

УДК 548.0 : 532.783

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ОБЛАСТЕЙ АБСОРБЦИИ “СРЕДНИХ ЧАСТОТ” СЛАБОПРОВОДЯЩИХ ДИЭЛЕКТРИКОВ ПРИ ОБМЕНЕ ПОЛЯРНЫМИ ГРУППАМИ

РАГИМОВ Д.А., ТАГИЕВ З.А., АЛИЕВ Т.А.

Азербайджанский Медицинский Университет

Введение. - Диэлектрические спектры некоторых синтетических диэлектриков демонстрируют область широкого диапазона поглощения средних частот. По нашим сведениям этому не было дано сколько-нибудь удовлетворительной интерпретации. Одни авторы полагались в этом на помощь эмпирических формул [1,2]. Другие, в очень частом случае области симметричного распространения, пытались объяснить распределение распространения частот, исходя из термического реагирования молекулярной структуры [3].

Для некоторых синтетических полимерных материалов можно рассматривать область распределения распространения частот как суперпозицию очень небольшого числа элементарных областей [4,5] и предложить теоретическую модель [5,6] для объяснения каждой из них.

Для подтверждения гипотез, введенных в эту модель, было бы интересно продолжить эти работы, распространив ее на новые структуры, содержащие различные типы полярных групп. С этой целью:

-разработали процесс анализа областей распространения частот, который частично повторяет прежние результаты, и предложили метод оригинального и быстрого использования результатов анализа с привлечением ЭВМ:

-изучили диэлектрические свойства новых материалов, полученных посредством полярного обмена, уточнив характеристики распространения областей средних частот:

-показали возможность разложения во всех случаях областей распространения частот на элементарные области методом, приводящим к этому эффекту.

Интерпретация полученных результатов позволила нам лучше изучить молекулярную структуру и распределение полярных групп в участках (позициях) полос-тей, уточнить их взаимодействие с поверхностью.

I. Новый метод разложения областей “распространения частот ” с помощью компьютера

I.1 Принцип метода: Мы рассматриваем здесь только области “распространения частот” как результат суперпозиции некоторых элементарных областей. Диэлектрическая постоянная ϵ^* соответствующего диэлектрика может быть выражена формулой

$$\epsilon^* = \epsilon' - j\epsilon'' = \epsilon'_\infty + \sum_{i=1}^n \frac{\delta_i}{1 + jf / F_i} \quad (1)$$

Где: ε' и ε'' - действительная и мнимая составляющие диэлектрической постоянной, ε'_∞ -действительная диэлектрическая постоянная при $f \gg F_n$, f - частота, δ_i и F_i - соответственно амплитуды и критические частоты элементарных областей.

Развивая уравнение (I), мы выводим

$$\varepsilon' = \varepsilon'_\infty + \sum_{i=1}^n \frac{\delta_i}{1 + (f / F_i)^2} \quad (2)$$

$$\varepsilon'' = \sum_{i=1}^n \frac{\delta_i f / F_i}{1 + (f / F_i)^2} \quad (3)$$

I.I.I. Свойства линейных диаграмм.

Мы полагаем, что элементарные области подчиняются следующим гипотезам:

-хорошо разделенные критические частоты $F \ll F_{i+1} \quad i=1,2,3,\dots,n$:

-амплитуды конечны и одинакового порядка величина i

а) Линейная диаграмма $\varepsilon' = G(\varepsilon'' / f)$ (4)

Пусть $x = \varepsilon'' / f$

(2) Кавычки указывают на то, что речь идет об областях распространения частот, которые можно разложить на элементарные области.

Из отношений (2), (3) и (4) мы выводим уравнения

$$\varepsilon' - F_g x = \varepsilon'_\infty + \sum_{i=1}^n \frac{F_i \delta_i}{F_i^2 + f^2} (F_i - F_g) \quad (5)$$

где g – выбирается среди $1,2,3,\dots n$.

