

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

Повздовжні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні,
динамічні та теплові властивості сегнетоелектриків типу
 KN_2PO_4

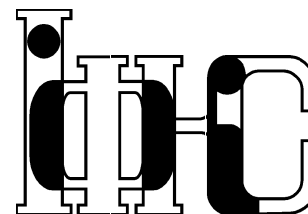
Роботу отримано 1 вересня 2006 р.

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

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-06-08U

Р.Р.Левицький, І.Р.Зачек, А.С.Вдович

ПОВЗДОВЖНІ ДІЕЛЕКТРИЧНІ, П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНІ,
ПРУЖНІ, ДИНАМІЧНІ ТА ТЕПЛОВІ ВЛАСТИВОСТІ
СЕГНЕТОЕЛЕКТРИКІВ ТИПУ KN_2PO_4

ЛЬВІВ

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

Повздожні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні, динамічні та теплові властивості сегнетоелектриків типу KN_2PO_4

Р.Р.Левицький, І.Р.Зачек, А.С.Вдович

Анотація. Розрахунки для кристалів типу KN_2PO_4 проведені в наближенні чотиричастинкового кластера для моделі з протонним впорядкуванням і врахуванням взаємодії зі зсувною деформацією ε_6 . Динаміка спінової підсистеми врахована в межах глауберівського підходу, і пов'язана з ньютонівською динамікою зсувної деформації. Отримані вирази для динамічної діелектричної проникності, модуля пружності, п'єзоелектричних модулів, а також швидкості і коефіцієнта поглинання звуку кристалів. Показано, що вплив п'єзоелектричної взаємодії на спонтанну поляризацію і теплоємність кристалів незначний, але вона призводить до появи п'єзоелектричного резонансу.

Longitudinal dielectric, piezoelectric, elastic, dynamic and thermal properties of KN_2PO_4 type ferroelectrics

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

Abstract. Calculations for KN_2PO_4 type crystals are performed within the fourparticle cluster approximation for the proton ordering model with taking into account a coupling with the shear strain ε_6 . Dynamics of the spin subsystem is considered within the Glauber approach, and it is supplemented with the Newtonian dynamics of the shear strain. Expressions for the dynamic dielectric permittivity, elastic stiffness and piezoelectric moduli, as well as sound velocity and attenuation of the crystals are derived. It is shown that the influence of piezoelectric coupling on spontaneous polarization and specific heat of the crystals is minor, but it leads to the piezoelectric resonances.

Подається в Physical Review, Condensed Matter Physics
Submitted to Physical Review, Condensed Matter Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 2006
Institute for Condensed Matter Physics 2006

1. Вступ

Сегнетоелектрики із загальною формулою $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$, де $\text{M} = \text{K}, \text{Rb}$, $\text{X} = \text{P}, \text{As}$ у параелектричній фазі кристалізуються в класі $\bar{4} \cdot m$ тетрагональної сингонії, просторова група $\text{I}\bar{4}2d$ і тому вони володіють п'єзоелектричними властивостями.

Статистичне вивчення фазового переходу та п'єзоелектричної взаємодії в сегнетоелектриках типу KN_2PO_4 започатковано в роботі [1], де модифіковано теорію Слетера [2] шляхом розщеплення найнижчого сегнетоелектричного рівня, яке зумовлене деформацією ε_6 , та досягнуто певного узгодження теорії з експериментом. У роботі [3] досліджувався механізм виникнення спонтанної деформації ε_6 у сегнетоелектриках типу KN_2PO_4 та вплив на неї взаємодії протонів з акустичними коливаннями ґратки.

Фундаментальними є результати для деформованих кристалів типу KN_2PO_4 , які наведені в роботах [4, 5], де вперше модифіковано гамільтоніан протонної моделі на випадок врахування деформації ε_6 , який містить деформаційне молекулярне поле і враховує розщеплення енергій “бічних” конфігурацій. У роботах [6, 7], враховуючи усі можливі розщеплення конфігураційних енергій, а саме “верхніх/нижніх”, “бічних” та однократно іонізованих, які зумовлені деформацією ε_6 , досліджено фазовий перехід та п'єзоелектричний ефект, вплив напруги σ_6 [6] та поля E_3 [7] на фізичні характеристики кристалів $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$ без тунелювання. Отримано задовільне узгодження теоретичних результатів і даних експериментів.

Дослідження сегнетоелектричного переходу та п'єзоефекту з врахуванням тунелювання для сегнетоелектриків типу KN_2PO_4 та антисегнетоелектриків типу $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ проведено в роботі [8]. Показано, що у параелектричній фазі теоретичні результати для кристалів KN_2PO_4 і $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ є спільними. Результати числового розрахунку фізичних характеристик у рамках запропонованої теорії задовільно описують відповідні експериментальні дані.

Наша робота присвячена вивченню в рамках модифікованої протонної моделі діелектричних, теплових, пружних і п'єзоелектричних характеристик кристалів типу $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ без врахування тунелювання в пара- і сегнетоелектричних фазах. Крім того, досліджуються релаксаційні явища в механічно затиснутих і механічно вільних кристалах $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$, розраховано для них поглинання і швидкість ультразвуку в цих кристалах.

2. Гамільтоніан кристалу

Розглянемо систему дейтронів, які рухаються на О-Д...О зв'язках у дейтерованих сегнетоелектриках типу MD_2XO_4 ($\text{M} = \text{K}, \text{Rb}; \text{X} = \text{P}, \text{As}$). Примітивна комірка Браве цих кристалів складається з двох тетраедрів PO_4 разом із 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).

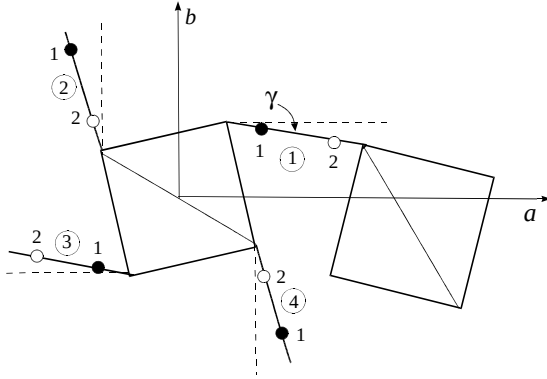


Рис. 1. Примітивна комірка Браве ДСОФ. Показано одну з числа можливих сегнетоелектричних протонних конфігурацій.

Гамільтоніан дейтронної системи з врахуванням короткосяжних і далекосяжних взаємодій при прикладанні до кристалу механічної напруги $\sigma_6 = \sigma_{xy}$ та електричного поля E_3 , яке напрямлене вздовж кристалографічної осі c , і які незалежно індукують внески в поляризацію P_3 та деформацію ε_6 кристала, складається із "затравочної" та псевдоспінової частин:

$$\hat{H} = N\hat{H}^0 + \hat{H}_s, \quad (2.1)$$

де N – загальна кількість примітивних комірок. "Затравочна" енергія примітивної комірки відповідає гратці важких іонів і явно не залежить від конфігурації дейтронної підсистеми. Вона виражається через деформацію ε_6 та електричне поле E_3 і включає в себе пружну, п'єзoeлектричну і діелектричну складові:

$$H^{(0)} = \bar{v} \left(\frac{1}{2} c_{66}^{E0} \varepsilon_6^2 - e_{36}^0 E_3 \varepsilon_6 - \frac{1}{2} \chi_{33}^{E0} E_3^2 \right), \quad (2.2)$$

де $\bar{v} = \frac{v}{k_B}$, v – об'єм примітивної комірки; c_{66}^{E0} , e_{36}^0 , χ_{33}^{E0} – "затравочні" пружна стала, коефіцієнт п'єзoeлектричної напруги, діелектрична сприйнятливості. Ці величини визначають температурну поведінку відповідних характеристик далеко від температури фазового переходу T_c .

Псевдоспінова частина гамільтоніану

$$\begin{aligned} \hat{H}_s &= \frac{1}{2} \sum_{qf, q'f'} J_{ff'}(qq') \frac{\langle \sigma_{qf} \rangle}{2} \frac{\langle \sigma_{q'f'} \rangle}{2} - \\ &- \sum_{qf} \left[\left(\sum_{q'f'} J_{ff'} \frac{\langle \sigma_{q'f'} \rangle}{2} \right) \frac{\sigma_{qf}}{2} - 2\psi_6 \varepsilon_6 \frac{\sigma_{qf}}{2} \right] + \\ &+ \hat{H}_{\text{кв.}}(6) - \sum_{qf} \mu_{f3} E_3 \frac{\sigma_{qf}}{2} = \\ &= 2N\nu_c \left(\eta^{(1)}(6) \right)^2 - \sum_{qf} [2\nu_c \eta^{(1)}(6) - 2\psi_6 \varepsilon_6] \frac{\sigma_{qf}}{2} + \\ &+ \hat{H}_{\text{кв.}}(6) - \sum_{qf} \mu_{f3} E_3 \frac{\sigma_{qf}}{2}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Перші два доданки у (2.3) – гамільтоніан середнього поля за далекосяжними диполь-дипольними взаємодіями, яка включає і непряму взаємодію дейтронів через коливання ґратки [38, 68], а також лінійного за деформацією ε_6 середнього поля, яке індуковане п'єзoeлектричною взаємодією [84]. У (2.3)

$$4\nu_c = J_{11}^{(0)} + 2J_{12}(0) + J_{13}(0)$$

– власне значення матриці $J_{ff'} = \sum_{\mathbf{R}_q - \mathbf{R}_{q'}} J_{ff'}(qq')$, яка є фур'є-образом матриці далекосяжної взаємодії між дейтронами;

$$\eta^{(1)}(6) = \langle \sigma_{q1} \rangle = \langle \sigma_{q2} \rangle = \langle \sigma_{q3} \rangle = \langle \sigma_{q4} \rangle$$

– параметр дейтронного впорядкування; σ_{qf} – оператор z -компоненти квазіспіна дейтрона, який знаходиться в q -ій комірці на f -ому зв'язку ($\sigma_{qf} = \pm 1$).

У (2.3) $\hat{H}_{\text{кв.}}(6)$ – гамільтоніан короткосяжних взаємодій між дейтронами кристалу, який лінійний за деформацією ε_6 . Гамільтоніан $\hat{H}_{\text{кв.}}(6)$ отримано, враховуючи розщеплення енергії конфігурацій дейтронів поблизу кисневого тетраедра PO_4 ε_s , ε_0 , ε_a і ε_1 внаслідок наявності деформації ε_6 (табл.1).

Табл. 1.

i		E_{i6}	i		E_{i6}
1		$\varepsilon_s - \delta_{s6}\varepsilon_6$	9		$\varepsilon_1 - \delta_{16}\varepsilon_6$
2		$\varepsilon_s + \delta_{s6}\varepsilon_6$	10		
3		ε_0	11		
4		ε_0	12		
5		$\varepsilon_a + \delta_{a6}\varepsilon_6$	13		$\varepsilon_1 + \delta_{16}\varepsilon_6$
6		$\varepsilon_a + \delta_{a6}\varepsilon_6$	14		
7		$\varepsilon_a - \delta_{a6}\varepsilon_6$	15		
8		$\varepsilon_a - \delta_{a6}\varepsilon_6$	16		

При цьому кристал втрачає симетрію дзеркального повороту на кут $\pi/4$ навколо осі c . Цей поворот змінює знак п'єзоелектричних зв'язаних деформації ε_6 і поляризації P_3 . Співставляючи кожній конфігурації оператор конфігурації $\hat{N}_i^A(\mathbf{q})$, отримуємо гамільтоніан конфігураційних взаємодій у наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{кв.}}(6) = & \sum_q \left\{ \left(\frac{\delta_{s6}}{8} \varepsilon_6 + \frac{\delta_{16}}{4} \varepsilon_6 \right) (\sigma_{q1} + \sigma_{q2} + \sigma_{q3} + \sigma_{q4}) + \right. \\ & + \left(\frac{\delta_{s6}}{8} \varepsilon_6 - \frac{\delta_{16}}{4} \varepsilon_6 \right) (\sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q3} + \sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q4} + \sigma_{q1} \sigma_{q3} \sigma_{q4} + \sigma_{q2} \sigma_{q3} \sigma_{q4}) + \\ & + \frac{1}{4} (V + \delta_{a6}) (\sigma_{q1} \sigma_{q2} + \sigma_{q3} \sigma_{q4}) + \frac{1}{4} (V - \delta_{a6}) (\sigma_{q2} \sigma_{q3} + \sigma_{q4} \sigma_{q1}) + \\ & \left. + \frac{1}{4} U (\sigma_{q1} \sigma_{q3} + \sigma_{q2} \sigma_{q4}) + \frac{1}{16} \Phi \sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q3} \sigma_{q4} - \frac{1}{2} \Delta^c (\sigma_{q1} + \sigma_{q2} + \sigma_{q3} + \sigma_{q4}), \right\} \end{aligned} \quad (2.4)$$

де

$$V = -\frac{1}{2} w_1, \quad U = \frac{1}{2} w_1 - \varepsilon, \quad \Phi = 4\varepsilon - 8w + 2w_1,$$

а

$$\varepsilon = \varepsilon_a - \varepsilon_s, \quad w = \varepsilon_1 - \varepsilon_s, \quad w_1 = \varepsilon_0 - \varepsilon_s,$$

Δ^c – ефективне поле, яке створене сусідніми поза межами кластера дейтронними зв'язками.

Останній доданок у (2.3) ефективно описує взаємодію дейтронів із зовнішнім електронним полем E_3 . Тут μ_{f3} – ефективний дипольний момент f -го зв'язку, причому

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

В результаті вихідний гамільтоніан (2.1)

$$\hat{H} = N[H^0 + 2\nu_c(\eta^{(1)}(6))^2] + \sum_q \hat{H}_{q6}^{(4)},$$

де

$$\begin{aligned} \hat{H}_{q6}^{(4)} = & - \sum_{f=1}^4 \frac{z_6}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2} + \frac{\varepsilon_6}{4} (-\delta_{s6} + 2\delta_{16}) \sum_{f=1}^4 \frac{\sigma_{qf}}{2} - \\ & - \varepsilon_6 (\delta_{s6} + 2\delta_{16}) \left(\frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \\ & + (V + \delta_{a6} \varepsilon_6) \left(\frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + (V - \delta_{a6} \varepsilon_6) \left(\frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q4}}{2} \frac{\sigma_{q1}}{2} \right) + \\ & + U \left(\frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \Phi \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

де

$$z_6 = \beta(-\Delta^c + 2\nu_c\eta^{(1)}(6) - 2\psi_6\varepsilon_6 + \mu_3E_3), \quad (\beta = \frac{1}{k_B T}).$$

Ефективне поле Δ^c можна визначити, якщо використати умову, що середні значення $\langle\sigma_{qf}\rangle$, які розраховані в наближенні чотиричастинкового кластера й одночастинкового, тобто з гамільтоніаном (2.5) і з

$$\hat{H}_{qf}^{(1)} = -\frac{\bar{Z}_{f6}}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2}, \quad (2.6)$$

відповідно, мають співпадати,

$$\bar{z}_{f6} = \beta[-2\Delta^c + 2\nu_c\eta^{(1)}(6) - 2\psi_6\varepsilon_6 + \mu_3E_3].$$

Отже,

$$\langle\sigma_{qf}\rangle = \frac{\text{Sp} \left\{ \sigma_{qf} e^{-\beta \hat{H}_{qf}^{(4)}} \right\}}{\text{Sp} e^{-\beta \hat{H}_{qf}^{(4)}}} = \frac{\text{Sp} \left\{ \sigma_{qf} e^{-\beta \hat{H}_{qf}^{(1)}} \right\}}{\text{Sp} e^{-\beta \hat{H}_{qf}^{(1)}}}. \quad (2.7)$$

В результаті

$$\eta^{(1)}(6) = \frac{m_6}{D_6},$$

де

$$\begin{aligned} m_6 &= \sinh(2z_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) + 2b \sinh(z_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6), \\ D_6 &= \cosh(2z_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) + 4b \cosh(z_6 - \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) + 2a \cosh \beta\delta_{a6}\varepsilon_6 + d, \\ z_6 &= \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta^{(1)}(6)}{1 - \eta^{(1)}(6)} + \beta\nu_c\eta^{(1)}(6) - \beta\psi_6\varepsilon_6 + \frac{\beta\mu_3}{2}E_3, \\ a &= e^{-\beta\varepsilon}, \quad b = e^{-\beta w}, \quad d = e^{-\beta w_1}. \end{aligned}$$

3. Повздовжні діелектричні, п'єзоелектричні і пружні характеристики кристалів MD₂XO₄

Використаємо електричний термодинамічний потенціал у розрахунку на один квазіспін, який у наближенні чотиричастинкового кластера отриманий у наступному вигляді:

$$\begin{aligned} g_{2E}(6) &= \frac{\bar{v}}{2} c_{66}^{E0} \varepsilon_6^2 - \bar{v} e_{36}^0 \varepsilon_6 E_3 - \frac{\bar{v}}{2} \chi_{33}^0 E_3^2 + 2T \ln 2 + \\ &+ 2\bar{\nu}_c [\eta^{(1)z}(6)]^2 - 2T \ln [1 - (\eta^{(1)z}(6))^2] - 2T \ln D_6^z - \bar{v} \sigma_6 \varepsilon_6. \end{aligned} \quad (3.1)$$

З умов термодинамічної рівноваги

$$\frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g_{2E}(6)}{\partial \varepsilon_6} \right)_{E_3, \sigma_6} = 0, \quad \frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g_{2E}(6)}{\partial E_3} \right)_{\sigma_6} = -P_3$$

ми отримуємо

$$\sigma_6 = c_{66}^{E0} \varepsilon_6 - e_{36}^0 E_3 + \frac{4\psi_6}{v} \frac{m^z(6)}{D_6^z} + \frac{2\delta_{a6}}{\bar{v} D_6^z} M_{a6} - \frac{2\delta_{s6}}{v D_6^z} M_{s6} + \frac{2\delta_{16}}{v D_6^z} M_{16}, \quad (3.2)$$

$$P_3 = e_{36}^0 \varepsilon_6 + \chi_{33}^0 E_3 + 2 \frac{\mu}{v} \frac{m^z(6)}{D_6^z}, \quad (3.3)$$

де

$$M_{a6} = aa_6 - \frac{a}{a_6}, \quad M_{s6} = \sinh(2z_6^z + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6), \quad M_{16} = 4b \sinh(z_6^z - \beta\delta_{16}\varepsilon_6).$$

З (3.3) електричне поле

$$E_3 = -h_{36}^0 \varepsilon_6 + k_{33}^0 \left(P_3 - 2 \frac{\mu}{v} \frac{m^z(6)}{D_6^z} \right), \quad (3.4)$$

де $h_{36}^0 = e_{36}^0 / \chi_{33}^0$, $k_{33}^0 = 1 / \chi_{33}^0$.

Підставивши вираз (3.4) у (3.2), отримаємо

$$\begin{aligned} \sigma_6 &= c_{66}^{P0} \varepsilon_6 - h_{36}^0 \left(P_3 - 2 \frac{\mu}{v} \frac{m^z(6)}{D_6^z} \right) + \frac{4\psi_6}{v} \frac{m^z(6)}{D_6^z} + \\ &+ \frac{2\delta_{a6}}{v D_6^z} M_{a6} - \frac{2\delta_{s6}}{v D_6^z} M_{s6} + \frac{2\delta_{16}}{v D_6^z} M_{16}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

де $c_{66}^{P0} = c_{66}^{E0} + e_{36}^0 h_{36}^0$.

Вирази (3.4) і (3.5) можна отримати і з умов

$$\frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g(6)}{\partial \varepsilon_6} \right)_{P_3} = \sigma_6, \quad \frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g(6)}{\partial P_3} \right)_{\varepsilon_6} = E_3,$$

де $g(6)$ – пружний термодинамічний потенціал у розрахунку на один квазіспін, причому

$$g(6) = f(6) - \bar{v} \sigma_6 \varepsilon_6, \quad (3.6)$$

а вільна енергія

$$f(6) = g_{2E}(6) + \bar{v} P_3 E_3 + \bar{v} \sigma_6 \varepsilon_6. \quad (3.7)$$

Підставивши вирази (3.1) і (3.4) у (3.7), отримаємо

$$f(6) = \frac{\bar{v}}{2} c_{66}^{P0} \varepsilon_6^2 - \bar{v} h_{36}^0 \varepsilon_6 P_3 + \frac{\bar{v}}{2} k_{33}^0 P_3^2 - \frac{\bar{v}}{2} k_{33}^0 \left(2 \frac{\mu}{\bar{v}} \eta^{(1)z}(6) \right)^2 + \quad (3.8)$$

$$+ 2T \ln 2 + 2\bar{\nu}_c [\eta^{(1)z}(6)]^2 - 2T \ln[1 - (\eta^{(1)z}(6))^2] - 2T \ln D_6^z.$$

Дослідимо тепер вплив механічної напруги σ_6 на п'єзоелектричні, діелектричні і пружні властивості ДСОФ.

Використовуючи вираз для унарної функції розподілу, отримаємо

$$\left(\frac{\partial \eta^{(1)}(6)}{\partial \varepsilon_6} \right)_{E_3} = \frac{\beta \theta_6}{D_6 - 2\varphi_6^\eta \varkappa_6}, \quad (3.9)$$

де $\theta_6 = -2\varkappa_6^c \psi_6 + f_6$,

$$\begin{aligned} \varkappa_6 &= \cosh(2z_6 + \beta \delta_{s6} \varepsilon_6) + b \cosh(z_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) - \eta^{(1)}(6) m(6), \\ f_6 &= \delta_{s6} \cosh(2z_6 + \beta \delta_{s6} \varepsilon_6) - 2b \delta_{16} \cosh(z_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) + \\ &+ \eta^{(1)z}(6) [-\delta_{s6} M_{s6} + \delta_{a6} M_{a6} + \delta_{16} M_{16}], \\ \varphi_6^\eta &= \frac{1}{1 - (\eta^{(1)}(6))^2} + \beta \nu_c. \end{aligned}$$

Звідси ізотермічний коефіцієнт п'єзоелектрично' напруги e_{36}^T має наступний вигляд:

$$e_{36}^T = - \left(\frac{\partial \sigma_6}{\partial E_3} \right)_{\varepsilon_6} = \left(\frac{\partial P_3}{\partial \varepsilon_6} \right)_{E_3} = e_{36}^0 + \frac{2\mu_3}{v} \frac{\beta \theta_6}{D_6 - 2\varphi_6^\eta \varkappa_6}. \quad (3.10)$$

У параелектричній фазі кристалу, коли $\eta^{(1)}(6) = 0$, ізотермічний коефіцієнт п'єзоелектричної напруги недеформованого кристалу ($\sigma_6 = 0$)

$$e_{36}^{T+} = e_{36}^0 + \frac{\mu_3}{v} \frac{2\beta[-2(1+b)\psi_6 + \delta_{s6} - 2b\delta_{16}]}{-1 + 2b + 2a + d - 2\beta\nu_c(1+b)}. \quad (3.11)$$

Диференціюючи вираз для поляризації кристалу (3.3) по полю при постійній деформації, отримуємо ізотермічну діелектричну сприйнятливості при $\varepsilon_6 = \text{const}$:

$$\chi_{33}^{T\varepsilon} = \left(\frac{\partial P_3}{\partial E_3} \right)_{\varepsilon_6} = \chi_{33}^0 + \bar{v} \frac{\mu^2}{v^2} \frac{1}{T} \frac{2\varkappa_6}{D_6 - 2\varkappa_6^a \varphi_6^{eta}}. \quad (3.12)$$

Оскільки

$$(D_6 - 2\varkappa_6 \varphi_6^\eta) \left(\frac{\partial \eta^{(1)}(6)}{\partial \varepsilon_6} \right)_{P_3} = \beta \theta_6 + \beta \mu_3 2\varkappa_6 \left(\frac{\partial E_3}{\partial \varepsilon_6} \right)_{P_3},$$

то ізотермічна стала п'єзоелектричної напруги

$$h_{36}^T = - \left(\frac{\partial E_3}{\partial \varepsilon_6} \right)_{P_3} = - \left(\frac{\partial \sigma_6}{\partial P_3} \right)_{\varepsilon_6} = \frac{e_{36}^T}{\chi_{33}^{T\varepsilon}}. \quad (3.13)$$

Ізотермічний коефіцієнт п'єзоелектричної деформації

$$d_{36}^T = \left(\frac{\partial P_3}{\partial \sigma_6} \right)_{E_3} = e_{36}^0 s_{66}^E + 2 \frac{\mu_3}{v} \left(\frac{\partial \eta^{(1)}(6)}{\partial \sigma_6} \right)_{E_3},$$

де $s_{66}^{TE} = \left(\frac{\partial \varepsilon_6}{\partial \sigma_6} \right)_{E_3}$ – ізотермічна податливість при постійному полю. Використовуючи вираз для унарної функції розподілу (2.10), отримуємо

$$(D_6 - 2\varkappa_6^c \varphi_6^\eta) \left(\frac{\partial \eta^{(1)}(6)}{\partial \sigma_6} \right)_{E_3} = \beta \theta_6 \left(\frac{\partial \varepsilon_6}{\partial \sigma_6} \right)_{E_3}.$$

В результаті

$$d_{36}^T = e_{36}^T s_{66}^{TE}. \quad (3.14)$$

Розрахуємо внесок у пружну сталу, зумовлену впорядкуванням дейтронів. Із (3.2), використовуючи (3.9), отримуємо вираз для ізотермічної пружної сталої при постійному полю:

$$\begin{aligned} c_{66}^{TE} &= c_{66}^{E0} + \frac{4\psi_6}{v} \cdot \frac{\beta(-\psi_6 \varkappa_6^c + f_6)}{D_6 - 2\varphi_6^\eta \varkappa_6^c} - \frac{4\beta \varphi_6^\eta f_6^2}{v D_6 (D_6 - 2\varphi_6^\eta \varkappa_6^c)} - \\ &- \frac{2\beta}{v D_6} [\delta_{s6}^2 \cosh(2z_6 + \beta \delta_{s6} \varepsilon_6) + \delta_{a6}^2 (aa_6 + \frac{a}{a_6}) + \\ &+ \delta_{16}^2 4b \cosh(z_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6)] + \frac{2\beta}{v D_6^2} (\delta_{s6} M_{s6} + \delta_{a6} M_{a6} + \delta_{16} M_{16})^2 \end{aligned} \quad (3.15)$$

і ізотермічну пружну сталу при постійній поляризації

$$c_{66}^{TP} = c_{66}^{TE} + e_{36}^T h_{36}^T. \quad (3.16)$$

У параелектричній фазі, коли $\eta^{(1)}(6) = 0$, перенормована пружна стала для недеформованого кристалу ($\sigma_a = 0$) має наступний вигляд:

$$\begin{aligned} c_{66}^{TE} &= c_{66}^{E0} + \\ &+ \frac{4\psi_6}{v} \frac{\beta[-\psi_6(1+b) + \delta_{s6} - \delta_{16} 2b]}{-1 + 2a + 2b + d - 2\beta\nu_c(1+b)} - \\ &- \frac{4\beta(1 + \beta\nu_c)(\delta_{s6} - \delta_{16} 2b)^2}{(1 + 4b + 2a + d)[-1 + 2a + 2b + d - 2\beta\nu_c(1+b)]} - \\ &- \frac{2\beta}{v} \frac{\delta_{s6}^2 + 2a\delta_{a6}^2 + 4b\delta_{16}^2}{1 + 4b + 2a + d}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

В результаті співвідношення (3.2)–(3.5) набувають вигляду

$$\begin{aligned} \sigma_6 &= c_{66}^{TE} \varepsilon_6 - e_{36}^T E_3, & \sigma_6 &= c_{66}^{TP} \varepsilon_6 - h_{36}^T P_3, \\ P_3 &= e_{36}^T \varepsilon_6 + \chi_{33}^{T\varepsilon} E_3, & E_3 &= -h_{36}^T \varepsilon_6 + k_{33}^{T\varepsilon} P_3, \end{aligned} \quad (3.18)$$

де $k_{33}^{T\varepsilon} = 1/\chi_{33}^{T\varepsilon}$ – обернена діелектрична сприйнятливість. Ці співвідношення можна отримати на основі феноменологічного підходу, однак тут розкрито мікроскопічний зміст величин c_{66}^{TE} , e_{36}^T , $\chi_{33}^{T\varepsilon}$, h_{36}^T .

Із системи рівнянь (3.18) при $E_3 = \text{const}$

$$\begin{aligned} c_{66}^{TP} \left(\frac{\partial \varepsilon_6}{\partial \sigma_6} \right)_{E_3} - h_{36}^T \left(\frac{\partial P_3}{\partial \sigma_6} \right)_{E_3} &= 1, \\ -h_{36}^T \left(\frac{\partial \varepsilon_6}{\partial \sigma_6} \right)_{E_3} + k_{33}^{T\varepsilon} \left(\frac{\partial P_3}{\partial \sigma_6} \right)_{E_3} &= 0 \end{aligned} \quad (3.19)$$

знаходимо вирази для ізотермічного коефіцієнта п'єзоелектричної деформації

$$d_{36}^T = \left(\frac{\partial P_3}{\partial \sigma_6} \right)_{E_3} = \frac{h_{36}^T}{c_{66}^{TP} k_{33}^{T\varepsilon} - h_{36}^{T2}} = \frac{e_{36}^T}{c_{66}^{TP} - e_{36}^T h_{36}^T}, \quad (3.20)$$

і ізотермічної податливості при постійному полю:

$$s_{66}^{TE} = \left(\frac{\partial \varepsilon_6}{\partial \sigma_6} \right)_{E_3} = \frac{k_{33}^{T\varepsilon}}{c_{66}^{TP} k_{33}^{T\varepsilon} - h_{36}^{T2}} = \frac{1}{c_{66}^{TP} - e_{36}^T h_{36}^T} = \frac{1}{c_{66}^{TE}}. \quad (3.21)$$

Із (3.18) при $P_3 = \text{const}$ отримуємо

$$\begin{aligned} c_{66}^{TE} \left(\frac{\partial \varepsilon_6}{\partial \sigma_6} \right)_{P_3} - e_{36}^T \left(\frac{\partial E_3}{\partial \sigma_6} \right)_{P_3} &= 1, \\ e_{36}^T \left(\frac{\partial \varepsilon_6}{\partial \sigma_6} \right)_{P_3} + \chi_{33}^{T\varepsilon} \left(\frac{\partial E_3}{\partial \sigma_6} \right)_{P_3} &= 0; \end{aligned}$$

Звідси ізотермічна стала п'єзоелектричної деформації

$$g_{36}^T = - \left(\frac{\partial E_3}{\partial \sigma_6} \right)_{P_3} = \frac{e_{36}^T}{\left(c_{66}^{TE} + \frac{e_{36}^{T2}}{\chi_{33}^{T\varepsilon}} \right) \chi_{33}^{T\varepsilon}} = \frac{h_{36}^T}{c_{66}^{TE} + e_{36}^T h_{36}^T} = \frac{h_{36}^T}{c_{66}^{TP}}, \quad (3.22)$$

і ізотермічна податливість при постійній поляризації

$$s_{66}^{TP} = \left(\frac{\partial \varepsilon_6}{\partial \sigma_6} \right)_{P_3} = \frac{1}{c_{66}^{TE} + \frac{e_{36}^{T2}}{\chi_{33}^{T\varepsilon}}} = \frac{1}{c_{66}^{TP}}. \quad (3.23)$$

Взявши від системи рівнянь (3.18) похідну по полю E_3 при постійній напрузі, отримаємо

$$c_{66}^{TE} \left(\frac{\partial \varepsilon_6}{\partial E_3} \right)_{\sigma_6} - e_{36}^T = 0, \quad -e_{36}^T \left(\frac{\partial \varepsilon_6}{\partial E_3} \right)_{\sigma_6} + \left(\frac{\partial P_3}{\partial E_3} \right)_{\sigma_6} = \chi_{33}^{T\varepsilon}. \quad (3.24)$$

Оскільки

$$d_{36}^T = \left(\frac{\partial \varepsilon_6}{\partial E_3} \right)_{\sigma_6},$$

то ізотермічний діелектрична сприйнятливість при $\sigma_6 = \text{const}$

$$\chi_{33}^{T\sigma} = \left(\frac{\partial P_3}{\partial E_3} \right)_{\sigma_6} = \chi_{33}^{T\varepsilon} + e_{36}^T d_{36}^T. \quad (3.25)$$

Таким чином, ми отримали мікроскопічні вирази для c_{66}^{TE} , e_{36}^T і $\chi_{33}^{T\varepsilon}$, а всі інші характеристики виражаються через них.

4. Теплові характеристики кристалів типу MD₂XO₄

Молярна ентропія кристалів типу MD₂XO₄, що обумовлена дейтронною підсистемою має такий вигляд:

$$\begin{aligned} S_6 = -R \left(\frac{\partial f(6)}{\partial T} \right)_{P_3, \varepsilon_6} &= R \left\{ 2 \ln 2 + 2 \ln [1 - (\eta^{(1)}(6))^2] + 2 \ln D_6 + \right. \\ &\quad \left. + 4T \varphi_6^T \eta^{(1)}(6) + \frac{2M_6}{D_6} \right\}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

де R – універсальна газова стала,

$$\varphi_6^T = -\frac{1}{T^2} (\nu_c \eta^{(1)}(6) - \psi_6 \varepsilon_6), \quad (4.2)$$

$$M_6 = 4b \frac{w}{T} \cosh z_6 + d \frac{w_1}{T} + \left(ac_6 + \frac{a}{c_6} \right) \frac{\varepsilon}{T} + \left(ac_6 - \frac{a}{c_6} \right) \frac{\delta_6 \varepsilon_6}{T}.$$

Молярну теплоємність MD₂XO₄, обумовлену дейтронною підсистемою при постійній напрузі обчислимо безпосередньо диференціюючи ентропію (4.1):

$$\Delta C_6^\sigma = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_\sigma = \Delta C_6^\varepsilon + q_6^P \alpha_6, \quad (4.3)$$

де ΔC_6^ε – молярна теплоємність при постійній деформації

$$\Delta C_6^\varepsilon = q_6^{P,\varepsilon} + q_6^\varepsilon p_6^\sigma. \quad (4.4)$$

Використовуючи співвідношення (4.1), отримуємо

$$\begin{aligned} q_6^{P,\varepsilon} &= \left(\frac{\partial S_6}{\partial T} \right)_{P_3, \varepsilon_6} = \\ &= \frac{2R}{D_6} \left\{ 2T\varphi_6^T [2\kappa_6 T \varphi_6^T + 2(q_6 - \eta^{(1)}(6)M_6)] + N_6 - \frac{M_6^2}{D_6} \right\}, \\ q_6^\varepsilon &= \left(\frac{\partial S_6}{\partial P_3} \right)_{\varepsilon_6, T} = \frac{v}{\mu_3} \frac{2RT}{D_6} \varphi_6^\eta \{ 2\kappa_6 T \varphi_6^T + [q_6 - \eta^{(1)}(6)M_6] \} \end{aligned} \quad (4.5)$$

– теплота поляризації при заданому ε_6 ,

$$\begin{aligned} q_6^P &= \left(\frac{\partial S_6}{\partial \varepsilon_6} \right)_{P_3, T} = \frac{2R}{D_6} \left\{ 2T\varphi_6^T (-2\kappa_6 \psi_6 + r_6) - 2[q_6 - \eta^{(1)}(6)M_6] \psi_6 \right. \\ &\quad \left. - \lambda_6 + \frac{M_6}{D_6} (-\delta_{s6} M_{s6} + \delta_{a6} M_{a6} + \delta_{16} M_{16}) \right\}, \end{aligned}$$

теплота деформації при заданому P_3 ,

$$\begin{aligned} N_6 &= \frac{1}{T^2} \left[(\varepsilon + \delta_{a6} \varepsilon_6)^2 a a_6 + (\varepsilon - \delta_{a6} \varepsilon_6)^2 \frac{a}{a_6} + 4bw^2 \cosh(z_6^z - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) + \right. \\ &\quad \left. + w_1^2 d - (\delta_{s6} \varepsilon_6)^2 \cosh(2z_6 + \beta \delta_{as} \varepsilon_6) + \right. \\ &\quad \left. + (\delta_{16} \varepsilon_6)^2 4b \cosh(z_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) + (\delta_{16} \varepsilon_6 w) 8b \cosh(z_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) \right], \\ q_6 &= \frac{1}{T} [-\delta_{s6} \varepsilon_6 \cosh(2z_6 + \beta \delta_{as} \varepsilon_6) + \delta_{16} \varepsilon_6 2b \cosh(z_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) + \\ &\quad + 2bw \cosh(z_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6)], \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} \lambda_6 &= \frac{1}{T} [-\delta_{s6}^2 \varepsilon_6 \sinh(2z_6 + \beta \delta_{as} \varepsilon_6) + \delta_{16}^2 \varepsilon_6 4b \cosh(z_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) + \\ &\quad + \delta_{a6} \left(a a_6 (\varepsilon + \delta_{a6} \varepsilon_6) - \frac{a}{a_6} (\varepsilon - \delta_{a6} \varepsilon_6) \right) + \delta_{16} w \varepsilon_6 4b \sinh(z_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6)]. \end{aligned}$$

У (4.3) і (4.4) $p_6^\sigma = (\partial P_3 / \partial T)_{\sigma, E_3}$ – піроелектричний коефіцієнт, а $\alpha_6 = (\partial \varepsilon_6 / \partial T)_\sigma$ – коефіцієнт теплового розширення.

Зі співвідношень (3.18) отримуємо

$$p_6^\sigma = p_6^\varepsilon + e_{36} \alpha_6, \quad (4.7)$$

де

$$p_6^\varepsilon = \frac{\mu_3}{v} \frac{2}{T} \frac{2\kappa_6 T \varphi_6^T + [q_6 - \eta^{(1)}(6)M_6]}{D_6 - 2\kappa_6 \varphi_6^\eta}, \quad (4.8)$$

а коефіцієнт теплового розширення

$$\alpha_6 = \frac{-p_6 + h_{36} p_6^\varepsilon}{c_{66}^E}, \quad (4.9)$$

де $p_6 = \left(\frac{\partial \sigma_6}{\partial T} \right)_{P_3, \varepsilon_6} = q_6^P$.

5. Системи рівнянь для залежних від часу функцій розподілу дейтронів

Динамічні властивості MD₂XO₄ при наявності напруги σ_6 будемо досліджувати на основі динамічної моделі дейтерованих сегнетоактивних ортофосфатів (ДСОФ), яка ґрунтується на ідеях стохастичної моделі Глаубера [9]. На основі методики, яка розвинута в роботах [10–12], отримуємо наступну систему рівнянь для залежних від часу функцій розподілу дейтронів

$$-\alpha \frac{d}{dt} \langle \prod_f \sigma_{qf} \rangle = \sum_{f'} \left\{ \langle \prod_f \sigma_{qf} \left[1 - \sigma_{qf'} \tanh \frac{1}{2} \beta \varepsilon_{qf'}^z(t) \right] \rangle \right\}, \quad (5.1)$$

де $\varepsilon_{qf'}^z(t)$ – локальне поле, що діє на f' -ий дейтрон у q -ій комірці.

Здійснимо тотожне перетворення виразу $\tanh \frac{1}{2} \beta \varepsilon_{qf'}^z(t)$, використовуючи гамільтоніан (2.1). Отримуємо

$$\tanh \frac{\beta \varepsilon_{qf}^z}{2} = \tanh \left(\frac{\beta \varepsilon_{qf}}{2} + \frac{z_6^z}{2} \right), \quad (5.2)$$

де

$$\begin{aligned} \frac{\beta \varepsilon_{q1}}{2} &= -\frac{\beta}{4} (V + \delta_{a6} \varepsilon_6) \sigma_{q2} - \frac{\beta}{4} (V - \delta_{a6} \varepsilon_6) \sigma_{q4} - \frac{\beta}{4} U \sigma_{q3} - \frac{\beta}{16} \Phi \sigma_{q2} \sigma_{q3} \sigma_{q4} - \\ &\quad - \frac{\beta}{4} \left(-\frac{\delta_{s6} \varepsilon_6}{2} - \delta_{16} \varepsilon_6 \right) (\sigma_{q2} \sigma_{q3} + \sigma_{q3} \sigma_{q4} + \sigma_{q2} \sigma_{q4}) - \frac{\beta}{4} \left(-\frac{\delta_{s6} \varepsilon_6}{2} + \delta_{16} \varepsilon_6 \right), \\ \frac{\beta \varepsilon_{q2}}{2} &= -\frac{\beta}{4} (V + \delta_{a6} \varepsilon_6) \sigma_{q1} - \frac{\beta}{4} (V - \delta_{a6} \varepsilon_6) \sigma_{q3} - \frac{\beta}{4} U \sigma_{q4} - \frac{\beta}{16} \Phi \sigma_{q1} \sigma_{q3} \sigma_{q4} - \\ &\quad - \frac{\beta}{4} \left(-\frac{\delta_{s6} \varepsilon_6}{2} - \delta_{16} \varepsilon_6 \right) (\sigma_{q1} \sigma_{q4} + \sigma_{q3} \sigma_{q4} + \sigma_{q1} \sigma_{q3}) - \frac{\beta}{4} \left(-\frac{\delta_{s6} \varepsilon_6}{2} + \delta_{16} \varepsilon_6 \right), \quad (5.3) \\ \frac{\beta \varepsilon_{q3}}{2} &= -\frac{\beta}{4} (V + \delta_{a6} \varepsilon_6) \sigma_{q4} - \frac{\beta}{4} (V - \delta_{a6} \varepsilon_6) \sigma_{q2} - \frac{\beta}{4} U \sigma_{q1} - \frac{\beta}{16} \Phi \sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q4} - \\ &\quad - \frac{\beta}{4} \left(-\frac{\delta_{s6} \varepsilon_6}{2} - \delta_{16} \varepsilon_6 \right) (\sigma_{q1} \sigma_{q2} + \sigma_{q1} \sigma_{q4} + \sigma_{q2} \sigma_{q4}) - \frac{\beta}{4} \left(-\frac{\delta_{s6} \varepsilon_6}{2} + \delta_{16} \varepsilon_6 \right), \end{aligned}$$

$$\frac{\beta \varepsilon_{q4}}{2} = -\frac{\beta}{4}(V + \delta_{a6}\varepsilon_6)\sigma_{q3} - \frac{\beta}{4}(V - \delta_{a6}\varepsilon_6)\sigma_{q1} - \frac{\beta}{4}U\sigma_{q2} - \frac{\beta}{16}\Phi\sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4} -$$

$$-\frac{\beta}{4}\left(-\frac{\delta_{s6}\varepsilon_6}{2} - \delta_{16}\varepsilon_6\right)(\sigma_{q1}\sigma_{q2} + \sigma_{q2}\sigma_{q3} + \sigma_{q1}\sigma_{q3}) - \frac{\beta}{4}\left(-\frac{\delta_{s6}\varepsilon_6}{2} + \delta_{16}\varepsilon_6\right).$$

Праві частини кожного з чотирьох рівнянь (5.3) приймають вісім різних значень і можуть бути представлені у вигляді

$$\begin{aligned} \tanh \frac{\beta \varepsilon_{q1}^z}{2} &= P_6^z \sigma_{q3} + Q_{61}^z \sigma_{q2} + Q_{62}^z \sigma_{q4} + R_6^z \sigma_{q2} \sigma_{q3} \sigma_{q4} + \\ &+ M_{61}^z \sigma_{q2} \sigma_{q3} + M_{62}^z \sigma_{q3} \sigma_{q4} + N_6^z \sigma_{q2} \sigma_{q4} + L_6^z, \\ \tanh \frac{\beta \varepsilon_{q2}^z}{2} &= P_6^z \sigma_{q4} + Q_{61}^z \sigma_{q1} + Q_{62}^z \sigma_{q3} + R_6^z \sigma_{q1} \sigma_{q3} \sigma_{q4} + \\ &+ M_{61}^z \sigma_{q4} \sigma_{q2} + M_{62}^z \sigma_{q3} \sigma_{q4} + N_6^z \sigma_{q1} \sigma_{q3} + L_6^z, \\ \tanh \frac{\beta \varepsilon_{q3}^z}{2} &= P_6^z \sigma_{q1} + Q_{61}^z \sigma_{q4} + Q_{62}^z \sigma_{q2} + R_6^z \sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q4} + \\ &+ M_{61}^z \sigma_{q1} \sigma_{q4} + M_{62}^z \sigma_{q1} \sigma_{q2} + N_6^z \sigma_{q2} \sigma_{q4} + L_6^z, \\ \tanh \frac{\beta \varepsilon_{q4}^z}{2} &= P_6^z \sigma_{q2} + Q_{61}^z \sigma_{q3} + Q_{62}^z \sigma_{q1} + R_6^z \sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q3} + \\ &+ M_{61}^z \sigma_{q2} \sigma_{q3} + M_{62}^z \sigma_{q1} \sigma_{q2} + N_6^z \sigma_{q1} \sigma_{q2} + L_6^z. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Враховуючи, що $\sigma_{qf} = \pm 1$, та прирівнюючи праві сторони виразів (5.3) і (5.4), знаходимо вирази для коефіцієнтів $P_6, \dots, L_6$:

$$\begin{aligned} P_6^z &= \frac{1}{8}(l_1^z - l_2^z + n_1^z - n_2^z + m_1^z - m_2^z + m_3^z - m_4^z), \\ Q_{61}^z &= \frac{1}{8}(l_1^z - l_2^z - n_1^z + n_2^z + m_1^z + m_2^z - m_3^z - m_4^z), \\ Q_{62}^z &= \frac{1}{8}(l_1^z - l_2^z - n_1^z + n_2^z - m_1^z - m_2^z + m_3^z + m_4^z), \\ R_6^z &= \frac{1}{8}(l_1^z - l_2^z + n_1^z - n_2^z - m_1^z + m_2^z - m_3^z + m_4^z), \\ N_6^z &= \frac{1}{8}(l_1^z + l_2^z + n_1^z + n_2^z - m_1^z - m_2^z - m_3^z - m_4^z), \\ M_{61}^z &= \frac{1}{8}(l_1^z + l_2^z - n_1^z - n_2^z + m_1^z - m_2^z - m_3^z + m_4^z), \\ M_{62}^z &= \frac{1}{8}(l_1^z + l_2^z - n_1^z - n_2^z - m_1^z + m_2^z + m_3^z - m_4^z), \\ L_6^z &= \frac{1}{8}(l_1^z + l_2^z + n_1^z + n_2^z + m_1^z + m_2^z + m_3^z + m_4^z), \end{aligned} \quad (5.5)$$

