



## АНАЛИТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ СВОЙСТВ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

*В. В. Камышлов, В. С. Быстров*

Институт математических проблем биологии РАН, Пущино

В статье описан метод, позволяющий получить аналитическое выражение для нелинейной зависимости величины поляризации сегнетоэлектрика от величины внешнего электрического поля. Для нахождения аналитической связи использована функция специального класса –  $K_{ml}$ -функция второго порядка. Указаны структура построенных рядов и группы рядов, представляющие  $K_{ml}$ -функцию в любой точке комплексной плоскости. Проанализированы области сходимости рядов, полученные в виде граничного условия. Применение метода рассмотрено в данной работе на примере полимерного сегнетоэлектрика поливинилиденфторида (ПВДФ–ТрФЭ). Предлагаемый метод может быть использован для любых сегнетоэлектриков или других нелинейных упорядоченных систем в окрестности точек фазовых переходов и при различных внешних воздействиях.

*Ключевые слова:* Нелинейные системы, аналитическое описание, метод специальных  $K_{ml}$ -функций второго порядка, сегнетоэлектрики, поляризация в электрическом поле.

### Введение

В настоящее время для математического описания и исследования нелинейных свойств многих нелинейных систем применяются различные приближенные и численные методы. Аналитические решения в общем виде, за исключением некоторых специальных случаев, как правило, построить не удастся. Получение таких решений в аналитическом виде имеет большое прикладное значение, так как позволяет существенно снизить вычислительные затраты на необходимое проведение исследований ряда нелинейных зависимостей. Например, в случае таких нелинейных систем и материалов, как сегнетоэлектрики, имеющих в настоящее время огромное значение для различных нанотехнологий, для исследования крайне важной зависимости поляризации от внешнего электрического поля (и других воздействий) приходится применять довольно длительные вычислительные процедуры, причем с ограниченной точностью, как для термодинамического описания [1], так и для молекулярного моделирования [2,3].

В то же время, проведены исследования, позволяющие получать такие аналитические описания нелинейных систем и аналитически исследовать различные

нелинейные зависимости в этих системах. Делать это позволяет метод специальных  $K_{ml}$ -функций второго порядка [4–6]. Ниже мы подробно рассмотрим применение этого метода к сегнетоэлектрическим поливинилиденфторидным (ПВДФ–ТрФЭ) сополимерам, с соотношением процентного состава компонентов ВДФ:ТрФЭ (70:30). Данный материал выбран нами в качестве примера, так как он имеет наиболее широкое практическое применение и по нему есть много экспериментальных данных (по необходимым нам для конкретных расчетов коэффициентам), а также данных по сопоставимому компьютерному молекулярному моделированию. Но рассматриваемый подход применим к любым типам сегнетоэлектриков, что и будет продемонстрировано ниже.

## 1. Основные соотношения. Методика анализа

Из теории сегнетоэлектриков известно нелинейное выражение, которое связывает величину поляризации в сегнетоэлектрике, напряженность внешнего электрического поля и температуру в окрестности точки фазового перехода [1]

$$E = \alpha_0(T - T_0)P + \beta P^3 + \gamma P^5, \quad (1)$$

где  $E$  – величина напряженности внешнего электрического поля;  $P$  – величина поляризации в сегнетоэлектрике;  $T$  – температура;  $T_0$  – температура Кюри;  $\alpha_0$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  – постоянные коэффициенты, которые определяются опытным путем для каждого сегнетоэлектрика отдельно.

В сегнетоэлектриках могут происходить фазовые переходы первого или второго рода. Для сегнетоэлектриков с фазовыми переходами второго рода (например, нитрит натрия, фторобериллат аммония [1]) коэффициенты  $\alpha_0$ ,  $\beta > 0$ , а  $\gamma = 0$ . Соответственно выражение (1) принимает следующий, более простой вид:

$$E = \alpha_0(T - T_0)P + \beta P^3. \quad (2)$$

Рассмотрим сначала подробнее этот более простой случай.

**1.1. Случай фазового перехода второго рода.** Запишем выражение (2) в виде полинома

$$\beta P^3 + \alpha_0(T - T_0)P - E = 0. \quad (3)$$

Разделим обе части уравнения на  $\beta$  и введем следующие обозначения:

$$P^3 + \frac{\alpha_0}{\beta}(T - T_0)P - \frac{E}{\beta} = 0; \quad (4)$$

$$s_2 = \frac{\alpha_0}{\beta}(T - T_0), \quad s_3 = -\frac{E}{\beta}. \quad (5)$$

В результате получим полином третьей степени

$$P^3 + s_2P + s_3 = 0. \quad (6)$$

Выразить поляризацию  $P$  как функцию от напряженности внешнего поля  $E$  в этом случае можно двумя способами.

**1.1.1. Решение методом Кардано.** Первый метод решения – это классическая формула Кардано. В этом случае решение имеет следующий известный вид:

$$P = \sqrt[3]{-\frac{s_3}{2} + \sqrt{\frac{s_3^2}{4} + \frac{s_2^3}{27}}} + \sqrt[3]{-\frac{s_3}{2} - \sqrt{\frac{s_3^2}{4} + \frac{s_2^3}{27}}}. \quad (7)$$

Из полученных значений берем только те, которые удовлетворяют условию

$$\alpha = \sqrt[3]{-\frac{s_3}{2} + \sqrt{\frac{s_3^2}{4} + \frac{s_2^3}{27}}}, \quad \beta = \sqrt[3]{-\frac{s_3}{2} - \sqrt{\frac{s_3^2}{4} + \frac{s_2^3}{27}}}, \quad (8)$$

$$\alpha\beta = -\frac{s_2}{3}.$$

**1.1.2. Решение методом  $K_{ml}$ -функций.** Второй метод решения – это метод  $K_{ml}$ -функций [4–6]. Используя  $K_{ml}$ -функции первого порядка, решение полинома (3) можно получить в виде одного ряда

$$P_j = \sqrt[3]{-s_3} K_{31}(\alpha_{31}), \quad j = 1, 2, 3, \quad (9)$$

$$\alpha_{31} = -\frac{1}{3} s_2 (-s_3)^{-\frac{2}{3}}$$

( $\alpha_{31}$  – параметр, в который входят коэффициенты и показатели степеней членов полинома) или в виде двух рядов

$$P_j = \sqrt[2]{-s_2} K'_{31}(\beta_{31}), \quad j = 1, 2, \quad (10)$$

$$\beta_{31} = -\frac{1}{2} s_3 (-s_2)^{-\frac{3}{2}}$$

и

$$P_j = -\frac{s_3}{s_2} K''_{31}(\gamma_{31}), \quad j = 3, \quad (11)$$

$$\gamma_{31} = -1 (-s_3)^2 (s_2)^{-3}$$

( $\beta_{31}$  и  $\gamma_{31}$  также являются параметрами, в которые входят коэффициенты и показатели степеней членов полинома).