Тогда оказывается, что кривая $\varepsilon' = G(x)$, возрастающая и непрерывная, представляет зоны, уподобляемые сегментам прямой, угловые коэффициенты которых равны критическим частотам F_i элементарных областей и пересечение которых позволяет определить амплитуды δ_i

Когда $x \rightarrow 0$, мы имеем $\varepsilon' \simeq \varepsilon'_\infty$

б) Линейная диаграмма $\varepsilon' = H(\varepsilon'' f)$

Пусть: $y = \varepsilon'' f$ (6)

Тем же способом, что и ранее, мы получаем:

$$\varepsilon' + \frac{y}{F_g} = \varepsilon'_\infty + \sum_{i=1}^{g-1} \delta_i \frac{F_i}{F_g} + \sum_{i=g}^n \delta_i \quad (7)$$

g - выбираются среди $1,2,3,\dots n$.

Нисходящая и непрерывная кривая $\varepsilon' = H(\varepsilon'' f)$ также представляют зоны, уподобляемые сегментам прямой, абсолютные значения обратных угловых коэффициентов которых равны критическим частотам F_i элементарных областей и пересечения которых позволяют определить амплитуды. При $x \rightarrow 0$, мы имеем $\varepsilon' \simeq \varepsilon'_s$

в) Вывод. - Исходя из исследования линейных диаграмм $\varepsilon' = G(\varepsilon'' / f)$ и $\varepsilon' = H(\varepsilon'' f)$ области “распространения частот”, можно определить:

-число элементарных областей,

-значение критической частоты и амплитуды каждой из них,

-значение ε'_s и ε'_∞

I.1.2 Свойства производных диаграмм.[3].

В большинстве экспериментов трудно бывает определить сегменты прямой на линейных диаграммах по двум основным причинам:

-отношения критических частот определенных областей недостаточно высоки и гипотезы, приведенные в параграфе (I.I.I.), не удовлетворяют,

-область распространения частот составляет несколько порядков, что при линейных представлениях чрезмерно ограничивает низкие или высокие частоты, в зависимости от рассматриваемого представления.

При этих условиях описанный выше метод не годится даже при расширении шкалы дробления частотной полосы исследуемой области на две или три части.

Чтобы устранить эти помехи, мы использовали свойства производных линейных диаграмм. На протяжении области распространения частот видно, что графические представления этих кривых изменяются непрерывно и представляют зоны с более слабым уклоном (соответствующие элементарным областям), связанные между собой зонами с сильным уклоном (рис.1,2). Поскольку изменения переменных систем координат не влияют на ход производных кривых, мы выбрали представление в логарифмических координатах, что позволяет исследовать значительное число порядков частоты.

Анализ производных диаграмм недвусмысленно показывает: графически легче различить “ступени” кривой в виде лестницы, чем аппроксимировать линейные диаграммы с помощью сегментов прямой, число которых не известно. Мы полагаем, что для использования производных диаграмм этот метод применен впервые.

(3) Чтобы облегчить чтение, мы будем называть производными диаграммами кривые, характерные для производных линейных диаграмм.

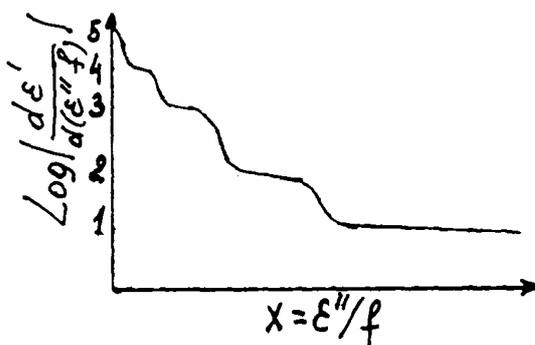


Рис.1. Производная диаграмма $\log \frac{d\epsilon'}{d(\epsilon'' f)}$ в функции x в случае 5 элементарных областей

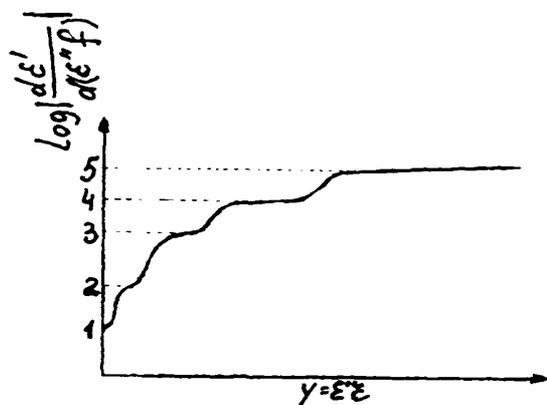


Рис.2. Производная диаграмма $\log \frac{d\epsilon'}{d(\epsilon'' f)}$ в функции y в случае 5 элементарных областей

1.1.3. Моделирование производных диаграмм и границ распознавания элементарных областей.-

Мы много раз моделировали на компьютере производные диаграммы [7] для того, чтобы :

- понять (узнать) ход производных кривых,
- определить практические границы распознавания элементарных областей предложенным методом.

