Д. ф.-м. н. В. В. НОВИКОВ, О. А. КОМКОВА, О. В. ЖАРОВА

Украина, Одесский национальный политехнический университет
E-mail: genri@ukr.net

Дата поступления в редакцию
14.02 2005 г.

Оппонент *к. ф.-м. н. В. А. БАЛИЦКАЯ*
(НПП "Карат", г. Львов)

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ ГАВРИЛЯКИ–НЕГАМИ

Впервые построена математическая модель, позволяющая прогнозировать аномальные динамические диэлектрические свойства в неупорядоченных материалах (сегнетоэлектриках, полимерах, композитах и т. п.).

Аномалии динамических диэлектрических свойств являются характерной особенностью разупорядоченных сегнетоэлектриков, полимеров, композитов и других материалов, которые используются в радиоэлектронике. В частности, сильная дисперсия динамической магнитной или диэлектрической восприимчивости наблюдалась во многих спиновых или дипольных стеклах (см., например, [1]). Дисперсия обычно связывается с существованием в разупорядоченных системах широкого спектра времени релаксации, который может быть извлечен из наблюдаемой частотной зависимости восприимчивости [2], например диэлектрического отклика сегнетоэлектрических релаксоров типа $PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3$, $PbSc_{1/2}Nb_{1/2}O_3$, $Pb_{1-x}La_xZr_{0,35}Ti_{0,65}O_3$ (x=0,7...0,9) [3—6].

Было показано [1—7], что для описания отличного от дебаевского отклика необходимы различные сложные эмпирические формулы, такие как Кола-Кола, Девидсона–Кола, Гавриляки–Негами и другие.

Эмпирические законы Кола-Кола, Девидсона–Кола, Гавриляки–Негами многие годы применялись для описания релаксационных процессов в обычных стеклах, полимерах, композитах, разупорядоченных сегнетоэлектриках и др. Данные, полученные различными методами, включая диэлектрическую спектроскопию, ядерный магнитный резонанс, квазиупругое рассеяние нейронов и т. д., успешно описывались («сшивались») с помощью соответствующих формул. Очевидно, однако, что использование функций распределения, извлеченных из наблюдаемого диэлектрического отклика (эксперимента), не позволяет выяснить физическую природу аномалий отклика разупорядоченных систем.

До настоящего времени практически не было расчетов функции распределения времен релаксации в рамках какой-либо физической модели, т. е. не существовало моделей, позволяющих описать диэлектрический отклик, который представляется более сложным, чем простой закон Дебая.

В настоящей работе анализируется математическая модель, которая позволяет описать аномальные динамические диэлектрические свойства и определить функцию распределения времен релаксации, совпадающую с эмпирическим законом Гавриляки–Негами.

Эта статья является продолжением статьи [8], в которой для описания аномальной релаксации Коул-Коула использовался математический язык дробной производной. Аналогично [8], рассмотрим обобщенный оператор дробного дифференцирования

$$\left(\tau^{-\alpha}+D^{\alpha}\right)^{\nu}=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\tau^{-\alpha}\right)^{n}\binom{\nu}{n}D^{\alpha(\nu-n)}, \qquad (1)$$

где $\binom{v}{n}=\frac{v!}{n!(v-n)!}$ — биномиальный коэффициент и D^{α} — оператор дробного дифференцирования:

$$D_{0+}^{\alpha}[f(t)]=C\frac{d}{dx}\int_{0+}^{x}\frac{f(t)}{(x-t)^{\alpha}}dt\,. \qquad (2)$$

В этом случае уравнение, которое описывает релаксационный процесс в диэлектриках, можно записать в виде [8]

$$\left(\tau^{-\alpha}+D^{\alpha}\right)^{\nu}[P(t)]=\frac{\chi_0 E_0}{\tau^{\alpha\nu}}. \qquad (3)$$

Начальное условие уравнения (3) имеет вид: $P(0)=0$.

