

А.С. ВДОВИЧ,¹ І.Р. ЗАЧЕК,² Р.Р. ЛЕВИЦЬКИЙ¹¹ Інститут фізики конденсованих систем НАН України
(Вул. Свінціцького, 1, Львів 79011)² Національний університет "Львівська політехніка"
(Вул. Бандери, 12, Львів 79013; e-mail: zachek_i@ukr.net)**ВПЛИВ НАПРУГ σ_5 , σ_6 І ЕЛЕКТРИЧНОГО ПОЛЯ E_1 НА ТЕРМОДИНАМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ СЕГНЕТОАКТИВНИХ МАТЕРІАЛІВ GPI**

УДК 539

Для дослідження ефектів, що виникають під дією зовнішніх зсувних напруг σ_5 , σ_6 і електричного поля E_1 , використано модифіковану модель кристала GPI шляхом врахування п'єзоелектричного зв'язку структурних елементів, які впорядковуються, з деформаціями ε_j . В наближенні двочастинкового кластера розраховано вектори поляризації та компоненти тензора статичної діелектричної проникності механічно затиснутого кристала, їх п'єзоелектричні та теплові характеристики. Досліджено одночасну дію напруги σ_5 і поля E_1 , а також напруги σ_6 і поля E_1 на фазовий перехід та фізичні характеристики кристала.

Ключові слова: сегнетоелектрики, фазовий перехід, діелектрична проникність, п'єзомодулі, зсувна напруга.

1. Вступ

Вивчення ефектів, які виникають при дії механічних напруг і зовнішнього електричного поля, є однією з актуальних проблем фізики сегнетоактивних сполук, зокрема для кристала фосфіту гліцину (glicinium phosphite – GPI), що належить до сегнетоактивних матеріалів з водневими зв'язками [1].

Експериментальне дослідження впливу поперечного електричного поля E_1 на діелектричну проникність ε_{33} кристала GPI виконане авторами робіт [2, 3]. Було показано, що під впливом поля E_1 має місце пониження температури сегнетоелектричного фазового переходу.

Модель деформованого кристала GPI на основі протонної моделі [3] було створено в роботі [5], яка враховує п'єзоелектричний зв'язок протонної і ґраткової підсистем. На основі цієї моделі в роботі [6] було досліджено вплив поперечних електричних полів E_1 і E_3 на діелектричні і п'єзоелектричні властивості GPI. Було кількісно правильно описано згадані вище експериментальні дані [3] для температурної залежності ε_{33} за наявності поля E_3 . Було виявлено, що вплив поля E_1 якісно подібний до впливу поля E_3 , але на порядок слабший.

В роботі [7] модифіковано модель GPI [5] на випадок прикладання зсувних напруг σ_4 , σ_5 і σ_6 до кристала GPI при відсутності електричного поля. Було отримано, що під впливом зсувних напруг σ_4 або σ_6 в сегнетофазі виникають компоненти спонтанної поляризації вздовж осей OX і OZ , а поперечні проникності ε_{11} і ε_{33} прямують до безмежності в точці T_c . При цьому вплив напруги σ_4 якісно подібний до впливу σ_6 .

В даній роботі на основі запропонованої моделі деформованого кристала GPI, яка є модифікацією моделі [4], досліджено спільну дію електричного поля E_1 і напруг σ_5 і σ_6 на фазовий перехід, термодинамічні та статичні діелектричні характеристики цього типу кристалів.

2. Гамільтоніан моделі

Розглянемо систему протонів у GPI, що рухаються на $O-H \dots O$ зв'язках, що утворюють зигзагоподібні ланцюги вздовж c -осі кристала. Припишемо протонам на зв'язках дипольні моменти \mathbf{d}_{qf} ($f = 1, \dots, 4$). У сегнетоелектричній фазі дипольні моменти взаємно компенсуються (\mathbf{d}_{q1} з \mathbf{d}_{q3} , \mathbf{d}_{q2} з \mathbf{d}_{q4}) у напрямках Z та X , і одночасно додаються у напрямку Y , породжуючи спонтанну поляризацію. Вектори \mathbf{d}_{qf} орієнтовані під певними кутами до кристалографічних осей і мають поздовжню

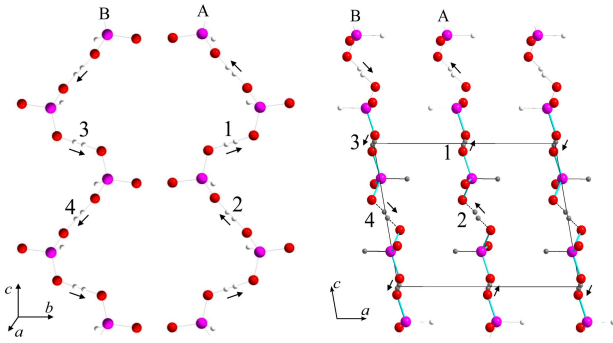


Рис. 1. Орієнтації векторів \mathbf{d}_{qf} у примітивній комірниці R_s у сегнетоелектричній фазі

і поперечну компоненти по відношенню до b -осі (рис. 1).

Гамільтоніан протонної системи GPI складається із “затравної” і псевдоспінової частин. “Затравна” енергія U_{seed} відповідає ґратці важких іонів і явно не залежить від конфігурації протонної підсистеми. Псевдоспінова частина враховує короткосяжні \hat{H}_{short} і далекосяжні \hat{H}_{MF} взаємодії протонів поблизу тетраедрів HPO_3 , а також ефективну взаємодію з електричними полями E_1 , E_2 і E_3 . Отже,

$$\hat{H} = N U_{\text{seed}} + \hat{H}_{\text{short}} + \hat{H}_{\text{MF}} + \hat{H}_E, \quad (1)$$

де N – загальна кількість примітивних комірок ґратки Браве.

U_{seed} – затравна енергія, яка включає в себе пружну, п’єзоелектричну і діелектричну частини, що виражаються через електричні поля E_i ($i = 1, 2, 3$) та деформації ε_j ($j = 1, 2, 3, 4, 5, 6$). Параметри $c_{ij}^{E0}(T)$, e_{ij}^0 , $\chi_{ij}^{\varepsilon 0}$ – т.зв. затравні пружні сталі коефіцієнти п’єзоелектричної напруги та діелектричні сприйнятливості, v – об’єм примітивної комірки:

$$\begin{aligned} U_{\text{seed}} = v & \left(\frac{1}{2} \sum_{i,i'=1}^3 c_{ii'}^{E0}(T) \varepsilon_i \varepsilon_{i'} + \sum_{i=1}^3 c_{i5}^{E0}(T) \varepsilon_i \varepsilon_5 + \right. \\ & + \frac{1}{2} c_{44}^{E0}(T) \varepsilon_4^2 + \frac{1}{2} c_{66}^{E0}(T) \varepsilon_6^2 + c_{46}^{E0}(T) \varepsilon_4 \varepsilon_6 - \\ & - \sum_{i=1}^3 e_{2i}^0 \varepsilon_i E_2 - e_{25}^0 \varepsilon_5 E_2 - e_{14}^0 \varepsilon_4 E_1 - \\ & - e_{16}^0 \varepsilon_6 E_1 - e_{34}^0 \varepsilon_4 E_3 - e_{36}^0 \varepsilon_6 E_3 - \\ & \left. - \frac{1}{2} \chi_{11}^{\varepsilon 0} E_1^2 - \frac{1}{2} \chi_{22}^{\varepsilon 0} E_2^2 - \frac{1}{2} \chi_{33}^{\varepsilon 0} E_3^2 - \chi_{31}^{\varepsilon 0} E_3 E_1 \right). \quad (2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{short}} = -2 \sum_{qq'} & \left(w_1 \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} + w_2 \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) \times \\ & \times \left(\delta_{\mathbf{R}_q \mathbf{R}_{q'}} + \delta_{\mathbf{R}_q + \mathbf{R}_c, \mathbf{R}_{q'}} \right). \quad (3) \end{aligned}$$

