

ДІЕЛЕКТРИЧНІ, П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНІ І ПРУЖНІ ВЛАСТИВОСТІ
ПРОСТОЇ МОДЕЛІ П'ЄЗОЕЛЕКТРИКАР.Р. Левицький^a, І.Р. Зачек^b, А.С. Вдович^a^a *Інститут фізики конденсованих систем НАН України
вул. Свенціцького, 1, Львів, 79011, Україна*^b *Національний університет “Львівська політехніка”
вул. С. Бандери 12, 79013, Львів, Україна**(Отримано 3 листопада 2009 р.)*

У межах двопідграткової моделі Ізінга з врахуванням короткосяжної і далекосяжної взаємодій та п'єзоелектричної взаємодії із зсувними деформаціями в наближенні двочастинкового кластера у випадку полярного впорядкування розраховано діелектричні, п'єзоелектричні пружні та теплові характеристики простої моделі п'єзоелектрика. Врахувавши динаміку п'єзоелектричної деформації, явно описано явища затискання кристала височастотним електричним полем та п'єзоелектричного резонансу. Розраховано коефіцієнт поглинання ультразвуку та досліджено його поведінку в області фазового переходу. Виконано детальний числовий аналіз отриманих результатів.

Ключові слова: кластерне наближення, напруга зсуву.**PACS:** 75.10.Nk, 75.40.Cx, 75.40.Gb**УДК:** 536.77

Вступ

Більше п'ятдесяти років велика увага приділяється побудові статистичної теорії матеріалів, які описуються моделлю Ізінга. Ця модель, зокрема, є доволі ефективною для вивчення процесів впорядкування в електро- та магнітовпорядкованих сполуках та бінарних сплавах. Особливий інтерес до моделі Ізінга зумовлений надією побудувати на її основі мікроскопічну теорію поведінки термодинамічних і динамічних характеристик матеріалів, які вона описує, в області фазового переходу другого роду.

Відомо [1], що поява впорядкування в системі зумовлена взаємодією між елементами структури, які впорядковуються. Цілком природним є припущення про те, що характер сил взаємодії між цими елементами структури визначає температуру фазового переходу та фізичні характеристики системи в широкій температурній області. До того ж характер поведінки фізичних характеристик в області фазового переходу є загальним для багатьох систем взаємодіючих частинок. Для поглибленого розуміння природи фазових переходів особливо важливими є точні результати для двовимірної моделі Ізінга та одновимірної моделі Каца [1]. Згадані моделі є граничними по відношенню до величини r_0 – відношення радіуса дії сил притягання до середньої відстані між частинками. Зокрема, для моделі Ізінга $r_0 = 1$, а в моделі Каца r_0 є безмежно великим. Для реальних матеріалів r_0 , як правило, відповідає проміжному випадку.

Перехід до тривимірних систем істотно ускладнює розрахунки. У зв'язку з цим в цьому випадку широко використовують наближені методи розрахунку, найпростішим серед яких є наближення молекулярного поля (НМП) [2–4]. Однак НМП є незадовільним за наявності в системі, яка досліджується, сильних короткосяжних взаємодій. Найпоследовніше опис такого типу сполук досягнуто на основі методу кластерних розвинень [2, 3], який завдяки последовнішому врахуванню короткосяжних кореляцій дає значно правильніші результати в широкій температурній області, ніж, наприклад, НМП. Кластерне наближення широко використовувалось для опису термодинамічних характеристик псевдоспінових систем [2, 3].

В останньому тридцятиріччі велику увагу приділяли дослідженню релаксаційних явищ в системах, які описуються моделлю Ізінга [5–8]. У цих роботах було використано підхід, який ґрунтується на стохастичній моделі Глаубера [9]. У роботах [10–16] модель Глаубера була використана для вивчення релаксаційних явищ в квазіодновимірних сегнетоактивних сполуках типу лад-безлад, зокрема і з водневими зв'язками.

Аналогічний підхід в роботах [17–27] було запропоновано для опису спостережуваних на експерименті динамічних характеристик сегнетоактивних сполук з водневими зв'язками сім'ї KN_2PO_4 . У згаданих вище роботах, враховуючи концепцію про важливе значення у фазовому переході в сегнетоактивних

сполуках з водневими зв'язками протонної системи, було запропоновано єдиний підхід для опису їх термодинамічних та динамічних характеристик.

До того ж потрібно відзначити, що серед сегнетоактивних сполук типу лад-безлад, зокрема і з водневими зв'язками відомий широкий клас нецентросиметричних кристалів, які є п'єзоелектриками. Типовими представниками цього типу матеріалів є сегнетоактивні сполуки сім'ї KN_2PO_4 (див. [28–33]) та сегнетової солі [34–36]. У згаданих роботах отримані вирази для статичних та динамічних діелектричних проникностей, модулів пружності, п'єзоелектричних модулів, термодинамічних характеристик, а також швидкості та коефіцієнта поглинання звуку кристалів, які досліджувались. Наявність надійних експериментальних даних для сегнетоелектриків сім'ї KN_2PO_4 дало змогу [28–33] в межах запропонованої теорії отримати при належному виборі мікропараметрів добрий кількісний опис для цих кристалів цих експериментальних результатів. Отримана також принципово важлива інформація про характер поведінки фізичних характеристик сегнетоелектриків типу KN_2PO_4 , відповідно, в широкому частотному і температурному діапазонах, а також область фазового переходу першого роду. У роботах [34–36] отримано добрий кількісний опис наявних експериментальних результатів та інформацію про характер поведінки фізичних характеристик при різних частотах та температурах, а також область фазового переходу другого роду для сегнетової солі.

Варто відзначити, що відсутність достовірної інформації про механізм фазового переходу в згаданих вище кристалах сегнетової солі, значний розкид експериментальних даних для них (див. [28–36]) вимагає подальших ґрунтовніших досліджень поведінки фізичних характеристик п'єзоелектричних сегнетоелектричних кристалів. У зв'язку з цим у цій роботі запропоновано просту модель п'єзоелектричного сегнетоелектрика, в межах якої буде досліджено поведінку його фізичних характеристик, відповідно, в широкій частотній і температурній областях, а також область фазового переходу другого роду.

I. Постановка задачі

Розглядатимемо системи, поведінка яких описується двопідґратковою моделлю Ізінга з врахуванням п'єзо ефекту. Модельний гамільтоніан таких систем має вигляд

$$\hat{H} = \frac{1}{2} N v c_{jj}^{E0} \varepsilon_{jj}^2 - N v e_{ij}^0 \varepsilon_{jj} E_i - \frac{1}{2} N v \chi_{ii}^{\varepsilon 0} E_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{qq'} J_{ff'}(qq') \frac{\sigma_{qf}}{2} \frac{\sigma_{q'f'}}{2} - \sum_{qf} (\psi_{fj} \varepsilon_j + \mu_{fi} E_i) \frac{\sigma_{qf}}{2}. \quad (2.1)$$

Перші три доданки в (2.1) відповідають “затравковій” енергії кристалічної ґратки, в потенціалі якої рухаються елементи структури, що впорядковуються (ЕСВ). c_{jj}^{E0} , e_{ij}^0 і $\chi_{ii}^{\varepsilon 0}$ – т.зв. “затравкові” пружна стала,

коефіцієнт п'єзоелектричної напруги і діелектрична сприйнятливість, відповідно; v – об'єм примітивної комірки, N – кількість примітивних комірок.

Наступний доданок описує взаємодію між ЕСВ, яка включає як короткосяжні, так і далекосяжні взаємодії; σ_{qf} – оператор внутрішніх ступенів вільності, що відповідає f -му ЕСВ q -ї комірки $\left(\sigma_{qf} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right)$.

У п'ятому доданку перший член – лінійне за зсувною деформацією ε_j молекулярне поле, індуковане п'єзоелектричною взаємодією, а другий описує взаємодію ЕСВ із зовнішнім полем E_i , яке напрямлене вздовж тієї кристалографічної осі, вздовж якої виникає спонтанна поляризація P_i в сегнетоелектричній фазі. Деформація $\varepsilon_j = \varepsilon_{i+3}$ перетворюється за тим самим незвідним представленням, що й поляризація P_i . Відповідно, $c_{jj}^E = c_{i+3,i+3}^E$; $e_{ij}^0 = e_{i,i+3}^0$. ψ_{fj} – деформаційний потенціал, μ_f – ефективний електричний момент у розрахунку на один ЕСВ. У випадку полярного впорядкування ЕСВ

$$\psi_{pj} = \psi_{1j} = \psi_{2j}, \quad \mu_p = \mu_{1i} = \mu_{2i}.$$

Для розрахунку фізичних характеристик кристалів, що описуються моделлю Ізінга, використаємо наближення двочастинкового кластера. В цьому наближенні будуть точно враховані кореляції між ЕСВ, які входять в число найближчих сусідів n . Для опису їх взаємодії з віддаленішими ЕСВ, які знаходяться в наступних координаційних сферах, обмежимося наближенням молекулярного поля. У результаті вихідний гамільтоніан (2.1) запишемо в такому вигляді:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} N v c_{jj}^{E0} \varepsilon_{jj}^2 - N v e_{ij}^0 \varepsilon_{jj} E_i - \frac{1}{2} N v \chi_{ii}^{\varepsilon 0} E_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{qq'} J_{ff'}(qq') \frac{\langle \sigma_q \rangle}{2} \frac{\langle \sigma_{f'} \rangle}{2} + \sum_q \hat{H}_q^{(2)}, \quad (2.2)$$

де

$$\hat{H}_q^{(2)} = -J \frac{\sigma_{q1}}{2} \frac{\sigma_{q2}}{2} - \sum_{f=1}^2 \frac{x_{fj}}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2} \quad (2.3)$$

– двочастинковий гамільтоніан. Відповідно, одночастинковий гамільтоніан

$$\hat{H}_q^{(1)} = - \sum_f \frac{\bar{x}_{fj}}{\beta} \frac{\sigma_{qf}}{2}. \quad (2.4)$$

У (2.3) і (2.4) використані такі позначення:

$$\frac{x_{fj}}{\beta} = \frac{n-1}{n} \Delta_f + \gamma_f + \psi_{fj} \varepsilon_j + \mu_f E_i, \\ \frac{\bar{x}_{fj}}{\beta} = \Delta_f + \gamma_f + \psi_{fj} \varepsilon_j + \mu_f E_i, \quad (2.5)$$

а

$$\gamma_{qf} = \frac{1}{2} \sum_{q'f'} J_{ff'}(qq') \langle \sigma_{f'} \rangle. \quad (2.6)$$

Параметр Δ_{qf} – це параметр самоузгодження короткосяжних взаємодій; він визначає вплив ЕСВ сусідніх комірок на f -й ЕСВ q -ї комірки. У кластерному наближенні параметр Δ_{qf} визначається з умови самоузгодження: середнє значення квазіспіна $\langle \sigma_{qf} \rangle$ не повинно залежати від того, за яким розподілом Гіббса (з двочастинковим чи одностинковим гамільтоніаном) воно розраховано. Отже,

$$\text{Sp}\{\sigma_{qf}\rho_q^{(2)}\} = \text{Sp}\{\sigma_{qf}\rho_q^{(1)}\}, \quad (2.7)$$