Согласно (3), Лаплас-образ функции $P(t)$ можно определить в виде

$$\overline{P}(p)=\frac{\chi_0 E}{p}\frac{1}{\left(1+(\tau p)^{\alpha}\right)^{\nu}},\ \overline{P}(p)=\int_{0}^{\infty}e^{-pt}P(t)dt. \qquad (4)$$

Заменой $p\rightarrow i\omega$ с учетом (4) можно определить комплексную восприимчивость Гавриляки–Негами в виде

$$\chi(i\omega)=\frac{\chi_0}{\left(1+(i\varpi\tau)^{\alpha}\right)^{\gamma}}\,. \qquad (5)$$

Зависимость (5) совпадает с экспериментальным законом Гавриляки–Негами [7]. Отсюда следует, что комплексная диэлектрическая проницаемость

$$\varepsilon^*(i\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{\left[1 + (i\omega\tau)^\alpha\right]^\gamma}, \qquad (6)$$

где

$$\varepsilon'(\text{щ}) = \mathrm{Re}\left[\varepsilon^*(i\omega)\right] =$$

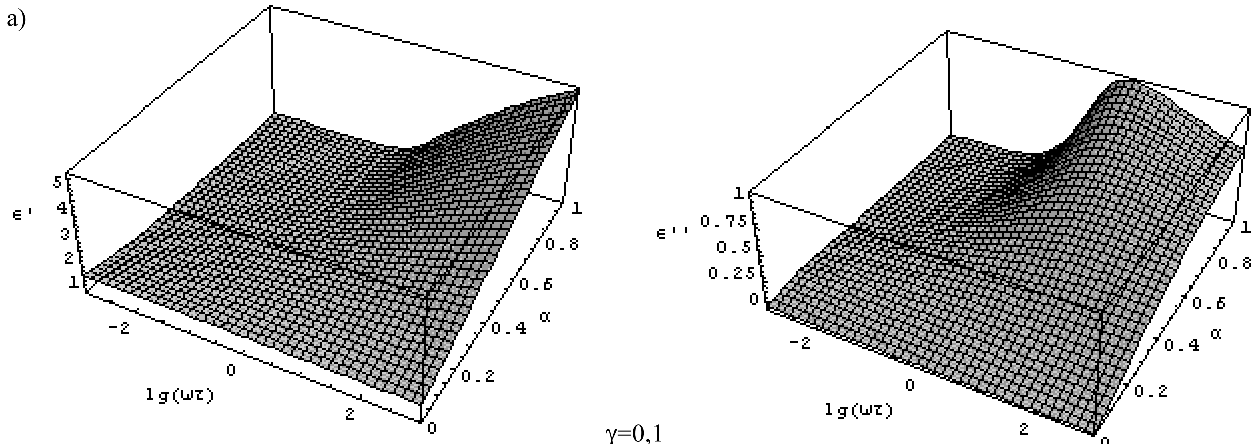
$$= \varepsilon_\infty + (\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty)\frac{\cos\left[\gamma \operatorname{arctg}\left(-\dfrac{\sin\dfrac{\alpha\pi}{2}(\omega\tau)^\alpha}{1 + \cos\dfrac{\alpha\pi}{2}(\omega\tau)^\alpha}\right)\right]}{\left(1 + (\omega\tau)^{2\alpha} + 2(\omega\tau)^\alpha \cos\dfrac{\alpha\pi}{2}\right)^{\frac{\gamma}{2}}}; \qquad (7)$$

$$\varepsilon''(\text{щ}) = \mathrm{Im}\left[\varepsilon^*(i\omega)\right] =$$

$$= (\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty)\frac{\sin\left[\gamma \operatorname{arctg}\left(-\dfrac{\sin\dfrac{\alpha\pi}{2}(\omega\tau)^\alpha}{1 + \cos\dfrac{\alpha\pi}{2}(\omega\tau)^\alpha}\right)\right]}{\left(1 + (\omega\tau)^{2\alpha} + 2(\omega\tau)^\alpha \cos\dfrac{\alpha\pi}{2}\right)^{\frac{\gamma}{2}}}. \qquad (8)$$