де використані наступні позначення:

$$\begin{aligned} l_1^z &= \tanh \frac{\beta}{2} \left[w + (\delta_{s6} + \delta_{16})\varepsilon_6 + \frac{z_6^z}{\beta} \right], \\ l_2^z &= \tanh \frac{\beta}{2} \left[-w + (\delta_{s6} + \delta_{16})\varepsilon_6 + \frac{z_6^z}{\beta} \right], \\ n_1^z &= \tanh \frac{\beta}{2} \left[(w - w_1) - \delta_{16}\varepsilon_6 + \frac{z_6^z}{\beta} \right], \\ n_2^z &= \tanh \frac{\beta}{2} \left[-(w - w_1) - \delta_{16}\varepsilon_6 + \frac{z_6^z}{\beta} \right], \\ m_1^z &= \tanh \frac{\beta}{2} \left[(\varepsilon - \delta_{a6}\varepsilon_6 - w) - \delta_{16}\varepsilon_6 + \frac{z_6^z}{\beta} \right], \\ m_2^z &= \tanh \frac{\beta}{2} \left[-(\varepsilon + \delta_{a6}\varepsilon_6 - w) - \delta_{16}\varepsilon_6 + \frac{z_6^z}{\beta} \right], \\ m_3^z &= \tanh \frac{\beta}{2} \left[(\varepsilon + \delta_{a6}\varepsilon_6 - w) - \delta_{16}\varepsilon_6 + \frac{z_6^z}{\beta} \right], \\ m_4^z &= \tanh \frac{\beta}{2} \left[-(\varepsilon - \delta_{a6}\varepsilon_6 - w) - \delta_{16}\varepsilon_6 + \frac{z_6^z}{\beta} \right]. \end{aligned}$$

Враховуючи симетрію функцій розподілу

$$\begin{aligned} \eta^{(1)z}(6) &= \langle \sigma_{q1} \rangle = \langle \sigma_{q2} \rangle = \langle \sigma_{q3} \rangle = \langle \sigma_{q4} \rangle = \\ &= \frac{1}{D_6^z} \left[\sinh(2z_6^z + \beta \delta_{s6}\varepsilon_6) + 2b \sinh(z_6^z - \beta \delta_{16}\varepsilon_6) \right], \\ \eta^{(3)z}(6) &= \langle \sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q3} \rangle = \langle \sigma_{q1}\sigma_{q3}\sigma_{q4} \rangle = \langle \sigma_{q1}\sigma_{q2}\sigma_{q4} \rangle = \langle \sigma_{q2}\sigma_{q3}\sigma_{q4} \rangle = \\ &= \frac{1}{D_6^z} \left[\sinh(2z_6^z + \beta \delta_{s6}\varepsilon_6) - 2b \sinh(z_6^z - \beta \delta_{16}\varepsilon_6) \right], \\ \eta_1^{(2)z}(6) &= \langle \sigma_{q2}\sigma_{q3} \rangle = \langle \sigma_{q1}\sigma_{q4} \rangle = \frac{1}{D_6^z} \left[\cosh(2z_6^z + \beta \delta_{s6}\varepsilon_6) - aa_6 + \frac{a}{a_6} - d \right], \\ \eta_2^{(2)z}(6) &= \langle \sigma_{q1}\sigma_{q2} \rangle = \langle \sigma_{q3}\sigma_{q4} \rangle = \frac{1}{D_6^z} \left[\cosh(2z_6^z + \beta \delta_{s6}\varepsilon_6) + aa_6 - \frac{a}{a_6} - d \right], \\ \eta_3^{(2)z}(6) &= \langle \sigma_{q1}\sigma_{q3} \rangle = \langle \sigma_{q2}\sigma_{q4} \rangle = \frac{1}{D_6^z} \left[\cosh(2z_6^z + \beta \delta_{s6}\varepsilon_6) - aa_6 - \frac{a}{a_6} + d \right], \end{aligned} \quad (5.6)$$

на основі (5.1) з врахуванням (5.3) і (5.4) можна отримати замкнену систему рівнянь для часозалежних унарної, тернарної парних функцій розподілу дейтронів MD₂XO₄ при наявності поля E_3 в на-

ступіноному вигляді:

$$\alpha \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta^{(1)z}(6) \\ \eta^{(3)z}(6) \\ \eta_1^{(2)z}(6) \\ \eta_2^{(2)z}(6) \\ \eta_3^{(2)z}(6) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{c}_{11} & \bar{c}_{12} & \bar{c}_{13} & \bar{c}_{14} & \bar{c}_{15} \\ \bar{c}_{21} & \bar{c}_{22} & \bar{c}_{23} & \bar{c}_{24} & \bar{c}_{25} \\ \bar{c}_{31} & \bar{c}_{32} & \bar{c}_{33} & \bar{c}_{34} & \bar{c}_{35} \\ \bar{c}_{41} & \bar{c}_{42} & \bar{c}_{43} & \bar{c}_{44} & \bar{c}_{45} \\ \bar{c}_{51} & \bar{c}_{52} & \bar{c}_{53} & \bar{c}_{54} & \bar{c}_{55} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta^{(1)z}(6) \\ \eta^{(3)z}(6) \\ \eta_1^{(2)z}(6) \\ \eta_2^{(2)z}(6) \\ \eta_3^{(2)z}(6) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \bar{c}_1 \\ \bar{c}_2 \\ \bar{c}_3 \\ \bar{c}_4 \\ \bar{c}_5 \end{pmatrix}. \quad (5.7)$$

Тут використані наступні позначення:

$$\begin{aligned} \bar{c}_{11} &= -(1 - P_6^z - Q_{61}^z - Q_{62}^z), \quad \bar{c}_{12} = R_6^z, \\ \bar{c}_{13} &= M_{61}^z, \quad \bar{c}_{14} = M_{62}^z, \quad \bar{c}_{15} = N_6^z, \quad \bar{c}_1 = L_6^z, \\ \bar{c}_{21} &= (2P_6^z + 2Q_{61}^z + 2Q_{62}^z + 3R_6^z), \quad \bar{c}_{22} = -(3 - P_6^z - Q_{61}^z - Q_{62}^z), \\ \bar{c}_{23} &= (N_6^z + M_{62}^z + L_6^z), \quad \bar{c}_{24} = (N_6^z + M_{61}^z + L_6^z), \\ \bar{c}_{25} &= (M_{61}^z + M_{62}^z + L_6^z), \quad \bar{c}_2 = (N_6^z + M_{61}^z + M_{62}^z), \\ \bar{c}_{31} &= (N_6^z + M_{62}^z + L_6^z), \quad \bar{c}_{32} = M_{61}^z, \\ \bar{c}_{33} &= -(1 - R_6^z), \quad \bar{c}_{34} = P_6^z, \quad \bar{c}_{35} = Q_{61}^z, \quad \bar{c}_3 = 2Q_{62}^z, \\ \bar{c}_{41} &= 2(N_6^z + M_{61}^z + L_6^z), \quad \bar{c}_{42} = 2M_{62}^z, \quad \bar{c}_{43} = 2P_6^z, \quad \bar{c}_{44} = -2(1 - R_6^z), \\ \bar{c}_{45} &= 2Q_{62}^z, \quad \bar{c}_4 = 2Q_{61}^z, \quad \bar{c}_{51} = 2(M_{61}^z + M_{62}^z + L_6^z), \quad \bar{c}_{52} = 2N_6^z, \\ \bar{c}_{53} &= 2Q_{61}^z, \quad \bar{c}_{54} = 2Q_{62}^z, \quad \bar{c}_{55} = -2(1 - R_6^z), \quad \bar{c}_5 = 2P_6^z. \end{aligned} \quad (5.8)$$

В одночастинковому наближенні з (5.1) отримуємо

$$\alpha \frac{d}{dt} \eta^{(1)z}(6) = -\eta^{(1)z}(6) + \tanh \frac{1}{2} \tilde{z}_6^z. \quad (5.9)$$

6. Релаксацийна динаміка механічно затиснутих кристалів MD₂XO₄

Розглянемо на основі отриманих систем рівнянь динамічні властивості MD₂XO₄ у випадку малих відхилень від стану рівноваги. Виділимо в системах рівнянь статичну і динамічну частини. Для цього представимо функції розподілу та ефективні поля у вигляді суми двох доданків – рівноважних функцій і їх відхилень від стану рівноваги:

$$\begin{aligned} \eta^{(1)z}(6) &= \tilde{\eta}^{(1)}(6) + \eta_t^{(1)z}(6); \quad \eta^{(3)z}(6) = \tilde{\eta}^{(3)}(6) + \eta_t^{(3)z}(6); \\ \eta^{(2)z}(6) &= \tilde{\eta}_i^{(2)}(6) + \eta_{it}^{(2)z}(6), \quad (i = 1, 2, 3), \\ z_6^z &= \tilde{z}_6 + z_{6t} = -\beta \tilde{\Delta} + 2\beta \nu_c \tilde{\eta}^{(1)}(6) - 2\beta \psi_6 \varepsilon_6 - \\ &\quad -\beta \Delta_t + 2\beta \nu_c \eta_t^{(1)z}(6) + \beta \mu_3 E_{3t}. \end{aligned} \quad (6.1)$$

Внаслідок п'єзоелектричного ефекту залежні від часу електричні поля повинні індукувати залежні від часу деформації. Однак у даній роботі ми розглядатимемо поля, частота яких – порядку $10^9 \sim 10^{12}$ Гц, що значно більше, ніж частота п'єзоелектричного резонансу. На таких частотах деформація не встигає за зовнішнім полем, тобто кристал є ефективно затиснутим. Тому в розкладах (4.1) і (3.2) ми вважаємо деформацію ε_6 незалежною від часу.

Розкладемо коефіцієнти $P_6^z, \dots, L_6^z$ у ряд по $z_{6t}^z/2$ з точністю до лінійних членів:

$$\begin{aligned} P_6^z &= P_6^{(0)} + \frac{z_{6t}^z}{2} P_6^{(1)}, \quad Q_{61}^z = Q_{61}^{(0)} + \frac{z_{6t}^z}{2} Q_{61}^{(1)}, \quad Q_{62}^z = Q_{62}^{(0)} + \frac{z_{6t}^z}{2} Q_{62}^{(1)}, \\ R_6^z &= R_6^{(0)} + \frac{z_{6t}^z}{2} R_6^{(1)}, \quad N_6^z = N_6^{(0)} + \frac{z_{6t}^z}{2} N_6^{(1)}, \\ M_{61}^z &= M_{61}^{(0)} + \frac{z_{6t}^z}{2} M_{61}^{(1)}, \quad M_{62}^z = M_{62}^{(0)} + \frac{z_{6t}^z}{2} M_{62}^{(1)}, \quad L_6^z = L_6^{(0)} + \frac{z_{6t}^z}{2} L_6^{(1)}. \end{aligned} \quad (6.2)$$

Тут використані наступні позначення:

$$\begin{aligned} P_6^{(0)} &= \frac{1}{4}[(1-b^2)Z_{61} + (b^2a_6^2 - a^2)Z_{62} + (b^2 - a^2a_6^2)Z_{63} + (d^2 - b^2)Z_{64}], \\ Q_{6\frac{1}{2}}^{(0)} &= \frac{1}{4}[(1-b^2)Z_{61} \pm (b^2a_6^2 - a^2)Z_{62} \mp (b^2 - a^2a_6^2)Z_{63} - (d^2 - b^2)Z_{64}], \\ R_6^{(0)} &= \frac{1}{4}[(1-b^2)Z_{61} - (b^2a_6^2 - a^2)Z_{62} - (b^2 - a^2a_6^2)Z_{63} + (d^2 - b^2)Z_{64}], \\ N_6^{(0)} &= \frac{1}{2}bZ_{61} \sinh(\tilde{z}_6 + \beta \delta_{s6} \varepsilon_6 + \beta \delta_{16} \varepsilon_6) - \frac{1}{2}aba_6 z_{62} \sinh(\tilde{z}_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) - \\ &\quad - \frac{1}{2}aba_6 Z_{63} \sinh(\tilde{z}_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) + \frac{1}{2}bdZ_{64} \sinh(\tilde{z}_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6), \\ M_{6\frac{1}{2}}^{(0)} &= \frac{1}{2}bZ_{61} \sinh(\tilde{z}_6 + \beta \delta_{s6} \varepsilon_6 + \beta \delta_{16} \varepsilon_6) \pm \frac{1}{2}aba_6 Z_{62} \sinh(\tilde{z}_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) \mp \\ &\quad \mp \frac{1}{2}aba_6 Z_{63} \sinh(\tilde{z}_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) - \frac{1}{2}bdZ_{64} \sinh(\tilde{z}_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6), \\ L_6^{(0)} &= \frac{1}{2}bZ_{61} \sinh(\tilde{z}_6 + \beta \delta_{s6} \varepsilon_6 + \beta \delta_{16} \varepsilon_6) + \frac{1}{2}aba_6 Z_{62} \sinh(\tilde{z}_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) + \\ &\quad + \frac{1}{2}aba_6 Z_{63} \sinh(\tilde{z}_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) + \frac{1}{2}bdZ_{64} \sinh(\tilde{z}_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6), \\ P_6^{(1)} &= -b(1-b^2)Z_{61}^2 \sinh(\tilde{z}_6 + \beta \delta_{s6} \varepsilon_6 + \beta \delta_{16} \varepsilon_6) - \\ &\quad - aba_6(b^2a_6^2 - a^2)Z_{62}^2 \sinh(\tilde{z}_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) - \\ &\quad - aba_6(b^2 - a^2a_6^2)Z_{63}^2 \sinh(\tilde{z}_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6) - bd(d^2 - b^2)Z_{64}^2 \sinh(\tilde{z}_6 - \beta \delta_{16} \varepsilon_6), \\ Q_{6\frac{1}{2}}^{(1)} &= -b(1-b^2)Z_{61}^2 \sinh(\tilde{z}_6 + \beta \delta_{s6} \varepsilon_6 + \beta \delta_{16} \varepsilon_6) \mp \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \mp aba_6(b^2a_6^2 - a^2)Z_{62}^2 \sinh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \pm \\
& \pm aba_6(b^2 - a^2a_6^2)Z_{63}^2 \sinh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) + bd(d^2 - b^2)Z_{64}^2 \sinh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6), \\
& R_6^{(1)} = -b(1 - b^2)Z_{61}^2 \sinh(\tilde{z}_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6 + \beta\delta_{16}\varepsilon_6) + \\
& + aba_6(b^2a_6^2 - a^2)Z_{62}^2 \sinh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) + \\
& + aba_6(b^2 - a^2a_6^2)Z_{63}^2 \sinh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) - bd(d^2 - b^2)Z_{64}^2 \sinh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6), \\
& N_6^{(1)} = \frac{1}{4} \left\{ - \left[(1 - b^2)^2 + 4b^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6 + \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right] Z_{61}^2 + \right. \\
& + \left[(b^2a_6^2 - a^2)^2 + 4a^2b^2a_6^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right] Z_{62}^2 + \\
& + \left[(b^2 - a^2a_6^2)^2 + 4a^2b^2a_6^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right] Z_{63}^2 - \\
& - \left[(d^2 - b^2)^2 + 4b^2d^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right] Z_{64}^2 \left. \right\}, \\
& M_{6\frac{1}{2}}^{(1)} = \frac{1}{4} \left\{ - \left[(1 - b^2)^2 + 4b^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6 + \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right] Z_{61}^2 \mp \right. \\
& \mp \left[(b^2a_6^2 - a^2)^2 + 4a^2b^2a_6^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right] Z_{62}^2 \pm \\
& \pm \left[(b^2 - a^2a_6^2)^2 + 4a^2b^2a_6^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right] Z_{63}^2 + \\
& + \left[(d^2 - b^2)^2 + 4b^2d^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right] Z_{64}^2 \left. \right\}, \\
& L_6^{(1)} = \frac{1}{4} \left\{ - \left[(1 - b^2)^2 + 4b^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6 + \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right] Z_{61}^2 - \right. \\
& - \left[(b^2a_6^2 - a^2)^2 + 4a^2b^2a_6^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right] Z_{62}^2 - \\
& - \left[(b^2 - a^2a_6^2)^2 + 4a^2b^2a_6^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right] Z_{63}^2 - \\
& - \left[(d^2 - b^2)^2 + 4b^2d^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right] Z_{64}^2 \left. \right\},
\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
Z_{61} &= \left[1 + b^2 + 2b \cosh(\tilde{z}_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6 + \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right]^{-1}, \\
Z_{62} &= \left[b^2a_6^2 + a^2 + 2aba_6 \cosh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right]^{-1}, \\
Z_{63} &= \left[b^2 + a^2a_6^2 + 2aba_6 \cosh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right]^{-1}, \\
Z_{64} &= \left[b^2 + d^2 + 2bd \cosh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) \right]^{-1},
\end{aligned}$$

а

$$\tilde{z}_6 = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \tilde{\eta}^{(1)}(6)}{1 - \tilde{\eta}^{(1)}(6)} + \beta\nu_c \tilde{\eta}^{(1)}(6) - \beta\psi_6\varepsilon_6.$$

Підставивши вирази (6.1) і (6.2) у рівняння системи (5.7) і в рівняння (5.9), отримаємо систему рівнянь для рівноважних функцій розподілу і рівняння, які описують поведінку флуктуаційних частин функцій розподілу:

$$\begin{aligned}
\alpha \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_t^{(1)}(6) \\ \eta_t^{(3)}(6) \\ \eta_{1t}^{(2)}(6) \\ \eta_{2t}^{(2)}(6) \\ \eta_{3t}^{(2)}(6) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \bar{c}_{11}^{(0)} + \beta\nu_c Y_6^{(1)} & \bar{c}_{12}^{(0)} & \bar{c}_{13}^{(0)} & \bar{c}_{14}^{(0)} & \bar{c}_{15}^{(0)} \\ \bar{c}_{21}^{(0)} + \beta\nu_c Y_6^{(3)} & \bar{c}_{22}^{(0)} & \bar{c}_{23}^{(0)} & \bar{c}_{24}^{(0)} & \bar{c}_{25}^{(0)} \\ \bar{c}_{31}^{(0)} + \beta\nu_c Y_{61}^{(2)} & \bar{c}_{32}^{(0)} & \bar{c}_{33}^{(0)} & \bar{c}_{34}^{(0)} & \bar{c}_{35}^{(0)} \\ \bar{c}_{41}^{(0)} + \beta\nu_c Y_{62}^{(2)} & \bar{c}_{42}^{(0)} & \bar{c}_{43}^{(0)} & \bar{c}_{44}^{(0)} & \bar{c}_{45}^{(0)} \\ \bar{c}_{51}^{(0)} + \beta\nu_c Y_{63}^{(2)} & \bar{c}_{52}^{(0)} & \bar{c}_{53}^{(0)} & \bar{c}_{54}^{(0)} & \bar{c}_{55}^{(0)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_t^{(1)}(6) \\ \eta_t^{(3)}(6) \\ \eta_{1t}^{(2)}(6) \\ \eta_{2t}^{(2)}(6) \\ \eta_{3t}^{(2)}(6) \end{pmatrix} + \\
&+ \left(-\frac{\beta\Delta_t}{2} + \frac{\mu_3 E_{3t}}{2kT} \right) \begin{pmatrix} Y_6^{(1)} \\ Y_6^{(3)} \\ Y_{61}^{(2)} \\ Y_{62}^{(2)} \\ Y_{63}^{(2)} \end{pmatrix}, \tag{6.3}
\end{aligned}$$

$$\alpha \frac{d}{dt} \eta_t^{(1)}(6) = - \left[1 - \beta\nu_c r_6 \right] \eta_t^{(1)}(6) - \beta\Delta_t r_6 + \frac{\mu_3 E_{3t}}{2kT} r_6. \tag{6.4}$$

Тут використані наступні позначення:

$$\begin{aligned}
Y_6^{(1)} &= \left(P_6^{(1)} + Q_{61}^{(1)} + Q_{62}^{(1)} \right) \tilde{\eta}^{(1)}(6) + R_6^{(1)} \tilde{\eta}^{(3)}(6) + M_{61}^{(1)} \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + \\
&+ M_{62}^{(1)} \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + N_6^{(1)} \tilde{\eta}_3^{(2)}(6) + L_6^{(1)}, \\
Y_6^{(3)} &= \left(2P_6^{(1)} + 2Q_{61}^{(1)} + 2Q_{62}^{(1)} + 3R_6^{(1)} \right) \tilde{\eta}^{(1)}(6) + \\
&+ \left(P_6^{(1)} + Q_{61}^{(1)} + Q_{62}^{(1)} \right) \tilde{\eta}^{(3)}(6) + \\
&+ \left(N_6^{(1)} + M_{62}^{(1)} + L_6^{(1)} \right) \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + \left(N_6^{(1)} + M_{61}^{(1)} + L_6^{(1)} \right) \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + \\
&+ \left(M_{61}^{(1)} + M_{62}^{(1)} + L_6^{(1)} \right) \tilde{\eta}_3^{(2)}(6) + \left(N_6^{(1)} + M_{61}^{(1)} + M_{62}^{(1)} \right), \\
Y_{61}^{(2)} &= \left(N_6^{(1)} + M_{62}^{(1)} + L_6^{(1)} \right) \tilde{\eta}^{(1)}(6) + M_{61}^{(1)} \eta^{(3)}(6) + R_6^{(1)} \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + \\
&+ P_6^{(1)} \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + Q_{61}^{(1)} \eta_3^{(2)}(6) + Q_{62}^{(1)}, \\
Y_{62}^{(2)} &= \left(N_6^{(1)} + M_{61}^{(1)} + L_6^{(1)} \right) \tilde{\eta}^{(1)}(6) + M_{62}^{(1)} \eta^{(3)}(6) + P_6^{(1)} \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + \\
&+ R_6^{(1)} \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + Q_{62}^{(1)} \eta_3^{(2)}(6) + Q_{61}^{(1)}, \\
Y_{63}^{(2)} &= \left(M_{61}^{(1)} + M_{62}^{(1)} + L_6^{(1)} \right) \tilde{\eta}^{(1)}(6) + N_6^{(1)} \eta^{(3)}(6) + Q_{61}^{(1)} \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + \\
&+ Q_{62}^{(1)} \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + R_6^{(1)} \eta_3^{(2)}(6) + P_6^{(1)},
\end{aligned}$$

$$r_6 = \sec^2 \left[\frac{1}{2} \ln \frac{1 + \tilde{\eta}^{(1)}(6)}{1 - \tilde{\eta}^{(1)}(6)} \right].$$

З першого рівняння системи (6.3) і (6.4) знайдемо $\beta\Delta_t$ і, виключаючи цей вираз з рівнянь системи (4.3), отримаємо

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_t^{(1)}(6) \\ \eta_t^{(3)}(6) \\ \eta_{1t}^{(2)}(6) \\ \eta_{2t}^{(2)}(6) \\ \eta_{3t}^{(2)}(6) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_t^{(1)}(6) \\ \eta_t^{(3)}(6) \\ \eta_{1t}^{(2)}(6) \\ \eta_{2t}^{(2)}(6) \\ \eta_{3t}^{(2)}(6) \end{pmatrix} - \frac{\mu_3 E_{3t}}{2kT} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \end{pmatrix}, \quad (6.5)$$

де

$$\begin{aligned} c_{11} &= \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{11}^{(0)} + \beta\nu_c Y_6^{(1)} - k_6^{(1)} \Psi_6^z), \quad c_{12} = \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{12}^{(0)} - k_6^{(1)} \bar{c}_{12}^{(0)}), \\ c_{13} &= \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{13}^{(0)} - k_6^{(1)} \bar{c}_{13}^{(0)}), \quad c_{14} = \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{14}^{(0)} - k_6^{(1)} \bar{c}_{14}^{(0)}), \\ c_{15} &= \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{15}^{(0)} - k_6^{(1)} \bar{c}_{15}^{(0)}), \quad c_1 = \frac{1}{\alpha} k_6^{(1)} r_6, \\ c_{21} &= \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{21}^{(0)} + \beta\nu_c Y_6^{(3)} - k_6^{(3)} \Psi_6^z), \quad c_{22} = \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{22}^{(0)} - k_6^{(3)} \bar{c}_{12}^{(0)}), \\ c_{23} &= \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{23}^{(0)} - k_6^{(3)} \bar{c}_{13}^{(0)}), \quad c_{24} = \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{24}^{(0)} - k_6^{(3)} \bar{c}_{14}^{(0)}), \\ c_{25} &= \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{25}^{(0)} - k_6^{(3)} \bar{c}_{15}^{(0)}), \quad c_2 = \frac{1}{\alpha} k_6^{(3)} r_6, \\ c_{31} &= \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{31}^{(0)} + \beta\nu_c Y_{61}^{(2)} - k_{61}^{(2)} \Psi_6^z), \quad c_{32} = \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{32}^{(0)} - k_{61}^{(2)} \bar{c}_{12}^{(0)}), \\ c_{33} &= \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{33}^{(0)} - k_{61}^{(2)} \bar{c}_{13}^{(0)}), \quad c_{34} = \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{34}^{(0)} - k_{61}^{(2)} \bar{c}_{14}^{(0)}), \\ c_{35} &= \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{35}^{(0)} - k_{61}^{(2)} \bar{c}_{15}^{(0)}), \quad c_3 = \frac{1}{\alpha} k_{61}^{(2)} r_6, \\ c_{41} &= \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{41}^{(0)} + \beta\nu_c Y_{62}^{(2)} - k_{62}^{(2)} \Psi_6^z), \quad c_{42} = \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{42}^{(0)} - k_{62}^{(2)} \bar{c}_{12}^{(0)}), \\ c_{43} &= \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{43}^{(0)} - k_{62}^{(2)} \bar{c}_{13}^{(0)}), \quad c_{44} = \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{44}^{(0)} - k_{62}^{(2)} \bar{c}_{14}^{(0)}), \\ c_{45} &= \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{45}^{(0)} - k_{62}^{(2)} \bar{c}_{15}^{(0)}), \quad c_4 = \frac{1}{\alpha} k_{62}^{(2)} r_6, \\ c_{51} &= \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{51}^{(0)} + \beta\nu_c Y_{63}^{(2)} - k_{63}^{(2)} \Psi_6^z), \quad c_{52} = \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{52}^{(0)} - k_{63}^{(2)} \bar{c}_{12}^{(0)}), \\ c_{53} &= \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{53}^{(0)} - k_{63}^{(2)} \bar{c}_{13}^{(0)}), \quad c_{54} = \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{54}^{(0)} - k_{63}^{(2)} \bar{c}_{14}^{(0)}), \end{aligned}$$

$$c_{55} = \frac{1}{\alpha} (\bar{c}_{55}^{(0)} - k_{63}^{(2)} \bar{c}_{15}^{(0)}), \quad c_5 = \frac{1}{\alpha} k_{63}^{(2)} r_6.$$

Тут використані такі позначення:

$$\begin{aligned} k_6^{(1)} &= Y_6^{(1)} (Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \quad k_6^{(3)} = Y_6^{(1)} (Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \\ k_{61}^{(2)} &= Y_{61}^{(2)} (Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \quad k_{62}^{(2)} = Y_{62}^{(2)} (Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \\ k_{63}^{(2)} &= Y_{63}^{(2)} (Y_6^{(2)} - 2r_6)^{-1}, \quad \Psi_6^z = [1 + \bar{c}_{11}^{(0)} + \beta\nu_3 (Y_6^{(1)} - r_6)]. \end{aligned}$$

Розв'яжемо спочатку систему рівнянь (6.5) для залежних від часу функцій розподілу у випадку $E_{3t} = 0$. Із системи (6.5) отримуємо однорідне диференціальне рівняння з постійними коефіцієнтами для уварної функції розподілу.

$$\begin{aligned} &\dots^{(1)z} \eta_t^{(1)}(6) + p_4 \dots^{(1)z} \eta_t^{(1)}(6) + p_3 \dots^{(1)z} \eta_t^{(1)}(6) + \\ &+ p_2 \dots^{(1)z} \eta_t^{(1)}(6) + p_1 \dots^{(1)z} \eta_t^{(1)}(6) + p_0 \eta_t^{(1)}(6) = 0, \end{aligned} \quad (6.6)$$

де

$$\begin{aligned} p_4 &= -(c_{11} + c_{22} + c_{33} + c_{44} + c_{55}), \\ p_3 &= \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{11} & c_{13} \\ c_{31} & c_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{11} & c_{14} \\ c_{41} & c_{44} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{11} & c_{15} \\ c_{51} & c_{55} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{22} & c_{23} \\ c_{32} & c_{33} \end{vmatrix} + \\ &+ \begin{vmatrix} c_{22} & c_{24} \\ c_{42} & c_{44} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{22} & c_{25} \\ c_{52} & c_{55} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{33} & c_{34} \\ c_{43} & c_{44} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{33} & c_{35} \\ c_{53} & c_{55} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{44} & c_{45} \\ c_{54} & c_{55} \end{vmatrix}, \\ p_2 &= - \left\{ \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{14} \\ c_{21} & c_{22} & c_{24} \\ c_{41} & c_{42} & c_{44} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{15} \\ c_{21} & c_{22} & c_{25} \\ c_{51} & c_{52} & c_{55} \end{vmatrix} + \right. \\ &+ \begin{vmatrix} c_{11} & c_{13} & c_{14} \\ c_{31} & c_{33} & c_{34} \\ c_{41} & c_{43} & c_{44} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{11} & c_{13} & c_{15} \\ c_{31} & c_{33} & c_{35} \\ c_{51} & c_{53} & c_{55} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{11} & c_{14} & c_{15} \\ c_{31} & c_{44} & c_{45} \\ c_{51} & c_{54} & c_{55} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{22} & c_{23} & c_{24} \\ c_{32} & c_{33} & c_{34} \\ c_{42} & c_{43} & c_{44} \end{vmatrix} + \\ &+ \begin{vmatrix} c_{22} & c_{23} & c_{25} \\ c_{32} & c_{33} & c_{35} \\ c_{52} & c_{53} & c_{55} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{22} & c_{24} & c_{25} \\ c_{42} & c_{44} & c_{45} \\ c_{52} & c_{54} & c_{55} \end{vmatrix} + \left. \begin{vmatrix} c_{33} & c_{34} & c_{35} \\ c_{43} & c_{44} & c_{45} \\ c_{53} & c_{54} & c_{55} \end{vmatrix} \right\}, \quad (6.7) \\ p_1 &= \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{15} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{25} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{35} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{55} \end{vmatrix} + \end{aligned}$$

$$+ \begin{vmatrix} c_{11} & c_{13} & c_{14} & c_{15} \\ c_{31} & c_{33} & c_{34} & c_{35} \\ c_{41} & c_{43} & c_{44} & c_{45} \\ c_{51} & c_{53} & c_{54} & c_{55} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{14} & c_{15} \\ c_{21} & c_{22} & c_{24} & c_{25} \\ c_{41} & c_{42} & c_{44} & c_{45} \\ c_{51} & c_{52} & c_{54} & c_{55} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} \\ c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} \\ c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} \\ c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} \end{vmatrix},$$

$$p_0 = - \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} \end{vmatrix}.$$

Розв'язок рівняння (6.6) має вигляд:

$$\eta_t^{(1)z}(6) = \sum_{i=1}^5 C_i^z \exp\left(-\frac{t}{\tau_i^z}\right).$$

Тут C_i^z – постійні коефіцієнти, а τ_i^z – часи релаксацій, які визначаються співвідношенням

$$\tau_i^z = (-q_i^z)^{-1},$$

а q_i^z – корені характеристичного рівняння

$$+(q^z)^5 + p_4(q^z)^4 + p_3(q^z)^3 + p_2(q^z)^2 + p_1(q^z) + p_0 = 0. \quad (6.8)$$

У випадку $E_{3t} \neq 0$ систему рівнянь (6.5) зводиться до неоднорідного диференціального рівняння з постійними коефіцієнтами для унарної функції розподілу:

$$+ \ddot{\ddot{\eta}}_t^{(1)z}(6) + p_4 \ddot{\ddot{\eta}}_t^{(1)z}(6) + p_3 \ddot{\ddot{\eta}}_t^{(1)z}(6) + p_2 \ddot{\ddot{\eta}}_t^{(1)z}(6) +$$

$$+ p_1 \dot{\eta}_t^{(1)z}(6) + p_0 \eta_t^{(1)z}(6) = \frac{\mu_3 E_{3t}}{2k_B T} p, \quad (6.9)$$

де $p = -[(i\omega)^4 p^{(4)} + (i\omega)^3 p^{(3)} + (i\omega)^2 p^{(2)} + (i\omega) p^{(1)} + p^{(0)}]$, а

$$p^{(4)} = c_1,$$

$$p^{(3)} = \begin{vmatrix} c_{12} & c_1 \\ c_{22} & c_2 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{13} & c_1 \\ c_{33} & c_3 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{14} & c_1 \\ c_{44} & c_4 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{15} & c_1 \\ c_{55} & c_5 \end{vmatrix},$$

$$p^{(2)} = \begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & c_1 \\ c_{22} & c_{23} & c_2 \\ c_{32} & c_{33} & c_3 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{14} & c_1 \\ c_{22} & c_{24} & c_2 \\ c_{42} & c_{44} & c_4 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{15} & c_1 \\ c_{22} & c_{25} & c_2 \\ c_{52} & c_{55} & c_5 \end{vmatrix} +$$

$$+ \begin{vmatrix} c_{13} & c_{14} & c_1 \\ c_{33} & c_{34} & c_3 \\ c_{43} & c_{44} & c_4 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{13} & c_{15} & c_1 \\ c_{33} & c_{35} & c_3 \\ c_{53} & c_{54} & c_5 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{14} & c_{15} & c_1 \\ c_{44} & c_{45} & c_4 \\ c_{54} & c_{55} & c_5 \end{vmatrix}, \quad (6.10)$$

$$p^{(1)} = \begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_1 \\ c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_2 \\ c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_3 \\ c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_4 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & c_{15} & c_1 \\ c_{22} & c_{23} & c_{25} & c_2 \\ c_{32} & c_{33} & c_{35} & c_3 \\ c_{52} & c_{53} & c_{55} & c_5 \end{vmatrix} +$$

$$+ \begin{vmatrix} c_{12} & c_{14} & c_{15} & c_1 \\ c_{22} & c_{24} & c_{25} & c_2 \\ c_{42} & c_{44} & c_{45} & c_4 \\ c_{52} & c_{54} & c_{55} & c_5 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_1 \\ c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_3 \\ c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_4 \\ c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_5 \end{vmatrix},$$

$$p^{(0)} = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_1 \\ c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_2 \\ c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_3 \\ c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_4 \\ c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_5 \end{vmatrix}. \quad (6.11)$$

Частинний розв'язок рівняння (6.9) будемо шукати у вигляді

$$\eta_t^{(1)z}(6) = A \exp i\omega t.$$

В результаті залежна від часу унарна функція розподілу має вигляд:

$$\eta_t^{(1)z}(6) = \sum_{i=1}^5 C_i^z \exp\left(-\frac{t}{\tau_i^z}\right) + \frac{\mu_3 E_{3t}}{2k_B T} \cdot \frac{\sum_{k=0}^4 (i\omega)^k p^{(k)}}{(i\omega)^5 + \sum_{k=0}^4 (i\omega)^k p_k}. \quad (6.12)$$

Динамічну сприйнятливність затиснутого кристалу визначимо наступним чином:

$$\chi_{33}^\varepsilon(\omega, T) = \lim_{E_{3t} \rightarrow 0} 2 \frac{\mu_3}{v} \frac{d\eta_t^{(1)z}(6)}{dE_{3t}}. \quad (6.13)$$

Тоді на основі (6.12) маємо

$$\chi_{33}^\varepsilon(\omega, T, \sigma_6) = \bar{v} \frac{\mu_3^2}{v^2} \frac{1}{T} \frac{\sum_{k=0}^4 (i\omega)^k p^{(k)}}{(i\omega)^5 + \sum_{k=0}^4 (i\omega)^k p_k} =$$

$$= \bar{v} \frac{\mu_3^2}{v^2} \frac{1}{T} \frac{\prod_{i=1}^5 \tau_i^z \left[\sum_{k=0}^4 (i\omega)^k p^{(k)} \right]}{\prod_{i=1}^5 (1 + i\omega \tau_i^z)} = \sum_{i=1}^5 \frac{\chi_{3i}}{1 + i\omega \tau_i^z}.$$

Коефіцієнти χ_{3i} знаходимо, розв'язуючи систему рівнянь

$$\begin{pmatrix} n_{11} & n_{12} & n_{13} & n_{14} & n_{15} \\ n_{21} & n_{22} & n_{23} & n_{24} & n_{25} \\ n_{31} & n_{32} & n_{33} & n_{34} & n_{35} \\ n_{41} & n_{42} & n_{43} & n_{44} & n_{45} \\ n_{51} & n_{52} & n_{53} & n_{54} & n_{55} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_{31} \\ \chi_{32} \\ \chi_{33} \\ \chi_{34} \\ \chi_{35} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ n_4 \\ n_5 \end{pmatrix}. \quad (6.14)$$

Тут використані наступні позначення:

$$\begin{aligned} n_{11} &= \tau_1^z \tau_3^z \tau_4^z \tau_5^z; & n_{12} &= \tau_1^z \tau_3^z \tau_4^z \tau_5^z; & n_{13} &= \tau_1^z \tau_2^z \tau_4^z \tau_5^z; \\ n_{14} &= \tau_1^z \tau_2^z \tau_3^z \tau_5^z; & n_{15} &= \tau_1^z \tau_2^z \tau_3^z \tau_4^z; \\ n_{21} &= \tau_2^z \tau_3^z \tau_4^z + \tau_2^z \tau_3^z \tau_5^z + \tau_2^z \tau_4^z \tau_5^z + \tau_3^z \tau_4^z \tau_5^z; \\ n_{22} &= \tau_1^z \tau_3^z \tau_5^z + \tau_1^z \tau_4^z \tau_5^z + \tau_1^z \tau_3^z \tau_4^z + \tau_3^z \tau_4^z \tau_5^z; \\ n_{23} &= \tau_1^z \tau_2^z \tau_4^z + \tau_1^z \tau_2^z \tau_5^z + \tau_1^z \tau_4^z \tau_5^z + \tau_2^z \tau_4^z \tau_5^z; \\ n_{24} &= \tau_1^z \tau_2^z \tau_3^z + \tau_1^z \tau_2^z \tau_5^z + \tau_1^z \tau_3^z \tau_5^z + \tau_2^z \tau_3^z \tau_5^z; \\ n_{25} &= \tau_1^z \tau_2^z \tau_3^z + \tau_1^z \tau_2^z \tau_4^z + \tau_1^z \tau_3^z \tau_4^z + \tau_2^z \tau_3^z \tau_4^z; \\ n_{31} &= \tau_2^z \tau_3^z + \tau_2^z \tau_4^z + \tau_3^z \tau_4^z + \tau_2^z \tau_5^z + \tau_3^z \tau_5^z + \tau_4^z \tau_5^z; \\ n_{32} &= \tau_1^z \tau_3^z + \tau_1^z \tau_4^z + \tau_1^z \tau_5^z + \tau_3^z \tau_4^z + \tau_3^z \tau_5^z + \tau_4^z \tau_5^z; \\ n_{33} &= \tau_1^z \tau_2^z + \tau_1^z \tau_4^z + \tau_1^z \tau_5^z + \tau_2^z \tau_4^z + \tau_2^z \tau_5^z + \tau_4^z \tau_5^z; \\ n_{34} &= \tau_1^z \tau_2^z + \tau_1^z \tau_3^z + \tau_1^z \tau_5^z + \tau_2^z \tau_3^z + \tau_2^z \tau_5^z + \tau_3^z \tau_5^z; \\ n_{35} &= \tau_1^z \tau_2^z + \tau_1^z \tau_3^z + \tau_1^z \tau_4^z + \tau_2^z \tau_3^z + \tau_2^z \tau_4^z + \tau_3^z \tau_4^z; \\ n_{41} &= \tau_2^z + \tau_3^z + \tau_4^z + \tau_5^z, & n_{42} &= \tau_1^z + \tau_3^z + \tau_4^z + \tau_5^z; \\ n_{43} &= \tau_1^z + \tau_2^z + \tau_4^z + \tau_5^z, & n_{44} &= \tau_1^z + \tau_2^z + \tau_3^z + \tau_5^z, \\ n_{45} &= \tau_1^z + \tau_2^z + \tau_3^z + \tau_4^z; \\ n_{51} &= n_{52} = n_{53} = n_{54} = n_{55} = 1; \\ n_1 &= \frac{\mu_3^2}{k_B v T} \prod_{i=1}^5 \tau_i^z p^{(4)}, & n_2 &= \frac{\mu_3^2}{k_B v T} \prod_{i=1}^5 \tau_i^z p^{(3)}, \\ n_3 &= \frac{\mu_3^2}{k_B v T} \prod_{i=1}^5 \tau_i^z p^{(2)}, & n_4 &= \frac{\mu_3^2}{k_B v T} \prod_{i=1}^5 \tau_i^z p^{(1)}, & n_5 &= \frac{\mu_3^2}{k_B v T} \prod_{i=1}^5 \tau_i^z p^{(0)}. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Комплексна поздовжня діелектрична проникність дейтронної системи ДСОФ

$$\varepsilon_{33}^{\varepsilon'}(\omega, T) = 1 + 4\pi\chi_{33}^{\varepsilon'}(\omega, T), \quad \varepsilon_{33}^{\varepsilon''}(\omega, T) = 4\pi\chi_{33}^{\varepsilon''}(\omega, T).$$

7. Динамічні характеристики механічно вільного кристалу $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$. П'єзоелектричний резонанс

Розглянемо коливання тонкої квадратної пластинки кристалу MD_2XO_4 , вирізаної у площині $[001]$, зі сторонами завдовжки l , під дією зовнішнього змінного електричного поля $E_{3t} = E_3 e^{i\omega_E t}$. Таке зовнішнє поле, окрім зсувної деформації ε_6 індукуює в системі ще й діагональні компоненти тензора деформації ε_i . Однак для простоти розгляду динамічних характеристик діагональними деформаціями будемо нехтувати.

Динаміку деформаційних процесів у MD_2XO_4 будемо описувати мовою класичних рівнянь руху елементарного об'єму кристалу, які мають вигляд

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \sum_k \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}, \quad (7.1)$$

де ρ – густина кристалу, u_i – зміщення елементарного об'єму вздовж осі x_i , σ_{ik} – механічна напруга. Зсувну деформацію ε_6 визначають зміщення $u_x = u_1$ і $u_y = u_z$, тобто

$$\varepsilon_6 = \varepsilon_{xy} = \frac{\partial u_1}{\partial y} + \frac{\partial u_2}{\partial x}.$$

У нашому випадку відмінною від нуля є зсувна напруга $\sigma_{xy} = \sigma_6$, яка має вигляд (3.2).

