Моделирование систем
2003. № 1(5)

УДК 621.315

© 2003 г. **И.Е. Еремин**, канд. физ.-мат. наук,
**В.В. Еремина**, канд. физ.-мат. наук,
**Н.С. Костюков**, д-р техн. наук**,**
**В.А. Оверчук**
(Амурский государственный университет, Благовещенск)

# ЭЛЕМЕНТЫ ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО СИНТЕЗА ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА УПРУГОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ

Рассматривается методика выбора коэффициентов в уравнениях процессов упругой электронной поляризации диэлектрика, базирующаяся на использовании кибернетической модели оптического показателя преломления и его экспериментальных данных.

## Введение

Сложность химического состава современных конструкционных диэлектриков, разнообразие происходящих в них поляризационных процессов, а также разветвленность используемых математических моделей существенно затрудняют выполнение необходимых вычислений. В этих условиях особую актуальность приобретают вопросы разработки компьютерных программ, позволяющих значительно ускорить моделирование требуемых характеристик с желаемой точностью.

## Кибернетическая модель поляризации диэлектрика

В работах [1 – 3] была рассмотрена математическая модель поляризации диэлектрика, полученная с помощью принципа обратных связей. На ее основании совокупность процессов упругой электронной поляризации в области их установления, протекающих в двухатомном ионном кристалле, можно описать следующей системой уравнений:

$$\frac{d^2\mu_k(t)}{dt^2}+2\beta_k\frac{d\mu_k(t)}{dt}+\omega_{0k}^2\mu_k(t)=\frac{2e^2}{m_e}\left(E_0(t)-\frac{2}{3\varepsilon_0}\sum_{i=1}^{K+L}\mu_i(t)N_i\right),$$

$$\frac{d^2\mu_l(t)}{dt^2}+2\beta_l\frac{d\mu_l(t)}{dt}+\omega_{0l}^2\mu_l(t)=\frac{2e^2}{m_e}\left(E_0(t)-\frac{2}{3\varepsilon_0}\sum_{i=1}^{K+L}\mu_i(t)N_i\right), \qquad (1)$$

$$k=\overline{1,K},\ l=\overline{1,L},$$

где $\mu_k(t)$, $\mu_l(t)$ – индуцированные дипольные моменты электронов; $K$ и $L$ – число электронных пар, соответственно положительных и отрицательных ионов; $\beta_k$, $\beta_l$, $\omega_{0k}$, $\omega_{0l}$ – их коэффициенты затухания и частоты собственных колебаний; $e$ и $m_e$ – заряд и масса электрона; $E_0(t)$ – функция напряженности внешнего электрического поля; $\varepsilon_0$ – электрическая постоянная; $N_i$ – концентрации ионов.

Непосредственно из уравнений (1) для рассматриваемой системы взаимодействующих заряженных частиц можно получить частотную передаточную функцию по рассогласованию напряженностей внешнего и внутреннего полей, знаменатель которой будет эквивалентен функции комплексной диэлектрической проницаемости материала $\varepsilon(j\omega)$:

$$\varepsilon(j\omega) = 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^{K+L} \alpha_i(j\omega) N_i , \qquad (2)$$

где $\alpha_i(j\omega)$ – частотные передаточные функции, соответствующие комплексным поляризуемостям электронных пар вида:

$$\begin{aligned} \alpha_k(j\omega) &= \frac{2e^2/m_e}{\omega_{0k}^2 - \omega^2 + j2\beta_k\omega}, \ k = \overline{1,K}; \\ \alpha_l(j\omega) &= \frac{2e^2/m_e}{\omega_{0l}^2 - \omega^2 + j2\beta_l\omega}, \ l = \overline{1,L}. \end{aligned} \qquad (3)$$