Для этого мы рассматривали четыре случая распределения:

1) Непрерывное распределение по типу Давидсон и Коул, для которого комплексная диэлектрическая постоянная выражается в виде

$$\varepsilon^* = \varepsilon'_\infty + \frac{\delta}{(1 + j\omega\tau)^\alpha} \quad (8)$$

2) Непрерывное распределение по типу Коул и Коула. Соответствующая комплексная диэлектрическая постоянная записывается:

$$\varepsilon^* = \varepsilon'_\infty + \frac{\delta}{1 + (j\omega\tau)^{1-\alpha}} \quad (9)$$

(3) Квазинепрерывное распределение, связанное с большим числом ($n > 30$) элементарных областей частот, близких к критическим.

(4) Дискретное распределение, связанное с несколькими элементарными областями ($n=3$).

При квазинепрерывном и дискретном распределениях комплексная диэлектрическая постоянная задается отношением (1), соответственно, $n=31$ и $n=3$.

Производные диаграммы показывают:

-плато при распределении Давидсон и Коула (1-случай), каким бы ни было значение параметра распределения α (рис.3).

-плато при распределении Коул и Коула (2-ой случай) при $\alpha < 0,4$, а при $\alpha > 0,4$ кривая не выходит на плато (рис.4)

-кривая не выходит на плато (за исключением концов кривой) при квазинепрерывном распределении, что дает большое число элементарных областей (рис.5).

Для этих трех случаев наблюдение единственного плато на производных диаграммах или полное отсутствие плато свидетельствует о наличии либо единственной области, не имеющей распределение составляющей (случай 1 и 2), либо об отсутствии какой-либо элементарной области (случай 2 и 3).

Эти результаты имеют графическое подтверждение в том, что невозможно рассматривать эти три типа распределения как результат суперпозиции малого числа (n меньше 5 или 6) элементарных областей.

И, наоборот, при дискретном распределении (случай 4) мы наблюдаем 3 ожидаемых плато (или зоны с очень слабым уклоном) (рис.6, например). Было проведено систематическое исследование для уточнения границ различения элементарных областей в области "распространения частот", состоящей из 3-х элементарных областей, как это было в случае с цеолитами группы А [7].

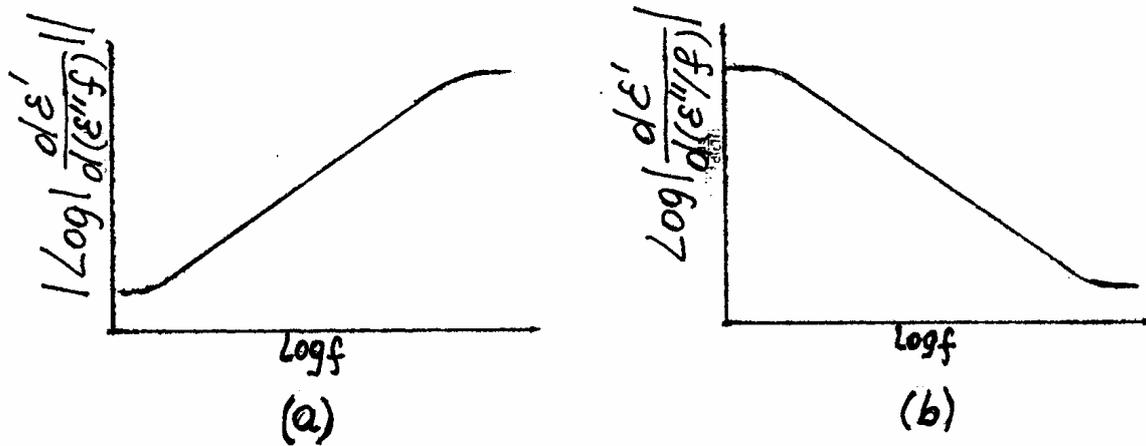


Рис.3. Производные диаграммы для распределения Давидсон-Коула.

