УДК 539.2+537.226

В.А. КАЛЫТКА, к.ф.-м.н, доктор phD (КарГТУ)
Ж.Б. БАЙДИЛЬДИНА, ст. преподаватель (КарГТУ)
С.Н. КАМАРОВА, магистрант (КарГТУ)
г. Караганда

СПЕКТРЫ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОТЕРЬ ИЗОЛЯЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ СВЕРХНИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Методом конечных разностей строится решение линеаризованного по внешнему полю квантового кинетического уравнения Лиувилля, совместно со стационарным уравнением Шредингера и операторным уравнением Пуассона, для ансамбля невзаимодействующих протонов, мигрирующих в поле кристаллической решетки возмущенной переменным поляризующим полем. Влияние фононной подсистемы не учитывается. Равновесная матрица плотности вычисляется с помощью квантовой статистики Больцмана. Рассчитываются частотно – температурные спектры комплексной диэлектрической проницаемости при сверхнизких температурах.

Теоретические исследования диэлектрической релаксации в кристаллах с водородными связями (КВС) в области высоких температур (100 – 450 К) проводятся методами квазиклассической кинетической теории, путем совместного решения системы уравнений Фоккера – Планка и Пуассона, в линейном приближении по малому параметру в линейном приближении по малому параметру $\gamma < 0{,}001$, при заданной модели электродов [1].

В области низких температур $(T \le 100K)$ параметр разложения заметно увеличивается $\gamma \approx 0{,}01 \div 0{,}1$, возрастает вклад нелинейных по полю членов в картину протонной релаксации, что уже в рамках квазиклассического подхода [2] требует более строгого учета влияния влияние туннелирования протонов на кинетику миграции протонов по водородным связям.

В [2], строгость квантово – механического подхода при учете туннелирования, заключена в применении аппарата матрицы плотности к расчету плотности токов термостимулированной деполяризации (ТСТД).

Применение неравновесной матрицы плотности к исследованию спектров комплексной диэлектрической проницаемости (СКДП) позволяет исследовать размерные эффекты в нанометровых слоях (1 – 10 нм) слоистых диэлектриков при сверхнизких температурах (4 – 25 К).

Статистические квантовые свойства модельного КВС, в отсутствии внешнего возмущения, исследуем на основании нестационарного уравнения Лиувилля [2,3]

$$\frac{\partial \hat{\rho}_c}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\rho}_c, \hat{H}_c\right] = 0. \qquad (1)$$

Гамильтониан невозмущенной системы (кристалла) представим в виде [3]

$$\hat{H}_c = \hat{H}_{пр}^{(0)} + \hat{H}_ф + \hat{H}_{пр.ф}. \qquad (2)$$

В (2) $\hat{H}_{пр}^{(0)}$ – гамильтониан протонной подсистемы; $\hat{H}_ф$ – гамильтониан фононной подсистемы; $\hat{H}_{рф}$ – оператор протон-фононного взаимодействия.

Согласно принятым в для протонной релаксации в КВС допущениям [2]: 1) пренебрегаем протон – фононным взаимодействием $\hat{H}_{пр,ф} \to 0$; 2) гамильтониан фононной подсистемы полагаем числовым оператором $\hat{H}_ф \to \text{const}$; 3) ограничиваемся моделью идеального протонного газа.

Тогда, уравнение Лиувилля (1), с учетом (2), принимает вид [3]

$$\frac{\partial \hat{\rho}_{пр}^{(0)}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\rho}_{пр}^{(0)}, \hat{H}_{пр}^{(0)}\right] = 0, \qquad (3)$$

Поскольку энергия Ферми протонного газа стремится к нулю, решение уравнения (3) запишем согласно квантовой статистике Больцмана [3]

$$\hat{\rho}_{пр}^{(0)} = N_П \left\{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_n}{k_Б T}\right)\right\}^{-1} \times \exp\left(-\frac{\hat{H}_{пр}^{(0)}}{k_Б T}\right) \qquad (4)$$

Статистический оператор протонной подсистемы в присутствии поляризующего поля вычисляется из уравнения [3]

$$\frac{\partial \hat{\rho}_{пр}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\rho}_{пр}; \hat{H}_{пр}\right] = 0, \qquad (5)$$

где $\hat{H}_{пр} = \hat{H}_{пр}^{(0)} + \hat{W}_{эл}$ - возмущенный внешним полем гамильтониан протона; $\hat{H}_{пр}^{(0)}$ - невозмущенный гамильтониан протона; $\hat{W}_{эл}$ - возмущённая поправка; $\hat{\rho}_{пр} = \hat{\rho}_{пр}^{(0)} + \delta\hat{\rho}_{пр}$ – неравновесный статистичес-кий оператор протонов; $\delta\hat{\rho}_{пр}$ – неравновесная поправка к невозмущенному статистическому оператору (4).

