

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

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

Роман Романович Левицький  
Ігор Романович Зачек  
Андрій Степанович Вдович

ПОПЕРЕЧНІ ДІЕЛЕКТРИЧНІ, П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНІ, ПРУЖНІ ТА ДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СЕГНЕТОЕЛЕКТРИКІВ ТИПУ  $\text{KN}_2\text{PO}_4$

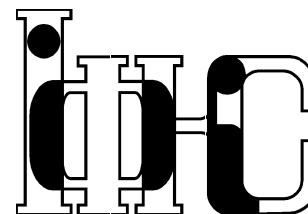
Роботу отримано 25 грудня 2007 р.

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-07-24U

Р.Р.Левицький, І.Р.Зачек, А.С.Вдович

ПОПЕРЕЧНІ ДІЕЛЕКТРИЧНІ, П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНІ,  
ПРУЖНІ ТА ДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ  
СЕГНЕТОЕЛЕКТРИКІВ ТИПУ  $\text{KN}_2\text{PO}_4$

ЛЬВІВ

УДК: 538.951, 538.953, 538.956, 537.2, 537.9

PACS: 77.22.Ch, 77.22.Gm, 77.65.-j, 77.84.Fa, 77.65.Fs.

## Поперечні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні та динамічні властивості сегнетоелектриків типу $\text{KN}_2\text{PO}_4$

Р.Р.Левицький, І.Р.Зачек, А.С.Вдович

**Анотація.** В рамках модифікованої моделі протонного впорядкування з врахуванням лінійних за деформаціями  $\varepsilon_6$ ,  $\varepsilon_4$  і  $\varepsilon_5$  внесків в енергію протонної системи в наближенні чотиричастинкового кластера за короткосяжними і середнього поля за далекосяжними взаємодіями розраховано відповідні термодинамічні потенціали, поперечні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні властивості, а також коефіцієнт поглинання і швидкість ультразвуку для механічно затиснутих і механічно вільних кристалів типу  $\text{KD}_2\text{PO}_4$ . Проведено ґрунтовний числовий аналіз отриманих результатів, знайдено оптимальні набори мікропараметрів, які забезпечують належний опис наявних експериментальних даних для сегнетоелектриків  $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$  ( $\text{M} = \text{K}, \text{Rb}, \text{X} = \text{P}, \text{As}$ ).

## Transverse dielectric, piezoelectric, elastic and dynamic properties of $\text{KN}_2\text{PO}_4$ type ferroelectrics

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

**Abstract.** Within the modified proton ordering model with taking into account linear in strain  $\varepsilon_6$ ,  $\varepsilon_4$  and  $\varepsilon_5$  contributions to the energy of proton system within the four-particle cluster approximation for short-range and the mean-field approximation for long-range interactions we have calculated corresponding thermodynamic potentials, transverse dielectric, piezoelectric, elastic properties, and also absorption factor and ultrasound speed for the clamped and the free  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  type crystals. Numerical analysis of the obtained results is performed, and the set of the theory parameters providing the best fit to the available experimental data for  $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$  ( $\text{M} = \text{K}, \text{Rb}, \text{X} = \text{P}, \text{As}$ ) ferroelectrics is found.

Подається в Condensed Matter Physics

Submitted to Condensed Matter Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 2007  
Institute for Condensed Matter Physics 2007

## 1. Вступ

Сегнетоелектрики  $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$  ( $\text{M} = \text{K}, \text{Rb}; \text{X} = \text{P}, \text{As}$ ) у параелектричній фазі кристалізуються в класі  $\bar{4} \cdot m$  тетрагональної сингонії (просторова група  $I\bar{4}2d$  з нецентросиметричною точковою групою  $D_{2d}$ ) і тому вони володіють п'єзоелектричними властивостями. При прикладанні відповідних електричних полів і зсувних напруг певної симетрії є можливість вивчати роль п'єзоелектричних взаємодій у фазовому переході та їх вплив на фізичні характеристики цих кристалів. Важливим є також і те, що в цих кристалах при сегнетоелектричному фазовому переході виникає спонтанна деформація  $\varepsilon_6 = \varepsilon_{xy}$ , яка приводить до зміни їхньої симетрії.

Фундаментальні результати для фізичних характеристик сегнетоелектриків  $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$  при прикладанні до них деформації зсуву  $\sigma_6$  та зовнішнього електричного поля  $E_3$ , яке напрямлене вздовж сегнетоелектричної осі  $c$ , отримані в роботах [1]- [10]. Зокрема, в роботі [10] в рамках модифікованої моделі протонного впорядкування сегнетоелектриків типу  $\text{KN}_2\text{PO}_4$  з врахуванням лінійного за деформацією  $\varepsilon_6$  внеску в енергію протонної системи, але без врахування тунелювання протонів на водневих зв'язках, в наближенні чотиричастинкового кластера за короткосяжними і молекулярного поля за далекосяжними взаємодіями розраховано відповідний термодинамічний потенціал. Використовуючи відповідне рівняння стану, розраховано спонтанну поляризацію, повздовжню статичну діелектричну проникність механічно затиснутих і механічно вільних кристалів, їх п'єзоелектричні характеристики, зумовлені деформацією  $\varepsilon_6$ , пружну сталу  $c_{66}$  та молярну теплоємність. Динамічні характеристики даної моделі розраховані на основі стохастичної моделі Глаубера для протонної підсистеми з врахуванням динаміки п'єзоелектричної деформації  $\varepsilon_6$  мовою класичних (ньютонівських) рівнянь руху. Розраховано коефіцієнт поглинання та швидкість ультразвуку, дійсну та уявну частини повздовжньої динамічної проникності для механічно затиснутих і механічно вільних кристалів типу  $\text{KN}_2\text{PO}_4$ .

Проведено ґрунтовний числовий аналіз у рамках запропонованої теорії фізичних характеристик сегнетоелектриків типу  $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$ . При цьому розрахунок фізичних характеристик частково дейтерованих кристалів проведено в наближенні середнього кристалу. Отримано оптимальні набори мікропараметрів сегнетоелектриків, що досліджувались, які дали змогу на належному рівні описати наявні для них експериментальні дані. Явно описано явища затискання кристалів високочастотним полем та п'єзоелектричного

резонансу.

Актуальним є і дослідження фізичних характеристик сегнетоелектриків  $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$  при прикладанні до них поперечних зовнішніх електричних полів  $E_1$  або  $E_2$  та зсувних напруг  $\sigma_4 = \sigma_{yz}$  і  $\sigma_5 = \sigma_{xz}$ , які незалежно індуюють відповідні внески в поляризацію  $P_1$  і  $P_2$  та деформації  $\varepsilon_4$  і  $\varepsilon_5$  цих кристалів із врахуванням при цьому наявності в них спонтанної деформації  $\varepsilon_6$ .

Слід відзначити, що в переважній більшості робіт, присвячених дослідженню поперечних діелектричних характеристик кристалів  $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$ , п'єзоелектричні взаємодії не враховувались. Тепер ми коротко зупинимось на отриманих у цих роботах результатах. У роботах [11, 12] на основі моделі де Жена з врахуванням взаємодії із повздовжнім ( $E_3$ ) та поперечним ( $E_1$ ) електричними полями в наближенні молекулярного поля були отримані вирази для статичних діелектричних сприйнятливостей  $\chi_{33}$  і  $\chi_{11}$ . При належному виборі параметрів теорії автори цих робіт отримали задовільний опис наявних експериментальних даних для сегнетоелектриків  $KH_2PO_4$  і  $KH_2AsO_4$ . В роботі [13] на основі протонної моделі без врахування тунелювання в наближенні чотиричастинкового кластера було розраховано поперечну статичну діелектричну сприйнятливість сегнетоелектриків типу  $KH_2PO_4$ . Однак у парафазі при отриманні виразу для  $\chi_{11}$  було використано ряд наближень і нехтується далекодією. Тим не менше, авторами даної роботи при належному виборі параметрів теорії було отримано задовільний опис відповідних експериментальних даних для сегнетоелектрика  $KH_2PO_4$ . В роботі [14] на основі отриманих у [13] виразів для  $\chi_{11}(T)$  та спонтанної поляризації  $P_s(T)$  були проведені розрахунки цих характеристик для сегнетоелектриків  $KH_2PO_4$ ,  $KD_2PO_4$ ,  $RbH_2PO_4$ ,  $CsH_2PO_4$  і  $KH_2AsO_4$  з метою опису наявних для цих кристалів експериментальних даних. Розрахунки поперечної діелектричної сприйнятливості сегнетоелектриків типу  $KD_2PO_4$  в рамках протонної моделі в наближенні чотиричастинкового кластера проводились і в роботі [15]. При цьому, як і в [14], вираз для  $\chi_{11}$  в [15] не містить далекодії. Відзначимо, що автори роботи [15] при належному виборі параметрів теорії отримали добрий опис експериментальних даних для діелектричної проникності  $\varepsilon_{11}(T)$  та спонтанної поляризації цього кристалу. Детальний аналіз результатів робіт [11]- [15] проведено в огляді [16]. Слід також відзначити, що в роботі [17] розрахунки спонтанної поляризації, повздовжньої і поперечної діелектричних проникностей  $KD_2PO_4$  проводились також і у рамках методу Монте-Карло.

Поперечна релаксація в сегнетоелектриках типу  $KH_2PO_4$  в рам-

ках методу Глаубера вивчалась в роботі [18]. Спочатку в наближенні молекулярного поля, а потім у наближенні чотиричастинкового кластера отримано вираз для динамічної поперечної сприйнятливості  $\chi_{11}(\nu, T)$ , а також наведені наближені вирази в парафазі для часів релаксації  $(\tau_1^x(T))^{-1}$ ,  $(\tau_2^x(T))^{-1}$  і відповідних діелектричних вкладів  $\chi_1(T)$ ,  $\chi_2(T)$  в  $\chi_{11}(\nu, T)$ , в яких не врахована далекодія. Авторами цієї роботи показано, що при належному виборі параметрів теорії їх теорія добре описує температурну залежність  $\varepsilon'_{11}(T)$  [19] при частоті  $\nu = 138,6$  ГГц для кристалу  $K(H_{0,14}D_{0,86})_2PO_4$ . Слід відзначити, що в роботі [15] при тих же значеннях параметрів теорії отримано добре узгодження теорії з експериментом для  $\varepsilon_{11}(T)$ , але для кристалу  $KH_{0,02}D_{0,98}$ . У роботі [20] у рамках протонної моделі з врахуванням взаємодії протонів із зовнішнім електричним полем, що напрямлене в площині  $ab$  під кутом  $45^\circ$  до осі  $a$  в наближенні чотиричастинкового кластера з врахуванням короткосяжних і далекосяжних взаємодій розраховано поперечні статичні в пара- і сегнетофазі, а також поперечні динамічні характеристики  $KD_2PO_4$  в парафазі. У випадку парафазі згаданий результат для статичної діелектричної проникності узгоджується з результатом роботи [21], а при нехтуванні далекодією легко отримати для поперечної динамічної проникності результати робіт [15, 18].

У роботах [22, 23], використовуючи отримані в роботі [20] результати і вважаючи, що кристалом  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$  відповідають усереднені параметри теорії, при належному виборі мікропараметрів було розраховано поперечні статичні і динамічні характеристики  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$  ( $x = 0,93; 0,84; 0,67$ ) і було отримано добрий кількісний опис експериментальних даних для дійсної та уявної частин поперечної комплексної діелектричної проникності  $\varepsilon_{ab}^*(\nu, T)$ , отриманих методом субміліметрової спектроскопії [24, 25]. У роботі [26], яка є продовженням робіт [20, 22, 23], розраховано поперечні динамічні характеристики  $KD_2PO_4$  в сегнетофазі і проведено ґрунтовний аналіз даних діелектричних вимірювань [24, 25] для високодейтерованих кристалів  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$  у широкій частотній та температурній областях. Слід зазначити, що в роботах [22, 23, 26] для кристалів  $KH_2PO_4$  і  $KD_2PO_4$  використано параметри теорії, що отримані в роботі [27].

У роботі [28] проведено ґрунтовний аналіз залежності отриманих у наближенні чотиричастинкового кластера і середнього кристалу термодинамічних і повздовжніх статичних і динамічних характеристик сегнетоелектриків  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$  від параметрів теорії і було вперше запропоновано оптимальний набір параметрів для цих спо-

лук, який дозволив адекватно описати наявні експериментальні дані для фізичних характеристик, що досліджувались.

У роботі [29], слідуючи [26], було продовжено дослідження поперечних статичних і динамічних характеристик сегнетоелектриків типу  $KD_2PO_4$ . Використовуючи параметри теорії, отримані в [28], було проведено числовий розрахунок цих характеристик для сегнетоелектриків  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ . Показано, що навіть без явного врахування тунелювання протонів на водневих зв'язках запропонована теорія [26, 29] дає задовільний кількісний опис наявних експериментальних даних для поперечних характеристик сегнетоелектриків  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$ . Слід відзначити, що в попередніх роботах [18, 20, 22, 23, 26, 28–30] динаміка сегнетоелектриків типу  $KD_2PO_4$  досліджувалась у рамках стохастичної моделі Глаубера.

З іншого боку, в ряді робіт [12, 31–34], використовуючи прості модельні представлення, за допомогою методу рівнянь Блоха (див. [31]) в наближенні самоузгодженого поля вивчалась динаміка сегнетоактивних сполук типу  $KH_2PO_4$ . При цьому реальна структура кристалу не враховувалась.

У [32] взято до уваги взаємодію протонної тунельної Е-моди з коливаннями ґратки деякої симетрії. Взято до уваги два спіни на комірку, що дало змогу мати справу з обома зв'язаними  $V_2$ - та Е-модами. Запропонована модель вище  $T_c$  дає для  $\chi_{11}$  поведінку Кюрі-Вейса.

Використовуючи рівняння типу Блоха, вираз для поперечної динамічної проникності  $KH_2PO_4$  у випадку  $T > T_c$  наведений у роботі [12], а для  $T < T_c$  і  $T > T_c$  – у [33], де теоретичний результат порівнюється з даними експерименту для  $\chi''_{11}(\omega)$ .

Використовуючи гейзенберґівські рівняння руху, в роботі [35] у наближенні чотиричастинкового кластера з врахуванням ефектів тунелювання протонів на зв'язках розрахована повздовжня динамічна сприйнятливність  $KH_2PO_4$  і проведено порівняння результатів розрахунку з даними експериментів.

У роботі [36], використовуючи метод рівнянь Блоха, вивчались динамічні повздовжні і поперечні динамічні властивості сегнетоелектриків типу  $KH_2PO_4$  з явним врахуванням реальної структури. Однак при цьому не бралась до уваги взаємодія протонів, що рухаються на  $O - H \dots O$ -зв'язках у  $KH_2PO_4$  із коливаннями ґратки.

У роботі [37] запропонована теорія динамічних явищ у  $KH_2PO_4$ , що побудована з врахуванням протон-протонної і протон-ґраткової взаємодій, ефектів тунелювання протонів на  $O - H \dots O$ -зв'язках і реальної структури кристалу. Розраховано повздовжні і поперечні

статичні і динамічні сприйнятливості і зв'язані протон-іонні коливання сегнетоелектриків типу  $KH_2PO_4$ . Розрахунки проведені в наближенні самоузгодженого поля. Показано, що у поперечну сприйнятливість в  $KH_2PO_4$  суттєвий вклад вносять як фононна, так і протонна підсистема.

В роботах [38–40] був запропонований підхід з метою побудови більш послідовної теорії динамічних явищ в сегнетоактивних сполуках сім'ї  $KH_2PO_4$  з врахуванням в рамках кластерного наближення тунелювання. Було показано, що в кластерному наближенні динамічні властивості характеризуються ефективним параметром тунелювання, перенормованим короткосяжною взаємодією. Пізніше на цю особливість фізичних характеристик кристалів типу  $KH_2PO_4$  вказали і вказали і автори роботи [41]. При цьому принципово важливим є той факт, що ефективне тунелювання є значно меншим від вихідного, в сегнетоактивних сполуках сім'ї  $KH_2PO_4$  має місце суттєве пригнічення тунелювання короткодією.

Вперше вирази для поперечних компонент статичної діелектричної проникності з врахуванням спонтанної деформації для кристалів сім'ї  $KH_2PO_4$  в парафазі отримані в роботі [9]. В роботі [42] для сегнетоелектриків типу  $KH_2PO_4$  запропоновано узагальнення протонної моделі з тунелюванням для дослідження п'єзоелектричних, діелектричних та пружних властивостей, що пов'язані із деформаціями  $\epsilon_4$  та  $\epsilon_5$ . Отримано в наближенні чотиричастинкового кластера за короткосяжними і молекулярного поля за далекосяжними взаємодіями вирази для відповідних фізичних характеристик у параелектричній фазі. Досягнуто належним вибором значень параметрів теорії доброго узгодження теоретичних та експериментальних результатів.

У роботі [43] відзначено, що симетрія ефективних дипольних моментів водневих зв'язків при прикладанні поперечних  $E_x$  та  $E_y$  полів, аналогічна, як і в [29], але встановлено, що вони складаються із двох доданків: проєкцій дипольних моментів водневих зв'язків і дипольних моментів протонних конфігурацій  $\mu_a^x$  і  $\mu_a^y$ .

Дана робота присвячена вивченню в рамках модифікованої протонної моделі діелектричних, п'єзоелектричних і пружних характеристик, що пов'язані з деформаціями  $\epsilon_4$  та  $\epsilon_5$  кристалів  $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$  без тунелювання в пара- і сегнетоелектричній фазах із врахуванням спонтанної деформації  $\epsilon_6$ . Крім того, досліджуються динамічні явища в механічно затиснутих і механічно вільних кристалах  $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$ .

## 2. Гамільтоніан кристалу

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

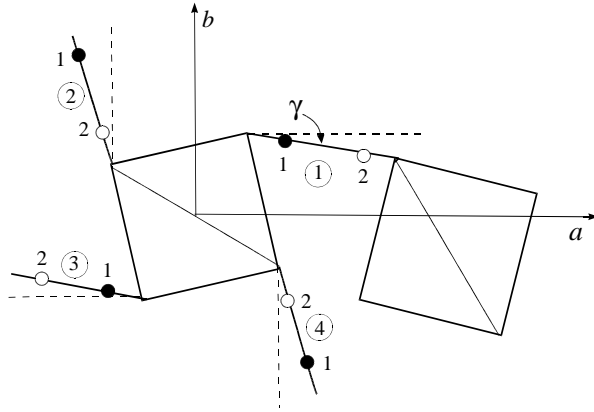


Рис. 1. Примітивна комірка Браве ДСОФ. Показано одну з числа можливих сегнетоелектричних протонних конфігурацій.

Гамільтоніан дейтронної системи ДСОФ з врахуванням короткосяжних і далекосяжних взаємодій при наявності одновісних напруг  $\sigma_4 = \sigma_{yz}$  і  $\sigma_5 = \sigma_{xz}$  кристалу відповідно в площинах  $(b, c)$  і  $(a, c)$  під кутом  $\frac{\pi}{4}$  до осей, коли виникають деформації  $\varepsilon_4 = \varepsilon_{yz}$  і  $\varepsilon_5 = \varepsilon_{xz}$  і при прикладанні зовнішніх полів  $E_1$  і  $E_2$ , напрямлених вздовж кристалграфічних осей  $a$  і  $b$ , відповідно, складається із "затравочної" та псевдоспінової частин:

$$\hat{H} = NH^0 + \hat{H}_s. \quad (2.1)$$

де  $N$  – загальна кількість примітивних комірок. "Затравочна" частина енергії примітивної комірки, яка виражається через деформації  $\varepsilon_j$  ( $j = 4, 5$ ) і електричні поля  $E_1$  і  $E_2$ , включають в себе пружну,

п'єзоелектричну та діелектричну складові:

$$H^0 = \frac{\bar{v}}{2}(c_{44}^{E0}\varepsilon_4^2 + c_{55}^{E0}\varepsilon_5^2) - \bar{v}e_{14}^0\varepsilon_4E_1 - \bar{v}e_{25}^0\varepsilon_5E_2 - \frac{\bar{v}}{2}\chi_{11}^{\varepsilon 0}E_1^2 - \frac{\bar{v}}{2}\chi_{22}^{\varepsilon 0}E_2^2. \quad (2.2)$$

Перші три доданки в правій частині (2.2) – пружна енергія, яка не залежить від розміщення дейтронів на водневих зв'язках ( $c_{66}^{E0}$ ,  $c_{44}^{E0}$ ,  $c_{55}^{E0}$  – "затравочні" пружні сталі); четвертий і п'ятий доданки – енергія взаємодій між поляризаціями, що виникають за рахунок п'єзоелектричного ефекту при деформаціях  $\varepsilon_4$  і  $\varepsilon_5$  без врахування водневих зв'язків і полями  $E_1$  і  $E_2$  ( $e_{14}^0$ ,  $e_{25}^0$  – "затравочні" коефіцієнти п'єзоелектричної напруги); шостий і сьомий доданки відповідають енергії, яка обумовлена поляризацією, що індукована зовнішніми електричними полями незалежно від конфігурацій дейтронів на водневих зв'язках ( $\chi_{11}^{\varepsilon 0}$ ,  $\chi_{22}^{\varepsilon 0}$  – "затравочні" діелектричні сприйнятливості),  $\bar{v} = \frac{v}{k_B}$ ,  $v$  – об'єм примітивної комірки,  $k_B$  – стала Больцмана.

Псевдоспінова частина гамільтоніану має вигляд

$$\hat{H}_s = \frac{1}{2} \sum_{qq'} J_{ff'}(qq') \frac{\langle \sigma_{qf} \rangle \langle \sigma_{q'f'} \rangle}{2} - \sum_{qf} 2\mu F_f(j) \frac{\sigma_{qf}}{2} + \hat{H}_{к.в.}(j) - \sum_{qf} (\mu_{f1}E_1 + \mu_{f2}E_2) \frac{\sigma_{qf}}{2}, \quad (j = 4, 5). \quad (2.3)$$

Перші два доданки в (2.3) – гамільтоніан середнього поля за далекосяжними диполь-дипольними взаємодіями і непрямыми через коливання ґратки міждейтронними взаємодіями, а також середнього поля, індукованого п'єзоелектричною взаємодією, причому

$$F_3(j) = 2\nu_3\eta_1^{(1)}(j) + 2\nu_1\eta_3^{(1)}(j) + 2\nu_2\eta_2^{(1)}(j) + 2\nu_2\eta_4^{(1)}(j) - 2\psi_6\varepsilon_6 \pm 2\psi_4\varepsilon_4, \\ F_4(j) = 2\nu_2\eta_1^{(1)}(j) + 2\nu_2\eta_3^{(1)}(j) + 2\nu_3\eta_2^{(1)}(j) + 2\nu_3\eta_4^{(1)}(j) - 2\psi_6\varepsilon_6 \mp 2\psi_5\varepsilon_5,$$

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

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

а  $J_{ff'} = \sum_{R_q - R_{q'}} J_{ff'}(qq')$  – фур'є-образ константи далекоюсяжних взаємодій між дейтронами;  $\psi_4, \psi_5, \psi_6$  – т. зв. деформаційні потенціали. В (2.3)  $\mu_{f1}, \mu_{f1}$  – ефективні дипольні моменти водневих зв'язків, які, як показано в [43], дорівнюють сумі дипольних моментів тетрадрів і водневих зв'язків, причому

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

$\hat{H}_{\text{к.в.}}(j)$  – гамільтоніан короткоюсяжних конфігураційних взаємодій між дейтронами поблизу тетрадрів  $\text{PO}_4$ . Враховуючи значення енергій дейтронів, які оточують тетрадр  $\text{PO}_4$ , при наявності спонтанної деформації  $\varepsilon_6$ , і деформацій  $\varepsilon_4$  і  $\varepsilon_5$  (табл.1) [42], отримуємо гамільтоніан короткоюсяжних взаємодій у наближенні чотиричастинкового кластера в наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{к.в.}}(j) = \sum_q \left\{ -\frac{1}{4}(\delta_{s6}\varepsilon_6 - 2\delta_{16}\varepsilon_6) \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \right. \\ -\frac{1}{2}(\delta_{a4}\varepsilon_4 + \delta_{14}\varepsilon_4) \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} - \frac{\sigma_{q3}}{2} \right) - \frac{1}{2}(\delta_{a5}\varepsilon_5 + \delta_{15}\varepsilon_5) \left( -\frac{\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \\ + (-\delta_{s6}\varepsilon_6 - 2\delta_{16}\varepsilon_6) \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} + \right. \\ \left. + \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \\ + 2(\delta_{a4}\varepsilon_4 - \delta_{14}\varepsilon_4) \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} - \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \\ + 2(\delta_{a5}\varepsilon_5 - \delta_{15}\varepsilon_5) \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} - \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \right) + \\ + (V + \delta_{a6}\varepsilon_6) \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \\ + (V - \delta_{a6}\varepsilon_6) \left( \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q4}}{2} \frac{\sigma_{q1}}{2} \right) + \\ \left. + U \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \Phi \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right\}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

де

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

а  $\varepsilon = \varepsilon_a - \varepsilon_s$ ,  $w = \varepsilon_1 - \varepsilon_s$ ,  $w_1 = \varepsilon_0 - \varepsilon_s$  – т. зв. слетерівські енергії,  $\Delta^a$  – ефективне поле, яке створене сусідніми поза межами кластера зв'язками.

Табл. 1. Енергії конфігурацій дейтронів поблизу тетраедра  $\text{PO}_4$ .

$i$	$\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4$	$E_i$	$i$	$\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4$	$E_i$
1	++++	$\varepsilon_s - \delta_{s6}\varepsilon_6$	9	----+	$\varepsilon_1 - \delta_{16}\varepsilon_6 - \delta_{15}\varepsilon_5$
2	----	$\varepsilon_s + \delta_{s6}\varepsilon_6$	10	---+-	$\varepsilon_1 - \delta_{16}\varepsilon_6 + \delta_{14}\varepsilon_4$
3	+--+	$\varepsilon_0$	11	-+--	$\varepsilon_1 - \delta_{16}\varepsilon_6 + \delta_{15}\varepsilon_5$
4	-+++		12	+----	$\varepsilon_1 - \delta_{16}\varepsilon_6 - \delta_{14}\varepsilon_4$
5	++--	$\varepsilon_a + \delta_{a6}\varepsilon_6 - \delta_{a4}\varepsilon_4 + \delta_{a5}\varepsilon_5$	13	++--	$\varepsilon_1 + \delta_{16}\varepsilon_6 - \delta_{14}\varepsilon_4$
6	--++	$\varepsilon_a + \delta_{a6}\varepsilon_6 + \delta_{a4}\varepsilon_4 - \delta_{a5}\varepsilon_5$	14	+++-	$\varepsilon_1 + \delta_{16}\varepsilon_6 + \delta_{15}\varepsilon_5$
7	-++-	$\varepsilon_a - \delta_{a6}\varepsilon_6 + \delta_{a4}\varepsilon_4 + \delta_{a5}\varepsilon_5$	15	-+++	$\varepsilon_1 + \delta_{16}\varepsilon_6 + \delta_{14}\varepsilon_4$
8	+--+	$\varepsilon_a - \delta_{a6}\varepsilon_6 - \delta_{a4}\varepsilon_4 - \delta_{a5}\varepsilon_5$	16	+--+	$\varepsilon_1 + \delta_{16}\varepsilon_6 - \delta_{15}\varepsilon_5$

В результаті вихідний гамільтоніан (2.1) має наступний вигляд

$$\hat{H} = NH^0 + \frac{1}{2} \sum_{qq'} J_{ff'}(qq') \frac{\langle \sigma_{qf} \rangle \langle \sigma_{q'f'} \rangle}{2} + \sum_q \hat{H}_q^{(4)},$$

де чотиричастинковий гамільтоніан дейтронів  $H_q^{(4)}$  має вигляд

$$\begin{aligned} \hat{H}_q^{(4)} = & (-\delta_{s6}\varepsilon_6 - 2\delta_{16}\varepsilon_6) \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} + \right. \\ & \left. + \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \\ & + 2(\delta_{a4}\varepsilon_4 - \delta_{14}\varepsilon_4) \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} - \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \\ & + 2(\delta_{a5}\varepsilon_5 - \delta_{15}\varepsilon_5) \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} - \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \right) + \\ & + (V + \delta_{a6}\varepsilon_6) \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \\ & + (V - \delta_{a6}\varepsilon_6) \left( \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q4}}{2} \frac{\sigma_{q1}}{2} \right) + \\ & + U \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} + \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) + \Phi \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} - \\ & - \frac{1}{4} (\delta_{s6}\varepsilon_6 - 2\delta_{16}\varepsilon_6) \sum_{f=1}^4 \frac{\sigma_{qf}}{2} + \\ & - \frac{1}{2} (\delta_{a4}\varepsilon_4 + \delta_{14}\varepsilon_4) \left( \frac{\sigma_{q1}}{2} - \frac{\sigma_{q3}}{2} \right) - \frac{1}{2} (\delta_{a5}\varepsilon_5 + \delta_{15}\varepsilon_5) \left( -\frac{\sigma_{q2}}{2} + \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) - \\ & - \sum_{f=1}^4 \frac{x_{fj}}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

В (2.5) використані такі позначення:

$$x_{3j} = \beta[-\Delta_j + 2\nu_3\eta_1^{(1)}(j) + 2\nu_3\eta_3^{(1)}(j) + 2\nu_2\eta_2^{(1)}(j) + 2\nu_2\eta_4^{(1)}(j) + 2\psi_6\varepsilon_6 \pm 2\psi_4\varepsilon_4 \pm \mu_1 \cos \gamma E_1 \mp \mu_1 \sin \gamma E_2], \quad (2.6)$$

$$x_{2j} = \beta[-\Delta_j + 2\nu_2\eta_1^{(1)}(j) + 2\nu_2\eta_3^{(1)}(j) + 2\nu_1\eta_2^{(1)}(j) + 2\nu_3\eta_4^{(1)}(j) + 2\psi_6\varepsilon_6 \mp 2\psi_5\varepsilon_5 \pm \mu_2 \sin \gamma E_1 \mp \mu_2 \cos \gamma E_2].$$

Одночастинкові гамільтоніани дейтронів мають вигляд

$$\hat{H}_{qf}^{(1)}(j) = \frac{\bar{x}_{fj}}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2}, \quad (2.7)$$

де

$$\bar{x}_{fj} = -\beta\Delta^a + x_{fj}.$$

Унарні функції розподілу дейтронів на основі (2.5) отримуємо в такому вигляді:

$$\eta_3^{(1)}(j) = \frac{1}{D_i} (\text{sh } A_{1j} + d \text{ sh } A_{2j} \pm aa_6 \text{ sh } A_{3j} \pm \frac{a}{a_6} \text{ sh } A_{4j} \pm \pm b \text{ sh } A_{5j} \mp b \text{ sh } A_{6j} + b \text{ sh } A_{7j} + b \text{ sh } A_{8j}) = \frac{m_1(j)}{D_j}, \quad (2.8)$$

$$\eta_4^{(1)}(j) = \frac{1}{D_j} (\text{sh } A_{1j} - d \text{ sh } A_{2j} \pm aa_6 \text{ sh } A_{3j} \mp \frac{a}{a_6} \text{ sh } A_{4j} + \pm b \text{ sh } A_{5j} + b \text{ sh } A_{6j} \pm b \text{ sh } A_{7j} \mp b \text{ sh } A_{8j}) = \frac{m_2(j)}{D_j},$$

де

$$D_j = \text{ch } A_{1j} + d \text{ ch } A_{2j} + aa_6 \text{ ch } A_{3j} + \frac{a}{a_6} \text{ ch } A_{4j} + \pm b \text{ ch } A_{5j} + b \text{ ch } A_{6j} + b \text{ ch } A_{7j} + b \text{ ch } A_{8j},$$

Тут використані наступні позначення:

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

$$A_{24} = \frac{1}{2} (x_{14} \pm x_{24} + x_{34} \pm x_{44}) + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6 \pm \beta\delta_{s6}\varepsilon_6,$$

$$A_{34} = \frac{1}{2} (x_{14} \pm x_{24} - x_{34} \mp x_{44}) + \beta\delta_{a4}\varepsilon_4,$$

$$A_{64} = \frac{1}{2} (\pm x_{14} + x_{24} \mp x_{34} + x_{44}) - \beta\delta_{16}\varepsilon_6 \pm \beta\delta_{14}\varepsilon_4,$$

$$A_{74} = \frac{1}{2} (x_{14} \pm x_{24} + x_{34} \mp x_{44}) - \beta\delta_{16}\varepsilon_6,$$

$$A_{25} = \frac{1}{2} (x_{15} \pm x_{25} + x_{35} \pm x_{45}) + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6 \pm \beta\delta_{s6}\varepsilon_6,$$

$$A_{35} = \frac{1}{2} (x_{15} \pm x_{25} - x_{35} \mp x_{45}) \mp \beta\delta_{a5}\varepsilon_5,$$

$$A_{65} = \frac{1}{2} (\pm x_{15} + x_{25} \mp x_{35} + x_{45}) - \beta\delta_{16}\varepsilon_6,$$

$$A_{75} = \frac{1}{2} (x_{15} \pm x_{25} + x_{35} \mp x_{45}) - \beta\delta_{16}\varepsilon_6 \mp \beta\delta_{15}\varepsilon_5.$$

В кластерному наближенні параметри  $\Delta_{4,5}$  визначаються з умови самоузгодження: середнє значення квазіспіна  $\eta_f^{(1)}(i)$  не повинно

залежати від того, по якому розподілу Гіббса (з чотири- чи одно- частинковим гамільтоніаном) воно розраховане. Виключаючи з (2.5) параметр  $\Delta_{4,5}$ , отримуємо:

$$x_{34} = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta_3^{(1)}(4)}{1 - \eta_3^{(1)}(4)} + \beta\nu_3\eta_1^{(1)}(4) + \beta\nu_3\eta_3^{(1)}(4) + \beta\nu_2[\eta_2^{(1)}(4) + \eta_4^{(1)}(4)] - \beta\psi_6\varepsilon_6 \pm \beta\psi_4\varepsilon_4 \pm \frac{\beta\mu_1}{2} \cos \gamma E_1, \quad (2.9)$$

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

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

$$x_{25} = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta_2^{(1)}(5)}{1 - \eta_2^{(1)}(5)} + \beta\nu_2[\eta_1^{(1)}(5) + \eta_3^{(1)}(5)] + \beta\nu_3\eta_2^{(1)}(5) + \beta\nu_3\eta_4^{(1)}(5) - \beta\psi_6\varepsilon_6 \mp 2\psi_5\varepsilon_5 \mp \frac{\beta\mu_2}{2} \cos \gamma E_2.$$

Якщо до кристалу не прикладені зовнішні електричні поля і напруги, то

$$\eta^{(1)}(j) = \eta_1^{(1)}(j) = \eta_2^{(1)}(j) = \eta_3^{(1)}(j) = \eta_4^{(1)}(j) = \frac{\text{sh}(2x + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) + 2b \text{sh}(x - \beta\delta_{16}\varepsilon_6)}{\text{ch}(2x + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) + 4b \text{ch}(x - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) + 2a + d},$$

а

$$x = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta^{(1)}}{1 - \eta^{(1)}} + \beta\nu_c\eta^{(1)} - \beta\psi_6\varepsilon_6 = z_6, \quad \nu_c = \nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3.$$

### 3. П'єзоелектричні, пружні й діелектричні властивості ДСОФ за наявності механічної напруги $\sigma_4$

Для вивчення впливу механічної напруги  $\sigma_4$  на п'єзоелектричні, пружні і діелектричні властивості ДСОФ використаємо термодина-

мічний потенціал в розрахунку на одну комірку, отриманий в наближенні чотиричастинкового кластера:

$$g(j) = \frac{\bar{v}}{2}(c_{66}^{E0}\varepsilon_6^2 + c_{jj}^{E0}\varepsilon_j^2) - \bar{v}e_{ij}^0\varepsilon_j E_i - \frac{\bar{v}}{2}\chi_{ii}^{\varepsilon_0}E_i^2 + 2T \ln 2 + \frac{1}{2}\nu_1[\eta_1^{(1)2}(j) + \eta_3^{(1)2}(j) + \eta_2^{(1)2}(j) + \eta_4^{(1)2}(j)] + \nu_3[\eta_1^{(1)}(j)\eta_3^{(1)}(j) + \eta_2^{(1)}(j)\eta_4^{(1)}(j)] + \nu_2[\eta_1^{(1)}(j)\eta_2^{(1)}(j) + \eta_2^{(1)}(j)\eta_3^{(1)}(j) + \eta_3^{(1)}(j)\eta_4^{(1)}(j) + \eta_4^{(1)}(j)\eta_1^{(1)}(j)] - \frac{1}{2}T \ln[1 - \eta_1^{(1)2}(j)] - \frac{1}{2}T \ln[1 - \eta_2^{(1)2}(j)] - \frac{1}{2}T \ln[1 - \eta_3^{(1)2}(j)] - \frac{1}{2}T \ln[1 - \eta_4^{(1)2}(j)] - 2T \ln D_j - \bar{v}\sigma_j\varepsilon_j. \quad (3.1)$$

де  $j = 4, 5$ ; а  $i = j - 3$ .

