

**И. И. Макоед<sup>1</sup>, Г. С. Римский<sup>2</sup>, К. И. Янушкевич<sup>2</sup>**

**I. Makoed<sup>1</sup>, G. Rymski<sup>2</sup>, K. Yanushkevich<sup>2</sup>**

*<sup>1</sup>Брестский государственный университет имени А.С. Пушкина  
(Брест, Беларусь)*

*<sup>2</sup>Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению  
(Минск, Беларусь)*

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО  
ЭКСПЕРИМЕНТА ПРИ ИЗУЧЕНИИ  
ПОЛЯРИЗАЦИИ ДИЭЛЕКТРИКОВ  
USING A COMPUTER EXPERIMENT  
IN STUDYING THE POLARIZATION OF DIELECTRIC**

Обоснована возможность и целесообразность использования элементов компьютерного эксперимента при изучении видов и механизмов диэлектрической поляризации в курсе общей физики. Методами диэлектрической и импедансной спектроскопии исследованы виды и механизмы диэлектрической поляризации ионных кристаллов со структурой перовскита. Рассмотрены методы обработки результатов диэлектрических измерений.

The possibility and practicability of using the elements of a computer experiment in studying optical phenomena in general physics has been explained. The types and mechanisms of dielectric polarization of ionic crystals with a perovskite structure have been investigated using dielectric spectroscopy. Methods for processing the results of dielectric and optical measurements have been considered.

**Ключевые слова:** моделирование, диэлектрические спектры, диэлектрическая поляризация.

**Keywords:** modeling, dielectric spectra, dielectric polarization.

Повышение степени доступности и качества физического образования в условиях перераспределения аудиторных часов между традиционными предметами и новыми дисциплинами, повышения доли управляемой самостоятельной работы студентов в сумме часов по дисциплине, развития дистанционного обучения физике требует разработки, обоснования

и использования новых педагогических методик, в том числе опирающихся на современные компьютерные технологии. Использование компьютерных моделей различных физических процессов и явлений способствует росту эффективности обучения, позволяет более глубоко понять механизмы физических явлений, в том числе и таких, непосредственное наблюдение которых оказывается невозможным по ряду объективных причин [1]. Целью работы является обоснование преимуществ использования компьютерного эксперимента по отношению к традиционной форме изучения процессов диэлектрической поляризации.

Формализованное изложение учебного материала и организации учебной исследовательской деятельности студентов приводят к тому, что понимание физической сущности предмета уступает место усвоению готовых знаний и приобретению ограниченного числа навыков. Компьютерное моделирование как составная часть и инструмент компьютерного обучения содержит в себе потенциальные возможности повышения эффективности изучения физических основ электрических явлений в курсах общей физики и специальных дисциплин вуза. Раздел «Электричество и магнетизм» программы курса общей физики предполагает изучение студентами основ физики электромагнитных явлений. Вопросы, связанные с практической реализацией диэлектрических измерений и корректной обработкой их результатов, представлены недостаточно. Отчасти это объясняется отсутствием современного лабораторного оборудования. Вместе с тем интенсивное развитие компьютерной техники, а также как количественное, так и качественное расширение содержательной части ИНТЕРНЕТ-баз данных открывает широкие возможности для изучения и моделирования диэлектрических функций твердых тел. В данной работе вычислительный компьютерный эксперимент был использован для изучения и моделирования диэлектрических функций мультиферроиков, синтезированных на основе феррита висмута, допированного катионами редкоземельных элементов  $\text{Bi}_{1-x}\text{R}_x\text{FeO}_3$  ( $\text{R} = \text{La} - \text{Lu}$ ) [2].

Спектральные методы исследования широко используются для изучения веществ и процессов, позволяя на основании данных обработки экспериментальных зависимостей величин компонент комплексной диэлектрической проницаемости образцов восстанавливать широкий круг диэлектрических функций, описывающих отклик веществ на воздействие электромагнитного излучения [3]. Исследованы широкодиапазонные диэлектрические спектры образцов, включающие области от радио- и сверхвысоких частот до дальнего инфракрасного (ИК) участка спектра электромагнитных волн. Модельные спектры компонент комплексной