Значения параметров поляризационных процессов – коэффициентов затухания и частот собственных колебаний – могут быть определены аналитически с помощью следующих формул:

$$\begin{aligned} \omega_{0k}^2 &= \frac{Z_{эф\ k} e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_e r_k^3}, \ \beta_k = \frac{e^2\omega_{0k}^2\mu_0}{6\pi m_e c}, \ k = \overline{1,K}, \\ \omega_{0l}^2 &= \frac{Z_{эф\ l} e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_e r_l^3}, \ \beta_l = \frac{e^2\omega_{0l}^2\mu_0}{6\pi m_e c}, \ l = \overline{1,L}, \end{aligned} \qquad (4)$$

где $Z_{эф\ k}$ и $Z_{эф\ l}$ – эффективные заряды атомных остатков, действующие на электроны; $r_k$ и $r_l$ – радиусы электронных орбит; $\mu_0$ – магнитная постоянная; $c$ – скорость света в вакууме.

Проведенные вычислительные эксперименты, направленные на имитационное моделирование поляризационных характеристик ряда химических соединений, показали наибольшую эффективность применения кибернетической модели (2) по сравнению с результатами использования других уравнений диэлектрической проницаемости.

Однако методика расчета параметров процессов упругой электронной поляризации, выполняемого в рамках использования традиционных подходов, оказалась недостаточно результативной с точки зрения величины отклонения аналитических спектров от их физических аналогов.

## Параметрический синтез на основе квантовой теории

При расчете параметров процессов упругой электронной поляризации (4), кроме фундаментальных физических констант, необходимо знание величин радиусов электронных орбит и эффективных зарядов.

Вычисление радиусов может основываться на модели строения атома по Бору, согласно которой:

$$r = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e Z e^2}, \tag{5}$$

где $n$ – главное квантовое число электронной оболочки; $\hbar$ – постоянная Планка; $Z$ – порядковый номер атома, эквивалентный заряду его ядра. Необходимо отметить, что данное уравнение обычно используется применительно к водородоподобным атомам или ионам. Для нахождения радиусов электронных орбит в общем случае предлагается модифицировать формулу (5) с учетом экранизации атомного остатка внутренними электронными оболочками, т.е. вместо полного заряда ядра $Z$ употреблять величину эффективного заряда $Z_{эф}$.

Ионизация атомов приводит к изменениям электронной конфигурации их оптических оболочек, вызванным переходом внешних электронов на более выгодные энергетические уровни. При этом у положительного иона такие уровни расположены как можно ближе к атомному ядру, вследствие чего исходные состояния его электронов, т.е. их квантовые числа, не изменяются. Данная ситуация распространяется и на электроны внутренних оболочек отрицательных ионов. Таким образом:

$$\begin{aligned} r_k &= \frac{n_k^2 \hbar^2}{m_e Z_{эф\ k} e^2},\ k = \overline{1, K}, \\ r_l &= \frac{n_l^2 \hbar^2}{m_e Z_{эф\ l} e^2},\ l = \overline{1, M}, \end{aligned} \tag{6}$$

где $M$ – число электронных пар отрицательного иона, не изменивших своего месторасположения.

Кроме того, рассматривая конфигурацию отрицательных ионов, следует принимать во внимание положение их внешних орбиталей. Например, для атомов химических элементов, расположенных во втором и третьем периодах таблицы Менделеева, заполняемые орбитали являются ближайшими к краю оболочек, стало быть, находящиеся на них электроны должны перейти на новую оболочку, с более высоким квантовым числом:

$$r_l = \frac{(n_l + 1)^2 \hbar^2}{m_e Z_{эф\ l} e^2},\ l = \overline{M+1, L}. \tag{7}$$

Если же между рассматриваемыми оптическими электронами и сле-

дующей электронной оболочкой имеется достаточное количество незанятых орбиталей, то такие электронные пары могут разместиться в пределах исходной оболочки, следовательно, их главное квантовое число останется прежним, поэтому $M=L$.