Отже,

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} &= c_{66}^{E0} \frac{\partial \varepsilon_6}{\partial y} + \frac{4\psi_6}{v} \frac{\partial \eta^{(1)}(6)}{\partial y} + \\ &+ \frac{2\delta_{a6}}{v} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{M_{a6}}{D_6} \right) - \frac{2\delta_{s6}}{v} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{M_{s6}}{D_6} \right) + \frac{2\delta_{16}}{v} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{M_{16}}{D_6} \right), \\ \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} &= c_{66}^{E0} \frac{\partial \varepsilon_6}{\partial x} + \frac{4\psi_6}{v} \frac{\partial \eta^{(1)}(6)}{\partial x} + \\ &+ \frac{2\delta_{a6}}{v} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{M_{a6}}{D_6} \right) - \frac{2\delta_{s6}}{v} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{M_{s6}}{D_6} \right) + \frac{2\delta_{16}}{v} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{M_{16}}{D_6} \right). \end{aligned} \quad (7.2)$$

При малих відхиленнях від стану рівноваги виділимо в системах (5.7) і (5.9) статичну і часозалежну частини, представивши функції розподілу, ефективні поля зміщення u_1 , u_2 і деформацію ε_6 у вигляді двох доданків – рівноважних функцій та їх відхилень від стану

рівноваги:

$$\begin{aligned} \eta^{(1)}(6) &= \tilde{\eta}^{(1)}(6) + \eta_t^{(1)}(6), \quad \eta^{(3)}(6) = \tilde{\eta}^{(3)}(6) + \eta_t^{(3)}(6), \\ \eta_i^{(2)}(6) &= \tilde{\eta}_i^{(2)}(6) + \eta_t^{(2)}(6), \quad (i = 1, 2, 3), \\ \varepsilon_6 &= \tilde{\varepsilon}_6 + \varepsilon_{6t}, \quad u_{1,2} = \tilde{u}_{1,2} + u_{1,2t}, \\ z_6^z &= \tilde{z}_6 + z_{6t} = -\beta\tilde{\Delta} + 2\beta\nu_c\tilde{\eta}^{(1)}(6) - 2\beta\psi_6\tilde{\varepsilon}_6 - \\ &\quad -\beta\tilde{\Delta}_t + 2\beta\nu_c\tilde{\eta}_t^{(1)}(6) - 2\beta\psi_6\tilde{\varepsilon}_{6t} + \beta\mu_3 E_{3t}. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Розкладемо коефіцієнти $P_6, \dots, L_6$ у ряд за часозалежними доданками. В результаті

$$\begin{aligned} P_6 &= P_6^{(0)} + \left(-\frac{\beta\Delta_t}{2} + \frac{\beta\mu_3 E_{3t}}{2}\right) P_6^{(1)} + \beta\nu_c P_6^{(1)} \eta_t^{(1)}(6) + \\ &\quad + \left(-\beta\psi_6 P_6^{(1)} + \beta\delta_{s6} P_s^{(1)} - \beta\delta_{a6} P_a^{(1)} + \beta\delta_{16} P_1^{(1)}\right) \varepsilon_{6t}, \\ Q_{61} &= Q_{61}^{(0)} + \left(-\frac{\beta\Delta_t}{2} + \frac{\beta\mu_3 E_{3t}}{2}\right) Q_{61}^{(1)} + \beta\nu_c Q_{61}^{(1)} \eta_t^{(1)}(6) + \\ &\quad + \left(-\beta\psi_6 Q_{61}^{(1)} + \beta\delta_{s6} P_s^{(1)} - \beta\delta_{a6} Q_a^{(1)} + \beta\delta_{16} Q_{11}^{(1)}\right) \varepsilon_{6t}, \\ Q_{62} &= Q_{62}^{(0)} + \left(-\frac{\beta\Delta_t}{2} + \frac{\beta\mu_3 E_{3t}}{2}\right) Q_{62}^{(1)} + \beta\nu_c Q_{62}^{(1)} \eta_t^{(1)}(6) + \\ &\quad + \left(-\beta\psi_6 Q_{62}^{(1)} + \beta\delta_{s6} P_s^{(1)} + \beta\delta_{a6} Q_a^{(1)} + \beta\delta_{16} Q_{12}^{(1)}\right) \varepsilon_{6t}, \\ R_6 &= R_6^{(0)} + \left(-\frac{\beta\Delta_t}{2} + \frac{\beta\mu_3 E_{3t}}{2}\right) R_6^{(1)} + \beta\nu_c R_6^{(1)} \eta_t^{(1)}(6) + \\ &\quad + \left(-\beta\psi_6 R_6^{(1)} + \beta\delta_{s6} P_s^{(1)} + \beta\delta_{a6} P_a^{(1)} + \beta\delta_{16} R_1^{(1)}\right) \varepsilon_{6t}, \\ N_6 &= N_6^{(0)} + \left(-\frac{\beta\Delta_t}{2} + \frac{\beta\mu_3 E_{3t}}{2}\right) N_6^{(1)} + \beta\nu_c N_6^{(1)} \eta_t^{(1)}(6) + \\ &\quad + \left(-\beta\psi_6 N_6^{(1)} + \beta\delta_{s6} L_s^{(1)} + \beta\delta_{a6} L_a^{(1)} + \beta\delta_{16} N_1^{(1)}\right) \varepsilon_{6t}, \\ M_{61} &= M_{61}^{(0)} + \left(-\frac{\beta\Delta_t}{2} + \frac{\beta\mu_3 E_{3t}}{2}\right) M_{61}^{(1)} + \beta\nu_c M_{61}^{(1)} \eta_t^{(1)}(6) + \\ &\quad + \left(-\beta\psi_6 M_{61}^{(1)} + \beta\delta_{s6} L_s^{(1)} - \beta\delta_{a6} M_a^{(1)} + \beta\delta_{16} M_{11}^{(1)}\right) \varepsilon_{6t}, \\ M_{62} &= M_{62}^{(0)} + \left(-\frac{\beta\Delta_t}{2} + \frac{\beta\mu_3 E_{3t}}{2}\right) M_{62}^{(1)} + \beta\nu_c M_{62}^{(1)} \eta_t^{(1)}(6) + \\ &\quad + \left(-\beta\psi_6 M_{62}^{(1)} + \beta\delta_{s6} L_s^{(1)} + \beta\delta_{a6} M_a^{(1)} + \beta\delta_{16} M_{12}^{(1)}\right) \varepsilon_{6t}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L_6 &= L_6^{(0)} + \left(-\frac{\beta\Delta_t}{2} + \frac{\beta\mu_3 E_{3t}}{2}\right) L_6^{(1)} + \beta\nu_c L_6^{(1)} \eta_t^{(1)}(6) + \\ &\quad + \left(-\beta\psi_6 L_6^{(1)} + \beta\delta_{s6} L_s^{(1)} - \beta\delta_{a6} L_a^{(1)} + \beta\delta_{16} L_1^{(1)}\right) \varepsilon_{6t}, \end{aligned}$$

а

$$\begin{aligned} P_6^{(0)} &= l_{12-}^{(0)} + m_{14-}^{(0)} + m_{32-}^{(0)} + n_{12-}^{(0)}, \quad P_6^{(1)} = l_{12-}^{(1)} + m_{14-}^{(1)} + m_{32-}^{(1)} + n_{12-}^{(1)}, \\ Q_{6\frac{1}{2}}^{(0)} &= l_{12-}^{(0)} \pm m_{14-}^{(0)} \mp m_{32-}^{(0)} - n_{12-}^{(0)}, \quad Q_{6\frac{1}{2}}^{(1)} = l_{12-}^{(1)} \pm m_{14-}^{(1)} \mp m_{32-}^{(1)} - n_{12-}^{(1)}, \\ R_6^{(0)} &= l_{12-}^{(0)} - m_{14-}^{(0)} - m_{32-}^{(0)} + n_{12-}^{(0)}, \quad R_6^{(1)} = l_{12-}^{(1)} - m_{14-}^{(1)} - m_{32-}^{(1)} + n_{12-}^{(1)}, \\ N_6^{(0)} &= l_{12+}^{(0)} - m_{14+}^{(0)} - m_{32+}^{(0)} + n_{12+}^{(0)}, \quad N_6^{(1)} = l_{12+}^{(1)} - m_{14+}^{(1)} - m_{32+}^{(1)} + n_{12+}^{(1)}, \\ M_{6\frac{1}{2}}^{(0)} &= l_{12+}^{(0)} \pm m_{14+}^{(0)} \mp m_{32+}^{(0)} - n_{12+}^{(0)}, \quad M_{6\frac{1}{2}}^{(1)} = l_{12+}^{(1)} \pm m_{14+}^{(1)} \mp m_{32+}^{(1)} - n_{12+}^{(1)}, \\ L_6^{(0)} &= l_{12+}^{(0)} + m_{14+}^{(0)} + m_{32+}^{(0)} + n_{12+}^{(0)}, \quad L_6^{(1)} = l_{12+}^{(1)} + m_{14+}^{(1)} + m_{32+}^{(1)} + n_{12+}^{(1)}, \\ P_s^{(1)} &= \frac{1}{2} l_{12-}^{(1)}, \quad P_a^{(1)} = \frac{1}{2} (m_{14+}^{(1)} - m_{32+}^{(1)}), \\ L_s^{(1)} &= \frac{1}{2} l_{12+}^{(1)}, \quad L_a^{(1)} = \frac{1}{2} (m_{14-}^{(1)} - m_{32-}^{(1)}), \\ Q_a^{(1)} &= \frac{1}{2} (m_{14+}^{(1)} + m_{32+}^{(1)}), \quad Q_{11}^{(1)} = \frac{1}{2} (l_{12-}^{(1)} - m_{14-}^{(1)} + m_{32-}^{(1)} + n_{12-}^{(1)}), \\ M_a^{(1)} &= \frac{1}{2} (m_{14-}^{(1)} + m_{32-}^{(1)}), \quad M_{11}^{(1)} = \frac{1}{2} (l_{12+}^{(1)} - m_{14+}^{(1)} + m_{32+}^{(1)} + n_{12+}^{(1)}), \\ Q_{12}^{(1)} &= \frac{1}{2} (l_{12-}^{(1)} + m_{14-}^{(1)} - m_{32-}^{(1)} + n_{12-}^{(1)}), \\ M_{12}^{(1)} &= \frac{1}{2} (l_{12+}^{(1)} + m_{14+}^{(1)} - m_{32+}^{(1)} + n_{12+}^{(1)}), \\ P_1^{(1)} &= \frac{1}{2} (l_{12-}^{(1)} - m_{14-}^{(1)} - m_{32-}^{(1)} - n_{12-}^{(1)}), \\ R_1^{(1)} &= \frac{1}{2} (l_{12-}^{(1)} + m_{14-}^{(1)} + m_{32-}^{(1)} - n_{12-}^{(1)}), \\ N_1^{(1)} &= \frac{1}{2} (l_{12+}^{(1)} + m_{14+}^{(1)} + m_{32+}^{(1)} - n_{12+}^{(1)}), \\ L_1^{(1)} &= \frac{1}{2} (l_{12+}^{(1)} - m_{14+}^{(1)} - m_{32+}^{(1)} - n_{12+}^{(1)}), \end{aligned}$$

де використані наступні позначення:

$$\begin{aligned} l_{12-}^{(0)} &= \frac{1}{8} \left\{ \tanh \frac{\beta}{2} \left[w + (\delta_{s6} + \delta_{16}) \tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] - \right. \\ &\quad \left. - \tanh \frac{\beta}{2} \left[-w + (\delta_{s6} + \delta_{16}) \tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] \right\} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{4}(1-b^2)Z_{61}, \quad Z_{61} = [1+b^2+2b \cosh(\tilde{z}_6 + \beta\delta_{s6}\tilde{\varepsilon}_6 + \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6)]^{-1}, \\
m_{14-}^{(0)} &= \frac{1}{8} \left\{ \tanh \frac{\beta}{2} \left[(\varepsilon - \delta_{a6}\tilde{\varepsilon}_6 - w) - \delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] - \right. \\
&\quad \left. - \tanh \frac{\beta}{2} \left[-(\varepsilon - \delta_{a6}\tilde{\varepsilon}_6 - w) - \delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] \right\} = \\
&= \frac{1}{4}(b^2a_6^2 - a^2)Z_{62}, \quad Z_{62} = [b^2a_6^2 + a^2 + 2aba_6 \cosh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6)]^{-1}, \\
m_{32-}^{(0)} &= \frac{1}{8} \left\{ \tanh \frac{\beta}{2} \left[(\varepsilon + \delta_{a6}\tilde{\varepsilon}_6 - w) - \delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] - \right. \\
&\quad \left. - \tanh \frac{\beta}{2} \left[-(\varepsilon + \delta_{a6}\tilde{\varepsilon}_6 - w) - \delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] \right\} = \\
&= \frac{1}{4}(b^2 - a^2a_6^2)Z_{63}, \quad Z_{63} = [b^2 + a^2a_6^2 + 2aba_6 \cosh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6)]^{-1}, \\
n_{12}^{(0)} &= \frac{1}{8} \left\{ \tanh \frac{\beta}{2} \left[(w - w_1) - \delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] - \right. \\
&\quad \left. - \tanh \frac{\beta}{2} \left[-(w - w_1) - \delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] \right\} = \\
&= \frac{1}{4}(d^2 - b^2)Z_{64}, \quad Z_{64} = [b^2 + d^2 + 2bd \cosh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6)]^{-1}, \\
l_{12+}^{(0)} &= \frac{1}{2}bz_{61} \sinh(\tilde{z}_6 + \beta\delta_{s6}\tilde{\varepsilon}_6 + \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6), \\
m_{14+}^{(0)} &= \frac{1}{2}aba_6z_{62} \sinh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6), \\
m_{32+}^{(0)} &= \frac{1}{2}aba_6z_{63} \sinh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6), \\
n_{12+}^{(0)} &= \frac{1}{2}bdz_{64} \sinh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6), \\
l_{12}^{(1)} &= \frac{1}{8} \left\{ \cosh^{-2} \frac{\beta}{2} \left[w + (\delta_{s6} + \delta_{16})\tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] - \right. \\
&\quad \left. - \cosh^{-2} \frac{\beta}{2} \left[-w + (\delta_{s6} + \delta_{16})\tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] \right\} = \\
&= -b(1-b^2)z_{61}^2 \sinh(\tilde{z}_6 + \beta\delta_{s6}\tilde{\varepsilon}_6 + \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6), \\
m_{14-}^{(1)} &= \frac{1}{8} \left\{ \cosh^{-2} \frac{\beta}{2} \left[(\varepsilon - \delta_{a6}\tilde{\varepsilon}_6 - w) - \delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] - \right. \\
&\quad \left. - \cosh^{-2} \frac{\beta}{2} \left[-(\varepsilon - \delta_{a6}\tilde{\varepsilon}_6 - w) - \delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] \right\} = \\
&= -aba_6(b^2a_6^2 - a^2)z_{62}^2 \sinh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m_{32-}^{(1)} &= \frac{1}{8} \left\{ \cosh^{-2} \frac{\beta}{2} \left[(\varepsilon + \delta_{a6}\tilde{\varepsilon}_6 - w) - \delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] - \right. \\
&\quad \left. - \cosh^{-2} \frac{\beta}{2} \left[-(\varepsilon + \delta_{a6}\tilde{\varepsilon}_6 - w) - \delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] \right\} = \\
&= -aba_6(b^2 - a^2a_6^2)z_{63}^2 \sinh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6), \\
n_{12-}^{(1)} &= \frac{1}{8} \left\{ \cosh^{-2} \frac{\beta}{2} \left[(w - w_1) - \delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] - \right. \\
&\quad \left. - \cosh^{-2} \frac{\beta}{2} \left[-(w - w_1) - \delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\tilde{z}_6}{\beta} \right] \right\} = \\
&= -bd(d^2 - b^2)z_{64}^2 \sinh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6), \\
l_{12+}^{(1)} &= \frac{1}{4} \{ 1 - [(1-b^2)^2 + 4b^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 + \beta\delta_{s6}\tilde{\varepsilon}_6 + \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6)]z_{61}^2 \}, \\
m_{14+}^{(1)} &= \frac{1}{4} \{ 1 - [(b^2a_6^2 - a^2)^2 + 4a^2b^2a_6^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6)]z_{62}^2 \}, \\
m_{32+}^{(1)} &= \frac{1}{4} \{ 1 - [(b^2 - a^2a_6^2)^2 + 4a^2b^2a_6^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6)]z_{63}^2 \}, \\
n_{12+}^{(1)} &= \frac{1}{4} \{ 1 - [(d^2 - b^2)^2 + 4b^2d^2 \sinh^2(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6)]z_{64}^2 \},
\end{aligned}$$

В результаті для часозалежних частин функцій розподілу отримуємо наступну систему рівнянь:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_t^{(1)}(6) \\ \eta_t^{(3)}(6) \\ \eta_{1t}^{(2)}(6) \\ \eta_{2t}^{(2)}(6) \\ \eta_{3t}^{(2)}(6) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_t^{(1)}(6) \\ \eta_t^{(3)}(6) \\ \eta_{1t}^{(2)}(6) \\ \eta_{2t}^{(2)}(6) \\ \eta_{3t}^{(2)}(6) \end{pmatrix} - \\
&- \frac{1}{2}\beta\mu_3 E_{3t} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \end{pmatrix} + \beta\psi_6 \varepsilon_{6t} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \end{pmatrix} - \beta\delta_{s6} \varepsilon_{6t} \begin{pmatrix} c_{1s} \\ c_{3s} \\ c_{2s} \\ c_{2s} \\ c_{2s} \end{pmatrix} + \\
&+ \beta\delta_{a6} \varepsilon_{6t} \begin{pmatrix} c_{1a} \\ -c_{1a} \\ c_{2a} \\ -c_{2a} \\ c_{3a} \end{pmatrix} - \beta\delta_{16} \varepsilon_{6t} \begin{pmatrix} \tilde{c}_{11} \\ \tilde{c}_{21} \\ \tilde{c}_{31} \\ \tilde{c}_{41} \\ \tilde{c}_{51} \end{pmatrix}, \tag{7.4}
\end{aligned}$$

де коефіцієнти $c_{11}, \dots, c_{55}, c_1, \dots, c_5$ співпадають із коефіцієнтами в

системі (6.5), а

$$\begin{aligned} c_{1s} &= \frac{1}{\alpha} k_{1s} r_6, \quad c_{2s} = \frac{1}{\alpha} k_{2s} r_6, \quad c_{3s} = 3k_{1s} r_6, \\ c_{1a} &= \frac{1}{\alpha} k_{1a} r_6, \quad c_{2a} = \frac{1}{\alpha} k_{2a} r_6, \quad c_{3a} = \frac{1}{\alpha} 3k_{3a} r_6, \\ \tilde{c}_{11} &= \frac{1}{\alpha} k_1 r_6, \quad \tilde{c}_{21} = \frac{1}{\alpha} k_2 r_6, \quad \tilde{c}_{31} = \frac{1}{\alpha} k_3 r_6, \\ \tilde{c}_{41} &= \frac{1}{\alpha} k_4 r_6, \quad \tilde{c}_{51} = \frac{1}{\alpha} k_5 r_6, \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} k_{1s} &= 2Y_s(Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \quad k_{2s} = 2Y_s^{(2)}(Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \\ k_{1a} &= 2Y_a(Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \quad k_{2a} = 2Y_a^{(2)}(Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \\ k_{3a} &= 2Y_{a3}^{(2)}(Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \\ k_1 &= 2Y_1^{(1)}(Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \quad k_2 = 2Y_1^{(3)}(Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \\ k_3 &= 2Y_1^{(2)}(Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \quad k_4 = 2Y_2^{(2)}(Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \\ k_5 &= 2Y_3^{(2)}(Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \end{aligned}$$

а

$$\begin{aligned} Y_s &= Y_s^{(1)} = \frac{1}{3} Y_1^{(3)} = 3P_s^{(1)} \tilde{\eta}^{(1)}(6) + P_s^{(1)} \tilde{\eta}^{(3)}(6) + L_s^{(1)} \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + \\ &+ L_s^{(1)} \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + L_s^{(1)} \tilde{\eta}_3^{(2)}(6) + L_s^{(1)}, \\ Y_s^{(2)} &= Y_{s1}^{(2)} = Y_{s2}^{(2)} = Y_{s3}^{(2)} = 2 \left[3L_s^{(1)} \tilde{\eta}^{(1)}(6) + L_s^{(1)} \tilde{\eta}^{(3)}(6) + P_s^{(1)} \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + \right. \\ &+ P_s^{(1)} \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + P_s^{(1)} \tilde{\eta}_3^{(2)}(6) + P_s^{(1)} \left. \right], \\ Y_a &= Y_a^{(1)} = -Y_a^{(3)} = -P_a^{(1)} \tilde{\eta}^{(1)}(6) + P_a^{(1)} \tilde{\eta}^{(3)}(6) - M_a^{(1)} \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + \\ &+ M_a^{(1)} \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + L_a^{(1)} \tilde{\eta}_3^{(2)}(6) - L_a^{(1)}, \\ Y_a^{(2)} &= Y_{a1}^{(2)} = -Y_{a2}^{(2)} = 2 \left[M_a^{(1)} \tilde{\eta}^{(1)}(6) - M_a^{(1)} \tilde{\eta}^{(3)}(6) + P_a^{(1)} \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) - \right. \\ &- P_a^{(1)} \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) - Q_a^{(1)} \tilde{\eta}_3^{(2)}(6) + Q_a^{(1)} \left. \right], \\ Y_{a3}^{(2)} &= 2 \left[-L_a^{(1)} \tilde{\eta}^{(1)}(6) + L_a^{(1)} \tilde{\eta}^{(3)}(6) - Q_a^{(1)} \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + \right. \\ &+ Q_a^{(1)} \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + P_a^{(1)} \tilde{\eta}_3^{(2)}(6) - P_a^{(1)} \left. \right], \\ Y_1^{(1)} &= \left(P_1^{(1)} + Q_{11}^{(1)} + Q_{12}^{(1)} \right) \tilde{\eta}^{(1)}(6) + R_1^{(1)} \tilde{\eta}^{(3)}(6) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ M_{11}^{(1)} \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + M_{12}^{(1)} \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + N_1^{(1)} \tilde{\eta}_3^{(2)}(6) + L_1^{(1)}, \\ Y_1^{(3)} &= \left(2P_1^{(1)} + 2Q_{12}^{(1)} + 2Q_{12}^{(1)} + 3R_1^{(1)} \right) \tilde{\eta}^{(1)}(6) + \\ &+ (P_1^{(1)} + Q_{11}^{(1)} + Q_{12}^{(1)}) \tilde{\eta}^{(3)}(6) + \\ &+ \left(N_1^{(1)} + M_{12}^{(1)} + L_1^{(1)} \right) \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + \left(N_1^{(1)} + M_{11}^{(1)} + L_1^{(1)} \right) \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + \\ &+ \left(M_{11}^{(1)} + M_{12}^{(1)} + L_1^{(1)} \right) \tilde{\eta}_3^{(2)}(6) + \left(N_1^{(1)} + M_{11}^{(1)} + M_{12}^{(1)} \right), \\ Y_1^{(2)} &= 2 \left(N_1^{(1)} + M_{12}^{(1)} + L_1^{(1)} \right) \tilde{\eta}^{(1)}(6) + 2M_{11}^{(1)} \tilde{\eta}^{(3)}(6) + \\ &+ 2R_1^{(1)} \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + 2P_1^{(1)} \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + 2Q_{11}^{(1)} \tilde{\eta}_3^{(2)}(6) + 2Q_{12}^{(1)}, \\ Y_2^{(2)} &= 2 \left(N_1^{(1)} + M_{11}^{(1)} + L_1^{(1)} \right) \tilde{\eta}^{(1)}(6) + 2M_{12}^{(1)} \tilde{\eta}^{(3)}(6) + \\ &+ 2P_1^{(1)} \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + 2R_1^{(1)} \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + 2Q_{12}^{(1)} \tilde{\eta}_3^{(2)}(6) + 2Q_{11}^{(1)}, \\ Y_3^{(2)} &= 2 \left(M_{11}^{(1)} + M_{12}^{(1)} L_1^{(1)} \right) \tilde{\eta}^{(1)}(6) + 2N_1^{(1)} \tilde{\eta}^{(3)}(6) + \\ &+ 2Q_{11}^{(1)} \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + 2Q_{12}^{(1)} \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + 2R_1^{(1)} \tilde{\eta}_3^{(2)}(6) + 2P_1^{(1)}. \end{aligned}$$

Враховуючи вирази (7.3), рівняння для зміщень (7.2) запишемо у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_{1t}}{\partial t^2} &= c_{16} \frac{\partial \varepsilon_{6t}}{\partial y} + c_{26} \frac{\partial \eta_t^{(1)}(6)}{\partial y}, \\ \rho \frac{\partial^2 u_{2t}}{\partial t^2} &= c_{16} \frac{\partial \varepsilon_{6t}}{\partial x} + c_{26} \frac{\partial \eta_t^{(1)}(6)}{\partial x}, \end{aligned} \quad (7.5)$$

де використані наступні позначення:

$$\begin{aligned} c_{16} &= c_{66}^{E0} + \frac{4\beta\psi_6}{vD_6} f_6 - \\ &- \frac{2\beta}{vD_6} \left[\delta_{s6}^2 \cosh(2\tilde{z}_6 + \beta\delta_{s6}\tilde{\varepsilon}_6) + \delta_{16}^2 4b \cosh(\tilde{z}_6 - \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6) + \right. \\ &+ \delta_{a6}^2 2a \cosh \beta\delta_{a6}\tilde{\varepsilon}_6 \left. \right] + \frac{2\beta}{vD_6^2} (-\delta_{s6}M_{s6} + \delta_{16}M_{16} + \delta_{a6}M_{a6})^2, \\ c_{26} &= \frac{4}{v} \left(\psi_6 - \frac{\varphi_6^\eta}{D_6} f_6 \right), \end{aligned}$$

Розв'язки систем (7.4) і (7.5) шукатимемо у вигляді гармонічних хвиль

$$\eta_t^{(1)}(6) = \eta_E^{(1)}(6, x, y) e^{i\omega_E t}, \quad \eta_t^{(3)}(6) = \eta_E^{(3)}(6, x, y) e^{i\omega_E t},$$

$$\begin{aligned}\eta_{1t}^{(2)}(6) &= \eta_{1E}^{(2)}(6, x, y)e^{i\omega_E t}, \quad \eta_{2t}^{(2)}(6) = \eta_{2E}^{(2)}(6, x, y)e^{i\omega_E t}, \quad (7.6) \\ \eta_{3t}^{(2)}(6) &= \eta_{3E}^{(2)}(6, x, y)e^{i\omega_E t}, \quad \varepsilon_{6t} = \varepsilon_{6E}(x, y)e^{i\omega_E t}, \\ u_{1t} &= u_{1E}(y)e^{i\omega_E t}, \quad u_{2t} = u_{2E}(x)e^{i\omega_E t}.\end{aligned}$$

В результаті, розв'язуючи систему рівнянь (7.4) з врахуванням (7.6), знаходимо, що

$$\begin{aligned}\eta_E^{(1)}(6, x, y) &= \frac{\beta\mu_3}{2}F^{(1)}(\alpha\omega_E)E_3 + \left[-\beta\psi_6F^{(1)}(\alpha\omega_E) + \right. \quad (7.7) \\ &\quad \left. + \beta\delta_{s6}F_s^{(1)}(\alpha\omega_E) - \beta\delta_{a6}F_a^{(1)}(\alpha\omega_E) + \beta\delta_{16}F_1^{(1)}(\alpha\omega_E)\right]\varepsilon_{6E}(x, y),\end{aligned}$$

де використані наступні позначення:

$$\begin{aligned}F^{(1)}(\alpha\omega) &= \frac{p^{(4)}(i\alpha\omega)^4 + p^{(3)}(i\alpha\omega)^3 + p^{(2)}(i\alpha\omega)^2 + p^{(1)}(i\alpha\omega) + p^{(0)}}{(i\alpha\omega)^5 + p_4(i\alpha\omega)^4 + p_3(i\alpha\omega)^3 + p_2(i\alpha\omega)^2 + p_1(i\alpha\omega) + p_0}, \\ F_s^{(1)}(\alpha\omega) &= \frac{p_s^{(4)}(i\alpha\omega)^4 + p_s^{(3)}(i\alpha\omega)^3 + p_s^{(2)}(i\alpha\omega)^2 + p_s^{(1)}(i\alpha\omega) + p_s^{(0)}}{(i\alpha\omega)^5 + p_4(i\alpha\omega)^4 + p_3(i\alpha\omega)^3 + p_2(i\alpha\omega)^2 + p_1(i\alpha\omega) + p_0}, \\ F_a^{(1)}(\alpha\omega) &= \frac{p_a^{(4)}(i\alpha\omega)^4 + p_a^{(3)}(i\alpha\omega)^3 + p_a^{(2)}(i\alpha\omega)^2 + p_a^{(1)}(i\alpha\omega) + p_a^{(0)}}{(i\alpha\omega)^5 + p_4(i\alpha\omega)^4 + p_3(i\alpha\omega)^3 + p_2(i\alpha\omega)^2 + p_1(i\alpha\omega) + p_0}, \\ F_1^{(1)}(\alpha\omega) &= \frac{p_1^{(4)}(i\alpha\omega)^4 + p_1^{(3)}(i\alpha\omega)^3 + p_1^{(2)}(i\alpha\omega)^2 + p_1^{(1)}(i\alpha\omega) + p_1^{(0)}}{(i\alpha\omega)^5 + p_4(i\alpha\omega)^4 + p_3(i\alpha\omega)^3 + p_2(i\alpha\omega)^2 + p_1(i\alpha\omega) + p_0}.\end{aligned} \quad (7.8)$$

У (7.8) вирази $p_4, \dots, p_0, p^{(4)}, \dots, p^{(0)}$ задаються співвідношеннями (6.7) і (6.10), а

$$\begin{aligned}p_s^{(4)} &= -c_{1s}, \quad p_a^{(4)} = -c_{1a}, \quad p_1^{(4)} = -\tilde{c}_{11}, \\ p_s^{(3)} &= -\left(\begin{vmatrix} c_{12} & c_{1s} \\ c_{22} & c_{3s} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{13} & c_{1s} \\ c_{33} & c_{2s} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{14} & c_{1s} \\ c_{44} & c_{2s} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{15} & c_{1s} \\ c_{55} & c_{2s} \end{vmatrix}\right), \\ p_a^{(3)} &= -\left(\begin{vmatrix} c_{12} & c_{1a} \\ c_{22} & -c_{1a} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{13} & c_{1a} \\ c_{33} & c_{2a} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{14} & c_{1a} \\ c_{44} & -c_{2a} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{15} & c_{1a} \\ c_{55} & c_{3a} \end{vmatrix}\right), \\ p_1^{(3)} &= -\left(\begin{vmatrix} c_{12} & \tilde{c}_{11} \\ c_{22} & \tilde{c}_{21} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{13} & \tilde{c}_{11} \\ c_{33} & \tilde{c}_{31} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{14} & \tilde{c}_{11} \\ c_{44} & \tilde{c}_{41} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{15} & \tilde{c}_{11} \\ c_{55} & \tilde{c}_{51} \end{vmatrix}\right), \\ p_s^{(2)} &= -\left(\begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & c_{1s} \\ c_{22} & c_{23} & c_{3s} \\ c_{32} & c_{33} & c_{2s} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{14} & c_{1s} \\ c_{22} & c_{24} & c_{3s} \\ c_{42} & c_{44} & c_{2s} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{15} & c_{1s} \\ c_{22} & c_{25} & c_{3s} \\ c_{52} & c_{55} & c_{2s} \end{vmatrix} + \right. \\ &\quad \left. + \begin{vmatrix} c_{13} & c_{14} & c_{1s} \\ c_{33} & c_{34} & c_{2s} \\ c_{43} & c_{44} & c_{2s} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{13} & c_{15} & c_{1s} \\ c_{33} & c_{35} & c_{2s} \\ c_{53} & c_{45} & c_{2s} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{14} & c_{15} & c_{1s} \\ c_{44} & c_{45} & c_{2s} \\ c_{54} & c_{55} & c_{2s} \end{vmatrix}\right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}p_a^{(2)} &= -\left(\begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & c_{1a} \\ c_{22} & c_{23} & -c_{1a} \\ c_{32} & c_{33} & c_{2a} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{14} & c_{1a} \\ c_{22} & c_{24} & -c_{1a} \\ c_{42} & c_{44} & -c_{2a} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{15} & c_{1a} \\ c_{22} & c_{25} & -c_{1a} \\ c_{52} & c_{55} & c_{3a} \end{vmatrix} + \right. \\ &\quad \left. + \begin{vmatrix} c_{13} & c_{14} & c_{1a} \\ c_{33} & c_{34} & c_{2a} \\ c_{43} & c_{44} & -c_{2a} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{13} & c_{15} & c_{1a} \\ c_{33} & c_{35} & c_{2a} \\ c_{53} & c_{45} & c_{3a} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{14} & c_{15} & c_{1a} \\ c_{44} & c_{45} & -c_{2a} \\ c_{54} & c_{55} & c_{3a} \end{vmatrix}\right), \\ p_1^{(2)} &= -\left(\begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & \tilde{c}_{11} \\ c_{22} & c_{23} & \tilde{c}_{21} \\ c_{32} & c_{33} & \tilde{c}_{31} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{14} & \tilde{c}_{11} \\ c_{22} & c_{24} & \tilde{c}_{21} \\ c_{42} & c_{44} & \tilde{c}_{41} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{15} & \tilde{c}_{11} \\ c_{22} & c_{25} & \tilde{c}_{21} \\ c_{52} & c_{55} & \tilde{c}_{51} \end{vmatrix} + \right. \\ &\quad \left. + \begin{vmatrix} c_{13} & c_{14} & \tilde{c}_{11} \\ c_{33} & c_{34} & \tilde{c}_{31} \\ c_{43} & c_{44} & \tilde{c}_{41} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{13} & c_{15} & \tilde{c}_{11} \\ c_{33} & c_{35} & \tilde{c}_{31} \\ c_{53} & c_{45} & \tilde{c}_{51} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{14} & c_{15} & \tilde{c}_{11} \\ c_{44} & c_{45} & \tilde{c}_{41} \\ c_{54} & c_{55} & \tilde{c}_{51} \end{vmatrix}\right), \\ p_s^{(1)} &= -\left(\begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{1s} \\ c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{3s} \\ c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{2s} \\ c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{2s} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & c_{15} & c_{1s} \\ c_{22} & c_{23} & c_{25} & c_{3s} \\ c_{32} & c_{33} & c_{35} & c_{2s} \\ c_{52} & c_{53} & c_{55} & c_{2s} \end{vmatrix} + \right. \\ &\quad \left. + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{14} & c_{15} & c_{1s} \\ c_{22} & c_{24} & c_{25} & c_{3s} \\ c_{42} & c_{44} & c_{45} & c_{2s} \\ c_{52} & c_{54} & c_{55} & c_{2s} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{1s} \\ c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{2s} \\ c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{2s} \\ c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{2s} \end{vmatrix}\right), \\ p_a^{(1)} &= -\left(\begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{1a} \\ c_{22} & c_{23} & c_{24} & -c_{1a} \\ c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{2a} \\ c_{42} & c_{43} & c_{44} & -c_{2a} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & c_{15} & c_{1a} \\ c_{22} & c_{23} & c_{25} & -c_{1a} \\ c_{32} & c_{33} & c_{35} & c_{2a} \\ c_{52} & c_{53} & c_{55} & c_{3a} \end{vmatrix} + \right. \\ &\quad \left. + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{14} & c_{15} & c_{1a} \\ c_{22} & c_{24} & c_{25} & -c_{1a} \\ c_{42} & c_{44} & c_{45} & -c_{2a} \\ c_{52} & c_{54} & c_{55} & c_{3a} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{1a} \\ c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{2a} \\ c_{43} & c_{44} & c_{45} & -c_{2a} \\ c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{3a} \end{vmatrix}\right), \\ p_1^{(1)} &= -\left(\begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & c_{14} & \tilde{c}_{11} \\ c_{22} & c_{23} & c_{24} & \tilde{c}_{21} \\ c_{32} & c_{33} & c_{34} & \tilde{c}_{31} \\ c_{42} & c_{43} & c_{44} & \tilde{c}_{41} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & c_{15} & \tilde{c}_{11} \\ c_{22} & c_{23} & c_{25} & \tilde{c}_{21} \\ c_{32} & c_{33} & c_{35} & \tilde{c}_{31} \\ c_{52} & c_{53} & c_{55} & \tilde{c}_{51} \end{vmatrix} + \right. \\ &\quad \left. + \begin{vmatrix} c_{12} & c_{14} & c_{15} & \tilde{c}_{11} \\ c_{22} & c_{24} & c_{25} & \tilde{c}_{21} \\ c_{42} & c_{44} & c_{45} & \tilde{c}_{41} \\ c_{52} & c_{54} & c_{55} & \tilde{c}_{51} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} c_{13} & c_{14} & c_{15} & \tilde{c}_{11} \\ c_{33} & c_{34} & c_{35} & \tilde{c}_{31} \\ c_{43} & c_{44} & c_{45} & \tilde{c}_{41} \\ c_{53} & c_{54} & c_{55} & \tilde{c}_{51} \end{vmatrix}\right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p_s^{(0)} &= - \begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{1s} \\ c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{3s} \\ c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{2s} \\ c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{2s} \\ c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{2s} \end{vmatrix}, \\
p_a^{(0)} &= - \begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{1a} \\ c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & -c_{1a} \\ c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{2a} \\ c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & -c_{2a} \\ c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{3a} \end{vmatrix}, \\
p_1^{(0)} &= - \begin{vmatrix} c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & \tilde{c}_{11} \\ c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & \tilde{c}_{21} \\ c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & \tilde{c}_{31} \\ c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & \tilde{c}_{41} \\ c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & \tilde{c}_{51} \end{vmatrix}.
\end{aligned}$$

Враховуючи співвідношення (7.5) і (7.6), отримуємо наступні хвилюв'язки рівняння для u_{1E} , u_{2E} :

$$c_{66}^E(\alpha\omega_E) \frac{\partial^2 u_{2E}}{\partial y^2} + \rho\omega_E^2 u_{1E} = 0, \quad c_{66}^E(\alpha\omega_E) \frac{\partial^2 u_{2E}}{\partial x^2} + \rho\omega_E^2 u_{2E} = 0, \quad (7.9)$$

де

$$\begin{aligned}
c_{66}^E(\alpha\omega) &= c_{66}^{E0} + \\
&+ \frac{4\beta\psi_6}{v} \left[-\psi_6 F^{(1)}(\alpha\omega) + \delta_{s6} F_s^{(1)}(\alpha\omega) + \delta_{16} F_1^{(1)}(\alpha\omega) - \delta_{a6} F_a^{(1)}(\alpha\omega) \right] - \\
&- \frac{4\varphi_3 f_6}{vD_6} \beta \left[-\psi_6 F^{(1)}(\alpha\omega) + \delta_{s6} F_s^{(1)}(\alpha\omega) + \delta_{16} F_1^{(1)}(\alpha\omega) - \delta_{a6} F_a^{(1)}(\alpha\omega) \right] - \\
&- \frac{2\beta}{vD_6} \left[\delta_{s6}^2 \cosh(2\tilde{z} + \beta\delta_{s6}\tilde{\varepsilon}_6) + \delta_{16}^2 \cosh(\tilde{z} - \beta\delta_{16}\tilde{\varepsilon}_6) + \delta_{a6}^2 2a \cosh\beta\delta_{a6}\tilde{\varepsilon}_6^2 \right] + \\
&+ \frac{4\beta\psi_6}{vD_6} f_6 + \frac{2\beta}{vD_6^2} (-\delta_{s6}M_{s6} + \delta_{16}M_{16} + \delta_{a6}M_{a6})^2.
\end{aligned}$$

Рівняння (7.9) запишемо в такому вигляді:

$$\frac{\partial^2 u_{1E}}{\partial y^2} + k_{6E}^2 u_{1E} = 0, \quad \frac{\partial^2 u_{2E}}{\partial x^2} + k_{6E}^2 u_{2E} = 0, \quad (7.10)$$

де k_{6E} – хвильове число

$$k_{6E} = \frac{\omega_E \sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{66}^E(\alpha\omega_E)}}. \quad (7.11)$$

Розв'язки рівнянь (7.10) шукаємо у наступному вигляді:

$$u_{1E} = A_{1E} \cos k_{6E}y + B_{1E} \sin k_{6E}y; \quad u_{2E} = A_{2E} \cos k_{6E}x + B_{2E} \sin k_{6E}x.$$

В результаті

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{6E}(x, y) &= k_{6E} \left[-(A_{1E} \cos k_{6E}y + A_{2E} \cos k_{6E}x) + \right. \\
&\quad \left. + (B_{1E} \sin k_{6E}y + B_{2E} \sin k_{6E}x) \right]. \quad (7.12)
\end{aligned}$$

Граничні умови задаємо в наступному вигляді:

$$\varepsilon_{6E}(0, 0) = \varepsilon_{6E}(l, l) = \varepsilon_{6E}(0, l) = \varepsilon_{6E}(l, 0) = \varepsilon_{0E}. \quad (7.13)$$

Значення ε_{0E} знаходимо із виразу (7.4), враховуючи співвідношення (7.9). В результаті

$$\varepsilon_{0E} = \frac{e_{36}(\alpha\omega_E)}{c_{66}^E(\alpha\omega_E)} E_3. \quad (7.14)$$

де

$$\begin{aligned}
e_{36}(\alpha\omega_E) &= e_{36}^0 + \frac{\beta\mu_3}{v} \left[-\psi_6 F^{(1)}(\alpha\omega_E) + \delta_{s6} F_s^{(1)}(\alpha\omega_E) + \right. \\
&\quad \left. + \delta_{16} F_1^{(1)}(\alpha\omega_E) - \delta_{a6} F_a^{(1)}(\alpha\omega_E) \right]. \quad (7.15)
\end{aligned}$$

Враховуючи граничні умови (7.14), із виразів (7.12) знаходимо, що

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{6E}(x, y) &= \frac{\varepsilon_{0E}}{2} \left[-\frac{\cos k_{6E}l - 1}{\sin k_{6E}l} (\sin k_{6E}y + \sin k_{6E}x) + \right. \\
&\quad \left. + (\cos k_{6E}y + \cos k_{6E}x) \right]. \quad (7.16)
\end{aligned}$$

Використовуючи вираз, який зв'язує поляризацію P_3 з параметром порядку $\eta^{(1)}$ та деформацією ε_6 , а також співвідношення (7.7), знаходимо, що

$$P_3(x, y, t) = P_{3E}(x, y) e^{i\omega_E t}, \quad (7.17)$$

де

$$P_{3E}(x, y) = e_{36}(\alpha\omega_E) \varepsilon_{6E}(x, y) + \chi_{33}^{\varepsilon}(\alpha\omega_E) E_3,$$

а

$$\chi_{33}(\alpha\omega_E) = \chi_{33}^{\varepsilon_0} + \frac{\beta\mu_3^2}{2v} F^{(1)}(\alpha\omega_E).$$

Розрахуємо тепер діелектричну динамічну сприйнятливість $\chi_{33}^\sigma(\alpha\omega_E)$ вільного кристалу, яка визначається наступним співвідношенням:

$$\chi_{33}^\sigma(\alpha\omega_E) = \frac{1}{l^2} \frac{\partial}{\partial E_3} \int_0^l \int_0^l P_{3E}(x, y) dx dy. \quad (7.18)$$

Враховуючи вирази (7.19), знаходимо, що

$$\frac{1}{l^2} \int_0^l \int_0^l dx dy \varepsilon_{6E}(x, y) = \frac{2\varepsilon_{0E}}{k_{6E}} \tan \frac{k_{6E}l}{2} = \frac{\varepsilon_{0E}}{R(\omega_E)}, \quad (7.19)$$

де

$$\frac{1}{R(\omega)} = \frac{2}{k_{6E}l} \tan \frac{k_{6E}l}{2}.$$

Беручи до уваги співвідношення (7.17) і (7.19), на основі виразів (7.18), отримуємо, що

$$\chi_{33}^\sigma(\alpha\omega_E) = \chi_{33}^\varepsilon(\alpha\omega_E) + \frac{1}{R(\omega_E)} \frac{e_{36}^2(\alpha\omega_E)}{c_{66}^E(\alpha\omega_E)}. \quad (7.20)$$

8. Поглинання і швидкість ультразвуку в кристалах KD_2PO_4

Ефективним методом вивчення поведінки кристалів є проходження через них ультразвукових хвиль, довжина яких набагато менша від лінійних розмірів зразка. При цьому всі динамічні змінні, а саме параметр порядку, елементарні зміщення, залежать лише від координати напрямку поширення хвилі. Якщо тонкі бруски кристалу вирізані вздовж напрямку $[001]$, то вздовж бруска поширюється поперечна ультразвукова хвиля, яка поляризована вздовж $[010]$. Серед похідних $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ відмінною від нуля є лише $\frac{\partial u_2}{\partial x}$ і тому замість систем рівнянь (7.4) і (7.5) можна записати наступні рівняння:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_t^{(1)}(6) \\ \eta_t^{(3)}(6) \\ \eta_{1t}^{(2)}(6) \\ \eta_{2t}^{(2)}(6) \\ \eta_{3t}^{(2)}(6) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_t^{(1)}(6) \\ \eta_t^{(3)}(6) \\ \eta_{1t}^{(2)}(6) \\ \eta_{2t}^{(2)}(6) \\ \eta_{3t}^{(2)}(6) \end{pmatrix} +$$

$$+ \beta \psi_{6\varepsilon_{6t}} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \end{pmatrix} - \beta \delta_{s6\varepsilon_{6t}} \begin{pmatrix} c_{1s} \\ c_{3s} \\ c_{2s} \\ c_{2s} \\ c_{2s} \end{pmatrix} + \beta \delta_{a6\varepsilon_{6t}} \begin{pmatrix} c_{1a} \\ -c_{1a} \\ c_{2a} \\ -c_{2a} \\ c_{3a} \end{pmatrix} - \beta \delta_{16\varepsilon_{6t}} \begin{pmatrix} \tilde{c}_{11} \\ \tilde{c}_{21} \\ \tilde{c}_{31} \\ \tilde{c}_{41} \\ \tilde{c}_{51} \end{pmatrix};$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_{2t}}{\partial t^2} = c_{16} \frac{\partial \varepsilon_{6t}}{\partial x} + c_{26} \frac{\partial \eta_t^{(1)}(6)}{\partial x}. \quad (8.1)$$

Розв'язуючи систему рівнянь (8.1), отримуємо для такого вибору брусків хвильове число, яке співпадає із знайденим вище, а саме

$$k_6 = \frac{\omega \sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{66}^E(\alpha\omega)}}. \quad (8.2)$$

Використовуючи співвідношення (8.2), можна розрахувати швидкість ультразвукової хвилі, а саме

$$v_{66}(\omega) = \frac{\omega}{\text{Re}|k_6|} = \text{Re} \frac{\sqrt{c_{66}^E(\alpha\omega)}}{\sqrt{\rho}} \quad (8.3)$$

і внесок квазіспінової підсистеми у коефіцієнт поглинання звуку:

$$\varkappa(\omega) = \varkappa_0 - \text{Im}|k_6| = \varkappa_0 - \text{Im} \left| \frac{\omega \sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{66}^E(\alpha\omega)}} \right|, \quad (8.4)$$

де $\varkappa_0$ – сталий, частотно і температурно незалежний доданок, який описує внесок інших механізмів у поглинання, що спостерігається на експерименті.

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

Перейдемо тепер до аналізу результатів числового розрахунку, отриманих у рамках запропонованої моделі, поздовжніх діелектричних, теплових, п'єзоелектричних та пружних характеристик кристалів $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$ ($\text{M} = \text{K}, \text{Rb}; \text{X} = \text{P}, \text{As}$) і порівняємо їх з відповідними експериментальними даними для цих кристалів. Відзначимо, що розвинута в попередніх параграфах теорія, строго кажучи, справедлива для кристалів типу MD_2XO_4 . Експериментальні ж дані стосуються кристалів $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$ із концентраціями дейтерію

x ($0 \leq x \leq 1$). Встановлений експериментальним шляхом релаксаційний характер дисперсії $\varepsilon_{33}^*(\nu, T)$ [16,19,31,75] у цього типу кристалах, слідуючи [80–82], скоріше всього пов'язаний з ефектом подавлення тунелювання короткосяжними взаємодіями. У зв'язку з цим ефектами тунелювання протонів на водневих зв'язках надалі будемо нехтувати. При цьому вважатимемо, що і для кристалів $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$ справедливою є запропонована теорія з усередненими ефективними мікропараметрами.

Головним завданням тепер є дослідження розрахованих на основі отриманих виразів залежностей статичних і динамічних поздовжніх діелектричних, теплових, п'єзоелектричних характеристик кристалів $M(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ від параметрів теорії і визначення оптимальних параметрів, які дозволили б отримати добре кількісне узгодження теоретичних розрахунків з відповідними експериментальними даними.

Для вибору оптимальних параметрів теорії необхідно використовувати залежність температури переходу T_c від концентрації дейтерію x . І тому зупинимось на експериментальних даних для $T_c(x)$ для $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$, які наведені на рис.2. Як видно, має місце досить великий розкид значень $T_c(x)$, наведений різними авторами.