де

$$\rho_q^{(2)} = \frac{e^{-\beta\hat{H}_q^{(2)}}}{\text{Spe}^{-\beta\hat{H}_q^{(2)}}}, \quad \rho_q^{(1)} = \frac{e^{-\beta\hat{H}_q^{(1)}}}{\text{Spe}^{-\beta\hat{H}_q^{(1)}}}.$$

Розраховані на основі (2.7), (2.3) і (2.4) унарні функції розподілу

$$\eta_{\frac{1}{2}}^{(1)} = \langle \sigma_{\frac{1}{2}} \rangle = \frac{\text{sh}\frac{1}{2}(x_1 + x_2) \pm \text{ash}\frac{1}{2}(x_1 - x_2)}{\text{ch}\frac{1}{2}(x_1 + x_2) + \text{ach}\frac{1}{2}(x_1 - x_2)},$$

$$a = e^{-\frac{\beta J}{2}}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (2.8)$$

$$\eta_{\frac{1}{2}}^{(1)} = \text{th}\frac{1}{2}\bar{x}_{\frac{1}{2}}. \quad (2.9)$$

Виключимо із (2.5) параметр Δ_f . В результаті отримуємо

$$x_{1j} = \frac{n-1}{n} \ln \frac{1 + \eta_{\frac{1}{2}}^{(1)}}{1 - \eta_{\frac{1}{2}}^{(1)}} + \frac{2}{n}\beta\nu_{11}\eta_{\frac{1}{2}}^{(1)} + \frac{2}{n}\beta\nu_{12}\eta_{\frac{1}{2}}^{(1)} + \frac{1}{n}(\beta\psi_{1j}\varepsilon_j + \beta\mu_1 E_i),$$

$$x_{2j} = \frac{n-1}{n} \ln \frac{1 + \eta_{\frac{1}{2}}^{(1)}}{1 - \eta_{\frac{1}{2}}^{(1)}} + \frac{2}{n}\beta\nu_{12}\eta_{\frac{1}{2}}^{(1)} + \frac{2}{n}\beta\nu_{11}\eta_{\frac{1}{2}}^{(1)} + \frac{1}{n}(\beta\psi_{2j}\varepsilon_j + \beta\mu_2 E_i),$$

де $\nu_{11} = \frac{1}{4}J_{11} = \frac{1}{4}J_{22}$; $\nu_{12} = \frac{1}{4}J_{12} = \frac{1}{4}J_{21}$, $J_{ff'} = \sum_{q'} J_{ff'}(qq')$.

Розглянемо випадок полярного впорядкування ЕСВ. Оскільки в цьому випадку

$$\langle \sigma_1 \rangle = \langle \sigma_2 \rangle = \eta_{pj}^{(1)}, \quad (2.10)$$

то

$$x_{pj} = x_{1j} = x_{2j} = \frac{n-1}{n} \ln \frac{1 + \eta_{pj}^{(1)}}{1 - \eta_{pj}^{(1)}} + 2\frac{\beta\nu_p}{n}\eta_{pj}^{(1)} + \frac{\beta}{n}\psi_{pj}\varepsilon_j + \frac{\beta}{n}\mu_p E_i,$$

де $\nu_p = \nu_{11} + \nu_{12}$.

Для параметра впорядкування $\eta_p^{(1)}$ отримуємо таке рівняння:

$$\eta_{pj}^{(1)} = \frac{\text{sh}x_{pj}}{a + \text{ch}x_{pj}} = \frac{M_{pj}}{D_{pj}}. \quad (2.11)$$

II. Діелектричні, п'єзоелектричні і пружні характеристики систем, що описуються моделлю Ізінга

Термодинамічні характеристики систем, що описуються моделлю Ізінга, вивчатимемо на основі термодинамічного потенціалу Гіббса в розрахунку на одну примітивну комірку, який у наближенні двочастинкового кластера отримано в такому вигляді:

$$g = \frac{1}{2}\bar{v}c_{jj}^{E0}\varepsilon_j^2 - \bar{v}e_{ij}^0\varepsilon_j E_i - \frac{1}{2}\bar{v}\chi_{ii}^{\varepsilon 0}E_i^2 - n\frac{J}{4} + (n-2)T \ln 2 +$$

$$+ \tilde{\nu}_p \eta_{pj}^{(1)2} - T(n-1) \ln[1 - \eta_{pj}^{(1)2}] - Tn \ln D_{pj} - \bar{v}\sigma_j \varepsilon_j;$$

$$\bar{\nu}_p = \frac{\nu}{k_B}, \quad \bar{v} = \frac{v}{k_B}.$$

З умов термодинамічної рівноваги

$$\frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g}{\partial \varepsilon_j} \right)_{E_i, \sigma_j} = 0, \quad \frac{1}{\bar{v}} \left(\frac{\partial g}{\partial E_i} \right)_{\sigma_j} = -P_i$$

знаходимо, що

$$\sigma_j = c_{jj}^{E0}\varepsilon_j - e_{ij}^0 E_i - \frac{\psi_{pj}}{v} \frac{M_{pj}}{D_{pj}}, \quad (3.2)$$

$$P_i^p = e_{ij}^0 \varepsilon_j + \chi_{ii}^{\varepsilon 0} E_i + \frac{\mu_p}{\bar{v}} \frac{M_{pj}}{D_{pj}}. \quad (3.3)$$

З (3.4) знаходимо електричне поле

$$E_i = -h_{ij}^0 \varepsilon_j + k_{ii}^{\varepsilon 0} \left(P_i - \frac{\mu_p}{v} \frac{M_{pj}}{D_{pj}} \right), \quad (3.4)$$

де $h_{ij}^0 = \frac{e_{ij}^0}{\chi_{ii}^{\varepsilon 0}}$, $k_{ij}^{\varepsilon 0} = \frac{1}{\chi_{ii}^{\varepsilon 0}}$.

Підставивши (3.4) у (3.2), отримуємо

$$\sigma_j = c_{ij}^{P0}\varepsilon_j - h_{ij}^0 \left(P_i - \frac{\mu}{v} \frac{M_{pj}}{D_{pj}} \right) - \frac{\psi_{pj}}{v} \frac{M_{pj}}{D_{pj}}, \quad (3.5)$$

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

Зі співвідношень (3.3) і (3.4) отримуємо вирази для діелектричних, пружних, п'єзоелектричних характеристик систем. Статична діелектрична сприйнятливість затиснутого кристала у впорядкованій фазі

$$\chi_{ii}^{\varepsilon}(p) = \left(\frac{\partial P_i}{\partial E_i} \right)_{\varepsilon_j} = \chi_{ii}^{\varepsilon 0} + \bar{v} \frac{\mu_p^2 \beta}{v^2 n} \frac{\varkappa_{pj}}{D_{pj} - \varkappa_{pj} \varphi_{pj}^{\eta}} \quad (3.6)$$

коефіцієнт п'єзоелектричної напруги

$$e_{ij}(p) = - \left(\frac{\partial \sigma_j}{\partial E_i} \right)_{\varepsilon_0} = \left(\frac{\partial P_i}{\partial \varepsilon_j} \right)_{E_i} = e_{ij}^0 + \frac{\mu_p \beta \psi_{pj}}{v n} \frac{\varkappa_{pj}}{D_{pj} - \varkappa_{pj} \varphi_{pj}^{\eta}}, \quad (3.7)$$

перенормована пружна стала при постійному полі

$$c_{jj}^E(p) = \left(\frac{\partial \sigma_j}{\partial \varepsilon_j} \right)_{E_i} = c_{jj}^{E0} - \frac{\psi_{pj}^2 \beta}{v} \frac{\varkappa_{pj}}{D_{pj} - \varkappa_{pj} \varphi_{pj}^\eta}. \quad (3.8)$$

У (3.6)–(3.8)

$$\varkappa_{pj} = \operatorname{ch} x_{pj} - \eta_{pj}^{(1)} \operatorname{sh} x_{pj} = \frac{1 + a \operatorname{ch} x_{pj}}{a + \operatorname{ch} x_{pj}},$$

$$\varphi_{pj}^\eta = \frac{2}{n} \left(\frac{n-1}{1 - \eta_{pj}^{(1)2}} + \beta \nu_p \right).$$

Диференціюючи вираз (3.5) по деформації при $p_i = \text{const}$, отримуємо вираз для сталої п'єзоелектричної напруги:

$$h_{ij}(p) = \frac{e_{ij}(p)}{\chi_{ii}^\varepsilon(p)}. \quad (3.9)$$

Виключивши з (3.2) деформацію, отримуємо залежні від напруги деформацію і поляризацію

$$\varepsilon_j = s_{jj}^{E0} \sigma_j + d_{ij}^0 E_i + \frac{\psi_{pj}}{v} s_{jj}^{E0} \frac{\bar{M}_{pj}}{D_{pj}}, \quad (3.10)$$

$$P_i^p = d_{ij}^0 \sigma_j + \chi_{ii}^{\sigma 0} E_i + \left(\frac{\mu_p}{v} + \frac{\psi_{pj}}{v} d_{14}^0 \right) \frac{\bar{M}_{pj}}{D_{pj}}. \quad (3.11)$$

Використовуючи вирази (3.10) і (3.11), знаходимо у випадку полярного впорядкування ЕСВ такі характеристики систем при температурах, менших за температуру фазового переходу:

– діелектрична сприйнятливість вільного кристала

$$\chi_{ii}^\sigma(p) = \left(\frac{\partial P_i^p}{\partial E_i} \right)_{\sigma_j} =$$

$$= \chi_{ii}^{\sigma 0} + \bar{v} \left(\frac{\mu_p}{v} + \frac{\psi_{pj}}{v} d_{jj}^0 \right)^2 \frac{\beta}{n} \frac{\bar{\varkappa}_{pj}}{D_{pj} - \bar{\varkappa}_{pj} \bar{\varphi}_{pj}^\eta}, \quad (3.12)$$

– коефіцієнт п'єзоелектричної деформації

$$d_{ij}(p) = \left(\frac{\partial P_i^p}{\partial \sigma_j} \right)_{E_i} = \left(\frac{\partial \varepsilon_j}{\partial E_i} \right)_{\sigma_j} =$$

$$= d_{ij}^0 + \left(\frac{\mu_p}{v} + \frac{\psi_{pj}}{v} d_{jj}^0 \right) s_{jj}^{E0} \psi_{pj} \frac{\beta}{n} \frac{\bar{\varkappa}_{pj}}{D_{pj} - \bar{\varkappa}_{pj} \bar{\varphi}_{pj}^\eta}, \quad (3.13)$$

