

Р.Р. Левицький¹, І.Р. Зачек², А.С. Вдович¹

Діелектрині властивості моноклінного RbD₂PO₄

¹Інститут фізики конденсованих систем НАН України, вул. Свенціцького, 1,
Львів, 79011, Україна, vas@ictp.lviv.ua

²Національний університет "Львівська політехніка", вул. С. Бандери 12, 79013,
Львів, Україна, zachek_i@ukr.net

Запропоновано модифіковану модель протонного впорядкування квазіодновимірного моноклінного RbD₂PO₄ з врахуванням лінійних за деформаціями ϵ_i та ϵ_5 внесків в енергію дейтронної системи. На основі запропонованої моделі в наближенні двочастинкового кластера отримано систему рівнянь для деформацій ϵ_i та ϵ_5 та параметра порядку. Використовуючи ці рівняння, розраховано статичну діелектричну проникність кристалу. В рамках методу нерівноважного статистичного оператора Д.М.Зубарева розраховано динамічну проникність кристалу. Описано експериментальні дані для статичних і динамічних діелектричних проникностей моноклінного RbD₂PO₄.

Ключові слова: сегнетоелектрики, кластерне наближення, теплоємність, діелектрична проникність, п'езомодулі, пружна стала.

Стаття постуила до редакції 23.05.2013; прийнята до друку 15.06.2013.

Вступ

В останні роки досить значна увага приділяється вивченню статичних і динамічних діелектричних, п'езоелектричних та пружних характеристик у сегнетоактивних сполуках з водневими зв'язками сім'ї KN₂PO₄. До цих сегнетоелектриків належить і низькосиметричний моноклінний кристал RbD₂PO₄.

У роботі [1] для опису статичних діелектричних характеристик моноклінного кристалу RbD₂PO₄ використана двопідграткова квазіодновимірна модель Ізінга, в якій взяті до уваги точно короткосяжні кореляції між квазіспінами в ланцюжках, а далекосяжні взаємодії – в наближенні молекулярного поля. На основі отриманих теоретичних результатів і знайдених параметрів теорії в роботі досягнуто задовільного опису температурного ходу $\epsilon_{22}(0, T)$. У цій роботі, однак, не розглянута релаксаційна динаміка досліджуваного кристалу.

У роботах [2, 3] проведено детальний аналіз даних рентгеноструктурних досліджень RbD₂PO₄, здійснено симетрійний аналіз взаємодій між дейтронами на водневих зв'язках, а також досліджені можливі упорядкування дейтронів на більш коротких

водневих зв'язках. Запропонована модель моноклінного RbD₂PO₄, на основі якої в кластерному наближенні, з врахуванням короткосяжних конфігураційних взаємодій між дейтронами в ланцюжках, більш коротких водневих зв'язків і далекосяжні взаємодії між цими зв'язками і, вважаючи полярний стан в низькотемпературній фазі сегнетіелектричним [4], розраховані статичні і динамічні проникності моноклінного RbD₂PO₄. В [2, 3] проведено порівняння результатів теоретичного розрахунку з експериментальними даними роботи [5].

У цій роботі модель моноклінного RbD₂PO₄ [2], узагальнена врахуванням деформацій ϵ_i , ϵ_5 , використана для опису статичних і динамічних діелектричних проникностей, отриманих експериментально в інших, крім [4], роботах.

I. Гамільтоніан кристалу RbD₂PO₄

Гамільтоніан дейтронної системи RbD₂PO₄ з врахуванням короткосяжних і далекосяжних взаємодій складається із затравної і псевдоспінової частин:

