

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

И

ПРОЦЕССЫ УПРАВЛЕНИЯ

№ 3, 2001

Электронный журнал,
рег. № П23275 от 07.03.97

<http://www.neva.ru/journal>
e-mail: diff@osipenko.stu.neva.ru

Прикладные задачи

О МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА ЭЛЕКТРОННОЙ УПРУГОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРИНЦИПА ОБРАТНОЙ СВЯЗИ

И.Е.Ерёмин

Россия, 675027, Благовещенск, Игнатьевское шоссе, д. 21,
Амурский государственный университет,
кафедра "Информационные и управляющие системы",
e-mail: eie@freemail.amursu.ru

Аннотация.

Рассматривается кибернетическая модель процесса поляризации конденсированных материалов, обеспечивающая достаточно хорошее совпадение теоретических и экспериментальных характеристик комплексной диэлектрической проницаемости в области электронной упругой поляризации.

1. Введение

На современном этапе развития науки и техники, с характерной для него необходимостью экономии сырьевых запасов, энергии и материальных ресурсов, существенный прогресс при решении задачи конструирования новых композиционных диэлектриков с требуемыми свойствами связан с ма-

тематическим моделированием их характеристик. При этом качество результатов или эффективность вычислительных экспериментов существенно зависит от уровня адекватности теоретической модели реальному физическому процессу. Предлагается, следуя идеологии работы [1], для описания процесса поляризации воспользоваться, наряду с традиционными моделями - кибернетической моделью, позволяющей описать свойства физической системы с помощью обратных связей

2. Традиционные модели процесса поляризации

Известно [2], что количественной мерой результата поляризации материала служит его поляризованность - P , которую можно описать выражением:

$$P = E \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i, \quad (1)$$

где E - напряженность электрического поля внутри диэлектрика; K - число разновидностей индуцированных диполей; n_i и α_i - соответственно, концентрации и поляризуемости частиц.

Для вычисления диэлектрической проницаемости материала - ε , обычно используются соотношения, связывающие ε с поляризуемостями частиц, составляющих диэлектрик.

Следует отметить, ради полноты изложения, что при вычислении диэлектрической проницаемости, например - газов обычно используется формула Борна:

$$\varepsilon = 1 + \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i. \quad (2)$$

где ε_0 - электрическая постоянная ($8,85418782 \cdot 10^{-12}$ Ф/м), при выводе которой предполагается, см., в частности [2], что E определяется напряженностью среднего макроскопического поля E_{cp} в материале:

$$E = E_{cp} = E_0 - E_1 = E_0 - \frac{P}{\varepsilon_0}, \quad (3)$$

где E_0 - напряженность внешнего поля; E_1 - напряженность деполяризующего поля, обусловливаемого наведенными поверхностными зарядами.

Действительно, если в выражении (3) осуществить замену $E_0 = \varepsilon E$, то в результате преобразований получим соотношение:

$$E_{cp} = \frac{P}{\varepsilon_0(\varepsilon - 1)}, \quad (4)$$

из которого, с учетом выражения (1), будет следовать соотношение (2).

Итак, если формула (2) применяется для газов, то расчет диэлектрической проницаемости конденсированных материалов как правило осуществляется по формуле Клаузиуса-Мосотти:

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i. \quad (5)$$

Здесь, согласно модели Лорентца, величина E определяется, в отличие от выражения (3), не только напряженностью среднего макроскопического поля, но и напряженностями внутренних полей

$$E = E_{cp} + E_2 + E_3, \quad (6)$$

где E_2 - напряженность поля, создаваемого поляризованными молекулами, окружающими сферу Лорентца, а E_3 - напряженность поля, образованного молекулами, находящимися внутри сферы.

Следуя [2], значения напряженностей E_2 и E_3 определяются следующим образом:

$$E_2 = \frac{P}{3\varepsilon_0}, \quad E_3 = 0. \quad (7)$$

Из выражения (6), с учетом (1), (4), (7), можно записать соотношение

$$E = \frac{P}{\varepsilon_0(\varepsilon - 1)} + \frac{P}{3\varepsilon_0} = \left(\frac{E}{\varepsilon_0(\varepsilon - 1)} + \frac{E}{3\varepsilon_0} \right) \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i, \quad (8)$$

из которого непосредственно вытекает формула Клаузиуса-Мосотти.