У (3) σ_{qf} – z -компонента оператора псевдоспіна, який знаходиться в q -й комірниці на f -му зв’язку ($f = 1, 2, 3, 4$). Перший символ Кронекера відповідає взаємодії протонів у ланцюжках поблизу тетраедрів HPO_3 типу “Т”, а другий – поблизу тетраедрів типу “П”, \mathbf{R}_c – радіус-вектор ґратки вздовж c -осі. Внески у конфігураційну енергію від взаємодії між протонами навколо тетраедрів різних типів, як і середні значення псевдоспінів $\langle \sigma_{qf} \rangle$, що відносяться до тетраедрів різних типів, є однаковими. Величини w_1, w_2 , які описують короткосяжні взаємодії протонів у ланцюжках, розкладаємо в ряд за деформаціями ε_j , обмежуючись лінійними доданками:

$$w_{1,2} = w^0 + \sum_l \delta_l \varepsilon_l \pm \delta_4 \varepsilon_4 \pm \delta_6 \varepsilon_6 \quad (l = 1, 2, 3, 5). \quad (4)$$

Гамільтоніан середнього поля \hat{H}_{MF} за далекосяжними диполь-дипольними взаємодіями та непрямыми (через коливання ґратки) міжпротонними взаємодіями \hat{H}_{MF} , враховуючи розклад фур’є-образів констант взаємодій $J_{ff'} = \sum_{qq'} J_{ff'}(qq')$ при $\mathbf{q} = 0$, у ряд за деформаціями ε_j , обмежуючись лінійними членами розкладу:

$$\begin{aligned} J_{\frac{11}{33}} &= J_{11}^0 + \sum_l \psi_{11l} \varepsilon_l \pm \psi_{114} \varepsilon_4 \pm \psi_{116} \varepsilon_6, \\ J_{\frac{13}{24}} &= J_{\frac{13}{24}}^0 + \sum_l \psi_{\frac{13l}{24l}} \varepsilon_l + \psi_{\frac{134}{244}} \varepsilon_4 + \psi_{\frac{136}{246}} \varepsilon_6, \\ J_{\frac{12}{34}} &= J_{12}^0 + \sum_l \psi_{12l} \varepsilon_l \pm \psi_{124} \varepsilon_4 \pm \psi_{126} \varepsilon_6, \\ J_{\frac{14}{23}} &= J_{14}^0 + \sum_l \psi_{14l} \varepsilon_l \pm \psi_{144} \varepsilon_4 \pm \psi_{146} \varepsilon_6, \\ J_{\frac{22}{44}} &= J_{22}^0 + \sum_l \psi_{22l} \varepsilon_l \pm \psi_{224} \varepsilon_4 \pm \psi_{226} \varepsilon_6, \end{aligned}$$

отримуємо у такому вигляді:

$$\hat{H}_{\text{MF}} = N H^0 + \hat{H}_s, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \text{де} \\ H^0 &= \frac{1}{8} J_{11} (\eta_1^2 + \eta_3^2) + \frac{1}{8} J_{22} (\eta_2^2 + \eta_4^2) + \end{aligned}$$

$$+ \frac{1}{4} J_{13} \eta_1 \eta + J_{24} \eta_2 \eta_4 + \frac{1}{4} J_{12} (\eta_1 \eta_2 + \eta_3 \eta_4) + \frac{1}{4} J_{14} (\eta_1 \eta_4 + \eta_2 \eta_3) \quad (6)$$

$$\hat{H}_s = - \sum_q \left(\mathcal{H}_1 \frac{\sigma_{q1}}{2} + \mathcal{H}_2 \frac{\sigma_{q2}}{2} + \mathcal{H}_3 \frac{\sigma_{q3}}{2} + \mathcal{H}_4 \frac{\sigma_{q4}}{2} \right). \quad (7)$$

У (7) використані такі позначення:

$$\mathcal{H}_f = \sum_{f'=1}^4 \frac{1}{2} J_{ff'} \eta_{f'} \quad (f = 1-4).$$

Четвертий доданок в (1) \hat{H}_E описує взаємодію псевдоспінів з електричними полями:

$$\hat{H}_E = \sum_{f=1}^4 H_{Ef} \frac{\sigma_{qf}}{2}, \quad (8)$$

$$H_{E1,3} = \pm \mu_{13}^x E_1 + \mu_{13}^y E_2 \pm \mu_{13}^z E_3,$$

$$H_{E2,4} = \mp \mu_{24}^x E_1 - \mu_{24}^y E_2 \pm \mu_{24}^z E_3,$$

де $\mu_{13}^{x,y,z} = \mu_1^{x,y,z} = \mu_3^{x,y,z}$, $\mu_{24}^{x,y,z} = \mu_2^{x,y,z} = \mu_4^{x,y,z}$ – ефективні дипольні моменти в розрахунку на один псевдоспін.

При розрахунку термодинамічних і динамічних характеристик сегнетоактивних сполук типу GPI використаємо наближення двочастинкового кластера (НДК). В цьому наближенні термодинамічний потенціал GPI при прикладанні зсувних напруг $\sigma_{5,6}$ має такий вигляд:

$$G = NU_{\text{seed}} + NH^0 - Nv \sum_{j=5}^6 \sigma_j \varepsilon_j - k_B T \sum_q \left[2 \ln \text{Sp} e^{-\beta \hat{H}_q^{(2)}} - \sum_{f=1}^4 \ln \text{Sp} e^{-\beta \hat{H}_{qf}^{(1)}} \right], \quad (9)$$

де $\hat{H}_q^{(2)}$, $\hat{H}_{qf}^{(1)}$ – двочастинкові і одночастинкові гамільтоніани, що задаються такими виразами:

$$\hat{H}_q^{(2)} = -2 \left(w_1 \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} + w_2 \frac{\sigma_{q3}}{2} \frac{\sigma_{q4}}{2} \right) - \sum_{f=1}^4 \frac{y_f}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2}, \quad (10)$$

$$\hat{H}_{qf}^{(1)} = -\frac{\bar{y}_f}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2}, \quad (11)$$

де використані такі позначення:

$$y_f = \beta (\Delta_1 + \mathcal{H}_f + H_{Ef}), \quad \bar{y}_f = \beta \Delta_f + y_f.$$

Тут Δ_f – ефективні поля, створені сусідніми зв'язками поза границями кластера. У кластерному наближенні поля Δ_f визначаються з умови самоузгодження:

$$\frac{\text{Sp} \sigma_{qf} e^{-\beta \hat{H}_q^{(2)}}}{\text{Sp} e^{-\beta \hat{H}_q^{(2)}}} = \frac{\text{Sp} \sigma_{qf} e^{-\beta \hat{H}_{qf}^{(1)}}}{\text{Sp} e^{-\beta \hat{H}_{qf}^{(1)}}}. \quad (12)$$

Тоді на основі (12) отримуємо вирази для середніх значень псевдоспіна $\langle \sigma_{qf} \rangle$ з двочастинковим або одночастинковим гамільтоніаном. Виключаючи параметри Δ_f , знаходимо такі співвідношення:

$$\eta_{\frac{1}{3}} = \frac{1}{D} \left[\sinh n_1 \pm \sinh n_2 + a^2 \sinh n_3 \pm \pm a^2 \sinh n_4 + aa_{46} \sinh n_5 + \frac{a}{a_{46}} \sinh n_6 \mp \mp aa_{46} \sinh n_7 \pm \frac{a}{a_{46}} \sinh n_8 \right],$$

$$\eta_{\frac{2}{4}} = \frac{1}{D} \left[\sinh n_1 \pm \sinh n_2 - a^2 \sinh n_3 \mp \mp a^2 \sinh n_4 \mp aa_{46} \sinh n_5 \pm \frac{a}{a_{46}} \sinh n_6 + + aa_{46} \sinh n_7 + \frac{a}{a_{46}} \sinh n_8 \right],$$

$$D = \cosh n_1 + \cosh n_2 + a^2 \cosh n_3 + + a^2 \cosh n_4 + aa_{46} \cosh n_5 + \frac{a}{a_{46}} \cosh n_6 + + aa_{46} \cosh n_7 + \frac{a}{a_{46}} \cosh n_8,$$