Функции  $K_{31}(\alpha_{31})$ ,  $K'_{31}(\beta_{31})$ ,  $K''_{31}(\gamma_{31})$  представляются бесконечными степенными рядами от параметров  $\alpha_{31}$ ,  $\beta_{31}$ ,  $\gamma_{31}$ , соответственно. Эти ряды имеют следующий вид:

$$K_{31}(\alpha_{31}) = 1 + \alpha_{31} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\alpha_{31}^n}{n!} \prod_{i=1}^{n-1} (n+1-3i),$$

$$K'_{31}(\beta_{31}) = 1 + \beta_{31} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\beta_{31}^n}{n!} \prod_{i=1}^{n-1} ((i-n)+1-3i), \quad (12)$$

$$K''_{31}(\gamma_{31}) = 1 + \gamma_{31} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\gamma_{31}^n}{n!} \prod_{i=1}^{n-1} (3n+1-1i).$$

Радиусы сходимости этих рядов, соответственно

$$\begin{aligned} R_{31} &= 0.6299604, \\ R'_{31} &= 0.1924501, \\ R''_{31} &= 0.1481481. \end{aligned} \quad (13)$$

Для всех  $|\alpha_{31}| \leq R_{31}$  ряд  $K_{31}(\alpha_{31})$  сходится и дает возможность получить три корня полинома (4). Как только начинает выполняться условие  $|\alpha_{31}| > R_{31}$ , сходимость ряда  $K_{31}(\alpha_{31})$  прекращается и начинают сходиться ряды  $K'_{31}(\beta_{31})$  и  $K''_{31}(\gamma_{31})$ . При этом выполняются условия  $|\beta_{31}| \leq R'_{31}$  и  $|\gamma_{31}| \leq R''_{31}$ .

Ряд  $K'_{31}(\beta_{31})$  дает возможность получить два корня, а ряд  $K''_{31}(\gamma_{31})$  – один корень.

Оба приведенных выше метода дают одинаковые результаты. Используя их, можно получить аналитическую зависимость поляризации  $P$  от напряженности поля  $E$ . Получив аналитическую зависимость  $P(E)$ , можем получить затем и аналитическую связь между диэлектрической восприимчивостью  $\varepsilon$  и напряженностью поля  $E$ , диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon$  (или обратной диэлектрической проницаемостью) и температурой  $T$ , полной поляризацией  $P$  и температурой  $T$  (при различных значениях напряженности поля  $E$ ). Получение всех этих нелинейных зависимостей, характеризующих конкретный сегнетоэлектрический материал, крайне важны для различных технических применений.

Итак, из вышеприведенных результатов видно, что, используя формулу Кардано либо  $K_{ml}$ -функции первого порядка, можно достаточно просто получить аналитическую зависимость  $P(E)$ . Но это достаточно простой случай, когда еще возможно получить аналитическое выражение решения по формуле Кардано. В случае фазовых переходов первого рода это уже невозможно. И вот тут метод  $K_{ml}$ -функций второго порядка позволяет получить аналитическое описание процессов поляризации в сегнетоэлектрике.

**1.2. Случай фазового перехода первого рода.** Для сегнетоэлектриков, в которых имеют место фазовые переходы первого рода (триглицинсульфат, колеманит, кислый сульфат аммония, сегнетова соль [2]), задача нахождения аналитической зависимости  $P(E)$  усложняется. Это объясняется тем, что в уравнении (1) ни один из коэффициентов  $\alpha_0$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  теперь не равен нулю. Поэтому уравнение (1) принимает следующий вид:

$$\alpha_0(T - T_0)P + \beta P^3 + \gamma P^5 - E = 0, \quad (14)$$

причем  $\alpha_0$  и  $\gamma$  больше нуля, а  $\beta$  меньше нуля. Преобразуем выражение (14) и запишем его по степеням  $P$

$$P^5 + \frac{\beta}{\gamma}P^3 + \frac{\alpha_0(T - T_0)}{\gamma}P - \frac{E}{\gamma} = 0. \quad (15)$$

Введем следующие обозначения:

$$s_2 = \frac{\beta}{\gamma}; \quad s_4 = \frac{\alpha_0(T - T_0)}{\gamma}; \quad s_5 = -\frac{E}{\gamma}. \quad (16)$$

Тогда уравнение (14) примет следующий вид:

$$P^5 + s_2P^3 + s_4P + s_5 = 0. \quad (17)$$

В уравнении (17) в коэффициент  $s_5$  входит напряженность внешнего поля  $E$ , поэтому для получения аналитической зависимости  $P(E)$  необходимо сделать обращение полинома (17), то есть найти функцию  $P(s_2, s_4, s_5)$ . Эта задача может быть решена при помощи  $K_{ml}$ -функций второго порядка [4–6].

**1.2.1. Решение задачи с помощью  $K_{ml}$ -функций второго порядка.** Запишем в общем виде четырехчленный полином (частным случаем которого будет являться наш полином (17)):

$$P^m + s_{m-l_1} P^{l_1} + s_{m-l_2} P^{l_2} + s_m = 0. \quad (18)$$

В выражении (18) приняты следующие обозначения:  $P$  – неизвестная исследуемая переменная;  $s_{m-l_1}, s_{m-l_2}, s_m$  – коэффициенты полинома, в общем случае комплексные числа;  $m, l_1, l_2$  – показатели степеней, целые положительные числа  $m > l_1 > l_2$ .

В общем виде ряд, представляющий  $K_{ml}$ -функции второго порядка, выглядит так [4–6]:

$$K_{m,l_1,l_2}(\alpha_{ml_1}, \alpha_{ml_2}) = 1 + \sum_{i=1}^2 \alpha_{ml_i} + \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^{n-1} \sum_{\substack{r_1, r_2=0; \\ r_1+r_2=n}}^n \prod_{i=1}^2 \frac{\alpha_{ml_i}^{r_i}}{r_i!} \prod_{v=1}^{n-1} (vm-1 - \sum_{i=1}^2 l_i r_i). \quad (19)$$

А корни полинома (18) через функции (19) выражаются следующим образом:

$$P_j = \sqrt[m]{-s_m} K_{m,l_1,l_2}(\alpha_{ml_1}, \alpha_{ml_2}), \quad j = 1, 2, \dots, m. \quad (20)$$

В формулах (19) и (20) приняты следующие обозначения:

$$\alpha_{m,l_1} = \frac{s_{m-l_1} (\sqrt[m]{-s_m})^{l_1}}{m s_m}, \quad \alpha_{m,l_2} = \frac{s_{m-l_2} (\sqrt[m]{-s_m})^{l_2}}{m s_m}. \quad (21)$$

где  $\alpha_{ml_1}, \alpha_{ml_2}$  – обобщенные параметры, сформированные из коэффициентов полинома (18) и его степеней.

Степенной ряд (19) представляет собой бесконечный ряд двух комплексных переменных, который сходится в некоторой области, определяемой сопряженными радиусами сходимости  $r_{ml_1}$  и  $r_{ml_2}$ . Для того чтобы ряд (19) сходился, необходимо и достаточно выполнения условия

$$|\alpha_{ml_1}| \leq r_{ml_1} \quad \text{и} \quad |\alpha_{ml_2}| \leq r_{ml_2} \quad (22)$$

Как только условие (22) нарушается и абсолютная величина одного из параметров превышает свой радиус сходимости, ряд (19) становится расходящимся. Таким образом возникает задача построения аналитического продолжения функции, которая выражается рядом (19) в области (22), за пределы этой области. Для решения этой задачи преобразуем полином (18). Разделим его почленно на  $s_{m-l_1}$ . В результате получим

$$\frac{1}{s_{m-l_1}} P^m + P^{l_1} + \frac{s_{m-l_2}}{s_{m-l_1}} P^{l_2} + \frac{s_m}{s_{m-l_1}} = 0, \quad (23)$$

$$P^{l_1} + \frac{1}{s_{m-l_1}} P^m + \frac{s_{m-l_2}}{s_{m-l_1}} P^{l_2} + \frac{s_m}{s_{m-l_1}} = 0. \quad (24)$$