Определение величин эффективных зарядов может быть выполнено на базе методики, предложенной Слейтором, согласно которой:

– вклад электронов, внешних по отношению к группе $X$ (предполагается, что рассматриваемая орбиталь принадлежит некоторой группе $X$), равен 0;

– вклад электронов из группы $X$ равен 0,30, если это $s^1$-электроны, и 0,35 в остальных случаях;

– если рассматриваемые электроны находятся на $s^n$- или $p^n$-орбиталях группы $X$, то вклад каждого из электронов, расположенных на внутренних орбиталях с главным квантовым числом $n$-1, равен 0,85, а вклады электронов, находящихся на орбиталях с главным квантовым числом $n$-2, $n$-3, … равны 1,00;

– если рассматриваются электроны, расположенные на $d^n$- или $f^n$-орбиталях группы $X$, то вклад каждого из электронов для групп, предшествующих рассматриваемой, равен 1,00.

Известно [4], что в разных химических соединениях один и тот же ион обладает различной величиной заряда, оказывающего влияние на его молекулярных соседей. Учитывая данное обстоятельство, изложенную выше методику предлагается модифицировать применительно к расчету заряда атомного остатка, действующего на электроны заполняемой орбитали отрицательного иона, оставив ее без изменений для электронов, соответствующих невозбужденным состояниям атомов.

Таким образом, для электронов всех оболочек положительного иона, а также внутренних оболочек отрицательного можно использовать уравнения:

$$\begin{aligned} Z_{эф\ k} &= Z^+ - \left( \sum_{i=1}^{K-1} 2D_i + D_K \right),\ k = \overline{1,K}, \\ Z_{эф\ l} &= Z^- - \left( \sum_{i=1}^{M-1} 2D_i + D_M \right),\ l = \overline{1,M}, \end{aligned} \qquad (8)$$

где $Z^+$ и $Z^-$ – соответственно полные заряды ядер положительного и отрицательного ионов; $D_i$ – экранирующие вклады каждого из рассматриваемых электронов, задаваемые согласно методике Слейтора, т.е. $D_1$=0,30 для $K$=1; $D_1$=0,85 для $K$=2, …, 5; $D_1$=1,00 для $K$=6, …, 9 и т.д.

Для электронов, расположенных на внешней орбитали оптической оболочки отрицательного иона, расчетные формулы будут иметь вид:

$$Z_{эф\ l} = Z^- - \left( \sum_{i=1}^{M} 2D_i + \sum_{j=M+1}^{L-1} 2d_j + d_L \right),\ l = \overline{M+1,L}, \qquad (9)$$

где $d_j$ – экранирующие вклады электронов оптической оболочки, которые могут быть определены с помощью следующей модифицированной методики.

### Методика определения экранирующих вкладов

В рамках использования изложенных математических моделей значения эффективных зарядов атомных остатков являются определяющими в расчетах параметров рассматриваемых процессов. Таким образом, величины экранирующих вкладов оптических электронов отрицательного иона можно подобрать, исследуя степень их влияния на поляризационные свойства вещества. Решение этой задачи предлагается проводить на основании оценки адекватности моделируемых и реально измеренных спектров оптического показателя преломления вещества.

Частотная зависимость оптического показателя преломления $n(\omega)$ может быть описана уравнением:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\left|\mathrm{Re}\left[\varepsilon(i\omega)\right]\right| + \sqrt{\left(\mathrm{Re}\left[\varepsilon(i\omega)\right]\right)^2 + \left(\mathrm{Im}\left[\varepsilon(i\omega)\right]\right)^2}}{2}}, \qquad (10)$$

где $\mathrm{Re}[\varepsilon(j\omega)]$ и $\mathrm{Im}[\varepsilon(j\omega)]$ – соответственно вещественная и мнимая части комплексной диэлектрической проницаемости материала, описываемой согласно ее кибернетической модели вида (2).