– пружна податливість при сталому полі

$$s_{jj}^E(p) = \left(\frac{\partial \varepsilon_j}{\partial \sigma_j} \right)_{E_i} =$$

$$= s_{jj}^{E0} + \left(s_{jj}^{E0} \right)^2 \frac{\psi_{pj}^2 \beta}{v} \frac{\bar{\varkappa}_{pj}}{D_{pj} - \bar{\varkappa}_{pj} \bar{\varphi}_{pj}^\eta}, \quad (3.14)$$

де

$$\bar{\varkappa}_{pj} = \operatorname{ch} \bar{x}_{pj} - \eta_p^{(1)} \operatorname{sh} \bar{x}_{pj},$$

$$\bar{\varphi}_{pj}^\eta = \frac{n-1}{n} \frac{2}{1 - \eta_p^{(1)2}} + \frac{1}{nT} \left(2\bar{\nu}_p + \frac{\tilde{\psi}_{pj}^2}{\bar{v}} s_{jj}^{E0} \right).$$

Температуру фазового переходу визначаємо з умови, що при $T \rightarrow T_c$ діелектрична сприйнятливість вільного кристала $\chi_{ii}^\sigma \rightarrow \infty$. Отже,

$$n e^{-\frac{\tilde{J}}{2T_c(p)}} = n - 2 + \frac{1}{T_c(p)} \left(2\bar{\nu}_p + \frac{\tilde{\psi}_{pj}^2}{\bar{v}} s_{jj}^{E0} \right). \quad (3.15)$$

III. Теплові характеристики систем, що описуються моделлю Ізінга

Молярна ентропія кристалів, що зумовлена ЕСВ, у випадку полярного впорядкування, має такий вигляд:

$$S_j^p = -R \left(\frac{\partial g_{1E}^p}{\partial T} \right)_{E_i, \sigma_j} =$$

$$= R \left\{ -(n-2) \ln 2 + (n-1) \ln(1 - \eta_{pj}^{(1)2}) + \right.$$

$$\left. + n \ln D_{pj} - \frac{\varphi_{pj}^T (\eta_{pj}^{(1)})^2}{T} + n \frac{a}{D_{pj}} \frac{\tilde{J}}{2T} \right\}, \quad (4.1)$$

де використане таке позначення:

$$\varphi_{pj}^T = \left(2\nu_p \eta_{pj}^{(1)} + \frac{\tilde{\psi}_{pj}^2}{c_{jj}^{E0} \bar{v}} \right).$$

Молярну теплоємність систем, зумовлену ЕСВ, при постійній напрузі обчислимо, безпосередньо диференціюючи ентропію

$$\Delta C_j^\sigma = T \left(\frac{\partial S_j^p}{\partial T} \right)_{E_i, \sigma_j} = RT (\lambda_{pT} + \lambda_{p\eta} \eta_{pT}), \quad (4.2)$$

де

$$\lambda_{pT} = \frac{(\eta_{pj}^{(1)})^2 \varphi_{pj}^T}{T^2} + \frac{na\tilde{J}}{2TD_{pj}} \left(\frac{\tilde{J}}{2T^2} - \frac{1}{T} \right) +$$

$$+ \left(\frac{n}{D_{pj}} - \frac{na\tilde{J}}{2TD_{pj}^2} \right) D_{pT},$$

$$\lambda_{p\eta} = \frac{-2\eta_{pj}^{(1)}(n-1)}{1 - \eta_{pj}^{(1)}} - \frac{2\eta_{pj}^{(1)} \varphi_{pj}^T}{T} +$$

$$+ \left(\frac{n}{D_{pj}} - \frac{na\tilde{J}}{2TD_{pj}^2} \right) D_{p\eta},$$

$$\eta_{pT} = \left(-\frac{\eta_{pj}^{(1)} a \tilde{J}}{2T^2} - \frac{\varkappa_{pj} \eta_{pj}^{(1)} \varphi_{pj}^T}{nT^2} \right) / (D_{pj} - \varkappa_{pj} x_{p\eta}),$$

$$D_{pT} = \frac{a\tilde{J}}{2T^2} - \operatorname{sh} x_{pj} \frac{\eta_{pj}^{(1)} \varphi_{pj}^T}{nT^2}, \quad D_{p\eta} = \operatorname{sh} x_{pj} x_{p\eta},$$

$$x_{p\eta} = \frac{n-1}{n} \frac{2}{1 - \eta_{pj}^{(1)}} + \frac{\varphi_{pj}^T}{nT}.$$

IV. Релаксаційні явища в моделі Ізінга при сталій деформації

Динамічні властивості системи, що описується гамільтоніаном (2.1), будемо вивчати на основі методу Глаубера [9], в якому система рівнянь для функцій розподілу ЕСВ, що залежать від часу, має такий вигляд:

$$-\alpha \frac{d}{dt} \langle \prod_f \sigma_{q_i}^2 \rangle = \sum_{f'} \langle \prod_f \sigma_{qf} \left[1 - \sigma_{qf'} \operatorname{th} \frac{\beta \varepsilon_{qf'}}{2} \right] \rangle, \quad (5.1)$$

де α – константа, що має розмірність, обернену до часу, й ефективно визначає часову шкалу динамічних процесів, а ε_{qf} – локальне поле, що діє на f -й ЕСВ в q -й комірці:

$$\varepsilon_{q_1} = \frac{J}{2} \sigma_{q_2} + \frac{x_{1j}}{\beta}, \quad \varepsilon_{q_2} = \frac{J}{2} \sigma_{q_1} + \frac{x_{2j}}{\beta}. \quad (5.2)$$

Перетворимо вираз $\operatorname{th} \frac{1}{2} \beta \varepsilon_{qf'}$, який входить у рівняння (5.1):

$$\operatorname{th} \frac{\beta \varepsilon_{q_1}}{2} = P_{1j} \sigma_{q_2} + L_{1j}, \quad \operatorname{th} \frac{\beta \varepsilon_{q_2}}{2} = P_{2j} \sigma_{q_1} + L_{2j}, \quad (5.3)$$

де

$$P_{fj} = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{th} \left[\frac{\beta J}{4} + \frac{x_{fj}}{2} \right] - \operatorname{th} \left[-\frac{\beta J}{4} + \frac{x_{fj}}{2} \right] \right\},$$

$$L_{fj} = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{th} \left[\frac{\beta J}{4} + \frac{x_{fj}}{2} \right] + \operatorname{th} \left[-\frac{\beta J}{4} + \frac{x_{fj}}{2} \right] \right\},$$

причому $P_{1p} = P_{2p} = P_{pj}$, $L_{1p} = L_{2p} = L_{pj}$.

У результаті на основі (5.1) з врахуванням (5.3) отримуємо рівняння для залежних від часу унарних функцій розподілу:

$$-\alpha \frac{d}{dt} \eta_{pj}^{(1)} = (1 - P_{pj}) \eta_{pj}^{(1)} - L_{pj}. \quad (5.4)$$

Відповідно запишемо рівняння руху для унарних функцій розподілу в одночастинковому наближенні:

$$-\alpha \frac{d}{dt} \eta_{pj}^{(1)} = \eta_{pj}^{(1)} - \operatorname{th} \frac{\tilde{x}_{pj}}{2}. \quad (5.5)$$

Обмежимося у подальшому випадком малих відхилень від стану рівноваги. Для цього представимо $\eta_p^{(1)}$, Δ_p і вираз (2.5) у вигляді суми двох доданків: рівноважних функцій і їх відхилень від стану рівноваги, які залежать від часу:

$$\eta_{pj}^{(1)} = \tilde{\eta}_{pj}^{(1)} + \eta_{pj}^{(1)}, \quad \Delta_p = \tilde{\Delta}_p + \Delta_{pt},$$

$$x_{pj} = \tilde{x}_{pj} + x_{pjt} = \frac{n-1}{n} \beta \tilde{\Delta}_p + 2\beta \nu_p \tilde{\eta}_{pj}^{(1)} + \beta \psi_{pj} \varepsilon_j +$$

$$+ \frac{n-1}{n} \beta \Delta_{pt} + 2\beta \nu_p \eta_{pjt}^{(1)} + \beta \mu_p E_{it}. \quad (5.6)$$

Розкладемо також у ряд по $\frac{x_{jt}}{2}$, обмежуючись лінійними членами, коефіцієнти $P_{p,aj}$ і $L_{p,aj}$:

$$P_{pj} = P_{pj0} + \frac{x_{pt}}{2} P_{pj1}, \quad L_{pj} = L_{pj0} + \frac{x_{pt}}{2} L_{pj1}, \quad (5.7)$$

де використані позначення

$$P_{pj0} = (1 - a^2) Z_{pj}^{-1},$$

$$L_{pj0} = 2a \operatorname{sh} \tilde{x}_{pj} Z_{pj}^{-1},$$

$$P_{pj1} = -4a(1 - a^2) \operatorname{sh} \tilde{x}_{pj} Z_{pj}^{-2},$$

$$L_{pj1} = 4a \left[2a + (1 + a^2) \operatorname{ch} \tilde{x}_{pj} \right] Z_{pj}^{-2},$$

а

$$Z_p = 1 + a^2 + 2a \operatorname{ch} \tilde{x}_{pj}.$$

Підставляючи вирази (5.7) у рівняння (5.4) і (5.5) і виключаючи параметр Δ_{pt} , отримуємо

$$-\alpha \frac{d}{dt} \eta_{pj}^{(1)} - m_{pj1} \eta_{pj}^{(1)} = m_{pj0} \frac{\beta \mu_p}{2} E_i e^{i\omega t}, \quad (5.8)$$

де використані такі позначення:

$$m_{pj1} = 1 + \frac{n P_{p0} + \beta \nu_p Y_{pj}}{(n-1) Y_{pj} - n(1 - \eta_{pj}^{(1)2})} (1 - \eta_{pj}^{(1)2}),$$

$$m_{pj0} = \frac{Y_{pj} (1 - \eta_{pj}^{(1)2})}{(n-1) Y_{pj} - n(1 - \eta_{pj}^{(1)2})},$$

а

$$Y_{pj} = P_{pj1} \tilde{\eta}_{pj}^{(1)} + L_{pj1}.$$

Розв'язуючи рівняння (5.8), отримуємо

$$\eta_{pj}^{(1)} = \tilde{\eta}_{pj}^{(1)} e^{-\frac{t}{\tau_{pj}^\varepsilon}} + \frac{\beta \mu_p}{2} F_{pj}(\omega) E_{it}, \quad (5.9)$$

де

$$F_{pj}(\omega) = \frac{m_{pj0}}{i\alpha\omega + m_{pj1}},$$

а τ_{pj}^ε – час релаксації, який має вигляд

$$\tau_{pj}^\varepsilon = \frac{\alpha}{1 + \frac{n P_{pj0} + \beta \nu_p Y_{pj}}{(n-1) Y_{pj} - n(1 - \eta_{pj}^{(1)2})} (1 - \eta_{pj}^{(1)2})}. \quad (5.10)$$

Із (5.9) знаходимо динамічну діелектричну сприйнятливість механічно затиснутого кристала:

$$\chi_{ii}^\varepsilon(p, \omega) = \chi_{ii}^{\varepsilon 0} + v \frac{\mu_p^2}{v^2} \frac{1}{2T} F_{pj}(\omega) = \chi_{ii}^{\varepsilon 0} + \frac{\chi_{ii}^\varepsilon(p)}{1 + i\omega \tau_{pj}^\varepsilon}, \quad (5.11)$$

де

$$\chi_{ii}^\varepsilon(p) = v \frac{\mu_p^2}{v^2} \frac{1}{2T} \frac{m_{pj0}}{m_{pj1}},$$

і ці вирази співпадають із (3.9).