З умов термодинамічної рівноваги

$$\frac{1}{\bar{v}} \left( \frac{\partial g(4)}{\partial \varepsilon_4} \right)_{E_1, \sigma_4} = 0, \quad \frac{1}{\bar{v}} \left( \frac{\partial g(4)}{\partial \varepsilon_6} \right)_{E_1} = 0, \quad \frac{1}{\bar{v}} \left( \frac{\partial g(4)}{\partial E_1} \right)_{\sigma_4} = -P_1, \\ \frac{1}{\bar{v}} \left( \frac{\partial g(5)}{\partial \varepsilon_5} \right)_{E_2, \sigma_5} = 0, \quad \frac{1}{\bar{v}} \left( \frac{\partial g(5)}{\partial \varepsilon_6} \right)_{E_2} = 0, \quad \frac{1}{\bar{v}} \left( \frac{\partial g(5)}{\partial E_5} \right)_{\sigma_5} = -P_2,$$

отримуємо

$$\sigma_4 = c_{44}^{E0}\varepsilon_4 - e_{14}^0 E_1 - \frac{2\psi_4}{v} \frac{1}{2}(\eta_1^{(1)}(4) - \eta_3^{(1)}(4)) - \frac{2\delta_{a4}}{vD_4}\varkappa_{s14}^a - \frac{2\delta_{14}}{vD_4}\varkappa_{s24}^b, \\ 0 = c_{66}^{E0}\varepsilon_6 + \frac{2\psi_6}{vD_4}(2\varkappa_{s14} + \varkappa_{s14}^b + \varkappa_{s34}^b) + \frac{2\delta_{a6}}{vD_4}\varkappa_{c24}^a - \frac{2\delta_{s6}}{vD_4}\varkappa_{s14} + \frac{2\delta_{16}}{vD_4}(\varkappa_{s14}^b + \varkappa_{s34}^b), \quad (3.2)$$

$$P_1 = e_{14}^0\varepsilon_4 + \chi_{11}^{\varepsilon_0} E_1 + \frac{2\mu_1 \cos \gamma}{v} \frac{1}{2}(\eta_1^{(1)}(4) - \eta_3^{(1)}(4)) + \frac{2\mu_2 \sin \gamma}{v} \frac{1}{2}(\eta_2^{(1)}(4) - \eta_4^{(1)}(4)),$$

$$\sigma_5 = c_{55}^{E0}\varepsilon_5 - e_{25}^0 E_2 - \frac{2\psi_5}{v} \frac{1}{2}(-\eta_2^{(1)}(5) + \eta_4^{(1)}(5)) - \frac{2\delta_{a5}}{vD_5}\varkappa_{s25}^a - \frac{2\delta_{25}}{vD_5}\varkappa_{s45}^b, \\ 0 = c_{66}^{E0}\varepsilon_6 - \frac{2\psi_6}{vD_5}(2\varkappa_{s15} + \varkappa_{s15}^b + \varkappa_{s35}^b) + \frac{2\delta_{a6}}{vD_5}\varkappa_{c25}^a - \frac{2\delta_{s6}}{vD_5}\varkappa_{s15} + \frac{2\delta_{16}}{vD_5}(\varkappa_{s15}^b + \varkappa_{s35}^b), \quad (3.3)$$



$$P_2 = e_{25}^0 \varepsilon_5 + \chi_{22}^{\varepsilon_0} E_2 + \frac{2\mu_2 \cos \gamma}{v} \frac{1}{2} (-\eta_2^{(1)}(5) + \eta_4^{(1)}(5)) + \\ + \frac{2\mu_1 \sin \gamma}{v} \frac{1}{2} (-\eta_1^{(1)}(5) + \eta_3^{(1)}(5)),$$

де використані наступні позначення:

$$\varkappa_{s_{2j}}^a = aa_6 \operatorname{sh} A_{3j} \pm \frac{a}{a_6} \operatorname{sh} A_{4j}, \quad \varkappa_{s_{2j}}^b = b(\operatorname{sh} A_{5j} \pm \operatorname{sh} A_{6j}), \\ \varkappa_{c_{2j}}^a = aa_6 \operatorname{ch} A_{3j} - \frac{a}{a_6} \operatorname{ch} A_{4j}, \quad \varkappa_{s_{3j}}^b = b(\operatorname{sh} A_{7j} \pm \operatorname{sh} A_{8j}), \\ \varkappa_{s_{1j}} = \operatorname{sh} A_{1j}.$$

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

$$E_1 = -h_{14}^0 \varepsilon_4 + k_{11}^0 P_1 - k_{11}^0 \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma \frac{1}{2} (\eta_1^{(1)}(4) - \eta_3^{(1)}(4)) - \\ - k_{11}^0 \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma \frac{1}{2} (\eta_2^{(1)}(4) - \eta_4^{(1)}(4)), \quad (3.4) \\ E_2 = -h_{25}^0 \varepsilon_5 + k_{22}^0 P_2 - k_{22}^0 \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma \frac{1}{2} (-\eta_2^{(1)}(5) + \eta_4^{(1)}(5)) - \\ - k_{22}^0 \frac{\mu_1}{v} \sin \gamma \frac{1}{2} (-\eta_1^{(1)}(5) + \eta_3^{(1)}(5)),$$

де

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

Використовуючи співвідношення (3.2) – (3.4), можна отримати п'єзоелектричні, діелектричні, і пружні характеристики ДСОФ.

Ізотермічні коефіцієнти п'єзоелектричної напруги

$$e_{14}^T = \left( \frac{\partial P_1}{\partial \varepsilon_4} \right)_{E_1} = e_{14}^0 + \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma (e_{41} - e_{43}) + \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma (e_{42} - e_{44}), \quad (3.5) \\ e_{25}^T = \left( \frac{\partial P_2}{\partial \varepsilon_5} \right)_{E_2} = e_{25}^0 + \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \sin \gamma (-e_{51} + e_{53}) + \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma (-e_{52} + e_{54}),$$

де

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

А вирази для  $e_{if}$  задовільняють наступну систему рівнянь

$$(D - \varkappa \varphi_a^\eta) \frac{1}{2} (e_{41} - e_{42}) - \varkappa_2^a \varphi_a^\eta \frac{1}{2} (e_{42} - e_{44}) = \beta (\psi_4 \varkappa - \delta_{a4} \varkappa_1^a - \delta_{14} 2 \varkappa^b), \\ - \varkappa_2^a \varphi_a^\eta \frac{1}{2} (e_{41} - e_{42}) + (D - \varkappa \varphi_a^\eta) \frac{1}{2} (e_{42} - e_{44}) = \beta (\psi_4 \varkappa_2^a - \delta_{a4} \varkappa_2^a); \\ (D - \varkappa \varphi_a^\eta) \frac{1}{2} (e_{53} - e_{51}) - \varkappa_2^a \varphi_a^\eta \frac{1}{2} (e_{54} - e_{52}) = \beta (\psi_5 \varkappa_2^a - \delta_{a5} \varkappa_a), \quad (3.6) \\ - \varkappa_2^a \varphi_a^\eta \frac{1}{2} (e_{51} - e_{53}) + (D - \varkappa \varphi_a^\eta) \frac{1}{2} (-e_{52} + e_{54}) = \beta (\psi_5 \varkappa - \delta_{a5} \varkappa_1^a - \delta_{15} 2 \varkappa^b),$$

де використані наступні позначення:

$$\varkappa = \varkappa_1^a + 2 \varkappa^b = aa_6 + \frac{a}{a_6} + 2b \operatorname{ch}(x - \beta \delta_{16} \varepsilon_6), \quad \varphi_a^\eta = \frac{1}{1 - \eta^{(1)2}} + \beta \nu_a, \\ \varkappa_2^a = aa_6 - \frac{a}{a_6}, \quad \nu_a = \nu_1 - \nu_3, \\ D = \operatorname{ch}(2x + \beta \delta_{s6} \varepsilon_6) + d + aa_6 + \frac{a}{a_6} + 4b \operatorname{ch}(x - \beta \delta_{16} \varepsilon_6), \\ x = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta^{(1)}}{1 - \eta^{(1)}} + \beta (\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_3) \eta^{(1)} - \beta \psi_6 \varepsilon_6.$$

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

$$e_{14}^T = e_{14}^0 + \\ + \frac{\mu_1 \cos \gamma + \mu_2 \sin \gamma}{vT} \frac{\tilde{\psi}_4 (aa_6 + \varkappa^b) - \tilde{\delta}_{a4} aa_6 - \tilde{\delta}_{14} \varkappa^b}{D - 2(aa_6 + \varkappa^b) \varphi_a^\eta} + \\ + \frac{\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma}{vT} \frac{\tilde{\psi}_4 (\frac{a}{a_6} + \varkappa^b) - \tilde{\delta}_{a4} \frac{a}{a_6} - \tilde{\delta}_{14} \varkappa^b}{D - 2(\frac{a}{a_6} + \varkappa^b) \varphi_a^\eta}, \quad (3.7)$$

$$e_{25}^T = e_{25}^0 + \\ + \frac{\mu_2 \cos \gamma + \mu_1 \sin \gamma}{vT} \frac{\tilde{\psi}_5 (aa_6 + \varkappa^b) - \tilde{\delta}_{a5} aa_6 - \tilde{\delta}_{15} \varkappa^b}{D - 2(aa_6 + \varkappa^b) \varphi_a^\eta} + \\ + \frac{\mu_2 \cos \gamma - \mu_1 \sin \gamma}{vT} \frac{\tilde{\psi}_5 (\frac{a}{a_6} + \varkappa^b) - \tilde{\delta}_{a5} \frac{a}{a_6} - \tilde{\delta}_{15} \varkappa^b}{D - 2(\frac{a}{a_6} + \varkappa^b) \varphi_a^\eta}, \quad (3.8)$$

В параелектричній фазі:

$$e_{14}^T = e_{25}^T = e_{14}^0 + \frac{\mu}{vT} \frac{\tilde{\psi}_4 2(a+b) - \tilde{\delta}_{a4} 2a - \tilde{\delta}_{14} 2b}{1 + 2b + d - \frac{2}{T} \tilde{\nu}_a (a+b)}.$$

Ізотермічні статичні поперечні діелектричні сприйнятливості при  $\varepsilon_i = \text{const}$  мають вигляд

$$\begin{aligned}\chi_{11}^{\varepsilon T} &= \left( \frac{\partial P_1}{\partial E_1} \right)_{\varepsilon_4} = \chi_{11}^0 + \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma (\chi_{41} - \chi_{43}) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma (\chi_{42} - \chi_{44}), \quad (3.9) \\ \chi_{22}^{\varepsilon T} &= \left( \frac{\partial P_2}{\partial E_2} \right)_{\varepsilon_5} = \chi_{22}^0 + \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \sin \gamma (-\chi_{51} + \chi_{53}) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma (-\chi_{52} + \chi_{54}),\end{aligned}$$

де  $\chi_{4f} = \left( \frac{\partial \eta_f^{(1)(4)}}{\partial E_1} \right)_{\varepsilon_4}$ ,  $\chi_{5f} = \left( \frac{\partial \eta_f^{(1)(5)}}{\partial E_2} \right)_{\varepsilon_5}$ . При  $\sigma_i = 0$ ,  $i E_j = 0$  отримуємо:

$$\begin{aligned}(D - \kappa \varphi_1)(\chi_{41} - \chi_{43}) - \kappa_a \varphi_1 (\chi_{42} - \chi_{44}) &= \beta \mu_1 \cos \gamma \kappa + \beta \mu_2 \sin \gamma \kappa_a, \\ -\kappa_a \varphi_1 (\chi_{41} - \chi_{43}) + (D - \kappa \varphi_1)(\chi_{42} - \chi_{44}) &= \beta \frac{\mu_1}{2} \cos \gamma \kappa_a + \beta \frac{\mu_2}{2} \sin \gamma \kappa,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(D - \kappa \varphi_1)(\chi_{53} - \chi_{51}) - \kappa_a \varphi_1 (\chi_{54} - \chi_{52}) &= \beta \mu_2 \cos \gamma \kappa_a + \beta \mu_1 \sin \gamma \kappa, \\ -\kappa_a \varphi_1 (\chi_{53} - \chi_{51}) + (D - \kappa \varphi_1)(\chi_{54} - \chi_{52}) &= \beta \frac{\mu_2}{2} \cos \gamma \kappa + \beta \frac{\mu_1}{2} \sin \gamma \kappa_a,\end{aligned}$$

В результаті, в сегнетоелектричній фазі ізотермічні поперечні діелектричні сприйнятливості недеформованого кристалу мають такий вигляд

$$\begin{aligned}\chi_{11}^{\varepsilon T} &= \chi_{11}^{\varepsilon 0} + \bar{v} \frac{(\mu_1 \cos \gamma + \mu_2 \sin \gamma)^2}{v^2} \frac{1}{2T} \frac{aa_6 + \varkappa^b}{D - 2(aa_6 + \varkappa^b)\varphi_a^\eta} + \\ &\quad + \bar{v} \frac{(\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma)^2}{v^2} \frac{1}{2T} \frac{\frac{a}{a_6} + \varkappa^b}{D - 2(\frac{a}{a_6} + \varkappa^b)\varphi_a^\eta}, \quad (3.10) \\ \chi_{22}^{\varepsilon T} &= \chi_{22}^{\varepsilon 0} + \bar{v} \frac{(\mu_2 \cos \gamma + \mu_1 \sin \gamma)^2}{v^2} \frac{1}{2T} \frac{aa_6 + \varkappa^b}{D - 2(aa_6 + \varkappa^b)\varphi_a^\eta} + \\ &\quad + \bar{v} \frac{(\mu_2 \cos \gamma - \mu_1 \sin \gamma)^2}{v^2} \frac{1}{2T} \frac{\frac{a}{a_6} + \varkappa^b}{D - 2(\frac{a}{a_6} + \varkappa^b)\varphi_a^\eta}.\end{aligned}$$

В параелектричній фазі, відповідно, отримуємо:

$$\chi_{11}^{\varepsilon T} = \chi_{22}^{\varepsilon T} = \chi_{11}^{\varepsilon 0} + \bar{v} \frac{\mu^2}{v^2} \frac{1}{T} \frac{(a+b)}{1+d+2b-\frac{2}{T}\nu_a(a+b)}. \quad (3.11)$$

Ізотермічні сталі п'єзоелектричної напруги

$$\begin{aligned}h_{14}^T &= - \left( \frac{\partial E_1}{\partial \varepsilon_4} \right)_{P_1} = h_{14}^0 - k_{11}^0 \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma (h_{41} - h_{43}) - \\ &\quad - k_{11}^0 \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma (h_{42} - h_{44}), \quad (3.12) \\ h_{25}^T &= - \left( \frac{\partial E_2}{\partial \varepsilon_5} \right)_{P_2} = h_{25}^0 - k_{22}^0 \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \sin \gamma (h_{53} - h_{51}) - \\ &\quad - k_{22}^0 \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma (h_{54} - h_{52}),\end{aligned}$$

де  $h_{4f} = \left( \frac{\partial \eta_f^{(1)(4)}}{\partial \varepsilon_4} \right)_{P_1}$ ,  $h_{5f} = \left( \frac{\partial \eta_f^{(1)(5)}}{\partial \varepsilon_5} \right)_{P_1}$ . Використовуючи співвідношення для унарних функцій (2.8), отримуємо системи рівнянь для  $h_{if}$ . В результаті:

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

Ізотермічні коефіцієнти п'єзоелектричної деформації

$$\begin{aligned}d_{14}^T &= \left( \frac{\partial P_1}{\partial \sigma_4} \right)_{E_1} = e_{14}^0 s_{44}^{E0} + \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \cos \gamma (d_{41} - d_{43}) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \sin \gamma (d_{42} - d_{44}), \quad (3.13) \\ d_{25}^T &= \left( \frac{\partial P_2}{\partial \sigma_5} \right)_{E_2} = e_{25}^0 s_{55}^{E0} + \frac{1}{2} \frac{\mu_1}{v} \sin \gamma (d_{53} - d_{51}) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{\mu_2}{v} \cos \gamma (d_{54} - d_{52}),\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}d_{4f} &= \left( \frac{\partial \eta_f^{(1)(4)}}{\partial \sigma_4} \right)_{E_1} = \left( \frac{\partial \eta_f^{(1)(4)}}{\partial \varepsilon_4} \right)_{E_1} \left( \frac{\partial \varepsilon_4}{\partial \sigma_4} \right)_{E_1} = \left( \frac{\partial \eta_f^{(1)(4)}}{\partial \varepsilon_4} \right)_{E_1} s_{44}^E, \\ d_{5f} &= \left( \frac{\partial \eta_f^{(1)(5)}}{\partial \sigma_5} \right)_{E_2} = \left( \frac{\partial \eta_f^{(1)(5)}}{\partial \varepsilon_5} \right)_{E_2} s_{55}^E,\end{aligned}$$

В результаті,

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

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

$$\begin{aligned} c_{44}^{ET} &= \left( \frac{\partial \sigma_4}{\partial \varepsilon_4} \right)_E = c_{44}^{E0} - \\ &- \frac{2\tilde{\psi}_4}{\bar{v}T} \left[ \frac{\tilde{\psi}_4(aa_6 + \varkappa^b) - \tilde{\delta}_{a4}aa_6 - \tilde{\delta}_{14}\varkappa^b}{D - 2(aa_6 + \varkappa^b)\varphi_a^\eta} + \frac{\tilde{\psi}_4(\frac{a}{a_6} + \varkappa^b) - \tilde{\delta}_{a4}\frac{a}{a_6} - \tilde{\delta}_{14}\varkappa^b}{D - 2(\frac{a}{a_6} + \varkappa^b)\varphi_a^\eta} \right] \\ &+ \frac{4\varphi_a^\eta}{\bar{v}DT} (\tilde{\delta}_{a4}aa_6 + \tilde{\delta}_{14}\varkappa^b) \frac{\tilde{\psi}_4(aa_6 + \varkappa^b) - \tilde{\delta}_{a4}aa_6 - \tilde{\delta}_{14}\varkappa^b}{D - 2(aa_6 + \varkappa^b)\varphi_a^\eta} + \quad (3.14) \\ &+ \frac{4\varphi_a^\eta}{\bar{v}DT} (\tilde{\delta}_{a4}\frac{a}{a_6} + \tilde{\delta}_{14}\varkappa^b) \frac{\tilde{\psi}_4(\frac{a}{a_6} + \varkappa^b) - \tilde{\delta}_{a4}\frac{a}{a_6} - \tilde{\delta}_{14}\varkappa^b}{D - 2(\frac{a}{a_6} + \varkappa^b)\varphi_a^\eta} + \\ &+ \frac{2\tilde{\psi}_4}{\bar{v}DT} (\tilde{\delta}_{a4}\varkappa_1^a + \tilde{\delta}_{14}\varkappa^b) - \frac{2}{\bar{v}DT} (\tilde{\delta}_{a4}^2\varkappa_1^a + \tilde{\delta}_{14}^2\varkappa^b). \end{aligned}$$

В параелектричній фазі  $c_{44}^{ET}$  має такий більш простий вигляд вигляд

$$\begin{aligned} c_{44}^{ET} &= c_{44}^{E0} - \frac{4\tilde{\psi}_4 [\tilde{\psi}_4(a+b) - \tilde{\delta}_{a4}a - \tilde{\delta}_{14}b]}{\bar{v}T (1+2b+d - \frac{2}{T}\tilde{v}_a(a+b))} - \\ &+ \frac{8(1 + \frac{\tilde{\varkappa}^a}{T})}{\bar{v}T} \frac{(\tilde{\delta}_{a4}a + \tilde{\delta}_{14}b)[\tilde{\psi}_4(a+b) - \tilde{\delta}_{a4}a - \tilde{\delta}_{14}b]}{(1+2a+4b+d)(1+2b+d - \frac{2}{T}\tilde{v}_a(a+b))} + \\ &+ \frac{4\tilde{\psi}_4}{\bar{v}T} \frac{\tilde{\delta}_{a4}a + \tilde{\delta}_{14}b}{1+2a+4b+d} - \frac{4}{\bar{v}T} \frac{\tilde{\delta}_{a4}^2a + \tilde{\delta}_{14}^2b}{1+2a+4b+d}. \end{aligned}$$

Аналогічно можна отримати вираз для пружної сталі  $c_{55}^E$ . Підставляючи вирази для поля  $E_j$  (3.6) у співвідношення  $\sigma_i(\varepsilon_i, E_j)$ , отримуємо вирази для напруги  $\sigma_i(\varepsilon_i, P_j)$ , на основі яких можна розрахувати пружні сталі при  $P_j = const$ . В результаті,

$$\begin{aligned} c_{44}^{PT} &= c_{44}^{ET} + e_{14}^T h_{14}^T, \quad (3.15) \\ c_{55}^{PT} &= c_{55}^{ET} + e_{25}^T h_{25}^T. \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \sigma_4 &= c_{44}^E \varepsilon_4 - e_{14} E_1, \quad P_1 = e_{14} \varepsilon_4 + \chi_{11}^\varepsilon E_1, \\ \sigma_4 &= c_{44}^P \varepsilon_4 - h_{14} P_1, \quad E_1 = -h_{14} \varepsilon_4 + k_{11}^\varepsilon P_1, \quad (3.16) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_5 &= c_{55}^E \varepsilon_5 - e_{25} E_2, \quad P_2 = e_{25} \varepsilon_5 + \chi_{22}^\varepsilon E_2, \\ \sigma_5 &= c_{55}^P \varepsilon_5 - h_{25} P_2, \quad E_2 = -h_{25} \varepsilon_5 + k_{22}^\varepsilon P_2. \quad (3.17) \end{aligned}$$

Із систем рівнянь (3.16) і (3.17) при  $E_j = const$  отримуємо:

$$\begin{aligned} c_{jj}^P \left( \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial \sigma_j} \right)_{E_i} - h_{ij} \left( \frac{\partial P_i}{\partial \sigma_j} \right)_{E_i} &= 1, \\ -h_{ij} \left( \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial \sigma_j} \right)_{E_i} + k_{ii}^\varepsilon \left( \frac{\partial P_i}{\partial \sigma_j} \right)_{E_i} &= 0. \end{aligned}$$

Звідси вираз для коефіцієнта п'єзоелектричної деформації отримується в наступному вигляді:

$$d_{ij} = \left( \frac{\partial P_i}{\partial \sigma_j} \right)_{E_i} = \frac{h_{ij}}{c_{jj}^P k_{ii}^\varepsilon - h_{ij}^2} = \frac{e_{ij}}{c_{jj}^P - e_{ij} h_{ij}} = \frac{e_{ij}}{c_{jj}^E}. \quad (3.18)$$

Відповідно отримуємо і податливість при сталому полі

$$s_{jj}^E = \left( \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial \sigma_j} \right)_{E_i} = \frac{k_{ii}^\varepsilon}{c_{jj}^P k_{ii}^\varepsilon - h_{ij}^2} = \frac{1}{c_{jj}^E}. \quad (3.19)$$

Диференціюючи перші рівняння систем (3.16) і (3.17) по напрузі  $\sigma_j$ , при  $P_i = const$ , отримуємо:

$$\begin{aligned} c_{jj}^P \left( \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial \sigma_j} \right)_{P_i} - e_{ij} \left( \frac{\partial E_i}{\partial \sigma_j} \right)_{P_i} &= 1, \\ -e_{ij} \left( \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial \sigma_j} \right)_{P_i} + \chi_{jj}^\varepsilon \left( \frac{\partial E_i}{\partial \sigma_j} \right)_{P_i} &= 0, \end{aligned}$$

де  $g_{ij} = \left( \frac{\partial E_i}{\partial \sigma_j} \right)_{P_i}$  – стала п'єзоелектричної деформації, а  $s_{jj}^P = - \left( \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial \sigma_j} \right)_{P_i}$  – податливість при  $P_i = const$ . Звідси

$$g_{ij} = \frac{h_{ij}}{c_{jj}^E + e_{ij} h_{ij}^2} = \frac{h_{ij}}{c_{jj}^P}, \quad s_{jj}^P = \frac{1}{c_{jj}^P} \quad (3.20)$$

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

$$\begin{aligned} c_{jj}^E \left( \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial E_i} \right)_{\sigma_j} - e_{ij} &= 0, \\ -e_{ij} \left( \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial E_i} \right)_{\sigma_j} + \left( \frac{\partial P_i}{\partial E_i} \right)_{\sigma_j} &= \chi_{ii}^\varepsilon. \end{aligned}$$

Оскільки  $\left(\frac{\partial \varepsilon_j}{\partial E_i}\right)_{\sigma_j} = d_{ij}$ , то ізотермічна діелектрична сприйнят-  
ливість при  $\sigma_j = const$  матиме такий вигляд:

$$\chi_{ii}^{\sigma} = \left(\frac{\partial P_i}{\partial E_i}\right)_{\sigma_j} = \chi_{ii}^{\varepsilon} + e_{ij} d_{ij}. \quad (3.21)$$

Отже, ми отримали мікроскопічні вирази для  $e_{ij}$ ,  $\chi_{ii}^{\varepsilon}$  і  $c_{jj}^E$ , а всі інші характеристики виражаються через них.