При исследовании частотных характеристик материала, его диэлектрическую проницаемость принято рассматривать как комплексную функцию $\varepsilon(j\omega)$, т.е. формулы (2) и (5) принимают вид, во-первых, модели Борна:

$$\varepsilon(j\omega) = 1 + \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i(j\omega), \quad (9)$$

и, во-вторых модели Клаузиуса-Мосотти-Лорентц-Лоренца

$$\frac{\varepsilon(j\omega) - 1}{\varepsilon(j\omega) + 2} = \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i(j\omega), \quad (10)$$

где $\alpha_k(j\omega)$ - так называемые комплексные поляризуемости частиц вида

$$\alpha_k(j\omega) = \frac{q_k^2/m_k}{\omega_{0k}^2 - \omega^2 + j2b_k\omega}. \quad (11)$$

При получении явного вида функций $\alpha_k(j\omega)$, как показано в работах [3, 4, 5, 6], используется математическое описание процесса поляризации, в котором участвует отдельно взятая заряженная частица. Если же ограничиться рассмотрением только одного вида поляризации - упругой электронной, то этот процесс можно описать системой уравнений:

$$\frac{d^2\mu_k(t)}{dt^2} + 2b_k \frac{d\mu_k(t)}{dt} + \omega_{0k}^2 \mu_k(t) = \frac{q_k^2}{m_k} E_0(t), \quad k = \overline{1, K}, \quad (12)$$

где k - индекс разновидности иона; K - их число; $\mu_k(t)$ - индуцированный дипольный момент электронного облака отдельного иона; ω_{0k} и b_k - собственная частота и коэффициент затухания колебаний облака; q_k и m_k - его заряд и масса; $E_0(t)$ - напряженность внешнего переменного электрического поля малой амплитуды.

3. Кибернетическая модель процесса поляризации

Как уже отмечалось, напряженность поля в диэлектрике E определяется как напряженностями внешнего и деполяризующего полей (E_0 и E_1), так и напряженностями внутренних полей (E_2 и E_3). Однако в отличие от выражения (6), где использовалось описание поля с напряженностью E_{cp} , напряженность поля внутри диэлектрика E , подобно известным результатам, например [7], можно записать в виде:

$$E = E_0 - E_1 + E_2 + E_3 = E_0 - \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \mu_i, \quad (13)$$

где $\mu_i = \alpha_i E$ - индуцированный дипольный момент частицы i -й разновидности.

Кроме того, при составлении математической модели процесса поляризации диэлектрика, следуя [8], будем учитывать как напряженность внешнего поля $E_0(t)$, так и напряженности других действующих полей. Относительно уравнения (12) это означает, что для его правой части справедлива замена $E_0(t) \rightarrow E(t)$, приводящая к математической модели вида:

$$\frac{d^2 \mu_k(t)}{dt^2} + 2b_k \frac{d\mu_k(t)}{dt} + \omega_{0k}^2 \mu_k(t) = \frac{q_k^2}{m_k} E(t), \quad k = \overline{1, K}, \quad (14)$$

где напряженность $E(t)$, согласно соотношению (13), описывается выражением

$$E(t) = E_0(t) - \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \mu_i(t). \quad (15)$$

Тогда с целью построения модели процесса поляризации диэлектрика, в результате объединения набора соотношений типа (14), описывающих все виды поляризации и выражения (15), можно получить следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mu_k(t)}{dt^2} + 2b_k \frac{d\mu_k(t)}{dt} + \omega_{0k}^2 \mu_k(t) = \\ = \frac{q_k^2}{m_k} \left(E_0(t) - \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \mu_i(t) \right), \quad k = \overline{1, K}. \end{aligned} \quad (16)$$

С позиции технической кибернетики [9], уравнения (16) можно рассматривать как математическую модель некоторой замкнутой линейной системы управления с отрицательной обратной связью. При этом, если уравнения (14), (15), подобно [10, 11], записать в изображениях и преобразовать к виду

$$\begin{aligned} E(s) &= E_0(s) - \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \mu_i(s), \\ \mu_k(s) &= \alpha_k(s) E(s), \quad k = \overline{1, K}, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\alpha_k(s) = \frac{q_k^2/m_k}{s^2 + 2b_k s + \omega_{0k}^2},$$

