



УДК 621.315

© 2007 г. **И.Е. Еремин**, канд. физ.-мат. наук,  
**С.А. Цапина**

(Амурский государственный университет, Благовещенск)

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК УПРУГОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ ФЛЮОРИТА. II**

Рассматривается имитационное моделирование диэлектрических свойств ионного кристалла  $CaF_2$ , имеющих место в области установления процессов его упругой электронной поляризации. Во второй части работы рассмотрен расчет временной зависимости диэлектрической проницаемости исследуемого материала.

### **Введение**

Обычно исследования взаимосвязи поляризационных свойств диэлектрика с параметрами приложенного к нему электрического поля ограничиваются анализом только частотных или аналогичных им зависимостей. При этом временные диэлектрические спектры, как правило, не рассматриваются. Скорее всего, подобное положение вещей исторически обусловлено следующими, вполне объективными обстоятельствами.

Во-первых (с практической стороны), экспериментальные измерения временных характеристик поляризации реальных образцов очень часто оказываются связанными с физически непреодолимыми затруднениями, вызванными, например, чрезвычайно малым временем установления поляризационных процессов упругих разновидностей, составляющим порядка  $10^{-18} \div 10^{-12}$  с. Во-вторых (с теоретической стороны), выполнение аналитических расчетов подобных характеристик опирается на рассмотрение громоздких систем дифференциальных уравнений, формируемых на базе сложной совокупности поляризационных процессов, решение которых может быть найдено только численными методами, что само по себе является весьма трудоемкой задачей.

Рассмотрим возможность, а также оценим эффективность проведения имитационного моделирования временного спектра диэлектрической проницаемости  $\epsilon(t)$  конденсированного материала с помощью ЭВМ, позволяющего, по мнению авторов, принципиально изменить сложившуюся ситуацию.

## Методика моделирования характеристики $e(t)$ на ЭВМ

Совокупность поляризационных процессов, происходящих в конденсированном диэлектрике под действием переменного электрического поля с малой амплитудой, в общем случае может быть представлена описанием вынужденных гармонических колебаний с трением, а именно – системой дифференциальных уравнений вида [1]:

$$\frac{d^2 \overline{m}_{k,l}(t)}{dt^2} + 2\overline{b}_{k,l} \frac{d\overline{m}_{k,l}(t)}{dt} + \overline{w}_{0k,l}^2 \overline{m}_{k,l}(t) = \frac{q_{k,l}^2}{m_{k,l}} E(t),$$

$$k = \overline{1, K}, l = \overline{1, L_k}; \quad (1)$$

$$E(t) = E_0(t) - \frac{2}{3e_0} \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^{L_i} \overline{m}_{i,j}(t) N_{i,j},$$

где  $\overline{m}_{k,l}(t)$  – функции, отражающие динамику изменения наведенных дипольных моментов;  $K$  и  $L_k$  – соответственно общие числа видов поляризуемых частиц и разновидностей происходящих с ними процессов;  $\overline{b}_{k,l}$  и  $\overline{w}_{0k,l}$  – их коэффициенты затухания и частоты собственных колебаний;  $q_{k,l}$  и  $m_{k,l}$  – заряды и массы или аналогичные параметры соответствующих частиц;  $N_i$  – их концентрации в единице объема;  $E(t)$  – напряженность электрического поля, эффективно действующего внутри поляризуемого диэлектрика;  $E_0(t)$  – гармоническая функция напряженности внешнего электрического поля;  $e_0$  – диэлектрическая проницаемость вакуума.