Із (5.11) отримуємо дійсну та уявну частини комплексної діелектричної проникності систем із полярним й антиполярним впорядкуванням ЕСВ:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{ii}'(p, \omega) &= \varepsilon_{ii}^{P0} + \frac{4\pi\chi_{ii}^\varepsilon(p)}{1 + (\omega\tau_{pj}^\varepsilon)^2}, \\ \varepsilon_{ii}''(p, \omega) &= \frac{4\pi\chi_{ii}^\varepsilon(p)\omega\tau_{pj}^\varepsilon}{1 + (\omega\tau_{pj}^\varepsilon)^2}.\end{aligned}\quad (5.12)$$

Оскільки ці проникності, як і часи релаксації (5.10), відповідають затиснутому кристалу, то вони залишаються скінченними в точках фазового переходу.

V. Релаксаційні явища в моделі Ізінга при сталій напрузі. П'єзоелектричний резонанс

Розглянемо коливання тонкої квадратної зі стороною завдовжки l пластинки кристала, властивості якого описуються на основі моделі Ізінга, під дією зовнішнього змінного електричного поля $E_{it} = E_i e^{i\omega t}$.

Динаміку системи ЕСВ в цьому випадку, згідно з [35], описуватимемо на основі рівнянь (5.4) і (5.5), а динаміку деформаційних процесів розглядатимемо, використовуючи класичні рівняння руху елементарного об'єму кристала, що мають вигляд

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \sum_l \frac{\partial \sigma_{il}}{\partial x_l}, \quad (6.1)$$

де ρ – густина кристала, u_i – зміщення елементарного об'єму вздовж осі x_i , σ_{il} – механічна напруга.

Нехай у системі, яка описується моделлю Ізінга, у впорядкованій фазі виникає спонтанна зсувна деформація $\varepsilon_6 = \varepsilon_{xy}$, причому

$$\varepsilon_6 = \frac{\partial u_1}{\partial y} + \frac{\partial u_2}{\partial x}. \quad (6.2)$$

Оскільки у випадку, який розглядаємо, відмінною від нуля є лише зсувна напруга $\sigma_6 = \sigma_{12}$, то вирази (6.1) для $i = 1, 2$ з врахуванням рівнянь (3.3) набувають вигляду:

$$\begin{aligned}\rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} &= c_{66}^{E0} \frac{\partial \varepsilon_6}{\partial y} - \frac{\psi_{p6}}{v} \frac{\partial \eta_{p6}^{(1)}}{\partial y}, \\ \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} &= c_{66}^{E0} \frac{\partial \varepsilon_6}{\partial x} - \frac{\psi_{p6}}{v} \frac{\partial \eta_{p6}^{(1)}}{\partial x}.\end{aligned}\quad (6.3)$$

Підставляючи в (6.3) вираз (6.2) і нехтуючи діагональними компонентами тензора деформації ε_1 і ε_2 , отримуємо хвильові рівняння для u_1 і u_2 :

$$\begin{aligned}\rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} &= c_{66}^{E0} \frac{\partial^2 u_1}{\partial y^2} - \frac{\psi_{p6}}{v} \frac{\partial \eta_{p6}^{(1)}}{\partial y}, \\ \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} &= c_{66}^{E0} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} - \frac{\psi_{p6}}{v} \frac{\partial \eta_{p6}^{(1)}}{\partial x}.\end{aligned}\quad (6.4)$$

При малих відхиленнях системи від стану рівноваги, крім величин $\eta_p^{(1)}$, Δ_p і полів у (5.6) представимо у вигляді суми рівноважних значень та флуктуаційних відхилень від них і деформацію ε_6 :

$$\varepsilon_6 = \tilde{\varepsilon}_6 + \varepsilon_{6t} = \tilde{\varepsilon}_6 + \frac{\partial u_{1t}}{\partial y} + \frac{\partial u_{2t}}{\partial x}.$$

У результаті

$$\begin{aligned}\eta_{p6}^{(1)} &= \tilde{\eta}_{p6}^{(1)} + \eta_{p6t}^{(1)}, \quad \Delta_p = \tilde{\Delta}_p + \Delta_{pt}, \\ x_{p6} &= \tilde{x}_{p6} + x_{p6t} = \frac{n-1}{n} \beta \tilde{\Delta}_p + 2\beta \nu_p \tilde{\eta}_{p6}^{(1)} + \\ &+ \beta \psi_{p6} \tilde{\varepsilon}_6 + \frac{n-1}{n} \beta \Delta_{pt} + 2\beta \nu_p \eta_{p6t}^{(1)} + \beta \psi_{p6} \frac{\partial u_{1t}}{\partial y} + \\ &+ \beta \psi_{p6} \frac{\partial u_{2t}}{\partial x} + \beta \mu_p E_{3t}.\end{aligned}\quad (6.5)$$

Підставляючи вирази (6.5) і (5.8) у рівняння (5.4), (5.5) і (6.4), виключаючи параметр Δ_{pt} , отримуємо для флуктуаційних частин таку систему рівнянь:

$$\begin{aligned}-\alpha \frac{d}{dt} \eta_{p6t}^{(1)} - m_{p61} \eta_{p6t}^{(1)} - m_{p60} \beta \psi_{p6} \varepsilon_{6t} &= \\ = m_{p60} \frac{\beta \mu_p}{2} E_3 e^{i\omega t},\end{aligned}\quad (6.6)$$

$$\begin{aligned}\rho \frac{\partial^2 u_{1t}}{\partial t^2} &= c_{66}^{E0} \frac{\partial^2 u_{1t}}{\partial y^2} - \frac{\psi_{p6}}{v} \frac{\partial \eta_{p6t}^{(1)}}{\partial y}, \\ \rho \frac{\partial^2 u_{2t}}{\partial t^2} &= c_{66}^{E0} \frac{\partial^2 u_{2t}}{\partial x^2} - \frac{\psi_{p6}}{v} \frac{\partial \eta_{p6t}^{(1)}}{\partial x}.\end{aligned}\quad (6.7)$$

Розв'язки рівнянь (6.6) і (6.7) шукатимемо у вигляді гармонічних хвиль:

$$\begin{aligned}\eta_{p6t}^{(1)} &= \eta_{p6E}^{(1)}(x, y) e^{i\omega t}, \quad \varepsilon_{6t} = \varepsilon_{6E}(x, y) e^{i\omega t}, \\ u_{1t} &= u_{1E}(y) e^{i\omega t}, \quad u_{2t} = u_{2E}(x) e^{i\omega t}.\end{aligned}\quad (6.8)$$

З рівняння (6.6) тоді отримуємо, що

$$\eta_{p6E}^{(1)}(x, y) = \beta \psi_{p6} F_{p16}(\omega) \varepsilon_{6E}(x, y) + \frac{\beta \mu_p}{2} F_{p16}(\omega) E_3. \quad (6.9)$$

Враховуючи тепер (6.8) і (6.9), із (6.7) маємо такі рівняння:

$$\frac{\partial^2 u_{1E}}{\partial y^2} + k^2 u_{1E} = 0, \quad \frac{\partial^2 u_{2E}}{\partial x^2} + k^2 u_{2E} = 0, \quad (6.10)$$

де

$$k = \frac{\omega \sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{66}^E(\omega)}}, \quad (6.11)$$

– хвильове число, а

$$c_{66}^E(\omega) = c_{66}^{E0} - \frac{\beta \psi_{p6}^2}{v} F_{p16}(\omega) \quad (6.12)$$

– динамічна пружна стала.

Розв'язки рівнянь (6.10) мають такий вигляд:

$$\begin{aligned} u_{1E} &= A_{1E} \cos ky + B_{1E} \sin ky, \\ u_{2E} &= A_{2E} \cos kx + B_{2E} \sin kx. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Враховуючи вираз (6.2), отримуємо

$$\begin{aligned} \varepsilon_{6E}(x, y) &= k \left[- \left(A_{1E} \sin ky + A_{2E} \sin kx \right) + \right. \\ &\left. + \left(B_{1E} \cos ky + B_{2E} \cos kx \right) \right]. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Граничні умови для $\varepsilon_{6E}(x, y)$ задамо в такому вигляді:

$$\varepsilon_{6E}(0, 0) = \varepsilon_{6E}(l, l) = \varepsilon_{6E}(0, l) = \varepsilon_{6E}(l, 0) = \varepsilon_0. \quad (6.15)$$

Значення ε_{0E} знаходимо із виразу (3.17), враховуючи співвідношення (6.9):

$$\varepsilon_0 = \frac{d_{36}^0 + \frac{\mu_p \tilde{\psi}_{p6} s_{66}^{E0}}{2\bar{v}T} F_{p16}(\omega)}{1 - \frac{\tilde{\psi}_{p6}^2 s_{66}^{E0}}{\bar{v}T} F_{p16}(\omega)} E_3.$$

Використавши граничні умови (6.15), отримуємо, що

$$\begin{aligned} \varepsilon_{6E}(x, y) &= \\ &= \frac{\varepsilon_0}{2} \left[\frac{1 - \cos kl}{\sin kl} (\sin ky + \sin kx) + (\cos ky + \cos kx) \right] \end{aligned} \quad (6.16)$$

Використовуючи співвідношення (3.4) між поляризацією P_3 і параметром порядку $\eta_{p6}^{(1)}$, а також вирази (6.9), знаходимо, що

$$\begin{aligned} P_3(x, y, t) &= P_{3E}(x, y) e^{i\omega t}, \\ P_{3E}(x, y) &= e_{36}(\omega) \varepsilon_{6E}(x, y) + \chi_{33}^{\varepsilon}(\omega) E_3, \end{aligned} \quad (6.17)$$

а

$$e_{36}(\omega) = e_{36}^0 + \frac{\mu_p}{v} \beta \psi_{p6} F_{p16}(\omega)$$

– динамічний коефіцієнт п'єзоелектричної напруги.