где s - комплексная переменная; $\mu_k(s)$, $E(s)$ и $E_0(s)$ - изображения по Лапласу, функций $\mu_k(t)$, $E(t)$ и $E_0(t)$; $\alpha_k(s)$ - передаточная функция, то структурную схему процесса поляризации диэлектрика можно представить в виде, показанном на рис. 1. Важно отметить, что как для системы (17), так и для структурной схемы (рис.1), можно записать уравнение связи типа выход-вход с использованием передаточной функции $W(s)$, описывающей взаимодействие между напряженностями внутреннего и внешнего полей следующим образом:

$$E(s) = W(s)E_0(s), \quad W(s) = \frac{1}{1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i(s)}. \quad (18)$$

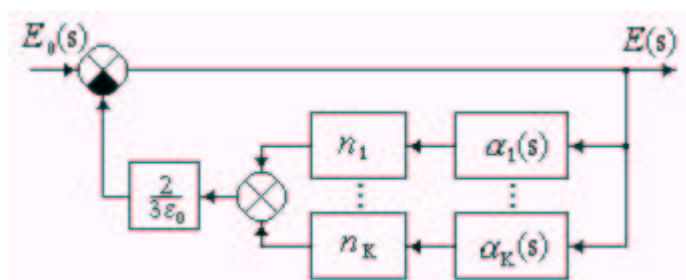


Рис. 1. Структурная схема процесса упругой электронной поляризации диэлектрика

Существенной значение передаточной функции $W(s)$ заключается также еще и в том, что с ее помощью, путем замены $s \rightarrow j\omega$, можно получить выражение вида:

$$W(j\omega) = \frac{1}{1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i(j\omega)}. \quad (19)$$

Однако, при исследовании свойств диэлектриков данное частотное соотношение и ему подобные не применяются, поскольку в физике общепринято использовать функцию $\varepsilon(j\omega)$ - комплексную диэлектрическую проницаемость материала, которая является обратной относительно функции $W(j\omega)$ - см. например, функциональные зависимости (9), (10).

Следовательно, согласно уравнению (19) будет иметь место новая функциональная зависимость

$$\varepsilon(j\omega) = 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i(j\omega), \quad (20)$$

которую в дальнейшем будем называть кибернетической моделью процесса поляризации, что в свою очередь позволяет для расчета ε использовать формулу

$$\varepsilon = 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha_i. \quad (21)$$

4. Параметрический синтез передаточной функции $\alpha_i(s)$

Известно [12, 13], что в диапазоне ближних инфракрасных, видимых и ультрафиолетовых частот внешнего поля диэлектрическая проницаемость материала определяется исключительно вкладом упругой электронной поляризации ионов, поскольку на этих частотах другие ее виды не проявляются из-за своей инерционности. Таким образом, для расчета частотных характеристик $\varepsilon(j\omega)$ с использованием моделей вида (10), (20), в указанном диапазоне и в соответствии с уравнением типа (12), требуется определить необходимые параметры, а именно, числовые значения для заряда, массы, коэффициента затухания и частоты собственных колебаний электронного облака каждого вида ионов, а также их концентрации в диэлектрике.

Согласно [2, 14], электронные поляризуемости ионов значительно возрастают с ростом их радиусов, поскольку наибольшее смещение под действием поля испытывают внешние (оптические) электроны, вследствие уменьшения притяжения между ними и ядром. Внутренние электроны находятся гораздо ближе к ядру и кроме того на них действует более высокий эффективный заряд, поэтому их поляризация весьма незначительна по сравнению с поляризацией внешних электронов. Следовательно, для описания электронной поляризации иона k -й разновидности можно ограничиться уравнением колебаний его оптической электронной оболочки, относительно экранизированного атомного ядра. В рамках такого приближения, заряд и масса электронного облака будут обуславливаться числом электронов - Z_k , входящих в состав названной оболочки, и вычисляться следующим образом:

$$q_k = Z_k e, \quad m_k = Z_k m_e, \quad (22)$$

где e и m_e - заряд ($1,6021892 \cdot 10^{-19}$ Кл) и масса ($0,9109534 \cdot 10^{-30}$ кг) электрона. Для определения ω_{0k} и b_k , аналогично [3, 8] и учитывая выражения

(22), можно воспользоваться следующими формулам:

$$\omega_{0k}^2 = \frac{Q_k e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r_k^3}, \quad 2b_k = \frac{\mu_0 Z_k e^2 \omega_{0k}^2}{6\pi m_e c} \quad (23)$$

где μ_0 - магнитная постоянная ($12,5663706144 \cdot 10^{-7}$ Гн/м); c - скорость света в вакууме ($2,99792458 \cdot 10^8$ м/с); r_k - ионные радиусы; Q_k - эффективный заряд атомного ядра, действующий на внешнюю электронную оболочку и определяемый по методике Слейтора [14]. Концентрации ионов в материале достаточно просто рассчитываются на основании табличных данных о его плотности и атомных массах химических элементов.