#### 4. Системи рівнянь для залежних від часу функцій розподілу

Динамічні властивості  $KD_2PO_4$  при наявності електричного поля  $E_i$  ( $i = 1, 2$ ) будемо вивчати на основі динамічної моделі дейтерованих сегнетоактивних ортофосфатів (ДСОФ), яка ґрунтується на ідеях стохастичної моделі Глаубера [44]. На основі методики, яка розвинута в роботах [20, 22–24, 28–30], отримуємо наступну систему рівнянь для залежних від часу функцій розподілу дейтронів

$$-\alpha \frac{d}{dt} \langle \prod_f \sigma_{qf} \rangle = \sum_{f'} \left\{ \prod_f \sigma_{qf} \left[ 1 - \sigma_{qf'} \tanh \frac{1}{2} \beta \varepsilon_{qf'}^x(t) \right] \right\}, \quad (4.1)$$

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

На основі гамільтоніану (2.5) легко отримати:

$$\begin{aligned} \tanh \frac{\beta \varepsilon_{q1}^x}{2} &= \tanh \frac{\beta}{2} \left[ -\frac{1}{2}(V + \delta_{a6} \varepsilon_6) \sigma_{q2} - \frac{1}{2}(V - \delta_{a6} \varepsilon_6) \sigma_{q4} - \frac{1}{2} U \sigma_{q3} - \right. \\ &- \frac{1}{8} \Phi \sigma_{q2} \sigma_{q3} \sigma_{q4} - \frac{1}{2} \left( -\frac{\delta_{s6}}{2} - \delta_{16} \right) \varepsilon_6 (\sigma_{q2} \sigma_{q3} + \sigma_{q3} \sigma_{q4} + \sigma_{q2} \sigma_{q4}) - \\ &- \frac{1}{2} \left( -\frac{\delta_{s6}}{2} + \delta_{16} \right) \varepsilon_6 - \frac{1}{2} (\delta_{a4} - \delta_{14}) \varepsilon_4 \sigma_{q2} \sigma_{q4} + \frac{1}{2} (\delta_{a4} + \delta_{14}) \varepsilon_4 - \\ &\left. \frac{1}{2} (\delta_{a5} - \delta_{15}) \varepsilon_5 (\sigma_{q3} \sigma_{q4} - \sigma_{q2} \sigma_{q3}) + \frac{x_{1j}}{\beta} \right], \\ \tanh \frac{\beta \varepsilon_{q2}^x}{2} &= \tanh \frac{\beta}{2} \left[ -\frac{1}{2}(V + \delta_{a6} \varepsilon_6) \sigma_{q1} - \frac{1}{2}(V - \delta_{a6} \varepsilon_6) \sigma_{q3} - \frac{1}{2} U \sigma_{q4} - \right. \\ &- \frac{1}{8} \Phi \sigma_{q1} \sigma_{q3} \sigma_{q4} - \frac{1}{2} \left( -\frac{\delta_{s6}}{2} - \delta_{16} \right) \varepsilon_6 (\sigma_{q1} \sigma_{q4} + \sigma_{q3} \sigma_{q4} + \sigma_{q1} \sigma_{q3}) - \\ &- \frac{1}{2} \left( -\frac{\delta_{s6}}{2} + \delta_{16} \right) \varepsilon_6 - \frac{1}{2} (\delta_{a4} - \delta_{14}) \varepsilon_4 (\sigma_{q1} \sigma_{q4} - \sigma_{q3} \sigma_{q4}) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\left. \frac{1}{2} (\delta_{a5} - \delta_{15}) \varepsilon_5 \sigma_{q1} \sigma_{q3} - \frac{1}{2} (\delta_{a5} + \delta_{15}) \varepsilon_5 + \frac{x_{2j}}{\beta} \right], \\ \tanh \frac{\beta \varepsilon_{q3}^x}{2} &= \tanh \frac{\beta}{2} \left[ -\frac{1}{2}(V + \delta_{a6} \varepsilon_6) \sigma_{q4} - \frac{1}{2}(V - \delta_{a6} \varepsilon_6) \sigma_{q2} - \frac{1}{2} U \sigma_{q1} - \right. \\ &- \frac{1}{8} \Phi \sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q4} - \frac{1}{2} \left( -\frac{\delta_{s6}}{2} - \delta_{16} \right) \varepsilon_6 (\sigma_{q1} \sigma_{q2} + \sigma_{q1} \sigma_{q4} + \sigma_{q2} \sigma_{q4}) - \\ &- \frac{1}{2} \left( -\frac{\delta_{s6}}{2} + \delta_{16} \right) \varepsilon_6 + \frac{1}{2} (\delta_{a4} - \delta_{14}) \varepsilon_4 \sigma_{q2} \sigma_{q4} - \frac{1}{2} (\delta_{a4} + \delta_{14}) \varepsilon_4 - \\ &\left. \frac{1}{2} (\delta_{a5} - \delta_{15}) \varepsilon_5 (\sigma_{q1} \sigma_{q4} - \sigma_{q1} \sigma_{q2}) + \frac{x_{3j}}{\beta} \right], \\ \tanh \frac{\beta \varepsilon_{q4}^x}{2} &= \tanh \frac{\beta}{2} \left[ -\frac{1}{2}(V + \delta_{a6} \varepsilon_6) \sigma_{q3} - \frac{1}{2}(V - \delta_{a6} \varepsilon_6) \sigma_{q1} - \frac{1}{2} U \sigma_{q2} - \right. \\ &- \frac{1}{8} \Phi \sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q3} - \frac{1}{2} \left( -\frac{\delta_{s6}}{2} - \delta_{16} \right) \varepsilon_6 (\sigma_{q1} \sigma_{q2} + \sigma_{q2} \sigma_{q3} + \sigma_{q1} \sigma_{q3}) - \\ &- \frac{1}{2} \left( -\frac{\delta_{s6}}{2} + \delta_{16} \right) \varepsilon_6 - \frac{1}{2} (\delta_{a4} - \delta_{14}) \varepsilon_4 (\sigma_{q1} \sigma_{q2} - \sigma_{q2} \sigma_{q3}) - \\ &\left. \frac{1}{2} (\delta_{a5} - \delta_{15}) \varepsilon_5 \sigma_{q1} \sigma_{q3} + \frac{1}{2} (\delta_{a5} + \delta_{15}) \varepsilon_5 + \frac{x_{4j}}{\beta} \right], \end{aligned} \quad (4.2)$$

а  $x_{fj}$  задані виразами (2.6). Праві сторони (4.2) можуть бути записані у наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \tanh \frac{\beta \varepsilon_{q1}^x}{2} &= P_{j1}^x \sigma_{q3} + Q_{j11}^x \sigma_{q2} + Q_{j12}^x \sigma_{q4} + R_{j1}^x \sigma_{q2} \sigma_{q3} \sigma_{q4} + \\ &+ M_{j11}^x \sigma_{q2} \sigma_{q3} + M_{j12}^x \sigma_{q3} \sigma_{q4} + N_{j1}^x \sigma_{q2} \sigma_{q4} + L_{j1}^x, \\ \tanh \frac{\beta \varepsilon_{q2}^x}{2} &= P_{j2}^x \sigma_{q4} + Q_{j21}^x \sigma_{q1} + Q_{j22}^x \sigma_{q3} + R_{j2}^x \sigma_{q1} \sigma_{q3} \sigma_{q4} + \\ &+ M_{j21}^x \sigma_{q4} \sigma_{q1} + M_{j22}^x \sigma_{q3} \sigma_{q4} + N_{j2}^x \sigma_{q1} \sigma_{q3} + L_{j2}^x, \\ \tanh \frac{\beta \varepsilon_{q3}^x}{2} &= P_{j3}^x \sigma_{q1} + Q_{j31}^x \sigma_{q4} + Q_{j32}^x \sigma_{q2} + R_{j3}^x \sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q4} + \\ &+ M_{j31}^x \sigma_{q1} \sigma_{q4} + M_{j32}^x \sigma_{q1} \sigma_{q2} + N_{j3}^x \sigma_{q2} \sigma_{q4} + L_{j3}^x, \\ \tanh \frac{\beta \varepsilon_{q4}^x}{2} &= P_{j4}^x \sigma_{q2} + Q_{j41}^x \sigma_{q3} + Q_{j42}^x \sigma_{q1} + R_{j4}^x \sigma_{q1} \sigma_{q2} \sigma_{q3} + \\ &+ M_{j41}^x \sigma_{q2} \sigma_{q3} + M_{j42}^x \sigma_{q1} \sigma_{q2} + N_{j4}^x \sigma_{q1} \sigma_{q3} + L_{j4}^x, \quad (j = 4, 5). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Прирівнюючи праві сторони виразів (2.2) і (2.3), враховуючи, що  $\sigma_{qf} = \pm 1$ , знаходимо співвідношення для коефіцієнтів  $P_{j1}^x, \dots, L_{j4}^x$ :

$$P_{jf}^x = \frac{1}{8} (l_{1f}^x - l_{2f}^x + n_{1f}^x - n_{2f}^x + m_{1f}^x - m_{2f}^x + m_{3f}^x - m_{4f}^x),$$

$$\begin{aligned}
Q_{jf1}^x &= \frac{1}{8}(l_{1f}^x - l_{2f}^x - n_{1f}^x + n_{2f}^x + m_{1f}^x + m_{2f}^x - m_{3f}^x - m_{4f}^x), \\
Q_{jf2}^x &= \frac{1}{8}(l_{1f}^x - l_{2f}^x - n_{1f}^x + n_{2f}^x - m_{1f}^x - m_{2f}^x + m_{3f}^x + m_{4f}^x), \\
R_{jf}^x &= \frac{1}{8}(l_{1f}^x - l_{2f}^x + n_{1f}^x - n_{2f}^x - m_{1f}^x + m_{2f}^x - m_{3f}^x + m_{4f}^x), \\
N_{jf}^x &= \frac{1}{8}(l_{1f}^x + l_{2f}^x + n_{1f}^x + n_{2f}^x - m_{1f}^x - m_{2f}^x - m_{3f}^x - m_{4f}^x), (4.4) \\
M_{jf1}^x &= \frac{1}{8}(l_{1f}^x + l_{2f}^x - n_{1f}^x - n_{2f}^x + m_{1f}^x - m_{2f}^x - m_{3f}^x + m_{4f}^x), \\
M_{jf2}^x &= \frac{1}{8}(l_{1f}^x + l_{2f}^x - n_{1f}^x - n_{2f}^x - m_{1f}^x + m_{2f}^x + m_{3f}^x - m_{4f}^x), \\
L_{jf}^x &= \frac{1}{8}(l_{1f}^x + l_{2f}^x + n_{1f}^x + n_{2f}^x + m_{1f}^x + m_{2f}^x + m_{3f}^x + m_{4f}^x),
\end{aligned}$$

де використані наступні позначення:

$$\begin{aligned}
l_{1_3}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [w + (\delta_{s6} + \delta_{16})\varepsilon_6 \pm \delta_{14}\varepsilon_4 + \frac{1}{\beta}x_{3j}^1], \\
l_{2_3}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [-w + (\delta_{s6} + \delta_{16})\varepsilon_6 \pm \delta_{14}\varepsilon_4 + \frac{1}{\beta}x_{3j}^1], \\
n_{1_3}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [(w - w_1) - \delta_{16})\varepsilon_6 \pm \delta_{14}\varepsilon_4 + \frac{1}{\beta}x_{3j}^1], \\
n_{2_3}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [-(w - w_1) - \delta_{16})\varepsilon_6 \pm \delta_{14}\varepsilon_4 + \frac{1}{\beta}x_{3j}^1], \\
m_{1_3}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [(\varepsilon - w) - (\delta_{a6} + \delta_{16})\varepsilon_6 \pm \delta_{a4}\varepsilon_4 \pm (\delta_{a5} - \delta_{15})\varepsilon_5 + \frac{1}{\beta}x_{3j}^1], \\
m_{2_3}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [-(\varepsilon - w) - (\delta_{a6} + \delta_{16})\varepsilon_6 \pm \delta_{a4}\varepsilon_4 \mp (\delta_{a5} - \delta_{15})\varepsilon_5 + \frac{1}{\beta}x_{3j}^1], \\
m_{3_3}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [(\varepsilon - w) + (\delta_{a6} - \delta_{16})\varepsilon_6 \pm \delta_{a4}\varepsilon_4 \mp (\delta_{a5} - \delta_{15})\varepsilon_5 + \frac{1}{\beta}x_{3j}^1], \\
m_{4_3}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [-(\varepsilon - w) + (\delta_{a6} - \delta_{16})\varepsilon_6 \pm \delta_{a4}\varepsilon_4 \pm (\delta_{a5} - \delta_{15})\varepsilon_5 + \frac{1}{\beta}x_{3j}^1], \\
l_{1_4}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [w + (\delta_{s6} + \delta_{16})\varepsilon_6 \mp \delta_{15}\varepsilon_5 + \frac{1}{\beta}x_{4j}^2], \\
l_{2_4}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [-w + (\delta_{s6} + \delta_{16})\varepsilon_6 \mp \delta_{15}\varepsilon_5 + \frac{1}{\beta}x_{4j}^2], \\
n_{1_4}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [(w - w_1) - \delta_{16})\varepsilon_6 \mp \delta_{15}\varepsilon_5 + \frac{1}{\beta}x_{4j}^2], \\
n_{2_4}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [-(w - w_1) - \delta_{16})\varepsilon_6 \mp \delta_{15}\varepsilon_5 + \frac{1}{\beta}x_{4j}^2],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m_{1_4}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [(\varepsilon - w) - (\delta_{a6} + \delta_{16})\varepsilon_6 \mp (\delta_{a4} - \delta_{14})\varepsilon_4 \mp \delta_{a5}\varepsilon_5 + \frac{1}{\beta}x_{4j}^2], \\
m_{2_4}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [-(\varepsilon - w) - (\delta_{a6} + \delta_{16})\varepsilon_6 \pm (\delta_{a4} - \delta_{14})\varepsilon_4 \mp \delta_{a5}\varepsilon_5 + \frac{1}{\beta}x_{4j}^2], \\
m_{3_4}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [(\varepsilon - w) - (\delta_{a6} - \delta_{16})\varepsilon_6 \pm (\delta_{a4} - \delta_{14})\varepsilon_4 \mp \delta_{a5}\varepsilon_5 + \frac{1}{\beta}x_{4j}^2], \\
m_{4_4}^x &= \tanh \frac{\beta}{2} [-(\varepsilon - w) + (\delta_{a6} - \delta_{16})\varepsilon_6 \mp (\delta_{a4} - \delta_{14})\varepsilon_4 \mp \delta_{a5}\varepsilon_5 + \frac{1}{\beta}x_{4j}^2].
\end{aligned}$$

При наявності поля  $E_i (i = 1, 2)$  функції розподілу дейтронів мають вигляд

$$\begin{aligned}
\eta_3^{(1)}(j) &= \langle \sigma_{q_3^1} \rangle = \frac{1}{D_j} \left\{ \sinh A_{1j} + d \sinh A_{2j} \pm aa_6 \sinh A_{3j} \pm \right. \\
&\quad \left. \pm \frac{a}{a_6} \sinh A_{4j} \pm b [\pm \sinh A_{5j} \mp \sinh A_{6j} + \sinh A_{7j} + \sinh A_{8j}] \right\}, \\
\eta_4^{(1)}(j) &= \langle \sigma_{q_4^2} \rangle = \frac{1}{D_j} \left\{ \sinh A_{1j} - d \sinh A_{2j} \pm aa_6 \sinh A_{3j} \mp \right. \\
&\quad \left. \mp \frac{a}{a_6} \sinh A_{4j} + b [\sinh A_{5j} + \sinh A_{6j} \pm \sinh A_{7j} \mp \sinh A_{8j}] \right\}, \\
\eta_3^{(3)}(j) &= \langle \sigma_{q_1^2} \sigma_{q_2^3} \sigma_{q_4^4} \rangle = \frac{1}{D_j} \left\{ \sinh A_{1j} + d \sinh A_{2j} \pm aa_6 \sinh A_{3j} \pm \right. \\
&\quad \left. \pm \frac{a}{a_6} \sinh A_{4j} - b [\pm \sinh A_{5j} \mp \sinh A_{6j} + \sinh A_{7j} + \sinh A_{8j}] \right\}, (4.5) \\
\eta_4^{(3)}(j) &= \langle \sigma_{q_1^1} \sigma_{q_2^3} \sigma_{q_3^4} \rangle = \frac{1}{D_j} \left\{ \sinh A_{1j} - d \sinh A_{2j} \pm aa_6 \sinh A_{3j} \mp \right. \\
&\quad \left. \mp \frac{a}{a_6} \sinh A_{4j} - b [\sinh A_{5j} + \sinh A_{6j} \pm \sinh A_{7j} \mp \sinh A_{8j}] \right\}, \\
\eta_{14_{23}}^{(2)}(j) &= \langle \sigma_{q_2^1} \sigma_{q_3^4} \rangle = \frac{1}{D_j} \left\{ \cosh A_{1j} - d \cosh A_{2j} - aa_6 \cosh A_{3j} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{a}{a_6} \cosh A_{4j} + b [\pm \cosh A_{5j} \mp \cosh A_{6j} \mp \cosh A_{7j} \pm \cosh A_{8j}] \right\}, \\
\eta_{34}^{(2)}(j) &= \langle \sigma_{q_3^1} \sigma_{q_4^2} \rangle = \frac{1}{D_j} \left\{ \cosh A_{1j} - d \cosh A_{2j} + aa_6 \cosh A_{3j} - \right. \\
&\quad \left. - \frac{a}{a_6} \cosh A_{4j} + b [\pm \cosh A_{5j} \mp \cosh A_{6j} \pm \cosh A_{7j} \mp \cosh A_{8j}] \right\}, \\
\eta_{24}^{(2)}(j) &= \langle \sigma_{q_2^1} \sigma_{q_4^3} \rangle = \frac{1}{D_j} \left\{ \cosh A_{1j} + d \cosh A_{2j} - aa_6 \cosh A_{3j} - \right. \\
&\quad \left. - \frac{a}{a_6} \cosh A_{4j} + b [\mp \cosh A_{5j} \mp \cosh A_{6j} \pm \cosh A_{7j} \pm \cosh A_{8j}] \right\}.
\end{aligned}$$

Враховуючи (4.3) на основі (4.1) і беручи до уваги симетрію статичних функцій розподілу (4.5), отримуємо систему 14 рівнянь для залежних від часу унарних, потрійних і парних функцій розподілу ДСОФ:

$$\alpha \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_1^{(1)x}(4) \\ \eta_3^{(1)x}(4) \\ \eta_2^{(1)x}(4) \\ \eta_4^{(1)x}(4) \\ \eta_1^{(3)x}(4) \\ \eta_3^{(3)x}(4) \\ \eta_2^{(3)x}(4) \\ \eta_4^{(3)x}(4) \\ \eta_1^{(2)x}(4) \\ \eta_{14}^{(2)x}(4) \\ \eta_{23}^{(2)x}(4) \\ \eta_{12}^{(2)x}(4) \\ \eta_{34}^{(2)x}(4) \\ \eta_{13}^{(2)x}(4) \\ \eta_{24}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{a}_{11} & \bar{a}_{12} & \dots & \bar{a}_{114} \\ \bar{a}_{21} & \bar{a}_{22} & \dots & \bar{a}_{214} \\ \bar{a}_{31} & \bar{a}_{32} & \dots & \bar{a}_{314} \\ \bar{a}_{41} & \bar{a}_{42} & \dots & \bar{a}_{414} \\ \bar{a}_{51} & \bar{a}_{52} & \dots & \bar{a}_{514} \\ \bar{a}_{61} & \bar{a}_{62} & \dots & \bar{a}_{614} \\ \bar{a}_{71} & \bar{a}_{72} & \dots & \bar{a}_{714} \\ \bar{a}_{81} & \bar{a}_{82} & \dots & \bar{a}_{814} \\ \bar{a}_{91} & \bar{a}_{92} & \dots & \bar{a}_{914} \\ \bar{a}_{101} & \bar{a}_{102} & \dots & \bar{a}_{1014} \\ \bar{a}_{111} & \bar{a}_{112} & \dots & \bar{a}_{1114} \\ \bar{a}_{121} & \bar{a}_{122} & \dots & \bar{a}_{1214} \\ \bar{a}_{131} & \bar{a}_{132} & \dots & \bar{a}_{1314} \\ \bar{a}_{141} & \bar{a}_{142} & \dots & \bar{a}_{1414} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_1^{(1)x}(4) \\ \eta_3^{(1)x}(4) \\ \eta_2^{(1)x}(4) \\ \eta_4^{(1)x}(4) \\ \eta_1^{(3)x}(4) \\ \eta_3^{(3)x}(4) \\ \eta_2^{(3)x}(4) \\ \eta_4^{(3)x}(4) \\ \eta_1^{(2)x}(4) \\ \eta_{14}^{(2)x}(4) \\ \eta_{23}^{(2)x}(4) \\ \eta_{12}^{(2)x}(4) \\ \eta_{34}^{(2)x}(4) \\ \eta_{13}^{(2)x}(4) \\ \eta_{24}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \bar{a}_1 \\ \bar{a}_2 \\ \bar{a}_3 \\ \bar{a}_4 \\ \bar{a}_5 \\ \bar{a}_6 \\ \bar{a}_7 \\ \bar{a}_8 \\ \bar{a}_9 \\ \bar{a}_{10} \\ \bar{a}_{11} \\ \bar{a}_{12} \\ \bar{a}_{13} \\ \bar{a}_{14} \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

а коефіцієнти системи (6.1) мають такий вигляд:

$$\begin{aligned} \bar{a}_{11} &= -1, & \bar{a}_{12} &= P_{41}^x, & \bar{a}_{13} &= Q_{411}^x, & \bar{a}_{14} &= Q_{412}^x, \\ \bar{a}_{15} &= R_{41}^x, & \bar{a}_{16} &= 0, & \bar{a}_{17} &= 0, & \bar{a}_{18} &= 0, \\ \bar{a}_{19} &= 0, & \bar{a}_{110} &= M_{411}^x, & \bar{a}_{111} &= 0, & \bar{a}_{112} &= M_{412}^x, \\ \bar{a}_{113} &= 0, & \bar{a}_{114} &= N_{41}^x, & \bar{a}_1 &= L_{41}^x, & & \\ \bar{a}_{21} &= P_{43}^x, & \bar{a}_{22} &= -1, & \bar{a}_{23} &= Q_{432}^x, & \bar{a}_{24} &= Q_{431}^x, \\ \bar{a}_{25} &= 0, & \bar{a}_{26} &= R_{43}^x, & \bar{a}_{27} &= 0, & \bar{a}_{28} &= 0, \\ \bar{a}_{29} &= M_{431}^x, & \bar{a}_{210} &= 0, & \bar{a}_{211} &= M_{432}^x, & \bar{a}_{212} &= 0, \\ \bar{a}_{213} &= 0, & \bar{a}_{214} &= N_{41}^x, & \bar{a}_2 &= L_{43}^x, & & \\ \bar{a}_{31} &= Q_{421}^x, & \bar{a}_{32} &= Q_{422}^x, & \bar{a}_{33} &= -1, & \bar{a}_{34} &= P_{42}^x, \\ \bar{a}_{35} &= 0, & \bar{a}_{36} &= 0, & \bar{a}_{37} &= R_{42}^x, & \bar{a}_{38} &= 0, \\ \bar{a}_{39} &= M_{421}^x, & \bar{a}_{310} &= 0, & \bar{a}_{311} &= 0, & \bar{a}_{312} &= M_{422}^x, \\ \bar{a}_{313} &= N_{42}^x, & \bar{a}_{314} &= 0, & \bar{a}_3 &= L_{42}^x, & & \\ \bar{a}_{41} &= Q_{442}^x, & \bar{a}_{42} &= Q_{441}^x, & \bar{a}_{43} &= P_{44}^x, & \bar{a}_{44} &= -1, \\ \bar{a}_{45} &= 0, & \bar{a}_{46} &= 0, & \bar{a}_{47} &= 0, & \bar{a}_{48} &= R_{44}^x, \\ \bar{a}_{49} &= 0, & \bar{a}_{410} &= M_{441}^x, & \bar{a}_{411} &= M_{442}^x, & \bar{a}_{412} &= 0, \\ \bar{a}_{413} &= N_{44}^x, & \bar{a}_{414} &= 0, & \bar{a}_4 &= L_{44}^x, & & \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{a}_{51} &= R_{42}^x + R_{43}^x + R_{44}^x, & \bar{a}_{52} &= P_{42}^x + P_{44}^x, \\ \bar{a}_{53} &= Q_{431}^x + Q_{441}^x, & \bar{a}_{54} &= Q_{422}^x + Q_{432}^x, \\ \bar{a}_{55} &= -3, & \bar{a}_{56} &= P_{43}^x, \\ \bar{a}_{57} &= Q_{421}^x, & \bar{a}_{58} &= Q_{442}^x, \\ \bar{a}_{59} &= N_{42}^x + M_{432}^x, & \bar{a}_{510} &= L_{44}^x, \\ \bar{a}_{511} &= M_{431}^x + N_{44}^x, & \bar{a}_{512} &= L_{42}^x, \\ \bar{a}_{513} &= M_{421}^x + M_{442}^x, & \bar{a}_{514} &= L_{43}^x, \\ \bar{a}_5 &= M_{422}^x + M_{441}^x + N_{43}^x, & & \\ \bar{a}_{61} &= P_{42}^x + P_{44}^x, & \bar{a}_{62} &= R_{41}^x + R_{42}^x + R_{44}^x, \\ \bar{a}_{63} &= Q_{412}^x + Q_{442}^x, & \bar{a}_{64} &= Q_{411}^x + Q_{421}^x, \\ \bar{a}_{65} &= P_{41}^x, & \bar{a}_{66} &= -3, \\ \bar{a}_{67} &= Q_{422}^x, & \bar{a}_{68} &= Q_{441}^x, \\ \bar{a}_{69} &= L_{42}^x, & \bar{a}_{610} &= M_{412}^x + N_{44}^x, \\ \bar{a}_{611} &= L_{44}^x, & \bar{a}_{612} &= M_{411}^x + N_{42}^x, \\ \bar{a}_{613} &= M_{422}^x + M_{441}^x, & \bar{a}_{614} &= L_{41}^x, \\ \bar{a}_6 &= M_{421}^x + M_{442}^x + N_{41}^x, & & \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{a}_{71} &= Q_{431}^x + Q_{441}^x, & \bar{a}_{72} &= Q_{412}^x + Q_{442}^x, \\ \bar{a}_{73} &= R_{41}^x + R_{43}^x + R_{44}^x, & \bar{a}_{74} &= P_{41}^x + P_{43}^x, \\ \bar{a}_{75} &= Q_{411}^x, & \bar{a}_{76} &= Q_{432}^x, \\ \bar{a}_{77} &= -3, & \bar{a}_{78} &= P_{44}^x, \\ \bar{a}_{79} &= L_{43}^x, & \bar{a}_{710} &= M_{442}^x + N_{41}^x, \\ \bar{a}_{711} &= M_{441}^x + N_{43}^x, & \bar{a}_{712} &= L_{41}^x, \\ \bar{a}_{713} &= L_{44}^x, & \bar{a}_{714} &= M_{411}^x + M_{432}^x, \\ \bar{a}_7 &= M_{412}^x + M_{431}^x + N_{44}^x, & & \\ \bar{a}_{81} &= Q_{422}^x + Q_{432}^x, & \bar{a}_{82} &= Q_{411}^x + Q_{421}^x, \\ \bar{a}_{83} &= P_{41}^x + P_{43}^x, & \bar{a}_{84} &= R_{41}^x + R_{42}^x + R_{43}^x, \\ \bar{a}_{85} &= Q_{412}^x, & \bar{a}_{86} &= Q_{431}^x, \\ \bar{a}_{87} &= P_{42}^x, & \bar{a}_{88} &= -3, \\ \bar{a}_{89} &= M_{442}^x + N_{43}^x, & \bar{a}_{810} &= L_{41}^x, \\ \bar{a}_{811} &= L_{43}^x, & \bar{a}_{812} &= M_{421}^x + N_{41}^x, \\ \bar{a}_{813} &= L_{42}^x, & \bar{a}_{814} &= M_{412}^x + M_{431}^x, \\ \bar{a}_8 &= M_{411}^x + M_{432}^x + N_{42}^x, & & \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{a}_{91} &= L_{44}^x, & \bar{a}_{92} &= M_{412}^x + N_{44}^x, \\
\bar{a}_{93} &= M_{442}^x + N_{41}^x, & \bar{a}_{94} &= L_{41}^x, \\
\bar{a}_{95} &= M_{411}^x, & \bar{a}_{96} &= 0, \\
\bar{a}_{97} &= 0, & \bar{a}_{98} &= M_{441}^x, \\
\bar{a}_{99} &= -2, & \bar{a}_{910} &= R_{41}^x + R_{44}^x, \\
\bar{a}_{911} &= P_{44}^x, & \bar{a}_{912} &= P_{41}^x, \\
\bar{a}_{913} &= Q_{441}^x, & \bar{a}_{914} &= Q_{411}^x, \\
\bar{a}_9 &= Q_{412}^x + Q_{442}^x, \\
\bar{a}_{101} &= M_{432}^x + N_{42}^x, & \bar{a}_{102} &= L_{42}^x, \\
\bar{a}_{103} &= L_{43}^x, & \bar{a}_{104} &= M_{422}^x + N_{43}^x, \\
\bar{a}_{105} &= 0, & \bar{a}_{106} &= M_{431}^x, \\
\bar{a}_{107} &= M_{421}^x, & \bar{a}_{108} &= 0, \\
\bar{a}_{109} &= R_{42}^x + R_{43}^x, & \bar{a}_{1010} &= -2, \\
\bar{a}_{1011} &= P_{43}^x, & \bar{a}_{1012} &= P_{42}^x, \\
\bar{a}_{1013} &= Q_{421}^x, & \bar{a}_{1014} &= Q_{431}^x, \\
\bar{a}_{10} &= Q_{422}^x + Q_{432}^x,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{a}_{111} &= L_{42}^x, & \bar{a}_{112} &= M_{411}^x + N_{42}^x, \\
\bar{a}_{113} &= L_{41}^x, & \bar{a}_{114} &= M_{421}^x + N_{41}^x, \\
\bar{a}_{115} &= M_{412}^x, & \bar{a}_{116} &= 0, \\
\bar{a}_{117} &= M_{422}^x, & \bar{a}_{118} &= 0, \\
\bar{a}_{119} &= P_{42}^x, & \bar{a}_{1110} &= P_{41}^x, \\
\bar{a}_{1111} &= -2, & \bar{a}_{1112} &= R_{41}^x + R_{42}^x, \\
\bar{a}_{1113} &= Q_{422}^x, & \bar{a}_{1114} &= Q_{412}^x, \\
\bar{a}_{11} &= Q_{411}^x + Q_{421}^x, \\
\bar{a}_{121} &= M_{431}^x + N_{44}^x, & \bar{a}_{122} &= L_{44}^x, \\
\bar{a}_{123} &= M_{441}^x + N_{43}^x, & \bar{a}_{124} &= L_{43}^x, \\
\bar{a}_{125} &= 0, & \bar{a}_{126} &= M_{432}^x, \\
\bar{a}_{127} &= 0, & \bar{a}_{128} &= M_{442}^x, \\
\bar{a}_{129} &= P_{43}^x, & \bar{a}_{1210} &= P_{44}^x, \\
\bar{a}_{1211} &= R_{43}^x + R_{44}^x, & \bar{a}_{1212} &= -2, \\
\bar{a}_{1213} &= Q_{442}^x, & \bar{a}_{1214} &= Q_{432}^x, \\
\bar{a}_{12} &= Q_{431}^x + Q_{441}^x,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{a}_{131} &= L_{43}^x, & \bar{a}_{132} &= L_{41}^x, \\
\bar{a}_{133} &= M_{411}^x + M_{432}^x, & \bar{a}_{134} &= M_{412}^x + M_{431}^x, \\
\bar{a}_{135} &= N_{41}^x, & \bar{a}_{136} &= N_{43}^x, \\
\bar{a}_{137} &= 0, & \bar{a}_{138} &= 0, \\
\bar{a}_{139} &= Q_{431}^x, & \bar{a}_{1310} &= Q_{411}^x, \\
\bar{a}_{1311} &= Q_{432}^x, & \bar{a}_{1312} &= Q_{412}^x, \\
\bar{a}_{1313} &= -2, & \bar{a}_{1314} &= R_{41}^x + R_{43}^x, \\
\bar{a}_{13} &= P_{41}^x + P_{43}^x, \\
\bar{a}_{141} &= M_{421}^x + M_{442}^x, & \bar{a}_{142} &= M_{422}^x + M_{441}^x, \\
\bar{a}_{143} &= L_{44}^x, & \bar{a}_{144} &= L_{42}^x, \\
\bar{a}_{145} &= 0, & \bar{a}_{146} &= 0, \\
\bar{a}_{147} &= N_{42}^x, \bar{a}_{148} = N_{44}^x, \\
\bar{a}_{149} &= Q_{421}^x, & \bar{a}_{1410} &= Q_{441}^x, \\
\bar{a}_{1411} &= Q_{442}^x, & \bar{a}_{1412} &= Q_{422}^x, \\
\bar{a}_{1413} &= R_{42}^x + R_{44}^x, & \bar{a}_{1414} &= -2, \\
\bar{a}_{14} &= P_{42}^x + P_{44}^x.
\end{aligned}$$

В одночастинковому наближенні з (4.1) маємо

$$\frac{d}{dt}\eta_f^{(1)}(j) = -\frac{1}{\alpha}\eta_f^{(1)}(j) + \frac{1}{\alpha}\tanh\frac{1}{2}\bar{z}_{fj}. \quad (4.7)$$

## 5. Релаксаційна динаміка механічно затиснутих кристалів ДСОФ

Розглянемо на основі отриманих систем рівнянь релаксаційну динаміку ДСОФ при наявності поля  $E_1$  у випадку малих відхилень від стану рівноваги. В цьому випадку функції розподілу та ефективні поля можна представити у вигляді суми двох доданків – рівноважних функцій і їх відхилень від стану рівноваги:

$$\begin{aligned}
\eta_f^{(1)x}(4) &= \tilde{\eta}^{(1)}(4) + \eta_{ft}^{(1)x}(4), & \eta_f^{(3)x}(4) &= \tilde{\eta}^{(3)}(4) + \eta_{ft}^{(3)x}(4), \\
\eta_{23}^{(2)x}(4) &= \tilde{\eta}_2^{(2)}(4) + \eta_{34t}^{(2)x}(4), & \eta_{12}^{(2)x}(4) &= \tilde{\eta}_1^{(2)}(4) + \eta_{41t}^{(2)x}(4), \\
\eta_{13}^{(2)x}(4) &= \tilde{\eta}_3^{(2)}(4) + \eta_{24t}^{(2)x}(4),
\end{aligned} \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned}
x_{14} &= x + [-\beta\Delta_{41t} + 2\beta\nu_1\eta_{1t}^{(1)x}(4) + 2\beta\nu_3\eta_{3t}^{(1)x}(4) + 2\beta\nu_2\eta_{2t}^{(1)x}(4) + \\
&+ 2\beta\nu_2\eta_{4t}^{(1)x}(4) - \beta\mu_1 E_{1t} \cos \gamma],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_{34} &= x + [-\beta\Delta_{43t} + 2\beta\nu_3\eta_{1t}^{(1)x}(4) + 2\beta\nu_1\eta_{3t}^{(1)x}(4) + 2\beta\nu_2\eta_{2t}^{(1)x}(4) + \\
&+ 2\beta\nu_2\eta_{4t}^{(1)x}(4) + \beta\mu_1 E_{1t} \cos \gamma],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_{24} &= x + [-\beta\Delta_{42t} + 2\beta\nu_2\eta_{1t}^{(1)x}(4) + 2\beta\nu_2\eta_{3t}^{(1)x}(4) + 2\beta\nu_1\eta_{2t}^{(1)x}(4) +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +2\beta\nu_3\eta_{4t}^{(1)x}(4) + \beta\mu_2 E_{1t} \sin \gamma], \\
x_{44} = x & + [-\beta\Delta_{44t} + 2\beta\nu_2\eta_{1t}^{(1)x}(4) + 2\beta\nu_2\eta_{3t}^{(1)x}(4) + 2\beta\nu_3\eta_{2t}^{(1)x}(4) + \\
& + 2\beta\nu_3\eta_{4t}^{(1)x}(4) - \beta\mu_2 E_{1t} \sin \gamma].
\end{aligned}$$

Розкладемо в ряд по  $\frac{x_{4f}}{2}$  коефіцієнти  $P_{6f}^x, \dots, L_{6f}^x$ , і отримаємо:

$$\begin{aligned}
P_{4f}^x &= P_6^{(0)} + \frac{x_{4ft}}{2}P_6^{(1)}, \quad Q_{41f}^x = Q_{61}^{(0)} + \frac{x_{4ft}}{2}Q_{61}^{(1)}, \\
Q_{42f}^x &= R_{62}^{(0)} + \frac{x_{4ft}}{2}Q_6^{(1)}, \quad R_{4f}^x = R_6^{(0)} + \frac{x_{4ft}}{2}R_6^{(1)}, \\
N_{4f}^x &= N_6^{(0)} + \frac{x_{4ft}}{2}N_6^{(1)}, \quad M_{41f}^x = M_{61}^{(0)} + \frac{x_{4ft}}{2}M_{61}^{(1)}, \quad (5.2) \\
M_{42f}^x &= M_{62}^{(0)} + \frac{x_{4ft}}{2}M_{62}^{(1)}, \quad L_{4f}^x = L_6^{(0)} + \frac{x_{4ft}}{2}L_6^{(1)}.
\end{aligned}$$

Коефіцієнти розкладу  $P_6^{(0)}, \dots, L_6^{(1)}$  мають такий самий вигляд, як і у випадку поздовжньої релаксації ДСОФ [10].