Легко заметить, что уравнение (24) можно получить из исходного полинома (18) путем подстановок

$$\begin{aligned} s_m &\rightarrow \frac{s_m}{s_{m-l_1}}, \\ s_{m-l_1} &\rightarrow \frac{1}{s_{m-l_1}}, \\ s_{m-l_2} &\rightarrow \frac{s_{m-l_2}}{s_{m-l_1}} \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} m &\rightarrow l_1, \\ l_1 &\rightarrow m, \\ l_2 &\rightarrow l_2. \end{aligned} \tag{25}$$

Соответственно и следующий ряд, представляющий  $K_{ml}$ -функцию за пределами области (22), получается из ряда (19) путем подстановок (25). В результате применения подстановок, аналогичных (25), мы получаем серию выражений для нахождения корней полинома (18) при любых значениях коэффициентов, принадлежащих полю комплексных чисел. В зависимости от соотношения коэффициентов полинома (18), его корни будут выражены либо одним рядом (26)

$$P_j = \sqrt[m]{-s_m} K_{ml_1, ml_2}(\alpha_{ml_1}, \alpha_{ml_2}), \quad j = 1, 2, \dots, m. \tag{26}$$

либо первой группой из двух рядов (27):

$$\left\{ \begin{aligned} P_j &= \sqrt[l_1]{-\frac{s_m}{s_{m-l_1}}} K_{l_1, m, l_2}(\alpha_{l_1 m}, \alpha_{l_1 l_2}), \quad j = 1, 2, \dots, l_1, \\ P_j &= \sqrt[m-l_1]{-s_{m-l_1}} K_{m-l_1, -l_1, l_2-l_1}(\alpha_{m-l_1, -l_1}, \alpha_{m-l_1, l_2-l_1}), \quad j = l_1 + 1, l_1 + 2, \dots, m, \end{aligned} \right\} \tag{27}$$

либо второй группой из двух рядов (28):

$$\left\{ \begin{aligned} P_j &= \sqrt[l_2]{-\frac{s_m}{s_{m-l_2}}} K_{l_2, m, l_1}(\alpha_{l_2 m}, \alpha_{l_2 l_1}), \quad j = 1, 2, \dots, l_2. \\ P_j &= \sqrt[m-l_2]{-s_{m-l_2}} K_{m-l_2, -l_2, l_1-l_2}(\alpha_{m-l_2, -l_2}, \alpha_{m-l_2, l_1-l_2}), \quad j = l_2 + 1, l_2 + 2, \dots, m, \end{aligned} \right\} \tag{28}$$

либо одной группой из трех рядов (29):

$$\left\{ \begin{aligned} P_j &= \sqrt[m-l_1]{-s_{m-l_1}} K_{m-l_1, -l_1, l_2-l_1}(\alpha_{m-l_1, -l_1}, \alpha_{m-l_1, l_2-l_1}), \quad j = 1, 2, \dots, m-l_1. \\ P_j &= \sqrt[l_1-l_2]{-\frac{s_{m-l_2}}{s_{m-l_1}}} K_{l_1-l_2, m-l_2, -l_2}(\alpha_{l_1-l_2, m-l_2}, \alpha_{l_1-l_2, -l_2}), \quad j = m-l_1+1, \dots, m-l_2. \\ P_j &= \sqrt[l_2]{-\frac{s_m}{s_{m-l_2}}} K_{l_2, m, l_1}(\alpha_{l_2 m}, \alpha_{l_2 l_1}), \quad j = m-l_2+1, \dots, m. \end{aligned} \right\} \tag{29}$$

Все вместе – (26), (27), (28) и (29) представляют полную  $K_{ml}$ -функцию второго порядка. Области сходимости для рядов (26)–(29) находятся из условия наличия общего корня у полинома и его производной и в общем случае достаточно сложны. Поэтому будем находить такие выражения для конкретных показателей степеней.

Вернемся к частному случаю, а именно к полиному (17). В этом полиноме

$$\begin{aligned} m = 5, \quad l_1 = 3, \quad l_2 = 1, \\ s_{m-l_1} = s_2, \quad s_{m-l_2} = s_4, \quad s_m = s_5. \end{aligned} \quad (30)$$

Запишем в развернутой форме все возможные группы представлений для полинома (17).

Первая группа состоит из одного ряда:

$$\begin{aligned} P_j = \sqrt[5]{-s_5} [1 + (\alpha_{ml_1} + \alpha_{ml_2}) - \\ - \frac{1}{2!} [(m - (2l_1 + 1))\alpha_{ml_1}^2 + 2(m - (l_1 + l_2 + 1))\alpha_{ml_1}\alpha_{ml_2} + \\ + (m - (2l_2 + 1))\alpha_{ml_2}^2] + \frac{1}{3!} [(m - (3l_1 + 1))(2m - (3l_1 + 1))\alpha_{ml_1}^3 + \\ + 3(m - (2l_1 + l_2 + 1))(2m - (2l_1 + l_2 + 1))\alpha_{ml_1}^2\alpha_{ml_2} + \\ + 3(m - (l_1 + 2l_2 + 1))(2m - (l_1 + 2l_2 + 1))\alpha_{ml_1}\alpha_{ml_2}^2 + \\ + (m - (3l_2 + 1))(2m - (3l_2 + 1))\alpha_{ml_2}^3] - \dots, \end{aligned}$$

где

$$\alpha_{ml_1} = \frac{s_2(-s_5)^{\frac{l_1}{m}}}{ms_5}, \quad \alpha_{ml_2} = \frac{s_4(-s_5)^{\frac{l_2}{m}}}{ms_5}, \quad j = 1, 2, \dots, m. \quad (31)$$

Вторая группа состоит из двух рядов:

$$\begin{aligned} P_j = \sqrt[2]{-s_2} [1 + (\alpha_{m-l_1, -l_1} + \alpha_{m-l_1, l_2-l_1}) - \frac{1}{2!} [((m - l_1) - (-2l_1 + 1))\alpha_{m-l_1, -l_1}^2 + \\ + 2((m - l_1) - (-l_1 + (l_2 - l_1) + 1))\alpha_{m-l_1, -l_1}\alpha_{m-l_1, l_2-l_1} + \\ + ((m - l_1) - (2(l_2 - l_1) + 1))\alpha_{m-l_1, l_2-l_1}^2] + \\ + \frac{1}{3!} [((m - l_1) - (-3l_1 + 1))(2(m - l_1) - (-3l_1 + 1))\alpha_{m-l_1, -l_1}^3 + \\ + 3((m - l_1) - (-2l_1 + (l_2 - l_1) + 1))(2(m - l_1) - \\ - (-2l_1 + (l_2 - l_1) + 1))\alpha_{m-l_1, -l_1}^2\alpha_{m-l_1, l_2-l_1} + \\ + 3((m - l_1) - (-l_1 + 2(l_2 - l_1) + 1))(2(m - l_1) - \\ - (-l_1 + 2(l_2 - l_1) + 1))\alpha_{m-l_1, -l_1}\alpha_{m-l_1, l_2-l_1}^2 + \\ + ((m - l_1) - (3(l_2 - l_1) + 1))(2(m - l_1) - (3(l_2 - l_1) + 1))\alpha_{m-l_1, l_2-l_1}^3] - \dots, \end{aligned}$$