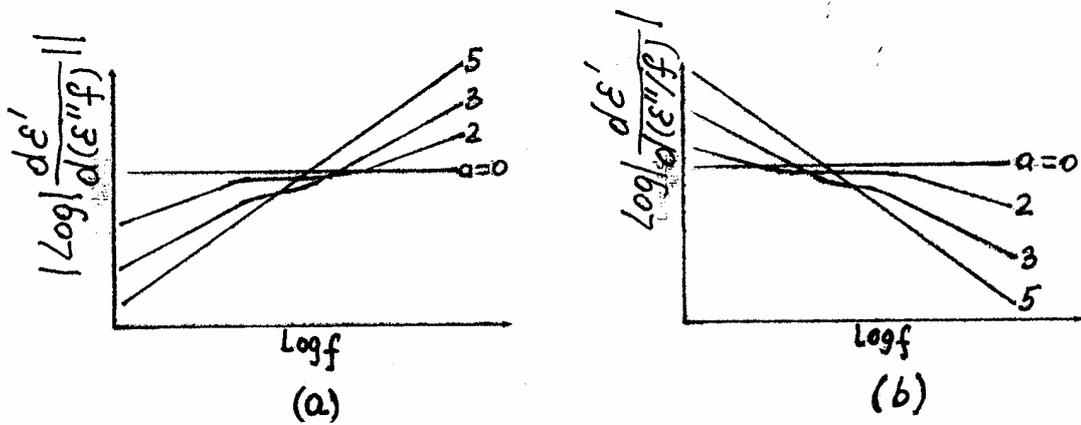


Рис.4 Производные диаграммы для распределения Коул-Коула.

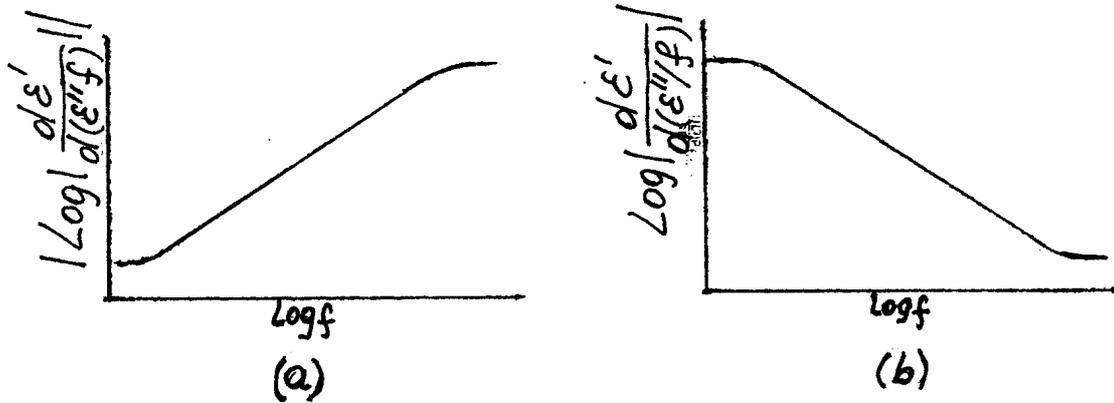


Рис.5. Производные диаграммы для дискретного распределения, связанного с большим числом элементарных областей частот, очень близких к критическим.

