

Если к диэлектрику внешнее поле не приложено, то в различных анионных вакансиях эти переходы происходят хаотически и поляризация не возникает. Приложение электрического поля приводит к тому, что перескоки становятся в значительной степени согласованными. При этом появляется преимущественная направленность перескоков и, таким образом, появляется результирующий дипольный момент. Время релаксации электронной тепловой поляризации достаточно велико — 10^{-7} — 10^{-2} с.

Тепловая электронная поляризация играет важную роль во многих диэлектриках, в частности в щелочно-галогидных кристаллах. В последних такая поляризация обусловлена возбуждением F -центров.

Вклад рассматриваемого вида поляризации в величину ϵ может быть весьма значительным даже при не слишком высокой концентрации дефектов. Это обусловлено высокой поляризуемостью «слабосвязанных» с дефектами электронов.

Если для расчета электронной тепловой поляризации пользоваться классическими представлениями, то результаты будут примерно такими же, как в случае ионной тепловой поляризации. Ясно, однако, что при описании движения электронов в кристаллах пренебрегать квантовыми эффектами нельзя. Необходимо учитывать, что эффективная масса электронов в кристалле сильно отличается от массы свободного электрона, что электроны в твердом теле подчиняются статистике Ферми—Дирака и т. д. Точные расчеты поляризуемости в этом случае достаточно сложны.

9.8. ДИПОЛЬНАЯ ТЕПЛОВАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ

Если в диэлектрике имеются полярные молекулы и связь между ними невелика, то под действием поля они могут относительно легко поворачиваться. Ориентации диполей в поле препятствует тепловое движение. В результате возникает дипольная поляризация, зависящая от теплового движения.

Вычислить дипольную тепловую поляризуемость можно, пользуясь аналогией между этим механизмом поляризации и ионной тепловой поляризацией. Разница лишь в том, что ион переходит из одного равновесного положения в другое за счет поступательного движения, а полярная молекула — за счет вращательного. Такой расчет приводит к обратно пропорциональной зависимости поляризуемости от температуры

$$\alpha_{dT} = \frac{P_0^2}{3 k_B T}, \quad (9.50)$$

где P_0 — дипольный момент молекулы. Выражение (9.50), так же как и соответствующее выражение (9.49) для тепловой ион-

ной поляризации, получено в предположении, что работа поля много меньше энергии теплового движения ($\Delta U \ll \kappa_B T$).

При больших напряженностях поля тепловое движение почти не препятствует ориентации диполей по полю. Таким образом, подавляющее большинство молекул поворачивается в направлении поля и средний дипольный момент становится не зависящим от поля. Наступает насыщение. Весьма приближенное вычисление $\alpha_{дт}$, основанное на аналогии с тепловой ионной поляризацией, не позволяет решить задачу о насыщении.

Более строгий расчет дипольной тепловой поляризации был предложен Дебаем. Следуя Дебаю, рассмотрим диэлектрик, содержащий N диполей P_0 . Пусть диполь направлен под углом θ к полю (рис. 9.8). Таким образом, составляющая дипольного момента полярной молекулы в направлении поля будет $P_0 \cos \theta$. Потенциальная энергия диполя в электрическом поле

$$U = -P_0 E \cos \theta.$$

Минимальное значение U достигается при $\theta=0$. Именно поэтому все диполи стремятся ориентироваться в направлении поля. Однако тепловое движение разориентирует молекулы. Результирующий дипольный момент диэлектрика определяется статистическим равновесием между ориентирующим действием поля и разориентирующим действием теплового движения.

Индукцированный полем дипольный момент

$$P = N \langle P \rangle = \alpha_{дт} E, \quad (9.51)$$

где $\langle P \rangle$ — средний момент молекулы, возникающий в поле E . Задача сводится, таким образом, к отысканию среднего дипольного момента молекулы в направлении поля. Если диполи связаны между собой слабо, то они могут ориентироваться в поле произвольным образом, т. е. угол θ может принимать любые значения.

Вероятность того, что дипольный момент направлен по отношению к полю под углом, заключенным между θ и $\theta + d\theta$, т. е. заключен внутри телесного угла $d\Omega$ (рис. 9.8), определяется фактором Больцмана:

$$\omega = A_1 \exp\left(-\frac{U}{\kappa_B T}\right) d\Omega = A_1 \exp\left(\frac{P_0 E \cos \theta}{\kappa_B T}\right) d\Omega.$$

Здесь A_1 — некоторая константа. Из рис. 9.8 найдем $d\Omega$. Видно, что объемный угол $d\Omega$ опирается на кольцо, вырезанное