У випадку прикладання до кристалу поперечного поля  $E_{1t}$ , враховуючи співвідношення (5.1) і (5.2), легко отримати систему рівнянь для залежних від часу різницевих функцій розподілу  $\eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) = \eta_{1t}^{(1)x}(4) - \eta_{3t}^{(1)x}(4); \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4) = \eta_{2t}^{(1)x}(4) - \eta_{4t}^{(1)x}(4); \eta_{(1-3)t}^{(3)x}(4) = \eta_{1t}^{(3)x}(4) - \eta_{3t}^{(3)x}(4); \eta_{(2-4)t}^{(3)x}(4) = \eta_{2t}^{(3)x}(4) - \eta_{4t}^{(3)x}(4); \eta_{1t}^{(2)x}(4) = \eta_{23t}^{(2)x}(4) - \eta_{14t}^{(2)x}(4); \eta_{2t}^{(2)x}(4) = \eta_{34t}^{(2)x}(4) - \eta_{12t}^{(2)x}(4)$ :

$$\alpha \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(1-3)t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{1t}^{(2)x}(4) \\ \eta_{2t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} + \beta\nu_a Y_6^{(1)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & 0 & a_{15}^{(0)} & a_{16}^{(0)} \\ a_{12}^{(0)} & a_{11}^{(0)} + \beta\nu_a Y_6^{(1)} & 0 & a_{13}^{(0)} & -a_{15}^{(0)} & a_{16}^{(0)} \\ a_{31}^{(0)} + \beta\nu_a Y_{61}^{(3)} & 2a_{12}^{(0)} + \beta\nu_a Y_{62}^{(3)} & a_{33}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{35}^{(0)} & a_{36}^{(0)} \\ 2a_{12}^{(0)} + \beta\nu_a Y_{62}^{(3)} & a_{31}^{(0)} + \beta\nu_a Y_{61}^{(3)} & a_{12}^{(0)} & a_{33}^{(0)} & -a_{35}^{(0)} & a_{36}^{(0)} \\ -(a_{35}^{(0)} + \beta\nu_a Y_{61}^{(2)}) & (a_{35}^{(0)} + \beta\nu_a Y_{61}^{(2)}) & -a_{15}^{(0)} & a_{15}^{(0)} & a_{55}^{(0)} & 0 \\ -(a_{36}^{(0)} + \beta\nu_a Y_{62}^{(2)}) & -(a_{36}^{(0)} + \beta\nu_a Y_{62}^{(2)}) & -a_{16}^{(0)} & a_{16}^{(0)} & 0 & a_{55}^{(0)} \end{pmatrix} \times$$

$$\begin{aligned}
& \times \begin{pmatrix} \eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(1-3)t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{1t}^{(2)x}(4) \\ \eta_{2t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} - \frac{\beta}{2}(\Delta_{43t} - \Delta_{41t}) \begin{pmatrix} Y_6^{(1)} \\ 0 \\ Y_{61}^{(3)} \\ Y_{62}^{(3)} \\ -Y_{61}^{(2)} \\ -Y_{62}^{(2)} \end{pmatrix} - \\
& - \frac{\beta}{2}(\Delta_{44t} - \Delta_{42t}) \begin{pmatrix} 0 \\ Y_6^{(1)} \\ Y_{62}^{(3)} \\ Y_{61}^{(3)} \\ Y_{61}^{(2)} \\ -Y_{62}^{(2)} \end{pmatrix} + \beta E_{1t} \begin{pmatrix} Y_6^{(1)} \mu_1 \cos \gamma \\ Y_6^{(1)} \mu_2 \sin \gamma \\ Y_{61}^{(3)} \mu_1 \cos \gamma + Y_{62}^{(3)} \mu_2 \sin \gamma \\ Y_{62}^{(3)} \mu_1 \cos \gamma + Y_{61}^{(3)} \mu_2 \sin \gamma \\ -Y_{61}^{(2)} (\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma) \\ -Y_{62}^{(2)} (\mu_1 \cos \gamma + \mu_2 \sin \gamma) \end{pmatrix}. \quad (5.3)
\end{aligned}$$

Тут використані наступні позначення:

$$\begin{aligned}
a_{11}^{(0)} &= -(1 + P_6^{(0)}), \quad a_{12}^{(0)} = Q_{61}^{(0)} - Q_{62}^{(0)}, \quad a_{13}^{(0)} = R_6^{(0)}, \\
a_{15}^{(0)} &= M_{61}^{(0)}, \quad a_{61}^{(0)} = M_{62}^{(0)}, \quad a_{31}^{(0)} = 3R_6^{(0)} - 2P_6^{(0)}, \\
a_{33}^{(0)} &= -(3 + P_6^{(0)}), \quad a_{35}^{(0)} = (-N_6^{(0)} - M_{62}^{(0)} + L_6^{(0)}), \quad (5.4) \\
a_{36}^{(0)} &= (-N_6^{(0)} - M_{61}^{(0)} + L_6^{(0)}), \quad a_{55}^{(0)} = -(2 + 2R_6^{(0)}),
\end{aligned}$$

a

$$\begin{aligned}
Y_6^{(1)} &= (P_6^{(1)} + Q_{61}^{(1)} + Q_{62}^{(1)})\tilde{\eta}^{(1)}(6) + R_6^{(1)}\tilde{\eta}^{(3)}(6) + M_{61}^{(1)}\tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + \\
& + M_{62}^{(1)}\tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + N_6^{(1)}\tilde{\eta}_3^{(2)}(6) + L_6^{(1)}, \\
Y_{61}^{(3)} &= -(Q_{61}^{(1)} + Q_{62}^{(1)} + R_6^{(1)})\tilde{\eta}^{(1)}(6) - P_6^{(1)}\tilde{\eta}^{(3)}(6) - \\
& - M_{62}^{(1)}\tilde{\eta}_1^{(2)}(6) - M_{61}^{(1)}\tilde{\eta}_2^{(2)}(6) - L_6^{(1)}\tilde{\eta}_3^{(2)}(6) - N_6^{(1)}, \\
Y_{62}^{(3)} &= (Q_{62}^{(1)} - Q_{61}^{(1)})\tilde{\eta}^{(1)}(6) + (Q_{61}^{(1)} - Q_{62}^{(1)})\tilde{\eta}^{(3)}(6) + (N_6^{(1)} - L_6^{(1)})\tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + \\
& + (-N_6^{(1)} + L_6^{(1)})\tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + (M_{61}^{(1)} - M_{62}^{(1)})\tilde{\eta}_3^{(2)}(6) + (M_{62}^{(1)} - M_{61}^{(1)}), \\
Y_{61}^{(2)} &= (N_6^{(1)} + M_{62}^{(1)} + L_6^{(1)})\tilde{\eta}^{(1)}(6) + M_{61}^{(1)}\tilde{\eta}^{(3)}(6) + R_6^{(1)}\tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + \\
& + P_6^{(1)}\tilde{\eta}_2^{(2)}(4) + Q_{61}^{(1)}\tilde{\eta}_3^{(2)}(4) + Q_{62}^{(1)}, \\
Y_{62}^{(2)} &= (N_6^{(1)} + M_{61}^{(1)} + L_6^{(1)})\tilde{\eta}^{(1)}(6) + M_{62}^{(1)}\tilde{\eta}^{(3)}(6) + P_6^{(1)}\tilde{\eta}_1^{(2)}(6) + \\
& + R_6^{(1)}\tilde{\eta}_2^{(2)}(6) + Q_{62}^{(1)}\tilde{\eta}_3^{(2)}(6) + Q_{61}^{(1)},
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}\tilde{\eta}^{(1)}(6) &= \frac{1}{D_6} [\sinh(2z_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) + 2b \sinh(z_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6)], \\ \tilde{\eta}^{(3)}(6) &= \frac{1}{D_6} [\sinh(2z_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) - 2b \sinh(z_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6)], \\ \tilde{\eta}_1^{(2)}(6) &= \frac{1}{D_6} [\cosh(2z_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) - aa_6 + \frac{a}{a_6} - d], \\ \tilde{\eta}_2^{(2)}(6) &= \frac{1}{D_6} [\cosh(2z_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) + aa_6 - \frac{a}{a_6} - d], \\ \tilde{\eta}_3^{(2)}(6) &= \frac{1}{D_6} [\cosh(2z_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) - aa_6 - \frac{a}{a_6} + d],\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}D_6 &= \cosh(2z_6 + \beta\delta_{s6}\varepsilon_6) + 4b \cosh(z_6 - \beta\delta_{16}\varepsilon_6) + aa_6 + \frac{a}{a_6} + d, \\ z_6 &= \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \tilde{\eta}^{(1)}(6)}{1 - \tilde{\eta}^{(1)}(6)} + \beta\nu_c \tilde{\eta}^{(1)}(6) - \beta\psi_6\varepsilon_6.\end{aligned}$$

В одночастинковому наближенні

$$\begin{aligned}\alpha \frac{d}{dt} \eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) &= \\ &= -[1 - \beta\nu_a r_6] \eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) - \beta(\Delta_{41t} - \Delta_{43t}) r_6 + \beta\mu_1 E_{1t} \cos \gamma r_6, \\ \alpha \frac{d}{dt} \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4) &= \\ &= -[1 - \beta\nu_a r_6] \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4) - \beta(\Delta_{42t} - \Delta_{44t}) r_6 + \beta\mu_2 E_{1t} \sin \gamma r_6.\end{aligned}\quad (5.5)$$

Виключаючи із систем (5.3) і (5.5) параметри  $(\Delta_{41t} - \Delta_{43t})$  і  $(\Delta_{42t} - \Delta_{44t})$ , отримуємо наступну систему рівнянь:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(1-3)t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{1t}^{(2)x}(4) \\ \eta_{2t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & 0 & a_{15} & a_{16} \\ a_{12} & a_{11} & 0 & a_{13} & -a_{15} & a_{16} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{32} & a_{31} & a_{34} & a_{33} & -a_{35} & a_{36} \\ -a_{51} & a_{51} & -a_{53} & a_{53} & a_{55} & 0 \\ -a_{61} & -a_{61} & -a_{63} & -a_{63} & 0 & a_{55} \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} \eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(1-3)t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{1t}^{(2)x}(4) \\ \eta_{2t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} - \beta E_{1t} \begin{pmatrix} a_1 \mu_1 \cos \gamma \\ a_1 \mu_2 \sin \gamma \\ a_3 \mu_1 \cos \gamma + a_2 \mu_2 \sin \gamma \\ a_4 \mu_1 \cos \gamma + a_3 \mu_2 \sin \gamma \\ a_5 (\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma) \\ a_6 (\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma) \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

Тут використані наступні позначення:

$$\begin{aligned}a_{11} &= \frac{1}{\alpha} [a_{11}^{(0)} + \beta\nu_a Y_6^{(1)} - K_6^{(1)} \Psi_6^x], \quad a_{12} = \frac{1}{\alpha} [a_{12}^{(0)} - K_6^{(1)} a_{12}^{(0)}], \\ a_{13} &= \frac{1}{\alpha} [a_{13}^{(0)} - K_6^{(1)} a_{13}^{(0)}], \quad a_{15} = \frac{1}{\alpha} [a_{13}^{(0)} - K_6^{(1)} a_{15}^{(0)}], \\ a_{16} &= \frac{1}{\alpha} [a_{16}^{(0)} - K_6^{(1)} a_{16}^{(0)}], \quad a_1 = \frac{1}{\alpha} K_6^{(1)} r_6, \\ a_{31} &= \frac{1}{\alpha} [a_{31}^{(0)} + \beta\nu_a Y_{61}^{(3)} - K_{61}^{(3)} \Psi_6^x - K_{62}^{(3)} a_{12}^{(0)}], \\ a_{32} &= \frac{1}{\alpha} [2a_{12}^{(0)} + \beta\nu_a Y_{62}^{(3)} - K_{61}^{(3)} a_{12}^{(0)} - K_{62}^{(3)} \Psi_6^x], \\ a_{33} &= \frac{1}{\alpha} [a_{33}^{(0)} - K_{61}^{(3)} a_{13}^{(0)}], \quad a_{34} = \frac{1}{\alpha} [a_{12}^{(0)} - K_{62}^{(3)} a_{13}^{(0)}], \\ a_{35} &= \frac{1}{\alpha} [a_{35}^{(0)} - K_{61}^{(3)} a_{15}^{(0)} + K_{62}^{(3)} a_{15}^{(0)}], \\ a_{36} &= \frac{1}{\alpha} [a_{36}^{(0)} - K_{61}^{(3)} a_{16}^{(0)} - K_{62}^{(3)} a_{16}^{(0)}], \quad a_3 = \frac{1}{\alpha} K_{61}^{(3)} r_6, \quad a_4 = \frac{1}{\alpha} K_{62}^{(3)} r_6, \\ a_{51} &= \frac{1}{\alpha} [a_{35}^{(0)} + \beta\nu_a Y_{61}^{(2)} + K_{61}^{(2)} a_{12}^{(0)} - K_{61}^{(2)} \Psi_6^x], \\ a_{53} &= \frac{1}{\alpha} [a_{15}^{(0)} - K_{61}^{(2)} a_{13}^{(0)}], \quad a_{55} = \frac{1}{\alpha} [a_{55}^{(0)} + 2K_{61}^{(2)} a_{15}^{(0)}], \quad a_5 = -\frac{1}{\alpha} K_{61}^{(2)} r_6, \\ a_{61} &= \frac{1}{\alpha} [a_{36}^{(0)} + \beta\nu_a Y_{62}^{(2)} - K_{62}^{(2)} a_{12}^{(0)} - K_{62}^{(2)} \Psi_6^x], \\ a_{63} &= \frac{1}{\alpha} [a_{16}^{(0)} - K_{62}^{(2)} a_{13}^{(0)}], \quad a_{66} = \frac{1}{\alpha} [a_{55}^{(0)} + 2K_{62}^{(2)} a_{16}^{(0)}], \quad a_6 = -\frac{1}{\alpha} K_{62}^{(2)} r_6,\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}K_6^{(1)} &= Y_6^{(1)} (Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \quad K_{61}^{(3)} = Y_{61}^{(3)} (Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \\ K_{62}^{(3)} &= Y_{62}^{(3)} (Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \quad K_{61}^{(2)} = Y_{61}^{(2)} (Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \\ K_{62}^{(2)} &= Y_{62}^{(2)} (Y_6^{(1)} - 2r_6)^{-1}, \\ \Psi_6^x &= 1 + a_{11}^{(0)} + \beta\nu_a (Y_6^{(1)} - r_6), \quad r_6 = 1 - (\tilde{\eta}^{(1)}(6))^2.\end{aligned}$$

Отримана система рівнянь (5.6) розпадається на дві системи відносно змінних  $\eta_{\pm t}^{(1)x}(4) = \eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) \pm \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4)$ ,  $\eta_{\pm t}^{(3)x}(4) = \eta_{(1-3)t}^{(3)x}(4) \pm \eta_{(2-4)t}^{(3)x}(4)$ ;  $\eta_{\frac{1}{2}t}^{(2)x}(4)$ , тобто

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{+t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{+t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{2t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} + a_{12} & a_{13} & 2a_{16} \\ a_{31} + a_{32} & a_{33} + a_{34} & 2a_{36} \\ -a_{61} & -a_{63} & a_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{+t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{+t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{2t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} - \beta E_{1t} (\mu_1 \cos \gamma + \mu_2 \sin \gamma) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 + a_4 \\ a_6 \end{pmatrix}, \quad (5.7)$$

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{-t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{-t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{1t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} - a_{12} & a_{13} & 2a_{15} \\ a_{31} - a_{32} & a_{33} - a_{34} & 2a_{35} \\ -a_{51} & -a_{53} & a_{55} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{-t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{-t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{1t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} - \beta E_{1t} (\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 - a_4 \\ a_5 \end{pmatrix}. \quad (5.8)$$

Розглянемо спочатку випадок  $E_{1t} = 0$ . Розв'язуючи системи (5.7) і (5.8), отримуємо однорідні диференціальні рівняння із сталими коефіцієнтами

$$\begin{aligned} \ddot{\eta}_{+t}^{(1)x}(4) + m_{2+} \dot{\eta}_{+t}^{(1)x}(4) + m_{1+} \eta_{+t}^{(1)x}(4) + m_{0+} \eta_{+t}^{(1)x}(4) &= 0, \\ \ddot{\eta}_{-t}^{(1)x}(4) + m_{2-} \dot{\eta}_{-t}^{(1)x}(4) + m_{1-} \eta_{-t}^{(1)x}(4) + m_{0-} \eta_{-t}^{(1)x}(4) &= 0, \end{aligned} \quad (5.9)$$

де

$$\begin{aligned} m_{2+} &= -(a_{11} + a_{12} + a_{33} + a_{34} + a_{66}), \\ m_{2-} &= -(a_{11} - a_{12} + a_{33} - a_{34} + a_{55}), \\ m_{1+} &= \begin{vmatrix} a_{11} + a_{12} & a_{13} \\ a_{31} + a_{32} & a_{33} + a_{34} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{11} + a_{12} & 2a_{16} \\ -a_{61} & a_{66} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{33} + a_{34} & 2a_{36} \\ -a_{63} & a_{66} \end{vmatrix}, \\ m_{1-} &= \begin{vmatrix} a_{11} - a_{12} & a_{13} \\ a_{31} - a_{32} & a_{33} - a_{34} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{11} - a_{12} & 2a_{15} \\ -a_{51} & a_{55} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{33} - a_{34} & 2a_{35} \\ -a_{53} & a_{55} \end{vmatrix}, \\ m_{0+} &= - \begin{vmatrix} a_{11} + a_{12} & a_{13} & 2a_{16} \\ a_{31} + a_{32} & a_{33} + a_{34} & 2a_{36} \\ -a_{61} & -a_{63} & a_{66} \end{vmatrix}, \\ m_{0-} &= - \begin{vmatrix} a_{11} - a_{12} & a_{13} & 2a_{15} \\ a_{31} - a_{32} & a_{33} - a_{34} & 2a_{35} \\ -a_{51} & -a_{53} & a_{55} \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Загальний розв'язок рівнянь (5.9) має вигляд

$$\eta_{+t}^{(1)x}(4) = \sum_{i=1}^3 C_i^x \exp\left(-\frac{t}{\tau_i^x}\right), \quad \eta_{-t}^{(1)x}(4) = \sum_{j=4}^6 C_j^x \exp\left(-\frac{t}{\tau_j^x}\right), \quad (5.10)$$

де  $\tau_{i,j}^x$  – часи релаксацій, причому

$$\tau_i^x = -(q_{i+})^{-1}, \quad \tau_j^x = -(q_{j-})^{-1},$$

а  $q_{i+}$ ,  $q_{j-}$  – корені характеристичних рівнянь

$$\begin{aligned} +(q_+)^3 + m_{2+}(q_+)^2 + m_{1+}q_+ + m_{0+} &= 0, \\ +(q_-)^3 + m_{2-}(q_-)^2 + m_{1-}q_- + m_{0-} &= 0. \end{aligned}$$

Неоднорідні ж системи рівнянь (5.7) і (5.8) мають розв'язок

$$\begin{aligned} \eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) + \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4) &= \sum_{i=1}^3 C_i^x \exp\left(-\frac{t}{\tau_i^x}\right) + \\ &+ \frac{E_{1t}}{k_B T} (\mu_1 \cos \gamma + \mu_2 \sin \gamma) \frac{(i\omega)^2 m_+^{(2)} + (i\omega) m_+^{(1)} + m_+^{(0)}}{(i\omega)^3 + (i\omega)^2 m_{2+} + (i\omega) m_{1+} + m_{0+}}, \\ \eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) - \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4) &= \sum_{j=4}^6 C_j^x \exp\left(-\frac{t}{\tau_j^x}\right) + \\ &+ \frac{E_{1t}}{k_B T} (\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma) \frac{(i\omega)^2 m_-^{(2)} + (i\omega) m_-^{(1)} + m_-^{(0)}}{(i\omega)^3 + (i\omega)^2 m_{2-} + (i\omega) m_{1-} + m_{0-}}, \end{aligned} \quad (5.11)$$

де

$$\begin{aligned} m_+^{(2)} &= -a, \quad m_-^{(2)} = -a_1, \\ m_+^{(1)} &= - \left( \begin{vmatrix} a_{13} & a_1 \\ a_{33} + a_{34} & a_3 + a_4 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 2a_{16} & a_1 \\ a_{66} & a_6 \end{vmatrix} \right), \\ m_-^{(1)} &= - \left( \begin{vmatrix} a_{13} & a_1 \\ a_{33} - a_{34} & a_3 - a_4 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 2a_{15} & a_1 \\ a_{55} & a_5 \end{vmatrix} \right), \\ m_+^{(0)} &= - \begin{vmatrix} a_{13} & 2a_{16} & a_1 \\ a_{33} + a_{34} & 2a_{36} & a_3 + a_4 \\ -a_{63} & a_{66} & a_6 \end{vmatrix}, \\ m_-^{(0)} &= - \begin{vmatrix} a_{13} & 2a_{15} & a_1 \\ a_{33} - a_{34} & 2a_{35} & a_3 - a_4 \\ -a_{53} & a_{55} & a_6 \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Из (5.11) отримуємо

$$\begin{aligned} \eta_{1t}^{(1)x}(4) - \eta_{3t}^{(1)x}(4) &= \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^3 C_i^x \exp\left(-\frac{t}{\tau_i^x}\right) + \sum_{j=4}^6 C_j^x \exp\left(-\frac{t}{\tau_j^x}\right) \right) + \\ &+ \frac{\mu_1 \cos \gamma + \mu_2 \sin \gamma}{k_B} \frac{1}{2T} F_+^{(1)}(\omega) E_{1t} + \frac{\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma}{k_B} \frac{1}{2T} F_-^{(1)}(\omega) E_{1t}, \\ \eta_{2t}^{(1)x}(4) - \eta_{4t}^{(1)x}(4) &= \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^3 C_i^x \exp\left(-\frac{t}{\tau_i^x}\right) - \sum_{j=4}^6 C_j^x \exp\left(-\frac{t}{\tau_j^x}\right) \right) + \\ &+ \frac{\mu_1 \cos \gamma + \mu_2 \sin \gamma}{k_B} \frac{1}{2T} F_+^{(1)}(\omega) E_{1t} - \frac{\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma}{k_B} \frac{1}{2T} F_-^{(1)}(\omega) E_{1t}, \end{aligned} \quad (5.12)$$

де

$$F_{\pm}^{(1)}(\omega) = \frac{(i\omega)^2 m_{\pm}^{(2)} + (i\omega) m_{\pm}^{(1)} + m_{\pm}^{(0)}}{(i\omega)^3 + (i\omega)^2 m_{2\pm} + (i\omega) m_{1\pm} + m_{0\pm}}.$$

Отже, якщо до кристалу ДСОФ прикладено поперечне поле  $E_{1t}$ , то динамічна сприйнятливість механічно затиснутого кристалу

$$\begin{aligned} \chi_{11}^{\varepsilon}(\omega, T) &= \chi_{11}^{\varepsilon 0} + \frac{\mu_1 \cos \gamma}{v} \frac{d}{dE_{1t}} \frac{1}{2} \left[ \eta_{3t}^{(1)x}(4) - \eta_{1t}^{(1)x}(4) \right] + \\ &+ \frac{\mu_2 \sin \gamma}{v} \frac{d}{dE_{1t}} \frac{1}{2} \left[ \eta_{4t}^{(1)x}(4) - \eta_{2t}^{(1)x}(4) \right] = \\ &= \chi_{11}^{\varepsilon 0} + \bar{v} \frac{(\mu_1 \cos \gamma + \mu_2 \sin \gamma)^2}{v^2} \frac{1}{4T} F_+^{(1)}(\omega) + \\ &+ \bar{v} \frac{(\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma)^2}{v^2} \frac{1}{4T} F_-^{(1)}(\omega). \end{aligned}$$

Оскільки кут  $\gamma$  дуже малий, то

$$\begin{aligned} \chi_{11}^{\varepsilon}(\omega, T) &= \chi_{11}^{\varepsilon 0} + \bar{v} \frac{\mu_1^2}{v^2} \frac{1}{4T} \left\{ \frac{\prod_{j=1}^3 \tau_j^x [(i\omega)^2 m_+^{(2)} + (i\omega) m_+^{(1)} + m_+^{(0)}]}{\prod_{j=1}^3 (1 + i\omega \tau_j^x)} + \right. \\ &\left. + \frac{\prod_{j=4}^6 \tau_j^x [(i\omega)^2 m_-^{(2)} + (i\omega) m_-^{(1)} + m_-^{(0)}]}{\prod_{j=4}^6 (1 + i\omega \tau_j^x)} \right\} = \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$= \chi_{11}^{\varepsilon 0} + \sum_{j=1}^3 \frac{\chi_{1j}}{1 + i\omega \tau_j^x} + \sum_{j=4}^6 \frac{\chi_{1j}}{1 + i\omega \tau_j^x}. \quad (5.14)$$

Коефіцієнти  $\chi_{1i}$  задовольняють наступні системи рівнянь:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ -m_{21} & -m_{22} & -m_{23} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_{11} \\ \chi_{12} \\ \chi_{13} \end{pmatrix} &= - \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix}; \\ \begin{pmatrix} m_{41} & m_{42} & m_{43} \\ -m_{51} & -m_{52} & -m_{53} \\ m_{61} & m_{62} & m_{63} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_{14} \\ \chi_{15} \\ \chi_{16} \end{pmatrix} &= - \begin{pmatrix} m_4 \\ m_5 \\ m_6 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} m_{11} &= r_2^x r_3^x, \quad m_{12} = r_1^x r_3^x, \quad m_{13} = r_1^x r_2^x; \\ m_{21} &= r_2^x + r_3^x, \quad m_{22} = r_1^x + r_3^x, \quad m_{23} = r_1^x + r_2^x; \\ m_{41} &= r_5^x + r_6^x, \quad m_{42} = r_4^x r_6^x, \quad m_{43} = r_4^x r_5^x; \\ m_{51} &= r_5^x + r_6^x, \quad m_{52} = r_4^x + r_6^x, \quad m_{53} = r_4^x + r_5^x; \\ m_{31} &= m_{32} = m_{33} = m_{61} = m_{62} = m_{63} = 1; \\ m_1 &= \bar{v} \frac{\mu_1^2}{v^2} \frac{1}{2T} \tau_1^x \tau_2^x \tau_3^x m_+^{(2)}, \quad m_4 = \bar{v} \frac{\mu_1^2}{v^2} \frac{1}{2T} \tau_4^x \tau_5^x \tau_6^x m_-^{(2)}, \\ m_2 &= \bar{v} \frac{\mu_1^2}{v^2} \frac{1}{2T} \tau_1^x \tau_2^x \tau_3^x m_+^{(1)}, \quad m_5 = \bar{v} \frac{\mu_1^2}{v^2} \frac{1}{2T} \tau_4^x \tau_5^x \tau_6^x m_-^{(1)}, \\ m_3 &= \bar{v} \frac{\mu_1^2}{v^2} \frac{1}{2T} \tau_1^x \tau_2^x \tau_3^x m_+^{(0)}, \quad m_6 = \bar{v} \frac{\mu_1^2}{v^2} \frac{1}{2T} \tau_4^x \tau_5^x \tau_6^x m_-^{(0)}. \end{aligned}$$

Відповідно, комплексна поперечна діелектрична проникність ДСОФ

$$\varepsilon_{11}^{\varepsilon'}(\omega, T) = \varepsilon_1^{\varepsilon'} + \sum_{i=1}^6 \frac{4\pi \chi_{1i}}{1 + (\omega \tau_i^x)^2}, \quad \varepsilon_{11}^{\varepsilon''}(\omega, T) = \sum_{i=1}^6 \frac{4\pi \chi_{1i} \omega \tau_i^x}{1 + (\omega \tau_i^x)^2}. \quad (5.15)$$

## 6. Поперечні динамічні характеристики механічно вільного кристалу MD<sub>2</sub>XO<sub>4</sub>

Розглянемо коливання тонкої квадратної пластинки кристалу ДСОФ, яка вирізана в площині  $[1,0,0]$  зі сторонами завдовжки  $l$  під дією зовнішніх змінних електричного поля  $E_{1t} = E_1 e^{i\omega t}$  або зсувної напруги  $\sigma_{4t} = \sigma_4 e^{i\omega t}$ . Такі зовнішні поля, окрім зсувної деформації  $\varepsilon_4$ , індукують у кристалі ще й діагональні компоненти тензора деформації  $\varepsilon_i$ . Однак для простоти розгляду динамічних характеристик будемо нехтувати діагональними деформаціями. Спонтанну

деформацію  $\varepsilon_6$  вважатимемо незалежною від часу. У глауберівському підході система рівнянь для часозалежних функцій розподілу квазіспінової підсистеми  $\text{MD}_2\text{XO}_4$  має вигляд (4.6).

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

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \sum_k \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}, \quad (6.1)$$

де  $\rho$  – густина кристалу,  $u_i$  – зміщення елементарного об'єму вздовж осі  $x_i$ ,  $\sigma_{ik}$  – механічна напруга. Зсувну деформацію  $\varepsilon_4$  визначають зміщення  $u_2$  та  $u_3$ :

$$\varepsilon_4 = \frac{\partial u_2}{\partial z} + \frac{\partial u_3}{\partial y}. \quad (6.2)$$

У нашому випадку відмінною від нуля є зсувна напруга  $\sigma_4 = \sigma_{23}$ , яка має наступний вигляд:

$$\sigma_4 = c_{44}^{E0} \varepsilon_4 - e_{14}^0 E_1 - \frac{2\tilde{\psi}_4}{\bar{v}} \frac{1}{2} \left[ \eta_1^{(1)}(4) - \eta_3^{(1)}(4) \right] - \frac{2\tilde{\delta}_{a4}}{\bar{v}D_4} \varkappa_{s14}^a - \frac{2\tilde{\delta}_{14}}{\bar{v}D_4} \varkappa_{s24}^b.$$

Отже,

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} &= c_{44}^{E0} \frac{\partial \varepsilon_4}{\partial z} - \frac{\tilde{\psi}_4}{\bar{v}} \left[ \frac{\partial \eta_1^{(1)}(4)}{\partial z} - \frac{\partial \eta_3^{(1)}(4)}{\partial z} \right] - \\ &- \frac{2\tilde{\delta}_{a4}}{\bar{v}} \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\varkappa_{s14}^a}{D_4} \right) - \frac{2\tilde{\delta}_{14}}{\bar{v}} \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\varkappa_{s24}^b}{D_4} \right), \\ \rho \frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2} &= c_{44}^{E0} \frac{\partial \varepsilon_4}{\partial y} - \frac{2\tilde{\psi}_4}{\bar{v}} \left[ \frac{\partial \eta_1^{(1)}(4)}{\partial y} - \frac{\partial \eta_3^{(1)}(4)}{\partial y} \right] - \\ &- \frac{2\tilde{\delta}_{a4}}{\bar{v}D_4} \frac{\partial \varkappa_{s14}^a}{\partial y} - \frac{2\tilde{\delta}_{14}}{\bar{v}D_4} \frac{\partial \varkappa_{s24}^b}{\partial y}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

При малих відхиленнях від стану рівноваги виділимо в системах (4.6) і (6.2) статичну і часозалежну частини, записавши функції розподілу, ефективні поля, зміщення  $u_2$  і  $u_3$  і деформацію  $\varepsilon_4$  у вигляді двох доданків – рівноважних функцій і їх відхилень від стану рівноваги:

$$\begin{aligned} \eta_f^{(1)x}(4) &= \eta^{(1)}(6) + \eta_{ft}^{(1)x}(4), & \eta_f^{(3)x}(4) &= \eta^{(3)}(6) + \eta_{ft}^{(3)x}(4), \\ \eta_{14}^{(2)x}(4) &= \eta_1^{(2)}(6) + \eta_{14t}^{(2)x}(4), & \eta_{12}^{(2)x}(4) &= \eta_2^{(2)}(6) + \eta_{12t}^{(2)x}(4), \\ & & & \eta_{23}^{(2)x}(4) &= \eta_{23t}^{(2)x}(4), & \eta_{34}^{(2)x}(4) &= \eta_{34t}^{(2)x}(4), \end{aligned}$$

$$\eta_{13}^{(2)x}(4) = \eta_3^{(2)}(6) + \eta_{13t}^{(2)x}(4), \quad u_{2,3} = \tilde{u}_{2,3} + u_{2,3t}, \quad (6.4)$$

$$\varepsilon_4 = \tilde{\varepsilon}_4 + \varepsilon_{4t} = \tilde{\varepsilon}_4 + \frac{\partial u_{2t}}{\partial z} + \frac{\partial u_{3t}}{\partial y}, \quad \Delta_{4f} = \tilde{\Delta}_{4f} + \Delta_{4ft}.$$