де

$$a = \exp \left[-\beta \left(w^0 + \sum_{l=1}^3 \delta_l \varepsilon_l \right) \right],$$

$$a_{46} = \exp [-\beta (\delta_4 \varepsilon_4 + \delta_6 \varepsilon_6)],$$

$$n_1 = \frac{1}{2} (y_1 + y_2 + y_3 + y_4),$$

$$n_2 = \frac{1}{2} (y_1 + y_2 - y_3 - y_4),$$

$$n_3 = \frac{1}{2}(y_1 - y_2 + y_3 - y_4),$$

$$n_4 = \frac{1}{2}(y_1 - y_2 - y_3 + y_4),$$

$$n_5 = \frac{1}{2}(y_1 - y_2 + y_3 + y_4),$$

$$n_6 = \frac{1}{2}(y_1 + y_2 + y_3 - y_4),$$

$$n_7 = \frac{1}{2}(-y_1 + y_2 + y_3 + y_4),$$

$$n_8 = \frac{1}{2}(y_1 + y_2 - y_3 + y_4),$$

$$y_f = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \eta_f}{1 - \eta_f} + \frac{\beta}{2} H_f + \frac{\beta}{2} \boldsymbol{\mu}_f \mathbf{E}.$$

3. Термодинамічні характеристики GPI

Для отримання діелектричних, п'єзоелектричних і пружних характеристик GPI знайдемо на основі (9) термодинамічний потенціал у розрахунку на одну комірку:

$$g = \frac{G}{N} = U_{\text{seed}} + H^0 - 2 \left(w^0 + \sum_l \delta_l \varepsilon_l \right) + 2k_B T \ln 2 - Nv \sum_{j=5}^6 \sigma_j \varepsilon_j - \frac{1}{2} k_B T \sum_{f=1}^4 \ln (1 - \eta_f^2) - 2k_B T \ln D, \quad l = 1, 2, 3, 5. \quad (13)$$

Упохіднюючи термодинамічний потенціал за полями E_i , отримуємо вирази для поляризацій P_i

$$P_1 = e_{14}^0 \varepsilon_4 + e_{16}^0 \varepsilon_6 + \chi_{11}^0 E_1 + \frac{1}{2v} [\mu_{13}^x (\eta_1 - \eta_3) - \mu_{24}^x (\eta_2 - \eta_4)], \quad (14)$$

$$P_2 = e_{21}^0 \varepsilon_1 + e_{22}^0 \varepsilon_2 + e_{23}^0 \varepsilon_3 + e_{25}^0 \varepsilon_5 + \chi_{22}^0 E_2 + \frac{1}{2v} [\mu_{13}^y (\eta_1 + \eta_3) - \mu_{24}^y (\eta_2 + \eta_4)], \quad (15)$$

$$P_3 = e_{34}^0 \varepsilon_4 + e_{66}^0 \varepsilon_6 + \chi_{33}^0 E_3 + \frac{1}{2v} [\mu_{13}^z (\eta_1 - \eta_3) + \mu_{24}^z (\eta_2 - \eta_4)]. \quad (16)$$

Статичні ізотермічні діелектричні сприйнятливості GPI вздовж осей для механічно затиснутого кристала мають такий вигляд:

$$\chi_{11}^\varepsilon = \chi_{11}^{\varepsilon 0} + \frac{1}{2v} [\mu_{13}^x (\dot{\eta}_{1E_1} - \dot{\eta}_{3E_1}) - \mu_{24}^x (\dot{\eta}_{2E_1} - \dot{\eta}_{4E_1})], \quad (17)$$

$$\chi_{22}^\varepsilon = \chi_{22}^{\varepsilon 0} + \frac{1}{2v} [\mu_{13}^y (\dot{\eta}_{1E_2} + \dot{\eta}_{3E_2}) - \mu_{24}^y (\dot{\eta}_{2E_2} + \dot{\eta}_{4E_2})], \quad (18)$$

$$\chi_{33}^\varepsilon = \chi_{33}^{\varepsilon 0} + \frac{1}{2v} [\mu_{13}^z (\dot{\eta}_{1E_3} - \dot{\eta}_{3E_3}) + \mu_{24}^z (\dot{\eta}_{2E_3} - \dot{\eta}_{4E_3})]. \quad (19)$$

А η_{1E} , η_{2E} , η_{3E} , η_{4E} є розв'язками такої системи рівнянь:

$$\begin{pmatrix} 2D - \varkappa_{11} & -\varkappa_{12} & -\varkappa_{13} & -\varkappa_{14} \\ -\varkappa_{21} & 2D - \varkappa_{22} & -\varkappa_{23} & -\varkappa_{24} \\ -\varkappa_{31} & -\varkappa_{32} & 2D - \varkappa_{33} & -\varkappa_{34} \\ -\varkappa_{41} & -\varkappa_{42} & -\varkappa_{43} & 2D - \varkappa_{44} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \dot{\eta}_{1E_\alpha} \\ \dot{\eta}_{2E_\alpha} \\ \dot{\eta}_{3E_\alpha} \\ \dot{\eta}_{4E_\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varkappa_1^{\chi_\alpha} \\ \varkappa_2^{\chi_\alpha} \\ \varkappa_3^{\chi_\alpha} \\ \varkappa_4^{\chi_\alpha} \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Тут використані такі позначення:

$$\varkappa_{f1} = \varkappa_{f11}(\varphi_1^+ + \beta \bar{\nu}_1^+) + \varkappa_{f12}(\beta \nu_2^+ + \beta \bar{\nu}_2^+) + \varkappa_{f13}(\varphi_1^- + \beta \bar{\nu}_1^-) + \varkappa_{f14} \beta(\nu_2^- + \beta \bar{\nu}_2^-);$$

$$\varkappa_{f2} = \varkappa_{f12}(\varphi_2^+ + \beta \bar{\nu}_3^+) + \varkappa_{f11}(\beta \nu_2^+ + \beta \bar{\nu}_2^-) + \varkappa_{f14}(\varphi_2^- + \beta \bar{\nu}_3^-) + \varkappa_{f13}(\beta \nu_2^- + \beta \bar{\nu}_2^+),$$

$$\varkappa_{f3} = \varkappa_{f11}(\varphi_3^+ - \beta \bar{\nu}_1^-) + \varkappa_{f12}(\beta \nu_2^+ - \beta \bar{\nu}_2^+) - \varkappa_{f13}(\varphi_3^- - \beta \bar{\nu}_1^+) - \varkappa_{f14}(\beta \nu_2^- - \beta \bar{\nu}_2^-),$$

$$\varkappa_{f4} = \varkappa_{f12}(\varphi_4^+ - \beta \bar{\nu}_3^-) + \varkappa_{f11}(\beta \nu_2^+ - \beta \bar{\nu}_2^-) - \varkappa_{f14}(\varphi_4^- - \beta \bar{\nu}_3^+) - \varkappa_{f13}(\beta \nu_2^- - \beta \bar{\nu}_2^+),$$

$$\varkappa_f^{\chi^x} = \varkappa_{f13} \beta \mu_{13}^x + \varkappa_{f15} \beta \mu_{24}^x, \quad \varkappa_f^{\chi^y} = \varkappa_{f11} \beta \mu_{13}^y + \varkappa_{f12} \beta \mu_{24}^y, \quad \varkappa_f^{\chi^z} = \varkappa_{f13} \beta \mu_{13}^z + \varkappa_{f14} \beta \mu_{24}^z,$$

