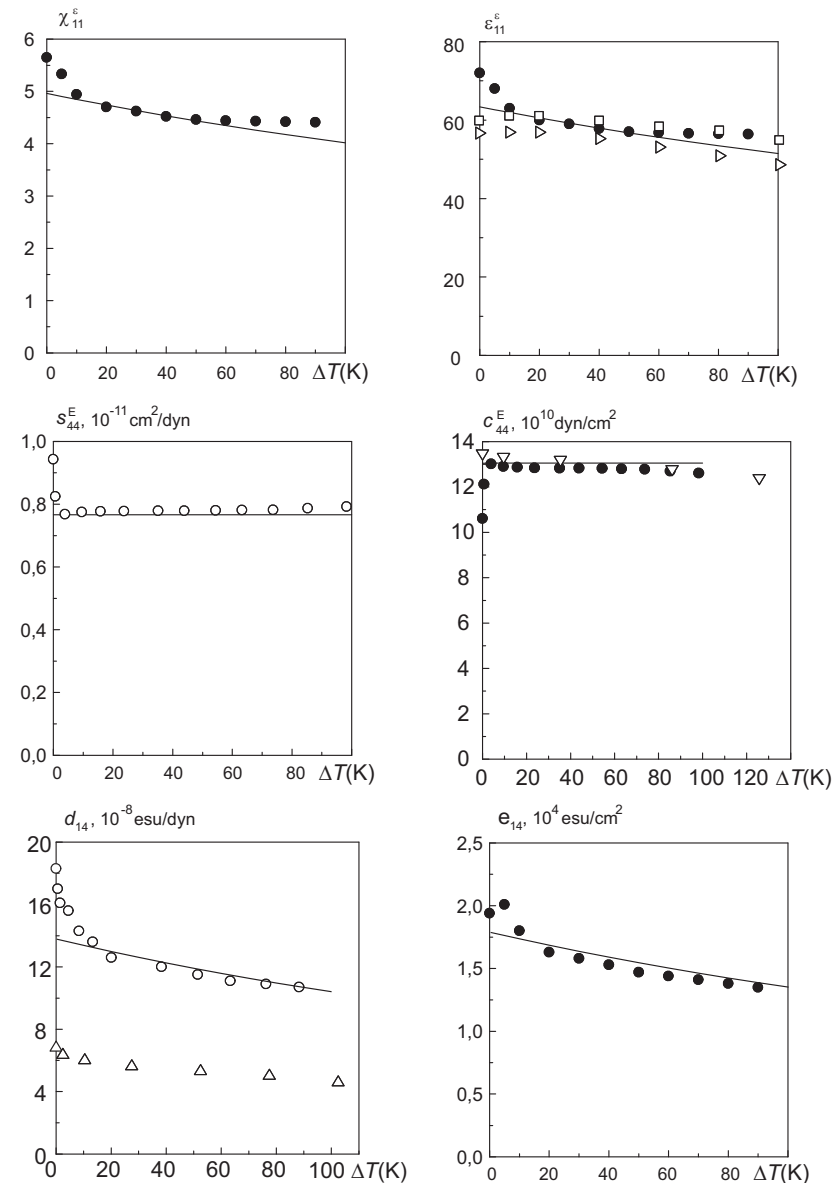
Для визначення значень деформаційних потенціалів і “затравочних” величин використано експериментальні дані праць [17,18], де наведені температурні залежності при $\sigma_4 = 0$ коефіцієнта п’єзоелектричної деформації d_{14} , податливості s_{44}^E і діелектричної сприйнятливості χ_{11} . Використовуючи співвідношення між діелектричними, пружними та п’єзоелектричними характеристиками кристала, за значеннями величин d_{14} , s_{44}^E і χ_{11}^σ можна розрахувати пружну сталу $c_{44}^E = \frac{1}{s_{44}^E}$, коефіцієнт п’єзоелектричної напруги $e_{14} = \frac{d_{14}}{s_{44}^E}$, діелектричну сприйнятливість при $\epsilon=\text{const}$ $\chi_{11}^\epsilon = \chi_{11}^\sigma - e_{14}d_{14} = \chi_{11}^\sigma - \frac{d_{14}^2}{s_{44}^E}$, константу п’єзоелектричної напруги $h_{14} = \frac{e_{14}}{s_{11}^\epsilon} = \frac{d_{14}}{\chi_{11}^\sigma s_{44}^E - d_{14}^2}$, константу п’єзоелектричної деформації $g_{14} = \frac{d_{14}}{s_{11}^\epsilon} = \frac{d_{14} s_{44}^E}{\chi_{11}^\sigma s_{44}^E - d_{14}^2}$, пружну сталу при $P=\text{const}$ $c_{44}^P = c_{44}^E - e_{14}h_{14} = \frac{1}{s_{44}^E} - \frac{d_{14}^2}{s_{44}^E(\chi_{11}^\sigma s_{44}^E - d_{14}^2)}$.