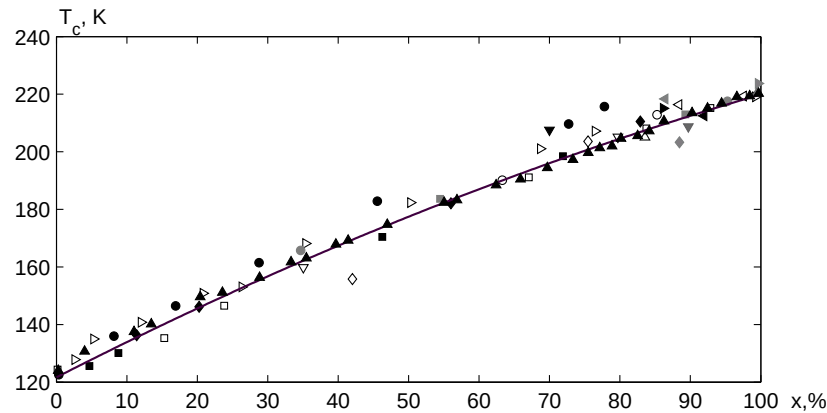


Рис. 2. Залежність температури фазового переходу $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ від концентрації дейтерію x : $\circ$ [13], $\bullet$ [14], $\bullet$ [15], $\square$ [16], $\blacksquare$ [17], $\blacksquare$ [18], $\diamond$ [19], $\diamond$ [20], $\blacklozenge$ [21], $\triangle$ [22], $\blacktriangle$ [23], $\blacktriangle$ [24,25], ∇ [26], ∇ [27], $\blacktriangledown$ [28], $\triangleright$ [29], $\blacktriangleright$ [30], $\blacktriangleright$ [31], $\triangleleft$ [32], $\blacktriangleleft$ [33], $\blacktriangleleft$ [34]. Лінія – використана в теорії залежність $T_c(x)$.

У роботах [19,46,83] залежність $T_c(x)$ кристалів $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ вважається лінійною і описується емпіричною залежністю $T_c = 123 + 106x \pm 2$ [19], $T_c = 121,7 + 107x$ [83]. Однак у цих роботах використана мала кількість зразків і невисокою є точність вимірювання $T_c(x)$. У роботах [26,29,47], які характеризуються більш високою точністю вимірювання і більшою кількістю використаних зразків, отримані нелінійні залежності $T_c(x)$. Однак результати цих робіт часто не узгоджуються між собою за величиною $\frac{dT_c}{dx}$ і екстрапольованими значеннями $T_c(0)$ і $T_c(1)$. У роботах [24,25] було проведено ґрунтовне дослідження концентраційної залежності температури фазового переходу для великої кількості зразків кристалу $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ і був підтверджений нелінійний характер $T_c(x)$. Порівнюючи дані робіт [24,25] із результатами $T_c(x)$ інших авторів, можна помітити, що значення $T_c(x)$ [24,25] узгоджуються з даними робіт [26], [83] в інтервалі $0 \leq x \leq 0,4$ із даними [47] в інтервалі складів $0 \leq x \leq 0,3$. Окремі значення T_c із [19] ($x = 0,35; 0,68$) та ($x = 0,4$) [83] співпадають з відповідними результатами робіт [24,25]. Але в інтервалі складів $0,4 \leq x \leq 1$ значення робіт [19,46,47,83] для $T_c(x)$ на 5–10 К вищі від отриманих у [24,25]. Досить великий розкид даних для $T_c(x)$ пов'язаний, скоріше всього, з неточним визначенням концентрацій дейтерію у зразках $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$, які досліджувались різними авторами. Надалі будемо ґрунтуватися на даних для $T_c(x)$, наведених у [24,25]. Беручи до уваги цю залежність $T_c(x)$ і дані тих робіт для $T_c(x)$, які відхиляються від результатів робіт [24,25], можна уточнити концентрацію x дейтерію у кристалах $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$. Суцільна лінія на рис.2 – використана в теорії залежність $T_c(x)$.

Експериментальні значення температури переходу T_c при різних значеннях x для кристалу $Rb(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ наведені на рис.3. Концентраційна залежність $T_c(x)$ у $Rb(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ є майже лінійною, на відміну від нелінійної для кристалів $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$.

У роботі [67] запропоновано емпіричну залежність $T_c(x)$ для $Rb(H_{1-x}D_x)_2PO_4$, а саме $T_c(x) = (146,6 + 108x)K$.

Для порівняння на рис.4 наведені залежності температур фазових переходів $T_c(x)$ від концентрації дейтерію x для кристалів $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$, $Cs(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ і $N(H_{1-x}D_x)_4(H_{1-x}D_x)_2PO_4$. Виявилось, що для кристалів $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$ коефіцієнт $\frac{dT_c(x)}{dx}$ практично однаковий і дещо більший для $Cs(H_{1-x}D_x)_2PO_4$. Залежності $T_c(x)$ для $Rb(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ і $N(H_{1-x}D_x)_4(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ співпадають.

Для кількісної оцінки температурних і частотних залежностей відповідних фізичних характеристик кристалів $M(H_{1-x}D_x)_2PO_4$, от-

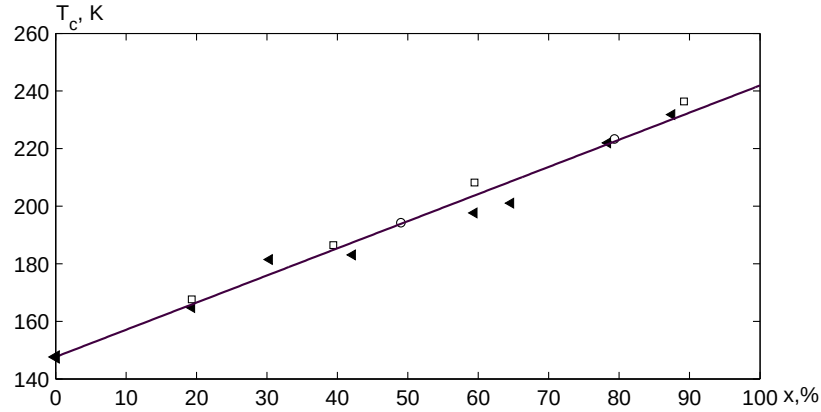


Рис. 3. Залежність температури фазового переходу $\text{Rb}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ від концентрації дейтерію x : $\circ$ [35], $\bullet$ [33], $\square$ [36], $\triangleleft$ [21], $\blacktriangleleft$ [37]. Лінія – використана в теорії залежність $T_c(x)$.

риманих в рамках запропонованої теорії, необхідно задати значення таких параметрів:

- енергій протонних і дейтронних конфігурацій ε_H , w_H , w_{1H} і ε_D , w_D , w_{1D} , відповідно;
- параметрів далекосяжної взаємодії $\nu_c(x)$;
- ефективних дипольних моментів μ_{3H} , μ_{3D} ;
- деформаційних потенціалів ψ_{6H} , $\psi_{6,012H}$, δ_{s6H} , $\delta_{s6,012H}$, δ_{a6H} , $\delta_{a6,012H}$, δ_{16H} , $\delta_{16,012H}$;
- “затравочних” діелектричних сприйнятливостей $\chi_{33H}^{\varepsilon 0}$, $\chi_{33D}^{\varepsilon 0}$;
- “затравочних” пружних сталей c_{66H}^{E0} , $c_{66,012H}^{E0}$;
- “затравочних” коефіцієнтів п’єзоелектричної напруги e_{36H}^0 , $e_{36,012H}^0$;
- параметрів α_H , α_D , що визначають часову шкалу релаксаційних процесів.

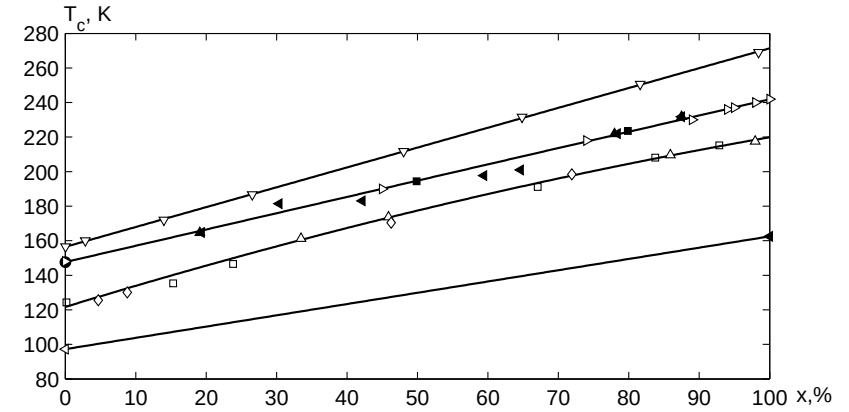


Рис. 4. Залежність температури фазового переходу від концентрації дейтерію x для кристалів $\text{Cs}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ – ∇ [38], $\text{Rb}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ – $\blacktriangleleft$ [37], $\blacksquare$ [89], $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ – $\diamond$ [18], $\square$ [16], $\triangle$ [24, 25], $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{AsO}_4$ – $\triangleleft$ [39], $\blacktriangleleft$ [40], $\text{N}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_4(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ – $\triangleright$ [41]. Лінії – використані в теорії залежності $T_c(x)$.

Індекс H у параметрах теорії відповідає кристалу MH_2XO_4 , а индекс D – MD_2XO_4 . Вважатимемо, що кристалам $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ з різними значеннями x відповідають усереднені ефективні параметри

$$\varepsilon(x) = \varepsilon_H(1-x) + \varepsilon_D x, \quad w(x) = w_H(1-x) + w_D x$$

і так далі.

В отримані теоретично вирази фізичних характеристик крім перерахованих параметрів теорії входить об’єм примітивної комірки кристалів $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$, що складається із двох тетраедрів PO_4 . Враховуючи, що для $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ $v(x) = [0, 19359 + 0, 00184x] \cdot 10^{-21} \text{ см}^3$ [67], нами використані такі значення v для кристалів $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$ (табл.2)

Табл. 2.

	KH_2PO_4	KD_2PO_4	RbH_2PO_4	KH_2AsO_4	KD_2AsO_4
$v, 10^{-21} \text{ см}^3$	0.1936	0.1954	0.2090	0.2052	0.2065

Енергія w_{1H} , яка відповідає двом протонним конфігураціям – чотири біля кисневого тетраедра і жодного протона – повинна бути значно більшою за енергії ε_H і w_H . І тому ми приймаємо $w_{1H} = \infty$ і $w_{1D} = \infty (d = 0)$.

Для визначення перерахованих нижче оптимальних мікропараметрів використаємо температурні залежності фізичних характеристик $M(H_{1-x}D_x)_2PO_4$, які отримані експериментально. Зокрема, для $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ $T_c(x)$ [24,25], $P_s(T)$ [26,42], ε_6 [84,85], $\Delta C_p(T)$ [35,48,50], $\varepsilon_{33}^*(0, T)$ [84,85] [23,26,39,57], d_{36} [57,70,71,59], c_{66}^E [57,66,73,68], $\varepsilon_{33}^*(\omega, T)$ [16], а для $Rb(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ $T_c(x)$ [37], $P_s(T)$ [28], $\Delta C_p(T)$ [35], $\varepsilon_{33}^*(0, T)$ [59], d_{36} [59], c_{66}^E [68], $\varepsilon_{33}^*(\omega, T)$ [76], а для $K(H_{1-x}D_x)_2AsO_4$ $T_c(x)$ [40], $P_s(T)$ [40], $\Delta C_p(T)$ [40], $\varepsilon_{33}^*(0, T)$ [39,40], d_{36} [72], c_{66}^E [72], $\varepsilon_{33}^*(\omega, T)$ [76].

Зупинимось тепер коротко на методиці знаходження параметрів теорії на прикладі кристалу KH_2PO_4 . Спочатку розглянемо випадок, коли п'єзоелектрична взаємодія відсутня і відповідні деформаційні потенціали рівні нулю. У випадку сегнетоелектричної фази головною задачею є розв'язок рівняння для параметра порядку $\eta^{(1)}(6)$. Температурний хід спонтанної поляризації та інших характеристик KH_2PO_4 визначають ті розв'язки рівняння для $\eta^{(1)}(6)$, які задовольняють умову мінімуму термодинамічного потенціалу. Візьмемо до уваги, що фазовий перехід у кристалі KH_2PO_4 є переходом першого роду. Тому при заданих параметрах мікротеорії ε_H і w_H параметр далекосяжної взаємодії ν_c будемо знаходити за допомогою програми мінімізації термодинамічного потенціалу за умови, щоб розраховане значення температури фазового переходу T_c у випадку фазового переходу першого роду відповідало експериментально визначеному. Вибираючи різні набори мікропараметрів ε_H і w_H і знаходячи величини ν_c , знаходимо ті значення цих параметрів, які найкраще кількісно відтворюють температурний хід спонтанної поляризації $P_s(T)$ і протонної теплоємності ΔC_p . Значення ефективного дипольного моменту μ_{3H}^- у сегнетоелектричній фазі визначається шляхом узгодження між теоретичним значенням параметра порядку $\eta^{(1)}(6)$ й експериментальною величиною поляризації насичення, а також із врахуванням температурної залежності $\varepsilon_{33}''(\omega, T)$.

Парафазне значення μ_{3H}^+ визначається з умови узгодження розрахованої на частоті $\nu = 154,2$ ГГц уявної частини діелектричної проникності $\varepsilon_{33}'(\omega, T)$ з відповідним експериментальним результатом роботи [16].

Якщо ж взяти до уваги п'єзоелектричну взаємодію, то, враховуючи проведений вище аналіз, який показав, що внески спонтанної

деформації ε_6 у температурні залежності спонтанної поляризації та протонної теплоємності є незначними, отримані раніше значення ε_H і w_H залишаються незмінними.

“Затравочні” величини χ_{33}^0 , e_{36}^0 , $c_{66}^E = \frac{1}{s_{66}^E}$ визначаються з умови найкращого узгодження теорії з відповідними експериментальними даними у температурних областях, які значно віддалені від температури переходу T_c .

Для вибору оптимального набору деформаційних параметрів ψ_{6H} , δ_{s6H} , δ_{a6H} і δ_{16H} проведено ґрунтовне дослідження їх впливу на температурну залежність розрахованих спонтанної деформації ε_6 , п'єзоелектричних характеристик d_{36} , e_{36} , h_{36} , g_{36} і пружної сталої c_{66}^E . Крім того, ці параметри і параметр далекосяжної взаємодії ν_{CH} входять в електричний термодинамічний потенціал $g_{2E}(6)$. В результаті отримано такий набір параметрів ν_{CH} , ψ_{6H} , δ_{s6H} , δ_{a6H} і δ_{16H} , при якому розрахована на основі потенціалу $g_{2E}(6)$ температура $T_c = 122,5$ К, а температурні залежності розрахованих ε_6 , d_{36} , e_{36} , h_{36} , g_{36} і c_{66}^E співпадають з експериментальними [41,42,57].

Для визначення параметра порядку $\eta^{(1)}(6)$ і спонтанної деформації ε_6 проведена мінімізація термодинамічного потенціалу $g_{2E}(6)$ при $E_3 = 0$ за параметром порядку $\eta^{(1)}(6)$ і знайдено деформацію ε_6 з рівняння (3.2) при $\sigma_6 = 0$. Поведінка $g_{2E}(6)$ є характерною для фазового переходу I роду: нижче точки переходу $g_{2E}(6)$ має три мінімуми – один при $\eta^{(1)}(6) = 0$ і два при $\pm\eta^{(1)}(6) \neq 0$. Останні два мають однакову глибину і є нижчими, ніж при $\eta^{(1)}(6) = 0$. При $T = T_c$ всі мінімуми є однакової глибини (умова на температуру фазового переходу), а при $T > T_c$ центральний мінімум є найглибшим.

Параметр α_H визначали з такої умови, щоб теоретично розраховані криві частотних залежностей $\varepsilon_{33}^*(\omega)$ узгоджувались із кривими, які отримано експериментально. При цьому передбачалось, що параметр α_H незначно змінюється з температурою:

$$\alpha_H = [P_H + R_H|\Delta T|] \cdot 10^{-14}, \quad \Delta T = T - T_c.$$

Отриманий таким чином оптимальний набір параметрів наведений у табл.3 для кристалів $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$, у табл.4 – для $Rb(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ і в табл.5 – для $K(H_{1-x}D_x)_2AsO_4$.

Тепер проаналізуємо отримані результати для модельних параметрів ε_H , w_H і ν_{CH} для кристалів KH_2PO_4 , RbH_2PO_4 і KH_2AsO_4 . Значення параметрів ε_H і w_H для фосфатів (KH_2PO_4 , RbH_2PO_4) є більшими від значень цих параметрів для арсенатів (KH_2AsO_4). Ізоморфне заміщення $K \rightarrow Rb$ приводить до незначної зміни значень параметрів ε_H і w_H , а відношення $\frac{\varepsilon_H}{w_H}$ приблизно однакові, а саме

Табл. 3.

x	T_c (K)	T_0 (K)	$\frac{\varepsilon}{k_B}$ (K)	$\frac{w}{k_B}$ (K)	$\frac{\nu_3(0)}{k_B}$ (K)	$\mu_{3-}, 10^{-18}$ (esu · cm)	$\mu_{3+}, 10^{-18}$ (esu · cm)	χ_{33}^0
0.00	122.5	122.5	56.00	422.0	17.91	1.46	1.71	0.73
0.21	146.0	145.9	63.78	515.8	23.18	1.54	1.79	0.65
0.29	155.0	154.8	66.74	551.5	25.21	1.57	1.82	0.62
0.64	191.0	190.3	79.71	707.8	32.34	1.70	1.96	0.48
0.79	204.0	203.1	85.27	774.8	34.18	1.76	2.02	0.42
0.81	205.6	204.8	85.82	781.5	33.44	1.76	2.02	0.42
0.84	208.0	207.0	87.12	797.1	34.63	1.77	2.03	0.41
0.88	211.0	210.0	88.60	815.0	34.90	1.79	2.05	0.39
0.91	213.2	212.2	89.71	828.4	35.07	1.80	2.06	0.38
0.93	215.0	213.9	90.45	837.3	35.36	1.81	2.07	0.37
0.99	219.0	217.9	92.67	864.1	35.52	1.83	2.09	0.35
1.00	220.1	219.0	93.05	868.6	35.76	1.84	2.10	0.34

x	$\frac{\psi_6}{k_B}$ (K)	$\frac{\delta_{s6}}{k_B}$ (K)	$\frac{\delta_{a6}}{k_B}$ (K)	$\frac{\delta_{16}}{k_B}$ (K)	$c_{66}^0 \cdot 10^{-10}$ (dyn/cm ²)	e_{36}^0 (esu/cm ²)
0.00	-150.00	82.00	-500.00	-400.00	7.10	1000.00
0.64	-142.73	58.73	-863.64	-400.00	6.59	1727.27
0.81	-200.00	52.73	-957.39	-400.00	6.45	1914.77
0.84	-140.45	51.45	-977.27	-400.00	6.43	1954.55
0.88	-140.00	50.00	-1000.00	-400.00	6.40	2000.00
0.93	-139.43	48.18	-1028.41	-400.00	6.36	2056.82
1.00	-138.64	45.64	-1068.18	-400.00	6.30	2136.36

x	P_- (s)	R_- ($\frac{s}{K}$)	P_+ (s)	R_+ ($\frac{s}{K}$)
0.00	0.35	0.0100	0.43	0.0160
0.21	0.85	0.0095	1.22	0.0193
0.29	1.05	0.0093	1.51	0.0217
0.64	1.76	0.0385	2.44	0.0173
0.79	1.92	0.0082	2.65	0.0151
0.81	1.95	0.0082	4.19	0.0001
0.84	2.02	0.0081	2.83	0.0167
0.88	2.10	0.0080	2.90	0.0150
0.91	2.16	0.0079	2.88	0.0130
0.93	2.20	0.0079	3.04	0.0149
0.99	2.72	0.0077	4.21	0.0189
1.00	2.84	0.0077	4.54	0.0349

Табл. 4.

x	T_c (K)	T_0 (K)	$\frac{\varepsilon}{k_B}$ (K)	$\frac{w}{k_B}$ (K)	$\frac{\nu_3(0)}{k_B}$ (K)	$\mu_{3-}, 10^{-18}$ (esu · cm)	$\mu_{3+}, 10^{-18}$ (esu · cm)	χ_{33}^0
0.00	147.6	147.6	60.00	440.0	29.13	1.50	2.00	0.40
0.48	193.0	192.5	78.00	645.8	36.52	1.68	2.03	0.39
0.80	223.0	222.1	90.00	783.0	41.47	1.80	2.05	0.39

x	$\frac{\psi_6}{k_B}$ (K)	$\frac{\delta_{s6}}{k_B}$ (K)	$\frac{\delta_{a6}}{k_B}$ (K)	$\frac{\delta_{16}}{k_B}$ (K)	$c_{66}^0 \cdot 10^{-10}$ (dyn/cm ²)	e_{36}^0 (esu/cm ²)
0.00	-130.00	50.00	-500.00	-300.00	5.90	3000.00
0.48	-124.00	44.00	-620.00	-300.00	6.32	2400.00
0.80	-120.00	40.00	-700.00	-300.00	6.60	2000.00

x	P_- (s)	R_- ($\frac{s}{K}$)	P_+ (s)	R_+ ($\frac{s}{K}$)
0.00	0.55	0.0080	0.93	0.0140

Табл. 5.

x	T_c (K)	T_0 (K)	$\frac{\varepsilon}{k_B}$ (K)	$\frac{w}{k_B}$ (K)	$\frac{\nu_3(0)}{k_B}$ (K)	$\mu_{3-}, 10^{-18}$ (esu · cm)	$\mu_{3+}, 10^{-18}$ (esu · cm)	χ_{33}^0
0.00	97.0	95.8	35.50	385.0	17.43	1.61	1.65	0.70
1.00	162.0	158.7	56.00	690.0	31.72	2.20	2.20	0.50

x	$\frac{\psi_6}{k_B}$ (K)	$\frac{\delta_{s6}}{k_B}$ (K)	$\frac{\delta_{a6}}{k_B}$ (K)	$\frac{\delta_{16}}{k_B}$ (K)	$c_{66}^0 \cdot 10^{-10}$ (dyn/cm ²)	e_{36}^0 (esu/cm ²)
0.00	-170.00	130.00	-500.00	-500.00	7.50	3000.00
1.00	-160.00	120.00	-800.00	-500.00	6.95	3000.00

x	P_- (s)	R_- ($\frac{s}{K}$)	P_+ (s)	R_+ ($\frac{s}{K}$)
0.00	0.47	0.0160	0.61	0.0190

рівні 7,1 у KH_2PO_4 і 7,2 у RbH_2PO_4 . Зміна значення параметра далекодії ν_c при ізоморфному заміщенні $\text{K} \rightarrow \text{Rb}$ близька за величиною до його зміни при ізоморфному заміщенні $\text{P} \rightarrow \text{As}$, але протилежна за знаком. Спробуємо пояснити особливості у зміні значень параметрів ε_H , w_H , ν_{CH} при переході від одного кристалу до іншого. На значення енергії ε_H нейтральних конфігурацій протонів впливає насамперед асиметрія розміщення водневих зв'язків біля ідеального тетраедра PO_4 . На значення енергії ε_H впливає також неідеальність тетраедра PO_4 й асиметрія його оточення вздовж і перпендикулярно до тетрагональної осі c [86]. За відсутності всіх цих асиметрій $\varepsilon_H = 0$. Отже, зміна значення енергії ε_H пов'язана зі зміною цих асиметрій. У кристалі KH_2PO_4 кутове викривлення тетраедра PO_4 є більшим, ніж у кристалі KH_2AsO_4 [87], і тому значення енергії ε_H для кристала KH_2PO_4 отримано більшим, ніж для кристала KH_2AsO_4 . Енергія w_H заряджених конфігурацій є менш чутливою до цих асиметрій. Менше значення енергії w_H для кристала KH_2AsO_4 порівняно зі значенням w_H для KH_2PO_4 можна пояснити послабленням електричної взаємодії, оскільки віддаль $\text{P}-\text{O}$ є меншою за віддаль $\text{As}-\text{O}$ [87,88].

У роботі [28] відзначено, що відношення величин мікропараметрів, що відповідають кристалу KH_2XO_4 , до відповідних величин кристалу KD_2XO_4 є приблизно однаковими. В нашому випадку для $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ $\frac{T_{CH}}{T_{CD}} = 0,556$, $\frac{\varepsilon_H}{\varepsilon_D} = 0,601$, $\frac{w_H}{w_D} = 0,485$, $\frac{\nu_{CH}}{\nu_{CD}} = 0,507$, $\frac{\mu_{3-H}^2}{\mu_{3-D}^2} = 0,629$, $\frac{\mu_{3+H}^2}{\mu_{3+D}^2} = 0,663$, а для $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{AsO}_4$ $\frac{T_{CH}}{T_{CD}} = 0,634$, $\frac{\varepsilon_H}{\varepsilon_D} = 0,634$, $\frac{w_H}{w_D} = 0,558$, $\frac{\nu_{CH}}{\nu_{CD}} = 0,598$, $\frac{\mu_{3-H}^2}{\mu_{3-D}^2} = 0,732$, $\frac{\mu_{3+H}^2}{\mu_{3+D}^2} = 0,750$.

З табл.3–5 видно, що для опису температурного ходу поляризації і статичної діелектричної проникності в парафазі значення ефективного дипольного моменту μ_3 слід покладати різними, причому $\mu_3^+ > \mu_3^-$. Таким же є вибір μ_3 і в інших роботах, зокрема [27]. У роботі [77] відмінність від одиниці відношення $\frac{\mu_3^+}{\mu_3^-}$ пояснено існуванням у кристалі недодемпорованої м'якої моди. Неможливість описати в рамках моделі лад-безлад як поляризацію, так і парафазну статичну проникність без введення для двох різних фаз двох значень μ_3 показує границі застосовності даної моделі. Тому крім моделі протонного впорядкування слід включити до розгляду фононні ступені вільності та ангармонізми.

Розраховані на основі модельних параметрів для $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$ різниці температур Кюрі-Вейса вільного і затиснутого кристалів $T_0^\sigma - T_0^\varepsilon$, різниці температур фазового переходу і температури Кюрі-Вейса вільного кристалу $T_c - T_0^\sigma$, а також дані

інших робіт наведені в табл.6.

Табл. 6.

	$T_0^\sigma - T_0^\varepsilon$ (К)	$T_0^\sigma - T_0^\varepsilon$ (К)	$T_c - T_0^\sigma$ (К)	$T_c - T_0^\sigma$ (К)
KH_2PO_4	3.2	3.5 [57] 4.0 [53]	0.006	0.000 [26] 0.012 [45] 0.021 [86] 0.053 [39] 0.060 [44] 0.060 [36]
KD_2PO_4	3.9	6.7 [23]	1.135	0.73 [39] 1.5 [26] 1.5 [40] 2.3 [23]
RbH_2PO_4	2.3		0.024	0.000 [86] 0.060 [35] 0.076 [39]
KH_2AsO_4	5.5		1.182	0.716 [86] 1.55 [40] 1.82 [39]
KD_2AsO_4	5.8		3.338	3.63 [40]

Параметр далекосяжної взаємодії ν_c можна визначити з рівняння для температури Кюрі-Вейса T_0^ε , при якій сприйнятливість затиснутого кристалу (3.12) має особливість і взявши $T_0^\sigma - T_0^\varepsilon = 3,5$ К. При цьому $\tilde{\nu}_c = 17,75$ К. Однак при цьому значенні $\tilde{\nu}_c$ не вдалося знайти такого набору деформаційних параметрів, щоб і $T_c = 122,5$ і розраховані температурні залежності п'єзоелектричних коефіцієнтів узгоджувались з експериментальними. Врахування тунелювання в [36] дало змогу описати різниці $T_0^\sigma - T_0^\varepsilon$ і $T_c - T_0^\sigma$ більш точно.

Перейдемо тепер до аналізу результатів числового розрахунку фізичних характеристик кристалів $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$ на основі знайдених параметрів теорії і порівняння отриманих теоретичних результатів з відповідними експериментальними даними.

Результати розрахунку температурного ходу спонтанної поляри-

зації $P_s(T)$ для $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ з різними ступенями дейтерування x разом з експериментальними даними наведені на рис.5. Слід відзначити, що в кристалі KNH_2PO_4 має місце фазовий перехід першого роду, близький до другого. При збільшенні x першорідність фазового переходу посилюється. Отримані на основі теоретичних розрахунків залежності $P_s(T)$ добре описують спостережуваний температурний хід поляризації [26] у випадку $x = 1,0$ і $0,80$. У випадку $x = 0,33$ і $x = 0,0$, починаючи з $\Delta T \sim 15$ К розраховані значення $P_s(T)$ більші на $\sim 10\%$ від даних роботи [26]. Але добре запропонована теорія описує $P_s(T)$ для KNH_2PO_4 робіт [43,45]. Розрахована в [36] з врахуванням тунелювання крива $P_s(T)$ для KNH_2PO_4 добре описує експериментальні дані роботи [26]. Розраховане відношення $\frac{P_{CH}}{P_{SH}} = 0,23$, отримане ж із даних експерименту [44] воно дорівнює $0,14$, а із робіт [39,40] – $0,36$. Для KD_2PO_4 результати наших розрахунків $\frac{P_{CH}}{P_{SH}} = 0,75$. Це значення узгоджується із даними експерименту $0,724$ [40], $0,65$ [26].

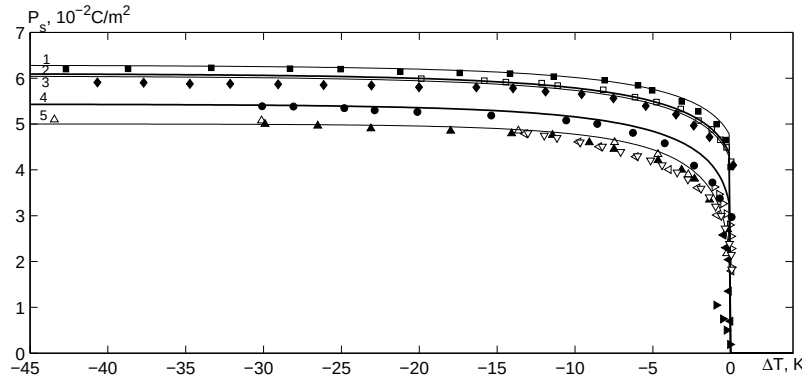


Рис. 5. Температурна залежність спонтанної поляризації $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ при різних x : $1.0 - 1$, $\blacksquare$ [26]; $0.84 - 2$, $\square$ [39]; $0.8 - 3$, $\blacklozenge$ [26]; $0.33 - 4$, $\bullet$ [26]; $0.0 - 5$, $\triangle$ [42], $\blacktriangle$ [26], $\triangleleft$ [43], $\blacktriangleright$ [45], $\blacktriangledown$ [39]. Точки – експериментальні, суцільні лінії – теоретичні значення, штрихові – теоретичні значення [36].

На рис.6 наведено результати розрахунку $P_s(T)$ для $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$ разом із даними експериментів для KNH_2PO_4 , KD_2PO_4 , $RbNH_2PO_4$, KNH_2AsO_4 . Штриховими лініями представлено температурні залежності $P_s(T)$, розраховані без врахування п'єзоелектричної взаємодії. Запропонована теорія добре кількісно

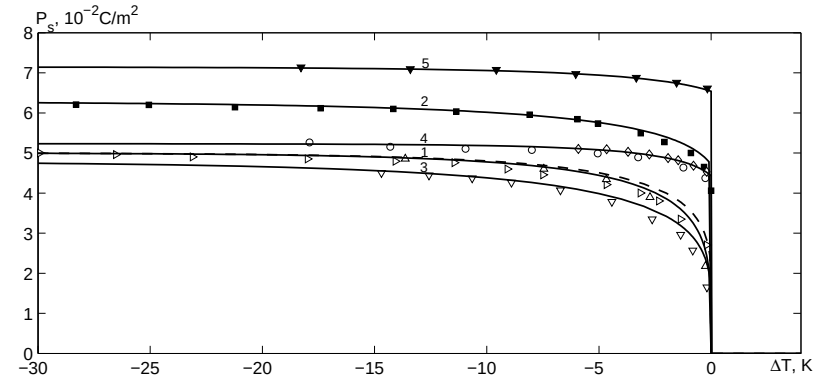


Рис. 6. Температурна залежність спонтанної поляризації для кристалів: $KNH_2PO_4 - 1$, $\triangle$ [42], $\triangleright$ [26]; $KD_2PO_4 - 2$, $\blacksquare$ [26]; $RbNH_2PO_4 - 3$, ∇ [28]; $KNH_2AsO_4 - 4$, $\circ$ [40], $\diamond$ [39]; $KD_2AsO_4 - 5$, $\blacktriangledown$ [40]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення, штрихові – теоретичні значення [36].

описує спостережувану температурну залежність спонтанної поляризації цих кристалів. У випадку $RbNH_2PO_4$ розраховане значення $\frac{P_{CH}}{P_{SH}} = 0,33$, а отримане на основі експерименту – $0,35$ [39], $0,30$ [40], для KNH_2AsO_4 маємо $\frac{P_{CH}}{P_{SH}} = 0,84$, а експериментальне $0,86$ [39] і $0,84$ [40], і, накінець, для KD_2AsO_4 розраховане відношення $\frac{P_{CH}}{P_{SH}} = 0,91$, а експериментальне значення дорівнює $0,92$ [40]. Відзначимо, що у випадку ізоморфного заміщення $K \rightarrow Rb$ спонтанна поляризація менша в усьому температурному діапазоні в середньому на 10% , а фазовий перехід залишається переходом першого роду, близьким до другого. При заміщенні $P \rightarrow As$ значення поляризації насичення зростає від $5,0 \cdot 10^{-2}$ C/m² до $5,2 \cdot 10^{-2}$ C/m², а температурна залежність $P_s(T)$ є дуже слабкою і при $T = T_c$ має місце чітко виражений перехід першого роду. При дейтеруванні величина поляризації насичення зростає до $7,1 \cdot 10^{-2}$ C/m².

На рис.7 представлено розраховану температурну залежність спонтанної деформації ε_6 кристалів KNH_2PO_4 , KD_2PO_4 , $RbNH_2PO_4$, KNH_2AsO_4 , KD_2AsO_4 і дані експерименту для $\varepsilon_6(T)$, які наведені в роботах [84,85] для KNH_2PO_4 . Як видно, розрахована крива $\varepsilon_6(T)$ задовільно узгоджується з результатами вимірювань, особливо роботи [85]. Температурний хід ε_6 якісно повторює хід спонтанної поляри-

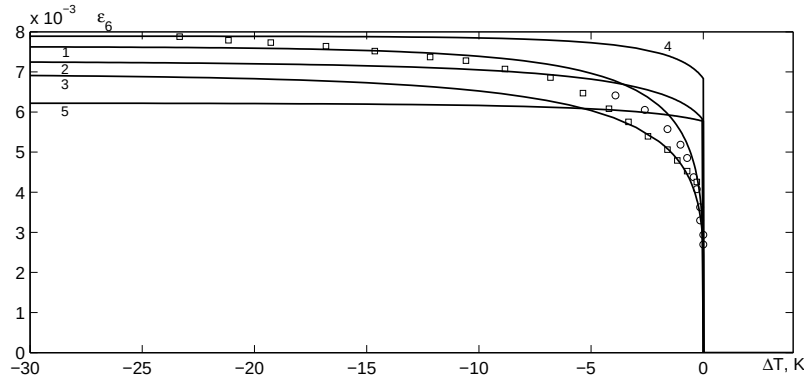


Рис. 7. Температурна залежність спонтанної деформації ε_6 для кристалів: KH_2PO_4 – 1, $\square$, [85], $\circ$, [84], KD_2PO_4 – 2, RbH_2PO_4 – 3, KH_2AsO_4 – 4, KD_2AsO_4 – 5. Суцільні лінії – результати теоретичного розрахунку.

зації $P_s(T)$.

Запропонована теорія кількісно добре описує, як видно з рис.8–10, температурну залежність протонної молярної теплоємності ΔC_p кристалів $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$, $\text{Rb}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$, KH_2AsO_4 і KD_2AsO_4 при сталому тиску. Експериментальне значення ΔC_p знаходимо внаслідок віднімання від теплоємності кристала ґраткового внеску, який в області фазового переходу апроксимується лінійною функцією температури. Проведений числовий аналіз залежності форми кривих температурних залежностей поляризації і протонної молярної теплоємності від параметрів теорії ε і w показує, що зміна величини ε при незмінному w дуже слабо змінює значення P_s і ΔC_p , а при сталому ε збільшення w наближає криву $\Delta C_p(T)$ до даних експерименту і в той же час зростає опуклість кривої $P_s(T)$. І тому вибрано оптимальні параметри ε і w , які задовільно описували б обидві характеристики кристалів.

Для порівняння температурні залежності протонної молярної теплоємності кристалів KH_2PO_4 , KD_2PO_4 , RbH_2PO_4 , KH_2AsO_4 і KD_2AsO_4 зображені на рис.11. Найменші значення ΔC_p властиві арсенатам. При зменшенні x у кристалах $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ значення ΔC_p збільшуються. При заміщенні $\text{K} \rightarrow \text{Rb}$ величина протонної теплоємності зростає.

Штриховою лінією на рис.11 зображено розраховану протонну

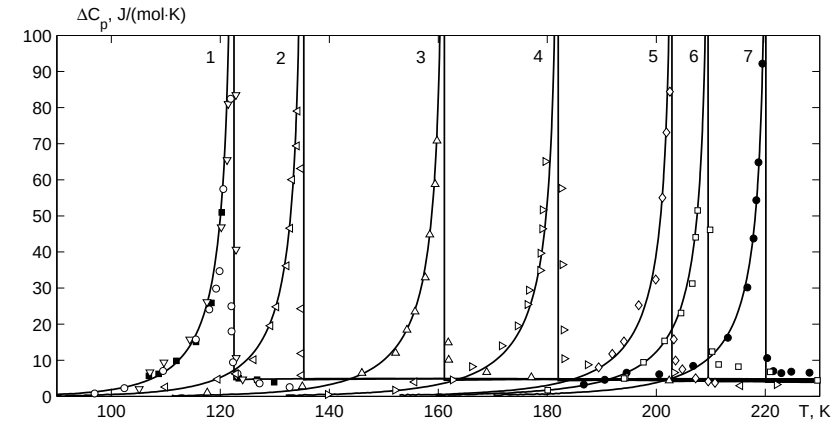


Рис. 8. Температурна залежність теплоємності $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ при різних x : 0.0 – 1, $\circ$ [47], $\blacktriangledown$ [48], $\blacksquare$ [49]; 0.11 – 2, $\triangleleft$ [47]; 0.34 – 3, $\triangle$ [47]; 0.54 – 4, $\triangleright$ [47]; 0.78 – 5, $\diamond$ [48]; 0.86 – 6, $\square$ [47]; 1.0 – 7, $\bullet$ [50]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

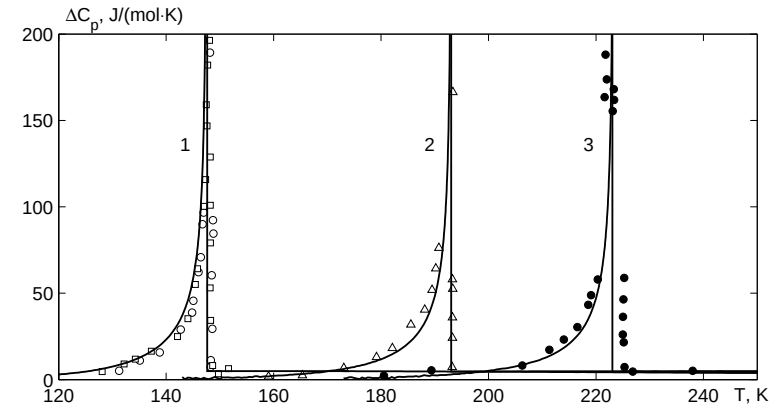


Рис. 9. Температурна залежність теплоємності $\text{Rb}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ при різних x : 0.0 – 1, $\circ$ [35], $\square$ [51]; 0.5 – 2, $\triangle$ [35]; 0.8 – 3, $\bullet$ [35]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

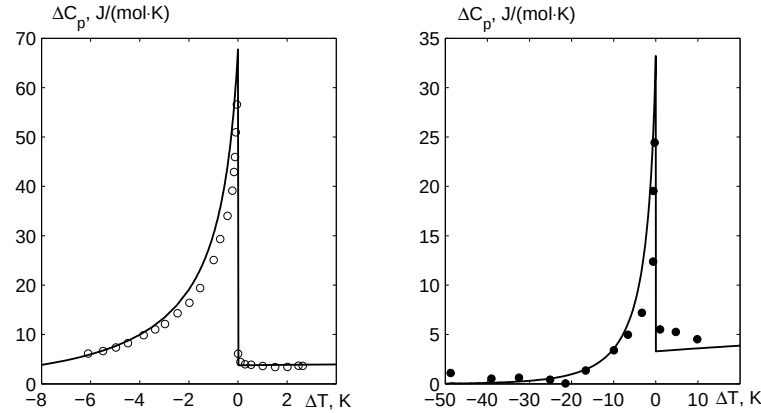


Рис. 10. Температурна залежність теплоємності для кристалів KN_2AsO_4 – $\circ$ і KD_2AsO_4 – $\bullet$. Точки – експериментальні [40], лінії – теоретичні значення, штрихові – теоретичні значення [36].

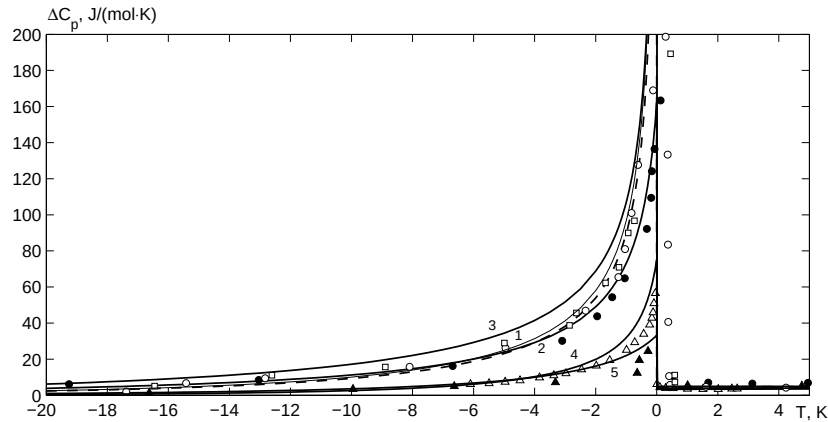


Рис. 11. Температурна залежність теплоємності для кристалів KN_2PO_4 – 1, $\circ$ [48]; KD_2PO_4 – 2, $\bullet$ [50]; RbH_2PO_4 – 3, $\square$ [51]; KN_2AsO_4 – 4, $\triangle$ [40]; KD_2AsO_4 – 5, $\blacktriangle$ [40]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

молярну теплоємність KN_2PO_4 уез врахування п'єзоелектричної взаємодії. Як видно, її вклад у ΔC_p є незначним.

Перейдемо тепер до обговорення результатів розрахунку поздовжніх статичних діелектричних проникностей механічно вільних і механічно затиснутих кристалів $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$.

Вище точки переходу T_c при $\Delta T = T - T_c < 50^\circ$ для температурної залежності діелектричної проникності $\epsilon_{33}^\sigma(0)$ механічно вільного кристалу досить точно виконується закон Кюри–Вейса [53]: $\epsilon_{33}^\sigma(0) \approx \frac{C_{CW}}{T - T_c}$ (C_{CW} – стала Кюри–Вейса, T_c – температура, при якій появляється спонтанна поляризація). У роботі [57] відзначено, що у KN_2PO_4 $\epsilon_{33}^\sigma(0, T)$ вище точки Кюри добре описується виразом

$$\epsilon_{33}^\sigma(0) = 4,5 + \frac{3122}{T + 251}.$$

При вимірюванні діелектричної проникності на частотах, більших від частоти п'єзоелектричного резонансу, отримуємо діелектричну проникність $\epsilon_{33}^\sigma(0, T)$ затиснутого кристалу, яка також описується законом Кюри–Вейса, причому стала C_{CW} у межах похибок вимірювань має таку ж величину, як і для вільного кристалу, що свідчить про те, що різниця обернених проникностей затиснутого і вільного кристалів фактично не залежить від температури [93].

Як видно із табл.7, значення сталих C_{CW} кристалів $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$, які запропоновані для опису вимірюваної безпосередньо статичної проникності або для розрахунку експериментально отриманої динамічної поздовжньої проникності, в різних роботах досить відмінні між собою.

Результати розрахунку температурних залежностей ізотермічних обернених статичних діелектричних проникностей вільного $\epsilon_{33}^\epsilon(0)$ і затиснутого $\epsilon_{33}^\epsilon(0)$ кристалу $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ при різних значеннях x і дані експериментів наведено на рис.12, а кристалів RbH_2PO_4 , KN_2AsO_4 і KD_2AsO_4 – на рис.13. Внаслідок досить значного розкиду експериментальних даних для KN_2PO_4 температурні залежності $(\epsilon_{33}^\sigma(0))^{-1}$, отримані в одних роботах, описуються добре, а інші – гірше, особливо при $\Delta T > 50$ К. Для температурного ходу $(\epsilon_{33}^\sigma(0))^{-1}$ і $(\epsilon_{33}^\epsilon(0))^{-1}$ при великих значеннях x виконується закон Кюри–Вейса в досить широкому температурному інтервалі. Із зменшенням x область температур, в яких справедливий закон Кюри–Вейса, звужується і проявляється помітна нелінійність в температурній залежності $(\epsilon_{33}^\sigma(0))^{-1}$. При рості ступеня дейтерування x величини $\epsilon_{33}^\sigma(0)$ і $\epsilon_{33}^\epsilon(0)$ збільшуються в парафазі і зменшуються в сегнетофазі. У випадку ізоморфного заміщення $\text{K} \rightarrow \text{Rb}$ величина поздовжньої статичної

Табл. 7.

x	$K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$	$Rb(H_{1-x}D_x)_2PO_4$	$K(H_{1-x}D_x)_2AsO_4$
0.00	2350 [52]	2546 [61]	2300 [40]
	2600 [53]	2800 [52]	2488 [39]
	2700 [54]	2924 [51]	2550 [52]
	2780 [55]	3000 [35]	2600 [54]
	2826 [56]	3060 [59]	2700 [64]
	2856 [39]	3100 [54]	2702 [65]
	2925 [26]	3200 [62]	
	3122 [57]	3490 [63]	
	3200 [47]	3696 [39]	
	3203 [66]		
	3220 [29]		
0.20	2680 [52]		
	3290 [47]		
0.33	3450 [26]		
0.34	3453 [47]		
0.54	4020 [47]		
0.64	3000 [52]		
0.67	3240 [13]		
0.78	2000 [58]		
0.80	3880 [26]	3800 [35]	
		4000 [62]	
0.84	3320 [52]		
	3866 [39]		
0.86	3700 [13]		
	3930 [47]		
0.89	3400 [59]		
0.93	3520 [52]		
	4160 [47]		
	4200 [60]		
0.96	4000 [32]		
1.00	3760 [30]		4500 [40]
	4020 [26]		
	4050 [23]		
	4435 [29]		

проникності стає більшою у всьому температурному інтервалі, а при $P \rightarrow As$ – меншою.