$$\hat{H} = Nu_2 \left(\frac{1}{2} \sum_{ij=1}^3 c_{ij} E_0 e_i e_j + \sum_{i=1}^3 c_{i5} E_0 e_i e_5 + c_{55} E_0^2 e_5^2 - \frac{1}{2} c_{22} E_2^2 \right) - 2w_2 \sum_{qq'} \sum_{l=1}^4 \left(\frac{s_{q1}^{(l)} s_{q'2}^{(l)}}{2} \right) (d_{R_q R_{q'}} + d_{R_q + r_{2l} R_{q'}}) -$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{2} \sum_{qq'} \sum_{ff'} J_{ff'}^{ll}(qq') \frac{\langle s_{qf}^{(l)} \rangle \langle s_{qf'}^{(l')} \rangle}{2} - \sum_{qq'} \sum_{ff'} J_{ff'}^{ll}(qq') \frac{\langle s_{qf'}^{(l')} \rangle s_{qf}^{(l)}}{2} + \frac{1}{2} \sum_{qq'} \sum_{ff' l \neq l'} K_{ff'}^{ll'}(qq') \frac{\langle s_{qf}^{(l)} \rangle \langle s_{qf'}^{(l')} \rangle}{2} - \\
 & - \sum_{qq'} \sum_{ff' l \neq l'} K_{ff'}^{ll'}(qq') \frac{\langle s_{qf'}^{(l')} \rangle s_{qf}^{(l)}}{2} - \sum_{qf} m_2 E_2 \left(\frac{s_{qf}^{(1)}}{2} + \frac{s_{qf}^{(2)}}{2} + \frac{s_{qf}^{(3)}}{2} + \frac{s_{qf}^{(4)}}{2} \right). \quad (2.1)
 \end{aligned}$$

де N – загальна кількість примітивних комірок, u_2 – об'єм розширеної примітивної комірки, $s_{qf}^{(l)}$ – оператор z -компоненти псевдоспіна дейтрона, який знаходиться в q -ій комірці на f -ому зв'язку ($f = 1, 2$) l -го ланцюжка. Власні значення оператора $s_{qf}^{(l)} = \pm 1$ відповідають двом можливим положенням дейтрона на водневому зв'язку, $m_2 = m_{11} = m_{12} = m_{21} = m_{22} = m_{13} = m_{23} = m_{14} = m_{24}$ – ефективні дипольні моменти в ланцюжках вздовж b -осі. Слід відмітити, що ланцюжки 1 і 2, утворюють

підґратку ``a''. Аналогічно ланцюжки 3 і 4 утворюють підґратку ``b''.

При розрахунку термодинамічних і динамічних характеристик RbD_2PO_4 використаємо, враховуючи специфіку його структури, наближення двочастинкового кластера (НДК). У рамках цього наближення вираз для термодинамічного потенціалу кристала в розрахунку на одну примітивну комірку отримуємо в наступному вигляді:

$$\begin{aligned}
 g = u_2 \left(\frac{1}{2} \sum_{ij=1}^3 c_{ij}^{E0} e_i e_j + \sum_{i=1}^3 c_{i5}^{E0} e_i e_5 + c_{55}^{E0} e_5^2 - \frac{1}{2} c_{22}^{E0} E_2^2 \right) - 4w_2 + n[(h_a^{(1)y})^2 + (h_b^{(1)y})^2] - 2n_{ab} h_a^{(1)y} h_b^{(1)y} - \\
 - \frac{1}{b} \ln(1 - (h_a^{(1)y})^2) - \frac{1}{b} \ln(1 - (h_b^{(1)y})^2) - \frac{4}{b} \ln 2 - 2 \frac{1}{b} \ln(a_2 + chy_{2a}) - 2 \frac{1}{b} \ln(a_2 + chy_{2b}). \quad (2.2)
 \end{aligned}$$

Тут $w_2 = w + \sum_{i=1}^3 d_{2i} e_i + d_5 e_5$ – параметр, який описує короткосяжні взаємодії дейтронів у ланцюжках,