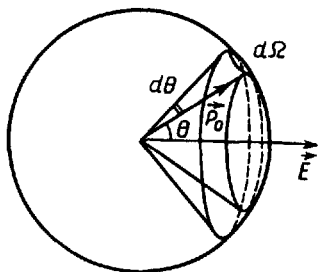


Рис. 9.8. Ориентация диполя в электрическом поле

на сфере радиуса r двумя коническими поверхностями. Площадь этого кольца равна длине его окружности $2\pi r \sin \theta$, умноженной на ширину кольца $r \cdot d\theta$, т. е. $dS = 2\pi r^2 \sin \theta d\theta$. При $r=1$ имеем $dS = d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$. Поэтому

$$\omega = A \exp\left(\frac{P_0 E \cos \theta}{\kappa_B T}\right) \sin \theta d\theta, \quad (9.52)$$

где новая константа $A = 2\pi A_1$.

Воспользовавшись определением статистического среднего, запишем:

$$\langle P \rangle = \langle P_0 \cos \theta \rangle = P_0 \frac{\int_0^\pi \cos \theta e^{\frac{P_0 E \cos \theta}{\kappa_B T}} \sin \theta d\theta}{\int_0^\pi e^{\frac{P_0 E \cos \theta}{\kappa_B T}} \sin \theta d\theta}. \quad (9.53)$$

Обозначим $\frac{P_0 E}{\kappa_B T} = a$, $\cos \theta = x$. С учетом этого (9.53) преобразуется к виду

$$\langle P \rangle = P_0 \frac{\int_{-1}^{+1} e^{ax} x dx}{\int_{-1}^{+1} e^{ax} dx}. \quad (9.54)$$

После вычисления интегралов получим

$$\langle P \rangle = P_0 \left(\frac{e^a + e^{-a}}{e^a - e^{-a}} - \frac{1}{a} \right) = P_0 \left(\operatorname{cth} a - \frac{1}{a} \right). \quad (9.55)$$

Функция $\left(\operatorname{cth} a - \frac{1}{a} \right) = L(a)$ называется функцией Ланжевена. Впервые эта функция была введена в теории парамагнитной восприимчивости. При малых значениях a (т. е. в области не очень низких температур и не слишком высоких полей) $L(a)$ может быть разложена в быстро сходящийся ряд

$$L(a) = \frac{a}{3} - \frac{a^3}{45} + \dots$$

В результате получаем

$$\langle P \rangle \approx \frac{P_0 a}{3} \left(1 - \frac{a^2}{15} + \dots \right)$$

или

$$\langle P \rangle = \frac{P_0^2 E}{3 \kappa_B T} \left(1 - \frac{P_0^2 E^2}{15 \kappa_B T} + \dots \right). \quad (9.56)$$

При $\frac{P_0 E}{\kappa_B T} \ll 1$ член $\frac{P_0^2 E^2}{15 \kappa_B T}$ и все последующие члены ряда можно вследствие малости не учитывать. Тогда

$$\langle P \rangle = \frac{P_0^2 E}{3 \kappa_B T}, \quad (9.57)$$

т. е. при малых полях средний дипольный момент в направлении поля прямо пропорционален полю. Поляризуемость полярных молекул равна, таким образом,

$$\alpha_{dT} = \frac{P_0^2}{3 \kappa_B T}. \quad (9.58)$$

Точно такое же выражение получается и при более грубом расчете (см. 9.50).

В то же время из (9.56) следует, что в сильных полях, когда потенциальная энергия диполя в электрическом поле сравнима с тепловой энергией ($\frac{P_0 E}{\kappa_B T} \sim 1$), средний дипольный момент в направлении поля уже не пропорционален полю. При увеличении поля $\langle P \rangle$ растет, стремясь постепенно к насыщению.

Заканчивая рассмотрение различных видов поляризаций, отметим, что поляризация реальных диэлектриков имеет обычно сложный характер. Она является совокупностью отдельных простейших видов поляризации. В общем случае результирующий дипольный момент единицы объема диэлектрика равен

$$\vec{P} = \left(\sum_m n_m \alpha_m \right) \vec{E}, \quad (9.59)$$

где α_m — поляризуемость m -го вида поляризации, n_m — концентрация частиц, участвующих в m -м виде поляризации. Если в диэлектрике имеются все рассмотренные выше механизмы поляризации, то $m=1, 2, \dots, 6$.

9.9. СВЯЗЬ МЕЖДУ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТЬЮ И ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬЮ

Из § 9.1 следует, что важнейший макроскопический параметр диэлектрика — диэлектрическая проницаемость ϵ — связана с вектором поляризации \vec{P} и полем \vec{E} соотношением

$$\vec{P} = \epsilon_0 (\epsilon - 1) \vec{E}. \quad (9.60)$$