Сталі Кюрі-Вейса, які відповідають розрахованим $(\epsilon_{33}^{\sigma}(0))^{-1}$ і $(\epsilon_{33}^{\epsilon}(0))^{-1}$, наведені в табл.8.

Табл. 8.

	$K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$						RbH_2PO_4	$K(H_{1-x}D_x)_2AsO_4$	
	0.00	0.33	0.55	0.80	0.88	1.00		0.00	1.00
$C_{CW}(K)$	2614	3033	3342	3744	3886	4104	3042	2402	4328

Обернена діелектрична проникність $(\epsilon_{33})^{-1}$ кристалу KH_2PO_4 , яка розрахована без врахування п'єзоелектричної взаємодії, при $\Delta T < 50$ К співпадає зі значеннями $(\epsilon_{33}^{\sigma})^{-1}$, а при більших ΔT крива $(\epsilon_{33}(T))^{-1}$ йде дещо вище, ніж $(\epsilon_{33}^{\sigma}(T))^{-1}$ (рис.12а).

На рис.14 і 15 наведено розраховані температурні залежності по-здовжніх статичних діелектричних проникностей вільного $\epsilon_{33}^{\sigma}(0)$ і затиснутого $\epsilon_{33}^{\epsilon}(0)$ кристалів $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ при різних значеннях x і RbH_2PO_4 , KH_2AsO_4 , KD_2AsO_4 , які добре кількісно узгоджуються із результатами вимірювань. Лише у випадку кристалу KD_2PO_4 розрахована крива $\epsilon_{33}^{\sigma}(0, T)$ йде дещо вище і експериментальної кривої, яка наведена в [23]. При наближенні в параелектричній фазі до температури T_c величина $\epsilon_{33}^{\sigma}(0)$ зростає за гіперболічним законом, досягаючи при $T = T_c$ дуже великих значень. При рості x величина $\epsilon_{33}^{\sigma \max}(0)$ зменшується. Зменшується ця величина і при ізоморфному заміщенні $P \rightarrow As$. Нижче температури переходу $\epsilon_{33}^{\sigma}(0)$ спадає дуже швидко, але без стрибка.

На рис.16 зображено розраховані температурні залежності коефіцієнтів п'єзоелектричної деформації d_{36} і коефіцієнтів п'єзоелектричної напруги e_{36} кристалів KH_2PO_4 , $K(H_{0.12}D_{0.88})_2PO_4$, RbH_2PO_4 і KH_2AsO_4 , а також наявні відповідні результати. Отримано задовільний кількісний опис на основі розвиненої теорії експериментальних даних для d_{36} і перерахованих для e_{36} . При $T \rightarrow T_c$ значення коефіцієнтів d_{36} і e_{36} зростають. У сегнетофазі розраховані на основі мікротеорії значення коефіцієнтів d_{36} і e_{36} характеризуються різким зменшенням, значно швидшим, ніж у параелектричній фазі. При дейтеруванні максимальні значення d_{36} і e_{36} зменшуються.

Екстраполюючи до нульових значень напруг, температурна залежність d_{36} може бути апроксимована за допомогою закону Кюрі-

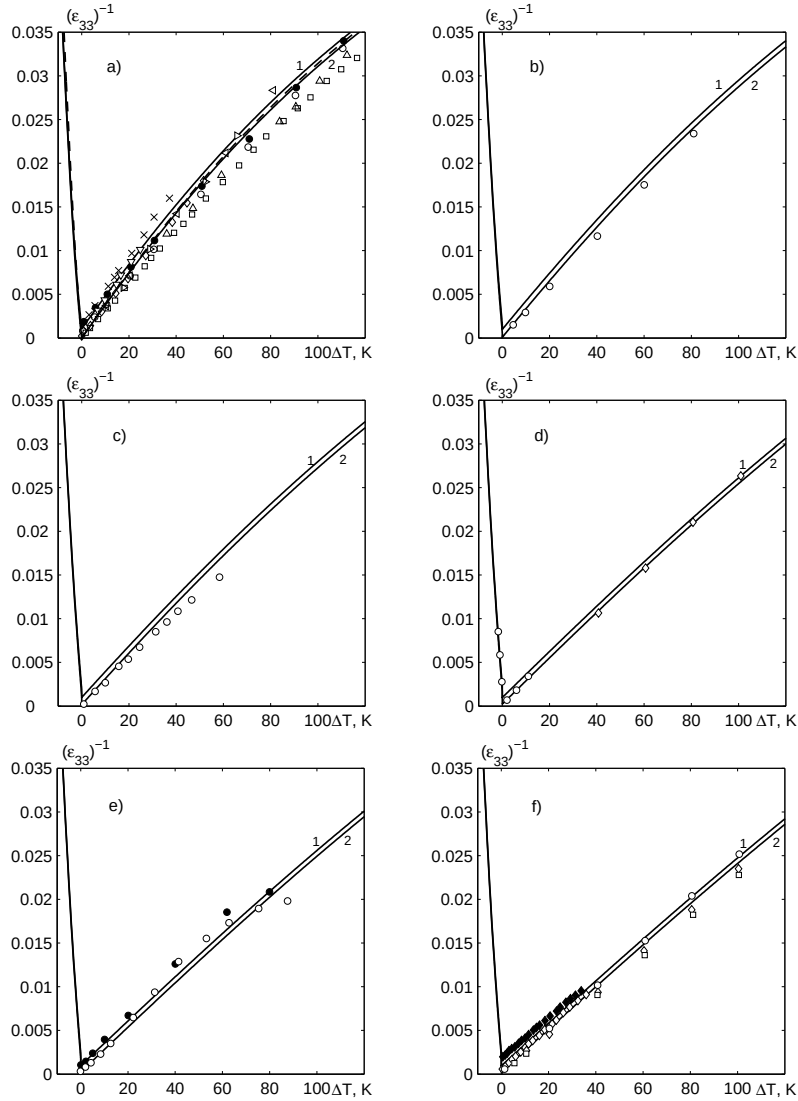


Рис. 12. Температурна залежність обернених статичних діелектричних проникностей затиснутого $(\epsilon_{33}^{\epsilon})^{-1}$ (1) і вільного $(\epsilon_{33}^{\sigma})^{-1}$ (2) кристалів $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$: $x=0.0$ – а), $\circ$, $\bullet$ [57], $\square$ [55], $\diamond$ [26], $\triangleright$ [54], $\triangleleft$ [39], ∇ [56], Δ [67], $\times$ [85], $x=0.33$ – б), $\circ$ [26]; $x=0.55$ – в), $\circ$ [47]; $x=0.8$ – д), $\circ$ [22], $\diamond$ [26]; $x=0.88$ – е), $\circ$ [59], $\bullet$ $(\frac{\epsilon_{33}^{\sigma}-1}{4\pi} [60] - \frac{d_{36}^2[60]}{s_{66}})4\pi + 1$; $x=1.0$ – ф), $\blacklozenge$, $\diamond$ [23], $\circ$ [26], $\square$ [29].

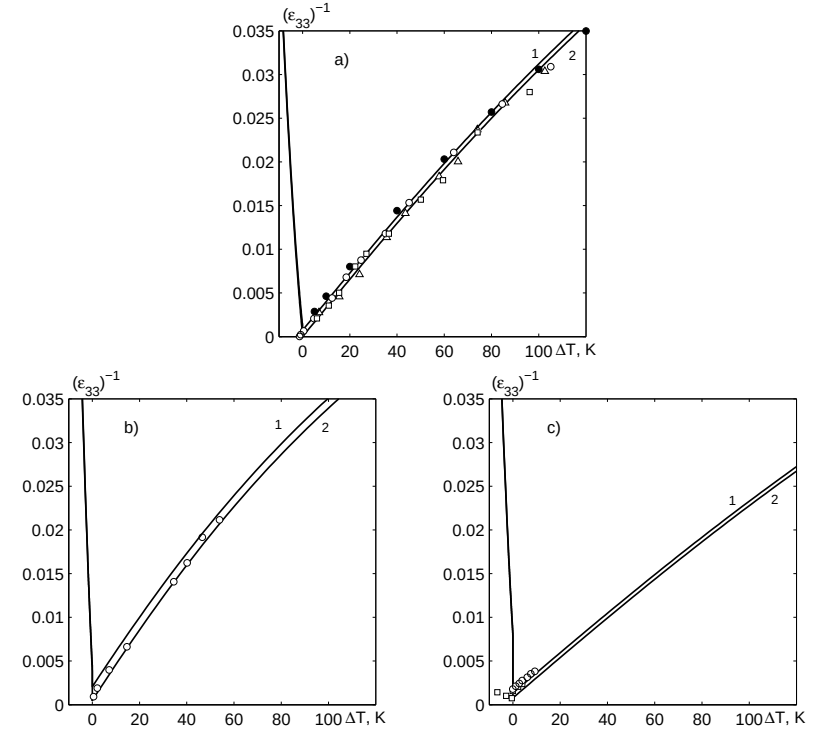


Рис. 13. Температурна залежність обернених статичних діелектричних проникностей затиснутого $(\epsilon_{33}^{\epsilon})^{-1}$ (1) і вільного $(\epsilon_{33}^{\sigma})^{-1}$ (2) кристалів: RbH_2PO_4 – а), $\circ$ [59], $\bullet$ $(\frac{\epsilon_{33}^{\sigma}-1}{4\pi} [60] - \frac{d_{36}^2[60]}{s_{66}})4\pi + 1$, $\square$ [69], Δ [54]; KH_2AsO_4 – б), $\circ$ [39]; KD_2AsO_4 – в), $\circ$ [40], $\square$ [64].

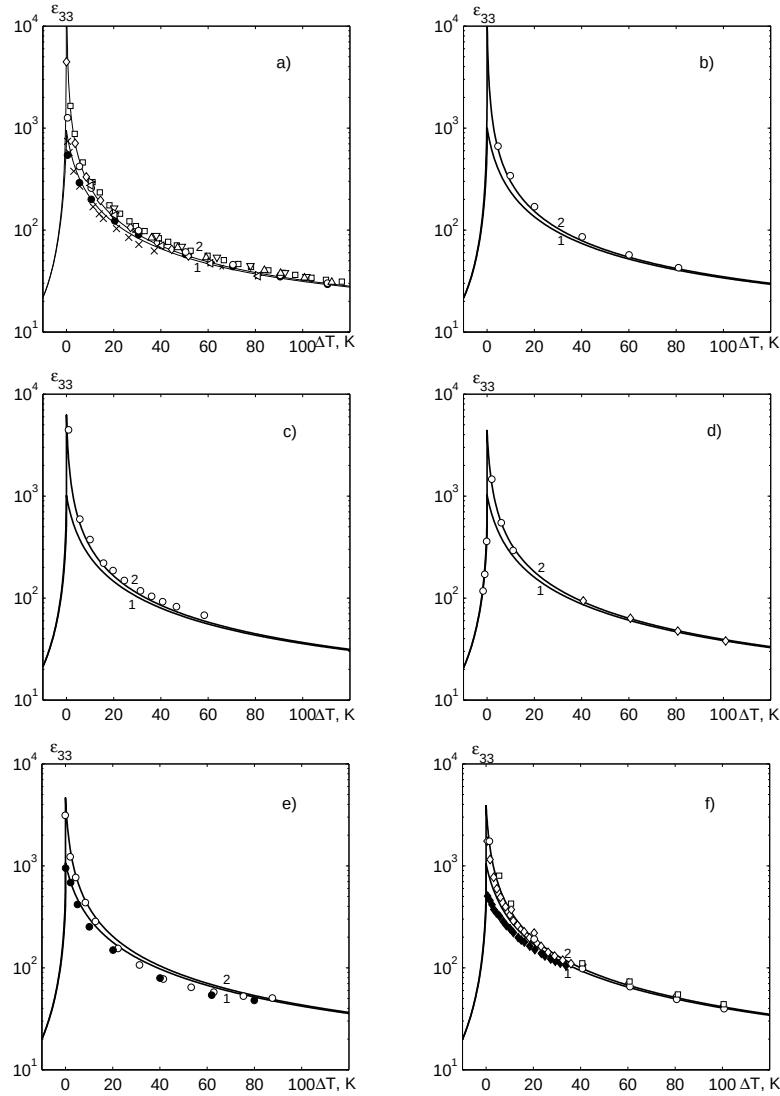


Рис. 14. Температурна залежність статичних діелектричних проникностей затиснутого $(\varepsilon_{33}^{\varepsilon})^{-1}$ (1) і вільного $(\varepsilon_{33}^{\sigma})^{-1}$ (2) кристалів $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$: $x=0.0$ – а), $\circ$, $\bullet$ [57], $\square$ [55], $\diamond$ [26], $\triangleright$ [54], $\triangleleft$ [39], ∇ [56], Δ [67], $\times$ [85], $x=0.33$ – б), $\circ$ [26]; $x=0.55$ – в), $\circ$ [47]; $x=0.8$ – д), $\circ$ [22], $\diamond$ [26]; $x=0.88$ – е), $\circ$ [59], $\bullet$ $(\frac{\varepsilon_{33}^{\sigma}-1}{4\pi}[60] - \frac{d_{36}^2[60]}{s_{66}^E})4\pi + 1$; $x=1.0$ – ф), $\blacklozenge$, $\diamond$ [23], $\circ$ [26], $\square$ [29].

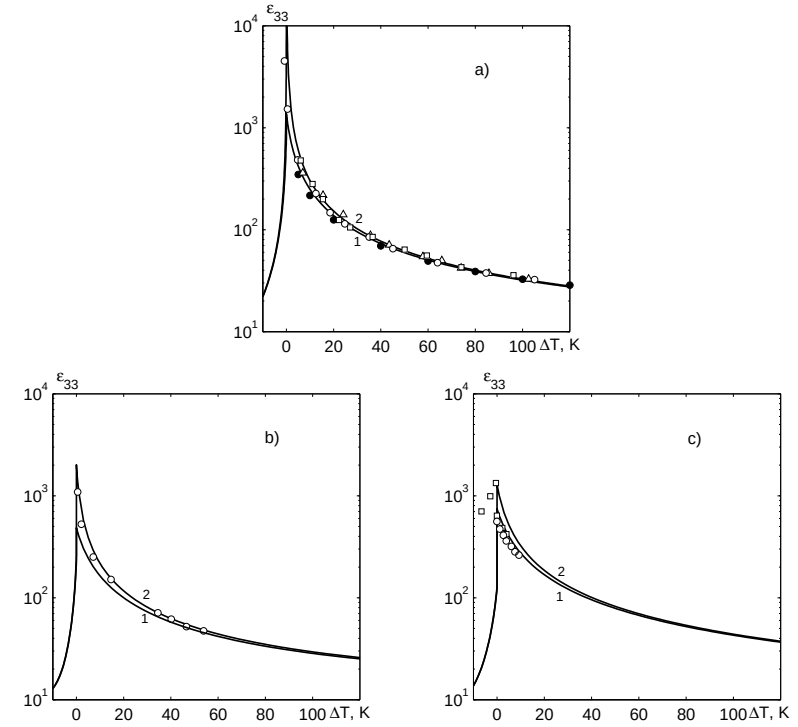


Рис. 15. Температурна залежність статичних діелектричних проникностей затиснутого $(\varepsilon_{33}^{\varepsilon})^{-1}$ (1) і вільного $(\varepsilon_{33}^{\sigma})^{-1}$ (2) кристалів: RbH_2PO_4 – а), $\circ$ [59], $\bullet$ $(\frac{\varepsilon_{33}^{\sigma}-1}{4\pi}[60] - \frac{d_{36}^2[60]}{s_{66}^E})4\pi + 1$, $\square$ [69], Δ [54]; KH_2AsO_4 – б), $\circ$ [39]; KD_2AsO_4 – в), $\circ$ [40], $\square$ [64].

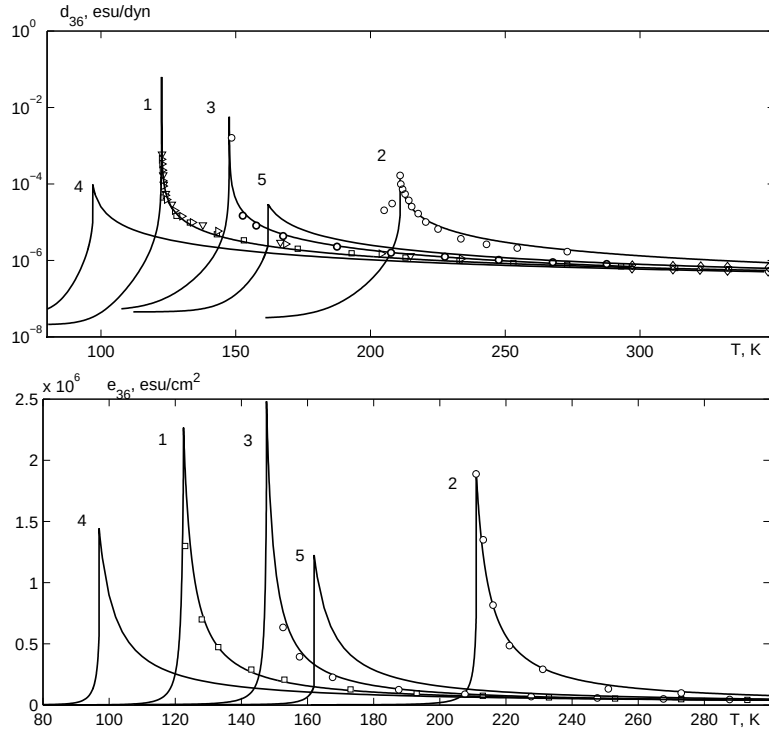


Рис. 16. Температурна залежність коефіцієнта п'єзоелектричної деформації d_{36} кристалів KH_2PO_4 – 1, $\square$ [57], ∇ [70], $\triangleright$ [71]; $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$ – 2, $\circ$ [69]; RbH_2PO_4 – 3, $\circ$ [69]; KH_2AsO_4 – 4, $\diamond$ [72]; KD_2AsO_4 – 5, $\blacklozenge$ [72], і температурна залежність коефіцієнта п'єзоелектричної напруги e_{36} кристалів KH_2PO_4 – 1, $\square$ [67]; $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$ – 2, $\circ$ $-\frac{d_{36}[59]}{s_{66}^E[68]}$; RbH_2PO_4 – 3, $\circ$ $-\frac{d_{36}[59]}{s_{66}^E[68]}$; KH_2AsO_4 – 4, $\diamond$ $-\frac{d_{36}}{s_{66}^E}$ [72]; KD_2AsO_4 – 5, $\blacklozenge$ $-\frac{d_{36}}{s_{66}^E}$ [72].

Вейса [94]:

$$d_{36} = d_{36}^0 + \frac{B}{T - T_c},$$

зокрема для KH_2PO_4 $B = 1,26 \cdot 10^{-4}$ од. CGSE, $d_{36}^0 \cong -8 \cdot 10^{-8}$ од. CGSE. Поблизу точки Кюрі можна знехтувати незалежним від температури доданком d_{36}^0 .

Температурні залежності констант п'єзоелектричної напруги h_{36}^T і п'єзоелектричної деформації g_{36}^T кристалів MH_2XO_4 і $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$, дані роботи [57] і перераховані значення h_{36}^T і g_{36}^T зображені на рис.17. У параелектричній фазі значення констант ми розраховували на основі співвідношень:

$$h_{36}^T = \frac{e_{36}^T}{\chi_{33}^T}, \quad g_{36}^T = \frac{d_{36}^T}{\chi_{33}^T}.$$

Розраховані температурні залежності h_{36}^T і g_{36}^T при $T > T_c$ добре узгоджуються з даними роботи [57] і перерахованими на основі даних експерименту роботи [59]. Оскільки діелектрична сприйнятливість описується законом Кюрі-Вейса

$$\chi_{36}^{T\sigma} \approx \frac{C_{CW}}{4\pi(T - T_c)},$$

зокрема для KH_2PO_4 $C_{CW} = 3250$ К [81]. З наведених формул отримуємо

$$g_{36}^T = \frac{4\pi B}{c} = \frac{1}{2,05 \cdot 10^6} \text{ од. CGSE} = 4,87 \cdot 10^{-7} \text{ од. CGSE}.$$

Розрахунок g_{36}^T на основі мікротеорії для KH_2PO_4 при $\Delta T < 20$ К дає значення $4,7 \cdot 10^{-7}$ од. CGSE, що узгоджується із наведеним $4,87 \cdot 10^{-7}$ [93] і $4,35 \cdot 10^{-7}$ [57].

У сегнетоелектричній фазі для механічно вільного кристалу ($\sigma_6 = 0$) поляризація P_s і деформація ε_6 зв'язані наступним чином:

$$P_s = \frac{\chi_{33}^{T\varepsilon}}{d_{36}^T} \varepsilon_6 = \frac{\varepsilon_6}{g_{36}^T}.$$

І тому при $T < T_c$ розрахунок температурної залежності константи п'єзоелектричної деформації виконаний на основі співвідношення

$$g_{36}^T = \frac{\varepsilon_6}{P_s},$$

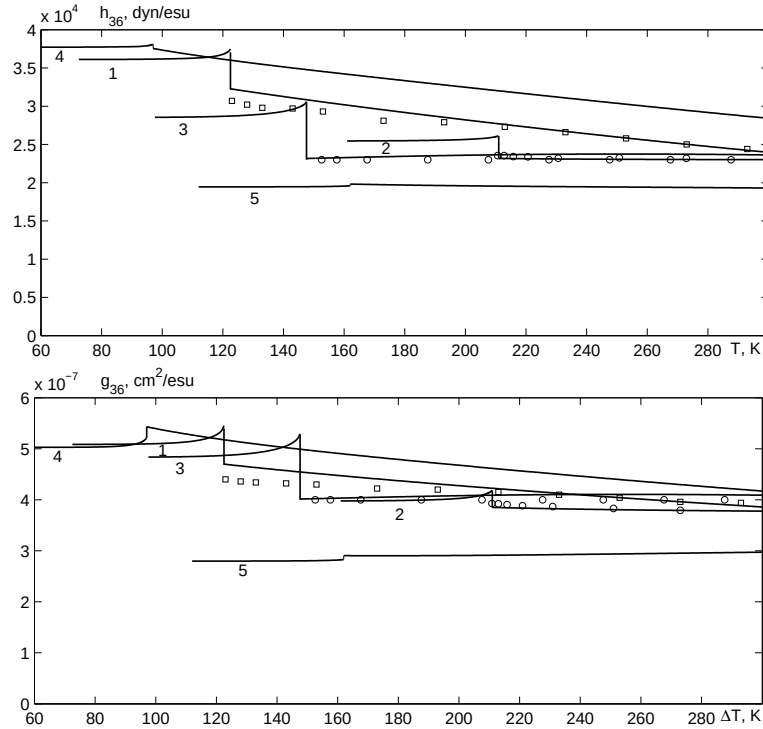


Рис. 17. Температурна залежність константи п'єзоелектричної напруги h_{36} кристалів KN_2PO_4 – 1, $\square$ [67]; $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$ – 2, $\circ$ – $\frac{d_{36}}{s_{66}^E \chi_{33}^E - d_{36}^2}$ [59]; RbH_2PO_4 – 3, $\circ$ [59]; KH_2AsO_4 – 4; KD_2AsO_4 – 5, і температурна залежність константи п'єзоелектричної деформації g_{36} кристалів KN_2PO_4 – 1, $\square$ [57]; $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$ – 2, $\circ$ – $\frac{d_{36}}{\chi_{33}^E}$ [59]; RbH_2PO_4 – 3, $\circ$ [59]; KH_2AsO_4 – 4; KD_2AsO_4 – 5.

а константи п'єзоелектричної напруги – на основі співвідношення

$$h_{36}^T = g_{36}^T c_{66}^{TP}.$$

Для KN_2PO_4 при $T = 110$ K, як наведено в роботі [94], $\frac{\varepsilon_6}{P_s} = \frac{1}{1.85 \cdot 10^6}$ од. CGSE = $5.41 \cdot 10^{-7}$ од. CGSE. На основі мікротеорії отримуємо, що $g_{36} = 5.2 \cdot 10^{-7}$ од. CGSE.

Як видно з рис.17, константи h_{36}^T і g_{36}^T незначно змінюються з ростом температури, змінюючись стрибкоподібно при $T = T_c$. А оскільки вони не мають особливостей при сегнетоелектричному переході, то їх називають “істинними” п'єзоелектричними константами кристалу.

Температурні залежності ізотермічних пружних сталих c_{66}^{TE} і c_{66}^{TP} та податливостей s_{66}^{TE} і s_{66}^{TP} , які розраховані на основі мікротеорії, для кристалів KN_2PO_4 , $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$, RbH_2PO_4 і KH_2AsO_4 і KD_2AsO_4 добре кількісно узгоджуються з даними експериментів (рис.18, 19). При температурі фазового переходу пружна стала c_{66}^{TE} кристалів KN_2PO_4 і RbH_2PO_4 прямує до нуля, а для інших кристалів набуває мінімального значення. Збільшення ступеня дейтерування x приводить до росту мінімального значення c_{66}^{TE} при $T = T_c$. У парафазі із ростом температури ΔT значення c_{66}^{TE} зростає значно повільніше ніж у сегнетофазі.

Аналіз експериментальних даних для KN_2PO_4 показує, що закон Кюрі-Вейса справедливий і для наступних величин:

$$\frac{1}{c_{66}^{TE}} - \frac{1}{c_{66}^{TP}} = s_{66}^{TE} - s_{66}^{TP} = \frac{D}{T - T_c},$$

де $D = 4.6 \cdot 10^{-11}$ см²·град/дин. У випадку RbHPO_4 $D = 15.6 \cdot 10^{-11}$ см²·град/дин [94].

Пружна стала c_{66}^{TP} при температурах $T < T_c$ з ростом температури не змінюється, при $T = T_c$ – стрибкоподібно зменшується; в парафазі збільшення температури приводить до незначного її зменшення за лінійним законом.

Перейдемо тепер до опису в рамках розвиненої теорії релаксаційних явищ у сегнетоелектричних кристалах $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$. Зупинимось спочатку на температурних залежностях динамічних поздовжніх діелектричних проникностей $\varepsilon'_{33}(\omega, T)$ і $\varepsilon''_{33}(\omega, T)$ затиснутого кристалу при різних ступенях дейтерування x . На рис.20–29 наведено розраховані температурні залежності цих величин на частотах, на яких виконані експериментальні вимірювання дійсної та уявної частин $\varepsilon'_{33}(\omega, T)$ для $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$, на рис.30–32 – для RbH_2PO_4 і на рис.33 – для KH_2AsO_4 .

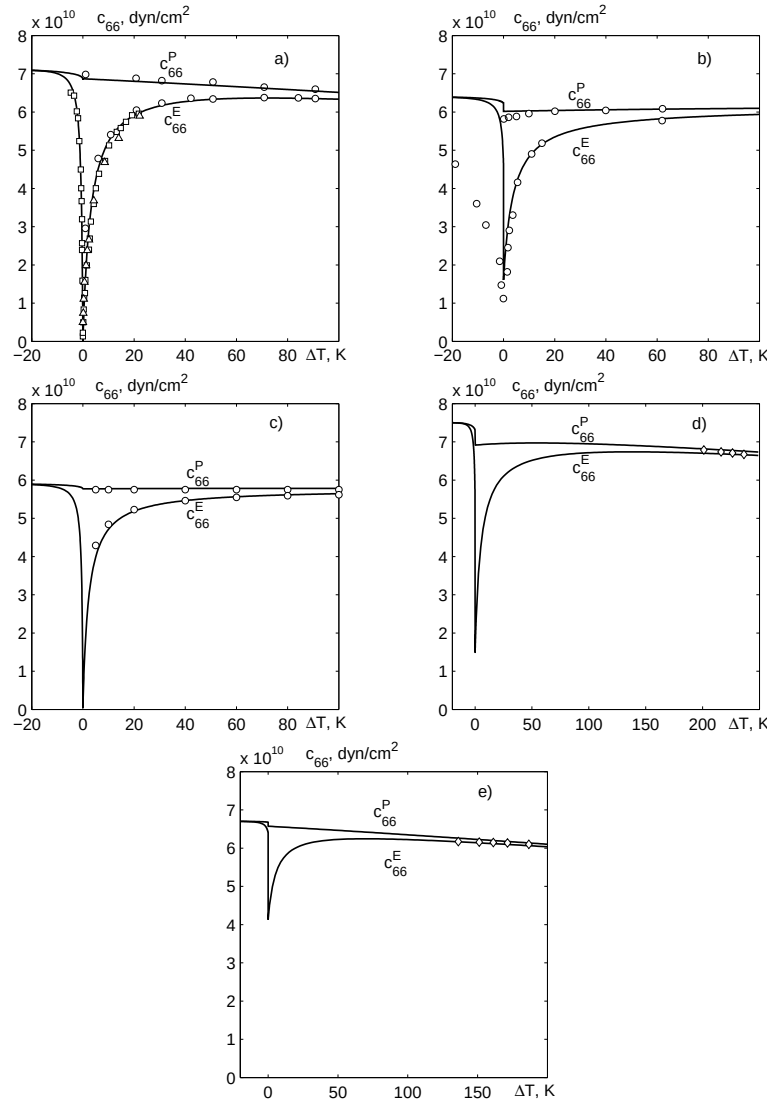


Рис. 18. Температурна залежність пружних сталей c_{66}^E і c_{66}^P кристалів KH_2PO_4 – а), $\circ$ [57], $\square$ [73], Δ [66]; $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$ – б), $\circ$ – $\frac{1}{s_{66}^E[68]}$; RbH_2PO_4 – в), $\circ$ – $\frac{1}{s_{66}^E[68]}$; KH_2AsO_4 – д), $\diamond$ – $\frac{1}{s_{66}^E[72]}$; KD_2AsO_4 – е), $\diamond$ – $\frac{1}{s_{66}^E[72]}$.

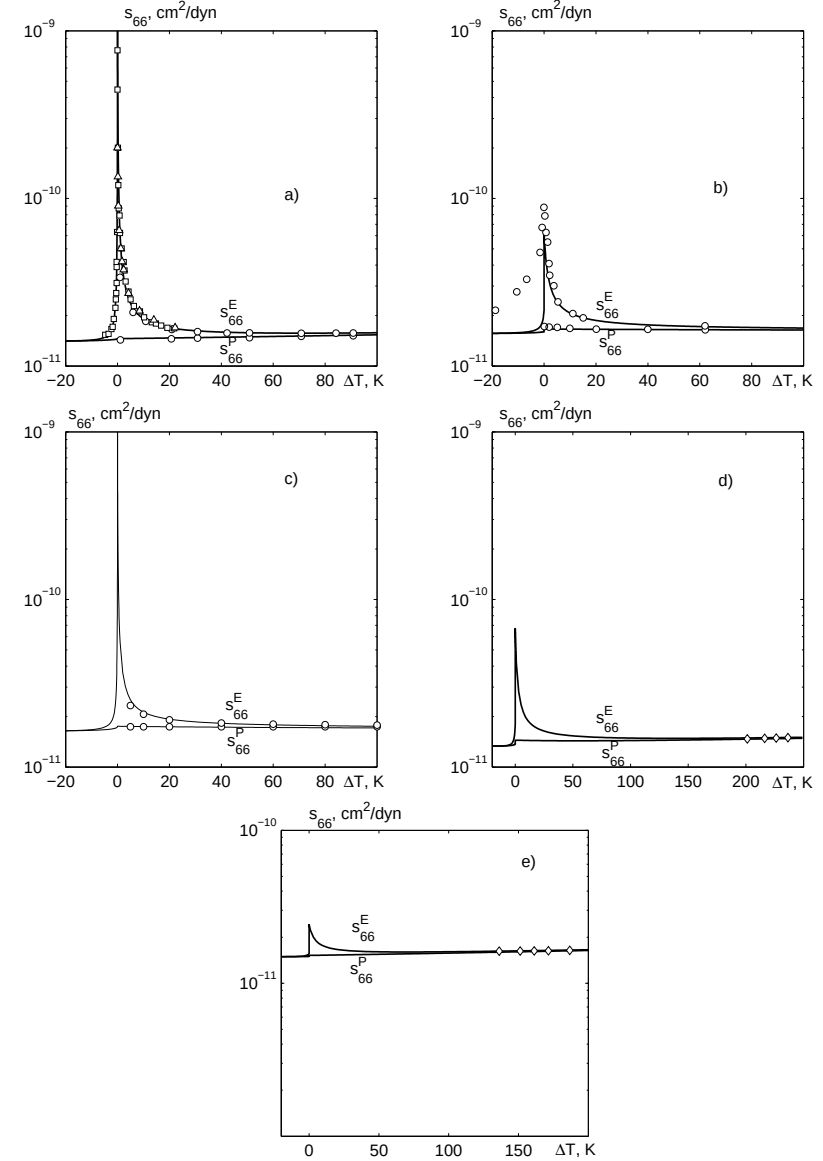


Рис. 19. Температурна залежність податливості s_{66}^E і s_{66}^P кристалів KH_2PO_4 – а), $\circ$ – $\frac{1}{c_{66}^E[57]}$, $\square$ – $\frac{1}{c_{66}^E[73]}$, Δ – $\frac{1}{c_{66}^E[68]}$; $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$ – б), $\circ$, [68]; RbH_2PO_4 – в), $\circ$, [68]; KH_2AsO_4 – д), $\diamond$, [72]; KD_2AsO_4 – е), $\diamond$, [72].

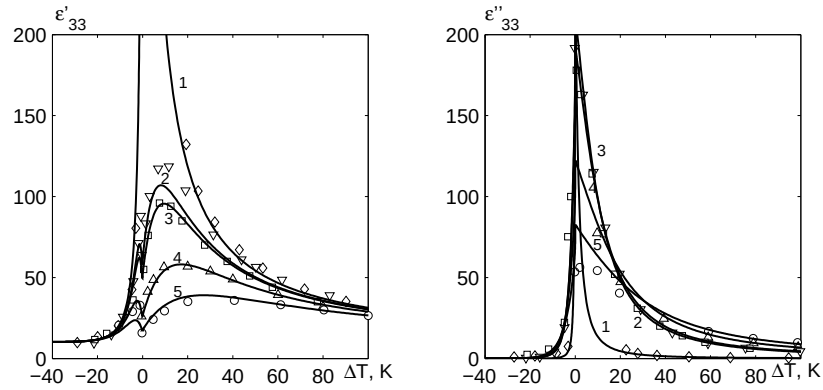


Рис. 20. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{KН}_2\text{P}\text{O}_4$ при різних частотах ν (ГГц): 9.2 – 1, $\diamond$ [19]; 138.6 – 2, ∇ [74]; 154.2 – 3, $\square$ [16]; 249.0 – 4, $\triangle$ [16]; 372.0 – 5, $\circ$ [16]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

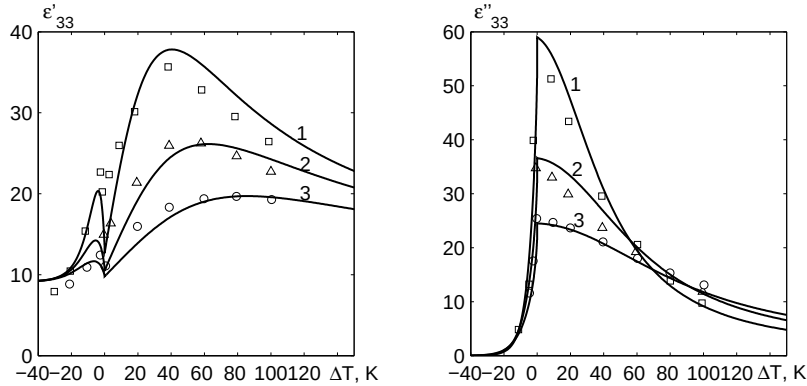


Рис. 21. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{K}(\text{H}_{0.79}\text{D}_{0.21})_2\text{P}\text{O}_4$ при різних частотах ν (ГГц) [16]: 154.2 – 1, $\square$; 249.0 – 2, $\triangle$; 372.0 – 3, $\circ$. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

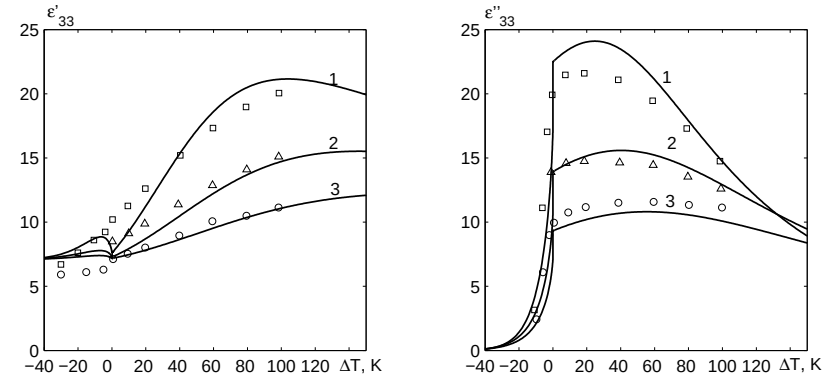


Рис. 22. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{K}(\text{H}_{0.36}\text{D}_{0.64})_2\text{P}\text{O}_4$ при різних частотах ν (ГГц) [16]: 154.2 – 1, $\square$; 249.0 – 2, $\triangle$; 372.0 – 3, $\circ$. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

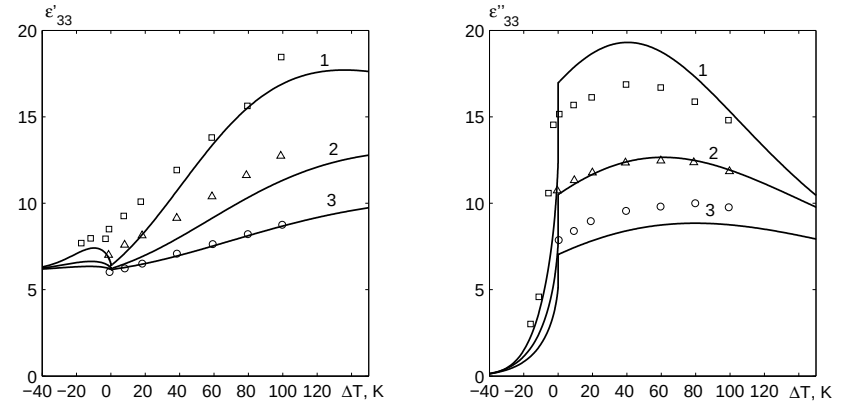


Рис. 23. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{K}(\text{H}_{0.16}\text{D}_{0.84})_2\text{P}\text{O}_4$ при різних частотах ν (ГГц) [16]: 154.2 – 1, $\square$; 249.0 – 2, $\triangle$; 372.0 – 3, $\circ$. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

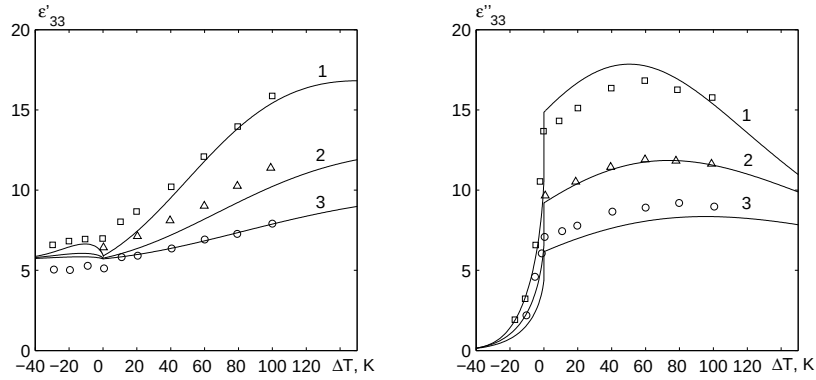


Рис. 24. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{K}(\text{H}_{0.07}\text{D}_{0.93})_2\text{PO}_4$ при різних частотах ν (ГГц) [16]: 154.2 – 1, $\square$; 249.0 – 2, $\triangle$; 372.0 – 3, $\circ$. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

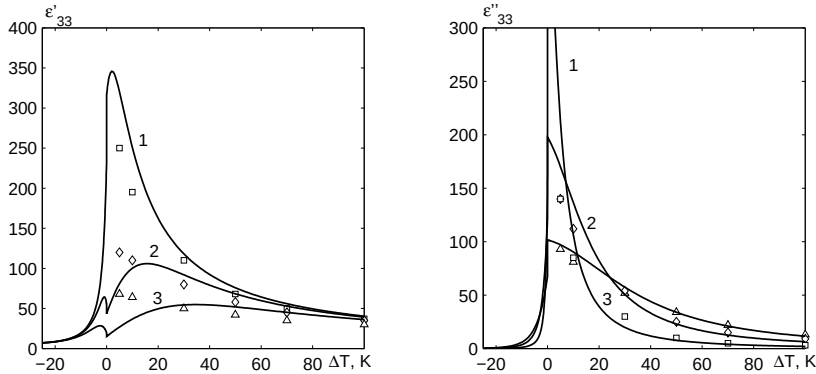


Рис. 25. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} KD_2PO_4 при частотах ν (ГГц): 3.0 – 1, $\square$ [31]; 10.0 – 2, $\diamond$ [31]; 20.0 – 3, $\triangle$ [31]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

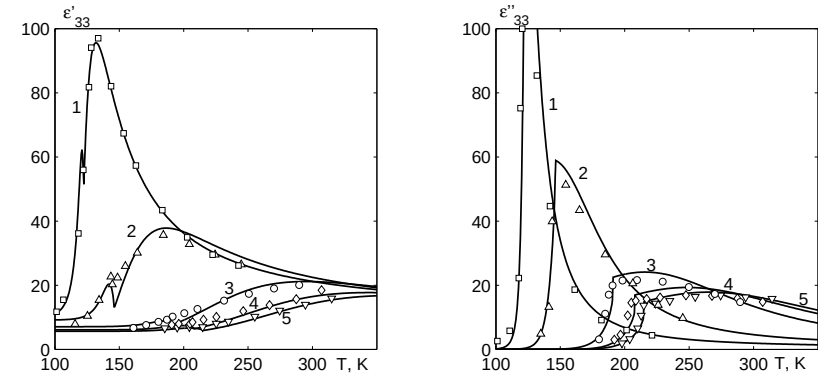


Рис. 26. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ для частоти $\nu=154.2$ ГГц при різних x [16]: 0.0 – 1, $\square$; 0.21 – 2, $\triangle$; 0.64 – 3, $\circ$; 0.84 – 4, $\diamond$; 0.93 – 5, ∇ . Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

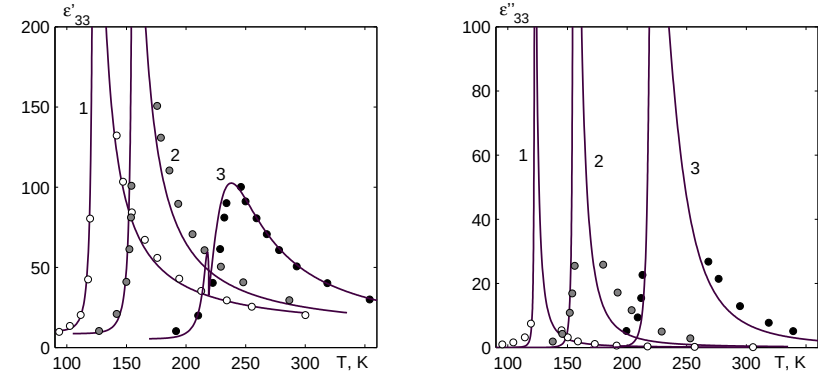


Рис. 27. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ для частоти $\nu=9.2$ ГГц при різних x [19]: 0.0 – 1, $\circ$; 0.29 – 2, $\bullet$; 0.99 – 3, $\bullet$. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

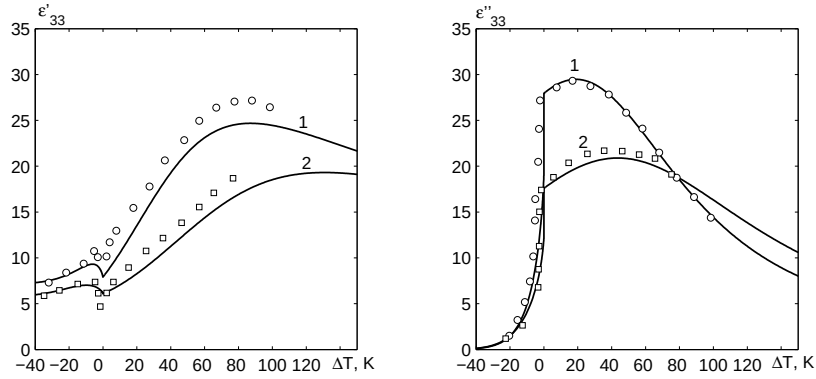


Рис. 28. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ для частоти $\nu=138.6\text{ГГц}$ при різних x [13]: 0.63 – 1, $\circ$; 0.91 – 2, $\square$. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

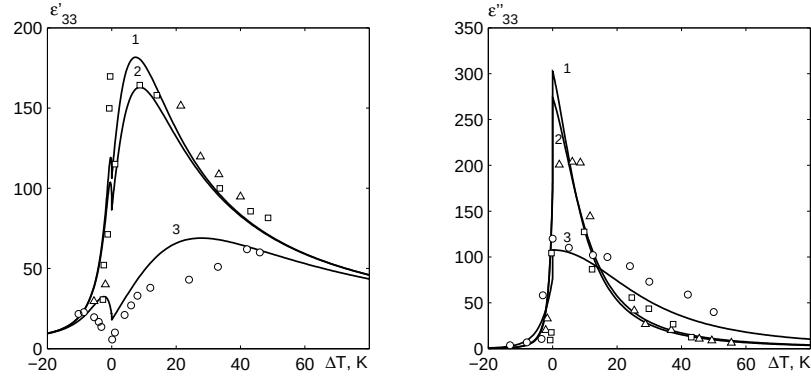


Рис. 29. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{K}(\text{H}_{0.22}\text{D}_{0.78})_2\text{PO}_4$ при різних частотах ν (ГГц) [75]: 8.6 – 1, $\triangle$; 9.7 – 2, $\square$; 26.5 – 3, $\circ$. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

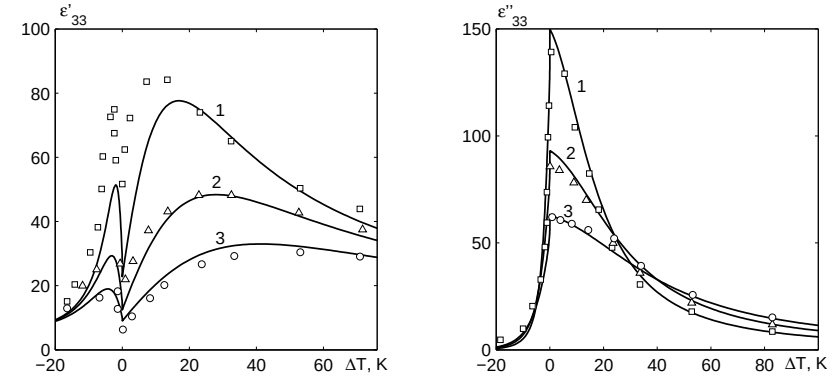


Рис. 30. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} RbH_2PO_4 при різних частотах ν (ГГц) [76]: 154.2 – 1, $\square$; 250.2 – 2, $\triangle$; 372.0 – 3, $\circ$. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

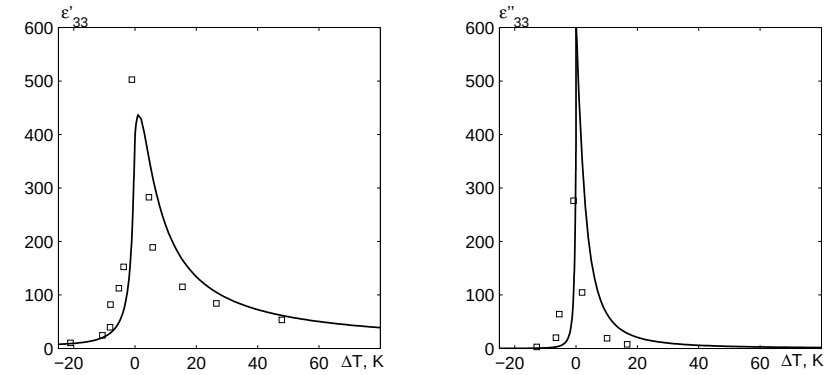


Рис. 31. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} RbH_2PO_4 при частоті 27ГГц [69]. Точки – експериментальні, лінія – теоретичні значення.