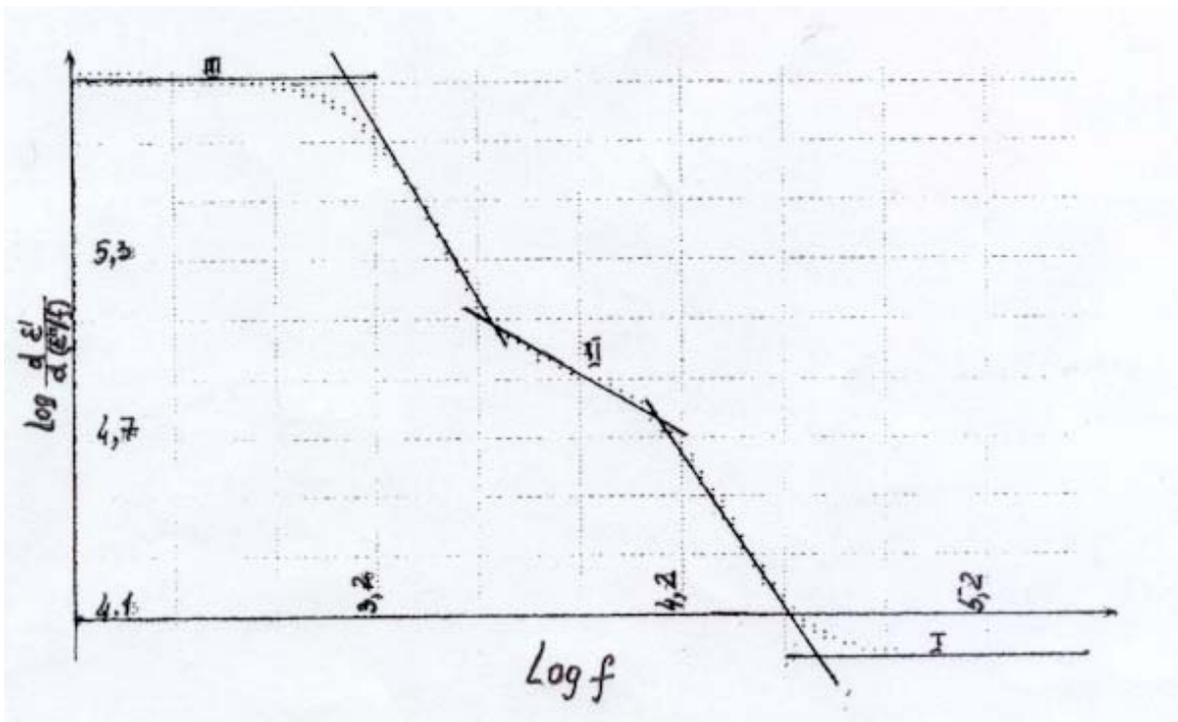


Рис.6. Производная диаграмма $\log \frac{d\varepsilon'}{d(\varepsilon''/f)}$ в функции $\log f$ для случая 3-х элементарных областей. Отношение критических частот с определенных областей $R_F=10$. Отношение амплитуд $R=1$.

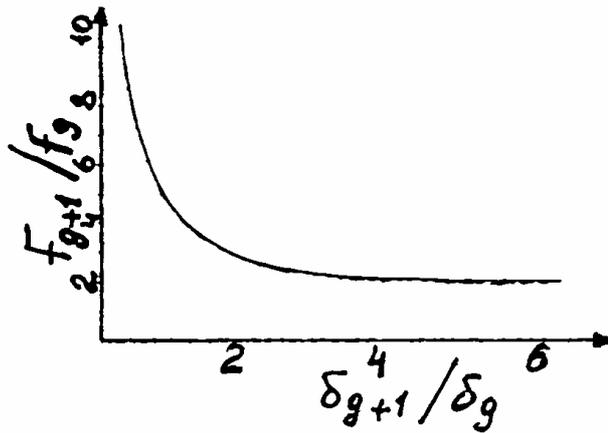


Рис.7. Область корректности метода разложения.

Основываясь на графическом анализе производных диаграмм относительно двух параметров (отношение критических частот и отношение амплитуд сопредельных элементарных областей), это исследование вылилось в рисунок 7. Заштрихованная зона соответствует значениям отношений частот и амплитуд, для которых разделение элементарных областей становится невозможным.

I.1. 4. Принцип метода разложения.

Комплекс этих результатов показывает:

- возможность графического анализа производных диаграмм по сравнению с анализом диаграмм для определения числа элементарных областей и порядка величины критических частот:

- необходимость линейных диаграмм для вычисления параметров каждой элементарной области. Производные диаграммы не дают никакой информации об амплитуде областей.

Итак, в методе разложения, который предлагается в следующем параграфе, мы используем специфические свойства каждой диаграммы.