$n = n^0 + \sum_{i=1}^3 y_i e_i + y_5 e_5$, $n_{ab} = n_{ab}^0 + \sum_{i=1}^3 y_{abi} e_i + y_{ab5} e_5$ – константи далекосяжних взаємодій між дейтронами, а параметри порядку

$$h_a^{(1)y} = \frac{shy_{2a}}{D_{a2}}; \quad h_b^{(1)y} = -\frac{shy_{2b}}{D_{b2}}, \quad (2.3)$$

$$D_{a2} = a_2 + chy_{2a}, \quad D_{b2} = a_2 + chy_{2b},$$

$$a_2 = aa_i a_5, \quad a = e^{-bw}, \quad a_i = e^{-\frac{b \sum_{i=1}^3 d_i e_i}{T}}, \quad a_5 = e^{-bd_5 e_5}.$$

$$y_{2a} = \frac{1}{2} \ln \frac{1+h_a^{(1)y}}{1-h_a^{(1)y}} + b n h_a^{(1)y} - b n_{ab} h_b^{(1)y} + \frac{b m_2 E_2}{2},$$

$$y_{2b} = -\frac{1}{2} \ln \frac{1+h_b^{(1)y}}{1-h_b^{(1)y}} + b n_{ab} h_a^{(1)y} - b n h_b^{(1)y} + \frac{b m_2 E_2}{2}.$$

У випадку $E_2 = 0$

$$h^{(1)} = h_a^{(1)} = h_b^{(1)} = \frac{shy}{a_2 + chy}, \quad (2.4)$$

$$y = \frac{1}{2} \ln \frac{1+h^{(1)}}{1-h^{(1)}} + b(n - n_{ab}) h^{(1)}.$$

Використовуючи рівняння термодинамічної рівноваги

$$\frac{1}{u_2} \left(\frac{\partial g}{\partial e_i} \right)_{E_2} = 0, \quad \frac{1}{u_2} \left(\frac{\partial g}{\partial e_5} \right)_{E_2} = 0, \quad \frac{1}{u_2} \left(\frac{\partial g}{\partial E_2} \right)_{e_i} = -P_2 \quad (2.5)$$

отримуємо рівняння для деформацій e_i , e_5 та поляризації P_2 :

$$0 = c_{i1}^{E0} e_1 + c_{i2}^{E0} e_2 + c_{i3}^{E0} e_3 + c_{i5}^{E0} e_5 - e_{2i}^0 E_2 - \frac{2d_i}{u_2} \left(2 - \frac{a_2}{D_{a2}} - \frac{a_2}{D_{b2}} \right) \frac{y_i}{u_2} [(h_a^{(1)y})^2 + (h_b^{(1)y})^2] + \frac{2y_{abi}}{u_2} h_a^{(1)y} h_b^{(1)y}, \quad (2.6)$$

$$0 = c_{15}^{E0} e_1 + c_{25}^{E0} e_2 + c_{35}^{E0} e_3 + c_{55}^{E0} e_5 - e_{25}^0 E_2 - \frac{2d_5}{u_2} \left(2 - \frac{a_2}{D_{a2}} - \frac{a_2}{D_{b2}} \right) \frac{y_5}{u_2} [(h_a^{(1)y})^2 + (h_b^{(1)y})^2] + \frac{2y_{ab5}}{u_2} h_a^{(1)y} h_b^{(1)y},$$

$$P_2 = c_{22}^{E0} E_2 + \frac{m_2}{v_2} [h_a^{(1)y} - h_b^{(1)y}]. \quad (2.7)$$

Звідси ізотермічна статична діелектрична сприйнятливість кристалу RbD₂PO₄ отримано в такому вигляді:

$$c_{22}^{eT} = \left(\frac{\partial P_2}{\partial E_2} \right)_{e_i} = c_{22}^{e0} + \frac{m_2^2}{v_2} b \frac{\alpha}{D - \alpha f^h}, \quad (2.8)$$

де

$$D = a_2 + chy, \quad \alpha = chy - h^{(1)} shy,$$

$$f^h = \frac{1}{1 - h^{(1)2}} + b(n + n_{ab}).$$

Використовуючи кінетичне рівняння для середніх псевдоспінових операторів, отримане на основі нерівноважного статистичного оператора Зубарева [10], яке має наступний вигляд [11, 12]:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p}_m \rangle = - \sum_{qf} \sum_{ma} \left\{ Q_{qf ma}^- \langle \hat{p}_m \rangle + i h \frac{\Omega_m^a}{2} Q_{qf ma}^+ \langle \hat{p}_m \rangle \right\} K_m^a, \quad (2.9)$$