Поскольку выражения вида (1) являются типичной математической моделью некоторой линейной динамической системы управления с обратной связью, то они могут быть эквивалентно представлены во второй стандартной форме записи:

$$\overline{m}_{k,l}(s) = W_{k,l}(s) E(s), \quad k = \overline{1, K}, l = \overline{1, L_k},$$

$$W_{k,l}(s) = \frac{q_{k,l}^2 / m_{k,l}}{s^2 + 2\overline{b}_{k,l}s + \overline{w}_{0k,l}^2}, \quad (2)$$

$$E(s) = E_0(s) - \frac{2}{3e_0} \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^{L_i} \overline{m}_{i,j}(s) N_{i,j},$$

где  $\overline{m}_{k,l}(s)$ ,  $E(s)$  и  $E_0(s)$  – изображения по Лапласу одноименных временных функций;  $W_{k,l}(s)$  – введенные в рассмотрение передаточные функции, полностью аналогичные комплексным поляризуемостям частиц;  $s$  – комплексная переменная. В свою очередь на основании представления разбираемых поляризационных процессов, полученного подобным образом, становится возможным сформировать структурную схему общей картины электрической поляризации конденсированного диэлектрического образца, изображенную на рис. 1.

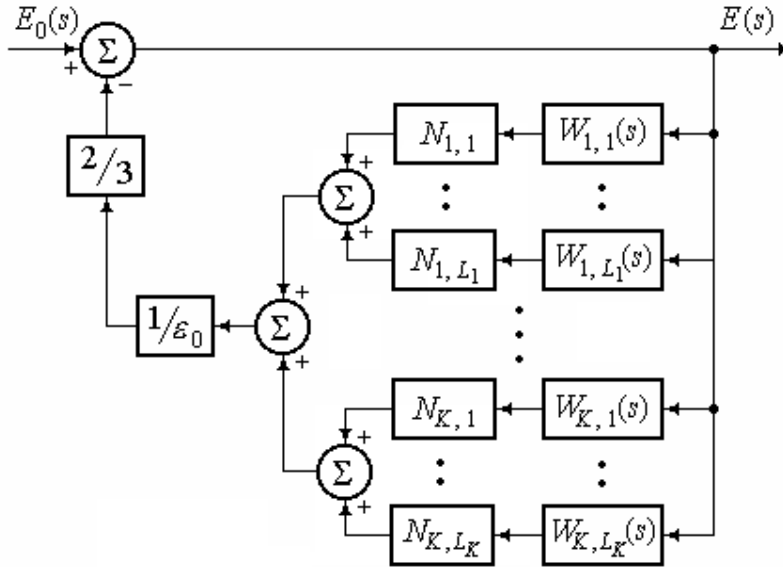


Рис. 1. Структурная схема  
общей поляризации конденсированного образца.

Является очевидным, что математические модели, позволяющие эффективно рассчитывать комплексные характеристики физических систем, потенциально содержат в себе возможность получения их временных зависимостей. Таким образом, отображение функциональных подсистем – процессов поляризации диэлектрика – через их передаточные функции вида (2) или же с помощью общей структурной схемы (рис. 1) может оцениваться в качестве математического обеспечения, необходимого для практического выполнения имитационного моделирования временного спектра диэлектрической проницаемости образца с помощью ЭВМ [2].

На следующем этапе решения разбираемой задачи, т.е. с точки зрения выбора наиболее подходящего программного обеспечения ее автоматизации, целесообразно использовать математический пакет *MatLAB* [3]. Преимущества применения именно этой среды обоснованы ее базовыми возможностями, реализация которых существенно снижает трудозатраты, связанные с разработкой конечных программных кодов. Например, специализированное приложение *MatLAB – Simulink* напрямую предназначено для имитационного моделирования временных характеристик. Кроме того, встроенная библиотека пакета – *Control System Toolbox* содержит универсальные операторы-функции, обеспечивающие построение передаточных функций сложных систем и позволяющие рассчитывать как их частотные спектры, так и временные отклики. Рассмотрим особенности практического создания программных модулей, позволяющих автоматизировать расчеты интересующей нас зависимости  $e(t)$ .

С одной стороны, может быть реализована *Simulink*-схема, принципиально представленная на рис. 2. При этом область, выделенная на ней

светло-серым цветом, должна являться точным программным аналогом структурной модели общей поляризации конкретного образца (рис. 1), созданный с применением программных средств используемого приложения в целях расчета значений напряженности эффективного поля, соответствующих величинам, поступающим на вход системы.