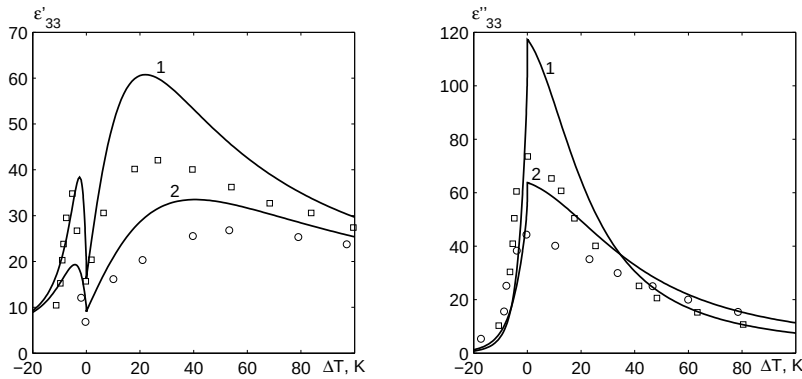


Рис. 32. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} RbH_2PO_4 при різних частотах ν (ГГц) [33]: 198.0 – 1, $\square$; 366.0 – 2, $\circ$. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

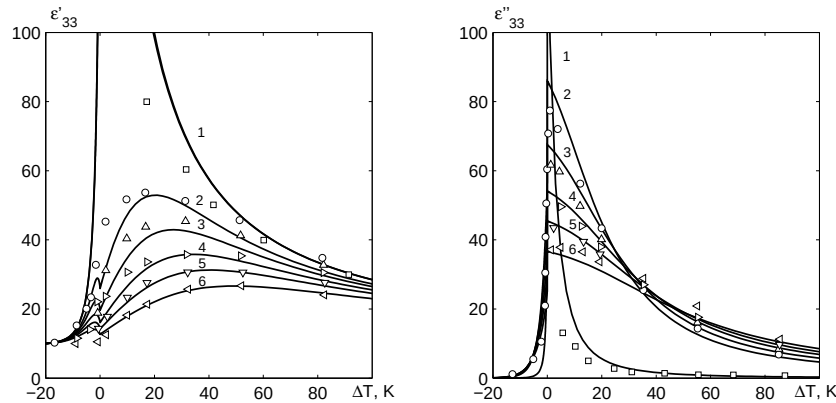


Рис. 33. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} KN_2AsO_4 при різних частотах ν (ГГц): 9.2 – 1, $\square$ [19]; 154.2 – 2, $\circ$ [76]; 198.9 – 3, $\triangle$ [76]; 250.2 – 4, $\triangleright$ [76]; 299.1 – 5, $\dashv$ [76]; 250.2 – 6, $\triangleleft$ [76]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

Запропонована теорія добре кількісно описує експериментальні дані для $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$, які отримані методом монохроматичної субміліметрової спектроскопії [16,52,76,90,91], даних робіт [13], [19], [58,69,75] і дещо гірше результати роботи [31], особливо при $\Delta T < 20$ K для $\varepsilon'_{33}(\omega, T)$. Але слід відмітити, що отримані з роботи [31] значення $\varepsilon'_{33}(\omega, T)$ при частотах більших 1 ГГц при $T = T_c$ мають не мінімальне, а максимальне значення.

Температурна залежність $\varepsilon_{33}^*(\omega, T)$ для RbH_2PO_4 , яка отримана в роботі [76], адекватно описується в рамках мікротеорії, за винятком значень для $\varepsilon'_{33}(\omega, T)$ при $\nu = 154, 2$ ГГц і $\Delta T < 20$ K (рис.30). Добрим є узгодження результатів розрахунків і даних роботи [69] для $\varepsilon_{33}^*(\omega, T)$ при $\nu = 27$ ГГц. Отримані на основі розрахунку криві $\varepsilon_{33}^*(\omega, T)$ на частотах 198 ГГц і 366 ГГц (рис.32) лише якісно відтворюють дані роботи [33], але результати цієї роботи не корелюють із експериментальними даними, які наведені в [76].

Добрим є узгодження розрахованих температурних залежностей $\varepsilon_{33}'(\omega, T)$ і $\varepsilon_{33}''(\omega, T)$ із даними вимірювань цих величин у [76] для KN_2AsO_4 при різних значеннях субміліметрових частот (рис.33). Дещо гірше, особливо при $\Delta T < 20$ K описуються величини $\varepsilon_{33}^*(\omega, T)$ роботи [19] на частоті $\nu = 9, 2$ ГГц.

Загальний характер температурної залежності проникностей $\varepsilon'_{33}(\omega, T)$ і $\varepsilon''_{33}(\omega, T)$ при різних значеннях частоти зовнішнього електричного поля для кристалів KN_2PO_4 , KD_2PO_4 , RbH_2PO_4 і KN_2AsO_4 наведених на рис.34–38. Починаючи з частоти ν_k замість низькочастотного максимуму $\varepsilon'_{33}(\omega, T)$ виникає гострий провал-мінімум при $\Delta T = 0$ K, який при збільшенні частоти розширюється і поглиблюється, досягаючи при $\nu \sim 10^{12}$ Гц величини ε_3^∞ . Максимум у температурному ході $\varepsilon'_{33}(\omega, T)$, якому відповідає температура $\Delta T_n = |T_n - T_c|$, з ростом частоти зменшується і розмивається, а величина ΔT_n збільшується. Збільшення частоти приводить до зменшення значень $\varepsilon_{33}(\omega)$ при всіх $\Delta T = |T - T_c|$. Максимальні величини $\varepsilon'_{33}(\omega)$ і значення ΔT_n у параелектричній фазі значно більші від цих величин у сегнетофазі. Відмітимо, що дисперсія дійсної частини проникності $\varepsilon'_{33}(\omega, T)$ у сегнетофазі спостерігається у вузькому температурному діапазоні $\Delta T \sim 20$ K, а у параелектричній фазі різниця ΔT значно більша і є порядку 200 K.

Мінімум значення $\varepsilon'_{33}(\omega)$ при $\Delta T = 0$ починається з частоти $\nu_k = (2\pi\tau_1^z)^{-1}$, тобто з центра області дисперсії. Для KN_2PO_4 $\nu_k = 33, 2$ ГГц, KD_2PO_4 – $\nu_k = 1, 4$ ГГц, RbH_2PO_4 – $\nu_k = 20, 5$ ГГц, KN_2AsO_4 – $\nu_k = 20, 8$ ГГц.

При збільшенні концентрації x дейтерію у кристалі

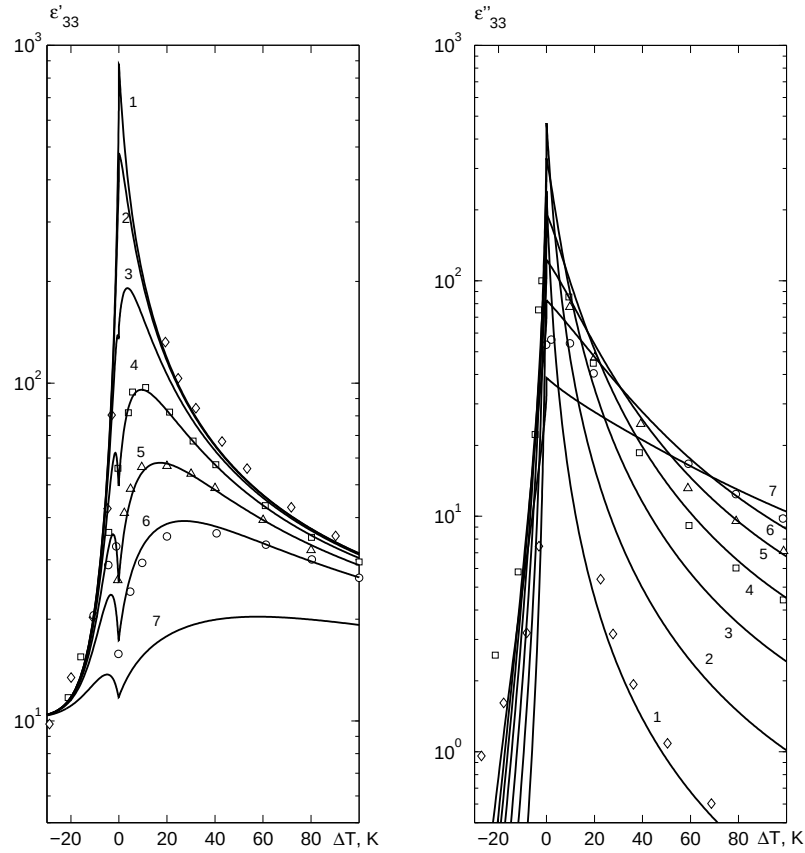


Рис. 34. Температурна залежність ϵ'_{33} і ϵ''_{33} $\text{KН}_2\text{P}\text{O}_4$ при різних частотах ν (ГГц): 9.2 – 1, $\diamond$ [19]; 33.2 – 2; 80 – 3; 154.2 – 4, $\square$ [16]; 249 – 5, $\triangle$ [16]; 372 – 6, $\circ$ [16]; 800 – 7. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

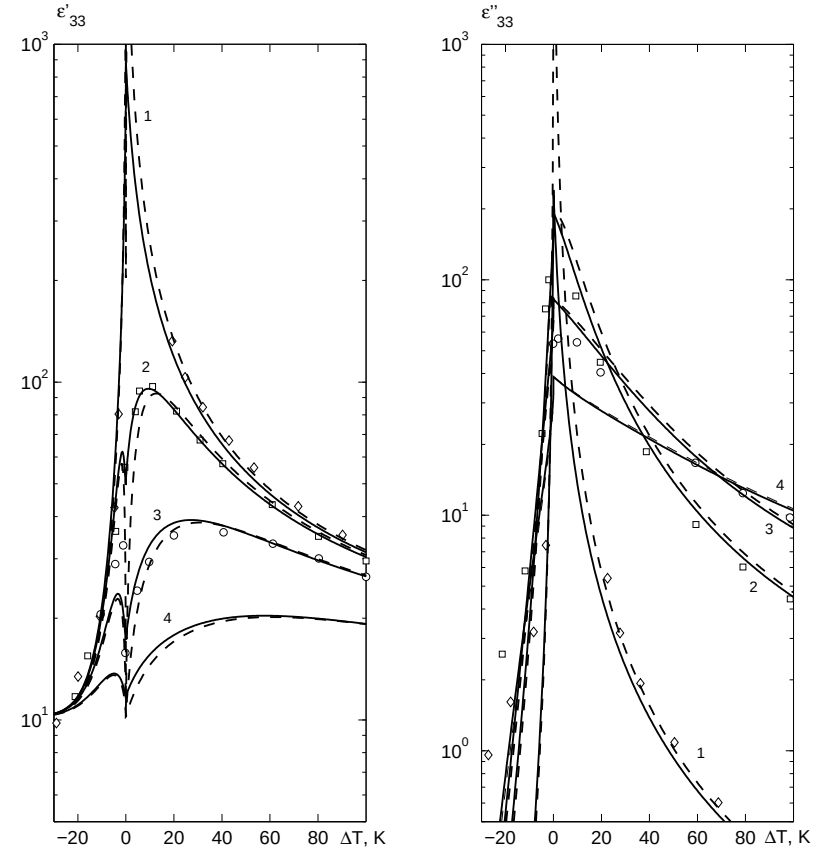


Рис. 35. Температурна залежність ϵ'_{33} і ϵ''_{33} $\text{KН}_2\text{P}\text{O}_4$ при різних частотах ν (ГГц): 9.2 – 1, $\diamond$ [19]; 154.2 – 2, $\square$ [16]; 372 – 3, $\circ$ [16]; 800 – 4. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

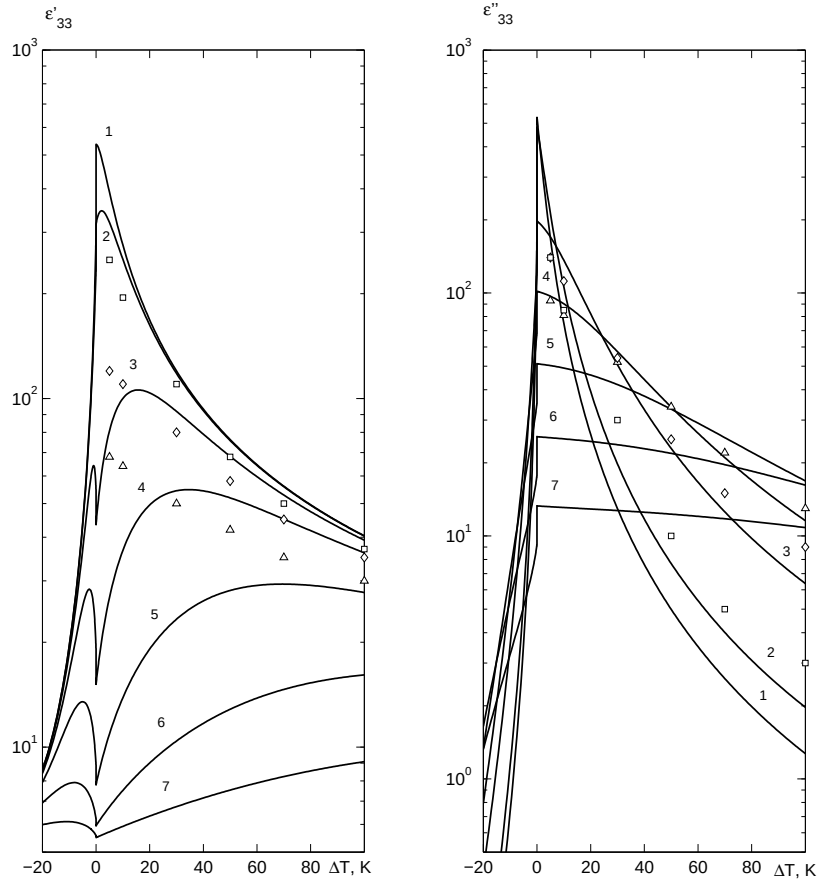


Рис. 36. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} KD_2PO_4 при частотах ν (ГГц): 1.93 – 1; 3.0 – 2, $\square$ [31]; 10.0 – 3, $\diamond$ [31]; 20.0 – 4, $\triangle$ [31]; 40.0 – 5; 80.0 – 6; 154.2 – 7. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

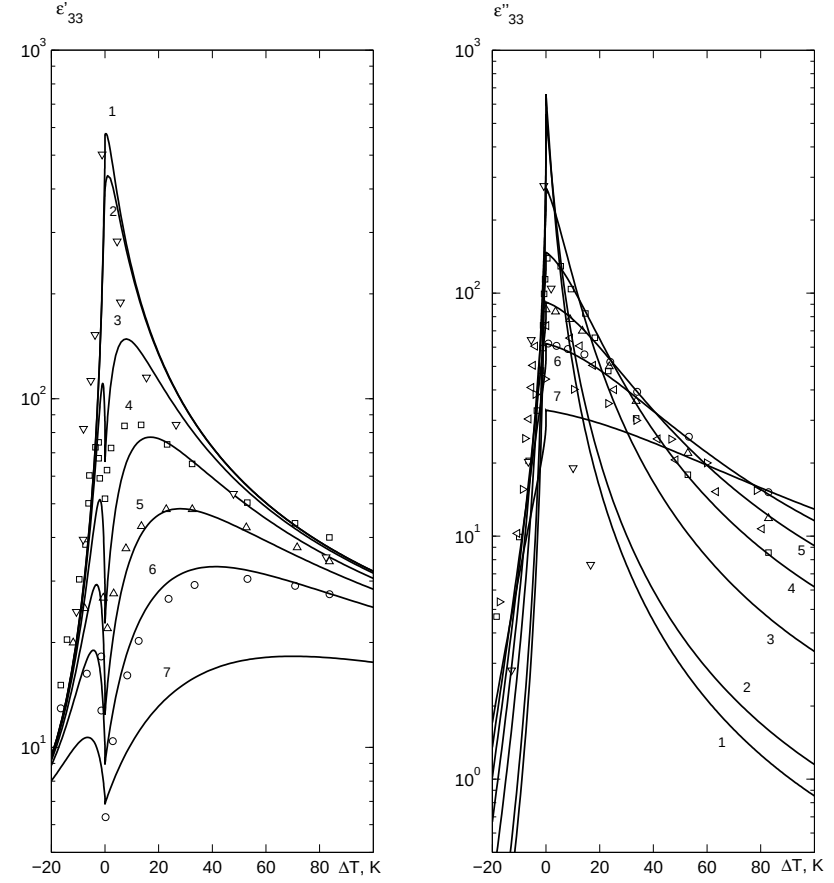


Рис. 37. Температурна залежність ε'_{33} і ε''_{33} RbH_2PO_4 при різних частотах ν (ГГц): 0.25 – 1; 10.0 – 2; 27.0 – 3, ∇ [69]; 154.2 – 4, $\square$ [76]; 250.2 – 5, $\triangle$ [76]; 372.0 – 6, $\circ$ [76]; 700.0 – 7. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

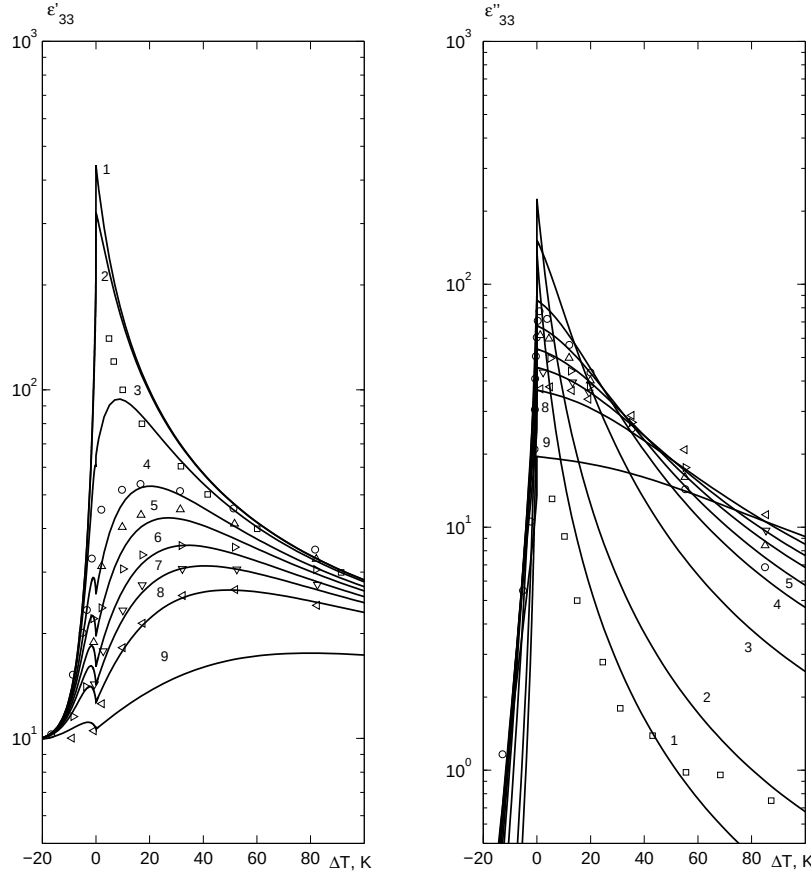


Рис. 38. Температурна залежність ϵ'_{33} і ϵ''_{33} $\text{KН}_2\text{AsO}_4$ при різних частотах ν (ГГц): 9.2 – 1, $\square$ [19]; 20.8 – 2; 80.0 – 3; 154.2 – 4, $\circ$ [76]; 198.9 – 5, $\triangle$ [76]; 250.2 – 6, $\triangleright$ [76]; 7, ∇ [76]; 372.0 – 8, $\triangleleft$ [76]; 700.0 – 9; . Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

$\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ величина $\epsilon'_{33}(\omega, T)$ зменшується, а різниця ΔT_n зростає.

При ізоморфному заміщенні $\text{K} \rightarrow \text{Rb}$, $\text{P} \rightarrow \text{As}$ максимальні значення $\epsilon'_{33}(\omega, T)$ майже не змінюються, але ΔT_n незначно збільшуються.

При зменшенні ΔT у сегнетофазі величина $\epsilon''_{33}(\omega)$ зростає, досягаючи максимуму при $\Delta T = 0$ і при рості ΔT у параметричній фазі значення $\epsilon''_{33}(\omega)$ зменшується. При збільшенні частоти зменшуються і величина максимуму проникності $\epsilon''_{33}(\omega)$ та її швидкість зміни з ростом ΔT .

При частотах ν_k значення $\epsilon'_{33}(\omega, T) = \epsilon''_{33}(\omega, T)$ і дорівнюють для $\text{KН}_2\text{PO}_4$ 465, KD_2PO_4 – 520, RbH_2PO_4 – 562 і $\text{KН}_2\text{AsO}_4$ – 330.

Відзначимо, що у випадку кристалів $\text{MН}_2\text{XO}_4$ експериментальні дані робіт [17, 19, 74, 76] розміщуються в області дисперсії діелектричної проникності, в той же час для KD_2PO_4 частоти субміліметрової спектроскопії [16] відповідають високочастотному “хвосту” дисперсії, а дані роботи [31] – низькочастотному. Тому необхідні експериментальні вимірювання $\epsilon'_{33}(\omega, T)$ в області частот від 10 ГГц і вище, щоб оцінити відповідність розрахованих $\epsilon'_{33}(\omega, T)$ даним експерименту.

На рис.35 штриховими лініями наведено результати розрахунку температурних залежностей $\epsilon'_{33}(\omega, T)$ і $\epsilon''_{33}(\omega, T)$ на основі мікротеорії без врахування п'єзоелектричної взаємодії, а суцільними – беручи її до уваги. Як видно, при врахуванні п'єзоэффекту при $\Delta T = 0$ мінімальні значення $\epsilon'_{33}(\omega)$ на різних частотах є більшими, ніж при нехтуванні п'єзоелектричною взаємодією.

Дослідження частотних залежностей дійсної та уявної частин діелектричної проникності є одним із важливих методів дослідження властивостей сегнетоелектриків. На рис.39–43 наведено результати розрахунку частотних залежностей $\epsilon'_{33}(\omega)$ і $\epsilon''_{33}(\omega)$ при різних значеннях ΔT для $\text{KН}_2\text{PO}_4$, KD_2PO_4 , RbH_2PO_4 і $\text{KН}_2\text{AsO}_4$, відповідно, а також експериментальні дані. При низьких частотах ($\nu < 10^7$ Гц) $\epsilon'_{33}(\omega) = \epsilon_{33}(0)$, а при високих ($\nu > 10^{13}$ Гц) – $\epsilon'_{33}(\omega) = \epsilon_{33}^0$. На частотах $2\pi\nu T_3 = \tau_c^{-1}(T)$ діелектричний внесок $\epsilon_T = \epsilon_{33}(0) - \epsilon_{33}^0$ зменшується вдвічі. При збільшенні ΔT значення $\epsilon'_{33}(\omega)$ зменшуються, а також зменшується швидкість зміни $\epsilon'_{33}(\omega)$ з ростом частоти. Величина $\epsilon''_{33}(\omega) = 0$, як при низьких частотах ($\omega \rightarrow 0$), так і при високих ($\omega \rightarrow \infty$). На частотах νT_3 $\epsilon''_{33}(\omega)$ набуває максимального значення, яке при рості ΔT зменшується і зміщується у високочастотну область.

У сегнетоелектричній фазі при однаковій, порівняно з парафазою, різниці $|\Delta T| = 5$ К значення $\epsilon'_{33}(\omega)$ і $\epsilon''_{33}(\omega)$ зменшуються, а

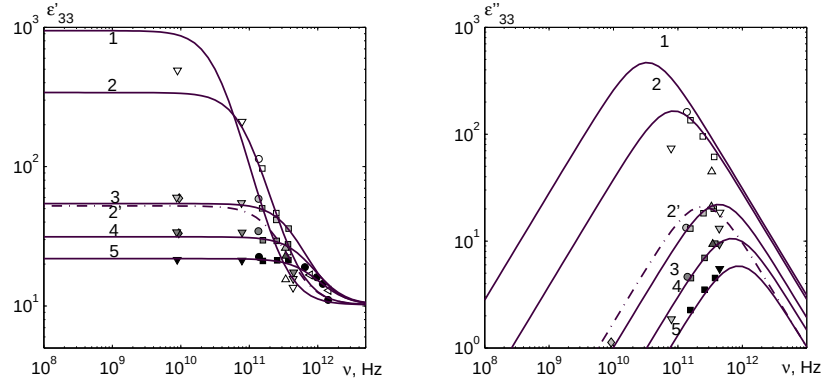


Рис. 39. Частотна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{KН}_2\text{P}\text{O}_4$ при різних температурах $\Delta T(\text{K})$: 0 – 1; 5 – 2, $\circ$ [74], $\square$ [16], $\diamond$ [19], $\triangle$ [33], ∇ [77]; 50 – 3, $\circ$ [74], $\square$ [16], $\diamond$ [19], $\triangle$ [33], ∇ [77]; 100 – 4, $\bullet$ [74], $\blacksquare$ [16], $\blacklozenge$ [19], $\blacktriangle$ [33], $\blacktriangledown$ [77]; 173 – 5, $\blacksquare$ [16], $\blacklozenge$ [19], $\blacktriangle$ [33], $\blacktriangledown$ [77]; -5 – 2'. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

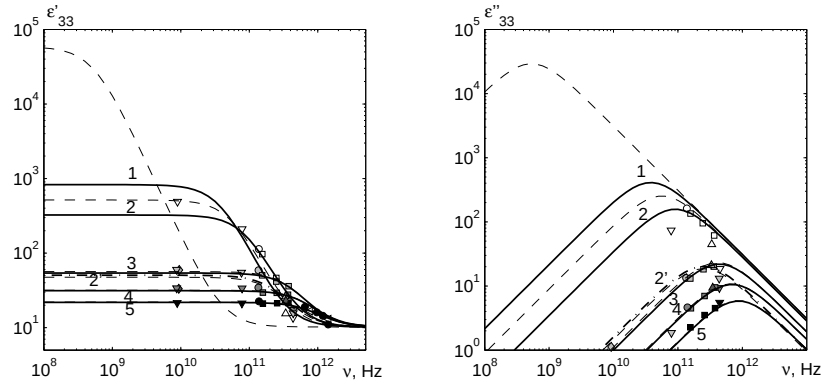


Рис. 40. Частотна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{KН}_2\text{P}\text{O}_4$ при різних температурах $\Delta T(\text{K})$: 0 – 1; 5 – 2, $\circ$ [74], $\square$ [16], $\diamond$ [19], $\triangle$ [33], ∇ [77]; 50 – 3, $\circ$ [74], $\square$ [16], $\diamond$ [19], $\triangle$ [33], ∇ [77]; 100 – 4, $\bullet$ [74], $\blacksquare$ [16], $\blacklozenge$ [19], $\blacktriangle$ [33], $\blacktriangledown$ [77]; 173 – 5, $\blacksquare$ [16], $\blacklozenge$ [19], $\blacktriangle$ [33], $\blacktriangledown$ [77]; -5 – 2'. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

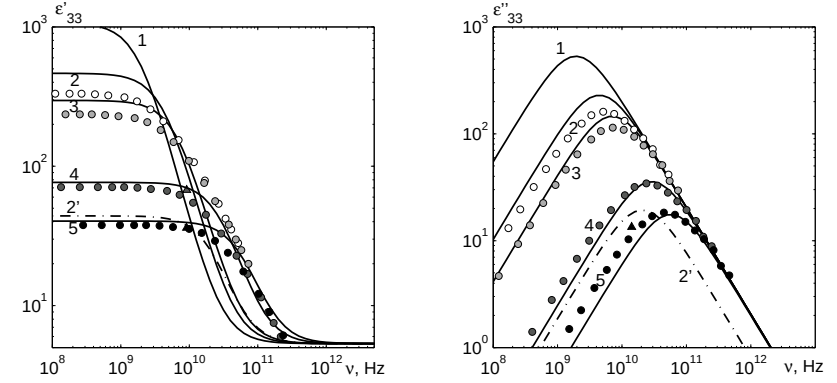


Рис. 41. Частотна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{KD}_2\text{P}\text{O}_4$ при різних температурах $\Delta T(\text{K})$: 0 – 1; 5 – 2, $\circ$ [23]; 10K – 3, $\bullet$ [23]; 50 – 4, $\bullet$ [23], $\blacktriangle$ [19]; 100 – 5, $\bullet$ [23], $\blacktriangle$ [19]; -5 – 2'. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

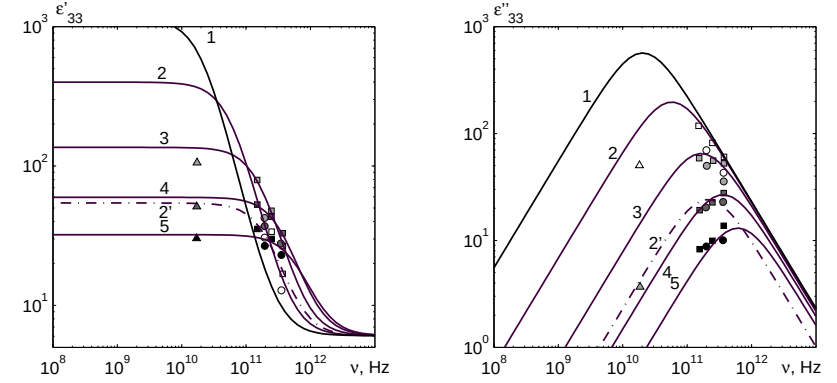


Рис. 42. Частотна залежність ε'_{33} і ε''_{33} $\text{RbН}_2\text{P}\text{O}_4$ при різних температурах $\Delta T(\text{K})$: 0 – 1; 5 – 2, $\circ$ [33], $\square$ [76], $\triangle$ [69]; 20 – 3, $\bullet$ [33], $\blacksquare$ [76], $\blacktriangle$ [69]; 50K – 4, $\bullet$ [33], $\blacksquare$ [76], $\blacktriangle$ [69]; 100 – 5, $\bullet$ [33], $\blacksquare$ [76], $\blacktriangle$ [69]; -5 – 2'. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

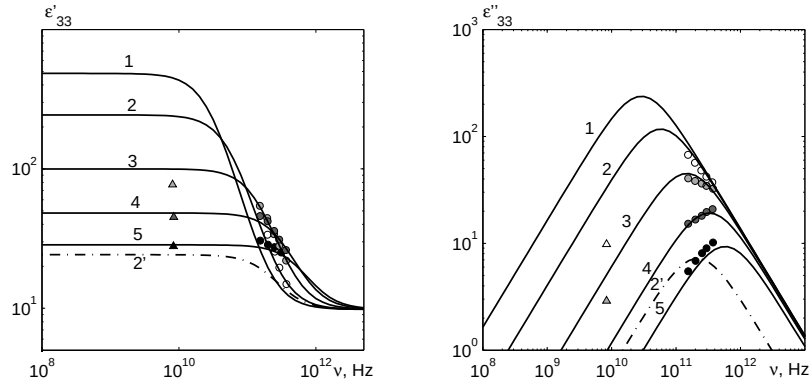


Рис. 43. Частотна залежність ε'_{33} і ε''_{33} KN_2AsO_4 при різних температурах ΔT (K): 0–1; 5–2, $\circ$ [76]; 20–3, $\bullet$ [76], Δ [19]; 50–4, $\bullet$ [76], Δ [19]; 100–5, $\bullet$ [76], Δ [19]; -5–2'. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

дисперсія проникності зміщується в область більших частот.

Із рис.39 видно, що у випадку KN_2PO_4 розраховані на основі запропонованої теорії, яка є по суті релаксаційною теорією дебаєвського типу, значення $\varepsilon'_{33}(\omega)$ і $\varepsilon''_{33}(\omega)$ добре узгоджуються з даними робіт [16,19,74]. Співпадає частотна залежність $\varepsilon'_{33}(\omega)$ з даними [77] при менших частотах, а $\varepsilon''_{33}(\omega)$ – при вищих частотах.

Розраховані частотні залежності $\varepsilon'_{33}(\omega)$ і $\varepsilon''_{33}(\omega)$ при різних температурах добре описують експериментальні дані роботи [23] кристалу KD_2PO_4 для залежностей $\varepsilon'_{33}(\omega)$ і $\varepsilon''_{33}(\omega)$ у всьому частотному діапазоні, за винятком $\Delta T < 50$ K і $\nu > 20$ ГГц для $\varepsilon'_{33}(\omega)$. У цій температурній і частотній області розрахована величина $\varepsilon'_{33}(\omega, T)$ зменшується при $\Delta T \rightarrow 0$, а експериментальна [23] – збільшується.

Задовільним є опис експериментальних даних для $\varepsilon'_{33}(\omega)$ і $\varepsilon''_{33}(\omega)$, які для RbH_2PO_4 отримані в роботах [76,33,69] (рис.42) і для KN_2AsO_4 – в роботах [76,19] (рис.43). Для виявлення більш повної можливості опису теорією експерименту доцільно було б виміряти $\varepsilon'_{33}(\omega)$ і $\varepsilon''_{33}(\omega)$ у більш широкій частотній області.

Проаналізуємо зміну дійсної та уявної частин $\varepsilon^*_{33}(\omega)$ кристалів $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$ при заміщеннях $\text{H} \rightarrow \text{D}$, $\text{K} \rightarrow \text{Rb}$ і $\text{P} \rightarrow \text{As}$. При $\Delta T = +0$ K дисперсійна частота, тобто частота, при якій спостерігається максимум $\varepsilon''_{33}(\omega)$, у випадку KN_2PO_4 дорівнює 33,2 ГГц,

KD_2PO_4 – 1,93 ГГц, RbH_2PO_4 – 20,5 ГГц, KN_2AsO_4 – 20,8 ГГц. Ширина спектра, яка визначається різницею частот, при якій максимум $\varepsilon''_{33}(\omega)$ зменшується вдвічі, для кристалу KN_2PO_4 дорівнює 12,0 ГГц, KD_2PO_4 – 4,8 ГГц, RbH_2PO_4 – 7,8 ГГц, а KN_2AsO_4 – 7,2 ГГц.

Найбільш повним відтворенням дисперсії дійсної та уявної частин діелектричної проникності $\varepsilon^*_{33}(\omega, T)$ кристалів $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$ є їх частотно-температурні залежності, розраховані в широкому температурному і частотному діапазонах. На рис.44, 45 разом із даними експериментів наведено результати розрахунку цих характеристик для KN_2PO_4 , на рис.46, 47 – для $\text{K}(\text{H}_{0,07}\text{D}_{0,93})_2\text{PO}_4$, для RbH_2PO_4 – на рис.48, 49 і для KN_2AsO_4 – на рис.50, 51.

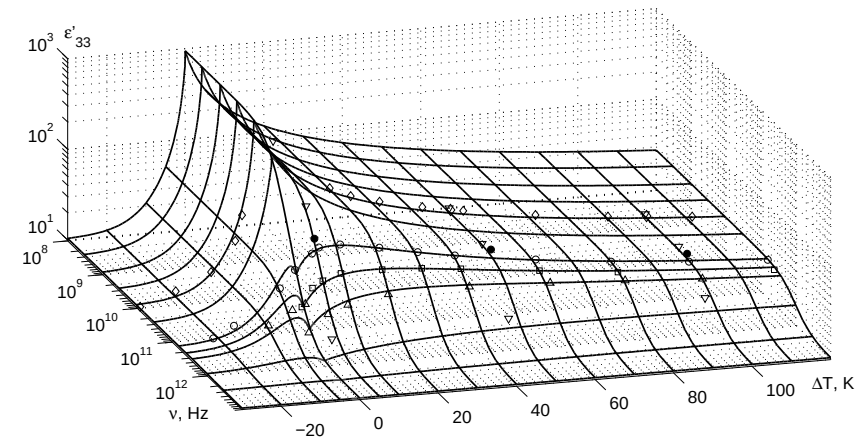


Рис. 44. Частотно-температурна залежність ε'_{33} KN_2PO_4 . $\diamond$ – [19]; $\circ$, $\square$, Δ – [16]; $\bullet$ – [74]; $\blacktriangledown$ – [77]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

У вирази для комплексної діелектричної проникності $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$ входять часи релаксації τ_1^z і $\tau_{2,3,4}^z$, які містять параметр α . Його значення, як було вказано вище, вибираємо таким, щоб розрахована дисперсія $\varepsilon^*_{33}(\omega)$ була в тому ж частотному діапазоні, що й отримана експериментально. Знайдене значення часів релаксації $\tau_{2,3,4}^z$, на відміну від τ_1^z , є слабо температурно залежним і набагато менший за величиною від τ_1^z . Температурна залежність оберненого часу релаксації $(\tau_1^z)^{-1}$ кристалу $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ при різних значеннях x , а також експериментально визначені значення $(\tau_1^z)^{-1}(T)$ наведені на рис.51. Видно, що мікротеорія дає для часу

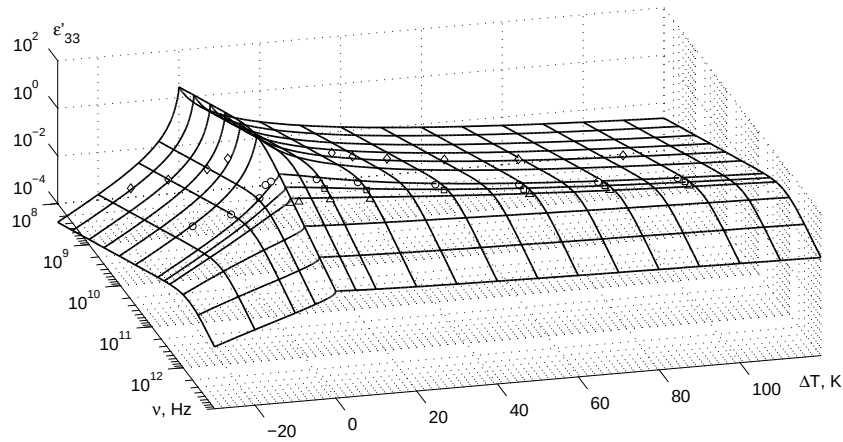


Рис. 45. Частотно-температурна залежність ε''_{33} $\text{KН}_2\text{P}\text{O}_4$. $\diamond$ – [19]; $\circ$, $\square$, $\triangle$ – [16]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

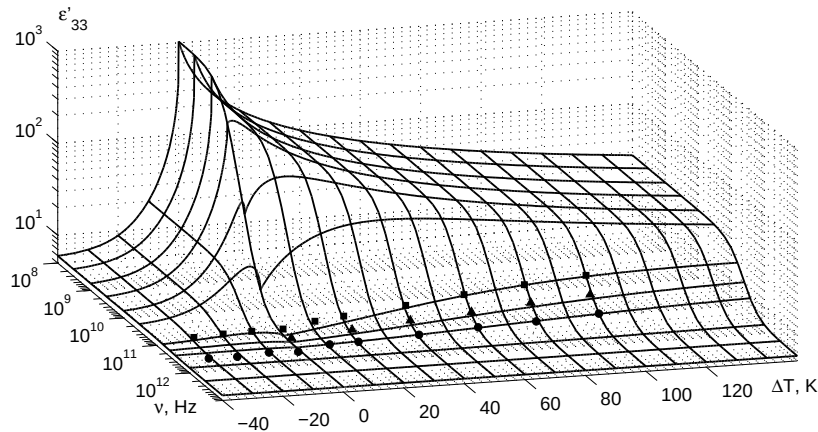


Рис. 46. Частотно-температурна залежність ε'_{33} $\text{K}(\text{H}_{0.07}\text{D}_{0.93})_2\text{P}\text{O}_4$. $\blacksquare$, $\blacktriangle$, $\bullet$ – [16]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

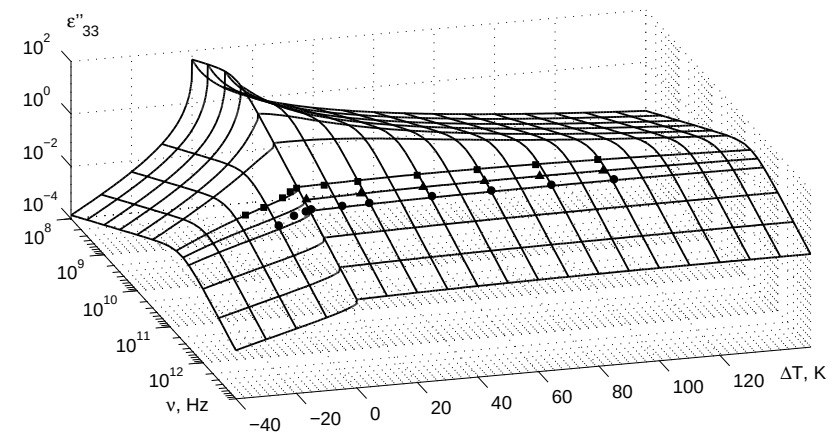


Рис. 47. Частотно-температурна залежність ε''_{33} $\text{K}(\text{H}_{0.07}\text{D}_{0.93})_2\text{P}\text{O}_4$. $\blacksquare$, $\blacktriangle$, $\bullet$ – [16]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

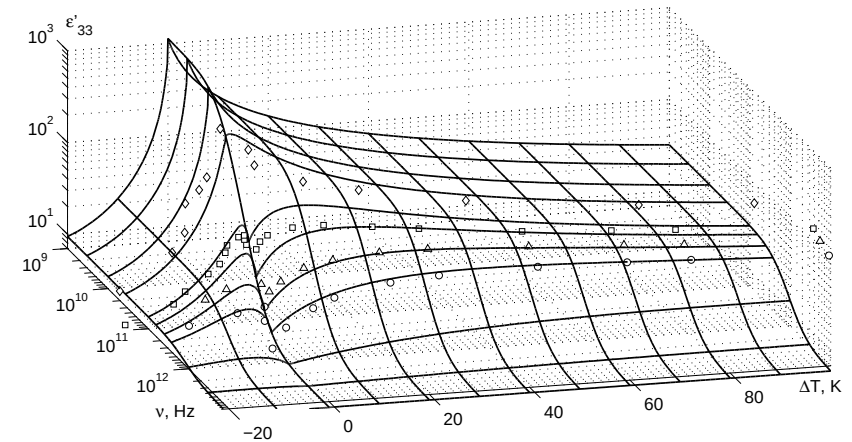


Рис. 48. Частотно-температурна залежність ε'_{33} $\text{RbH}_2\text{P}\text{O}_4$. $\diamond$ – [69]; $\square$, $\triangle$, $\circ$ – [76]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

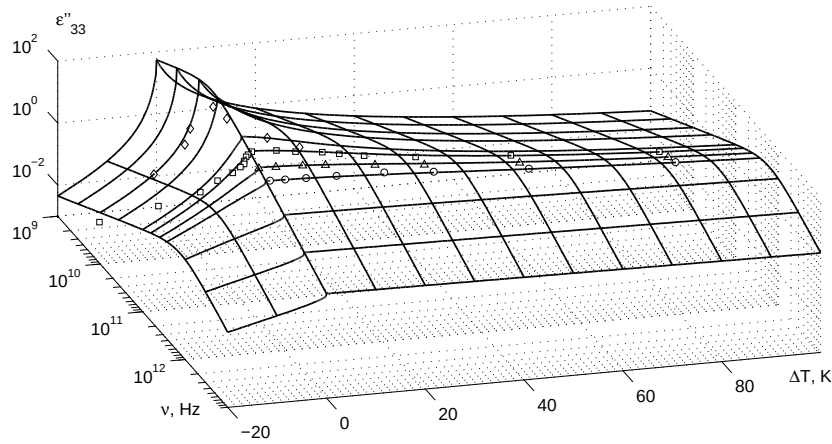


Рис. 49. Частотно-температурна залежність ε''_{33} RbH_2PO_4 . $\diamond$ – [69]; $\square$, $\triangle$, $\circ$ – [76]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

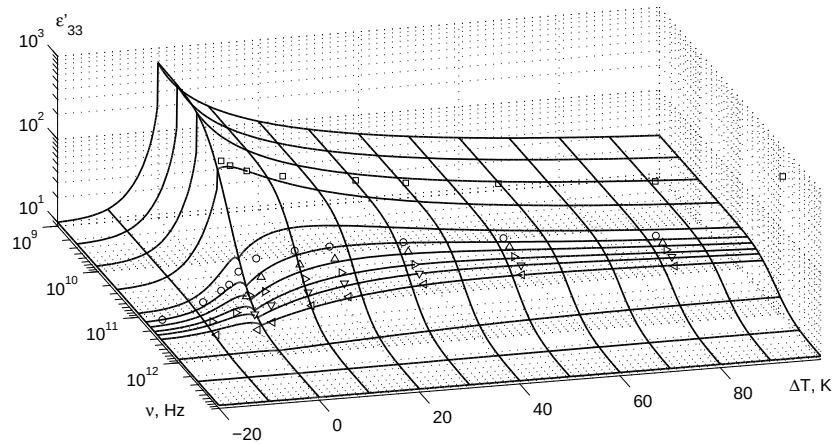


Рис. 50. Частотно-температурна залежність ε'_{33} $\text{KН}_2\text{AsO}_4$. $\square$ – [19]; $\circ$, $\triangle$, $\triangleright$, ∇ , $\triangleleft$ – [76]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

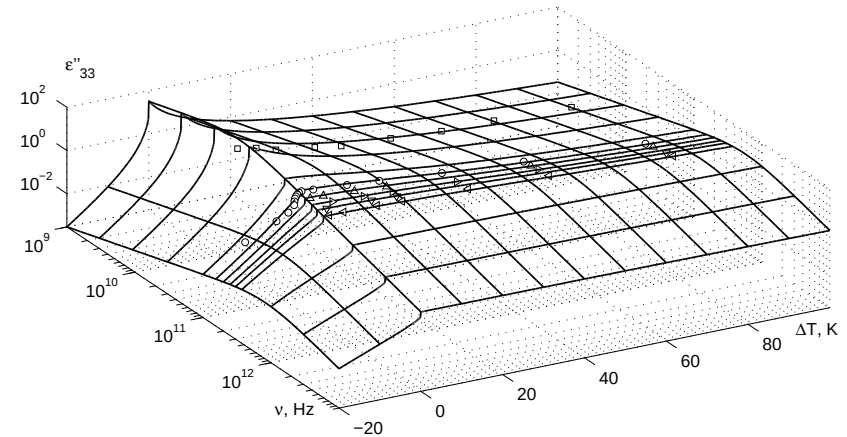


Рис. 51. Частотно-температурна залежність ε''_{33} $\text{KН}_2\text{AsO}_4$. $\square$ – [19]; $\circ$, $\triangle$, $\triangleright$, ∇ , $\triangleleft$ – [76]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

релаксації залежність від температури, яка задовільно відтворює результати вимірювань. Деяка відмінність часів релаксації, визначених із діелектричних спектрів та ультразвукових вимірювань, пов'язана з тим, що поряд із сегнетоелектричною релаксацією у поглинання ультразвуку дають вклад і інші механізми дисипації (наприклад, розсіювання на домішках).