где

$$\alpha_{m-l_1, -l_1} = \frac{s_5(-s_2)^{-\frac{l_1}{m-l_1}}}{(m-l_1)s_2}, \quad \alpha_{m-l_1, l_2-l_1} = \frac{s_4(-s_3)^{\frac{l_2-l_1}{m-l_1}}}{(m-l_1)s_2}, \quad j = 1, 2, \dots, m - l_1;$$

$$\begin{aligned}
P_j = & \sqrt[3]{\frac{-s_5}{s_2}} [1 + (\alpha_{l_1 m} + \alpha_{l_1 l_2}) - \frac{1}{2!} [(l_1 - (2m + 1))\alpha_{l_1 m}^2 + \\
& + 2(l_1 - (m + l_2 + 1))\alpha_{l_1 m}\alpha_{l_1 l_2} + (l_1 - (2l_2 + 1))\alpha_{l_1 l_2}^2] + \\
& + \frac{1}{3!} [(l_1 - (3m + 1))(2l_1 - (3m + 1))\alpha_{l_1 m}^3 + \\
& + 3(l_1 - (2m + l_2 + 1))(2l_1 - (2m + l_2 + 1))\alpha_{l_1 m}^2\alpha_{l_1 l_2} + \\
& + 3(l_1 - (m + 2l_2 + 1))(2l_1 - (m + 2l_2 + 1))\alpha_{l_1 m}^2\alpha_{l_1 l_2} + \\
& + (l_1 - (3l_2 + 1))(2l_1 - (3l_2 + 1))^3\alpha_{l_1 l_2}^3] - \dots,
\end{aligned}$$

где

$$\alpha_{l_1 m} = -\frac{\left(\frac{-s_5}{s_2}\right)^{\frac{m-l_1}{l_1}}}{l_1 s_2}, \quad \alpha_{l_1 l_2} = -\frac{s_4 \left(\frac{-s_5}{s_2}\right)^{\frac{l_2-l_1}{l_1}}}{l_1 s_2}, \quad j = 1, 2, \dots, l_1. \quad (32)$$

Третья группа, состоит из двух рядов:

$$\begin{aligned}
P_j = & \sqrt[4]{-s_4} [1 + (\alpha_{m-l_2, l_1-l_2} + \alpha_{m-l_2, -l_2}) - \\
& - \frac{1}{2!} [(m-l_2) - (2(l_1-l_2) + 1))\alpha_{m-l_2, l_1-l_2}^2 + \\
& + 2((m-l_2) - ((l_1-l_2) + (-l_2) + 1))\alpha_{m-l_2, l_1-l_2}\alpha_{m-l_2, -l_2} + \\
& + ((m-l_2) - (2(-l_2) + 1))\alpha_{m-l_2, -l_2}^2] + \\
& + \frac{1}{3!} [(m-l_2) - (3(l_1-l_2) + 1))(2(m-l_2) - (3(l_1-l_2) + 1))\alpha_{m-l_2, l_1-l_2}^3 + \\
& + 3((m-l_2) - (2(l_1-l_2) + (-l_2) + 1))(2(m-l_2) - \\
& - (2(l_1-l_2) + (-l_2) + 1))\alpha_{m-l_2, l_1-l_2}^2\alpha_{m-l_2, -l_2} + \\
& + 3((m-l_2) - ((l_1-l_2) + 2(-l_2) + 1))(2(m-l_2) - \\
& - ((l_1-l_2) + 2(-l_2) + 1))\alpha_{m-l_2, l_1-l_2}\alpha_{m-l_2, -l_2}^2 + \\
& + ((m-l_2) - (3(-l_2) + 1))(2(m-l_2) - (3(-l_2) + 1))\alpha_{m-l_2, -l_2}^3] - \dots,
\end{aligned}$$

где

$$\alpha_{m-l_2, l_1-l_2} = \frac{s_2(-s_4)^{\frac{l_1-l_2}{m-l_2}}}{(m-l_2)s_4}, \quad \alpha_{m-l_2, -l_2} = \frac{s_5(-s_4)^{-\frac{l_2-l_2}{m-l_2}}}{(m-l_2)s_4}, \quad j = 1, 2, \dots, m-l_2; \quad (33)$$



$$\begin{aligned}
P_j = & \frac{-s_5}{s_4} [1 + (\alpha_{l_2 l_1} + \alpha_{l_2 m}) - \frac{1}{2!} [(l_2 - (2l_1 + 1)) \alpha_{l_2 l_1}^2 + \\
& + 2(l_2 - (l_1 + m + 1)) \alpha_{l_2 l_1} \alpha_{l_2 m} + (l_2 - (2m + 1)) \alpha_{l_2 m}^2] + \\
& + \frac{1}{3!} [(l_2 - (3l_1 + 1))(2l_2 - (3l_1 + 1)) \alpha_{l_2 l_1}^3 + \\
& + 3(l_2 - (2l_1 + m + 1))(2l_2 - (2l_1 + m + 1)) \alpha_{l_2 l_1}^2 \alpha_{l_2 m} + \\
& + 3(l_2 - (l_1 + 2m + 1))(2l_2 - (l_1 + 2m + 1)) \alpha_{l_2 l_1} \alpha_{l_2 m}^2 + \\
& + (l_2 - (3m + 1))(2l_2 - (3m + 1)) \alpha_{l_2 m}^3] - \dots,
\end{aligned}$$

где

$$\alpha_{l_2 l_1} = -\frac{s_2 \left( -\frac{s_5}{s_4} \right)^{\frac{l_1 - l_2}{l_2}}}{l_2 s_4}, \quad \alpha_{l_2 m} = -\frac{\left( -\frac{s_5}{s_4} \right)^{\frac{m - l_2}{l_2}}}{l_2 s_4}, \quad j = 1, 2, \dots, l_2.$$

Четвертая группа состоит из трех рядов:

$$\begin{aligned}
P_j = & \sqrt[3]{-s_2} [1 + (\alpha_{m-l_1, -l_1} + \alpha_{m-l_1, l_2-l_1}) - \frac{1}{2!} [((m-l_1) - (-2l_1+1)) \alpha_{m-l_1, -l_1}^2 + \\
& + 2((m-l_1) - (-l_1 + (l_2-l_1) + 1)) \alpha_{m-l_1, -l_1} \alpha_{m-l_1, l_2-l_1} + \\
& + ((m-l_1) - (2(l_2-l_1) + 1)) \alpha_{m-l_1, l_2-l_1}^2] + \\
& + \frac{1}{3!} [((m-l_1) - (-3l_1+1))(2(m-l_1) - (-3l_1+1)) \alpha_{m-l_1, -l_1}^3 + \\
& + 3((m-l_1) - (-2l_1 + (l_2-l_1) + 1))(2(m-l_1) - \\
& - (-2l_1 + (l_2-l_1) + 1)) \alpha_{m-l_1, -l_1}^2 \alpha_{m-l_1, l_2-l_1} + \\
& + 3((m-l_1) - (-l_1 + 2(l_2-l_1) + 1))(2(m-l_1) - \\
& - (-l_1 + 2(l_2-l_1) + 1)) \alpha_{m-l_1, -l_1} \alpha_{m-l_1, l_2-l_1}^2 + \\
& + ((m-l_1) - (3(l_2-l_1) + 1))(2(m-l_1) - (3(l_2-l_1) + 1)) \alpha_{m-l_1, l_2-l_1}^3] - \dots,
\end{aligned}$$