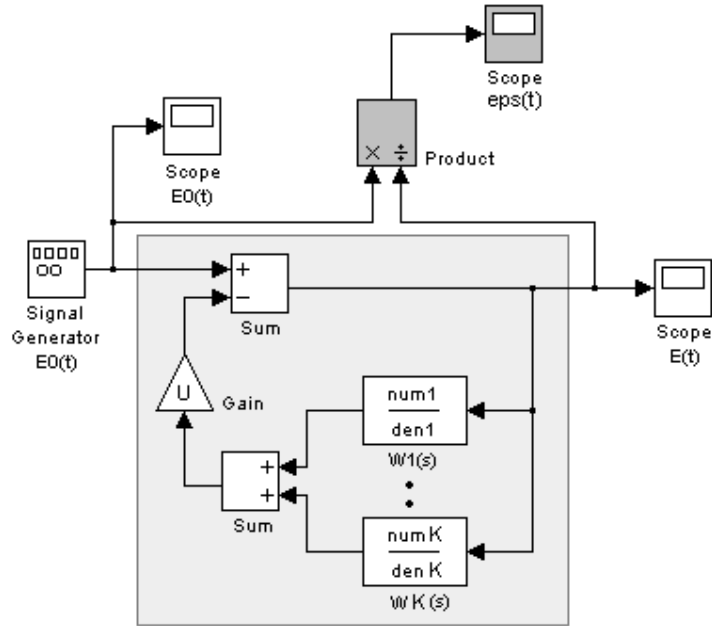


Рис. 2. Принципиальная Simulink-модель.

В свою очередь, указанная часть реализуемой Simulink-схемы может быть дополнена блоками, выделенными на рисунке темно-серым цветом, предназначенными для определения рассогласования между напряжениями внешнего и внутреннего полей в каждый текущий момент времени, а также графического вывода его результатов:  $e(t) = E_0(t) / E(t)$ .

Во-вторых, программное представление общей передаточной функции суммарной поляризации образца, осуществляемое через описание ее числителя *num* и знаменателя *den*, может быть сформировано непосредственно на макроязыке среды *MatLAB* с помощью операторов *parallel* и *feedback*, которые дают возможность объединять параллельно соединенные элементы системы и учитывать влияние выделенной обратной связи:

```
[num, den]=parallel(num1, den1, num2, den2);
...
[num, den]=parallel(num, den, numK, denK);
[num, den]=feedback(1, 1, num*U, den, -1);
```

Далее пользователю остается задать параметры внешнего поля, а также автоматизировать расчет вектора значений напряженности эффективного поля и построение графика исследуемой характеристики  $e(t)$  посредством следующего программной связки:

$E_0 = A e_0 \sin(\omega_0 t);$   
 $E = \text{lsim}(\text{num}, \text{den}, E_0, t);$   
 $\text{plot}(t, E_0./E'),$

Отметим, что из двух предлагаемых вариантов возможной автоматизации решения поставленной задачи, по мнению авторов, наиболее приемлемым является второй. Действительно, явное преимущество текстовой формы представления разобранного алгоритма заключается в ее большей гибкости по сравнению с жестким проектированием модели в виде типовых блоков, объединенных посредством объектно-ориентированных связей.

Рассмотрим результативность имитационного моделирования временного спектра диэлектрической проницаемости кристалла флюорита, имеющего место в области установления процессов исследуемого типа.

### Моделирование временного диэлектрического спектра $CaF_2$

В первой части работы [4] было показано, что упругая электронная поляризация кристалла  $CaF_2$  может быть эффективно описана в виде:

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 m_k(t)}{dt^2} + 2b_k \frac{dm_k(t)}{dt} + w_{0k}^2 m_k(t) &= \frac{2e^2}{m_e} E(t), \quad k = \overline{1,9}, \\
 \frac{d^2 m_l(t)}{dt^2} + 2b_l \frac{dm_l(t)}{dt} + w_{0l}^2 m_l(t) &= \frac{2e^2}{m_e} E(t), \quad l = \overline{10,14}, \\
 E(t) = E_0(t) - \frac{2}{3e_0} \sum_{i=1}^{14} m_i(t) N_i,
 \end{aligned} \tag{3}$$

здесь  $k$  и  $l$  – индексы, отражающие порядковые номера электронных пар каждого из ионов  $Ca^{2+}$  и  $F^-$ ;  $e$  и  $m_e$  – заряд и масса электрона.