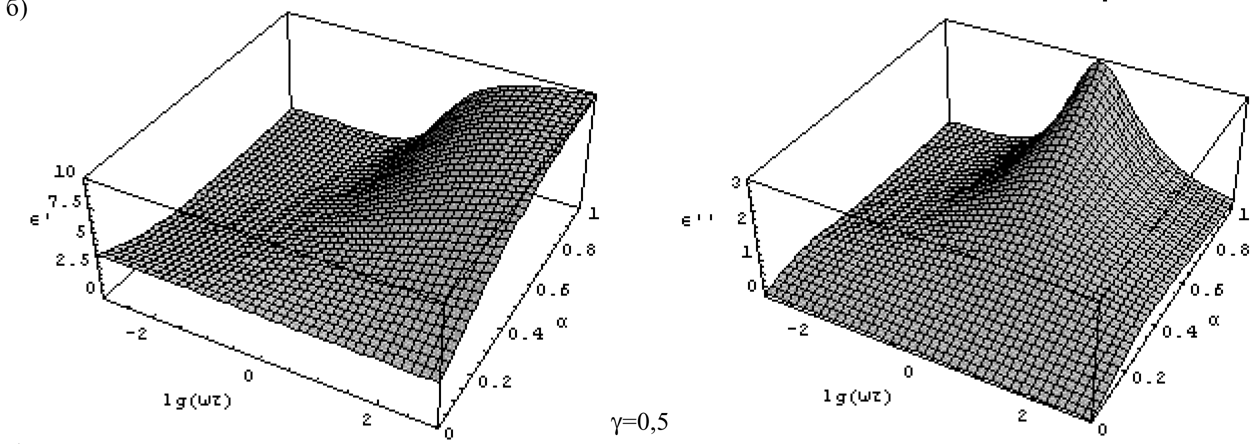
Расчеты, результаты которых показаны на **рисунке**, проводились при $\eta = \varepsilon_\infty/\varepsilon_0 = 10$.

а)