Розкладемо коефіцієнти  $P_{41}^x, \dots, L_{44}^x$  (4.4) у ряд за часозалежними доданками:

$$\begin{aligned} P_{43}^x &= P_6^{(0)} + \left( -\frac{\beta \Delta_{43t}}{2} \mp \frac{\beta \mu_1}{2} \cos \gamma E_{1t} \right) P_6^{(1)} + \\ &+ \left[ \beta \nu_1 \eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_3 \eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_2 \eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_2 \eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] P_6^{(1)} + \\ &+ \left( \mp \beta \psi_4 P_6^{(1)} \pm \beta \delta_{14} P_{41}^{(1)} \pm \beta \delta_{a4} M_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\ Q_{431}^x &= Q_{61}^{(0)} + \left( -\frac{\beta \Delta_{43t}}{2} \mp \frac{\beta \mu_1}{2} \cos \gamma E_{1t} \right) Q_{61}^{(1)} + \\ &+ \left[ \beta \nu_1 \eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_3 \eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_2 \eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_2 \eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] Q_{61}^{(1)} + \\ &+ \left( \mp \beta \psi_4 Q_{61}^{(1)} \pm \beta \delta_{14} Q_{41}^{(1)} \pm \beta \delta_{a4} L_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\ Q_{432}^x &= Q_{62}^{(0)} + \left( -\frac{\beta \Delta_{43t}}{2} \mp \frac{\beta \mu_1}{2} \cos \gamma E_{1t} \right) Q_{62}^{(1)} + \\ &+ \left[ \beta \nu_1 \eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_3 \eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_2 \eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_2 \eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] Q_{62}^{(1)} + \\ &+ \left( \mp \beta \psi_4 Q_{62}^{(1)} \pm \beta \delta_{14} Q_{41}^{(1)} \mp \beta \delta_{a4} L_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\ R_{43}^x &= R_6^{(0)} + \left( -\frac{\beta \Delta_{43t}}{2} \mp \frac{\beta \mu_1}{2} \cos \gamma E_{1t} \right) R_6^{(1)} + \\ &+ \left[ \beta \nu_1 \eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_3 \eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_2 \eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_2 \eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] R_6^{(1)} + \\ &+ \left( \mp \beta \psi_4 R_6^{(1)} \pm \beta \delta_{14} P_{41}^{(1)} \mp \beta \delta_{a4} M_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\ N_{43}^x &= N_6^{(0)} + \left( -\frac{\beta \Delta_{43t}}{2} \mp \frac{\beta \mu_1}{2} \cos \gamma E_{1t} \right) N_6^{(1)} + \\ &+ \left[ \beta \nu_1 \eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_3 \eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_2 \eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta \nu_2 \eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] N_6^{(1)} + \\ &+ \left( \mp \beta \psi_4 N_6^{(1)} \pm \beta \delta_{14} N_{41}^{(1)} \mp \beta \delta_{a4} Q_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\ M_{431}^x &= M_{61}^{(0)} + \left( -\frac{\beta \Delta_{43t}}{2} \mp \frac{\beta \mu_1}{2} \cos \gamma E_{1t} \right) M_{61}^{(1)} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left[ \beta\nu_1\eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_2\eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_2\eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] M_{61}^{(1)} + \\
& + \left( \mp\beta\psi_4 M_{61}^{(1)} \pm \beta\delta_{14} M_{41}^{(1)} \pm \beta\delta_{a4} P_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
M_{4_3^1 2}^x & = M_{62}^{(0)} + \left( -\frac{\beta\Delta_{4_3^1 t}}{2} \mp \frac{\beta\mu_1}{2} \cos \gamma E_{1t} \right) M_{62}^{(1)} + \\
& + \left[ \beta\nu_1\eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_2\eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_2\eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] M_{62}^{(1)} + \\
& + \left( \mp\beta\psi_4 M_{62}^{(1)} \pm \beta\delta_{14} M_{41}^{(1)} \pm \beta\delta_{a4} P_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
L_{4_3^1}^x & = L_6^{(0)} + \left( -\frac{\beta\Delta_{4_3^1 t}}{2} \mp \frac{\beta\mu_1}{2} \cos \gamma E_{1t} \right) L_6^{(1)} + \\
& + \left[ \beta\nu_1\eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_2\eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_2\eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] L_6^{(1)} + \\
& + \left( \mp\beta\psi_4 L_6^{(1)} \pm \beta\delta_{14} N_{41}^{(1)} \pm \beta\delta_{a4} Q_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
P_{4_4^2}^x & = P_6^{(0)} + \left( -\frac{\beta\Delta_{4_4^2 t}}{2} \mp \frac{\beta\mu_2}{2} \sin \gamma E_{1t} \right) P_6^{(1)} + \\
& + \left[ \beta\nu_2\eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_2\eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] P_6^{(1)} + \\
& - \left( \mp\beta\delta_{14} L_a^{(1)} \pm \beta\delta_{a4} L_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
Q_{4_4^1 1}^x & = Q_{61}^{(0)} + \left( -\frac{\beta\Delta_{4_4^1 t}}{2} \mp \frac{\beta\mu_2}{2} \sin \gamma E_{1t} \right) Q_{61}^{(1)} + \\
& + \left[ \beta\nu_2\eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_2\eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] Q_{61}^{(1)} + \\
& - \left( \mp\beta\delta_{14} M_a^{(1)} \pm \beta\delta_{a4} M_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
Q_{4_4^2 2}^x & = Q_{62}^{(0)} + \left( -\frac{\beta\Delta_{4_4^2 t}}{2} \mp \frac{\beta\mu_2}{2} \sin \gamma E_{1t} \right) Q_{62}^{(1)} + \\
& + \left[ \beta\nu_2\eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_2\eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] Q_{62}^{(1)} + \\
& - \left( \pm\beta\delta_{14} M_a^{(1)} \mp \beta\delta_{a4} M_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
R_{4_4^2}^x & = R_6^{(0)} + \left( -\frac{\beta\Delta_{4_4^2 t}}{2} \mp \frac{\beta\mu_2}{2} \sin \gamma E_{1t} \right) R_6^{(1)} + \\
& + \left[ \beta\nu_2\eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_2\eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] R_6^{(1)} +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \left( \pm\beta\delta_{14} L_a^{(1)} \mp \beta\delta_{a4} L_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
N_{4_4^2}^x & = N_6^{(0)} + \left( -\frac{\beta\Delta_{4_4^2 t}}{2} \mp \frac{\beta\mu_2}{2} \sin \gamma E_{1t} \right) N_6^{(1)} + \\
& + \left[ \beta\nu_2\eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_2\eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] N_6^{(1)} + \\
& - \left( \pm\beta\delta_{14} P_a^{(1)} \mp \beta\delta_{a4} P_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
M_{4_4^1}^x & = M_{61}^{(0)} + \left( -\frac{\beta\Delta_{4_4^1 t}}{2} \mp \frac{\beta\mu_2}{2} \sin \gamma E_{1t} \right) M_{61}^{(1)} + \\
& + \left[ \beta\nu_2\eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_2\eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] M_{61}^{(1)} + \\
& - \left( \mp\beta\delta_{14} Q_a^{(1)} \pm \beta\delta_{a4} Q_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
M_{4_4^2 2}^x & = M_{62}^{(0)} + \left( -\frac{\beta\Delta_{4_4^2 t}}{2} \mp \frac{\beta\mu_2}{2} \sin \gamma E_{1t} \right) M_{62}^{(1)} + \\
& + \left[ \beta\nu_2\eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_2\eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] M_{62}^{(1)} + \\
& - \left( \pm\beta\delta_{14} Q_a^{(1)} \mp \beta\delta_{a4} Q_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t}, \\
L_{4_4^2}^x & = L_6^{(0)} + \left( -\frac{\beta\Delta_{4_4^2 t}}{2} \mp \frac{\beta\mu_2}{2} \sin \gamma E_{1t} \right) L_6^{(1)} + \\
& + \left[ \beta\nu_2\eta_{1t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_2\eta_{3t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{2t}^{(1)x}(4) + \beta\nu_3\eta_{4t}^{(1)x}(4) \right] L_6^{(1)} + \\
& - \left( \mp\beta\delta_{14} P_a^{(1)} \pm \beta\delta_{a4} P_a^{(1)} \right) \varepsilon_{4t},
\end{aligned}$$

де коефіцієнти  $P_6^{(0)}, \dots, L_6^{(1)}$  наведені в [10], а

$$\begin{aligned}
P_{41}^{(1)} & = \frac{1}{2} \left( l_{12-}^{(1)} + n_{12-}^{(1)} \right), \quad M_a^{(1)} = \frac{1}{2} \left( m_{14-}^{(1)} + m_{32-}^{(1)} \right), \\
Q_{41}^{(1)} & = \frac{1}{2} \left( l_{12-}^{(1)} - n_{12-}^{(1)} \right), \quad L_a^{(1)} = \frac{1}{2} \left( m_{14-}^{(1)} - m_{32-}^{(1)} \right), \\
N_{41}^{(1)} & = \frac{1}{2} \left( l_{12+}^{(1)} + n_{12+}^{(1)} \right), \quad Q_a^{(1)} = \frac{1}{2} \left( m_{14+}^{(1)} + m_{32+}^{(1)} \right), \\
M_{41}^{(1)} & = \frac{1}{2} \left( l_{12+}^{(1)} - n_{12+}^{(1)} \right), \quad P_a^{(1)} = \frac{1}{2} \left( m_{14+}^{(1)} - m_{32+}^{(1)} \right).
\end{aligned}$$

В результаті, виключаючи параметри  $\Delta_{4ft}$ , отримуємо для часозалежних різницьових функцій розподілу  $\eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) = \eta_{1t}^{(1)x}(4) - \eta_{3t}^{(1)x}(4)$ ,  $\eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4) = \eta_{2t}^{(1)x}(4) - \eta_{4t}^{(1)x}(4)$ ,  $\eta_{(1-3)t}^{(3)x}(4) = \eta_{1t}^{(3)x}(4) - \eta_{3t}^{(3)x}(4)$ ,

$\eta_{(2-4)t}^{(3)x}(4) = \eta_{2t}^{(3)x}(4) - \eta_{4t}^{(3)x}(4)$ ,  $\eta_{1t}^{(2)x}(4) = \eta_{23t}^{(2)x}(4) - \eta_{14t}^{(2)x}(4)$ ,  $\eta_{2t}^{(2)x}(4) = \eta_{34t}^{(2)x}(4) - \eta_{12t}^{(2)x}(4)$  систему рівнянь у наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(1)x}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(1-3)t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{(3)x}^{(3)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(2)x}(4) \\ \eta_{1t}^{(2)x}(4) \\ \eta_{2t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & 0 & a_{15} & a_{16} \\ a_{12} & a_{11} & 0 & a_{13} & -a_{15} & a_{16} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{32} & a_{31} & a_{34} & a_{33} & -a_{35} & a_{36} \\ -a_{51} & a_{51} & -a_{53} & a_{53} & a_{55} & 0 \\ -a_{61} & -a_{61} & -a_{63} & -a_{63} & 0 & a_{66} \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} \eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(1)x}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(1-3)t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{(3)x}^{(3)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(2)x}(4) \\ \eta_{1t}^{(2)x}(4) \\ \eta_{2t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} &- \frac{E_{1t}}{k_B T} \begin{pmatrix} a_1 \mu_1 \cos \gamma \\ a_1 \mu_2 \sin \gamma \\ a_3 \mu_1 \cos \gamma + a_4 \mu_2 \sin \gamma \\ a_4 \mu_1 \cos \gamma + a_3 \mu_2 \sin \gamma \\ a_5 (\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma) \\ a_6 (\mu_1 \cos \gamma + \mu_2 \sin \gamma) \end{pmatrix} - \quad (6.5) \\ -\beta \psi_{4\epsilon_{4t}} \begin{pmatrix} 2a_1 \\ 0 \\ 2a_3 \\ 2a_4 \\ 2a_5 \\ 2a_6 \end{pmatrix} &- \beta \delta_{14\epsilon_{4t}} \begin{pmatrix} a_{141} \\ a_{142} \\ a_{143} \\ a_{144} \\ a_{145} \\ a_{146} \end{pmatrix} - \beta \delta_{a4\epsilon_{4t}} \begin{pmatrix} a_{a41} \\ a_{a42} \\ a_{a43} \\ a_{a44} \\ a_{a45} \\ a_{a46} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

де коефіцієнти  $a_{11}, \dots, a_6$  співпадають з коефіцієнтами в системі (3.6) [10], а

$$\begin{aligned} a_{141} &= \frac{1}{\alpha} 2Y_{141}^{(1)} (K_6^{(1)} - 1), \\ a_{142} &= \frac{1}{\alpha} 2Y_{142}^{(1)} (K_6^{(1)} - 1), \\ a_{143} &= \frac{2}{\alpha} (K_{61}^{(3)} Y_{141}^{(1)} + K_{62}^{(3)} Y_{142}^{(1)} - Y_{141}^{(3)}), \\ a_{144} &= \frac{2}{\alpha} (K_{62}^{(3)} Y_{141}^{(1)} + K_{61}^{(3)} Y_{142}^{(1)} - Y_{142}^{(3)}), \\ a_{145} &= \frac{2}{\alpha} (K_{61}^{(2)} Y_{142}^{(1)} - K_{61}^{(2)} Y_{141}^{(1)} - Y_{141}^{(2)}), \\ a_{146} &= -\frac{2}{\alpha} (K_{62}^{(2)} Y_{142}^{(1)} + K_{62}^{(2)} Y_{141}^{(1)} + Y_{142}^{(2)}), \\ a_{a41} &= \frac{1}{\alpha} 2Y_{a41}^{(1)} (K_6^{(1)} - 1), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_{a42} &= \frac{1}{\alpha} 2Y_{a42}^{(1)} (K_6^{(1)} - 1), \\ a_{a43} &= \frac{2}{\alpha} (K_{61}^{(3)} Y_{a41}^{(1)} + K_{62}^{(3)} Y_{a42}^{(1)} - Y_{a41}^{(3)}), \\ a_{a44} &= \frac{2}{\alpha} (K_{62}^{(3)} Y_{a41}^{(1)} + K_{61}^{(3)} Y_{a42}^{(1)} - Y_{a42}^{(3)}), \\ a_{a45} &= \frac{2}{\alpha} (K_{61}^{(2)} Y_{a42}^{(1)} - K_{61}^{(2)} Y_{a41}^{(1)} - Y_{a41}^{(2)}), \\ a_{a46} &= -\frac{2}{\alpha} (K_{62}^{(2)} Y_{a42}^{(1)} + K_{62}^{(2)} Y_{a41}^{(1)} + Y_{a42}^{(2)}), \end{aligned}$$

i

$$\begin{aligned} Y_{141}^{(1)} &= - \left[ (P_{41}^{(1)} + 2Q_{41}^{(1)}) \eta^{(1)}(6) + P_{41}^{(1)} \eta^{(3)}(6) + M_{41}^{(1)} \eta_1^{(2)}(6) + \right. \\ & \left. M_{41}^{(1)} \eta_2^{(2)}(6) + N_{41}^{(1)} \eta_3^{(2)}(6) + N_{41}^{(1)} \right] \\ -Y_{142}^{(1)} &= -Y_{142}^{(3)} = Y_{a42}^{(1)} = L_a^{(1)} \eta^{(1)}(6) - L_a^{(1)} \eta^{(3)}(6) + Q_a^{(1)} \eta_1^{(2)}(6) - \\ & - Q_a^{(1)} \eta_2^{(2)}(6) - P_a^{(1)} \eta_3^{(2)}(6) + P_a^{(1)}, \\ Y_{141}^{(3)} &= (P_{41}^{(1)} + 2Q_{41}^{(1)} + 2M_a^{(1)}) \eta^{(1)}(6) + (P_{41}^{(1)} - 2M_a^{(1)}) \eta^{(3)}(6) + \\ & + (M_{41}^{(1)} + 2P_a^{(1)}) \eta_1^{(2)}(6) + (M_{41}^{(1)} - 2P_a^{(1)}) \eta_2^{(2)}(6) + \\ & + (N_{41}^{(1)} - 2Q_a^{(1)}) \eta_3^{(2)}(6) + (N_{41}^{(1)} + 2Q_a^{(1)}), \\ Y_{141}^{(2)} &= Y_{142}^{(2)} = (2N_{41}^{(1)} + M_{41}^{(1)} + Q_a^{(1)}) \eta^{(1)}(6) + \\ & + (M_{41}^{(1)} - Q_a^{(1)}) \eta^{(3)}(6) + (P_{41}^{(1)} + L_a^{(1)}) \eta_1^{(2)}(6) + \\ & + (P_{41}^{(1)} - L_a^{(1)}) \eta_2^{(2)}(6) + (Q_{41}^{(1)} - M_a^{(1)}) \eta_3^{(2)}(6) + (Q_{41}^{(1)} + M_a^{(1)}), \\ Y_{a41}^{(1)} &= -M_a^{(1)} \eta^{(1)}(6) + M_a^{(1)} \eta^{(3)}(6) - P_a^{(1)} \eta_1^{(2)}(6) + \\ & + P_a^{(1)} \eta_2^{(2)}(6) + Q_a^{(1)} \eta_3^{(2)}(6) - Q_a^{(1)}, \\ Y_{a41}^{(3)} &= 3Y_{a41}^{(1)}, \quad Y_{a42}^{(3)} = -3Y_{142}^{(1)}, \\ Y_{a41}^{(2)} &= -(P_a^{(1)} + Q_a^{(1)}) \eta^{(1)}(6) + (P_a^{(1)} + Q_a^{(1)}) \eta^{(3)}(6) - \\ & - (M_a^{(1)} + L_a^{(1)}) \eta_1^{(2)}(6) + (M_a^{(1)} + L_a^{(1)}) \eta_2^{(2)}(6) + \\ & + (M_a^{(1)} + L_a^{(1)}) \eta_3^{(2)}(6) - (M_a^{(1)} + L_a^{(1)}), \\ Y_{a42}^{(2)} &= (P_a^{(1)} - Q_a^{(1)}) \eta^{(1)}(6) + (-P_a^{(1)} + Q_a^{(1)}) \eta^{(3)}(6) + \\ & + (M_a^{(1)} - L_a^{(1)}) \eta_1^{(2)}(6) + (-M_a^{(1)} + L_a^{(1)}) \eta_2^{(2)}(6) + \end{aligned}$$

$$+ \left( M_a^{(1)} - L_a^{(1)} \right) \eta_3^{(2)}(6) + \left( -M_a^{(1)} + L_a^{(1)} \right).$$

Систему рівнянь (6.5) можна записати у вигляді двох систем рівнянь відносно змінних  $\eta_{\pm t}^{(1)x}(4) = \eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) \pm \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4)$ ,  $\eta_{\pm t}^{(3)x}(4) = \eta_{(1-3)t}^{(3)x}(4) \pm \eta_{(2-4)t}^{(3)x}(4)$ ,  $\eta_{\frac{1}{2}t}^{(2)x}(4)$  і  $\varepsilon_{4t}$ , тобто

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{+t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{+t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{2t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a_{11} + a_{12} & a_{13} & 2a_{16} \\ a_{31} + a_{32} & a_{33} + a_{34} & 2a_{36} \\ -a_{61} & -a_{63} & a_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{+t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{+t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{2t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} - \\ &- \beta E_{1t} (\mu_1 \cos \gamma + \mu_2 \sin \alpha) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 + a_4 \\ a_6 \end{pmatrix} - \beta \psi_4 \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} 2a_1 \\ 2(a_3 + a_4) \\ 2a_6 \end{pmatrix} - \quad (6.6) \\ &- \beta \delta_{14} \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{141} + a_{142} \\ a_{143} + a_{144} \\ a_{146} \end{pmatrix} - \beta \delta_{a4} \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{a41} + a_{a42} \\ a_{a43} + a_{a44} \\ a_{a46} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{-t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{-t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{1t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a_{11} - a_{12} & a_{13} & 2a_{15} \\ a_{31} - a_{32} & a_{33} - a_{34} & 2a_{35} \\ -a_{51} & -a_{53} & a_{55} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{-t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{-t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{1t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} - \\ &- \beta E_{1t} (\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 - a_4 \\ a_5 \end{pmatrix} - \beta \psi_4 \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} 2a_1 \\ 2(a_3 - a_4) \\ 2a_5 \end{pmatrix} - \quad (6.7) \\ &- \beta \delta_{14} \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{141} - a_{142} \\ a_{143} - a_{144} \\ a_{145} \end{pmatrix} - \beta \delta_{a4} \varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{a41} - a_{a42} \\ a_{a43} - a_{a44} \\ a_{a45} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Враховуючи вирази (6.4), рівняння для зміщень (6.3) запишемо у наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_{2t}}{\partial t^2} &= c_{14} \frac{\partial \varepsilon_{4t}}{\partial z} + c_{24} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{2} [\eta_{1t}^{(1)}(4) - \eta_{3t}^{(1)}(4)] + \\ c_{34} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{2} [\eta_{2t}^{(1)}(4) - \eta_{4t}^{(1)}(4)], \\ \rho \frac{\partial^2 u_{3t}}{\partial t^2} &= c_{14} \frac{\partial \varepsilon_{4t}}{\partial e} + c_{24} \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{2} [\eta_{1t}^{(1)}(4) - \eta_{3t}^{(1)}(4)] + \\ c_{34} \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{2} [\eta_{2t}^{(1)}(4) - \eta_{4t}^{(1)}(4)], \quad (6.8) \end{aligned}$$

де використані наступні позначення:

$$\begin{aligned} c_{14} &= c_{44}^{E0} + \frac{2\tilde{\psi}_4}{\tilde{v}DT} (\tilde{\delta}_{a4} \varkappa_1^a + \tilde{\delta}_{14} 2\varkappa^b) - \frac{2}{\tilde{v}DT} (\tilde{\delta}_{a4}^2 \varkappa_1^a + \tilde{\delta}_{14}^2 2\varkappa^b), \\ c_{24} &= -\frac{2\tilde{\psi}_4}{\tilde{v}} + \frac{2\varphi_a^\eta}{\tilde{v}D} (\tilde{\delta}_{a4} \varkappa_1^a + \tilde{\delta}_{14} 2\varkappa^b), \\ c_{34} &= \frac{2\varphi_a^\eta}{\tilde{v}D} \tilde{\delta}_{a4} \varkappa_2^a. \end{aligned}$$

Розв'язки систем (6.6)–(6.8) шукатимемо у вигляді гармонічних хвиль:

$$\begin{aligned} \eta_{\frac{(1-3)t}{(2-4)t}}^{(1)x}(4) &= \eta_{\frac{(1-3)t}{(2-4)t}E}^{(1)x}(4, y, z) e^{i\omega}, \quad \eta_{\frac{(3)x}{(2-4)t}}^{(3)x}(4) = \eta_{\frac{(3)x}{(2-4)t}E}^{(3)x}(4, y, z) e^{i\omega}, \\ \eta_{\frac{1}{2}t}^{(2)x}(4) &= \eta_{\frac{1}{2}E}^{(2)x}(4, y, z) e^{i\omega}, \\ \varepsilon_{4t} &= \varepsilon_{4E}(y, z) e^{i\omega}, \quad u_{2t} = u_2(z) e^{i\omega}, \quad u_{3t} = u_3(y) e^{i\omega} \quad (6.9) \end{aligned}$$

В результаті, розв'язуючи системи рівнянь (6.6)–(6.8) з врахуванням (6.9), отримуємо, що

$$\begin{aligned} \eta_{\frac{(3-1)t}{(4-2)t}E}^{(1)x}(4, y, z) &= \frac{\beta \mu_1}{2} \cos \gamma [F_+^{(1)}(\omega) \pm F_-^{(1)}(\omega)] E_1 + \\ &+ \frac{\beta \mu_2}{2} \sin \gamma [F_+^{(1)}(\omega) \mp F_-^{(1)}(\omega)] E_1 + \\ &+ \left\{ \frac{\beta \psi_4}{2} [F_{4+}^{(1)}(\omega) \pm F_{4-}^{(1)}(\omega)] + \frac{\beta \delta_{14}}{2} [F_{14+}^{(1)}(\omega) \pm F_{14-}^{(1)}(\omega)] \mp \right. \\ &\left. \mp \frac{\beta \delta_{a4}}{2} [F_{a4+}^{(1)}(\omega) \pm F_{a4-}^{(1)}(\omega)] \right\} \varepsilon_{4E}(y, z), \end{aligned}$$

де використані наступні позначення:

$$\begin{aligned} F_{4\pm}^{(1)} &= \frac{(i\omega)^2 m_{4\pm}^{(2)} + (i\omega) m_{4\pm}^{(1)} + m_{4\pm}^{(0)}}{(i\omega)^3 + (i\omega)^2 m_{2\pm} + (i\omega) m_{1\pm} + m_{0\pm}}, \\ F_{14\pm}^{(1)} &= \frac{(i\omega)^2 m_{14\pm}^{(2)} + (i\omega) m_{14\pm}^{(1)} + m_{14\pm}^{(0)}}{(i\omega)^3 + (i\omega)^2 m_{2\pm} + (i\omega) m_{1\pm} + m_{0\pm}}, \\ F_{a4\pm}^{(1)} &= \frac{(i\omega)^2 m_{a4\pm}^{(2)} + (i\omega) m_{a4\pm}^{(1)} + m_{a4\pm}^{(0)}}{(i\omega)^3 + (i\omega)^2 m_{2\pm} + (i\omega) m_{1\pm} + m_{0\pm}}, \end{aligned}$$

а

$$m_{4\pm}^{(2)} = -2a_1, \quad m_{14\pm}^{(2)} = -(a_{141} \pm a_{142}), \quad m_{a4\pm}^{(2)} = -(a_{a41} \pm a_{a42}),$$

$$\begin{aligned}
m_{4+}^{(1)} &= - \left( \begin{array}{cc|c} a_{13} & 2a_1 & \\ a_{33} + a_{34} & 2(a_3 + a_4) & \end{array} + \begin{array}{cc} 2a_{16} & 2a_1 \\ a_{66} & 2a_6 \end{array} \right), \\
m_{4-}^{(1)} &= - \left( \begin{array}{cc|c} a_{13} & 2a_1 & \\ a_{33} - a_{34} & 2(a_3 - a_4) & \end{array} + \begin{array}{cc} 2a_{15} & 2a_1 \\ a_{55} & 2a_5 \end{array} \right), \\
m_{14+}^{(1)} &= - \left( \begin{array}{cc|c} a_{13} & a_{141} + a_{142} & \\ a_{33} + a_{34} & a_{143} + a_{144} & \end{array} + \begin{array}{cc} 2a_{16} & a_{141} + a_{142} \\ a_{56} & 2a_{146} \end{array} \right), \\
m_{14-}^{(1)} &= - \left( \begin{array}{cc|c} a_{13} & a_{141} - a_{142} & \\ a_{33} - a_{34} & a_{143} - a_{144} & \end{array} + \begin{array}{cc} 2a_{15} & a_{141} - a_{142} \\ a_{55} & 2a_{145} \end{array} \right), \\
m_{a4+}^{(1)} &= - \left( \begin{array}{cc|c} a_{13} & a_{a41} + a_{a42} & \\ a_{33} + a_{34} & a_{a43} + a_{a44} & \end{array} + \begin{array}{cc} 2a_{16} & a_{a41} + a_{a42} \\ a_{66} & 2a_{a46} \end{array} \right), \\
m_{a4-}^{(1)} &= - \left( \begin{array}{cc|c} a_{13} & a_{a41} - a_{a42} & \\ a_{33} - a_{34} & a_{a43} - a_{a44} & \end{array} + \begin{array}{cc} 2a_{15} & a_{a41} - a_{a42} \\ a_{55} & 2a_{a45} \end{array} \right), \\
m_{4+}^{(0)} &= - \begin{vmatrix} a_{13} & 2a_{16} & 2a_1 \\ a_{33} + a_{34} & 2a_{36} & 2(a_3 + a_4) \\ -a_{63} & a_{66} & 2a_6 \end{vmatrix}, \\
m_{4-}^{(0)} &= - \begin{vmatrix} a_{13} & 2a_{15} & 2a_1 \\ a_{33} - a_{34} & 2a_{35} & 2(a_3 - a_4) \\ -a_{53} & a_{55} & 2a_5 \end{vmatrix}, \\
m_{14+}^{(0)} &= - \begin{vmatrix} a_{13} & 2a_{16} & a_{141} + a_{142} \\ a_{33} + a_{34} & 2a_{36} & a_{143} + a_{144} \\ -a_{63} & a_{66} & 2a_{146} \end{vmatrix}, \\
m_{14-}^{(0)} &= - \begin{vmatrix} a_{13} & 2a_{15} & a_{141} - a_{142} \\ a_{33} - a_{34} & 2a_{35} & a_{143} - a_{144} \\ -a_{53} & a_{55} & 2a_{145} \end{vmatrix}, \\
m_{a4+}^{(0)} &= - \begin{vmatrix} a_{13} & 2a_{16} & a_{a41} + a_{a42} \\ a_{33} + a_{34} & 2a_{36} & a_{a43} + a_{a44} \\ -a_{63} & a_{66} & a_{a46} \end{vmatrix}, \\
m_{a4-}^{(0)} &= - \begin{vmatrix} a_{13} & 2a_{15} & a_{a41} - a_{a42} \\ a_{33} - a_{34} & 2a_{35} & a_{a43} - a_{a44} \\ -a_{53} & a_{55} & a_{a45} \end{vmatrix}.
\end{aligned}$$

Враховуючи вирази (6.8) і (6.9), отримуємо хвильові рівняння для  $u_2$ ,  $u_3$  в наступному вигляді:

$$c_{44}^E(\omega) \frac{\partial^2 u_2}{\partial z^2} + \rho \omega^2 u_2 = 0, \quad c_{44}^E(\omega) \frac{\partial^2 u_3}{\partial y^2} + \rho \omega^2 u_3 = 0, \quad (6.10)$$

де

$$c_{44}^A(\omega) = c_{44}^{E0} + \frac{2\tilde{\psi}_4}{\bar{v}DT} (\tilde{\delta}_{a4}\kappa_1^a + \tilde{\delta}_{14}2\kappa^b) - \frac{2}{\bar{v}DT} (\tilde{\delta}_{a4}^2\kappa_1^a + \tilde{\delta}_{14}^22\kappa^b) -$$

$$\begin{aligned}
& \frac{2\tilde{\psi}_4}{\bar{v}} \frac{1}{4T} \left\{ \tilde{\psi}_4 \left[ F_{4+}^{(1)}(\omega) + F_{4-}^{(1)}(\omega) \right] + \tilde{\delta}_{14} \left[ F_{14+}^{(1)}(\omega) + F_{14-}^{(1)}(\omega) \right] + \right. \\
& \left. + \tilde{\delta}_{a4} \left[ F_{a4+}^{(1)}(\omega) + F_{a4-}^{(1)}(\omega) \right] \right\} + \\
& + \frac{4\varphi_a^\eta}{\bar{v}DT} (\tilde{\delta}_{a4}aa_6 + \tilde{\delta}_{14}\kappa^b) \left\{ \tilde{\psi}_4 F_{4+}^{(1)}(\omega) + \tilde{\delta}_{a4} F_{a4+}^{(1)}(\omega) + \tilde{\delta}_{14} F_{14+}^{(1)}(\omega) \right\} + \\
& + \frac{4\varphi_a^\eta}{\bar{v}DT} (\tilde{\delta}_{a4}\frac{a}{a_6} + \tilde{\delta}_{14}\kappa^b) \left\{ \tilde{\psi}_4 F_{4-}^{(1)}(\omega) + \tilde{\delta}_{a4} F_{a4-}^{(1)}(\omega) + \tilde{\delta}_{14} F_{14-}^{(1)}(\omega) \right\}.
\end{aligned} \quad (6.11)$$

Рівняння (6.10) запишемо в такому вигляді:

$$\frac{\partial^2 u_2}{\partial z^2} + k_4^2 u_2 = 0, \quad \frac{\partial^2 u_3}{\partial y^2} + k_4^2 u_3 = 0, \quad (6.12)$$

де хвильове число

$$k_4 = \frac{\omega \sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{44}^E(\omega)}}, \quad (6.13)$$

Розв'язки рівнянь (6.12) шукаємо в наступному вигляді:

$$u_2 = A_2 \cos k_4 z + B_2 \sin k_4 z; \quad u_3 = A_3 \cos k_4 y + B_3 \sin k_4 y.$$

В результаті

$$\varepsilon_4(y, z) = k_4 [-(A_2 \sin k_4 z + A_3 \sin k_4 y) + (B_2 \cos k_4 z + B_3 \cos k_4 y)]. \quad (6.14)$$

Граничні умови задаємо в наступному вигляді:

$$\varepsilon_{4E}(0, 0) = \varepsilon_{4E}(l, l) = \varepsilon_{4E}(0, l) = \varepsilon_{4E}(l, 0) = \varepsilon_{4E}^{(0)}. \quad (6.15)$$

Значення  $\varepsilon_{4E}^{(0)}$  отримуємо з виразу (3.2), враховуючи співвідношення (6.9). В результаті

$$\varepsilon_{4E}^{(0)} = \frac{e_{14}(\omega)}{c_{66}^E(\omega)} E_1, \quad (6.16)$$

де

$$\begin{aligned}
e_{14}(\omega) &= e_{14}^0 + \\
& + \frac{\mu_1 \cos \gamma + \mu_2 \sin \gamma}{v} \frac{1}{4T} \left[ \tilde{\psi}_4 F_{4+}^{(1)}(\omega) + \tilde{\delta}_{a4} F_{a4+}^{(1)}(\omega) + \tilde{\delta}_{14} F_{14+}^{(1)}(\omega) \right] + \\
& + \frac{\mu_1 \cos \gamma - \mu_2 \sin \gamma}{v} \frac{1}{4T} \left[ \tilde{\psi}_4 F_{4-}^{(1)}(\omega) + \tilde{\delta}_{a4} F_{a4-}^{(1)}(\omega) + \tilde{\delta}_{14} F_{14-}^{(1)}(\omega) \right].
\end{aligned} \quad (6.17)$$

Враховуючи граничні умови (6.15), отримуємо, що

$$\varepsilon_{4E}(y, z) = \frac{\varepsilon_{4E}^{(0)}}{2} \left[ -\frac{\cos k_4 l - 1}{\sin k_4 l} (\sin k_4 z + \sin k_4 y) + (\cos k_4 z + \cos k_4 y) \right]. \quad (6.18)$$



Використовуючи вираз, що пов'язує поляризацію  $P_1$  із  $(\eta_1^{(1)x}(4) - \eta_3^{(1)x}(4))$  та деформацію  $\varepsilon_4$ , отримуємо, що

$$P_1(y, z, t) = P_{1E}(y, z)e^{i\omega}, \quad (6.19)$$

де

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

а  $\chi_{11}^\varepsilon(\alpha\omega)$  задано виразом (5.12). Використовуючи співвідношення

$$\chi_{11}^\sigma(\omega) = \frac{1}{l^2} \frac{\partial}{\partial E_1} \int_0^l \int_0^l P_{1E}(y, z) dy dz, \quad (6.20)$$

