

Поляризуемость уменьшается с увеличением температуры, т. к. тепловое движение препятствует упорядоченному распределению ионов.

В заключение отметим, что найденная нами эквивалентная тепловая поляризуемость α_{iT} каждого иона (9.49) существенно отличается от ионной поляризуемости при упругом смещении α_i . Величина α_i была определена (см. § 9.3) как коэффициент пропорциональности между дипольным моментом и внешним полем и выражалась отношением квадрата заряда иона к коэффициенту упругости связи. В случае тепловой поляризации дипольный момент, возникающий при перемещении каждого иона, постоянен и не зависит от напряженности поля ($P=e\delta$). Поэтому поляризуемость каждого иона обратно пропорциональна полю E :

$$\alpha_{iT} = \frac{P}{E} = \frac{e\delta}{E}.$$

Другими словами, α_{iT} не является коэффициентом, не зависящим от напряженности поля. Дипольный момент единицы объема, возникающий при ионной тепловой поляризации, зависит от E только потому, что от E зависит число избыточно перескакивающих через потенциальный барьер ионов.

9.7. ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕПЛОВАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ

В твердых диэлектриках, имеющих определенного рода дефекты, возможна электронная поляризация, обусловленная тепловым движением. Механизм такой поляризации рассмотрим на примере кристалла TiO_2 (рутил), содержащего анионные вакансии. Двухмерная модель структуры TiO_2 с анионной вакансией изображена на рис. 9.7.

В одном из узлов отсутствует ион кислорода O^{2-} . Компенсация заряда отсутствующего иона осуществляется за счет 3-х ближайших ионов титана (в трехмерном случае таких ионов шесть). Они становятся трехвалентными, т. е. содержат на внешней оболочке по одному слабосвязанному электрону. Предполагается, что под действием тепловых флуктуаций два электрона перескакивают между ближайшими к вакансии ионами титана так, как показано на рисунке. При этом преодолевается некоторый потенциальный барьер.

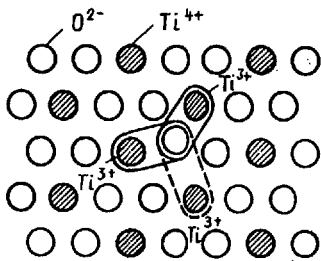


Рис. 9.7. Двухмерная модель структуры рутила, содержащая анионную вакансию

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-