Розрахуємо тепер діелектричну сприйнятливість $\chi_{33}^{\sigma}(\omega)$ вільного кристала. Ця величина визначається так:

$$\chi_{33}^{\sigma}(\omega) = \frac{1}{l^2} \frac{\partial}{\partial E_3} \int_0^l \int_0^l P_{3E}(x, y) dx dy. \quad (6.18)$$

Враховуючи вирази (6.16), отримуємо

$$\frac{1}{l^2} \int_0^l \int_0^l dx dy \varepsilon_{6E}(x, y) = \frac{2\varepsilon_0}{k} \operatorname{tg} \frac{kl}{2} = \frac{\varepsilon_0}{R(\omega)},$$

де

$$\frac{1}{R(\omega)} = \frac{2}{kl} \operatorname{tg} \frac{kl}{2}.$$

В результаті

$$\begin{aligned} \chi_{33}^{\sigma}(\omega) &= \frac{R(\omega) - 1}{R(\omega)} \left[\chi_{33}^{\varepsilon 0} + \bar{v} \frac{\mu_p^2}{v^2} \frac{1}{2T} F_{p16}(\omega) \right] + \\ &+ \frac{1}{R(\omega)} \left[\chi_{33}^{\sigma 0} + \bar{v} \left(\frac{\mu_p}{v} + \frac{\psi_{pj}}{v} d_{36}^0 \right)^2 \frac{1}{2T} F_{p26}(\omega) \right], \end{aligned} \quad (6.19)$$

де використані такі позначення:

$$\chi_{33}^{\sigma 0} = \chi_{33}^{\varepsilon 0} + e_{36}^0 d_{36}^0, \quad d_{36}^0 = e_{36}^0 s_{66}^{E0},$$

$$F_{p26}(\omega) = \frac{m_{p60}}{i\alpha\omega + (m_{p61} + \frac{\varphi_6}{2} m_{p60})},$$

а

$$\varphi_6 = \frac{\psi_{p6}^2 s_{66}^{E0}}{v T}.$$

Проаналізуємо співвідношення, яке отримане для $\chi_{33}^{\sigma}(\omega)$. Із виразу (6.19) при $\omega \rightarrow 0$, а отже $R(\omega) \rightarrow 1$, отримуємо статичну сприйнятливість вільного кристала (3.9), а в границі високих частот, коли $\omega \rightarrow \infty$ $R(\omega) \rightarrow \infty$, маємо динамічну сприйнятливість затигнутого кристала (5.13).

У проміжній області в частотній залежності $\chi_{33}^{\sigma}(\omega)$ спостерігається дисперсія резонансного типу з численними піками на частотах, для яких

$$\operatorname{Re} \frac{kl}{2} = (2n + 1) \frac{\pi}{2}.$$

Враховуючи вирази (6.11), отримуємо рівняння для резонансних частот:

$$\omega_n = \sqrt{\frac{c_{66}^E(\omega)}{\rho}} (2n + 1) \frac{\pi}{l}. \quad (6.20)$$

VI. Поглинання ультразвуку в кристалах, що описуються моделлю Ізінга

Дослідження проходження ультразвукових хвиль через кристал є одним з методів дослідження поведінки кристалів. Довжина акустичної хвилі, що поширюється у зразку кристала, є набагато меншою від його лінійних розмірів, при цьому усі динамічні змінні залежать лише від координати напрямку поширення хвилі. Якщо тонкі бруски кристала вирізані вздовж напрямку $[001]$, то вздовж бруска поширюється поперечна ультразвукова хвиля, яка поляризована вздовж $[010]$. Серед похідних $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ відмінною від нуля є лише $\frac{\partial u_x}{\partial x}$ і тоді замість рівнянь (6.6) і (6.7) матимемо такі рівняння:

$$-\alpha \frac{d}{dt} \eta_{p6t}^{(1)} - m_{p61} \eta_{p6t}^{(1)} - m_{p60} \beta \psi_{p6} \varepsilon_{6t} = 0, \quad (7.1)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_{2t}}{\partial t^2} = c_{66}^E \frac{\partial^2 u_{2t}}{\partial x^2} - \frac{4\tilde{\psi}_{p6}}{\bar{v}} \frac{\partial \eta_{p6t}^{(1)}}{\partial x}.$$

Розв'язуючи цю систему рівнянь, отримуємо хвильове число у такому вигляді:

$$k = \frac{\omega \sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{66}^E(\omega)}}, \quad (7.2)$$

яке співпадає із виразом (6.11).

На основі співвідношення (7.2) можна знайти швидкість ультразвукової хвилі, а саме:

$$v_6 = \frac{\omega}{\text{Re}(k)} = \text{Re} \frac{\sqrt{c_{66}^E(\omega)}}{\sqrt{\rho}}, \quad (7.3)$$

і внесок квазіспінової підсистеми у коефіцієнт поглинання звуку:

$$\alpha_6(\omega) = \alpha_{06} - \text{Im}(k) = \alpha_{06} - \text{Im} \left(\frac{\omega \sqrt{\rho}}{\sqrt{c_{66}^E(\omega)}} \right), \quad (7.4)$$

де α_{06} – сталий доданок, частотно і температурно незалежний і описує внески інших механізмів у поглинання, що спостерігається на експерименті.

VII. Обговорення отриманих результатів

У попередніх параграфах отримані вирази для статичних термодинамічних, пружних, п'єзоелектри-

чних і динамічних характеристик затиснутого кристала при прикладанні зовнішніх електричного поля E_i ($i=1, 2, 3$) і механічної напруги σ_j ($j = i + 3$), а для вільного кристала за наявності поля E_3 і механічної напруги σ_6 . І тому числові розрахунки величин, які розраховані вище, будемо проводити у випадку прикладання до кристала саме поля E_3 і напруги σ_6 .

В отриманих виразах для характеристик кристалів, що описуються моделлю Ізінга, входять параметри J і ν_p , які описують короткосяжні і далекосяжні взаємодії між псевдоспінами, параметр деформації ψ_{p6} , “затравкові” величини, а також число найближчих сусідів n . Для дослідження температурного і частотного ходу характеристик систем, які описуються моделлю Ізінга, використаємо значення кількох наборів параметрів, які наведені в таблиці.

Для “затравкових” сталих вибрані такі значення: $\chi_{33}^{\varepsilon 0} = 0.4$, $e_{36}^0 = 3000 \frac{\text{з}}{\text{з}}$, $c_{66}^{E0} = 8 \cdot 10^{10} \frac{\text{з}}{\text{з}}$, об'єм примітивної комірки прийнятий таким, що дорівнює $v = 0.5 \cdot 10^{-21} \text{з}^3$, а дипольний момент $\mu = 5 \cdot 10^{-18} \text{з} \cdot \text{з}$.

Таблиця параметрів теорії

No	J (K)	ψ_{p6} (K)	$\tilde{\nu}_p$ (K)					вид лінії
			$n = 2$ $T_c=75.48$	$n = 4$ $T_c=171.65$	$n = 6$ $T_c=270.93$	$n = 8$ $T_c=370.65$	$n = 12$ $T_c=570.42$	
1	200	0	20.07	20.07	20.07	20.07	20.07
2	200	200	20	20	20	20	20	—
3	100	200	38.85	84.83	133.89	183.49	283.12	----
4	200	400	19.79	19.79	19.79	19.79	19.79	----

На рис. 1 зображені температурні залежності поляризації P_3 , спонтанної деформації ε_6 , ентропії S , теплоємності C , обернених статичних діелектричних сприйнятливостей затиснутого χ_{33}^{ε} та вільного χ_{33}^{σ} кристалів, п'єзомодулів e_{36} , d_{36} та пружної сталі c_{66}^E і податливості s_{66}^E при $n = 6$ і двох наборах параметрів 2 і 3 (див. таблицю).

Відзначимо, що при різному числі найближчих сусідів n , зрозуміло, отримується при фіксованих значеннях J , ψ_{p6} , $\tilde{\nu}_p$ різні значення температури переходу T_c . Аналогічно, зростає значення температури T_c при фіксованих n , J , ψ_{p6} і при збільшенні $\tilde{\nu}_p$. Якісний же хід температурних залежностей характеристик кристала є однаковим при різних значеннях n і $\tilde{\nu}_p$. Незначно кількісно змінюються розраховані вище характеристики при різних наборах параметрів 2 і 3 із таблиці.

На рис. 2 наведені температурні залежності χ_{33}^{ε} , χ_{33}^{σ} , e_{36} , d_{36} , c_{66}^E , s_{66}^E і обернених часів релаксації $(\tau_1^{\varepsilon})^{-1}$, $(\tau_1^{\sigma})^{-1}$, які розраховані при 1, 2, 4 наборах

параметрів із таблиці. Відзначимо, що зміна величини ψ_{p6} дуже слабо впливає на кількісні значення поляризації P_3 , ентропії S та теплоємності. З ростом ψ_{p6} значення $(\chi_{33}^{\varepsilon})^{-1}$ і $(\tau_1^{\varepsilon})^{-1}$ в точці фазового переходу зростає, але швидкість зміни цих величин із зміною температури не змінюється. Збільшення значення ψ_{p6} призводить до зменшення величини пружної сталі c_{66}^E і збільшення п'єзомодуля d_{36} .

Всі подальші результати будуть наведені для набору параметрів 2 із таблиці.

Частотно-температурні залежності дійсної та уявної частин діелектричної сприйнятливості затиснутого кристала в околі температури фазового переходу наведені на рис. 3.

На рис. 4 наведені частотні залежності дійсної та уявної частин діелектричної сприйнятливості механічно затиснутого та вільного кристалів при різних температурах сегнето- і параелектричних фаз в околі температури переходу для пластини зі сторонами довжиною $l = 1$.