де

$$Q_{qf ma}^m \langle \hat{p}_m \rangle = \left\langle \left[\hat{p}_m, s_{qf}^{-a}(\Omega_m^a) \right], s_{qf}^a(\Omega_m^a) \right\rangle_m,$$

$$K_m^a = \int_0^\infty dt e^{-et} \cos \Omega_m^a \text{Re} \langle \bar{u}^-(t) \bar{u}^+ \rangle_q, \quad a = 0, \pm 1,$$

а $\langle \bar{u}^a(t) \bar{u}^{a'} \rangle_q$ – кореляційні функції термостату,

$s_{qf}^a(\Omega_m^a)$ – фур'є-компоненти оператора

$s_{qf}^a(t) (s_{qf}^0 = s_{qf}, s_{qf}^\pm = s^x \pm i s_{qf}^y)$, отримано вирази

для дійсної та уявної частин комплексної діелектричної проникності моноклінного RbD₂PO₄ у такому вигляді:

$$e_{22}^{e'}(n) = e_{22}^{e0} + \frac{4pc}{1 + (2pnt)^2}, \quad e_{22}^{e''}(n) = \frac{4pcpnt}{1 + (2pnt)^2}, \quad (2.10)$$

де використані такі позначення:

$$c = \frac{m_2^2 b}{v_2} \frac{1}{\frac{2r(1 - P^{(0)}) - Y}{Yr} - b(n + n_{ab})}$$

$$t^{-1} = \frac{1}{a} \frac{Yr}{2r - Y} \left\{ \frac{2r(1 - P^{(0)}) - Y}{Yr} - b(n + n_{ab}) \right\},$$

$$Y = P^{(1)} h^{(1)} + L^{(1)}, \quad r = 1 - (h^{(1)})^2,$$

$$P^{(0)} = \frac{1 - a_2^2}{1 + a_2^2 + 2a_2 chy}, \quad L^{(0)} = \frac{2a_2 shy}{1 + a_2^2 + 2a_2 chy},$$

$$P^{(1)} = - \frac{4a_2(1 - a_2^2) shy}{(1 + a_2^2 + 2a_2 chy)^2},$$

$$L^{(1)} = \frac{4a_2[2a_2 + (1 + a_2^2) chy]}{(1 + a_2^2 + 2a_2 chy)^2}.$$

II. Обговорення отриманих результатів

Для кількісної оцінки температурних і частотних залежностей відповідних фізичних характеристик кристалу RbD₂PO₄, отриманих у рамках запропонованої теорії, необхідно задати значення таких параметрів: параметра двочастинкового кластера w ; параметрів далекосяжних взаємодій $n_- = n^{(0)} - n_{ab}^{(0)}$; $n_+ = n^{(0)} + n_{ab}^{(0)}$ ефективного дипольного моменту m_2 ; деформаційних потенціалів $d_{2i}, d_5, y_i, y_{abi}; Y_5, Y_{ab5}$; затравних діелектричних сприйнятливостей c_{22}^{e0} ; затравних пружних сталих $c_{ij}^{E0}, c_{i5}^{E0}, c_{55}^{E0}$; параметра a , що визначає часову шкалу релаксаційних процесів.

Для визначення перерахованих нижче мікропараметрів використаємо температурні залежності фізичних характеристик RbD₂PO₄, які отримані експериментально, а саме $e_{22}^e(0)$ [1, 5, 9], $e_{22}(n)$

Table 1

Набір параметрів теорії для кристалу RbD₂PO₄

T_{c2}	$\frac{w}{k_B}$	$\frac{n_-}{k_B}$	$\frac{n_+}{k_B}$	$m_{2III}, 10^{-18}$	$m_{2II}, 10^{-18}$	c_{22}^{e0}
(K)	(K)	(K)	(K)	(esu · cm)	(esu · cm)	
315	2500	0,150	0,004	0,64	0,64	0,70