Штриховою лінією на рис.52 наведена температурна залежність $(\tau_1^z)^{-1}$ для $x = 0.805$, яка узгоджується із значенням $(\tau_1^z)^{-1}$, що отримане із ультразвукових досліджень [22]. Суцільна ж лінія б отримана із умови опису проникності $\varepsilon_{33}^*(\omega)$.

Для температурного ходу $(\tau_1^z)^{-1}$ характерна нелінійність, особливо при великих значеннях x . Дейтерування приводить до збільшення часу релаксації τ_1^z , а, отже, і до зменшення частоти дисперсії $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$. У парафазі час релаксації τ_1^z є більшим, ніж у сегнетоелектричній фазі.

Ізоморфні заміщення $\text{K} \rightarrow \text{Rb}$, $\text{P} \rightarrow \text{As}$ практично не змінюють швидкості температурної зміни оберненого часу релаксації $(\tau_1^z)^{-1}(T)$ (рис.53), але збільшується скачок значення $(\tau_1^z)^{-1}$ у точці фазового переходу.

У відповідності з теорією Ландау–Халатнікова статична діелектрична сприйнятливість безпосередньо пов'язана з часом діелектрич-

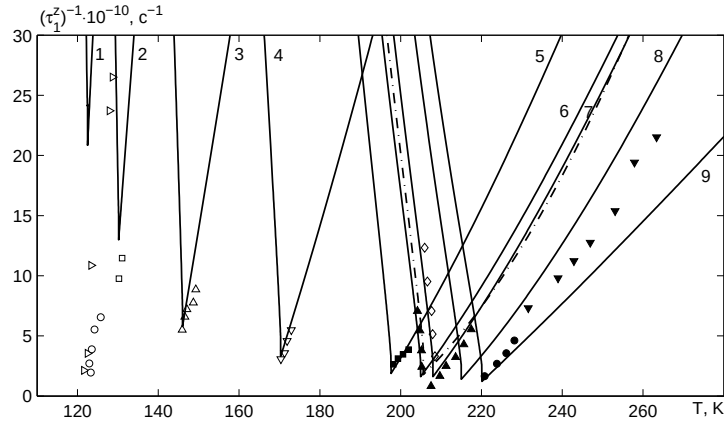


Рис. 52. Температурна залежність оберненого часу релаксації поляризації при різних x : 0.0 – 1, $\triangleright$ [66], $\triangleleft$ [98], $\circ$ [79]; 0.07 – 2, $\square$ [18]; 0.21 – 3, $\triangle$ [18]; 0.43 – 4, ∇ [18]; 0.72 – 5, $\blacksquare$ [18]; 0.805 – 6, $\blacktriangle$ [22]; 0.84 – 7, $\diamond$ [99]; 0.93 – 8, $\blacktriangledown$ [98]; 1.0 – 9, $\bullet$ [96]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

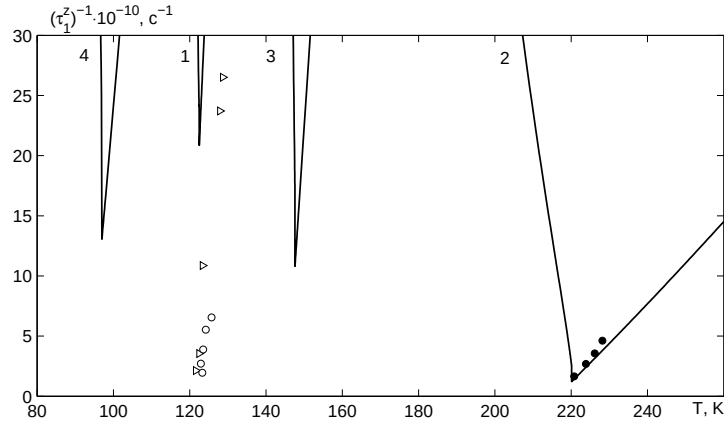


Рис. 53. Температурна залежність оберненого часу релаксації поляризації $(\tau_1^z)^{-1}$: 1 – KN_2PO_4 ; 2 – KD_2PO_4 ; 3 – RbH_2PO_4 ; 4 – KN_2AsO_4 ; Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

ної релаксації, а саме

$$\chi_{33}(0) = \Gamma_3 \tau_1^z,$$

де Γ_3 – кінетичний коефіцієнт.

Перейдемо тепер до дослідження розрахованих динамічних характеристик механічно вільних кристалів $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$, які вирізані у вигляді квадратної пластинки зі сторонами $l = 1$ мм у площині $[0,0,1]$. Для числових розрахунків у цьому випадку необхідно задати значення тих же параметрів теорії, які були використані при описі статичних і динамічної діелектричної проникності механічно затиснутого кристалу.

Відзначимо, що ми не можемо провести кількісне порівняння теоретично отриманих температурних і частотних динамічних характеристик механічно вільного кристалу в області п'єзоелектричного резонансу із експериментальними даними, оскільки нам не відомі такі вимірювання. Крім того, результати розрахунків залежать від розмірів сторін пластинки кристалу.

На рис.54–57 представлено температурні залежності дійсної $\varepsilon'_{33}(\omega, T)$ частини діелектричної проникності механічно вільних кристалів KN_2PO_4 , KD_2PO_4 , RbH_2PO_4 і KN_2AsO_4 при різних частотах зовнішнього електричного поля. При частотах, нижчих від частоти першого резонансного піку, залежність динамічної проникності $\varepsilon'_{33}(\omega, T)$ співпадає із температурною залежністю статичної проникності вільного кристалу. В діапазоні резонансних частот на кривій температурної залежності проникності виникають резонансні піки, кількість яких зі збільшенням частоти зростає, а їх амплітуда зменшується. При наступному збільшенні частоти численні резонансні піки малої амплітуди накладаються на криву температурної залежності динамічної діелектричної проникності затиснутого кристалу. При ще вищих частотах резонансні піки зникають взагалі. Резонансні піки для дійсної та уявної частин проникності спостерігаються при заданій частоті при однакових температурах ΔT . Характер кривих п'єзоелектричного резонансу різний для кристалів, які нами досліджуються.

На рис.58–61 зображено частотні залежності дійсної та уявної частин динамічної діелектричної проникності механічно вільних кристалів KN_2PO_4 , KD_2PO_4 , RbH_2PO_4 і KN_2AsO_4 у парафазі при різних температурах ΔT . В області частот $3 \cdot 10^5$ – $3 \cdot 10^8$ Гц для кристалів MH_2XO_4 має місце дисперсія резонансного типу, а для KD_2PO_4 – у діапазоні $5 \cdot 10^5$ – $5 \cdot 10^8$ Гц. При $\omega \rightarrow 0$ отримуємо статичну діелектричну проникність вільного кристалу. Враховуючи закон дисперсії

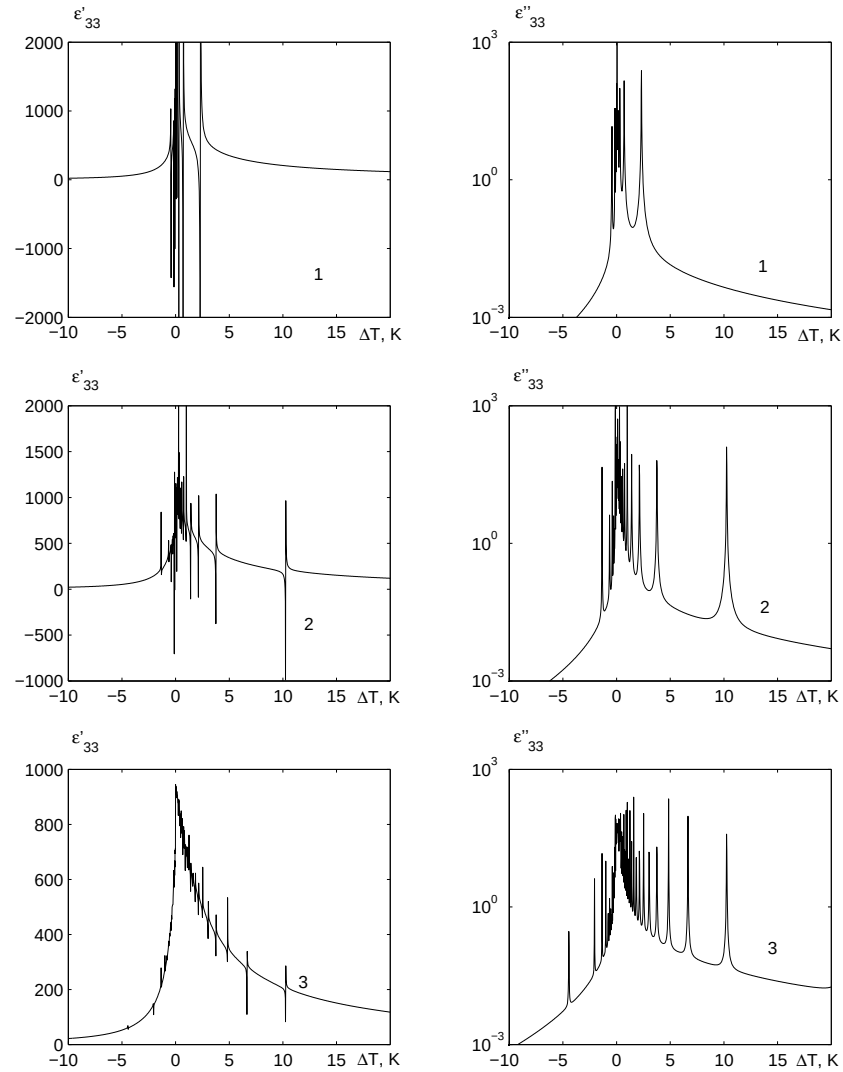


Рис. 54. Температурні залежності дійсної та уявної частини діелектричної сприйнятливості вільного кристалу KH_2PO_4 при різних частотах ν , МГц: 1 – 3, 2 – 10, 3 – 30.

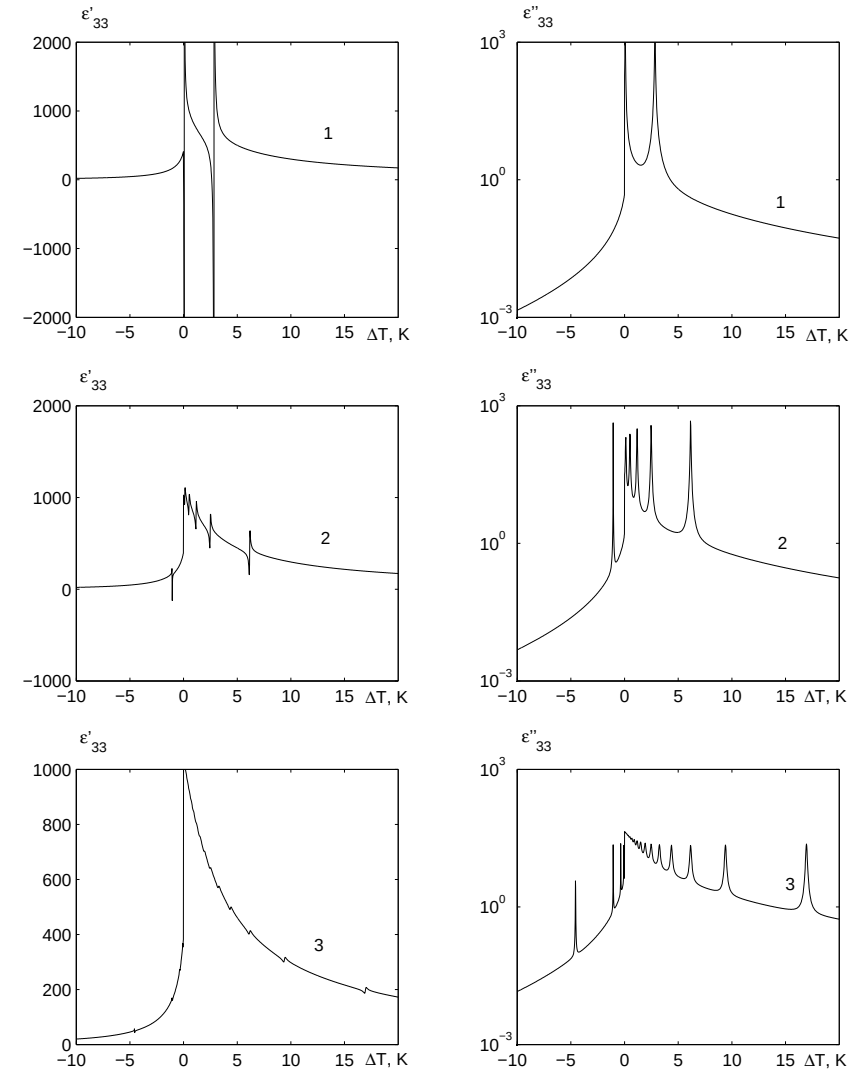


Рис. 55. Температурні залежності дійсної та уявної частини діелектричної сприйнятливості вільного кристалу KD_2PO_4 при різних частотах ν , МГц: 1 – 3, 2 – 10, 3 – 30.

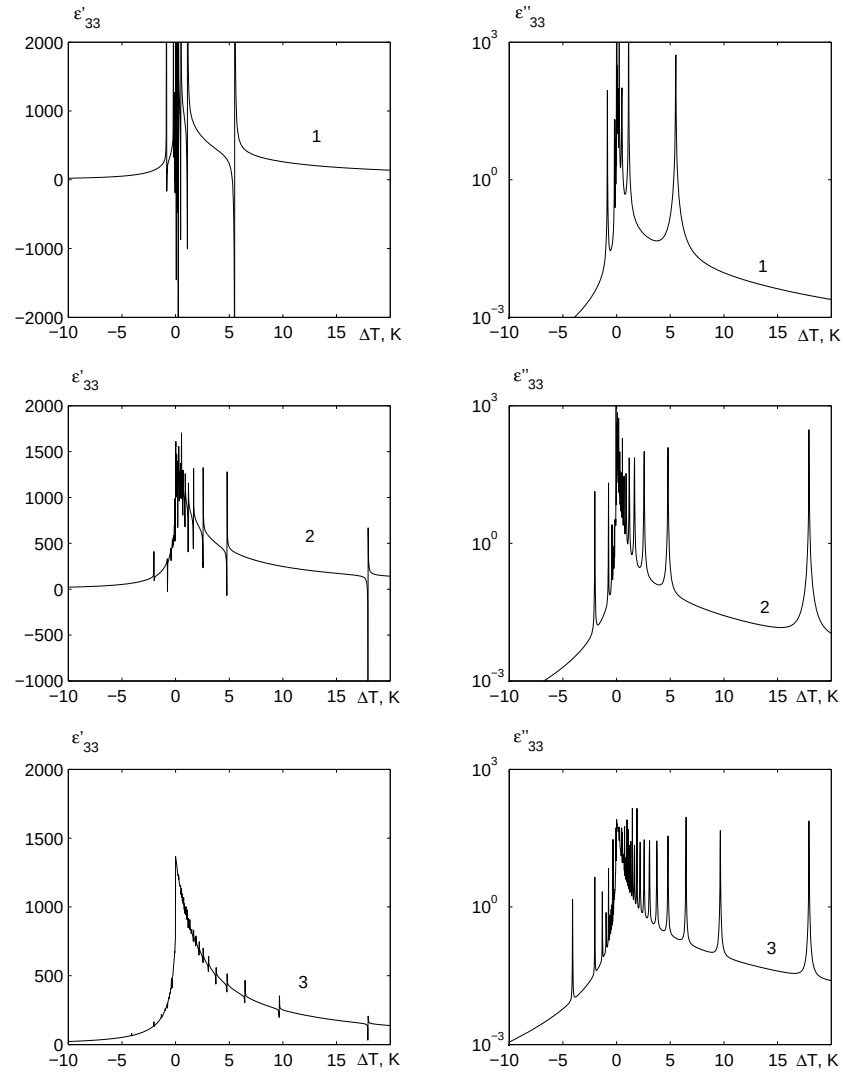


Рис. 56. Температурні залежності дійсної та уявної частини діелектричної сприйнятливості вільного кристалу RbH_2PO_4 при різних частотах ν , МГц: 1 – 3, 2 – 10, 3 – 30.

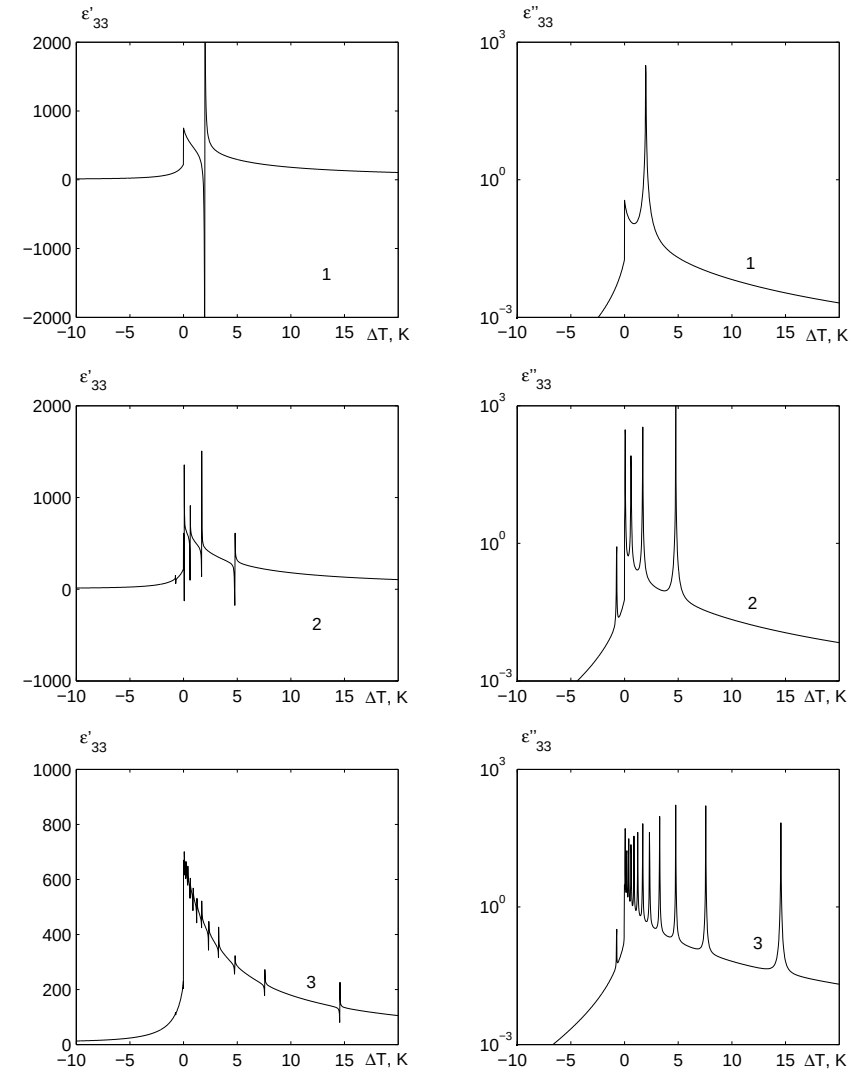


Рис. 57. Температурні залежності дійсної та уявної частини діелектричної сприйнятливості вільного кристалу KH_2AsO_4 при різних частотах ν , МГц: 1 – 3, 2 – 10, 3 – 30.

(7.11), знаходимо рівняння для резонансних частот

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

де враховано в області частот $5 \cdot 10^5 - 5 \cdot 10^8$ Гц $c_{66}^E(\omega)$ від частоти практично не залежить. Резонансні частоти обернено пропорційні до розмірів зразка.

Штрихова лінія на рис.58–61 відповідає низькочастотному ходу проникності затиснутого кристалу. При збільшенні частоти і температури ΔT амплітуди резонансних піків зменшуються. При збільшенні температури ΔT останній резонансний пік зміщується в область вищих частот. Аналогічна багатопікова резонансна дисперсія спостерігається і в сегнетоелектричній фазі. Вище від резонансної частоти спостерігається затискання кристалу високочастотним полем і для проникності затиснутого кристалу вище частоти 10^9 Гц має місце дисперсія релаксаційного типу. Криві частотних залежностей $\epsilon'_{33}(\omega)$ і $\epsilon''_{33}(\omega)$, які розраховані на основі мікротеорії, добре узгоджуються з даними експериментів. Дисперсія резонансного типу в кристалі KN_2PO_4 наведена схематично в роботі [95], для випадку сегнетофази – при частотах $10^4 - 10^6$ Гц.

Температурна залежність динамічних $c_{36}^*(\omega)$, $d_{36}^* = \frac{c_{36}^*(\omega)}{c_{66}^*(\omega)}$, $c_{66}^*(\omega)$ і $s_{66}^{E*} = \frac{1}{c_{66}^*(\omega)}$ для кристалів KN_2PO_4 , RbH_2PO_4 , KN_2AsO_4 при частотах $\nu = 10^7, 10^{11}$ Гц і для KD_2PO_4 при частотах $\nu = 10^7, 10^9$ Гц наведені на рис.62–65. На рис.62 зображені і дані експериментів для ϵ_{36} і c_{66}^E . Як видно, значення дійсних частин розглянутих характеристик при $\nu = 10$ МГц співпадають із $\nu = 0$ МГц.

На рис.66 наведені частотні характеристики дійсних і уявних частин $\epsilon_{36}^*(\omega)$, $d_{36}^*(\omega)$, $c_{66}^{E*}(\omega)$ і $s_{66}^{E*}(\omega)$ для кристалів KN_2PO_4 , KD_2PO_4 , RbH_2PO_4 і KN_2AsO_4 . При частотах менших 10^{10} Гц для MH_2XO_4 і 10^9 Гц для KD_2PO_4 значення дійсних частин величин, які розглядаються, є незмінними, а при збільшенні частоти ϵ'_{36} , d'_{36} , $s_{66}^{E'}$ зменшуються до, а $\epsilon_{66}^{E'}$ – збільшується в області $10^{10} - 10^{12}$ Гц, а потім залишається сталою. Уявна частина $\epsilon_{36}^*(\omega)$, $d_{36}^*(\omega)$, $c_{66}^{E*}(\omega)$ і $s_{66}^{E*}(\omega)$ в області частот $10^{10} - 10^{12}$ Гц збільшується, досягаючи максимуму, і зменшується.

На рис.67 зображено розраховані температурні залежності коефіцієнта поглинання звуку α_6 кристалів KN_2PO_4 , $\text{K}(\text{H}_{0.195}\text{D}_{0.805})_2\text{PO}_4$, RbH_2PO_4 і KN_2AsO_4 при різних частотах і дані вимірювань α_6 , які наведені в [22], [79]. Отримано хороше кількісне узгодження розрахованих та експериментальних даних, особливо для

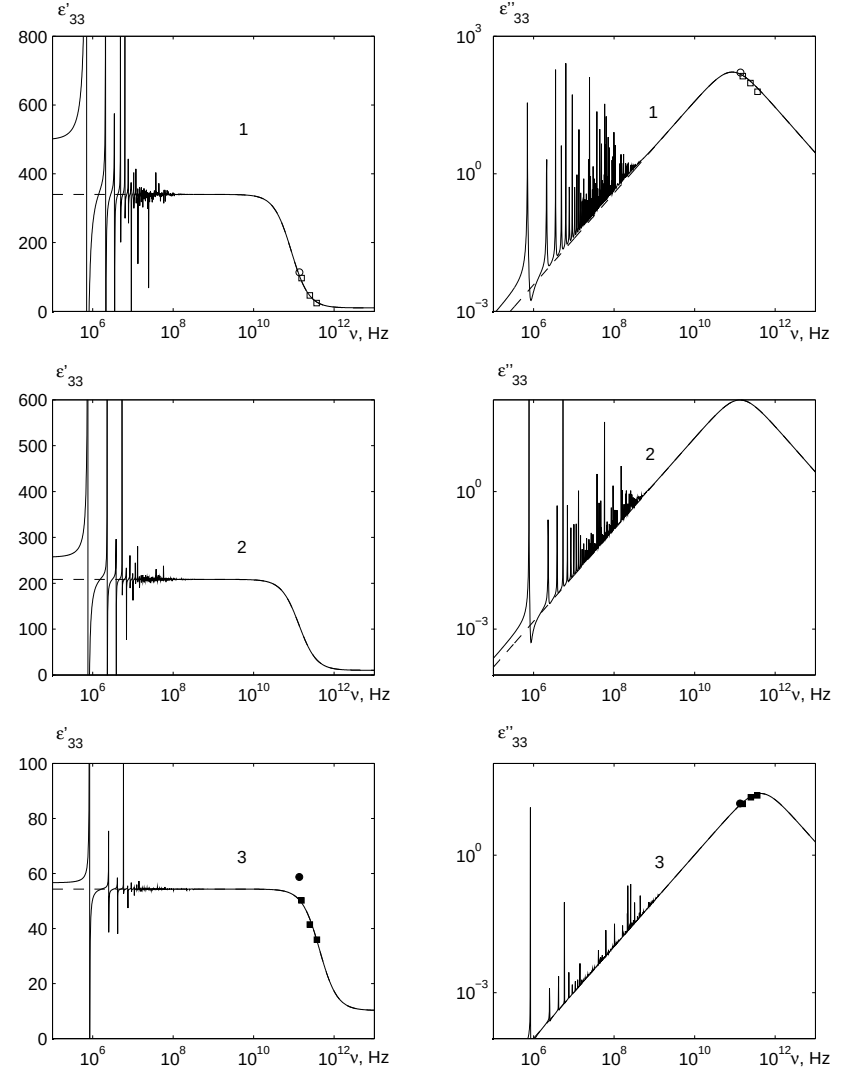


Рис. 58. Частотні залежності дійсної та уявної частини діелектричної сприйнятливості вільного і затиснутого кристалу KN_2PO_4 при різних $\Delta T, \text{K}$: 1 – 5, 2 – 10, 3 – 50.

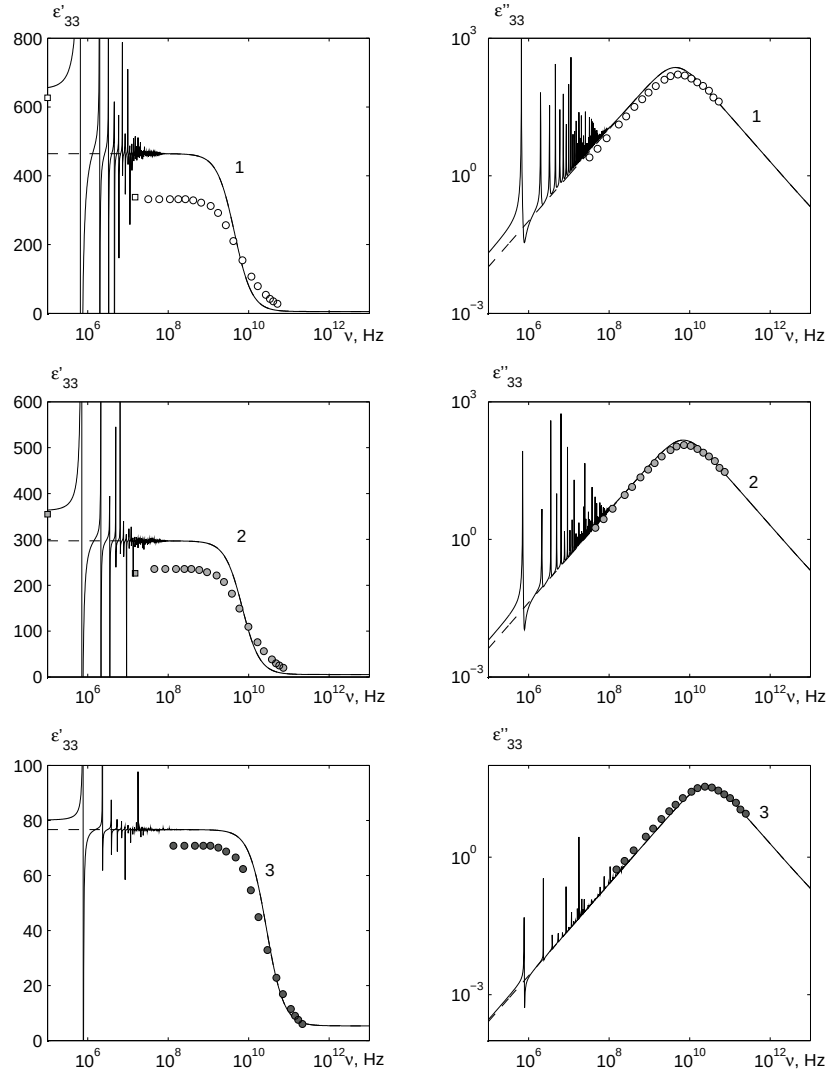


Рис. 59. Частотні залежності дійсної та уявної частини діелектричної сприйнятливості вільного і затиснутого кристалу KD_2PO_4 при різних $\Delta T, \text{K}$: 1 – 5, 2 – 10, 3 – 50.

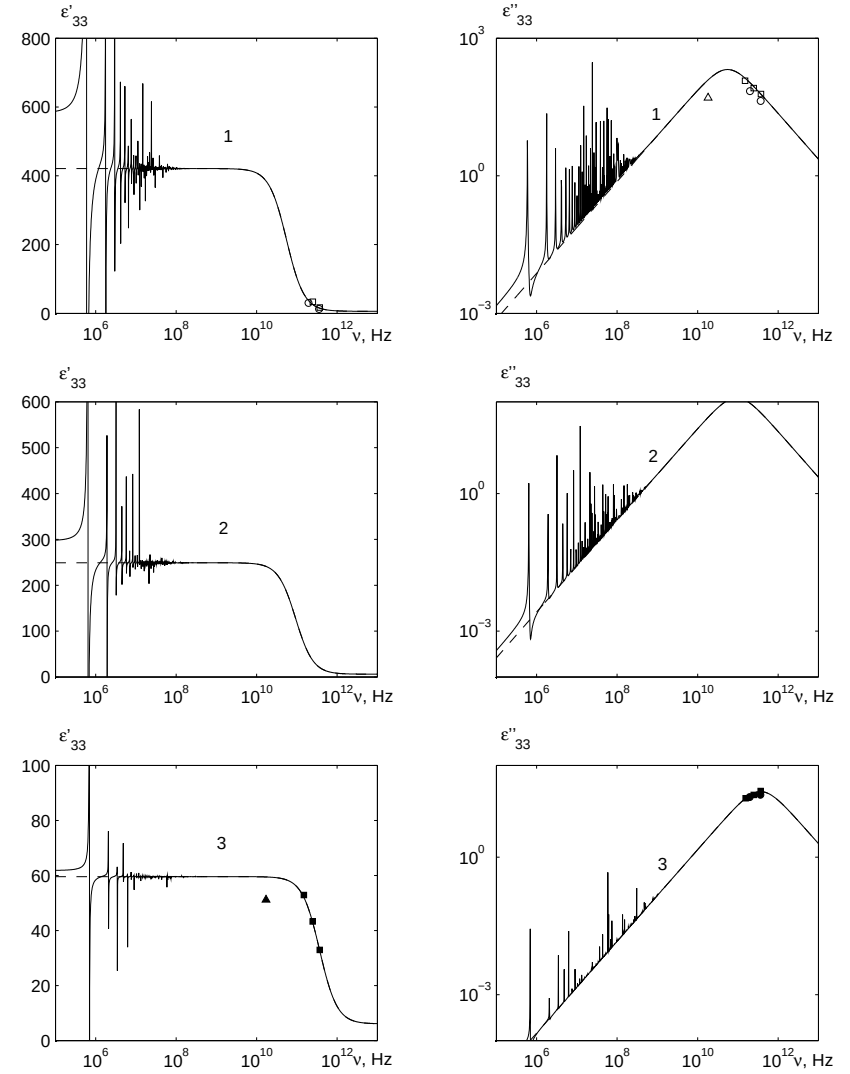


Рис. 60. Частотні залежності дійсної та уявної частини діелектричної сприйнятливості вільного і затиснутого кристалу RbH_2PO_4 при різних $\Delta T, \text{K}$: 1 – 5, 2 – 10, 3 – 50.

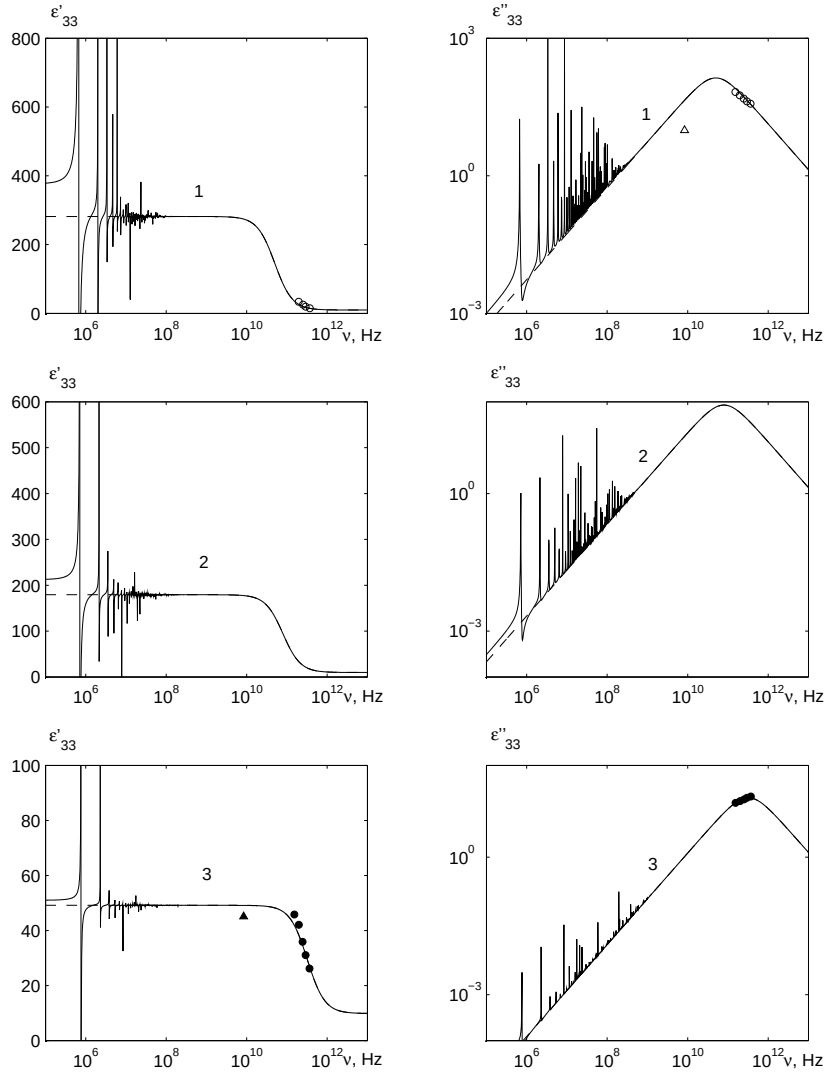


Рис. 61. Частотні залежності дійсної та уявної частини діелектричної сприйнятливості вільного і затиснутого кристалу KH_2AsO_4 при різних $\Delta T, \text{K}$: 1 – 5, 2 – 10, 3 – 50.

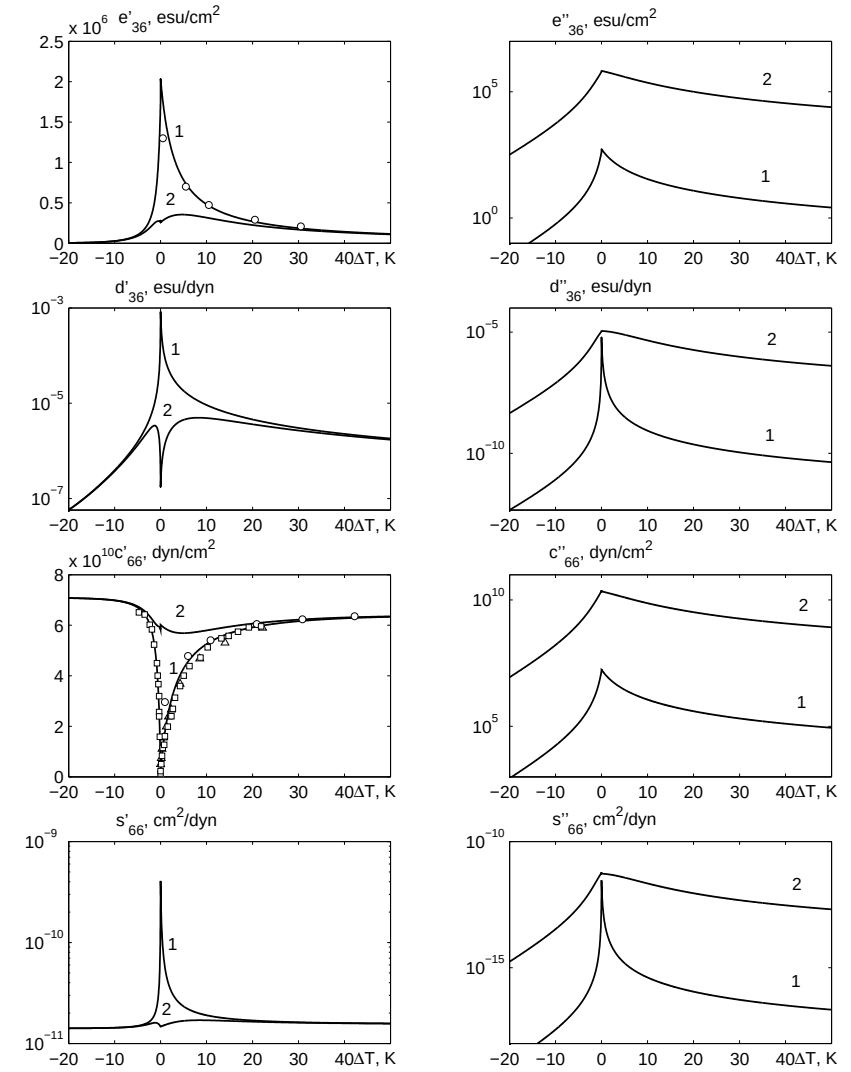


Рис. 62. Температурні залежності дійсної та уявної частини ϵ'_{36} , d'_{36} , ϵ''_{36} , d''_{36} кристалу KH_2PO_4 при частотах $\nu = 10^7(1)$, $10^{11}(2)$ Гц.

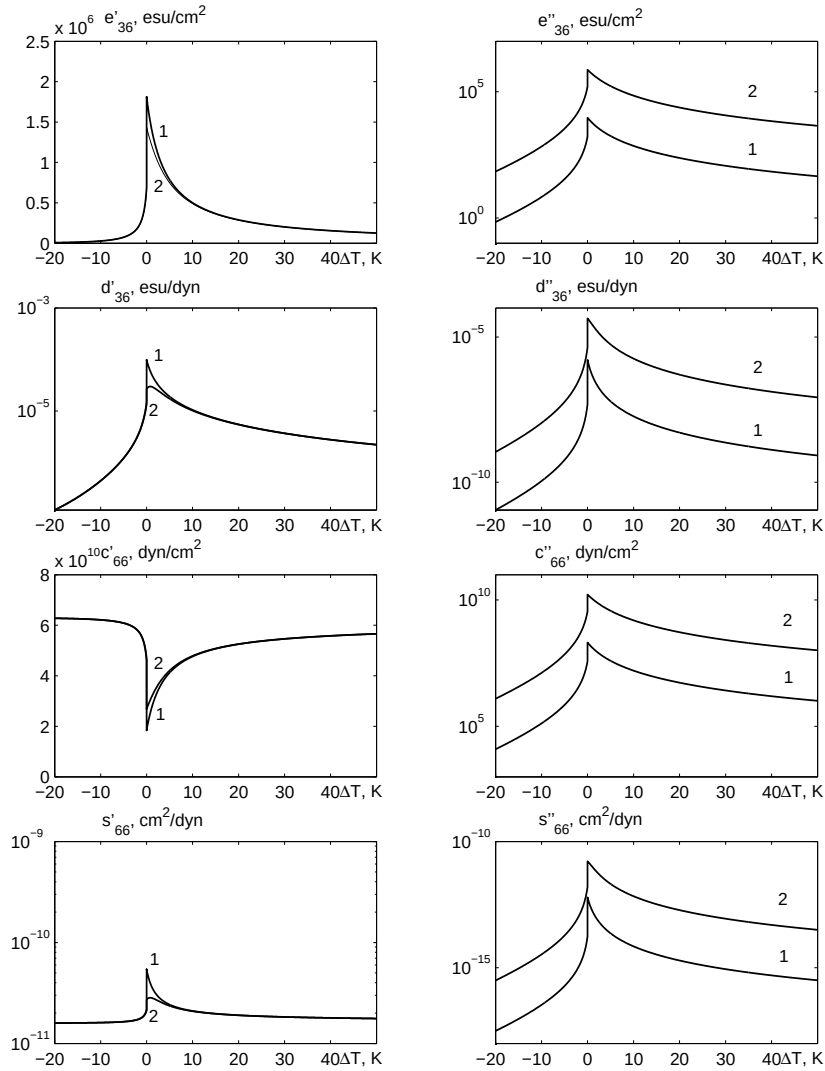


Рис. 63. Температурні залежності дійсної та уявної частини e_{36}^T , d_{36}^T , c_{66}^T , s_{66}^T кристалу KD_2PO_4 при частотах $\nu = 10^7(1), 10^9(2)$ Гц.