5. Вычислительный эксперимент

С целью оценки эффективности рассматриваемых математических моделей, во-первых, был проведен вычислительный эксперимент, связанный с расчетом спектров диэлектрической проницаемости ряда ионных кристаллов, в частности - с расчетом вещественных частотных характеристик

$$\epsilon' = \operatorname{Re}(\epsilon(j\omega)),$$

для $NaCl$, MgO , Al_2O_3 и SiO_2 по функциональным зависимостям (10), (20), преобразованных к виду:

$$\epsilon' = \frac{\left(1 + \frac{2}{3\epsilon_0} \sum_{i=1}^K \frac{n_i (\omega_{0i}^2 - \omega^2) q_i^2 / m_i}{(\omega_{0i}^2 - \omega^2)^2 + 4b_i^2 \omega^2}\right) \left(1 - \frac{1}{3\epsilon_0} \sum_{i=1}^K \frac{n_i (\omega_{0i}^2 - \omega^2) q_i^2 / m_i}{(\omega_{0i}^2 - \omega^2)^2 + 4b_i^2 \omega^2}\right)}{\left(1 - \frac{1}{3\epsilon_0} \sum_{i=1}^K \frac{n_i (\omega_{0i}^2 - \omega^2) q_i^2 / m_i}{(\omega_{0i}^2 - \omega^2)^2 + 4b_i^2 \omega^2}\right)^2 + \left(\frac{1}{3\epsilon_0} \sum_{i=1}^K \frac{2n_i b_i \omega q_i^2 / m_i}{(\omega_{0i}^2 - \omega^2)^2 + 4b_i^2 \omega^2}\right)^2} - \frac{2 \left(\frac{1}{3\epsilon_0} \sum_{i=1}^K \frac{2n_i b_i \omega q_i^2 / m_i}{(\omega_{0i}^2 - \omega^2)^2 + 4b_i^2 \omega^2}\right)^2}{\left(1 - \frac{1}{3\epsilon_0} \sum_{i=1}^K \frac{n_i (\omega_{0i}^2 - \omega^2) q_i^2 / m_i}{(\omega_{0i}^2 - \omega^2)^2 + 4b_i^2 \omega^2}\right)^2 + \left(\frac{1}{3\epsilon_0} \sum_{i=1}^K \frac{2n_i b_i \omega q_i^2 / m_i}{(\omega_{0i}^2 - \omega^2)^2 + 4b_i^2 \omega^2}\right)^2}, \quad (24)$$

$$\epsilon' = 1 + \frac{2}{3\epsilon_0} \sum_{i=1}^K \frac{n_i (\omega_{0i}^2 - \omega^2) q_i^2 / m_i}{(\omega_{0i}^2 - \omega^2)^2 + 4b_i^2 \omega^2}, \quad (25)$$

а, во-вторых, было выполнено сравнение полученных кривых с данными физического эксперимента [13] в диапазоне от 10^{15} до 10^{16} рад/с.

Исходные данные для определения параметров процессов упругой электронной поляризации рассматриваемых материалов по формулам (22), (23), приведены в табл. 1, а данные для расчета концентрации ионов и их результаты в табл. 2.

Таблица 1. Данные для расчета параметров по формулам (22), (23)

Ион	Z_k	Q_k	r_k (10^{-10} м)
Na^+	8	6,85	0,98
Mg^{2+}	8	7,85	0,78
Al^{3+}	8	8,85	0,57
Si^{4+}	8	9,85	0,39
O^{2-}	8	3,85	1,32
Cl^-	8	5,75	1,81

Таблица 2. Данные и результаты расчета концентрации ионов

Ион	Плотность (кг/м ³)	n_k иона +	n_k иона -
$NaCl$	2165,25	$2,2311 \cdot 10^{28}$	$2,2311 \cdot 10^{28}$
MgO	3582,50	$5,3528 \cdot 10^{28}$	$5,3528 \cdot 10^{28}$
Al_2O_3	3960,00	$4,6778 \cdot 10^{28}$	$7,0167 \cdot 10^{28}$
SiO_2	2650,00	$2,6560 \cdot 10^{28}$	$5,3121 \cdot 10^{28}$

Результаты вычислительного эксперимента представлены на рис. 2 и 3, где использованы следующие обозначения: характеристика, полученная на основании модели (10) - штрих-пунктирная линия; характеристика, полученная на основании модели (20) - пунктирная линия; экспериментальная кривая - сплошная линия.