можна розрахувати діелектричну сприйнятливість вільного кристалу  $\chi_{11}^\sigma(\omega)$ . Враховуючи вирази (6.18), знаходимо, що

$$\frac{1}{l^2} \int_0^l dy \int_0^l dz \varepsilon_{4E}(y, z) = \frac{2\varepsilon_{4E}^{(0)}}{k_{4E}l} \tanh \frac{K_{4E}l}{2} = \frac{\varepsilon_{4E}^{(0)}}{R_4(\omega)}, \quad (6.21)$$

де

$$\frac{1}{R_4(\omega)} = \frac{2}{k_4 l} \tanh \frac{k_4 l}{2}.$$

Беручи до уваги вирази (6.19) і (6.21), на основі співвідношення (6.20), отримуємо, що

$$\chi_{11}^\sigma(\omega) = \chi_{11}^\varepsilon(\omega) + \frac{1}{R_4(\omega)} \frac{e_{14}^2(\omega)}{c_{44}^E(\omega)}. \quad (6.22)$$

## 7. Поглинання і швидкість ультразвуку в кристалах $M(\mathbf{H}_{1-x}\mathbf{D}_x)_2\mathbf{XO}_4$

Нехай уздовж бруска, який вирізаний уздовж напрямку [100], поширюється поперечна ультразвукова хвиля, яка поляризована вздовж [010]. Серед похідних  $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$  відмінною від нуля є лише  $\frac{\partial u_2}{\partial z}$  і тому можна записати наступні рівняння:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(1-3)t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{1t}^{(2)x}(4) \\ \eta_{2t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} = \quad (7.1)$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & 0 & a_{15} & a_{16} \\ a_{12} & a_{11} & 0 & a_{13} & -a_{15} & a_{16} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{32} & a_{31} & a_{34} & a_{33} & -a_{35} & a_{36} \\ -a_{51} & a_{51} & -a_{53} & a_{53} & a_{55} & 0 \\ -a_{61} & -a_{61} & -a_{63} & -a_{63} & 0 & a_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{(1-3)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(1)x}(4) \\ \eta_{(1-3)t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{(2-4)t}^{(3)x}(4) \\ \eta_{1t}^{(2)x}(4) \\ \eta_{2t}^{(2)x}(4) \end{pmatrix} -$$

$$-\beta\psi_{4\varepsilon 4t} \begin{pmatrix} 2a_1 \\ 0 \\ 2a_3 \\ 2a_4 \\ 2a_5 \\ 2a_6 \end{pmatrix} - \beta\delta_{14}\varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{141} \\ a_{142} \\ a_{143} \\ a_{144} \\ a_{145} \\ a_{146} \end{pmatrix} - \beta\delta_{a4}\varepsilon_{4t} \begin{pmatrix} a_{a41} \\ a_{a42} \\ a_{a43} \\ a_{a44} \\ a_{a45} \\ a_{a46} \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_{2t}}{\partial t^2} &= c_{14} \frac{\partial \varepsilon_{4t}}{\partial z} + c_{24} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{2} [\eta_{1t}^{(1)}(4) - \eta_{3t}^{(1)}(4)] + \\ &+ c_{34} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{2} [\eta_{2t}^{(1)}(4) - \eta_{4t}^{(1)}(4)], \\ \rho \frac{\partial^2 u_{3t}}{\partial t^2} &= c_{14} \frac{\partial \varepsilon_{4t}}{\partial e} + c_{24} \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{2} [\eta_{1t}^{(1)}(4) - \eta_{3t}^{(1)}(4)] + \\ &+ c_{34} \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{2} [\eta_{2t}^{(1)}(4) - \eta_{4t}^{(1)}(4)], \end{aligned}$$

Розв'язуючи систему рівнянь (7.1), отримуємо для такого вибору брусків хвильове число, яке збігається зі знайденим вище, а саме

$$k_4 = \frac{\omega \sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{44}^E(\alpha\omega)}}. \quad (7.2)$$

Використовуючи співвідношення (7.2), можна розрахувати швидкість ультразвукової хвилі, а саме

$$v_{44}(\omega) = \frac{\omega}{\text{Re}|k_4|} = \text{Re} \frac{\sqrt{c_{44}^E(\alpha\omega)}}{\sqrt{\rho}} \quad (7.3)$$

і внесок квазіспінової підсистеми у коефіцієнт поглинання звуку:

$$\alpha_4(\omega) = \alpha_{04} - \text{Im}|k_4| = \alpha_{04} - \text{Im} \left| \frac{\omega \sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{44}^E(\alpha\omega)}} \right|, \quad (7.4)$$

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

## 8. Порівняння результатів числових розрахунків з експериментальними даними. Обговорення отриманих результатів

Перейдемо тепер до аналізу результатів числового розрахунку, отриманих в рамках запропонованої моделі поперечних діелектричних, п'єзоелектричних і пружних характеристик кристалів  $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$  ( $M = K, Rb$ ;  $X = P, As$ ) і порівняємо їх з відповідними експериментальними даними для цих сполук. При цьому вважатимемо [10], що розвинена нами для ДСОФ теорія є справедлива і для  $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$  з усередненими ефективними мікропараметрами. Підставою для цього є суттєве подавлення тунелювання короткосяжними кореляціями [38–40].

Для числового розрахунку температурних і частотних характеристик кристалів  $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$ , які отримані в попередніх розділах, необхідно знайти значення ефективних параметрів. Величини енергій дейтронних конфігурацій  $\varepsilon(x)$ ,  $w(x)$ , енергії далекоюсяжної взаємодії  $\nu_c(x)$  і деформаційних потенціалів  $\psi_6(x)$ ,  $\delta_{s6}(x)$ ,  $\delta_{a6}(x)$  і  $\delta_{16}(x)$  вибираємо такими, як і при розгляді поздовжніх характеристик кристалів  $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$  [10].

При розрахунку поперечних характеристик потрібно визначити ще такі ефективні параметри:

- енергії далекоюсяжної взаємодії  $\nu_{aH}$ ,  $\nu_{aD}$ ,
- ефективних дипольних моментів  $\mu_{1H}$ ,  $\mu_{1D}$ ,
- “затравочні” діелектричні сприйнятливості  $\chi_{11H}^e$ ,  $\chi_{11D}^e$ ,
- “затравочні” пружні сталі  $c_{44H}^{E0}$ ,  $c_{440,12H}^{E0}$ ,
- “затравочні” коефіцієнти п'єзоелектричної напруги  $e_{14H}^0$ ,  $e_{140,12H}^0$ ,
- параметри  $\alpha_H$  і  $\alpha_D$ , які визначають часову шкалу релаксаційних процесів, які досліджуються в даній роботі.

Індекс  $H$  у параметрах теорії відповідає кристалу  $MH_2XO_4$ , індекс  $D$  –  $MD_2XO_4$ . Вважаємо, що кристалам  $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$  з різними значеннями  $x$  відповідають усереднені ефективні параметри:

$$\begin{aligned}\nu_a(x) &= \nu_{aH}(1-x) + \nu_{aD}(x), \\ \mu_1(x) &= \mu_{1H}(1-x) + \mu_{1D}(x)\end{aligned}$$

і так далі.

Для визначення оптимальних параметрів мікротеорії ми використали температурні залежності фізичних характеристик кристалів  $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$ , які отримані експериментально. Зокрема, для  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$   $\varepsilon_{11}^{\sigma}(0, T)$  [45],  $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$  [24],  $d_{14H}$  [46],  $d_{140,12H}$  [47],

$c_{44H}^E$  [48],  $c_{440,12H}^E$  [47]; для  $RbH_2PO_4$   $\varepsilon_{11}^{\sigma}(0, T)$  [47],  $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$  [49],  $d_{14H}$  [47],  $c_{44H}^E$  [47]; для  $KH_2AsO_4$   $\varepsilon_{11}^{\sigma}(0, T)$  [14],  $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$  [49],  $d_{14}$  [50],  $c_{44}^E$  [50].

Числовий аналіз показує, що для визначення ефективних дипольних моментів  $\mu_1(x)$  треба враховувати не лише дані експерименту для статичної діелектричної проникності  $\varepsilon_{11}^{\sigma}(0)$ , але й результати вимірювань  $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$ . Для адекватного опису температурних залежностей  $\varepsilon_{11}^{\sigma}(0, T)$  і  $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$  слід прийняти, що величина  $\mu_1(x)$  незначно збільшується з ростом температури:

$$\mu_1(x) = \mu_1^0(x) + k_{\mu}(T - T_c).$$

Незначно температурно залежним отримано і параметр  $\alpha(x)$ :

$$\alpha(x) = [P(x) + R(x)(|\Delta T| - 1)] \cdot 10^{-14}.$$

Отриманий набір оптимальних параметрів на основі “прив’язки” розрахованих поперечних характеристик кристалів  $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$  до даних експериментів наведений у табл. 2-4.

Табл. 2. Оптимальні набори параметрів для  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$

$x$	$\nu_a$ (K)	$\mu_1^0$ (esu · cm)	$k_{\mu}$ ( $\frac{esu \cdot cm}{K}$ )	$\chi_{11}^0$	$P$ (s)	$R$ ( $\frac{s}{K}$ )
0.00	7.00	4.27	0.0057	0.80	0.46	0.0130
0.21	9.39	4.57	0.0053	0.76	1.13	0.0117
0.64	14.27	5.18	0.0046	0.69	2.50	0.0090
0.84	16.55	5.46	0.0043	0.66	3.14	0.0077
0.93	17.57	5.59	0.0042	0.64	3.43	0.0072

$x$	$\psi_4$ (K)	$\delta_{a4}$ (K)	$\delta_{14}$ (K)	$c_{44}^0 \cdot 10^{-10}$ (dyn/cm <sup>2</sup> )	$e_{14}^0$ (esu/cm <sup>2</sup> )
0.00	124.0	92.0	80.0	13.00	500
0.21	139.3	92.7	132.5	12.96	500
0.64	170.5	94.2	240.0	12.89	500
0.84	185.1	94.9	290.0	12.86	500
0.93	191.6	95.2	312.5	12.84	500

Зупинимось тепер на отриманих результатах. На рис.2 представлено температурні залежності розрахованих поперечних статичних діелектричних проникностей механічно вільних кристалів  $K(H_{1-x}D_x)_2PO_4$  і результати експериментальних вимірювань, які

Табл. 3. Оптимальний набір параметрів для  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$ 

$x$	$\nu_a$ (K)	$\mu_1^0$ (esu · cm)	$k_\mu$ ( $\frac{\text{esu} \cdot \text{cm}}{\text{K}}$ )	$\chi_{11}^0$	$P$ (s)	$R$ ( $\frac{\text{s}}{\text{K}}$ )
0.00	28.00	3.68	0.0057	1.25	0.56	0.0107

$x$	$\psi_4$ (K)	$\delta_{a4}$ (K)	$\delta_{14}$ (K)	$c_{44}^0 \cdot 10^{-10}$ (dyn/cm <sup>2</sup> )	$e_{14}^0$ (esu/cm <sup>2</sup> )
0.00	152.0	80.0	5.0	10.60	2000

Табл. 4. Оптимальний набір параметрів для  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{AsO}_4$ 

$x$	$\nu_a$ (K)	$\mu_1^0$ (esu · cm)	$k_\mu$ ( $\frac{\text{esu} \cdot \text{cm}}{\text{K}}$ )	$\chi_{11}^0$	$P$ (s)	$R$ ( $\frac{\text{s}}{\text{K}}$ )
0.00	20.00	4.85	0.0064	0.70	3.20	0.0140
1.00	21.00	6.26	0.0000	0.20	3.20	0.0140

$x$	$\psi_4$ (K)	$\delta_{a4}$ (K)	$\delta_{14}$ (K)	$c_{44}^0 \cdot 10^{-10}$ (dyn/cm <sup>2</sup> )	$e_{14}^0$ (esu/cm <sup>2</sup> )
0.00	370.0	70.0	30.0	10.80	2000
1.00	450.0	80.0	100.0	9.90	2000

можна поділити на дві групи. Перша – це роботи [47, 48, 52], в яких в околі  $T_c$  спостерігався  $\lambda$ -подібний характер  $\varepsilon_{11}^\sigma(0, T)$ , друга – роботи [14, 15, 45, 53–55], в яких  $\varepsilon_{11}^\sigma(0, T)$  має куполоподібну поведінку. В [45] виявлено, що поява  $\lambda$ -подібного піку, як проекції аномалії  $\varepsilon_{33}^\sigma(0)$ , викликана неточністю орієнтації  $x$ -зрізів, які використовувались. У цій роботі проведено детальні вимірювання температурної залежності  $\varepsilon_{11}^\sigma(0, T)$  для кристалів  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$  з різними ступенями дейтерування  $x$ . Виявлено дуже малу залежність значень  $\varepsilon_{11}^\sigma(0, T)$  від концентрації  $x$ . Величина  $\varepsilon_{11}^{\sigma_{max}}(0)$  зростає від 56,4 при  $x = 0,00$  до 57,4 при  $x = 0,98$ . В точці фазового переходу спостерігається стрибок  $\varepsilon_{11}^\sigma(0)$ , який із ростом  $x$  зростає. Значення  $\varepsilon_{11}^\sigma(0, T)$  [45] при різних  $x$  на 6–10% менше в параелектричній фазі від даних інших робіт.

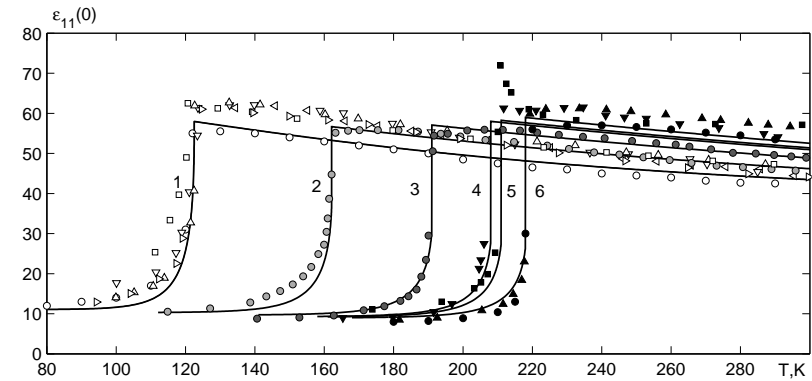


Рис. 2. Температурна залежність поперечної проникності  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$  при різних  $x$ : 0.0 – 1,  $\square$  [52],  $\triangleleft$  [48],  $\nabla$  [15],  $\triangle$  [54],  $\triangleright$  [55],  $\circ$  [45]; 0.35 – 2,  $\bullet$  [45]; 0.64 – 3,  $\bullet$  [45]; 0.84 – 4,  $\blacktriangledown$  [14]; 0.88 – 5,  $\blacksquare$  [47]; 0.98 – 6,  $\bullet$  [45],  $\blacktriangle$  [15]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

Ефективні дипольні моменти  $\mu_{1H}^0$  і  $\mu_{1D}^0$  вибираємо такими, щоб дані розрахунку  $\varepsilon_{11}(0, T)$  відповідали даним роботи [45]. Отримано добрий опис температурного ходу  $\varepsilon_{11}(0, T)$  для  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  і  $\text{K}(\text{H}_{0,02}\text{D}_{0,98})_2\text{PO}_4$  роботи [45], однак теорія не відтворює куполоподібної поведінки проникності  $\varepsilon_{11}(0, T)$  при  $T = T_c$  рівна 3,25 для  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  і 32,8 для  $\text{K}(\text{H}_{0,02}\text{D}_{0,98})_2\text{PO}_4$ , що узгоджуються із, відповідно, 4,0 і 37,1 [15] і 5,2 і 37,5 [45].

На рис.3 зображено температурні залежності  $\varepsilon_{11}^\sigma(0)$  кристалів

$\text{KH}_2\text{PO}_4$ ,  $\text{K}(\text{H}_{0,12}\text{D}_{0,88})_2\text{PO}_4$ ,  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  і  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$ . Як видно, розраховані на основі запропонованої теорії криві  $\varepsilon_{11}^\sigma(0, T)$  добре описують дані експериментів. Для кристалів  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ ,  $\text{K}(\text{H}_{0,12}\text{D}_{0,88})_2\text{PO}_4$ ,  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  значення поперечних проникностей механічно вільного і затиснутого кристалів збігаються. У випадку  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$  крива 4 відповідає  $\varepsilon_{11}^\sigma(0)$ , а крива 4' –  $\varepsilon_{11}^\varepsilon(0)$ .

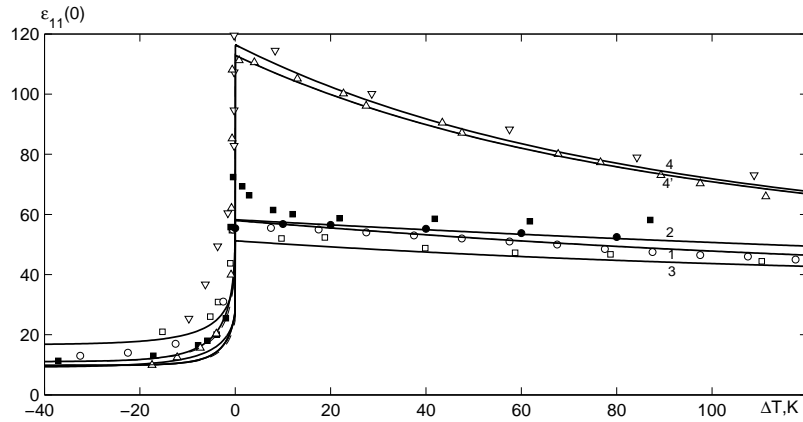


Рис. 3. Температурна залежність поперечної проникності сегнетоелектричних ортофосфатів:  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  – 1,  $\circ$  [45];  $\text{K}(\text{H}_{0,12}\text{D}_{0,88})_2\text{PO}_4$  – 2,  $\bullet$  [45],  $\blacksquare$  [47];  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  – 3,  $\square$  [47];  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$  – 4,  $\triangle$  [14]. Точки – експериментальні, суцільні лінії – теоретичні значення.

При ізоморфному заміщенні  $\text{K} \rightarrow \text{Rb}$  значення проникності  $\varepsilon_{11}^\sigma(0)$  незначно зменшується в параелектричній фазі і збільшується в сегнетофазі. При заміні  $\text{P} \rightarrow \text{As}$  значно зростає величина  $\varepsilon_{11}^\sigma(0)$  у парафазі і до незначного – в сегнетофазі.

Температурні залежності коефіцієнтів п'єзоелектричних деформації  $d_{14}$  і напруги  $e_{14}$  зображені на рис.4, а на рис.5 – зміни із температурою констант п'єзоелектричних напруги  $h_{14}$  і деформації  $g_{14}$ , які розраховані на основі отриманих співвідношень для  $\text{MH}_2\text{XO}_4$  і  $\text{K}(\text{H}_{0,12}\text{D}_{0,88})_2\text{PO}_4$ . На цих рисунках наведено й експериментально отримані значення  $d_{14}$  при різних температурах. Використовуючи дані експериментів для  $d_{14}$ ,  $\varepsilon_{11}^\sigma(0)$  і  $c_{44}^E$  ( $s_{44}^E$ ), отримуємо значення  $e_{14}$ ,  $h_{14}$  і  $g_{14}$ , які і наведені на рис.4,5. Експериментальні і перераховані п'єзомодулі кількісно добре описуються на основі мікротеорії. П'єзоелектричні характеристики  $d_{14}$ ,  $e_{14}$ ,  $h_{14}$  і  $g_{14}$  не виявляють ано-

мальної температурної залежності.

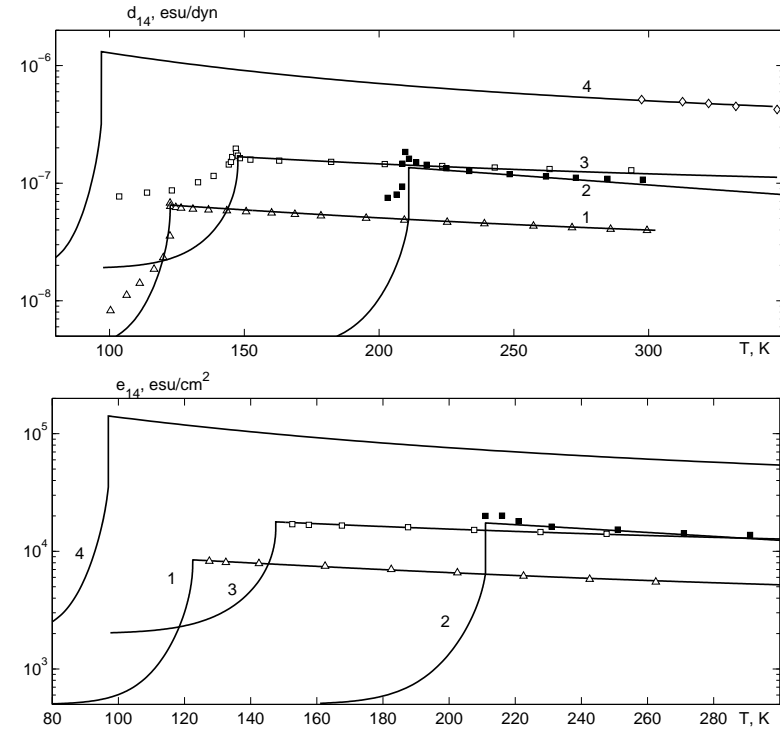


Рис. 4. Температурна залежність коефіцієнта п'єзоелектричної деформації  $d_{14}$  кристалів  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  – 1,  $\triangle$  [46],  $\text{K}(\text{H}_{0,12}\text{D}_{0,88})_2\text{PO}_4$  – 2,  $\blacksquare$  [47],  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  – 3,  $\square$  [47],  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$  – 4,  $\diamond$  [50] і температурна залежність коефіцієнта п'єзоелектричної напруги  $e_{14}$  кристалів  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  – 1,  $\triangle$  –  $d_{14}$  [46]/ $s_{44}^E$  [48],  $\text{K}(\text{H}_{0,12}\text{D}_{0,88})_2\text{PO}_4$  – 2,  $\blacksquare$  –  $d_{14}$  [47]/ $s_{44}^E$  [56],  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  – 3,  $\square$  –  $d_{14}$  [47]/ $s_{44}^E$  [56],  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$  – 4,  $\diamond$  –  $d_{14}/s_{44}^E$  [50].

Не виявлено аномальних температурних залежностей для розрахованих температурних залежностей пружних сталей  $c_{44}^E = c_{44}^P$  і податливостей  $s_{44}^E = s_{44}^P$  (рис.6,7) для кристалів, які досліджуються. Результати розрахунків узгоджуються з даними експериментів.

Розглянемо особливості дисперсії комплексної діелектричної проникності  $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$  кристалів  $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$  при прикладанні поперечного електричного поля  $E_1$ . Експериментальні дані при різ-

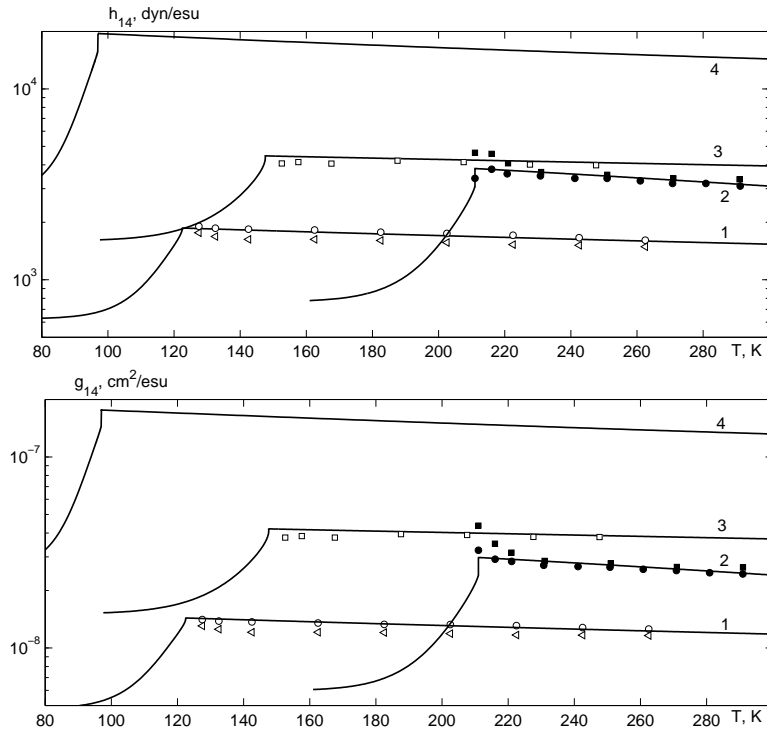


Рис. 5. Температурна залежність константи п'єзоелектричної напруги  $h_{14}$   $\text{KH}_2\text{PO}_4$  – 1,  $\triangleleft$  –  $d_{14}$  [46]/( $s_{44}^E$  [48] –  $d_{14}^2$  [46]),  $\circ$  –  $d_{14}$  [46]/( $s_{44}^E$  [48] $\chi_{11}^\sigma$  [45] –  $d_{14}^2$  [46]);  $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$  – 2,  $\blacksquare$  –  $d_{14}$  [47]/( $s_{44}^E$  [51] $\chi_{11}^\sigma$  [47] –  $d_{14}^2$  [47]),  $\bullet$  –  $d_{14}$  [47]/( $s_{44}^E$  [51] $\chi_{11}^\sigma$  [45] –  $d_{14}^2$  [47]);  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  – 3,  $\square$  –  $d_{14}$  [47]/( $s_{44}^E$  [51] $\chi_{11}^\sigma$  [47] –  $d_{14}^2$  [47]),  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$  – 4 і температурна залежність константи п'єзоелектричної деформації  $g_{36}$   $\text{KH}_2\text{PO}_4$  – 1,  $\triangleleft$  –  $d_{14}$  [46]/ $\chi_{11}^\sigma$  [48],  $\circ$  –  $d_{14}$  [46]/ $\chi_{11}^\sigma$  [45],  $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$  – 2,  $\blacksquare$  –  $d_{14}$  [47]/ $\chi_{11}^\sigma$  [47],  $\bullet$  –  $d_{14}$  [47]/ $\chi_{11}^\sigma$  [45],  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  – 3,  $\square$  –  $d_{14}$  [47]/ $\chi_{11}^\sigma$  [47],  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$  – 4.

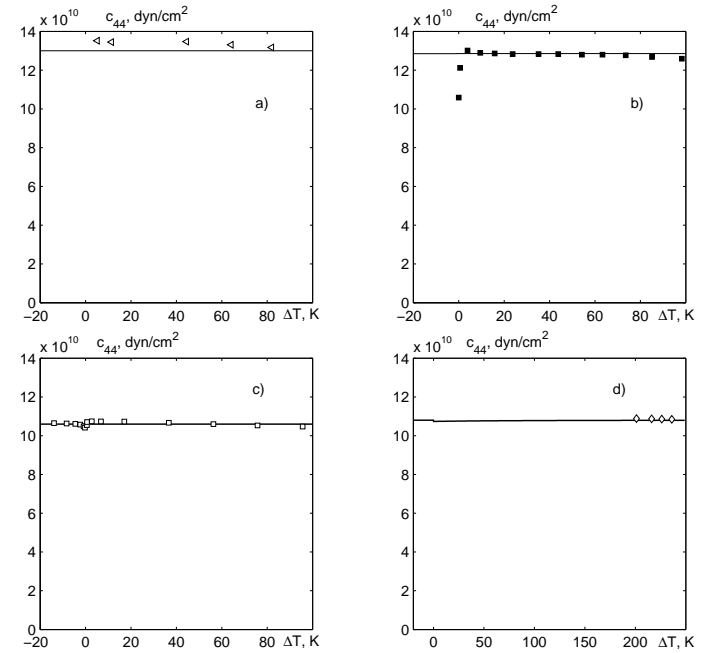


Рис. 6. Температурна залежність пружної сталі  $c_{44}^E$  кристалів  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  – а),  $\triangleleft$  – [48],  $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$  – б),  $\blacksquare$  [51];  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  – с),  $\square$  – [51],  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$  – д),  $\diamond$  – [50].

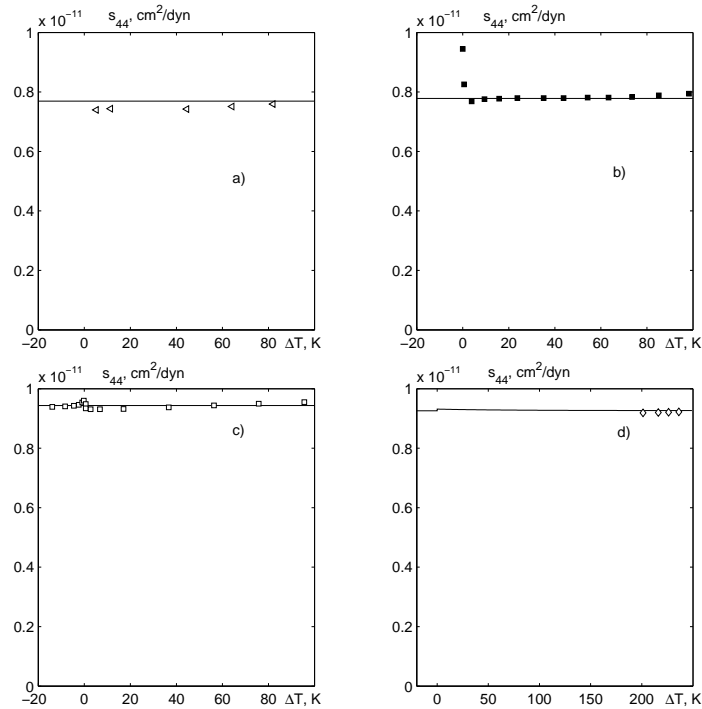


Рис. 7. Температурна залежність податливості  $s_{44}^E$  кристалів  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  – a),  $\triangleleft$  – [48],  $\text{K}(\text{H}_{0.12}\text{D}_{0.88})_2\text{PO}_4$  – b),  $\blacksquare$  [51];  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  – c),  $\square$  – [51],  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$  – d),  $\diamond$  – [50].

них значеннях температур і частот для цих кристалів, а також розраховані на основі запропонованої теорії температурні залежності  $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$  і  $\varepsilon''_{11}(\omega, T)$  при частотах від  $\omega = 0$  Гц до 1000 ГГц наведені на рис.8-13.

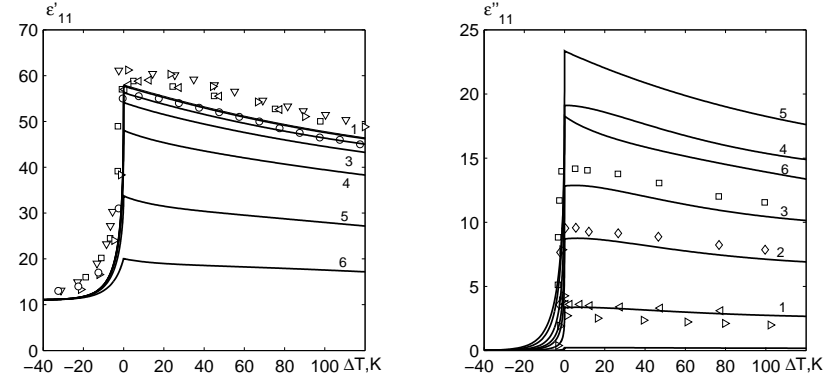


Рис. 8. Температурна залежність  $\varepsilon'_{11}$  і  $\varepsilon''_{11}$   $\text{KH}_2\text{PO}_4$  при різних частотах  $\nu$  (ГГц): 0 –  $\circ$  [45]; 9.2 –  $\nabla$  [55]; 138.6 –  $\triangle$  [24],  $\triangleright$  [58]; 372.0 – 2,  $\diamond$  [24]; 576.0 – 3,  $\square$  [24]; 800.0 – 5; 1500.0 – 6. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

Із рис.8-11 видно, що мікротеорія в цілому дає добрий кількісний опис температурної залежності  $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$  і  $\varepsilon''_{11}(\omega, T)$  для  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$  за винятком даних робіт [24, 58] для  $\varepsilon'_{11}(\omega)$  при  $x = 0,0$ . Розраховані значення  $\varepsilon'_{11}(\omega)$  в цьому випадку менші на  $\sim 12\%$  від експериментальних даних. Але відмітимо, що значення статичної проникності  $\varepsilon_{11}(0, T)$  робіт [45, 47, 52] менші, ніж отримані в [24, 58] значення  $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$  і які виміряні при частотах, на яких дисперсія ще не спостерігається.