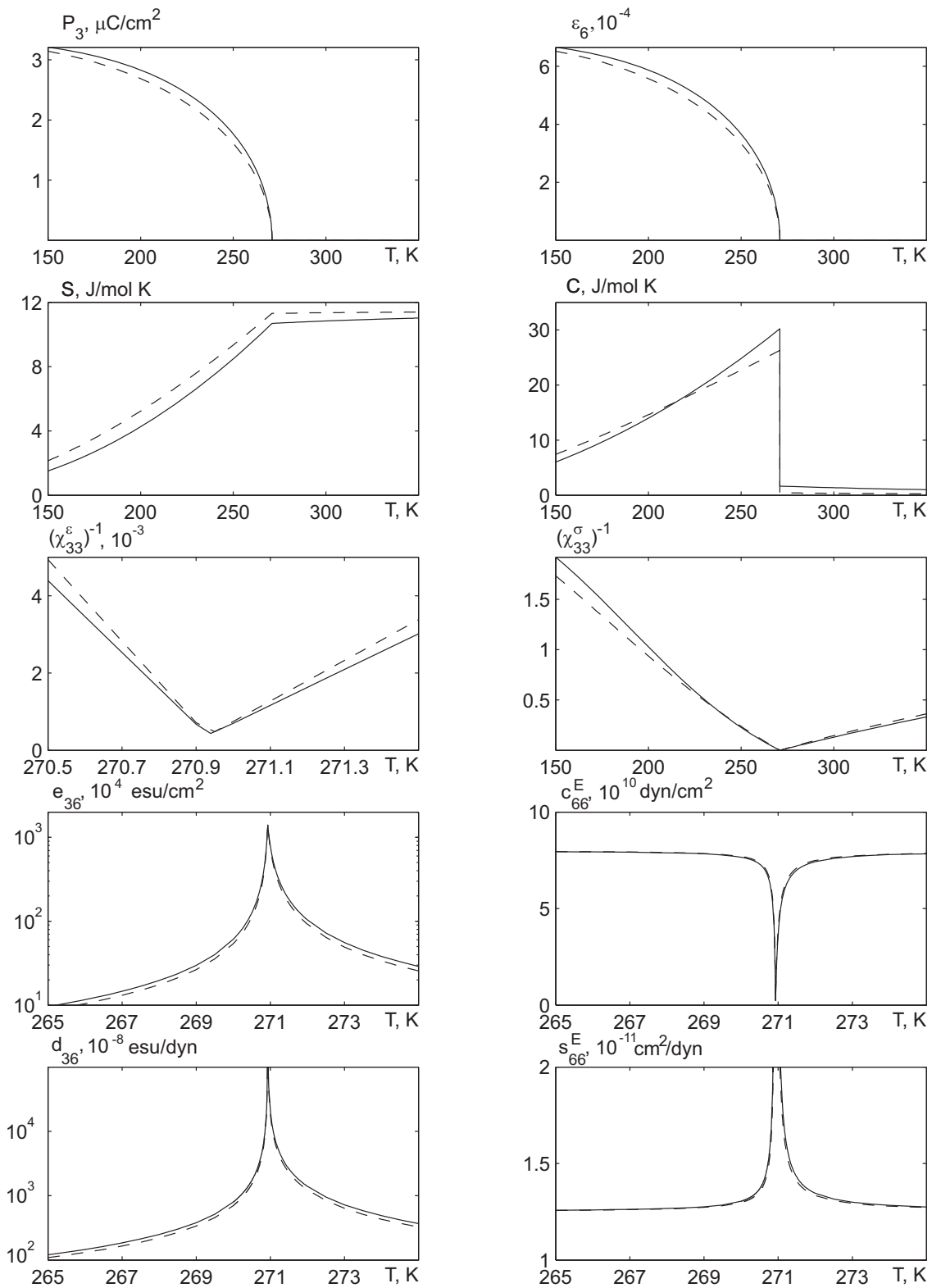


Рис. 1. Температурна залежність статичних діелектричних, теплових, п'єзоелектричних і пружних характеристик кристалів при $n=6$ для наборів параметрів 2 і 3 з таблиці

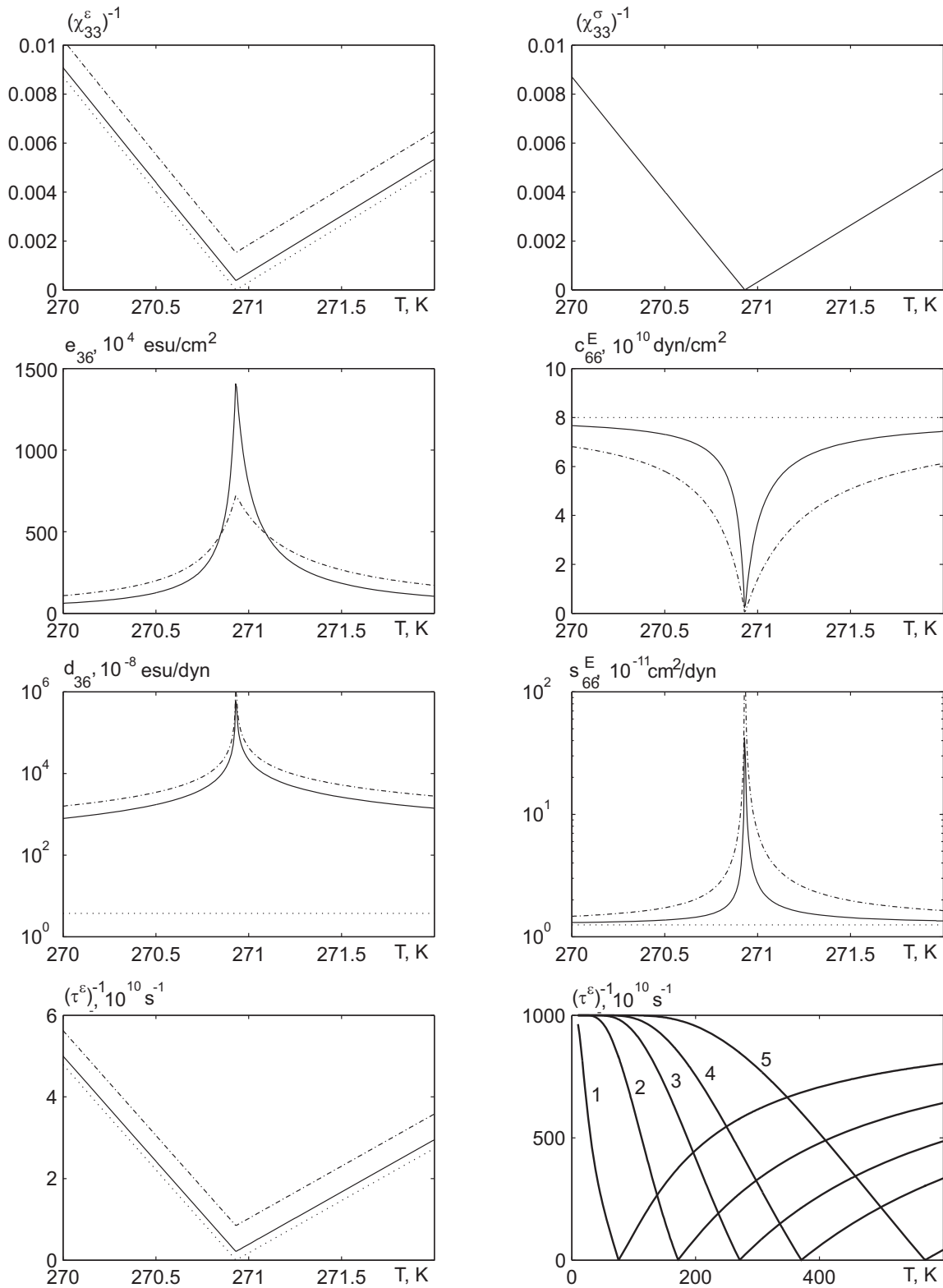


Рис. 2. Температурна залежність статичних діелектричних, п'єзоелектричних, пружних характеристик і часів релаксації кристалів з $n=6$ при $J=200$ К і $\psi=0$ К, $\nu=20.069$ К; $\psi=200$ К, $\nu=20$ К; $\psi=400$ К, $\nu=19.792$ К; часів релаксації для $J=200$ К, $\psi=200$ К, $\nu=20$ К з різними n : 1 – 2, 2 – 4, 3 – 6, 4 – 8, 5 – 12

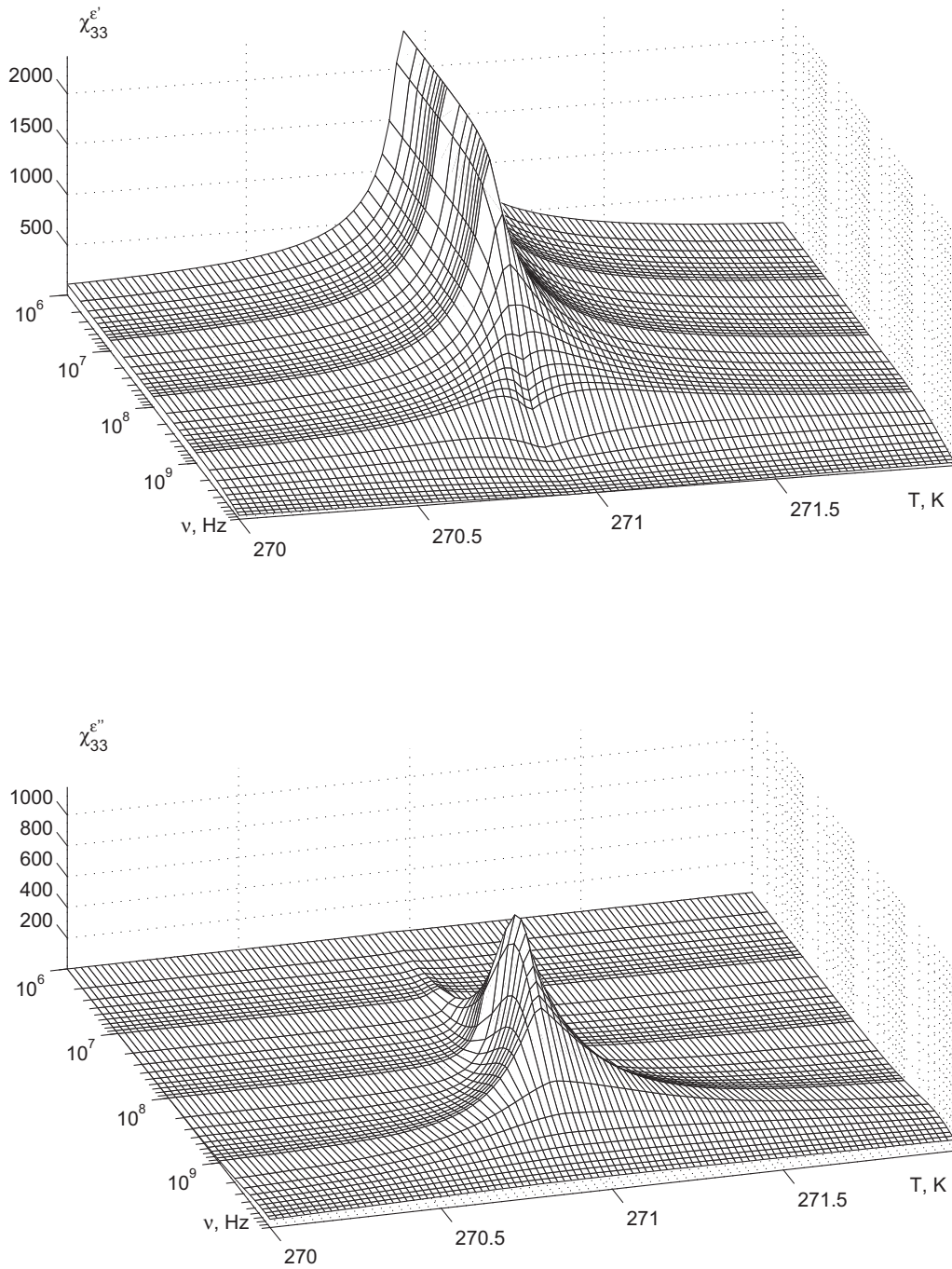


Рис. 3. Частотно-температурні залежності дійсної та уявної частин діелектричної сприйнятливості затиснутого кристала в околі температури переходу ($n=6$)