На основании данной системы уравнений вытекают следующие выражения частотных зависимостей реальных составляющих  $a'_k(\omega)$  и  $a'_l(\omega)$  комплексных поляризуемостей частиц, а также вещественной частотной характеристики  $e'(\omega)$  комплексной диэлектрической проницаемости исследуемого образца:

$$\begin{aligned}
 a'_k(\omega) = \text{Re}[W_k(s)], \quad W_k(s) &= \frac{2e^2/m_e}{s^2 + 2b_k s + w_{0k}^2}, \quad k = \overline{1,9}, \\
 a'_l(\omega) = \text{Re}[W_l(s)], \quad W_l(s) &= \frac{2e^2/m_e}{s^2 + 2b_l s + w_{0l}^2}, \quad l = \overline{10,14}, \\
 e'(\omega) = 1 + \frac{2}{3e_0} \sum_{i=1}^{14} a'_i(\omega) N_i.
 \end{aligned} \tag{4}$$

Результаты имитационного моделирования частотного диэлектрического спектра  $e'(\omega)$  флюорита, полученные на базе использования соотно-

шений (4), а также применения ранее предложенной методики параметрического синтеза их коэффициентов [4], представлены на рис. 3.

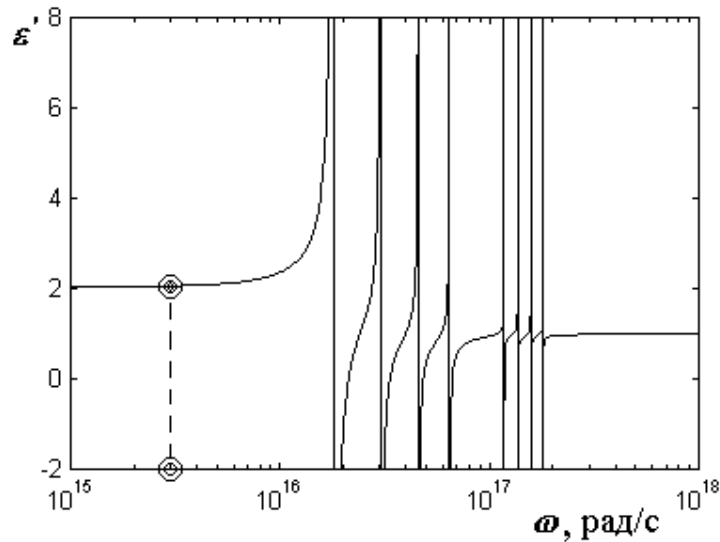


Рис. 3. Имитационный частотный спектр диэлектрической проницаемости кристалла  $CaF_2$ .

Поскольку полученная расчетная характеристика практически адекватна наблюдаемым свойствам исследуемого кристалла используемое описание разбираемых поляризационных процессов представляется вполне результативным. Таким образом, возникает объективная возможность проведения достаточно эффективного моделированного временного спектра диэлектрической проницаемости  $\epsilon(t)$  флюорита, имеющего место при заданных параметрах внешнего электрического поля.

С целью автоматизации выполнения этой задачи в рамках описанной выше алгоритмической методики была разработана прикладная программа, написанная на макроязыке *MatLAB* и предназначенная для решения исходной системы дифференциальных уравнений (3) численными методами с помощью ЭВМ, а также построения графика искомой функции. Отметим, что при создании данного программного кода были использованы комплексные выражения упругих электронных поляризуемостей частиц вида (4).