T_{c2}	P_{III}	R_{III}	P_{II}	R_{II}
(K)	(s)	(s/K)	(s)	(s/K)
315	0,0008	0,00002	0,0008	0,00002

T_{c2}	$\frac{d_1}{k_B}$	$\frac{d_2}{k_B}$	$\frac{d_3}{k_B}$	$\frac{d_5}{k_B}$	$\frac{Y_1}{k_B}$	$\frac{Y_2}{k_B}$	$\frac{Y_3}{k_B}$	$\frac{Y_5}{k_B}$
(K)	(K)	(K)	(K)	(K)	(K)	(K)	(K)	(K)
315	108	-1450	350	-450	128.4	69.4	189	26

[1, 5], а також залежності значень $T_c(x, p)$ [9] від величини гідростатичного тиску.

Параметр a визначаємо з умови, щоб теоретично розраховані криві частотних залежностей $\epsilon_{22}(\omega)$ узгоджувались з кривими, які отримано експериментально. При цьому передбачалось, що параметр a незначно змінюється з температурою:

$$a = [P + R(\Delta T)] \cdot 10^{-14}, \quad \Delta T = T - T_c.$$

Об'єм примітивної комірки RbD_2PO_4 – $u_2 = 0,4282 \cdot 10^{-21} \text{ см}^3$. Отриманий таким чином набір оптимальних параметрів для RbD_2PO_4 наведено в табл.1.

Нам, на жаль, не відомі значення матриці пружних сталей для моноклінного RbD_2PO_4 . Тому для оцінки величин деформацій та пружних сталей RbD_2PO_4 використаємо в ролі затравних пружних сталей ті, які ми вибирали для опису CsH_2PO_4 [13], а

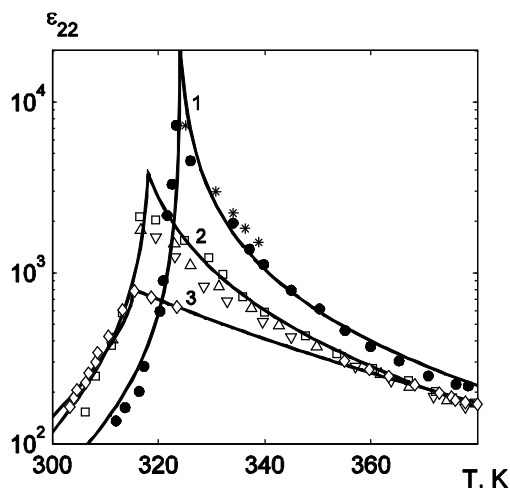


Рис. 1. Температурна залежність діелектричної проникності кристалу RbD_2PO_4 при $T_{c2} = 324 \text{ K}$ – 1, ● [5], * [6]; 318 K – 2, □ [1], Δ [7], ∇ [8]; 315 K – 3, ◇ [9].

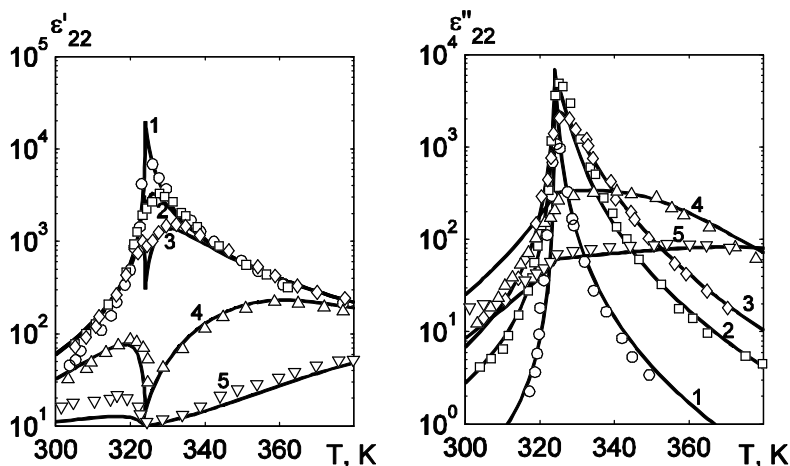


Рис. 2. Температурні залежності дійсної ϵ'_{22} і уявної ϵ''_{22} частин діелектричної проникності RbD_2PO_4 при $T_{c2} = 324 \text{ K}$ і різних частотах ω (ГГц) [5]: 0.05 – 1, ○; 0.5 – 2, □; 1.25 – 3, ◇; 10 – 4, Δ; 52.56 – 5, ∇