где

$$\alpha_{m-l_1, -l_1} = \frac{s_5 (-s_2)^{-\frac{l_1}{m-l_1}}}{(m-l_1) s_2}, \quad \alpha_{m-l_1, l_2-l_1} = \frac{s_4 (-s_3)^{\frac{l_2-l_1}{m-l_1}}}{(m-l_1) s_2}, \quad j = 1, 2, \dots, m-l_1;$$

$$\begin{aligned}
P_j = & \sqrt[2]{-\frac{s_4}{s_2}} [1 + (\alpha_{l_1-l_2, m-l_2} + \alpha_{l_1-l_2, -l_2}) - \\
& - \frac{1}{2!} [((l_1 - l_2) - (2(m - l_2) + 1)) \alpha_{l_1-l_2, m-l_2}^2 + \\
& + 2((l_1 - l_2) - ((m - l_2) + (-l_2) + 1)) \alpha_{l_1-l_2, m-l_2} \alpha_{l_1-l_2, -l_2} + \\
& + ((l_1 - l_2) - (2(-l_2) + 1)) \alpha_{l_1-l_2, -l_2}^2] + \\
& + \frac{1}{3!} [((l_1 - l_2) - (3(m - l_2) + 1))(2(l_1 - l_2) - (3(m - l_2) + 1)) \alpha_{l_1-l_2, m-l_2}^3 + \\
& + 3((l_1 - l_2) - (2(m - l_2) + (-l_2) + 1))(2(l_1 - l_2) - \\
& - (2(m - l_2) + (-l_2) + 1)) \alpha_{l_1-l_2, m-l_2}^2 \alpha_{l_1-l_2, -l_2} + \\
& + 3((l_1 - l_2) - ((m - l_2) + 2(-l_2) + 1))(2(l_1 - l_2) - \\
& - ((m - l_2) + 2(-l_2) + 1)) \alpha_{l_1-l_2, m-l_2} \alpha_{l_1-l_2, -l_2}^2 + \\
& + ((l_1 - l_2) - (3(-l_2) + 1))(2(l_1 - l_2) - (3(-l_2) + 1))^3 \alpha_{l_1-l_2, -l_2}^3] - \dots,
\end{aligned}$$

где

$$\alpha_{l_1-l_2, m-l_2} = \frac{\left(-\frac{s_4}{s_2}\right)^{\frac{m-l_2}{l_1-l_2}}}{(l_1-l_2)s_4}, \quad \alpha_{l_1-l_2, -l_2} = \frac{s_5 \left(-\frac{s_4}{s_2}\right)^{\frac{-l_2}{l_1-l_2}}}{(l_1-l_2)s_4}, \quad j = 1, 2, \dots, l_1 - l_2;$$

$$\begin{aligned}
P_j = & \frac{-s_5}{s_4} [1 + (\alpha_{l_2 l_1} + \alpha_{l_2 m}) - \\
& - \frac{1}{2!} [(l_2 - (2l_1 + 1)) \alpha_{l_2 l_1}^2 + 2(l_2 - (l_1 + m + 1)) \alpha_{l_2 l_1} \alpha_{l_2 m} + \\
& + (l_2 - (2m + 1)) \alpha_{l_2 m}^2] + \frac{1}{3!} [(l_2 - (3l_1 + 1))(2l_2 - (3l_1 + 1)) \alpha_{l_2 l_1}^3 + \\
& + 3(l_2 - (2l_1 + m + 1))(2l_2 - (2l_1 + m + 1)) \alpha_{l_2 l_1}^2 \alpha_{l_2 m} + \\
& + 3(l_2 - (l_1 + 2m + 1))(2l_2 - (l_1 + 2m + 1)) \alpha_{l_2 l_1} \alpha_{l_2 m}^2 + \\
& + (l_2 - (3m + 1))(2l_2 - (3m + 1)) \alpha_{l_2 m}^3] - \dots,
\end{aligned}$$

где

$$\alpha_{l_2 l_1} = -\frac{s_2 \left(-\frac{s_5}{s_4}\right)^{\frac{l_1-l_2}{l_2}}}{l_2 s_4}, \quad \alpha_{l_2 m} = -\frac{\left(-\frac{s_5}{s_4}\right)^{\frac{m-l_2}{l_2}}}{l_2 s_4}, \quad j = 1, 2, \dots, l_2. \quad (34)$$

Области сходимости рядов (31)–(34) определяем из следующего выражения:

$$108p_5^2 p_2^5 + 16p_4^3 p_2^4 - 900p_4 p_5^2 p_2^3 - 128p_4^4 p_2^2 + 2000p_2 p_4^2 p_5^2 + 3125p_5^4 + 256p_4^5 = 0. \quad (35)$$

Таким образом, используя группы рядов (31)–(34) и выражение для нахождения областей сходимости (35), мы можем аналитически определить величину поляризации в сегнетоэлектрике при любых значениях величины напряженности внешнего электрического поля.

## 2. Применение полученных аналитических зависимостей

Покажем на примере поливинилиденфторидного (ПВДФ–ТрФЭ) сополимера с соотношением процентного состава компонентов ВДФ:ТрФЭ (70:30), как работает рассмотренный аналитический метод.

Этот сегнетоэлектрик имеет фазовые переходы первого рода и следующие численные значения для коэффициентов:

$$\begin{aligned}\alpha &= \alpha_0(T - T_0) = 7.5 \cdot 10^7 (T - 303), \\ \beta &= (-1.1 \pm 0.3) \cdot 10^{12}, \\ \gamma &= (6.2 \pm 1.5) \cdot 10^{13}.\end{aligned}\tag{36}$$

Расчет проводим в следующих температурных диапазонах:

$$\begin{aligned}\Delta T_1 &= 2 \dots 5 \text{ К}, \\ \Delta T_2 &= 5 \dots 10 \text{ К}, \\ \Delta T_3 &= 10 \dots 50 \text{ К}, \\ \Delta T_4 &= 50 \dots 80 \text{ К}, \\ \Delta T_5 &= 80 \dots 117 \text{ К}.\end{aligned}\tag{37}$$

Напряженность внешнего поля меняем в пределах

$$E = -10^{10} \dots 10^{10} \text{ [В/м]}.$$

Запишем полином, который связывает величину поляризации и величину напряженности внешнего электрического поля

$$P^5 + s_2 P^3 + s_4 P + s_5 = 0,\tag{38}$$

где

$$\begin{aligned}s_2 &= \frac{\beta}{\gamma} = \frac{(-1.1 \cdot 10^{12})}{6.2 \cdot 10^{13}} = -0.0177, \\ s_4 &= \frac{\alpha_0(T - T_0)}{\gamma} = \frac{7.53 \cdot 10^7 (T - 303)}{6.2 \cdot 10^{13}} = 1.2145 \cdot 10^{-6} (T - 303), \\ s_5 &= -\frac{E}{\gamma} = -\frac{E}{6.2 \cdot 10^{13}} = -1.613 \cdot 10^{-14} E.\end{aligned}\tag{39}$$

Коэффициенты принимают следующие значения.