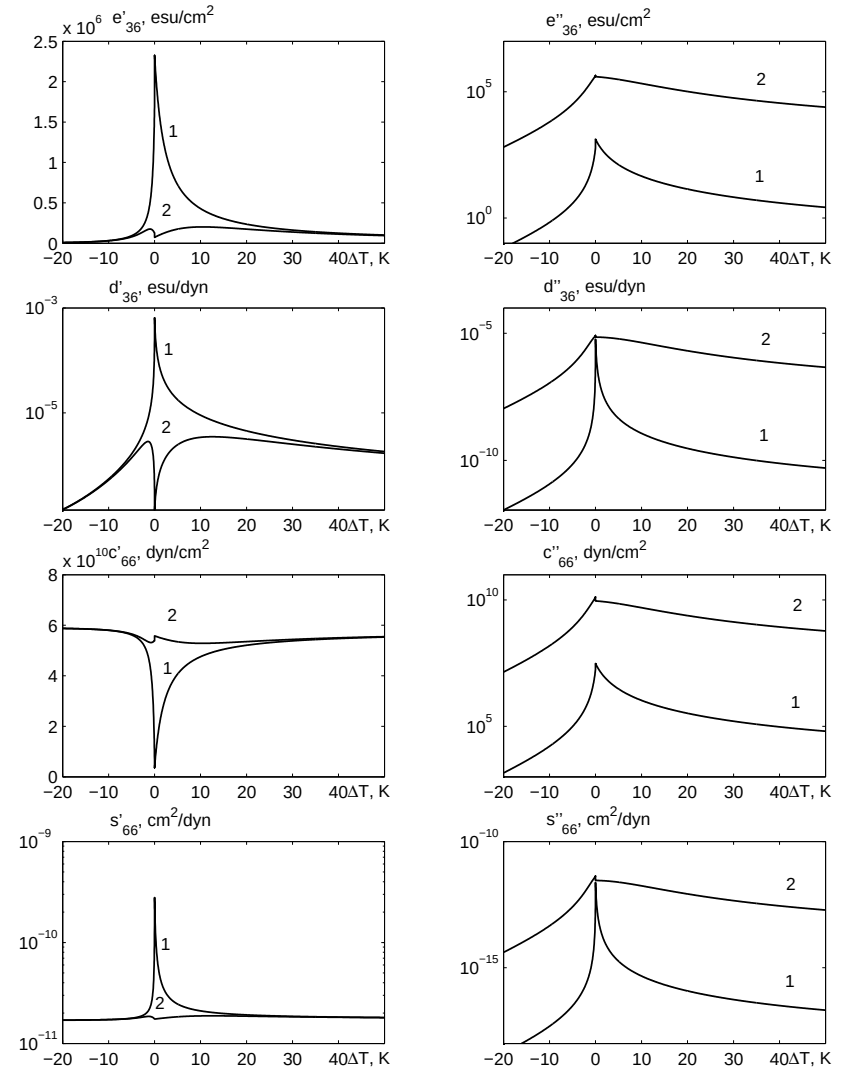


Рис. 64. Температурні залежності дійсної та уявної частини e_{36}^T , d_{36}^T , c_{66}^T , s_{66}^T кристалу RbH_2PO_4 при частотах $\nu = 10^7(1), 10^{11}(2)$ Гц.

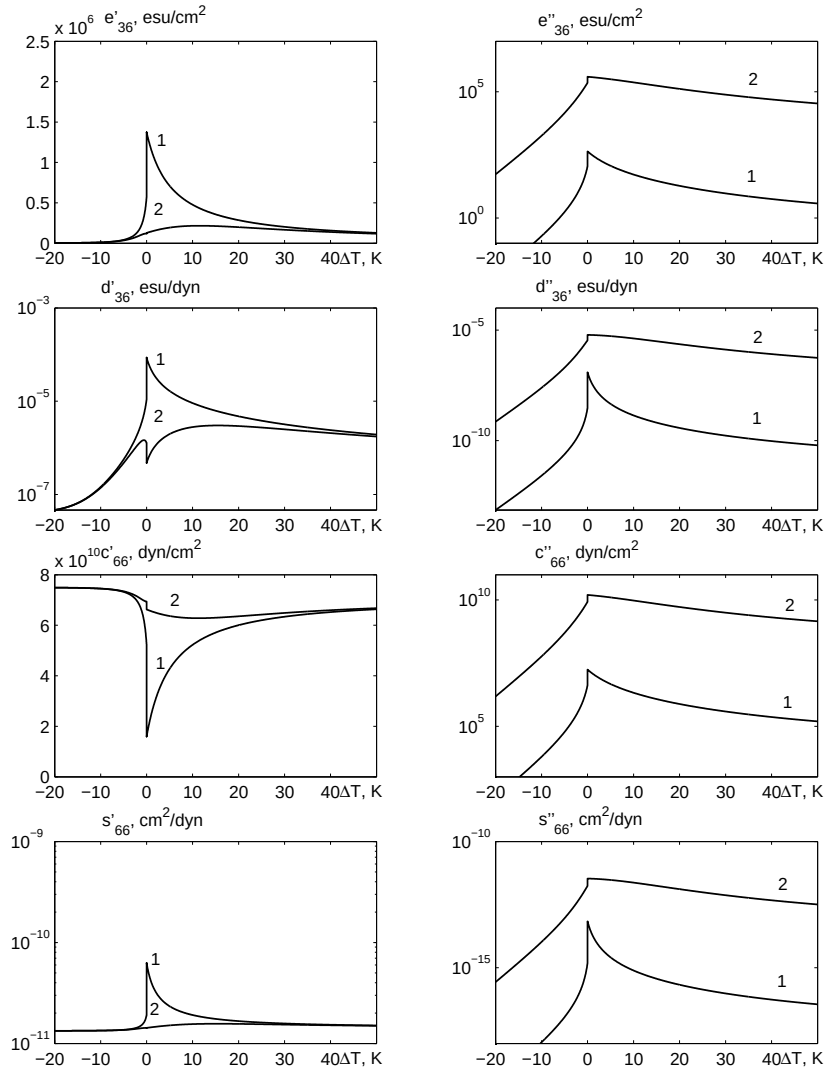


Рис. 65. Температурні залежності дійсної та уявної частини e'_{36} , d'_{36} , c'_{66} , s'_{66} кристалу KH_2AsO_4 при частотах $\nu = 10^7(1)$, $10^{11}(2)$ Гц.

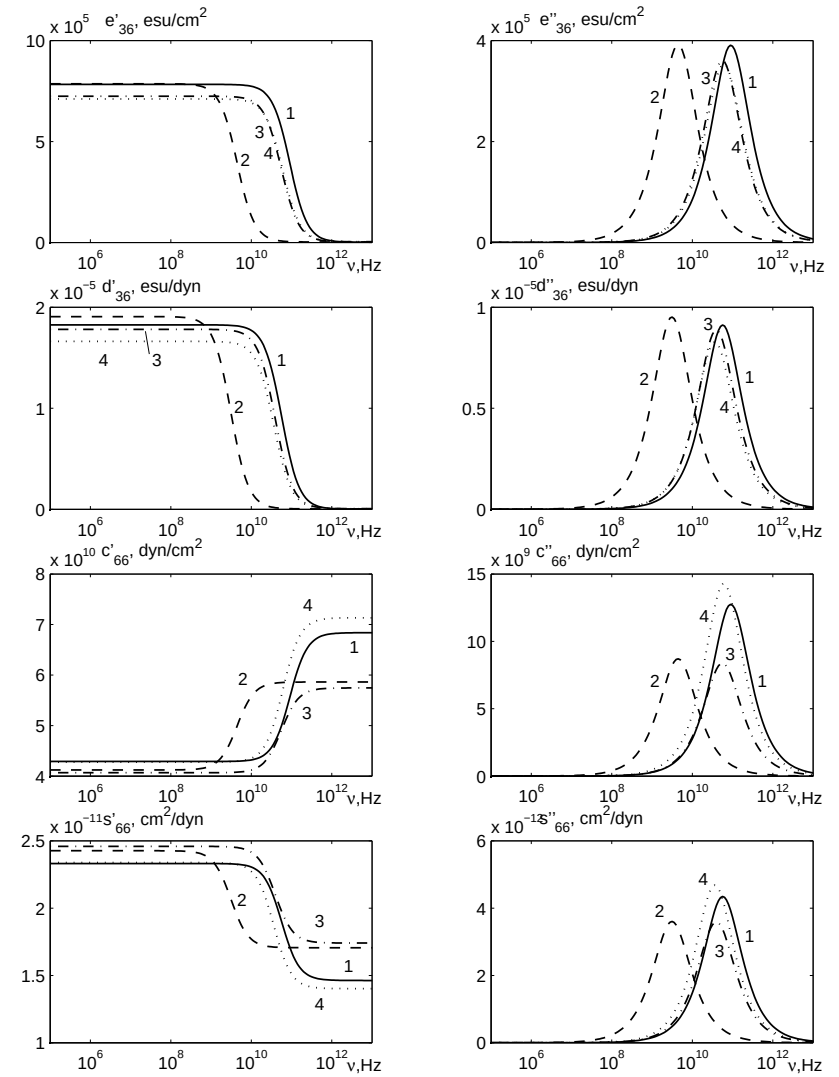


Рис. 66. Частотні залежності дійсної та уявної частини e'_{36} , d'_{36} , c'_{66} , s'_{66} кристалів KH_2PO_4 (1), KD_2PO_4 (2), RbH_2PO_4 (3) і KH_2AsO_4 (4) при $\Delta T = 5\text{K}$.

$\text{K}(\text{H}_{0.195}\text{D}_{0.805})_2\text{PO}_4$.

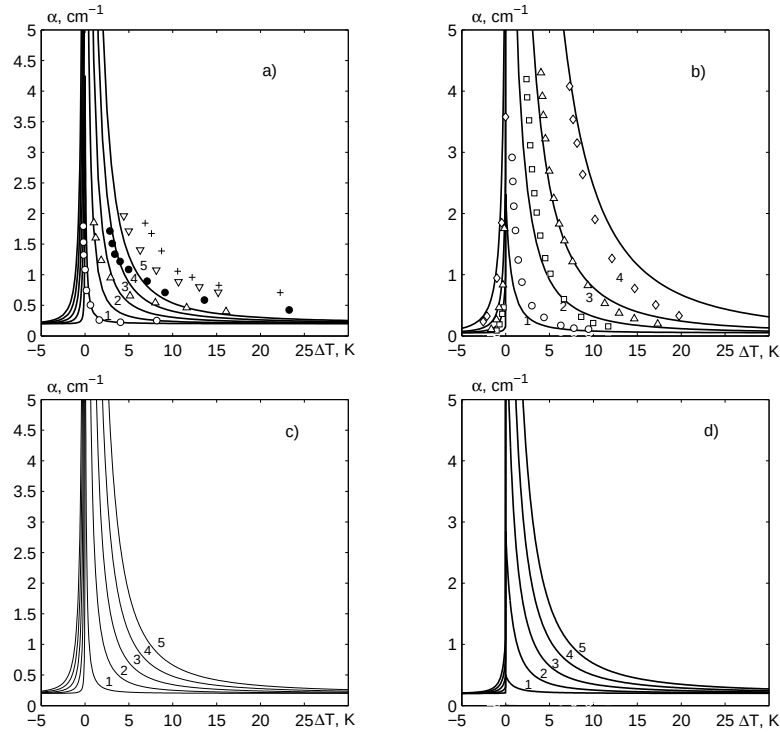


Рис. 67. Температурні залежності коефіцієнта поглинання кристалів KNO_3 (a), RbH_2PO_4 (c), KNO_3 (d), при різних частотах $\nu, 10^6 \text{ Гц}$: 1 – 10, $\circ$ [79], 2 – 30, Δ [79], 3 – 50, $\bullet$ [79], 4 – 70, ∇ [79], 5 – 90, $+$ [79] і кристалу $\text{K}(\text{H}_{0.195}\text{D}_{0.805})_2\text{PO}_4$ (b) при таких частотах $\nu, 10^6 \text{ Гц}$: 1 – 5, $\circ$ [22], 2 – 15, $\square$ [22], 3 – 25, Δ [22], 4 – 45, $\diamond$ [22].

В околі температури переходу T_c спостерігається різке зростання поглинання звуку α_6 . В сегнетофазі зі зменшенням температури коефіцієнт поглинання зменшується значно швидше, ніж у парафазі.

Залежність коефіцієнта поглинання звуку α_6 від квадрата частоти ω^2 для кристалів KNO_3 , $\text{K}(\text{H}_{0.195}\text{D}_{0.805})_2\text{PO}_4$, RbH_2PO_4 і KNO_3 при різних температурах ΔT зображено на рис.68. Як видно, коефіцієнт поглинання змінюється пропорційно до квадрата частоти. Швидкість зростання α_6 з частотою тим більша, чим ближче температура до точки Кюрі.

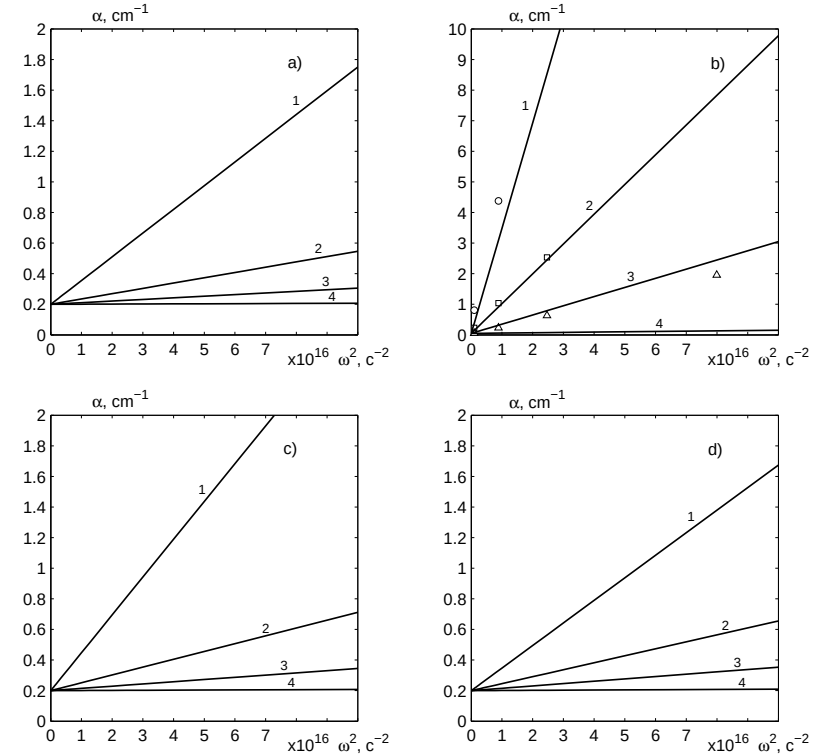


Рис. 68. Частотні залежності коефіцієнта поглинання кристалів KNO_3 (a), $\text{K}(\text{H}_{0.195}\text{D}_{0.805})_2\text{PO}_4$ (b), RbH_2PO_4 (c), KNO_3 (d), при різних температурах $\Delta T, \text{K}$: 1 – 2, 2 – 5, 3 – 10, 4 – 50.

При збільшенні частоти зовнішнього поля, починаючи від частот $\sim 10^7 \text{ Гц}$, результати розрахунків показують, що коефіцієнт поглинання звуку різко лінійно зростає і виходить на насичення в області частот 10^{10} Гц (рис.69). У парафазі обрізаюча частота тим нижча, чим ближча температура до температури переходу T_c . Зменшується величина обрізаючої частоти і при збільшенні ступеня дейтерування x . Значення коефіцієнта поглинання α_6 при насиченні настільки великі, що це означає відсутність поширення звуку.

На рис.70 зображено розраховану температурну залежність швидкості звуку v_{66} для кристалів KNO_3 , $\text{K}(\text{H}_{0.195}\text{D}_{0.805})_2\text{PO}_4$, RbH_2PO_4 і KNO_3 . Швидкість v_{66} при $T = T_c$ характеризується

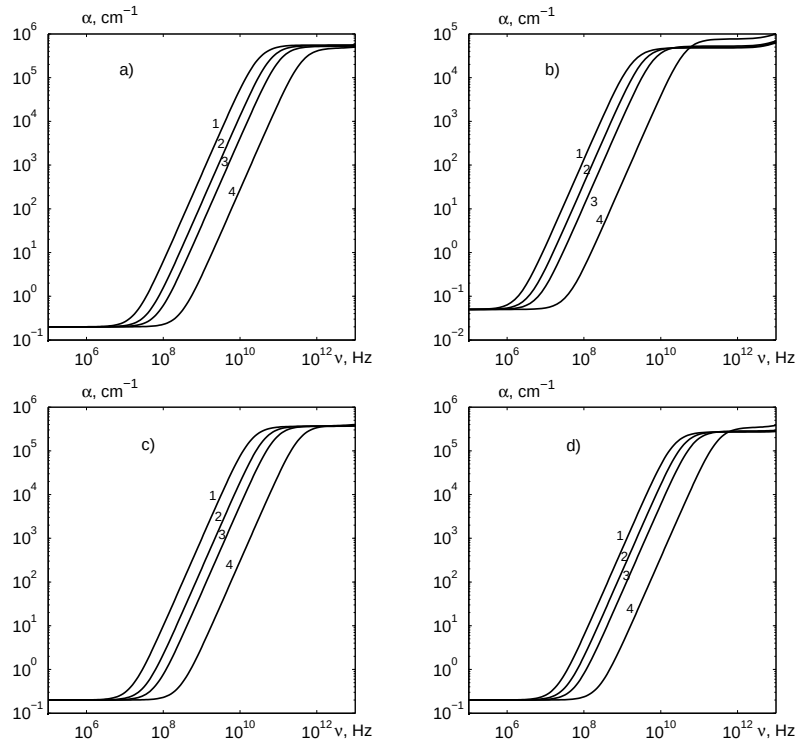


Рис. 69. Частотні залежності коефіцієнта поглинання кристалів KN_2PO_4 (a), $\text{K}(\text{H}_{0.195}\text{D}_{0.805})_2\text{PO}_4$ (b), RbH_2PO_4 (c), KH_2AsO_4 (d), при різних температурах $\Delta T, \text{K}$: 1 – 2, 2 – 5, 3 – 10, 4 – 50.

мінімумом. При частотах, менших 10^{10} Гц, величина $c_{66}^E(\omega)$ від частоти не залежить, тому ми провели на основі формули (8.3) розрахунок швидкості звуку, використовуючи експериментальні дані для c_{66}^{TE} і густини кристалів ρ . Результати цих розрахунків наведено на рис.70 у вигляді $\bullet$.

На тих же частотах, де спостерігається дисперсія діелектричної проникності затиснутого кристалу, швидкість звуку v_{66} різко зростає і виходить на насичення при частотах $\sim 10^{11}$ Гц (рис.71). Значення швидкості звуку при насиченні не залежить від температури.

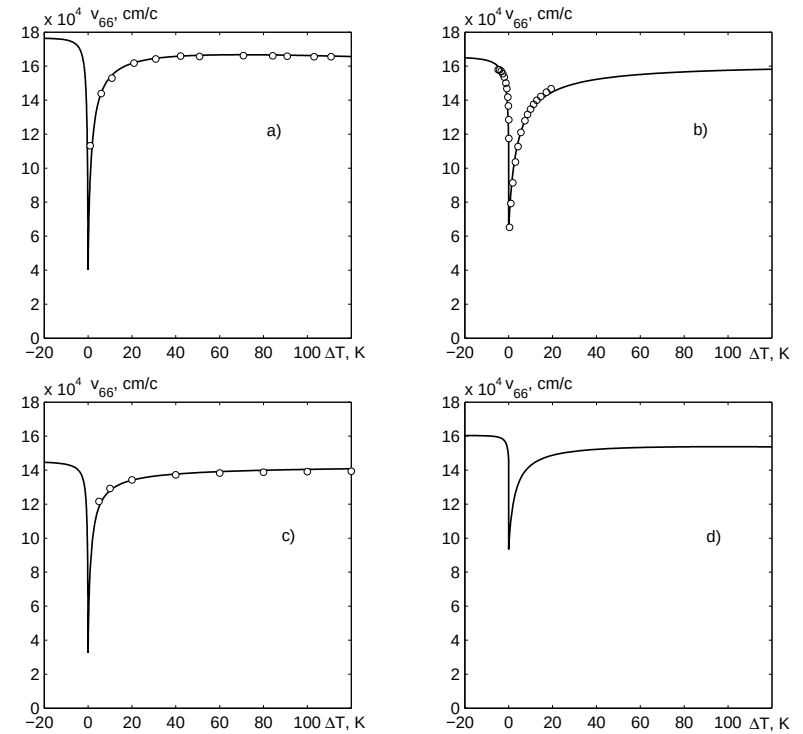


Рис. 70. Температурні залежності швидкості звуку кристалів KN_2PO_4 (a), $\text{K}(\text{H}_{0.195}\text{D}_{0.805})_2\text{PO}_4$ (b), RbH_2PO_4 (c), KH_2AsO_4 (d).

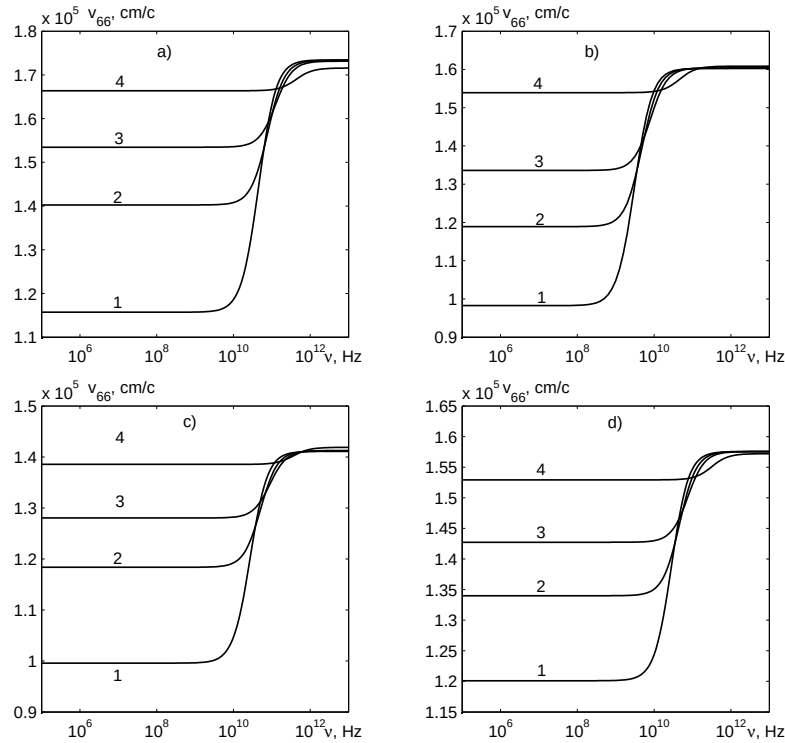


Рис. 71. Частотні залежності швидкості звуку кристалів KH_2PO_4 (a), $\text{K}(\text{H}_{0.195}\text{D}_{0.805})_2\text{PO}_4$ (b), RbH_2PO_4 (c), KH_2AsO_4 (d), при різних температурах $\Delta T, \text{K}$: 1 – 2, 2 – 5, 3 – 10, 4 – 50.

10. Заключні зауваження

У даній роботі на основі модифікованої моделі протонного впорядкування без врахування тунелювання протонів на водневих зв'язках у наближенні чотиричастинкового кластера для короткосяжних і молекулярного поля для далекосяжних взаємодій розраховані вирази для поляризації, діелектричних, пружних, п'єзоелектричних і теплових характеристик сегнетоелектричних кристалів $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$. Дана модель враховує лінійний за деформацією ε_6 внесок в енергію протонної підсистеми. Знайдено оптимальний набір значень параметрів теорії, деформаційних потенціалів і “затравочних” характеристик, який дав можливість на належному рівні описати відповідні експериментальні дані, навіть у випадку $x = 0$.

Вперше з врахуванням п'єзоефекту розраховані дійсна $\varepsilon'_{33}(\omega)$ та уявна $\varepsilon''_{33}(\omega)$ частини діелектричної проникності механічно затиснутого кристалу $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ і отримано задовільне узгодження даних розрахунку з експериментальними даними. Вивчено вплив дейтерування та ізоморфного заміщення $\text{K} \rightarrow \text{Rb}$, $\text{P} \rightarrow \text{As}$ на значення цих характеристик і на частоту дисперсії. Отримані вирази для $\varepsilon'_{33}(\omega)$ і $\varepsilon''_{33}(\omega)$ механічно вільного кристалу $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$. Значення цих характеристик збігаються на частотах більших ніж 10^9 Гц із відповідними величинами механічно затиснутого кристалу, а при частотах 10^5 - 10^7 Гц має місце явище п'єзоелектричного резонансу.

Врахування п'єзоелектричної взаємодії мало впливає на величину спонтанної поляризації і молярної теплоємності, приводить до появи відмінності між діелектричними проникностями механічно затиснутого і вільного кристалів. У температурному ході $\varepsilon'_{33}(\omega, T)$ при $T = T_c$ і при дисперсійних частотах отримується значно вищий мінімум, ніж без врахування п'єзоефекту. У більш високочастотну область зміщується і частота дисперсії при наявності п'єзоефекту.

Отримано і задовільний опис коефіцієнта поглинання ультразвуку в $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ та проаналізовано температурний і частотний хід швидкості v_{66} ультразвуку в цих сегнетоелектриках.

Література

1. Yomosa Sh., Nagamiya T. The phase transition and the piezoelectric effect of KH_2PO_4 . // *Progr. Theor. Phys.*, 1949, v. 4, № 3, p. 263–274.
2. Slater J.C. Theory of the transition in KH_2PO_4 . // *J. Chem. Phys.*, 1941, v. 9, № 1, p. 16–33.
3. Стасюк І.В., Камінська Н.М. Теорія спонтанної поляризації і деформації сегнетоелектриків типу KH_2PO_4 . // *УФЖ*, 1974, т. 19, в. 2, с. 237–252.
4. Стасюк І.В., Билецкий И.Н. Фазовые переходы в одноосногодеформированных сегнетоэлектриках типа KD_2PO_4 . / Препринт ИТФ-83-93Р, Киев, 1983, 25 с.
5. Стасюк І.В., Билецкий И.Н., Стягар О.Н. Индуцированные внешним давлением фазовые переходы в кристаллах KD_2PO_4 . // *УФЖ*, 1986, т. 31, № 4, с. 567–571.
6. Stasyuk I.V., Levitskii R.R., Zachek I.R., Moina A.P. The KD_2PO_4 ferroelectrics in external fields conjugate to the order parameter: Shear stress σ_6 . // *Phys. Rev. B*, 2000, v. 62, №. 10, p. 6198–6207.
7. Stasyuk I.V., Levitskii R.R., Moina A.P., Lisnii B.M. Longitudinal field influence on phase transition and physical properties of the KH_2PO_4 family ferroelectrics. // *Ferroelectrics*, 2001, v. 254, p. 213–227.
8. Levitskii R.R., Lisnii B.M. Theory of related to shear strain u_6 physical properties of ferroelectrics and antiferroelectrics of the KH_2PO_4 family // *phys. stat. sol. (b)*. - 2004. - Vol.241, №6.-P.1350-1368.
9. Glauber J. Time-dependent statistics of the Ising model // *J. Math. Phys.* - 1963. - v.4, №2. - P. 294-307.
10. Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Миц Е.В. Термодинамика и продольная релаксация сегнетоэлектриков $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)\text{PO}_4$ – Киев, 1987.- 48 с.-(Препринт/АН УССР. Ин-т теор.физ.; ИТФ-87-И4Р).
11. Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Миц Е.В. Поперечная релаксация в сегнетоэлектриках типа $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)\text{PO}_4$. - Киев, 1987. - 48 с.-(Препринт/АН УССР. Ин-т теор. физ.; ИТФ-87-П5Р).
12. Зачек И.Р., Миц Е.В., Левицкий Р.Р. Релаксационная динамика и термодинамические свойства сегнетоэлектриков с водородными связями типа КДР-ДКДР. - Киев, 1987. - 45 с. - (Препринт/АН УССР. Ин-т теор. физ.; ИТФ-89-7Р).
13. Gauss K.E., Happ H. Millimeter wave investigation of the complex

- dielectric constant in DKDP // *Phys.Stat.Sol.b.*-1976. - V.78, №1. - P. 133-138.
14. Жуков С.Г., Кульбачинский В.А., Смирнов П.С, Струков Б.А., Чудинов СМ. Влияние гидростатического давления на фазовые переходы в кристаллах $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ // *Изв. АН СССР, сер.физ.* - 1985. - Т.49, №2. - С. 255-258.
 15. Баддур А., Струков Б.А., Величко И.А., Сеткина В.Н. Зависимость температуры Кюри в кристаллах $\text{KD}_{2x}\text{H}_{2(1-x)}\text{PO}_4$ от концентрации дейтерия // *Кристаллография.* - 1972. - Т.17, №5. -С. 1065-1066.
 16. Волков А.А., Козлов Г.В., Лебедев СП., Величко И.А. Диэлектрические спектры смешанных кристаллов КДР-ДКДР в субмиллиметровом диапазоне волн // *Физ.твердого тела*, - 1979. - Т.21, №11. - С. 3304-3309.
 17. Skalyo J., Frazer B.C. Jr., Shirane G., Daniels W.B. The pressure dependence of the transition temperature in KDP and ADP // *J.Phys.Chem.Solids.* -1969.-v.30, №8.-P.2045-2051.
 18. Kasahara M., Tatsuzaki I. Concentration dependence of relaxation time of polarization fluctuation in mixed crystals $\text{KDP}_{1-x}\text{DKDP}_x$ // *J.Phys.Soc.Japan.*-1981.-v.50, №2.-p.551-554.
 19. Kaminov I.P. Microwave dielectric properties of $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$, KH_2AsO_4 and partially deuterated KH_2PO_4 // *Phys. Rev.* -1965, v. 138, №5A. - p. 1539-1543.
 20. Струков Б.А... Амин М., Сонин А.С Теплоемкость и диэлектрическая проницаемость кристалла дидейтерофосфата калия в окрестности сегнетоэлектрической точки Кюри // *Физ.твердого тела.* - 1967, №8. - С. 2421-2423.
 21. Волкова Е.Н., Подшивалов Ю.С., Рашкович Л.Н., Струков Б.А. Влияние концентрации дейтерия на температуру Кюри некоторых кристаллов группы КДР // *Изв. АН СССР, сер.физ.* - 1975. -. Т. 39, №4. - С. 787-790.
 22. Litov E., Uehling E.A. Polarization relaxation and susceptibility in the ferroelectric transition region of KD_2PO_4 // *Phys. Rev. B.* - 1970. - v. 1, №9- 3713-3726.
 23. Hill R.M., Ichiki S.K. Paraelectric response of KD_2PO_4 // *Phys. Rev.* - 1963. - v. 130, №1. - P. 150-151.
 24. Крамаренко В.А., Волкова Е.Н., Цибизова М.Д. Температуры фазовых переходов в кристаллах $\text{K}(\text{D}_x\text{H}_{1-x})_2\text{PO}_4$ и $\text{Rb}(\text{D}_x\text{H}_{1-x})_2\text{PO}_4$ в связи с их реальной структурой // В сб.: XI Всесоюзная конф. по физике сегнетоэлектриков. Тезисы докл. - Киев:Изд.ИФ АН УССР, 1986. - Т.2. - С.28.

25. Волкова Е.Н., Крамаренко В.А., Цибизова М.Д. О температурном интервале стабильности кристаллов $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ // Письма в Журн. техн. физ. - 1988. - Т.14, №5. - С. 408-412.
26. Samara G.A. The effects of deuteration on the static ferroelectric properties of KH_2PO_4 (KDP) // *Ferroelectrics*. - 1973. - v.5. - P. 25-37.
27. Samara G.A. Pressure dependence of ferroelectric properties of KD_2PO_4 // *Phys. Lett. A.*, 1967, v.25, №9, P.664-666.
28. Gilletta P., Chabin M. Longitudinal and transverse dielectric properties of KDP type crystals // *Phys. Stat. Sol. b*. - 1980. - V. 100. - P. K77-K82.
29. Breziria B., Fouskova A., Smutny P. Regular behaviour of solid solutions of $KH_{2(1-n)}D_{2n}PO_4$ single crystals // *Phys.Stat. Sol. a*. - 1972.-V.11, №2. -P. K149-K152.
30. Sliker T.R., Burlage S.R. Some dielectric and optical properties of KD_2PO_4 // *J.Appl.Phys.* - 1963. - V. 34, №7. - P.1837-1840.
31. Hill R.M., Ichiki S.K. High-frequency behaviour of hydrogen-bonded ferroelectrics: triglycine sulphate and KD_2PO_4 // *Phys. Rev.* - 1963.-V.132, №4. - P. 1603-1608.
32. Luther G. Dielectric dispersion of deuterated KDP in the microwave region // *Ferroelectrics*.-1976.-V.12, №1-4.-P.243-246.
33. Мериакри В.В., Ушаткин Е.Ф. Исследование неорганических материалов методами субмиллиметровой спектроскопии // В сб.: Физические методы исследования неорганических материалов. М.: Наука, 1981. - С. 195-205.
34. Шерман А. Б., Вайда Д., Величко И.А., Гутнер О.С., Леманов В.В. Затухание Ландау-Халатникова в кристаллах KD_2PO_4 // *Физ. твердого тела*. - 1971.- Т.13, №12. - С. 3716-3719.
35. Струков Б.А., Баддур А., Зиненко В.Н., Мищенко А.В., Копчик В. Изотопический эффект в кристаллах RbH_2PO_4 // *Фиэ. твердого тела*. - 1973. - Т.15, №6. - С. 1388-1394.
36. Левицький Р.Р., Лісний Б.М. Термодинаміка та діелектричні властивості сегнетоелектриків з водневими зв'язками типу KH_2PO_4 в кластерному наближенні // *Журн. фіз. досл.* - 2002. - Т. 6, №1. - С 91-108.
37. Волкова Е.Н., Бережной Б.М., Израиленко А.Н., Мищенко А.В., Рашкович Л.Н. Электрооптические и оптические свойства час тично дейтерированных кристаллов дигидрофосфата рубидия // *Изв. АН СССР, сер.физ.*-1971. - Т.35, №9. - С.1858-1861.
38. Deguchi K., Nakamura E., Okaue E., Aramaki N. Effect of deuter-

- ation on the dielectric properties of ferroelectric CsH_2PO_4 . II. Dynamic dielectric properties // *J.Phys.Soc.Japan.* - 1982. - V. 51, №11. - P. 3575-3582.
39. Chabin M., Gilletta P. Polarization and dielectric constant of KDP - type crystals // *Ferroelectrics*. - 1977. - V.15, №3-4 - P. H9-154.
40. Fairall C.W., Reese W. Thermodynamic properties of KH_2AsO_4 and KD_2AsO_4 // *Phys.Rev.B*. -1972.-V.6, №1. - P. 193-199.
41. Kozlov G.V., bebedev S.P., Prokhorov A.M., Volkov A.A. In vestigation of ferroelectric excitations in hydrogen-bond crystals using the method of submillimeter spectroscopy // *J.Phys.Soc.Japan.* - 1980. - V.49, Suppl. - P. 188-190.
42. Wiseman G.G. Electrocaloric effect on potassium dihydrogen phosphate // *Iee Transactions on Electron Devices*. - 1969- - V. ED-16, №6. - P. 588-593.
43. Samara G.A. Pressure dependence of the static dielectric properties of $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ and RbH_2PO_4 // *Ferroelectrics*. - 1979. - V. 22, №3-4. - P. 925-936.
44. Струков Б.А., Коржуев М.А., Баддур А., Копчик В.А. Спонтанная поляризация кристалла KH_2PO_4 вблизи точки Кюри // *Физ. твердого тела*. - 1971. - Т.13, №7. - С. 1872-1877.
45. Benepe J.W., Reese W. Electrocaloric studies of KH_2PO_4 // *Phys. Rev. B*. - 1971. - V.3, №9. - P. 3032-3039.
46. Hazario I., Gonzalo J.A. Ferroelectric behaviour of KH_2PO_4 in the critical region. // *Sol. St. Commun.*, 1969., v.7, №18, p.1305-1308.
47. Струков Б.А., Баддур А., Копчик В.А., Величко И.А. Электрические и тепловые свойства смешанных сегнетоэлектрических кристаллов $KH_{2(1-x)}D_{2x}PO_4$ // *Физ.твердого тела*. - 1972. - Т.14, №4. - С. 1034-1039.
48. Strukov B.A., Amin M., Kopsik V.A. The specific heat of some KDP - type crystals // *J. Phys. Soc. Japan*. - 1970. - V.28, Suppl. - P. 207-209.
49. Reese W., May L.F. Critical phenomena in order-disorder ferroelectrics. I. Calorimetric studies of KH_2PO_4 // *Phys. Rev.*- 1967. - V. 162, №2. - P. 510-518.
50. Reese W., May L.P. Studies of phase transition in order-disorder ferroelectrics.II.Calorimetric investigations of KD_2PO_4 // *Phys.Rev.* -1968. -V. 167, №2. - P. 504-510.
51. Амин М., Струков Б.А. Теплоемкость монокристаллического RbH_2PO_4 // *Физ.твердого тела*. - 1968. - Т.10, №10. - С.3158-3160.
52. Волков А.А., Козлов Г.В., Лебедев С.П. Исследование дисперсии

- диэлектрической проницаемости кристалла KH_2PO_4 на частотах $6-12 \text{ см}^{-1}$ // Физ.твёрдого тела.-1978.-Т.20, №7.-С.2021-2026.
53. Baumgartner H. Unterschied der dielektrizitäts-konstanten zwischen einem freien und einem geklemmten KH_2PO_4 – kristall. // *Helv.phys.acta.* - 1951. v.24. - p.326-329.
 54. Василевская А.С., Сонин А.С. Связь диэлектрических и электрооптических свойств сегнетоэлектрических кристаллов группы KDP в параэлектрической фазе // Физ.твёрдого тела. - 1971. -Т.13, №6. - С. 1550-1556.
 55. Deguchi K., Nakamura E. Deviation from the Curie-Weiss law in KH_2PO_4 // *J.Phys.Soc.Japan.*-1980.-V.49, №5.-P. 1887-1891.
 56. Mayer R.J., Bjorkstam J.L. Dielectric properties of KD_2PO_4 // *J.Phys.Chem.Solids.* - 1962. - V.23. - P. 619-620.
 57. Мэзон У. Пьезоэлектрические кристаллы и их применение в ультразвуке. - М.: ИЛ, 1952. - 447 с.
 58. Переверзева Л.П. Проявление динамических свойств в дисперсии диэлектрической проницаемости водородосодержащих сегнетоэлектриков. - В сб.: Механизмы релаксационных явлений в твёрдых телах. Каунас, 1974. - С. 223-227.
 59. Шувалов Л.А., Желудев И.С., Мнацаканян А.В., Лупудов Ц.Ж., Фиала И. Сегнетоэлектрические аномалии диэлектрических и пьезоэлектрических свойств кристаллов RbH_2PO_4 и KD_2PO_4 // Изв. АН СССР, сер.физ. - 1967. - Т.31, №11. - С.1919-1922.
 60. Струков Б.А., Баддур А., Величко И.А. О фазовом переходе первого рода в кристаллах KD_2PO_4 // Физ. твёрдого тела. - 1971.- Т.13, №8. - С. 2484-2485.
 61. Martines Jase L., Gonzalo J. Dielectric-constant logarithmic correction in RbH_2PO_4 above the Curie point // *Phys.Rev. B.* - 1985. - V. 32, №1. - P. 400-402.
 62. Крыжановская Н.Д., Товченко Г.В., Тузник Е.Ф., Мищенко А.В. Процессы переполяризации кристаллов $\text{Rb}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ // Изв. АН СССР, сер.физ. - 1975. - Т.39, №5. - С.1031-1035.
 63. Гладкий В.В., Сидненко Е.В. Поляризация в кристаллах RbH_2PO_4 в области фазового перехода // Физ.твёрдого тела. - 1971. -Т.13, №6. - С. 1642-1648.
 64. Blinc R., Burgar M., Levstik A. On the order of the phase transition in KDA type ferroelectric crystals // *Sol. Stat Commun.* - 1973. - Vol. 12, №6. - P. 573-576.
 65. Gladkii V.V., Magataev V.K., Sidnenko E.V. Phase transition in KH_2AsO_4 single crystal // *Ferroelectrics.* - 1973. - Vol. 5. - P. 107-

- 109.
66. Garland C.W., Novotny D.B. Ultrasonic velocity and attenuation in KH_2PO_4 // *Phys.Rev.* -1969.-V.177, №2. -P. 971-975.
67. Волкова Е.Н. Физические свойства сегнетоэлектрических твёрдых растворов $\text{K}(\text{D}_x\text{H}_{1-x})_2\text{PO}_4$ // Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Москва, 1991г, с.152.
68. Shuvalov L.A., Mnatsakanyan A.V. The elastic properties of KD_2PO_4 crystals over a wide temperature range. // *Sov. Phys. Crystall.*, 1966, vol. 11, №2, p. 210-212.
69. Переверзева Л.П. Особенности дисперсии ϵ в сегнетоэлектриках с фазовым переходом типа порядок-беспорядок // Изв. АН СССР, сер. физ. - 1971. - Т.35, №12. - С. 2613-2614.
70. Bantle W., Caffish C. // *Helv. Phys. Acta*, 1943, vol. 16, p. 235.
71. Von Arx A., Bantle W. // *Helv. Phys. Acta*, 1943, vol. 16, p. 211.
72. Adhav.R.S. // *J.Appl.Phys.*, 1968, v.39, p.4095.
73. Brody E.M., Cummins H.Z. // *Phys. Rev. Lett.*, 1968, vol. 21, p. 1263.
74. Gauss K.E., Happ H., Rother G. Millimeter wave and far-infrared investigation on KDP with assymetric interferometers // *Phys. Stat. Sol. B.* - 1975.-V.72, №2. - P. 623-630.
75. Переверзева Л.П., Поплавко Ю.М., Рез И.С., Кузнецова Л.И. - Высокочастотная динамика сегнетоэлектриков порядок-беспорядок (на примере кристалла KD_2PO_4) // Кристаллография. - 1976. - Т.21, №5. - С. 981-984.
76. Volkov A.A., Kozlov G.V., Lebedev S.P., Prokhorov A.M. Proton modes in the crystals of KH_2PO_4 family // *Ferroelectrics.* - 1980. - V.25, №1-4 - P. 531-534.
77. Мериакри В.В., Поплавко Ю.М., Ушаткин Е.Ф. Дисперсия диэлектрической проницаемости в кристаллах KH_2PO_4 на частотах, близких к частоте мягкой моды // Журн. техн. физ. - 1974. - Т.44, №5. - С.1111-1113.
78. Onjango P., Smith W., Angress J.F.I.R. Reflection and transmission properties of KH_2PO_4 // *J.Phys.Chem.Solids.* - 1975- -V. 36, №4. - P. 309-313-
79. Litov E., Garland CM. Ultrasonic investigation of the ferroelectric transition region in KH_2PO_4 // *Phys. Rev. B.* - 1970. - V. 2, №11. - P. 4597-4602.
80. Levitskii R.R., Stasyuk I.V., Korinevsky H.A. Dynamics of ferroactive crystals of orthophosphate type // *Ferroelectrics.* - 1978. - V. 21. - P. 481-483.

81. Кориневский Н.А., Левицкий Р.Р. Динамическая теория ортофосфатов в кластерном приближении // Теорет. и мат. физика. - 1980. - Т. 42, №3. - С. 416-429.
82. Blinc R., Schmidt V.H. Soft modes and proton tunneling in PbHPO_4 , squaric acid and KH_2PO_4 type ferroelectrics // Ferroelectrics Letters. - 1984. - V. 1. - P. 119-129.
83. Yoiacano G.M., Balashio J.F., Osborne W. Effect of deuteration on the ferroelectric transition temperature and the distribution coefficient of deuterium in $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ // Appl.Phys.Lett. -1974. -V.24, №10. - P. 455-456.
84. Bastie P., Bornarel J., Lajzerowicz J., Vallade M., Schneider J.R. γ -ray diffractometry: A new technique of measuring the spontaneous shear deformation in ferroelastics: Application to KH_2PO_4 . Comparison with recent measurements of the birefringence // Phys.Rev.B. -1975.-V.12, №11. -P.5112-5115.
85. Kobayashi J., Uesu Y., Mizutani I., Enomoto Y. X-ray study on thermal expansion of ferroelectric KH_2PO_4 . // Phys. stat. sol. (a), 1970, vol. 3, p. 63Ц69.
86. Vaks V.G., Zein N.E., Strukov B.A. On the theory of ferroelectric KH_2PO_4 -KDP type // Phys.Stat.Sol. (a). - 1975. - V.30, №2. - P. 801-819.
87. Ichikawa M., Amasaki D., Gustafsson T., Olovsson I. X-ray structural study of ferroelectric KH_2AsO_4 and KD_2AsO_4 // J. Phys. Soc. Jpn. - 2001. - Vol. 70, №8. -P. 2327-2332.
88. Kennedy N.S.J., Nelmes R.J. Structural studies of RbH_2PO_4 in its paraelectric and ferroelectric phases // J. Phys. C - 1980. - Vol. 13, №26. - P. 4841-4853.
89. Tokunaga M. Two different mechanismus of the Curie-Weiss dielectric susceptibility in dispeasive-type ferroelectrics // J. Phys. Soc. Jpn. - 1987. - v.56. -P. 1653-1656.
90. Козлов Г.В., Волков А.А., Лебедев С.П. Диэлектрическая спектроскопия мягких мод в сегнетоэлектриках // Усп.физ.наук. - 1981. - Т.135. - С. 515-521.
91. Козлов Г.В. Субмиллиметровая спектроскопия сегнетоэлектриков типа порядок-беспорядок // Автореферат докторской диссертации, Москва, 1982. - 41 с.
92. Happ H., Rother G. Investigation on the far-infrared response of DKDP by asymmetric fourier spectrosoopy // Phys.Stat.Sol. b. - 1977. - V. 79, №2. - P. 473-477.
93. Иона Ф., Ширанэ Д. Сегнетоэлектрические кристаллы. - М.: Мир, 1965. - 555 с.

94. Кенциг В. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. - М.: ИЛ, 1960. - 234 с.
95. Поплавко Ю.М. Механизмы электрической релаксации в сегнетоэлектриках порядок-беспорядок (СПБ) // В кн.: Механизмы релаксационных явлений в твердых телах. - Каунас, 1974.- С. 280-284.
96. Reese R.L., Fritz J.J., Cummins H.Z. Light-scattering studies of the soft ferroelectric and acoustic modes of KD_2PO_4 // Phys. Rev. B. - 1973. - V.7, №9. - P. 4165-4185-
97. Переверзева Л.П., Поплавко Ю.М., Петров В.М., Макаревская С.В., Рез И.С. Дисперсия диэлектрической проницаемости в кристаллах KH_2PO_4 // Кристаллография. - 1973. - Т.18, вып.3.- С. 645-646.
98. Vajda D. The dependence of the polarization relaxation time and the Landau kinetic coefficient of the degree of deuteration in $\text{K}(\text{H}_{1-n}\text{D}_n)_2\text{PO}_4$ crystals // Acta Phys. Slov. - 1980.- V.30, №1. - P. 99-102.
99. Shimshoni M., Harnik E. Anomalous propagation of longitudinal ultrasonic waves in KD_2PO_4 // Phys.Letters.A. - 1970. -V.32, №5. - P. 321-322.