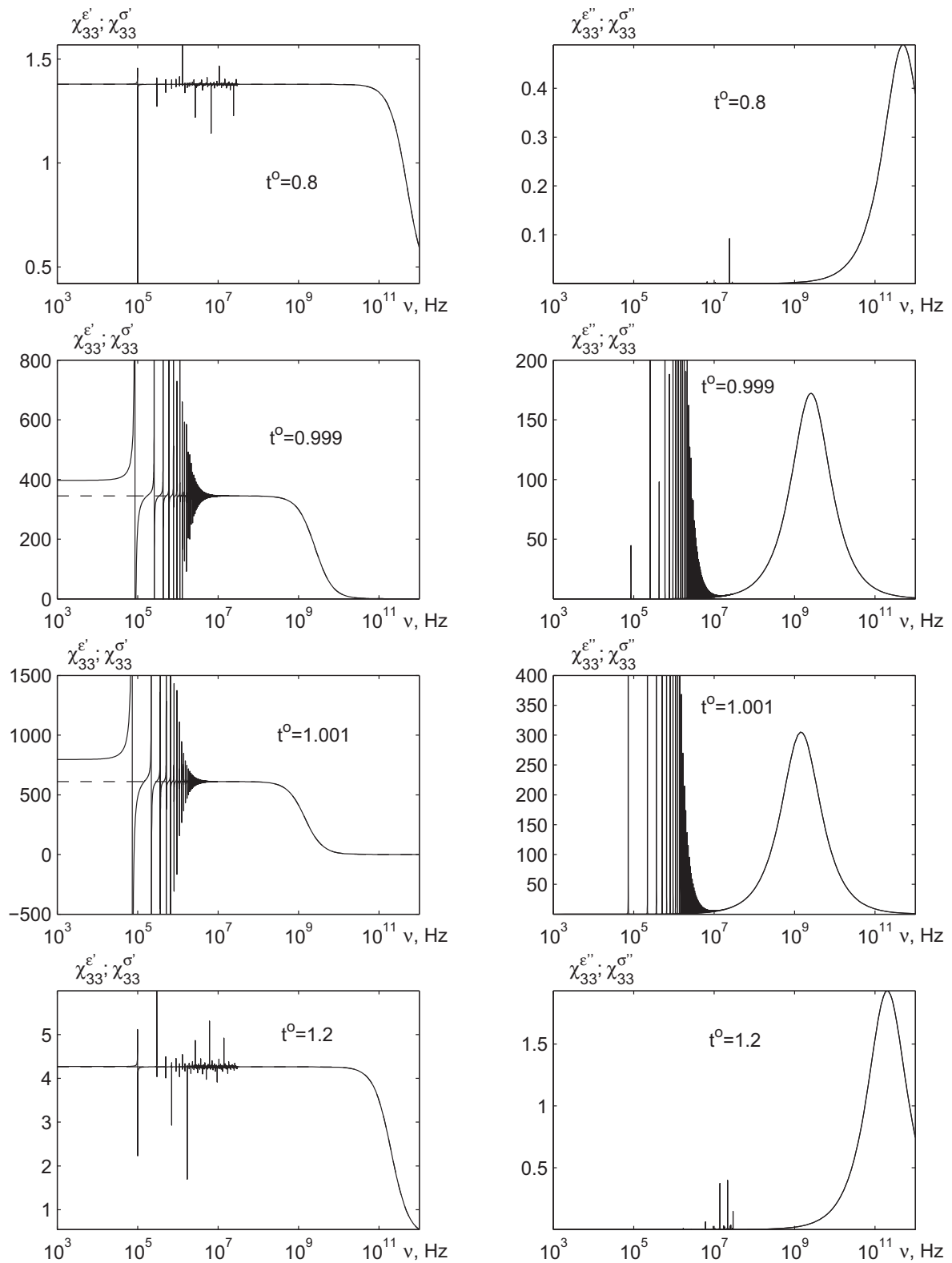


Рис. 4. Частотні залежності дійсної та уявної частин динамічної діелектричної сприйнятливості вільного кристала $\chi_{33}^{\sigma}(\nu)$ для $n=6$ при різних значеннях $t^0 = \frac{T}{T_c}$

При частоті $\nu = 0$ отримуємо статичні значення $\chi_{33}^e(0)$ і $\chi_{33}^s(0)$. Вище частоти 10^9 має місце затискання кристала високочастотним полем, сприйнятливості затиснутого та вільного кристала співпадають і спостерігається дисперсія релаксаційного типу. У температурному інтервалі $0.7T_c - 1.3T_c$ і в області частот $10^4 - 10^7$ для механічно вільного кристала має місце дисперсія сприйнятливості резонансного

типу. Амплітуди резонансних піків зменшуються при збільшенні частоти зовнішнього поля і збільшуються при $T \rightarrow T_c$.

Зменшення розмірів пластини l призводить до зменшення числа резонансних піків і їх амплітуд.

Частотно-температурні залежності швидкості звуку і коефіцієнта поглинання зображені на рис. 5.

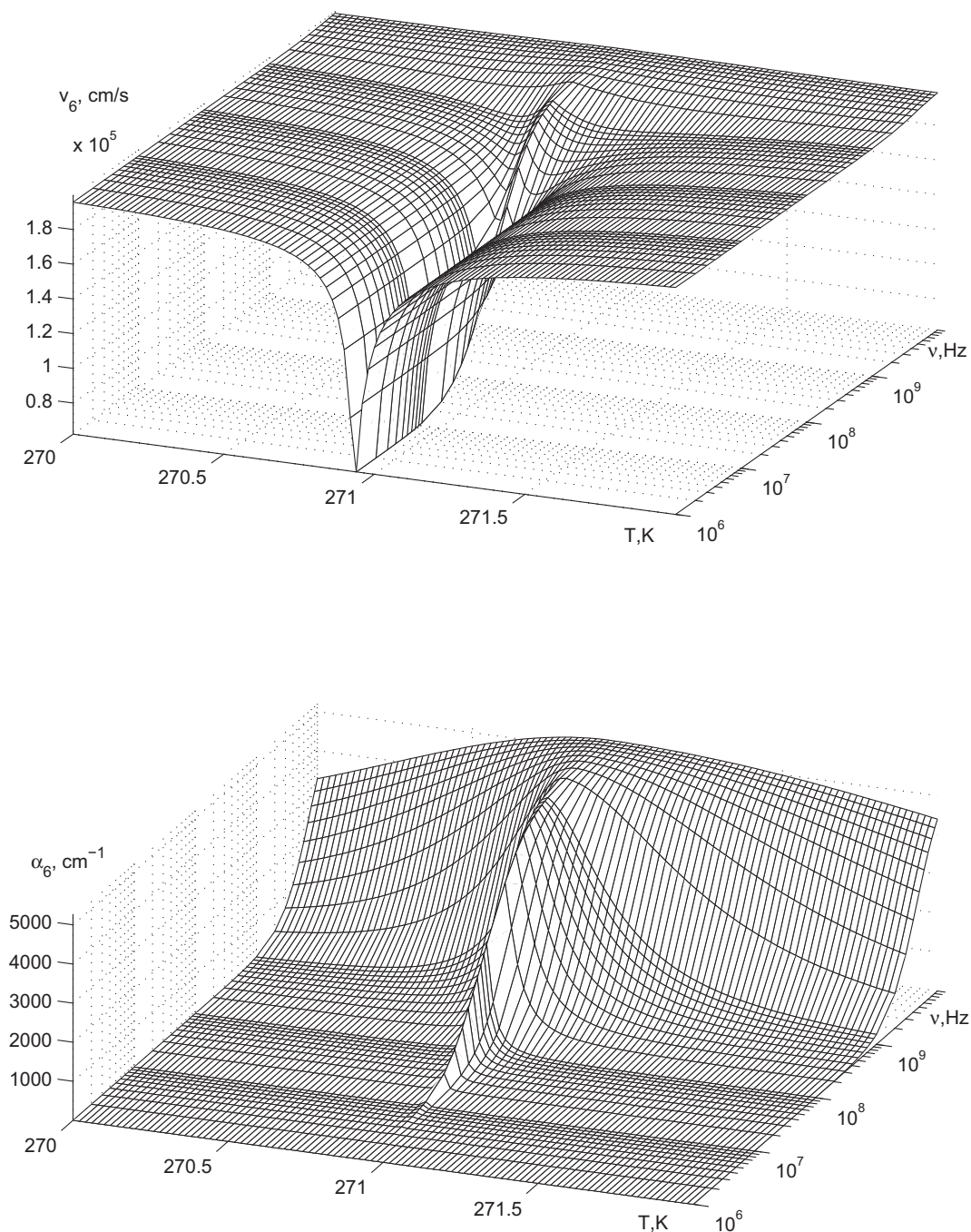


Рис. 5. Частотно-температурні залежності швидкості звуку і коефіцієнта поглинання ($n=6$)

При температурі переходу при частотах більше $0.3 \cdot 10^9$ спостерігається пік швидкості звуку. При збільшенні $\Delta T = |T - T_c|$ швидкість звуку зменшується, досягаючи мінімуму, а також потім зростає до величини, яка є однаковою при всіх частотах. Коефіцієнт поглинання звуку при $T = T_c$ характеризується максимальним значенням, яке майже не залежить від частоти ν , при зростанні температури ΔT величина α_6 зменшується, причому тим повільніше, чим більша частота.

В області частот, менших від частот високочастотної дисперсії діелектричної проникності швидкість і коефіцієнт поглинання звуку є постійними. В області частот високочастотної дисперсії теорія передбачає різке зростання швидкості і коефіцієнта поглинання звуку із ростом частоти, після чого частотна крива цих характеристик виходить на насичення. Значення коефіцієнта поглинання звуку при насиченні настільки великі, що звук практично не поширюється, а значить можна стверджувати про наявність обрізаючої частоти пропускання звуку.

VIII. Заключні зауваження

Модель Ізінга з врахуванням п'єзоелектричної взаємодії є вдалою моделлю для дослідження нецентросиметричних сегнетоелектриків, оскільки вона є проста для розрахунків і водночас якісно правильно описує поведінку всіх діелектричних, п'єзоелектричних і пружних характеристик. Ці характеристики в основному залежать від трьох параметрів нашої моделі: J , ν_p , ψ_{p6} . Перші два параметри переважно визначають температуру фазового переходу, температурну залежність теплоємності, спонтанної поляризації, діелектричної проникності. Врахування же деформаційного потенціалу ψ_{p6} коректує ці характеристики, а також дає змогу описати спонтанну деформацію, п'єзоелектричні модулі, пружні сталі та явище п'єзоелектричного резонансу.