Для  $\Delta T_1 = 2 \text{ К}$

$$\begin{aligned}s_2 &= -0.0177, \\ s_4 &= 2.429 \cdot 10^{-6}, \\ s_5 &= -1.613 \cdot 10^{-14} E.\end{aligned}\tag{40}$$

Для  $\Delta T_1 = 5 \text{ К}$

$$\begin{aligned}s_2 &= -0.0177, \\ s_4 &= 6.0725 \cdot 10^{-6}, \\ s_5 &= -1.613 \cdot 10^{-14} E.\end{aligned}\tag{41}$$

Для  $\Delta T_1 = 10$  К

$$\begin{aligned} s_2 &= -0.0177, \\ s_4 &= 12.145 \cdot 10^{-6}, \\ s_5 &= -1.613 \cdot 10^{-14} E. \end{aligned} \quad (42)$$

Для  $\Delta T_1 = 50$  К

$$\begin{aligned} s_2 &= -0.0177, \\ s_4 &= 60.725 \cdot 10^{-6}, \\ s_5 &= -1.613 \cdot 10^{-14} E. \end{aligned} \quad (43)$$

Для  $\Delta T_1 = 80$  (°К)

$$\begin{aligned} s_2 &= -0.0177, \\ s_4 &= 97.16 \cdot 10^{-6}, \\ s_5 &= -1.613 \cdot 10^{-14} E. \end{aligned} \quad (44)$$

Для  $\Delta T_1 = 117$  К

$$\begin{aligned} s_2 &= -0.0177, \\ s_4 &= 142.096 \cdot 10^{-6}, \\ s_5 &= -1.613 \cdot 10^{-14} E. \end{aligned} \quad (45)$$

• Для коэффициентов (40) при  $\Delta T_1 = 2$  К определяем из выражения (35), какие ряды сходятся при различных значениях напряженности  $E$ . Получаем следующие области для рядов:

$$E = (0 \dots 6.798e5) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходятся ряды } (m - l_1), (l_1 - l_2), (l_2);$$

$$E = (6.798e5 \dots 4.648e8) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходятся ряды } (m - l_1), (l_1);$$

$$E = (4.648e8 \dots 1.00e10) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходится ряд } m.$$

В среде MATLAB была составлена программа для нахождения суммы рядов (31)–(34). Результаты расчета сводим в табл. 1.

При  $E < 0$  значения корней симметричны относительно начала координат.

• Для коэффициентов (41) при  $\Delta T_2 = 5$  К определяем из выражения (35), какие ряды сходятся при различных значениях напряженности  $E$ . Получаем следующие области для рядов:

$$E = (0 \dots 2.6927e6) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходятся ряды } (m - l_1), (l_1 - l_2), (l_2);$$

$$E = (2.6927e6 \dots 4.41689e8) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходятся ряды } (m - l_1), (l_1);$$

$$E = (4.41689e8 \dots 1.0e10) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходится ряд } m.$$

Результаты расчета сведены в табл. 2.

• Для коэффициентов (42) при  $\Delta T_3 = 10$  К определяем из выражения (35), какие ряды сходятся при различных значениях напряженности  $E$ . Получаем следующие области для рядов:

$$E = (0 \dots 7.64185e6) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходятся ряды } (m - l_1), (l_1 - l_2), (l_2);$$

$$E = (7.64185e6 \dots 4.03213e8) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходятся ряды } (m - l_1), (l_1);$$

$$E = (4.03213e8 \dots 1.0e10) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходится ряд } m.$$

Результат расчета сводим в табл. 3.

• Для коэффициентов (43) при  $\Delta T_4 = 50$  К определяем из выражения (35), какие ряды сходятся при различных значениях напряженности  $E$ . Получаем следующие области для рядов:

$$E = (0 \dots 8.808e7) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходятся ряды } (m - l_1), (l_1 - l_2), (l_2);$$

$$E = (8.808e7 \dots 1.0400129e8) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходятся ряды } (m - l_1), (l_1);$$

$$E = (1.0400129e8 \dots 1.0e10) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходится ряд } m.$$

Результаты расчета сводим в табл. 4.

• Для коэффициентов (44) при  $\Delta T_5 = 80$  К определяем из выражения (35), какие ряды сходятся при различных значениях напряженности  $E$ . Получаем следующие области для рядов:

$$E = (0 \dots 1.081e8) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходятся ряды } (m - l_1), (l_1 - l_2), (l_2);$$

$$E = (1.081e8 \dots 1.8359e8) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходятся ряды } (m - l_1), (l_1);$$

$$E = (1.8359e8 \dots 1.0e10) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходится ряд } m.$$

Результаты расчета сводим в табл. 5.

• Для коэффициентов (45) при  $\Delta T_6 = 117$  К определяем из выражения (35), какие ряды сходятся при различных значениях напряженности  $E$ . Получаем следующие области для рядов:

$$E = (0 \dots 1.0e8) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходятся ряды } (m - l_2), (l_2);$$

$$E = (1.0e8 \dots 1.0e10) \text{ В/м} \rightarrow \text{сходится ряд } m.$$

Результаты расчета сводим в табл. 6.

При  $\Delta T_{кр} = 117$  К точки ветвления функции  $P = P(E)$  переходят из области действительных значений в область комплексных значений, поэтому петли гистерезиса на графике  $P = P(E)$  исчезают.

Таблица 1

Зависимость величины поляризации от величины напряженности внешнего электрического поля при  $\Delta T_1 = 2$  К

$E$ (В/м)	1	1e5	6.798e5	1e6	1e7	1e8
Z1	0.132	0.132	0.132	0.132	0.132	0.135
Z2	0.0117	0.0114	0.0068	0.007+	0.011+	0.021+
				+0.003i	+0.016i	+0.038i
Z3	-0.132	-0.132	-0.132	-0.132	-0.132	-0.129
Z4	-0.0117	-0.012	-0.013	-0.014	-0.023	-0.048
Z5	6.64e-9	6.66e-4	0.0068	0.007-	0.011-	0.021-
				-0.003i	-0.016i	-0.038i
$E$ (В/м)	3e8	4e8	4.648e8	5e8	1e9	1e10
Z1	0.139	0.141	0.142	0.143	0.149	0.196
Z2	0.028+	0.03+	0.031+	0.032+	0.037+	0.058+
	+0.055i	+0.061i	+0.063i	+0.064i	+0.079i	+0.14i
Z3	-0.122	-0.115	-0.1028	-0.1+	-0.112+	-0.15+
				+0.012i	+0.035i	+0.09i
Z4	-0.074	-0.087	-0.1028	-0.1-	-0.112-	-0.15-
				-0.012i	-0.035i	-0.09i
Z5	0.028-	0.03-	0.031-	0.032-	0.037-	0.058-
	-0.055i	-0.061i	-0.063i	-0.064i	-0.079i	-0.14i

Таблица 2

Зависимость величины поляризации от величины напряженности  
внешнего электрического поля при  $\Delta T_2 = 5$  К

$EВ/м$	1	1e5	1e6	2.6927e6	1e7	1e8
Z1	0.13	0.131	0.131	0.131	0.132	0.134
Z2	0.0188	0.0185	0.017	0.0107	0.013+ +0.013i	0.022+ +0.03i
Z3	-0.13	-0.13	-0.13	-0.131	-0.13	-0.128
Z4	-0.0188	-0.0188	-0.02	-0.0216	-0.026	-0.05
Z5	2e-9	2e-4	0.0027	0.0107	0.013- -0.013i	0.022- -0.03i
$E$ (В/м)	3e8	4e8	4.416e8	5e8	1e9	1e10
Z1	0.138	0.14	0.141	0.142	0.149	0.1967
Z2	0.029+ +0.05i	0.031+ +0.06i	0.032+ +0.06i	0.032+ +0.06i	0.038+ +0.08i	0.058+ +0.15i
Z3	-0.12	-0.113	-0.1025	-0.1+ +0.014i	-0.11+ +0.035i	-0.157+ +0.09i
Z4	-0.076	-0.09	-0.1025	-0.1- -0.014i	-0.11- -0.035i	-0.157- -0.09i
Z5	0.029- -0.05i	0.031- -0.06i	0.032- -0.06i	0.032- -0.06i	0.038- -0.08i	0.058- -0.15i