$$\varphi_{1,3}^\pm = \frac{1}{1 - \eta_{1,3}^2} + \beta \nu_1^\pm,$$

$$\begin{aligned} \varphi_{2,4}^{\pm} &= \frac{1}{1 - \eta_{2,4}^2} + \beta \nu_3^{\pm}, \\ \varphi_{1,3}^{\pm} &= \frac{1}{1 - \eta_{1,3}^2} + \beta \nu_1^{\pm}, \\ \varphi_{2,4}^{\pm} &= \frac{1}{1 - \eta_{2,4}^2} + \beta \nu_3^{\pm}, \\ \nu_l^{\pm} &= \nu_l^{0\pm} + \sum_{i=1}^3 \psi_{li}^{\pm} \varepsilon_i + \psi_{l5}^{\pm} \varepsilon_5, \\ \bar{\nu}_l^{\pm} &= \psi_{l4}^{\pm} \varepsilon_4 + \psi_{l6}^{\pm} \varepsilon_6, \\ \nu_1^{0\pm} &= \frac{1}{4}(J_{11}^0 \pm J_{13}^0), \quad \psi_{1i}^{\pm} = \frac{1}{4}(\psi_{11i} \pm \psi_{13i}), \\ \nu_2^{0\pm} &= \frac{1}{4}(J_{12}^0 \pm J_{14}^0), \quad \psi_{2i}^{\pm} = \frac{1}{4}(\psi_{12i} \pm \psi_{14i}), \\ \nu_3^{0\pm} &= \frac{1}{4}(J_{22}^0 \pm J_{24}^0), \quad \psi_{3i}^{\pm} = \frac{1}{4}(\psi_{22i} \pm \psi_{24i}), \\ \varkappa_{\frac{1}{3}11} &= (l_{1+3}^c + l_{5+6}^c) - \eta_{\frac{1}{3}}(l_{1+3}^s + l_{5+6}^s), \\ \varkappa_{\frac{1}{3}12} &= (l_{1-3}^c \mp l_{7-8}^c) - \eta_{\frac{1}{3}}(l_{1-3}^s + l_{7+8}^s), \\ \varkappa_{\frac{1}{3}13} &= \pm(l_{2+4}^c + l_{7+8}^c) - \eta_{\frac{1}{3}}(l_{2+4}^s - l_{7-8}^s), \\ \varkappa_{\frac{1}{3}14} &= (\pm l_{2-4}^c - l_{5-6}^c) - \eta_{\frac{1}{3}}(l_{2-4}^s - l_{5-6}^s), \\ \varkappa_{\frac{2}{4}11} &= (l_{1-3}^c \mp l_{5-6}^c) - \eta_{\frac{2}{4}}(l_{1+3}^s + l_{5+6}^s), \\ \varkappa_{\frac{2}{4}12} &= (l_{1+3}^c + l_{7+8}^c) - \eta_{\frac{2}{4}}(l_{1-3}^s + l_{7+8}^s), \\ \varkappa_{\frac{2}{4}13} &= (\pm l_{2-4}^c - l_{7-8}^c) - \eta_{\frac{2}{4}}(l_{2+4}^s - l_{7-8}^s), \\ \varkappa_{\frac{2}{4}14} &= (\pm l_{2+4}^c \pm l_{5+6}^c) - \eta_{\frac{2}{4}}(l_{2-4}^s - l_{5-6}^s), \\ \varkappa_{\frac{1}{3}15} &= (\mp l_{2-4}^c + l_{5-6}^c) - \eta_{\frac{1}{3}}(-l_{2-4}^s + l_{5-6}^s), \\ \varkappa_{\frac{2}{4}15} &= (\mp l_{2+4}^c + l_{5+6}^c) + \eta_{\frac{2}{4}}(-l_{2-4}^s + l_{5-6}^s), \\ l_{1\pm 3}^c &= \text{chn}_1 \pm a^2 \text{chn}_3; \quad l_{2\pm 4}^c = \text{chn}_2 \pm a^2 \text{chn}_4; \\ l_{5\pm 6}^c &= aa_{46} \text{chn}_5 \pm \frac{a}{a_{46}} \text{chn}_6; \quad l_{7\pm 8}^c = aa_{46} \text{chn}_7 \pm \frac{a}{a_{46}} \text{chn}_8; \\ l_{1\pm 3}^s &= \text{shn}_1 \pm a^2 \text{shn}_3; \quad l_{2\pm 4}^s = \text{shn}_2 \pm a^2 \text{shn}_4; \\ l_{5\pm 6}^s &= aa_{46} \text{shn}_5 \pm \frac{a}{a_{46}} \text{shn}_6; \quad l_{7\pm 8}^s = aa_{46} \text{shn}_7 \pm \frac{a}{a_{46}} \text{shn}_8. \end{aligned}$$

На основі співвідношень (14)–(16) отримуємо вирази для ізотермічних коефіцієнтів п'єзоелектричних напруг e_{1j} , e_{2l} , e_{3j} GPI:

$$e_{1j} = \left(\frac{\partial P_1}{\partial \varepsilon_l} \right)_{E_1} =$$

$$= e_{2j}^0 + \frac{1}{2\nu} [\mu_{13}^x (\dot{\eta}_{1\varepsilon_j} - \dot{\eta}_{3\varepsilon_j}) - \mu_{24}^x (\dot{\eta}_{2\varepsilon_j} - \dot{\eta}_{4\varepsilon_j})], \quad (j = 4, 6), \quad (21)$$

$$e_{2l} = \left(\frac{\partial P_2}{\partial \varepsilon_l} \right)_{E_2} = e_{2l}^0 + \frac{1}{2\nu} [\mu_{13}^y (\dot{\eta}_{1\varepsilon_l} + \dot{\eta}_{3\varepsilon_l}) - \mu_{24}^y (\dot{\eta}_{2\varepsilon_l} + \dot{\eta}_{4\varepsilon_l})], \quad (22)$$

$$e_{3j} = \left(\frac{\partial P_3}{\partial \varepsilon_j} \right)_{E_3} = e_{3j}^0 + \frac{1}{2\nu} [\mu_{13}^z (\dot{\eta}_{1\varepsilon_j} - \dot{\eta}_{3\varepsilon_j}) + \mu_{24}^z (\dot{\eta}_{2\varepsilon_j} - \dot{\eta}_{4\varepsilon_j})], \quad (j = 4, 6). \quad (23)$$

$\dot{\eta}_{1\varepsilon_l}$, $\dot{\eta}_{2\varepsilon_l}$, $\dot{\eta}_{3\varepsilon_l}$, $\dot{\eta}_{4\varepsilon_l}$ є розв'язками такої системи рівнянь:

$$\begin{pmatrix} 2D - \varkappa_{11} & -\varkappa_{12} & -\varkappa_{13} & -\varkappa_{14} \\ -\varkappa_{21} & 2D - \varkappa_{22} & -\varkappa_{23} & -\varkappa_{24} \\ -\varkappa_{31} & -\varkappa_{32} & 2D - \varkappa_{33} & -\varkappa_{34} \\ -\varkappa_{41} & -\varkappa_{42} & -\varkappa_{43} & 2D - \varkappa_{44} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \dot{\eta}_{1\varepsilon_l} \\ \dot{\eta}_{2\varepsilon_l} \\ \dot{\eta}_{3\varepsilon_l} \\ \dot{\eta}_{4\varepsilon_l} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varkappa_1^{e_l} \\ \varkappa_2^{e_l} \\ \varkappa_3^{e_l} \\ \varkappa_4^{e_l} \end{pmatrix}. \quad (24)$$