В даній же праці отримані вирази для діелектричної сприйнятливості χ_{11}^ϵ , коефіцієнта п’єзоелектричної напруги e_{14} і пружної сталі при $E=\text{const}$ c_{44}^E . На основі цих величин можна розрахувати п’єзоелектричні сталі d_{14} , h_{14} , g_{14} , пружні характеристики c_{44}^P , c_{44}^E , s_{44}^P і діелектричну сприйнятливість χ_{11}^σ .

“Затравочний” коефіцієнт п’єзоелектричної напруги e_{14}^0 і значення потенціалу ψ_4 знаходимо з умови, щоб температурний хід кривої e_{14} відповідав експериментальному. Отримано, що $e_{14}^0 = 0,1 \cdot 10^4 \text{CGSEq}/\text{cm}^2$ і $\frac{\psi_4}{k_B} = -158, 3K$. Аналогічно маємо і $c_{44}^{E0} = 12, 97 \cdot 10^{10} \text{дин}/\text{cm}^2$, $\bar{\delta}_4 = 20K$.

На рис.2 показано, як запропонована теорія описує температурну поведінку в параелектричній фазі фізичних характеристик кристала $K(H_{0,11}D_{0,89})_2PO_4$, пов’язаних із деформацією ϵ_4 при атмосферному тиску.

Як бачимо, у параелектричній фазі теоретичні результати добре узгоджуються з експериментальними даними, за винятком області $\Delta T \leq 10K$, в якій експериментальні значення всіх характеристик незначно змінюються. Однак, якщо за результатами роботи [13] величина ϵ_{11}^ϵ в цій області зростає, то за даними праць [15–17] ця величина зменшується. Податливість S_{44}^E кристалу $K(H_{0,11}D_{0,89})_2PO_4$ при $T=T_{c0}$ має максимум в околі температур $\Delta T \leq 10K$ [14], а в той



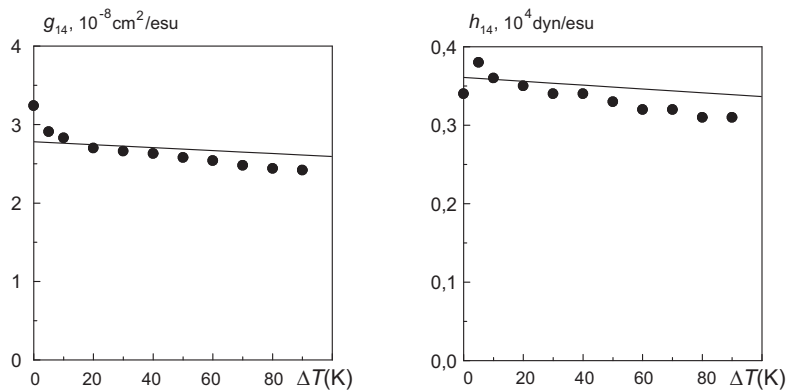


Рис. 2. Температурні залежності пов'язаних з деформацією ε_4 фізичних характеристик кристалу $K(H_{0,11}D_{0,89})_2PO_4$. Лінії – результати теоретичного розрахунку. \circ – експериментальні дані робіт [13, 14], \bullet – перераховані значення з використанням даних [13, 14]. \triangleright – експериментальні дані робіт [15, 16] для кристалу $K(H_{0,16}D_{0,84})_2PO_4$; \square – [17] ($x=1,00$); ∇ – [18] ($x=0,00$), \triangle – [19] ($x=0,00$).