Таблица 3

Зависимость величины поляризации от величины напряженности  
внешнего электрического поля при  $\Delta T_3 = 10$  К

$E$ (В/м)	1	1e5	1e6	7.64185e6	3e7	4e7
Z1	0.13	0.13	0.13	0.13	0.131	0.131
Z2	0.026	0.026	0.026	0.015	0.018+ +0.019i	0.019+ 0.023i
Z3	-0.13	-0.13	-0.13	-0.13	-0.129	-0.0129
Z4	-0.0267	-0.0268	-0.027	-0.031	-0.039	-0.041
Z5	1.3e-9	1.3e-4	1.3e-3	0.015	0.018- -0.019i	0.019- -0.023i
$E$ (В/м)	2e8	3e8	4.03213e8	6e8	1e9	1e10
Z1	0.135	0.137	0.139	0.142	0.148	0.196
Z2	0.027+ +0.046i	0.03+ +0.053i	0.032+ +0.058i	0.035+ +0.067i	0.038+ +0.08i	0.058+ +0.147i
Z3	-0.123	-0.117	-0.1019	-0.10+ +0.023i	-0.11+ +0.036i	-0.157+ 0.088i
Z4	-0.067	-0.08	-0.1019	-0.10+ -0.023i	-0.11- -0.036i	-0.157- 0.088i
Z5	0.027- -0.046i	0.03- -0.05i	0.032- -0.058i	0.035- -0.067i	0.038- -0.08i	0.058- -0.147i

Таблица 4

Зависимость величины поляризации от величины напряженности внешнего электрического поля при  $\Delta T_4 = 50$  К

$E$ (В/м)	1	1e6	1e7	8.808e7	1.0400129e8	1e9	1e10
Z1	0.117	0.114	0.115	0.12	0.12	0.142	0.1947
Z2	0.066	0.068	0.066	0.036+ +0.01i	0.036	0.04+ +0.07i	0.06+ +0.14i
Z3	-0.066	-0.068	-0.07	-0.096	-0.104	-0.11+ +0.04i	-0.15+ +0.09i
Z4	-0.117	-0.114	-0.113	-0.096	-0.087	-0.11- -0.04i	-0.15- -0.09i
Z5	2e-10	2e-4	0.0026	0.036- -0.036i	0.036	0.04- -0.07i	0.06- -0.14i

Таблица 5

Зависимость величины поляризации от величины напряженности внешнего электрического поля при  $\Delta T_5 = 80$  К

$E$ (В/м)	1	1e6	1e7	1.081e8	1.8359e8	1e9	1e10
Z1	0.096+ +0.02i	0.096+ +0.02i	0.096+ +0.02i	0.0909	0.108	0.137	0.193
Z2	0.096- -0.02i	0.096- -0.02i	0.096- -0.02i	0.0909	0.048	0.048+ +0.07i	0.06+ 0.14i
Z3	-0.096+ +0.02i	-0.096+ +0.02i	-0.097+ +0.02i	-0.1+ +0.029i	-0.1+ +0.03i	-0.11+ +0.05i	-0.16+ +0.09i
Z4	-0.096- -0.02i	-0.096- -0.02i	-0.097- -0.02i	-0.1- -0.029i	-0.1- -0.03i	-0.11- -0.05i	-0.16- -0.09i
Z5	1.6e-10	1.66e-4	1.66e-3	0.019	0.048	0.048- -0.07i	0.06- -0.14i

Таблица 6

Зависимость величины поляризации от величины напряженности внешнего электрического поля при  $\Delta T_6 = 117$  К

$E$ (В/м)	1	1e6	1e7	1e8	1e9	1e10
Z1	1.13e-10	1.13e-4	1.13e-3	1.15e-2	0.129	0.191
Z2	0.1+ +0.039i	0.1+ +0.039i	0.1+ +0.038i	0.098+ +0.035i	0.054+ +0.06i	0.06+ +0.14i
Z3	-0.1+ +0.039i	-0.1+ +0.039i	-0.1+ +0.039i	-0.1+ +0.04i	-0.12+ +0.05i	-0.16+ +0.09i
Z4	-0.1- -0.039i	-0.1- -0.039i	-0.1- -0.039i	-0.1- -0.04i	-0.12- -0.05i	-0.16- -0.09i
Z5	0.1- -0.039i	0.1- -0.039i	0.1- -0.038i	0.098- -0.035i	0.054- -0.06i	0.06- -0.14i

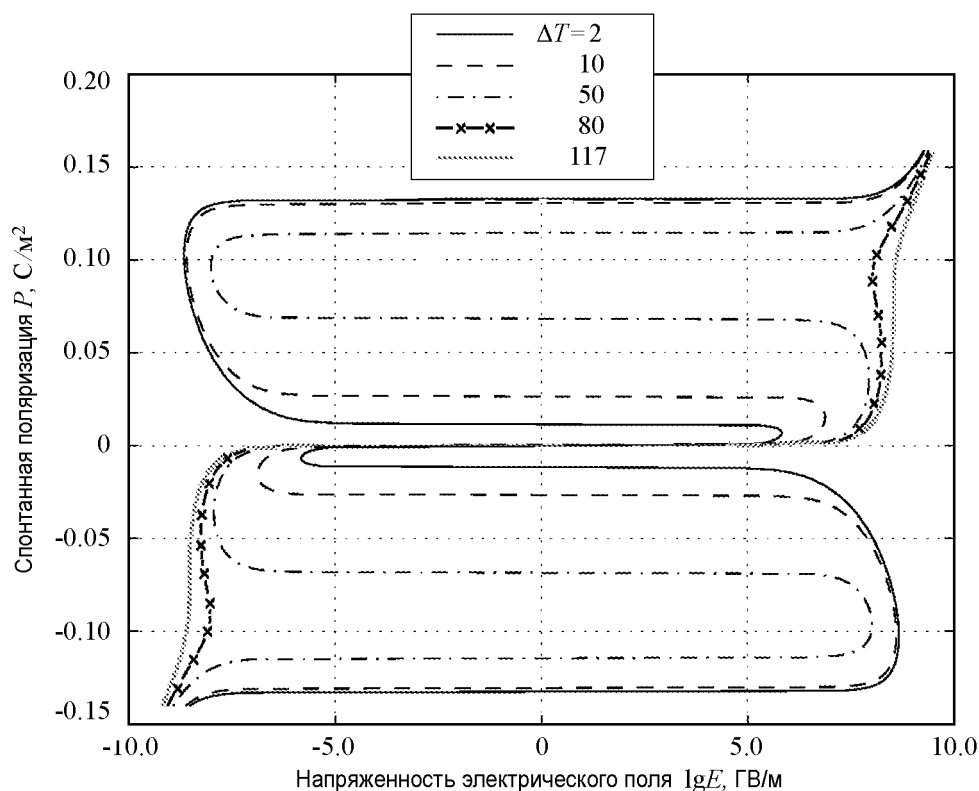


Рис. Зависимость спонтанной поляризации  $P$  от напряженности электрического поля  $E$  при различных температурах  $\Delta T$ , К

Построенные по данным из таблиц графики представлены на рисунке.