Тут використані такі позначення:

$$\begin{aligned} \varkappa_f^{e_l} &= \beta(\psi_{1l}^+ \varkappa_{f11} + \psi_{2l}^+ \varkappa_{f12})(\eta_1 + \eta_3) + \\ &+ \beta(\psi_{2l}^+ \varkappa_{f11} + \psi_{3l}^+ \varkappa_{f12})(\eta_2 + \eta_4) + \\ &+ \beta(\psi_{1l}^- \varkappa_{f13} + \psi_{2l}^- \varkappa_{f14})(\eta_1 - \eta_3) + \\ &+ \beta(\psi_{2l}^- \varkappa_{f13} + \psi_{3l}^- \varkappa_{f14})(\eta_2 - \eta_4) + \\ &+ 2\beta\delta_l(\rho_{f1} + \rho_{f2}), \end{aligned}$$

$$\psi_{1l}^{\pm} = \frac{1}{4}(\psi_{11l} \pm \psi_{13l}), \quad \psi_{2l}^{\pm} = \frac{1}{4}(\psi_{12l} \pm \psi_{14l}),$$

$$\psi_{3l}^{\pm} = \frac{1}{4}(\psi_{22l} \pm \psi_{24l}),$$

$$\rho_{\frac{1}{3}1} = -2(l_{3\pm 4}^s - \eta_{\frac{1}{3}} l_{3+4}^c),$$

$$\rho_{\frac{1}{3}2} = -l_{5+6}^s \pm l_{7-8}^s + \eta_{\frac{1}{3}}(l_{5+6}^c + l_{7+8}^c),$$

$$\rho_{\frac{2}{4}1} = 2(l_{3\pm 4}^s + \eta_{\frac{1}{3}} l_{3+4}^c),$$

$$\rho_{\frac{2}{4}2} = \pm l_{5-6}^s - l_{7+8}^s + \eta_{\frac{1}{3}}(l_{5+6}^c + l_{7+8}^c),$$

$$\begin{aligned}\rho_{\frac{1}{3}j} &= l_{5+6}^s \pm l_{7-8}^s + \eta_{\frac{1}{3}}(l_{5+6}^c - l_{7+8}^c), \\ \rho_{\frac{2}{4}j} &= \mp l_{5-6}^s + l_{7+8}^s + \eta_{\frac{2}{4}}(l_{5+6}^c - l_{7+8}^c), \\ l_{3\pm 4}^s &= a^2 \sinh n_3 \pm a^2 \sinh n_4, \\ l_{3+4}^c &= a^2 \cosh n_3 + a^2 \cosh n_4.\end{aligned}$$

Молярна ентропія протонної підсистеми (тут R – універсальна газова стала):

$$\begin{aligned}S &= \frac{R}{4} \left\{ -2 \ln 2 + \sum_{f=1}^4 \ln(1 - \eta_f) + 2 \ln D - \right. \\ &- 2 \{ \beta \nu_1^+ (\eta_1 + \eta_3)^2 + \beta \bar{\nu}_1^+ [\eta_1 (\eta_1 + \eta_3) + \\ &+ \eta_3 (\eta_1 - \eta_3)] + 2 \beta \nu_2^+ (\eta_1 + \eta_3) (\eta_2 + \eta_4) + \\ &+ 2 \beta \bar{\nu}_2^+ (\eta_1 - \eta_3) (\eta_2 + \eta_4) + \beta \nu_3^+ (\eta_2 + \eta_4)^2 + \\ &+ \beta \bar{\nu}_3^+ [\eta_2 (\eta_2 + \eta_4) + \eta_4 (\eta_2 - \eta_4)] + \\ &+ \beta \nu_1^- (\eta_1 - \eta_3)^2 + \\ &+ \beta \bar{\nu}_1^- [\eta_1 (\eta_1 - \eta_3) + \eta_3 (\eta_1 + \eta_3)] + \\ &+ 2 \beta \nu_2^- (\eta_1 - \eta_3) (\eta_2 - \eta_4) + \\ &+ 2 \beta \bar{\nu}_2^- (\eta_1 + \eta_3) (\eta_2 - \eta_4) + \beta \nu_3^- (\eta_2 - \eta_4)^2 + \\ &\left. + \beta \bar{\nu}_3^- [\eta_2 (\eta_2 - \eta_4) - \eta_4 (\eta_2 + \eta_4)] \right\} + \frac{4w}{TD} M. \quad (25)\end{aligned}$$

Молярну теплоємність при сталому тиску протонної підсистеми кристала GPI знаходимо диференціюючи етропію (25).

4. Порівняння результатів числових розрахунків з експериментальними даними

Для проведення числових розрахунків залежностей від температури діелектричних та п'єзоелектричних характеристик GPI, які розраховані нижче теоретично, необхідні значення таких мікропараметрів: параметрів короткосяжних взаємодій w^0 ; параметрів далекосяжних взаємодій $\nu_f^{0\pm}$ ($f = 1, 2, 3$); деформаційних потенціалів δ_i , ψ_{fi}^{\pm} ($i = 1, \dots, 6$); ефективних дипольних моментів μ_{13}^a ; μ_{24}^a ; μ_{13}^b ; μ_{24}^b ; μ_{13}^c ; μ_{24}^c ; “затравних” діелектричних сприйнятливостей $\chi_{ij}^{\varepsilon 0}$; “затравних” коефіцієнтів п'єзоелектричної напруги e_{ij}^0 ; та пружних сталей c_{ij}^{E0} .

Для визначення перерахованих нижче мікропараметрів використаємо температурні залежності експериментальних фізичних характеристик GPI, а саме $P_s(T)$ [8], $C_p(T)$ [9], $\varepsilon_{11}^{\sigma}$, $\varepsilon_{33}^{\sigma}$ [1], d_{21} , d_{23} [10].

Об'єм примітивної комірки GPI взято рівним $v_{0,0} = 0,601 \cdot 10^{-21} \text{ см}^3$.

Отримані оптимальні значення параметрів далекосяжних взаємодій є рівними: $\tilde{\nu}_1^{0+} = \tilde{\nu}_2^{0+} = \tilde{\nu}_3^{0+} = 3,065 \text{ К}$, $\tilde{\nu}_1^{0-} = \tilde{\nu}_2^{0-} = \tilde{\nu}_3^{0-} = 0,05 \text{ К}$, де $\tilde{\nu}_f^{0\pm} = \nu_f^{0\pm} / k_B$.

Знайдений параметр короткосяжних взаємодій w_0 кристала GPI рівний $w_0 / k_B = 800 \text{ К}$. Оптимальні деформаційні потенціали δ_i : $\delta_1 = 500 \text{ К}$, $\delta_2 = 600 \text{ К}$, $\delta_3 = 500 \text{ К}$, $\delta_4 = 150 \text{ К}$, $\delta_5 = 100 \text{ К}$, $\delta_6 = 150 \text{ К}$; $\delta_i = \delta_i / k_B$ і оптимальні значення ψ_{fi}^{\pm} є такими: $\tilde{\psi}_{f1}^+ = 93,6 \text{ К}$, $\tilde{\psi}_{f2}^+ = 252,5 \text{ К}$, $\tilde{\psi}_{f3}^+ = 110,7 \text{ К}$, $\tilde{\psi}_{f5}^+ = 22,7 \text{ К}$, $\tilde{\psi}_{f4}^+ = \tilde{\psi}_{f6}^+ = \tilde{\psi}_{f4}^- = \tilde{\psi}_{f6}^- = 79,5 \text{ К}$, $\tilde{\psi}_{f1}^- = \tilde{\psi}_{f2}^- = \tilde{\psi}_{f3}^- = \tilde{\psi}_{f5}^- = 0 \text{ К}$, де $\tilde{\psi}_{fi}^{\pm} = \psi_{fi}^{\pm} / k_B$.