Анализ возможных величин экранирующих вкладов, например, для ионов из второго и третьего периодов таблицы Менделеева, показал, что их значения должны выбираться из следующих диапазонов:

$$\begin{aligned} &0.35 \le d_s \le 0.85, \\ &0.05 \le d_p \le d_s, \end{aligned} \qquad (11)$$

где $d_s$ – вклады $s$-электронов ($j$=1); $d_p$ – вклады $p$-электронов ($j$=2, 3, 4). Значение шага дискретизации для указанных диапазонов было выбрано равным 0,05.

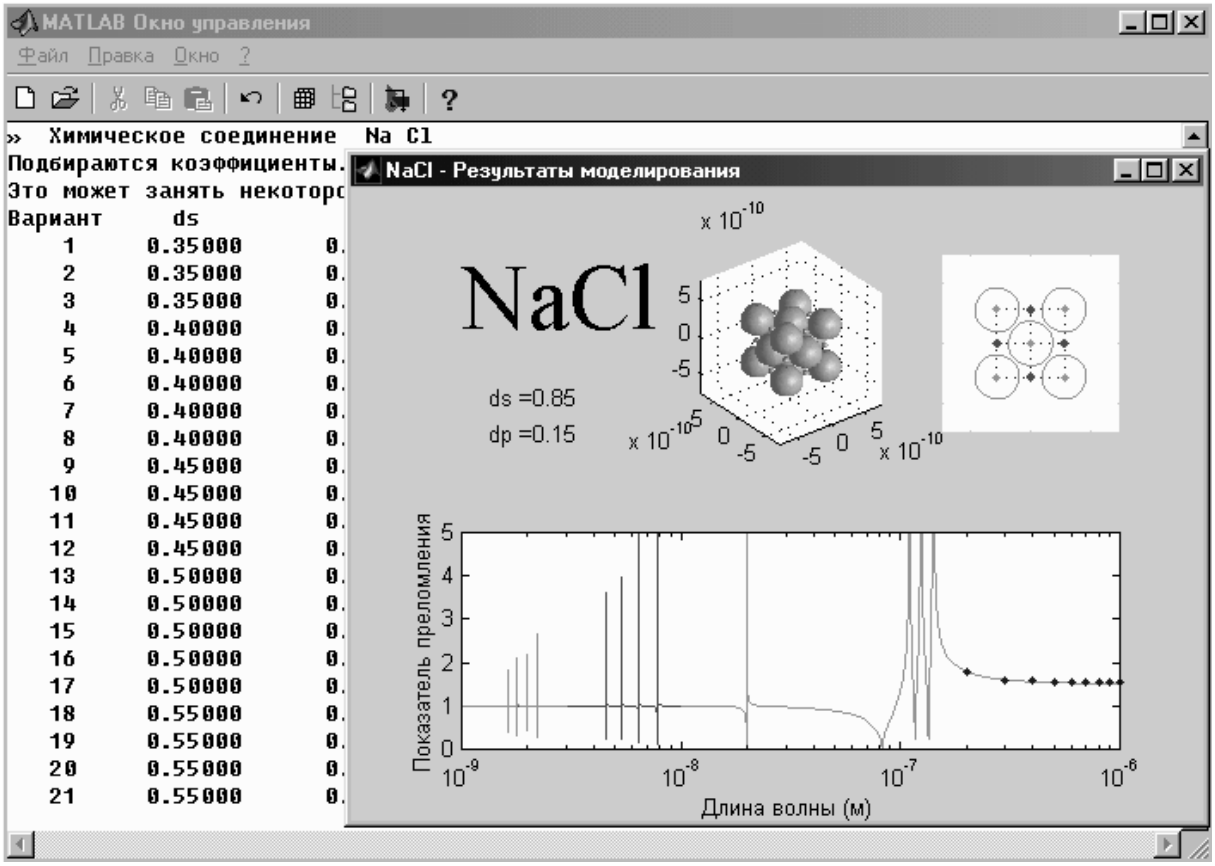
Оптимизация значений экранирующих вкладов электронов при расчетах параметров поляризационных процессов, выполнение моделирования соответствующих характеристик комплексной диэлектрической проницаемости и оптического показателя преломления, а также оценка расхождения моделируемых и экспериментально измеренных спектров являются весьма трудоемкой вычислительной задачей. Таким образом, ее реализация делает особо актуальной разработку специализированных программных продуктов.

