УДК 537.226

РАСЧЕТ ДИНАМИЧЕСКОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ И УПРУГОЙ ПОДАТЛИВОСТИ ПОЛИМОРФНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Я. О. Шабловский, П. А. Сусло

Учреждение образования «Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого», Беларусь

Рассмотрим семейство кристаллов, изоморфных дигидрофосфату калия KH_2PO_4 (KDP), обладающих кристаллографической симметрией $\bar{4}2m$ в высокосимметричной фазе и симметрией $mm2$ в низкосимметричной фазе. Фазовый переход (ФП) $\bar{4}2m - mm2$ может быть описан одним параметром порядка, отождествляемым с компонентой вектора электрической поляризации, ориентированной вдоль полярной кристаллографической оси. Термодинамический потенциал, учитывающий изменение энергии при упругой деформации, имеет вид:

$$F = F_0 + \frac{1}{2}\alpha q^2 + \frac{\beta}{4}q^4 + Aq^2(u_1 + u_2) + Bq^2u_3 + \frac{1}{2}C_{11}(u_1^2 + u_2^2) +$$
$$+ \frac{1}{2}C_{33}u_3^2 + C_{12}u_1u_2 + C_{13}u_3(u_1 + u_2) + C_{44}(u_4^2 + u_5^2) + \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})u_6^2,$$

где $\alpha = \alpha_T(T - T_c)$; u_ν – компоненты тензора деформаций ($\nu = 1, 2, ..., 6$); C – тензор упругих жесткостей.

Исходя из этой формулы, находим равновесное значение параметра порядка: в высокосимметричной фазе $q_0 = 0$, в низкосимметричной фазе $q_0 = (G\alpha)^{1/2}$.

Если в рассматриваемом случае исследуемый кристалл находится в поле упругой волны частоты Ω, то $\delta q \sim \exp(i\Omega t)$. Тогда находим при $T < T_c$

$$\left[iL\Omega + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial q^2}\right)\right]\delta q = -2q_0[A(\delta u_1 + \delta u_2) + B\delta u_3], \text{ откуда } q_0 = \sum_i \alpha_i \delta u_i,$$

где $\alpha_1 = \alpha_2 = -\dfrac{2q_0A}{P}$, $\alpha_3 = -\dfrac{2q_0B}{P}$, $\alpha_4 = \alpha_5 = \alpha_6 = 0$.

Поскольку при $i = 4, 5, 6$ $\alpha_i = 0$, отсюда следует, что в результате ФП приобретают дополнительные («аномальные») приращения компоненты C_{ij}, где $i, j = 1, 2, 3$.

При этом

$$\Delta C_{11} = \Delta C_{22} = \Delta C_{12};\ \Delta C_{13} = \Delta C_{23}.$$

Имеем:

$$\Delta C_{11} = -\frac{2A^2(1 + 2i\Omega\tau)}{\beta(1 + i\Omega\tau)^2},\ \Delta C_{13} = -\frac{2AB(1 + 2i\Omega\tau)}{\beta(1 + i\Omega\tau)^2},$$

$$\Delta C_{33} = -\frac{2B^2(1 + 2i\Omega\tau)}{\beta(1 + i\Omega\tau)^2},$$

$$\Delta C_{44} = \Delta C_{66} = 0\,.$$

При $T \to T_c$ время релаксации $\tau \to \infty$, вследствие чего аномальные приращения ΔC_{11}, ΔC_{12}, ΔC_{22}, ΔC_{13}, ΔC_{23} и ΔC_{33} по мере приближения к точке ФП убывает до нуля. В то же время, компоненты тензора упругих жесткостей C_{44} и C_{66} в области ФП вообще не претерпевают никаких изменений.