Ефективні дипольні моменти в парафазі до рівнюють $\mu_{13} = (0,4, 4,02, 4,3) \cdot 10^{-18} \text{ esu} \cdot \text{см}$, $\mu_{24} = (-2,3, -3,0, 2,2) \cdot 10^{-18} \text{ esu} \cdot \text{см}$. В сегнетофазі y -компонента першого дипольного моменту $\mu_{13}^{y \text{ ferro}} = 3,82 \cdot 10^{-18} \text{ esu} \cdot \text{см}$.

“Затравні” коефіцієнти п'єзоелектричної напруги e_{ij}^0 , “затравні” діелектричні сприйнятливості $\chi_{ij}^{\varepsilon 0}$ і “затравні” пружні константи c_{ij}^{E0} отримані в наступному вигляді: $e_{ij}^0 = 0,0 \frac{\text{esu}}{\text{см}^2}$; $\chi_{11}^{\varepsilon 0} = 0,1$, $\chi_{22}^{\varepsilon 0} = 0,403$, $\chi_{33}^{\varepsilon 0} = 0,5$, $\chi_{31}^{\varepsilon 0} = 0,0$; $c_{11}^{E0} = 269,1 \text{ кбар}$, $c_{12}^{E0} = 145 \text{ кбар}$, $c_{13}^{E0} = 116,4 \text{ кбар}$, $c_{15}^{E0} = 39,1 \text{ кбар}$, $c_{22}^{E0} = (649,9 - 0,4(T - T_c)) \text{ кбар}$, $c_{23}^{E0} = 203,8 \text{ кбар}$, $c_{25}^{E0} = 56,4 \text{ кбар}$, $c_{33}^{E0} = 244,1 \text{ кбар}$, $c_{35}^{E0} = -28,4 \text{ кбар}$, $c_{55}^{E0} = 85,4 \text{ кбар}$, $c_{44}^{E0} = 153,1 \text{ кбар}$, $c_{46}^{E0} = -11 \text{ кбар}$, $c_{66}^{E0} = 118,8 \text{ кбар}$.

Розглянемо тепер як змінюються термодинамічні характеристики кристала GPI при одночасному прикладанні зсувних напруг σ_5, σ_6 і електричного поля E_1 .

Основний механізм впливу зсувних напруг σ_5 і σ_6 на термодинамічні характеристики кристала GPI зв'язаний із особливістю температурної поведінки параметрів порядку η_f при різних напругах. Напруга σ_5 в площині кристала XZ не змінює симетрії параметрів, які зміщуються лише по температурній осі. Дія напруги σ_6 в площині XY кристала приводить до того, що $\eta_1 = \eta_2$ і $\eta_3 = \eta_4$ і вони не рівні між собою. Крім того, параметри порядку розмиваються, що свідчить про зникнення фазового переходу із сегнето – в параелектричну фазу. У випадку прикладання зсувної напруги σ_6 при відсутності електричного поля (криві b_0^2 на всіх рисунках) симетрія кристала понижується, а дві підґратки (ланцюжок А і ланцюжок В) стають не-

еквівалентними (див. [7]). Як наслідок, в ланцюжку А взаємодії між псевдоспінами посилюються, а в ланцюжку В – послаблюються. Посилення взаємодій в одній з підґраток при певній величині напруги σ_6 ініціює фазовий перехід в сегнетофазу та підвищує температуру T_c . На рисунках, які наведені нижче, номер ліній відповідає прикладеній механічній нарузі: $5 - \sigma_5$, $6 - \sigma_6$. Верхній індекс вказує значення напруги (кбар), а нижній – величину напруженості поля (МВ/м).

Температурні залежності поляризацій P_2 кристала GPI при різних значеннях напруг σ_5 , σ_6 і електричного поля E_1 наведені на рис. 2.

Сумісна дія $\{\sigma_5, E_1\}$ приводить лише до зміщення кривої $P_2(T)$ по температурній осі. Крива поляризації при напруженості поля 4 МВ/м і нульовій нарузі σ_5 (5_4^0) є крайньою з боку низьких температур, а крива 5_0^2 – з сторони високих. Збільшення величини напруженості поля E_1 зміщує криві $P_2(T)$ вліво від кривої 5_0^0 , а ріст напруги σ_5 – вправо.

При прикладанні $\{\sigma_6, E_1\}$ фазовий перехід розмивається (рис. 2). Криві поляризації $P_2(T)$, коли діють або лише поле (5_4^0), або прикладена лише напруга (5_0^2), при температурі ФП зануляються, а спільна дія поля і напруги приводить до зникнення температури ФП і його розмивання.

При прикладанні до кристала $\{\sigma_6, E_1\}$ індукуються поляризації P_1 і P_3 (рис. 3), які при наявності лише наруги σ_6 зануляються при температурі ФП, а при дії лише поля E_1 , чи спільній дії напруги і поля є розмитими.

При дії $\{\sigma_6, E_1\}$ криві $P_1(T)$ є додатними і зростають з ростом температури, досягаючи максимуму, а потім зменшуються. Поляризації P_3 при прикладанні $\{\sigma_6, E_1\}$ є від'ємними, спочатку зменшуються до мінімуму і при дальшому рості температури зростають. Збільшення і поля і напруги приводять до росту абсолютних значень поляризації. Індукована поляризація P_3 при тих самих величинах σ_6 і E_3 є набагато більшою, ніж P_1 .

Виникнення індукованих поляризацій пов'язано з тим, що дві підґратки під дією напруги σ_6 стають нееквівалентні. А тому дипольні моменти двох підґраток в площинах, відповідно, XZ і XY не компенсуються.

На рис. 4 зображені температурні залежності обернених діелектричних проникностей ε_{22}^{-1} кристала GPI при $\{\sigma_5, E_1\}$. Сумісна дія $\{\sigma_5, E_1\}$ при-

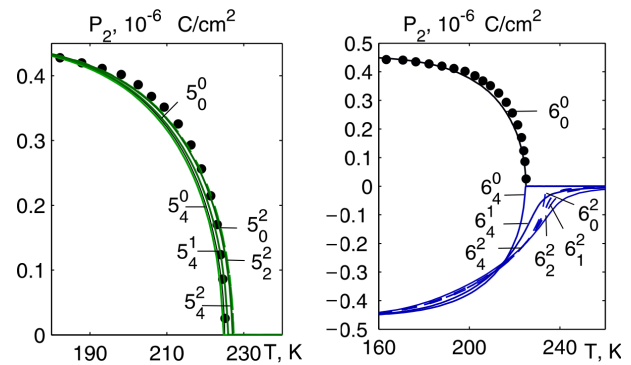


Рис. 2. Температурні залежності поляризації P_2 кристала GPI при різних напругах σ_j і електричних полях E_1

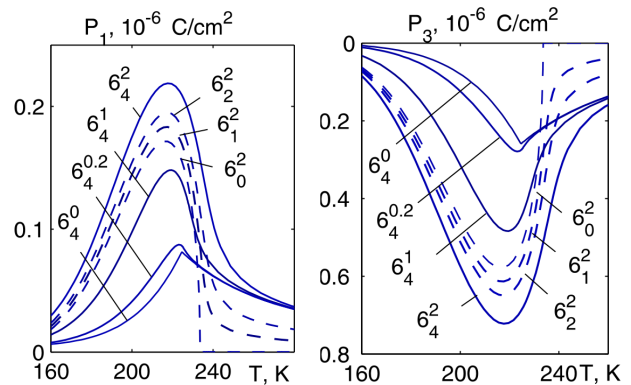


Рис. 3. Температурні залежності поляризацій P_1 і P_3 кристала GPI при різних напругах σ_6 і електричному полю E_1