Анализ полученных результатов показывает, что в температурном диапазоне от 305 до 383 К в поливинилиденфториде (ПВДФ–ТрФЭ) имеет место явно выраженный фазовый переход первого рода. Происходят значительные скачки величины поляризации и присутствуют устойчивые петли гистерезиса.

В температурном диапазоне от 383 до 420 К также имеет место фазовый переход первого рода, но он имеет менее выраженное проявление.

При температуре около 420 К фазовый переход прекращается и сегнетоэлектрик переходит в параэлектрическую фазу.

Все полученные результаты хорошо совпадают с экспериментальными данными, взятыми из [7].

### Заключение

Полученные в статье результаты, позволяют судить о том, что метод  $K_{ml}$ -функций дает возможность аналитически описывать практически любые нелинейные процессы. Если в достаточно простых случаях, например, при описании фазового перехода второго рода, еще существует альтернатива, то в более сложных



случаях этот метод становится практически единственным методом, который позволяет получить аналитическое решение для сложных нелинейных процессов.

На данном этапе исследований удалось хорошо изучить  $K_{ml}$ -функции первого и второго порядков, для них найдены структуры рядов и области сходимости этих рядов, для функций более высоких порядков еще не выяснены вопросы, связанные с областями сходимости. Развитие теории  $K_{ml}$ -функций высоких порядков позволит аналитически описывать еще более сложные нелинейные процессы. В этом направлении будут продолжены исследования.

Кроме этого, хотелось бы отметить историко-математическое значение  $K_{ml}$ -функций. Большинство процессов, которые мы наблюдаем в природе и в жизни, имеют нелинейный характер. Нелинейные зависимости, с любой разумной точностью, можно описать полиномами разных степеней, ученые это поняли давно. Но если описывать процессы удавалось, то находить решение полиномов в виде аналитических функций долгое время не получалось. Многие крупные ученые, такие как Абель, Клейн, Лагранж и другие, пытались получить такие функции, но в общем виде решить эту задачу не смогли.  $K_{ml}$ -функции, впервые открытые нашим соотечественником Ф.Г. Кравченко, позволяют ответить на все вопросы, связанные с аналитическим решением полиномов. Работы с использованием  $K_{ml}$ -функций будут продолжены и в ближайшем будущем дадут интересные результаты.

#### Библиографический список

1. Струков Б.А., Леванюк А.П. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах. М.: Наука. Физматлит, 1995. 304 С.
2. Bystrov V.S., Bystrova N.K., Paramonova E.V., Sapronova A.V. Computational nanostructures and physical properties of the ultra-thin ferroelectric Langmuir–Blodgett films // *Ferroelectrics Letters*. 2006. Vol. 33. P. 153.
3. Bystrov V.S., Bystrova N.K., Paramonova E.V., Vizdrik G., Sapronova A.V., Kuehn M., Kliem H. and Kholkin A.L. First-principles calculations of molecular polarization switching in P(VDF-TrFE) ferroelectric thin Langmuir-Blodgett films // *J. Phys. D: Condens.Matter*. 2007. Vol. 19. 456210. doi: 10.1088/0953-8984/19/45/456210.
4. Кравченко Ф.Г. Элементарные  $K_{ml}$ -функции и их свойства // *Вычислительная и прикладная математика* // Межвед. науч. сборник. Киев. 1970. Вып. 2. С. 171.
5. Быстров В.С., Камышилов В.В. Аналитический метод исследования характеристических уравнений // *Электронный журнал «Исследовано в России»*. 2006. Т. 194. С. 1825. <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2006/194.pdf>
6. Кравченко Ф.Г., Камышилов В.В. Формальные операции над элементами аналитических функций // *Электронный журнал «Исследовано в России»*. 2006. 195. С. 1835. <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2006/195.pdf>
7. Блинов Л.М., Фридкин В.М., Палто С.П., Буне А.В., Даубен П.А., Дюшарм С. Двумерные сегнетоэлектрики // *Успехи физических наук*. 2000. Т. 170, № 3.

Поступила в редакцию 26.03.2014

## ANALYTICAL RESEARCH OF NONLINEAR PROPERTIES OF FERROELECTRICS

*V. V. Kamyshlov, V. S. Bystrov*

Institute of Mathematical Problems of Biology RAS, Pushchino

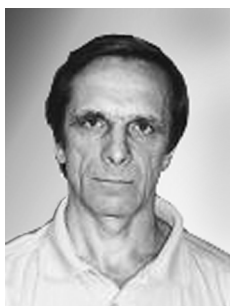
This paper describes a method to obtain an analytical expression for the nonlinear dependence of the ferroelectric polarization on the external electric field. To find analytical dependence, used a special  $K_{ml}$ -function of second order. Listed structure built of series and groups of series representing  $K_{ml}$ -function at any point in the complex plane. Analyzed domain of convergence of series, received as a boundary condition. To show the application of the method, as an example used a ferroelectric polymer polyvinylidene fluoride (PVDF–TrFE). The proposed method can be used for any other ferroelectric or nonlinear systems ordered in the neighborhood of phase transitions under various external influences.

*Keywords:* Nonlinear systems, analytical expression, special  $K_{ml}$ -function of second order, ferroelectric, polarization on the external electric field.



*Камышов Владимир Витальевич* – родился в Новокузнецке (1970), окончил Московский энергетический институт (1996). После окончания МЭИ работал в различных научно-исследовательских организациях. Окончил аспирантуру (2006) в Институте математических проблем биологии. Опубликовал 10 научных статей. Является одним из авторов нового метода обращения алгебраических функций. Область научных интересов: аналитические методы решения нелинейных алгебраических уравнений и систем, методы обращения алгебраических функций.

142290, Московская область, г. Пушкино, ул. Институтская, д. 4  
Институт математических проблем биологии РАН  
E-mail: gatorado@rambler.ru



*Быстров Владимир Сергеевич* – родился в г. Барановичи (1949), окончил физико-математический факультет Латвийского университета (1971). Защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук (Ростовский-на-Дону государственный университет, 1984) и доктора физико-математических наук (Латвийский университет, 1993) по физике локальных фазовых образований в полярных средах. С 1991 года работает в Институте математических проблем биологии Пушкинского научного центра РАН (Пушино), является ведущим научным сотрудником, руководителем группы компьютерного моделирования молекулярных наноструктур. С 2006 года также постоянно сотрудничает с Университетом Авейро (Португалия) как приглашенный научный сотрудник. Активно занимается новым научным направлением «Биосегнетоэлектричество», а также математическим моделированием, квантово-химическими расчетами и исследованием различных неорганических (таких, как гидроксипатит) и органических, биомолекулярных структур с водородными связями и полярными свойствами. Автор монографии «Компьютерное моделирование молекулярных наноструктур. Биосегнетоэлектричество: Пептидные нанотрубки» и ряда других книг и глав в книгах. Опубликовал около 150 научных работ по указанным выше направлениям.

142290, Московская область, г. Пушкино, ул. Институтская, д. 4  
Институт математических проблем биологии РАН  
E-mail: vsbys@mail.ru