Воздействуем операторами $\frac{\partial \hat{\rho}_{пр}}{\partial t}$ и $\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\rho}_{пр}; \hat{H}_{пр}\right]$ на волновую функцию протона в n-ом стационарном состоянии и исключая члены второго порядка по полю $\delta\hat{\rho}_{пр}\left(\hat{W}_{эл}\psi_n\right)$, $\hat{W}_{эл}\left(\delta\hat{\rho}_{пр}\psi_n\right)$, имеем

$$\frac{\partial\left(\delta\hat{\rho}_{пр}\psi_n\right)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\left\{\delta\hat{\rho}_{пр}\left(\hat{H}_{пр}^{(0)}\psi_n\right) - \hat{H}_{пр}^{(0)}\left(\delta\hat{\rho}_{пр}\psi_n\right) + \hat{\rho}_{пр}^{(0)}\left(\hat{W}_{эл}\psi_n\right) - \hat{W}_{эл}\left(\hat{\rho}_{пр}^{(0)}\psi_n\right)\right\} = 0. \qquad (6)$$

Вводя в (6) скалярный оператор $\hat{u}_n(x;t) = \delta\hat{\rho}_{пр}\psi_n(x;t)$, имеем

$$\frac{\partial \hat{u}_n}{\partial t} + \frac{E_n}{i\hbar}\hat{u}_n - \frac{1}{i\hbar}\hat{H}_{пр}^{(0)}\hat{u}_n + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\rho}_{пр}^{(0)}; \delta\hat{W}_{эл}\right]\psi_n = 0. \qquad (7)$$

Для модели блокирующих электродов [2,3]

$$\hat{j}_{пр}(d;t) = \hat{j}_{пр}(0;t) = 0, \qquad (8)$$

В начальный момент времени поляризация отсутствует [3]

$$\hat{u}_{ns}(x;0) = 0 \,, \hat{u}_{ns}(x;0) = 0 \,. \qquad (9)$$

Решение операторного уравнения (7) строим совместно с операторным уравнением Пуассона [2,3]

$$\frac{\partial \hat{E}}{\partial x} = \frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon} \delta \hat{N}_{пр}(x;t) \,, \qquad (10)$$

с учётом граничного условия [1,2]

$$\int_0^d \hat{E}(x;t)\, dx = V_0 \exp(i\omega t) \,, \qquad (11)$$

где V_0, ω - соответственно амплитуда и круговая частота внешнего поля.

На основании квантово – механического выражения для избыточной концентрации релаксирующих протонов [2], запишем оператор поляризации протонной подсистемы [3]

$$\hat{P} = q \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^* \, \hat{x} \breve{u}_n \,. \qquad (12)$$

Усреднение (12) по координате и энергии проведем с помощью неравновесной поляризационной матрицы плотности [3]

$$\left\langle \hat{P} \right\rangle = \int_0^d \Psi^* \, \hat{P}(x,t) \Psi \, dx \,. \qquad (13)$$

Поляризация кристалла в переменном поле [3]

$$\left\langle \hat{P} \right\rangle = \varepsilon_0 (\varepsilon^* - \varepsilon_\infty) E_0 \exp(i\omega t) \,. \qquad (14)$$

На основании (13), (14), запишем теоретический спектр комплексной диэлектрической проницаемости [3]

$$\varepsilon^*(\omega, T) = \varepsilon_\infty + \frac{1}{\varepsilon_0 E_0} \exp(-i\omega t) \int_0^d \Psi^* \, \hat{P}(x,t) \Psi \, dx \,. \qquad (15)$$

Список литературы:

1. Тонконогов М.П. Диэлектрическая спектроскопия кристаллов с водородными связями. Протонная релаксация. // УФН. 1998. -№1.-Т. 168.-С.29-54.
2. Тонконогов М.П., Кукетаев Т.А., Фазылов К.К., Калытка В.А. Квантовые эффекты при термодеполяризации в сложных кристаллах с водородными связями. Изв. Вузов. Физика. – 2004. – №6. – С. 8-15.
3. Депонированная научная статья «Квантовые свойства диэлектрических потерь в слоистых кристаллах при низких и сверхнизких температурах». Москва, ВИНИТИ, № 251 В – 2013.08.20.