Температурний хід  $\varepsilon'_{11}(\omega)$  характеризується в параелектричній фазі при  $T = T_c$  неглибоким мінімумом, який при збільшенні частоти зменшується. При рості температури величина  $\varepsilon'_{11}(\omega)$  повільно зростає, досягаючи максимуму, яке при підвищенні частоти зміщується в область вищих температур. При збільшенні концентрації дейтерію значення  $\varepsilon'_{11}^{\min}(\omega)$  зменшується, наприклад, для  $\nu = 138,6$  ГГц при  $x = 0,0$  ця величина дорівнює 57,0, при  $x = 0,64$  – 42,0,  $x = 0,84$  – 33,2 і  $x = 0,93$  – 31,2. У сегнетоелектричній фазі при зменшенні  $|\Delta T|$  величина  $\varepsilon'_{11}(\omega)$  дуже слабо зростає, а при  $|\Delta T| \rightarrow 0$  стрімко збільшується, досягаючи максимуму. Дисперсії  $\varepsilon'_{11}(\omega)$  у цій фазі

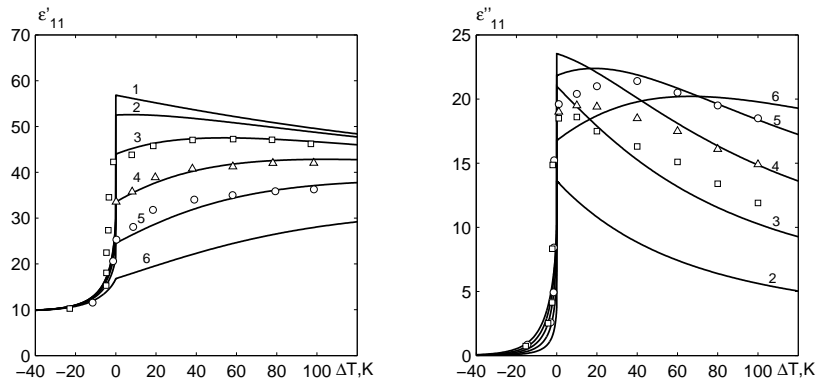


Рис. 9. Температурна залежність  $\varepsilon'_{11}$  і  $\varepsilon''_{11}$   $\text{K}(\text{H}_{0.36}\text{D}_{0.64})_2\text{PO}_4$  при різних частотах  $\nu$  (ГГц): 0.0 – 1; 80.0 – 2; 154.2 – 3,  $\square$ ; 249.0 – 4,  $\triangle$ ; 372.0 – 5,  $\circ$ ; 600.0 – 6. Точки – експериментальні [24], лінії – теоретичні значення.

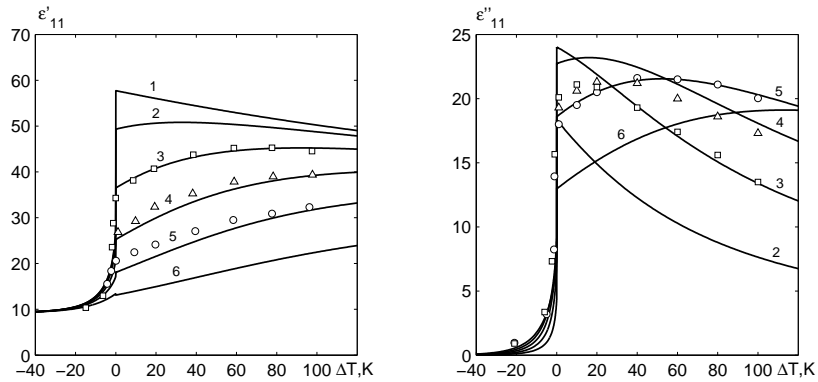


Рис. 10. Температурна залежність  $\varepsilon'_{11}$  і  $\varepsilon''_{11}$   $\text{K}(\text{H}_{0.16}\text{D}_{0.84})_2\text{PO}_4$  при різних частотах  $\nu$  (ГГц): 0.0 – 1; 80.0 – 2; 154.2 – 3,  $\square$ ; 249.0 – 4,  $\triangle$ ; 372.0 – 5,  $\circ$ ; 600.0 – 6. Точки – експериментальні [24], лінії – теоретичні значення.

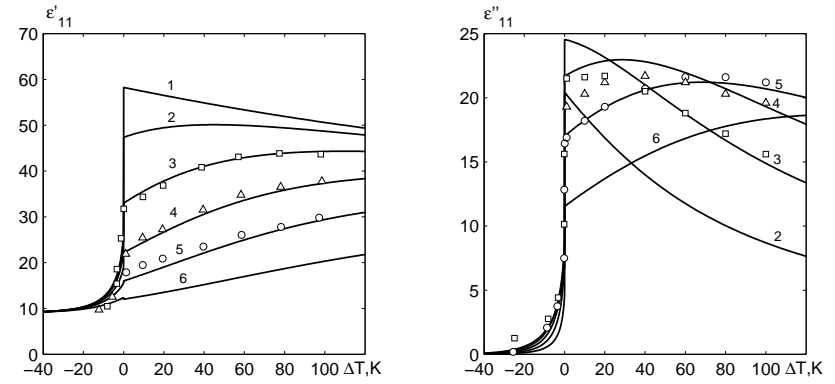


Рис. 11. Температурна залежність  $\varepsilon'_{11}$  і  $\varepsilon''_{11}$   $\text{K}(\text{H}_{0.07}\text{D}_{0.93})_2\text{PO}_4$  при різних частотах  $\nu$  (ГГц): 0.0 – 1; 80.0 – 2; 154.2 – 3,  $\square$ ; 249.0 – 4,  $\triangle$ ; 372.0 – 5,  $\circ$ ; 600.0 – 6. Точки – експериментальні [24], лінії – теоретичні значення.

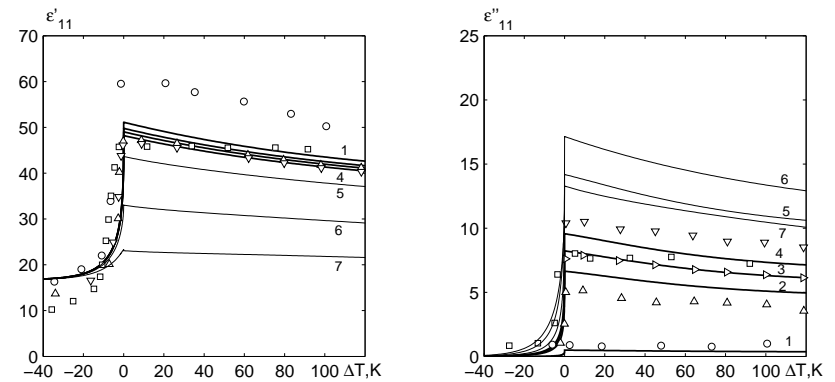


Рис. 12. Температурна залежність  $\varepsilon'_{11}$  і  $\varepsilon''_{11}$   $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  при різних частотах  $\nu$  (ГГц): 27.0 – 1,  $\circ$  [56]; 342.0 –  $\square$  [57]; 381.0 – 2,  $\triangle$  [49]; 483.0 – 3,  $\triangleright$  [49]; 576.0 – 4,  $\nabla$  [49]; 1000.0 – 5; 2000.0 – 6; 4000.0 – 7. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

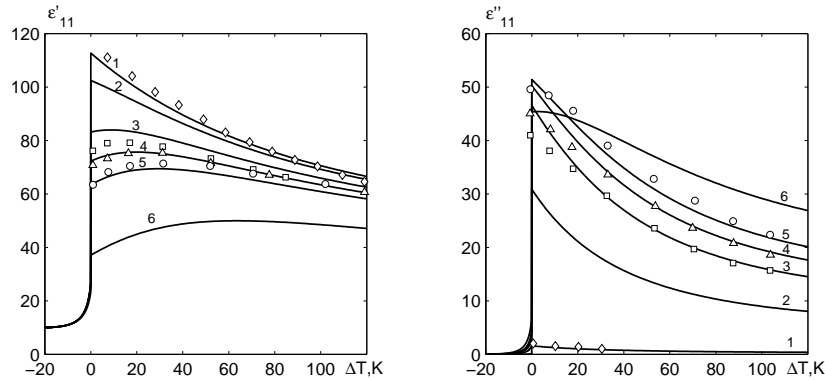


Рис. 13. Температурна залежність  $\varepsilon'_{11}$  і  $\varepsilon''_{11}$   $\text{KN}_2\text{AsO}_4$  при різних частотах  $\nu$  (ГГц): 9.2 – 1,  $\diamond$  [55]; 200.0 – 2; 381.0 – 3,  $\square$  [49]; 483.0 – 4,  $\triangle$  [49]; 576.0 – 5,  $\circ$  [49]; 1000.0 – 6. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

практично не спостерігається.

Аналогічна температурна залежність і  $\varepsilon''_{11}(\omega)$  в сегнетофазі. В параелектричній фазі при частотах субміліметрового діапазону для  $\varepsilon''_{11}(\omega)$  властивий мінімум при  $T = T_c$ , який у кристалах з  $x$  від 0,0 до  $\sim 0,7$  з ростом частоти збільшується, а при наступному збільшенні  $x$  – зменшується. При збільшенні температури величина  $\varepsilon''_{11}(\omega)$  зростає, досягаючи максимуму, який при  $x > 0,64$  дуже слабо залежить від частоти і концентрації дейтерію. Оскільки криві  $\varepsilon''_{11}(\omega, T)$ , які відносяться до різних частот, перетинаються при певних  $\Delta T$  для високодейтерованих кристалів, то при збільшенні температури  $\Delta T$  аномальна дисперсія змінюється на нормальну.

Як видно з рис.12, розраховані значення  $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$   $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  добре описують дані експерименту [49]. Вимірювання  $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$ , виконані на частоті 27 ГГц [56], дають величини  $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$ , які значно більші від  $\varepsilon_{11}(0, T)$  [47]. На частотах, при яких проводились дослідження в [49], відповідають лише початку дисперсії  $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$ . Експериментальні ж [49] криві  $\varepsilon''_{11}(\omega, T)$  розмиті значно сильніше, ніж розраховані.

У випадку кристалу  $\text{KN}_2\text{AsO}_4$  температурна залежність експериментально отриманих  $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$  і  $\varepsilon''_{11}(\omega, T)$  у роботах [49,55] адекватно відтворюється результатами розрахунку (рис.13).

Розраховані на основі запропонованої теорії частотні залежності  $\varepsilon'_{11}(\omega, T)$  і  $\varepsilon''_{11}(\omega, T)$  при різних температурах  $\Delta T$  добре описують

експериментальні дані робіт [24,49] для  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ ,  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  і  $\text{KN}_2\text{AsO}_4$  і результати вимірювань  $\varepsilon_{11}^*(\omega)$  [55] для  $\text{KN}_2\text{AsO}_4$  (рис.14–19). Дещо гірше узгодження теорії і даних експериментів [55,58] для частотного ходу  $\varepsilon'_{11}(\omega)$ , отриманого при  $x = 0,0$  і  $x = 0,63$  для  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$  (рис.14,15) і для  $\varepsilon_{11}^*(\omega)$  [56,57] кристалу  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  (рис.18).

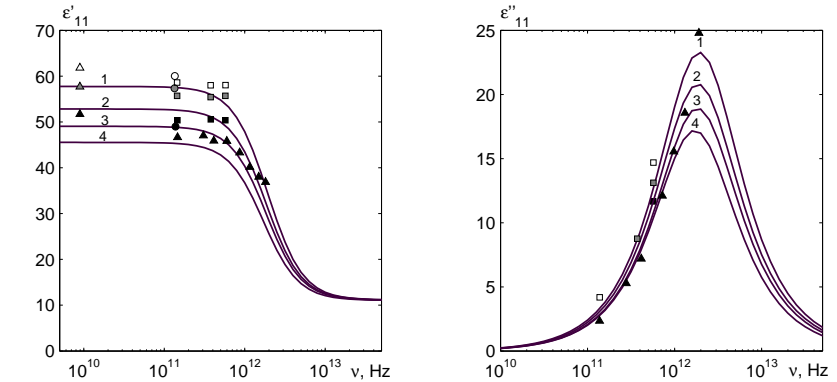


Рис. 14. Частотна залежність  $\varepsilon'_{11}$  і  $\varepsilon''_{11}$   $\text{KN}_2\text{PO}_4$  при різних температурах  $\Delta T$ (К): 1 – 1,  $\circ$  [58],  $\square$  [24],  $\triangle$  [55]; 50 – 2,  $\circ$  [58],  $\square$  [24],  $\triangle$  [55]; 100 – 3,  $\bullet$  [58],  $\blacksquare$  [24],  $\blacktriangle$  [55]; 173 – 4,  $\bullet$  [58]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

При збільшенні концентрації дейтерію  $x$  частота дисперсії  $\nu_{T1}$  при  $\Delta T = +0$  К зменшується, а значення  $\varepsilon''_{11}^{\max}$  незначно збільшується (табл.5).

Табл. 5.

	$\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$				$\text{RbH}_2\text{PO}_4$	$\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{AsO}_4$
	$x=0.00$	$x=0.64$	$x=0.84$	$x=0.93$		
$\nu_{T1}$ , ГГц	1935	251	174	150	1893	599
$\varepsilon''_{11}^{\max}$	23.3	23.5	24.2	24.6	17.2	51.4

При рості  $\Delta T$  частота дисперсії  $\varepsilon_{11}^*(\omega)$  кристалів  $\text{KN}_2\text{PO}_4$  і  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  не змінюється, а при збільшенні  $x$  в  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$  і в  $\text{KN}_2\text{AsO}_4$  збільшується, при цьому максимальне значення  $\varepsilon''_{11}(\omega)$  зменшується.



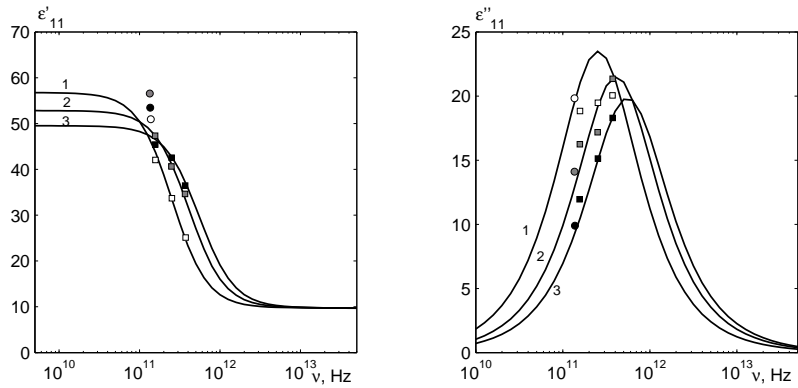


Рис. 15. Частотна залежність  $\varepsilon'_{11}$  і  $\varepsilon''_{11}$   $\text{K}(\text{H}_{0.36}\text{D}_{0.64})_2\text{PO}_4$  при різних температурах  $\Delta T(\text{K})$  [24]: 1 – 1,  $\square$ ; 50 – 2,  $\blacksquare$ ; 100 – 3,  $\blacksquare$ ;  $\text{K}(\text{H}_{0.37}\text{D}_{0.63})_2\text{PO}_4$  при різних температурах  $\Delta T(\text{K})$  [19]: 1 – 1,  $\circ$ ; 50 – 2,  $\bullet$ ; 100 – 3,  $\bullet$ . Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

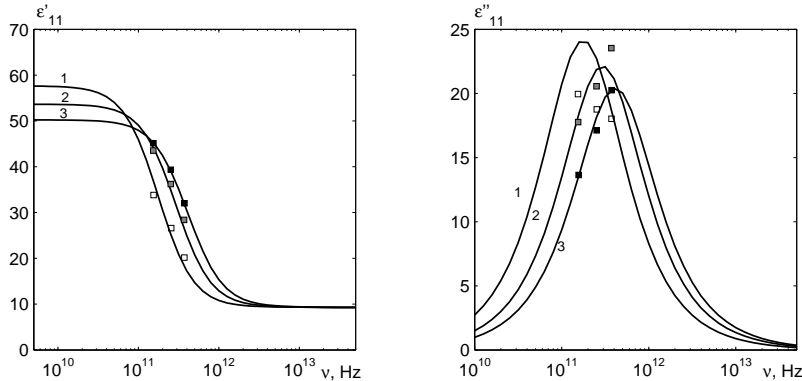


Рис. 16. Частотна залежність  $\varepsilon'_{11}$  і  $\varepsilon''_{11}$   $\text{K}(\text{H}_{0.16}\text{D}_{0.84})_2\text{PO}_4$  при різних температурах  $\Delta T(\text{K})$  [24]: 1 – 1,  $\square$ ; 50 – 2,  $\blacksquare$ ; 100 – 3,  $\blacksquare$ . Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

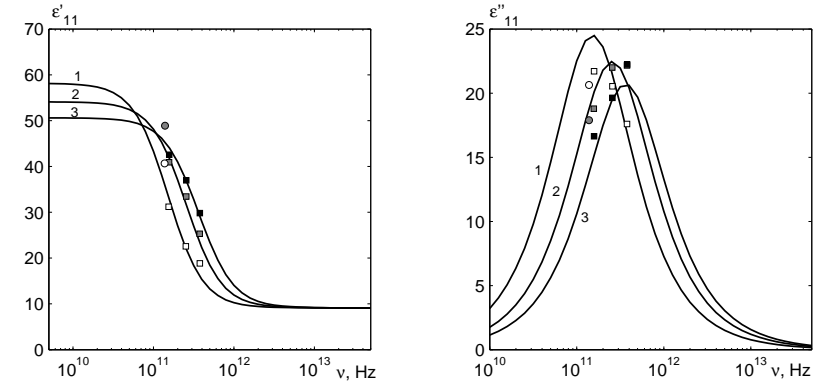


Рис. 17. Частотна залежність  $\varepsilon'_{11}$  і  $\varepsilon''_{11}$   $\text{K}(\text{H}_{0.07}\text{D}_{0.93})_2\text{PO}_4$  при різних температурах  $\Delta T(\text{K})$  [24]: 1 – 1,  $\square$ ; 50 – 2,  $\blacksquare$ ; 100 – 3,  $\blacksquare$ ;  $\text{K}(\text{H}_{0.09}\text{D}_{0.91})_2\text{PO}_4$  при різних температурах  $\Delta T(\text{K})$  [19]: 1 – 1,  $\circ$ ; 50 – 2,  $\bullet$ ; 100 – 3,  $\bullet$ . Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

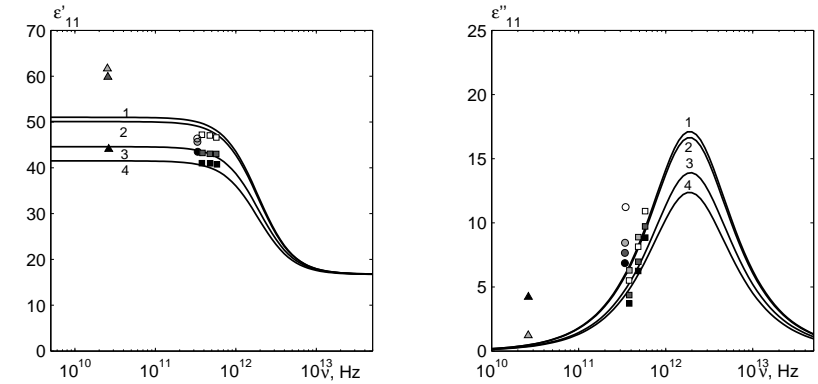


Рис. 18. Частотна залежність  $\varepsilon'_{11}$  і  $\varepsilon''_{11}$   $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  при різних температурах  $\Delta T(\text{K})$ : 1 – 1,  $\square$  [49],  $\circ$  [57],  $\triangle$  [56]; 10 – 2,  $\blacksquare$  [49],  $\bullet$  [57],  $\triangle$  [56]; 80 – 3,  $\blacksquare$  [49],  $\bullet$  [57],  $\triangle$  [56]; 150 – 4,  $\blacksquare$  [49],  $\bullet$  [57],  $\triangle$  [56]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

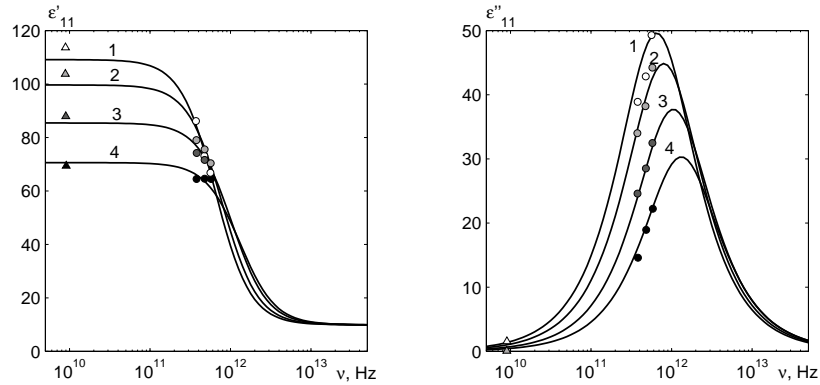


Рис. 19. Частотна залежність  $\varepsilon'_{11}$  і  $\varepsilon''_{11}$   $\text{KN}_2\text{AsO}_4$  при різних температурах  $\Delta T(\text{K})$ : 5 – 1,  $\circ$  [49],  $\Delta$  [55]; 20 – 2,  $\circ$  [49],  $\Delta$  [55]; 50 – 3,  $\bullet$  [49],  $\blacktriangle$  [55]; 100 – 4,  $\bullet$  [49],  $\blacktriangle$  [55]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

Як видно з табл.5 і рис.20, ізоморфне заміщення  $\text{K} \rightarrow \text{Pb}$  майже не змінює частоти дисперсії  $\varepsilon_{11}^*(\omega)$ , а значення  $\varepsilon'_{11}(\omega)$  і  $\varepsilon''_{11}(\omega)$  зменшуються на  $\sim 26\%$ . Якщо  $\text{P} \rightarrow \text{As}$ , то частота дисперсії зменшується, а величина  $\varepsilon_{11}^*(\omega)$  зростає майже вдвічі.

На рис.21–28 наведено температурно-частотні залежності  $\varepsilon'_{11}(\omega)$  і  $\varepsilon''_{11}(\omega)$  для  $\text{KN}_2\text{PO}_4$ ,  $\text{K}(\text{H}_{0,07}\text{D}_{0,93})_2\text{PO}_4$ ,  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  і  $\text{KN}_2\text{AsO}_4$ , розрахунки яких проведені в широкому температурному і частотному діапазонах.

Температурна залежність оберненого часу релаксації  $(\tau_1^x)^{-1}(T)$  для кристалів  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$  при різних значеннях  $x$ ,  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  і  $\text{KN}_2\text{AsO}_4$  наведена на рис.29. Як видно, для  $(\tau_1^x)^{-1}(T)$  характерна лінійна залежність від температури. Значення  $\tau_1^x(T)$  для  $\text{KN}_2\text{PO}_4$  і  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  близькі між собою і практично не залежать від температури. Збільшення концентрації дейтерію  $x$  приводить до росту  $\tau_1^x(T)$  і незначної температурної залежності.

Порівняння результатів розрахунку  $\tau_1^x$  для  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$  на основі запропонованої теорії у випадку  $\nu_1(0) = 0$  із відповідними результатами роботи [18], показує, що вони є досить близькими між собою. Однак врахування далекодії при описі  $\varepsilon_{11}^*(\omega, T)$  покращує кількісне узгодження теорії з експериментом. Отримані в [25] температурні залежності часів релаксації, які одержані в результаті обробки

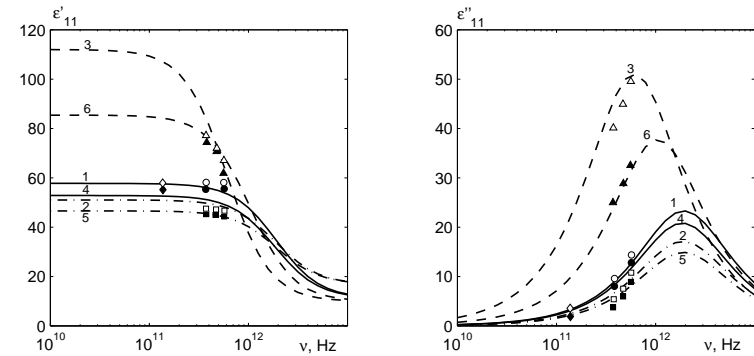


Рис. 20. Частотна залежність  $\varepsilon'_{11}$  і  $\varepsilon''_{11}$  сегнетоелектричних ортофосфатів: при  $\Delta T=1\text{K}$ :  $\text{KN}_2\text{PO}_4$  – 1,  $\circ$  [49],  $\diamond$  [58];  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  – 2,  $\square$  [49];  $\text{KN}_2\text{AsO}_4$  – 3,  $\Delta$  [49]; при  $\Delta T=50\text{K}$ :  $\text{KN}_2\text{PO}_4$  – 4,  $\bullet$  [49],  $\blacklozenge$  [58];  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  – 5,  $\blacksquare$  [49];  $\text{KN}_2\text{AsO}_4$  – 6,  $\blacktriangle$  [49].

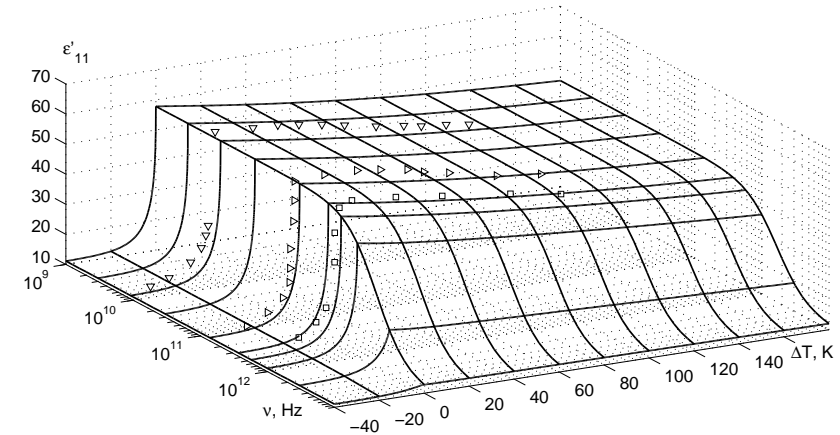


Рис. 21. Частотно-температурна залежність  $\varepsilon'_{11}$   $\text{KN}_2\text{PO}_4$ .  $\nabla$  – [55],  $\triangleright$ ,  $\square$  – [24]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

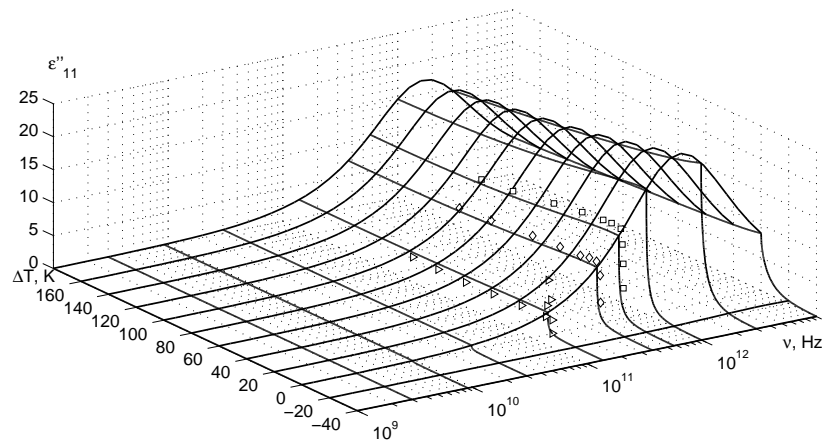


Рис. 22. Частотно-температурна залежність  $\varepsilon''_{11}$   $\text{KN}_2\text{PO}_4$ .  $\nabla$ ,  $\triangleright$ ,  $\square$  – [24]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

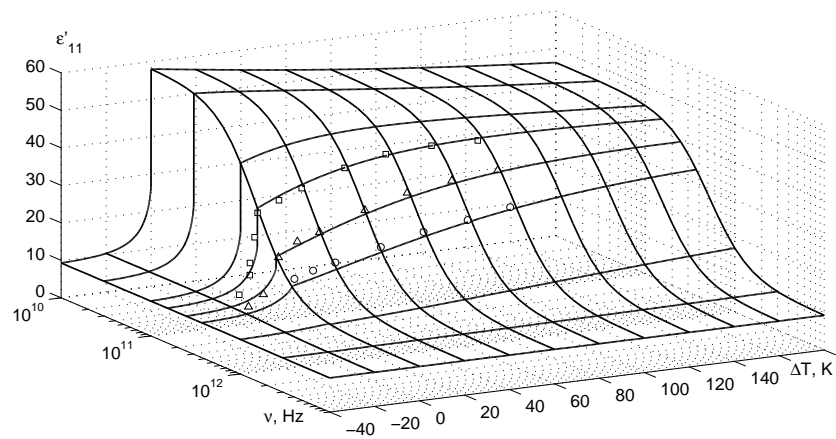


Рис. 23. Частотно-температурна залежність  $\varepsilon'_{11}$   $\text{K}(\text{H}_{0.07}\text{D}_{0.93})_2\text{PO}_4$ .  $\square$ ,  $\triangle$ ,  $\circ$  – [24]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

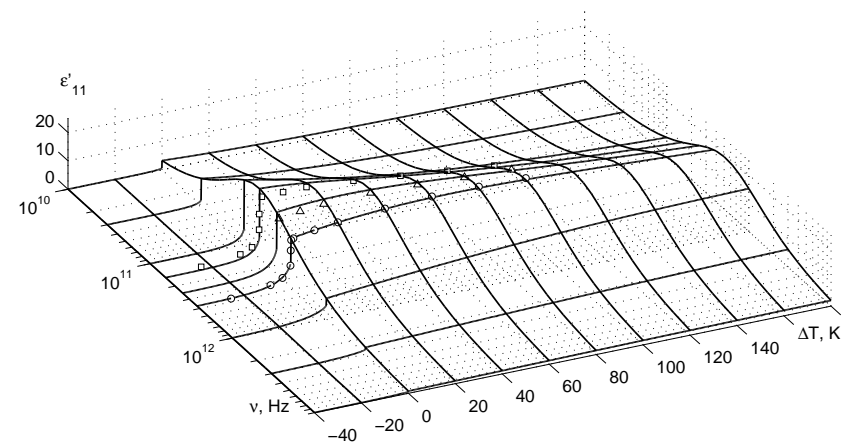


Рис. 24. Частотно-температурна залежність  $\varepsilon''_{11}$   $\text{K}(\text{H}_{0.07}\text{D}_{0.93})_2\text{PO}_4$ .  $\square$ ,  $\triangle$ ,  $\circ$  – [24]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

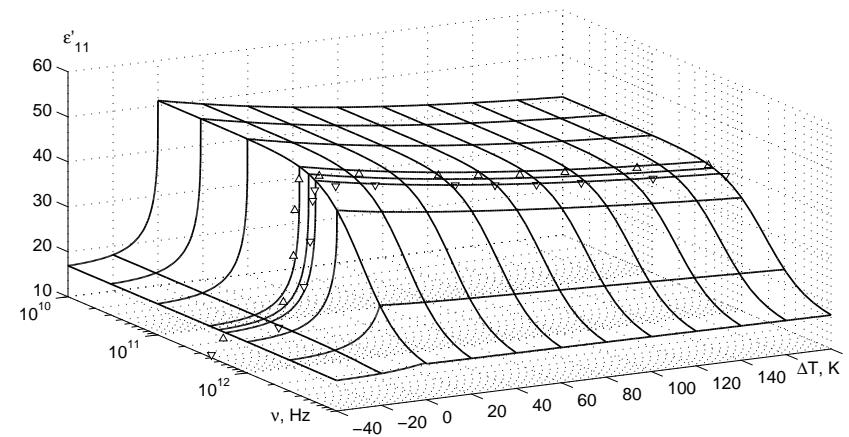


Рис. 25. Частотно-температурна залежність  $\varepsilon'_{11}$   $\text{RbH}_2\text{PO}_4$ .  $\triangle$ ,  $\nabla$  – [49]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

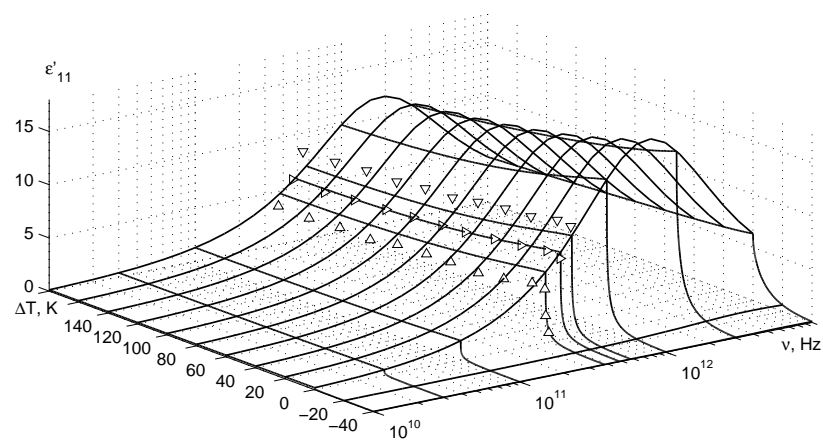


Рис. 26. Частотно-температурна залежність  $\varepsilon''_{11}$   $\text{RbH}_2\text{PO}_4$ .  $\Delta$ ,  $\triangleright$ ,  $\nabla$  – [49]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

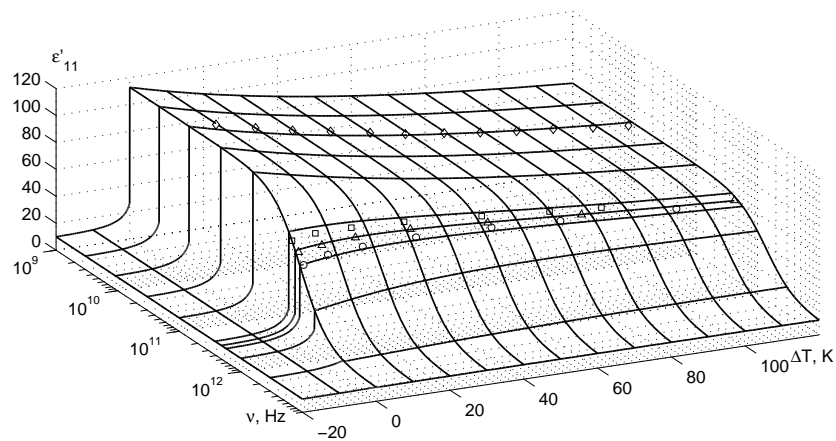


Рис. 27. Частотно-температурна залежність  $\varepsilon'_{11}$   $\text{KH}_2\text{AsO}_4$ .  $\diamond$  – [55];  $\square$ ,  $\Delta$ ,  $\circ$  – [49]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

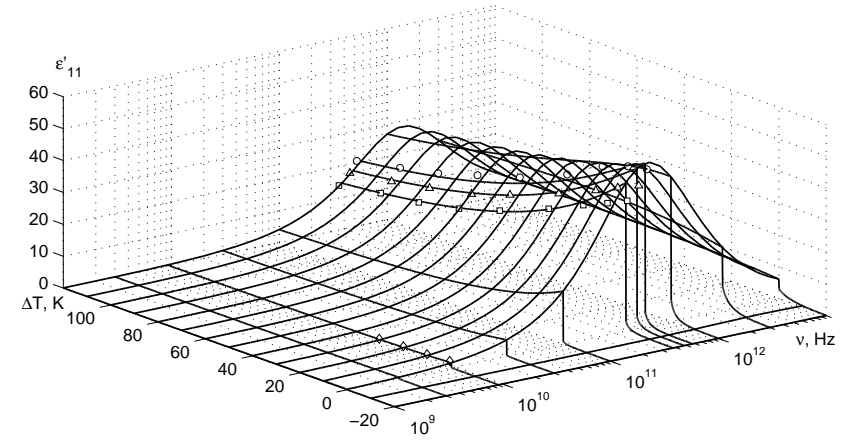


Рис. 28. Частотно-температурна залежність  $\varepsilon''_{11}$   $\text{KH}_2\text{AsO}_4$ .  $\diamond$  – [55];  $\square$ ,  $\Delta$ ,  $\circ$  – [49]. Точки – експериментальні, лінії – теоретичні значення.