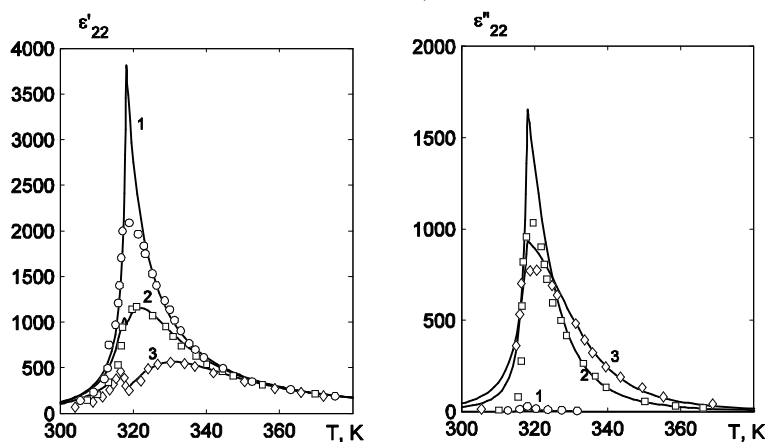


Рис. 3. Температурні залежності дійсної ϵ'_{22} і уявної ϵ''_{22} частин діелектричної проникності RbD_2PO_4 при $T_{c2} = 318 \text{ K}$ і різних частотах ω (ГГц) [1]: 0.001 – 1, ○; 0.45 – 2, □; 1.0 – 3, ◇

саме ($10^{10} \frac{dyn}{cm^2}$):

$$c_{11}^{0E} = 28,83, \quad c_{12}^{E0} = 11,4, \quad c_{13}^{E0} = 42,87,$$

$$c_{22}^{E0} = 26,67, \quad c_{23}^{E0} = 14,5, \quad c_{33}^{E0} = 65,45,$$

$$c_{25}^{E0} = 8,4, \quad c_{35}^{E0} = 7,50, \quad c_{55}^{E0} = 5,20$$

Відзначимо, що всі теоретичні розрахунки проведені лише для фаз II і III. А тому і числові розрахунки будуть стосуватися тільки цих фаз.

Температурна залежність $(e_{22}(T))^{-1}$ кристалів RbD₂PO₄ при $T_{c2} = 324$ K, 318 K і 315 K разом з відповідними даними експериментів наведена на рис. 1.

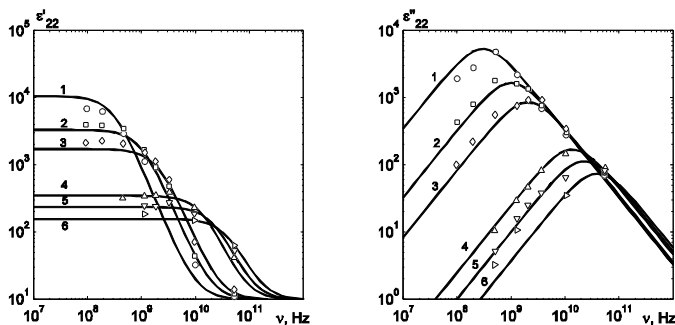


Рис. 4. Частотні залежності дійсної e'_{22} і уявної e''_{22} частин діелектричної проникності RbD₂PO₄ з $T_{c2} = 324$ K при різних температурах в парафазі: 325 K – 1, \bullet [5]; 329 K – 2, \square [5]; 334 K – 3, \diamond [5]; 364 K – 4, \triangle [5]; 377 K – 5, ∇ [5]; 394 K – 6, $>$ [5].