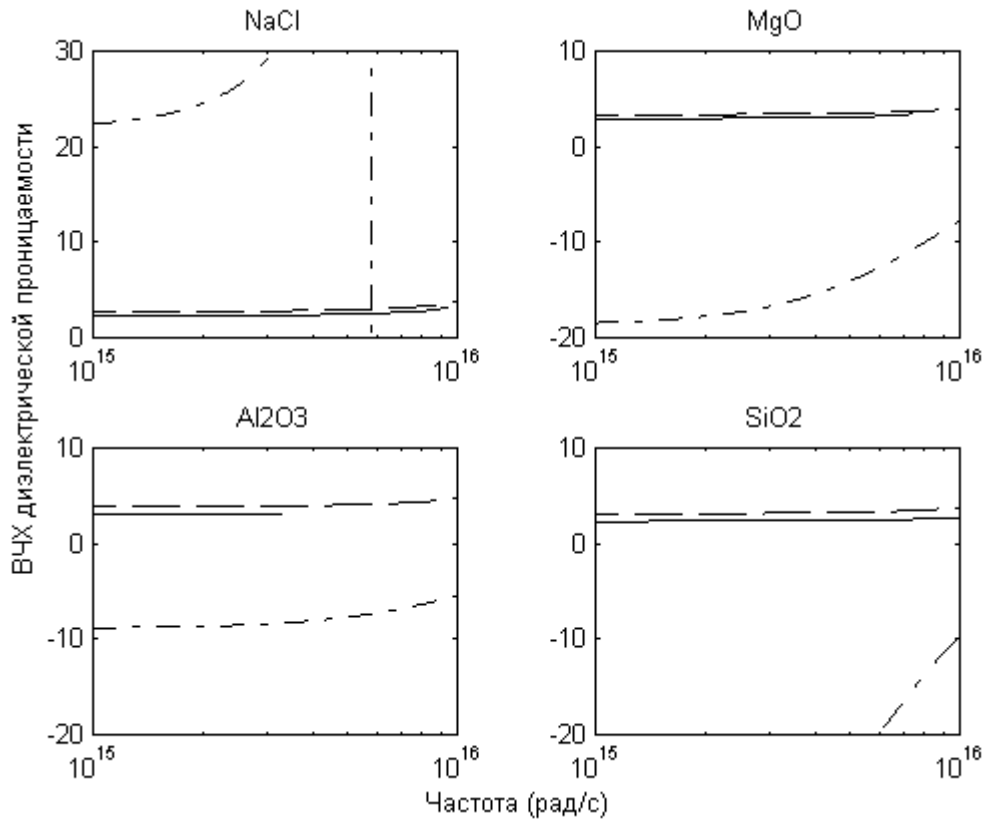


Рис. 2. Общий вид характеристик ϵ'