I.2 Численный процесс метода разложения. – Для разложения области «распространения частот» необходимо три этапа:

- поиск аналитических выражений действительных и мнимых составляющих диэлектрической постоянной и вычерчивание производных диаграмм,

- определение числа и первого значения параметров элементарных областей, исходя из линейных и производных диаграмм,

- аффинное преобразование параметров элементарных областей с помощью метода наименьших квадратов.

I. 2. I. Аналитические выражения составляющих диэлектрической постоянной.

Вычерчивание производных диаграмм.

Экспериментальные спектры (в частности те, которые относятся к нашим исследованиям цеолитов) вычерчиваются, в основном, с помощью 4 или 5 точек измерения на один порядок, что недостаточно для расчетов, предусмотренных на ЭВМ, особенно для тех расчетов, которые позволяют получить производные

диаграммы. Для увеличения этого числа точек мы определили аналитические выражения составляющих ε' и ε'' диэлектрической постоянной относительно частоты с помощью нескольких полиномов. Таким образом, вычисление коэффициентов полиномов становится более точным, чем при представлении одним полиномом высокой степени. Отметим, что:

-для описания кривой нужно столько же полиномов, сколько существует экспериментальных точек, минус k , k - это степень каждого полинома, в основном она равна 3:

-чтобы быть уверенным в непрерывности кривой в точке соединения двух последовательных полиномов, признается, что в этой точке полином R_{i+1} имеет ту же касательную, что и полином R_i .

Производные диаграммы получены путем дифференцирования аналитических уравнений линейных диаграмм. Для этого мы используем отношение

$$\frac{d}{dU} \varepsilon'(U_i) = \frac{\varepsilon'_{i+1} - \varepsilon'_i}{U_{i+1} - U_i} \quad (10)$$

причем $U_i = \varepsilon'' / f_i$ или $\varepsilon'' f_i$, в зависимости от рассматриваемой диаграммы. Это определение действительно, если $\ll x_{i+1} - x_i \gg$ достаточно мало или если у нас есть достаточно большое число точек в заданном интервале, откуда мы хотим получить аналитические уравнения производных диаграмм. Производные диаграммы выводятся на принтер компьютера.

I.2.2. Определение числа элементарных областей и их параметров.

-число элементарных областей задается числом плато или зон со слабым уклоном кривой, наблюдаемыми на производных диаграммах. Точки, относящиеся к оконечностям этих зон, выделяются, а затем вводятся в ЭВМ, которая определяет соответствующие прямые регрессии на линейных диаграммах с помощью существующей программы. Исходя из уклонов от прямых и их пересечений, компьютер выдает данные критической частоты F_i и амплитуды δ_i каждой элементарной области, а также диэлектрические постоянные при низких частотах ε'_s и высоких ε'_∞ .

I. 2.3. Аффинное преобразование параметров элементарных областей.

Синтез области распространения частот осуществляется компьютером с помощью предыдущих данных (F_i , δ_s и ε'_∞). Теоретические точки сравниваются с экспериментальными измерениями и параметры каждой элементарной области подвергаются аффинному преобразованию с использованием метода наименьших квадратов.

I.3. Контроль пригодности метода разложения.

Для контроля правильности метода мы протестировали его с помощью известных областей "распространения частот", полученных синтезом элементарных областей. Мы оставили 20 точек для области "распространения частот", охватывающей 4 порядка частоты, как в случае с экспериментальными спектрами. Были проведены две серии опытов в соответствии с точностью, заданной 20 точкам, введенным в компьютер:

-Тест 1: очень большая точность (10^{-6}) для того, чтобы оценить точность, присущую процедуре разложения:

-Тест 2: точность, близкая к точности экспериментальных измерений (порядка 2%) для того, чтобы вычислить недостоверности, приносимые методом, в определении параметров элементарных областей в конкретном случае.

В таблице I мы приводим результаты, полученные для тестов области “распространения частот”, состоящей из 3-х элементарных областей, амплитуды которых равны, а отношение сопредельных частот оценивается 5.