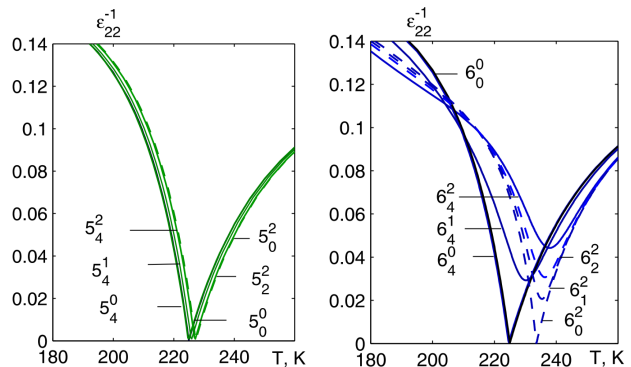


Рис. 4. Температурні залежності обернених діелектричних проникностей ε_{22} кристала GPI при різних напругах σ_j і електричному полю E_1

водить лише до зміщення кривих ε_{22}^{-1} по температурній шкалі. Збільшення величини напруженості поля E_1 зміщує криві ε_{22}^{-1} вліво від кривої 5_0^0 , а ріст напруги σ_5 – вправо. При відсутності поля та напруг поздовжна проникність розбігається в то-

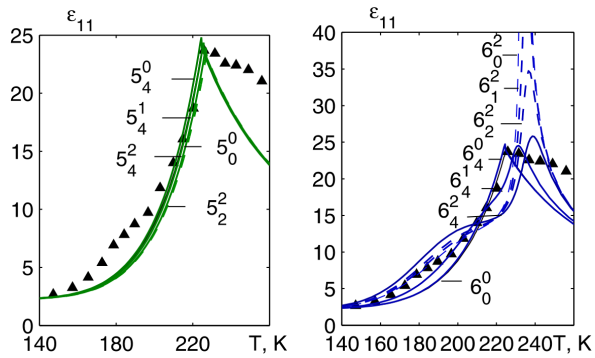


Рис. 5. Температурні залежності діелектричних проникностей ϵ_{11} кристала GPI при різних напругах σ_j і електричних полях E_1

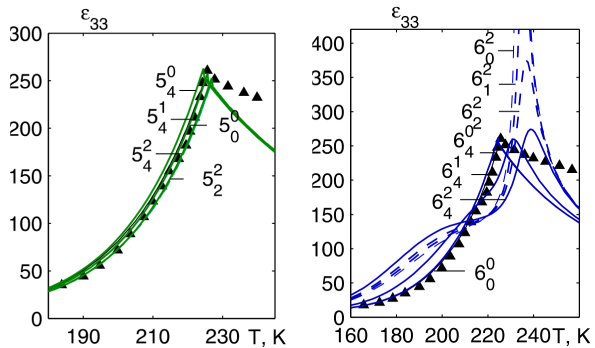


Рис. 6. Температурні залежності діелектричних проникностей ϵ_{33} кристала GPI при різних напругах σ_j і електричному полю E_1

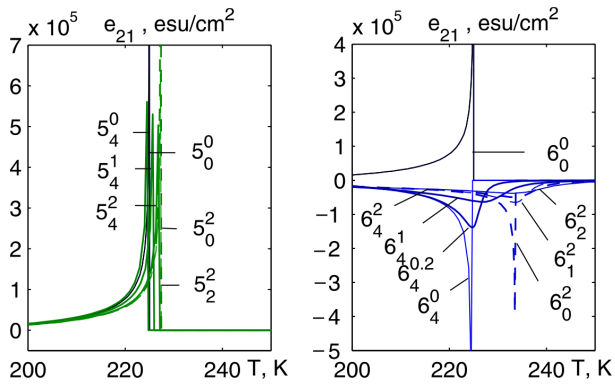


Рис. 7. Температурні залежності коефіцієнта п'єзоелектричної напруги e_{21} кристала GPI при різних напругах σ_j і електричному полю E_1

чці T_c , а при їх прикладанні максимуми ϵ_{22} стають скінченими.

Якщо до кристала прикладено дію $\{\sigma_6, E_1\}$ (рис. 4), то криві обернених проникностей $6_0^0, 6_2^0$,

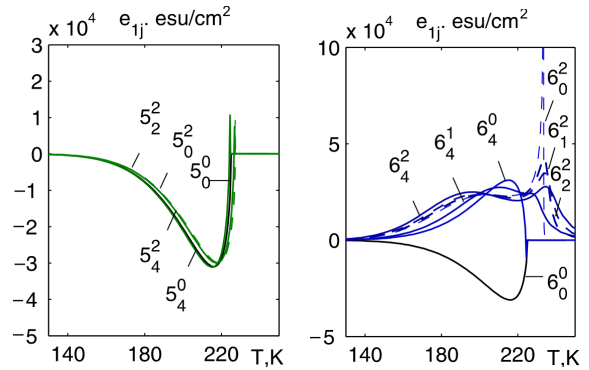


Рис. 8. Температурні залежності коефіцієнта п'єзоелектричної напруги e_{1j} кристала GPI при різних напругах σ_j і електричному полю E_1

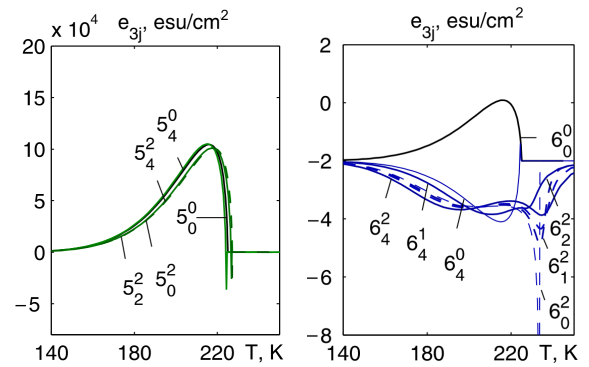


Рис. 9. Температурні залежності коефіцієнта п'єзоелектричної напруги e_{3j} кристала GPI при різних напругах σ_j і електричному полю E_1

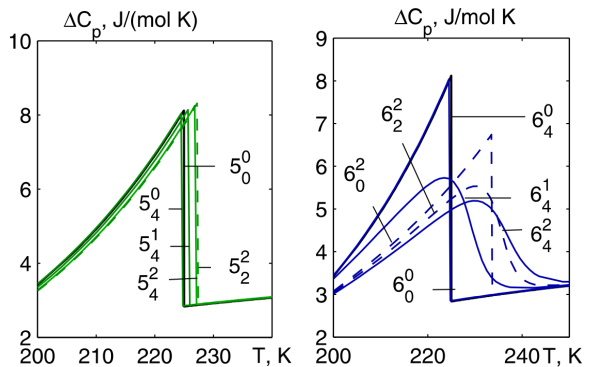


Рис. 10. Температурні залежності ΔC_p кристала GPI при різних напругах σ_j і електричних полях E_1

6_0^4 зануляються при $T = T_c$, а при спільній дії напруги σ_6 і поля E_1 індукуються проникності ϵ_{22} , причому при рості напруги при сталому полі та при збільшенні поля при сталій нарузі проникності ϵ_{22} зменшуються.

При прикладанні до кристала $\{\sigma_5, E_1\}$ при температурах ФП виникає стрибок проникностей ε_{11} , ε_{33} , який при збільшенні напруги σ_5 зміщується в область більших температур і зменшується за величиною (рис. 5, 6). В [6] встановлено, що це пониження T_c і збільшення ε_{33} в сегнетофазі пов'язано з частковим розупорядкуванням протонів у ланцюжку типу "В" на рис. 1 під дією поля E_1 .