же час пружна стала c_{44}^E у випадку $x=0$ [19] не має ніяких особливостей в точці переходу. Значно менший окіл температур, в якому зростає величина d_{14} при наближенні до T_{c0} у випадку $x=0$ [17], ніж отриманий результат для $x=0,89$ у праці [13]. Відзначимо, що, якщо значення ε_{33}^E і ε_{33}^S , а також значення c_{66}^E і c_{66}^P значно відрізняються [9–12], то в даному випадку в усьому температурному діапазоні $\varepsilon_{11}^E = \varepsilon_{11}^S$ і $c_{44}^E = c_{44}^P$.

6. Завершальні зауваження.

У даній роботі розглянуто протонну модель, у межах якої можна вивчати впливи механічної напруги σ_4 та електричних полів E_i з врахуванням спонтанної деформації ε_6 на п'єзоелектричні, діелектричні, пружні та теплові властивості сегнетоелектриків типу KD_2PO_4 . У межах цієї моделі, використовуючи наближення чотиричастинкового кластера за короткосяжними взаємодіями та молекулярного поля за далекосяжними, отримані вирази для коефіцієнтів п'єзоелектричної напруги e_{14} і e_{36} , статичних поперечних діелектричних сприйнятливостей при сталій деформації χ_{11}^E , χ_{22}^E і поздовжньої сприйнятливості

χ_{33}^E . Врахування спонтанної деформації ε_6 привело до появи відмінності між двома поперечними сприйнятливостями сегнетоелектриків типу KD_2PO_4 в сегнетоелектричній фазі. В роботі розраховано пружні сталі при постійному полі c_{44}^E і c_{66}^E та молярну ентропію та теплоємність кристалу KD_2PO_4 . Запропонована модель дала можливість при належному виборі параметрів теорії адекватно кількісно описати експериментальні дані для температурних залежностей діелектричних, п'єзоелектричних та пружних характеристик, які пов'язані з деформацією ε_4 та полем E_1 , сегнетоелектрика KD_2PO_4 . Числові розрахунки проведені для температур, що відповідають параелектричній фазі. Вивченню поведінки характеристик KD_2PO_4 в сегнетоелектричній фазі та дослідженню впливу напруг σ_4 та σ_6 на діелектричні, п'єзоелектричні, пружні та теплові характеристики KD_2PO_4 буде присвячена наступна робота.

Література

1. Стасюк І.В., Билецкий І.Н. Влияние всестороннего и одноосного давления на сегнетоэлектрический фазовый переход в кристаллах типа KH_2PO_4 . // Изв. АН СССР, сер. физ., 1983, т.47, №4, с.705-709.
2. Стасюк І.В., Билецкий І.Н., Стягар О.Н. Индуцированные внешним давлением фазовые переходы в кристаллах KD_2PO_4 . // Укр. физ. журн., 1986, т.31, №4, с.567-571.
3. Стасюк І.В., Билецкий І.Н. Фазовые переходы в однооснодеформированных сегнетоэлектриках типа KD_2PO_4 . // Препринт ИТФ-83-93Р, Киев 1983, с.24.
4. Stasyuk I.V., Zachek I.R., Levitskii R.R., Kukushkin K.V. Influence of the Uniaxial Stress $\sigma_{xx} - \sigma_{yy}$ on Phase Transition and Thermodynamic Properties of the KD_2PO_4 -Type Hydrogen Bonded Ferroelectrics. // Preprint, ICMP-93-11E, Kyiv, 1993, 37p.
5. Stasyuk I.V., Levitskii R.R., Zachek I.R., Krokhmalski T.Ye., Duda A.S. Uniaxial pressure $\sigma_1 - \sigma_1$ influence on phase transition and physical properties of the KD_2PO_4 -type hydrogen bonded ferroelectrics. // Preprint, ICMP-97-11E, Lviv, 1997, 22p.
6. Stasyuk I.V., Levitsky R.R., Zachek I.R., Moyna A.P., Duda A.S. Hydrostatic pressure influence on phase transition and physical properties of KD_2PO_4 -type ferroelectrics. // Cond. Matt. Phys., 1996, №8, p.129-156.
7. Stasyuk I.V., Levitsky R.R., Zachek I.R., Moyna A.P., Duda A.S. Hydrostatic pressure influence on phase transition and physical proper-

