

с определением доверительных интервалов для них. После составления уравнения регрессии производится проверка адекватности полученной модели, для чего сравниваются экспериментальные и расчетные значения исследуемой функции. Полученное уравнение регрессии может быть составлено как с кодированными, так и с натуральными значениями факторов. В программе реализована возможность нахождения экстремумов функции. Нахождение минимума и максимума реализуется методом прямого перебора значений функции в пределах плана эксперимента.

На этапе анализа полученной модели особую важность приобретает форма ее представления. Если количество факторов равно двум или трем, то самой наглядной формой представления полученных данных будет форма трехмерного графика или графика линий уровня. Полученная программа используется при разработке композиционных материалов для изготовления изолирующих и амортизирующих деталей рельсовых креплений.

РАСЧЕТ РЕЛАКСАЦИОННЫХ АНОМАЛИЙ УПРУГИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ДИЭЛЕКТРИКОВ СЕМЕЙСТВА KDP

Я.О. Шабловский, А.Ю. Струкачев

*Гомельский государственный технический университет
им. П.О. Сухого
Гомель, Беларусь*

Семейство кристаллов, изоморфных дигидрофосфату калия KH_2PO_4 (KDP), обладает кристаллографической симметрией $\bar{4}2m$ в высокосимметричной фазе и симметрией $mm2$ в низкосимметричной фазе. Фазовый переход $\bar{4}2m - mm2$ может быть описан

одним параметром порядка Q , отождествляемым с компонентой вектора спонтанной диэлектрической поляризации, ориентированной вдоль полярной кристаллографической оси. Термодинамический потенциал, учитывающий изменение энергии при упругой деформации и построенный с учетом требования инвариантности относительно операций симметрии кристаллографической группы $\bar{4}2m$, имеет вид

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

где $\alpha = \alpha_T(T - T_c)$, T_c – точка фазового перехода; u_ν – компоненты тензора деформаций ($\nu = 1, 2, \dots, 6$), C – тензор упругих жесткостей. Исходя из (1), находим равновесное значение параметра порядка:

в высокосимметричной фазе

$$Q_0 = 0; \quad (2)$$

в низкосимметричной фазе

$$Q_0 = (G\alpha)^{1/2}, \quad (3)$$

где

$$G = -\left(\frac{1}{\beta + 4AM + 2BN}\right), \quad M = \frac{(C_{13}B - C_{33}A)}{(C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2}, \\ N = \frac{-(B + 2MC_{13})}{C_{33}}.$$

Для оценки флуктуационных отклонений δQ параметра Q от его равновесного значения Q_0 воспользуемся уравнением Ландау–Халатникова, представив при этом величину $(\partial F / \partial Q)$ в виде

$$\left(\frac{\partial F}{\partial Q}\right) \approx \left(\frac{\partial^2 F_0}{\partial Q^2}\right)_0 \delta Q + \sum_j \left(\frac{\partial^2 F}{\partial Q \partial \eta_j}\right)_0 \delta \eta_j. \quad (4)$$

При этом мы предполагаем, что флуктуации параметра порядка следует за осцилляциями внешнего воздействия. Поэтому если в рассматриваемом случае исследуемый кристалл находится в поле упругой волны частоты Ω , то $\delta Q \sim \exp(i\Omega t)$. Тогда с учетом (4) находим, что при $T < T_c$

$$\left[iL\Omega + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial Q^2}\right)\right] \delta Q = -2Q_0 [A(\delta u_1 + \delta u_2) + B\delta u_3] \quad (5)$$

откуда

$$Q_0 = \sum_i \alpha_i \delta u_i, \quad (6)$$

где

$$\alpha_1 = \alpha_2 = -\frac{2Q_0 A}{P}, \quad \alpha_3 = -\frac{2Q_0 B}{P}, \quad \alpha_4 = \alpha_5 = \alpha_6 = 0, \quad (7)$$

$$P = (i\Omega L + 2\beta Q_0^2) = 2\beta Q_0^2 (1 + i\Omega \tau),$$

$\tau = \frac{\tau_0}{(T - T_c)}$ — время релаксации, определяемое по формуле

$$\tau = \frac{L}{\left(\frac{\partial^2 F}{\partial Q^2}\right)_0} = \frac{L}{2\beta Q_0^2}.$$

Теперь подставим выражения $Q = Q_0 + \delta Q$ и $u = u_0 + \delta u$ в исходный термодинамический потенциал (1) и выделим в полученном выражении набор слагаемых, образующих сумму вида

$$F_2 = \frac{1}{2} \sum_{ij} \delta C_{ij} \delta u_i \delta u_j,$$

где

$$\delta C_{ij} = C_{ij} + \Delta \delta C_{ij}.$$

С учетом (6), (7) имеем:

$$F_2 = \beta Q_0^2 \left(\sum_i \alpha_i \delta u_i \right)^2 + 2Q_0 \left(\sum_i \alpha_i \delta u_i \right) (A(\delta u_1 + \delta u_2) + B\delta u_3)$$

Поскольку при $i = 4, 5, 6$ $\alpha_i = 0$, приходим к выводу, что в результате фазового перехода дополнительные («аномальные») приращения приобретают только компоненты C_{ij} , где $i, j = 1, 2, 3$. При этом в силу кристаллографических особенностей структуры кристаллов семейства KDP

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

Имеем:

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

$$\Delta C_{13} = -\frac{2AB(1 + 2i\Omega\tau)}{\beta(1 + i\Omega\tau)^2}, \quad \Delta C_{33} = -\frac{2B^2(1 + 2i\Omega\tau)}{\beta(1 + i\Omega\tau)^2},$$

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

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