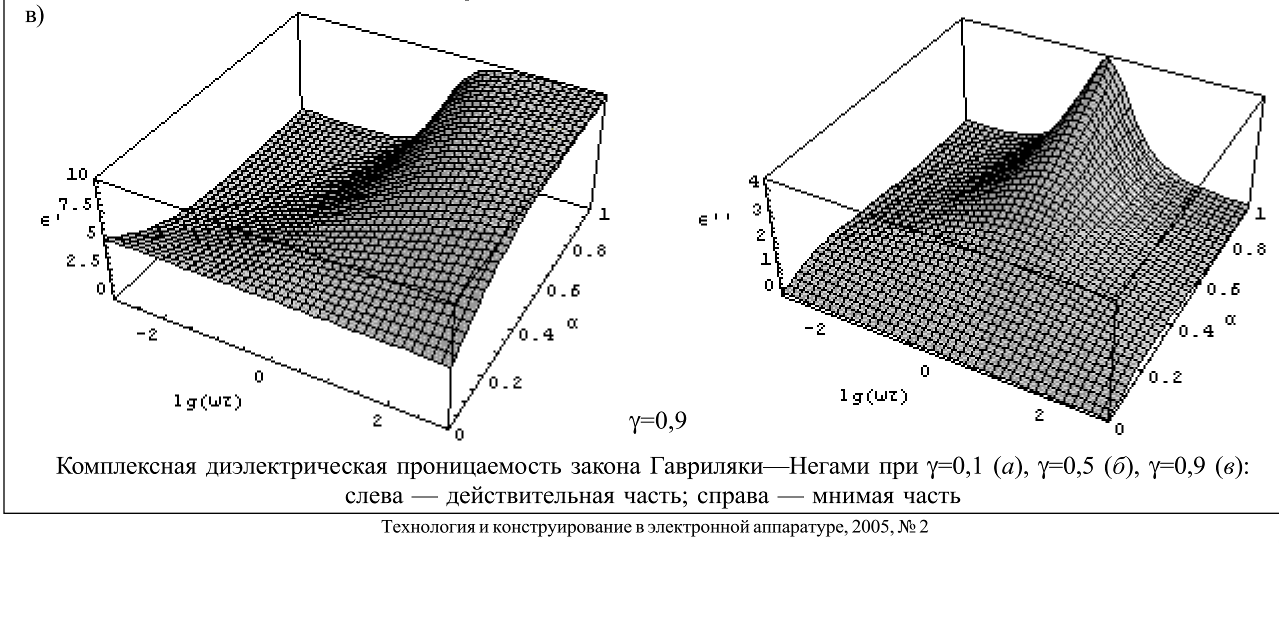
γ=0,1

б)



γ=0,5

в)



γ=0,9

Комплексная диэлектрическая проницаемость закона Гавриляки—Негами при γ=0,1 (*а*), γ=0,5 (*б*), γ=0,9 (*в*): слева — действительная часть; справа — мнимая часть

Осуществляя переход от изображения (4) к оригиналу, получим решение уравнения (3), которое описывает релаксацию диэлектрика, совпадающую с экспериментальным законом Гавриляки–Негами:

$$P(t) = -\frac{1}{\Gamma(\gamma)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \Gamma(k+\gamma)}{\Gamma(\alpha k + \alpha\gamma)\Gamma(k+1)} \left(\frac{t}{\tau}\right)^{\alpha(k+\gamma)},$$

$$0<\alpha<1, 0<\gamma<1. \qquad (9)$$

То есть для релаксации Гавриляки–Негами зависимость поляризации диэлектрика $P(t)$ от времени имеет вид (9).

При $\gamma=1$ зависимость (9) переходит в закон релаксации Коул-Коула, а при $\alpha=1$ — в закон Коул–Девидсона. Исходя из этого можно сделать вывод, что оператор (1) есть обобщающий оператор дробного дифференцирования.

***

Таким образом, впервые построена математическая модель (дифференциальное уравнение с дробными производными), которая описывает релаксацию Гавриляки– Негами в диэлектриках.

Полученное решение дифференциального уравнения с дробными производными позволяет прогнозировать аномальные динамические диэлектрические свойства в неупорядоченных материалах (сегнетоэлектриках, полимерах, композитах и т. п.).

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Коренблит И. Я., Шендер Е. Ф. Спиновые стекла и неэргодичность // УФН.— 1989.— Т. 157, № 2.— С. 267—274.

2. Colla E. V., Koroleva E. Yu., Okuneva N. M., Vakhrushev S. B. Low-frequency dielectric response of $PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3$ // J. Phys.: Cond. Matter.— 1992.— Vol. 4.— P. 3671.—3679.

3. Glinchuk M. D., Stephanovich V. A., Hilczer B. et al. Peculiarities of dielectric response of 1:1 family relaxors // Ibid.— 1999.— Vol. 11.— P. 6263—6271.

4. Glinchuk M. D., Stephanovich V. A. Theory of the nonlinear susceptibility of relaxor ferroelectrics // Ibid.— 1998.— Vol. 10.— P. 11081—11084.

5. Glinchuk M. D., Stephanovich V. A. Random fields and their influence on the phase transitions in disordered ferroelectrics // Ibid.— 1994.— Vol. 6.— P. 6317—6319.

6. Glinchuk M. D., Farhi R., Stephanovich V. A. Theory of phase transitions in disordered ferroelectrics allowing for nonlinear and spatial correlation effects // Ibid.— 1997.— Vol. 9.— P. 10237—10243.

7. Jonsher A. K. Dielectric relaxation in solids.— London: Chelsea Dielectric, 1983.

8. Новиков В. В., Комкова О. А. Диэлектрическая релаксация Коул-Коула // Технология и конструирование в электронной аппаратуре.— 2004.— № 5.— С. 61—64.

ВЫСТАВКИ. КОНФЕРЕНЦИИ