- ties of KD_2PO_4 -type ferroelectrics. // Preprint, ICMP-96-12E, Lviv, 1996, 42p.
8. Stasyuk I.V., Levitsky R.R., Zachek I.R., Duda A.S., Moina A.P., Romanyuk M.O., Stadnyk V.J., Chervony R.G., Shcherbina Ye.V. Uniaxial pressure influence on phase transition and physical properties of highly deuterated $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ -type ferroelectrics. // Preprint, ICMP-96-18E, Lviv, 1996, 36p.
 9. Stasyuk I.V., Levitsky R.R., Zachek I.R., Moina A.P., Duda A.S. Influence of shear stress σ_6 on phase transition and physical properties of KD_2PO_4 -type ferroelectrics. I. // Preprint ICMP-99-E, Lviv, 1999, 40p.
 10. Стасюк І.В., Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Моїна А.П., Дуда А.С. Вплив напруги зсуву σ_6 на фазовий перехід і фізичні властивості сегнетоелектриків типу KD_2PO_4 . II // Препринт ICMP-99-26U, Львів, 1999, 36с.
 11. Стасюк І.В., Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Моїна А.П., Дуда А.С. Вплив напруги зсуву σ_6 на фазовий перехід і фізичні властивості сегнетоелектриків типу KD_2PO_4 . // Журн. фіз. дослідж., 2000, т.4, №2, с.190-201.
 12. Stasyuk I.V., Levitsky R.R., Zachek I.R., Moina A.P. The KD_2PO_4 ferroelectrics in external field conjugate to the order parameter: Shear stress σ_6 . // Phys. Rev. B, 2000, v.62, №10, p.6198-6207.
 13. Шувалов Л.А., Желудев И.С., Мнацаканян А.В., Лудупов Ц.Ж., Фиаля 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.
 14. Шувалов Л.А., Мнацаканян А.В. Упругие свойства кристаллов дейтерофосфата калия (KD_2PO_4) в широком диапазоне температур. // Кристаллография, 1966, т.11, №2 с.222-226.
 15. Волкова Е.Н., Подшивалов Ю.С., Рашкович Л.Н., Струков Б.А. Влияние концентрации дейтерия на температуру Кюри некоторых кристаллов группы KDP // Изв. АН СССР, сер. физ., 1975, т.39, №4, с.787-790.
 16. Волкова Е.Н., Израиленко А.Н. Струков Б.А. Некоторые физические свойства твердых растворов ADP-DADP // Кристаллография, 1983, 28, №6, с.1217-1219.
 17. Havlin S., Jitov E., Sompolinsky H. Theoretical and Experimental Studies of the Transverse Dielectric Properties of KH_2PO_4 . // Phys. Rev. B, 1976, v.13, №1, p.4999-5006.
 18. Zwicker B., Elastische Untersuchungen an $NH_2H_2PO_4$ and KH_2PO_4 . // Helv. phys. acta., 1946, v.19, fasc.6-7, p.523-549.

19. Jaeger R.E., Egerton L. J.Am.Ceram Soc., 1962, 45, 209.
20. Lisnii B.M., Levitsky R.R. Theory of physical properties of ferro- and antiferroelectrics of the KH_2PO_4 family related to strains u_4 and u_5 // Ukr. J. Phys. 2004, v.49, No 7, p.701-709.
21. Р.Р. Левицький, А.П. Моїна, Б.М. Лісний. Вплив поздовжнього електричного поля на фазовий перехід і фізичні властивості сегнетоелектриків сім'ї KH_2PO_4 // Препринт ІФКС-00-12U, Львів 2000, с.37.
22. Stasyuk I.V., Levitsky R.R., Korinevsky N.A. Collective vibrations of protons in compounds KH_2PO_4 -type. The cluster approximation. // Phys. Stat. Sol. (b), 1979, v.91, №2, p.541-550.
23. Levitsky R.R., Stasyuk I.V., Korinevsky N.A. Dynamics of ferroactive crystals of orthophosphate type. // Ferroelectrics, 1978, v.21, p.481-483.
24. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Миц Е.В. Термодинамика и продольная релаксация в сегнетоэлектриках типа $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$. // Препринт ИТФ-87-114Р, Киев 1987, с.48.
25. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Миц Е.В. Поперечная релаксация в сегнетоэлектриках типа $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$. // Препринт ИТФ-87-115Р, Киев 1987, с.48.

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

ВПЛИВ НАПРУГ ЗСУВУ σ_4 І σ_5 НА ФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ
СЕГНЕТОЕЛЕКТРИКІВ ТИПУ KD_2PO_4

Роботу отримано 31 березня 2005 р.

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