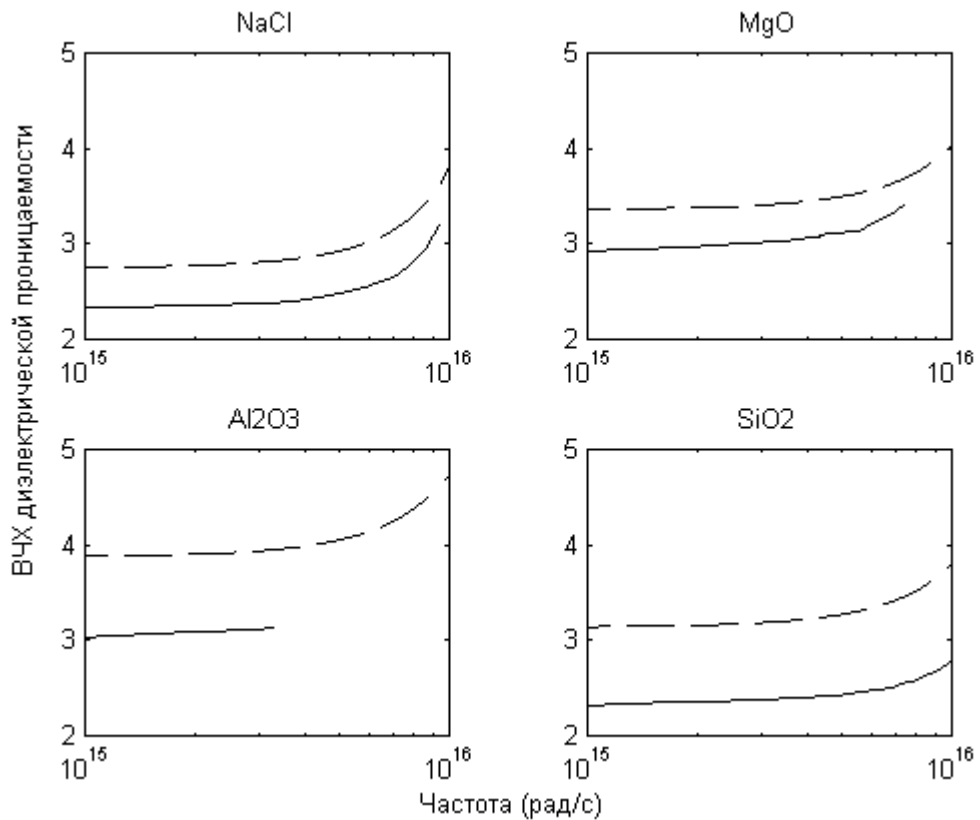


Рис. 3. Детализация графиков экспериментальной характеристики и кривой, полученной по кибернетической модели

6. Заключение

Представленные результаты показывают существенное преимущество кибернетической модели по сравнению с моделью Клаузиуса-Мосотти. Действительно, по крайней мере в области электронной упругой поляризации диэлектриков модель, построенная с использованием кибернетического принципа - обратных связей, дает практически минимальный уровень отклонений между результатами теоретических расчетов и экспериментальными данными.

Список литературы

- [1] Фрадков А.Л. Исследование физических систем при помощи обратных связей // Автоматика и телемеханика. 1999. © 3. С. 213-229.
- [2] Сканави Г.И. Физика диэлектриков (область слабых полей). М.-Л.: ГИТТЛ, 1952.
- [3] Деккер А. Физика электротехнических материалов. М.-Л.: Госэнергоиздат, 1962.
- [4] Костюков Н.С., Щербакова Е.В., Арташ С.М. Некоторые аспекты влияния нейтронного облучения на оптические и диэлектрические свойства керамических материалов в видимой, УФ- и ИК-области. Препринт. Благовещенск: Изд-во ДВО РАН, 1997.
- [5] Костюков Н.С., Иванова О.С., Банышева В.В. Упругая дипольная поляризация // Вестник АНЦ. 1999. Сер. 2. Вып. 2. С. 83-89.
- [6] Костюков Н.С., Лукичев А.А. Диэлектрические свойства керамики на основе α -Al₂O₃ в области релаксационной поляризации // Электричество. 1999. © 5. С. 44-47.
- [7] Мотт Н., Герни Р. Электронные процессы в ионных кристаллах. М.: Изд-во иностранной литературы, 1950.
- [8] Хиппель А.Р. Диэлектрики и волны. М.: Изд-во иностранной литературы, 1960.
- [9] Иванов В.А., Чемоданов Б.К., Медведев В.С. Математические основы теории автоматического регулирования. М.: Высшая школа, 1971.

- [10] Костюков Н.С., Еремин Е.Л., Еремин И.Е. Моделирование частотных характеристик процесса упругой электронной поляризации диэлектриков в оптическом спектре // Вестник АмГУ. 2000. © 8. С. 6-8.
- [11] Костюков Н.С., Еремин И.Е. Математические модели процесса общей поляризации диэлектрика // Вестник АмГУ. 2001. © 11. С. 47-48.
- [12] Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. Учебник для вузов. Н.Новгород: Изд-во Нижегородского гос. ун-та, 1993.
- [13] Золотарев В.М., Морозов В.Н., Смирнова Е.В. Оптические постоянные природных и технических сред. Л.: Химия, 1984.
- [14] Эткинс П. Кванты: Справочник концепций. М.: Мир, 1977.