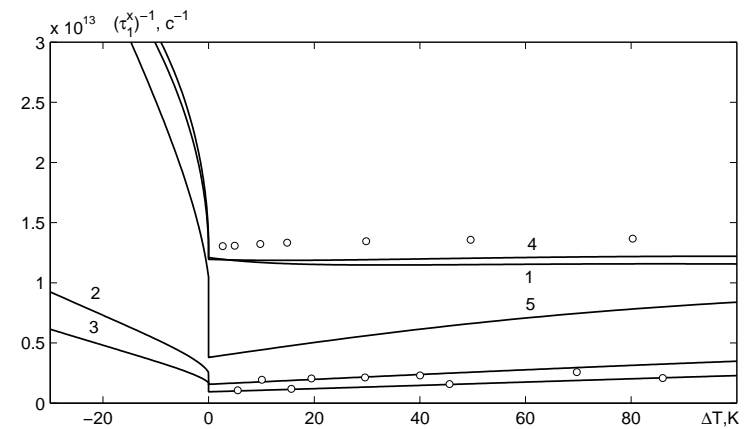


Рис. 29. Температурна залежність оберненого часу релаксації поляризації  $(\tau_1^x)^{-1}$   $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$  при різних  $x$ : 0.0 – 1; 0.64 – 2; 0.84 – 3; 0.93 – 4;  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  – 5;  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$  – 6.

експериментальних даних на базі феноменологічної моделі дисперсії, добре узгоджуються із результатами розрахунків на основі мікротеорії (рис.29).

Проаналізуємо тепер температурні і частотні залежності розрахованих динамічних характеристик механічно вільних кристалів  $M(H_{1-x}D_x)_2XO_4$ , які вирізані у вигляді квадратної пластинки зі сторонами  $l = 1$  мм у площині  $[1, 0, 0]$ . Для числових розрахунків у цьому випадку треба задати значення тих же параметрів теорії, які були використані при описі статичної і динамічної діелектричної проникності механічно затиснутого кристалу і п'єзоелектричних модулів.

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

На рис.30 наведено температурні залежності дійсної та уявної частин діелектричної проникності  $\varepsilon_{11}^{*\sigma}$  кристалів  $KH_2PO_4$ ,  $K(H_{0,07}D_{0,93})_2PO_4$ ,  $RbH_2PO_4$  і  $KH_2AsO_4$  при частоті, що відповідає приблизно резонансній частоті того чи іншого кристалу. З рівняння для резонансних частот

$$\nu_n = \frac{2n+1}{2l} \sqrt{\frac{c_{44}^E}{\rho}}$$

для  $KH_2PO_4$  і  $n = 1$ , зокрема отримуємо, що  $\nu_1 = 1,185943424$  МГц, а резонанс  $\varepsilon'_{11}$  спостерігається в дуже вузькому частотному околі, а саме  $1,185943423 - 1,185943425$  МГц. Величина ж  $\varepsilon'_{11}(\nu_1)$  досягає значення  $\sim 10^7$ .

На відміну від температурного ходу  $\varepsilon_{33}^{*\sigma}$ , в якому спостерігались в кожній фазі по кілька резонансних піків, на кривих  $\varepsilon_{11}^{*\sigma}(\Delta T)$  при певній частоті має місце один резонансний пік. Це пов'язано з тим, що  $c_{66}^E$  є температурно залежною величиною, а  $c_{44}^E$  практично стала в обох фазах. Для кристалів  $KH_2PO_4$ ,  $K(H_{0,07}D_{0,93})_2PO_4$ ,  $RbH_2PO_4$  і  $KH_2AsO_4$  при однаковому значенні  $n$  резонансні піки спостерігаються при різних  $\Delta T$ .

Частотні залежності дійсної та уявної частин діелектричної проникності  $\varepsilon_{11}^{*\sigma}$  кристалів  $KH_2PO_4$ ,  $K(H_{0,07}D_{0,93})_2PO_4$ ,  $RbH_2PO_4$  та  $KH_2AsO_4$  при температурі  $\Delta T = 5$  К наведені на рис.31. В області частот  $10^{-10} - 10^8$  Гц має місце дисперсія резонансного типу. При  $\omega \rightarrow 0$  отримуємо статичну діелектричну проникність вільного кристалу. Штрихова лінія відповідає низькочастотному ходу проникності затиснутого кристалу. Вище від резонансних частот спостерігається

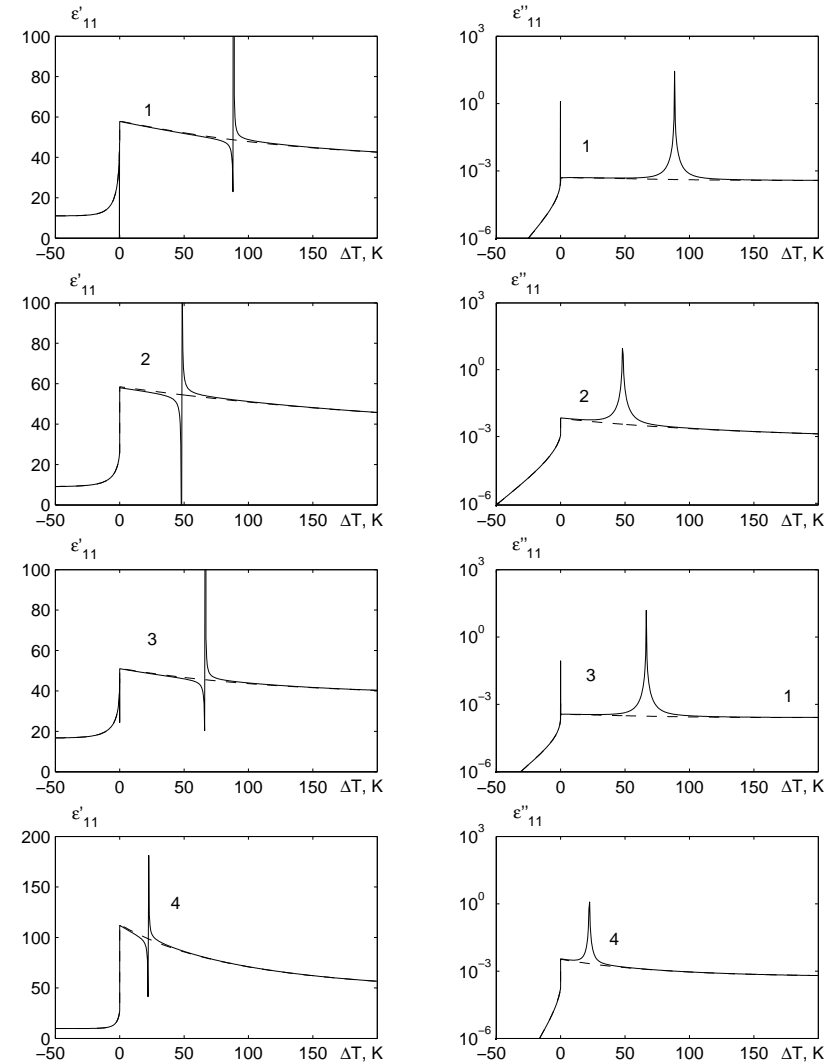


Рис. 30. Температурні залежності дійсної та уявної частин діелектричної проникності вільних кристалів  $KH_2PO_4$  (1),  $K(H_{0,07}D_{0,93})_2PO_4$  (2),  $RbH_2PO_4$  (3),  $KH_2AsO_4$  (4) при частотах  $\nu$ , МГц: 1 – 20.162, 2 – 19.807, 3 – 20.060, 4 – 20.000.

затискання кристалу високочастотним полем і для проникності затиснутого кристалу вище частот  $10^9$  Гц має місце дисперсія релаксаційного типу. Невеликі значення резонансних піків для  $\epsilon'_{11}$  обумовлені тим, що вони не відповідають точно резонансним частотам. Щоб досягнути цього, розрахунок потрібно було б проводити з кроком  $10^{-9}$  Гц.

Температурні залежності динамічних  $e_{14}^*(\omega)$ ,  $d_{14}^*(\omega)$ ,  $c_{44}^*(\omega)$  та  $s_{44}^*(\omega)$  для кристалів  $\text{KN}_2\text{PO}_4$  на частоті  $\nu = 302,55$  ГГц,  $\text{K}(\text{H}_{0,07}\text{D}_{0,93})_2\text{PO}_4$  при  $\nu = 25,48$  ГГц,  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  при  $\nu = 302,55$  ГГц і  $\text{KN}_2\text{AsO}_4$  при  $\nu = 103,50$  ГГц наведені на рис.32, а частотні залежності цих характеристик при  $\Delta T = 5$  К – на рис.33. При частотах менших  $10^{11}$  Гц значення дійсних частин  $e'_{14}(\omega)$  і  $d'_{14}(\omega)$  є незмінними, а при збільшенні частоти ці величини зменшуються. В частотному ході  $e''_{14}$ ,  $d''_{14}$ ,  $c_{44}^{E''}$ ,  $s_{44}^{E''}$  спостерігається максимум на частотах, які мають різне значення для кристалів  $\text{KN}_2\text{PO}_4$ ,  $\text{K}(\text{H}_{0,07}\text{D}_{0,93})_2\text{PO}_4$ ,  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  і  $\text{KN}_2\text{AsO}_4$ .

## 9. Завершальні зауваження

У даній роботі розглянуто модифіковану протонну модель, у межах якої можна вивчати впливи механічної напруги  $\sigma_4$  та електричних полів  $E_i$  з врахуванням спонтанної деформації  $\epsilon_6$  на п'єзоелектричні, діелектричні та пружні властивості сегнетоелектриків типу  $\text{KD}_2\text{PO}_4$ . У межах цієї моделі, використовуючи наближення чотиричастинкового кластера за короткосяжними взаємодіями та молекулярного поля за далекосяжними, отримані вирази для коефіцієнтів п'єзоелектричної напруги  $e_{14}$ , статичних поперечних діелектричних сприйнятливостей при сталій деформації  $\chi_{11}^\epsilon$ ,  $\chi_{22}^\epsilon$ . В роботі розраховано пружні сталі при постійному полі  $c_{44}^E$ . Запропонована модель дала можливість при належному виборі параметрів теорії адекватно кількісно описати експериментальні дані для температурних залежностей діелектричних, п'єзоелектричних та пружних характеристик, які пов'язані з деформацією  $\epsilon_4$  та полем  $E_1$ , сегнетоелектриків  $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$ .

В роботі розраховані поперечні динамічні проникності затиснутих і механічно вільних кристалів типу  $\text{KD}_2\text{PO}_4$ . Показано, що в певній частотній області спостерігається п'єзоелектричний резонанс. Запропонована теорія задовільно описує дані експериментів для кристалів  $\text{M}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{XO}_4$ .

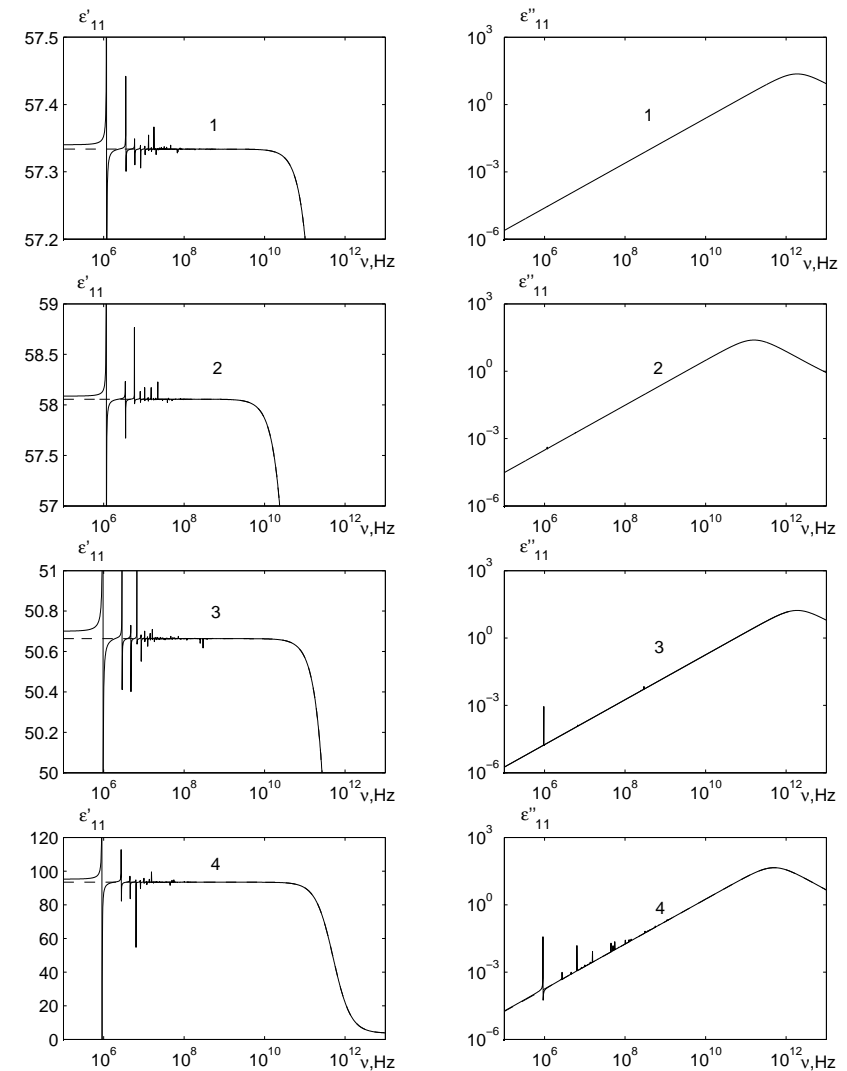


Рис. 31. Частотні залежності дійсної та уявної частини діелектричної проникності вільних кристалів  $\text{KN}_2\text{PO}_4$  (1),  $\text{K}(\text{H}_{0,07}\text{D}_{0,93})_2\text{PO}_4$  (2),  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  (3),  $\text{KN}_2\text{AsO}_4$  (4) при температурі  $\Delta T=5$ К.

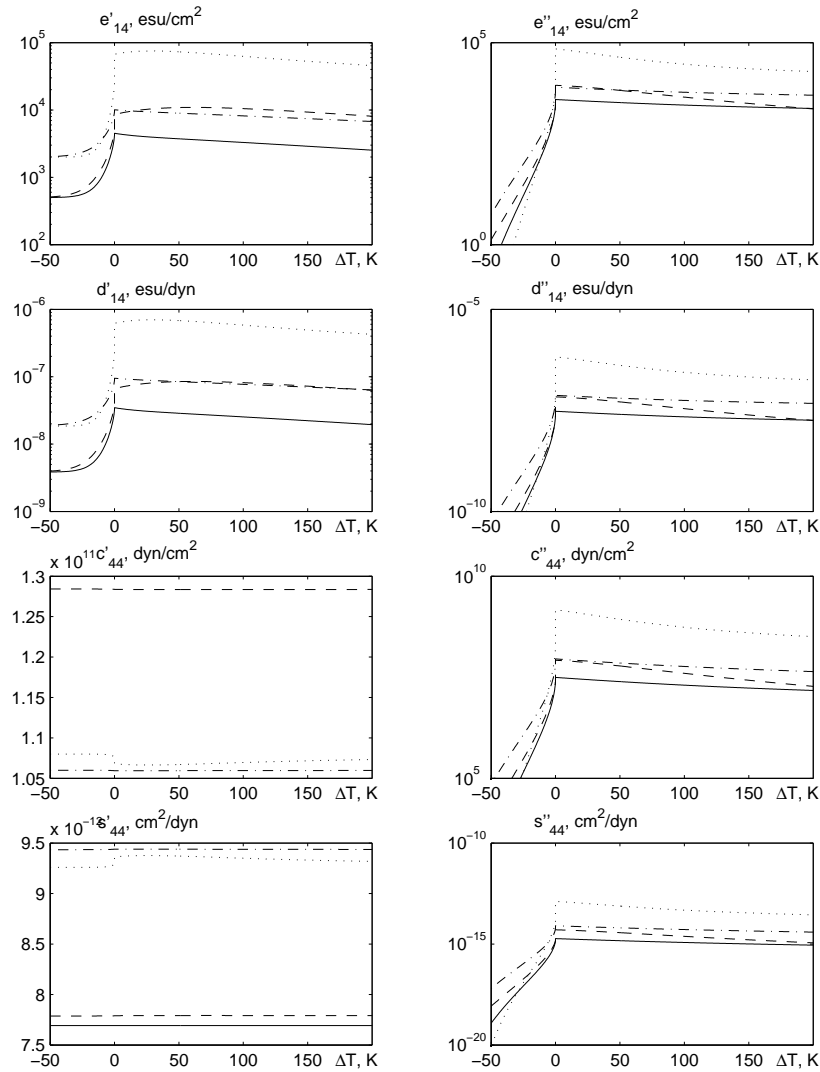


Рис. 32. Температурні залежності дійсної та уявної частини  $e'_{14}$ ,  $d'_{14}$ ,  $c'_{44}$ ,  $s'_{44}$  кристалів  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  (—),  $\text{K}(\text{H}_{0.07}\text{D}_{0.93})_2\text{PO}_4$  (---),  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  (-.-.-),  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$  (.....) при частотах  $\nu$  відповідно 1900, 160, 1900, 650 ГГц.

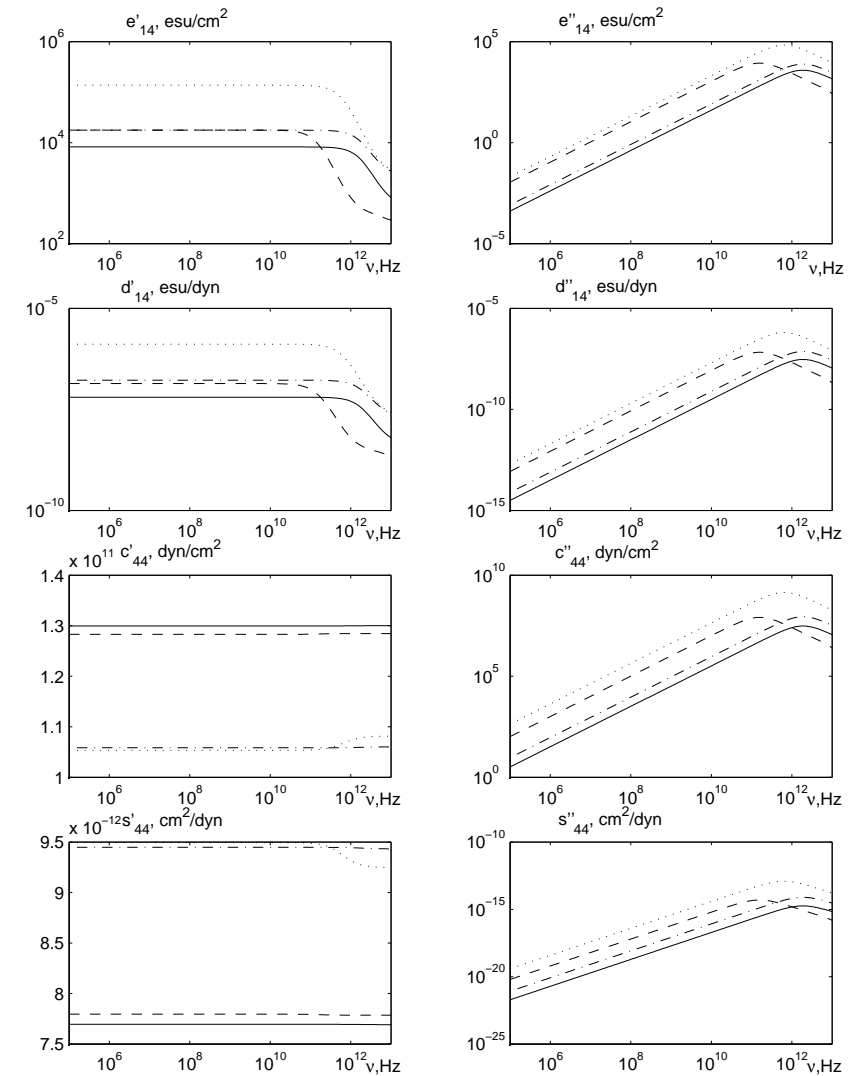


Рис. 33. Частотні залежності дійсної та уявної частини  $e'_{36}$ ,  $d'_{36}$ ,  $c'_{66}$ ,  $s'_{66}$  кристалів  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  (—),  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  (---),  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  (-.-.-) і  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$  (.....) при  $\Delta T = 5\text{K}$ .

## Література

1. Yomosa Sh., Nagamiya T. The phase transition and the piezoelectric effect of  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ . // *Progr. Theor. Phys.*, 1949, v. 4, № 3, p. 263–274.
2. Slater J.C. Theory of the transition in  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ . // *J. Chem. Phys.*, 1941, v. 9, № 1, p. 16–33.
3. Стасюк І.В., Камінська Н.М. Теорія спонтанної поляризації і деформації сегнетоелектриків типу  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ . // *УФЖ*, 1974, т. 19, в. 2, с. 237–252.
4. Стасюк І.В., Билецкий І.Н. Фазовые переходы в одноосногодеформированных сегнетоэлектриках типа  $\text{KD}_2\text{PO}_4$ . / Препринт ИТФ–83–93Р, Киев, 1983, 25 с.
5. Стасюк І.В., Билецкий І.Н., Стягар О.Н. Индуцированные внешним давлением фазовые переходы в кристаллах  $\text{KD}_2\text{PO}_4$ . // *УФЖ*, 1986, т. 31, № 4, с. 567–571.
6. Stasyuk I.V., Levitskii R.R., Zachek I.R., Moina A.P. The  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  ferroelectrics in external fields conjugate to the order parameter: Shear stress  $\sigma_6$ . // *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  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  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  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  family // *phys. stat. sol. (b)*. - 2004. -Vol.241, №6.-P.1350-1368.
9. Левицький Р.Р., Лісний Б.М., Теорія п'єзоелектричних, пружних та діелектричних властивостей кристалів сім'ї  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  при деформації  $u_6$ . Фазовий перехід та п'єзоелектр у кристалі  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  // *Журн. фіз. досліджень*, 2003, т. 7, №4, с. 431-445.
10. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Вдович А.С. Повздовжні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні, динамічні та теплові властивості сегнетоелектриків типу  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  // Препринт ІСМР-06-08U, Львів, 2006, 116 с.
11. S. Havlin, E. Litov, E.A. Uehling. Transverse Susceptibility in  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ -type crystals // *Phys. Rev. B*, 1974, v. 9, №3, p. 1024-1028.
12. Y. Takagi, T. Shigenavi. Transverse Susceptibility and E-Mode Raman Spencetra of a  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  Crystal // *J. of Phys. Soc. Japan*, 1975, v. 39, №2, p. 440-447.
13. S. Halvin, E. Litov, H. Sompolinsky. The transverse dielectric prop-

- erties of  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  // *Phys. Letters*, 1975, v. 51A, №1, p. 33-35.
14. F. Gilletta, M. Chabin. Longitudinal and transverse dielectric properties of KDP Type Crystals // *Phys. stat. sol. (b)*, 1980, v. 100, p. K77-K82.
15. S. Halvin, E. Litov, H. Sompolinsky. Theoretical and experimental studies of the transverse dielectric properties of  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  // *Phys. Rev. B*, 1976, v. 13, №11, p. 4999-5006.
16. S. Halvin. Longitudinal and transverse dielectric constants of KDP-type ferro- and antiferroelectrics // *Ferroelectrics*, 1987, v. 71, p. 183-223.
17. D.C. Rapport, S. Havlin. Longitudinal and transverse properties of  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  - A monte carlo study // *Solid Stat. Comm.*, 1979, v. 29, p. 611-614.
18. H. Sompolinsky, S. Halvin. Effect of short-range interactions on the transverse dynamics of  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  // *Phys. Rev. B*, 1977, v. 16, №7, p. 3223-3229.
19. Gauss K.E., Happ H. Millimeter Wave Investigation of the Complex Dielectric Constant in DKDP // *Phys. stat. sol. (b)*, 1976, v. 78, p. 133-138.
20. Левицький Р.Р., Зачек І.Р. Релаксационная динамика в дейтерированных ортофосфатах вдоль несегнетоэлектрической оси // Препринт ИТФ-80-105Р, Киев, 1980, 39 с.
21. Levitsky R.R., Korinevsky N.A., Stasyuk I.V. Distribution Function and Thermodynamical Properties of  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  and  $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$  Type Crystals // *Phys. Stat. Sol.*, 1978, v. 88, №1, p. 51-63.
22. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Миц Е.В. Диелектрические свойства сегнетоэлектриков типа  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  // Препринт ИТФ-81-93Р, Киев, 1981, 38 с.
23. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Миц Е.В., Волков А.А., Козлов Г.В., Лебедев С.П. Продольная и поперечная релаксация в  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  // Препринт ИТФ-81-94Р, Киев, 1981, 36 с.
24. Волков А.А., Козлов Г.В., Лебедев С.П., Величко И.А. Диелектрические спектры смешанных кристаллов KDP-DKDP в субмиллиметровом диапазоне волн // *ФТТ*, 1979, т. 21, №11, с. 3304-3309.
25. Козлов Г.В. Субмиллиметровая спектроскопия сегнетоэлектриков типа порядок-беспорядок // Автореф. докт. дисс., Москва, 1982, 41 с.
26. Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Миц Е.В. К теории релаксационных явлений в дейтерированных сегнетоэлектрических ортофосфатах // Препринт ИТФ-82-131Р, Киев, 1982, 42 с.



27. Vaks V.G., Zein N.E., Strukov B.A. On the Theory of Ferroelectric of  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ -KDP Type // *Phys. Stat. Sol. (a)*, 1975, v. 30, №1, p. 801-819.
28. Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Миц Е.В. Термодинамика и продольная релаксация сегнетоэлектриков  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$  // Препринт ИТФ-87-114Р, Киев, 1987, 48 с.
29. Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Миц Е.В. Поперечная релаксация в сегнетоэлектриках типа  $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$  // Препринт ИТФ-87-115Р, Киев, 1987, 48 с.
30. Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Миц Е.В. Релаксационная динамика и термодинамические свойства сегнетоэлектриков с водородными связями типа KDP-DKDP // Препринт ИТФ-89-7Р, Киев, 1989, 45 с.
31. Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики // Москва, "Мир" 1975, 398 с.
32. S. Halvin, E. Litov, H. Sompolinsky. The anomalous temperature dependence of the protonic E-mode in KDP-type crystals // *Phys. Letters*, 1975, v. 53A, №1, p. 41-42.
33. S. Halvin, H. Sompolinsky. Coupling Between Protonic E-Mode and Lattice Vibrations in KDP-Type Crystals // *Ferroelectrics*, 1976, v. 14, p. 617-618.
34. S. Halvin, H. Sompolinsky. Central E-Mode and Transverse Dynamical Properties of KDP-Type Crystals // *Phys. Letters*, 1976, v. 57A, №2, p. 171-172.
35. Havlin S., Sompolinsky H. Low-frequency dynamics of  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ -type crystals // *J. Phys. C: Sol. St. Phys.*, 1979, v. 12, p. 3135-3147.
36. Левицкий Р.Р., Зачек И.Р. Релаксационные явления в ортофосфатах. Метод уравнений Блоха // Препринт ИТФ-80-106Р, Киев, 1980, 33 с.
37. Левицкий Р.Р., Зачек И.Р. К теории релаксационных явлений в ортофосфатах. Метод уравнений Блоха // Препринт ИТФ-82-8Р, Киев, 1982, 42 с.
38. I.V. Stasyuk, R.R. Levitskii, N.A. Korinevskii. Collective vibrations of protons in compounds of  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ -type. The cluster approximation // *Phys. Stat. Sol. (b)*.- 1979.- 91, №2.- P. 541-550.
39. Levitskii R.R., Stasyuk I.V., Korinevsky H.A. Dynamics of ferroactive crystals of orthophosphate type // *Ferroelectrics*. - 1978. - V. 21. - P. 481-483.
40. Кориневский Н.А., Левицкий Р.Р. Динамическая теория ортофосфатов в кластерном приближении // *Теорет. и мат. физика*. - 1980. - Т. 42, №3. - С. 416-429.

41. Blinc R., Schmidt V.H. Soft modes and proton tunneling in  $\text{PbHPO}_4$ , squaric acid and  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  type ferroelectrics // *Ferroelectrics Letters*. - 1984. - V. 1. - P. 119-129.
42. Lisnii B.M., Levitskii R.R. Theory of physical properties of ferro- and antiferroelectrics of the  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  family related to strains  $u_4$  and  $u_5$  // *Ukr. J. Phys.*, 2004, v. 49, №7, p.701-709.
43. Левицкий Р.Р., Моїна А.П., Лісний Б.М. Вплив поздовжнього електричного поля на фазовий перехід і фізичні властивості сегнетоелектриків сім'ї  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  // Препринт ICMP-00-12U, Львів, 2000, 36 с.
44. Glauber J. Time-dependent statistics of the Ising model // *J. Math. Phys.* - 1963. - v.4, №2. - P. 294-307.
45. Волкова Е.Н. Физические свойства сегнетоэлектрических твердых растворов  $\text{K}(\text{D}_x\text{H}_{1-x})_2\text{PO}_4$  // Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Москва, 1991г, с.152.
46. Иона Ф., Ширанэ Д. Сегнетоэлектрические кристаллы. - М.: Мир, 1965. - 555 с.
47. Шувалов Л.А., Желудев И.С, Мнацаканян А.В., Лупудов Ц-Ж., Фиала И. Сегнетоэлектрические аномалии диэлектрических и пьезоэлектрических свойств кристаллов  $\text{RbH}_2\text{PO}_4$  и  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  // *Изв. АН СССР, сер.физ.* - 1967. - Т.31, №11. - С.1919-1922.
48. Мэзон У. Пьезоэлектрические кристаллы и их применение в ультразвуке. - М.: ИЛ, 1952. - 447 с.
49. Volkov A.A., Kozlov G.V., Lebedev S.P., Prokhorov A.M. Proton modes in the crystals of  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  family // *Ferroelectrics*. - 1980. - V.25, №1-4 - P. 531-534.
50. Adhav.R.S. // *J.Appl.Phys.*, 1968, v.39, p.4095.
51. Shuvalov L.A., Mnatsakanyan A.V. The elastic properties of  $\text{KD}_2\text{PO}_4$  crystals over a wide temperature range. // *Sov. Phys. Crystall.*, 1966, vol. 11, №2, p. 210-212.
52. Кенциг В. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. - М.: ИЛ, 1960. - 234 с.
53. Струков Б.А., Баддур А., Кошчик В.А., Величко И.А. Электрические и тепловые свойства смешанных сегнетоэлектрических кристаллов  $\text{KH}_{2(1-x)}\text{D}_{2x}\text{PO}_4$  // *Физ.твёрдого тела*. - 1972. - Т.14, №4. - С. 1034-1039.
54. Deguchi K., Nakamura E. Deviation from the Curie-Weiss law in  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  // *J.Phys.Soc.Japan*.-1980.-V.49, №5.-P. 1887-1891.
55. Kaminov I.P. Microwave dielectric properties of  $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ ,  $\text{KH}_2\text{AsO}_4$  and partially deuterated  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  // *Phys. Rev.* -1965,

- v. 138, №5A. - p. 1539-1543.
56. Переверзева Л.П. Особенности дисперсии  $\varepsilon$  в сегнетоэлектриках с фазовым переходом типа порядок-беспорядок // Изв. АН СС-СР, сер. физ. - 1971. - Т.35, №12. - С. 2613-2614.
57. 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.
58. 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.

## CONDENSED MATTER PHYSICS

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

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

---

### ABSTRACTED/INDEXED IN:

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

---

**EDITOR IN CHIEF:** Ihor Yukhnovskii

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

### CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics  
of the National Academy of Sciences of Ukraine  
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine  
Tel: +380(322)760908; Fax: +380(322)761158  
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>

---