Итоги имитационного моделирования временной характеристики диэлектрической проницаемости ионного кристалла  $CaF_2$ , проведенного с учетом воздействия на него переменного электрического поля синусоидального типа, обладающего амплитудой  $A_{E0}$  единичной величины, а также круговой частотой  $\omega_{E0}$ , равной  $3 \cdot 10^{15}$  рад/с (маркированной на предыдущем графике), приведены на рис. 4.

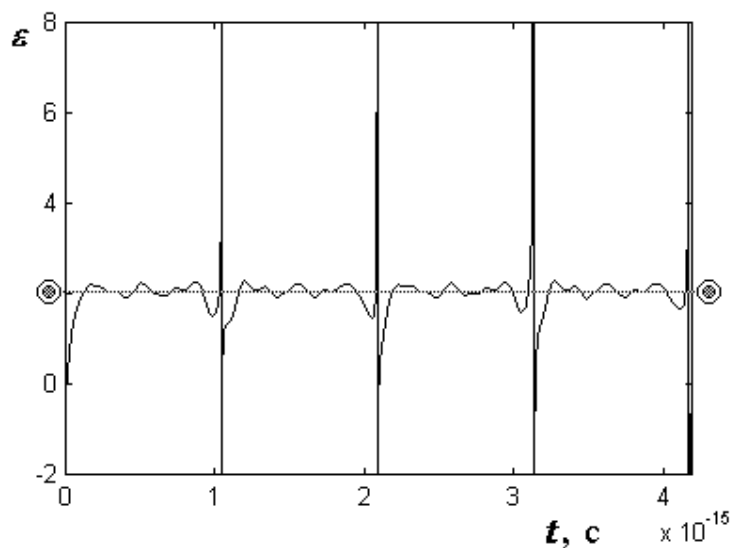


Рис. 4. Имитационная временная характеристика диэлектрической проницаемости кристалла  $CaF_2$ .

Анализ внешнего вида расчетной кривой  $\epsilon(t)$  показал, что в большую часть времени она стремится приблизиться к устойчивому состоянию, соответствующему скалярному значению  $\epsilon'(w)$ , присущему рассматриваемой частоте приложенного поля (маркированному на текущем графике тонкой горизонтальной линией). При этом в моменты времени, отвечающие изменениям знака фазы функции  $E_0(t) = A_{E0} \cdot \sin(w_{E0}t)$ , моделируемая характеристика импульсивно изменяет свою величину, достигая весьма внушительных значений.

Рассмотрим теоретическое обоснование выявленного сложного вида полученных результатов имитационного моделирования временной зависимости диэлектрической проницаемости конденсированного образца с точки зрения общей физики исследуемых процессов.

### Физическая интерпретация результатов

Во-первых, несколько хаотичное поведение расчетного спектра  $\epsilon(t)$  в областях, расположенных между импульсными выбросами, может быть объяснено сложным (многосоставным) откликом величины напряженности эффективного поля на упорядоченное гармоническое воздействие внешнего электрического поля, обусловленным различной инерционностью каждого из исследуемых процессов, а также действием на них объективно существующих обратных связей.

Во-вторых, факт потенциального появления импульсных выбросов, во время которых диэлектрическая проницаемость любого поляризуемого материала гипотетически достигает существенных значений, также может быть связан с инерционностью рассматриваемой физической системы. В

моменты смены знака функции внешнего гармонического воздействия, имеющего синусоидальный характер (в случае значений ее фазового угла, равных  $p$ ,  $2p$  и т.д.), текущие величины  $E_0(t)$  становятся равными нулю. В то же самое время, дипольные моменты поляризованных электронных пар, непосредственно влияющие на напряженность эффективного поля, все еще обладают некоторыми ненулевыми значениями.

С целью наглядного подтверждения такого теоретического обоснования особенностей имитационного временного спектра был проведен вычислительный эксперимент, направленный на совместное моделирование временных зависимостей напряженностей внешнего и внутреннего полей, а также их детализацию в области перемены фазы функции  $E_0(t)$ , итоги которого проиллюстрированы на рис. 5.