При врахуванні ψ_{p6} виникають два типи сприйнятливостей: затиснутого χ_{33}^ε і вільного χ_{33}^σ криста-

ла. Як показують проведені нами розрахунки, при низьких частотах χ_{33}^σ трохи більша за χ_{33}^ε , що пов'язано з деформуванням кристала під дією зовнішнього поля. При високих частотах кристал не встигає деформуватись, а отже, χ_{33}^ε і χ_{33}^σ практично співпадають. При проміжних частотах, які співпадають з власними частотами коливань кристала, виникає п'єзоелектричний резонанс, що спостерігається експериментально в нецентросиметричних сегнетоелектриках.

У цій роботі виконано дослідження систем, що описуються двопідгратковою моделлю Ізінга з врахуванням п'єзоэффекту. У наближенні двочастинкового кластера і точним врахуванням кореляцій n найближчих сусідів у випадку полярного впорядкування елементів структури, що впорядковуються, теоретично розраховані діелектричні, п'єзоелектричні пружні і теплові характеристики систем і виконано детальний числовий аналіз температурних залежностей цих величин.

На основі методу Глаубера отримано динамічну діелектричну сприйнятливості механічно затиснутого кристала; часи релаксації в точці переходу в конкретному випадку залишаються скінченними.

У випадку врахування часової залежності деформації ε_6 , використовуючи класичні рівняння руху елементарного об'єму кристала для розгляду динаміки деформаційних процесів, отримано вирази для діелектричної сприйнятливості вільного кристала, залежних від частоти коефіцієнта п'єзоелектричної деформації, пружної податливості. Показано, що в температурному інтервалі $0.7T_c - 1.3T_c$ і в області частот $10^4 - 10^7$ має місце дисперсія діелектричної сприйнятливості резонансного типу. В області ж частот, більших за 10^{10} сприйнятливості затиснутого та вільного кристалів співпадають і спостерігається дисперсія релаксаційного типу.

У межах цієї моделі проведено розрахунок швидкості і коефіцієнта поглинання звуку, досліджено температурний і частотний хід цих величин. Зокрема, теоретично можна визначити обрізаючу частоту пропускання звуку.

Література

- [1] Дайсон Ф., Монтролл Э., Кац М., Фишер М., Устойчивость и фазовые переходы. – М.: Мир, 1973.
- [2] Вакс В.Г., Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. – М.: Наука, 1973.
- [3] Смарт Дж., Эффективное поле в теории магнетизма. – М.: Мир, 14, 1968.
- [4] Изюмов Ю.А., Кассан-Оглы Ф.А., Скрыбин Ю.Н., Полевые методы в теории ферромагнетизма. – М.: Наука, 1974.
- [5] Suzuki H., Kubo R., Dynamics of Ising model near Curie temperature // J. Phys. Soc. Japan, 1968, v. 24, №1. – P. 51–60.
- [6] Власова А.А., Шнейдер В.И., Релаксационная динамика модели Изинга в кластерном приближении // Журн. exper. и теор. физики, 1977, т. 73, №10. – С. 1493–1498.
- [7] Левицький Р.Р., Зачек И.Р., Вараницкий В.И. Функции распределения и релаксационные процессы в модели Изинга. Кластерное приближение // Препринт ИТФ-78-41Р Киев, 1978, 40 с.

- [8] Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Вараницкий В.И. Релаксационные процессы, описываемые моделью Изинга. Кластерное приближение // Укр. физ. журн., 1978, т. 24, №10. – С. 1486–1495.
- [9] Glauber R.J. Time dependent statistics of the Ising model // Journ. Math. Phys., 1963, v. 4. – P. 294–307.
- [10] Levitsky R.R., Zachek I.R., Mits Ye.V., Grigas J., Paprotny W. Relaxational dynamics of quasi-one-dimensional CsD_2PO_4 -type ferroelectrics // Ferroelectrics, 1986, v. 67, №1–3. – P. 109–124.
- [11] Григас И., Зачек И.Р., Зайцева Н., Левицкий Р.Р., Мизерис Р., Миц Е.В. Сегнетоэлектрическая дисперсия в CsD_2PO_4 // Литовский физ. сборник, 1988, т. 28, №4. – С. 486–498.
- [12] Mizeris R., Grigas J., Levitsky R.R., Zachek I.R., Sorokov S.I. Relaxational dynamics of hydrogen-bonded ferroelectrics // Ferroelectrics, 1990, v. 108. – P. 261–266.
- [13] Levitsky R.R., Zachek I.R., Kutny I.V., Schur J.I., Grigas J., Mizeris R. Relaxational dynamics of monoclinic ferroelectric RbD_2PO_4 // Ferroelectrics, 1990, v. 110. – P. 85–98.
- [14] Levitskii R.R., Zachek I.R., Sokolovskii R.O. To the theory of relaxational phenomena in quasi-one-dimensional ferroelectrics with hydrogen bonds. Nonequilibrium statistical operator approach // Condens. Matter Phys., 1998, 1, №4, v. 16. – P. 849–872.
- [15] Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Миц Е.В. Динамика и термодинамические свойства квазиодномерных сегнетоэлектриков $\text{Cs}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)\text{PO}_4$ // Препринт ИТФ-85-96Р, Киев, 1985, 44 с.
- [16] Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Миц Е.В. Релаксационная динамика квазиодномерных сегнетоэлектриков типа порядок-беспорядок // Препринт ИТФ-85-103Р, Киев, 1985, 41 с.
- [17] Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Волков А.А., Козлов Г.В., Лебедев С.П. Теоретическое и экспериментальное исследование релаксационных явлений в KD_2PO_4 // Препринт ИТФ-80-13Р, Киев, 1980, 39 с.
- [18] Зачек И.Р., Левицкий Р.Р. Релаксационная динамика дейтерированных сегнетоэлектрических ортофосфатов // Теорет. и математ. физика, 1980, т.43, №1. – С. 128–137.
- [19] Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Вараницкий В.И. Релаксационные процессы в сегнетоэлектриках с водородными связями типа KD_2PO_4 // Укр. физ. журн., 1980, т. 25, №12. – С. 1961–1970.
- [20] Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Миц Е.В., Волков А.А., Козлов Г.В., Лебедев С.П. Продольная и поперечная релаксация в $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ // Препринт ИТФ-82-2Р, Киев, 1982, 30 с.
- [21] Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Миц Е.В., Волков А.А., Козлов Г.В., Лебедев С.П. Релаксационные явления в антисегнетоэлектриках с водородными связями типа ортофосфатов // Физика многочастичных систем, Киев, 1983, Вып. 4. – С. 72–84.
- [22] Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Миц Е.В. Релаксационные явления в сегнетоэлектриках с водородными связями $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ // В кн.: Современные проблемы статистической физики: Труды Всесоюз. конф., Львов, 3-5 февр. 1987 г. – К., 1989. – С. 194–206.
- [23] Стасюк И.В., Левицкий Р.Р., Сабан А.Я. Теория индуцированных внешними полями эффектов и релаксационных явлений в кристаллах со структурными и сегнетоэлектрическими фазовыми переходами // В кн.: Проблемы современной статистической физики. – К., 1985. – С. 274–285.
- [24] Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Миц Е.В. Термодинамика и продольная релаксация сегнетоэлектриков типа $\text{K}(\text{H}_{1-x}\text{D}_x)_2\text{PO}_4$ // Препринт ИТФ-87-114Р, Киев, 1987, 48 с.
- [25] 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.
- [26] 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.
- [27] Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Миц Е.В., Моїна А.П. Релаксационні явища і термодинамічні властивості антисегнетоелектриків з водневими зв'язками типу ортофосфатів // Фізичний збірник. Львів: НТШ, 1998, Т. 3. – С. 417–446.
- [28] Stasyuk I.V., Levitskii R.R., Zachek I.R., Moina A.P. The KD_2PO_4 ferroelectrics in external fields conjugate to the order parameter: Shear stress σ_6 . // Phys. Rev. B, 2000, v.62, №10. – P.6198–6207.
- [29] Levitskii R.R., Lisnii V.M. Theory of related to shear strain u_6 physical properties of ferroelectrics and antiferroelectrics of the KN_2PO_4 family // phys. stat. sol. (b), 2004, v.241, №6. – P.1350–1368.
- [30] Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Вдович А.С. Поздовжні діелектричні, п'єзоелектричні, пружні, динамічні та теплові властивості сегнетоелектриків типу KN_2PO_4 // Препринт ІСМР-06-08U, Львів, 2006, 117 с.
- [31] Levitskii R.R., Zachek I.R., Moina A.P., Vdovych A.S. Longitudinal relaxation of mechanically free KN_2PO_4 type crystals. Piezoelectric resonance and sound attenuation // Condens. Matter Phys., 2008, v. 11, №3(55). – P. 555–570.
- [32] Levitskii R.R., Zachek I.R., Moina A.P., Vdovych A.S. Longitudinal relaxation of $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$ type antiferroelectrics. Piezoelectric resonance and sound attenuation. // Condens. Matter Phys., 2009, v. 12, №2. – P. 1–20.
- [33] Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Вдович А.С. Поперечная релаксация в сегнетоэлектриках с водневими зв'язками сім'ї KN_2PO_4 . // Фізика і хімія твердого тіла, 2009, т. 10, №2. – С. 377–388.
- [34] Levitskii R.R., Zachek I.R., Verkholyak T.M., Moina A.P. Dielectric, piezoelectric and elastic properties of the Rochelle salt $\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$: A theory // Phys. Rev. B., 2003, 67, №17. – P. 112–174.

- [35] Moina A.P., Levitskii R.R., Zachek I.R. Piezoelectric resonance and sound attenuation in the Rochelle salt $\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ // *Phys. Rev. B.*, 2005, 71, 134108. – P. 1–8.
- [36] Левицький Р.Р., Зачек І.Р., Вдович А.С. Вплив поперечних електричних полів на діелектричні, п'єзоелектричні, пружні і теплові властивості сегнетової солі // Препринт ІСМР-09-02U, Львів, 2009, 57 с.

DIELECTRIC, PIEZOELECTRIC AND ELASTIC PROPERTIES OF A SIMPLE MODEL OF A PIEZOELECTRIC

R.R. Levitsky^a, I.R. Zachek^b, A.S. Vdovych^a

^a*Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine,
1 Svientsitskii str, 79011 Lviv, Ukraine*

^b*National University "Lvivska Politechnika"
12 S. Bandera Str., 79013, Lviv, Ukraine*

Within the framework of two-sublattice Ising model with taking into account short-range and long-range interactions and the piezoelectric interaction with the shear strain within two-particle cluster approximation, the dielectric, piezoelectric, elastic and thermal characteristics of simple model of piezoelectric are calculated in the case of polar ordering. Taking into account a dynamics of piezoelectric deformation, the phenomena of crystal clamping by high frequency electric field and piezoelectric resonance are described. Ultrasound attenuation is calculated, peculiarities of its temperature dependence near the phase transition points are investigated. Detailed numerical analysis of the obtained results is carried out.

Keywords: cluster approximation, dynamic permittivity.

PACS: 75.10.Hk, 75.40.Cx, 75.40.Gb

УДК: 536.77