### Средства автоматизации расчетов

На базе ядра программной среды *MatLAB* и ряда *m*-функций ее приложения *Control System Toolbox* разработан пакет прикладных программ

*Physics Dielectrics Toolbox* [5], предназначенный для моделирования диэлектрических характеристик материалов. Отметим, что данный программный продукт, как и любое другое подобное приложение, обладает необходимой гибкостью, предусматривающей его дальнейшую модификацию с целью создания универсального набора вычислительных инструментов физики диэлектриков.

Для повышения эффективности моделирования диэлектрических характеристик материалов пакет *Physics Dielectrics Toolbox* был дополнен программным модулем, автоматизирующим оптимизацию значений параметров поляризационных процессов методом сканирования, результаты работы которого отражены на рисунке.




Для его реализации используется следующий итерационный цикл:

1. Экранирующим вкладам оптических электронов рассматриваемого отрицательного иона присваиваются минимальные значения из соответствующего диапазона, например, согласно условиям (11).
2. На основании представленных математических моделей вычисляется длинноволновый спектр оптического показателя преломления в области от 1 *нм* до 1 *мкм*.
3. Определяются абсолютные отклонения результатов моделирования от данных физического эксперимента для соответствующих длин волн, затем рассчитывается их средняя величина, которая сохраняется в памяти ЭВМ.

4. Значения вкладов внешних электронов увеличиваются на 0,05, если укладываются в заданный диапазон. При этом после перебора всех значений вкладов внешних электронов аналогично изменяются вклады электронов, расположенных на предыдущей орбитали, а внешним электронам вновь задаются минимальные значения.
5. Осуществляется переход к пункту 2 до тех пор, пока не будут исчерпаны все варианты сочетаний величин экранирующих вкладов.
6. На основании сохраненных данных определяются величины экранирующих вкладов оптических электронов отрицательного иона, дающие минимальное среднее отклонение моделируемого графика от реального спектра оптического показателя преломления.
7. Формируется графическое окно, демонстрирующее эффективность формирования параметров уравнений упругой электронной поляризации выбранного химического соединения.

## Заключение

Предлагаемые математические модели и разработанные в их рамках программные средства существенно повышают эффективность имитационного моделирования характеристик диэлектрических материалов на основании использования ограниченного числа экспериментальных данных.

Помимо того, рассмотренный подход реализует возможность построения визуальной модели кристаллической решетки, отражающей расчетные радиусы оптических оболочек ионов, которые отличаются от традиционно используемых в физике табличных значений ионных радиусов.

## ЛИТЕРАТУРА


1. *Еремин И.Е., Костюков Н.С.* Построение модели процесса поляризации диэлектриков с помощью обратных связей // Информатика и системы управления. 2001. № 1. С. 45-53.
2. *Еремин И.Е., Костюков Н.С.* Построение кибернетической модели оптического показателя преломления // Информатика и системы управления. 2001. № 2. С. 42-49.
3. *Банышева В.В., Еремин И.Е., Костюков Н.С.* Моделирование длинноволнового спектра оптического показателя преломления воды // Информатика и системы управления. 2002. № 1(3). С. 14-23.
4. *Эткинс П.* Кванты: Справочник концепций. М.: Мир, 1977.
5. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2001611758. Пакет программ имитационного моделирования диэлектрических характеристик (Physics Dielectrics Toolbox) / *Еремин И.Е.*



*Статья представлена к публикации членом редколлегии Е.С. Астаповой.*