Якщо прикладено лише поле E_1 , то виникає стрибок проникностей ε_{11} , ε_{33} , максимумами яких з ростом напруги σ_6 заокруглюється і знижується (рис. 5, 6). При напругах більше 1 кбар криві ε_{11} , ε_{33} розмиваються і виникають два максимуми в температурному ході. Якщо прикладено до кристала лише напругу σ_6 , то криві проникностей ε_{11} , ε_{33} поводять себе, як поздовжня проникність. Спільна дія $\{\sigma_6, E_1\}$ веде до того, що проникності ε_{11} , ε_{33} стають скінченими і її величина зменшується з ростом поля.

Температурні залежності коефіцієнтів п'єзоелектричної напруги e_{21} кристала GPI при дії $\{\sigma_5, E_1\}$ наведені на рис. 7. При прикладанні до кристала лише поля E_1 крива e_{21} зміщується в область менших температур і стає скінченою. При сумісній дії $\{\sigma_5, E_1\}$ і рості напруги σ_5 криві e_{21} зміщуються в сторону вищих температур і від'ємні максимуми e_{21} дещо зменшуються.

Подібними є температурні поведінки при дії $\{\sigma_5, E_1\}$ п'єзомодулів e_{1j} (рис. 8); e_{3j} (рис. 9).

При температурах, близьких до температури ФП, сумісна дія напруги σ_5 і поля E_1 приводить до різкого зростання від'ємних значень e_{1j} і додатних значень e_{3j} . При сумісній дії напруги σ_6 і поля E_1 криві п'єзомодулів e_{1j} та e_{3j} розмиваються і індукуються їх значення в парафазі. Ще одна особливість – зміна знака поперечних п'єзоелектричних коефіцієнтів e_{1j} , e_{3j} поблизу T_c пов'язана з майже повним розупорядкуванням протонів у ланцюжку типу "В" поблизу T_c . Як видно з рис. 8 і рис. 9 (криві 6_0^2), температурні залежності $e_{1j}(T)$, $e_{3j}(T)$ розбігаються в точці T_c . Це пов'язано з тим, що при ненульовій напрузі σ_6 маленькі зміни деформацій $d\varepsilon_4$, $d\varepsilon_6$ супроводжуються зміною температури dT_c і зсувом кривих $P_1(T)$ і $P_3(T)$ до вищих температур. А оскільки поблизу температури фазового переходу $dP_i/dT \rightarrow \infty$, то $dP_i/d\varepsilon_4 \rightarrow \infty$, $dP_i/d\varepsilon_6 \rightarrow \infty$.

Температурні залежності ΔC_p кристала GPI при $\{\sigma_5, E_1\}$ зображені на рис. 10. При прикладан-

ні до кристала $\{\sigma_5, E_1\}$ криві ΔC_p зміщуються в область менших температур і зменшується їх максимум. Зменшення поля E_1 приводить до зростання максимуму ΔC_p .

Якщо діє $\{\sigma_6, E_3\}$, то скачок ΔC_p розмивається при рості напруги σ_6 (рис. 10).

5. Висновки

В даній роботі в рамках модифікованої моделі протонного впорядкування квазіодновимірних сегнетоелектриків з водневими зв'язками типу GPI з врахуванням в сегнетоелектричній фазі п'єзоелектричного зв'язку з деформаціями ε_j в наближенні двочастинкового кластера вивчено вплив спільної дії напруг σ_5 , σ_6 і електричного поля E_1 на фазовий перехід та фізичні характеристики квазіодновимірного сегнетоелектрика GPI.

Встановлено, що при прикладанні зсувної напруги σ_5 суттєво зростає деформація ε_5 і незначно ε_3 , а напруга σ_6 збільшує лише деформацію ε_6 . Виявлено, що зміна термодинамічних характеристик кристала внаслідок дії напруг σ_5 , σ_6 і поля E_1 зумовлена зміною температурної поведінки параметрів порядку.

В результаті числових розрахунків встановлено, як при сумісній дії зсувних напруг σ_j і електричного поля E_1 зміна температурних залежностей термодинамічних характеристик залежить від знаків напруг σ_j та поля E_1 .

Термодинамічні характеристики при прикладанні до кристала напруги σ_5 та поля E_1 зміщуються вздовж температурної осі в сторону менших температур.

Спільна дія напруги σ_6 і поля E_1 зумовлюють ряд цікавих ефектів, зокрема розмивання поляризації P_2 і зникнення фазового переходу, виникнення поперечних поляризацій P_1 і P_3 в сегнето – і парафазах, діелектричної проникності ε_{22} і коефіцієнта п'єзоелектричної напруги e_{21} , розмивання сталої п'єзоелектричної напруги h_{21} .

Для проведення числових розрахунків термодинамічних характеристик з врахуванням зсувних напруг і поля E_1 не використовуються додаткові параметри порівняно з рахунками без зовнішніх впливів. Тому отримані в даній роботі температурні залежності термодинамічних характеристик кристала GPI мають характер передбачень.

1. S. Dacko, Z. Czapla, J. Baran, M. Drozd. Ferroelectricity in Gly-H₃PO₃ crystal. *Phys. Lett. A* **223**, 217 (1996).
2. I. Stasyuk, Z. Czapla, S. Dacko, O. Velychko. Proton ordering model of phase transitions in hydrogen bonded ferroelectric type systems: the GPI crystal. *Condens. Matter Phys.* **6**, 483 (2003).
3. I. Stasyuk, Z. Czapla, S. Dacko, O. Velychko. Dielectric anomalies and phase transition in glycinium phosphite crystal under the influence of a transverse electric field. *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, 1963 (2004).
4. I. Stasyuk, O. Velychko. Theory of electric field influence on phase transition in glycine phosphite. *Ferroelectrics* **300**, 121 (2004).
5. I.R. Zachek, Ya. Shchur, R.R. Levitskii, A.S. Vdovych. Thermodynamic properties of ferroelectric NH₃CH₂COOH · H₂PO₃ crystal. *Physica B* **520**, 164 (2017).
6. I.R. Zachek, R.R. Levitskii, A.S. Vdovych, I.V. Stasyuk. Influence of electric fields on dielectric properties of GPI ferroelectric. *Condens. Matter Phys.* **20**, 23706 (2017).
7. I.R. Zachek, R.R. Levitskii, A.S. Vdovych. Deformation effects in glycinium phosphite ferroelectric. *Condens. Matter Phys.* **21**, 33702 (2018).
8. J. Nayeem, T. Kikuta, N. Nakatani, F. Matsui, S.-N. Takeda, K. Hattori, H. Daimon. Ferroelectric phase transition character of glycine phosphite. *Ferroelectrics* **332**, 13 (2006).
9. F. Shikanai, J. Hatori, M. Komukae, Z. Czapla, T. Osaka. Heat capacity and thermal expansion of NH₃CH₂COOH · H₂PO₃. *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 1812 (2004).
10. M. Wiesner. Piezoelectric properties of GPI crystals. *Phys. Status Solidi B* **238**, 68 (2003).

Одержано 10.01.20

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

INFLUENCE OF THE STRESSES σ_5
AND σ_6 AND THE ELECTRIC FIELD E_1
ON THE THERMODYNAMIC PARAMETERS
OF GPI FERROELECTRIC MATERIALS

Effects arising in glycine phosphite (GPI) ferroelectrics under the action of the shear stresses σ_5 and σ_6 and the electric field E_1 have been studied in the framework of a modified model that accounts for the piezoelectric coupling between the ordered structural elements and the strains ε_j . The components of the polarization vectors and the tensor of static dielectric permittivity are calculated in the two-particle cluster approximation for mechanically clamped crystals. The corresponding piezoelectric and thermal parameters are also determined. The influence of the simultaneous action of the stress σ_5 and the field E_1 , as well as the stress σ_6 and the field E_1 , on the physical parameters of the GPI ferroelectric crystals and the phase transition in them is analyzed.

Key words: ferroelectrics, phase transition, dielectric permittivity, piezoelectric moduli, shear stress. *Keywords:* ferroelectrics, phase transition, dielectric permittivity, piezoelectric moduli, shear stress.