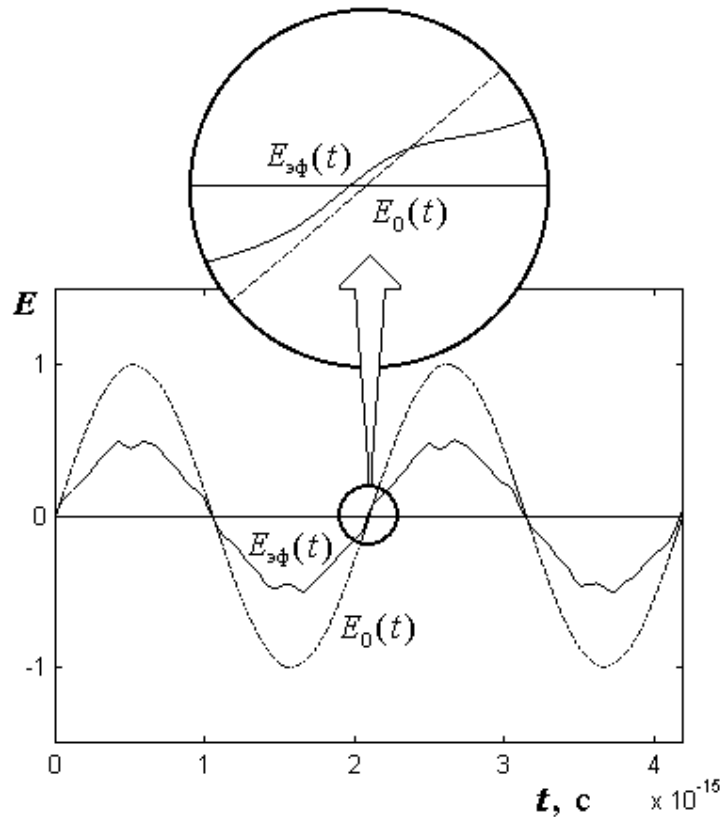


Рис. 5. Детализация временных спектров напряженностей внешнего и эффективного полей в области смены знака их фаз.

Представленные графики достаточно наглядно отражают особенность рассогласования рассматриваемых функций (см. область, выделенную окружностью). Действительно, расчет характеристики  $E(t)$ , проведенный с помощью численного решения системы дифференциальных уравнений (3) на ЭВМ, позволяет утверждать, что каждая из них достигает своих нулевых значений в различные моменты времени.



## Заключение

Проведенное исследование показало, что численное решение исходной системы дифференциальных уравнений, описывающих общую картину поляризации диэлектрика, может быть достаточно просто реализовано в рамках использования базовых возможностей вычислительной среды *MatLAB*. В свою очередь, полученные результаты принципиально позволяют осуществить имитационное моделирование «новой» поляризационной характеристики, а именно – временного спектра диэлектрической проницаемости конкретного материала. Кроме того, проведенные расчеты теоретически выявили ряд особенностей реакции реальной диэлектрической системы на гармоническое электрическое воздействие, которые могут оказаться практически полезными, – например, с точки зрения использования диэлектриков в качестве активных элементов перспективных электрических схем.

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Костюков Н.С., Еремин Е.Л., Еремин И.Е.* Имитационное моделирование диэлектрической проницаемости конденсированных материалов: ультрафиолетовый и видимый спектры частот. – Благовещенск: Изд-во Амурского КНИИ ДВО РАН, 2001.
2. *Еремин Е.Л.* Динамические модели и S-моделирование систем. – Благовещенск: Изд-во Амурского гос. ун-та, 2003.
3. *Дьяконов В., Круглов В.* Математические пакеты расширения MATLAB. Специальный справочник. – СПб.: Питер, 2001.
4. *Еремин И.Е., Цаплина С.А.* Моделирование характеристик упругой электронной поляризации флюорита. I. // Информатика и системы управления. – 2006. – № 2 (12). – С. 7-16.

*Статья представлена к публикации членом редколлегии А.Д. Плутенко.*