диэлектрической проницаемости образцов, достаточно хорошо согласующиеся с экспериментальными данными, могут быть описаны соотношениями модели Дебая с распределениями времен релаксации соответственно Коула – Коула и Коула – Дэвидсона [4,5]. В низкочастотном пределе величины действительной компоненты диэлектрической проницаемости вкладом квазисвободных носителей электрического тока в диэлектрическую поляризацию, т. е. диэлектрические потери связаны с проводимостью в соответствии с моделями Максвелла – Вагнера и Купса [6]. Интенсивность электронного обмена структурно зависима и определяется степенью перекрытия электронных орбиталей O-2p и Fe-3d, которая коррелирует с изменениями величин валентных углов Fe-O-Fe и длин межионных связей Fe-O, R – O. Это приводит к изменению величины проводимости. При этом также изменяются внутренние структурные искажения в образцах, связанные с наклоном октаэдров FeO<sub>6</sub>, что приводит к росту величины проводимости переменного тока, главным образом, в составах с R-катионами малого радиуса. Оба механизма взаимосвязаны и сложным образом влияют на изменение величины проводимости, которая на низких частотах оказывает шунтирующее действие и затрудняет интерпретацию результатов измерения диэлектрических функций.

На основании анализа полученных данных выделены механизмы диэлектрической поляризации, связанные с перескоковым механизмом обмена валентностями Fe<sup>2+</sup> ↔ Fe<sup>3+</sup>, который проявляется в диапазоне от 103 до 106 Гц. Вероятным механизмом диэлектрической поляризации в области частот от 107–109 Гц является движение стенок сегнетоэлектрических доменов [7]. Возможна также интерпретация поведения диэлектрической проницаемости в данном частотном интервале в рамках модели несобственной сегнетоэлектрической поляризации, связанной с индуцированием электрических диполей за счет смещения ионов кристаллической решетки под действием внешнего электрического поля.

Проанализированы особенности формирования диэлектрических функций кристаллов. Выполнено моделирование диэлектрических функций образцов. На основании результатов обработки полученных данных восстановлены параметры моделей и исследованы их зависимости от состава и структуры образцов. Введение замещающих ионов R<sup>3+</sup> (R = La – Lu) в Bi<sub>1-x</sub>R<sub>x</sub>FeO<sub>3</sub> приводит к изменению абсолютных значений диэлектрических характеристик. Выявлены корреляции параметров модельных спектров с типом и концентрацией R-катионов. Проведено сопоставление полученных результатов с экспериментальными данными. Рассчитанные спектры отличаются от экспериментальных на величины, меньшие погрешностей

эксперимента во всем интервале частот. На основании сопоставления экспериментальных и расчетных данных определены виды и механизмы диэлектрической поляризации.

Полученные результаты могут быть использованы как при изучении видов и механизмов диэлектрической поляризации, наблюдаемых в ионных кристаллах, так и при экспериментальном исследовании структурных, диэлектрических, а также при синтезе новых материалов с заданными физическими свойствами. Относительная простота моделей и наглядность результатов моделирования служат основанием для их использования в образовательном процессе в лабораторных практикумах при изучении соответствующих разделов курса физики, при выполнении курсовых, дипломных и магистерских работ, а также при проведении научных исследований.

#### Список использованных источников

1. Толстик, А. М. Роль компьютерного эксперимента в физическом образовании / А. М. Толстик // Физическое образование в вузах. – 2002. – Т. 8. – № 2, с. 94-102.
2. Eerenstein, W. Multiferroic and magnetoelectric material / W. Eerenstein, N. Mathur, J. F. Scott // Nature. – 2006. – Vol. 442 (17). – P. 759–765.
3. Impedance spectroscopy: Theory experiment and applications / Ed. By E. Barsoukov, J. R. Macdonald. — New York : Wiley, 2005. — 595 p.
4. Cole, K. S. Dispersion and absorption in dielectrics I. Alternating current characteristics / K. S. Cole, R. H. Cole // J. Chem. Phys. – 1941. – V. 9, – P. 341–351.
5. Davidson, D. W. Dielectric relaxation in glycerol, propylene glycol, and nPropanol / D. W. Davidson, R. H. Cole // J. Chem. Phys. – 1951. – V. 19, – P. 1484–1490.
6. Koops, G. G. On the dispersion of resistivity and dielectric constant of some semiconductors at audiofrequencies / G. G. Koops // Phys. Rev. – 1951. – V. 83, – P. 121–124.
7. Magnetic domain-wall induced ferroelectric polarization in rare-earth orthoferrites  $AFeO_3$  ( $A = Lu, Y, Gd$ ): first-principles calculations / W. Wang [et al] // J. Mater. Chem. – 2019. – V. 7, – P. 10059–10065.