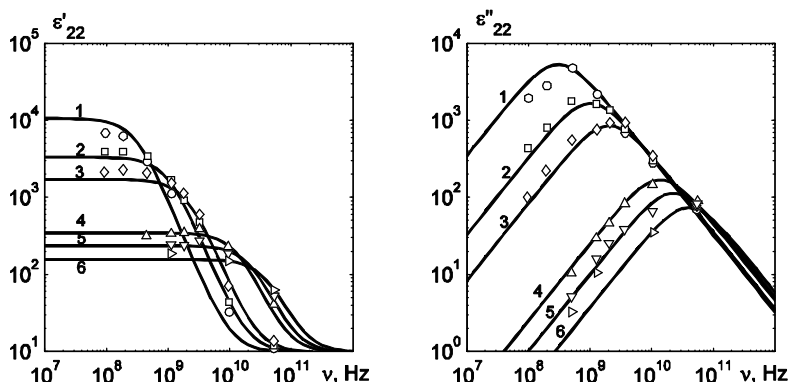


Рис. 5. Частотні залежності дійсної e'_{22} і уявної e''_{22} частин діелектричної проникності RbD₂PO₄ з $T_{c2} = 324$ K при різних температурах в антисегнетофазі: 304 K – 1, \bullet [5]; 314 K – 2, \square [5]; 319 K – 3, \diamond [5].

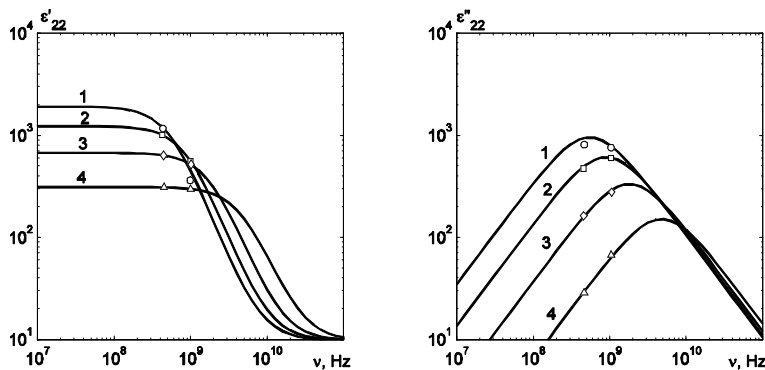


Рис. 6. Частотні залежності дійсної e'_{22} і уявної e''_{22} частин діелектричної проникності RbD₂PO₄ з $T_{c2} = 318$ K при різних температурах в антисегнетофазі: 323 K – 1, \bullet [1]; 328 K – 2, \square [1]; 338 K – 3, \diamond [1]; 358 K – 4, \triangle [1].

Отримано добрий кількісний опис експериментальних даних на основі запропонованої теорії. Для температурного ходу $(e_{22}(T))^{-1}$ в проміжній області характерним є значне відхилення від закону Кюри-Вейсса, а при $T < T_{c2}$ залежність оберненої статичної проникності від температури має майже лінійний характер.

На рис. 2 наведені температурні залежності дійсної $e_{22}^e(n, T)$ і уявної $e_{22}''(n, T)$ частин динамічної діелектричної проникності при різних частотах кристалу RbD_2PO_4 з $T_{c2} = 324\text{K}$ і $T_{c1} = 377\text{K}$, а також дані експериментів роботи [2, 5], а на рис. 3 – температурні залежності дійсної $e_{22}^e(n, T)$ і уявної $e_{22}''(n, T)$ частин динамічної діелектричної проникності при різних частотах кристалу RbD_2PO_4 з $T_{c2} = 318\text{K}$ і $T_{c1} = 377\text{K}$, а також дані експериментів роботи [5]. Має місце адекватний кількісний опис теорією експериментальних даних.