Таблица I

Сравнение между теоретическими значениями параметров областей и значениями, полученными с помощью метода в соответствии с точностью экспериментальных точек

Теоретические значения параметров	Результаты аффинных преобразований данных	
	10^{-6}	2×10^{-2}
$F_1=20\text{КГц}$	19,9916	19,98
$\delta_1=4$	3,9992	4,001
$F_2=100\text{КГц}$	99,9908	98,89
$\delta_2=4$	3,9999	3,95
$F_3=500\text{КГц}$	499,9564	490,80
$\delta_3=4$	4,001	4,03
$\varepsilon'_\infty=5$	4,9998	5,01

Этот пример, взятый среди многих других [7], показывает, что данный метод выгоден из-за точности, которую он позволяет достичь.

Замечание о единственности полученных разложений. Априори может показаться парадоксальным, что пока не обсуждалась тема единственности или множественности полученных разложений. Фактически, эта задача не ставится. В самом деле, для заданной области “распространения частот”, если бы существовали два возможных разложения, то рациональные дроби отношений (2) и (3) были бы записаны по-разному при их разложении в ряд по сумме сократимых рациональных дробей [7].

Следовательно, если область “распространения частот” разложима на элементарные области, имеется только одно решение и единственное с точностью до экспериментальных погрешностей.

1. *Chapoton, A.*, These de Doctorat 3^e cycle, Lille (1966).
2. *Morris, B.*, J. Phys. Chem. Solids 30 (1969) 73.
3. *Jansen, F.J., Schoonehydt, R. A.*, Trans. Faraday Soc. 69. (1973) 1388.
4. *Chapoton A., Vandorpe B., Choquet M.*, C. R. Hebd. Sean. Acad. Sci. 272 (1972), 1261.
5. *Chapoton, A., Ravalitera, G., Vandorpe, B., Choquet, M., Lebrun, A.*, J.Chim. Phys. 7-8 (1972) 1191.
6. *Chapoton, A.*, These de Doctorat d'Etat, Lille (1973).
7. *Ravalitera, G.*, These de Doctorat de 3^e cycle, Lille (1975)/
8. *Choquet, M.*, These de Doctorat de 3^e cycle Lille (1973).

POLYAR QRUPPALI ZƏİF KEÇİRİCİLİYƏ MALİK DIELEKTRİKLƏRDƏ ORTA TEZLİKLƏRDƏ UDULMANIN NƏZƏRİ İNTERPRETASIYASI

RƏHİMOV D.A., TAĞIYEV Z.A., ƏLİYEV T.A.

Təqdim olunan məqələdə polyar dielektriklərin radiotezliklərdə udulmanın kompüterlə araşdırılmasının yeni metodu təklif olunur. Bu metodun köməyi ilə orta tezliklərdə müxtəlif dielektriklərin spektrlərini kiçik və sonlu sayda elementar oblastlara bölmək olar. Polyar qrupların paylanmasından asılı olaraq bu oblastların uyğun şəkildə yerləşməsi, qrupların yerdəyişmə mexanizmi ilə tənzimlənməsi müşahidə olunur.

Nəzəri model relaksasiya mexanizmini, onun vaxtını və polyar qrupların elektrik momentlərini təyin etməyə imkan verir. Alınan nəticələr başqa metodlarla alınmış nəticələrə çox yaxınlaşır. Belə ki, bu metod dielektriklərin quruluşlarının öyrənilməsində yaxşı və əhəmiyyətli rol oynaya bilər.

THEORETICAL INTERPRETATION OF DATUM WITH HIGHPOLAR DIELECTRICS IN THE RADIOFREQUENCY BAND

RAGIMOV D.A., TAGIYEV Z.A., ALIYEV T.A.

In the articles the new processing techniques computer-aided, area of absorption is offered in the field of radio frequencies of polar dielectrics at exchange of polar groups. With the help of an offered method it became possible to show, that all areas of distribution of medium frequencies in spectra of different dielectrics is separable on final and small number of elementary areas. The reference of these elementary areas to sets (combinations) of polar groups in cavities of absorption has allowed to make accommodation (arrangement) of groups on stands and to update their gears of exchange. The idealized model allows computing a relaxation time and electric moments bound with polar groups and gears different molecular rotation.

The obtained outcomes will well agreed conclusions (injections) obtained with the help of other method of testing, testify to usefulness of offered decomposing and their interpretation in analysis of frame of dielectrics.