На рис. 4, 5 наведено результати розрахунку частотних залежностей $e_{22}^e(n)$ і $e_{22}''(n)$ для RbD_2PO_4 з $T_{c2} = 324\text{K}$, а на рис. 6 – з $T_{c2} = 318\text{K}$ при різних

значеннях температури, а також експериментальні дані.

Заклучні зауваження

У даній роботі на основі модифікованої моделі протонного впорядкування без врахування тунелювання протонів на водневих зв'язках у наближенні двочастинкового кластера розвинена теорія діелектричних та динамічних властивостей моноклінного RbD_2PO_4 . Проведено ґрунтовний числовий аналіз залежності розрахованих характеристик від параметрів теорії і деформаційних параметрів. Знайдено оптимальні набори цих параметрів і затравних характеристик для кристалу RbD_2PO_4 , які дали можливість описати наявні для них відповідні експериментальні дані.

Левицький Р.Р.—доктор фізико-математичних наук, професор, провідний науковий співробітник;
Зачек І.Р.—кандидат фізико-математичних наук, доцент;
Вдович А.С.—кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник.

- [1] M. Komukae, Y. Makita, J.Phys.Soc.Jap. 54(11), 4359 (1985).
- [2] R.R. Levitsky, I.R. Zachek, I.V. Kutny, J.J. Schur, J. Grigas, R. Mizeris, Ferroelectrics, 110, 85 (1990).
- [3] I.V. Stasjuk, I.R. Zachek, R.R. Levickij, Ja.J. Shhur, I.V. Kutnyj, E.V. Mic, Dinamika i termodinamicheskie svojstva monoklinnogo RbD_2PO_4 . (Kiev, 1989). (Preprint AN USSR, In-t teor. fiziki, ITF-89-53R).
- [4] Ya. Shchur, J. Phys.: Condens.Matter. 20, 195212 (2008).
- [5] R. Mizeris, J. Grigas, Z.A. Shuvalov, A.I. Baranov, Ferroelectrics, 72, 83 (1987).
- [6] B.H. Pykacz, Z. Czaplá, J. Mroz, Acta phys.PolA66(6), 639 (1984).
- [7] M. Sumita, T. Osaka, Y. Makita, J.Phys.Soc.Jap. 50(1), 154 (1981).
- [8] M. Sumita, T. Osaka, Y. Makita, J.Phys.Soc.Jap. 53(8), 2784 (1984),
- [9] K. Gesi, K. Ozawa, T. Osaka, Y. Makita, J.Phys.Soc.Jap. 52, 2538 (1983).
- [10] D.N. Zubarev, Sovremennye metody statisticheskoy teorii neravnovesnyh processov // V kn. Itogi nauki i tehniki. Sovremenyé problemy matematiki (Viniti, Moskva, 1980).
- [11] G.O.Berim, A.R. Kessel, Physica. 101A(1), 112 (1980).
- [12] G.O. Berim, A.R. Kessel, Physica 101A(1), 127 (1980).
- [13] R.R. Levic'kij, I.R. Zachek, A.S. Vdovich, FHTT 13, 40 (2012).

R.R. Levitskii¹, I.R. Zachek², A.S. Vdovich¹

Dielectric Properties of Monoclinic RbD_2PO_4 Type Ferroelectrics

¹Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine,
 1 Svientsitskii Street, 79011, Lviv, Ukraine

²Lviv Polytechnic National University, 12 Bandery Street, 79013, Lviv, Ukraine

We proposed modified proton ordering model for quasi-one-dimensional monoclinic RbD_2PO_4 , that takes into account linear over strains ϵ_i and ϵ_5 contributions to the proton subsystem energy. Within the framework of the model, using the two-particle cluster approximation we obtain a system of equations for the strains ϵ_i and ϵ_5 and for the order parameter. Using these equations we calculate the static dielectric permittivity of the crystal. The dynamic dielectric permittivity of the crystal is calculated within the D.N.Zubarev nonequilibrium statistical operator method. The available experimental data for static and dynamic permittivities, is described.

Keywords: ferroelectrics, cluster approximation, heat capacity, dielectric permittivity, piezoelectric moduli, elastic constant.